$$\Psi(x,t) = r \sin 2\pi(kx - \nu t) \quad \cdots\cdots(3\text{-}5)$$

Ψは x と t の関数なので、今の方法で、Ψを x と t で“偏微分”してみる。

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = 2\pi kr \cos 2\pi(kx - \nu t)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -4\pi^2 k^2 r \sin 2\pi(kx - \nu t) \quad \cdots\cdots(3\text{-}6)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -2\pi\nu r\cos 2\pi(kx - \nu t)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -4\pi^2\nu^2 r\sin 2\pi(kx - \nu t)\cdots\cdots(3\text{-}7)$$

(3-6)、(3-7)より、

$$\boxed{\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{k^2}{\nu^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}} \quad \cdots\cdots(3\text{-}8)$$

これが、弦の振動のような1次元の波に対する波動方程式である。

$$\mathrm{y} = A \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda} \right)$$

$$\left. \begin{aligned} \psi &= r \sin 2\pi (\nu t - kx) \\ \psi &= r \sin 2\pi (kx - \nu t) \end{aligned} \right\} \text{ともに(3−8)式を満たす。}$$

$$\Psi_1(x,t) = r\, sin\, 2\pi(kx - \nu t)$$

$$\Psi_2(x,t) = r\, sin\, 2\pi(kx + \nu t)$$

この2つの波を重ね合わせる。

$$\Psi(x,t) = 2r\sin(2\pi kx)\cos(2\pi\nu t)$$

これをxで2回微分すると

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -(2\pi k)^2 \psi \qquad \cdots\cdot(3\text{-}9)$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = hk$$

なので、(3-1)式より、

$$k = \frac{p}{h} = \frac{1}{h}\sqrt{2m(E - V)}$$

と変形できる。

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{8m\pi^2}{h^2}(E - V)\psi$$

これを整理する。

$$\boxed{-\frac{h^2}{8m\pi^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi=E\psi} \quad \cdots\cdots(3\text{-}10)$$

