量子物理学特論

第1回目

進藤哲央

はじめに

- ⭐ 講義資料を下記で配布します。
  http://www.ns.kogakuin.ac.jp/~ft13245/lecture/2018/Quantum/

- ⭐ 成績は授業中に課すレポートに基づいて評価します。

量子物理学特論

- ⭐ 今年度は「量子力学」の基礎をやります
- ⭐ 量子力学とは？
  - ⭐ ミクロな世界を記述する物理法則
  - ⭐ 古典物理（力学，電磁気学）とは色々な点が異なっている

力学・電磁気学の復習

- 力学
  - 物体の運動を扱う。運動方程式

$$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \vec{F}$$

- 電磁気学
  - 電磁気現象の根本的原因である電磁波の振る舞いを支配する法則。マクスウェル方程式。

$$\partial^\nu \partial_\nu A^\mu - \partial^\mu \partial_\nu A^\nu = \mu_0 j^\mu$$

- いずれの場合も，初期条件等が正しく与えられていれば，その後の物体の運動／電磁場の伝播の様子が厳密に予言できる。

量子力学の難しさ

- ⭐ 量子力学は難しい？
- ⭐ 日常生活の経験に基づく勘が効かない
- ⭐ 数学的記述と物理との対応が直接的ではない

量子論の誕生

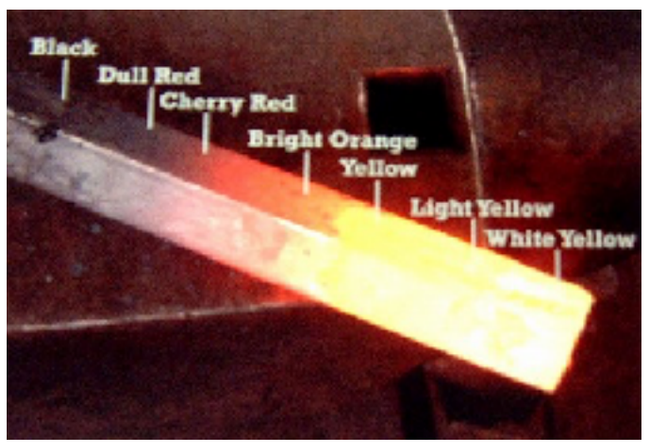
第1の問題：黒体輻射

物体を構成する原子や分子は温度に応じて熱的に振動

↓

物体は温度で決まる特有の電磁波を放射

例: 鉄を熱する



阿蘇ものづくり学校のサイトより

低温 → 高温

赤　　橙色　　白っぽくなる

壁が温度Tの黒体でできている箱（空洞）を考える

空洞内の光のスペクトルは，Tのみに依存し，壁の物質，空洞の形，大きさと全く無関係に決まる（キルヒホッフの法則）。

ボルツマンの分布則

温度Tの平衡状態において，エネルギーEの状態にある確率は，

$$P \propto e^{-E/k_B T}$$

$$k_B = 1.38064852 \times 10^{-23}\ \mathrm{m^2 kg\ s^{-2} K^{-1}}$$

ボルツマン定数

$E = ap^2$ として，Eの期待値を計算する

$$I = \int ap^2 \exp\left(-\frac{1}{k_B T} ap^2\right) dp = -\frac{k_B T}{2} \int p \frac{d}{dp} \exp\left(-\frac{1}{k_B T} ap^2\right) dp = \frac{k_B T}{2} \int \exp\left(-\frac{1}{k_B T} ap^2\right) dp$$

より，

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

この結果は次のように解釈できる。

エネルギー等分配則

熱平衡状態において，1自由度ごとにその平均のエネルギーは

$$\langle e \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

で与えられる

例：単原子分子理想気体の平均運動エネルギー

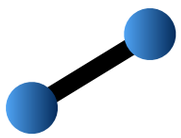
$$\langle E \rangle = \frac{m}{2}\overline{v^2} = \frac{3}{2} k_B T$$ (3次元運動の自由度は3)

気体の物質量がn[mol]のとき，内部エネルギーは

$$U = nN_A \times \frac{3}{2} k_B T = \frac{3}{2} nRT \longrightarrow$$ 定積モル比熱：$C = \frac{3}{2} R$

もうすこし複雑な例

2原子分子理想気体

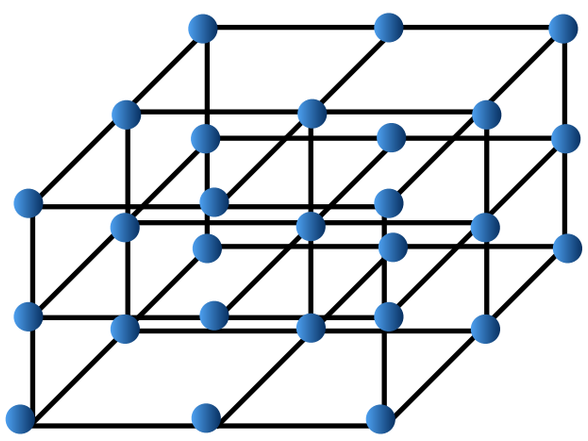


3方向の重心運動＋2方向の回転　$\langle E \rangle = \frac{5}{2} k_B T$

全系の内部エネルギーは $U = \frac{5}{2} nRT$

→ 定積モル比熱は $C = \frac{5}{2} R$

結晶体



振動の自由度は？

f=3N-6

全体の並進と回転

$$U = (3N - 6)kT \simeq 3NkT = 3nRT$$

↑

結晶の場合は，運動エネルギー＋位置エネルギーなのでkTずつ分配

→ モル比熱は$C = 3R$　(デュロン・プティーの法則)

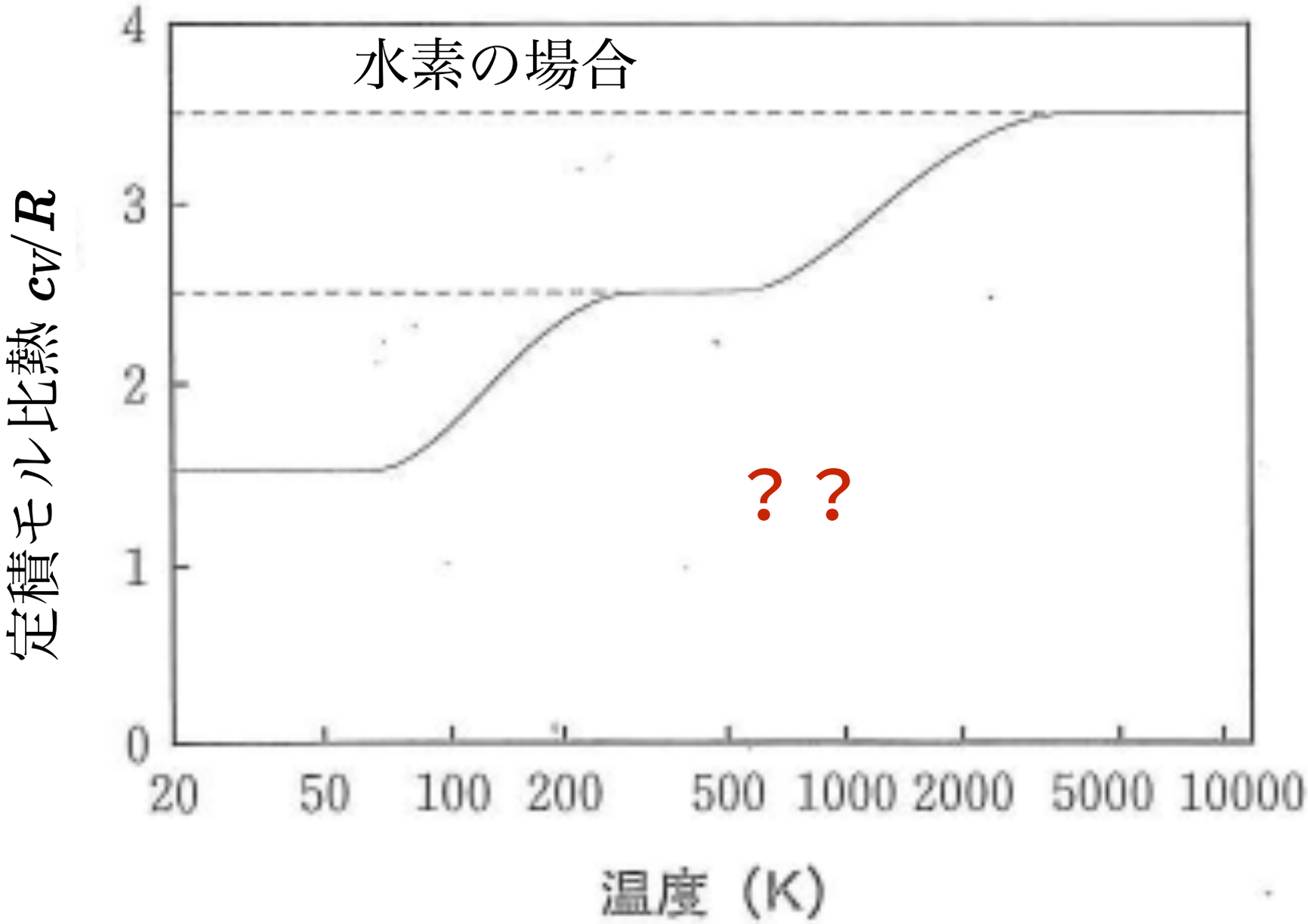
実験との比較

物質	モル比熱 [J/mol K]	測定温度[℃]	理論値
He	12.6	-180	12.5
Ne	12.7	19	
Ar	12.5	27	
H_2	20.5	27	20.8
N_2	20.8	27	
O_2	21.1	27	
Al	24.3	25	24.9
Pb	26.8	25	

