量子力学ノート

とが

目次

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 $\mathit{\Psi}\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{C}$ は Schrödinger 方程式

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

を満たす．ただし $V\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ 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，$\mathit{\Psi}$ とその n 次導関数は $x \to \pm\infty$ で 0 に収束するものとする．

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

$\varPsi$ が Schrödinger 方程式を満たすとき，$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\left|\varPsi(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x$ は t に依存しない（計算 2）.

ある解 $\varPsi$ があったときに，定数をかけて

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\varPsi'(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x = 1$$

を満たす解 $\varPsi'$ を見つける操作を，正規化という.

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

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x\left|\varPsi(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \varPsi^*[x]\varPsi \mathrm{d}x\end{aligned}$$

（ただし $\varPsi^*$ は $\varPsi$ 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

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\varPsi^*\frac{\partial\varPsi}{\partial x}\mathrm{d}x$$

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

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

となる. $\langle x\rangle$ の定義中の x，および $\langle p\rangle$ の定義中の $-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ 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

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

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

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

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

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

である．ここで

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

に注意すると，

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

を得るので，$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2\mathrm{d}x$ 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

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

となり，部分積分により

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

となる．ここで部分積分

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

に着目すると

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

が得られる．

第 2 章　2021/4/22

1．問題 1.9

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

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

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

Ψ を微分すると

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

となるので，Schrödinger 方程式より

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

Vについて解いて $V(x) = 2a^2mx^2$.

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

$-i\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial x} = (\mathrm{const})x\Psi$ より，$\langle p\rangle = (\mathrm{const})\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^* x\Psi\,\mathrm{d}x = 0$.

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

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

2. 問題 1.15

Schrödinger 方程式より

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

よって

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

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，$\dfrac{\partial\Psi}{\partial t} = \psi\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}$, $\dfrac{\partial^2\Psi}{\partial x} = \dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\varphi$ より Schrödinger 方程式は

$$
i\hbar\psi\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\varphi + V\psi\varphi
$$

となり，両辺を $\psi\varphi$ で割って

$$
i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V
$$

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

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

よって，時間に依存しない Schrödinger 方程式

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

を解けば，そこに $i\hbar\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = E\varphi$ 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 $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi$ 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

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$$

が得られる．

2. 計算 1

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

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

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．

$\int_0^{\frac{a}{2\pi}}\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x = \int_0^{\frac{a}{2\pi}}\cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x$ より $\int_0^{a}\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x = n\int_0^{\frac{a}{2\pi}}\mathrm{d}x = \frac{a}{2}$ であるから，

$$\begin{aligned}\int_0^a |\psi|^2\mathrm{d}x &= A^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x \\ &= A^2\cdot\frac{a}{2}\end{aligned}$$

よって $\int_0^a |\psi(x)|^2\mathrm{d}x = 1$ 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

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

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

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

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

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

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

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，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\Psi(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x = \left|\varphi(t)\right|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi(x)\right|^2 \mathrm{d}x$$

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

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

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，

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

の両辺の複素共役をとると

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

よって

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\frac{\psi+\psi^*}{2} + V\frac{\psi+\psi^*}{2} &= E\frac{\psi+\psi^*}{2} \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\frac{\psi-\psi^*}{2i} + V\frac{\psi-\psi^*}{2i} &= E\frac{\psi-\psi^*}{2i}
\end{aligned}$$

より $\psi_R = \dfrac{\psi + \psi^*}{2}$ と $\psi_I = \dfrac{\psi - \psi^*}{2i}$ 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，$\lim\limits_{x\to\pm\infty} \psi = 0$ より $\lim\limits_{x\to\pm\infty} \psi_R = \lim\limits_{x\to\pm\infty} \psi_I = 0$ であり，また

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi_R\right|^2 \mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi_I\right|^2 \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi\right|^2 \mathrm{d}x = 1$$

である．一方 $\left|\psi_R\right|^2$，$\left|\psi_I\right|^2$ は常に 0 以上なので $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi_R\right|^2 \mathrm{d}x \geq 0$，$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi_I\right|^2 \mathrm{d}x \geq 0$.

- $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi_R\right|^2 \mathrm{d}x = 1$，$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi_I\right|^2 \mathrm{d}x = 0$ のとき，ψ は正規化された実数値関数解 ψ_R に等しい．
- $0 < \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi_R\right|^2 \mathrm{d}x < 1$，$0 < \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi_I\right|^2 \mathrm{d}x < 1$ 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．
- $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi_R\right|^2 \mathrm{d}x = 0$，$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi_I\right|^2 \mathrm{d}x = 1$ 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

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

において $V(x) = V(-x)$ なら

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

よって

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

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

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

となる．ここである x_0 が存在して $\psi\big(x_0\big) > 0$ であると仮定する．$\psi'\big(x_0\big) \geq 0$ の場合，集合 $A = \big\{x \geq x_0 \bigm| \psi(x) \leq 0\big\}$ 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 $\psi'(x) \geq \psi'\big(x_0\big) \geq 0$．よって ψ の単調性より $\psi\big(x_1\big) \geq \psi\big(x_0\big) > 0$ 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 $\psi(x) \geq \psi\big(x_0\big)$ となり，ψ は正規化不可能である．同様に $\psi'\big(x_0\big) \leq 0$ の場合 $x \leq x_0$ の範囲で $\psi(x) \geq \psi\big(x_0\big)$ となるため ψ は正規化不可能である．よって $\psi\big(x_0\big) > 0$ となる x_0 は存在しない．同様に $\psi\big(x_0\big) < 0$ 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 $V(x) = -\displaystyle\int\big(-m\omega^2 x\big)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ である．この V について時間に依存しない Schrödinger 方程式

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

を解く．

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

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

と書き換えられる．ここで $\hat{a}_-, \hat{a}_+$ を

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

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 $\left(\psi, E\right)$ がこの方程式の解ならば，組 $\left(\hat{a}_+\psi, E+\hbar\omega\right)$ と組 $\left(\hat{a}_-\psi, E-\hbar\omega\right)$ 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 $\left(\hat{a}_-\psi, E-\hbar\omega\right)$ 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

$$\left(i\hat{p} + m\omega x\right)\psi = 0$$

を解いて $\psi = \left(\dfrac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$． 対応する E を計算すると $\dfrac{1}{2}\hbar\omega$ 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 $E_n = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$ と表せる.

