i-PERC

電気通信大学

基礎電子工学CH-2

曽我部　東馬

電気通信大学

i-パワードエネルギーシステム研究センター(i-PERC）

先週のOUTLINE：

- ❒ 黒体輻射
- ❒ 量子論の誕生
- ❒ 光量子論
- ● 電子の古典力学特性
- ● 原子構造における電子の早期量子論
- ● 電子波とは何？

量子論

量子論

今週の概要：

- 電子波
- 不確定性原理

量子論

- 円運動の方程式

量子力学

- 複素数表現の導入
- シュレーディンガー方程式の導き

波動性と粒子性

電子や光子において、次の関係が成立する：

１個の光子(電子）のエネルギー

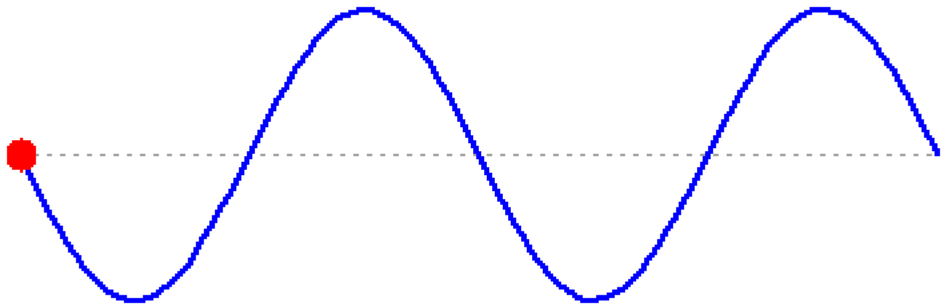
$$E = h\nu$$

光子(電子）の運動量

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

三角関数を表示した波：

X 方向に進む波（余弦波と仮定する）は次のような式で書ける。

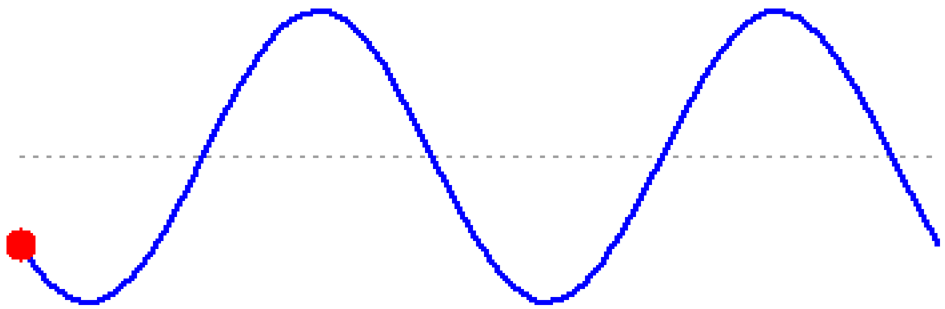


$$y = A\cos\left\{2\pi\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)\right\}$$

$$y = A\cos\left\{2\pi\left(\nu t - \frac{p}{h}x\right)\right\}$$

三角関数を表示した波：

X 方向に進む波（余弦波と仮定する）は次のような式で書ける。



$$y = Acos\left\{2\pi\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)\right\}$$

更に $t = 0$ と仮定し、$\boldsymbol{P} = \frac{\boldsymbol{h}}{\boldsymbol{\lambda}}$ という関係式を導入すると:

$$\boldsymbol{y = Acos\left\{2\pi\left(\frac{p}{h}x\right)\right\}}$$

波数kを導入する:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$y = cos\left\{\left(2\pi\frac{1}{\lambda}x\right)\right\}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad k = \frac{2\pi p}{h}$$

$$y = cos(kx)$$

$$y = A cos\left(2\pi\frac{p}{h}x\right)$$

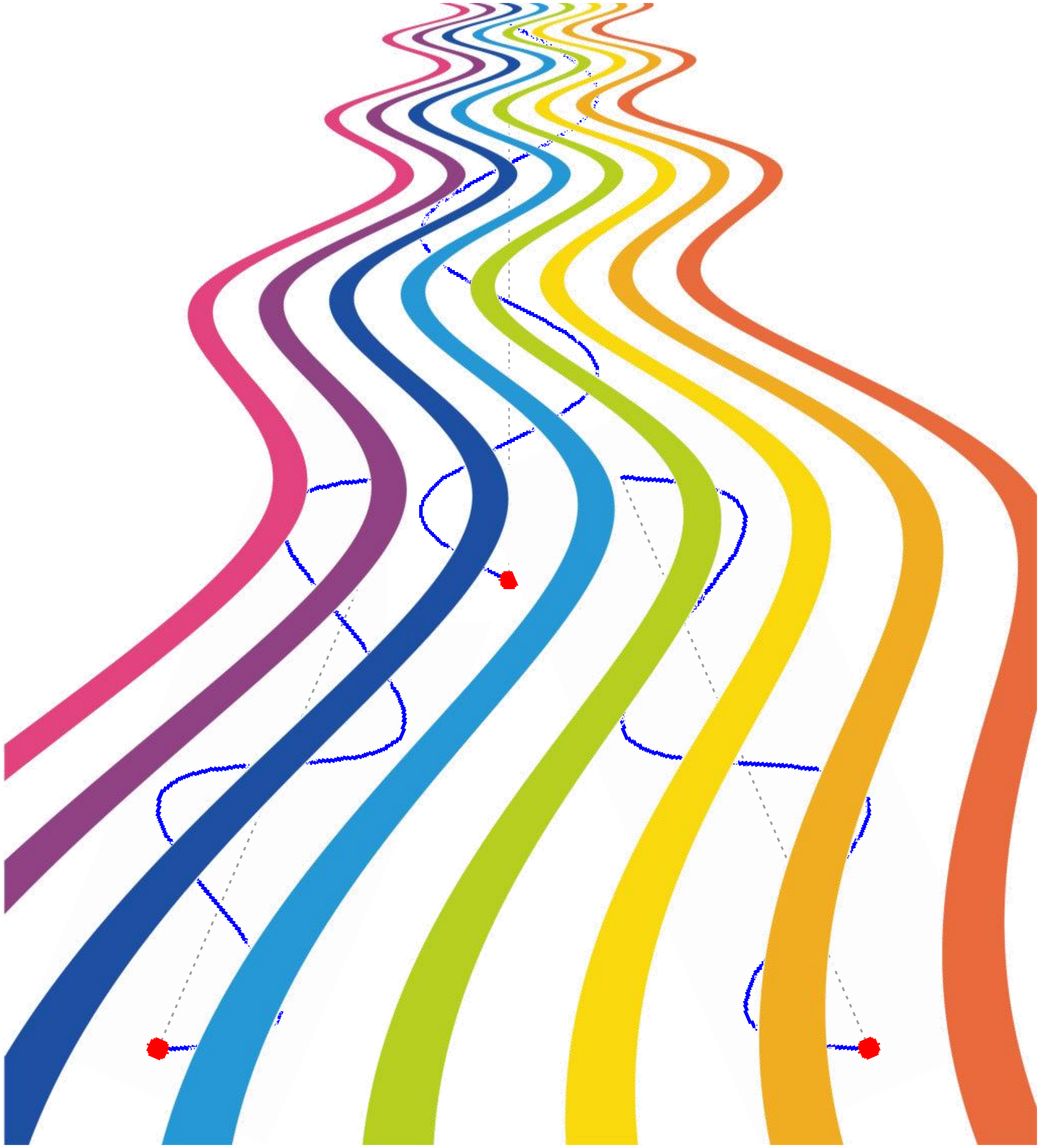
$$p = \frac{hk}{2\pi} = \frac{h}{2\pi}k = \hbar k$$