だいたいよく合っている

もっと詳しく調べると

第９８回薬剤師国家試験より



もっと詳しく調べると

http://www.campus.ouj.ac.jp/~hamada/

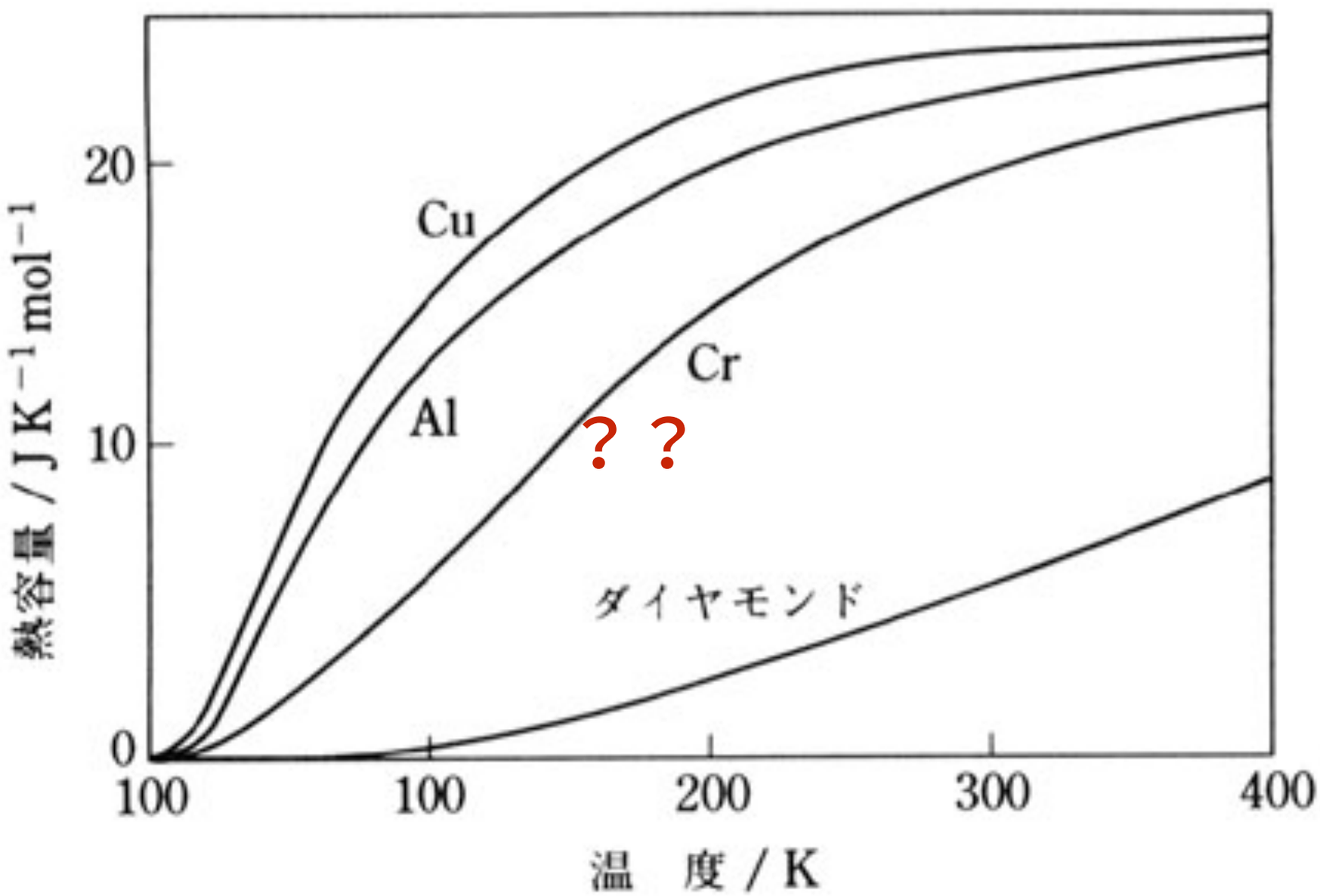


図 2-4　結晶のモル熱容量の温度依存性

「真空」の比熱

空洞に放射される電磁波のエネルギーは

$$U = \sigma T^4 \qquad \sigma \simeq 5.7 \times 10^{-8} \mathrm{J\ s^{-1}\ m^{-2}\ K^{-4}}$$

(シュテファン・ボルツマン法則)

しかし，電磁波の場合は無限の固有振動モードがあるはず

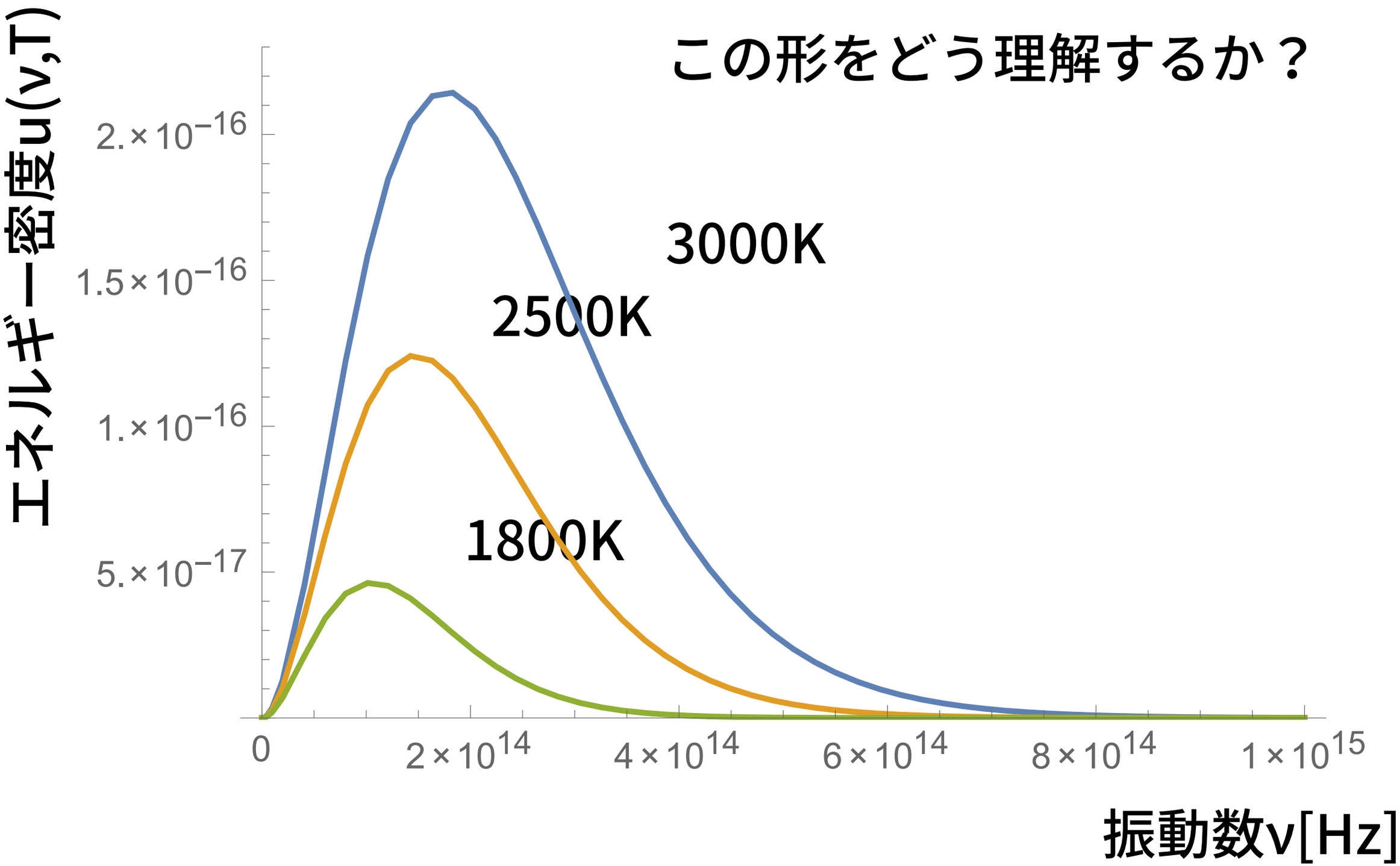
エネルギー等分配則に従うと，比熱は無限になるはずだが…

↓

電磁波に分配されるエネルギーは等分配則で
期待されるよりも，かなり小さい

黒体輻射のスペクトル

この形をどう理解するか？



レイリー・ジーンズ公式

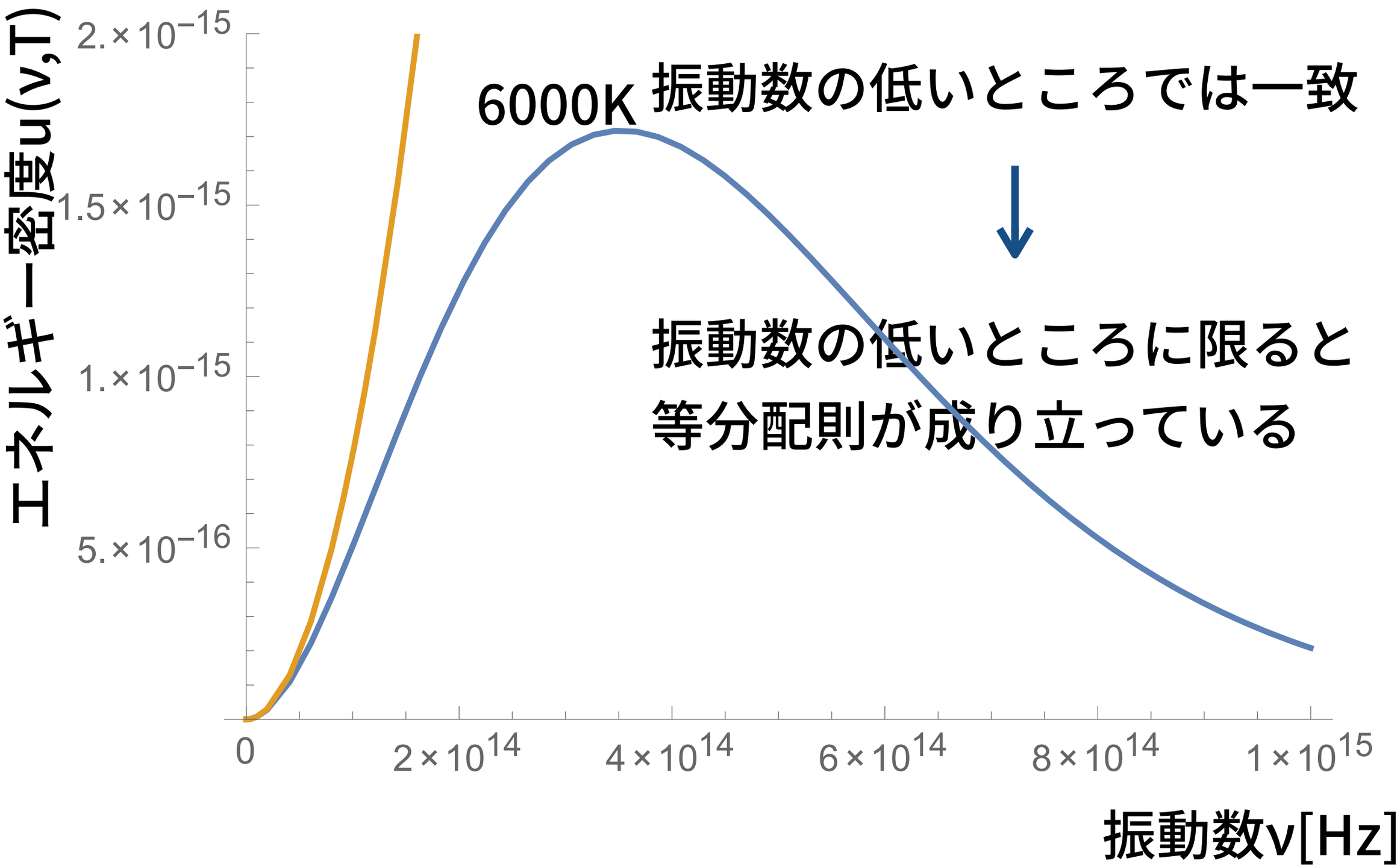
- ⭐ 光は電磁波（波動）である
- ⭐ 電磁波の全て振動モードに対してエネルギー等分配即が成り立つ

