# ３章　波動関数

## ３．１　シュレーディンガー方程式

一次元の波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \qquad (3.1)$$

変数分離法で解け、位置の関数と時間の関数の積として表せる。

$$u(x, t) = \psi(x)\cos\omega t \qquad (3.2)$$

（3.2）式を（3.1）式に入れて

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{v^2}\psi(x) = 0 \qquad (3.3)$$

を得る。$\omega = 2\pi\nu = 2\pi v / \lambda$ の関係を用いて

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi = 0 \qquad (3.4)$$

を得る。粒子の全エネルギーは運動量 $p = m v$ とポテンシャルエネルギー $V(x)$ を用いて

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \qquad (3.5)$$

運動量について解くと

$$p = \sqrt{2m\,(E - V(x))} \qquad (3.6)$$

ドブロイ波長は

$$\lambda = h / p = h / \sqrt{2m\,(E - V(x))}$$

となる、これを（3.4）式に入れて

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\psi = 0 \qquad (3.7)$$

をえる。ここに $\hbar = h / 2\pi$ である。（3.7）式は次のように変形できる

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \qquad (3.8)$$

## ３．２　物理量と線形演算子

$$\hat{A} f(x) = g(x)$$

演算子 $\hat{A}$ を関数 $f(x)$ に作用させて新しい関数 $g(x)$ を得る。

量子力学では線形演算子のみ扱う。これは次の関係を満たす。

$$\hat{A}[c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x)] = c_1 \hat{A} f_1(x) + c_2 \hat{A} f_2(x) \qquad (3.9)$$

微分演算子 $\frac{d}{dx}$ は

$$\frac{d}{dx}[c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x)] = c_1 \frac{d}{dx} f_1(x) + c_2 \frac{d}{dx} f_2(x)$$

（3.9）式の関係を満たすので線形演算子である。

二乗演算子 **sqr** は

$\mathrm{sqr}\,[c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x)\,]$
$= c_1^2 f_1^2(x) + c_2^2 f_2^2(x) + 2\,c_1 c_2 f_1(x)\, f_2(x)$
$\neq c_1\,\mathrm{sqr}\, f_1(x) + c_2\,\mathrm{sqr}\, f_2(x) = c_1 f_1^2(x) + c_2 f_2^2(x)$
となるので線形演算子ではない。

## ３．３　固有値問題

$$\hat{A}\,\phi(x) = a\,\phi(x) \tag{3.10}$$

$\hat{A}$ の演算（作用）によって$\phi(x)$ の定数倍が得られる。

$\phi(x)$　　　　$\hat{A}$ の固有関数

$a$　　　　固有値

与えられた $\hat{A}$ について$\phi(x)$ と $a$ を決める問題を固有値問題という。
（3.8）式は

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\,]\,\psi(x) = E\,\psi(x) \tag{3.12}$$

と書ける。［　］の中の演算子を$\hat{H}$ と置くと

$$\hat{H}\,\psi(x) = E\,\psi(x) \tag{3.13}$$

これは演算子$\hat{H}$ （ハミルトニヤン）についての固有値問題である。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{3.14}$$

ここで$V(x) = 0$ の時エネルギーは運動エネルギーだけとなるので

$$\hat{K}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \tag{3.15}$$

と運動エネルギー演算子 $\hat{K}_x$ を定義する。
古典的には $K = p^2 / 2m$ であるから、運動量演算子の二乗は

$$\hat{p}_x^{\,2} = 2m\,\hat{K}_x = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} = (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) \tag{3.16}$$

で与えられ、運動量演算子は

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{3.11}$$

で与えられる。
例　$e^{ikx}$は $\hat{p}_x$ の固有関数であることを示せ

$$\hat{p}_x e^{ikx} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}e^{ikx} = k\hbar\, e^{ikx}$$

となるので$e^{ikx}$は $\hat{p}_x$ の固有関数であり$k\hbar$ は固有値である。

## 演算の順序

２以上の演算子が作用するときには右の演算子から順に作用する

$$\hat{A}\hat{B}f(x) = \hat{A}[\hat{B}f(x)]$$

例

$\hat{A} = \dfrac{d}{dx}$ と $\hat{B} = x^2$ の作用について調べてみよう

$$\hat{A}\hat{B}f(x) = \hat{A}[\hat{B}f(x)] = \frac{d}{dx}[x^2 f(x)]$$

$$= 2xf(x) + x^2\frac{d}{dx}f(x)$$

$$\hat{B}\hat{A}f(x) = \hat{B}[\hat{A}f(x)] = x^2[\frac{d}{dx}f(x)] = x^2\frac{d}{dx}f(x)$$

となり、 $\hat{A}\hat{B}f(x) \neq \hat{B}\hat{A}f(x)$ であることに注意が必要である。

特に $\hat{A}\hat{B}f(x) = \hat{B}\hat{A}f(x)$ となる場合には、この二つの演算子は交換可能（可換）という。

$\hat{A}$ を２回作用させることは $\hat{A}\hat{A} = \hat{A}^2$ と書ける。

## ３．４　箱の中の粒子

$x$ 軸上で $x = 0$ と $x = a$ の間に閉じこめられた自由粒子の場合を扱う。

粒子がポテンシャルエネルギーを感じていない場合即ち $V(x) = 0$ の時を言う。この場合のシュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \qquad 0 \leq x \leq a \tag{3.17}$$

