４／１６　授業

量子論の夜明け　続き

１．６　de Broglie 物質波

$$\lambda = h / p$$ （1.12）　p 運動量　Einstein 光量子

$$\lambda = h / mv$$ ド・ブロイ波長

１．７　ド・ブロイ波の実測

電子線回折　<-->　Ｘー線回折

電子顕微鏡

１．８　Bohr の原子論

水素原子核（プロトン）と電子とのクーロン力

$$f = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$ ε_0　真空の誘電率

回転運動による遠心力（原子核は電子に比べて十分重いと仮定）

$$f = \frac{m_e v^2}{r}$$ m_e，v　電子の質量、速度

両方の力がつり合っている

$$f = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \qquad (1.14)$$

軌道運動をしている電子のドブロイ波長は１周で整合する

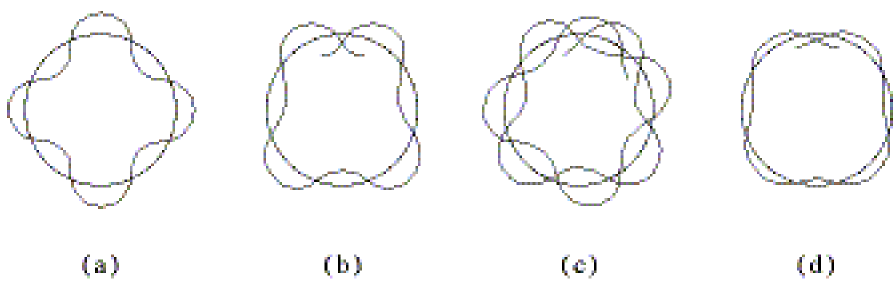

図１．９　Bohr 軌道中を運動する de Broglie 波の整合と不整合

整合の条件

$$2\pi r = n\lambda \quad n = 1, 2, 3, \cdots \qquad (1.15)$$

（1.12）-->（1.15）

$$m_e v r = nh / 2\pi = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \cdots \qquad (1.16)$$

角運動量の量子化

（1.16）--> （1.14）

$$r = \frac{\varepsilon_0 h^2 n^2}{\pi m_e e^2} = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 n^2}{m_e e^2} \qquad (1.17)$$

$\boldsymbol{n = 1}$　の時最小半径（ボーア半径）

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 5.292 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{m} = 52.92\,\mathrm{pm} \qquad (1.18)$$

電子の全エネルギー　E = KE + V (r)
クーロンの法則よりポテンシャルエネルギーは

$$V(r) = \int_{\infty}^{r} \frac{e^2 dr}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = -\left[\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]_{\infty}^{r} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (1.19)$$

$$E = KE + V(r) = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (1.20)$$

（1.14）--> （1.20）

$$E = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} \qquad (1.21)$$

（1.17）--> （1.21）

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \cdots \qquad (1.22)$$

n = 1　最低エネルギー　この軌道に電子がいる状態　基底状態
n > 1　の軌道に電子がいる状態　励起状態
水素原子のスペクトル　　状態間の遷移
エネルギー差（ Bohr の振動数条件）

$$\Delta E = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) = h\nu \qquad (1.23)$$

この波数表示は

$$\tilde{\nu} = \nu / c = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 c h^3}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \qquad (1.24)$$

（1.11）式と比較して

$$R_\infty = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 c h^3} \qquad (1.25)$$

