宿題８　　　　　　　　　　　　　解答例

問１エルミート多項式の循環式は次の関係式を持つ

$$\frac{d\,H_v(\xi)}{d\xi} = 2\xi\, H_v(\xi) - H_{v+1}(\xi)$$

$$H_{v+1}(\xi) - 2\xi\, H_v(\xi) + 2v\, H_{v-1}(\xi) = 0$$

振動の量子数$v = 1,\ 2,\ 3$ についてそれぞれ上の関係式を検証せよ。

下の循環式を移項して

$$2v\, H_{v-1}(\xi) = 2\xi\, H_v(\xi) - H_{v+1}(\xi)$$

となることを確かめる。この値が上の循環式の微分した値となることを確かめればよい。

v = 1 の時

$$2v\, H_{v-1}(\xi) = 2\, H_0 = 2\times 1 = 2$$

$$2\xi\, H_v(\xi) - H_{v+1}(\xi) = 2\xi\, H_1(\xi) - H_2(\xi)$$

$$= 2\xi(2\xi) - (4\xi^2 - 2) = 2$$

ともに等しい値となったので検証できた。

$$\frac{d\,H_v(\xi)}{d\xi} = \frac{d\,H_1(\xi)}{d\xi} = \frac{d\,(2\xi)}{d\xi} = 2$$

こちらも同様検証できた。

同様にして　v = 2 の時

$$2v\, H_{v-1}(\xi) = 2\times 2\, H_1 = 4\times 2\xi = 8\xi$$

$$2\xi\, H_v(\xi) - H_{v+1}(\xi) = 2\xi\, H_2(\xi) - H_3(\xi)$$

$$= 2\xi(4\xi^2 - 2) - (8\xi^3 - 12\xi) = 8\xi$$

$$\frac{d\,H_v(\xi)}{d\xi} = \frac{d\,H_2(\xi)}{d\xi} = \frac{d\,(4\xi^2 - 2)}{d\xi} = 8\xi$$

同様にして　v = 3 の時

$$2v\, H_{v-1}(\xi) = 2\times 3\, H_2 = 6\,(4\xi^2 - 2) = 24\xi^2 - 12$$

$$2\xi\, H_v(\xi) - H_{v+1}(\xi) = 2\xi\, H_2(\xi) - H_3(\xi)$$

$$= 2\xi(8\xi^3 - 12\xi) - (16\xi^4 - 48\xi^2 + 12) = 24\xi^2 - 12$$

$$\frac{d\,H_v(\xi)}{d\xi} = \frac{d\,H_3(\xi)}{d\xi} = \frac{d\,(8\xi^3 - 12\xi)}{d\xi} = 24\xi^2 - 12$$

問２．問１のエルミート多項式の循環式を用いて、$\langle\ \hat{p}_x\ \rangle = 0$ および

$\langle\ \hat{p}_x{}^2\ \rangle = \hbar\,(\mu k)^{1/2}\,(v + \frac{1}{2})$ を証明せよ。

$$\langle\ \hat{p}_x\ \rangle = (\psi_v,\ \hat{p}_x\,\psi_v) = (\psi_v,\ -i\hbar\frac{d}{dx}\psi_v) = -i\hbar\,(\psi_v,\alpha^{1/2}\ \frac{d}{d\xi}\psi_v)$$

$$= -i\hbar\alpha^{1/2}(\psi_v,\ N_v\frac{d}{d\xi}\ H_v\,e^{-\xi^2/2})$$

$$\frac{d}{d\xi}\ H_v\,e^{-\xi^2/2} = (\frac{d\,H_v}{d\xi} - \xi\,H_v)\ e^{-\xi^2/2}$$

$$= (\,2\,v\ H_{v-1} - \frac{1}{2}\,H_{v+1} - v\ H_{v-1}\,)\ e^{-\xi^2/2} = A\psi_{v-1} + B\,\psi_{v+1}$$

となるので波動関数の直交性より$< \hat{p}_x > = 0$

$$< \hat{p}_x{}^2 > = -i\hbar\alpha^{1/2}\ N_v\,(\psi_v\,,-i\hbar\,\alpha^{1/2}\ \frac{d}{d\xi}\,(\,v\ H_{v-1} - \frac{1}{2}\ H_{v+1}\,)\ e^{-\xi^2/2}\,)$$

$$= -\hbar^2\,\alpha\,(\,\psi_v\,,(\,v\ \frac{d\,H_{v-1}}{d\xi} - \frac{1}{2}\frac{d\,H_{v+1}}{d\xi} - v\,\xi\,H_{v-1} + \frac{1}{2}\,\xi\,H_{v+1}\,)\ e^{-\xi^2/2}\,)$$

$$= -\hbar^2\,\alpha\,(\,\psi_v\,,\{\,v\,2\,(v-1)\ H_{v-2} - \frac{1}{2}\ 2\,(v+1)\ H_v\ - v\,(\,\frac{1}{2}\,H_v +\ (v-1)H_{v-2}\,)$$

$$+\frac{1}{2}\,(\,\frac{1}{2}\,H_{v+2} + (v+1)\ H_v\,)\,\}\ e^{-\xi^2/2}\,)$$

直交性より内積で値を持つのは$\psi_v$のみであるから

$$= -\hbar^2\,\alpha\,\{\,-(v+1) - \frac{v}{2}\ + \frac{1}{2}\,(v+1)\,\} = \hbar^2\,\alpha\,(v+\frac{1}{2}) = \hbar\ (\mu\,k\,)^{1/2}\,(\,v+\frac{1}{2}\,)$$

