量子力学入門　第四回　**シュレジンガー波動方程式**の導出　　小山　裕

【波動方程式】

電子が波としての性質を持つのであれば、波動が従う方程式に、電子の振る舞いも従うと考えてよいです。古典的には、波（例えば電磁波・電波・音・熱等）が伝わる様子を表す方程式はすべて同じ形の方程式「**波動方程式**」に従います。

電界についての波動方程式は、マックスウェルの方程式から導かれます。一次元ではこのような形をしています。　$\Rightarrow \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0$　ここでｃは光の位相速度、Ｅ は電界強度です。これは位置の変数ｘと時間の変数ｔについての、二階の偏微分方程式です。電磁波はこの電界Ｅと磁界Ｈの両方が伝わるので、磁界 Ｈ も同じ形の方程式で現されます。音の場合であれば、ｃは音速とすると、音の伝わり方も同じこの形の方程式で表されます。熱の伝わり方も、同じ形の方程式です。

【平面波と球面波】

波動には、大きく分けて２種類があります。それは**「平面波」と「球面波」**の二つです。平面波とは、例えばある一つの軸方向の位置ｘでは同じ強度の波が存在して、波のある強度のところを「波面」といいますが、その波面が軸方向あるいは時間とともに振動して伝わる波です。

平面波とは、この波面が例えばｘ軸に垂直な平面であり、ｘ軸方向に伝わる平面波であれば、

$\varphi(x,y,z) = e^{ikx}, k = \frac{2\pi}{\lambda}$　ここでλは波長です。これは時間的には振動しないで、伝わって行くにつれて強度が振動する平面波ですが、時間的にも振動する場合は、$\varphi(x,y,z) = e^{i(kx-\omega t)}, k = \frac{2\pi}{\lambda}$

という式で表されます。一般的には、ベクトル $\boldsymbol{k}$ 方向に進む平面波は

$\varphi(x,y,z) = e^{ik\cdot r} = e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$　と書かれます。$k = (k_x, k_y, k_z)$は波数ベクトルと呼ばれ、波長λと

$|k| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{2\pi}{\lambda}$　の関係があります。

球面波は、波面が球面で、ある一点から放射状に広がっていく波のことを言います。球面波は、

$\varphi(x,y,z) = \frac{e^{ikr}}{r}$　の式で表されます。小さな穴を通過した後の波、光や電子の波はこのような球面波となって空間に放射状に広がっていきます。

しかし、球面波も非常に遠くまで伝わっていくと、その波面は球状からだんだんと平面に近くなりますから、球面波が発生したところから遠く離れたところで観測した場合は、平面波として近似することができます。今は簡単のために、電子の波を平面波として考えてみることにします。

【電子を波で表す】

電子の波としての性質を平面波　$y = Ae^{i(-kx+\omega t)}$　という進行波で表されると、波動方程式

$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0$　を満足することを示します。$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = 0$　この展開は参考書の６２ページに具体的に出ています。

$$\frac{\partial y}{\partial x} = -ikAe^{i(-kx+\omega t)}$$
$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = (-ik)^2 Ae^{i(-kx+\omega t)}$$
$$\frac{\partial y}{\partial t} = i\omega Ae^{i(-kx+\omega t)}$$
$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = (i\omega)^2 Ae^{i(-kx+\omega t)}$$

となりますから、波動方程式は $-k^2 - \frac{1}{c^2}\left(-\omega^2\right) = 0$

となります。従って $c = \frac{\omega}{k}$ となります。ここで $\omega = 2\pi\nu$, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ なので、$c = \nu\lambda$ の関係になります。これを、波の周波数あるいは振動数がエネルギーに対応する関係 $E = h\nu = \frac{h}{2\pi}\omega$ そして、波の波数 k と粒子の運動量との関係を示す式、$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}k$ に展開できます。ここで、たびたびプランク定数を２π で割った $\frac{h}{2\pi}$ が出てきました。これも同じプランク定数と言い、$\frac{h}{2\pi} \equiv \hbar$ エイチバーと読みます。$\hbar$ を使って電子の波のエネルギーと運動量を表すと $E = \hbar\omega$ $p = \hbar k$ となります。これらの関係式と、電子の粒子としてのエネルギーと運動量の関係式 $E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$ を用いて、電子の平面波 $\psi = Ae^{i(kx-\omega t)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$ が満たす波動方程式が得られれば、それが電子の波の様子を表す波動方程式となります。

【シュレジンガーの波動方程式の導出】

求める波動方程式は、先に出てきた古典的な波動方程式を参考にして、時間についての偏微分と場所についての偏微分の線形（つまり足し算）形式であると推測してみます。その場合、**時間で微分した項と、場所で微分した項の次元（単位）が、同じになる必要**があります。

