'21 11/8 15

エネルギー固有値 $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$

$E_n \geqq E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$: 零点エネルギー (量子ゆらぎの反映)

最低エネルギー

$\Updownarrow$

$|0\rangle$:「基底状態 (ground state)」

次に $|n+1\rangle = c_n\,\hat{a}^\dagger|n\rangle$ の c_n, d_n

$|n-1\rangle = d_n\,\hat{a}|n\rangle$ を求める

$$1 = \langle n+1|n+1\rangle = |c_n|^2\langle n|\underbrace{\hat{a}\hat{a}^\dagger}_{\hat{a}^\dagger\hat{a}+1}|n\rangle = (n+1)|c_n|^2 \quad \therefore c_n = \frac{1}{\sqrt{n+1}}$$

$$1 = \langle n-1|n-1\rangle = |d_n|^2\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|d_n|^2 \quad \therefore d_n = \frac{1}{\sqrt{n}}$$

↑ ← $e^{i\theta}$ の不定性は無視

$$\therefore \begin{cases} \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \\ \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \end{cases} \qquad \therefore |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$$

波動関数 (x表示)

$\hat{a}|0\rangle = 0$ (基底状態をまず求める)

$\langle x|\rightarrow \Downarrow$

$$\langle x|\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)|0\rangle = 0$$

x $\quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$

$$\left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)\underbrace{\langle x|0\rangle}_{\varphi_0(x)\ \text{波動関数}} = 0 \rightarrow \varphi_0(x) = A\,e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

位相因子 $= 1$ ↘ $A = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$ ← $\langle 0|0\rangle = 1$

↑ x の完全系

Aを計算して求めよ. 宿題1

($\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}$ を用いてよい)

(第n番目の)励起状態の波動関数 $\varphi_n(x)$ も同様に求まる:

$$\varphi_n(x) = \langle x|n\rangle = \langle x|\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$$

$$= N_n\left[\xi - \frac{d}{d\xi}\right]^n e^{-\frac{\xi^2}{2}} = N_n\underbrace{H_n(\xi)}_{\text{エルミート多項式}}\,e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$\xi := \beta x,\ \beta := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},\ N_n := \sqrt{\frac{\beta}{\pi^{\frac{1}{2}}n!\,2^n}}$ $\qquad H_n(\xi) := (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}$

§4 シュレーディンガー方程式の解法(空間3次元)

4.1 QM (3次元)

粒子の位置: $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3) \equiv (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$

〃 運動量: $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3) \equiv (p_x, p_y, p_z)$

(CCR) $[\hat{x}_k, \hat{p}_\ell] = i\hbar\,\delta_{k\ell}$ $\quad k, \ell \in \{1, 2, 3\}$

(x表示) $\hat{x}_k |x_k\rangle = x_k |x_\ell\rangle$

$\langle x_k | x'_\ell \rangle = \delta_{k\ell}\,\delta(x_k - x'_\ell)$

$\int dx_k |x_k\rangle\langle x_k| = \hat{1}_{\mathcal{H}_k}$

$\hat{x}_1, \hat{p}_1 \quad \hat{x}_2, \hat{p}_2 \quad \hat{x}_3, \hat{p}_3$

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3$

(Sch. eq.) $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}) |\psi(t)\rangle \in$

↓ 左から $\langle \vec{r}|$ をかける $\quad (\langle \vec{r}|\psi(t)\rangle =: \psi(\vec{r}, t))$

$\langle \vec{r}| = \langle x| \otimes \langle y| \otimes \langle z|$

$\vec{r}$表示 $\quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \underbrace{H\left(\vec{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla\right)}_{= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})} \psi(\vec{r}, t)$

ナブラ $\nabla := \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$

$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$: ラプラシアン

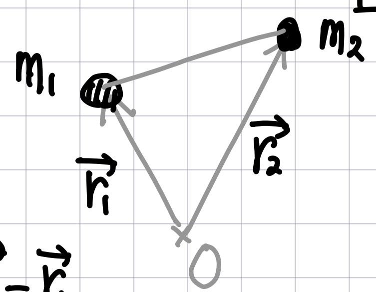
↓ $\psi(\vec{r}, t) = f(t)\varphi(\vec{r})$ (変数分離)

