8 章　量子論：序論と原理（量子力学の基礎）

＜光の粒子性＞（プランク 1900 年、アインシュタイン 1905 年）

・ 従来、光は電磁波、つまり波だと考えられていた。
（$c = \nu\lambda$、ここでc、ν、λ はそれぞれ光の速さ、振動数、波長）

・ プランク → 光のエネルギーが $h\nu$ の整数倍であると考えることで、高温物体からの光放射の強度スペクトル$I(\nu)$を正しく導いた。[注1]
（h はプランク定数で$h = 6.6 \times 10^{-34}$ Js）

・ つまり光はエネルギーが$h\nu$ の粒子としての性格をもつ。
（光の粒子は「光子」、あるいは「フォトン」（photon）とよばれる）[注2]

・アインシュタインは、光電効果の研究から光の粒子性を指摘した。

＜電子の波動性＞（ド・ブロイ 1925 年）

・ 従来、電子は粒子だと考えられていた。

・ ド・ブロイ→ 電子も（他のミクロな粒子も）波動性を持つと予測。
→ド・ブロイ波（あるいは物質波）とよばれ、波長は $\lambda = h/p$ （$p = mv$ は運動量）。

・ 電子の波動性はまもなく電子線回折の実験で実証され、また現代でも電子顕微鏡などに応用されている。

＜波としての電子が従うべき波動方程式は？＞

・ 水面を伝わるさざ波や空気中を伝わる音など、波は「波動方程式」に従う。

・ 1 次元の場合、座標をx, 振動する量（水面の高さ、空気の密度など）を$f(x,t)$、波の進む速さをvすると、波動方程式は以下のようになる。

$$\frac{d^2}{dx^2}f(x,t) - \frac{1}{v^2}\frac{d^2}{dt^2}f(x,t) = 0$$

例えば$+x$方向へ進む 1 次元の波は、高校物理で習ったように

$$f(x,t) = A\sin\frac{2\pi}{\lambda}(x - vt)$$

と表せる。A は波の振幅である。これを上の波動方程式に代入すると、等式が成立することは簡単に示せる。

・ ではド・ブロイ波の場合の波動方程式はどうなる？？
→シュレディンガーが答を与えた。（シュレディンガー方程式、1926 年）

（注 1）プランクは、自身の発見から光の粒子性を直ちに認識したわけでは無かったらしい。しかしアインシュタインは光電効果の研究で光の粒子性（光量子仮説）を明確に主張した。

（注 2）大変興味深いことに、”photon”という用語を初めて用いたのは、共有結合の研究や価電子を表す「・」で有名な化学者ルイスだそうです。以下の記事を参考にして下さい）
https://www.aps.org/publications/apsnews/201212/physicshistory.cfm

DATE

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = H\Psi(x,t)$$
$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\Psi(x,t)$$

○ シュレディンガー方程式と波動関数

波としての電子が従う方程式

・時間に依存しない（定常状態）場合，1次元では

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x),$$

ここで $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ は全エネルギーを表す演算子

$\hat{H}$ は ハミルトニアンと呼ばれる。

（演算子：その右側に来る量に作用する）

$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)$ は運動エネルギー $\frac{p^2}{2m}$ に対応する。

（ $p = mv$ と書くと，運動エネルギー $= \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$ となる）

量子力学では 運動量 p_x は 演算子 $-i\hbar\frac{d}{dx}$ で与えられる。

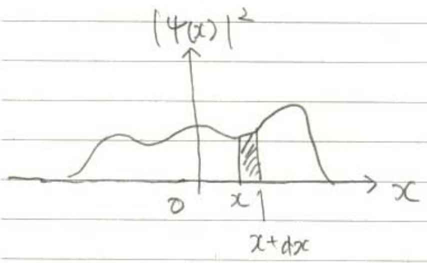
（演算子を意味する）

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx} \quad \text{or} \quad \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

$$\hat{p}_x^2 = \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)^2 = i^2\hbar^2\frac{d^2}{dx^2} = -\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}$$

・波動関数の意味

$|\Psi(x)|^2 dx$ が，粒子が x から $x+dx$ までの間に存在する確率を表す。



（図8-19参照）

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x)|^2 dx = 1 \quad \text{（規格化）}$$

