

化学

(化学結合論)

平成19年 5月10日

津田 栄

ラウエ斑点とは何か？

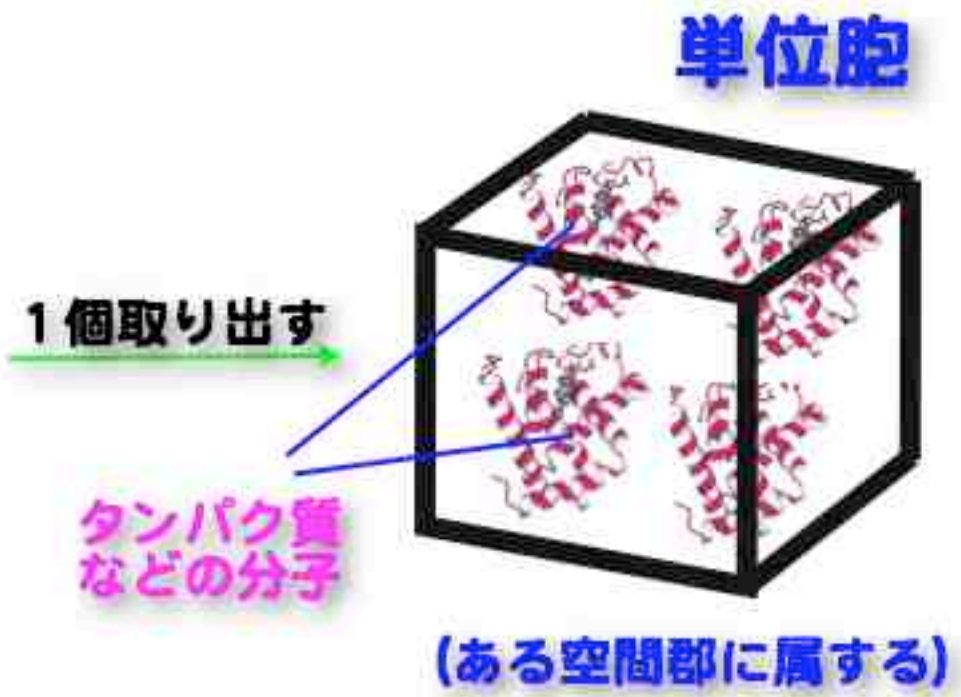
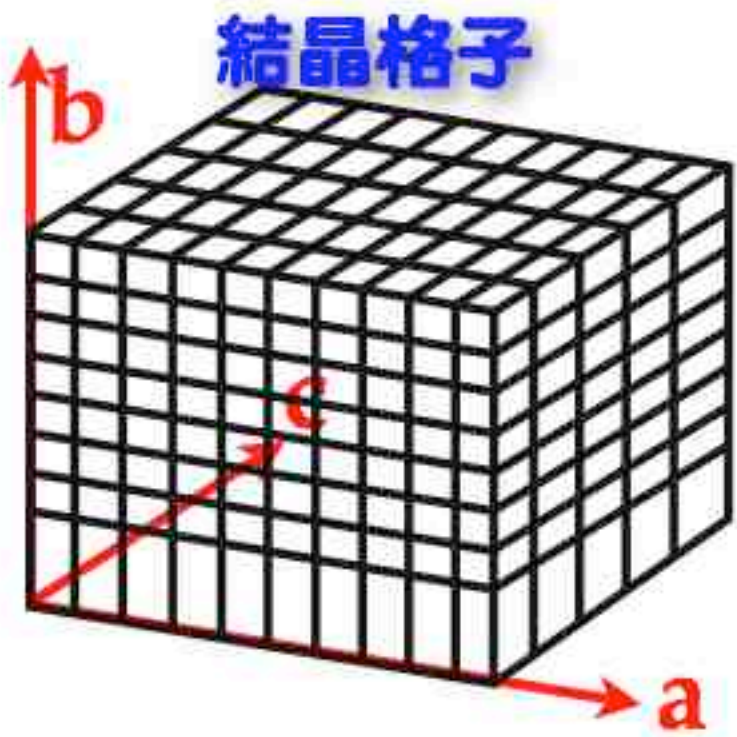
放射光利用研究促進機構 財団法人高輝度光科学研究センター

