量子力学演習問題6 解答: 調和振動子

問題6-1: 1次元シュレーディンガー方程式の一般的な性質

問題設定

1次元シュレーディンガー方程式:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\psi(x)=E\psi(x)$$

ここで、$V(x)$は実関数である。束縛状態（$|x|\to\infty$で波動関数$\psi(x)$が十分速く減衰する状態）について、以下の定理を証明せよ。

(i) エネルギー準位は離散的である

問題: 束縛状態のエネルギー準位が離散的であることを証明せよ。

証明:

導出の戦略

束縛状態の定義（境界条件）と、シュレーディンガー方程式が2階線形微分方程式であることを組み合わせて、離散性を証明する。

ステップ1: 束縛状態の定義と境界条件

束縛状態とは、$|x|\to\infty$で波動関数$\psi(x)$が十分速く0に減衰する状態である。これは、以下の境界条件を意味する:

$$\lim_{x\to+\infty}\psi(x)=0,\quad \lim_{x\to-\infty}\psi(x)=0$$

重要なポイント: この境界条件は、波動関数が無限遠で0になるという強い制約である。

ステップ2: シュレーディンガー方程式の性質

1次元シュレーディンガー方程式:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\psi(x)=E\psi(x)$$

これは**2階線形常微分方程式**である。一般に、2階線形微分方程式の一般解は、2つの独立な解$\psi_1(x)$と$\psi_2(x)$の線形結合で表される:

$$\psi(x)=c_1\psi_1(x)+c_2\psi_2(x)$$

ここで、c_1とc_2は定数である。

ステップ3: 境界条件の適用

束縛状態では、$x\to+\infty$と$x\to-\infty$の両方で$\psi(x)=0$でなければならない。

重要な観察: 一般に、2つの独立な解$\psi_1(x)$と$\psi_2(x)$は、異なる漸近挙動を持つ。例えば: - $\psi_1(x)$は$x\to+\infty$で発散するかもしれない - $\psi_2(x)$は$x\to-\infty$で発散するかもしれない

しかし、束縛状態では、**両方の無限遠で0になる**必要がある。これは、c_1とc_2を適切に選ぶことで実現できるかもしれないが、**エネルギーEによっては不可能な場合がある**。

ステップ4: エネルギーによる条件

具体的には、与えられたエネルギーEに対して: 1. $x\to+\infty$での境界条件: $\lim_{x\to+\infty}[c_1\psi_1(x)+c_2\psi_2(x)]=0$ 2. $x\to-\infty$での境界条件: $\lim_{x\to-\infty}[c_1\psi_1(x)+c_2\psi_2(x)]=0$

これらの2つの条件を同時に満たすためには、c_1とc_2が**自明でない解**（$c_1 = c_2 = 0$以外の解）を持つ必要がある。これは、2つの条件式の係数行列式が0になる必要があることを意味する。

重要な結論: この条件は、エネルギーEに対する**特性方程式**として表される。この特性方程式は、一般的には**離散的な解**$E = E_n$（$n = 0, 1, 2, ...$）のみを持つ。

ステップ5: 離散性の結論

したがって、束縛状態のエネルギー準位は離散的になる。すなわち、エネルギーの値は連続的ではなく、特定の値$E_0, E_1, E_2, ...$のみが許される。

答え: エネルギー準位は離散的である。

物理的意味と直感的理解:

1. **古典力学との対比:**
   - **古典力学:** 束縛状態（例：調和振動子）では、エネルギーは連続的に変化できる。エネルギーがEのとき、粒子は特定の軌道を描くが、Eは任意の正の値を取れる。
   - **量子力学:** 波動関数の波動性と境界条件により、エネルギーが離散化される。これは**量子化**と呼ばれる。
2. **波動関数の波動性:**
   - 波動関数は波動として振る舞う。境界条件を満たすためには、波動の波長や節の数が特定の値でなければならない。
   - これが、エネルギーが離散的な値のみを取る理由である。
3. **具体例:**
   - **調和振動子:** $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$（$n = 0, 1, 2, ...$）
   - **無限井戸型ポテンシャル:** $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2}$（$n = 1, 2, 3, ...$）
   - **水素原子:** 離散スペクトル（バルマー系列など）
4. **実験的意義:**
   - 原子のスペクトルが離散的な線スペクトルになる理由
   - 量子ドットなどのナノ構造でのエネルギー準位の離散化
   - 量子コンピュータなどでの応用

より詳細な数学的理解:

境界条件を満たす解が存在するための条件は、**固有値問題**として定式化される。この固有値問題は、一般に**離散スペクトル**を持つことが知られている（関数解析の結果）。これは、束縛状態のエネルギー準位が離散的であることの数学的な基礎である。

(ii) エネルギー準位に縮退はない

問題: 同じエネルギーEに対応する独立な波動関数が2つ以上存在しないこと（縮退がないこと）を証明せよ。

証明:

導出の戦略

背理法を用いる。同じエネルギーに対応する2つの独立な波動関数が存在すると仮定し、矛盾を導く。

ステップ1: 仮定の設定

背理法の仮定: 同じエネルギーEに対応する2つの**独立な**波動関数$\psi_1(x)$と$\psi_2(x)$が存在すると仮定する。

どちらもシュレーディンガー方程式を満たす:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + V(x)\psi_1 = E\psi_1 \quad \cdots (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + V(x)\psi_2 = E\psi_2 \quad \cdots (2)$$

重要なポイント: 「独立な」とは、$\psi_1(x) \neq c\psi_2(x)$（$c$は任意の定数）を意味する。

ステップ2: 2つの式の組み合わせ

(1)式に$\psi_2(x)$を掛け、(2)式に$\psi_1(x)$を掛ける:

$$\psi_2(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+V(x)\psi_1\right)=E\psi_1(x)\psi_2(x)$$

$$\psi_1(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dx^2}+V(x)\psi_2\right)=E\psi_1(x)\psi_2(x)$$

両辺は等しいので、左辺同士も等しい:

$$\psi_2(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+V(x)\psi_1\right)=\psi_1(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dx^2}+V(x)\psi_2\right)$$

展開すると:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+V(x)\psi_1\psi_2=-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1\frac{d^2\psi_2}{dx^2}+V(x)\psi_1\psi_2$$

$V(x)\psi_1\psi_2$の項は両辺で相殺される。したがって:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2\frac{d^2\psi_1}{dx^2}=-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1\frac{d^2\psi_2}{dx^2}$$

両辺に$2m/\hbar^2$を掛けて符号を変えると:

$$\psi_2\frac{d^2\psi_1}{dx^2}-\psi_1\frac{d^2\psi_2}{dx^2}=0 \quad \cdots(3)$$

ステップ3: 微分の書き換え（ロンスキアンの導出）

式(3)の左辺は、次のように書き換えられる。積の微分法則を逆に用いる:

$$\frac{d}{dx}\left(\psi_2\frac{d\psi_1}{dx}-\psi_1\frac{d\psi_2}{dx}\right)=\psi_2\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+\frac{d\psi_2}{dx}\frac{d\psi_1}{dx}-\psi_1\frac{d^2\psi_2}{dx^2}-\frac{d\psi_1}{dx}\frac{d\psi_2}{dx}$$

第2項と第4項は相殺される:

$$=\psi_2\frac{d^2\psi_1}{dx^2}-\psi_1\frac{d^2\psi_2}{dx^2}$$

したがって、式(3)は:

$$\frac{d}{dx}\left(\psi_2\frac{d\psi_1}{dx}-\psi_1\frac{d\psi_2}{dx}\right)=0$$

重要: この量$\psi_2\frac{d\psi_1}{dx}-\psi_1\frac{d\psi_2}{dx}$は**ロンスキアン**（Wronskian）と呼ばれる。

ステップ4: ロンスキアンが定数であること

微分が0なので、ロンスキアンは定数:

$$\psi_2\frac{d\psi_1}{dx}-\psi_1\frac{d\psi_2}{dx}=C \qquad (C\text{は定数})$$

ステップ5: ロンスキアンが定数であることの確認

ステップ4で示したように、ロンスキアンはxに依存しない定数である:

$$W(x) = \psi_2(x)\frac{d\psi_1}{dx}(x) - \psi_1(x)\frac{d\psi_2}{dx}(x) = C \quad (C\text{は定数})$$

これは、すべてのxに対して成り立つ。特に、$x \to +\infty$でも$x \to -\infty$でも成り立つ。

ステップ6: 束縛状態での波動関数の減衰

束縛状態では、$|x| \to \infty$で波動関数が0に減衰する:

$$\lim_{x\to+\infty} \psi_1(x) = 0, \quad \lim_{x\to+\infty} \psi_2(x) = 0$$

$$\lim_{x\to-\infty} \psi_1(x) = 0, \quad \lim_{x\to-\infty} \psi_2(x) = 0$$

重要なポイント: 導関数の減衰について

束縛状態では、波動関数が**十分速く**減衰することが要求される。これは、シュレーディンガー方程式から導かれる性質である。

具体的には、$|x| \to \infty$での漸近挙動を考える。ポテンシャル$V(x)$が有限であるか、あるいは無限遠で0に近づく場合を考えると、$|x|$が十分大きいところでは、シュレーディンガー方程式は:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} \approx E\psi$$

これは、ψが指数関数的に減衰することを意味する（$E < 0$の場合、束縛状態）。指数関数の導関数も指数関数的に減衰するため、導関数$\frac{d\psi}{dx}$も0に減衰する。

より正確な議論:

$|x|$が十分大きいとき、波動関数は$\psi(x) \sim e^{-\kappa|x|}$（$\kappa > 0$）のように減衰すると仮定できる。このとき:

$$\frac{d\psi}{dx} \sim -\kappa \mathrm{sgn}(x) e^{-\kappa|x|} \to 0 \quad (|x| \to \infty)$$

したがって、$|x| \to \infty$で:

$$\psi_1(x) \to 0, \quad \psi_2(x) \to 0$$
$$\frac{d\psi_1}{dx}(x) \to 0, \quad \frac{d\psi_2}{dx}(x) \to 0$$

ステップ7: ロンスキアンの極限値

ロンスキアン$W(x) = \psi_2(x)\frac{d\psi_1}{dx}(x) - \psi_1(x)\frac{d\psi_2}{dx}(x)$の極限を考える。

$|x| \to \infty$で、$\psi_1, \psi_2 \to 0$かつ$\frac{d\psi_1}{dx}, \frac{d\psi_2}{dx} \to 0$であるから、$W(x)$の各項は0に近づく。

しかし、より厳密には、**積の極限**を考える必要がある。例えば、$\psi_2\frac{d\psi_1}{dx}$の極限を考えると:

$$\lim_{x\to\infty} \psi_2(x)\frac{d\psi_1}{dx}(x) = \lim_{x\to\infty} \psi_2(x) \cdot \lim_{x\to\infty} \frac{d\psi_1}{dx}(x) = 0 \cdot 0 = 0$$

同様に:

$$\lim_{x\to\infty} \psi_1(x)\frac{d\psi_2}{dx}(x) = 0$$

したがって:

$$\lim_{x\to\infty} W(x) = \lim_{x\to\infty} \left(\psi_2\frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1\frac{d\psi_2}{dx}\right) = 0 - 0 = 0$$

同様に、$x \to -\infty$でも:

$$\lim_{x \to -\infty} W(x) = 0$$

ステップ8: 定数が0であることの結論

一方、ステップ4で示したように、$W(x)$は定数Cである。すなわち、すべてのxに対して$W(x) = C$である。

しかし、ステップ7で示したように、$x \to \infty$で$W(x) \to 0$であるから:

$$C = \lim_{x \to \infty} W(x) = 0$$

したがって、定数Cは0でなければならない:

$$\psi_2 \frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1 \frac{d\psi_2}{dx} = 0$$

ステップ9: 線形従属の導出

式を変形すると:

$$\psi_2 \frac{d\psi_1}{dx} = \psi_1 \frac{d\psi_2}{dx}$$

$\psi_2 \neq 0$の領域で、両辺をψ_2^2で割ると:

$$\frac{1}{\psi_2} \frac{d\psi_1}{dx} = \frac{\psi_1}{\psi_2^2} \frac{d\psi_2}{dx}$$

これは:

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\psi_1}{\psi_2}\right) = \frac{\frac{d\psi_1}{dx}\psi_2 - \psi_1 \frac{d\psi_2}{dx}}{\psi_2^2} = 0$$

を意味する。

したがって:

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\psi_1}{\psi_2}\right) = 0$$

ステップ10: 矛盾の導出

ψ_1/ψ_2の微分が0なので、ψ_1/ψ_2は定数である:

$$\frac{\psi_1(x)}{\psi_2(x)} = \text{定数} = c$$

したがって:

$$\psi_1(x) = c\psi_2(x)$$

これは、ψ_1とψ_2が**線形従属**であることを意味する。しかし、これは「2つの独立な波動関数が存在する」という仮定に矛盾する。

ステップ11: 結論

背理法により、同じエネルギーEに対応する独立な波動関数は1つしか存在しないことが示された。

答え: エネルギー準位に縮退はない（各エネルギー準位に対応する波動関数は1つに定まる）。

物理的意味と直感的理解:

1. **1次元の特殊性:**
    - **1次元:** 各エネルギー準位に対応する波動関数は1つに定まる（縮退なし）

- **3次元:** 対称性により縮退が生じることがある
  - 例：水素原子では、同じエネルギー（主量子数n）に対応する波動関数が複数存在する（角運動量量子数l、磁気量子数mによる縮退）

