量子力学Ⅰ　平成 26 年 4 月 23 日　　　　　　　　　工学主専攻　学籍番号　　　　　　　　氏名

１．粒子に対するド・ブロイ波と電磁波に対する粒子性について、具体的な数値から考えてみよう。

⑴　100 eV の運動エネルギーを持つ電子のド・ブロイ波長を求めよ。但し電子の静止質量を 9.1×10^{-31} kg、素電荷を 1.6×10^{-19} C、プランク定数 h を 6.6×10^{-34} Js とする。（以下の問題において粒子の運動エネルギーは相対論的効果を考慮しなければいけないほど高くはなく、その影響は無視できる）

運動エネルギーを K とすると、ド・ブロイ波長は $\lambda = h/p = h/\sqrt{2mK}$。1 eV とは素電荷粒子が 1V=1J/C の電位差で加速されたときに得る運動エネルギーを表わす。100V で電子を加速するので、$(6.6\times10^{-34}\,[\mathrm{J\ s}])/(2\times9.1\times10^{-31}\,[\mathrm{kg}]\times100\,[\mathrm{V}]\times1.6\times10^{-19}\,[\mathrm{C}])^{1/2} \sim 1.2\times10^{-10}$ [m]。参考：固体や液体などの凝集体において原子や分子の結合に関与する電子のエネルギーは大きくともせいぜい 10　eV 程度である。

(2)　中性子においてド・ブロイ波長が 2×10^{-10} m となるときの運動エネルギーを eV 単位で答えよ。（中性子の静止質量=1.7×10^{-27} kg）

$K = p^2/(2m) = (h/\lambda)^2/2m \cong 3.2\times10^{-21}[\mathrm{J}]\ \cong 0.02\,[\mathrm{eV}]$。速度で表わすと約 1940 m/s。電荷をもたない中性子でも慣例で eV 単位のエネルギー表示がよく用いられる。電子では 100 eV 程度、中性子では 0.01 eV 程度のときに、そのド･ブロイ波の波長が 10^{-10} m のオーダーとなる。結晶の格子定数も 10^{-10} m オーダーであり、結晶に対する回折実験には 100 eV 程度の電子や熱中性子（30 meV、温度換算で約 300 K）が用いられる。より微細な配列構造を研究するためにはより短い波長のド･ブロイ波が必要である。そのため、原子配列を直接観察する透過型電子顕微鏡では 100 keV 以上に加速した電子を用いる。例えば、1MeV の電子のド･ブロイ波長は約 8.7×10^{-13}　m である。

⑶　直径 0.5mm の雨粒が 2 m/s で落下している。この雨粒に対するド･ブロイ波長を求めよ。

雨粒の質量は $m = \frac{4}{3}\pi\left(2.5\times10^{-4}\right)^3\times10^3 \cong 6.5\times10^{-8}$ [kg]ゆえ、$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.6\times10^{-34}}{6.5\times10^{-8}\times2} \cong 5.0\times10^{-27}$ m。

この値は水素原子の大きさの指標であるボーア半径 5.3×10^{-11} m や原子核の大きさ〜10^{-15} m よりもはるかに小さく、原子や核子レベルのスケールで見てもその波動性が認識できないことを意味する。雨粒くらいの小ささの粒子の運動では、波動（量子力学）として取り扱うよりも、まだまだ粒子（古典力学）として取り扱ったほうが適していることを示す。

⑷　FM 放送局 NACK5 の周波数は 79.5 MHz でその出力は 5 kW である。送信アンテナから 1 秒間に放出される光子の数を求めよ。また、光子が等方的に放出されるとした場合、送信アンテナから 10km 離れた地点で 1 秒間に断面積 1cm^2 あたり通過する光子数を求めよ。

$5\times10^3/(6.6\times10^{-34}\times79.5\times10^6) \sim 9.5\times10^{28}$ [個/s]

9.5×10^{28}[個/s]$\times(1\times10^{-2}$[m/cm]$)^2/(4\times3.14\times(10\times10^3$[m]$)^2) \sim 7.6\times10^{15}$ [個/s/cm^2]

