演習問題

2024 年 5 月 2 日　　学籍番号 ______________　　氏名 ______________

[問 1]　3 つの正規直交化されたベクトル $|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle$ を考える。正規直交化されているというのは、正規 ($i = j$ に対して $\langle e_i|e_j\rangle = 1$) かつ直交 ($i \neq j$ に対して $\langle e_i|e_j\rangle = 0$) という意味である。以下の 2 つのベクトル

$$|u\rangle = i\,|e_1\rangle - 2\,|e_2\rangle - i\,|e_3\rangle, \qquad |v\rangle = i\,|e_1\rangle + 2\,|e_3\rangle,$$

を考える。

(1)　$\langle u|, \langle v|$ を $\langle e_1|, \langle e_2|, \langle e_3|$ で表せ。

(2)　$\langle u|v\rangle$ および $\langle v|u\rangle$ を計算し、$\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*$ であることを確認せよ。

(3)　$\hat{A} := |u\rangle\langle v|$ とする。演算子 $\hat{A}$ を基底 $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$ で表示した行列を求めよ。つまり、ij 成分が $\langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle$ であるような 3×3 の行列を求めよ。

[問 2]　以下の行列を **Pauli 行列**と言う。

$$\sigma^1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

これらが Hermite 行列であることを確認せよ。また、それぞれについて、固有値が実数であること、異なる固有値に属する固有ベクトルが直交すること、固有ベクトルが完全系を成すこと (= 2 つの固有ベクトルで任意の 2 成分ベクトルを表せること) を示せ。

[問 3]　正規化されたベクトル $|e\rangle$ から構成された射影演算子

$$\hat{P} := |e\rangle\langle e|,$$

について、$\hat{P}^2 = \hat{P}$ であることを示せ。この性質を**冪等 (idempotent)** と言う。また、$\hat{P}$ の固有値としてあり得る値は何か。

[問 4]　射影演算子を用いた**スペクトル分解 (spectral decomposition)** について学ぼう。演算子 $\hat{A}$ が正規直交完全系 $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \cdots\}$ の各々を固有ベクトルに持つとし、その固有値を $\alpha_1, \alpha_2, \cdots$ としよう。つまり

$$\hat{A}\,|e_n\rangle = \alpha_n\,|e_n\rangle \quad (n = 1, 2, \cdots),$$

である。

(1)　$\hat{A}$ は

$$\hat{A} = \sum_n \alpha_n\,|e_n\rangle\langle e_n|,$$

と書けることを示せ。任意のベクトル $|\Psi\rangle$ に対し、$\hat{A}|\Psi\rangle$ と $(\sum_n \alpha_n\,|e_n\rangle\langle e_n|)|\Psi\rangle$ が等しくなることを示すとよい。

(2)　演算子の関数 $f(\hat{A})$ を定義する方法がいくつか存在する。1 つは級数展開

$$f(\hat{A}) := \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)}(0)\hat{A}^n = f(0) + \frac{1}{1!} f'(0)\hat{A} + \frac{1}{2!} f''(0)\hat{A}^2 + \cdots,$$

であり、もう 1 つはスペクトル分解

$$f(\hat{A}) := \sum_n f(\alpha_n)|e_n\rangle\langle e_n|,$$

である。$f(x) = e^x$ について、これら 2 つの方法で定義された $f(\hat{A})$ が等価となることを示せ。任意のベクトル $|\Psi\rangle$ に演算したときに、両者が同じものを返すことを示すとよい。

[問 5]　系の状態 $|\Psi\rangle$ が正規直交基底 $\{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle\}$ を用いて

$$|\Psi\rangle = \frac{3}{5}|\alpha_1\rangle - \frac{4}{5}|\alpha_2\rangle,$$

と書かれているとする。

(1)　$\{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle\}$ 表示の波動関数を求めよ。

(2)　別の正規直交基底 $\{|\beta_1\rangle, |\beta_2\rangle\}$ を

$$\begin{pmatrix} |\alpha_1\rangle \\ |\alpha_2\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\beta_1\rangle \\ |\beta_2\rangle \end{pmatrix},$$

で定義する。$\{|\beta_1\rangle, |\beta_2\rangle\}$ 表示の波動関数を求めよ。