

第3章 定式化

不確定性原理より

“状態, エネルギー値”

求める.

不確定性関係 ($\Delta p \cdot \Delta q \geq \hbar$) を直接用いる

$$\Delta q = L$$

$$\Delta p = p_{\max} - p_{\min} = 2p_{\max} = 2p$$

したがって、

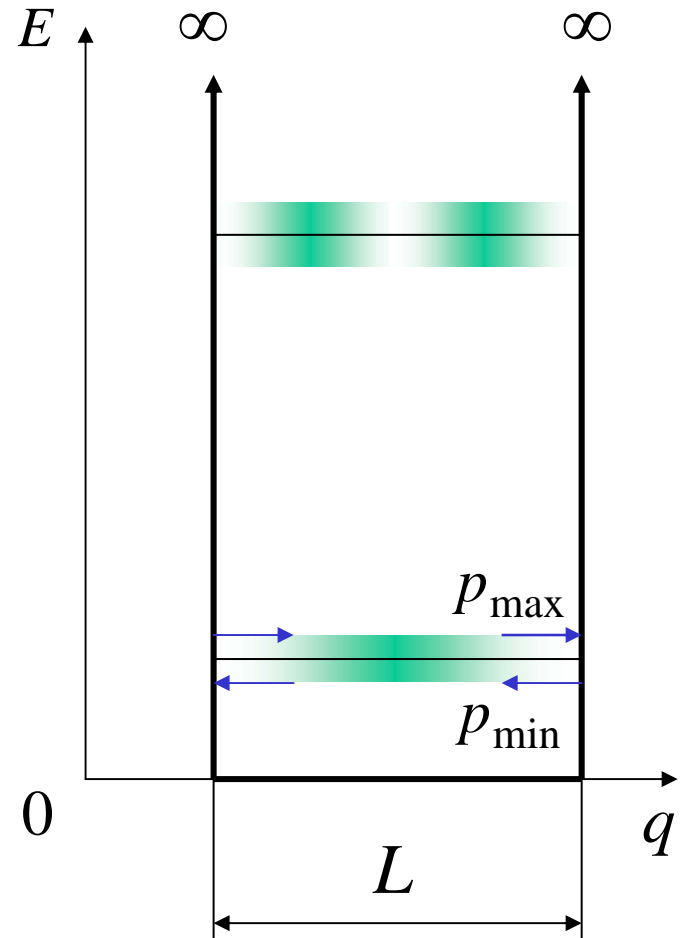
$$2p \cdot L \geq \hbar$$

等号を選び

$$p = \hbar/2L$$

エネルギーとして次式が与えられる。

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8mL^2}$$



工学的問題に対するおおよその見積り

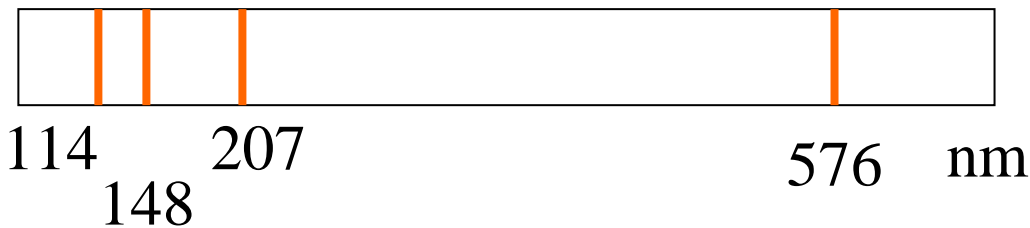
$$E = \frac{h^2}{8m_e L^2}$$

物質よりの発光

$$\Delta E = (n_{n+1}^2 - n_n^2) \frac{h^2}{8m_e L^2}$$

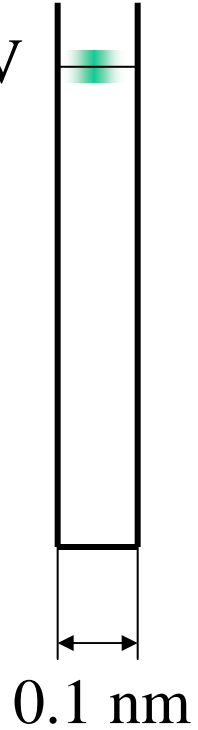
$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{8m_e L^2 c}{(n_{n+1}^2 - n_n^2) h}$$

ブタジエンのスペクトル

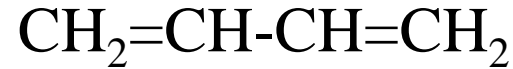


水素原子 H

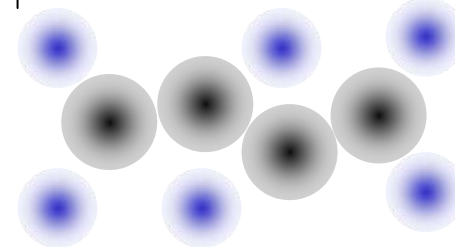
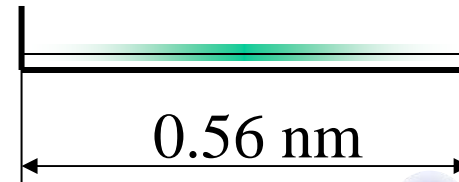
37.65 eV



ブタジエン



1.2 eV



: C : H

輻射

	原子核	内殻軌道	外殻軌道	分子 (結合)	分子 (剛体運動)	電子, 核と場
準位						
線種	γ 線	X線～ 紫外線	可視光線	赤外線	マイクロ波	電波
波長 (m)	$\sim 10^{-12}$	$10^{-11} \sim 10^{-7}$ Å	$(4 \sim 8) \times 10^{-7}$ μm	$10^{-6} \sim 10^{-3}$	$10^{-3} \sim 10^{-1}$	1 ～
目安	陽子	核	原子	蛋白質	細胞	人
eV	$\sim 10^5$	$10^5 \sim 3.2$	$3.2 \sim 1.6$	$1 \sim 10^{-3}$	$10^{-4} \sim 10^{-5}$	$10^{-6} \sim$
温度 (K)	$\sim 10^{10}$	$10^9 \sim 3.7 \times 10^4$	$(3.7 \sim 1.8) \times 10^4$	$10^3 \sim 10$	1 ～ 10^{-1}	$10^{-2} \sim$

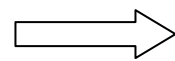
不確定性関係の関数表示

$$\Delta p \cdot \Delta q \geq \hbar$$

p, q に対して, 存在確率

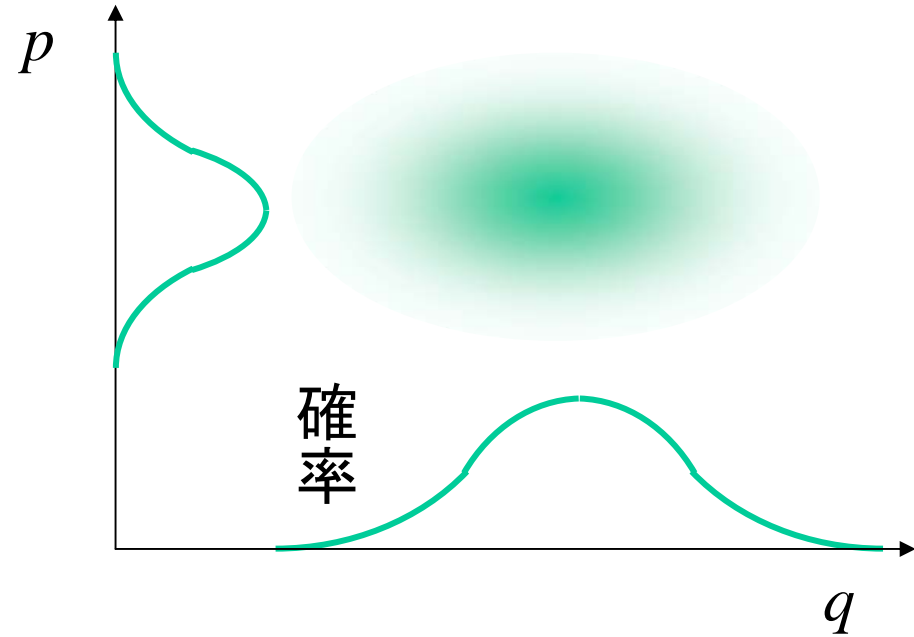
たとえば, “うなり”

Fourier 変換



周期関数の重ね合せ

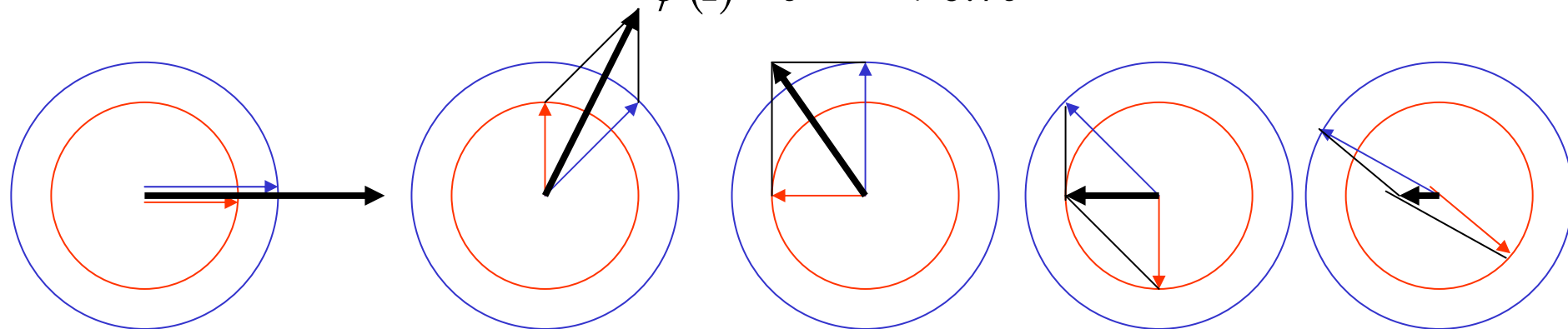
ただし, 三角関数の重ね合せでは元々の振動が残り,
1つの自由粒子の状態を表せない.



複素周期関数の重ね合せの絶対値

$$\psi(x) = e^{i(\pi/4)x} + 0.7e^{i(\pi/2)x}$$

$$\psi(1) = e^{i(\pi/4)} + 0.7e^{i(\pi/2)}$$



2つの複素周期関数の重ね合せにおける絶対値

$$\psi = c_1 e^{i\theta_1} + c_2 e^{i\theta_2}$$

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi = (c_1 e^{-i\theta_1} + c_2 e^{-i\theta_2}) (c_1 e^{i\theta_1} + c_2 e^{i\theta_2}) = c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 \cos(\theta_1 - \theta_2)$$

一般に
$$\psi = \sum_n c_n e^{i\theta_n}$$

ここで, $\theta_n = S_n/\hbar = (p \cdot q)_n/\hbar$ と置く

$S = \text{作用量}$ (=運動量 \times 位置 = エネルギー \times 時間) が **状態** (確率) を決め, その **状態関数** として ψ (複素数) が定義される.

