

量子力学：用語と記号の詳細説明

このドキュメントでは、量子力学で使われる基本的な用語と記号を、初心者にもわかりやすく詳しく説明します。

目次

1. 基本的な物理量と記号
 2. 演算子（オペレーター）
 3. 波動関数と状態
 4. 重要な方程式
 5. 重要な概念
 6. よく使う記号とその意味
 7. すべての問題パターンに通用する解法
-

基本的な物理量と記号

1. \hbar （エイチバー）

- 読み方：エイチバー、プランク定数
- 意味：プランク定数 h を 2π で割った値
- 値： $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1.054571817 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
- なぜ使うか：量子力学の式で 2π が頻繁に出てくるため、 \hbar を使うと式が簡潔になる
- 例：エネルギー $E = \hbar\omega$ (ω は角周波数)

2. m （質量）

- 意味：粒子の質量
- 単位：kg（キログラム）
- 注意：電子の質量は $m_e \approx 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$ など、非常に小さい

3. ω （オメガ）

- 読み方：オメガ
- 意味：角周波数（角振動数）
- 単位：rad/s（ラジアン毎秒）
- 関係式： $\omega = 2\pi f$ (f は周波数)
- 例：調和振動子では、 $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ (k はバネ定数)

4. E （エネルギー）

- 意味：粒子の全エネルギー
- 単位：J（ジュール）または eV（電子ボルト）
- 注意：量子力学では、エネルギーは「離散的」（とびとびの値）になることが多い

5. k （波数）

- 意味：波の空間的な振動の度合い
- 定義： $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ (λ は波長)
- 単位： $1/\text{m}$ （メートルの逆数）
- 物理的意味： k が大きいほど、波の振動が激しい

6. λ （ラムダ）

- 読み方：ラムダ
- 意味：波長

- 単位: m (メートル)
 - 関係: $\lambda = \frac{2\pi}{k}$
-

演算子 (オペレーター)

1. \hat{x} (位置演算子)

- 読み方: ハットエックス、位置演算子
- 意味: 位置を表す演算子
- 作用: 波動関数 $\psi(x)$ に作用すると、 x を掛ける: $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$
- 注意: ハット () がついているのは「演算子」であることを示す

2. \hat{p} (運動量演算子)

- 読み方: ハットピー、運動量演算子
- 意味: 運動量を表す演算子
- 作用: $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ (1次元の場合)
- 例: $\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$
- なぜ $-i\hbar$ か: 量子力学の基本原則から導かれる

3. \hat{H} (ハミルトニアン)

- 読み方: ハットエイチ、ハミルトニアン
- 意味: 全エネルギーを表す演算子
- 1次元の場合: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$
 - 第1項: 運動エネルギー
 - 第2項: ポテンシャルエネルギー
- 役割: シュレーディンガー方程式の左辺に現れる

4. \hat{a} (消滅演算子)

- 読み方: ハットエー、消滅演算子、下降演算子
- 意味: 調和振動子で使う演算子。エネルギー準位を 1 つ下げる
- 定義: $\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}$
- 作用: $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ ($|n\rangle$ は n 番目のエネルギー固有状態)

5. \hat{a}^\dagger (生成演算子)

- 読み方: ハットエーダガー、生成演算子、上昇演算子
- 意味: 調和振動子で使う演算子。エネルギー準位を 1 つ上げる
- 定義: $\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}$
- 作用: $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$
- 注意: \dagger (ダガー) は「エルミート共役」を表す記号

6. \hat{N} (数演算子)

- 読み方: ハットエヌ、数演算子
 - 意味: 励起の数を数える演算子
 - 定義: $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$
 - 作用: $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$
-

波動関数と状態

1. $\psi(x, t)$ (波動関数)

- 読み方: プサイ、波動関数

- 意味：粒子の状態を表す関数
- 性質：
 - 複素数値関数（実数ではない）
 - $|\psi(x, t)|^2$ が粒子の存在確率密度を表す
- 規格化条件： $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$

2. $u(x)$ （時間に依存しない波動関数）

- 読み方：ユー、固有関数
- 意味：時間に依存しないシュレーディンガー方程式の解
- 関係： $\psi(x, t) = u(x)e^{-iEt/\hbar}$ の形で時間発展する

