

量子力学の役割

自然現象の解釈

最先端技術への応用

(I) 量子力学とは

量子力学 = 諸現象, 物質の根本

量子力学の2大原理

1. Heisenberg の不確定性原理

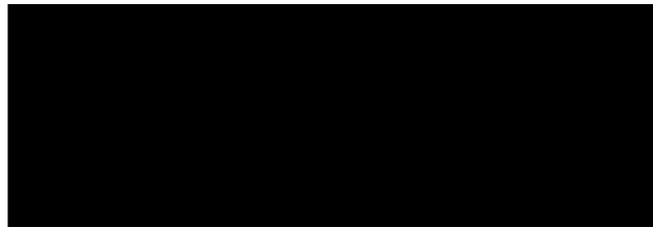
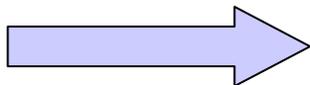
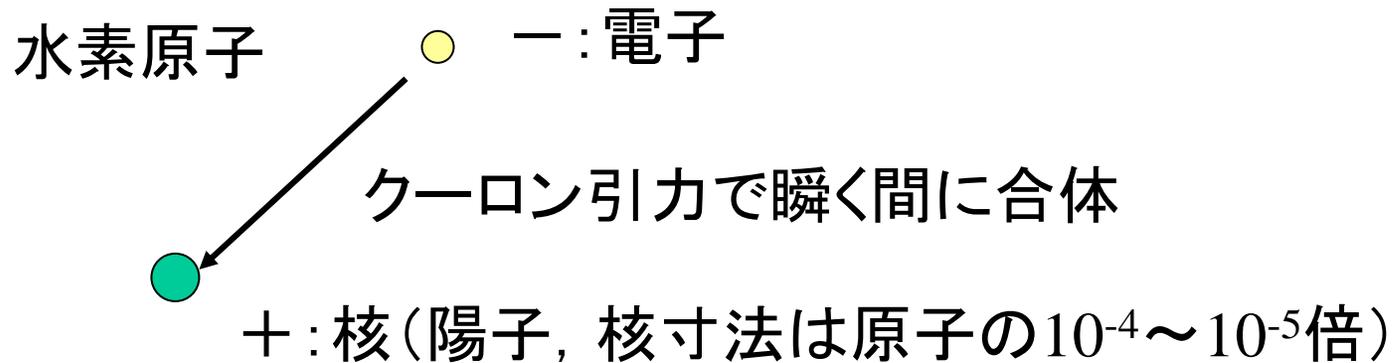
小さな空間に閉じこまれるほど粒子(核子, 電子など)のエネルギーは高くなる

2. Pauli の排他律

複数のフェルミ粒子(核子, 電子など)は同一状態を占めることはできない

量子力学のもつ意味

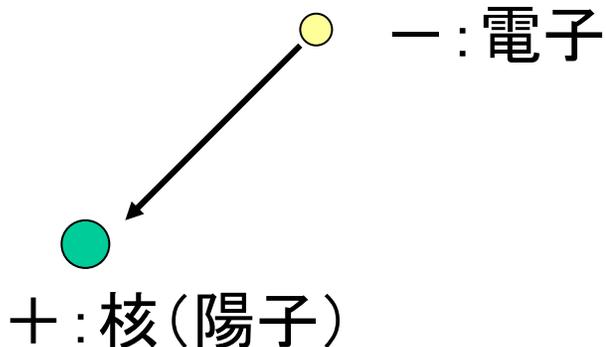
(a) 古典物理のみ (量子力学の原理が働かないとした場合)



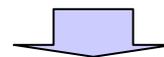
無の世界 (宇宙さえ存在しない)

原子の安定性 ?

(b) 古典物理 + 不確定性原理

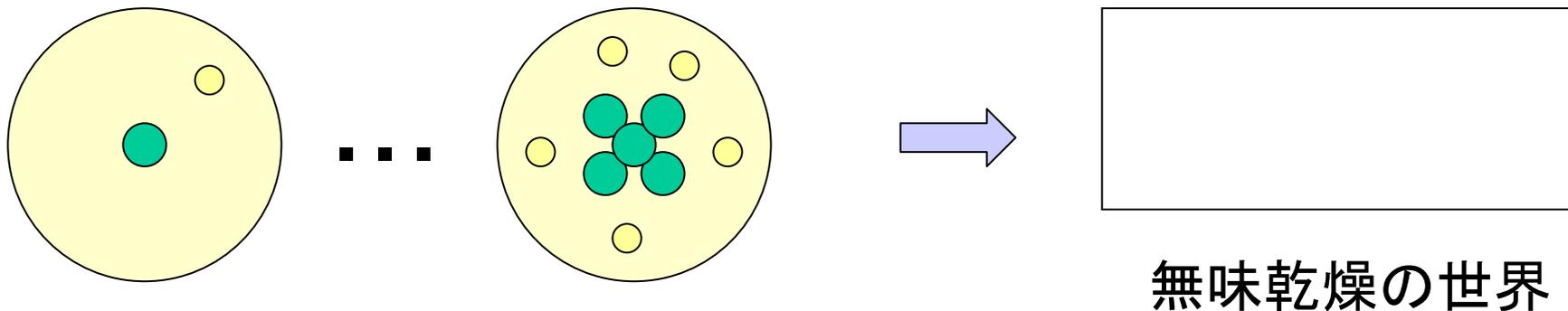


電子が原子に近づけば, 電子の (運動) エネルギーは高くなる.



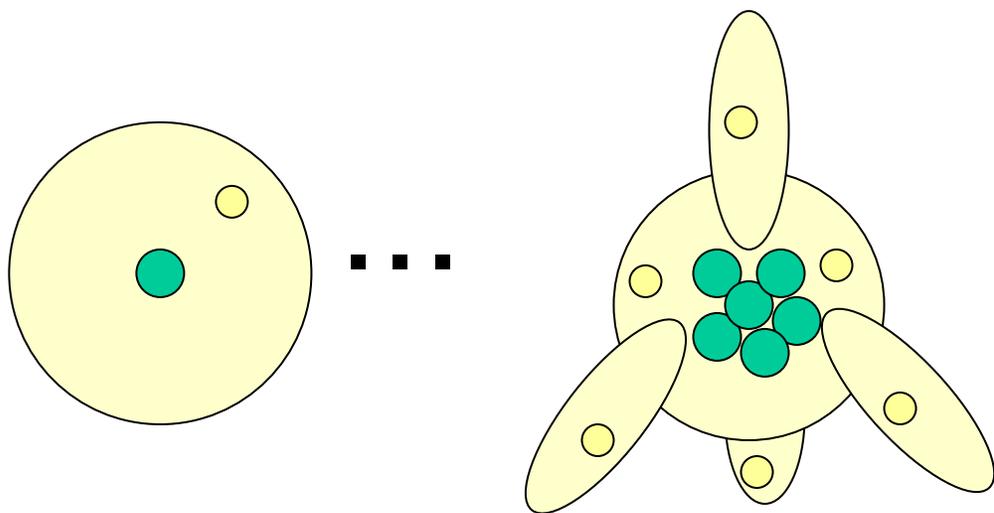
クーロンポテンシャルと運動エネルギーと釣り合ったところで安定
= 原子の寸法

ところが, 原子番号が増えても質量が増えるだけで同性質の原子

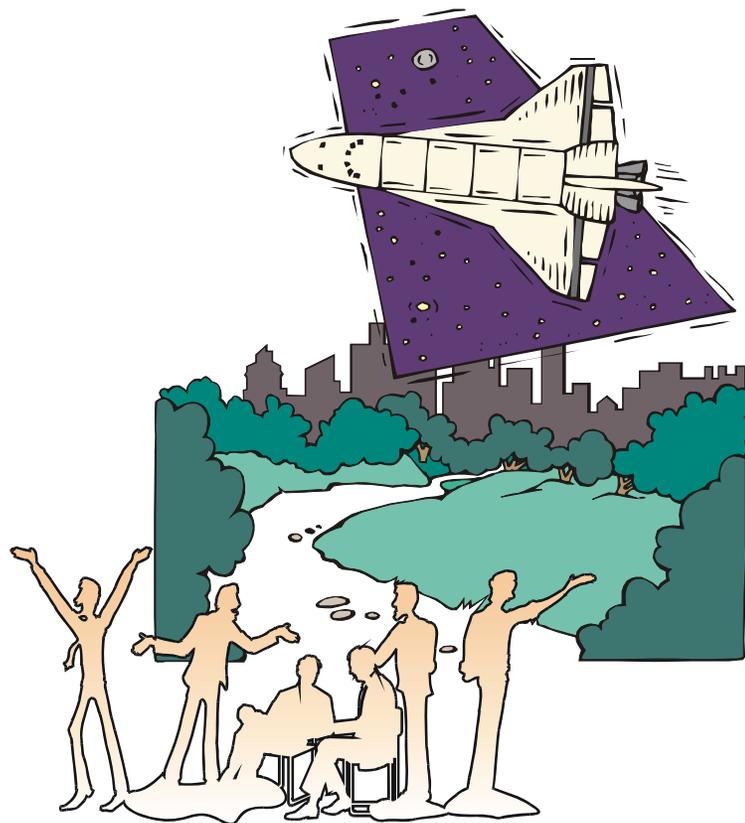
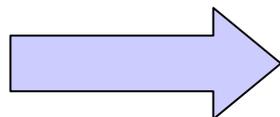


(c) 量子力学が満たされている場合

排他律により, 各電子は異なった状態



色々な原子が結合したり, 反発したり
の多様な相互作用



原子, 分子, 無機, 有機, 生物
情報, 各種物性

(Ⅱ) 可視光

人は眼で見たものでどう判断しているか

- ・ チューリップはなぜ赤, 黄色をしているか?
- ・ 葉はなぜ緑色か?
- ・ 金属はなぜ光沢があり, 特有な色をしているか?



- ・ 鉄は加熱していくにしたがい, なぜ「黒 → 赤 → 黄 → 白」と変わっていくか?

光の波長(色)で光のエネルギーが判断できる
(量子力学により導き出された)

$$E = h \nu$$

$$\nu = E/h$$

E : 光子1つのエネルギー(光を粒子としてみる)

ν : 光の振動数(光を波動としてみる)

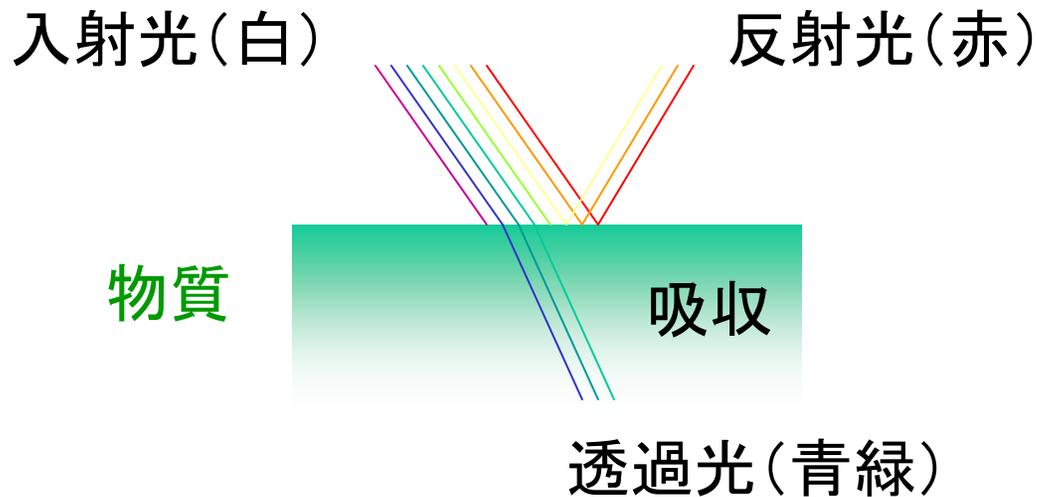
なお, $\lambda = c/\nu$: 波長

h : プランク定数(粒子性と波動性を結びつける)

物質には特有の色(=決まったエネルギーの光)

→ 特有の色の光を出す機構？

一部の発色機構(蛍光など)を除けば, 物質に入射光(白)があたり透過光, 反射光が特有の色をだす.

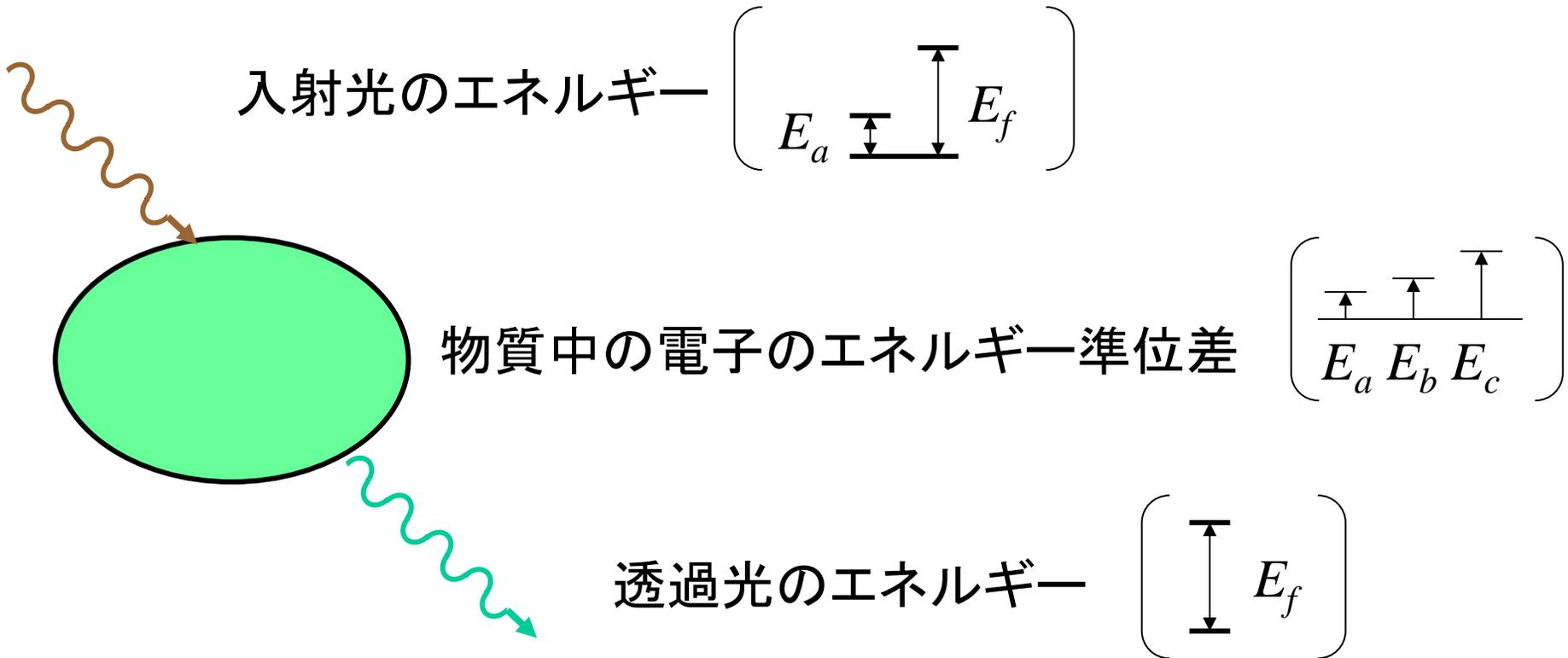


物質中で特有の色を奪う機構は？

入射光のエネルギー

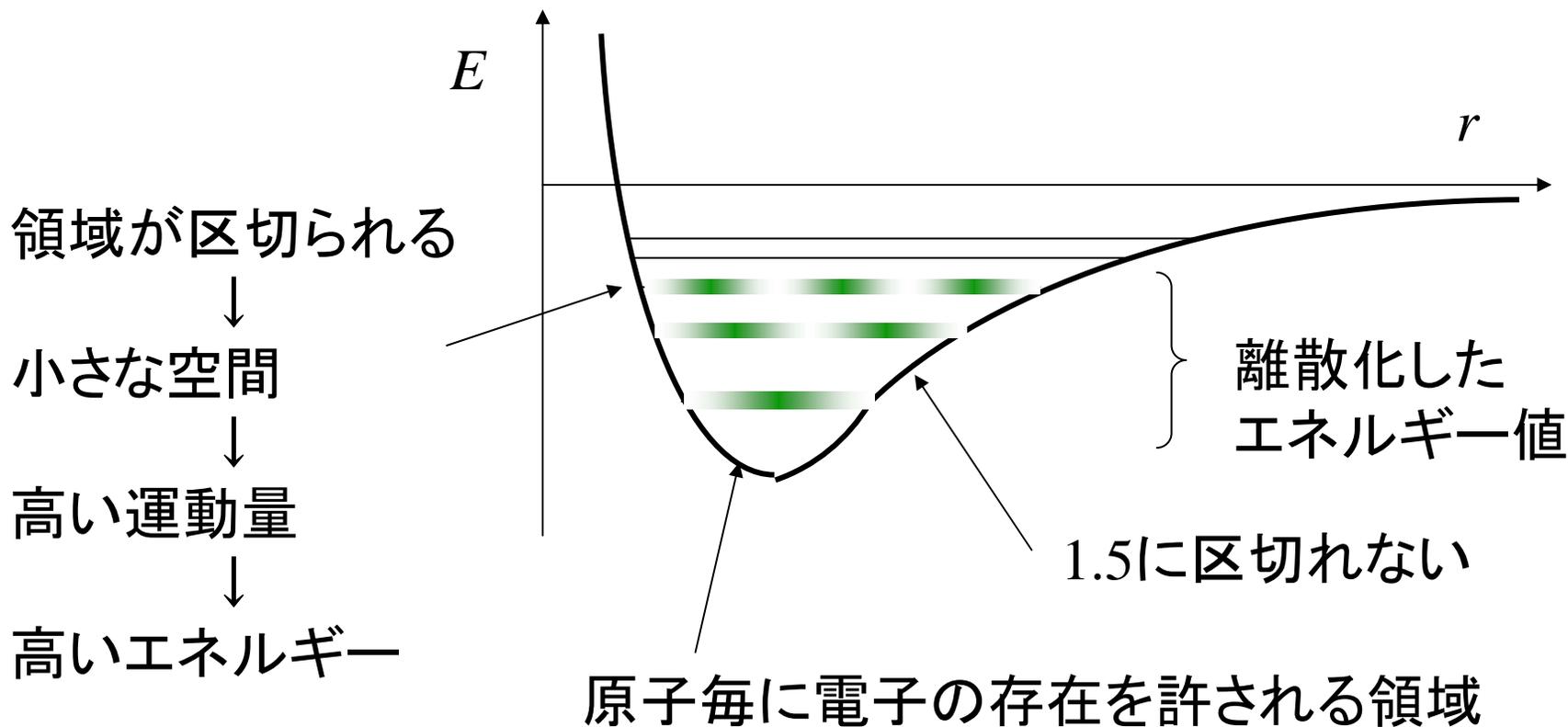
— 物質内の電子状態間のエネルギー

⇒ 透過光のエネルギー(物質の色)



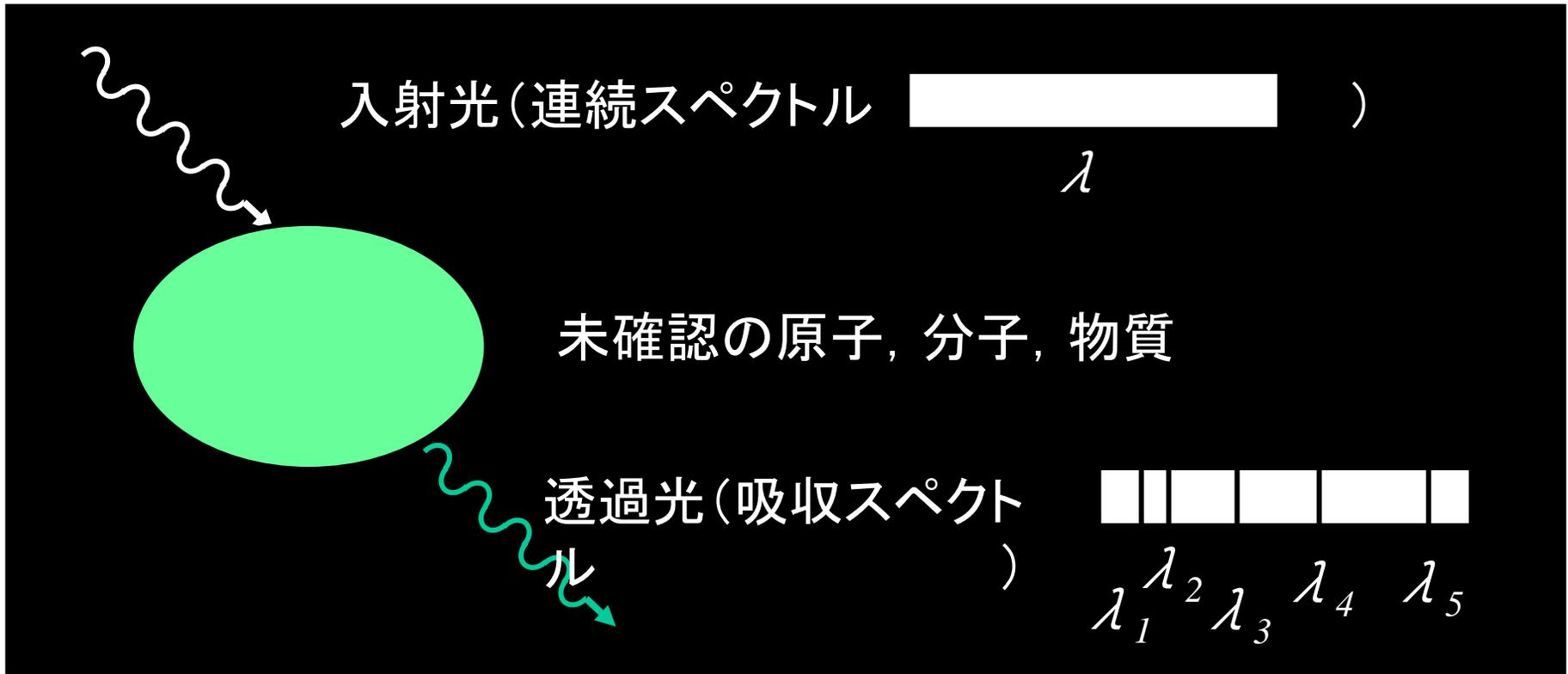
固有スペクトル

原子内の電子状態間のエネルギー差は離散化した特定値

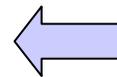


原子, 分子, 物質毎にスペクトルは固有

→ スペクトルが分かれば原子, 分子, 物質を同定



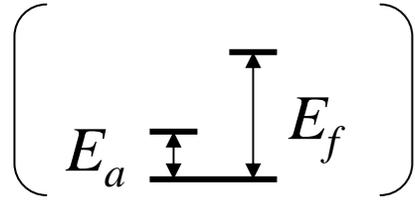
原子, 分子, 物質を同定



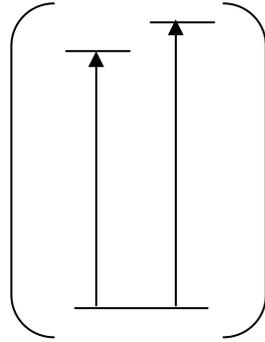
固有スペクトル
(特定波長だけ抜ける)

透明な物質とは

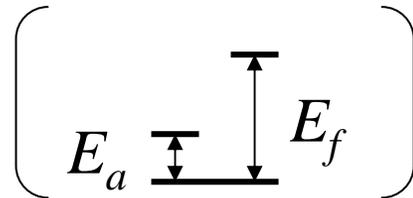
入射光のエネルギー



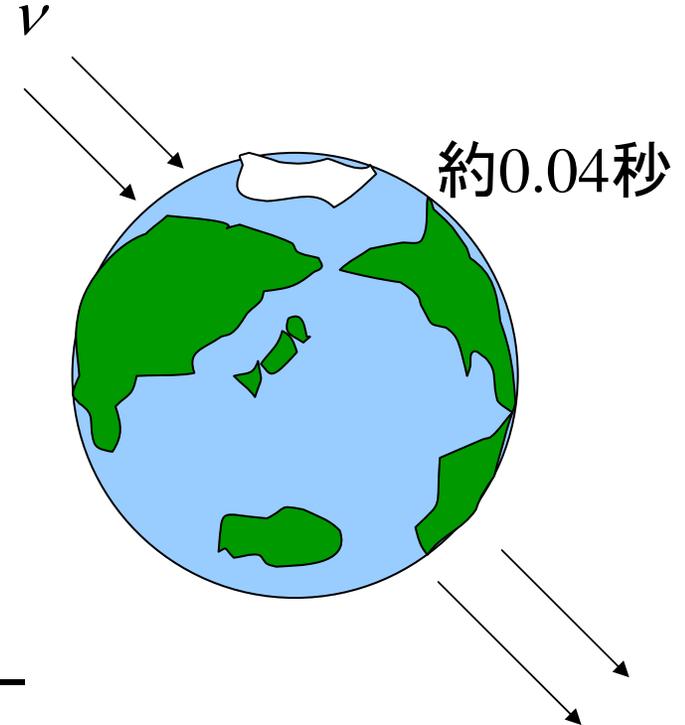
物質中の電子の
エネルギー準位差



透過光のエネルギー



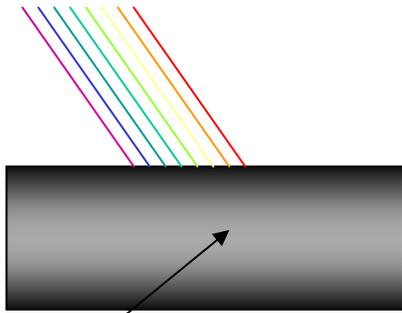
ニュートリノにとって
地球は透明物質



同一単一原子の物質でも異なる電子状態

[炭素]

