

量子力学ノート

とが

目次

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

1.2. (b)	14
1.3. (c)	15
2. 問題 2.2	16
3. 要点 (1 次元調和振動子)	16
4. 計算 1	17
5. 計算 2	18
第 5 章 2021/4/26	19
1. 問題 2.10	19
2. 問題 2.11	21
第 6 章 2021/5/10	24
1. 問題 1.7	24
2. 要点 (1 次元調和振動子つづき)	25
3. 計算 1	27
4. 計算 2	27
第 7 章 2021/5/12	28
1. 要点 (ヒルベルト空間)	28
2. 問題 3.1	28
3. 計算 1	29
第 8 章 2021/5/15	29
1. 要点 (エルミート作用素)	29
2. 計算 1	30
3. 計算 2	31
4. 計算 3	31

5. 計算 4	31
第 9 章 2021/05/17	32
1. 要点 (運動量表示)	32
2. 計算 1	34
3. 問題 3.11	34
第 10 章 2021/5/18	35
1. 問題 3.12	35
2. 要点 (不確定性原理)	36
第 11 章 2021/5/19	37
1. 問題 3.13	37
第 12 章 2021/05/25	38
1. 要点	38
2. 計算 1	39
3. 問題 3.23	39
4. 問題 3.24	40
第 13 章 2021/5/26	41
1. 問題 3.31	41

第 1 章 2021/4/21

1. 要点 (1 次元 Schrödinger 方程式)

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

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

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

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

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

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

ある解 Ψ があったときに, 定数をかけて

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

を満たす解 Ψ' を見つける操作を, 正規化という。

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

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

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

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

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

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

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

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

と書ける.

座標 x と運動量 p の標準偏差をそれぞれ σ_x , σ_p とすると,

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

が成り立つ.

2. 計算 1

Ψ が Schrödinger 方程式を満たすとする. A を定数とすると

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

より $A\Psi$ も Schrödinger 方程式を満たす.

3. 計算 2

Schrödinger 方程式を変形すると

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

となり, 両辺の複素共役をとると

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

となる. これより

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

である。ここで

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

に注意すると,

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

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

4. 計算 3

計算 2 の途中式を流用すると

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

となり, 部分積分により

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

となる．ここで部分積分

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

に着目すると

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

が得られる．

第 2 章 2021/4/22

1. 問題 1.9

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

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

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

Ψ を微分すると

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

となるので, Schrödinger 方程式より

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

V について解いて $V(x) = 2a^2mx^2$.

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

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

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

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

2. 問題 1.15

Schrödinger 方程式より

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

よって

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

3. 要点（時間に依存しない Schrödinger 方程式）

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

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

となり, 両辺を $\psi \varphi$ で割って

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

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

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

よって, 時間に依存しない Schrödinger 方程式

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

を解けば、そこに $i\hbar \frac{d\varphi}{dt} = E\varphi$ の解である $\varphi = Ae^{-iEt/\hbar}$ をかけることで 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 $\psi(x) = 0$ に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、

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

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

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)。

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

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

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

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

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

第 9 章 2021/05/17

1. 要点 (運動量表示)

関数 $f(x)$ のフーリエ変換を

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

で定義すると, その逆変換は

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

である. ここで $f(x) = \delta(x)$ とすると

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

であるから, 逆フーリエ変換より

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

を得る.

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

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

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

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

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

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

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

で定義すると

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

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

2. 計算 1

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

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

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

であり, \hat{Q} のエルミート共役性より

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

であるから,

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

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

第 13 章 2021/5/26

1. 問題 3.31

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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