# シュレディンガー方程式を解くとは？

① シュレディンガー方程式を立てる
- 分子や原子、モデルによって異なる
- 主に位置エネルギーが違う

② ①の微分方程式（固有値問題）を満たす $\Psi(x)$ を推測する

③ $\Psi(x)$ の満たすべき条件
- 規格化
- 境界条件

などからさらに $\Psi(x)$ を絞り込む

④ ③の $\Psi(x)$ を①に代入し $E$（エネルギー固有値）を求める。

⑤ 電子密度（確率密度）$\rho(x)$ を求め、ともども図示して理解を深める。

---

# 1次元井戸型ポテンシャル問題

最も簡単なシュレディンガー方程式

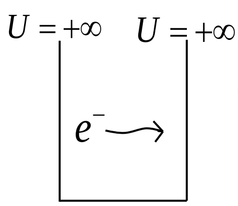
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

運動エネルギー演算子　　ポテンシャルエネルギー（位置）　↑単なる関数

$$\begin{cases} U(x) = 0 & (0 \le x \le L) \\ U(x) = +\infty & (x < 0, x > L) \end{cases}$$

$U = +\infty$ とは・・・その領域に電子が $\boxed{\quad}$

$U = 0$ とは・・・その領域で電子は $\boxed{\quad}$ （何の力も働いていない）




電子が井戸に閉じ込められている!

## ①シュレディンガー方程式をたてる

$\boxed{\quad}$ $(0 \le x \le L)$

ただし $\boxed{\quad}$ $(x < 0, x > L)$

## ② $\Psi(x)$ のあたりをつける

2階微分で負の固有値
（$E$ は運動エネルギーに一致するので正）

$\Rightarrow \Psi(x) \cdot \boxed{\quad} \cdot\cdot ?$

## ③ $\Psi(x)$ を絞り込む

波動関数の連続性から、

$\Psi(0) = \Psi(L) = 0$　が必要（境界条件）

$\therefore \Psi(x) = A \boxed{\quad}$

規格化条件から $A$ を決める

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)\,dx = \boxed{\quad}$$

$\boxed{\quad}$

これが1になるので、$A = \boxed{\quad}$ とする。

※規格化条件を満たす $A$ は本当は、$\boxed{\quad}$（$\theta$: 任意の実数）なので1つには定まらない。
代表的なものとして,実数で正になる $\boxed{\quad}$ を採用。

## ④エネルギーを求める

$\Psi_n(x) =$ ☐ を(＊)に代入する。

$E_n =$ ☐ $\quad n = 1, 2, 3, \cdots$

エネルギーが量子化されている!

## ⑤電子密度 $\rho(x)$ を求める

$$\rho_n(x) = \psi_n^*(x)\psi_n(x)$$

$$\because \sin^2\alpha = \frac{1}{2}(1-\cos 2\alpha)$$

### まとめ（図示）

- $\underline{n = 1\text{ のとき}}$ $\quad E_1 =$ ☐

波動関数 $\psi_1(x)$ 　　電子密度 $\rho_1(x)$

- $\underline{n = 2\text{ のとき}}$ $\quad E_2 =$ ☐

$\psi_2(x)$ 　　$\rho_2(x)$

- $\underline{n = 3\text{ のとき}}$ $\quad E_3 =$ ☐

$\psi_3(x)$ 　　$\rho_3(x)$