SPRING-8



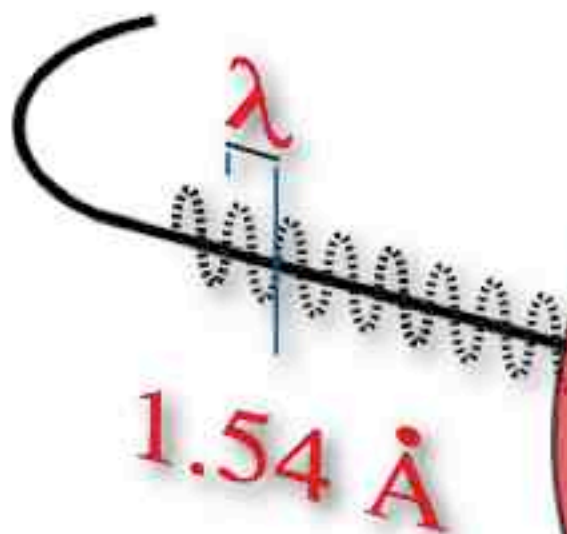
〒679-5198 兵庫県佐用郡三日月町光都 1丁目 1-1



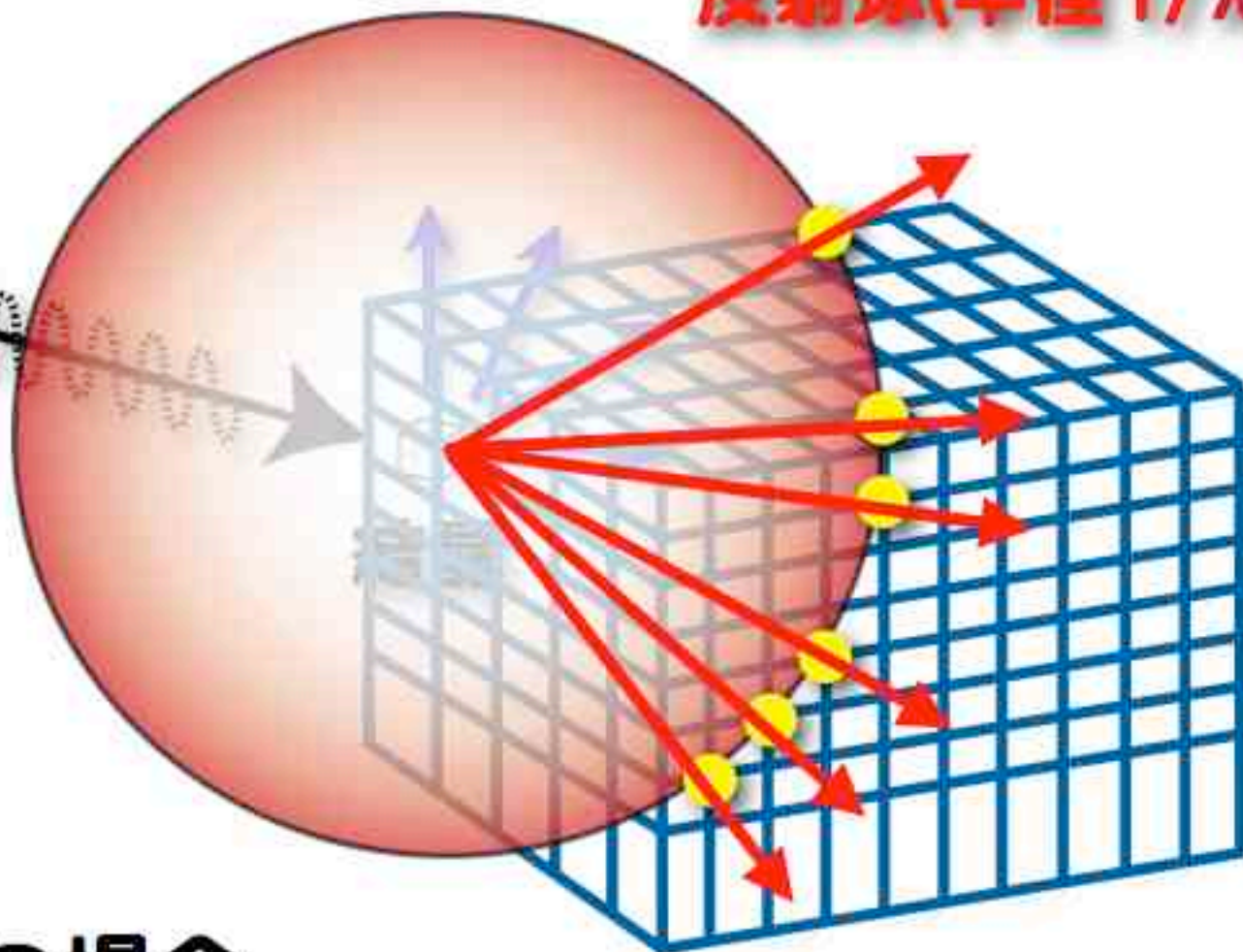


X線回折の原理

電子線(X-ray)