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

$$p = \hbar k$$

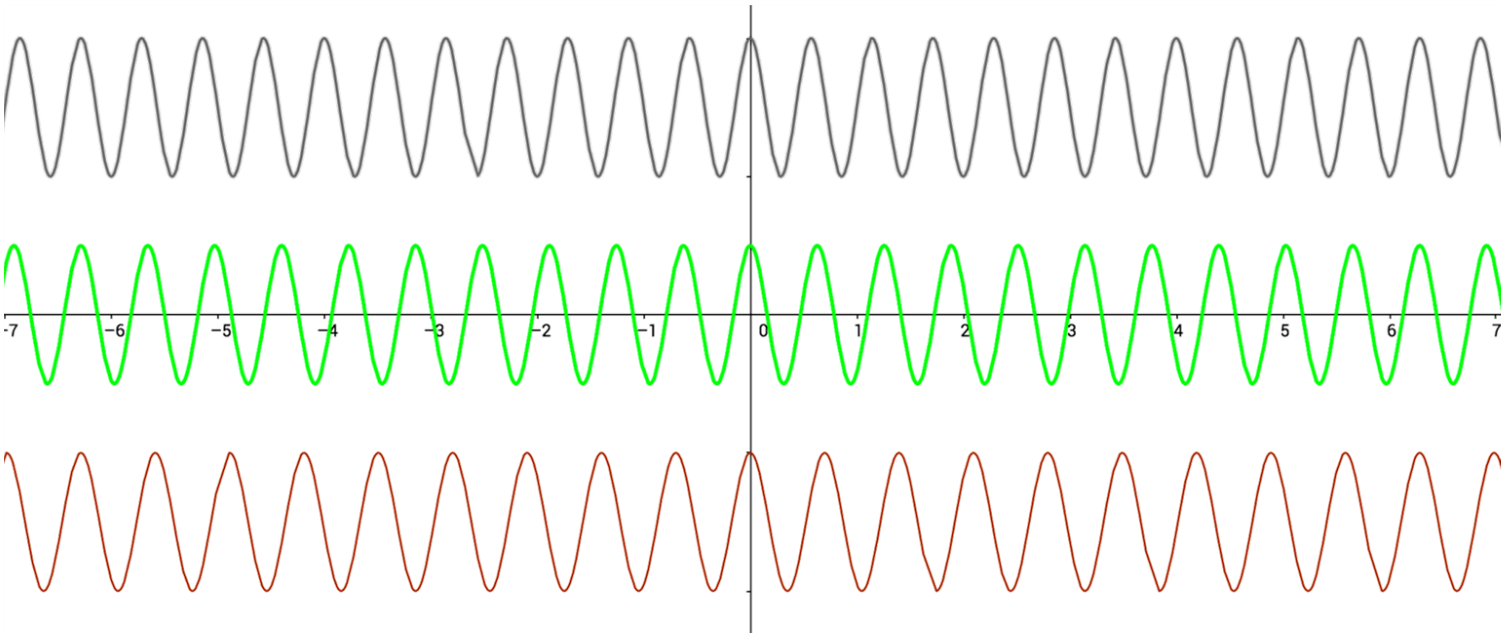
$$y = A cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right)$$

進行する波を止める：



波の合成： $y = cos(kx)$

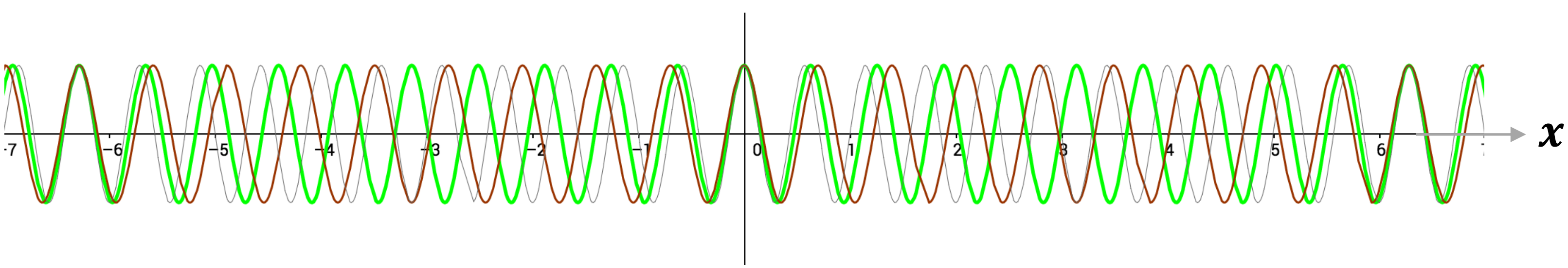
例：$k = 9, 10, 11 \quad (p = 9\hbar, 10\hbar, 11\hbar)$



