電気工学2第15回

電子の波動性

- 光が波動性と粒子性を同時に持つなら，電子などの粒子も波動性をもってもよいのではないか
  - ルイ・ド・ブロイ(1923年)
    - フランスの名門貴族
    - 兄モーリスは実験物理学者
    - 博士論文で提唱
    - アインシュタインによりド・ブロイの説が広まる
    - 量子力学の基礎
    - 1925年－1927年G.P.トムソンにより電子線の回折実験で波動性を確認
    - 1929年ノーベル賞

アインシュタイン-ド・ブロイの関係式

物質の持つエネルギー

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

p：運動量

光子はm=0なので

$$E = cp = h\nu$$ アインシュタイン・ド・ブロイの関係式

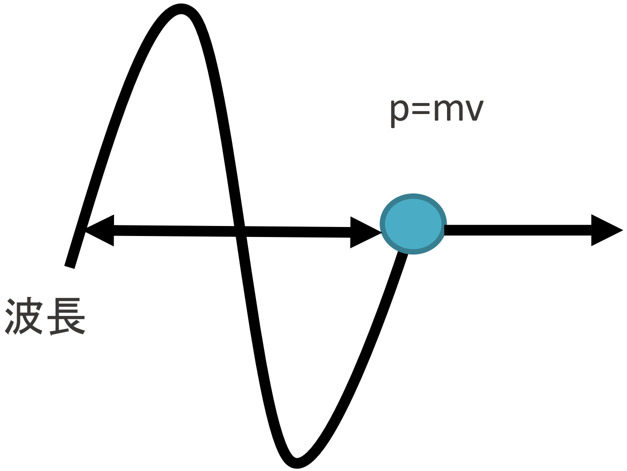
$$p = h\nu/c$$

$$= h/\lambda$$

この式が物質にも成り立つとド・ブロイは考えた

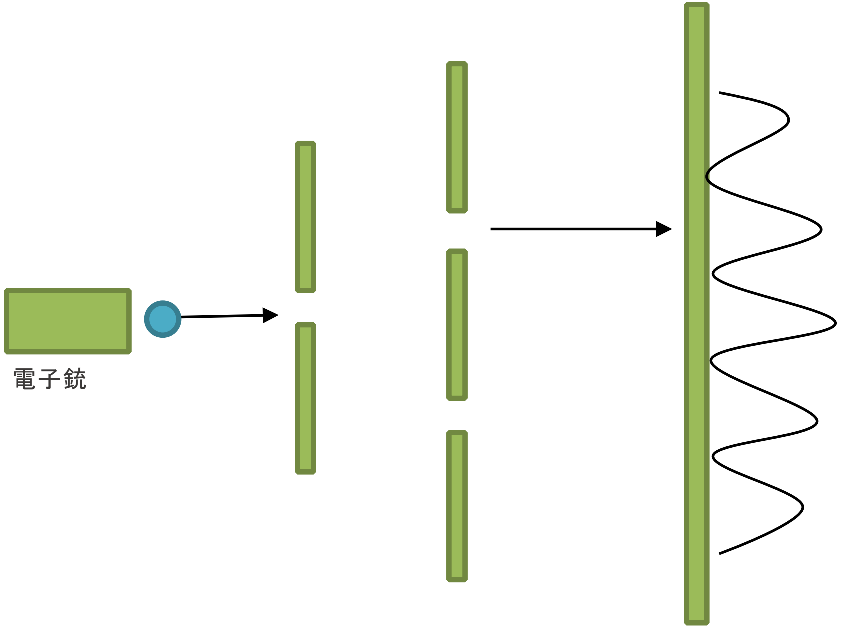
式の意味するところ

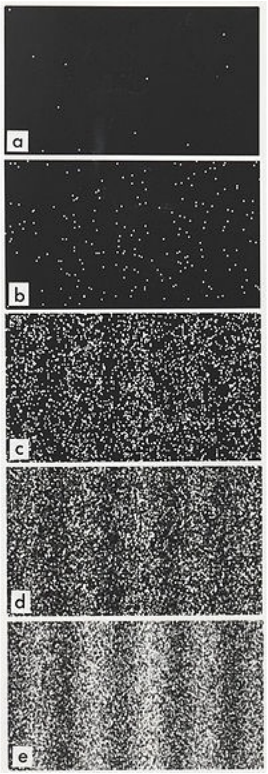
- 運動量pを持つ物体は，波長h/pの波としての性質を持つ.
  - 粒子は波である！？
  - 物質波（ド・ブロイ波）



電子線のヤングの干渉実験

電子という物質が波の性質があるなら，ヤングの干渉実験を行えば，干渉波が現れるはず





原康夫 現代物理学

量子力学

量子力学

- 小さな粒子の振る舞いはニュートン力学では記述できない
  - 粒子なのに波の性質を持つ
- 小さな粒子の振る舞いを扱う力学が量子力学

シュレディンガー

- 1887年ウィーン生まれ
- 1926年シュレディンガー方程式(39歳)
- 1933年ノーベル物理学賞受賞
- 1935年シュレディンガーの猫提唱
- 物理をやめて生物をやる
- 1944年「生命とは何か」を出版
  - 分子生物学の道を開く
  - 遺伝子について考察
    - ワトソンとクリックに影響を与える

シュレディンガー方程式

- 量子力学の基礎方程式はシュレディンガー方程式

$$\mathcal{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Hはハミルトニアン(演算子)
Ψは波動関数(粒子の状態を表す)

ポテンシャルエネルギー

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\boxed{V(\boldsymbol{r})}$$

シュレディンガー方程式がなぜそうなるか気にしない

■ 時間に依存しない1次元のシュレディンガー方程式

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

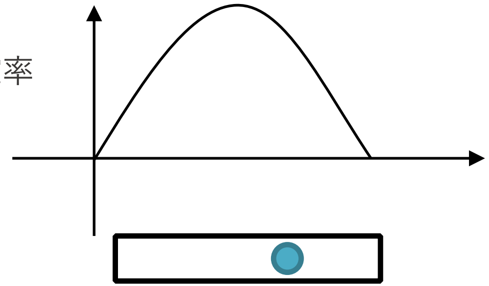
波動関数とは何か

1次元の箱にある粒子は箱のどこにあるかまでは正確に分からない.

どこにある？

確率で考える

波動関数と関係する



見えないなら確率で考えよう

波動関数とは何か

- 波動関数の絶対値の自乗が粒子の存在確率を表すと考えるとなぜか実験と合う

$$|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$$

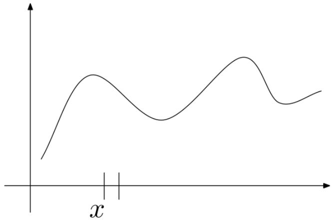
存在確率(発見確率)

波動関数は，実は虚数も許されるので複素共役とかけることで存在確率になる

規格化条件

- 波動関数の自乗は確率密度関数になる.
- 当然，確率密度関数は全空間で積分すれば1となる

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

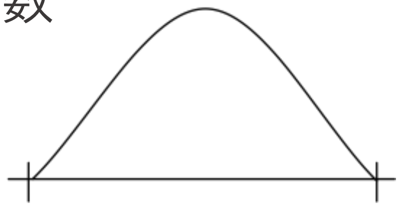


規格化条件という.
要は，全空間のどこかには粒子はあるということを意味する.
もし1でなければ，空間内に存在しない可能性もある.

波動関数の収縮

収縮ってよく分からん．多世界解釈のほうがネタになりそうだ．

- 観測前の波動関数



どこにあるかわからないので，波動関数は広がりを持っている

- 観測後の波動関数
  - 観測すると位置が特定されるので波動関数はδ関数となる（広がりがなくなる）．

どこにあるかわかっているので，波動関数は観測した場所のみ1となる．

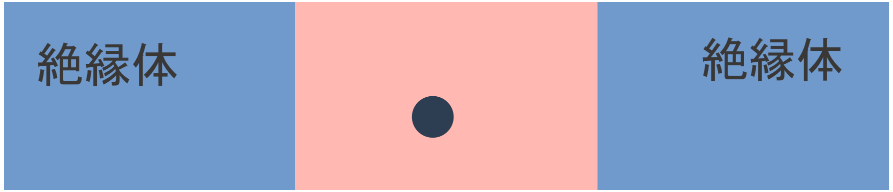
■ 無限に深い井戸型ポテンシャル

絶対外に出ることができない箱のなかに粒子がある状態.

