宿題５　　　　　　　　　　解答例

問１．次の関数を指定した領域で規格化せよ（α＞0）

a)	$e^{i\theta}\ (\equiv \cos\theta + i\sin\theta)$	$0 \le \theta \le 2\pi$
b)	$e^{-\alpha x}$	$0 \le x < \infty$
c)	$e^{-\alpha x^2}$	$0 \le x < \infty$
d)	$x\,e^{-\alpha x}$	$0 \le x < \infty$
e)	$x\,e^{-\alpha x^2}$	$0 \le x < \infty$

c) の積分では $\sqrt{2\alpha}\,x = X$ と変数を置き換え、また $\int_0^\infty e^{-x^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ であることを用いるとよい。　d) は部分積分を繰り返せばよい。

e) では $\frac{d}{dx}e^{-2\alpha x^2} = -4\alpha x\,e^{-2\alpha x^2}$ を用いて部分積分した後 c) の結果を使う。

a) $\int_0^{2\pi} e^{-i\theta}e^{i\theta}d\theta = \int_0^{2\pi} 1\,d\theta = 2\pi$　　　$A^2\,2\pi = 1$ より　　$A = (2\pi)^{-1}$

b) $\int_0^\infty e^{-\alpha x}e^{-\alpha x}dx = \int_0^\infty e^{-2\alpha x}dx = \frac{-1}{2\alpha}\left[e^{-2\alpha x}\right]_0^\infty = \frac{1}{2\alpha}$ より　　$A = \sqrt{2\alpha}$

c) $\int_0^\infty e^{-\alpha x^2}e^{-\alpha x^2}dx = \int_0^\infty e^{-2\alpha x^2}dx = \int_0^\infty e^{-X^2}\frac{dX}{\sqrt{2\alpha}} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}$ より　　$A = (\frac{8\alpha}{\pi})^{1/4}$

d) $\int_0^\infty x e^{-\alpha x}x e^{-\alpha x}dx = \int_0^\infty x^2 e^{-2\alpha x}dx = \left[x^2\frac{-e^{-2\alpha x}}{2\alpha}\right]_0^\infty + \int_0^\infty 2x\frac{e^{-2\alpha x}}{2\alpha}dx$

$$= \frac{1}{\alpha}\left[x\frac{-e^{-2\alpha x}}{2\alpha}\right]_0^\infty + \frac{1}{\alpha}\int_0^\infty \frac{e^{-2\alpha x}}{2\alpha}dx = \frac{1}{2\alpha^2}\left[\frac{-e^{-2\alpha x}}{2\alpha}\right]_0^\infty = \frac{1}{4\alpha^3}$$ より

$A = 2\alpha^{3/2}$

e) $\int_0^\infty x e^{-\alpha x^2}x e^{-\alpha x^2}dx = \int_0^\infty x\ x e^{-2\alpha x^2}dx = \left[x\frac{-e^{-2\alpha x^2}}{4\alpha}\right]_0^\infty + \int_0^\infty \frac{e^{-2\alpha x^2}}{4\alpha}dx$

$$= 0 + \frac{1}{4\alpha}\frac{1}{\sqrt{2\alpha}}\frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{1}{8\alpha}\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2\alpha}}$$ より　　$A = (\frac{128\alpha^3}{\pi^2})^{1/4}$

問２．長方形の箱 $0 \le x \le a,\ 0 \le y \le b$ の中で運動するように制限された自由粒子の固有関数は

$$\psi(x,y) = A\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b} \qquad n = 1, 2, \cdots \quad m = 1, 2, \cdots$$

と書ける。この系のハミルトニヤンは $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2})$ である。

1) 規格化定数 $\boldsymbol{A}$を求めよ。

2) この系が固有状態の１つにある時 $\sigma_E^2 = <E^2> - <E>^2 = 0$ であることを示せ。

3) 位置の平均値 $<\hat{r}>$ を求めよ。ここに $\hat{r} = i\,x + j\,y$ である。

4) 位置の二乗の平均値 $<r^2>$ 及び位置の分散 σ_r^2 を求めよ。
 ここに$r^2 = x^2 + y^2$ である。

5) 二次元の運動量演算子は $\hat{p} = -i\hbar\,(i\,\frac{\partial}{\partial x} + j\frac{\partial}{\partial y})$ である。$<p>$ 及び σ_p^2 を求めよ。