4. 計算 1

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

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

で定義すると

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

より $\left[x,\hat{p}\right]=i\hbar$ なので，

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

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

5. 計算 2

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

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

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

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

第 5 章　2021/4/26

1. 問題 2.10

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

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

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

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

$$
\int_{-\infty}^{\infty}{\psi_0}^*\psi_1\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty}{\psi_1}^*\psi_2\,\mathrm{d}x = 0
$$

一方

$$
\begin{aligned}
\int \left(2m\omega x^2 - \hbar\right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \mathrm{d}x &= 2m\omega \int x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \mathrm{d}x - \hbar \int e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \mathrm{d}x \\
&= -\hbar x e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} + \hbar \int e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \mathrm{d}x - \hbar \int e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \mathrm{d}x \\
&= -\hbar x e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} + (\mathrm{const})
\end{aligned}
$$

より

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} {\psi_0}^*(x) \psi_2(x) \mathrm{d}x &= (\mathrm{const}) \int_{-\infty}^{\infty} \left(2m\omega x^2 - \hbar\right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \mathrm{d}x \\
&= (\mathrm{const}) \left[x e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \right]_{-\infty}^{\infty} \\
&= 0
\end{aligned}
$$

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

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

ψ_0 は偶関数なので $\frac{\mathrm{d}\psi_0}{\mathrm{d}x}$ は奇関数．よって $\psi_0 \frac{\mathrm{d}\psi_0}{\mathrm{d}x}$ は奇関数なので

$$
\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} {\psi_0}^* \left(-i\hbar \frac{\mathrm{d}\psi_0}{\mathrm{d}x}\right) \mathrm{d}x \\
&= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0 \frac{\mathrm{d}\psi_0}{\mathrm{d}x} \mathrm{d}x \\
&= 0
\end{aligned}
$$

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

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

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

$\left|\psi_1\right|^2 = \dfrac{2m\omega}{\hbar}\sqrt{\dfrac{m\omega}{\pi\hbar}}x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$ は偶関数なので $\langle x\rangle = \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}x\left|\psi_1\right|^2\mathrm{d}x = 0$．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

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

ψ_1 は奇関数なので $\dfrac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}$ は偶関数．よって $\psi_1\dfrac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}$ は奇関数なので

$$\begin{aligned}\langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1{}^*\left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}\right)\mathrm{d}x\\ &= -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1\frac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x\\ &= 0\end{aligned}$$

また

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2} &= \frac{m\omega}{\hbar}\frac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}\xi^2}\\ &= \frac{\sqrt{2}\,m\omega\alpha}{\hbar}\left(\xi^3-3\xi\right)e^{-\frac{\xi^2}{2}}\end{aligned}$$

より

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

ψ_0 については $\sigma_x=\sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}$, $\sigma_p=\sqrt{\dfrac{\hbar m\omega}{2}}$ より $\sigma_x\sigma_p=\dfrac{\hbar}{2}$. ψ_1 については $\sigma_x=\sqrt{\dfrac{3\hbar}{2m\omega}}$, $\sigma_p=\sqrt{\dfrac{3\hbar m\omega}{2}}$ より $\sigma_x\sigma_p=\dfrac{3\hbar}{2}$. いずれについても不確定性原理は成り立っている.

$T=\dfrac{p^2}{2m}$, $V=\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$ 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

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p\rangle &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)+\psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial^2\psi}{\partial x\,\partial t}\right)\right)\mathrm{d}x\\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}+V\psi^*\right)\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi\right)\right)\mathrm{d}x\\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi^*\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}\right)\mathrm{d}x+\int_{-\infty}^{\infty}\left(V\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi^*\frac{\partial}{\partial x}(V\psi)\right)\mathrm{d}x
\end{aligned}
$$

ここで

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x}\mathrm{d}x = \cancel{\left[\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]_{-\infty}^{\infty}} - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\mathrm{d}x$$

$$= -\cancel{\left[\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right]_{-\infty}^{\infty}} + \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}\mathrm{d}x$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}\mathrm{d}x$$

より

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}\right)\mathrm{d}x = 0$$

であるから，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left(V\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial}{\partial x}(V\psi)\right)\mathrm{d}x$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\left(V\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\psi - \psi^* V\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)\psi\,\mathrm{d}x$$

$$= \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

2. 要点（1 次元調和振動子つづき）

$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ より $\hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_n$ なので

$$\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n = \left(n+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right)\psi_n = n\psi_n$$

同様に $\hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_n$ 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

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*\left(\hat{a}_+ g\right)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{a}_- f\right)^* g\,\mathrm{d}x$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*\left(\hat{a}_- g\right)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{a}_+ f\right)^* g\,\mathrm{d}x$$

（計算 1）に着目すると，

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\hat{a}_-\psi_n\right)^*\left(\hat{a}_-\psi_n\right)\mathrm{d}x &= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n\right)^*\psi_n\,\mathrm{d}x \\ &= n\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n{}^*\psi_n\,\mathrm{d}x \\ &= n\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\hat{a}_+\psi_n\right)^*\left(\hat{a}_+\psi_n\right)\mathrm{d}x &= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n\right)^*\psi_n\,\mathrm{d}x \\ &= (n+1)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n{}^*\psi_n\,\mathrm{d}x \\ &= n+1\end{aligned}$$

であるから，$\hat{a}_-\psi_n$ の定数倍である ψ_{n-1} が $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n-1}{}^*\psi_{n-1}\,\mathrm{d}x = 1$ 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 $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}{}^*\psi_{n+1}\,\mathrm{d}x = 1$ 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 $\psi_n = \dfrac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}_+\right)^n\psi_0$ を得る．

