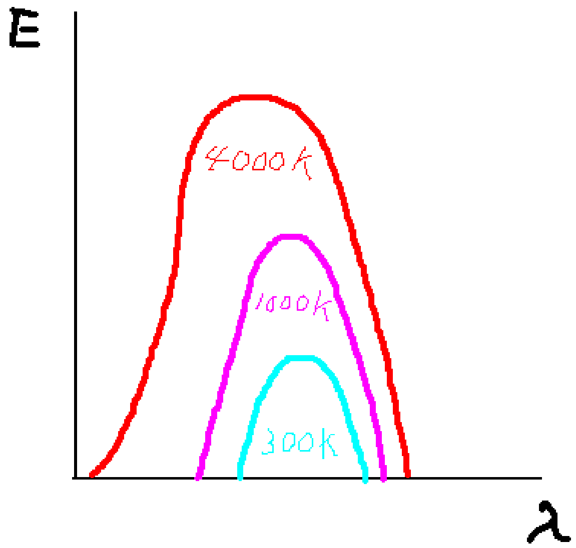
①･完全黒体

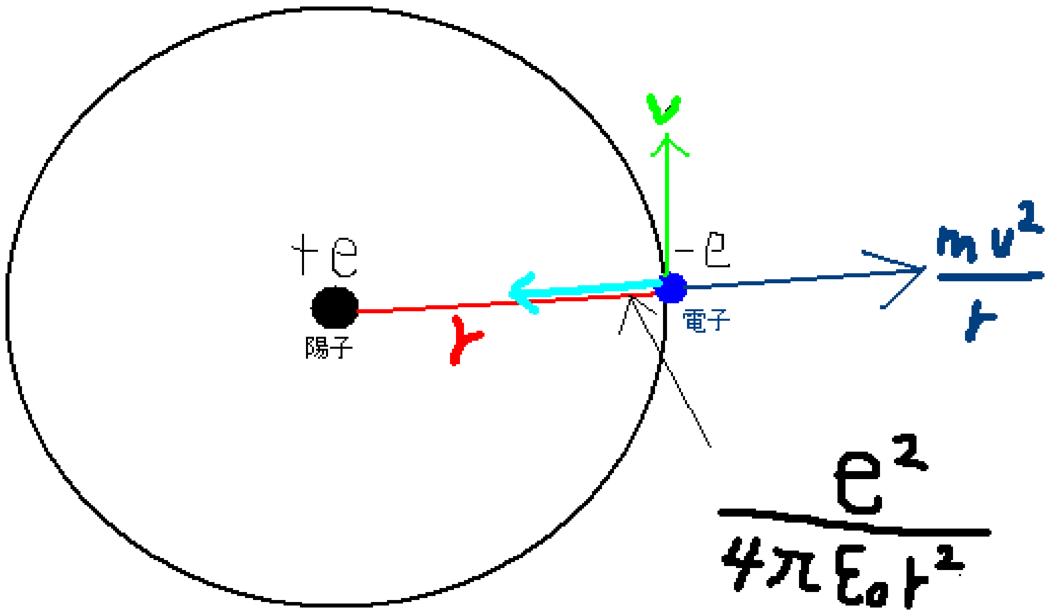
19 世紀後半から、緊迫する世界情勢の中で、ドイツは製鉄工業の発展に力を注いだ。溶鉱炉中の溶鉄の温度とそこから発する光（熱放射）の関係を調べるなかで、それ以前から、熱した金属の発する光の波長は広範囲に分布することが知られていた。物質は自身が吸収する光と同じ波長の光を発することがわかると、W.Wien は溶鉄を「全ての光を吸収する真っ黒な物体」と考えたのである。(1895 年)



上図は、温度との関数で表した熱放射のエネルギー分布である。
放射エネルギーが最大となる波長は、黒体の温度上昇に従い短くなることがわかる。これに対し、様々な理論的説明がなされた。

紫外部破局
熱せられた球のなかにはいろいろな波長で振動している光の波があると考えられる。これらには、波長に関わらず一様にエネルギーが分配されるため、一定の波長帯域に収まる光のエネルギーは、その範囲にある光の波の数とそれぞれの波に分配されたエネルギーの積で表される。波長の短い波ほど、僅かに波長の異なる波が多く存在すると考えられるため、短波長の照射光のほうが強度が強くなると考えられる。
ただしこの考えは長波長帯域の挙動に対しては合致しなかった。長波長帯域の電磁波を紫外線と呼ぶことから、これを紫外部破局という。

②･Bohr の原子モデル



遠心力とクーロン力の関係から、以下の等式が成り立つ。

$$\frac{m\mathrm{v}^2}{r}=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \quad \cdots(1\text{-}1)$$

角運動量 mvr に対し、以下の等式が成り立つとする。

$$m\mathrm{v}r=n\left(\frac{h}{2\pi}\right)$$

すなわち、

$$\mathrm{v}=\frac{hn}{2\pi\mathrm{mr}} \quad \cdots(1\text{-}2)$$

(1-1)より、

$$m\mathrm{v}^2 r=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

(1-2)を代入すると、

$$m\left(\frac{hn}{2\pi\mathrm{mr}}\right)^2 r=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

式を整理して、

$$\frac{h^2mn^2}{4\pi^2m^2r}=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$\frac{1}{r}=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{4\pi^2m^2}{h^2mn^2}=\frac{Ze^2\pi m}{\varepsilon_0 h^2n^2}$$

$$r=\frac{n^2\varepsilon_0h^2}{\pi me^2Z} \quad \cdots(1\text{-}3)$$

自然数 n に対する軌道半径 r の値を r_n とすると、

$$r_n=\frac{n^2\varepsilon_0h^2}{\pi me^2Z} \quad //$$

次に、電子のもつ全エネルギーについて考えよう。

運動エネルギーTは、

$$T=\frac{1}{2}m\mathrm{v}^2$$

ポテンシャルエネルギー（位置エネルギー）Vは、

$$V=-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

電子のもつ全エネルギーEは、これらの和として表される。

$$E=T+V=\frac{1}{2}mv^2-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad \cdots(2\text{-}1)$$

