

$$\downarrow \quad \langle E \rangle = \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/k_B T} - 1}$$

$$\varepsilon = h\nu \text{ とすると}$$

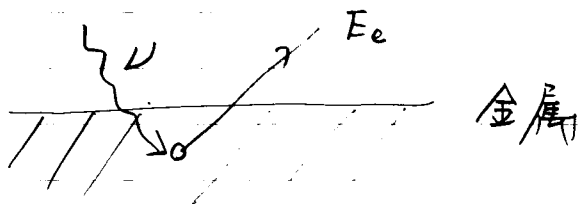
$$U(\nu) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu \cdot \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

電磁波のエネルギー : $h\nu$ の整数倍のみ

「エネルギー量子」

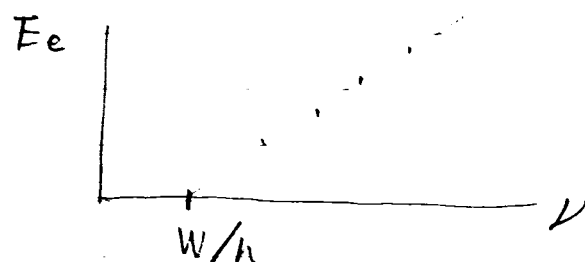
→ 電磁波が粒子のように振る舞う

1.3 光電効果と光量子仮説



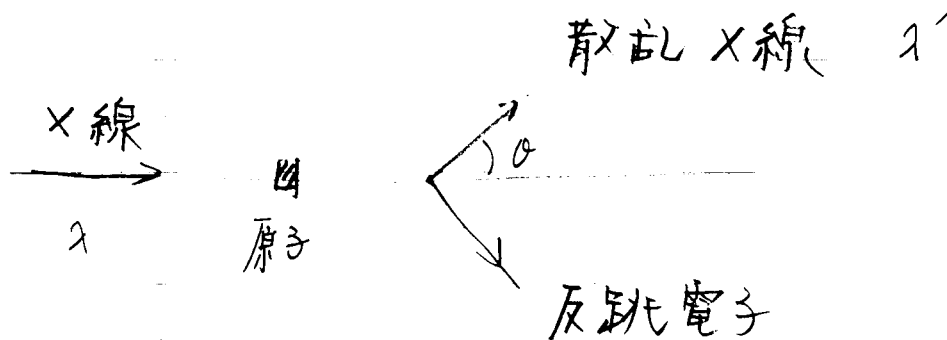
$$E_e = h\nu - W \quad (\text{アインシュタイン 光量子仮説})$$

ミリカンの実験

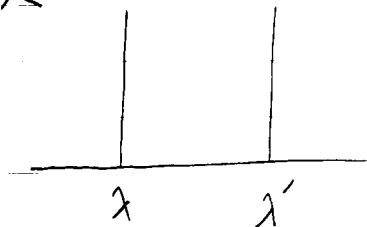


E_e は光の強さには関係しない

・コンプトン効果



θ : 一定



原子全体との散乱
(反跳が小さいので λ がほぼ)

電子との散乱

X線が「粒子」と電子の2体散乱を仮定すると
実験データをうまく説明

→ 「光子 (フォトン)」

1.4. ボーアの原子模型

エネルギーの離散性 → 原子でも

バルマーの公式 (原子のスペクトル線に成り立つ式)

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (n_1, n_2 \text{ は自然数})$$

→ 原子のエネルギーが $\frac{1}{n^2}$ に比例することを示唆

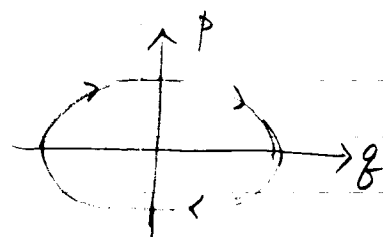
ボール-アの原子模型

- i) 原子は離散的なエネルギーを持つ状態のみ。
「定常状態」。2つの定常状態間をジャンプ
するときのみ光を放出・吸収する。

ii) $h\nu = E' - E''$

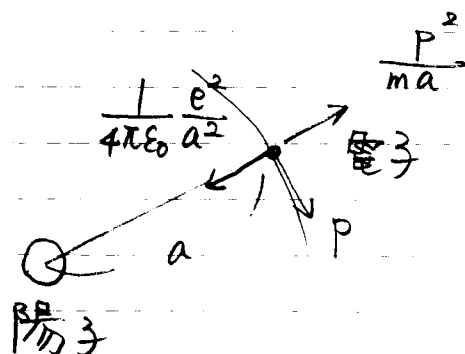
- iii) 電子は古典的な運動のうち

$$\oint p d\phi = n h \quad (n=1, 2, \dots)$$



を満たす状態のみが許される。

「ボール-ア・ゾンマーフェルトの量子化条件」



$$\begin{cases} 2\pi a \cdot P = n h & (\text{量子化条件}) \\ \frac{P^2}{ma} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a^2} & (\text{古典的な運動方程式}) \end{cases}$$

