シュレディンガー方程式の組み立て

波動関数 $\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$

$$\mathrm{E} = h\nu = 2\pi\hbar\nu = \hbar\omega \qquad (\hbar = h/2\pi)$$

$$P = \hbar k$$

$$\Psi(x,t) = Ae^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)(Et-Px)}$$

xで二度微分する.

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{P^2}{\hbar^2}\Psi$$

tで一度微分する.

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\Psi$$

$$\mathrm{E} = \frac{p^2}{2m} + V \quad \Rightarrow \quad E\Psi = \frac{P^2\Psi}{2m} + V \quad \Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

微分演算子

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=(i\hbar)\left(-\frac{i}{\hbar}\mathrm{E}\right)\mathrm{A}\exp[(i/\hbar)(P_x\cdot x-\mathrm{E}t]=\mathrm{E}\Psi$$

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}=(-i\hbar)\left(\frac{i}{\hbar}P_x\right)\mathrm{A}\exp[(i/\hbar)(P_x\cdot x-\mathrm{E}t]=P_x\Psi$$

すなわち，$i\hbar\partial/\partial t$ の微分を Ψ に作用させると，エネルギーEが求められ，

$-i\hbar\partial/\partial x$ の微分を Ψ に作用させると運動量 P_x が求められた．

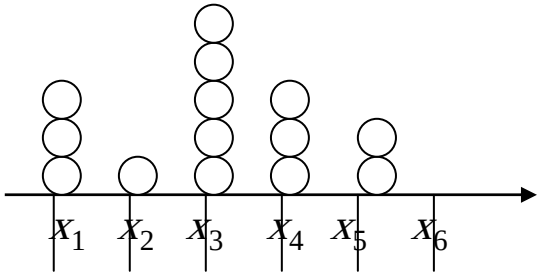
このような微分を（微分）演算子という．

$\mathrm{A}\Psi=\mathrm{a}\Psi$ のとき Aを演算子，aを固有値，

Ψ をAの固有関数という．

波動関数の物理的意味

$$\bar{x} = \frac{N_1 x_1 + N_2 x_2 + N_3 x_3 + \cdots}{N_1 + N_2 + N_3 + \cdots} = \frac{\sum N_i x_i}{\sum N_i}$$



$$\bar{x} = \frac{x_1 |\Psi_1|^2 dx_1 + x_2 |\Psi_2|^2 dx_2 + x_3 |\Psi_3|^2 dx_3 + \cdots}{|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + |\Psi_3|^2 + \cdots}$$

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx}$$

規格化 $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = 1$

期待値

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \Psi^* \mathbf{r} \Psi d\mathbf{r}$$

$$\langle \mathrm{E} \rangle = \int \Psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi d\mathbf{r}$$

$$\langle \mathrm{V} \rangle = \int \Psi^* \mathrm{V} \Psi d\mathbf{r}$$

$$\langle \mathbf{P} \rangle = \int \Psi^* (-i\hbar \nabla) \Psi d\mathbf{r}$$