2. **波動関数の一意性:**
   - 1次元では、エネルギーEが与えられると、境界条件（束縛状態では無限遠で0）を満たす波動関数は本質的に1つに定まる
   - これは、2階微分方程式の解の一意性と関係している
3. **解析の容易さ:**
   - 縮退がないため、1次元系の解析は比較的容易
   - 各エネルギー準位が明確に区別される
4. **応用:**
   - 1次元ポテンシャル問題（井戸型、調和振動子など）の解析
   - 量子井戸、量子細線などの低次元構造の物理

(iii) $V(x)$が偶関数なら、$\psi(-x) = \pm\psi(x)$

問題: $V(x) = V(-x)$（偶関数）のとき、波動関数が$\psi(-x) = \pm\psi(x)$を満たすことを証明せよ。

証明:

導出の戦略

ポテンシャルの対称性（偶関数）を利用して、波動関数の対称性を導出する。$\psi(-x)$もシュレーディンガー方程式の解であることを示し、(ii)の結果（縮退なし）を用いる。

ステップ1: ポテンシャルの対称性

ポテンシャルが偶関数であること:

$$V(x) = V(-x)$$

具体例: - 調和振動子: $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$（$x^2$は偶関数） - 無限井戸（中心を原点に取る）: 対称なポテンシャル - 二重井戸型ポテンシャル（対称な場合）

ステップ2: 変数変換の適用

シュレーディンガー方程式:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad \cdots (1)$$

変数変換$x \to -x$を行う。これにより、xの関数$\psi(x)$は$\psi(-x)$に変わる。

重要な注意: 微分演算子$\frac{d^2}{dx^2}$は、変数変換$x \to -x$に対してどのように振る舞うか？

合成関数の微分法則を用いると、$u = -x$とすると:

$$\frac{d}{d(-x)} = \frac{d}{du} = \frac{d}{dx} \cdot \frac{dx}{du} = \frac{d}{dx} \cdot (-1) = -\frac{d}{dx}$$

したがって:

$$\frac{d^2}{d(-x)^2} = \frac{d}{d(-x)}\left(\frac{d}{d(-x)}\right) = \left(-\frac{d}{dx}\right)\left(-\frac{d}{dx}\right) = \frac{d^2}{dx^2}$$

重要な結果: $\frac{d^2}{d(-x)^2} = \frac{d^2}{dx^2}$（2階微分は符号が変わらない）

ステップ3: 変数変換後の方程式

式(1)で$x \to -x$とすると:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(-x)}{d(-x)^2} + V(-x)\psi(-x) = E\psi(-x)$$

ステップ2の結果$\frac{d^2}{d(-x)^2} = \frac{d^2}{dx^2}$と、$V(-x) = V(x)$（偶関数）を用いると:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(-x)}{dx^2} + V(x)\psi(-x) = E\psi(-x) \quad \cdots (2)$$

ステップ4: $\psi(-x)$が解であること

式(2)は、$\psi(-x)$が同じエネルギーEのシュレーディンガー方程式の解であることを示している。

重要な観察: 元の波動関数$\psi(x)$がエネルギーEの解であるなら、$\psi(-x)$も同じエネルギーEの解である。

ステップ5: 縮退の不存在の適用

(ii)の結果より、同じエネルギー準位には縮退がない（独立な波動関数は1つだけ）。したがって、$\psi(-x)$は$\psi(x)$と**線形従属**でなければならない。

すなわち、ある定数Cが存在して:

$$\psi(-x) = C\psi(x) \quad \cdots (3)$$

ステップ6: 定数Cの決定

式(3)で、xを$-x$に置き換える:

$$\psi(-(-x)) = C\psi(-x)$$

すなわち:

$$\psi(x) = C\psi(-x)$$

式(3)と組み合わせると:

$$\psi(x) = C\psi(-x) = C \cdot C\psi(x) = C^2\psi(x)$$

したがって:

$$(1 - C^2)\psi(x) = 0$$

$\psi(x)$は恒等的に0ではない（非自明な解）ので:

$$1 - C^2 = 0$$

したがって:

$$C^2 = 1$$

すなわち:

$$C = \pm 1$$

ステップ7: 最終結果

式(3)に代入すると:

$$\psi(-x) = \pm\psi(x)$$

答え: $\psi(-x) = \pm\psi(x)$

すなわち、波動関数は**偶関数**（$C = 1$の場合、$\psi(-x) = \psi(x)$）または**奇関数**（$C = -1$の場合、$\psi(-x) = -\psi(x)$）である。

物理的意味と直感的理解:

1. **対称性の反映:**

    - ポテンシャルが偶関数（$x \to -x$で不変）の場合、系全体がこの対称性を持つ
    - この対称性は波動関数に反映され、各エネルギー固有状態は偶関数または奇関数になる
2. **具体例: 調和振動子:**
    - 調和振動子$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$は偶関数
    - 基底状態（$n = 0$）：偶関数（$\psi_0(-x) = \psi_0(x)$）
    - 第1励起状態（$n = 1$）：奇関数（$\psi_1(-x) = -\psi_1(x)$）
    - 第2励起状態（$n = 2$）：偶関数
    - 一般に、nが偶数のとき偶関数、nが奇数のとき奇関数
3. **パリティ:**
    - 偶関数: **偶パリティ**（parity = +1）
    - 奇関数: **奇パリティ**（parity = -1）
    - これは、空間反転（$x \to -x$）に対する波動関数の変換性を表す
4. **選択則への応用:**
    - 遷移の選択則（どの状態間で遷移が可能か）は、パリティによって決定されることがある
    - 電気双極子遷移では、パリティが変化する必要がある
5. **1次元の特徴:**
    - 1次元では、対称なポテンシャルに対する各エネルギー固有状態は必ず偶関数または奇関数のいずれかになる
    - これは、縮退がないことと組み合わせて、非常に強い結果である

数学的な補足:

より一般に、系がある対称性（群の作用）を持つ場合、波動関数はその対称性の既約表現に分類される。1次元の場合、空間反転（$x \to -x$）という対称性により、波動関数は2つの既約表現（偶関数と奇関数）に分類される。

(iv) エネルギーが1つ上がると、波動関数の節の数は少なくとも1つ増える

問題: エネルギー準位が1つ上がると、波動関数の節（ノード）の数が少なくとも1つ増えることを示せ。

証明:

導出の戦略

ノード定理（節の定理）を用いて、エネルギー準位と節の数の関係を証明する。この定理は、1次元シュレーディンガー方程式の重要な性質である。

ステップ1: 節（ノード）の定義

波動関数の**節**（ノード、node）とは、$\psi(x) = 0$となる点（ただし、孤立した点で符号が変わる点）である。

注意: - 単に$\psi(x) = 0$となる点だけではなく、その前後で符号が変わる点を節と呼ぶ - 節の間では波動関数の符号が一定である

具体例（調和振動子）: - 基底状態（$n = 0$）：節の数 = 0 - 第1励起状態（$n = 1$）：節の数 = 1 - 第2励起状態（$n = 2$）：節の数 = 2

ステップ2: ノード定理の内容

ノード定理（Node Theorem）: 1次元束縛状態のシュレーディンガー方程式において、エネルギー準位を低い順に$E_0 < E_1 < E_2 < \cdots$と番号付けしたとき（基底状態を$n = 0$とする）、n番目のエネルギー準位に対応する波動関数$\psi_n(x)$は、**正確にn個の節**を持つ。

重要な性質: - 基底状態（$n = 0$）：節の数 = 0（符号が変わらない、通常は常に正または常に負） - 第1励起状態（$n = 1$）：節の数 = 1 - 第n励起状態: 節の数 = n

ステップ3: ノード定理の証明のスケッチ

ノード定理の完全な証明は関数解析を用いるが、ここでは直感的な説明と証明のアウトラインを示す。

方法1: 固有値問題の性質から

1次元束縛状態のシュレーディンガー方程式は、境界条件を満たす固有値問題として定式化できる。この固有値問題は、**スツルム・リウヴィル型**の固有値問題であり、以下の性質を持つ:

- 固有値は離散的で、$E_0 < E_1 < E_2 < \cdots$と順序付けできる
- n番目の固有関数は、区間内に正確にn個の零点（節）を持つ

これは、スツルムの比較定理（Sturm comparison theorem）から導かれる。

方法2: 変分原理からの直感的説明

エネルギーが高い状態ほど、波動関数はより「振動的」になる必要がある。これは、変分原理から理解できる:

- 基底状態は、エネルギー期待値を最小化する
- より多くの節を持つ波動関数は、より高いエネルギーを持つ傾向がある
- したがって、エネルギーの低い順に並べると、節の数が増える

方法3: 波動関数の振動性とエネルギーの関係

シュレーディンガー方程式:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

これを書き換えると:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi$$

エネルギーEが大きいほど、右辺の係数$[V(x) - E]$の絶対値が大きくなる（$E > V(x)$の領域では負の値が大きくなる）。これにより、波動関数はより「曲がりやすく」なり、より多くの節を持つようになる。

ステップ4: エネルギー準位と節の数の関係

ノード定理より、n番目のエネルギー準位の波動関数は正確にn個の節を持つ。

したがって: - n番目の準位: 節の数 = n - $(n+1)$番目の準位: 節の数 = $n+1$

エネルギー準位が1つ上がる（$n \to n+1$）と、節の数は:

$$(n+1) - n = 1$$

すなわち、**1つ増える**。

答え: エネルギー準位が1つ上がると、波動関数の節の数は1つ増える。

ステップ5: より弱い主張（「少なくとも1つ増える」について）

問題文では「少なくとも1つ増える」と書かれているが、ノード定理により、実際には**正確に1つ増える**ことが示される。

「少なくとも1つ増える」という表現は、より一般的な場合（例えば、縮退がある場合や、より一般的なポテンシャルの場合）を考慮したものと考えられるが、1次元束縛状態では、ノード定理により「正確に1つ増える」ことが保証される。

物理的意味と直感的理解:

1. **波動関数の振動性:**
    - 節の数が増えることは、波動関数がより「振動的」になることを意味する
    - エネルギーが高い状態ほど、波動関数はより激しく振動する
    - これは、粒子の運動量が大きくなることに対応する（ド・ブロイ波長が短くなる）
2. **基底状態の特徴:**
    - 基底状態（$n = 0$）には節がない
    - これは、最も「滑らか」な波動関数に対応する
    - 符号が変わらないため、通常は常に正（または常に負）である

3. **エネルギーの増加と節の増加:**
   - エネルギーが増加すると、粒子はより大きな運動量を持つ
   - 運動量が大きいと、ド・ブロイ波長が短くなり、波動関数がより多くの節を持つ
   - これは、古典力学での「より激しい運動」に対応する
4. **具体例: 調和振動子**
   - $n = 0$: 節の数 = 0（ガウス関数型、符号は常に正）
   - $n = 1$: 節の数 = 1（1次エルミート多項式、原点で符号が変わる）
   - $n = 2$: 節の数 = 2（2次エルミート多項式、2点で符号が変わる）
   - 一般に、n番目の状態はn個の節を持つ
5. **量子数の物理的意味:**
   - 節の数nは、量子数としての役割も果たす
   - nは、エネルギー準位を区別するラベルとして機能する
   - 1次元では、節の数によってエネルギー準位が一意に決定される（縮退がないことと関連）
6. **波動関数の形状:**
   - 基底状態: 単一の「山」（または「谷」）の形
   - 第1励起状態: 1つの節を挟んで正負が反転する形
   - 第n励起状態: n個の節を挟んで符号が交互に変わる形
7. **確率密度への影響:**
   - 節では、確率密度$|\psi(x)|^2 = 0$である
   - したがって、節の数が多いほど、粒子が存在できない点が増える
   - これは、エネルギーが高い状態ほど、粒子の運動がより制約されることを意味する

数学的な補足:

ノード定理は、より一般的な形で述べることができる:

一般化されたノード定理: n次元の束縛状態においても、エネルギー準位が低い順に並べたとき、n番目の準位の波動関数の節の数（または節の構造）が特定の性質を持つことが知られている。ただし、1次元の場合が最も単純で明確である。

応用: - スペクトル解析: 実験的に観測されるスペクトルから、状態を特定する際に節の数が指標となる - 近似計算: 変分法などで、試行関数の節の数を適切に選ぶことが重要 - 数値計算: 節の数が分かれば、数値計算の精度を向上させることができる

問題6-2: エルミート多項式と母関数

問題設定

エルミート多項式$H_n(\xi)$は、次の母関数で定義される:

$$S(\xi, s) = e^{-s^2+2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n$$

(i) $dH_n/d\xi = 2nH_{n-1}$を示せ

証明:

母関数$S(\xi, s) = e^{-s^2+2s\xi}$を$\xi$で偏微分する:

$$\frac{\partial S}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial \xi} e^{-s^2+2s\xi} = 2se^{-s^2+2s\xi} = 2sS(\xi, s)$$

一方、Sを級数展開した形でξで偏微分すると:

$$\frac{\partial S}{\partial \xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{dH_n}{d\xi} s^n$$

したがって:

$$2sS(\xi, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{dH_n}{d\xi} s^n$$

