4. 調和振動子

No.
Date

4-1 調和振動子による束縛状態

調和振動子のポテンシャル

$$\boxed{V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2}$$

◎ 復習：古典力学では力が重要

$$F = -\frac{\partial V}{\partial x} = -m\omega^2 x$$ より

Newton方程式は

$$m\ddot{x} = -m\omega^2 x$$

$$\underline{\ddot{x} + \omega^2 x = 0}$$

この一般解は

$$\underline{x = A\sin\omega t + B\cos\omega t}$$

例えば：初期条件を

$t=0$ で $x=0$, $\dot{x} = v_0$ と与えると

$$\underline{x = \frac{v_0}{\omega}\sin\omega t}$$ と求まる

[量子力学]

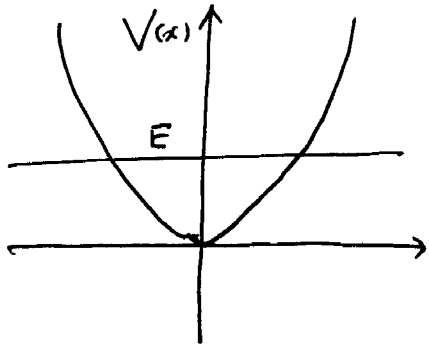
ポテンシャル $V(x)$ が重要

$$\boxed{\text{力はでてこない!!}}$$

No.

Date

[ポテンシャル $V(x)$]　$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$　70



$x\to\infty$ で $V(x)\to\infty$

従って 常に束縛状態

散乱状態が存在しない!!

- 束縛状態 $\Rightarrow$ 波動関数を $u(x)$ とすると $\boxed{u(\pm\infty)=0}$ （境界条件）

- Schrödinger 方程式は

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2u(x)=Eu(x)}$$

この微分方程式を

$$\boxed{\begin{gathered} u(\pm\infty)=0 \\ \int_{-\infty}^{\infty}|u(x)|^2dx=1 \end{gathered}}$$

の条件下で解く。（固有値方程式）

- 変数の導入 (簡単のため, みやすいから)

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x \ , \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \ , \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

この時 : Schrödinger 方程式は

$$\begin{cases} \boxed{\left(\dfrac{d^2}{d\xi^2} + \lambda - \xi^2\right) u(\xi) = 0} \\ u(\pm\infty) = 0 \end{cases}$$

となる.

[解法の指針]

1. ξ が大きいところに注目する
   $\Longrightarrow$ 境界条件が $\begin{pmatrix} \xi \to \infty, \ \xi \to -\infty \\ u(\pm\infty) = 0 \end{pmatrix}$ だから
2. $u(\xi)$ を ξ でべき展開する
   そして, その展開係数に対する条件式にもってゆく
3. 境界条件 $u(\pm\infty) = 0$ と矛盾しない解をみつける

No.
Date

1. ξが大きいところのふるまい

$\xi \gg 1$ よって $\xi^2 \gg \lambda$

従って微分方程式は近似的に

$$\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2 u(\xi) = 0$$ とかける.

$$\begin{cases} u(\xi) \simeq e^{-\frac{1}{2}\xi^2} & \text{とおいてみると} \\ u'(\xi) \approx (-\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ u''(\xi) \approx (\xi^2 - 1)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \approx \xi^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \end{cases}$$

従って. これは $\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2 u(\xi) \approx 0$ をみたす.

すなわち ξが十分大きいところでは

$$\boxed{u(\xi) \approx e^{-\frac{1}{2}\xi^2}}$$ とふるまう.

よって

$$\boxed{u(\xi) = f(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}}$$

と仮定して、$f(\xi)$に対する式に直す.

- $u(\xi) = f(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ を

Schrödinger 方程式

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} + \lambda - \xi^2\right) u(\xi) = 0$$ に代入する.

$$\begin{cases} \dfrac{du(\xi)}{d\xi} = \dfrac{df(\xi)}{d\xi} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} - f(\xi)\cdot\xi\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ \dfrac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} = \dfrac{d^2f(\xi)}{d\xi^2} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} - 2\dfrac{df(\xi)}{d\xi}\xi\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ \qquad - f(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} + f(\xi)\xi^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \end{cases}$$

より

$f(\xi)$ に対する微分方程式は

$$\boxed{\frac{d^2f(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\frac{df(\xi)}{d\xi} + (\lambda - 1) f(\xi) = 0}$$

となる.

