量子力学

第3回目（4/27）

2AM　前期木曜2限

先進工学部マテリアル創成工学科　田村隆治

tamura☺rs.tus.ac.jp

第3回目で学ぶ内容

光電効果とコンプトン効果の発見により光の粒子性に至った経緯を学ぶ。次に、電子など粒子と考えられていたものが波動性を有することを学ぶ。最後に、量子力学の基本方程式を学習する。

光と粒子の性質に関する3つの重要な仮説

プランク仮説（1900年）	学習済み
光量子仮説（1905年）	光の二重性
ド・ブロイの物質波（1923年）	粒子の二重性

※前回の授業では、光のエネルギーに単位量$h\nu$があることを学習した。今回は、光が粒子性を有することを学ぶ。

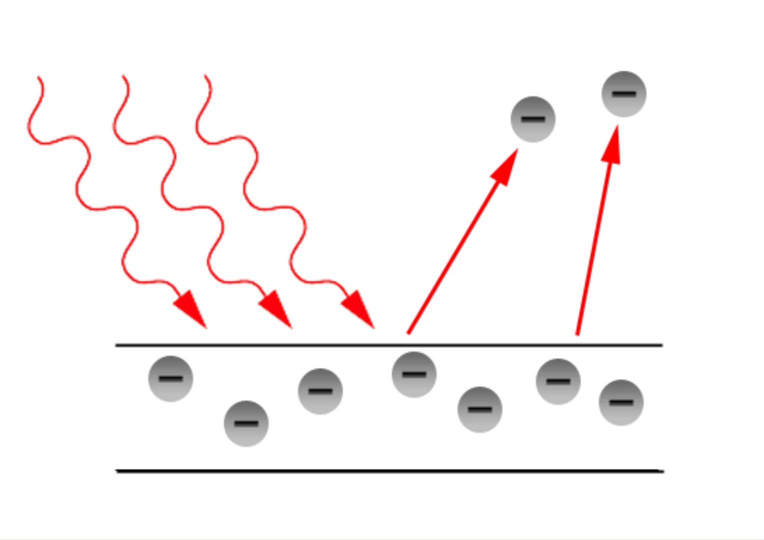
※光の粒子性は、一言で言えば、光が点のような小さな電子に有限のエネルギーや運動量を瞬時に渡せることに尽きる。そのためには自分も粒子性を帯びていなければならない。

光電効果（1888年）

金属に光を当てると中の電子がたたき出される現象

※光によってたたき出される電子を光電子とよぶ。

※出てくる光電子は様々な運動エネルギーを有する。その理由は、電子は金属内で様々なエネルギーを持っているためである。



一定の振動数νをもった光を金属に入射することを考えよう。

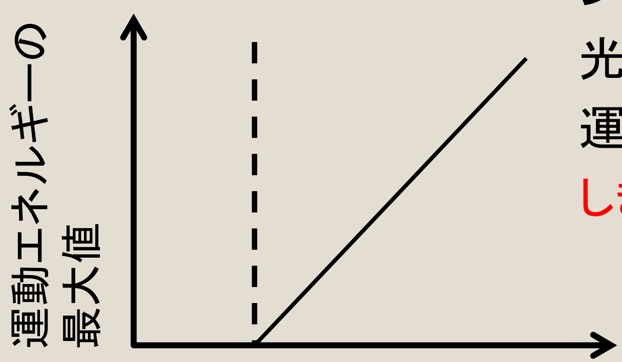
光のエネルギーの単位が$h\nu$なので、光の強度は$h\nu$の整数倍となる。

光電効果

問題：電子が受け取るエネルギーは$nh\nu$か、それとも、$h\nu$か？

1．$nh\nu$であれば、どんなに振動数が低くともnが十分大きければ（＝光の強度が十分強ければ）電子を叩き出すことができる。

2．$h\nu$であれば、光の強度とは関係なく、ある振動数ν（しきい値とよぶ）以上の光でないと電子を叩き出すことができない。従って、電子の運動エネルギーの最大値はνに比例することになる。



