量子力学Ⅰ　平成 26 年 5 月 14 日　　　　　　　　　　　　主専攻　学籍番号　　　　　　　　　氏名

1．バネ定数 k のバネと質量 m の粒子からなる１次元調和振動子を考える。古典的な角振動数を $\omega = \sqrt{k/m}$ とする。

(1)　平衡位置からの変位 x 、運動量 p_x とあらわすとき、古典的なハミルトニアン（系のエネルギー）を答えよ。

$H_{classic} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2$ （古典的ハミルトニアン $H_{classic}$ は共役な位置と運動量変数で表した運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和である。）

(2)　量子力学によると粒子の位置及び運動量を同時に定めようとするとそれらの値にはある不確定性 Δx 、Δp が付きまとい、それらの間には $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ の関係が成り立つ（不確定性原理）。この関係を用いて、この振動系のエネルギー ε の最小値が大雑把な見積もりで $\varepsilon_0 \cong \hbar\omega/2$ となることを示せ。（ヒント：古典的なハミルトニアンにおいて運動の大きさが $|x| \cong \Delta x$、 $|p| \cong \Delta p$ と見なせるほどに小さいとして近似し、それに不確定性原理の関係を適応する。）

$\varepsilon \cong \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{k}{2}(\Delta x)^2 \geq 2\sqrt{\frac{k(\Delta x \Delta p)^2}{4m}} \geq \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{\hbar\omega}{2}$。よって $\varepsilon_0 \cong \hbar\omega/2$ と見積もれる。

注：不確定性原理は $\Delta x \Delta p \geq h$ などとも表されている場合もあるが、大事なことは“$\Delta x \Delta p$ はプランク定数程度までしか小さくならない”ということである。

(3)　変位と系のエネルギーに関する変数変換 $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$、 $\lambda = \frac{2\varepsilon}{\hbar\omega}$ を考える。このとき、ξ 、λ について次元解析せよ。

ξ ： $\sqrt{\frac{Kg \cdot s^{-1}}{Js}} \cdot m = \sqrt{\frac{Kg \cdot s^{-1}}{Kg \cdot ms^{-2} \cdot m \cdot s}} \cdot m$ となり無次元。λ ： $\frac{J}{Js \cdot s^{-1}}$ となり無次元（分子、分母ともエネルギーを表わすことからも明らか）。

(4)　時間を含まないシュレディンガー方程式が $\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right)u(\xi) = \lambda u(\xi)$　①　と書けることを示せ（$u(\xi)$ は固有関数）。

対応関係より、 $H_{classic} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)^2 \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{m\omega^2\hbar\xi^2}{2m\omega} = -\frac{\hbar\omega}{2}\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{\hbar\omega\xi^2}{2} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right)$

よって、時間を含まないシュレディンガー方程式 $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)u(x) = \varepsilon u(x)$ は、 $\frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right)u(\xi) = \varepsilon u(\xi)$ と表わされる。

さらに $\lambda = \frac{2\varepsilon}{\hbar\omega}$ の変数変換を施すと、 $\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right)u(\xi) = \lambda u(\xi)$。

2．　$|\xi|$ が小さい領域では振動解となり、$\xi \to \pm\infty$ では 0 に収束するようなシュレディンガー方程式①の解を求めよう。

(1)　微分方程式①に対して、 $u_{\inf}(\xi) = C\exp(-\xi^2/2)$ は $|\xi| >> 1$ における近似解となっている。実際に代入して計算することで確認せよ。

$\lambda u(\xi)$ の項を移行し、代入して実際に計算してみると、

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 - \lambda\right)\left(C\exp(-\xi^2/2)\right) = (-\xi^2 + 1 + \xi^2 - \lambda)C\exp(-\xi^2/2) = (1-\lambda)C\exp(-\xi^2/2) \approx 0 \qquad (\because |\xi| >> 1)$$

