

量子力学講義

小川 哲生 著

章末問題略解

第1章

(1) 次の積分計算を用いよ .

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \frac{x^3}{\exp(x)-1} dx &= \int_0^\infty dx x^3 \exp(-x) \frac{1}{1-\exp(-x)} \\&= \int_0^\infty dx x^3 \exp(-x) \sum_{n=0}^\infty \exp(-nx) = \sum_{n=0}^\infty \int_0^\infty dx x^3 \exp[-(n+1)x] \\&= \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{(n+1)^4} \int_0^\infty dy y^3 \exp(-y) = 6 \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{(n+1)^4} = \frac{\pi^4}{15}.\end{aligned}$$

(2) $\lambda = c/\nu$ を用いて , (1.4) の $u(\nu, T)$ を λ の関数として書き換えると ,
 $d\nu = cd\lambda/\lambda^2$ に注意して ,

$$u(\lambda, T) = \frac{8\pi ch}{\lambda^5} \frac{1}{\exp[ch/(k_B T \lambda)] - 1}$$

となる . この $u(\lambda, T)$ が極大となる波長が $\lambda_{\max}$ で ,

$$\lambda_{\max} T = \frac{1}{\alpha} \frac{ch}{k_B} = \frac{1}{4.965} \frac{ch}{k_B}$$

となる . ここで α は , 方程式 $(5 - \alpha)e^\alpha = 5$ の解である . h, c, k_B の数値を代入すると , 右辺は $2.8977 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$ となり , ウィーンの変移則とのよい一致をみる .

(3) 解説 1.6 を参照せよ . イオン化エネルギーは $\hbar^2/(2\mu a_B^2)$ なので , 13.6058 eV である .

(4) $m = 3$ は 656.1 nm , $m = 4$ は 486.0 nm , $m = 5$ は 433.9 nm .

第2章

(1) 位相 $\varphi(\mathbf{r}, t)$ が一定の面 (波面という) が単位時間に $\mathbf{k}$ の方向に進む距離が位相速度である . 波面上では $d\varphi = \mathbf{k} \cdot d\mathbf{r} - \omega dt = 0$ であるから , $d\mathbf{r}$ として $\mathbf{k}$ 方向の微小ベクトルをとれば , $d\mathbf{r}/dt = \omega/|\mathbf{k}|$ となる .

- (2) (a) $i\hbar f(\mathbf{r})$.
 (b) 0.

第3章

- (1) 任意の連続関数を $f(x)$ とすると,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(\alpha x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{x'}{\alpha}\right)\delta(x')\frac{dx'}{\alpha} = \frac{f(0)}{\alpha}.$$

- (2) 階段関数 $\theta(x-a)$ のフーリエ変換は

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(x-a) \exp(-ikx)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_a^{\infty} \exp(-ikx)dx$$

である．右辺の被積分関数に収束因子 $\exp(-\epsilon x)$ を掛けて，積分してから $\epsilon \rightarrow 0+$ とすると，

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \int_a^{\infty} \exp(-ikx - \epsilon x)dx &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\exp(-ika - \epsilon a)}{ik + \epsilon} \\ &= -i \exp(-ika) \left[P \frac{1}{k} \mp i\pi\delta(k) \right] \end{aligned}$$

となり，結局

$$\mathcal{F}[\theta(x-a)] = \frac{-i \exp(-ika)}{\sqrt{2\pi}} \left[P \frac{1}{k} \mp i\pi\delta(k) \right]$$

となる．ここで記号 P は，積分に際してコーシーの主値をとることを意味する．なお， ϵ を無限小の正の数としたときの関数 $1/(x \pm i\epsilon) = -i \int_0^{\pm\infty} \exp[ik(x \pm i\epsilon)]dk$ はディラックのデルタ関数と関係が深く，

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = P \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)$$

