シュレディンガー方程式の具体的な適用

2016 年 2 月 21 日

1　この章の目的

前章では量子力学の世界で成り立つ波動方程式である**シュレディンガー方程式**と，その解となる波動関数の物理的意味を解説した．この章ではそれらを使って量子がどのような振る舞いをするのかを解くことにする．

2　電子の位置エネルギー（ポテンシャルエネルギー）

図 1 のように水素原子の原子核に座標の原点を取る．電子の位置エネルギー V を求める．[*1]位置エネルギーは力を積分して求められるので，電子にかかるクーロン力のマイナス 1 倍である $-F$ を無限遠点から r まで積分する．

$$F = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

$$V = \int_{\infty}^{r} (-F)\,\mathrm{d}r = \int_{\infty}^{r} \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\mathrm{d}r = \left[-\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]_{\infty}^{r} = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

位置エネルギーの大きさのグラフ概形は図 2 のようになる．

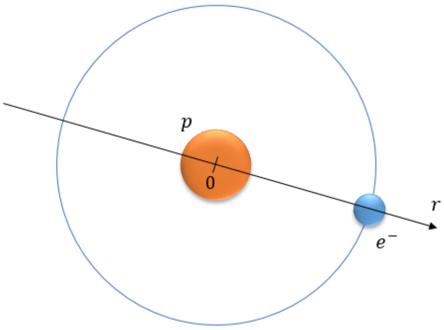

図 1　水素原子

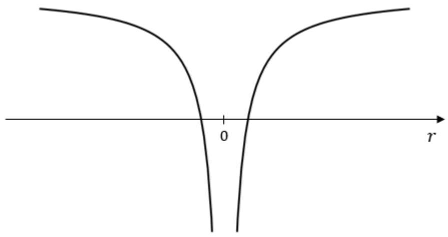

図 2　位置エネルギーの概形

3　井戸型ポテンシャル

ここでは具体的で簡単なモデルを考えて問題を解いていきたいので，図 2 をさらに単純な形にした，井戸型ポテンシャルを用いる．井戸型ポテンシャルとは位置エネルギーがある場所で 0 となり，それ以外の場所で一定の値（ここでは V_0）となるようなモデルである．式に表すと (1) 式となり，グラフは図 3 のようになる．

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}) \\ V_0 & (x \leq -\frac{a}{2}, x \geq \frac{a}{2}) \end{cases} \tag{1}$$

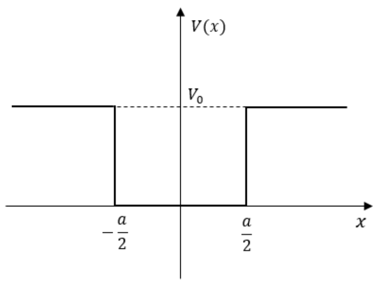

図 3　井戸型ポテンシャル

[*1] 位置エネルギーを V とおいているが，電位とは別の物理量である．

3.1　無限井戸型ポテンシャル

まずは，井戸の高さ V_0 が無限大だと考えて計算を行う．1 次元の場合を考えると，解くべきシュレディンガー方程式は (2) 式である．

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}\psi(x)=\varepsilon\psi(x) \tag{2}$$

(i) $-\frac{a}{2}\leq x\leq\frac{a}{2}$ のとき

このとき，$V(x)=0$ となるので，(2) 式は以下のようになる．

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=\varepsilon\psi(x) \tag{3}$$

変形すると

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\psi(x) \tag{4}$$

ここで，

$$k=\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \tag{5}$$

とおくと，

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=-k^2\psi(x) \tag{6}$$

と，簡潔な形になる．この微分方程式の一般解は

$$\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \tag{7}$$

である．[*2] A, B は積分定数である．この定数は，波動関数とその一階微分した関数が $x=\pm\frac{a}{2}$ で連続になるという条件（境界条件）を用いて実数化できる．そのために波動関数 ψ の一階微分も求めておくと

$$\psi'(x)=ikAe^{ikx}-ikBe^{-ikx} \tag{8}$$

となる．

(ii) $x\leq-\frac{a}{2}$ または $x\geq\frac{a}{2}$ のとき

このときは $V(x)=V_0$ となるので，

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_0\right\}\psi(x)=\varepsilon\psi(x) \tag{9}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-\varepsilon)\psi(x) \tag{10}$$

