シュレーディンガー方程式は有効なのだろうか？

不自然に思えたシュレーディンガー方程式は
<u>円周軌道を前提</u>
に正確に量子化条件とハミルトニアンを合体した式であった。
ただこの式には欠陥があり恐らくそれが顕在的な解釈に含まれている可能性がある。それハミルトニアンをHとすると**d H/dt＝0 が欠落している**ことです。そのため１電子軌道において力の釣り合いが取れていない $\theta=\pi/2$ 以外の偏角に対しても解を与えている。

説　明

波の状態関数 ϕ を $\phi=\phi_0\mathrm{Exp}(i\Theta)$とすると、波数ベクトル $\mathbf{k}=\nabla\Theta$ で表される。

この $\mathbf{k}$ は波長 λ、周波数 ν、速度cとすれば

$k=2\pi/\lambda=2\pi\nu/c$、且つ運動方向 $\mathbf{v}$ と一致し $\mathbf{k}\ //\ \mathbf{v}$

の関係にある。

また量子化条件

$$P\cdot\lambda=h \qquad (1)$$

を前提にすれば　$h=P\cdot 2\pi/k$ から $k=(2\pi/h)P$ かつ $\mathbf{k}\ //\ \mathbf{v}$ から $\mathbf{k}\ //\ \mathbf{p}$

$\mathbf{k}=(2\pi/h)\mathbf{P}$

すなわち

$\nabla\Theta=(2\pi/h)\mathbf{P}$

改めて

$\nabla\phi=(i\nabla\Theta)\phi$

$$\therefore\quad \mathbf{P}=(h/(2\pi))\nabla\Theta=i(h/(2\pi))(\nabla\phi)/\phi \qquad (2)$$

ここまでは問題ない。

一方ハミルトニアン H について考える。

一つの電子が一つの陽子の周りを周回しているとき

$$H=(1/2m)P^2+U \qquad \text{(U はポテンシャル)} \qquad (3)$$

P を(2)で置き換えると

$P^2=-(h/(2\pi))^2(\nabla\phi)^2/\phi^2$

$$H=-(1/2m)(h/(2\pi))^2(\nabla\phi)^2/\phi^2+U \qquad (4)$$

ここで面白い〝からくり〟があることに気が付く。

$(\nabla\phi)^2=\nabla(\phi(\nabla\phi))-\phi\nabla^2\phi=\{\nabla(\phi(\nabla\phi))-2\phi\nabla^2\phi\}+\phi\nabla^2\phi$

もし

$$\{\nabla(\phi(\nabla\phi))-2\phi\nabla^2\phi\}=0 \qquad (5)$$

ならば

$$(\nabla\phi)^2=\phi\nabla^2\phi \qquad (6)$$

(4)は

$$H=-(1/2m)(h/(2\pi))^2(\nabla^2\phi)/\phi+U$$

すなわち

$$H\phi=-(1/2m)(h/(2\pi))^2(\nabla^2\phi)/+U\phi \quad (7)$$

これはシュレーディンガー方程式そのもの。

当然(5)の制約を満たすという”からくり”があったのです。

つぎにその”からくり”について考えてみる。

$\phi=\phi_0\mathrm{Exp}(i\Theta)$かつ$\mathbf{k}=\nabla\Theta$

である。一方

$$\{\nabla(\phi(\nabla\phi))-2\phi\nabla^2\phi\}=0$$

から

$$\nabla(\phi(\nabla\phi))-2\phi\nabla^2\phi$$

$$=\nabla(\phi(\nabla\phi))-2\phi\nabla(\nabla\phi)=\nabla(\phi\mathbf{k}\phi)-2\phi\nabla(\mathbf{k}\phi)=\nabla(\phi^2\mathbf{k})-2\phi\nabla(\mathbf{k}\phi)$$

$$=\{\mathbf{k}\nabla\phi^2+\phi^2\nabla\mathbf{k}\}-2\phi\{\mathbf{k}\nabla\phi+\phi\nabla\mathbf{k}\}=\{2\mathbf{k}\phi\nabla\phi+\phi^2\nabla\mathbf{k}\}-\{2\phi\mathbf{k}\nabla\phi+2\phi^2\nabla\mathbf{k}\}$$

$$=-\phi^2\nabla\mathbf{k}$$

すなわち

$$\nabla\mathbf{k}=0$$

が必要だったのです。これは$|\mathbf{k}|$＝一定値であることを示している。

もし陽子の周りを回るのであれば**円周軌道**を前提とすることに成る。

電子の軌道計算のための提案

シュレーディンガー方程式が円周軌道に限定した方程式であることがわかった。

そこでより一般性の高い軌道解析のための5つの等式から成る

〞定在波状態方程式〟

を提案する。

定在波状態方程式とは以下の通り。

○ 個々の電子が陽子の周りを定在波状態で周回しているとき

周期T、速度$\mathbf{v}$、位置$\mathbf{R}$、波数$\mathbf{k}_v$、波長 λ_v、運動量$\mathbf{P}_v$で

$0 = \int_0^T dt\ \mathbf{v}$ （QF－1）

$2\pi n = \int_0^T dt(\mathbf{k}_\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})$ （QF－2）

