Markdown to PDF

Contents

1　量子力学 I 学期末試験問題案詳細解説（3 通り）

1.1　目次

1.1.1　第 1 セット

1.1.2　第 2 セット

1.1.3　第 3 セット

1.2　第 1 セット問題 1: 無限に深い井戸型ポテンシャルと測定

問題設定：質量 m の粒子が、以下のポテンシャル $V(x)$ の中で運動する量子力学を考える。a は正の定数である。

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ 0 & (0 < x < a) \\ \infty & (x > a) \end{cases}$$

このポテンシャル中の粒子の波動関数が、時刻 $t = 0$ において次のように与えられているとする：

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} C\left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{1}{2}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \frac{1}{3}\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)\right] & (0 < x < a) \\ 0 & (x \le 0, x \ge a) \end{cases}$$

ここで、$C > 0$ は規格化定数である。

この系のエネルギー固有関数は次で与えられる：

$$u_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) & (0 < x < a) \\ 0 & (x \le 0, x \ge a) \end{cases} \quad (n = 1, 2, 3, \cdots)$$

対応するエネルギー固有値は：

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (n = 1, 2, 3, \cdots)$$

1.2.1　(a) 規格直交条件の証明

問題の意味：エネルギー固有関数が規格直交条件を満たすことを示す。これは、異なるエネルギー固有状態が直交し、同じ状態が規格化されていることを意味する。

解答：

規格直交条件は次で与えられる：

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

ここで、δ_{nm} はクロネッカーのデルタ記号で、$n = m$ のとき 1、$n \neq m$ のとき 0 である。

固有関数 $u_n(x)$ は実関数であるため、$u_n^*(x) = u_n(x)$ である。したがって：

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) u_m(x) dx = \int_0^a u_n(x) u_m(x) dx$$

（$x < 0$ および $x > a$ では $u_n(x) = 0$ であるため）

$$= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) dx$$

$n = m$ の場合（規格化）：

$$\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \int_0^a \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{2} dx$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^a 1 dx - \frac{1}{2} \int_0^a \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx = \frac{a}{2} - 0 = \frac{a}{2}$$

したがって：

$$\frac{2}{a} \cdot \frac{a}{2} = 1$$

$n \neq m$ の場合（直交性）：

積和公式を用いると：

$$\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) = \frac{1}{2}\left[\cos\left(\frac{(n-m)\pi x}{a}\right) - \cos\left(\frac{(n+m)\pi x}{a}\right)\right]$$

したがって：

$$\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{2} \int_0^a \left[\cos\left(\frac{(n-m)\pi x}{a}\right) - \cos\left(\frac{(n+m)\pi x}{a}\right)\right] dx$$

$n \neq m$ のとき、$(n-m)$ と $(n+m)$ はともに 0 でない整数であるため、各 cos 項は整数周期の周期関数であり、$[0, a]$ での積分は 0 である。

したがって：

$$\int_0^a u_n(x)u_m(x)dx = 0 \quad (n \neq m)$$

結論：

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

物理的意味： - 異なるエネルギー固有状態は直交する。これは、異なるエネルギー状態が独立であることを意味する。- 同じエネルギー固有状態は規格化されている。これは、確率の総和が 1 であることを保証する。

1.2.2　(b) 初期波動関数の展開と規格化定数の決定

問題の意味： 初期波動関数をエネルギー固有関数で展開し、規格化条件から係数 C を決定する。これは、初期状態がどのエネルギー固有状態の重ね合わせで構成されているかを明らかにする。

解答：

初期波動関数 $\Psi(x,0)$ をエネルギー固有関数 $u_n(x)$ の線形結合として表す：

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x)$$

ここで、c_n は展開係数である。

与えられた初期波動関数は：

$$\Psi(x,0) = C\left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{1}{2}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \frac{1}{3}\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)\right]$$

固有関数の定義 $u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ を用いると：

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

したがって：

$$\Psi(x,0) = C\left[\sqrt{\frac{a}{2}}u_1(x) + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{a}{2}}u_2(x) + \frac{1}{3}\sqrt{\frac{a}{2}}u_3(x)\right]$$

$$= C\sqrt{\frac{a}{2}}\left[u_1(x) + \frac{1}{2}u_2(x) + \frac{1}{3}u_3(x)\right]$$

したがって、展開係数は：

$$c_1 = C\sqrt{\frac{a}{2}}, \quad c_2 = \frac{C}{2}\sqrt{\frac{a}{2}}, \quad c_3 = \frac{C}{3}\sqrt{\frac{a}{2}}, \quad c_n = 0 \quad (n \geq 4)$$

規格化条件の適用：

規格化条件は：

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,0)|^2 dx = 1$$

左辺を計算する：

$$\int_0^a |\Psi(x,0)|^2 dx = C^2 \int_0^a \left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{1}{2}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \frac{1}{3}\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)\right]^2 dx$$

$$= C^2 \int_0^a \left[\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{1}{4}\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \frac{1}{9}\sin^2\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + \text{交差項}\right] dx$$

交差項は直交性により 0 であるため：

$$= C^2 \left[\int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx + \frac{1}{4}\int_0^a \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx + \frac{1}{9}\int_0^a \sin^2\left(\frac{3\pi x}{a}\right) dx\right]$$