“確率 = (状態関数の大きさ)²”

(1) 状態関数の変数

不確定性関係 $\Rightarrow p, q$ 同時には確定し得ない

\longrightarrow 状態関数は $\psi(q)$ or $\phi(p)$ $\iff \zeta(p, q)$ でない

q の関数 $\psi(q)$ とすると

$$\theta = S/\hbar = (p \cdot q)/\hbar = (p/\hbar)q = k \cdot q, \quad p = k\hbar$$

$$\psi(q) = \sum_n c_n e^{i\theta_n} = \sum_n c_n e^{ik_n q}$$

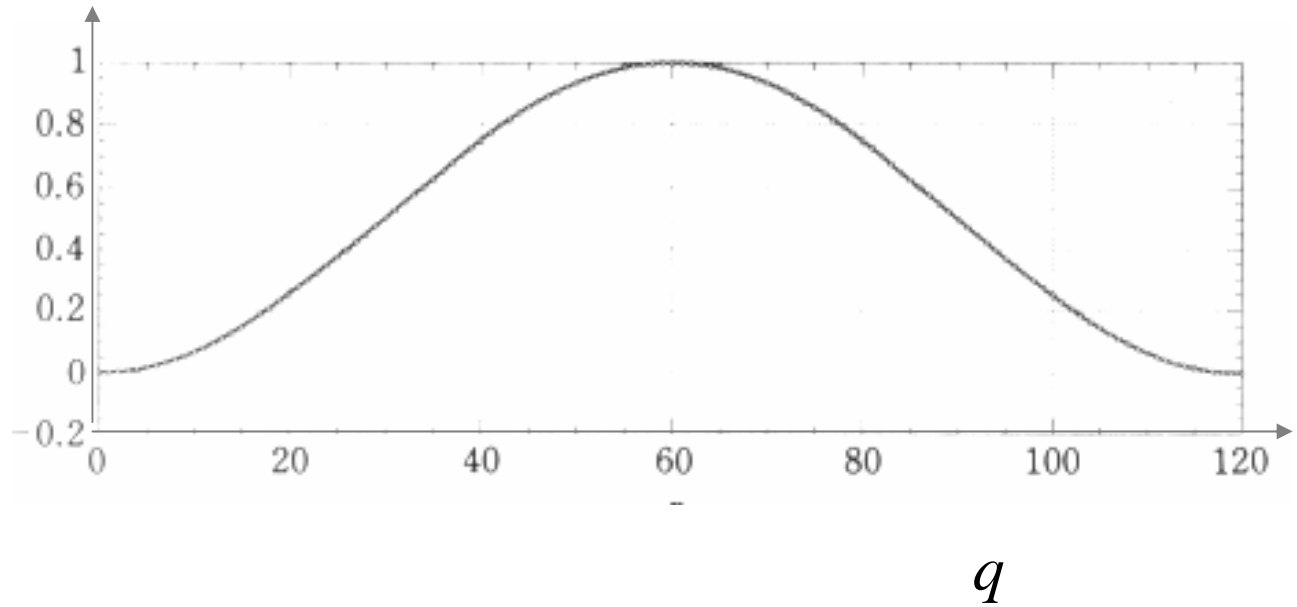
状態関数 = 複素関数の重ね合せ

状態関数の図式表示

$\psi(q)$

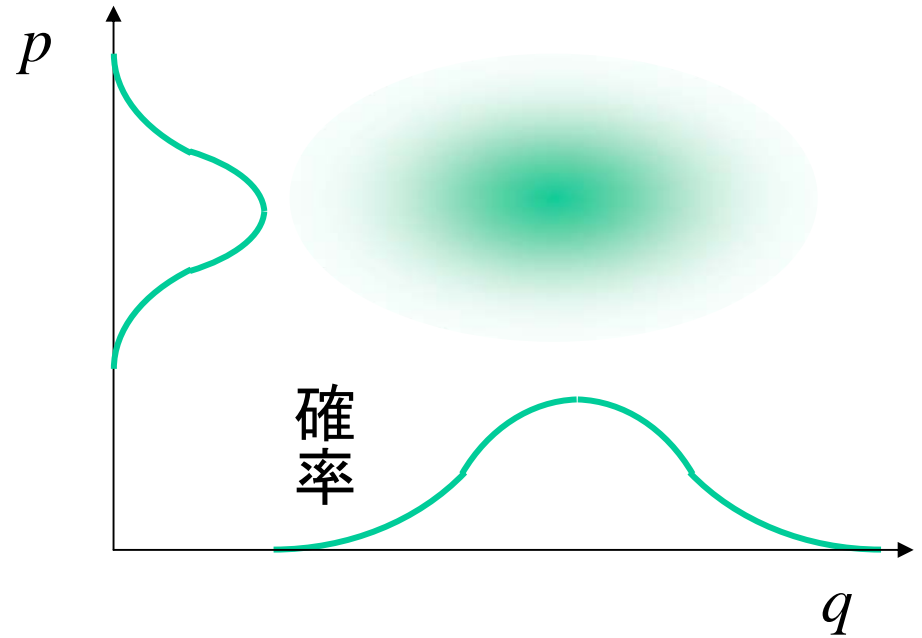


$\psi^* \psi$



(2) 規格化

$$\int_V |\psi|^2 dV = \int_V \psi^* \psi dV = 1$$



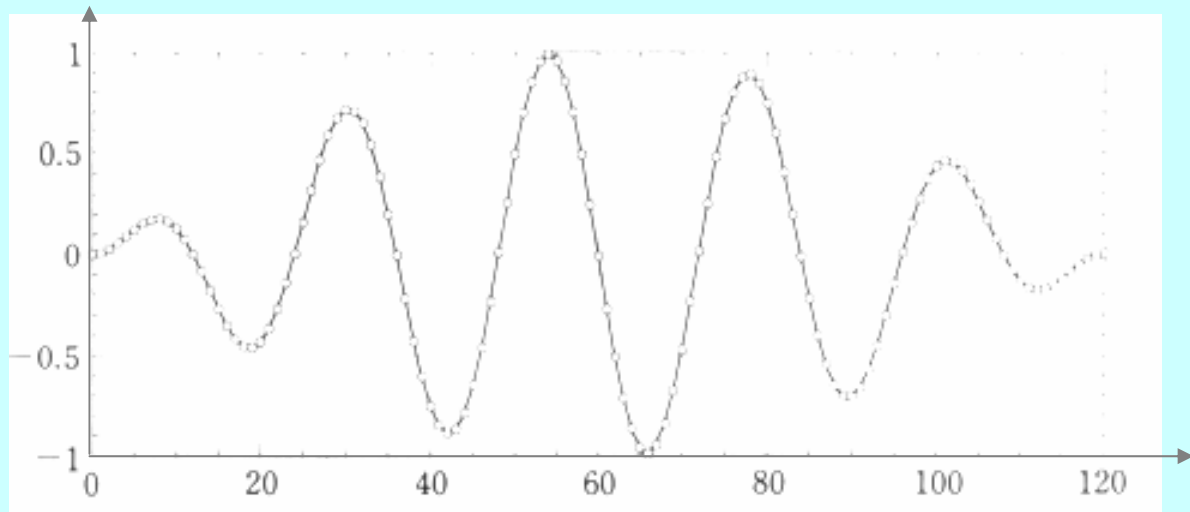
(3) 直交性

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + c_3 \psi_3 + \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\psi_m^* \psi_n + \psi_n^* \psi_m) dq = \int_{-\infty}^{\infty} (e^{i(n-m)q} + e^{-i(n-m)q}) dq = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \cos[(n-m)q] dq = 0$$

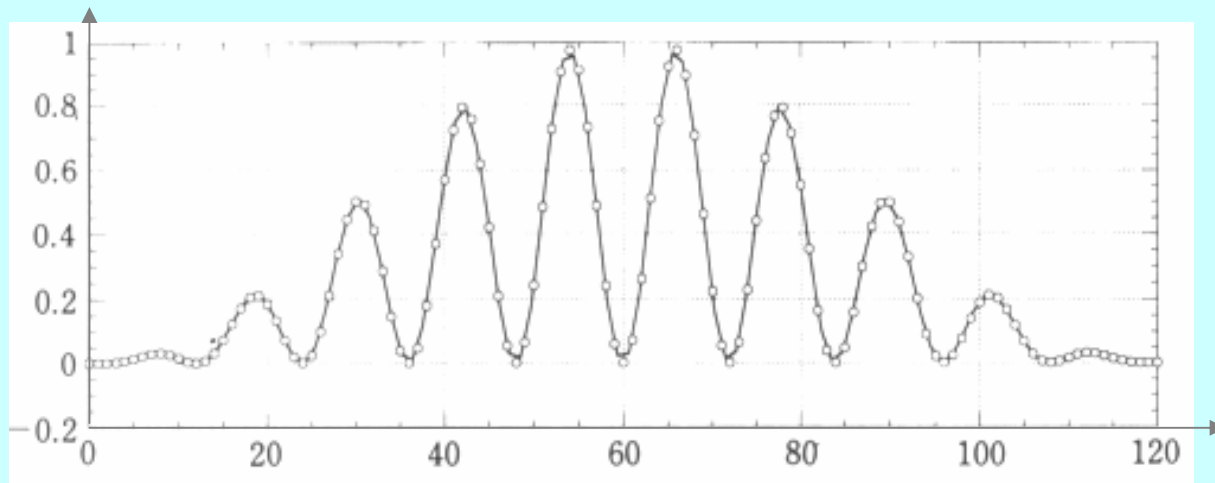
実数周期関数の状態関数 ← 自由粒子としては不合理

$$\psi(q)$$



q

$$\psi^* \psi$$



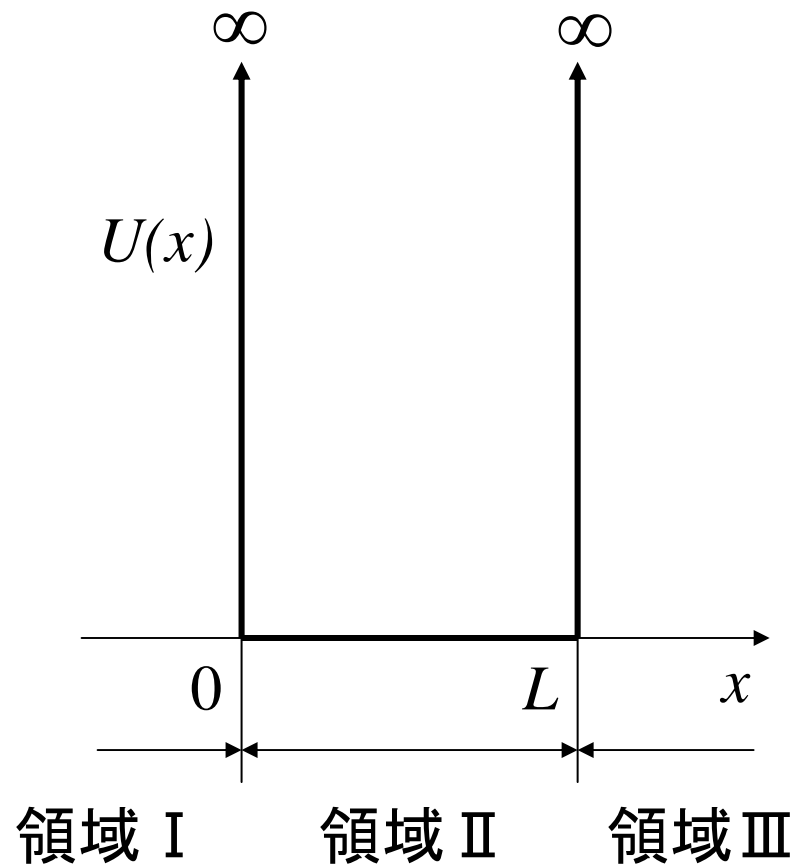
q

無限の深さの井戸型ポテンシャル

$$U(x) = 0; 0 < x < L \quad (\text{領域 II})$$

$$U(x) = \infty; \begin{cases} x \leq 0 & (\text{領域 I}) \\ x \geq L & (\text{領域 III}) \end{cases}$$

