1-2 Schrödinger方程式

- 運動は「1次元」とする.

Schrödinger 方程式

$$\boxed{\hat{H}\,\psi(x) = E\,\psi(x)}$$

但し. $\underline{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)}$

- $\begin{cases} \psi(x) & : \text{波動関数} \\ E & : \text{エネルギー固有値} \end{cases}$

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right]\psi(x) = E\,\psi(x)}$$

これは固有値方程式である

◎ 2階の微分方程式 ⟶ 2ケの条件が必要

束縛状態 ⟷ $\psi(\pm\infty) = 0$

が条件となる

$\boxed{\psi(x)\ は何か？}$ ⇔ （波動関数 / 状態関数）

↓

ハミルトニアンをオペレータにしたので
その オペレータが作用する $\boxed{相手}$ として導入された。

- $|\psi(x)|^2 \equiv \psi^*(x)\,\psi(x)$

↑ 粒子の存在確率 と解釈する

- $\psi(x)$ ： 粒子が作る「場」でもある

↕

電場 $\mathbb{E}$，磁場 $\mathbb{B}$ に対応している

- 何故 確率か？　$\rho(x) \equiv |\psi(x)|^2$ とすると

$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\,dx = 1$ としてある．（規格化）

↑ このは 確率 そのもののこと．

No.
Date

[オペレータと物理的観測量]

1. 量子力学では観測量は何になるのか？

$\psi(x)$ 自体は観測量ではない

↓

$\boxed{\text{期待値}}$ が観測量

e.g. $E = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{+}(x) \hat{H} \psi(x) \, dx$

2. $\psi(x)$ は複素関数

$$\begin{cases} \psi^{*}(x) & : \text{複素共役} \\ \psi^{+}(x) & : \text{エルミート共役} \end{cases}$$

3. x, p はオペレータ

それ自体は観測量ではない

↓

期待値 : $\langle x \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{+}(x) \, x \, \psi(x) \, dx$

が観測量

【複素共役とエルミート共役】

$$
\begin{cases}
\text{複素数}: & z = x + iy \quad (x, y\text{は実数}) \\
\text{複素共役}: & z^* = x - iy \\
\text{絶対値}: & |z| = \sqrt{x^2 + y^2} = \sqrt{z^* \cdot z}
\end{cases}
$$

- 行列の場合： $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ とする

複素共役 $A^* = \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{12}^* \\ a_{21}^* & a_{22}^* \end{pmatrix}$

エルミート共役 $A^\dagger = \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* \end{pmatrix}$

↑これが重要

- エルミート共役 $A^\dagger = A$ の時

- 微分オペレータの場合：

$\hat{p} = -i\hbar \dfrac{d}{dx}$ とすると

$\hat{p}^\dagger = \hat{p}$ となる

No.

Date

- 運動量 $\hat{p}$ の期待値：

$$\underline{\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}}$$ と仮定された.

$$\langle \hat{p} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{+}(x)\ \hat{p}\ \psi(x)\ dx$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{+}(x) \frac{d}{dx} \psi(x)\ dx$$

- 期待値は

ψ^{+} と ψ で はさんで 積分する.