で結びついている．計算の途中でこの関係式を用いた．

- (3) 任意の f_1 と f_2 に対して， $\int f_1^*(\hat{A}f_2)d^3\mathbf{r} = \int (\hat{A}^\dagger f_1)^* f_2 d^3\mathbf{r}$ が成り立

つことを示せばよい． $(\hat{O}^\dagger \hat{O})^\dagger = \hat{O}^\dagger \hat{O}$ ， $(\hat{O}^\dagger + \hat{O})^\dagger = \hat{O}^\dagger + \hat{O} = \hat{O}^\dagger + \hat{O}$ ， $[i(\hat{O} - \hat{O}^\dagger)]^\dagger = -i(\hat{O}^\dagger - \hat{O}) = i(\hat{O} - \hat{O}^\dagger)$ が成り立つ．また， $\hat{O} = (\hat{O} + \hat{O}^\dagger)/2 + i(\hat{O} - \hat{O}^\dagger)/2i$ を用いる．

- (4) (a) $N = \sqrt{a/2}$.

(b) 定数 a が長さの逆数の次元をもつから，規格化された波動関数は， $(\text{長さ})^{-1/2}$ の次元をもつ．

- (5) まず，ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ は

$$\int \psi^*(\mathbf{r})[V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})]d^3\mathbf{r} = \int [V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})]^*\psi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}$$

なのでエルミートである．次に，解説 1.12 より，運動量演算子 $\hat{p}$ はエルミート演算子だから，

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right)^\dagger = \frac{1}{2m}\hat{p}^\dagger \cdot \hat{p}^\dagger = \frac{1}{2m}\hat{p} \cdot \hat{p} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

が成り立ち，運動エネルギー部分もエルミートであることがわかる．

(6)

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{(3.23)}{=} \int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} \stackrel{(3.38)}{=} \int \left| \sum_n C_n(t) \chi_n(\mathbf{r}) \right|^2 d^3\mathbf{r} \\ &= \int \left[\sum_n C_n^*(t) \chi_n^*(\mathbf{r}) \right] \left[\sum_m C_m(t) \chi_m(\mathbf{r}) \right] d^3\mathbf{r} \\ &= \sum_{n,m} C_n^*(t) C_m(t) \int \chi_n^*(\mathbf{r}) \chi_m(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \stackrel{(3.39)}{=} \sum_n |C_n(t)|^2. \end{aligned}$$

(7) (3.38) の両辺に $\chi_m^*(\mathbf{r})$ を掛けて $\mathbf{r}$ で積分すると，

$$\begin{aligned} \int \chi_m^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} &= \int \chi_m^*(\mathbf{r}) \sum_n C_n(t) \chi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ &= \int \sum_n C_n(t) \chi_m^*(\mathbf{r}) \chi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \stackrel{(3.39)}{=} C_m(t). \end{aligned}$$

(8)

$$\begin{aligned} \int_{-L/2}^{L/2} \chi_{k'}^*(x) \chi_k(x) dx &= \frac{1}{2\pi} \int_{-L/2}^{L/2} \exp[i(k - k')x] dx \\ &= \begin{cases} \frac{L}{2\pi} & k = k' \\ \frac{\sin[L(k - k')/2]}{\pi(k - k')} & k \neq k' \end{cases}. \end{aligned}$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L/2}^{L/2} \chi_{k'}^*(x) \chi_k(x) dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(k - k')x] dx = \delta(k - k').$$

(9) (3.50) の右辺に (3.41) とその複素共役を代入し，閉包関係 (3.42) を用いる．

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &\stackrel{(3.41)}{=} \sum_n a_n \left[\int \chi_n(\mathbf{r}) \Psi^*(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \right] \left[\int \chi_n^*(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t) d^3\mathbf{r}' \right] \\ &= \sum_n \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \Psi^*(\mathbf{r}, t) a_n \chi_n(\mathbf{r}) \chi_n^*(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t) \\ &= \sum_n \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \chi_n(\mathbf{r}) \chi_n^*(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t) \\ &= \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \sum_n \left[\chi_n(\mathbf{r}) \chi_n^*(\mathbf{r}') \right] \Psi(\mathbf{r}', t) \\ &\stackrel{(3.42)}{=} \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \Psi(\mathbf{r}', t) d^3\mathbf{r}. \end{aligned}$$

