定常状態に対するシュレーディンガー方程式を次の手順で導出する。ここで、粒子の質量を m,h はプランク定数、それを 2π で割ったものを $\hbar$ とする。

1. 一般には粒子の位置と時間に依存するポテンシャル $V(x,t)$ を含む場合のハミルトニアン演算子 $\hat{H} = -\hbar^2/(2m)\partial^2/\partial x^2 + V(x,t)$、波動関数を $\Psi(x,t)$ として、時間に依存する場合のシュレーディンガー方程式を記せ。
2. ポテンシャル V が時間に依存しない場合、$V = V(x)$、波動関数 Ψ が座標だけの関数 $\psi(x)$ と時間だけの関数 $T(t)$ の積、すなわち $\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot T(t)$ で書けるとして、時間に依存する場合のシュレーディンガー方程式に代入した式を計算せよ。
3. 前問の結果の両辺を $\psi(x) \cdot T(t)$ で割り、変数 x, t に依存しない定数を E とおき、この E の物理的次元を述べよ。
4. 前問の結果において、まず時間だけに依存する微分方程式の解を求めよ。
5. 前問の結果を二つ前の結果に代入して、時間に依存しない、定常状態に対するシュレーディンガー方程式と全体の関数 $\Psi(x,t)$ の式を記せ。

(解答例)

1.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right)\Psi. \tag{1}$$

2.

$$i\hbar \cdot \psi(x)\frac{dT(x)}{dt} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x) \cdot T(t). \tag{2}$$

3. 題意より

$$i\hbar\frac{\frac{dT(x)}{dt}}{T(t)} = \frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x)}{\psi(x)} \tag{3}$$

となる。ここで、等号の両辺はそれぞれ変数 t, x だけに依存するので、全体として定数になることがわかるので、その定数を E とおいて

$$i\hbar\frac{\frac{dT(x)}{dt}}{T(t)} = \frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x)}{\psi(x)} \equiv E \tag{4}$$

が得られる。この式の右側の等式の分子において、関数 $\psi(x)$ の前の因子の次元はエネルギーの次元であるから、定数 E の次元はエネルギーの次元であることがわかる。

4.

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\frac{dT(x)}{dt}}{T(t)} &= E \\ \to T(x) &\propto \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}. \end{aligned} \tag{5}$$

定常状態に対するシュレーディンガー方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi(x) \quad = \quad E\psi(x) \tag{6}$$

となり、全体の波動関数 $\Psi(x,t)$ は、$\psi(x)$ で規格化を行うとして、

$$\Psi(x,t)=\psi(x)\mathrm{e}^{-iEt/\hbar} \tag{7}$$

と書ける。