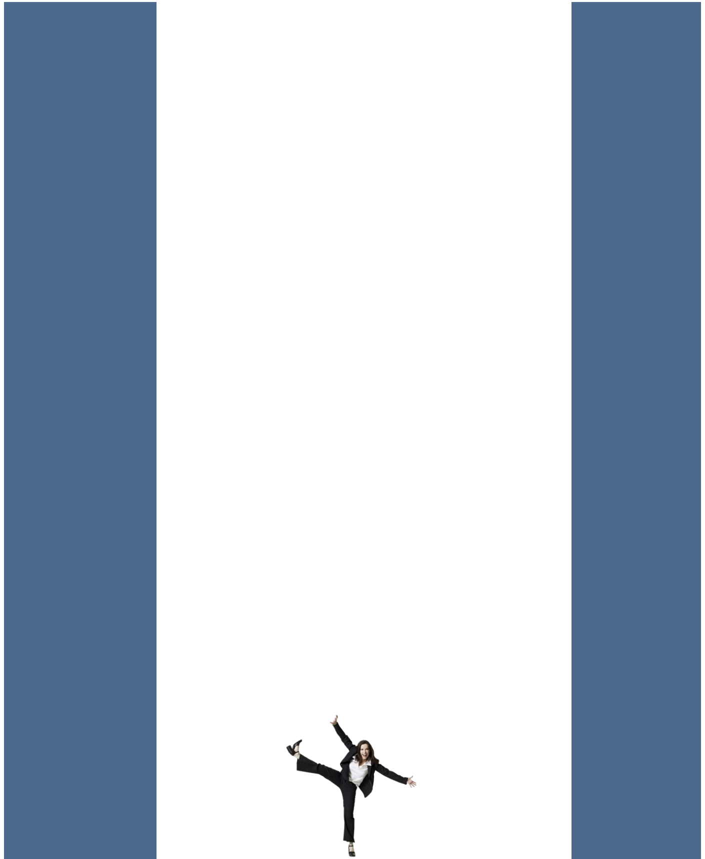
具体的な系

導体が絶縁体の間に挟まれている(絶縁体なので伝導電子は存在しない).

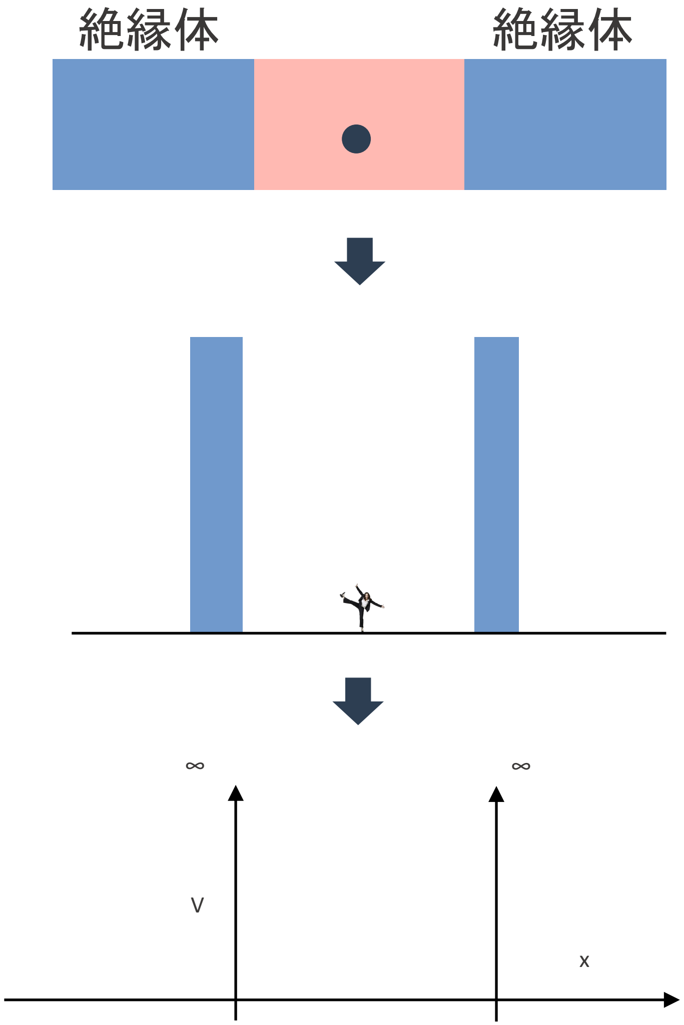
導体の中に伝導電子が1つある.



■ 人間で例えると



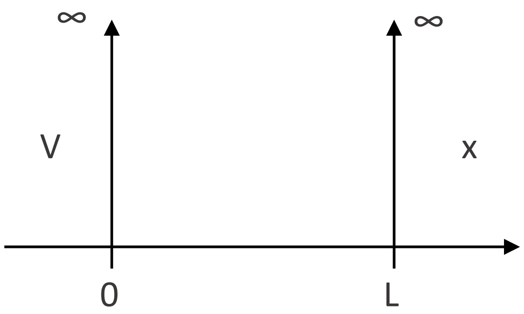
とてつもなく高い壁に囲まれている



絶縁体
絶縁体
∞
∞
V
x

■ ド・ブロイの関係式から考えてみる

ド・ブロイ波は定在波として存在しているとすると，定在波の最大波長は2Lなので



$$n\lambda = 2L$$

$$\lambda = 2L/n$$

ド・ブロイ波は波なので正弦波か余弦波である．x=0,Lのとき粒子は存在しないので正弦波となる．

$$\phi = A\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

本当はシュレディンガー方程式を解かなければなりません

無限に深い井戸型ポテンシャルの波動関数

- 規格化条件より

- なので

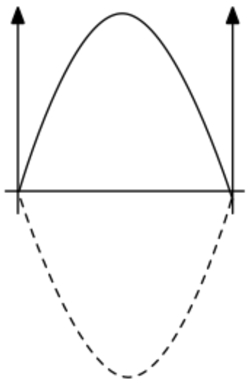
$$\int_0^L (A\sin(\frac{\pi n x}{L}))^2 dx = 1$$

- よって無限に深い井戸型ポテンシャルの波動関数は

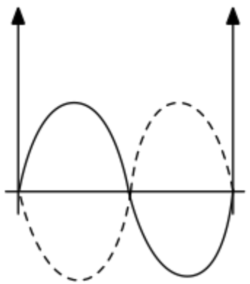
$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\phi = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{\pi n x}{L})$$

n=1の時の波動関数



n=2の時の波動関数

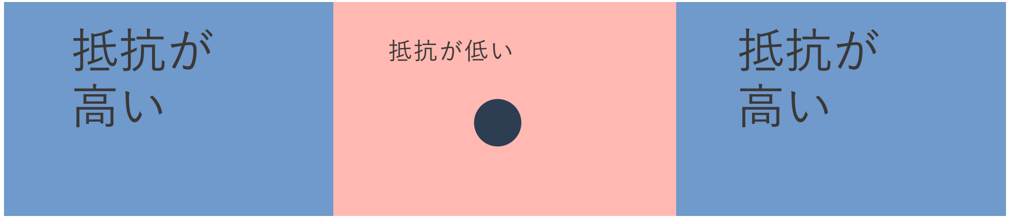


有限の深さの井戸型ポテンシャル

少し高い壁に囲まれたなかに粒子がある状態.

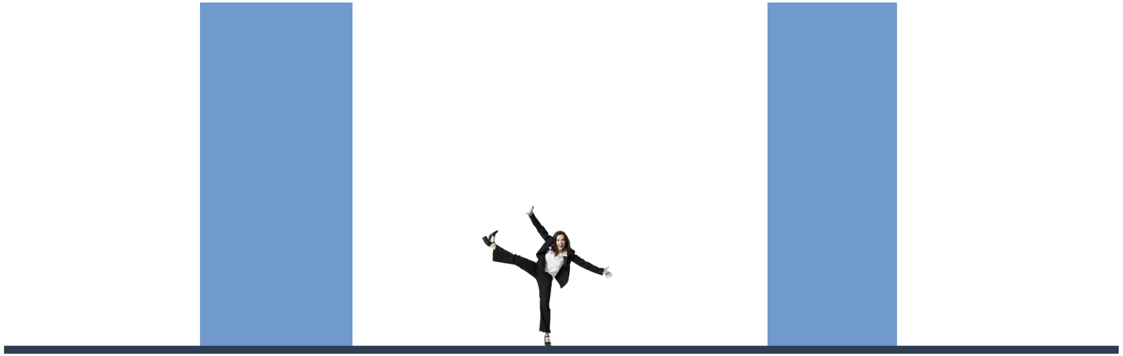
具体的な系

導体が抵抗が高い物質の間に挟まれている(普通は伝導電子は少ない).
導体の中に伝導電子が1つある.

