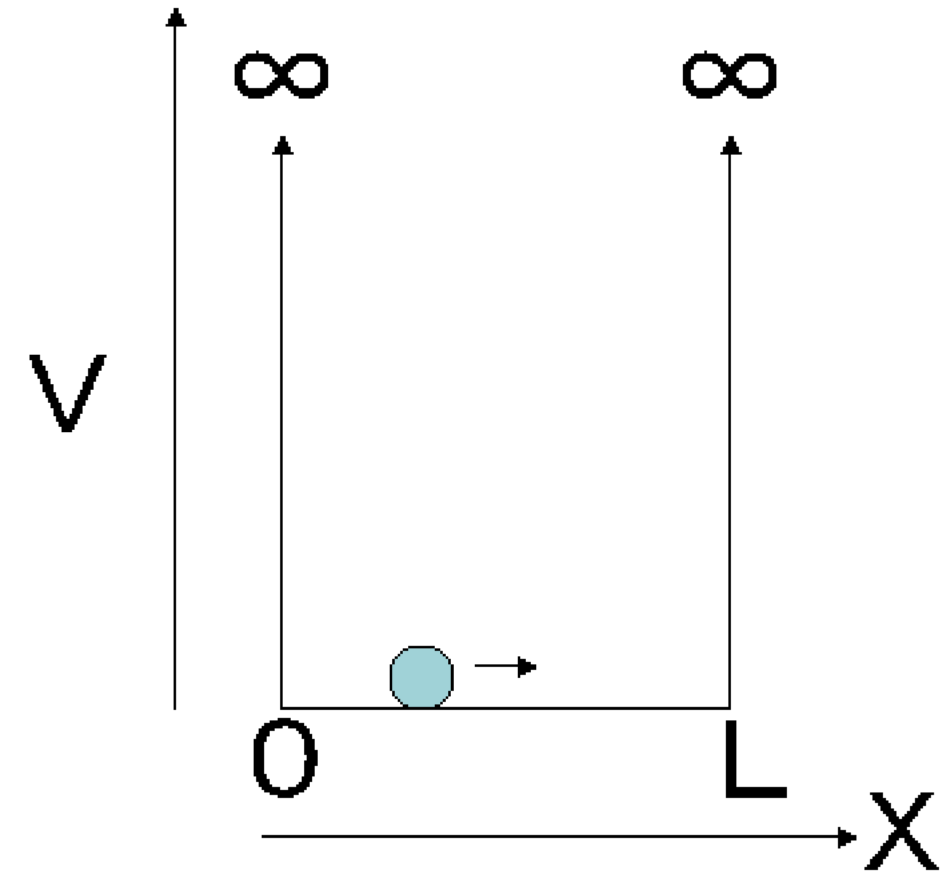
12　量子論：手法と応用

- 系の性質　　←　シュレーディンガー方程式を解く
- 分子運動
  並進運動　振動運動　回転運動
- 量子化された性質

並進運動

箱の中の粒子

井戸型ポテンシャル



$$\psi_k(x) \quad C\sin kx \quad D\cos kx$$

$$E_k = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$$

境界条件 $x < 0 \quad x > L \longrightarrow \psi_{\mathrm{k}}(x) = 0$

$$x = 0 \quad \psi_{\mathrm{k}}(0) = 0 \qquad D = 0$$

$$x = L \quad \psi_{\mathrm{k}}(L) = C\sin kL = 0 \qquad kL = n\pi$$

$$\psi_{\mathrm{n}}(x) = C\sin\frac{n\pi x}{L} \qquad E_n = \frac{n^2h^2}{8mL^2} \qquad n = 1,2,3\cdots$$

規格化

$$\int_0^L \psi^2 \mathrm{d}x = 1 \rightarrow \quad C = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}$$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \qquad n = 1,2,3\cdots$$ 量子数

