科　目　名	学年	番号	学　籍　番　号	氏　　　名
量子力学 I　第 2 回	2	後日お伝えします		

全問解答し，答え合わせ（自己採点）をして提出せよ。　　　　**授業時間外の学習時間：＿＿＿時間＿＿＿分**

[1] 「詳解　量子化学の基礎」の 1 章の 1.1 節〜1.5 節（3 頁〜12 頁）を読みなさい。

[2] 粒子系の状態は**波動関数**（はどうかんすう）Ψ（プサイ）で表現する。これは粒子の $\boxed{\text{(a)}}$ $\boldsymbol{r}$ と $\boxed{\text{(b)}}$ t を変数に持つ。

$$\Psi \;=\; \Psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{1}$$

波動関数 Ψ は，定義された領域で，変数のあらゆる値に対して一価，連続，有限である。波動関数は直接測定 $\boxed{\text{(c) できる or できない}}$。

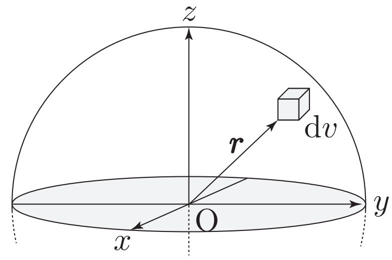
[3] 「波動関数の絶対値の自乗と d^3r の積 $|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2\mathrm{d}^3r$ が微小体積 d^3r の中に粒子を見いだす確率を表す」という考え方を，波動関数の $\boxed{\text{(d)}}$ という。粒子は全空間のどこかにいるはずだから，$|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2\mathrm{d}^3r$ を全空間にわたって足し合わせると 1 になるはずである。これを数式で表現すれば，

$$\int_{\text{全空間}} \boxed{\text{(e)}}\,\mathrm{d}^3r \;=\; 1 \tag{2}$$

となる。これを波動関数の $\boxed{\text{(f)}}$ 条件といい，この条件を満たす波動関数は「規格化されている」と言う。直交座標系で 3 次元空間を考えれば，(2) 式は次のように書ける。

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, y, z, t)|^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \;=\; 1 \tag{3}$$

また,「確率＝確率密度 × 体積」の関係から，$|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2$ は「単位体積あたりの存在確率」という意味を持ち，$\boxed{\text{(g)}}$ という。



[4] $|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2\mathrm{d}^3r$ は微小体積 d^3r の中に粒子を見いだす確率であるから，$|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2$ は $\boxed{\text{(h) 実 or 虚}}$ 数である。なぜなら，粒子を見いだす確率が虚数であるということは，物理的に許容できない。しかし，波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ そのものは $\boxed{\text{(i) 実 or 虚}}$ 数とはかぎらない。

[5] ある状態を表す波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ に $\boxed{\text{(j)}}$ をかけた $e^{i\theta}\cdot\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ の確率密度を計算すると，

$$\begin{aligned} |e^{i\theta}\cdot\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 &= |e^{i\theta}|^2|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 \\ &= e^{i\theta}e^{-i\theta}|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 \\ &= |\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 \end{aligned} \tag{4}$$

となり，$e^{i\theta}$ が消えてしまう。観測にかかるのは粒子の存在確率であり，波動関数ではない。すなわち，自乗すると同じ形になる波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ と $e^{i\theta}\cdot\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ は実験的に区別 $\boxed{\text{(k) できる or できない}}$。量子力学では区別できない状態は $\boxed{(\ell)}$ の状態と考える。とくに $\theta = \pi$ の場合について考えると，$e^{i\pi} = \boxed{\text{(m) 数値}}$ であるから[1]，Ψ と $-\Psi$ の状態は区別しない。

[1] $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ を思い出すこと。

[6] 数学 **演算子**(えんざんし)とは，数学的な演算を表す記号である。たとえば，

$\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}$ の $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ は「x で $\boxed{\quad(\mathrm{n})\quad}$ しろ」

という意味を持つ演算子である。演算子にみえないし，演算子と意識することもほとんどないが，

$xf(x)$ の x も「x を $\boxed{\quad(\mathrm{o})\quad}$」

という意味を持つから，演算子のひとつと考えられる。演算子は $\boxed{\quad(\mathrm{p})\quad}$ とよばれることもある。

[7] 数学 x と y を変数とする関数 $f(x,y)$ を x で微分する場合には，**偏微分**(へんびぶん)であることがわかるように，

$\dfrac{\mathrm{d}f(x,y)}{\mathrm{d}x}$ ではなく，$\dfrac{\partial f(x,y)}{\partial x}$ と書く[2]。