ここで，

$$\alpha=\sqrt{\frac{2m(V_0-\varepsilon)}{\hbar^2}} \tag{11}$$

とおくと，

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=\alpha^2\psi(x) \tag{12}$$

[*2] 応用数学 I - 「定数係数斉次線形微分方程式」

となるので，これを解けば

$$\psi(x) = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x} \tag{13}$$

となる．C, D は積分定数である．無限遠方で波動関数が発散しないという条件を用いると，$x \leq -\dfrac{a}{2}$ で $D = 0$ とし，$x \geq \dfrac{a}{2}$ では $C = 0$ とする必要がある．すなわち，

$$\psi(x) = Ce^{\alpha x} \qquad \left(x \leq -\frac{a}{2}\right) \tag{14}$$

$$\psi(x) = De^{-\alpha x} \qquad \left(x \geq \frac{a}{2}\right) \tag{15}$$

一階微分も求めると

$$\psi'(x) = \alpha Ce^{\alpha x} \qquad \left(x \leq -\frac{a}{2}\right) \tag{16}$$

$$\psi'(x) = -\alpha De^{-\alpha x} \qquad \left(x \geq \frac{a}{2}\right) \tag{17}$$

ここから境界条件を使って A, B, C, D を求めていく．$x = -\dfrac{a}{2}$ で (7) 式と (14) 式，および (8) 式と (16) 式が等しいので

$$Ae^{-ika/2} + Be^{ika/2} = Ce^{-\alpha a/2} \tag{18}$$

$$ikAe^{-ika/2} - ikBe^{ika/2} = \alpha Ce^{-\alpha a/2} \tag{19}$$

$x = \dfrac{a}{2}$ でも同様に，(7) 式と (15) 式，および (8) 式と (17) 式が等しいので

$$Ae^{ika/2} + Be^{-ika/2} = De^{-\alpha a/2} \tag{20}$$

$$ikAe^{ika/2} - ikBe^{-ika/2} = -\alpha De^{-\alpha a/2} \tag{21}$$

(18) 式，(19) 式を使って C を消去し，(20) 式，(21) 式を使って D を消去する．

$$A(\alpha - ik)e^{-ika/2} = -B(\alpha + ik)e^{ika/2} \tag{22}$$

$$-A(\alpha + ik)e^{ika/2} = B(\alpha + ik)e^{-ika/2} \tag{23}$$

(22) 式と (23) 式の左辺同士，右辺同士をそれぞれかけ合わせると $A^2 = B^2$ が得られ，次の関係が成り立つ．

$$A = \pm B \tag{24}$$

$A = B$ の関係を (7) 式に代入すると，

$$\psi(x) = A(e^{ikx} + e^{-ikx}) = 2A\cos(kx) \tag{25}$$

一方，$A = -B$ の関係を (7) 式に代入すると，

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA\sin(kx) \tag{26}$$

つまり，$A = B$ の関係のときは波動関数が偶関数となり，$A = -B$ の関係のときは奇関数となることがわかる．

ここで，(5) 式から電子のエネルギー ε を求めると，

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \tag{27}$$

となり，定数 k によって電子のエネルギー ε が決まるということがわかる．具体的な k の値を求めるため，まずは k と α の関係を求める．波動関数が偶関数のときには $A = B$ の関係が成り立つので，これを (18) 式，(19) 式に代入する．

$$Ce^{-\alpha a/2} = A(e^{-ika/2} + e^{ika/2}) = 2A\cos\left(\frac{ka}{2}\right) \tag{28}$$

$$\alpha Ce^{-\alpha a/2} = ikA(e^{-ika/2} - e^{ika/2}) = 2kA\sin\left(\frac{ka}{2}\right) \tag{29}$$

