演習問題

2024 年 5 月 16 日　　学籍番号 ＿＿＿＿＿＿＿＿　　氏名 ＿＿＿＿＿＿＿＿

[問 1]　2 つの正規直交基底

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

で Hamiltonian が

$$\hat{H} = h|1\rangle\langle 1| + g|1\rangle\langle 2| + g|2\rangle\langle 1| + h|2\rangle\langle 2| = \begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix},$$

と与えられる系を考える。ここで g, h は実数である。時刻 $t = 0$ において系の初期状態は $|\Psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ である。この系が Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle,$$

に従って発展するとき、任意の時刻 t における状態 $|\Psi(t)\rangle$ を求めたい。

(1)　$\hat{H}$ が Hermite 演算子であることを確かめよ。

(2)　$\hat{H}$ の固有状態の線型結合で元の方程式の解を表したい。

$$\hat{H}|s\rangle = E|s\rangle,$$

を解くことで、2 つの固有値 E_+, E_- および正規化されたエネルギー固有状態 $|s_+\rangle, |s_-\rangle$ を求めよ。

(3)　Schrödinger 方程式に左から $\langle s_\pm|$ を掛けることで、$|s_\pm\rangle$ 表示の波動関数 $\langle s_\pm|\Psi(t)\rangle$ に対する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle s_\pm|\Psi(t)\rangle = E_\pm \langle s_\pm|\Psi(t)\rangle,$$

が得られることを示せ。また、この微分方程式を解くことで、$\langle s_\pm|\Psi(t)\rangle$ を初期値 $\langle s_\pm|\Psi(t=0)\rangle$ を用いて表せ。

(4)　初期状態が $|\Psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ であることを用いて、$\langle s_\pm|\Psi(t=0)\rangle$ を求めよ。

(5)　任意の時刻 t における状態 $|\Psi(t)\rangle$ を g, h を用いて表せ。完全性関係より

$$|\Psi(t)\rangle = |s_+\rangle\langle s_+|\Psi(t)\rangle + |s_-\rangle\langle s_-|\Psi(t)\rangle,$$

であることを用いるとよい。

[解 1]

(1)　$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ より $\hat{H}$ は Hermite 演算子である。

(2)　固有値は

$$\det \begin{pmatrix} h-E & g \\ g & h-E \end{pmatrix} = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad E = E_\pm := h \pm g,$$

であり、対応するエネルギー固有状態は

$$|s\rangle = |s_\pm\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \pm |2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix},$$

である。

(3)　Schrödinger 方程式に左から $\langle s_\pm|$ を掛け、$\langle s_\pm|\hat{H} = E_\pm \langle s_\pm|$ を用いると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle s_\pm|\Psi(t)\rangle = E_\pm \langle s_\pm|\Psi(t)\rangle,$$

を得る。解は

$$\langle s_\pm|\Psi(t)\rangle = \langle s_\pm|\Psi(t=0)\rangle\, e^{-iE_\pm t/\hbar},$$

である。

(4)　$|\Psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ より

$$\langle s_+|\Psi(t=0)\rangle = \langle s_-|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

である。

(5)　完全性関係を用いて

$$\begin{aligned}
|\Psi(t)\rangle &= |s_+\rangle\langle s_+|\Psi(t)\rangle + |s_-\rangle\langle s_-|\Psi(t)\rangle \\
&= |s_+\rangle\langle s_+|\Psi(t=0)\rangle\, e^{-iE_+ t/\hbar} + |s_-\rangle\langle s_-|\Psi(t=0)\rangle\, e^{-iE_- t/\hbar} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}|s_+\rangle\, e^{-iE_+ t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}}|s_-\rangle\, e^{-iE_- t/\hbar} \\
&= \frac{1}{2} e^{-i(h+g)t/\hbar}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} e^{-i(h-g)t/\hbar}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\
&= e^{-iht/\hbar}\begin{pmatrix} \cos(gt/\hbar) \\ -i\sin(gt/\hbar) \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

となる。

[問 2]　時刻 $t=0$ における $|x\rangle$ 表示の波動関数 $\langle x|\Psi(t=0)\rangle = \Psi(t=0,x)$ が

$$\langle x|\Psi(t=0)\rangle = \frac{A}{x^2+a^2},$$

で与えられているとする。ここで A, a は正の実数とする。必要であれば

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{1}{(x^2+1)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{x^2}{(x^2+1)^2} = \frac{\pi}{2},$$

を用いよ。

(1)　規格化条件より A を a で表せ。

(2) $\langle x\rangle, \langle x^2\rangle, \sigma_x$ を求めよ。

(3) $|p\rangle$ 表示の波動関数 $\langle p|\Psi(t=0)\rangle$ を求めよ。波動関数の変換則

$$\langle p|\Psi(t=0)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \langle p|x\rangle\langle x|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-ipx/\hbar}\langle x|\Psi(t=0)\rangle,$$

