量子力学I　レポート (第2回)

341052G　(計数)
さいたまおとこ

2005年1月12日提出

1. フーリエ変換
   (a)
   $$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^{1} 1 \cdot e^{-ikx} dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin k}{k}$$
   (b)
   $$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^{1} x \cdot e^{-ikx} dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{i(k\cos k - \sin k)}{k^2}$$
   (c) 誤差関数の積分を使って
   $$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx - x^2} dx = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{k^2}{4}}$$

2. Hermite 多項式
   (a) Hermite 多項式の母関数を $S(x,t)$ とすると
   $$S(x,t) = e^{-t^2+2tx} \left(= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^n \right) \tag{1}$$
   $$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} (n \geq 0) \tag{2}$$
   (1) を t で微分して
   $$\frac{\partial S}{\partial t} = (-2t+2x)S(x,t) = -2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^{n+1} + 2x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^n \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{(n-1)!} t^{n-1}$$
   t^n の係数を比較することにより、$n \geq 1$ では
   $$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0 \tag{3}$$
   (b) (1) を x で微分して、
   $$\frac{\partial S}{\partial x} = 2tS(x,t) = 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^{n+1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(x)}{n!} t^n$$
   t^n の係数を比較して、
   $$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x) \to H''_n(x) = 2^2 n(n-1)H_{n-2}(x)$$
   これを (3) に代入すれば、
   $$H''_n(x) - 2xH'_n(x) + 2nH_n(x) = 0$$

（c）母関数の積分からまとめて求めてやればよい。(1) 式第 2 項から、

$$\int_{-\infty}^{\infty} S(x,m)S(x,n)e^{-x^2}dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m^2+2mx-n^2+2nx-x^2}dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{2mn}e^{-x-m-n^2}dx$$

$$= e^{2mn}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx = e^{2mn}\sqrt{\pi} = \sqrt{\pi}\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(2mn)^\nu}{\nu!}$$

また (1) 式第 3 項から、

$$\int_{-\infty}^{\infty} S(x,m)S(x,n)e^{-x^2}dx = \sum_{\mu=0}^{\infty}\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{m^\mu n^\nu}{\mu!\nu!}\int_{-\infty}^{\infty} H_\mu(x)H_\nu(x)e^{-x^2}dx$$

$m^\mu n^\nu$ の係数を比較して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_\mu(x)H_\nu(x)e^{-x^2}dx = 2^n n!\sqrt{\pi}\delta_{\mu\nu}$$

3. 井戸型ポテンシャル

（a）まず、１次元の Schrödinger 方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\varphi = E\varphi$$

$0 < x < a$ において、$V(x) = 0$ より

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi = -A^2\varphi, \qquad A = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

一般解は

$$\varphi(x) = B\sin Ax + C\cos Ax$$

境界条件 $\varphi(0) = C = 0, \varphi(a) = B\sin Aa + C\cos Aa = 0$ より、自明でない解は

$$A_n = \frac{n\pi}{a}, \qquad \varphi_n(x) = B\sin\frac{n\pi}{a}x$$

規格化条件から、

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_n(x)|^2 dx = |B|^2\int_0^a \sin^2\frac{n\pi}{a}x dx = \frac{a}{2}|B|^2 = 1$$

よって、エネルギー固有値は

$$E_n = \frac{A_n^2\hbar^2}{2m} = \frac{h^2}{8ma^2}n^2 (n \in \boldsymbol{N})$$

固有関数は

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x & (0 < x < a) \\ 0 & (x \leq 0, a \leq x) \end{cases}$$

（b）一般解は (a) と同じく

$$\varphi(x) = B\sin Ax + C\cos Ax$$

として、$\varphi(x) = 0(|x| > a)$ である。境界条件より

$$\varphi(-a) = -B\sin Aa + C\cos Aa = 0, \qquad \varphi(a) = B\sin Aa + C\sin Aa$$

自明でない解が存在する場合は２通りあって

i. $B = 0$ の時

cos の項に対する境界条件から、奇数 n に対し $A_n = \frac{n\pi}{2a}$ より

$$\varphi_n(x) = C\cos\frac{n\pi}{2a}x$$

規格化して

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{n\pi}{2a}x$$

ii. $C = 0$ の時

sin の項に対する境界条件から、偶数 n に対し $A_n = \frac{n\pi}{2a}$ より

$$\varphi_n(x) = B\sin\frac{n\pi}{2a}x$$

規格化して

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi}{2a}x$$

エネルギー固有値は常に

$$E_n = \frac{\hbar^2 A_n^2}{2m} = \frac{h^2}{32ma^2}n^2$$

(c) $|x| < a$ においては一般解は (b) と同じである。記号のキャスティングがよくなかったので新しく

$$\varphi_n(x) = A\sin kx + B\cos kx, \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

とおき直す。$|x| > a$ において

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi = R^2\varphi, \qquad R^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{h^2}$$

で、無限遠で正則とすると

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ce^{-Rx} & (a < x) \\ De^{Rx} & (x < -a) \end{cases}$$

境界条件から

$$-A\sin ka + B\cos ka = De^{-Ra}$$
$$k(A\cos ka + B\sin ka) = DRw^{-Ra}$$
$$A\sin ka + B\cos ka = Ce^{-Ra}$$
$$k(A\cos ka - B\sin ka) = -CRe^{-Ra}$$

C,D を消去して

$$A\left(\tan ka + \frac{k}{R}\right) = 0, \qquad B\left(\tan ka - \frac{R}{k}\right) = 0$$

自明でない解は２通りあって

i. A=0 の時

$$\tan ka = \frac{R}{k}, \qquad C = D = Be^{Ra}\cos ka$$

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} B\cos k_n x & (|x| < a) \\ Be^{-R_n(x-a)}\cos k_n a & (a < x) \\ Be^{R_n(a+x)}\cos k_n a & (x < -a) \end{cases}$$

ii. B=0 の時

$$\tan ka = -\frac{R}{k}, \qquad C = -D = Ae^{Ra}\sin ka$$

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} A\sin k_n x & (|x| < a) \\ Ae^{-R_n(x-a)}\sin k_n a & (a < x) \\ Ae^{R_n(a+x)}\sin k_n a & (x < -a) \end{cases}$$

エネルギー固有値は常に

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

4. 調和振動子

(a)

(b)

正直、わかりません。a も b も。