　また，次が成り立つ（計算 2）．

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m\psi_n\,\mathrm{d}x = \delta_{mn}$$

3. 計算 1

$\hat{a}_+ = \dfrac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + m\omega x\right)$ より

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*\left(\hat{a}_+ g\right)\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\int_{-\infty}^{\infty} f^*\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x + m\omega\int_{-\infty}^{\infty} f^* x g\,\mathrm{d}x\right)$$

一方 $\hat{a}_- = \dfrac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + m\omega x\right)$ より

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_- f)^* g\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}f^*}{\mathrm{d}x} g\,\mathrm{d}x + m\omega\int_{-\infty}^{\infty} x f^* g\,\mathrm{d}x\right)$$

ここで部分積分

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}f^*}{\mathrm{d}x} g\,\mathrm{d}x &= \left[f^* g\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f^*\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x \\ &= -\int_{-\infty}^{\infty} f^*\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x\end{aligned}$$

より $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} f^*\left(\hat{a}_+ g\right)\mathrm{d}x$ と $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\left(\hat{a}_- f\right)^* g\,\mathrm{d}x$ は等しい.

4. 計算 2

$\hat{a}_+$ と $\hat{a}_-$ のエルミート共役性より

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}{\psi_m}^*\left(\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n\right)\mathrm{d}x &= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\hat{a}_-\psi_m\right)^*\left(\hat{a}_-\psi_n\right)\mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_m\right)^*\psi_n\,\mathrm{d}x\end{aligned}$$

よって

$$n\int_{-\infty}^{\infty}{\psi_m}^*\psi_n\,\mathrm{d}x = m\int_{-\infty}^{\infty}{\psi_m}^*\psi_n\,\mathrm{d}x$$

であるから，$n \neq m$ ならば $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} {\psi_m}^* \psi_n \,\mathrm{d}x = 0$.

第 7 章　2021/5/12

1. 要点（ヒルベルト空間）

可測関数 $f, g : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$（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

$$\langle f|g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) g(x) \mathrm{d}x$$

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 $L^2(\mathbb{R}) = \left\{ f : \mathbb{R} \to \mathbb{C} \;\middle|\; \|f\| < \infty \right\}$ 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 $\left| \langle f|g \rangle \right| < \infty$ 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

$$\begin{aligned}
\|f + g\|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left| f(x) + g(x) \right|^2 \mathrm{d}x \\
&\leq \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left| f(x) \right| + \left| g(x) \right| \right)^2 \mathrm{d}x \\
&\leq \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left(\left| f(x) \right| + \left| g(x) \right| \right)^2 + \left(\left| f(x) \right| - \left| g(x) \right| \right)^2 \right) \mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left(2\left| f(x) \right|^2 + 2\left| g(x) \right|^2 \right) \mathrm{d}x \\
&= 2\|f\|^2 + 2\|g\|^2 \\
&< \infty
\end{aligned}$$

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 $ab \leq \dfrac{1}{2}\left(a^2 + b^2\right)$ が成り立つことに注意すると，

$$
\begin{aligned}
\left|\langle f|g\rangle\right| &= \left|\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) g(x) \mathrm{d}x\right| \\
&\leq \int_{-\infty}^{\infty} \left|f^*(x) g(x)\right| \mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left|f(x)\right| \cdot \left|g(x)\right| \mathrm{d}x \\
&\leq \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left|f(x)\right|^2 + \left|g(x)\right|^2\right) \mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{2}\left(\|f\|^2 + \|g\|^2\right) \\
&< \infty
\end{aligned}
$$

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 $\langle f|\hat{Q}g\rangle = \left\langle \hat{Q}^\dagger f \middle| g\right\rangle$ 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 $(\alpha\hat{Q})^\dagger = \alpha^* \hat{Q}^\dagger$
- $(\hat{Q}\hat{R})^\dagger = \hat{R}^\dagger \hat{Q}^\dagger$

$\dfrac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}^\dagger = (-1)^n \dfrac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}$ 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 $\langle Q \rangle = \left\langle \Psi \middle| \hat{Q}\Psi \right\rangle$ 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）：

- $\left\langle \Psi \middle| \hat{Q}\Psi \right\rangle$ 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

$$\begin{aligned}\left\langle f \middle| \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x} \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x} \mathrm{d}x \\ &= \left[f^* g \right]_{\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}f^*}{\mathrm{d}x} g \, \mathrm{d}x \\ &= \left\langle -\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} \middle| g \right\rangle\end{aligned}$$

より $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}^\dagger = -\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ であるから，

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}^\dagger &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}^\dagger \right)^n \\ &= \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \right)^n \\ &= (-1)^n \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\end{aligned}$$

3. 計算 2

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

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

4. 計算 3

Q の期待値は $\langle Q\rangle = q$，分散は

$$
\begin{aligned}
\sigma^2 &= \left\langle (Q-q)^2 \right\rangle \\
&= \left\langle \varPsi \middle| (\hat{Q}-q)^2 \varPsi \right\rangle \\
&= \left\langle (\hat{Q}-q)\varPsi \middle| (\hat{Q}-q)\varPsi \right\rangle \\
&= \left\| (\hat{Q}-q)\varPsi \right\|^2
\end{aligned}
$$

であるから，$\sigma^2 = 0$ となるのは $(\hat{Q}-q)\varPsi = 0$ のときである．

5. 計算 4

- 内積の性質より $\langle \varPsi|\hat{Q}\varPsi\rangle^* = \langle \hat{Q}\varPsi|\varPsi\rangle$，エルミート作用素の定義より $\langle \varPsi|\hat{Q}\varPsi\rangle = \langle \hat{Q}\varPsi|\varPsi\rangle$ であるから，$\langle \varPsi|\hat{Q}\varPsi\rangle = \langle \varPsi|\hat{Q}\varPsi\rangle^*$ より $\langle \varPsi|\hat{Q}\varPsi\rangle$ は実数．
- 固有値を q とすると $\langle \varPsi|\hat{Q}\varPsi\rangle = q\langle \varPsi|\varPsi\rangle = q\|\varPsi\|^2$ であるから，$\langle \varPsi|\hat{Q}\varPsi\rangle$ 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