グラファイト

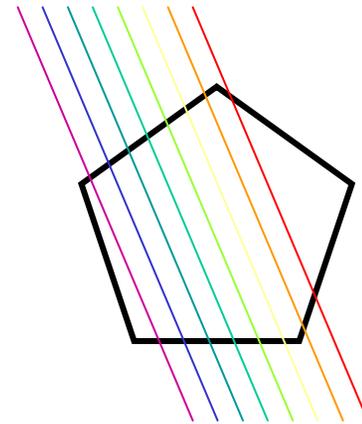


自由電子

自由電子: 連続したエネルギー準位

光をすべて吸収

ダイヤモンド



電子: 共有結合中に束縛

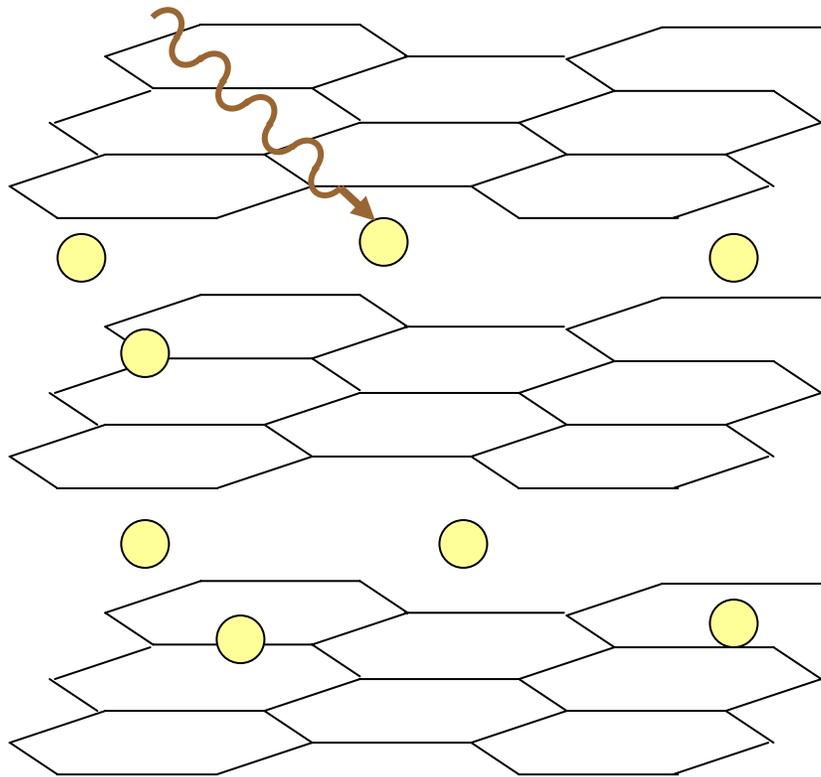
光をすべて透過



15.24ct D-EL
のダイヤモンド

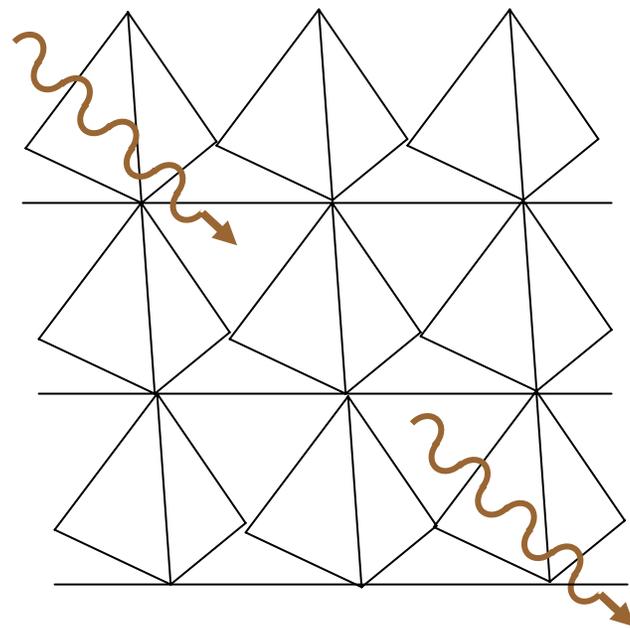
炭素原子同士

黒鉛(グラファイト)



六角形タイルを並べたものの何層も

ダイヤモンド



テトラポッド構造(4本の腕)

↳ 巨大な立体構造

熱・機械的力に強い

↳ 原子炉内部のモニター

ダイヤモンド半導体
= ダイヤモンドにPを添加

宝石の輝き：永遠の魅力



スリランカ産
サファイア
11.75ct



モゴク産ルビー
15.97ct



モゴク産サファイア
658ct



スリランカ産
ゴールデンサファイア
185.14ct

ルビー, サファイアの成分, 色相など

ルビー: 多様な色相の赤 $\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Cr}_2\text{O}_3$ (Cr 1%程度)
ピンク・サファイア $\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Cr}_2\text{O}_3$ (Cr 0.1%程度)

(注) エメリー(工業用研磨用砥粒)

$\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Cr}_2\text{O}_3$ (Cr 5%以上)

ブルー・サファイア: 多様な色相の青
 $\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Fe}_2\text{O}_3$ (1%程度) + TiO_2 (0.1%程度)

その他, Al_2O_3 を主成分として

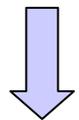
グリーン・サファイア, ゴールデン・サファイア等

いずれにしても, ルビー, サファイアの成分の
98%以上が Al_2O_3

鋼玉（コランダム） Al_2O_3

クラーク数（地表付近の元素の構成比） O : 47%, Al : 8%
硬度 9

Al_2O_3 （通称，アルマイトと呼び、
什器に使用）



溶融（ 2250°C ） → 冷却

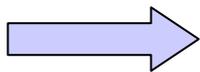
コランダム結晶



無色透明で、しかも高い屈折率
により強い煌めき

無色透明なコランダム
スリランカ産 0.9~1.5ct

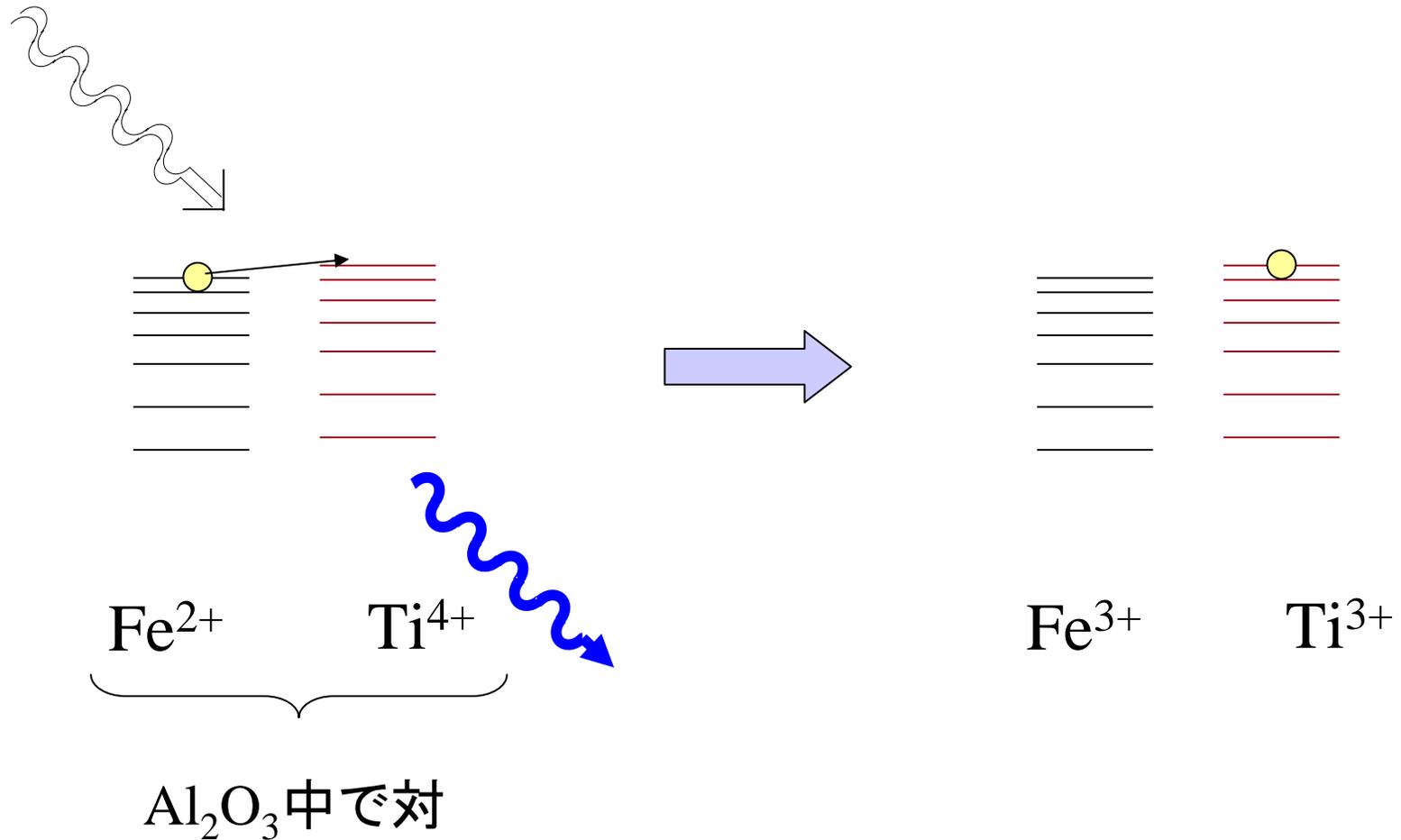
ほんの微量な元素が煌びやかな色の決め手



発色機構 ？

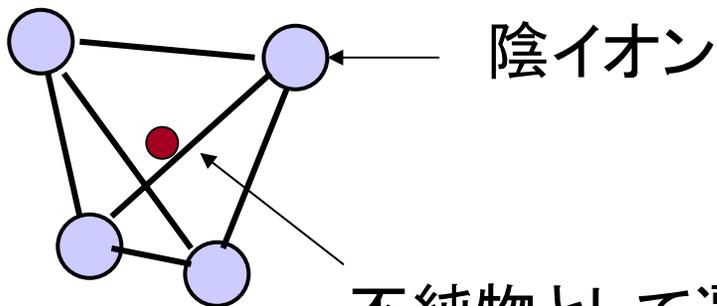
1. 電荷移動 (Charge Transfer)

ブルー・サファイア: $\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{TiO}_2$

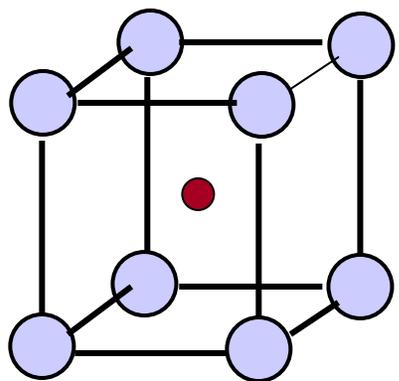


2. 配位多面体による着色

鉱物：陽イオンと陰イオンとが三次元的交互に結合する結晶構造

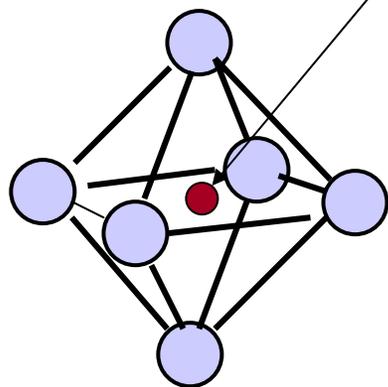


不純物として遷移金属 (Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu)



結晶間のバランス変化

可視光線中の特定エネルギー(波長)の吸収

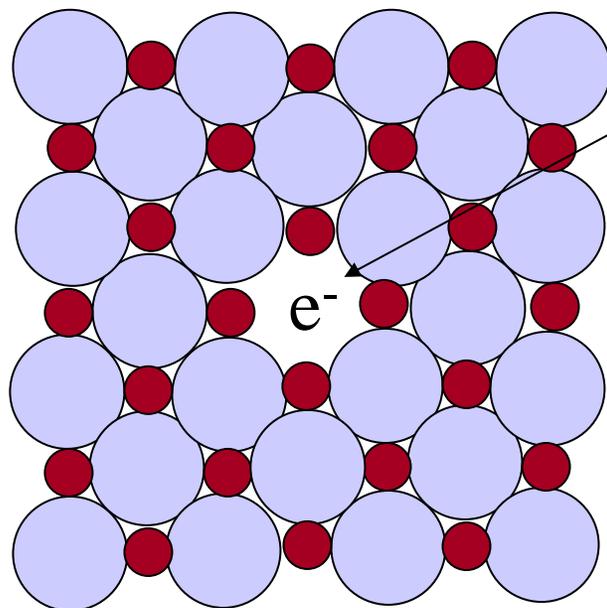


ルビー：青~緑吸収 ⇒ 赤

↓ 僅かにイオン同士の結合距離異なる

エメラルド： ⇒ 緑

3. 着色中心 (Color Center)



陰イオンが抜け落ちる

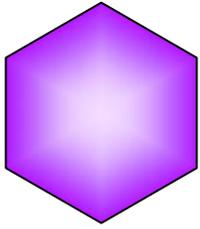
結晶全体の電氣的バランスを取る為

電子が欠落を埋める

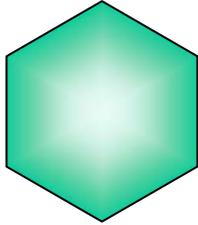
光の波長の選択吸収

水晶(紫、黄色、黒), 様々な色のダイヤモンド, ジルコン

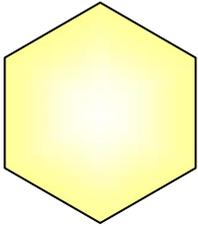
青以外のサファイア



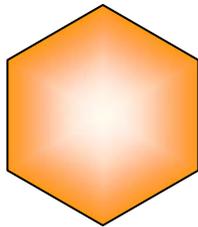
紫：電荷移動 (Fe, Ti)
+ 配位多面体構造 (Cr^{3+})



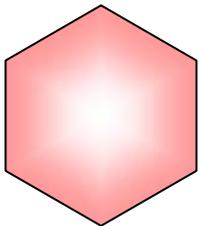
緑：電荷移動 (Fe, Ti)
+ 配位多面体構造 (Cr^{3+})



黄：電荷移動 (O^{-2} , Fe^{3+})
+ カラーセンター (Cr^{3+} , Fe^{3+})



橙色：配位多面体構造 (Cr^{3+})
+ カラーセンター (Cr^{3+} , Fe^{3+})



パパラチャ：配位多面体構造 (Cr^{3+})
+ 電荷移動 (Cr^{4+} , Mg^{2+})
(橙がかったピンク)

ルビーとサファイアの色の加熱処理



色むらのある
天然サファイア



淡色の
サファイア原石



淡色のサファイア



淡色の原石

加熱処理
(むら無くし、
濃い色にする)

加熱加工されたルース

無色, 淡色の原石が加熱により濃い青のサファイア に変貌する機構

サファイア原石 : $\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{ルチル(金紅石, TiO}_2)$



高温処理 (1300°C ~ 1650°C)

ルチル (低融点) は溶出, 還元されてTiイオンがサファイアの結晶格子中に取り込まれる.

(サファイア (融点2050°C) は溶けない)

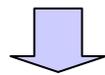
色が濃過ぎる石 : Ti, Feを酸化除去 ⇒ 色を薄める

淡青や淡緑の原石 : 鮮やかな黄色に発色

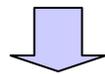
ビルマ・モンスー産のルビー：

結晶中心部の黒いサファイア成分を除去
⇒ 鮮やかな赤いルビーに発色

炭, 薪, ガス等の燃焼 ←—— 加熱温度, 時間の調整



H₂O, CO, Hの酸化, 還元作用の微妙な加減



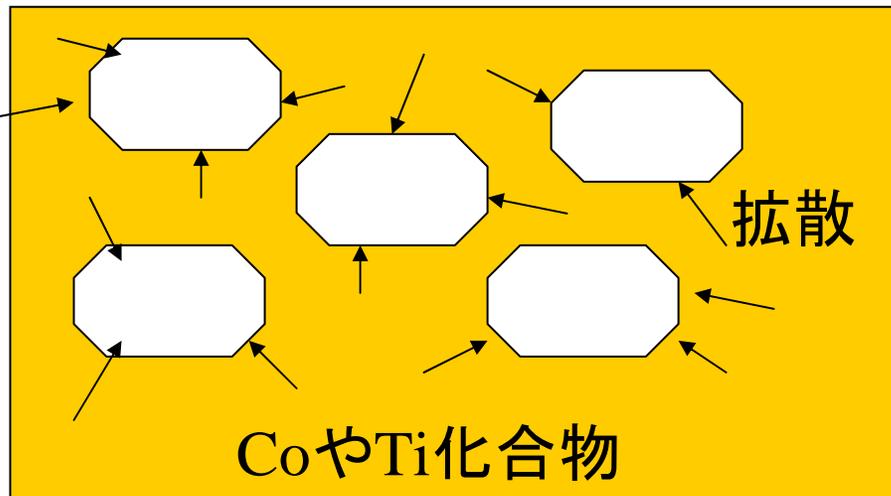
コントロール

不純物の除去, 結晶内への適度な拡散

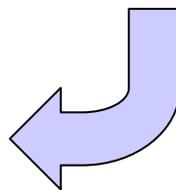
ディフュージョン・サファイア



無色のサファイア



2000°C
(サファイアの融点に近い高温)





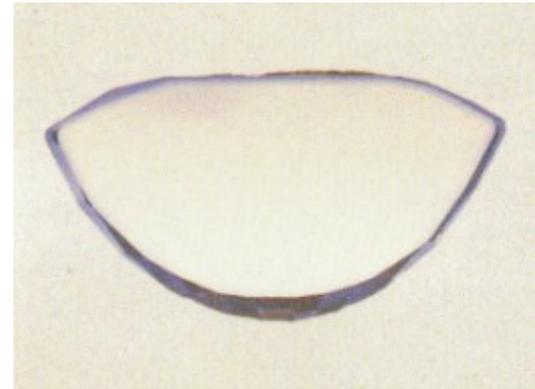
処理前のルース



処理直後のルース



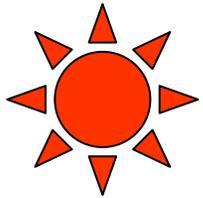
再研磨後のルース



断面
(表面だけに着色)

夜はなぜ暗いか ?

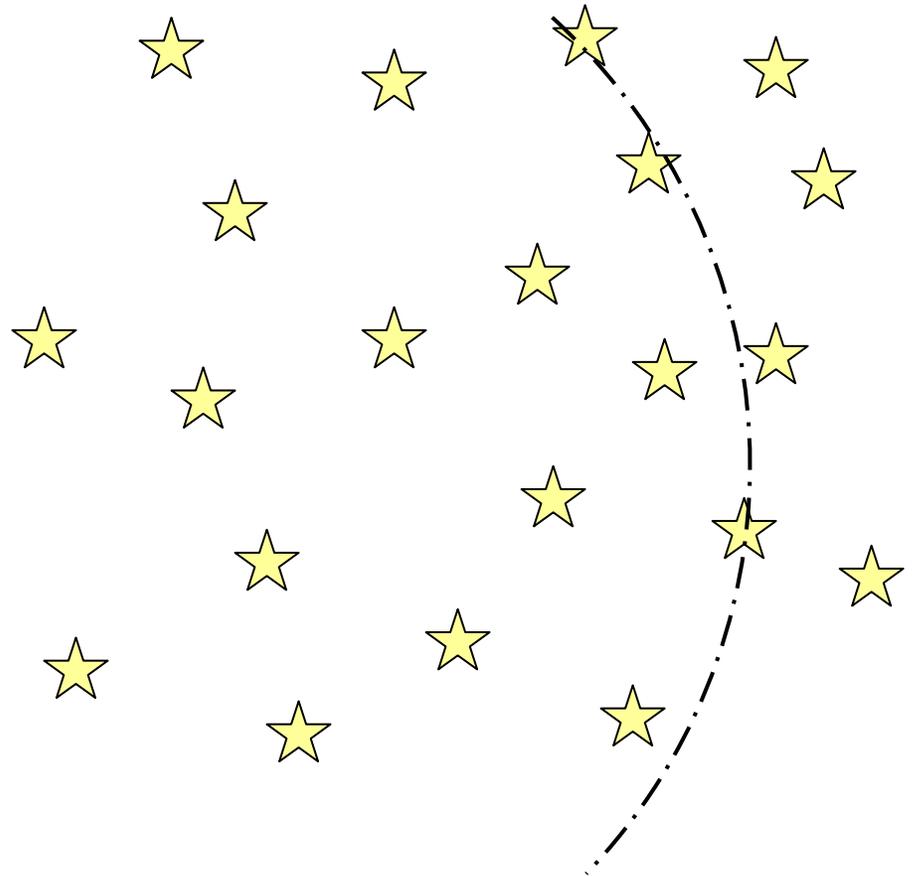
無限個の星 \Rightarrow 夜空は明るくてよい筈



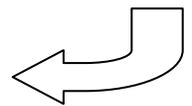
太陽



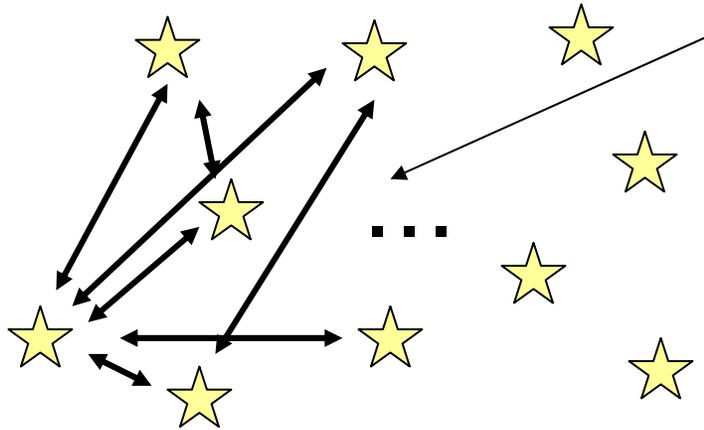
地球



遠方の星からの光が届かない理由 ?



