ボーアの原子模型
― 革命からの百年 ―

江沢　洋

1900	M. Planck	光の吸収・放出、エネルギー量子
1905	A. Einstein	光量子、光電効果
1911/5	N. Bohr	学位論文・固体電子論、**理論の限界**
/5	E. Rutherford	原子核発見、原子の太陽系モデル
/9	Bohr	ケンブリッジ大学へ、失望
1912/3	Bohr	マンチェスターの Rutherford のもとへ
/6	C.G. Darwin	α 粒子の減速、Bohr 異論
	Bohr	**原子構造**に関心、原子内電子数、実験
1913/2	M. Hansen	Balmer 公式の検討を促す
1913/4	Bohr	第 1 論文を提出、**原子と分子の構造**
1913/7		第 1 論文刊行, /11, 第 3 論文刊行

	生年月日	1913 年には	没年
H.A. Lorentz	1853	60 歳	1928
M. Planck	1858	55	1947
長岡半太郎	1865	48	1950/12/11
A. Sommerfeld	1868	45	1951
寺田寅彦	1878/11/28	35	1935/12/31
A. Einstein	1879	34	1955
石原 純	1881/1/15	32	1947
N. Bohr	1885/10/7	**28**	1962/11/18
E. Schrödinger	1887/8/12	26	1961/1/4
仁科芳雄	1890/12/6	23	1951
W. Heisenberg	1901/12/5	12	1976/2/1
朝永振一郎	1906/3/31	7	1978/7/8
湯川秀樹	1907/1/23	6	1981/9/8

1913 年　日本では 大正 2 年

2/10　護憲派の民衆が議会をとりまく. 桂首相は内閣総辞職を決意

3/16　関西連合憲政擁護大会、大阪で。会衆 5 万人。

6/15　H.A. Lorentz『物理学』、翻訳刊行

6/23　高嶺譲吉：国民科学研究所の設立を提唱、後の理化学研究所

12/27　長岡半太郎：Bohr に書簡： Bohr の原子模型は長岡模型の発展

寺田寅彦：結晶による X 線の干渉（*Nature* に発表）

石原 純：新しい重力場の理論（Sci. Rept. Tohoku Univ.）

運動物体中の電磁場に対する最小作用の原理（Ann. Phys.）

1915　作用量子の普遍的意味（量子条件, Tokyo Math.-Phys. Soc.）

量子の法則と水素原子（Tokyo Math.-Phys. Soc.）

同僚 M. Hansen:　**Balmer 公式**（1884）は出るか？　調べてみたら？

$$\lambda = B\frac{n^2}{n^2-4}, \quad B = 3.6456\times 10^{-7}\,\mathrm{m}$$

W. Ritz の変形 (1908)

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{B}\left(1-\frac{4}{n^2}\right) = \frac{4}{B}\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right) \quad (n=3,4,\cdots)$$

Ritz の予想：　**結合原理** (1908)

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right) \qquad (n=m+1, m+2, \cdots)$$

$$m = \begin{cases} 1 & \text{未発見 — 紫外部,} \quad \text{Lyman 系列} \\ 2 & \text{Balmer 系列} \quad (1884) - \text{可視部} \\ 3 & \textbf{Paschen 系列} \quad (1908) - \text{赤外部} \\ 4 & \text{未発見 — 赤外部,} \quad \text{Blacket 系列} \end{cases}$$

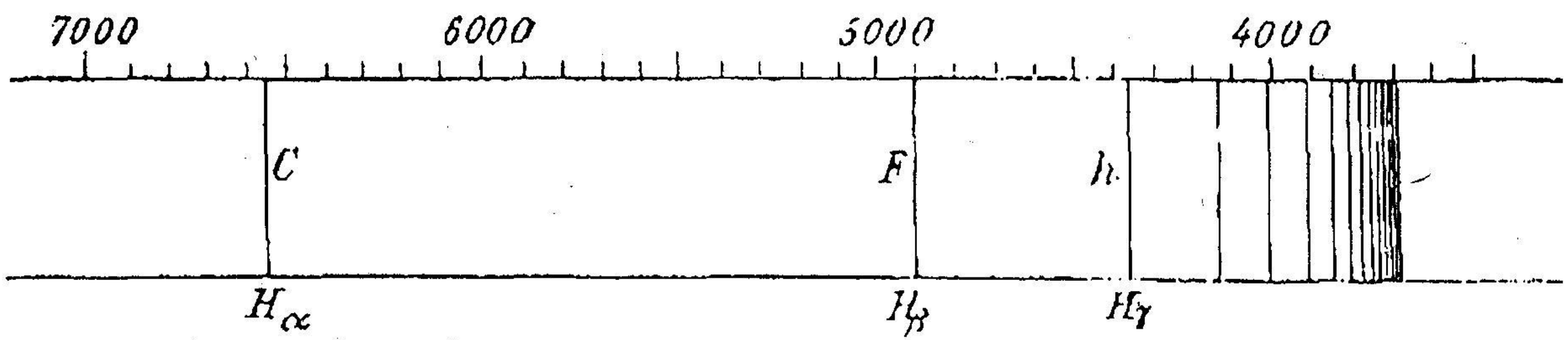
同僚 M. Hansen:　**Balmer 公式**（1884）は出るか？調べてみたら？

Ritz 結合原理 (1908)　**項**の差

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad (n = m+1, m+2, \cdots)$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda}, \qquad cR = c\frac{2^2}{B} = 3.290 \times 10^{15}\,\mathrm{s}^{-1}$$

Bohr の教科書に載っていた.　**Bohr**： Hansen に言われ初めて.



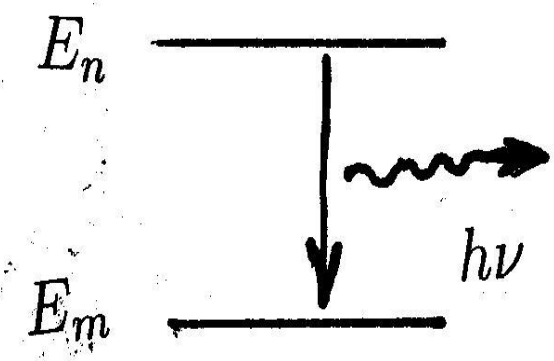
Bohr の使った教科書（ただし、1910 年版）の図

Ritz の結合原理 (1908):

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{cR}{m^2} - \frac{cR}{n^2} \qquad (n = m+1, m+2, \cdots)$$

光量子 $h\nu$ と結びつけた:

$$(*) \qquad h\nu = E_n - E_m = -E_m + E_n$$



こうすると

$$E_n = -\frac{hcR}{n^2}, \quad \text{原子内の電子のエネルギー} \quad (n = 1, 2, \cdots)$$

トビトビ

(*) は Planck も考えた

水素原子の電子：　原子核のまわりを**円運動**、等速

仮定：

1. **定常状態:**

   Newton の運動法則に従う,

   量子条件で選ばれる，　$E_n = -hcR\dfrac{1}{n^2} \quad (n = 1, 2, \cdots),$

   加速度運動でも光は出さない.

2. **量子遷移**

   状態　$n \longrightarrow m \ : \quad E_n - E_m = h\nu.$

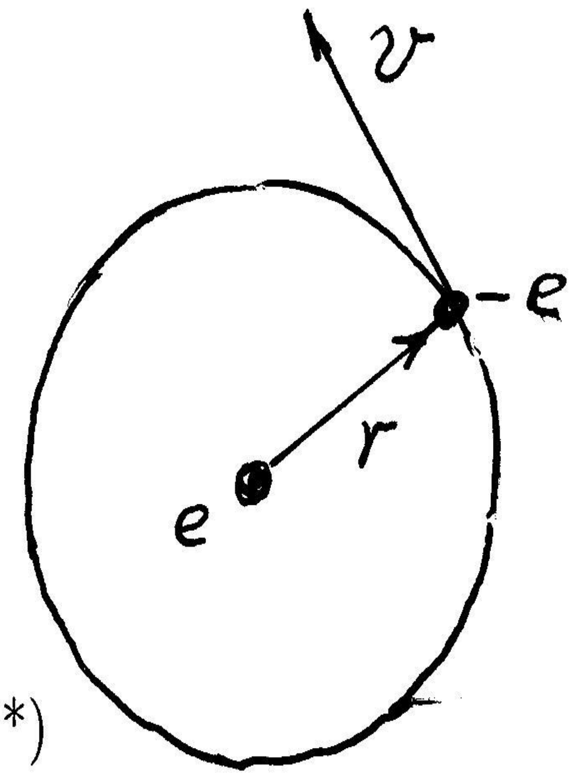
どう考えたか．

定常状態： $\boxed{E_n = -hcR\frac{1}{n^2}}$ $(n = 1, 2, \cdots)$. (*)

(1) **運動方程式**: $\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2}$,

エネルギー： $E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r} = -\frac{1}{2}mv^2$

$= -\frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r}$.



角運動量： $L = mvr$,

エネルギーは： $\boxed{E = -\frac{m}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\frac{1}{L^2}}$. (**)

(*) と (**) を比べて

(2) **量子条件**： $L = nA$, $hcR = \frac{m}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\frac{1}{A^2}$

$$L = nA, \qquad hA^2 = \frac{m}{2cR}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2.$$

$cR = 3.290 \times 10^{15}\ \mathrm{s}^{-1}$ から $\boldsymbol{A}$ をもとめる。

Bohr の用いた値： $\dfrac{e}{m} = 5.31 \times 10^{17}\ \mathrm{e.s.u./g}$

$$e = \begin{cases} 4.65 \times 10^{-10}\,\mathrm{e.s.u.} & \text{(Rutherford)} \\ 4.87 \times 10^{-10}\,\mathrm{e.s.u.} & \text{(Millikan)} \end{cases} \Longrightarrow A = \frac{h}{2\pi}$$

$$h = \begin{cases} 6.26 \times 10^{-27}\,\mathrm{erg \cdot s} \\ 6.76 \times 10^{-27}\,\mathrm{erg \cdot s} \end{cases}$$

Planck (1906) $\quad h \;=\; 6.548 \times 10^{-27}\ \mathrm{erg \cdot s.}$ （『熱輻射論』）

量子条件 $\quad L = \dfrac{h}{2\pi}n = n\hbar \qquad (n = 1, 2, \cdots)$

原子の大きさ： $\quad a_n = 4\pi\epsilon_0 \dfrac{\hbar^2}{me^2} = (0.53 \times 10^{-10}\mathrm{m}) \cdot n^2$

革命的!

