付録 E

章末演習問題のヒント

★【演習問題 1-1】 …………………………………… （問題は p32、解答は p10w）

光子のエネルギーは $\frac{hc}{\lambda}$ で計算できる。SI 単位系で計算すると J で出てくるから、eV に直そう。紫外線、赤外線は水素原子をイオン化できるだろうか??

★【演習問題 1-2】 …………………………………… （問題は p32、解答は p10w）

100W は 100J/s であり、1 個の光子のエネルギーは $h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.6\times10^{-34}\times3.0\times10^{8}}{5.0\times10^{-7}}$ となる。あとは数を数えるだけ。

瞳に飛び込む光子の数は全体の $\frac{0.5\mathrm{cm}^2}{4\pi\mathrm{m}^2}$ 倍。半径 1m の球の表面積のうち、$0.5\mathrm{cm}^2$ 分を受ける。

★【演習問題 1-3】 …………………………………… （問題は p32、解答は p10w）

まず眼に入ってくるエネルギーの大きさは

$$2.5\times10^{-6}\times\frac{1}{683}\times0.5\times10^{-4}\simeq1.83\times10^{-13}J \tag{E.1}$$

このうち、$\frac{4\pi(10^{-10})^2}{4\pi(10^{-6})^2}$ が 1 原子のロドプシンにあたる。

★【演習問題 1-4】 …………………………………… （問題は p32、解答は p11w）

0 等星の照度（2.5×10^{-6} ルクス$=\frac{2.5}{683}\times10^{-6}\mathrm{W/m}^2$）から、人間の瞳（$0.5\mathrm{cm}^2$）にやってくる光のエネルギーを考えて、可視光 1 個のエネルギー（だいたい 4×10^{-19}J）で割ってみよう。

★【演習問題 2-1】 …………………………………… （問題は p49、解答は p11w）

線密度 ρ の次元は $[\mathrm{ML}^{-1}]$、張力 T の次元は $[\mathrm{MLT}^{-2}]$。まず M を消そう。

★【演習問題 2-2】 …………………………………… （問題は p49、解答は p11w）

ke^2 の次元が $[\mathrm{ML}^N\mathrm{T}^{-2}]$、$h$ の次元が $[\mathrm{ML}^2\mathrm{T}^{-1}]$ である。この他に使えるのは換算

質量 μ の次元が [M] であることである。長さを出すためには [M] と [T] を消す。

3 次元 $N=3$ においては、n が大きくなると、半径も大きくなる。

★【演習問題 2-3】 .... （問題は p49、解答は p11w）

単純な計算問題だが、ある程度、電子の「感じ」をつかんで欲しい。エネルギーと運動量の関係は $p=\sqrt{2mE}$ で、エネルギーは 1eV=1.6×10^{-19}J を使って計算する。

回折実験をするためには、2.4節 → p46 に書いた $d\sin\theta=n\lambda$ という式からして、格子間隔より少し短いぐらいの波長を使うのがよい。

★【演習問題 2-4】 .... （問題は p49、解答は p12w）

$\dfrac{1}{r}=x$ とおくことで（同時に、$x_-=\dfrac{1}{r_-},x_+=\dfrac{1}{r_+}$ とおく）、

$$2L\int_{r_-}^{r_+}\sqrt{\left(\frac{1}{r_-}-\frac{1}{r}\right)\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{r_+}\right)}\mathrm{d}r=2L\underbrace{\int_{x_+}^{x_-}}_{積分域を逆に}\sqrt{(x_--x)(x-x_+)}\underbrace{\frac{\mathrm{d}x}{x^2}}_{-\mathrm{d}r} \tag{E.2}$$

となる。$x=\dfrac{x_++x_-}{2}+\dfrac{x_--x_+}{2}\cos\theta$ と置いてやることで積分できる。

★【演習問題 3-1】 .... （問題は p76、解答は p13w）

$v_p=\dfrac{\omega}{k},v_g=\dfrac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}$ に代入してみよう。情報伝達速度は v_g の方。

★【演習問題 3-2】 .... （問題は p76、解答は p13w）

$$\int_a^b f(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x)\mathrm{d}x=[f(x)\delta(x)]_a^b-\int_a^b\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x)\delta(x)\mathrm{d}x$$

の第 1 項は、積分の端で $\delta(x)=0$ とすれば（つまり x が a,b に一致しないとすれば）0 である。第 2 項は単純にデルタ関数の定義どおりに。

★【演習問題 3-3】 .... （問題は p76、解答は p13w）

$$\delta\left(f(x)\right)=\frac{1}{|f'(x)|}\delta(x-x_0)$$

を証明したいので、左辺に任意の関数をかけて x で積分する。

★【演習問題 3-4】 .... （問題は p77、解答は p14w）

手順どおりに、ていねいに計算すればよい。

★【演習問題 3-5】 .... （問題は p77、解答は p15w）

$\Delta x=d$ になれば、$\Delta p>\dfrac{h}{d}$ と考えればよい。

★【演習問題 3-6】 .... （問題は p77、解答は p15w）

(1)　光の波長 λ とすれば、その運動量は $\dfrac{h}{\lambda}$。$\lambda<d$ なので…。

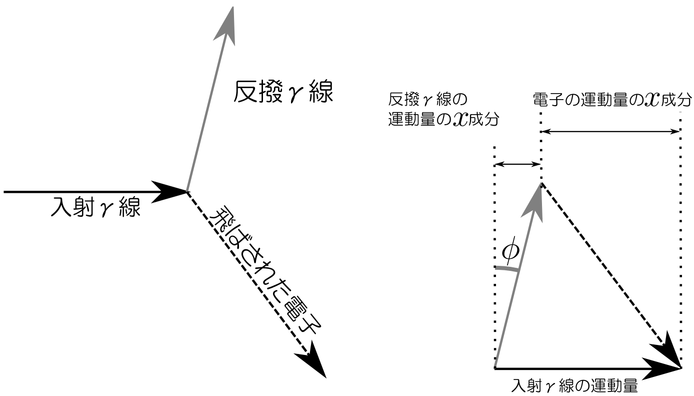
(2)　光子の運動量を全部もらってしまった場合、電子の運動量変化は (1) の答え。その運動量を m で割れば電子の横方向の速度が出る。

(3)　答えは、(2) の答えを見ればわかると思う。途中で電子の運動量に（光を当てる程度の）小さな乱れが生じただけでも、干渉縞ができなくなることがわかる。

★【演習問題 3-7】 ……………………………………… (問題は p78、解答は p16w)

光の全運動量は $\dfrac{h}{\lambda}$ であるが、上を通る場合の運動量はその $\dfrac{d}{2\sqrt{L^2+\left(\frac{d}{2}\right)^2}}$ 倍である。よって上を通り抜けた後の運動量変化は $\dfrac{h}{\lambda}\times\dfrac{d}{2\sqrt{L^2+\left(\frac{d}{2}\right)^2}}\times 2$ となる。スリットの運動量をこの値より精密に測定できない限り、「上を通ったか下を通ったか」は判定できない。

★【演習問題 3-8】 ……………………………………… (問題は p79、解答は p16w)



上の図のように考えると、反撥したγ線と電子の運動量の x 成分の間の関係がわかる。この二つの和は一定値である。つまり、反発したγ線の運動量の x 成分がわからないのと同じぐらい、電子の運動量の x 成分もわからない。

エネルギーはγ線の方が圧倒的に大きいので、γ線の波長は（実際にはコンプトン効果によって変化するわけであるが）変化しないとして計算してよい。

★【演習問題 4-1】 ……………………………………… (問題は p100、解答は p16w)

まずは $\psi^*\psi$ を積分する。それが1になるようにするのだから、結果が $N=\int_{-\pi}^{\pi}\psi^*\psi\,\mathrm{d}x$ であったとしたら、$\dfrac{1}{\sqrt{N}}$ で割る。

★【演習問題 4-2】 ……………………………………… (問題は p101、解答は p17w)

下の方に関しては、

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\underbrace{A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}}_{\psi} &= \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}}_{\psi}\\ -\frac{\hbar^2}{2m}k^2A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)} &= \hbar\omega A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}\end{aligned}\tag{E.3}$$

となる。

★【演習問題 4-3】 .... （問題は p101、解答は p18w）

定数になることを示すのは、$\psi^*\psi$ を真面目に計算すればよい。これは $\Delta x = \infty$ ということである。

★【演習問題 4-4】 .... （問題は p101、解答は p18w）

ガリレイ変換 $x' = x - vt, t' = t$ によって、微分の方は

$$\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t} + v\frac{\partial}{\partial x} \tag{E.4}$$

となる（座標の変換は x の方だが、微分はむしろ、t 微分の方が影響を受ける）。これを使って代入していく。

★【演習問題 5-1】 .... （問題は p114、解答は p19w）

$$\int_{-\pi}^{\pi} \psi^*\psi \mathrm{d}x = \int_{-\pi}^{\pi} \left(\mathrm{e}^{-3\mathrm{i}x} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}\right)\left(\mathrm{e}^{3\mathrm{i}x} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}x}\right) \mathrm{d}x \tag{E.5}$$

とする。$\displaystyle\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}nx}\mathrm{d}x = 0$（$n$ が 0 でない整数の時）を使えば、積分は実は簡単。

★【演習問題 5-2】 .... （問題は p114、解答は p19w）

関数を

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < a \\ \dfrac{H}{b-a}(x-a) & a < x < b \\ 0 & b < x \end{cases} \tag{E.6}$$

と置く。

★【演習問題 5-3】 .... （問題は p114、解答は p20w）

問い 4-1 の答えですでに規格化はしてあるので、$\psi^*\psi$ に x をかけて積分すればよい。
→ p16w

★【演習問題 6-1】 .... （問題は p134、解答は p20w）

$$[A, [B, C]] = [A, BC - CB] = ABC - ACB - BCA + CBA$$

となるので、これを $A \to B \to C \to A$ とサイクリックに回しながら足す。

★【演習問題 6-2】 .... （問題は p134、解答は p20w）

$$\langle A(p, x, t)\rangle = \int \psi^*(x, t)A(p, x, t)\psi(x, t)\mathrm{d}x \tag{E.7}$$

と書く。今度は微分すべき t が 3 つある。

★【演習問題 6-3】 .... （問題は p134、解答は p21w）

交換関係の時と同様に、ばらして計算していけばよい。

★【演習問題 6-4】 .... （問題は p134、解答は p21w）

$\left[A^{-1}, B\right] = A^{-1}B - BA^{-1}$ であるから、$[A, B] = AB - BA$ で表すには、前後から A^{-1} をかけていけばよい。

★【演習問題 7-1】 .... （問題は p162、解答は p21w）

-1 から 1 の範囲の積分なので、奇関数になっていると 0 になる。よって例えば、$|0\rangle$ と $|1\rangle$ は直交する（$\langle 0|1\rangle = 0$）。直交化していくべきなのは $|2\rangle$ からである。

★【演習問題 7-2】 .... （問題は p162、解答は p22w）

p-表示では運動量 p は数に、位置 x は $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial p}$ となる。解くべきシュレーディンガー方程式は、

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \mathrm{i}mg\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\psi(p) = E\psi(p) \tag{E.8}$$

となる。

★【演習問題 7-3】 .... （問題は p162、解答は p23w）

微分という演算は

$$\frac{\partial}{\partial x}f(x) = \lim_{\Delta x\to 0}\frac{1}{\Delta x}\left(f(x+\Delta x) - f(x)\right) \tag{E.9}$$

である。$\hat{D}$ の式を $\langle x|\hat{D}|f\rangle$ に代入してみよう。代入するときは x という文字がすでに使われているので、

$$\hat{D} = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x' \lim_{\Delta x'\to 0}\frac{1}{\Delta x'}|x'\rangle\left(\langle x'+\Delta x| - \langle x'|\right) \tag{E.10}$$

のように積分変数を変えてから代入する。

★【演習問題 8-1】 .... （問題は p173、解答は p23w）

公式 $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ の両辺を a で微分すると、

$$\int_{-\infty}^{\infty}(-x^2)\mathrm{e}^{-ax^2} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \tag{E.11}$$

となるので、これから分散を求めるための公式を作る。

★【演習問題 8-2】 .... （問題は p173、解答は p23w）

演習問題 8-1 とほぼ同じ計算である。

★【演習問題 9-1】 .... （問題は p195、解答は p24w）

【次元解析】使える定数は $\hbar[\mathrm{ML}^2\mathrm{T}^{-1}]$、$m[\mathrm{M}]$,$g[\mathrm{LT}^{-2}]$。これからエネルギー $E[\mathrm{ML}^2\mathrm{T}^{-2}]$ を作るのは、ちょっとややこしい。$\hbar^x m^y g^z$ として、M,L,T について方程式を立てよう。

【不確定性関係】$\dfrac{1}{2m}(\Delta p)^2 = mg\Delta x$ とすると、$\Delta x\Delta p = h$ により、$\dfrac{1}{2m}(\Delta p)^3 \simeq mgh$（この h はプランク定数であって高さではない）から求める。

★【演習問題 9-2】 .... （問題は p195、解答は p25w）

これは問い Schhozon での計算を、積分を使わずにやっていると思えばよい。
→ p124

★【演習問題 9-3】 .... （問題は p195、解答は p26w）

$\psi = P\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x}$ の時と、$\psi = R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ の時の場合で、$\dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\partial_x\psi^*\psi - \psi^*\partial_x\psi\right)$ を計算する。

★【演習問題 9-4】 .... （問題は p195、解答は p26w）

これは古典力学の問題である。$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}kT$ の 2 倍（2 個分）が $\frac{ke^2}{r}$ を超えられればよい。

