シュレーディンガー (Schrödinger) 方程式

シュレーディンガー方程式は、量子力学を波動形式でもって記述したときの基本方程式であって、低エネルギーの微視的対象に適用される。時刻 t, 直交座標 $x,\ y,\ z$ を用いて表記すると、粒子の波動関数 $\psi = \psi(t, x, y, z)$ は、次のようなシュレーディンガー方程式に従って変化する。

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

ただし $\hbar = h/(2\pi)$ で定義される基本定数であって、h はプランク定数である。また m は粒子の質量であり、$U(x, y, z)$ は ポテンシャル エネルギーである。なお $i = \sqrt{-1}$ である。一般に波動関数は、複素数の値をとる関数であって、$\psi^*\psi$ は粒子の存在する確率密度を与える。したがって 与えられた体積領域 V 内に粒子が存在する確率は

$$\int_V \psi^*\psi\ dxdydz$$

で与えられる。ただし ψ^* は ψ の複素共役である。

シュレーディンガー方程式は、ニュートン力学におけるエネルギー公式

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x,\ y,\ z)$$

に対して、以下で述べるような置き換えを施すことにより容易に得られる。ここで E は全エネルギー, p は運動量, m は質量, U はポテンシャルエネルギーである。両辺に $\psi(t, x, y, z)$ をかけると

$$E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi + U(x, y, z)\psi$$

となる。そこで 全エネルギー E, 運動量 p を、それぞれ次のように置き換える。

$$E \ \longrightarrow\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$p^2 \ \longrightarrow\ (i\hbar)^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

よって

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

が得られる。これは前述のシュレーディンガー方程式に他ならない。

一般に

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U(x, y, z)$$

とおいて、この H をハミルトニアンと呼ぶ。

ハミルトニアン H を用いると、シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$$

のように簡潔に記すことができる。

ハミルトニアン H が独立変数として時間 t を含まないとき、波動関数 $\psi(t, x, y, z)$ は次のように時間に依存する部分と空間座標に依存する部分とに分離できる。

$$\psi(t, x, y, z) \ = \ e^{-i\omega t} \ \phi(x, y, z)$$

ここで ω は角振動数である。このときシュレーディンガー方程式は、時間 t を含まない形に記せる。すなわち 時間を含まない波動関数 $\phi = \phi(x, y, z)$ の従う方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right) + U(x, y, z)\phi = E\phi$$

となる。ここで $E = \hbar\omega$ である。この方程式をハミルトニアン H を用いて簡潔に表すと

$$H\phi = E\phi$$

のように記せる。このように波動関数が時間に依存しないとき、定常状態と呼ばれる。原子内において周回運動している電子は、定常状態の波動関数 ϕ で表される。

量子力学においては、ある物理的条件の下でシュレーディンガー方程式を解いて、この方程式を満足するような波動関数を求めることが重要な課題となる。

(補遺)

歴史的には、シュレーディンガー方程式はオーストリーの理論物理学者 Erwin Schrödinger によって 1926 年に提唱された。Schrödinger 自身は、波動関数について確率的な解釈を行ってはいない。波動関数の確率解釈は、デンマークの物理学者 N. H. D. Bohr (ボーア) を中心とするコペンハーゲン学派の研究者達による処が大きい。量子力学における波動関数の物理的解釈については様々な考えや議論があるが、波動関数を確率的に解釈する方法は、現在では幅広く普及している。
なお ドイツ出身の理論物理学者 A. Einstein (アインシュタイン) が、波動関数の確率解釈に対して異議を唱えた事は歴史的によく知らている。