

# 量子力系の現象についての研究

鈴鹿高専 3年 大久保和樹

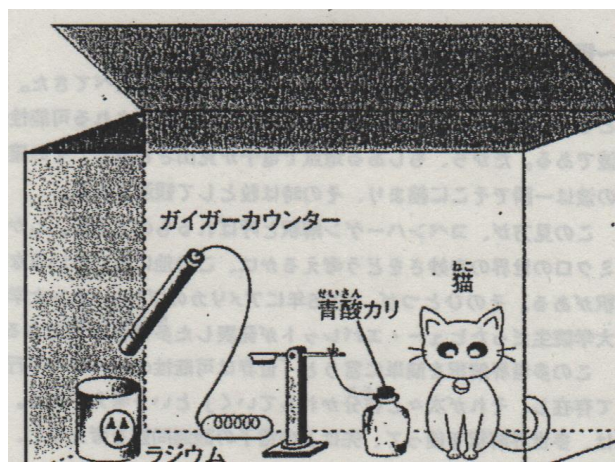
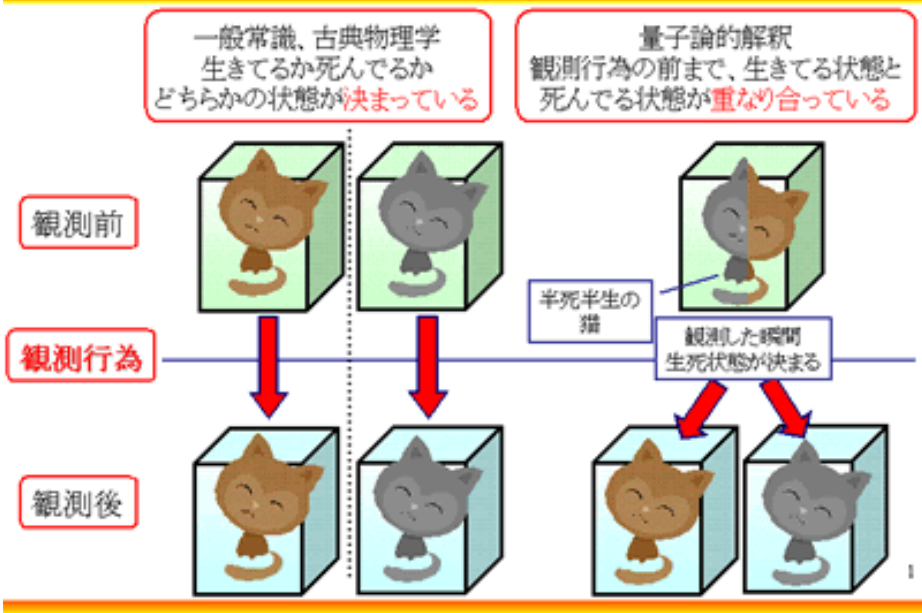
# 動機

## 1、なぜ量子力学に興味を持ったのか

シュレディンガーの猫

## 2、シュレディンガーの猫とは？

思考実験「シュレディンガーの猫」



# 量子力学とは？

ミクロの世界(微小領域)を記述する物理学

マクロの世界(巨視領域)を記述する物理学

- ・大きく言うと現代物理学の1つ

19世紀までの物理学→古典物理学 現代物理学→20世紀以降

古典物理学の代表例→ニュートン力学、マクスウェルの電磁気学

現代物理学ではアインシュタインの相対性理論

- ・量子力学の有名な学者と内容

マックス・プランク「黒体放射に関する研究」

アインシュタイン「光電効果に関する研究」

ニールス・ボーア「原子構造論」

前期量子論

シュレディンガー「シュレディンガー方程式」→波動力学

ハイゼンベルク、マックス・ボルン「ハイゼンベルクの運動方程式」→行列力学

量子論

# 光は波か粒子か？

17世紀

・光は粒子である(ニュートンらが唱える)