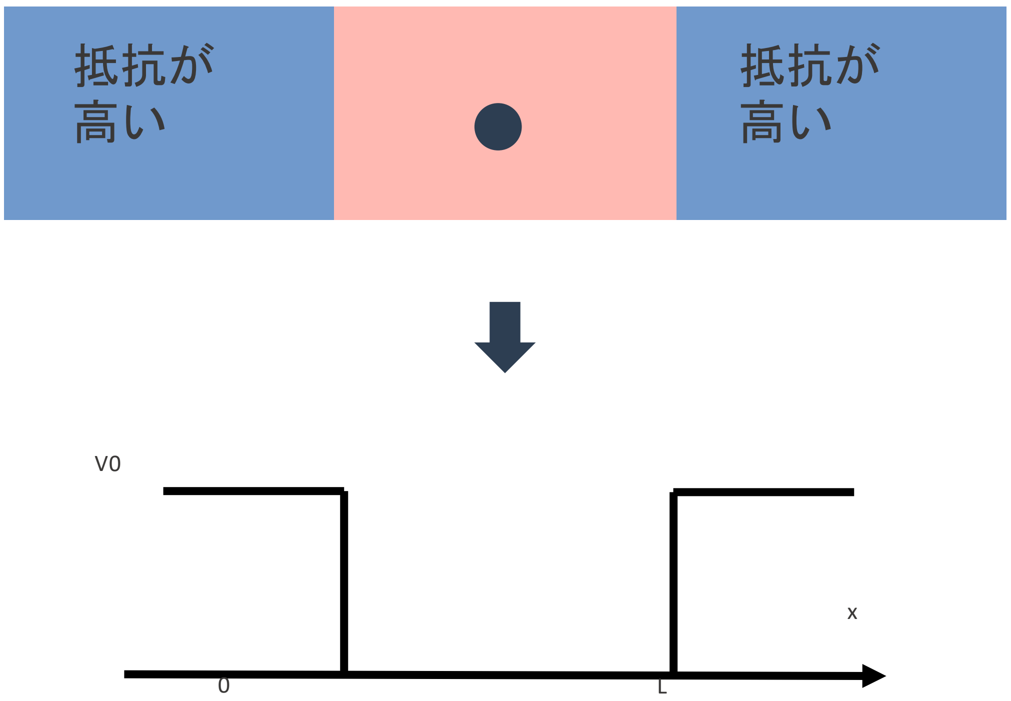


■ 人間で例えると

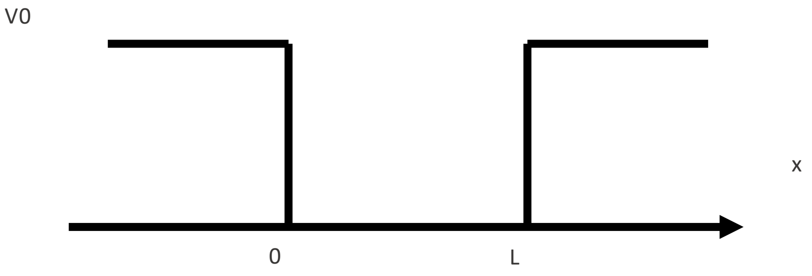
飛び越えられない程度の壁がある

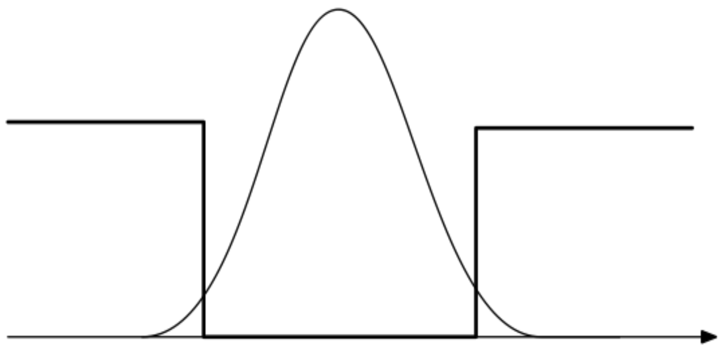


有限の深さの井戸型ポテンシャル

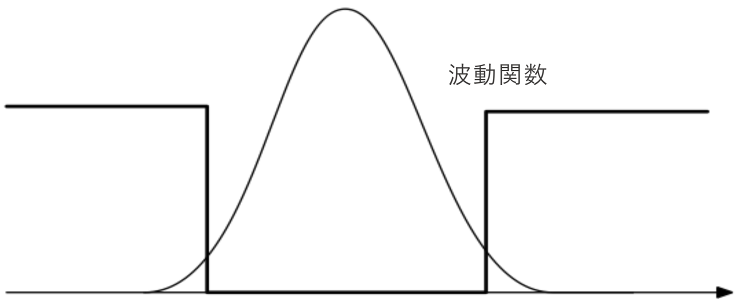


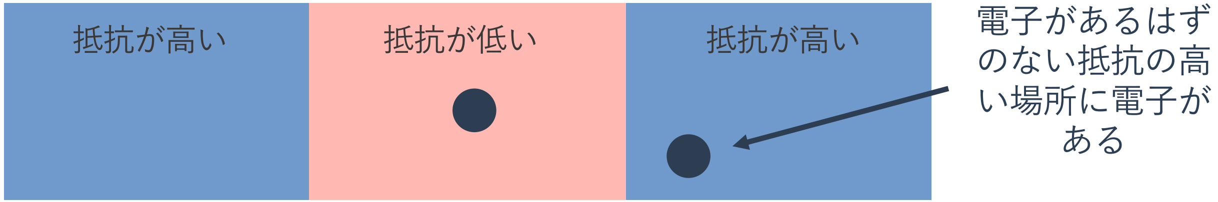
有限井戸型ポテンシャルの波動関数





■ 波動関数の染み出し

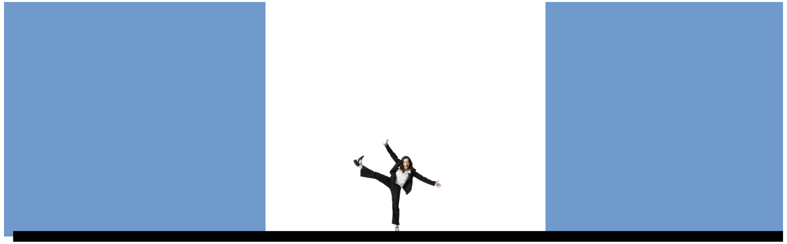




ポテンシャルが高い場所(抵抗が高い場所)にも波動関数は値を持っている（波動関数の染み出し）．
回路の例では，抵抗が高い場所にも電流が流れる可能性がある．

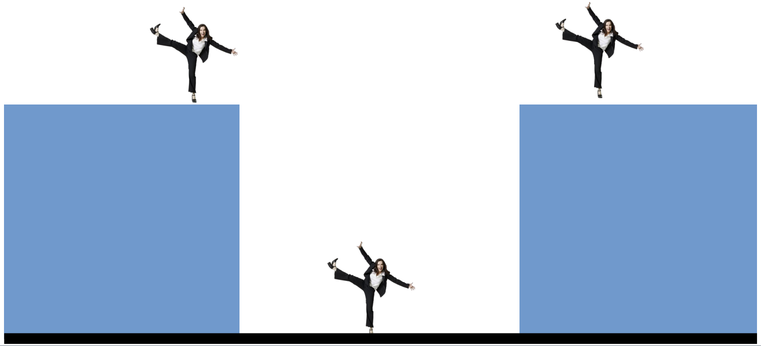
波動関数の染み出しの意味

古典的な世界では，壁が高ければ外に出られない



ジャンプしても
外に出られない

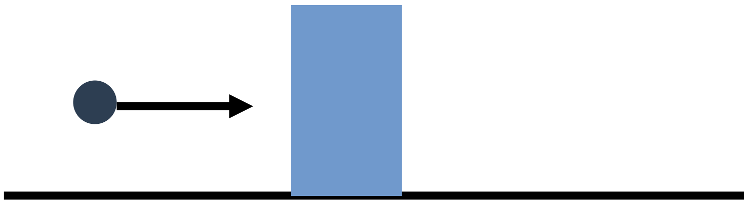
量子力学の世界では，飛び越えられない高さ壁の上に登っている可能性がある．