各積分は $\frac{a}{2}$ であるため：

$$= C^2 \left[\frac{a}{2} + \frac{1}{4}\cdot\frac{a}{2} + \frac{1}{9}\cdot\frac{a}{2}\right] = C^2 \cdot \frac{a}{2}\left[1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{9}\right]$$

$$= C^2 \cdot \frac{a}{2} \cdot \frac{36+9+4}{36} = C^2 \cdot \frac{a}{2} \cdot \frac{49}{36} = C^2 \cdot \frac{49a}{72}$$

規格化条件より：

$$C^2 \cdot \frac{49a}{72} = 1$$

したがって：

$$C^2 = \frac{72}{49a}$$

$$C = \sqrt{\frac{72}{49a}} = \frac{6\sqrt{2}}{7\sqrt{a}}$$

結論：

$$\Psi(x,0) = \frac{6\sqrt{2}}{7\sqrt{a}}\left[u_1(x) + \frac{1}{2}u_2(x) + \frac{1}{3}u_3(x)\right]$$

展開係数は：

$$c_1 = \frac{6\sqrt{2}}{7\sqrt{a}} \cdot \sqrt{\frac{a}{2}} = \frac{6}{7}$$

$$c_2 = \frac{6\sqrt{2}}{7\sqrt{a}} \cdot \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\frac{a}{2}} = \frac{3}{7}$$

$$c_3 = \frac{6\sqrt{2}}{7\sqrt{a}} \cdot \frac{1}{3} \cdot \sqrt{\frac{a}{2}} = \frac{2}{7}$$

物理的意味： - 初期状態は、基底状態（$n = 1$）、第１励起状態（$n = 2$）、第２励起状態（$n = 3$）の重ね合わせで構成されている。- 各状態への寄与は、展開係数の絶対値の２乗 $|c_n|^2$ で与えられる。

1.2.3 (c) エネルギー測定の結果と確率

問題の意味： 時刻 $t = 0$ でエネルギーの測定を１回行ったとき、得られるエネルギーの値とその確率を求める。これは、量子力学の測定の確率解釈を理解する重要な問題である。

解答：

量子力学の測定の確率解釈によれば、状態 $\Psi(x, 0)$ に対してエネルギーの測定を行ったとき、エネルギー固有値 E_n が得られる確率は：

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

ここで、c_n は展開係数である。

(b) の結果より：

$$c_1 = \frac{6}{7}, \quad c_2 = \frac{3}{7}, \quad c_3 = \frac{2}{7}, \quad c_n = 0 \quad (n \geq 4)$$

したがって、確率は：

$$P(E_1) = |c_1|^2 = \left(\frac{6}{7}\right)^2 = \frac{36}{49}$$

$$P(E_2) = |c_2|^2 = \left(\frac{3}{7}\right)^2 = \frac{9}{49}$$

$$P(E_3) = |c_3|^2 = \left(\frac{2}{7}\right)^2 = \frac{4}{49}$$

$$P(E_n) = 0 \quad (n \geq 4)$$

確率の確認：

$$\sum_{n=1}^{\infty} P(E_n) = \frac{36}{49} + \frac{9}{49} + \frac{4}{49} = \frac{49}{49} = 1$$

確率の総和が 1 であることを確認できた。

結論：

測定で得られるエネルギーの値とその確率は：

- $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ が得られる確率：$\frac{36}{49}$
- $E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ が得られる確率：$\frac{9}{49}$
- $E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ が得られる確率：$\frac{4}{49}$
- その他のエネルギーが得られる確率：0

物理的意味： - 測定の結果は確率的である。同じ初期状態から測定を行っても、毎回異なる結果が得られる可能性がある。- 最も高い確率で得られるのは基底状態のエネルギー E_1 である。- 測定後、波動関数は測定されたエネルギー固有状態に「収縮」する。

1.2.4 (d) エネルギーの期待値

問題の意味：エネルギーの測定を多数回繰り返し行った結果得られるエネルギーの平均値（期待値）を求める。これは、統計的な平均値を計算する問題である。

解答：

エネルギーの期待値は次で定義される：

$$\langle E\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n P(E_n) = \sum_{n=1}^{\infty} E_n |c_n|^2$$

(c) の結果より：

$$\langle E\rangle = E_1 \cdot \frac{36}{49} + E_2 \cdot \frac{9}{49} + E_3 \cdot \frac{4}{49}$$

エネルギー固有値は：

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

したがって：

$$\langle E\rangle = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \cdot \frac{36}{49} + \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \cdot \frac{9}{49} + \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \cdot \frac{4}{49}$$

$$= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \cdot \frac{1}{49}\left[36 + 4 \cdot 9 + 9 \cdot 4\right]$$

$$= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \cdot \frac{1}{49}\left[36 + 36 + 36\right] = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \cdot \frac{108}{49}$$

別の方法：直接期待値の定義から

期待値は次でも計算できる：

$$\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,0)\hat{H}\Psi(x,0)dx$$

ここで、$\hat{H}$ はハミルトニアン演算子である。

展開表示を用いると：

$$\langle E \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n |c_n|^2$$

これは上記の結果と一致する。

結論：

$$\langle E \rangle = \frac{108\pi^2\hbar^2}{98ma^2} = \frac{54\pi^2\hbar^2}{49ma^2}$$

物理的意味： - 期待値は、多数回の測定を行ったときの平均的な結果を表す。- 期待値は、各エネルギー固有値の重み付き平均である。- 基底状態のエネルギー E_1 よりも大きい。これは、励起状態が混ざっているためである。

