

# 量子力学ノート

---

とが

---

---

## 目次

---

---

第 1 章 2021/4/21	4
1. 要点 (1 次元 Schrödinger 方程式)	4
2. 計算 1	5
3. 計算 2	6
4. 計算 3	7
第 2 章 2021/4/22	8
1. 問題 1.9	8
2. 問題 1.15	9
3. 要点 (時間に依存しない Schrödinger 方程式)	9
第 3 章 2021/4/23	10
1. 要点 (1 次元井戸型ポテンシャル)	10
2. 計算 1	11
3. 問題 2.4	12
第 4 章 2021/4/25	14
1. 問題 2.1	14
1.1. (a)	14

1.2. (b) .....	15
1.3. (c) .....	16
2. 問題 2.2 .....	16
3. 要点 (1 次元調和振動子) .....	17
4. 計算 1 .....	18
5. 計算 2 .....	19
第 5 章 2021/4/26 .....	20
1. 問題 2.10 .....	20
2. 問題 2.11 .....	22
第 6 章 2021/5/10 .....	25
1. 問題 1.7 .....	25
2. 要点 (1 次元調和振動子つづき) .....	26
3. 計算 1 .....	28
4. 計算 2 .....	28
第 7 章 2021/5/12 .....	29
1. 要点 (ヒルベルト空間) .....	29
2. 問題 3.1 .....	29
3. 計算 1 .....	30
第 8 章 2021/5/15 .....	30
1. 要点 (エルミート作用素) .....	30
2. 計算 1 .....	31
3. 計算 2 .....	32
4. 計算 3 .....	32

5. 計算 4 .....	32
第 9 章 2021/05/17 .....	33
1. 要点 (運動量表示) .....	33
2. 計算 1 .....	35
3. 問題 3.11 .....	35
第 10 章 2021/5/18 .....	36
1. 問題 3.12 .....	36
2. 要点 (不確定性原理) .....	37
第 11 章 2021/5/19 .....	38
1. 問題 3.13 .....	38
第 12 章 2021/05/25 .....	39
1. 要点 (ベクトル表示) .....	39
2. 計算 1 .....	40
3. 問題 3.23 .....	40
4. 問題 3.24 .....	41
第 13 章 2021/5/26 .....	42
1. 問題 3.31 .....	42
2. 要点 (3 次元における Schrödinger 方程式) .....	43
3. 計算 1 .....	44
4. 問題 4.3 .....	45
第 14 章 2021/5/27 .....	47
1. 要点 (球面調和関数) .....	47
2. 問題 4.4 .....	48

3. 問題 4.5 .....	49
第 15 章 2021/5/28 .....	50
1. 問題 4.7 .....	50
第 16 章 2021/5/30 .....	52
1. 要点 .....	52
2. 計算 1 .....	54
3. 計算 2 .....	54

## 第 1 章 2021/4/21

### 1. 要点 (1 次元 Schrödinger 方程式)

1 次元の直線上を動く質量  $m$  の粒子の波動関数  $\Psi: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$  は Schrödinger 方程式

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

を満たす。ただし  $V: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  はポテンシャル,  $\hbar$  は換算プランク定数,  $i$  は虚数単位。

暗黙の了解として,  $\Psi$  とその  $n$  次導関数は  $x \rightarrow \pm\infty$  で 0 に収束するものとする。

ある  $\Psi$  が Schrödinger 方程式を満たすなら, 定数  $A$  をかけた  $A\Psi$  も Schrödinger 方程式を満たす (計算 1)。

$\Psi$  が Schrödinger 方程式を満たすとき,  $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx$  は  $t$  に依存しない (計算 2)。

ある解  $\Psi$  があったときに, 定数をかけて

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi'(x, t)|^2 dx = 1$$

を満たす解  $\Psi'$  を見つける操作を, 正規化という。

波動関数  $\Psi(x, t)$  で表される粒子の「座標の期待値」 $\langle x \rangle$  を

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*[x] \Psi dx\end{aligned}$$

(ただし  $\Psi^*$  は  $\Psi$  の共役複素数) で定義する.  $\langle x \rangle$  の時間微分を計算すると

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

となり (計算 3), これが粒子の「速度の期待値」 $\langle v \rangle$  となる. これに  $m$  をかけた「運動量の期待値」 $\langle p \rangle = m\langle v \rangle$  は

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

となる.  $\langle x \rangle$  の定義中の  $x$ , および  $\langle p \rangle$  の定義中の  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  は作用素とみなせる. こうして  $x, p$  の関数  $Q(x, p)$  として表せる任意の物理量の期待値が<sup>3</sup>

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

と書ける.

座標  $x$  と運動量  $p$  の標準偏差をそれぞれ  $\sigma_x, \sigma_p$  とすると,

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

が成り立つ.

## 2. 計算 1

$\Psi$  が Schrödinger 方程式を満たすとする.  $A$  を定数とすると

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(A\Psi) &= A \cdot i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\
&= A \cdot \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(A\Psi) + V(A\Psi)
\end{aligned}$$

より  $A\Psi$  も Schrödinger 方程式を満たす.

### 3. 計算 2

Schrödinger 方程式を変形すると

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

となり, 両辺の複素共役をとると

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

となる. これより

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) &= \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \\
&= \Psi^* \left( \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V\Psi \right) + \left( -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V\Psi^* \right) \Psi \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right)
\end{aligned}$$

である. ここで

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) &= \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \left( \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) \\
&= \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi
\end{aligned}$$

に注意すると,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) dx \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right]_{-\infty}^{\infty} \\
&= 0
\end{aligned}$$

を得るので,  $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx$  が  $t$  に依存しないことが分かる.

## 4. 計算 3

計算 2 の途中式を流用すると

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi|^2 dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) dx \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx
\end{aligned}$$

となり, 部分積分により

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \frac{i\hbar}{2m} \left( \left[ x \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \right) \\
&= -\frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx
\end{aligned}$$

となる. ここで部分積分

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi dx &= [\Psi^* \Psi]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx
\end{aligned}$$

に着目すると

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = -\frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

が得られる.

## 第2章 2021/4/22

### 1. 問題 1.9

$\Psi(x, t) = Ae^{-a((mx^2/\hbar)+it)}$  より  $|\Psi(x, t)|^2 = \Psi(x, t)\Psi^*(x, t) = A^2e^{-2amx^2/\hbar}$  なので

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2am}{\hbar}x^2} dx \\ &= A^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2am}}\end{aligned}$$

よって,  $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$  となるためには  $A = \left(\frac{2am}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$  であればよい.

$\Psi$  を微分すると

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -ia\Psi \\ \frac{\partial \Psi}{\partial x} &= -\frac{2amx}{\hbar}\Psi \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= \frac{2am(2amx^2 - \hbar)}{\hbar^2}\Psi\end{aligned}$$

となるので, Schrödinger 方程式より

$$\hbar a\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{2am(2amx^2 - \hbar)}{\hbar^2}\Psi + V\Psi$$

$V$ について解いて  $V(x) = 2a^2mx^2$ .

$|\Psi|^2$  は正規分布  $N\left(0, \frac{\hbar}{4am}\right)$  の密度関数なので,  $\langle x \rangle = 0$ ,  $\sigma_x = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}}$ ,  $\langle x^2 \rangle = \sigma_x^2 = \frac{\hbar}{4am}$ .

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = (\text{const})x\Psi \text{ より, } \langle p \rangle = (\text{const}) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx = 0.$$



$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left( -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left( -2am(2amx^2 - \hbar) \Psi \right) dx \\
&= -2am(2am\langle x^2 \rangle - \hbar) \\
&= \hbar am
\end{aligned}$$

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}}, \sigma_p = \sqrt{\hbar am} \text{ より } \sigma_x \cdot \sigma_p = \sqrt{\frac{\hbar}{4am} \cdot \hbar am} = \frac{\hbar}{2}.$$

## 2. 問題 1.15

Schrödinger 方程式より

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Psi_1^*}{\partial t} &= -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_1^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \Psi_1^* \\
\frac{\partial \Psi_2}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V \Psi_2 \\
\therefore \frac{\partial}{\partial t} (\Psi_1^* \Psi_2) &= \frac{i\hbar}{2m} \left( \frac{\partial^2 \Psi_1^*}{\partial x^2} \Psi_2 - \Psi_1^* \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} \right)
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \Psi_2 dx &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial^2 \Psi_1^*}{\partial x^2} \Psi_2 - \Psi_1^* \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} \right) dx \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \left[ \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} \Psi_2 - \Psi_1^* \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} \right]_{-\infty}^{\infty} \\
&= 0
\end{aligned}$$

## 3. 要点（時間に依存しない Schrödinger 方程式）

$t$  に依存しない  $\psi(x)$  と  $x$  に依存しない  $\varphi(t)$  を用いて  $\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$  と表せると仮定すると,  $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \psi \frac{d\varphi}{dt}$ ,  $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \psi}{dx^2} \varphi$  より Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\psi\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\varphi + V\psi\varphi$$

となり，両辺を  $\psi\varphi$  で割って

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V$$

とすると左辺は  $\varphi$ ，右辺は  $\psi$  だけの式になるから，ある定数  $E$  が存在して

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} &= E \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V &= E \end{aligned}$$

よって，時間に依存しない Schrödinger 方程式

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

を解けば，そこに  $i\hbar\frac{d\varphi}{dt} = E\varphi$  の解である  $\varphi = Ae^{-iEt/\hbar}$  をかけることで  $\Psi$  が得られる．

## 第 3 章 2021/4/23

### 1. 要点（1 次元井戸型ポテンシャル）

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq a) \\ \infty & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

とする． $\psi(0) = \psi(a) = 0$  として  $0 \leq x \leq a$  の範囲で時間に依存しない Schrödinger 方程式  $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$  を解くと， $n$  を正の整数として

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

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

が得られる（計算 1）.