このとき，残りの変数 y は定数として扱う。反対に，変数 y だけで微分するときは立場が逆転して，x を定数として扱う。たとえば，$f(x,y)=x^5y^2$ を考えれば，

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}=5x^4y^2 \tag{5}$$

$$\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2}=\boxed{\quad(\mathrm{q})\quad} \tag{6}$$

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}=\boxed{\quad(\mathrm{r})\quad} \tag{7}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right)=\boxed{\quad(\mathrm{s})\quad} \tag{8}$$

である。

[8] ベクトル演算子 $\boldsymbol{\nabla}$ を次式で定義する。

$$\boldsymbol{\nabla}:=\left(\frac{\partial}{\partial x},\ \frac{\partial}{\partial y},\ \frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{9}$$

$$=\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial x}+\boldsymbol{j}\frac{\partial}{\partial y}+\boldsymbol{k}\boxed{\quad(\mathrm{t})\quad} \tag{10}$$

ここで，$\boldsymbol{i}$，$\boldsymbol{j}$，$\boldsymbol{k}$ は x 方向，y 方向，z 方向の単位ベクトルである。この演算子は $\boxed{\quad(\mathrm{u})\quad}$ とよばれる。

[9] 古典力学における運動量 $\boldsymbol{p}$ を**微分演算子**(びぶんえんざんし) $\hat{\boldsymbol{p}}$ で書き換えると，形式的に古典力学が量子力学に書き換えられる。

$$\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v} \quad \xrightarrow{\text{書き換え}} \quad \hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\boldsymbol{\nabla} \tag{11}$$

ここで，$\hbar:=\dfrac{h}{2\pi}$ は $\boxed{\quad(\mathrm{v})\quad}$ であり,「エイチバー」と読む。また，$\hat{}$ は $\boxed{\quad(\mathrm{w})\quad}$ と読む。

$\hat{\boldsymbol{p}}=(\hat{p}_x,\ \hat{p}_y,\ \hat{p}_z)$ として,(11) 式を成分ごとに書くと次のようになる。

$$\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{12}$$

$$\hat{p}_y=-i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \tag{13}$$

$$\hat{p}_z=\boxed{\quad(\mathrm{x})\quad} \tag{14}$$

[2] ∂ は，ラウンドディー，ラウンドデルタ，ラウンド，デル，パーシャル，ルンドなど，いろいろな読み方をする。

[10] 粒子の位置 $\boldsymbol{r}$，速度 $\boldsymbol{v}$，運動量 $\boldsymbol{p}$，運動エネルギー K，位置エネルギー U などの古典物理量は，粒子の位置座標 $\boldsymbol{r}$ と運動量 $\boldsymbol{p}$ で書き表すことができる。

たとえば，**運動エネルギー**(うんどう) K を考えると，

$$K = \frac{m\boldsymbol{v}^2}{2} = \frac{(\boxed{\quad (\mathrm{y}) \quad})^2}{2m} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \tag{15}$$

となる。これに (11) 式の関係を代入すれば，運動エネルギーを次のような演算子に書き換えることができる。

$$\hat{K} = \frac{\left(\boxed{\quad (\mathrm{z}) \quad}\right)^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 \tag{16}$$

これに対し，**位置エネルギー**(いち)は位置座標 $\boldsymbol{r}$ だけの関数 $U(\boldsymbol{r})$ として表され，運動量が含まれないから，量子力学においても同じ形をとる。

$$U(\boldsymbol{r}) \xrightarrow{\text{書き換え}} \hat{U}(\boldsymbol{r}) = U(\boldsymbol{r}) \tag{17}$$

運動エネルギーと位置エネルギーの和を $\boxed{\quad (\alpha) \quad}$ といい，$\boxed{\quad (\beta) \quad}$ 関数 H で表す。

$$H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}) \tag{18}$$

これに運動量の書き換えを施せば，$\boxed{\quad (\beta)\ \text{再出} \quad}$ 関数の演算子表式 $\hat{H}$ が得られる。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + U(\boldsymbol{r}) \tag{19}$$

これを**Hamilton 演算子**(ハミルトンえんざんし)もしくは $\boxed{\quad (\gamma) \quad}$ という。

[11] $\boldsymbol{\nabla}$ の自乗で新たな演算子 Δ を定義する。

$$\begin{aligned} \Delta &:= \boldsymbol{\nabla}^2 \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{aligned} \tag{20}$$

この演算子 Δ を $\boxed{\quad (\delta) \quad}$ とよぶ。すると，ハミルトニアンは次のように書ける。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\boldsymbol{r}) \tag{21}$$

