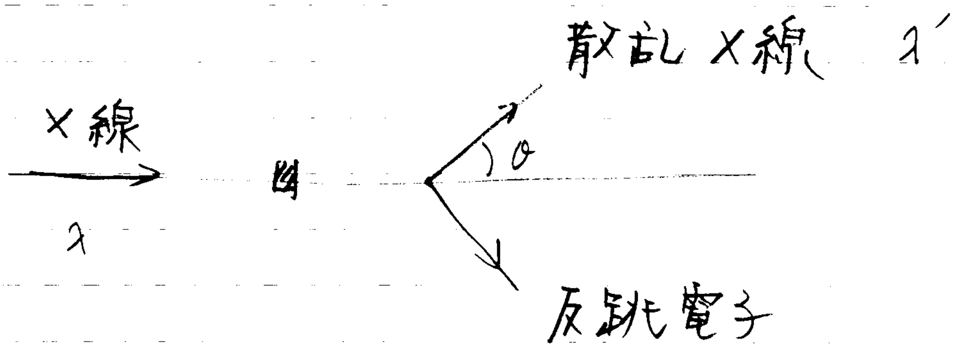
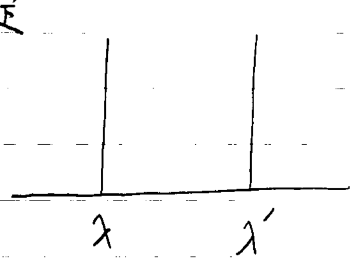
・コンプトン効果



θ：一定



X線の「粒子」と電子の2体散乱を仮定すると実験データをきれいに説明

1.4. ボーアの原子模型

エネルギーの離散性 → 原子でも

バルマーの公式（原子のスペクトル線に成り立つ式）

$$\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \qquad (n_1, n_2 \text{ は自然数})$$

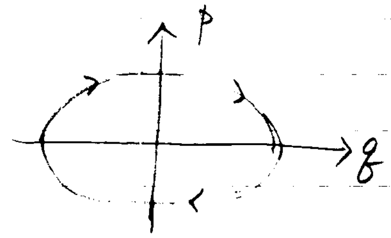
→ 原子のエネルギーが $\frac{1}{n^2}$ に比例することを示唆

ボーアの原子模型

i) 原子は離散的なエネルギーを持つ状態のみ。
「定常状態」。2つの定常状態間をジャンプするときにのみ光を放出・吸収する。

ii) $h\nu = E' - E''$

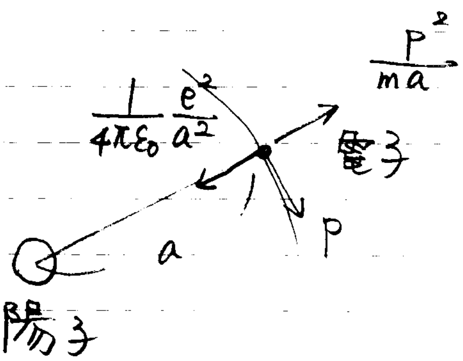
iii) 電子は古典的な運動のうち



$$\oint p\,dq = nh \quad (n=1,2,\cdots)$$

を満たす状態のみが許される。

「ボーア・ゾンマーフェルトの量子化条件」



$$\begin{cases} 2\pi a \cdot p = nh & (\text{量子化条件}) \\ \dfrac{p^2}{ma} = \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a^2} & (\text{古典的な運動方程式}) \end{cases}$$

$$\rightarrow \quad \frac{1}{ma}\cdot\frac{n^2h^2}{4\pi^2\cancel{a^2}} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\cancel{a^2}}$$

$$\rightarrow \quad a = \frac{\varepsilon_0 n^2 h^2}{\pi m e^2}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a} = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a}$$

$$= -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2} \equiv E_n$$

すなわち $E_n \propto \dfrac{1}{n^2}$

原子の安定性：最低エネルギー状態 $(n=1)$ が存在。
「基底状態」
これ以下にエネルギーがなることはない。

2. 量子力学と波動関数

2.1. 波動関数とシュレーディンガー方程式

光（電磁波）⟷ 粒子（光子）

- 黒体輻射
- 光電効果
- コンプトン効果

それならば
粒子（電子など）⟷ 波としての性質
（ド・ブロイ）

「ド・ブロイ波」
「物質波」

ド・ブロイ

運動量 $\mathbb{P}$
エネルギー E
の自由粒子

古典的なエネルギー：$E = \frac{\mathbb{P}^2}{2m}$

→ ド・ブロイ波
波数ベクトル：$\mathbb{k} = \mathbb{P}/\hbar$
角振動数：$\omega = E/\hbar$

で特徴づけられる波動

$$\psi(\mathbb{r}, t) = e^{i\mathbb{k}\cdot\mathbb{r} - i\omega t} = e^{i\mathbb{P}\cdot\mathbb{r}/\hbar - iEt/\hbar}$$

