◎一次元調和振動子の解を微分方程式を直接解いて求める

問．　ハミルトニアン $H=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{m\omega^2x^2}{2}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}+\dfrac{m\omega^2x^2}{2}$ のシュレディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\right)\varphi(x)=E\varphi(x) \qquad \text{—— (1)}$$

の解を以下の手順で求めよ。

1. 以下の変数変換でシュレディンガー方程式を無次元化し、(2)式となることを示せ。

$$y=\alpha x,\ \varphi(x)=\varphi(y/\alpha)=\psi(y), \qquad \text{但し、}\ \alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},\ \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$\left(\frac{d^2}{dy^2}+\left(\lambda-y^2\right)\right)\psi(y)=0 \qquad \text{—— (2)}$$

2. さらに $\psi(y)=e^{-y^2/2}f(y)$ と変換すると $f(y)$ は、

$$\left(\frac{d^2}{dy^2}-2y\frac{d}{dy}+(\lambda-1)\right)f(y)=0 \qquad \text{—— (3)}$$

を満たすことを示せ。また、どうしてこのような変換を行うかも考えよ。

3. $f(y)$ に対し、次の形を仮定して(3)式に代入してみる(多項式法)。

$$f(y)=y^s\cdot\left(a_0+a_1y+a_2y^2+\cdots\right), \qquad \text{但し、}\ s\ge 0,\ a_0\ne 0$$

すると、規格化可能な波動関数を得るためには、 $\lambda=2n+1\quad(n=0,1,2\ldots)$ でなければならないことを示せ。このとき、$f(y)$ は n 次の Hermite 多項式 $H_n(y)$ となることを説明せよ。

4. 結局、シュレディンガー方程式(1)の規格化された解 $\varphi(x)\equiv u_n(x)$ は、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\right)u_n(x)=E_nu_n(x), \quad E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad (n=0,\ 1,\ 2,\ldots)$$

$$u_n(x)=N_n\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right)H_n(\alpha x), \quad N_n=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}}$$

で与えられることを示し、n が小さい場合の波動関数をグラフに描いてみよ。

5. $n\to\infty$ のときの解と古典論での解をグラフを描いて比較せよ。

担当 —— 後藤 email: gotoo-t