[12] $\boxed{\text{数学}}$ 問題 [11] の 2 行目への変形は，ごく普通に分配して展開すればよい。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla}^2 &= \left(\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial x} + \boldsymbol{j}\frac{\partial}{\partial y} + \boldsymbol{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial x} + \boldsymbol{j}\frac{\partial}{\partial y} + \boldsymbol{k}\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ &= \boldsymbol{i}^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \boldsymbol{i}\cdot\boldsymbol{j}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y} + \boldsymbol{i}\cdot\boldsymbol{k}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial z} \\ &\quad + \boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x} + \boldsymbol{j}^2\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{k}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial z} \\ &\quad + \boxed{\qquad\qquad (\epsilon) \qquad\qquad} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \Delta \end{aligned} \tag{22}$$

$\boldsymbol{i}$，$\boldsymbol{j}$，$\boldsymbol{k}$ は x 方向，y 方向，z 方向の単位ベクトルであるから，おたがいに直交している（おたがいのなす角度が $\pi/2$ であることを直交するという）。また，式中の $\boldsymbol{i}\cdot\boldsymbol{j}$ などはベクトルの $\boxed{\quad (\zeta) \quad}$ を意味する。すなわち，$\boldsymbol{i}$ と $\boldsymbol{j}$ のなす角を θ とすると，

$$\boldsymbol{i}\cdot\boldsymbol{j} = \boxed{\quad (\eta) \quad} \tag{23}$$

である。ここで，$\boldsymbol{i}$，$\boldsymbol{j}$，$\boldsymbol{k}$ が単位ベクトルであること（$|\boldsymbol{i}| = |\boldsymbol{j}| = |\boldsymbol{k}| = 1$）と，おたがいのなす角が $\pi/2$ であることから，

$$\boldsymbol{i}\cdot\boldsymbol{j} = \boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{i} = \boxed{\quad (\theta)\ \text{数値} \quad} \tag{24}$$

$$\boldsymbol{i}^2 = \boldsymbol{j}^2 = \boldsymbol{k}^2 = \boxed{\quad (\iota)\ \text{数値} \quad} \tag{25}$$

を得る。(22) 式の計算ではこれを用いた。

[13] いくつかの関数（あるいはベクトル）があるとき，それぞれを定数倍して和をとることを「$\boxed{\quad(\kappa)\quad}$をとる」と言う。いま，任意の関数 Ψ_1 と Ψ_2 の $\boxed{\quad(\kappa)\ \text{再出}\quad}$ $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ に演算子 $\hat{F}$ を作用させることを考える。このとき，演算子が，

$$\hat{F}\left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right) = c_1\hat{F}\Psi_1 + c_2\hat{F}\Psi_2 \tag{26}$$

の関係を満たすとき，演算子 $\hat{F}$ を$\boxed{\quad(\lambda)\quad}$演算子という。これまでみてきたハミルトニアンや運動量演算子は$\boxed{\quad(\lambda)\ \text{再出}\quad}$演算子である。典型的な$\boxed{\quad(\mu)\quad}$演算子としては，**平方根演算子**（へいほうこんえんざんし）がある。これは $\sqrt{c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2} \neq c_1\sqrt{\Psi_1} + c_2\sqrt{\Psi_2}$ から明らかである。

[14] 系の波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ は時間を含む$\boxed{\quad(\nu)\ \text{人名}\quad}$方程式を満足する。

$$\hat{H}\Psi(\boldsymbol{r}, t) \quad = \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{27}$$

この要請よりただちに，波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ が$\boxed{(\xi)\ \text{実 or 純虚 or 複素}}$数でなければならないことがわかる[3]。仮に，波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ が実数であるとしよう。すると，ハミルトニアンには虚数が含まれていないから，(27) 式の左辺は実数になる。一方，(27) 式の右辺は$\boxed{(o)\ \text{実 or 純虚 or 複素}}$数になり，これを満足するのは $\Psi(\boldsymbol{r}, t) = 0$ という物理的に意味のない解しかない。すなわち，波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ が実数であってはならない。同様に，波動関数は$\boxed{(\pi)\ \text{実 or 純虚 or 複素}}$数でもいけない。

[15] 2 つの状態 Ψ_1 と Ψ_2 を考えた場合，2 つの波動関数の線形結合 $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ をとって，「中間の状態」を作ることができる。この操作を，「状態を$\boxed{\quad(\rho)\quad}$」と言い，「Ψ は Ψ_1 と Ψ_2 の**重ね合わせ**（かさねあわせ）である」と言う。重ね合わせの原理とは，$\Psi_1(\boldsymbol{r}, t), \Psi_2(\boldsymbol{r}, t), \cdots$ が系の状態であるならば，これらの線形結合 $\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \sum_i c_i\Psi_i(\boldsymbol{r}, t)$ も系の状態であることを要請する原理である。

