

# 量子力学第2:第1回演習(2001/4)

担当: 星 健夫 (理工工学科)

以下の問題の解答を、A4レポート用紙(枚数自由)にまとめ、教務室内の専用ポストに提出せよ。締切: 5月7日(月)午後5時(厳守)。

## 1

Hermite 方程式

$$y'' - 2xy' + 2\nu y = 0, \quad [\nu: \text{定数}]$$

の一般解を求めたい。

(a) 原点は正則点であるので、以下の級数解を仮定して、解が求まる。実際に求めよ。また得られた級数の収束半径を求めよ。

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$$

(b) (a) では、全ての  $\nu$  に対して、解が得られた。ここで境界条件

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} y(x) e^{-\frac{1}{2}x^2} = 0$$

を課すと、 $\nu$  にいかなる制限がつくか。又その時、解はどう書けるか。(注) 得られた関数  $\phi(x) \equiv y(x)e^{-\frac{1}{2}x^2}$  は、(規格化定数を除いて) 次元調和振動子の固有関数になっている。

(c) [自由課題] コンピュータを用いて、様々な  $\nu$  に対する  $\phi(x)$  の振る舞いを、調べてみよ。Java などを用いて、グラフ表示プログラムを作るとさらに良い。

## 2

微分方程式

$$x(x-1)y'' + (3x-1)y' + y = 0$$

の一般解を求めたい。

(a) 原点は確定特異点であるので、以下の級数解を仮定して、すくなくとも一つの解が求まる。

$$y = x^\lambda \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n, \quad (a_0 \equiv 1)$$

実際に代入して、 $\lambda$  を決める方程式を導出せよ。これは重解になっている(この解を  $\lambda = \lambda_1$  とする)。

(b) 級数として、一つの解 ( $y_1(x)$  とする) が求まる。これを求めよ。また、得られた級数解の収束半径を求めよ。

(c) もう一つの独立解 ( $y_2(x)$  とする) を、以下の形を仮定して求めよ。

$$y_2(x) = y_1(x) \log x + x^{\lambda_1} \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n$$

### 3

Legendre 方程式

$$\frac{d}{dx} \left[ (1-x^2) \frac{dy}{dx} \right] + l(l+1)y = 0, \quad [l: \text{実定数}] \quad (1)$$

に対し、以下の問いに答えよ。

(a) 方程式 (1) は 2 階線形斉次常微分方程式である。原点 (正則点) での級数解を求めよ。また、収束半径が 1 であることを示せ。

(b) (a) は「級数が  $|x| < 1$  で収束する」ことを意味し、 $x = \pm 1$  での正則性は、保証されない (実際、 $x = -1, 1, \infty$  は特異点になっている)。ところが「 $l = \text{非負整数}$ 」の時は、 $x = \pm 1$  でも正則な解が得られる。これをしめし、具体的に求めよ。

(ヒント：実はこのとき、級数は  $x^l$  で切れ、 $-\infty < x < \infty$  で正則な解になっている)

(c) さらに  $y(1) = 1$  の条件を課すと、解は一意に決まる。これを「Legendre 多項式」といい、 $P_l(x)$  と書く。 $P_0(x), P_1(x), P_2(x), P_3(x), P_4(x)$  を具体的に書き下せ。

(d)  $l$  を自然数に固定し、Legendre 方程式の解を  $y(x)$  とする。 $w(x) \equiv (1-x^2)^{\frac{m}{2}} y^{(m)}(x)$  とおくと [ただし  $m$  は自然数]、 $w(x)$  は、Legendre 陪方程式

$$\frac{d}{dx} \left[ (1-x^2) \frac{dw}{dx} \right] + \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] w = 0 \quad (2)$$

を満たすことを示せ。

(ヒント：たとえば、(1) を  $m$  回微分し、 $y^{(m)}, y^{(m+1)}, y^{(m+2)}$  を  $w$  で表わせればよい)

(e) 方程式 (2) の解  $w(x)$  に対し、「 $w(x) \equiv 0$  ではなく、 $-1 \leq x \leq 1$  で正則である」ことを要求する。このとき  $(l, m)$  に対し、「 $l = \text{非負整数}, m = 0, 1, 2, 3 \dots l$ 」の制限がつくことを示せ。

(f) (e) のとき、解  $w(x)$  は、

$$w(x) = P_{lm}(x) \equiv (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$$

と書ける。 $P_{lm}(\cos \theta)$  を、 $(l, m) = (0, 0), (1, 0), (1, 1)$  に対し、具体的に書き下せ。ただし、 $0 \leq \theta < \pi$  とする。

### 4

原子単位 (atomic unit, a.u.) とは、電子の質量、Plank 定数、電子の電荷量 (の絶対値) を、1 とおくものである ( $m_e = \hbar = e = 1$ )。長さ・エネルギー・時間において、それぞれ、1 a.u. はいくらになるか。SI 単位系に換算せよ。また、どのような物理的意味をもっているか。光速は原子単位でいくらになるか。

シリコン結晶における平均原子間距離を a.u. に換算せよ。エネルギー 1 a.u. を、電子ボルト (eV) に換算せよ。以下のエネルギー量と、電子ボルト (eV) との関係調べよ：可視光のエネルギー (波長 400-800nm)、キロジュール/モル (kJ/mol)、絶対温度 (K)。