1. $\left(-\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right)u(\xi)=\lambda u(\xi)$ を満たす $u_n(\xi)=C_n H_n(\xi)\exp(-\xi^2/2)$ の性質について調べてみよう。ここで、$H_n(\xi)$ はエルミート多項式であり、n は零以上の整数である。また、$a^*=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)$、$a=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{d}{d\xi}\right)$ と定義する。

(1)　$au_n(\xi)=\sqrt{n}u_{n-1}(\xi)$ と変形できることを示せ。ヒント：左辺の微分を実際に計算し、$H_n{}'(\xi)=2nH_{n-1}(\xi)$ の関係を用いる。

$$\frac{d}{d\xi}u_n(\xi)=\sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}}\left(H_n{}'(\xi)\exp(-\xi^2/2)-\xi H_n(\xi)\exp(-\xi^2/2)\right)=\sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}}\left(2nH_{n-1}(\xi)\exp(-\xi^2/2)-\xi H_n(\xi)\exp(-\xi^2/2)\right)$$

$$=\sqrt{\frac{2n}{\sqrt{\pi}2^{n-1}(n-1)!}}H_{n-1}(\xi)\exp(-\xi^2/2)-\sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}}\xi H_n(\xi)\exp(-\xi^2/2)=\sqrt{2n}u_{n-1}(\xi)-\xi u_n(\xi)\quad\therefore\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{d}{d\xi}\right)u_n(\xi)=\sqrt{n}u_{n-1}(\xi)$$。

この関係は、$u_n(\xi)$ に $\left(\xi+\frac{d}{d\xi}\right)$ を演算する（作用させる）ことにより $u_{n-1}(\xi)$ の定数倍、つまり量子数が 1 減った状態に変換されることを表す。

それ故、演算子 a は消滅演算子（あるいは下降演算子）と呼ばれる。

ちなみに、$a^*u_n(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)u_n(\xi)=\sqrt{(n+1)}u_{n+1}(\xi)$ と計算されることから、演算子 a^* は生成演算子（あるいは上昇演算子）と呼ばれる。

(2)　演算子 A,B に対し、交換子 $[A,B]\equiv AB-BA$ を定義する。任意の関数 $f(\xi)$ について $\left[\xi,\frac{d}{d\xi}\right]f(\xi)=(-1)f(\xi)$ となることを計算して確かめよ。

$$\left[\xi,\frac{d}{d\xi}\right]f(\xi)=\left(\xi\frac{d}{d\xi}-\frac{d}{d\xi}\xi\right)f(\xi)=\xi\frac{d}{d\xi}f(\xi)-\frac{d}{d\xi}\xi f(\xi)=\xi\frac{df}{d\xi}-1\cdot f(\xi)-\xi\frac{df}{d\xi}=(-1)f(\xi)$$

この関係から、一般には $\left[\xi,\frac{d}{d\xi}\right]=\left(\xi\frac{d}{d\xi}-\frac{d}{d\xi}\xi\right)=-1$ と表わされる。また $[A,B]=0$ となる演算子は交換可能（可換）であると言われる。

(3)　(2)の結果を用いて、$a^*a+\frac{1}{2}=\left(-\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right)$ と変形できることを示せ。

$$a^*a+\frac{1}{2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{d}{d\xi}\right)+\frac{1}{2}=\frac{1}{2}\left(\xi^2+\xi\frac{d}{d\xi}-\frac{d}{d\xi}\xi-\frac{d^2}{d\xi^2}\right)+\frac{1}{2}=\frac{1}{2}\left(\xi^2+\left[\xi,\frac{d}{d\xi}\right]-\frac{d^2}{d\xi^2}\right)+\frac{1}{2}=\frac{1}{2}\left(\xi^2-1-\frac{d^2}{d\xi^2}\right)+\frac{1}{2}=\frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right)$$

(4)　(3)の結果及び $a^*u_n(\xi)=\sqrt{(n+1)}u_{n+1}(\xi)$ の関係（既知として良い）を用いて、$\frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right)u_n(\xi)=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)u_n(\xi)$ と変形できることを示せ。