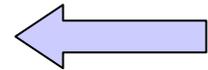
宇宙の安定性 ？



星間に作用するのは万有引力のみ
⇒ 宇宙すべての物質が合体
⇒ 宇宙の喪失 ？

夜の暗さ

宇宙の安定



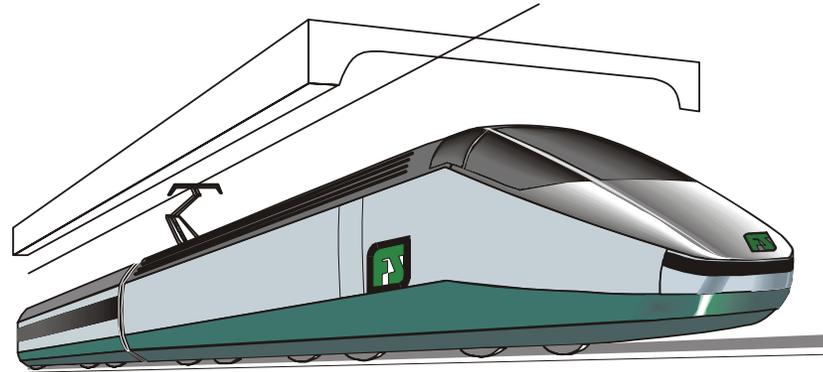
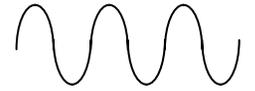
宇宙が膨張していると考えれば解決

- 検証？ ⇒ 星の対地球の速度の計測
⇒ 人類の到達できない星の情報？
⇒ 宇宙の90%は水素
(多種類の原子の存在する地球は特異箇所)
⇒ 水素の特性スペクトルは宇宙の果てでも同一

ドップラー効果

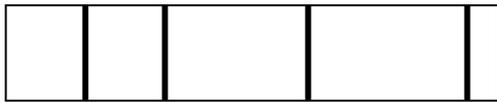
発する音

聞こえる音



・光であれば

水素であれば、
スペクトルは一定

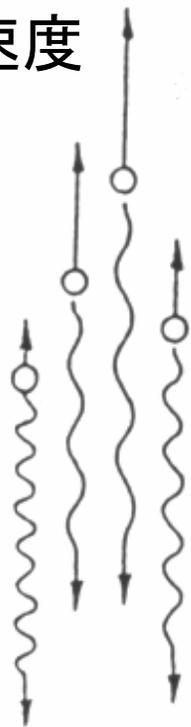


長波長(赤色)にずれる
= 赤方偏移

短波長(紫)にずれる

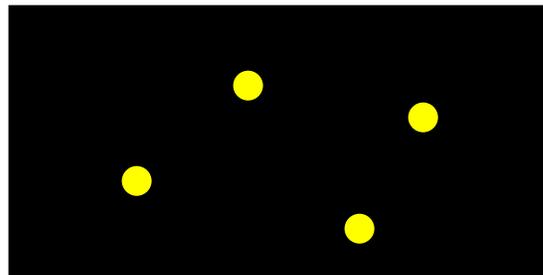
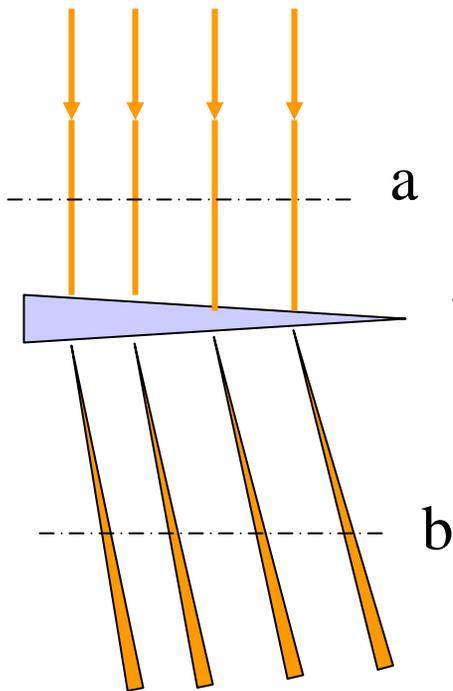
赤方偏移

後退速度

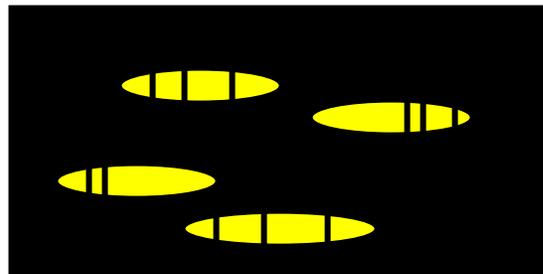


地球

地球上での観察



a位置での観察



b位置での観察

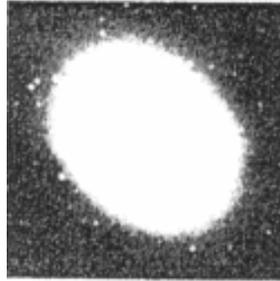


標準スペクトル線

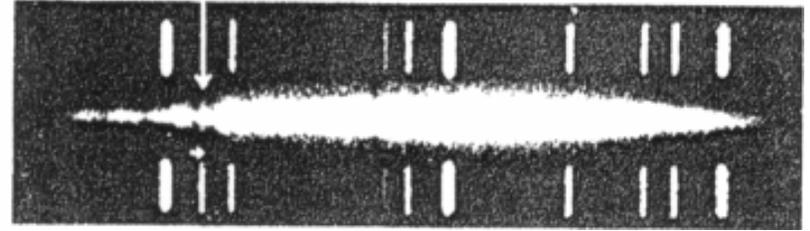
赤方偏移の例

乙女座団

1,200 km/sec

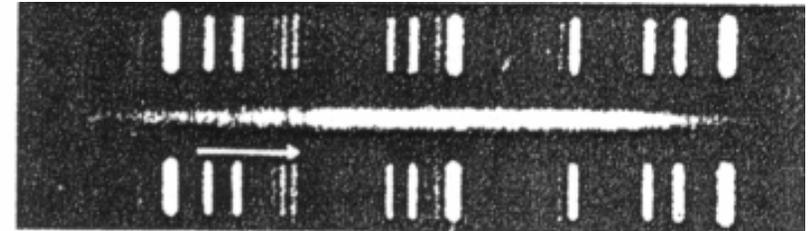


H+K



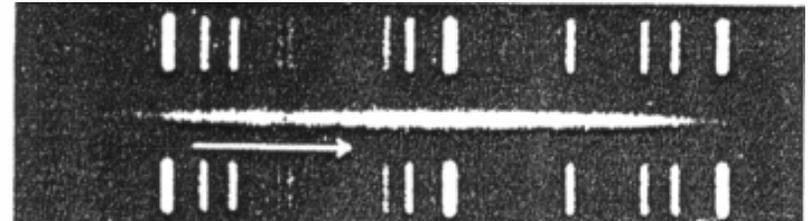
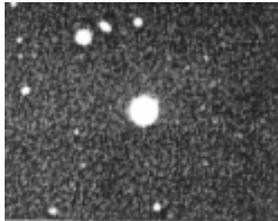
大熊座団

15,000 km/sec



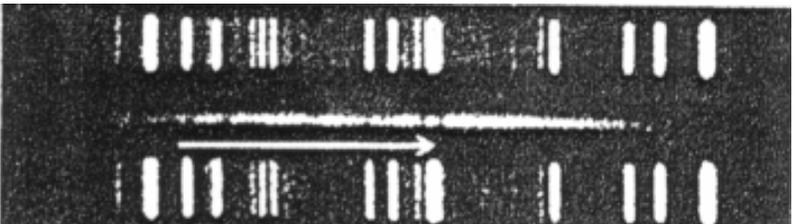
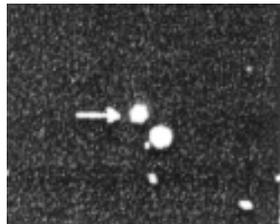
かんむり座団

22,000 km/sec



牛飼座団

39,000 km/sec



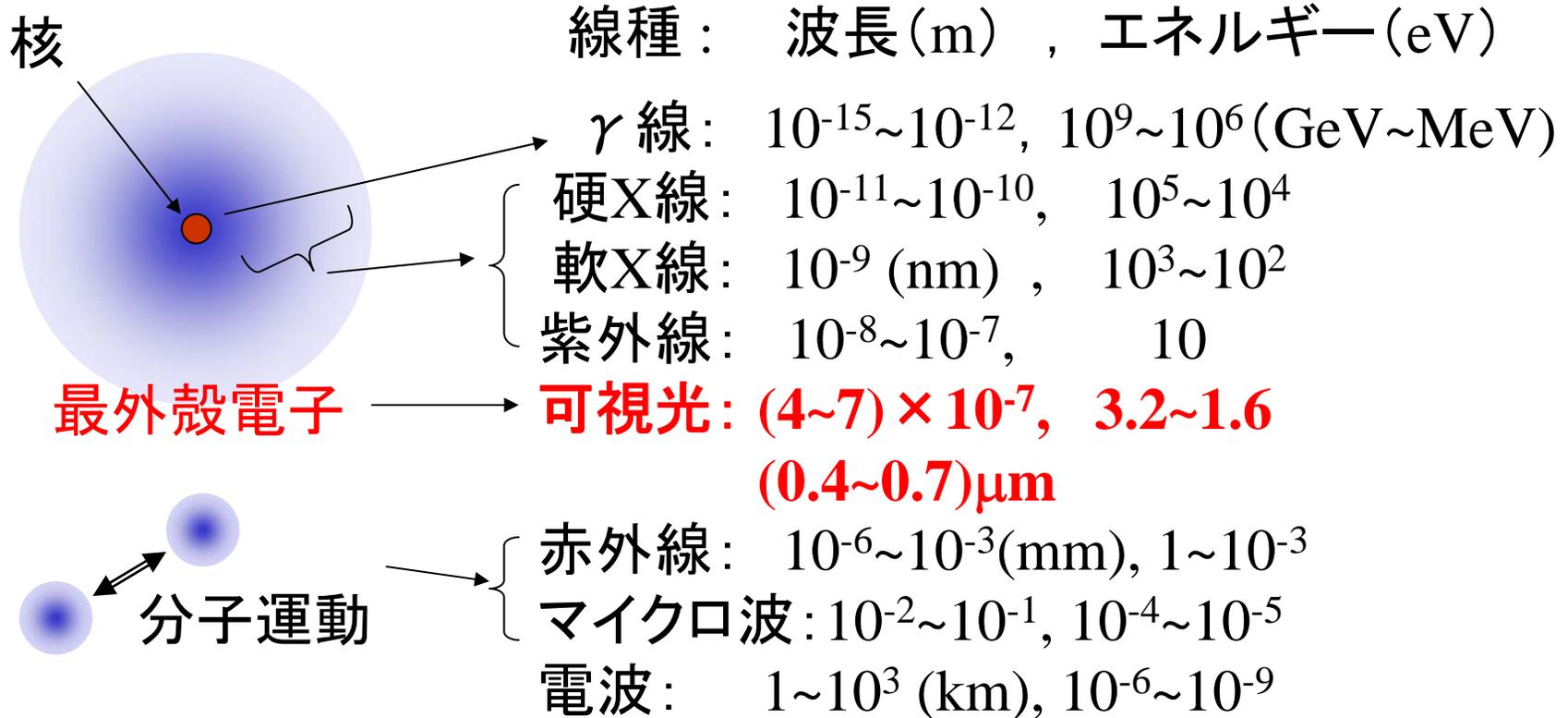
海蛇座団

61,000 km/sec



光のエネルギー

小さな空間から放射される光 ⇒ 高エネルギーの光
(高振動数, 短波長)



光は放射された空間程度の粒子に影響を及ぼす
⇒ γ 線は核を崩壊, X線は原子を崩壊する

視覚

光(電磁波)の波長は20桁以上の範囲

⇔ 人の視覚は可視光のみの0.5桁

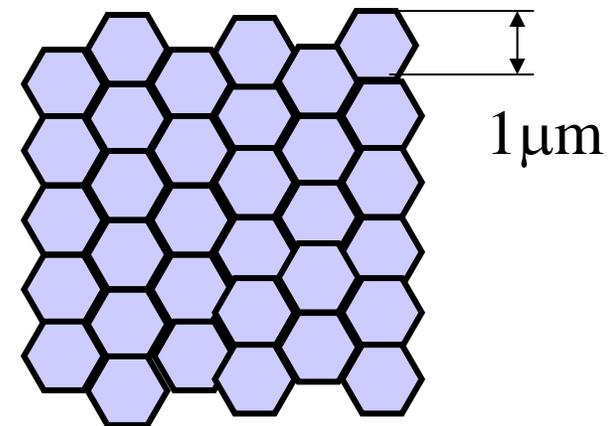
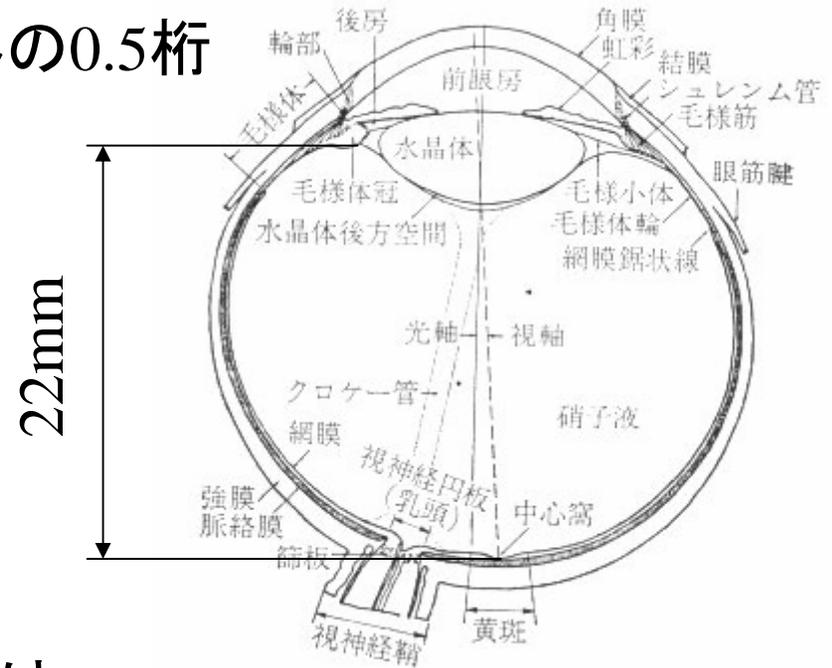
視覚の物理学, 生理学上の合理性

- ・波長 $0.1\mu\text{m}$ の紫外線より高エネルギーの光は原子・分子を変改
⇒ 細胞で光センサー不可能

- ・ 1eV (赤外線)以下のエネルギーでは視覚情報が視神経を伝播しない

- ・網膜細胞の大きさ $=1\mu\text{m}$
⇒ 可視光($0.4\sim 0.7\mu\text{m}$)に適切

画素数 $=7^2\pi/10^{-6}=1$ 億5400万

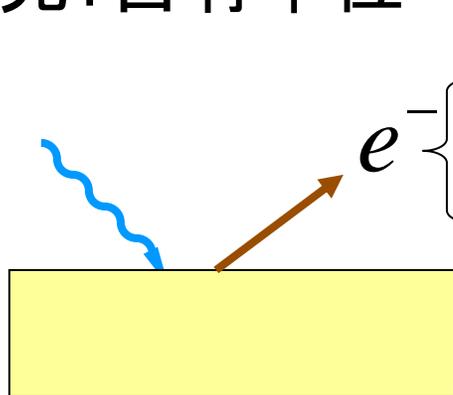
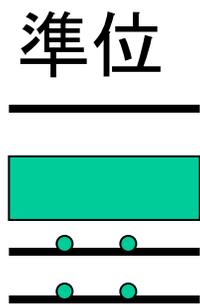


網膜細胞

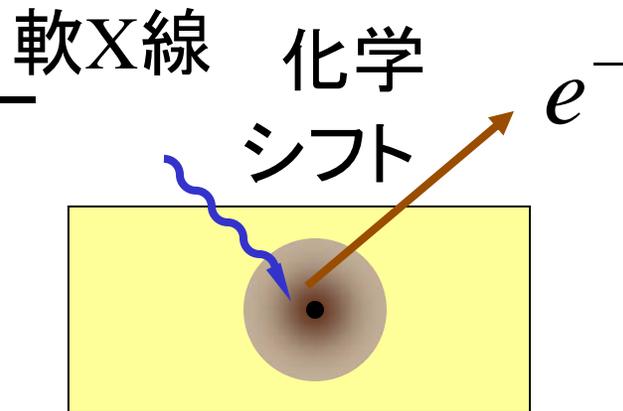
電子状態

真性表面準位 \longleftrightarrow { 表面電磁物性
表面の反応性

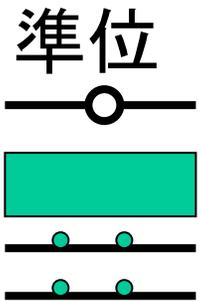
光電子分光: 占有準位



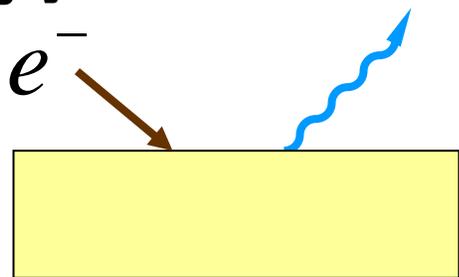
エネルギー
運動量



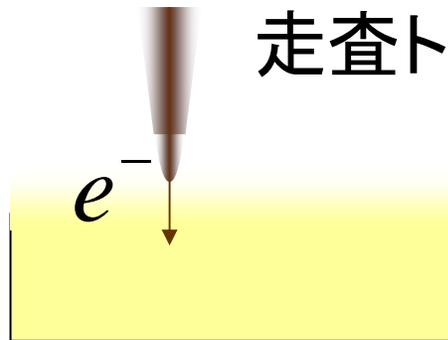
逆光電子分光法: 空準位



低速電子

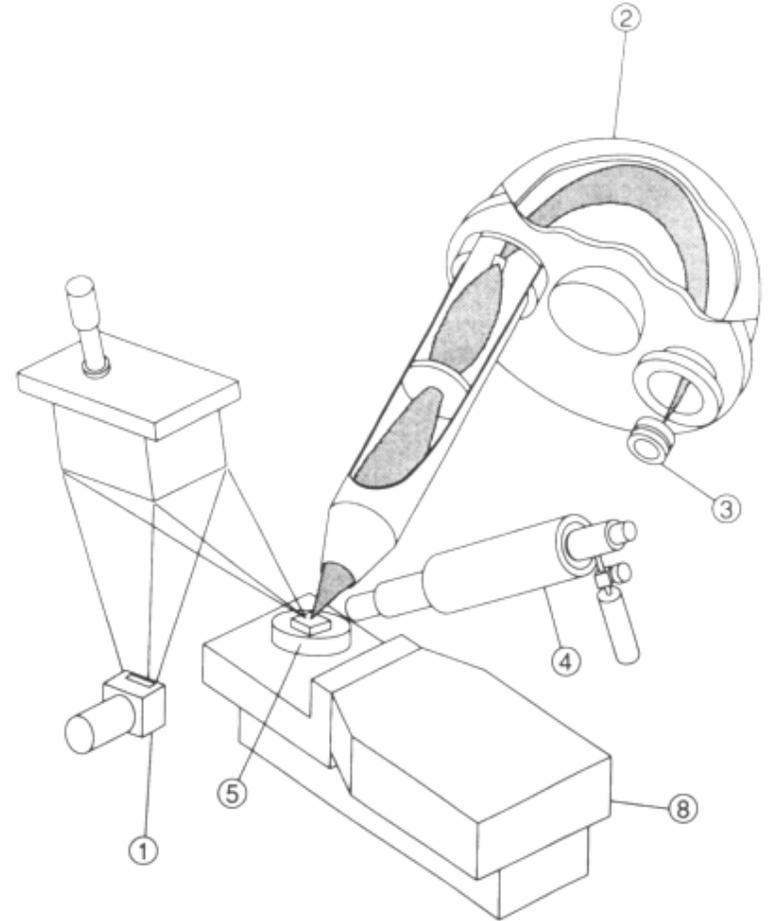
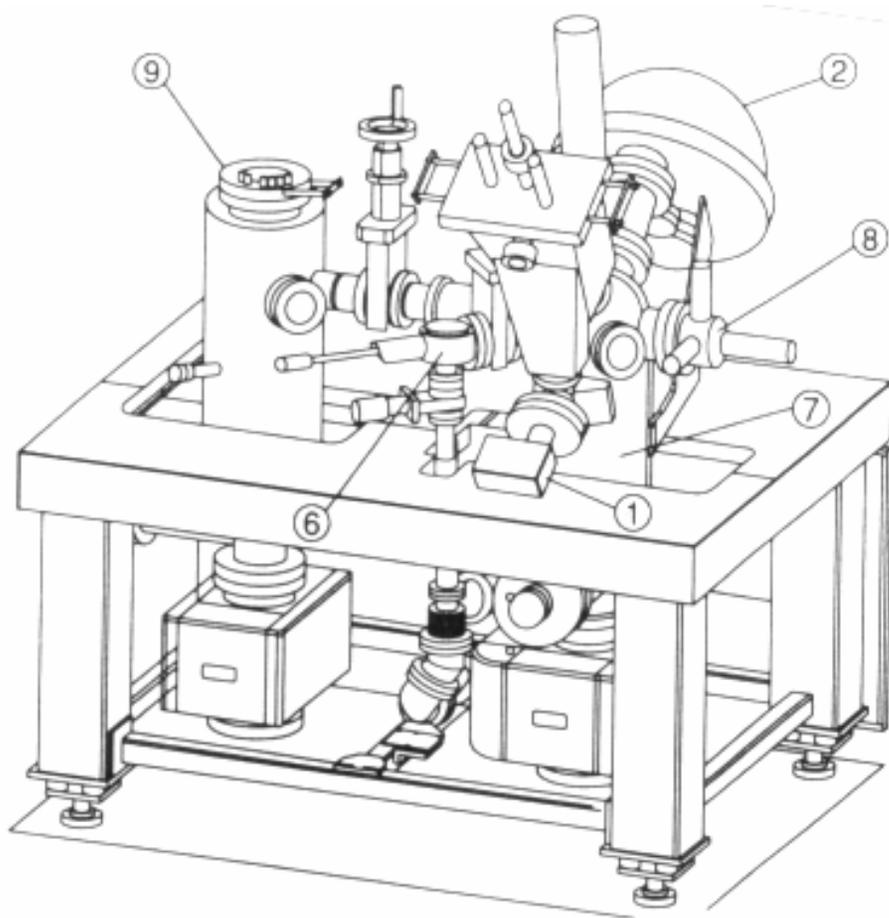


走査トンネル分光



ESCA装置の構造原理図

電子状態 ⇔ スペクトル測定



- ①X線源, ②分光器, ③検出器,
④イオン銃と深さ方向分析器,
⑤試料ホルダー, ⑥予備排気室と真空中での試料の搬送, ⑦真空槽
⑧試料移動機構(マニピュレーター), ⑨試料処理室

(Ⅲ) 水

特異分子である水

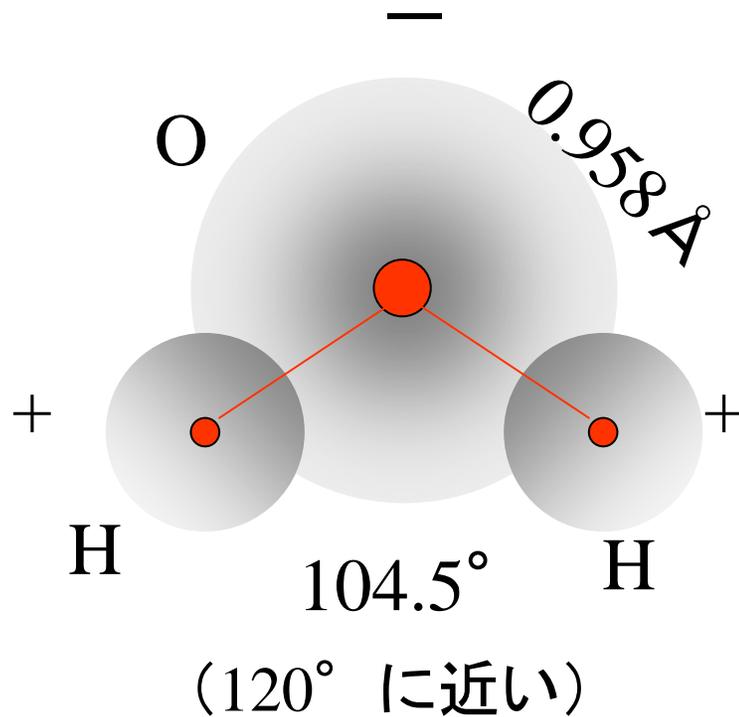
水は地球上に豊富にあり, ありふれた物質
→ ところが, 他の物質にない多くの特性を有する

1. 固体(氷)が液体に浮く
2. 雪はきれいな結晶, 雪は保温性がある
3. 塩を良く溶かす
4. 比熱が高い
(物質1gr を 1°C 上昇させる熱量)
5. 融解潜熱が高い
6. 蒸発潜熱が高い