(29) 式の右辺を (28) 式の右辺で割り，(29) 式の左辺を (28) 式の左辺で割ると，以下の関係が得られる．

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{\alpha}{k} \tag{30}$$

次に，波動関数が奇関数のときには $A = -B$ の関係が成り立つので，同様に (18) 式，(19) 式に代入して k と α の関係を求める．

$$Ce^{-\alpha a/2} = A(e^{-ika/2} - e^{ika/2}) = -2iA\sin\left(\frac{ka}{2}\right) \tag{31}$$

$$\alpha Ce^{-\alpha a/2} = ikA(e^{-ika/2} + e^{ika/2}) = 2kiA\cos\left(\frac{ka}{2}\right) \tag{32}$$

$$\cot\left(\frac{ka}{2}\right) = -\frac{\alpha}{k} \tag{33}$$

V_0 は無限大なので，(11) 式の α も無限大になる．波動関数が偶関数のとき，(30) 式より，$\tan\left(\frac{ka}{2}\right)$ が無限大であることから，$\frac{ka}{2}$ が $\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \cdots$ でなければならない．よって，$\frac{ka}{2}$ は次の関係式を満たす．

$$\frac{ka}{2} = \frac{1}{2}(2m+1)\pi \quad (m = 0, 1, 2, \cdots) \tag{34}$$

波動関数が奇関数のときも同様に，(33) 式より，$\cot\left(\frac{ka}{2}\right)$ が無限大であることから，$\frac{ka}{2}$ が $\pi, 2\pi, 3\pi, \cdots$ でなければならないので次の関係式を満たす．

$$\frac{ka}{2} = n\pi \quad (m = 1, 2, 3, \cdots) \tag{35}$$

(34) 式と (35) 式の場合を合わせると，

$$ka = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \cdots) \tag{36}$$

という関係を満たさなければならないことがわかる．

(36) 式から得られる $k = \frac{n\pi}{a}$ を (27) 式に代入すると，

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (n = 1, 2, 3, \cdots) \tag{37}$$

となり，井戸型ポテンシャルの電子のエネルギーがとびとびの値を取ることがわかる．$n = 1$ のときに最もエネルギーが低くなり，この状態を**基底状態**と呼ぶ．また，$n = 2$ のときは**第一励起状態**と呼び，以降は第二励起状態，第三励起状態と続く．

また，$k = \frac{n\pi}{a}$ を使って波動関数を求めると，

$$n = 1, 3, 5, \cdots \text{のとき：} \quad \psi(x) = 2A\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{38}$$

$$n = 2, 4, 6, \cdots \text{のとき：} \quad \psi(x) = 2A\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{39}$$

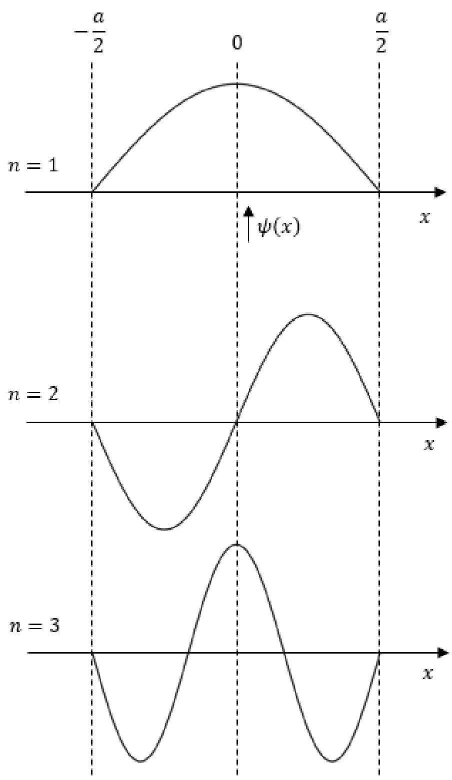

図 4　無限井戸型ポテンシャルの波動関数

となる．つまり，エネルギーの障壁の高さが無限大のときには，障壁の位置で波動関数の値が 0 になる．これは障壁の外に電子が存在しないことを意味する．$n = 1, 2, 3$ のときの波動関数の概形を図 4 に示す．