(3)の結果から $\frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right)u_n(\xi)=\frac{\hbar\omega}{2}\left(a^*a+\frac{1}{2}\right)u_n(\xi)$ と表わすことができる。さらに、$au_n(\xi)=\sqrt{n}u_{n-1}(\xi)$、$a^*u_n(\xi)=\sqrt{(n+1)}u_{n+1}(\xi)$ の関係を用いると、$a^*au_n(\xi)=a^*\sqrt{n}u_{n-1}(\xi)=\sqrt{n}a^*u_{n-1}(\xi)=\sqrt{n}\sqrt{(n-1)+1}u_{n-1+1}(\xi)=nu_n(\xi)$。

これらから、$\frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right)u_n(\xi)=\hbar\omega\left(a^*a+\frac{1}{2}\right)u_n(\xi)=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)u_n(\xi)$。

注：$\frac{\hbar\omega}{2}\left(\xi^2-\frac{d^2}{d\xi^2}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2}{2}x^2$ は調和振動子のハミルトニアン $\left(\because\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$ になっている。

２. 位置と運動量で表されるある物理量 $F(\vec{r},-i\hbar\nabla)$ について、$F(\vec{r},-i\hbar\nabla)$ の固有値、固有関数が f_n、$\chi_n(\vec{r})$ と求まっているとする（$F(\vec{r},-i\hbar\nabla)\chi_n(\vec{r})=f_n\chi_n(\vec{r})$）。また、$\chi_n(\vec{r})$ は規格（正規）直交化されているとする。さらに、シュレディンガー方程式 $H\psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)$ に従って運動している粒子に対する波動関数 $\psi(\vec{r},t)$ が、時間変化する係数 $c_n(t)$ を用いることで $\psi(\vec{r},t)=c_1(t)\chi_1(\vec{r})+c_2(t)\chi_2(\vec{r})+c_3(t)\chi_3(\vec{r})+\cdots$ と表せる場合を考える。

(1)　$\psi(\vec{r},t)$ が規格化されている場合、$\sum_i |c_i(t)|^2$ の値はいくらになるか答えよ。

$\iiint |\psi(\vec{r},t)|^2 d\vec{r} = \iiint \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)d\vec{r} = \iiint \left(\sum_i c_i{}^*(t)\chi_i{}^*(\vec{r})\right)\left(\sum_j c_j(t)\chi_j(\vec{r})\right)d\vec{r} = \sum_i |c_i(t)|^2$ 。 $\psi(\vec{r},t)$ が規格化されているならば、$\iiint |\psi(\vec{r},t)|^2 d\vec{r} = 1$ であるからして、$\sum_i |c_i(t)|^2 = 1$ となる。

(2)　$\psi(\vec{r},t)$ の運動状態に対する $F(\vec{r},-i\hbar\nabla)$ の期待値を $\overline{F}_\psi = \iiint \psi^*(\vec{r},t)F(\vec{r},-i\hbar\nabla)\psi(\vec{r},t)d\vec{r}$ として計算するとき、$\overline{F}_\psi = \sum_i f_i|c_i(t)|^2$ となることを示せ。

$\overline{F}_\psi = \iiint \psi^*(\vec{r},t)F(\vec{r},-i\hbar\nabla)\psi(\vec{r},t)d\vec{r}$ の右式に $\psi(\vec{r},t)=\sum c_i(t)\chi_i(\vec{r})$ を代入すると、

$$\overline{F}_\psi = \iiint \psi^*(\vec{r},t)F(\vec{r},-i\hbar\nabla)\psi(\vec{r},t)d\vec{r} = \iiint \left(\sum c_i{}^*(t)\chi_i{}^*(\vec{r})\right)F(\vec{r},-i\hbar\nabla)\left(\sum c_i(t)\chi_i(\vec{r})\right)d\vec{r}$$
$$= \iiint \left(\sum c_i{}^*(t)\chi_i{}^*(\vec{r})\right)\left(\sum f_i c_i(t)\chi_i(\vec{r})\right)d\vec{r} = \sum f_i c_i{}^*(t)c_i(t) = \sum f_i|c_i(t)|^2$$

