量子力学　第 4 回演習解答（訂正版）

（問題・解答に不備がありましたので訂正します．こちらを参照下さい）

1. 任意の状態ベクトル$|\Psi\rangle$で表される量子状態において, 演算子$\hat{A}$に対する物理量の測定値の期待値は，一般に$\langle A\rangle=\dfrac{\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$で与えられる（$|\Psi\rangle$が規格化されていれば$\langle A\rangle=\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$）．任意の複素定数を$\chi$としたとき，$|\Psi\rangle$および$\chi|\Psi\rangle$に対する$\hat{A}$の期待値$\langle A\rangle$は互いに一致することを示せ．

【解答】

$|\Psi\rangle$および$\chi|\Psi\rangle$に対する$\hat{A}$の期待値を計算すると，

$|\Psi\rangle$に対する$\hat{A}$の期待値　$\langle A\rangle_\Psi=\dfrac{\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$

$\chi|\Psi\rangle$に対する$\hat{A}$の期待値　$\langle A\rangle_{\chi\Psi}=\dfrac{\langle\Psi|\chi^*\hat{A}\chi|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\chi^*\chi|\Psi\rangle}=\dfrac{|\chi|^2\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle}{|\chi|^2\langle\Psi|\Psi\rangle}=\dfrac{\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}=\langle A\rangle_\Psi$

となり互いに一致する．

（補足：$(\chi|\Psi\rangle)^\dagger=\langle\Psi|\chi^*=\chi^*\langle\Psi|, \chi\chi^*=|\chi|^2\neq\chi^2$である．$\chi^2$と書いている人がいるが，間違いなので注意すること．）

（問 2 以降の問題では，特に断りがない限り，状態ベクトルは規格化されているとする）

2. 演算子$\hat{A}$がエルミート演算子である場合（$\hat{A}=\hat{A}^\dagger$），任意の状態ベクトル$|\Psi\rangle$に対する演算子$\hat{A}$の期待値$\langle A\rangle$は実数となることを示せ（ヒント：$c=c^*$（*は複素共役）が成り立てば，cは実数であると言える）．

   （補足：可観測物理量に対する演算子はエルミート演算子で表され，その期待値は実数となる（複素数で表される量は観測できない））

【解答】

$$\langle A\rangle=\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$$

$$\langle A\rangle^*=\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle^*=\langle\Psi|\hat{A}^\dagger|\Psi\rangle=\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle=\langle A\rangle$$

よって，$\langle A\rangle=\langle A\rangle^*$であることから，$\langle A\rangle$は実数である．

（補足：*と†を混同して使用している人がいるが，これらは異なるので注意すること．$c^*, \langle A\rangle^*, \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle^*$は複素数$c, \langle A\rangle, \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$の複素共役を表すのに対し，$\hat{A}^\dagger, |\Psi\rangle^\dagger, (\hat{A}|\Psi\rangle)^\dagger$は複素ベクトルや複素行列の転置複素共役を表す．）

3. $\hat{A}$を任意のエルミート演算子とする．$\hat{A}$に対する固有ベクトルを$|i\rangle$，固有値をA_{ii}とする（$\hat{A}|i\rangle=A_{ii}|i\rangle$）．ここで異なる固有値に対する固有ベクトルが直交することを示せ．

（ヒント：$\langle i|\hat{A}|j\rangle - \langle j|\hat{A}|i\rangle^*$ を計算し，$\langle i|j\rangle = 0$ を示す）これより，エルミート演算子に対する固有ベクトルの組 $\{|i\rangle\}$ は，直交系をなすことがわかる．$|i\rangle$ は $\langle i|i\rangle = 1$ となるよう規格化できるため，$\{|i\rangle\}$ は規格直交系をなすことがわかる．

（補足：ここでは証明しないが，$\{|i\rangle\}$ は完全系をなす（$\sum_i |i\rangle\langle i| = \hat{1}$）．すなわち，$\{|i\rangle\}$ は完全規格直交系をなすことから，$\{|i\rangle\}$ を基底ベクトルとすることができる）