全エネルギーは発散してしまうが…

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi kT}{c^3}\nu^2$$

というスペクトルが得られる

比較

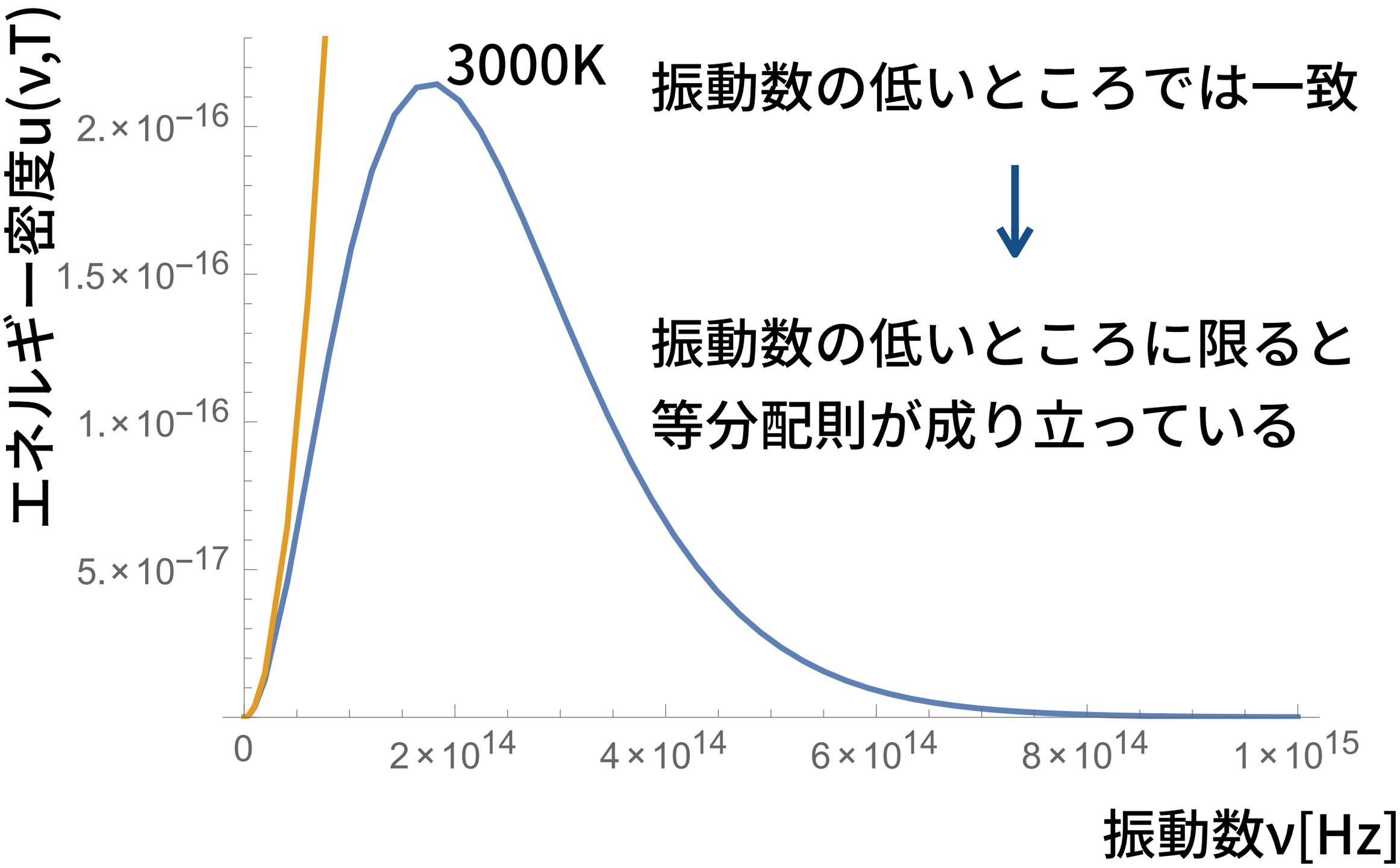


振動数の低いところでは一致

↓

振動数の低いところに限ると
等分配則が成り立っている

比較

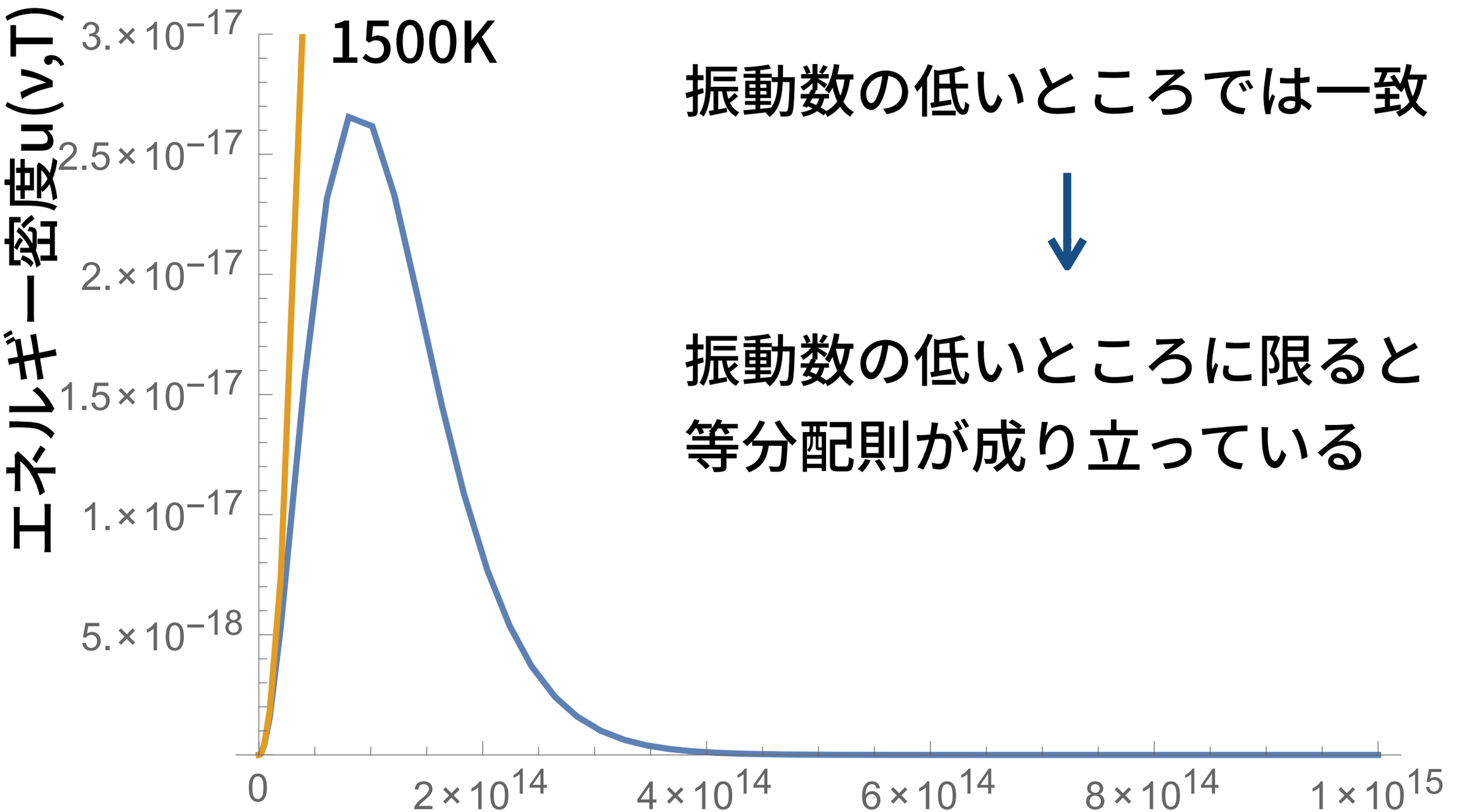


振動数の低いところでは一致

↓

振動数の低いところに限ると
等分配則が成り立っている

比較



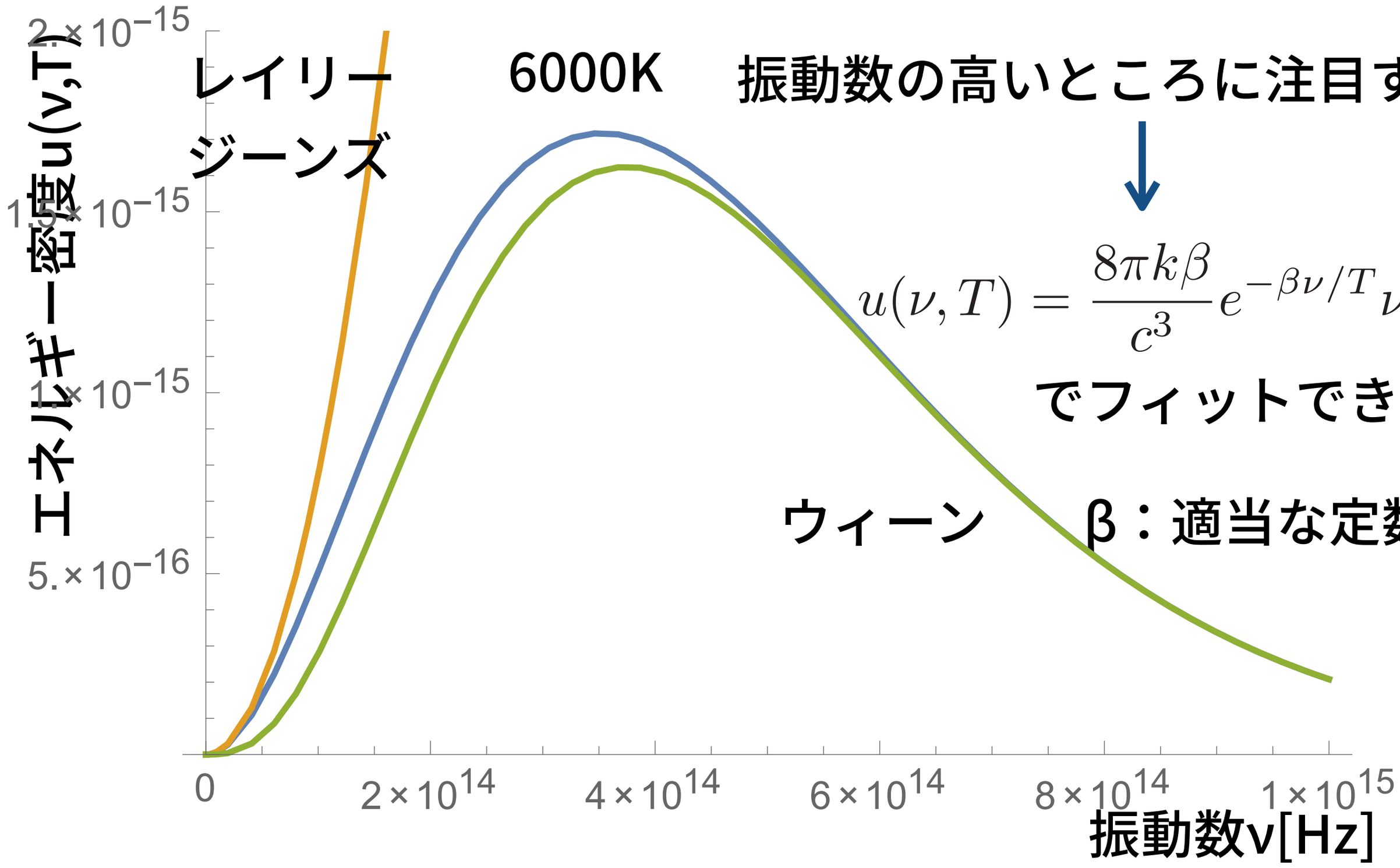
振動数の低いところでは一致

↓

振動数の低いところに限ると
等分配則が成り立っている

温度が低くなると，高い振動数の自由度に
エネルギーが配分されなくなっていく

ウィーンの公式



振動数の高いところに注目する

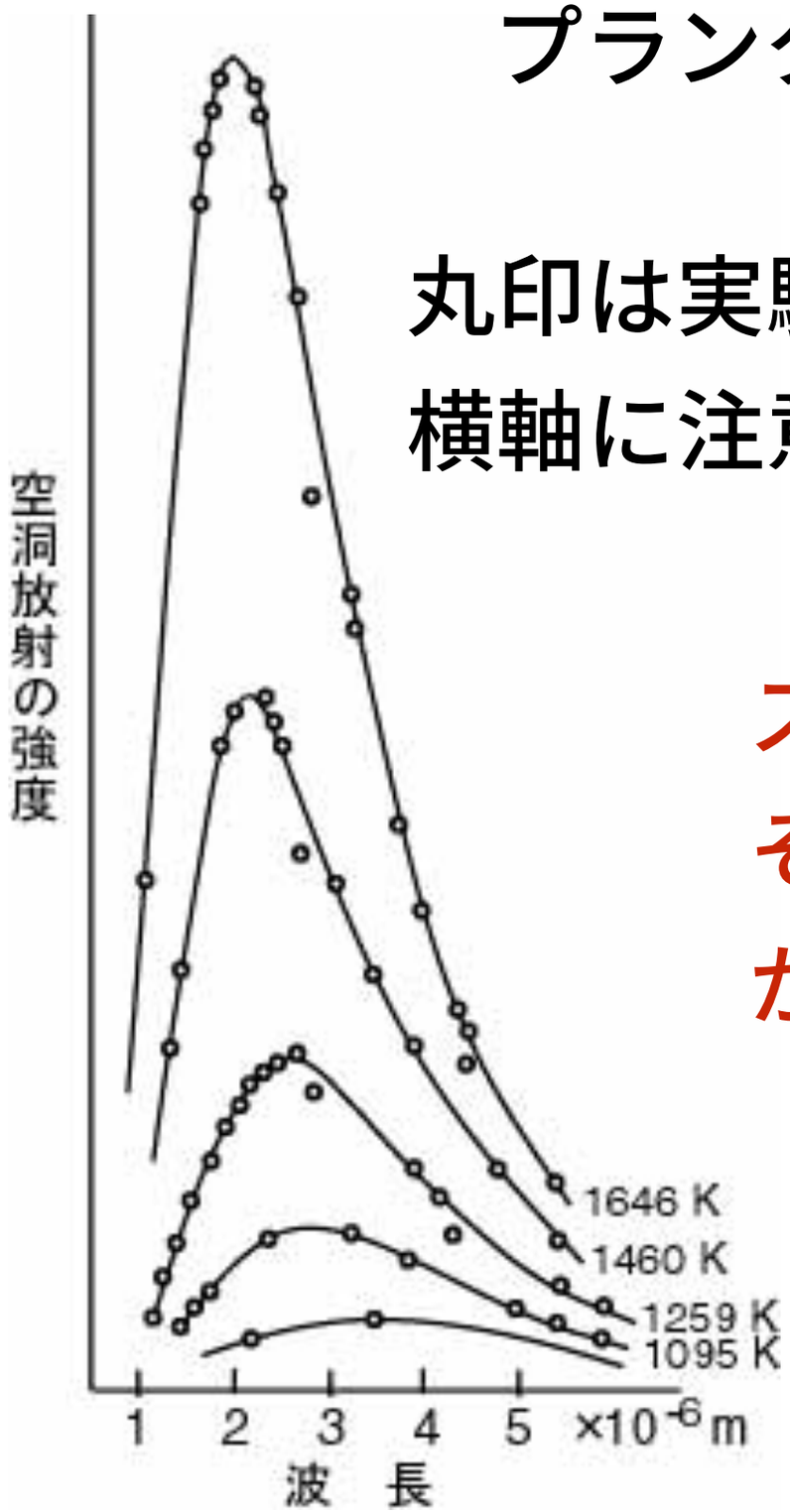
$$u(\nu, T) = \frac{8\pi k\beta}{c^3} e^{-\beta\nu/T} \nu^3$$

でフィットできる

β：適当な定数

プランクの輻射公式

プランクによって導かれた内挿公式



丸印は実験値

横軸に注意

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \nu^3$$

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \mathrm{m}^2 \mathrm{kg}/s$$

スペクトルの形はこれで説明できるが，その背後にはどんな物理があるだろうか？

http://ne.phys.kyushu-u.ac.jp/seminar/MicroWorld/Part3/

エネルギー量子

仮説：

エネルギーは，連続量ではなく，振動数νの輻射エネルギーはhνの整数倍しかとることができない。

この仮説とボルツマンの分布則により，1つの振動数νの状態について，エネルギーの平均値は