$\psi = Ae^{i(kx-\omega t)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$ の形の関数は、時間について一回微分すると E（エネルギー）が前に出て、場所 x について二回微分すると p ^{2} が前に出てきて、$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$ の関係から、同じ次元にできそうですから、$\frac{\partial\psi}{\partial t} - \gamma\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = 0$ の形の方程式が、適切な様に思えます。これに $\psi = Ae^{i(kx-\omega t)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$ を代入して γ を決めてみると、$\gamma = i\frac{\hbar}{2m}$ と定まります。従って、$\frac{\partial\psi}{\partial t} - i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = 0$ が求める方程式の形でよさそうに見えます。ここで、この方程式の次元について考えてみます。時間についての一次の偏微分は、要するに無次元の Ψ を時間で割っていますから、[1/時間]という次元、つまり振動数あるいは周波数の次元を持っています。$E = \hbar\omega$ でわかるよう

に、波の振動数は、エネルギーですから、$\frac{\partial \psi}{\partial t} - i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0$ の第一項はエネルギーの次元を持つことが分かります。これをもっと明らかな形で示すために、各項に $i\hbar$ をかけると、

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0$$
$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

となります。このプランク定数はJ・ｓという単位を持っていますから、時間で割ると、実際エネルギー（J：ジュール）の次元になります。これが電子の波Ψの動きを表す波動方程式、つまりシュレジンガーの波動方程式と言われるものです。

これと、古典的な粒子のエネルギーと運動量の関係を対応させてみます。

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$
$$E = \frac{p^2}{2m}$$

を対応して見ると、

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$
$$p \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

のように、古典的な粒子のエネルギーEと運動量 $\boldsymbol{p}$ が、量子力学の波動方程式では、時間の微分演算子と、位置の微分演算子に対応していることが分かります。それぞれエネルギー演算子、運動量演算子と呼ばれます。ところで、エネルギーとは一般的には、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和です。$E = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$　と表されます。シュレジンガー方程式も $i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x,t)\psi$ となります。ここで、再び

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$
$$p \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

の関係を使って、一般化したシュレジンガー方程式を書き直すと

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

となり、｛　｝の中は運動エネルギー＋ポテンシャルエネルギーです。この｛　｝の中を $\mathcal{H}$ で表し、これを「ハミルトニアン」といいます。ハミルトニアンは演算子であることに注意します。これは古典的解析力学でも使われます。これを用いると、シュレジンガー方程式は、$H\psi = E\psi$ と表されます。$\mathcal{H}$ はすべてのエネルギーに対応する量であり、$\mathcal{E}$ と同じですが、演算子であることを強調するために $\mathcal{H}$ を用いています。一般に、数学の問題ですが、ある関数にある演算を行い、つまり演算子を関数に作用させた結果が、もとの関数の定数倍になるとき、その関数を、演算子の固有関数といい、その定数を固有値といいます。シュレジンガー方程式を解く・・・という行為は、エネルギー演算子であるハミルトニアン演算子の、固有関数Ψ（波動関数）と固有値 $\mathcal{E}$ を求める問題ということが出来ます。クーロン力や重力のような中心力場の場合には、このポテンシャルエネルギーは $V(r,t) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q^2}{r}$　となります。電荷と電荷の間に働くクーロン力場の場合です。次週は、この波動方程式、つまりシュレジンガー方程式を満たす波動関数と、観測可能な物理量との関係についてお話します。

例題　**波動関数Ψが　$\psi = \exp(-i4x)$ のとき、観測される運動量を求めよ。観測される運動量は、波動関数に運動量演算子を作用させたときの固有値であるとする。**

例題　波動関数Ψが
$\psi = \exp(-i4x)$のとき、
観測される運動量を求めよ。
観測される運動量は、波動関数に運動量演算子を作用させたときの固有値であるとする。

これは
$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\{\exp(-i4x)\}$$
から得られる固有値に等しい。
実際に計算すると、
$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\{\exp(-i4x)\} = -i\hbar\times(-i4)\exp(-i4x) = -4\hbar\{\exp(-i4x)\}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\{\exp(-i4x)\} = -4\hbar\{\exp(-i4x)\}$$
となる。これは固有値が$-4\hbar$の固有方程式であるから、この波動関数から得られる運動量の値は$-4\hbar$である。

＊　物理の数式に良く使うギリシャ語

ギリシャ文字	名　称	ギリシャ文字	名　称
Α α	アルファ	Ν ν	ニュー
Β β	ベータ	Ξ ξ	クシ
Γ γ	ガンマ	Ο o	オミクロン
Δ δ	デルタ	Π π	パイ
Ε ε	イプシロン	Ρ ρ	ロー
Ζ ζ	ゼータ	Σ σ	シグマ
Η η	イータ	Τ τ	タウ
Θ θ	シータ	Υ υ	イプシロン
Ι ι	イオタ	Φ ϕ	フィ
Κ κ	カッパ	Χ χ	ヒ
Λ λ	ラムダ	Ψ ψ	プシー
Μ μ	ミュー	Ω ω	オメガ