<量子力学に向けて>

§光の粒子性と波動性

① Maxwell方程式と波動方程式

真空中のMaxwell方程式

$$(1)\ \begin{cases} ①\ \mathrm{div}\,\mathbb{E}(t,\mathbb{r})=0 & ②\ \mathrm{rot}\,\mathbb{E}(t,\mathbb{r})=-\dfrac{\partial}{\partial t}\mathbb{B}(t,\mathbb{r}) \\ ③\ \mathrm{div}\,\mathbb{B}(t,\mathbb{r})=0 & ④\ \mathrm{rot}\,\mathbb{B}(t,\mathbb{r})=\mu_0\varepsilon_0\dfrac{\partial}{\partial t}\mathbb{E}(t,\mathbb{r}) \end{cases}$$

②のrotをとる

$$(2)\ \underbrace{\mathrm{rot}\,\mathrm{rot}\,\mathbb{E}(t,\mathbb{r})}_{=\mathrm{grad}\,\underbrace{\mathrm{div}\,\mathbb{E}(t,\mathbb{r})}_{=0\ (①)}-\triangle\mathbb{E}(t,\mathbb{r})}=-\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{\mathrm{rot}\,\mathbb{B}(t,\mathbb{r})}_{=\mu_0\varepsilon_0\frac{\partial}{\partial t}\mathbb{E}(t,\mathbb{r})\ (④)}$$

よって

$$(3)\ \frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbb{E}(t,\mathbb{r})=\frac{1}{\mu_0\varepsilon_0}\triangle\mathbb{E}(t,\mathbb{r})$$

④のrotをとれば

$$(4)\ \frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbb{B}(t,\mathbb{r})=\frac{1}{\mu_0\varepsilon_0}\triangle\mathbb{B}(t,\mathbb{r})$$

各成分についての波動方程式

波の速度は $(5)\ c=\dfrac{1}{\sqrt{\mu_0\varepsilon_0}}$ → 光速度

(1) ① $\mathrm{div}\,\mathbf{E}(t,\mathbf{r})=0$　② $\mathrm{rot}\,\mathbf{E}(t,\mathbf{r})=-\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{B}(t,\mathbf{r})$　Maxwell 方程式

③ $\mathrm{div}\,\mathbf{B}(t,\mathbf{r})=0$　④ $\mathrm{rot}\,\mathbf{B}(t,\mathbf{r})=\frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{E}(t,\mathbf{r})$

(2) $\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{E}(t,\mathbf{r})=c^2\Delta\mathbf{E}(t,\mathbf{r})$, $\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{B}(t,\mathbf{r})=c^2\Delta\mathbf{B}(t,\mathbf{r})$　波動方程式

▷平面波の解　$\mathbf{k}$ 任意の波数ベクトル　$\mathbf{E}_0$, $\mathbf{B}_0$ 定ベクトル

(3) $\mathbf{E}(t,\mathbf{r})=\mathbf{E}_0\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)$, $\mathbf{B}(t,\mathbf{r})=\mathbf{B}_0\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)$　と仮定

波動方程式 ⟶ (4) $\omega=c|\mathbf{k}|$

(3)より

(5) $\mathrm{div}\,\mathbf{E}(t,\mathbf{r})=-\mathbf{k}\cdot\mathbf{E}_0\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)$　①より (6) $\mathbf{k}\cdot\mathbf{E}_0=0$

(7) $\mathrm{div}\,\mathbf{B}(t,\mathbf{r})=-\mathbf{k}\cdot\mathbf{B}_0\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)$　③より (8) $\mathbf{k}\cdot\mathbf{B}_0=0$

(9) $\mathrm{rot}\,\mathbf{E}(t,\mathbf{r})=-\mathbf{k}\times\mathbf{E}_0\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)$

(10) $\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{B}(t,\mathbf{r})=\omega\mathbf{B}_0\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)$

②より (11) $\mathbf{B}_0=\frac{1}{\omega}\mathbf{k}\times\mathbf{E}_0$

((3)と④から $\mathbf{E}_0=-\frac{c^2}{\omega}\mathbf{k}\times\mathbf{B}_0$ が得られるが これは独立な関係ではない

