

2.3 シュレディンガー方程式の解法

'20 26
6/26

Schrödinger eq. (1次元):

$$i\hbar |\psi(t)\rangle = \hat{H}(\hat{q}, \hat{p}) |\psi(t)\rangle$$

↓ 左から $\langle q|$ をかける

$$\langle q|\hat{q} = \langle q|q \quad \psi(q, t)$$

$$\langle q|\hat{p} = \langle q|\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q} \quad \langle q|\psi(t)\rangle$$

$$i\hbar \psi(q, t) = H\left(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right) \psi(q, t)$$

q 表示での Sch. eq. (普通形)

変数分離 $\psi(q, t) = f(t)\varphi(q)$:

$$\underbrace{\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df(t)}{dt}}_{t \text{ のみ}} = \underbrace{\frac{H\varphi(q)}{\varphi(q)}}_{q \text{ のみ}} = E \quad (\text{定数})$$

$$\therefore \begin{cases} f(t) = A e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (A: \text{定数}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} H\left(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right) \varphi(q) = E \varphi(q) \quad \dots (*) \leftarrow \text{この固有値問題を} \end{cases}$$

このとき $|\psi(q, t)|^2 = |\varphi(q)|^2$: 時間変化しない (定常状態) 解きたい

例 2.22 調和振動子 (固有値問題を解き、エネルギー準位を求めよ)

$$\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}^2$$

また次の ops. を def: ↑ 正規化共役

$$\hat{a} := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{q} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right), \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{q} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad \hat{H} \text{ の固有値問題} \leftrightarrow \hat{N} := \hat{a}^\dagger \hat{a} \text{ の固有値問題}$$

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \Rightarrow [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

$$\text{また. } [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad \dots \textcircled{1}$$

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \quad \dots \textcircled{2}$$

今日の課題1 二つを示せ

27

$$([\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B})$$

ε用いずよい

\hat{N} の固有状態 $|n\rangle$, 固有値 λ_n とする: $\hat{N}|n\rangle = \lambda_n|n\rangle$

$$\text{よって. } \begin{cases} \hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle \stackrel{\textcircled{1}}{=} (\hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger)|n\rangle = (\lambda_n + 1)\hat{a}^\dagger|n\rangle \\ \hat{N}\hat{a}|n\rangle \stackrel{\textcircled{2}}{=} (\hat{a}\hat{N} - \hat{a})|n\rangle = (\lambda_n - 1)\hat{a}|n\rangle \end{cases}$$

よって $\hat{a}^\dagger|n\rangle, \hat{a}|n\rangle \in \hat{N}$ の固有状態.

$$\text{一方, } \langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = |\hat{a}|n\rangle|^2 \geq 0$$

$$\lambda_n \langle n|n\rangle = 1 \quad (\text{規格化可能とする})$$

よって $\hat{a}|0\rangle = 0$ とするなければならぬ

\hat{N} : number op. ϵ ii) \leftarrow $|0\rangle$ とする

$$\hat{a}^\dagger: \text{creation op.} \quad \lambda_0 = \langle 0|\hat{N}|0\rangle = \langle 0|\hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle = 0 \text{ より}$$

$$\hat{a}: \text{annihilation op.} \quad \lambda_n \in \{0, 1, 2, \dots\} \text{ とする. } \hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

$$\text{エネルギー固有値 } E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$E_n \geq E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega: \text{零点エネルギー}$$

$$\text{次に } |n+1\rangle = c_n \hat{a}^\dagger|n\rangle \text{ or } c_n, d_n$$

最低エネルギー状態 (量子ゆらぎの反映)

$$|n-1\rangle = d_n \hat{a}|n\rangle \text{ と求める}$$

「基底状態 (ground state)」とす

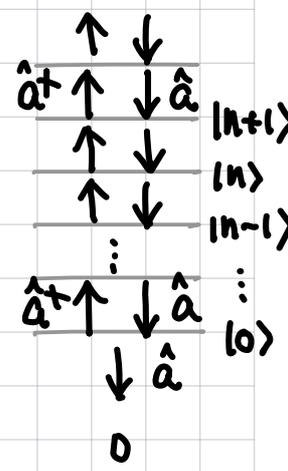
$$1 = \langle n+1|n+1\rangle = |c_n|^2 \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (n+1)|c_n|^2 \therefore c_n = \frac{1}{\sqrt{n+1}}$$

