◆◆ Appendix(付録)・シュレーディンガー方程式 ◆◆

まだ解説していない有名な微分方程式として“シュレーディンガー方程式”(*Schrödinger equation*) があるので，ここでその概略を解説しておこう。

一般に，物質には，粒子と波動の **2** 重性があり，この物質波を表す波動関数 $\Psi(x, t)$ (プサイ（大文字）) や $\psi(x)$ (プサイ（小文字）) についての微分方程式がシュレーディンガーの波動方程式と呼ばれるものなんだね。このシュレーディンガーの波動方程式は，量子力学において量子的 (ミクロな) 粒子の運動を記述する重要な基礎方程式で，**1** 次元の方程式は次のように表される。

シュレーディンガーの波動方程式

(Ⅰ) 時刻 t を含む波動関数 $\Psi(x, t)$ についての波動方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \quad \cdots\cdots(*a_1)$$

(Ⅱ) 時刻 t を含まない波動関数 $\psi(x)$ についての波動方程式

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi \quad \cdots\cdots(*b_1)$$

(ここで，$\Psi(x, t)$，$\psi(x)$：波動関数，i：虚数単位 $(i^2 = -1)$

$\hbar\left(=\dfrac{h}{2\pi}\right)$：プランク定数 $h(\fallingdotseq 6.6\times 10^{-34}(\mathrm{j\cdot s}))$ を 2π で割ったもの

t：時刻 (s)，x：変位 (m)，m：粒子の質量 (kg)

$V(x)$：ポテンシャルエネルギー (J)，E：力学的エネルギー (J))

物理学 (量子力学) の方程式なので，$(*a_1)$，$(*b_1)$ 共に物理定数 $(\hbar, m, E)$ が含まれているけれど，$(*a_1)$ は，位置 x と時刻 t を独立変数にもつ波動関数 $\Psi(x, t)$ の偏微分方程式であり，$(*b_1)$ は，位置 x のみを独立変数にもつ波動関数 $\psi(x)$ の常微分方程式になっているんだね。

しかし，これらシュレーディンガーの波動方程式 $(*a_1)$，$(*b_1)$ が，これまでに解説した一般の 1 次元の波動方程式：$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ ………$(*o)$(P106) と大きく異なることに気付かれたと思う。そう…，$(*o)$ では時刻 t による 2 階の偏微分の項が含まれているけれど，$(*a_1)$ では，時刻 t による 1 階の偏微分の項しか含まれておらず，さらに $(*b_1)$ においては，時刻 t による偏微分の項そのものが欠落して，位置変数 x のみによる常微分方程式になっているんだね。同じ波動方程式と呼ばれているにも関わらず，何故このような大きな差異が生じているのか？その理由を解説しよう。

実は，シュレーディンガーの波動関数 $\Psi(x,t)$ や $\psi(x)$ は実数関数ではなく，次に示すような複素指数関数を前提としているからなんだね。

$$\Psi(x,t) = e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)} \quad \cdots\cdots\cdots ①$$
$$\psi(x) = e^{i\frac{p}{\hbar}x} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots ②$$

$\left(\begin{array}{l} p：運動量 \\ i：虚数単位 \end{array}\right)$

> オイラーの公式：$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ より，
>
> ①は，$\Psi(x,t) = \cos\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right) + i\sin\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)$
>
> ②は，$\psi(x) = \cos\frac{p}{\hbar}x + i\sin\frac{p}{\hbar}x$ 　と表すことができる。

(Ⅰ)の波動方程式 $(*a_1)$ は①の波動関数と，古典力学のエネルギー保存則：$\underbrace{E}_{全力学的エネルギー} = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{運動エネルギー} + \underbrace{V}_{ポテンシャルエネルギー}$ ………③から導くことができる。

> 運動エネルギー
> $K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{(mv)^2}{2m}$
> $= \frac{p^2}{2m}$ となる。
> (p：運動量)

まず①を t と x で，それぞれ偏微分すると

$$\begin{cases} \cdot \dfrac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\dfrac{E}{\hbar}e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)} = -i\dfrac{E}{\hbar}\Psi & \cdots\cdots\cdots ④ \\ \cdot \dfrac{\partial \Psi}{\partial x} = i\dfrac{p}{\hbar}e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)} = i\dfrac{p}{\hbar}\Psi & \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots ⑤ \end{cases}$$

となる。

④より，$E\Psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i^2}{i}\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ ………④′ となり，

また，⑤より

$$p\Psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -\frac{i^2\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad \cdots\cdots\text{⑤}'$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad \cdots\cdots\text{③}$$
$$E\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad \cdots\cdots\text{④}'$$
$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = i\frac{p}{\hbar}\Psi \quad \cdots\cdots\text{⑤}$$

