量子力学第２:第4回演習(2001/6)

担当：星　健 夫（物理工学科）

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：７月９日（月）午後５時（厳守)。（自由課題は、夏休み明けの提出でも良い)。

1

1 次元調和振動子系の固有状態 $\phi_n(x) \quad (n = 0, 1, 2...)$ は、以下のような性質をもつ（教科書などを参照せよ)。これを既知として、以下の問いに答えよ。

$$
\begin{aligned}
&H_{1\mathrm{D}}\phi_n(x) = \varepsilon_n \phi_n(x) \\
&H_{1\mathrm{D}} \equiv \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \\
&\phi_n(x) = C_n\ u_n(\alpha x) \\
&\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \\
&\langle \phi_i \,|x|\, \phi_j \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left\{\delta_{i,j+1}\sqrt{i} + \delta_{i+1,j}\sqrt{j}\right\}
\end{aligned}
$$

ここで、$\alpha \equiv \sqrt{m\omega/\hbar}$ は（１／長さ）の次元を持つ定数。$C_n \equiv \sqrt{\alpha}(\sqrt{\pi}2^n n!)^{-1/2}$ は規格化定数。関数 $u_n(\xi)$ は、Hermite 多項式 H_n を用いて $u_n(\xi) = H_n(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ と書けるが、以下では既知関数として用いて良い。

(a) 各固有状態に対するポテンシャルエネルギーを求めよ。

(b) 外場 $V \equiv \lambda x$ がかかったとする。厳密解を求めよ。摂動ではどうなるか。

(c) 外場 $V \equiv \lambda x^2$ がかかったとする。厳密解を求めよ。摂動ではどうなるか。

2

距離 $R(\gg 1)$ だけ離れた水素原子間の相互作用エネルギーを求めよう。原子核の座標を $(0, 0, 0), (0, 0, R)$ とし、それぞれの原子に属する電子の座標を、$\boldsymbol{r}_1 \equiv (x_1, y_1, z_1), \boldsymbol{r}_2 \equiv (x_2, y_2, z_2 - R)$ とする。以下では、原子単位 (atomic unit) を用いている。

(1) 相互作用ハミルトニアンは以下のように近似できることを示せ（双極子近似)。

$$V = \frac{x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2}{R^3}$$

(2) 水素原子が基底状態 (1s 状態）にあるとする。摂動により、相互作用エネルギーが R^{-6} に比例することを示せ（van der Waals 力)。

(3) (2) の摂動エネルギーは励起状態に関する無限和を含み、厳密に計算するのは不可能である。そこで、水素原子を（クーロンポテンシャル系でなく）調和振動子系と考え直す。

$$H = H_0 + V \equiv \sum_{i=1,2}\left(-\frac{1}{2}\Delta_i + \frac{\omega^2}{2}r_i^2\right) + \frac{x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2}{R^3}$$

このとき、(2) の摂動エネルギーを具体的にもとめよ（クーロンポテンシャル系と異なり、正確な値が簡単に計算できる)。

(4)(3) のハミルトニアンは、摂動を使わなくても厳密に解ける。実際に解き、H_0 の基底エネルギーと第１励起エネルギーが、V によってどのように変化したか調べよ。

[注] クーロンポテンシャル系において、(2) の摂動エネルギーを近似的に求める方法は、例えば以下を参照。シッフ「量子力学」（吉岡書房）第３版 32-7 節

3

Hermite 多項式 $H_n(x) \quad (n=0,1,2...)$ は、次式のように書ける (Rodorigues 公式)。

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \tag{1}$$

(a) 低次の n について、$H_n(x)$ を書き下せ。

(b) Hermite 多項式 $H_n(x)$ は次式のように書ける (母関数表示)。

$$g(s,x) \equiv e^{-s^2+2sx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} s^n \tag{2}$$

これは、$g(s,x)$ を s について Taylor 展開したものと考えれば良い。実際に、

$$\left.\frac{\partial^n g}{\partial s^n}\right|_{s=0}$$

を計算することにより、Rodorigues 公式 (1) を示せ。

[ヒント] 一般に、$(s-x)$ のみの関数 $f(s-x)$ に対しては、$(\partial f/\partial s) = -(\partial f/\partial x)$。

4

座標 x のみを含むハミルトニアン H に対する、固有値 (ε_n)・固有関数 $(\phi_n(x))$ を考える。すなわち、

$$H\phi_n(x) = \varepsilon_n \phi_n(x) \tag{1}$$

このハミルトニアンによる時間発展方程式を解きたい。

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \tag{2}$$

(a)$\{\phi_n(x)\}$ は完全系を張るので、任意の波動関数 $\Psi(x,t)$ は次式のように展開できる。

$$\Psi(x,t) = \sum_n a_n(t)\phi_n(x) \tag{3}$$

ここで、展開係数 $a_n(t)$ が次式で決まることを示せ。

$$a_n(t) = \int \Psi(x,t)\phi_n(x)dx \tag{4}$$

(2) より、$a_n(t)$ の時間発展はどうなるか。

(b) 以後、ハミルトニアン H として 1 次元調和振動子を考える。記法として、問題 1 で $m = \hbar = \omega = 1$ としたものを用いる。$t=0$ の波動関数として

$$\Psi(x,0) = \phi_0(x-x_0) \equiv C_0 e^{-\frac{1}{2}(x-x_0)^2} \tag{5}$$

が与えられたとする。(4) より、$a_n(0)$ が次式となることを示せ。

$$a_n(0) = \frac{x_0^n}{(2^n n!)^{1/2}} e^{-\frac{x_0^2}{4}} \tag{6}$$

[ヒント] 例えば、Hermite 関数の Rodorigues 公式（前問参照）を使って、部分積分にもちこむ。

(c) これらから、$\Psi(x,t)$ を (3) の形に書き下すことができる。これは無限和（$\sum_n$）になっているが、Hermite 関数の母関数表示（前問参照）を使うと、この和を計算することができる。これを行い、$\Psi(x,t)$ の厳密解を求めよ。さらに、次式となることを確かめよ。

$$|\Psi(x,t)|^2 = C_0^2 e^{-(x-x_0\cos t)^2} \tag{7}$$

これは、どのような意味を持つか。

(d) [自由課題] JAVA などをもちいて、以下のグラフを作成せよ：(3) の表式で（n の和を有限項で打ち切って)、波動関数 $\Psi(x,t)$ をプロットせよ。(c) で得られたの厳密解も、一緒にプロットしてみよ。