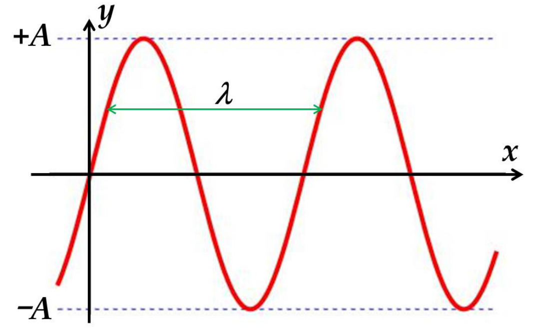
物理学演習 II　第 10 回　Schrödinger 方程式

2017 年 12 月 8 日　　担当：佐藤 純

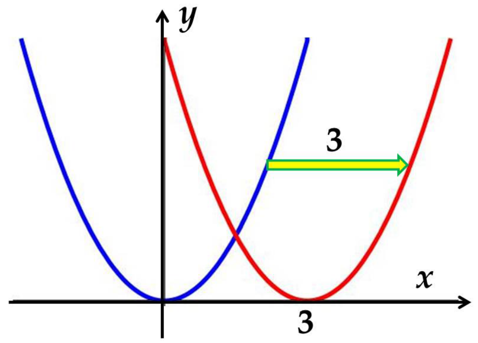
$\boxed{\text{問題 1}}$ [波を表す式]

(1-1) $y = A\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)$ のグラフを描け.



$\boxed{\text{振幅 } A\text{，波長 } \lambda \text{ の波を表す}}$

(1-2) $y = x^2$ と $y = (x-3)^2$ のグラフを重ねて描き，これら 2 つのグラフの関係を述べよ.



$\boxed{\text{右に 3 平行移動}}$

(1-3) 時刻 $t = 0$ の波形が $y = A\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)$ で表される波が，速度 c で x 軸の正方向に進んでいるとき，時刻 t における波形を表す式を書け.

時間 t の間に波は ct だけ進むので，ct だけ平行移動して $\boxed{y = A\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}(x-ct)\right)}$ となる.

(1-4) 波の波長 λ，速度 c，振動数 ν の間に成り立つ関係式を求めよ.

1 秒間に ν 個の波が進み，波ひとつの長さは λ なので，ν 個分の波の長さは $\nu\lambda$，つまり波は 1 秒間に $\nu\lambda$ だけ進むので，$\boxed{c = \nu\lambda}$ となる.

(1-5) 波の波数 k と，角振動数 ω を，

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = 2\pi\nu$$

で定義する．これを使って **(1-3)** で求めた波の式を書き直せ.

$y = A\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}(x-ct)\right) = A\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - 2\pi\frac{c}{\lambda}t\right) = A\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - 2\pi\nu t\right) = \boxed{A\sin(kx-\omega t)}$

(1-6) $f(x) = e^{\mathrm{i}x}$ とするとき，$f'(x)$ を求めよ．

$f'(x) = \mathrm{i}e^{\mathrm{i}x} = \mathrm{i}f(x)$

(1-7) $f(x) = \cos x + \mathrm{i}\sin x$ の微分 $f'(x)$ を計算し，$f'(x) = \mathrm{i}f(x)$ が成り立っていることを示せ．

$f'(x) = -\sin x + \mathrm{i}\cos x = \mathrm{i}(\cos x + \mathrm{i}\sin x) = \mathrm{i}f(x)$

問題 2 [Schrödinger 方程式]

(2-1) 波動関数を

$$\psi(x,t) = Ae^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$$

とする．偏微分 $\frac{\partial\psi}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial t}$ を計算せよ．

$\boxed{\frac{\partial\psi}{\partial x} = \mathrm{i}k\psi}$ $\boxed{\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\mathrm{i}\omega\psi}$

(2-2) 粒子性と波動性をつなぐ式 $E = h\nu,\ p = \frac{h}{\lambda}$ を使って，

$$E = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad p = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

を示せ．

まず，$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) = \mathrm{i}k\psi(x,t)$ より，$\frac{\partial}{\partial x} = \mathrm{i}k$ と考えることができる．また，$p = \frac{h}{\lambda}$ より，$k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi\frac{p}{h} = \frac{p}{\hbar}$ なので，$\frac{\partial}{\partial x} = \mathrm{i}\frac{p}{\hbar}$ より，$p = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ を得る．

同様に，$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\mathrm{i}\omega\psi(x,t)$ より，$\frac{\partial}{\partial t} = -\mathrm{i}\omega$ と考えることができる．また，$E = h\nu$ より，$\omega = 2\pi\nu = \frac{E}{\hbar}$ なので，$\frac{\partial}{\partial t} = -\mathrm{i}\frac{E}{\hbar}$ より，$E = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ を得る．

(2-3) 質量 m の粒子が運動量 p で運動しているとき，その運動エネルギーを求めよ．

$p = mv$ より，$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\left(\frac{p}{m}\right)^2 = \boxed{\frac{p^2}{2m}}$

(2-4) 質量 m の粒子がポテンシャル $V(x)$ の中を運動量 p で運動しているとき，粒子の全エネルギーは $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ と書けることから，Schrödinger 方程式

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

を導け．(これを，時間を含む Schrödinger 方程式という)

$E = \mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$,　$p = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ を $E = \dfrac{p^2}{2m} + V(x)$ に代入して，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

となるので，これを波動関数 $\psi(x,t)$ に作用させて，Schrödinger 方程式を得る．

(2-5) 波動関数 $\psi(x,t)$ が，t だけに依存する部分 $f(t)$ と x だけに依存する部分 $\varphi(x)$ に

$$\psi(x,t) = f(t)\varphi(x)$$

と分離できるとする．このとき，E を定数として，$\varphi(x)$ は微分方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

を満たすことを示せ.（これを，時間を含まない Schrödinger 方程式という）

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}\{f(t)\varphi(x)\} = f'(t)\varphi(x) \qquad (x \text{ を定数と見て，} t \text{ で微分})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\{f(t)\varphi(x)\} = f(t)\varphi''(x) \qquad (t \text{ を定数と見て，} x \text{ で微分})$$

これらに注意して，時間を含む Schrödinger 方程式

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

に $\psi(x,t) = f(t)\varphi(x)$ を代入すると，

$$\mathrm{i}\hbar f'(t)\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}f(t)\varphi''(x) + V(x)f(t)\varphi(x)$$

となる．これの両辺を $f(t)\varphi(x)$ で割ると，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{f'(t)}{f(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + V(x)$$

となるが，左辺は t だけの関数，右辺は x だけの関数なので，これらは定数でなければならない．その定数を E とおくと，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + V(x) = E$$

より，両辺に $\varphi(x)$ をかければ，時間を含まない Schrödinger 方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

を得る．