第5章　Schroedinger 方程式

5.1　Schroedinger 方程式の導出

連続空間の古典的粒子は $E = p^2/2m$ の関係を持っている。一次元格子空間の Δx を縮めていくと、固有値をこの形に変形していくことができる。$A = (\hbar/\Delta x)^2/2m$、$E_0 = 2A$ の関係を保ちながら $\Delta x \to 0$ とすると、古典的関係が得られる。このとき運動方程式は $\langle \underline{x} | \, \psi(t) \rangle$ を $\psi(x,t)$ と表して

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2}$$

となる。位置のポテンシャル $V(x)$ が変化するような環境では、E_0 に変化項が加わることになるので、上式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)$$

と変形される。これが Schroedinger 方程式である。

5.2　一次元空間での Schroedinger 方程式の解

定常解 $\psi(x,t) = \Psi(x) \exp(Et/i\hbar)$ を考えると、Schroedinger 方程式は

$$E\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x)\Psi(x)$$

これより二次微分が得られる。

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\Psi(x)$$

つまり、ある x での $\Psi(x)$ がわかると、その地点での $\Psi(x)$ の曲がり具合がわかることになる。この結果、$V(x) > E$ であると指数関数的、$V(x) < E$ であると正弦関数的になる。全区間で有限な解を得るには、$x \to -\infty$ の $V(x) \to 0$ で発散型の指数関数的、$x \to \infty$ の $V(x) \to 0$ で減衰型の指数関数的となるように関数が計算される必要がある。左から順に計算していって右で減衰型の指数関数的になるには E は勝手な値ではいけない。こうしたことから、E が固有値を持つことが推定できる。また高い固有値に対する固有状態ほど、正弦関数的な振動が多くなる。