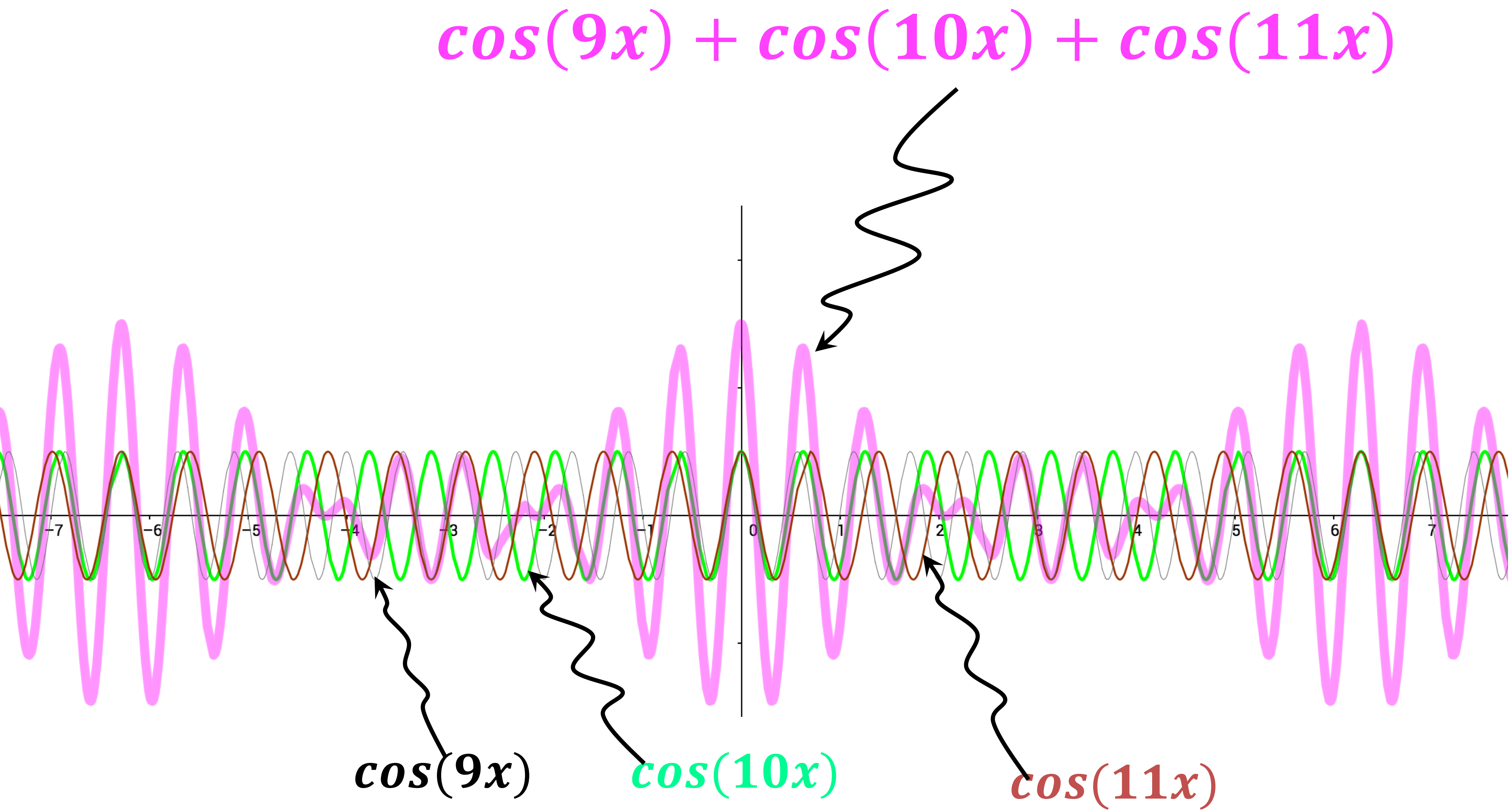
$cos(9x)$

$cos(10x)$

$cos(11x)$

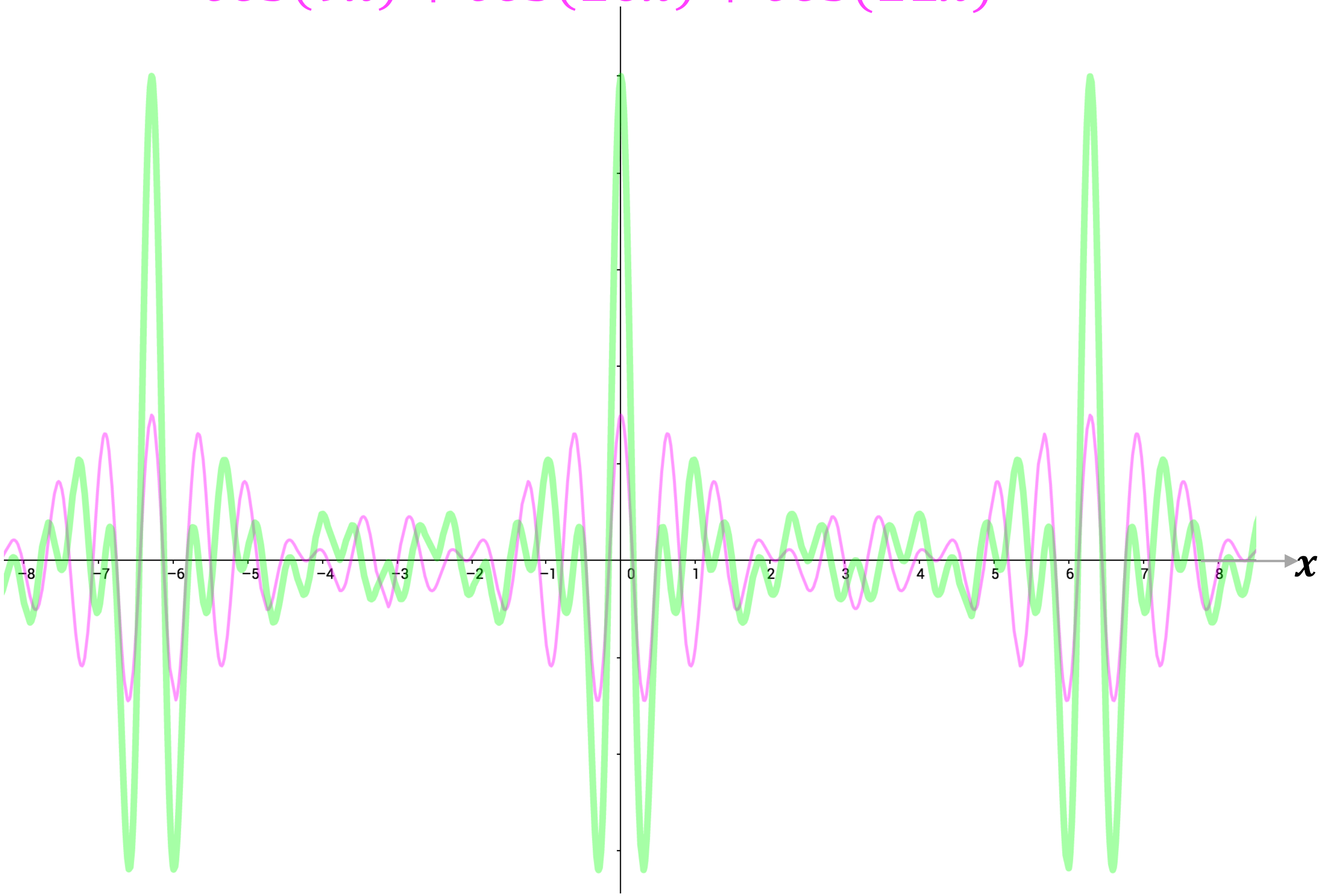


波の合成：②



波の合成：③

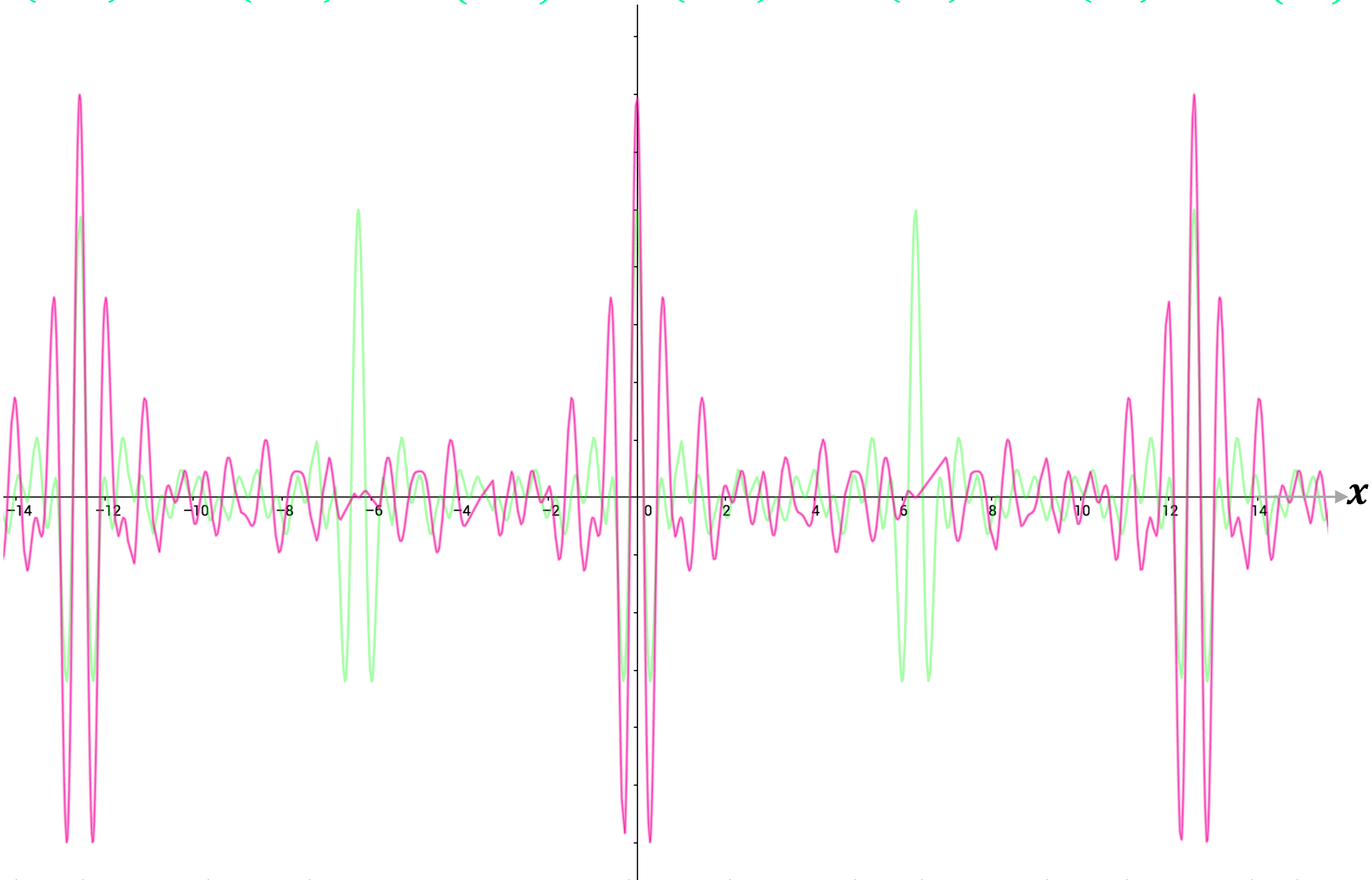
$$\cos(9x) + \cos(10x) + \cos(11x)$$



$$\cos(10x) + \cos(11x) + \cos(13x) + \cos(14x) + \cos(9x) + \cos(8x) + \cos(7x)$$

波の合成：④

$cos(10x) + cos(11x) + cos(13x) + cos(14x) + cos(9x) + cos(8x) + cos(7x)$