（ $|\Psi(x)|^2$ は確率密度を表す）

単位 x あたりの確率

$\Psi(x)$ は一般に複素数なので

$$|\Psi(x)|^2 = \Psi^*(x)\Psi(x)$$

＜固有値と固有関数＞

方程式

$$\hat{A}\,\psi = a\,\psi$$

を満たす演算子$\hat{A}$，数a，関数ψが存在する時、aは$\hat{A}$の固有値とよばれ、またψは$\hat{A}$の固有関数とよばれる。つまり、

（演算子）×（関数）＝（数）×（関数）　（1）

の形に表せて、両辺の関数が同じ関数である場合、この関数は左辺の演算子の固有関数であり、右辺の数は、左辺の演算子の固有値である。上式は固有値方程式ともよばれる。$\hat{A}$が観測量に対応する場合、aは実数である。

（例その１）

シュレディンガー方程式

$$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$$

を満たすEとψが存在する時、全エネルギーに対応する演算子（ハミルトニアン）$\hat{H}$の固有値はEであり固有エネルギーともよばれる。また固有関数はψである。

（例その 2）

波動関数$\psi(x) = \exp(ikx)$、運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar(d/dx)$に対して、

$$\hat{p}\,\psi(x) = -i\hbar\frac{d}{dx}\left(e^{ikx}\right) = -i\hbar(ik)\,e^{ikx} = -i^2\hbar k\left(e^{ikx}\right) = (\hbar k\,)\psi(x)$$

つまり、

$$\hat{p}\,\psi(x) = (\hbar k\,)\psi(x)$$

となる。$\hbar k$は数であるから上式は(1)式の形になっており、$\hat{p}$の固有値は$\hbar k = h/\lambda$であり、$\psi(x) = \exp(ikx)$は$\hat{p}$ の固有関数である。ここで$k = 2\pi/\lambda$は波数（はすう）とよばれる。また$p = h/\lambda$より$\lambda = h/p$でありド・ブロイ波長に一致する。なお$\psi(x) = \exp(\pm ikx)$は$\pm x$方向に進む平面波に対応する。(時間に依存する部分は省略されている。詳しくは補足①の最後を参照)

・通常、固有値は量子化されており、とびとびの離散的な値を持つ。これらの値は「量子数」とよばれる数字で指定される。

＜観測量（物理量）の期待値＞

ある量を表す演算子を$\hat{A}$とすると、その期待値（固有値）は以下のように表される。

$$\langle\hat{A}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\,\hat{A}\,\psi(x)dx$$

No. 補足①

Date

（補足）

時間に依存するシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}\Psi(\vec{r},t), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$$

（運動E＋ポテンシャルE）

$\Psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})\psi(\vec{r})$ と仮定する。（変数分離解）

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\varphi(\vec{r})\cdot\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r})\cdot\hat{H}\psi(\vec{r})$$

$$i\hbar\frac{\frac{\partial\varphi}{\partial t}}{\varphi} = \frac{\hat{H}\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} = E \quad \text{とおく}$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = E\varphi,$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{E}{i\hbar}\varphi = -i\frac{E}{\hbar}\varphi$$

$$\therefore \varphi(t) = \varphi(0)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$= \varphi(0)e^{-i\omega t}$$

$$(E \equiv \hbar\omega)$$

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

（時間に依存しないシュレディンガー方程式）

$$\boxed{\therefore \Psi(\vec{r},t) = \varphi(0)e^{-i\omega t}\cdot\psi(\vec{r})}$$

$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ のとき（ポテンシャル・エネルギーがゼロの自由粒子）

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

A, Bは境界条件で決まる定数。

一般解 $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \left(k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right)$

$$\Psi(\vec{r},t) = \varphi(0)e^{-i\omega t}(Ae^{ikx} + Be^{-ikx})$$

$$= \varphi(0)\{\underbrace{Ae^{i(kx-\omega t)}}_{+x\text{方向へ進む波}} + \underbrace{Be^{-i(kx+\omega t)}}_{-x\text{方向へ進む波}}\}$$

（ウラへ）

つまり時間に依存しないシュレディンガー方程式に関して，

$$\psi_+ = e^{ikx}, \quad \psi_- = e^{-ikx}$$

は，それぞれ $+x$ 方向及び $-x$ 方向へ進む平面波を表す。（補足②も参照のこと。）

（電磁波の場合　$p = E/c$
　　$\left(\vec{g} = \frac{1}{c^2}\vec{S} \right)$ → $\vec{g}$ は $1\,m^3$ 当たり，$\vec{S}$ は $1\,sec$ 当たり，$1\,m^2$ 当たり．）