★【演習問題 9-5】 .... （問題は p196、解答は p27w）

計算の中身は問題に書いてあるので、後は数値を入れて確かめるのみ。

★【演習問題 9-6】 .... （問題は p196、解答は p27w）

$-\frac{\hbar^2}{2m} \times 2$ 階微分の項は運動エネルギーであることに注意する。運動エネルギーは $\frac{h^2}{2m\lambda^2}$ という形になっている。波長が長くなるということは？—振幅が大きくなるということは、その場所にいる確率が高くなる、ということ。1 個の粒子の運動を考えて、ある範囲にいる確率が高くなるのは、その粒子の運動がどうなった時か？—と考えるとよい。

★【演習問題 10-1】 .... （問題は p220、解答は p27w）

計算の筋道は10.2節→ p201の奇関数の場合と同様になる。というのは、$x = 0$ で $V = \infty$ なので、この場所で波動関数は 0 にならなくてはならず、$\psi(0) = 0$ という境界条件を置くから。

★【演習問題 10-2】 .... （問題は p220、解答は p27w）

(10.32)→ p213で、$a = 0, V_0 = -\lambda$ としたものを考える。$x = \pm\infty$ で 0 にならなくてはいけないから、波動関数は

$$\psi(x) = \begin{cases} C\mathrm{e}^{\kappa x} & x < 0 \\ D\mathrm{e}^{-\kappa x} & x > 0 \end{cases} \tag{E.12}$$

の形になる。

★【演習問題 11-1】 .... （問題は p245、解答は p28w）

x と p を上昇下降演算子で表すと計算が楽になる。$a\phi_0 = 0, a^\dagger\phi_0 = \phi_1$ などを使って内積の直交性を使う。

★【演習問題 11-2】 .... （問題は p246、解答は p28w）

(11.86)→ p246の両辺に $\mathrm{e}^{-\xi^2}$ をかけると、

$$\begin{aligned} \exp\left(2\xi t - t^2\right) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)t^n}{n!} \\ \exp\left(-\xi^2 + 2\xi t - t^2\right) &= \exp\left(-\xi^2\right) sum_{n=0}^{\infty} \frac{\frac{\mathrm{d}H_n(\xi)}{\mathrm{d}\xi} t^n}{n!} \end{aligned} \tag{E.13}$$

となるが、左辺は $\exp\left(-(\xi - t)^2\right)$ となる。

★【演習問題 11-3】 .... （問題は p246、解答は p29w）

演習問題 11-2 の母関数を使うのが一番簡単。

★【演習問題 11-4】 .... （問題は p246、解答は p29w）

演習問題 11-3 の (2) の式が使えるのである。(2) から

$$\xi H_n(\xi) = nH_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2}H_{n+1}(\xi) \tag{E.14}$$

なので、

$$\underbrace{\xi \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}H_n(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi 2}}_{\phi_n(\xi)} = \underbrace{n \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}H_{n-1}(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi 2}}_{\frac{1}{\sqrt{2n}}\phi_{n-1}(\xi)} + \frac{1}{2}\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}H_{n+1}(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi 2}}_{\sqrt{2(n+1)}\phi_{n+1}(\xi)} \tag{E.15}$$

となることを使う。後は直交性をうまく使う。

★【演習問題 11-5】 ………………………………… （問題は p246、解答は p30w）

関数の形で計算するのはかなりたいへんだが、たとえば、

$$\frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{2m\omega}(a+a^\dagger)^2 = \frac{1}{4}\hbar\omega(a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + (a^\dagger)^2) \tag{E.16}$$

として考える。同じエネルギー固有状態で挟むので、a^2 や $(a^\dagger)^2$ のような、エネルギーレベルを（2 だけ）変えてしまう部分は結果に効かない。

★【演習問題 11-6】 ………………………………… （問題は p246、解答は p31w）

$I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x$ を計算するのは難しいのだが、意外なことに、

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-y^2}\mathrm{d}y \tag{E.17}$$

の方が計算が簡単なのである。この二重積分を直交座標 (x,y) から極座標 (r,θ) に変換すると積分ができる。

★【演習問題 12-1】 ………………………………… （問題は p288、解答は p31w）

$$\begin{aligned} E\psi_1(x,y,z) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x,y)\right)\psi_1(x,y,z) \\ E\psi_2(x,y,z) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x,y)\right)\psi_2(x,y,z) \end{aligned} \tag{E.18}$$

という式から始める。上の式に ψ_2 をかけ、下の式に ψ_1 をかけたものを引くと ??

★【演習問題 12-2】 ………………………………… （問題は p289、解答は p32w）

任意の関数にかけて、実際に計算してみればよい。

$$\begin{aligned} (p_r)^2 f &= -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rf) \\ &= -\hbar^2\frac{1}{r}\left[\frac{\partial^2 r}{\partial r^2}f + 2\frac{\partial r}{\partial r}\frac{\partial f}{\partial r} + r\frac{\partial^2 f}{\partial r^2}\right] \end{aligned} \tag{E.19}$$

$$\begin{aligned} (p_\theta)^2 f &= -\hbar^2\frac{1}{\sqrt{\sin\theta}}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\left(\sqrt{\sin\theta}f\right) \\ &= -\hbar^2\frac{1}{\sqrt{\sin\theta}}\left[\frac{\partial^2\sqrt{\sin\theta}}{\partial\theta^2}f + 2\frac{\partial\sqrt{\sin\theta}}{\partial\theta}\frac{\partial f}{\partial\theta} + \sqrt{\sin\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\theta^2}\right] \end{aligned} \tag{E.20}$$

のように。

★【演習問題 12-3】 .... （問題は p289、解答は p32w）

まず、$L_z = -\mathrm{i}\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ の自乗を計算してみよう。それをサイクリックに置換した式を足せば $|\vec{L}^2$ が計算できるから、その式を $-\hbar^2$ で割って、$r^2\triangle$ を引いた式を、$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{x}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{y}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{z}\frac{\partial}{\partial z}$ を使って書く。

★【演習問題 12-4】 .... （問題は p289、解答は p34w）

部分積分を使うわけだが、そこで $\psi^*(r,\theta,\phi)$ 以外にも微分がかかることを忘れてはいけない。特に、積分の中に $\sin\theta$ が挟まれていることに注意。

★【演習問題 12-5】 .... （問題は p289、解答は p34w）

代入して計算していけばよいが、途中で P_ℓ^m が満たす微分方程式

$$-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}P_\ell^m}{\mathrm{d}\theta}\right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta}P_\ell^m = \lambda P_\ell^m \tag{E.21}$$

を使おう。

★【演習問題 12-6】 .... （問題は p289、解答は p35w）

いろんな方法があるが、もともと三角関数だったので、$x=\cos\theta, \mathrm{d}x = -\sin\theta\mathrm{d}\theta$ を使って、

$$\int_{-1}^{1}\mathrm{d}x(\underbrace{1-x^2}_{1-\cos^2\theta})^n = \int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin^{2n+1}\theta \tag{E.22}$$

にして計算するのが一つの手。$\sin^{2n+1}\theta = -\sin^{2n}\theta\frac{\mathrm{d}\cos\theta}{\mathrm{d}\theta}$ のようにして部分積分すると、使える式が出てくる。

★【演習問題 12-7】 .... （問題は p289、解答は p36w）

10.1.1節→ p197での計算と同じにやればよい。つまり、(12.85)→ p274に $P_\ell^{-m}(x)$ をかけたもの

$$P_\ell^{-m}(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left((1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^m(x)\right) - \frac{m^2}{1-x^2}P_\ell^{-m}(x)P_\ell^m(x) + \ell(\ell+1)P_\ell^{-m}(x)P_\ell^m(x) = 0 \tag{E.23}$$

と、(12.85)→ p274で $m\to -m$ と置き換えてから P_ℓ^m をかけたもの

$$P_\ell^{m}(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left((1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^{-m}(x)\right) - \frac{m^2}{1-x^2}P_\ell^{m}(x)P_\ell^{-m}(x) + \ell(\ell+1)P_\ell^{m}(x)P_\ell^{-m}(x) = 0 \tag{E.24}$$

を辺々引く。

★【演習問題 13-1】 .... （問題は p314、解答は p37w）

書くのは簡単。グラフを書いてみると、ℓ が大きくなるにしたがって、位置エネルギーが全エネルギー $-\frac{1}{4}$ より小さい範囲が狭くなる。この範囲では運動エネルギーが負になることになるが、その領域が狭くなるとは??

★【演習問題 13-2】 .... （問題は p314、解答は p37w）

$$\sum_{n=0}^{\infty} L_n(x)\frac{t^n}{n!} = \frac{\mathrm{e}^{-x\frac{t}{1-t}}}{1-t} \tag{E.25}$$

を二つかけて積分する。

$$\begin{aligned}
&\int_0^{\infty} \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-x} \sum_{m=0}^{\infty} L_m(x)\frac{s^m}{m!} \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x)\frac{t^n}{n!} \\
=& \int_0^{\infty} \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-x} \frac{\mathrm{e}^{-x\frac{s}{1-s}}}{1-s} \frac{\mathrm{e}^{-x\frac{t}{1-t}}}{1-t} \\
=& \frac{1}{(1-s)(1-t)} \int_0^{\infty} \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-x\left(1+\frac{s}{1-s}+\frac{t}{1-t}\right)}
\end{aligned} \tag{E.26}$$

この積分の結果を見て、それを s, t でテイラー展開して比較する。

★【演習問題 13-3】 .... （問題は p314、解答は p38w）

まずは $L_{2,\ell} = \rho^2 + c_1\rho + c_0$ とおいて、(13.35)→ p301に代入する。

ψ_{300} と比較するためには、$\rho = \frac{2}{n}r$（今の場合は $n=3$）という座標お置き換えをすることが必要であることを忘れずに。

★【演習問題 13-4】 .... （問題は p314、解答は p39w）

$r_1 = 0$ を極座標の原点におくと、

$$r_2 = \sqrt{r^2 + R^2 - 2Rr\cos\theta} \tag{E.27}$$

となる。たとえば、

$$\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty} \mathrm{d}r \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi r^2 \sin\theta \mathrm{e}^{-2r} \frac{1}{\sqrt{r^2 + R^2 - 2Rr\cos\theta}} \tag{E.28}$$

のような積分をしなくてはならないが、これは Legendre 多項式の母関数になっているから、Legendre の直交関係を使って積分できる（まじめに積分することも可能である)。

計算の途中、$|r-R|$ が出てくるが、$r > R$ と $r < R$ で場合分けせよ。

付録 F

章末演習問題の解答

★【演習問題 1-1】 ……………………………………… （問題は p32、ヒントは p1w）

光子１個のエネルギーは $\frac{hc}{\lambda}$ でこのまま計算するとＪで出るから、1.6×10^{-19} で割ってeVにする。紫外線の場合、

$$\frac{6.6\times10^{-34}\times3.0\times10^{8}}{5\times10^{-8}\times1.6\times10^{-19}}\simeq 24.8\mathrm{eV}$$

赤外線の場合、

$$\frac{6.6\times10^{-34}\times3.0\times10^{8}}{1\times10^{-6}\times1.6\times10^{-19}}\simeq 1.24\mathrm{eV}$$

となり、紫外線には水素原子をイオン化するエネルギーがあるが、赤外線にはない。

★【演習問題 1-2】 ……………………………………… （問題は p32、ヒントは p1w）

まず光子の個数は、単純に公式通りに、

$$\frac{W}{\frac{hc}{\lambda}}=\frac{100\mathrm{J/s}}{\frac{6.6\times10^{-34}\times3.0\times10^{8}}{5.0\times10^{-7}}}\simeq 2.5\times10^{20}\text{個} \tag{F.1}$$

として計算できる。1m 向こうではこれが $4\pi\mathrm{m}^2$ の面積に広がるので、瞳にはいるのは、

$$2.5\times10^{20}\text{個}\times\frac{0.5\times10^{-4}\mathrm{m}^2}{4\pi\mathrm{m}^2}\simeq 1.0\times10^{15}\text{個} \tag{F.2}$$

けっこう多い。

★【演習問題 1-3】 ……………………………………… （問題は p32、ヒントは p1w）

$$1.83\times10^{-13}\times\frac{4\pi(10^{-10})^2}{4\pi(10^{-6})^2}=1.83\times10^{-21} \tag{F.3}$$

5.0×10^{-19}をこれで割ると、約273。4分33秒かかることになる。

★【演習問題1-4】 .... （問題はp32、ヒントはp1w）

ヒントに書いたようにして恒星からやってくる光が人間の瞳に入る数を計算すると、1秒間に

$$\frac{\frac{2.5}{683}\times10^{-6}\times0.5\times10^{-4}}{4\times10^{-19}}=4.6\times10^{5}$$

である。星からは充分な数の光子が来ており、またたく原因と光の粒子性は関係ない。

ちなみに、星がまたたくのは、空気の乱れによってさまざまな方向に屈折するからである。

★【演習問題2-1】 .... （問題はp49、ヒントはp1w）

線密度ρの次元$[\mathrm{ML}^{-1}]$と張力Tの次元は$[\mathrm{MLT}^{-2}]$を組み合わせてMを消すには、$\dfrac{T}{\rho}[\mathrm{L}^2\mathrm{T}^{-2}]$。速さの次元にするには、平方根をとって、$\sqrt{\dfrac{T}{\rho}}[\mathrm{LT}^{-1}]$。

