

材料科学者のための物理入門シリーズ

材料科学、化学、物性物理学などの物質科学を学ぼうとする学生のための物理学入門書

材料科学者のための

量子力学入門

材料科学者のための
量子力学入門

志賀 正幸 著

A5・144頁・ISBN 978-4-7536-5555-7

定価(本体 2400 円+税)

1 量子力学の発展

シュレーディンガー方程式に至る量子力学の発展について解説。

- 1.1 古典物理学の完成と限界
- 1.2 プランクの黒体放射の理論
- 1.3 光電効果による光の粒子説
- 1.4 電子の波動性
- 1.5 ハイゼンベルグの不確定性原理
 - 実験による検証
- 1.6 水素原子の構造とスペクトル
 - 1.6.1 土星モデルと古典物理学の破綻
 - 1.6.2 水素原子の光スペクトルの研究
 - 1.6.3 ボーアの理論—前期量子力学—
- 1.7 シュレーディンガーの波動方程式
- 1.8 その後の発展

2 量子力学の方法Ⅰ—シュレーディンガーの方程式を解く—

自由電子、調和振動子、水素原子など、解析的にシュレーディンガー方程式が解ける代表的な系についての解を求める。

- 2.1 固有値と固有関数
- 2.2 $V=0$ (自由電子)
 - 2.2.1 1次元箱の中の電子
 - 2.2.2 有限ポテンシャル箱中の電子
 - 2.2.3 3次元箱の中の電子
 - 閉じ込められた電子の運動エネルギー
- 2.3 調和振動子
- 2.4 水素様原子
 - 2.4.1 極座標系での微分演算子
 - 2.4.2 極座標系での変数分離と各成分の解
 - $2p$, $3d$ 軌道の実関数表示
 - 2.4.3 物理的考察
 - 2次元振動膜との比較

3 量子力学の方法Ⅱ—物理量と演算子—

運動量や角運動量などの物理量を求める方法について述べる。

- 3.1 量子力学における運動量
 - 数学的復習(固有方程式と固有値)
- 3.2 自由電子の運動量
 - 3.2.1 周期的境界条件による自由電子の波動関数
 - 3.2.2 運動量
 - 3.2.3 電子の粒子像と不確定性原理
- 3.3 3次元自由電子
 - 3.3.1 エネルギーと運動量
 - 3.3.2 状態密度
- 3.4 量子力学における角運動量
 - 3.4.1 軌道角運動量の演算子
 - 3.4.2 水素様原子の軌道角運動量
 - 3.4.3 一般的角運動量とスピン角運動量
 - 電子のスピン角運動量
 - その他の角運動量
- 3.5 いろいろな表示法
 - 3.5.1 ブラ・ケット表示

3.5.2 行列表示

3.6 磁場中でのシュレーディンガー方程式

- 原子の軌道磁気モーメントと内殻電子の反磁性

4 近似解—摂動法と変分法—

解析的には解けない実際に即した系に対し、そのエネルギーや波動関数を近似的に求める方法である摂動法や変分法の原理や応用について説明する。

- 4.1 固有関数の完全直交性—数学的準備—
- 4.2 摂動法
 - 4.2.1 縮退がない状態に対する摂動法
 - 例1 電場中の荷電調和振動子
 - 例2 水素原子の分極—シュタルク効果—
 - 例3 自由電子系におよぼす周期ポテンシャルの影響—エネルギーギャップの発生—
 - 4.2.2 縮退がある状態に対する摂動法
 - 例 軸対称結晶場内での p 波動関数
- 4.3 変分法
 - 4.3.1 水素原子の分極
 - 4.3.2 水素分子イオン
 - 4.3.3 1次変分関数による解法

5 多電子系の取り扱い

2個以上の電子を含むヘリウム原子や水素分子などの多電子系の取り扱い方を説明し、量子力学特有のパウリの原理や交換相互作用などについての解説もする。

- 5.1 ヘリウム原子の基底状態
 - 5.1.1 電子間相互作用を無視したときの解
 - 5.1.2 摂動法による近似
 - 5.1.3 変分法による近似
- 5.2 ヘリウム原子の励起状態—電子のスピンとパウリの原理—
 - 5.2.1 第1励起状態の波動関数
 - 5.2.2 2電子系のスピン関数
 - 5.2.3 パウリの原理
- 5.3 水素分子
 - 5.3.1 波動関数
 - 5.3.2 エネルギー準位
 - フントの規則と強磁性の原因?
- 5.4 多電子系の一般式とハートリーおよびハートリー-フォックの近似法
 - 5.4.1 ハートリーの近似
 - 5.4.2 ハートリー-フォックの近似

6 状態間遷移—時間を含む摂動論—

散乱現象など時間的に変化する系での量子力学の方法について簡単に触れる。

- 6.1 時間を含む波動方程式
- 6.2 水素原子の遷移確率

付録 A 変数分離法

付録 B 軌道角運動量の関係式((3-33)式)の証明

付録 C 関係式 $S = \lim_{L \rightarrow \infty} L^{-1} \int_{-L/2}^{L/2} \exp[i(k'-k)x] dx = \delta(k'-k)$ の証明

注 文 書

お名前

〒

おところ

☎

()

材料科学者のための量子力学入門

部

部

部