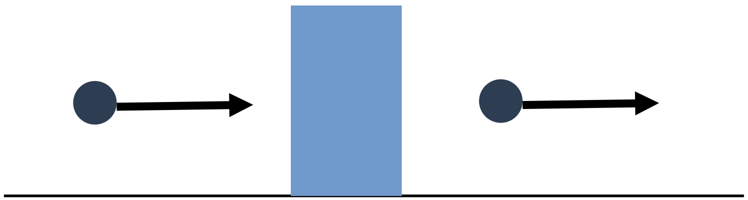
何もしていない
のになぜか壁の
上に登っている
かもしれない．

トンネル効果

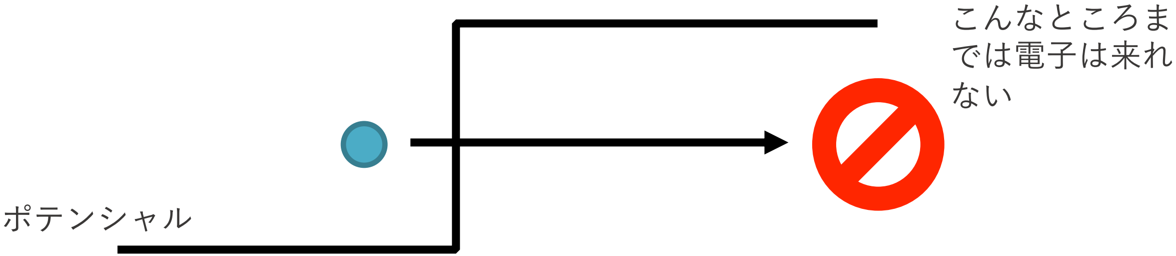
古典的な世界では，壁を粒子が突き抜けることはない



量子力学の世界では，壁を突き抜ける可能性がある．

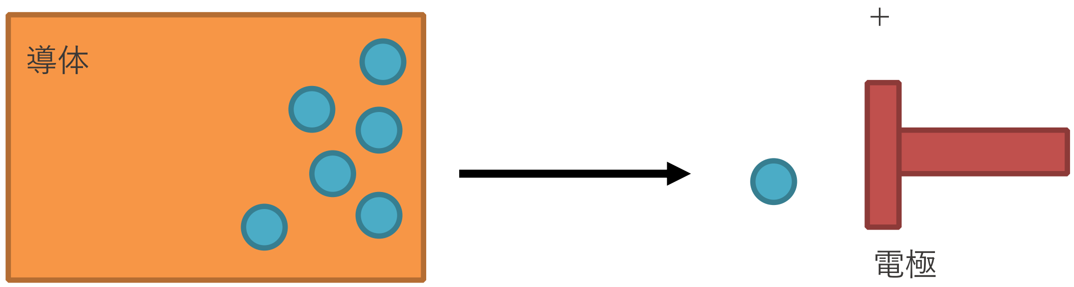


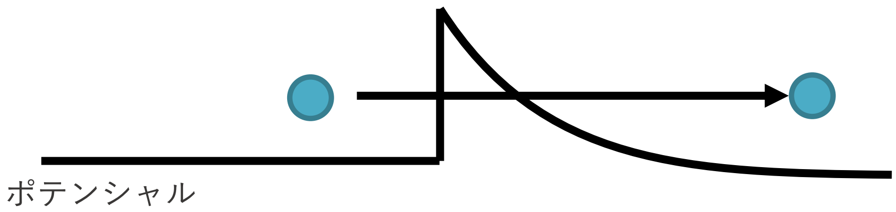
電界電子放出



導体内の方がポテンシャルが低く居心地がいい

電界電子放出



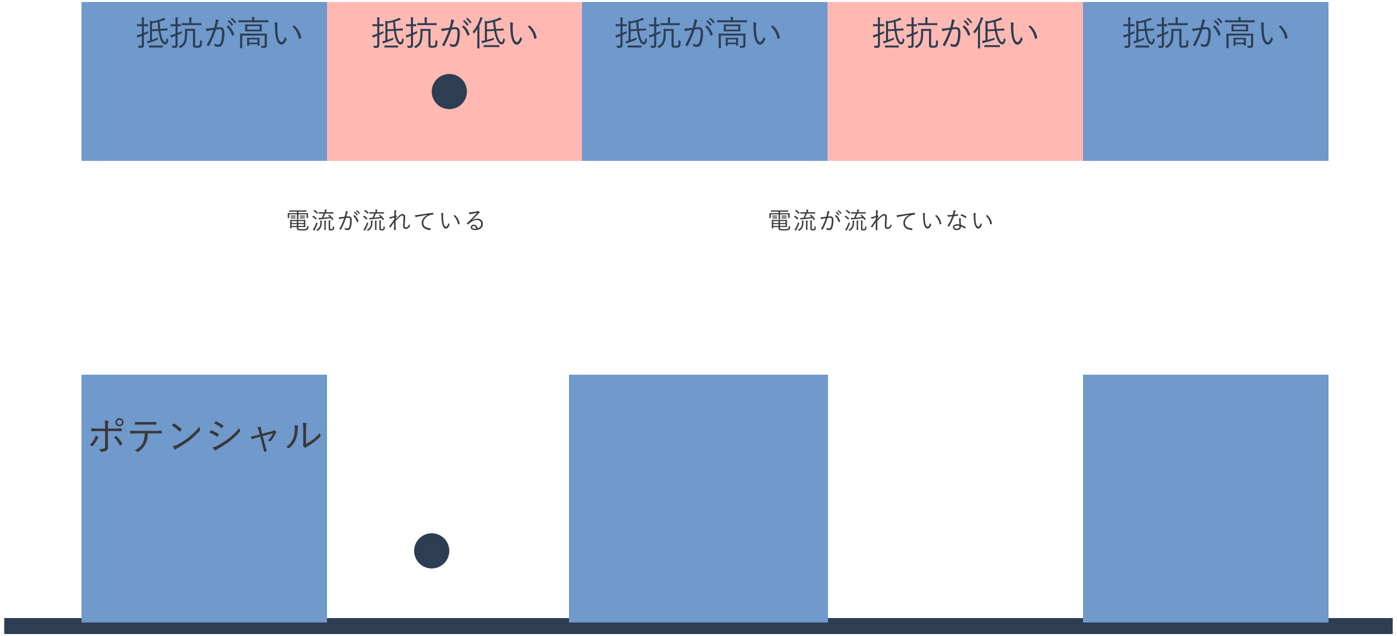


電極付近はポテンシャルが低いので，障壁さえ突破すれば良い

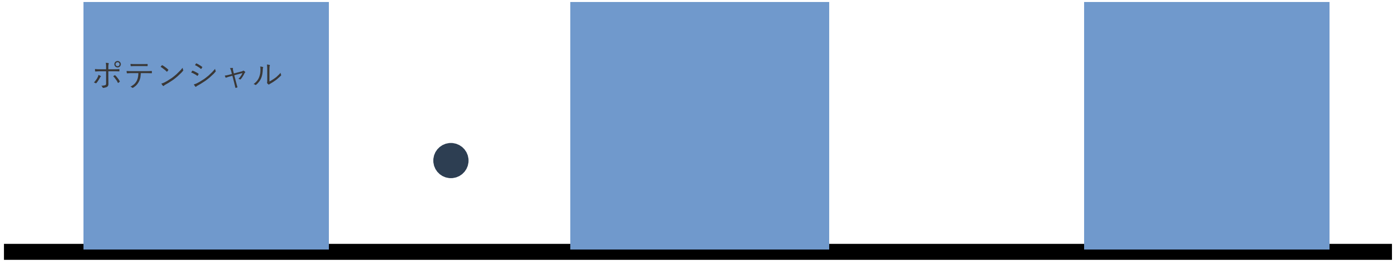
電場が生じると＋電極側もポテンシャルが低くなる．
障壁が薄くなりトンネル効果により電極側に電子が飛んでいく．

リーク電流

ICの断面



電流が流れている　　　　電流が流れていない



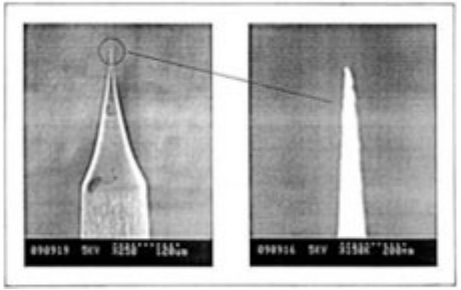
隣の回路にトンネル効果で電子が移動することがある.