【解答】

$$\langle i|\hat{A}|j\rangle = \langle i|A_{jj}|j\rangle = A_{jj}\langle i|j\rangle$$
$$\langle j|\hat{A}|i\rangle^* = \langle j|A_{ii}|i\rangle^* = \langle i|A_{ii}^*|j\rangle = A_{ii}^*\langle i|j\rangle = A_{ii}\langle i|j\rangle$$

また

$$\langle j|\hat{A}|i\rangle^* = \langle i|\hat{A}^\dagger|j\rangle = \langle i|\hat{A}|j\rangle \qquad \left(\because \hat{A} = \hat{A}^\dagger\right)$$

であることから，

$$\langle i|\hat{A}|j\rangle - \langle j|\hat{A}|i\rangle^* = 0$$
$$\left(A_{jj} - A_{ii}\right)\langle i|j\rangle = 0$$

となる．$A_{jj} \neq A_{ii}\,(i \neq j)$ であることから，上式が成り立つためには $\langle i|j\rangle = 0$ でなければならない．よって固有値に対する固有ベクトル $|i\rangle, |j\rangle\,(i \neq j)$ は直交する．

4. 任意の状態ベクトルは，完全規格直交系をなす基底ベクトル $|i\rangle$ の重ね合わせ状態 $|\Psi\rangle = \sum_i c_i|i\rangle$ として記述できる．c_i は状態 $|i\rangle$ を取り得る確率振幅，$|c_i|^2$ は $|i\rangle$ を取り得る確率を示す．$c_j = \langle j|\Psi\rangle$ であることを示せ．また $|\Psi\rangle$ に対する，射影演算子 $\hat{A} = |j\rangle\langle j|$ の期待値を計算せよ．

（補足：内積 $c_j = \langle j|\Psi\rangle$ は状態ベクトル $|\Psi\rangle$ の基底ベクトル $|j\rangle$ への射影成分（確率振幅）を示す．）

【解答】

直交性（$\langle j|i\rangle = \delta_{ij}$）より，

$$\langle j|\Psi\rangle = \langle j|\sum_i c_i|i\rangle = \sum_i c_i\langle j|i\rangle = \sum_i c_i\delta_{ij} = c_j$$

となる．また，$|\Psi\rangle$ に対する，射影演算子 $\hat{A} = |j\rangle\langle j|$ の期待値 $\langle A\rangle$ は，

$$\langle A\rangle = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \left(\sum_i c_i|i\rangle\right)^\dagger |j\rangle\langle j|\left(\sum_k c_k|k\rangle\right) = \sum_i c_i^*\langle i|j\rangle\sum_k c_k\langle j|k\rangle = \sum_i c_i^*\delta_{ij}\sum_k c_k\delta_{jk} = c_j^*c_j = |c_j|^2$$

となる．

5.　任意のエルミート演算子 $\hat{A}$ に対する固有ベクトル（完全規格直交系）$|i\rangle$ を基底ベクトルとして，任意の状態ベクトル $|\Psi\rangle$ を $|\Psi\rangle=\sum_i c_i|i\rangle$ と表す．$\hat{A}$ に対する $|i\rangle$ の固有値を A_{ii} とするとき（$\hat{A}|i\rangle=A_{ii}|i\rangle$），$|\Psi\rangle$ に対する $\hat{A}$ の期待値を計算せよ．

【解答】

$|\Psi\rangle$ に対する $\hat{A}$ の期待値 $\langle A\rangle$ は，

$$\langle A\rangle=\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle=\left(\sum_j c_j|j\rangle\right)^{\dagger}\hat{A}\left(\sum_i c_i|i\rangle\right)=\sum_{i,j}c_j^*c_iA_{ii}\langle j|i\rangle=\sum_{i,j}c_j^*c_iA_{ii}\delta_{ij}=\sum_i|c_i|^2A_{ii}$$

となる．これは $\hat{A}$ に対する $|i\rangle$ の固有値 A_{ii} に，$|i\rangle$ を取り得る確率 $|c_i|^2$ で重みづけをして足し合わせたものとなっている．

（補足： $\hat{A}$ に対する $|i\rangle$ の固有値を A_{ii} とするとき， $\hat{A}$ に対する $|i\rangle$ の期待値は $\langle A\rangle=\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle=A_{ii}\langle\Psi|\Psi\rangle=A_{ii}$ となり，固有値に一致する．これは一般に成り立つことなので，覚えておくと便利である．物理的には，$|i\rangle$ は $\hat{A}$ の固有ベクトルであり，$\hat{A}$ を作用させても状態が変化しない＝測定値はばらつかず常に一定値 A_{ii} を取ることを意味する）