前章において，波動関数は粒子の存在確率を表すと述べた．そのため，波動関数の絶対値の 2 乗 $|\psi(x)|^2$ を全区間で積分したときの値を 1 とおく[*3]ことにより，残った積分定数 A を求めることができる．この手順を**規格化**と呼ぶ．

[*3] 確率はすべての場合を合わせたとき，1 であると定義されているため．

実際にその規格化を行ってみると，(38) 式より

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1 \tag{40}$$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \left\{ 2A\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right\}^2 \mathrm{d}x \\
&= 4A^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x
\end{aligned}$$

半角の公式[*4] $\cos\dfrac{\alpha}{2} = \dfrac{1+\cos\alpha}{2}$ を用いれば，

$$\begin{aligned}
4A^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x &= 4A^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \left(\frac{1+\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2} \right) \mathrm{d}x \\
&= 2A^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \left\{ 1+\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right\} \mathrm{d}x \\
&= 2A^2 \left[x + \frac{a}{2n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right]_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \\
&= 2A^2 a \\
&= 1
\end{aligned}$$

$$\therefore A = \frac{1}{\sqrt{2a}} \tag{41}$$

結局，無限井戸型ポテンシャルの波動関数は以下のようになる．

$$n = 1, 3, 5, \cdots \text{のとき：} \quad \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{42}$$

$$n = 2, 4, 6, \cdots \text{のとき：} \quad \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{43}$$

[*4] 基礎数学 II - 「加法定理から導かれる公式」

3.2　有限井戸型ポテンシャル

この場合，(11) 式の α が無限大にならないので，(36) 式の関係が成り立たない．すると，$x=\pm\frac{a}{2}$ において波動関数 $\psi(x)$ が 0 とならず，有限の値を持つようになる．ただし，(24) 式の関係は成り立っているので，波動関数は $\sin(kx), \cos(kx)$ という形のままである．有限井戸型ポテンシャルの波動関数の概形を図 5 に示す．

この図より，電子が障壁を超えて存在していることがわかる．これは，壁に向かって投げ上げたボールが，壁の高さに達していない（つまり，ボールが壁を超えるのに必要な位置エネルギーを獲得していない）にも関わらず，ある確率で壁の向こうに抜けてしまうと例えることができる．そのような現象はありえないことである．量子力学の世界では古典力学ではありえないことが起こるのである．このような原理で電子などがエネルギー障壁を通り抜けてしまうことを**トンネル現象**という．