- (10) (2.27) の両辺に $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ を掛けた式から , (2.27) の複素共役に $\Psi(\mathbf{r}, t)$ を掛けた式を辺々引くと ,

$$\Psi^* i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \left[(-i)\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \right] = \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi \right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + V\Psi^* \right) \Psi.$$

これより , 確率密度 $\rho(\mathbf{r}, t) \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ をある有限領域 D 内で積分した量 $\int_D \rho(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}$ の時間微分は ,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_D \rho(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} &= \int_D \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \right) d^3\mathbf{r} \\ &= \int_D \left(-\frac{\hbar}{2im} \right) [\Psi^* \nabla^2 \Psi - (\nabla^2 \Psi^*) \Psi] d^3\mathbf{r} \\ &= \int_D \left(-\frac{\hbar}{2im} \right) \nabla \cdot [\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi] d^3\mathbf{r} \\ &= - \int_D \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \end{aligned}$$

となるので , 被積分関数を比較すると , 連続の方程式 (3.69) が得られる . また , ガウスの定理を用いて領域 D の表面 S の積分に書き換えると , 最後の式は , $-\int_S \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} dS$ と変形できるが , 面積要素 dS の外向き法線ベクトルを $\mathbf{n}$ としているので , この積分は , 表面 S を通って領域 D の内部から外部に流れ出る確率密度流の総量を表している . よって , D を全空間と考えれば , 確率密度の流れ込みや流れ出しは無いから , 全確率は保存し , 規格化条件は常に成り立っていることになる .

- (11) 全確率の保存則 , すなわち時間 t によらず波動関数の規格化条件は常に満たされていることを式で表すと ,

$$\int \Psi^*(\mathbf{r}, 0) \Psi(\mathbf{r}, 0) d^3\mathbf{r} = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}$$

となる . この右辺を , (3.66) を使って変形すると ,

$$\begin{aligned} \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} &\stackrel{(3.66)}{=} \int [\hat{U}(t, 0) \Psi(\mathbf{r}, 0)]^* \hat{U}(t, 0) \Psi(\mathbf{r}, 0) d^3\mathbf{r} \\ &= \int \Psi^*(\mathbf{r}, 0) \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{U}(t, 0) \Psi(\mathbf{r}, 0) d^3\mathbf{r} \end{aligned}$$

となるので , 両式を比べると , $\hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{U}(t, 0) = 1$ でなければならないことがわかる .