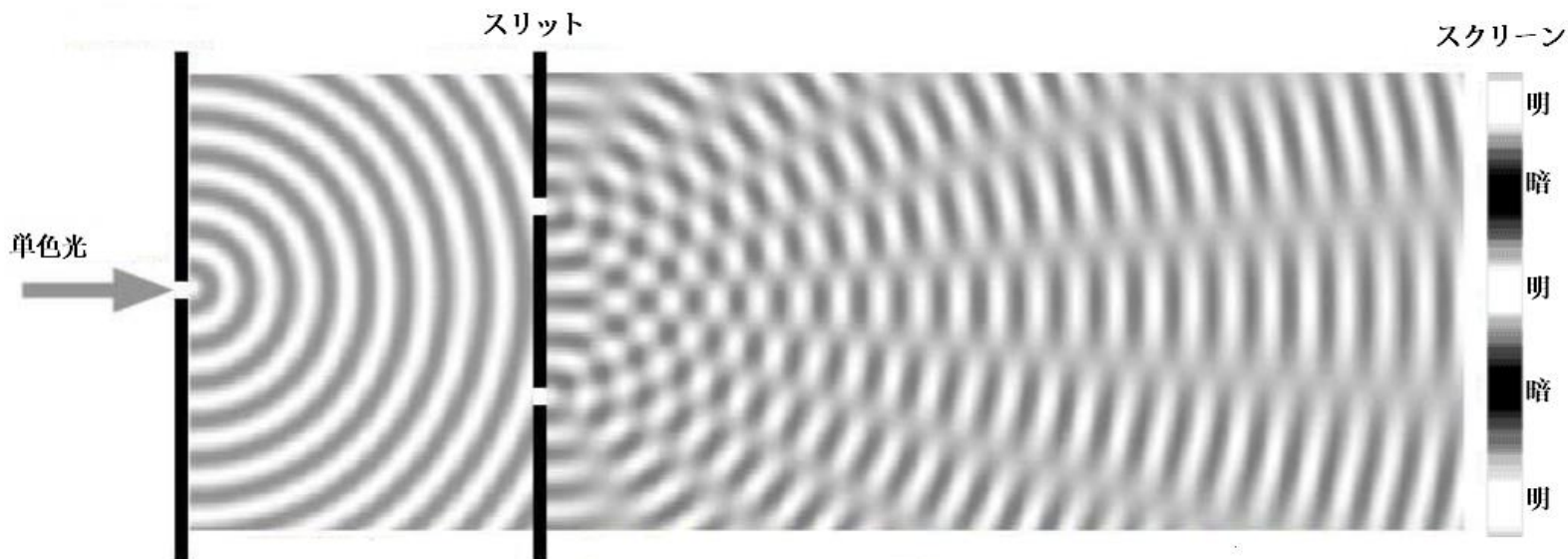
18・19  
世紀

・光は波である(電磁波の発見などによる)