および留数積分を用いるとよい。

(4) $\langle p\rangle, \langle p^2\rangle, \sigma_p$ を求めよ。

(5) 不確定性関係 $\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$ が成り立っていることを確かめよ。

[解 2]

(1)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{A}{x^2+a^2}\right)^2 \overset{x=ax'}{=} \frac{A^2}{a^3}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\ \frac{1}{(x'^2+1)^2} = \frac{\pi A^2}{2a^3} = 1 \qquad \Longrightarrow \qquad A = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}}.$$

(2)

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle &= A^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \frac{x}{(x^2+a^2)^2} = 0,\\
\langle x^2\rangle &= A^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \frac{x^2}{(x^2+a^2)^2} \overset{x=ax'}{=} \frac{A^2}{a}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\ \frac{x'^2}{(x'^2+1)^2} = \frac{\pi A^2}{2a} = a^2,\\
\sigma_x &= \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = a.
\end{aligned}$$

(3)

$$\begin{aligned}
\langle p|\Psi(t=0)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \langle p|x\rangle\langle x|\Psi(t=0)\rangle\\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-ipx/\hbar}\langle x|\Psi(t=0)\rangle\\
&= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-ipx/\hbar}\frac{1}{(x-ia)(x+ia)}\\
&\overset{\text{留数積分}}{=} \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}}(-2\pi i)e^{-ip(-ia)/\hbar}\frac{1}{-ia-ia} & (p>0)\\ \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}}(2\pi i)e^{-ip(ia)/\hbar}\frac{1}{ia+ia} & (p<0)\end{cases}\\
&= \sqrt{\frac{a}{\hbar}}e^{-a|p|/\hbar}.
\end{aligned}$$

(4)

$$\begin{aligned}
\langle p\rangle &= \frac{a}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp\ pe^{-2a|p|/\hbar} = 0,\\
\langle p^2\rangle &= \frac{a}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp\ p^2e^{-2a|p|/\hbar} = \frac{a}{\hbar}\frac{\hbar^2}{4}\frac{\partial^2}{\partial a^2}\int_{-\infty}^{\infty} dp\ e^{-2a|p|/\hbar} = \frac{a}{\hbar}\frac{\hbar^2}{4}\frac{\partial^2}{\partial a^2}\left(\frac{\hbar}{a}\right) = \frac{\hbar^2}{2a^2},\\
\sigma_p &= \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}a}.
\end{aligned}$$

(5)

$$\sigma_x\sigma_p = a\cdot\frac{\hbar}{\sqrt{2}a} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} > \frac{\hbar}{2}.$$

[問 3]
以下の交換関係を満たす Hermite 演算子の組 $(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ を考えよう。

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \qquad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y.$$

ただし、交換子は $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ で定義される。
(1) $\hat{L}^2 := \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ は $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ と交換することを示せ。$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$ を用いるとよい。L_z について示せば他も同様なので、$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$ を示せば十分である。
(2) 不確定性関係

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle\Psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\Psi\rangle\right)^2,$$

を $\hat{A} = \hat{L}_x, \hat{B} = \hat{L}_y$ に適用し、$\sigma_{L_x}\sigma_{L_y}$ の下限を $\langle\Psi|\hat{L}_z|\Psi\rangle$ で表せ。ただし、$|\Psi\rangle$ は任意の状態であり、σ_A^2, σ_B^2 は $\Delta A := \hat{A} - \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle, \Delta B := \hat{B} - \langle\Psi|\hat{B}|\Psi\rangle$ の分散 $\sigma_A^2 := \langle\Psi|(\Delta A)^2|\Psi\rangle, \sigma_B^2 := \langle\Psi|(\Delta B)^2|\Psi\rangle$ である。
[解 3]
(1) L_z について示す。他は同様である。

$$\begin{aligned}
[\hat{L}^2, \hat{L}_z] &= [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_z] \\
&= [\hat{L}_x^2, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_z] \\
&= \hat{L}_x[\hat{L}_x, \hat{L}_z] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z]\hat{L}_x + \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y, \hat{L}_z]\hat{L}_y \\
&= \hat{L}_x(-i\hbar\hat{L}_y) + (-i\hbar\hat{L}_y)\hat{L}_x + \hat{L}_y(i\hbar\hat{L}_x) + (i\hbar\hat{L}_x)\hat{L}_y \\
&= 0.
\end{aligned}$$

(2)

$$\sigma_{L_x}^2\sigma_{L_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle\Psi|[\hat{L}_x, \hat{L}_y]|\Psi\rangle\right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\langle\Psi|\hat{L}_z|\Psi\rangle\right)^2 \qquad \Longrightarrow \qquad \sigma_{L_x}\sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2}\left|\langle\Psi|\hat{L}_z|\Psi\rangle\right|.$$