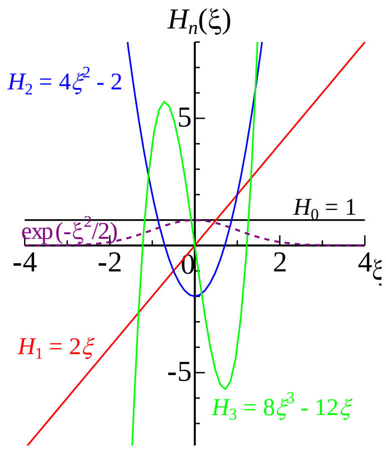
量子力学 I　平成 26 年 5 月 19 日　自習課題

1．Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ は母関数 $\exp(-t^2+2\xi t)$ を t について展開したときの係数、$\exp(-t^2+2\xi t)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}H_n(\xi)t^n$ ①　で与えられる。

(1)　t について展開し、$H_1(\xi)$、$H_2(\xi)$、$H_3(\xi)$ の具体的な形を求めよ。また、変化の様子を図示せよ。



$$\exp(-t^2+2\xi t)=1+(-t^2+2\xi t)+\frac{(-t^2+2\xi t)^2}{2!}+\frac{(-t^2+2\xi t)^3}{3!}+\ldots$$

$$=1+2\xi t+(2\xi^2-1)t^2+\left(\frac{4}{3}\xi^3-2\xi\right)t^3+\ldots$$

$$=1+\frac{1}{1!}(2\xi)t+\frac{1}{2!}(4\xi^2-2)t^2+\frac{1}{3!}\left(8\xi^3-12\xi\right)t^3+\ldots$$

t^n 項の係数部分で $1/n!$を除いたξの多項式部分が Hermite 多項式であるから、$H_0(\xi)=1$、$H_1(\xi)=2\xi$、$H_2(\xi)=4\xi^2-2$、$H_3(\xi)=8\xi^3-12\xi$。

(2)　式①の両辺を t で微分し、同次項の係数比較することから、$H_{n+1}(\xi)=2\xi H_n(\xi)-2nH_{n-1}(\xi)$ を示せ。

（同様に両辺をξで微分し係数比較することから、$H_n{}'(\xi)=2nH_{n-1}(\xi)$ の関係が得られる。）

両辺を t で微分すると、$(-2t+2\xi)\exp(-t^2+2\xi t)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}H_n(\xi)t^{n-1}$。左辺に $\exp(-t^2+2\xi t)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}H_n(\xi)t^n$ を代入すると、

$(-2t+2\xi)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}H_n(\xi)t^n=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}H_n(\xi)t^{n-1}$。左辺を変形すると、$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{-2}{n!}H_n(\xi)t^{n+1}+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}2\xi H_n(\xi)t^n=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}H_n(\xi)t^{n-1}$。

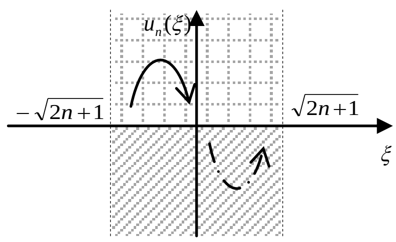
両辺において和記号の t の次数を合わせて記述すると、$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{-2}{(n-1)!}H_{n-1}(\xi)t^n+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}2\xi H_n(\xi)t^n=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}H_{n+1}(\xi)t^n$。任意の n について成り立つためには、$-2nH_{n-1}(\xi)+2\xi H_n(\xi)=H_{n+1}(\xi)$ とならなければいけない。

(3)　$H_n{}'(\xi)=2\xi H_n(\xi)-H_{n+1}(\xi)$ となることを示せ。さらに $H_n(\xi)$ が微分方程式 $H_n{}''(\xi)-2\xi H_n{}'(\xi)+2nH_n(\xi)=0$ を満たすことを示せ。

$H_{n+1}(\xi)=2\xi H_n(\xi)-2nH_{n-1}(\xi)$ を $H_n{}'(\xi)=2nH_{n-1}(\xi)$ に代入して $H_{n-1}(\xi)$ を消去すると、$H_n{}'(\xi)=2\xi H_n(\xi)-H_{n+1}(\xi)$。この両辺を$\xi$で微分すると、$H_n{}''(\xi)=2H_n(\xi)+2\xi H_n{}'(\xi)-H_{n+1}{}'(\xi)$。$H_n{}'(\xi)=2nH_{n-1}(\xi)$ から $H_{n+1}{}'(\xi)=2(n+1)H_n(\xi)$ となるので、これを代入すると、$H_n{}''(\xi)=2\xi H_n{}'(\xi)-2nH_n(\xi)$、すなわち $H_n{}''(\xi)-2\xi H_n{}'(\xi)+2nH_n(\xi)=0$

2．調和振動子に対する変数変換したシュレディンガー方程式 $\left(-\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right)u_n(\xi)=\lambda u_n(\xi)$ において、固有関数は Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ を用いて $u_n(\xi)=C_nH_n(\xi)\exp(-\xi^2/2)$ とあらわせる。$|\xi|<\sqrt{2n+1}$ において $u_n(\xi)$ は $u_n(\xi)>0$ のとき上に凸、$u_n(\xi)<0$ のとき下に凸の関数となることを示せ。

上半面で $\frac{d^2}{d\xi^2}u_n(\xi)<0$ ゆえ上に凸



下半面で $\frac{d^2}{d\xi^2}u_n(\xi)>0$ ゆえ下に凸

$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right)u_n(\xi)=\lambda u_n(\xi)$ に $\lambda=2n+1$を代入し、変形すると $\frac{d^2}{d\xi^2}u_n(\xi)=[\xi^2-(2n+1)]u_n(\xi)$。この式は、$\xi$ が $|\xi|<\sqrt{2n+1}$ となる範囲で $u_n(\xi)>0$ のときは $\frac{d^2}{d\xi^2}u_n(\xi)<0$ となって $u_n(\xi)$ は上に凸の関数、$u_n(\xi)<0$ のときは $\frac{d^2}{d\xi^2}u_n(\xi)>0$ となって下に凸の関数となることを示す。右図例のように、$u_n(\xi)$ が上半面にある（$u_n(\xi)>0$）とき $u_n(\xi)$ は上に凸の曲線で、最大となる ξ から離れるほど $u_n(\xi)$ はより減少する。とことが、ξ 軸を横切り下半面に入るまで減少すると $u_n(\xi)<0$ となるので、今度は下に凸の曲線となり、やがては増大に転じる。すなわち、振動解の形となっている。（$|\xi|>\sqrt{2n+1}$ ではどうなるか各自考えよ。ちなみに $\xi=\pm\sqrt{2n+1}$ は変曲点。）