# 1-3 Schrödinger 方程式の解 

解析的に解けるか？

[解析解のある例]

1. 1次元の場合：

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)}$$

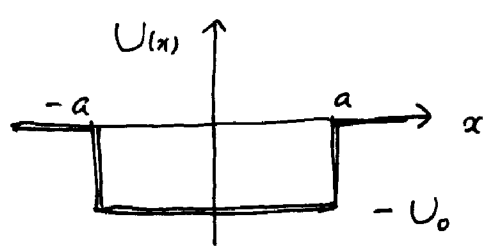
で $\underline{U(x)\text{ の形}}$

(a) $U(x)=0$ (自由粒子)

- 解析的に解ける
- 但し粒子を箱 $\left(-\frac{L}{2}\leq x\leq\frac{L}{2}\right)$ の中に入れて解く。Lは十分大きいとする

(b) $U(x)$ が井戸型ポテンシャル

$$U(x)=\begin{cases}-U_0 & |x|<a\\ 0 & |x|>a\end{cases}$$



No.

Date



この場合： $\left\{ \begin{array}{l} \text{波動関数は解析的に求まる} \\ \text{エネルギー固有値は数値的に求まる} \end{array} \right.$

(c) 調和振動子 $U(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

この場合： 波動関数、エネルギー固有値
ともに解析的に求まる

(d) $U(x) = -\dfrac{U_0}{\cosh^2 \frac{x}{a}}$ の時：

微分方程式の解は
超幾何関数で表わされる

(e) $U(x) = U_0 \cot^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) \quad (0 < x < a)$

これも超幾何関数で表わされる

(2) 3次元の場合：

(a) $U(r) = 0$ ・自由粒子

これは解ける

(b) $U(r) = \begin{cases} -U_0 & (r<a) \\ 0 & (r>a) \end{cases}$

- 3次元井戸型ポテンシャル
- これは解析的に解ける

(c) $U(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$

- 3次元調和振動子
- 厳密に解ける
- エネルギー固有値は簡単な式でかける

(d) $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ クーロン力

- 波動関数，エネルギー固有値ともに解析的に求められる
- 水素原子のスペクトルを記述する
- 最も重要なポテンシャル
- この理解が量子力学の目標

# 『自由粒子』（1次元） 

Schrödinger 方程式

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x)}$$

自由粒子 $\Rightarrow$ $U=0$

このとき $\boxed{E>0}$ である.

よって $$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)=0}$$

ここで $\underline{k^2\equiv\frac{2mE}{\hbar^2}}$ とおく

$$\therefore\ \boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0}$$

この一般解は

$$\boxed{\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}}$$

⊙ ここで問題： A, B の係数はどうやって
決定できるのか？

【条件】

1. 粒子が $x$ 軸上 正の方向に進む.
2. 粒子を箱の中 $\left(-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}\right)$ にとじこめる.
3. 境界条件を課す $\psi\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi\left(\frac{L}{2}\right)$

(a) $\psi(x)$ が運動量 $\hat{p}$ $\left(\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}\right)$ の固有関数

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$ は

一般に $\hat{p}$ の固有関数ではない.

・固有関数 $\Longrightarrow$ $\hat{p}\,\psi(x) = \hbar k \psi(x)$
となる事

(計算) $\hat{p}\,\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\left(A e^{ikx} + B e^{-ikx}\right)$

$$= \hbar k \left(A e^{ikx} - B e^{-ikx}\right) \neq \psi$$

で固有関数になっていない!

$\boxed{B=0}$ としてみると $\psi(x) = A e^{ikx}$

この時 $\underline{\hat{p}\,\psi(x) = \hbar k \psi(x)}$

これは固有関数になっている

その固有値は $\boxed{\hbar k}$

これは正の量 → 右方向に進む

(b) Aを決める

粒子は箱の中に存在している.

• 存在確率 $|\psi(x)|^2 = A^2$

よって $\displaystyle\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} |\psi(x)|^2 dx = 1$ より

$A^2 L = 1$ ∴ $\boxed{A = \frac{1}{\sqrt{L}}}$

∴ $\boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}}$

(注) $A^2 = \frac{1}{L}$ の解は もともと

$|A|^2 = \frac{1}{L}$ だから

$A = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\phi}$ が解となる

$\phi$を位相因子とよぶが

物理量には影響しない

→ 常に期待値なので

$\psi^\dagger\psi$ では $\underline{e^{-i\phi}e^{i\phi} = 1}$

となる.

$\boxed{\phi = 0 \text{ で 十分}}$

(c) 境界条件

周期的境界条件を課す。

$$\boxed{\psi\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi\left(\frac{L}{2}\right)}$$

この時 $\frac{1}{\sqrt{L}} e^{-\frac{i}{2}kL} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i}{2}kL}$

$\therefore \boxed{e^{ikL} = 1}$ となる。

$\Downarrow$

従って $\boxed{k = \frac{2\pi}{L} n}$ 但し $n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$ の整数。

よって エネルギー固有値 E は

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L} n\right)^2}$$ となる

n の添え字は量子数 n によりエネルギー E が指定されるのでつける。

$n$ : 量子数 ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$)