が導けるんだね。ここで

p を Ψ にかけるということは「$-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ という演算子を Ψ に作用させることである。」と考えると，⑤′より

$$p^2\Psi = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\Psi = i^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} \quad \cdots\cdots\text{⑤}''$$ となるんだね。

以上より，まず，③の両辺に波動関数 Ψ を右からかけると

$$\underbrace{E\Psi}_{i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}\,(\text{④}')\text{より}} = \left(\frac{p^2}{2m} + V\right)\Psi = \frac{1}{2m}\underbrace{p^2\Psi}_{-\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\,(\text{⑤}'')\text{より}} + V\Psi \quad \cdots\cdots\text{⑥}$$ となる。

⑥に④′と⑤″を代入すると，時刻 t を含む波動関数 $\Psi(x, t)$ のシュレーディンガー方程式：

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \quad \cdots\cdots(*a_1)$$ が導かれる。大丈夫だった？

では次，時刻 t を含まない波動関数 $\psi(x)$ のシュレーディンガー方程式 $(*b_1)$ も導いてみよう。まず，時刻 t を含む波動関数 $\Psi(x, t)$ が次のように x のみの関数 $\psi(x)$ と t のみの関数 $\tau(t)$ に変数分離できるものとすると，

$$\Psi(x, t) = \underbrace{\psi(x)}_{t\text{を含まない波動関数のこと}}\tau(t) \quad \cdots\cdots\text{⑦}$$ となる。

⑦を $(*a_1)$ に代入すると

$$i\hbar\psi\dot{\tau} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''\tau + V\psi\tau \quad \cdots\cdots\text{⑦}'$$ となる。

$$\dot{\tau} = \frac{d\tau}{dt}$$
$$\psi'' = \frac{d^2\psi}{dx^2}$$

⑦′の両辺を $\psi\tau$ で割ると，次のように，左辺は t のみの式になり，右辺は x のみの式になる。よって，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。この定数を $E(>0)$ とおくと，

$$\underbrace{i\hbar\frac{\dot{\tau}}{\tau}}_{(\text{i})\,t\text{のみの式}} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''}{\psi} + V}_{(\text{ii})\,x\text{のみの式}} = E(\text{正の定数}) \quad \cdots\cdots\cdots ⑧$$ となる。

(ⅰ) まず，$i\hbar\frac{\dot{\tau}}{\tau} = E$ より，　$\dot{\tau} = \frac{E}{i\hbar}\tau = -\frac{i^2E}{i\hbar}\tau = -i\frac{E}{\hbar}\tau$　となる。

よって，$\frac{d\tau}{dt} = -i\frac{E}{\hbar}\tau$　をみたす $\tau(t)$ は，

$\tau(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$　………⑨　となる。

本当は
$\tau(t) = ce^{-i\frac{E}{\hbar}t}$　だけれど，
積分定数 c は省略した。

(ⅱ) 次に，$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''}{\psi} + V = E$ より，両辺に ψ 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方程式：

$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi$　………$(*b_1)$　が導けるんだね。

以上(ⅰ)(ⅱ)より，$\Psi(x, t) = \psi(x)\,\tau(t)$ と表されるとき，これは，⑨より

$\Psi(x, t) = \psi(x)\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$　と表され，$\psi(x)$ はシュレーディンガー方程式 $(*b_1)$ をみたすことが分かったんだね。

このように，シュレーディンガー方程式 $(*a_1)$，$(*b_1)$ は，エネルギー保存則 $E = \frac{p^2}{2m} + V$ と $\Psi(x, t) = e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)}$，$\psi(x) = e^{i\frac{p}{\hbar}x}$ を前提条件として導かれたんだけれど，今度は逆に，この微分方程式を解く際には，様々な形状のポテンシャルエネルギー $V(x)$ やいろんな境界条件などによって，その解 $\Psi(x, t)$ や $\psi(x)$ の形もまた多様に変化するんだね。

一見単純そうに見えるシュレーディンガー方程式 $(*a_1)$，$(*b_1)$ だけれど，これから，量子的な粒子の様々な力学的状態を導き出すことができる。そして，さらに，この波動方程式を基に実に多彩な応用数学の理論が展開されていくことになる。感覚的な表現になるけれど，このシュレーディンガー方程式 $(*a_1)$，$(*b_1)$ から文字通り様々な分野の応用数学が溢れ出してくるという感じなんだね。これについては，「**量子力学キャンパス・ゼミ**」で詳しく親切に解説しているので興味を持たれた方は，さらに学習を進めていって頂きたい。