定常状態：

×初期条件に応じて運動はさまざま。Newton 力学を否定

量子条件:　恣意的

×電荷が加速度運動すれば輻射を出す。Maxwell 否定

量子遷移：

×輻射の振動数＝波源の力学的振動数、Maxwell の否定

Planck も　$h\nu = E_n - E_m$　としたが, 調和振動子

×因果律, 電子は予め行き先を知って輻射の振動数を選ぶ？

どの準位に行くという理由がない。

Rutherford（1913）, 寺田寅彦（1924）

1913 年, Bohr 理論の全体に対して,

H.A. Lorentz:

あまりに投機的 (speculative) 冒険的. 将来に期待.

P. Ehrenfest:

これが理論なら. 私は物理をやめる. これは怪物だ (1916) .

A. Sommerfeld:

R が出せたのは大成功だが, この理論には疑問がある.

ゲッチンゲンでは, Hilbert を別として,

若者たち — M. Born など — は Bohr 理論を信じていない.

1913, Maxwell 電磁気理論を信奉.

M. von Laue :

すべてナンセンス. Maxwel 理論は正しい.

C.W. Oseen :

原子が存在するためには Maxwell 理論をどう変更する？

W. Wien (1915) :

加速度運動しても輻射しないなんて Maxwell 理論に矛盾.

G.N. Lewis (1916) :

何も引き起こさない運動状態は, 静止状態と同じだ.

原子の多面体モデルを提案.

Bohr 支持

A. Einstein：

R が正しく出たのは偶然とは思えない。He スペクトルの導出は偉大.

A. Sommerfeld（1914）：

興味が日に日に増している. Bohr 理論を楕円軌道に広げる（1916）.

E. Rutherford（1914）：

将来に期待できる第一歩が踏み出された.

R. Millikan（1916）：

定常状態では輻射しないとは，事実を言ったにすぎない.

P. Ehrenfest（1918）：

Bohr 理論の熱烈な支持者となる.

1896, E. Pickering, ξ Puppis から $\lambda = 5411, 4686, 4200$ A

水素原子のスペクトル： 量子数 が 分数？

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{(n_1/2)^2} - \frac{1}{(n_2/2)^2}\right), \quad (7 \to 4), (3 \to 4), (11 \to 4)$$

1912, A. Fowler, 実験室で 4686 A を発生、H と He の混合気体

1913, N. Bohr, **He のスペクトルだ：** $\displaystyle \frac{1}{\lambda} = 4R\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right),$

E. J. Evans, 純粋の He で実験、4686 A を検出（1913 秋）

Fowler: λ が **Balmer 線 とわずかに違う**

Bohr : $\displaystyle cR = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3}$ で $m \to$ **換算質量** $\displaystyle = \frac{m}{1+(m/M)}$

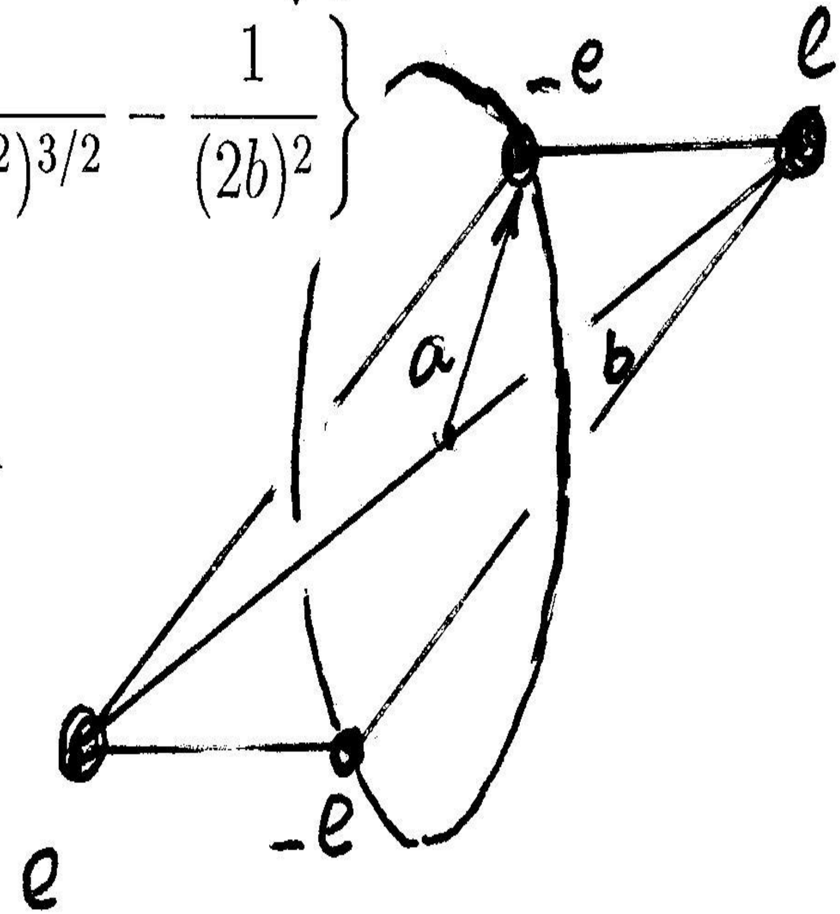
Einstein, Bohr 理論に信頼、深める

水素分子の理論

力の釣合: $$\frac{2a}{(a^2+b^2)^{3/2}} = \frac{1}{(2a)^2}, \quad \Longrightarrow b = \frac{a}{\sqrt{3}}.$$

運動方程式： $$\frac{mv^2}{a} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left\{\frac{2b}{(a^2+b^2)^{3/2}} - \frac{1}{(2b)^2}\right\}$$

量子条件: $L = mva = n\hbar$



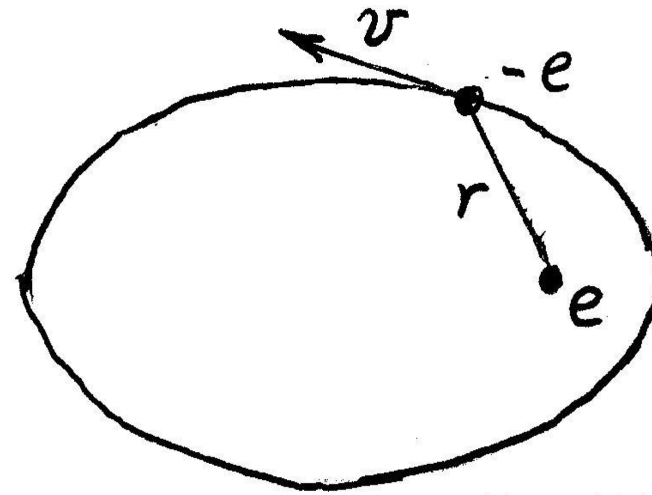
$\Longrightarrow$ 結合エネルギー： $B = 2.70\,\mathrm{eV}$

化合熱： $W = 62$ kcal

Langmuir の実験値: 130 kcal

Bohr 論文の後、**再測定:** 76 kcal. **Bohr を賞賛**

Sommerfeld, 量子条件の拡張 (1916 年 7 月)



楕円軌道

$$\oint p_\phi d\phi = 2\pi L = n_\phi h, \qquad \oint p_r dr = n_r h.$$

水素原子の電子に適用

$$E_{n_r,n_\phi} = -\frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{(n_r+n_\phi)^2} \quad (n_r, n_\phi = \text{整数})$$

これは. Bohr の E_n で　$n \longrightarrow n_r + n_\phi$ としたもの。

Bohr が **円運動だけ考えて正しい** E_n **を得た理由**. 自然は教育的。

Franck - Hertz の実験 (1916)

X 線分光学 (H.G.J. Mosely, 1913-14),　Stark 効果,　Zeeman 効果

1916 秋, Bohr → Rutherford:　ドイツから絶え間ない論文の流れ

Bohr の理論，　認知される — 方法論：　新しい世界へ！

1916　『Bohr 論文集』，ドイツ語訳 刊行

1918　P. Ehrenfest の弟子，　学位論文に Bohr 理論

1919　A. Sommerfeld, *Atombau und Spektrallinien*,

1922　Bohr に **ノーベル賞**,　1921, Einstein,

1923　*Naturwissenschaften*,　特集：Bohr 理論の 10 年,

M. Planck:　理論物理学の比類なき一里塚

一般向けにも

1918　『原子理論』，ドイツの教授, 任意的な仮定, 実験支持

1922　Kramers and Holst,『原子とその構造の Bohr 理論』

1925　スペイン語, オランダ語,　英語　訳

1924　B. Russel,　『原子の ABC』

日本における Bohr 理論の受容

長岡半太郎

1915　量子論 (Quantum Theory) について　「東洋学芸雑誌」

1920　原子の構造,　「哲学雑誌」

1924　懇親会で Kramers-Holst を紹介,　寺田寅彦, 因果律？

石原 純　「思想」

1922　原子の電子的構造論, Bohr により基礎

1923　原子番号 72 の新元素,　Bohr の理論で構造を予言

1925　Bohr の原子構造論,　自然の極致に到達, X 線スペクトル

1925　原子内における電子分布,　Bohr 理論, 周期律

1926　N. Bohr, 原子理論と力学 (*Nature*) の訳

1927　A. Sommerfeld, 原子物理学に関する 3 つの講義

革命後の力学 = 量子力学

電子には 行き先 をきめる理由がない:

行き先は**確率**できまる – Einstein (1916), 遷移確率

定常状態では輻射しない:

基底状態： 輻射できない, エネルギーのより低い状態がない

励起状態： 時刻 t に輻射しないでいる確率 $e^{-\lambda t}$

輻射の振動数 $\neq$ 波源の 力学的振動 の振動数:

定常状態： エネルギーの定まった状態, $e^{-iEt/\hbar}$ で振動

$\Longrightarrow$ 遷移要素は $e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar}$ で振動

軌道運動： $u_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$ の重ね合わせ。

対応原理： $\nu = \dfrac{E_n - E_{n-\tau}}{h} \underset{n\to\infty}{\longrightarrow}$ (古典力学的な基本振動数)τ

Heisenberg：運動学的および力学的関係の量子力的な読みかえ (1925)

古典量子論	量子力学
$x_n(t) = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} X(n,\tau) e^{i\omega(n,\tau)t}$	$X_{n,n-\tau} \exp\left[i \frac{W_n - W_{n-\tau}}{\hbar} t \right]$
n 番目の軌道	$n \to n-\tau$ への **遷移** n と $n-\tau$ は **状態** を表す

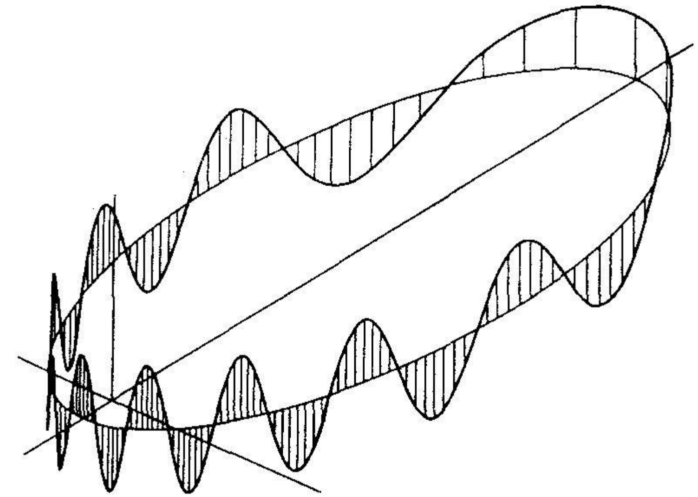
掛け算の規則— 行列算

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} X_{nk} e^{2\pi i (W_n - W_m)t/\hbar} Y_{km} e^{i(W_k - W_m)t/\hbar} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} X_{nk} Y_{km} e^{-(W_n - W_m)t/\hbar}$$

量子条件： $\oint p dq = nh$ | $\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X} = i\hbar\hat{I}$

L. de Broglie: 物質の波動性 (1924)

光の粒子性	物質の波動性
$\varepsilon = h\nu, \quad p = \dfrac{h}{\lambda}$	$\nu = \dfrac{E}{h}, \quad \lambda = \dfrac{h}{p}$



量子条件: $$nh = \oint p ds = h \oint \frac{ds}{\lambda}$$

波動関数 $\psi(x,t)$

運動量 $\hat{p} = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}$: $\quad \hat{p}\psi(x,t) = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)$

$$\exp\left[2\pi i \left\{\frac{x}{\lambda} - \frac{Et}{h}\right\}\right] = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\{px - Et\}\right], \qquad \hat{p}\exp[\cdots] = p\exp[\cdots]$$

座標 $\hat{x} = x$をかける : $\quad \hat{x}\psi(x,t) = x\psi(x,t)$

交換関係 : $\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$

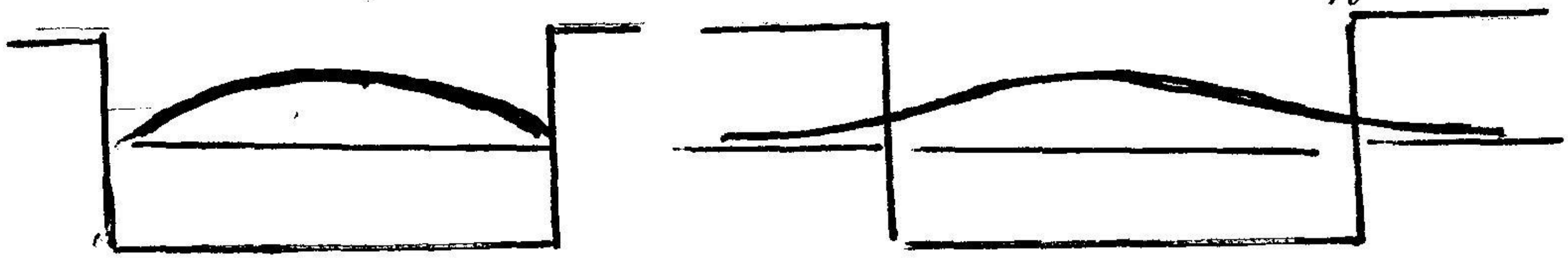
Schrödinger の波動方程式 (1926) : $$\left\{\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right\} u_n(x) = E_n u_n(x)$$

