[12]シュレディンガー方程式の導出

定常波の微分方程式

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = -\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \Psi(x) \quad \cdots ①$$

ド・ブロイの式

$$p = mv = \frac{h}{\lambda} \quad \cdots ② \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{p}{h} \quad \cdots ②'$$

エネルギー保存

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + U(x) \quad \cdots ③$$

$$(\because p = mv)$$

$$= \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

$$\Rightarrow p^2 = (E - U(x))2m \quad \cdots ③'$$

方針:①, ②', ③'から λ, p, v を消去

①, ②'より λ を消し、$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ を代入すると

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = -\left(\frac{2\pi p}{h}\right)^2 \Psi(x) = -\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \Psi(x) \quad \cdots ④$$

④, ③'から p^2 を消去すると、

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\Psi(x)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right]\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

シュレディンガー方程式

また③と見比べると、$\frac{p^2}{2m} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ と変化

関数か数値

演算子

$\hat{p} \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ とすると、

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$ となるので

シュレディンガー方程式の

ハミルトニアンは $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)$ と書ける。

[12]波動関数の性質

① $\Psi(x)$ は電子の何を表わすのか？

『位置xでの存在確率のようなもの？』

シュレディンガー方程式の解

$\Psi(x)$は負にもなるし、複素数にもなる

⇒ そのままでは確率に不適

$$\rho(x) \equiv \Psi^*(x)\Psi(x) = |\Psi(x)|^2$$

*は複素共役の意味

確率密度

単位量(1次元の場合、長さ)あたりの確率を表わす。

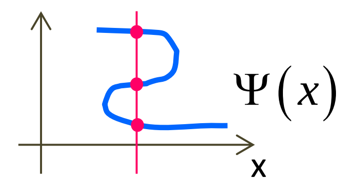
($\rho(x)dx$ で確率の次元)

② $\Psi(x)$ の条件

a) 規格化 …全空間で確率を足しあげると(積分すると)1になる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1$$

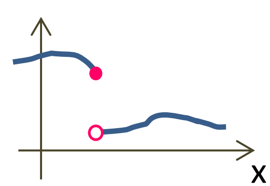
b) 一価性 …位置xが決まれば $\Psi(x)$ の値も1つに決まる。



← こういうのはダメ

c) 有限性 …各位置で常に確率密度を有限にするためには、
$\Psi(x)$ 自身も常に有限
(発散してはダメ)

d) 連続性 … $\Psi(x)$ は不連続ではいけない。



← こういうのはダメ