(2)　n 次多項式は一般に n 個の根を持つ。そこで ξ の多項式 $P(\xi)$ で $|\xi|$ が小さい領域で振動する様子を表し、また(1)の $\xi \to \pm\infty$ での近似解を踏まえて、$u(\xi) = P(\xi)\exp(-\xi^2/2)$ の解の形を仮定する。この仮定の下で $P(\xi)$ は $P''(\xi) - 2\xi P'(\xi) + (\lambda - 1)P(\xi) = 0$　②　の微分方程式を満たす必要があることを示せ。

$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right)u(\xi) = \lambda u(\xi)$ の左辺と右辺に $u(\xi) = P(\xi)\exp(-\xi^2/2)$ を代入して計算すると

左辺 $= -P''(\xi)\exp(-\xi^2/2) + P(\xi)\exp(-\xi^2/2) + 2\xi P'(\xi)\exp(-\xi^2/2) - \xi^2 P(\xi)\exp(-\xi^2/2) + \xi^2 P(\xi)\exp(-\xi^2/2)$

右辺 $= \lambda P(\xi)\exp(-\xi^2/2)$

整理して、 $P''(\xi) - 2\xi P'(\xi) + (\lambda - 1)P(\xi) = 0$

(3)　$P(\xi)=\sum_{i=0} c_i\xi^i$ と表わすとき、これが微分方程式②を満たすには $(i+2)(i+1)c_{i+2}-(2i-\lambda+1)c_i=0$ の関係③が成立しなければいけないことを示せ。

式②の左辺に $P(\xi)$ の級数の形を代入して微分計算すると、 $\sum_{i=2} i(i-1)c_i\xi^{i-2}-2\xi\sum_{i=1} ic_i\xi^{i-1}+(\lambda-1)\sum_{i=0} c_i\xi^i=0$

各級数項において $i=0$ からの和の形に書き直すと $\sum_{i=0}(i+2)(i+1)c_{i+2}\xi^i-\sum_{i=0}2ic_i\xi^i+\sum_{i=0}(\lambda-1)c_i\xi^i=0$

この関係式が恒等的に成り立つには、左辺で次数 i に対する係数の和は零とならないといけない、すなわち $(i+2)(i+1)c_{i+2}-(2i-\lambda+1)c_i=0$

(4)　$P(\xi)$ が無限級数の場合、 $P(\xi)\approx e^{\xi^2}$ となることを示せ。ヒント： i>>1 及び i>>λとして、(3)での関係を近似してみよ。

(3)の結果から、次数 i が大きなところでは $c_{i+2}=\dfrac{(2i-\lambda+1)}{(i+2)(i+1)}c_i\cong\dfrac{2}{i}c_i$ と近似できる。さらに両辺での次数が 2 異なっていることに注意して $i=2j$ と

変数変換すると $c_{2(j+1)}\cong\dfrac{1}{j}c_{2j}$。従って、 $P(\xi)\approx\sum_{j=0}^{\infty}\dfrac{1}{j!}\xi^{2j}=e^{\xi^2}$

(5)　$P(\xi)$ が無限級数だと、(4)より $\xi\to\pm\infty$ で $u(\xi)=P(\xi)\exp(-\xi^2/2)\approx e^{\xi^2/2}$ となり $u(\xi)$ は発散する。しかし、n より大きい次数の係数が全て零となる場合には $P(\xi)$ は有限の多項式 $H_n(\xi)$ となり、 $u(\xi)=H_n(\xi)\exp(-\xi^2/2)$ は $\xi\to\pm\infty$ で零に収束するようになる。そのようにするために λ の値に対して課せられる条件（制限）を答えよ。（ヒント：関係③で $c_{n+2}=0$ とするにはどうすればよい？）

(3)の結果より係数間には $c_{i+2}=\dfrac{(2i-\lambda+1)}{(i+2)(i+1)}c_i$ 　③の関係が成り立っている。ここで、もし $c_{n+2}=0$ となれば自動的に $c_{n+4}=c_{n+6}=...=0$ となり、$P(\xi)$

