1-3 Schrödinger 方程式の解

解析的に解ける例

（一般的にはコンピュータで解く）

1. 1次元の場合：

Schrödinger 方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \underset{\text{ポテンシャル}}{\underline{\underline{U(x)}}}\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

(a) $U(x)=0$ の時

（自由粒子）

- 解析的に解ける
- 但し，粒子を箱の中に入れる

（$-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$ の箱）

L は $L \to \infty$ とする.

- この時 周期的境界条件を考える

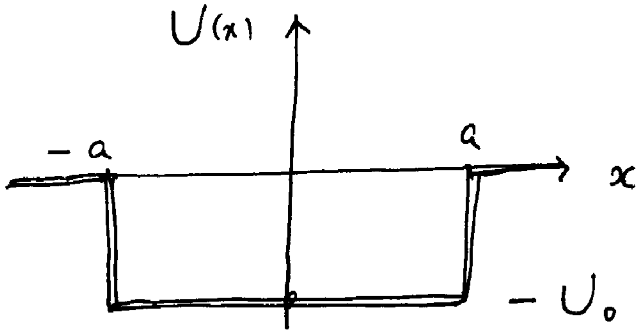
$$\downarrow$$

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

(b) $U(x)$ が 井戸型ポテンシャル

↓

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



$(U_0 > 0)$

- 波動関数 $\psi(x)$ は解析的に求まる
- エネルギー固有値 E は数値的に求まる

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

- 波動関数，エネルギー固有値 共に解析的に求まる

(d)
$$\begin{cases} U(x) = -\dfrac{U_0}{\cosh^2 \frac{x}{a}} \\ U(x) = U_0 \cot^2\left(\frac{\pi}{a} x\right) \quad (0 < x < a) \end{cases}$$

も超幾何関数で表わされる

(2) 3次元の場合

(a) $U(r)=0$ 自由粒子は解ける

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

- 3次元井戸型ポテンシャル
- 解析的に解ける（エネルギーは数値的）

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

- 3次元調和振動子
- 厳密解
- エネルギー，波動関数共に解析的にかける

(d) $U(r)=-\frac{Ze^2}{r}$ （クーロンポテンシャル）

- エネルギー，波動関数共に解析的にかける
- 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

［水素原子の理解が量子力学の目標］

[自由粒子 (1次元)]

自由粒子　$U=0$　よって

Schrödinger 方程式は

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

ここで $\boxed{E>0}$　(自由粒子だから)

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

ここで　$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$　とおくと

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

この一般解は

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

A, B は定数

$\Rightarrow$ 深の方は ?

[条件]

$$\begin{cases} 1.\ \text{粒子が } x \text{ 軸上を正の方向に進む} \\ 2.\ \text{粒子を箱の中 } (-\frac{L}{2} \le x \le \frac{L}{2}) \text{ にとじこめる} \\ 3.\ \text{境界条件を課す} \quad (\psi(-\frac{L}{2}) = \psi(\frac{L}{2})) \end{cases}$$

(a) $\psi(x)$ が運動量 $\hat{p}$ の固有関数である

$$\left(\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

固有関数 $\Rightarrow$ $\boxed{\hat{p}\,\psi(x) = \hbar k\,\psi(x)}$

となっている事

$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ に $\hat{p}$ をオペレートする

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

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

で固有関数ではない。

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

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

$$\begin{cases} \text{これは固有関数になっている。} \\ \text{その固有値は } \underline{\underline{\hbar k}} > 0 \end{cases}$$

(b) A の決定

粒子は箱の中に存在している

・存在確率は $|\psi(x)|^2 = A^2$

よって

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} |\psi(x)|^2 \, dx = 1 \quad より$$

$$A^2 L = 1 \qquad \therefore \; \underline{A = \frac{1}{\sqrt{L}}}$$

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

(注)

$A^2 = \frac{1}{L}$ の一般解は　もともとは

$|A|^2 = \frac{1}{L}$ なので

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

ϕ は実数であり, 位相因子という.

しかし これは 物理的な観測量(期待値)

には影響しない!! $\Rightarrow \phi = 0$ 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

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

$$\therefore \boxed{e^{ikL} = 1}$$

よって

$$\boxed{k = \frac{2\pi}{L} n} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$$

(整数)

この時エネルギー固有値は

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

となる

n の添字は量子数 n によって

E が指定されている事を示す