6) この系において異なる固有値に属する固有関数は直交することを示せ。

1) 規格化

$$\int_0^a dx\int_0^b dy\; A^2\,\sin^2\frac{n\pi x}{a}\sin^2\frac{m\pi y}{b}$$

$$= A^2\int_0^a \sin^2\frac{n\pi x}{a}\,dx\int_0^b \sin^2\frac{m\pi y}{b}\,dy$$

$$= A^2\left\{\frac{1}{2}\left[x - \frac{a}{2n\pi}\sin\frac{2n\pi x}{a}\right]_0^a \frac{1}{2}\left[y - \frac{b}{2m\pi}\sin\frac{2m\pi y}{b}\right]_0^b\right\} = A^2\,\frac{ab}{4} = 1$$

$$\psi(x, y) = \psi_{nm} = \left(\frac{4}{ab}\right)^{1/2}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b}$$

2) ψ_{nm} を固有状態の１つとすると

$$<E> = \iint \psi^*_{nm}\hat{H}\,\psi_{nm}\,dx\,dy = \int_0^a dx\int_0^b dy\;\psi^*_{mn}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\right\}\psi_{nm}$$

演算子以降を求めると

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi_{nm} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{4}{ab}\right)^{1/2}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b}$$

$$= \left(\frac{4}{ab}\right)^{1/2}\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b}\right\}$$

$$= \left(\frac{4}{ab}\right)^{1/2}\left\{\frac{n\pi}{a}\,\frac{-n\pi}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b} + \frac{m\pi}{b}\,\frac{-m\pi}{b}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b}\right\}$$

$$= -\left\{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\}\left(\frac{4}{ab}\right)^{1/2}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b}$$

$$= -\left\{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\}\psi_{nm}$$

と成るので元の式に入れて

$$<E> = -\left\{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\iint \psi^*_{nm}\,\psi_{nm}\,dx\,dy$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\}$$

を得る。次も同様に演算子を順次作用させて

$$<E^2> = \iint \psi^*_{nm}\hat{H}^2\,\psi_{nm}\,dx\,dy$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \iint \psi^*_{nm} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \psi_{nm}\, dx\, dy$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \left\{-\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 - \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\} \iint \psi^*_{nm} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \psi_{nm}\, dx\, dy$$

$$= \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \left\{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\}^2 \iint \psi^*_{nm}\, \psi_{nm}\, dx\, dy$$

$$= \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \left\{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\}^2$$

分散は次式に上の結果を入れてゼロと成ることが確かめられた。

$$\sigma_E^2 = < E^2 > - < E >^2$$

$$= \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \left\{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\}^2 - \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \left\{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\}^2 = 0$$

3)　位置の平均値 $< \hat{r} >$ を求めよ。ここに $\hat{r} = i\, x + \ j y$ である。

$$< \hat{r} > = \iint \psi^*_{nm} (\, i\, x + \ j y\,)\, \psi_{nm}\, dx\, dy$$

$$= \frac{4}{ab} \iint \sin\frac{n\pi x}{a} \sin\frac{m\pi y}{b} (\, i\, x + \ j y\,) \sin\frac{n\pi x}{a} \sin\frac{m\pi y}{b}\, dx\, dy$$

$$= \frac{4}{ab} \iint \left(\, i\, x \sin^2\frac{n\pi x}{a} \sin^2\frac{m\pi y}{b} + \ j y \sin^2\frac{n\pi x}{a} \sin^2\frac{m\pi y}{b}\,\right) dx\, dy$$

$$= \frac{4}{ab} \left\{ \frac{i}{4} \iint x \left(1 - \cos\frac{2n\pi x}{a}\right) dx \left(1 - \cos\frac{2m\pi y}{b}\right) dy \right.$$

$$\left. + \frac{j}{4} \iint \left(1 - \cos\frac{2n\pi x}{a}\right) dx\ y\ \left(1 - \cos\frac{2m\pi y}{b}\right) dy \right\}$$

$$= \frac{1}{ab} \left\{ i \left[\frac{x^2}{2} - \frac{a}{2n\pi} x \sin\frac{2n\pi x}{a} - \left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2 \cos\frac{2n\pi x}{a}\right]_0^a b \right.$$

$$\left. + \ j a \left[\frac{b^2}{2} - 0 - \left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2 (1 - 1)\right] \right\} = i\frac{a}{2} + \ j\frac{b}{2}$$

