量子力学の運動方程式

古典力学は，時間の経過とともに物体がどう動くかを記述・分析・予測する理論体系である．古典力学を使って，物体に所望の運動をさせる方法・しかけを作ることもできる．

量子力学でも，原子や電子などの物理系の時間変化を調べる．時間変化の記述の仕方には，シュレーディンガー描像とハイゼンベルク描像と呼ばれる 2 通りの流儀がある．具体的なハミルトニアンの数式を定めることによって，物理系の数理モデルが作られる．

今回で量子力学の基本的な枠組みは完成する．つまり，物理系の状態はヒルベルト空間のベクトルで表され，物理量はヒルベルト空間上の演算子で表され，物理系の時間変化はハミルトニアンとシュレーディンガー方程式で決まる．あとは，現実の現象をうまく説明できるようなハミルトニアンを見つけて方程式を立てて解き，得られた答えを現実と照らし合わせて解釈するという問題が残る．

シュレーディンガー方程式

系の状態ベクトルは時間とともに変化する．時刻 t における状態ベクトルを $|\psi(t)\rangle$ と書く．状態ベクトルの変化の仕方を決めるのが**シュレーディンガー方程式** (Schrödinger equation)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{1}$$

である．ここで $\hat{H}$ は**ハミルトニアン** (Hamiltonian) と呼ばれる演算子である．また，

$$h = (6.62606957\cdots)\times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s} \tag{2}$$

は [エネルギー $\times$ 時間] の次元を持つ物理定数であり，プランク定数 (Planck constant) と呼ばれる．h を 2π で割った

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = (1.054571726\cdots)\times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s} \tag{3}$$

を使うことも多い．$\hbar$ は「エイチ・バー」とか「エイチ・スラッシュ」と読む．

シュレーディンガー方程式にはハミルトニアンという演算子が現れるが，唯一のハミルトニアンを決める絶対的規則はなく，むしろハミルトニアンの候補となる演算子が複数あると考えるべきである．ハミルトニアンとして具体的な演算子を一つ選ぶごとに一つのモデルが定まり，それを分析することによって，いろいろな予測を引き出せる．**ハミルトニアンはそういう予測が実験と合うように選ばれるものである**．

ただ，ハミルトニアンの選び方に関して，すべてのモデルに共通する規則はある．最低限の規則として，**ハミルトニアンは自己共役演算子でなくてはならない**：

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H} \tag{4}$$

問 1．ヒルベルト空間 $\mathbb{C}^2$ の状態ベクトル

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} \tag{5}$$

が，ハミルトニアン

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon & \alpha \\ \alpha & \varepsilon \end{pmatrix} \tag{6}$$

に関してシュレーディンガー方程式 (1) を満たしているとする．ただし，ε, α は実数とする．(i) シュレーディンガー方程式の初期値問題を解け．つまり，$c_1(t), c_2(t)$ を $c_1(0), c_2(0)$ と t の

関数で表せ．
(ii) 初期状態が

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} c_1(0) \\ c_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{7}$$

だった場合の $c_1(t), c_2(t)$ を求めよ．また，$p_1(t) = |c_1(t)|^2$, $p_2(t) = |c_2(t)|^2$ を求め，それぞれグラフを描け．また，この解の物理的意味を検討せよ．
(iii) 初期状態が

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} c_1(0) \\ c_2(0) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{8}$$

だった場合の $c_1(t), c_2(t)$ を求めよ．また，$p_1(t) = |c_1(t)|^2$, $p_2(t) = |c_2(t)|^2$ を求め，それぞれグラフを描け．また，この解の物理的意味を検討せよ．

問 2. $|\psi(t)\rangle$ がシュレーディンガー方程式 (1) を満たすなら，任意の t に対して

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle \tag{9}$$

が成り立つことを証明せよ．この式を**ノルムの保存則**または**確率の保存則**という．

問 3. 演算子 $\hat{A}$ の指数関数を

$$\begin{aligned} e^{\hat{A}} &:= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n \\ &= I + \hat{A} + \frac{1}{2!}\hat{A}^2 + \frac{1}{3!}\hat{A}^3 + \cdots \end{aligned} \tag{10}$$

で定義する．実数変数 t について

$$\frac{d}{dt} e^{t\hat{A}} = \hat{A} \cdot e^{t\hat{A}} = e^{t\hat{A}} \cdot \hat{A} \tag{11}$$

$$\left(e^{\hat{A}}\right)^\dagger = e^{(\hat{A}^\dagger)} \tag{12}$$

が成り立つことを示せ．

問 4. 実数 t とベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{13}$$

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle \tag{14}$$

とおくと，この $|\psi(t)\rangle$ は方程式 (1) を満たすことを示せ．また，

$$\hat{U}(t)^\dagger = e^{i\hat{H}t/\hbar} \tag{15}$$

であることを証明せよ．$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ は**時間発展演算子** (time-evolution operator) と呼ばれる．

エネルギー固有状態は定常状態

ハミルトニアンの固有値問題

$$\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \tag{16}$$

にあてはまる固有値 E_n を**エネルギー固有値** (energy eigenvalue) といい，固有ベクトル $|\phi_n\rangle$ を**エネルギー固有状態**という．ハミルトニアンの固有値問題 (16) のことを**時間に依らないシュレーディンガー方程式** (time-independet Schrödinger equation) ともいう．

E_n の n はエネルギー固有値の通し番号である．$E_1, E_2, E_3, \cdots$ のように飛び飛びのエネルギー値があることを念頭に置いて n という文字を使ったが，必ずしもエネルギー値は不連続とは限らず，連続的な値をとることもある．

問 5. ハミルトニアンの固有ベクトル $|\phi_n\rangle$ に関して

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_nt/\hbar}|\phi_n\rangle \tag{17}$$

