Schroedinger 方程式

BQ17007　生駒 海斗

平成 29 年 11 月 3 日

1　勉強動機

高校のときに Schroedinger 方程式の存在を知り、詳しく知りたいと思ったから。

2　波動関数

波動関数とは、ある系が量子論の法則に従って一定の運動をしているときに、その運動の状態[*1]を記述するもの。

2.1　粒子の存在確率

2.1.1　微小領域の中

ある粒子の振舞を示す波動関数 $\psi(x,y,z,t)$ が求められたとすると、時刻 t にこの粒子の位置測定をしたとき点 (x,y,z) を含む微小領域 dx,dy,dz 内に粒子が見出される確率は $|\psi(x,y,z,t)|^2dxdydz$ に比例する。

2.1.2　絶対確率

全空間について積分を

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,y,z,t)|^2dxdydz$$

とすると $\frac{|\psi(x,y,z,t)|^2dxdydz}{I}$ は絶対確率を表す。なぜなら、これを全空間にわたって積分したものは 1 となり、これは粒子がどこかには必ず存在することを示すからである。

3　Schroedinger 方程式

ψ の平面波を考えるとき、以下の条件であると $\boldsymbol{k}$ ベクトルの方向に進む平面波である。

$$\psi_1=A_1\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-wt+\delta)$$

$$\begin{cases}\boldsymbol{k}=(k_x,k_y,k_z)\\ \boldsymbol{r}=(x,y,z)\\ \omega:\text{角速度}\\ t,A_1,\delta:\text{一定}\end{cases}\tag{1}$$

これの式の右辺は $\psi=A_1e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t+\delta)}$ の実数部分になっている。$A_1e^{i\delta}\equiv A$ と記すと

$$\psi=Ae^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}\tag{2}$$

となる。(2) 式の ψ が自由粒子を表す波動関数であることを認めることとする。
(2) 式の ψ に対しては、

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hbar\omega\psi$$

という関係が成り立つ。de・Broglie の仮定により
エネルギー $\epsilon=\hbar\omega$ ということになっているので。また、
(1) および $\nabla=i\frac{\partial}{\partial x}+j\frac{\partial}{\partial y}+k\frac{\partial}{\partial z}$ を用いて

$$-i\hbar\nabla\psi=\hbar\boldsymbol{k}\psi$$

と表現できる。$\hbar\boldsymbol{k}=\boldsymbol{p}$ は粒子の運動量であるから、(2) 式の ψ に演算 ∇ を行って $-i\hbar$ を掛けるのは $\boldsymbol{p}$ を掛けることと同等である。

$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}=\hbar k_x\psi$ を微分すると、

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\hbar^2{k_x}^2\psi$$

が得られるから、$\Delta\equiv\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$(ラプラス演算子) を用いると

$$-\hbar^2\nabla^2\psi=\hbar^2({k_x}^2+{k_y}^2+{k_z}^2)\psi\tag{3}$$
$$=({p_x}^2+{p_y}^2+{p_z}^2)\psi=\boldsymbol{p}^2\psi\tag{4}$$

さらに、粒子としてのエネルギー $\epsilon(=\hbar\omega)$ と p の間には $\epsilon=\frac{1}{2m}p^2$ という関係があるから、ψ を掛けて $\frac{1}{2m}p^2\psi=\hbar\omega\psi$ が得られる。そして、$\hbar\boldsymbol{k}=\boldsymbol{p}$ より

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

という方程式が得られる。
この式のエネルギーに力のポテンシャル $(V(r)$ を加えると、

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

となり、これを時間を含む Schroedinger 方程式という。
さらに、ハミルトニアン $H\equiv-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})+V(r)$ という演算子を考えると、Schroedinger 方程式は

$$H\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

とシンプルな式になる。

4　感想

ソフトテニス部と両立して進めるのはすごく大変でした。今回のポスターにはあまり含まれていませんが特に重積分、ベクトル解析 (おもに Green の定理) を使えるようになるのにほとんどの時間を割いたと思います。基礎数学の知識が足りないと感じました。

5　今後の課題

基礎数学から勉強し直して、機械学習を使った研究をできるようにする。

参考文献

小出昭一郎著, 量子論, 裳華房,1968.

[*1] 量子状態という