★【演習問題2-2】 .... （問題はp49、ヒントはp1w）

[L]を作るには、まず[T]を消す。$\dfrac{ke^2}{h^2}$で次元が$[\mathrm{M}^{-1}\mathrm{L}^{N-4}]$となるから、[M]を消すために$\mu$をかけてから$\dfrac{1}{N-4}$乗する。

$$\left(\frac{\mu ke^2}{h^2}\right)^{\frac{1}{N-4}} \tag{F.4}$$

となる。

ボーアの量子条件からhは常にnh（nは自然数）という組み合わせで現れるとすれば、

$$r=(\text{定数})\left(\frac{\mu ke^2}{(nh)^2}\right)^{\frac{1}{N-4}} \tag{F.5}$$

これからわかるように$N=4$では半径が決まらないし、$N=5$以上ではnが大きいほど半径が小さいということになる。

なお、実は$N=4$以上では古典力学の範囲ですら、安定解がないことが知られている（つまり原子核まで落ちてしまうか、遠くに飛び去ってしまうか、どっちかの解しかない）。

★【演習問題2-3】 .... （問題はp49、ヒントはp2w）

エネルギー(eV)	1	10	100	1000	10^6	10^9
運動量(kg・m/s)	5.4×10^{-25}	1.7×10^{-24}	5.4×10^{-24}	1.7×10^{-23}	5.4×10^{-22}	1.7×10^{-20}
波長(m)	1.2×10^{-9}	3.9×10^{-10}	1.2×10^{-10}	3.9×10^{-11}	1.2×10^{-12}	3.9×10^{-14}

典型的な結晶のサイズ10^{-10}mからすると、100Vぐらいで加速した電子を使うのがよさそうである（もちろん、見たい構造のサイズに合わせて調整する）。

★【演習問題 2-4】 .... (問題は p49、ヒントは p2w)

ヒントの式に続けて、$x=\dfrac{x_++x_-}{2}+\dfrac{x_--x_+}{2}\cos\theta$ とおいてやると、

$$
\begin{aligned}
x_--x &= \frac{x_--x_+}{2}-\frac{x_--x_+}{2}\cos\theta=\frac{x_--x_+}{2}(1-\cos\theta) \qquad \text{(F.6)}\\
x-x_+ &= \frac{x_--x_+}{2}+\frac{x_--x_+}{2}\cos\theta=\frac{x_--x_+}{2}(1+\cos\theta) \qquad \text{(F.7)}
\end{aligned}
$$

となり、θ が 0 から π まで変化する間に $x=x_-$ から x_+ への変化する。計算すべき積分は、

$$
\begin{aligned}
&2L\int_0^\pi \frac{\sqrt{\left(\frac{x_--x_+}{2}\right)^2(1-\cos^2\theta)}\frac{x_--x_+}{2}\sin\theta}{\left(\frac{x_++x_-}{2}+\frac{x_--x_+}{2}\cos\theta\right)^2}\mathrm{d}\theta\\
=&\ 2L\int_0^\pi \frac{\sin^2\theta}{\left(\frac{x_++x_-}{x_--x_+}+\cos\theta\right)^2}\mathrm{d}\theta
\end{aligned} \qquad \text{(F.8)}
$$

以下、$\dfrac{x_++x_-}{x_--x_+}=a$ とおいて計算を続けよう。$x_\pm$ は正なので、$a>1$ である。

$$
\begin{aligned}
2L\int_0^\pi \frac{\sin^2\theta}{(a+\cos\theta)^2}\mathrm{d}\theta =&\ 2L\int_0^\pi \frac{1-\cos^2\theta}{\cos^2\theta+2a\cos\theta+a^2}\mathrm{d}\theta\\
=&\ 2L\int_0^\pi\left(\frac{1+a^2+2a\cos\theta}{\cos^2\theta+2a\cos\theta+a^2}-1\right)\mathrm{d}\theta\\
=&\ 2L\int_0^\pi\left(\frac{1-a^2+2a(a+\cos\theta)}{(\cos\theta+a)^2}-1\right)\mathrm{d}\theta\\
=&\ 2L\int_0^\pi\left(\frac{1-a^2}{(\cos\theta+a)^2}+\frac{2a}{\cos\theta+a}-1\right)\mathrm{d}\theta
\end{aligned} \qquad \text{(F.9)}
$$

ここで、

$$
\int_0^\pi\frac{1}{a+\cos\theta}\mathrm{d}\theta=\frac{\pi}{\sqrt{a^2-1}} \qquad \text{(F.10)}
$$

という公式を使う。これを a で微分すると、

$$
\int_0^\pi\frac{1}{(a+\cos\theta)^2}\mathrm{d}\theta=\frac{\pi a}{(a^2-1)^{\frac{3}{2}}} \qquad \text{(F.11)}
$$

という式が作られる。当てはめると、

$$
\begin{aligned}
&2L\int_0^\pi\left(\frac{1-a^2}{(\cos\theta+a)^2}+\frac{2a}{\cos\theta+a}-1\right)\mathrm{d}\theta\\
=&\ 2L\left((1-a^2)\frac{\pi a}{(a^2-1)^{\frac{3}{2}}}+\frac{2a\pi}{\sqrt{a^2-1}}-\pi\right)\\
=&\ 2\pi L\left(\frac{a}{\sqrt{a^2-1}}-1\right)
\end{aligned} \qquad \text{(F.12)}
$$

a を元に戻すと、

$$2\pi L\left(\frac{\frac{x_++x_-}{x_--x_+}}{\sqrt{\left(\frac{x_++x_-}{x_--x_+}\right)^2-1}}-1\right)=2\pi L\left(\frac{x_++x_-}{\sqrt{(x_++x_-)^2-(x_--x_+)^2}}-1\right)$$
$$=2\pi L\left(\frac{x_++x_-}{2\sqrt{x_+x_-}}-1\right)=2\pi L\left(\frac{r_++r_-}{2\sqrt{r_+r_-}}-1\right) \tag{F.13}$$

となる。

★【演習問題 3-1】 .... （問題は p76、ヒントは p2w）

$\omega=\sqrt{k^2c^2+\frac{m^2c^4}{\hbar^2}}$ となる。

$$v_p=\frac{\omega}{k}=\frac{\sqrt{k^2c^2+\frac{m^2c^4}{\hbar^2}}}{k}=\underbrace{\frac{\sqrt{k^2+\frac{m^2c^4}{\hbar^2c^2}}}{k}}_{>1}c \tag{F.14}$$

$$v_g=\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}=\frac{kc^2}{\sqrt{k^2c^2+\frac{m^2c^4}{\hbar^2}}}=\underbrace{\frac{k}{\sqrt{k^2+\frac{m^2c^4}{\hbar^2c^2}}}}_{<1}c \tag{F.15}$$

となる。よって、$v_g<c, v_p<c$。情報伝達の速度である v_g は光速を超えていない。

★【演習問題 3-2】 .... （問題は p76、ヒントは p2w）

ヒントに書いたように

$$\int_a^b f(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x)\mathrm{d}x=[f(x)\delta(x)]_a^b-\int_a^b\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x)\delta(x)\mathrm{d}x$$

の第 1 項は 0、第 2 項はデルタ関数の定義どおりに、$-\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(0)$ になる。よって、デルタ関数の微分は

$$f(x)\frac{\mathrm{d}\delta(x)}{\mathrm{d}x}=-\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}\delta(x) \tag{F.16}$$

という式を満たす。

★【演習問題 3-3】 .... （問題は p76、ヒントは p2w）

$$\delta\left(f(x)\right)=\frac{1}{|f'(x)|}\delta(x-x_0)$$

を証明したいので、左辺に任意の関数をかけて x で積分する。積分範囲 (a,b) は、x_0 を中に含み（$a<x_0<b$）、x_0 以外では $f(x)=0$ にならない。

$$\int_a^b g(x)\delta\left(f(x)\right)\mathrm{d}x$$

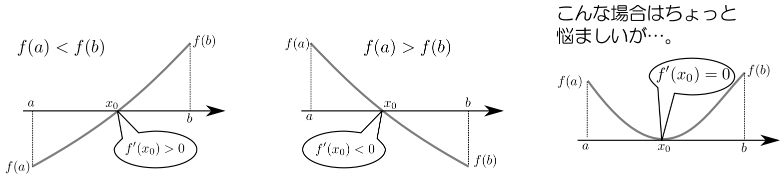
ここで、変数を $y=f(x)$ に直す。

$$\int_{f(a)}^{f(b)} g\left(f^{-1}(y)\right)\delta\left(y\right)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y}\mathrm{d}y$$

となるが、ここで $\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y}=\dfrac{1}{f'(x)}$ である。積分の結果 $y=0$ になるところのみが生き残るから、答は

$$\pm g(x_0)\frac{1}{f'(x_0)}$$

である。ただし複号 $\pm$ は $f(a)<f(b)$ なら $+$、$f(a)>f(b)$ なら $-$ である。今、$x=x_0$ 以外では $f(x)$ は 0 にならないのだから、



と考えると、どちらの場合も $\pm f'(x_0)$ が正になる。ということは $\pm\dfrac{1}{f'(x_0)}$ も常に正となるので、$\dfrac{1}{|f'(x_0)|}$ と書いておけばよい。よって、任意の関数 $g(x)$ に対して

$$\int g(x)\delta\left(f(x)\right)\mathrm{d}x=g(x_0)\frac{1}{|f'(x_0)|}$$

が示された。

なお、図にも示した通り、関数 $f(x)$ が $x=x_0$ において x 軸に接するような場合は、$f'(x_0)=0$ になってしまっているので、そもそもこの公式の適用範囲外だということになる。

なお、もう一つ心配なのは関数 $f(x)$ が不連続であったら、ということだが、その場合は不連続な点で積分を切り分けて、$x=x_0$ を含む部分だけを考えて上の証明をやり直せばよい。

★【演習問題 3-4】 .... （問題は p77、ヒントは p2w）

(1) (3.18)→ p63の $\Delta\to 0$ 極限を取る前は、$x=-\Delta$ から $x=\Delta$ までの間 $\dfrac{1}{2\Delta}$ という値で、それ以外の場所では 0 であるような関数である。よってこの関数をフーリエ変換するには、積分を $-\Delta<x<\Delta$ の範囲にして、

$$F(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\Delta}^{\Delta}\frac{1}{2\Delta}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x$$

を実行すればよい。答は、

$$\frac{1}{2\Delta\sqrt{2\pi}}\left[\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}}{-\mathrm{i}k}\right]_{-\Delta}^{\Delta}=\frac{1}{-2\mathrm{i}k\Delta\sqrt{2\pi}}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\Delta}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\Delta}\right)$$

であるが、$\sin\theta=\frac{1}{2\mathrm{i}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta})$ を使うと、

$$\frac{1}{k\Delta\sqrt{2\pi}}\sin k\Delta$$

となる。

(2) $\lim_{\theta\to 0}\frac{\sin\theta}{\theta}=1$ である。(1) の答は $\theta=k\Delta$ とすればこの式 $\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ そのものであるから、極限値は $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$。

(3) $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ を逆フーリエして、

$$f(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x$$

となる。

★【演習問題 3-5】 .... (問題は p77、ヒントは p2w)

全運動量 p は変化しない。横方向（図の x 軸方向）の不確定性 $\Delta x=d$ から、x 方向の運動量は $\Delta p=\frac{h}{d}$ を持つ。ということは、$\frac{x\text{軸方向の運動量}}{\text{全運動量}}=\sin\theta$ として、$\Delta(\sin\theta)=\frac{\frac{h}{d}}{\frac{h}{\lambda}}=\frac{\lambda}{d}$ となる。これが 1 の時、$\sin\theta$ が $-\frac{1}{2}$ から $\frac{1}{2}$ まで（つまり $\theta=\pm\frac{\pi}{6}$）と変化していることになるので、広がり角度が 30 度になるのは、$d\simeq\lambda$ の時。

★【演習問題 3-6】 .... (問題は p77、ヒントは p2w)

(1) 波長が d より短いのだから、運動量は $\frac{h}{d}$ より大きい。

(2) $\frac{h}{d}$ 程度の運動量を光からもらってしまうと、電子の速度は $\frac{h}{md}$ ぐらい変化する。電子はだいたい $v=\frac{h}{m\lambda}$ の速度で走っているから、スクリーンに到着するまでに $\frac{m\lambda L}{h}$ の時間がかかり、余分に獲得した速度 $\frac{h}{md}$ によって、この間に $\frac{h}{md}\times\frac{m\lambda L}{h}=\frac{\lambda L}{d}$ ぐらいずれる。これはヤングの実験で（電子に光を当てるという操作をしなかった時の）干渉縞の間隔と同じであるから、電子が作っていた干渉縞はこれによって乱されてしまう。

★【演習問題 3-7】 .... （問題は p78、ヒントは p3w）

ヒントにあるように、光子がスリットにあたえる運動量は $\dfrac{hd}{\lambda\sqrt{L^2+\left(\frac{d}{2}\right)^2}}$ ぐらいである。この運動量を測定できるためには、スリットの運動量がその精度以上に確定していなくてはいけない（最初からスリット全体の運動量が大きな分散を持っていたら、「これだけの運動量を得た」と測定することに意味がなくなってしまう）。$\Delta x\Delta p \gtrsim h$ であることを考えると、スリットの運動量をそんなに厳密に測定すると、$\Delta x \gtrsim \dfrac{h}{\Delta p} = \dfrac{\lambda\sqrt{L^2+\left(\frac{d}{2}\right)^2}}{d}$ という大きさだけ、スリットの位置が不確定になる。ところがこの不確定度は、今できると思われる干渉縞の幅である $\dfrac{\lambda L}{d}$ よりも大きいのである。すきまがそんなに不確定では、干渉縞はできない。