3. $|n\rangle$ （ケット記法）

- 読み方：ケットエヌ、エネルギー固有状態
- 意味： n 番目のエネルギー固有状態を表す
- 例： $|0\rangle$ は基底状態、 $|1\rangle$ は第 1 励起状態
- 注意：これは「ブラ・ケット記法」の一部

4. $\langle n|$ （ブラ記法）

- 読み方：ブラエヌ
- 意味： $|n\rangle$ の複素共役
- 内積： $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ （クロネッカーのデルタ）

重要な方程式

1. 時間に依存するシュレーディンガー方程式

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

- 意味：波動関数の時間発展を記述する
- 左辺：時間変化の速度
- 右辺：ハミルトニアン の作用

2. 時間に依存しないシュレーディンガー方程式

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

または

$$\hat{H}u(x) = Eu(x)$$

- 意味：エネルギー固有値と固有関数を求める方程式
- E ：エネルギー固有値（離散的になることが多い）
- $u(x)$ ：エネルギー固有関数

3. 基本交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

- 意味：位置と運動量は交換しない（非可換）
- 交換子の定義： $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$
- 物理的意味：不確定性原理の根源

重要な概念

1. 交換子 $[\hat{A}, \hat{B}]$

- 定義: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$
- 意味: 2 つの演算子が「交換するかどうか」を測る
- $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ の場合: 可換 (交換する)
- $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ の場合: 非可換 (交換しない)
- 例: $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \neq 0 \rightarrow$ 位置と運動量は同時に確定できない

2. ポテンシャル $V(x)$

- 意味: 粒子に働く力による位置エネルギー
- 例:
 - 井戸型ポテンシャル: $V(x) = 0$ (井戸の中), $V(x) = \infty$ (壁)
 - 調和振動子: $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$
 - デルタ関数ポテンシャル: $V(x) = -\alpha\delta(x)$

3. 境界条件

- 意味: 波動関数が満たすべき条件
- 例:
 - 無限に深い井戸: $u(0) = 0, u(a) = 0$ (壁で波動関数は 0)
 - 連続性: 波動関数は連続でなければならない

4. 規格化

- 意味: 波動関数の絶対値の 2 乗を積分すると 1 になるようにする
- 式: $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$
- 物理的意味: 粒子がどこかに存在する確率が 100% であることを保証

5. 固有値と固有関数

- 固有値: 演算子を作用させたときに、波動関数に掛かる定数
- 固有関数: 固有値に対応する波動関数
- 例: $\hat{H}u_n(x) = E_n u_n(x)$
 - E_n : エネルギー固有値
 - $u_n(x)$: エネルギー固有関数

6. エルミート共役 \dagger

- 読み方: ダガー
- 意味: 演算子の複素共役と転置を取ったもの
- 例: $(\hat{a}^\dagger)^\dagger = \hat{a}$

よく使う記号とその意味

数学記号

| 記号 | 読み方 | 意味 | 例 |
|---------------|------------|----------------------|-------------------------------|
| ∂ | パーシャル | 偏微分 | $\frac{\partial}{\partial t}$ |
| d | ディー | 常微分 | $\frac{d}{dx}$ |
| δ | デルタ | デルタ関数 | $\delta(x)$ |
| δ_{mn} | クロネッカーのデルタ | $m = n$ のとき 1、それ以外 0 | $\delta_{12} = 0$ |
| \sum | シグマ | 和 | $\sum_{n=1}^{\infty}$ |
| \int | インテグラル | 積分 | $\int_{-\infty}^{\infty}$ |

| 記号 | 読み方 | 意味 | 例 |
|-------|-----|--------|-----------------------|
| i | アイ | 虚数単位 | $i^2 = -1$ |
| e | イー | 自然対数の底 | e^{ikx} |
| π | パイ | 円周率 | $\pi \approx 3.14159$ |

物理定数

| 記号 | 読み方 | 値 (概算) |
|---------|--------|--|
| \hbar | エイチバー | $1.055 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ |
| h | プランク定数 | $6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ |
| c | 光速 | $3.00 \times 10^8 \text{ m/s}$ |
| m_e | 電子の質量 | $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ |

演算子の記法

| 記号 | 意味 |
|----------------------|---|
| \hat{A} | 演算子 (ハットがついている) |
| \hat{A}^\dagger | エルミート共役 |
| $[\hat{A}, \hat{B}]$ | 交換子 |
| $\hat{A}\hat{B}$ | 演算子の積 (\hat{A} を作用させてから \hat{B} を作用) |

よくある質問

Q1: なぜ演算子にハット () がつくの？

A: 普通の数 (スカラー) と区別するためです。量子力学では、位置や運動量は「数」ではなく「演算子」(関数に作用するもの) として扱います。

Q2: なぜ波動関数は複素数なの？

A: 量子力学の基本原則から導かれます。確率は $|\psi|^2$ で計算されるので、波動関数自体は複素数でも問題ありません。

Q3: 交換子が 0 でないとどうなるの？

A: 2 つの物理量を同時に正確に測定できません。これが不確定性原理です。

Q4: なぜ $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ なの？

A: これは量子力学の基本仮定です。波動関数の空間的な変化が運動量に対応します。

Q5: 生成消滅演算子は何のためにあるの？

A: 調和振動子の問題を解くときに、代数的に簡単に扱えるためです。エネルギー準位を「上げる」「下げる」操作として理解できます。

学習のヒント

1. 記号に慣れる：最初は記号が多くて混乱しますが、使っているうちに慣れます
2. 物理的意味を考える：数式だけでなく、「これは何を表しているか」を考えましょう
3. 具体例で理解する：抽象的な記号も、具体例 (井戸型ポテンシャルなど) で理解するとわかりやすいです
4. 段階的に学ぶ：一度に全部を理解しようとせず、少しずつ理解を深めましょう

すべての問題パターンに通用する解法

このセクションでは、量子力学の問題を解く際に適用できる一般的な解法手順をまとめます。これらの手順は、多くの問題パターンに共通して使える基本的なアプローチです。

解法は以下のように分類されています：- **I. 基本解法**：シュレーディンガー方程式の解法、規格化、境界条件 - **II. 計算手法**：期待値、交換関係、積分計算 - **III. 特殊な解法**：生成消滅演算子、デルタ関数、対称性の利用 - **IV. 時間発展**：時間依存のシュレーディンガー方程式、重ね合わせの原理 - **V. 理論的關係**：不確定性関係 - **VI. 計算テクニック**：効率化のためのテクニック - **VII. 解法を選択と検証**：解法の選び方、検証方法

I. 基本解法

1. シュレーディンガー方程式を解く一般的な手順

ステップ 1：問題の設定を理解する

- ポテンシャル $V(x)$ の形を確認：井戸型、調和振動子、デルタ関数型など
- 領域の分割：ポテンシャルが区分的に定義されている場合、各領域で別々に解く
- 束縛状態か散乱状態か：エネルギーが負なら束縛状態、正なら散乱状態

ステップ 2：時間に依存しないシュレーディンガー方程式を書く

$$\hat{H}u(x) = Eu(x)$$

または

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

ステップ 3：各領域での一般解を求める

- $E > V(x)$ の領域：振動解 (\sin, \cos または $e^{\pm ikx}$)
 - $k = \sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}}$
 - 一般解： $u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ または $u(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$
- $E < V(x)$ の領域：減衰解 (指数関数)
 - $\kappa = \sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}}$
 - 一般解： $u(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$
 - 無限遠で発散しない解を選ぶ (束縛状態の場合)

ステップ 4：境界条件を適用する

- 連続性条件：波動関数は連続

$$u(x_0^-) = u(x_0^+)$$

- 導関数の連続性：ポテンシャルが有限なら導関数も連続

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x_0^-} = \left. \frac{du}{dx} \right|_{x_0^+}$$

- デルタ関数ポテンシャルの場合：導関数は不連続

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x_0^+} - \left. \frac{du}{dx} \right|_{x_0^-} = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} u(0)$$

- 無限ポテンシャル壁：波動関数は 0

$$u(\text{壁の位置}) = 0$$

ステップ 5: エネルギー固有値を決定する 境界条件から、自明でない解が存在するための条件（特性方程式）を導く。これにより、離散的なエネルギー固有値が決まる。

ステップ 6: 規格化を行う 規格化条件: $\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx = 1$ から規格化定数を決定する。