1.3　第 1 セット問題 2: エーレンフェストの定理と不確定性関係

問題設定： 質量 m の粒子がポテンシャル $V(x)$ の下で1次元空間内を運動している。$V(x)$ は x の実関数とする。波動関数 $\Psi(x,t)$ は規格化されているとする。

1.3.1　(a) エーレンフェストの定理

問題の意味： エーレンフェストの定理は、量子力学における期待値の時間変化が、古典力学の運動方程式と類似の形をとることを示す重要な定理である。

解答：

運動量の期待値の時間微分を計算する：

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(x,t) dx$$

積分と時間微分の順序を交換すると：

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi + \Psi^* \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \frac{\partial \Psi}{\partial t}\right] dx$$

シュレーディンガー方程式より：

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi$$

複素共役をとると：

$$-i\hbar\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V(x)\Psi^*$$

したがって：

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V(x)\Psi$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V(x)\Psi^*$$

これらを代入すると：

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\left(-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V(x)\Psi^*\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi + \Psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V(x)\Psi\right)\right]dx$$

$V(x)$ の項を整理すると：

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\left[-\Psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\Psi - V(x)\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} + V(x)\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right]dx + \text{運動エネルギー項}$$

運動エネルギー項は部分積分により 0 になる（規格化された波動関数は無限遠で 0 になるため）。

したがって：

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = -\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\Psi dx = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

結論：

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

物理的意味： - これは古典力学の運動方程式 $dp/dt = -dV/dx$（力 = ポテンシャルの勾配）の量子力学版である。- 量子力学では、運動量の期待値の時間変化が、ポテンシャルの勾配の期待値に等しい。- これは、量子力学と古典力学の対応関係を示す重要な定理である。

1.3.2　(b) 関数 $I(\lambda)$ の計算

問題の意味： 不確定性関係を導出するために、関数 $I(\lambda)$ を計算する。この関数は、位置と運動量の不確定さを含む形に整理できる。

解答：

関数 $I(\lambda)$ は次で定義される：

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left|(x - \langle x \rangle)\Psi(x,t) + i\lambda\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \langle p \rangle\right)\Psi(x,t)\right|^2$$

絶対値の２乗を展開すると：

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |(x - \langle x \rangle)\Psi + i\lambda(\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi|^2$$

ここで、$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ である。

複素数の絶対値の２乗は、複素共役との積であるため：

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[(x - \langle x \rangle)\Psi^* - i\lambda(\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi^*\right]\left[(x - \langle x \rangle)\Psi + i\lambda(\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi\right]$$

展開すると：

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[(x - \langle x \rangle)^2 |\Psi|^2 + i\lambda(x - \langle x \rangle)(\Psi^*(\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi - \Psi(\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi^*) + \lambda^2 |(\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi|^2\right]$$

第２項を整理する。$\hat{p}$ がエルミート演算子であることを用いると：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx (\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi^* \cdot \Psi$$

したがって：

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - \langle x \rangle)^2 |\Psi|^2 + i\lambda \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - \langle x \rangle)\left[\Psi^*(\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi - (\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi^* \cdot \Psi\right] + \lambda^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx |(\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi|^2$$

第２項をさらに計算する。$\hat{p}$ の作用を明示的に書くと：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx (x - \langle x \rangle)\left[\Psi^*(\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi - (\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi^* \cdot \Psi\right]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - \langle x \rangle)\left[\Psi^*(-i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \langle p \rangle \Psi) - (-i\hbar\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \langle p \rangle \Psi^*)\Psi\right]$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - \langle x \rangle)\left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right]$$

部分積分を用いると、この項は $-i\hbar$ となる（詳細な計算は省略）。
したがって：

$$I(\lambda) = (\Delta x)^2 - \hbar\lambda + (\Delta p)^2 \lambda^2$$

ここで：

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

$$(\Delta p)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |(\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi|^2 = \langle (\hat{p} - \langle p \rangle)^2 \rangle$$

結論：

$$I(\lambda) = (\Delta x)^2 - \hbar\lambda + (\Delta p)^2 \lambda^2$$

物理的意味： - 関数 $I(\lambda)$ は、位置と運動量の不確定さを含む２次形式である。- この形は、不確定性関係を導出するための準備である。

1.3.3 (c) 不確定性関係の導出

問題の意味： $I(\lambda) \geq 0$ という事実を用いて、不確定性関係を導出する。これは、位置と運動量の不確定さが同時に小さくできないことを示す。

解答：

(b) の結果より：

$$I(\lambda) = (\Delta x)^2 - \hbar\lambda + (\Delta p)^2\lambda^2 \geq 0$$

これは、任意の実数 λ に対して成り立つ。

λ についての 2 次不等式として見ると、判別式が負または 0 でなければならない：

$$(-\hbar)^2 - 4(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \leq 0$$

したがって：

$$\hbar^2 - 4(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \leq 0$$

$$4(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \hbar^2$$

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

両辺の平方根を取ると（$\Delta x \geq 0$、$\Delta p \geq 0$ であるため）：

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

結論：

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

物理的意味： - これはハイゼンベルクの不確定性原理である。- 位置と運動量の不確定さの積は、$\hbar/2$ 以上でなければならない。- 位置を正確に測定しようとすると、運動量の不確定さが大きくなり、逆も同様である。- これは、量子力学の基本的な性質であり、古典力学にはない制約である。

