量子力学 I 演習 問題 (第 7回)

樋口 さぶろお*

1998年11月26日

[7-1] 固有関数展開 (微分方程式)

時刻 t にも依存する x の関数 $f(x;t)$ が, 微分方程式

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} f(x;t) = A f(x;t)$$

にしたがって時間発展する. ただし, $|x| \to \infty$ で $|f(x)| \to \infty$ とならないような関数だけを考える. ただし, A は演算子 $A = v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. ($v$ は定数). 初期条件は

$$f(x; t=0) = \exp(-x^2/a^2), \qquad \frac{\partial}{\partial t} f(x; t=0) = 0.$$

次の手順で解 $f(x;t)$ を求めよ.

1. 演算子 A の固有値, 固有関数 $\{\phi_k(x)\}_{k \in \mathbb{R}}$ を求める.
2. 固有関数 $\phi_k(x)$ を基底として, 解を

$$f(x;t) = \int dk \; F_k(t) \phi_k(x)$$

   とかく. このとき, 係数関数 $F_k(t)$ の従う微分方程式を求め, 解く.
3. $f(x;t=0), \frac{\partial}{\partial t} f(x;t=0)$ を固有関数 $\phi_k(x)$ の線型結合としてかく.
4. 初期条件を満たす解 $f(x;t)$ を求める.

*hig@rice.c.u-tokyo.ac.jp, URL: http://rice.c.u-tokyo.ac.jp/~hig/, へや: 駒場 16 号館 809B, でんわ: (03)5454.6735

[7-2]　Ket vector の時間発展

時間 t に依存する ket vector $|\psi(t)\rangle$ が, 微分方程式

$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = A|\psi(t)\rangle \tag{1}$$

にしたがって時間発展する. A は演算子.

1. 演算子 A の固有値, 固有 ket vector を$\lambda_j, |\phi_j\rangle$ とする. 系 $|\phi_j\rangle$ が正規直交完全系をなしているとき,
$$A = \sum_j |\phi_j\rangle \lambda_j \langle\phi_j| \tag{2}$$
であることを示せ.
2. 係数 $\langle\phi_j|\psi(t)\rangle$ の時間発展を求めよ.
3. $|\psi(t)\rangle$ の時間発展が
$$|\psi(t)\rangle = \sum_j \mathrm{e}^{-i\lambda_j t}\langle\phi_j|\psi(0)\rangle|\phi_j\rangle \tag{3}$$
であることを示せ.

[7-3]　Fourier 変換と波動方程式

無限区間 $-\infty < x < \infty$ で波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,t) = v^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) \tag{4}$$

を考える. 時刻 $t=0$ で,

$$u(x,0) = f(x) := \begin{cases} u_0 \times (1 - |x/a|) & (|x| < a), \\ 0 & (\text{otherwise}), \end{cases}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,0) = 0$$

だったとする. 以後の時刻での $u(x,t)$ を, 次の手順で求めよ.

1. Fourier 積分表示 $u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk a(k,t)\mathrm{e}^{ikx}$ を代入して, $a(k,t)$ の満たす微分方程式を求める.
2. $u(x,0)$, $\dot{u}(x,0)$ を Fourier 変換して $a(k,0), \dot{a}(k,0)$ を求める.
3. 時間について積分して, $a(k,t)$ を求める.
4. 逆 Fourier 変換は, 少し面倒なのでしなくてよい.

[7-4] 正規直交完全系

1. 関数系 $\{\phi_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ を考える．この関数系が正規直交系であるということの定義を, bra, ket 記号 $\langle,\rangle$ を用いて書け.
2. 以下, この関数系が正規直交系であるとする．ある関数 ψ が, 係数 $c_k \in \mathbb{C}$ を用いて,
$$\psi(x) = \sum_{k\in\mathbb{N}} c_k \phi_k(x) \tag{5}$$
と表されているとする．$c_k = \langle\phi_k|\psi\rangle$ を示せ.
3. 任意の波動関数 ψ が, ある係数 $c_k \in \mathbb{C}$ を用いて, 式 (5) のように表されるとき, 関数系 $\{\phi_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ は完全系であるという．完全系であることと, '閉包の式'
$$1 = \sum_{k\in\mathbb{N}} |\phi_k\rangle\langle\phi_k| \tag{6}$$
が成立することとが同値であることを示せ.

[7-5] Hermite 行列

演算子 A を考える．正規直交完全系 $\{|\phi_a\rangle\}_{a\in\mathbb{N}}$ のもとで, 行列 $A_{ab} = \langle\phi_a|A\phi_b\rangle$ が Hermite であるとする (こういうとき, 演算子 A は hermite であるという).

1. 任意の $\langle v|, |w\rangle$ について, 内積の関係$\langle v|Aw\rangle = \langle Av|w\rangle$ を示せ.
2. A の固有値は実であることを示せ.

Hint. Vector v を固有 vector としたとき, $\langle v|Av\rangle = \langle v|Av\rangle^*$ をいえばよい.

3. A のすべての固有値は互いに相異なるとする．A のすべての固有関数は互いに直交することを示せ.

Hint. 2 つの異なる固有関数 $|v_1\rangle, |v_2\rangle$ について, $\langle v_1|Av_2\rangle$ を考える.

4. 別の正規直交完全系 $\{|\psi_a\}\rangle_{a\in\mathbb{N}}$ をとったとき, 行列 $U_{ab} = \langle\psi_a|\phi_b\rangle$ は unitary であることを示せ.
5. 演算子 B のすべての固有値は実で, 固有関数は (正規) 直交完全とする．任意の正規直交完全系 $\{|\psi_a\}\rangle_{a\in\mathbb{N}}$ のもとで, $B_{ab} = \langle\psi_a|B\psi_b\rangle$ は Hermite 行列であることを示せ.