$S(\xi, s) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_m(\xi)}{m!} s^m$を代入すると:

$$2s \sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_m(\xi)}{m!} s^m = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{dH_n}{d\xi} s^n$$

左辺は:

$$2 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_m(\xi)}{m!} s^{m+1} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_{n-1}(\xi)}{(n-1)!} s^n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2nH_{n-1}(\xi)}{n!} s^n$$

したがって、s^nの係数を比較すると（$n \geq 1$）:

$$\frac{1}{n!} \frac{dH_n}{d\xi} = \frac{2nH_{n-1}(\xi)}{n!}$$

答え: $\frac{dH_n}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi)$

物理的意味: - この関係式は、エルミート多項式の微分がより低次の多項式で表されることを示している。 - 調和振動子の波動関数を扱う際に、この関係式が有用である。

(ii) $H_{n+1} - 2\xi H_n + 2nH_{n-1} = 0$を示せ

証明:

母関数$S(\xi, s) = e^{-s^2+2s\xi}$を$s$で偏微分する:

$$\frac{\partial S}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s} e^{-s^2+2s\xi} = (-2s + 2\xi)e^{-s^2+2s\xi} = (-2s + 2\xi)S(\xi, s)$$

一方、Sを級数展開した形でsで偏微分すると:

$$\frac{\partial S}{\partial s} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} ns^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_{n+1}(\xi)}{n!} s^n$$

したがって:

$$(-2s + 2\xi)S(\xi, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_{n+1}(\xi)}{n!} s^n$$

$S(\xi, s) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_m(\xi)}{m!} s^m$を代入すると:

$$(-2s + 2\xi) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_m(\xi)}{m!} s^m = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_{n+1}(\xi)}{n!} s^n$$

左辺を展開:

$$2\xi\sum_{m=0}^{\infty}\frac{H_m(\xi)}{m!}s^m - 2s\sum_{m=0}^{\infty}\frac{H_m(\xi)}{m!}s^m$$

$$= 2\xi\sum_{m=0}^{\infty}\frac{H_m(\xi)}{m!}s^m - 2\sum_{m=0}^{\infty}\frac{H_m(\xi)}{m!}s^{m+1}$$

$$= 2\xi\sum_{m=0}^{\infty}\frac{H_m(\xi)}{m!}s^m - 2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{H_{n-1}(\xi)}{(n-1)!}s^n$$

$$= 2\xi H_0(\xi) + \sum_{n=1}^{\infty}\left(2\xi\frac{H_n(\xi)}{n!} - 2n\frac{H_{n-1}(\xi)}{n!}\right)s^n$$

したがって、s^nの係数を比較すると（$n \geq 1$）：

$$\frac{H_{n+1}(\xi)}{n!} = 2\xi\frac{H_n(\xi)}{n!} - 2n\frac{H_{n-1}(\xi)}{n!}$$

両辺に$n!$を掛けると:

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi)$$

答え: $H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi) = 0$

この関係式は、エルミート多項式の漸化式である。

物理的意味: - この漸化式により、低次のエルミート多項式から高次の多項式を逐次的に計算できる。 - 調和振動子の波動関数の計算において重要な役割を果たす。

(iii) エルミートの微分方程式を導く

問題: (i), (ii)を用いて、H_nの満たす微分方程式を求めよ。

解答:

導出の戦略

(i)の微分関係式と(ii)の漸化式を組み合わせて、H_nの満たす2階微分方程式を導出する。

ステップ1: 2階微分の計算

(i)の結果: $\frac{dH_n}{d\xi} = 2nH_{n-1}$より、両辺を$\xi$で微分する:

$$\frac{d^2H_n}{d\xi^2} = \frac{d}{d\xi}(2nH_{n-1}) = 2n\frac{dH_{n-1}}{d\xi}$$

ステップ2: 再帰的関係の適用

(i)の結果を$n \to n-1$に適用すると:

$$\frac{dH_{n-1}}{d\xi} = 2(n-1)H_{n-2}$$

したがって:

$$\frac{d^2H_n}{d\xi^2} = 2n \cdot 2(n-1)H_{n-2} = 4n(n-1)H_{n-2}$$

ステップ3: 漸化式の適用

(ii)の漸化式: $H_{n+1} - 2\xi H_n + 2nH_{n-1} = 0$を、$n \to n-1$に置き換えると:

$$H_n - 2\xi H_{n-1} + 2(n-1)H_{n-2} = 0$$

これをH_{n-2}について解く:

$$2(n-1)H_{n-2} = 2\xi H_{n-1} - H_n$$

したがって:

$$H_{n-2} = \frac{2\xi H_{n-1} - H_n}{2(n-1)}$$

ステップ4: H_{n-2}の代入

ステップ2の結果$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} = 4n(n-1)H_{n-2}$に、ステップ3の$H_{n-2}$の表式を代入:

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} = 4n(n-1) \cdot \frac{2\xi H_{n-1} - H_n}{2(n-1)}$$

分数を約分すると:

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} = 4n \cdot \frac{2\xi H_{n-1} - H_n}{2} = 2n(2\xi H_{n-1} - H_n)$$

展開すると:

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} = 4n\xi H_{n-1} - 2nH_n$$

ステップ5: H_{n-1}の消去

(i)の結果$\frac{dH_n}{d\xi} = 2nH_{n-1}$より、$H_{n-1}$について解くと:

$$H_{n-1} = \frac{1}{2n}\frac{dH_n}{d\xi}$$

これをステップ4の結果に代入:

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} = 4n\xi \cdot \frac{1}{2n}\frac{dH_n}{d\xi} - 2nH_n = 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} - 2nH_n$$

ステップ6: 微分方程式の完成

すべての項を左辺に移項すると:

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0$$

答え:

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0$$

これはエルミートの微分方程式である。

物理的意味: - この微分方程式は、調和振動子のシュレーディンガー方程式を変数変換することによって導かれる。 - エルミート多項式がこの微分方程式の解であることが確認できた。 - これにより、H_nが確かにエルミート多項式に一致することが言える。

(iv) 積分$I(s,t)$の計算

問題: 母関数Sを用いて次の式を考える:

$$I(s,t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, S(\xi,s) S(\xi,t) e^{-\xi^2}$$

$S(\xi,s) = e^{-s^2+2s\xi}$であることを用いて、次を示せ:

$$I(s,t) = \sqrt{\pi} e^{2st} = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\pi} \frac{(2st)^n}{n!}$$

その際、ガウスの積分公式:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-(\xi-a)^2} = \sqrt{\pi}$$

（aは任意の定数）を用いてよい。

解答:

導出の戦略

2つの母関数の積を計算し、ガウス積分の形に帰着させる。その後、指数関数を級数展開する。

ステップ1: 母関数の積の計算

$S(\xi,s) = e^{-s^2+2s\xi}$、$S(\xi,t) = e^{-t^2+2t\xi}$より、積は:

$$S(\xi,s)S(\xi,t) = e^{-s^2+2s\xi} e^{-t^2+2t\xi}$$

指数関数の積は指数の和になる:

$$S(\xi,s)S(\xi,t) = e^{-s^2+2s\xi-t^2+2t\xi} = e^{-s^2-t^2+2(s+t)\xi}$$

ステップ2: 積分の書き換え

したがって:

$$I(s,t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-s^2-t^2+2(s+t)\xi} e^{-\xi^2}$$

$e^{-s^2-t^2}$はξに依存しないので、積分の外に出せる:

$$I(s,t) = e^{-s^2-t^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-\xi^2+2(s+t)\xi}$$

ステップ3: 平方完成

指数部分$-\xi^2 + 2(s+t)\xi$を平方完成する。完全平方の形にするため:

$$-\xi^2 + 2(s+t)\xi = -(\xi^2 - 2(s+t)\xi)$$

$\xi^2 - 2(s+t)\xi$を完全平方の形にする:

$$(\xi - (s+t))^2 = \xi^2 - 2(s+t)\xi + (s+t)^2$$

したがって:

$$\xi^2 - 2(s+t)\xi = (\xi - (s+t))^2 - (s+t)^2$$

したがって:

$$-\xi^2 + 2(s+t)\xi = -((\xi-(s+t))^2 - (s+t)^2) = -(\xi-(s+t))^2 + (s+t)^2$$

ステップ4: ガウス積分への帰着
したがって:

$$I(s,t) = e^{-s^2-t^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\ \exp\left[-(\xi-(s+t))^2 + (s+t)^2\right]$$
$$= e^{-s^2-t^2+(s+t)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, e^{-(\xi-(s+t))^2}$$

ガウスの積分公式$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, e^{-(\xi-a)^2} = \sqrt{\pi}$（$a$は任意の定数）を用いると:

$$I(s,t) = e^{-s^2-t^2+(s+t)^2} \cdot \sqrt{\pi}$$

ステップ5: 指数部分の計算
指数部分を計算する:

$$-s^2 - t^2 + (s+t)^2 = -s^2 - t^2 + s^2 + 2st + t^2$$

s^2とt^2の項が相殺される:

$$-s^2 - t^2 + s^2 + 2st + t^2 = 2st$$

したがって:

$$I(s,t) = \sqrt{\pi} e^{2st}$$

ステップ6: 級数展開
e^{2st}をテイラー級数展開すると:

$$e^{2st} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!}$$

したがって:

$$I(s,t) = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\pi} \frac{(2st)^n}{n!}$$

答え: 示された。

物理的意味: - この積分は、エルミート多項式の直交性を導くための重要な中間結果である。 - 母関数を用いることで、複雑な積分計算を簡潔に扱うことができる。

(v) エルミート多項式の直交性

問題: 一方、エルミート多項式を用いて:

$$I(s,t) = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{s^n t^m}{n!m!} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2}$$

と書ける。これと(iv)を用いて、次を示せ:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} = \begin{cases} \sqrt{\pi} 2^n n! & (n = m\text{のとき}) \\ 0 & (n \neq m\text{のとき}) \end{cases}$$

解答:

導出の戦略

(iv)で求めた$I(s,t)$の級数展開と、母関数を用いた展開を比較することで、直交性を導出する。

ステップ1: 母関数による$I(s,t)$の展開

問題文より、$I(s,t)$は母関数の積分として:

$$I(s,t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, S(\xi,s)S(\xi,t)e^{-\xi^2}$$

$S(\xi,s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!}s^n$、$S(\xi,t) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_m(\xi)}{m!}t^m$より:

$$S(\xi,s)S(\xi,t) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)H_m(\xi)}{n!m!}s^n t^m$$

したがって:

$$I(s,t) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} \frac{s^n t^m}{n!m!}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}$$

ステップ2: (iv)の結果の書き換え

(iv)の結果より:

$$I(s,t) = \sqrt{\pi}e^{2st} = \sqrt{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2st)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{\pi}\frac{2^n}{n!}(st)^n$$

$(st)^n = s^n t^n$なので:

$$I(s,t) = \sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{\pi}\frac{2^n}{n!}s^n t^n$$

ステップ3: 係数の比較（$n \neq m$の場合）

ステップ1とステップ2の結果を比較する。両式はsとtのべき級数として展開されているため、各$s^n t^m$の係数が等しくなければならない。

ステップ2の結果では、$n \neq m$の項（$s^n t^m$、$n \neq m$）は存在しない（係数が0）。一方、ステップ1では、すべてのn, mについて項が存在する。

したがって、$n \neq m$のとき:

$$\frac{1}{n!m!}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2} = 0$$

すなわち:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2} = 0 \quad (n \neq m)$$

これが**直交性**である。

ステップ4: 係数の比較（$n = m$の場合）

$n = m$の場合、ステップ2の結果では$s^n t^n$の係数は$\sqrt{\pi}\frac{2^n}{n!}$である。一方、ステップ1では$s^n t^n$の係数は$\frac{1}{n!n!}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}$である。

したがって:

$$\frac{1}{n!n!}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2} = \sqrt{\pi}\frac{2^n}{n!}$$

両辺に$n!n!$を掛けると:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2} = \sqrt{\pi}\frac{2^n}{n!}\cdot n!n! = \sqrt{\pi}2^n n!$$

答え: 示された。

物理的意味: - エルミート多項式は重み関数$e^{-\xi^2}$に関して直交する。 - この直交性により、調和振動子の波動関数が規格直交系を形成する。 - 異なるエネルギー準位の波動関数の内積が0になることは、それらが独立であることを意味する。

(vi) 規格化定数c_nの決定

問題: 任意のエネルギー準位nにある調和振動子の波動関数は:

$$u_n(x) = c_n H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

で与えられる。ここで、c_nは規格化定数であり、$\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}x$。これまでの結果を用いて、$c_n$を決定せよ。

解答:

導出の戦略

規格化条件と(v)の直交性の結果を用いて、規格化定数を決定する。

ステップ1: 規格化条件

規格化条件:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x)u_n(x) = 1$$

ステップ2: 変数変換

変数変換: $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}x$より、$dx = \sqrt{\hbar/(m\omega)}d\xi$である。

したがって:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x)u_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}d\xi\, c_n^2 H_n^2(\xi)e^{-\xi^2}$$

$$= c_n^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n^2(\xi)e^{-\xi^2} = 1$$

ステップ3: 直交性の結果の適用

(v)の結果より:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n^2(\xi)e^{-\xi^2} = \sqrt{\pi}2^n n!$$

したがって:

$$c_n^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\cdot\sqrt{\pi}2^n n! = 1$$