波動関数  $\Psi$  の初期状態  $\Psi(x, 0)$  が与えられれば，フーリエ級数展開によって

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

と表すことで

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

が得られる.

## 2. 計算 1

$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  とおくと時間に依存しない Schrödinger 方程式は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi$$

と表せるので，一般解は

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

ここで  $\psi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B$  で， $\psi(0) = 0$  なので  $B = 0$ . よって  $\psi(x) = A \sin kx$  だが， $\psi(a) = 0$  なのである整数  $n$  が存在して  $ka = n\pi$ . よって解は定数  $A$  と整数  $n$  を用いて  $A \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$  と表せる.

$n = 0$  のときは  $\psi(x) = 0$  となってしまうので不適. また  $n$  が負のときは定数  $A' = -A$  と正の整数  $n' = -n$  を用いて  $\psi(x) = A' \sin\left(\frac{n'\pi}{a}x\right)$  と表せるので， $n$  が正の整数のときだけを考えればよい.

$\int_0^{\frac{a}{2\pi}} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = \int_0^{\frac{a}{2\pi}} \cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$  より  $\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = n \int_0^{\frac{a}{2\pi}} dx = \frac{a}{2}$  であるから,

$$\begin{aligned}\int_0^a |\psi|^2 dx &= A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx \\ &= A^2 \cdot \frac{a}{2}\end{aligned}$$

よって  $\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1$  となるためには  $A = \pm \sqrt{\frac{2}{a}}$  であればよい. ただし物理学の観点では  $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$  のときを考えれば十分らしい.

さて,  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  と  $ka = n\pi$  より  $E$  としてありえる値は  $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$  であり, 各  $E_n$  に対応する  $\psi$  は  $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$  である. これが今回の  $V$  に対する時間に依存しない Schrödinger 方程式の解である.

### 3. 問題 2.4

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_0^a x |\psi_n(x)|^2 dx \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\ &= \frac{1}{a} \left( \int_0^a x \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx + \int_0^a (a-x) \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \right) \\ &= \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\ &= \frac{a}{2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \int_0^a x^2 |\psi_n(x)|^2 dx \\
&= \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\
&= \frac{1}{a} \int_0^a x^2 \left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right) dx \\
&= \frac{1}{a} \int_0^a x^2 dx - \frac{1}{a} \int_0^a x^2 \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) dx \\
&= \frac{a^2}{3} - \frac{1}{a} \left( \frac{a}{2n\pi} \left[ x^2 \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right]_0^a - \frac{a}{n\pi} \int_0^a x \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) dx \right) \\
&= \frac{a^2}{3} + \frac{1}{n\pi} \left( -\frac{a}{2n\pi} \left[ x \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right]_0^a + \frac{a}{2n\pi} \int_0^a \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) dx \right) \\
&= \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \int_0^a \psi_n^*(x) \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \psi_n(x) \right) dx \\
&= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \left( -i\hbar \cdot \frac{n\pi}{a} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right) dx \\
&= \frac{2n\pi i\hbar}{a^2} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\
&= \frac{n\pi i\hbar}{a^2} \int_0^a \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) dx \\
&= 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= \int_0^a \psi_n^*(x) \left( -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) \right) dx \\
&= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \left( \hbar^2 \cdot \frac{n^2\pi^2}{a^2} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right) dx \\
&= \frac{2n^2\pi^2\hbar^2}{a^3} \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\
&= \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \\
&= \sqrt{\frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} - \frac{a^2}{4}} \\
&= a \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_p &= \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \\
&= \frac{n\pi\hbar}{a}
\end{aligned}$$

より  $\sigma_x\sigma_p = \hbar \sqrt{\frac{n^2\pi^2}{12} - \frac{1}{2}}$ , これは  $n = 1$  のとき最小値  $\hbar \sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}} = 0.568\hbar$  をとるので不確定性原理は成り立っている。

## 第4章 2021/4/25

### 1. 問題 2.1

#### 1.1. (a)

$\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$  が Schrödinger 方程式の解ならば,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = |\varphi(t)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx$$

は  $t$  によらず一定なので  $|\varphi(t)|^2$  は定数である。ここで  $\varphi(t) = Ae^{-iEt/\hbar}$  より

$$\begin{aligned}
|\varphi(t)|^2 &= \varphi^*(t)\varphi(t) \\
&= Ae^{iE^*t/\hbar} \cdot Ae^{-iEt/\hbar} \\
&= A^2 e^{-i(E-E^*)t/\hbar}
\end{aligned}$$

であるから、一定となるためには  $E - E^* = 0$ ，すなわち  $E$  は実数でなければならない。

## 1.2. (b)

時間に依存しない Schrödinger 方程式について、任意の解  $\psi$  が、実数値関数解の線型結合として表せることを示す。 $E$  が実数であるから、

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

の両辺の複素共役をとると

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

よって

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \frac{\psi + \psi^*}{2} + V \frac{\psi + \psi^*}{2} &= E \frac{\psi + \psi^*}{2} \\
-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \frac{\psi - \psi^*}{2i} + V \frac{\psi - \psi^*}{2i} &= E \frac{\psi - \psi^*}{2i}
\end{aligned}$$

より  $\psi_R = \frac{\psi + \psi^*}{2}$  と  $\psi_I = \frac{\psi - \psi^*}{2i}$  はともに解である。これらはそれぞれ  $\psi$  の実部と虚部であるから、 $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi = 0$  より  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_R = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_I = 0$  であり、また

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_R|^2 dx + \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_I|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$$

である。一方  $|\psi_R|^2, |\psi_I|^2$  は常に 0 以上なので  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_R|^2 dx \geq 0, \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_I|^2 dx \geq 0$ 。

- $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_R|^2 dx = 1, \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_I|^2 dx = 0$  のとき、 $\psi$  は正規化された実数値関数解  $\psi_R$  に等しい。

- $0 < \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_R|^2 dx < 1, 0 < \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_I|^2 dx < 1$  のとき,  $\psi$  は正規化可能な 2 つの実数値関数解  $\psi_R, \psi_I$  の線型結合として表される.
- $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_R|^2 dx = 0, \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_I|^2 dx = 1$  のとき,  $\psi$  は正規化された実数値関数解  $\psi_I$  の  $i$  倍に等しい.

いずれの場合も  $\psi$  を正規化可能な実数値関数解の線型結合として表すことができた.

### 1.3. (c)

時間に依存しない Schrödinger 方程式

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

において  $V(x) = V(-x)$  なら

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

よって

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

より  $\psi(x) + \psi(-x)$  と  $\psi(x) - \psi(-x)$  はともに解である. 前者は偶関数, 後者は奇関数であるから,  $\psi$  を偶関数解と奇関数解の線型結合として表すことができた.

## 2. 問題 2.2

任意の  $x$  について  $V(x) \geq E$  が成り立つと仮定する.

時間に依存しない Schrödinger 方程式を変形すると

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



となる．ここである  $x_0$  が存在して  $\psi(x_0) > 0$  であると仮定する． $\psi'(x_0) \geq 0$  の場合，集合  $A = \{x \geq x_0 \mid \psi(x) \leq 0\}$  が空でないと仮定し，その下限を  $x_1$  とおく． $\psi$  の連続性より  $A$  は閉であるから  $x_1 \in A$ ，また  $x_0 \notin A$  より  $x_0 < x_1$  である． $x_0 \leq x < x_1$  の範囲では， $\psi(x) > 0$  と  $V(x) - E \geq 0$  より  $\psi''(x) \geq 0$  であるから， $\psi'$  の単調性より  $\psi'(x) \geq \psi'(x_0) \geq 0$ ．よって  $\psi$  の単調性より  $\psi(x_1) \geq \psi(x_0) > 0$  となるが， $x_1 \in A$  に反する．よって  $A = \emptyset$  である．すると同様に  $x_0 \leq x$  の範囲で  $\psi''(x) \geq 0$  であるから  $\psi'$  の単調性， $\psi$  の単調性より  $\psi(x) \geq \psi(x_0)$  となり， $\psi$  は正規化不可能である．同様に  $\psi'(x_0) \leq 0$  の場合  $x \leq x_0$  の範囲で  $\psi(x) \geq \psi(x_0)$  となるため  $\psi$  は正規化不可能である．よって  $\psi(x_0) > 0$  となる  $x_0$  は存在しない．同様に  $\psi(x_0) < 0$  となる  $x_0$  も存在しないので， $\psi$  は定数 0 となるが，これも正規化不可能である．

よって，ある  $x$  が存在して  $V(x) < E$  である（この証明は @buta\_kimchi\_ さんにいただいたリブをもとに書いている）．

### 3. 要点（1 次元調和振動子）

古典力学の単振動  $x = \sin \omega t$  を考えると， $m\ddot{x} = -m\omega^2 \sin \omega t = -m\omega^2 x$  より位置エネルギーは  $V(x) = -\int (-m\omega^2 x) dx = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$  である．この  $V$  について時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi = E\psi$$

を解く．

運動量を得る作用素  $-i\hbar \frac{d}{dx}$  を  $\hat{p}$  とおくと， $\hat{p}^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$  であるから，方程式は

$$\frac{1}{2m} (\hat{p}^2 + (m\omega x)^2) \psi = E\psi$$

と書き換えられる．ここで  $\hat{a}_-, \hat{a}_+$  を

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp i\hat{p} + m\omega x)$$

と定義すると，方程式はさらに

$$\hbar\omega\left(\hat{a}_{\pm}\hat{a}_{\mp}\pm\frac{1}{2}\right)\psi = E\psi$$

と書き換えられる（計算 1）.

