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。

[解 1]

(1)　係数に複素共役が取られることに注意して、

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

となる。

(2)　(1) の結果より

$$\langle u|v\rangle = (-i\,\langle e_1| - 2\,\langle e_2| + i\,\langle e_3|)\,(i\,|e_1\rangle + 2\,|e_3\rangle) = (-i)(i)\,\langle e_1|e_1\rangle + (i)(2)\,\langle e_3|e_3\rangle = 1 + 2i,$$
$$\langle v|u\rangle = (-i\,\langle e_1| + 2\,\langle e_3|)\,(i\,|e_1\rangle - 2\,|e_2\rangle - i\,|e_3\rangle) = (-i)(i)\,\langle e_1|e_1\rangle + (2)(-i)\,\langle e_3|e_3\rangle = 1 - 2i,$$

であるから、$\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*$ である。

(3)　各成分を求めると

$$\langle e_1|\hat{A}|e_1\rangle = \langle e_1|u\rangle\langle v|e_1\rangle = 1, \qquad \langle e_1|\hat{A}|e_2\rangle = \langle e_1|u\rangle\langle v|e_2\rangle = 0, \qquad \langle e_1|\hat{A}|e_3\rangle = \langle e_1|u\rangle\langle v|e_3\rangle = 2i,$$
$$\langle e_2|\hat{A}|e_1\rangle = \langle e_2|u\rangle\langle v|e_1\rangle = 2i, \qquad \langle e_2|\hat{A}|e_2\rangle = \langle e_2|u\rangle\langle v|e_2\rangle = 0, \qquad \langle e_2|\hat{A}|e_3\rangle = \langle e_2|u\rangle\langle v|e_3\rangle = -4,$$
$$\langle e_3|\hat{A}|e_1\rangle = \langle e_3|u\rangle\langle v|e_1\rangle = -1, \qquad \langle e_3|\hat{A}|e_2\rangle = \langle e_3|u\rangle\langle v|e_2\rangle = 0, \qquad \langle e_3|\hat{A}|e_3\rangle = \langle e_3|u\rangle\langle v|e_3\rangle = -2i,$$

であるから、求める行列は

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 2i \\ 2i & 0 & -4 \\ -1 & 0 & -2i \end{pmatrix},$$

である。

[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。

[解 2]　$(\sigma^i)^\dagger = ((\sigma^i)^t)^* = \sigma^i$ よりこれらは Hermite 行列である。σ^i の固有値を $\lambda^{(i)}_{1,2}$、固有ベクトルを $\vec{v}^{(i)}_{1,2}$ とする。

$$\det(\lambda - \sigma^1) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda^2 - 1 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda^{(1)}_1 = 1 \left(\vec{v}^{(1)}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right), \quad \lambda^{(1)}_2 = -1 \left(\vec{v}^{(1)}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right),$$

$$\det(\lambda - \sigma^2) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda^2 - 1 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda^{(2)}_1 = 1 \left(\vec{v}^{(2)}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \right), \quad \lambda^{(2)}_2 = -1 \left(\vec{v}^{(2)}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \right),$$

$$\det(\lambda - \sigma^3) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda^2 - 1 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda^{(3)}_1 = 1 \left(\vec{v}^{(3)}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right), \quad \lambda^{(3)}_2 = -1 \left(\vec{v}^{(3)}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right),$$

より固有値は実数であり、$\vec{v}^{(i)*}_1 \cdot \vec{v}^{(i)}_2 = \vec{v}^{(i)*}_2 \cdot \vec{v}^{(i)}_1 = 0$ なので異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する。また、σ^i のそれぞれについて固有ベクトルは 1 次独立なので完全系を成す。

[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。

[解 3]　$\hat{P}^2 = \hat{P}$ は

$$\hat{P}^2 = |e\rangle\langle e|e\rangle\langle e| \overset{\langle e|e\rangle=1}{=} |e\rangle\langle e| = \hat{P},$$

