No. Date

10/30 (金)

Bohr 理論

↓

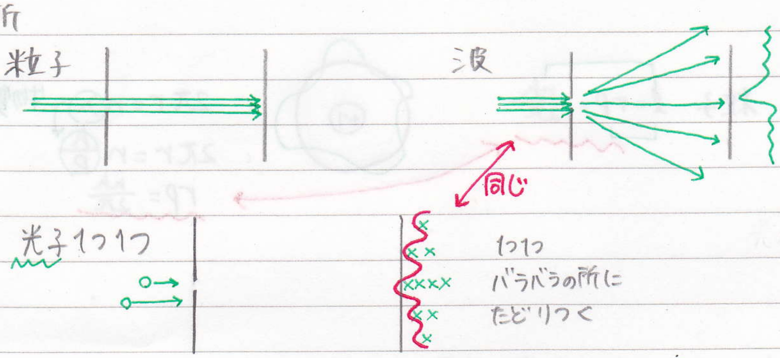
Heisenbergの不確定性原理と矛盾

↓ 波動方程式 → 粒子性を加える

シュレディンガー方程式 … 微視的粒子(粒子性+波動性)が従うべき方程式

シュレディンガー方程式 → 確率

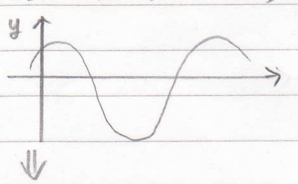
回折



以上より

光の波動論によって得られる光強度 = 粒子を見いだす確率

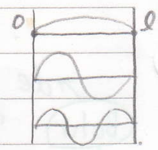
波動方程式 : まとめ



1次元

$y = a\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - 2\pi\nu t\right) = a\cos(kx - \omega t)$

$\rightarrow \boxed{y = a\sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)\cos\omega t}$ 定常波の条件



⇓

3次元に拡張

$\psi(r,t) = a\cos(k\cdot r - \omega t) \rightarrow \boxed{\psi(r,t) = \phi(r)\cos\omega t}$

$\hookrightarrow \Delta\psi = -k^2\psi\ ,\ \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\omega^2\psi$

波動方程式 $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \frac{\omega^2}{k^2}\Delta\psi \longrightarrow \Delta\phi + k^2\phi = 0$ 定常波の波動方程式

$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

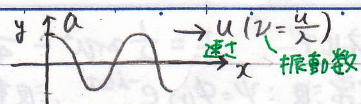
ラプラシアン

$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$

10/30 (金)

一次元 $t=0$

$y = a\cos(\frac{2\pi}{\lambda}x)$ 波長



$y = a\cos(\frac{2\pi}{\lambda}x - ut) = a\cos(\frac{2\pi}{\lambda}x - 2\pi\nu t)$

$= a\cos(kx - \omega t)$

(角)波長　(角)振動数

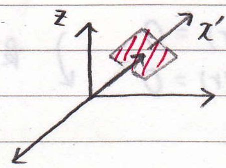
一般式：ある物理量 ψ (プサイ) が変化

$\psi(x,t) = a\cos(kx - \omega t)$

平面波：3次元に拡張

$\psi(\mathbf{r},t) = a\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)$

波数ベクトル



$\psi = a\cos(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)$

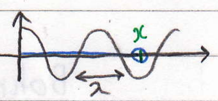
11/6 (金)

ボーアモデル　不確定性原理

波動方程式 … 粒子性を加える

シュレディンガー方程式 { 時間に依存する
$H\psi = E\psi$ 〃 しない

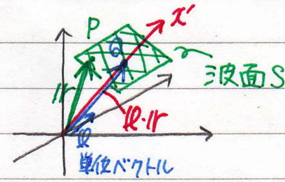
波動の式



$\nu = \frac{速度}{\lambda}$

3次元 { $y = a\cos(\frac{2\pi}{\lambda}x - 2\pi\nu t) = a\cos(kx - \omega t)$

$\psi(\mathbf{r},t) = a\cos(k\boldsymbol{\ell}\cdot\mathbf{r} - \omega t) = a\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)$



$\begin{cases} \Delta\psi = -k^2\psi \\ \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\omega^2\psi \end{cases} \Longrightarrow \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \frac{\omega^2}{k^2}\Delta\psi$

波動方程式

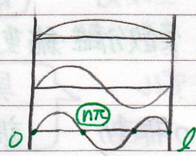
$k\boldsymbol{\ell} = \mathbf{k}$ 波数ベクトル

$\psi = a\cos(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)$

定常波の条件

$\psi(\mathbf{r},t) = \phi(\mathbf{r})\cos\omega t = \phi(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$

