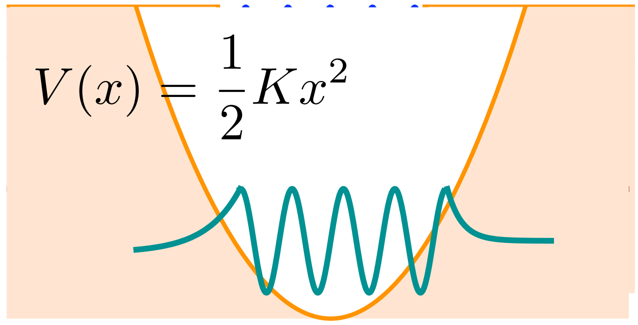
一次元調和振動子

一次元調和振動子のエネルギーと波動関数

ポテンシャルと束縛状態



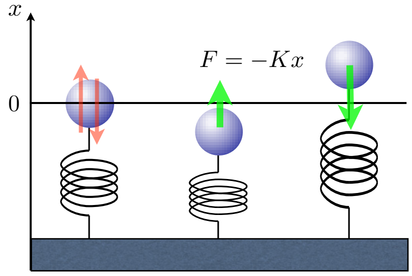
$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2$$

一次元調和振動子の運動状態

調和振動子

K ：力定数（バネ定数）

m ：質量

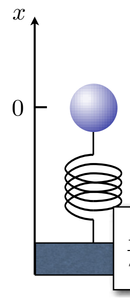


調和振動子の古典力学

$F = -Kx$: 力

K ：力定数（バネ定数）

m ：質量



ポテンシャルエネルギー

$$F = -\frac{\partial}{\partial x}V(x) \ \Rightarrow V(x) = \frac{1}{2}Kx^2$$

運動方程式

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}x(t) = -Kx(t)$$

$\frac{K}{m} = \omega^2$ とおくと $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}x(t) + \omega^2 x(t) = 0$

調和振動子の古典力学的運動

初期条件：時刻0でAの位置に静止

$$x(0) = A,\ \frac{d}{dx}x(0) = 0 \quad \Rightarrow x(t) = A\cos\omega t$$

振幅A, 角振動数ω の単振動

- 運動量 $p(t) = m\frac{d}{dt}x(t) = -m\omega A\sin\omega t$
- 運動エネルギー $T = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2}m\omega^2A^2\sin^2\omega t$
- ポテンシャルエネルギー

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2A^2\cos^2\omega t \quad (K = m\omega^2)$$

- 全エネルギー

$$E = T + V = \frac{1}{2}m\omega^2A^2 \quad \text{(エネルギー保存則)}$$

調和振動子のHamiltonian

- Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

- シュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\varphi(x) = E\varphi(x)$$

- 境界条件

$$\lim_{x\to\pm\infty}\varphi(x) = 0$$

シュレディンガー方程式の解

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\varphi(x)=E\varphi(x)$$

$x=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi,\ E=\frac{1}{2}\hbar\omega\lambda$ とおくと

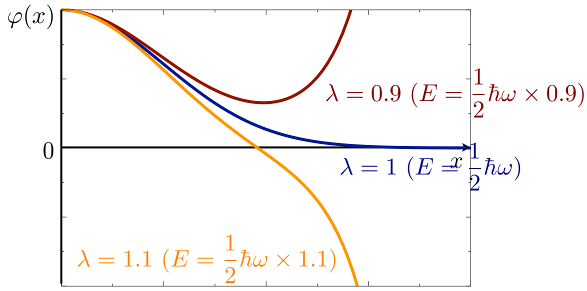
$$\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\varphi(\xi)+(\lambda-\xi^2)\varphi(\xi)=0$$

$\varphi(\xi)=u(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ とおくと

$$\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}u(\xi)-2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}u(\xi)+(\lambda-1)u(\xi)=0$$