境界条件



有限な深さの井戸型ポテンシャル

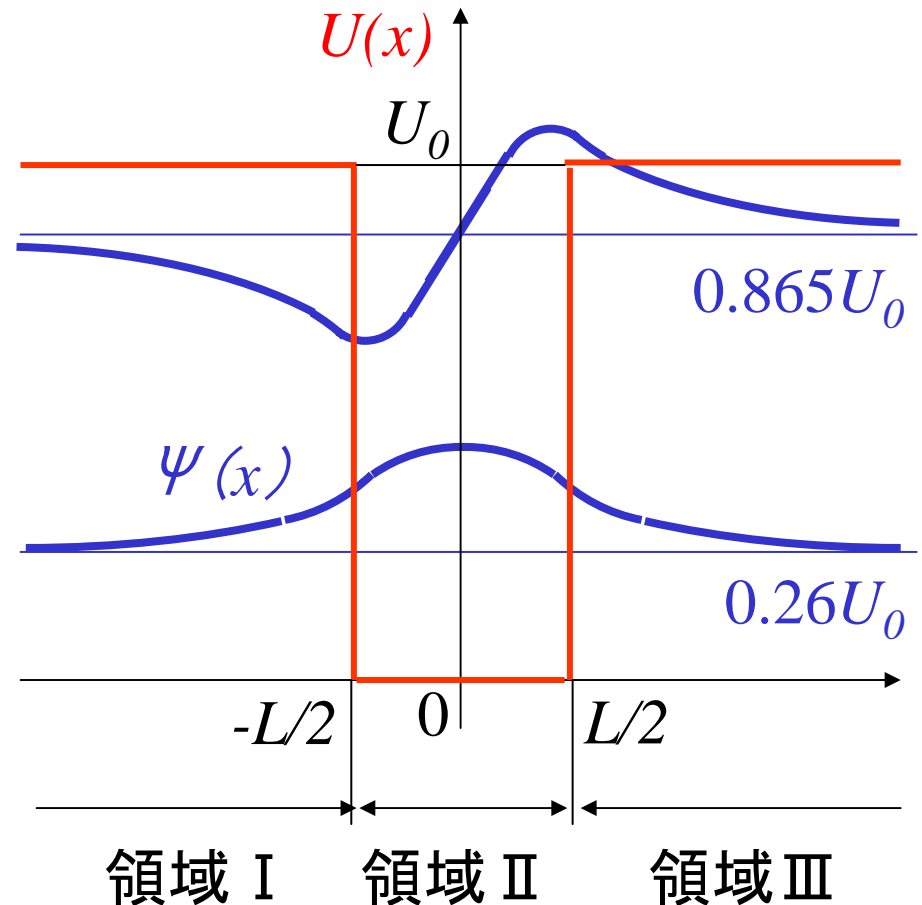
$$U(x) = 0; -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \quad (\text{領域 II})$$

$$U(x) = U_0; \begin{cases} x \leq \frac{L}{2} & (\text{領域 I}) \\ x \geq \frac{L}{2} & (\text{領域 III}) \end{cases}$$

境界条件

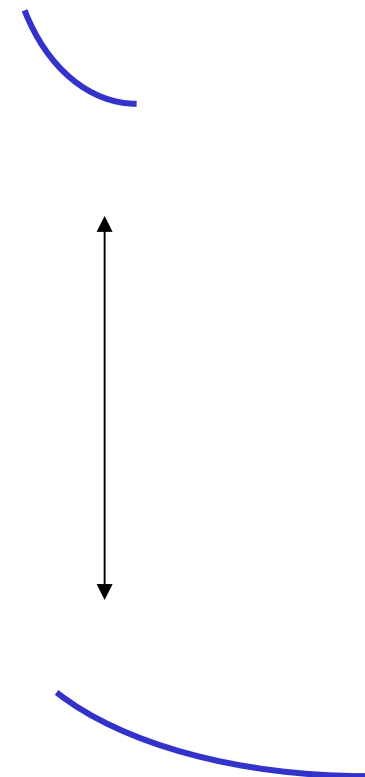
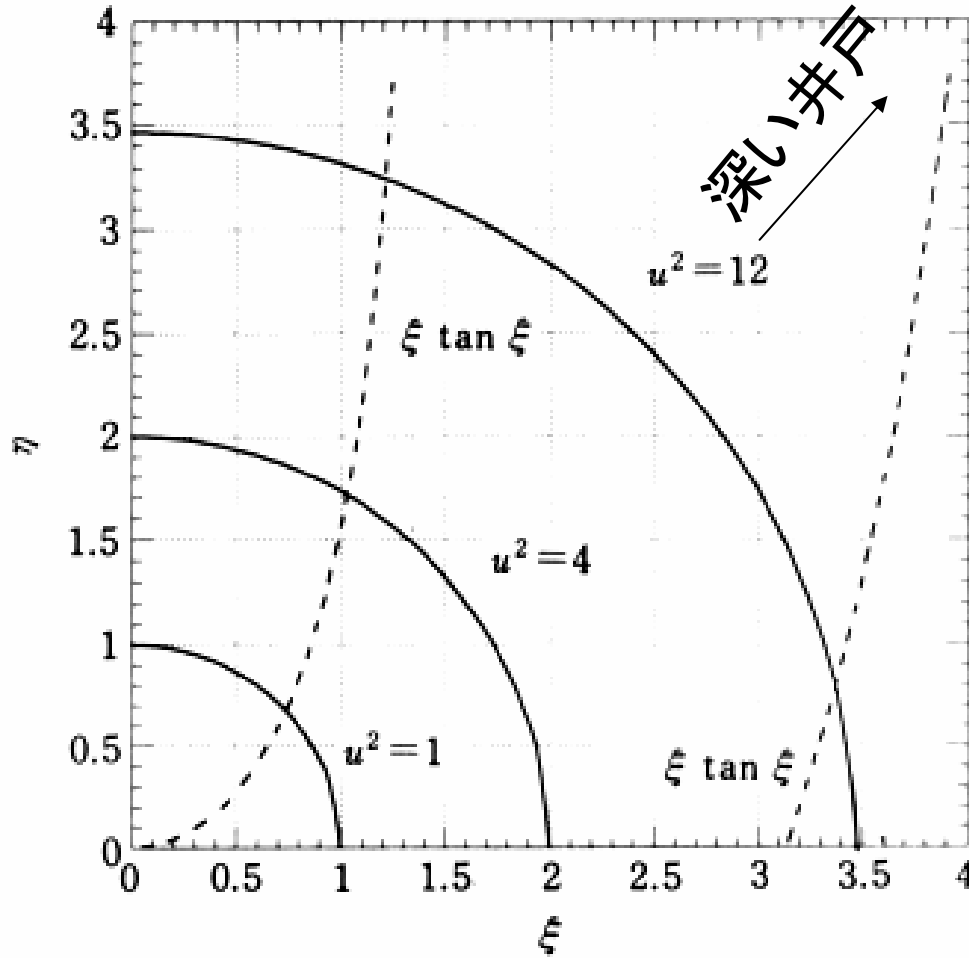
$$\eta = \xi \tan \xi$$

$$\xi^2 + \eta^2 = u^2; \quad u^2 = 2m_e U_0 / \hbar^2$$

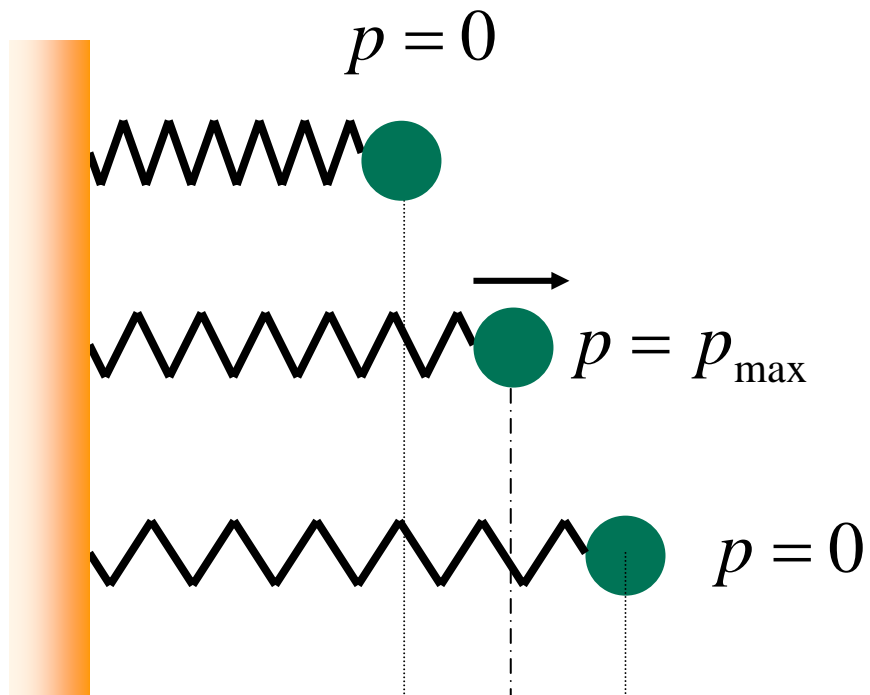


$$\xi = \frac{kL}{2}, \eta = \frac{\kappa L}{2}$$

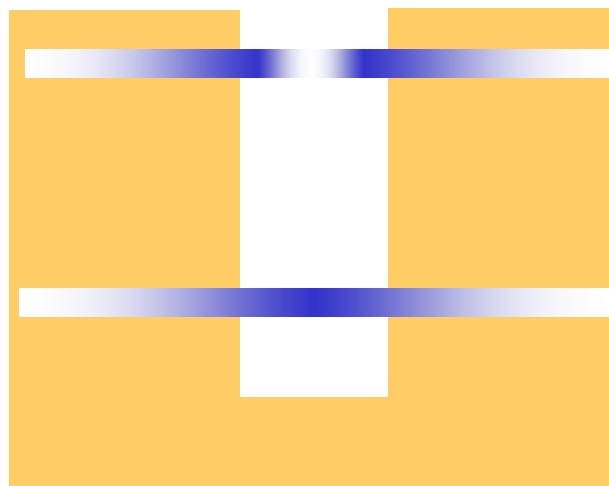
領域 I, IIIにおける減衰速度



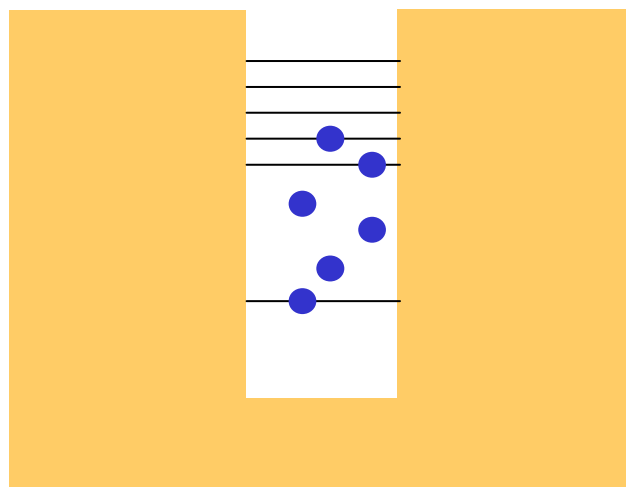
領域 IIにおける波数



量子力学



古典力学



量子力学



古典力学



位置とともに変化するポテンシャル

井戸の中

$$k(x) = \frac{p(x)}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m[E - U(x)]}}{\hbar}$$