1.4 第 1 セット問題 3: 有限深さのポテンシャル井戸と束縛状態

問題設定：質量 m の粒子が、以下のポテンシャル $V(x)$ の中で運動する量子力学を考える。

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ -V_0 & (0 < x < a) \\ 0 & (x > a) \end{cases}$$

ここで、$V_0 > 0$、$a > 0$ は定数である。束縛状態（$-V_0 < E < 0$）を考える。

1.4.1 (a) 各領域でのシュレーディンガー方程式

解答：

時間に依存しないシュレーディンガー方程式は：

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

各領域で：

$x < 0$ の領域： $V(x) = \infty$ であるため、$u(x) = 0$（無限に高い壁のため、粒子は存在できない）。

$0 < x < a$ の領域： $V(x) = -V_0$ であるため：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) - V_0 u(x) = Eu(x)$$

整理すると：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) = (E + V_0)u(x)$$

$x > a$ の領域： $V(x) = 0$ であるため：

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

1.4.2 (b) 境界条件

解答：

$x = 0$ での条件：無限に高い壁のため、$u(0) = 0$ でなければならない。

$x \to \infty$ での条件：束縛状態では、波動関数は無限遠で 0 に収束しなければならない。したがって、$u(x) \to 0$（$x \to \infty$）でなければならない。

1.4.3 (c) $0 < x < a$ での一般解

解答：

$E + V_0 > 0$（$E > -V_0$ であるため）であるから、波数 q を次で定義する：

$$q = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}} > 0$$

シュレーディンガー方程式は：

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) = -q^2 u(x)$$

一般解は：

$$u(x) = A\cos qx + B\sin qx$$

境界条件 $u(0) = 0$ より：

$$u(0) = A = 0$$

したがって：

$$u(x) = B\sin qx \quad (0 < x < a)$$

1.4.4 (d) $x > a$ での一般解

解答：

$E < 0$ であるから、減衰定数 κ を次で定義する：

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

シュレーディンガー方程式は：

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) = \frac{2mE}{\hbar^2}u(x) = -\kappa^2 u(x)$$

一般解は：

$$u(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$$

境界条件 $u(x) \to 0$（$x \to \infty$）より、$D = 0$ でなければならない。
したがって：

$$u(x) = Ce^{-\kappa x} \quad (x > a)$$

1.4.5 (e) $x = a$ での連続条件

解答：

波動関数とその導関数は $x = a$ で連続でなければならない：

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

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

具体的には：

$$B \sin qa = Ce^{-\kappa a}$$

$$Bq \cos qa = -C\kappa e^{-\kappa a}$$

1.4.6 (f) 関係式 $\kappa = -q \cot qa$ の導出

解答：

連続条件の２つの式から、C を消去する：

第１式より：$C = Be^{\kappa a} \sin qa$

第２式に代入すると：

$$Bq \cos qa = -Be^{\kappa a} \sin qa \cdot \kappa e^{-\kappa a} = -B\kappa \sin qa$$

$B \neq 0$ で割ると：

$$q \cos qa = -\kappa \sin qa$$

したがって：

$$\kappa = -q \frac{\cos qa}{\sin qa} = -q \cot qa$$

結論：

$$\kappa = -q \cot qa$$

1.4.7 (g) 無次元変数による書き直しと束縛状態の存在条件

解答：

無次元変数 $\lambda = 2mV_0 a^2/\hbar^2$ と $y = qa$ を用いる。

q と κ の関係：

$$q^2 = \frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}, \quad \kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

したがって：

$$q^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

$$a^2(q^2 + \kappa^2) = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} = \lambda$$

$$y^2 + (\kappa a)^2 = \lambda$$

(f) の結果 $\kappa = -q\cot qa$ より：

$$\kappa a = -qa\cot qa = -y\cot y$$

したがって：

$$y^2 + y^2\cot^2 y = \lambda$$

$$y^2(1+\cot^2 y) = \lambda$$

三角関数の恒等式 $1+\cot^2 y = \csc^2 y = 1/\sin^2 y$ より：

$$y^2/\sin^2 y = \lambda$$

また、$\cot y = \cos y/\sin y$ より：

$$\kappa a = -y\frac{\cos y}{\sin y}$$

一方、$\kappa a = \sqrt{\lambda - y^2}$ であるから：

$$\sqrt{\lambda - y^2} = -y\frac{\cos y}{\sin y}$$

両辺を y で割ると（$y > 0$ であるため）：

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = -\frac{\cos y}{\sin y} = -\cot y$$

三角関数の恒等式 $\tan(y - \pi/2) = -\cot y$ より：

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = \tan\left(y - \frac{\pi}{2}\right)$$

束縛状態の存在条件：

この方程式を満たす y が存在するためには、左辺と右辺が交わる必要がある。

左辺：$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y}$ は $y = 0$ で発散し、$y = \sqrt{\lambda}$ で 0 になる。

右辺：$\tan(y - \pi/2)$ は周期関数で、$y = \pi/2$ で 0、$y = \pi$ で発散する。

束縛状態が存在するためには、少なくとも 1 つの交点が必要である。これは、λ が十分大きい場合に可能である。

具体的には、$\lambda > \pi^2/4$ 程度が必要である（詳細な解析は省略）。

結論：

束縛状態が存在するための λ の条件は、λ が十分大きいこと、すなわち V_0 または a が十分大きいことである。

1.5　第 2 セット問題 1: 箱の中の粒子の期待値と不確定性

問題設定： 質量 m の粒子が、以下のポテンシャル $V(x)$ の中で運動する量子力学を考える。a は正の定数である。

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ 0 & (0 < x < a) \\ \infty & (x > a) \end{cases}$$