エネルギー固有値と波動関数

$\varphi(0)=1,\ \frac{\partial\varphi}{\partial x}(0)=0$ を満たす数値解



エネルギー固有値

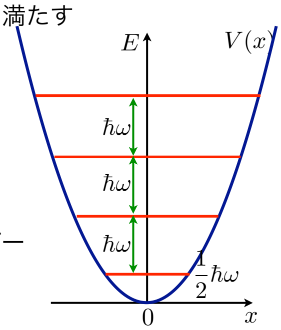
$\lambda=2n+1\quad(n=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$ の場合だけ

境界条件 $\lim_{x\to\pm\infty}\varphi(x)=0$ を満たす

$$E=\frac{1}{2}\hbar\omega\lambda=\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n\right)$$

$(n=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$

$\frac{1}{2}\hbar\omega$：零点振動のエネルギー
(零点エネルギー)



固有関数

$\lambda=2n+1\quad(n=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$

$$\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}u(\xi)-2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}u(\xi)+(\lambda-1)u(\xi)=0$$

$$\Rightarrow\ \frac{\partial^2}{\partial\xi^2}u(\xi)-2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}u(\xi)+2nu(\xi)=0$$

この方程式の解はエルミートの多項式

$$H_n(\xi)\quad(n=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$$

で与えられる

$$\boxed{\varphi_n(x)=C_ne^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)}$$

C_n は規格化条件できめられる

エルミートの多項式

$\frac{\partial^2}{\partial z^2}H_n(z)-2z\frac{\partial}{\partial z}H_n(z)+2nH_n(z)=0$ を満たす次の多項式

$$H_0(z)=1$$
$$H_1(z)=2z$$
$$H_2(z)=4z^2-2$$
$$H_3(z)=8z^3-12z$$
$$H_4(z)=16z^4-48z^2+12$$
$$\vdots$$
$$H_n(z)=(-1)^ne^{z^2}\frac{d^n}{dz^n}e^{-z^2}$$

nが偶数ならば偶関数、
奇数ならば奇関数になる

エルミートの多項式の性質

- 母関数

$$S(z,t)\equiv e^{z^2-(t-z)^2}=e^{-t^2+2zt}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(z)}{n!}t^n$$

- 漸化式

$$\frac{d}{dz}H_n(z)=2nH_{n-1}(z)$$

$$H_{n+1}(z)=2zH_n(z)-2nH_{n-1}(z)$$

クロネッカのデルタ
$$\delta_{n,m}=\begin{cases}1 & (n=m)\\ 0 & n\neq m\end{cases}$$

- 直交条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-z^2}H_n(z)H_m(z)dz=2^nn!\sqrt{\pi}\delta_{n,m}$$

一次元調和振動子の解のまとめ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_n(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\varphi_n(x)=E_n\varphi_n(x)$$

$$E_n=\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n\right)\qquad (n=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$$

$$\varphi_n(x)=C_ne^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)$$

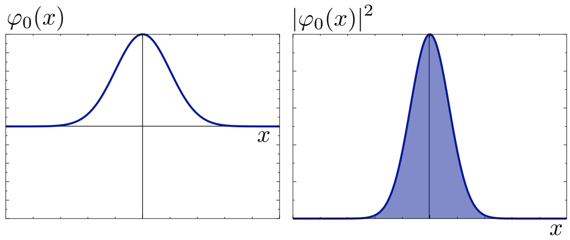
$H_n(z)$ はn次のエルミートの多項式

$$C_n=\frac{1}{\sqrt{2^nn!\sqrt{\pi}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}}$$

