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　1

第 1 章　量子力学ことはじめ　2

1.1　光の粒子性・電子の波動性 2

1.2　Schrödinger 方程式 (S-eq.) 3

1.3　Born の確率解釈 4

1.4　定常状態・境界条件 4

参考文献　6

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、

$$\Delta\lambda\!\!\!^{-} := \lambda - \lambda' = \lambda\!\!\!^{-}_c(1 - \cos\theta)$$

ここで **Compton 波長**：

$$\lambda\!\!\!^{-}_c = \frac{\hbar}{mc} \sim 10^{-13}\ \mathrm{m}$$

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。

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

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：

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

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

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

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 (**量子化の手続き**)。

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

先の波動方程式は、**Schrödinger 方程式**（以降、**S-eq.** と略記）：

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

となる。ここで古典論からの類推により、**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。

1.3 Born の確率解釈

波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ は電子の存在確率を与える確率波と解釈する。すなわち、

$$[\text{Probability of an } e^- \text{ exist in } \mathrm{d}^3 r \text{ near } \boldsymbol{r}] = |\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 \mathrm{d}^3 r$$

である。

S-eq.：

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

と、その複素共役 (complex conjugate(c.c.))：

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

から、

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\psi\right) = \frac{-\hbar}{2mi}\nabla\cdot\left[\psi^*\cdot\nabla\psi - \nabla\psi^*\cdot\psi\right]$$

となり、ここで**確率密度**：

$$\rho := \psi^*\psi = |\psi|^2$$

および **確率の流れ**：

$$\boldsymbol{j} := \frac{-\hbar}{2mi}\ \left[\psi^*\cdot\nabla\psi - \nabla\psi^*\cdot\psi\right]$$

を定義すれば、さきの式は**確率の保存則**：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{j} = 0$$

を意味する。

1.4 定常状態・境界条件

定常状態とは、波動が進行せず、振幅のみが時間変化する波の状態である。このとき、波動関数は、

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \phi(\boldsymbol{r})f(t)$$

とかける。

S-eq. は、任意の $\boldsymbol{r}, t$ に対して成り立つことを課すことにより、ある定数 E をもちいて、

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = Ef(t), \quad H\phi(\boldsymbol{r}) = E\phi(\boldsymbol{r})$$

となる。

これより、

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \phi(\boldsymbol{r})\exp(-iEt/\hbar)$$

とかけて、E はエネルギーに相当することがわかる。

S-eq. は線型方程式であるから、固有状態 $\{\psi_i\}$ の線形和である ψ もまた解となる。

Hamilitonian の固有値 E_i 固有関数 ψ_i を求めることを**固有値問題**と呼ぶ。解を求めるためには境界条件を設定する必要がある。

- 無限遠方で波動関数が 0 になる。：$\phi(\boldsymbol{r} \ \to \ \infty) = 0$
- ポテンシャル関数があるところで不連続である。：S-eq. $\to$

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{-2m}{\hbar}[E - V(x)]\phi(x)$$

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.