(3-10)式を1次元のシュレディンガーの波動方程式をいう。

§3.4　波動関数からわかること

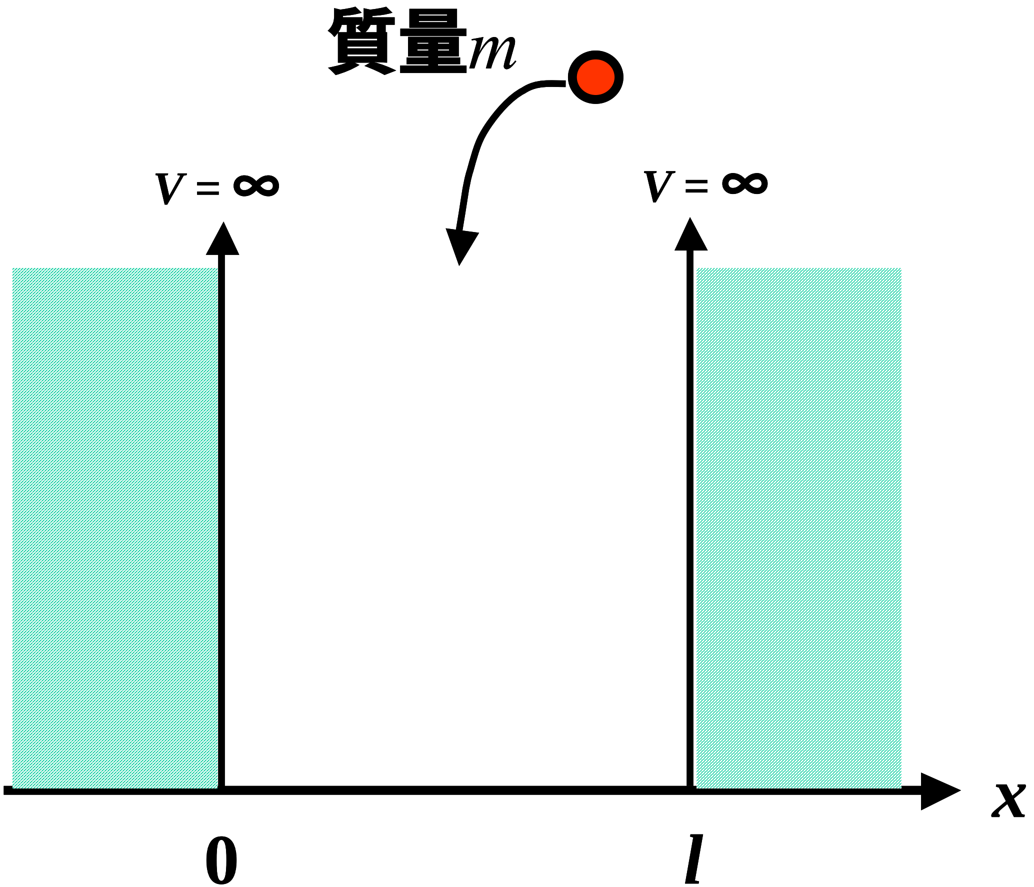
粒子が点xで見出される確率$P(x)$は、波動関数の絶対値の2乗に比例する。

$$P(x) \propto \left|\psi(x)\right|^2$$

以下の条件を満たすとき、波動関数は規格化されているという。

$$P(x) = \left|\psi(x)\right|^2 \qquad \int \left|\psi(x)\right|^2 dx = 1$$

§3.5 一次元の箱の中の粒子



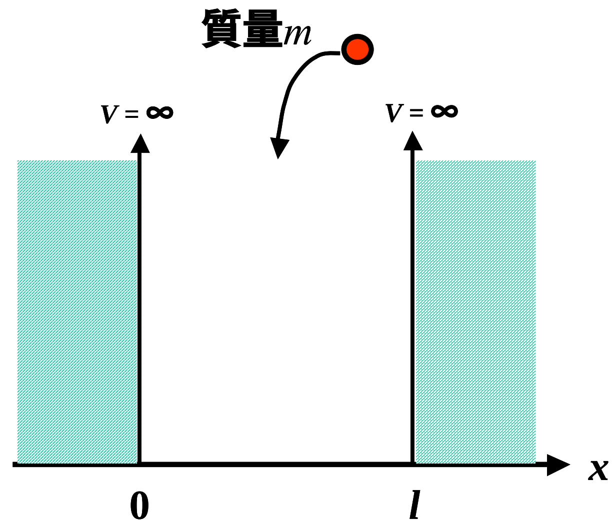
$$-\frac{h^2}{8m\pi^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi=E\psi$$

ポテンシャルエネルギーの条件:

$$\mathbf{V}(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq l) \\ \infty & (\boldsymbol{x} < 0, \boldsymbol{x} > \boldsymbol{l}) \end{cases}$$

境界条件:

$$\psi(0)=\psi(l)=0$$



箱の中では、 $V = 0$ なので

$$-\frac{h^2}{8m\pi^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = E\psi \qquad \cdots\cdots(3\text{-}11)$$

これを変形すると、

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}}\right)^2 \psi$$

ここで、

$$\boldsymbol{a}=\sqrt{\frac{8\pi^{2}\boldsymbol{mE}}{\boldsymbol{h}^{2}}}$$

とおくと、

$$\frac{\partial^{2}\psi}{\partial x^{2}}=-a^{2}\psi \quad \cdots\cdots(3\text{-}12)$$

の形になる。したがって、(3-12)式は、

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

の一般解をもつ（A,Bは任意定数）。

境界条件を代入する。　$x = 0$で $\Psi = 0$なので、

$$\psi(0) = A\sin 0 + B\cos 0 = B = 0$$

とBが決まる。　$x = l$ で $\Psi = 0$なので、

$$\psi(l) = A\sin al = 0$$

$$al = n\pi \, (n = 0, 1, 2, 3 \cdots)$$

A=0とすると、　$\psi(x) = 0 \Rightarrow \left|\psi(x)\right|^2 = 0$

になるので、箱の中に粒子がないことになる。

同様に、

$$a = \frac{n\pi}{l}$$

なので　$n = 0$　では、　$a = 0$

よって、

$$\psi(x) = A\sin ax = 0$$

となってしまうので、$n = 0$　はとれない。

$$a = \frac{n\pi}{l} \quad (n = 1, 2, 3 \cdots)$$

$$\sqrt{\frac{8\pi^2 \boldsymbol{mE}}{\boldsymbol{h}^2}}\boldsymbol{l} = \boldsymbol{n}\pi$$

これより箱の中の粒子のエネルギーは、

$$E = \frac{n^2 h^2}{8ml^2} \quad \left(\equiv E_n\right) \quad (n = 1, 2, 3 \cdots)$$

