

13:15

構造化学 4 回目.

13:20

前回までで、原子の存在、電子、核の存在の実験的証明がされた。
物質の粒子性・波動性の実験的証明もされた。これを紹介。
古典力学の破綻が確定となり、新しい物理を構築する必要
が出てきた。今では量子力学とよばれる。量子力学では、
波動方程式 または シュレーディンガー方程式 を解く。

今回は、古典力学から量子力学へ移行する準備を行う

4-1 1次元の波動方程式 弓矢の微小振動と導出

4-2. 波動方程式の解

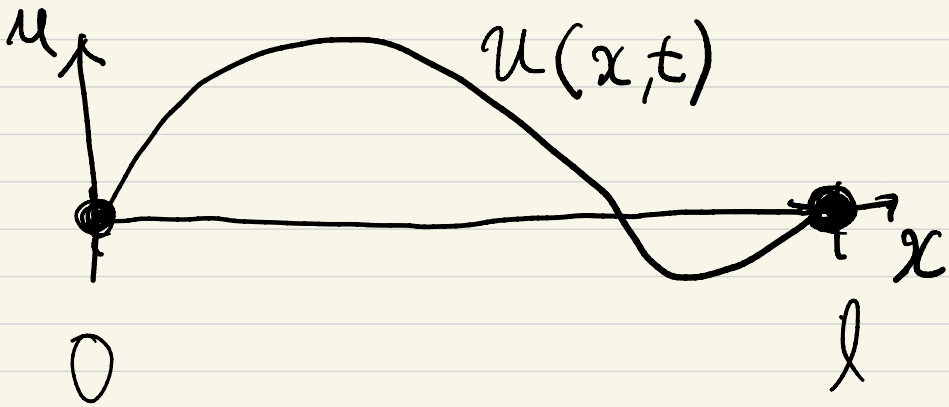
4-3. ドーブロイの物質波と波動方程式から
シュレーディンガー方程式 を導いたところになる。

4-4 $\left\{ \begin{array}{l} \text{波動光学} \\ \text{量子力学} \end{array} \right\}$ と $\left\{ \begin{array}{l} \text{幾何光学} \\ \text{古典力学} \end{array} \right\}$ の関係

13:20

13:25

4-1 1次元の波動方程式 弦の微小振動と仮定
 下図のような弦を考える



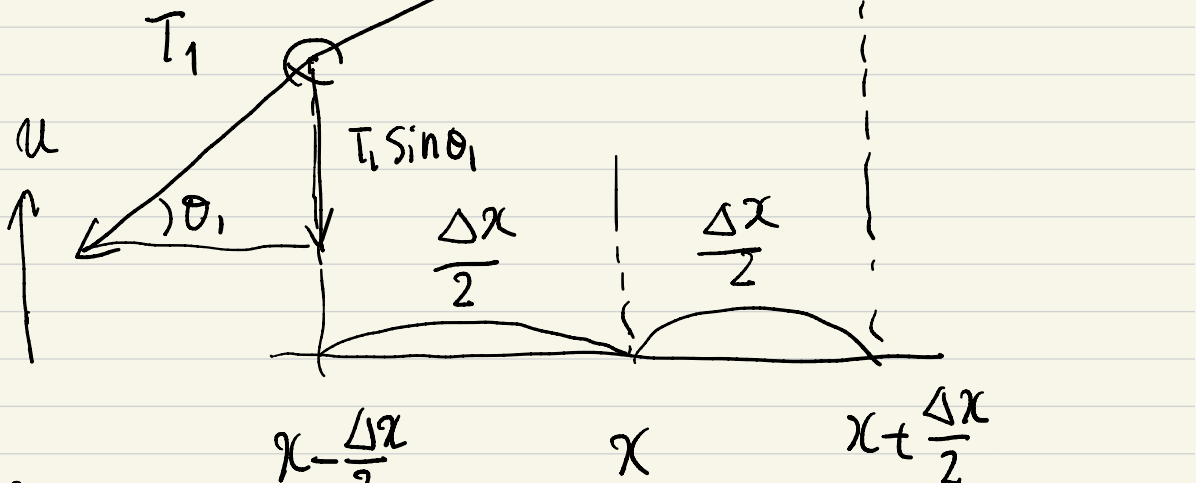
- ① $0, l, \forall t \in u(0, t) = u(l, t) = 0$ と固定.
- ② 弦は, x 軸に垂直方向 (u 軸方向) に動く
- ③ 弦の密度は一様 ρ とする.
- ④ 弦と x 軸のなす角 θ は小さい $\theta \ll 1$
- ⑤ 弦には接線方向に張力 T がかかる.