(11)に代入　$\mathbf{B}_0=\frac{1}{\omega}\mathbf{k}\times\left(-\frac{c^2}{\omega}\mathbf{k}\times\mathbf{B}_0\right)=-\frac{c^2}{\omega^2}\underbrace{\mathbf{k}\times(\mathbf{k}\times\mathbf{B}_0)}_{=\mathbf{k}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{B}_0)-\mathbf{B}_0|\mathbf{k}|^2}=\mathbf{B}_0$　$\mathbf{k}\cdot\mathbf{B}_0=0$)

電磁波 (1) $\mathbf{E}(t,\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)$, $\mathbf{B}(t,\mathbf{r}) = \mathbf{B}_0 \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)$

$\mathbf{k}$は任意 (2) $\omega = c|\mathbf{k}|$ → 光速で進む

(3) $\mathbf{k}\cdot\mathbf{E}_0 = 0$, $\mathbf{k}\cdot\mathbf{B}_0 = 0$ → 変位と進行方向が直交 (横波)

(4) $\mathbf{B}_0 = \frac{1}{\omega}\mathbf{k}\times\mathbf{E}_0$ → 電場と磁場は直交

光は電磁波の一種　つまり「波」

(ii) 光は「粒子」?

黒体輻射 (電磁場の熱力学) の理論的研究

- 1900 Planck 物質は エネルギー $E = h\nu = \hbar\omega$ を単位にして 光を放出・吸収する ← 中途はんぱなアイディア
- 1905 Einstein 単色光は エネルギー $E = h\nu = \hbar\omega$ をもつ「粒」の集まり 「粒」= 光子

Planck定数 $h = 6.62607015\times10^{-34}$ Js, $\hbar = h/2\pi \simeq 1.0546\times10^{-34}$ Js

可視光の場合 $\lambda \sim 500$ nm　$\nu = \frac{c}{\lambda} \sim \frac{3\times10^8\,\mathrm{m/s}}{500\times10^{-9}\,\mathrm{m}} \sim 6\times10^{14}$ /s

$h\nu \sim 4\times10^{-19}$ J ← 小さい!　通常の光は膨大な数の光子の集まり

「光が光子の集まりである実験的な証拠」とされるものは、ほとんど「光を波」と考えて「物質と光のエネルギーのやりとりが $h\nu$ を単位にする」と仮定しても説明できる。

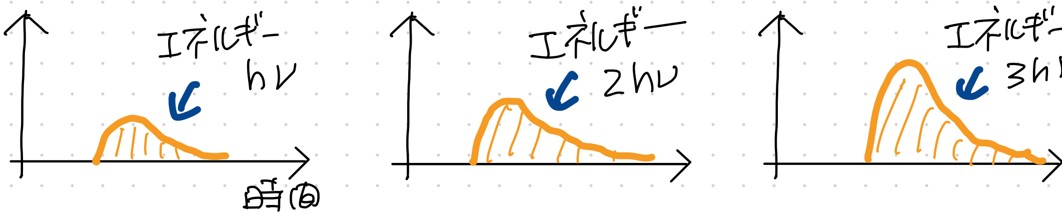
↘ 光電効果とか…

→ それでも様々な実験結果から「光が『粒子』でもあること」は確実

21世紀の実験からのかなり強力な証拠

(Fukuda et al. 2008)

パルスがあたった際の吸収体の温度変化



など

光のパルスのエネルギーは $h\nu$ の整数倍

パルス中の光子の個数のゆらぎも理論と一致

↳ Poisson分布

光子の運動量

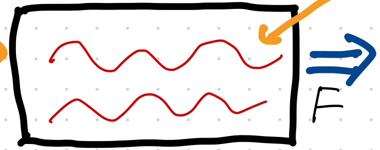
熱力学(田崎)問題7.4(p147)

電磁場の圧力(電磁気学からの結果)

定在波

$(k,0,0)$ と $(-k,0,0)$ の平面波の重ね合わせ

金属の箱

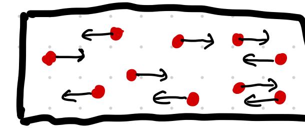


F

かべに (1) $F=Au$ の力が働く

A 面積　u エネルギー密度

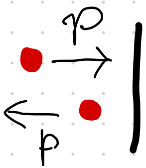
圧力を光子の概念で再現



個々の光子は エネルギー $\hbar\omega=h\nu$, 運動量 p をもつ

体積 V の中に N 個の光子(右向き $\frac{N}{2}$, 左向き $\frac{N}{2}$)が一様分布　(2) $\rho=\frac{N}{V}$

個数密度



光子ひとつがかべで反射すると運動量 $2p$ をかべに与える。

力積　t の間の衝突回数

かべが平均で受ける力　(3) $F=\dfrac{2p\times\frac{\rho}{2}ctA}{t}=p\rho cA$

一方 (4) $u=\dfrac{N\hbar\omega}{V}=\rho\hbar\omega$ なので (1)より (5) $F=\rho\hbar\omega A$

(3)と(5)を比べて (6) $p=\dfrac{\hbar\omega}{c}=\hbar k$

一般に、波数 $\mathbb{k}$ の電磁場 → 運動量 $\mathbb{p}=\hbar\mathbb{k}$ の光子の集まり

光子のエネルギー E と運動量 $\mathbb{p}$

Maxwell方程式からでた

(1) $\begin{cases} E=\hbar\omega \\ \mathbb{p}=\hbar\mathbb{k} \end{cases}$ (2) $\omega=c|\mathbb{k}|$

より (3) $E=c|\mathbb{p}|$

$\parallel$

質量ゼロの粒子の E と $\mathbb{p}$ の関係（相対論）

$\left(E=\dfrac{|\mathbb{p}|^2}{2m} \text{ とはちがう.} \right)$

(1)はおもしろい!

プランク定数

粒子についての力学的な量 = エネルギー E = $\boxed{\hbar}$ 角振動数 ω = 波についての量

運動量 $\mathbb{p}$ = $\boxed{\hbar}$ 波数 $\mathbb{k}$

§ 「物質波」と水素原子の構造

当時も「変」だったし、今ではもっと「変」！

ド・ブロイ(de Broglie)の「変な考え」

$\boxed{E=\hbar\omega,\ p=\hbar k\ \text{の関係は電子でも成り立つのでは？}}$

（もちろん分散関係は $\omega=c|k|$ とはちがう
一般に波の ω と k を結ぶ関係のこと）

エネルギー E, 運動量 p の電子は $\omega=\frac{E}{\hbar}$, $k=\frac{p}{\hbar}$ の「波」に似た性質をもつ？

ド・ブロイは「物質波」とよんだ

- 最大のヒントは水素原子

陽子 + 電子

重い　電荷 $+e$

軽い　電荷 $-e$

$-e$

$+e$

簡単なモデル

m $-e$

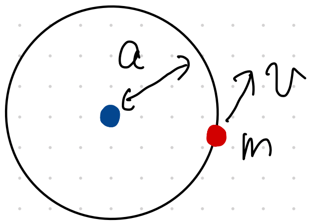
$+e$

電子が運動する

陽子は静止

このモデルを Newton 力学で解析しよう

円運動のエネルギー



(1) $m\frac{v^2}{a} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a^2}$

加速度　クーロン力

よって (2) $av^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m}$ → 定数

をみたせば解

無限個の解がある
他にも多円とOK..

運動エネルギー (3) $\frac{m}{2}v^2 = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a}$

位置エネルギー (4) $-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a}$

→ 全力学的エネルギー

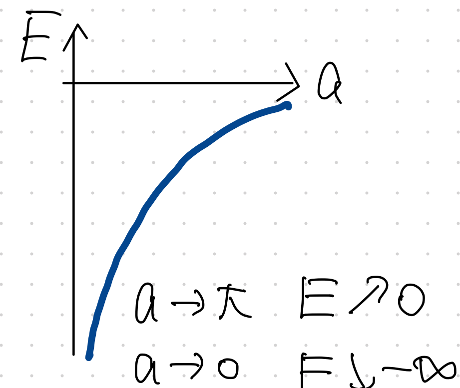
(5) $E = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a}$

問題点

- 円運動(つまり加速度運動)する電子は電磁波を放出してエネルギーを失っていく
- aを小さくすればエネルギーはいくらでも低くなる

電子は陽子に落ちこんで終わる　寿命10^{-10}秒!!

これは困る…



現実の水素原子

- もちろん 原子は安定（電子が陽子におちこんだりしない）
- 電子のエネルギーは (1) $\boxed{E_n = -E_0 \dfrac{1}{n^2} \quad (n=1,2,\dots)}$

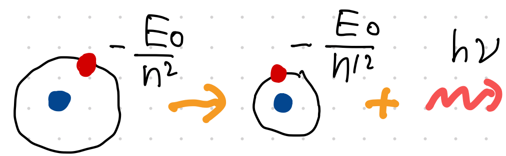
  という「とびとび」の値をとる。 (2) $E_0 \simeq 13.6\,\mathrm{eV} \simeq 2.18\times 10^{-18}\,\mathrm{J}$

  $(1\,\mathrm{eV} \simeq 1.602\times 10^{-19}\,\mathrm{J})$

（原子から放出される光の振動数 ν が

(3) $h\nu = E_0\left(\dfrac{1}{n'^2} - \dfrac{1}{n^2}\right)$ の形になる

$n, n' = 1, 2, \cdots \quad (n > n')$ ）



Bohr 1913　ある条件をみたす電子の軌道は（なぜか知らないが）

すぐには電磁波を放出せず安定

量子化条件 （「とびとび」の状態を選び出す）

量子化条件をみたす状態 $=$ 定常状態

ド・ブロイの量子化条件

「物質波」とよんだ

軌道の上で「電子の波」が定在波をつくるときに「安定」になるのでは？

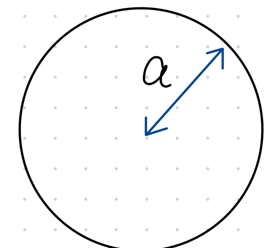
量子力学が完成したあとからみれば まったく不正確なアイディア!!

変な考え

- 運動量 p の電子 $=$ 波数 (1) $k=\frac{p}{\hbar}$ の「波」 $=$ 波長 (2) $\lambda=\frac{2\pi}{k}=\frac{2\pi\hbar}{p}$ の「波」
- 定在波の条件 (3) $n\lambda = 2\pi a \quad (n=1,2,\cdots)$

つまり (4) $n\frac{2\pi\hbar}{p}=2\pi a$ → (5) $\boxed{ap} = n\hbar$

角運動量だ..



- 「安定」な円軌道の条件 p8-(2) → (6) $v=\frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 m}}\frac{1}{\sqrt{a}}$

よって (7) $ap = amv = \sqrt{\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0}}\sqrt{a}$

(5)より (8) $\sqrt{\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0}}\sqrt{a}=n\hbar$ (9) $a_n = \boxed{\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}}n^2 \quad (n=1,2,\cdots)$

: a_B Bohr半径

条件をみたす半径 a は とびとび!!

・「安定」な円軌道のエネルギー

P8-(5)より (1) $E_n = -\dfrac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_n} = -\overbrace{\boxed{\dfrac{me^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2}}}^{E_0}\dfrac{1}{n^2} = -E_0\dfrac{1}{n^2}$

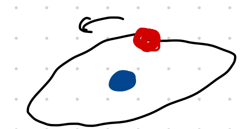
$\varepsilon_0, m, e, \hbar$ の値を代入すると (2) $E_0 \simeq 13.6\ \mathrm{eV}$ になる

→ すべて水素原子とは関係のない実験からでる!!

→ 実験結果と一致!!!

基本的な考え方は明らかに無茶

・古典力学の結果をそのまま使い，解を無理に制限した



・イミ不明． おまけにこれが正しければ水素原子は円盤??

→ そんなことない..

しかし，こうして求めたE_0と実測値の一致は偶然とは思えない.

なにかがある!?