（1-1）より、これを変形して、

$$m\mathrm{v}^2=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad \cdots(2\text{-}2)$$

（2-1）に（2-2）を代入すると、

$$E=\frac{1}{2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}=\frac{-Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

自然数nに対するエネルギーEの値をE_nとし、（1-3）を代入すると、

$$E_n=-\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2\pi m}{\varepsilon_0 h^2 n^2}=-\frac{Z^2e^4m}{8\varepsilon_0^2h^2n^2}=-\left(\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2h^2}\right)\left(\frac{Z^2}{n^2}\right) \qquad //$$

ただし、nの値は自然数のみを取り得るものとする。

遷移によるエネルギー差ΔEは、nの値の変化によって生じる。

$$\Delta E=E_{n2}-E_{n1}=h\nu$$

すなわち、

$$h\nu=\frac{me^4Z^2}{8\varepsilon_0^2h^2}\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)$$

$$\nu=\frac{me^4Z^2}{8\varepsilon_0^2h^3}\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right) \qquad \cdots(3\text{-}1)$$

これは、以前から知られていたスペクトル線の波長に関する関係則に非常に近い形をしており、この関係則をよく説明できた。

次に、振動数νを波数 $\tilde{\nu}$ により表現する。

$$\tilde{\nu}=\frac{1}{\lambda}=\frac{\nu}{c}$$

（3-1）に代入すると、

$$\tilde{\nu}=\frac{me^4Z^2}{8c\varepsilon_0^2h^3}\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)$$

これが関係則に非常によく合致する。

$$R\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)=\frac{me^4Z^2}{8c\varepsilon_0^2h^3}\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)$$

よって、この場合におけるリュードベリ定数Rは、

$$R=\frac{me^4Z^2}{8c\varepsilon_0^2h^3} \qquad //$$

また、最も小さな軌道半径 a_0 は、Z=1,n=1 とした場合であるから、

$$a_0 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 0.05292[nm]$$

これを Bohr 半径という。
しかしその後の研究で、より複雑な原子(原子量の大きい原子)についてはこの理論では説明できないことがわかったため、量子論の基礎となる新たな理論展開がなされることになる。

③・de Brogile 波

相対性理論より、物体のエネルギーと質量の関係について、以下の式が提示されている。

$$E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2 \quad \cdots (1)$$

p は物体の運動量である。

$$p = m \mathrm{v}$$

光については、m=0 であるために、(1)の式は以下のようになる。

$$E^2 = p^2 c^2 = (m \mathrm{v})^2 c^2 = (m \mathrm{v} c)^2$$

v=c より、

$$E^2 = m^2 c^4$$

すなわち、

$$E = mc^2 \quad //$$

この式は特に有名であり、質量をもつ粒子がエネルギーに変換されたとき、どれだけ莫大なエネルギーを生み出すかが見てとれる。例として、原子爆弾はこの理論により発展した放射線物理学によって理論が生み出され、量子力学の完成(シュレディンガー方程式の登場を起点とすると 1926 年)から僅か 20 年足らずの間にヒロシマ・ナガサキに投下されている(1945 年)。原子崩壊を引き起こす放射性物質がどれだけ莫大なエネルギーを伴って上空でエネルギー化したかは歴史の示すとおりである。
ちなみに、原子爆弾や原子力発電に必要となる中性子の発見は 1932 年のことである。

光のもつエネルギーについて、

$$E = h\nu$$

また、

$$c = \nu\lambda$$

これより、$E=mc^2$ から、

$$E = mc^2 = pc = h\nu = p\nu\lambda \quad \cdots (2)$$

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

運動量 p は、質量を持つ物体が持ち得る量であり、λ は波の性質を表している。
これにより、波動性と粒子性の両方が一つの式で結ばれたことになる。

④・不確定性原理

$$\Delta x \Delta p_x = h$$

ミクロの粒子を観測しようとするとき、顕微鏡が用いる光の波長は十分に小さくしなければならない。しかし、光子のもつ運動量を考えると、(2)より、

$$p = \frac{hv}{c}$$

短波長の光はその運動量が粒子の運動量に比べると非常に大きくなる。そのため、運動量を正確に計測することが逆に難しくなる。すなわち、ミクロの粒子の位置と運動量を同時に高い精度で求めることはできない。このように、同時に正確に求められない関係にあるものを互いに相補的であるという。
時間とエネルギーの関係もまた、互いに相補的である。

$$\Delta t \Delta E \geq h$$

⑤・規格化の条件

$$\Psi_n(x) = A \sin kx = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}\right)x$$

規格化の条件より、

$$\int_0^L \Psi_n(x)^2 dx = 1$$

すなわち、

$$1 = \int_0^L A^2 \sin^2 kx\, dx = \frac{A^2}{2}\int_0^L (1 - \cos 2\mathrm{kx})\, dx = \frac{A^2}{2}\left[x - \frac{1}{2\mathrm{k}}\sin 2\mathrm{kx}\right]_0^L = \frac{A^2}{2}\left(L - \frac{1}{2\mathrm{k}}\sin 2\mathrm{kL}\right)$$

kL=nπ より、

$$1 = \frac{A^2}{2}\left(L - \frac{1}{2\mathrm{k}}\sin 2\mathrm{n}\pi\right)$$

n は整数のみを取り得るため、sin(2nπ)=0 となる。

$$1 = \frac{A^2 L}{2}$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \qquad //$$