ある組  $(\psi, E)$  がこの方程式の解ならば，組  $(\hat{a}_{+}\psi, E + \hbar\omega)$  と組  $(\hat{a}_{-}\psi, E - \hbar\omega)$  もこの方程式の解となる（計算 2）. ただし  $\psi$  が正規化可能でも  $\hat{a}_{\pm}\psi$  が正規化可能とは限らない.

組  $(\hat{a}_{-}\psi, E - \hbar\omega)$  について，もし  $E - \hbar\omega \leq 0$  ( $V$  の最小値) ならば  $\hat{a}_{-}\psi$  は正規化不可能なので  $\hat{a}_{-}\psi = 0$ . よって

$$(i\hat{p} + m\omega x)\psi = 0$$

を解いて  $\psi = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ . 対応する  $E$  を計算すると  $\frac{1}{2}\hbar\omega$  となり，これが基底状態のエネルギー  $E_0$  である.  $0 < E \leq \hbar\omega$  の範囲の解はこれ 1 つなので，任意の解  $E$  は  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$  と表せる.

## 4. 計算 1

作用素  $\hat{A}, \hat{B}$  について交換子  $[\hat{A}, \hat{B}]$  を

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

で定義すると

$$\begin{aligned} [x, \hat{p}]\psi &= (x\hat{p} - \hat{p}x)\psi \\ &= x\left(-i\hbar\frac{d\psi}{dx}\right) - \left(-i\hbar\frac{d}{dx}(x\psi)\right) \\ &= -i\hbar x\frac{d\psi}{dx} + i\hbar x\frac{d\psi}{dx} + i\hbar\psi \\ &= i\hbar\psi \end{aligned}$$

より  $[x, \hat{p}] = i\hbar$  なので,

$$\begin{aligned}
\hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right) &= \hbar\omega\left(\frac{1}{2\hbar m\omega}(-i\hat{p} + m\omega x)(i\hat{p} + m\omega x) + \frac{1}{2}\right) \\
&= \hbar\omega\left(\frac{1}{2\hbar m\omega}(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2 + im\omega[x, \hat{p}]) + \frac{1}{2}\right) \\
&= \hbar\omega\left(\frac{1}{2\hbar m\omega}(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2 - \hbar m\omega) + \frac{1}{2}\right) \\
&= \hbar\omega \cdot \frac{1}{2\hbar m\omega}(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2) \\
&= \frac{1}{2m}(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right) &= \hbar\omega\left(\frac{1}{2\hbar m\omega}(i\hat{p} + m\omega x)(-i\hat{p} + m\omega x) - \frac{1}{2}\right) \\
&= \hbar\omega\left(\frac{1}{2\hbar m\omega}(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2 - im\omega[x, \hat{p}]) - \frac{1}{2}\right) \\
&= \hbar\omega\left(\frac{1}{2\hbar m\omega}(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2 + \hbar m\omega) - \frac{1}{2}\right) \\
&= \hbar\omega \cdot \frac{1}{2\hbar m\omega}(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2) \\
&= \frac{1}{2m}(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2)
\end{aligned}$$

## 5. 計算 2

$$\hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi \text{ より,}$$

$$\begin{aligned}
\hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right)(\hat{a}_+\psi) &= \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2}\hat{a}_+\right)\psi \\
&= \hbar\omega\hat{a}_+\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2}\right)\psi \\
&= \hat{a}_+\left(\hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\right)\psi \\
&= \hat{a}_+(E + \hbar\omega)\psi \\
&= (E + \hbar\omega)(\hat{a}_+\psi)
\end{aligned}$$

$$\hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi \text{ より,}$$

$$\begin{aligned}\hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right)(\hat{a}_-\psi) &= \hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+\hat{a}_- - \frac{1}{2}\hat{a}_-\right)\psi \\ &= \hbar\omega\hat{a}_-\left(\hat{a}_+\hat{a}_- - \frac{1}{2}\right)\psi \\ &= \hat{a}_-\left(\hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega\right)\psi \\ &= \hat{a}_-(E - \hbar\omega)\psi \\ &= (E - \hbar\omega)(\hat{a}_-\psi)\end{aligned}$$

## 第 5 章 2021/4/26

### 1. 問題 2.10

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \text{ より}$$

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= \hat{a}_+\psi_0(x) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-i\hat{p} + m\omega x) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \left(-\frac{m\omega}{\hbar} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right) + m\omega x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \cdot 2m\omega x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}_+ \psi_1(x) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-i\hat{p} + m\omega x) \left( x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left( -\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \left( x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left( -\hbar \left( x \cdot \left( -\frac{m\omega}{\hbar} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right) + e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right) + m\omega x^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left( m\omega x^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} - \hbar e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} + m\omega x^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} (2m\omega x^2 - \hbar) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}
\end{aligned}$$

$\psi_0, \psi_2$  は偶関数,  $\psi_1$  は奇関数なので  $\psi_0^* \psi_1$  と  $\psi_1^* \psi_2$  は奇関数. よって

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \psi_1 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \psi_2 dx = 0$$

一方

$$\begin{aligned}
\int (2m\omega x^2 - \hbar) e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx &= 2m\omega \int x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx - \hbar \int e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx \\
&= -\hbar x e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} + \hbar \int e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx - \hbar \int e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx \\
&= -\hbar x e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} + (\text{const})
\end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \psi_2(x) dx &= (\text{const}) \int_{-\infty}^{\infty} (2m\omega x^2 - \hbar) e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx \\
&= (\text{const}) \left[ x e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \right]_{-\infty}^{\infty} \\
&= 0
\end{aligned}$$

であるから  $\psi_0, \psi_1, \psi_2$  はそれぞれ直交する.

## 2. 問題 2.11

$|\psi_0|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$  は正規分布  $N\left(0, \frac{\hbar}{2m\omega}\right)$  の密度関数なので  $\langle x \rangle = 0$ ,  $\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$ .

$\psi_0$  は偶関数なので  $\frac{d\psi_0}{dx}$  は奇関数. よって  $\psi_0 \frac{d\psi_0}{dx}$  は奇関数なので

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \left( -i\hbar \frac{d\psi_0}{dx} \right) dx \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0 \frac{d\psi_0}{dx} dx \\ &= 0\end{aligned}$$

また,  $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ ,  $\alpha = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$  とおくと  $\psi_0 = \alpha e^{-\frac{\xi^2}{2}}$  であるから

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi_0}{dx^2} &= \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2\psi_0}{d\xi^2} \\ &= \frac{m\omega\alpha}{\hbar} (\xi^2 - 1) e^{-\frac{\xi^2}{2}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \left( -\hbar^2 \frac{d^2 \psi_0}{dx^2} \right) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \alpha e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left( -\hbar m \omega \alpha (\xi^2 - 1) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \right) \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}} d\xi \\
&= -\frac{\hbar m \omega}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (\xi^2 - 1) e^{-\xi^2} d\xi \\
&= -\frac{\hbar m \omega}{\sqrt{\pi}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi - \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi \right) \\
&= -\frac{\hbar m \omega}{\sqrt{\pi}} \left( -\frac{1}{2} [\xi e^{-\xi^2}]_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi - \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi \right) \\
&= \frac{\hbar m \omega}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi \\
&= \frac{\hbar m \omega}{2}
\end{aligned}$$

$$|\psi_1|^2 = \frac{2m\omega}{\hbar} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} \text{ は偶関数なので } \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi_1|^2 dx = 0. \text{ また上と}$$

同じ  $\xi$  と  $\alpha$  を用いて  $\psi_1 = \sqrt{2}\alpha\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$  と表すと

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi_1|^2 dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar}{m\omega} \xi^2 \cdot 2\alpha^2 \xi^2 e^{-\xi^2} \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} d\xi \\
&= \frac{2\hbar}{m\omega\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^4 e^{-\xi^2} d\xi \\
&= \frac{2\hbar}{m\omega\sqrt{\pi}} \left( -\frac{1}{2} [\xi^3 e^{-\xi^2}]_{-\infty}^{\infty} + \frac{3}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi \right) \\
&= \frac{3\hbar}{m\omega\sqrt{\pi}} \left( -\frac{1}{2} [\xi e^{-\xi^2}]_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi \right) \\
&= \frac{3\hbar}{2m\omega}
\end{aligned}$$

$\psi_1$  は奇関数なので  $\frac{d\psi_1}{dx}$  は偶関数. よって  $\psi_1 \frac{d\psi_1}{dx}$  は奇関数なので

