期待値とニュートン力学

時間を含むシュレーディンガー方程式は（4.15）式より

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

と表せ、位置の期待値は次式のように書ける。

$$<x> = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)\,dx \tag{4.50}$$

この式の両辺を時間で微分すると

$$\frac{d}{dt}<x> = \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)\,dx$$

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

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

$$= \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)(\hat{H}x - x\hat{H})\Psi(x,t)\,dx \tag{4.51}$$

を得る。ハミルトニアンは

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

であるのでカッコ内を別々に演算すると

$$\hat{H}x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}x + V(x)x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}(1 + x\frac{\partial}{\partial x}) + V(x)x$$

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

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

が得られる。これをまとめると

$$\hat{H}x - x\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x} = -\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$$

となる。この結果を（4.51）式に代入して

$$\frac{d}{dt}<x> = \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)(-\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x)\Psi(x,t)\,dx = \frac{<\hat{p}_x>}{m}$$

が得られる。整理すると

$$m\frac{d<x>}{dt} = <\hat{p}_x>$$

となる。期待値についてニュートン力学と同じ式が得られる。

この関係をもう一度時間について微分するとニュートン運動方程式が得られる。

A 偶関数・奇関数

偶関数　$f(x)=f(-x)$

$$\int_{-a}^{a} f(x)\,dx=\int_{0}^{a} f(x)\,dx+\int_{-a}^{0} f(x)\,dx$$

$x=-u$ と置くと $dx=-du$　　　　$f(u)=f(-u)$

$$\int_{-a}^{a} f(x)\,dx=\int_{0}^{a} f(x)\,dx-\int_{a}^{0} f(-u)\,du$$

$$=\int_{0}^{a} f(x)\,dx-\int_{a}^{0} f(u)\,du$$

$$=\int_{0}^{a} f(x)\,dx+\int_{0}^{a} f(u)\,du=2\int_{0}^{a} f(x)\,dx$$

奇関数　$f(x)=-f(-x)$

$$\int_{-a}^{a} f(x)\,dx=\int_{0}^{a} f(x)\,dx+\int_{-a}^{0} f(x)\,dx$$

$$=\int_{0}^{a} f(x)\,dx-\int_{a}^{0} f(-u)\,du \qquad f(u)=-f(-u)$$

$$=\int_{0}^{a} f(x)\,dx+\int_{a}^{0} f(u)\,du$$

$$=\int_{0}^{a} f(x)\,dx-\int_{0}^{a} f(u)\,du=0$$

関数の積　$h(x)=f(x)\cdot g(x)$ と置くと

$f(x)=f(-x)$, $g(x)=g(-x)$ の時（偶関数同士）

$h(x)=f(x)\cdot g(x)=f(-x)\cdot g(-x)=h(-x)$　偶関数

$f(x)=-f(-x)$, $g(x)=-g(-x)$ の時（奇関数同士）

$h(x)=f(x)\cdot g(x)=-f(-x)\cdot\{-g(-x)\}=h(-x)$　偶関数

$f(x)=f(-x)$, $g(x)=-g(-x)$ の時（偶関数と奇関数）

$h(x)=f(x)\cdot g(x)=f(-x)\cdot\{-g(-x)\}=-h(-x)$　奇関数

偶・偶＝偶　奇・奇＝偶　偶・奇＝奇・偶＝奇　となる。

箱の中の粒子で見てみよう

3.4 では壁が 0 と a にあるとして解いた、これを座標をずらして $-a$ と a に有るとして解くには $u=2x-a$ と置くと $x=0$ の時 $u=-a$ 、 $x=2a$ の時 $u=a$ であるから、

$\psi(x) = B\sin\dfrac{n\pi x}{a}$ より

$$\psi(u) = B\sin\frac{n\pi(u+a)}{2a}$$

$$= B\{\sin\frac{n\pi u}{2a}\cos\frac{n\pi}{2} + \cos\frac{n\pi u}{2a}\sin\frac{n\pi}{2}\}$$

$$= \left\{\begin{array}{ll} B\cos\dfrac{n\pi u}{2a} & n = 1, 3, 5, \cdots \\ B\sin\dfrac{n\pi u}{2a} & n = 2, 4, 6, \cdots \end{array}\right\}$$

となり、 cos 関数と sin 関数が交互に出てくることになる。 $u = x$ と置き直して

$\int_{-a}^{a}\psi_n^*(x)\psi_n(x)\,dx \neq 0$　　偶×偶または奇×奇となり偶関数になるので値を持つ。

$< x > = \int_{-a}^{a} x\,\psi_n^*(x)\psi_n(x)\,dx = 0$　　奇×偶で奇関数となるので値を持たない。

$< p_x > = \int_{-a}^{a}\psi_n^*(x)\,(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\,\psi_n(x)\,dx = 0$　　この場合も被積分関数は奇関数となるので値を持たない。

B ２，３の関数の積分を求める

エルミート多項式関連（調和振動子）

$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\,dx = I$ とおいて積分値を求める

$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\,dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2}\,dy = I^2$ ここで平面座標を用いる

$r^2 = x^2 + y^2$, $dS = dx\,dy = r\,d\theta\,dr$ の関係から

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\,dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2}\,dy = \iint_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2+y^2)}\,dx\,dy$$

$$= \iint e^{-r^2}\,r\,d\theta\,dr = \int_0^{\infty} re^{-r^2}\,dr \int_0^{2\pi} d\theta$$

$$= 2\pi\left[-\frac{1}{2}e^{-r^2}\right]_0^{\infty} = \pi$$

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\,dx = \sqrt{\pi} \tag{1}$$

(1) 式において

$u = \sqrt{\alpha}x$ と置くと $du = \sqrt{\alpha}\,dx$, $u^2 = \alpha x^2$ であるから

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2}\,du\,/\,\sqrt{\alpha} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{2}$$

偶関数であることから (2) 式は

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x^2}\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha}} \tag{3}$$

と得られる。

(3) 式の両辺を α で微分して一般式を求める１回微分すると

$$\frac{d}{d\alpha}\int_0^\infty e^{-\alpha x^2}\,dx = -\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2}\,dx \qquad \frac{d}{d\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{4\alpha}} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^3}}$$

２回微分（ー符号は両辺に有るのでしばらく無視する）

$$\frac{d}{d\alpha}\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2}\,dx = -\int_0^\infty x^4 e^{-\alpha x^2}\,dx \qquad \frac{d}{d\alpha}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^3}} = -\frac{1}{2}\,\frac{3}{2}\sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^5}}$$

ｎ回微分すると

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

$$\frac{d^n}{d\alpha^n}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = (-1)^n\,\frac{1\cdot 3\cdots(2n-1)}{2^n}\sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^{2n+1}}}$$

が得られるので一般式は

$$\int_0^\infty x^{2n} e^{-\alpha x^2}\,dx = \frac{1\cdot 3\cdots(2n-1)}{2^n}\sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^{2n+1}}} = \frac{1\cdot 3\cdots(2n-1)}{2^{n+1}\alpha^n}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{4}$$

と表すことができる。