化学A ２０１５ ０３ 大野公一

4/22　量子の世界の基礎（1）波の振舞

位置 x 時刻 t に依存して振動する正弦波 Ψ プサイ

$\Psi(x, t) = A \sin 2\pi(x/\lambda - t/T) = A \sin 2\pi(x/\lambda - \nu t)$

変位　振幅　位相　$\theta = 2\pi(x/\lambda - \nu t)$

波長 λ

周期 T

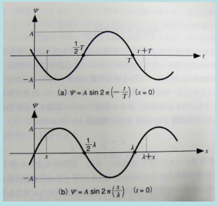
振動数 $\nu = 1/T$

速度 $v = \lambda/T = \nu\lambda$

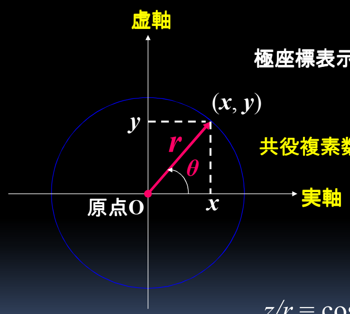
電磁波（光）の速度（真空中）

$c = \nu\lambda = 2.99792458 \times 10^8$ ms^{-1}

（電磁波の基本式）



座標・ベクトル・複素数



極座標表示 $x = r\cos\theta$, $y = r\sin\theta$

$z = x + iy$

共役複素数 $z^* = x - iy$

$i^2 = -1$, $i = \sqrt{-1}$

$|z|^2 = z z^*$

$= x^2 + y^2 = r^2$

$z/r = \cos\theta + i\sin\theta = e^{i\theta}$

微分方程式・演算子

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

$\boxed{de^{ax}/dx = ae^{ax}}$

$de^{i\theta}/d\theta = -\sin\theta + i\cos\theta$

$= i^2 \sin\theta + i\cos\theta$

$= i(\cos\theta + i\sin\theta)$

$= i e^{i\theta}$

$d^2e^{i\theta}/d\theta^2 = i^2 e^{i\theta} = -e^{i\theta}$

$e^{i\theta} = F$ とおくと、$d^2F/d\theta^2 = -F$

$$\boxed{\frac{d^2}{d\theta^2} F = -F}$$

多変数の場合の微分：偏微分

$\Psi(x, t) = A \sin 2\pi(x/\lambda - \nu t)$

x で微分（偏微分：記号∂ デルタ, ディー と読む）

$d/dx \cdot \Psi(x, t) = \partial/\partial x \cdot \Psi(x, t) = \partial\Psi/\partial x$

$= (2\pi/\lambda) A \cos 2\pi(x/\lambda - \nu t)$

t で微分（偏微分）

$d/dt \cdot \Psi(x, t) = \partial/\partial t \cdot \Psi(x, t) = \partial\Psi/\partial t$

$= -2\pi\nu A \cos 2\pi(x/\lambda - \nu t)$

量子論の基礎方程式：シュレーディンガー方程式

波動方程式（シュレーディンガー方程式）(1926年)

量子論の関係式：$p\lambda = h$, $E = h\nu$

複素数の波動（オイラーの式）：$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$

空間と時間に依存する波動関数：

$\theta = 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right) = (px - Et)/\hbar$

$\Psi(x, t) = e^{i(px - Et)/\hbar}$

Crossed h

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$

エイチバーともいう

$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \boxed{i(-E/\hbar)}\Psi$: $\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \boxed{i(p/\hbar)}\Psi$

$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = E\Psi : -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} = p\Psi}$　$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \Leftrightarrow E : -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \Leftrightarrow p$

ハミルトニアン　$H = E(p) \rightarrow \hat{H} = E(-i\hbar\partial/\partial x)$

量子力学の基礎方程式　$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi}$

ハミルトニアンのつくり方

ハミルトニアンの作り方

ハミルトニアン　$H = E(p) \rightarrow \hat{H} = E(-i\hbar\partial/\partial x)$

E =（運動エネルギー）＋（位置エネルギー）

1次元1粒子（質量 m）の場合

$E = \frac{1}{2}mv^2 + U(x) = \frac{p^2}{2m} + U(x)$　$(p = mv)$

$\hat{H} = \frac{(-i\hbar\partial/\partial x)^2}{2m} + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial^2/\partial x^2 + U(x)$

$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x)$　∇：ナブラ

$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x)$　Δ：ラプラシアン

3次元への拡張

$p_x = -i\hbar\partial/\partial x$,　$p_y = -i\hbar\partial/\partial y$,　$p_z = -i\hbar\partial/\partial z$

$\nabla^2 = \Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$　　$U(x, y, z)$

多粒子系への拡張　各粒子の運動量成分を演算子で置換