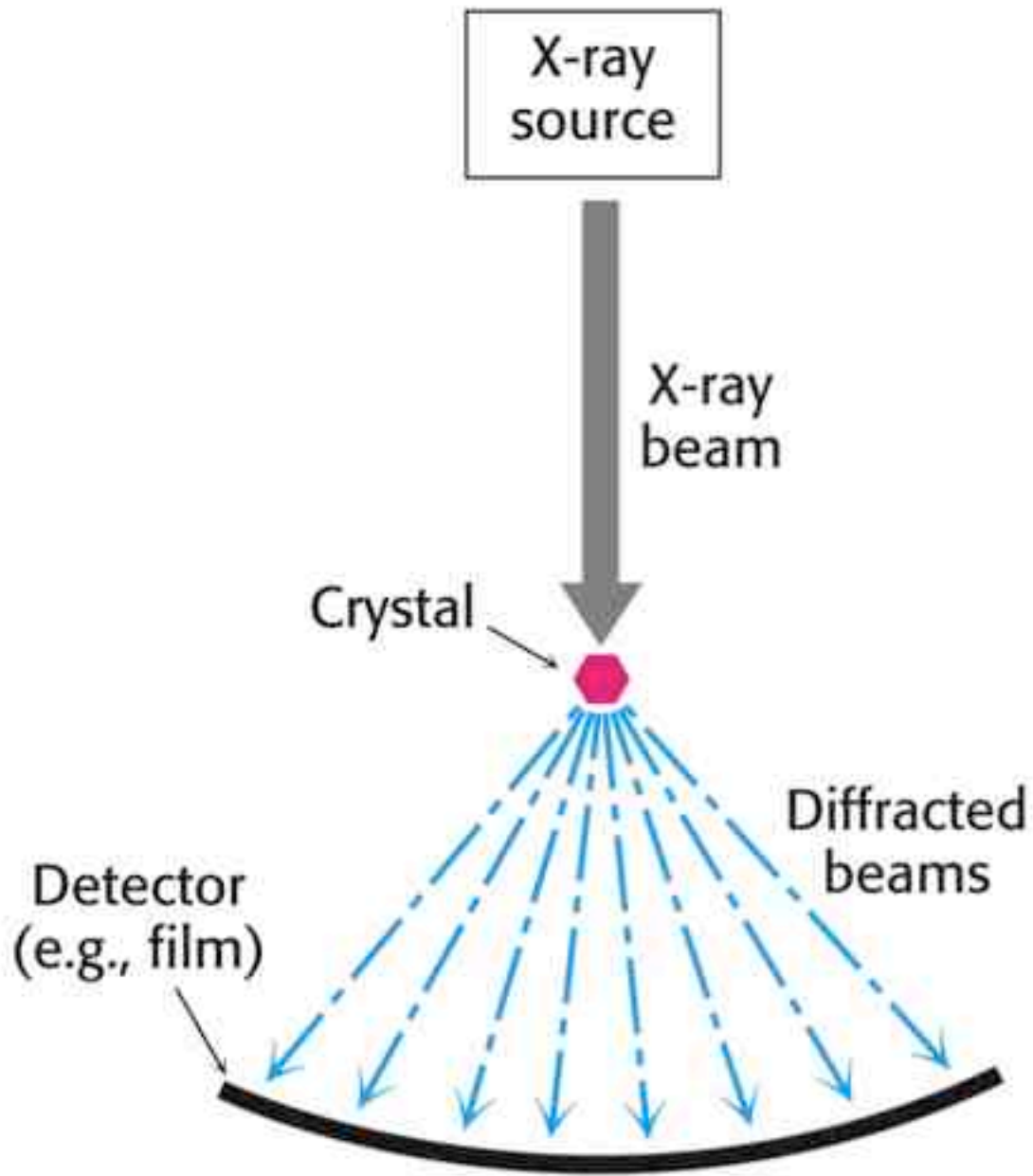


反射球(半径 $1/\lambda$)

