演習問題 1 :量子力学における変換と保存量

問題 1. エルミート行列 $H = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ について考えよう。

(1) $|1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, |3\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$ が H の規格直交化された固有ケットであることを確認し，各固有値 $\epsilon_{1,2,3}$ を求めよ。

(2) $\psi = (|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle)$ として $\psi^\dagger H \psi$ を計算し，H が対角化されていることを確認せよ。

(3) $P_i = |i\rangle\langle i|$ として，$P_1P_2 = P_2P_3 = P_3P_1 = O$, $P_i^2 = P_i$ を確認せよ。

(4) $P_1 + P_2 + P_3 = E_3$ を確認せよ。また，どうしてこの関係式が成立するか考えよ。

(5) $\sum_i \epsilon_i P_i$ を計算し H に等しいことを確認せよ。

(6) $R = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ として，$[H, R] = 0$ と可換であることを確認せよ。

(7) $R' = \psi^\dagger R \psi$ を計算せよ。

(8) 行列 R' を対角化し，その規格直交化された固有ベクトルを v_1, v_2, v_3 として行列 $U = (v_1, v_2, v_3)$ を作り $\psi' = \psi U = (|1'\rangle, |2'\rangle, |3'\rangle)$ としたとき，$|i'\rangle$ は H, R の同時固有ケットであることを確認せよ。

問題 2. 区間 $[-L/2, L/2]$ で周期的境界条件 $\psi(x) = \psi(x + L)$ を満たす関数について考える。

(1) $\partial_x = \frac{d}{dx}$ として，$\langle \partial_x \psi | \varphi \rangle = -\langle \psi | \partial_x \varphi \rangle$ を示せ。よって $\partial_x^\dagger = -\partial_x$ であり $\langle \psi | \partial_x | \varphi \rangle = \langle \psi | (\partial_x | \varphi \rangle) = (-\langle \psi | \overleftarrow{\partial}_x) | \varphi \rangle$ となる。これから $p_x = -i\hbar \partial_x$ がエルミート演算子であることを示せ。

(2) $p_x \psi_k(x) = \hbar k \, \psi_k(x)$ を満たす ψ_k は，$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$ と書けることを確認し，許される k が $k = \frac{2\pi}{L} n$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$ となることを示せ。

(3) ψ_k が規格直交化された完全系をつくることを示せ。ただし，$[0, 2\pi]$ で周期的な関数に対して $\frac{1}{2\pi} \sum_n e^{inx} = \delta(x)$ である。

(4) $H = \frac{p_x^2}{2m}$ としたとき，$\psi_k(x)$ が固有関数であることを確認し、エネルギー固有値と各エネルギー固有値の縮退度を求めよ。

(5) 空間反転の演算子 R を $R : x \to x' = Rx = -x$ としたとき，$H' = U_R H U_R^{-1}$ を求めよ。ここで $U_R\psi(x) = \psi(R^{-1}x) = \psi(-x)$ である。

(6) H と H' の関係を述べ，次に $\psi_k(x)$ は H と R の同時固有関数になっているか述べよ。

(7) H の縮退した状態の線形結合から H と U_R の同時固有状態 $\psi_{\epsilon,r}$ ($H\psi_{\epsilon,r} = \psi_{\epsilon,r}\epsilon$, $U_R\psi_{\epsilon,r} = \psi_{\epsilon,r}r$) を作れ。

(8) 上記の r の取り得る値は ± 1 に限られることを示せ。

問題 3. 有限次元のエルミート行列について以下の性質を示せ。

(1) エネルギー固有値は実である。

(2) 異なるエネルギーに属する固有ベクトルは直交する。

(3) 次元の数だけある規格直交化された固有ベクトルは完全である。

(4) 完全な固有ベクトルと次元の数だけある規格直交化された固有ベクトルとの関係をまとめよ。

問題 4. 量子力学におけるユニタリ変換 U に関して考えよう。ただし状態をブラケット記法で $|\psi\rangle$ と書き、$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ と状態は変換されるとせよ。

(1) シュレディンガー方程式 $i\hbar\partial_t|\psi\rangle = H|\psi\rangle$ の形式解を導け。

(2) 時刻 t における任意の物理量 $\mathcal{O}$ の期待値を求めよ。

(3) $U_\lambda = e^{i\lambda G/\hbar}$ (λ は実) と書いたとき、G がエルミートとなることを示せ。（G は変換の母関数と呼ばれる）

(4) 物理量 $\mathcal{O}$ はこの変換でどのように変換されるか。理由とともに示せ。

(5) ハミルトニアン H が無限小変換 $U_{\delta\lambda}$ で不変な時、ハミルトニアンと変換の母関数の満たす関係式を導け。

(6) 変換の母関数は保存量となることを示せ。

(7) 変換の例と対応する保存量を複数列挙せよ。