

8 Schrödinger 方程式

[8.A] Schrödinger 方程式

Schrödinger による量子力学の記述法では、状態を表す波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ の時間発展は、Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{x}, t), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \quad (8.1)$$

により記述される。ここで、potential $V(\mathbf{x})$ は実関数であり、Hamiltonian $\hat{H}$ は Hermite 演算子である。

[8.B] 時間に依存しない Schrödinger 方程式

Hamiltonian が陽に時間に依存しない場合、エネルギーの固有状態は、時間が変化しても形が変わらない定常状態となる。この定常状態の波動関数が満たすべき方程式は次の時間に依存しない Schrödinger 方程式となる。

$$\hat{H} \phi(\mathbf{x}) = E \phi(\mathbf{x}) \quad (8.2)$$

[8.C] 束縛状態と散乱状態

物理の多くの問題では、Potential が $V(x) \rightarrow 0$ ($x \rightarrow \pm\infty$) という条件を満たす。このとき、エネルギーの固有関数は、 $r \rightarrow \pm\infty$ の領域で、次の様な漸近形をもつ。

$$E > 0 \text{ の場合: } \phi(x) \rightarrow A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) \quad (k = \sqrt{2mE}/\hbar)$$

$$E < 0 \text{ の場合: } \phi(x) \rightarrow A \exp(-\kappa|x|) \quad (\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar)$$

$E < 0$ の状態では粒子が無限遠に有限の確率で存在する事は不可能であり、**束縛状態**と呼ばれる。一方、 $E > 0$ の状態は、**散乱状態**と呼ばれる。

また、エネルギー準位については、 $E < 0$ の場合には、エネルギーはあるとびとびの値しかとれず、離散的であるが、 $E > 0$ の場合には連続的になる。

8. 例題 (演算子の期待値の時間発展、学生による解答可、ただし丁寧にやること)
時間に依存する Schrödinger 方程式の解は、

$$\psi(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar) \psi(t=0) \quad (8.3)$$

と表せる。(両辺を t で微分してみよ。) さて、このとき陽に時間に依存しない演算子 $\hat{A} = A(\hat{x}, \hat{p})$ の期待値 $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$ の時間発展を考えてみよう。ただし、波動関数は規格化されており、遠方 ($x \rightarrow \pm\infty$) で十分速く 0 に近づくとする。

(1) 波動関数の時間発展を考えることにより、次の関係式を示せ。

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \quad (8.4)$$

これから $\hat{A}$ が Hamiltonian と交換する時には、 $\hat{A}$ の期待値は時間によらないことがわかる。

(2) このことから、次の関係式が成り立つことを示せ (エーレンフェストの定理)。

$$\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}, \quad \frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle. \quad (8.5)$$

[8.1] (確率密度と確率流)

Born の確率解釈が成り立つためには、”全確率” $\int dx \psi^*(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t)$ が保存量であることが必要である。この保存量を運ぶ流れについて調べてみよう。

確率密度 $\rho(\mathbf{x}, t) \equiv \psi^*(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t)$ を考える。このとき、連続の方程式

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{-i\hbar}{2m} (\psi^* (\nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \psi),$$

が成り立つ事を示せ。 $\mathbf{j}$ を確率の流れ (確率流) と呼ぶ。

この確率流をもちいて、”全確率” が保存する条件を示せ。また、運動量 $\mathbf{p}$ をもつ自由粒子の波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ に対して、確率流 $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ を具体的に求めよ。(このとき、波動関数が平面波で与えられることを用いてよい。)

[8.2] (時間に依存する Schrödinger 方程式の変数分離)

Schrödinger 方程式の時間成分が変数分離できることを確かめてみよう。(時間に依存する) Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{x}, t), \quad (8.6)$$

において、Hamiltonian $\hat{H}$ は時間を陽に含んでいないので、変数分離した解 $\psi(\mathbf{x}, t) = f(t)\phi(\mathbf{x})$ を仮定できる。

- (1) 変数分離した解を Schrödinger 方程式に代入し、 $f(t)$ がどのような形になるか求めよ。変数分離された解は、分離定数 E を用いて次のようになる。