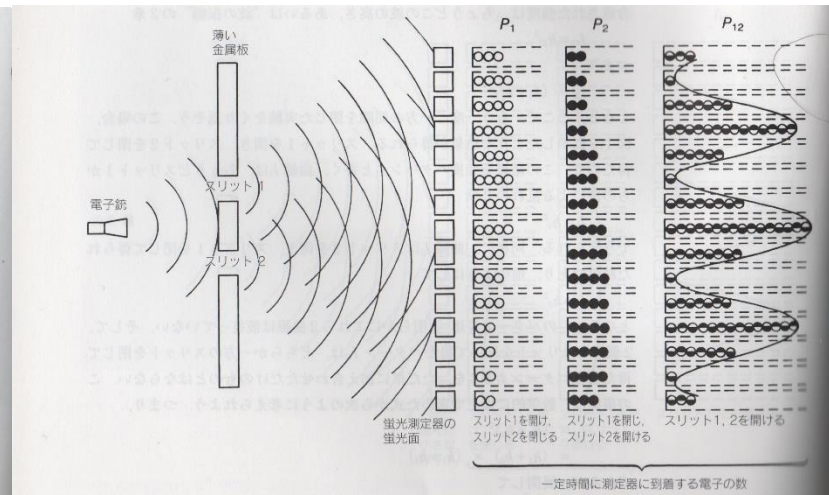
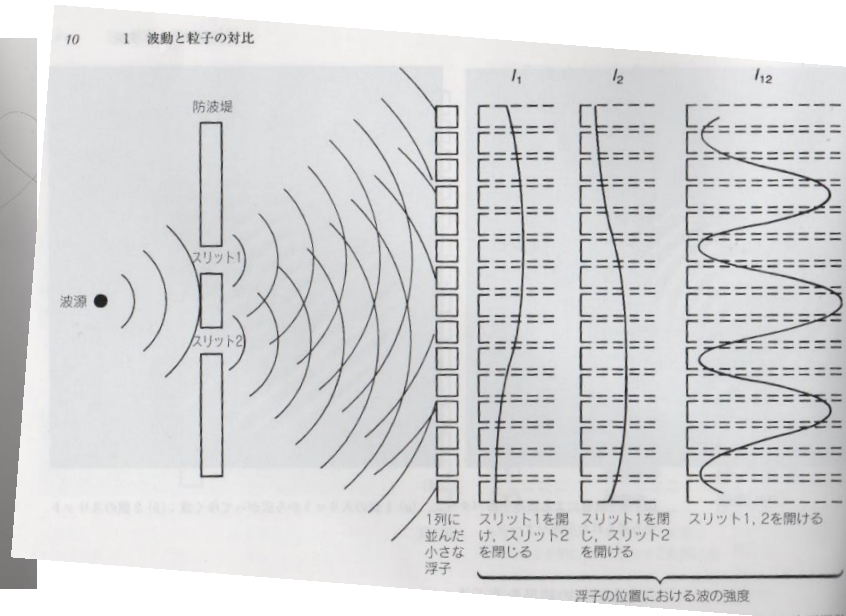
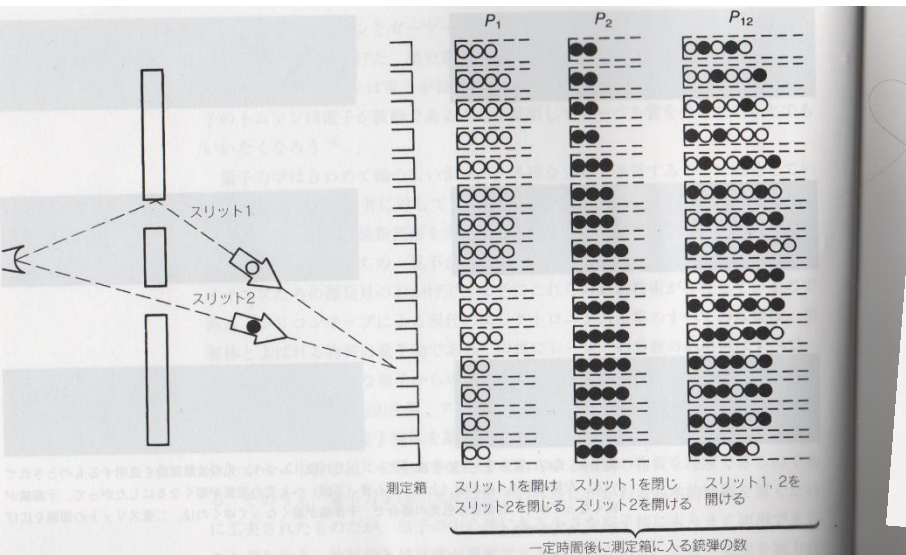
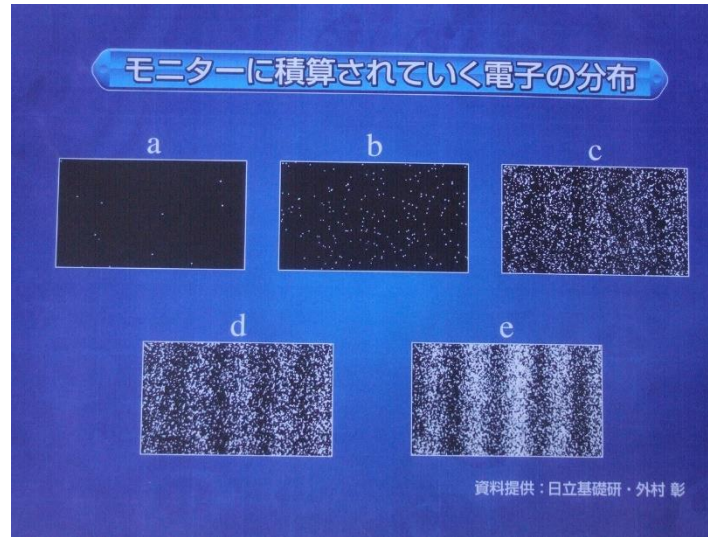
20世紀  
以降

