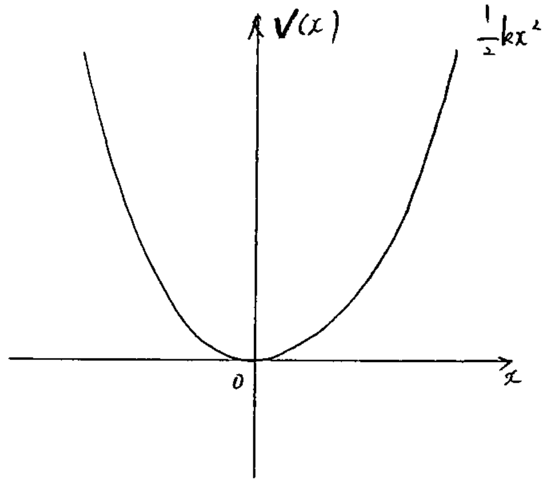
§ 一次元調和振動子

$$F(x) = -kx$$

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

$$\left(F = -\frac{dV}{dx} \right)$$



$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

Schrödinger Eq.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2u = Eu$$

無次元化　$\xi = \alpha x$ とおく

$$-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\frac{d^2u}{d\xi^2} + \frac{k}{2\alpha^2}\xi^2u = Eu$$

$\dfrac{\hbar^2\alpha^2}{2m}$ は エネルギーの次元をもっている

両辺を $\dfrac{\hbar^2\alpha^2}{2m}$ で割る

$$\lambda = \frac{E}{\left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\right)} \quad \text{とおくと}$$

$$-\frac{d^2u}{d\xi^2} + \frac{mk}{\hbar^2\alpha^4}\xi^2u = \lambda u$$

1となるように α を決める

$$\alpha^4 = \frac{mk}{\hbar^2}$$

$k = m\omega^2$

$mk = m^2\omega^2$

このとき、

$$\lambda = \frac{E}{\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\sqrt{mk}}{\hbar}} = \frac{2E}{\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}} = \frac{2E}{\hbar\omega_c}$$

$$\omega_c = \sqrt{\frac{k}{m}}$$ （古典的調和振動子の角振動数）

したがって、

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} + (\lambda^2 - \xi^2)u = 0$$ となる。

以下では、上式の微分方程式を解く。

▶ 境界条件 (Boundary Condition)

$\xi \longrightarrow \pm\infty$ のときの漸近形は、

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} \sim \xi^2 u$$

を満たさなくてはならないから、$u \sim e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}$ の形をもつ

また、波動関数は無限遠 ($\xi \to \pm\infty$) で有限である必要があるので、

$$u \sim e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

の漸近形をもつ。

∵

$$u \sim e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$$\frac{du}{d\xi} \sim e^{-\frac{1}{2}\xi^2}(-\xi)$$

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} \sim e^{-\frac{1}{2}\xi^2}(-\xi)^2 - e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = (\xi^2 - 1)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$\downarrow \xi \gg 1$

$$\sim \xi^2 \underbrace{e^{-\frac{1}{2}\xi^2}}_{u}$$

したがって、

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} \sim \xi^2 u$$ となっている。

▶ エネルギー固有値

漸近形の考察から 波動関数を

$$u(\xi) = H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

とおく.

$\dfrac{d^2u}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)u = 0$ に uを代入すると.

$$\frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH(\xi)}{d\xi} + (\lambda - 1)H(\xi) = 0$$

べき級数法で解く.

$$H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + a_3\xi^3 + \cdots$$

$$\frac{dH(\xi)}{d\xi} = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n \xi^{n-1}$$

$$\frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2} = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)a_n\xi^{n-2}$$

を代入すると.

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)a_n\xi^{n-2} - 2\boxed{\sum_{n=1}^{\infty}\xi n a_n \xi^{n-1}} + (\lambda-1)\sum_{n=0}^{\infty}a_n\xi^n = 0$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} n a_n \xi^n$$

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

ここにnがあるので,
n=0 からにしても 和の形は変わらない

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

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left\{(n+2)(n+1)a_{n+2} - (2n-\lambda+1)a_n\right\}\xi^n = 0$$

上式が成り立つためには、ξ^n の係数が $\overset{\text{ゼロ}}{0}$ になればよい

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

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

つまり、

初項 a_0 と a_1 が決まれば、$a_2, a_4, \cdots\cdots$ および $a_1, a_3, \cdots\cdots$ が次々に求まる。

具体的に書き下してみると、

$$H(\xi) = a_0\left(1 - \frac{\lambda-1}{1\cdot2}\xi^2 + \frac{\lambda-1}{1\cdot2}\cdot\frac{4-\lambda+1}{3\cdot4}\xi^4 - \cdots\cdots\right)$$
$$+ a_1\left(\xi - \frac{2-\lambda+1}{2\cdot3}\xi^3 + \frac{2-\lambda+1}{2\cdot3}\cdot\frac{6-\lambda+1}{4\cdot5}\xi^5 - \cdots\cdots\right)$$

