

一般に、ハミルトニアン H は時刻 t を含まない場合が多いので、ここで、時刻 t を含まない波動関数 $\psi(x)$ の方程式も求めてみよう。

波動関数 $\Psi(x, t)$ が、次のように変数分離形で表されるものとして。

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \tau(t) \dots\dots\dots \textcircled{9}$$

t を含む
波動関数

t を含まない
波動関数

これは、偏微分方程式を解く際に“変数分離法”と呼ばれる基本的解法のパターンの1つだ。

⑨を (*a₁) に代入して、

$$i\hbar \psi \frac{d\tau}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' \tau + U\psi \tau$$

∵ $\dot{\Psi} = \psi \cdot \dot{\tau}$, $\Psi'' = \psi'' \cdot \tau$

この両辺を $\psi\tau$ で割ると、次のように左辺は t のみの、そして右辺は x のみの式となるので、これが恒等的に成り立つためには、これはある定数に等しくなければならない。ここで、その定数を $E (> 0)$ とおくと、

$$i\hbar \frac{\dot{\tau}}{\tau} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi''}{\psi} + U = E \quad (\text{正の定数}) \text{ となる。}$$

(i) t のみの式 (ii) x のみの式 力学的エネルギーのこと

ここで、エネルギー E が定数として現れる。

(i) まず、 $i\hbar \frac{\dot{\tau}}{\tau} = E$ より、 $\dot{\tau} = \frac{E}{i\hbar} \tau = -\frac{i^2 E}{i\hbar} \tau = -i \frac{E}{\hbar} \tau$

$\frac{d\tau}{dt} = -i \frac{E}{\hbar} \tau$ となり、これをみたす $\tau(t)$ は、

$\tau(t) = e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$

定数係数 C は、 $\psi(x)$ の方につけることにして、この係数は 1 とした。

$\frac{df}{dt} = \alpha f$ のとき、一般解は $f = C e^{\alpha t}$ となるからね。

となるんだね。では次の方程式について考えてみよう。

(ii) $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi''}{\psi} + U = E$ より、両辺に $\psi(x)$ をかけると、

時刻 t を含まない波動関数 $\psi(x)$ のシュレーディンガーの波動方程式

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U\psi \dots\dots\dots (*a_2) \quad \text{が導ける。}$$

この(*a₂)は、 $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ とおいて、

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi \dots\dots\dots(*a_1) \quad \text{に代入することによっても}$$

求められる。実際に実行してみると、

$$i\hbar \psi \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U\psi e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$-i\frac{E}{\hbar} e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$E\psi e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + U\psi e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

よって、両辺を $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ で割ると、(*a₂)が導けるんだね。

このように、 $\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ で表されるとき、これは、エネルギーが一定の値 E (定数) をとる定常状態と考えることができる。

そして、単にシュレーディンガー方程式と呼ぶ場合、(*a₂)を指すことが多いことも知っておくといい。

それでは、 Ψ と ψ についてのシュレーディンガー方程式をもう1度ここにまとめておこう。

(I) 時刻 t を含む波動関数 $\Psi(x, t)$ の波動方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x)\Psi \dots\dots\dots(*a_1) \quad \text{で表され、}$$

(II) (*a₁) の解の1つとして、 $\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ と表され、時刻 t を含まない波動関数 $\psi(x)$ の波動方程式は、

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi \dots\dots\dots(*a_2) \quad \text{で表されるんだね。}$$

そして、様々なポテンシャル $U(x)$ や境界条件の下で、(*a₁) や (*a₂) の波動方程式を解くことにより、波動関数 $\Psi(x, t)$ や $\psi(x)$ を求めることができる。本格的に学びたい方は、この後「量子力学キャンパス・ゼミ」で学習されることを勧めます。新たな力学の世界を十分に楽しんで頂けると幸いです。