$cos(10x) + cos(10.5x) + cos(11x) + cos(11.5x) + cos(12x) + cos(9.5x) + cos(9x) + cos(8.5x) + cos(8x) + cos(7.5x) + cos(7x)$

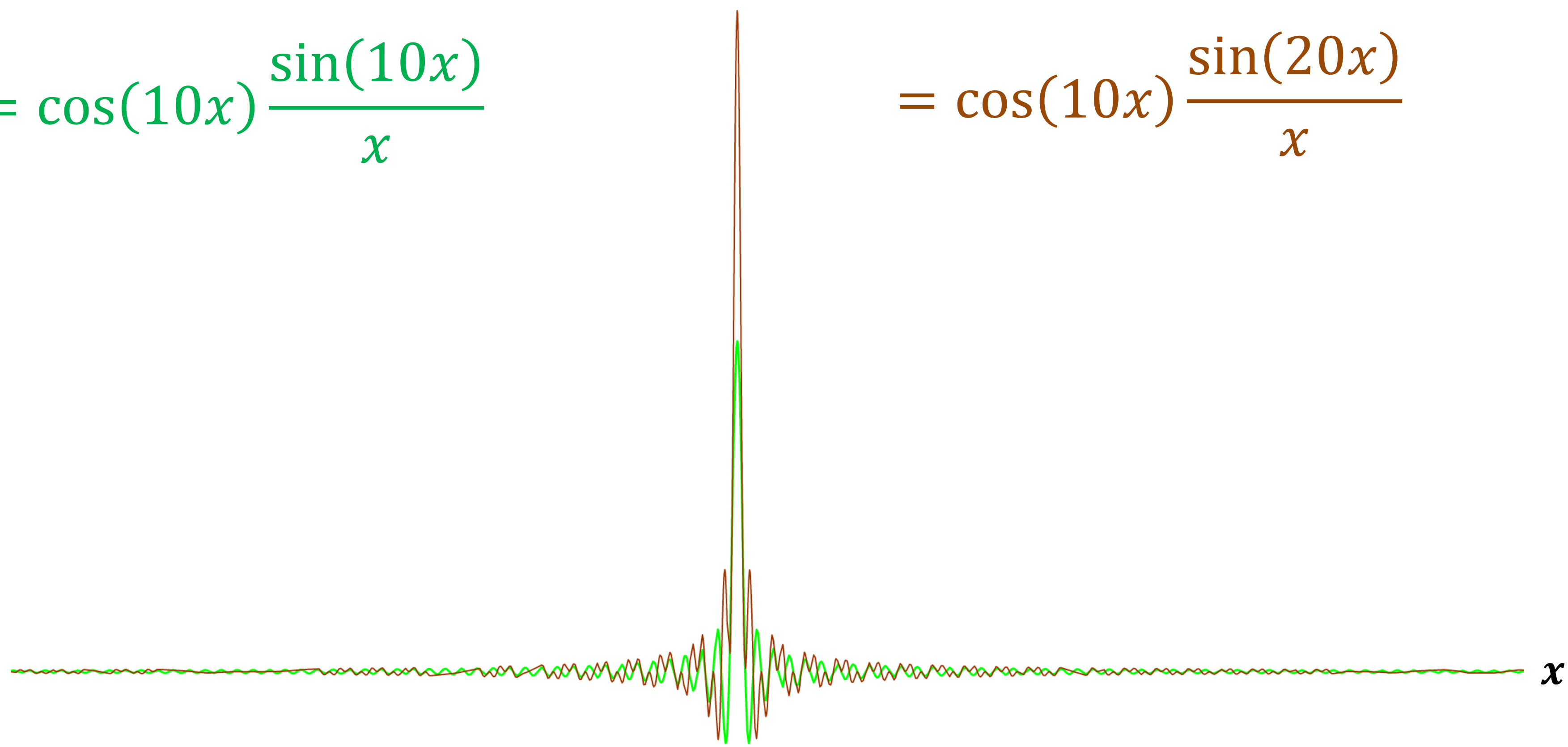
波の合成：究極

$$\int_{k_0-10}^{k_0+10} \cos(kx)\,dk \quad (k_0 = 10)$$

$$= \cos(10x)\frac{\sin(10x)}{x}$$

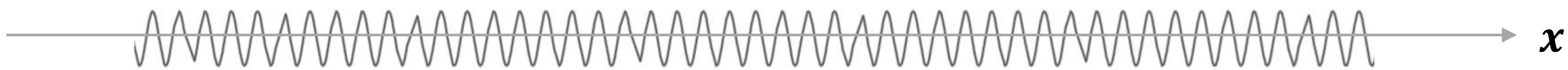
$$\int_{k_0-20}^{k_0+20} \cos(kx)\,dk \quad (k_0 = 10)$$