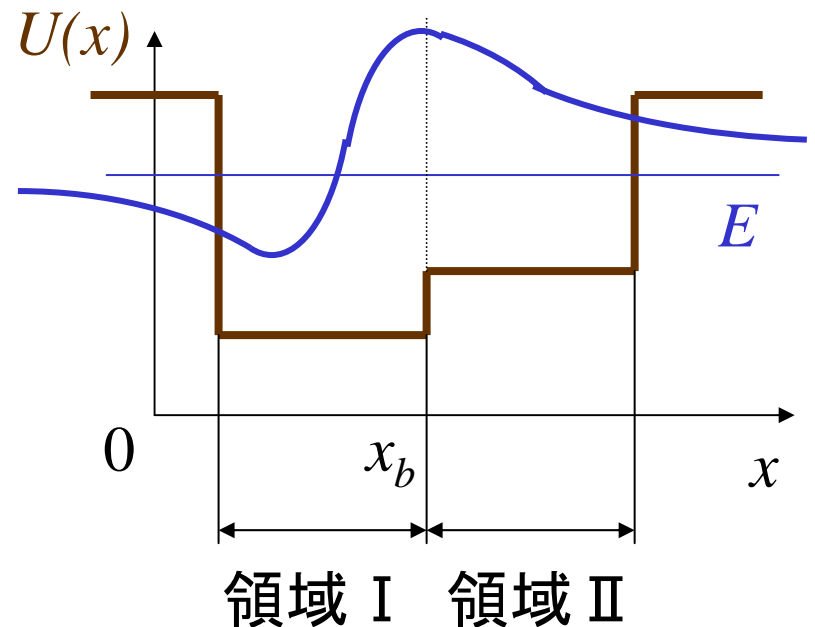
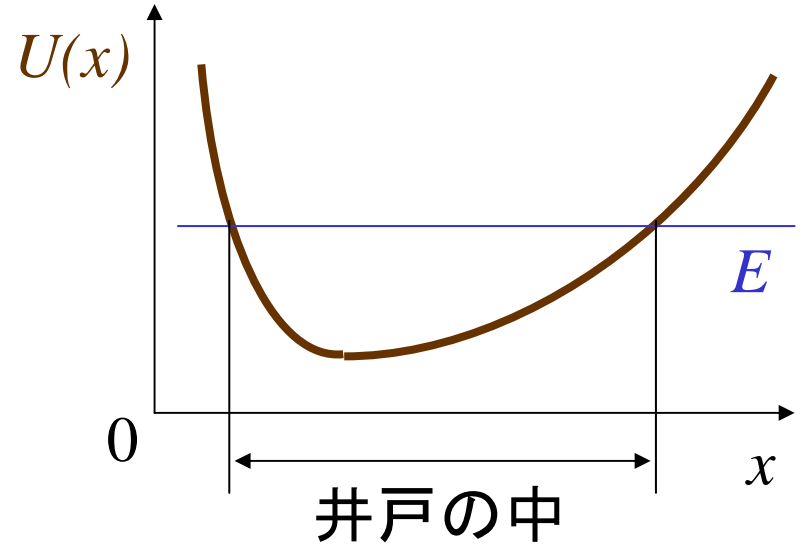
井戸の外

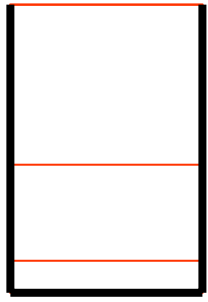
$$\kappa(x) = \frac{ip(x)}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m[U(x) - E]}}{\hbar}$$

$\psi_1(x) = A_1 \sin(k_1 x + \phi_1)$: 領域 I

$\psi_2(x) = A_2 \sin(k_2 x + \phi_2)$: 領域 II

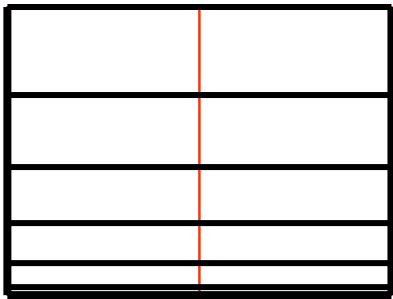
$$\frac{A_2}{A_1} = \sqrt{\frac{1 + \left\{ \frac{\psi'(x_b)}{\psi(x_b)} \right\}^2 \frac{1}{k_2^2}}{1 + \left\{ \frac{\psi'(x_b)}{\psi(x_b)} \right\}^2 \frac{1}{k_1^2}}}$$



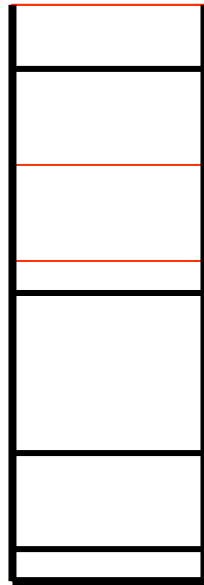


3

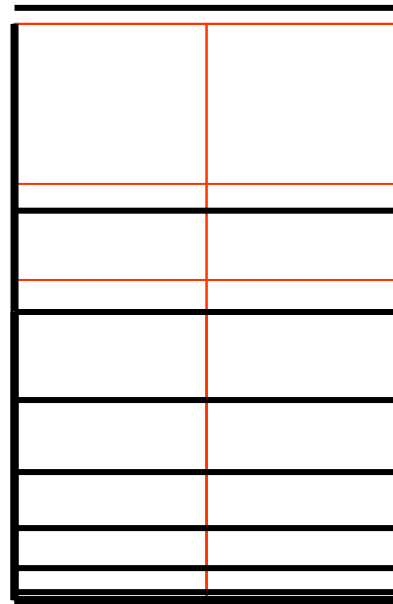
$$V_0 \geq E = \frac{n^2 h^2}{8m_e L^2} = a \frac{n^2}{L^2}, \quad \therefore n \approx bL\sqrt{V_0}$$



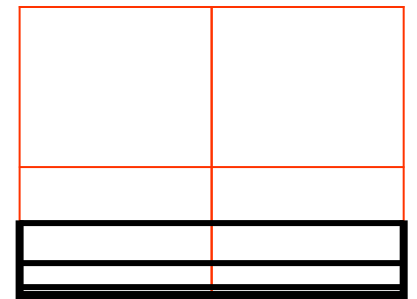
6



>4

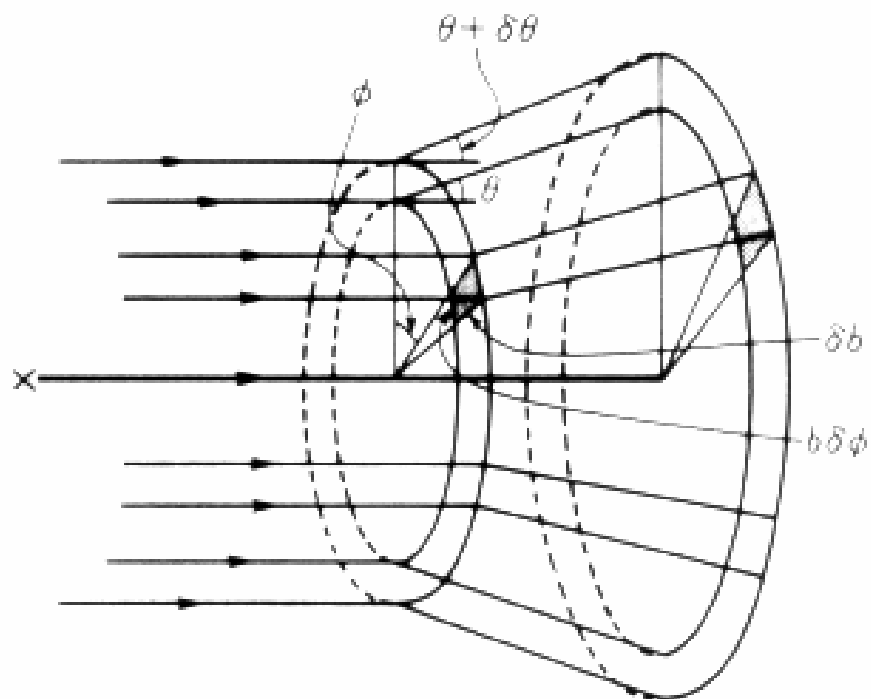
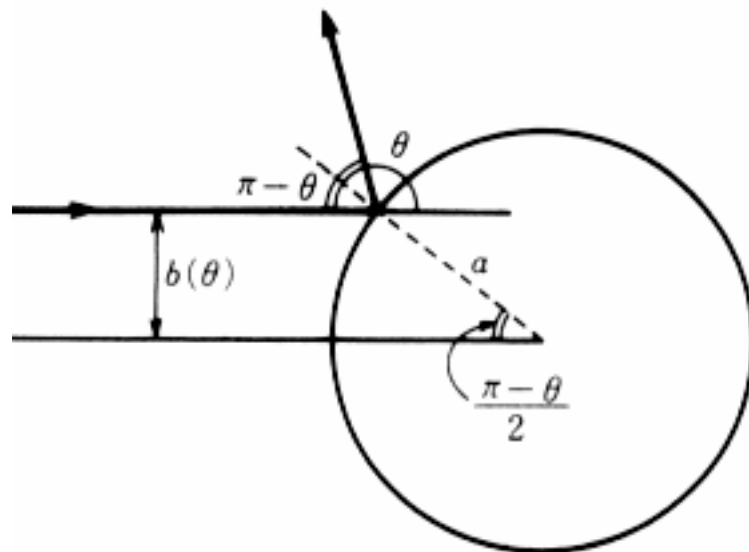
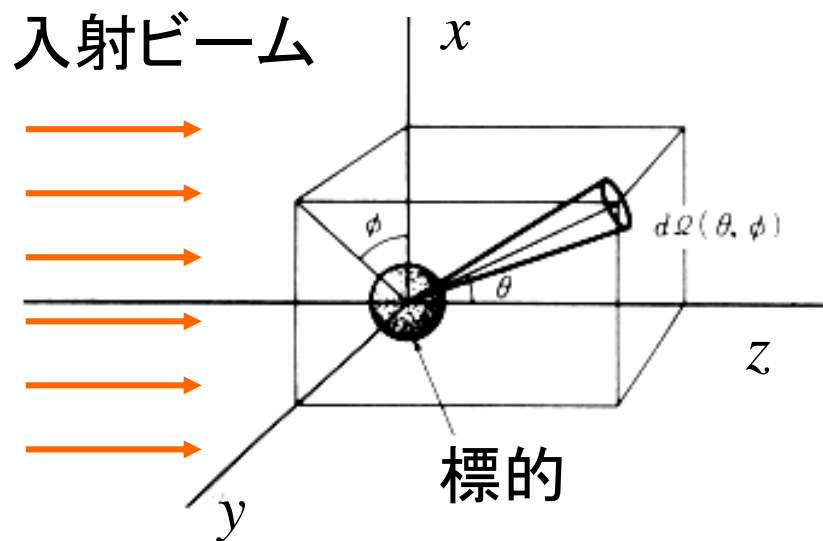