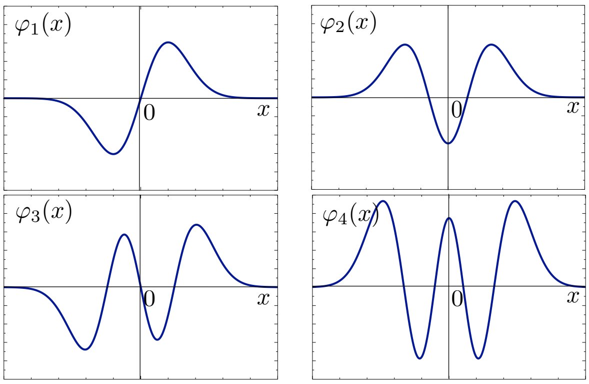
基底状態

$$\varphi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

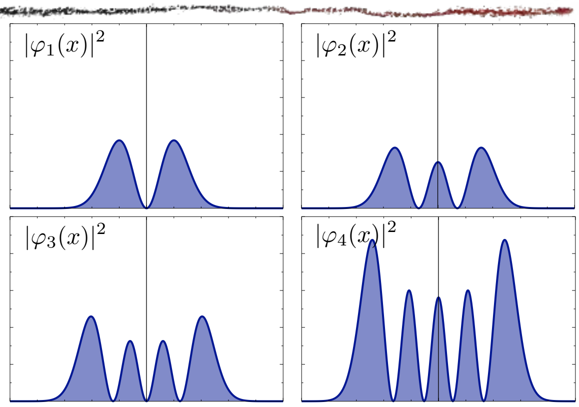
$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$$



励起状態の波動関数



励起状態の確率密度



物理量の平均値

$$\langle n|x|n'\rangle$$

$$\equiv\int_{-\infty}^{\infty}C_ne^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)xC_{n'}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}H_{n'}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)dx$$

$$=C_nC_{n'}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}xH_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)H_{n'}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)dx$$

$$=\begin{cases}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{\frac{n}{2}} & (n'=n-1)\\ \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{\frac{n+1}{2}} & (n'=n+1)\\ 0 & (\text{otherwize})\end{cases}$$

$$=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{n',n-1}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{n',n+1}\right)$$

物理量の平均値

$$\langle x\rangle=\langle n|x|n\rangle=0$$

$$\langle x^2\rangle=\langle n|x^2|n\rangle=\frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{1}{2}+n\right)$$

$$\langle p\rangle=\langle n|p|n\rangle=0$$

$$\langle p^2\rangle=\langle n|p^2|n\rangle=m\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n\right)$$

$$\Delta x\Delta p=\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2}\sqrt{\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2}$$

$$=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{1}{2}+n\right)}\sqrt{m\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n\right)}=\hbar\left(\frac{1}{2}+n\right)$$

物理量の誤差（標準偏差）

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

- ハイゼンベルグの不確定性関係

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar \qquad \left(\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}\right)$$

$$\Delta p_y \Delta y \geq \hbar$$

$$\Delta p_z \Delta z \geq \hbar$$

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \qquad \left(\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}\right)$$

物理量の平均値

$$\boxed{\begin{aligned}\langle x^2 \rangle &= \frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{1}{2}+n\right) \\ \langle p^2 \rangle &= m\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n\right)\end{aligned}}$$

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle$$

$$T = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{1}{2m} m\hbar\omega \left(\frac{1}{2}+n\right) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{1}{2}+n\right)$$

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{1}{2}+n\right) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{1}{2}+n\right)$$

$$E = \hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n\right) \qquad T = V = \frac{1}{2}E$$

金属(Ni)表面上の水素原子の振動

$$m = 1.67 \times 10^{-27}[\mathrm{kg}]$$

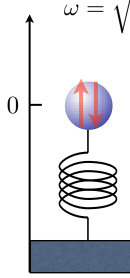
$$K = 86.9\ [\mathrm{N/m}]$$

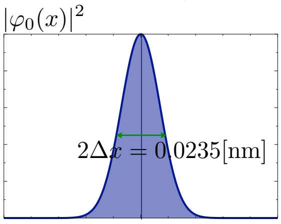
$$\omega = \sqrt{\frac{K}{m}} = 2.28 \times 10^{14}[\mathrm{Hz}]$$

$$\hbar\omega = 2.44 \times 10^{-20}[\mathrm{J}] = 150[\mathrm{meV}]$$

$$\frac{1}{2}\hbar\omega = 75[\mathrm{meV}]$$

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = 1.66 \times 10^{-11}[\mathrm{m}] = 0.0166[\mathrm{nm}]$$





一次元調和振動子の比熱

比熱

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T}\langle E \rangle_T$$

温度を 1 度上げるのに必要なエネルギー

$\langle E \rangle_T$ ：エネルギーの熱平均値

T ：温度

熱平均値

$\langle A \rangle_T = AP(E)$ の全ての可能な状態についての和 or 積分

$P(E) \propto e^{-\frac{E}{k_B T}}$: エネルギー E の状態が観測される確率

$P(E)$ の全ての可能な状態についての和 or 積分は1

$k_{\mathrm{B}} = 1.38 \times 10^{-23}$ [J/K] = 0.0863 [meV/K]: ボルツマン定数

エネルギーの熱平均値

$P(E) \propto e^{-\frac{E}{k_B T}}$ $\qquad \beta = \dfrac{1}{k_{\mathrm{B}}T}$

全ての可能な状態についての和 or 積分

$E = E(p,q)\ (-\infty \leq p, q \leq \infty)$ のような連続関数

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{E(p,q)}{k_B T}} dpdq = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta E(p,q)} dpdq$$

$$\langle E \rangle_T = \frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{\infty} E(p,q) e^{-\beta E(p,q)} dpdq$$

$E = E_n (n = 0,\ 1,\ 2,\ 3, \cdots)$ のようなとびとびの値

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \qquad \langle E \rangle_T = \frac{1}{Z}\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-\beta E_n}$$

エネルギーの熱平均値

$$\langle E \rangle_T = \frac{1}{Z}\int_{\mathrm{all}} E e^{-\beta E} d(\mathrm{all})$$

$$Z = \int_{\mathrm{all}} e^{-\beta E} d(\mathrm{all})$$

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \int_{\mathrm{all}} (-E) e^{-\beta E} d(\mathrm{all}) = -Z\langle E \rangle_T$$

$$\langle E \rangle_T = \frac{1}{Z}\sum_{\mathrm{all}} E e^{-\beta E}$$

$$Z = \sum_{\mathrm{all}} e^{-\beta E}$$

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \sum_{\mathrm{all}} (-E) e^{-\beta E} = -Z\langle E \rangle_T$$

$$\langle E \rangle_T = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta}\ln Z$$

$$\boxed{\langle E \rangle_T = -\frac{\partial}{\partial \beta}\ln Z}$$

1次元調和振動子の比熱(古典力学)

$$E = E(p,x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta(\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2)}dpdx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta}{2m}p^2}dp \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta m\omega^2}{2}x^2}dx$$

$$= \sqrt{\frac{2m}{\beta}\pi}\sqrt{\frac{2}{\beta m\omega^2}\pi}$$

$$= \frac{2\pi}{\omega}\frac{1}{\beta}$$

$$\langle E\rangle_T = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\frac{2\pi}{\omega}\frac{1}{\beta}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\ln\frac{2\pi}{\omega} + \ln\frac{1}{\beta}\right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial\beta}\ln\beta = \frac{1}{\beta} = k_{\mathrm{B}}T$$

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T}\langle E\rangle_T = k_{\mathrm{B}}$$

1次元調和振動子の比熱(量子力学)

$$E_n = \hbar\omega(\tfrac{1}{2}+n)$$

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}e^{-\beta\hbar\omega n}$$

$$= \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$\langle E\rangle_T = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$= \frac{\partial}{\partial\beta}(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega) + \frac{\partial}{\partial\beta}\ln(1-e^{-\beta\hbar\omega})$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T}\langle E\rangle_T = \hbar\omega\frac{\partial}{\partial T}\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1} = \hbar\omega\frac{\partial\beta}{\partial T}\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$

1次元調和振動子の比熱(量子力学)