井戸型ポテンシャル

定常状態： Bohr によれば

① 古典力学に従う $\Longrightarrow$ 運動量　$p =$ 一定，壁で反射

② 量子条件：$\oint p dx = nh,$　よって　$\Longrightarrow \lambda = \dfrac{2a}{n}$



量子条件による　　　　量子力学による

合わない

水素原子の電子、もし、井戸型ポテンシャルだったら？

自然は教育的である！

21世紀の量子情報科学

根本香絵・国立情報学研究所

08.12.2013

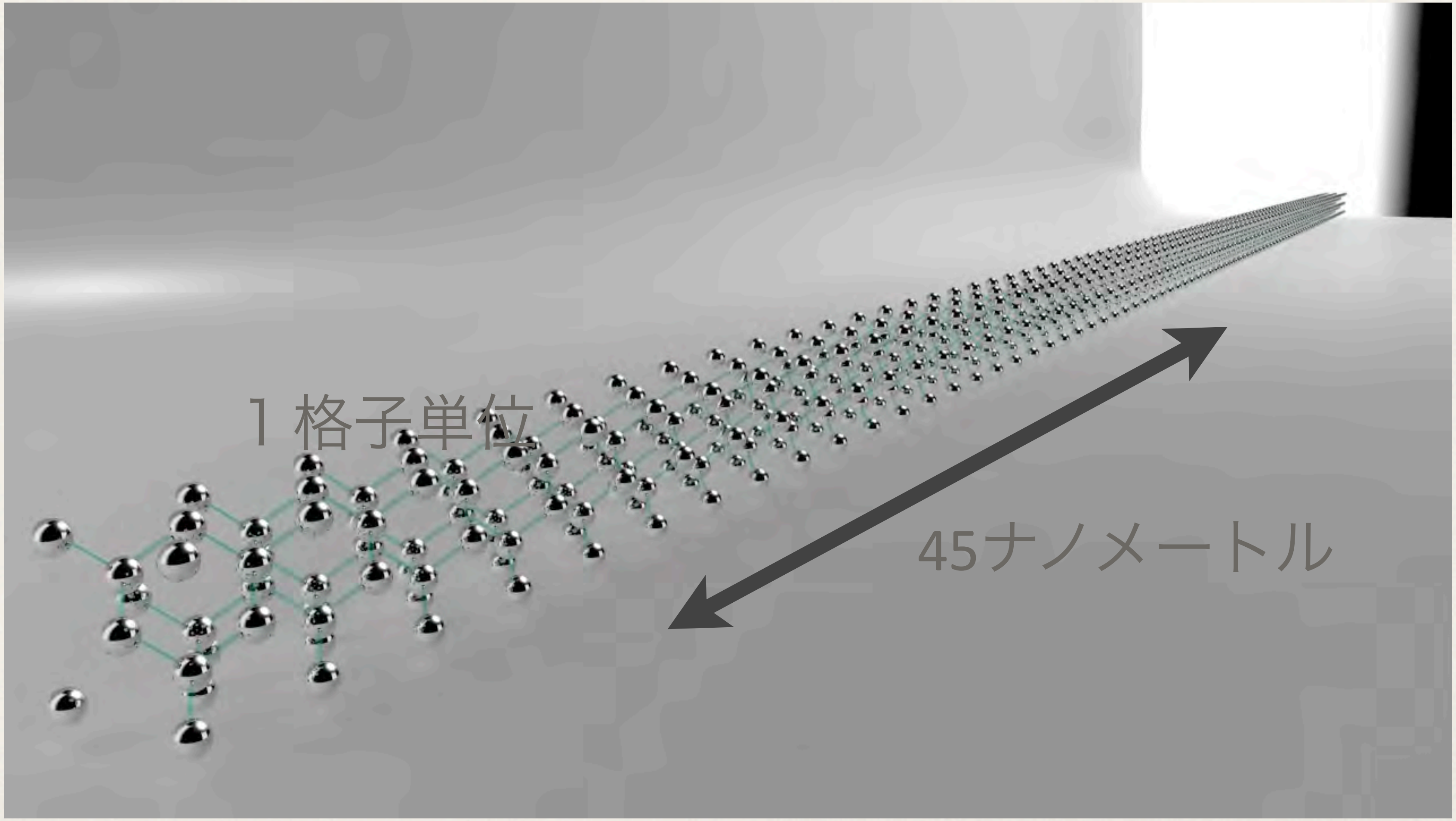
テクノロジー in 10^{-6}

5μm
50cm

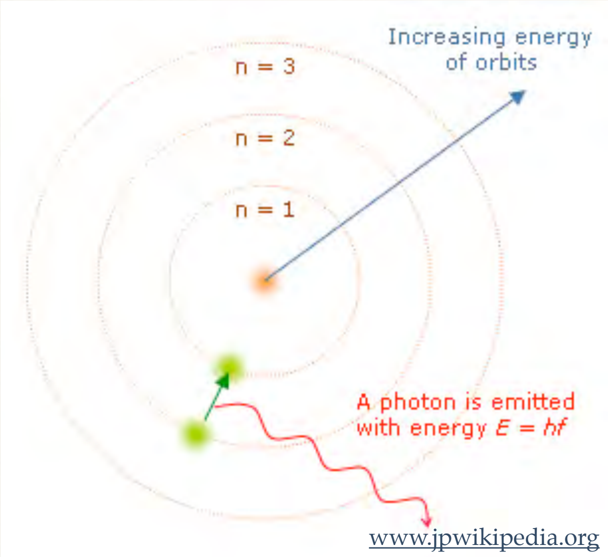
微細構造

どのくらい原子のスケールまで近づいているのでしょうか？

10^{-6}から原子レベルへ

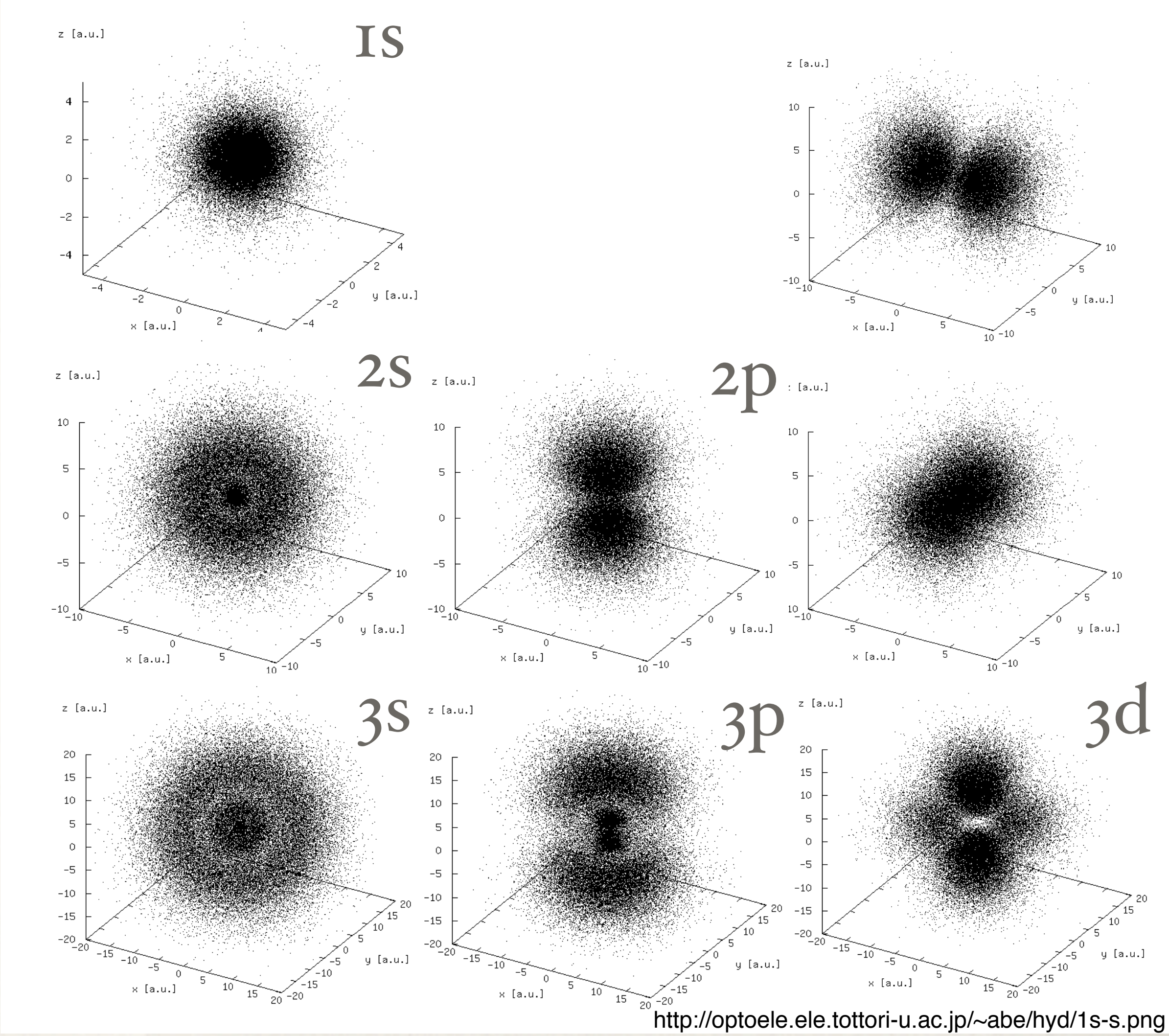


ボーア原子模型



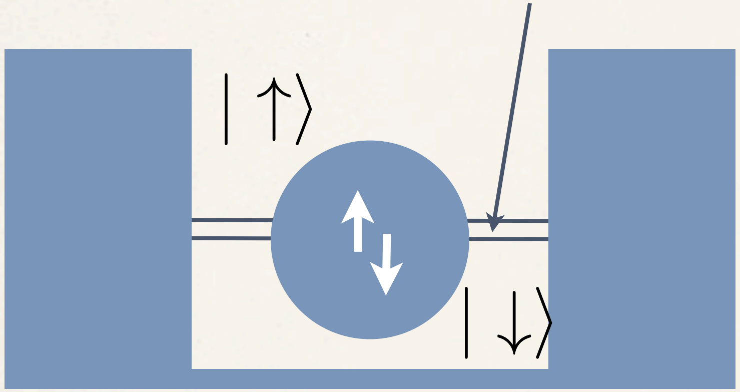
エネルギースペクトルの

<u>離散化</u>



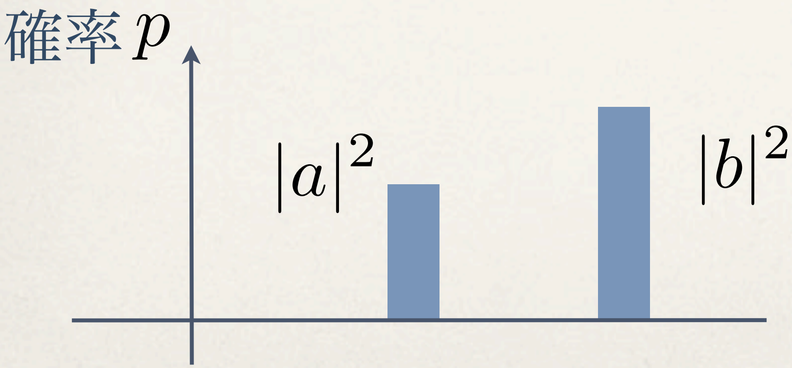
重ね合わせ

離散化したエネルギー状態



スピンの状態

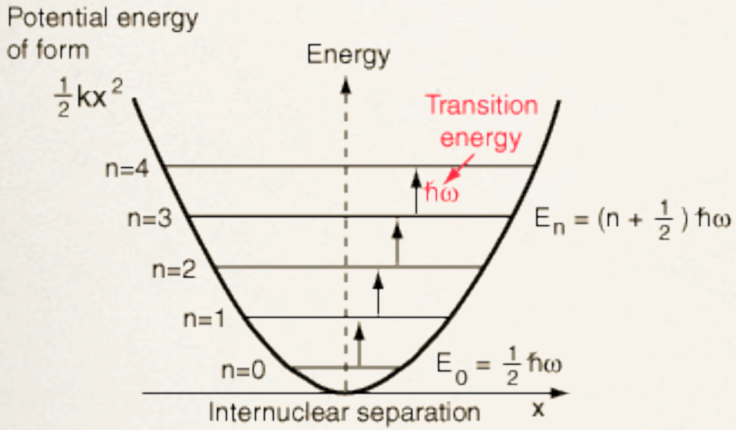
$$|\psi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$$