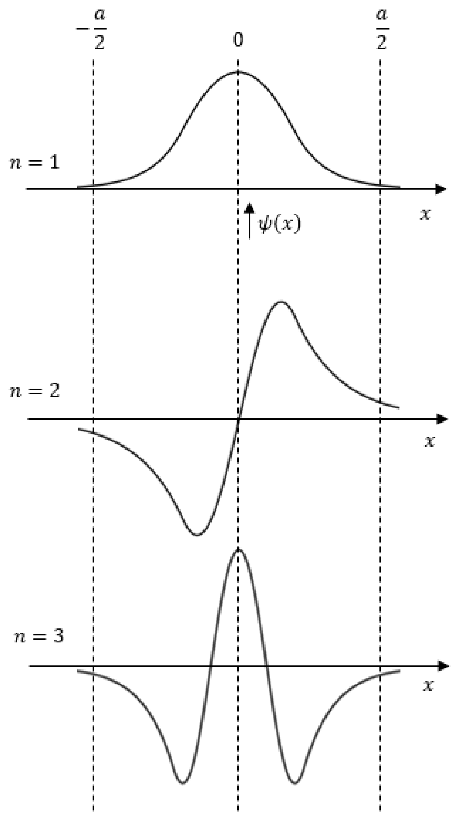

図 5　有限井戸型ポテンシャルの波動関数

4　調和振動子へのシュレディンガー方程式の適用

調和振動とは単振動のことである．なぜここで調和振動を扱うかというと，物質中の原子の動きを表すモデルとして使えるからである．物質に熱を与えれば，物質中の原子は振動する．その振動は無秩序なものではなく，原子と原子がバネのようなものでつながっていて，調和振動すると考えられている．このため，量子力学の初歩的な問題として，調和振動子が扱われる．

問題を簡単にするため，ここでも一次元について考える．シュレディンガー方程式のために，まずは調和振動の位置エネルギーを求めておく．バネにつながれたおもりにかかる力は，バネ定数を k とすると

$$F = -kx \tag{44}$$

であった．[*5] これより積分で位置エネルギー $V(x)$ を求めれば以下のようになる．

$$\begin{aligned} V(x) &= \int_0^x (-F)\mathrm{d}x \\ &= \int_0^x kx\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2}kx^2 \end{aligned}$$

実際の原子はバネでつながれているわけではないので，k を角周波数 ω で表しておくと

$$\begin{aligned} &\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \\ &\therefore k = m\omega^2 \end{aligned}$$

となるので位置エネルギー $V(x)$ は

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{45}$$

と表せる．定常状態のシュレディンガー方程式を改めて示すと

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right\}\psi(x) = \varepsilon\psi(x) \tag{46}$$

であるが，ここでは位置の記号として x ではなく q を使うことにする．（慣例による）

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2} + V(q)\right\}\psi(q) = \varepsilon\psi(q) \tag{47}$$

これに $V(q)$ を代入すると解くべき方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right)\psi(q) = \varepsilon\psi(q) \tag{48}$$

となる．さらに，これを簡潔にするために以下のような変数変換を行う．

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q \tag{49}$$

こうおけば

$$\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}q} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \qquad \frac{\mathrm{d}^2\xi}{\mathrm{d}q^2} = 0 \tag{50}$$

[*5] 物理 II - 「単振動」

となり，波動関数を ξ の関数 $\psi(\xi)$ として見れば，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\psi(q) = \frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}q}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi(\xi) = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi(\xi) \tag{51}$$

$$\begin{align}
\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q^2}\psi(q) &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}q}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi(\xi) + \frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}q}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi(\xi)\right) \tag{52}\\
&= \frac{\mathrm{d}^2\xi}{\mathrm{d}q^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi(\xi) + \frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}q}\left(\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}q}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi(\xi)\right) \tag{53}\\
&= \left(\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}q}\right)^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi(\xi) \tag{54}\\
&= \frac{m\omega}{\hbar}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi(\xi) \tag{55}
\end{align}$$

という関係が得られる．(51) 式は合成関数の微分法，(52)〜(55) 式はそれに加えて積の微分法を使用している．これらの関係を使うと (48) 式は以下のようになる．

$$\frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} + \xi^2\right)\psi(\xi) = \varepsilon\psi(\xi) \tag{56}$$