$h = \mathbf{P}_\mathbf{v} \cdot \lambda_v$ （hはプランク定数） （QF－3）

○ 空間全体でq個の電子、s個のポテンシャルが有り全体でのエネルギーをHとすれば

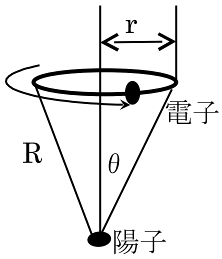
$SH = \Sigma_{i=1}^{q} 1/2\, m_e \mathbf{v}_i^2 + \Sigma_{j=1}^{s} U_j(R_1, \mathbf{R}_2, , , . \mathbf{R}_s)$ （QF－4）

またエネルギー SH の授受の時間不変 $dH/dt = 0$ （QF－5）

注：シュレーディンガー方程式で欠落しているエネルギーの授受に関する式を（QF－5）として加えている。

定在波状態方程式を使って具体的に解く

陽子１つ、電子が１つのみ。
電子が陽子の周りを周回している。特に円周軌道を描いている場合。



前　提

電子が陽子の周りを**定在波状態**にあって

周期T、速度**v**、位置**R**、波数$\mathbf{k}_v$、波長 λ_v、運動量$\mathbf{P}_v$、空間全体のエネルギー SH である時

（QF－1）　$0=\int_0^T dt\ \mathbf{v}$

（QF－2）　$2\pi n=\int_0^T dt(\mathbf{k_V}\cdot\mathbf{v})$

（QF－3）　$h=\mathbf{P_V}\cdot\lambda_V$

（QF－4）　$SH=\Sigma_{i=1}^{q}\ 1/2\, m_e \mathbf{v}_i^2+\Sigma_{j=1}^{s} U_j(R_1, \mathbf{R_2}, , , .\ \mathbf{R_s})$

（QF－5）　$dSH/dt=0$

陽子の中心(0,0,0)、電子から陽子までの距離$|\mathbf{R}|=R_e$一定、傾き $\theta=\theta_0$一定、運動速度 **v** も$|\mathbf{v}|=v_0$一定。

また電子の周回周期を T、電子の静止時の質量を m_e。

これより

電子の位置　$\mathbf{R}=R_e(\sin\theta_0\cdot\cos\omega t,\ \sin\theta_0\cdot\sin\omega t,\ \cos\theta_0)$　(1)

電子の運動速度　$\mathbf{v}=\omega R_e(-\sin\theta_0\cdot\sin\omega t,\ \sin\theta_0\cdot\cos\omega t,\ 0)$　(2)

電子の運動加速度　$\mathbf{a}=-\omega^2 R_e(\cos\omega t,\ \sin\omega t,\ 0)\sin\theta_0$　(3)

さらに　$v^2=\omega^2 R_e^2 \sin^2\theta_0$　(4)

陽子と電子の相互作用によるポテンシャル U は

$U=-(e^2/(4\pi\varepsilon))/|\mathbf{R}|$　(5)

計　算

(QF-1)より

$0=\int_0^T dt\ \mathbf{v}=\int_0^T dt\,\omega R_e(-\sin\omega t,\ \cos\omega t,\ 0)\sin\theta_0$

$\therefore\ 0=R_e\omega\sin\theta_0\int_0^T dt(-\sin\omega t,\ \cos\omega t,\ 0)=R_e\sin\theta_0[\cos\omega t, \sin\omega t,\ 0]_0^T$

$=R_e\sin\theta_0(\cos\omega T-1, \sin\omega T,\ 0)$

$\therefore\ 0=\cos\omega T-1,\ \ 0=\sin\omega T$

$\therefore\ \omega T=2\pi l$ （l は正の整数）　(6)

(QF-3)より $P_v\cdot\lambda_v=h$ は

$h=(m_e v)\cdot(2\pi/k_v)=2\pi m_e v/k_v$

$\therefore k_v=2\pi m_e v/h$　且つ $\mathbf{v}//\mathbf{k}_v$ から

$\mathbf{k}_v=2\pi m_e\mathbf{v}/h$ (7)

(QF-2)より $2\pi n=\int_0^T dt(\mathbf{k}_v\cdot\mathbf{v})$ から

$2\pi n=\int_0^T dt(\mathbf{k}_v\cdot\mathbf{v})=\int_0^T dt(2\pi m_e\mathbf{v}/h)\cdot\mathbf{v}=(2\pi m_e/h)\int_0^T dt(\omega R_e \sin\theta_0)^2$

$\therefore \omega^2 T=nh/(m_e R_e^2 \sin^2\theta_0)$

(6)と合わせて

$nh/(m_e R_e^2\sin^2\theta_0)=\omega^2 T=\omega\cdot\omega T=\omega 2\pi l$

$\omega=h/(2\pi m_e R_e^2\sin^2\theta_0)\cdot(n/l)$ (8)