$$\cdots\cdots(3\text{-}13)$$

$$\psi = A \sin \frac{n\pi}{l} x$$

に規格化条件

$$\int_0^l \psi^2 dx = 1$$

を当てはめる。

$$\int_0^l \psi^2 dx = \int_0^l A^2 \sin^2 \frac{n\pi}{l} x dx$$

$$= \frac{A^2}{2} \int_0^l 1 - \cos \frac{2n\pi}{l} x dx = \frac{A^2}{2} l = 1$$

これより、

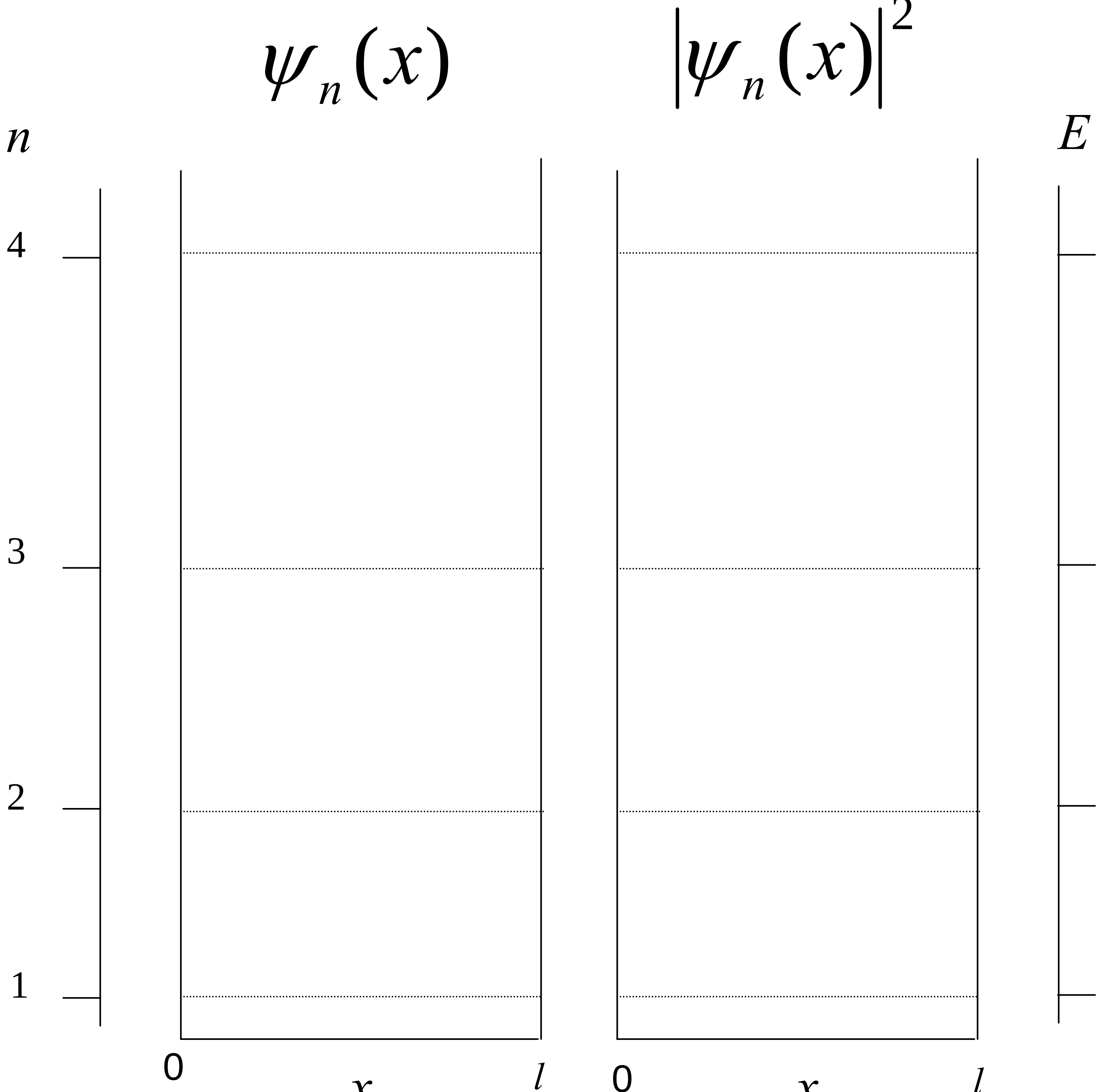
$$\boldsymbol{A} = \sqrt{\frac{2}{\boldsymbol{l}}}$$

したがって、

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x \ \left(= \psi_n(x)\right)$$

$$(n = 1, 2, 3 \cdots) \quad \cdots\cdots (3\text{-}14)$$

n	E_n	$\psi_n(x)$
1	$\frac{h^2}{8ml^2}$	$\sqrt{\frac{2}{l}}\, sin\frac{\pi}{l}x$
2	$\frac{4h^2}{8ml^2}$	$\sqrt{\frac{2}{l}}\, sin\frac{2\pi}{l}x$
3	$\frac{9h^2}{8ml^2}$	$\sqrt{\frac{2}{l}}\, sin\frac{3\pi}{l}x$
4	$\frac{16h^2}{8ml^2}$	$\sqrt{\frac{2}{l}}\, sin\frac{4\pi}{l}x$