第4章

- (1) 自由粒子なので， $\psi(x)$ は波数演算子の固有関数 $\psi_k(x) = N \exp(ikx)$ の形をしている．これが周期的境界条件 $\psi(x+L) = \psi(x)$ を満たすには，波数が $k_n = 2n\pi/L$ であればよい．ここで， $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ である．箱形規格化をおこなうと，規格化定数は $N = 1/\sqrt{L}$ ．エネルギー固有値は， $E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m = (\hbar^2 / 2m)(2n\pi/L)^2$ ．
- (2) 同じエネルギー固有値 E に属する1次元系の束縛状態を表す波動関数が2つ存在したとする．それらを $\psi_1(x)$ と $\psi_2(x)$ とする．どちらもシュレーディンガー方程式を満たすから， $\hat{H}\psi_1 = E\psi_1$ と $\hat{H}\psi_2 = E\psi_2$ が成り立っている．ここで， $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 + V(x)$ である．2つのシュレーディンガー方程式の両辺に ψ_2 と ψ_1 を掛けて引き算すると， $\psi_2 d^2\psi_1/dx^2 - \psi_1 d^2\psi_2/dx^2 = 0$ となるが，これは $\psi_2 d\psi_1/dx - \psi_1 d\psi_2/dx$ が x に依存しない定数であることを意味する．束縛状態の波動関数には，境界条件として $\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi_1(x) = \lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi_2(x) = 0$ が課されているので，この定数は0でなければならない．よって， $\psi_2 d\psi_1/dx - \psi_1 d\psi_2/dx = 0$ より， x に依らない定数 c を用いて $\psi_1(x) = c\psi_2(x)$ でなければならない．これは同じ状態を表す（1次従属な）波動関数なので，縮退はないことになる．
- (3) 前者では，確率密度流は $j(x, t) = v|N|^2$ となる．デルタ関数規格化をすれば $j(x, t) = v/2\pi$ である．状態 $\exp[i(kx - \omega t)]$ は，粒子が波数 k の等速で運動している「進行波」を表す．他方，後者の実関数の波動関数で計算すると，確率密度流は $j(x, t) = 0$ となる． $\cos(kx - \omega t)$ は「定在波」を表すので，確率密度の流れは左向きと右向きとで相殺して0となる．
- (4) (a) $|N| = \sqrt{\alpha}/\pi^{1/4}$.
 (b) $\Psi(k, t) = (\pi\alpha^2)^{-1/4} \exp(-k^2/2\alpha^2) \exp(-i\omega t)$.
 (c) $1/(\sqrt{2}\alpha)$.
 (d) $\alpha/\sqrt{2}$.
- (5) $T = 0.88$.
- (6) $n = 1, 3, 5, \dots = 2\nu - 1$ ($\nu = 1, 2, 3, \dots$) のとき，

$$\psi_n(k) = (-1)^\nu \frac{2n\sqrt{\pi}}{L^{3/2}} \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \left[k^2 - \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\right]^{-1}.$$

$n = 2, 4, 6, \dots = 2\nu$ ($\nu = 1, 2, 3, \dots$) のとき，

$$\psi_n(k) = i(-1)^{\nu+1} \frac{2n\sqrt{\pi}}{L^{3/2}} \sin\left(\frac{kL}{2}\right) \left[k^2 - \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\right]^{-1}.$$

いずれの場合も，分母が0になる点 $k = \pm n\pi/L$ は零点ではないし，発散も生じない．波数の存在確率密度 $|\psi_n(k)|^2$ は， $k = \pm n\pi/L$ 付近

に大きな2つのピークを持つ関数となる．ただし，基底状態 ($n = 1$) では， $k = 0$ に大きなピークが存在する．

- (7) 束縛状態の波動関数 $\psi(x)$ は，境界条件 $\psi(0) = \psi(\infty) = 0$ を満たす．束縛状態のエネルギー固有値を E とし， $k = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$ ， $\kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ とおくと，2つの領域での解の形は，

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin(kx) & 0 < x < L/2 \\ B \exp(-\kappa x) & x > L/2 \end{cases}$$

となる． $x = L/2$ での $\psi(x)$ と $d\psi(x)/dx$ の連続性条件より， $\tan(kL/2) = -k/\kappa$ が成り立つ．この超越方程式を満たす E が束縛状態のエネルギー固有値である．この解は，108 ページの解と同じである．すなわち，対称な井戸形ポテンシャル (4.46) での，奇パリティの解 $\psi(-x) = -\psi(x)$ に相当する．奇パリティの波動関数は，原点での境界条件 $\psi(0) = 0$ を満たしているので，この問題の解にもなり得る．

- (8) 基底状態の波数表示の波動関数は， $1/\rho \equiv (\hbar/m\omega)^{1/2}$ として

$$\tilde{\psi}_0(k_x) = \left(\frac{1}{\pi\rho^2} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{k_x^2}{2\rho^2} \right)$$

となる．これから $\langle k_x^2 \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}_0^*(k_x) k_x^2 \tilde{\psi}_0(k_x) dk_x = m\omega/(2\hbar)$ が得られ，基底状態の運動エネルギーの期待値は $\hbar\omega/4$ となる．