実験結果

光の強度とは無関係、しきい値が存在

運動エネルギーの最大値は振動数に比例

しきい値以上の振動数であれば光電子は瞬時に出てくる。

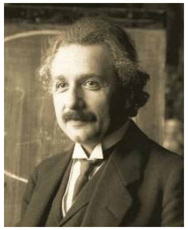
答：電子が受け取るエネルギーは$h\nu$である

波である光が殆ど面積を持たない電子に瞬時にエネルギーを渡すことは如何にして可能か？

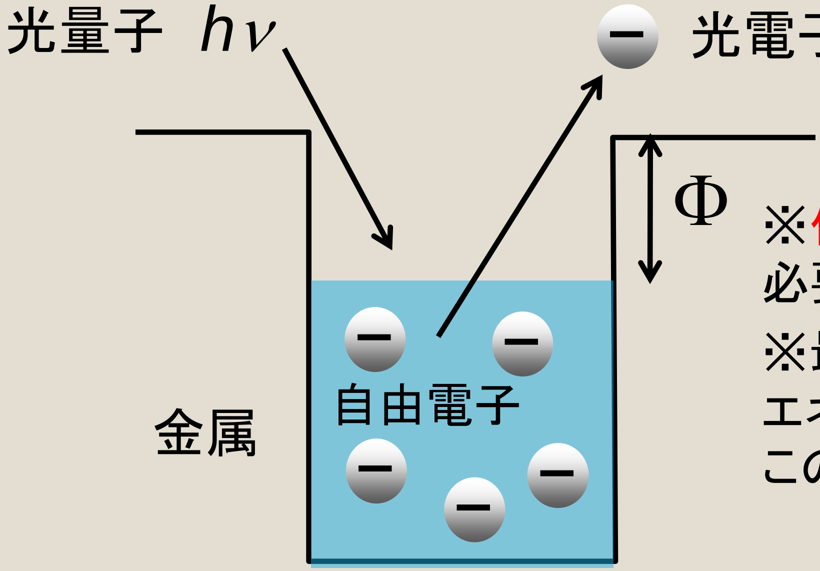
光も粒子と考えないと不合理

※光は$h\nu$のエネルギーを持った粒子と考えれば次に示すように実験結果を完全に説明することができる。

光量子仮説(1905、アインシュタイン)
光は$h\nu$のエネルギーを持つ粒子



光の粒子を光量子(フォトン)とよぶ



※仕事関数Φ:電子が金属から飛び出すのに必要な最低のエネルギー

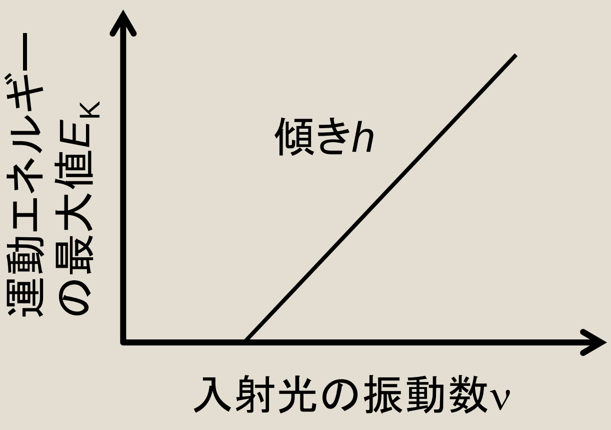
※最も高いエネルギーを有する電子は、Φのエネルギーで金属から飛び出すことができる。この電子が運動エネルギーの最大値を与える。

エネルギー保存則(最大エネルギーを有する電子)

$$h\nu = \Phi + E_K \quad \therefore E_K = h\nu - \Phi$$

※E_K:光電子の運動エネルギーの最大値

※直線の傾きからプランク定数hを決定することができる。



フォトンに関する例題（10分）

1．電子レンジから2.45GHzの電磁波が出力1000W
で放射されている。
（１）放射されるフォトンのエネルギーは何eVか。
（２）１秒間に放射されるフォトンの数はいくらか。