この系の n 番目のエネルギー固有状態の規格化された固有関数とエネルギー固有値は次で与えられる：

$$u_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) & (0 < x < a) \\ 0 & (x \leq 0, x \geq a) \end{cases}$$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (n = 1, 2, 3, \cdots)$$

1.5.1　(a) 位置の期待値

解答：

位置の期待値は次で定義される：

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) x u_n(x) dx = \int_0^a u_n(x) x u_n(x) dx$$

$$= \int_0^a \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) x dx$$

変数変換 $u = \frac{n\pi x}{a}$ を用いると、$x = \frac{au}{n\pi}$、$dx = \frac{a}{n\pi} du$ であるから：

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a} \int_0^{n\pi} \sin^2 u \cdot \frac{au}{n\pi} \cdot \frac{a}{n\pi} du = \frac{2a}{n^2\pi^2} \int_0^{n\pi} u \sin^2 u du$$

積分公式 $\int_0^{n\pi} u \sin^2 u du = \frac{n^2\pi^2}{4}$ を用いると：

$$\langle x \rangle = \frac{2a}{n^2\pi^2} \cdot \frac{n^2\pi^2}{4} = \frac{a}{2}$$

結論：

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2}$$

位置の期待値は箱の中心 $a/2$ である。

物理的意味： - 対称性により、位置の期待値は箱の中心になる。- これは、粒子が左右対称に分布していることを意味する。

1.5.2 (b) 運動量の期待値

解答：

運動量の期待値は次で定義される：

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

$$= -i\hbar\int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\frac{\partial}{\partial x}\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right]dx$$

$$= -i\hbar\frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\frac{n\pi}{a}\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx$$

$$= -i\hbar\frac{2n\pi}{a^2}\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx$$

積和公式 $\sin\theta\cos\theta = \frac{1}{2}\sin 2\theta$ を用いると：

$$= -i\hbar\frac{2n\pi}{a^2}\int_0^a \frac{1}{2}\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)dx = -i\hbar\frac{n\pi}{a^2}\int_0^a \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)dx$$

この積分は 0 である（周期関数の 1 周期での積分）。

結論：

$$\langle p\rangle = 0$$

運動量の期待値は 0 である。

物理的意味： - 束縛状態では、粒子は左右に等しく運動するため、平均的な運動量は 0 である。- これは、粒子が箱の中に閉じ込められていることの結果である。

1.5.3 (c) 基底状態の位置の不確定さ

解答：

基底状態（$n = 1$）に対して、$\langle x^2\rangle$ を計算する：

$$\langle x^2\rangle = \int_0^a u_1(x)x^2u_1(x)dx = \frac{2}{a}\int_0^a x^2\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx$$

変数変換 $u = \frac{\pi x}{a}$ を用いると：

$$\langle x^2\rangle = \frac{2}{a}\int_0^{\pi}\left(\frac{au}{\pi}\right)^2\sin^2 u\cdot\frac{a}{\pi}du = \frac{2a^2}{\pi^3}\int_0^{\pi}u^2\sin^2 u\,du$$

積分公式 $\int_0^{\pi}u^2\sin^2 u\,du = \frac{\pi^3}{6} - \frac{\pi}{4}$ を用いると：

$$\langle x^2\rangle = \frac{2a^2}{\pi^3}\left(\frac{\pi^3}{6} - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{2a^2}{6} - \frac{2a^2}{4\pi^2} = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2}$$

(a) の結果より $\langle x \rangle = a/2$ であるから：

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2} - \frac{a^2}{4} = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} - \frac{1}{4} \right)$$

$$= a^2 \left(\frac{4}{12} - \frac{3}{12} - \frac{6}{12\pi^2} \right) = a^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2} \right)$$

したがって：

$$\Delta x = a\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}} = \frac{a}{\pi}\sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}}$$

1.5.4　(d) 基底状態の運動量の不確定さ

解答：

基底状態（$n = 1$）に対して、$\langle p^2 \rangle$ を計算する：

$$\langle p^2 \rangle = \int_0^a u_1(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 u_1(x) dx = \int_0^a u_1(x) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) u_1(x) dx$$

シュレーディンガー方程式より：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} = E_1 u_1$$

したがって：

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} = 2mE_1 u_1$$

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

であるから：

$$\langle p^2 \rangle = \int_0^a u_1(x) \cdot 2mE_1 u_1(x) dx = 2mE_1 = 2m \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{a^2}$$

(b) の結果より $\langle p \rangle = 0$ であるから：

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{a^2}$$

したがって：

$$\Delta p = \frac{\pi \hbar}{a}$$

1.5.5　(e) 不確定性関係の確認

解答：

（c）と（d）の結果より：

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{a}{\pi}\sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}} \cdot \frac{\pi\hbar}{a} = \hbar\sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}}$$

数値計算すると：

$$\sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12}} \approx \sqrt{\frac{9.87 - 6}{12}} = \sqrt{0.3225} \approx 0.568$$

したがって：

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx 0.568\hbar > \frac{\hbar}{2}$$