- $f(\xi)$ の性質:

$f(\xi)$ は パリティ・オペレータ $\hat{P}$ の固有関数となっている

$\hat{P}$ の定義: $\boxed{\hat{P}\psi(x) \equiv \psi(-x)}$

・ パリティ・オペレータ $\hat{P}$:

$$\underline{\hat{P}\psi(x) \equiv \psi(-x)}$$

さて $\hat{P}$ の固有関数, その固有値を

$\psi_\alpha(x)$, α とすれば

$$\boxed{\hat{P}\psi_\alpha(x) = \alpha\psi_\alpha(x)}$$

ところが $\hat{P}^2\psi_\alpha(x) = \alpha\hat{P}\psi_\alpha(x) = \alpha^2\psi_\alpha(x)$

$$= \hat{P}\psi_\alpha(-x) = \psi_\alpha(x)$$

これより $\alpha^2 = 1$ $\therefore \boxed{\alpha = \pm 1}$

パリティ・オペレータ $\hat{P}$ の固有値は ± 1

$$\boxed{\begin{aligned} &\hat{P}\psi_1(x) = \psi_1(x) &&: \text{対称} \\ &\hat{P}\psi_{-1}(x) = -\psi_{-1}(x) &&: \text{反対称} \end{aligned}}$$

という。

No.

Date

◎ パリティの固有関数；

調和振動子の固有関数 $u(x)$ は

パリティの固有関数でもある.

(証) Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) u(x) = E\,u(x)$$

ここで　$x \to -x$ としてみる. この時, 上式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) u(-x) = E\,u(-x)$$

となる.

この2つの方程式は全く同じ固有値方程式
同じ固有値をもつ

⇓ よって

$u(x) \propto u(-x)$

すなわち　$u(x) = k\,u(-x)$　　k は定数

これより　$u(x) = k\,u(-x) = k^2 u(x)$　より

∴ $\boxed{k = \pm 1}$

$u(x) = u(-x)$　対称
$u(x) = -u(-x)$　反対称

となる

[$f(\xi)$ について]

$u(\xi) = f(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ と定義したから

$f(\xi)$ は対称と反対称の場合がある.

(1) 対称の場合 : $f(\xi) = f(-\xi)$

$f(\xi)$ をべき展開 : ξ^2 のべき乗

$$f(\xi) = a_0 + a_1 \xi^2 + a_2 \xi^4 + \cdots + a_n \xi^{2n} + \cdots$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi^2)^n$$

[解くべき方程式]

$$\boxed{f''(\xi) - 2\xi f'(\xi) + (\lambda - 1) f(\xi) = 0}$$

ここで

$$\begin{cases} f'(\xi) = 2a_1 \xi + 4a_2 \xi^3 + \cdots + 2n a_n \xi^{2n-1} \\ f''(\xi) = 2a_1 + 4\times 3\times a_2 \xi^2 + \cdots + 2n(2n-1) a_n^{2n-2} + \cdots \end{cases}$$

この式を微分方程式に代入すると

$$\left\{\begin{aligned} &2a_1 + 4\times3\times a_2\xi^2 + \cdots + 2n(2n-1)a_n\xi^{2n-2} + 2(n+1)(2n+1)\xi^{2n} + \cdots \\ &-2\left(2a_1\xi^2 + 4a_2\xi^4 + \cdots + 2na_n\xi^{2n}\right) + \cdots \\ &+(\lambda-1)\left(a_0 + a_1\xi^2 + a_2\xi^4 + \cdots + a_n\xi^{2n}\right) + \cdots \quad = 0 \end{aligned}\right.$$

$\boxed{\text{ポイント}}$ ： 微分方程式が ξ に対する恒等式に書き直された

⇓

変数が $\boxed{a_n}$ になっている.

恒等式 ⟺ ξ^n の係数は ゼロ

$$\left\{\begin{aligned} \xi^0 &: \quad 2a_1 + (\lambda-1)a_0 = 0 \\ \xi^2 &: \quad 4\times3\times a_2 - 2\times2a_1 + (\lambda-1)a_1 = 0 \\ \xi^{2n} &: \quad 2(n+1)(2n+1)a_{n+1} - 2\cdot2n\cdot a_n + (\lambda-1)a_n = 0 \end{aligned}\right.$$

よって

$$\boxed{2(n+1)(2n+1)a_{n+1} = (4n-\lambda+1)a_n}$$

が成立する.

↑

（微分方程式の解となっている）

[境界条件]

$$u(\xi) = f(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \quad \boxed{u(\pm\infty) = 0}$$

が境界条件

但し
$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi^2)^n$$

ここで a_n は

$$2(n+1)(2n+1)\, a_{n+1} = (4n - \lambda + 1)\, a_n$$

をみたす.

