

### 3 前期量子論

Planck, Einstein から始まったエネルギー量子の考え方は、Bohr の前期量子論 (原子の安定性の問題) を通じてミクロな世界全体を記述する描像へと広がっていきます。ここでは前期量子論について学びます。

#### [3.A] Bohr の前期量子論 (1913)

長岡-Rutherford 原子模型が古典的には不安定である事、原子から出る光のスペクトルが離散的である事の 2 点の解決のため、Bohr が導入した概念

仮説 1. 電子の占める円軌道の角運動量は  $n\hbar (n = 1, 2, 3, \dots)$  という値のみがゆるされ、この状態にある間は光は放出されない (定常状態)。

仮説 2. 定常状態間を電子が飛び移る時、 $h\nu = E_n - E_m$  というエネルギーの光が放出される。

#### [3.B] Bohr-Sommerfeld の量子化規則 (=エネルギー離散化の規則)

多自由度の周期運動に対して、次のような条件を満たす場合に定常状態となる。

$$\oint p_i dq_i = n_i h \quad (n_i = 1, 2, 3, \dots)$$

#### 3. 例題 (水素原子のスペクトルの量子化: 高校での物理の復習)

Bohr-Sommerfeld の量子化規則を用いて、水素原子 (ただし 2 次元) の円軌道でのスペクトルを求めてみよう。

potential  $V = -\frac{e^2}{r}$  (MKSA 単位系では  $V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$ ) の下で質量  $m$  の電子がある平面内で周期運動しているとする。このとき、1. 例題 より、Hamiltonian は、

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r},$$

となる。Hamilton の運動方程式は

$$\dot{r} = \frac{p_r}{m}, \quad \dot{p}_r = \frac{p_\theta^2}{mr^3} - \frac{e^2}{r^2}, \quad \dot{\theta} = \frac{p_\theta}{mr^2}, \quad \dot{p}_\theta = 0,$$

となり、 $p_\theta$  は保存量であることが分かるので、 $\theta$  についての Bohr-Sommerfeld の量子化規則  $\oint p_\theta d\theta = nh$  から、 $p_\theta = \boxed{\text{ア}}$  を得る。さて、半径が一定の条件は遠心力とクーロン力の釣合から

$$\dot{r} = 0 \rightarrow \dot{p}_r = 0 \rightarrow r = \boxed{\text{イ}}$$

となるので、これをエネルギーの表式に代入すると、

$$E = H = \boxed{\text{ウ}}$$

となり、エネルギーが量子化 (離散化) されることが分かる。

#### [3.1] (de Broglie 波と Bohr-Sommerfeld の量子化規則の関連)

再び、平面内で円運動している水素内の電子を考える。de Broglie 波は、波長  $\lambda = h/p$  であり、原子核のまわりをまわる電子に対応する波が、一周した時にもとの波と (位相が) 一致すれば定常波が構成される。

- (1) このことから、電子の運動量  $p$  と円軌道の半径  $r$  の間にある関係を導け。
- (2) この条件が Bohr-Sommerfeld の量子化規則と一致していることを確かめよ。
- (3) 上の条件は、どのような物理量が”量子化 (離散化)” されていることに対応するか?

### [3.2] (調和振動子)

Bohr-Sommerfeld の量子化条件を用いて、調和振動子

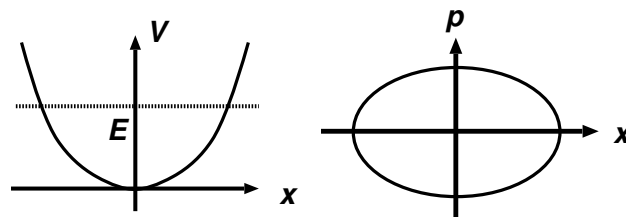
$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2,$$

のエネルギー準位が

$$E = n \hbar \omega$$

で与えられる事を示せ。

ヒント:  $\oint p dx$  は位相空間  $(x, p)$  において軌道に囲まれた面積であることを利用すると分かりやすい。



### [3.3] (井戸型ポテンシャル)

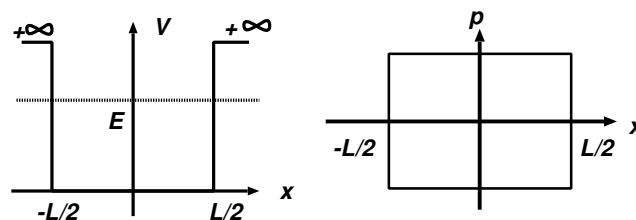
Bohr-Sommerfeld の量子化条件を用いて、無限の高さをもつ井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| \leq L/2) \\ +\infty & (|x| > L/2) \end{cases}$$