2．金属セシウムに波長500nmの光を当てたとき、出て
くる光電子の運動エネルギーの最大値は何eVか？
ただし、セシウムの仕事関数を1.38eVとする。

※1 eV=1.60×10^{-19} J
※h=6.63×10^{-34} Js
※c=3.00×10^{8} m/s

フォトンに関する例題（10分）

1．電子レンジから2.45GHzの電磁波が出力1000Wで放射されている。
（１）放射されるフォトンのエネルギーは何eVか。
（２）１秒間に放射されるフォトンの数はいくらか。

（１）フォトンのエネルギーは、

$$E = h\nu = 6.63\times10^{-34}\times2.45\times10^{9} = 1.62\times10^{-24}\ \mathrm{J}$$

$$E = \frac{1.62\times10^{-24}}{1.60\times10^{-19}} = 1.0\times10^{-5}\ \mathrm{eV} = 10\ \mu\mathrm{eV}$$

（２）フォトンの数は、

$$N = \frac{W}{E} = \frac{1000}{1.62\times10^{-24}} = 6.2\times10^{26}\ \ \mathrm{s}^{-1}$$

フォトンに関する例題（10分）

２．金属セシウムに500nmの波長の光を当てたとき、出てくる光電子の運動エネルギーの最大値は何eVか？ただし、セシウムの仕事関数は1.38eVである。

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3.0\times10^{8}}{500\times10^{-9}} = 6.0\times10^{14}\ \mathrm{s}^{-1}$$

$$h\nu = \frac{6.63\times10^{-34}\times6.0\times10^{14}}{1.60\times10^{-19}} = 2.49\,\mathrm{eV}$$

$$E_{Kin} = 2.49 - 1.38 = 1.11\,\mathrm{eV}$$

フォトンの運動量

古典力学における運動量

$$p = mv$$

※ニュートン力学では、質量を持たない粒子にはそもそも運動量を定義できない。

特殊相対性理論（1905）

$$\boxed{E^2 = p^2c^2 + m^2c^4}$$

※静止質量mの自由粒子の相対論的なエネルギーを表す。

※フォトンの質量はゼロなので $E = pc$。従って、次式が得られる。

※静止した粒子の場合は、有名な式$E = mc^2$が得られる。

フォトンの運動量

$$\boxed{p = \frac{E}{c}}$$

※この式に$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$を代入すると以下の式が得られる。

アインシュタインの関係

$$\boxed{p = \frac{h}{\lambda}}$$

※光の波長と運動量の関係を表す重要な式

コンプトン効果

物質にX線をあてると波長の長いX線が発生する現象

※古典論では、波の反射は振動数（従って波長）を変えない。

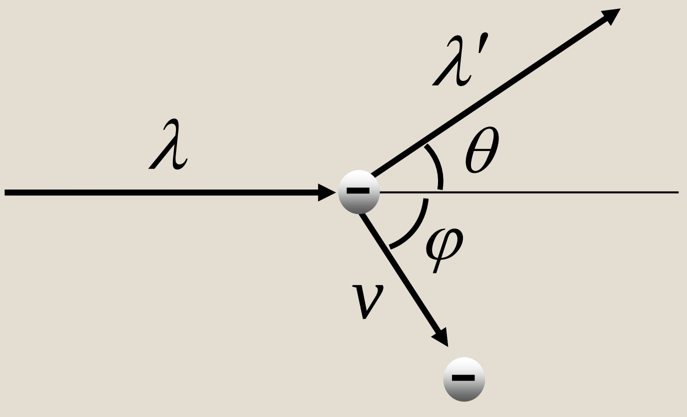
※X線回折においては散乱X線の波長は変化しない。このような散乱を
トムソン散乱とよぶ。

※電子によるX線の散乱にはトムソン散乱とコンプトン散乱の二種類がある。

※光電効果との違いは、光電効果は光の全エネルギーが電子に渡される
のに対し、コンプトン散乱は一部のエネルギーが渡されることにある。

フォトンが運動量$p = h/\lambda$をもつと仮定して、フォトンが電子によって
散乱される場合を考えよう。

フォトンの運動量 $p = \dfrac{h}{\lambda}$



エネルギー保存則 $$\frac{hc}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda'} + \frac{1}{2}mv^2$$

