

1. シュレーディンガー方程式

Schrödinger equation

時間に依存するシュレーディンガー方程式 time-dependent Schrödinger equation は

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\vec{r}, t) \quad (1.1)$$

で与えられる。

時間に依存しないシュレーディンガー方程式 time-independent Schrödinger equation は

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1.2)$$

で与えられる。 \hat{H} はハミルトニアン Hamiltonian, $\Psi(\vec{r}, t)$ および $\psi(\vec{r})$ は波動関数 wave function である。位置が \vec{r} , 時刻が t で表される。 i は虚数単位 imaginary unit である。

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457168(18) \times 10^{-34} \quad [\text{J} \cdot \text{s}]$$

はプランク定数

$$h = 6.62606896(33) \times 10^{-34} \quad [\text{J} \cdot \text{s}]$$

を 2π で割ったものであり, ディラック定数とも呼ばれる。

ハミルトニアンが時間に依存しない場合,

$$\Psi(\vec{r}, t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\psi(\vec{r})$$

として式 (1.1) に代入すれば,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\psi(\vec{r}) \right] = \hat{H} \left[\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\psi(\vec{r}) \right]$$

$$\Leftrightarrow E \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\psi(\vec{r}) = \hat{H} \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\psi(\vec{r})$$

$$\Leftrightarrow \hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

となり, 式 (1.2) の形式が得られる。