

初等量子力学

—琉球大学理学部物質地球科学科 2004 年度講義テキスト—

前野昌弘

平成 17 年 5 月 5 日

目次

第 1 章	量子力学の「あらすじ」—光の粒子性を中心に	1
1.1	光の粒子性はどこにあらわれるか	1
1.2	二重スリットと波束の収縮	2
1.3	これからの学習で注意すべきこと	4
第 2 章	光の粒子性	5
2.1	プランクによる黒体輻射の研究	5
2.2	光電効果	8
2.3	光子の運動量	9
2.4	コンプトン効果	11
2.5	粒子性と波動性の二重性	12
第 3 章	ボーアの原子模型	13
3.1	原子模型の困難	13
3.2	ボーアの量子条件	14
3.3	ゾンマーフェルトの量子条件と位相空間	16
3.4	状態の遷移と原子の出す光	17
第 4 章	物質の波動性	19
4.1	ド・ブロイの仮説	19
4.2	電子波の確認	20
4.3	波動力学と古典力学の関係	21
4.4	最小作用の原理と、波の重ね合わせ	23
第 5 章	不確定性関係と、波の重ね合わせ	25
5.1	ハイゼンベルグの思考実験	25
5.2	不確定性関係の意味	27
5.3	円周上に発生する波の重ね合わせ	28
5.4	直交関数系という考え方	31
5.5	波の群速度と位相速度	32
第 6 章	Schrödinger 方程式と波動関数	35
6.1	Schrödinger 方程式	35
6.2	なぜ波動関数 ψ は複素数なのか?	36
6.3	波動関数の意味	39
6.4	座標の期待値と分散	41
6.5	運動量、その他の物理量の期待値	43

第1章 量子力学の「あらすじ」—光の粒子性を中心に

この章では、これから「初等量子力学」および「量子力学」で学ぶ量子力学のあらましをつかんでもらうために、まず光の粒子性ということについて概観を述べる。詳細な計算などは後で述べるが、まずは量子力学とはどのような学問なのかの「あらすじ」を知ってもらいたい。

1.1 光の粒子性はどこにあらわれるか

19世紀の終わり頃、「物理はもうすぐ終わる」と言われていた。力学、電磁気学がほぼ完成し、天体の運動がニュートン力学で完全に予言されるようになった。ところが次の年から20世紀だという1900年、プランクは黒体輻射に関する研究から「光のエネルギーは不連続な値を取る」という仮説を発表した（このプランクの主張までは、光に限らずエネルギーというのはいかなる値でも取ることができると思われていた）。これが量子力学の始まりである。量子力学と直接関係はないが、20世紀の始まりには特殊相対性理論¹も作られている。量子力学と相対論が、「終わる」はずだった物理の世界を一変させてしまったのである。

光は波であるか粒子であるか、というのはニュートンやホイヘンスの時代（17世紀後半）でも論争になった謎であったが、波と考えるのが妥当であろう、というのが20世紀初頭までの考え方だった。そのように考えられた理由は光が干渉現象を起こすことである。また、マックスウェルが電磁気学の方程式から光速で進む波動解（電磁波）を見つけたことも光が波であることを支持していた。プランクの主張²によれば、振動数 ν を持った光のエネルギーは、 $h\nu$ の整数倍に制限される（ h はプランク定数で、値は 6.6×10^{-34} J·sec）。

プランク以外にもいろんな研究により、光は一個あたり（プランク定数） \times （振動数）というエネルギーを持った粒子（「光子」と名付ける）でできているとわかった。プランク定数は非常に小さいゆえに、通常我々が目にする光は、たくさんの光子の集まりでできている。

[問い1] 100Wの電球が波長 5×10^{-7} mの光を出しているとする、この電球が1秒間に出している光のエネルギーは $h\nu$ を単位として何個分と考えられるか。光速は 3×10^8 m/sである。
また、この電球の1メートル向こうで断面積 0.5cm^2 の瞳でこの光を見たとしても、瞳に飛込む光子は1秒に何個か。

実は光の粒子性は特殊な現象を見なくても、日常生活にも現れる。たとえば夏に太陽の光を浴びると日焼けするが、冬に電気ストーブにあたって日焼けすることはない。得られるエネルギーは同程度であっても、紫外線と赤外線では質が違う。古典的に見るとそれは振動数の違いであり、「紫外線の方が振動数が大きい（振動が速い）から、人間の体に化学変化を起こさせるのだ」という考えもで

¹勘違いしている人が多いが、相対論は古典力学である。物理の世界で「古典力学」と言ったら「量子力学ではない」という意味。

²プランクがどのような根拠を持ってこの主張を行ったか、およびそれがどのように正当化されるかについては次の章で述べる。

きないではない。しかし、光を光子の集まりとして考えると、赤外線（振動数が小さい）は一個一個のエネルギーが低い光子でできており、紫外線は一個一個のエネルギーが高い光子でできていると考えられる。人間の体に化学変化を起こさせるのは、この光子一個一個の衝突だと考えるとこの現象が理解できる³。

[問い2] 紫外線（波長が $5 \times 10^{-8} \text{m}$ ）と赤外線（波長が $1 \times 10^{-6} \text{m}$ ）の一個の光子の持つエネルギーと、水素原子のイオン化エネルギー 13.6eV を比較せよ。これは何を意味するか。（注： 1eV は $1.6 \times 10^{-19} \text{J}$ ）

例えば、夜空の星を見上げればすぐに星が見えるが、これも光が光子という塊で降ってくるおかげである。眼が見える（人間が光を感知できる）のは、眼の中にある化学物質が光に反応して化学変化を起こすからである。しかし、光が連続的にやってきて、エネルギーがたまって始めて反応が起こるのだとすると、長い時間がたたないと感知できないことになる。

[問い3] 0等星の照度は 2.5×10^{-6} ルクスである。1ルクスは1平方メートルあたり $\frac{1}{683}$ ワットのエネルギー流に対応する。人間の瞳の広さを 0.5cm^2 として、瞳から入ってくるエネルギーを考え、そのエネルギーが眼の水晶体（レンズ）によって視細胞一個（半径 10^{-6}m の球とする）に集められたとする。光を波動と考えた場合、視細胞にある感光物質（ロドプシン）の1原子（半径 10^{-10}m としよう）が化学反応するエネルギー（ $5 \times 10^{-19} \text{J}$ としよう）を得るには何秒かかるか。

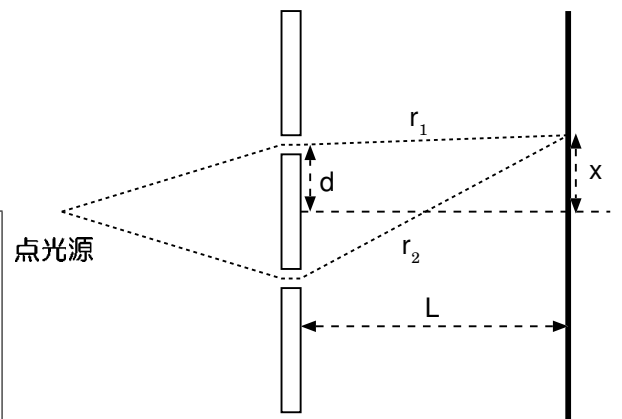
[問い4] 「光が粒でやってきていて、連続的な波ではないから、星の光がまたたいて見えるのではないか？」と言った人がいる。これがほんとうかどうか、つまり星のまたたきは光子の粒子性によるものかどうかを考察せよ。

1.2 二重スリットと波束の収縮

光が波でありながら粒子である、ということは非常に理解しがたいことであろう。しかし今は「あらすじ」の段階なので、これをどう理解すべきかということとはとりあえず後に回す。ここではさらに別の例で光の粒子性がどのような現象を起こすのか、を見ていく。

そこで、光の波動性を表す実験として有名なヤングの実験を考えよう。ヤングの実験では点光源（実際の実験では単スリットで点光源化することが多い）から出た光が、複スリットを通った後スクリーンにあたり、そこに干渉縞が生じる。

[問い5] 図の二つの光の光路差を計算し、スクリーン上で暗くなる場所の x 座標を求めよ。ただし、光の波長を λ とし、 L は d および λ に比べて十分大きいとして近似せよ。必要ならば公式 $(1+x)^n \simeq 1+nx$ ($x \ll 1$ の時) を使え。



二つのスリットからスクリーン上にやってきた電場を $E_0 \sin(k(r_1 - ct))$ および $E_0 \sin(k(r_2 - ct))$ としよう。電場の振幅 E_0 は定数ではなく r が大きくなるほど小さくなるはずであるが、ここでは簡単のために定数とおいた。スクリーン上にできる電場はこの二つの和なので、

$$E_0 (\sin(k(r_1 - ct)) + \sin(k(r_2 - ct)))$$

³念のために書いておくと、紫外線によって起こった化学変化が日焼けそのものではない。人間の体が紫外線によって起こされた化学変化に反応した結果が日焼けである。肌が黒くなるのは、人間の体の持っている防衛機構である。

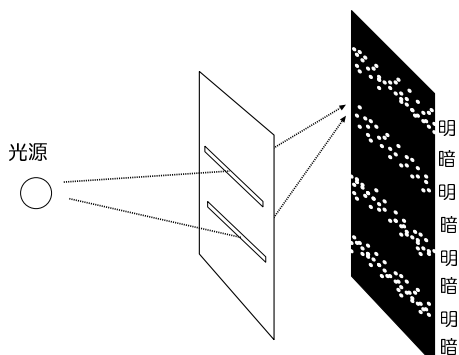
とおける。光を波と考えるならば、この電場の振幅の自乗が明るさに比例すると言える。この考え方ではもちろん、光はスクリーン全体に連続的に広がった存在である。

[問い6] 二つのスリットから出る電場の和から、スクリーン上の電場のエネルギー密度 $\frac{1}{2}\epsilon E^2$ の一周期分での平均を計算せよ。

ヒントその1: $\sin A + \sin B = 2 \sin\left(\frac{A+B}{2}\right) \cos\left(\frac{A-B}{2}\right)$