第5章

- (1) 無摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ のエネルギー固有値は非縮退で $E_1^{(0)} = \Delta$ と $E_2^{(0)} = -\Delta$ ，それぞれの固有関数は $\psi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ， $\psi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ である．

(a) エネルギー固有値の1次の補正項は，(5.11) より $E_1^{(1)} = E_2^{(1)} = 0$ となるので，1次摂動ではエネルギー固有値は変わらない．波動関数の1次の補正項は (5.14) より， $\psi_1^{(1)} = \frac{v}{2\Delta} \psi_2^{(0)}$ ， $\psi_2^{(1)} = -\frac{v}{2\Delta} \psi_1^{(0)}$ となるので，1次摂動での固有関数は，規格化もおこなうと，

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \sqrt{1 - \frac{v^2}{4\Delta^2}} \psi_1^{(0)} + \frac{v}{2\Delta} \psi_2^{(0)}, \\ \psi_2 &= -\frac{v}{2\Delta} \psi_1^{(0)} + \sqrt{1 - \frac{v^2}{4\Delta^2}} \psi_2^{(0)}. \end{aligned}$$

(b) エネルギー固有値の2次の補正項は (5.16) より， $E_1^{(2)} = v^2/(2\Delta)$ ， $E_2^{(2)} = -v^2/(2\Delta)$ である．2次摂動での固有関数は，

$$\psi_1 = \sqrt{1 - \frac{v^2}{4\Delta^2} \left(1 - \frac{v^2}{4\Delta^2} \right)} \psi_1^{(0)} + \frac{v}{2\Delta} \sqrt{1 - \frac{v^2}{4\Delta^2}} \psi_2^{(0)},$$

$$\psi_2 = -\frac{v}{2\Delta}\sqrt{1-\frac{v^2}{4\Delta^2}}\psi_1^{(0)} + \sqrt{1-\frac{v^2}{4\Delta^2}}\left(1-\frac{v^2}{4\Delta^2}\right)\psi_2^{(0)}.$$

(c) エネルギー固有値の厳密解は, $E_{\pm} = \pm\sqrt{\Delta^2 + v^2}$ である. 正負それぞれに対応する固有ベクトルの厳密解は,

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{1 \pm \frac{1}{\sqrt{1+v^2/\Delta^2}}} \\ \sqrt{1 \mp \frac{1}{\sqrt{1+v^2/\Delta^2}}} \end{pmatrix}.$$

v が小さいとして展開すると,

$$E_{\pm} \approx \pm \left(\Delta + \frac{v^2}{2\Delta} - \frac{v^4}{8\Delta^3} + \cdots \right),$$

$$\psi_+ \approx \begin{pmatrix} 1 - \frac{v^2}{8\Delta^2} + \cdots \\ \frac{v}{2\Delta} + \cdots \end{pmatrix}, \quad \psi_- \approx \begin{pmatrix} -\frac{v}{2\Delta} + \cdots \\ 1 - \frac{v^2}{8\Delta^2} + \cdots \end{pmatrix}.$$

(2) (a) エネルギー固有値の1次の補正項は0. 2次の補正項は $-F^2/(2m\omega^2)$.
よって, 2次摂動の範囲でのエネルギー固有値は, $(n + 1/2)\hbar\omega - F^2/(2m\omega^2)$. ちなみに, 2次摂動の範囲での波動関数は,

$$\psi_n(x) = \psi_n^{(0)}(x) - \frac{F}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}} \left[\sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)}(x) - \sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)}(x) \right].$$

エネルギー固有値の厳密解は $(n + 1/2)\hbar\omega - F^2/(2m\omega^2)$ で, 2次摂動での結果と一致する. ちなみに, 波動関数の厳密解は, $x_0 \equiv F/(m\omega^2)$ として

$$\psi_n^{\text{exact}}(x) = A_n \exp\left[-\frac{\rho^2}{2}(x - x_0)^2\right] H_n(\rho(x - x_0)).$$