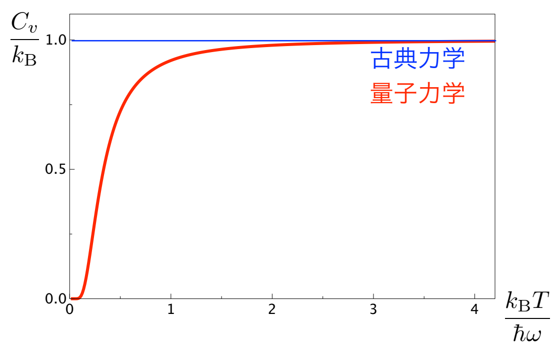
$$C_v = \frac{\partial}{\partial T}\langle E\rangle_T = \hbar\omega\frac{\partial\beta}{\partial T}\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1} \qquad \beta = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}$$

$$= \hbar\omega\left(-\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T^2}\right)\left(-\frac{\hbar\omega e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega}-1)^2}\right)$$

$$= k_{\mathrm{B}}\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}\right)^2\frac{e^{\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}}}{(e^{\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}}-1)^2}$$

$$\longrightarrow \begin{cases} k_{\mathrm{B}} & (k_{\mathrm{B}}T >> \hbar\omega) \\ k_{\mathrm{B}}\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}\right)^2 e^{-\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}} & (k_{\mathrm{B}}T << \hbar\omega) \end{cases}$$

一次元調和振動子の比熱



反射率

$$|A|^2 = \frac{\sinh^2\alpha d}{\sinh^2\alpha d + \sin^2 2\delta_k}$$

透過率

$$|D|^2 = \frac{\sin^2 2\delta_k}{\sinh^2\alpha d + \sin^2 2\delta_k}$$

$$\tan\delta_k = \frac{\sin\delta_k}{\cos\delta_k} = \sqrt{\frac{V_0-E}{E}}$$

$$\tan^2\delta_k = \frac{\sin^2\delta_k}{\cos^2\delta_k} = \frac{1-\cos^2\delta_k}{\cos^2\delta_k} = \frac{1}{\cos^2\delta_k} - 1 = \frac{V_0-E}{E}$$

$$\cos^2\delta_k = \frac{1}{1+\tan^2\delta_k} = \frac{1}{1+\frac{V_0-E}{E}} = \frac{E}{V_0}$$

$$\sin^2 2\delta_k = 4\sin^2\delta_k\cos^2\delta_k = 4\left(1-\cos^2\delta_k\right)\cos^2\delta = \frac{4E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)$$

$$\alpha d = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}d\sqrt{V_0-E}$$

$$= 5.14\times d\,[\mathrm{nm}]\times\sqrt{(V_0-E)}\,[\mathrm{eV}]$$

$\hbar = 1.05\times10^{-34}$ [Js]
$e = 1.60\times10^{-19}$ [As]
$m = 9.11\times10^{-31}$ [kg]

$$\text{反射率} = \frac{\sinh^2\alpha d}{\sinh^2\alpha d + \sin^2 2\delta_k}$$

$$\text{透過率} = \frac{\sin^2 2\delta_k}{\sinh^2\alpha d + \sin^2 2\delta_k}$$

$V_0 = 5.0$[eV]

$$\sin^2 2\delta_k = \frac{4E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)$$

$$\alpha d = 5.14\times d[\mathrm{nm}]\times\sqrt{(V_0-E)[\mathrm{eV}]}$$

d	E[eV]	αd	$\sinh^2\alpha d$	$\sin^2 2\delta_k$	反射率	透過率
0.2	1	2.06	14.80	0.64	0.959	0.041
0.2	2	1.78	8.32	0.96	0.897	0.103
0.2	3	1.45	4.10	0.96	0.810	0.190
0.2	4	1.03	1.49	0.64	0.699	0.301
0.1	3	0.73	0.63	0.96	0.396	0.604
0.2	3	1.45	4.10	0.96	0.810	0.190
0.3	3	2.18	19.13	0.96	0.952	0.048
0.4	3	2.91	83.55	0.96	0.989	0.011
0.5	3	3.64	359.39	0.96	0.997	0.003