

量子力学の原理は粒子＝波動の二重性を表わす次の2つの「公理」から導かれる。

(1) 振動数 ν の波動はエネルギー $E=h\nu (= \hbar\omega)$ の粒子性をもつ。

- (1) プランクの光粒子説 → 黒体放射の説明
- (2) 光電効果

(2) 運動量 p の粒子は波長 $\lambda = h/p$ の波動性をもつ。
(ド・ブローイ波)

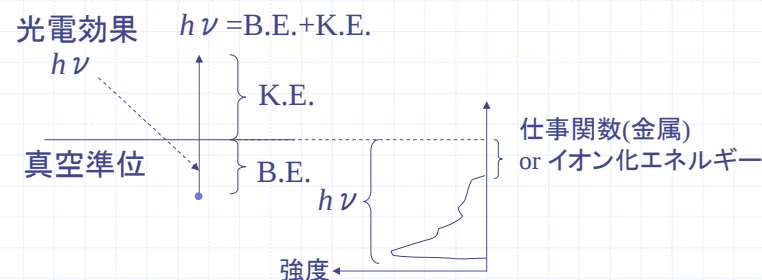
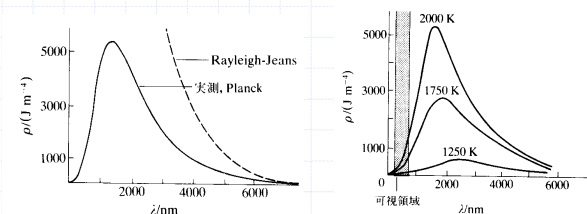
- (1) 電子線の回折
- (2) 水素原子の線スペクトル

これにより 粒子性(エネルギー、運動量)
波動性(振動数、波長)の対応がつく。

黒体放射

振動数 ν の光は $E=h\nu$ の整数倍のエネルギーしかもたない。

→ エネルギー $E=h\nu$ の光子 → エネルギー $E=hc/\lambda$



ド・ブローイ波の導出

光について $\lambda \nu = c$ (波長) × (振動数) = (光速)

$E=mc^2$ 特殊相対論のエネルギー

$E=h\nu$ プランクの式

これより $mc^2 = h\nu = hc/\lambda$ だから

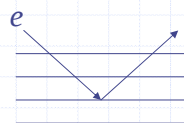
$$mc = \left[\right]$$

通常の粒子について $p = mv$ だから $mc \rightarrow p$ だとすると

$$p = \left[\right]$$

あるいは

$$\lambda = h/p \quad \text{ド・ブローイ波の式}$$



電子線回折

(運動)エネルギー = $eV = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{h}{\lambda} \right)^2$ より

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}} = \frac{1.2265 \text{ nm}}{\sqrt{V(\text{V})}} \quad V=150 \text{ Vで} \quad 0.1 \text{ nmくらい}$$

水素原子

$$\frac{\text{クーロン力}}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{\text{遠心力}}{\frac{mv^2}{r}} = \frac{p^2}{mr}$$

円周が波長の整数倍 $2\pi r = n\lambda$

ここで $\lambda = h/p$ を使うと:

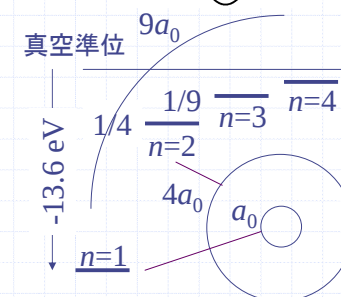
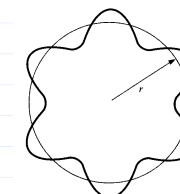
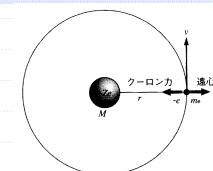
$$r = \left[\right] n^2 = a_0 n^2$$

a_0 : ボーア半径 $0.529 \text{ \AA}$

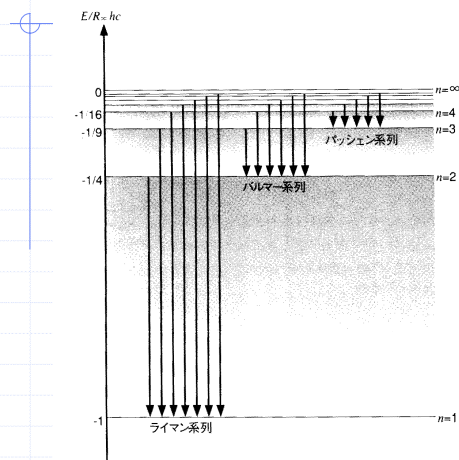
このとき

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{me^4}{8\epsilon_0 h^2} \frac{1}{n^2}$$