2. 変数分離法

時間に依存するシュレーディンガー方程式を解く際に用いる基本的な手法。

手順

1. 変数分離の仮定: $\Psi(x, t) = u(x)T(t)$ と仮定する
2. 方程式に代入:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [u(x)T(t)] = \hat{H}[u(x)T(t)]$$

3. 変数分離: 両辺を $u(x)T(t)$ で割ると

$$\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{u(x)} \hat{H}u(x)$$

4. 定数への等置: 左辺は t のみ、右辺は x のみの関数なので、これらは定数 E に等しい
5. 2 つの方程式に分離:
 - 時間部分: $i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = ET(t)$
 - 空間部分: $\hat{H}u(x) = Eu(x)$
6. 解を求める:
 - 時間部分: $T(t) = T(0)e^{-iEt/\hbar}$
 - 空間部分: 時間に依存しないシュレーディンガー方程式を解く

一般解の構成 エネルギー固有関数 $u_n(x)$ とその固有値 E_n を用いて:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

ここで、 c_n は初期条件から決定される係数。

3. 規格化の一般的な手順

ステップ 1: 規格化積分を計算する

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} u^*(x)u(x) dx$$

ステップ 2: 積分を実行する

- 区分的に定義された波動関数: 各領域で積分して合計
- 対称性の利用: 偶関数・奇関数の性質を利用
- 標準的な積分公式:
 - $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (a > 0)$
 - $\int_0^{\pi} \sin^2(nx) dx = \int_0^{\pi} \cos^2(nx) dx = \frac{\pi}{2}$

ステップ 3: 規格化定数を決定する 規格化条件から:

$$|C|^2 \times (\text{積分の値}) = 1$$

したがって:

$$|C| = \frac{1}{\sqrt{\text{積分の値}}}$$

位相を適切に選んで（通常は正の実数）：

$$C = \frac{1}{\sqrt{\text{積分の値}}}$$

4. 境界条件と接続条件

基本的な境界条件

- 連続性条件：波動関数は連続

$$u(x_0^-) = u(x_0^+)$$

- 導関数の連続性：ポテンシャルが有限なら導関数も連続

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x_0^-} = \left. \frac{du}{dx} \right|_{x_0^+}$$

- 無限ポテンシャル壁：波動関数は 0

$$u(\text{壁の位置}) = 0$$

デルタ関数ポテンシャルの接続条件 ポテンシャル $V(x) = -g\delta(x)$ の場合：- 波動関数の連続性： $u(0_-) = u(0_+)$ - 導関数の不連続性：

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{0_+} - \left. \frac{du}{dx} \right|_{0_-} = -\frac{2mg}{\hbar^2} u(0)$$

導出方法：シュレーディンガー方程式を $x = -\epsilon$ から $x = \epsilon$ まで積分し、 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限を取る。

複数の接続点がある場合 複数のデルタ関数や不連続点がある場合、各点で接続条件を適用し、連立方程式を解く。

II. 計算手法

5. 期待値の計算方法

基本的な公式 物理量 A の期待値は：

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

位置の期待値

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

運動量の期待値

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx$$

期待値の計算手順

1. 演算子を位置表示で書き下す
2. 波動関数に演算子を作用させる
3. 複素共役を取って積分する
4. 部分積分を必要に応じて適用する

部分積分の使い方

$$\int_a^b u(x)v'(x)dx = [u(x)v(x)]_a^b - \int_a^b u'(x)v(x)dx$$

重要なポイント：- 規格化された波動関数では、境界項は通常 0 になる（無限遠で波動関数が 0）- 部分積分を繰り返し適用することで、期待値を簡潔な形に変形できる

6. 交換関係の利用方法

基本的な交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

交換関係の計算手順

1. 交換子の定義を適用： $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$
2. 演算子の積を展開する
3. 既知の交換関係を代入する
4. 整理して結果を得る

交換関係の性質

- 線形性： $[\hat{A}, \alpha\hat{B} + \beta\hat{C}] = \alpha[\hat{A}, \hat{B}] + \beta[\hat{A}, \hat{C}]$
- 反対称性： $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$
- ヤコビ恒等式： $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$

