4. 調和振動子

4-1 調和振動子ポテンシャルによる束縛状態

調和振動子のポテンシャル（バネと同じ）

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

【古典力学】 古典力学では力が重要であった

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

この時 Newton 方程式は

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

よって $\boxed{\ddot{x} + \omega^2 x = 0}$

この一般解は $x = A\sin\omega t + B\cos\omega t$

この解に初期条件をつけるとA, Bが決まる。

例えば、$t=0$ で $x=0$, $\dot{x} = v_0$ とすれば

$$\boxed{x = \frac{v_0}{\omega}\sin\omega t}$$

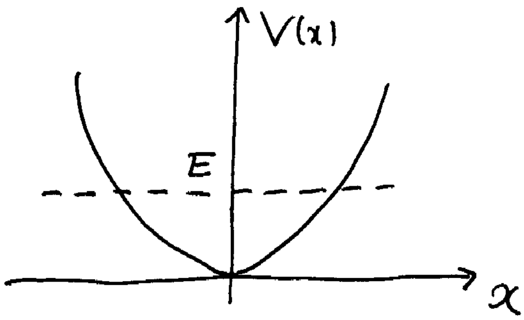
と粒子（質点）の運動が決定される。

[量子力学]

ポテンシャル $V(x)$ が重要

力はあらわれない!!

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



$x\to\infty$ のとき

$V(x)\to\infty$

⇓

束縛状態のみ存在する

(散乱状態がない!!)

・束縛状態 : $u(\pm\infty)=0$ (境界条件)

・Schrodinger 方程式

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

この2階の微分方程式を

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

条件で解く.

・新しい変数の導入　（簡単のため）

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

この時，Schrödinger方程式は

$$\boxed{\left(\frac{d^2}{d\xi^2} + \lambda - \xi^2 \right) u(\xi) = 0}$$

となる.

境界条件は　$\boxed{u(\pm\infty) = 0}$

【解法の指針】

1.　ξ が大きいところに注目する

$\longleftrightarrow$ 境界条件が $\boxed{\xi \to \pm\infty}$ なので $\boxed{u(\pm\infty)=0}$

2.　$u(\xi)$ を ξ^n のべきで展開.

その展開係数 a_n に対する方程式にもってゆく

3.　境界条件 $u(\pm\infty) = 0$ と矛盾しない解をみつける.

1. ξ が大きいところのふるまい

$$\begin{cases} \xi \gg 1 \\ \xi^2 \gg \lambda \end{cases}$$

従って微分方程式は

$$\underline{\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2 u(\xi) \approx 0}$$

とかける

ここで $u(\xi) \approx e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ とおいてみると

$$u'(\xi) \approx (-\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$$u''(\xi) \approx (\xi^2 - 1)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \approx \xi^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

($\xi^2 \gg 1$ だから)

よってこれは $\dfrac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2 u(\xi) \approx 0$ 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 $\boxed{u(\xi) = f(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}}$ とおいて

$f(\xi)$ にみたす式にする

【$f(\xi)$ に対する微分方程式】

$u(\xi) = f(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ を Schrödinger 方程式に代入

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} + \lambda - \xi^2 \right) u(\xi) = 0$$

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

よって $f(\xi)$ に対する方程式は

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

となる。

【$f(\xi)$ の性質】

$f(\xi)$ は パリティ・オペレータ $\hat{P}$ の固有関数である。

$\hat{P}\psi(x) \equiv \psi(-x)$ と定義したとき

$$\boxed{\hat{P} f(\xi) = \pm f(\xi)}$$ である。

【パリティ・オペレータ $\hat{P}$】

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

ここで　$\hat{P}$ の固有関数とその固有値を

$\psi_\alpha(x)$, α とすると

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

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

一方　$\hat{P}^2\psi_\alpha(x) = \hat{P}\,\psi_\alpha(-x) = \psi_\alpha(x)$

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

である

これより

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

という

[パリティの固有関数]

調和振動子の波動関数 $\boxed{u(x)}$ は

パリティの固有関数でもある。

(証) Schrödinger 方程式は

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

ここで $x\to -x$ と変換すると

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

この2つの方程式は全く同じ固有値をもつ

固有値方程式も同じ

⇓ よって

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

よって $\boxed{u(x)=ku(-x)}$ kは定数

$u(x)=ku(x)=k^2u(x)$ より

よって $\boxed{k=\pm 1}$ $\left\{\begin{array}{ll} u(x)=u(-x) & (\text{対称}) \\ u(x)=-u(-x) & (\text{反対称}) \end{array}\right\}$ となる

【 $f(\xi)$ のべき展開 】

$$u(\xi) = f(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad \text{なので}$$

$f(\xi)$ 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 ξ^2 のべきで展開する

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

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

[方程式]

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

従って $f(\xi)$ の微分は

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

この式を微分方程式に代入する.

