量子力学 II 演習問題 12

2019 年 7 月 9 日

1　調和振動子の WKB 近似

1 次元ポテンシャル $V(x)$ の下で運動している質量 m の粒子の運動を WKB 近似を用いて考える。座標表示を取り、ハミルトニアンの固有値方程式を

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi_E(x)=E\psi_E(x) \tag{1.1}$$

とする。

1.1

$\psi_E(x)=e^{i\frac{S_E(x)}{\hbar}}$ としたとき、(1.1) から $S_E(x)$ の満たすべき微分方程式を求めよ。

1.2

前問で導入した関数 $S_E(x)$ を $\hbar$ の冪で

$$S_E(x)=S_E^{(0)}+\frac{\hbar}{i}S_E^{(1)}+\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2S_E^{(2)}+\ldots \tag{1.2}$$

と展開する。このとき、$S_E^{(0)}$ と $S_E^{(1)}$ の満たすべき微分方程式を導け。また、第一項に比べて第二項が小さくなるためにポテンシャル $V(x)$ が満たすべき条件を求めよ。

以下では、具体的に調和振動子 $V(x)=\frac{m\omega^2}{2}x^2$ を考える。

1.3

与えられたエネルギー E に対して $E = V(x)$ となる転回点 $x = a, b$ $(a < b)$ を求めよ。

1.4

条件 $\lim_{x\to\pm\infty} \psi_E(x) = 0$ の下で、領域 $x < a$、$a < x < b$、$b < x$ における固有関数 ψ_E の一般解を求めよ。ここではまだ領域間の接続は行わなくて良い。

1.5

領域間の接続を行うため、ポテンシャル $V(x)$ を転回点付近で線形近似し

$$V(x) - E = +c_1(x-a) + c_2(x-a)^2 \simeq c_0 + c_1(x-a) \tag{1.3}$$

などとする。第二項と第三項の絶対値が等しくなるときの $|x-a|$ の値を L とする。L を m, ω, E を用いて表せ。このとき、$|x-a| << L$ の範囲で線形近似が有効になる。

1.6

線形近似と WKB 近似がともに有効である領域が存在するために E が満たすべき条件を ω を用いて表せ。また、線形近似と WKB 近似がともに有効である領域 I を求めよ。

1.7

転回点 a 周りの前問で求めた領域でポテンシャル $V(x)$ を線形近似する。得られた固有関数を $|r-a| \in I$ となる定数 $r > 0$ について $a - x = re^{i\theta}$ と解析接続し、$\theta = 0$ から $\theta = \pm\pi$ と変化させることで領域 $x < a$ と領域 $a < x < b$ における固有関数を接続せよ。

1.8

同様に、$x - b = re^{i\theta}$ とおいて領域 $a < x < b$ と領域 $b < x$ における固有関数を接続し、$a < x < b$ における波動関数の一価性からエネルギー固有値 E が満たすべき条件（ボーア・ゾンマーフェルトの量子化規則）を導け。それが調和振動子の厳密なエネルギースペ

クトルに一致することを確かめよ。[*1]

1.9

第 n 励起状態のエネルギー固有値を E_n とし、対応する固有関数を $\psi_n(x)$ と書き直す。$S^{(0)}_{E_n}$、$S^{(1)}_{E_n}$ を計算し、$\psi_n(x)$ を WKB 近似の範囲内で求めよ。ここで、関数

$$\eta(z) \coloneqq 2\int_{-1}^{z} \sqrt{|z^2-1|}\,\mathrm{d}z \tag{1.4}$$

$$= \begin{cases} z\sqrt{z^2-1} - \log\left(-z+\sqrt{z^2-1}\right) & (z < -1 \text{ のとき }) \\ z\sqrt{1-z^2} + \arcsin(z) + \frac{\pi}{2} & (-1 < z < 1 \text{ のとき }) \\ z\sqrt{z^2-1} + \log\left(z+\sqrt{z^2-1}\right) + \pi & (z > 1 \text{ のとき }) \end{cases} \tag{1.5}$$

を用いて良い。

WKB 近似は n が大きくなるほど良い近似になる。上記で求めた WKB 近似による調和振動子の固有関数と厳密解を $n = 0, 5, 12, 25$ の場合に比較したのが次の図である。

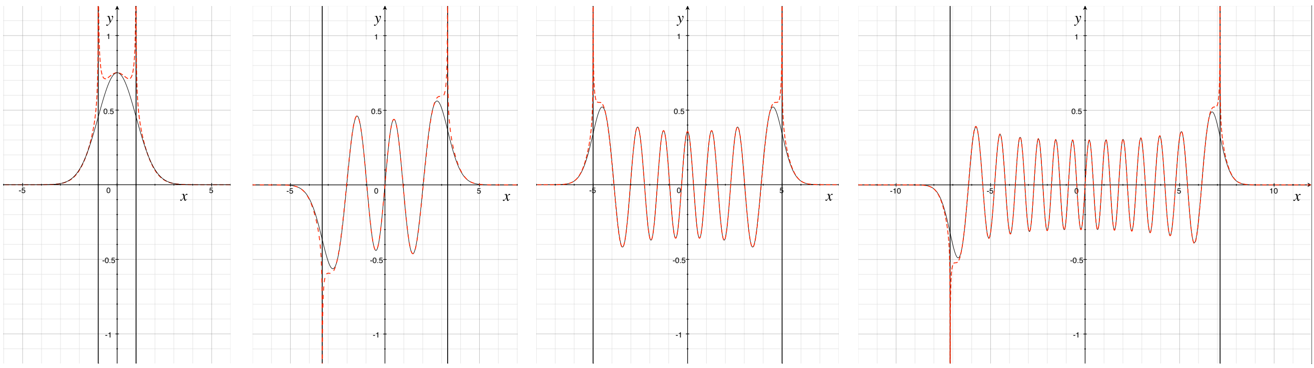

図 1　左から $n = 0, 5, 12, 25$ のとき。赤点線が WKB 近似による固有関数、黒実線は厳密解である。横軸は無次元化した位置 $x\sqrt{m\omega/\hbar}$ である。

[*1] 演習問題 11 大問 2 のように、一般にはボーア・ゾンマーフェルトの量子化規則により得られるエネルギースペクトルは近似的なものである。