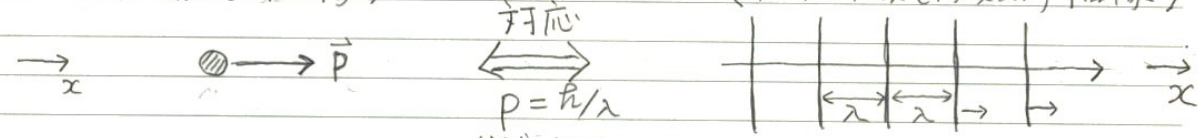
NO. 補足②

DATE　・　・

x方向の運動量

〈補足〉　なぜ p_x に対応する演算子は $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ となるか？

（粒子描像）　　　　（ド・ブロイ波（物質波）描像）



（ド・ブロイの関係式）

（＋x方向に一定の運動量 $\vec{p}$ で進む粒子）　　（＋x方向に一定の速さで進む波長λの平面波）

ド・ブロイ波に対応する平面波は，（補足①も参照のこと。）

$$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

（cos や sin を使っても書けるが，この方がより一般的である．）

と書ける。ここで $k = \frac{2\pi}{\lambda}$（波数），$\omega = 2\pi\nu$（角速度）である。（A＝定数）

$$\left[kx - \omega t = \frac{2\pi}{\lambda}\left(x - \frac{\omega}{k}t\right) = \frac{2\pi}{\lambda}(x - vt) \text{ に注意} \right]$$

（ド・ブロイ波は波動関数に対応すると考える）

$\frac{\partial}{\partial x}$ を $\psi(x,t)$ に作用させると

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) = (ik)Ae^{i(kx-\omega t)} = (ik)\psi(x,t)$$

$$= \frac{i}{\hbar}(\hbar k)\psi(x,t) \quad \text{—}(*)$$

ここで $\hbar k = \frac{h}{2\pi}\cdot\frac{2\pi}{\lambda} = h/\lambda = p$ なので

$(*) \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) = \frac{i}{\hbar}p\,\psi(x,t)$

$\Rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) = p\,\psi(x,t)$

（演算子）ψ ＝（固有値）ψ
微分　　　　定数

↑
演算子と固有値

これより $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ であると言える。

固有値に p を与える演算子。（運動量演算子）

$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ は $\frac{p^2}{2m}$ が $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ で与えられる事とも合う。

（$\frac{p^2}{2m}$ と $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ の対応だけでは $\pm i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ の両方がOKとなってしまう。）

3次元では $\hat{p} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$。

9章 量子論：手法と応用

・並進運動（1次元）

例：$V(x)=0$ の場合（ポテンシャル・エネルギーは常にゼロ。）

$$\Rightarrow \hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \qquad —①$$

①は $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$ とおくと（ただし $E>0$ と仮定）

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \qquad —②$$

②は単振動を表す微分方程式に似ており、一般解は、

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx \qquad —③$$

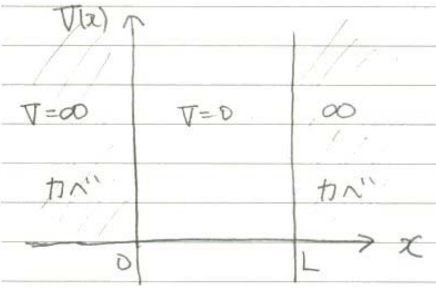
と書けるが、より一般的には、

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad —④$$

と書ける。［④を③の形に変形できる］（$+x$ 方向の平面波と $-x$ 方向の平面波の重ね合わせになっている。）

9-1. 箱の中の粒子（1次元の量子井戸）（9.1章に詳しい説明）

ポテンシャル・エネルギー $V(x) = \begin{cases} 0 & (0<x<L \text{ のとき}) \\ \infty & (0 \leqq x,\ L \leqq x \text{ のとき}) \end{cases}$



一般解

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

しかし、A, Bを決定する必要がある。

○境界条件

$\psi(0) = 0$, $\psi(L) = 0$ を要求する。（仮定する）

⇒（ポテンシャル・エネルギー ∞ となる $x=0, L$ では $\psi=0$, つまり粒子は境界に存在できないと考える。）

$$\psi(0) = A\cdot 1 + B \cdot 1 = 0 \rightarrow A+B=0,\ B=-A.$$

$$\psi(L) = 0 \Rightarrow \psi(L) = A e^{ikL} - A e^{-ikL} = 0$$

$$\Rightarrow A(e^{ikL} - e^{-ikL}) = A(2i)\sin(kL) = 0$$

$$\Rightarrow k = \frac{\pi}{L} n \Rightarrow \psi(x) = 2iA \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$\equiv C \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ とおく。