$\boxed{\text{Q}}$ この無限級数は、もしかしたら、$\xi \to \pm\infty$ で発散してしまうのでは？

$\longrightarrow$ そうなったら、解にならない。

$n \to \infty$ での振舞を調べる。

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{2n-\lambda+1}{n^2+3n+2} = \frac{\frac{2}{n} - \frac{\lambda-1}{n^2}}{1+\frac{3}{n}+\frac{2}{n^2}} \sim \frac{2}{n} \quad (n\to\infty)$$

一方で、e^{ξ^2} のテイラー展開を考えよう。

$$e^{\xi^2} = 1 + \xi^2 + \frac{1}{2!}\xi^4 + \frac{1}{3!}\xi^6 + \cdots\cdots + \frac{1}{n!}\xi^{2n} + \cdots\cdots$$

であるから、$$\frac{\xi^{2n}\text{の係数}}{\xi^{2n-2}\text{の係数}} = \frac{\frac{1}{n!}}{\frac{1}{(n-1)!}} = \frac{1}{n}$$

となっている。$\frac{a_{n+2}}{a_n} \sim \frac{2}{n}$ の振舞とほぼ同じになっている。

つまり $n \to \infty$ では、

$$H(\xi) \sim e^{\xi^2}$$

となる。

波動関数に代入すると、

$$u = He^{-\frac{1}{2}\xi^2} = e^{\xi^2}e^{-\frac{\xi^2}{2}} = e^{\frac{\xi^2}{2}} \longrightarrow \infty \quad (\xi \to \pm\infty)$$

となり、発散してしまう！

Q. どうすれば良い？

▶ $H(\xi)$ が無限級数ではなく、有限の項で終わる多項式になっていればよい！

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

たまたま、どこかの n 番目の項がゼロになっていれば、それ以後の $n+2$ 番以降の項も全てゼロになってくれる。

つまり $\boxed{2n-\lambda+1 = 0}$

という条件を満たせばよい。

注) 上の方法では、$n+1$ 番目以降をゼロにできない。

そこで、n が偶数の場合には、$a_1 = 0$、〃 奇数 〃 $a_0 = 0$ とし、最初から止めておけばよい。

まとめると、

$$\lambda=1 \qquad H_0(\xi)=a_0$$

$$\lambda=3 \qquad H_1(\xi)=a_1\xi$$

$$\lambda=5 \qquad H_2(\xi)=a_0\left(1-\frac{4}{1\cdot 2}\xi^2\right)$$

$$\lambda=7 \qquad H_3(\xi)=a_1\left(\xi-\frac{4}{2\cdot 3}\xi^3\right)$$

$$\lambda=9 \qquad H_4(\xi)=a_0\left(1-\frac{8}{1\cdot 2}\xi^2+\frac{8}{1\cdot 2}\cdot\frac{4}{3\cdot 4}\xi^4\right)$$

$$\lambda=11 \qquad H_5(\xi)=a_1\left(\xi-\frac{8}{2\cdot 3}\xi^3+\frac{8}{2\cdot 3}\cdot\frac{4}{4\cdot 5}\xi^5\right)$$

$$\vdots$$

$H_n(\xi)$ を エルミート多項式 という.

まとめると、

固有値

$$\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega_c} \text{ より } E=\frac{\hbar\omega_c}{2}\lambda=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

$$2n+1=\lambda \qquad\qquad n=0,1,2,\cdots$$

エネルギーが離散化された

波動関数

$$u_n(\xi)\propto H_n(\xi)\,e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

まだ規格化はしていない

$$\xi=\alpha x=\left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/4}x=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x$$

§ エルミート多項式の諸性質

定義

$$g(t,\xi) \equiv \exp(-t^2+2\xi t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) t^n \quad \text{—(1)}$$

$g(t,\xi)$を母関数(generating function)とよび、そのtについての展開の係数が、エルミート多項式 $H_n(\xi)$である。

$H_n(\xi)$について、次の性質が導かれる。

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi\frac{d}{d\xi} + 2n\right) H_n(\xi) = 0 \quad \text{—— ②}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \begin{cases} 0 & (n \neq m) \\ 2^n n! \sqrt{\pi} & (n = m) \end{cases} \quad \text{—③}$$

(②式の証明)

$$e^{-t^2+2\xi t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) t^n$$

$$2t\, e^{-t^2+2\xi t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} t^n \quad \text{—④}$$

$$4t^2 e^{-t^2+2\xi t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^2 H_n(\xi)}{d\xi^2} t^n \quad \text{—⑤}$$

ξについての微分

また、(1)式をtについて微分し、2tをかける。

$$e^{-t^2+2\xi t}(-4t^2+4\xi t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} 2n H_n(\xi) t^n \quad \text{—⑥}$$