$$= \cos(10x)\frac{\sin(20x)}{x}$$



不確定性原理

$cos(10x)$　　$k = 10 \rightarrow$　　$p = \hbar k = 10\hbar$

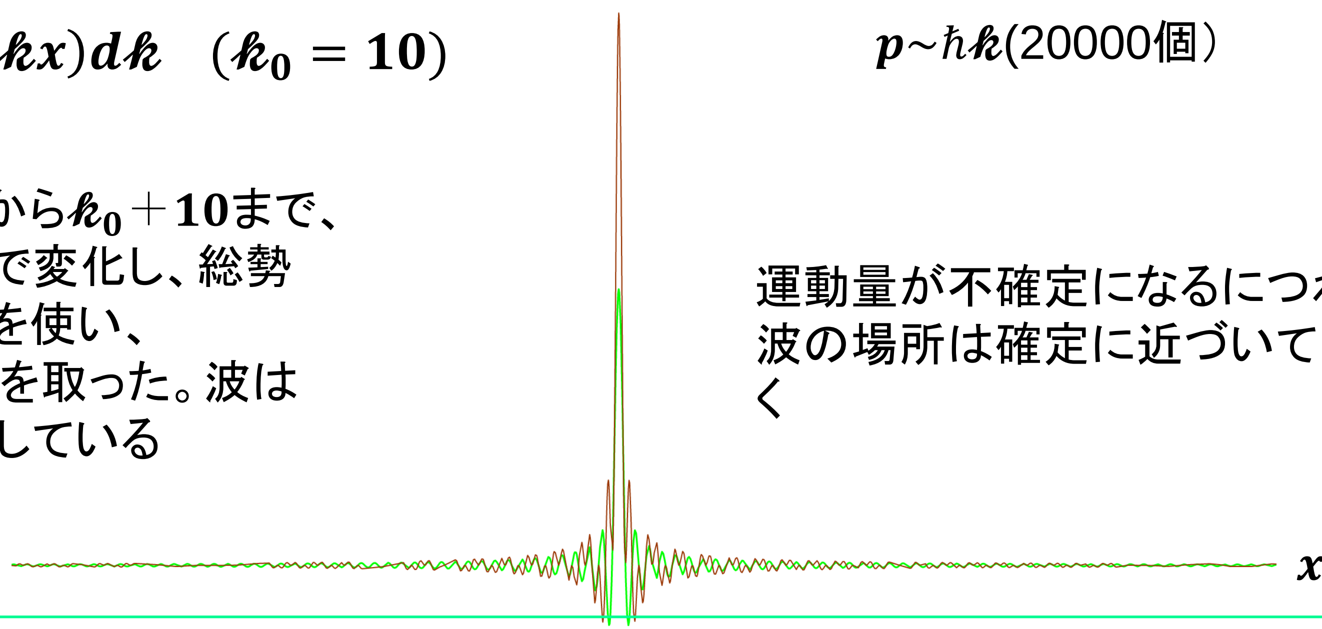


運動量が1個の場合、波はx方向に進行してしまう！

運動量が確定、波の場所は非確定となる

$$\int_{k_0-10}^{k_0+10} cos(kx)dk \quad (k_0 = 10)$$

kは$k_0 - 10$から$k_0 + 10$まで、0.001の刻みで変化し、総勢20000個のkを使い、$cos(kx)$の和を取った。波は0付近に集約している



$p \sim \hbar k$(20000個）

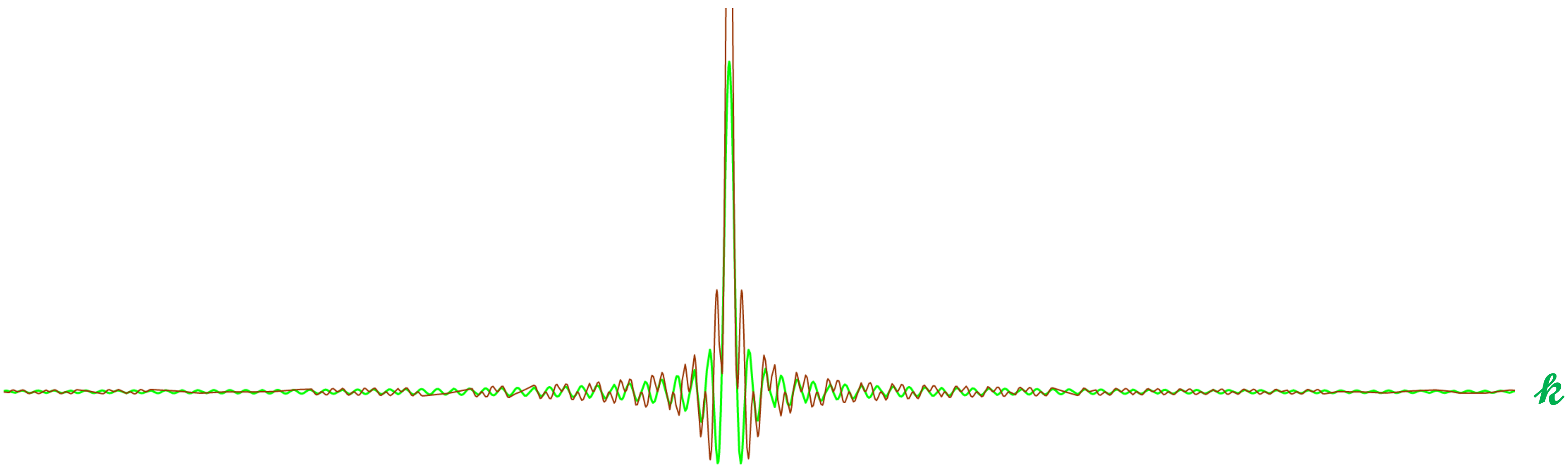
運動量が不確定になるにつれ、波の場所は確定に近づいていく

不確定性原理:p & x

kとx 交換

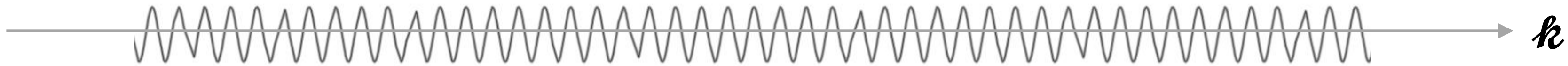
$$y = cos(kx) \qquad\qquad y = cos(xk)$$

$$\int_{x_0-10}^{x_0+10} cos(xk)dx \quad (x_0 = 10) \quad = \cos(10k)\frac{\sin(10k)}{k}$$