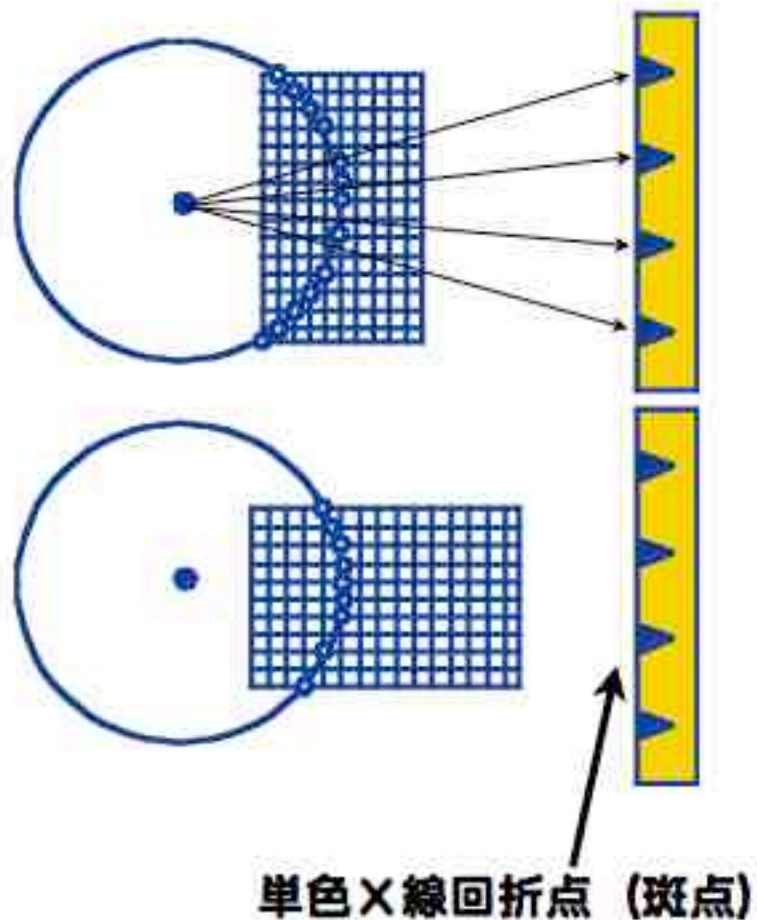


単色X線法の場合

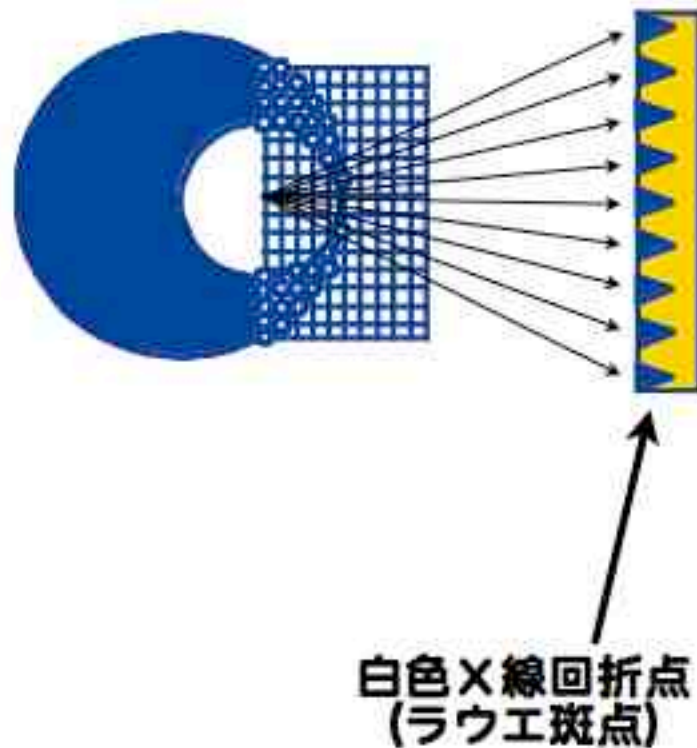
逆格子



単色X線法



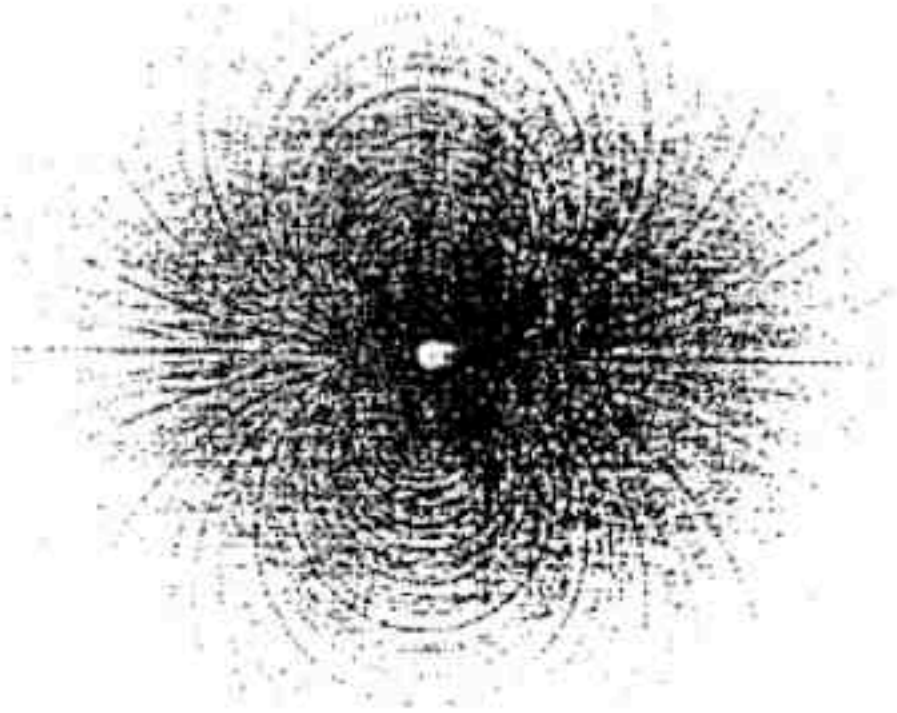
白色X線法 (ラウエ法)



単色X線回折点 (斑点)



白色X線回折点
(ラウエ斑点)



量子力学の本を読んでいて 分からなくなること

- 「電子」の説明をしていた途中で「光」の説明に話が変わり、さらには「輻射光」や「電磁波」「原子核」「X線」といったものの説明が始まる。
- 挙げ句の果てに、「光電子」「熱電子」というモノの説明が始まる。