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \left( -i\hbar \frac{d\psi_1}{dx} \right) dx \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 \frac{d\psi_1}{dx} dx \\ &= 0\end{aligned}$$

また

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} &= \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2\psi_1}{d\xi^2} \\ &= \frac{\sqrt{2}m\omega\alpha}{\hbar} (\xi^3 - 3\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}\end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned}\langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \left( -\hbar^2 \frac{d^2\psi_1}{dx^2} \right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{2}\alpha\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left( -\hbar\sqrt{2}m\omega\alpha(\xi^3 - 3\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \right) \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} d\xi \\ &= -\frac{2\hbar m\omega}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (\xi^4 - 3\xi^2) e^{-\xi^2} d\xi \\ &= -\frac{2\hbar m\omega}{\sqrt{\pi}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \xi^4 e^{-\xi^2} d\xi - 3 \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi \right) \\ &= -\frac{2\hbar m\omega}{\sqrt{\pi}} \left( -\frac{1}{2} [\xi^3 e^{-\xi^2}]_{-\infty}^{\infty} + \frac{3}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi - 3 \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi \right) \\ &= \frac{3\hbar m\omega}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi \\ &= \frac{3\hbar m\omega}{\sqrt{\pi}} \left( -\frac{1}{2} [\xi e^{-\xi^2}]_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi \right) \\ &= \frac{3\hbar m\omega}{2}\end{aligned}$$



$\psi_0$  については  $\sigma_x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$ ,  $\sigma_p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}$  より  $\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2}$ .  $\psi_1$  については  $\sigma_x = \sqrt{\frac{3\hbar}{2m\omega}}$ ,  $\sigma_p = \sqrt{\frac{3\hbar m\omega}{2}}$  より  $\sigma_x \sigma_p = \frac{3\hbar}{2}$ . いずれについても不確定性原理は成り立っている.

$T = \frac{p^2}{2m}$ ,  $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$  であるから,  $\psi_0$  については

$$\begin{aligned}\langle T \rangle &= \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\hbar\omega}{4} \\ \langle V \rangle &= \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar\omega}{4}\end{aligned}$$

$\psi_1$  については

$$\begin{aligned}\langle T \rangle &= \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{3\hbar\omega}{4} \\ \langle V \rangle &= \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{3\hbar\omega}{4}\end{aligned}$$

## 第 6 章 2021/5/10

### 1. 問題 1.7

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle p \rangle &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left( -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \left( -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \psi^* \left( -i\hbar \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial t} \right) \right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V\psi^* \right) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi \right) \right) dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \right) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \left( V\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (V\psi) \right) dx\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx &= \left[ \cancel{\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x}} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx \\
&= - \left[ \cancel{\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}} \right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} dx
\end{aligned}$$

より

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \right) dx = 0$$

であるから,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( V \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (V \psi) \right) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left( V \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \psi - \psi^* V \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left( -\frac{\partial V}{\partial x} \right) \psi dx \\
&= \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle
\end{aligned}$$

## 2. 要点 (1 次元調和振動子つづき)

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \text{ より } \hbar \omega \left( \hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \right) \psi_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \psi_n \text{ なので}$$

$$\hat{a}_+ \hat{a}_- \psi_n = \left( n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right) \psi_n = n \psi_n$$

$$\text{同様に } \hbar \omega \left( \hat{a}_- \hat{a}_+ - \frac{1}{2} \right) \psi_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \psi_n \text{ なので}$$

$$\hat{a}_- \hat{a}_+ \psi_n = \left( n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \psi_n = (n+1) \psi_n$$

ここで,  $\hat{a}_+$  と  $\hat{a}_-$  のエルミート共役性

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} f^*(\hat{a}_+g)dx &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_-f)^*gdx \\ \int_{-\infty}^{\infty} f^*(\hat{a}_-g)dx &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_+f)^*gdx\end{aligned}$$

(計算 1) に着目すると,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_-\psi_n)^*(\hat{a}_-\psi_n)dx &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n)^*\psi_n dx \\ &= n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*\psi_n dx \\ &= n\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_+\psi_n)^*(\hat{a}_+\psi_n)dx &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n)^*\psi_n dx \\ &= (n+1) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*\psi_n dx \\ &= n+1\end{aligned}$$

であるから,  $\hat{a}_-\psi_n$  の定数倍である  $\psi_{n-1}$  が  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}^*\psi_{n-1}dx = 1$  を満たすためには

$$\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}_-\psi_n$$

$\hat{a}_+\psi_n$  の定数倍である  $\psi_{n+1}$  が  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}^*\psi_{n+1}dx = 1$  を満たすためには

$$\psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}_+\psi_n$$

であればよい. これを繰り返して  $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n\psi_0$  を得る.

また, 次が成り立つ (計算 2).

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m\psi_n dx = \delta_{mn}$$

### 3. 計算 1

$$\hat{a}_+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left( -\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \text{ より}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(\hat{a}_+ g) dx = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left( -\hbar \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{dg}{dx} dx + m\omega \int_{-\infty}^{\infty} f^* x g dx \right)$$

$$\text{一方 } \hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left( \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \text{ より}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_- f)^* g dx = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left( \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df^*}{dx} g dx + m\omega \int_{-\infty}^{\infty} x f^* g dx \right)$$

ここで部分積分

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df^*}{dx} g dx &= [f^* g]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{dg}{dx} dx \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{dg}{dx} dx \end{aligned}$$

より  $\int_{-\infty}^{\infty} f^*(\hat{a}_+ g) dx$  と  $\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_- f)^* g dx$  は等しい.

### 4. 計算 2

$\hat{a}_+$  と  $\hat{a}_-$  のエルミート共役性より

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* (\hat{a}_+ \hat{a}_- \psi_n) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_- \psi_m)^* (\hat{a}_- \psi_n) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_+ \hat{a}_- \psi_m)^* \psi_n dx \end{aligned}$$

よって

$$n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx$$

であるから,  $n \neq m$  ならば  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = 0$ .

## 第 7 章 2021/5/12

### 1. 要点 (ヒルベルト空間)

可測関数  $f, g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$  (可積分とは限らない) に対して内積  $\langle f|g \rangle$  (有限とは限らない) を

$$\langle f|g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)dx$$

で定義すると,  $\langle f|f \rangle$  は必ず 0 以上の実数あるいは  $\infty$  となる. ノルム  $\|f\|$  を

$$\|f\| = \sqrt{\langle f|f \rangle}$$

で定義する. このとき, 集合  $L^2(\mathbb{R}) = \{f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \mid \|f\| < \infty\}$  は和とスカラー倍について閉じている (問題 3.1). また,  $f, g \in L^2(\mathbb{R})$  ならば  $|\langle f|g \rangle| < \infty$  である (計算 1).

### 2. 問題 3.1

任意の  $f, g \in L^2(\mathbb{R})$  について

$$\begin{aligned} \|f+g\|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)+g(x)|^2 dx \\ &\leq \int_{-\infty}^{\infty} (|f(x)|+|g(x)|)^2 dx \\ &\leq \int_{-\infty}^{\infty} \left( (|f(x)|+|g(x)|)^2 + (|f(x)|-|g(x)|)^2 \right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (2|f(x)|^2 + 2|g(x)|^2) dx \\ &= 2\|f\|^2 + 2\|g\|^2 \\ &< \infty \end{aligned}$$

より  $f+g \in L^2(\mathbb{R})$ .

任意の  $f \in L^2(\mathbb{R})$ ,  $\alpha \in \mathbb{C}$  について

$$\begin{aligned}\|\alpha f\|^2 &= |\alpha|^2 \|f\|^2 \\ &< \infty\end{aligned}$$

より  $\alpha f \in L^2(\mathbb{R})$ .

### 3. 計算 1

任意の実数  $a, b$  について  $a^2 + b^2 - 2ab = (a - b)^2 \geq 0$  より  $ab \leq \frac{1}{2}(a^2 + b^2)$  が成り立つことに注意すると,

$$\begin{aligned}|\langle f|g \rangle| &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)dx \right| \\ &\leq \int_{-\infty}^{\infty} |f^*(x)g(x)|dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)| \cdot |g(x)|dx \\ &\leq \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (|f(x)|^2 + |g(x)|^2)dx \\ &= \frac{1}{2} (\|f\|^2 + \|g\|^2) \\ &< \infty\end{aligned}$$

となる (この証明は @nkswtr さんにいただいたリプをもとに書いている).