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

離散的エネルギー

定常波（定在波）　nの増加　半波長の追加
波長を短くする
節の増加

零点エネルギー $E_1 = \dfrac{h^2}{8mL^2}$

不確定性原理の要請
波動関数の連続性

直交性 $\int \psi_n^* \psi_{n'} \mathrm{d}\tau = 0$

ディラックのブラケット表記

$\langle n | n' \rangle = 0 \qquad (n' \neq n)$

$\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}$ クロネッカーのデルタ

二次元における運動

変数分離法

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\right)=E\psi \qquad \psi(x,y)=X(x)Y(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}x^2}=E_X X \quad -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\mathrm{d}^2Y}{\mathrm{d}y^2}=E_Y Y \qquad E=E_X+E_Y$$

$$X_{n_1}(x)=\left(\frac{2}{L_1}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{n_1\pi x}{L_1}\right)$$

$$Y_{n_2}(y)=\left(\frac{2}{L_2}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{n_2\pi y}{L_2}\right)$$

$$\psi_{n_1 n_2}(x,y) = \frac{2}{(L_1 L_2)^{1/2}} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{L_1}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{L_2}\right)$$

$$E_{n_1 n_2} = \left(\frac{{n_1}^2}{{L_1}^2} + \frac{{n_2}^2}{{L_2}^2}\right)\frac{h^2}{8m}$$

$L_1 = L_2 = L$　のとき

$n_1 = 1, n_2 = 2$　と $n_1 = 2, n_2 = 1$　の場合

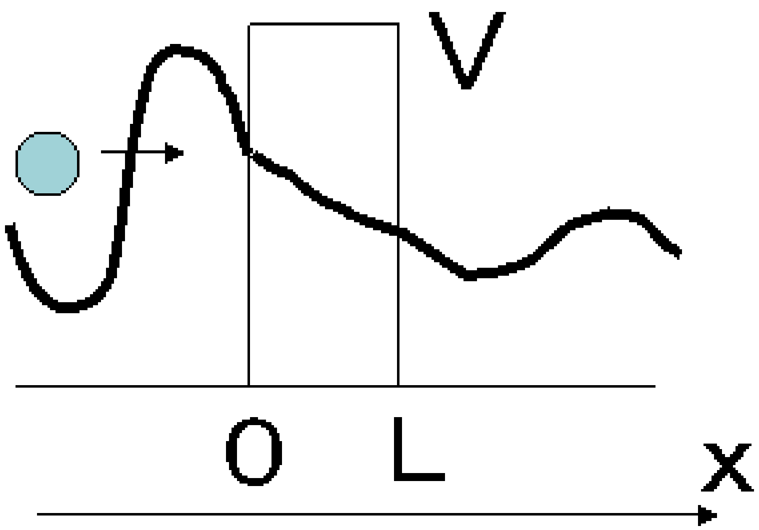
異なる波動関数が同じエネルギーに対応

⇩

縮退

トンネル現象

粒子は自らのエネルギーEよりも高いポテンシャルの壁を通り抜ける



1．x＜0の時

無限大の時と同じ

2．$0 \le x \le L$ のとき

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+V\psi=E\psi$$

$$\psi = C\mathrm{e}^{\kappa x}+D\mathrm{e}^{-\kappa x}$$

$$k\hbar = \{2m(V - E)\}^{1/2}$$

透過確率 $$T=\left\{1+\frac{\left(\mathrm{e}^{\kappa L}-\mathrm{e}^{-\kappa L}\right)^2}{16\varepsilon(1-\varepsilon)}\right\}^{-1}$$

振動運動

調和振動 $F = -kx$ $k:$力の定数

ポテンシャルエネルギー $V = \frac{1}{2}kx^2$

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi = E\psi$$

エネルギー準位

$$E_v = (v + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad \omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2} \quad v = 0,1,2,\cdots$$

波動関数

$$\psi_v(x) = N_v H_v(\mathrm{y}) \mathrm{e}^{-\mathrm{y}^2/2}$$

$H_v(\mathrm{y})$

エルミート多項式

$$\mathrm{y} = \frac{x}{\alpha} \qquad \alpha = \left(\frac{\hbar^2}{mk}\right)^{1/4}$$

$$N_v = \frac{1}{\left(\alpha \pi^{1/2} 2^v v!\right)^{1/2}}$$

期待値

$$\langle x \rangle = 0 \qquad \langle x^2 \rangle = (v + \frac{1}{2}) \frac{\hbar}{(mk)^{1/2}}$$