# 演習 3.　一次元非調和振動子の固有値と固有関数

(1) 直接対角化の方法

a) ここでは以下のようなポテンシャルに 4 次の項がある非調和振動子について考える。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{k}{2}x^2 + \frac{g}{4}x^4 \tag{1}$$

座標およびエネルギーを $\xi = \alpha x$, $H = \varepsilon \tilde{H}$ で適当な $\alpha, \varepsilon$ を用いて変換すると、以下のように書けることを示せ。

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}\Big(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\Big) + \frac{g}{4\varepsilon\alpha^4}\xi^4 \tag{2}$$

さらに、生成演算子 $b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\frac{d}{d\xi} + \xi)$ および消滅演算子 $b = \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{d}{d\xi} + \xi)$ を用いると

$$\tilde{H} = b^\dagger b + \frac{1}{2} + \tilde{g}(b^\dagger + b)^4 \qquad\qquad (\tilde{g} = \frac{g}{16\varepsilon\alpha^4}) \tag{3}$$

と書けることを示せ。

b) 調和振動子の固有関数 $|n\rangle$　($(b^\dagger b + \frac{1}{2})|n\rangle = (n + \frac{1}{2})|n\rangle$) を基底として用いると $\tilde{H}$ はどのような行列になるか？

c) 有限個の基底 $|n\rangle$ ($n = 0 \dots N$) について $\tilde{H}$ を対角化してみよ。$N \sim 50$ とし、基底状態および下から 10 個の励起状態のエネルギーをいくつかの $\tilde{g}$ について 2 次までの摂動エネルギーと比較せよ。また、$N$ を変えることで有限個の基底に限ったことによる誤差を調べよ。

(2) シュレーディンガー方程式を差分法で解く

a) (2) 式より、$\tilde{H}\varphi(\xi) = E\varphi(\xi)$ を満たすような波動関数 $\varphi(\xi)$ は微分方程式

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\varphi(\xi) = (\xi^2 + 8\tilde{g}\xi^4 - 2E)\varphi(\xi) \tag{4}$$

をみたす。これを用いて、$\varphi(\xi)$ が $\xi = 0$ の近傍で

$$\begin{aligned} \varphi(\xi) &= \varphi(0)\big(1 - E\xi^2 + (\frac{E^2}{6} + \frac{1}{12})\xi^4\big) \\ &+ \varphi'(0)\big(\xi - \frac{E}{3}\xi^3 + (\frac{E^2}{30} + \frac{1}{20})\xi^5\big) + O(\xi^6) \end{aligned} \tag{5}$$

の形に展開できることを示せ。

b) ヌメロフの方法を使って固有関数を求めよう。それには以下のような手順で行うと良い。

1) 固有値に近い $E$ を選ぶ。
2) 初期値を決める。ポテンシャルは原点について対称であるから、固有関数は対称か反対称である。よって、$\xi = 0$ からヌメロフ法を始めるとして、例えば対称な波動関数の場合、$\varphi(0) = 1$, $\varphi'(0) = 0$ として (5) 式使い、初期値 $\varphi(h)$ を決めて良い。(反対称の場合、$\varphi(0) = 0$, $\varphi'(0) = 1$ とするとよい。)

3) ヌメロフ法を実行する。

4) 十分大きい $a$ に対し、$\varphi(a) = 0$ となるような $E$ が見つかるまで $E$ を変えて 1) から繰り返す。

この方法で $\tilde{g} = 0$ の場合と $\tilde{g} \neq 0$ の場合で基底状態と下から 10 個の励起状態の固有関数を求めてみよ。

c) 余裕のある人は非対称なポテンシャル $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{f}{3}x^3$ の場合や二重井戸 $V(x) = -kx^2 + x^4 \ \ (k > 0)$ について、あるいは三次元の調和振動子、水素原子の軌道などについても試みよ。