問題５

運動量演算子の行列表現 P を成分で書くと

$$P_{j,k} = \frac{i\hbar}{2\Delta x}(\delta_{j-1,k} - \delta_{j,k-1})$$

ここで、

$$Q_{j,k} = \delta_{j-1,k}$$

とおくと

$$P = \frac{i\hbar}{2\Delta x}\left(Q - {}^{t}Q\right)$$

となる。ところで、

$$Q^N = I\left(\text{単位行列}\right)$$

ゆえ、

$$Q^{-1} = Q^{N-1} = {}^{t}Q$$

Q の固有値を λ、固有ベクトルの一つを **y** とおくと、

$$Q\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}$$

$$\therefore \lambda^N\mathbf{y} = Q^N\mathbf{y} = \mathbf{y}$$

$$\therefore (\lambda^N - 1)\mathbf{y} = \mathbf{o}$$

これにより

$$\lambda_m = \exp\,(i\frac{2m}{N}\pi)$$

ただし固有値を区別するために添え字 m を付けた。λ_m に属する単位固有ベクトル $\mathbf{y}_m$ は

$$(\mathbf{y}_m)_l = \frac{1}{\sqrt{N}}\exp\left(-i\frac{2ml}{N}\pi\right)$$

である。したがって、ユニタリ行列$(U)_{l,m} = (\mathbf{y}_m)_l$で Q は対角化できる。

また、Q^{-1} の固有ベクトルも $\mathbf{y}_m$ であるが、それが属する固有値は逆数になるから Q と同じ行列 U で対角化でき、かつその対角行列の各成分は Q を対角化した行列の各成分の逆数になる。すなわち、

$$({}^{t}UQU)_{j,k} = \delta_{j,k}\exp\,(i\frac{2j}{N}\pi)$$

$$({}^{t}UQ^{-1}U)_{j,k} = \delta_{j,k}\exp\,(-i\frac{2j}{N}\pi)$$

従って

$$\{{}^{t}U(Q - Q^{-1})U\}_{j,k} = \delta_{j,k}\left\{\exp\left(i\frac{2j}{N}\pi\right) - \exp\left(-i\frac{2j}{N}\pi\right)\right\} = 2i\delta_{j,k}\sin(\frac{2j}{N}\pi)$$

よって

$$({}^t\mathrm{UPU})_{j,k} = \frac{-\hbar}{\Delta x}\delta_{j,k}\sin(\frac{2j}{N}\pi)$$

これが P を対角化した行列である。これを D と置こう。

$\boldsymbol{\phi}$ を第 j 成分が ϕ_j であるベクトルとし、$\boldsymbol{\psi}$ を第 j 成分が ψ_j であるベクトルとすると

$$\hat{p}\ {}^t\boldsymbol{\phi} = {}^t\boldsymbol{\phi}\mathrm{P} = {}^t\boldsymbol{\phi}\mathrm{UD}\ {}^t\mathrm{U}$$

$$\therefore \hat{p}\ {}^t\boldsymbol{\phi}\mathrm{U} = {}^t\boldsymbol{\phi}\mathrm{UD}$$

すなわち

$${}^t\boldsymbol{\psi} = {}^t\boldsymbol{\phi}\mathrm{U}$$

したがって

$$\psi_j = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{l=0}^{N-1}\phi_l \exp\left(-i\frac{2lj}{N}\pi\right)$$

これが正規直交系であることを確かめる。

$$\sum_{m=0}^{N-1}\psi_j(x_m)\,\psi_k{}^*(x_m) = \sum_{l=0}^{N-1}\frac{1}{N}\exp\left\{i\frac{2\pi}{N}l(k-j)\right\}\ \because \boldsymbol{\phi}\text{の正規直交性}$$

k=j のとき

$$= \sum_{l=o}^{N-1}\frac{1}{N} = 1$$

そうでないとき

$$= \frac{1-\exp\{2\pi i(k-j)\}}{1-\exp\left\{i\frac{2\pi}{N}(k-j)\right\}} = 0$$

よって正規直交系。

次に完全性条件を満たすことを示す。

$$\sum_{j=0}^{N-1}\psi_j(x_l)\,\psi_j{}^*(x_{l'}) = \sum_{j,k,m=o}^{N-1}\frac{1}{N}\phi_k(x_l)\phi_m{}^*(x_{l'})\exp\{i\frac{2\pi}{N}(mj-kj)\}$$

$$= \sum_{j,k,m=o}^{N-1}\frac{1}{N}\delta_{k,l}\delta_{m,l'}\exp\{i\frac{2\pi}{N}(mj-kj)\}$$

$$= \sum_{j=o}^{N-1}\frac{1}{N}\exp\{i\frac{2\pi}{N}j(l'-l)\}$$

$$= \delta_{l,l'}\ (\because \text{正規直交性を確かめた計算参照})$$

問題６

$$\psi(x)=\sum_{j=0}^{N-1} d_j \psi_j(x)$$

と置く。このとき、

$$\hat{p}\psi_j(x)=\frac{-\hbar}{\Delta x}\sin(\frac{2j}{N}\pi)\,\psi_j(x)$$

を用いれば

$$<\psi|\hat{p}|\psi>=\sum_{j,k,l=0}^{N-1} d_k^* \psi_k^*(x_j) d_l\ (\frac{-\hbar}{\Delta x})\sin(\frac{2l}{N}\pi)\,\psi_l(x_j)$$

$$=\sum_{k,l=0}^{N-1} d_k^* d_l\ (\frac{-\hbar}{\Delta x})\sin(\frac{2l}{N}\pi)\,\delta_{k,l} \because \psi_k\text{の正規直交性}$$

$$=\sum_{k=0}^{N-1} |d_k|^2 (\frac{-\hbar}{\Delta x})\sin(\frac{2k}{N}\pi)$$

これは非負とは限らないが、同様の計算により

$$<\psi|\hat{p}^2|\psi>=\sum_{k=0}^{N-1} |d_k|^2\ (\frac{\hbar}{\Delta x})^2 \sin^2(\frac{2k}{N}\pi)$$

となり、これは必ず非負である。

よって題意は示された。