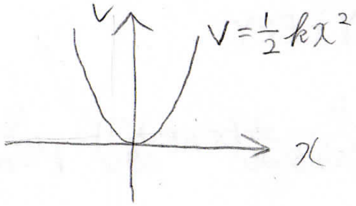
調和振動子



マクロな系

$$x = A\sin(\omega t+\delta)$$

ミクロな系

$$\psi = ?$$

・シュレディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}kx^2\right)\psi(x)=E\psi(x)$$

ここで ξ（グザイ）$=\alpha x$ とおく

（ただし、$\alpha^2=\frac{m\omega}{\hbar}$, $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$, $\varepsilon=\frac{2}{\hbar\omega}E$）

$$\left(-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\frac{d^2}{d\xi^2}+\frac{k}{2\alpha^2}\xi^2\right)\psi(\xi)=E\psi(\xi)$$

両辺に $\frac{2}{\hbar\omega}$ をかける

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right)\psi(\xi)=\varepsilon\psi(\xi)$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\psi(\xi)=(\xi^2-\varepsilon)\psi(\xi)$$

☆ $\xi\to\pm\infty$ のとき $\xi^2-\varepsilon\approx\xi^2$

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\psi(\xi)=\xi^2\psi(\xi)$$

$$\psi(\xi)=H_+(\xi)e^{\frac{1}{2}\xi^2}+H_-(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$\xi\to\pm\infty$とき, $\psi\to 0$より $\psi(\xi)=H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$

$$\frac{d}{d\xi}\psi=H'(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}-H(\xi)\cdot\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\psi=H''(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}-H'(\xi)\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2}-H'(\xi)\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2}-H(\xi)\left(e^{-\frac{1}{2}\xi^2}-\xi^2e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right)$$

シュレディンガー方程式に代入

$$-\frac{d^2}{d\xi^2}H(\xi)+2\xi\frac{d}{d\xi}H(\xi)+H(\xi)=\varepsilon H(\xi)$$

$$\psi_n(x)=\underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\,2^n\cdot n!}\right)^{\frac{1}{2}}}_{\text{規格化定数}}\underbrace{H_n(\alpha x)}_{\text{エルミート多項式}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

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

この $\psi_n(x)$ は直交性を満たす

$$\int\psi_i\psi_j\,dV=0$$ 状態間で相互作用なし

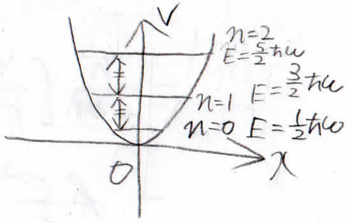
$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (n=0,1,2,\cdots)$$

エネルギー間隔は等間隔 ($\hbar\omega$)

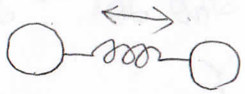
$n=0$ のとき $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega\neq 0$

最安定状態でも振動している

→ 零点振動



結合をばねに見立てると、



結合の長さは一定ではなく振動している

練習問題

$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$, $E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega$ を確認

答え

・$n=0$ のとき

$$H_0(\xi)=(-1)^0\exp(\xi^2)\exp(-\xi^2)=1$$

$$\psi_0(x)=\pi^{-\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}x^2\right)$$

$$\frac{d\psi_0}{dx}=-\pi^{-\frac{1}{4}}\alpha^2 x\exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}x^2\right)$$

$$\frac{d^2\psi_0}{dx^2}=-\pi^{\frac{1}{4}}\alpha^2\left\{\exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}x^2\right)-\alpha^2x^2\exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}x^2\right)\right\}$$

$$=-\alpha^2\psi_0(x)+\alpha^4x^2\psi_0(x)$$

$$E\psi_0(x)=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\alpha^2+\alpha^4x^2\right)+\frac{1}{2}kx^2\right\}\psi_0(x)$$

$\alpha^2=\frac{m\omega}{\hbar}$, $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$ を代入

$$E=-\frac{1}{2}kx^2+\frac{1}{2}kx^2+\frac{1}{2}\hbar\omega=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

・$n=1$ のとき

$$H_1(\xi)=(-1)\exp(\xi^2)(-2\xi)\exp(-\xi^2)$$

$$=2\xi$$

$$\psi_1(x)=\left(\frac{4}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\alpha x\exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}x^2\right)$$

$$\frac{d\psi_1}{dx}=\left(\frac{4}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\alpha\left\{\exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}x^2\right)-\alpha^2x^2\exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}x^2\right)\right\}$$

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2}=\left(\frac{4}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\alpha\left[-\alpha^2x\exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}x^2\right)-\alpha^2\left\{2x\exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}x^2\right)-\alpha^2x^3\exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}x^2\right)\right\}\right]$$

$$=-3\alpha^2\psi_1(x)+\alpha^4x^2\psi_1(x)$$

$$E\psi_1(x)=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-3\alpha^2+\alpha^4x^2\right)+\frac{1}{2}kx^2\right\}\psi_1(x)$$

$$E=-\frac{1}{2}kx^2+\frac{1}{2}kx^2+\frac{3}{2}\hbar\omega=\frac{3}{2}\hbar\omega$$