量子論

我々の世界を支配している微少の粒子を「量子」という。極微の世界における数々の物理法則は、多くの著名な科学者の着想と研究成果として20世紀以降に築き上げられた。

この講義では、量子論の完成に至るまでの歴史的経緯、科学者のユニークな発想とその法則を学ぶ。

熱放射現象

物質はそれ自身が吸収する光と同じ波長の光を発する
G. R. Kirchhoff(1859)

完全黒体による熱放射現象の説明（古典力学の観点による）
→短波長の挙動について説明できない（紫外部破局）

M. Plankによる仮定(1900)
光の波は振動数νに比例するエネルギーEをもち、振動数の整数倍に相当するエネルギーのみが出入りできるとする。

$E=nh\nu$ 　　h=プランク定数($=6.626*10^{-34}$[Js])

温度T、振動数νにおける輻射のエネルギーρ（ν, T)

$$\rho(\nu,T)=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{\exp(\frac{h\nu}{kT})-1}$$

光は不連続な値のエネルギーをもつ

光電効果

光電効果：金属に光を照射すると、その表面から電子（光電子）が飛び出る

・光の強度により飛び出る光電子の数が変わる
・振動数 ν_0 以下の光では、強度に関わり無く光電子は飛び出ない
・光電子のエネルギーは照射光の強さとは無関係
・照射光の振動数により光電子のエネルギーは増加する

古典力学の観点では･･･
→光電子のエネルギーは照射光の強さによって変わる
→光電効果を説明できない

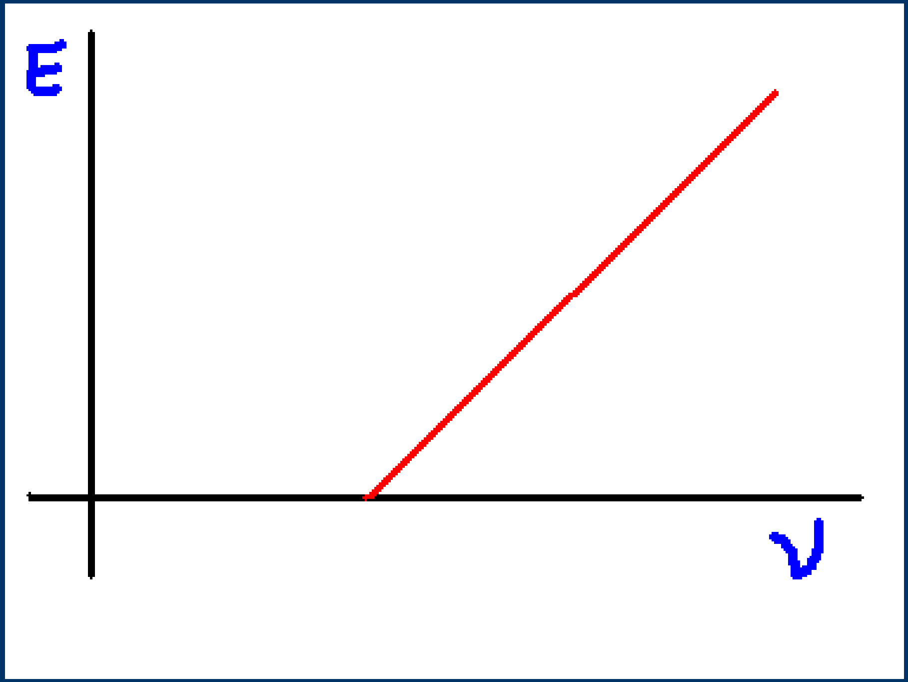
A.Einsteinによる量子概念の導入

振動数νの光をhνという「量」のエネルギーをもつ粒子の流れであるとする。

電子が金属の外部に飛び出るときのエネルギーをWとし、飛び出した光電子の質量をm、速度をvとおくと、

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W$$

光量子（光子）



$1/2(mv^2)=0$ において、

$$W=h\nu_0$$

すなわち、

$$\nu_0=W/h$$

W/hより振動数が小さいとき、光電子は飛び出ないことがわかる。

Wは仕事関数とよばれ、金属の種類によって異なる。

このhνというエネルギーを持つ光の流れを光量子または光子という。

これらの発見により・・・

光の強度を上げる＝光量子の数を増やす（光量子のもつエネルギー自体は変わらない）

光をνという振動数、すなわち波の性質（波動性）をもつ粒子（粒子性）と捉えることで、光電効果は見事に説明された。

水素原子のスペクトル

原子の発光スペクトル解析に関する原理の確立は、分光学の発達に大きく寄与した。その原理の解明に向けては、様々な研究がなされた。

可視部に観測される一連のスペクトル線の波長に関する関係則

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right) = R\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