$$\langle\psi|S_z|\psi\rangle = \frac{|a|^2 - |b|^2}{2}$$

期待値

量子ノイズ

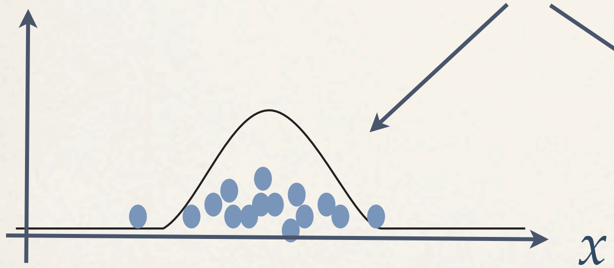


量子ノイズ：原理的に取り除けないノイズ

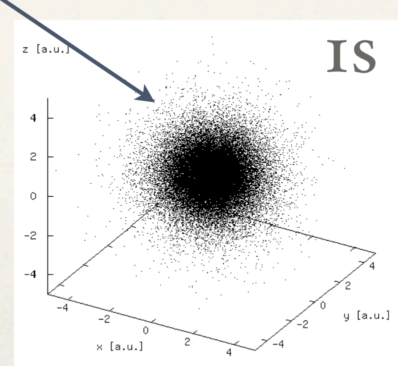
不確定性原理

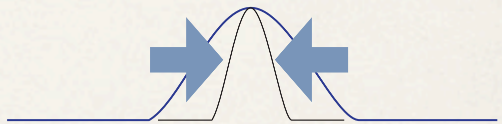
位置と運動量の両方を正確に測定する
ことはできない

ノイズとして見える



確率分布





量子的に考えると量子ノイズを制御できる

http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/hosc2.html

量子ノイズから量子制御へ

$|0\rangle$

最初の状態

$a|0\rangle + b|1\rangle$

重ね合わせ状態

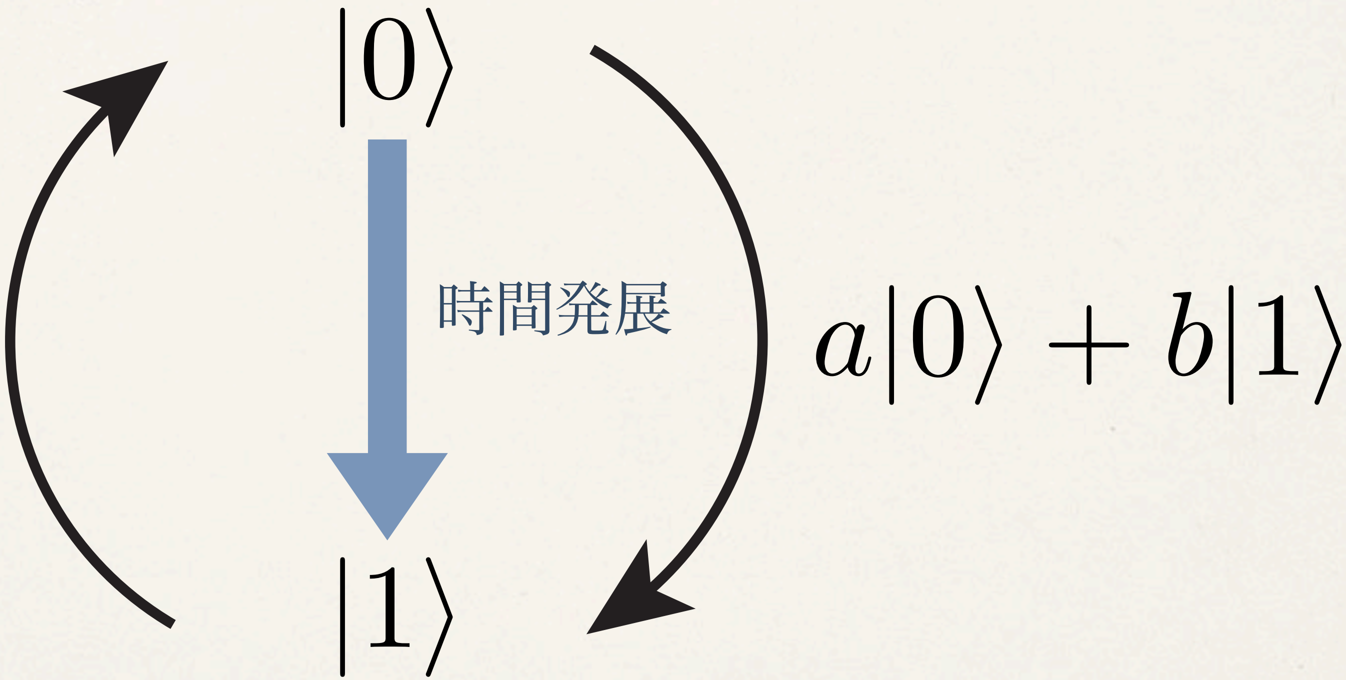
測定する

$|1\rangle$

$|0\rangle$

操作する

量子状態を操作する



量子測定

$$|0\rangle$$

$$\downarrow$$

$$\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow[\text{$|0\rangle, |1\rangle$ へ射影測定}]{\text{測定する}} \begin{array}{ll} |1\rangle & 50\% \\ |0\rangle & 50\% \end{array}$$

量子測定

$$|0\rangle$$

$$\downarrow$$

$$\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow[\frac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}}\text{へ射影測定}]{} \frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$$

100%

量子測定

$$|0\rangle \xrightarrow[\frac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}}\text{へ射影測定}]{} \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

<u>測定によって状態操作ができる</u>

量子計算からみると、量子演算（量子的時間発展）

と量子測定は同じ能力をもつ

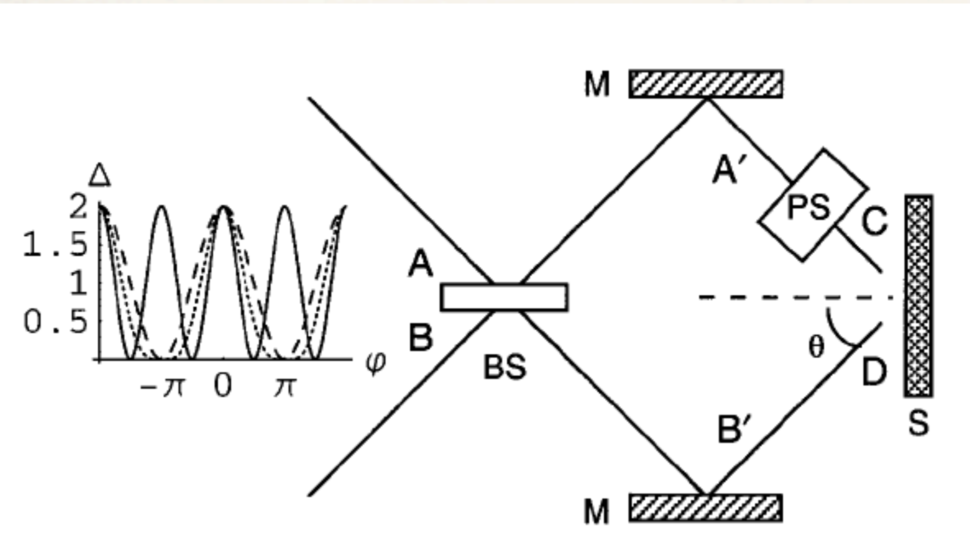
量子測定

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

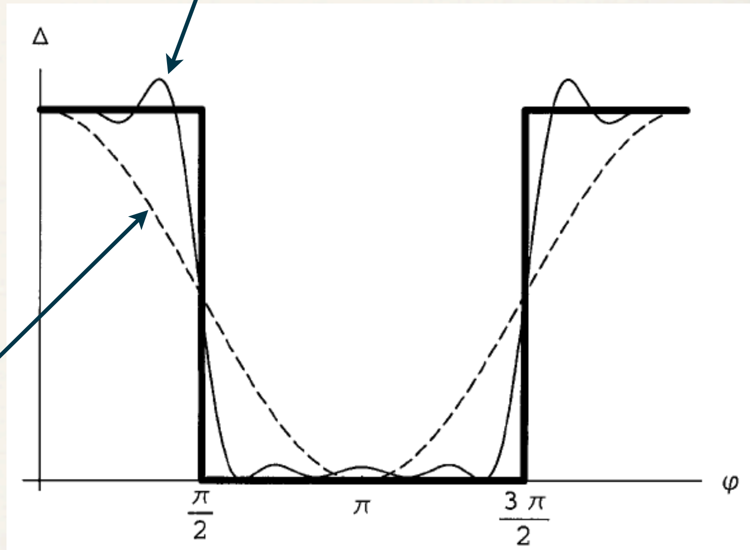
$$\xrightarrow[\,|n\rangle\text{ へ射影測定}\,]{} \quad |0\rangle, \ \vdots, \ |n\rangle, \ \vdots$$

光子数の期待値：$\langle\alpha|n|\alpha\rangle = |\alpha|^2 \equiv \bar{n}$

量子リソグラフィー



量子相関をもった状態
entangled state



量子相関のない状態

Phys.Rev.Lett., 85, 2773 (2000)

なぜ量子系は複雑なのでしょう

ビット数

1　0,1　$\alpha\lvert 0\rangle+\beta\lvert 1\rangle$

2　00,01,10,11　$\alpha_1\lvert 0\rangle_1+\beta_1\lvert 1\rangle_1\ ,\ \alpha_2\lvert 0\rangle_2+\beta_2\lvert 1\rangle_2$

$$\alpha\lvert 00\rangle+\beta\lvert 01\rangle+\gamma\lvert 10\rangle+\varepsilon\lvert 11\rangle$$

3　000,001,010,011,
100,101,110,111

$$\left(\alpha\lvert 0\rangle+\beta\lvert 1\rangle\right)^{\otimes 3} \Rightarrow \sum_{j=0}^{7} c_j\lvert j\rangle$$

4　$2^4=16$

5　$2^5=32$

6　$2^6=64$

n　2^n　$\sum_{j=0}^{2^n-1} c_j\lvert j\rangle$

量子系の複雑性

Can a quantum system be probabilistically simulated by a classical universal computer? *...the answer is certainly, No!*

— Richard P. Feynman (1982)

$$\left|\underbrace{000,\ldots,00}_{n\ \text{qubits}}\right\rangle \xrightarrow{\text{Time evolution}} \sum_{j=0}^{2^n-1} c_j\,|j\rangle$$

