

ぼよぼよ量子波束ダイナミクスの厳密解

佐藤駿丞

December 22, 2024

このノートの最新版は、下記のURLからアクセス出来ます。
https://shunsuke-sato.github.io/page/etc/wavepacket_in_quantum_well/index_ja.html

1 問題設定

時間に依存するシュレディンガー方程式を厳密に解ける例として、無限に深い井戸型ポテンシャル中に閉じ込められた波束の運動について考えてみよう。まず、幅 L の無限に深い井戸型ポテンシャルの基底状態にいる粒子を考える。この井戸型ポテンシャル $V_L(x)$ は

$$V_L(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq L) \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

によって与えられているものとする。

次に、時刻 $t = 0$ で井戸型ポテンシャルの幅が瞬時に倍になり、次のようなポテンシャルに変化することを考える。

$$V_{2L}(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq 2L) \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

このようにポテンシャルの幅が倍に変化した後の量子波束のダイナミクスを、次のような時間に依存するシュレディンガー方程式を解いて調べてみよう。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H}_{2L} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{2L}(x) \right] \psi(x, t). \quad (3)$$

2 準備その1：時間に依存しないシュレディンガー方程式の解

時間に依存するシュレディンガー方程式[式(3)]を解く準備として、井戸型ポテンシャル $V_L(x)$ と $V_{2L}(x)$ の時間に依存しないシュレディンガー方程式を解き、それぞれのポテンシャルに対する固有状態を求めてみよう。

ポテンシャル $V_L(x)$ に対するシュレディンガー方程式は、領域 $(0 \leq x \leq L)$ において次のように書ける。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u_L(x) = E u_L(x). \quad (4)$$

あるエネルギー E に対するこの微分方程式の一般解は次のように書ける。

$$u_L(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (5)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (6)$$

領域($0 \leq x \leq L$)の外側では、ポテンシャル $V_L(x)$ は無有限大となり、波動関数 $u_L(x)$ の値はゼロとなる。したがって、領域の境界($x = 0$ 及び $x = L$)で波動関数が連続となるためには、波動関数は境界条件

$$u_L(0) = u_L(L) = 0 \quad (7)$$

を満たす必要がある。式(5)の一般解のうち、境界条件、式(7),を満たす解は、次のように与えられる。

$$u_{L,n}(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right). \quad (8)$$

ここで、 n は自然数(1以上の整数)である。したがって、規格化された固有状態の波動関数 $u_{L,n}(x)$ 及びエネルギー固有値 $E_{L,n}$ は次のように与えられる。

$$u_{L,n}(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & (0 \leq x \leq L) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (9)$$

$$E_{L,n} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} n^2. \quad (10)$$

同様に、幅 $2L$ の井戸型ポテンシャル $V_{2L}(x)$ に対するシュレディンガー方程式の固有状態 $u_{2L,n}(x)$ 、及びエネルギー固有値 $E_{2L,n}$ を次のように求めることができる。

$$u_{2L,n}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{2L}x\right) & (0 \leq x \leq 2L) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (11)$$

$$E_{2L,n} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m L^2} n^2. \quad (12)$$

ここで、 n は自然数である。

3 準備その2: 初期波動関数の展開

時間に依存するシュレディンガー方程式を解く準備として、時刻0における初期波動関数 $\psi(x, t = 0)$ を、幅 $2L$ の井戸型ポテンシャルの固有状態 $u_{2L,n}(x)$ で展開することを考える。初期波動関数は、幅 L の井戸型ポテンシャルの基底状態であるため、

$$\psi(x, t = 0) = u_{L,n=1}(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) & (0 \leq x \leq L) \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (13)$$

によって与えられる。

次のように、 $\psi(x, t = 0)$ を $u_{2L,n}(x)$ を用いて展開する:

$$\psi(x, t = 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_{2L,n}(x). \quad (14)$$

ここで、 c_n は展開係数である。この展開係数を求めるためには、式(14)の両辺に $u_{2L,k}^*(x)$ を掛け、全空間で積分を行えばよい。その結果、固有関数の正規直交性($\int_{-\infty}^{\infty} dx u_{2L,k}^*(x) u_{2L,n}(x) = \delta_{kn}$)より、次のような式を得る。

$$\begin{aligned} c_k &= \int_{-\infty}^{\infty} dx u_{2L,k}^*(x) \psi(x, t = 0) \\ &= \int_0^L dx \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{k\pi}{2L}x\right) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{L} \int_0^L dx \sin\left(\frac{k\pi}{2L}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right). \end{aligned} \quad (15)$$

ここで、 $s = x/L$ と変数変換して具体的に積分を実行することで、展開係数は次のように与えられる。

$$c_k = \sqrt{2} \int_0^1 ds \sin\left(\frac{k\pi}{2}s\right) \sin(\pi s) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{2} & k = 2 \\ \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{4 \sin(\frac{k\pi}{2})}{4 - k^2} & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$= \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{2} & k = 2 \\ (-1)^{\frac{k+3}{2}} \frac{1}{\pi} \frac{4\sqrt{2}}{4 - k^2} & k \text{ is odd} \\ 0 & k \text{ otherwise} \end{cases} \quad (16)$$

図 1 に、厳密な初期波動関数 $\psi(x, t = 0) = u_{L, n=1}(x)$ と式(14)の和を $n = 101$ で打ち切った場合の近似波動関数 $\psi^{\text{approx}}(x)$ とを比べた結果を示す。近似波動関数によって、厳密な波動関数を良く再現できていることが確認できる。

