宿題７　　　　　　　　　　　　　解答例

問１．時間を含むシュレーディンガー方程式は

$$H\,\psi(x\,,t) = i\,\hbar\,\frac{\partial\psi(x\,,t)}{\partial t}$$

と表せる。１粒子のハミルトニアンは次式で示される

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

位置の期待値は次式のように書ける。

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x\,,t)\,x\,\Psi(x\,,t)\,dx$$

s を時間を含まない物理量とし、$\hat{S}$ をその演算子とするとき

$$\frac{d}{dt}\langle s \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\,\hat{H}\,,\hat{S}\,] \rangle$$

と成ることを示せ。この関係を用いて次の関係式を示せ。

$$\frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle x\,\hat{p}_x + \hat{p}_x\,x \rangle$$

また $\hat{F}$ を力の演算子としてニュートン運動方程式に相当する式を導け。

$$\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = \langle -\frac{\partial V(x)}{\partial x} \rangle = \langle f \rangle$$

$\dfrac{d}{dt}\langle s \rangle = \dfrac{i}{\hbar}\langle [\,\hat{H}\,,\hat{S}\,] \rangle$　を求める。

$$\hat{H}\,\Psi(x,t) = i\,\hbar\,\frac{\partial\,\Psi(x,t)}{\partial t}$$　とこの複素共役

$$\hat{H}^*\,\Psi^*(x,t) = -\,i\,\hbar\,\frac{\partial\,\Psi^*(x,t)}{\partial t}$$　を用いる

$$\frac{d}{dt}\langle s \rangle = \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x\,,t)\,\hat{S}\,\Psi(x\,,t)\,dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \{\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(x,t)\,\hat{S}\,\Psi(x\,,t) + \Psi^*(x,t)\,\hat{S}\,\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)\}\,dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \{-\frac{\hat{H}^*}{i\,\hbar}\,\Psi^*(x\,,t)\,\hat{S}\,\Psi(x,t) + \Psi^*(x\,,t)\,\hat{S}\,\frac{\hat{H}}{i\,\hbar}\,\Psi(x\,,t)\,\}\,dx$$

$$= \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x\,,t)\,(\hat{H}\,\hat{S} - \hat{S}\,\hat{H}\,)\,\Psi(x\,,t)\;\;dx$$

$$= \frac{i}{\hbar}\langle [\,\hat{H}\,,\hat{S}\,] \rangle$$

$\dfrac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = \dfrac{1}{m}\langle x\,\hat{p}_x + \hat{p}_x\,x \rangle$　を上の結果を用いて求める。

まず交換子のそれぞれの項は

$$\hat{H}\hat{S} = \{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\}x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}(2x + x^2\frac{\partial}{\partial x}) + V(x)x^2$$

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

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

および

$$\hat{S}\hat{H} = x^2\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\} = -\frac{\hbar^2}{2m}x^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2V(x)$$

と求まったので交換子の値は

$$[\hat{H}, \hat{S}] = -\frac{i\hbar}{m}(p_x x + x p_x)$$

これを入れて整理すると求める関係式が得られる。

$$\frac{d}{dt} < x^2 > = \frac{i}{\hbar} < [\hat{H}, x^2] > = \frac{i}{\hbar} < -\frac{i\hbar}{m}(p_x x + x p_x) >$$

$$= \frac{1}{m} < x\hat{p}_x + \hat{p}_x x >$$

$\hat{S}$ を $\hat{p}_x$ と置いて上に求めた結果を用いると次式を得る。

$$\frac{d}{dt} < p_x > = \frac{i}{\hbar} < [\hat{H}, \hat{p}_x] > \qquad (1)$$

ここで

$$H p_x = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x))(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) = \frac{i\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3}{\partial x^3} + (-i\hbar V(x)\frac{\partial}{\partial x})$$

$$p_x H = (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)) = \frac{i\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3}{\partial x^3} + (-i\hbar)(\frac{\partial}{\partial x}V(x) + V(x)\frac{\partial}{\partial x})$$

であるから (1) 式は

$$\frac{d}{dt} < p_x > = \frac{i}{\hbar} < H p_x - p_x H > = \frac{i}{\hbar} < -(-i\hbar)(\frac{\partial}{\partial x}V(x)) > = < -\frac{\partial V(x)}{\partial x} > = < f >$$

と求められた。

問２． $\frac{d}{dx}e^{-\alpha x^2} = -2\alpha x e^{-\alpha x^2}$ であることを利用して、

積分 $\int_0^\infty x e^{-\alpha x^2} dx$ を求め、結果の両辺を α で微分を繰り返し

積分 $\int_0^\infty x^{2n+1} e^{-\alpha x^2} dx$ の一般式を求めよ。

結果の検証も行うこと。

与えられた式の両辺を積分すると $e^{-\alpha x^2} = -2\alpha\int x e^{-\alpha x^2} dx$ であるから

$$\int_0^\infty x e^{-\alpha x^2} dx = [-\frac{1}{2\alpha}e^{-\alpha x^2}]_0^\infty = \frac{1}{2\alpha}$$ と求まる。