ヒントその2: $\sin \theta, \cos \theta$ などは一周期分積分したら0になる。 $\sin^2 \theta = \frac{1 - \cos 2\theta}{2}$ となるが、 $\cos 2\theta$ の部分もやはり、一周期分積分すると0である。

この実験を、「光は粒子でもある」という知見のもとに考え直すと、いろいろ不思議なことが出てくる。



左図はこの実験の様子を、光が粒子であるという観点を強調して描いたものである。

粒子説にしたがえば、光がやってくるということは実際には光子がやってくるということである。つまり、ヤングの実験で発生する明暗の縞は、実は左の図のように、光子の当たる場所と当たらない場所が発生しているということになる。

ここで光源の光量を絞って、一度に一個の光子しか来ないようにしたとしよう⁴。この場合干渉は起こるだろうか。「干渉」というのは普通、二つの波がぶつかっておきる。一度に一個の光子し

か来ないなら、二つの光子はぶつかれないから干渉なんて起きないはず、と思いたいところだが、実際にはこれでも左図のような干渉は起きる。極端な場合として、光子一個だけを送り込むという実験ができたとする。するとこの光子は、図の「明」のどこかにあたる。けっして「暗」の部分にはあたらない。

念のために注意しておく。この干渉によって光が消し合うという現象を「一個の光子と一個の光子がぶつかって消える」というイメージを持っている人がいたら、さっさとそのイメージを消去してもらいたい。そんなことが起こったらエネルギー（光子一個につき $h\nu$ ）が保存しなくなってしまう。あくまで、一個ずつやってきた光子は一個ずつ到着する。ただ「暗」の場所には来ないのである。

以上の実験からわかることは、あたかも「一つの光子が二つのスリットを同時に通ってきた」と解釈できるような現象が起こっているということである。つまりこのスクリーンにあたった一個の光子は「上のスリットを通ってきた光子」でも「下のスリットを通ってきた光子」でもなく、いわばその重ね合わせとして存在しているのである。

たとえば上のスリットをふさいだとする。すると、光子は「暗」の場所にも当たるようになる。この場合、光子は確実に下のスリットを通ってきているはずなのだが、「上のスリットが空いているのか空いていないのか」ということを知っているかのごとく、それに応じて挙動が変化することになる。

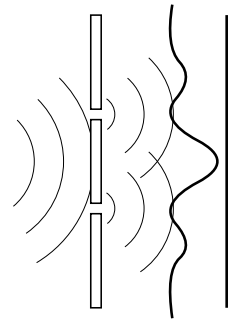
つまり、観測機器などの状況設定が変わると、光の粒子性が顕著になったり、波動性が顕著になったりする。ここでは詳しく述べないが、たとえばスリットの片側に光が通過するかどうかの測定器をつけたりすると、この干渉縞は消失してしまう。このように、「何を観測しようとするか」によって観測される側の状態が変わってしまうというのが量子力学のややこしいところである（と書いたが、観測機器によって状態が乱されるということ自体は、古典力学的状況であっても同様である。量子力学では少々劇的になっているというだけのこと）。

量子力学の世界では、こういう「非常識」なことが起きる。我々が普段こういう「非常識」を経験しな

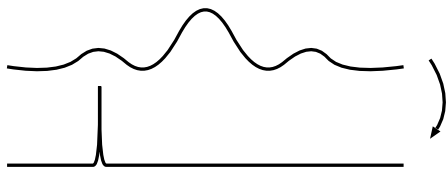
⁴可視光であっても弱い光を使ってこの条件を満たすことはできる。また、エックス線をつかってガイガー管などで計測すれば、一個の光子を測定することも可能である

いのは、我々が見る光源はたいてい1秒に 10^{20} 個以上の光を出していて、光が粒子の集まりであることを実感できないからである。

ここで起こったことをもう一度よく考えてみる。二つのスリットを通る時の電子は、両方を通るような波として広がっている。そして通り抜けた後は、図で太い線で表したような、二つの波の干渉の結果としてできあがる波がスクリーンに到達する。ところが、スクリーンに到着する光子は一個であって、ある一カ所にしか光子は存在しなくなってしまう。



ここでスクリーンで起こっている現象を考えよう。スクリーンに当たる直前の光は、左図の上のような状態、つまり干渉を起こした波の状態であったはずである。ところがスクリーンに当たると、粒子性が顔を出して一点のみに光子がぶつかる。広がっていたはずの波がいきなり一点に縮まってしまふ、ということで、このような現象を「波束の収縮」と呼ぶ。収縮が起こるメカニズムについてはよくわかっていないが、そういうことが起こっていると解釈しなければならないような現象が起こっていることは確かである⁵。大事なことは、どこに収縮するのかを決める方法がないということである。残念ながら量子力学で計算できるのは確率だけなのである。後でくわしく学ぶが、量子力学の計算を正しく用いれば波の形が計算できる。波の振幅が大きくなっている部分（つまり「明」となる部分）に収縮する確率が大きく、振幅が小さい部分（「暗」部）に収縮する確率は小さいのである。



確率だけしか計算できない、ということについてはもちろん批判者も多く、量子力学は不完全であるとの主張がよくされてきた。その筆頭はアインシュタインであって、「神はサイコロ遊びをしない」という言葉は有名である。アインシュタインは量子力学の計算の中には入ってこないだけで、粒子がどこにいるかは最初から決まっているはずだ、という考え方をしていた。しかし、そのように「粒子がどこにいるか最初から決まっている」という考え方と矛盾する実験結果がある。どうやら光子の位置を観測するまでは光子の位置は決まっていなかったと考えるてはいけないらしい。

1.3 これからの学習で注意すべきこと

この章では、量子力学の「あらすじ」を述べた。ボーアは

「量子力学に衝撃を受けないとしたら、それは量子力学を理解してない証拠だ」

という意味のことを言っている。だから、この「あらすじ」を聞いて「そうか、量子力学ってそういうものなのか」とわかったような気がしたとしたら、

それは錯覚である。

これからの1年間の講義の中で、量子力学に衝撃を受け、量子力学の不思議さを感じて欲しい。量子力学の不思議さはすなわち、我々の住んでいるこの世界の不思議さである。

また、今回は概要だけを述べたわけであるが、物理を学ぶ者は、

自分で手を動かして納得するまでは、何事も信じ込んではいけない。

ということを肝に命じておこう。先生の説明を聞いてわかったような気になっただけでは、実はまだまだ何もわかってない⁶。まして概要をかいつまんで述べただけの講義を聞いて納得してはいけない。

次の章からしばらくは、歴史をたどりながら、この不思議な量子力学がどのように建設されていったかを学ぶ。

⁵この現象をどう解釈するかについては諸説があるが、ややこしくなるのでここでは触れない。

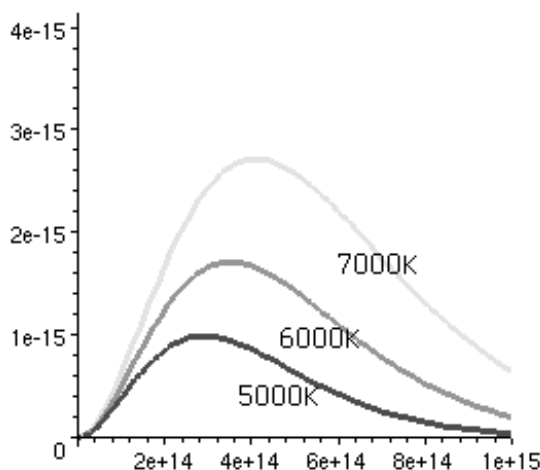
⁶これはもちろん、前野の自戒が込められた言葉である。

第2章 光の粒子性

2.1 プランクによる黒体輻射の研究

20世紀初頭の物理学者たちがいかにして「光は粒子でもある」という認識を得るにいたったかを説明するために、まずはプランクが1900年に発表した黒体輻射の研究について述べよう。これが量子力学の始まりなのである。

19世紀末、プランクが研究していたのは黒体輻射もしくは空洞輻射と呼ばれる現象である。この研究はもともと溶鉱炉の中がどの温度でどんな色に見えるかという疑問から始まった。実際どうなるかという、低温では赤く光るのだが、温度があがるにしたがって橙、黄、白と白っぽくなっていく。そしてさらに温度があがると今度は青白くなる。これは実は恒星の色と温度の関係とほぼ同じである。右のグラフがこの輻射のスペクトルである。可視光は振動数が 3.9×10^{14} から 7.9×10^{14} Hz である。5000K のグラフを見ると、この範囲では、グラフはおおむね右下がりになっている。これは振動数の低い（波長の長い）成分の方が多いということであり、赤い色であることがわかる。これがなぜ問題なのかという、当時の常識にしたがって計算すると、決して赤い色は出ないのである。



統計力学（ただし、古典統計力学）では等分配の法則という法則がある¹。

「熱平衡状態にある物質には、1自由度あたり $\frac{1}{2}kT$ のエネルギーが分配される」

という法則である。 $k = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K で、ボルツマン定数と呼ばれる。

たとえば単原子分子の理想気体では分子一個あたりの持つエネルギーは $\frac{3}{2}kT$ となる（動く方向が3つあるので3倍される）。また2原子分子であれば、 $\frac{5}{2}kT$ となる（単原子分子の場合に比べ、2方向に回転できる）。もちろん $\frac{1}{2}kT$ などの値は平均値もしくは期待値である。実際の原子はいろんなエネルギーを持っているが、その分布の平均がこの大きさになる。また固体分子の場合、一定点を中心に振動を行っていると考えられるが、その振動の位置エネルギー（ $\frac{1}{2}kx^2$ ）に対しても同様に一つの自由度あたり $\frac{1}{2}kT$ のエネルギーが分配される。

実際に分子がこのようなエネルギーを持っていることは、比熱の測定から確認できる。下の問題の表にもあるように水素は比熱が大きい、これは質量1グラムあたりで比較しているからである。