電流が流れている　　　　電流がちょっと流れる

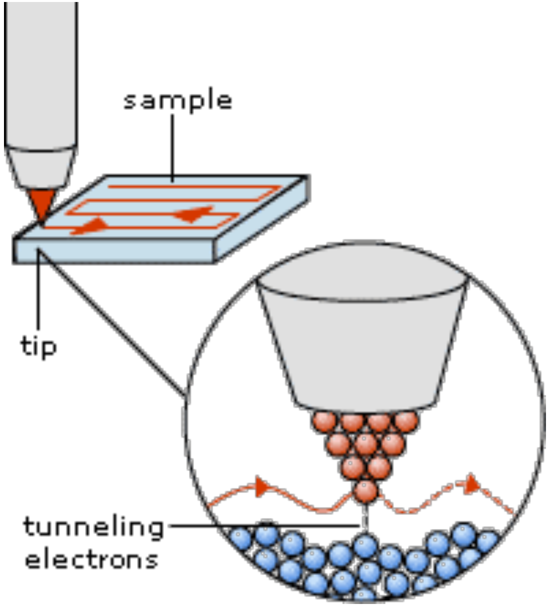
流れてはいけない場所に電流が漏れる(leak)

走査型トンネル顕微鏡

探針と試料との間に生じるトンネル電流により試料表面の凹凸を調べる顕微鏡

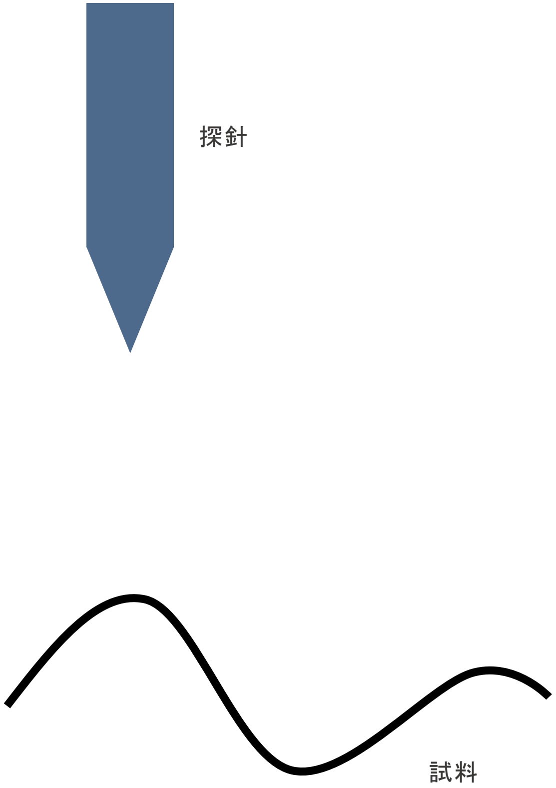


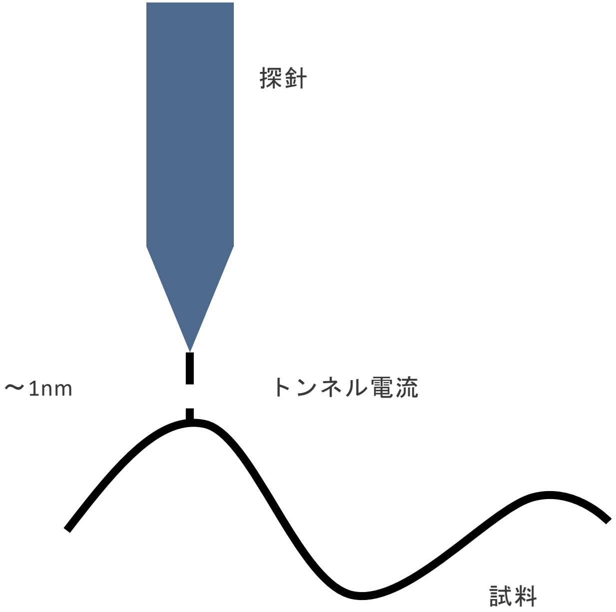
(SII)



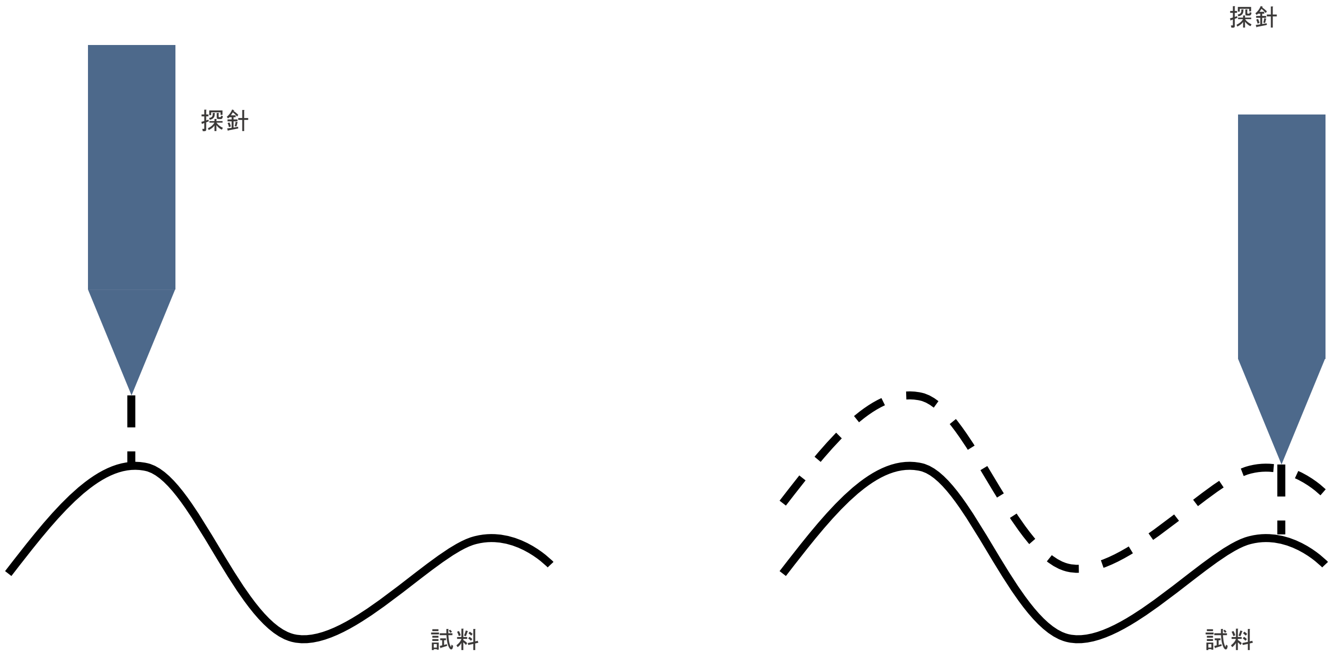
(norbelprize.org)

探針を近づけるとトンネル効果により，電子が試料と探針の間を移動する．





トンネル電流が流れる間隔を保ちながら探針を移動させてやれば，試料表面の凹凸がわかる．



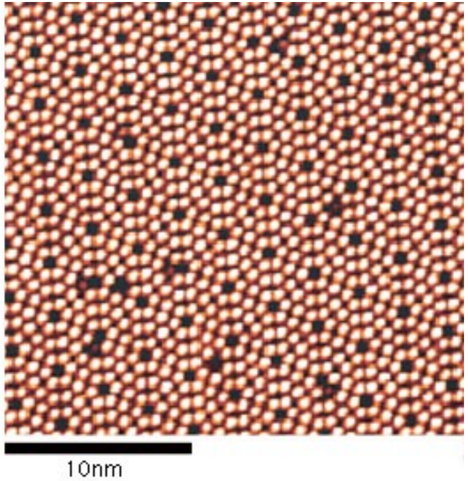
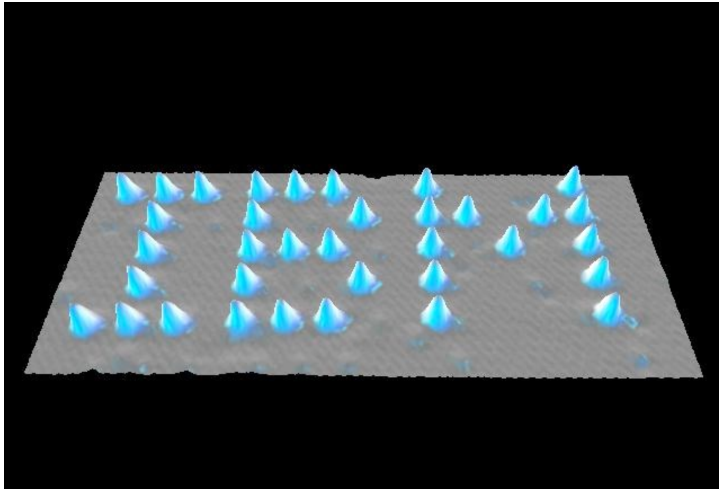


図3 STMによってとらえたシリコン表面
白い丸い粒1個がシリコン原子1個である。

(Riken News Feb 2004)