○規格化（Cを決める）

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_0^L C^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1$$

$$\Rightarrow C^2 \underbrace{\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx}_{=\frac{1}{2}L} = 1$$

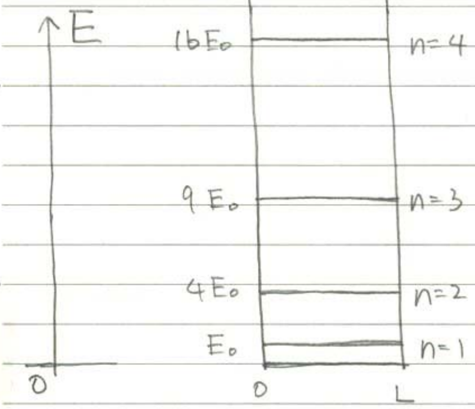
$\frac{1}{2}L$ となる。計算をやってみること。

$$C = \sqrt{\frac{2}{L}} \Rightarrow \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (0 \leqq x \leqq L)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\pi^2 n^2}{L^2}$$

$$= \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2} \left(= \frac{h^2 n^2}{8mL^2}\right)$$

・解の意味：固有エネルギー



$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2mL^2} \qquad n=1,2,3,\cdots$$

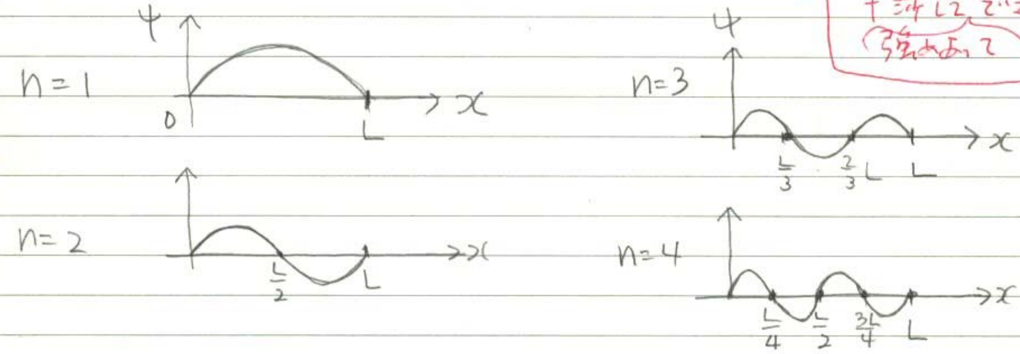
$$= E_0 n^2 \qquad \left(E_0 \equiv \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\right)$$

$$= E_0,\ 4E_0,\ 9E_0,\ 16E_0,\ \cdots$$

［最低エネルギー E_0：閉じ込めエネルギーと呼ばれる。
⇒量子力学的効果である。
（古典的にはエネルギーゼロである）］

・固有波動関数 $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$

定在波。右向きの波と左向きの波が干渉してできる
（強めあって）



nが大きいほど節が増えて$\psi(x)$の変化が多くなる
⇒ $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx} \propto$ 傾きなので。（$|p|$大きい）

・物理量の期待値（平均値）

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x\, \psi(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\, |\psi(x)|^2 dx$$

$$= \int_0^L x \cdot \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = \ ?$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi(x)\, dx = \ ?$$

$\langle x^2 \rangle = \ ?$ $\longleftrightarrow$ $\langle x \rangle^2$ とくらべると？ （各自計算してみること）

$\langle p^2 \rangle = \ ?$ $\quad \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \ ?$

［（注意）：$n=2$のとき、$x=\frac{L}{2}$で$\psi(x)=0$ ⇒ $x=\frac{L}{2}$である確率はゼロ。
しかし$\langle x \rangle = L/2$である。⇒$\langle x \rangle$の意味をよく考えること。］

1次元の閉じ込め問題 ⇒ 例えば ほぼ1次元である分子などに応用できる）
〈数値例9-1及び例題9-1参照〉

NO.
DATE . .