≈ 8

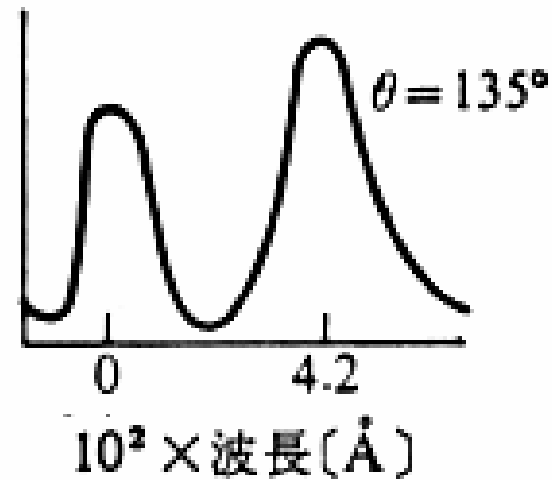
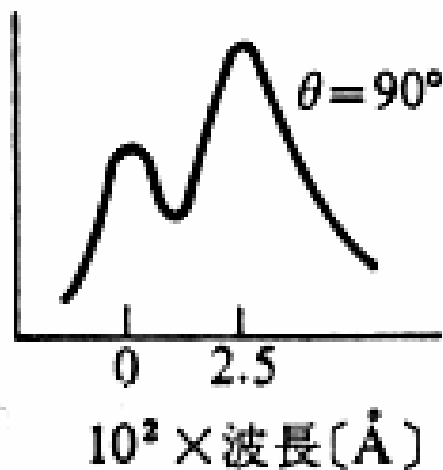
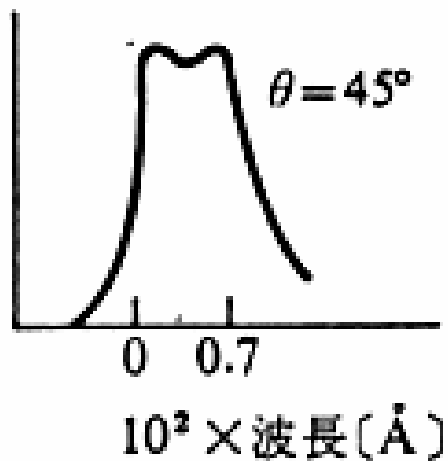
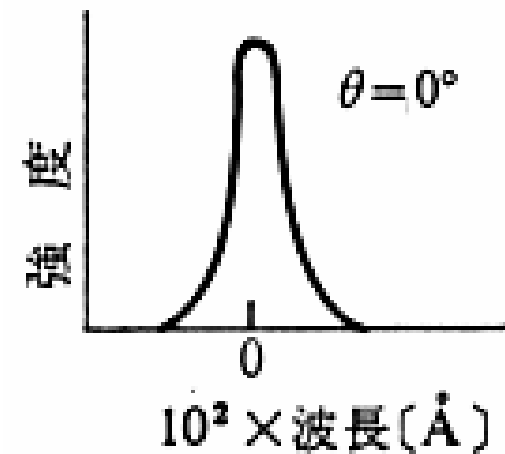
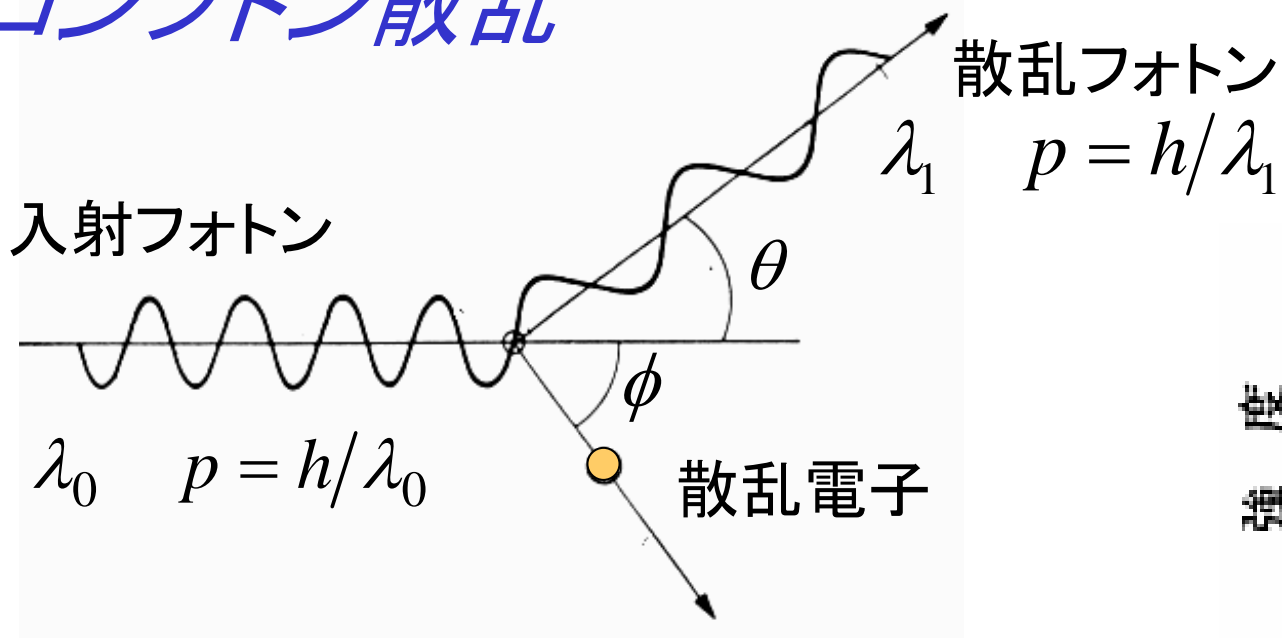


3

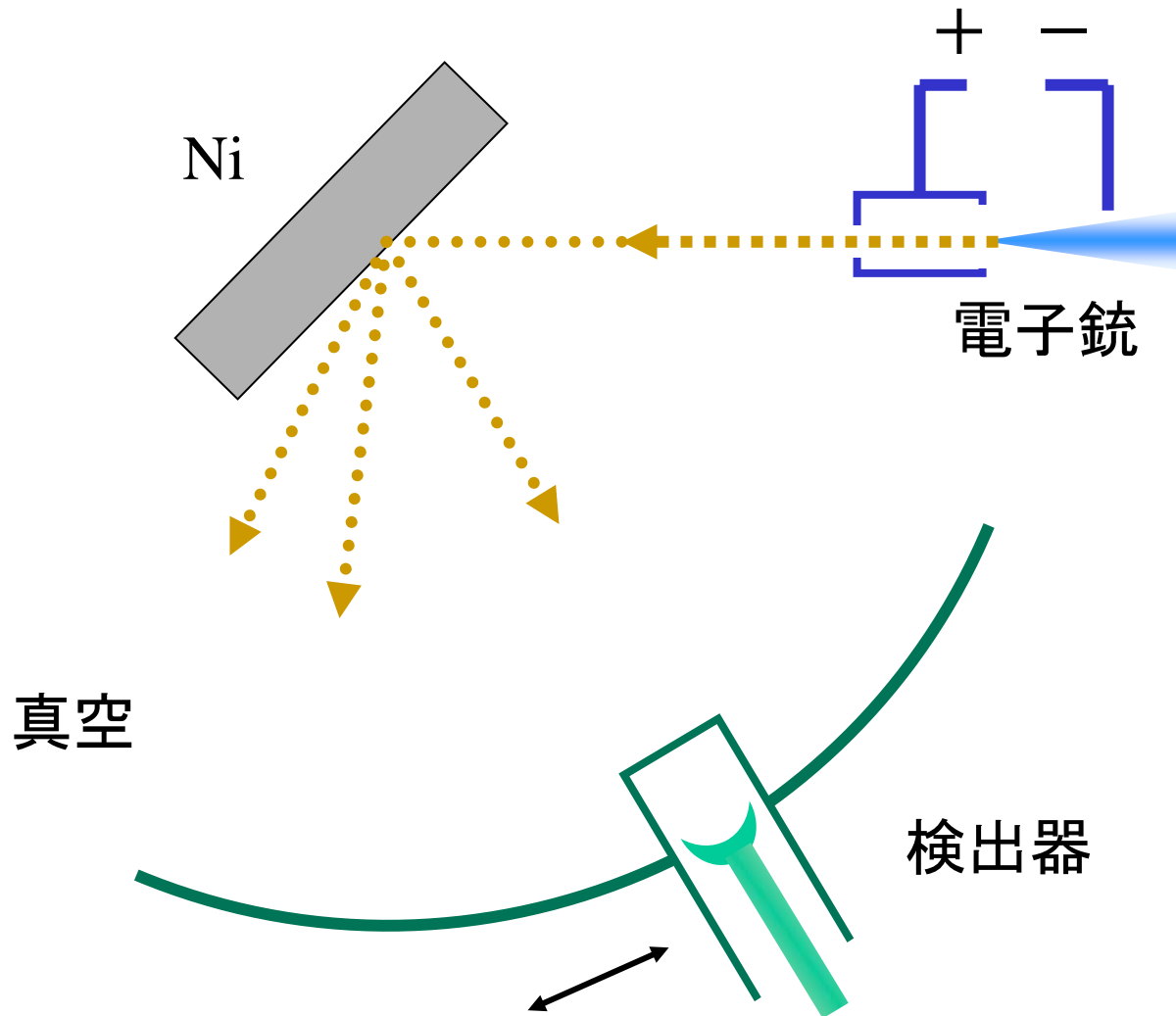
散乱現象



コンプトン散乱

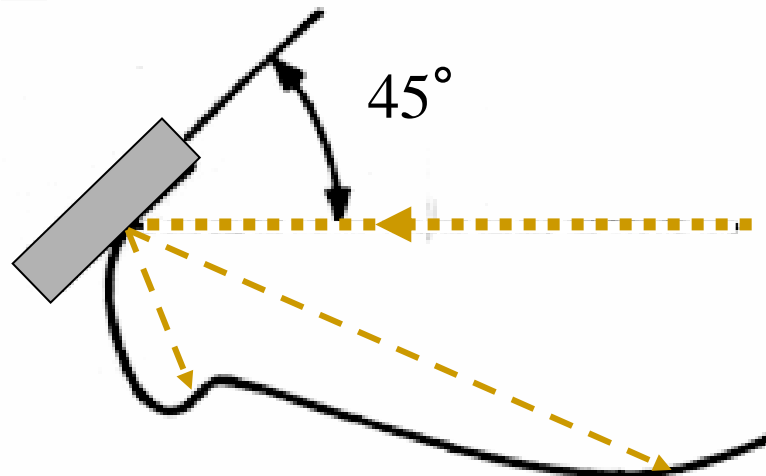
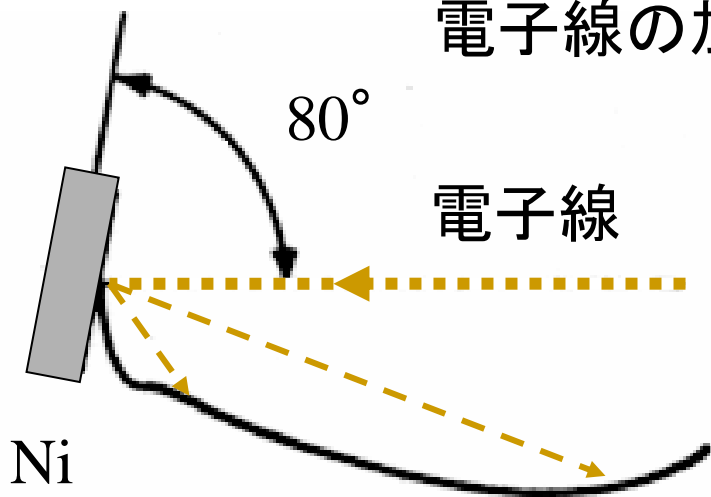


