1次元における運動演算子、シュレディンガー方程式の「導出」

filename=schroedinger030519.tex

質量 m と運動量 p をもつ自由な粒子（＝力の場がないときの粒子）の運動エネルギー E は

$$E = \frac{p^2}{2m} \tag{1}$$

である。ここで、粒子描像と波動描像の橋渡しとして、光量子における振動数 ν とエネルギー E についてのアインシュタインの関係式

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (h: \text{プランク定数}, \omega = 2\pi\nu) \tag{2}$$

と粒子の運動量 p とそれに伴うド・ブローイ波の波長 λ の関係（ド・ブローイの関係）

$$\begin{aligned} p &= \frac{h}{\lambda} \\ &= \hbar k \end{aligned} \tag{3}$$

を考える。ここで $\hbar$ と波数 k は次のように定義される。

$$\begin{aligned} \hbar &\equiv \frac{h}{2\pi}, \\ k &\equiv \frac{2\pi}{\lambda}. \end{aligned} \tag{4}$$

式 (2,3）を用いると式 (1）は

$$\hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \tag{5}$$

と書きなおせる。一方、x 方向に波数 k、角振動数 ω で進行する平面波（振幅を除く）をあらわす関数

$$\Psi = \exp\{i(kx - \omega t)\} \tag{6}$$

は次の方程式を満たす。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi \tag{7}$$

これらの中の重要なことは運動量と時間を次のように座標と時間の微分演算子に置き換える処方である。

$$p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \tag{8}$$

$$E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}. \tag{9}$$

そこで上述の方程式を未知関数 $\Psi(x,t)$ に対する微分方程式（自由粒子に対するシュレディンガー方程式）と解釈する。

次に、ポテンシャル U をもつ力の下における対応する微分方程式を導出してみよう。非相対論においては粒子の力学的エネルギー E は運動エネルギー K とポテンシャル U の和

である。自由粒子に対するシュレディンガー方程式（7）をいったん次のように書き直してみる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = E\Psi = K\Psi. \tag{10}$$

この関係は常に成立するとみなし、ポテンシャル U がある場合には $K = E - U$ であるので、最右辺の式に代入して整理すると

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi = (E-U)\Psi \\ \rightarrow \quad & [-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U]\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi \end{aligned} \tag{11}$$