$$\rightarrow \frac{1}{ma} \cdot \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 a^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a^2}$$

$$\rightarrow a = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{\pi m e^2}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a}$$
$$= -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a} = -\frac{m e^4}{8\epsilon_0^2 n^2 h^2} \equiv E_n$$

すなわち $E_n \propto \frac{1}{n^2}$

原子の安定性 : 最低エネルギー状態 ($n=1$) が存在。
「基底状態」

これ以下にエネルギーがなることはない。

2. 量子力学と波動関数

2.1. 波動関数とシュレーディンガー方程式

光 (電磁波) $\longleftrightarrow$ 粒子 (光子)

- ・黒体輻射
- ・光電効果
- ・コンプトン効果

それならば

粒子 (電子など) $\longleftrightarrow$ 波としての性質
(ド・ブロイ)

「ド・ブロイ波」
「物質波」

ド・ブロイ

運動量 P
エネルギー E) の自由粒子

古典的なエネルギー: $E = \frac{P^2}{2m}$

→ ド・ブロイ波

波数ベクトル: $k = P/\hbar$

角振動数: $\omega = E/\hbar$

で特徴づけられる波動

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t} = e^{i(P \cdot \mathbf{r}/\hbar - iEt/\hbar)}$$

空間の位置ベクトル 時間
で記述できると主張

波長: $\lambda = \frac{h}{P} = \frac{1}{k}$ 「ド・ブロイ波長」

符号は 相対論から。

シュレディンガー : $\psi(r, t) = e^{ik \cdot r - i\omega t}$

$\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$ に従うことを発見 $[\nabla = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)]$

(左辺) $= i\hbar \cdot \frac{\omega}{i} \psi = \hbar\omega \psi = E\psi$

(右辺) $= -\frac{\hbar^2}{2m} (-ik)^2 \psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi = \frac{P^2}{2m} \psi$

$\rightarrow \underbrace{\left(E - \frac{P^2}{2m}\right)}_0 \psi = 0$

$\boxed{E} \psi = \boxed{\frac{P^2}{2m}} \psi$
 $\Downarrow$
 $\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}} \psi = \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2} \psi$

$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

$P \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$

↑
符号の違いは相対論から

という置き換えをして
関数 $\psi(r, t)$ に 演算

関数 $\psi(r, t)$ に作用する「演算子」
(オペレーター)

(古典論) エネルギー E , 運動量 P : 数 (「c数」)

(量子論) エネルギー : $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

運動量 : $\hat{P} = \frac{\hbar}{i} \nabla$

演算子

「量子化の手続き」

cf. 相対論

ローレンツ変換

$$\begin{cases} t' = \gamma \left(t - \frac{\vec{v} \cdot \vec{x}}{c^2} \right) \\ \vec{x}' = \gamma (\vec{x} - \vec{v} t) \end{cases}$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

ローレンツ不変量 : $E t - \vec{p} \cdot \vec{x} \equiv \sum_{\mu} p_{\mu} x^{\mu} = \sum_{\mu} p^{\mu} x_{\mu}$

$$\begin{cases} p^{\mu} = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right) \\ x_{\mu} = (c t, -\vec{x}) \end{cases}$$

$$p_{\mu} = \left(\frac{E}{c}, -\vec{p} \right)$$

$$x^{\mu} = (c t, \vec{x})$$

演算子 : $p^{\mu} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} = i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right)$

① ポテンシャルがある場合にも拡張が可能

(古典) $E = \frac{p^2}{2m} + V(r, t)$

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

シュレディンガー方程式

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r, t)$ (ハミルトニアン)

→
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$$

ψ : 「波動関数」

② 重ね合わせの原理

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1 = \hat{H} \psi_1 \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2 = \hat{H} \psi_2 \end{cases}$$

とすると, $\psi(r, t) = \alpha \psi_1(r, t) + \beta \psi_2(r, t)$

は $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = \hat{H} \psi(r, t)$ に従う。

(α, β は r や t によらない定数)

(note) ガウス型 波束

$\psi_k(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$ (1次元)

→ $\psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\gamma(k-k_0)^2/2} \psi_k(x, 0)$