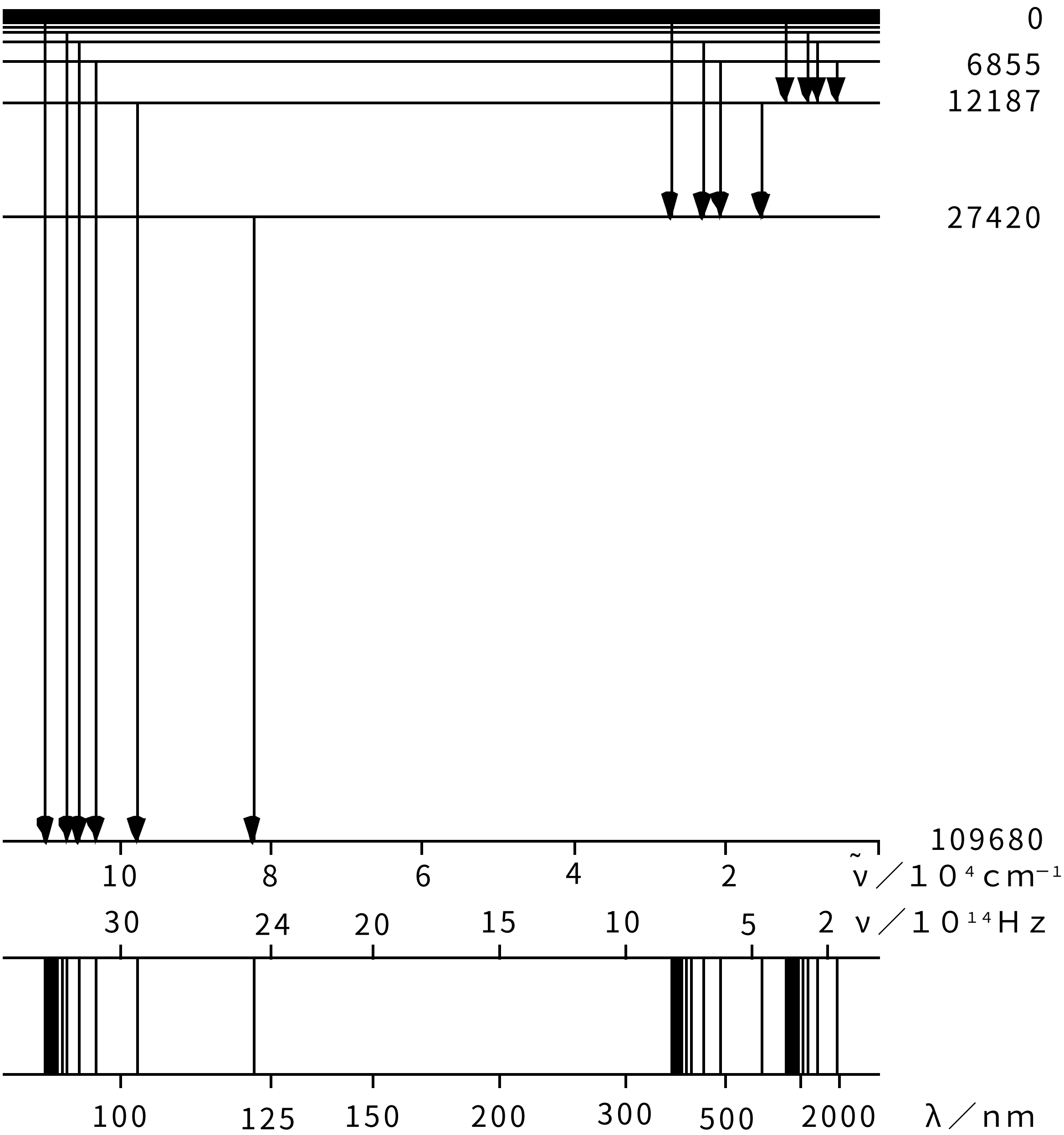

図１．10　水素原子のエネルギー準位図

２章古典的波動方程式

２．１　古典的波動方程式　１次元（弦の振動）

$$\partial^2 \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}) / \partial \boldsymbol{x}^2 = (1 / \boldsymbol{v}^2)\, \partial^2 \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}) / \partial \boldsymbol{t}^2 \quad (2.1)$$

境界条件（両端固定）　$\boldsymbol{x} = 0, \boldsymbol{L}$ で $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}) = 0$　(2.2)

２．２　変数分離法で解く

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}) = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{T}(\boldsymbol{t}) \quad (2.3)$$

2.3 式を 2.1 式に代入し、

$$T(t)\frac{d^2X(x)}{dx^2}=\frac{X(x)}{v^2}\frac{d^2T(t)}{dt^2} \tag{2.4}$$

$X(x)\cdot T(t)$で両辺を割る x と t は独立変数であるので常に成り立つためには定数であることが必要

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2}=\frac{1}{v^2\,T(t)}\frac{d^2T(t)}{dt^2}=K \tag{2.5}$$

Kを分離定数という。整理すると

$$\frac{d^2X(x)}{dx^2}-K\ X(x)=0 \tag{2.8}$$

$$\frac{d^2T(t)}{dt^2}-K\,v^2\ T(t)=0 \tag{2.9}$$

Kで場合分けをする

（1）　$K=0$ の場合

$$X(x)=a_1\,x+b_1 \tag{2.10}$$

$$T(t)=a_2\,x+b_2 \tag{2.11}$$

境界条件

$$X(0)=b_1=0\ ,\quad X(L)=a_1L=0\quad\rightarrow\quad a_1=0$$

全ての x に対して $X(x)=0$ それゆえ常に $u(x,t)=0$ となり物理的には意味の無い解である。

（2）　$K>0$ の場合

k を実数とすると　$K=k^2>0$

$y=e^{\alpha x}\quad y'=\alpha\,e^{\alpha x}\quad y''=\alpha^2\,e^{\alpha x}=\alpha^2\,y$ の関係を使うと

$$\frac{d^2y}{dx^2}-k^2\,y=0\quad\rightarrow\quad(\alpha^2-k^2)\,y=0 \tag{2.15}$$

