量子力学

1　シュレーディンガー方程式の導出

1.1　波動関数の導出

まず、最初に、

k:波数	ω:角振動数	A:振幅
λ:波長	ν:振動数	v:波速
	T:周期	

とするとき、

$k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$	$\omega = 2\pi\nu$	$\lambda = vT$
	$\nu = \dfrac{1}{T}$	$v = \lambda\nu$

が成り立っていることが（よく考えれば）分かる。

これを用いて、最も簡単な波である正弦波の進行波を式に書いてみると、

$$\Psi(x,t) = A\sin\{\pm(kx - \omega t + \delta)\}$$

と表される。 また、同じく後退波は、

$$\Psi(x,t) = A\sin\{\pm(kx + \omega t + \delta)\}$$

と表せる。またオイラーの等式を用いるとこの進行波は、

$$\Psi(x,t) = A\exp\{\pm i(kx - \omega t + \delta)\}$$

のように複素化できる。古典物理においては、波は実態を伴うものだから、この複素化は主に計算を簡単にする目的などで用いられるが、量子力学においては、この置き換えは本質的であると考えられている。それについては後に述べる。

1.2 シュレーディンガー方程式の導出

古典的な波は普通の波動方程式の解となっているわけだが、ここでは**全ての粒子に波動性を仮定**し、それらの満たすべき新しい波動方程式（＝シュレーディンガー方程式) を導く。

物質の波動、物質波（＝ド・ブロイ波）の満たすべき新しい波動方程式を導くために、その波動方程式が満たすべきある特殊解となる波動関数を仮に、

$$\Psi(x,t) = A\exp\{i(kx-\omega t)\}$$

としよう。ここでド・ブロイ波のエネルギー（E）と運動量（p）が、波長（λ）と振動数（ν）の間に、

$$\begin{aligned} p &= \frac{h}{\lambda} \\ E &= h\nu \end{aligned}$$

の関係があることは分かっているものとする。すると上の式はそれぞれ、前項の波に成り立つ関係式より、

$$\begin{aligned} p &= \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \\ E &= h\nu = \frac{h}{2\pi}2\pi\nu = \hbar\omega \end{aligned}$$

と表すことが出来る。よって、これを上の波動関数に代入すると、

$$\Psi(x,t) = A\exp\left\{i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)\right\}$$

と表されることが分かる。さて、この関数は明らかに、

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Psi}{\partial x} &= i\frac{p}{\hbar}\Psi \\ \frac{\partial\Psi}{\partial t} &= -i\frac{E}{\hbar}\Psi \end{aligned}$$

をみたす。これは少し変形すると、

$$\begin{aligned} -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} &= p\Psi \\ i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= E\Psi \end{aligned}$$

という非常に面白い形になる。ここでもう一歩踏み出して、この対応関係が**波動関数に対しては**いつでも成り立つ、とする。つまり演算子としてみて、

$$
\begin{aligned}
p &\longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \\
E &\longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}
\end{aligned}
$$

という対応関係があるとするのである。すると、ポテンシャルを V とするとき

$$
E \quad = \frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{(mv)^2}{2m} + V = \frac{p^2}{2m} + V \equiv H
$$

が成り立っていることより、

$$
\begin{aligned}
E &\longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \\
p^2 &\longrightarrow \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}
\end{aligned}
$$

だから、

$$
\hat{E}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi = \left(\widehat{\frac{p^2}{2m} + V}\right)\Psi = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right\}\Psi
$$

つまり、

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

となる。これを 1 次元のシュレーディンガー方程式と呼ぶ。