・固有状態の直交性（固有波動関数）

$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = 0$ のとき ⇒ ψ_m と ψ_n は「直交」している。

（「直交」という言葉は、ベクトルの内積がゼロの時とのアナロジーによる）

・2つの固有状態 ψ_m と ψ_n が異なるエネルギーをもつとき、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = 0$$

である。（2次元、3次元でも成立する）

理由は「根拠9・2」（p292）参照のこと。

・2次元の閉じ込め（9.2）

シュレディンガー方程式：$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi(x,y) = E\psi(x,y)$ (9-10)

$\psi(x,y)$ ：［2次元の波動関数：$|\psi(x,y)|^2 dxdy$ が、粒子が (x,y) と $(x+dx, y+dy)$ の間にある確率を表す。］

変数分離：$\psi(x,y) = X(x)Y(y)$ とおいて (9-10) に代入する。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)X(x)Y(y) = E\,X(x)Y(y)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}Y(y) + X(x)\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}\right) = E\,X(x)Y(y)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}\cdot\frac{1}{X(x)} + \frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}\right) = E$$

x、y が互いに独立変数で、かつ左辺の E が定数であるためには、左辺の2つの項は、それぞれ定数 ⇒ E_x、E_y と記す。

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}\cdot\frac{1}{X} = E_x \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}\cdot\frac{1}{Y} = E_y \end{cases}$$ かつ $E = E_x + E_y$

各々は1次元の場合と同じ。⇒ $X(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$

$Y(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}y\right)$

（L_x、L_y は x、y 方向の井戸幅）

〈波動関数の様子は図9.7参照〉 NO. 4

DATE

$$\Rightarrow \quad \psi(x, y) = X(x)Y(y) = \sqrt{\frac{4}{L_x L_y}}\,\sin\left(\frac{n_x\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{L}y\right)$$

$$E = E_x + E_y = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right) \quad \left[L_x = L_y = L \text{ のとき } = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2)\right]$$

3次元も同様に、

$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}}\,\sin\left(\frac{n_x\pi}{L_x}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{L_y}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{L_z}z\right)$$

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right) \quad \left[L_x = L_y = L_z = L \text{ なら } \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\right]$$

・縮退（$L_x = L_y = L_z = L$ のとき）

2次元の場合、$(n_x, n_y) = (1, 2)$ と $(2, 1)$ は同じエネルギーを持つ。

⇒ 縮退していると言う。ただし $(1,2)$ と $(2,1)$ は異なる固有状態である。

（2重縮退）

3次元 ⇒ $(n_x, n_y, n_z) = (2,1,1)\ (1,2,1)\ (1,1,2)$ 3重縮退.

・トンネル現象：・有限高さのポテンシャル障壁の場合

・古典論との違い：簡潔に。

・振動運動（調和振動子） p300 (simple harmonic oscillator, SHO)

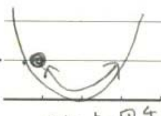
$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \qquad \text{（バネ＋おもりの問題。} k \text{は定数）}$$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\psi(x) = E\psi(x) \qquad (9.24)$$

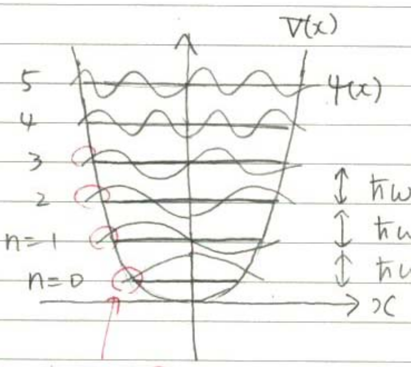
数学的にはよく知られた微分方程式であり E は

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$

古典的には



往復運動



トンネル効果（しみこみ）アリ。

・波動関数は図のようになる。（箱の場合と似ている）p302, 303

・分子や原子の振動は SHO として表せる。

例）O_2, N_2, CO etc

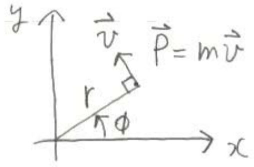
O=O　N≡N　C=O

（ω は赤外線の領域）

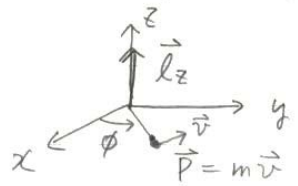
（$\nu = 10 \sim 100$ THz, $\lambda = 3 \sim 30\,\mu m$） H O H