は有限の n 次多項式 $\sum_{i=0}^{n}c_i\xi^i$ となる。$c_{n+2}=0$ とするには、関係式③で $i=n$ のときに $2n-\lambda+1=0$ となるように $\lambda=2n+1$ と λ の値を限定すればよい。

(6)　$H_0(\xi)$、 $H_1(\xi)$、 $H_2(\xi)$ の具体的な形を求めよ。

$H_0(\xi)$ ： $n=0$ ゆえ定数項以外の係数は零。よって、 c_0 を任意定数として $H_0(\xi)=c_0$

$H_1(\xi)$ ： $n=1$ ゆえ 3 次以上の奇数次及び全ての偶数次の係数は零。よって、 c_1 を任意定数として $H_0(\xi)=c_1\xi$

$H_2(\xi)$ ： $n=2$ ゆえ 4 次以上の偶数次及び全ての奇数次の係数は零。また、 $\lambda=2\cdot 2+1=5$。 $c_2=\dfrac{(2\cdot 0-5+1)}{(0+2)(0+1)}c_0=-2c_0$ よって、 $H_2(\xi)=c_0(1-2\xi^2)$

微分方程式①は線形であり、その定数倍も解であることを踏まえると、任意定数を C_n として一般的には $u_n(\xi)=C_nH_n(\xi)\exp(-\xi^2/2)$ と表わされる。

(7)　$m\neq n$ のとき、$u_n(\xi)$ と $u_m(\xi)$ は $(-\infty,\infty)$ で直交することを示せ。ヒント：規格直交化されたエルミート多項式では $\int_{-\infty}^{\infty}H_m(\xi)H_n(\xi)\exp(-\xi^2)d\xi=\sqrt{\pi}2^nn!\delta_{mn}$

$\int_{-\infty}^{\infty}u_m(\xi)u_n(\xi)d\xi=\int_{-\infty}^{\infty}C_mH_m(\xi)\exp(-\xi^2/2)C_nH_n(\xi)\exp(-\xi^2/2)d\xi=C_mC_n\int_{-\infty}^{\infty}H_m(\xi)H_n(\xi)\exp(-\xi^2)d\xi=0$

別解　固有値が実数の演算子 $\left(-\dfrac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right)=A$ はエルミートで、 $u_n(\xi)$ の固有値が $2n+1$、 $u_m(\xi)$ のものが $2m+1$ と異なることを利用： $Au_m(\xi)=(2m+1)u_m(\xi)$

に左から $u_n{}^*(\xi)$ を掛けて積分 $\int_{-\infty}^{\infty}u_n{}^*(\xi)Au_m(\xi)d\xi=(2m+1)\int_{-\infty}^{\infty}u_n{}^*(\xi)u_m(\xi)d\xi$ ④。 $Au_n(\xi)=(2n+1)u_n(\xi)$ に左から $u_m{}^*(\xi)$ を掛けて積分

$\int_{-\infty}^{\infty}u_m{}^*(\xi)Au_n(\xi)d\xi=(2n+1)\int_{-\infty}^{\infty}u_m{}^*(\xi)u_n(\xi)d\xi$ ⑤。エルミートゆえ $\int_{-\infty}^{\infty}u_n{}^*(\xi)Au_m(\xi)d\xi=\left(\int_{-\infty}^{\infty}u_m{}^*(\xi)Au_n(\xi)d\xi\right)^*$。よって④と⑤の右辺の関係は、

$(2m+1)\int_{-\infty}^{\infty}u_n{}^*(\xi)u_m(\xi)d\xi=\left((2n+1)\int_{-\infty}^{\infty}u_m{}^*(\xi)u_n(\xi)d\xi\right)^*$。整理すると $(n-m)\int_{-\infty}^{\infty}u_n{}^*(\xi)u_m(\xi)d\xi=0$。 $n\neq m$ ゆえ、 $\int_{-\infty}^{\infty}u_n{}^*(\xi)u_m(\xi)d\xi=0$。