量子力学入門セミナー
～シュレーディンガー方程式を解いてみよう～

総合図書館LS（理学研究科・D2）

目標

- シュレーディンガー方程式について理解する。
- 1粒子系の簡単な問題が解けるようになる。

目標

- シュレーディンガー方程式について理解する。
- 1粒子系の簡単な問題が解けるようになる。

導入

力学の運動方程式

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = F$$

例：等加速度直線運動　（外力一定、加速度a）

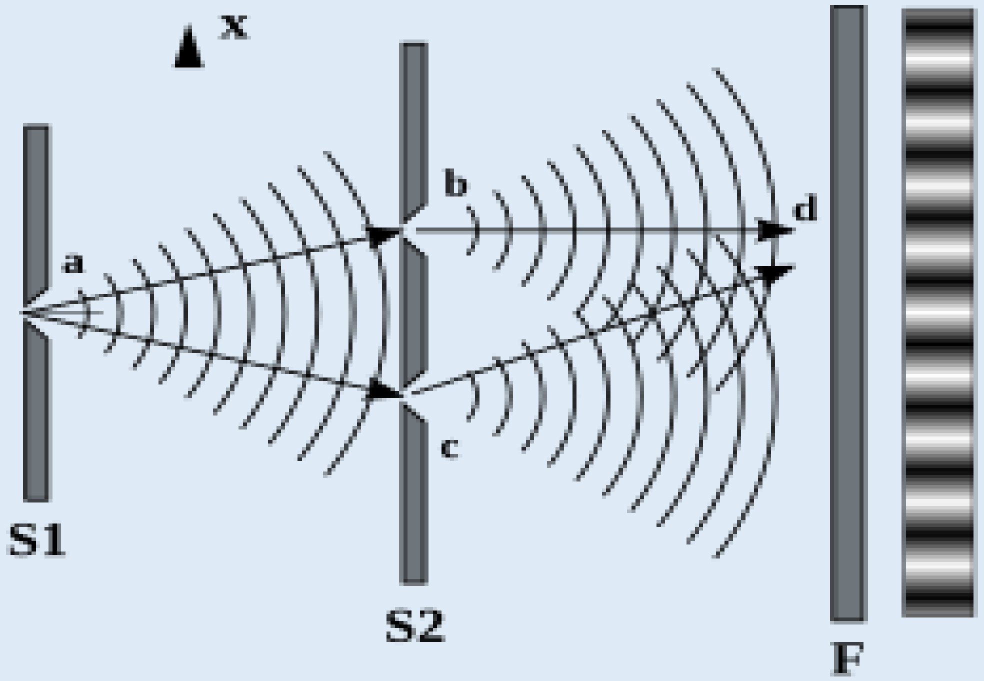
tについて積分すると・・・

$$\begin{cases} \text{速度} \quad v(t) = v_0 + at \\ \text{位置} \quad x(t) = x_0 + v_0 t + \frac{1}{2}at^2 \end{cases}$$

物体の最初の位置や速度（初期条件）が与えられれば、
物体の未来の位置や速度が決まる！

Q: この運動方程式はどんな物体に対しても使えるか？

導入　光の2重スリット実験 (ヤングの実験)

