科　目　名	学年	番号	学　籍　番　号	氏　　　名
量子力学Ⅰ　第4回	2			

全問解答し，答え合わせ（自己採点）をして提出せよ。　　　**授業時間外の学習時間：＿＿時間＿＿分**

[1] 「詳解　量子化学の基礎」の1章の1.9節〜1.15節（15頁〜24頁）を読みなさい。

[2] あらゆる古典物理量演算子の固有関数系は**完全系**（かんぜんけい）をなす。「完全系をなす」というのは，その関数の［(a)］であらゆる任意の関数を表現できることをいう。固有関数系のこのような性質を［(b)］性，または**完備性**（かんびせい）という。なお，ある関数を他の複数の関数の線形結合で表すことを「［(c)］する」という。

古典物理量演算子の固有関数 ψ_i は必ず規格化できる。すなわち，固有関数を定数倍し，

$$\int \psi_i^* \psi_i \mathrm{d}^3 r \quad = \quad 1 \tag{1}$$

が成り立つように調節することが可能である。また，異なった固有値に対応する固有関数どうしは直交するから，

$$\int \psi_j^* \psi_i \mathrm{d}^3 r \quad = \quad \boxed{\quad (d) \quad} \tag{2}$$

が成り立つ。これらをまとめて，次のように書く。

$$\int \psi_i^* \psi_j \mathrm{d}^3 r \quad = \quad \delta_{ij} \quad \text{ただし,}\delta_{ij} = \begin{cases} 1 \ (i = j) \\ 0 \ (i \neq j) \end{cases} \tag{3}$$

ここで，δ_{ij} は［(e)］のデルタという。

古典物理量演算子の固有関数に関する以上の性質をまとめて，「古典物理量演算子の固有関数は［(b) 再出］［(f)］［(g)］系をなす」と言う。

[3] 系が波動関数 Ψ で表される状態にあり，演算子 $\hat{F}$ の固有関数 ψ_i で $\Psi = \sum_i c_i \psi_i$ のように展開されるとする。この系で物理量 F の測定を行ったとき，測定値が f_i（f_i は ψ_i に対応する $\hat{F}$の固有値である）である確率 p_i は，$p_i = \boxed{\quad (h) \quad}^2$ で表される。

[4] 系が波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ で表される状態にあるとき，古典物理量 F の**期待値**（きたいち）は次式で与えられる。

$$\langle F \rangle \quad = \quad \int \Psi^*(\boldsymbol{r}, t) \hat{F} \Psi(\boldsymbol{r}, t) \mathrm{d}^3 r \tag{4}$$

ある系で物理量 F の測定を**繰り返し**（くりかえし）行った場合，測定値として得られる値の［(i)］値を期待値といい，$\langle F \rangle$ で表す。この意味で期待値を［(i) 再出］測定値とよんでもよい。

定常状態における古典物理量の期待値を計算するには，(4) 式に定常状態の波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t) = e^{-i(E/\hbar)t} \psi(\boldsymbol{r})$ を代入すればよい。

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \int \boxed{\quad (j) \quad} \hat{F} e^{-i(E/\hbar)t} \psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3 r \\ &= \int \psi^*(\boldsymbol{r}) \hat{F} \psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3 r \end{aligned} \tag{5}$$

これより，系の時間依存性 $e^{-i(E/\hbar)t}$ が打ち消し合い，物理量の期待値が時間に依存［(k) する or しない］ことがわかる。定常状態の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ はエネルギー固有状態であり，エネルギー固有値が時刻に依存することはない。これが定常状態の大きな特徴であるが，(5) 式によれば，エネルギー固有値だけでなくすべての物理量の期待値が時間によらず一定値となる。

[5] 1つの固有値に対して複数の独立な固有関数があるとき，この固有関数は「**縮退**(しゅくたい)している」もしくは「 (ℓ) している」と言い，その独立な固有関数の数を (m) という。

[6] 演算子 $\hat{F}$ の固有値 f_i が n 重に縮退しているとき，それらの線形結合 $\psi_i' = \sum_j^n c_j \psi_{ij}$ も f_i に対応する $\hat{F}$ の固有関数で (n) ある or ない 。

[7] 古典物理量 F と G に対応する演算子 $\hat{F}$ と $\hat{G}$ が**可換**(かかん)であるならば，$\hat{F}$ と $\hat{G}$ に共通な (o) が存在する。これは，F と G が同時に (p) をとることを意味する。ただし，可換とは，演算子を作用させる順序を変えても同じ結果を得ることを意味する。

