1-2 Schrödinger 方程式

1次元運動をしばらくは考える

(簡単のため)

Schrödinger 方程式は

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

- $\psi(x)$: 波動関数
- E : エネルギー固有値

これは固有値方程式である

◎ $U(x)$: ポテンシャル

⇓

力は量子力学では出てこない!!

◎ 2階の微分方程式 ⇒ 2つの条件が必要

【$\psi(x)$ とは何か？】

（波動関数，状態関数，… という）

- ◎ $\psi(x)$ は 粒子の『場』を表わす．
- ◎ $|\psi(x)|^2$ ： 粒子の存在確率をあらわす

（注： $|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\,\psi(x)$
　↑（複素共役）

【何故 確率解釈が可能か？】

- $\psi(x)$ は 規格化条件をみたす

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1$$

- $\rho(x) \equiv |\psi(x)|^2$ とすると

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

この $\rho(x)$ は 確率密度そのもの

【オペレータと物理的観測量】

1. 量子力学の観測量

$\psi(x)$ 自体は観測量ではない

[期待値] が観測量

(例) $$E = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, \hat{H}\, \psi(x)\, dx$$

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

2. $\psi(x)$ は複素関数

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

3. x, $\hat{p}$ はオペレータ

よって観測量はその期待値

$$\begin{cases} \langle x \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x\, \psi(x)\, dx \\ \langle \hat{p} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} -i\hbar\, \psi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x)\, dx \end{cases}$$

【複素共役とエルミート共役】

$$\begin{cases} \text{複素数} : & z = x + iy \\ \text{複素共役} : & z^* = x - iy \\ \text{絶対値} : & |z| \equiv \sqrt{x^2+y^2} = \sqrt{z^* z} \end{cases}$$

◉ 行列の場合 :　$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$　(2行2列で説明)

$$\begin{cases} \text{複素共役} : & A^* \equiv \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{12}^* \\ a_{21}^* & a_{22}^* \end{pmatrix} \\ \text{エルミート共役} : & A^\dagger \equiv \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* \end{pmatrix} \end{cases}$$

エルミートオペレータ

$A^\dagger = A$ の時

Aはエルミートである

◉ 微分オペレータの場合 :

$\hat{p} = -i\hbar \dfrac{d}{dx}$ の時

$\hat{p}^\dagger = \hat{p}$ となる

(証明はあとで)