交換関係の応用

- 不確定性関係の導出
- 演算子の順序の変更： $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + [\hat{A}, \hat{B}]$
- 期待値の計算： $\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle$ の計算

7. 固有関数の直交性を利用した係数の決定

初期状態 $\Psi(x, 0)$ をエネルギー固有状態で展開する場合：

$$\Psi(x, 0) = \sum_n c_n u_n(x)$$

係数 c_n は、固有関数の直交性を用いて：

$$c_n = \int u_n^*(x) \Psi(x, 0) dx$$

計算の手順：1. 初期状態 $\Psi(x, 0)$ を固有関数 $u_n(x)$ と掛ける 2. 積分領域全体で積分する 3. 直交性により、 $m \neq n$ の項は消える 4. $m = n$ の項のみが残り、係数が決定される

注意点：- 固有関数が実関数の場合は $u_n^*(x) = u_n(x)$ となる - 積分領域は、波動関数が定義されている領域全体（例： $[0, a]$ や $[-a, a]$ ）
- 規格化条件 $\sum_n |c_n|^2 = 1$ を満たすことを確認する

8. フーリエ級数展開

初期状態をエネルギー固有状態で展開することは、フーリエ級数展開の一種である。

三角関数による展開（井戸型ポテンシャル）

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

初期状態を展開：

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

係数は：

$$c_n = \int_0^a u_n(x) \Psi(x, 0) dx$$

三角関数の積和公式の利用 複数の三角関数の積を含む積分を計算する際、積和公式を用いて和の形に変換する：

$$\sin A \sin B = \frac{1}{2} [\cos(A - B) - \cos(A + B)]$$

$$\cos A \cos B = \frac{1}{2} [\cos(A - B) + \cos(A + B)]$$

$$\sin A \cos B = \frac{1}{2} [\sin(A + B) + \sin(A - B)]$$

III. 特殊な解法

9. 生成消滅演算子を使った解法（調和振動子）

ステップ 1：生成消滅演算子の定義

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$
$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$

ステップ 2：交換関係を確認する

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

ステップ 3：ハミルトニアンを個数演算子で表現する

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right)$$

ここで、 $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ は数演算子。

ステップ 4：基底状態を求める

$$\hat{a}|0\rangle = 0$$

この条件から基底状態の波動関数を決定する。

ステップ 5：励起状態を生成する

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$$

ステップ 6：エネルギー固有値を求める

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle$$

したがって、エネルギー固有値は：

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

10. デルタ関数ポテンシャルの特別な扱い

接続条件 ポテンシャル $V(x) = -g\delta(x)$ の場合：- 波動関数の連続性： $u(0_-) = u(0_+)$ - 導関数の不連続性：

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{0_+} - \left. \frac{du}{dx} \right|_{0_-} = -\frac{2mg}{\hbar^2} u(0)$$

導出方法 シュレーディンガー方程式を $x = -\epsilon$ から $x = \epsilon$ まで積分し、 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限を取る。

複数のデルタ関数がある場合 複数のデルタ関数がある場合、各点で接続条件を適用し、連立方程式を解く。対称性がある場合は、偶関数解と奇関数解に分類できる。

11. 対称性を利用した解法

パリティ対称性 ポテンシャルが偶関数 $V(-x) = V(x)$ の場合、固有関数は偶関数または奇関数になる。

- 偶関数解： $u(-x) = u(x)$
- 奇関数解： $u(-x) = -u(x)$

対称性の利用方法

1. 対称性の確認：ポテンシャルの対称性を確認する
2. 解の分類：偶関数解と奇関数解に分けて考える
3. 境界条件の簡略化：対称性により、境界条件が簡略化される
4. 計算の効率化：対称性により、積分範囲を半減できる