問３．問２の関係式を用いて調和振動子の波動関数について

$$(\psi_v\,,\ x\,\psi_w\,) = \begin{cases} \sqrt{2\,(w+1)}\ /\ 2\,\alpha^{1/2} & v = w+1 \\ \sqrt{2\,w}\ /\ 2\,\alpha^{1/2} & v = w-1 \\ 0 & v \neq w \pm 1 \end{cases}$$

が成り立つことを示せ。

$(\psi_v\,,\ \hat{p}_x\ \psi_w\,)$ についても同様な関係を求めよ。

$$x\,\psi_w = \alpha^{-1/2}\ \xi\ N_w H_w\,e^{-\xi^2/2}$$

$$= N_w\,(\ H_{w+1} + 2\,w\ H_{w-1}\,)\,e^{-\xi^2/2}\ /\ 2\,\alpha^{1/2}$$

$$= N_w\,(\ H_{w+1}\ N_{w+1}\ /\ N_{w+1} + 2\,w\ H_{w-1}\ N_{w-1}\ /\ N_{w-1})\,e^{-\xi^2/2}\ /\ 2\,\alpha^{1/2}$$

$$= N_w\ (\ \psi_{w+1}\ /\ \ N_{w+1} + 2\ w\,\psi_{w-1}\ /\ \ N_{w-1}\,)\ /\ 2\,\alpha^{1/2}$$

$$(\psi_v\,,\ x\,\psi_w\,) = \frac{N_w}{2\,\alpha^{1/2}}\ \{\,(\ \psi_v\,,\psi_{w+1}\ /\ \ N_{w+1}) + (\ \psi_v\,,\psi_{w-1}\,2\ w\ /\ \ N_{w-1})\,\}$$

ここで調和振動子の波動関数規格直交性を使う。

$v = w+1$ の時規格化から

$$\frac{N_w}{2\,\alpha^{1/2}}\ /\ N_{w+1} = \{2^{\,w}\ \ w\,!\,\}^{-1/2}\ /\ \{2^{\,w+1}(\ w\ +1)!\,\}^{-1/2}\ /\ 2\,\alpha^{1/2}$$

$$= \{2\,(\ w\ +1)\,\}^{1/2}\ /\ 2\,\alpha^{1/2}$$

規格化定数に含まれる$(\frac{\alpha}{\pi})^{1/4}$は分母分子に共通なので省略した。以下同じ

$v = w - 1$ の時規格化から

$$\frac{2\,w\;N_w}{2\,\alpha^{1/2}} \,/\; N_{w-1} = 2\,w\,\{2^{\,w-1}(\,w-1)!\,\}^{1/2} \,/\, \{2^{\,w}\,w\,!\,\}^{1/2} \,/\, 2\,\alpha^{1/2}$$

$$= \{2\,w\,\}^{1/2} \,/\, 2\,\alpha^{1/2}$$

その他の場合直交性からゼロ

$(\psi_v\,,\;\hat{p}_x\;\psi_w)$ については

$(\psi_v\,,\;\hat{p}_x\;\psi_w) = -\,i\hbar\,(\psi_v\,, \partial\,/\,\partial x\;\psi_w) = -\,i\hbar\,\alpha^{1/2}(\psi_v\,,\;d\,/\,d\xi\,\psi_w)$

$d\,/\,d\xi\,\psi_w = N_w\,d\,/\,d\xi\,(\,H_w\,e^{-\xi^2/2}\,)$

$$= N_w\,\{\,2\,w\;H_{w-1}\,e^{-\xi^2/2} + H_w\,(-\,\xi\,)\;e^{-\xi^2/2}\,\}$$

$$= N_w\,\{\,2\,w\;H_{w-1} - w\;H_{w-1} - \frac{1}{2}\,H_{w+1}\,\}\,e^{-\xi^2/2}$$

$$= N_w\,\{\,w\,\psi_{w-1}\,/\;N_{w-1} - \frac{1}{2}\,\psi_{w+1}\,/\;N_{w-1}\,\}$$

$$(\psi_v\,,\;\hat{p}_x\;\psi_w) = -\,i\hbar\,\alpha^{1/2}\,\{\,\frac{w\;N_w}{N_{w-1}}\,(\,\psi_v\,,\psi_{w-1}\,) - \frac{N_w}{2\;N_{w+1}}\,(\,\psi_v\,,\psi_{w+1}\,)\,\}$$

$v = w + 1$ の時、規格化から

$$i\hbar\,\alpha^{1/2}\,\frac{1}{2}\;N_w\,/\;N_{w+1} = i\hbar\,\alpha^{1/2}\,\sqrt{(\,w+1\,)\,/\,2}$$

$v = w - 1$ の時、規格化から

$$-\,i\hbar\,\alpha^{1/2}N_w\;w\,/\;N_{w-1} = -\,i\hbar\,\alpha^{1/2}\,\sqrt{w\,/\,2}$$

その他の場合直交性からゼロとなる。