2010 Dec. 13

量子力学 I (上田正仁) Homework.2

量子力学の線形代数的側面とオブザーバブルの考え方に慣れるため, 1 次元空間における電子の運動を考える. 簡単化のため, 空間のサイズを有限 ($0 \leq x \leq L$) とし, さらに $x = 0, L$ を同一視する (周期境界条件). ここではさらなる簡単化として空間を N 個の点に離散化する. すると, 空間の x 座標は, $\Delta x \equiv L/N$ を用いて $x_k = k\Delta x$ ($k = 0, 1, \ldots, N-1$) と書ける. さて, 電子の運動は波動関数つまり空間上の複素数値関数で表されるが, 今のセットアップでは空間は N 点 $(x_0, x_1, \ldots, x_{N-1})$ なので, 複素数値関数 $\phi(x)$ は N 個の複素数 $(c_1, c_2, \ldots, c_{N-1})$ で表される. 言い換えると, $x = x_k$ でのみ 1 となり他で 0 を返す関数 $\phi_k(x)$ ($k = 0, 1, \ldots, N-1$) を導入すれば, 関数 $\phi(x)$ は

$$\phi(x) = \sum_{k=0}^{N-1} c_k \phi_k(x) \tag{1}$$

と表せる.

問題 1 N 個の関数 $\phi_k(x)$ ($k = 0, 1, \ldots, N-1$) は正規直交基底であることを確かめよ. ただし関数 $\psi(x), \phi(x)$ の内積は $\sum_{l=0}^{N-1} \psi^*(x_l)\phi(x_l)$ で定義する (空間が連続の場合は積分で定義する). また, 完全性条件 $\sum_{k=0}^{N-1} \phi_k(x_l)\phi_k^*(x_{l'}) = \delta_{ll'}$ を満たすことを確かめよ. さらに, $\phi(x)$ の規格化条件を $c_1, c_2, \ldots, c_{N-1}$ で表せ.

問題 2 オブザーバブルの例として, 運動量 $\hat{p} = (\hbar/i)d/dx$ を考える. 空間を離散化したので微分は差分に置き換わり, 関数 $\phi(x)$ への作用は

$$\hat{p}\phi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\phi(x+\Delta x) - \phi(x-\Delta x)}{2\Delta x} \tag{2}$$

と表せるとする. ただし対称性を重視する記法を用いた (前進差分 $[\phi(x+\Delta x) - \phi(x)]/\Delta x$ と後退差分 $[\phi(x) - \phi(x-\Delta x)]/\Delta x$ の平均). $\hat{p}\phi_k(x)$ ($k = 0, 1, \ldots, N-1$) を求めよ.

問題 3 $\phi_k(x)$ ($k = 0, 1, \ldots, N-1$) を基底とすると, (1) は

$$\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{bmatrix} \tag{3}$$

と成分表示出来る. この表示で $\hat{p}$ を $N \times N$ 行列として書け. また, この行列のエルミート共役を計算することにより, $\hat{p}$ がエルミート演算子であることを確かめよ.

問題 4 この問題でのみ, 周期境界条件を外し, 空間を $x_k = k\Delta x$ ($k = 0, 1, \ldots, N$) の $N+1$ 点とする. この時 $\hat{p}\phi_k(x)$ $k = 0, N$ の定義は, 式 (2) のようには出来ず, 前進差分または後退差分で定義するしかない. この場合 $\hat{p}$ を $(N+1) \times (N+1)$ 行列として表示し, $\hat{p}$ はエルミート演算子では無いことを示せ.

問題 5 $\hat{p}$ を対角化し, 全ての固有値と対応する固有関数 $\psi_k(x)$ ($k = 0, 1, \ldots, N-1$) を求めよ. ただし, 固有関数は正規直交基底であるように選ぶこととする. さらにこれらが完全性条件 $\sum_{k=0}^{N-1} \psi_k(x_l)\psi_k^*(x_{l'}) = \delta_{ll'}$ を満たすことを直接計算によって示せ.

問題 6 $\hat{p}$ は正値演算子では無いが $\hat{p}^2$ は正値演算子であることを示せ.

Key Point 関数全体からなる集合はベクトル空間を成す. 空間が連続の場合 $(N \to \infty)$ これは無限次元であるが, 空間を離散化すれば有限次元に出来る. 量子力学における状態はこのような高次元のベクトル空間のひとつのベクトルとして表現される. また, 物理量はその空間上に作用するエルミートな線形演算子として表現され, オブザーバブルと呼ばれる. 運動量演算子のエルミート性は適切な境界条件によって保証されている. ([進んだ注] 空間を離散化する手法は線形代数的側面を理解しやすくしてくれるが, オブザーバブルの交換関係を乱すことがあるため, 実際の物理と対応付ける際には注意が必要である.)