$Rhc = -13.6 \text{ eV}$
リードベリ定数



水素原子の線スペクトル



$$E = -\frac{Rhc}{n^2}$$

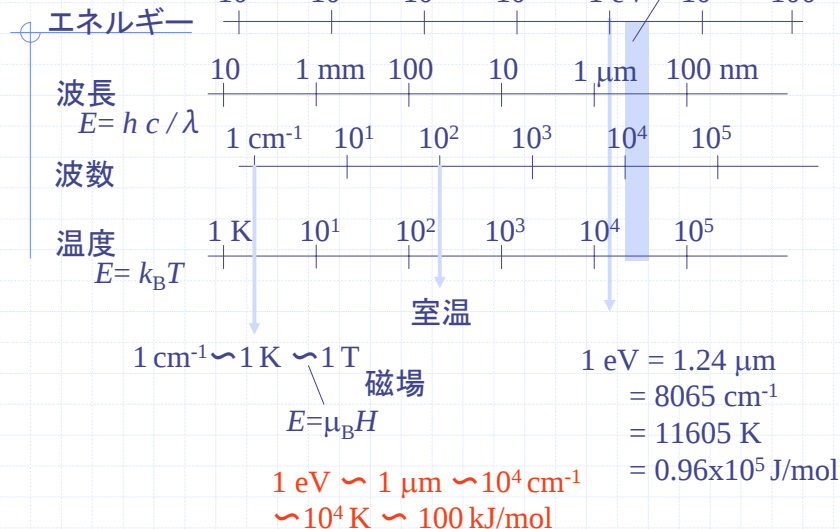
n から m への遷移は

$$\Delta E = Rhc \left[\right]$$

あるいは

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta E}{hc} = \left[\right]$$

エネルギー



一般に波動は $\phi(x, t) = \phi_0 e^{2\pi i(\frac{x}{\lambda} - \nu t)}$ と表わされる。
 ただし $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$
 交流回路では、例えば $I(x, t) = I_0 e^{2\pi i(\frac{x}{\lambda} - \nu t)}$ の実数部をとる。

$t=0$ での実数部は

$$I(x) = \left[\right]$$

波の形

$x=0$ での実数部は

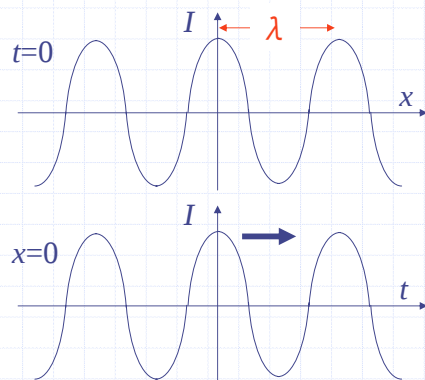
$$I(t) = \left[\right]$$

のように振動する。

したがって位相=一定の部分は、(expの肩より)、速度

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} = \left[\right] \text{ で右方向に移動する。波数 } k = 2\pi/\lambda、$$

角振動数 $\omega = 2\pi\nu$ を使うと波の式は $\phi(x, t) = \left[\right]$



一般に波動は $\phi(x, t) = \phi_0 e^{2\pi i(\frac{x}{\lambda} - \nu t)}$ と表わされるので、これを x で微分して

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{2\pi i}{\lambda} \phi = \frac{i}{\hbar} p \phi \quad \therefore p \phi = \left[\right] \quad (1)$$

同様に t で微分して

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{2\pi i}{T} \phi = \frac{i}{\hbar} E \phi \quad \therefore E \phi = \left[\right] \quad (2)$$

ϕ を x または t で微分して $\hbar/\lambda$ (または $i\hbar$) をかけると p, E が求まる。
 あるいは p, E を微分演算子

$$p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

に置き換える式と見ることもできる。

特に(2)に $E = \frac{p^2}{2m} + V$ を入れて

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left(\frac{p^2}{2m} + V \right) \phi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \phi \quad (3)$$

E が時間によらず一定の時は $\phi(x, t) = \phi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ を(3)に入れて

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \phi = \left[\quad \right] \quad (4)$$

Schrödinger方程式を得る。

(1), (2), (4)式は[微分を含んだ演算子M] $\phi = m\phi$ の形をしているので、 ϕ についての微分方程式である。

この微分方程式は特定の m について解 ϕ を持つので、そのときの m を**固有値**、対応する ϕ を**固有関数**という。

$V=0$ のとき(自由電子)

Schrödinger方程式 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi = E\phi$ の解(固有関数)は $\phi(x) = e^{ikx}$

対応するエネルギー(固有値)は $E = \left[\quad \right]$

$\phi(x) = e^{ikx}$ は同時に $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial x} = p\phi$ の解(固有関数)にもなっ

て、対応する固有値は $p = \left[\quad \right]$

つまり平面波 $\phi(x) = e^{ikx}$ は運動量 $p = \left[\quad \right]$

エネルギー $E = \left[\quad \right]$ を持つ状態である。

$\phi(x) = e^{-ikx}$ は運動量 $p = \left[\quad \right]$ エネルギー $E = \left[\quad \right]$

をもつので、反対(k マイナス)方向に進行する、運動量の絶対値、エネルギーの等しい波である。