不確定性原理:p & x

$\boldsymbol{cos(10k)}$ $\boldsymbol{x=10}$ $\boldsymbol{p \sim \hbar k}$



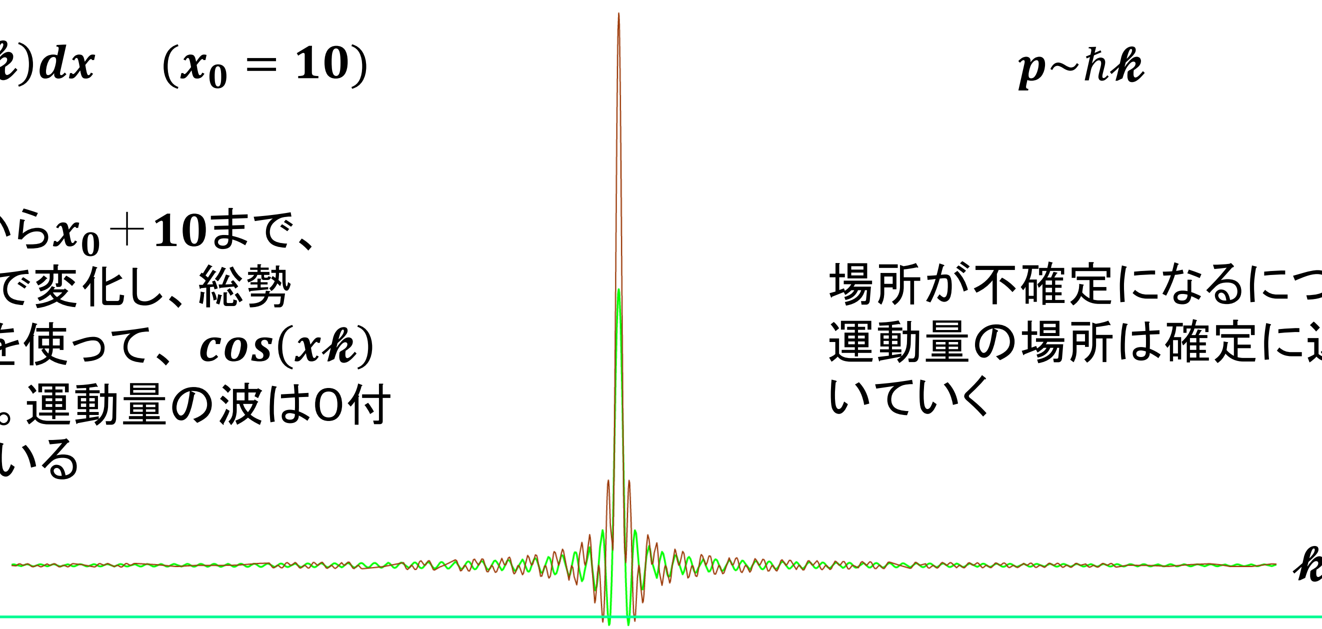
場所が1ヵ所の場合、運動量はk方向に進行してしまう！

場所が確定、波の運動量は非確定になる

$$\int_{x_0-10}^{x_0+10} \boldsymbol{cos(xk)dx} \quad (\boldsymbol{x_0=10})$$

$\boldsymbol{p \sim \hbar k}$

$\boldsymbol{x}$は$\boldsymbol{x_0-10}$から$\boldsymbol{x_0+10}$まで、0.001の刻みで変化し、総勢20000個の$\boldsymbol{x}$を使って、$\boldsymbol{cos(xk)}$の和を取った。運動量の波は0付近に集約している



場所が不確定になるにつれ、運動量の場所は確定に近づいていく

不確定性原理:E & t

X 方向に進む波（余弦波と仮定する）は次のような式で書ける。

$$y = A\cos\left\{2\pi\left(\nu t - \frac{p}{h}x\right)\right\}$$

更に $x = 0$ と仮定する:

$$y = A\cos(2\pi\nu t)$$

$$E = h\nu$$

$$y = A\cos\left(\frac{E}{\hbar}t\right)$$

不確定性原理:E & t

$$y = cos(\hbar x)$$

$$y = cos(2\pi\nu t)$$

↓

$$y = cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right)$$

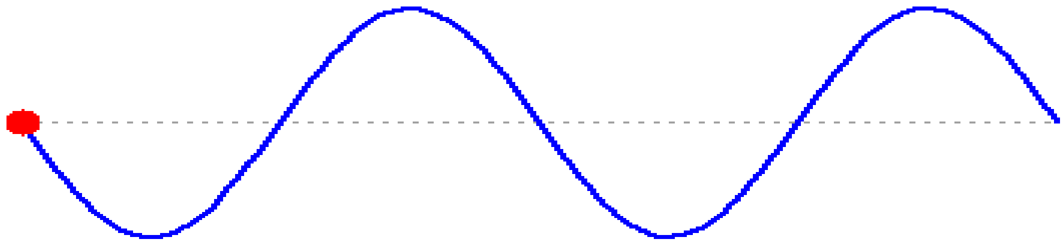
$$y = cos\left(\frac{E}{\hbar}t\right)$$

不確定性原理: p & x が成立なので、

不確定性原理:E & t も成立する

三角関数を表示した波：

X 方向に進む波（余弦波と仮定する）は次のような式で書ける。



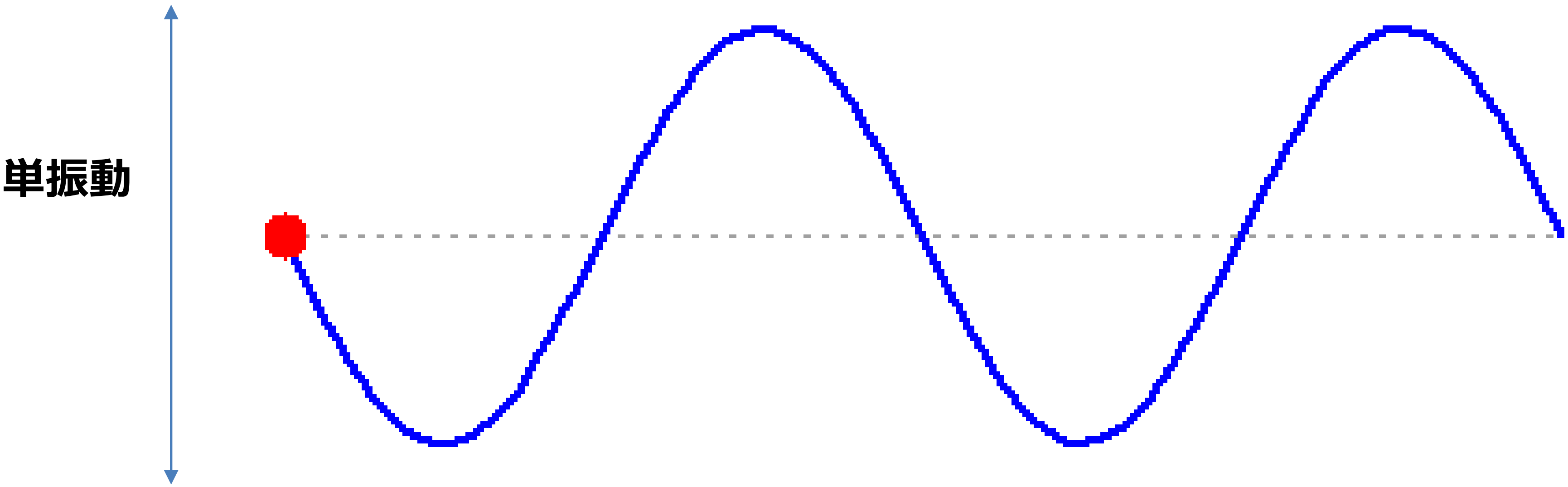
$$y = A\cos\left\{2\pi\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)\right\}$$

$$y = A\cos\left\{2\pi\left(\nu t - \frac{p}{h}x\right)\right\}$$

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{2}\boldsymbol{\pi\nu} = \frac{\boldsymbol{E}}{\boldsymbol{\hbar}} \qquad \boldsymbol{k} = \frac{\boldsymbol{p}}{\boldsymbol{\hbar}}$$

