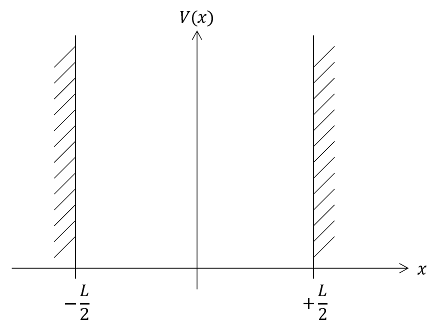
1　Schrödinger 波動方程式の簡単な復習：

一次元の井戸型ポテンシャルの中で運動する粒子 (質量 m):

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| < \frac{L}{2}) \\ +\infty & (|x| > \frac{L}{2}) \end{cases}$$



Schrödinger 波動方程式：

$$H(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{1}$$

ただし、ハミルトニアン演算子は $H(x) = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$
$= -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x) = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x).$
(ただし、$\hat{p} = -i\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ は運動量演算子である。)

この問題は束縛状態（**定常状態**）の例なので、全ての時刻 t に対して

- $\Psi(x,t) = 0$ for $|x| > L/2$.（その領域では粒子が存在できないから。）

- 波動関数の連続性から、次の境界条件を満たさないと行けない：

$$\Psi(x=-\frac{L}{2},t)=\Psi(x=\frac{L}{2},t)=0\,. \tag{2}$$

この条件を満たす解は**次の積のみ**である：

$$\Psi(x,t)\equiv\psi(x)\,\phi(t)\,. \tag{3}$$

（**変数分類の方法。**）式 (3) を式 (1) に代入し、両辺を $\psi(x)\,\phi(t)$ で割算すると、

$$\frac{1}{\psi(x)}H(x)\psi(x)=\frac{1}{\phi(t)}i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}\equiv E \tag{4}$$

となる。ただし、E は定数。従って、$\phi(t)$ および $\psi(x)$ について次の式が得られる：

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} \;=\; E\phi\Rightarrow\phi(t)=e^{-iEt/\hbar} \tag{5}$$

$$H(x)\psi(x) \;=\; E\psi(x) \tag{6}$$

式 (6) は**「時間に依存しない Schrödinger 方程式」**と呼ぶ。数学的に表すと、$\psi(x)$ はハミルトニアン $H(x)$ の**固有関数**で、E はハミルトニアン H の**固有値**である。$|x|<L/2$ の領域では、式 (6) を具体的に書くと

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=E\psi(x)\,.$$

その一般解は、

$$\psi(x)=A\sin kx+B\cos kx\qquad(k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar})$$

となる。(A,B は任意の定数。) 境界条件 (2) から

$$\psi(x=\frac{L}{2})=A\sin\frac{kL}{2}+B\cos\frac{kL}{2} \;=\; 0$$

$$\psi(x=-\frac{L}{2})=-A\sin\frac{kL}{2}+B\cos\frac{kL}{2} \;=\; 0\,.$$

従って、$A\sin\frac{kL}{2}=0$ かつ $B\cos\frac{kL}{2}=0$ が得られる。ここで次の場合分けを考える：

$$
\begin{aligned}
&(1)\quad B=0, A\neq 0 \to \sin\frac{kL}{2} \;=\; 0 \to \frac{kL}{2}=\pi, 2\pi, \dots \\
&(2)\quad A=0, B\neq 0 \to \cos\frac{kL}{2} \;=\; 0 \to \frac{kL}{2}=\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \dots
\end{aligned}
$$

つまり、$kL = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, ...)$ である。エネルギー固有値は、

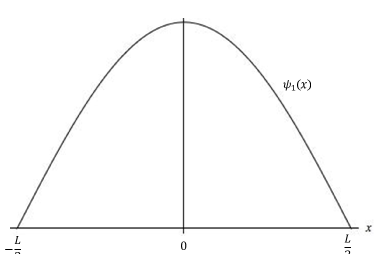
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \qquad (n = 1, 2, 3, ...)$$

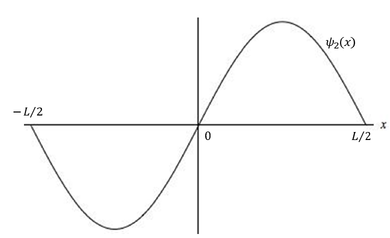
固有関数は、

$$
\begin{aligned}
n = 1, 3, 5, \dots \Rightarrow\ \psi_n(x) = C\cos\frac{n\pi}{L}x \\
n = 2, 4, 6, \dots \Rightarrow\ \psi_n(x) = C\sin\frac{n\pi}{L}x
\end{aligned}
$$

ただし、C は**規格化定数**で、粒子は $-L/2 < xL/2$ の領域で必存在する条件からきまる：

$$\int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x|\psi_n(x)|^2 = 1$$





以上の簡単な復習から次ぎのことを覚えておく：

- Schrödinger 方程式を解くときに、**変数分類**は有力な方法である。
- **定常状態**の波動関数の時間依存性は $e^{-iEt/\hbar}$ である。
- 時間に依存しない Schrödinger 方程式はハミルトニアンの**固有方程式** である。それは２階の常微分方程式で、**境界条件２つを要すると固有値** E **は離散的になる。**