$e^{-i\omega t} = \cos\omega t - i\sin\omega t$



横波

$y = a\sin(\frac{n\pi}{\ell}x)\cos\omega t$

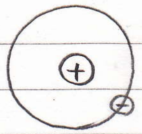
$= A(x)\cos\omega t$

$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \frac{\omega^2}{k^2}\Delta\psi$ ← 代入

$\Rightarrow \Delta\phi + k^2\phi = 0$

No. Date

11/6 (金)



古典的粒子のエネルギー $E=\frac{1}{2}mv^2-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}=\frac{p^2}{2m}-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ $(p=mv)$

定常波: $\psi=\phi(r)e^{-i\omega t}$, 波動方程式 $\Delta\phi(r)+k^2\phi(r)=0$

粒子性を加える $p^2=-\hbar^2\Delta$

$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$

時間に依存しない シュレディンガー方程式

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Big]\phi(r)=E\phi(r) \longrightarrow \hat{H}\phi(r)=E\phi(r)$$

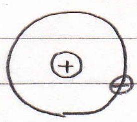
ハミルトニアン　波動関数

波　$\Delta\phi(r)+k^2\phi(r)=0$

$\Delta\phi(r)+\frac{p^2}{\hbar^2}\phi(r)=0$　$k=\frac{p}{\hbar} \leftarrow p=\frac{h}{\lambda}$ ド・ブロイ波 粒子の波動性

$p^2=-\hbar^2\Delta$

時間に依存するシュレディンガー方程式



$\psi=ae^{i(k\cdot r-\omega t)}$　(cos を exp へ)

$\frac{\partial\psi}{\partial t}=-i\omega\psi$

$E=\hbar\omega \leftarrow E=h\nu$ 光電効果: 光の粒子性

粒子　波

$\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{iE}{\hbar}\psi$　$E=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}=E=i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow \hat{H}\psi=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$　時間に依存した シュレディンガー方程式

$\Downarrow$ $\boxed{\psi=\phi(r)e^{-i\omega t}}$ 定常波

$\hat{H}\psi=E\psi$

11/13(金)

Bohrモデル　不確定性原理

↓ 波動方程式

シュレディンガー方程式　微視的粒子が従うべき方程式

回転 極座標表現, 角運動量

1次元の箱の内の粒子 < 最も簡単な手続き 規格直交関数

水素原子　球面調和関数

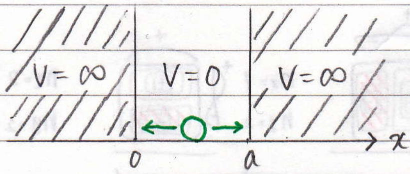
三次元 変数分離・縮重

ばねモデル 二原子分子の振動 < 具体例 調和振動子

多電子原子 分子

11/13(金)

1次元の箱の中の粒子



$\mathcal{H}\phi = E\phi$

$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx^2} + V\right]\phi = E\phi$

運動エネルギー　位置エネルギー

$\phi = \beta \sin\frac{n\pi}{a}x$

β:規格化定数

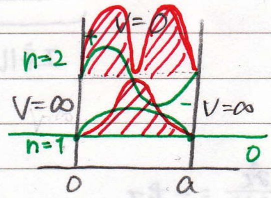
$\int_{-\infty}^{\infty}|\phi|^2 dx = 1$

$\int_0^a|\phi^2|dx = 1$

$\Rightarrow \beta = \sqrt{\frac{2}{a}}$ … 規格化

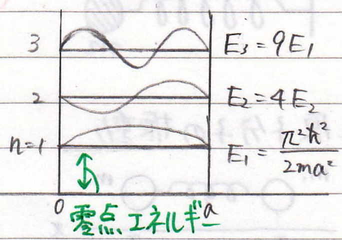
$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{nx}{a}\pi$　固有関数

$E = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2}$　固有値



① 粒子 → 波
② +, − ある
③ 存在確率 は $|\phi|^2$

量子化



固有関数の重要な性質

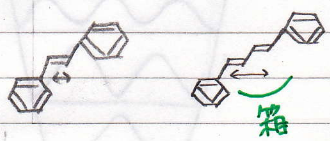
$\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m^*(x)\,\phi_n(x)\,dx = 0 \quad (m \neq n)$ → 直交している

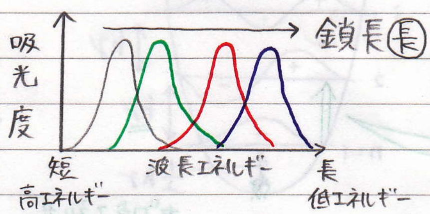
$\downarrow$　　$\downarrow$

$\sin\frac{n}{a}dx$ (n=1)　　$\sin\frac{2\pi}{a}dx$ (n=2)