## 第 8 章 2021/5/15

### 1. 要点 (エルミート作用素)

作用素  $\hat{Q}$ ,  $\hat{Q}^\dagger$  が任意の  $f, g$  について  $\langle f|\hat{Q}g \rangle = \langle \hat{Q}^\dagger f|g \rangle$  を満たすとき, これらはエルミート共役であるという. 次が成り立つ:

- $(\hat{Q} + \hat{R})^\dagger = \hat{Q}^\dagger + \hat{R}^\dagger$
- $\alpha$  を複素数とすると  $(\alpha\hat{Q})^\dagger = \alpha^*\hat{Q}^\dagger$
- $(\hat{Q}\hat{R})^\dagger = \hat{R}^\dagger\hat{Q}^\dagger$

$$\frac{d^{n\ \dagger}}{dx^n} = (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} \text{ である (計算 1).}$$

作用素  $\hat{Q}$  が  $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$  を満たすとき、これをエルミート作用素という。  $x$ ,  $\hat{p}$  はエルミート作用素である (計算 2)。波動関数  $\Psi$  から得られる観測可能な量  $Q$  の期待値は、エルミート作用素  $\hat{Q}$  を用いて  $\langle Q \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle$  と表される。ある波動関数  $\Psi$  の観測可能な量  $Q$  の分布が退化してただ 1 つの値  $q$  をとるとき、 $q$  は  $\hat{Q}$  の固有値、 $\Psi$  は  $\hat{Q}$  の固有関数である (計算 3)。

エルミート作用素  $\hat{Q}$  について、次が成り立つ (計算 4) :

- $\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle$  は実数である。
- $\hat{Q}$  の固有値は実数である。
- $\hat{Q}$  の 2 つの固有関数は、固有値が異なるならば直交する。

$\hat{Q}$  の全ての固有値の集まりをスペクトルという。線形独立な複数の波動関数が同じ固有値をもつとき、スペクトルは縮退しているという。

## 2. 計算 1

$$\begin{aligned} \left\langle f \left| \frac{dg}{dx} \right. \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{dg}{dx} dx \\ &= [f^* g]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df^*}{dx} g dx \\ &= \left\langle -\frac{df}{dx} \middle| g \right\rangle \end{aligned}$$

より  $\frac{d^{n\ \dagger}}{dx} = -\frac{d}{dx}$  であるから,

$$\begin{aligned} \frac{d^{n\ \dagger}}{dx^n} &= \left( \frac{d^\dagger}{dx} \right)^n \\ &= \left( -\frac{d}{dx} \right)^n \\ &= (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} \end{aligned}$$

### 3. 計算 2

$$\begin{aligned}\langle f|g\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} f^* x g \, dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (x f)^* g \, dx \\ &= \langle x f|g\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^\dagger &= i\hbar \frac{d}{dx} \\ &= -i\hbar \frac{d}{dx}\end{aligned}$$

### 4. 計算 3

$Q$  の期待値は  $\langle Q \rangle = q$ , 分散は

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \langle (Q - q)^2 \rangle \\ &= \langle \Psi | (\hat{Q} - q)^2 \Psi \rangle \\ &= \langle (\hat{Q} - q) \Psi | (\hat{Q} - q) \Psi \rangle \\ &= \|(\hat{Q} - q) \Psi\|^2\end{aligned}$$

であるから,  $\sigma^2 = 0$  となるのは  $(\hat{Q} - q)\Psi = 0$  のときである.

### 5. 計算 4

- 内積の性質より  $\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle^* = \langle \hat{Q} \Psi | \Psi \rangle$ , エルミート作用素の定義より  $\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \langle \hat{Q} \Psi | \Psi \rangle$  であるから,  $\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle^*$  より  $\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle$  は実数.
- 固有値を  $q$  とすると  $\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = q \langle \Psi | \Psi \rangle = q \|\Psi\|^2$  であるから,  $\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle$  が実数より  $q$  も実数.



- 固有値を  $q_1, q_2$ , 対応する固有関数を  $\Psi_1, \Psi_2$  とすると,

$$\langle \Psi_1 | \hat{Q} \Psi_2 \rangle = q_2 \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$$

$$\langle \hat{Q} \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = q_1 \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$$

であるが, エルミート作用素の定義より  $\langle \Psi_1 | \hat{Q} \Psi_2 \rangle = \langle \hat{Q} \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$  であるから,  $q_1 \neq q_2$  ならば  $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = 0$ .

## 第 9 章 2021/05/17

### 1. 要点 (運動量表示)

関数  $f(x)$  のフーリエ変換を

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

で定義すると, その逆変換は

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} dk$$

である. ここで  $f(x) = \delta(x)$  とすると

$$\begin{aligned} F(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) e^{-ikx} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ik \cdot 0} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \end{aligned}$$

であるから, 逆フーリエ変換より

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk \end{aligned}$$

を得る.

運動量演算子  $\hat{p}$  の固有値  $p$  と固有関数  $f_p$  を考える.  $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$  より

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{df_p}{dx} &= pf_p \\ \therefore f_p(x) &= Ae^{\frac{ip}{\hbar}x} \end{aligned}$$

ここで2つの固有値  $p_1, p_2$  と対応する固有関数  $f_{p_1}(x) = A_1 e^{\frac{ip_1}{\hbar}x}$ ,  $f_{p_2}(x) = A_2 e^{\frac{ip_2}{\hbar}x}$  について

$$\begin{aligned} \langle f_{p_1} | f_{p_2} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} A_1 e^{\frac{ip_1}{\hbar}x} \cdot A_2 e^{\frac{ip_2}{\hbar}x} dx \\ &= A_1 A_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i(p_2-p_1)}{\hbar}x} dx \\ &= A_1 A_2 \cdot \hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p_2-p_1)x} dx \\ &= A_1 A_2 \cdot 2\pi\hbar \delta(p_2 - p_1) \end{aligned}$$

であるから,  $A_1 = A_2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$  とすれば  $\langle f_{p_1} | f_{p_2} \rangle = \delta(p_2 - p_1)$  となる.

座標表示の波動関数  $\Psi(x, t)$  に対して運動量表示の波動関数  $\Phi(p, t)$  を

$$\begin{aligned} \Phi(p, t) &= \langle f_p | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ip}{\hbar}x} \Psi(x, t) dx \end{aligned}$$

で定義すると

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip}{\hbar}x} \Phi(p, t) dp$$

であり (計算 1), 時刻  $t$  における運動量  $p$  の確率密度関数は  $|\Phi(p, t)|^2$  となる.

## 2. 計算 1

$\Phi$  の定義中の  $p$  を  $\hbar p$  に置き換えると

$$\Phi(\hbar p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx} \Psi(x, t) dx$$

となるから,  $\Psi$  のフーリエ変換は  $\sqrt{\hbar} \Phi(\hbar p, t)$  である. よって逆フーリエ変換より

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} \sqrt{\hbar} \Phi(\hbar p, t) dp \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip}{\hbar}x} \sqrt{\hbar} \Phi(p, t) \frac{dp}{\hbar} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip}{\hbar}x} \Phi(p, t) dp \end{aligned}$$

## 3. 問題 3.11

1 次元調和振動子の基底状態の座標表示は  $\Psi_0(x, t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 - \frac{i\omega}{2}t}$  であるから, 運動量表示は

$$\begin{aligned} \Phi_0(p, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ip}{\hbar}x} \Psi_0(x, t) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{i\omega}{2}t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 - \frac{ip}{\hbar}x} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{i\omega}{2}t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x + \frac{ip}{m\omega}\right)^2 - \frac{p^2}{2\hbar m\omega}} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega} - \frac{i\omega}{2}t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega} - \frac{i\omega}{2}t} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{m\omega}} \\ &= \left(\frac{1}{\pi\hbar m\omega}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega} - \frac{i\omega}{2}t} \end{aligned}$$

一方古典力学におけるエネルギー  $\frac{1}{2} \hbar \omega$  の単振動は速度  $v$  が  $\frac{1}{2} m v^2 \leq \frac{1}{2} \hbar \omega$  すなわち  $-\sqrt{\frac{\hbar \omega}{m}} \leq v \leq \sqrt{\frac{\hbar \omega}{m}}$  を満たすので、運動量  $mv$  は区間  $[-\sqrt{\hbar m \omega}, \sqrt{\hbar m \omega}]$  内の値をとる。基底状態の調和振動子の運動量がこの範囲の値をとる確率は

$$\begin{aligned} \int_{-\sqrt{\hbar m \omega}}^{\sqrt{\hbar m \omega}} |\Phi_0(p, t)|^2 dp &= \frac{1}{\sqrt{\pi \hbar m \omega}} \int_{-\sqrt{\hbar m \omega}}^{\sqrt{\hbar m \omega}} e^{-\frac{p^2}{\hbar m \omega}} dp \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi \hbar m \omega}} \cdot \sqrt{\hbar m \omega} \int_{-1}^1 e^{-p^2} dp \\ &= \text{erf}(1) \\ &= 0.843 \end{aligned}$$

(ただし erf は誤差関数)。

## 第 10 章 2021/5/18

### 1. 問題 3.12

自由粒子の波動関数

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)} dk$$

において  $k = \frac{p}{\hbar}$  と置換すると

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi\left(\frac{p}{\hbar}\right) e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{p^2}{2\hbar m} t\right)} \frac{dp}{\hbar} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \left( \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \varphi\left(\frac{p}{\hbar}\right) e^{-\frac{ip^2}{2\hbar m} t} \right) dp \end{aligned}$$

よって

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \varphi\left(\frac{p}{\hbar}\right) e^{-\frac{ip^2}{2\hbar m} t}$$

であり,

$$|\Phi(p, t)|^2 = \frac{1}{\hbar} \left| \varphi\left(\frac{p}{\hbar}\right) \right|^2$$

より  $|\Phi(p, t)|^2$  は  $t$  に依らない.