空間の位置ベクトル　時間

で記述できると主張

符号は相対論から。

$\boxed{\text{波長：} \lambda = \frac{\hbar}{p} = \frac{1}{k}}$ 「ドブロイ波長」

シュレーディンガー：　$\psi(\mathbb{r},t) = e^{i\mathbb{k}\cdot\mathbb{r} - i\omega t}$

$\rightarrow\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi$　に従うことを発見 $[\nabla = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)]$

$$(\text{左辺}) = i\hbar\cdot\frac{\omega}{i}\psi = \hbar\omega\psi = E\psi$$

$$(\text{右辺}) = -\frac{\hbar^2}{2m}(-i\mathbb{k})^2\psi = \frac{\mathbb{k}^2\hbar^2}{2m}\psi = \frac{\mathbb{P}^2}{2m}\psi$$

$$\rightarrow\ (\underbrace{E - \frac{\mathbb{P}^2}{2m}}_{=0})\psi = 0$$

$$\boxed{E}\psi = \boxed{\frac{\mathbb{P}^2}{2m}}\psi$$

$$\Updownarrow$$

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

$$\left.\begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \\ \mathbb{P} &\rightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla \end{aligned}\right)$$

という置き換えをして関数 $\psi(\mathbb{r},t)$ に演算

符号の違いは相対論から

関数 $\psi(\mathbb{r},t)$ に作用する「演算子」
(オペレーター)

(古典論)　エネルギー E、運動量 $\mathbb{P}$ ： 数（「c数」）
(量子論)　エネルギー ： $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
運動量 ： $\hat{\mathbb{P}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$
演算子

「量子化の手続き」

◎ ポテンシャルがある場合にも拡張が可能

(古典) $E = \frac{p^2}{2m} + V(r,t)$

$$\rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r,t)\right)\psi(r,t)}$$

シュレーディンガー方程式

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r,t)$$ (ハミルトニアン)

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

ψ:「波動関数」

◎ 重ね合わせの原理

$$\begin{cases} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1 = \hat{H}\psi_1 \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2 = \hat{H}\psi_2 \end{cases}$$

とすると、 $\psi(r,t) = \alpha\,\psi_1(r,t) + \beta\,\psi_2(r,t)$

は $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) = \hat{H}\psi(r,t)$ に従う。

(α, β は r や t によらない定数)

(note) ガウス型波束

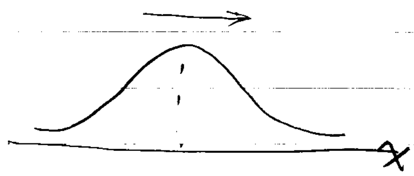
$$\psi_k(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$$ (1次元)

$$\rightarrow \psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\; e^{-\gamma(k-k_0)^2/2}\,\psi_k(x,0)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk \; e^{-\frac{\gamma}{2}\left(k^2 - 2k_0 k + k_0^2 - \frac{2ix}{\gamma}k\right)}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk \; e^{-\frac{\gamma}{2}\left(k - k_0 - \frac{ix}{\gamma}\right)^2} e^{-\frac{x^2}{2\gamma}} e^{ik_0 x}$$

$$= \sqrt{\frac{2\pi}{\gamma}} \; e^{-\frac{x^2}{2\gamma}} \boxed{e^{ik_0 x}}$$



古典的な「粒子」に対応、
ただし幅は t とともに広がる
（レポート問題）。

四 固有状態

ポテンシャル V が陽に時間に依存しない時

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r})\, e^{-iEt/\hbar}$$

とおくと、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = E\,\phi(\mathbf{r})\,\cancel{e^{-iEt/\hbar}}$$

$$= \cancel{e^{-iEt/\hbar}}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\phi(\mathbf{r})$$

$$\rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\phi(\mathbf{r}) = E\,\phi(\mathbf{r})$$

又は $\hat{H}\,\phi(\mathbf{r}) = E\,\phi(\mathbf{r})$

「時間に依存しないシュレーディンガー方程式」

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

自由粒子：$\psi_k(r,t) = e^{ik\cdot r - iEt/\hbar}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi_k(r,t) = \underbrace{\frac{k^2\hbar^2}{2m}}_{=E} \underbrace{\psi_k(r,t)}_{\text{固有関数}}$$

No.

$$\hat{H}\phi(r) = E\phi(r)$$

$\phi(r)$ ： 演算子 $\hat{H}$ の「固有波動関数」

E ： エネルギー「固有値」

$\phi(r)$ で表わされる状態 ： $\hat{H}$ の「固有状態」

2.2. 波動関数の確率解釈

波動関数 $\psi(r,t)$ ：粒子の状態を表す。

→ 粒子は時刻 t において特定の r にいるわけではなく，ψ に従って分布する。

→ $\psi(r,t)$ は時刻 t において粒子を r に見出す確率の振幅と解釈する。

すなわち，粒子が r と $r+dr$ の間にある確率は

$$P(r,t)\,dr = |\psi(r,t)|^2\,dr.$$

「確率解釈」

(note) ψ ：一般に複素数
→ 絶対値をとって2乗する.

(note) $\psi(r,t) \to e^{i\theta}\psi(r,t)$
としても $P(r,t)$ は不変.

→ 波動関数は位相の分だけ自由度がある。