・回転運動と角運動量演算子 $\hat{l}_z$

xy 平面内の回転運動を考える。（z 軸回り） 図9-27



または



$$\vec{l}_z = \vec{r}\times\vec{p} = \vec{r}\times m\vec{v}$$

$$(\, l_z = rp = r\cdot mv \,)$$

（$+\phi$ 方向の回転による角運動量の方向は $+z$ 向きと定義。）
↓
$-\phi$ 方向の回転なら $\vec{l}_z$ は $-z$ 方向

・$\vec{l}_z$ に対応する演算子 $\hat{l}_z$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}}$$

$\hat{l}_z$ の固有関数を探す。（つまり $\hat{l}_z\psi=$（定数）ψ となる ψ を探す）

$\rightarrow$ $-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\psi = A\psi$ とおく。A は定数。これを満たすには、

$$\psi = c\,e^{i\frac{A}{\hbar}\phi}$$ であればよい。

$$\left[\because\ -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\phi} = -i\hbar\cdot\left(i\frac{A}{\hbar}\right)c\,e^{i\frac{A}{\hbar}\phi} = A\psi\text{，確かになる}\right]$$

・規格化 $\Rightarrow$ $\int_0^{2\pi}|\psi|^2 d\phi = 1$ より $C=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$.

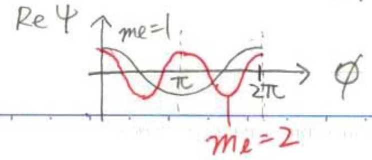
・$\psi(\phi)=\psi(\phi+2\pi)$ を要求する.

$$\Rightarrow\quad e^{i\frac{A}{\hbar}\phi} = e^{i\frac{A}{\hbar}(\phi+2\pi)} = e^{i\frac{A}{\hbar}\phi}\times e^{i\frac{A}{\hbar}(2\pi)}$$

$$\Rightarrow\quad e^{i\frac{A}{\hbar}(2\pi)} = 1 \quad\Rightarrow\quad \frac{A}{\hbar} = 0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots$$

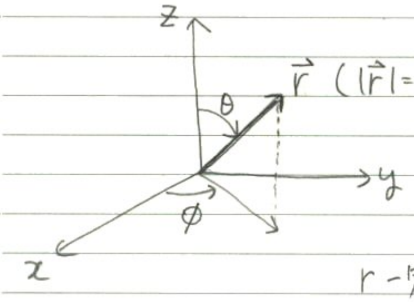
$$\Rightarrow\quad \psi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im_l\phi},\quad m_l = 0, \pm1, \pm2, \cdots$$

角運動量の固有値は $\hbar$ の整数倍になる。（定在波の条件）
（回転運動も量子化される.）



(9.7) 3次元の回転運動（より詳しい議論）

半径 r の球面上の運動



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

今、$V=0$（Eは運動エネルギーのみ）

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

r一定の極座標では，（以下，p311「根拠9.7」参照）

$$\vec{\nabla}^2=\frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

$\psi(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\times\Phi(\phi)$ と変数分離して

$$\underbrace{\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}}_{-m_l^2\text{とおく。}}+\underbrace{\frac{\sin\theta}{\Theta}\cdot\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}+\varepsilon\sin^2\theta}_{+m_l^2\text{とおく。}}=0,\quad \varepsilon=\frac{2IE}{\hbar^2}$$

$(I=mr^2)$

（m_l定数）

ϕの部分： $\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}=-m_l^2 \Rightarrow \Phi(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im_l\phi}$ を得る。（2次元と同じ）

θの部分： 量子数 m_l に加えて，$\Theta(\theta+2\pi)=\Theta(\theta)$ によって新たな量子数 l が導入される。$\Theta(\theta)$ は ルジャンドル関数になる。

まとめて $\Phi_{m_l}(\phi)\cdot\Theta_{l,m_l}(\theta)=Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$ と記す。

球面調和関数 とよばれる。

$Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$の具体形は表9・3見よ。(p312)

「軌道量子数」$l=0,1,2,3,\cdots$ （or 軌道角運動量量子数）

「磁気量子数」$m_l=l, l-1, l-2, \cdots, -l$ （$2l+1$個の値）

$$\left\{\begin{array}{ll} l=0\text{ のとき} & m_l=0\text{ のみ}\\ l=1\text{ のとき} & m_l=0,\pm1\\ l=2\text{ のとき} & m_l=0,\pm1,\pm2\\ l=3\text{ のとき} & m_l=0,\pm1,\pm2,\pm3\end{array}\right.$$

NO.