## 2. 要点（不確定性原理）

観測可能な 2 つの量  $A, B$  について,  $\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle = a$ ,  $\langle B \rangle = \langle \Psi | \hat{B} \Psi \rangle = b$  とおく. このとき,  $\sigma_A = \|(\hat{A} - a)\Psi\|$  と  $\sigma_B = \|(\hat{B} - b)\Psi\|$  の積  $\sigma_A \sigma_B$  を,  $[\hat{A}, \hat{B}]$  を用いて評価したい.

まず, シュワルツの不等式より

$$\begin{aligned} \sigma_A \sigma_B &= \|(\hat{A} - a)\Psi\| \cdot \|(\hat{B} - b)\Psi\| \\ &\geq |\langle (\hat{A} - a)\Psi | (\hat{B} - b)\Psi \rangle| \end{aligned}$$

であり,

$$\begin{aligned} \langle (\hat{A} - a)\Psi | (\hat{B} - b)\Psi \rangle &= \langle \Psi | (\hat{A} - a)(\hat{B} - b)\Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \hat{A}\hat{B}\Psi \rangle - b\langle \Psi | \hat{A}\Psi \rangle - a\langle \Psi | \hat{B}\Psi \rangle + ab\langle \Psi | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \hat{A}\hat{B}\Psi \rangle - ab - ab + ab \\ &= \langle \Psi | \hat{A}\hat{B}\Psi \rangle - ab \end{aligned}$$

一方

$$\begin{aligned} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle &= \langle \Psi | [\hat{A}, \hat{B}] \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \hat{A}\hat{B}\Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{B}\hat{A}\Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \hat{A}\hat{B}\Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{A}\hat{B}\Psi \rangle^* \\ &= 2i \cdot \text{Im} \langle \Psi | \hat{A}\hat{B}\Psi \rangle \end{aligned}$$

であるから,

$$\begin{aligned}
|\langle (\hat{A} - a)\Psi | (\hat{B} - b)\Psi \rangle| &\geq |\operatorname{Im} \langle (\hat{A} - a)\Psi | (\hat{B} - b)\Psi \rangle| \\
&= |\operatorname{Im} \langle \Psi | \hat{A}\hat{B}\Psi \rangle| \\
&= \left| \frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|
\end{aligned}$$

よって  $\sigma_A \sigma_B \geq \left| \frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$  が成り立つ。

特に,  $\hat{A} = x$ ,  $\hat{B} = \hat{p}$  のとき  $\langle [x, \hat{p}] \rangle = [x, \hat{p}] = i\hbar$  であるから  $\sigma_x \sigma_p \geq \left| \frac{i\hbar}{2i} \right| = \frac{\hbar}{2}$ .

## 第 11 章 2021/5/19

### 1. 問題 3.13

$\Phi$  を  $p$  で微分すると

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial p} \Phi(p, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial p} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \cdot \Psi(x, t) dx \\
&= -\frac{i}{\hbar \sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \Psi(x, t) dx
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
&\Phi^*(p, t) \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \Phi(p, t) \\
&= \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ipy}{\hbar}} \Psi^*(y, t) dy \right) \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \Psi(x, t) dx \right) \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip(y-x)}{\hbar}} \Psi^*(y, t) x \Psi(x, t) dx dy
\end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p, t) \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \Phi(p, t) dp \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip(y-x)}{\hbar}} dp \right) \Psi^*(y, t) x \Psi(x, t) dx dy \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y-x) \Psi^*(y, t) x \Psi(x, t) dx dy \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx \\
&= \langle x \rangle
\end{aligned}$$

## 第 12 章 2021/05/25

### 1. 要点 (ベクトル表示)

座標表示の 2 つの波動関数  $\Psi_1, \Psi_2$  とその運動量表示  $\Phi_1, \Phi_2$  について

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle$$

が成り立つ (計算 1) から, 波動関数の座標表示と運動量表示はヒルベルト空間として同型である. そこで, 座標表示や運動量表示と同型な何らかのヒルベルト空間を考え, 波動関数をその空間上のベクトル  $|\mathcal{S}(t)\rangle$  として表すことにする. 座標表示における  $\delta(x)$  に対応するベクトルを  $|x\rangle$  とすると,  $\Psi(x, t)$  だったものは  $\langle x | \mathcal{S}(t) \rangle$  になり, 運動量表示における  $\delta(p)$  (座標表示ならば  $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ ) に対応するベクトルを  $|p\rangle$  とすると,  $\Phi(p, t)$  だったものは  $\langle p | \mathcal{S}(t) \rangle$  になる.

作用素はヒルベルト空間上の線形変換として表される. 1 で恒等作用素を表すことにすれば,  $|e_n\rangle$  ( $n = 0, 1, \dots$ ) が正規直交基底をなすというのは

$$\sum_n |e_n\rangle \langle e_n| = 1$$

と書き表すことができ, 同様に  $|e_z\rangle$  ( $z \in \mathbb{R}$ ) がディラック正規直交連続基底をなすというのは

$$\int_{-\infty}^{\infty} |e_z\rangle\langle e_z| dz = 1$$

と書き表すことができる.

## 2. 計算 1

$$\begin{aligned}\Phi_1(p, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip}{\hbar}x} \Psi_1(x, t) dx \\ \Phi_2(p, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip}{\hbar}x} \Psi_2(x, t) dx\end{aligned}$$

のとき,

$$\begin{aligned}\Phi_1^*(p, t)\Phi_2(p, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip}{\hbar}x} \Psi_1^*(x, t) e^{-\frac{ip}{\hbar}y} \Psi_2(y, t) dx dy \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip}{\hbar}(x-y)} \Psi_1^*(x, t) \Psi_2(y, t) dx dy\end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned}\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_1^*(p, t) \Phi_2(p, t) dp \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip}{\hbar}(x-y)} dp \right) \Psi_1^*(x, t) \Psi_2(y, t) dx dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-y) \Psi_1^*(x, t) \Psi_2(y, t) dx dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x, t) \Psi_2(x, t) dx \\ &= \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle\end{aligned}$$

## 3. 問題 3.23

$\hat{P} = |\alpha\rangle\langle\alpha|$  ( $\alpha$  はベクトル) とすると



$$\begin{aligned}
\hat{P}^2 &= |\alpha\rangle\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha| \\
&= |\alpha\rangle\langle\alpha| \\
&= \hat{P}
\end{aligned}$$

また  $\hat{P}|x\rangle = p|x\rangle$  ( $p \in \mathbb{C}$ ) のとき

$$|\alpha\rangle\langle\alpha|x\rangle = p|x\rangle$$

の両辺に  $\langle\alpha|$  をかけて

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha|x\rangle = p\langle\alpha|x\rangle$$

$$(p-1)\langle\alpha|x\rangle = 0$$

よって  $p = 1$  または  $\langle\alpha|x\rangle = 0$  である.  $p = 1$  のとき,  $|x\rangle$  は  $|\alpha\rangle$  のスカラー倍で表される任意のベクトル. 一方,  $\langle\alpha|x\rangle = 0$  のとき

$$p|x\rangle = \hat{P}|x\rangle = |\alpha\rangle 0 = 0$$

なので  $p = 0$  または  $|x\rangle = 0$  となる.

## 4. 問題 3.24

内積  $\langle\alpha|\beta\rangle$  が  $|\alpha\rangle^\dagger|\beta\rangle$  であることに注意すると

$$\langle e_m|\hat{Q}|e_n\rangle = \left( (|\hat{Q}|e_n\rangle)^\dagger |e_m\rangle \right)^*$$

であり,  $\hat{Q}$  のエルミート共役性より

$$(|\hat{Q}|e_n\rangle)^\dagger |e_m\rangle = \langle e_n|\hat{Q}|e_m\rangle$$

であるから,

$$\langle e_m|\hat{Q}|e_n\rangle = \langle e_n|\hat{Q}|e_m\rangle^*$$

よって  $Q_{mn} = Q_{nm}^*$ . (うーんやはり多少不正確でも  $\langle e_m|\hat{Q}|e_n\rangle = \langle \hat{Q}e_n|e_m\rangle^* = \langle e_n|\hat{Q}|e_m\rangle^*$  と書いた方が見やすいし分かりやすい)

## 第 13 章 2021/5/26

### 1. 問題 3.31

最初の基底は 1 を正規化したものである.  $\int_{-1}^1 dx = 2$  より  $e_0 = \frac{\sqrt{2}}{2}$ .

次の基底は,  $x - \langle e_0|x \rangle e_0$  を正規化したものである.  $\langle e_0|x \rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \int_{-1}^1 x dx = 0$  より  $x - \langle e_0|x \rangle e_0 = x$  であり,  $\int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3}$  より  $e_1 = \frac{\sqrt{6}}{2} x$ .

次の基底は,  $x^2 - \langle e_0|x^2 \rangle e_0 - \langle e_1|x^2 \rangle e_1$  を正規化したものである.

$$\langle e_0|x^2 \rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{\sqrt{2}}{3}$$

$$\langle e_1|x^2 \rangle = \frac{\sqrt{6}}{2} \int_{-1}^1 x^3 dx = 0$$

より  $x^2 - \langle e_0|x^2 \rangle e_0 - \langle e_1|x^2 \rangle e_1 = x^2 - \frac{1}{3}$  であり,

$$\left\| x^2 - \frac{1}{3} \right\|^2 = \int_{-1}^1 \left( x^2 - \frac{1}{3} \right)^2 dx = \frac{8}{45}$$

より  $e_2 = \frac{3\sqrt{10}}{4} \left( x^2 - \frac{1}{3} \right)$ .

