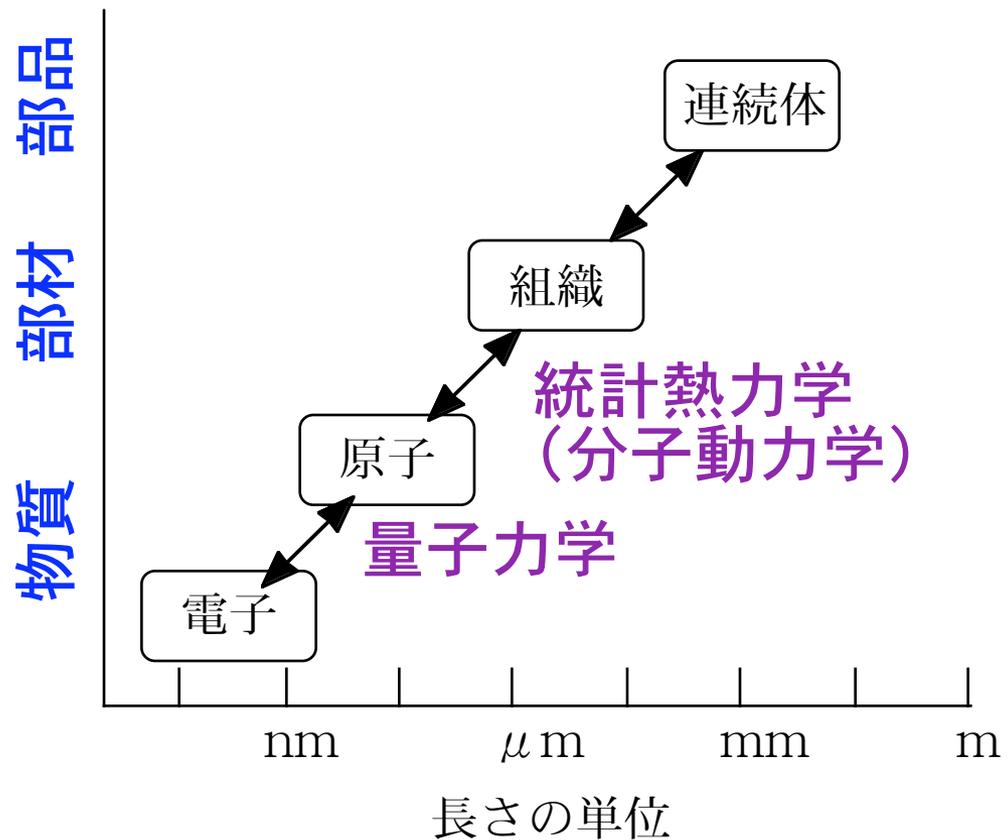


計算材料学

○ 量子力学と熱統計力学



量子力学

-
- シュレディンガー方程式の導出
 - 化学結合の起源
 - ばねモデル
 - 第一原理計算

前期量子論

- 黒体輻射, 光電効果, コンプトン散乱
- 波動一粒子の二重性 (duality)

(de Broglie, 1923)

- 電子線回折 (1927
Davisson & Germer)
- 物質波
- Schrödinger方程式
(1926)

de Broglieの関係式

$$k = p / \hbar$$

k : 波数

p : 運動量

$$\hbar = h / 2\pi$$

h : Planck定数

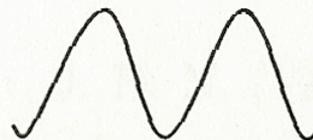
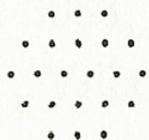
宇宙