ステップ4: c_nの決定

c_n^2について解く:

$$c_n^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{2^n n!}$$

c_nは正の実数であるから:

$$c_n = \sqrt{\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{2^n n!}} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$$

答え:

$$c_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$$

物理的意味: - 規格化定数は、波動関数の確率解釈（全空間での積分が1）を保証する。 - この定数により、調和振動子の波動関数が完全な規格直交系を形成する。 - c_nはnが増加すると減少し、高エネルギー準位の波動関数の振幅が小さくなることを反映している。

問題6-3: 調和振動子のゼロ点振動（レポート問題）

問題設定

1次元調和振動子のシュレーディンガー方程式:

$$\hat{H}\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

この解およびエネルギー固有値は:

$$u_n(x) = c_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (n = 0, 1, 2, ...)$$

ここで、$\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}x$、また$H_n(\xi)$は$n$次の多項式（エルミート多項式）である。規格化定数$c_n$（正の実数とする）を適切に選ぶことにより、$u_n$は規格直交条件:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x) u_m(x) = \delta_{nm}$$

を満たす。

(i) エネルギー期待値の計算

問題: 以下の式を示せ:

$$E_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x) \hat{H} u_n(x) = \langle \hat{H} \rangle$$

ただし、$\langle \cdots \rangle$は波動関数$u_n(x)$に関する期待値を表す。

解答:

導出の戦略

エネルギー固有関数$u_n(x)$とエネルギー固有値E_nの関係を用いて、期待値を計算する。この関係は、量子力学における基本的な性質の一つである。

ステップ1: 期待値の定義

量子力学における物理量$\hat{O}$の期待値は、波動関数$\psi(x)$に対して次のように定義される:

$$\langle \hat{O} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x) \hat{O} \psi(x)$$

ここで、$\psi^*(x)$は$\psi(x)$の複素共役である。

ステップ2: ハミルトニアンの期待値

ハミルトニアン$\hat{H}$の期待値を計算する。$u_n(x)$を用いると:

$$\langle \hat{H} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n^*(x) \hat{H} u_n(x)$$

ステップ3: 波動関数が実関数であることの確認

調和振動子の波動関数は:

$$u_n(x) = c_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

ここで、c_nは正の実数、$H_n(\xi)$は実係数の多項式（エルミート多項式）、$e^{-\xi^2/2}$も実関数である。したがって、$u_n(x)$は実関数であり:

$$u_n^*(x) = u_n(x)$$

ステップ4: 期待値の簡略化

ステップ3の結果より:

$$\langle \hat{H} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x) \hat{H} u_n(x)$$

ステップ5: エネルギー固有値方程式の適用

$u_n(x)$はエネルギー固有関数であり、次を満たす:

$$\hat{H} u_n(x) = E_n u_n(x)$$

ここで、$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$はハミルトニアン演算子、$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$は対応するエネルギー固有値である。

この関係式をステップ4に代入:

$$\langle \hat{H} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x) \cdot E_n u_n(x) = E_n \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x) u_n(x)$$

ステップ6: 規格化条件の適用

規格化条件より:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x) u_n(x) = 1$$

したがって:

$$\langle \hat{H} \rangle = E_n \cdot 1 = E_n$$

答え:

$$E_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x) \hat{H} u_n(x) = \langle \hat{H} \rangle$$

物理的意味と詳細な考察:

1. **エネルギー固有状態での期待値:**
    - エネルギー固有状態$u_n(x)$では、ハミルトニアンの期待値は対応するエネルギー固有値E_nと一致する。
    - これは、エネルギー固有状態が「確定状態」であることを意味する。
2. **測定における意味:**

- エネルギー固有状態でエネルギーを測定すると、常に同じ値E_nが得られる。
- エネルギーは**確定**しており、測定のたびに異なる値が得られることはない。

3. **エネルギーの分散（ゆらぎ）:**
   - エネルギーの分散（不確定性）を計算すると:

$$(\Delta E)^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2$$

   - エネルギー固有状態では、$\hat{H}^2 u_n = E_n^2 u_n$であるため:

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = E_n^2, \quad (\Delta E)^2 = E_n^2 - E_n^2 = 0$$

   - すなわち、エネルギー固有状態ではエネルギーのゆらぎ（分散）が0である。これが「定常状態」の意味である。

4. **一般状態との違い:**
   - 一般の状態$\Psi(x) = \sum_n c_n u_n(x)$（重ね合わせ状態）では:

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m \int u_n^*(x) \hat{H} u_m(x) dx = \sum_n |c_n|^2 E_n$$

   - エネルギー期待値は異なるエネルギー固有値の重み付き平均になる。
   - この場合、エネルギーの分散は0ではなく、測定のたびに異なる値が得られる可能性がある。

5. **定常状態の重要性:**
   - エネルギー固有状態は「定常状態」であり、時間が経過しても確率密度$|u_n(x)|^2$は変化しない。
   - これは、時間依存するシュレーディンガー方程式において、$u_n(x)$が位相因子$e^{-iE_n t/\hbar}$のみで時間発展することに対応する。

(ii) 位置と運動量の期待値

問題: 以下の式を示せ:

$$\langle x \rangle = 0, \quad \langle p \rangle = 0$$

解答:

導出の戦略

調和振動子の対称性と、波動関数の性質を用いて、位置と運動量の期待値を計算する。

ステップ1: 位置の期待値の計算

位置の期待値:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x) x u_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n^2(x) x$$

ステップ2: 対称性の利用

調和振動子の波動関数$u_n(x)$は、以下の性質を持つ: - nが偶数のとき: $u_n(-x) = u_n(x)$（偶関数） - nが奇数のとき: $u_n(-x) = -u_n(x)$（奇関数）

いずれの場合も、$u_n^2(x) = u_n^2(-x)$（u_n^2は常に偶関数）である。

ステップ3: 積分の変数変換

$x \to -x$の変数変換を行う:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n^2(x) x = \int_{+\infty}^{-\infty} (-dx')\, u_n^2(-x')(-x')$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, u_n^2(-x')x' = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, u_n^2(x')x' = \langle x \rangle$$

ここで、$u_n^2(-x') = u_n^2(x')$（偶関数）を用いた。

一方、直接計算すると:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, u_n^2(x)x$$

被積分関数$u_n^2(x)x$は奇関数である（u_n^2は偶関数、xは奇関数のため）。奇関数の無限区間での積分は0である。

したがって:

$$\langle x \rangle = 0$$

ステップ4: 運動量の期待値の計算

運動量演算子は$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$である。運動量の期待値:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, u_n(x)\hat{p}u_n(x) = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \, u_n(x)\frac{du_n}{dx}$$

ステップ5: 部分積分の適用

部分積分を用いる:

$$\langle p \rangle = -i\hbar \left[u_n(x)u_n(x)\right]_{-\infty}^{\infty} - i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \, u_n(x)\frac{du_n}{dx}$$

第1項は、束縛状態では$|x| \to \infty$で$u_n(x) \to 0$であるため0である。したがって:

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \, u_n(x)\frac{du_n}{dx}$$

ステップ6: 積分の性質の詳細な検討

$u_n(x)$は実関数であるため、$\frac{du_n}{dx}$も実関数である。したがって、被積分関数$u_n(x)\frac{du_n}{dx}$は実関数である。

一方、運動量の期待値は物理量なので実数でなければならない。しかし、上式は純虚数の係数$-i\hbar$を持つ。

この矛盾を解決するために、積分を詳しく見る。実関数$f(x)$について:

$$-i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \, f(x)\frac{df}{dx} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \frac{1}{2}\frac{d}{dx}[f(x)]^2$$

ここで、積の微分法則を用いた: $\frac{d}{dx}[f(x)]^2 = 2f(x)\frac{df}{dx}$である。

部分積分（または微積分学の基本定理）により:

$$= -i\hbar \frac{1}{2}[f(x)]^2|_{-\infty}^{\infty}$$

束縛状態では、$|x| \to \infty$で$u_n(x) \to 0$であるため:

$$[u_n(x)]^2|_{-\infty}^{\infty} = 0 - 0 = 0$$

したがって:

$$\langle p \rangle = 0$$

ステップ7: より厳密な証明（対称性の利用）

別の方法として、波動関数の対称性を直接利用する。調和振動子の波動関数は、問題6-1(iii)の結果より、偶関数または奇関数である。

運動量演算子$\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$は、パリティ変換（$x \to -x$）に対して奇演算子である。すなわち、$\hat{p}$を偶関数に作用させると奇関数に、奇関数に作用させると偶関数になる。

$u_n(x)$が偶関数または奇関数のとき、$\hat{p}u_n(x)$はそれぞれ奇関数または偶関数になる。したがって、$u_n(x)\hat{p}u_n(x)$は常に奇関数になる。

奇関数の無限区間での積分は0であるため:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x)\hat{p}u_n(x) = 0$$

答え:

$$\langle x \rangle = 0, \quad \langle p \rangle = 0$$

物理的意味:

1. **対称性からの結果:** 調和振動子のポテンシャルは偶関数（$V(-x) = V(x)$）である。この対称性により、位置と運動量の期待値は0になる。
2. **平衡位置:** $\langle x \rangle = 0$は、粒子の平均位置が原点（平衡位置）にあることを意味する。これは古典力学での結果と一致する。
3. **平均運動量:** $\langle p \rangle = 0$は、粒子の平均運動量が0であることを意味する。これも古典力学での結果と一致する。
4. **量子状態での対称性:** 量子状態でも、対称性が保持され、古典的な「静止」や「平衡位置」に対応する性質が成り立つ。

(iii) エネルギーと分散の関係

問題: (i), (ii)を用いて、以下を示せ:

$$E_n = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

ここで、Δx、Δpはそれぞれx、pの分散を表す。

解答:

導出の戦略

分散の定義と、(i), (ii)の結果を用いて、エネルギーを分散で表す。この関係式は、エネルギーが量子ゆらぎによって決まることを示している。

ステップ1: 分散（不確定性）の定義

統計学および量子力学における分散（分散、variance）の定義を確認する。

位置の分散:

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$$

ここで、$\langle x \rangle$は位置の期待値（平均値）である。

これを展開すると:

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle\langle x \rangle + \langle x \rangle^2$$

期待値の線形性より:
$$(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle - 2\langle x\rangle^2 + \langle x\rangle^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$
同様に、運動量の分散:
$$(\Delta p)^2 = \langle (p - \langle p\rangle)^2\rangle = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2$$
ステップ2: (ii)の結果の適用

(ii)の結果より、調和振動子のエネルギー固有状態では:
$$\langle x\rangle = 0, \quad \langle p\rangle = 0$$
これは、位置と運動量の期待値（平均値）が0であることを意味する。

したがって、ステップ1の分散の定義は、次のように簡略化される:
$$(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle - 0^2 = \langle x^2\rangle$$
$$(\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle - 0^2 = \langle p^2\rangle$$
重要な観察: 期待値が0であるため、分散は2乗の期待値と一致する。これは、分散が「原点からの広がり」を表すことを意味する。

ステップ3: ハミルトニアンの構造

調和振動子のハミルトニアンは:
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$
これは、運動エネルギー$\frac{\hat{p}^2}{2m}$と位置エネルギー$\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$の和である。

ステップ4: (i)の結果の適用

(i)の結果より、エネルギー固有状態では:
$$E_n = \langle \hat{H}\rangle$$
したがって:
$$E_n = \left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \right\rangle$$
ステップ5: 期待値の線形性

期待値は線形演算子である。すなわち、任意の演算子$\hat{A}$、$\hat{B}$と定数a、bに対して:
$$\langle a\hat{A} + b\hat{B}\rangle = a\langle \hat{A}\rangle + b\langle \hat{B}\rangle$$
この性質を用いると:
$$E_n = \left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \right\rangle$$
定数は期待値の外に出せるため:
$$E_n = \frac{1}{2m}\langle \hat{p}^2\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2\langle \hat{x}^2\rangle$$
ステップ6: 分散を用いた表現への変換

ステップ2の結果より:
$$\langle x^2\rangle = (\Delta x)^2, \quad \langle p^2\rangle = (\Delta p)^2$$
したがって、ステップ5の結果に代入すると:
$$E_n = \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

これを整理すると:

$$E_n = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

答え:

$$E_n = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

物理的意味と詳細な考察:

1. **エネルギーの分解と分散の役割:**
   - エネルギーは、運動エネルギーの分散$(\Delta p)^2/(2m)$と位置エネルギーの分散$m\omega^2(\Delta x)^2/2$の和として表される。
   - これは、期待値が0である（$\langle x\rangle = 0$、$\langle p\rangle = 0$）ため、分散が直接的に「平均的な」運動エネルギーと位置エネルギーを表すことを意味する。
   - 古典力学では、エネルギーは$E = p^2/(2m) + m\omega^2x^2/2$であるが、量子力学では位置と運動量が確定していないため、分散を用いて表現される。
2. **量子ゆらぎとエネルギーの関係:**
   - $(\Delta x)^2$と$(\Delta p)^2$は、それぞれ位置と運動量の**量子力学的な不確定性（ゆらぎ）**を表す。
   - この関係式は、エネルギーがこの不確定性によって決まることを示している。
   - 不確定性が大きいほど、エネルギーも大きくなる傾向がある（ただし、不確定性関係によって制約される）。
3. **最小エネルギー状態の特徴:**
   - 基底状態では、不確定性関係の下限$\Delta x\cdot\Delta p = \hbar/2$が達成される。
   - このとき、ΔxとΔpの間に最適なバランスが存在し、これがゼロ点エネルギー（$E_0 = \hbar\omega/2$）に対応する。
   - 基底状態では、$\Delta x = \sqrt{\hbar/(2m\omega)}$、$\Delta p = \sqrt{m\hbar\omega/2}$である。
4. **エネルギーの等分配:**
   - 基底状態では、運動エネルギーと位置エネルギーの期待値は等しい:

$$\left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}$$

   - これは、エネルギーの等分配の一例である。
5. **励起状態での分散:**
   - 励起状態（$n > 0$）では、ΔxとΔpは基底状態よりも大きくなる。
   - これにより、エネルギー$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$が大きくなる。
   - ただし、不確定性関係$\Delta x\cdot\Delta p \geq \hbar/2$は常に成り立つ。
6. **古典極限との関係:**
   - 古典極限（$\hbar \to 0$または$n \to \infty$）では、不確定性は相対的に小さくなり、古典的な軌道に近づく。
   - しかし、基底状態では$\hbar$が有限であるため、不確定性は常に存在する。
7. **分散と確率分布の関係:**
   - 分散は、確率分布の「広がり」を表す統計量である。
   - $(\Delta x)^2$が大きいほど、粒子の位置の確率分布は広がっている。
   - $(\Delta p)^2$が大きいほど、運動量の確率分布は広がっている。
   - エネルギーは、これらの広がりの大きさによって決まる。

(iv) 不確定性関係からのエネルギー下限

問題: 不確定性関係

$$\Delta x\cdot\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

を用いることにより、次の不等式を示せ:

$$E_n \geq \frac{1}{2}\hbar\omega$$

解答:

導出の戦略

(iii)の結果と不確定性関係を組み合わせて、エネルギーの下限を導出する。

ステップ1: (iii)の結果の再確認

(iii)より:

$$E_n = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

ステップ2: 不確定性関係の利用

不確定性関係より:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

したがって、$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$である（$\Delta x > 0$と仮定）。

ステップ3: エネルギーの下限

E_nをΔxの関数として考える。Δpを不確定性関係で制約すると:

$$\begin{aligned} E_n &\geq \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{2\Delta x}\right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2 \end{aligned}$$

ステップ4: 最小値の計算（変数変換と微分）

右辺を$(\Delta x)^2 = u$とおいて最小化する（$u > 0$である）:

$$f(u) = \frac{\hbar^2}{8mu} + \frac{1}{2}m\omega^2 u$$

uで微分:

$$\frac{df}{du} = -\frac{\hbar^2}{8mu^2} + \frac{1}{2}m\omega^2$$

最小値を求めるため、$\frac{df}{du} = 0$とおく:

$$-\frac{\hbar^2}{8mu^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 = 0$$

したがって:

$$\frac{\hbar^2}{8mu^2} = \frac{1}{2}m\omega^2$$

両辺に$8mu^2$を掛ける:

$$\hbar^2 = 4m^2\omega^2u^2$$

したがって:

$$u^2 = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}$$

$u > 0$であるから:

$$u = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

ステップ4-2: 極小値の確認（2階微分）

これが最小値であることを確認するため、2階微分を計算する:

$$\frac{d^2 f}{du^2} = \frac{\hbar^2}{4mu^3}$$

$u > 0$であるから、$\frac{d^2 f}{du^2} > 0$であり、これは極小値であることを示している。

ステップ5: 最小値の計算

$u = \frac{\hbar}{2m\omega}$を$f(u)$に代入:

$$\begin{aligned} f_{\min} &= \frac{\hbar^2}{8m \cdot \frac{\hbar}{2m\omega}} + \frac{1}{2}m\omega^2 \cdot \frac{\hbar}{2m\omega} \\ &= \frac{\hbar^2 \cdot 2m\omega}{8m\hbar} + \frac{1}{2}m\omega^2 \cdot \frac{\hbar}{2m\omega} \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2} \end{aligned}$$

したがって:

$$E_n \geq \frac{1}{2}\hbar\omega$$

答え:

$$E_n \geq \frac{1}{2}\hbar\omega$$

物理的意味:

1. **ゼロ点エネルギー:** この結果は、調和振動子のエネルギーが$\frac{1}{2}\hbar\omega$以上であることを示す。特に、基底状態のエネルギーは$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$である。
2. **不確定性関係の役割:** 不確定性関係により、位置と運動量を同時に0にすることができない。これが、エネルギーが0より大きい理由である。
3. **量子効果:** 古典力学では、調和振動子のエネルギーは0になり得るが、量子力学では不確定性関係により、最小エネルギーが$\frac{1}{2}\hbar\omega$である。

(v) 基底状態の概形とゼロ点振動

問題: 基底状態$u_0(x)$の概形を描け。またゼロ点振動の物理的意味について述べよ。

解答:

ステップ1: 基底状態の波動関数の具体的な形

基底状態（$n = 0$）の波動関数:

$$u_0(x) = c_0 H_0(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

ここで、$\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}x$である。

$H_0(\xi) = 1$（0次エルミート多項式は定数1）であるから:

$$u_0(x) = c_0 e^{-\xi^2/2} = c_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

問題6-2(vi)より、規格化定数は:

$$c_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

したがって、基底状態の波動関数は:

$$u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

これは**ガウス関数**（正規分布関数）の形である。

ステップ2: 波動関数の数学的特徴の詳細

$u_0(x)$の特徴: - **最大値:** $x = 0$で最大値$c_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$を取る（$e^0 = 1$） - **減衰:** $|x|$が増加すると、$e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$が指数的に減少する - **対称性:** $u_0(-x) = u_0(x)$（偶関数、問題6-1(iii)の結果） - **節の数:** 0（基底状態には節がない、問題6-1(iv)の結果） - **連続性:** 無限回微分可能な滑らかな関数

ステップ3: 確率密度の詳細

確率密度は:

$$|u_0(x)|^2 = u_0^2(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

これは標準偏差$\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$のガウス分布である。

確率密度の特徴: - **最も確率が高い位置:** $x = 0$（平衡位置） - **広がり:** 粒子は完全に$x = 0$に局在しているわけではなく、ある範囲に分布している - **位置の不確定性:** $\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$（後述）

ステップ4: 基底状態のグラフの描き方と概形（詳細版）

基底状態$u_0(x)$の波動関数の概形を詳しく説明する。

波動関数の数学的な形式:

$$u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

数学的な特徴の詳細:

1. **対称性:**
    - $u_0(-x) = u_0(x)$（偶関数）
    - 原点$x = 0$を中心として左右対称
2. **最大値:**
    - $x = 0$で最大値$c_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$を取る
    - これは、規格化定数でもある
3. **減衰の様子:**
    - $|x|$が増加すると、$\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$が指数的に減少
    - ガウス型の減衰（$\propto e^{-x^2}$）で、非常に速く0に近づく
4. **漸近挙動:**
    - $|x| \to \infty$で$u_0(x) \to 0$（$\lim_{x\to\pm\infty} u_0(x) = 0$）
    - 無限遠で0に漸近する（束縛状態）
5. **節（ゼロ点）:**
    - 節は存在しない（$u_0(x) > 0$ for all x）
    - これは基底状態の特徴（問題6-1(iv)の結果）
6. **滑らかさ:**
    - 無限回微分可能な滑らかな関数
    - すべての導関数が連続

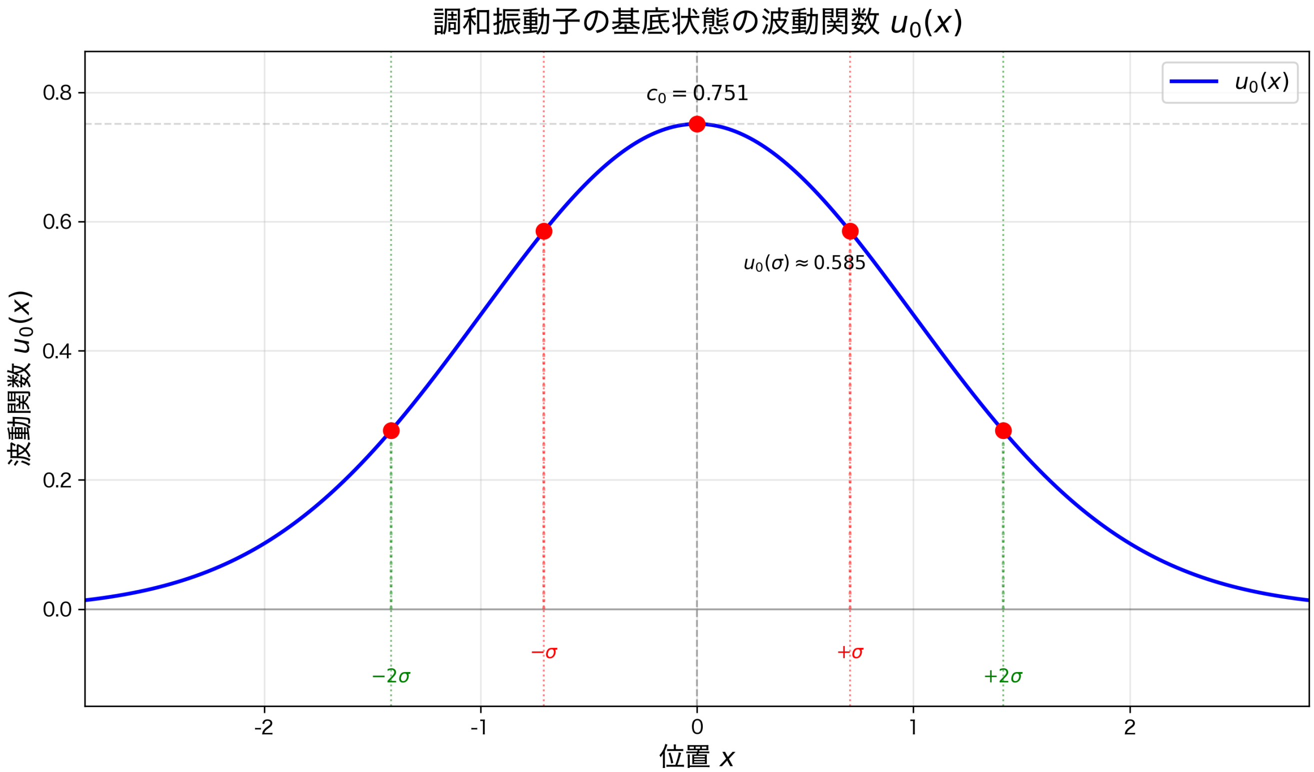

Figure 1: 基底状態の波動関数

波動関数$u_0(x)$の概形（詳細図）：

図の詳細な説明:

- **縦軸**: 波動関数$u_0(x)$の値
- **横軸**: 位置x
- $c_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$: 最大値（$x = 0$での値）
- $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$: 標準偏差（確率密度の標準偏差）
- $\pm\sigma$: 標準偏差に対応する位置
- $\pm 2\sigma$: 2標準偏差に対応する位置

特徴的な値の計算:

波動関数の値: - $u_0(0) = c_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$（最大値）

標準偏差での値: - $u_0(\pm\sigma) = c_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\sigma^2} = c_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\cdot\frac{\hbar}{2m\omega}} = c_0 e^{-1/4} \approx 0.779 \cdot c_0$

2標準偏差での値: - $u_0(\pm 2\sigma) = c_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(2\sigma)^2} = c_0 e^{-1} \approx 0.368 \cdot c_0$

確率密度$|u_0(x)|^2$の概形（詳細図）：

確率密度は波動関数の絶対値の2乗:

$$|u_0(x)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)$$

これは標準偏差$\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$のガウス分布である。

確率密度の特徴的な値:

- $|u_0(0)|^2 = c_0^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}$（最大値）

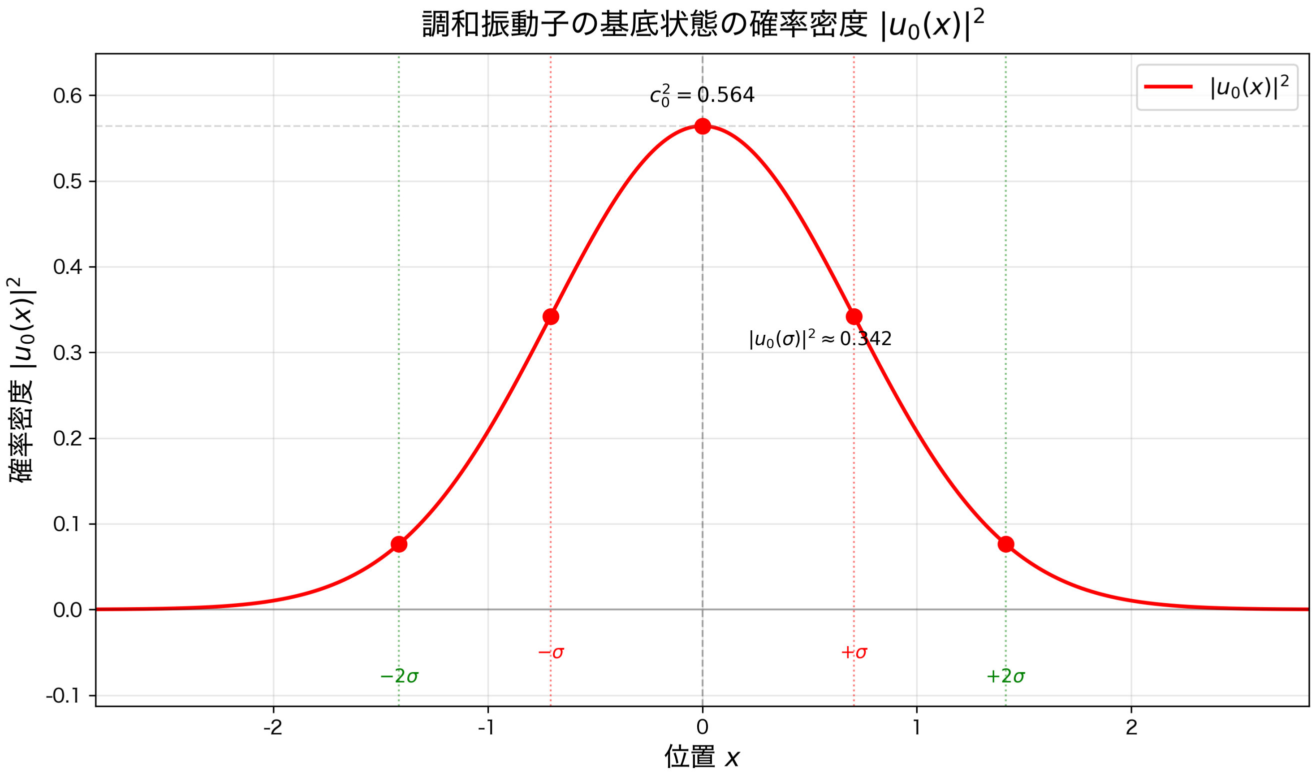

Figure 2: 基底状態の確率密度

- $|u_0(\pm\sigma)|^2 = c_0^2 e^{-1/2} \approx 0.607 \cdot c_0^2$（$e^{-1/2}$倍）
- $|u_0(\pm 2\sigma)|^2 = c_0^2 e^{-2} \approx 0.135 \cdot c_0^2$（$e^{-2}$倍）

確率密度の詳細な特徴:

1. **最も確率が高い位置:**
   - $x = 0$（平衡位置）
   - 確率密度$|u_0(0)|^2 = c_0^2$が最大
2. **標準偏差:**
   - $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$
   - これは確率分布の「広がり」を表す
3. **位置の不確定性:**
   - $\Delta x = \sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$
   - これは、位置測定の不確定性（ゆらぎ）を表す
4. **確率の範囲:**
   - $|x| < \sigma$の範囲に粒子が存在する確率: 約68%（1標準偏差内）
   - $|x| < 2\sigma$の範囲に粒子が存在する確率: 約95%（2標準偏差内）
   - $|x| < 3\sigma$の範囲に粒子が存在する確率: 約99.7%（3標準偏差内）

物理的解釈の詳細:

1. **波動関数の形状:**
   - 波動関数$u_0(x)$は、原点を中心として左右対称に広がった「ベル型」（ガウス型）の曲線
   - 単一の山（ピーク）のみを持ち、節（ゼロ点）はない
   - これは、基底状態が最も「滑らか」な状態であることを示している
2. **粒子の存在確率:**
   - 粒子は、最も確率が高い$x = 0$の周りに分布している

- しかし、完全に$x = 0$に局在しているわけではない
- この広がりが、量子力学的な不確定性（$\Delta x > 0$）を表している

3. **量子ゆらぎ:**
   - 基底状態でも、粒子の位置はある範囲（$\sim \pm\sigma$）に分布している
   - これは、粒子が「静止」しているのではなく、平衡位置の周りで「揺らいで」いることを意味する
   - この「揺らぎ」がゼロ点振動である
4. **古典極限との比較:**
   - **古典力学:** 粒子は$x = 0$に完全に局在している（$\Delta x = 0$）
   - **量子力学:** 粒子は$x = 0$の周りに分布している（$\Delta x = \sigma > 0$）
   - これは、量子効果の重要な特徴である

基底状態の波動関数と確率密度の数値例:

例えば、$m = 1$、$\omega = 1$、$\hbar = 1$の単位系では: - $c_0 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} \approx 0.751$ - $\sigma = \sqrt{\frac{1}{2}} \approx 0.707$ - $u_0(0) = 0.751$ - $u_0(\pm 0.707) \approx 0.585$ - $u_0(\pm 1.414) \approx 0.277$

この場合、粒子は主に$|x| < 0.707$の範囲に存在する（約68%の確率）。

波動関数の導関数の性質:

1階導関数:

$$\frac{du_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \cdot u_0(x)$$

- $x = 0$で0（極大値）
- $x > 0$で負、$x < 0$で正（単調減少・増加）

2階導関数:

$$\frac{d^2u_0}{dx^2} = \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar} x\right)^2 - \frac{m\omega}{\hbar}\right] u_0(x)$$

- $x = 0$で負（上に凸、極大値）
- 変曲点: $x = \pm\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \pm\sqrt{2}\sigma$

これらの性質は、波動関数が滑らかで連続的であることを示している。

ステップ5: ゼロ点エネルギーと不確定性関係の詳細

基底状態のエネルギーは:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0$$

これは**ゼロ点エネルギー**（zero-point energy）と呼ばれる。

(iii)の結果より:

$$E_0 = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (\Delta x)^2$$

基底状態では、不確定性関係の下限が達成される（実際、基底状態は最小エネルギー状態であり、不確定性関係の等号が成り立つ）：

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

具体的には、基底状態では:

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad \Delta p = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}$$

これらを(iii)に代入すると:

$$E_0 = \frac{1}{2m} \cdot \frac{m\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \cdot \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

これは正しい基底状態のエネルギーである。

ゼロ点振動の物理的意味と詳細な考察:

1. **ゼロ点エネルギーとは何か:**
   - 基底状態でも、エネルギーは$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0$である。
   - これは、粒子が完全に静止（$E = 0$）できないことを意味する。
   - 不確定性関係により、位置と運動量を同時に0にすることができないため、最小エネルギーが$\frac{1}{2}\hbar\omega$となる。
2. **不確定性関係からの必然性:**
   - 不確定性関係$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$により、$\Delta x = 0$または$\Delta p = 0$にすることはできない。
   - もし$\Delta x = 0$（位置が確定）なら、$\Delta p \to \infty$となり、運動エネルギーが無限大になる。
   - もし$\Delta p = 0$（運動量が確定、すなわち静止）なら、$\Delta x \to \infty$となり、位置エネルギーが大きくなる。
   - エネルギーの最小化により、ΔxとΔpの間に最適なバランスが存在する。これがゼロ点エネルギーである。

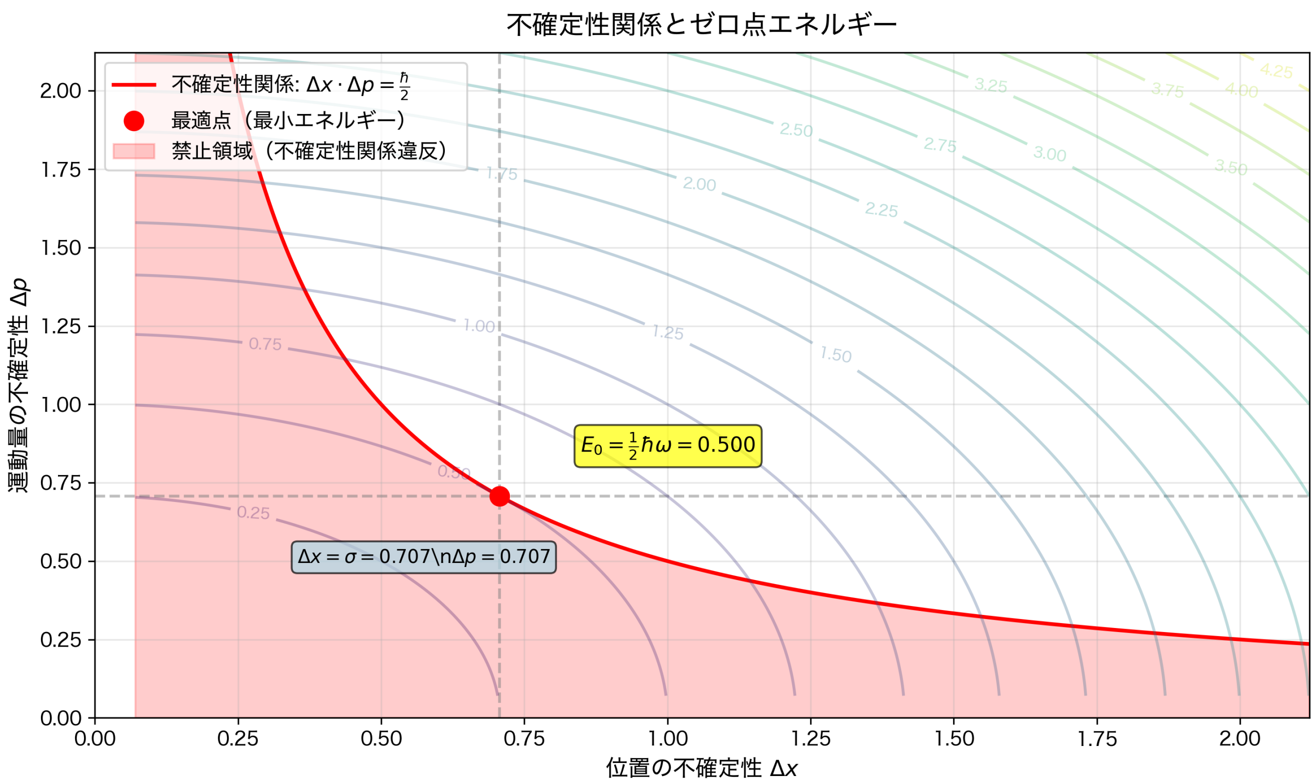

Figure 3: 不確定性関係とゼロ点エネルギー

3. **量子ゆらぎの意味:**
   - 基底状態でも、粒子の位置はある範囲に分布しており（$\Delta x = \sqrt{\hbar/(2m\omega)} > 0$）、運動量も0ではない（$\Delta p = \sqrt{m\hbar\omega/2} > 0$）。
   - この量子力学的な不確定性による「振動」がゼロ点振動である。
   - これは、粒子が「静止」しているのではなく、平衡位置の周りで常に量子力学的な「振動」をしていることを意味する。
4. **古典力学との根本的な違い:**
   - **古典力学:**
     - 粒子は完全に静止（$x = 0$、$p = 0$）することができる。
     - エネルギーは0になり得る（$E = 0$は可能）。

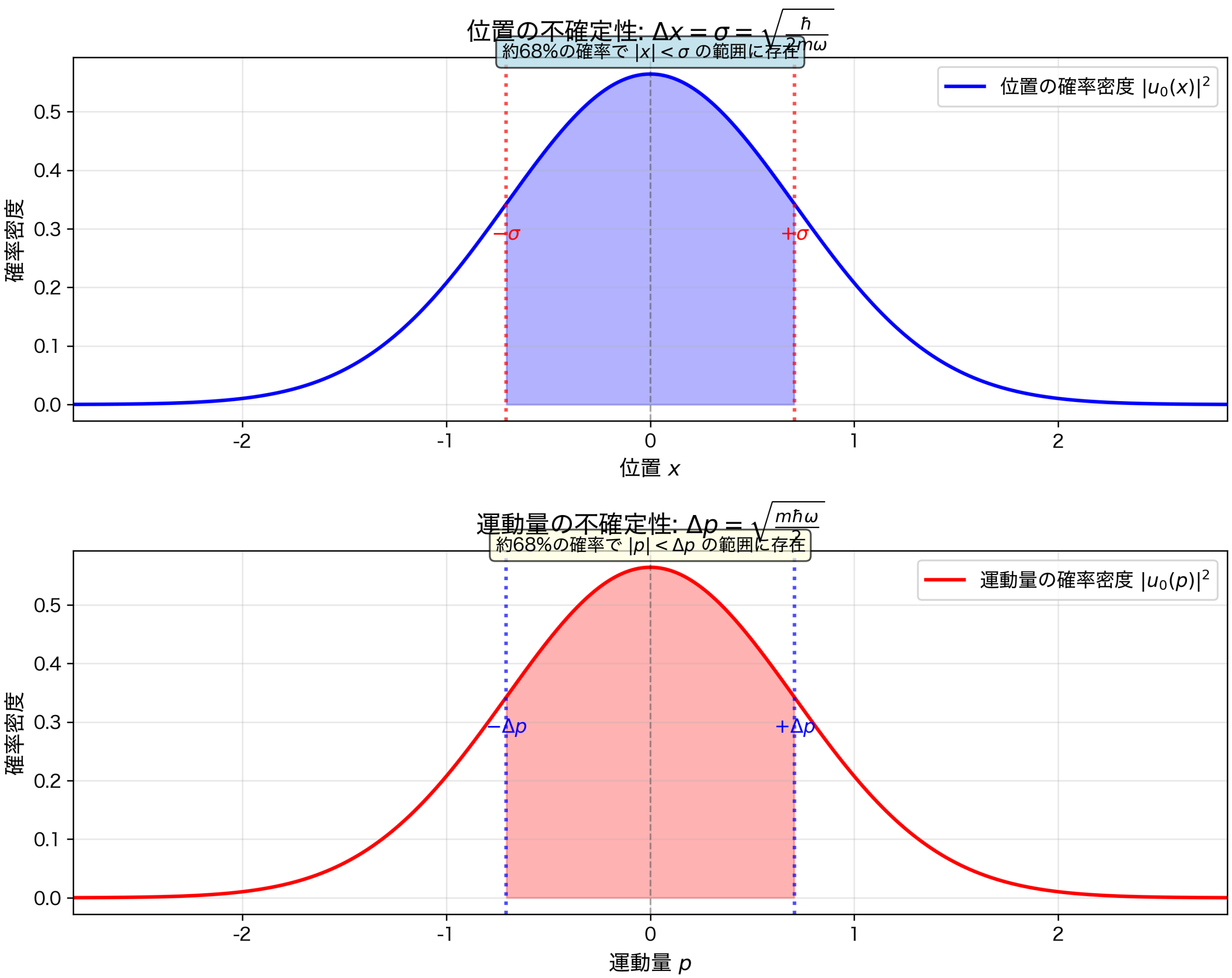

Figure 4: 位置と運動量の不確定性分布

– 粒子は明確な軌道を描く（位置と運動量が同時に確定）。

- **量子力学:**
  - 不確定性関係により、粒子は完全に静止できない。
  - 最小エネルギーは$\frac{1}{2}\hbar\omega$である（$E = 0$は不可能）。
  - 粒子は確率分布として記述される（位置と運動量は同時に確定しない）。