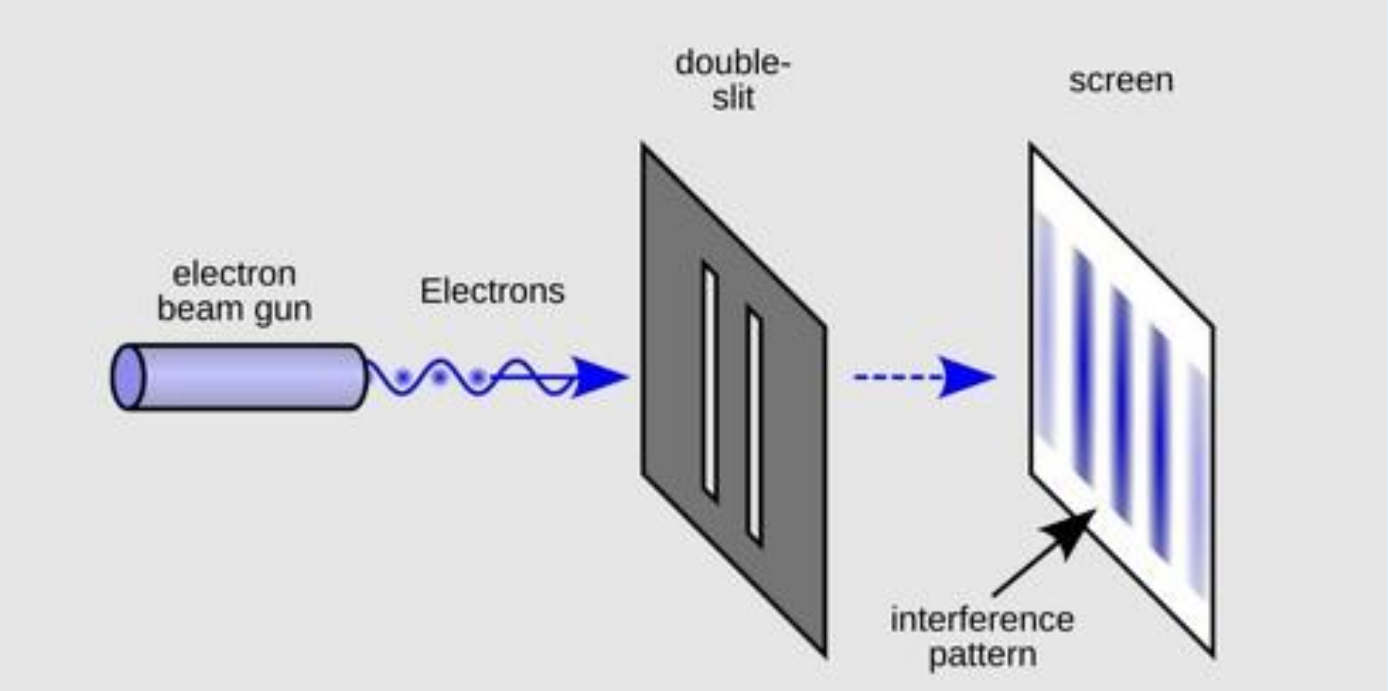


二つのスリットを同時に通り抜けた光が重ね合わされ、
スクリーンに縞模様が現れる。（干渉）
→**波の性質**

画像引用元：https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%A4%E3%83%B3%E3%82%B0%E3%81%AE%E5%AE%9F%E9%A8%93

導入　電子の2重スリット実験

照射するものを電子に変えてみる。



電子は粒子なので、干渉は起きないはずだが・・・
光と同様、スクリーンに縞模様が現れる！

画像引用元：https://ja.wikipedia.org/wiki/%E4%BA%8C%E9%87%8D%E3%82%B9%E3%83%AA%E3%83%83%E3%83%88%E5%AE%9F%E9%A8%93

導入

この実験結果をどう理解するか？

- 観測するまでの間、**電子の位置は確率的に広がっており、その確率が波のように振る舞う！**（確率的解釈）
- 電子の位置は、**観測することで1点に決まる！**
（波動関数（後述）の収縮）

導入

Q: **力学の運動方程式** $m\frac{d^2x}{dt^2} = F$ はどんな物体にも使えるか？

A: 電子のようなミクロの世界では使えない！

ミクロの世界では・・・

粒子の位置と運動量（速度）を同時に正確に予測することができない！
（不確定性原理）

粒子の存在確率を扱う新たな学問体系が必要

→量子力学

波動関数

時刻t, 位置xにおける粒子の存在確率　→　**波動関数** $\psi(x,t)$

①一般に波動関数は複素数（確率の波の性質をうまく表すため）

→**絶対値の２乗** $|\psi(x,t)|^2$ が確率を表す。

②確率の総和は１になる。

例：サイコロで1から6の目が出る確率　$\frac{1}{6}\times 6 = 1$

→ $\int |\psi(x,t)|^2 dx = 1$を満たす。（波動関数の**規格化**）

シュレーディンガー方程式

シュレーディンガー方程式（一次元）

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

$\hat{H}$:ハミルトニアン

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

参考：古典力学のハミルトニアン

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

$p\rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ の置き換えに対応

波動関数はシュレーディンガー方程式に従って時間発展する。

シュレーディンガー方程式

方程式を解く準備

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x,t)$$

変数分離　$\psi(x,t)=f(t)\phi(x)$ 、両辺を$f(t)\phi(x)$ で割る

$$\underbrace{i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial f(t)}{\partial t}}_{t\text{のみの関数}}=\underbrace{\frac{1}{\phi(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\phi(x)}_{x\text{のみの関数}}=E$$