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-nh\nu/k_B T}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu/k_B T}}$$

分子分母の和の部分を計算した上で，νとν+dνの間にある振動数の状態数をかけるとu(ν,T)dνになるので，そこからu(ν,T)がもとまる。

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}$$

問題

1. エネルギー量子仮説に基づいて，プランクの輻射公式を導き出せ。（おおまかな方針は前頁で説明した通り）
2. 振動数に対するプランクの輻射公式を波長λを用いた形に書き直せ。

ヒント：与えられている式は，振動数がνからν+dνの間のエネルギー密度を表しているので，これを元に波長がλからλ+dλの間のエネルギー密度を求める式を作れば良い。

$$u(\nu, T)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \qquad \lambda = \frac{c}{\nu}$$

状態数の数え方

両端が固定端の1次元定常波の条件 $L = \dfrac{n\lambda}{2} \longrightarrow n = \dfrac{2L\nu}{c}$

一辺Lの立方体中で振動数がνと $\nu + d\nu$ の間の定常波の数は

$$d^3n = \left(\frac{2L}{c}\right)^3 d^3\nu = \frac{8L^3}{c^3} 4\pi\nu^2 \frac{1}{8} d\nu$$

↑

振動数は正

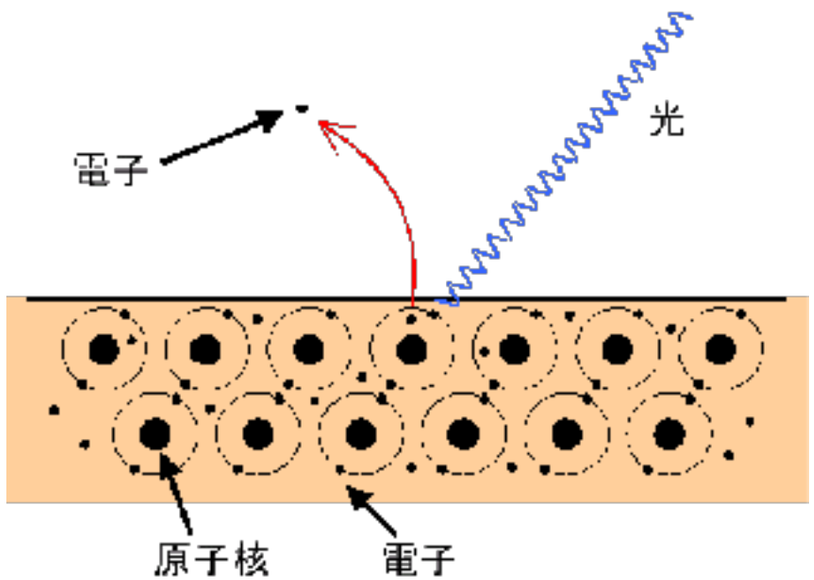
光は横波であり，偏光モードが2つある。
よって，単位体積中の状態数は

$$\frac{8L^3}{c^3} 4\pi\nu^2 \frac{1}{8} d\nu \times 2 \times \frac{1}{L^3} = \frac{8\pi\nu^2 d\nu}{c^3}$$

