11章まとめ: 量子論:導入と原理

□ 古典力学:

17世紀にアイサック・ニュートンにより創始された運動の法則.

□量子力学:

20世紀にハイゼンベルクとシュレーディンガーにより創始された運動の法則.

量子論の原理

□電磁場: 空間を調和波として伝搬する、振動する電気的・磁気的擾乱

□電場: 荷電粒子に作用する場.

□磁場　運動する荷電粒子に作用する場.

11章まとめ: 量子論:導入と原理

□波長: λ,波の山と山の距離.

□周波数: ν,変位が元に戻る1秒あたりの回数.

□波数: 波長の逆数.

□電磁スペクトル　周波数単位で表した電磁界の範囲.

11.1古典物理学の失敗

□ 黒 体: 全周波数の電磁波を一様に放射・吸収できる物体。

□ レイリー・ジーンズの法則: dE = ρdλ, ρ = 8πkT/λ4.

□ 状態密度, ρ: 波長範囲とエネルギー密度との比例係数 (dE = ρdλ).

□ 紫外部破綻: 高周波数域での黒体のエネルギー密度の発散.

□ エネルギーの量子化　エネルギーがとびとびの値に制限されること.

11章まとめ: 量子論:導入と原理

11.1古典物理学の失敗(続き)

□ プランク定数　$h = 6.626\,08 \times 10^{-34}$ J s.

□ プランク分布:

$$d\varepsilon = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\left(\frac{1}{e^{hc/\lambda kT}-1}\right)d\lambda$$

□ デュロン・ペティの法則　すべての単原子固体のモル比熱は等しく、25 J/K・mol 程度である.

□ アインシュタインの定式　$C_{V,m} = 3R\left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2\left(\frac{e^{h\nu/2kT}}{e^{h\nu/kT}-1}\right)^2$

□ アインシュタイン温度:　$\theta_E = \frac{h\nu}{k}$

11章まとめ: 量子論:導入と原理

11.1古典物理学の失敗(続き)

□ デバイの定式　$C_{V,m} = 3R \cdot 3\left(\frac{kT}{h\nu_D}\right)\int_0^{\frac{h\nu_D}{kT}} \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2}$

□ デバイ温度　$\theta_E = \frac{h\nu}{k}$

□ スペクトラム: 透過・吸収・散乱した光の記録. 周波数・波長・波数の関数として記述される.

□ 分光学: スペクトルの検知と分析(の学問)

□ 分光学的遷移　スペクトル形状の変化にに顕れるような状態変化.

□ ボーア周波数遷移　エネルギー変化と放射・吸収された光の周波数の関係: $\Delta E = h\nu$

11章まとめ: 量子論:導入と原理

11.2 粒子性と波動性

- □ 光子　電磁放射の粒.
- □ 光電効果: 紫外線に曝された金属表面から電子が放出される現象. $1/2 m_e v^2 = h\nu - \Phi$
- □ 仕事関数(Φ): 電子を金属表面から無限遠まで飛ばすのに必要なエネルギー.
- □ デビソン・ジャーマーの実験: 結晶による電子の散乱.
- □ 電子の散乱: 光路上に存在する物体による電子の散乱.
- □ ド・ブロイの関係　$p = h/\lambda$
- □ 波動性と粒子性の共存: 物体と光において、波として性質と粒子としての性質が共存すること.

11章まとめ: 量子論:導入と原理

微視的な系での動力学

- □ 波動関数ψ　ある系に関するすべての力学的情報を含んでいるSchrodinger方程式を解くことにより得られた関数.

11.3 Schrodingerの波動方程式

- □ 時間依存でないSchrodingerの波動方程式.

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

11.4 波動関数のBornの解釈

- □ ある場所での波動関数の2乗の値は、その粒子がその位置に存在する確率に比例する.

11章まとめ: 量子論:導入と原理

11.4 波動関数のBornの解釈(続き)

- □ 確率密度　粒子がある場所の単位体積中に存在する確率.
- □ 確率強度: 確率密度の2乗.
- □ 規格化係数: 波動関数を規格化する係数
- □ 球面座標　半径(r), 余角(θ), 方位角(φ)からなる座標.

  体積素片 = $r^2 \sin\theta \cdot dr \cdot d\theta \cdot d\phi$
- □ 量子化　変化するオブザーバブル(観測可能量)がとびとびの値に制限されること.
- □ 波動関数の制限　波動関数は、連続関数、一次導関数も連続、一価関数、2乗値が積分可能でなければならない.