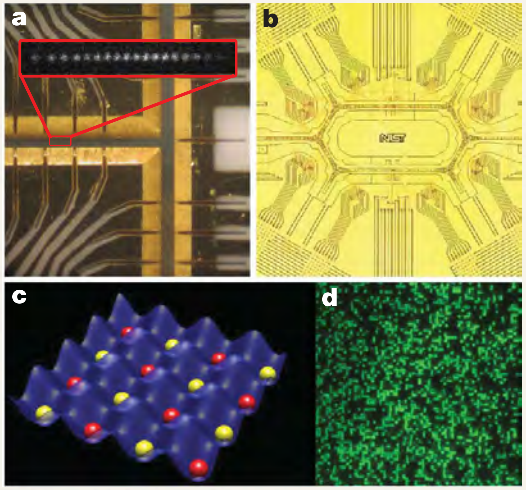
2^n個の基底状態

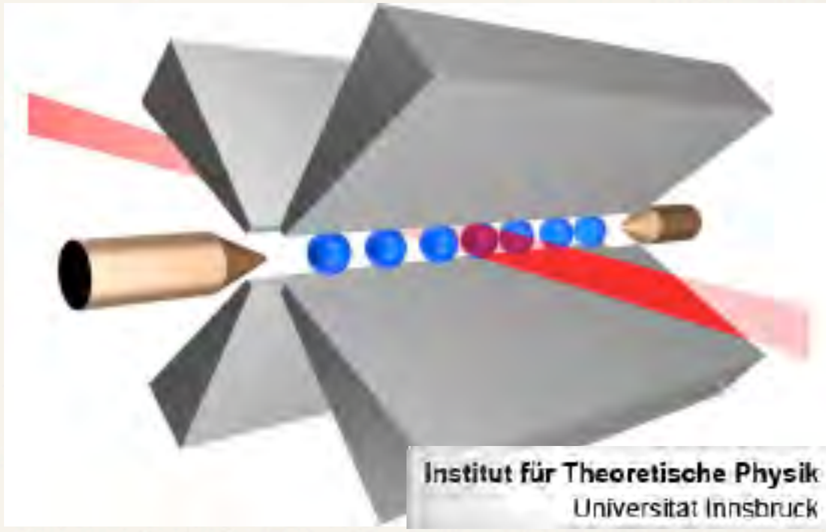
2^n個の係数

（指数的な増加）

イオン・原子

REVIEWS NATURE|Vol 464|4 March 2010





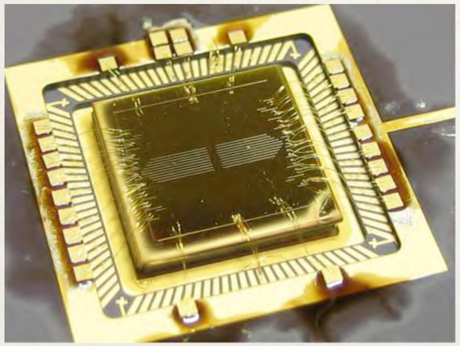
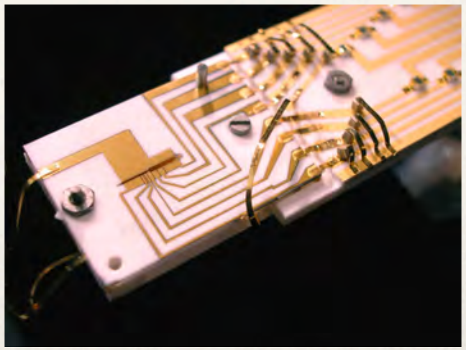
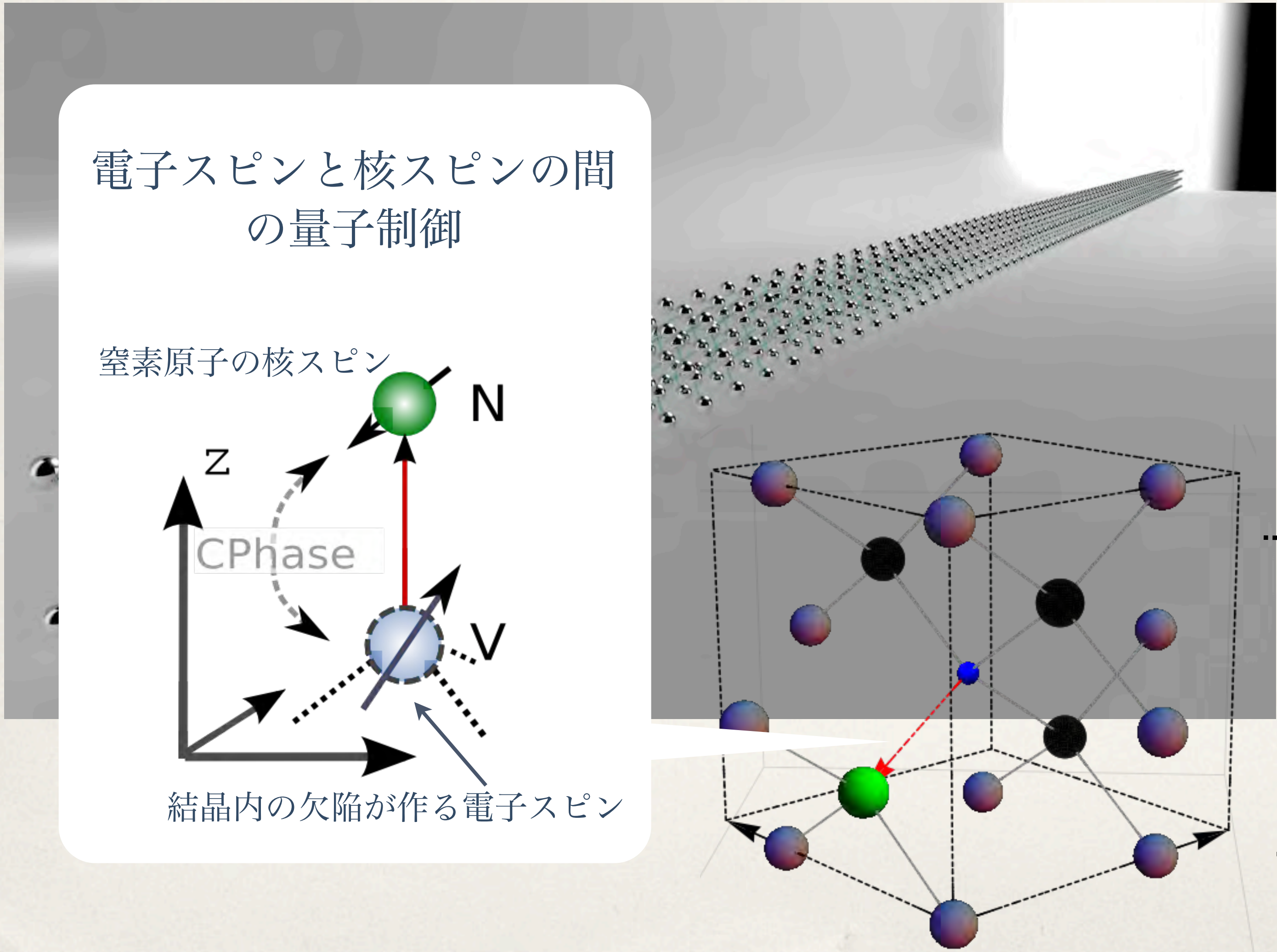


Photo © Oxford Ion trap group

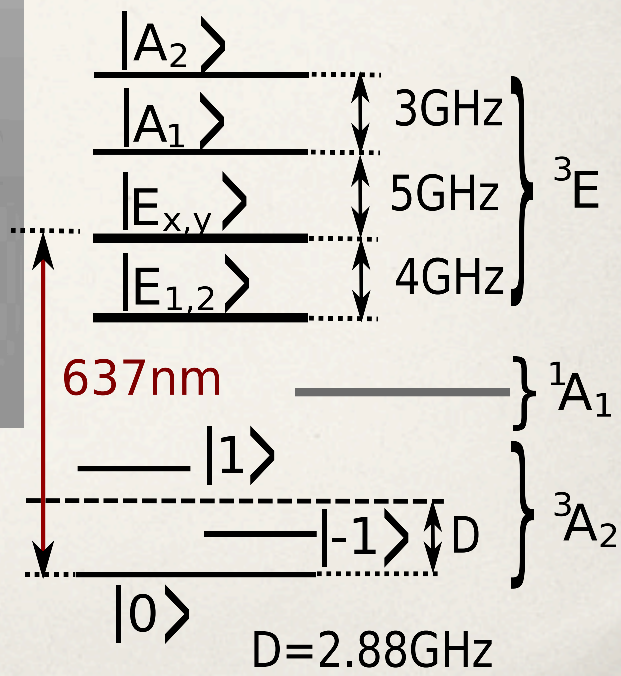


Credit: J. Jost/NIST

ダイヤモンド



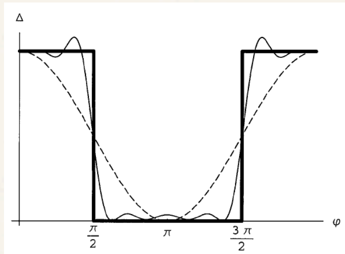
電子スピンと核スピンの間
の量子制御
窒素原子の核スピン
N
Z
CPhase
V
結晶内の欠陥が作る電子スピン



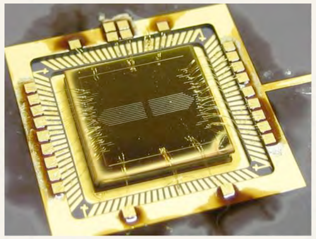
|A2〉
|A1〉
|Ex,y〉
|E1,2〉
3GHz
5GHz
4GHz
3E
637nm
1A1
|1〉
|-1〉
D
3A2
|0〉
D=2.88GHz

量子情報技術とは

- 様々なレベルでの量子制御により、従来の技術原理では原理的に到達できない性能を可能にする。
    - 高精度の測定
    - 複雑系のシミュレーション
    - 高性能の計算
    - 安全な通信…など