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

- (2) このときの分離定数 E が、Hamiltonian の固有値であることを確かめよ。
 (3) 変数分離された解のもとで、各点 $\mathbf{x}$ での確率密度 $\rho(\mathbf{x}, t) = \psi^*(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t)$ は、どのような特徴を持つか?(この特徴から、Hamiltonian の固有状態のことが”定常状態” とよばれることから推定せよ。)

[8.3] (基本交換関係)

演算子は座標表示 (x 表示)、運動量表示 (p 表示) では次のようになる。

$$\text{座標表示} : \hat{x} = x, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \psi(x) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ipx/\hbar) a(p),$$

$$\text{運動量表示} : \hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, \quad \hat{p} = p, \quad a(p) = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(-ipx/\hbar) \psi(x),$$

どちらの表示でも次の基本交換関係が成り立っていることを示せ。また、この交換関係は古典力学の Poisson 括弧とどのような関係にあるか?

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \quad [\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0, \quad (8.7)$$

[8.4] (時間に依存しない Schrödinger 方程式の解の性質 — ロンスキアン)

ϕ_1, ϕ_2 を一次元の時間に依存しない Schrödinger 方程式 (Eq. (8.2) で一次元の場合) の2つの解とする。このとき、

$$W(\phi_1, \phi_2) = \phi_1(x) \phi_2'(x) - \phi_1'(x) \phi_2(x) \quad (8.8)$$

をロンスキアンとよぶ。

- (1) ϕ_1, ϕ_2 が独立でないとき、ロンスキアンは 0 になることを示せ。

- (2) ϕ_1, ϕ_2 が同じエネルギー固有値をもつとき、ロンスキアン W は x に無関係になる事を示せ。
- (3) 1次元問題では、束縛状態に縮退がないこと (同じエネルギー固有値をもつ一次独立な状態が2つ以上ないこと) を示せ。
- (4) 1次元問題において、流れの密度をロンスキアンを用いて表せ。これにより、定常状態で流れの密度が一定であることを示せ。(ヒント: 解の複素共役も解である。)

[8.5] (束縛状態と散乱状態、エネルギー固有値のとり得る範囲*)

ポテンシャルが遠方で十分速く0になる ($V(x) \rightarrow 0$ ($x \rightarrow \pm\infty$)) して、次の間に答えよ。

- (1) 時間に依存しない Schrödinger 方程式 Eq.(8.2) において、(a) $E < 0$ 、(b) $E > 0$ のそれぞれの場合に、波動関数の漸近形 ($x \rightarrow \pm\infty$ における波動関数の形) を求めよ。
- (2) 束縛状態のエネルギー E が $E > V_{min}$ で無ければならないことを示せ。ただし、 V_{min} は Potential $V(x)$ の最小値である。また (時間によらない) 波動関数は実数にとれるとする。

[8.6] (正規完全直交系*)

N 次元の列 vector 空間で、正規直交基底 $\{\mathbf{v}_n : n = 1, 2, \dots, N\}$ を考える。この基底は、任意の (複素) ベクトル $\mathbf{A}$ にたいして、

$$\mathbf{A} = \sum_n \mathbf{v}_n (\mathbf{v}_n, \mathbf{A}) = \sum_n \mathbf{v}_n (\mathbf{v}_n^\dagger \cdot \mathbf{A}) \quad (8.9)$$

すなわち、 $\mathbf{E}$ を $N \times N$ 単位行列として、

$$\sum_n \mathbf{v}_n \mathbf{v}_n^\dagger = \mathbf{E} \quad (8.10)$$

を満たす。(ただし、 $\mathbf{v}_n^\dagger$ は、 N 次元の行ベクトルで、その成分が $(\mathbf{v}_n^\dagger)_i = (\mathbf{v}_n)_i^*$ で与えられるものとする。)

- (1) このとき、行列 U を $U = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N)$ (成分では、 $U_{ij} = (\mathbf{v}_j)_i$) と定義すると、Eq. (8.10) と行列 U が unitary である条件が同値であることを示せ。

次に、正規完全直交系をなす関数の組 $\{\phi_n(x) : n = \text{integer}\}$ を考える。

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \int dx \phi_n^*(x) \phi_m(x) = \delta_{nm} \quad (\text{正規直交性}) \quad (8.11)$$

$$\sum_n \phi_n(x') \phi_n^*(x) = \delta(x' - x) \quad (\text{完全性}) \quad (8.12)$$