の中を運動する質量  $m$  の粒子のエネルギー準位が

$$E = \frac{1}{2m} \left( \frac{n\pi\hbar}{L} \right)^2$$

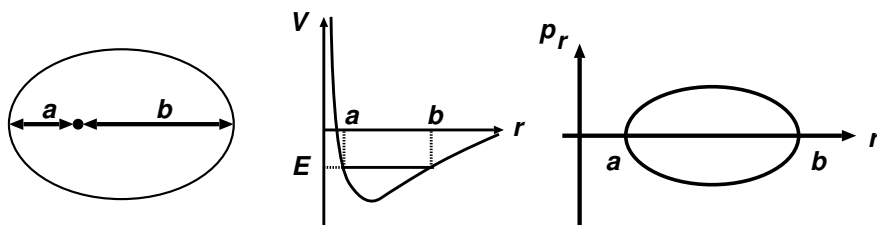
で与えられる事を示せ。



### [3.4] (水素原子のスペクトルの量子化: 楕円軌道の場合\*)

Bohr-Sommerfeld の量子化規則を用いて、水素原子で電子が楕円軌道を描く場合のスペクトルを求めてみよう。

- (1) Bohr-Sommerfeld の量子化規則を  $\theta, r$  座標について示せ。また、座標  $\theta$  について積分を実行し、 $p_\theta$  を求めよ。



- (2) 楕円軌道において、 $E$ ,  $p_\theta = L$  は保存量であるから、 $r$  の正準共役運動量が  $r, E, L$  の関数  $p_r = p_r(r, E, L)$  として求まる。よって、座標  $r$  についての Bohr-Sommerfeld の量子化規則に現われる一周積分は結局上図の  $a$  から  $b$  までの積分

$$2 \times \int_a^b p_r(E, L, r) dr$$

を求めればよいことになる。

回帰点  $a, b$  を求め、これらを用いて関数  $p_r = p_r(r, E, L)$  をあらわせ。

- (3) 上の小問で現われる積分を実行し、水素原子のエネルギースペクトルが、

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (3.1)$$

となることを示せ。

ヒント：次の定積分の公式

$$I(a, b) = \int_a^b \frac{\sqrt{(r-a)(b-r)}}{r} = \pi \left( \frac{a+b}{2} - \sqrt{ab} \right) \quad (3.2)$$

を用いてよい。(余裕があればこれを示せ。)

- (4) Eq. (3.1) に現れる係数を数値で求めよ。これより、水素原子の基底状態 (エネルギーの一番小さい状態) における電子の束縛エネルギーを求めよ。答えは 13.6 eV であるが、計算機を使わずに 10 % の精度の範囲内で求めてみよ。微細構造定数

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.04}$$

の 2 乗が  $\alpha^2 \simeq 1/2 \times 10^{-4}$  を用いると便利である。

- (5) 電子のエネルギーが  $E_1$  の準位 (定常状態) から  $E_2$  の準位へ遷移する際には  $h\nu = E_1 - E_2$  のエネルギーを持つ光子が放出される。例題において  $n = 3, 4, 5$  の準位から  $n = 2$  の準位へ遷移する時に放出される光の波長を求めよ。(電卓をつかってよい。)

### [3.5] (2次元調和振動子\*)

2次元の調和振動子にたいして同様の事を考えてみよう。

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2(x^2 + y^2),$$

- (1) まず、 $(x, y)$  を正準座標と考えて、正準運動量にたいして Bohr-Sommerfeld の量子化規則を適用し、エネルギー準位を求めよ ( $n_x, n_y$  で表せ)。  
 (2) 次に、 $(r, \theta)$  を正準座標と考えた時、Hamiltonian を  $r, \theta, p_r, p_\theta$  で表せ。(運動エネルギーの形は例題参照)  $\theta$  に対する量子化条件はどのようになるか? 積分を実行せよ。

- (3)  $r$  に対する量子化条件を書き下せ。また積分を実行し、エネルギーを求めよ ( $n_\theta, n_r$  で表せ)。

ヒント: 定積分の公式 Eq. (3.2) を利用できる。

[3.6] (Bohr の対応原理\*)

Bohr は、古典力学との対応原理を用いて  $\oint pdq = nh$  をもちいた量子化という概念を生み出した。その考え方に少しだけ触れてみる。

まず、原子のエネルギー準位がとびとびであるとする。また、その準位間の遷移の時に光子が放出されるとする。Bohr が基盤にした対応原理は

**放出される光子の振動数は、 $n$  が大きな時 (古典的なとき) には、  
古典力学での電子の振動数 (の整数倍) に一致するべきである、**

というものであった。(メシア、朝永参照)