LIGO@US



東京QKDネットワーク@NICT

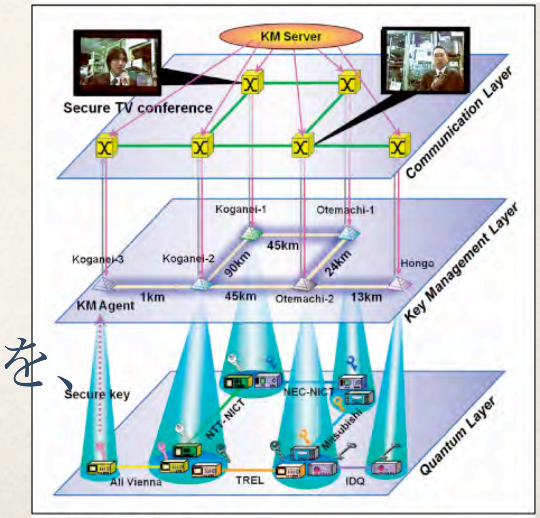
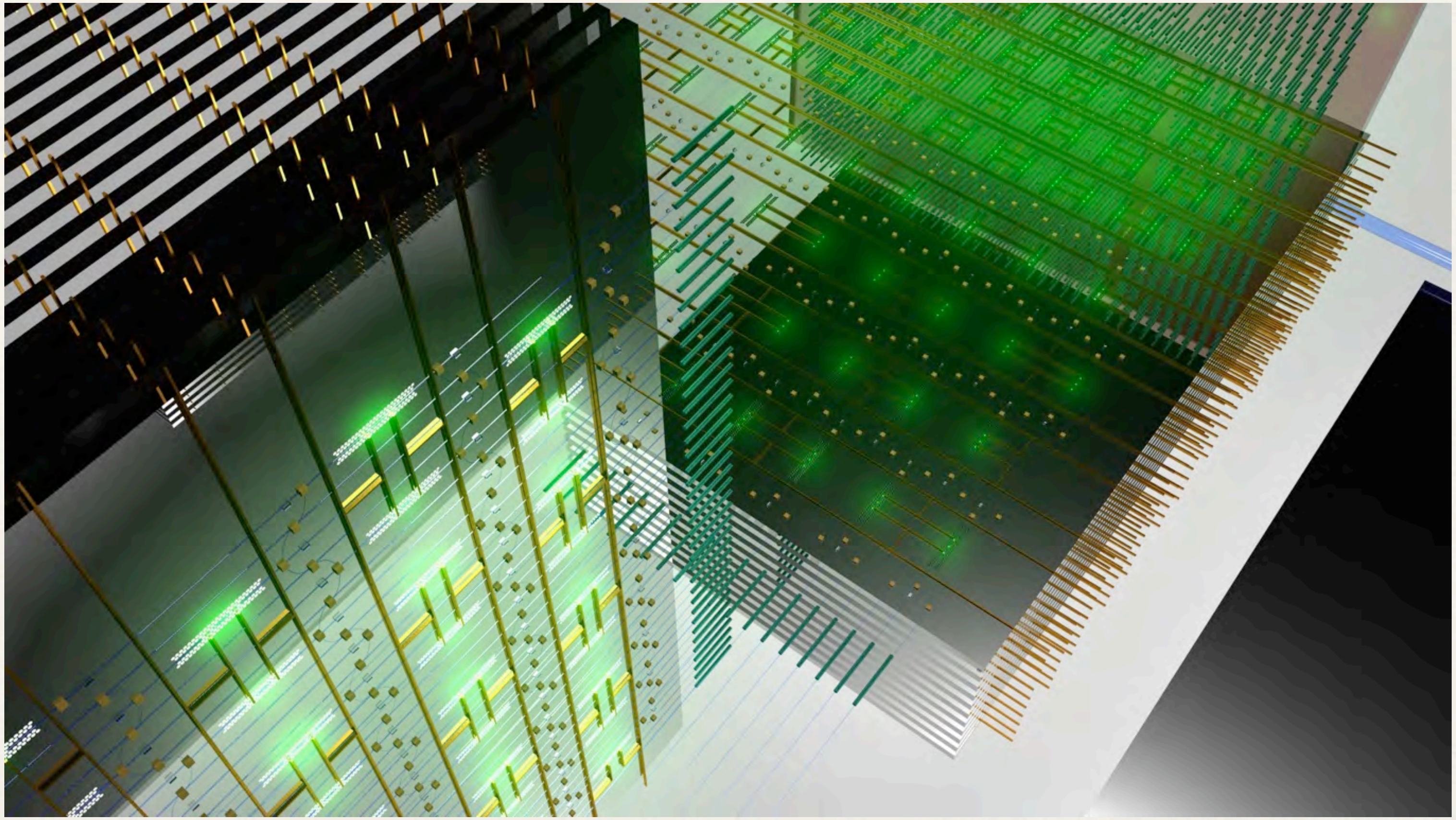