13:25

13:30

弦の運動方程式

- ① 点 x まわりの微小小区間で
運動方程式を導く。
変位を誇張して書いてある



- ② まづ x 軸方向には力があからないことを確認しておく

②より $T_1 \cos \theta_1 = T_2 \cos \theta_2$

- ③より $\theta_1, \theta_2 \ll 1$ 従って $\cos \theta_1 \approx \cos \theta_2 \approx 1$ が成立.

つまり $T_1 = T_2 (= T)$, どの点でも T といえる(矛盾しない)

- ④ u 軸方向にかかる力 F は.

$$F = T_2 \sin \theta_2 - T_1 \sin \theta_1 = T \sin \theta_2 - T \sin \theta_1$$

$$= T \left(\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x+\frac{\Delta x}{2}} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x-\frac{\Delta x}{2}} \right)$$

と723.

① ~~運動方程式をたて~~

(1): 27
17: 35

$$F = ma = T \left(\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x+\frac{\Delta x}{2}} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x-\frac{\Delta x}{2}} \right)$$

$$= \rho \Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad \left(\because m = \rho \Delta x, a = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)$$

② ~~$\Delta x \rightarrow 0$ の極限をとる~~

$$\rho \Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = T \left(\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x+\frac{\Delta x}{2}} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x-\frac{\Delta x}{2}} \right)$$

$$= T \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Delta x$$

$$\frac{\rho}{T} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \text{となる.}$$

$$\sqrt{\frac{\rho}{T}} = \frac{1}{c} \quad \text{とすると} \quad \underline{c} \text{ は 速度とよばれる.}$$

$$\boxed{\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}$$

③ となる ~~一次元の波動方程式とよばれる~~
~~方程式が得られた.~~

4-2. 波動方程式の解.

13:35

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

13:40

は、無限に解をもつ。(特に二階の偏微分方程式なので)

具体的な解を得るには、2つの定数が必要となる。様々な定数の定め方があがるが、今使われるのは、境界での点の値を定める"ディリクレの境界条件"である。つまり $u(0, t) = u(l, t) = 0$.



端点を固定ね、となる。

さまざまな現象がこの波動方程式を満たす。

- たいこの振動。(音)
- 光 (電磁波)
- 水面の波

具体的な形を求めると $u(x, t)$ が $u(kx - \omega t)$

という形をとっている場合、波動方程式を満たしていることを確かめる

$$\frac{\partial^2 u(kx - \omega t)}{\partial t^2} = \omega^2 \frac{\partial^2 u(kx - \omega t)}{\partial t^2}$$

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

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

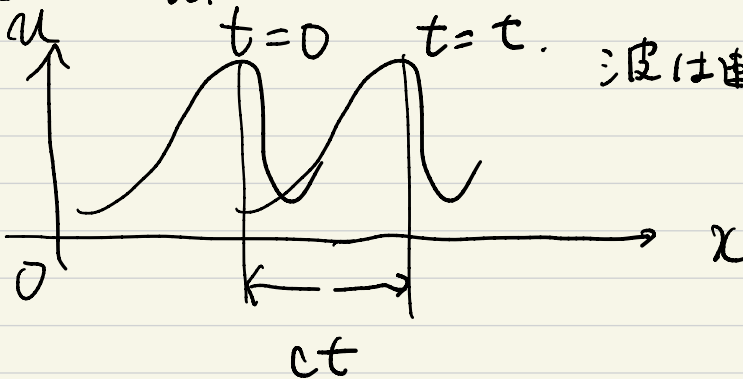
$$\left(\frac{k}{\omega} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \text{となり} \quad \frac{\omega^2}{k^2} = c^2$$

したがって波動方程式を満たすことがわかる。

② $u(kx - \omega t)$ が波動方程式をみたす意味を
考える.

- ① ある現象が形をかえず一定の方向に進むとすると
このような現象は、“波らしい”ので、波動方程式を満しほしい
- ② ある現象が周期的なパターンをもっている。
このような現象は“波らしい”ので波動方程式をみたしてほしい。