物質

輻射

粒子

波動



エネルギー E と
運動量 p で特徴
付けられる

角振動数 ω と波数
ベクトル k で特徴
付けられる

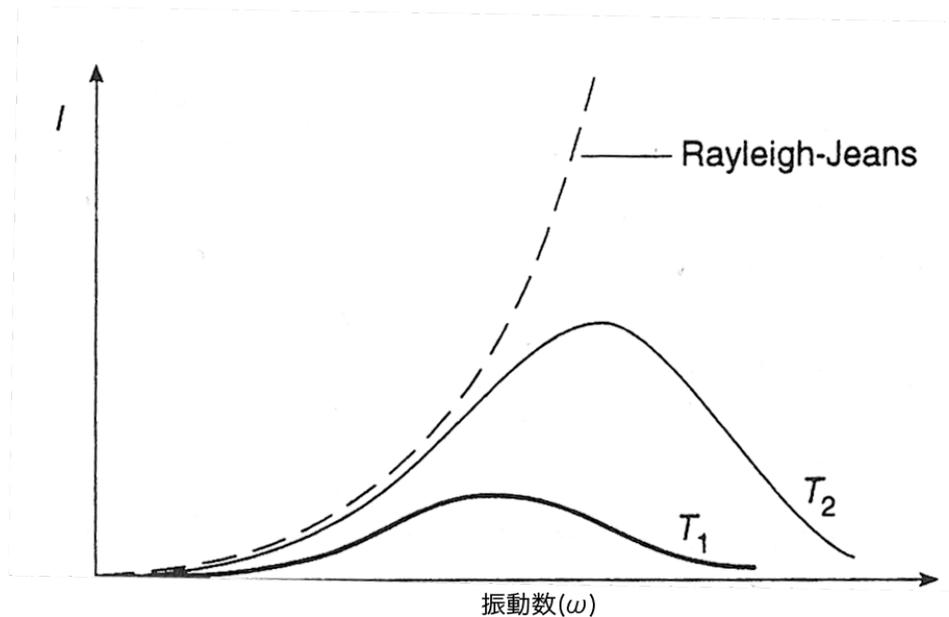
Newtonの運動法則

Maxwellの電磁理論

Lorentzの法則

黒体輻射 (blackbody radiation)

- 黒体から熱放射の形で放出される電磁波.
- http://www.electro-optical.com/bb_rad/bb_rad.htm



コンプトン散乱 (Compton scattering)

- 物質によって散乱されたX線のなかに,その波長が入射X線より長いものが含まれている現象.
- X線(振動数 ν)が物質中の電子によって弾性散乱をうけるため,波長変化は光子と電子との衝突においてエネルギー保存則と運動量保存則から導かれる.
- 光子がきまった運動量を荷う粒子として振舞うことの直接の証拠.
- 1923年にコンプトンが発見.

光電効果 (photoelectric effect)

- 光(X線を含む)を吸収し,そのエネルギーを得て物質(原子,分子,固体)から外部に自由電子が放出される現象.
- 振動数 ν の光をエネルギー $h\nu$ の粒子として吸収した金属内の電子は, $h\nu$ がその金属の仕事関数によってきまる限界値 $h\nu^*$ より大きいときに限って,光電子として金属の表面から跳び出すことができる.
- アインシュタインは光の粒子性を示すものとして解釈.

Schrödinger方程式

- 導出(テキストp.32を参照して各自トライ)

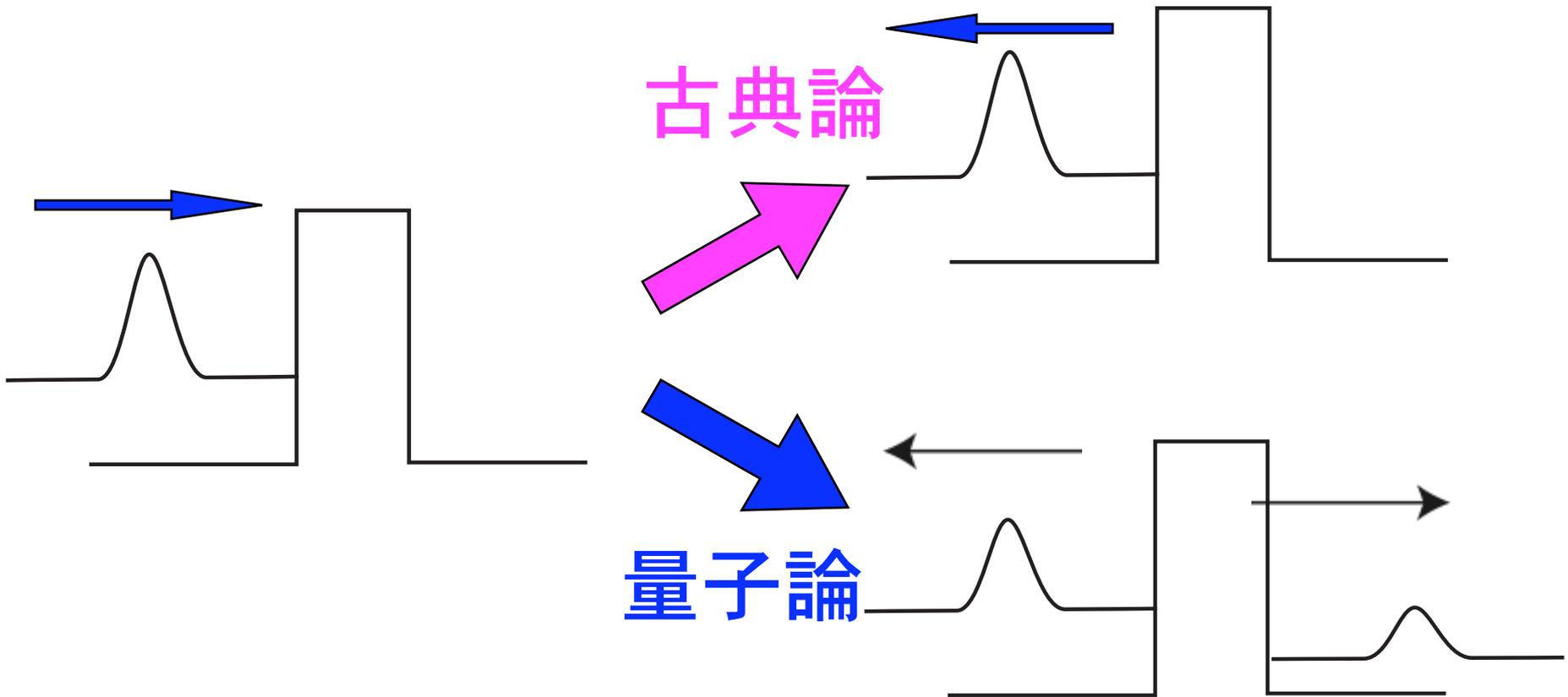
$$H \psi = \varepsilon \psi$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$$

