Eをrのみ又はvのみで表記

$$\frac{1}{2}m_e v^2 = \frac{1}{2}m_e (r\varpi)^2 = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

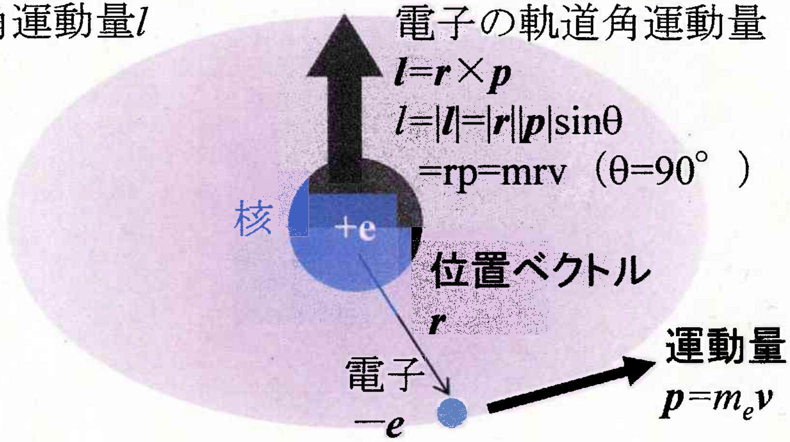
$$m_e r\varpi^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

加速度　クーロン引力

（SI単位系：ガウス単位系で $\frac{e^2}{r^2}$）

$$v = r\varpi \qquad \varpi = \sqrt{\frac{e^2}{m_e 4\pi\varepsilon_0 r^3}}$$

電子の軌道角運動量l



Eをlで表記

$$E = \frac{E^2}{E} = \frac{\left(-\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)^2}{-\frac{m_e v^2}{2}} = \frac{-m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0 m_e r v)^2} = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2 l^2}$$

二次元の箱の中の粒子（箱の2辺の長さa_x, a_y）：式誘導

箱の中：$V_x = V_y = 0$, 箱の外：$V_x = V_y = \infty$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+V\right]\phi = E\phi$$

変数分離

変数分離①
$\phi(x,y) = X(x)Y(y)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(Y(y)\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+X(x)\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2}\right)+(V_x+V_y)X(x)Y(y) = EX(x)Y(y)$$

$-\frac{\hbar^2}{2m}X(x)Y(y)$で割る

$$\left(\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2}\right)-\frac{2m}{\hbar^2}(V_x+V_y) = -\frac{2m}{\hbar^2}E$$

変数分離

変数分離②
左辺がxだけの関数、右辺がyだけの関数
それぞれが定数でなければならない→$\frac{2m}{\hbar^2}E_y$とおく

$$\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E_x - V_x)X(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E_y - V_y)Y(y) = 0$$

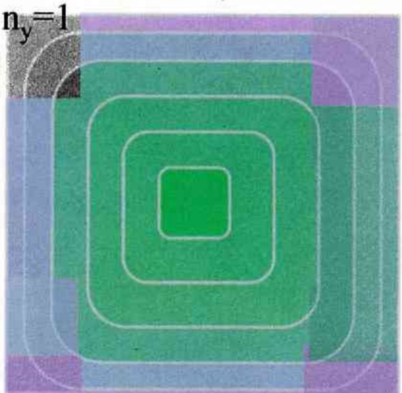
$$E = E_x + E_y$$

$$\phi_{nxny} = \sqrt{\frac{4}{a_x a_y}}\sin\frac{n_x\pi}{a}x\sin\frac{n_y\pi}{b}y$$

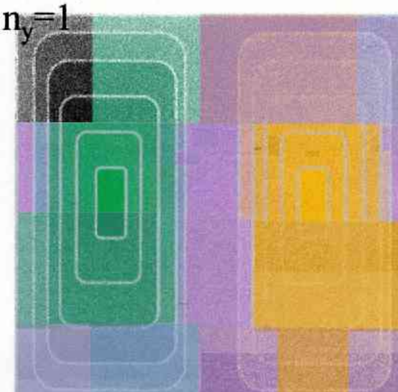
$$E_{nxny} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x{}^2}{a_x{}^2}+\frac{n_y{}^2}{a_y{}^2}\right)$$