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

で定義すると，その逆変換は

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

である．ここで $f(x) = \delta(x)$ とすると

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

であるから，逆フーリエ変換より

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

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．$\hat{p} = -ih\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ より

$$-i\hbar\frac{\mathrm{d}f_p}{\mathrm{d}x} = pf_p$$
$$\therefore f_p(x) = Ae^{\frac{ip}{\hbar}x}$$

ここで 2 つの固有値 p_1，p_2 と対応する固有関数 $f_{p_1}(x) = A_1e^{\frac{ip_1}{\hbar}x}$，$f_{p_2}(x) = A_2e^{\frac{ip_2}{\hbar}x}$ について

$$\begin{aligned}\left\langle f_{p_1}\middle|f_{p_2}\right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} A_1e^{-\frac{ip_1}{\hbar}x}\cdot A_2e^{\frac{ip_2}{\hbar}x}\mathrm{d}x\\ &= A_1A_2\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{i\left(p_2-p_1\right)}{\hbar}x}\mathrm{d}x\\ &= A_1A_2\cdot\hbar\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\left(p_2-p_1\right)x}\mathrm{d}x\\ &= A_1A_2\cdot 2\pi\hbar\delta\left(p_2-p_1\right)\end{aligned}$$

であるから，$A_1 = A_2 = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ とすれば $\left\langle f_{p_1}\middle|f_{p_2}\right\rangle = \delta\left(p_2-p_1\right)$ 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

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

で定義すると

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

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 $\left|\Phi(p,t)\right|^2$ となる．

2. 計算 1

$\varPhi$ の定義中の p を $\hbar p$ に置き換えると

$$\varPhi(\hbar p,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ipx}\varPsi(x,t)\mathrm{d}x$$

となるから，$\varPsi$ のフーリエ変換は $\sqrt{\hbar}\varPhi(\hbar p,t)$ である．よって逆フーリエ変換より

$$\begin{aligned}\varPsi(x,t)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ipx}\sqrt{\hbar}\varPhi(\hbar p,t)\mathrm{d}p\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{ip}{\hbar}x}\sqrt{\hbar}\varPhi(p,t)\frac{\mathrm{d}p}{\hbar}\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{ip}{\hbar}x}\varPhi(p,t)\mathrm{d}p\end{aligned}$$

3. 問題 3.11

1 次元調和振動子の基底状態の座標表示は $\varPsi_0(x,t)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2-\frac{i\omega}{2}t}$ であるから，運動量表示は

$$\begin{aligned}\varPhi_0(p,t)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{ip}{\hbar}x}\varPsi_0(x,t)\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{i\omega}{2}t}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2-\frac{ip}{\hbar}x}\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{i\omega}{2}t}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x+\frac{ip}{m\omega}\right)^2-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}}\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}-\frac{i\omega}{2}t}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}-\frac{i\omega}{2}t}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{m\omega}}\\&=\left(\frac{1}{\pi\hbar m\omega}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}-\frac{i\omega}{2}t}\end{aligned}$$

一方古典力学におけるエネルギー $\dfrac{1}{2}\hbar\omega$ の単振動は速度 v が $\dfrac{1}{2}mv^2 \ \leq \ \dfrac{1}{2}\hbar\omega$ すなわち $-\sqrt{\dfrac{\hbar\omega}{m}} \leq v \leq \sqrt{\dfrac{\hbar\omega}{m}}$ を満たすので，運動量 mv は区間 $\left[-\sqrt{\hbar m\omega}, \sqrt{\hbar m\omega}\right]$ 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

$$\begin{aligned}
\int_{-\sqrt{\hbar m\omega}}^{\sqrt{\hbar m\omega}} \left|\Phi_0(p,t)\right|^2 \mathrm{d}p &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar m\omega}} \int_{-\sqrt{\hbar m\omega}}^{\sqrt{\hbar m\omega}} e^{-\frac{p^2}{\hbar m\omega}} \mathrm{d}p \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar m\omega}} \cdot \sqrt{\hbar m\omega} \int_{-1}^{1} e^{-p^2} \mathrm{d}p \\
&= \mathrm{erf}(1) \\
&= 0.843
\end{aligned}$$

（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

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} \mathrm{d}k$$

において $k = \dfrac{p}{\hbar}$ と置換すると

$$\begin{aligned}
\Psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi\left(\frac{p}{\hbar}\right) e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{p^2}{2\hbar m}t\right)} \frac{\mathrm{d}p}{\hbar} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip}{\hbar}x} \left(\frac{1}{\sqrt{\hbar}} \varphi\left(\frac{p}{\hbar}\right) e^{-\frac{ip^2}{2\hbar m}t}\right) \mathrm{d}p
\end{aligned}$$

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，

$$\left|\Phi(p,t)\right|^2 = \frac{1}{\hbar}\left|\varphi\!\left(\frac{p}{\hbar}\right)\right|^2$$

より $\left|\Phi(p,t)\right|^2$ 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，$\sigma_A = \left\|(\hat{A}-a)\Psi\right\|$ と $\sigma_B = \left\|(\hat{B}-b)\Psi\right\|$ の積 $\sigma_A\sigma_B$ を，$\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ を用いて評価したい．

まず，シュワルツの不等式より

$$\begin{aligned}\sigma_A\sigma_B &= \left\|(\hat{A}-a)\Psi\right\|\cdot\left\|(\hat{B}-b)\Psi\right\| \\ &\geq \left|\left\langle(\hat{A}-a)\Psi\middle|(\hat{B}-b)\Psi\right\rangle\right|\end{aligned}$$

であり，

$$\begin{aligned}\left\langle(\hat{A}-a)\Psi\middle|(\hat{B}-b)\Psi\right\rangle &= \left\langle\Psi\middle|(\hat{A}-a)(\hat{B}-b)\Psi\right\rangle \\ &= \langle\Psi|\hat{A}\hat{B}\Psi\rangle - b\langle\Psi|\hat{A}\Psi\rangle - a\langle\Psi|\hat{B}\Psi\rangle + ab\langle\Psi|\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|\hat{A}\hat{B}\Psi\rangle - ab - ab + ab \\ &= \langle\Psi|\hat{A}\hat{B}\Psi\rangle - ab\end{aligned}$$

