

量子力学ノート

とが

目次

第 1 章 2021/4/21	5
1. 要点 (1 次元 Schrödinger 方程式)	5
2. 計算 1	6
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	10
3. 要点 (時間に依存しない Schrödinger 方程式)	10
第 3 章 2021/4/23	11
1. 要点 (1 次元井戸型ポテンシャル)	11
2. 計算 1	12
3. 問題 2.4	13
第 4 章 2021/4/25	15
1. 問題 2.1	15
1.1. (a)	15

1.2. (b)	15
1.3. (c)	16
2. 問題 2.2	17
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（ボーアの式）	52
2. 計算 1	54
3. 計算 2	54
第 17 章 2021/5/31	55
1. 問題 4.12	55
第 18 章 2021/6/1	57
1. 問題 4.13	57
1.1. (a)	58
1.2. (b)	59
第 19 章 2021/6/2	60
1. 問題 4.14	60
1.1. (a)	60
1.2. (b)	61
1.3. (c)	62
2. 問題 4.15	62
2.1. (a)	62
2.2. (b)	63
2.3. (c)	63

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

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

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

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

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

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

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

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 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

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

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

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

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 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 (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

Φ 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, Ψ 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

Φ 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 Ψ_1, Ψ_2 とその運動量表示 Φ_1, Φ_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

$\hat{P} = |\alpha\rangle\langle\alpha|$ (α 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

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

であり, \hat{Q} のエルミート共役性より

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

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 Ψ 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 ψ_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, θ, φ) 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, ψ が r の関数 R と θ, φ 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 Θ 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 (ボーアの式)

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 ε_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 ρ_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 ρ 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 ρ 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, ρ_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

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

第 17 章 2021/5/31

1. 問題 4.12

$n = 3, l = 0$ のときの方程式

$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + 4v = 0$$

の解を $v(\rho) = c_0 + c_1 \rho + c_2 \rho^2$ とおくと,

$$\frac{dv}{d\rho} = c_1 + 2c_2 \rho$$

$$\frac{d^2 v}{d\rho^2} = 2c_2$$

より方程式は

$$2c_2\rho + 2(1-\rho)(c_1 + 2c_2\rho) + 4(c_0 + c_1\rho + c_2\rho^2) = 0$$

$$\therefore 4c_0 + 2c_1 + (2c_1 + 6c_2)\rho = 0$$

係数を比較して

$$4c_0 + 2c_1 = 0$$

$$2c_1 + 6c_2 = 0$$

よって $c_1 = -2c_0$, $c_2 = \frac{2}{3}c_0$ だから

$$v(\rho) = c_0 \left(1 - 2\rho + \frac{2}{3}\rho^2 \right)$$

$$\rho = \frac{r}{an} = \frac{r}{3a} \text{ より}$$

$$u(r) = \frac{r}{3a} e^{-\frac{r}{3a}} v\left(\frac{r}{3a}\right) = (\text{const}) r e^{-\frac{r}{3a}} \left(1 - \frac{2r}{3a} + \frac{2r^2}{27a^2} \right)$$

$$R_{30}(r) = \frac{u(r)}{r} = (\text{const}) e^{-\frac{r}{3a}} \left(1 - \frac{2r}{3a} + \frac{2r^2}{27a^2} \right)$$

$n = 3$, $l = 1$ のときの方程式

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

の解を $v(\rho) = c_0 + c_1\rho$ とおくと,

$$\frac{dv}{d\rho} = c_1$$

$$\frac{d^2 v}{d\rho^2} = 0$$

より方程式は

$$2(2 - \rho)c_1 + 2(c_0 + c_1\rho) = 0$$

$$\therefore 4c_1 + 2c_0 = 0$$

よって $c_1 = -\frac{1}{2}c_0$ であるから

$$v(\rho) = c_0\left(1 - \frac{1}{2}\rho\right)$$

$$u(r) = \left(\frac{r}{3a}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a}} v\left(\frac{r}{3a}\right) = (\text{const}) r^2 e^{-\frac{r}{3a}} \left(1 - \frac{r}{6a}\right)$$

$$R_{31}(r) = \frac{u(r)}{r} = (\text{const}) r e^{-\frac{r}{3a}} \left(1 - \frac{r}{6a}\right)$$