QF-5 より

$0=m_e\mathbf{v}\cdot\mathbf{a}+d\mathbf{U}/dt=m_e\mathbf{v}\cdot\mathbf{a}+e^2/(4\pi\varepsilon)\cdot\mathbf{R}/R_e^3\cdot(d\mathbf{R}/dt)=(m_e\mathbf{a}+e^2/(4\pi\varepsilon)\cdot\mathbf{R}/R_e^3)\cdot\mathbf{v}$

$\forall$v に対して

$0=(m_e\mathbf{a}+e^2/(4\pi\varepsilon)\cdot\mathbf{R}/R_e^3)$

$\therefore$ $\mathbf{a}=-e^2/(4\pi\varepsilon m_e)\cdot\mathbf{R}/R_e^3$ (9)

また(3)から

$\mathbf{a}=-\omega^2 R_e(\cos\omega t, \sin\omega t, 0)\sin\theta_0$

$-(e^2/(4\pi\varepsilon m_e))\mathbf{R}/R_e^3=-\omega^2 R_e(\cos\omega t, \sin\omega t, 0)\sin\theta_0$

(1)より　$\mathbf{R}=R_e(\sin\theta_0\cdot\cos\omega t, \sin\theta_0\cdot\sin\omega t, \cos\theta_0)$

$\therefore$ $(\sin\theta_0\cdot\cos\omega t, \sin\theta_0\cdot\sin\omega t, \cos\theta_0)$ // $(\cos\omega t, \sin\omega t, 0)$

$\therefore$ $\theta_0=\pi/2$　　$(0<=\theta_0<=\pi)$

改めて $\sin\theta_0=1$、$\cos\theta_0=0$ より

$\mathbf{R}=R_e(\cos\omega t, \sin\omega t, 0)$ (10)

$\mathbf{v}=\omega R_e(-\sin\omega t, \cos\omega t, 0)$ (11)

$\mathbf{a}=-\omega^2 R_e(\cos\omega t, \sin\omega t, 0)=\omega^2\mathbf{R}$ (12)

$v^2=\omega^2 R_e^2$ (13)

となる。

(9)と(12)から

$\omega^2=e^2/(4\pi\varepsilon m_e)/R_e^3$ (14)

$\sin\theta_0=1$ と(8)から $\omega=h/(2\pi m_e R_e^2)\cdot(n/l)$ さらに $\omega^2=h^2/(2\pi m_e)^2/R_e^4\cdot(n/l)^2$

(14)とあわせて $\omega^2=h^2/(2\pi m_e)^2/R_e^4\cdot(n/l)^2=e^2/(4\pi\varepsilon m_e)/R_e^3$

$R_e=(\varepsilon h^2/(\pi m_e e^2))\cdot(n/l)^2$ (15)

(13)に(14)と(15)を順に代入していくと

$v^2=\omega^2 R_e^2=e^2/(4\pi\varepsilon m_e)/R_e^3\cdot R_e^2=e^2/(4\pi\varepsilon m_e)/R_e=e^4(l/n)^2/(4\varepsilon^2 h^2)$

$SH=(1/2)m_e v^2-e^2/(4\pi\varepsilon)/R_e=(1/2)m_e e^4(l/n)^2/(4\varepsilon^2h^2)-e^2/(4\pi\varepsilon)/((\varepsilon h^2/(\pi m_e e^2))\cdot(n/l)^2)$

$=-(m_e e^4/(8\varepsilon^2 h^2))(l/n)^2$

整理すると

$\theta_0=\pi/2$（陽子中心を通る面内を電子は周回することを意味する。）

$SH=-(m_e e^4/(8\varepsilon^2 h^2))(l/n)^2$ 自身の運動エネルギー＋ポテンシャルエネルギーの和

$R_e=(\varepsilon h^2/(\pi m_e e^2))\cdot(n/l)^2$　　陽子の周りを R_e の円周を回る。

$|\mathbf{v}|=(e^2/(2\varepsilon h))(l/n)$　　周回する電子の運動速度

さらに $l=1$ とすると

$SH = -(m_e e^4/(8 ε^2 h^2))/n^2$

$R_e = (ε h^2/(π m_e e^2))・n^2$

$|\mathbf{v}| = (e^2/(2 ε h))/n$

n=1の時

$|\mathbf{v}| = e^2/(2 ε h) = 2.2・10^3$[km/s]

$R_e = (ε h^2/(π m_e e^2)) = 1.7・10^{-14}$[pm]

$SH = -(m_e e^4/(8 ε^2 h^2)) = 2・10^{-5}$[pj]

参考資料

真空中の誘電率 ε	8.854187816 × 10-12
Planck 定数h	6.6260755 × 10-34
電気素量e	1.60217733 × 10-19
電子の静止質量me	9.1093897 × 10-31