一方

$$\begin{aligned}\left\langle[\hat{A},\hat{B}]\right\rangle &= \left\langle\Psi\middle|[\hat{A},\hat{B}]\Psi\right\rangle \\ &= \left\langle\Psi\middle|(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\Psi\right\rangle \\ &= \langle\Psi|\hat{A}\hat{B}\Psi\rangle - \langle\Psi|\hat{B}\hat{A}\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|\hat{A}\hat{B}\Psi\rangle - \langle\Psi|\hat{A}\hat{B}\Psi\rangle^* \\ &= 2i\cdot\mathrm{Im}\langle\Psi|\hat{A}\hat{B}\Psi\rangle\end{aligned}$$

であるから，

$$
\begin{aligned}
\left|\left\langle(\hat{A}-a)\Psi\middle|(\hat{B}-b)\Psi\right\rangle\right| &\geq \left|\mathrm{Im}\left\langle(\hat{A}-a)\Psi\middle|(\hat{B}-b)\Psi\right\rangle\right| \\
&= \left|\mathrm{Im}\langle\Psi|\hat{A}\hat{B}\Psi\rangle\right| \\
&= \left|\frac{1}{2i}\left\langle[\hat{A},\hat{B}]\right\rangle\right|
\end{aligned}
$$

よって $\sigma_A\sigma_B \geq \left|\dfrac{1}{2i}\left\langle[\hat{A},\hat{B}]\right\rangle\right|$ が成り立つ.

特に，$\hat{A}=x$，$\hat{B}=\hat{p}$ のとき $\left\langle[x,\hat{p}]\right\rangle = [x,\hat{p}] = i\hbar$ であるから $\sigma_x\sigma_p \geq \left|\dfrac{i\hbar}{2i}\right| = \dfrac{\hbar}{2}$.

第 11 章　2021/5/19

1. 問題 3.13

Φ を p で微分すると

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial p}\Phi(p,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial p}e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\cdot\Psi(x,t)\mathrm{d}x \\
&= -\frac{i}{\hbar\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-\frac{ipx}{\hbar}}\Psi(x,t)\mathrm{d}x
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
&\Phi^*(p,t)\cdot i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\Phi(p,t) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{ipy}{\hbar}}\Psi^*(y,t)\mathrm{d}y\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-\frac{ipx}{\hbar}}\Psi(x,t)\mathrm{d}x\right) \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{ip(y-x)}{\hbar}}\Psi^*(y,t)x\Psi(x,t)\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y
\end{aligned}
$$

であるから

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \varPhi^*(p,t) \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \varPhi(p,t) \mathrm{d}p \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip(y-x)}{\hbar}} \mathrm{d}p \right) \varPsi^*(y,t) x \varPsi(x,t) \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y-x) \varPsi^*(y,t) x \varPsi(x,t) \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \varPsi^*(x,t) x \varPsi(x,t) \mathrm{d}x \\
&= \langle x \rangle
\end{aligned}
$$

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 $\varPsi_1$, $\varPsi_2$ とその運動量表示 $\varPhi_1$, $\varPhi_2$ について

$$
\langle \varPsi_1 | \varPsi_2 \rangle = \langle \varPhi_1 | \varPhi_2 \rangle
$$

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，$\varPsi(x,t)$ 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，$\varPhi(p,t)$ 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，$|e_n\rangle$（$n = 0, 1, \ldots$）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

$$\int_{-\infty}^{\infty} |e_z\rangle\langle e_z| \mathrm{d}z = 1$$

と書き表すことができる．

2. 計算 1

$$\begin{aligned}
\varPhi_1(p,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ip}{\hbar}x} \varPsi_1(x,t) \mathrm{d}x \\
\varPhi_2(p,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ip}{\hbar}x} \varPsi_2(x,t) \mathrm{d}x
\end{aligned}$$

のとき，

$$\begin{aligned}
\varPhi_1^*(p,t)\varPhi_2(p,t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip}{\hbar}x} \varPsi_1^*(x,t) e^{-\frac{ip}{\hbar}y} \varPsi_2(y,t) \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip}{\hbar}(x-y)} \varPsi_1^*(x,t)\varPsi_2(y,t) \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y
\end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned}
\langle \varPhi_1 | \varPhi_2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \varPhi_1^*(p,t)\varPhi_2(p,t) \mathrm{d}p \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ip}{\hbar}(x-y)} \mathrm{d}p \right) \varPsi_1^*(x,t)\varPsi_2(y,t) \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-y) \varPsi_1^*(x,t)\varPsi_2(y,t) \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \varPsi_1^*(x,t)\varPsi_2(x,t) \mathrm{d}x \\
&= \langle \varPsi_1 | \varPsi_2 \rangle
\end{aligned}$$

3. 問題 3.23

$\hat{P} = |\alpha\rangle\langle\alpha|$（$\alpha$ 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．$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x = 2$ 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．$\langle e_0 | x \rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \int_{-1}^{1} x \, \mathrm{d}x = 0$ より $x - \langle e_0 | x \rangle e_0 = x$ であり，$\int_{-1}^{1} x^2 \, \mathrm{d}x = \frac{2}{3}$ 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．

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

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

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，

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

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．

$$\begin{aligned}
\langle e_0 | x^3 \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{2} \int_{-1}^{1} x^3 \, \mathrm{d}x &&= 0 \\
\langle e_1 | x^3 \rangle &= \frac{\sqrt{6}}{2} \int_{-1}^{1} x^4 \, \mathrm{d}x &&= \frac{\sqrt{6}}{5} \\
\langle e_2 | x^3 \rangle &= \frac{3\sqrt{10}}{4} \int_{-1}^{1} \left(x^5 - \frac{1}{3} x^3 \right) \mathrm{d}x &&= 0
\end{aligned}$$

より $x^3 - \langle e_0 | x^3 \rangle e_0 - \langle e_1 | x^3 \rangle e_1 - \langle e_2 | x^3 \rangle e_2 = x^3 - \dfrac{3}{5}x$ であり，

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

より $e_3 = \dfrac{5\sqrt{14}}{4}\left(x^3 - \dfrac{3}{5}x \right)$.

