

質量 m の粒子が次のような時間に依存しないシュレーディンガー方程式に従うとする。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \cdot \psi(x) = E \psi(x). \quad (E, \omega : \text{正定数}) \quad (1)$$

1. 位置座標 x とエネルギー E を次のように変換 (無次元化) して, このシュレーディンガー方程式を新しい変数 ξ についての微分方程式に書き直せ。

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x \equiv \alpha x \equiv \xi, \quad \frac{2E}{\hbar\omega} \equiv \lambda. \quad (2)$$

その際, $\psi(x) = \psi(\xi/\alpha) \equiv \phi(\xi)$ で定義される, 新しい変数 ξ の関数 $\phi(\xi)$ を用いよ。

2. 束縛状態に対する無限遠方における境界条件, $|x| \rightarrow \infty$ ($|\xi| \rightarrow \infty$) のとき, $|\psi| \rightarrow 0$ ($|\phi| \rightarrow 0$) を満たすような, 前問で得られた微分方程式の近似的な解 $\phi(\xi)_{\text{approx}}$ を求めよ。
3. 前々問で得られた微分方程式の厳密な解を $\phi(\xi) = f(\xi) \cdot \phi(\xi)_{\text{approx}}$ とおいて, この微分方程式に代入し, 未知の関数 $f(\xi)$ についての微分方程式を求めよ。
4. $f(\xi) \equiv c_0$ (c_0 : 定数) として, 定数 λ, E を求めよ。

(解答例)

1. 式 (1) の両辺に $\frac{2}{\hbar\omega}$ をかけ, 記号 α, λ を用いて書き直すと

$$-\frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \psi = \frac{2E}{\hbar\omega} \psi \rightarrow -\frac{1}{\alpha^2} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha^2 x^2 \psi = \lambda \psi \quad (3)$$

となる。合成関数の微分公式を用いて, x についての 1 次微分, 2 次微分を計算する。

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{d\phi(\xi)}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \alpha \frac{d\phi(\xi)}{d\xi}, \quad (4)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{d}{d\xi} \left(\alpha \frac{d\phi(\xi)}{d\xi} \right) \frac{d\xi}{dx} = \alpha^2 \frac{d^2\phi(\xi)}{d\xi^2}. \quad (5)$$

式 (4) と (5) を式 (3) に代入すると, 次式が得られる。

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\phi = 0. \quad (6)$$

2. $|x| \rightarrow \infty$ ($|\xi| \rightarrow \infty$) のときは, ξ^2 に比べて, 定数 λ は無視できるので, 式 (6) は次のようになる。

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} \approx \xi^2 \cdot \phi. \quad (7)$$

変数 ξ で微分して, 元の関数に比例するのは, 指数関数であること, 2 階微分して, 変数の 2 乗に比例する項が現れ, その符号が同じになる関数の候補としては $\phi_{\text{approx}} = e^{-\xi^2/2}$

が考えられる。実際，この関数を微分すると

$$\frac{de^{-\xi^2/2}}{d\xi} = -\xi \cdot \phi_{\text{approx}}, \quad (8)$$

$$\rightarrow \frac{d^2e^{-\xi^2/2}}{d\xi^2} = \xi^2 \cdot \phi_{\text{approx}} - \phi_{\text{approx}} \quad (9)$$

となり， $|\xi| \rightarrow \infty$ の極限で， $\xi^2 \cdot \phi_{\text{approx}}$ に比べて， ϕ_{approx} は無視できる。このとき， $\phi_{\text{approx}} = e^{-\xi^2/2}$ は式 (7) を満たすので，題意の近似的な解が得られた。

3.

$$\frac{d\phi}{d\xi} = \frac{df}{d\xi} \cdot e^{-\xi^2/2} - \xi \cdot f \cdot e^{-\xi^2/2}, \quad (10)$$

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} = \frac{d^2f}{d\xi^2} \cdot e^{-\xi^2/2} - 2\xi \frac{df}{d\xi} \cdot e^{-\xi^2/2} + (\xi^2 - 1)f \cdot e^{-\xi^2/2}. \quad (11)$$

式 (10), (11) を式 (7) に代入すると，関数 $f(\xi)$ が満たすべき微分方程式

$$\frac{d^2f}{d\xi^2} - 2\xi \frac{df}{d\xi} + (\lambda - 1)f = 0 \quad (12)$$

が得られる。

4. 題意より，関数形 $f(\xi) = c_0$ を式 (12) に代入すると

$$(\lambda - 1)c_0 = 0 \quad (13)$$

が得られる。題意より， $c_0 \neq 0$ と考えてよいから， $\lambda = 1$ ， $E = \hbar\omega/2$ が得られる。(このエネルギーは調和振動子ポテンシャルの下での量子的粒子の最低エネルギーである。)