

量子力学ノート

とが

目次

第 1 章 2021/4/21	3
1. 要点 (1 次元 Schrödinger 方程式)	3
2. 計算 1	4
3. 計算 2	5
4. 計算 3	6
第 2 章 2021/4/22	6
1. 問題 1.9	6
2. 問題 1.15	8
3. 要点 (時間に依存しない Schrödinger 方程式)	8
第 3 章 2021/4/23	9
1. 要点 (1 次元井戸型ポテンシャル)	9
2. 計算 1	10
3. 問題 2.4	11
第 4 章 2021/4/25	13
1. 問題 2.1	13
1.1. (a)	13

1.2. (b)	13
1.3. (c)	14
2. 問題 2.2	15
3. 要点 (1 次元調和振動子)	15
4. 計算 1	16
5. 計算 2	17
第 5 章 2021/4/26	18
1. 問題 2.10	18
2. 問題 2.11	20
第 6 章 2021/5/10	23
1. 問題 1.7	23
2. 要点 (1 次元調和振動子つづき)	24
3. 計算 1	26
4. 計算 2	26
第 7 章 2021/5/12	27
1. 要点 (ヒルベルト空間)	27
2. 問題 3.1	27
3. 計算 1	28
第 8 章 2021/5/15	28
1. 要点 (エルミート作用素)	28
2. 計算 1	29
3. 計算 2	30
4. 計算 3	30

5. 計算 4	30
第 9 章 2021/05/17	31
1. 要点 (運動量表示)	31
2. 問題 3.11	33

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, Ψ 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 Ψ 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).

Ψ 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 Ψ 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 Ψ' 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 Ψ^* は Ψ 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 σ_x, σ_p とすると,

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

が成り立つ.

2. 計算 1

Ψ 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

$\Psi(x, t) = A e^{-a((mx^2/\hbar)+it)}$ 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.

Ψ 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, $\langle x \rangle = 0$, $\sigma_x = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}}$, $\langle x^2 \rangle = \sigma_x^2 = \frac{\hbar}{4am}$.

$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = (\text{const})x\Psi$ 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 φ , 右辺は ψ 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 Ψ 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 Ψ 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 ψ 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 ψ 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 ψ 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、 ψ は正規化された実数値関数解 ψ_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、 ψ は正規化可能な 2 つの実数値関数解 ψ_R, ψ_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、 ψ は正規化された実数値関数解 ψ_I の i 倍に等しい。

いずれの場合も ψ 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， ψ 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． ψ 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， ψ' の単調性より $\psi'(x) \geq \psi'(x_0) \geq 0$ ．よって ψ 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 ψ' の単調性， ψ の単調性より $\psi(x) \geq \psi(x_0)$ となり， ψ 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 ψ 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， ψ 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プ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 (ψ, 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 ψ 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

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

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

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

ψ_0, ψ_2 は偶関数, ψ_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 ψ_0, ψ_1, ψ_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 $\langle x \rangle = 0$, $\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$.

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

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

ψ_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

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

ψ_0 については $\sigma_x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$, $\sigma_p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}$ より $\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2}$. ψ_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, ψ_0 については

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

ψ_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 ψ_{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 ψ_{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 ∞ 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:

- $(\hat{Q} + \hat{R})^\dagger = \hat{Q}^\dagger + \hat{R}^\dagger$
- α 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 Ψ 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 Ψ 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、 Ψ 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

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

より $\frac{d^\dagger}{dx} = -\frac{d}{dx}$ 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

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

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

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 Ψ_1, Ψ_2 とすると,

$$\begin{aligned}\langle \Psi_1 | \hat{Q} \Psi_2 \rangle &= q_2 \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle \\ \langle \hat{Q} \Psi_1 | \Psi_2 \rangle &= q_1 \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle\end{aligned}$$

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, 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. 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 $\frac{1}{2}mv^2 \leq \frac{1}{2}\hbar\omega$ 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)。