§ Schrödinger方程式

電子についても (1) $E=\hbar\omega$, $\mathbb{P}=\hbar\mathbb{k}$ を認める

$\omega, \mathbb{k}$ をもつ「波」はどんな方程式に従うか？

波動方程式 (2) $\frac{\partial^2}{\partial t^2}f(t,\mathbb{r}) = (v_s)^2 \Delta f(t,\mathbb{r})$ ならば (3) $\omega = v_s|\mathbb{k}|$

(1)と(3)から (4) $E = v_s|\mathbb{P}|$ → しかし(力をうけない)電子なら (5) $E=\frac{|\mathbb{P}|^2}{2m}$

分散関係から方程式をさぐる

一般の波における ω と $\mathbb{k}$ の関係

(5)と(1)から (6) $\hbar\omega = \frac{\hbar^2|\mathbb{k}|^2}{2m}$

1次 2次

波だから解は (7) $\psi(t,\mathbb{r}) = \cos(kx-\omega t)$?

tについて1階微分 → ω　　xについて2階微分 → k^2

(8) $\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,\mathbb{r}) = \alpha\Delta\psi(t,\mathbb{r})$ はどうだろう？ (αは定数)

(9) (左辺) $= \omega\sin(kx-\omega t)$

(10) (右辺) $= -\alpha k^2\cos(kx-\omega t)$

ちがう

解にならない…

方程式の候補 (1) $\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,x) = \alpha \, \triangle \Psi(t,x)$ (αは定数) のまま

解を (2) $\Psi(t,x) = \cos(kx-\omega t) + C\sin(kx-\omega t)$ とおいてみよう

(3) $(\text{左辺}) = \omega\sin(kx-\omega t) - \omega C\cos(kx-\omega t)$

(4) $(\text{右辺}) = -\alpha k^2\cos(kx-\omega t) - \alpha k^2 C\sin(kx-\omega t)$

(左)=(右) とすれば (5) $\omega = -\alpha k^2 C$

(6) $\omega C = \alpha k^2$

どちらでもOK

(5)÷(6) → (7) $\frac{1}{C} = -C$ → $C^2 = -1$ → $C = \pm i$

(8) $\boxed{C = i}$ とする.

よって (9) $\omega = -i\alpha k^2$ (10) $\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$ になってほしいので (11) $-i\alpha = \frac{\hbar}{2m}$

(12) $\boxed{\alpha = \frac{\hbar}{2m}i}$

よって方程式は (1) $\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m} i \Delta\psi(t,\mathbf{r})$

両辺に $i\hbar$ をかけて

虚数単位!!

(2) $\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(t,\mathbf{r})}$

自由粒子のSchrödinger方程式

$\psi(t,\mathbf{r})$ 波動関数 t と $\mathbf{r}$ の複素数値関数 → 「状態関数」とよびたい…

P13-(2)の解 (3) $\psi(t,\mathbf{r}) = \cos(kx-\omega t) + i\sin(kx-\omega t)$

$= e^{i(kx-\omega t)} = e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)}$

複素数値をとる平面波

(ただし (4) $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $E = \frac{p^2}{2m}$)

一般の平面波解

(5) $\psi(t,\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} = e^{i\left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\cdot\mathbf{r} - \frac{E}{\hbar}t\right)}$

$E=\hbar\omega$, $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$

(ただし (6) $\hbar\omega = \frac{\hbar^2|\mathbf{k}|^2}{2m}$, $E = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m}$)

Schrödinger方程式の両辺の今

15

Sch.方程式　(1) $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\Psi(t,\mathbf{r}) = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(t,\mathbf{r})$

平面波解　(2) $\Psi(t,\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} = e^{i\left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\cdot\mathbf{r}-\frac{E}{\hbar}t\right)}$

(2)を(1)に代入

(3) $(\text{左辺}) = \boxed{i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}} e^{i\left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\cdot\mathbf{r}-\frac{E}{\hbar}t\right)} = \boxed{E}\, e^{i\left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\cdot\mathbf{r}-\frac{E}{\hbar}t\right)}$

(4) $(\text{右辺}) = \boxed{-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta} e^{i\left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\cdot\mathbf{r}-\frac{E}{\hbar}t\right)} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\left|i\dfrac{\mathbf{p}}{\hbar}\right|^2 e^{i\left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\cdot\mathbf{r}-\frac{E}{\hbar}t\right)}$

$= \boxed{\dfrac{|\mathbf{p}|^2}{2m}} e^{i\left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\cdot\mathbf{r}-\frac{E}{\hbar}t\right)}$

この場合の対応関係

(5) $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} \leftrightarrow E$　　(6) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta \leftrightarrow \dfrac{|\mathbf{p}|^2}{2m}$

Sch. eq. $\longleftrightarrow$ (7) $E = \dfrac{|\mathbf{p}|^2}{2m}$

古典力学における自由粒子(外力をうけない粒子)のエネルギー

Ⅲ ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ からの力をうける粒子の Sch. eq.