運動量保存則 $$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'}\cos\theta + mv\cos\varphi$$

$$0 = \frac{h}{\lambda'}\sin\theta - mv\sin\varphi$$

$\Delta\lambda \equiv \lambda' - \lambda$ として、$\dfrac{\Delta\lambda}{\lambda} << 1$ のとき、$\boxed{\Delta\lambda = \dfrac{h}{mc}(1 - \cos\theta)}$

波長の増加量Δλは散乱角θのみで決まる。 >>実験結果と良く一致

※光が点のような電子と運動量をやり取りする。コンプトン散乱も光の粒子性を表していないか。

光の二重性（まとめ）

光は波動性と粒子性の両方を併せ持つ。

波としての性質：　振動数 ν　波長 λ

粒子としての性質：　エネルギー E　運動量 p

両者の関係式

$$\boxed{E = h\nu,\ p = \frac{h}{\lambda}}$$

※波から粒子への翻訳の式と見なすことができる。

粒子の二重性　ド･ブロイ(1923年)

ド･ブロイの仮説（思いつき？）

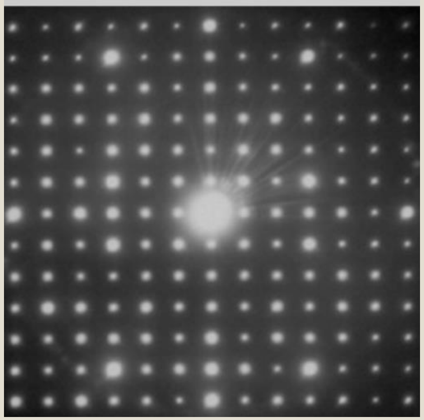
光が粒子の性質をもつなら、逆に、一般の粒子は波の性質をもっても良いのではないか？

粒子性：エネルギー E　運動量 p

$$E = h\nu,\ p = \frac{h}{\lambda}$$

粒子から波への翻訳と読む

波動性：振動数 ν　波長 λ



結晶による電子の回折

回折は波の干渉によって説明される。

ド･ブロイの仮説が正しいことが証明された。

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

粒子から波への翻訳
（ド･ブロイの関係式）

※今からちょうど100年前のこのド･ブロイの仮説が人類の物質観を根本から変えることになった。あらゆる粒子が波動性を持つことになった瞬間である。

物質波に関する例題（20分）

以下の物質波のド・ブロイ波長を求めなさい。

（1） 速度1m/sで歩く体重60kgの人

（2） 速度1000m/sで飛行している10gの弾丸

（3） 速度10^6m/sで運動する自由電子（電子波）

（4） 室温(290K)で熱運動している中性子

（5） 温度1Kで熱運動しているヘリウム原子

（6） 教室の窒素分子（300K）

※電子の質量：m_e=9.11×10^{-31} kg
※中性子の質量：m_n=1.67×10^{-27} kg
※ヘリウム原子の質量：6.64×10^{-27} kg
※窒素分子の質量：4.65×10^{-26} kg
※ボルツマン定数：k_B=1.38×10^{-23} J/K

（1） 速度1m/sで歩く体重60kgの人

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.63\times10^{-34}}{60\times1.0} = 1.1\times10^{-35}\ \mathrm{m}$$

（2） 速度1000m/sで飛行している10gの弾丸

$$\lambda = \frac{6.63\times10^{-34}}{10\times10^{-3}\times10^{3}} = 6.6\times10^{-35}\ \mathrm{m}$$

（3） 速度10^{6}m/sで運動する自由電子（電子波）

$$\lambda = \frac{6.63\times10^{-34}}{9.11\times10^{-31}\times10^{6}} = 7.3\times10^{-10}\ \mathrm{m} = 0.73\,\mathrm{nm}$$