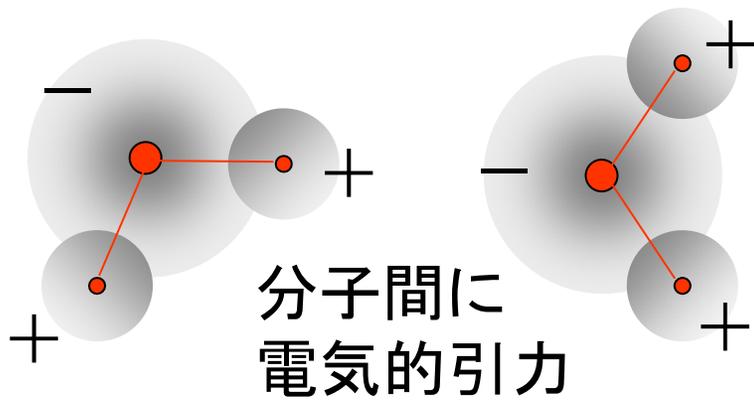
} 水枕, 氷枕

100 $^{\circ}\text{C}$ の水より100 $^{\circ}\text{C}$ の蒸気による火傷は酷い

水分子の構造



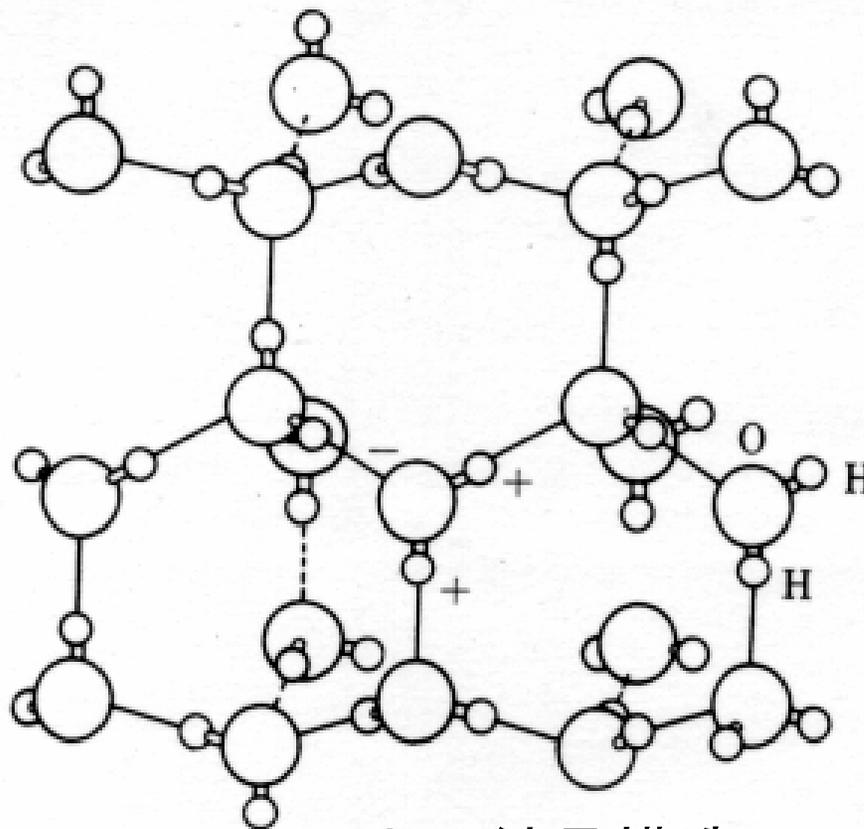
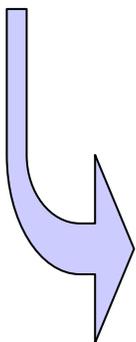
電気双極子



雪の結晶

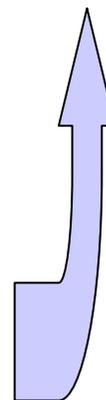


構造を形成

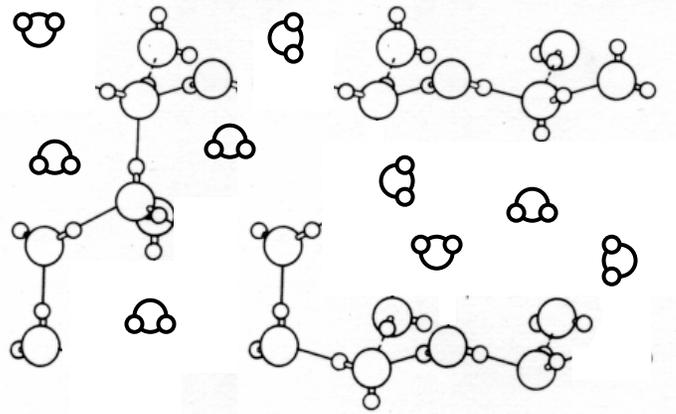


氷の結晶構造

可視サイズ

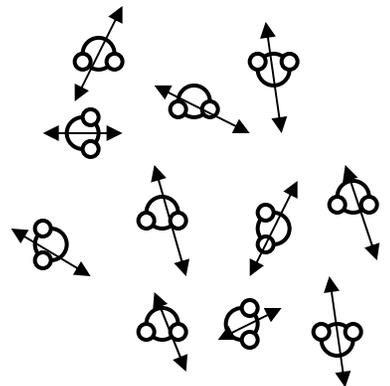


液相 (0~4°C)



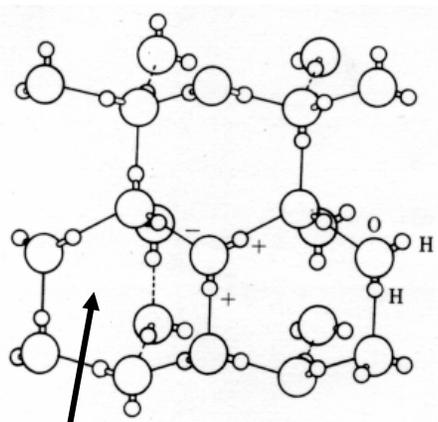
固相の構造が残る

液相 (0~4°C)



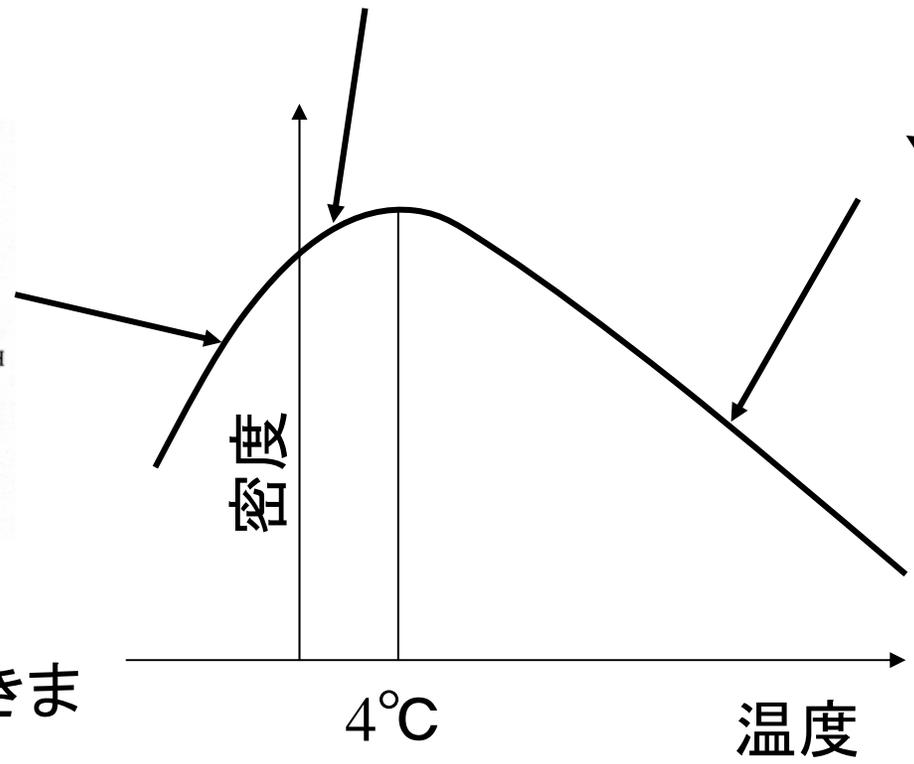
熱運動

固相 (0°C以下)



構造

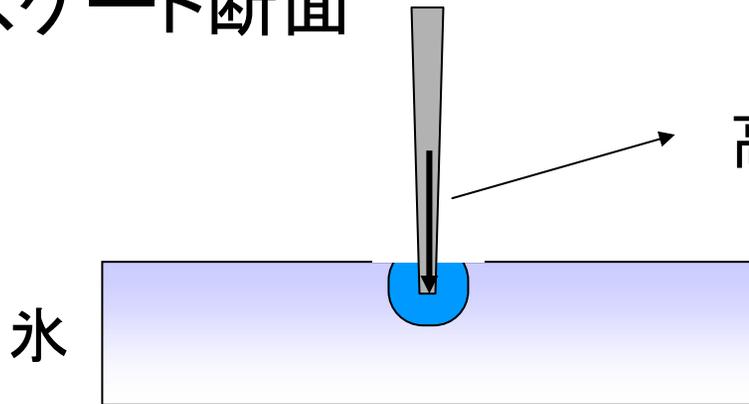
⇒ 分子間にすきま



スケート, スキーはなぜ良く滑るか



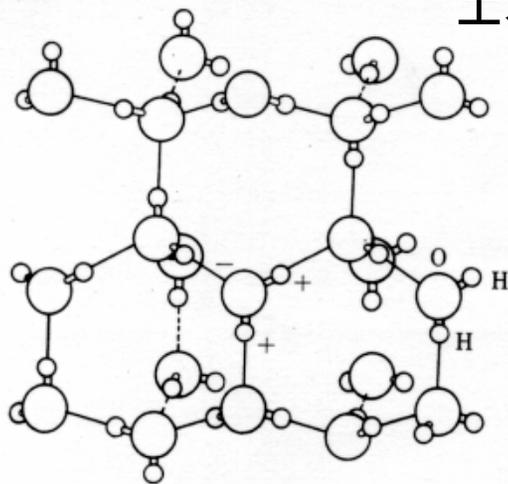
スケート断面



高压 \Rightarrow 固体から液体に相転移
 \Rightarrow 水(液体)が潤滑材

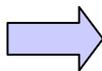
水の高い比熱, 高い融解潜熱, 蒸発潜熱

[水分子]



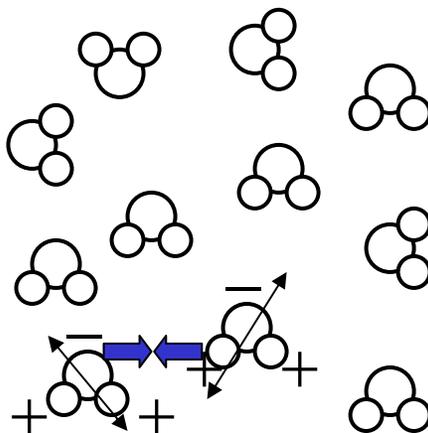
構造を壊して

融解潜熱
(融解に要する
エネルギー)



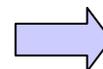
融点

比熱
(1°C上げるに必
要なエネルギー)



電氣的引力が熱
運動に抗する

蒸発潜熱

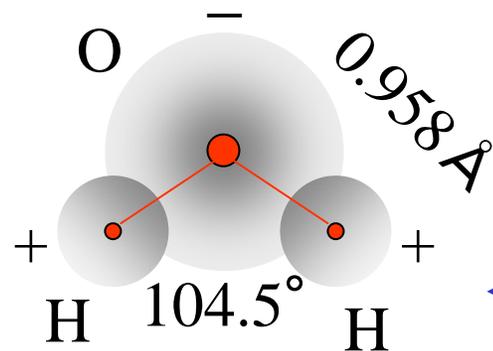


沸点

水は良好な極性溶媒

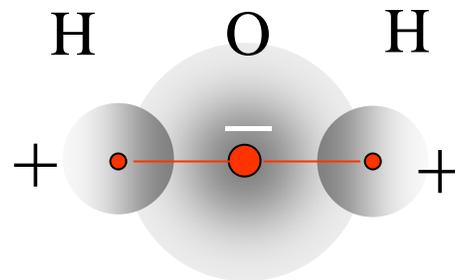
極性溶媒: HCN, H₂O₂, HF

☆ 量子力学



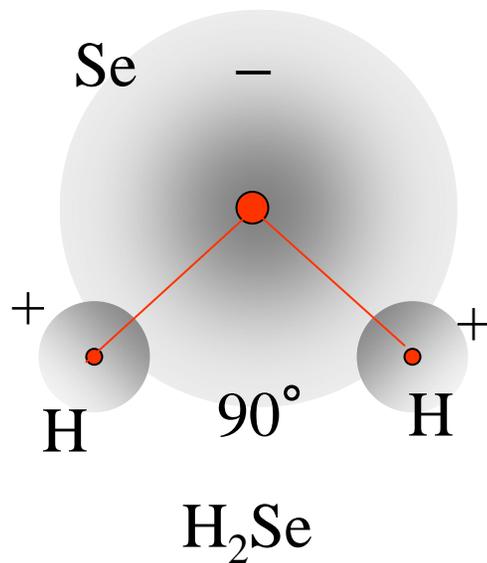
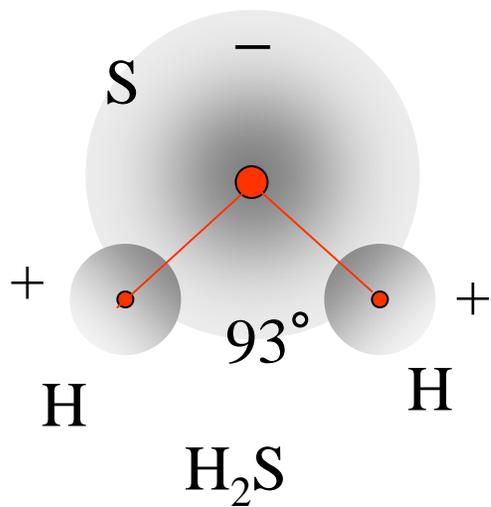
← 何故？

電磁気学に基づけば



の筈

電気双極子でない



(IV) 炭素

地球上ではなぜ炭素生命体が存在するか？

炭素生命体： 炭素(蛋白質, 炭水化物)が骨格

生命は神が作ったものでもない

生命： 非常に複雑な特性, 機構, 機能を有する

始め非常に単純な分子ができる

⇒ それらがお互いに会合して複雑な分子

⇒ 生命体の部品として有用な分子が残る

⇒ それらのコピーができる

生物の進化



この過程を可能とするには

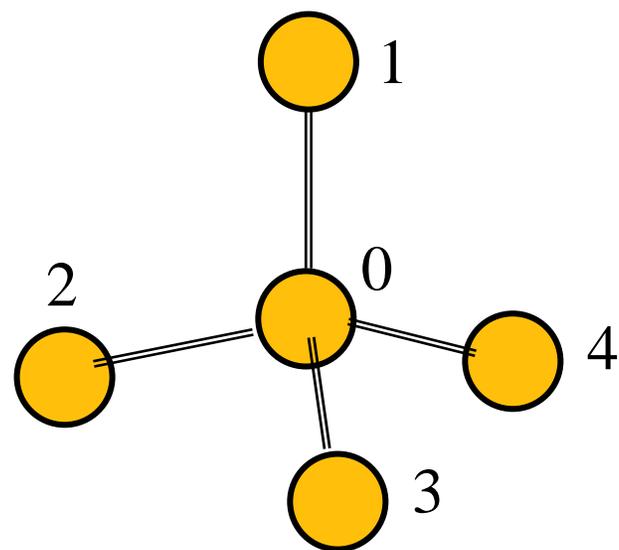
⇒ 非常に多様な物質を形成する原子が生命体の材料

変幻自在の炭素

炭素原子の結合の多様性



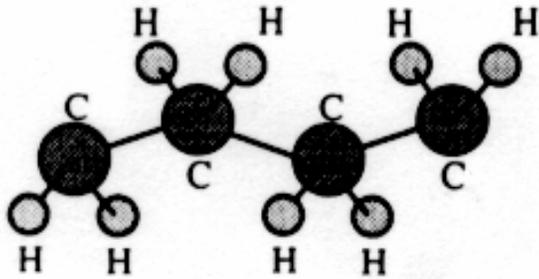
複雑な構造



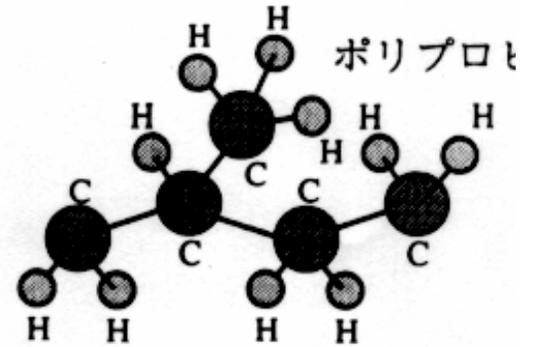
炭素の最外殻 (sp^3 混成軌道)

炭素原子： 生命の重要な骨格

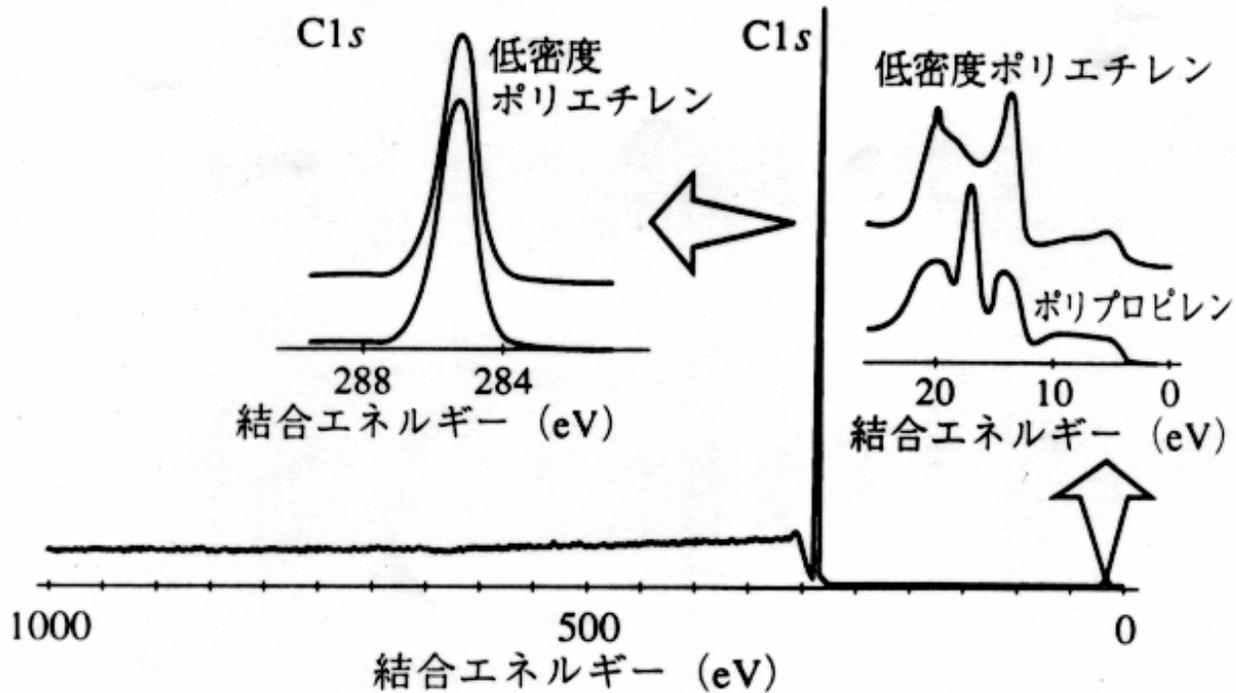
有機物質，高分子（蛋白質，DNA，アルコールなど）



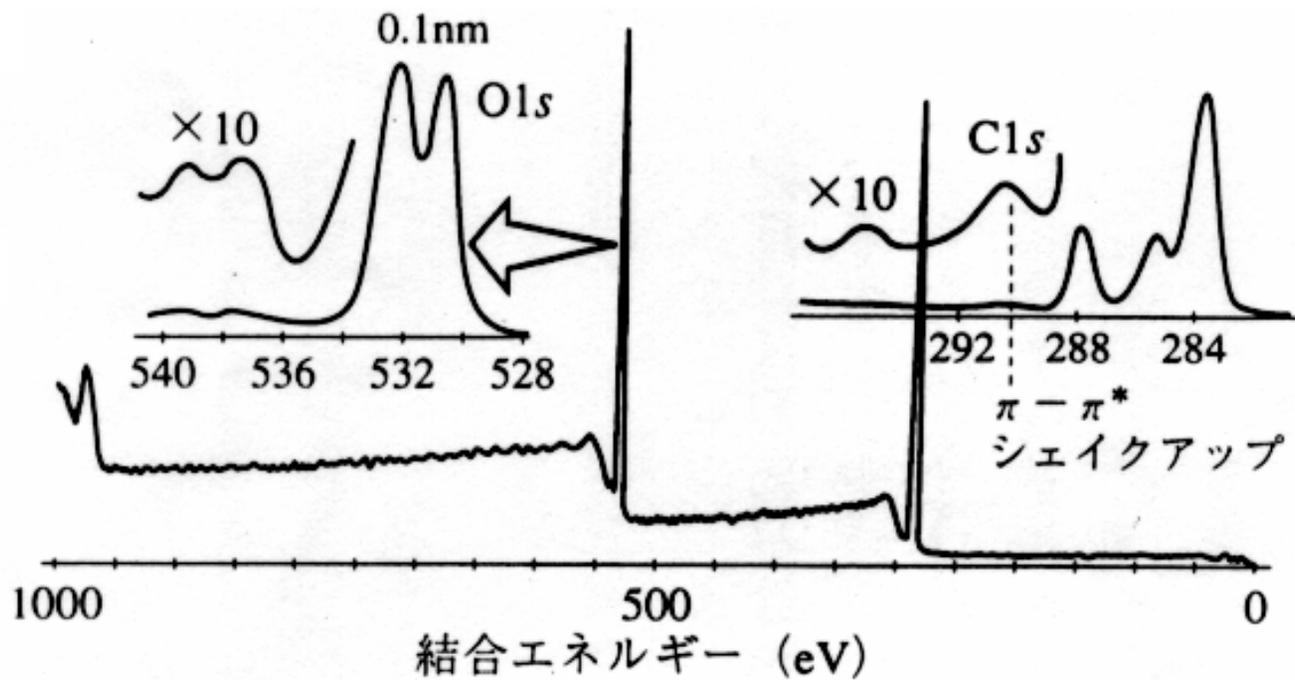
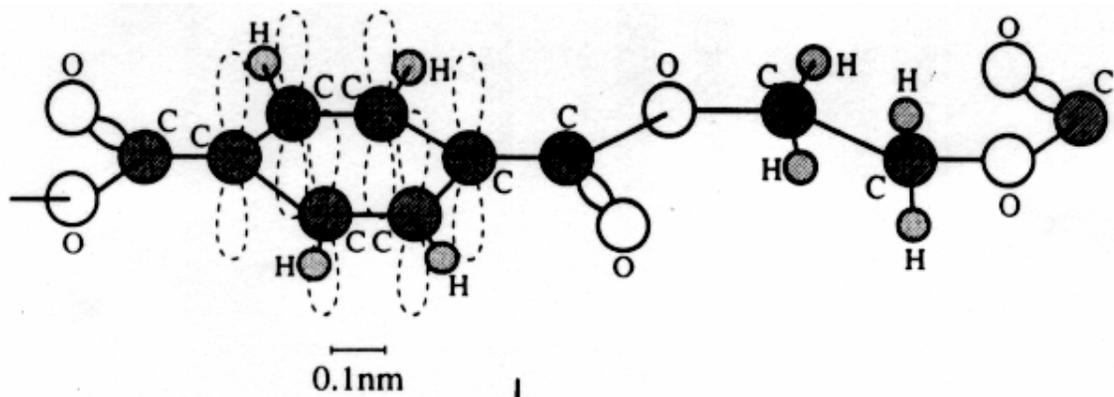
ポリエチレン



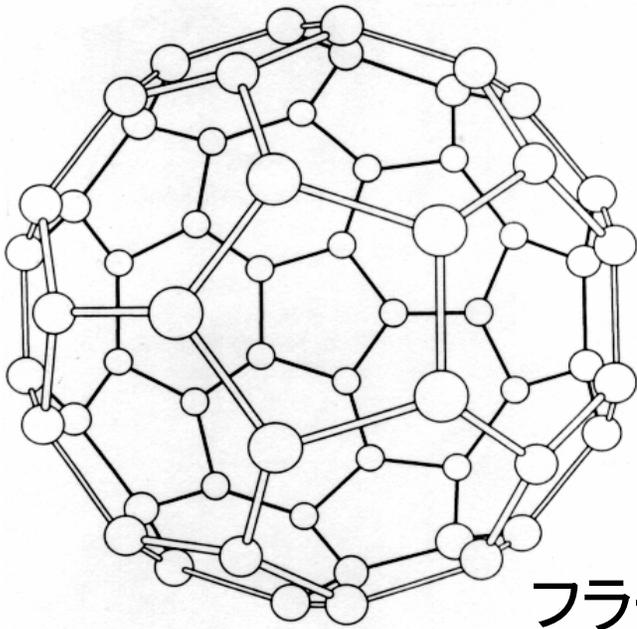
ポリプロピレン



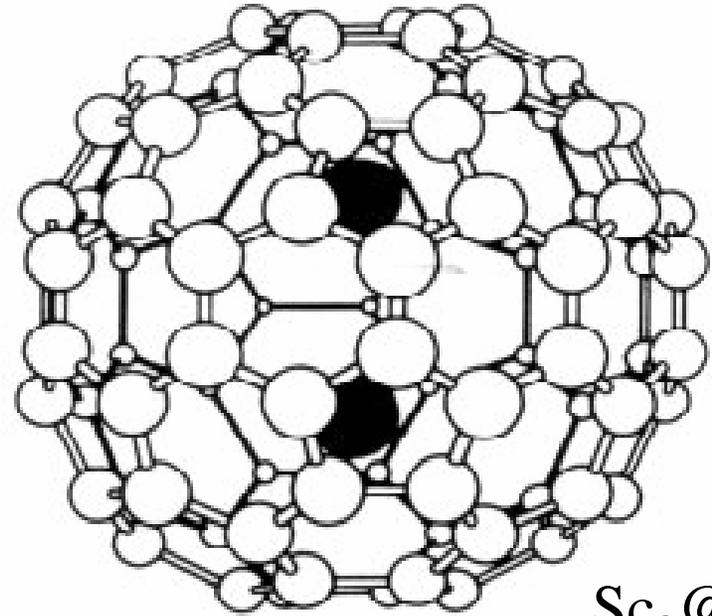
ポリテレフタル酸エチル (PET, ポリエステル)