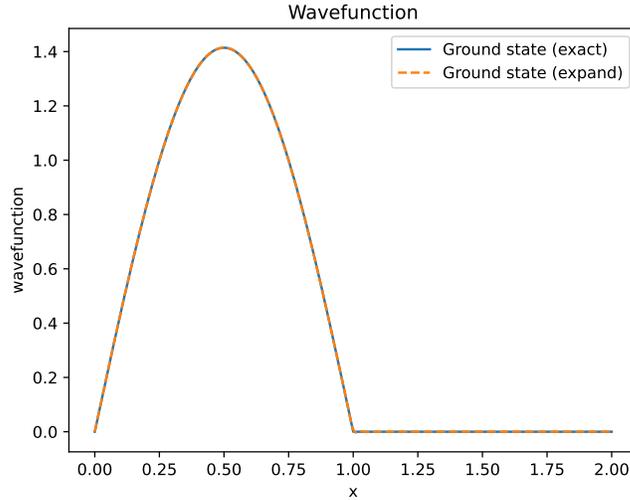


Figure 1: 厳密な初期波動関数と固有関数展開を $n = 101$ で打ち切った場合の波動関数の比較。ここでは、 $m = \hbar = L = 1$ として数値計算を行った。

4 波動関数の時間発展

節 3 及び節 2 で行った準備をもとに、波動関数の時間発展を行う。時間に依存しないハミルトニアン \hat{H} の下での波動関数の時間発展は、次のようなシュレディンガー方程式によって記述される。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t). \quad (17)$$

この運動方程式を、時刻 $t = 0$ から解いた際の形式解は次のように書くことができる。

$$\psi(x, t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right] \psi(x, 0). \quad (18)$$

ここで、演算子の指数関数は、次のようなテイラー展開によって定義されているものとする。

$$\exp[\hat{A}] = \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n. \quad (19)$$

ここで、 \hat{A} は任意の演算子であり、 \hat{I} は恒等演算子である。

式(18)を式(17)に代入することで、実際にシュレディンガー方程式の解になっていることを確認することができる。また、式(18)に $t = 0$ を代入することで、波動関数 $\psi(x, t)$ が時刻0の波動関数 $\psi(x, 0)$ を再現することも確認できる。このことから、時刻0から時刻 t までの波動関数の時間発展を記述する演算子[時間発展演算子 $\hat{U}(t, 0)$]は、次のように書けることが分かる。

$$\hat{U}(t, 0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t \right]. \quad (20)$$

この時間発展演算子 $\hat{U}(t, 0)$ を、式(13)の初期波動関数 $\psi(x, 0)$ に作用させることで、波動関数を時間発展させることを考えてみよう。ただし、時刻($t \geq 0$)においてはポテンシャルは幅 $2L$ の井戸型ポテンシャルになっており、この系のハミルトニアンは次の式で与えられていることに注意しよう。

$$\hat{H}_{2L} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{2L}(x). \quad (21)$$

このハミルトニアンを用いた時間発展演算子を作用させることで、時刻 t における波動関数は、次のように書くことができる。

$$\psi(x, t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{2L}t \right] \psi(x, 0). \quad (22)$$

ここで、式(14)を用いて、初期波動関数 $\psi(x, 0)$ を \hat{H}_{2L} の固有状態で展開してみると、次のような式を得る。

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{2L}t \right] \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_{2L,n}(x) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{2L}t \right] u_{2L,n}(x) \end{aligned} \quad (23)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_{2L,n}t \right] u_{2L,n}(x). \quad (24)$$

ここで、 $u_{2L,n}(x)$ が \hat{H}_{2L} の固有状態である $[\hat{H}_{2L}u_{2L,n}(x) = E_{2L,n}u_{2L,n}(x)]$ ことを用いて、時間発展演算子中のハミルトニアン演算子 \hat{H}_{2L} を固有値 $E_{2L,n}$ で置き換えた。このような操作が許されるのは、演算子の指数関数が式(19)のようなテイラー展開で定義されていることに立ち返れば容易に確かめられる。

式(24)において、展開係数 c_n 、エネルギー固有値 $E_{2L,n}$ 及び固有関数 $u_{2L,n}(x)$ はそれぞれ具体的に求められているので、時刻 $t \leq 0$ における波動関数 $\psi(x, t)$ が厳密に求められたことになる。領域($0 \leq x \leq 2L$)において、この厳密解を纏めると次のようになる。

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8mL^2} t \right] \sin \left(\frac{n\pi}{2L} x \right), \quad (25)$$

$$c_n = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{2} & n = 2 \\ (-1)^{\frac{k+3}{2}} \frac{1}{\pi} \frac{4\sqrt{2}}{4-n^2} & n \text{ is odd} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (26)$$

得られた厳密解、式(25)、用いて、井戸型ポテンシャルの中の波束のダイナミクスを調べてみよう。実際に波動関数を評価する際は、無限項の和を取ることは難しいので、次のように有限項の和からなる近似的な波動関数を図示してみよう。

$$\psi^{\text{approx}}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=1}^{N_{\max}} c_n \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8mL^2} t \right] \sin \left(\frac{n\pi}{2L} x \right). \quad (27)$$

実際に、式(27)の有限項の和により波動関数 $\psi^{\text{approx}}(x, t)$ を評価し、さらに確率密度 $|\psi^{\text{approx}}(x, t)|^2$ のダイナミクスの動画を作るPythonコードを作成し、参考のために下記のURLへアップロードした。

https://shunsuke-sato.github.io/page/etc/wavepacket_in_quantum_well/qm_wide_well.py このコードの実行には、環境によって12分の時間を要する。また、完成した量子波束のダイナミクスの動画を下記のURLへアップロードした。

https://shunsuke-sato.github.io/page/etc/wavepacket_in_quantum_well/index_ja.html