古典力学でのエネルギー (1) $E = \dfrac{|\boldsymbol{p}|^2}{2m} + V(\boldsymbol{r})$

$E \leftrightarrow i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$, $\dfrac{|\boldsymbol{p}|^2}{2m} \leftrightarrow -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta$

先ほどの対応関係からすると以下の方程式が予想される

(2) $$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,\boldsymbol{r}) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r})\right\}\psi(t,\boldsymbol{r})}$$

ポテンシャル中の粒子の Schrödinger 方程式

(2) が適切かどうかは計算結果と実験をくらべて判定 → うまくいく.

(例) (3) $V(\boldsymbol{r}) = -\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}|}$ とすれば水素原子の問題

(4) $E_n = -E_0\dfrac{1}{n^2}$ $(n=1,2,\ldots)$ がばっちり出る!! → 量子力学2

§ 波動関数の意味

Schrödinger方程式　(1)　$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,x)=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(x)\right\}\psi(t,x)$

波動関数　$\psi(t,x)$ ＝ 偏微分方程式(1)の解 → すべての t, x で (1)をみたす

$\psi(t,x)$ は 1つの点状の粒子の状態の時間変化を記述する。

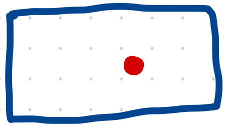
$\psi(t,x)$ の物理的意味（の一部）

- 粒子の位置を測定すると、粒子はかならずどこか1点でみつかる。
- ただし どこでみつかるかは確率的にしか定まらない
- 時刻 t に粒子の位置を測定したとき、粒子が位置 x でみつかる確率密度は　$|\psi(t,x)|^2$

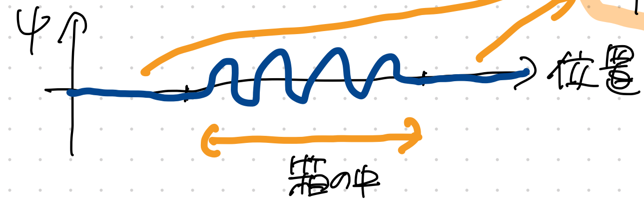
（ただし　(2)　$\int d^3x\,|\psi(t,x)|^2=1$）

Einsteinが悩んだこと　(量子力学における非局所性)

- 箱の中に粒子をひとついれる (中は見えない)

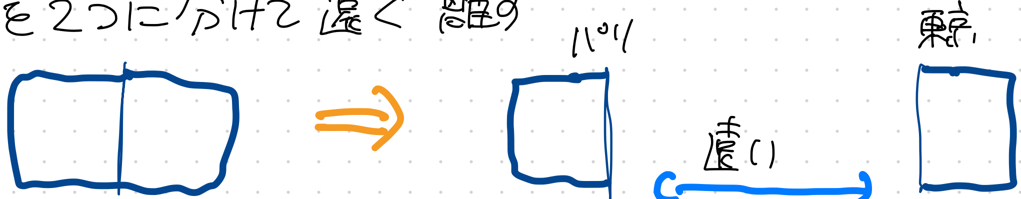


波動関数



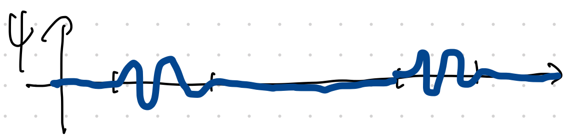
箱の外では
$\psi(t,x)=0$

- 粒子の位置を測定しないようにして、箱のまん中にうすい壁をいれる.
- そして箱を2つに分けて遠く離す



(de Broglie 64)

波動関数



パリで箱の中の粒子の位置を測定 → みつかった! → 東京の箱の中に粒子はいない!! $\psi=0$ → 波動関数が一瞬で変化した! これはおかしい!!

実は困ることは何もない 量子力学3 で.