量子力学　第６回演習　解答

1.　シュテルンとゲルラッハは，スピンの特定方向成分を測定する実験を行なった．その実験結果に関して，“古典的に説明できない点”は何か，思いつく限り挙げ説明せよ．

【解答】

・スピンの特定方向成分（例えば z 成分）は，古典的には連続的な値を取ると予想される．しかし，シュテルンとゲルラッハが行なった実験では，スピンの特定方向成分（例えば z 成分）は，$\pm\hbar/2$ の２通りのとびとびの値しか取らないことがわかった．

・古典的には, 全ての方向に対するスピンの成分を同時に確定することができると考えられるが, シュテルンとゲルラッハが行なった実験では, スピンの特定方向成分（例えば z 成分）を確定させると，他の方向成分（x,y 成分）が不確定になることがわかった．

2.　２準位系のハミルトニアン $\hat{H}$ が $\hat{H} = \varepsilon_0 \hat{\sigma}_z + g\hat{\sigma}_x$ で与えられている．ε_0, g はエネルギーの次元をもつ定数であり，正の実数とする．

（1）　$\hat{\sigma}_z$ に対する固有ベクトル $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ を基底ベクトルとした場合のハミルトニアン $\hat{H}$ を求め，２行２列の行列および $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ を用いたブラ・ケット表現の２通りの表現法で表せ．またハミルトニアン $\hat{H}$ の対角項，非対角項の示す物理的意味を言葉で説明せよ．

（補足：行列表現とブラ・ケット表現の変換例　$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = |\alpha\rangle\langle\beta|$）

【解答】

パウリ行列はそれぞれ $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = |\alpha\rangle\langle\beta| + |\beta\rangle\langle\alpha|, \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = |\alpha\rangle\langle\alpha| - |\beta\rangle\langle\beta|$

と表されることから,

$$\hat{H} = \varepsilon_0 \hat{\sigma}_z + g\hat{\sigma}_x = \varepsilon_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + g \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & g \\ g & -\varepsilon_0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{H} = \varepsilon_0 \left(|\alpha\rangle\langle\alpha| - |\beta\rangle\langle\beta| \right) + g\left(|\alpha\rangle\langle\beta| + |\beta\rangle\langle\alpha| \right)$$

となる．

ε_0, g はエネルギーの次元をもつ定数であり，$\hat{H}$ の対角項，非対角項は物理的には以下のような意味をもつ．

対角項… $g=0$ のときの基底ベクトル $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ に対するエネルギーの期待値
非対角項…基底ベクトル $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ 間の状態遷移の際にやりとりされる相互作用エネルギー（遷移エネルギー）の期待値

（2） エネルギー固有値 $\varepsilon_1, \varepsilon_2 \left(\varepsilon_1 > \varepsilon_2\right)$ を求めよ． また $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ を ε_0 の関数として概形をグラフに示せ．グラフを書く際には，横軸・縦軸の表す物理量および極大・極小における縦軸・横軸の値をグラフ中に明記すること．

【解答】
エネルギー固有値を ε とおくと， ε は次の固有値方程式を満たす．

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_0 - \varepsilon & g \\ g & -\varepsilon_0 - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

$$\varepsilon = \pm\sqrt{\varepsilon_0^2 + g^2}$$

したがって，

$$\varepsilon_1 = +\sqrt{\varepsilon_0^2 + g^2}, \varepsilon_2 = -\sqrt{\varepsilon_0^2 + g^2}$$

と求められる．
$\varepsilon_1, \varepsilon_2$ を ε_0 の関数としてグラフに示すと図のようになる．
（注釈）エネルギーの近接した 2 つの準位間に相互作用が働く場合には，お互いに反発するように固有状態を形成する．これを 2 準位間の反交差（anti-crossing）といい，相互作用エネルギー g が大きい程，反交差の大きさは大きくなる．

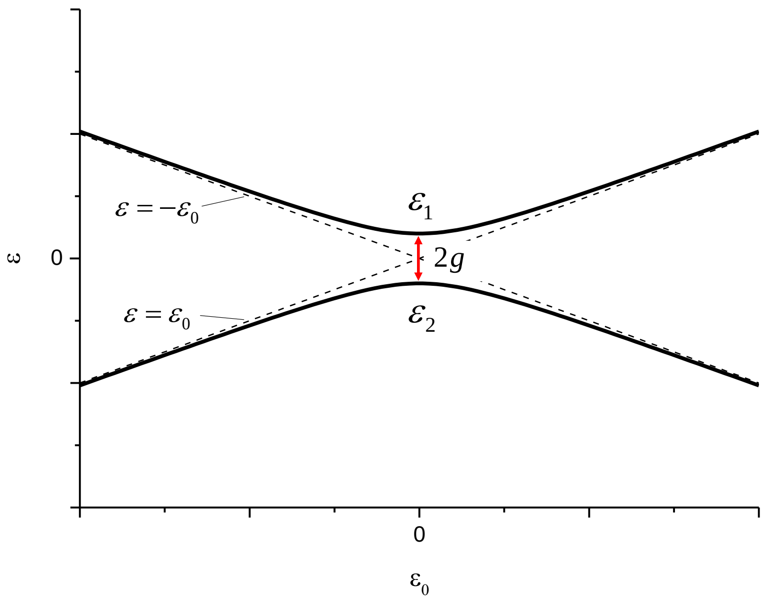

図 1 $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ の ε_0 依存性

(3)　$\varepsilon_0 = 0$ の場合について，$\varepsilon_1, \varepsilon_2 \left(\varepsilon_1 > \varepsilon_2\right)$ および $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ に対応する規格化された固有ベクトル $\left|\varphi_1\right\rangle = a_1\left|\alpha\right\rangle + b_1\left|\beta\right\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}, \left|\varphi_2\right\rangle = a_2\left|\alpha\right\rangle + b_2\left|\beta\right\rangle = \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}$ を求めよ．