$\psi_n(x)$
$|\psi_n(x)|^2$
n
E
4
3
2
1
0
x
l
0
x
l

§3.6　三次元の箱の中の粒子

1次元のシュレディンガーの方程式:

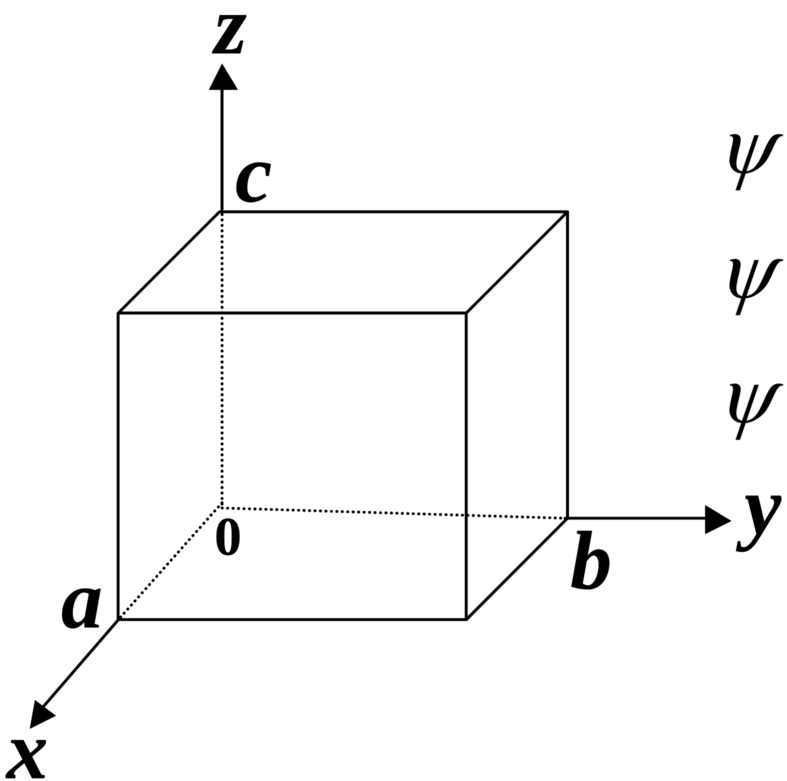
$$-\frac{h^2}{8m\pi^2}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

3次元のシュレディンガーの方程式:

$$-\frac{h^2}{8m\pi^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z)+V(x,y,z)\psi(x,y,z)$$

$$=E\psi(x,y,z) \qquad \cdots\cdots(3\text{-}15)$$

下の箱の中でVがゼロ。Ψは、箱のすべての壁でゼロになる。



$$\psi(0,y,z)=\psi(a,y,z)=0$$

$$\psi(x,0,z)=\psi(x,b,z)=0$$

$$\psi(x,y,0)=\psi(x,y,c)=0$$

ここで波動関数を以下のような形であるとする。

$$\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z)$$

・・・・(3-16)

(3-16)式を(3-15)式に代入する。

$$-\frac{h^2}{8m\pi^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z^2}\right)XYZ = EXYZ$$

・・・・(3-17)

次に両辺をXYZでわると、

$$-\frac{h^2}{8m\pi^2}\left(\frac{1}{X}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}+\frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}+\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial z^2}\right)=E$$

････(3-18)

(3-18)の左辺は、x,y,zだけの関数である。この式が、x,y,zのすべての値に成り立つためには、それぞれの項がある定数に等しくならなければならない。

$$\boldsymbol{E}_x+\boldsymbol{E}_y+\boldsymbol{E}_z=\boldsymbol{E} \qquad \cdots\cdots(3\text{-}19)$$

$$-\frac{h^2}{8m\pi^2}\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}=E_x \quad \boldsymbol{X}(0)=\boldsymbol{X}(\boldsymbol{a})=0$$

このXは、一次元の式のΨと同じ形。

$$E_{n_x}=\frac{{n_x}^2h^2}{8ma^2} \qquad n_x=1,2,3,\cdots$$

$$X(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_x\pi x}{a}$$

$$\psi_{n_x,n_y,n_z} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\frac{n_x \pi x}{a} \sin\frac{n_y \pi y}{b} \sin\frac{n_z \pi z}{c}$$

$$\cdots\cdots(3\text{-}20)$$

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{{n_x}^2}{a^2} + \frac{{n_y}^2}{b^2} + \frac{{n_z}^2}{c^2}\right)$$

$$\cdots\cdots(3\text{-}21)$$

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \cdots$$