6.　（訂正前）

任意のエルミート演算子 $\hat{A}$ に対する固有ベクトル（完全規格直交系）$|i\rangle$ を基底ベクトルとして，任意の状態ベクトル $|\Psi\rangle$ を $|\Psi\rangle=\sum_i c_i|i\rangle$ と表す．ここで演算子 $\hat{B}$ は，状態 $|j\rangle$ を別の状態 $|i\rangle(i\neq j)$ に遷移させる作用をする演算子であり，$\hat{B}|j\rangle=B_{ij}|i\rangle(i\neq j)$ の関係を満たすものとする．$|\Psi\rangle$ に対する $\hat{B}$ の期待値を計算せよ．

（訂正後）

訂正前の問題文中の演算子 $\hat{B}$ の定義 $\hat{B}|j\rangle=B_{ij}|i\rangle(i\neq j)$ が不明瞭であったこと＆こちらが意図した定義ではなかったことから，当初の解答にて，間違った解答を提示してしまいました．申し訳ありません．以下で，訂正した解答を示します．訂正した解答ですが，$\hat{B}$ の定義として 2 通りの異なった定義に対する解答を示しております．なお採点は，学生の不利にならないよう採点いたしますので，ご了承下さい．

【解答 1（$\hat{B}|j\rangle=\sum_{i\neq j}B_{ij}|i\rangle$ の場合．これが一般的な定義である．終状態 $|i\rangle$ は $i\neq j$ であるあらゆる状態を取り得るので，一般には $i(i\neq j)$ に関する和を取らないといけない．）】

$|\Psi\rangle$ に対する $\hat{B}$ の期待値は，

$$\langle B\rangle=\langle\Psi|\hat{B}|\Psi\rangle=\left(\sum_i c_i|i\rangle\right)^{\dagger}\hat{B}\left(\sum_j c_j|j\rangle\right)=\sum_{i,j}c_i^*c_j\langle i|\hat{B}|j\rangle$$

$$=\sum_{i,j}c_i^*c_j\sum_{k\neq j}B_{kj}\langle i|k\rangle=\sum_{i,j}c_i^*c_j\sum_{k\neq j}B_{kj}\delta_{ik}=\sum_{i,j(i\neq j)}c_i^*c_jB_{ij}$$

となる．B_{ij} は状態$|j\rangle$から別の状態$|i\rangle(i\neq j)$へ遷移する際にやり取りする物理量を表している．また$c_i^*c_j=|c_i||c_j|\exp\left[i(\theta_j-\theta_i)\right]$は状態$|i\rangle$と状態$|j\rangle$の間の可干渉性を表しており，状態$|i\rangle$と状態$|j\rangle$が一定の位相関係を保っている場合のみ有限の値をもつ．これを量子コヒーレンスと言い，量子コンピュータや量子センサにおいては，量子コヒーレンス（可干渉性）が保たれていることが必要である．遷移確率は$|c_i||c_j|$に依存する．

【解答 2（$\hat{B}|j\rangle=B_{ij}|i\rangle(i\neq j)$の場合．訂正前の問題中の$\hat{B}$の定義．これは，終状態$|i\rangle$が$i\neq j$である<u>特定の</u>基底ベクトルのみ取ることを前提としている）】

$$\langle B\rangle=\langle\Psi|\hat{B}|\Psi\rangle=\left(\sum_k c_k|k\rangle\right)^\dagger\hat{B}\left(\sum_j c_j|j\rangle\right)=\sum_{j,k}c_k^*c_j\langle k|\hat{B}|j\rangle$$
$$=\sum_{j,k(j\neq i)}c_k^*c_jB_{ij}\langle k|i\rangle=\sum_{j,k(j\neq i)}c_k^*c_jB_{ij}\delta_{ki}=\sum_{j(j\neq i)}c_i^*c_jB_{ij}$$