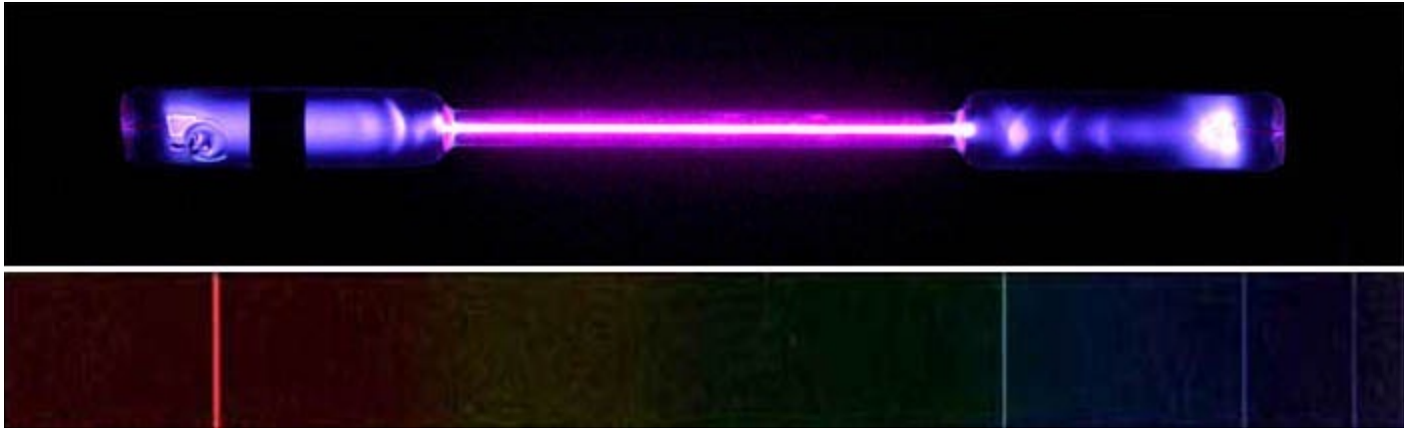
(IBM)

針で電子を操作すれば字も書ける.

原子の構造

■ 水素のスペクトル

水素放電管



放電管から出た光のスペクトル

水素が光るとき

- 水素にエネルギーを与える
  - 熱する
  - 電子をぶつける

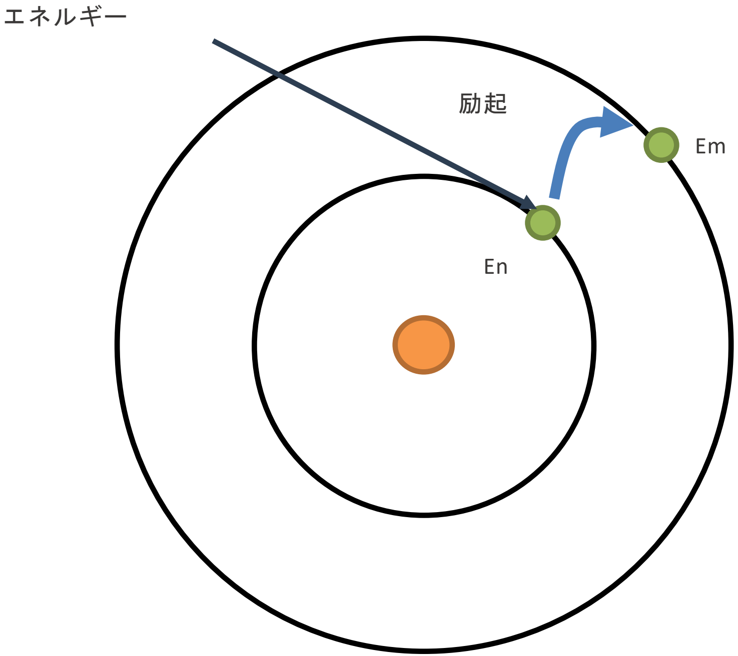
⬇

- 光を発する

⬇

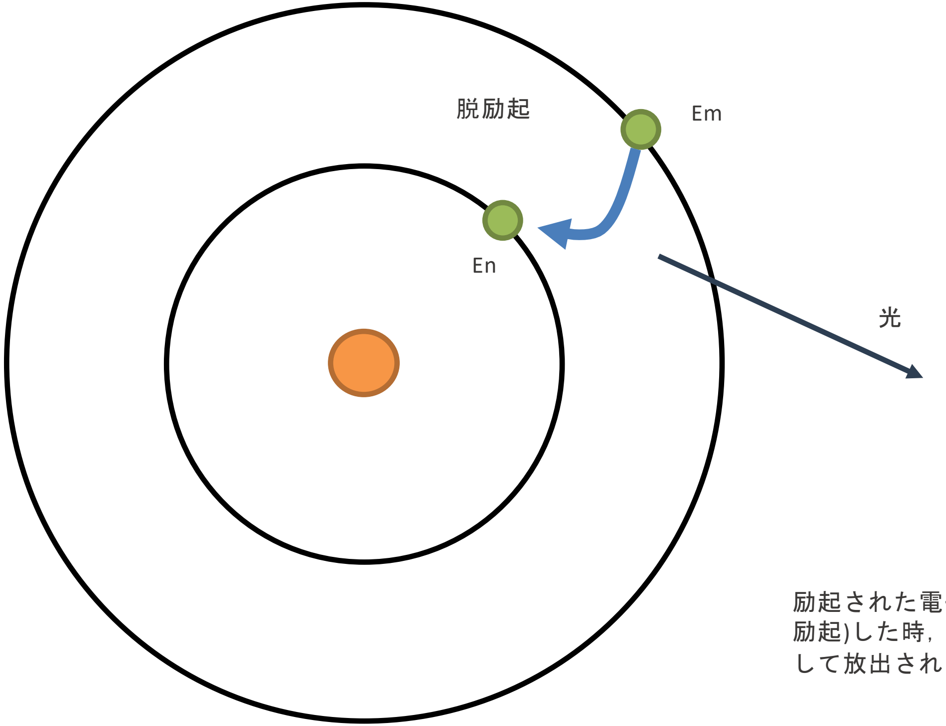
- その光は不連続なスペクトルを持つ
  - 線スペクトル

なぜ水素から光が出るのか



エネルギーを受けた電子はエネルギーの
高い状態になる(励起という).

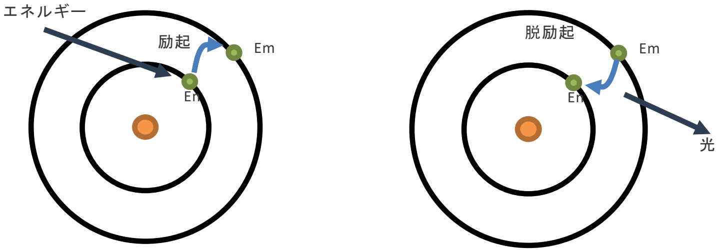
なぜ水素が光が出るのか



励起された電子が，元の状態に戻るとき(脱励起)した時，エネルギーが減った分が光として放出される．

問題

- なぜスペクトルはなぜ飛び飛びなのか？
- なぜ放出される光のエネルギーは離散的なのか(量子化されているのか)
- 電子の持つエネルギーは量子化されているのではないか？
- 電子の軌道半径は連続的ではないのではないか？



■ ボーア模型(1913年)

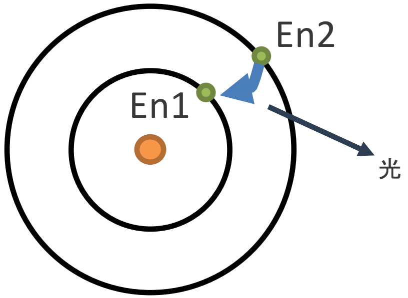
- 電子がエネルギーを貰って励起し，その電子がエネルギーの低い状態に脱励起するとき，差のエネルギーが光となる．

