演習問題 1

問題 1. $\mathcal{O}$ を観測者がいる系の物理量とし、系の密度行列を ρ とする。

(a) $\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle = \mathrm{Tr}\ \hat{\rho}\hat{\mathcal{O}} = \sum_n \langle n|\rho\mathcal{O}|n\rangle$ が観測者の基底 $\{|n\rangle\}$, $(n = 1, 2, \cdots)$ の選び方によらないことを示せ。(ユニタリー変換で不変であることを示す。)

(b) 観測者の状態の他に外界の状態 $|m\rangle^{ex}$ を補って全宇宙の状態 $|\Psi\rangle$ を $|\Psi\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m}|n\rangle \otimes |m\rangle^{ex}$ と展開したとき、全宇宙の波動関数の規格化条件を書け。

(c) $\mathcal{O}$ は外界の波動関数に関しては C 数であること、つまり $\mathcal{O}|m\rangle^{ex} = |m\rangle^{ex}\mathcal{O}$, を用いて　$\langle n|\rho|n'\rangle$ を $c_{n,m}$ で表せ。

(d) ρ がエルミートであることを示せ。

(e) $\mathrm{Tr}\rho = 1$ を示せ。

(f) ρ の固有値 ρ_i に対して $0 \leq \rho_i \leq 1$ を示せ。

問題 2. 2 準位 ϵ_1, ϵ_2 をもつ粒子が N 個ある系の比熱 $C = \frac{1}{N}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T}$ を求める。

(a) 系をミクロカノニカル集団として扱い全エネルギー固有値とその縮退度を求めよ。次に N は十分大きいとしてスターリングの公式を用いエネルギーと温度の関係を求め比熱を求めよ。

(b) 次に同じ系をカノニカル集団として扱い比熱を求めよ。

(c) 熱力学的極限と統計集団の同等性について議論せよ。

問題 3. 独立な 2 つの系 A,B の密度行列 $\rho_{A,B}$、分配関数 $Z_{A,B}$、自由エネルギー $F_{A,B}$ としたとき全系の密度行列 ρ と $\rho_{A,B}$ の関係を論じ、分配関数 Z、自由エネルギー F が

$$
\begin{aligned}
Z &= Z_A Z_B \\
F &= F_A + F_B
\end{aligned}
$$

となることを示せ。よって独立な n 粒子系の場合 $Z = \prod_{i=1}^n Z_i$、$F = \sum_{i=1}^n F_i$ となることを確認せよ。

問題 4. 調和振動子についてまとめる。

(a) 古典的な運動方程式 $\ddot{x} = -\omega^2 x$ は古典解析力学におけるハミルトニアン

$$H_1 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

から Hamilton の正準運動方程式を用いて導かれることを示せ。

(b) $p = -i\hbar\partial_x$ の置き換えにより古典的なハミルトニアンを量子化する。ここで $[x, p] = i\hbar$ を確認せよ。

(c)

$$
\begin{aligned}
x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a) \\
p &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a^\dagger - a)
\end{aligned}
$$

が $[x, p] = i\hbar$ を満たすことを示し $H = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2})$ を導け。なお $[a, a] = 0$, $[a^\dagger, a^\dagger] = 0$, $[a, a^\dagger] = 1$、$\hat{N} = a^\dagger a$ である。

(d) $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle$、$a|0\rangle = 0$ としたとき

$$
\begin{aligned}
H_1|n\rangle &= \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle \\
\langle n|n'\rangle &= \delta_{nn'}
\end{aligned}
$$

となることを示せ。

(e) 1 次元調和振動子の分配関数を求めよ。

(f) 2 次元、3 次元調和振動子について考察せよ。

問題 5. 1 次元の質量 m の自由粒子を一辺 L の箱の中で周期的境界条件で考える。

(a) 波動関数が $\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}$ となることを示し、そのエネルギー E と運動量 p を書け。

(b) 許される波数の条件を示せ。

(c) $\phi_k(x)$ の規格化の条件を書け。

(d) $L \to \infty$ として、$\phi_k(x)$ の完全性の条件について議論せよ。

(e) a を格子定数として $\phi^n = \phi(na)$ とおき、周期的な数列 $\{\phi^n|\phi^{n+N} = \phi^n, n = 1, \cdots, N\}$ をつくる。ただし $L = Na$。$\phi^{n\pm 1} = \phi(na \pm a) = \phi^n + a\phi' - \frac{a^2}{2}\phi''$ と展開し差分シュレディンガー方程式

$$
-t(\phi^{n-1} + \phi^{n+1} - 2\phi^n) = E\phi^n
$$

がシュレディンガー方程式と一致するように t を定めよ。

(f) $\tilde{\phi}_k^n = e^{ikn}/\sqrt{N}$ が差分シュレディンガー方程式の解であることを示し E と k との関係を求めよ。

(g) 周期性 $\tilde{\phi}_k^{n+N} = \tilde{\phi}_k^n$ から許される k の値を記せ。

(h) $\tilde{\phi}_k^n$ の規格直交性 $\sum_{n=1}^{N}(\tilde{\phi}_k^n)^*\tilde{\phi}_{k'}^n = \delta_{kk'}$ を示せ。

(i) $\tilde{\phi}_k^n$ の完全性 $\sum_k \tilde{\phi}_k^n(\tilde{\phi}_m^k)^* = \delta_{nm}$ を示せ。