この条件は、 $n$  の大きな所では

$$\frac{1}{h} \frac{dE}{dn} = \nu_{cl.}(E) \quad (3.3)$$

(左辺は差分と思えば  $n$  が一つ変わった時の光子の振動数、右辺は電子の古典的な振動数。) と表される。

- (1) Eq. (3.3) から  $n$  の大きな所での量子化規則

$$\int^E \frac{dE}{\nu_{cl.}(E)} = nh + \text{const.} \quad (3.4)$$

を導け。(ほとんど当り前かも知れない。)

- (2) 作用  $J = \oint pdq$  をエネルギーの関数と考え、これと Eq. (3.4) を結びつけよう。  
例題でもあったように、エネルギーが与えられると、運動量  $p$  は、座標  $q$  とエネルギー  $E$  の関数として与えられる。運動量  $p$  をエネルギーで微分するとどのような物理量が得られるか?
- (3) 作用  $J$  を少し書き直してみると、

$$J = 2 \int_{a(E)}^{b(E)} p(E, q) dq$$

あるいは

$$J = \oint p \frac{dq}{dt} dt$$

となる。前問の結果を用いると、この量のエネルギー微分はどのような量を示している事になるか?

- (4) あるエネルギー  $E_{min}$  において、Eq. (3.4) の右辺に現れる定数と  $n$  がともに 0 であるとする。これまでの結果を用いて、

$$\int_{E_{min}}^{E_n} \frac{dE}{\nu_{cl.}(E)} = \oint_{H=E} pdq = nh$$

を導け。

## (補足ノート) 前期量子論における論理の流れ

前期量子論についての論理展開をまとめておきます。

### 1. 光 (輻射) の量子論

… 光は波と考えられていたが、振動数  $\nu$  をもつ光はエネルギー  $h\nu$  をもつ粒子のような振る舞いもする。

$$\text{光: } E = h\nu, \quad p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

(1) Planck のエネルギー量子仮説 (1900) … 真空のエネルギー密度

(2) Einstein の光量子仮説 (1905) … 光電効果、Compton 散乱

こうした物事を理解するうえで、統計力学、相対論的力学、電磁気学が必要であった。  
(19 世紀終り頃に整備された物理学の粋を集めてつくられた !!)

### 2. 電子の量子論

… 電子は粒子と考えられていたが、運動量  $p$  の電子は波長  $h/p$  の波としても振る舞う。

(1) Bohr の仮説 (1913) … 電子の角運動量は定常状態では”量子化”されており、この間の遷移の時に  $\nu = \Delta E/h$  という振動数の光が放出される。

$$\oint_{\text{円軌道}} \mathbf{P} \cdot d\mathbf{R} = nh \rightarrow PR = n\hbar \rightarrow E_n = -\frac{mc^2\alpha^2}{2} \frac{1}{n^2}$$

(2) de Broglie の物質波 (1923)

$$\text{電子: } \lambda = \frac{h}{p}$$

(3) Bohr-Sommerfeld の量子化規則 … 定常状態では電子の波は定常波となる。

$$\oint_{H=E \text{ の周期軌道}} \frac{p_i(E, q)}{h} dq_i = \oint_{H=E \text{ の周期軌道}} \frac{dq_i}{\lambda(E, q)} = n$$

(定常状態では一周で丁度  $n$  回 (整数回) の波を打つ。)