このように極めて多数のフォトン数となるため、電磁波の粒子性はあらわには見えてこず、波動としてみなしたほうが都合よい。

２．質量 m の物体とバネ定数 α のバネからなる一次元振動系を考える。平衡位置からの変位が x のときの運動量を p とする。

⑴　x 及び p を用いて 運動エネルギー K とポテンシャルエネルギー U の和を示せ。(このエネルギー和 $H = K + U$ はハミルトニアンと呼ばれる)。

$$K + U = H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\alpha x^2}{2}$$

共役な変数（この場合は x 及び p）で表わされた運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和がハミルトニアンである。

⑵　上で求めた H は時間変化しないことを示せ。

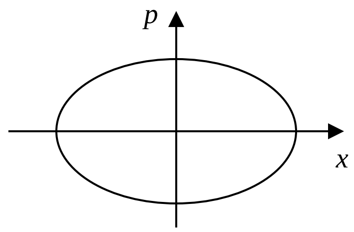
$\frac{dH}{dt} = \frac{p}{m}\frac{dp}{dt} + \alpha x\frac{dx}{dt} = \dot{x}\left[m\ddot{x} + \alpha x\right]$。ここで、運動方程式 $m\ddot{x} = -\alpha x$ から、$\frac{dH}{dt} = 0$。よって H は時間変化しない。

あるいは、解析力学から $\frac{\partial x}{\partial t} = \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}$、$\frac{\partial p}{\partial t} = \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}$ より、$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial x}\frac{\partial H}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial p}\left(-\frac{\partial H}{\partial x}\right) = \{H, H\} = 0$

最後の式で左端より 1 つ左側の中括弧はポアソン括弧である。

⑶　横軸 x、縦軸 p とする $x-p$ 平面上での運動の様子を考える。上で求めた H は $x-p$ 平面上でどのような軌跡を描くか答えよ。

$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\alpha x^2}{2}$ から $1 = \frac{p^2}{2mH} + \frac{x^2}{2H/\alpha}$。これは x 及び p に対する楕円関数である。



従って H を x 及び p の関数と見なすと、x 及び p 軸にそれぞれ $\pm\sqrt{\frac{2H}{\alpha}}$ 及び $\pm\sqrt{2mH}$ で交わる楕円となる。

(4)　　ゾンマーフェルトは周期的運動に対して$\oint pdx = nh$の拘束条件を考えた（ゾンマーフェルトの量子化条件、nは自然数）。この条件を用いて、この振動系のエネルギーが$E_n = nh\nu$と表わされることを示せ。ここで、E_nはnのときの系のエネルギーH、また$\nu = (2\pi)^{-1}\sqrt{\alpha/m}$である。

周回積分は楕円の面積を表すので、$\oint pdx = \pi\sqrt{\frac{2H}{\alpha}}\sqrt{2mH} = 2\pi\sqrt{\frac{m}{\alpha}}H = \frac{1}{\nu}H$。題意より$n$のときの系のエネルギー$H$を$E_n$とするので、$\frac{1}{\nu}E_n = nh$。すなわち$E_n = nh\nu$。この量子化条件により、系のエネルギーは$n$で決定される不連続な値となる。

ボーアは、水素原子の電子軌道の円周はある波長λの整数倍となる、すなわち$2\pi r = n\lambda$と制限され、これにド･ブロイの関係$\lambda = h/p$を適応することで$p\cdot 2\pi r = nh$の量子化条件を考えた。ゾンマーフェルトの量子化条件は円運動以外への周期運動への拡張となっている。

(5)　$\alpha = 10^{-3}$ [N/m]のバネと見なせる繊維の先にぶら下がった 1m g のホコリが振幅 1μm で振動している。この運動状態に対してnを求めよ。

最大振幅での U は系のエネルギーに等しくなる（このとき K ＝ 0）ので、$E_n = \frac{1}{2}\times 10^{-3}\times\left(10^{-6}\right)^2 = 5\times 10^{-16}$ [J]。一方、$h\nu = 6.6\times 10^{-34}\times\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{10^{-3}}{10^{-6}}} \approx 3.3\times 10^{-33}$ [J]。よって、$n \approx 1.5\times 10^{17}$！ 1mg のおもりが非常に弱いバネにつながれて小さく振動している状態でも、それに対するnは極めて大きい。このような場合に量子力学的な効果（エネルギーが不連続になるなど）はあらわに観測されず、その運動の記述には量子力学よりも古典力学による取り扱いが適している。