第2の問題：光電効果

光電効果とは？

金属のような物質の表面に，紫外線やX線を当てると，電子が飛び出してくる現象。



http://www.phys.u-ryukyu.ac.jp/WYP2005/koudenpamph.html

次のような性質をもつ

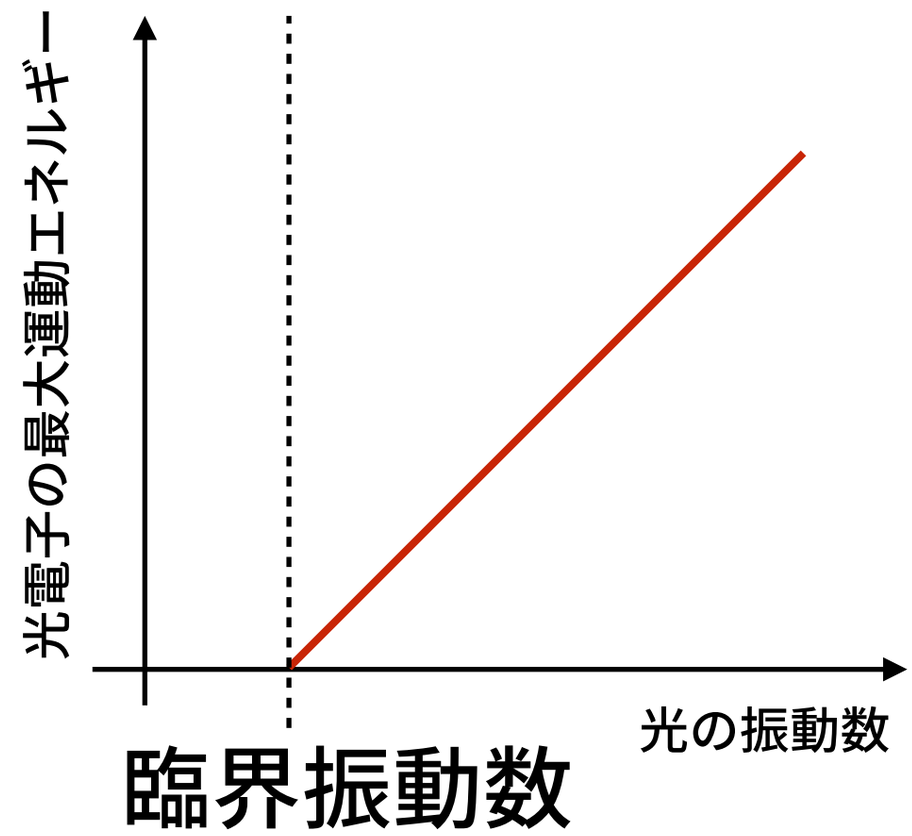
- ☆ 光電子ひとつひとつのエネルギーは，照射する光の強さによらず，振動数νによる
- ☆ 単位時間あたりの光電子の個数は照射する光の強さに比例する

何が問題か？

電磁気学の帰結：光は電磁波である

電子に与えられるエネルギーは電磁場の強さ二乗に比例するはず

しかし，光電子が飛び出すか否かは，強さではなく振動数で決まる。



光量子仮説

振動数νの光は，hνのエネルギーをもつ粒子（光子）のようにふるまう。

1個の光子が1個の電子にエネルギーを与えるとすると，

$$\frac{m}{2}v^2 = h\nu - W$$

W(仕事関数): 自由電子が金属表面を飛び出すのに必要な仕事

この仮説のもとでは，光の強さは次のように解釈する

強い光=光子の数が多い

光量子の運動量

空洞内の光が等方的に壁に当たる場合，エネルギー密度と光による圧力との間には，

$$P = \frac{u}{3}$$

が成り立つことが知られている。

一辺がLの立方体空洞の中に，振動数νの光量子が1個入っている状況を考える。この光量子のx方向の運動量をp_xとする。

この光量子によってx軸に垂直な壁が受ける圧力は

$$P_x = \frac{p_x c_x}{L^3}$$

光量子の運動量

N個の光量子がある場合，壁が受ける圧力は

$$P = \frac{1}{L^3}\sum p_x c_x$$

平均を用いて，

$$P = \frac{N}{L^3}\langle p_x c_x \rangle$$

一方，エネルギー密度 $u = \frac{N\nu h}{L^3}$ との間には

が成り立つ。また，$p_x = p\frac{c_x}{c}$ および $\langle c_x^2 \rangle = \frac{1}{3}c^2$ より

$$P = \frac{u}{3}\frac{cp}{h\nu}$$

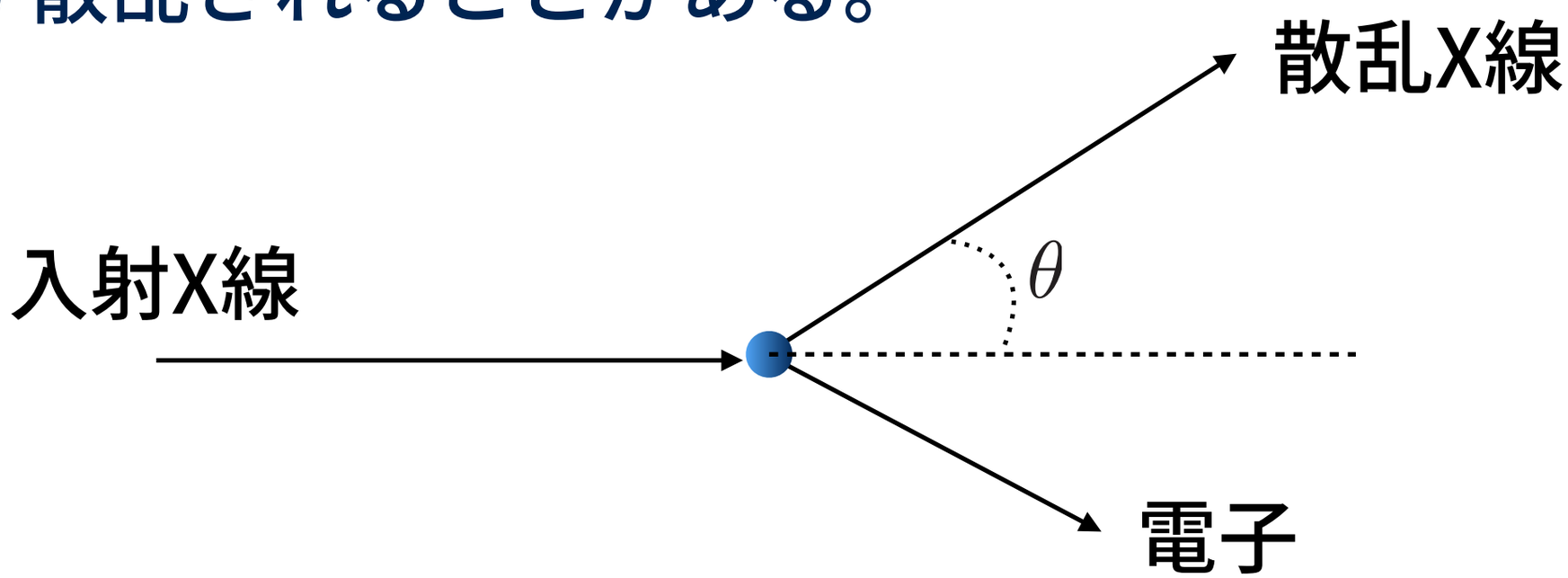
$P = \frac{u}{3}$ と見比べると，

$$\boxed{p = \frac{h\nu}{c}}$$

コンプトン効果

光の粒子性を顕著に示す実験事実

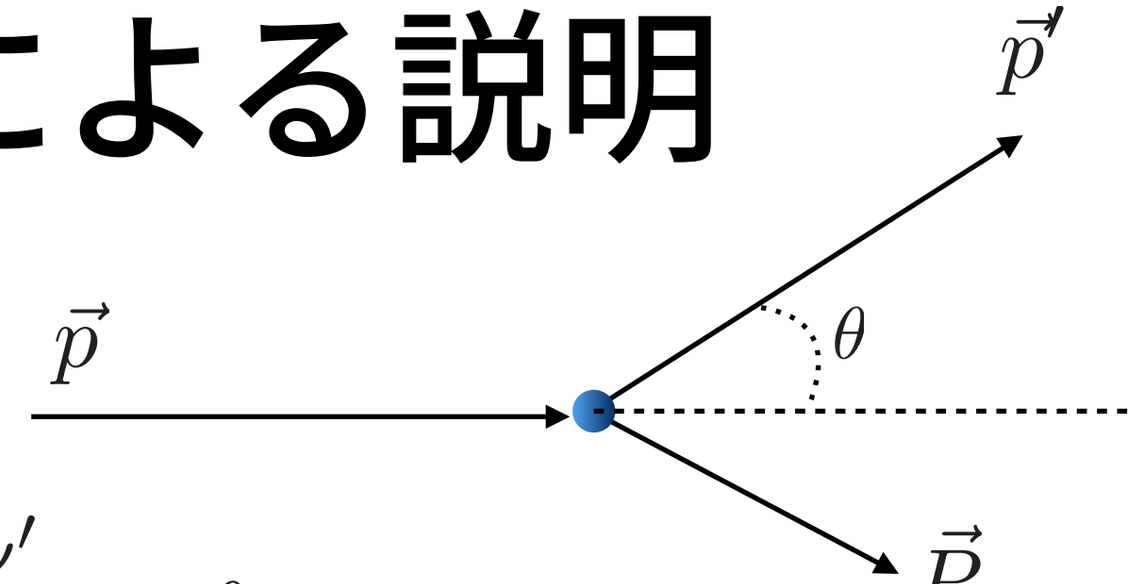
X線を物質に当てると，照射したものより波長の長いX線が散乱されることがある。



より精密に測定すると，波長のずれは散乱された角度だけで決まり，次で与えられることがわかる。

$$\Delta\lambda = 0.0243(1 - \cos\theta)\text{Å}$$

光量子仮説による説明



$$\vec{p} = \vec{P} + \vec{p}'$$

$$p^2c^2 = h^2\nu^2 \text{,} p'^2c^2 = h^2\nu'^2$$

$$P^2 = \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 - 2\frac{h\nu}{c}\frac{h\nu'}{c}\cos\theta$$

