試験を突破する量子力学

1次元シュレディンガー方程式を中心に

総合図書館LS
(理学研究科D2)

このセミナーでは

目標

- シュレディンガー方程式の意味が分かる
- (試験に頻出の) 1次元ポテンシャル問題が解ける

物理的なイメージや感覚をつかむのも重要ですが、

定番問題を解く為の方法論に重点を当てます

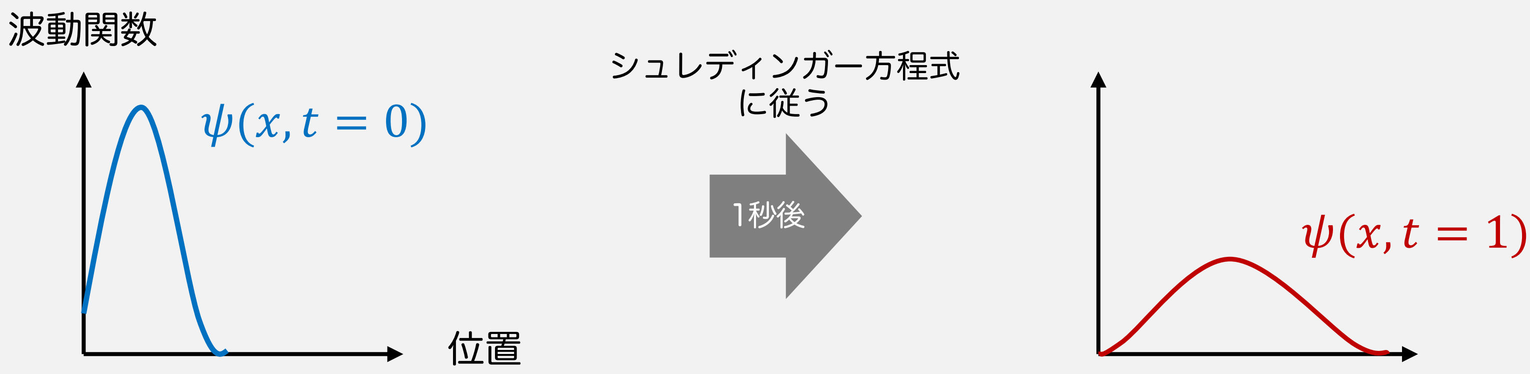
第一部

- シュレディンガー方程式の意味が分かる
- (試験に頻出の) 1次元ポテンシャル問題が解ける

ことはじめ

量子力学の原理（の一部をラフに言えば）

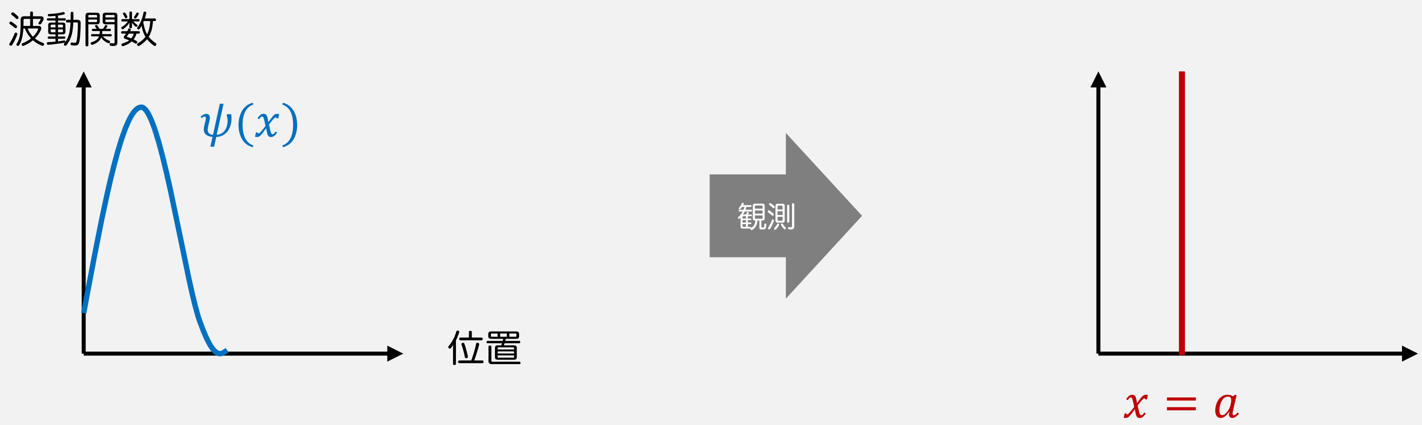
- 粒子の状態は確率の波（波動関数）であり、重ね合わせができる
- 波動関数の絶対値の2乗は、粒子の存在する確率密度になる
- 波動関数の時間変化は、シュレディンガー方程式によって決まる



ことはじめ

量子力学の原理（の一部をラフに言えば）

- 観測を行うと、波動関数は一点に収縮する
- 位置や運動量などの物理量は、エルミート演算子で表される



この過程はシュレディンガー方程式では予言されず、
単なる確率で決まる

シュレディンガー方程式

シュレディンガー方程式（一次元）

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\psi(x,t)$$

$\hbar$は換算プランク<u>定数</u>

ハミルトニアン

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)$$

cf.) 解析力学でのハミルトニアン（運動エネルギー＋ポテンシャルエネルギー）

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$$

$p \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$の置き換えをしたものと一致

ハミルトニアンは粒子のエネルギーに対応する微分演算子

シュレディンガー方程式

シュレディンガー方程式（一次元）

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\psi(x,t)$$

$\hbar$は換算プランク定数

ハミルトニアン $$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)$$

注目する系の情報はポテンシャルに含まれる

ex.) 自由粒子 $V(x,t) = 0$

調和振動子として振る舞う粒子 $V(x,t) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2$

大きさaの箱の中の自由粒子 $$V(x,t) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq a) \\ \infty & (\mathrm{others}) \end{cases}$$

方程式を解くとはどういうことか

シュレディンガー方程式（一次元）

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\psi(x,t) \qquad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)$$

方程式を解く $\Longleftrightarrow$ 与えられた系の情報に対して、
時間、位置を含んだ偏微分方程式を解いて、$\psi(x,t)$を決定する

さらにポテンシャルが時間を含んでいなければ（実はほとんどの場合そう）、
粒子のエネルギー（ハミルトニアンの固有値）が求められる

一次元ポテンシャル中の粒子の量子力学としてよくあるのは、
このエネルギー固有値を求めよという問題

変数分離と定常状態

$V(x,t)=V(x)$の時、シュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=H\psi(x,t) \qquad H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)$$

において、$\psi(x,t)=f(t)\phi(x)$と変数分離できる

代入して両辺を$f(t)\phi(x)$で割って、

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{d}{dt}f(t)=\frac{1}{\phi(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\phi(x)=E\ (\text{定数})$$

よってまず、 $f(t)=\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$ を得る

変数分離と定常状態

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]}_{=H}\phi(x)=E\phi(x)$$

微分を含むハミルトニアンにある関数をかけて
その関数の定数倍になれという方程式

cf.) 線形代数における固有値問題　$A\,\boldsymbol{x}=\lambda\,\boldsymbol{x}$

A : ある（正則な）行列
$\boldsymbol{x}$: 固有ベクトル
λ : 固有値

Eはハミルトニアンの固有値（定数）であり、$\phi(x)$は固有関数と呼ばれる

エネルギーが時間変化しないという意味で、定常状態と呼ばれる

ただし、波動関数自体は時間変化することに注意

$$\psi(x,t)=\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\phi(x)$$

第二部

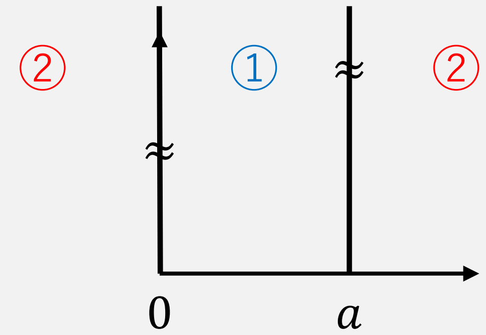
- シュレディンガー方程式の意味が分かる
- (試験に頻出の) 1次元ポテンシャル問題が解ける

井戸型ポテンシャル問題

解くべきシュレディンガー方程式　$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\phi(x)=E\phi(x)$

例題 1

$$V(x)=\begin{cases}0 & (0\le x\le a)\\ \infty & \text{others}\end{cases}$$



右側の②　（∞がすごく大きい数と思った）雑な議論

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\infty\right]\phi(x)=E\phi(x) \quad \Leftrightarrow \quad \phi''(x)=\infty\times\phi(x)$$

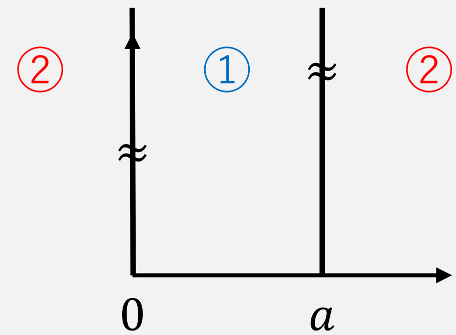
2 階常微分方程式の一般解　$\phi(x)=Ce^{\rho x}+De^{-\rho x}$ ➡ $\rho=\infty$

無限遠で発散するのは物理的にマズい（境界条件）ので、$C=0$ ➡ $\phi(x)=0$

井戸型ポテンシャル問題

例題 1

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \le x \le a) \\ \infty & \text{others} \end{cases}$$



②での解　$\phi(x) = 0$　（無限に高い壁の中には粒子は存在できない）

①　$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = E\phi(x) \iff \phi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\phi(x)$$

2 階常微分方程式の一般解

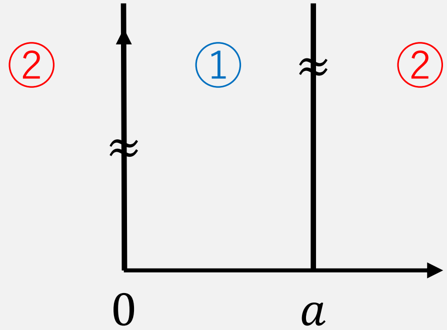
$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$ （k : 正の実数） ➡ $$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

2 階微分方程式には未知数が 2 つ（AとB）⇨ 物理的な条件（境界条件）で決める

境界条件（接続条件）

例題 1

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \le x \le a) \\ \infty & \text{others} \end{cases}$$



①での解　$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$　　$k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

②での解　$\phi(x) = 0$

$x = 0, a$ で、波動関数が繋がるようにA, Bを決める

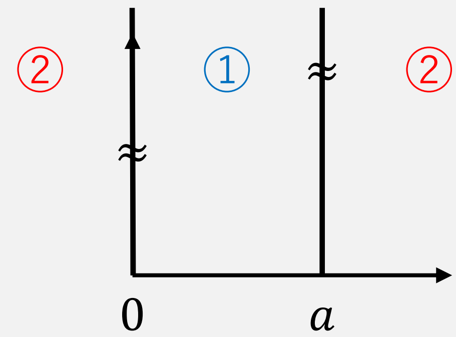
$\phi(0) = 0$ ➡ $A + B = 0$

$\phi(a) = 0$ ➡ $\sin ak = 0$ ⬄ $ak = n\pi$ （nは整数） ⬄ $E = \dfrac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}$

境界条件（接続条件）

例題 1

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \le x \le a) \\ \infty & \text{others} \end{cases}$$



①

②

境界条件を課すことによって、
波動関数とエネルギー固有値が得られた！

$x = 0, a$ で、波動関数が繋がるようにA, Bを決める

$\phi(0) = 0$ ➡ $A + B = 0$

$\phi(a) = 0$ ➡ $\sin ak = 0$ ⬄ $ak = n\pi$ （nは整数） ⬄ $E = \dfrac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}$

規格化まで

波動関数の解としては、 $\phi(x) = Ae^{ikx} - Ae^{-ikx} = 2A \sin kx$

波動関数の絶対値の2乗は確率密度になるので、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\phi(x)|^2 = 1$$

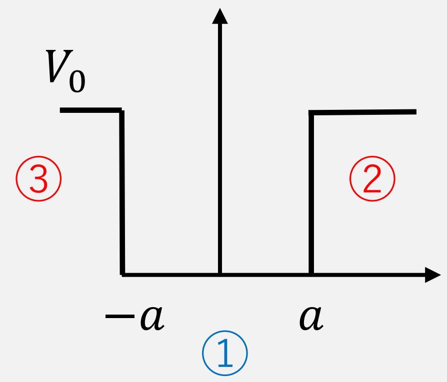
を満たすようにAを決める

0からa以外は0なので、$|A| = 1/\sqrt{2a}$を得る（やってみてください）

位相の自由度は残るが、物理的な量には関係ない

井戸型ポテンシャル問題

例題 2



$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-a \le x \le a) \\ V_0 & \text{others} \end{cases}$$

①　$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$　　$k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

②での解（$V_0 > E$であるとします）

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = (E - V_0)\phi(x) \quad \Leftrightarrow \quad \phi''(x) = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\phi(x)$$

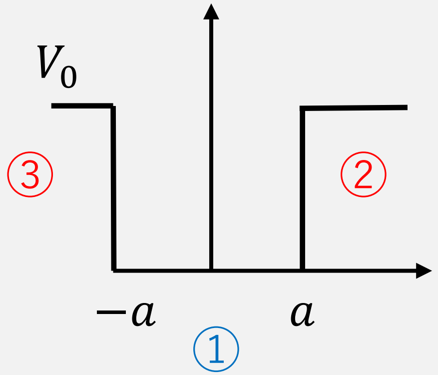
$$\phi(x) = Ce^{\rho x} + De^{-\rho x} \quad \Rightarrow \quad \rho = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$x \to \infty$での境界条件より、$C = 0$　　　③でも同様

井戸型ポテンシャル問題

例題 2

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-a \le x \le a) \\ V_0 & \text{others} \end{cases}$$



① $\phi(x) = A \sin kx + B \cos kx$ $\quad k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

（三角関数に書き直した）

② $\phi(x) = De^{-\rho x}$ $\quad \rho = \sqrt{\dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

③ $\phi(x) = Ce^{\rho x}$

境界条件 $x = a$での連続条件 $\quad A \sin ka + B \cos ka = D\, e^{-\rho a}$

$x = -a$での連続条件 $\quad -A \sin ka + B \cos ka = C\, e^{-\rho a}$

$x = a$で滑らかにつながる条件 $\quad kA \cos ka - kB \sin ka = -\rho D e^{-\rho a}$

$x = -a$で滑らかにつながる条件 $\quad kA \cos ka + kB \sin ka = \rho C\, e^{-\rho a}$

目的を見失わない

$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ $\rho = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

目的はエネルギー固有値を求めること

$A \sin ka + B \cos ka = D\ e^{-\rho a}$

$-A \sin ka + B \cos ka = C\ e^{-\rho a}$

$kA \cos ka - kB \sin ka = -\rho D e^{-\rho a}$

$kA \cos ka + kB \sin ka = \rho C\ e^{-\rho a}$

から、 $\rho = \frac{kA \cos ka + kB \sin ka}{-A \sin ka + B \cos ka} = \frac{-kA \cos ka + kB \sin ka}{A \sin ka + B \cos ka}$ よって$AB = 0$

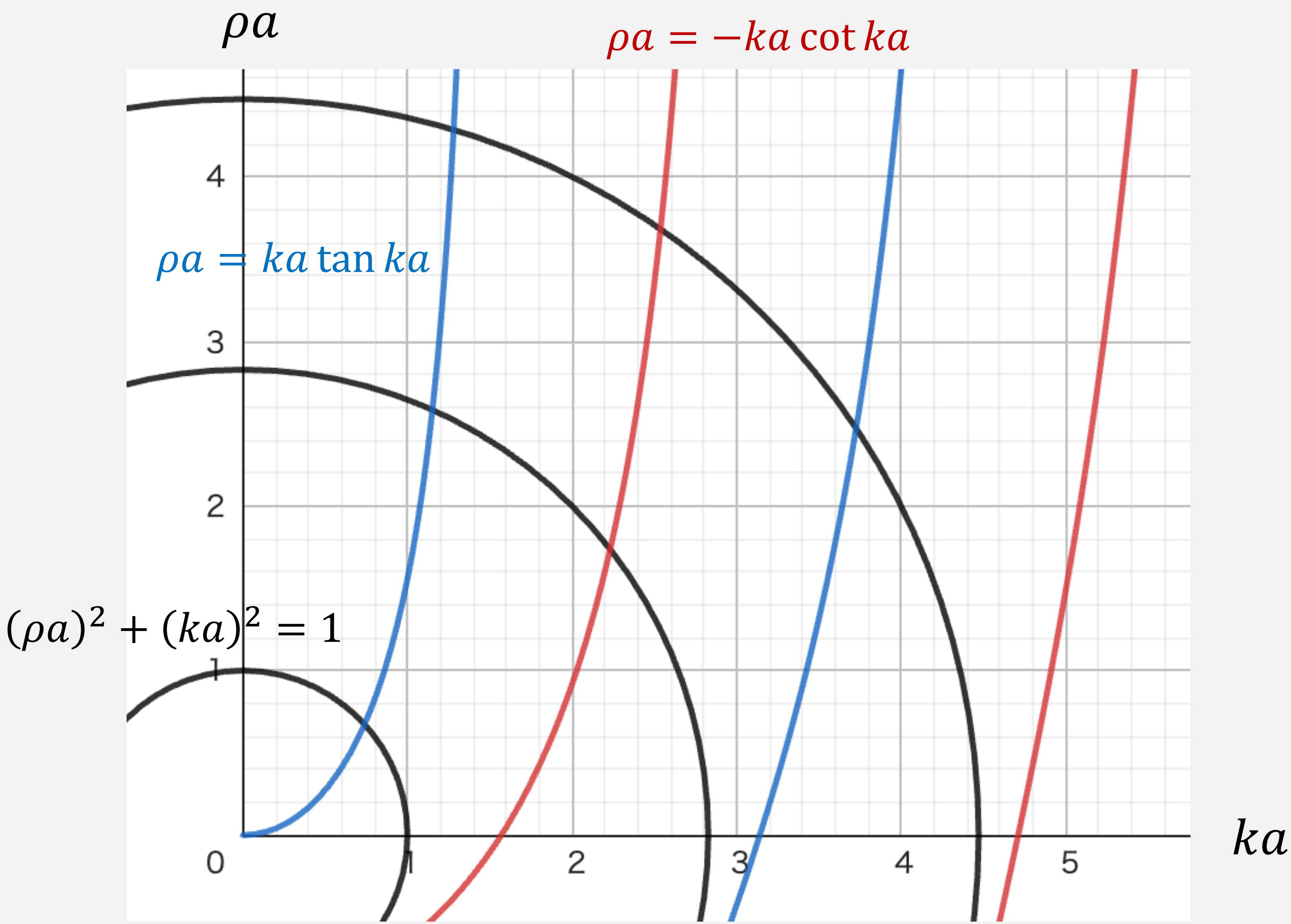
(i) $A = 0$のとき $\rho = k \tan ka$

(ii) $B = 0$のとき $\rho = -k \cot ka$

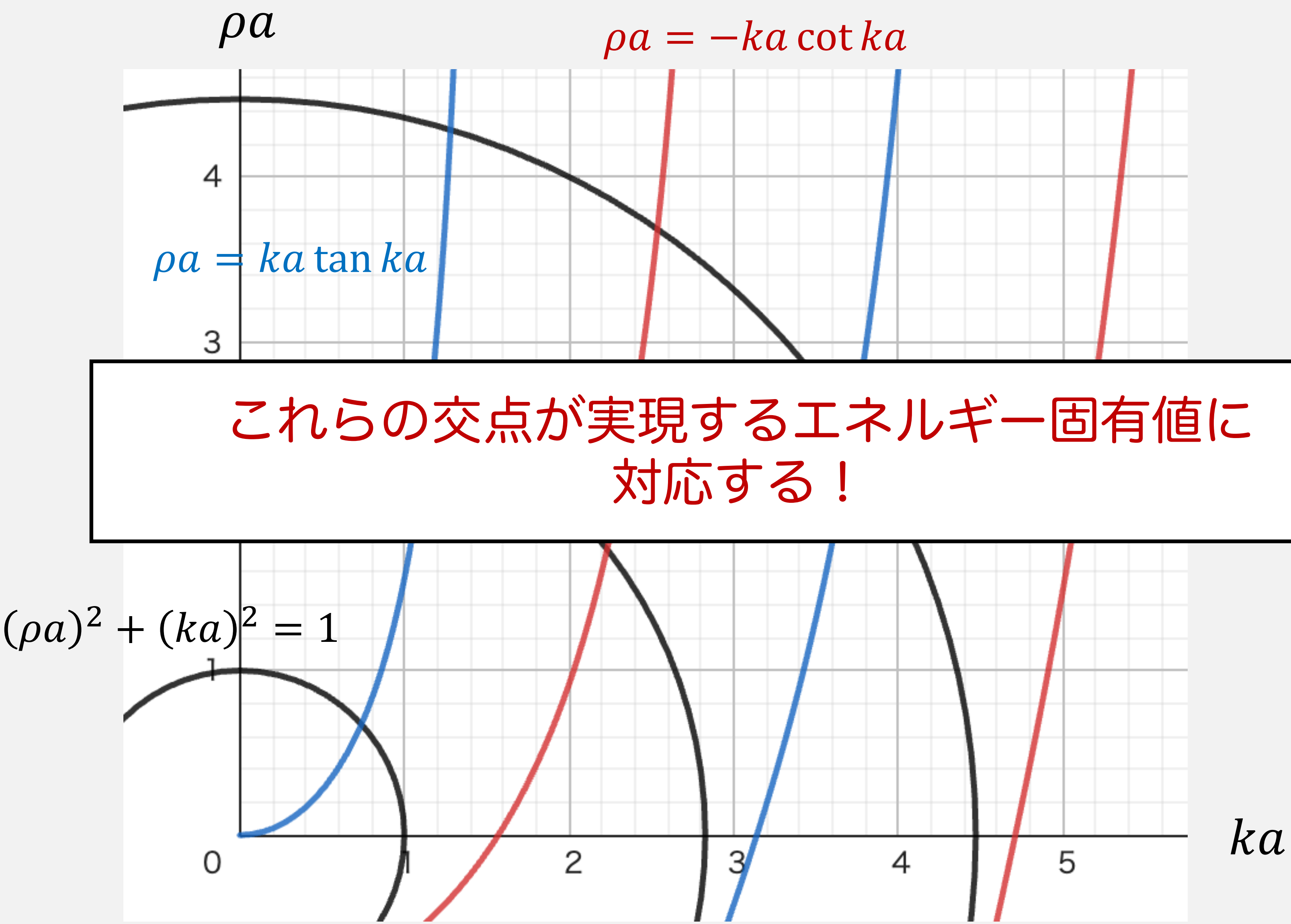
kとρの拘束条件 $\rho^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$

それぞれの場合について、二つの方程式から(k, ρ)が求まる

図示してみる



図示してみる



これらの交点が実現するエネルギー固有値に
対応する！

まとめ

- 量子力学では
  粒子の位置などの物理量は、波動関数から決まる期待値で表される
  波動関数はシュレディンガー方程式に従って時間発展する

- シュレディンガー方程式を解く
  変数分離を行い、定常状態のシュレディンガー方程式を得る
  微分方程式を解いて、エネルギー固有値と波動関数を求める

- １次元井戸型ポテンシャル問題
  領域ごとに微分方程式を立てて解く
  境界条件（連続かつ滑らか）を設定し、エネルギー固有値を求める