３．振幅が同じで波数と角振動数がわずかに異なる２つの波$A\cos(k_1x - \omega_1 t)$、$A\cos(k_2x - \omega_2 t)$を考える。$k_1 - k_2 = \Delta k$、$\omega_1 - \omega_2 = \Delta\omega$とする。

(1)　合成波は近似的に$2A\cos\left((\Delta kx - \Delta\omega t)/2\right)\cos(k_1x - \omega_1 t)$と表せることを示せ。

和積の公式から$A\cos(k_1x - \omega_1 t) + A\cos(k_2x - \omega_2 t) = 2A\cos\frac{(k_1+k_2)x - (\omega_1+\omega_2)t}{2}\cos\frac{(k_1-k_2)x - (\omega_1-\omega_2)t}{2}$。

$k_1 + k_2 \approx 2k_1$、$\omega_1 + \omega_2 \approx 2\omega_1$の近似及び$k_1 - k_2 = \Delta k$、$\omega_1 - \omega_2 = \Delta\omega$を用いると、$2A\cos\frac{\Delta kx - \Delta\omega t}{2}\cos(k_1x - \omega_1 t)$。

(2)　合成波の振幅が最大となる部分が移動する速度は$v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$と表わせることを示せ。（一般的な定義は$\Delta k \to 0$の極限として$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k}$である。）

合成波は振幅が$2A\cos\frac{\Delta kx - \Delta\omega t}{2}$で時間変化する“うなり”を伴った進行波$\cos(k_1x - \omega_1 t)$である。振幅が最大となる部分の移動速度は振幅の変化を表す成分$\cos\frac{\Delta kx - \Delta\omega t}{2}$に対する位相速度に等しいので、$v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$。これに対して、ある注目した位相点が移動するときの速度が位相速度である。$A\cos(k_1x - \omega_1 t)$の単色波に対して、空間的な繰り返しの長さが波長λであり、時間的な繰り返しの長さが周期Tであるから、その位相速度は$v_p = \lambda/T = (2\pi/T)/(2\pi/\lambda) = \omega_1/k_1$となる。

(3)　質量mの自由粒子（力が働いていない粒子）が速度vで移動している。そのド・ブロイ波の群速度v_gはvに一致することを示せ。

アインシュタインの式$\varepsilon = \hbar\omega$を変形したものに、古典力学での粒子のエネルギーと運動量の関係$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$及びド・ブロイの関係$\lambda = \frac{h}{p}$を代入すると、$\omega = \frac{\varepsilon}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar^2(2\pi)^2}{2m\lambda^2\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$（$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k}$の関係を利用したいがため、ωを$k$の関数として表わした）。これより$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$となり、$v_g$は古典力学での粒子の速度に等しくなることが分かる。式の変形途中で見られるように、波数を用いると運動量は$p = \hbar k$と表わされる（波長の代わりに波数を使って表わしたド・ブロイの関係）。

４．粒子を狭い空間に閉じ込めようとすると運動エネルギー（運動量）は非常に大きくなる。このことを踏まえて、水素原子の大きさ（半径r）の空間に電子を閉じ込めるとき、その運動量pとの間には$r\cdot p = \hbar$なる関係が成り立つとしよう。このとき、電子のエネルギーが最少となるr_0を求めよ。

$r\cdot p = \hbar$を変形して$p = \hbar/r$。運動エネルギーとポテンシャル（静電）エネルギーの和が電子のエネルギーであるから、$E = p^2/(2m) - e^2/(4\pi\varepsilon_0 r) = \hbar^2/(2mr^2) - e^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$。$r$に対して微分すると$dE/dr = -\hbar^2/(mr^3) + e^2/(4\pi\varepsilon_0 r^2) = 0$、すなわち$r_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(me^2)$でエネルギー最小値となる。ちなみにこの$r_0$はボーア半径に等しい。