定常状態
$$\begin{cases} f(t) = a\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}), \quad E \in \mathbb{R} \\ |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |a|^2 |\varphi(\vec{r})|^2 \end{cases}$$

E ↑ エネルギー固有値

4.2 2体問題

$\vec{p}_i := m_i \dot{\vec{r}}_i$ ← 時間微分



ハミルトニアン $H = \frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m_2} + V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)$

重心座標 $\vec{R} := \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2}$，相対座標 $\vec{r} := \vec{r}_2 - \vec{r}_1$

全質量 $M := m_1 + m_2$，換算質量 $\mu := \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$ $\left(\Leftrightarrow \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)$

$\vec{P} := M\dot{\vec{R}}$，$\vec{p} := \mu\dot{\vec{r}}$，$r := |\vec{r}|$ $\quad m_1 \gg m_2 \Rightarrow \mu \fallingdotseq m_2$

$$H = \frac{1}{2M}\vec{P}^2 + \frac{1}{2\mu}\vec{p}^2 + V(r)$$ ← 宿題2 これを示せ

量子化：$[\hat{x}^{(1)}_k, \hat{p}^{(1)}_l] = [\hat{x}^{(2)}_k, \hat{p}^{(2)}_l] = i\hbar\delta_{kl}$ $\left(\Rightarrow \underset{\text{重心}}{[\hat{X}_k, \hat{P}_l]} = \underset{\text{相対}}{[\hat{x}_k, \hat{p}_l]} = i\hbar\delta_{kl}\right)$

Sch. eq.
(位置表示)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{R},\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} + V(r)\right]\Psi(\vec{R},\vec{r},t)$$

$$\Psi(\vec{R},\vec{r},t) = e^{i\frac{\vec{P}'\cdot\vec{R}}{\hbar} - i\frac{\vec{P}'^2}{2M\hbar}t}\psi(\vec{r},t)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} + V(r)\right]\psi(\vec{r},t)$$ 1粒子の eq. に帰着

4.3 角運動量と極座標系

定義 4.1 軌道角運動量 op. (エルミート)

$\hat{\vec{L}} := \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$ $\quad$ (i.e. $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \cdots$)

同じ添字
(ϵ_{122} などは 0)

$\epsilon_{jkl} := \mathrm{sgn}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ j & k & l\end{pmatrix}$

エディントンのイプシロン
完全反対称テンソル

命題 4.2 (i) $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\,\epsilon_{jkl}L_l$ $\quad$ (i.e. $[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = i\hbar\hat{L}_3, \cdots$)

l について和がとられている
(アインシュタインの規約)

(ii) $[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_k] = 0$，$\forall k$

$a_i b_i := \sum_i a_i b_i$

命題4.3 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} + V(r)$ の極座標表示:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\sin\phi \\ y = r\sin\theta\cos\phi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$$

∵ レポート

ここで $\vec{L}^2$ の固有値方程式を

$$\vec{L}^2 Y(\theta,\phi) = \hbar^2\lambda Y(\theta,\phi) \quad \cdots ①$$

と書き、$\varphi(\vec{r}) = R(r)Y(\theta,\phi)$ と変数分離:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2\lambda}{2\mu r^2} + V(r)\right]u(r) = E\,u(r) \quad \cdots ② \quad \left(u(r) := rR(r)\right)$$

規格化条件: $\displaystyle\int_0^\infty \underbrace{|R(r)|^2 r^2}_{|u(r)|^2} dr \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} |Y(\theta,\phi)|^2 d\phi = 1$

b.c. $\begin{cases} u(r\to\infty) = 0 \\ u(0) = 0 \quad \left(V(r) \sim \frac{1}{r} \text{ などの下}\right) \end{cases}$ (詳しくはレポート)