座標基底と運動量演算子

式 (70)（運動量演算子 $\hat{p}$ の座標基底 $|\,x\,\rangle$ への作用）の導出。

座標演算子の座標基底 $|\,x\,\rangle$ への作用：

$$\hat{x}|\,x\,\rangle = x|\,x\,\rangle, \quad \langle\,x\,|\hat{x} = x\langle\,x\,|$$

§1 より、規格化と完全性

$$\langle\,x\,|\,x'\,\rangle = \delta(x-x'), \quad \int dx|\,x\,\rangle\langle\,x\,| = 1$$

交換関係 $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ の行列要素を考えると

$$\begin{aligned}
\langle\,x\,|i\hbar|\,x'\,\rangle &= i\hbar\delta(x-x') \\
\langle\,x\,|[\hat{x},\hat{p}]|\,x'\,\rangle &= \langle\,x\,|(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})|\,x'\,\rangle \\
&= \langle\,x\,|(x\hat{p}-\hat{p}x')|\,x'\,\rangle \\
&= (x-x')\langle\,x\,|\hat{p}|\,x'\,\rangle \\
\Rightarrow \langle\,x\,|\hat{p}|\,x'\,\rangle &= \frac{i\hbar}{x-x'}\delta(x-x')
\end{aligned}$$

ここで任意の関数 $f(x)$ に対し

$$\begin{aligned}
\int dx\ f(x)x\frac{d}{dx}\delta(x) &= -\int dx\frac{d}{dx}[f(x)x]\delta(x) \quad \leftarrow (\text{部分積分、表面項は }\delta(x)\text{ が消えるので }0) \\
&= -\int dx\left[x\frac{df(x)}{dx}+f(x)\right]\delta(x) \\
&= -\int dx f(x)\delta(x) \quad \leftarrow \int xg(x)\delta(x)dx = 0
\end{aligned}$$

より

$$x\frac{d}{dx}\delta(x) = -\delta(x)$$

である。$x \to x-x'$ と置き換えると、$d(x-x') = dx$ より

$$\begin{aligned}
(x-x')\frac{d}{dx}\delta(x-x') &= -\delta(x-x') \\
\frac{1}{x-x'}\delta(x-x') &= -\frac{d}{dx}\delta(x-x')
\end{aligned}$$

となるので、

$$\langle\,x\,|\hat{p}|\,x'\,\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-x')$$

を得る。よって

$$
\begin{aligned}
\langle\, x\,|\hat{p} &= \int dx' \langle\, x\,|\hat{p}|\, x'\,\rangle\langle\, x'\,| \\
&= \int dx' \left[-i\hbar \frac{d}{dx}\delta(x-x') \right] \langle\, x'\,| \\
&= -i\hbar \frac{d}{dx} \int dx' \delta(x-x')\langle\, x'\,| \\
&= -i\hbar \frac{d}{dx}\langle\, x\,|
\end{aligned}
\tag{C1}
$$

また

$$
\begin{aligned}
\hat{p}|\, x\,\rangle &= \int dx' |\, x'\,\rangle\langle\, x'\,|\hat{p}|\, x\,\rangle \\
&= \int dx' |\, x'\,\rangle \left[-i\hbar \frac{d}{dx'}\delta(x'-x) \right] \\
&= -i\hbar \int dx' |\, x'\,\rangle \left[\frac{d}{dx'}\delta(x'-x) \right]
\end{aligned}
$$

この場合 (C1) と異なり微分が dx' になっているためそのまま積分の外に出せず、δ 関数にも微分がかかっているので通常の積分ができない。そこで部分積分を行うと

$$
\hat{p}|\, x\,\rangle = i\hbar \int dx' \left[\frac{d}{dx'}|\, x'\,\rangle \right] \delta(x'-x) \quad \leftarrow (\text{表面項は } \delta(x'-x) \text{ が消えるので } 0)
$$

となる。δ 関数の微分が外れたので積分が実行でき

$$
\hat{p}|\, x\,\rangle = i\hbar \frac{d}{dx}|\, x\,\rangle
$$

つまり

$$
\langle\, x\,|\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}\langle\, x\,|, \quad \hat{p}|\, x\,\rangle = +i\hbar \frac{d}{dx}|\, x\,\rangle
$$

となる。

直感的な覚え方：$\hat{p} \to -i\hbar d/dx$ は座標表示の波動関数 $\phi(x)$ に対して作用させる際の置き換えであり、これはブラケットで書くと $\phi(x) = \langle\, x\,|\,\phi\rangle$ と表される。ここに $|\,x\rangle$ ではなく $\langle\, x\,|$ が入っているため、$\hat{p}$ を $\langle\, x\,|$ に作用させた方と同じ演算になる。

ガウス積分

ガウス積分の公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{71}$$

の導出。

左辺を I と置いて、I^2 を計算すると

$$\begin{aligned} I &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} \\ I^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\alpha y^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\alpha(x^2+y^2)} \end{aligned}$$

I^2 の計算で、同じ積分変数を使ってはいけないことに注意。2 次元極座標 $(x, y) = (r\cos\theta, r\sin\theta)$ に変数変換すると、$dxdy = rdrd\theta$ より

$$\begin{aligned} &= \int_0^{\infty} dr\ r \int_0^{2\pi} d\theta e^{-\alpha r^2} \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} dr\ r e^{-\alpha r^2} \end{aligned}$$

$X = r^2$ とすると、$dX = 2rdr$ なので

$$\begin{aligned} I^2 &= 2\pi \int_0^{\infty} \frac{dX}{2r}\ r e^{-\alpha X} = \pi \int_0^{\infty} dX e^{-\alpha X} = \pi \left[\frac{e^{-\alpha X}}{-\alpha} \right]_0^{\infty} = \frac{\pi}{\alpha} \\ I &= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \end{aligned}$$

を得る。公式の両辺を α で微分すると

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} &= \frac{d}{d\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d}{d\alpha} e^{-\alpha x^2} &= \sqrt{\pi} \frac{d}{d\alpha} \alpha^{-1/2} \\ -\int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2 e^{-\alpha x^2} &= \sqrt{\pi} \frac{-1}{2} \alpha^{-3/2} \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2 e^{-\alpha x^2} &= \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \end{aligned}$$

のように、x の偶数ベキを挟んだガウス積分の公式も得られる。