Davisson – Germer の実験

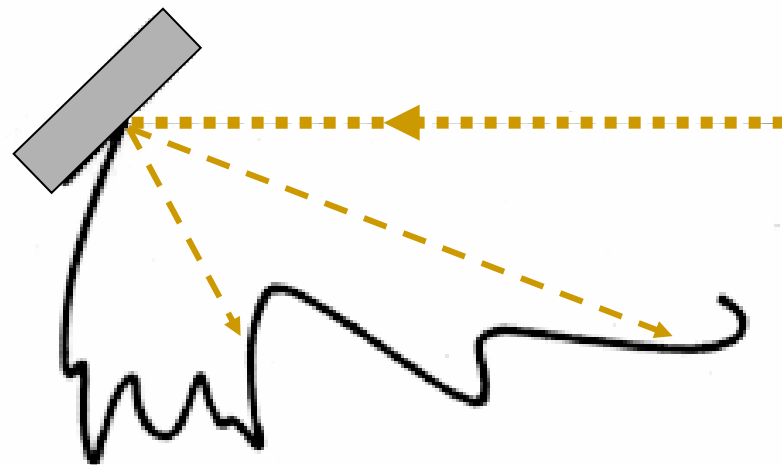
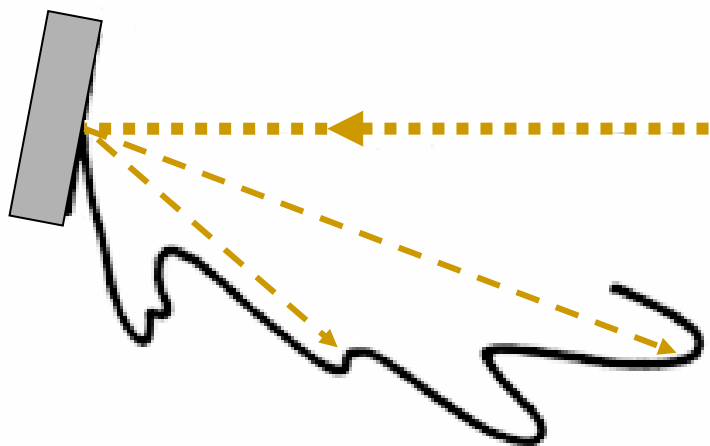


電子線の加速電圧=75V

多結晶

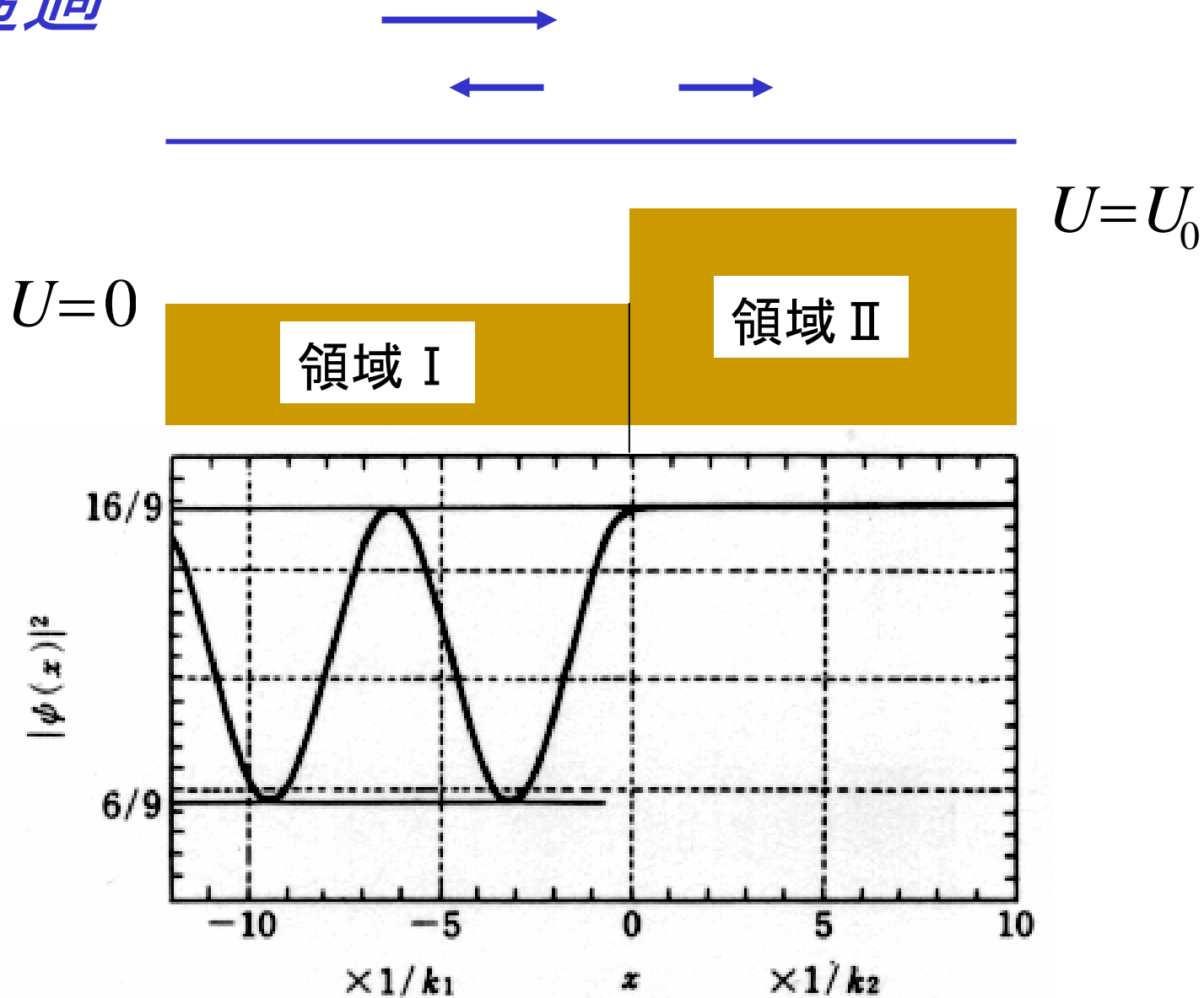


単結晶



多結晶： 焼鈍し前， 単結晶： 焼鈍し後

反射, 透過



$$\frac{A}{A_0} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad \frac{B}{A_0} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

$$\frac{\psi_1(x)}{A} = \frac{2k_2}{k_1 + k_2} e^{ik_1x} + \frac{2(k_1 - k_2)}{k_1 + k_2} \cos k_1x, \quad \frac{\psi_2(x)}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2x}$$

$$\left| \frac{\psi_1(x)}{A_0} \right|^2 = \frac{2[k_1^2 + k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)\cos(2k_1x)]}{(k_1 + k_2)^2}, \quad \left| \frac{\psi_2(x)}{A_0} \right|^2 = \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

R : 反射係数, T : 透過係数

$$R = \left| \frac{A}{A_0} \right|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad T = 1 - R = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{B}{A_0} \right|^2$$

$$\frac{v_2}{v_1} = \frac{p_2}{p_1} = \frac{k_2}{k_1} \longrightarrow \text{確率の流れ} = \text{確率速度} \times \text{特性速度}$$

浅い井戸型または低い障壁ポテンシャルによる散乱 (共鳴による完全透過)

$$T = \left| \frac{D}{A_0} \right|^2 = \left| \frac{4k_1 k_2}{[(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 L} - (k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 L}] e^{ik_1 L}} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin^2(k_2 L)}$$

[共鳴条件]