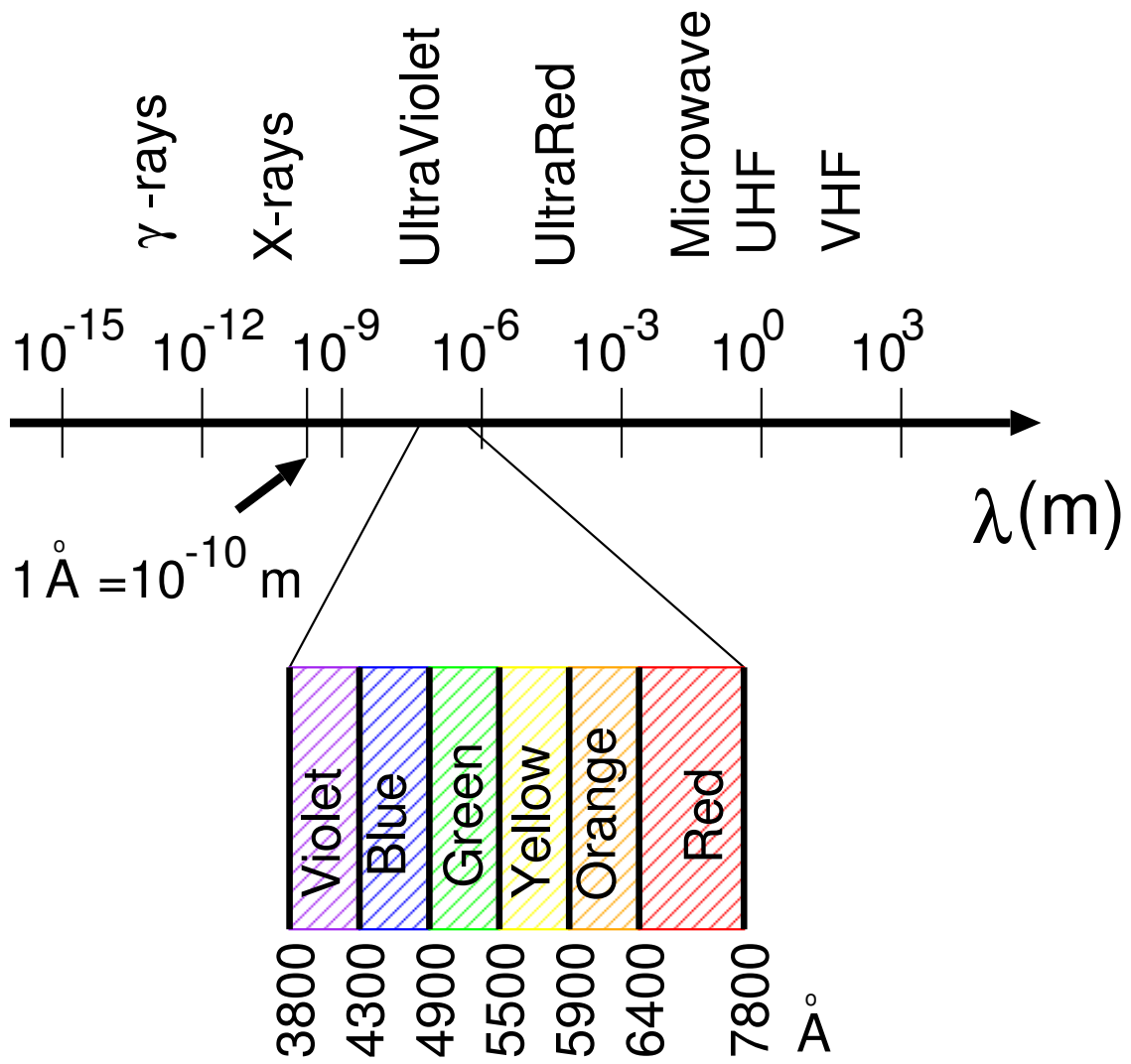
こうした物事を理解するうえでは、Hamilton 形式で整備された古典力学の知識が用いられた。

### 3. 簡単なポテンシャルにおけるエネルギー準位

|       | ポテンシャル                                                    | 前期量子論                                                   | 量子力学                                             |
|-------|-----------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|--------------------------------------------------|
| 水素原子  | $V(r) = -\frac{e^2}{r}$                                   | $E_n = -\frac{mc^2\alpha^2}{2n^2}$                      | 左に同じ                                             |
| 調和振動子 | $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$                         | $E_n = n\hbar\omega$                                    | $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ |
| 井戸型   | $V(x) = 0 ( x  \leq L/2)$<br>$V(x) = +\infty ( x  > L/2)$ | $E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$ | 左に同じ                                             |

さて、このような前期量子論には、非周期運動が扱えない、様々な例外 (角運動量が 0 など) がある、”量子化”する軸 (円運動する時の平面など) が作為的に選ばれる、などの様々な問題があり不十分である。このため、物質の波自体を記述する方程式と理論の枠組が必要となる。

- 参考: 光の波長



### 量子力学レポート問題 3.

[R3.1] 長岡-Rutherford 原子模型は原子内で正電荷がほぼ一点の原子核に集中していることは説明するが、古典的には電子が常に加速度運動をするために電磁波を放出し続け、原子が不安定になってしまうという問題があった。この場合の水素原子の「寿命」を求めてみよう。

- (1) 古典電磁気学において、電気双極子  $\mathbf{d}$  が単位時間あたりに放出するエネルギーは

$$S = \frac{2}{3c^3} |\ddot{\mathbf{d}}|^2$$

である。(cgs 単位系) 原子核からみた電子の位置を  $\mathbf{r}$  として、電子が円運動している場合にこのエネルギー損失を  $r$  の関数として求めよ。(ただし、原子核は十分重くて動かないとしてよい。)

- (2) 3. 例題と同様にして、半径  $r$  の円運動をしている電子のエネルギー  $E$  を  $r$  の関数として求めよ。さらに、単位時間当たりのエネルギー損失と  $E$  の関係  $dE/dt = -S$  から  $r$  を消去して、 $E$  についての微分方程式を作れ。
- (3) 初期状態 ( $t = 0$ ) であるエネルギー  $E$  ( $E < 0$ ) の束縛状態にある電子が崩壊する ( $E = -\infty$  となる) 時刻  $\tau$  を求めよ。また、初期エネルギーが  $E = -me^4/2\hbar^2$  である場合、この寿命  $\tau$  がどの程度となるか、有効数字 1 桁以上で答えよ。