- (2) このとき、任意の波動関数 $\psi(x, t)$ は

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n(t) \phi_n(x), \quad c_n(t) = \langle \phi_n | \psi(t) \rangle \equiv \int dx \phi_n^*(x) \psi(x, t) \quad (8.13)$$

と展開できることを示せ。

補足: 問題 [6.4] で示したように、 $N \times N$ Hermite 行列の固有ベクトルの組は、条件 Eq. (8.10) を満たすように取ることができる。同様に Hermite 演算子の固有関数系も一般的に正規直交完全系を作る。また、完全性を表す関係式 Eq. (8.10) (8.12) を、後で出てくる Dirac の bracket を用いて、

$$\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = 1, \quad \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1 \quad (8.14)$$

と記すことがある。ただし、ここで現われる 1 の意味は、 $N \times N$ 行列の場合には単位行列、関数空間の場合には $\delta(x' - x)$ である。

[8.7] (エネルギーの固有状態による展開*)

エネルギーの固有状態 $\hat{H}\phi_n = E_n\phi_n$ を考えよう。Hamiltonian は Hermite 演算子であるから、前問での $N \times N$ Hermite 行列の場合と同様にその固有関数の組 $\{\phi_n(x)\}$ で正規完全直交系を作ることが出来る。

(1) この時、

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad c_n = \langle \phi_n | \psi(t=0) \rangle \equiv \int dx \phi_n^*(x) \psi(x, 0) \quad (8.15)$$

とおくと、この波動関数 $\psi(x, t)$ は Schrödinger 方程式の解となっていることを示せ。

すなわち、Hamiltonian の全ての固有値と固有関数が求まれば、任意の時刻での波動関数の求められることがわかる。

(2) この波動関数は

$$G(x, t; x', t') \equiv \sum_n \phi_n(x) \phi_n^*(x') e^{-iE_n(t-t')/\hbar}, \quad (8.16)$$

で定義される Green 関数を持ちいて、

$$\psi(x, t) = \int dx' G(x, t; x', 0) \psi(x', 0) \quad (8.17)$$

(より一般には $\psi(x, t) = \int dx' G(x, t; x', t') \psi(x', t')$) と表されることを示せ。

(3) 上の Green 関数は、次の意味で unitary 演算子であること

$$\int dy G(x, t; y, \tau) G^*(x', t; y, \tau) = \delta(x - x') \quad (8.18)$$

を示せ。

量子力学レポート問題 8.

- [R8.1] 質量 m の粒子の位置と運動量の期待値がどのように時間発展するかを波動関数を直接に求めずに調べてみよう。空間の次元は x 軸方向の 1 次元とする。自由粒子の Hamiltonian は、 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ と与えられる。また、時刻 $t = 0$ での波動関数が

$$\psi(x, t = 0) = \left(\frac{2\nu}{\pi}\right)^{1/4} \exp(-\nu x^2 + ik_0 x) \quad (8.19)$$

と与えられているとする。

- (1) 上で与えられた波動関数 (8.19) で、 $t = 0$ における位置と運動量の期待値・分散・相関 ($\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $(\Delta x)^2$, $(\Delta p)^2$, $\langle \psi | (\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) | \psi \rangle$) を求めよ。
- (2) 一般の時刻 t における位置・運動量期待値の時間微分 ($\frac{d\langle x \rangle}{dt}$, $\frac{d\langle p \rangle}{dt}$) を位置と運動量の期待値で表せ。
- (3) 一般の時刻 t における位置・運動量 2 乗期待値の時間微分 ($\frac{d\langle x^2 \rangle}{dt}$, $\frac{d\langle p^2 \rangle}{dt}$) をなんらかの期待値で表せ。
- (4) 一般の時刻 t における位置・運動量の期待値・分散・相関を求めよ。
(ヒント: $f(t) = \langle x^2 \rangle$, $g(t) = \langle \psi | (\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) | \psi \rangle$, $h(t) = \langle p^2 \rangle$ についての連立の微分方程式ができる。)