4)　位置の二乗の平均値 $< r^2 >$ 及び位置の分散 σ_r^2 を求めよ。

$$< r^2 > = < x^2 + y^2 > = \iint \psi^*_{nm} (\, x^2 + y^2\,)\, \psi_{nm}\, dx\, dy$$

$$= \iint x^2 \psi^*_{nm} \psi_{nm}\, dx\, dy + \iint y^2 \psi^*_{nm} \psi_{nm}\, dx\, dy$$

$$= \frac{4}{ab} \int_0^a x^2 \sin^2\frac{n\pi x}{a} dx \int_0^b \sin^2\frac{m\pi y}{b} dy + \frac{4}{ab} \frac{a}{2} \frac{1}{2} \int_0^b y^2 \left(1 - \cos\frac{2m\pi y}{b}\right) dy$$

$$= \frac{1}{a} \left\{ \left[\frac{x^3}{3}\right]_0^a - \left[x^2 \frac{a}{2n\pi} \sin\frac{2n\pi x}{a}\right]_0^a + \int_0^a 2x \frac{a}{2n\pi} \sin\frac{2n\pi x}{a} dx \right\}$$

$$+ \frac{1}{b} \left\{ \frac{b^3}{3} - 0 - \frac{b}{m\pi} \left[y \frac{b}{2m\pi} \cos\frac{2m\pi y}{b}\right]_0^b + \frac{b}{m\pi} \int_0^b \frac{b}{2m\pi} \cos\frac{2m\pi y}{a} dy \right\}$$

$$= \frac{1}{a}\left\{ \frac{a^3}{3} - \frac{a}{n\pi}\frac{a}{2n\pi} a + 0 \right\} + \left\{ \frac{b^2}{3} - \frac{1}{2}\left(\frac{b}{m\pi}\right)^2 \right\}$$

$$= \frac{a^2 + b^2}{3} - \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{a^2}{n^2} + \frac{b^2}{m^2}\right)$$

5) $< \hat{p} > = \iint \psi_{nm} \ \hat{p}\, \psi_{nm} dx\, dy$

２次元のベクトルであることに注意する。やはり演算子を作用させると

$$\hat{p}\,\psi_{nm} = -i\hbar\left(i\frac{\partial}{\partial x} + \ j\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(\frac{4}{ab}\right)^{1/2} \sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b}$$

$$= -i\hbar\left(\frac{4}{ab}\right)^{1/2}\left\{ i\frac{n\pi}{a}\cos\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b} + \ j\frac{m\pi}{b}\sin\frac{n\pi x}{a}\cos\frac{m\pi y}{b}\right\}$$

と得られるので期待値は

$$< \hat{p} > = -i\hbar\frac{4}{ab}\iint \sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b}\, dx\, dy$$

$$\times\left\{ i\frac{n\pi}{a}\cos\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b} + \ j\frac{m\pi}{b}\sin\frac{n\pi x}{a}\cos\frac{m\pi y}{b}\right\} dx\, dy$$

ここでベクトルの i 成分について求めると

$$\int_0^a \sin\frac{n\pi x}{a}\cos\frac{n\pi x}{a}\, dx \int_0^b \sin\frac{m\pi y}{b}\sin\frac{m\pi y}{b}\, dy$$

$$= \int_0^a \frac{1}{2}\sin\frac{2n\pi x}{a}\, dx\,\frac{b}{2} = \frac{b}{4}\left[-\frac{a}{2n\pi}\cos\frac{2n\pi x}{a}\right]_0^a = 0$$

j 成分は前後が入れ替わる式となり同様にゼロとなる。よって

$< \hat{p} > = 0$

$< \hat{p}^2 > = \iint \psi_{nm} \ \hat{p}^2\, \psi_{nm} dx\, dy$

ここも同様に考えるが $\hat{p}^2 = \hat{p}\bullet\hat{p}$ スカラー積に注意して解く

$i\bullet i = j\bullet j = 1,\quad i\bullet j = j\bullet i = 0$

$$\hat{p}^2\psi_{nm} = \hat{p}\,\hat{p}\,\psi_{nm} = -\hbar^2\left(i\frac{\partial}{\partial x} + \ j\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(\frac{4}{ab}\right)^{1/2}$$

$$\bullet\left\{ i\frac{n\pi}{a}\cos\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b} + \ j\frac{m\pi}{b}\sin\frac{n\pi x}{a}\cos\frac{m\pi y}{b}\right\}$$

$$= -\hbar^2\left(\frac{4}{ab}\right)^{1/2}\left\{ \frac{n\pi}{a}\frac{-n\pi}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b}\right.$$

$$\left. + \frac{m\pi}{b}\frac{-m\pi}{b}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b}\right\}$$

$$= \hbar^2\left\{ \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\}\psi_{nm}$$

$$< \hat{p}^2 > = \iint \psi_{nm}\hbar^2\left\{ \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\}\psi_{nm} dx\, dy$$

$$= \hbar^2\left\{ \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\}$$

$$\sigma_p^2 = < \hat{p}^2 > - < \hat{p} >^2 = \hbar^2\left\{ \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2\right\}$$

