シュレディンガー方程式導出

複素数の波

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{k^2}{\omega^2}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}$$

$$\varphi = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

ド・ブロイ波長

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

p：運動量
h：プランク定数

量子1コあたりのエネルギー

$$E = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\text{ポテンシャル0を仮定}} = h\nu$$

ν：振動数

これを使って変形

$$\begin{cases} k = \dfrac{2\pi}{\lambda} = \dfrac{2\pi p}{h} \\ \omega = 2\pi\nu = \dfrac{2\pi E}{h} \end{cases}$$

$\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ とおくと

$$\begin{cases} k = \dfrac{p}{\hbar} \\ \omega = \dfrac{E}{\hbar} \end{cases}$$

$E = \dfrac{p^2}{2m}$ より、$\omega = \dfrac{p^2}{2m\hbar} = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar} = \dfrac{\hbar}{2m}k^2$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -i\omega\varphi = -i\frac{\hbar}{2m}k^2\varphi$$

$$i\hbar\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}k^2}_{E}\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}$$

$$\underbrace{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}}_{\text{演算子}}\varphi = \underbrace{E}_{\text{スカラー}}\varphi \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = \hat{E}$$

エネルギー演算子

$\hat{E} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}$ なので $-\hbar^2\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} = \hat{p}^2 \rightarrow i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} = \hat{p}$

運動量演算子

ポテンシャルエネルギー $V(x)$ も考慮すると、

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]}_{\hat{H}\ \text{ハミルトニアン演算子}}\varphi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}$$

シュレディンガー方程式

$$\hat{H}\varphi = \hat{E}\varphi$$

時間依存しないシュレディンガー方程式

$$\varphi = Ae^{i(kx-\omega t)} = \underbrace{Ae^{ikx}}_{\phi(x)\text{とおく}}e^{-i\omega t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x)\right)e^{-i\omega t} + V(x)\phi(x)e^{-i\omega t} = \underbrace{\hbar\omega}_{E}e^{-i\omega t}\phi(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\phi(x) = \underbrace{E}_{\text{スカラー}}\phi(x)$$

練習問題

$E = \dfrac{p^2}{2m} + V$ として $\left[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right]\varphi = i\hbar\dfrac{\partial\varphi}{\partial t}$ を導出

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} + \frac{V}{\hbar} = \frac{\hbar}{2m}k^2 + \frac{V}{\hbar}$$

$$k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar} - \frac{2mV}{\hbar^2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi = -k^2\varphi$$

$$= \left(-\frac{2m\omega}{\hbar} + \frac{2mV}{\hbar^2}\right)\varphi$$

$\frac{\partial}{\partial t}\varphi = -i\omega\varphi$ より　$\omega\varphi = -\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial t}\varphi = i\frac{\partial}{\partial t}\varphi$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi = -\frac{2m}{\hbar}i\frac{\partial}{\partial t}\varphi + \frac{2mV}{\hbar^2}\varphi$$

両辺に $-\frac{\hbar^2}{2m}$ をかけて整理

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi + V\varphi = i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}$$

よって $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$

三次元、時間依存なしの形

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)}_{\nabla^2} + V(x,y,z)\right]\varphi(x,y,z) = E\varphi(x,y,z)$$