

$$i\hbar \frac{\dot{\tau}}{\tau} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi''}{\psi} + V = E \text{ (正の定数)} \quad \dots\dots\dots \textcircled{8} \quad \text{となる。}$$

(i) t のみの式 (ii) x のみの式

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

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

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

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

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

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

ここで、2つのシュレーディンガーの波動方程式 $(*a_1)$ と $(*b_1)$ は、次のように表すことができる。

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

これを 1 まとめて、 Ψ に作用する演算子として、 \hat{H} とおく

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

これも 1 まとめて、 ψ に作用する演算子として、 \hat{H} とおく

このように、 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$ (または、 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V$) を Ψ や ψ に作用する

演算子として、 \hat{H} とおくと、シュレーディンガーの波動方程式はシンプルに、

これを “エイチハット” または “エイチマウント” と呼ぼう

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad \dots\dots\dots (*a_1)' \quad \text{や} \quad E\psi = \hat{H} \psi \quad \dots\dots\dots (*b_1)' \quad \text{と表現することができる。}$$

それでは、 $(*a_1)$ と $(*b_1)$ の波動方程式とそれらの解の波動関数 $\Psi(x, t)$ と $\psi(x)$ について、重要な性質を示そう。

シュレーディンガーの波動方程式

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \dots\dots(*a_1)'$$

$$E\psi = \hat{H}\psi \dots\dots(*b_1)'$$

(I) 波動方程式 $(*a_1)'$ は線形方程式なので、 Ψ_1 と Ψ_2 が解とするならば、 $C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2$ (C_1, C_2 : 定数) も $(*a_1)'$ の解になる。これは次のように示せる。

Ψ_1 と Ψ_2 が $(*a_1)'$ の解のとき、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1 = \hat{H}\Psi_1 \dots\dots\dots①, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_2 = \hat{H}\Psi_2 \dots\dots\dots②$$

が成り立つ。よって、 $C_1 \times ① + C_2 \times ②$ を実行すると、

$$C_1 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1 + C_2 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_2 = C_1 \hat{H}\Psi_1 + C_2 \hat{H}\Psi_2 \quad \text{より、}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2) = \hat{H}(C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2) \quad \text{となるので、}$$

$C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2$ も $(*a_1)'$ の解になるんだね。これを、解の線形性と呼んだり、解の重ね合わせの原理と呼ぶ。

(II) 波動方程式 $(*b_1)$ は、任意のエネルギー E に対して解をもつとは限らない。これは、微分方程式の固有値問題に対応する。 E がある E_1 の値であるとき、 $(*b_1)$ が解 $\psi_1(x)$ をもつとき、 E_1 を“固有値”といい、 $\psi_1(x)$ を“固有関数”という。

(III) 従って、 H が時刻 t を含まないとき、 $E\psi = \hat{H}\psi \dots\dots(*x)'$ が、離散的な固有値 $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$ をもつとき、これらに対応する固有関数をそれぞれ $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$ とおくと、 $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \dots\dots(*a_1)'$ の一般解は、解の線形性(解の重ね合わせ)により、

$$\Psi(x, t) = \sum_n C_n \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \quad \text{と表せる。}$$

(IV) 波動関数 $\Psi(x, t)$ は、量子的粒子の量子力学的な状態を表し、 $\Psi(x, t)$ と $C\Psi(x, t)$ (C : 定数係数) は同じ量子的状態を表す。何故なら、

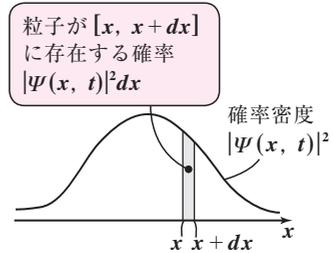
$\int |\Psi(x, t)|^2 dt = \frac{1}{|C|^2}$ (C は、複素定数) のとき、 $C\Psi(x, t)$ を新たな

$\Psi(x, t)$ とおいて正規化すれば、 $\Psi(x, t)$ は、

$\int |\Psi(x, t)|^2 dt = 1$ (全確率) をみたすからなんだね。

この正規化された波動関数 $\Psi(x, t)$ に対して、図 1 に示すように、粒子が微小な範囲 $[x, x + dx]$ に存在する (見出される) 確率は $|\Psi(x, t)|^2 dx$ となる。

図 1 確率密度 $|\Psi(x, t)|^2$



ここで、 $\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ のとき、

$$|\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2 \underbrace{|e^{-i\frac{E}{\hbar}t}|^2}_{\text{①}} = |\psi(x)|^2 \text{ より,}$$

粒子が、微小区間 $[x, x + dx]$ に存在する確率は、

$$|\psi(x)|^2 dx \text{ と表すこともできる。}$$

確率密度

一般に、実数 θ に対して、

$$\begin{aligned} |e^{i\theta}|^2 &= e^{i\theta} (e^{i\theta})^* \\ &= e^{i\theta} \cdot e^{-i\theta} \\ &= e^{i\theta - i\theta} = e^0 = 1 \end{aligned}$$

以上より、正規化された波動関数 $\Psi(x, t)$, $\psi(x)$ に対して、粒子が区間 $[a, b]$ に存在する (見出される) 確率は、 $\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx$

$a \leq x \leq b$ のこと

となるんだね。

このように、波動関数のノルム (絶対値) の 2 乗がミクロな粒子の存在確率と密接に関わっていることが、量子力学の大きな特徴と言えるんだね。興味を持たれた方は、さらに「量子力学キャンパス・ゼミ」で学習して下さい。このシュレーディンガーの波動方程式を基に、様々な数学的な手法を駆使して、ミクロな粒子の世界が描きだされていく様子をお楽しみ頂けると思う。