6) この系において異なる固有値に属する固有関数は直交する

１つの状態は量子数２つを指定して初めて決まることに注意する。

$$\iint \psi^*_{nm}\psi_{kl}dx\,dy = \frac{4}{ab}\iint \sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b}\sin\frac{k\pi x}{a}\sin\frac{l\pi y}{b}dx\,dy$$

$$= \frac{4}{ab}\int_0^a \sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{k\pi x}{a}dx\int_0^b \sin\frac{m\pi y}{b}\sin\frac{k\pi y}{b}dy$$

$$= \frac{4}{ab}\left[\int_0^a \frac{1}{2}\left\{\cos\frac{(n-k)\pi x}{a} - \cos\frac{(n+k)\pi x}{a}\right\}dx\right.$$

$$\left.\times\int_0^a \frac{1}{2}\left\{\cos\frac{(m-l)\pi y}{b} - \cos\frac{(m+l)\pi y}{b}\right\}dy\right]$$

ここで x の積分を取り上げるが、y の積分も同形であることに注意

$$\int_0^a \left\{\cos\frac{(n-k)\pi x}{a} - \cos\frac{(n+k)\pi x}{a}\right\}dx$$

つぎの２つに場合分けして

$$= \left[\frac{a}{(n-k)\pi}\sin\frac{(n-k)\pi x}{a} - \frac{a}{(n+k)\pi}\sin\frac{(n+k)\pi x}{a}\right]_0^a = 0 \qquad n \neq k$$

$$= \left[x - \frac{a}{(n+k)\pi}\sin\frac{(n+k)\pi x}{a}\right]_0^a = a \qquad n = k$$

クロネッカーのデルタを使って２つの結果をまとめると

$$\int_0^a \left\{\cos\frac{(n-k)\pi x}{a} - \cos\frac{(n+k)\pi x}{a}\right\}dx = a\,\delta_{nk}$$

y の結果も含めると

$$\iint \psi^*_{nm}\psi_{kl}dx\,dy = \frac{4}{ab}\left[\frac{a}{2}\delta_{nk}\right]\left[\frac{b}{2}\delta_{ml}\right] = \delta_{nk}\,\delta_{ml}$$

注意　n と k が等しくかつ m と l が等しい時のみ１その他の場合は０

問３．ψ_n と ψ_m が共にハミルトニヤン $\hat{H}$ の定常状態であれば次の波動関数が時間に依存するシュレーディンガー方程式を満たすことを示せ。

$$\Psi(x,t) = c_m\psi_m(x)\,e^{-iE_m t/\hbar} + c_n\psi_n(x)\,e^{-iE_n t/\hbar}$$

ψ_n と ψ_m が共にハミルトニヤン $\hat{H}$ の定常状態であるということから、

$$\hat{H}\,\psi_n(x) = E_n\,\psi_n(x),\quad \hat{H}\,\psi_m(x) = E_m\,\psi_m(x)$$

が得られる。時間依存シュレーディンガー方程式は次式で表せる

$$\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$　この式の左辺を演算すると

$$\hat{H}\,\Psi(x,t) = \hat{H}\left\{c_m\psi_m(x)\,e^{-iE_m t/\hbar} + c_n\psi_n(x)\,e^{-iE_n t/\hbar}\right\}$$

$$= c_m \hat{H}\,\psi_m(x)\,e^{-iE_m t/\hbar} + c_n \hat{H}\,\psi_n(x)\,e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$= c_m E_m\,\psi_m(x)\,e^{-iE_m t/\hbar} + c_n E_n\,\psi_n(x)\,e^{-iE_n t/\hbar}$$

となる、

右辺は時間に関する項は指数部だけであることに注意して

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\{c_m\psi_m(x)\,e^{-iE_m t/\hbar} + c_n\psi_n(x)\,e^{-iE_n t/\hbar}\}$$

$$= i\hbar\{c_m\psi_m(x)\frac{\partial e^{-iE_m t/\hbar}}{\partial t} + c_n\psi_n(x)\frac{\partial e^{-iE_n t/\hbar}}{\partial t}\}$$

$$= i\hbar\{c_m\psi_m(x)(-iE_m/\hbar)\,e^{-iE_m t/\hbar}$$

$$+ c_n\psi_n(x)(-iE_n/\hbar)\,e^{-iE_n t/\hbar}\}$$

$$= c_m E_m\,\psi_m(x)\,e^{-iE_m t/\hbar} + c_n E_n\,\psi_n(x)\,e^{-iE_n t/\hbar}$$

これは先に計算した左辺に一致しているのでシュレーディンガー方程式を満たすことが示せた。