① をたしかめる。下図のような現象 $u(x, t)$ があるとする。



$$t=0 \text{ で } u(kx)$$

$$t=t \text{ で } u(kx - \omega t) \quad \text{とよていさ?}$$

$u(kx)$ に $x \rightarrow x - ct$ を代入すると

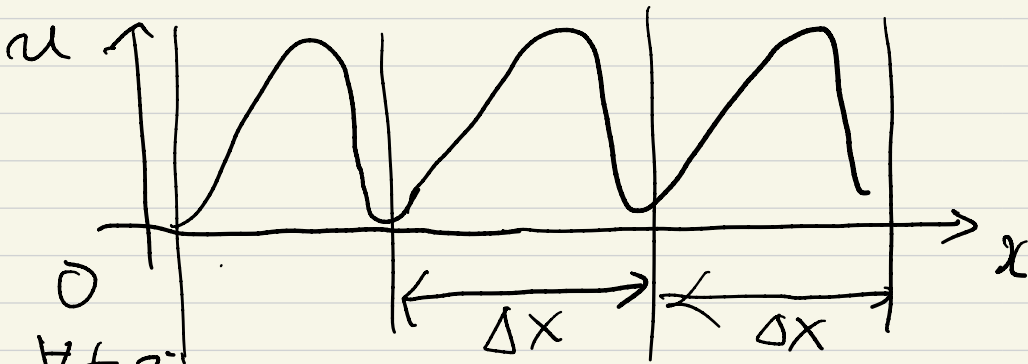
$$\begin{aligned} u(k(x - ct)) &= u(kx - kcct) \\ &= u(kx - \omega t). \end{aligned}$$

とよていさ。たしかに形をかえずに進む。

13:45

- 13:50

② をたしかめる.



$u(x + \Delta x) = u(x)$ なる関係が成立つとき、周期波の
つまり

$$u(k(x + \Delta x) - \omega t) = u(kx - \omega t) \text{ が成立.}$$

x について偏微分すると

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(k(x + \Delta x) - \omega t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(kx - \omega t)$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u(k(x + \Delta x) - \omega t) = \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(kx - \omega t)$$

$$\begin{aligned} \text{したがって} \quad \frac{1}{k^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(k(x + \Delta x) - \omega t) &= \frac{1}{k^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u = \frac{1}{\omega^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u \\ &= \frac{1}{\omega^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(k(x + \Delta x) - \omega t) \end{aligned}$$

すなわち波動方程式を満たしていることがわかる。

13.50

14.55

一般解を求める.

このような方程式は変数分離法でとく.

$$u(x, t) = f(x) g(t)$$

と積でかく. これを $\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ に代入すると

$$\frac{1}{c^2} g''(t) f(x) = f''(x) g(t)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{g''(t)}{g(t)} = \frac{f''(x)}{f(x)}$$

左辺は t のみの関数, 右辺は x のみの関数となる.

従って両辺を定数 $-\alpha^2$ とおす (!!)

$$\frac{1}{c^2} \frac{g''(t)}{g(t)} = -\alpha^2 \quad \frac{f''(x)}{f(x)} = -\alpha^2.$$

これは $f''(x) = -\alpha^2 f(x)$

$$f(x) = A \cos \alpha x + B \sin \alpha x$$

境界条件より. $f_n(x) = \sin \frac{n\pi x}{l}$ ($n=1, 2, 3, \dots$)
が得られる.

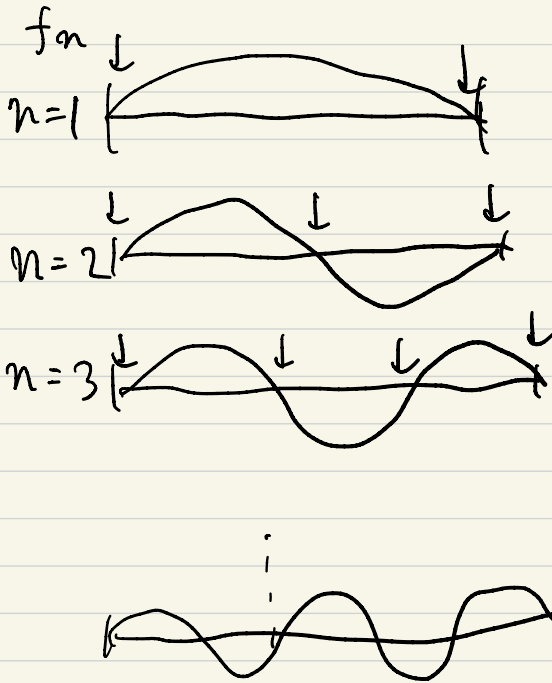
同様にして $g(t)$ についても解く.

$$u(x, t) = f_n(x) g(t) = a_n \sin \frac{n\pi x}{l} \cos(\omega_n t + \phi_n)$$

を得る.

14:55

f_n 形



2775243.

(8.55)
14.00

3-3 ド・ブロイの物質波と波動方程式から シュレーディンガー方程式を導いたつもりになる。

(あくまで導出したつもりであることに留意しつつ...)