・光は粒子性と波動性(二重性)を持つ！





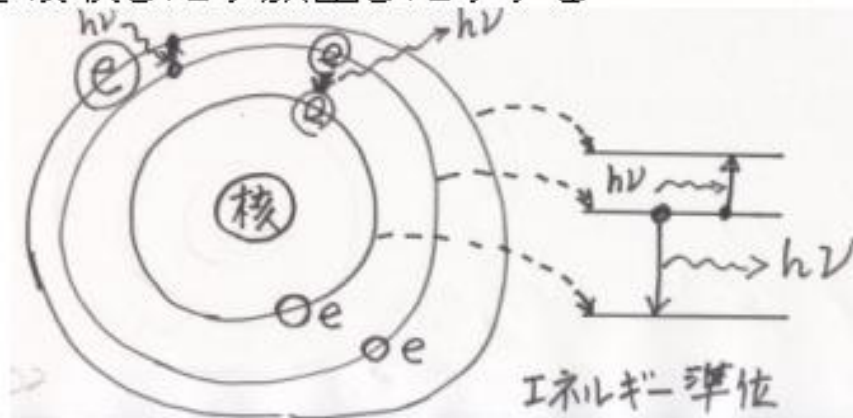
# 電子も波動性を持つ



# 電子が波動性を持つと何が変わるのか

## ボーアの原子模型(1913年)

- 核の周りに電子が存在する
- 電子の軌道は核から見て決まった位置に存在する
- 電子が1つの軌道から別の軌道に移るときに光を吸収したり放出したりする



量子条件の式

$$m_e v r = n \frac{h}{2\pi}$$

ド・ブロイ波の式

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

導入すると、、、

$$m_e v r = p_e r = n \frac{h}{2\pi}$$

$$2\pi r = n \frac{h}{p_e} = n \lambda_e$$

↓

電子が違う軌道になるには一定のエネルギーをあたえないといけない



# 量子力学と化学の結びつき

- ・現代技術との結びつき

- 化学、物質科学、エレクトロニクスの全体の基礎をなしており、先進国の国内総生産の1/3以上が量子力学の知識がなければ存在しなかったもの

- ・量子力学が発展しなかった場合、、、

- ・半導体の振る舞いは理解できない→トランジスタもマイクロチップもコンピュータも開発できない
  - ・レーザー、CD、DVD、ブルーレイプレイヤーもない
  - ・スマートフォンやGPS、MRIもなかった

- ・物理学者ファインマンが残した言葉

- 「量子力学を理解しているものは1人もいない」



# 謝辞

- 波田野先生、仲本先生、加瀬様
- 参考文献
  - 「波田野先生からいただいた資料」
  - 「ファインマン物理学」
  - 「量子力学入門、前野昌弘著」
  - 「量子力学で生命の謎を解く、ジム・アルカリーリ著」

# 補足1

- 電子顕微鏡→「電子と粒子の2重性」
- 太陽がなぜ輝いているのか→「量子トンネル効果」
- 重水素の存在→「重ね合わせ」

# 補足2

- 粒子と波動の2重性が現実世界では起こらない理由

→大きい(マクロな)物体の中で粒子がどのように並び運動しているかに関係している。

原子や分子は生きていない固体の中ではランダムに散らばって不規則に振動していることが多く、液体や気体の中ではさらに熱のためにたえずランダムな運動をしている。

この分散や運動といったランダムな要因によって粒子の不安定な量子的性質はあとという間に消えてしまう。

→物体を構成するすべての量子的粒子の作用が組み合わさってそれぞれ互いが互いを「量子測定」する。それによって身の回りの世界は正常に見えている。

# 補足3

## 分析の原理

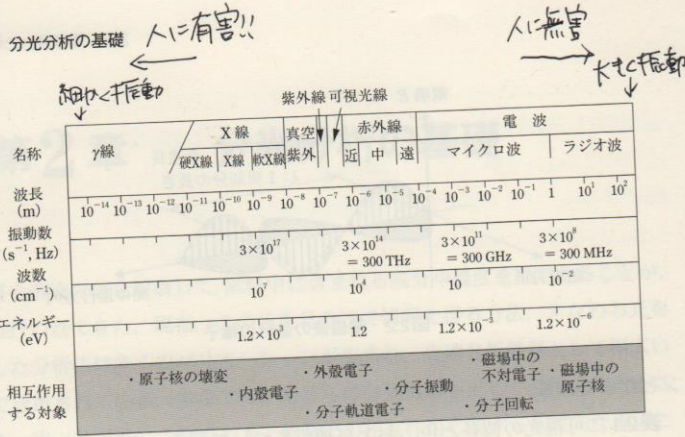


図2.3 電磁波の種類

線である。紫外線よりもさらに波長の短い領域にはX線とγ線がある。一方、赤外線よりも波長の長い領域にはマイクロ波やラジオ波がある。

電磁波を波動として取り扱うとき、通常の波と同じように振動数 $\nu$ や波数 $\tilde{\nu}$ で表すこともできる。波数 $\tilde{\nu}$ は単位長さ (1 cm) あたりの波の数であり、振動数 $\nu$ は単位時間 (1 秒) あたりに発生する波の数である。それぞれ電磁波の波長 $\lambda$ と次のような関係がある。

