◎ 電子の状態 → ヒルベルト空間を考える、

ベクトルの軸方向で表す

共存、重ね合わせの原理

$$\psi_A + \psi_B = \psi_{AB} \neq \psi_C$$

☆A, B を、同じ次元で並立的に考えない

☆異なる次元に対応している

電子の位置

無数の点→無数のベクトル（軸）→無数の次元

共存の状態→ $\psi(\mathbf{r})$ 波動関数（複素関数）

ある位置に電子が見つかる頻度

（見い出される確率）

$$\rho(r) = \underset{\text{複素共役}}{\psi^*}(r)\psi(r)$$

$$\int_{\text{全空間}} \rho(r)dv = 1$$

ρ ：**確率密度**

$$\int \psi^* \psi dv = 1$$

1になるように調節　→　波動関数の規格化

$$\psi_{AB} = \psi_A + \psi_B$$

$$\rho_{AB} = |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2 + (\psi^*_A \psi_B + \psi^*_B \psi_A)$$

ρ A　　ρ B　　　干渉を示す項

◎ 波

量子力学では複素数の波を考える

$$\psi = \cos\frac{2\pi}{\lambda}x + i\sin\frac{2\pi}{\lambda}x$$

実数部分　　　複素数部分

複素数--- z = x + iy

$$\frac{d\psi}{dx} = i\frac{2\pi}{\lambda}\left(\cos\frac{2\pi}{\lambda}x + i\sin\frac{2\pi}{\lambda}x\right) = i\frac{2\pi}{\lambda}\psi$$

ψは自身に比例（微分すると元に戻る）

波動方程式（微分方程式）では重要

次の式でも同様

$$\psi = e^{i\frac{2\pi}{\lambda}x}$$

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$ オイラーの公式

$$(-i\hbar)\frac{d}{dx}\psi = (-i\hbar)\left(\frac{i2\pi}{\lambda}\right)\psi = (-i\hbar)\left(\frac{ip}{\hbar}\right)\psi = p\psi$$

古典的粒子に戻す

$$p = \frac{h}{\lambda}, \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$p_x \to (-i\hbar)\frac{d}{dx}$$ 量子力学の公理の１つ

◎ 波動方程式の導出

進行波を考える

$$\varphi = A\sin\left\{\frac{2\pi}{\lambda}(x-\delta)\right\} \quad (1)$$

$$\delta = vt$$

$$\varphi = A\sin\left\{\frac{2\pi}{\lambda}\left(x - vt\right)\right\} \quad (2)$$

一番簡単な波を表現する１つの式

$$v = \lambda\nu$$ 波長λの波がν回うねる

振動数

$$\varphi = A\sin\left\{\frac{2\pi}{\lambda}x - \frac{2\pi}{\lambda}(\lambda\nu)t\right\}$$

$$= A\sin\left\{\frac{2\pi}{\lambda}x - 2\pi\nu t\right\}$$

$$= A\sin\left\{kx - \omega t\right\}] \quad (3)$$

よくみかける波の式

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \omega = 2\pi\nu$$

1/λ 波数　角振動数

☆ 式(3)を t で２回微分する（元に戻るように）

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\omega A \cos(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -\omega^2 A \sin(kx - \omega t)$$

$$= -\omega^2 \varphi$$

☆ 式(3)を x で２回微分する

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = kA \cos(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -k^2 A \sin(kx - \omega t)$$

$$= -k^2 \varphi$$

$$\varphi = -\frac{1}{\omega^2}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}$$

$$\therefore \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{k^2}{\omega^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu}{\nu\lambda} = \frac{\omega}{v} \rightarrow \frac{k}{\omega} = \frac{1}{v}$$

$$\therefore \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}$$

波動方程式

一般化すると

$$\nabla^2 \varphi = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

ナブラの２乗

◎ ド・ブロイの物質波の仮説

光は波であり粒子（光量子）

電子→電子波
物質→物質波

アインシュタイン＝ド・ブロイの関係式

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \rightarrow \lambda = \frac{h}{p}$$