この場合. 微分方程式は ξ に対する

$\boxed{\text{恒等式}}$ となる.

$$\begin{cases} 2a_1 + 4\times 3a_2\xi^2 + \cdots + 2n(2n-1)a_n\xi^{2n-2} + 2(n+1)(2n+1)\xi^{2n} + \cdots \\ -2(2a_1\xi^2 + 4a_2\xi^4 + \cdots + 2na_n\xi^{2n} + \cdots +) \\ +(\lambda-1)(a_0 + a_1\xi^2 + a_2\xi^4 + \cdots + a_n\xi^{2n} + \cdots +) = 0 \end{cases}$$

◎ ポイント　微分方程式が ξ に対する恒等式になった

但し 変数は $\boxed{a_n}$ $(n=0,1,2,\cdots)$

恒等式だから ξ^n の係数はゼロ

ξ^0 :　$2a_1 + (\lambda-1)a_0 = 0$

ξ^2 :　$4\times 3a_2 - 2\times 2a_1 + (\lambda-1)a_1 = 0$

⋮

ξ^{2n} :　$2(n+1)(2n+1)a_{n+1} - 4na_n + (\lambda-1)a_n = 0$

すなわち　$\Downarrow$

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

が成立する.　a_n に対する漸化式

微分方程式を解いたことに対応している

【境界条件】

微分方程式を解くときの条件は

$$\boxed{u(\pm\infty)=0}$$ であった。

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

$$\begin{cases} f(\xi)=\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} a_n(\xi^2)^n \\ 2(n+1)(2n+1)a_{n+1}=(4n-\lambda+1)a_n \end{cases}$$

【ポイント】 ξ が大きいところのふるまいが重要

$\xi\to\infty$ での $f(\xi)$ のふるまい

↓

a_n の n が十分大きいところ

$$\boxed{n\gg1}$$

よって

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

$$\Downarrow$$

$$\boxed{n\,a_{n+1}=a_n}$$ となる。

$n\,a_{n+1} = a_n$ の解は

$\boxed{a_n \approx \frac{1}{n!}}$ $(n \gg 1)$ である

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

[この時 $f(\xi)$ は？]

$$f(\xi) = \sum a_n (\xi^2)^n \approx \sum \frac{1}{n!} (\xi^2)^n \approx e^{\xi^2}$$

(n が十分大きいところ)

従って

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

$$\approx e^{\xi^2} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = e^{\frac{1}{2}\xi^2} \to \infty$$

となってしまい $\boxed{u(\pm\infty) = 0 \text{ と矛盾}}$

↓

どうしたらよいのか？

$\xi \to \infty$ の $f(\xi)$ のふるまいをみるとき

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

が成立している事を使って

[$\xi \to \infty$ で $u(\infty) \to \infty$ をさけるには]

$\Downarrow$

どこかで a_n がゼロになればよい

すなわち　ある n で

$$\boxed{4n+1-\lambda = 0}$$

が成立したとする。

この時は、$a_{n+1} = 0$ となる。

従ってそれから先の n ではすべて

$a_{n+1} = 0$ となる

一方，$\boxed{\lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}}$ であったから

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

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

ときまった

全く同様に計算すると

反対称、$f(\xi) = -f(-\xi)$ の時は

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

となる

まとめると

$$E = \begin{cases} \hbar\omega\left(2n+\frac{1}{2}\right) & n=0,1,2,\cdots \\ \hbar\omega\left(2n+1+\frac{1}{2}\right) & n=0,1,2,\cdots \end{cases}$$

と求めるのも。

この両方をまとめて書くと

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

これが調和振動子のエネルギー固有値である。

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

(添え字) と書く場合が多い。

【波動関数】

$$\begin{cases} \text{波動関数} & u_n(\xi) : & \underline{u_n(\xi) = f(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}} \\ \text{Energy} & E_n : & E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \end{cases}$$

$(n = 0, 1, 2, \cdots)$

$$\left(\xi = \alpha x,\ \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

- $n = 0$ (基底状態)

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

この時 a_0 のみが non-zero

よって

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

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

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

【反対称の場合】

$$f(\xi) = -f(-\xi)$$

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

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

ξ^{2n+1} の項 :

$$(2n+3)(2n+2) a_{n+1} \xi^{2n+1} + \{-2(2n+1) a_n + (\lambda - 1) a_n\} \xi^{2n+1} = 0$$

よって

$$\boxed{(2n+3)(2n+2) a_{n+1} = \left(2(2n+1) + 1 - \lambda\right) a_n}$$

これより $\boxed{\lambda = 4n + 3}$

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

- $n=1$ 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

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