初等量子力学

小田　一郎

2020 年 5 月 4 日

1　量子力学の歴史

量子力学周辺の歴史をざっと見ておきましょう。

1864 年 J. C. Maxwell (英): Maxwell 方程式の導出 → 光は電磁波であることを予言

1888 年 H. R. Herz (独): 電磁波の存在を実験で確認

1900 年 M. Planck (独): 黒体輻射の理論 → 「エネルギー量子」の発見。量子力学の誕生

1905 年 A. Einstein (独): 光電効果の理論 → 「光量子仮説」

1913 年 N. Bohr (デンマーク): ボーアの原子模型

1923 年 de Broglie (仏): 物質波の理論 → 「粒子と波動の二重性」

1925 年 W. Heisenberg (独): 行列力学

1926 年 E. Schrödinger (オーストリア): 波動力学

1926 年 M. Born (独): 波動関数の確率解釈

1927 年 W. Heisenberg (独): 不確定性関係

2　光の粒子性と波動性について

量子力学は、光に関する不思議な物理現象から生まれた。量子力学以前には、Maxwell の理論から、光は電磁波という波であるということが確立していた。しかし、量子力学によって、光は電磁波という波動性と光 (量）子という粒子の二重性をもつことが分かってきた。

2.1　エネルギー量子

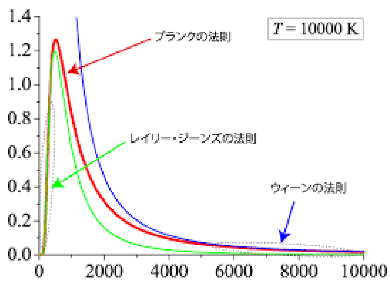
2.1.1　黒体輻射

鉄や銅などを熱していく $\longrightarrow$ 表面が赤色から白色に変化

これは鉄や銅の表面から赤や白色の光をだしているため。 cf. 太陽や星の色

壁が鉄でできた大きな直方体の空洞を考える。この空洞には小さな窓があって, 外から中の様子が見ることが出来る。外側から空洞を熱すると、空洞の中は鉄でできた壁から出る光によって満たされていく。小さな窓から外に出てくる光のエネルギーを調べてみると、それは壁の物質（鉄とか銅）や空洞の形や大きさによらず、光の波長（もしくは振動数）と壁の温度のみに依存することが分かる。

(絶対) 温度 T の空洞中の輻射で、振動数 $\nu \sim \nu + d\nu$ 内にある単位体積当たりのエネルギー分布を $U(\nu, T)$ と書くと、下図のようになる。



1900 年に、M. Planck が行ったことは、低振動数で成り立つレーリー・ジーンズの法則と高振動数で成り立つウィーンの法則をつなぐ内挿公式を見つけたこと:

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}. \tag{1}$$

ここで、c は光速度、k はボルツマン定数。h は Planck が初めて導入した定数で、今では「プランク定数」と呼ばれ、MKS 単位系ではとても小さな値、$h = 6.626 \times 10^{-34} [J \cdot s]$ をとる。現代では、h よりもそれを 2π で割った定数 (「エッチバー」と呼ばれる)、$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.0546 \times 10^{-34} [J \cdot s]$ がよく使われる。式 (1) のことを、「プランクの輻射公式」と呼び、この輻射公式を満たす輻射のことを「黒体輻射」と言ったり、「プランク分布」をする輻射と

言ったりする。[*1]

♣ 古典的極限

量子力学から古典力学に移行するためには、$h \to 0$ の極限をとれば良い。但し、プランク定数は、エネルギー × 秒の次元を持っているから、数学的に無次元の 0 の極限をとることは無意味。つまり、単位を変えることによって、次元を持っている量は大きい量にもなるし、小さな量にもなる (e.g. $1[m] = 10^{-3}[km] = 10^3[mm] = 10^6[\mu m] = 10^9[pm] = 10^{12}[fm]$)。

だから、ここで言う古典的極限とは、正確に言うと、考えている物理系で h と同じ次元をもつある量 a を見つけて、$\frac{h}{a} \to 0$ の極限をとるという意味である。

次に、プランクの輻射公式 (1) は、低振動数ではレーリー・ジーンズの法則に、高振動数ではウィーンの法則に移行することを見ておこう。

$$
\begin{aligned}
&\nu \sim 0 \text{ に対して、} U(\nu, T) \propto \frac{\nu^3}{\frac{\nu}{kT}} \propto \nu^2, \\
&\nu \gg 1 \text{ に対して、} U(\nu, T) \propto e^{-\frac{h\nu}{kT}} \to 0.
\end{aligned} \tag{2}
$$