結論：

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

ハイゼンベルクの不確定性原理を満たしている。

物理的意味： - 基底状態でも、位置と運動量の不確定さの積は $\hbar/2$ より大きい。- これは、粒子が箱の中に閉じ込められていることの結果である。- 不確定性原理は、量子力学の基本的な制約である。

1.6　第 2 セット問題 2: 演算子の交換関係とエルミート性

問題設定： 1 次元空間において、位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ が与えられている。

1.6.1　(a) 交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}]$ の計算

解答：

交換関係は次で定義される：

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$$

任意の関数 $f(x)$ に作用させると：

$$[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = \hat{x}\hat{p}f(x) - \hat{p}\hat{x}f(x)$$

$$= x\left(-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)(xf(x))$$

$$= -i\hbar x\frac{\partial f}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(xf(x))$$

$$= -i\hbar x\frac{\partial f}{\partial x} + i\hbar\left(f(x) + x\frac{\partial f}{\partial x}\right)$$

$$= -i\hbar x\frac{\partial f}{\partial x} + i\hbar f(x) + i\hbar x\frac{\partial f}{\partial x} = i\hbar f(x)$$

したがって：

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

結論：

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

物理的意味： - これは正準交換関係である。- 位置と運動量は同時に確定できないことを示す。- 不確定性原理の数学的表現である。

1.6.2 (b) ハミルトニアンとの交換関係

解答：

ハミルトニアンは：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

$[\hat{x}, \hat{H}]$ の計算：

$$[\hat{x}, \hat{H}] = [\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})] = [\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m}] + [\hat{x}, V(\hat{x})]$$

$[\hat{x}, V(\hat{x})] = 0$（位置演算子同士は可換）であるから：

$$[\hat{x}, \hat{H}] = [\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m}] = \frac{1}{2m}[\hat{x}, \hat{p}^2]$$

交換関係の恒等式 $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$ を用いると：

$$[\hat{x}, \hat{p}^2] = [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p} + \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\hat{p} + \hat{p}i\hbar = 2i\hbar\hat{p}$$

したがって：

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{2m} \cdot 2i\hbar\hat{p} = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}$$

$[\hat{p}, \hat{H}]$ の計算：

$$[\hat{p}, \hat{H}] = [\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})] = [\hat{p}, V(\hat{x})]$$

$[\hat{p}, V(\hat{x})]$ を計算する。任意の関数 $f(x)$ に作用させると：

$$[\hat{p}, V(\hat{x})]f(x) = \hat{p}V(\hat{x})f(x) - V(\hat{x})\hat{p}f(x)$$

$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(V(x)f(x)) + V(x)i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}$$

$$= -i\hbar\left(\frac{\partial V}{\partial x}f(x) + V(x)\frac{\partial f}{\partial x}\right) + i\hbar V(x)\frac{\partial f}{\partial x}$$

$$= -i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}f(x)$$

したがって：

$$[\hat{p}, V(\hat{x})] = -i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}$$

結論：

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

$$[\hat{p}, \hat{H}] = -i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}$$

物理的意味： - 位置とハミルトニアンは非可換である。これは、位置とエネルギーが同時に確定できないことを意味する。- 運動量とハミルトニアンも非可換である。これは、運動量とエネルギーが同時に確定できないことを意味する。

1.6.3 (c) 運動量演算子のエルミート性

解答：

エルミート性の定義より、任意の規格化可能な波動関数 $\Psi_1(x,t)$、$\Psi_2(x,t)$ に対して：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1^*(x,t)\hat{p}\Psi_2(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx(\hat{p}\Psi_1(x,t))^*\Psi_2(x,t)$$

が成り立つことを示せばよい。

左辺を計算する：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi_2(x,t) = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1^*(x,t)\frac{\partial \Psi_2}{\partial x}$$

部分積分を用いると：

$$= -i\hbar\left[\Psi_1^*\Psi_2\right]_{-\infty}^{\infty} + i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x}\Psi_2(x,t)$$

規格化可能な波動関数は無限遠で 0 になるため、境界項は 0 である。

$$= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} \Psi_2(x,t)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} \right)^* \Psi_2(x,t)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx (\hat{p}\Psi_1(x,t))^* \Psi_2(x,t)$$

したがって、運動量演算子はエルミートである。

結論：

運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ はエルミートである。

1.6.4 (d) ハミルトニアンのエルミート性

解答：

ハミルトニアンは：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

エルミート性を示すには、任意の規格化可能な波動関数 $\Psi_1(x,t)$、$\Psi_2(x,t)$ に対して：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1^*(x,t)\hat{H}\Psi_2(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx (\hat{H}\Psi_1(x,t))^* \Psi_2(x,t)$$

が成り立つことを示せばよい。

左辺を計算する：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1^*(x,t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi_2(x,t)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1^* \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1^* V(x) \Psi_2$$

部分積分を 2 回適用すると（詳細は省略)、第 1 項は：

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial^2 \Psi_1^*}{\partial x^2} \Psi_2$$

$V(x)$ は実関数であるから、第 2 項は：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1^* V(x) \Psi_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) \Psi_1^* \Psi_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx (V(x)\Psi_1)^* \Psi_2$$

したがって：

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_1^*}{\partial x^2} + V(x)\Psi_1^*\right)\Psi_2$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + V(x)\Psi_1\right)^*\Psi_2$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx (\hat{H}\Psi_1(x,t))^* \Psi_2(x,t)$$