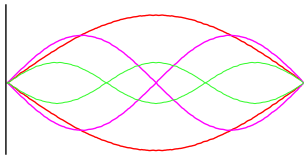
¹まだ統計力学は勉強してないと思うが、ここではとりあえず「等分配の法則」というものがあるということだけ知っておけばよい。

水素の方が同じ質量の中に含まれている分子の数が多い。この等分配の法則は液体や固体でもだいたい成立している。

原子の持つさまざまな形態のエネルギー、回転のエネルギーにも並進のエネルギーにも振動の位置エネルギーにも、等しく $\frac{1}{2}kT$ ずつのエネルギーが分配されるのだから、この法則が普遍的なものであると考えるのは理にかなっているように思われる²。

[問い7] 以下の表を見て、各物質の1分子あたりの定積比熱を計算し、 $\frac{3}{2}k$ および $\frac{5}{2}k$ と比較し考察せよ。

	水素	窒素	アルゴン	ヘリウム	水蒸気	ベンゼン
1グラムあたりの定積比熱 (J/gK)	10.23	0.740	0.313	3.152	1.542	1.250
分子量 (g/mol)	2	28	40	4	18	78



では等分配の法則を、溶鉱炉の中にある光(電磁波)の場合に適用して、電磁波の振動の1自由度ごとに kT のエネルギーが分配されると考えてみよう ($\frac{1}{2}kT$ でないのは、固体の振動と同様、1自由度に対して運動エネルギー + 位置エネルギーを考えるため)。そのような考え方をすると、溶鉱炉内部はどんな色になるだろうか。

この考察のためには、溶鉱炉内の電磁波がどれだけの「自由度」を持っているのかをまず考えねばならない。とりあえず話を簡単にするため、溶鉱炉の中はからっぽとし、壁で電磁波が固定端反射していると考え。空洞輻射という名前がつけられているのはそういう意味がある。「黒体」というのは光を反射しないという意味である(空洞は当然黒体である)。実際の炉ならば中に入っている物質の種類によって色に差が出るはずであるが、まずはそのような物質の種類によらずに計算できるように、内部を空洞とし、両端で電磁波が完全に反射するとしたわけである。空洞を一辺 L の立方体とすれば、中に存在できる電磁波の波長は $2L, L, \frac{2L}{3}, \frac{L}{2}, \frac{2L}{5}, \dots, \frac{2L}{n}, \dots$ となる。よって電磁波の波数 ($\frac{2\pi}{\text{波長}}$ で定義されている) は $n\frac{\pi}{L}$ のように、 $\frac{\pi}{L}$ の整数倍になる。つまり電場が

$$E = E_0 \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (2.1)$$

と書けるだろう。実際には3次元なので、 x, y, z 方向にわけて考えて、

$$E = E_0 \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L} \quad (2.2)$$

のように、3つの自然数 (n_x, n_y, n_z) を使って空洞内の電磁波の状態を表すことができる。空洞内に存在できる電磁波は、 $\frac{\pi}{L}$ を単位とした3次元格子点の数だけの自由度がある、ということになる。そして、この「自由度」一つずつに kT のエネルギーが与えられることになりそうである。以上の議論をナイーブに考えるとどんなに短い波長の電磁波でも(つまり「どんなに大きな波数の電磁波でも」)存在できることになるので、空洞の持っているエネルギーは無限大になってしまう³。実際にはグラフにあるように短い波長(高い振動数)の電磁波は少ない。

²等分配の法則の導出過程などについては統計力学の授業で勉強して欲しい。ここではとりあえず実験事実としてこれが成立していると思え。たとえば一つの空気中の酸素と窒素は、分子一個の質量は違うにも関わらず、同じ平均エネルギーを与えられていることは、実験的にもわかることである。

³これは、空洞を作って有限温度の物体を接触させると、熱平衡に達するまでの間に空洞が無限の大きさの電磁エネルギーを吸い込むことができるということである。もちろんこんな現象が起こるはずはない。

[問い8] 真空中を進む電磁波の電場が満たすべき式は

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) E(x, y, z, t) = 0$$

である。真空中のマクスウェル方程式からこの式を導け。

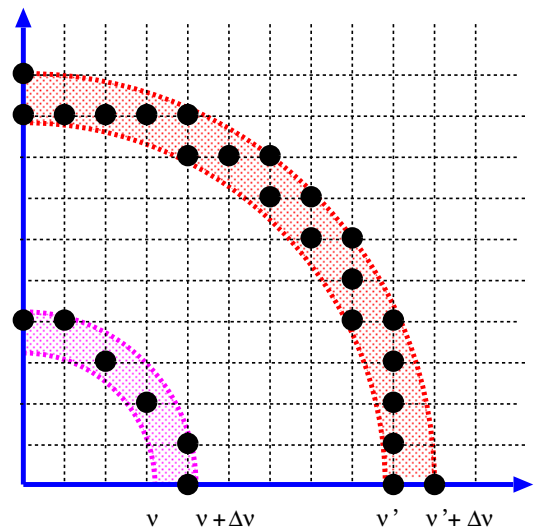
[問い9] 上で求めた定常波解は

$$E(x, y, z, t) = \sin \frac{n_x \pi x}{L} \times \sin \frac{n_y \pi y}{L} \times \sin \frac{n_z \pi z}{L} \times f(t)$$

と書ける。 $f(t)$ を求め、この電磁波の振動数を求めよ。

右図は (n_x, n_y) の分布を表す図である（本来は n_z もいれて立体的な図にするべきだが、ややこしくなるので省略した）。格子点一つ一つが、空洞内に存在する電磁波のモード一つ一つに対応する。この空間で原点を中心とした一つの球面上にあるモードは、同じ振動数を持つ⁴。図に書かれたように、ある程度の振動数の幅の中 (ν から $\nu + \Delta\nu$ まで、あるいは ν' から $\nu' + \Delta\nu$ まで) にある格子点の数は、半径が大きいほど大きい⁵。

こう考えていくと、高い振動数の波は、（それだけ格子点の数が多くなるから）よりたくさんの自由度を持っており、むしろ高い振動数の方がエネルギーは大きくなりそうに思われる。ところが実際の分布ではグラフには山があり、振動数の大きい光はエネルギーが減ってしまう。5000K ぐらいでは赤っぽい色になるが、それは可視光内で波長の短い青の部分グラフの山より右にあたり、赤の光の方が大きなエネルギーを持っているからである。



[問い10] 振動数が ν から $\nu + \Delta\nu$ の間にある格子点の数（電磁波のモードの数）を $\Delta\nu$ は十分小さいとして2次以上は無視するという近似を行って見積もれ。

[問い11] モードの数 $\times kT$ がエネルギーになるとする（つまり等分配の法則が成立するとする）と、単位体積あたり、単位振動数あたりにどれだけのエネルギーが分布していることになるか（この式は Rayleigh-Jeans の公式と呼ばれる）。振動数とエネルギーのグラフはどんな形になるか。

注意：光が偏光を持つことによる $\times 2$ を忘れないこと。

以上のように等分配の法則は成立していない。しかし一方で、波長の長い部分（振動数の小さい部分）つまりグラフの左側部分に関しては等分配の法則は非常によく成立している。したがって等分配の法則が完全に間違いだとも言い切れない。

では、等分配の法則が高い振動数の領域で崩れてしまう理由は何だろうか？—プランクはこの理由を以下のように考えた。

電磁波の持つエネルギーはどんな値をとってもよいのではなく、 $h\nu$ (ν は振動数) の定数倍に限るとする。すると振動数が大きい光は、エネルギーの塊の単位が大きいということになる。等分配の法則

⁴問い9 で求められる光の振動数は $\nu = \frac{c\sqrt{(n_x)^2 + (n_y)^2 + (n_z)^2}}{2L}$ である。

⁵ここまでの計算では光が横波であることを無視していた。実際には光には二つの振動成分（進行方向と垂直な方向が二つあるから）があるので、最後にエネルギーを2倍にする必要がある。

はエネルギーを kT ずつ分配しようとするが、 $kT < h\nu$ となっていると、エネルギーが分配されにくい。その分高い振動数の光に与えられるエネルギーが少なくなってしまう。

高い振動数の光は「大きな塊 ($h\nu$) のエネルギーをよこせ」と要求するが、そのエネルギーが等分配の法則によって分配されるエネルギー (kT) より大きいので、それだけの分け前にあずかることができないのである。これに対して低い振動数の光はエネルギーの単位 $h\nu$ が小さいので、この単位で $kT \div h\nu$ 個分のエネルギーを受け取ることができる。

たとえば、高い振動数成分の光は「5000円あげよう」と言われたのに「万札でよこせ」と言っているようなものである。これでは1円ももらえない。低い振動数の光は「100円玉でください」と言うので、50枚の100円玉をもらうことができる。よって、低い振動数では等分配の法則が成立する。結局、「強欲すぎるとかえって分け前は小さい」ということである。念のため再確認しておくが、これは実際の光の振動モード一個一個がちょうどこれだけエネルギーを持っているというのではなく、これより多いものもこれより少ないものもいるのだが、平均をとるとこうなるのである。だから $h\nu > kT$ であっても、分け前0になるわけではない。

プランクは実際に光のエネルギーが $h\nu$ の整数倍であるという条件のもとにスペクトルを計算してみた。その計算は統計力学の知識が必要となるので省略する。ちなみに単位体積あたり、単位振動数あたりのエネルギー密度が

$$\frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (2.3)$$

になるというのがプランクの答である。この式は実験で得られた値とぴったり一致した。ただしそのプランクも、この時点では光が粒子性を持つ、ということまでは考えてはいない。ただエネルギーが不連続であることを指摘したのみである。

[問い12] 問い11で計算した Rayleigh-Jeans の式が、プランクの出した式を ν が小さいとして、あるいは h が小さいとして近似したものに等しくなることを確かめよ^a

^aたまにこういう問題を見て「 ν は小さいから、小さいものの3乗である ν^3 は無視できる。よって分子はゼロ」とかやってしまうあわてものがある。物理では確かによく「小さいから無視できる」とやるが、無視できるのは「(大きいもの) + (小さいもの)」のように大きいものと足し算されている小さいものである。100万円持っている人は100円を無視してもいいが、100円しか持っていない人は100円を無視できない。