ν：波数[Hz]
λ ：波長[cm]
R：リュードベリ定数(=109737[cm^{-1}]=3.2898*10^{15}[Hz])
(n=3,4,5･･･),(n_2=n_1+1),(n_1=1,Lyman系列、n_1=2,Balmer系列)

これの物理的な解釈のために様々な試みがなされたが、Bohrの原子モデルによる説明が特に有名である。

Bohrの原子モデル

質量M、電荷Zeの核の回りを、質量m、電荷-eの電子が円運動している
(E.ratherfordのモデル)

円運動による遠心力とクーロン力が釣り合って円軌道が成立していると考えれば、

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

r:円軌道半径
ε_0:真空中の誘電率

また、電子のエネルギーは運動エネルギーTとポテンシャルエネルギーVの和によって表される。

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r} = \frac{-Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

この段階では、エネルギーの値は連続的な値をとることになる。ここでBohrはある仮定を導入した。

電子の軌道運動に対する角運動mvrは、h/(2π)を単位としてその整数倍の値のみをとるとする。

$$mvr = n\left(\frac{h}{2\pi}\right)$$

すなわち、

$$r_n = \frac{n^2 \varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2 Z} \quad (n = 1, 2, 3 \cdots)$$

$$E_n = -\left(\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\right)\left(\frac{Z^2}{n^2}\right) \quad (n = 1, 2, 3 \cdots)$$

量子の世界においては、エネルギーは非連続的な値をとり、線スペクトルは、このような異なるエネルギーをもつ状態の間を移り変わること（遷移）により、そのエネルギー差ΔEが出入りするために生ずる。

Compton効果

物質にＸ線を照射したとき、散乱されてくるＸ線の波長は、もとの波長に比べて長くなる

Ｘ線について、エネルギー$h\nu$、運動量$h\nu/c$の光子と考えれば、この光子が物質中の電子に衝突するとき、

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c}(1-\cos\theta)$$

θ ：散乱角
m_e ：電子の静止質量
c ：光速度

ここで、$h/m_e c$は既知の値であり、これを定数として考えれば、

$$h/m_e c = 2.43*10^{-3}\ [\mathrm{nm}]$$

これをCompton波長といい、光が粒子性を示す実験的な証拠でもある。

de Brogile波

光だけでなく、電子に関しても同様の性質をもつとすると、電子の場合にも以下の関係が成り立つ。

$$p = \mathrm{m\,v} = \frac{h}{\lambda}$$

de Brogileは、この関係が他の粒子でも成り立つと考え、粒子のもつ波動性を物質波と呼んだ。

これは粒子と波の関係を示す上で大きな意味をなし、電子が波動性と粒子性を併せ持つことは、1927年に電子線回折の実験によって証明された。（G.P.Thomson 菊地正士ら）

不確定性原理

マクロな世界での物体の運動については、その位置座標と運動量は正確に求められるが、ミクロの世界においては、その波動性から一点には集約できずある程度の広がりをもつ。ミクロの世界では、粒子のもつ波動性を考慮した上で、その**「不正確さ」**を検討しなければならない。

電子の運動量の観測値については、最低でも±(hν/c)sinαの不正確さ（誤差範囲）が生じる。電子の位置座標については、この不正確さをΔxとおくと、回折に対する考察より、Δx=λ/sinαだけの広がりをもつ。

