宿題６　　　　　　　　　　　解答例

問１．演算子 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ について次の交換関係を証明せよ

1) $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]$

2) $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$

1) 左辺 $= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B}$

右辺 $= \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B}$

2) 左辺 $= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A}$

右辺 $= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A}$

問２．次の演算子がエルミート演算子であるかどうかを確かめよ

$$x, \quad \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

エルミート演算子が満たすべき条件： $(f(x), \hat{A}g(x)) = (\hat{A}f(x), g(x))$

$$(f(x), xg(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)\, x\, g(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} x f^*(x)\, g(x)\, dx = (x f(x), g(x))$$

エルミート演算子

x は x を掛けるの意味なので順序を変えても関数の形は変わらない

$$(f(x), \frac{\partial}{\partial x} g(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \frac{\partial}{\partial x} g(x)\, dx$$

$$= \Big[f^*(x)\, g(x)\Big]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x} f^*(x)\right) g(x)\, dx = -\left(\frac{\partial}{\partial x} f(x), g(x)\right)$$

２行目の第一項は波動関数は有限の値を取るので $x \to \pm\infty$ でゼロでなければならないことによる。エルミート演算子ではない。

$$(f(x), \frac{\partial^2}{\partial x^2} g(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} g(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial g(x)}{\partial x}\, dx$$

$$= \left[f^*(x) \frac{\partial g(x)}{\partial x}\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x} f^*(x)\right) \frac{\partial g(x)}{\partial x}\, dx$$

$$= -\left[\frac{\partial f^*(x)}{\partial x}\, g(x)\right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} f^*(x)\right) g(x)\, dx = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x), g(x)\right)$$

２，３行目の第一項についても上と同じ理由でゼロとなる。エルミート演算子

問３．軌道角運動量について以下の問に答えよ。

$\mathbf{i}$，$\mathbf{j}$，$\mathbf{k}$ を x，y，z 方向の単位ベクトルとすると位置は $\mathbf{r} = \mathbf{i}x + \mathbf{j}y + \mathbf{k}z$ と、運動量は $\boldsymbol{p} = \mathbf{i}\,p_x + \mathbf{j}\,p_y + \mathbf{k}\,p_z = -i\hbar\left(\mathbf{i}\frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j}\frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)$ とまた角運動量は $\boldsymbol{L} = \mathbf{i}L_x + \mathbf{j}L_y + \mathbf{k}L_z$ と表せる。角運動量は $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ で定義される。

1) 角運動量の各成分を求めよ。

2) 角運動量に対する交換関係を示せ。

$[L_x, L_y]$，$[L_y, L^2]$，$[L_z, L_\pm]$，$[L^2, L_\pm]$

ただし $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$，$L_\pm = L_x \pm i L_y$ である。

1) ベクトル積 $\mathbf{i} \times \mathbf{j} = \mathbf{k}$，$\mathbf{j} \times \mathbf{k} = \mathbf{i}$，$\mathbf{k} \times \mathbf{i} = \mathbf{j}$ 及び $\mathbf{i} \times \mathbf{i} = \mathbf{j} \times \mathbf{j} = \mathbf{k} \times \mathbf{k} = \mathbf{0}$ に注意して

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$$

$$= \mathbf{i}\,(y\,p_z - z\,p_y) + \mathbf{j}\,(z\,p_x - x\,p_z) + \mathbf{k}\,(x\,p_y - y\,p_x)$$

$$L_x = y\,p_z - z\,p_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$L_y = z\,p_x - x\,p_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$L_z = x\,p_y - y\,p_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

2.1) $[L_x, L_y] = L_x L_y - L_y L_x$

$$= (-i\hbar)^2\left\{\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) - \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right\}$$

$$= (-i\hbar)^2\left\{y\left(\frac{\partial}{\partial x} + z\frac{\partial^2}{\partial z\,\partial x} - x\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - z\left(z\frac{\partial^2}{\partial y\,\partial x} - x\frac{\partial^2}{\partial y\,\partial z}\right)\right.$$

$$\left. - z\left(y\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial z} - z\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial y}\right) + x\left(y\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial y} - z\frac{\partial^2}{\partial z\,\partial y}\right)\right\}$$

$$= (-i\hbar)^2\left\{y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right\} = -(-i\hbar L_z) = i\hbar L_z$$

同じようにして $[L_y, L_z] = i\hbar L_x$，$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$ （cyclic) と成ることを時間のあるときに確かめよ。

以下 1) の結果を使って解く

2.2) $[L_y, L^2] = L_y L_x^2 + L_y L_y^2 + L_y L_z^2 - L_x^2 L_y - L_y^2 L_y - L_z^2 L_y$

$$= L_y L_x L_x + L_y L_z L_z - L_x L_x L_y - L_z L_z L_y$$

$$= (-i\hbar L_z + L_x L_y)\,L_x + (L_z L_y + i\hbar L_x)\,L_z$$

$$- L_x(i\hbar L_z + L_y L_x) - L_z\,(L_y L_z - i\hbar L_x)$$

$$= i\hbar(-L_z L_x + L_x L_z - L_x L_z + L_z L_x) + L_x L_y L_x + L_z L_y L_z - L_x L_y L_x - L_z L_y L_z = 0$$

同じようにして $[L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0$　を時間のあるときに確かめよ

2.3) $[L_z, L_\pm] = [L_z, L_x] \pm i[L_z, L_y]$

$= i\hbar L_y \pm i(-i\hbar L_x) = \pm\hbar L_x + i\hbar L_y = \pm\hbar L_\pm$

2.4) $[L^2, L_\pm] = [L^2, L_x \pm i L_y] = [L^2, L_x] \pm i[L^2, L_y] = 0$