量子力学での基本方程式は、シュレーディンガー方程式である。
一次元系であるポテンシャル $V(x)$ 下での粒子のシュレーディンガー方程式を

① ド・ブロイの関係式 $\lambda = \frac{h}{p}$.

② 一粒子の運動エネルギー $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$.

③ 波動方程式 $\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$.

④ 波の基本関係式 $2\pi\nu = \omega$, $v\lambda = v$

⑤ 系は定常状態 $u(x,t) = \psi(x) e^{i\omega t}$ にある。
という仮定から求めしめる。

まず ⑤ を ③ に代入.

$$\psi(x) \frac{1}{v^2} (-\omega^2) \cancel{e^{i\omega t}} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \cancel{e^{i\omega t}}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{v^2} \psi(x) = 0$$

14:00

(1) 05

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{v^2} \psi = 0 \quad \text{d's } \textcircled{2} \text{ あり.}$$

$$\frac{\omega^2}{v^2} = 4\pi^2 \frac{v^2}{\cancel{\lambda^2}} = 4\pi^2 \frac{\cancel{\lambda^2}}{\lambda^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi = 0. \quad \dots (*)$$

$$\textcircled{1} \quad \lambda = \frac{h}{p} \quad \text{e} \quad \textcircled{2} \quad E = \frac{p^2}{2m} + V. \quad \text{あり.}$$

$$p = \sqrt{2m(E - V)}$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V)}}$$

$$(*) \text{ に } \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V)}} \text{ を代入すると.}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2}{h^2} \cdot 2m(E - V) \psi = 0$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \text{ を 代入して}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (E - V) \psi = 0 \quad \text{とし、さらに変形して.}$$

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \psi = E \psi.$$

を得る。これは一次元系で V というポテンシャル下にある (時間に依存しない) シュレディンガー方程式である。

4-4 }波動光学、} と }幾何光学、} の関係 14:05 14:15

光(電磁場)を表す方程式はマクスウェル方程式と呼ばれる。

電荷や電流がなく、電場は空間の関数 $E(x, t)$ とすると
マクスウェル方程式は z の軸方向に振動するような波動方程式

$$\frac{\partial E_z}{\partial t^2} = \frac{1}{\epsilon_0 \mu_0} \frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial E_y}{\partial t^2} = \frac{1}{\epsilon_0 \mu_0} \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2}$$

となる。

ならば、幾何光学とは何だろうか? 直観的に光が動くことも
主な事実である。フェルマーの原理では、"光は、2点間、
最小経路になるように進む"であった。ということは、

何らかの極限で波動光学は幾何光学に

近づかず。(フレイタ-リッパフ, 場の古典論 §53)

これは波長 $\lambda \rightarrow 0$ というように等しい

電磁場は $f = A e^{i\phi}$ で ϕ が大きい時に

相当する。これをアインシュタイン近似とよぶ。点Aから点Bへは
さまざまな波が送られ、干渉するが、 ϕ が大きいと、
経路が最小のもの意外はすべて打ち消しあう。

これが幾何光学へ移行する。

マクスウェル方程式 $\rightarrow$ アインシュタイン近似 $\rightarrow$ フェルマーの原理

これは量子力学に何を入れたらいいんだろう?

14:15
14:20

相当するのは、フーリエ変換 $\hbar \rightarrow 0$ の極限だろう。
波動関数は $\psi = A e^{i\phi}$ という形式で近似を考える。

古典力学では、端点固定の作用積分が最小になるような軌跡を通る。
$$S = \int_a^b dt \quad \delta S = 0$$

波動関数 $\psi(x) = \exp(\frac{i}{\hbar} S(x))$ とおきかえてみよう。(WKB近似)

これをシュレーディンガー方程式に代入する。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V\psi = E\psi, \quad \psi = e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}$$

2次の微分を先に計算

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \right) = \frac{d}{dx} \left(\frac{i}{\hbar} \frac{dS}{dx} e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \right) = \frac{i}{\hbar} \frac{d^2 S}{dx^2} e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}$$

から、シュレーディンガー方程式に代入して

$$-\frac{\hbar}{2m} \left(\frac{d^2 S}{dx^2} \right) + \frac{1}{2m} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} + V e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} = E e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \quad \text{と得る。}$$

ここで、 $\hbar \rightarrow 0$ として量子力学から古典力学へ移行し、

さらに両辺を $e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}$ で割って

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 + V = E, \quad \text{と得る。}$$

よってハミルトン・ポテンシャルの運動方程式が得られる

(つまり、リフマン) 量子力学、1 §17 参照)