⬇

- そのスペクトルが不連続なら，電子の持つエネルギー状態(軌道)も不連続では

⬇

- ボーア模型

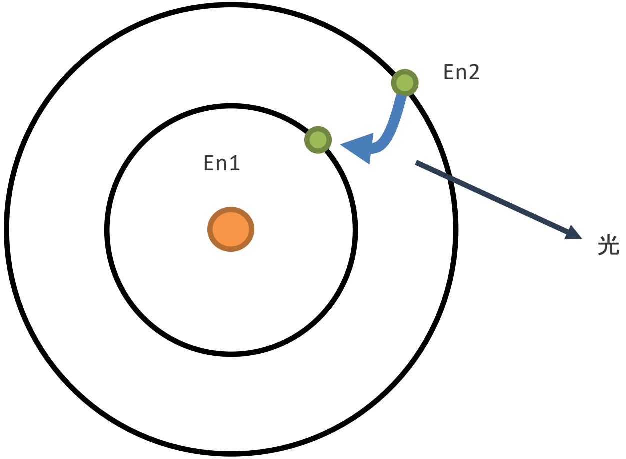


振動数条件

状態n2から状態n1へ遷移したとき，放出される光の振動数は

$$h\nu = E_{n_2} - E_{n_1}$$

に従う．

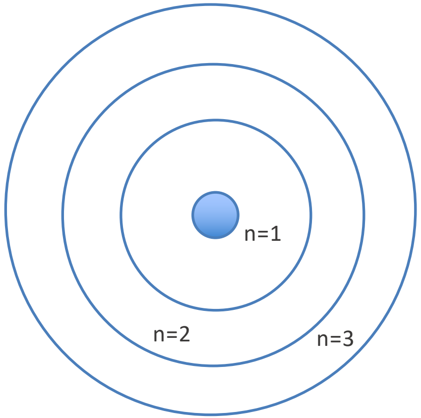


量子条件

- 電子が放出するエネルギーが不連続なら電子の運動も不連続
- 電子の運動を円運動と仮定すると

$$p \cdot 2\pi r = nh \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

nは電子のエネルギー状態(軌道)の番号を表す.



量子条件の求め方

円軌道上に物質波が定在波として存在していると考える.

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

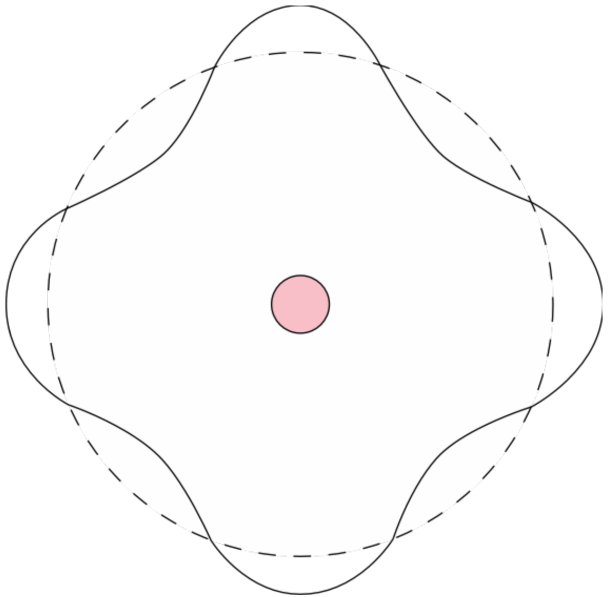
ド・ブロイの関係式

$$n\lambda = \frac{nh}{p}$$

定在波なので軌道の長さが波長のn倍になっている.

$$2\pi r = \frac{nh}{p}$$

$$p \cdot 2\pi r = nh$$

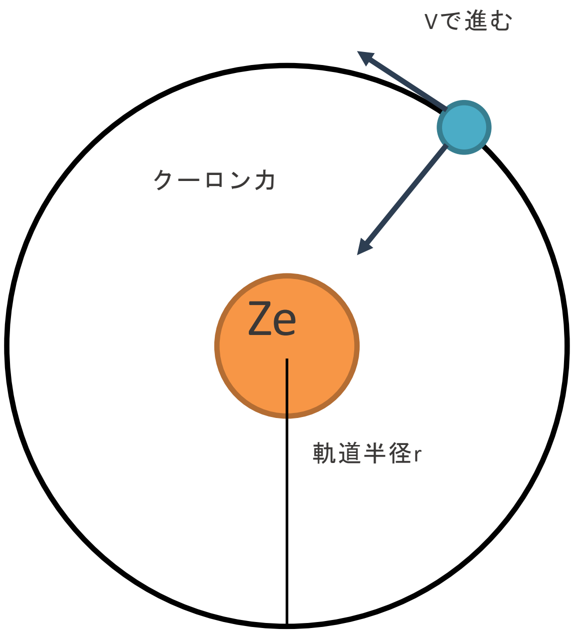


電子のエネルギー

- 電子は円運動をしている
- 円運動の向心力はクーロン力

$$\boxed{m\frac{v^2}{r}} = \boxed{\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2}}$$

向心力　　クーロン力



量子条件より

$$p \cdot 2\pi r = nh$$

$$mv \cdot 2\pi r = nh$$

$$v = \frac{nh}{2\pi rm}$$

先ほどの向心力とクーロン力の関係式に代入すると

$$r = \frac{4\pi\varepsilon_0}{Ze^2}\frac{\hbar^2 n^2}{m}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

電子のエネルギー

運動エネルギー

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{r}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2}$$

$$= \frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

向心力=クーロン力の式から

クーロン力によるポテンシャルエネルギー

$$U = -eV = -e\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze}{r}$$

$$= -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

電子が持つエネルギーは，運動エネルギーとポテンシャルエネルギーを足したものなので

$$E = (\frac{1}{8\pi\varepsilon_0} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0})\frac{Ze^2}{r}$$

これに量子条件から求めたrを代入すると

$$E_n = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{Z^2e^4m}{\hbar^2n^2}$$

電子が状態n2から状態n1に遷移したとすると

$$E_{n_2\to n_1} = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{Z^2e^4m}{\hbar^2}\left(\frac{1}{n_2^2}-\frac{1}{n_1^2}\right)$$

$$=\boxed{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{Z^2e^4m}{\hbar^2}}\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)$$

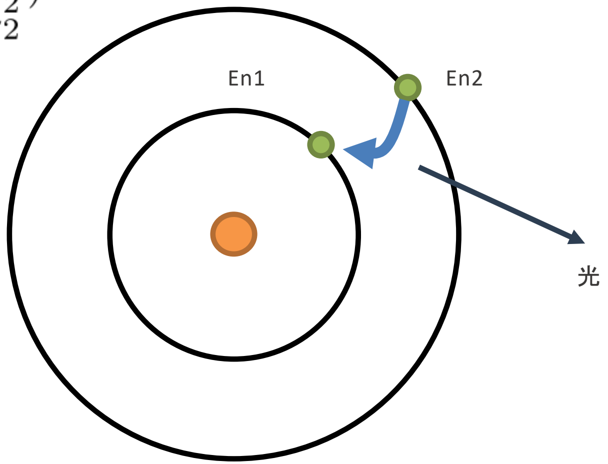
Aとおくと

$$h\nu = A\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)$$

$$h\frac{c}{\lambda} = \left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)$$

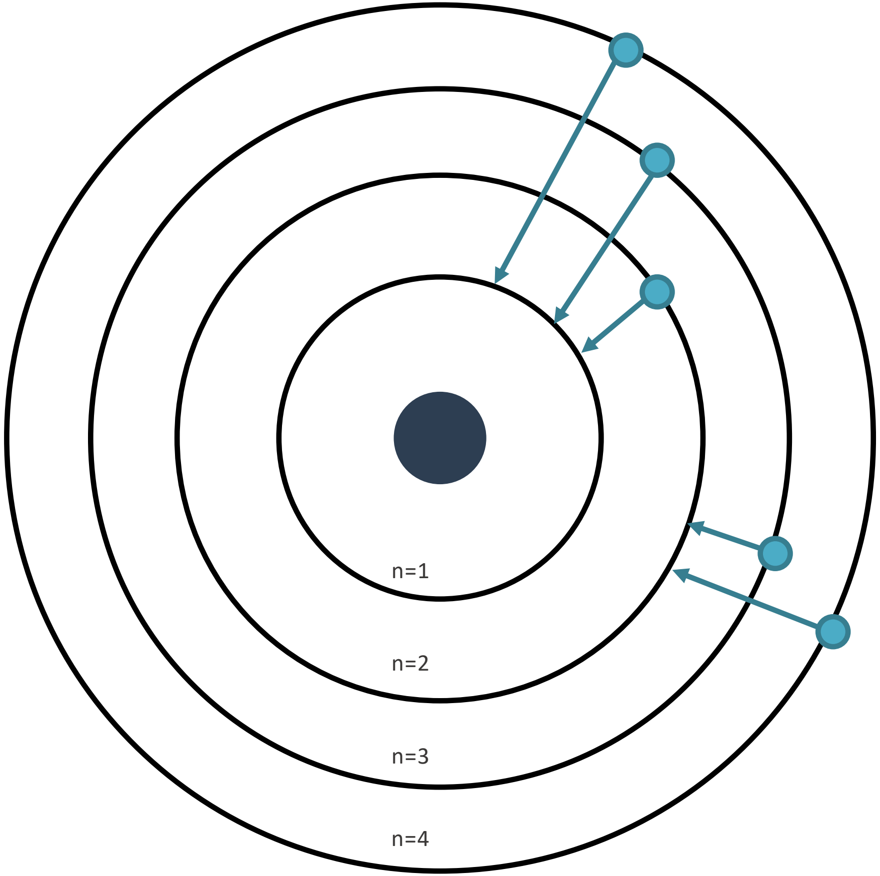
$$\frac{1}{\lambda} = \boxed{\frac{A}{hc}}\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)$$