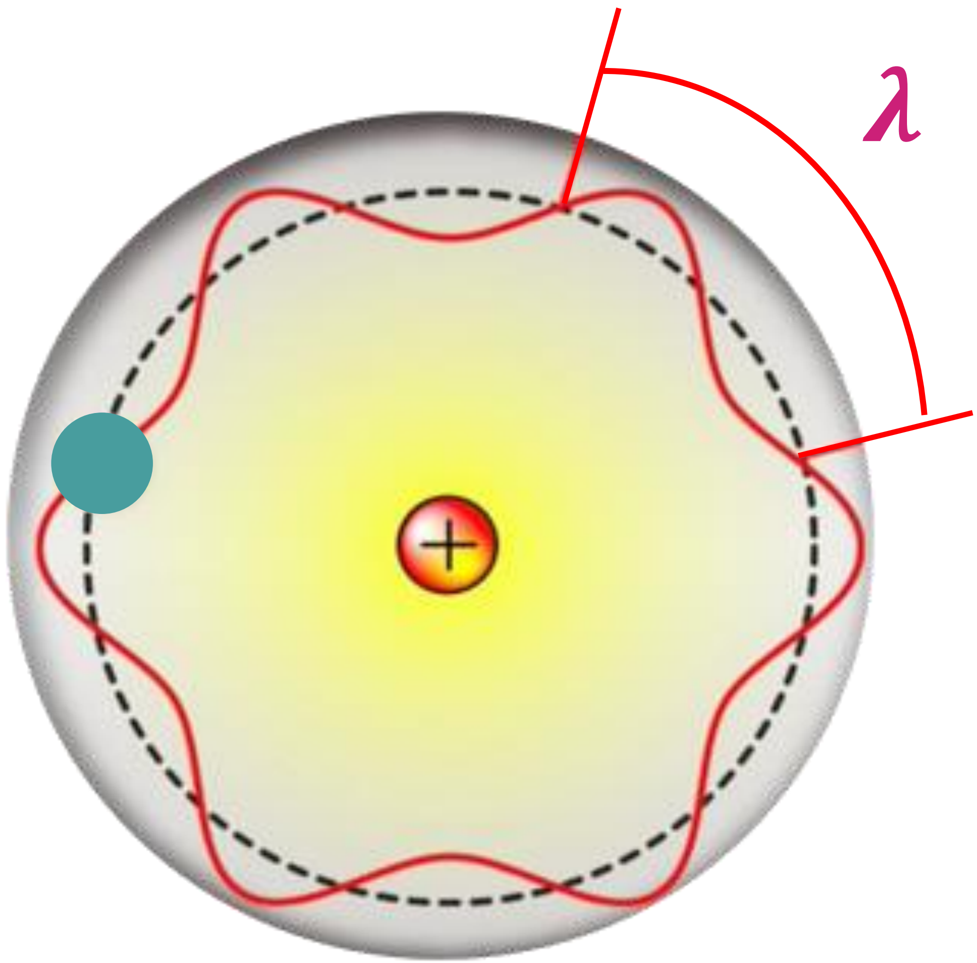
$$y = A\cos(\omega t - \boldsymbol{k}x)$$