フラーレン C60, サッカーボール形状



フラーレン(C₆₀)



Sc₂@C₈₄

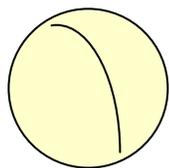
サッカーボールの内部は空洞 → 非常に軽く, 硬い
空洞内に他の原子を収容し, 新物質

特性: 超伝導, 植物の光合成(人間の技術で合成できない)と同じ働き

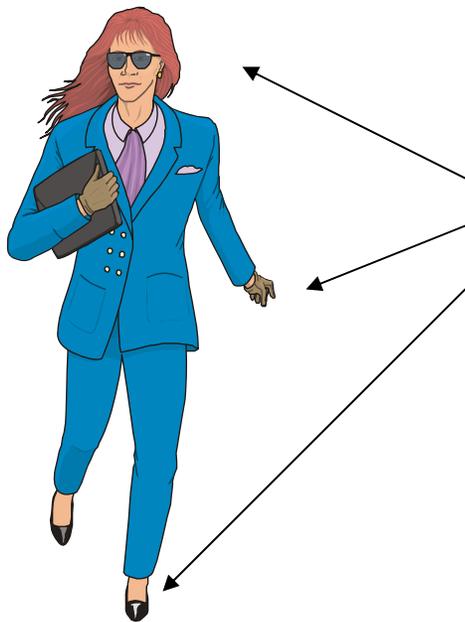
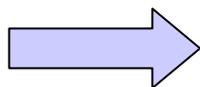
その他: C70, C120

(V) DNA

生命体を形成していく設計書 ⇒ 遺伝子(DNA)



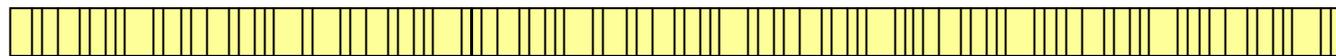
胚種



すべて同一の遺伝子から細胞ができています

始め人の形をしていたわけではない

遺伝子

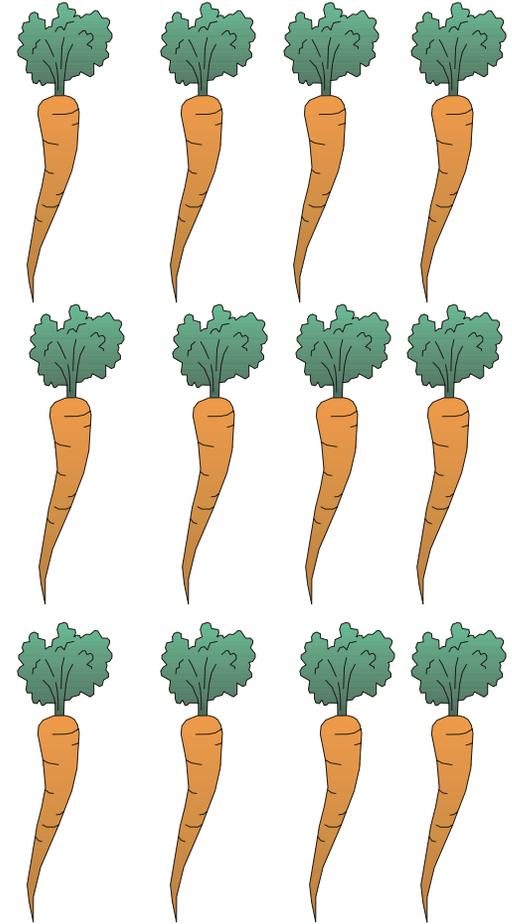
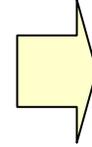
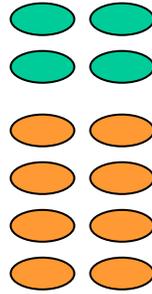
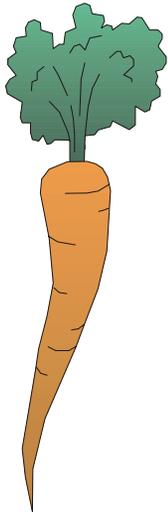


頭 眼 鼻 酵素 抗体 手 心臓 ……

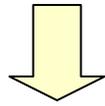


細胞が鼻の場所に位置すれば、この箇所が発現

実際に利用されている情報は遺伝子に含まれる情報の数十%



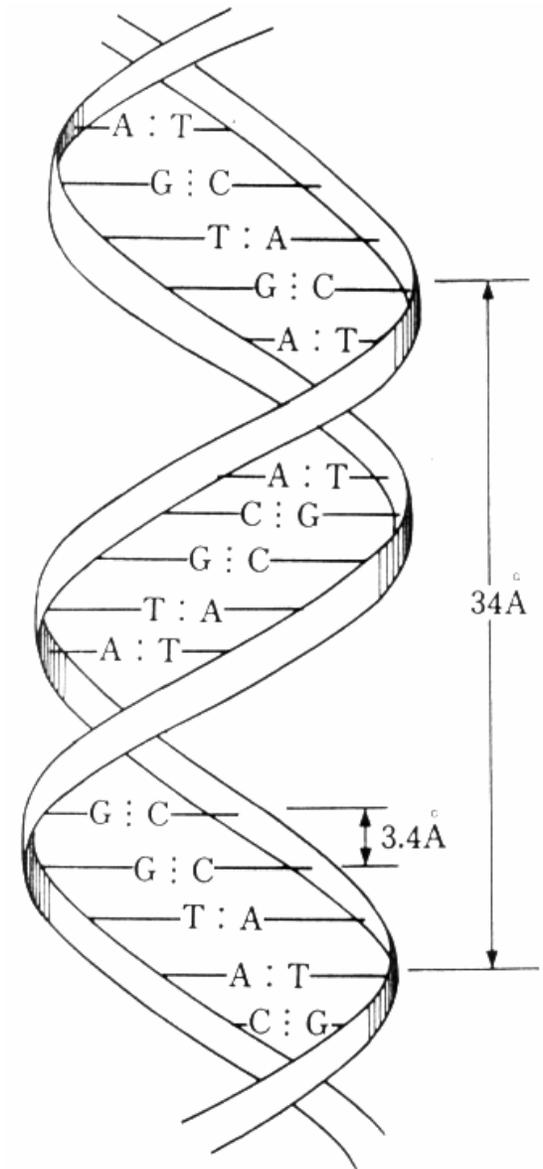
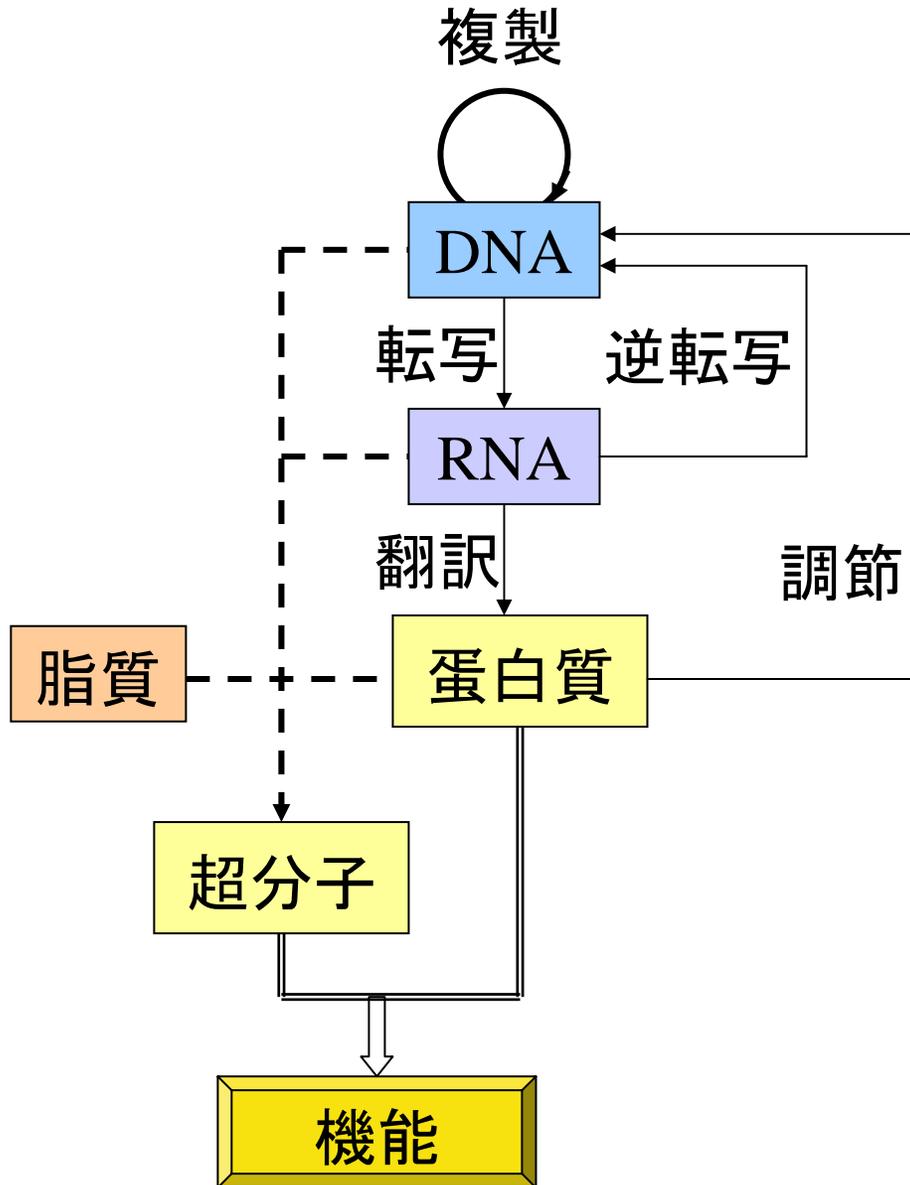
ニンジンを1つ1つの細胞に分割



どの細胞からも完全なニンジンを再生
⇒ クローン生物

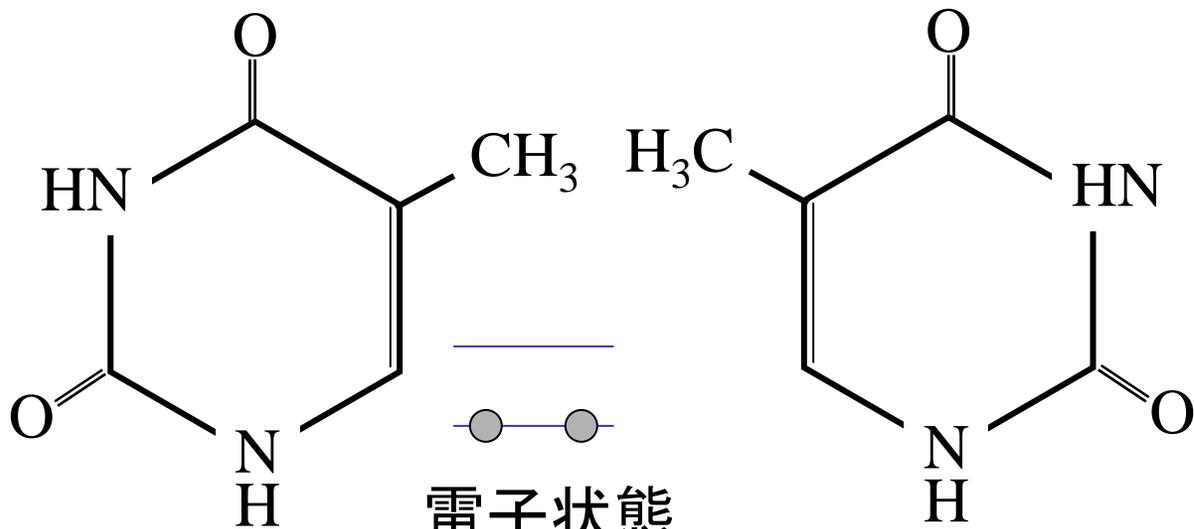
いずれにしても遺伝子(生命体の設計書)には莫大な情報量
⇒ その言語は? ⇒ たったの4文字(A, T, G, C)

DNAの作用



A:アデニン, T:チミン
G:グアニン, C:シトシン

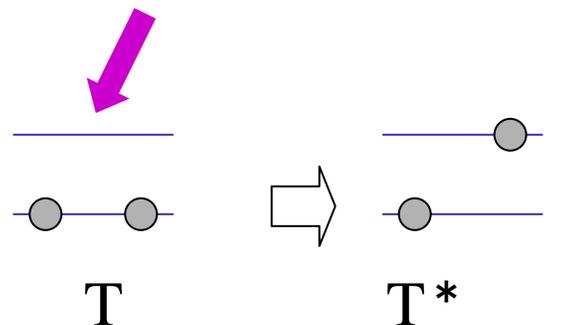
皮膚ガン



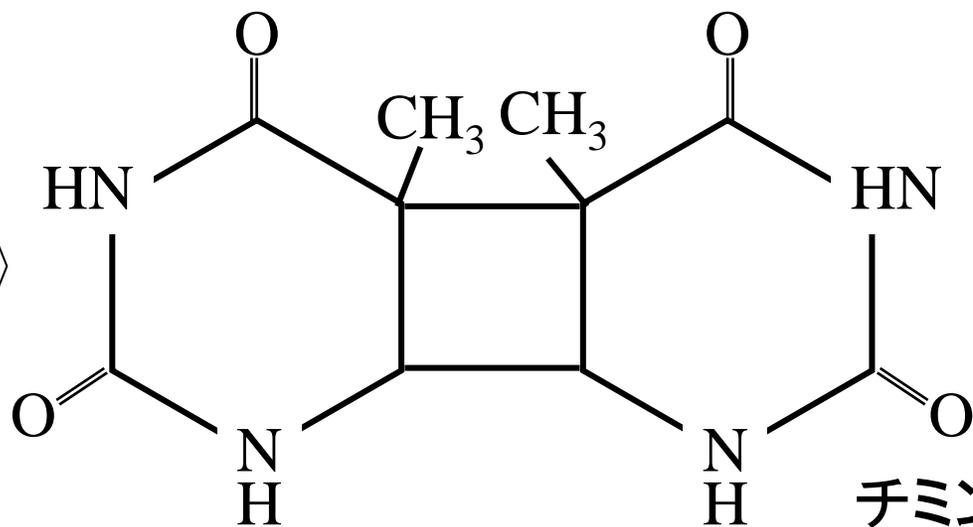
チミン

電子状態
(T)

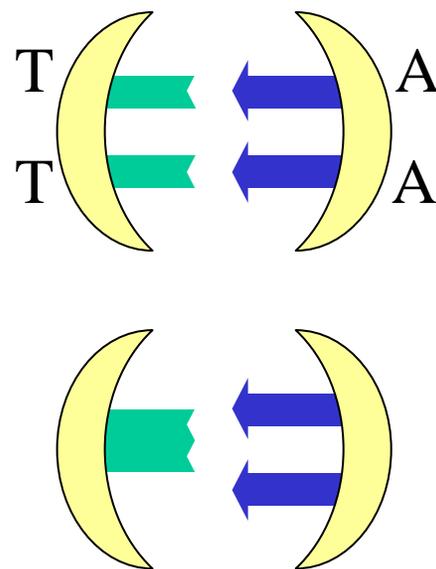
紫外線



(励起状態)



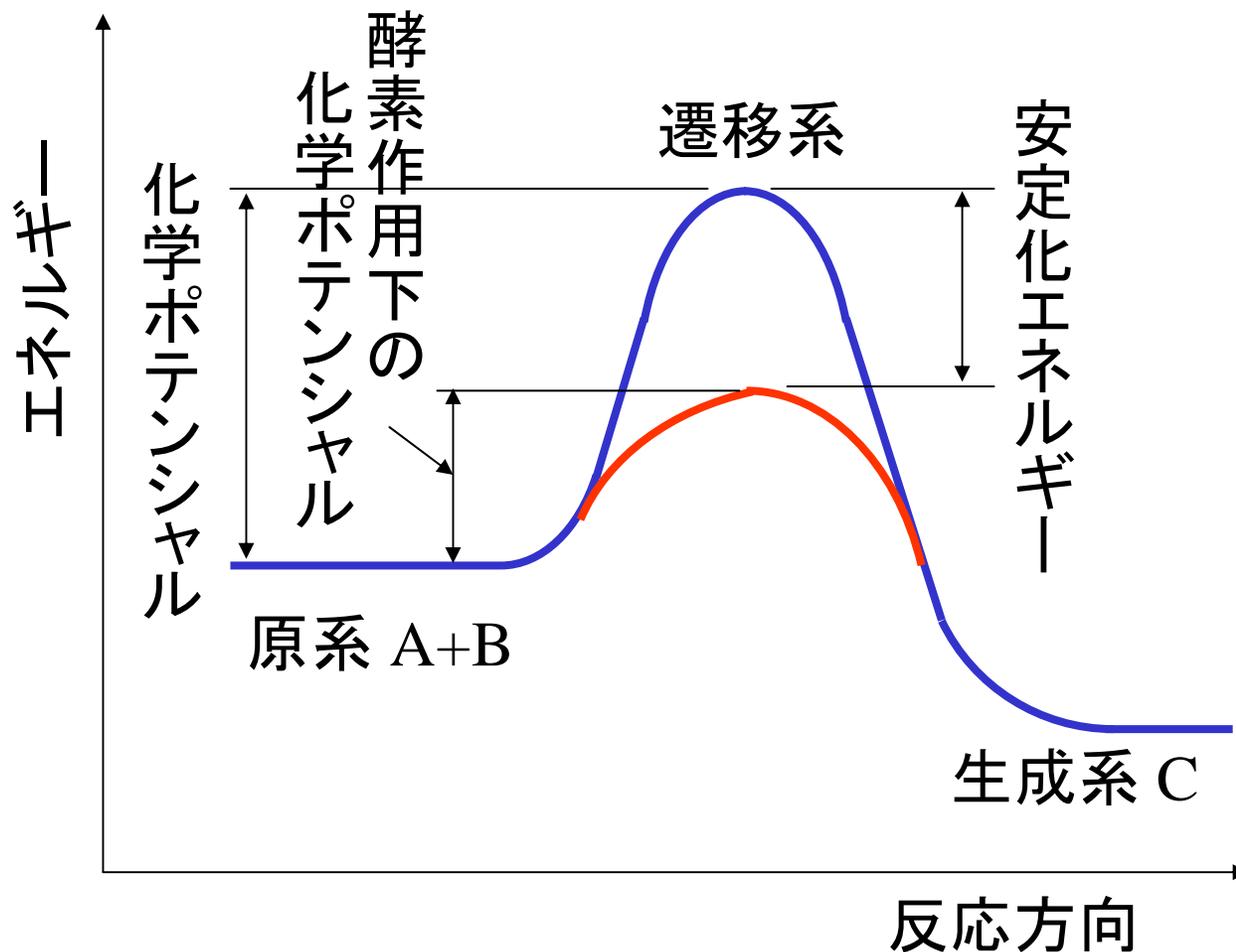
結合部分
の状態



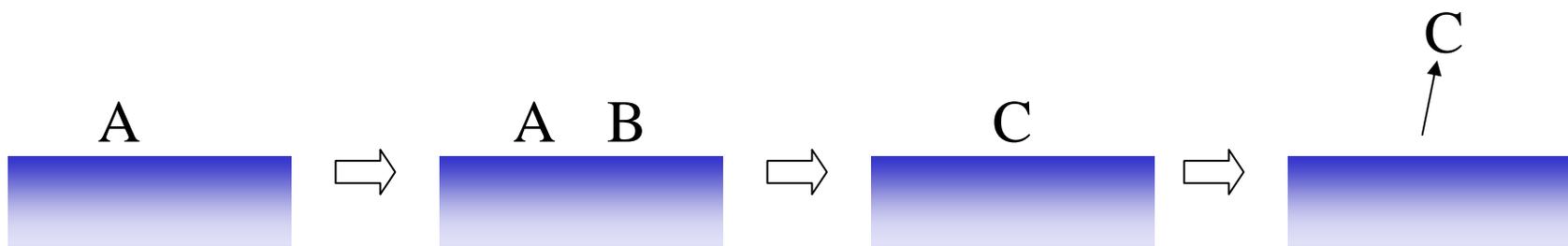
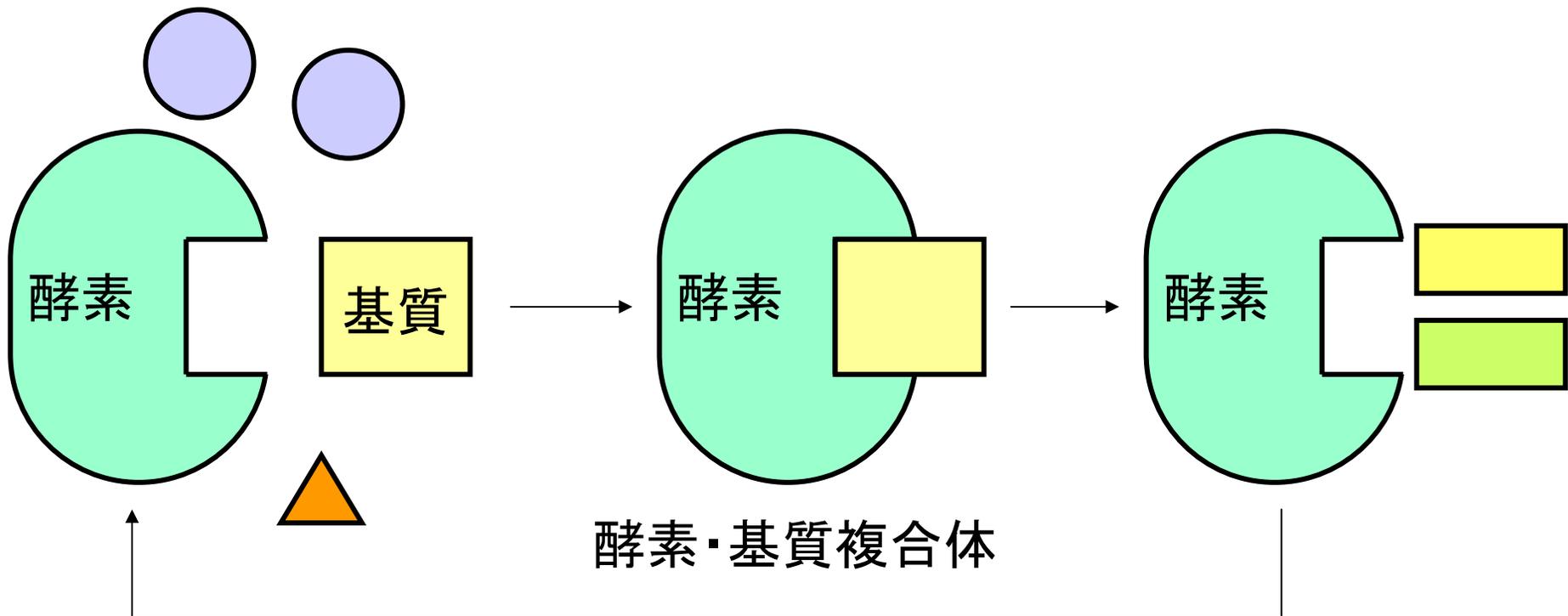
チミン二量体