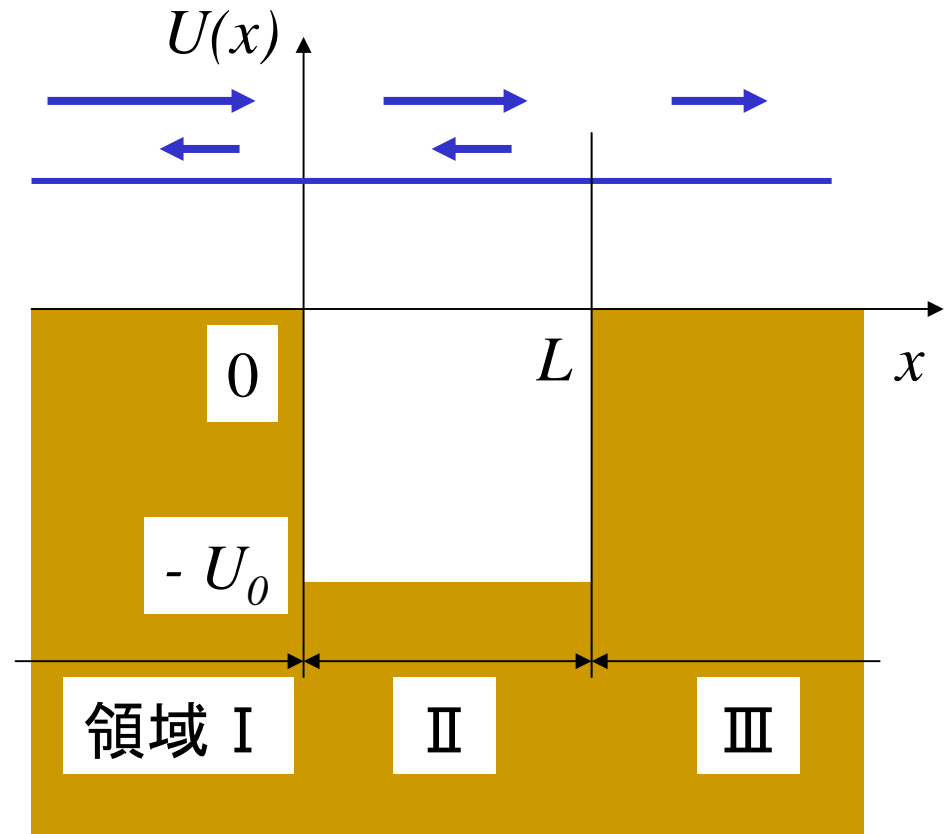
完全に透明 = 完全透過

$$\sin(k_2 L) = 0$$

$$\longrightarrow k_2 L = n\pi$$

$$L = n \frac{\lambda_2}{2}$$

ここで, $\lambda_2 = \frac{2\pi}{k_2}$



井戸寸法の状態を特徴づける無次元化パラメータ

$$\beta = Lp_0/\hbar = L\sqrt{2mU_0}/\hbar$$

E_n の無次元量

$$\varepsilon_n = E_n/U_0$$

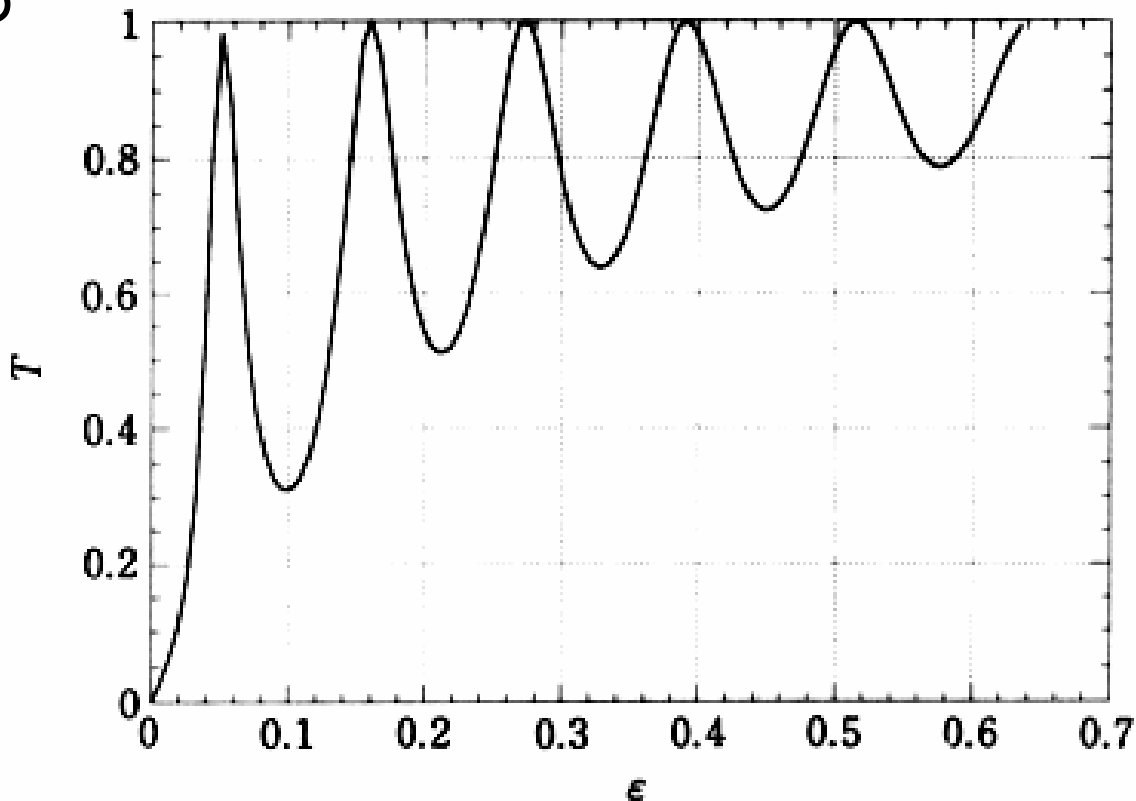
共鳴条件

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E_n + U_0)}}{\hbar} = \frac{n\pi}{L}$$

$$\beta = n\pi\left(1 - \frac{1}{2}\varepsilon_n\right) = (n+1)\pi\left(1 - \frac{1}{2}\varepsilon_{n+1}\right) \longrightarrow \Delta\varepsilon = \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n = 2/n$$

透過係数

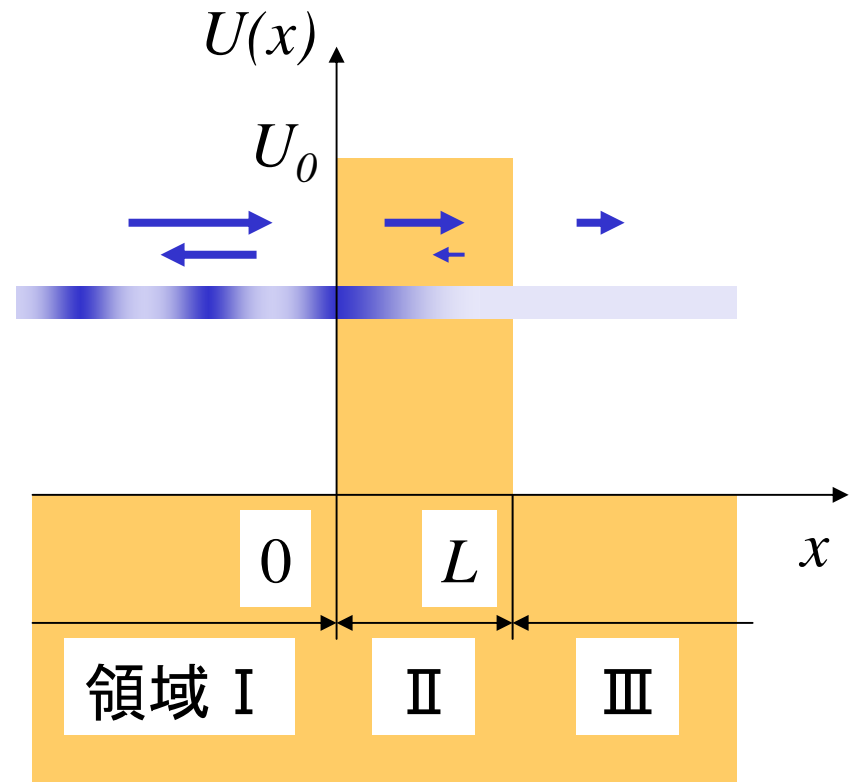
$$T(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \frac{1}{4\varepsilon(1+\varepsilon)} \sin^2(\beta\sqrt{1+\varepsilon})}$$



障壁の通過 (トンネル効果)

連続条件

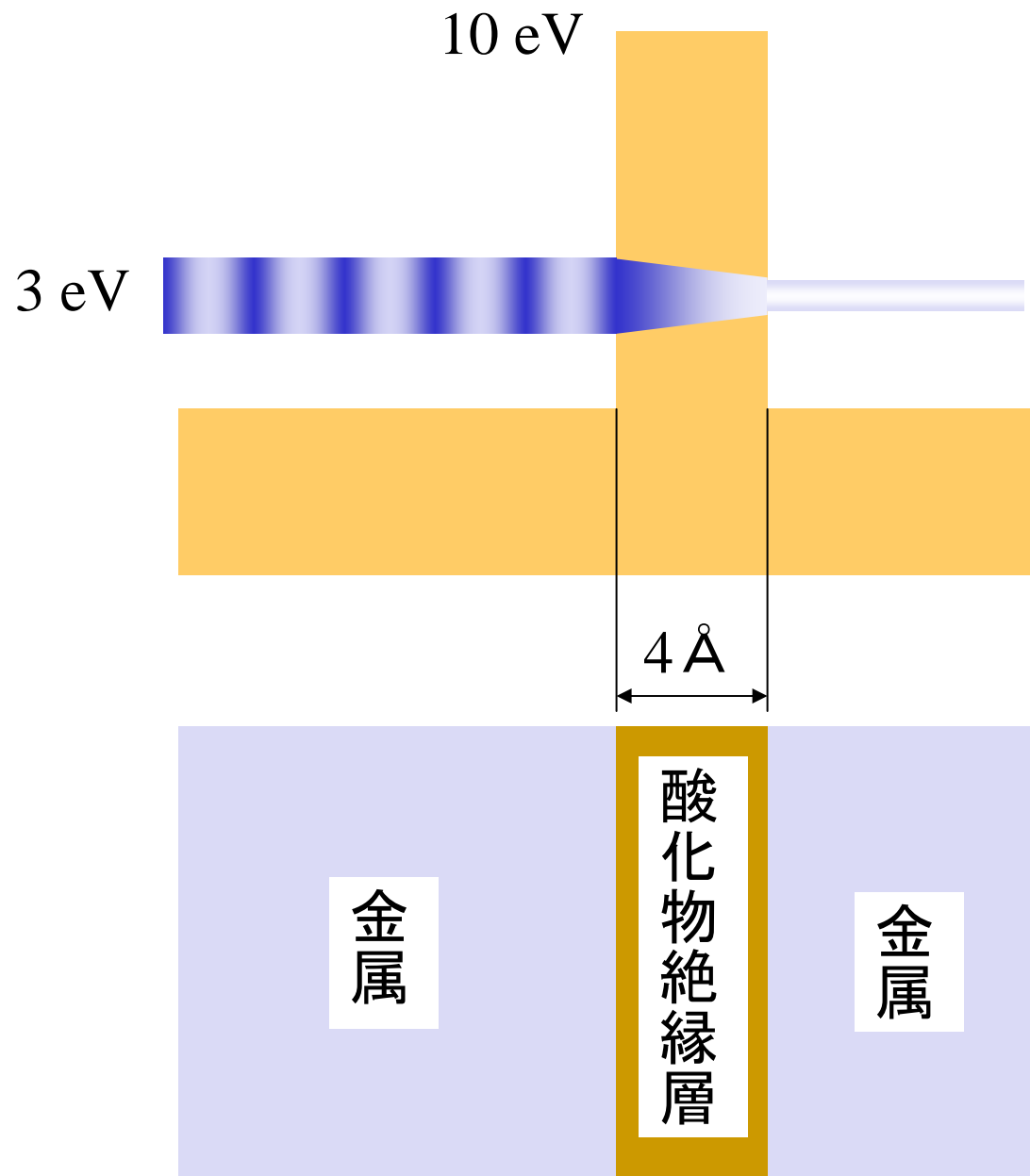
貫通率(透過係数)



$$T = \left| \frac{D}{A_0} \right|^2 = \left| \frac{4ik\kappa}{\left[(\kappa + ik)^2 e^{-\kappa L} - (\kappa - ik)^2 e^{\kappa L} \right] e^{ikL}} \right|^2$$

$L \gg 1/\kappa$ の場合

$$T = \left| \frac{D}{A_0} \right|^2 = \frac{16\kappa^2 k^2 e^{-2\kappa L}}{(\kappa^2 + k^2)^2} = 16 \left(\frac{E}{U_0} \right) \left(1 - \frac{E}{U_0} \right) e^{-2\kappa L}$$



$$\kappa = 1.35 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

$$1/\kappa = 0.74 \text{ \AA}$$

$$2\kappa L = 10.8$$

$$T = 6.7 \times 10^{-5}$$

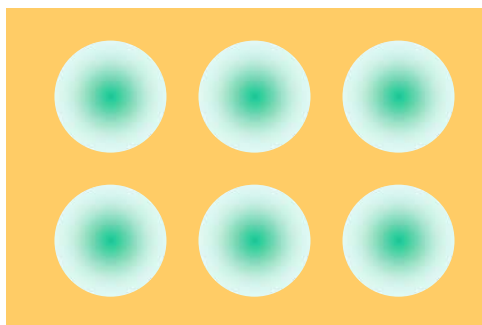
障壁の通過 (電界放出)