量子効果

- 量子力学に特有の効果という。
- エネルギー準位がとびとびになること，
- トンネル効果，
- 零点振動，方向量子化，超流動，超伝導，アハロノフ - ボーム効果その他種々の波動関数の干渉効果など数多い。
- プランク定数 $h \rightarrow 0$ の極限で消えるのが一般的な特徴である。

トンネル効果



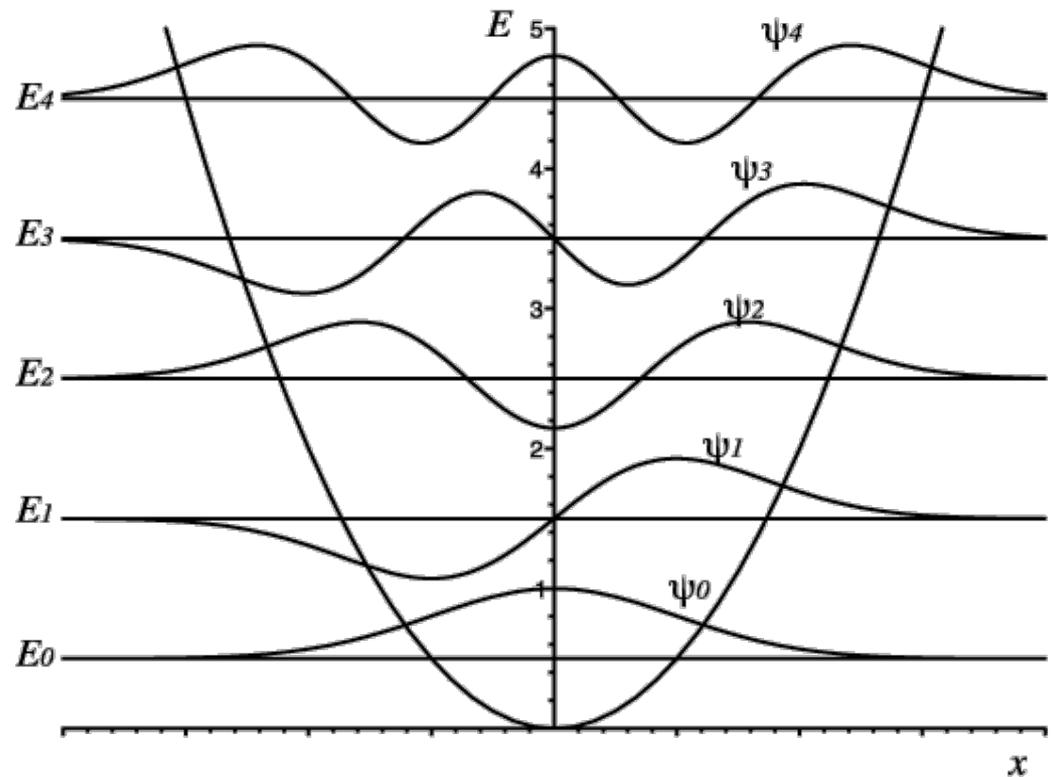
簡単な例(一次元調和振動子)

■ ポテンシャル

$$V = \frac{K}{2} x^2$$

■ エネルギー準位

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega,$$
$$n = 0, 1, 2, \dots$$



水素原子

$$V(r) = -\frac{1}{r}$$
$$E_n = -\frac{1}{n^2}$$