2つの演算子には**交換関係**(こうかんかんけい)があり，これは量子力学において本質的に重要である。関数 ψ に $\hat{F}$ を作用させ，そのあとで $\hat{G}$ を作用させる場合を考えよう。これは $\hat{G}\hat{F}\psi$ と表される。次に，これとは逆に，まず ψ に $\hat{G}$ を作用させ，そのあとで $\hat{F}$ を作用させた場合を考えれば，$\hat{F}\hat{G}\psi$ と表される。一般に演算子を作用させる順番によって得られる結果は異なるから，

$$\hat{G}\hat{F}\psi \quad \neq \quad \hat{F}\hat{G}\psi \tag{6}$$

が成り立つのが普通である。これを，「演算子 $\hat{F}$ と $\hat{G}$ が (q) 」と言う。一方，演算子を作用させる順番を変えても結果が同じ場合もある。この場合,「演算子 $\hat{F}$ と $\hat{G}$ が (r) 」と言う。

[8] 演算子 $\hat{F}$ と $\hat{G}$ を次のように定義する。

$$\hat{F} = \hat{x} = x \tag{7}$$

$$\hat{G} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \tag{8}$$

ここで，$\psi(x) = x^2$ として $\hat{F}\hat{G}\psi$ と $\hat{G}\hat{F}\psi$ が異なることを確認せよ。

[9] 「1次元の無限に深い井戸にトラップされた粒子」の波動関数（詳しくは，次回の講義で説明する）は，次式で与えられる。

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{9}$$

ただし，a は井戸の幅を表す。この波動関数に，位置演算子 $\hat{x} = x$ と運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$ を連続して作用させることを考える。まずは，$\hat{p}$ を作用させてから $\hat{x}$ を作用させる。

$$\begin{aligned}
\hat{x}\hat{p}\Psi_n &= x\left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\Psi_n \\
&= -i\hbar x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi_n \qquad \text{定数} -i\hbar\text{を前に出した} \\
&= -i\hbar x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right) \\
&= \boxed{\text{(s) 文字式}}\, x\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)
\end{aligned} \tag{10}$$

次に，$\hat{x}$ を作用させてから $\hat{p}$ を作用させる。

$$\begin{aligned}
\hat{p}\hat{x}\Psi_n &= -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x\Psi_n \\
&= -i\hbar\Psi_n - i\hbar x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi_n \qquad \text{積の微分をした} \\
&= -i\hbar\Psi_n + \boxed{\text{(s) 再出}}\, x\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)
\end{aligned} \tag{11}$$

これらの差をとると，次の結果を得る。

$$\hat{x}\hat{p}\Psi_n - \hat{p}\hat{x}\Psi_n = \boxed{\text{(t) 文字式}} \tag{12}$$

Ψ_n を書かないと次のように書ける。

$$\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar \tag{13}$$

ここで，$[\hat{F}, \hat{G}]$ という記号を

$$[\hat{F}, \hat{G}] := \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} \tag{14}$$

で定義する（$\hat{F}$ と $\hat{G}$ は物理量 F と G の演算子)。この $[\hat{F}, \hat{G}]$ を $\boxed{\text{(u)}}$ とよび，これを用いれば上の関係は次のように書ける。

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \tag{15}$$

もしくは，演算子を具体的に書けば次のようになる。

$$\left[x, -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right] = i\hbar \tag{16}$$

じつは，波動関数が $\Psi_n = \sqrt{2/a}\sin(n\pi x/a)$ で表される場合に限らず，位置演算子と運動量演算子にはこの関係が成立する。この関係を $\boxed{\text{(v)}}$ 交換関係という。

位置演算子と運動量演算子に限らず，一般に，$[\hat{F}, \hat{G}] = 0$ のとき，$\hat{F}$ と $\hat{G}$ は $\boxed{\text{(w)}}$ であるといい，$[\hat{F}, \hat{G}] \neq 0$ のとき，$\hat{F}$ と $\hat{G}$ は $\boxed{\text{(w) 再出}}$ でないという。

解答

[1]　なし

[2]　(a)：線形結合　(b)：完全　(c)：展開　(d)：0　(e)：Kronecker（クロネッカー）
(f)：規格　(g)：直交

[3]　(h)：$|c_i|$

[4]　(i)：平均　(j)：$e^{i(E/\hbar)t}\psi^*(\boldsymbol{r})$　(k)：しない

[5]　(ℓ)：縮重　(m)：縮重度

[6]　(n)：ある

[7]　(o)：固有関数　(p)：確定値　(q)：可換でない　(r)：可換である

[8]　$\hat{F}\hat{G}\psi = x\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x^2 = x(2x) = 2x^2$　$\hat{G}\hat{F}\psi = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}xx^2 = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x^3 = 3x^2$　よって，$\hat{F}\hat{G}\psi \neq \hat{G}\hat{F}\psi$

[9]　(s)：$-i\hbar\sqrt{\dfrac{2}{a}}\dfrac{n\pi}{a}$　(t)：$i\hbar\Psi_n$　(u)：交換子　(v)：正準　(w)：可換

今日の講義でわからないことがあれば，お伝えください。また，講義に対する要望があればお書きください。感想などでも結構です。もちろん，成績等には一切関係ありません。

✎ **記述欄**