

量子力学ノート

とか

1. 2021/4/21

1.1. 要点

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

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

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

暗黙の了解として, 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．

1.2. 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．

1.3. 計算 2

Schrödinger 方程式を変形すると

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

となり，両辺の複素共役をとると

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

となる．これより

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

である．ここで

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

に注意すると，

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

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

1.4. 計算 3

計算 2 の途中式を流用すると

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

となり、部分積分により

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

となる。ここで部分積分

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

に着目すると

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

が得られる。

2. 2021/4/22

2.1. 問題 1.9

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

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

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

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

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

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

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

2.2. 問題 1.15

Schrödinger 方程式より

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

よって

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

2.3. 要点

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

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

となり, 両辺を $\psi \varphi$ で割って

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

とすると左辺は 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。

3. 2021/4/23

3.1. 要点

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

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

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

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

が得られる（計算 1）。

波動関数 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。

3.2. 計算 1

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

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

と表せるので、一般解は

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

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

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

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

3.3. 問題 2.4

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

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

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

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

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

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

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

4. 2021/4/25

4.1. 問題 2.1

4.1.1. (a)

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

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

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

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

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

4.1.2. (b)

時間に依存しない Schrödinger 方程式について, 任意の解 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。

4.1.3. (c)

時間に依存しない Schrödinger 方程式

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

において $V(x) = V(-x)$ なら

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

よって

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

より $\psi(x) + \psi(-x)$ と $\psi(x) - \psi(-x)$ はともに解である。前者は偶関数、後者は奇関数であるから、 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。

4.2. 問題 2.2

任意の x について $V(x) \geq E$ が成り立つと仮定する。

時間に依存しない Schrödinger 方程式を変形すると

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

となる。ここである x_0 が存在して $\psi(x_0) > 0$ であると仮定する。 $\psi'(x_0) \geq 0$ の場合、集合 $A = \{x \geq x_0 \mid \psi(x) \leq 0\}$ が空でないと仮定し、その下限を x_1 とおく。 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）。

4.3. 要点

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

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

を解く。

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

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

と書き換えられる. ここで \hat{a}_-, \hat{a}_+ を

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

と定義すると, 方程式はさらに

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

と書き換えられる (計算 1).

ある組 (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.

4.4. 計算 1

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

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

で定義すると

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

より $[x, \hat{p}] = i\hbar$ なので,

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

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

4.5. 計算 2

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

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

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

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

5. 2021/4/26

5.1. 問題 2.10

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

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

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

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.

5.2. 問題 2.11

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

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

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