期待値は（事象に対する値）×（事象が生じる確率）の和で与えられる。従って上式は、$\psi(\vec{r},t)$ で表わされる運動状態にある粒子に対して $F(\vec{r},-i\hbar\nabla)$ を測定すると固有値 f_i が確率 $|c_i(t)|^2$ で観測されるため、その期待値が $\overline{F}_\psi = \sum_i f_i|c_i(t)|^2$ となることを示している。別の見方をすれば、$\psi(\vec{r},t)$ が $F(\vec{r},-i\hbar\nabla)$ の固有関数にはなっていなくとも、$F(\vec{r},-i\hbar\nabla)$ の固有関数 f_n の一次結合で表わすことができるならば、（わざわざ $\psi(\vec{r},t)$ を $\chi_n(\vec{r})$ で展開した形を求めなくとも）$\overline{F}_\psi = \iiint \psi^*(\vec{r},t)F(\vec{r},-i\hbar\nabla)\psi(\vec{r},t)d\vec{r}$ を計算することで、$\psi(\vec{r},t)$ で表わされる運動状態にある粒子に対する演算子 $F(\vec{r},-i\hbar\nabla)$ の期待値を求められることを示している。

３.　[0,a]の一次元空間に完全に閉じ込められた自由粒子の固有関数は $X_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin k_x x$ で与えられる。ここで $k_x=\frac{\pi}{a}n_x$、n_x は自然数である。一方、一次元自由粒子の運動量に対する固有関数は $\chi_\pm(x)=A_\pm e^{\pm ik_x x}$、その固有値 $f_\pm$ は $\pm\hbar k_x$ で与えられる。

(1)　$\chi_+(x)$ と $\chi_-(x)$ が $[0,a]$ において正規直交系となるように係数 $A_\pm$ を決定せよ（簡単のために双方の場合とも正の実数に限定してよい）。

$\int_0^a \chi_+{}^*(x)\chi_-(x)dx = A_+{}^*A_-\int_0^a e^{-ik_x x}e^{-ik_x x}dx = -\frac{A_+{}^*A_-}{2ik_x}\left[e^{-2ik_x x}\right]_0^a = 0$ であるから、$\chi_+(x)$ と $\chi_-(x)$ は $[0,a]$ において直交している。正規化を考えると $\int_0^a \chi_+{}^*(x)\chi_+(x)dx = A_+{}^*A_+\int_0^a e^{-ik_x x}e^{ik_x x}dx = |A_+|^2 a = 1$。ここで題意より、$A_+=\frac{1}{\sqrt{a}}$。また、全く同様にして、$A_-=\frac{1}{\sqrt{a}}$。

(2)　$X_n(x)$ を $\chi_\pm(x)$ で展開するとき、その展開係数 $c_\pm$ を求めよ。ヒント：オイラーの公式及び(1)の結果を用いよ。

$$X_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin k_x x=\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{1}{2i}\left(e^{ik_x x}-e^{-ik_x x}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}i}\left(\frac{1}{\sqrt{a}}e^{ik_x x}-\frac{1}{\sqrt{a}}e^{-ik_x x}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}i}\left(\chi_+-\chi_-\right)$$

従って、$X_n(x)$ を $\chi_\pm(x)$ で展開したときのそれぞれの係数は $\frac{1}{\sqrt{2}i}$、$\frac{-1}{\sqrt{2}i}$ （あるいは $(\chi_+,X_n)=\frac{1}{\sqrt{2}i}$、$(\chi_-,X_n)=\frac{-1}{\sqrt{2}i}$ と計算してもよい)。なお、これら係数の大きさの 2 乗は共に $\frac{1}{2}$ である。

(3)　運動状態が $X_n(x)$ で表わされる粒子に対して、運動量の期待値 $\overline{p}_x$ を２. (2)の結果に従って求めよ。

$$\overline{p}_x = f_+\cdot|c_+|^2+f_-\cdot|c_-|^2=(+hk_x)\cdot\frac{1}{2}+(-hk_x)\cdot\frac{1}{2}=0$$

これは、$X_n(x)$ の運動状態に対して運動量を観測する場合、確率 $|c_+|^2=1/2$ で $\chi_+(x)$ の状態での固有値 $\hbar k_x$ が、確率 $|c_-|^2=1/2$ で $\chi_-(x)$ の状態での固有値 $-\hbar k_x$ が観測されることを表わしており、結果として期待値としては 0 となる。