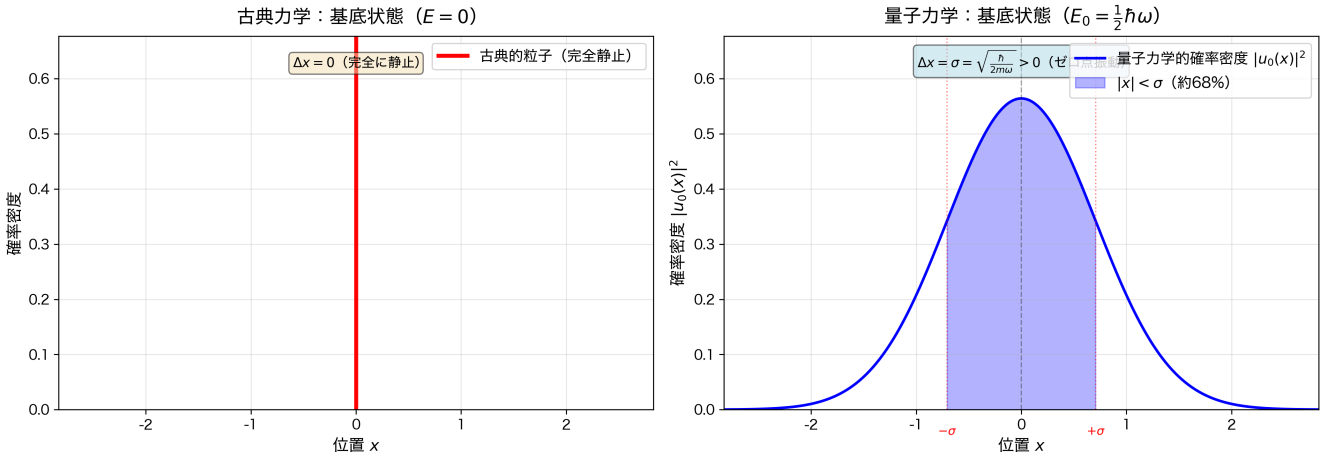

Figure 5: 古典力学と量子力学の比較

5. **実験的観測と重要性:**
   - ゼロ点振動は、実際に観測可能な効果である。
   - **液体ヘリウム:** 絶対零度（$T = 0$）でも固体化しないのは、ゼロ点振動による効果である。ヘリウム原子の質量が小さいため、$\hbar/(2m)$が大きく、ゼロ点エネルギーが大きくなる。
   - **結晶格子:** 結晶中の原子もゼロ点振動を行っており、これは熱膨張や格子定数の測定に影響を与える。
   - **カシミール効果:** ゼロ点エネルギーの存在が示される実験的証拠の一つ。
6. **基底状態での運動の理解:**
   - 基底状態では、粒子は「静止」しているのではなく、平衡位置の周りで量子力学的な「振動」をしている。
   - これは、確率密度$|u_0(x)|^2$が原点周りにガウス分布として分布していることから理解できる。
   - 粒子は、最も確率が高い$x = 0$の周りを「揺らいで」いる。
7. **エネルギーの等分配:**
   - 基底状態では、運動エネルギーと位置エネルギーの期待値は等しく:

$$\left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}$$

   - これは、エネルギーの等分配の一例である。
8. **波動関数の重ね合わせとの関係:**
   - ゼロ点振動は、波動関数が複数の運動量状態の重ね合わせであることの結果である。
   - 粒子は、さまざまな運動量を持つ状態の重ね合わせとして記述されるため、「静止」することができない。

答え:

基底状態$u_0(x)$は、原点を中心としたガウス型の分布を持つ。ゼロ点振動は、不確定性関係により、基底状態でも粒子が完全に静止できず、平衡位置の周りで量子力学的な振動をしている現象である。

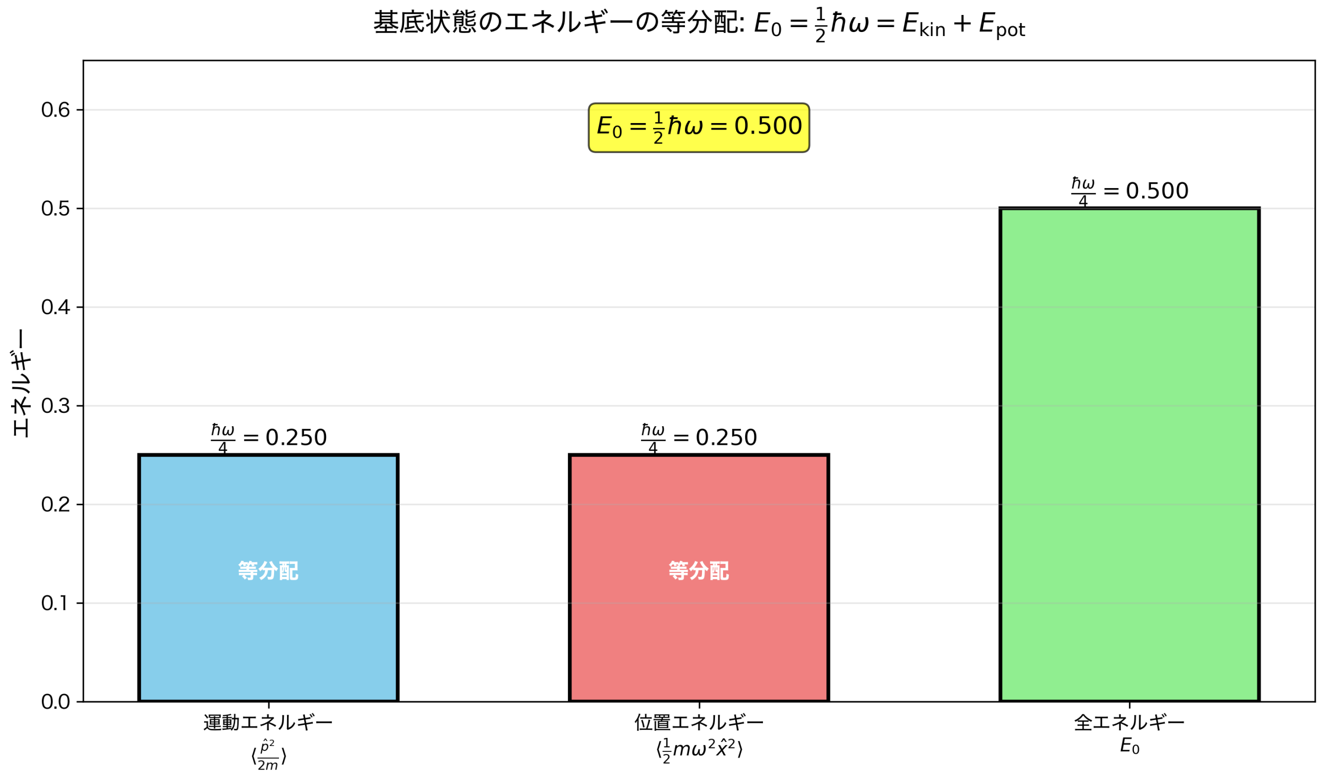

Figure 6: エネルギーの等分配

問題6-4: 調和振動子問題における波束とその時間発展

問題設定

1次元調和振動子系の時間に依存するシュレーディンガー方程式は:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right)\Psi(x,t)$$

で与えられる。

(i) 一般解の時間依存性

問題: 一般解として、問題6-2で考えたエネルギー固有関数$u_n(x)$を用いて:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(t) u_n(x)$$

を仮定する。ここで、$\alpha_n(t)$はtの関数である。この$\Psi(x,t)$が時間に依存するシュレーディンガー方程式の解となるには、$\alpha_n(t)$がどのような形であるべきか示せ。

解答:

時間に依存するシュレーディンガー方程式:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \hat{H}\Psi(x,t)$$

$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(t) u_n(x)$を代入:

$$i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d\alpha_n}{dt} u_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(t) \hat{H} u_n(x)$$

エネルギー固有値方程式$\hat{H} u_n = E_n u_n$（$E_n = \hbar\omega(n+1/2)$）より:

$$i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d\alpha_n}{dt} u_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(t) E_n u_n(x)$$

$u_n(x)$は線形独立であるから、各nについて係数を比較:

$$i\hbar \frac{d\alpha_n}{dt} = E_n \alpha_n(t)$$

この微分方程式を解く:

$$\frac{d\alpha_n}{dt} = -\frac{iE_n}{\hbar} \alpha_n(t)$$

解は:

$$\alpha_n(t) = A_n e^{-iE_n t/\hbar}$$

ここでA_nは定数である。

答え: $\alpha_n(t) = A_n e^{-iE_n t/\hbar}$（$A_n$は定数）

物理的意味: - 各エネルギー固有状態は、位相因子$e^{-iE_n t/\hbar}$で時間発展する。 - これは、エネルギー固有状態が定常状態であることを示している。 - 一般の波動関数は、これらの定常状態の重ね合わせとして表される。

(ii) ガウス型波束の係数A_nの決定

問題: $t = 0$における波動関数として、次のようなガウス型の波束を考える:

$$\Psi(x, t=0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(\xi-\xi_0)^2/2}$$

（ξ_0は定数）

この波束を実現するためには、係数A_nをどのように選べばよいか確かめよ。

解答:

導出の戦略

初期波動関数$\Psi(x,0)$を、エネルギー固有関数$u_n(x)$の重ね合わせとして表す。規格直交性を用いて、各係数A_nを決定する。

ステップ1: 係数の決定方法

$t = 0$での波動関数は:

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n u_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(\xi-\xi_0)^2/2}$$

規格化された波動関数$u_n(x) = c_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$は規格直交系を形成する（$\int u_n(x) u_m(x) dx = \delta_{nm}$）ため、両辺に$u_n(x)$を掛けて積分すると:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x)\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x) \sum_{m=0}^{\infty} A_m u_m(x) = \sum_{m=0}^{\infty} A_m \delta_{nm} = A_n$$

したがって:

$$A_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n(x)\Psi(x,0)$$

ステップ2: 変数変換

$u_n(x) = c_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$、$\Psi(x,0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(\xi-\xi_0)^2/2}$を代入:

$$A_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, c_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(\xi-\xi_0)^2/2}$$

変数変換: $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}x$より、$dx = \sqrt{\hbar/(m\omega)}d\xi$である。したがって:

$$A_n = c_n \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} e^{-(\xi-\xi_0)^2/2}$$

ステップ3: 指数部分の整理

指数部分を計算する:

$$-\frac{\xi^2}{2} - \frac{(\xi-\xi_0)^2}{2} = -\frac{\xi^2 + (\xi-\xi_0)^2}{2}$$

$(\xi-\xi_0)^2 = \xi^2 - 2\xi\xi_0 + \xi_0^2$より:

$$-\frac{\xi^2 + \xi^2 - 2\xi\xi_0 + \xi_0^2}{2} = -\frac{2\xi^2 - 2\xi\xi_0 + \xi_0^2}{2} = -\xi^2 + \xi\xi_0 - \frac{\xi_0^2}{2}$$

平方完成を行う。$-\xi^2 + \xi\xi_0$の部分を$(\xi-\alpha)^2$の形にする:

$$-\xi^2 + \xi\xi_0 = -(\xi^2 - \xi\xi_0) = -\left(\xi - \frac{\xi_0}{2}\right)^2 + \frac{\xi_0^2}{4}$$

したがって:

$$-\xi^2 + \xi\xi_0 - \frac{\xi_0^2}{2} = -\left(\xi - \frac{\xi_0}{2}\right)^2 + \frac{\xi_0^2}{4} - \frac{\xi_0^2}{2} = -\left(\xi - \frac{\xi_0}{2}\right)^2 - \frac{\xi_0^2}{4}$$

ステップ4: 積分の書き換え

したがって:

$$A_n = c_n \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} e^{-\xi_0^2/4} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi) e^{-(\xi-\xi_0/2)^2}$$