空洞輻射と同じように、エネルギーの分配が等分配則を満たさない例としては、低温での比熱の問題がある。たとえば上で述べた「2原子分子であれば分子一個あたりのエネルギーは $\frac{5}{2}kT$ 」という議論は、温度が低くなるとくずれてしまう。固体の比熱でも同様のことが起こる。低温では、分子の回転運動のエネルギーの平均が kT よりも小さくなってしまっているようなのである。これは光だけではなく、物質にも「エネルギーの単位」があることの証拠と言える。回転運動の方がエネルギーの単位が大きいのであろうと推測できる。

2.2 光電効果

同じように光のエネルギーが離散的であることを証明する実験が光電効果である。光電効果はヘルツによって1887年に発見された。ヘルツは光が放電現象を引き起こすことを見つけたのだが、1899年にはトムソンにより、金属に光をあてることによって金属中から電子が飛び出したのだということが確認された。金属中には「自由電子」がたくさんいるのだから、飛び出してくることは別には別に不思議なことではない。不思議なことには、1902年にレナルトが発見した、「飛び出してくる電子のエネルギーは光の強さとは無関係である」という事実である。また、ある一定の振動数より低い振動数の光ではこの効果が起きないこともわかっていた。

光電効果を「光の電場によって、金属内の自由電子がゆらされ、その結果外に飛び出す」と考えると、振動数が低くても振幅が大きければ飛び出してもよいと思われるし、逆に振動数が高くても振幅が小さければ飛び出さないだろうと考えたくなる。しかし現実はそのではなく、飛び出すか飛び出さないかは振動数だけで決まるし、出てきた電子のエネルギーは振幅によっていない。

具体的な計算は下の問題を解いてもらいたいが、光電効果という現象において大事なことは、光を波と考えた場合と粒子と考えた場合で、そのエネルギーが金属に与えられるときに連続的に与えられるのか、不連続な塊で与えられるのかという大きな違いがある、ということである。

[問い 13] 光が波のように連続的であると仮定して 100W の電球から 5メートルの位置にある金属の原子が電子を飛び出させるだけのエネルギーをため込むのにどれだけの時間がかかるかを計算せよ。ただし、100W の電球は文字通り、1s 間に 100J のエネルギーをすべて光の形で放出するとし、そのエネルギーは等方的に広がるとせよ。金属の原子の半径を 10^{-10}m として受け取るエネルギーがどれくらいになるかを考えればよい。なお、電子は $5 \times 10^{-19}\text{J}$ 程度のエネルギーをもらって飛び出すとせよ。

連続的にやってくるエネルギーならば、時間がたった後でなければ電子は飛び出さない。しかし実験は、ただちに電子が飛び出すという結果をみせている。光を波だと考えるならば、金属の中に、(どんなものなのか想像もつかないが)「広がってやってきた光のエネルギーをかきあつめて電子一個に与えるメカニズム」があることになる。もちろんそんなものはなく、光電効果は、光が「光子」というエネルギーの塊として降ってきていることを示しているのである。

アインシュタインはこのような現象は、光が「光量子」という粒で出来ていると考えれば説明できる、という「光量子仮説」をとらえた(1905年)。アインシュタインはプランクが考えた光のエネルギーの単位 $h\nu$ は光量子一個分のエネルギーであり、電子は一個の光量子に衝突されてそのエネルギーを吸収し、外に出てくると考えたのである。こうすると確かに、光が強いということは光量子が多いということであるから、電子一個のエネルギーは変化せず、出てくる電子の数が増えることになる。アインシュタインは電子が金属外に出るときに W (仕事関数と呼ぶ) だけエネルギーを消費すると考えると、金属から出てきた時に電子の持っているエネルギーは

$$E = h\nu - W \quad (2.4)$$

で表されると結論した。もし、 $h\nu < W$ であれば電子は外に出てくることができない。

しかしこの時点では飛び出してきた電子のエネルギーを正確にはかることはできていなかった。1916年にミリカンがこの式を実験的に導き出し、光量子仮説の正しさを実証することになる⁶。

光電効果(後であげるコンプトン効果も)の意義は、光が実際に粒子的形態を取っている(ことがある)ということを示したことにある。プランクが「光のエネルギーは $h\nu$ の整数倍である」と言った時点では、まだそこまでの主張はされていない。実際、1905年に出たアインシュタインの論文に関しては、多くの批判がされている。当時の物理学者にとっては「光のエネルギーが不連続である」という主張以上に「光は粒子である」という主張は衝撃的であったことがわかる。

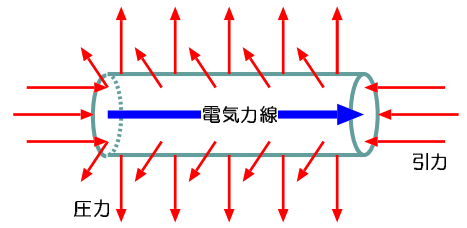
2.3 光子の運動量

光が粒子であると考えると、プランクが考えたような空洞の中では、光子がとびまわっていると解釈できる。分子でできた気体がそうであるように、光にも圧力がある。気体に圧力があるのは分子が運動量を持つからである。したがって光子にも運動量があることになる。では、エネルギー $h\nu$ を持った光子の運動量はどうなるべきであろうか。普通の粒子であればエネルギー $\frac{1}{2}mv^2$ で運動量 mv

⁶現在では光の粒子には「光量子(light quantum)」という言葉は使われず、「光子(photon)」と呼ばれている。

とするところだが、光子の場合は少し違う。光子の運動量を見積もるには、光がまわりの壁にどのような力をおよぼすかを考えれば良い。

まず光すなわち電磁波の持っている力を計算する。一般に、真空中に電場 E がある時、単位体積あたりにエネルギー $\frac{1}{2}\epsilon_0 E^2$ が分布し、電場の方向には単位面積あたり $\frac{1}{2}\epsilon_0 E^2$ の引っ張り力が、電場と垂直な方向には単位面積あたり $\frac{1}{2}\epsilon_0 E^2$ の圧力が発生する（マックスウェルの応力）。これは磁場についても同様である。ただし磁力に対しては式が $\frac{1}{2}\mu_0 H^2$ に変わる。



6つの方向 ($\pm x, \pm y, \pm z$) のうち、2方向は引力、4方向は斥力である。今電磁波が壁のなかであっちへこっちへと飛び回っていると考えると、この圧力と斥力は平均化されて、 $\frac{1}{3}$ の引力と $\frac{2}{3}$ の斥力となり、結局 $\frac{1}{3}$ の斥力が残ると考えられる。つまり、圧力はエネルギー密度の $\frac{1}{3}$ である。この圧力は1892年にLebedevによってはじめて実験的に確かめられている。

[問い14] 別の計算で光の圧力がエネルギーの $\frac{1}{3}$ であることを計算する。今一辺 L の立方体の箱の中に光子が入れているとする。このうち一個の光子に着目し、波だと考えた時の x, y, z 方向の波数を $\frac{n_x\pi}{L}, \frac{n_y\pi}{L}, \frac{n_z\pi}{L}$ とする。箱の x 方向の長さをゆっくりと $L + \Delta L$ (ΔL は微小) まで伸ばす。この時、中に入っている波の n_x, n_y, n_z が変化しなかったとする（箱が延びるにしたがって波長も延びたことになる）。この時光子のエネルギーの減少を計算し、その減少分は箱の壁を押す仕事をしたと考えることで、光子が壁におよぼしていた力を求めよ。光子がたくさんいろんな方向に動き回っていたと考えて平均をとって、圧力がエネルギー密度の $\frac{1}{3}$ であることを示せ。

では、圧力がエネルギー密度の $\frac{1}{3}$ であるということから光子の運動量に関して何がわかるであろうか。箱に入れられた N 個の粒子が、それぞれ E_i のエネルギーと \vec{p}_i の運動量を持っているとしよう ($i = 1, 2, \dots, N$)。 \vec{p}_i の運動量を持った光子が x 方向に垂直な壁にぶつかってはねかえるとする。その時、 \vec{p}_i の x 成分 (p_{ix}) の2倍の力積を壁に与える。この光子は x 方向に $2L$ 走ることによってこの壁に衝突するが、 x 方向の速度は $c \times \frac{p_{ix}}{|\vec{p}_i|}$ であるから、1秒の間に

$$c \times \frac{p_{ix}}{|\vec{p}_i|} \div 2L = c \times \frac{p_{ix}}{2L|\vec{p}_i|} \quad (2.5)$$

衝突することになり、1秒にあたる力積（つまり力）は $c \times \frac{(p_{ix})^2}{L|\vec{p}_i|}$ となる。 N 個分の和をとれば、等方性から、 $\sum_i (p_{ix})^2 = \frac{1}{3} \sum_i |\vec{p}_i|^2$ となると考えて良いだろう。よって、 N 個全体が壁に及ぼす力は

$$\frac{c}{3L} \sum_i |\vec{p}_i| \quad (2.6)$$

となる。圧力はこれを L^2 で割ったものであり、その圧力が $\frac{1}{3L^3} \sum_i E_i$ に等しいのだから、 $c|\vec{p}_i| = E_i$ と考えられる。つまり、運動量の大きさ $\times c$ がエネルギーである。

[問い15] 通常物質であれば $p = mv, E = \frac{1}{2}mv^2$ である。この場合、圧力とエネルギー密度の関係はどうか？

なお、電磁波の運動量に関してはマックスウェル方程式から導かれる一般論があり、それによると、真空中の電磁場の持つエネルギーは単位体積あたり、 $\frac{1}{2}\epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2$ で、電磁場の持つ運動量は単位体積あたり $\vec{D} \times \vec{B}$ である (今は真空中なので $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E}$)。この場合はエネルギーが

$$\frac{1}{2}\epsilon_0(E_0)^2 \sin^2(k(z - ct)) + \frac{1}{2\mu_0} \left(\frac{E_0}{c}\right)^2 \sin^2(k(z - ct)) = \epsilon_0(E_0)^2 \sin^2(k(z - ct)) \quad (2.7)$$

となり、運動量は

$$\frac{(E_0)^2}{c} \sin^2(k(z - ct)) \quad (2.8)$$

となる (方向は z 向き)。このことから、電磁波の運動量はエネルギーを c で割った大きさを持つ⁷。

以上から、光子一個の持つ運動量は $\frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$ と考えていいだろう。

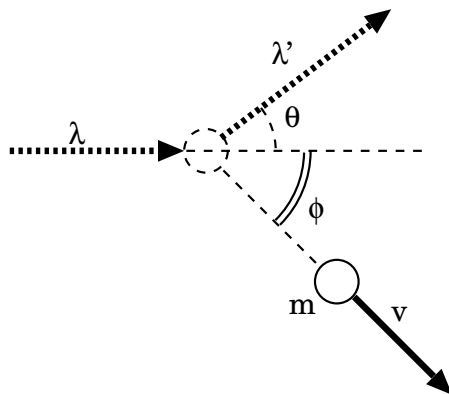
2.4 コンプトン効果

同じく光の粒子性を示す実験として知られているのがコンプトン効果である。この実験では電子に X 線を照射し、はねかえってきた X 線の波長を測定する。すると、X 線の波長は少し長くなっている。この現象自体はコンプトンの 1923 年の実験以前に知られていた。コンプトンは入射 X 線の波長 λ とはねかえってくる X 線の波長 λ' 、そして X 線が散乱される角度 θ の間に、

$$\lambda' - \lambda = 0.024 \times 10^{-10}(1 - \cos\theta)[m] \quad (2.9)$$

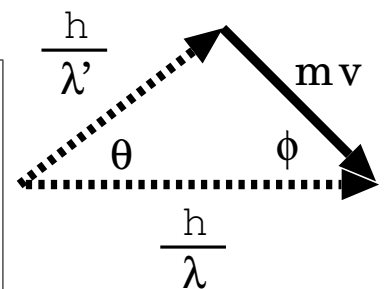
という関係があることを実験でしめした。

静止していた電子 (質量 m) に振動数 ν の光 (実験では X 線) があたり、これが振動数 ν' で、元の方角と角度 θ だけ違う角度に散乱されたとしよう。電子はこの時、この光と同一平面内で、最初の光の進行方向に対し角度 ϕ 、速さ v (光速 c に比べ小さいとする) で飛び出すとする。



[問い 16] 光を波動と見れば、この振動数変化をドップラー効果と考えることができる。静止している電子に振動数 ν の光があたり、電子はそのエネルギーを吸収したのち、上に述べた方向に速さ v で動きながら振動数 ν の光を出すとして、 ν' を求める式を作れ。

この現象に関する運動量保存則をベクトル図で表わすと右の図のようになる。



[問い 17] この図から、 $\cos\theta$ に関する式 (他の角度は入らない式)、 $\cos\phi$ の式、 $\cos(\theta + \phi)$ の式、をそれぞれ作れ。

[問い 18] エネルギー保存を示す式を作れ。

[問い 19] 以上の式が、古典的なドップラー効果の式を含んでいることを示せ (v^2 は c^2 に比べて小さいとする近似を使え)。

ヒント：ドップラー効果の式には m が含まれていないから、まずこれを消去する。

⁷まだ相対論の講義がそこまですすんでいないので解説しないが、一般に質量 m の粒子に対しては、エネルギー E と運動量の大きさ p の間に $E^2 - p^2c^2 = m^2c^4$ という式が成立する。光子はこの質量 m が 0 になっている場合である。

[問い20] 以上の式から、コンプトンによる実験式が出てくることを確認せよ。電子の質量は $9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$ である。

ヒント: ν と ν' はほぼ等しいので、 $\nu^2 + (\nu')^2 = 2\nu\nu'$ という近似を行なえ。

以上のように光を粒子と考えると、コンプトン効果は光子と電子の衝突という物理現象として矛盾なく記述される。古典的に考えれば（運動量が $\frac{h}{\lambda}$ という塊であることが古典的には出てこない）この結果は説明できない。

以上のようないろいろなことから、光の粒子性は疑いのないものになったと言える。

2.5 粒子性と波動性の二重性

この章では、光を粒子と考えなくては都合の悪いことを並べ立ててきた。しかし一方、光を波と考えなくては都合の悪いこともたくさんある（前に述べたヤングの実験などの干渉現象が代表的なもの）。このような性質を「光は粒子性と波動性を持つ」と言う。言うのはやさしいが、この二重性の意味するところは何なのか。当時の物理学者ボルンは「月・水・金は光を波動であると考え、火・木・土は光を粒子と考える」などとふざけているが、量子力学が完全に確立されるまでの間は「ある時は粒子と考え、ある時は波動と考える」というよく言えば臨機応変、悪く言えばその場しのぎの方法がとられてきた。問題はどんな「ある時」に波動性があらわれ、どんな「ある時」には粒子性があらわれるかである。それがわからないとちゃんとした物理にならない。

しかし、その解決の前に、学ぶべきことがある。この章では「波動だと思っていた光には粒子性がある」ということを学んだが、この逆、すなわち「粒子だと思っていた物質（電子など）にも波動性がある」ということを知らねばならない。これが次章のテーマである。

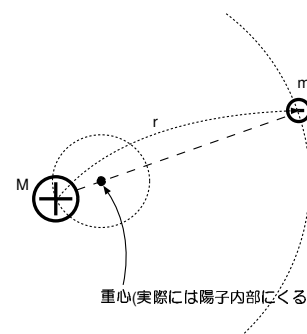
この章では、1900年のプランクの光のエネルギー量子の発見から、1923年のコンプトン効果の実験まで、「光の粒子性」の発見について述べてきた。「光の粒子性」の発見と「物質の波動性」の発見は同時に進行したので、次の章ではボーアが原子模型を発表した1913年まで、いったん時代を戻すことにする。

第3章 ボーアの原子模型

前章で書いたように、光は粒子性と波動性の両面を持ち、相手によって（あるいは状況設定によって）そのどちらかの側面を顕わす。特にエネルギーの不連続性は、光を波動として捉えると非常に不思議な現象である。しかし、この不思議な性質は光子だけにあるのではない。エネルギーなどの物理量が連続的値を取ると考えると説明できないことが物質の場合にもある。物質の不連続性の顕れの一つは、原子の中の電子の状態である。

3.1 原子模型の困難

ラザフォードは1911年にアルファ線を非常に薄い金板にあてる実験で「原子の中心にはプラス電気を持った核がある」ということを示した。これにより、プラスの電気を持った原子核の回りをマイナスの電気を持った電子が回る、という古典的な原子像が考えられた。我々が考える「原子の大きさ」は原子核の大きさではなく、まわりを回っている電子の広がり大きさである。しかし、この（それこそ中学校の理科の教科書にも載っている）おなじみの原子模型は、現実の原子を説明できない。なぜなら、古典力学的計算では電子の持っているエネルギーは原子核に近づくほど小さくなる。そして、古典力学的観点からは、電子がどのような半径で回るかは、全く任意である。たとえば、ほぼ同じような運動方程式で表すことができる、惑星の円運動（実際には楕円である）は古典力学にしたがうと考えていいが、軌道半径にはなんら制限はない。



[問い 21] 質量 M の陽子と質量 m の電子が距離 r 離れて、クーロン力で引き合いながら重心の回りを角速度 ω で等速円運動している時の運動方程式をたててみよ。二つの粒子の運動方程式はどちらも、「一方が静止し、もう一方が $\frac{Mm}{M+m}$ という質量を持って半径 r 、角速度 ω の円運動をしている」場合の運動方程式と同じになることを示せ。クーロンの法則の比例定数を k 、素電荷を e とする。

[問い 22] この系の持つ全エネルギーを、 k, r, e で表せ。（注： M, m, ω はちゃんと計算すれば消える）

原子核の半径は、原子の半径（およそ、電子が円運動している半径）に比べ、 10^{-5} 倍以下である。なぜ電子はもっと下の、エネルギーの低い方にいかないのだろう？—まして今電子は加速度運動をしており、加速度運動する荷電粒子は一般に電磁波を放出することによってエネルギーを失うはずである。

[問い 23] 電荷 q を持った粒子が加速度 a の加速運動をしている時、単位時間あたり $\frac{2k(aq)^2}{3c^3}$ のエネルギーを電磁波として放射する。電子が陽子から距離 r の位置を回っているとすると、この時放射されるエネルギーは単位時間あたりどれだけか。（陽子の放射する電磁波は無視して考えよ）

「物体はエネルギーの低い方に行きたがる」という原則からすると、電子はこの電磁波を放出しながら、どんどん原子核に近づくはずである。そして、その時間は驚くほど短い。

[問い24] [問い22] で計算した電子の持つ全エネルギーの式で、時間によって変化しうるのは r だけである。この全エネルギーの式の時間微分にマイナス符号をつけたものは、さっき計算した単位時間に放射されるエネルギーに等しい。これを微分方程式として時、何秒後に $r = 0$ になるか、計算してみよ。最初電子は半径 $5.0 \times 10^{-11} \text{m}$ のところを回っていたとして考えよ。

しかし現実には、どの原子を見ても、電子は一定の場所を回っているようである。何かが電子に制限を加えているのである。古典力学的に考えるとけっして電子の軌道に制限が出てこない、ということは次元解析からもわかる。水素原子の半径を何かから計算できるとしよう。この場合、その計算結果に使える「材料」となる量は

	次元	MKSA 単位系での数値
陽子の質量 M	$[M]$	$1.7 \times 10^{-27} \text{kg}$
電子の質量 m	$[M]$	$9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$
素電荷 e	$[Q]$	$1.6 \times 10^{-19} \text{C}$
クーロンの法則の比例定数 k	$[ML^3T^{-2}Q^{-2}]$	$9.0 \times 10^9 \text{F}^{-1}\text{m}$

である。中央の枠の [] に書いたのはそれらの量の持つ次元で、 M は質量 L は長さ、 T は時間、 Q は電気量を表す。単位で書くなれば、 $[L]$ はメートル、 $[M]$ はキログラム、 $[T]$ は秒、 $[Q]$ はクーロンである。物理の計算では必ず次元が揃わなくてはならない¹。クーロンの法則の比例定数の次元が上のようになるのは、 $F = \frac{ke^2}{r^2}$ のように、 $e^2[Q^2]$ をかけて $r^2[L^2]$ で割ると力 $[MLT^{-2}]$ になるからである。

もし原子の半径が計算できるとしたら、これらの量を使って作られた、長さの次元 ($[L]$) を持つ式が出てくることになる。しかし、どうやってもそんなことはできない。すぐにわかることは $[L]$ を含むのは k だけだが、その k に含まれている $[T]$ を消してくれる相手がどこにもいないことである ($[M]$ や $[Q]$ は消してくれる相手がいる)。

[問い25] ケプラーの第3法則 (公転周期の自乗と軌道長径の3乗が比例する) を、次元解析だけから導け (この場合使える物理定数は万有引力定数 G である)。

[問い26] 弦を伝わる横波の伝播速度は、弦の線密度 ρ と弦の張力 T に依存する (ギターの弦を考えてみよ)。どのように依存するかを次元解析から導け。

3.2 ボーアの量子条件

前節のようなおかしい結果になった理由として、「原子の内部のようなマイクロな領域では、マックスウェルの電磁理論やニュートン力学が成立しないのではないか?」という考えが浮かぶ。実際、マックスウェルの電磁気学が成立しなくなることがあることは、プランクたちが光の粒子性という形で示している。

そこで、プランクが「光のエネルギーは $h\nu$ の整数倍である」としたように、 h を含む条件をつけることでこの状況が回避できるのではないかと考えられる。ありがたいことに h の次元は $[ML^2T^{-1}]$ であり、上の量と組み合わせることで次元が $[L]$ になる量を作れそうである²。

その条件はボーアの量子条件と呼ばれるもので、電子が円軌道を描くと考えた場合には、

$$mv \times 2\pi r = nh \tag{3.1}$$

¹次元という概念が理解しにくい人は、まず「物理の計算では両辺の単位が揃わなくてはならない」というところから理解していくとよい。

²プランクは始めてプランク定数を導入した時、「次元のある物理定数が増えた」ということを一番喜んだという話である。

と書かれる。 n は自然数であり、 h はプランク定数である。 h がちょうど (運動量) \times (座標) という次元を持っていることに注意せよ。歴史的にこのような条件が出てくるまでは、電磁場 (光) の場合の $E = nh\nu$ をいかにして一般化していくかということから始まる、長い話があるのだが、「 h が式に入ってくるとしたら、(運動量) \times (座標) という形になっていれば次元が合う」という程度で理解しておいて欲しい。後でド・ブロイの物質波の話や、Schrödinger 方程式の話などが出てくると、この式の意味も少し物理的にわかってくると思う。

この条件によって電子のエネルギーは下限を持つことになる。ボーアの条件は r が小さくなると v が反比例して大きくなることを示しているが、運動方程式は r と v^2 が反比例するという制限を与えている。両方を成立させるには特定の軌道しか回れないことになる。

ボーアは、量子条件が満たされている時には古典力学での運動方程式が成立していて、電子は電磁波を放出することはないと考えた。ただし、後で述べるようにある軌道から別の軌道へ (つまり量子条件の n が違う状態へ) 移る時には、その軌道間のエネルギー差分のエネルギーを吸収または放出する。

まず、次元解析から電子の半径がどう予想できるかをしめそう。上に書いたように、次元 $[T]$ を消去せねばならない。 k に $[T^{-2}]$ 、 h に $[T^{-1}]$ が入っていることから、 $\frac{h^2}{k}$ という組み合わせが必要である。この組み合わせだと、次元は $[MLQ^2]$ であるから、 $[MQ^2]$ を消すために M, m, e を使う。原子の半径に関係するのは原子核と電子の相対運動であるから、相対運動を記述する時に出てくる質量である換算質量 $\mu = \frac{Mm}{M+m}$ を使って次元 $[M]$ を消すのが妥当だろう (ただし、この場合の換算質量は電子の質量とそう大きくは変わらない。換算質量の意味については、[問い21] を参照)。

以上から、原子半径 (電子の円運動の半径) r は (無次元定数) $\times \frac{h^2}{k\mu e^2}$ という形になると考えられる。具体的な数字をいれてみると、この値は

$$\frac{h^2}{k\mu e^2} = \frac{(6.6 \times 10^{-34})^2}{9.0 \times 10^9 \times 9.1 \times 10^{-31} \times (1.6 \times 10^{-19})^2} = 2.1 \times 10^{-9} \quad (3.2)$$

となる。この値は原子の半径よりちょっと大きいのだが、実は具体的に計算してみると、この答えには無次元定数として $\frac{1}{(2\pi)^2} = 0.0253$ がかり、 $5.3 \times 10^{-11} \text{m}$ という答えが出て、現実の原子半径ぐらいになるのである。この値をボーア半径と呼ぶ。

ここで、計算の中に h が登場してきた時に、自然数 n がいっしょにくっついてきたことを思えば、最終結果でもそうなっているだろうと考えられる。よって、半径は (無次元定数) $\times \frac{n^2 h^2}{k\mu e^2}$ という式になるだろう。つまり、電子の運動の半径は、 $n^2 \times$ (ボーア半径) のように、 n^2 に比例する。

一方、電子の持つエネルギーは $-\frac{ke^2}{2r}$ で表される (上の問題参照) から、全エネルギーは

$$-(\text{未定の無次元数}) \frac{k^2 \mu e^4}{n^2 h^2} \quad (3.3)$$

となる。(未定の無次元数) の部分を求めるには具体的計算が必要である (次の問題で実行せよ)。

[問い27] これまでに求めた古典力学での式とボーアの量子条件を使って、許されるエネルギーを計算せよ。結果を $-\frac{E_1}{n^2}$ という形 (E_1 は定数) と表せ。

結果を数値で書くと、

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2} \text{eV} \quad (3.4)$$

である。

原子が安定して存在できるのは、この条件が満たされない軌道が存在しないからである。特に、 $n = 1$ の軌道よりエネルギーの低い状態が存在しないのだから、それよりも下に落ちることはできない。量子条件がなければ、この世にある原子はみな、原子核のサイズまで縮んでしまうことになる（その前に原子核も存在できないだろうけれど）。

[問い28] 水素ではなく、ヘリウムを考える。ただし電子は一個しか回っていないとする（ He^+ イオンの状態である）。この電子の持つエネルギーと基底状態での原子の大きさを計算せよ。水素と比べて、何倍違うか？

[問い29] 水素原子の回りに電子でなく μ 粒子（性質は電子に似ているが、質量が約 200 倍）が回っていたとする。この水素原子もどきの基底状態での大きさは通常の水素原子に比べて何倍か。

3.3 ゾンマーフェルトの量子条件と位相空間

以上のような現象を見ていくと、たとえば光のエネルギーは $nh\nu$ 、原子内の電子のエネルギーは $-\frac{E_1}{n^2}$ という形に「量子化」されている。どちらの条件においても、同じプランク定数 h が大事な役割を果たしていることに注意すべきである。光であるとか電子であるとかに限らず、プランク定数 h を通して「物質（光を含む）の取り得る状態」に制限がつけられることになる。

その制限がボーアの量子条件なのだが、より一般的には、ゾンマーフェルトによって

$$\oint pdq = nh \quad (3.5)$$

の形に書かれている。 p, q はそれぞれ一般化運動量と対応する一般化座標であり、 \oint は周期運動一回分の積分である。

一般化座標 q とそれに対応する一般化運動量 p の両方を座標として扱った 2 次元の空間 (q, p) （座標が N 個あるならば $2N$ 次元の空間になる）を位相空間と呼ぶ。時間がたつと q も p も変化していくが、その変化の軌跡は決まった線になる。位相空間内の各点は運動方程式（正準方程式）で決められた方向に移動するからである。 H が t を陽に含んでいない場合、 H はその線上で一定値を保つ。

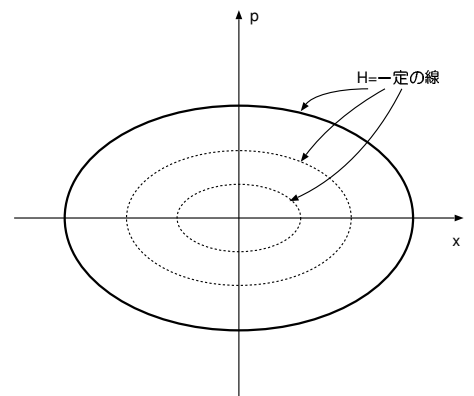
たとえば、ハミルトニアンが

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (3.6)$$

で表せる系（バネ定数 $k = m\omega^2$ のバネにつながれた質量 m の調和振動子）の場合の位相空間を考えよう。この物体は $H = E$ （一定値）となる線の上を動くことになるが、それはつまり、 (x, p) 座標系

でみると、 p 方向の径が $\sqrt{2mE}$ 、 x 方向の径が $\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$ の楕円である。調和振動子が 1 回振動するたびに、位相空間内の点はこの楕円を時計回り方向に 1 周する。 $\oint pdq$ という積分を 1 周分行うということは、この楕円の面積を求めていることになる。ゾンマーフェルトの条件は、位相空間における面積を計算していると考えて良い。楕円の面積公式 $S = \pi ab$ (a, b は長半径と短半径) により、

$$\oint pdx = \pi\sqrt{2mE} \times \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = 2\pi\frac{E}{\omega} \quad (3.7)$$



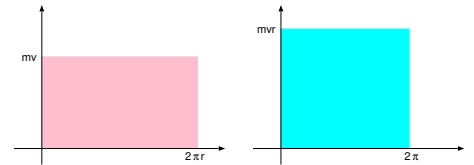
[問い30] この調和振動子が $x = A \sin \omega t$ で表される振動をしていると考えて、 $\oint pdx = \int_0^T p \frac{dx}{dt} dt$ となること (T は周期) を使って $\oint pdx$ を計算し、上の計算と比較せよ。

ゾンマーフェルトの量子条件を適用すれば、この値は nh なので、

$$E = nh \frac{\omega}{2\pi} = nh\nu \quad (3.8)$$

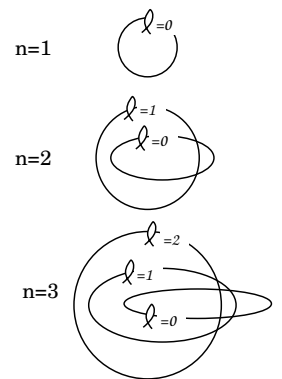
となる。このように、調和振動子のような系では、ゾンマーフェルトの量子条件は $E = nh\nu$ を与える。実は電磁波の場合でも同様の計算が成立して $E = nh\nu$ を与えるので、この条件は光や電子や、いろんな場合で共通して使える、一般的な条件なのである。

原子模型の場合に話を戻そう。電子が等速円運動しているなら、運動量の大きさは mv で一定で、一周すると q (位置座標) が $2\pi r$ 変化する。これから (3.1) が出る。あるいは、 p として角運動量 mvr を取り、対応する座標として角度をとれば、一周は角度 2π であるので同じ結果になる。



ここまでは電子は円運動していると考えたが、惑星のように楕円運動をしてもよいはずである。

楕円運動 (に相当するもの) を含めた詳しい計算は後で、より物質の波動性との関連が明らかになってから行うが、簡単に結果を述べておくと、やはりこの場合も量子条件により、どんな形の楕円でもいい、というわけにはいかない。許される電子の軌道は主量子数と呼ばれる n (自然数) と、軌道量子数と呼ばれる ℓ (0 以上の整数で、最大値は $n-1$ 。楕円の扁平さを表す)、および磁気量子数と呼ばれる m (整数で $-\ell < m < \ell$ 。軌道の傾きを表す。0 の時は円) で分類できる。エネルギーは主量子数 n だけに依存する ($E = -\frac{E_1}{n^2}$)。主量子数 n の状態には、 $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$ の状態³ があり、各々の ℓ の値に対し磁気量子数が $-\ell$ から ℓ までの $2\ell+1$ 個ずつある。よって主量子数 n の状態は



$$\underbrace{1}_{\ell=0} + \underbrace{3}_{\ell=1} + \underbrace{5}_{\ell=2} + \dots + \underbrace{(2n-1)}_{\ell=n-1} = n^2 \quad (3.9)$$

個あることがわかった。このように、同じエネルギーを持つ状態がたくさんある時、「縮退 (degenerate) している」と言う。後でわかった「スピン」という状態変数のおかげで状態数は全て 2 倍されるので、 $n = 1, 2, 3, \dots$ の状態は $2, 8, 18, \dots$ 個ずつあることになる。この $2, 8, 18$ という数字は原子の周期表に出てくる 1 行あたりに並ぶ元素の数である。原子の回りを回る電子の配置が化学的性質の違いを作っていることを示している⁴。また、すでに他の電子が入っている状態にもう一つの電子が入ることはできない (パウリの排他律) という事もわかっている。なぜそうなのかはずっと後になってわかることになる。

3.4 状態の遷移と原子の出す光

今求めた通り、水素原子内の電子の持つエネルギーは $-\frac{E_1}{n^2}$ で表される。したがって $n = 1$ に対応する軌道 (基底状態) は安定であるが、 $n = 2, 3, 4, \dots$ の状態 (励起状態) はそうではない。電子はすきさえあればよりエネルギーの低い状態へと飛び移ろうとする。逆に何かからエネルギーをもらおうと、より高い軌道へと飛び移る。これを「遷移」(transition) とか「量子ジャンプ」などと言う。途

³ $\ell = 0, 1, 2$ の状態をそれぞれ s 状態、p 状態、d 状態と呼ぶ。さらに前に主量子数をつけて、1s 状態 ($n = 1, \ell = 0$) とか 2p 状態 ($n = 2, \ell = 1$) などと呼ぶこともある。

⁴なぜヘリウム (原子番号 2)、ネオン (原子番号 10) が安定なのかは、これらの原子の回りを回っている電子がちょうど主量子数 $n = 1, 2$ をきっちり満たす数であることと関係がある。

中の軌道は量子条件が許さないので存在できない。たとえば $n = n_2$ から $n = n_1$ (当然 $n_2 > n_1$) へと遷移すると、エネルギーが

$$E_{n_2 \rightarrow n_1} = E_1 \left(\frac{1}{(n_1)^2} - \frac{1}{(n_2)^2} \right) \quad (3.10)$$

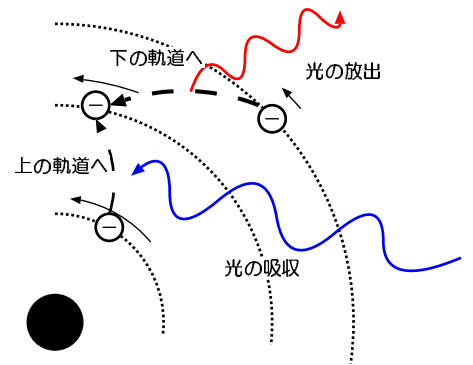
だけ余る。

ボーアは原子が光を出す時は、このような軌道の遷移が起こり、その時に余ったエネルギーが光子一個になって放出されると考えた。その時出る光の振動数はエネルギー保存則により、

$$h\nu_{n_2 \rightarrow n_1} = E_1 \left(\frac{1}{(n_1)^2} - \frac{1}{(n_2)^2} \right) \quad (3.11)$$

を満たす。この式は、それよりも前から求められていた、水素原子から出てくる光の波長に関する式

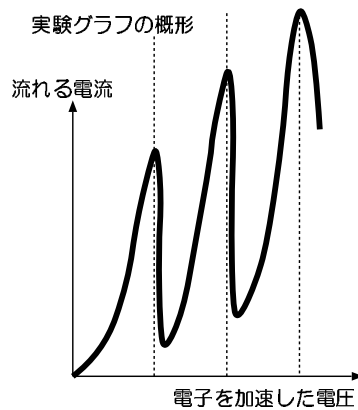
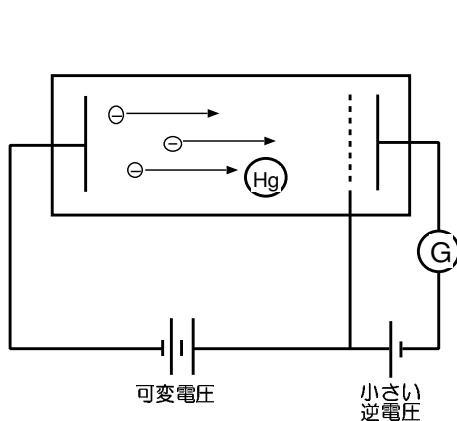
$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{(n_1)^2} - \frac{1}{(n_2)^2} \right) \quad (3.12)$$



と比較された (R はリュドベリ定数)。 $\nu = \frac{c}{\lambda}$ を使うとこの二つの式は完璧に一致し、ボーアの原子模型が現実の水素原子を表していることが確実となった。と同時に、この原子模型における「遷移」の存在は、原子の内部では古典力学が役に立たないということを証明している。

炎色反応で代表されるように、原子はそれぞれ特有の光を吸収・放出する。それは各原子ごとに電子の回っている軌道と、そのエネルギーの値が違っているからである (水素以外の原子の場合は、電子が2個以上回っているのが話はずっと複雑になる)。

フランクとヘルツ⁵は原子内の電子の持つエネルギーがとびとびであることを、以下のような実験 (1914年) で証明している。



水銀の蒸気を満たした管の中に電子を発生させ、電圧をかけて管内を走らせる。電子がやってきた先には網と、その後ろに電子を追い返すような逆電圧をかけたプレートが待ち構えている。電圧を高くすれば走ってきた電子は勢いで網を通り抜けてプレートに入り、検流計に電流が流れるのだが、電圧が4.9Vを超えると、突然電流が減少する。これは管内に放出された電子のエネルギーをもらって、水銀のまわりを回る電子が励起するからである。

この時走ってきた電子はエネルギーを失う。つまり水銀の場合の $E_2 - E_1$ に相当するエネルギーが4.9eVぐらいであり、4.9eV以下のエネルギーしか持っていない電子では、水銀原子を励起することはできない。ということは逆に、4.9eV以下のエネルギーしか持っていない電子はエネルギーを取られることはないのである (貧乏人は泥棒に狙われない)。電圧が9.8Vを超えると、今度は2個の水銀原子を励起できるので、また電流の減少が起こる (13.7Vでも同様)。この実験によって、原子の回りの電子が確かに基底状態、励起状態という安定状態を持っていることが確認できた。

⁵このヘルツは電磁波を発見し、光電効果発見のきっかけとなる実験を行ったヘルツの甥。

第4章 物質の波動性

前章で、ボーアの量子条件を導入することで原子の中の電子の運動の法則性を得ることができた。しかし、このボーアの（あるいはゾンマーフェルトの）量子条件の物理的意味はなんだろうか？—光の粒子性を表す数値であるプランク定数 h がここにも登場したことには、何か本質的な、統一された意味を見つけることができるのだろうか？

4.1 ド・ブロイの仮説

ド・ブロイは「波動だと思っていた光に、光子という粒子的記述が必要であることがわかった。ならば、粒子だと思っていた電子やその他の粒子にも、波動的記述が必要なのではないか？」という着想のもと、物質の波動論を展開した（1923年）。ド・ブロイはアインシュタインによる光量子のエネルギー $E = h\nu$ と運動量 $p = \frac{h}{\lambda}$ の式を電子などにも適用して、