(VI) 酵素

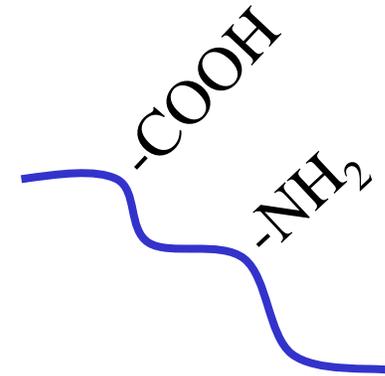
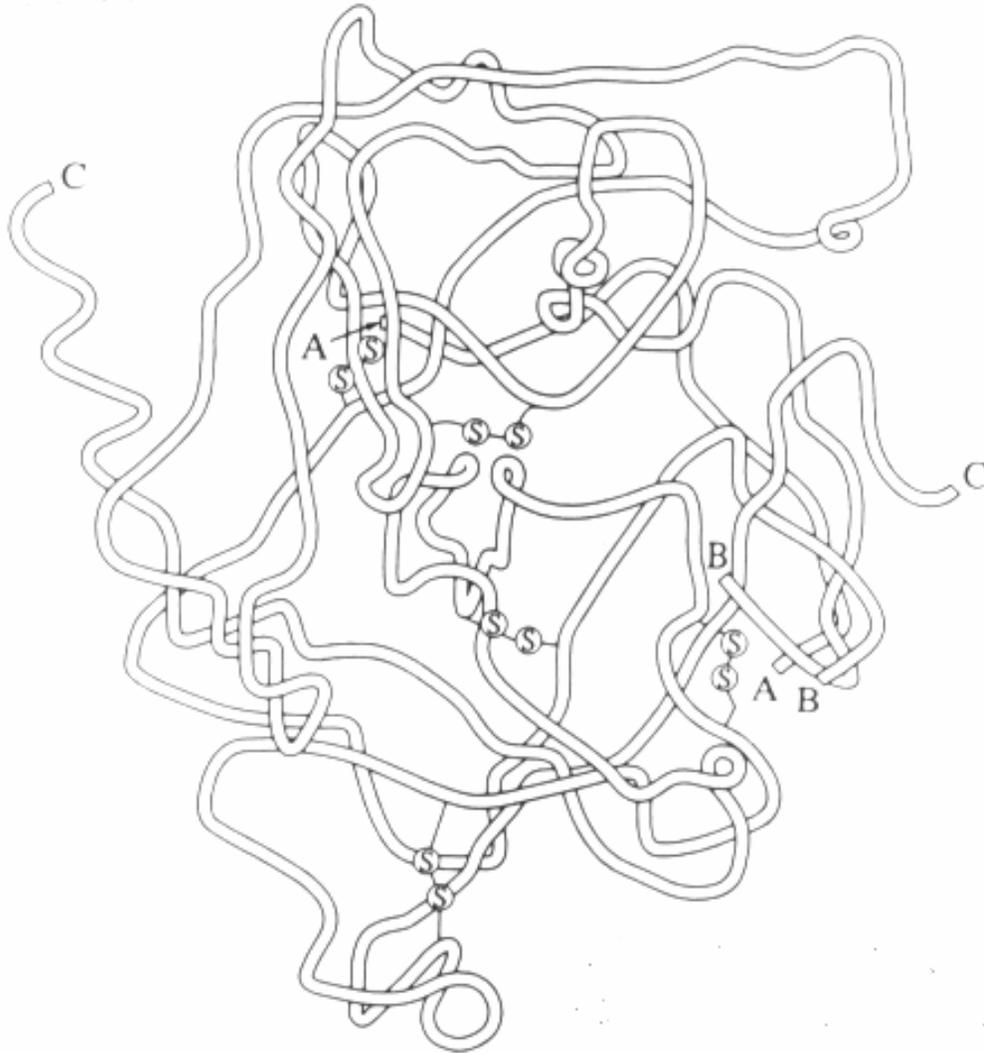
生命体の維持 ⇒ 最も効率良いエネルギー機構



酵素作用

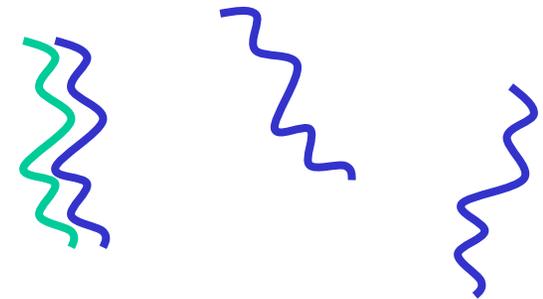


酵素(α -キモトリプシン)の立体構造



特有の形状を呈する表面,
電荷パターン, 化学的傾向

酵素複製=DNAの働き



A, B, C : ポリペプチド鎖
-S-S- : ジスフィルド結合

触媒(量子化学)

触媒: 化学反応を促進する物質
酵素からの類推

反応方向性の強い原子 \Rightarrow 遷移金属
活性で, 反応後ただちに元に戻る \Rightarrow 白金(d電子数=9)

白金は強力な触媒
 \rightarrow 他の遷移金属を白金型にするため, 金属錯体

三中心結合

生命

材料： 多様な炭素を中心

情報： 遺伝子

莫大な情報量, 効率的な情報読取り方
効率的な情報コピーの方法

生体活動： 酵素

効率的機構

(VII) 物質相互の作用, 反応

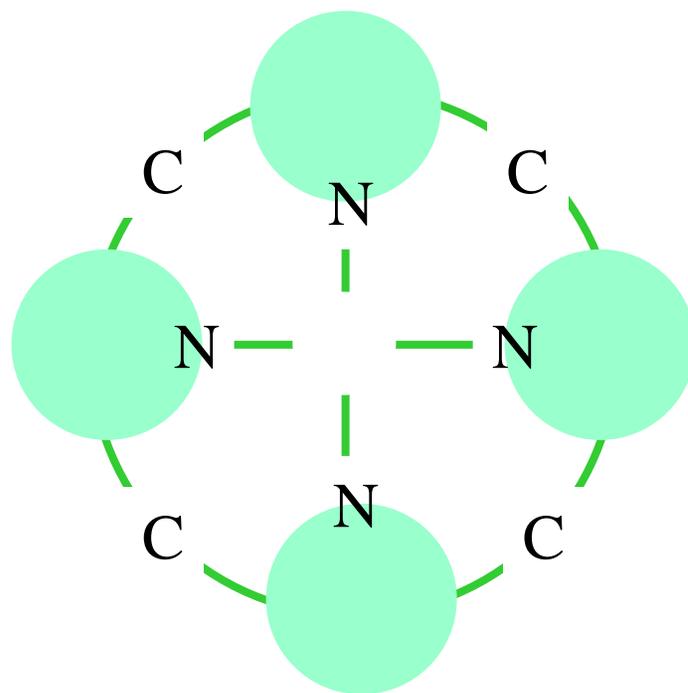
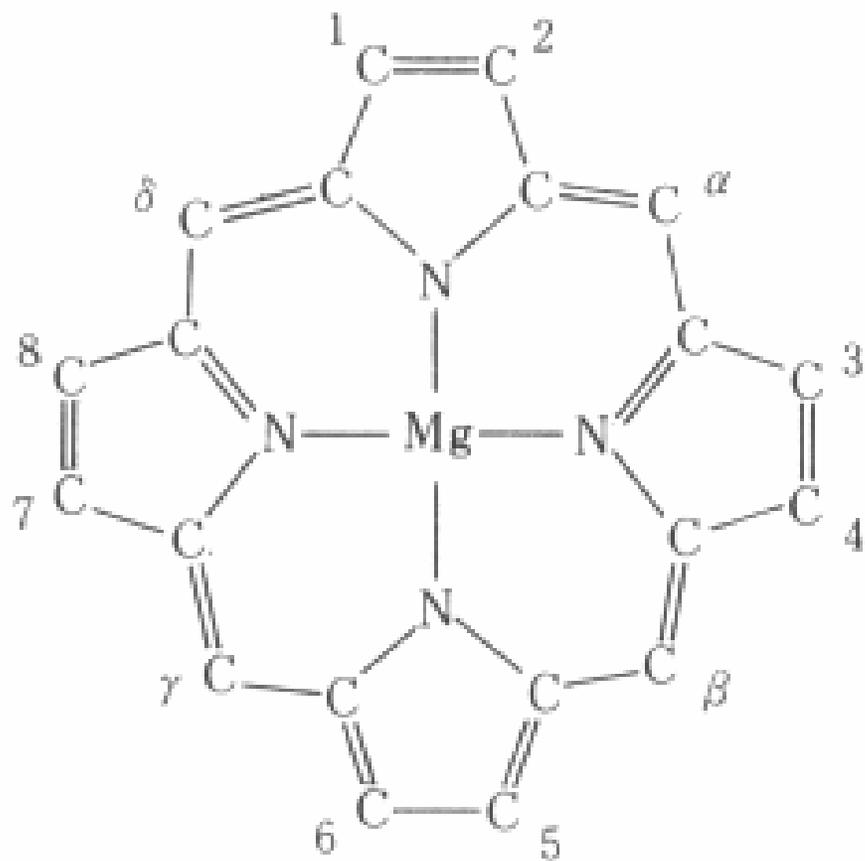
物質相互の作用, 反応は表面を介する

表面構造に特徴

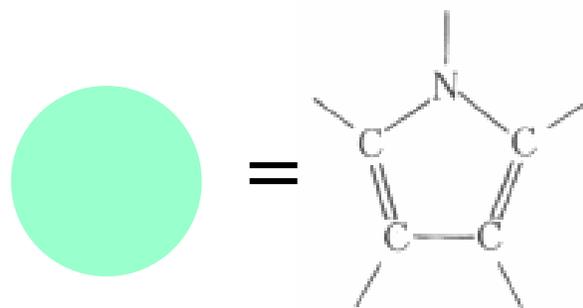
特徴的表面構造は類似
(自然界における構造に対する経済性)

クロロフィル ⇔ ヘモ分子(ヘモグロビン)

クロロフィル

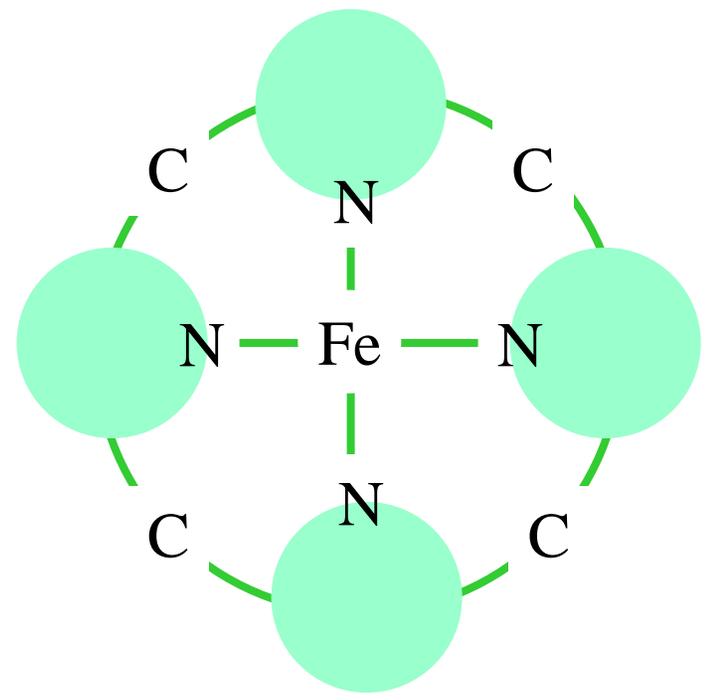
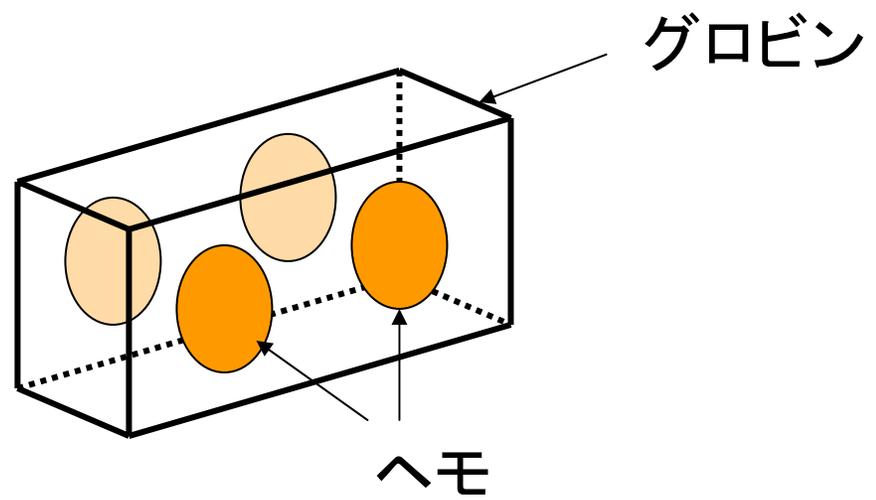


ポルフィリン環



ピロール基

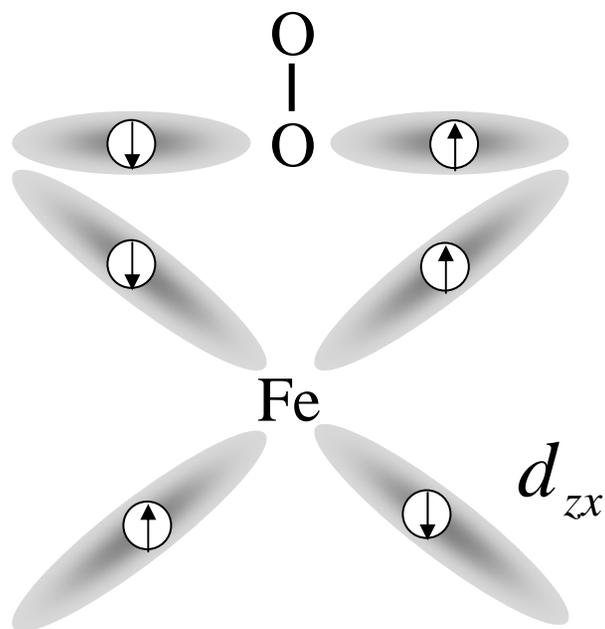
ヘモグロビン



ヘモ分子

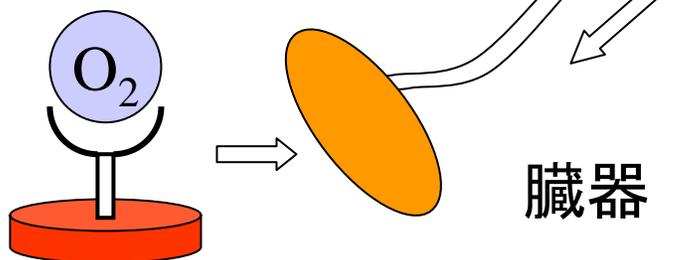
ヘモグロビンの作用

(酸素輸送, 一酸化炭素中毒)

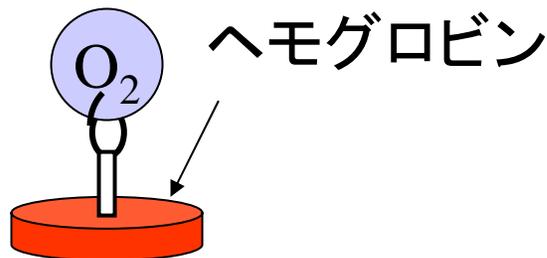


π 型結合(弱い結合)

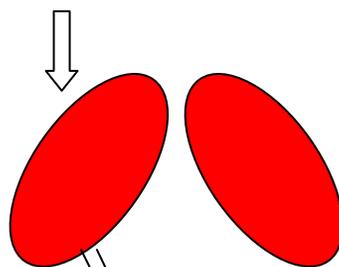
酸素輸送



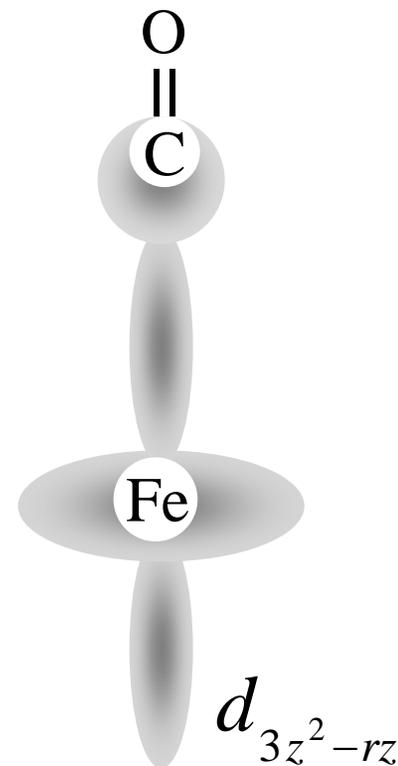
臓器



ヘモグロビン



肺

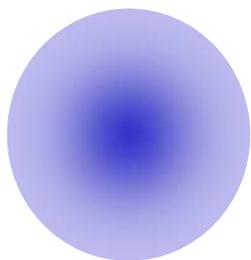


σ 型結合
(強い結合)

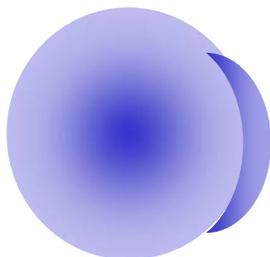
一酸化炭素中毒

(Ⅷ) 機械的特性

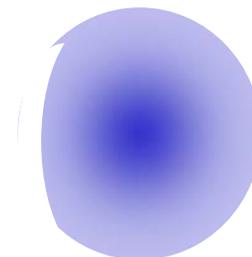
物質の結合力, 弾性, 塑性, 破断



最外殻が閉殻



最外殻に電子



閉殻の電子不足

[結合]

イオン結合

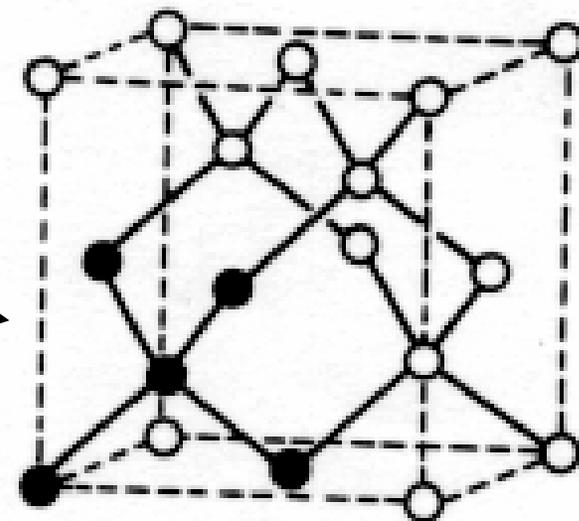
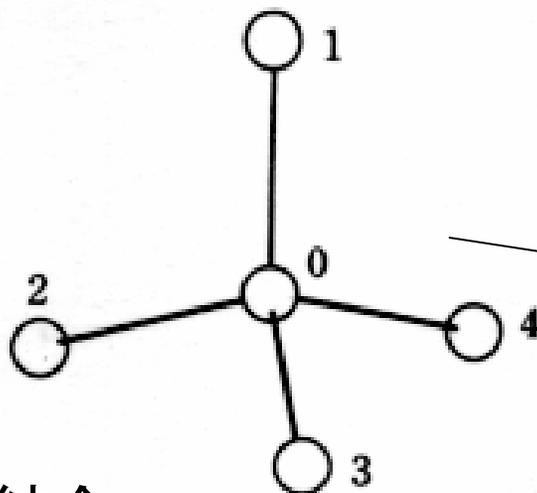
共有結合

金属結合

分子結合

水素結合

ファンデルワールス結合



ダイヤモンド構造

弾性的性質

$$V(r) = V_{r_0} + \left(\frac{dV}{dr} \right)_{r_0} \Delta r + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dr^2} \right)_{r_0} (\Delta r)^2 + \dots,$$

原子変位: $\Delta r = r - r_0$

$$r = r_0 \text{ で } dV/dr = 0 \longrightarrow V(r) = V_{r_0} + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dr^2} \right)_{r_0} (\Delta r)^2,$$

ここで,

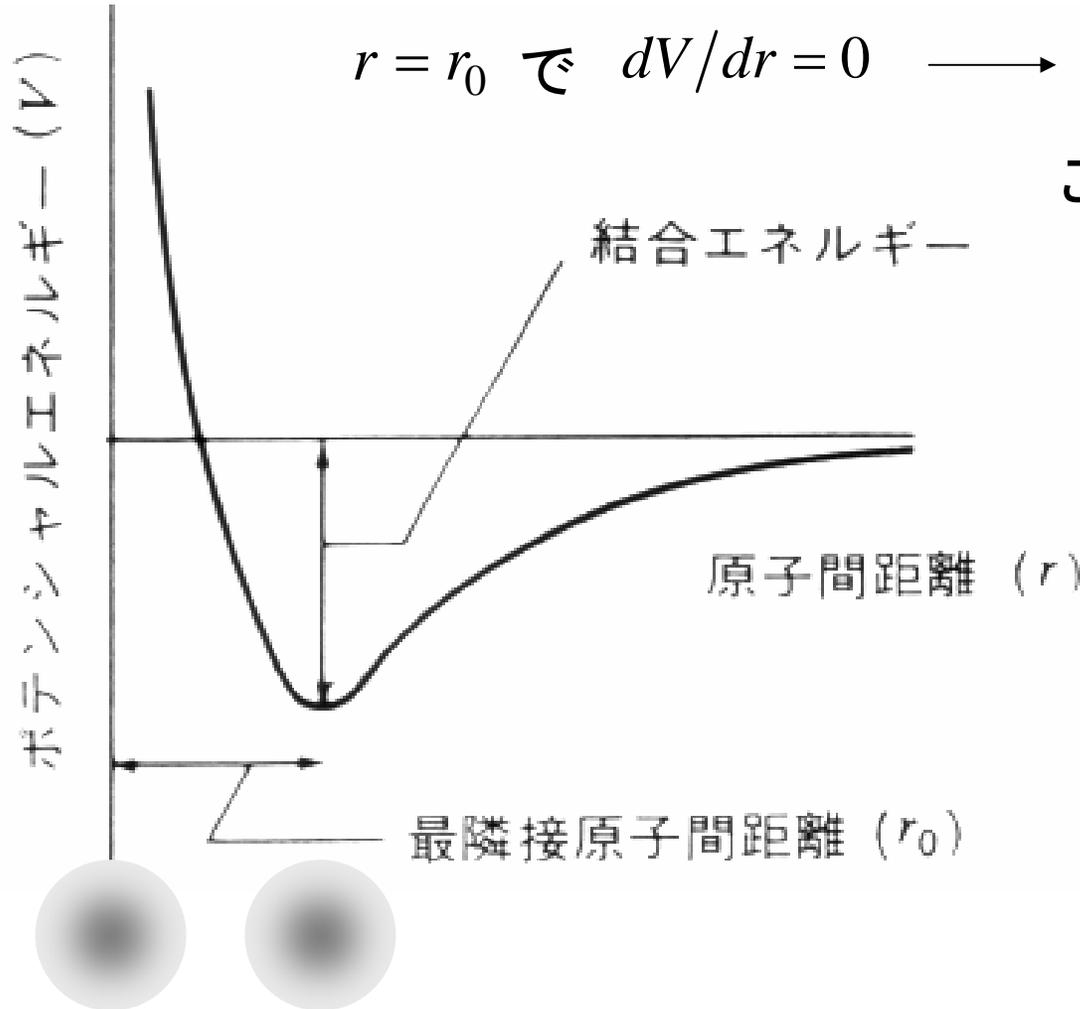
$$F = -\frac{dV}{d(\Delta r)} = -\left(\frac{d^2V}{dr^2} \right)_{r_0} \Delta r$$

なお, $dW = dV = Fd(\Delta r)$

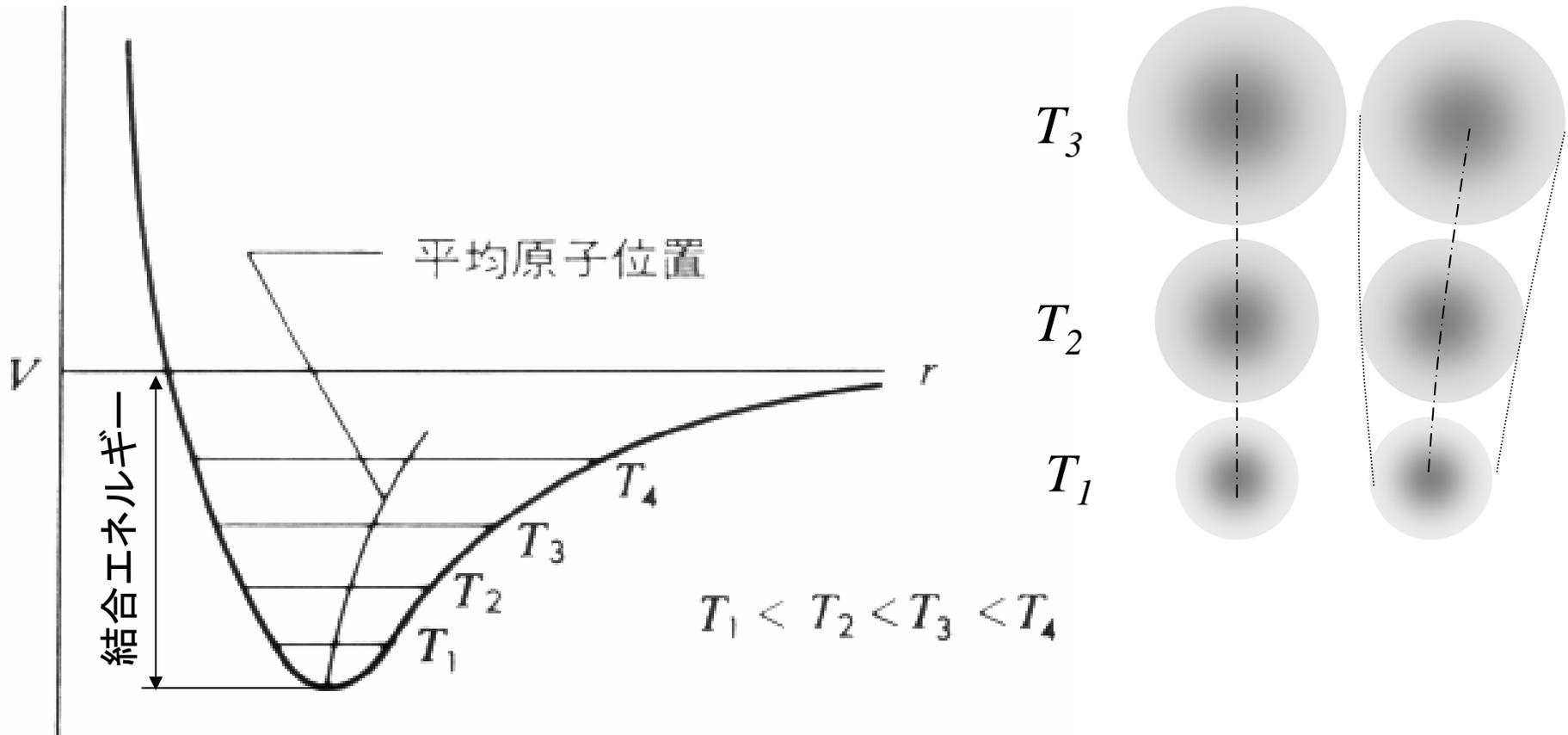
したがって, **弾性定数**は

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} \propto \frac{dF}{d(\Delta r)} = \left(\frac{d^2V}{dr^2} \right)_{r_0}$$

と与えられる.