E: 定数

時間成分　$i\hbar\frac{\partial f(t)}{\partial t}=Ef(t)\Rightarrow f(t)=\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$

波動関数：$\psi(x,t)=\exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right)\phi(x)$

あとは$\phi(x)$を求めればよい！

シュレーディンガー方程式

位置成分：$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\phi(x)=E\phi(x)$

エネルギー固有関数

エネルギー固有値

参考：線形代数の固有値問題

$$\hat{A}\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}$$

$\hat{A}$:正則行列
λ:固有値
$\boldsymbol{x}$:固有ベクトル

- **波動関数**　$\psi(x,t)=\exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right)\phi(x)$
- **エネルギー固有値**　E

を求めることで、粒子の存在確率が求められる！

時間に依存しないポテンシャル$V(x)$が与えられれば解くことができる！

目標

- シュレーディンガー方程式について理解する。
- 1粒子系の簡単な問題が解けるようになる。

シュレーディンガー方程式を解く手順

①ポテンシャルの異なる領域に分け、シュレーディンガー方程式を解く

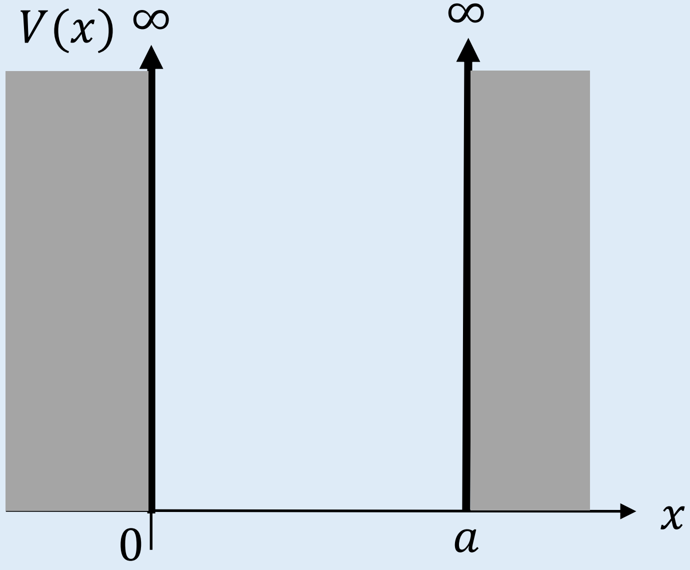
②それぞれの領域における波動関数が、境界で繋がるように
境界条件を定める

→エネルギー固有値、（規格化されていない）波動関数が求められる。

③波動関数の規格化（必要があれば）

例題１：無限深さの井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq a) \\ \infty & (x < 0, a < x) \end{cases}$$



井戸の中 $(0 \leq x \leq a)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} = E\phi(x)$$

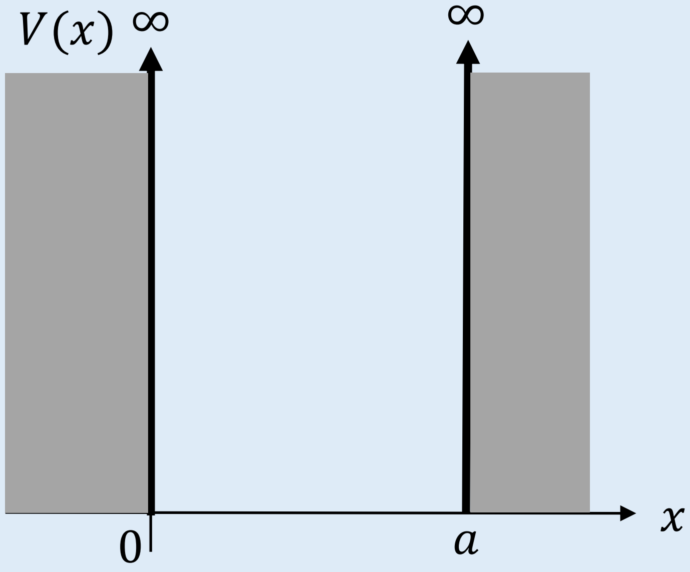
$$\Rightarrow \phi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