IV. 時間発展

12. 時間発展の取り扱い

時間に依存するシュレーディンガー方程式

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

一般解の構成 エネルギー固有関数 $u_n(x)$ を用いて：

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

初期条件からの係数の決定 $t = 0$ での波動関数 $\Psi(x, 0)$ をエネルギー固有関数で展開：

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

係数は：

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

13. 重ね合わせの原理

基本原理 任意の量子状態は、エネルギー固有状態の重ね合わせとして表現できる：

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

確率の時間依存性 エネルギー E_n が測定される確率：

$$P(E_n) = |c_n|^2$$

これは時間に依存しない（エネルギー固有状態の重ね合わせでは、確率は保存される）。

期待値の時間発展 位置の期待値などは、一般に時間に依存する：

$$\langle \hat{x} \rangle(t) = \int \Psi^*(x, t) \hat{x} \Psi(x, t) dx$$

重ね合わせ状態では、異なるエネルギー固有状態間の干渉により、期待値が時間的に振動する。

定常状態 単一の固有状態 $|c_n| = 1, c_m = 0 (m \neq n)$ の場合、確率密度 $|\Psi(x, t)|^2 = |u_n(x)|^2$ は時間に依存しない。これが定常状態である。

V. 理論的關係

14. 不確定性関係の導出

ステップ 1：不確定性の定義

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

ステップ 2：シュワルツの不等式を適用

$$|\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 \leq \langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle$$

ステップ 3：交換関係を利用

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$$

の場合：

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle|$$

位置と運動量の不確定性関係

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{\hbar}{2}$$

VI. 計算テクニック

15. よくある計算テクニック

問題を読むとき

- ☐ ポテンシャルの形を確認したか
- ☐ 束縛状態か散乱状態かを判断したか
- ☐ 領域の分割が必要か確認したか

シュレーディンガー方程式を解くとき

- ☐ 各領域での一般解を正しく書いたか
- ☐ 境界条件をすべて適用したか
- ☐ エネルギー固有値の条件を正しく導いたか

規格化を行うとき

- ☐ 規格化積分が収束することを確認したか
- ☐ 積分を正しく実行したか
- ☐ 規格化定数の符号を適切に選んだか

期待値を計算するとき

- ☐ 演算子を正しく位置表示で書いたか
- ☐ 部分積分を適切に適用したか
- ☐ 境界項が 0 になることを確認したか

答えを確認するとき

- ☐ 次元が正しいか
 - ☐ 極限 ($\hbar \rightarrow 0$ など) で古典的な結果に一致するか
 - ☐ 物理的に意味のある結果か
-

解法のまとめ

解法の流れ (典型的な問題の場合)

1. 問題の理解: ポテンシャルの形、束縛状態か散乱状態かを判断
2. シュレーディンガー方程式の設定: 時間に依存しないシュレーディンガー方程式を書く
3. 一般解の導出: 各領域での一般解を求める
4. 境界条件の適用: 連続性、導関数の連続性などを適用
5. エネルギー固有値の決定: 特性方程式からエネルギー固有値を求める
6. 規格化: 規格化条件から規格化定数を決定
7. 期待値などの計算: 必要に応じて期待値を計算
8. 検証: 次元、極限值、物理的意味を確認

時間発展を扱う場合

1. 初期状態の展開: 初期状態をエネルギー固有状態で展開 (フーリエ級数展開)
2. 係数の決定: 固有関数の直交性を利用して係数を決定
3. 時間発展: 各固有状態が独立に時間発展
4. 確率や期待値の計算: 時間依存の確率や期待値を計算

部分積分の繰り返し適用 期待値の計算で、部分積分を 2 回以上適用することで、式を簡潔にできる。

変数変換と無次元化

- 無次元化: $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$ など、無次元変数に変換すると計算が簡単になる
- 変数変換の利点: 積分範囲の変更、計算の簡略化

漸化関係の利用 エルミート多項式など、漸化関係を利用して計算を簡略化する。

規格化の計算テクニック

1. 三角関数の場合:
 - $\sin^2 \theta = \frac{1 - \cos 2\theta}{2}$ または $\cos^2 \theta = \frac{1 + \cos 2\theta}{2}$ を用いる
 - 例: $\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{a}{2}$
2. ガウス関数の場合:
 - ガウス積分の公式を利用:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (\alpha > 0)$$

- x^2 を含む場合は、 α で微分することで得られる:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$$

3. 規格化定数の決定:
 - 波動関数を $u(x) = Nf(x)$ の形に書く

- $\int |Nf(x)|^2 dx = |N|^2 \int |f(x)|^2 dx = 1$ より
 - $|N| = \frac{1}{\sqrt{\int |f(x)|^2 dx}}$
 - 通常、 $N > 0$ を選ぶ
-