(b) $t > 0$ での遷移確率は, ポアソン分布

$$P_n = \frac{1}{n!} \left(\frac{m\omega x_0^2}{2\hbar} \right)^n \exp\left(-\frac{m\omega x_0^2}{2\hbar}\right).$$

(3) ハミルトニアン $\hat{p}^2/2m$ の期待値を試行関数を用いて計算すると,

$$E[\phi_{\text{trial}}(a, b)] = \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{2a-1} + \frac{1}{2b-1} \right) (a+b)(2a+2b+1).$$

これは $a = b$ のときに, $\partial E[\phi_{\text{trial}}(a, b)]/\partial a = \partial E[\phi_{\text{trial}}(a, b)]/\partial b$ となる.

$$E[\phi_{\text{trial}}(a, b=a)] = \frac{\hbar^2}{2m} \left(4a + 3 + \frac{3}{2a-1} \right),$$

$$\frac{\partial E[\phi_{\text{trial}}(a, b=a)]}{\partial a} = \frac{\hbar^2}{m} \left[2 - \frac{3}{(2a-1)^2} \right]$$

なので, $a = b = (1 + \sqrt{3/2})/2$ のときに $E[\phi_{\text{trial}}(a, b)]$ は極小になり, このときのエネルギーは, $(\hbar^2/2m)(5 + 2\sqrt{6})$. 厳密な値は $E_{\text{GS}}^{\text{exact}} = \hbar^2\pi^2/2m$ なので, $E[\phi_{\text{trial}}]/E_{\text{GS}}^{\text{exact}} = (5 + 2\sqrt{6})/\pi^2 \simeq 9.899/\pi^2 \simeq 1.003$ となり, 誤差は解説 5.17 の結果よりも小さい.

- (4) 古典的な運動が可能な領域の端点は, $x = \pm x_0 \equiv \pm\sqrt{2E/(m\omega^2)}$ である. (5.89) より,

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} dx \left[2m \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \right]^{1/2} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi$$

が $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して成り立つ. これより, エネルギー固有値は $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ となり, 厳密解と一致する.

第6章

- (1) $\mu = m_e/(1 + m_e/m_p) \simeq m_e(1 - 1/1836) \simeq 0.99945m_e$.
 (2) ベクトル解析や電磁気学で習うガウスの法則 (の積分表現) において, 体積積分 $-\int \nabla \cdot (\mathbf{r}/r^2) d^3\mathbf{r} = \int \nabla^2(1/r) d^3\mathbf{r}$ の値は, 体積積分を行う領域に原点 $r = 0$ を含むか否かで値が変わる. 原点を含む場合は, 上記の積分の値は -4π となるが, 含まない場合は0である. よって, $\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta(x)\delta(y)\delta(z)$ と表せる.
 (3) 省略
 (4)

$$\begin{aligned} \langle L_x \rangle &= \langle Y_{lm} | \hat{L}_x | Y_{lm} \rangle = \left\langle Y_{lm} \left| \frac{1}{2} (\hat{L}^{(+)} + \hat{L}^{(-)}) \right| Y_{lm} \right\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} \left\langle Y_{lm} \left| \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \right| Y_{l,m+1} \right\rangle + \frac{\hbar}{2} \left\langle Y_{lm} \left| \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \right| Y_{l,m-1} \right\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \langle Y_{lm} | Y_{l,m+1} \rangle + \frac{\hbar}{2} \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \langle Y_{lm} | Y_{l,m-1} \rangle \\ &= 0, \\ \langle L_x^2 \rangle &= \langle Y_{lm} | \hat{L}_x^2 | Y_{lm} \rangle = \left\langle Y_{lm} \left| \frac{1}{2} (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) \right| Y_{lm} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle Y_{lm} | \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2 | Y_{lm} \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m^2]. \end{aligned}$$

