

2018年度 構造化学 (中田) Quiz 6 回目

1. 系の状態が Ψ で表される時、 Ψ をなんとよぶか。
2. 時間に依存しないシュレーディンガー方程式 $\hat{H}\Psi = E\Psi$ について、 E をなんと呼ぶか。 Ψ をなんと呼ぶか。
3. 2.について、 E を低い順に並べる。もっとも低い E_0 とそれに対応する Ψ_0 、したがって $\hat{H}\Psi_0 = E_0\Psi_0$ 、この E_0, Ψ_0 をなんと呼ぶか。
4. E_0 より大きな E_1 とそれに対応する Ψ_1 をなんと呼ぶか。
5. エルミート行列はどんな性質を持った行列か。
6. エルミート行列の固有値は全て実数であることを示せ。
7. エルミート行列の違う固有値に属する固有ベクトル同士は直交することを示せ。
8. $-i\hbar\frac{d}{dx}$ はエルミート演算子か。理由をつけて答えよ
9. 状態が Ψ のときの系のエネルギーの期待値を系の \hat{H} を使って表わせ。
10. 1粒子からなる系の状態が $\Psi(x)$ で表されているとき、粒子が $x \sim x + dx$ にある確率を求めよ。
11. 1粒子からなる系の状態が $\Psi(x)$ で表されているとき、状態の規格化はどうすればよいか一つ示せ。
12. 状態 $\Psi(x)$ には $[-\infty, \infty]$ で絶対値をとって二乗して、積分可能な関数を考える。その物理的意味を述べよ。
13. 状態の線形重ね合わせはまた状態である。これを式で表せ。
14. エルミート演算子の固有関数 $\{\Phi_i\}_{i=1,2,3,\dots,\infty}$ たちは一般に完全系である。任意の Ψ について、 Φ_i で展開できる。これを式で表せ。
15. 系の Hamiltonian の固有関数、固有値を $H\Phi_i = E_i\Phi_i (i = 1, 2, \dots, \infty)$ で表す。系の状態が Ψ で表されているとき、エネルギーを一回測定したらどうなるか、答えよ。
16. 系の Hamiltonian の固有関数、固有値を $H\Phi_i = E_i\Phi_i (i = 1, 2, \dots, \infty)$ で表す。系の状態が Ψ のとき、エネルギーの期待値を求めよ。
17. 感想、コメント、質問

裏側にこの講義では物足りない人向けの問題をつけた。

18. 交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を示せ。

19. 位置演算子の固有状態を $|x\rangle$ とする。これについて上記の交換関係を

$$\langle x | [\hat{x}, \hat{p}] | x \rangle = \langle x | \hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x} | x \rangle = x \langle x | \hat{p} | x \rangle - \langle x | \hat{p} | x \rangle x = 0$$

求めると上の式のように矛盾するようになる。この議論のおかしな点を指摘せよ。これより量子力学の数学は有限次元の線形代数とみなせないことがわかる。大抵の場合は有限次元で ok であるが、注意しないとイケない。

20. 位置と運動量に関する不確定性原理を一次元の波動関数 Ψ について示せ(過去問参照)

21. \hat{H} がエルミート演算子であるとき $\exp(i\hat{H}) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{H}^n}{n!}$ はユニタリ演算子であることを示せ。

22. 運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ と何回も微分可能な関数 $\psi(x)$ について

$$\exp(i\hat{p}a)\psi(x) = \psi(x+a)$$

が成立することを示せ。 \hat{p} は、波動関数にかかると微小移動させることがわかる。それを何度もかけると(=exp)有限の長さ a だけ移動させる、という物理的意味を持つ。

23. 系の Hamiltonian \hat{H} が波動関数 ψ にかかると微小時間系が時間発展する。これは時間依存のシュレーディンガー方程式である ($-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$)。有限時間発展の場合の方程式を求めよ。