16. 計算の効率化と検証

対称性の利用

- 偶関数・奇関数の性質を利用して積分範囲を半減
- パリティ対称性により、特定の状態のみが寄与することを事前に判断

次元解析

- 計算結果の次元が正しいか確認（例：波動関数の次元は $[L]^{-1/2}$ ）
- エネルギー固有値の次元は $[ML^2T^{-2}]$ （ジュール）

極限値の確認

- 特殊な場合（例： $n = 1, t = 0$ ）で結果が正しいか確認
- 規格化条件 $\sum_n |c_n|^2 = 1$ を満たすか確認
- 古典極限（ $\hbar \rightarrow 0$ ）で古典的な結果に一致するか確認

数値的検証

- 可能であれば、簡単な場合で数値計算を行い、結果を検証
-

VII. 解法の実践と検証

17. 解法の実践指針

どの解法を使うべきか

1. シュレーディンガー方程式を直接解く
 - 適用：井戸型ポテンシャル、デルタ関数ポテンシャルなど
 - 手順：上記の「1. シュレーディンガー方程式を解く一般的な手順」を参照
 2. 生成消滅演算子を使う
 - 適用：調和振動子
 - 手順：上記の「9. 生成消滅演算子を使った解法」を参照
 3. 対称性を利用する
 - 適用：対称なポテンシャル
 - 手順：上記の「11. 対称性を利用した解法」を参照
 4. 変数分離法
 - 適用：時間に依存するシュレーディンガー方程式
 - 手順：上記の「2. 変数分離法」を参照
 5. フーリエ級数展開
 - 適用：初期状態をエネルギー固有状態で展開する場合
 - 手順：上記の「8. フーリエ級数展開」を参照
 6. 数値解法
 - 適用：解析的に解けない場合
 - 手順：シュレーディンガー方程式を数値的に解く
-

18. 問題を解く際のチェックリスト

問題を読むとき

- ☐ ポテンシャルの形を確認したか

- ☐ 束縛状態か散乱状態かを判断したか
- ☐ 領域の分割が必要か確認したか

シュレーディンガー方程式を解くとき

- ☐ 各領域での一般解を正しく書いたか
- ☐ 境界条件をすべて適用したか
- ☐ エネルギー固有値の条件を正しく導いたか

規格化を行うとき

- ☐ 規格化積分が収束することを確認したか
- ☐ 積分を正しく実行したか
- ☐ 規格化定数の符号を適切に選んだか

期待値を計算するとき

- ☐ 演算子を正しく位置表示で書いたか
- ☐ 部分積分を適切に適用したか
- ☐ 境界項が 0 になることを確認したか

答えを確認するとき

- ☐ 次元が正しいか
 - ☐ 極限 ($\hbar \rightarrow 0$ など) で古典的な結果に一致するか
 - ☐ 物理的に意味のある結果か
-

解法のまとめ

解法の流れ（典型的な問題の場合）

1. 問題の理解：ポテンシャルの形、束縛状態か散乱状態かを判断
2. シュレーディンガー方程式の設定：時間に依存しないシュレーディンガー方程式を書く
3. 一般解の導出：各領域での一般解を求める
4. 境界条件の適用：連続性、導関数の連続性などを適用
5. エネルギー固有値の決定：特性方程式からエネルギー固有値を求める
6. 規格化：規格化条件から規格化定数を決定
7. 期待値などの計算：必要に応じて期待値を計算
8. 検証：次元、極限值、物理的意味を確認

時間発展を扱う場合

1. 初期状態の展開：初期状態をエネルギー固有状態で展開（フーリエ級数展開）
 2. 係数の決定：固有関数の直交性を利用して係数を決定
 3. 時間発展：各固有状態が独立に時間発展
 4. 確率や期待値の計算：時間依存の確率や期待値を計算
-

まとめ

量子力学の記号や用語は最初は難しく感じますが、一つ一つ理解していけば必ずわかるようになります。このドキュメントを参考に、少しずつ学習を進めてください。

解法のポイント：1. 問題の設定を正確に理解する 2. 系統的な手順に従って解く 3. 境界条件を忘れずに適用する 4. 規格化を必ず確認する 5. 物理的な意味を常に考える

わからないことがあれば、いつでも質問してください！