④, ⑤を⑥の左辺へ代入

$$0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\frac{d^2 H_n(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} + 2n H_n(\xi) \right] t^n$$

$[\cdots] = 0$ より、②式が得られる。

(③式の証明)

$$e^{-t^2+2\xi t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) t^n \qquad (1)$$

(1)式で t を s とかきかえた式を用意する.

$$e^{-s^2+2\xi s} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) s^n \qquad (1)'$$

(1)式と(1)′式の積に $e^{-\xi^2}$ をかけると、左辺は、

$$e^{-t^2+2\xi t-s^2+2\xi s-\xi^2} = e^{-(\xi-t-s)^2+2st}$$ とかけることに注意すると、

$$e^{-(\xi-t-s)^2+2st} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} H_m(\xi)H_n(\xi)\frac{s^m}{m!}\cdot\frac{t^n}{n!}e^{-\xi^2}$$

両辺をそれぞれ $(-\infty,\infty)$ で ξ について積分すれば

$$\underbrace{\sqrt{\pi}}\, e^{2st} = \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_m(\xi)H_n(\xi)\,\frac{s^m}{m!}\,\frac{t^n}{n!}\,e^{-\xi^2}$$

ここで、ガウス積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$ を使った.

さらに $\sqrt{\pi}\, e^{2st} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sqrt{\pi}}{n!} 2^n s^n t^n$ なので

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\sqrt{\pi}\, 2^n s^n t^n = \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} \boxed{\int d\xi\, H_m(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}}\, \frac{s^m}{m!}\cdot\frac{t^n}{n!}$$

この部分が

$\delta_{mn}\, 2^n n! \sqrt{\pi}$ となれば

等式が成立

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_m(\xi)H_n(\xi)\, e^{-\xi^2} = 2^n n! \sqrt{\pi}\, \delta_{mn}$$

▷ エルミート多項式の漸化式

エルミート多項式 $H_n(\xi)$ は、次の関係式を満たす。

$$H_{n+1}(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)H_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

$$2n H_{n-1}(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = \left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)H_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

(証明)

④式に、①式を代入

$$④\quad 2t\boxed{e^{-t^2+2\xi t}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{dH_n(\xi)}{d\xi}t^n$$

$$①\quad e^{-t^2+2\xi t} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}H_n(\xi)t^n$$

$$\Rightarrow\quad \sum_{n=0}^{\infty}\frac{2}{n!}H_n(\xi)t^{n+1} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{dH}{d\xi}t^n$$

t^n の係数比較

$$\frac{2}{(n-1)!}H_{n-1}(\xi) = \frac{1}{n!}\frac{dH_n(\xi)}{d\xi}$$

$$\Rightarrow\quad H_n'(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi) \qquad —⑦$$

次に、①式をtについて微分

$$(-2t+2\xi)e^{-t^2+2\xi t} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}H_n(\xi)t^{n-1}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}Ht^n$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-2t^{n+1}H_n + 2\xi t^n H_n\right) = \sum_{n=0}\frac{1}{(n-1)!}H_n t^{n-1}$$

t^n の係数比較

$$\frac{-2}{(n-1)!}H_{n-1} + \frac{2\xi}{n!}H_n = \frac{1}{n!}H_{n+1}$$

▶ エルミート多項式の表現

エルミート多項式は、n階微分を使って

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right)$$

と表すこともできる。 ロドリグ公式

(証明)

$$g(t,\xi) = e^{2t\xi - t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi)\frac{t^n}{n!}$$ だから

$$H_n(\xi) = \frac{\partial^n}{\partial t^n} g(t,\xi)\Big|_{t=0}$$

$$e^{2t\xi - t^2} = e^{-(t-\xi)^2 - \xi^2}$$

$$= e^{-\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial t^n} e^{-(t-\xi)^2}\Big|_{t=0}$$

$$= e^{-\xi^2} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-(t-\xi)^2}\Big|_{t=0}$$

$$= (-1)^n e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

▷ 調和振動子 〜規格化された波動関数 etc.〜

調和振動子の WF

$\xi = \alpha x$ に注意すると

$$u_n(\alpha x) = N_n H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2} \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

規格化因子

規格化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \; u_n^2(\alpha x) = 1$$

$$N_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{N_n^2}{\alpha} \underbrace{\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi}}_{= 2^n n! \sqrt{\pi}} = 1$$

$\alpha x \equiv \xi$ とすると $dx = \frac{d\xi}{\alpha}$

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{1/2} = \left(\frac{m\omega/\hbar}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{1/2}$$

$$\therefore \quad u_n(x) = \left(\frac{m\omega/\hbar}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{1/2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

また

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

次の関係が成り立つことに注意.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \, u_m(x) u_n(x) = \delta_{mn} = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ 1 & m = n \end{cases}$$

波動関数の規格直交性