とおくと，

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = E_n|\psi(t)\rangle \tag{18}$$

が成り立つことを確認せよ．また，シュレーディンガー方程式 (1) も成り立つことを確認せよ．また，このとき任意のベクトル χ に対して

$$\Big|\langle\chi|\psi(t)\rangle\Big| = \Big|\langle\chi|\psi(0)\rangle\Big| \tag{19}$$

が成り立つことを示せ．

上の式 (18) は，エネルギー固有状態は時間が経っても同じエネルギー固有値に属する固有状態であり続けることを意味している．また，(19) は，エネルギー固有状態においては確率分布が時間変化しないことを意味している．そのため，エネルギー固有状態のことを**定常状態** (stationary state) ともいう．

問 6. ε, α を実数とする．ヒルベルト空間 $\mathbb{C}^3$ 上のハミルトニアン

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon & \alpha & 0 \\ \alpha & \varepsilon & \alpha \\ 0 & \alpha & \varepsilon \end{pmatrix} \tag{20}$$

のエネルギー固有値と固有ベクトルを求めよ．

ハイゼンベルク方程式

状態ベクトルの時間変化を与える式 (13), (14) と物理量の期待値を与える公式（ノート 3 (45) 式を参照せよ）

$$\langle \hat{A} \rangle \;=\; \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \tag{21}$$

を併せると，時刻 t における物理量の期待値は

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_t &= \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \hat{U}(t)\psi | \hat{A} | \hat{U}(t)\psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{U}(t)^\dagger \hat{A} \hat{U}(t) | \psi \rangle \end{aligned} \tag{22}$$

に等しい．ここで，演算子 $\hat{U}$ のエルミート共役 $\hat{U}^\dagger$ の定義式

$$\langle \hat{U}\psi | \chi \rangle = \langle \chi | \hat{U}\psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{U}^\dagger \chi \rangle \tag{23}$$

を使った．さらに

$$\hat{A}(t) := \hat{U}(t)^\dagger \hat{A} \hat{U}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A}\, e^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{24}$$

と定める．このとき，

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle \psi | \hat{A}(t) | \psi \rangle \tag{25}$$

が成り立つ．つまり同じ期待値を求めるのに，時間変化を状態ベクトルに押し付けることもできるし，時間変化を物理量演算子の方に押し付けることもできる．

問 7. 式 (24) の $\hat{A}(t)$ が

$$i\hbar \frac{d\hat{A}}{dt} = [\hat{A}(t),\, \hat{H}] \tag{26}$$

を満たすことを示せ．この式を**ハイゼンベルクの運動方程式** (Heisenberg equation of motion) という．

問 8. 演算子の交換子 $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ は次の性質を満たすことを示せ．ただし λ は任意の複素数．

$$[\hat{B}, \hat{A}] = -[\hat{A}, \hat{B}] \tag{27}$$

$$[\lambda\hat{A}, \hat{B}] = \lambda[\hat{A}, \hat{B}] \tag{28}$$

$$[\hat{A}, \lambda\hat{B}] = \lambda[\hat{A}, \hat{B}] \tag{29}$$

$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}] \tag{30}$$

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \tag{31}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \tag{32}$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] \tag{33}$$

$$\begin{aligned} &[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] \\ &\quad + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \end{aligned} \tag{34}$$

性質 (32), (33) は**ライプニッツ則** (Leibniz rule) と呼ばれる．(34) は**ヤコビ律** (Jacobi law) とか**ヤコビの恒等式** (Jacobi identity) と呼ばれる．

問 9. 位置 $\hat{Q}$ と運動量 $\hat{P}$ は正準交換関係 $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar$ を満たす自己共役演算子である．
(i) 質量 m, ばね定数 k のばねにつながっている質点の運動を考える．$k = m\omega^2$，同じことだが，$\omega = \sqrt{k/m}$ とおく．このとき，

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}k\hat{Q}^2 \tag{35}$$

をハミルトニアンとする系の運動方程式

$$\frac{d\hat{Q}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{Q}, \hat{H}], \quad \frac{d\hat{P}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{P}, \hat{H}] \tag{36}$$

を求めよ.

(ii) 上で求めた運動方程式を解け．ただし，$\hat{Q}(t), \hat{P}(t)$ を $\hat{Q}(0), \hat{P}(0)$ と t で表した式を運動方程式の初期値問題の解という.

(iii) 演算子 $\hat{A}, \hat{A}^\dagger$ を

$$\hat{A} := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\hat{P} - im\omega\hat{Q}) \tag{37}$$

$$\hat{A}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\hat{P} + im\omega\hat{Q}) \tag{38}$$

と定める．このとき,

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = 1 \tag{39}$$

が成り立つことを示せ.

(iv)

$$\frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}k\hat{Q}^2 = \hbar\omega\left(\hat{A}^\dagger\hat{A} + \frac{1}{2}\right) \tag{40}$$

が成り立つことを示せ.

(v)

$$\hat{N} := \hat{A}^\dagger\hat{A} \tag{41}$$

とおくと,

$$[\hat{N}, \hat{A}] = -\hat{A}, \tag{42}$$

$$[\hat{N}, \hat{A}^\dagger] = \hat{A}^\dagger \tag{43}$$

が成り立つことを示せ.

(vi) $\hat{N}$ の固有値は $n = 0, 1, 2, 3, \cdots$ であることを証明せよ．つまり，非負整数 n に対して，状態ベクトル $|\phi_n\rangle$ で

$$\hat{N}|\phi_n\rangle = n|\phi_n\rangle, \qquad \langle\phi_n|\phi_n\rangle = 1 \tag{44}$$

を満たすものが存在し，これら以外に $\hat{N}$ の固有値・固有ベクトルは存在しないことを証明せよ.