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

$$P^2c^2 = (h\nu - h\nu')^2 + 2(h\nu)(h\nu')(1-\cos\theta)$$

相対論的エネルギー保存則

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + \sqrt{m^2c^4 + P^2c^2}$$

$$m^2c^4 + P^2c^2 = (h\nu - h\nu')^2 + 2mc^2(h\nu - h\nu') + m^2c^4$$

よって，

$$\boxed{\frac{h}{mc}(1-\cos\theta) = c\left(\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu}\right) = \lambda' - \lambda}$$

$$\frac{h}{mc} = 0.0242\text{Å}$$

いくつかの数字

- プランク定数

$$h = 6.626 \times 10^{-34}\mathrm{m}^2\mathrm{kg}/s = 0.6582 \times 10^{-15}\mathrm{eV\ s}$$

- 真空中の光速度

$$c = 2.998 \times 10^8\ \mathrm{m/s}$$

- 電子の質量

$$mc^2 = 0.511\ \mathrm{MeV}$$

ミクロな世界の話では，質量はmc^2の組み合わせを用いて，eV単位で表される。

陽子質量：938.3 MeV

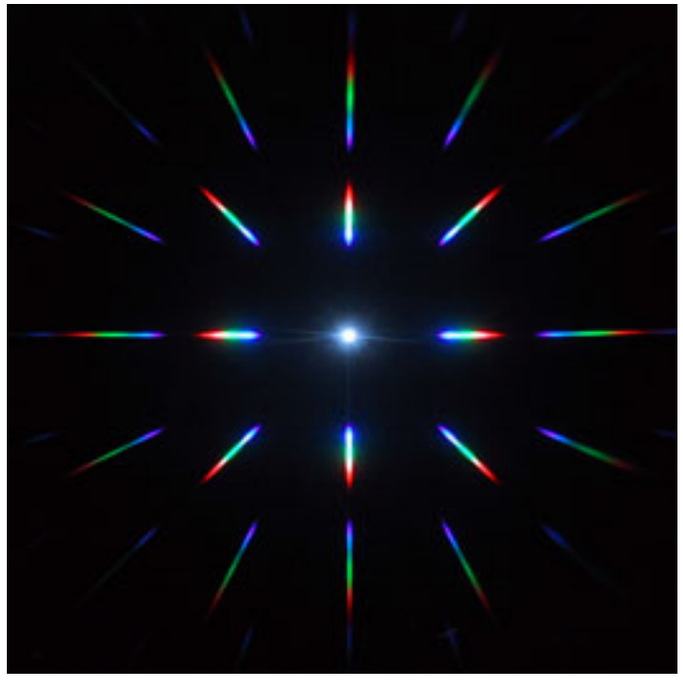
中性子質量：939.6 MeV

ちなみに，h/2π=1, c=1とする単位系を自然単位系という

粒子性と波動性

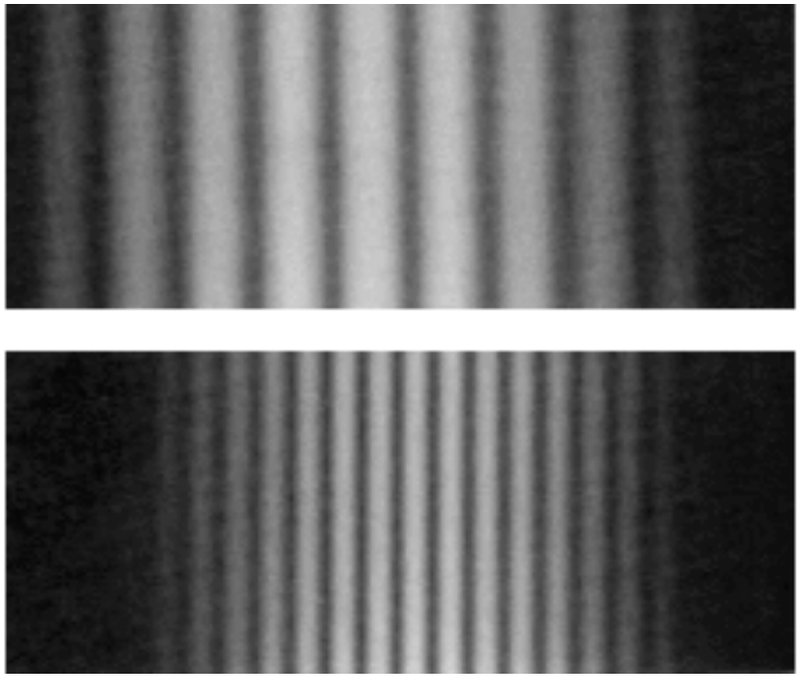
光電効果や，コンプトン効果など，光の粒子性を示す実験事実がある一方，光の回折や干渉など，波動性を示す実験事実も厳然として存在する。

回折



http://www.holorer.jp/index-j.html

干渉



http://koshiro56.la.coocan.jp/

以上に基づいて考えると，光は粒子性と波動性の両方の性質をあわせ持つ，二重人格であると考えざるを得ない。

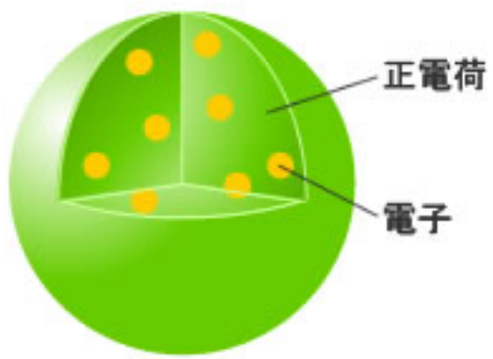
第3の問題：原子の構造

- ⭐ 19世紀初めドルトンの原子説
- ⭐ 19世紀半ば ボルツマンの分子説
- ⭐ 1897年　電子の発見
- ⭐ 1898年　ウランの放射壊変
- ⭐ 1911年　原子核の発見

原子の存在の実証と，原子の内部構造の解明

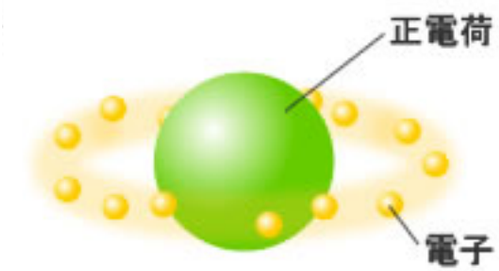
原子模型

トムソンの原子模型



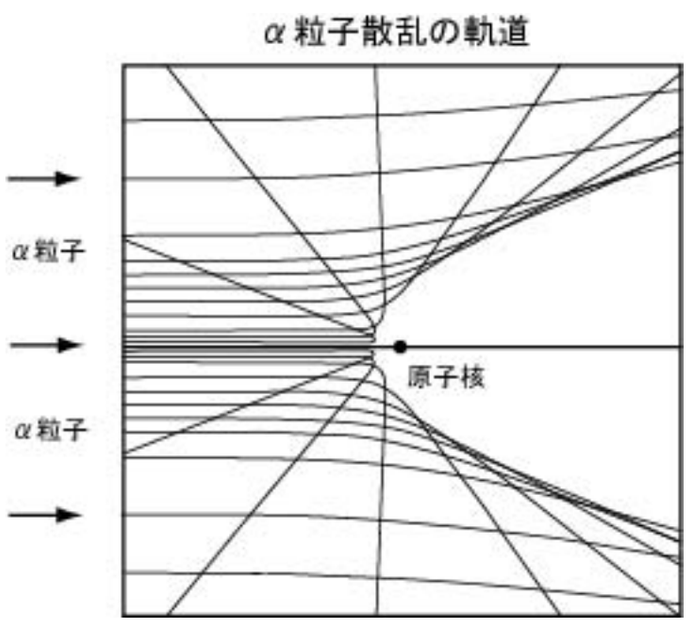
http://sf-fantasy.com/

長岡の原子模型



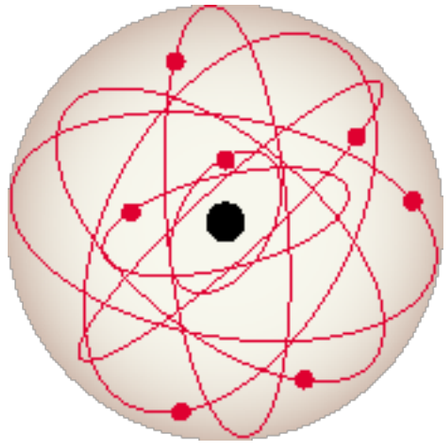
http://sf-fantasy.com/

ラザフォードの散乱実験



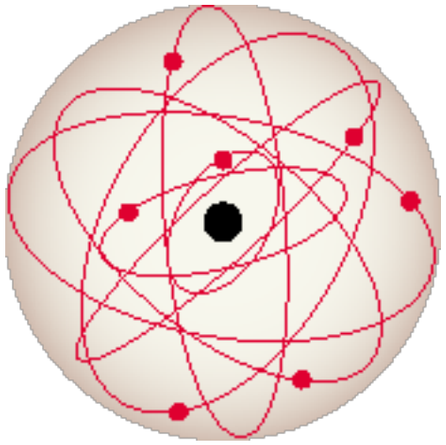
http://ne.phys.kyushu-u.ac.jp/seminar/MicroWorld/

ラザフォードの原子模型



http://ne.phys.kyushu-u.ac.jp/seminar/MicroWo

新しい問題



http://ne.phys.kyushu-u.ac.jp/seminar/MicroWorld/

原子核の周りを電子が回っているという描像

↓

電子は常に加速度を生じる（円軌道を描くため）

↓

電磁気学によると，短時間(10^{-11}秒)で電磁波を放射して，原子核に落ち込んで行く。

水素原子の寿命

ラザフォード模型を考える。
水素原子の半径（陽子と電子の距離）がボーア半径に等しいとしたとき，古典電磁気学によって，水素原子の寿命を計算する。

単位時間に加速度運動をする電子の放出するエネルギーは

$$S = \frac{2}{3}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 c^3}|a|^2$$