次の基底は,  $x^3 - \langle e_0|x^3 \rangle e_0 - \langle e_1|x^3 \rangle e_1 - \langle e_2|x^3 \rangle e_2$  を正規化したものである.

$$\langle e_0|x^3 \rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \int_{-1}^1 x^3 dx = 0$$

$$\langle e_1|x^3 \rangle = \frac{\sqrt{6}}{2} \int_{-1}^1 x^4 dx = \frac{\sqrt{6}}{5}$$

$$\langle e_2|x^3 \rangle = \frac{3\sqrt{10}}{4} \int_{-1}^1 \left( x^5 - \frac{1}{3} x^3 \right) dx = 0$$

より  $x^3 - \langle e_0 | x^3 \rangle e_0 - \langle e_1 | x^3 \rangle e_1 - \langle e_2 | x^3 \rangle e_2 = x^3 - \frac{3}{5}x$  であり,

$$\left\| x^3 - \frac{3}{5}x \right\|^2 = \int_{-1}^1 \left( x^3 - \frac{3}{5}x \right)^2 dx = \frac{8}{175}$$

より  $e_3 = \frac{5\sqrt{14}}{4} \left( x^3 - \frac{3}{5}x \right)$ .

## 2. 要点 (3次元における Schrödinger 方程式)

3次元における Schrödinger 方程式は,  $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$  を用いて

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi$$

と表される. 正規化は  $\int |\Psi|^2 d^3\mathbf{r} = 1$  を満たすように行われる.

$V$  が時間独立であれば, Schrödinger 方程式の解  $\Psi$  は時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi$$

の解  $\psi_n, E_n$  によって  $\Psi = \sum_n c_n \psi_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$  と表される.

極座標  $(r, \theta, \varphi)$  で表したときに  $V$  が  $r$  のみの関数  $V(r)$  で表されるとする. 極座標において時間に依存しない Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) + V\psi = E\psi$$

となる (計算 1) から,  $\psi$  が  $r$  の関数  $R$  と  $\theta, \varphi$  の関数  $Y$  を用いて  $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$  と表されると仮定すると,

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V - E) = l(l+1)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} = -l(l+1)Y$$

( $l$  は定数) と分けられる.

### 3. 計算 1

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \sin \theta \cos \varphi \\ r \sin \theta \sin \varphi \\ r \cos \theta \end{pmatrix} \text{ より}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \theta} \\ \frac{\partial x}{\partial \varphi} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} & \frac{\partial z}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi & \sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \\ r \cos \theta \cos \varphi & r \cos \theta \sin \varphi & -r \sin \theta \\ -r \sin \theta \sin \varphi & r \sin \theta \cos \varphi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

であり, ここで

$$\begin{aligned} & \left\| \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi & \sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \\ r \cos \theta \cos \varphi & r \cos \theta \sin \varphi & -r \sin \theta \\ -r \sin \theta \sin \varphi & r \sin \theta \cos \varphi & 0 \end{pmatrix} \right\| \\ &= r^2 \sin^3 \theta \sin^2 \varphi + r^2 \sin^3 \theta \cos^2 \varphi + r^2 \sin \theta \cos^2 \theta \cos^2 \varphi + r^2 \sin \theta \cos^2 \theta \sin^2 \varphi \\ &= r^2 \sin \theta \end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi & \sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \\ r \cos \theta \cos \varphi & r \cos \theta \sin \varphi & -r \sin \theta \\ -r \sin \theta \sin \varphi & r \sin \theta \cos \varphi & 0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \begin{pmatrix} r^2 \sin^2 \theta \cos \varphi & r \sin \theta \cos \theta \cos \varphi & -r \sin \varphi \\ r^2 \sin^2 \theta \sin \varphi & r \sin \theta \cos \theta \sin \varphi & r \cos \varphi \\ r^2 \sin \theta \cos \theta & -r^2 \sin^2 \theta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi & \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} & -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \\ \sin \theta \sin \varphi & \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} & \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \\ \cos \theta & -\frac{\sin \theta}{r} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\
&= \left( \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 \\
&\quad + \left( \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 \\
&\quad + \left( \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 \\
&= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}
\end{aligned}$$

#### 4. 問題 4.3

$\psi = Ae^{-r/a}$  のとき  $\frac{\partial \psi}{\partial r} = -\frac{\psi}{a}$  であるから,

$$\begin{aligned}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) &= -\frac{1}{ar^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\psi) \\ &= -\frac{2}{ar}\psi + \frac{1}{a^2}\psi\end{aligned}$$

よって

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{2}{ar}\psi + \frac{1}{a^2}\psi\right) + V\psi = E\psi$$

$$\therefore \frac{\hbar^2}{mar} - \frac{\hbar^2}{2ma^2} + V = E$$

であるから

$$\begin{aligned}E &= \lim_{r \rightarrow \infty} \left( \frac{\hbar^2}{mar} - \frac{\hbar^2}{2ma^2} + V \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}V &= E - \frac{\hbar^2}{mar} + \frac{\hbar^2}{2ma^2} \\ &= -\frac{\hbar^2}{mar}\end{aligned}$$

$\psi = Ae^{-r^2/a^2}$  のとき  $\frac{\partial\psi}{\partial r} = -\frac{2r}{a^2}\psi$  であるから,

$$\begin{aligned}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) &= -\frac{2}{a^2r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^3\psi) \\ &= -\frac{6}{a^2}\psi + \frac{4r^2}{a^4}\psi\end{aligned}$$

よって

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{6}{a^2}\psi + \frac{4r^2}{a^4}\psi\right) + V\psi = E\psi$$

$$\therefore \frac{3\hbar^2}{ma^2} - \frac{2\hbar^2 r^2}{ma^4} + V = E$$

であるから  $V = \frac{2\hbar^2 r^2}{ma^4}$ ,  $E = \frac{3\hbar^2}{ma^2}$ .

## 第 14 章 2021/5/27

### 1. 要点（球面調和関数）

$Y(\theta, \varphi)$  の方程式

$$\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} = -l(l+1) \sin^2\theta Y$$

において  $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$  と分けると

$$\frac{1}{\Theta} \sin\theta \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -l(l+1) \sin^2\theta$$

となるから、定数  $m$  を用いて

$$\sin\theta \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + (l(l+1) \sin^2\theta - m^2) \Theta = 0$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2 \Phi$$

と書ける.

後者の解  $\Phi(\varphi) = e^{im\varphi}$  (指数の符号は  $m$  に、全体の係数は  $\Theta$  に吸収させた) において境界条件  $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$  より  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  が従う.

一方で、前者の解は、Legendre 多項式

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

を用いて定義される Legendre 陪関数

$$P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$$

を用いて  $\Theta(\theta) = AP_l^m(\cos \theta)$  と表される.

以上から球面調和関数

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta)$$

が得られる.

## 2. 問題 4.4

$$P_0^0(x) = P_0(x) = \frac{1}{2^0 \cdot 0!} (x^2 - 1)^0 = 1$$

より

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1 \cdot 0!}{4\pi 0!}} e^0 \cdot 1 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

一方

$$P_2(x) = \frac{1}{2^2 \cdot 2!} \frac{d^2}{dx^2} (x^2 - 1)^2 = \frac{3x^2 - 1}{2}$$

$$P_2^1(x) = -(1-x^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dx} P_2(x) = -3x\sqrt{1-x^2}$$

より

$$Y_2^1(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5 \cdot 1!}{4\pi \cdot 3!}} e^{i\varphi} (-3\sin \theta \cos \theta) = -\frac{3}{2} \sqrt{\frac{5}{6\pi}} e^{i\varphi} \sin \theta \cos \theta$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_0^0|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 1$$



$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_2^1|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi &= \frac{15}{8\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin^3 \theta \cos^2 \theta \, d\theta \\
&= \frac{15}{4} \int_0^\pi \sin \theta (\cos^2 \theta - \cos^4 \theta) \, d\theta \\
&= -\frac{15}{4} \left[ \frac{1}{3} \cos^3 \theta - \frac{1}{5} \cos^5 \theta \right]_0^\pi \\
&= -\frac{15}{4} \left( -\frac{2}{3} + \frac{2}{5} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_0^{0*} Y_2^1 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi &= (\text{const}) \int_0^{2\pi} e^{i\varphi} \, d\varphi \int_0^\pi \sin \theta \cos \theta \, d\theta \\
&= (\text{const}) (e^{2\pi i} - e^0) \int_0^\pi \sin \theta \cos \theta \, d\theta \\
&= 0
\end{aligned}$$

### 3. 問題 4.5

$l = m = 0$  とすると微分方程式は

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = 0$$

となるから,  $\sin \theta = 0$  となる点以外では  $\frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = 0$  が成り立つので  $\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta}$  は定数. よって  $\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} = A$  とおくと  $\frac{d\Theta}{d\theta} = \frac{A}{\sin \theta}$  であるから

$$\begin{aligned}
\Theta &= A \int \frac{d\theta}{\sin \theta} \\
&= A \log \left| \tan \frac{\theta}{2} \right| + C
\end{aligned}$$

( $C$  は定数).