A, B：規格化定数（後述）

例題１：無限深さの井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq a) \\ \infty & (x < 0, a < x) \end{cases}$$



井戸の外 $(x < 0, a < x)$

粒子は井戸の外に存在できない。

分厚い壁を通り抜けられないイメージ

$\Rightarrow \phi(x) = 0$

例題１：無限深さの井戸型ポテンシャル

境界条件　→　**波動関数がポテンシャルの境界で繋がるように決める！**

$$\begin{cases} A\cos(ka) + B\sin(ka) = 0 \quad (x = a) \\ A = 0 \quad (x = 0) \end{cases} \quad \Leftrightarrow ka = n\pi \quad (n\text{は整数})$$

$k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ より　$E = \dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{n\pi}{a}\right)^2$

エネルギー固有値が求められた！

波動関数の規格化

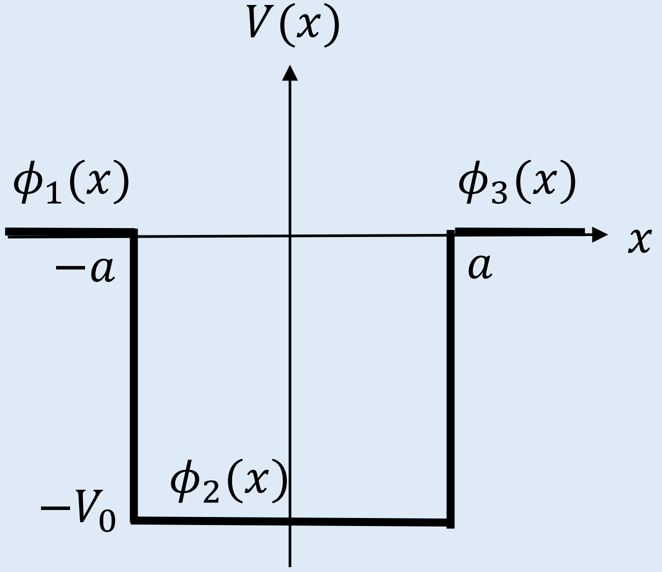
境界条件を解くと、$\psi(x,t) = B\sin(kx) \ (0 \leq x \leq a)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1 \quad \Leftrightarrow B = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}}$$

例題２：有限深さの井戸型ポテンシャル

粒子の束縛状態（エネルギー $-\mathrm{V}_0 < E < 0$）

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



シュレーディンガー方程式

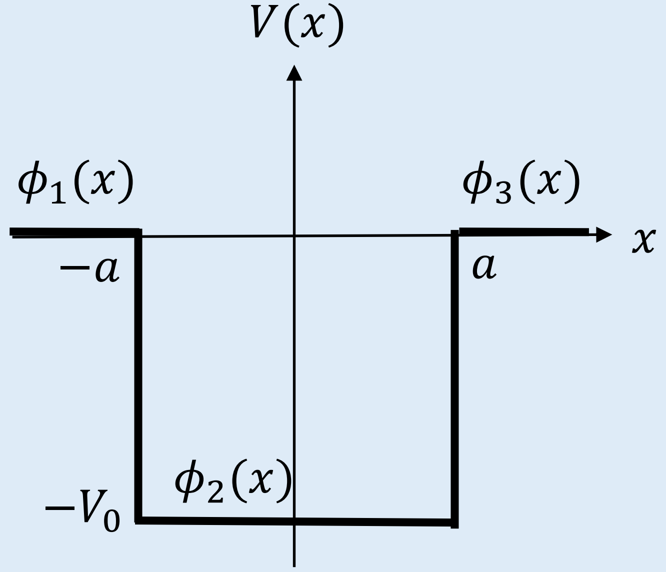
$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\phi_i}{dx^2} = E\phi_i(x) \quad ,(i = 1,3) \\ \left[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2} - V_0\right]\phi_2(x) = E\phi_2(x) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \phi_1(x) = Ae^{\rho x} + Be^{-\rho x} \\ \phi_2\,(x) = C\cos kx + D\sin kx \\ \phi_3(x) = Fe^{\rho x} + Ge^{-\rho x} \end{cases}$$

$$\rho \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad k \equiv \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar}$$