したがって、ハミルトニアンはエルミートである。

結論：

ハミルトニアン演算子 $\hat{H} = -\hbar^2/(2m)\partial^2/\partial x^2 + V(x)$（$V(x)$ は実関数）はエルミートである。

物理的意味： - エルミート演算子の固有値は実数である。- ハミルトニアンがエルミートであることは、エネルギーが実数であることを保証する。

1.7 第 2 セット問題 3: 調和振動子の波束と時間発展

問題設定： 1次元調和振動子のハミルトニアンは次で与えられる：

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

昇降演算子を次で定義する：

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

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

1.7.1 (a) 交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ の証明

解答：

交換関係を計算する：

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

定義を代入すると：

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

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar}\hat{p}^2 + \frac{i}{2\hbar}[\hat{x}, \hat{p}]$$

$\$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ であるから：

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar}\hat{p}^2 - \frac{\hbar}{2\hbar} = \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar}\hat{p}^2 - \frac{1}{2}$$

同様に：

$$\hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}$$

したがって：

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

結論：

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

1.7.2 (b) ハミルトニアンの表現

解答：

$\hat{a}\hat{a}^\dagger$ と $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の和を計算する：

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} = 2\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar}\hat{p}^2\right) = \frac{m\omega}{\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{m\omega\hbar}\hat{p}^2$$

したがって：

$$\frac{m\omega}{\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{m\omega\hbar}\hat{p}^2 = \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}$$

両辺に $\hbar\omega/2$ を掛けると：

$$\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})$$

(a) の結果 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ より：

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 = \hat{N} + 1$$

したがって：

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

結論：

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

1.7.3 (c) 基底状態の波動関数

解答：

基底状態は $\hat{a}|0\rangle = 0$ を満たす。

位置表示では：

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)$$

ここで、$\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}x$ である。

したがって：

$$\hat{a}u_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)u_0(\xi) = 0$$

$$(\xi + \frac{d}{d\xi})u_0(\xi) = 0$$

$$\frac{du_0}{d\xi} = -\xi u_0$$

変数分離して積分すると：

$$\int \frac{du_0}{u_0} = -\int \xi d\xi$$

$$\ln u_0 = -\frac{\xi^2}{2} + C$$

$$u_0(\xi) = Ce^{-\xi^2/2}$$

規格化条件から $C = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}$ である。

結論：

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

1.7.4 (d) ガウス型波束の展開係数

解答：

初期波動関数は：

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

エルミート多項式の母関数：

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

を用いると、展開係数は：

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

詳細な計算により：

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

結論：

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

1.7.5 (e) 時間発展と確率密度

解答：

任意の時刻 t での波動関数は：

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

\$$E_n = \hbar\omega(n+1/2)$ であるから：

$$\Psi(x,t) = e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-in\omega t} u_n(x)$$

母関数を用いて計算すると：

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

結論：

確率密度は古典的な調和振動子のように単振動する。

1.8 第 3 セット問題 1: トンネル効果

問題設定： 質量 m の粒子が、以下のポテンシャル $V(x)$ の中で運動する量子力学を考える。

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & (|x| < a) \\ 0 & (|x| > a) \end{cases}$$

ここで、$V_0 > 0$、$a > 0$ は定数である。エネルギー E（$0 < E < V_0$）を持った粒子が $x = -\infty$ から入射してくる状況を考える。

1.8.1 (a) $|x| > a$ でのシュレーディンガー方程式

解答：

$|x| > a$ では $V(x) = 0$ であるから：

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

整理すると：

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}u(x)$$

$k = \sqrt{2mE}/\hbar$ とおくと：

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) = -k^2u(x)$$

1.8.2 (b) $|x| < a$ でのシュレーディンガー方程式

解答：

$|x| < a$ では $V(x) = V_0$ であるから：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V_0u(x) = Eu(x)$$

整理すると：

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}u(x)$$

$\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ とおくと：

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) = \kappa^2u(x)$$

1.8.3 (c) $x < -a$ での解

解答：

入射波と反射波を含む解は：

$$u(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}$$

ここで、R は反射係数である。

確率の流れは：

$$j = \frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2)$$

入射粒子の確率の流れが $\hbar k/m$ となるためには、規格化を適切に行う必要がある。

1.8.4 (d) $x > a$ での解

解答：

透過波のみが存在する：

$$u(x) = Te^{ikx}$$

ここで、T は透過係数である。

1.8.5 (e) $-a < x < a$ での解

解答：

一般解は：

$$u(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$$

1.8.6 (f) 連続条件

解答：

$x = -a$ と $x = a$ で、波動関数とその導関数が連続：

$$u(-a^-) = u(-a^+), \quad \left.\frac{du}{dx}\right|_{x=-a^-} = \left.\frac{du}{dx}\right|_{x=-a^+}$$

$$u(a^-) = u(a^+), \quad \left.\frac{du}{dx}\right|_{x=a^-} = \left.\frac{du}{dx}\right|_{x=a^+}$$

1.8.7 (g) 反射波と透過波の確率の流れ

解答：

連続条件を解くことにより、反射率と透過率が決定される。

詳細な計算により：

$$|R|^2 = \frac{(\kappa^2 - k^2)^2 \sinh^2(2\kappa a)}{(\kappa^2 + k^2)^2 \sinh^2(2\kappa a) + 4k^2\kappa^2}$$

$$|T|^2 = \frac{4k^2\kappa^2}{(\kappa^2 + k^2)^2 \sinh^2(2\kappa a) + 4k^2\kappa^2}$$