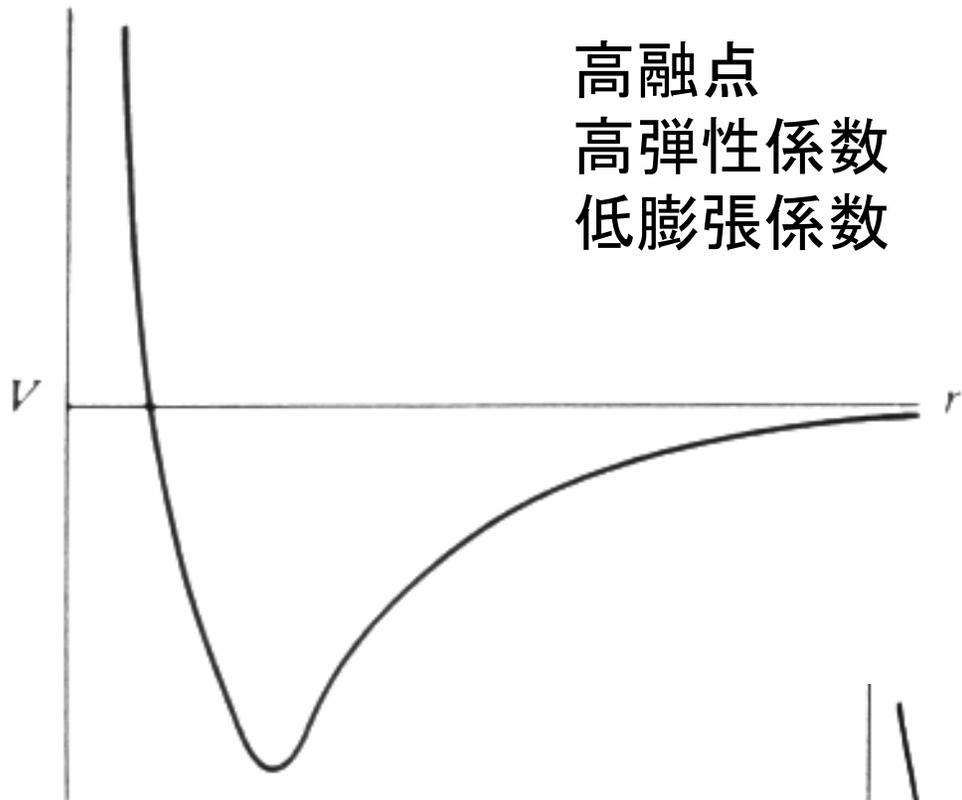
熱的性質



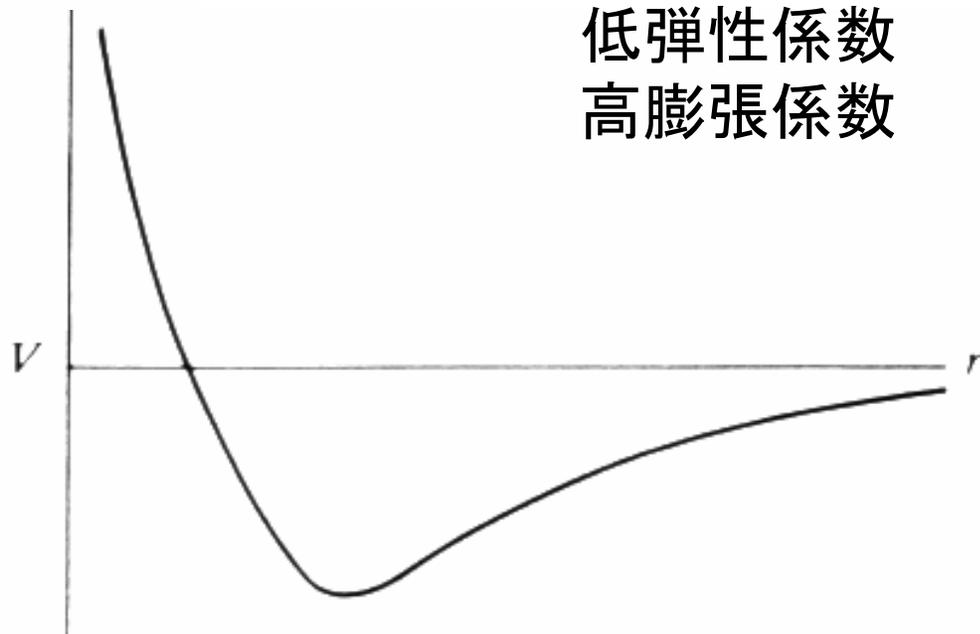
融点 \Leftrightarrow 結合エネルギー \Leftrightarrow ポテンシャルエネルギーの深さ

膨張係数
$$\alpha = \frac{(r_{0,ave.})_{T_2} - (r_{0,ave.})_{T_1}}{T_2 - T_1} = \frac{d(r_{0,ave.})}{dT}$$

高融点
高弹性系数
低膨脹系数

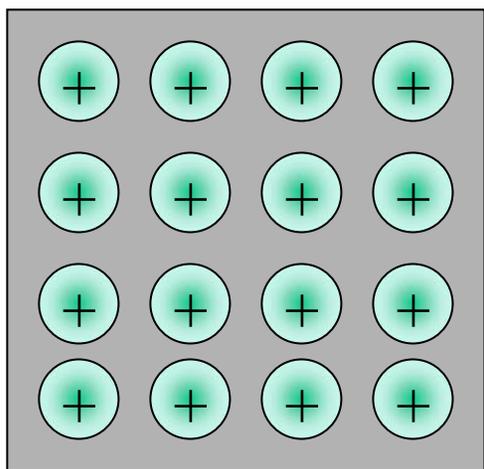
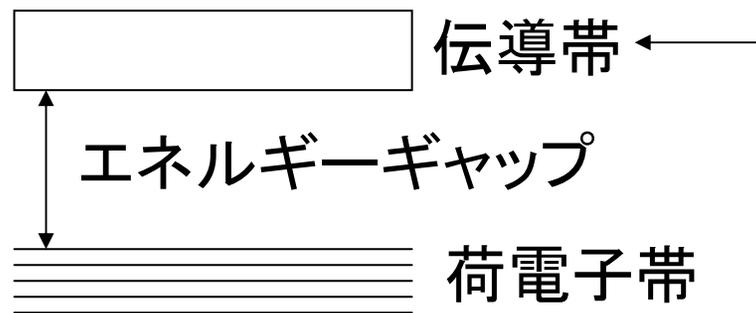
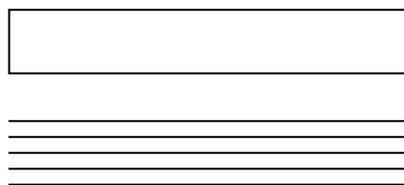
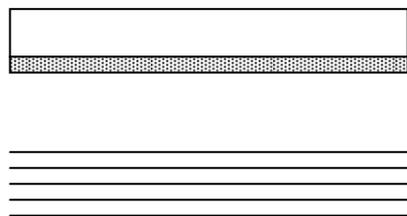


低融点
低弹性系数
高膨脹系数

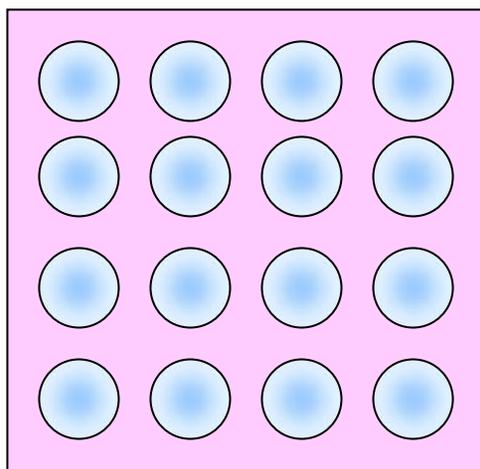


(Ⅸ) 電磁気作用

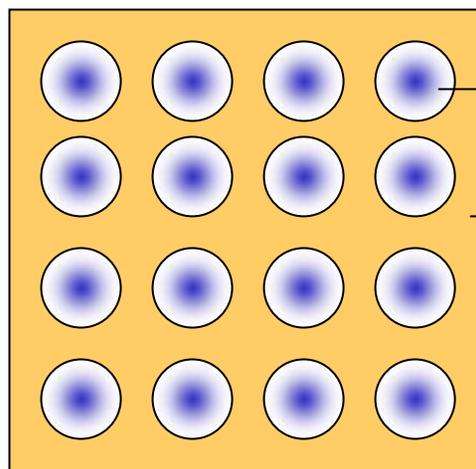
電子のエネルギー状態



金属



半導体



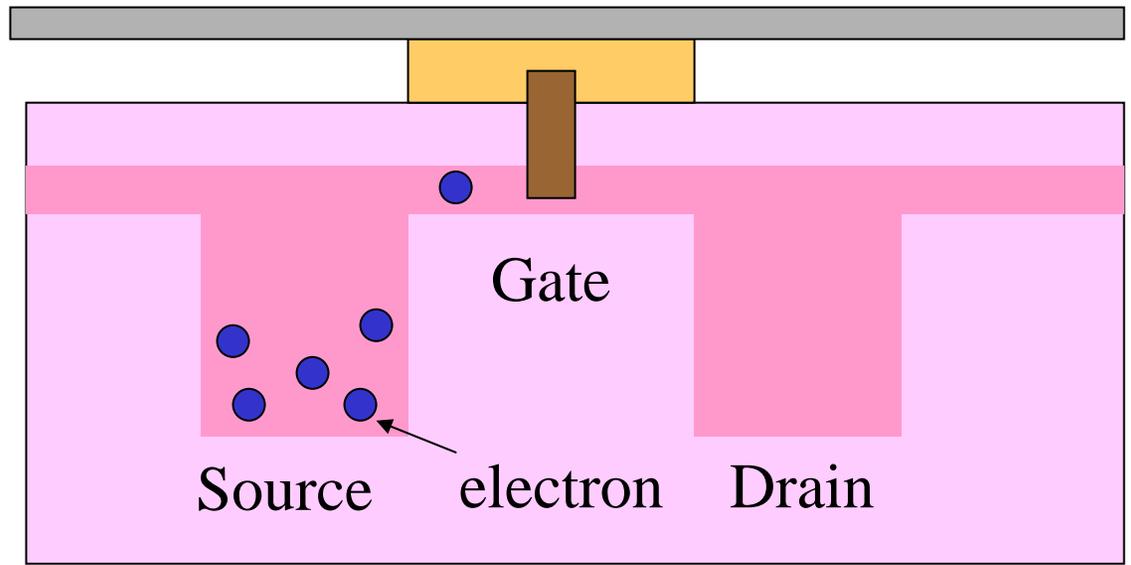
絶縁体

[半導体]

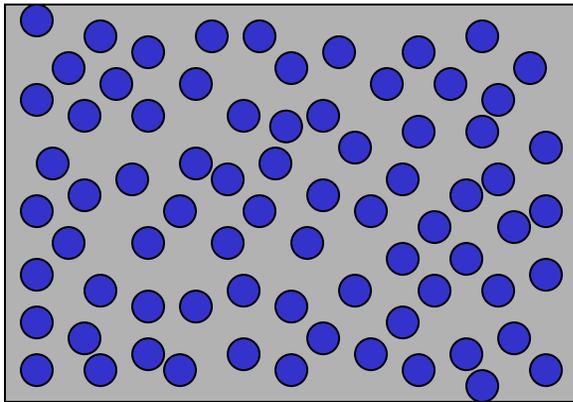
適度な量の電子

↳ 電子が情報の担い手

半導体 = 知能
(推論, 判断, 演算)



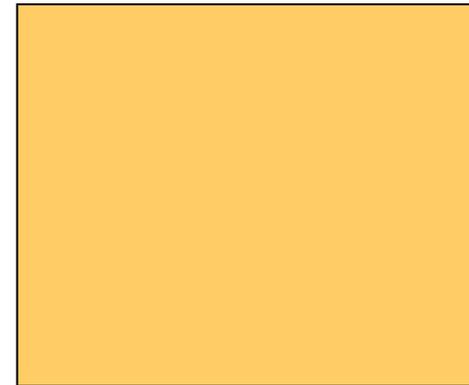
[良導体]



電子の量 = ∞

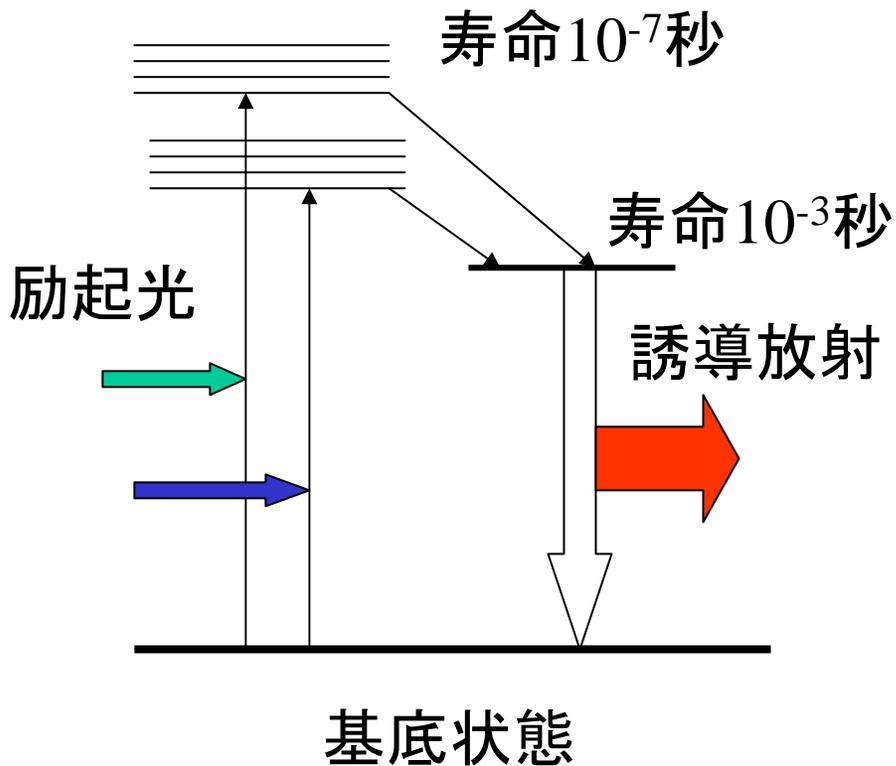
良導体 = 電子の伝送路

[絶縁体]

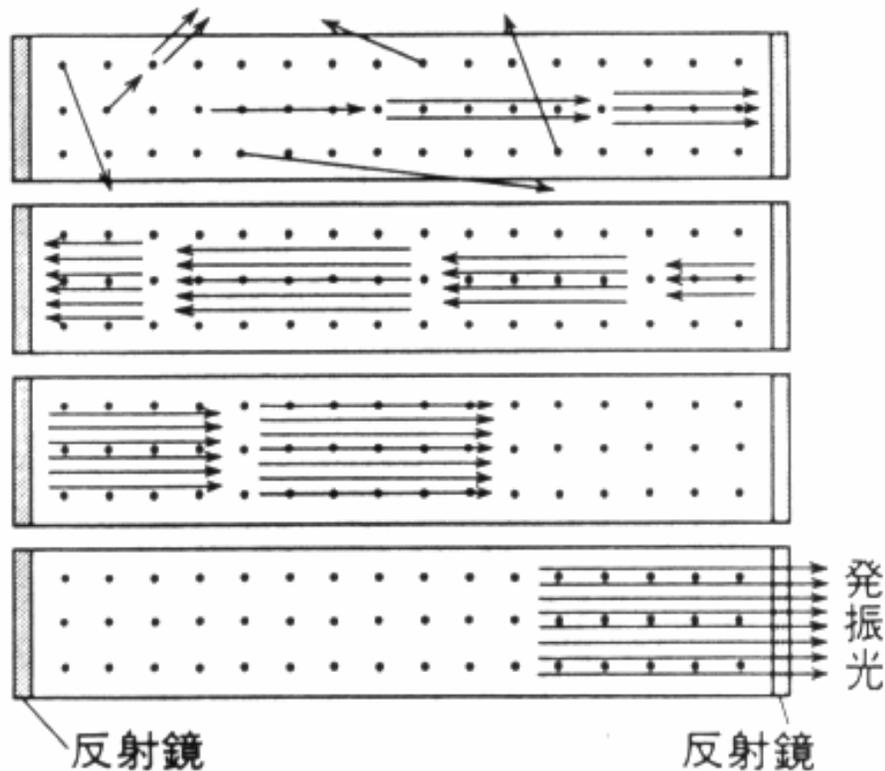
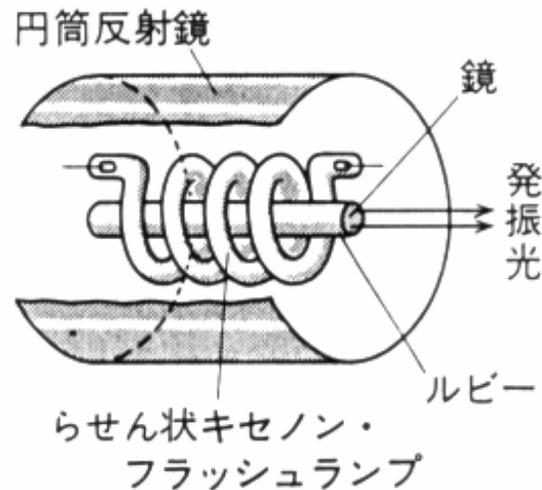


電子の量 = 0

レーザー



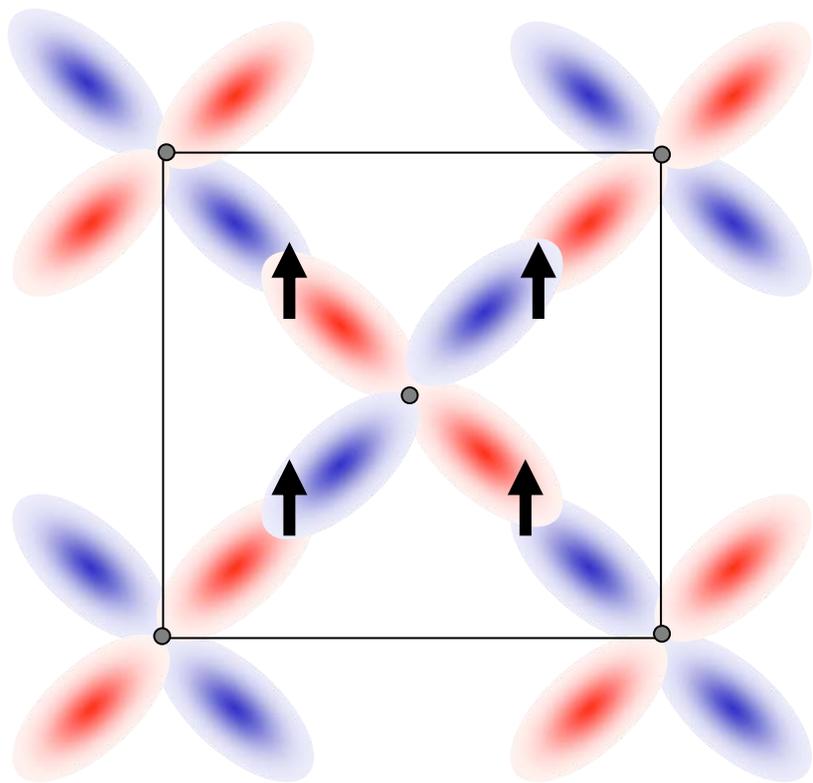
レーザー発振原理



磁性(遷移金属, d電子)

d電子: 原子に局在

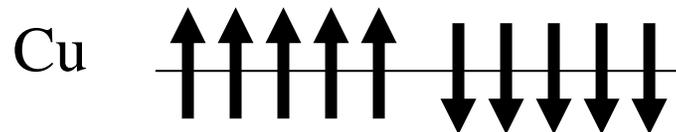
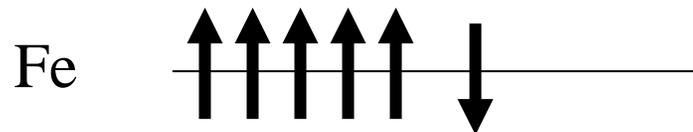
ハイゼンベルグの交換相互作用: 隣り合ったd電子は互いに
スピンを平行に揃える. 2つのd電子波が重なり合って作る
干渉現象



↓
スピンの全部揃う

↓
強い磁石

3d電子のスピンの

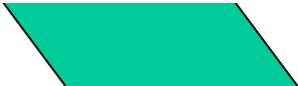


(X) 量子力学成立までの変遷

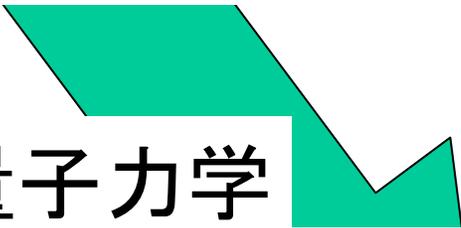
Rutherford の実験



原子の安定性



前期量子論
(Bohr, Sommerfeld)