リュードベリ定数と一致



仮説から求めた数値が観測値と合うことで，仮説がおそらく正しいということが示せる．

エネルギーとスペクトル列



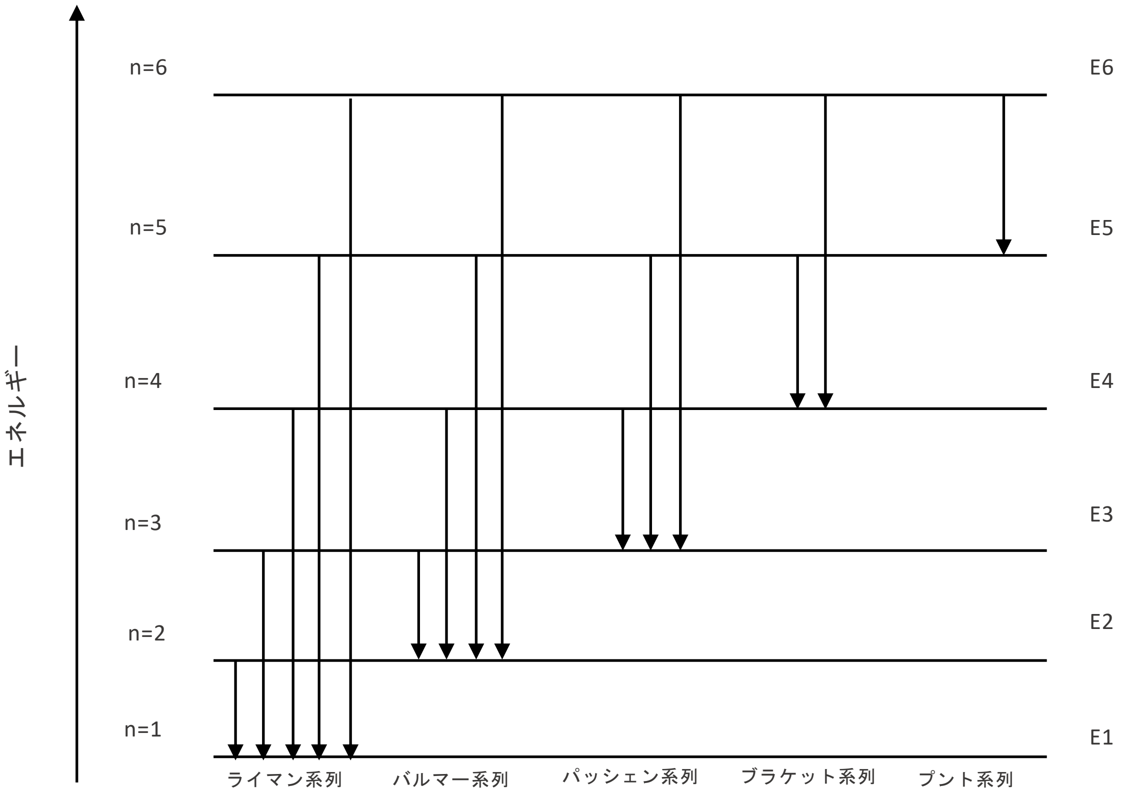
n=1の状態に脱励起したとき，ライマン系列が生じる.

N=2の状態に脱励起したとき，バルマー系列が生じる.

励起と脱励起

- 電子のエネルギーはnに依存
- エネルギーは飛び飛びの値を取る
- n=1の時，最もエネルギーが低い
  - 基底状態という
- エネルギーを得てエネルギの高い状態になることを励起という．
- 逆にエネルギーを放出し，エネルギーの低い状態になることを脱励起という．

エネルギー準位



エネルギーが順番に離散的に並んでいる（エネルギー準位）

放出される光

放出される光の波長は，電子がどのエネルギー準位からどのエネルギー準位へ移動したかで決まる．

ボーアモデルの限界

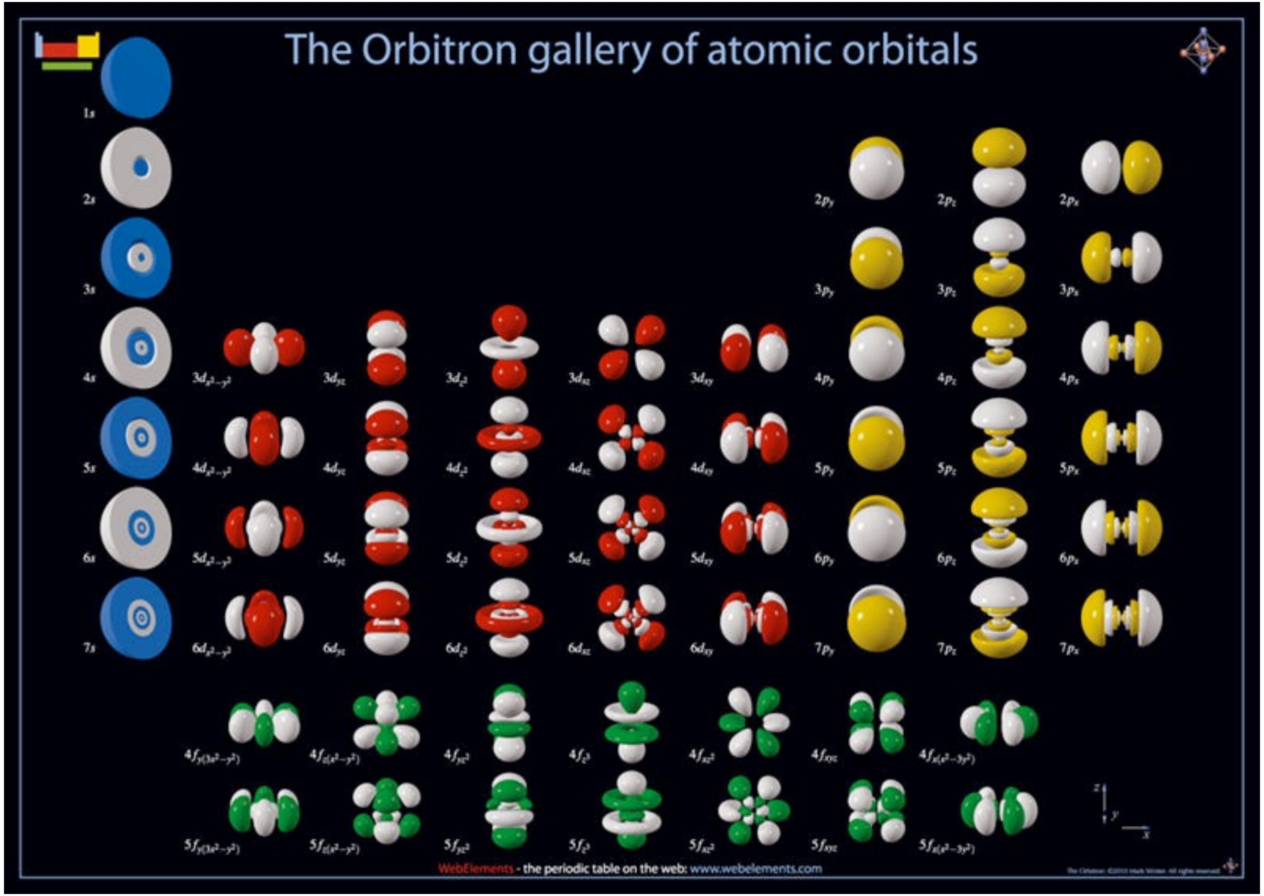
- ボーアモデルは電子の軌道が円軌道であることを前提としている
- 水素では実験的事実を説明できたが，それ以外の元素では説明できなかった．
- 円軌道に限らなければ他の元素に対しても説明できる
  - ゾンマーフェルトの量子条件

■ 原子モデル

- 実際の電子の軌道はラザフォードの原子モデルのような太陽系の惑星のように電子が原子核の周りを回っているわけではない.
- 原子核の周りに雲のようにぼやっと存在している(電子雲)

ラザフォードの原子モデル

電子の起動



The Orbitron gallery of atomic orbitals
WebElements - the periodic table on the web: www.webelements.com