## 第 15 章 2021/5/28

### 1. 問題 4.7

$$P_3(x) = \frac{1}{2^3 \cdot 3!} \frac{d^3}{dx^3} (x^2 - 1)^3 = \frac{5x^3 - 3x}{2}$$

$$P_3^2(x) = (1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} P_3(x) = 15x(1 - x^2)$$

より

$$Y_3^2(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{7}{4\pi} \cdot \frac{1}{5!}} e^{2i\varphi} P_3^2(\cos \theta) = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} e^{2i\varphi} \sin^2 \theta \cos \theta$$

$$\frac{\partial^2 Y_3^2}{\partial \varphi^2} = (2i)^2 Y_3^2 = -4 \sqrt{\frac{105}{32\pi}} e^{2i\varphi} \sin^2 \theta \cos \theta$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y_3^2}{\partial \theta} &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}} e^{2i\varphi} (2 \sin \theta \cos^2 \theta - \sin^3 \theta) \\ &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}} e^{2i\varphi} (2 \sin \theta - 3 \sin^3 \theta) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y_3^2}{\partial \theta} \right) &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}} e^{2i\varphi} \frac{d}{d\theta} (2 \sin^2 \theta - 3 \sin^4 \theta) \\ &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}} e^{2i\varphi} (4 \sin \theta \cos \theta - 12 \sin^3 \theta \cos \theta) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y_3^2}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y_3^2}{\partial \varphi^2} \\ &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}} e^{2i\varphi} (4 \sin^2 \theta \cos \theta - 12 \sin^4 \theta \cos \theta - 4 \sin^2 \theta \cos \theta) \\ &= -12 \sqrt{\frac{105}{32\pi}} e^{2i\varphi} \sin^4 \theta \cos \theta \\ &= -3 \cdot 4 \sin^2 \theta Y_3^2 \end{aligned}$$

一方

$$\begin{aligned}
P_l^l(x) &= (-1)^l (1-x^2)^{\frac{l}{2}} \frac{d^l}{dx^l} P_l(x) \\
&= (-1)^l (1-x^2)^{\frac{l}{2}} \frac{1}{2^l l!} \frac{d^{2l}}{dx^{2l}} (x^2-1)^l \\
&= (-1)^l (1-x^2)^{\frac{l}{2}} \frac{1}{2^l l!} (2l)! \\
&= \frac{(2l)!}{(-2)^l l!} (1-x^2)^{\frac{l}{2}}
\end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned}
Y_l^l(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{1}{(2l)!}} e^{il\varphi} P_l^l(\cos\theta) \\
&= \frac{1}{(-2)^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} e^{il\varphi} \sin^l \theta
\end{aligned}$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_l^l(\theta, \varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi = \frac{(2l+1)!}{4\pi \cdot 2^{2l} (l!)^2} \int_0^\pi \sin^{2l+1} \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 1$$

$$\frac{\partial^2 Y_l^l}{\partial \varphi^2} = (il)^2 Y_l^l = -l^2 Y_l^l$$

$$\frac{\partial Y_l^l}{\partial \theta} = \frac{1}{(-2)^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} e^{il\varphi} l \sin^{l-1} \theta \cos\theta = \frac{l Y_l^l \cos\theta}{\sin\theta}$$

$$\begin{aligned}
\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial Y_l^l}{\partial \theta} \right) &= l \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} (Y_l^l \cos\theta) \\
&= -l Y_l^l \sin^2 \theta + l^2 Y_l^l \cos^2 \theta
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial Y_l^l}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y_l^l}{\partial \varphi^2} &= -l Y_l^l \sin^2 \theta + l^2 Y_l^l \cos^2 \theta - l^2 Y_l^l \\
&= -l Y_l^l \sin^2 \theta - l^2 Y_l^l \sin^2 \theta \\
&= -l(l+1) Y_l^l \sin^2 \theta
\end{aligned}$$

## 第 16 章 2021/5/30

### 1. 要点

動径方向の方程式

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}(V - E)R = l(l+1)R$$

において、 $\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right)$  の部分が  $u(r) = rR(r)$  という置換によって  $r \frac{d^2 u}{dr^2}$  と書ける（計算 1）  
ことに着目すると、方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left(V + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}\right)u = Eu$$

と書き換えられる．これは遠心項  $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}$  を除けば 1 次元 Schrödinger 方程式と同じ形をしている．

電気素量を  $e$ ，真空の誘電率を  $\varepsilon_0$  とする．水素原子核にある 1 個の陽子を作る電位は，陽子からの距離を  $r$  とすると  $-\int \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r^2} dr = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r}$  であるから，距離  $r$  のところにある電子 1 個のもつ位置エネルギーは

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r}$$

である．これと電子の質量  $m = m_e$  を上の方程式に代入して

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left(-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2}\right)u = Eu$$

を得る．電子が束縛されている  $E < 0$  のときについてこれを解く．

定数  $-\frac{\hbar^2}{2m_e}$  と  $E$  を整理するために，両辺を  $E$  で割った後  $-\frac{\hbar^2}{2m_e E}$  を  $\frac{1}{\kappa^2}$  とする（すなわち  $\kappa = \frac{\sqrt{-2m_e E}}{\hbar}$  とおく）．

$$\frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left( \frac{m_e e^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa^2 r} - \frac{1}{\kappa^2} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u = u$$

さらに  $\kappa r = \rho$  とおくと  $\frac{d}{dr} = \kappa \frac{d}{d\rho}$  より  $\frac{d^2 u}{dr^2} = \kappa^2 \frac{d^2 u}{d\rho^2}$  だから

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left( \frac{m_e e^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa \rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u = u$$

最後に定数  $\frac{m_e e^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa}$  を  $\rho_0$  において整理すると

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left( 1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u$$

ここで,  $u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho)$  とおくと, 方程式は

$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + (\rho_0 - 2(l+1))v = 0$$

と書ける (計算 2).

$v$  が  $\rho$  の  $N$  次多項式であると仮定し, 最高次の係数を  $c_N$  とする. すると, 方程式中の  $\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2}$  と  $2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho}$  はそれぞれ  $\rho$  の  $N-1$  次多項式と  $N$  次多項式であるから, 両辺の  $N$  次の係数を比較して

$$-2Nc_N + (\rho_0 - 2(l+1))c_N = 0$$

$$\therefore \rho_0 = 2(N+l+1)$$

$N+l+1=n$  とおくと,  $\rho_0$  は整数  $n$  を用いて  $\rho_0 = 2n$  と表せることが分かる.  $\rho_0 = \frac{m_e e^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa}$ ,

$\kappa = \frac{\sqrt{-2m_e E}}{\hbar}$  より  $E = -\frac{m_e e^4}{8\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 \rho_0^2}$  であるから,

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$$

## 2. 計算 1

$$R = \frac{u}{r} \text{ より}$$

$$\begin{aligned}\frac{dR}{dr} &= \frac{d}{dr} \frac{u}{r} \\ &= \frac{1}{r} \frac{du}{dr} - \frac{u}{r^2}\end{aligned}$$

よって  $r^2 \frac{dR}{dr} = r \frac{du}{dr} - u$  であるから

$$\begin{aligned}\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) &= r \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{du}{dr} - \frac{du}{dr} \\ &= r \frac{d^2 u}{dr^2}\end{aligned}$$

## 3. 計算 2

ライプニッツの公式（っていうとなんだかかっこよく聞こえるね）より

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \rho^{l+1} e^{-\rho} \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2 \frac{d}{d\rho} (\rho^{l+1} e^{-\rho}) \cdot \frac{dv}{d\rho} + \frac{d^2}{d\rho^2} (\rho^{l+1} e^{-\rho}) \cdot v$$

ここで

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\rho} (\rho^{l+1} e^{-\rho}) &= (l+1) \rho^l e^{-\rho} - \rho^{l+1} e^{-\rho} \\ &= \left( \frac{l+1}{\rho} - 1 \right) \rho^{l+1} e^{-\rho}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{d\rho^2} (\rho^{l+1} e^{-\rho}) &= \left( \frac{l+1}{\rho} - 1 \right) \frac{d}{d\rho} (\rho^{l+1} e^{-\rho}) - \frac{l+1}{\rho^2} \rho^{l+1} e^{-\rho} \\ &= \left( \left( \frac{l+1}{\rho} - 1 \right)^2 - \frac{l+1}{\rho^2} \right) \rho^{l+1} e^{-\rho} \\ &= \left( 1 - \frac{2(l+1)}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \rho^{l+1} e^{-\rho}\end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned}\frac{d^2 u}{d\rho^2} &= \rho^{l+1} e^{-\rho} \frac{d^2 v}{d\rho^2} \\ &\quad + 2\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right) \rho^{l+1} e^{-\rho} \frac{dv}{d\rho} \\ &\quad + \left(1 - \frac{2(l+1)}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) \rho^{l+1} e^{-\rho} v \\ &= \rho^{l+1} e^{-\rho} \left( \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right) \frac{dv}{d\rho} + \left(1 - \frac{2(l+1)}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) v \right)\end{aligned}$$

よって方程式は

$$\frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right) \frac{dv}{d\rho} + \left(\cancel{\rho} - \frac{2(l+1)}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\cancel{\rho^2}}\right) v = \left(\cancel{\rho} - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\cancel{\rho^2}}\right) v$$

整理して

$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + (\rho_0 - 2(l+1))v = 0$$