★【演習問題 3-8】 .... （問題は p79、ヒントは p3w）

ヒントに書いた図より、反撥 γ 線の運動量の x 成分は、もっとも大きい場合で $\dfrac{h}{\lambda}\sin\phi$ であり、もっとも小さい場合では $-\dfrac{h}{\lambda}\sin\phi$ になる。よって $\Delta p = \dfrac{2h}{\lambda}\sin\phi$ である。これに $\Delta x = \dfrac{\lambda}{2\sin\phi}$ をかけて、

$$\Delta x\Delta p = \frac{2h}{\lambda}\sin\phi \times \frac{\lambda}{2\sin\phi} = h$$

となる。不確定性関係が成立している。

ただし、ここで示している不確定性は3.5節 → p74 で説明した不確定性のうち、「x を観測すると p が乱される」という意味での不確定性である。より重要な不確定性は「物質の波動的性質から、観測する前からすでに存在しているもの」であることは忘れないように。

★【演習問題 4-1】 .... （問題は p100、ヒントは p3w）

グラフは最後にまとめる。

(1)　$\psi^*\psi = \sin^2 x$ なので、

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin^2 x \mathrm{d}x = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1-\cos 2x}{2}\mathrm{d}x = \left[\frac{x-\frac{1}{2}\sin 2x}{2}\right]_{-\pi}^{\pi} = \pi$$

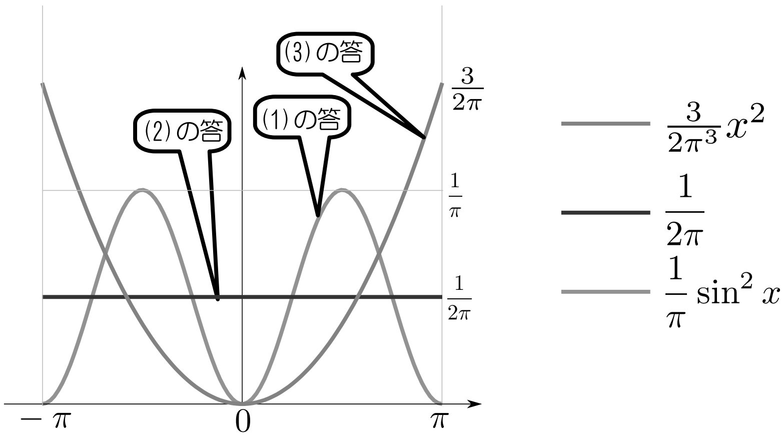
よって規格化された波動関数は $\psi = \dfrac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x$ となる。

(2)　$\psi^*\psi = 1$ なので、積分は（書くまでもなく）2π であり、規格化された波動関数は $\psi = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{inx}$ となる。

(3)　$\psi^*\psi = x^2$ となる（符号はどっちにしろ消える）。よって、

$$\int_{-\pi}^{\pi} x^2 \mathrm{d}x = \left[\frac{x^3}{3}\right]_{-\pi}^{\pi} = \frac{2\pi^3}{3}$$

よって、規格化された波動関数は $\psi = \pm\sqrt{\frac{3}{2\pi^3}}x$ となる（符号は $x > 0$ で $+$、$x < 0$ で $-$）。



★【演習問題 4-2】 .... （問題は p101、ヒントは p3w）

二つの式から、上では波数を k として、

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\omega$$

下では波数を k' として、

$$\frac{\hbar^2 (k')^2}{2m} = \hbar\omega$$

が成立する。$\hbar k = \frac{h}{\lambda}$ であることを使うと、波長は、$\frac{h}{\sqrt{2m(\hbar\omega - V)}}$ から $\frac{h}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$ へと変化する。

位相速度は $\frac{\omega}{k}$ と $\frac{\omega}{k'}$ であるから、

$\frac{\hbar\omega}{\sqrt{2m(\hbar\omega - V)}}$ から、$\frac{\hbar\omega}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$ へと変化する（つまり、遅くなる）。

一方群速度は $\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}$ であるから、上では $\frac{\hbar k}{m}$、下では $\frac{\hbar k'}{m}$ となり、$\frac{\sqrt{2m(\hbar\omega - V)}}{m}$ から $\frac{\sqrt{2m\hbar\omega}}{m}$ へと変化する（つまり、速くなる）。

★【演習問題 4-3】 .... （問題は p101、ヒントは p4w）

$$\psi^*\psi = \underbrace{A^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kx-\omega t)}}_{\psi^*}\underbrace{A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}}_{\psi} = A^*A$$

となって場所によらない。これは k という 1 個の明確な波数を持っており、つまり運動量が $\hbar k$ という確定した値を持っていることが原因である（$\Delta p = 0$ なので $\Delta x = \infty$）

★【演習問題 4-4】 .... （問題は p101、ヒントは p4w）

$\dfrac{\partial}{\partial x'} = \dfrac{\partial}{\partial x}$,　$\dfrac{\partial}{\partial t'} = \dfrac{\partial}{\partial t} + v\dfrac{\partial}{\partial x}$ の逆関係である $\dfrac{\partial}{\partial x} = \dfrac{\partial}{\partial x'}$,　$\dfrac{\partial}{\partial t} = \dfrac{\partial}{\partial t'} - v\dfrac{\partial}{\partial x'}$ を元のシュレーディンガー方程式に代入すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial(x')^2}\psi = \mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t'} - v\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi \tag{F.17}$$

となる。ここで問題にあるように $\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\Psi$ と代入して、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial(x')^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\Psi = \mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t'} - v\frac{\partial}{\partial x'}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\Psi \tag{F.18}$$

この左辺は

$$\begin{aligned}
&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x'}\left(\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\Psi + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\frac{\partial\Psi}{\partial x'}\right)\\
=&-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-k^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\Psi + 2\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\frac{\partial\Psi}{\partial x'} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\frac{\partial^2\Psi}{\partial(x')^2}\right)\\
=&-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-k^2\Psi + 2\mathrm{i}k\frac{\partial\Psi}{\partial x'} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial(x')^2}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}
\end{aligned} \tag{F.19}$$

となり、右辺は、

$$\begin{aligned}
&\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\Psi - \mathrm{i}\hbar v\frac{\partial}{\partial x'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\Psi\\
=&-\epsilon\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\Psi + \mathrm{i}\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\frac{\partial\Psi}{\partial t'} + \hbar kv\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\Psi - \mathrm{i}\hbar v\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}\frac{\partial\Psi}{\partial x'}\\
=&\left(-\epsilon\hbar\Psi + \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t'} + \hbar kv\Psi - \mathrm{i}\hbar v\frac{\partial\Psi}{\partial x'}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}
\end{aligned} \tag{F.20}$$

共通因数である $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx'+\epsilon t')}$ を除いた部分を整理すると、

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-k^2\Psi + 2\mathrm{i}k\frac{\partial\Psi}{\partial x'} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial(x')^2}\right) &= -\epsilon\hbar\Psi + \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t'} + \hbar kv\Psi - \mathrm{i}\hbar v\frac{\partial\Psi}{\partial x'}\\
\frac{\hbar^2k^2}{2m}\Psi - \mathrm{i}\frac{\hbar^2k}{m}\frac{\partial\Psi}{\partial x'} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial(x')^2} &= -\epsilon\hbar\Psi + \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t'} + \hbar kv\Psi - \mathrm{i}\hbar v\frac{\partial\Psi}{\partial x'}
\end{aligned} \tag{F.21}$$

となるので、両辺を比較して、

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\epsilon\hbar + \hbar k v \tag{F.22}$$

$$-\mathrm{i}\frac{\hbar^2 k}{m} = -\mathrm{i}\hbar v \tag{F.23}$$

が成り立っていればよい。下の式から

$$k = \frac{mv}{\hbar} \tag{F.24}$$

となり、

$$\frac{1}{2}mv^2 = -\epsilon\hbar + mv^2 \tag{F.25}$$

となるので、

$$\epsilon = \frac{\frac{1}{2}mv^2}{\hbar} \tag{F.26}$$

となる。これは、元の方程式の静止状態が今速度 v で運動している、ということを考えると、それだけエネルギーの原点が移動したと見ればよい。

★【演習問題 5-1】 .... (問題は p114、ヒントは p4w)

$$\int_{-\pi}^{\pi}\psi^*\psi\mathrm{d}x = \int_{-\pi}^{\pi}\left(\mathrm{e}^{-3\mathrm{i}x} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}\right)\left(\mathrm{e}^{3\mathrm{i}x} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}x}\right)\mathrm{d}x \tag{F.27}$$

であるが、$\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}nx}\mathrm{d}x = 0$（$n$ が 0 でない整数の時）であるので、計算すべきは、$\int_{-\pi}^{\pi}\left(\mathrm{e}^{-3\mathrm{i}x}\mathrm{e}^{3\mathrm{i}x} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}\right)\mathrm{d}x$ であり、$\int_{-\pi}^{\pi}2\mathrm{d}x = 4\pi$ なので、規格化のためには $\sqrt{4\pi}$ で割って、$\psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\mathrm{e}^{3\mathrm{i}x} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}x}\right)$ とする。これを使って運動量の期待値を計算すると、

$$\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}x\psi^*\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi = \frac{1}{4\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}x\left(\mathrm{e}^{-3\mathrm{i}x} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}\right)\left(3\hbar\mathrm{e}^{3\mathrm{i}x} + \hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}\right) \tag{F.28}$$

となり、やはり同じ運動量の波動関数の積だけが積分後も生き残り、

$$\frac{1}{4\pi} \times 2\pi \times (3\hbar + \hbar) = 2\hbar \tag{F.29}$$

が運動量の期待値となる。

★【演習問題 5-2】 .... (問題は p114、ヒントは p4w)

ヒントにある関数を積分するが、実際に必要な積分は (a, b) の範囲のみなので、$\frac{H}{b-a}(x-a)$ を自乗して積分する。まず規格化を行う。

$$\int_a^b \psi^*\psi\mathrm{d}x = \frac{H^2}{(b-a)^2}\int_a^b (x-a)^2 = \frac{H^2}{(b-a)^2}\left[\frac{1}{3}(x-a)^3\right]_a^b = \frac{H^2}{3}(b-a) \tag{F.30}$$

が1になることから、$H^2 = \dfrac{3}{b-a}$ となる。次に x の期待値が、

$$\int_a^b \psi^* x\psi \mathrm{d}x = \frac{H^2}{(b-a)^2}\int_a^b x(x-a)^2 = \frac{3}{(b-a)^3}\left[\frac{1}{4}x^4 - \frac{2a}{3}x^3 + \frac{a^2}{2}x^2\right]_a^b = \frac{a+3b}{4} \tag{F.31}$$

という答えになる。

★【演習問題 5-3】 .... （問題は p114、ヒントは p4w）

(1)　規格化された波動関数は $\psi = \dfrac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x$ であったから

$$\frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} x\sin^2 x\mathrm{d}x$$

を計算すればよいが、これは奇関数なので、計算結果は0である。

(2)　規格化された波動関数は $\psi = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}nx}$ なので、

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} x\mathrm{d}x = 0$$

(3)　規格化された波動関数は $\psi = \pm\sqrt{\dfrac{3}{2\pi^3}}x$ であったから、

$$\frac{3}{2\pi^3}\int_{-\pi}^{\pi} x^3\mathrm{d}x$$

となり、これまた奇関数なので結果は0。

★【演習問題 6-1】 .... （問題は p134、ヒントは p4w）

ヒントにあるように $[A,[B,C]] = [A, BC-CB] = ABC - ACB - BCA + CBA$ にサイクリック置換した式を足す。まずは並べてみると、

$$\begin{aligned}
[A,[B,C]] &= ABC - ACB - BCA + CBA\\
[B,[C,A]] &= BCA - BAC - CAB + ACB\\
[C,[A,B]] &= CAB - CBA - ABC + BAC
\end{aligned} \tag{F.32}$$

となる。ここに12個の項があるが、A,B,C の3つの置換である $3! = 6$ 通りの項が $\pm$ の符号を伴いつつ2回ずつ現れている。よって総和は0である。

★【演習問題 6-2】 .... （問題は p134、ヒントは p4w）

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle &= \int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}A\psi + \psi^*\frac{\partial A}{\partial t}\psi + \psi^* A\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)\mathrm{d}x\\
&= \int\left(-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(H\psi)^* A\psi + \psi^*\frac{\partial A}{\partial t}\psi + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\psi^* AH\psi\right)\mathrm{d}x\\
&= \int\left(\psi^*\frac{\partial A}{\partial t}\psi + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\psi^*\left(AH - HA\right)\psi\right)\mathrm{d}x
\end{aligned} \tag{F.33}$$

となり、証明された。

★【演習問題6-3】 .... （問題は p134、ヒントは p4w）

(1) $\{A,B+C\}=A(B+C)+(B+C)A=AB+BA+AC+CA=\{A,B\}+\{A,C\}$

(2) $\{A,BC\}=ABC+BCA=ABC\underbrace{+BAC-BAC}_{\text{足して引く。}}+BCA=-B[A,C]+\{A,B\}C$

(3) $[A,BC]=ABC-BCA=ABC\underbrace{+BAC-BAC}_{\text{足して引く。}}-BCA=-B\{A,C\}+\{A,B\}C$

★【演習問題6-4】 .... （問題は p134、ヒントは p4w）

$$
\begin{aligned}
\left[A^{-1},B\right] &= A^{-1}B-BA^{-1}\\
A\left[A^{-1},B\right]A &= AA^{-1}BA-ABA^{-1}A\\
A\left[A^{-1},B\right]A &= BA-AB=-[A,B]\\
\left[A^{-1},B\right] &= -A^{-1}[A,B]A^{-1}
\end{aligned}
\tag{F.34}
$$

★【演習問題7-1】 .... （問題は p162、ヒントは p5w）

ヒントに書いたように、すでに $|0\rangle,|1\rangle$ までは直交している。直交済みの関数を $|\bar{0}\rangle,|\bar{1}\rangle$ のようにバーをつけて表現することにするが、$|\bar{0}\rangle=|0\rangle,|\bar{1}\rangle=|1\rangle$ でいい。次に $|\bar{2}\rangle$ を作る。

$$
|\bar{2}\rangle=\left(1-\frac{1}{\langle\bar{0}|\bar{0}\rangle}|\bar{0}\rangle\langle\bar{0}|-\frac{1}{\langle\bar{1}|\bar{1}\rangle}|\bar{1}\rangle\langle\bar{1}|\right)|2\rangle \tag{F.35}
$$

として $|\bar{2}\rangle$ を作る。$\langle x|\bar{1}\rangle$ が奇関数、$\langle x|2\rangle$ が偶関数であることから、$\langle\bar{1}|2\rangle=\int_{-1}^{1}\mathrm{d}x\langle\bar{1}|x\rangle\langle x|2\rangle=0$ である（以下でも、偶数番目と奇数番目の内積はすべて0になる）。さらに、$\langle\bar{0}|\bar{0}\rangle=2$ と、

$$
\langle\bar{0}|2\rangle=\int_{-1}^{1}x^2\mathrm{d}x=\left[\frac{x^3}{3}\right]_{-1}^{1}=\frac{2}{3} \tag{F.36}
$$

より、

$$
|\bar{2}\rangle=|2\rangle-\frac{1}{3}|\bar{0}\rangle \tag{F.37}
$$

となる。つまり、$\langle x|\bar{2}\rangle=x^2-\dfrac{1}{3}$ ということ。次に $|\bar{3}\rangle$ を

$$
|\bar{3}\rangle=\left(1-\frac{1}{\langle\bar{1}|\bar{1}\rangle}|\bar{1}\rangle\langle\bar{1}|\right)|3\rangle \tag{F.38}
$$

により作る（$|\bar{0}\rangle, |\bar{2}\rangle$ の項はどうせ直交するのでいれなくてよい）。$\langle\bar{1}|\bar{1}\rangle = \int_{-1}^{1} x^2 \mathrm{d}x = \frac{2}{3}$ と、

$$\langle\bar{1}|3\rangle = \int_{-1}^{1} x^4 \mathrm{d}x = \frac{2}{5} \tag{F.39}$$

より、

$$|\bar{3}\rangle = |3\rangle - \frac{3}{5}|1\rangle \tag{F.40}$$

つまり、$\langle x|\bar{3}\rangle = x^3 - \frac{3}{5}x$ である。同様に、

$$|\bar{4}\rangle = \left(1 - \frac{1}{\langle\bar{0}|\bar{0}\rangle}|\bar{0}\rangle\langle\bar{0}| - \frac{1}{\langle\bar{2}|\bar{2}\rangle}|\bar{2}\rangle\langle\bar{2}|\right)|4\rangle \tag{F.41}$$

を計算する。

$$\langle\bar{2}|\bar{2}\rangle = \int_{-1}^{1} \left(x^2 - \frac{1}{3}\right)^2 = \frac{8}{45} \tag{F.42}$$

$$\langle\bar{0}|4\rangle = \int_{-1}^{1} x^4 \mathrm{d}x = \frac{2}{5} \tag{F.43}$$

$$\langle\bar{2}|4\rangle = \int_{-1}^{1} \left(x^2 - \frac{1}{3}\right) x^4 \mathrm{d}x = \frac{16}{105} \tag{F.44}$$

を代入して、

$$|\bar{4}\rangle = |4\rangle - \frac{1}{5}|\bar{0}\rangle - \frac{6}{7}|\bar{2}\rangle \tag{F.45}$$

これから、

$$\langle x|\bar{4}\rangle = x^4 - \frac{1}{5} - \frac{6}{7}\left(x^2 - \frac{1}{3}\right) = x^4 - \frac{6}{7}x^2 + \frac{3}{35} \tag{F.46}$$

となる。

　p279 の表の $P_0^0, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0$ と比較しておこう（規格化してないので、定数倍分ずれている）。

★【演習問題 7-2】 .... （問題は p162、ヒントは p5w）

　ヒントの方程式を

$$\mathrm{i}mg\hbar\frac{\partial}{\partial p}\psi(p) = \left(E - \frac{p^2}{2m}\right)\psi(p) \tag{F.47}$$

と書き直してやれば、微分すると $\frac{E - \frac{p^2}{2m}}{\mathrm{i}mg}$ が前に出てくるような関数が解だということになる。それは

$$\psi(p) = C\exp\left[\frac{1}{\mathrm{i}mg\hbar}\left(Ep - \frac{p^3}{6m}\right)\right] \tag{F.48}$$

である。

★【演習問題 7-3】 .... (問題は p162、ヒントは p5w)

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{D}|f\rangle =& \lim_{\Delta x'\to 0}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \frac{1}{\Delta x'} \underbrace{\langle x|x'\rangle}_{=\delta(x-x')} \left(\langle x'+\Delta x'|f\rangle - \langle x'|f\rangle\right) \\ =& \lim_{\Delta x'\to 0}\frac{1}{\Delta x'}\left(\langle x+\Delta x'|f\rangle - \langle x|f\rangle\right) \\ =& \frac{\partial}{\partial x}\langle x|f\rangle\end{aligned} \tag{F.49}$$

また、

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{D}|f\rangle =& \lim_{\Delta x'\to 0}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \frac{1}{\Delta x'} \Big(\underbrace{\langle x|x'-\Delta x'\rangle}_{=\delta(x-x'+\Delta x')} - \underbrace{\langle x|x'\rangle}_{=\delta(x-x')} \Big)\langle x'|f\rangle \\ =& \lim_{\Delta x'\to 0}\frac{1}{\Delta x'}\left(\langle x+\Delta x'|f\rangle - \langle x|f\rangle\right) \\ =& \frac{\partial}{\partial x}\langle x|f\rangle\end{aligned} \tag{F.50}$$

★【演習問題 8-1】 .... (問題は p173、ヒントは p5w)

x の期待値は

$$\langle x\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x \tag{F.51}$$

となるが、奇関数であるからこの積分は 0 である。したがって分散は

$$\langle x^2\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x^2\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x \tag{F.52}$$

を計算すればよい。ヒントにあるように、$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} x^2\mathrm{e}^{-ax^2} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$ という公式が作れるので、

$$\langle x^2\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \times \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}} = \frac{1}{2\alpha} \tag{F.53}$$

と計算できる。

★【演習問題 8-2】 .... (問題は p173、ヒントは p5w)

考えるべき波動関数は $\psi = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2C}x^2}$ であるが、これは演習問題 8-1 で計算した波動関数を $\alpha \to \dfrac{1}{C}$ と置き換えればよい。これで規格化の問題も解決し、規格化定数は $\left(\dfrac{1}{C\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$ とわかる。x の期待値と分散は、8-1 の結果を使って、$\langle x\rangle = 0, (\Delta x)^2 = \dfrac{C}{2}$ である。

次に p の期待値であるが、

$$\sqrt{\frac{1}{C\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2C}x^2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2C}x^2} = \mathrm{i}\hbar\sqrt{\frac{1}{C\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2C}x^2}\frac{x}{C}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2C}x^2} \tag{F.54}$$

となって、これも奇関数なので答は 0。

分散は p^2 の期待値を計算して、

$$\begin{aligned}
&\sqrt{\frac{1}{C\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2C}x^2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\mathrm{e}^{-\frac{1}{2C}x^2}\\
=&-\hbar^2\sqrt{\frac{1}{C\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2C}x^2}\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{x}{C}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2C}x^2}\right)\\
=&-\hbar^2\sqrt{\frac{1}{C\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2C}x^2}\left(-\frac{1}{C}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2C}x^2}+\frac{x^2}{C^2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2C}x^2}\right)\\
=&\frac{\hbar^2}{C}\sqrt{\frac{1}{C\pi}}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{C}x^2}}_{=\sqrt{C\pi}}-\frac{\hbar^2}{C^2}\sqrt{\frac{1}{C\pi}}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}x^2\mathrm{e}^{-\frac{1}{C}x^2}}_{=\frac{1}{2}\sqrt{C^3\pi}}\\
=&\frac{\hbar^2}{C}\sqrt{\frac{1}{C\pi}}\sqrt{C\pi}-\frac{\hbar^2}{C^2}\sqrt{\frac{1}{C\pi}}\times\frac{1}{2}\sqrt{C^3\pi}=\frac{\hbar^2}{2C}
\end{aligned}\tag{F.55}$$

となって、$(\Delta x)^2(\Delta p)^2=\dfrac{\hbar^2}{4}$ となる。

★【演習問題 9-1】 .... (問題は p195、ヒントは p5w)

【次元解析】

$\hbar[\mathrm{ML^2T^{-1}}]$、$m[\mathrm{M}]$,$g[\mathrm{LT^{-2}}]$ からエネルギー $E[\mathrm{ML^2T^{-2}}]$ を作る。

$\hbar^x m^y g^z$ という量を考えると、その次元は $[\mathrm{M}^{x+y}\mathrm{L}^{2x+z}\mathrm{T}^{-x-2z}]$ であるから、

$$x+y=1,\quad 2x+z=2,\quad -x-2z=-2\tag{F.56}$$

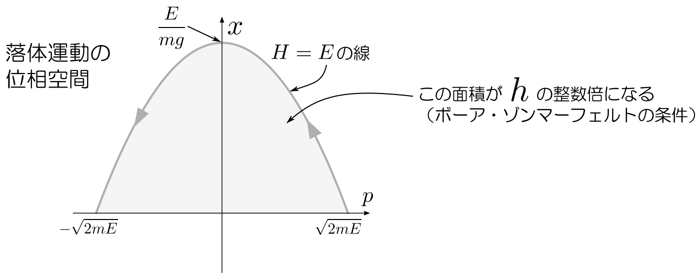
という連立方程式を解く。解くと、$x=\dfrac{2}{3}, y=\dfrac{1}{3}, z=\dfrac{2}{3}$ という解が出るから、$(\hbar^2 mg^2)^{\frac{1}{3}}$ でエネルギーの次元となる。

【不確定性関係】

ヒントにあるように $\dfrac{1}{2m}(\Delta p)^3\simeq mgh$ であるから、$(\Delta p)=(2m^2gh)^{\frac{1}{3}}$ となる。運動エネルギーは、だいたい $\dfrac{(\Delta p)^2}{2m}=\dfrac{(4m^4g^2h^2)^{\frac{1}{3}}}{2m}=\left(\dfrac{mg^2h^2}{2}\right)^{\frac{1}{3}}$ となる。

【ボーア・ゾンマーフェルトの条件】

落体運動の位相空間図を書いてみると、



となる。この放物線の式は $mgx+\dfrac{p^2}{2m}=E$ を変形して、$x=\dfrac{E-\frac{p^2}{2m}}{mg}$ と書けるので、

$$\int_{-\sqrt{2mE}}^{\sqrt{2mE}}\frac{E-\frac{p^2}{2m}}{mg}\mathrm{d}p=\left[\frac{Ep-\frac{p^3}{6m}}{mg}\right]_{-\sqrt{2mE}}^{\sqrt{2mE}}=\frac{4\sqrt{2mE^3}}{3mg} \tag{F.57}$$

これが nh になる。最小のエネルギーは $n=1$ なのでこれを代入して、

$$\frac{32mE^3}{9m^2g^2}=h^2 \quad \text{より、} E=\left(\frac{9mg^2h^2}{32}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{F.58}$$

となる。

★【演習問題 9-2】 .... （問題は p195、ヒントは p5w）

まず $\dfrac{\partial}{\partial x}J$ を計算しよう。

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}J=&\ \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\\=&\ \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi+\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)\\=&\ \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi-\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)\end{aligned} \tag{F.59}$$

ここでシュレーディンガー方程式 $\left(-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi(x,t)=\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)$ を使って、

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}J=&\ \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}+V(x)\psi^*\right)\psi+\psi^*\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}-V(x)\psi\right)\right)\\=&\ -\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)=-\frac{\partial\rho}{\partial t}\end{aligned} \tag{F.60}$$

が証明される。

★【演習問題 9-3】 ……………………………………… （問題は p195、ヒントは p5w）

$\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\partial_x\psi^*\psi-\psi^*\partial_x\psi\right)$ に、$\underbrace{\frac{2k}{k+k'}}_{=P}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x}$ を代入すると、

$$\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\partial_x\left(\frac{2k'}{k+k'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x}\right)\frac{2k}{k+k'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x}-\frac{2k}{k+k'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x}\partial_x\left(\frac{2k}{k+k'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x}\right)\right)=\frac{4k^2}{(k+k')^2}\frac{\hbar k'}{m} \tag{F.61}$$

であり、$\underbrace{\frac{k-k'}{k+k'}}_{=R}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ を代入すると、

$$\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\partial_x\left(\frac{k-k'}{k+k'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\right)\frac{k-k'}{k+k'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\frac{k-k'}{k+k'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\partial_x\left(\frac{k-k'}{k+k'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right)\right)=-\frac{(k-k')^2}{(k+k')^2}\frac{\hbar k}{m} \tag{F.62}$$

となる。この二つの絶対値を足すと、

$$\frac{4k^2}{(k+k')^2}\frac{\hbar k'}{m}+\frac{(k-k')^2}{(k+k')^2}\frac{\hbar k}{m}=\frac{4kk'+(k^2-2kk'+(k')^2)}{(k+k')^2}\frac{\hbar k}{m}=\frac{\hbar k}{m} \tag{F.63}$$

となる。これは最初の入射してきた波動関数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ による流れ密度に等しい。

★【演習問題 9-4】 ……………………………………… （問題は p195、ヒントは p6w）

まず陽子の速度を v とすると、

$$\frac{1}{2}\underbrace{1.7\times10^{-27}kg}_{m}v^2=\frac{3}{2}\underbrace{1.38\times10^{-23}}_{k_{\mathrm{B}}}\times\underbrace{1.5\times10^7K}_{T} \tag{F.64}$$

より、$v=6.04\times10^5$ ということになりそうだ。

陽子のもつ運動エネルギーが

$$\frac{3}{2}\underbrace{1.38\times10^{-23}}_{k_B}\underbrace{1.5\times10^7}_{T} \tag{F.65}$$

である。陽子二つが持つ運動エネルギーが、陽子が接触した時の位置エネルギーより大きければ接触できるから、

$$2\times\frac{3}{2}\times1.38\times10^{-23}\times1.5\times10^7>\underbrace{9.0\times10^9}_{k}\times(\underbrace{1.6\times10^{-19}}_{e})^2\times\underbrace{1.0\times10^{15}}_{\frac{1}{R}} \tag{F.66}$$

が条件。両辺を計算してみると、

$$6.2\times10^{-16}>2.3\times10^{-13} \tag{F.67}$$

となってしまって、3 桁以上足りない。

★【演習問題9-5】 .... （問題は p196、ヒントは p6w）

$V(r)$ すなわち、陽子の半径でのクーロンポテンシャルは前問で計算したように 2.3×10^{-13}J である。

また、古典的に陽子が接近できる距離は、前問の式 (F.66) を等式に変えて距離を変数として作った式

$$2\times\frac{3}{2}\times1.38\times10^{-23}\times1.5\times10^{7}=9.0\times10^{9}\times\left(1.6\times10^{-19}\right)^2\times\frac{1}{\delta r} \tag{F.68}$$

から計算できて、$\delta r=3.7\times10^{-13}$ となる。

後は数字を入れて計算する。

$$-2\frac{\sqrt{2\times1.7\times10^{-27}\times2.3\times10^{-13}}}{6.6\times10^{-34}\div2\pi}\times(3.7\times10^{-13}-1.0\times10^{-15})\simeq-197 \tag{F.69}$$

e^{-197} というのは、実は 10^{-86} 程度、という非常に小さい数字である。

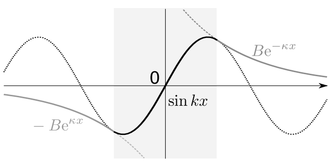
★【演習問題9-6】 .... （問題は p196、ヒントは p6w）

(1) $\left(\dfrac{\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}}{\psi}\right)$ は $-\dfrac{\hbar^2}{2m}$ を掛けると運動エネルギーに対応する量（p190 の説明を参照）になる。よって A 点より左では運動エネルギーが正、右では運動エネルギーが負だということになる。つまり、A 点は古典力学的な転回点（ここより右には、古典力学的には粒子は到着しない）である。

(2) 波長が長いということは遅い、つまり運動エネルギーが小さいということ。ポテンシャルの坂を登ることで位置エネルギーが増加し運動エネルギーが減少していることを意味している。

(3) 粒子の速度が遅くなっているために、「その場所にいる確率」が上昇しているのである。流れ密度 $\simeq\dfrac{\hbar k}{m}\times$(確率密度) で比較すれば、$k$ が小さくなった（波長が長くなった）と同時に確率密度が上昇し、流れ密度を一定に保っている。

★【演習問題10-1】 .... （問題は p220、ヒントは p6w）



$$\psi(x)=\begin{cases}\sin kx & 0<x<d\\ B\mathrm{e}^{-\kappa x} & x>d\end{cases} \tag{F.70}$$

と置けばよい。後は、問い 10-2 以降と全く同様。

★【演習問題10-2】 .... （問題は p220、ヒントは p6w）

束縛状態であるから $E<0$ である。よって、$x\neq0$ の領域では

$$\psi(x)=\begin{cases}C\mathrm{e}^{\kappa x} & x<0\\ D\mathrm{e}^{-\kappa x} & x>0\end{cases} \tag{F.71}$$

という解を得る。$\psi(x)$ の接続条件から $C=D$ がわかり、(10.32)→ p213に $a=0, V_0=-\lambda$ を代入して、$\dfrac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}$ の接続条件

$$\begin{aligned}-\kappa C\mathrm{e}^{-\kappa x}\Big|_{x=0}-\kappa C\mathrm{e}^{\kappa x}\Big|_{x=0}&=\frac{-2m\lambda}{\hbar^2}C\mathrm{e}^{\kappa x}\Big|_{x=0}\\ -2\kappa&=-\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\end{aligned} \tag{F.72}$$

より、$\kappa=\dfrac{m\lambda}{\hbar^2}$ と求められる。

★【演習問題 11-1】……………………………………（問題は p245、ヒントは p6w）

$\displaystyle\int \mathrm{d}x\psi_m^*(a$ または $a^\dagger)\psi_n$ で $m,n=0,1$ の場合を考える。0 にならないのは、

$$\int \mathrm{d}x\psi_1^* a^\dagger\psi_0=\int \mathrm{d}x\psi_1^*\psi_1=1 \tag{F.73}$$

$$\int \mathrm{d}x\psi_0^* a\psi_1=\int \mathrm{d}x\psi_0^*\psi_0=1 \tag{F.74}$$

の二つだけ。よって、

$$\int \mathrm{d}x\Psi^* a\Psi=C_0^*C_1 \tag{F.75}$$

$$\int \mathrm{d}x\Psi^* a^\dagger\Psi=C_1^*C_0 \tag{F.76}$$

となるので、

$$\langle x\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(C_0^*C_1+C_1^*C_0),\quad \langle p\rangle=\mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(C_1^*C_0-C_0^*C_1) \tag{F.77}$$

★【演習問題 11-2】……………………………………（問題は p246、ヒントは p6w）

$$\begin{aligned}\underbrace{\exp\left(-\xi^2+2\xi t-t^2\right)}_{\exp(-\xi^2)\text{を}\xi\to\xi-t\text{ と平行移動したもの}}&=\exp\left(-\xi^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)t^n}{n!}\\ \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-t)^n}{n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\exp\left(-\xi^2\right)&=\exp\left(-\xi^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)t^n}{n!}\end{aligned} \tag{F.78}$$

の 1 行目と 2 行目の t^n の係数を比較すると、

$$(-1)^n\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\exp\left(-\xi^2\right)=\exp\left(-\xi^2\right)H_n(\xi) \tag{F.79}$$

より、求めたい式を得る。

★【演習問題 11-3】 . . . . （問題は p246、ヒントは p6w）

$$\exp\left(2\xi t - t^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi) t^n}{n!} \tag{F.80}$$

の両辺を ξ で微分すると、

$$2t\exp\left(2\xi t - t^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\frac{\mathrm{d}H_n(\xi)}{\mathrm{d}\xi} t^n}{n!} \tag{F.81}$$

となるが、これに元の式を代入すると、

$$2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi) t^{n+1}}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\frac{\mathrm{d}H_n(\xi)}{\mathrm{d}\xi} t^n}{n!} \tag{F.82}$$

である。両辺の t の k 次の項を取り出すと、$2\dfrac{H_{k-1}(\xi)t^k}{(k-1)!} = \dfrac{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}H_k(\xi)t^k}{k!}$ であることから、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} H_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi) \tag{F.83}$$

である。

次に母関数を t で微分すると、

$$(2\xi - 2t)\exp\left(2\xi t - t^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi) t^{n-1}}{(n-1)!} \tag{F.84}$$

となり、

$$(2\xi - 2t)\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi) t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi) t^{n-1}}{(n-1)!} \tag{F.85}$$

となり、これの t^k 次を取り出すことで、

$$\frac{2\xi H_k(\xi) t^k}{k!} - \frac{2\xi H_{k-1}(\xi) t^k}{(k-1)!} = \frac{H_{k+1}(\xi) t^k}{k!} \tag{F.86}$$

となるから、$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi)$ がわかる。

★【演習問題 11-4】 . . . . （問題は p246、ヒントは p6w）

ヒントにあるように、

$$\xi\phi_n(\xi) = n\frac{1}{\sqrt{2n}}\phi_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2}\sqrt{2(n+1)}\phi_{n+1}(\xi) = \sqrt{\frac{n}{2}}\phi_{n-1}(\xi) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\phi_{n+1}(\xi) \tag{F.87}$$

を使う。

$$
\begin{aligned}
&\int \mathrm{d}\xi \left(C_m^*\phi_m^* \mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+\frac{1}{2})\omega t} + C_n^*\phi_n^* \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n+\frac{1}{2})\omega t}\right) \xi \left(C_m\phi_m \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(m+\frac{1}{2})\omega t} + C_n\phi_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n+\frac{1}{2})\omega t}\right) \\
= &\int \left(C_m^*\phi_m^* \mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+\frac{1}{2})\omega t} + C_n^*\phi_n^* \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n+\frac{1}{2}\omega t)}\right) \\
&\times\Bigg(C_m \left(\sqrt{\frac{m}{2}}\phi_{m-1} + \sqrt{\frac{m+1}{2}}\phi_{m+1}\right) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(m+\frac{1}{2})\omega t} \\
&+C_n \left(\sqrt{\frac{n}{2}}\phi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\phi_{n+1}\right) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n+\frac{1}{2}\omega t)}\Bigg) \\
= &\ C_n^* C_m \int \mathrm{d}\xi \phi_n^* \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n-m)\omega t)} \left(\sqrt{\frac{m}{2}}\phi_{m-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\phi_{m+1}\right) \\
&+C_m^* C_n \int \mathrm{d}\xi \phi_m^* \mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-n)\omega t} \left(\sqrt{\frac{n}{2}}\phi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\phi_{n+1}\right) \\
= &\ C_n^* C_m \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n-m)\omega t} \left(\sqrt{\frac{m}{2}}\delta_{n,m-1} + \sqrt{\frac{m+1}{2}}\delta_{n,m+1}\right) \\
&+C_m^* C_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-n)\omega t} \left(\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1}\right) \\
= &\ C_n^* C_{n+1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{n,m-1} + C_n^* C_{n-1} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{n,m+1} \\
&+C_{n-1}^* C_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1} + C_{n+1}^* C_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1}
\end{aligned}
\tag{F.88}
$$

★【演習問題 11-5】 .... （問題は p246、ヒントは p7w）

第 n 励起状態は

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle \tag{F.89}$$

である。これに $x^2 = \dfrac{\hbar}{2m\omega}(a+a^\dagger)^2$ を代入する。明らかに、$(a+a^\dagger)$ のうち a^2 と $(a^\dagger)^2$ の項は効かない（エネルギー固有値を変えてしまうから）。よって計算すべきは、

$$\frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|(aa^\dagger + a^\dagger a)|n\rangle \tag{F.90}$$

である。ここで、$aa^\dagger = 1 + a^\dagger a$ を使い、

$$\frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|(1 + 2a^\dagger a)|n\rangle \tag{F.91}$$

とすれば、$a^\dagger a$ の部分は固有値 n を出すことを既に知っているので、

$$\langle n|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1) \tag{F.92}$$

という答になる。位置エネルギーの期待値はこれに $\frac{1}{2}m\omega^2$ をかけて、$\frac{\hbar\omega}{4}(2n+1)$ となる。運動エネルギーの方は、$p^2=-\frac{\hbar m\omega}{2}(a^\dagger-a)^2$ であることを使えばほぼ同様に、

$$\bar{n}p^2|n\rangle=\frac{\hbar m\omega}{2}\langle n|(aa^\dagger+a^\dagger a)|n\rangle=\frac{\hbar m\omega}{2}(2n+1) \tag{F.93}$$

となるので、運動エネルギーの期待値はこれに $\frac{1}{2m}$ をかけて、$\frac{\hbar\omega}{4}(2n+1)$ となる。

★【演習問題 11-6】 . . . . （問題は p246、ヒントは p7w）

$$I^2=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-(x^2+y^2)}\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{F.94}$$

として、これを極座標での積分に直す。$x^2+y^2=r^2$ であり、$\mathrm{d}x\mathrm{d}y=r\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta$ であるから、

$$\begin{aligned}I^2&=\int_0^\infty\int_0^{2\pi}\mathrm{e}^{-r^2}r\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\\&=2\pi\int_0^\infty\underbrace{\mathrm{e}^{-r^2}r}_{=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(-\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-r^2}\right)}\mathrm{d}r\\&=2\pi\left[-\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-r^2}\right]_0^\infty=\pi\end{aligned} \tag{F.95}$$

となるので、$I=\sqrt{\pi}$ とわかる。

★【演習問題 12-1】 . . . . （問題は p288、ヒントは p7w）

ヒントにある計算から１次元の場合と同様に続けると、

$$\begin{aligned}0=&\frac{\partial}{\partial x}\left[\psi_2(x,y,z)\frac{\partial\psi_1(x,y,z)}{\partial x}-\frac{\partial\psi_2(x,y,z)}{\partial x}\psi_1(x,y,z)\right]\\&+\frac{\partial}{\partial y}\left[\psi_2(x,y,z)\frac{\partial\psi_1(x,y,z)}{\partial y}-\frac{\partial\psi_2(x,y,z)}{\partial y}\psi_1(x,y,z)\right]\\&+\frac{\partial}{\partial z}\left[\psi_2(x,y,z)\frac{\partial\psi_1(x,y,z)}{\partial z}-\frac{\partial\psi_2(x,y,z)}{\partial z}\psi_1(x,y,z)\right]\end{aligned} \tag{F.96}$$

までは計算できる（微分が $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 一つから、$\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z}$ の三つに変わっただけ）。

１次元では $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$(なにか) $=0$ の形だったので (なにか) = (定数) となったが、ここで言えることはこの３つの量

$$\begin{aligned}\Bigg(&\psi_2(x,y,z)\frac{\partial\psi_1(x,y,z)}{\partial x}-\frac{\partial\psi_2(x,y,z)}{\partial x}\psi_1(x,y,z),\\&\psi_2(x,y,z)\frac{\partial\psi_1(x,y,z)}{\partial y}-\frac{\partial\psi_2(x,y,z)}{\partial y}\psi_1(x,y,z),\\&\psi_2(x,y,z)\frac{\partial\psi_1(x,y,z)}{\partial z}-\frac{\partial\psi_2(x,y,z)}{\partial z}\psi_1(x,y,z)\Bigg)\end{aligned} \tag{F.97}$$

のベクトル $\vec{j}$ が $\mathrm{div}\,\vec{j}=0$ を満たすということである。div が 0 でもベクトルは 0 とは限らないから、2 次元以上では束縛状態であっても縮退がないとは限らない。

★【演習問題 12-2】 .... （問題は p289、ヒントは p7w）

ヒントの(E.20)が合わない答えを出すことを示す。
→ p7w

$\dfrac{\partial\sqrt{\sin\theta}}{\partial\theta}=\dfrac{1}{2}\dfrac{\cos\theta}{\sqrt{\sin\theta}}$ と、$\dfrac{\partial^2\sqrt{\sin\theta}}{\partial\theta^2}=-\dfrac{1}{4}\dfrac{\cos^2\theta}{\sin^{\frac{3}{2}}\theta}-\dfrac{1}{2}\sqrt{\sin\theta}$ となるので、

$$
\begin{aligned}
(p_\theta)^2 f =& -\hbar^2\frac{1}{\sqrt{\sin\theta}}\left[\frac{\partial^2\sqrt{\sin\theta}}{\partial\theta^2}f+2\frac{\partial\sqrt{\sin\theta}}{\partial\theta}\frac{\partial f}{\partial\theta}+\sqrt{\sin\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\theta^2}\right]\\
=& -\hbar^2\left[\underbrace{\left(-\frac{1}{4}\frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}-\frac{1}{2}\right)f}_{\text{不要な項}}+\cot\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}+\frac{\partial^2 f}{\partial\theta^2}\right]
\end{aligned}
\tag{F.98}
$$

となる。最初の部分が余計である。

これは「エルミートであれ！」という条件だけでは、ラプラシアン（というよりは量子力学的ハミルトニアン）の形を決めるには足りない、ということを示している。

★【演習問題 12-3】 .... （問題は p289、ヒントは p8w）

$$
\begin{aligned}
(L_z)^2 =& -\hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)\\
=& -\hbar^2\left(x^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}+y^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}-2xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}-x\frac{\partial}{\partial x}-y\frac{\partial}{\partial y}\right)
\end{aligned}
\tag{F.99}
$$

とまず計算する。これから、

$$
\begin{aligned}
(L_x)^2+(L_y)^2+(L_z)^2=-\hbar^2\Bigg[&\ x^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}+y^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}-2xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}-x\frac{\partial}{\partial x}-y\frac{\partial}{\partial y}\\
+&\ y^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}+z^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}-2yz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}-y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\\
+&\ z^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+x^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}-2zx\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}-z\frac{\partial}{\partial z}-x\frac{\partial}{\partial y}\Bigg]
\end{aligned}
\tag{F.100}
$$

となるが、これをまとめると、

$$
\begin{aligned}
-\frac{1}{\hbar^2}|\vec{L}|^2 =& (y^2+z^2)\frac{\partial^2}{\partial x^2}+(z^2+x^2)\frac{\partial^2}{\partial y^2}+(x^2+y^2)\frac{\partial^2}{\partial z^2}\\
&-2\left(xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}+yz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}+zx\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}\right)\\
&-2\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)
\end{aligned}
\tag{F.101}
$$

a となる。計算したいのは $-\hbar^2\triangle-\dfrac{1}{r^2}|\vec{L}|^2$ であるから、まずはこれの $\dfrac{r^2}{h^2}$ 倍である、$-r^2\triangle-\dfrac{1}{\hbar^2}|\vec{L}|^2$ を計算すると、

$$
\begin{aligned}
-r^2\triangle-\frac{1}{\hbar^2}|\vec{L}|^2 =& -(x^2+y^2+z^2)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\\
&+(y^2+z^2)\frac{\partial^2}{\partial x^2}+(z^2+x^2)\frac{\partial^2}{\partial y^2}+(x^2+y^2)\frac{\partial^2}{\partial z^2}\\
&-2\left(xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}+yz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}+zx\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}\right)\\
&-2\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right) \qquad (F.102)\\
=& -x^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}-y^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}-z^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}\\
&-2\left(xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}+yz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}+zx\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}\right)\\
&-2\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)
\end{aligned}
$$

となるが、ここで、

$$
\left(x\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = x\frac{\partial}{\partial x}\left(x\frac{\partial}{\partial x}\right) = x^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+x\frac{\partial}{\partial x} \qquad (F.103)
$$

であることを使うと、

$$
\begin{aligned}
-r^2\triangle-\frac{1}{\hbar^2}|\vec{L}|^2 =& -\left(x\frac{\partial}{\partial x}\right)^2-\left(y\frac{\partial}{\partial y}\right)^2-\left(z\frac{\partial}{\partial z}\right)^2\\
&-2\left(x\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial y}\right)-2\left(y\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial z}\right)-2\left(z\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial x}\right)\\
&-\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)
\end{aligned}
\qquad (F.104)
$$

と書きなおすことができ、まとめて、

$$
-r^2\triangle-\frac{1}{\hbar^2}|\vec{L}|^2 = -\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)^2-\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right) \qquad (F.105)
$$

となる。ここで $x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}=r\frac{\partial}{\partial r}$ と置き直して、

$$
-r^2\triangle-\frac{1}{\hbar^2}|\vec{L}|^2 = -\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2-r\frac{\partial}{\partial r} = -r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}-2r\frac{\partial}{\partial r} \qquad (F.106)
$$

となって、r と $\frac{\partial}{\partial r}$ の形にまとめられた。これから、

$$
\triangle = \frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{\hbar^2 r^2}|\vec{L}|^2 \qquad (F.107)
$$

とも書ける。

★【演習問題 12-4】 .... （問題は p289、ヒントは p8w）

L_x についてだけ書く（L_y はほぼ同様）。

$$
\begin{aligned}
&\int \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi r^2 \sin\theta \psi^*(r,\theta,\phi) \left(-\mathrm{i}\hbar\left(-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi} - \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right)\Psi(r,\theta,\phi) \\
=\ & \mathrm{i}\hbar\int \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi r^2 \sin\theta \psi^*(r,\theta,\phi)\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\Psi(r,\theta,\phi) \\
& +\mathrm{i}\hbar\int \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi r^2 \sin\theta \psi^*(r,\theta,\phi)\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\Psi(r,\theta,\phi) \\
=\ & -\mathrm{i}\hbar\int \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi \left[\frac{\partial}{\partial\phi}\left(r^2\sin\theta\psi^*(r,\theta,\phi)\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\right)\right]\Psi(r,\theta,\phi) \\
& -\mathrm{i}\hbar\int \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi \left[\frac{\partial}{\partial\theta}\left(r^2\sin\theta\psi^*(r,\theta,\phi)\sin\phi\right)\right]\Psi(r,\theta,\phi) \\
=\ & -\mathrm{i}\hbar\int \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi \left[r^2\sin\theta\frac{\partial\psi^*(r,\theta,\phi)}{\partial\phi}\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi \underbrace{-r^2\sin\theta\psi^*(r,\theta,\phi)\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi}_{\text{相殺}}\right]\Psi(r,\theta,\phi) \\
& -\mathrm{i}\hbar\int \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi \left[\underbrace{r^2\cos\theta\psi^*(r,\theta,\phi)\sin\phi}_{\text{相殺}} + r^2\sin\theta\frac{\partial\psi^*(r,\theta,\phi)}{\partial\theta}\sin\phi\right]\Psi(r,\theta,\phi) \\
=\ & -\mathrm{i}\hbar\int \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi r^2\sin\theta \left[\frac{\partial\psi^*(r,\theta,\phi)}{\partial\phi}\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi + \frac{\partial\psi^*(r,\theta,\phi)}{\partial\theta}\sin\phi\right]\Psi(r,\theta,\phi) \\
=\ & \int \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi r^2\sin\theta \left(-\mathrm{i}\hbar\left(-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi} - \sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\psi(r,\theta,\phi)\right)^*\Psi(r,\theta,\phi)
\end{aligned}
\tag{F.108}
$$

★【演習問題 12-5】 .... （問題は p289、ヒントは p8w）

$$
\begin{aligned}
& \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} - (m-1)\cot\theta\right)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} + m\cot\theta\right)P_\ell^m(\cos\theta) \\
=\ & \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} - (m-1)\cot\theta\right)\left(\frac{\mathrm{d}P_\ell^m(\cos\theta)}{\mathrm{d}\theta} + m\cot\theta P_\ell^m(\cos\theta)\right) \\
=\ & \frac{\mathrm{d}^2P_\ell^m(\cos\theta)}{\mathrm{d}\theta^2} + m\frac{\mathrm{d}\cot\theta}{\mathrm{d}\theta}P_\ell^m(\cos\theta) + m\cot\theta\frac{\mathrm{d}P_\ell^m(\cos\theta)}{\mathrm{d}\theta} \\
& -(m-1)\cot\theta\frac{\mathrm{d}P_\ell^m(\cos\theta)}{\mathrm{d}\theta} - m(m-1)\cot^2\theta P_\ell^m(\cos\theta) \\
=\ & \frac{\mathrm{d}^2P_\ell^m(\cos\theta)}{\mathrm{d}\theta^2} - m\frac{1}{\sin^2\theta}P_\ell^m(\cos\theta) + \cot\theta\frac{\mathrm{d}P_\ell^m(\cos\theta)}{\mathrm{d}\theta} \\
& -m(m-1)\cot^2\theta P_\ell^m(\cos\theta)
\end{aligned}
\tag{F.109}
$$

となる。ここで、$P_\ell^m(\cos\theta)$ の満たす微分方程式が

$$
-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}P_\ell^m}{\mathrm{d}\theta}\right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta}P_\ell^m = \lambda P_\ell^m \tag{F.110}
$$

であったことを思い出す。これから、

$$
\frac{\mathrm{d}^2P_\ell^m}{\mathrm{d}\theta^2} + \cot\theta\frac{\mathrm{d}P_\ell^m}{\mathrm{d}\theta} = \frac{m^2}{\sin^2\theta}P_\ell^m - \lambda P_\ell^m \tag{F.111}
$$

となるからこれを代入して、

$$\begin{aligned}&\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}-(m-1)\cot\theta\right)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}+m\cot\theta\right)P_\ell^m(\cos\theta)\\=&\ \frac{m^2}{\sin^2\theta}P_\ell^m-\lambda P_\ell^m-m\frac{1}{\sin^2\theta}P_\ell^m(\cos\theta)-m(m-1)\cot^2\theta P_\ell^m(\cos\theta)\\=&\ \frac{m(m-1)}{\sin^2\theta}P_\ell^m-m(m-1)\cot^2\theta P_\ell^m-\lambda P_\ell^m\end{aligned}\tag{F.112}$$

となるが、$\dfrac{1}{\sin^2\theta}-\dfrac{1}{\cot^2\theta}=\dfrac{1-\cos^2\theta}{\sin^2\theta}=1$ となるので、以上から、

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}-(m-1)\cot\theta\right)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}+m\cot\theta\right)P_\ell^m(\cos\theta)=\left(m(m-1)-\lambda\right)P_\ell^m\tag{F.113}$$

が証明できた。

★【演習問題 12-6】 .... （問題は p289、ヒントは p8w）

ヒントに書いたように、$\displaystyle\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin^{2n+1}\theta$ を計算すればよいが、

$$\begin{aligned}\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin^{2n+1}\theta=&\ \underbrace{\left[-\sin^{2n}\theta\cos\theta\right]_0^\pi}_{\sin 0=\sin\pi=0\text{ なので }0}+\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\frac{\mathrm{d}(\sin^{2n}\theta)}{\mathrm{d}\theta}\cos\theta\\=&\ 2n\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin^{2n-1}\theta\ \underbrace{\cos^2\theta}_{1-\sin^2\theta}\\=&\ 2n\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin^{2n-1}\theta-2n\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin^{2n+1}\theta\end{aligned}\tag{F.114}$$

となって、右辺に左辺の $-2n$ 倍が現れる。これを左辺に移して $2n+1$ で割り、

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin^{2n+1}\theta=\frac{2n}{2n+1}\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin^{2n-1}\theta\tag{F.115}$$

という公式を作ることができる。同様に

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin^{2n-1}\theta=\frac{2n-2}{2n-1}\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin^{2n-3}\theta\tag{F.116}$$

という式を作り、これを $\sin\theta$ の 1 次になるまで繰り返すと、

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin^{2n+1}\theta=\frac{2n(2n-2)(2n-4)\cdots4\times2}{(2n+1)(2n-1)(2n-3)\cdots3\times1}\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin\theta\tag{F.117}$$

となる。分母と分子に $2n(2n-2)(2n-4)\cdots4\times2$ をかけると、

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin^{2n+1}\theta=\frac{(2n(2n-2)(2n-4)\cdots4\times2)^2}{(2n+1)2n(2n-1)(2n-2)\cdots3\times2\times1}\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin\theta\tag{F.118}$$