DATE

(P313)

$Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)$ の様子：図9.36, 9.37を見ること（節の数に注意）

・粒子のエネルギー：シュレディンガー方程式の固有値より.

（$\vec{J}^2$の期待値（固有値）は$\ell(\ell+1)$である）

$$E_\ell = \ell(\ell+1)\frac{\hbar^2}{2I}$$

（$\ell=0,1,2,\cdots$, $I=mr^2$＝慣性モーメント）

［$2\ell+1$重に縮退している。あるℓに対して$2\ell+1$個のm_ℓあり。
外部磁場がゼロなら E はm_ℓに依存しない。］

・角運動量：エネルギーは$\frac{J^2}{2I}$と書けるので、$\frac{J^2}{2I}=\ell(\ell+1)\frac{\hbar^2}{2I}$より.

$$J=\sqrt{\ell(\ell+1)\hbar^2}=\sqrt{\ell(\ell+1)}\cdot\hbar,\quad \ell=0,1,2,\cdots$$

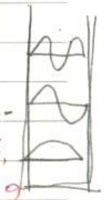
$$J_z = m_\ell\hbar$$

（2次元と同じ。ただし$m_\ell=\ell,\ell-1,\cdots,-\ell$）

$Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)$の節の数 ⇒ ℓと共に増加する.

⇒ 波動関数の変化が激しくなる.（λが短くなる）

⇒ 運動エネルギーが大きくなる。⇒ 量子井戸を思い出すこと。



（運動Eの高い状態ほどλ短かく、$\psi(x)$の変化が大きい）

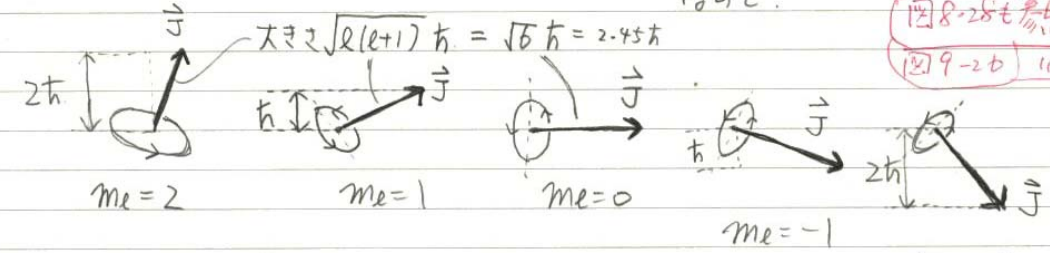
・ℓ_zの量子化（m_ℓの値が$\ell,\ell-1,\cdots-\ell$に制限されること）

$$J=\sqrt{\ell(\ell+1)}\cdot\hbar > \sqrt{\ell^2}\hbar=\ell\hbar$$

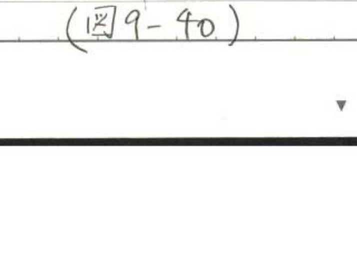
（ℓはm_ℓの最大値）なので.

（図8-28も参照）
（図9-26 〃）

図9-38（$\ell=2$の例）



・角運動量は大きさと方向の両方が量子化される！（とびとびになる）



（図9-40）

コマの「歳差運動」を想像すればよい。

（異なるm_ℓの状態は縮退
⇒ 磁場を加えると分裂
$H=-\vec{B}\cdot\vec{\mu}\propto -B_zJ_z$）

NO. 7

DATE . .

(9・8) スピン角運動量

粒子は

軌道角運動量に加えて、スピン角運動量(あるいは単純にスピン)を持つ。

電子，プロトン，中性子 : $s=\frac{1}{2}$, スピン角運動量 $=\sqrt{\frac{3}{4}}\hbar$

$s=\frac{1}{2}$, $m_s=+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ の2通り　(フォトン: $s=1$)

(自転する)

- 「スピン(回転する)」の名の通り自転に似ているが、電子etcが本当に自転しているわけではない。「生まれつき」備わった自由度。

- 相対論的シュレディンガー方程式(ディラク方程式)から自然に導かれる。

角運動量

電子の場合、スピンの大きさ $\sqrt{s(s+1)}\hbar=\sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}}\hbar=\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar=\underline{0.87\hbar}$