“量子”のはなしは何処へ？

で、結局“量子力学”って何？

光 (電磁波)、原子核、電子



ぜんぶ量子力学的性質をもつ
関係者一同

チーム・バチスタというか
SMAPのようなもの

《 超重要 》

量子力学の勉強

II

” 渡鬼 ” を観るようなもの

橋田壽賀子ドラマ
渡る世間は鬼ばかり



ちなみに光というのは電磁波の1つである。電磁波には、光 (赤外線、可視光、紫外線)、電波 (長波、短波、FM波)、X線、 γ 線などの種類がある。

“量子” は単独で使われる言葉ではない。量子というモノは無い。

量子力学、エネルギー量子、光量子、量子化、量子数などの複合語として使われるときに、始めて意味をもつ。

“量子力学”とは

一義的には、光(電磁波)、原子核、電子などの超微粒子の世界を支配している力学といえる。

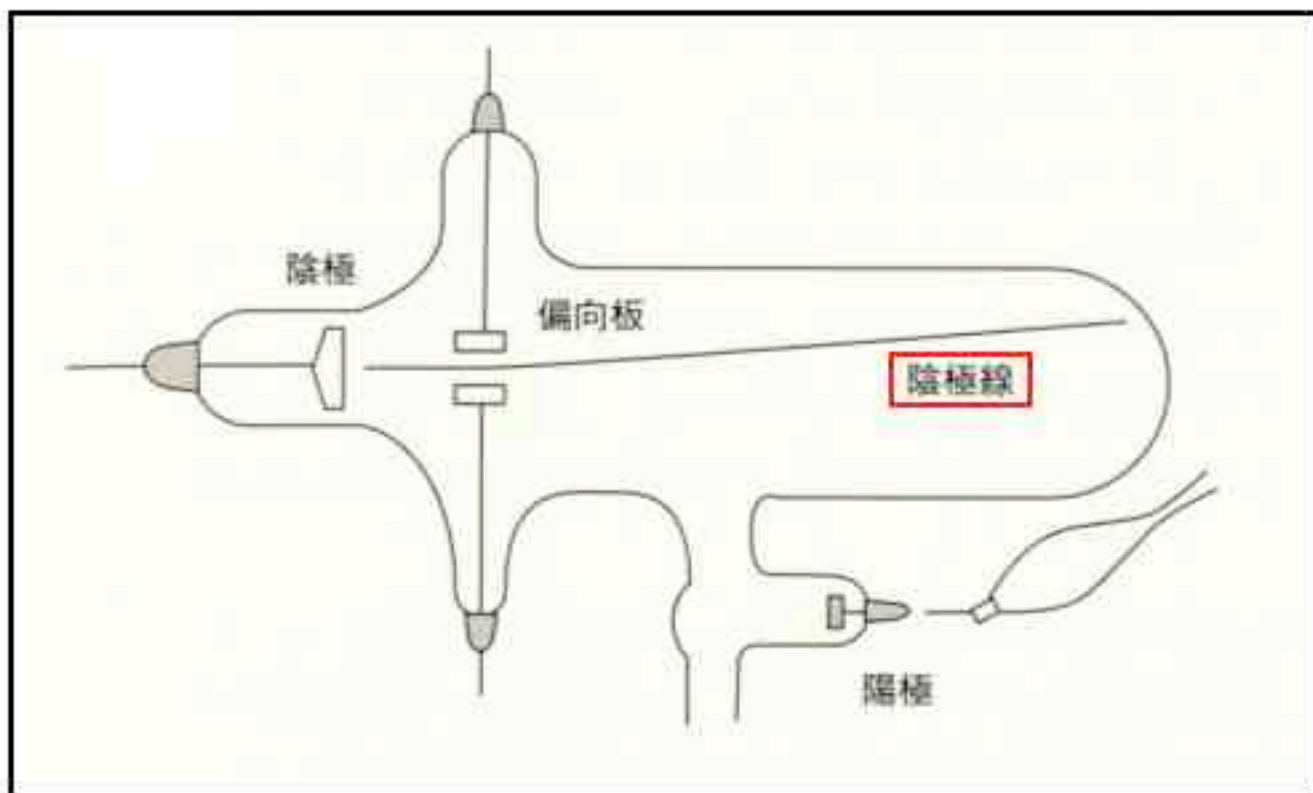
しかし、量子力学はじつは古典力学を包含している。即ち、特別な条件($h\nu=0$)を満たしている量子力学が、古典力学なのである。

つまり、“量子力学”とは

全宇宙を支配している力学のことである。

真空放電（陰極線）の実験

放電管の概略図



電子の電荷： $-1.60218 \times 10^{-19} \text{ C}$

電子の質量： $9.1094 \times 10^{-31} \text{ kg}$

ガラス管に2つの電極（陽極と陰極）を封入し、管内の空気を引いて真空にしたもの。電極間に電圧をかけると、真空中を電流が流れることが分かった。その後、陰極から何らかのビームすなわち陰極線が出ていることが明らかになった。

J.J.トムソンは陰極線が電場や磁場によって曲げられることに注目し、放電管内の陰極線が電荷をもった粒子であることを明らかにした。その粒子の比電荷（電荷÷質量）は陰極がどんな物質であっても一定であったことから、あらゆる物質の中にもこの粒子が含まれているであろうことが推測された。これが電子の最初の発見である。

電子の電荷と質量は、その後ミリカンの実験により具体的に明らかにされた。

産業革命が進むと鉄の需要が急速に増加した。自然界において鉄は純粋な状態では存在していなくて、実際には鉄鉱石という形で産出される。この鉄鉱石にコークス（石炭）を混ぜて高温で溶かし、鉄鉄（せんてつ）を取り出すのが通常の工程である。この鉄鉄は不純物である炭素を3~4.5%も含んでいるので比較的もろい。このため、鑄造をしたり加熱して鍛えるなどの加工をして強度を高めなければならない。

溶鉱炉が画期的に進歩したのは、19世紀後半、右図のようなベッセマー転炉（1856年）やジューメンスとマルタンの平炉の発明からである。これらの炉の特徴は、融解した鉄鉄に多量の空気を送り続けて余分な炭素を燃焼させ、含有炭素量を0.03%程度まで減らす点にある。

鋼炉が発明されてから約10年後の1870年、ドイツは普仏戦争でナポレオン3世率いるフランス群を敗り、莫大な賠償金と鉄鉱石を豊富に産出するアルザス・ロレーヌ地方を手に入れた。これを機に、ドイツは工業国家を目標にかけ、ベルリンに国立物理工学研究所を設立した。所長には当時最高の物理学者キルヒホッフが就任した。

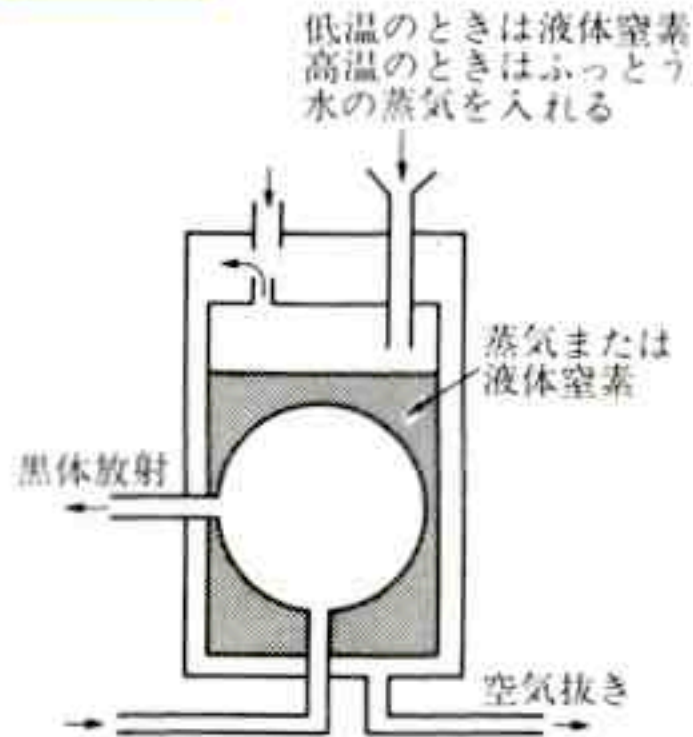
所長に就任したキルヒホッフの仕事は、熱力学を用いて理想的な熱放射を行う物体という概念を確立することであった。