ハミルトニアン H を

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} + \xi^2\right) \tag{57}$$

とおけば，(56) 式は

$$H\psi(\xi) = \varepsilon\psi(\xi) \tag{58}$$

となる．

ここで，以下のような演算子を定義する．

$$b^+ \equiv \sqrt{\frac{1}{2}}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + \xi\right), \qquad b \equiv \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + \xi\right) \tag{59}$$

b^+ を生成演算子，b を消滅演算子と呼ぶ．[*6]なぜこのように呼ぶかというと，この演算子をシュレディンガー方程式に施すと，粒子が生成されたり，消滅するからである．粒子が生成，消滅するということは，エネルギーが増えたり，減ったりするということである．これは，原子核のまわりを回る電子が増えるごとに，より外側の電子軌道を回る，つまり電子のエネルギーが高くなるとイメージするとわかりやすいであろう．試しに，消滅演算子 b を (58) 式の両辺に施す．

$$bH\psi(\xi) = \varepsilon b\psi(\xi) \tag{60}$$

もとのシュレディンガー方程式では，波動関数 ψ で表される粒子の，エネルギー ε にあたる演算子がハミルトニアン H なのであった．b を施したあとでは，$b\psi(\xi)$ で表される，エネルギーの下がった粒子がどうなるかを求めたい．そのためには，左辺でも $b\psi(\xi)$ の形を作り出す必要がある．b と H は数ではなく演算子なので，単純に交換することはできない．交換のようなことをするために，まずは生成消滅演算子の積を求める．

$$\begin{aligned}
b^+b &= \frac{1}{2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + \xi\right)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + \xi\right)\\
&= \frac{1}{2}\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\xi + \xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + \xi^2\right)\\
&= \frac{1}{2}\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} - 1 + \xi^2\right)
\end{aligned}$$

[*6] これらの演算子は $\frac{1}{2}\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} + \xi^2\right)$ を因数分解したもののように見えるが，$\xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$ と $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\xi$ は等価ではないので，そうではない．

$$\therefore b^+b = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2} \tag{61}$$

同様に bb^+ も求める．

$$bb^+ = \frac{1}{\hbar\omega}H + \frac{1}{2} \tag{62}$$

(61) 式に左から b をかける．

$$bb^+b = b\left(\frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}\right) \tag{63}$$

一方，(62) 式より，

$$bb^+b = \left(\frac{1}{\hbar\omega}H + \frac{1}{2}\right)b \tag{64}$$

これを展開すると

$$\frac{1}{\hbar\omega}Hb + \frac{1}{2}b = \frac{1}{\hbar\omega}Hb - \frac{1}{2}b \tag{65}$$

整理すると

$$bH = Hb + \hbar\omega b \tag{66}$$

これを (60) 式に代入して整理する（$b\psi(\xi)$ の形を作る）と，

$$Hb\psi = (\varepsilon - \hbar\omega)b\psi \tag{67}$$

となる．b と H が交換され，右辺ではエネルギーの項が $\varepsilon - \hbar\omega$ に置き換わっている．粒子が持つエネルギーは $\hbar\omega$ の整数倍であったので，エネルギーが 1 段階下がっていることがわかる．

今度は (58) 式の両辺に生成演算子 b^+ を施す．

$$b^+H\psi(\xi) = \varepsilon b^+\psi(\xi) \tag{68}$$

(62) 式に左から b^+ をかける．

$$b^+bb^+ = b^+\left(\frac{1}{\hbar\omega}H + \frac{1}{2}\right) = \left(\frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}\right)b^+ \tag{69}$$

$$b^+H = Hb^+ - \hbar\omega b^+ \tag{70}$$

これを (68) 式に代入して整理すると，

$$Hb^+\psi = (\varepsilon + \hbar\omega)b^+\psi \tag{71}$$

(67) 式とは逆に，エネルギーが 1 段階上がっていることがわかる．

ところで，井戸型ポテンシャルの問題では最低エネルギーの状態を基底状態と呼ぶことを述べた．そこで，基底状態の波動関数を $\psi_0(\xi)$，エネルギーを ε_0 と表すことにする．[*7] そのときのシュレディンガー方程式

$$H\psi_0 = \varepsilon_0\psi_0 \tag{72}$$

に消滅演算子を施すと，

$$Hb\psi_0 = (\varepsilon_0 - \hbar\omega)b\psi_0 \tag{73}$$

となる．しかし，最低のエネルギー ε_0 より低いエネルギーは存在しないはずなので，

$$b\psi_0 = 0 \tag{74}$$

[*7] 井戸型ポテンシャルでは $n = 1$ を基底状態としたので注意が必要である．また，この章冒頭の ε_0 は真空中の誘電率を表すが，これにも注意すべきである．