（4） 室温(290K)で熱運動している中性子

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{3}{2}kT = \frac{3}{2}\times1.38\times10^{-23}\times290 = 6.0\times10^{-21}\ \mathrm{J}$$

$$p = \sqrt{2\times1.67\times10^{-27}\times6.0\times10^{-21}} = 4.48\times10^{-24}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.63\times10^{-34}}{4.48\times10^{-24}} = 1.5\times10^{-10}\ \mathrm{m} = 0.15\,\mathrm{nm}$$

（5） 温度1Kで熱運動しているヘリウム原子

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{3}{2}kT = \frac{3}{2} \times 1.38 \times 10^{-23} \times 1 = 2.07 \times 10^{-23}$$

$$p = \sqrt{2 \times \left(6.64 \times 10^{-27}\right) \times 2.07 \times 10^{-23}} = 5.24 \times 10^{-25}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{5.24 \times 10^{-25}} = 1.3 \times 10^{-9}\ \mathrm{m} = 1.3\,\mathrm{nm}$$

（6） 教室の窒素分子（300K）

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{3}{2}kT = \frac{3}{2} \times 1.38 \times 10^{-23} \times 300 = 6.21 \times 10^{-21}$$

$$p = \sqrt{2 \times \left(4.65 \times 10^{-26}\right) \times 6.21 \times 10^{-21}} = 2.40 \times 10^{-23}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{2.40 \times 10^{-23}} = 2.8 \times 10^{-11}\ \mathrm{m} = 0.028\,\mathrm{nm}$$

※「物質波（Matter wave）」という概念は、電子や中性子など、小さな粒子に対して物理的に意味のある（あるいは観測可能な）波長を与える。

※「物質波」を用いた回折の例：電子回折、中性子回折

分散関係

※波を特徴づける量は波数kと角振動数ω。

※波数kと角振動数ωの関係によって波を記述する方程式が決まる。波数kと角振動数ωの関係を分散関係とよぶ。まず、古典的な波の分散関係を調べよう。

古典的な波の場合:

$$\boxed{\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}}$$

Ψ : 波動関数とよぶ。

v : 波の速度

$\Psi(x,t) = A\sin(kx - \omega t)$ を仮定して解を求める。

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -(-\omega)^2 A\sin(kx - \omega t) = -\omega^2 \Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 A\sin(kx - \omega t) = -k^2 \Psi \qquad \therefore \omega^2 = v^2 k^2$$

古典的な波の分散関係 $\boxed{\omega = vk}$

※古典的な波の場合、角振動数は波数に比例する。

※電磁波の場合は$\omega = ck$である。:

物質波の分散関係

古典的な波: $\boxed{\omega = vk}$

ド･ブロイの関係式より

振動数: $\nu = \dfrac{E}{h} = \dfrac{p^2}{2mh} \qquad \because E = \dfrac{p^2}{2m}$

波長: $\lambda = \dfrac{h}{p}$　これを上式に代入して、$\nu = \dfrac{h}{2m}\left(\dfrac{1}{\lambda}\right)^2$

$$\therefore \boxed{\omega = \frac{h}{4\pi m}k^2 = \frac{\hbar}{2m}k^2} \quad \because \omega = 2\pi\nu, k = \frac{2\pi}{\lambda}, \boxed{\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}}$$

ディラック定数

※物質波の角振動数は波数の二乗に比例する。

※物質波と古典的な波とでは分散関係（すなわち方程式）が異なる。

結論: $\dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = v^2 \dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ の形で物質波の波動方程式を書くことができない。

※もしこの式で表されるとするとω=*vk*となり矛盾する。

※物質波には新たな波動方程式が必要である所以である。

物質波が従う波動方程式

物質波の分散関係 $\boxed{\omega = \dfrac{\hbar}{2m}k^2}$

波の式 $\Psi(x,t) = A\sin(kx - \omega t)$ を例にとって考えると、

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 A\sin(kx - \omega t)$$ ２階微分でk^2をはき出す

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\omega A\cos(kx - \omega t)$$ １階微分でωをはき出す