単振動の波動方程式：



$$y = A\cos(\omega t - \boldsymbol{k}x)$$

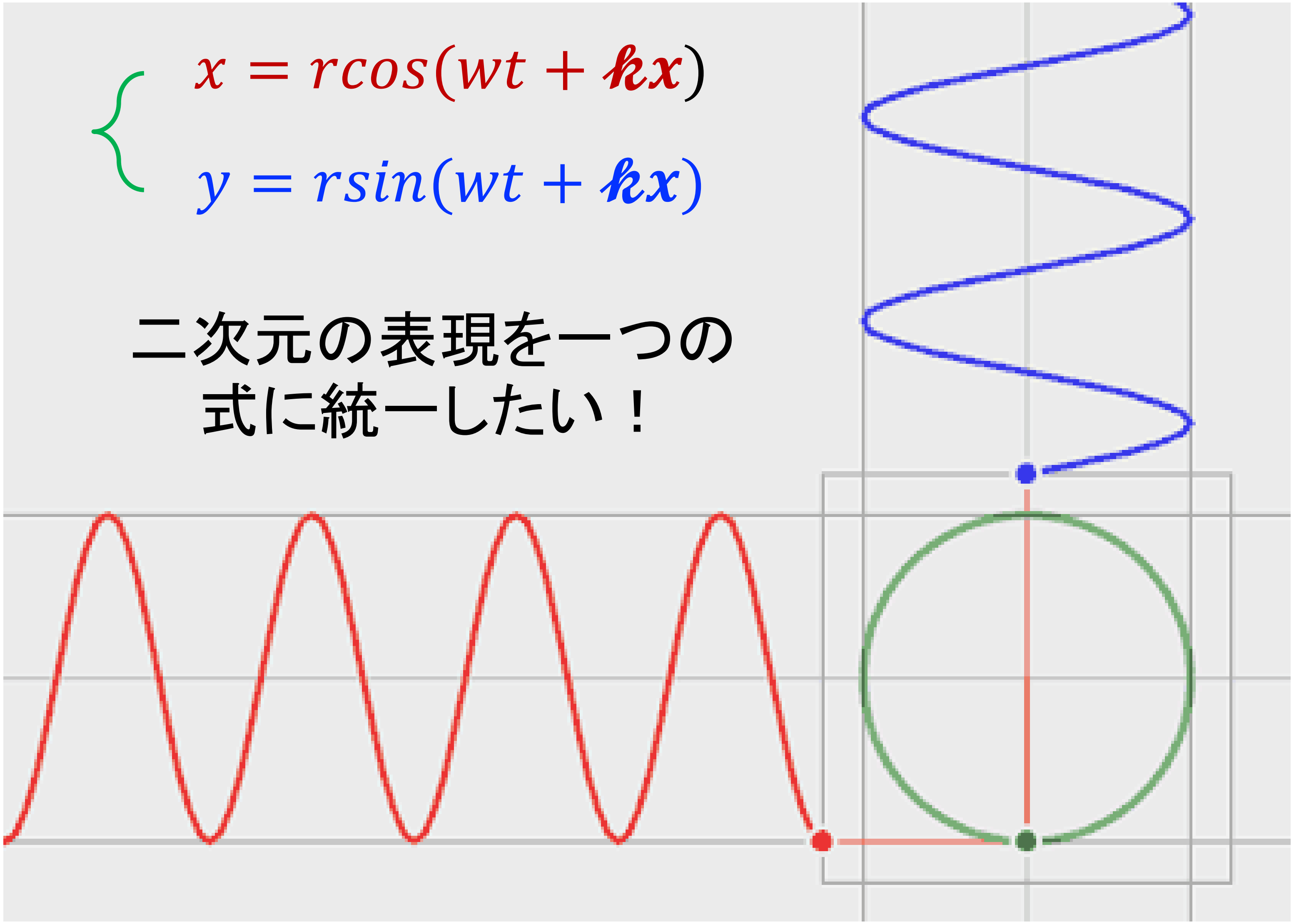
電子の運動：



円運動における波の描像：

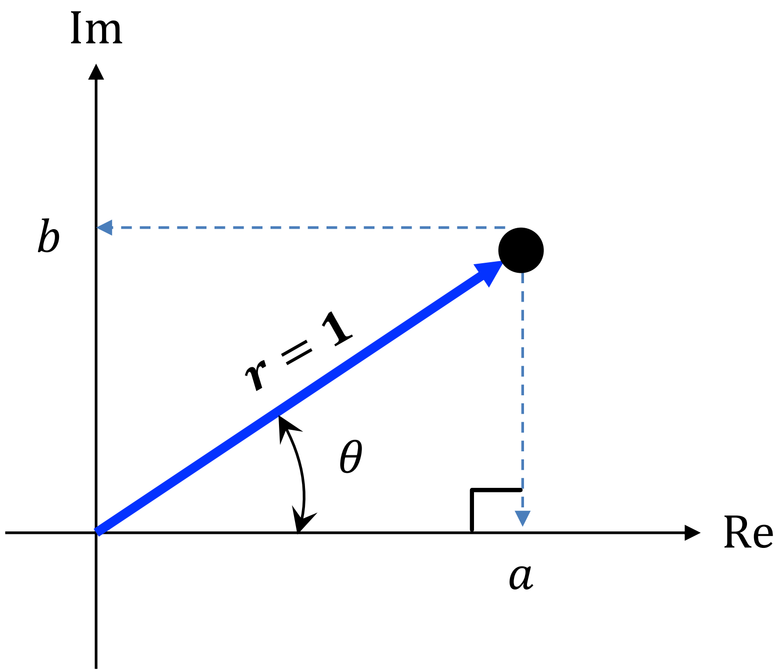
$$\begin{cases} x = r\cos(wt + \boldsymbol{kx}) \\ y = r\sin(wt + \boldsymbol{kx}) \end{cases}$$

二次元の表現を一つの
式に統一したい！



$$\boldsymbol{x^2 + y^2 = r^2}$$

解決策：二次元の表現を一つの式に複素数の導入



$$z = a + ib$$

$$a = rcos(\theta)$$

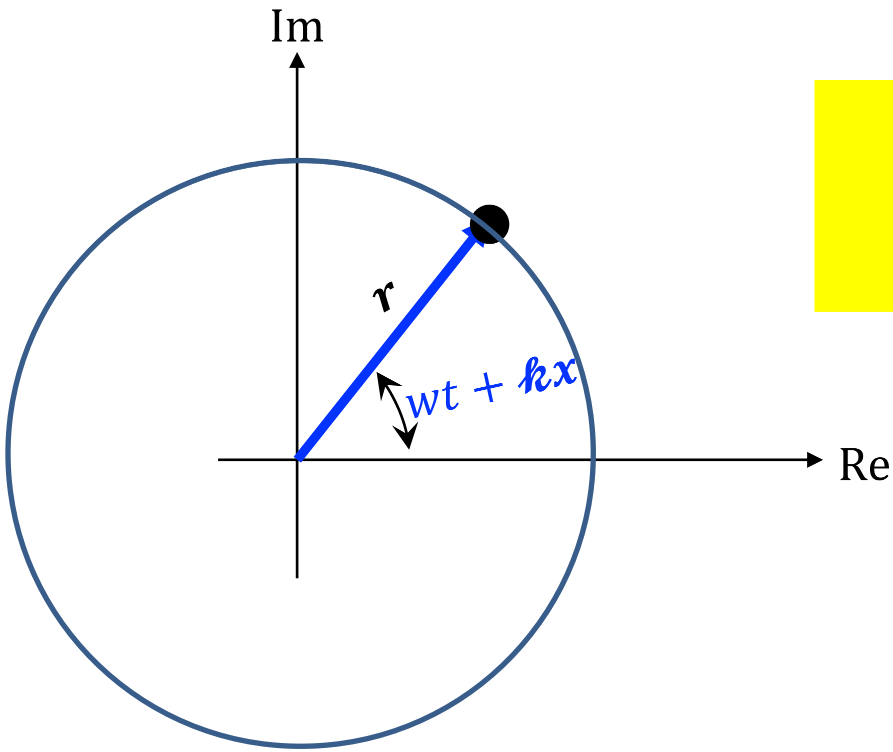
$$b = rsin(\theta)$$

$$z = rcos(\theta) + i\,rsin(\theta)$$

オイラー等式： $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$

$$z = re^{i\theta}$$

二次元の表現を一つの式に：$\theta = wt + kx$



オイラー等式：

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$

$$z = r\cos(wt + kx) + i\, r\sin(wt + kx)$$

$$z = re^{i(wt+kx)}$$

電子の波動関数: $\Psi(x,t)$

$$z = re^{i(wt+\boldsymbol{k}x)}$$

$$\Psi(x,t) = re^{i(wt+\boldsymbol{k}x)}$$

自由電子の波動方程式の導入:

$$\Psi(x,t)=re^{i(wt+kx)}$$

$$\Psi(x,t)=re^{i(\frac{E}{\hbar}t+\frac{p}{\hbar}x)}$$

自由電子のエネルギー

$$E=\frac{1}{2}\mathrm{mv}^2$$

自由電子の運動量:

$$p=m\mathrm{v}$$

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

自由電子の波動方程式の微分遊び:

$$\Psi(x,t) = re^{i\left(\frac{\boldsymbol{E}}{\hbar}t + \frac{\boldsymbol{p}}{\hbar}\boldsymbol{x}\right)}$$

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\boldsymbol{E}\Psi(x,t)$$

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} = \frac{p}{\hbar}\Psi(x,t)$$

$$\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\boldsymbol{p^2}}{\hbar^2}\Psi(x,t)$$

自由電子の波動方程式 ＋ $\boldsymbol{E}\sim\boldsymbol{p}$ 関係式

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\boldsymbol{E}\Psi(x,t) \quad\Rightarrow\quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \boldsymbol{E}\Psi(x,t)$$

$$\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}\Psi(x,t) \quad\Rightarrow\quad \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{p^2}{\boldsymbol{2m}}\Psi(x,t)$$

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

$$\boldsymbol{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = 0}$$

自由電子の波動方程式からシュレーディンガー方程式

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = 0$$

$$i^2 = -1$$

$$i\hbar\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

シュレーディンガー方程式

演算子という概念の導入:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} \qquad E = \frac{p^2}{2m}$$

$$\begin{cases} E \to & i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} \\ p \to & i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} \end{cases}$$

エネルギー演算子

運動量演算子

来週の予告

波動関数

確率波

二重スリット実験

シュレーディンガーの猫

自由電子ではない場合の波動方程式の導入:

1次元の無限に高い井戸型ポテンシャルのシュレーディンガー方程式の解: