ボーア理論の教育的意義

ーどこまでが正しいのか，何を教えるべきなのか

2018.11.18　ＹＰＣ例会　筑波大学附属高校　鈴木　亨

１．最近の The Physics Teacher の記事

米国物理学協会（AIP）の元理事，米国物理教師協会（AAPT）の元会長という重鎮，K. W. Ford（1926 年生まれの 92 歳！）

“Niels Bohr’s First 1913 Paper: Still Relevant, Still Exciting, Still Puzzling,”　「ニールス・ボーア 1913 年第一論文：いまだに妥当で，いまだに刺激的で，いまだに困惑させる」

今日，正しいとされる量子力学と一致しないことなどから，その成果に比べて，不当に扱いが低いのではないか，という指摘

1913 年，ニールス・ボーアによって記された“On the Constitution of Atoms and Molecules,” Philosophical Magazine, [6], 26, 1-25, (1913),「原子および分子の構造について」の再考

２．ボーア理論の概要

$mv\cdot r = n\cdot\frac{h}{2\pi}$　…(1)　ボーアの量子条件，　$m\frac{v^2}{r} = k_0\frac{e^2}{r^2}$　…(2)　円運動の方程式

$E_n - E_{n'} = h\nu$　…(3)　振動数条件　この３式から，

エネルギー準位　$E_n = -\frac{2\pi^2 {k_0}^2 me^4}{h^2}\cdot\frac{1}{n^2}$　…(４)

リュードベリの公式　$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right)$　…(5)　$R = \frac{2\pi^2 {k_0}^2 me^4}{ch^3} = 1.1\times10^7\ 1/\mathrm{m}$　も一致

(1)式はド・ブロイ波長（1923）を用いると，$2\pi r = n\cdot\frac{h}{mv}$　，定常波を形成と解釈

３．当時にしても衝撃的

ラウエ（Max von Laue，1879～1960）「これはまったくナンセンスだ。どんなことがあってもマクスウェルの方程式は正しく，円運動する電子は放射を出すにきまっている」

その場にいないボーア（1885～1962）に代わり，

アインシュタイン（1879～1955）「非常に注目すべきことだ。この背後に何かあるに違いない。リュードベリ定数の絶対値の導出が単なる偶然であるとは，私には信じられない。」

（マックス・ヤンマー「量子力学史□」）

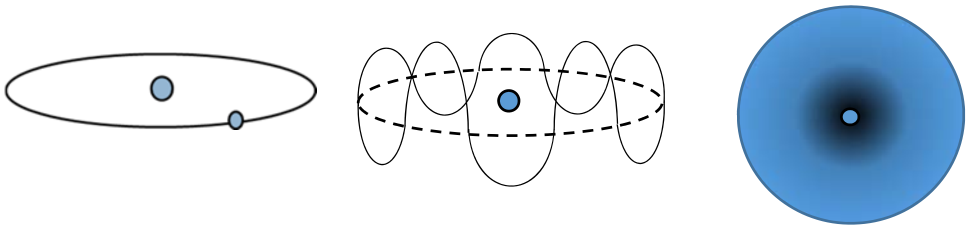
４．ボーア理論の限界（あまり教科書では触れられていない？）

２電子以上の原子に適用できない…

基底状態で，電子は軌道角運動量をもたないはず…

より「正しい」原子の描像はどれ？

・太陽系モデル　　　　　・定常波モデル　　　　・球状電子雲モデル



ゾウリムシが草履のように薄くないように，偏平な原子ってある？

５．量子条件の式　$mv \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi}$　が誤り？

では，どうしてエネルギー準位が正しく求められるのか？

実は，原論文では，「前提条件」として提示されてはいない！（結論ののちに記述）

ボーアは円運動ではなく，軌道電子を楕円運動とし，楕円の半長軸をaとして，

電子を核から十分に引き離すためのエネルギー$E = k_0 \frac{e^2}{2a}$　＞0　とし，

軌道電子の回転振動数を，$f = \frac{\sqrt{2}}{\pi k_0 e^2 \sqrt{m}} E^{\frac{3}{2}}$　としている

（原論文の式の表記や記号を現代風に改めている）

ボーアは，軌道回転振動数が事実上ゼロである遠方から，定常状態への遷移の際の放射は，最終状態の軌道回転振動数の半分（単純な算術平均）であると言う

したがって，放射エネルギーの条件は，$E = n \cdot h\nu = n \cdot h\frac{f}{2}$

これは不思議な条件式で，Ford もこれに異議

得られる最低エネルギーの結合エネルギーの値 13.6 eV は実験事実と一致

無限遠から途中にあるすべての状態を飛び越えての遷移の際に，13.6 eV の量子を１つ

n＝２の状態への遷移に，大きさ 13.6 eV/8 の量子を２つ

n = 10 の状態へ，　13.6eV / 1000 である 10 個の量子が放出？？？

観測されたスペクトルを説明するには，差額のエネルギーに相当する光子 1 つだけ放出するのでなければならない

６．初めに対応原理ありき？

百歩譲って，ボーアの示す通りに解くと，

$E=\frac{2\pi^2{k_0}^2me^4}{n^2h^2}$　（絶対値は(4)と一致），　$f=\frac{2}{nh}E=\frac{4\pi^2{k_0}^2me^4}{n^3h^3}$　となる

nが非常に大きいとき，古典論に近似できるという，対応原理を考えるとき，すなわち，nから$n-1$ への遷移で，

$$\nu=\frac{1}{h}\cdot(E_{n-1}-E_n)=\frac{2\pi^2{k_0}^2me^4}{h^3}\left(\frac{1}{(n-1)^2}-\frac{1}{n^2}\right)=\frac{2\pi^2{k_0}^2me^4}{h^3}\cdot\frac{n^2-(n-1)^2}{n^2(n-1)^2}=\frac{2\pi^2{k_0}^2me^4}{h^3}\cdot\frac{2n+1}{n^2(n-1)^2}$$

$\to\frac{2\pi^2{k_0}^2me^4}{h^3}\cdot\frac{2}{n^3}$　$n\to\infty$の極限で，上式のf と一致

ボーアは仮定の妥当性について，エネルギー準位の形式を得た後に，代わりに，エネルギーがhf の$f(n)$ 倍であると，$E=f(n)\cdot hf$ と置いたうえで，同様の式を展開，スペクトルがバルマーの式と同じ形になるためには，$f(n)=cn$ でなければならないとし，さらに対応原理が成り立つために，$c=\frac{1}{2}$ でならなければならないとして，仮定を正当化

順番を変えれば，楕円運動の関係式とバルマーの式（リュードベリの公式）の形に相当する振動数条件と対応原理を出発点にしてエネルギー準位を求めることができる

７．ゾンマーフェルトによる拡張

ボーアは前提としなかったとはいえ，数学的には(1)式，すなわち角運動量の量子化に基づくものと同値　→　　ボーア理論を「物理学的には誤り」とする主たる根拠

教育的な意味でも平面的な原子像を定着させるという弊害

ゾンマーフェルトは一般化運動量p_kと一般化座標 q_kを用いて，任意の自由度kについて，量子条件を　$\oint p_k\,dq_k=n_kh$ …(6)　とした（ボーア=ゾンマーフェルトの量子化規則）

この結果，1 周期の積分について，特定平面内の角運動量だけを特別扱いする必要はなくなったはず

直交座標で考えてもいいし，極座標で考えても三次元の自由度について量子化される

極座標で表すと，エネルギー準位は主量子数nのみで決まるように，他の 2 つの自由度について（それぞれの量子数は方位量子数，磁気量子数と呼ばれる）は，縮退

→　(1)式の量子条件からのみで，エネルギー準位を求めることができる

→　三次元の運動を考える必要がなく，特定の平面運動のイメージから抜け出せない

ゾンマーフェルトの理論も「前期量子論」であり，そのまま量子力学に発展したものではない（ネアンデルタール人が，現生人類の直接の祖先ではないように）

しかし，量子力学と全く関連がないわけではない

前野昌弘によれば，ボーア＝ゾンマーフェルトの量子化規則は，量子力学における波動関数の一価性と解釈できるという

８．ボーア半径とは何か？

ボーア理論において，基底状態での電子の軌道半径　→　水素原子の大きさをほぼ再現

量子力学では，軌道確率密度が極大値を取る距離

古典的な円運動の半径は確定的な値，量子力学における存在確率の極値の位置とは，全く概念的に異なる存在

ボーア理論を破棄したうえで構築された量子力学で，どこにいるか決まらない電子が，ボーア半径で存在確率がピークになるのも随分と義理堅い話！

物理とは，より少数の原理でより広範囲な現象が説明できる，というところに本質

ボーア半径がボーア理論で登場したがゆえに，あたかもそちらが優先するがごとく感じるので，奇妙

実は，電子の質量，電気素量，クーロンの法則の定数，プランク定数などを組み合わせてできる，長さの次元になる定数が存在する（それは何と呼んでも構わないが，歴史的にボーア半径と呼ばれる）だけのこと？

例えば一つの場面として，波動関数についてその値にそった周積分を行うと極値をもつ経路がある（最小作用の原理？），それがボーア＝ゾンマーフェルトの量子条件と一致

９．まとめ

＊ボーア理論の評価

・定常状態，量子飛躍，対応原理など大胆な仮定をいくつも繰り出したこと
・ミクロの世界で成り立つか，自明ではなかったエネルギー保存則は不動とした
・それらに比べれば，数学的な技巧（適否を含めて）は，些末な問題？

＊授業で意識したいこと

「古典論」の対語としての「量子論」のもつ現代的な香り

量子論が現代生活と密接にかかわっていること

エネルギーと仕事の関係など，古典論を学ぶ間に身につけた（はずの）センスの再確認

不思議な経験則の解決　→　ケプラーの法則とニュートン力学の関係を想起

先入観にとらわれない柔軟な発想　＋　先人の得た成果を取り入れるバランス感覚

自然界に分からないことはまだまだたくさんあること…