となる。マックスボルンによれば $\psi^*\psi dx$ は粒子が $x \sim x + dx$ の間にいる確率である。

箱の外に粒子は存在しないので確率はゼロである従って　$\psi(x) = 0 \quad x < 0,\ x > a$

壁の位置で波動関数が連続でなければならないので境界条件は $\psi(0) = \psi(a) = 0$ となる。

## ３．５　箱の中の粒子のエネルギー

（3.17）式の一般解は

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx$$

で与えられ $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$ より

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{2\pi\sqrt{2mE}}{h} \tag{3.18}$$

境界条件より

$$\psi(0) = A = 0 \quad \rightarrow \quad A = 0$$

これは無意味な解である。もう一つの境界条件より

$$\psi(a) = B\sin ka = 0 \tag{3.19}$$

これより $B = 0$ はまた無意味な解を与えるのでのぞき、

$$ka = n\pi \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{3.20}$$

を得る。

$\boldsymbol{n = 0}$ は無意味な解となるので除くまた $\boldsymbol{n = -1, -2,}\cdots$ の場合解ではあるが、波動関数の符号を変えるだけであるので除き、正の値を用いる。エネルギーは（3.18）式と（3.20）式からえられ

$$\boldsymbol{E_n = \frac{h^2 n^2}{8\,m\,a^2} \qquad n = 1, 2,\cdots} \tag{3.21}$$

箱の中の粒子のエネルギーは量子化されていることが分かる。この整数 $\boldsymbol{n}$ は量子数と言われる。相応する波動関数は

$$\psi_n(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{B \sin k\,x = B \sin \frac{n\pi x}{a} \qquad n = 1, 2,\cdots} \tag{3.22}$$

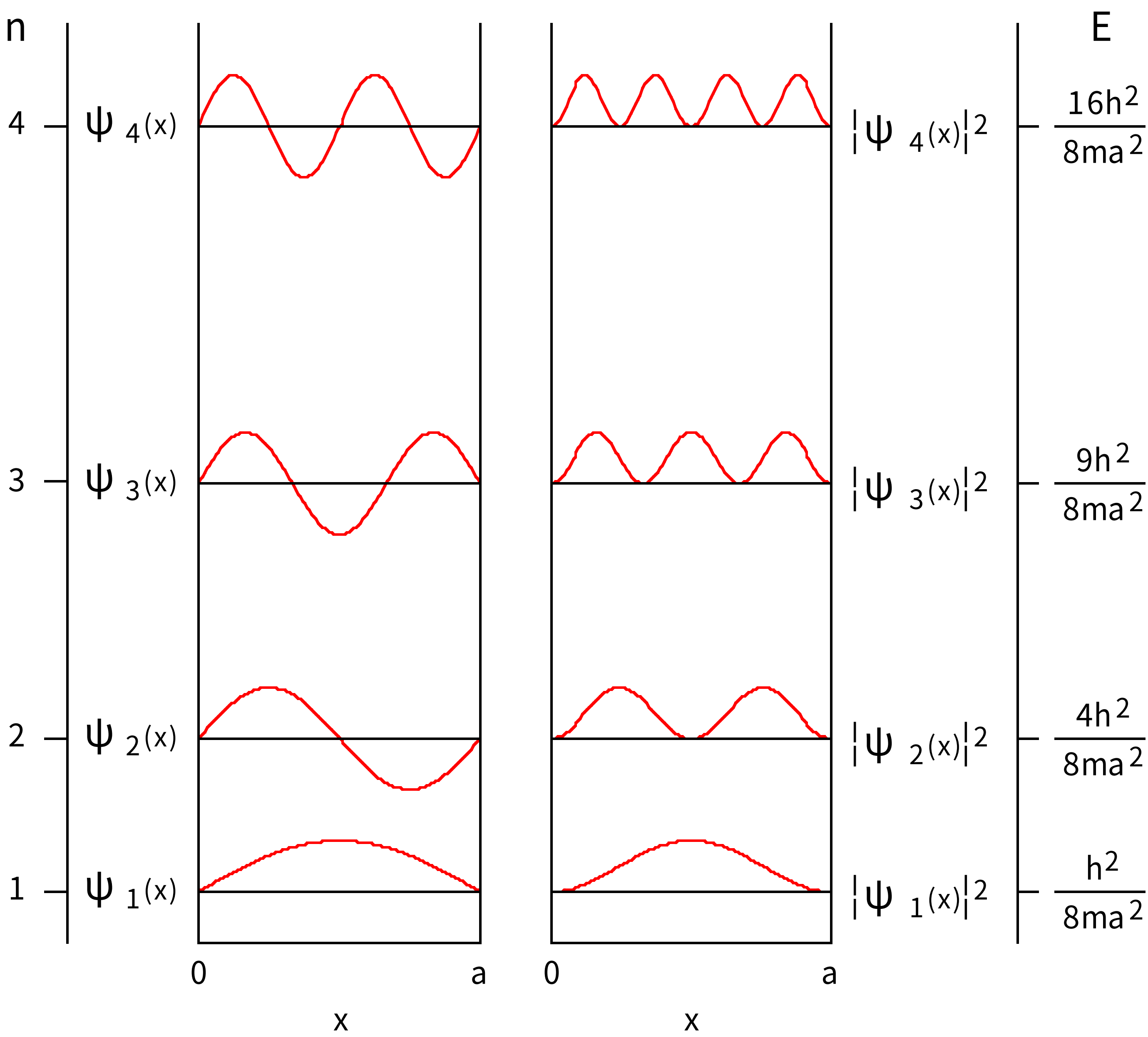


図３．２　箱の中の粒子のエネルギー、波動関数、確率密度