

力が働く粒子に対するシュレーディンガー方程式を次の手順で導出する。ここで、粒子の質量を  $m$ 、運動エネルギーを まず  $E$ 、角振動数を  $\omega$ 、波数を  $k$ 、運動量を  $p$  とする。ただし、 $h$  はプランク定数、それを  $2\pi$  で割ったものを  $\hbar$  とする。

1. 光量子に対するアインシュタインの関係式を記せ。
2. 物質粒子に対するド・ブローイの関係式を記せ。
3. この粒子の運動エネルギーと運動量、質量の関係式を  $\hbar, \omega, k, m$  を用いて書きなおせ。
4.  $x$  方向に進行する 1 次元平面波の複素数表現  $\Psi(x, t) = \exp[i(kx - \omega t)]$  に対して、 $\frac{\partial \Psi}{\partial t}, \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$  を計算せよ。
5. 直前の二つの問の結果を満たし、条件 1(=線形方程式であること)、条件 2(= $p, E$  など運動に関係する量を含まないこと)を満たすもっとも簡単な微分方程式を記せ。
6. ニュートン力学において、全エネルギーが (運動エネルギー + ポテンシャル) であることから類推して、前問の結果における運動エネルギー演算子を、一般には粒子の位置と時間に依存するポテンシャル  $V(x, t)$  を含む、全エネルギー に対応する演算子  $\hat{H} = -\hbar^2/(2m)\partial^2/\partial x^2 + V(x, t)$  で置き換えることにより、力が働く粒子に対するシュレーディンガー方程式を導け。

(解答例)

1. アインシュタインの関係式は  $E = \hbar\omega$  である。
2. ド・ブローイの関係式は  $p = \hbar k$  である。
3. 自由な粒子のエネルギーと運動量、質量の関係式は

$$E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \quad (1)$$

4. 題意より

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \exp[i(kx - \omega t)] = -i\omega \Psi, \quad (2)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 \exp[i(kx - \omega t)] = -k^2 \Psi. \quad (3)$$

5. 式(1)の両辺に  $\Psi$  を右からかけ、前二つの問の結果を代入すると

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}. \quad (4)$$

6. 前問の結果は力が働かない場合の方程式であるが、力が働く一般の場合の特殊な場合に相当すると見なし、前問の結果における運動エネルギー演算子を全エネルギーに対応する演算子 (ハミルトニアン) に置き換えると

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \Psi. \quad (5)$$