より示される。また、$\hat{P}$ の固有値を λ、固有ベクトルを $|\alpha\rangle$ として、

$$\hat{P}^2|\alpha\rangle = \hat{P}\hat{P}|\alpha\rangle = \hat{P}\lambda|\alpha\rangle = \lambda\hat{P}|\alpha\rangle = \lambda^2|\alpha\rangle,$$

である一方、

$$\hat{P}^2|\alpha\rangle \overset{\hat{P}^2=\hat{P}}{=} \hat{P}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle,$$

であるから、固有ベクトルは 0 ベクトルでないことも用いて

$$\lambda^2|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle \quad \Longrightarrow \quad \lambda^2\langle\alpha|\alpha\rangle = \lambda\langle\alpha|\alpha\rangle \quad \Longrightarrow \quad \lambda^2 = \lambda \quad \Longrightarrow \quad \lambda(\lambda - 1) = 0,$$

となる。したがって、許される値は $\lambda = 0, 1$ である。

[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。

[解 4]

(1)　任意のベクトル $|\Psi\rangle$ に対し、$\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \cdots\}$ は完全系であるから

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n|e_n\rangle,$$

と展開できる。係数 c_n は左から $\langle e_n|$ を作用させることにより

$$c_n = \langle e_n|\Psi\rangle,$$

と求まるので、

$$|\Psi\rangle = \sum_n |e_n\rangle\langle e_n|\Psi\rangle,$$

である。ここに $\hat{A}$ を作用させると

$$\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_n \hat{A}|e_n\rangle\langle e_n|\Psi\rangle \overset{\hat{A}|e_n\rangle = \alpha_n|e_n\rangle}{=} \sum_n \alpha_n|e_n\rangle\langle e_n|\Psi\rangle = \left(\sum_n \alpha_n|e_n\rangle\langle e_n|\right)|\Psi\rangle,$$

である。これが任意の $|\Psi\rangle$ について成り立つので、

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

である。

(2)　任意のベクトル $|\Psi\rangle$ に対し、

$$\begin{aligned}
f_{\text{前者}}(\hat{A})|\Psi\rangle &= \left(\sum_m \frac{1}{m!}\hat{A}^m\right)\left(\sum_n |e_n\rangle\langle e_n|\Psi\rangle\right) \\
&= \sum_n \left(\sum_m \frac{1}{m!}\hat{A}^m\right)|e_n\rangle\langle e_n|\Psi\rangle \\
&\overset{\hat{A}|e_n\rangle=\alpha_n|e_n\rangle,\hat{A}^2|e_n\rangle=\alpha_n^2|e_n\rangle,\cdots}{=} \sum_n \left(\sum_m \frac{1}{m!}\alpha_n^m\right)|e_n\rangle\langle e_n|\Psi\rangle \\
&= \sum_n e^{\alpha_n}|e_n\rangle\langle e_n|\Psi\rangle \\
&= f_{\text{後者}}(\hat{A})|\Psi\rangle,
\end{aligned}$$

となるから、両者の方法で定義された $f(\hat{A})$ は一致する。

[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。

[解 5]

(1)

$$\begin{pmatrix} \langle\alpha_1|\Psi\rangle \\ \langle\alpha_2|\Psi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ -\frac{4}{5} \end{pmatrix}.$$

(2)

$$\begin{pmatrix} \langle\beta_1|\Psi\rangle \\ \langle\beta_2|\Psi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\beta_1|\alpha_1\rangle & \langle\beta_1|\alpha_2\rangle \\ \langle\beta_2|\alpha_1\rangle & \langle\beta_2|\alpha_2\rangle \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \langle\alpha_1|\Psi\rangle \\ \langle\alpha_2|\Psi\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ -\frac{4}{5} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -\frac{1}{5} \\ -\frac{7}{5} \end{pmatrix}.$$