$n = 3, l = 2$ のとき

$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(3 - \rho) \frac{dv}{d\rho} = 0$$

より v は定数関数 $v(\rho) = c_0$ であるから

$$u(r) = \left(\frac{r}{3a}\right)^3 e^{-\frac{r}{3a}} c_0 = (\text{const}) r^3 e^{-\frac{r}{3a}}$$

$$R_{32}(r) = \frac{u(r)}{r} = (\text{const}) r^2 e^{-\frac{r}{3a}}$$

第 18 章 2021/6/1

1. 問題 4.13

ガンマ関数の定義

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt$$

において $t = \frac{r}{a}$ と置換すると

$$\Gamma(x) = \frac{1}{a} \int_0^\infty \left(\frac{r}{a}\right)^{x-1} e^{-\frac{r}{a}} dr$$

よって $x - 1 = n$ として公式

$$\int_0^\infty r^n e^{-\frac{r}{a}} dr = n! a^{n+1}$$

を得る.

1.1. (a)

$n = 2, l = 0$ としたときの方程式

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

において $v = c_0 + c_1 \rho$ とおくと $c_1 = -c_0$ より $v = c_0(1 - \rho)$ なので

$$u = c_0 \frac{r}{2a} e^{-\frac{r}{2a}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right)$$

$$R_{20}(r) = \frac{c_0}{2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}$$

(4.82 式). 規格化は $\int_0^\infty |R_{20}(r)|^2 r^2 dr = 1$ にすればよいから,

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \left(1 - \frac{r}{2a}\right)^2 e^{-\frac{r}{a}} r^2 dr &= \int_0^\infty \left(r^2 - \frac{r^3}{a} + \frac{r^4}{4a^2}\right) e^{-\frac{r}{a}} dr \\ &= 2!a^3 - \frac{3!a^4}{a} + \frac{4!a^5}{4a^2} \\ &= 2a^3 \end{aligned}$$

より

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$\begin{aligned}\psi_{200}(r) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{20}(r) \\ &= \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}\end{aligned}$$

1.2. (b)

$n = 2$, $l = 0$ のとき v は定数関数 $v(r) = c_0$ であるから

$$u = c_0 \left(\frac{r}{2a}\right)^2 e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$R_{21}(r) = \frac{c_0}{4a^2} r e^{-\frac{r}{2a}}$$

積分は

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \left(r e^{-\frac{r}{2a}}\right)^2 r^2 dr &= \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{r}{a}} dr \\ &= 24a^5\end{aligned}$$

となるから

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24a^5}} r e^{-\frac{r}{2a}}$$

一方で,

$$\begin{aligned}P_1(x) &= \frac{1}{2 \cdot 1} \frac{d}{dx} (x^2 - 1) \\ &= x\end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned}P_1^1(x) &= -\sqrt{1-x^2} \frac{d}{dx} P_1(x) \\ &= -\sqrt{1-x^2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_1^{-1}(x) &= -\frac{0!}{2!}P_1^1(x) \\
 &= \frac{1}{2}\sqrt{1-x^2}
 \end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned}
 Y_1^1(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi} \frac{0!}{2!}} e^{i\varphi} (-\sin \theta) &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \theta \\
 Y_1^0(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi} \frac{1!}{1!}} \cos \theta &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\
 Y_1^{-1}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi} \frac{2!}{0!}} e^{-i\varphi} \cdot \frac{1}{2} \sin \theta &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \sin \theta
 \end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
 \psi_{211}(r, \theta, \varphi) &= R_{21}(r) Y_1^1(\theta, \varphi) \\
 &= -\sqrt{\frac{1}{64\pi a^5}} r e^{i\varphi - \frac{r}{2a}} \sin \theta
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \psi_{210}(r, \theta, \varphi) &= R_{21}(r) Y_1^0(\theta, \varphi) \\
 &= \sqrt{\frac{1}{32\pi a^5}} r e^{-\frac{r}{2a}} \cos \theta
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \psi_{21-1}(r, \theta, \varphi) &= R_{21}(r) Y_1^{-1}(\theta, \varphi) \\
 &= \sqrt{\frac{1}{64\pi a^5}} r e^{-i\varphi - \frac{r}{2a}} \sin \theta
 \end{aligned}$$