が成り立つ必要がある．この両辺に左から b^+ をかけると，

$$b^+b\psi_0 = \left(\frac{1}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)\psi_0 = 0 \tag{75}$$

2 項目と 3 項目を整理すれば,

$$H\psi_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega\psi_0 \tag{76}$$

となる．つまり，基底状態のエネルギー ε_0 は

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{77}$$

であることがわかった．第 n 励起状態のエネルギー ε_n は，エネルギーが $\hbar\omega$ きざみで飛び飛びの値を取ることから，

$$\varepsilon_n = \left(\frac{1}{2} + n\right)\hbar\omega \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots) \tag{78}$$

となる．生成消滅演算子によってエネルギーが変わる様子をまとめると，図 6 のようになる．

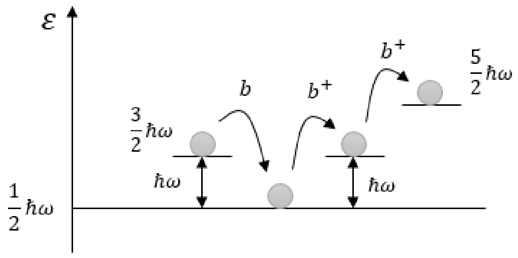

図 6　生成消滅演算子

(74) 式から $\psi_0(\xi)$ を求める．

$$\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + \xi\right)\psi_0(\xi) = 0 \tag{79}$$

変数分離法を用いて解くと

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi_0 = -\xi\psi_0 \\
&\int \frac{1}{\psi_0}\mathrm{d}\psi_0 = -\int \xi \mathrm{d}\xi \\
&\ln|\,\psi_0\,| = -\frac{1}{2}\xi^2 + A \qquad (A\text{ は積分定数}) \\
&\psi_0 = \pm e^{-\frac{1}{2}\xi^2 + A} \\
&\therefore \psi_0(\xi) = N_0 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \qquad (\because N_0 \equiv \pm e^A)
\end{aligned}$$

ξ を q に戻すと

$$\psi_0(q) = N_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2} \tag{80}$$

規格化を行う．

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} |\,\psi_0(q)\,|^2 \mathrm{d}q &= N_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}q^2} \\
&= N_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}q^2}
\end{aligned}$$

ここで，ガウス積分[*8]を用いると

$$
\begin{aligned}
N_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}q^2} &= N_0^2 \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} \\
&= 1
\end{aligned}
$$

であるから，

$$
\therefore N_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \tag{81}
$$

となる．よって，

$$
\psi_0(q) = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2} \tag{82}
$$

と求まる．第 n 励起状態の波動関数 $\psi_n(q)$ は，b^+ をかけていくことで求められるので，b^+, b も ξ から q に戻す．(59) 式と (49),(51) 式より

$$
\begin{aligned}
b^+ &= \left(-\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} + \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q \right) \\
b &= \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} + \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q \right)
\end{aligned}
$$

となる．

また，第 n 励起状態の波動関数 $\psi_n(\xi)$ の一般形は，

$$
\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^+)^n \psi_0(\xi) \tag{83}
$$

である．$\dfrac{1}{\sqrt{n!}}$ は規格化部分であるが，なぜこうなるのかは証明が難しいのでここでは省略する．

参考文献

[1] 岸野 正剛. **納得しながら 量子力学**. 朝倉書店, 2013.

[2] 小出 昭一郎 and 水野 幸夫. **量子力学演習**. 裳華房, 1978.

[*8] 解析学基礎 - 「広義積分」，用語解説参照