- (5) エネルギー固有関数を変数分離し, $\psi(r, \varphi) = R(r)\Phi(\varphi)$ とする. 角度依存部分は, 固有方程式 $(\hbar/i)\partial\Phi(\varphi)/\partial\varphi = l\hbar\Phi(\varphi)$ から決まる. 動径方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l^2}{r^2} \right) + \frac{m\omega^2}{2} r^2 - E \right] R(r) = 0$$

となる．このべき級数解が有限項で終わるための条件から，エネルギー固有値は $E_n = \hbar\omega(n+1)$ となり，主量子数 $n = 0, 1, 2, \dots$ だけに依存する．

(6)

$$\begin{aligned}\langle r^n \rangle &= \int_0^\infty r^n P_{00}(r) dr = \frac{(n+2)!}{2^{n+1}} a_B^n, \\ \langle V \rangle &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle r^{-1} \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B}, \\ \langle K \rangle &= -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_B} - \langle V \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_B}.\end{aligned}$$

第7章

(1) フェルミ粒子の場合，(7.9) や (7.10) より，

$$\begin{aligned}\Psi_{m,n,r}^{(A)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\phi_m(\mathbf{r}_1) \phi_n(\mathbf{r}_2) \phi_r(\mathbf{r}_3) - \phi_m(\mathbf{r}_1) \phi_n(\mathbf{r}_3) \phi_r(\mathbf{r}_2) \right. \\ &\quad - \phi_m(\mathbf{r}_2) \phi_n(\mathbf{r}_1) \phi_r(\mathbf{r}_3) + \phi_m(\mathbf{r}_2) \phi_n(\mathbf{r}_3) \phi_r(\mathbf{r}_1) \\ &\quad \left. + \phi_m(\mathbf{r}_3) \phi_n(\mathbf{r}_1) \phi_r(\mathbf{r}_2) - \phi_m(\mathbf{r}_3) \phi_n(\mathbf{r}_2) \phi_r(\mathbf{r}_1) \right].\end{aligned}$$

3つの量子数 m, n, r のうち，どれか2つの値が等しいときは， $\Psi_{m,n,r}^{(A)} = 0$ となることがすぐに分かる．ボーズ粒子の場合は，(7.11) より，

$$\begin{aligned}\Psi_{m,n,r}^{(S)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\phi_m(\mathbf{r}_1) \phi_n(\mathbf{r}_2) \phi_r(\mathbf{r}_3) + \phi_m(\mathbf{r}_1) \phi_n(\mathbf{r}_3) \phi_r(\mathbf{r}_2) \right. \\ &\quad + \phi_m(\mathbf{r}_2) \phi_n(\mathbf{r}_1) \phi_r(\mathbf{r}_3) + \phi_m(\mathbf{r}_2) \phi_n(\mathbf{r}_3) \phi_r(\mathbf{r}_1) \\ &\quad \left. + \phi_m(\mathbf{r}_3) \phi_n(\mathbf{r}_1) \phi_r(\mathbf{r}_2) + \phi_m(\mathbf{r}_3) \phi_n(\mathbf{r}_2) \phi_r(\mathbf{r}_1) \right].\end{aligned}$$

(2) $K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \langle x_2 | \exp(-i\hat{H}t/\hbar) | x_1 \rangle$ に，波数演算子の固有状態の閉包関係 $1 = \int dk |k\rangle \langle k|$ を挿入し，

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \int dk \left\langle x_2 \left| \exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right) \right| k \right\rangle \langle k | x_1 \rangle$$

とする． $\hat{H} = \hbar^2 \hat{k}^2 / 2m$ と $\langle x | k \rangle = (2\pi)^{-1/2} \exp(ikx)$ を利用して変形すると，

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \frac{1}{2\pi} \int dk \exp\left[-i\frac{\hbar k^2(t_2 - t_1)}{2m}\right] \exp[ik(x_2 - x_1)]$$

