

古典的な波動の式導入

一般式: ある物理量 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ が変化するものを波動として捉える

平面波: $\Psi(\mathbf{r}, t) = a \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$

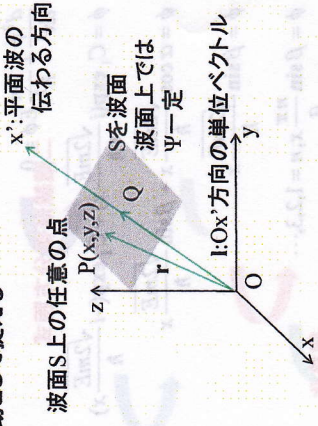
平面波: 3次元に拡張

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

$\overline{OQ} = \mathbf{l} \cdot \mathbf{r} = |\mathbf{l}| |\mathbf{r}| \cos \theta = |\mathbf{r}| \frac{\overline{OQ}}{|\mathbf{r}|}$

$kl = \mathbf{k} \cdot \mathbf{l}$: 波数ベクトル

OQがxに対応するもの
lは単位ベクトルなので $l=1$



電子・原子などの微視的粒子が従うべき方程式

定常波: $\Psi = \phi(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}$

振幅が満たすべき方程式

$\Delta \phi(\mathbf{r}) + k^2 \phi(\mathbf{r}) = 0$

$\Delta \phi(\mathbf{r}) + \frac{p^2}{\hbar^2} \phi(\mathbf{r}) = 0$

$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi + \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{\hbar^2} \phi = 0$

$(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \phi = \left(\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 \right) \phi$

$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, p_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, p_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$

$\mathbf{p}^2 = \hbar^2 \Delta$

de Broglie波: 粒子の波動性
粒子に関連した運動量
 $p = \frac{h}{\lambda}$ ← 波動に関連した波長
 $p = \hbar k$ $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

粒子性を加味

$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi + \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{\hbar^2} \phi = 0$

$(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \phi = \left(\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 \right) \phi$

$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, p_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, p_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$

$\mathbf{p}^2 = \hbar^2 \Delta$

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

$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -k_x \sin(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)$

$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k_x^2 \cos(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)$

$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k_x^2 \Psi, \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = -k_y^2 \Psi, \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -k_z^2 \Psi$

$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -k^2 \Psi$

$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\omega^2 \Psi = \frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) = \frac{\omega^2}{k^2} \Delta \Psi$

波動方程式

$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \Delta = \nabla^2, \Delta: \text{ラプラシアン}, \nabla: \text{ナブラ}$

時間に依存したSchrödinger方程式

$\Psi = a \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) = a \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t))$

$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = i k_x \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) = i k_x \Psi$

$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i k_x \frac{\partial \Psi}{\partial x} = -k_x^2 \Psi$

$\Delta \Psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi = -k^2 \Psi$

同様に $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = -k_y^2 \Psi, \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -k_z^2 \Psi$

$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i \omega \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) = -i \omega \Psi$

粒子 波動 $p = \hbar k$
 $\Delta \Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi$

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

粒子 → (粒子 + 波動)

$E = i \hbar \frac{\partial}{\partial t}$

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = k_x x + k_y y + k_z z$

古典的な波動の式

Einsteinの式: 光の粒子性
粒子に関連したエネルギー
 $E = h \nu$
波動に関連した振動数

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\Psi$$

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

微分演算子を含んでいるので方程式にならない
→両辺に波動関数作用すると考えて
時間に依存したSchrödinger方程式を得る
平面波の式から導かれた
→一般の場合にも成立(最も根本的な方程式)

$$E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi \quad \text{定常波の式: } \Psi = \phi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} = \phi(\mathbf{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\hat{H}\phi(\mathbf{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(\mathbf{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = E\phi(\mathbf{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\hat{H}\phi(\mathbf{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = E\phi(\mathbf{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad \text{時間に依存しないSchrödinger方程式は、}$$

$$\Psi(\mathbf{r},t) \text{ が } \phi(\mathbf{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \text{ の形(定常波)の時、}$$

$$\mathbf{r} \text{ の関数と } t \text{ の関数が分離され成立}$$

規格直交関数系

$$m \neq n$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x)\phi_n(x)dx$$

$$= \frac{2}{a} \int_0^a \sin \frac{m\pi}{a} x \sin \frac{n\pi}{a} x dx$$

$$= -\frac{1}{a} \left\{ \cos \frac{(m+n)\pi}{a} x - \cos \frac{(m-n)\pi}{a} x \right\} dx$$

$$= \frac{-1}{(m+n)\pi} \left[\sin \frac{(m+n)\pi}{a} x \right]_0^a + \frac{1}{(m-n)\pi} \left[\sin \frac{(m-n)\pi}{a} x \right]_0^a$$

$$= 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x)\phi_n(x)dx = \delta_{mn} \rightarrow \text{直交する}$$

一次元の箱の中の粒子:式誘導

箱の中 $V=0$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\phi = 0$$

二階線形微分方程式

$$\phi = C_1 \exp(i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x) + C_2 \exp(-i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x)$$

$$\phi = \alpha \cos \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x + \beta \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x$$

$$\phi = \beta \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x$$

$$\phi = \beta \sin \frac{n\pi}{a}x, n=1,2,3,\dots$$

規格化

$$\text{固有関数: } \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a}x, n=1,2,3$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a}x \right) + \frac{2m}{\hbar^2}E \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a}x \right) = 0$$

$$\sqrt{\frac{2}{a}} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 \sin \frac{n\pi}{a}x + \frac{2m}{\hbar^2}E \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a}x = 0$$

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

二階線形微分方程式

$$(D^2 + a)\phi = 0$$

$$(D + \sqrt{a})(D - \sqrt{a})\phi = 0$$

$$(D \pm \sqrt{a})\phi = 0$$

$$\frac{d\phi}{dx} \pm \sqrt{a}\phi = 0, \frac{d\phi}{dx} = \mp \sqrt{a}\phi$$

これを満たすのは $\phi = C \exp(\mp \sqrt{a}x)$

一般解: $\phi = C_1 \exp(\sqrt{a}x) + C_2 \exp(-\sqrt{a}x)$

$$\exp(\pm ia) = \cos a \pm i \sin a$$

$$x = a$$

$$\phi(a) = \beta \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = 0$$

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a = n\pi, n=1,2,3,\dots$$

規格化

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi|^2 dx = \beta^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a}x dx = \beta^2 \int_0^a \frac{1 - \cos \frac{2n\pi}{a}x}{2} dx$$

$$= \frac{a}{2} \beta^2 = 1$$

$$\sin \frac{A}{2} = \pm \sqrt{\frac{1 - \cos A}{2}}$$

$$\int f'(x) \cos f(x) dx = \sin f(x)$$

$$\int_0^a \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2n\pi}{a}x \right) dx = \left[\frac{x}{2} - \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{a}x \right]_0^a = \frac{a}{2}$$