ここまで話を進めてきて、Planck が偉かった所はどこにあるのだろうか？　プランクの輻射公式 (1) を発見したこと？　プランク定数 h を初めて物理に導入したこと？　これらのことは、凡人の物理屋でもできること！ Planck が偉かった所は実は、プランクの輻射公式 (1) の物理的な意味を深く考えて、「エネルギー量子」の考えに至ったこと！

プランクの「エネルギー量子仮説」とは、次のことを言う：

エネルギーはいくらでも小さく分けられる連続量ではなくて、振動数 ν の光のエネルギーは、h の整数倍

$$
E = nh\nu = n\hbar\omega, \tag{3}
$$

の値しかとることができない。つまり、振動数 ν の光のエネルギーは、エネルギー $h\nu = \hbar\omega$ の固まりである「エネルギー量子」からできている。但し、上の公式で、ω は $\omega = 2\pi\nu$ で定義される角振動数（角周波数）のことである。

この授業の最後に、エネルギー量子仮説 (3) からプランクの輻射公式 (1) を導いておこう。

温度 T、エネルギー E の熱平衡状態における確率は、ボルツマンの法則から、$e^{-\frac{E}{kT}}$ に比

[*1] 元々の空洞輻射の意味は、真っ暗な空洞の中でも光がたちこめていること。また、黒体輻射の意味は、真っ黒な物体である黒体も、実は光を出しているという意味。物理学者の偉いところ（ずるい？）は、黒体輻射をあいまいなく定義するために、Planck の研究を逆手にとって、黒体輻射とはプランクの輻射公式を満足する輻射と定義し直したこと。同じような再定義のやり方は、物理の分野では至る所にお目にかかる。

例するのでエネルギーの期待値は、エネルギー量子仮説 (3) を用いて、

$$\langle E\rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-\frac{nh\nu}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nh\nu}{kT}}} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-nh\nu x}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu x}}. \tag{4}$$

但し、2 番目の等式では、$x \equiv \frac{1}{kT}$ と定義した。次に、無限等比級数の公式: 初項 a_0 ，公比 r の等比数列 a_n において，$-1 < r < 1$ のとき

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n = \frac{a_0}{1-r}, \tag{5}$$

を利用すると、(4) の分母は計算できて ($|e^{-h\nu x}| < 1$ に注意)、

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu x} = \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-h\nu x})^n = \frac{1}{1-e^{-h\nu x}}. \tag{6}$$

次に、(4) の分子を計算するためには、今得られた (6) を x について微分すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-nh\nu x} = \frac{h\nu e^{-h\nu x}}{(1-e^{-h\nu x})^2}, \tag{7}$$

が導ける。(6) と (7) を (4) に代入すると、簡単な計算の後に

$$\langle E\rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}. \tag{8}$$

最後のステップとして、振動数 $\nu \sim \nu + d\nu$ 内にある単位体積当たりのエネルギー分布 $U(\nu, T)$ は、上で求めたエネルギーの期待値に単位体積当たりの状態密度 $\Omega = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}$ を掛けた量で与えられること、$U(\nu, T) = \langle E\rangle\Omega$ を使うと、

$$U(\nu, T) = \langle E\rangle \frac{8\pi\nu^2}{c^3} = \frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}, \tag{9}$$

となり、プランクの輻射公式 (1) が導出できた。

演習問題 1

1. (2) を示しなさい。

2. 橙色 (波長 $\lambda = 6000\mathring{A}$) の光の量子当たり ($n = 1$) のエネルギーを求め、この色の $60W$ の光源から 1 秒間に放出される量子数を求めよ。

3. 単位体積当たりの状態密度 $\Omega = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}$ を求めよう。

(1) 関数 $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ に、x, y, x 軸方向に各々周期 L の周期的境界条件を課す。そのとき、ベクトル $\vec{k}$ の満たす条件を求めよ。この条件を満足する $\vec{k}$ は、$|\vec{k}| = k$ から $k + dk$ の間に何個あるか。

(2) 単位体積当たりの、振動数 ν から $\nu + d\nu$ の間の光の振動モードの数 $\Omega d\nu$ を求めよ。但し、波数 k と振動数 ν の関係は、$k = \frac{2\pi\nu}{c}$ であり、光は横波で 2 つの偏極方向をもっているので、2 の自由度を考慮する必要がある。