量子力学ノート

とが

1. 2021/4/21

1.1. 要点

1 次元の直線上を動く質量 m の粒子の波動関数 $\Psi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{C}$ 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 $V : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ 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，Ψ 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 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，$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \left|\Psi(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x$ 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

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

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

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

（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

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

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

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

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

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

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．

1.2. 計算 1

Ψ が Schrödinger 方程式を満たすとする．A を定数とすると

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

より $A\Psi$ も Schrödinger 方程式を満たす．

1.3. 計算 2

Schrödinger 方程式を変形すると

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

となり，両辺の複素共役をとると

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

となる．これより

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

である．ここで

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

に注意すると，

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

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．

1.4. 計算 3

計算 2 の途中式を流用すると

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

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．

2. 2021/4/22

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

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

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

2.2. 問題 1.15

Schrödinger 方程式より

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \varPsi_1{}^*}{\partial t} &= -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \varPsi_1{}^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\varPsi_1{}^* \\
\frac{\partial \varPsi_2}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \varPsi_2}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\varPsi_2 \\
\therefore \frac{\partial}{\partial t}\left(\varPsi_1{}^*\varPsi_2\right) &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2 \varPsi_1{}^*}{\partial x^2}\varPsi_2 - \varPsi_1{}^*\frac{\partial^2 \varPsi_2}{\partial x^2}\right)
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\varPsi_1{}^*\varPsi_2\,\mathrm{d}x &= \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial^2 \varPsi_1{}^*}{\partial x^2}\varPsi_2 - \varPsi_1{}^*\frac{\partial^2 \varPsi_2}{\partial x^2}\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\left[\frac{\partial \varPsi_1{}^*}{\partial x}\varPsi_2 - \varPsi_1{}^*\frac{\partial \varPsi_2}{\partial x}\right]_{-\infty}^{\infty} \\
&= 0
\end{aligned}$$

2.3. 要点

t に依存しない $\psi(x)$ と x に依存しない $\varphi(t)$ を用いて $\varPsi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$ と表せると仮定すると，$\dfrac{\partial \varPsi}{\partial t} = \psi\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}$, $\dfrac{\partial^2 \varPsi}{\partial x} = \dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\varphi$ 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

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

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 $i\hbar\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = E\varphi$ の解である $\varphi = Ae^{-iEt/\hbar}$ をかけることで $\mathit{\Psi}$ が得られる．

3. 2021/4/23

3.1. 要点

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

とする．$\psi(0) = \psi(a) = 0$ として $0 \le x \le a$ の範囲で時間に依存しない Schrödinger 方程式 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi$ 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 $\mathit{\Psi}$ の初期状態 $\mathit{\Psi}(x,0)$ が与えられれば，フーリエ級数展開によって

$$\mathit{\Psi}(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(x)$$

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．

3.2. 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 $A\sin\left(\dfrac{n\pi}{a}x\right)$ 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 $\psi(x) = A'\sin\left(\dfrac{n'\pi}{a}x\right)$ と表せるので，n が正の整数のときだけを考えればよい．

$\displaystyle\int_0^{\frac{a}{2\pi}} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x = \int_0^{\frac{a}{2\pi}} \cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x$ より $\displaystyle\int_0^{a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x = n\int_0^{\frac{a}{2\pi}} \mathrm{d}x = \frac{a}{2}$ 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 $\displaystyle\int_0^a |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$ となるためには $A = \pm\sqrt{\dfrac{2}{a}}$ であればよい．ただし物理学の観点では $A = \sqrt{\dfrac{2}{a}}$ のときを考えれば十分らしい．

さて，$k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ と $ka = n\pi$ より E としてありえる値は $E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ であり，各 E_n に対応する ψ は $\psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\left(\dfrac{n\pi}{a}x\right)$ である．これが今回の V に対する時間に依存しない Schrödinger 方程式の解である．

3.3. 問題 2.4

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

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

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

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

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

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

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．

4. 2021/4/25

4.1. 問題 2.1

4.1.1. (a)

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

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

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．

4.1.2. (b)

時間に依存しない Schrödinger 方程式について，任意の解 ψ が，実数値関数解の線型結合として表せることを示す．E が実数であるから，

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

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，$\lim_{x\to\pm\infty} \psi = 0$ より $\lim_{x\to\pm\infty} \psi_R = \lim_{x\to\pm\infty} \psi_I = 0$ であり，また

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

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

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

4.1.3. (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

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

より $\psi(x)+\psi(-x)$ と $\psi(x)-\psi(-x)$ はともに解である．前者は偶関数，後者は奇関数であるから，ψ を偶関数解と奇関数解の線型結合として表すことができた．

4.2. 問題 2.2

任意の x について $V(x) \geq E$ が成り立つと仮定する．

時間に依存しない Schrödinger 方程式を変形すると

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

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 $A = \big\{x \geq x_0 \;\big|\; \psi(x) \leq 0\big\}$ 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）．

4.3. 要点

古典力学の単振動 $x = \sin\omega t$ を考えると，$m\ddot{x} = -m\omega^2 \sin\omega t = -m\omega^{2x}$ より位置エネルギーは $V(x) = -\displaystyle\int\big(-m\omega^{2x}\big)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 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

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

と書き換えられる．ここで $\hat{a}_-, \hat{a}_+$ を

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

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 $\big(\psi, E\big)$ がこの方程式の解ならば，組 $\big(\hat{a}_+\psi, E+\hbar\omega\big)$ と組 $\big(\hat{a}_-\psi, E-\hbar\omega\big)$ 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 $\big(\hat{a}_-\psi, E-\hbar\omega\big)$ について，もし $E-\hbar\omega \le 0$（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

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

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．$0 < E \le \hbar\omega$ 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．

4.4. 計算 1

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

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

で定義すると

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

より $[x,\hat{p}]=i\hbar$ なので，

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

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

4.5. 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，

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

5. 2021/4/26

5.1. 問題 2.10

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

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

より

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

であるから ψ_0, ψ_1, ψ_2 はそれぞれ直交する.

5.2. 問題 2.11

$\left|\psi_0\right|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$ 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

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

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

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

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

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

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

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．

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

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

6. 2021/5/10

6.1. 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

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

より

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

であるから，

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

6.2. 要点

$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ 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

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

（計算 1）に着目すると，

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

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

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 $\psi_n = \dfrac{1}{\sqrt{n!}}\big(\hat{a}_+\big)^n\psi_0$ を得る．

また，次が成り立つ（計算 2）．

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

6.3. 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

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

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

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

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

6.4. 計算 2

$\hat{a}_+$ と $\hat{a}_-$ のエルミート共役性より

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

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 $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} {\psi_m}^* \psi_n \, \mathrm{d}x = 0$.

7. 2021/5/12

7.1. 要点

可測関数 $f, g : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ に対して内積 $\langle f \mid g \rangle$ を

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

で定義すると，$\langle f \mid f \rangle$ は必ず 0 以上の実数あるいは ∞ となる．ノルム $\|f\|$ を

$$\|f\| = \sqrt{\langle f \mid f \rangle}$$

で定義する．このとき，$L^2(\mathbb{R}) = \left\{ f : \mathbb{R} \to \mathbb{C} \;\middle|\; \|f\| < \infty \right\}$ 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 $\left| \langle f \mid g \rangle \right| < \infty$ である（計算 1）．

7.2. 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 $\alpha f \in L^2(\mathbb{R})$.

7.3. 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,

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