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，$\nabla = \dfrac{\partial}{\partial x} + \dfrac{\partial}{\partial y} + \dfrac{\partial}{\partial z}$ 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 $\displaystyle\int |\Psi|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = 1$ 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 $\Psi = \displaystyle\sum_n c_n \psi_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$ 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，

$$
\frac{1}{R}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}(V-E)=l(l+1)
$$

$$
\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}=-l(l+1)Y
$$

（l は定数）と分けられる．

3. 計算 1

$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} r\sin\theta\cos\varphi \\ r\sin\theta\sin\varphi \\ r\cos\theta \end{pmatrix}$ より

$$
\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{\partial}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}
=\begin{pmatrix} \dfrac{\partial x}{\partial r} & \dfrac{\partial y}{\partial r} & \dfrac{\partial z}{\partial r} \\ \dfrac{\partial x}{\partial \theta} & \dfrac{\partial y}{\partial \theta} & \dfrac{\partial z}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial x}{\partial \varphi} & \dfrac{\partial y}{\partial \varphi} & \dfrac{\partial z}{\partial \varphi} \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}
$$

$$
=\begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta \\ r\cos\theta\cos\varphi & r\cos\theta\sin\varphi & -r\sin\theta \\ -r\sin\theta\sin\varphi & r\sin\theta\cos\varphi & 0 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}
$$

であり，ここで

$$
\begin{Vmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta \\ r\cos\theta\cos\varphi & r\cos\theta\sin\varphi & -r\sin\theta \\ -r\sin\theta\sin\varphi & r\sin\theta\cos\varphi & 0 \end{Vmatrix}
$$

$$
=r^2\sin^3\theta\sin^2\varphi+r^2\sin^3\theta\cos^2\varphi+r^2\sin\theta\cos^2\theta\cos^2\varphi+r^2\sin\theta\cos^2\theta\sin^2\varphi
$$

$$
=r^2\sin\theta
$$

であるから

$$
\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}
= \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta \\ r\cos\theta\cos\varphi & r\cos\theta\sin\varphi & -r\sin\theta \\ -r\sin\theta\sin\varphi & r\sin\theta\cos\varphi & 0 \end{pmatrix}^{-1}
\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{\partial}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}
$$

$$
= \frac{1}{r^2\sin\theta}\begin{pmatrix} r^2\sin^2\theta\cos\varphi & r\sin\theta\cos\theta\cos\varphi & -r\sin\varphi \\ r^2\sin^2\theta\sin\varphi & r\sin\theta\cos\theta\sin\varphi & r\cos\varphi \\ r^2\sin\theta\cos\theta & -r^2\sin^2\theta & 0 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{\partial}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \dfrac{\cos\theta\cos\varphi}{r} & -\dfrac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \\ \sin\theta\sin\varphi & \dfrac{\cos\theta\sin\varphi}{r} & \dfrac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \\ \cos\theta & -\dfrac{\sin\theta}{r} & 0 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{\partial}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}
$$

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 $\dfrac{\partial\psi}{\partial r} = -\dfrac{\psi}{a}$ であるから，

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) &= -\frac{1}{ar^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\psi\right) \\
&= -\frac{2}{ar}\psi + \frac{1}{a^2}\psi
\end{aligned}
$$

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

$$
\begin{aligned}
E &= \lim_{r\to\infty}\left(\frac{\hbar^2}{mar} - \frac{\hbar^2}{2ma^2} + V\right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2ma^2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
V &= E - \frac{\hbar^2}{mar} + \frac{\hbar^2}{2ma^2} \\
&= -\frac{\hbar^2}{mar}
\end{aligned}
$$

$\psi = Ae^{-r^2/a^2}$ のとき $\dfrac{\partial\psi}{\partial r} = -\dfrac{2r}{a^2}\psi$ であるから，

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) &= -\frac{2}{a^2r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^3\psi\right) \\
&= -\frac{6}{a^2}\psi + \frac{4r^2}{a^4}\psi
\end{aligned}
$$

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 $V = \dfrac{2\hbar^2 r^2}{ma^4}$, $E = \dfrac{3\hbar^2}{ma^2}$.

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

$$\frac{1}{\Theta}\sin\theta \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta \frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right) + \frac{1}{\Phi}\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2} = -l(l+1)\sin^2\theta$$

となるから，定数 m を用いて

$$\sin\theta \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta \frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right) + \left(l(l+1)\sin^2\theta - m^2\right)\Theta = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2} = -m^2\Phi$$

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 $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$ が従う．

一方で，前者の解は，Legendre 多項式

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}\left(x^2 - 1\right)^l$$

を用いて定義される Legendre 陪関数

$$P_l^m(x) = (-1)^m \left(1 - x^2\right)^{\frac{m}{2}} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} P_l(x)$$

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

$$P_0^0(x) = P_0(x) = \frac{1}{2^0 \cdot 0!}\left(x^2 - 1\right)^0 = 1$$

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

$$P_2(x) = \frac{1}{2^2 \cdot 2!} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(x^2 - 1\right)^2 = \frac{3x^2 - 1}{2}$$

$$P_2^1(x) = -\left(1 - x^2\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} P_2(x) = -3x\sqrt{1 - x^2}$$

より

$$Y_2^1(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5 \cdot 1!}{4\pi \cdot 3!}} e^{i\varphi}(-3\sin\theta\cos\theta) = -\frac{3}{2}\sqrt{\frac{5}{6\pi}} e^{i\varphi} \sin\theta\cos\theta$$