第 19 章 2021/6/2

1. 問題 4.14

1.1. (a)

$$\begin{aligned}
 L_0(x) &= \frac{e^x}{0!} \cdot e^{-x} \\
 &= 1
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_1(x) &= \frac{e^x}{1!} \frac{d}{dx} (xe^{-x}) \\
&= e^x \cdot (1 - x)e^{-x} \\
&= 1 - x
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_2(x) &= \frac{e^x}{2!} \frac{d^2}{dx^2} (x^2 e^{-x}) \\
&= \frac{e^x}{2} (2 - 2 \cdot 2x + x^2) e^{-x} \\
&= 1 - 2x + \frac{1}{2}x^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_3(x) &= \frac{e^x}{3!} \frac{d^3}{dx^3} (x^3 e^{-x}) \\
&= \frac{e^x}{6} (6 - 3 \cdot 6x + 3 \cdot 3x^2 - x^3) e^{-x} \\
&= 1 - 3x + \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{6}x^3
\end{aligned}$$

1.2. (b)

$$L_7(x) = \frac{1}{0!} - \frac{7}{1!}x + \frac{21}{2!}x^2 - \frac{35}{3!}x^3 + \frac{35}{4!}x^4 - \frac{21}{5!}x^5 + \frac{7}{6!}x^6 - \frac{1}{7!}x^7$$

$$\begin{aligned}
L_2^5(x) &= -\frac{d^5}{dx^5} L_7(x) \\
&= -\frac{d^5}{dx^5} \left(-\frac{21}{5!}x^5 + \frac{7}{6!}x^6 - \frac{1}{7!}x^7 \right) \\
&= \frac{21}{0!} - \frac{7}{1!}x + \frac{1}{2!}x^2 \\
&= 21 - 7x + \frac{1}{2}x^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
v(\rho) &= L_2^5(2\rho) \\
&= 21 - 14\rho + 2\rho^2
\end{aligned}$$

1.3. (c)

$n = 5, l = 2$ のときの方程式

$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(3 - \rho) \frac{dv}{d\rho} + 4v = 0$$

において $v = c_0 + c_1 \rho + c_2 \rho^2$ とすると

$$2c_2 \rho + 2(3 - \rho)(c_1 + 2c_2 \rho) + 4(c_0 + c_1 \rho + c_2 \rho^2) = 0$$

$$(14c_2 + 2c_1)\rho + 6c_1 + 4c_0 = 0$$

よって $c_1 = -\frac{2}{3}c_0, c_2 = \frac{2}{21}c_0$ であるから

$$v(\rho) = c_0 \left(1 - \frac{2}{3}\rho + \frac{2}{21}\rho^2 \right)$$

$c_0 = 21$ とすれば (b) と一致する.

2. 問題 4.15

2.1. (a)

$$\psi_{100}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}} \text{ より}$$

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} r |\psi_{100}|^2 d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty r^3 e^{-\frac{2r}{a}} dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= \frac{1}{\pi a^3} \cdot \frac{3}{8} a^4 \cdot 2 \cdot 2\pi \\ &= \frac{3}{2} a \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle r^2 \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} r^2 |\psi_{100}|^2 d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{2r}{a}} dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\
&= \frac{1}{\pi a^3} \cdot \frac{3}{4} a^5 \cdot 2 \cdot 2\pi \\
&= 3a^2
\end{aligned}$$

2.2. (b)

ψ_{100} は球対称なので,

$$\langle x \rangle = 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle$$

また $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$ より $\langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle = \langle r^2 \rangle$ であるから,

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle = a^2$$

2.3. (c)

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} a^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$Y_1^1(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

より

$$\psi_{211}(r, \theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{1}{64\pi}} a^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{2a} + i\varphi} \sin \theta$$

であるから

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} x^2 |\psi_{211}|^2 d\mathbf{r} \\
&= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty (r \sin \theta \cos \varphi)^2 \cdot \frac{r^2}{64\pi a^5} e^{-\frac{r}{a}} \sin^2 \theta \cdot r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \\
&= \frac{1}{64\pi a^5} \int_0^\infty r^6 e^{-\frac{r}{a}} dr \int_0^\pi \sin^5 \theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi d\varphi \\
&= \frac{1}{64\pi a^5} \cdot 6! \cdot a^7 \cdot \frac{16}{15} \cdot \pi \\
&= 12a^2
\end{aligned}$$