となる．このガウス積分を実行して，

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \left[\frac{m}{2\pi i \hbar (t_2 - t_1)} \right]^{1/2} \exp\left[i\frac{m(x_2 - x_1)^2}{2\hbar(t_2 - t_1)}\right].$$

(3) 結果のみ示すと ,

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \left[\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t_2 - t_1)]} \right]^{1/2} \times \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin[\omega(t_2 - t_1)]} [(x_1^2 + x_2^2) \cos[\omega(t_2 - t_1)] - 2x_1 x_2] \right\}.$$

(4) 波数演算子の固有状態の閉包関係を 2 回用いて

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{r} \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} \right| \mathbf{r}' \right\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 \mathbf{k}_1 \int d^3 \mathbf{k}_2 \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_1 \rangle \left\langle \mathbf{k}_1 \left| \frac{1}{E - (\hbar^2 \mathbf{k}_1^2 / 2m) \pm i\epsilon} \right| \mathbf{k}_2 \right\rangle \langle \mathbf{k}_2 | \mathbf{r}' \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{k}_1 \frac{\exp[i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] }{E - (\hbar^2 \mathbf{k}_1^2 / 2m) \pm i\epsilon} \end{aligned}$$

と変形する . ここで , $\langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_1 \rangle = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r})$, $\langle \mathbf{k}_2 | \mathbf{r}' \rangle = (2\pi)^{-3/2} \exp(-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}')$ と

$$\langle \mathbf{k}_1 | \frac{1}{E - (\hbar^2 \mathbf{k}_1^2 / 2m) \pm i\epsilon} | \mathbf{k}_2 \rangle = \frac{\delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}{E - (\hbar^2 \mathbf{k}_1^2 / 2m) \pm i\epsilon}$$

を用いた . ここで $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ において , 右辺を球面極座標 $\mathbf{k}_1 = (k_1, \theta, \varphi)$ で積分すると ,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty k_1^2 dk_1 \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{\exp[ik_1 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cos \theta]}{k^2 - k_1^2 \pm i\epsilon} \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{i|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^\infty k_1 dk_1 \frac{\exp(ik_1 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) - \exp(-ik_1 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{k_1^2 - k^2 \mp i\epsilon} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \end{aligned}$$

(5) 球対称ポテンシャルの場合の (7.45) を用いる . ガウス型ポテンシャルでの散乱振幅は ,

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\theta) &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r \sin(qr) \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right) dr \\ &= -\frac{mV_0}{\hbar^2 q} \int_{-\infty}^\infty r \sin(qr) \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right) dr \\ &= -\frac{mV_0}{2i\hbar^2 q} \int_{-\infty}^\infty r dr \left\{ \exp\left[-\frac{1}{r_0^2} \left(r - \frac{ir_0^2 q}{2}\right)^2 - \frac{r_0^2 q^2}{4}\right] \right. \\ &\quad \left. - \exp\left[-\frac{1}{r_0^2} \left(r + \frac{ir_0^2 q}{2}\right)^2 - \frac{r_0^2 q^2}{4}\right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{mV_0r_0^3\sqrt{\pi}}{2\hbar^2}\exp\left(-\frac{r_0^2q^2}{4}\right) \\
&= -\frac{mV_0r_0^3\sqrt{\pi}}{2\hbar^2}\exp\left[-kr_0\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right].
\end{aligned}$$

指数関数型ポテンシャルでの散乱振幅は，

$$\begin{aligned}
f^{(1)}(\theta) &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2q}\int_0^\infty r\sin(qr)\exp\left(-\frac{r}{r_0}\right)dr \\
&= -\frac{4mV_0}{\hbar^2r_0(q^2+r_0^{-2})^2} \\
&= -\frac{4mV_0}{\hbar^2r_0[4k^2\sin^2(\theta/2)+r_0^{-2}]^2}.
\end{aligned}$$