例えば鉄と鋼の色は室温ではまったく異なっているが、これらを溶かして高温にすると、両方とも同じように白熱する。ただ、見かけは同じ白色でも、その振動数スペクトル分布は鉄と鋼で異なっている。このスペクトル分布に統一的な説明を加え解析するための科学技術が必要とされていた。



黒体輻射（空洞放射の問題）

装置の例



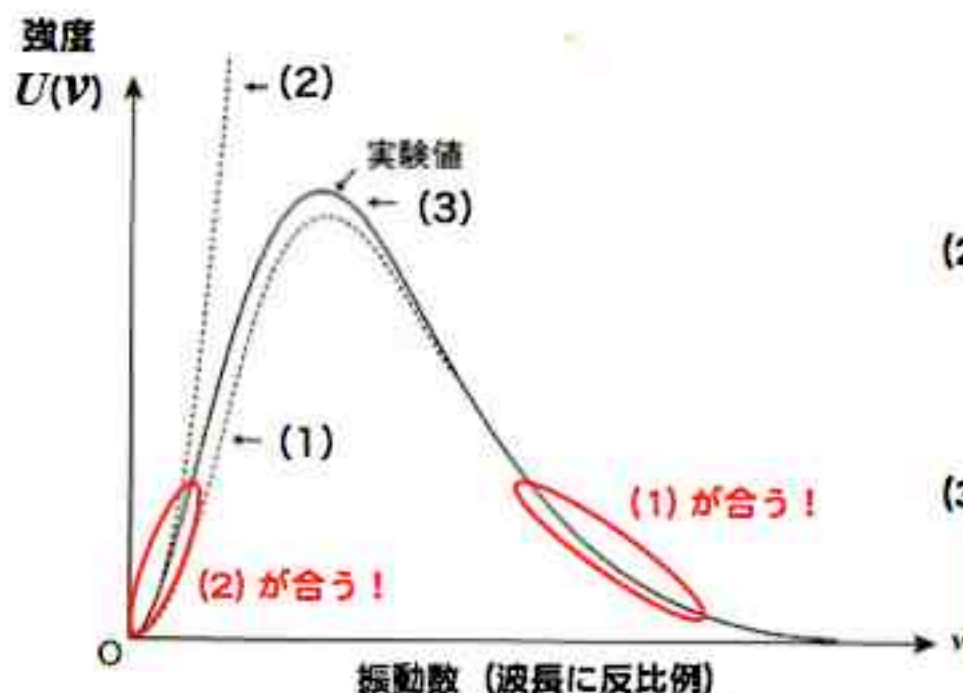
(a) Lummer-Pringsheim の装置
(二重壁の金属容器)

注. 現実には完全な黒体は存在しないが左図の様な”空洞”はほぼ理想的な黒体と見なすことができる。

黒体(空洞)の温度によって、放射される電磁波(光)の分布が決まる

黒体輻射 (空洞放射の問題)

黒体輻射スペクトルの振動数とエネルギーの関係



(1) 1896年にウィーンが提案した式

$$U(\nu) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{k\beta\nu}{e^{\beta\nu/T}} d\nu$$

振動数の高い所
だけが合う。

(振動数 ν から $\nu + d\nu$ の間にある電磁波の数)

(2) 1900年頃にレイリーとジーンズが提案した式

$$U(\nu) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT d\nu$$

振動数の低い所
だけが合う。

(3) 1900年頃にプランクが提案した式

$$U(\nu) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{k\beta\nu}{e^{\beta\nu/T} - 1} d\nu$$

すべての所で合う!

プランクは、(3) 式をさらにきれいにまとめることを試み、ボルツマン定数 k とレイリーのパラメータ β の積 $k\beta$ をひとまとめにして、記号 h で表した。この h が「プランク定数」である。 $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ その後、プランクはなぜこの式が実験結果に合うのかを考え続けた。