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} \text{ (cm}^{-1}\text{)} \quad (2.1)$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \text{ (s}^{-1}\text{, Hz)} \quad (2.2)$$

ここで、 $c$ は電磁波の速度であり、 $c = 2.998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ である。

一方、電磁波 (光) にはエネルギーをもった粒子としての性質もある。光を粒子として取り扱うとき、光は質量をもたないエネルギーの塊とみなされ、光子 (photon) と呼ばれるようになる。光子は原子や分子のように1つずつ数えることができる。1個の光子のもつエネルギー $E$ は次式によって与えられ、波とエネルギーが関連付けられる。

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \text{ (J)} \quad (2.3)$$

ここで、 $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$ はプランク定数であり、量子論のいろいろな関係

式に現れる重要な定数である。電気素量 $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$ を用いると、式(2.3)は

$$E = \frac{hc}{e\lambda} \text{ (eV)} = h\nu \div e \quad (2.4)$$

と表され、エネルギーの単位はeVとなる。

波長の短い電磁波ほどそのエネルギーは高く、波長の長い電磁波ほどそのエネルギーが低い。物質と電磁波とがどのような相互作用をするかは、光子のもつエネルギーの大きさによって決まってくる。電磁波を使い分けることによって、試料成分のさまざまな情報を引き出すことが可能となる。

## 2.3 電磁波と物質の相互作用

### 2.3.1 物質による電磁波の吸収と放出

電磁波が物質を通過すると、物質に固有の波長の電磁波が弱められる。これは、物質により特定の波長の電磁波が吸収されるからである。その実体は、物質を構成している分子や原子に含まれる電子による電磁波のエネルギーの吸収である。

一般に、ある系のエネルギー状態について、最もエネルギーの低い状態を基底状態 $E_{gr}$ 、基底状態よりもエネルギーの高い状態を励起状態 $E_{ex}$ という (図2.4)。電子が電磁波のエネルギーを吸収すると、分子は基底状態から励起状態に移る。電子がエネルギー準位間を移動することを遷移 (transition) といい、特に、エネルギー準位の低い軌道から高い軌道に移ることを励起 (excitation) という。一方、励起状態にある分子は不安定であるため、熱や電磁波としてエ

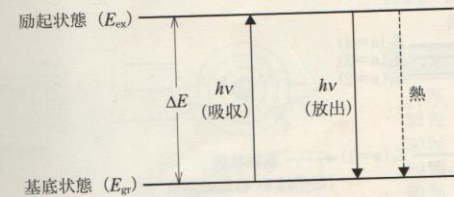


図2.4 電磁波の吸収と放出 (遷移エネルギー)



# 補足4

## ベンゼン、アントラセンの場合

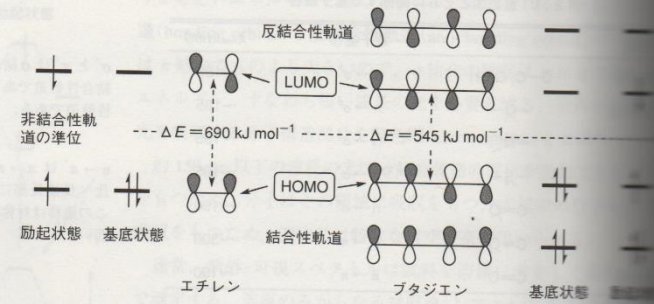


図 2.3 エチレンとブタジエンの分子軌道 HOMO と LUMO のエネルギーの違いが共役とともに減少することに注意せよ。

発色団という言葉は化合物を着色させる(吸収を可視部の領域に到達させる)共役系という意味で使われたが、今日では、紫外部や可視部領域に吸収をもつ共役系を意味する。

**訳者注** 助色団の基に H を付けた化合物は通常 200 nm 以上に吸収をもたない。

溶液中の紫外-可視スペクトルはいろいろな吸収をもつが、それぞれの吸収の山に相当する波長が極大吸収波長 ( $\lambda_{max}$ ) であり、スペクトルの測定時にその波長を記載する。最も大きな極大吸収を最大吸収とよぶ。

