量子力学

Ver. 0.0.1

2sjump

tw : @2sjump

2019 年 7 月 13 日

目次

第 0 章

まえがき

- この教科書は砂川先生の教科書『量子力学』をベースに作成しています。
- (3 元) ベクトルは太字で表します。(例：$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}$)
- 説明は簡素ですので、初学には向かないかもしれません。

第 1 章

量子力学ことはじめ

この章では、量子力学が適用されるスケールについて、具体的な定数を用いて説明していきます。

1.1 光の粒子性・電子の波動性

1.1.1 Compton 効果

光の粒子性から、その粒子を **光子, photon** という。
角振動数 ω , 波数 k であるとき、その電磁波は

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k$$

である photon の集団であるとみなす。
自由電子に X 線を照射する。エネルギーと運動量の保存から、

$$mc^2 + \hbar\omega = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} + \hbar\omega', \quad \hbar\boldsymbol{k} = \hbar\boldsymbol{k'} + \boldsymbol{k}'$$

$\boldsymbol{p}$ の消去により、

$$\Delta\lambdabar := \lambda - \lambda' = \lambdabar_c(1 - \cos\theta)$$

ここで **Compton 波長**：

$$\lambdabar_c = \frac{\hbar}{mc} \sim 10^{-13}\ \mathrm{m}$$

を定義した。これは電子スケールの世界の基本の長さの単位となる。

1.1.2 Bohr モデル

量子条件：

$$mrv = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, ...$$

振動数条件：

$$\hbar\omega_0 = E_{n'} - E_n$$

電子の運動方程式 (EoM: Equation of Mortion)：

$$m\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0^2}\frac{1}{r^2}$$

これらの式より、

$$r_n = \left(\frac{\lambdabar_c}{\alpha}\right) n^2$$

ここで、微細構造定数, **fine-structure constant** ：

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \sim \frac{1}{137}$$

を定義した。微細構造定数は、電磁場にはたらく力、すなわち電磁相互作用の強さをあらわす定数である。
$n = 1$ としたときの半径：

$$a_0 = \frac{\lambdabar}{\alpha} \sim 5 \times 10^{-11}\ \mathrm{m}$$

は **Bohr 半径** と呼ばれる。

定常状態のエネルギー：

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{1}{2} m v_n^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n} \\ &= \left(-\frac{mc^2}{2}\right) \frac{\alpha^2}{n^2} \end{aligned}$$

とくに $E_n \propto n^{-2}$ である。$n = 1$ をとくに、**Rydberg Energy** とよび、様々な表現がある。

$$E_{Ryd} := |E_{n=1}| = \left(-\frac{mc^2}{2}\right) \alpha^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{1}{a_0^2} \sim 13.61 eV$$

1.1.3　電子の波動性

粒子であると考えられた電子もまた、波としての性質をもつ（電子波）。

電子の運動量の値を決める。 **Einstein-de Broglie** の関係：

$$p = \frac{\hbar}{\lambdabar}$$

より、電子波の波長 $\lambdabar$ を測定すれば運動量がわかる。

1.2　Schrödinger 方程式 (S-eq.)

平面波：

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = a \exp[\ i\ (\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)\ ]$$

$$\downarrow \text{substitute.}\ \ E = \hbar\omega, \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$$

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = a \exp[\ i\ \left(\boldsymbol{p'} \cdot \boldsymbol{r}/\hbar - (\boldsymbol{p'}^2/2m)t/\hbar\right)\ ]$$

これは以下の波動方程式の解である。

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$$

ここで、古典論に対して以下の置き換えをする。

$$E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t},\quad p_w \to \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial w} \quad (w = x, y, z)$$

先の波動方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

となる。ここで **Hamiltonian** とよばれる演算子は、

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})$$

と与えられる。

参考文献

[1] 砂川重信、量子力学、岩波書店、1991.
[2] 清水明、新版 量子論の基礎 その本質のやさしい理解のために、サイエンス社、2003