規格直交関数

1次元の箱の中の例: プリントNO.5 ジフェニルポリエン





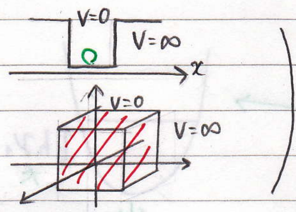
11/27(金)

1次元の箱の中の粒子

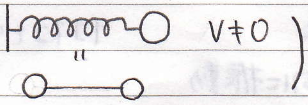
↓ 三次元の箱の中の粒子

ばねモデル

2原子分子の振動

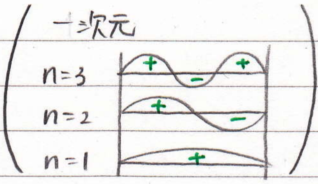


運動エネルギー

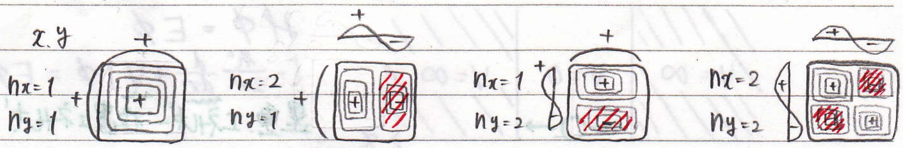


位置エネルギー

11/27 (金)

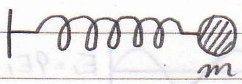


二次元



エネルギー等しい → 縮重.縮退

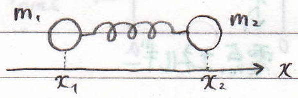
ばねモデル



$$m\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = -kx$$

加速度　　ばね定数

二原子分子の振動



$$\begin{cases} m_1 \dfrac{\partial^2 x_1}{\partial t^2} = k(x_2 - x_1 - l_0) & \cdots ① \\ m_2 \dfrac{\partial^2 x_2}{\partial t^2} = -k(x_2 - x_1 - l_0) & \cdots ② \end{cases}$$

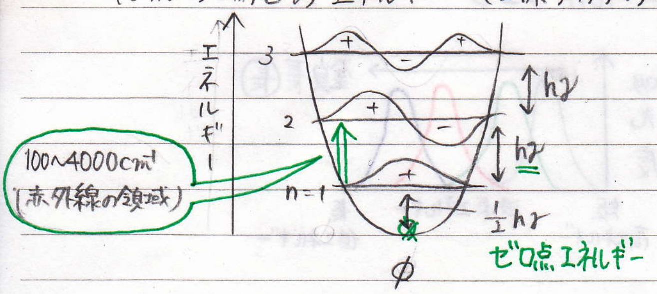
② − ① より.
$$\frac{\partial^2 (x_2 - x_1)}{\partial t^2} = -k(x_2 - x_1 - l_0)\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) = -k(x_2 - x_1 - l_0)\left(\frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}\right)$$

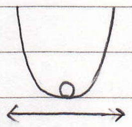
$$\Leftrightarrow \underbrace{\left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\right)}_{\mu} \frac{\partial^2 (x_2 - x_1)}{\partial t^2} = -k\underbrace{(x_2 - x_1 - l_0)}_{x}$$

μ:換算質量

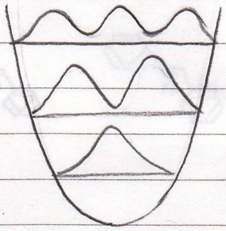
$$\mu\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = -kx \Rightarrow V = \frac{kx^2}{2}$$

ばねの場合のエネルギー (2原子分子の場合)

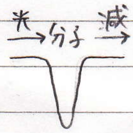




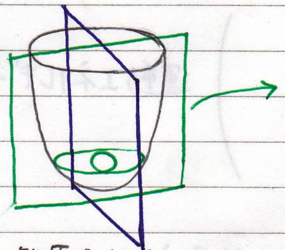
調和振動子

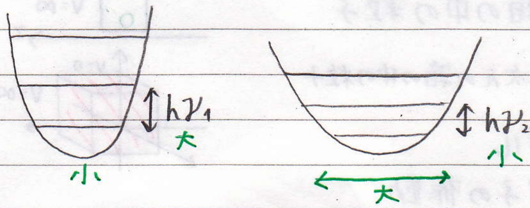


$|\phi|^2$



磁率





多原子分子
(いろんな方向に振動
→お椀型になっている)

1コ1コとり出して見ると
様子が違っている。