フェルミ準位

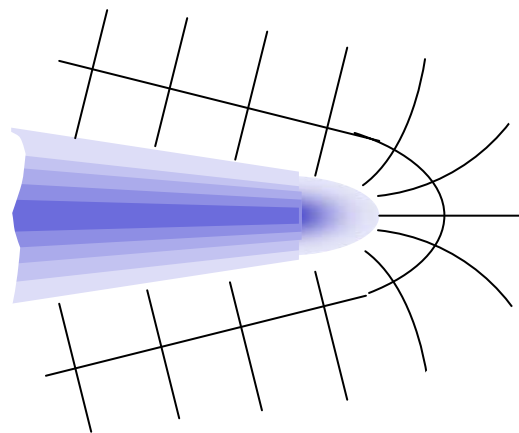
$W=4eV$

真空準位 U_0

E



空間



陰極(金属)

$$r_{tip} \approx 0.5 \mu m$$

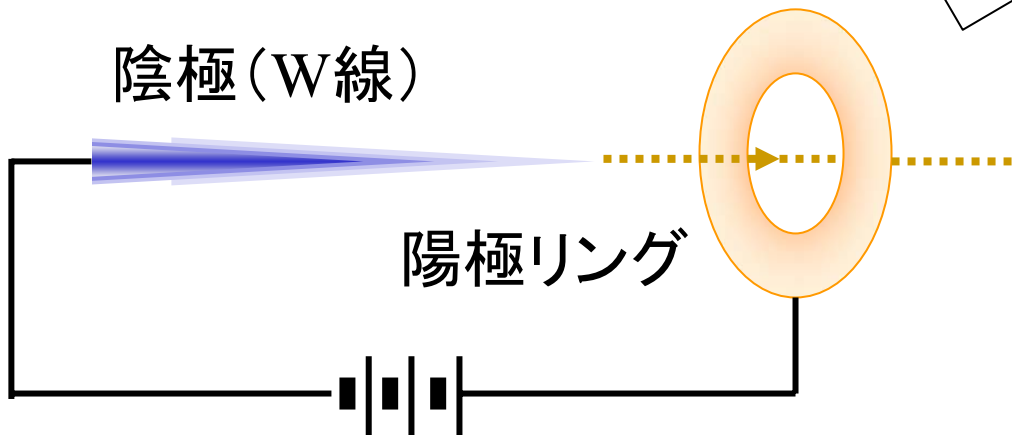
$$E_{tip} \approx 5.5 \times 10^{10} V/m$$

r_{tip} : 先端半径

E_{tip} : 先端電界

陰極(W線)

陽極リング



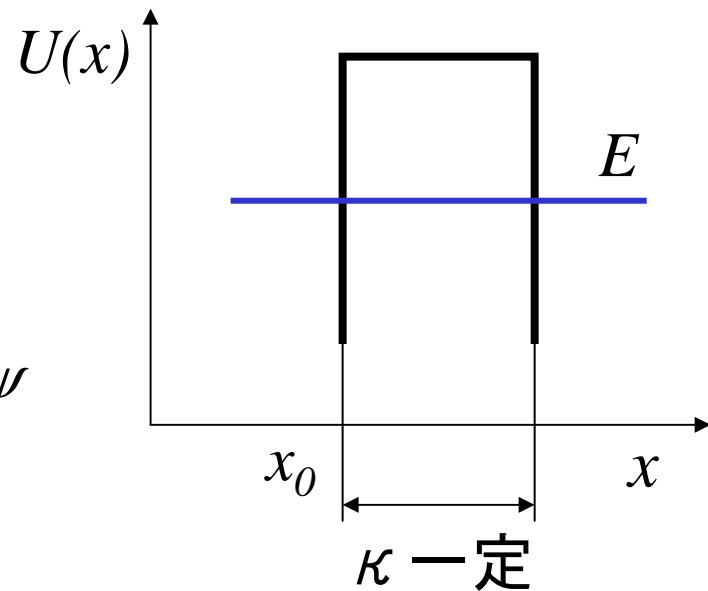
矩形障壁に対して

$$\psi(x) = \psi(x_0) e^{-\kappa(x-x_b)}$$

変動する障壁に対して

$$\psi(x + \Delta x) = \psi(x) e^{-\kappa(x) \times \Delta x} \quad \longrightarrow \quad \frac{d\psi}{dx} = -\kappa(x)\psi$$

$$T = \left[\frac{\psi(x_2)}{\psi(x_1)} \right]^2 = e^{-2 \int_{x_1}^{x_2} \kappa(x) dx}$$



電界放出

$$U(x) = \begin{cases} 0 & : x < 0 \\ U_0 - eVx & : x \geq 0 \end{cases}$$

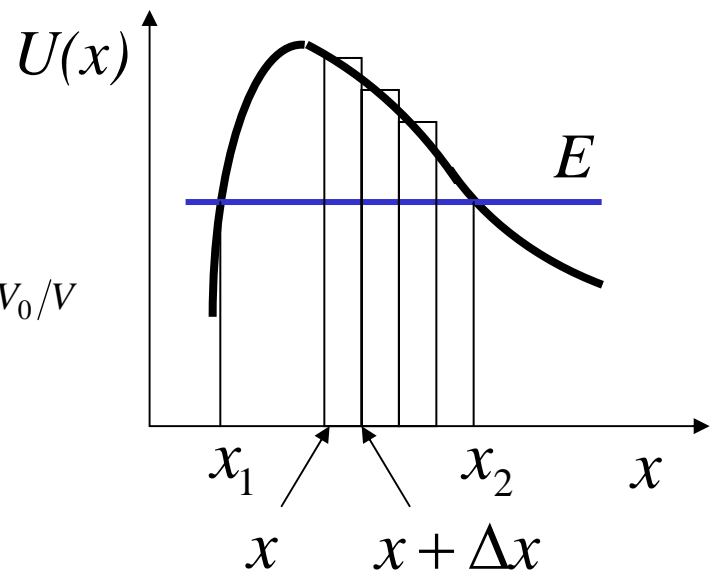
$$L = (U_0 - E)/eV = W/eV, \quad T = e^{-2 \int_{x_1}^{x_2} \kappa(x) dx} = e^{V_0/V}$$

$$V_0 = 4\sqrt{2mW^3}/3\hbar$$

$W=4\text{eV}$ の場合

$$V_0 \approx 5.5 \times 10^{10} \text{ V/m}$$

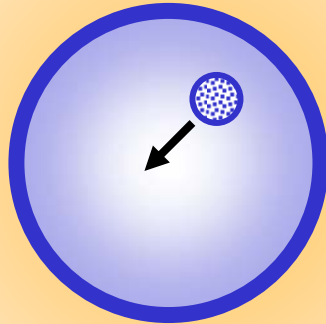
$$T > 10^{-20} \approx e^{-50}$$



障壁の通過 (α 崩壊)

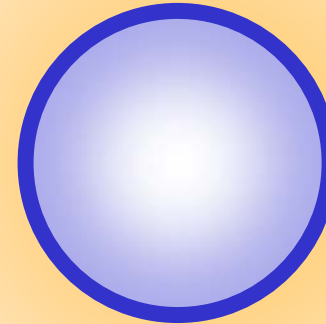
核内
引力ポテンシャル
強い力 (漸近自由)

$+Ze$



核外
斥力ポテンシャル
クーロン力

$+(Z-2)e$



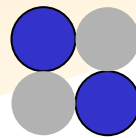
$+2e$



α 粒子:



=



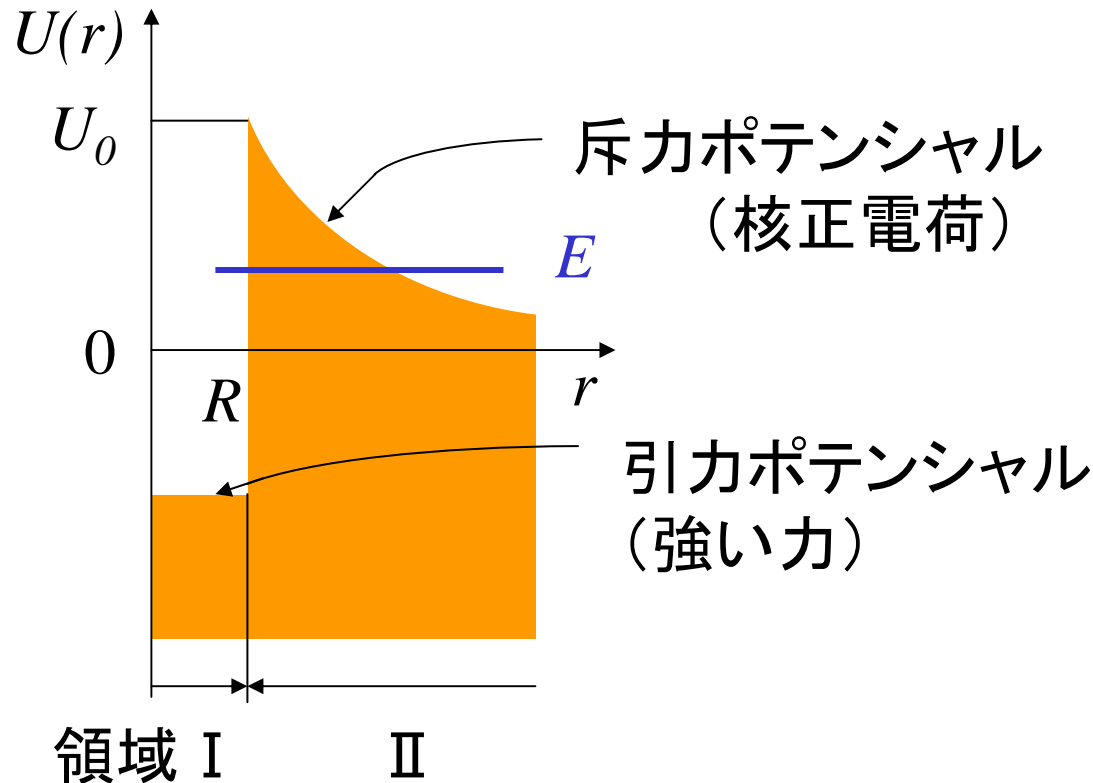
中性子

陽子

[崩壊] 減衰曲線: $P(t) = P(0)e^{-\gamma t}$ 半減期 τ : $\tau = \ln 2 / \gamma$

核内の存在確率: $P = \int_0^R (\psi^* \psi) 4\pi r^2 dr = 8\pi R |A_0|^2$

核外への確率の流れ: $J_3 = 4\pi v_3 |D|^2$



保存条件:

$$\frac{dP}{dt} = J_1 = J_3$$

崩壊定数 γ :

$$\gamma = \frac{v_3}{2R} \left| \frac{D}{A_0} \right|^2$$

透過係数:

$$T = \frac{v_3}{v_1} \left| \frac{D}{A_0} \right|^2$$

$$\gamma = \frac{v_1}{2R} T = (\text{壁に対する衝突回数}) \times (\text{透過係数})$$

$$\frac{\tau_2}{\tau_1} = \frac{\gamma_1}{\gamma_2} = \frac{T_1}{T_2}$$

$$U(r) = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = U_0 \frac{R}{r}, \quad U_0 = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

$$\ln T \approx -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_R^{r_1} \sqrt{U_0 \frac{R}{r} - E} dr = -\frac{RU_0\sqrt{2m}}{\hbar} \left(-\frac{\pi}{\sqrt{E}} + \frac{4}{U_0} \right); \quad r_1 = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 E}$$

$$\log\left(\frac{\tau_2}{\tau_1}\right) \approx \log\left(\frac{T_1}{T_2}\right) = -\left(\frac{1}{\sqrt{E_1}} - \frac{1}{\sqrt{E_2}}\right) \frac{U_0 R \pi \sqrt{2m}}{\hbar} \log(e)$$

放射性元素: $Z-2 \approx 90, \quad R \approx 10^{-14} m \longrightarrow U_0 = 25 \text{ MeV}$

$\text{Po}^{212}: E_1 = 8.95 \text{ MeV}, \quad \text{Th}^{232}: E_2 = 4.05 \text{ MeV} \longrightarrow \log\left(\frac{\tau_2}{\tau_1}\right) \approx 25.4$

実測値: $\text{Po}^{212}: 0.3 \mu\text{sec} (= 3 \times 10^{-7} \text{ sec}),$
 $\text{Th}^{232}: 139 \text{ 億年} (= 4.38 \times 10^{17} \text{ sec})$