11章まとめ: 量子論:導入と原理

量子力学の原理

- □ 波動関数ψ　ある系に関するすべての力学的情報を含んでいるSchrodinger方程式を解くことにより得られた関数.

11.5 波動関数の情報

- □ ノード: 波動関数が0(ゼロ)を通る点.
- □ 演算子: ある関数に数学的に作用するもの.
- □ ハミルトン演算子　系の全エネルギーに対応する演算子.
- □ 固有値: 固有方程式 ΩΨ = ωΨ における定数ω.
- □ 固有関数 固有方程式 ΩΨ = ωΨ における関数Ψ.
- □ オブザーバブル: ある系における観測可能量.

11章まとめ: 量子論:導入と原理

11.5 波動関数の情報(続き)

- □ 位置演算子 $\hat{x} = xX$
- □ 運動量演算子: $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
- □ エルミート演算子: $\int \psi_i^* \hat{\Omega} \psi_j dx = \left\{ \int \psi_j^* \hat{\Omega} \psi_i dx \right\}^*$ を満たす.
- □ 直交系 $\int \psi_i^* \psi_j d\tau = 0$
- □ 線形結合: $c_1 f(x) + c_2 g(x)$
- □ 波動関数の重ね合わせ: 波動関数の線形結合.
- □ ある関数系が完全系をなす 任意の関数が線形結合で表現可.
- □ 期待値: $\langle \Omega \rangle = \iiint_{\text{全空間}} \psi^* \hat{\Omega} \psi d\tau$

11章まとめ: 量子論:導入と原理

11.6 不確定性原理

- □ ハイゼンベルグの不確定性原理 粒子の位置と運動量を、任意の精度で同時に決めることはできない; $\Delta p \cdot \Delta q \geq \frac{1}{2}\hbar$
- □ 波束: 波動関数の重ね合わせで作られた、局所的に存在する波動関数.
- □ 相補的なオブザーバブル: 非可換な演算子に対応するオブザーバブル.
- □ 可換演算子: 交換子がゼロとなる演算子の組み合わせ.
- □ 交換子: $[\Omega_1, \Omega_2] = \Omega_1\Omega_2 - \Omega_2\Omega_1$
- □ 不確定性原理の一般表式. $\Delta\Omega_1 \cdot \Delta\Omega_2 \geq \frac{1}{2}\left|\langle [\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2] \rangle\right|$

12章まとめ: 量子論－技術と応用

並進運動

- □ 自由粒子の波動関数とエネルギー

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad E = \frac{k^2 h^2}{2m}$$

12.1 箱の中の粒子

- □ 境界条件 空間内にある点での波動関数の制限.
- □ 波動関数とエネルギー:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \qquad E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

- □ 量子数: 系の状態を番号付けするための整数(または半整数)
- □ ゼロ点エネルギー: エネルギーの最低値 $E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}$

12章まとめ: 量子論－技術と応用

12.1 箱の中の粒子(続き)

- □ 対応原理 古典力学は、非常に大きな量子数における量子力学に対応する.
- □ 直交性 2つの波動関数が次の関係を満たす. $\int \psi_n^* \psi_{n'} = 0$
- □ 規格直交: 2つの関数が規格化され、かつ直交している.

12.2 2次元および高次元での運動.

- □ 変数分離 $\psi(x,y) = X(x) \cdot Y(y)$ と書けること.
- □ 波動関数とエネルギー:

$$\psi_{n_1 n_2}(x,y) = \frac{2}{\sqrt{L_1 L_2}} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{L_1}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{L_2}\right) \qquad E_{n_1 n_2} = \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2}\right)\frac{h^2}{8m}$$

- □ 縮退: 異なる波動関数が等しいエネルギーをもつこと.

12章まとめ: 量子論－技術と応用

12.3 トンネル効果

- トンネル現象 古典力学では許されない領域に波動関数が浸みだす現象.
- 透過確率 長方形のエネルギー障壁に対して、トンネル現象が起こる場合の、入射に対する透過の比率.

$$T=\left\{1+\frac{(e^{\kappa L}-e^{-\kappa L})^2}{16\varepsilon(1-\varepsilon)}\right\}^{-1}\approx 16\varepsilon(1-\varepsilon)e^{-2\kappa L}$$