常に成り立つためには $\alpha=\pm k$

一般解は　$y=c_1\,e^{k\,x}+c_2\,e^{-k\,x}$

境界条件

$$x=0\quad y=0=c_1+c_2\quad\rightarrow\quad c_2=-c_1$$

$$x=L\quad y=0=c_1(e^{kL}-e^{-kL})$$

常に成り立つためには $c_1 = c_2 = 0$ でなければならず、またもや $y = 0$ となるので $u(x, t) = 0$ となり意味を持たない。

（3）　$K < 0$ の場合　振動する解

k を実数とすると　$K = -k^2 < 0$

（2）と同様にして解く $y = e^{\alpha x}$ と置いて

$(\alpha^2 + k^2)\, y = 0$,　$\alpha = \pm i\, k$　を得る

一般解は

$$y = c_1 e^{i k x} + c_2 e^{-i k x} \tag{2.17}$$

オイラーの公式 $e^{\pm i \theta} = \cos(\theta) \pm i \sin(\theta)$ を使って書き直すと

$$y = (c_1 + c_2) \cos(k\, x) + i\, (c_1 - c_2) \sin(k\, x)$$

$$= A \cos(k\, x) + B \sin(k\, x) \equiv X(x)$$

境界条件

$$x = 0 \quad y = 0 = A = X(0)$$

$$x = L \quad y = 0 = B \sin(k\, L) = X(L) \tag{2.18}$$

$B = 0$ の時は無意味な解となる。

$\sin(k\, L) = 0$ の時は

$$k\, L = n\, \pi\, , \quad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{2.19}$$

従って

$$X(x) = B \sin\left(\frac{n\, \pi\, x}{L}\right) \tag{2.20}$$

が得られた。

$T(t)$ についても同様にして

$$\frac{d^2 T(t)}{dt^2} + k^2\, v^2\, T(t) = 0 \tag{2.21}$$

$$T(t) = D \cos \omega_n\, t + E \sin \omega_n\, t \tag{2.22}$$

が得られた。

$$k = \frac{n\, \pi}{L} \quad \rightarrow \quad k\, v = \omega_n = \frac{n\, \pi\, v}{L}$$

$$u(x, t) = X(x) \cdot T(t)$$

$$= B \sin\left(\frac{n\, \pi\, x}{L}\right) (D \cos \omega_n\, t + E \sin \omega_n\, t)$$

$$= (F \cos \omega_n t + G \sin\omega_n t) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad n = 1, 2, \cdots \tag{2.23}$$

F，G は n に依存するので各 n について１つの波がある

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} (F_n \cos \omega_n t + G_n \sin\omega_n t) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{2.24}$$

これを振幅と位相角で書き直すと

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos(\omega_n t + \phi_n) \sin\frac{n\pi x}{L} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x, t) \end{aligned} \tag{2.25}$$

各 $u_n(x, t)$ は基準モードといわれ、各基準モードの時間依存性は振動数が

$$\nu_n = \frac{\omega_n}{2\pi} = \frac{n v}{2L} \tag{2.26}$$

の調和運動をする。

$n = 1$ のモードを基本モード又は第一調和振動といい、$n = 2$ のモードを第２調和振動（第１倍音）という、$n = 3$ のモードを第３調和振動（第２倍音）という。各調和振動は $n - 1$ 個の節を持つ。この節は時間によらず固定されているので定在波という。定在波を重ねると進行波（節が時間とともに移動）ができる。

宿題２　　　　　　　提出期限　４月２３日

問１．水素のｎ番目のボーア軌道に居る電子の速度は $v = e^2 / 2\varepsilon_0 n h$ で与えられることを示せ、また最初の３つのボーア軌道に居る電子の速度とド・ブローイ波長を計算せよ。

問２．原子番号 z の核のボーアの式を $\tilde{\nu}$ について導け。He^+ イオンの基底状態にある電子の運動エネルギー（ J および eV 単位）を計算せよ。$n = 4$ の準位にそれより高い準位から遷移する時の限界波長と最長波長を求めよ。

問３．$x(t) = \cos\omega t$ が振動数 $\nu = \omega / 2\pi$ で振動することを示し、
$x(t) = A\cos\omega t + B\sin\omega t$ も同じ振動数 $\omega / 2\pi$ で振動することを証明せよ。

問４．変位 $u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos(\omega_n t + \phi_n) \sin\frac{n\pi x}{L}$ が次の古典的波動方程式を満たすことを示せ。　$\partial^2 u / \partial x^2 = (1 / v^2)\, \partial^2 u / \partial t^2$