例題２：有限深さの井戸型ポテンシャル

$$
\begin{cases}
\phi_1(x) = Ae^{\rho x} + Be^{-\rho x} \\
\phi_2(x) = C\cos kx + D\sin kx \\
\phi_3(x) = Fe^{\rho x} + Ge^{-\rho x}
\end{cases}
$$

$$\rho \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad k \equiv \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar}$$



境界条件①:　無限遠方に粒子は存在しない

$$\phi_1(x) \to 0 \ (x \to -\infty), \qquad \phi_3(x) \to 0 \ (x \to +\infty)$$

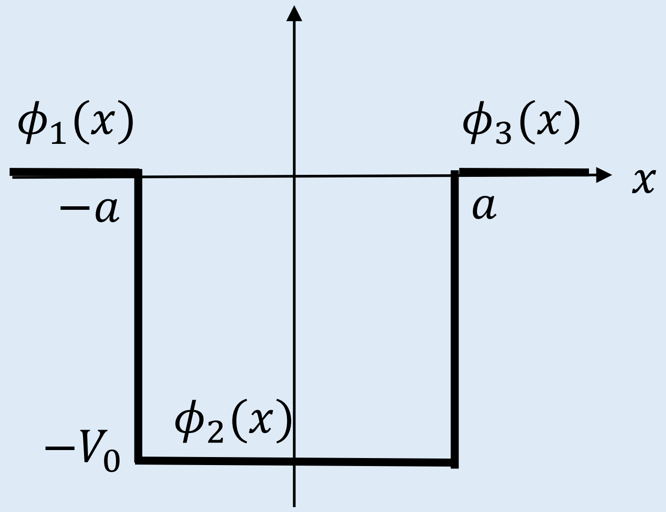
$$\Rightarrow \quad B = F = 0$$

$$\therefore \phi_1(x) = Ae^{\rho x}, \qquad \phi_3(x) = Ge^{-\rho x}$$

例題２：有限深さの井戸型ポテンシャル

$$
\begin{cases}
\phi_1(x) = Ae^{\rho x} \\
\phi_2(x) = C\cos kx + D\sin kx \\
\phi_3(x) = Ge^{-\rho x}
\end{cases}
$$

$$\rho \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar},\quad k \equiv \frac{\sqrt{2m(V_0+E)}}{\hbar}$$



境界条件②:$x = \pm a$でなめらかに接続

微分も考慮する！

$$
\begin{cases}
\phi_1(-a) = \phi_2(-a) \\
\phi_1'(-a) = \phi_2'(-a) \\
\phi_2(a) = \phi_3(a) \\
\phi_2'(a) = {\phi_3}'(a)
\end{cases}
\Rightarrow
\begin{cases}
C\cos ka - D\sin ka = Ae^{-\rho a} \\
-\rho Ae^{-\rho a} = -k(C\sin ka + D\cos ka) \\
Ge^{-\rho a} = C\cos ka + D\sin ka \\
-\rho Ge^{-\rho a} = -k(C\sin ka - D\cos ka)
\end{cases}
$$

例題２：有限深さの井戸型ポテンシャル

$$\begin{cases} Ae^{-\rho a} = C\cos ka - D\sin ka \\ -\rho Ae^{-\rho a} = -k(C\sin ka + D\cos ka) \\ Ge^{-\rho a} = C\cos ka + D\sin ka \\ -\rho Ge^{-\rho a} = -k(C\sin ka - D\cos ka) \end{cases}$$

$$\rho = \frac{k(C\sin ka + D\cos ka)}{C\cos ka - D\sin ka} = \frac{k(C\sin ka - D\cos ka)}{C\cos ka + D\sin ka}$$