となり、分母は $(2n+1)!$、分子は $(2^n n!)^2$ となる。最後に $\displaystyle\int_0^\pi \mathrm{d}\theta \sin\theta = 2$ なので、

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\theta \sin^{2n+1}\theta = \frac{2^{2n+1}(n!)^2}{(2n+1)!} \tag{F.119}$$

を示すことができた。

★【演習問題 12-7】 ………………………………………… （問題は p289、ヒントは p8w）

ヒントに書いたような引き算を行うことで、

$$P_\ell^{-m}(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left((1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^m(x)\right) - P_\ell^m(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left((1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^{-m}(x)\right) = 0 \tag{F.120}$$

を得る。これに、$(1-x^2)\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^{-m}(x)\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^m(x)$ を足して引くことで、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(P_\ell^{-m}(x)(1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^m(x)\right) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(P_\ell^m(x)(1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^{-m}(x)\right) = 0 \tag{F.121}$$

となり、これから、

$$P_\ell^{-m}(x)(1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^m(x) - P_\ell^m(x)(1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^{-m}(x) = \text{定数} \tag{F.122}$$

である。この式は x^2-1 に比例している。ここで考えている関数は $x=\pm1$ で発散しないので、$x=\pm1$ を代入するとこの「定数」は 0 である。よって、

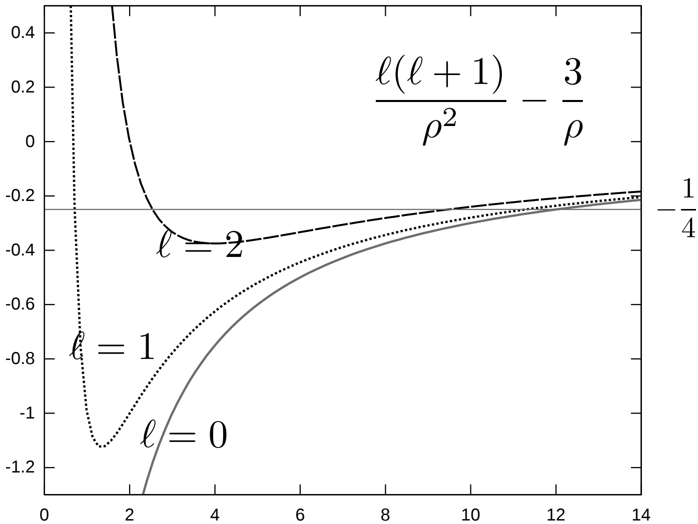
$$P_\ell^{-m}(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^m(x) - P_\ell^m(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^{-m}(x) = 0 \tag{F.123}$$

となる。(10.4) → p199 で行ったのと同様に

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{P_\ell^m(x)}{P_\ell^{-m}(x)}\right) = 0 \tag{F.124}$$

と変形して、$P_\ell^m(x) = (\text{定数}) \times P_\ell^{-m}(x)$ と結論できる。

★【演習問題 13-1】 .... （問題は p314、ヒントは p8w）



グラフは図の通り。

ℓ が大きいということは、運動エネルギーのうち、角運動量に行くエネルギーが大きくなるということ。この式に現れる運動エネルギーは動径方向の運動エネルギーだから、角運動量が大きくなると運動エネルギーが正の領域が減ってしまう。

★【演習問題 13-2】 .... （問題は p314、ヒントは p9w）

ヒントにあるように、

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-x}\sum_{m=0}^\infty L_m(x)\frac{s^m}{m!}\sum_{n=0}^\infty L_n(x)\frac{t^n}{n!}\\&=\frac{1}{(1-s)(1-t)}\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-x\left(1+\frac{s}{1-s}+\frac{t}{1-t}\right)}\end{aligned}\tag{F.125}$$

という計算になるので、この積分を実行すると、

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-x\left(1+\frac{s}{1-s}+\frac{t}{1-t}\right)}&=\left[\frac{1}{-\left(1+\frac{s}{1-s}+\frac{t}{1-t}\right)}\mathrm{e}^{-x\left(1+\frac{s}{1-s}+\frac{t}{1-t}\right)}\right]_0^\infty\\&=\frac{1}{1+\frac{s}{1-s}+\frac{t}{1-t}}=\frac{(1-s)(1-t)}{1-ts}\end{aligned}\tag{F.126}$$

よって、

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-x}\sum_{m=0}^\infty L_m(x)\frac{s^m}{m!}\sum_{n=0}^\infty L_n(x)\frac{t^n}{n!}=\frac{1}{1-ts}=\sum_{n=0}(ts)^n\tag{F.127}$$

となる。

これから、左辺は $m=n$ のところだけが残り、

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-x}L_m(x)\frac{s^m}{m!}L_n(x)\frac{t^n}{n!}=\delta_{mn}(ts)^n \tag{F.128}$$

となる。よって、

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-x}L_m(x)L_n(x)=\delta_{mn}(n!)^2 \tag{F.129}$$

が示された。

★【演習問題 13-3】 .... （問題は p314、ヒントは p9w）

$L_{2,\ell}=\rho^2+c_1\rho+c_0$ の場合、

$$\underbrace{\frac{\mathrm{d}^2(\rho^2+c_1\rho+c_0)}{\mathrm{d}\rho^2}}_{2}+\left(\frac{2\ell+2}{\rho}-1\right)\underbrace{\frac{\mathrm{d}(\rho^2+c_1\rho+c_0)}{\mathrm{d}\rho}}_{2\rho+c_1}+\frac{2}{\rho}(\rho^2+c_1\rho+c_0)=0$$

$$2+\underbrace{\left(\frac{2\ell+2}{\rho}-1\right)(2\rho+c_1)}_{4\ell+4-2\rho+c_1\frac{2\ell+2}{\rho}-c_1}+2\rho+2c_1+\frac{2c_0}{\rho}=0$$

$$6+4\ell+c_1\frac{2\ell+2}{\rho}+c_1+\frac{2c_0}{\rho}=0 \tag{F.130}$$

より、$c_1=-6-4\ell$ とすると定数項が消え、

$$(-6-4\ell)\frac{2\ell+2}{\rho}+\frac{2c_0}{\rho}=0 \tag{F.131}$$

より、$c_0=2(\ell+1)(2\ell+3)$ となる。ゆえに

$$L_{2,\ell}=\rho^2-2(2\ell+3)\rho+2(\ell+1)(2\ell+3) \tag{F.132}$$

である。$\ell=0$ の場合は、

$$L_{2,0}=\rho^2-6\rho+6 \tag{F.133}$$

であるが、これは $n'=2,\ell=0$ だから、$n=3$ で $\ell=0$ すなわち 3s 軌道の波動関数ということになる。ということは、$\rho=\frac{2}{3}r$ と直して、

$$\frac{4}{9}r^2-4r+6=\frac{1}{3}\left(\frac{4}{3}r^2-12r+18\right) \tag{F.134}$$

という形になる。これは $\psi_{300}=\frac{1}{162}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\left(18-12r+\frac{4}{3}r^2\right)\mathrm{e}^{-r/3}$ の多項式部分に一致する。

★【演習問題 13-4】 .... （問題は p314、ヒントは p9w）

$_1\langle 1s|\dfrac{1}{r_2}|1s\rangle_1$ から計算しよう。$r_1=0$ を極座標の原点におくと、

$$r_2=\sqrt{r^2+R^2-2Rr\cos\theta} \tag{F.135}$$

であり、$\psi_{100}=\sqrt{\dfrac{1}{\pi}}\mathrm{e}^{-r}$ を使うと

$$\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}r\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi r^2\sin\theta\mathrm{e}^{-2r}\frac{1}{\sqrt{r^2+R^2-2Rr\cos\theta}} \tag{F.136}$$

を計算すればよいことになるが、この $\dfrac{1}{\sqrt{r^2+R^2-2Rr\cos\theta}}$ は Legendre 多項式の母関数の形をしていて、

$$\frac{1}{\sqrt{r^2+R^2-2Rr\cos\theta}}=\underbrace{\frac{1}{r}\sum_{\ell=0}^\infty\left(\frac{R}{r}\right)^\ell P_\ell(\cos\theta)}_{r>R\text{ の時}}=\underbrace{\frac{1}{R}\sum_{\ell=0}^\infty\left(\frac{r}{R}\right)^\ell P_\ell(\cos\theta)}_{r<R\text{ の時}} \tag{F.137}$$

と書くことができる。ゆえに θ 積分の結果は $\ell=0$ のみが（結果 2 で）残る。

あるいは、

$$\int_{-1}^1\mathrm{d}t\frac{1}{\sqrt{r^2+R^2-2Rrt}}=\left[-\frac{\sqrt{r^2+R^2-2Rrt}}{Rr}\right]_{-1}^1 \tag{F.138}$$

という定積分を行ってもよい。この積分の結果には $\sqrt{(R-r)^2}=|R-r|$ が現れるので、$R>r$ と $R<r$ にわけて計算する必要がある。

ϕ 積分の結果は 2π だから、

$$4\int_0^R\frac{r^2}{R}\mathrm{e}^{-2r}+4\int_R^\infty r\mathrm{e}^{-2r}=\frac{1}{R}-\frac{1+2R+2R^2}{R}\mathrm{e}^{-2R}+(1+2R)\mathrm{e}^{-2R}=\frac{1}{R}-\frac{R+1}{R}\mathrm{e}^{-2R} \tag{F.139}$$

という結果となる。また、$_2\langle 1s|\dfrac{ke^2}{r_1}|1s\rangle_2$ は 1 と 2 の立場を入れ替えただけなので結果は同じである。

最後に $_1\langle 1s|\dfrac{1}{r_1}|1s\rangle_2+$ 複素共役 の項を考えよう。

$$\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}r\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi r\sin\theta\mathrm{e}^{-r}\mathrm{e}^{-\sqrt{r^2+R^2-2Rr\cos\theta}} \tag{F.140}$$

$\cos\theta=t$ として、前にも使った公式(13.56)を使って、
→ p311

$$
\begin{aligned}
& 2\int_0^\infty \mathrm{d}r r\mathrm{e}^{-r}\left[-\frac{2}{-2Rr}\left(\sqrt{r^2+R^2-2Rr\cos\theta}+1\right)\mathrm{e}^{-\sqrt{r^2+R^2-2Rr\cos\theta}}\right]_{t=-1}^{t=1} \\
=\ & 2\int_0^\infty \mathrm{d}r\mathrm{e}^{-r}\frac{1}{R}\left((|r-R|+1)\,\mathrm{e}^{-|r-R|}-(R+r+1)\,\mathrm{e}^{-(R+r)}\right) \\
=\ & 2\int_0^R \mathrm{d}r\frac{1}{R}\left((R-r+1)\,\mathrm{e}^{-R}\right)+2\int_R^\infty \mathrm{d}r\frac{1}{R}\left((r-R+1)\,\mathrm{e}^{-2r+R}\right) \\
& -2\int_0^\infty \mathrm{d}r\mathrm{e}^{-r}\frac{1}{R}\left((R+r+1)\,\mathrm{e}^{-(R+r)}\right) \\
=\ & (R+2)\mathrm{e}^{-R}+\frac{3}{2R}\mathrm{e}^{-R}-\frac{2R+3}{2R}\mathrm{e}^{-R}=(R+1)\,\mathrm{e}^{-R}
\end{aligned}
\tag{F.141}
$$

結果をまとめる。

$$
\begin{aligned}
=\ & -ke^2\underbrace{|C_1|^2}_{\frac{1}{2(1\pm S)}}\left(\underbrace{\frac{1}{R}-\frac{R+1}{R}\mathrm{e}^{-2R}}_{{}_1\left\langle 1s\middle|\frac{1}{r_2}\middle|1s\right\rangle_1}\pm\underbrace{(R+1)\mathrm{e}^{-R}}_{{}_1\left\langle 1s\middle|\frac{1}{r_1}\middle|1s\right\rangle_2}\pm\underbrace{(R+1)\mathrm{e}^{-R}}_{{}_2\left\langle 1s\middle|\frac{1}{r_1}\middle|1s\right\rangle_1}+\underbrace{\frac{1}{R}-\frac{R+1}{R}\mathrm{e}^{-2R}}_{{}_2\left\langle 1s\middle|\frac{1}{r_1}\middle|1s\right\rangle_2}\right) \\
& +E_1+\frac{ke^2}{R} \\
=\ & \frac{-ke^2}{2(1\pm S)}\left(\frac{2}{R}-\frac{2(R+1)}{R}\mathrm{e}^{-2R}\pm 2(R+1)\mathrm{e}^{-R}\right)+E_1+\frac{ke^2}{R} \\
=\ & \frac{-ke^2}{1\pm S}\left(\frac{1}{R}-\frac{(R+1)}{R}\mathrm{e}^{-2R}\pm(R+1)\mathrm{e}^{-R}\ \underbrace{-\frac{1}{R}\,(1\pm S)}_{\text{括弧の外にいた}\frac{ke^2}{R}}\right)+E_1 \\
=\ & \frac{ke^2}{1\pm S}\left(\frac{(R+1)}{R}\mathrm{e}^{-2R}\mp(R+1)\mathrm{e}^{-R}\pm\frac{1}{R}\underbrace{\left(1+R+\frac{1}{3}R^2\right)\mathrm{e}^{-R}}_{S}\right)+E_1 \\
=\ & \frac{ke^2}{1\pm S}\left(\frac{(R+1)}{R}\mathrm{e}^{-2R}\pm\frac{1}{R}\left(1-\frac{2}{3}R^2\right)\mathrm{e}^{-R}\right)+E_1
\end{aligned}
\tag{F.142}
$$

となり、求めたかった式を得る。