図 2.4 代表的な芳香族化合物のスペクトル 共役の拡張は極大吸収波長 ( $\lambda_{max}$ ) を増加させる。

など)であり、それらは発色団とよばれる。共役系の  $\pi \rightarrow \pi^*$  遷移や  $n \rightarrow \pi^*$  遷移は特徴的な吸収を示す。芳香族化合物や含ヘテロ原子芳香族化合物などは共役系の代表例である。芳香族化合物に特徴的な発色団である(吸収の特徴は後述する)。紫外-可視分光法の威力を発揮するのは、それらの共役系である。

共役系に窒素、酸素、硫黄などのヘテロ原子が含まれると、そのヘテロ原子上の孤立電子対が共鳴に関与し、共役が広がる。基本となる共役系をさらに減少させる。

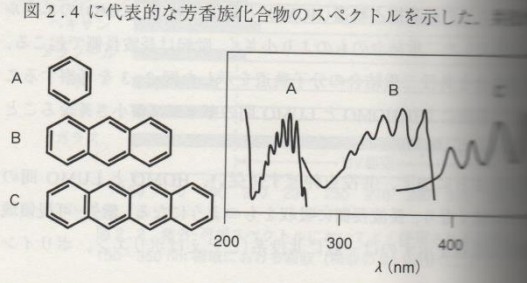


図 2.4 に代表的な芳香族化合物のスペクトルを示した。

極大吸収波長 ( $\lambda_{max}$ ) が大きくなるのがわかる。吸収の位置に影響を与える。フランク-コンドンの原理 (Franck-Condon principle) によって電子遷移は高速で起こるため原子核の位置は変わらないが、電子は(溶媒の電子を含め)互いに相互作用する。励起状態は基底状態よりも分極している。もしも、溶媒が極性溶媒であれば、励起状態は双極子-双極子相互作用によって、基底状態よりも安定化の度合いは大きくなる。そのため、HOMO と LUMO のエネルギー差は減少し、無極性溶媒中よりも低エネルギーで励起できる。例えば、エタノール中では、ヘキサン中よりも 10 ~ 50 nm 長波長側に吸収が移動する(図 2.5)。このようなシフトを深色シフト (bathochromic shift) あるいは  $\lambda_{max}$  が赤色方向(光の赤色側、すなわち長波長側)に移動するので、レッドシフト (red shift) とよぶ\*。

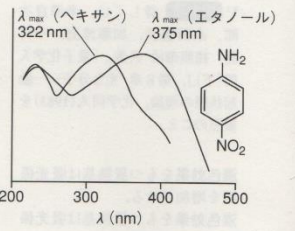


図 2.5 4-ニトロアニリンの紫外-可視スペクトルにおいてヘキサンからエタノールに溶媒を変えた場合に見られる深色シフト

**訳者注** 深色シフト(レッドシフト)や浅色シフト(ブルーシフト)という言葉は、溶媒の効果だけでなく、置換基の効果や、その他の効果であっても、長波長側へのシフト、短波長側へのシフトという意味で使用される。

また、カルボニル基の  $n \rightarrow \pi^*$  遷移をあげるができる。カルボニル基の置換基は、励起状態よりも基底状態のほうがプロトン性溶媒で安定化しやすい。そのため、水素結合が可能な溶媒中では無極性溶媒よりも電子遷移に必要なエネルギーは大きくなり、たとえば 15 nm ほど短波長側にシフトする。この溶媒による短波長シフトを浅色シフト (hypsochromic shift) あるいはブルーシフト (blue shift) とよぶ\*。これは基底状態よりも高い励起エネルギーが必要なことを示している。

### 紫外-可視スペクトルの記録および解釈

紫外-可視分光法から二つの重要な情報が得られる。一つはすでに見たように、吸収位置 ( $\lambda_{max}$ , nm) である。これは電子遷移のエネルギーに直接関係しており、いままでも蓄積された多くの経験的なデータとの比較から、特定の発色団に関する情報が得られる。もう一つは、モル吸光係数 (molar absorptivity あるいは molar extinction coefficient:  $\epsilon$ ) とよばれる量であり、一定波長で分子に固有の吸収による電子遷移の起こりやすさの目安である。もしも電子遷移の基底に起こるならば、光は強く吸収され、 $\epsilon$  の値は大き