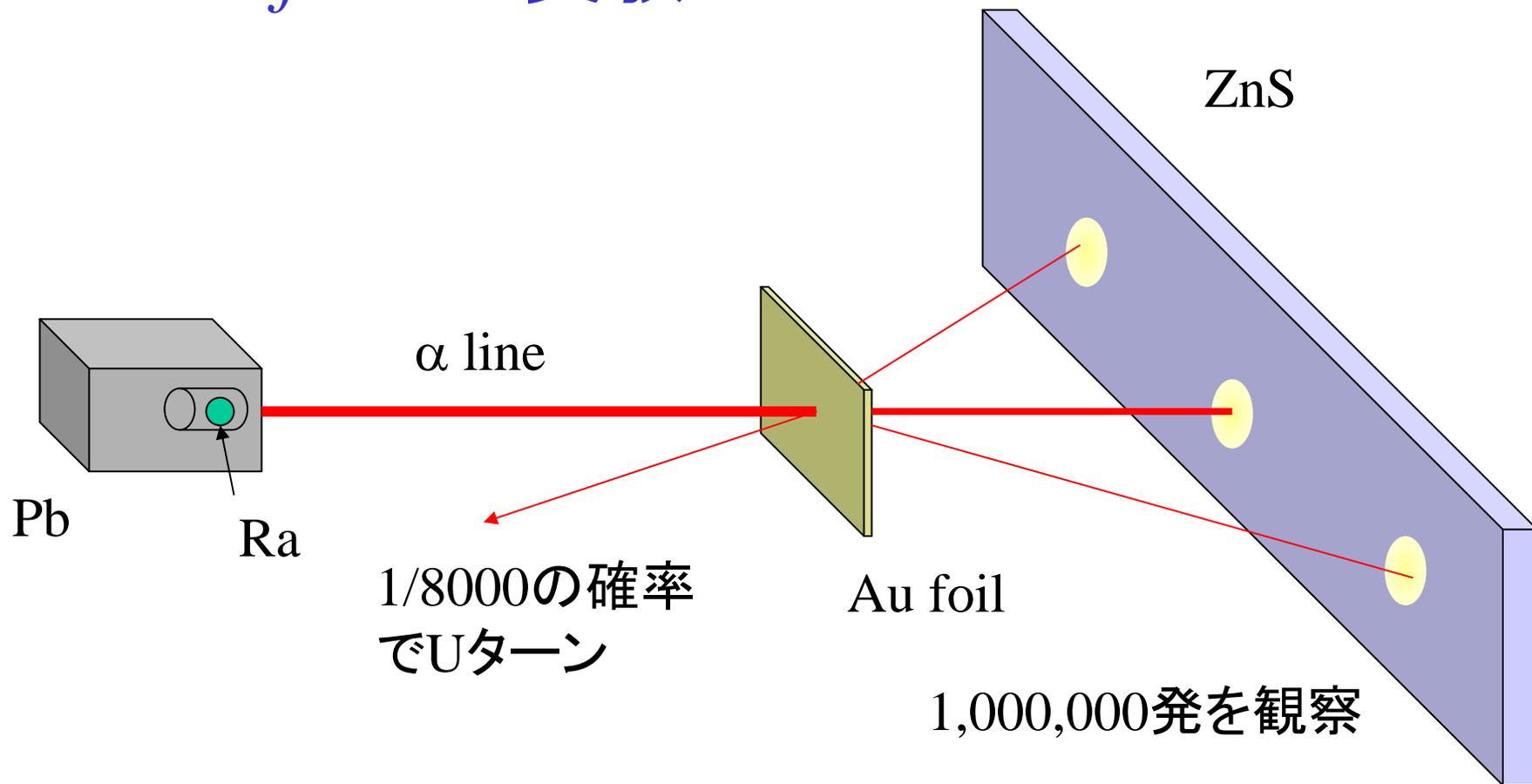


量子力学

Heisenberg の不確定性原理
Pauli の排他律

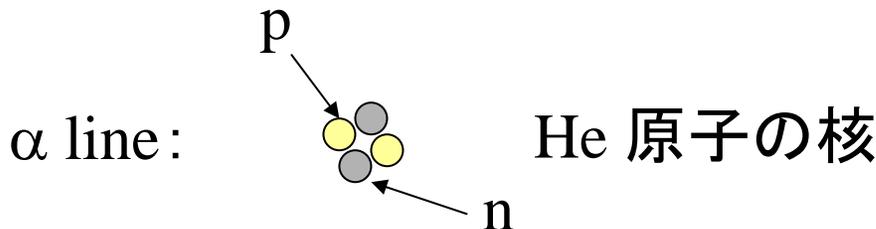


Rutherford の実験

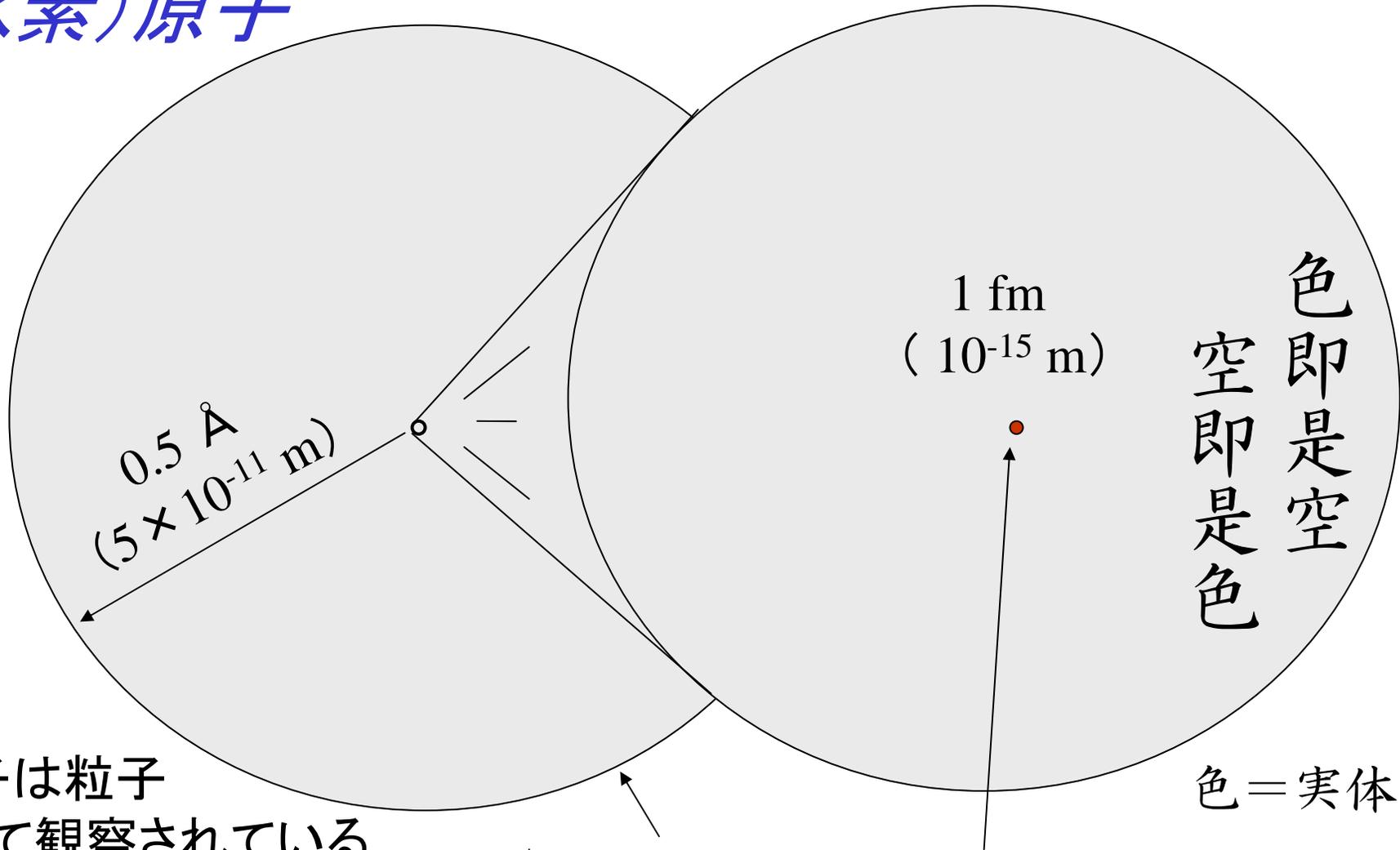


1/8000の確率
でUターン

1,000,000発を観察

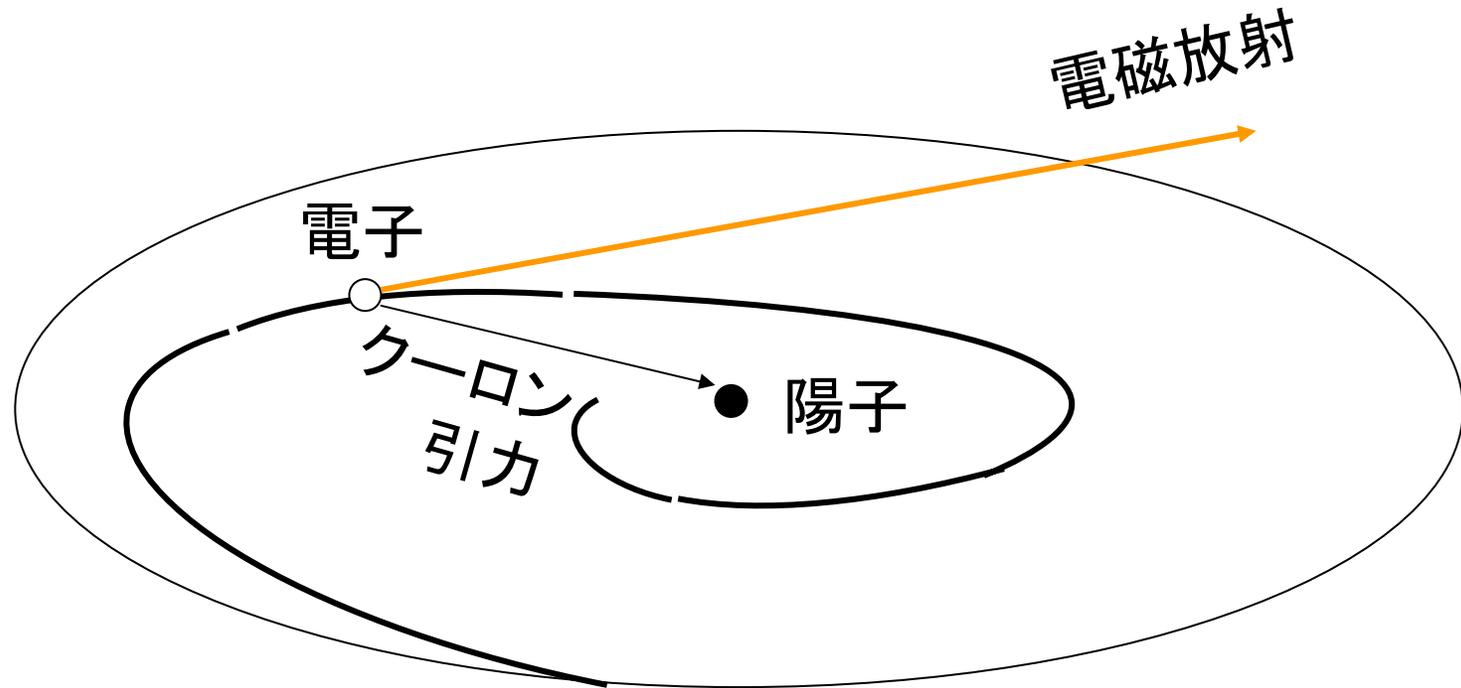


(水素)原子



	電子	核(陽子)	
占める空間(原子に対し)	ほぼ全体積	ほぼ零	$p = mv$
質量(原子に対し)	0.05%	99.95%	

水素原子の太陽系モデル

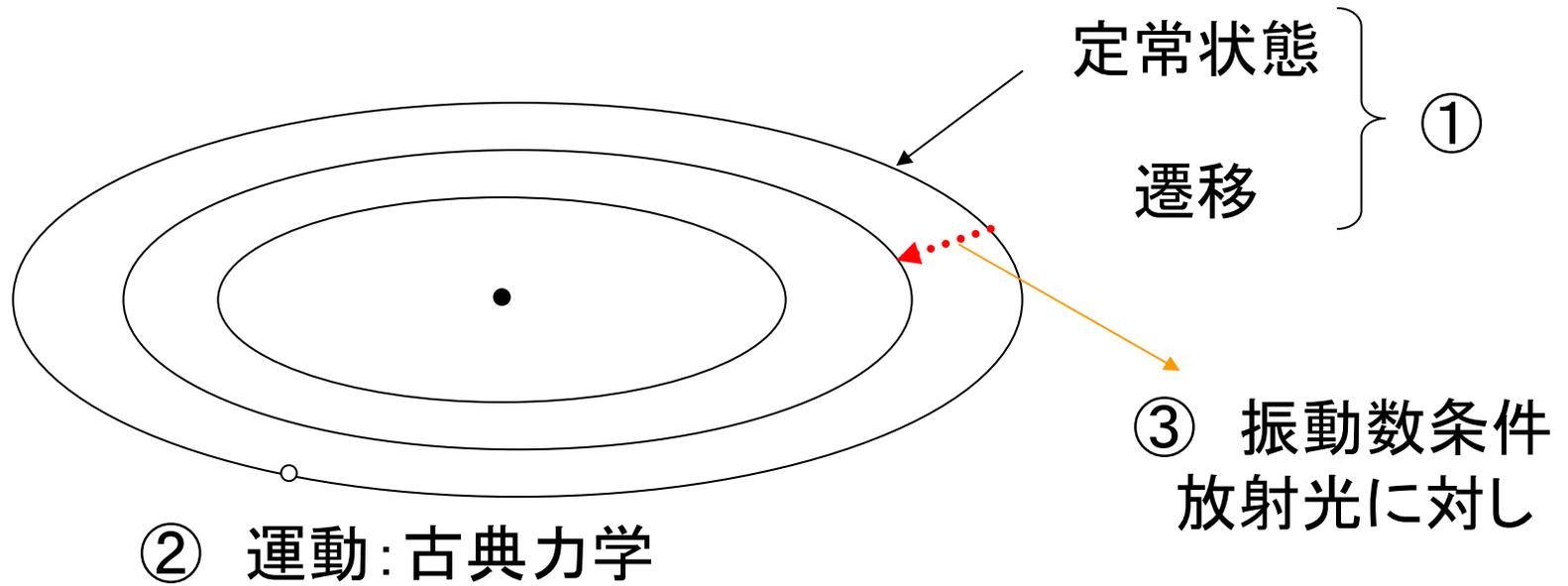


一瞬(10^{-10} 秒程度)のうちに陽子と電子は合体

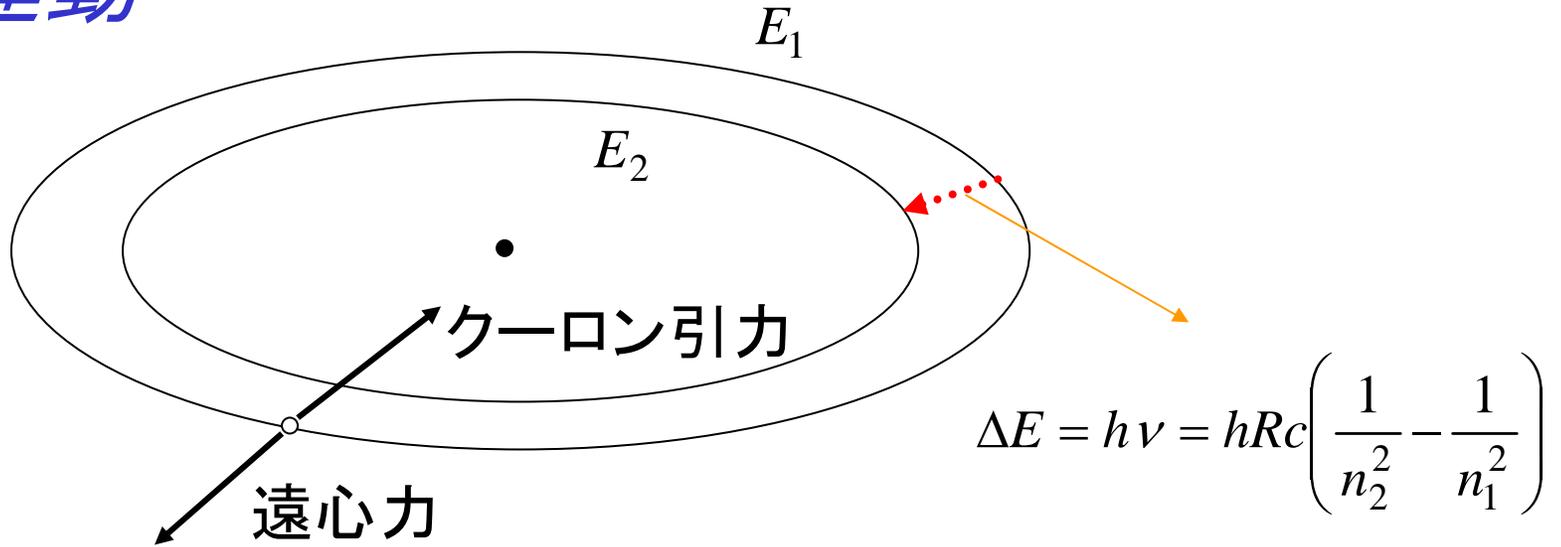
前期量子論

Bohr

- Rutherford の原子模型の修正
- 原子スペクトルに対するRitzの組合せ則
- Planck定数



円運動



クーロン引力 = 遠心力より $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m_e r \omega^2$

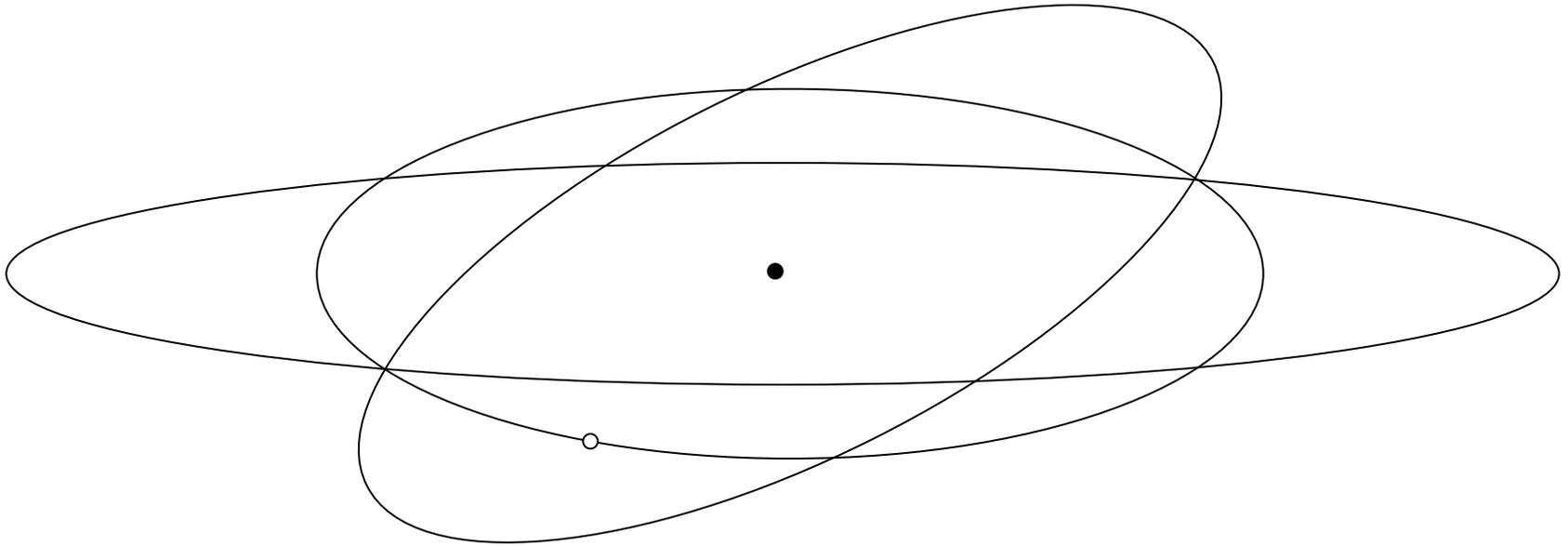
$$E = -\frac{hRc}{n^2} = \text{運動エネルギー} + \text{クーロンポテンシャルエネルギー}$$
$$= \frac{m_e r^2 \omega^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

未知数: r, ω ボーア半径 $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 0.528 \text{ \AA}$

量子条件: 角運動量が離散化 $L = m_e r \omega^2 = n\hbar$ n : 量子数

Sommerfeld モデル

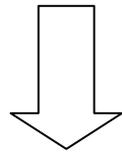
3次元力学系



直交3方向に対する角運動量に対する量子条件
⇒ エネルギー, 角運動量, z軸角運動量に量子数

前期量子論

元素の周期律, Frank-Hertzの実験, Moseleyの結果を説明



原子論, 物質構造論としては不十分

- ・ 非周期系に適用できない → 一般性, 厳密性に欠ける
- ・ 遷移における放出・吸収の機構が曖昧
- ・ スペクトル線の定量的扱いできない
- ・ Zeeman効果, Stark効果, スペクトルの微細構造の説明不可能

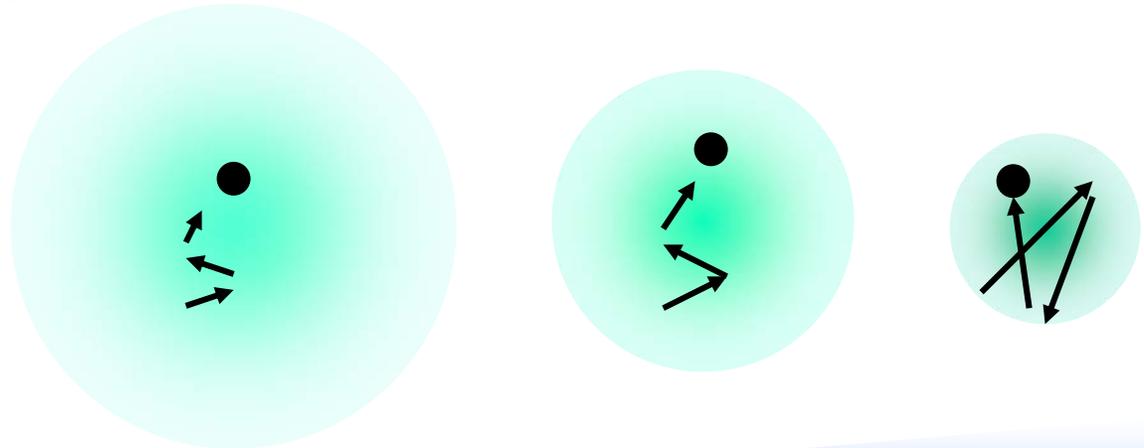
量子力学の確立

(1) Heisenberg の不確定性原理

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

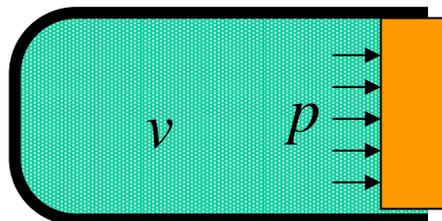
$$q_{ave.} = 0, \quad p_{ave.} = 0$$

空間の大きさ



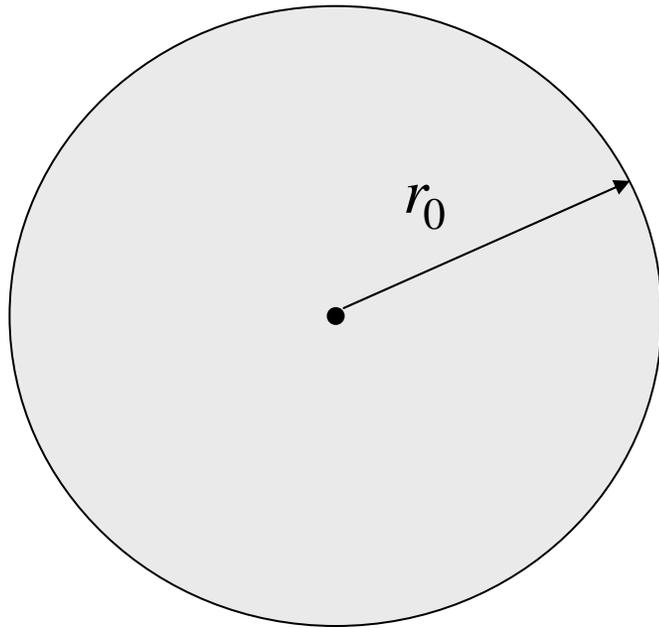
運動量
運動エネルギー

(注: 古典力学におけるボイルの法則)



$$pv = \text{const.}$$

水素原子

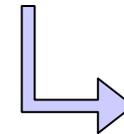


原子半径 $\Delta q = r$

$$p = \Delta p = \frac{\hbar}{r}, \quad \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e r^2}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$dE/dr = 0$$



$$r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$

水素原子の核と電子の関係

速度同一とすると \rightarrow

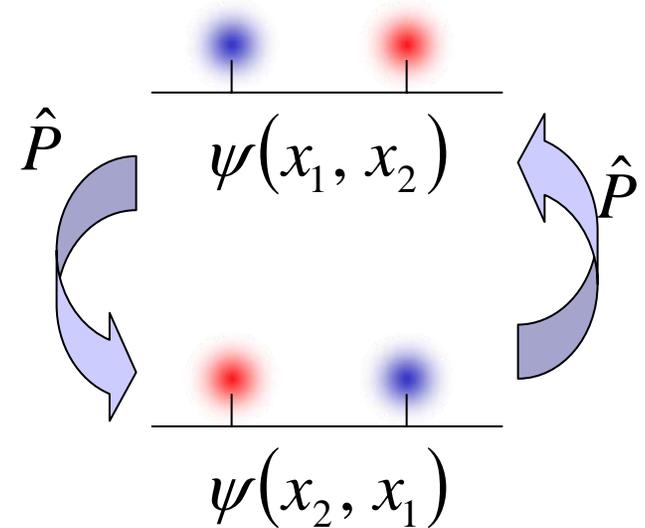
電子と核の占める空間寸法比 = 電子と核の質量の逆数比
= 2,000

(2) Pauli の排他律

対称関数:
(ボース粒子) $\psi(x_2, x_1) = \psi(x_1, x_2)$

または

反対称関数:
(フェルミ粒子) $\psi(x_2, x_1) = -\psi(x_1, x_2)$



両粒子とも同一座標 x_1 に入るとすると

対称関数:
(ボース粒子) $\psi(x_1, x_1) = \psi(x_1, x_1)$

反対称関数:
(フェルミ粒子) $\psi(x_1, x_1) = 0$

フェルミ粒子は1つの状態に1粒子

“1つの状態には1つのフェルミ粒子しか占めることができない”

フェルミ粒子： 半整数のスピンをもつ粒子

電子, 陽子, 中性子, 中間子など

原子の原子番号

→ Schrodinger 方程式 (不確定性原理と同一) で電子状態計算

→ 各状態のエネルギーの低いほうから電子を占有させる

(電子の個数 = 原子番号)

→ 最外殻の電子の状態決定 (方向, 充満度など)

→ 原子の諸性質明確化

他の原子との結合の形式, 結合力, 物性

原子から出る特性スペクトル = 状態間のエネルギー差

分子についても同様の考察