従って、$\dfrac{\partial \Psi}{\partial t} = C\dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ のような形であることが期待される。

※ただし、sin波やcos波では明らかにこの方程式を満足しない。

各自、理由を考えてみよ。

微分して元に戻る関数は指数関数である。従って、以下のような
sin波とcos波の線形結合を考えよう。

$$\Psi = A\cos(kx - \omega t) + iA\sin(kx - \omega t) = A\exp[i(kx - \omega t)]$$

$\Psi = A\exp\left[i\left(kx-\omega t\right)\right]$ は波動方程式 $\dfrac{\partial\Psi}{\partial t} = C\dfrac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$ の解であり、

定数Cは物質波の分散関係から決定することができる。

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -k^2\Psi \qquad \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi$$ より、 $\dfrac{\partial\Psi}{\partial t} = C\dfrac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$ に代入して、

$$-i\omega\Psi = C\left(-k^2\Psi\right) \qquad \therefore \omega = -iCk^2$$

分散関係より、$-iC = \dfrac{\hbar}{2m}$ $\quad\therefore C = \dfrac{i\hbar}{2m}$ 従って、$\boxed{i\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}}$

波動方程式の意味

左辺: $i\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t} = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}A\exp\left[i\left(kx-\omega t\right)\right] = \hbar\omega\Psi = E\Psi$ エネルギーを表す。

右辺: $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}A\exp\left[i\left(kx-\omega t\right)\right] = \dfrac{\hbar^2k^2}{2m}\Psi = \dfrac{p^2}{2m}\Psi$

運動エネルギーを表す。

※ただし、次の関係を使った。$\lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{2\pi}{k} \quad \therefore \hbar k = p$

※（エネルギー）＝（運動エネルギー）の形をしている。

※一般には、（エネルギー）＝（運動エネルギー）＋（ポテンシャルエネルギー）なので、ポテンシャルエネルギーがある場合に拡張しよう。

Schrödinger方程式（1926年）

ポテンシャルV(x,t)が存在する場合

一粒子の全エネルギー： $E=\frac{p^2}{2m}+V(x,t)$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$ （自由粒子の波動方程式）

$$\longrightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V\right)\Psi}$$ Schrödinger方程式

※この式が物質波の基本方程式であることを要請する（量子力学）。

※あくまで要請である。正しいかどうかは実験で検証することになる。

$$\boxed{\hat{H}\equiv-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x,t)}$$ エネルギー演算子（ハミルトニアン）とよぶ

※「ハミルトニアン」：解析力学の用語で、全エネルギーを表す。

※「演算子」：一般に、関数に作用させて演算を行うものをさす。

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi}$$ Schrödinger方程式

第3回目のまとめ

以下の内容を良く消化して、人に説明できるようにしましょう。

【光の二重性】光は、エネルギー$E = h\nu$、運動量$p = h/\lambda$の粒子（フォトン）と見なすことができる。

【粒子の二重性】電子などの粒子は波の性質を併せ持つ。エネルギーE、運動量pの粒子は振動数$\nu = E/h$、波長$\lambda = h/p$の波（物質波）としてふるまう。

【物質波の基本方程式】

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad \text{Schrödinger方程式}$$

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x,t)$$

※粒子の波動性の発見が古典物理学からの大きな転換を生んだ。

※量子力学は、一言で言えば、粒子の波動性を取り込んだ理論である。

レポート課題（30分）

コンプトン散乱において、散乱前後の波長の変化が十分小さいとした場合（$\Delta\lambda/\lambda<<1$）、波長の変化量が以下の式で与えられることを示せ。

$$\Delta\lambda \equiv \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}\left(1-\cos\theta\right)$$

※必要に応じ、以下の近似を用いよ。

$$\frac{1}{1+x} \cong 1-x \quad \left(x<<1\right)$$

ヒント>>tamura☺rs.tus.ac.jpまで

※提出方法

〆切：5/10(水)　　提出先：LETUS

フォーマット：手書き・ワープロいずれも可

ファイル形式：PDF　　ファイル名書式：”82xxxxx材料太郎.pdf”