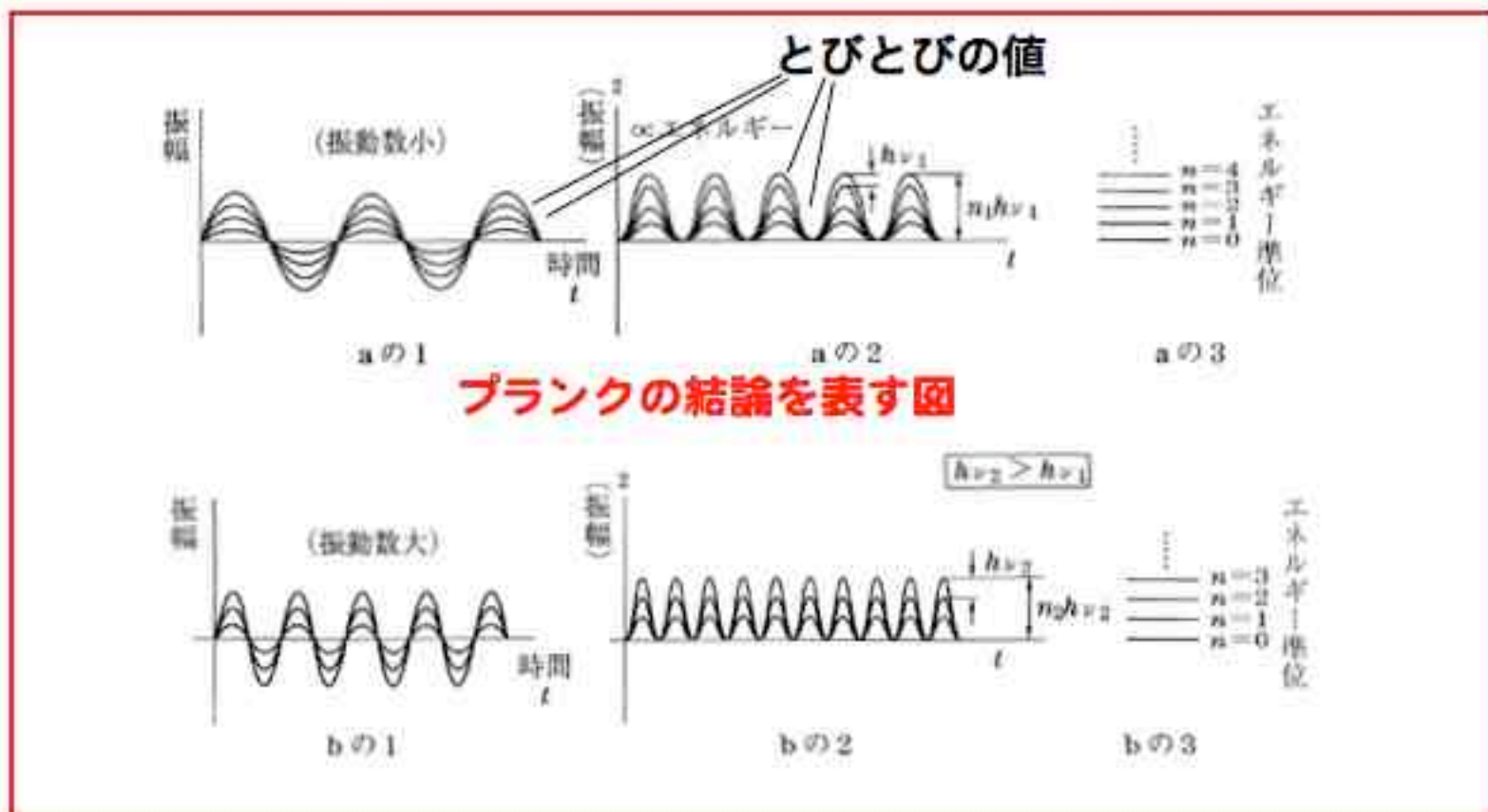
プランクが至った結論 (エネルギー量子)

ν という振動数をもつ電磁波のエネルギー E は連続量ではなく $h\nu$ という量の整数倍

$$E = nh\nu \quad (n = 0, 1, 2, 3 \dots)$$

の値 (とびとびの値) しかとることができない。

$h\nu$ をエネルギーの1つの単位とみなし、エネルギー量子と名づけた。





エネルギー量子という考えを初めて唱えたプランク(1858~1947)。電磁波のエネルギーが不連続な値をもつという結論に至った。



当時の物理学者は、エネルギーが不連続量であるとするプランクの考えをまったく受け入れなかった。



“光量子”という考えを用いればプランクが発見したものの意味を明快に説明できると発表した26歳のアインシュタイン(1879~1955)

アインシュタインの光量子仮説

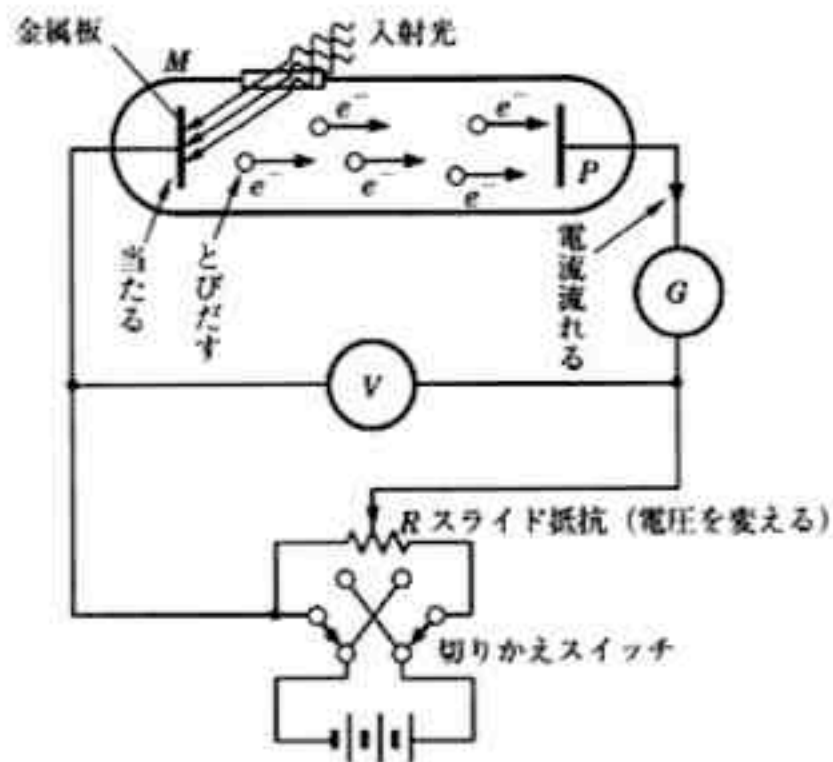
光は波ではなく、1つ1つが $h\nu$ というエネルギーをもった粒子(光子、光量子)である。光が波のように振る舞うのは、光子の集団の統計的な結果を観測するからである。