$n_x, n_y = 1,2,3\cdots$

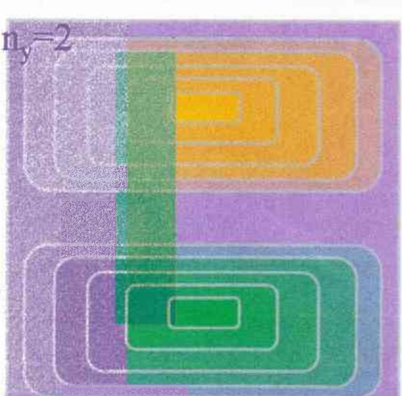
n_x=1, n_y=1



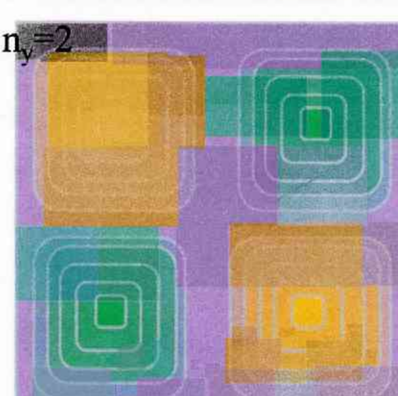
n_x=2, n_y=1



n_x=1, n_y=2



n_x=2, n_y=2



$$\Psi = c_a\phi_a + c_b\phi_b$$

$$H\Psi = \varepsilon\Psi$$

$$\langle\Psi|H|\Psi\rangle = \varepsilon\langle\Psi|\Psi\rangle$$

覚えよ

$$c_a^{\,2}\langle\phi_a|H|\phi_a\rangle + c_b^{\,2}\langle\phi_b|H|\phi_b\rangle + c_a c_b\langle\phi_a|H|\phi_b\rangle + c_b c_a\langle\phi_b|H|\phi_a\rangle = \varepsilon\{c_a^{\,2}\langle\phi_a|\phi_a\rangle + c_b^{\,2}\langle\phi_b|\phi_b\rangle + c_a c_b\langle\phi_a|\phi_b\rangle + c_b c_a\langle\phi_b|\phi_a\rangle\}$$

$$c_a^{\,2}\alpha_a + c_b^{\,2}\alpha_b + 2c_a c_b\beta_{ab} = \varepsilon\{c_a^{\,2} + c_b^{\,2} + 2c_a c_b S_{ab}\}$$

ここで微分する$\dfrac{\partial}{\partial c_a}$、$\dfrac{\partial}{\partial c_b}$

$$2c_a\alpha_a + 2c_b\beta_{ab} = \frac{\partial\varepsilon}{\partial c_a}\{c_a^{\,2} + c_b^{\,2} + 2c_a c_b S_{ab}\} + \varepsilon\{2c_a + 2c_b S_{ab}\}$$

$$2c_b\alpha_b + 2c_a\beta_{ab} = \frac{\partial\varepsilon}{\partial c_b}\{c_a^{\,2} + c_b^{\,2} + 2c_a c_b S_{ab}\} + \varepsilon\{2c_b + 2c_a S_{ab}\}$$

εの極小値が真の値に近い（変分法）。$\dfrac{\partial\varepsilon}{\partial c_b}=0$、$\dfrac{\partial\varepsilon}{\partial c_b}=0$とし、極小値を求める。

$$c_a(\alpha_a - \varepsilon) + c_b(\beta_{ab} - \varepsilon S_{ab}) = 0$$

$$c_a(\beta_{ab} - \varepsilon S_{ab}) + c_b(\alpha_b - \varepsilon) = 0$$

$$\begin{vmatrix} \alpha_a - \varepsilon & \beta_{ab} - \varepsilon S_{ab} \\ \beta_{ab} - \varepsilon S_{ab} & \alpha_b - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

対角化して固有値ε、固有関数c_a、c_bに関する情報を得る。

この方法を用いれば、ϕ_iの数が増えても波動関数を得ることができる。