簡単な Schrödinger 方程式の導出

波長λ、振動数νの波は

$$\psi = A\sin\left(2\pi(\frac{x}{\lambda}-\nu t)\right) \qquad (2.1)$$

のように表される。x=0 の位置で考えると、関数の値は時間と共に振動しており、１秒間にν回振動することになる。図 2.1 は定常的な波の関数

$$\psi = A\sin\left(2\pi\frac{x}{\lambda}\right) \qquad (2.2)$$

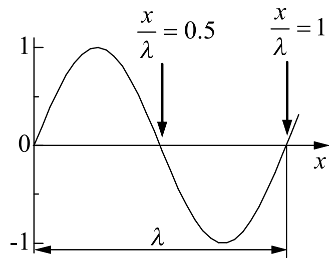

図 2.1 sin 関数で表された波

のプロットである。この波は 1 波長λごとに同じ形（位相）を持っている。

この式の 1 次微分は

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{2\pi}{\lambda}A\cos\left(2\pi\frac{x}{\lambda}\right) \qquad (2.3)$$

2 次微分は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 A\sin\left(2\pi\frac{x}{\lambda}\right) \qquad (2.4)$$

であるので、ψを使って書き直すと、微分方程式

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi \qquad (2.5)$$

が得られる。この式は図 2.1 のような定常的な波動を表す微分方程式で、波動方程式と呼ばれる。音や光のような波動はこの式に従った定在波を立てる。粒子も波動性を持つとする量子力学の仮定に従えば、ミクロな世界では、粒子もこの式に従うはずである。この時、粒子の波長は、ド・ブローイ(de Broglie) の関係 $\lambda = h/(mv)$ で与えられるので、これを代入すると

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -4\pi^2\left(\frac{m^2v^2}{h^2}\right)\psi = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(\frac{1}{2}mv^2\right)\psi \qquad (2.6)$$

が得られる。ここで、$(1/2)mv^2$ は運動エネルギーであって、全エネルギーからポテンシャルエネルギーを引いたもの、E - V、である。したがって、

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\psi = 0} \qquad (2.7)$$

が導かれる。

この式は、１次元の定常的なシュレディンガー（Schrödinger）の方程式と呼ばれている。これを３次元に拡張すると、微分の部分は偏微分となって、

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\psi = 0} \qquad (2.8)$$

を得る。これが 3 次元の定常的なシュレディンガーの方程式である。

シュレディンガー方程式はまた、以下のような形に書かれることがある。(2.8) 式を変形して

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+V\psi = E\psi \qquad (2.9)$$

と書き、更に

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V \qquad (2.10)$$

と定義すれば、(2.9)式を

$$H\psi = E\psi \qquad (2.11)$$

と簡略に書くことが出来る。ここで H はハミルトニアン（Hamiltonian）と呼ばれる演算子である。演算子とは、関数 ψ を微分したり定数を掛けたりする一群の作用をまとめて書いたものをいう。