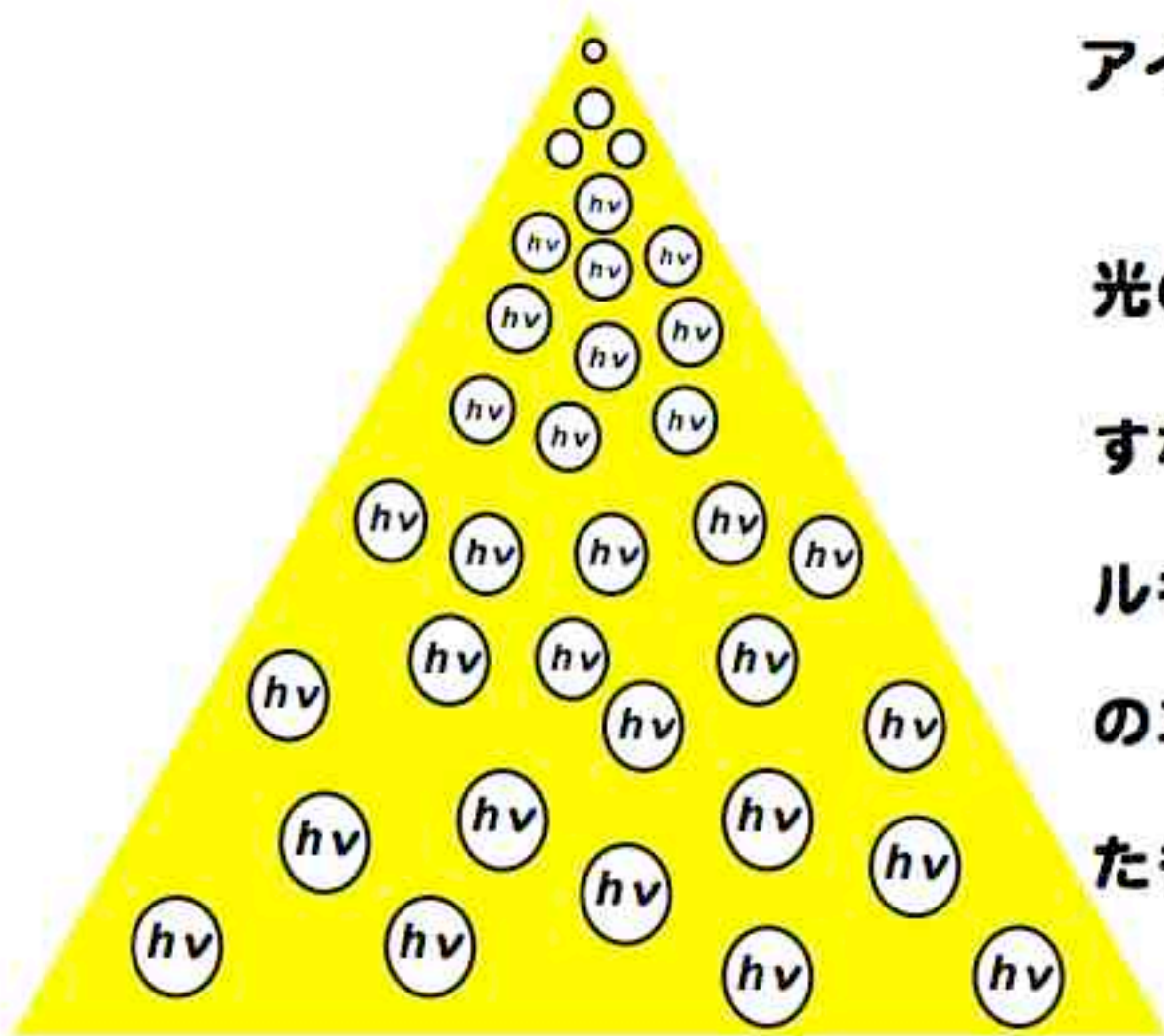
光電効果

金属の内部には自由に動ける電子(自由電子)が存在する。自由電子は通常では外に飛び出せない。しかし例えば亜鉛に紫外線を当てると電子は紫外線からエネルギーをもらって外部に飛び出してくる。この現象を光電効果といい、出てくる電子を光電子という。一方、赤外線では、どんなに光度の大きい赤外線を当てても金属から光電子は出てこない。

即ち、ある波長よりも長い波長の光では、どんなに強い光を当てても電子は飛び出してこない。しかし限界波長よりも短い波長(大きい振動数)の光ならば、光度の弱い光でも直ちに光電子が飛び出してくる。

光電効果を調べるための実験の模式図





アインシュタインの光量子仮説

光のエネルギー E は、 $E=nh\nu$ 。

すなわち、1個あたり $h\nu$ のエネルギーをもった光子(=プランクのエネルギー量子)が n 個集まったものである。

光子数が増える = 光の強度 (明るさ) が増す