円運動を考えると

$$ma = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2}$$

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{2}{3}\frac{e^6}{(4\pi\varepsilon_0)^3 m^2 c^3 r^4}$$

水素原子の寿命

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{2}{3}\frac{e^6}{(4\pi\varepsilon_0)^3 m^2 c^3 r^4}$$

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

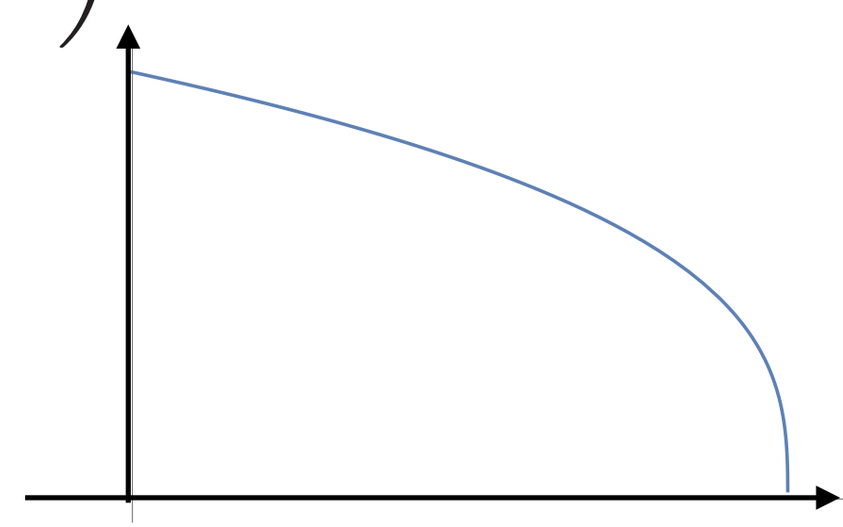
円運動で電子が持つエネルギーは

$$W = \frac{m}{2}v^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

これらから，

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{4}{3}\frac{e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 m^2 c^3 r^2}$$

$$r(t) = \left(a_0^3 - 4\frac{e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 m^2 c^3}t\right)^{1/3}$$



r=0になるまでの時間は

$$\tau = \frac{1}{4}\left(\frac{4\pi\varepsilon_0 a_0 m c^2}{e^2}\right)^2 \frac{a_0}{c}$$

水素原子の寿命

$$\tau = \frac{1}{4}\left(\frac{4\pi\varepsilon_0 a_0 mc^2}{e^2}\right)^2 \frac{a_0}{c}$$

数値を代入してみる

$$a_0 = 0.53 \times 10^{-10}\ \mathrm{m}$$

$$mc^2 = 0.511\ \mathrm{MeV}$$

$$e = 1.6 \times 10^{-19}\ \mathrm{C}$$

$$c = 3.9 \times 10^{8}\ \mathrm{m/s}$$

$$\varepsilon_0 = 8.9 \times 10^{-12}\ \mathrm{m}^{-3}\mathrm{kg}^{-1}\mathrm{s}^{4}\mathrm{A}^{2}$$

<u>単位に注意しつつ</u>計算すると

$$\tau = 1.6 \times 10^{-11}\mathrm{s}$$

補足：相対論的関係式

- 運動量とエネルギーの関係 $E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$

- 非相対論的極限では

$$E = mc^2\sqrt{1 + \frac{p^2}{mc^4}} \simeq mc^2\left(1 + \frac{p^2}{2mc^2} + \cdots\right) = mc^2 + \frac{p^2}{2m} + \cdots$$

新しい問題

水素原子から発せられる光のスペクトルが離散的

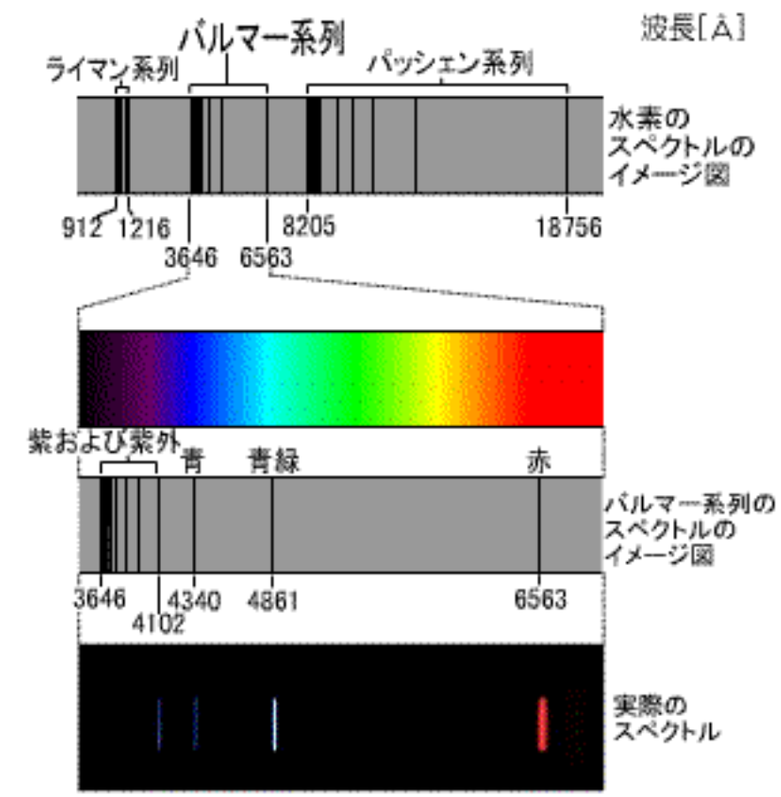
バルマー系列 $Rc\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right)$

$Rch = 13.61\mathrm{eV}$

リュードベリー定数

ライマン系列 $Rc\left(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{n^2}\right)$

パッシェン系列 $Rc\left(\frac{1}{3^2}-\frac{1}{n^2}\right)$



http://galaxy.cc.osaka-kyoiku.ac.jp/mano/

電磁気学に支配される放射の場合は，連続なスペクトルになるはず。

ボーア模型

ボーア仮説

- ⭐ 電子の軌道は，角運動量が$n\hbar$に等しくなるようなものだけが許される

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

- ⭐ 電子がある定常状態(エネルギーE_n)から別の定常状態(エネルギーE_m)に移ったとき，光子が放出され，そのエネルギーは次の関係を満たす。$h\nu = E_n - E_m$

ボーア模型

$mv_n r_n = n\hbar$ の円運動を考える → $m\dfrac{v_n^2}{r_n^2} = k_0\dfrac{e^2}{r_n^2}$

$v_n = \dfrac{n\hbar}{mr_n}$ より $r_n = \hbar^2\dfrac{n^2}{k_0 me^2}$

n=1のとき $r_1 = \dfrac{\hbar^2}{k_0 me^2}$ （ボーア半径）～10^{-10}m

$$E_n = \frac{m}{2}v_n^2 - k_0\frac{e^2}{r_n} = -k_0\frac{e^2}{2r_n} = -\frac{k_0^2 me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \rightarrow E_n \simeq -\frac{13.6\mathrm{eV}}{n^2}$$

水素原子のスペクトルが説明できた！

なお，水素原子のイオン化エネルギーは約13.6eV

↑

これも説明できる

ドブロイ仮説

ボーアの仮説の意味を考える

光が粒子性を物ならば，逆に電子のような粒子が波動性を持つのではないか？

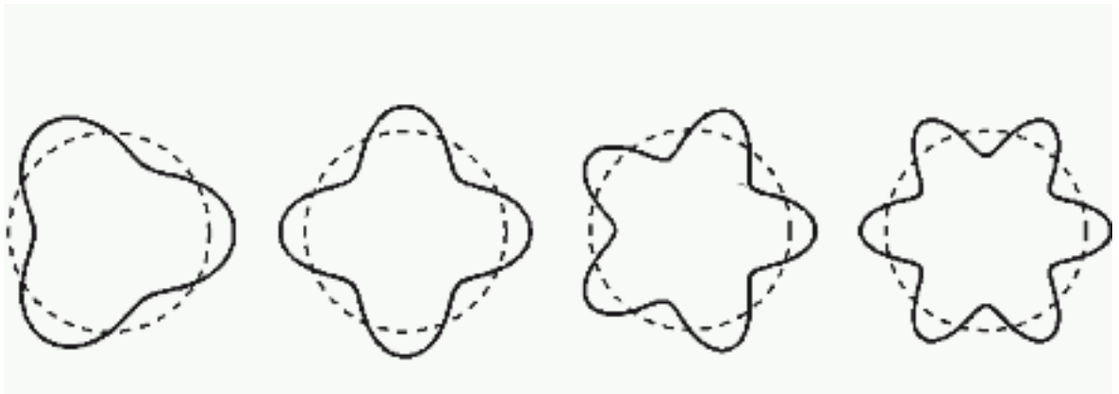
光子の場合は　$E = h\nu \qquad p = \dfrac{h\nu}{c} = \dfrac{h}{\lambda}$