ステップ5: 母関数を用いた方法

直接積分を計算する代わりに、母関数の性質を利用する方が簡単である。

与えられた初期波動関数:

$$\Psi(x,0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(\xi-\xi_0)^2/2}$$

一方、$\Psi(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n u_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n c_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$である。

両辺を$e^{\xi^2/2}$で割ると:

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(\xi-\xi_0)^2/2+\xi^2/2} = \sum_{n=0}^{\infty} A_n c_n H_n(\xi)$$

ステップ6: 指数部分の計算

指数部分を計算する:

$$-(\xi-\xi_0)^2/2+\xi^2/2 = -\frac{(\xi-\xi_0)^2-\xi^2}{2}$$

$(\xi-\xi_0)^2 = \xi^2 - 2\xi\xi_0 + \xi_0^2$より:

$$(\xi-\xi_0)^2-\xi^2 = -2\xi\xi_0+\xi_0^2$$

したがって:

$$-(\xi-\xi_0)^2/2+\xi^2/2 = \frac{2\xi\xi_0-\xi_0^2}{2} = \xi\xi_0 - \frac{\xi_0^2}{2}$$

ステップ7: 母関数との比較

したがって:

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{\xi\xi_0-\xi_0^2/2} = \sum_{n=0}^{\infty} A_n c_n H_n(\xi)$$

母関数$S(\xi,s) = e^{-s^2+2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n$を利用する。$s=\xi_0/2$とおくと:

$$S(\xi,\xi_0/2) = e^{-(\xi_0/2)^2+2(\xi_0/2)\xi} = e^{-\xi_0^2/4+\xi\xi_0} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!}\left(\frac{\xi_0}{2}\right)^n$$

左辺$e^{\xi\xi_0-\xi_0^2/2}$を書き換える:

$$e^{\xi\xi_0-\xi_0^2/2} = e^{-\xi_0^2/4+\xi\xi_0-\xi_0^2/4} = e^{-\xi_0^2/4}\cdot e^{-\xi_0^2/4+\xi\xi_0} = e^{-\xi_0^2/4} S(\xi,\xi_0/2)$$

したがって:

$$e^{\xi\xi_0-\xi_0^2/2} = e^{-\xi_0^2/4}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!}\left(\frac{\xi_0}{2}\right)^n$$

ステップ8: 係数の比較

したがって:

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi_0^2/4}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!}\left(\frac{\xi_0}{2}\right)^n = \sum_{n=0}^{\infty} A_n c_n H_n(\xi)$$

両辺の$H_n(\xi)$の係数を比較すると:

$$A_n c_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi_0^2/4}\frac{1}{n!}\left(\frac{\xi_0}{2}\right)^n$$

ステップ9: c_nを用いたA_nの決定

問題6-3(vi)より、規格化定数は:

$$c_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$$

したがって:

$$A_n = \frac{1}{c_n}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi_0^2/4}\frac{1}{n!}\left(\frac{\xi_0}{2}\right)^n$$

$$= \frac{\sqrt{2^n n!}}{(m\omega/(\pi\hbar))^{1/4}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi_0^2/4}\frac{1}{n!}\left(\frac{\xi_0}{2}\right)^n$$

$$= \sqrt{2^n n!}\cdot e^{-\xi_0^2/4}\frac{1}{n!}\left(\frac{\xi_0}{2}\right)^n$$

$$= e^{-\xi_0^2/4}\frac{\sqrt{2^n n!}}{n!}\left(\frac{\xi_0}{2}\right)^n = e^{-\xi_0^2/4}\frac{1}{n!}\left(\frac{\xi_0}{2}\right)^n\sqrt{2^n n!}$$

ここで、$\sqrt{2^n n!} = 2^{n/2}\sqrt{n!}$なので:

$$A_n = e^{-\xi_0^2/4}\frac{1}{n!}\left(\frac{\xi_0}{2}\right)^n 2^{n/2}\sqrt{n!} = e^{-\xi_0^2/4}\frac{\xi_0^n}{2^n n!}2^{n/2}\sqrt{n!}$$

$$= e^{-\xi_0^2/4}\frac{\xi_0^n}{2^n}\frac{2^{n/2}}{n!}\sqrt{n!} = e^{-\xi_0^2/4}\frac{\xi_0^n}{2^{n/2}}\frac{1}{n!}\sqrt{n!}$$

さらに整理すると:

$$A_n = e^{-\xi_0^2/4}\frac{\xi_0^n}{\sqrt{2^n}}\frac{\sqrt{n!}}{n!} = e^{-\xi_0^2/4}\frac{\xi_0^n}{\sqrt{2^n n!}}$$

答え:

$$A_n = \frac{\xi_0^n}{\sqrt{2^n n!}}e^{-\xi_0^2/4}$$

物理的意味:

ガウス型波束の展開:

1. **重ね合わせの表現:** ガウス型波束は、すべてのエネルギー固有状態の重ね合わせとして表現できる。係数A_nは、各エネルギー固有状態の寄与の大きさを表す。
2. **係数の性質:**
   - A_nは、nが増加すると指数的に減少する（$e^{-\xi_0^2/4}$因子と$1/\sqrt{n!}$因子により）。
   - これは、波束が主に低エネルギー準位の状態で構成されることを示している。
   - 高エネルギー準位の寄与は小さい。
3. **物理的解釈:**
   - ξ_0が大きいほど（初期位置が平衡点から離れているほど）、より多くのエネルギー固有状態の寄与が必要になる。
   - しかし、それでも低エネルギー準位の寄与が主要である。
4. **規格化の確認:** この係数は、初期波動関数の規格化を保証するように選ばれている。

(iii) 任意の時刻tにおける波動関数

問題: (i)の結果と(ii)で定めたA_nを用いると、任意の時刻tにおける波動関数は:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(t) u_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi^2/2 - \xi_0^2/4 - i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\xi_0 e^{-i\omega t}}{2}\right)^n H_n(\xi)$$

と書ける。ここでエルミート多項式の母関数$S(\xi, s)$を用いることにより、次を示せ:

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{\xi_0^2}{4} e^{-2i\omega t} + \xi_0 \xi e^{-i\omega t} - \frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi_0^2}{4} - \frac{i\omega t}{2}\right]$$

解答:

母関数$S(\xi, s) = e^{-s^2 + 2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n$より、$s = \frac{\xi_0 e^{-i\omega t}}{2}$とおくと:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\xi_0 e^{-i\omega t}}{2}\right)^n H_n(\xi) = S\left(\xi, \frac{\xi_0 e^{-i\omega t}}{2}\right) = e^{-(\xi_0 e^{-i\omega t}/2)^2 + 2(\xi_0 e^{-i\omega t}/2)\xi}$$

$$= e^{-\xi_0^2 e^{-2i\omega t}/4 + \xi_0 \xi e^{-i\omega t}}$$

したがって:

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi^2/2 - \xi_0^2/4 - i\omega t/2} \cdot e^{-\xi_0^2 e^{-2i\omega t}/4 + \xi_0 \xi e^{-i\omega t}}$$

指数部分を整理:

$$-\frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi_0^2}{4} - \frac{i\omega t}{2} - \frac{\xi_0^2 e^{-2i\omega t}}{4} + \xi_0 \xi e^{-i\omega t}$$

ステップ4: 指数部分の整理

したがって:

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi^2/2 - \xi_0^2/4 - i\omega t/2} \cdot e^{-\xi_0^2 e^{-2i\omega t}/4 + \xi_0 \xi e^{-i\omega t}}$$

指数部分をまとめると:

$$-\frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi_0^2}{4} - \frac{i\omega t}{2} - \frac{\xi_0^2 e^{-2i\omega t}}{4} + \xi_0 \xi e^{-i\omega t}$$

答え: 示された。

物理的意味:

1. **母関数による簡潔な表現:** 波動関数は時間とともに複雑に変化するが、母関数を用いることで簡潔な形で表現できる。無限級数を指数関数の形にまとめることができる。
2. **時間依存性:** 指数部分の時間依存性（$e^{-i\omega t}$項）は、波束の運動を記述している。これにより、波束がどのように時間発展するかを追跡できる。
3. **複素指数の役割:** $e^{-i\omega t}$の因子により、波動関数の位相が時間とともに変化する。これが波動関数の時間発展の本質である。

(iv) 確率密度の時間発展

問題: さらに次を確かめよ:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-(\xi-\xi_0\cos\omega t)^2}$$

このことは、$\Psi(x,t)$があたかも古典的調和振動子のように単振動する波束であることを意味する。

解答:

導出の戦略

(iii)で求めた波動関数の複素共役を取って、確率密度$|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$を計算する。指数部分の複素項が消えることを確認する。

ステップ1: 波動関数の複素共役

(iii)の結果より:

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{\xi_0^2}{4}e^{-2i\omega t} + \xi_0\xi e^{-i\omega t} - \frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi_0^2}{4} - \frac{i\omega t}{2}\right]$$

複素共役を取ると、虚数単位iが$-i$に変わり、複素指数の指数部分の符号が変わる:

$$\Psi^*(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{\xi_0^2}{4}e^{2i\omega t} + \xi_0\xi e^{i\omega t} - \frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi_0^2}{4} + \frac{i\omega t}{2}\right]$$

ステップ2: 確率密度の計算

$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$を計算する。指数関数の積は指数の和になる:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[\text{（指数部分の和）}\right]$$

指数部分の和を計算する:

$$\begin{aligned}&-\frac{\xi_0^2}{4}e^{2i\omega t} + \xi_0\xi e^{i\omega t} - \frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi_0^2}{4} + \frac{i\omega t}{2}\\ &+\left(-\frac{\xi_0^2}{4}e^{-2i\omega t} + \xi_0\xi e^{-i\omega t} - \frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi_0^2}{4} - \frac{i\omega t}{2}\right)\end{aligned}$$

実数項と複素数項をまとめると: - ξ^2項: $-\xi^2/2 - \xi^2/2 = -\xi^2$ - ξ_0^2項: $-\xi_0^2/4 - \xi_0^2/4 = -\xi_0^2/2$ - 複素指数項: $-\frac{\xi_0^2}{4}(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t}) + \xi_0\xi(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$ - 純虚数項: $+i\omega t/2 - i\omega t/2 = 0$（消える）

したがって:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{\xi_0^2}{4}(e^{-2i\omega t} + e^{2i\omega t}) + \xi_0\xi(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) - \xi^2 - \frac{\xi_0^2}{2}\right]$$

ステップ3: オイラーの公式の適用

オイラーの公式$e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2\cos\theta$を用いる:

$$\begin{aligned}e^{-2i\omega t} + e^{2i\omega t} &= 2\cos(2\omega t)\\ e^{-i\omega t} + e^{i\omega t} &= 2\cos(\omega t)\end{aligned}$$

したがって:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{\xi_0^2}{4}\cdot 2\cos(2\omega t) + \xi_0\xi\cdot 2\cos(\omega t) - \xi^2 - \frac{\xi_0^2}{2}\right]$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{\xi_0^2}{2}\cos(2\omega t) + 2\xi_0\xi\cos(\omega t) - \xi^2 - \frac{\xi_0^2}{2}\right]$$

ステップ4: 三角関数の公式の適用

倍角の公式$\cos(2\theta) = 2\cos^2\theta - 1$を用いる:

$$\cos(2\omega t) = 2\cos^2(\omega t) - 1$$

したがって:

$$-\frac{\xi_0^2}{2}\cos(2\omega t) = -\frac{\xi_0^2}{2}(2\cos^2(\omega t) - 1) = -\xi_0^2\cos^2(\omega t) + \frac{\xi_0^2}{2}$$

ステップ5: 指数部分の整理

ステップ3の結果にステップ4を代入:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[-\xi_0^2\cos^2(\omega t) + \frac{\xi_0^2}{2} + 2\xi_0\xi\cos(\omega t) - \xi^2 - \frac{\xi_0^2}{2}\right]$$

$\xi_0^2/2$の項が相殺される:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[-\xi_0^2\cos^2(\omega t) + 2\xi_0\xi\cos(\omega t) - \xi^2\right]$$

ステップ6: 平方完成

ξに関する項を平方完成する。ξの2次式:

$$-\xi^2 + 2\xi_0\xi\cos(\omega t) - \xi_0^2\cos^2(\omega t)$$

これは$(\xi - \xi_0\cos(\omega t))^2$の形に平方完成できることを確認する:

$$-(\xi - \xi_0\cos(\omega t))^2 = -(\xi^2 - 2\xi_0\xi\cos(\omega t) + \xi_0^2\cos^2(\omega t))$$
$$= -\xi^2 + 2\xi_0\xi\cos(\omega t) - \xi_0^2\cos^2(\omega t)$$

これは確かに一致する。したがって:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[-(\xi - \xi_0\cos(\omega t))^2\right]$$
$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-(\xi - \xi_0\cos\omega t)^2}$$

答え: 確かめられた。

物理的意味: - 確率密度$|\Psi(x,t)|^2$は、ガウス型の分布で、その中心が$\xi = \xi_0\cos(\omega t)$で時間発展する。 - これは、波束が古典的な調和振動子のように、$\xi = \xi_0\cos(\omega t)$の位置で単振動することを示している。 - 波束の形状（ガウス型）は時間とともに変化せず、位置だけが振動する。これは、調和振動子の特殊な性質である（一般には波束は拡散する）。 - この結果は、量子力学と古典力学の対応関係を示す重要な例である（エーレンフェストの定理とも関連する）。