シュレディンガーの波動方程式 1

2007.6.21

シュレディンガーは、2重スリットの実験に対して、電子波すなわち電子は雲のように実質的に広がったものであると考えた。つまり、電子の雲はスリットで二手に分かれてそこを通り抜け、互いに干渉すると主張した。そして、波動関数 $\psi(x,t)$ というものが、電子波の状態を表わすと考えた。
プサイ

$\psi(x,t)\,dx$ は、ある時刻 t で位置 x と $x+dx$ の間にある電子波の状態を表わす。

シュレディンガーが1926年に波動方程式（シュレディンガー方程式とも呼ばれる）を発表するよりも前に、エネルギー E、運動量 p の電子（粒子的概念）が波動性をもつことが回折実験等から分っていた。また、振動数 ν と波長 λ とは「アインシュタイン、ドブロイの関係」と呼ばれる

$$E = h\nu,\quad p = \frac{h}{\lambda} \quad \left(E = \frac{p^2}{2m} \right) \qquad ①$$

により、粒子的概念である E と p に関係づけられていた。

シュレディンガーは古典論からの類推に基づき波動関数 $\psi(x,t)$ を波の式で表わした。

$$\psi(x,t) = a\exp\left\{2\pi i\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)\right\} \qquad ②$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{p}{h}$$

①を用いて②を書き直すと $\left(\hbar = \frac{h}{2\pi},\ \frac{1}{\lambda} = \frac{p}{h}\right)$

$$\psi(x,t) = a\exp\left\{2\pi i\left(\frac{p}{h}x - \frac{E}{h}t\right)\right\}$$
$$= a\exp\left\{\frac{2\pi}{h} i\,(px - Et)\right\}$$
$$= a\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right\} \qquad ③$$

$\exp x = e^{x}$

$y = e^{ax+b}$

$\frac{\partial y}{\partial x} = ae^{ax+b}$

となる。③を t について微分すると、

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\,\underbrace{a\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right\}}_{=\psi}$$

両辺に $i\hbar$ を掛けると

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi} \qquad ④$$

また、③を x について2回微分すると、

1回目 $$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \left(\frac{i}{\hbar}p\right) a\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right\}$$

2回目 $$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar}p\right)\left(\frac{i}{\hbar}p\right) a\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right\}$$
$$= -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \qquad ⑤$$

$E = \frac{p^2}{2m}$ であるから $E\psi = \frac{1}{2m}p^2\psi$。すると⑤から $E\psi = \frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)$。

これを④に入れると

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}} \qquad ⑥$$

1次元の自由粒子に対する波動方程式

電子の運動が3次元のときには 運動量はベクトル $\mathbb{p}$ で与えられる。

$$\because \ \mathbb{p} = p_x + p_y + p_z$$

このとき③の式は次のように書ける。

$$\psi(\mathbb{r}, t) \equiv \psi(x, y, z, t) = a\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbb{p}\cdot\mathbb{r} - Et)\right\}$$

t について 微分した結果は ④と同じで

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

となる。

$\mathbb{r}$ について微分した結果は grad という記号を用いて

$$\frac{\hbar}{i}\,\mathrm{grad}\,\psi = \mathbb{p}\psi$$

となる。

$\mathrm{grad}\,\psi = \nabla\psi$
$= \left[\frac{\partial\psi}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial y}, \frac{\partial\psi}{\partial z}\right]$
のこと。
$\nabla = \left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right]$
のこと。

$$E = \frac{\mathbb{p}^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

ラプラシアン Δ

を用いると、

はなれている Δ と ψ

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi} \quad ⑦$$

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

3次元シュレディンガー方程式

が得られる。Δ はラプラシアンと呼ばれる。ここで、演算子 H というものを導入すると、（H は ハミルトン演算子 $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ で与えられるもの）

⑦は

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi} \quad ⑧$$

H は次にくる関数に演算をするもの。
H はエネルギーであり、運E と ポテンシャルE を足したもの。

と書ける。

一般に⑧が 波動方程式 または シュレーディンガー方程式 と呼ばれている。（の形）

- -

微分 = 微少な変化 のこと。 ⑧の左辺は ψ の微少な時間変化という意味。

具体的に

"右辺のエネルギーが分かれば、ψ の時間変化が計算できる"
という意味の式。あるいは「ψ を微分すれば ψ になる」という意味にも解釈できる。