図3● 量子暗号ネットワークレイヤ構造

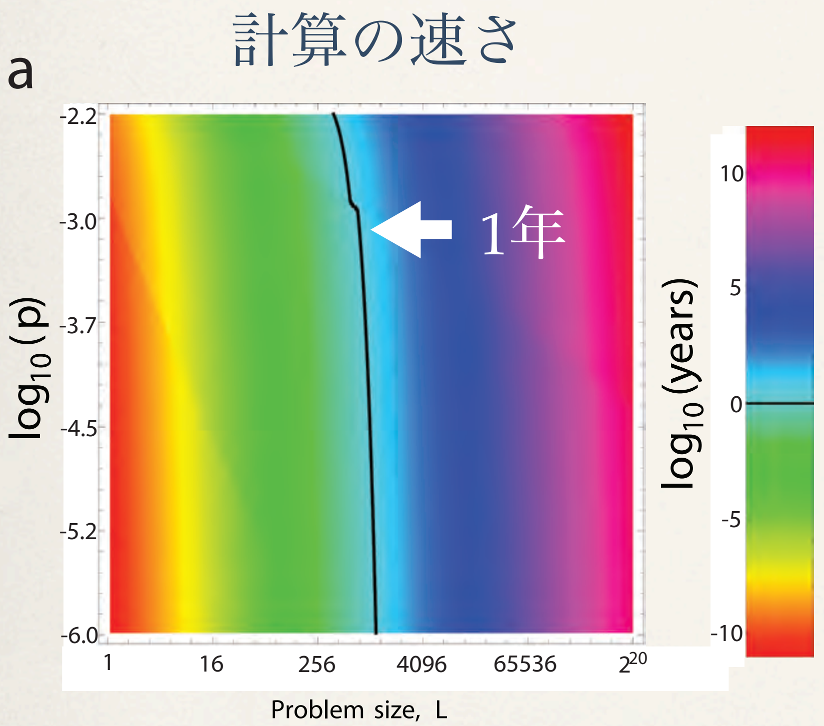
量子情報技術：従来の方法では原理的に出来ないことを、

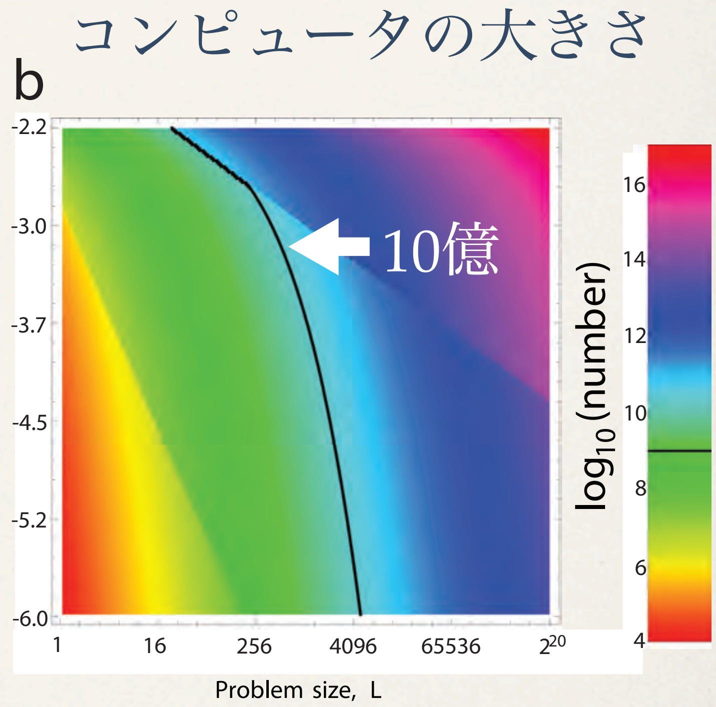
様々なシーンで可能にする

量子コンピュータの中身？



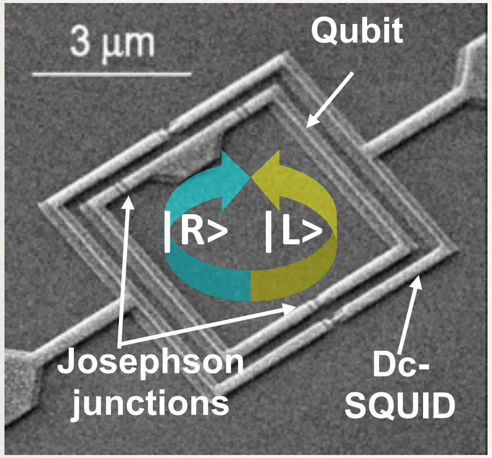
量子情報科学・技術の発展

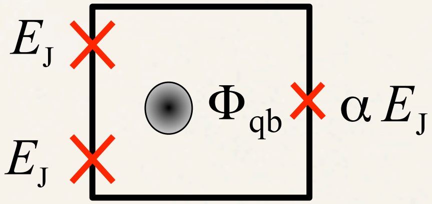


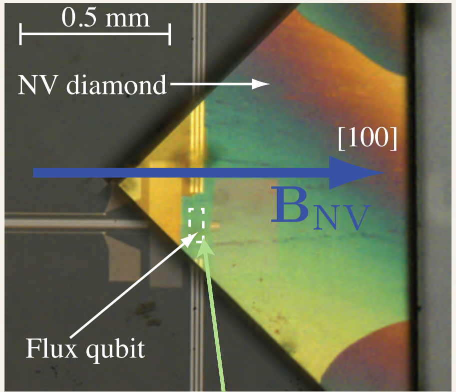


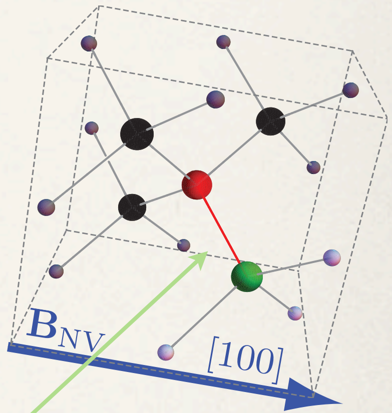
768–ビットRSA modulus、数年

広がる量子情報領域　：超伝導素子







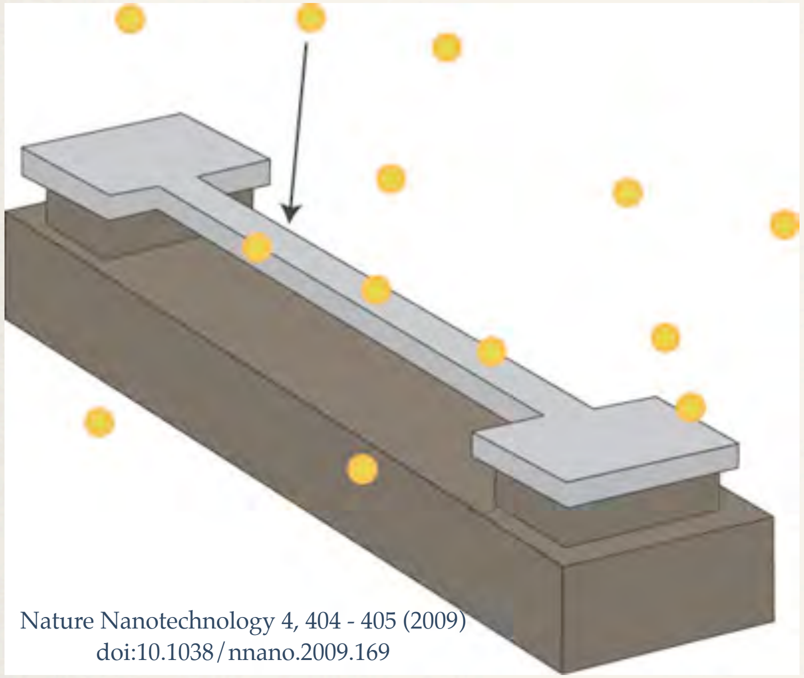


10^6ものNVセンターのアンサンブル

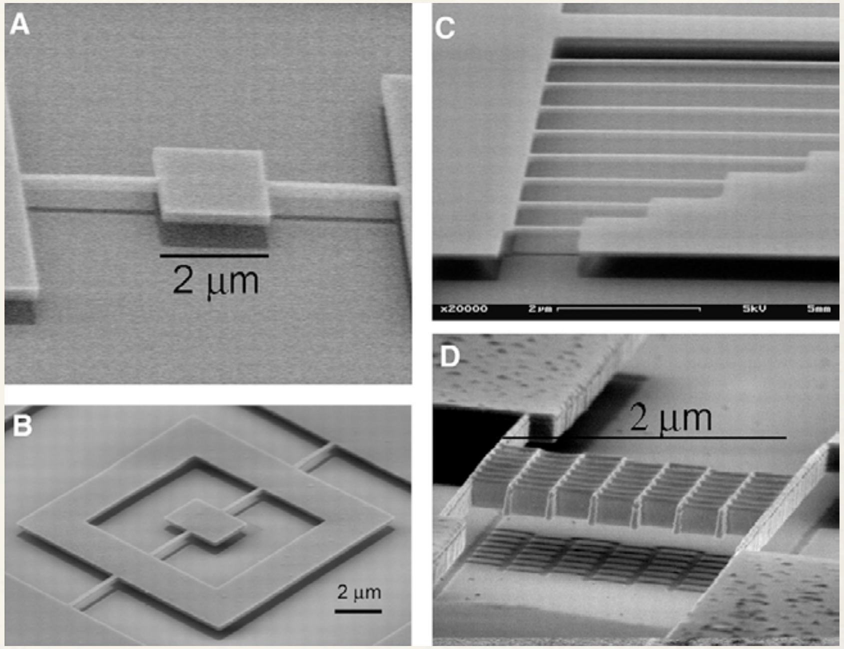
２つの巨視的な物理系の間で量子がやりとりできる

これまでは実現出来なかった量子領域へ

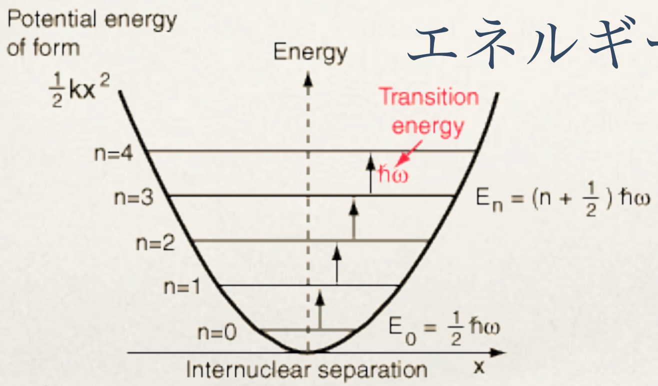
量子力学系



Nature Nanotechnology 4, 404 - 405 (2009)
doi:10.1038/nnano.2009.169



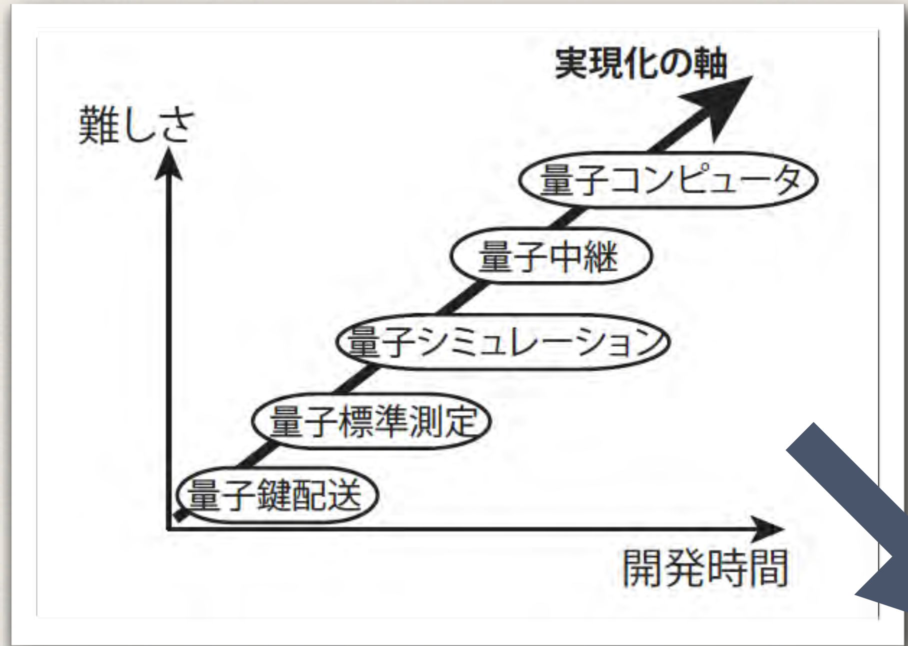
Science 24 November 2000: vol. 290 no. 5496, 1532-1535

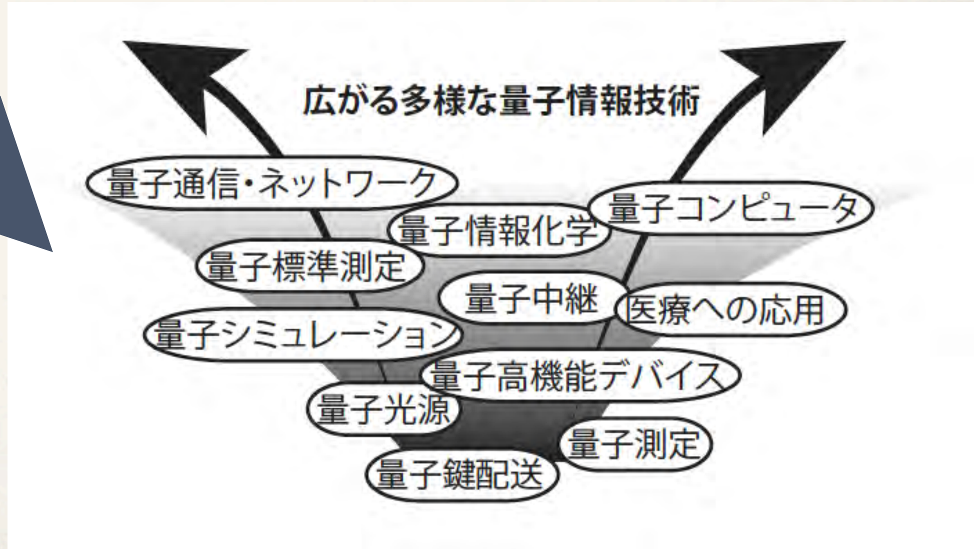


エネルギーレベルの離散化

新しい物理の出現

量子情報科学・技術の発展





新しい技術が拓く、新しい科学・技術