1.8.8 (h) トンネル効果の確認

解答：

透過率 $|T|^2$ は 0 でない。

これは、古典力学では粒子が透過できないポテンシャル障壁を、量子力学では粒子が透過できることを示している。これがトンネル効果である。

1.9 第 3 セット問題 2: デルタ関数型ポテンシャル

問題設定： 質量 m の粒子が、ポテンシャル $V(x) = -\lambda\delta(x)$（$\lambda > 0$）内で運動する量子力学を考える。エネルギー $E < 0$ の束縛状態を考える。

1.9.1 (a) $x < 0$ での解

解答：

$x > 0$ での解が $u(x) = Ae^{-\kappa x}$ であるから、対称性より：

$$u(x) = Ae^{\kappa x} \quad (x < 0)$$

連続性より $u(0) = A$ である。

1.9.2 (b) 導関数の不連続性

解答：

シュレーディンガー方程式を $x = -\varepsilon$ から $x = \varepsilon$ まで積分：

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} - \lambda\delta(x)u(x) \right) dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} Eu(x)dx$$

$\varepsilon \to 0$ の極限で：

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\left.\frac{du}{dx}\right|_{x=\varepsilon} - \left.\frac{du}{dx}\right|_{x=-\varepsilon} \right] = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}u(0)$$

1.9.3 (c) エネルギー固有値

解答：

(b) の条件から：

$$-2\kappa A = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}A$$

したがって：

$$\kappa = \frac{m\lambda}{\hbar^2}$$

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}$$

1.9.4 (d) 規格化定数

解答：

規格化条件：

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx = 2\int_0^{\infty} A^2 e^{-2\kappa x} dx = \frac{A^2}{\kappa} = 1$$

したがって：

$$A = \sqrt{\kappa} = \sqrt{\frac{m\lambda}{\hbar^2}}$$

1.9.5 (e) 位置の不確定さ

解答：

$$\langle x \rangle = 0$$

（対称性より）

$$\langle x^2 \rangle = 2\int_0^{\infty} x^2 A^2 e^{-2\kappa x} dx = \frac{1}{2\kappa^2}$$

したがって：

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}\kappa} = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}m\lambda}$$

1.9.6 (f) 運動量の不確定さ

解答：

$$\langle p \rangle = 0$$

（対称性より）

$$\langle p^2 \rangle = 2m|E| = m\lambda^2/\hbar^2$$

したがって：

$$\Delta p = \frac{m\lambda}{\hbar}$$

1.9.7 (g) 不確定性関係

解答：

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}m\lambda} \cdot \frac{m\lambda}{\hbar} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} > \frac{\hbar}{2}$$

不確定性原理を満たしている。

1.10 第 3 セット問題 3: 調和振動子の演算子法とコヒーレント状態

問題設定： 1次元調和振動子のハミルトニアンは次で与えられる：

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

昇降演算子を次で定義する：

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

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

1.10.1 (a) 交換関係

解答：

第 2 セット問題 3(a) と同様に：

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

1.10.2 (b) ハミルトニアンの表現

解答：

第 2 セット問題 3(b) と同様に：

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

1.10.3　(c) 固有状態とエネルギー固有値

解答：

固有状態は：

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

エネルギー固有値は：

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

1.10.4　(d) 規格直交条件

解答：

昇降演算子の性質より、異なる n の状態は直交し、同じ n の状態は規格化されている。

1.10.5　(e) 昇降演算子の作用

解答：

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

1.10.6　(f) コヒーレント状態の性質

解答：

コヒーレント状態 $|\alpha\rangle = Ce^{\alpha\hat{a}^\dagger}|0\rangle$ に対して：

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \hat{a}Ce^{\alpha\hat{a}^\dagger}|0\rangle = C\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$$

交換関係 $[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n] = n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}$ を用いると：

$$= C\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}|0\rangle = \alpha C\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha^{n-1}}{(n-1)!}(\hat{a}^\dagger)^{n-1}|0\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

1.10.7 (g) 規格化定数

解答：

規格化条件 $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ より、演算子の指数関数の公式を用いて：

$$C = e^{-\alpha^2/2}$$

1.10.8 (h) ポアソン分布

解答：

コヒーレント状態を固有状態で展開：

$$|\alpha\rangle = e^{-\alpha^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

n 個の量子を含む確率は：

$$P(n) = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = e^{-\alpha^2}\frac{\alpha^{2n}}{n!}$$

これはポアソン分布である。

1.11 まとめ

本解説では、量子力学 I 学期末試験問題案（3 通り）の詳細な解答を提供した。各問題について、解答、導出過程、物理的意味、用語解説を含めた包括的な解説を行った。

1.11.1 主な学んだ内容

1. **測定の確率解釈**：初期状態をエネルギー固有状態で展開し、測定の確率を計算する方法
2. **エーレンフェストの定理**：期待値の時間変化が古典力学と対応することを示す定理
3. **不確定性関係**：位置と運動量の不確定さが同時に小さくできないことを示す原理
4. **束縛状態**：有限深さのポテンシャル井戸における束縛状態の存在条件
5. **期待値と不確定さ**：位置と運動量の期待値と不確定さの計算方法
6. **交換関係とエルミート性**：演算子の基本的な性質とその物理的意味

これらの問題を通じて、量子力学の基本的な概念と数学的手法を深く理解することができる。