これについて1926年、W.K.Heisenbergによる不確定性原理では以下のように説明されている。

$$\Delta x \Delta p_x \geqq h$$

つまり、**量子の位置を正確に求めることはできない**ことをこの式は示している。

ミクロの世界の粒子の運動は、我々が目で見るような、ある定まった軌跡に沿って運動するものとして考えることはできない（＝**観測することができない**）。

「ならば粒子の実体はどこにあるのか」という問いは、非常に多くの科学者を悩ませた問題である。特に有名なシュレディンガーの猫は、この問題に対する一つの解であった波動関数に対する各界の冷ややかな反応への皮肉とも言える。

探しても見つからない（探せない）　∈　そこに存在しない

これが真であるとするならば、これまでの理論は全て否定されなければならない。そこに存在しないものは探しても見つかるはずはないが、果たして探しても見つからないもの（＝あるかどうかわからないもの）はそこに存在していると言えるのだろうか？

実体は発見できないにも関わらず、「そこに存在している」ことは確かであり、古典物理学はここで大きな壁に突き当たることとなった。

Schrödinger方程式（波動方程式）

ミクロの粒子の挙動や状態を表す方程式には、これまでに話したように、粒子性と波動性両方の関係が盛り込まれていなければならない。

E. Schrödingerは1926年、「粒子」という表現を用いず、粒子の存在を表現するために波動関数とよばれる関数を導入し、これを求めるための方程式を提案した。これはSchrödinger方程式とよばれ、量子力学の中核をなす重要な式として特に有名である。

ポテンシャルエネルギーV(x)のもと一次元空間において運動する質量mの物質について、

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}+V(x)\Psi(x)=E\Psi(x)$$

Ψ：波動関数
E：全エネルギー(運動エネルギー＋ポテンシャルエネルギー)

ここでは、粒子は一種の波のような存在として扱われる。これに伴いプランク定数hは以下のように書き換えられている。

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

三次元空間におけるSchrödinger方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x,y,z)+V(x,y,z)\Psi(x,y,z)=E\Psi(x,y,z)$$

偏微分演算子を省略して∇^2と表現する場合がある。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x,y,z)+V(x,y,z)\Psi(x,y,z)=E\Psi(x,y,z)$$

更に簡略化した式として、ハミルトニアン演算子を用いた方法があるが、ここでは省略する。

次に、量子論におけるΨの取り得る関数とその値の持つ意味について考えなければならない。不確定性原理により、粒子の存在する位置座標は正確に掴むことができないため、一次元空間においては$|\Psi(x)|^2dx$をx～x+dxの範囲における**電子の存在確立**と考える。

電子の存在確立$|\Psi(x)|^2dx$の取り得る値は次のように考えられる。
・座標の変化に対し連続的に変化する
・負の値をとらない
・解は有限である
・解は常にひとつとなる

また、粒子の存在する全空間についてこれを積分すれば、以下のようになることは明らかである。

$$\int |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

規格化の条件(normalization condition)