この式の両辺を α で微分すると

左辺　$\dfrac{d}{d\alpha}\displaystyle\int_0^\infty x e^{-\alpha x^2}\,dx = -\int_0^\infty x^3 e^{-\alpha x^2}\,dx$

右辺　$\dfrac{d}{d\alpha}\dfrac{1}{2\alpha} = \dfrac{1}{2}\left(-\dfrac{1}{\alpha^2}\right)$

となり、次の関係が得られる。　$\displaystyle\int_0^\infty x^3 e^{-\alpha x^2}\,dx = \frac{1}{2}\frac{1}{\alpha^2}$

この式の両辺をまた α で微分すると

左辺＝$\displaystyle -\int_0^\infty x^5 e^{-\alpha x^2}\,dx$　右辺＝$\dfrac{1}{2}\dfrac{-2}{\alpha^3}$

微分を n 回繰り返すと

左辺は　$\dfrac{d^n}{d\alpha^n}\displaystyle\int_0^\infty x e^{-\alpha x^2}\,dx = (-1)^n\int_0^\infty x^{2n+1} e^{-\alpha x^2}\,dx$

右辺は　$\dfrac{d^n}{d\alpha^n}\dfrac{1}{2\alpha} = (-1)^n\dfrac{n!}{2\alpha^{n+1}}$

となる、まとめて次の一般式が得られる。

$$\int_0^\infty x^{2n+1} e^{-\alpha x^2}\,dx = \frac{n!}{2\alpha^{n+1}} \qquad \text{n は 0 を含む正の整数} \qquad (1\text{-}1)$$

ただし $0! = 1$ と定義する。

この表示で良いか確かめる。

$n = 0$ の時 (1-1) に入れると $\displaystyle\int_0^\infty x e^{-\alpha x^2}\,dx = \frac{1}{2\alpha}$ が得られるこれは元の式である。$n = 1$ の時には $\displaystyle\int_0^\infty x^3 e^{-\alpha x^2}\,dx = \frac{1}{2\alpha^2}$ となり上の計算に一致することが確かめられた。

問３．積分 $\displaystyle\int_0^\infty x e^{-\alpha x}\,dx$ の値を部分積分を用いて求めよ。得られた結果の両辺を α で微分を繰り返し積分 $\displaystyle\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x}\,dx$ の一般式を求めよ。

結果の検証も行うこと。

与式を部分積分すると

$$\int_0^\infty x e^{-\alpha x}\,dx = \left[x\frac{e^{-\alpha x}}{-\alpha}\right]_0^\infty - \int_0^\infty \frac{1}{-\alpha} e^{-\alpha x}\,dx$$

$$= 0 + \frac{1}{\alpha}\left[\frac{e^{-\alpha x}}{-\alpha}\right]_0^\infty = \frac{1}{\alpha}\left(0 - \frac{1}{-\alpha}\right) = \frac{1}{\alpha^2}$$

まとめて $\displaystyle\int_0^\infty x e^{-\alpha x}\,dx = \frac{1}{\alpha^2}$　この式の両辺を α で微分する。

$$\frac{d}{d\alpha}\int_0^\infty x e^{-\alpha x}\,dx = \int_0^\infty (-x^2)\, e^{-\alpha x}\,dx \qquad \frac{d}{d\alpha}\frac{1}{\alpha^2} = \frac{-1\cdot 2}{\alpha^3}$$

もう一度両辺を α で微分する。

$$\frac{d}{d\alpha}\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x}dx = \int_0^\infty (-x^3)e^{-\alpha x}dx \qquad \frac{d}{d\alpha}\frac{1\cdot 2}{\alpha^3} = \frac{-1\cdot 2\cdot 3}{\alpha^3}$$

微分をｎ - １回繰り返すと

$$(-1)^{n-1}\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x}dx = (-1)^{n-1}\frac{1\cdot 2\cdot 3\cdots n}{\alpha^{n+1}} = (-1)^{n-1}\frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x}dx = \frac{1\cdot 2\cdot 3\cdots n}{\alpha^{n+1}} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

検算　$n=1$ 　　　　　　　　　　　　　　　　　　　$n=2$

$$\int_0^\infty x^1 e^{-\alpha x}dx = \frac{1!}{\alpha^2} = \frac{1}{\alpha^2} \qquad \int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x}dx = \frac{2!}{\alpha^3} = \frac{2}{\alpha^3}$$

となり確かめられた。なお $n=0$ の時も成り立つ。

$$\int_0^\infty x^0 e^{-\alpha x}dx = \int_0^\infty e^{-\alpha x}dx = \frac{0!}{\alpha^1} = \frac{1}{\alpha}$$

別の求め方　部分積分の繰り返しによる解法

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x}dx = \left[x^n\frac{e^{-\alpha x}}{-\alpha}\right]_0^\infty - \frac{n}{-\alpha}\int_0^\infty x^{n-1}e^{-\alpha x}dx = \frac{n}{\alpha}\int_0^\infty x^{n-1}e^{-\alpha x}dx$$

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

$$= \frac{n}{\alpha}\frac{n-1}{\alpha}\cdots\frac{1}{\alpha}\int_0^\infty x^0 e^{-\alpha x}dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$