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \left|Y_0^0\right|^2 \sin\theta \,\mathrm{d}\theta \,\mathrm{d}\varphi = \frac{1}{4\pi}\int_0^{\pi} \sin\theta \,\mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi = 1$$

$$
\begin{aligned}
\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left|Y_2^1\right|^2\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi &= \frac{15}{8\pi}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin^3\theta\cos^2\mathrm{d}\theta \\
&= \frac{15}{4}\int_0^{\pi}\sin\theta\Bigl(\cos^2\theta-\cos^4\theta\Bigr)\mathrm{d}\theta \\
&= -\frac{15}{4}\left[\frac{1}{3}\cos^3\theta-\frac{1}{5}\cos^5\theta\right]_0^{\pi} \\
&= -\frac{15}{4}\left(-\frac{2}{3}+\frac{2}{5}\right)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}Y_0^{0*}Y_2^1\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi &= (\mathrm{const})\int_0^{2\pi}e^{i\varphi}\,\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\cos\theta\,\mathrm{d}\theta \\
&= (\mathrm{const})\Bigl(e^{2\pi i}-e^0\Bigr)\int_0^{\pi}\sin\theta\cos\theta\,\mathrm{d}\theta \\
&= 0
\end{aligned}
$$

3. 問題 4.5

$l=m=0$ とすると微分方程式は

$$
\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)=0
$$

となるから，$\sin\theta=0$ となる点以外では $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)=0$ が成り立つので $\sin\theta\dfrac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}$ は定数．よって $\sin\theta\dfrac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}=A$ とおくと $\dfrac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}=\dfrac{A}{\sin\theta}$ であるから

$$
\begin{aligned}
\Theta &= A\int\frac{\mathrm{d}\theta}{\sin\theta} \\
&= A\log\left|\tan\frac{\theta}{2}\right|+C
\end{aligned}
$$

（C は定数）．

第 15 章　2021/5/28

1. 問題 4.7

$$P_3(x) = \frac{1}{2^3 \cdot 3!}\frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}x^3}\left(x^2-1\right)^3 = \frac{5x^3-3x}{2}$$

$$P_3^2(x) = \left(1-x^2\right)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}P_3(x) = 15x\left(1-x^2\right)$$

より

$$Y_3^2(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{7}{4\pi}\cdot\frac{1}{5!}}e^{2i\varphi}P_3^2(\cos\theta) = \sqrt{\frac{105}{32\pi}}e^{2i\varphi}\sin^2\theta\cos\theta$$

$$\frac{\partial^2 Y_3^2}{\partial\varphi^2} = (2i)^2 Y_3^2 = -4\sqrt{\frac{105}{32\pi}}e^{2i\varphi}\sin^2\theta\cos\theta$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial Y_3^2}{\partial\theta} &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}}e^{2i\varphi}\left(2\sin\theta\cos^2\theta-\sin^3\theta\right)\\ &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}}e^{2i\varphi}\left(2\sin\theta-3\sin^3\theta\right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y_3^2}{\partial\theta}\right) &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}}e^{2i\varphi}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(2\sin^2\theta-3\sin^4\theta\right)\\ &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}}e^{2i\varphi}\left(4\sin\theta\cos\theta-12\sin^3\theta\cos\theta\right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y_3^2}{\partial\theta}\right)+\frac{\partial^2 Y_3^2}{\partial\varphi}\\ &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}}e^{2i\varphi}\left(4\sin^2\theta\cos\theta-12\sin^4\theta\cos\theta-4\sin^2\theta\cos\theta\right)\\ &= -12\sqrt{\frac{105}{32\pi}}e^{2i\varphi}\sin^4\theta\cos\theta\\ &= -3\cdot 4\sin^2\theta Y_3^2\end{aligned}$$

一方

$$
\begin{aligned}
P_l^l(x) &= (-1)^l\left(1-x^2\right)^{\frac{l}{2}}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}P_l(x) \\
&= (-1)^l\left(1-x^2\right)^{\frac{l}{2}}\frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^{2l}}{\mathrm{d}x^{2l}}\left(x^2-1\right)^l \\
&= (-1)^l\left(1-x^2\right)^{\frac{l}{2}}\frac{1}{2^l l!}(2l)! \\
&= \frac{(2l)!}{(-2)^l l!}\left(1-x^2\right)^{\frac{l}{2}}
\end{aligned}
$$

より

$$
\begin{aligned}
Y_l^l(\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{1}{(2l)!}}e^{il\varphi}P_l^l(\cos\theta) \\
&= \frac{1}{(-2)^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}e^{il\varphi}\sin^l\theta
\end{aligned}
$$

$$
\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left|Y_l^l(\theta,\varphi)\right|^2\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi = \frac{(2l+1)!}{4\pi\cdot 2^{2l}\left(l!\right)^2}\int_0^{\pi}\sin^{2l+1}\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi = 1
$$

$$
\frac{\partial^2 Y_l^l}{\partial\varphi^2} = (il)^2 Y_l^l = -l^2 Y_l^l
$$

$$
\frac{\partial Y_l^l}{\partial\theta} = \frac{1}{(-2)^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}e^{il\varphi}l\sin^{l-1}\theta\cos\theta = \frac{lY_l^l\cos\theta}{\sin\theta}
$$

$$
\begin{aligned}
\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y_l^l}{\partial\theta}\right) &= l\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(Y_l^l\cos\theta\right) \\
&= -lY_l^l\sin^2\theta + l^2Y_l^l\cos^2\theta
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y_l^l}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial^2 Y_l^l}{\partial\varphi^2} &= -lY_l^l\sin^2\theta + l^2Y_l^l\cos^2\theta - l^2Y_l^l \\
&= -lY_l^l\sin^2\theta - l^2Y_l^l\sin^2\theta \\
&= -l(l+1)Y_l^l\sin^2\theta
\end{aligned}
$$

第 16 章　2021/5/30

1．要点（ボーアの式）

動径方向の方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}(V-E)R=l(l+1)R$$

において，$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\dfrac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)$ の部分が $u(r)=rR(r)$ という置換によって $r\dfrac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}$ と書ける（計算 1）ことに着目すると，方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left(V+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right)u=Eu$$