7.　（訂正前）

任意の演算子$\hat{A}$の行列表現におけるi行j列目の要素を行列要素A_{ij}とおく．完全規格直交系をなす状態ベクトル$|i\rangle$を基底ベクトルとして，$A_{ij}=\langle i|\hat{A}|j\rangle$であることを示せ．$\hat{A}$の行列表現における対角項$A_{ii}$および非対角項$A_{ij}(i\neq j)$の示す物理的意味を説明せよ．（ヒント：問 5・6 の結果および講義ビデオから考えてみよ）

（訂正後）

任意の演算子$\hat{A}$の行列表現におけるi行j列目の要素を行列要素A_{ij}とおく．完全規格直交系をなす状態ベクトル$|i\rangle$を基底ベクトルとする．ここで<u>**基底ベクトルが，i行目の要素のみ 1，他の要素は 0 である列ベクトルで表されるとき**</u>，$A_{ij}=\langle i|\hat{A}|j\rangle$であることを示せ．$\hat{A}$の行列表現における対角項$A_{ii}$および非対角項$A_{ij}(i\neq j)$の示す物理的意味を説明せよ．（ヒント：問 5・6 の結果および講義ビデオから考えてみよ）

（補足説明：一般に基底ベクトルは，完全規格直交系をなすベクトルであれば何でも良く，i行目の要素のみ 1，他の要素は 0 である列ベクトルで表されない場合もある．基底ベクトルが，i 行目の要素のみ 1，他の要素は 0 である列ベクトルで表される場合のみ$A_{ij}=\langle i|\hat{A}|j\rangle$が成り立つが，訂正前の問題文では，その点が明記されておりませんでした．深く考えた学生は，「これでは答えがでないではないか！」と悩んでしまったかもしれません．そのような理由で答えられなかったとしたら，連絡下さい．点数をあげたいと思います．ただほとんどの学生は，基底ベクトルが，i 行目の要素のみ 1，他の要素は 0 の列ベクトルで表されるという前提で解いていましたので，影響のある学生は少なかったのではないかと思います．厳密さに欠けていて申し訳ありませんでした）

【解答】

以下の解答は，基底ベクトル$|i\rangle$が，i行目の要素のみが1，他の要素が0である列ベクトルで表されることを前提にして解答している．

基底ベクトル$|i\rangle$は完全系をなすことから，$\sum_i |i\rangle\langle i| = \hat{1}$の関係を満たす．これより，

$$\hat{A} = \left(\sum_i |i\rangle\langle i|\right)\hat{A}\left(\sum_j |j\rangle\langle j|\right) = \sum_{i,j}\langle i|\hat{A}|j\rangle|i\rangle\langle j|$$

となる. ここで$|i\rangle\langle j|$はi行j列目の要素のみが1, 他の要素が0である行列であることから, $\langle i|\hat{A}|j\rangle$が$i$行$j$列目の要素$A_{ij}$であることがわかる.

対角項A_{ii}は，基底ベクトル$|i\rangle$を$\hat{A}$に対する固有ベクトルにした場合には，その固有値A_{ii}に一致する．すなわち対角項A_{ii}は，$\hat{A}$に対する基底ベクトル$|i\rangle$の固有値に対応する．もし状態ベクトルが特定の基底ベクトルでのみ表される状態の場合，$\hat{A}$の期待値はA_{ii}に一致する．

非対角項$A_{ij}\,(i \neq j)$は，基底ベクトル$|i\rangle$を$\hat{A}$に対する固有ベクトルにした場合には，問6のおけるB_{ij}に一致する．このことから，非対角項$A_{ij}\,(i \neq j)$は状態$|j\rangle$から別の状態$|i\rangle(i \neq j)$に遷移する際に$\hat{A}$で表される物理量の変化量を表している．

補足説明：問3～5で用いられているA_{ii}（演算子$\hat{A}$に対する固有値）と，問7で用いられているA_{ii}（演算子$\hat{A}$の行列要素）は，異なるものを示している．ただし基底ベクトルとして，演算子$\hat{A}$の固有ベクトルを用いた場合，両者は一致する．同様に，問6のB_{ij}と問7の$A_{ij}\,(i \neq j)$は異なるものを示しているが，基底ベクトルとして，演算子$\hat{A}$の固有ベクトルを用いた場合，両者は一致する．同じような文字を用いているため混同しやすいが，区別して使用すること．