(複習) プランク: $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = n\varepsilon$
$(n = 0, 1, 2, \cdots)$
のみが許される

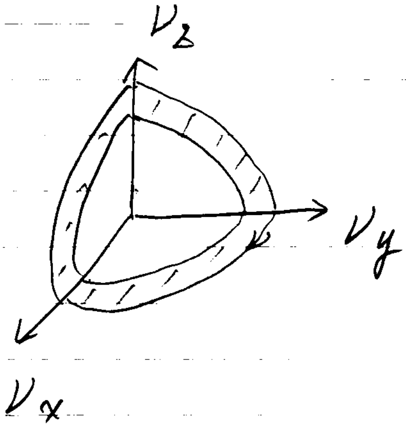
$$\to U(\nu)d\nu = \frac{8\pi}{c^3}\nu^2 d\nu \cdot \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

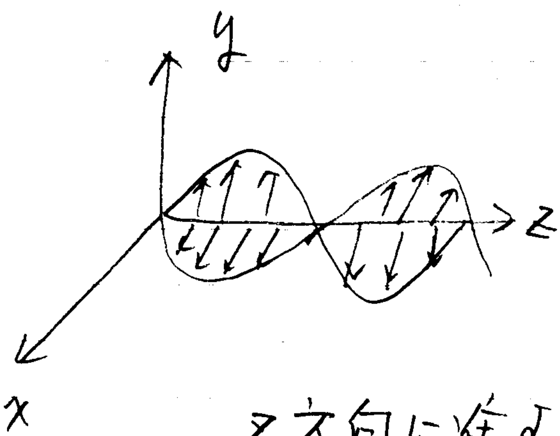
「エネルギー量子」
電磁波が粒子のように振るまう

他にも
・光電効果
・コンプトン散乱

（補足）

$$Z(\nu)\,d\nu = 4\pi\nu^2 d\nu \times \frac{1}{8} \times \underbrace{2}_{\text{偏極}} \times \left(\frac{2L}{c}\right)^3$$





z方向に進む波

2種類 $\begin{cases} x\text{方向への振動} \\ y\text{方向への振動} \end{cases}$

・ボルツマン因子

統計力学：カノニカル分布（T＝一定）

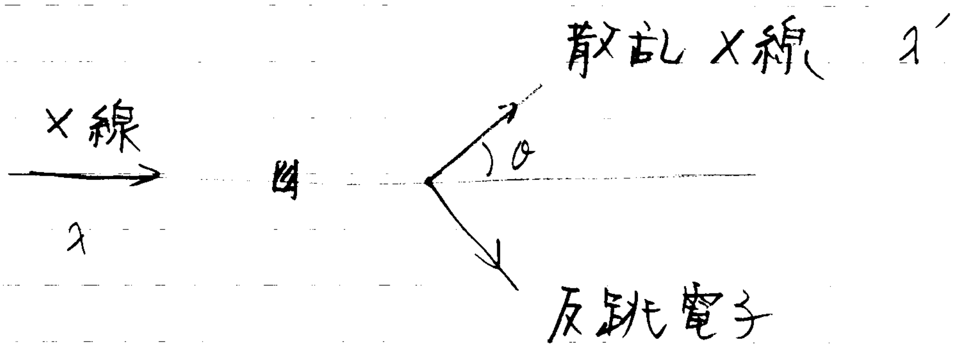
ボルツマン分布　$P(E) = \dfrac{1}{Z} e^{-E/k_B T}$

$$Z = \sum_i e^{-\varepsilon_i/k_B T}$$

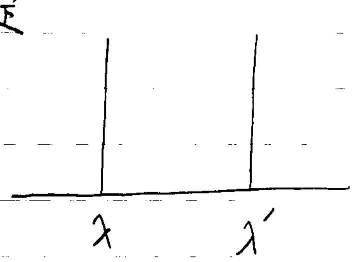
→ プランク

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\varepsilon\, e^{-n\varepsilon/k_B T}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\varepsilon/k_B T}} = \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/k_B T} - 1}$$

・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）

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

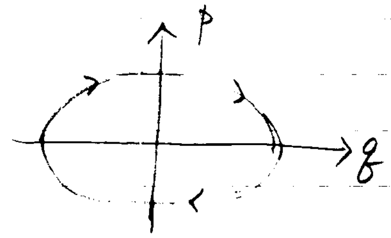
↪ 原子のエネルギーが $\frac{1}{n^2}$ に比例することを示唆.

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

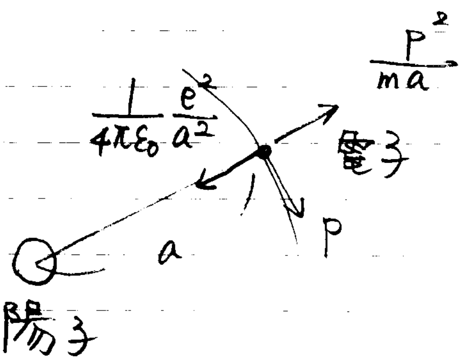
iii) 電子は古典的な運動のうち



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

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」



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

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

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

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

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

すなわち　$E_n \propto \frac{1}{n^2}$

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）$\longleftrightarrow$ 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）$\longleftrightarrow$ 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；$E = \frac{\mathbb{P}^2}{2m}$

$\rightarrow$ 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

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

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。

$\boxed{\text{波長：} \lambda = \frac{h}{p} = \frac{1}{k}}$　「ド・ブロイ波長」

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

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

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

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

$\rightarrow \big(\underbrace{E - \frac{\mathbf{p}^2}{2m}}_{=0}\big)\psi = 0$

$$\boxed{E}\,\psi = \boxed{\frac{\mathbf{p}^2}{2m}}\,\psi$$
$$\Updownarrow$$
$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}}\,\psi = \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2}\,\psi$$

$E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
$\mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla$

という置き換えをして関数 $\psi(\mathbf{r},t)$ に演算

符号の違いは相対論から

関数 $\psi(\mathbf{r},t)$ 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 $\mathbf{p}$ ： 数（「c数」）
（量子論） エネルギー： $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
運動量： $\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$

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

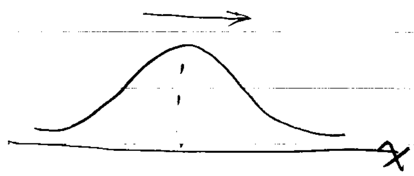
$$\psi_k(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$$ (1次元)

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

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

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

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



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」