【解答】

$\varepsilon_1 = +g$ のとき，規格化された固有ベクトルは $\left|\varphi_1\right\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\alpha\right\rangle + \left|\beta\right\rangle\right) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$\varepsilon_2 = -g$ のとき，規格化された固有ベクトルは $\left|\varphi_1\right\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\alpha\right\rangle - \left|\beta\right\rangle\right) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

ただし，固有ベクトルの選び方は一通りではなく，別解もある．

（補足：ハミルトニアン $\hat{H}$ に非対角項が存在する場合，$\left|\alpha\right\rangle, \left|\beta\right\rangle$ 間の遷移（相互作用）のために，２準位系の固有状態は $\left|\alpha\right\rangle$ あるいは $\left|\beta\right\rangle$ 単独で表すことができず，$\left|\alpha\right\rangle, \left|\beta\right\rangle$ の重ね合わせで表されるようになる．また固有状態のエネルギーは，$\left|\alpha\right\rangle, \left|\beta\right\rangle$ 間の遷移（相互作用）のためシフトし，反交差を示すようになる（問（2）参照））

(4)　任意の状態ベクトル $\left|\Psi\right\rangle$ は，$\left|\alpha\right\rangle, \left|\beta\right\rangle$ を基底ベクトルとして，その重ね合わせ $\left|\Psi\right\rangle = a\left|\alpha\right\rangle + b\left|\beta\right\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ で表される．一方，$\left|\Psi\right\rangle$ は問（3）で求めた $\left|\varphi_1\right\rangle, \left|\varphi_2\right\rangle$ を基底ベクトルとして，$\left|\Psi\right\rangle = p_1\left|\varphi_1\right\rangle + p_2\left|\varphi_2\right\rangle = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}$ と表すこともできる（基底ベクトルは完全規格直交系であれば何でも良い）．$\left|\alpha\right\rangle, \left|\beta\right\rangle$ を基底ベクトルとする状態表現から，$\left|\varphi_1\right\rangle, \left|\varphi_2\right\rangle$ を基底ベクトルとする状態表現へ変換（基底変換）するための演算子 $\hat{T}$ を求めよ．また $\hat{T}$ がユニタリーであることを示し，ユニタリー変換の前と後の状態ベクトルのノルムの２乗（確率に相当）が保存されることを示せ．

（補足：$\hat{T}\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \hat{T}\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ となる $\hat{T}$ を求めれば良い．）

（補足：基底変換とは，座標軸を回転させて，基底ベクトルにしたい固有ベクトル

と座標軸の方向を一致させる変換であるとイメージできる）

【解答】

固有ベクトル$\left|\varphi_1\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$，$\left|\varphi_2\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$として解く．

$$\hat{T}\left|\varphi_1\right\rangle = \hat{T}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$
$$\hat{T}\left|\varphi_2\right\rangle = \hat{T}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

の関係式を満たす$\hat{T}$を求める．上式より，

$$\hat{T}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \hat{1}$$

であることから，

$$\hat{T} = \left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{pmatrix}\right\}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{pmatrix}$$

と求められる．これより，

$$\hat{T}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{pmatrix}$$

となる．したがって，

$$\begin{aligned}\hat{T}\cdot\hat{T}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{pmatrix}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{pmatrix}\\ &= \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \hat{1}\\ &\therefore \hat{T}^{\dagger} = \hat{T}^{-1}\end{aligned}$$

したがって，行列$\hat{T}$はユニタリーである．

任意の状態ベクトルを$\left|\Psi\right\rangle$で表される量子状態を取りうる確率pは，$\left|\Psi\right\rangle$のノルムの 2 乗で与えられる．$\left|\Psi\right\rangle$をユニタリー行列$\hat{T}$で変換した状態ベクトル$\left|\Psi'\right\rangle = \hat{T}\left|\Psi\right\rangle$で表される量子状態を取りうる確率$p'$は，以下のように与えられる．

$$p' = \langle \Psi' | \Psi' \rangle = \langle \Psi | \hat{T}^{\dagger} \cdot \hat{T} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{T}^{-1} \cdot \hat{T} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle = p$$

したがって，ユニタリー行列による変換（ユニタリー変換）によって，状態を取りうる確率は変化しない．言い換えれば，ユニタリー変換は，状態を取りうる確率が保存される変換であり，この時物理量の測定値の期待値も保存される*.

（補足）物理量の測定値の期待値（実験値）は，状態の表し方に依らず，同じ値を取る．状態の表し方は，我々が自由に決めていいものであるが，その決め方によって，実験値が変わることはない.

(5)　問(4)で得た$\hat{T}$を用いて，$\varepsilon_0 = 0$におけるハミルトニアンを基底変換し，基底変換後の対角化されたハミルトニアン$\hat{H}'$を求めよ.

【解答】

$\varepsilon_0 = 0$におけるハミルトニアンは,

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & g \\ g & 0 \end{pmatrix}$$

である．このハミルトニアンを基底変換すると，以下のようになる.

$$\hat{H}' = \hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & g \\ g & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g & 0 \\ 0 & -g \end{pmatrix}$$

（補足）基底変換後のハミルトニアンの対角項には，固有ベクトル（基底変換後の基底ベクトル）に対するエネルギー固有値が入るので，上記の答えは明らかである.