ここで、 $\varepsilon = E/V$

振動運動

- 調和振動子 復元力が変位に比例する場合.
- 力の定数: フックの法則における比例定数.
- 放物ポテンシャルエネルギー

12章まとめ: 量子論－技術と応用

12.4 一次元調和振動子のエネルギーレベル

- エネルギー: $E_n=(v+\frac{1}{2})\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}=(v+\frac{1}{2})\hbar\omega$
- ゼロ点エネルギー $E_1=\frac{1}{2}\hbar\omega$
- エネルギー間隔 $\Delta E_n=E_{n+1}-E_n=\hbar\omega$

12章まとめ: 量子論－技術と応用

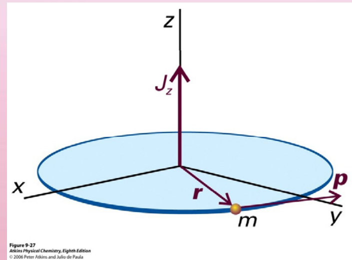
12.5 一次元調和振動子の波動関数

- 波動関数: $\psi_v(x)=N_vH_v(y)e^{-y^2/2}$ $\quad y=\frac{x}{\alpha}$ $\quad \alpha=\left(\frac{\hbar}{mk}\right)^{1/4}$
- エルミート多項式 直交基底をなす多項式のひとつ.
- 平均変位 $\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_v^* x\psi_v dx=0$
- 平均二乗変位 $\langle x^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_v^* x^2\psi_v dx=(v+\frac{1}{2})\frac{\hbar}{\sqrt{mk}}$
- ビリアル定理: もしある粒子のポテンシャルエネルギーが $V=ax^b$ の形に書けると、平均の運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの関係は $2\langle E_K\rangle=b\langle V\rangle$ となる.

12章まとめ: 量子論－技術と応用

12.6 2次元での回転運動: 輪の上の粒子

- 角運動量: $J_z=\pm mvr=\pm pr$
- 慣性モーメント: $I=mr^2$
- 環状の境界条件 $\lambda=\frac{2\pi r}{m_l}$ $\quad (m_l=0,\pm1,\pm2,....)$
- 波動関数 $\psi_{m_l}(\varphi)=\frac{e^{im_l\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$
- エネルギー $E=\frac{J_z^2}{2mr^2}=\frac{J_z^2}{2I}$
- ゼロ点エネルギー $E_0=0$



12章まとめ: 量子論ー技術と応用

12.6 2次元での回転運動: 輪の上の粒子(続き)

□ 軌道角運動量演算子: $l_z = xp_y - yp_x = -i\hbar\partial/\partial\varphi.$

□ そのz方向成分 $l_z = m_l\hbar \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, ...)$

12.7 3次元での回転運動 球の上の粒子

□ ラプラシアン: $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$

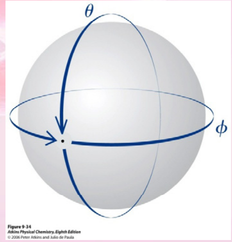
□ 波動方程式: $\mathscr{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi$

□ 方位量子数: $l = 0,1,2...$

□ 球面調和関数: $\psi(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\cdot\Phi(\varphi) = Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)$

12章まとめ: 量子論ー技術と応用

12.7 3次元での回転運動: 球の上の粒子(続き)



□ エネルギー: $E = l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I} \quad l = 0,1,2...$

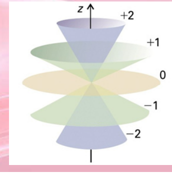
□ 縮退 2l+1個の波動関数が縮退.

□ 角運動量の大きさ $J = \sqrt{l(l+1)}\hbar$

□ 角運動量のz方向成分 $J_z = m_l\hbar \qquad m_l = l,..0.,-l$

□ 空間量子化: 回転体が離散化した2l+1個の方向に制限.

□ ベクトルモデル:



12章まとめ: 量子論ー技術と応用

12.7 3次元での回転運動: 球の上の粒子(続き)

□ 励起子(エキシトン): 結晶内での電子/ホール対

□ 量子ドット 10^3~10^5個の半導体原子からなる3次元結晶.

12.8 スピン

□ スピン: 粒子が元から持っている角運動量.

□ スピン量子数: スピン角運動量$\sqrt{s(s+1)}\hbar$を定義する量子数.

□ スピン磁気量子数: スピン角運動量のz方向成分 $m_s\hbar$ を定義する量子数.

12章まとめ: 量子論ー技術と応用

12.8 スピン(続き)

□ Stern-Gerlachの実験: 不均一な磁場で電子ビームを偏向させ、電子のスピンを観測.

□ フェルミ粒子: 半整数のスピン量子数を持つ粒子.

□ ボーズ粒子 整数のスピン量子数を持つ粒子.