[ポイント] 境界条件は $\xi \to \infty$ だから

ξ が大きいところの $u(\xi)$ をみる

$\Downarrow$

[n が十分大きいところ]

$\downarrow$

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi^2 \\ \xi^{10} \end{array} \right.$$

$\xi \sim 10$ のとき

$$\left. \begin{array}{l} \xi^2 \sim 10^2 \\ \xi^{10} \sim 10^{10} \end{array} \right\}$$

ξ^{10} の方が圧倒的に大きい.

[$n \gg 1$ とする]

$$2(n+1)(2n+1)\,a_{n+1} = (4n-\lambda+1)\,a_n$$

$$\downarrow \quad n\to\infty$$

$$\boxed{n\,a_{n+1} = a_n}$$

これは $\boxed{a_n \approx \dfrac{1}{n!}}$ で大体みたしている

(但し $n! \equiv 1\times 2\times 3\times\cdots\times n$)

この時 $f(\xi)$ は ?

$$f(\xi) \simeq \Sigma\, a_n(\xi^2)^n \approx \Sigma\, \frac{1}{n!}(\xi^2)^n \approx e^{\xi^2}$$

(n:十分大きい)

よってこの時は

$$u(\xi) = f(\xi)\,e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \approx e^{\xi^2}e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \simeq e^{\frac{1}{2}\xi^2} \to \infty$$

$(\xi\to\infty)$

となって $u(\infty)\to\infty$ となってしまい

$u(\pm\infty)=0$ の境界条件と矛盾する!!

これは何を意味しているか？

$$2(n+1)(2n+1)\,a_{n+1} = (4n+1-\lambda)\,a_n$$

$\Updownarrow$

［どの n でも常に成立する］とした

$\Downarrow$ どこかで a_n がゼロになって欲しい

よって　ある n で

$$\boxed{4n+1-\lambda=0}$$ とする

こうするとその先では $\boxed{a_{n+1}=0}$ となる

一方 $\boxed{\lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}}$ であってから

$$\frac{2E}{\hbar\omega} = 4n+1$$

$$\therefore \boxed{E = \hbar\omega\left(2n+\frac{1}{2}\right)} \quad (n=0,1,2,\cdots)$$

◦ 全く同様にして

反対称、$f(\xi) = -f(-\xi)$ の時

$$\boxed{E = \hbar\omega\left(2n+1+\frac{1}{2}\right)} \quad (n=0,1,2,\cdots)$$

これらをまとめると　$E \to E_n$ と書いて

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)} \quad (n=0,1,2,\cdots)$$

これが調和振動子のエネルギー固有値である。

No.
Date

[波動関数]

量子数 n の場合の波動関数

$$\begin{cases} u_n(\xi) = f_n(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \end{cases}$$

$$\xi = \alpha x, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

[$n=0$ の場合]　　$u_0(x)$ が求まる

この時，a_0 のみ有限

$$\boxed{u_0(x) = a_0\, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}}$$

規格化　　$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} |u_0(x)|^2\, dx = 1$ より

$$\underline{u_0(x) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}}$$

【反対称 $f(\xi) = -f(-\xi)$ の時】(付録)

$$\begin{cases} f(\xi) = a_1\xi + a_2\xi^3 + \cdots + a_n\xi^{2n+1} \\ f'(\xi) = a_1 + 3a_2\xi^2 + \cdots + (2n+1)a_n\xi^{2n} \\ f''(\xi) = 3\cdot 2\cdot a_2\xi + \cdots + (2n+1)(2n)a_n\xi^{2n-1} \end{cases}$$

微分方程式

$$f''(\xi) - 2\xi f'(\xi) + (\lambda-1)f(\xi) = 0$$ に代入

ξ^{2n+1} の項：

$$(2n+3)(2n+2)a_{n+1}\xi^{2n+1}$$

$$+ \left[-2(2n+1)a_n + (\lambda-1)a_n\right]\xi^{2n+1} = 0$$

よって

$$(2n+3)(2n+2)a_{n+1} = \underbrace{\left[2(2n+1)+1-\lambda\right]}_{\Downarrow\ 0}a_n$$

これより $\lambda = 4n+3$

$$\therefore\ E = \hbar\omega\left(2n+1+\frac{1}{2}\right) \quad (n=0,1,\cdots)$$

【 $n=1$ の波動関数 】

$$u_1(\xi) = N\xi \, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = N\alpha x \, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

規格化 : $\int_{-\infty}^{\infty} |u_1(x)|^2 dx = 1$ より

$$\boxed{u_1(x) = \left(\frac{4\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \alpha x \, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}}$$