光子定数
アインシュタインの光量子仮説

運動量 p←波長λ　　波長λ←運動量 p

円軌道の波を考える

$$\frac{2\pi r}{\lambda} = \frac{p}{h} 2\pi r = n$$

$$\frac{2\pi r}{\lambda} = n \quad (n=1,2,3,---)$$

(波が定常的に存在するための条件)

$$2\pi r p = nh$$

$$M = n\hbar$$　ボーアの量子条件

角運動量

電子が波であるためには量子条件は必須

◎ Shrodinger 方程式の導出

先程の波動方程式から導出は無理

$$\nabla^2 \varphi = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}$$

$$\frac{1}{v^2} = \frac{k^2}{\omega^2}$$ 採用できない

実際に変形してみるとやはり無理

$$\frac{1}{v^2} = \frac{k^2}{\omega^2} = \frac{\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2}{(2\pi\nu)^2} = \frac{1}{(\lambda\nu)^2} = \frac{1}{\left(\frac{h}{p}\bullet\frac{E}{h}\right)^2} = \frac{p^2}{E^2}$$

ここで $\lambda = \frac{h}{p}, E = h\nu$

ド・ブロイ波に対する波動方程式を作ってみる

($\lambda = \dfrac{h}{p}, E = h\nu$ の関係式を用いて)

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$ ここで $T = \dfrac{1}{2}mv^2, p = mv$

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\dfrac{p^2}{2m} + V(r)}{\hbar}$$

$$= \frac{(\hbar k)^2}{2m\hbar} + \frac{V(r)}{\hbar}$$

$$= \frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{V(r)}{\hbar}$$

ωと**k**²が結びついた→時間の１階微分を考える

１回の微分でω，ψがでてくるものは？

$$\psi = Ae^{i(kr-\omega t)} \qquad (イ)$$

$$\psi = Ae^{-i(kr-\omega t)} \qquad (ロ)$$

（イ）の場合

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\omega Ae^{i(kr-\omega t)} = -i\omega\psi$$

$$= -i\left(\frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{V(r)}{\hbar}\right)\psi$$

$$= i\frac{\hbar}{2m}\left(-k^2\psi\right) - i\frac{V(r)}{\hbar}\psi$$

$$= i\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi - i\frac{V(r)}{\hbar}\psi$$

ここで $\nabla^2\psi = -k^2\psi$

粒子の特徴である p, E はない

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

時間を含むシュレディンガーの波動方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(r)\right)\psi$$

$$=\left(\frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(r)\right)\psi$$

$$E\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$p_x\rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},p_y\rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},p_z\rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

古典力学　量子力学

定常状態のシュレディンガーの波動方程式

$$\nabla^2\psi+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi=0$$

◎ Shrodinger 方程式を解く

＜１次元の自由粒子＞

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$$

外力の影響を受けていない→**V = 0**

$$\psi=C\sin\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x+D\cos\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x \qquad (1)$$

（すぐ思いつく解）を試す

$x=0,\ \psi=0 \rightarrow D=0$
境界条件

つまり、 $\psi=C\sin\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x$

$x=L,\ \psi=0$ なので

$$0=C\sin\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L$$

したがって

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L=n\pi$$

$$\therefore E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$ 1,4,9,16---倍

固有値、許されるエネルギー

これを式（1）に代入すると波動関数は,

$$\psi_n = C\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$\int_0^L |\psi_n|^2 dx = 1$$ になるように C を決める

$$\int_0^L C^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 1$$

つまり,

$$\left[\frac{1}{2}\left(x - \frac{1}{2}\sin 2\frac{n\pi x}{L}\right)\right]_0^L = \frac{1}{c^2}$$

公式： $\int \sin^2 x dx = \frac{1}{2}\left(x - \frac{1}{2}\sin 2x\right) + c$

これを解くと,

$$C = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\therefore \psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$ 固有関数

次の固有方程式を解いたことになる

$$H\psi_n = E_n\psi_n$$

$\psi_3 = \sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin\left(\dfrac{3\pi x}{L}\right)$ では,

$$\int_{\frac{L}{12}}^{\frac{3}{12}L} |\psi_3|^2 dx = \frac{1}{6} + \frac{1}{3\pi}$$

古典的粒子なら **1/6** の確率で存在
1/3 π分だけ大きい