$\therefore C = 0$または$D = 0$

$C = 0$のとき、$\rho = -k\cot ka$

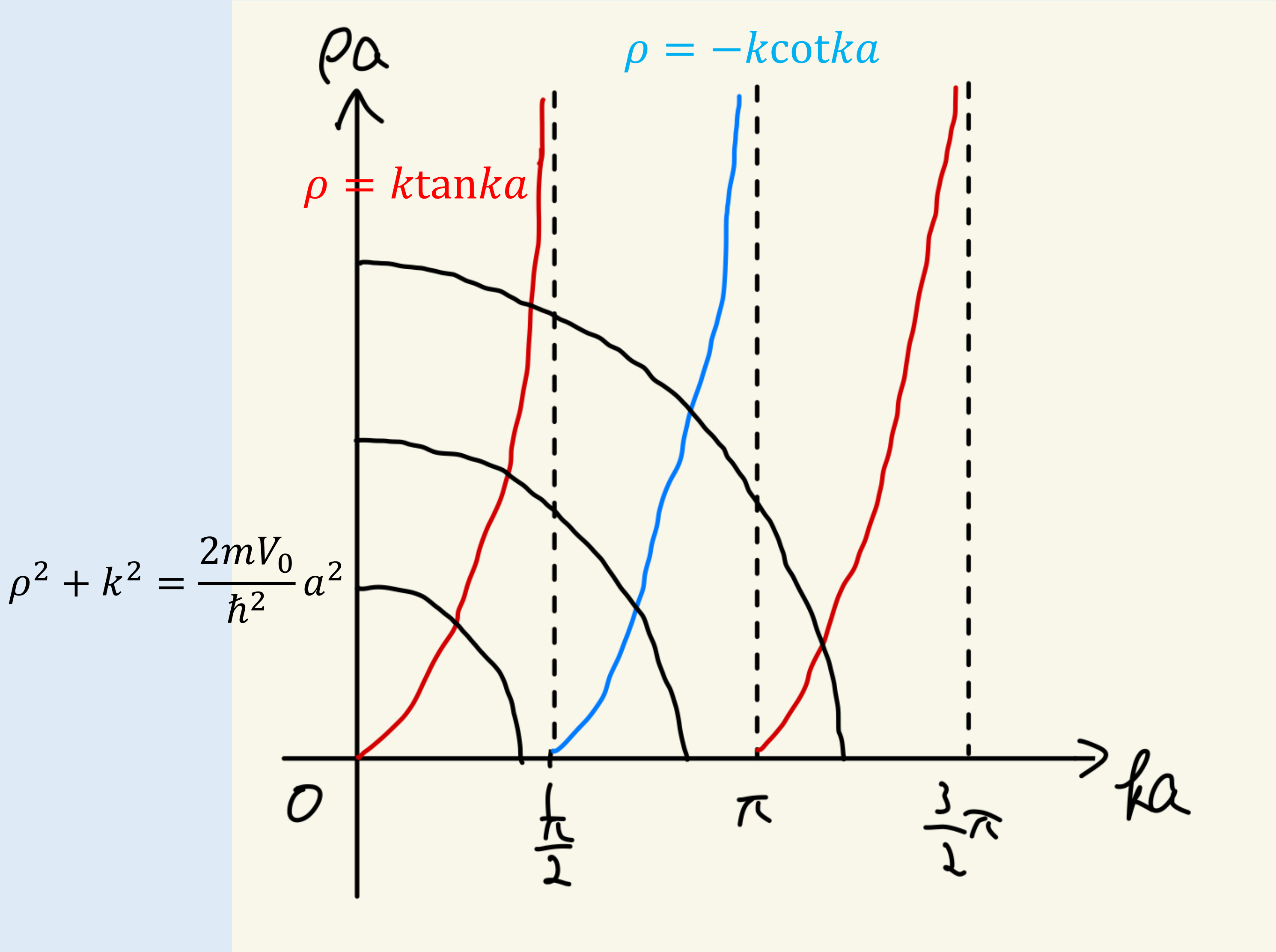
$D = 0$のとき、$\rho = k\tan ka$

ρとkの定義から、

$$\rho^2 + k^2 = \frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2} + \frac{-2mE}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

ρとkに関する方程式を解けばよい！（グラフを用いる）

例題２：有限深さの井戸型ポテンシャル



グラフの交点の座標
→**エネルギー固有値に対応**

束縛状態の数
→**交点の数に対応**

井戸の幅によって束縛状態の数が変わる！

まとめ

- 粒子の存在確率は波のように振る舞う。→**量子力学**
- 波動関数の時間発展→**シュレーディンガー方程式**
- 波動関数とエネルギー固有値を求める手順
  ①領域ごとにシュレーディンガー方程式を解く
  ②各領域をなめらかにつなぐ**境界条件**を課す。
  ３次元の問題でも同様にして解く！