と書き換えられる．これは遠心項 $\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{l(l+1)}{r^2}$ 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 個の陽子が作る電位は，陽子からの距離を r とすると $-\displaystyle\int\frac{e}{4\pi\varepsilon_0r^2}\mathrm{d}r=\frac{e}{4\pi\varepsilon_0r}$ 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 $m=m_\mathrm{e}$ を上の方程式に代入して

$$-\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left(-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}+\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}\frac{l(l+1)}{r^2}\right)u=Eu$$

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 $-\dfrac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}$ と E を整理するために，両辺を E で割った後 $-\dfrac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}E}$ を $\dfrac{1}{\kappa^2}$ とする（すなわち $\kappa=\dfrac{\sqrt{-2m_\mathrm{e}E}}{\hbar}$ とおく）．

$$\frac{1}{\kappa^2}\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2}+\left(\frac{m_\mathrm{e}e^2}{2\pi\varepsilon_0\hbar^2\kappa^2}\frac{1}{r}-\frac{1}{\kappa^2}\frac{l(l+1)}{r^2}\right)u=u$$

さらに $\kappa r=\rho$ とおくと $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}=\kappa\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}$ より $\dfrac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}=\kappa^2\dfrac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2}$ だから

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\rho^2}+\left(\frac{m_\mathrm{e}e^2}{2\pi\varepsilon_0\hbar^2\kappa}\frac{1}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)u=u$$

最後に定数 $\dfrac{m_\mathrm{e}e^2}{2\pi\varepsilon_0\hbar^2\kappa}$ を ρ_0 でおいて整理すると

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\rho^2}=\left(1-\frac{\rho_0}{\rho}+\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)u$$

ここで，$u(\rho)=\rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho)$ とおくと，方程式は

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

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 $\rho\dfrac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2}$ と $2(l+1-\rho)\dfrac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho}$ 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

$$-2Nc_N+\big(\rho_0-2(l+1)\big)c_N=0$$

$$\therefore \rho_0=2(N+l+1)$$

$N+l+1=n$ 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．$\rho_0=\dfrac{m_\mathrm{e}e^2}{2\pi\varepsilon_0\hbar^2\kappa}$, $\kappa=\dfrac{\sqrt{-2m_\mathrm{e}E}}{\hbar}$ より $E=-\dfrac{m_\mathrm{e}e^4}{8\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2\rho_0^2}$ であるから，

$$E_n=-\frac{m_\mathrm{e}e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

2. 計算 1

$R = \dfrac{u}{r}$ より

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{u}{r} \\ &= \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r} - \frac{u}{r^2}\end{aligned}$$

よって $r^2\dfrac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} = r\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r} - u$ であるから

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right) &= r\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r} - \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r} \\ &= r\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}\end{aligned}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2} = \rho^{l+1}e^{-\rho}\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2} + 2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left(\rho^{l+1}e^{-\rho}\right)\cdot\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}\left(\rho^{l+1}e^{-\rho}\right)\cdot v$$

ここで

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left(\rho^{l+1}e^{-\rho}\right) &= (l+1)\rho^l e^{-\rho} - \rho^{l+1}e^{-\rho} \\ &= \left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\rho^{l+1}e^{-\rho}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}\left(\rho^{l+1}e^{-\rho}\right) &= \left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left(\rho^{l+1}e^{-\rho}\right) - \frac{l+1}{\rho^2}\rho^{l+1}e^{-\rho} \\ &= \left(\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)^2 - \frac{l+1}{\rho^2}\right)\rho^{l+1}e^{-\rho} \\ &= \left(1 - \frac{2(l+1)}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\rho^{l+1}e^{-\rho}\end{aligned}$$

であるから

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2} = \rho^{l+1}e^{-\rho}\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2} \\
&+ 2\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\rho^{l+1}e^{-\rho}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} \\
&+ \left(1 - \frac{2(l+1)}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\rho^{l+1}e^{-\rho}v \\
= \rho^{l+1}e^{-\rho}\left(\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2} + 2\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + \left(1 - \frac{2(l+1)}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)v\right)
\end{aligned}
$$

よって方程式は

$$
\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2} + 2\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + \left(\cancel{1} - \frac{2(l+1)}{\rho} + \cancel{\frac{l(l+1)}{\rho^2}}\right)v = \left(\cancel{1} - \frac{\rho_0}{\rho} + \cancel{\frac{l(l+1)}{\rho^2}}\right)v
$$

整理して

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

第 17 章　2021/5/31

1. 問題 4.12

$n = 3,\ l = 0$ のときの方程式

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} 4c_0 + 2c_1 &= 0 \\ 2c_1 + 6c_2 &= 0 \end{aligned}$$

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

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

$\rho = \dfrac{r}{an} = \dfrac{r}{3a}$ より

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

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

$n = 3,\ l = 1$ のときの方程式

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

の解を $v(\rho) = c_0 + c_1\rho$ とおくと，

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} = c_1$$

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

より方程式は

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

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

よって $c_1 = -\dfrac{1}{2}c_0$ であるから

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

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

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

$n = 3,\ l = 2$ のとき

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

より v は定数関数 $v\bigl(\rho\bigr) = c_0$ であるから

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

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

第 18 章　2021/6/1

1. 問題 4.13

ガンマ関数の定義

$$\mathit{\Gamma}(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t}\,\mathrm{d}t$$

において $t = \dfrac{r}{a}$ と置換すると

$$\varGamma(x) = \frac{1}{a}\int_0^\infty \left(\frac{r}{a}\right)^{x-1} e^{-\frac{r}{a}}\mathrm{d}r$$

よって $x-1=n$ として公式

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

を得る．

1.1. (a)

$n=2,\ l=0$ としたときの方程式

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

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 $\displaystyle\int_0^\infty \left|R_{20}(r)\right|^2 r^2\mathrm{d}r = 1$ にすればよいから，

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

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

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

となるから

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

一方で，

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

より

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

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

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

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

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

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