1. 量子力学の基本方程式

1-1 Schrödinger 方程式

量子力学

↓ 基本方程式は Dirac 方程式

↓ 非相対論近似で

Schrödinger 方程式となる

↓ ミクロスケールでの粒子の運動の記述

- 1粒子の Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(r) = E\,\psi(r)$$

m : 質点の質量

$V(r)$: 質点のポテンシャル（他の粒子が作っている）

$\hbar$: Planck 定数

$\psi(r)$: 波動関数，状態関数，…

E : エネルギー固有値

- ポテンシャル $V(r)$ ［相互作用ともいう］が重要
- 力 $\mathbf{F}$ という概念は量子力学にはない。

$\langle -\nabla V(r) \rangle$ が力に対応する
（期待値）

［量子力学は何を記述できるか？］

1. 水素原子における電子の運動
（とくにエネルギー固有値）

2. 観測量はエネルギー固有値 E_n

$$\boxed{E_n = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2}} \quad (n = 1, 2, 3, \cdots)$$

（n：量子数という）

3. 電子の状態間の遷移確率
（時間依存の摂動論）

- ポテンシャル $V(r)$ の形

$$\begin{cases} \text{クーロン力} & V(r) = -\dfrac{Ze^2}{r} \\ \text{重力} & V(r) = -\dfrac{GMm}{r} \end{cases}$$

$$(r = |\mathbf{r}|)$$

⇓

極座標が重要

(それ以外, 解けない)

- ∇^2 と $\hat{\mathbb{L}}^2$:

$$\begin{cases} \nabla^2 = \dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r^2\dfrac{\partial}{\partial r}\right) + \dfrac{1}{r^2}\left[\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right) + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \\ \hat{\mathbb{L}}^2 = -\hbar^2\left[\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right) + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \end{cases}$$

(但し, $\hat{\mathbb{L}} = -i\hbar\, \mathbf{r}\times\nabla$)

【ポテンシャルは何故 $\frac{1}{r}$ の形か？】

Poisson 方程式，重力の方程式 共に

$$\boxed{\nabla^2 \phi = g(\mathbf{r})}$$

の形である.

これを解くとき Green 関数を使うと簡単.

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

をみたす $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を Green 関数という.

このとき

$$\boxed{\phi(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') g(\mathbf{r}') d^3 r'}$$

と求まる事はあきらか.

この Green 関数は

$$\boxed{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}$$

であらわされる

点粒子の場合，$g(\mathbf{r}) = g_0 \delta(\mathbf{r})$ とすればよいので

$$\boxed{\phi(\mathbf{r}) = -\frac{g_0}{4\pi} \frac{1}{r}}$$

となる.