$$1 = \langle n-1|n-1\rangle = |d_n|^2 \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|d_n|^2 \therefore d_n = \frac{1}{\sqrt{n}}$$

$$\therefore \begin{cases} \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \end{cases} \therefore |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$$

不定性は無視

$$(\langle 0|0\rangle = 1 \Rightarrow \langle n|n\rangle = 1, \forall n)$$



波動関数 (q 表示)

$\hat{a}|0\rangle = 0$ (基底状態)

$\langle q| \rightarrow \downarrow$
 $\langle q| \left(\hat{q} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) |0\rangle = 0$

$\left(q + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dq} \right) \underbrace{\langle q|0\rangle}_{\varphi_0(q) \text{ 波動関数}} = 0$ $\varphi_0(q) = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2}$

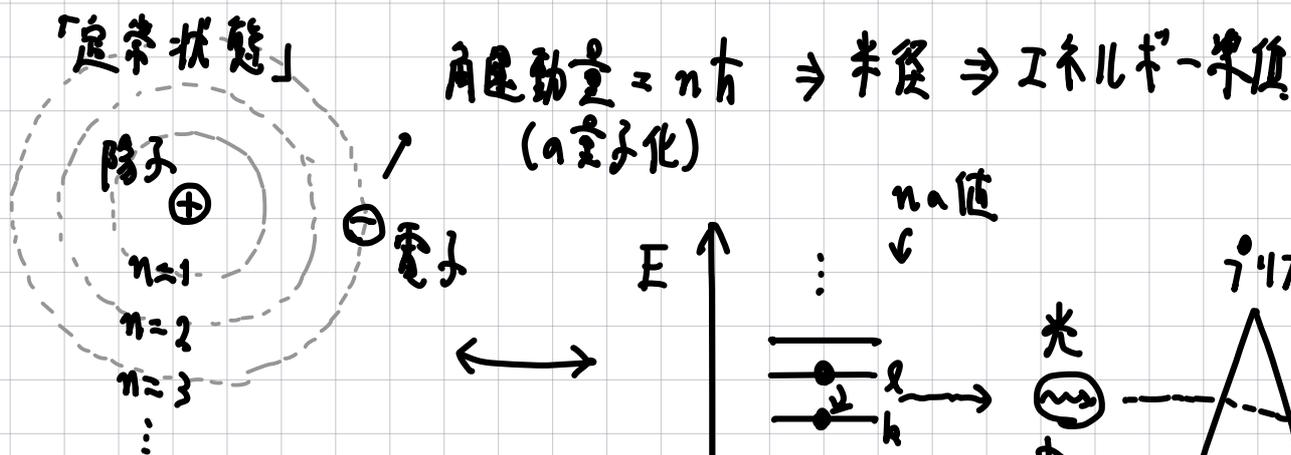
$\langle 0|0\rangle = 1$ (規格化)
 $\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}}$ ← $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ の置き換え

(第 n 番目の) 励起状態、波動関数 $\varphi_n(q)$ も同様に見る: (今日課題2)

$\varphi_n(q) = \langle q|n\rangle = \sqrt{\frac{\beta}{\pi^{1/2} n! 2^n}} \left[\xi - \frac{d}{d\xi} \right]^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ $\xi := \beta q, \beta := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$
 (レポート問題10)

例 2.23 水素原子 (詳しくはレポート)

Bohr 模型 (1913年)



水素原子の Schrödinger eq. の解

$H\varphi_n = E_n\varphi_n$

$E_n = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2}$

完全一致! 13.6 eV

$Rc\hbar \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{l^2} \right)$

固有の波長 (振動数) λ の光