[16] ここで，波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ が時間 t だけの関数 $f(t)$ と座標 $\boldsymbol{r}$ だけの関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ の積で書けると仮定する。すると，$\psi(\boldsymbol{r})$ は，

$$\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{28}$$

を満足しなければならない。ここで，定数 E はエネルギーである。この式を$\boxed{\quad(\sigma)\quad}$ **Schrödinger**（シュレディンガー）**の波動方程式**（はどうほうていしき）という。また，波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ は次式で表せることがわかる[4]。

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) \quad = \quad \psi(\boldsymbol{r}) \cdot e^{-i(E/\hbar)t} \tag{29}$$

$\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ は時間に依存しないわけではないが，実際に観測にかかる量である確率密度が $|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 = \Psi^*(\boldsymbol{r}, t)\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi^*(\boldsymbol{r}) \cdot e^{i(E/\hbar)t}\psi(\boldsymbol{r}) \cdot e^{-i(E/\hbar)t} = |\psi(\boldsymbol{r})|^2$ となり，時間に依存しない。こういう理由で，このような状態を$\boxed{\quad(\tau)\quad}$という。

[17] 問題 [14] で見たように，$\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ は$\boxed{(\upsilon)\ \text{実 or 複素}}$数でなくてはならないが，$\psi(\boldsymbol{r})$ は$\boxed{(\phi)\ \text{実 or 複素}}$数でも$\boxed{(\chi)\ \text{実 or 複素}}$数でもどちらでもよい。これは，$\boxed{\quad(\sigma)\ \text{再出}\quad}$ Schrödinger の波動方程式を見ればあきらかである。

[3] たとえば，$2i$，$-3i$，$z^2 i$ などのように，複素数 $a + bi$ (a と b は実数) で，$a = 0$ かつ $b \neq 0$ を純虚数という。
[4] (29) 式を (27) 式に代入して整理すると，(28) 式になることで確認できる。各自確認せよ。

[18] 下記の解答群に示した関数のうち，$\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ の固有関数は，$\boxed{\quad (\psi)\ \text{複数可}\quad}$ であり，$\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2$ の固有関数は，$\boxed{\quad (\omega)\ \text{複数可}\quad}$ である。

解答群

e^{ax},　e^{ax^2},　xe^{ax},　x^2,　$ax+b$,　$\sin x$

解答

[1]　なし

[2]　(a)：座標（位置でも可）　(b)：時刻　(c)：できない

[3]　(d)：確率解釈　(e)：$|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2$　(f)：規格化　(g)：確率密度

[4]　(h)：実　(i)：実

[5]　(j)：位相因子　(k)：できない　(ℓ)：同一　(m)：-1

[6]　(n)：微分　(o)：かけろ　(p)：作用素

[7]　(q)：$20x^3y^2$　(r)：$2x^5y$　(s)：$10x^4y$

[8]　(t)：$\dfrac{\partial}{\partial z}$　(u)：ナブラ

[9]　(v)：換算 Planck（プランク）定数　(w)：ハット　(x)：$-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial z}$

[10]　(y)：$m\boldsymbol{v}$　(z)：$-i\hbar\boldsymbol{\nabla}$　(α)：全エネルギー　(β)：Hamilton（ハミルトン）　(γ)：ハミルトニアン

[11]　(δ)：ラプラシアン

[12]　(ϵ)：$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{i}\dfrac{\partial}{\partial z}\dfrac{\partial}{\partial x}+\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{j}\dfrac{\partial}{\partial z}\dfrac{\partial}{\partial y}+\boldsymbol{k}^2\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$　(ζ)：内積　(η)：$|\boldsymbol{i}||\boldsymbol{j}|\cos\theta$　(θ)：0　(ι)：1

[13]　(κ)：線形結合　(λ)：線形　(μ)：非線形

[14]　(ν)：Schrödinger（シュレディンガー）　(ξ)：複素　(o)：純虚　(π)：純虚

[15]　(ρ)：重ねあわせる

[16]　(σ)：時間に依存しない

[17]　(τ)：定常状態　(υ)：複素　(ϕ)：実　(χ)：複素

[18]　(ψ)：e^{ax}　(ω)：e^{ax} と $\sin x$

今日の講義でわからないことや，この宿題でわからない箇所があれば，お伝えください。また，講義に対する要望があればお書きください。感想などでも結構です。もちろん，成績等には一切関係ありません。

✎ **記述欄**