三次元空間についても同様に考えると、

$$\int |\Psi_{(x,y,z)}|^2 dxdydz = 1$$

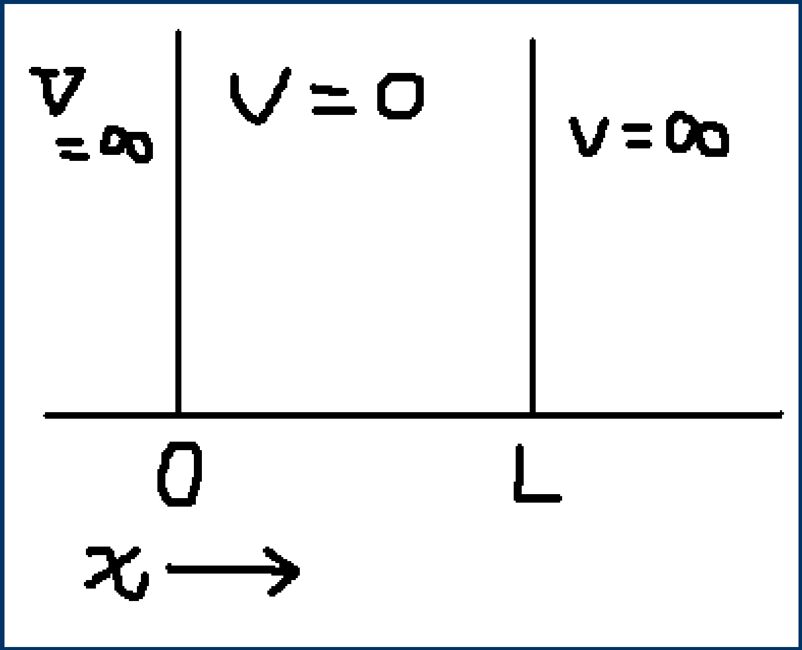
簡単のためdxdydz=dτとおけば、

$$\int |\Psi|^2 d\tau = 1$$

これを規格化の条件といい、すなわち粒子が必ず存在する空間について必用区間を積分することを条件とすることを定義している。

積分区間に必ず粒子が存在することを条件として存在確立を問うと、その解は必ず１になることは明白であり、これにより単位空間における粒子の存在を定義することができる。

波動方程式による計算



波動方程式により、粒子の世界を実際に記述してみよう。最も単純な例をここに示す。

一次元の箱の中を運動する粒子について考えよう。x=0〜Lの範囲では、ポテンシャルエネルギーVは0であり、それ以外では∞とすると、粒子はV=∞の領域には存在しないことになる。

x=0〜Lを除く領域において、

$$\Psi(x)=0$$

箱の中にある粒子について、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}=E\Psi(x)$$

この２階常微分方程式の一般解は、指数関数ではなく三角関数で表される。

$$\Psi_{(x)} = A\sin kx + B\cos kx \qquad k = \frac{\sqrt{2\mathrm{mE}}}{\hbar}$$

A, B：任意定数

波動関数はxの値について連続でなければならないため、箱の境界x=0, LにたいしてはΨ(x)=0が成り立つ。これを境界条件という。

x=0のとき、

$$\sin 0 = 0, \cos 0 = 1 \quad \text{より、} \quad \Psi_{(0)} = B = 0$$

同様に、x=Lのとき、

$$A\sin kL + B\cos kL = A\sin kL = 0$$
$$\sin kL = 0$$
$$kL = n\pi \quad (n = 0,1,2\cdots)$$

これにより、エネルギーEと波動関数Ψ(x)は、整数値nを含む関数として次のように表される。

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

$$\Psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}\right) x \quad (n = 1,2,3\cdots)$$

この場合の規格化の条件を考えると、

$$\int_0^L \Psi_n(x)^2 dx = 1$$

これより、

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

x=0, Lにおける制限から、エネルギーの値は非連続な値をとることがわかる。ここでnを量子数という。

零点エネルギー

ここでn=0の場合を考えると、波動関数が全ての位置で0の値をとることになる。これは波動関数の意義自体を打ち消すものであるため、エネルギーの最低値はn=1となる。

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mathrm{mL}^2}$$

これを零点エネルギーといい、量子の取り得る最低のエネルギー値を表している。つまり、**量子力学の世界では量子の運動を止めることはできない**ことがわかり、古典力学における絶対零度の概念を根底から覆すものとなった。

対応原理

量子力学の発展により、古典力学の存在意義が失われたかというと決してそうではない。最後に、量子力学と古典力学の理論的な共通性について考えよう。

我々の見ることのできるマクロの世界では、粒子は全ての位置で同じ確立で存在する。$n\to\infty$における波動関数の変化は、量子が箱の中に一様に分布するような状態に近づいていき、よりマクロな粒子分布を表現できる。

つまり、古典力学の存在意義は失われたわけではなく、量子力学における**量子数を∞としたときの近似値**として、現在も様々な分野で用いられる非常に重要な学問として使用されているのである。

まとめ

- ミクロの世界におけるエネルギーの値は非連続
- 量子自体を観測することはできない
- 波動方程式により、量子の存在は確立によって示される
- 絶対零度においても、量子は運動し続ける
- 量子数が増えれば、取り得る値は古典力学により近似できる

普段の生活の中で、量子論的な観点で物事を考える機会はほとんどないだろう。しかし、量子論はこれまで想像上のものでしかなかった様々な「夢」を現実的に捉えることに成功し、現在ではここから生まれた発明の多くが我々の生活を支えている。この講義を期にこれまでの物理に対する理解をより一層深め、興味を持っていただけたならば幸いである。

以上です