

# 量子力学ノート

とか

## 1. 2021/4/21

### 1.1. 要点

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

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

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．

## 1.2. 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．

### 1.3. 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．

## 1.4. 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。

## 2. 2021/4/22

### 2.1. 問題 1.9

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

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

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

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

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

## 2.2. 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

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

## 2.3. 要点

$t$  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

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = E$$

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

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。

### 3. 2021/4/23

#### 3.1. 要点

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

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。

## 3.2. 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。

$|\psi|^2 = A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$  を  $0 \leq x \leq a$  で積分すると

$$\begin{aligned} A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx &= A^2 \int_0^a \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2} dx \\ &= A^2 \left[ \frac{1}{2}x - \frac{a}{4n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right]_0^a \\ &= A^2 \cdot \frac{a}{2} \end{aligned}$$

より、 $\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1$  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.

### 3.3. 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。

## 4. 2021/4/25

### 4.1. 問題 2.1

#### 4.1.1. (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。

#### 4.1.2. (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.

### 4.1.3. (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.

## 4.2. 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）．

### 4.3. 要点

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.

## 4.4. 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,

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

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

## 4.5. 計算 2

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

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



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

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

## 5. 2021/4/26

### 5.1. 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.

## 5.2. 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

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

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