

2022 年 6 月 2 日

提案者：松田 修

1924 年，フランスの物理学者ルイ・ド・ブロイは，光子のエネルギー E と運動量 p が，それぞれ $E = h\nu$ ， $p = h/\lambda$ は，電子に対しても成り立つとした．ここで， h はプランク定数， ν は振動数， λ は光の波長である．

さて，電子の運動を波（電子波，ド・ブロイ波）と考え， m を電子の質量， v を速度とすると，ニュートン力学においては，

$$E = \frac{mv^2}{2}, \quad p = mv \quad (1)$$

が成り立つので，

$$\frac{mv^2}{2} = h\nu, \quad mv = \frac{h}{\lambda} \quad (2)$$

が得られる．よって，

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (3)$$

が得られる． λ をド・ブロイ波長と呼ぶ．

ド・ブロイ波 ψ を複素関数と考えると，

$$\psi = Ae^{i2\pi(\frac{x}{\lambda} - \nu t)} = Ae^{i2\pi(px - Et)} \quad (4)$$

となる．ここで A は実数の定数である．これより，

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = p\psi \quad (5)$$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi \quad (6)$$

ここで， $\hbar = h/2\pi$ である．

1926 年，オーストリアの物理学者エルヴィン・シュレーディンガーは，量子力学の基礎となるシュレディンガー方程式を提示した．以下，それを導出する．

二つの式(5)と(6)から， p と E を

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad E = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \quad (7)$$

という演算子として考える．そして，粒子（電子など）に働く力のポテンシャルを $V(x)$ とすると，エネルギー保存の法則

$$\frac{1}{2m} p^2 + V(x) = E$$

と，式(7)から

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + V(x) \right] \psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (8)$$

が得られる．これを整理して，

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (9)$$

を得る．また， E が一定の場合は，(7)を用いて

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi = E \psi \quad (10)$$

と書き直す．式(9)と(10)をシュレディンガー方程式，そして， ψ を波動関数と呼ぶ．

シュレディンガー方程式は，粒子（電子など）の運動を表す方程式である．しかし，量子力学には，粒子の運動において，速度と運動量を同時に正確に測定することができないという不確定性原理がある．そのため，波動関数 ψ の2乗 $|\psi|^2$ は粒子を見出す確率として扱われる．すなわち，

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (11)$$

と考える．

以下，シュレディンガー方程式に関する演習を行う．

演習

E を定数としてシュレディンガー方程式(10)において， $V(x) \equiv 0$ とする．以下の問いに答えよ．

問1．シュレディンガー方程式(10)，すなわち，

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

を解け．

問2．境界条件として $\psi(0) = 0$ とする（すなわち， $x = 0$ に壁があるとする）．このとき， $E \geq 0$ でなければならないことを証明せよ．

問3． L の正の定数とし，境界条件として $\psi(0) = \psi(L) = 0$ とする（すなわち， $x = 0$ と $x = L$ に壁があるとする）．このとき， $E = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ となることを証明せよ．ただし， n は1以上の整数である．

解答

問 1

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + E\psi = 0$$

の特性方程式は、変数を ξ とすると、

$$\frac{\hbar^2}{2m} \xi^2 + E = 0$$

より、

$$\xi = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} i$$

よって、

$$\psi = C_1 \cos \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x + C_2 \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x$$

問 2 $\psi(0) = 0$ より、 $C_1 = 0$ である。よって、

$$\psi = C_2 \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x$$

である。もし、 $E < 0$ なら、

$$\begin{aligned} \psi &= C_2 \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x = C_2 \left(\frac{e^{i\sqrt{2mE}x} - e^{-i\sqrt{2mE}x}}{2i} \right) = C_2 \left(\frac{e^{-\sqrt{2m|E|x}} - e^{\sqrt{2m|E|x}}}{2i} \right) \\ &= \frac{-C_2}{i} \sinh \sqrt{2m|E|x} \end{aligned}$$

となり、 $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = \infty$ となり式(11)に反する。したがって、 $E \geq 0$ でなければならない。

問 3. $\psi(0) = 0$ より、

$$\psi = C_2 \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x, \quad E \geq 0$$

である (問 2)。さらに、 $\psi(L) = 0$ より、

$$C_2 \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L = 0$$

よって、

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L = n\pi$$

であり、 n は1以上の整数である。したがって、

$$E = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$