これと同様に，電子は $\boxed{\lambda = \dfrac{h}{p}}$ という波長に対応する波動性持つのではないか？

$mr_n v_n = n\hbar$ の意味

軌道上に定常波として存在できる場合のみが許されていると解釈

定在波なので安定

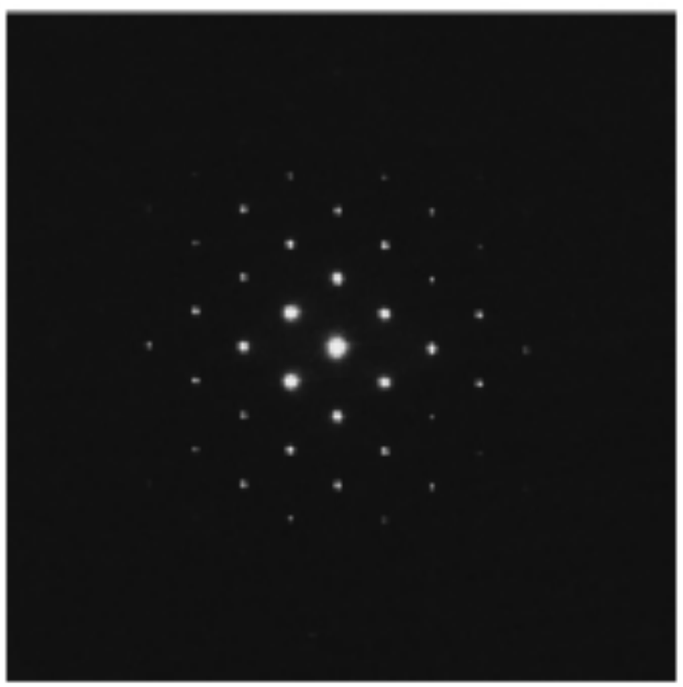


http://blog.goo.ne.jp/quantum-

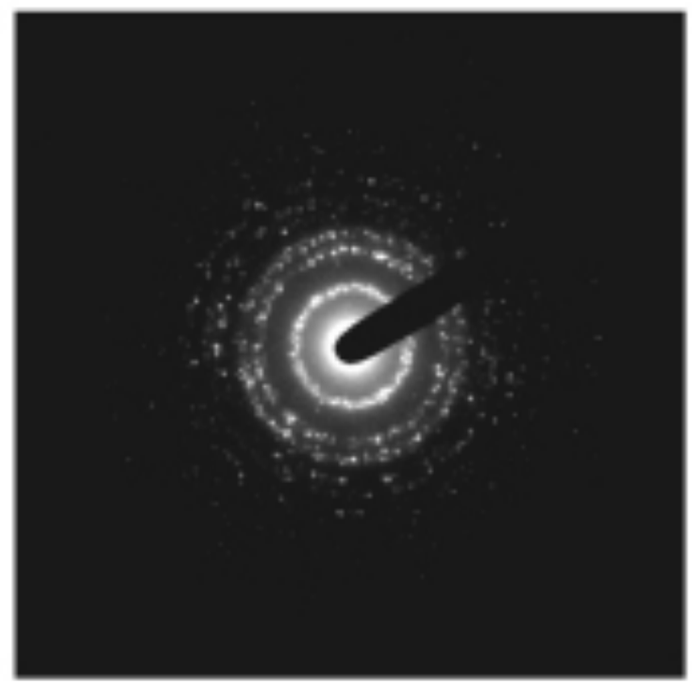
電子の回折現象

ドブロイ仮説が正しければ，電子も回折や干渉を引き起こすはず

実際に電子の回折は観測されている!

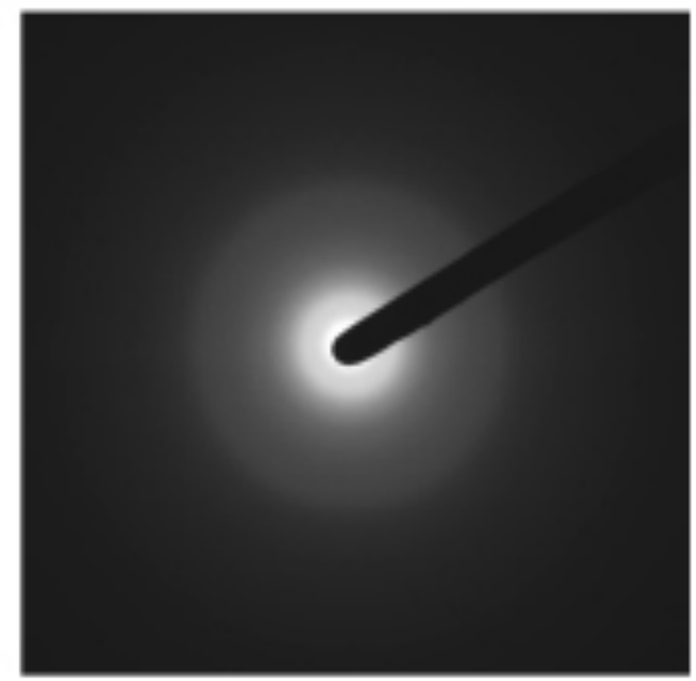


単結晶Si



多結晶Si

http://www.mst.or.jp/



石英ガラス

（結晶構造を持たない）

ブラッグ反射

LOADING

1%

TutorVista.com™

https://www.youtube.com/watch?v=Ho7K27B_Uu8

補足：相対論的関係式

- 運動量とエネルギーの関係 $E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$

- 非相対論的極限では

$$E = mc^2\sqrt{1 + \frac{p^2}{mc^4}} \simeq mc^2\left(1 + \frac{p^2}{2mc^2} + \cdots\right) = mc^2 + \frac{p^2}{2m} + \cdots$$

電子のドブロイ波長

光速よりも充分遅い（非相対論的）自由電子のエネルギーは，運動量pを用いて次のように表される。

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

電子をVボルトの電圧で加速した時のドブロイ波長を求める。

Vボルトの電圧で加速された電子の運動エネルギーは

$$E = eV = \frac{p^2}{2m} \longrightarrow p = \sqrt{2meV}$$

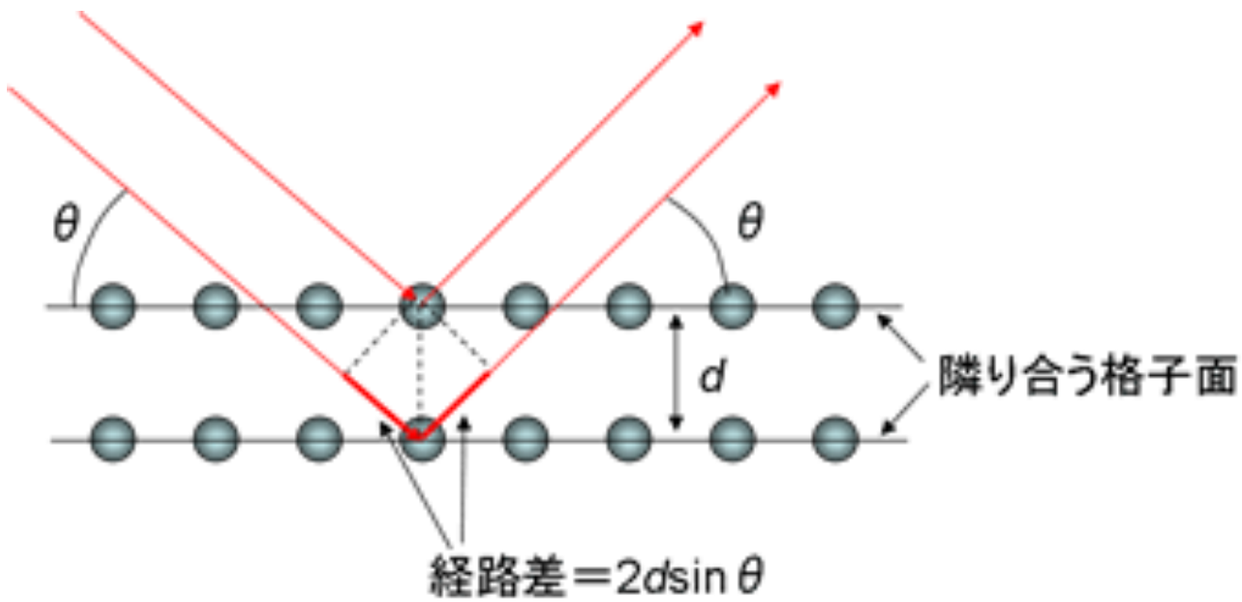
故に，ドブロイ波長は

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2eV}} = \frac{2\pi\hbar c}{2mc^2eV} \simeq \frac{12.2}{\sqrt{V}}\text{Å}$$

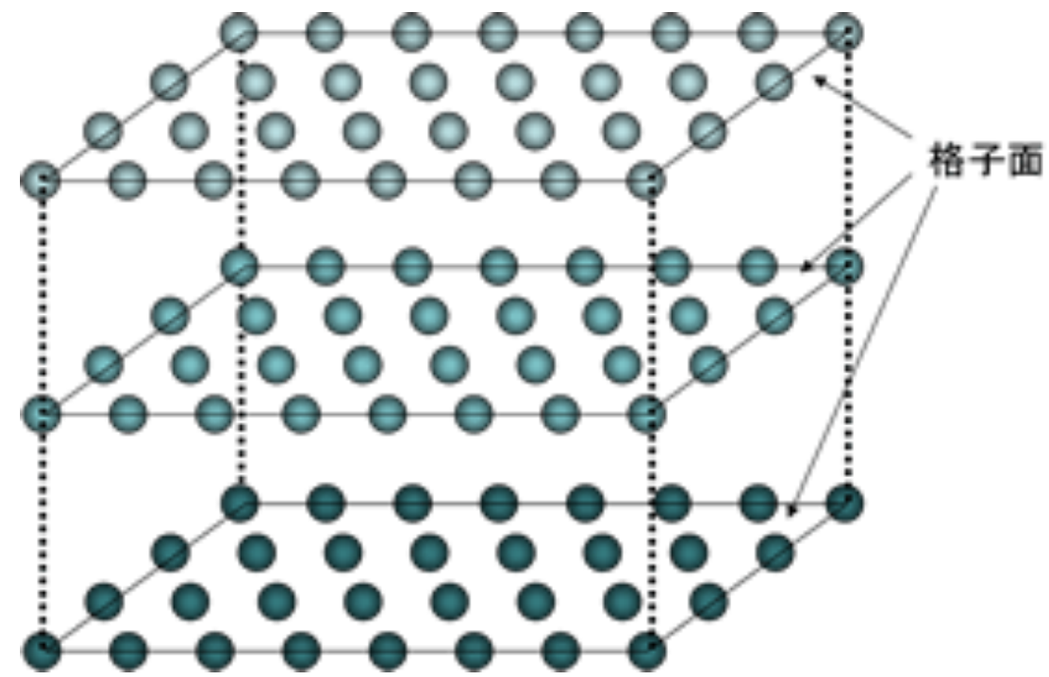
100Vくらいで加速すれば，波長は約１Å

ブラッグ反射

結晶体に光をあてる。



角度の定義に注意



http://www.nims.go.jp/opal/syokai/bragg.html

光が強め合う条件 $n\lambda = 2d\sin\theta$

n: 正の整数