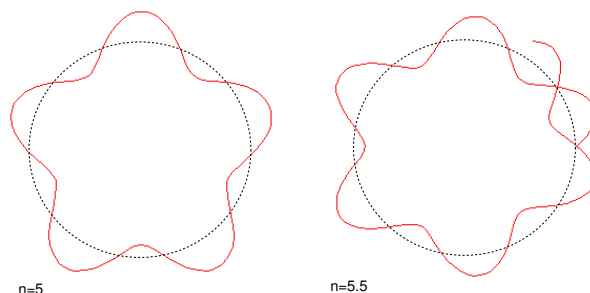
$$\frac{p^2}{2m} + V = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (4.1)$$

という式が成立するのだと考えた。 p は粒子の持つ運動量、 V は位置エネルギーである。つまり運動エネルギー $\frac{p^2}{2m}$ と位置エネルギー V の和である全エネルギーを $h\nu$ と置き換えた。

この置き換えの結果、ボーアの量子条件には明確な物理的意味が生まれた。円運動している場合のボーアの量子条件は $mv \times 2\pi r = nh$ であったが、 mv の部分をド・ブロイの関係式をつかって $\frac{h}{\lambda}$ と置き換えると、

$$\frac{h}{\lambda} \times 2\pi r = nh \quad \text{すなわち} \quad 2\pi r = n\lambda \quad (4.2)$$

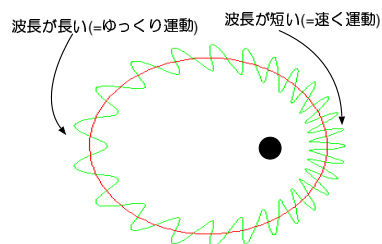
という式が出てくる。これは、円軌道の上を波が進んで一周する（ $2\pi r$ 進む）間の距離に自然数個の波が入っていることを意味するのである。



これによって、ボーア・ゾンマーフェルトの量子条件に、物理的な意味が生まれた。

楕円軌道の場合、電子が原子核に近づくと p は大きくなる。なぜなら今、

$$E = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{ke^2}{r} \quad (4.3)$$



が一定となっており、 r が小さくなると p が大きくなるからである。よって $\oint pdq$ を計算する時、半径が小さいところでは p を大きく、大きいところでは p を小さくしながら積分を行うことになる。 p が大きいということは波長 λ が短いということだから、半径が小さいところでは波長が短くなり、半径が大きいところでは波長が長くなることを意味している。

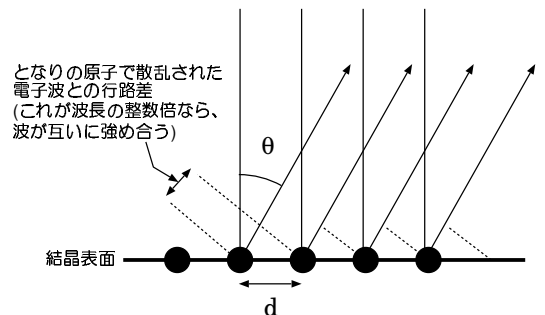
古典力学的に考えると「位置エネルギー V が増えると運動エネルギーが減る」という現象が起きているが、波動として考えると「 V が大きい場所では波長が伸びる」という現象が起きていることになる。ド・ブロイの波動力学では、位置エネルギーというものへの捉え方が古典力学とは違ってきている。結果としてこの二つの力学が同じような結果を示すようになっているのである（詳細は後で示す）。

4.2 電子波の確認

いかにド・ブロイの仮説がボーアの量子条件をうまく説明しても、それだけで電子もまた波であるという確証は持てない。しかし、電子が波動としてふるまう現象が、他のところでも見つかった。量子条件は原子内のような特別な場所でだけ課される条件ではなく、電子の波動性という、より一般的な現象の顕れの一つに過ぎなかったのである。電子の波動性をより直接的に示したのは1927年に Davisson が行った電子線回折の実験である。Davisson と Germer はド・ブロイが物質波の考え方を発表するよりも前から、ニッケルや白金に電子をあててその反射する方向を見るという実験を行っていた。すでに1923年の時点で、Davisson は電子線の数を角度を横軸にグラフにしてみたところ、奇妙な凹凸があらわれることに気づいていたが、当時は原子の中にある電子がボーア模型のように殻状になっていることから来るのではないかと考えていた。1925年、実験でちょっとした事故が起こった。そのためニッケル板が酸化してしまったので、酸化したニッケルを元にもどすために真空中でニッケルを加熱した。不思議なことに、その後の実験では奇妙な凹凸が顕著になったのである。加熱してもまた冷却してから実験しているのだから、原子内の電子の運動が変化しているとは考えがたい。これは高温状態を経たニッケルが再結晶化した、つまりニッケル原子が加熱前より規則正しく並んだ結果ではないかと考えられた。

そこで Davisson らは1927年、ニッケルの単結晶板で実験を行い、電子が特定の角度に強く散乱されることを確認した。

規則正しく並んだニッケルの結晶表面に電子の波がやってきて、原子一個一個によって散乱される。特定の角度に散乱された場合に限って、となりの原子での散乱波との行路差が波長の整数倍になって互いに強め合うことになる（原子がきれいに並んでなければ、各原子ごとに強め合う条件が変わってしまうので、きれいな形で強弱が見えたりしない）。そのように波が強めあった場所にだけ電子が到達すると考えると、特定の角度にだけ電子が散乱されることが説明づけられ、奇妙な凹凸も理解できる。



[問い31] 上の図のように、電子波が結晶面の法線方向から入射したとする。表面の原子で電子が散乱された時、どのような角度への反射波が強められるか。

これと似た、X線が特定の方向に強く散乱されるという現象は、ラウエによって1912年に発見されていた。この現象はX線が波動であるがゆえに起こることである。全く同じような現象を電子が起こすということは、電子も波動としてふるまっていることになる。Davisson たちはいろんな運動量の電子をあててみて、運動量によって回折パターンが変化することを確認し、その現象からド・ブロイの式 $p = \frac{h}{\lambda}$ を実験的に確認した。こうなると、電子が波としてふるまうことも、誰にも否定できない事実となったのである。

電子波の波長は可視光に比べて短くできる。波長が短いほど、その波を使って作った顕微鏡の分解能は小さくなる。光学顕微鏡では発見できないウィルスも電子顕微鏡でなら見ることができるのは、

電子波の波長の長さのおかげである。

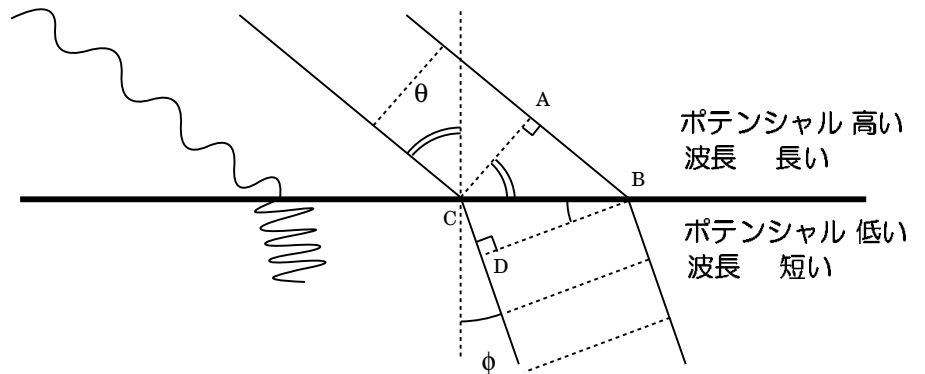
4.3 波動力学と古典力学の関係

では、このような物質波のふるまいと、それを粒子として見た時のふるまいにはどのように関係がつくのであろうか。すでに説明したように、ド・ブロイの式が成立していると、エネルギーの保存が

$$\frac{h^2}{2m\lambda^2} + V = \text{一定} \tag{4.4}$$

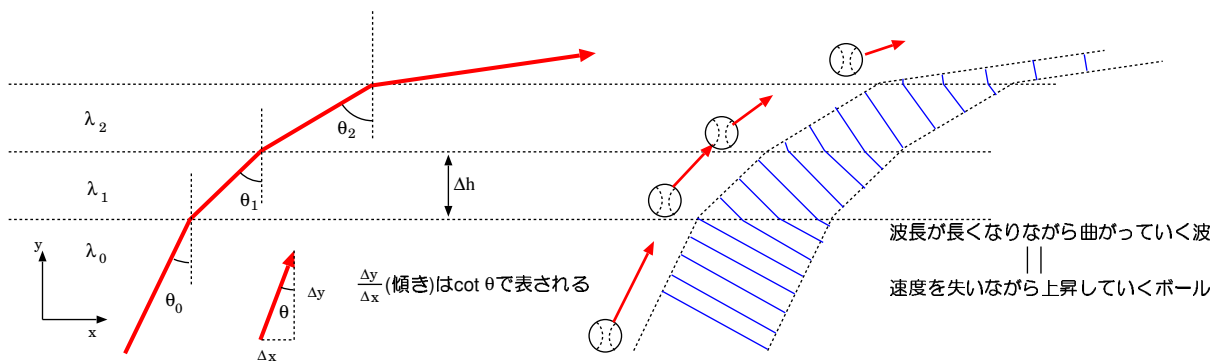
という形になる。これは普通のエネルギー保存則に $p = \frac{h}{\lambda}$ を代入したものである。すなわち、 V が大きいところでは λ が長くなり、 V が小さいところでは λ が短くなる。つまり、ポテンシャル（位置エネルギー）の違いは波長を変化させるのである。

ある線を境に、上ではポテンシャルが大きく、下ではポテンシャルが小さくなっている時、何が起こるだろうか。上では波長が長く、下では波長が短くなるから、ちょうど空気中から水中に光が入射した時と同じ現象である。この時、光は屈折するが、屈折する理由は、上の部分の波（空気中の光）の波長が下の部分の波（水中の光）の波長より長いからである。図の AB



が1波長（Aが山の時Bも山）になっているとすると、CDも1波長（Cが山の時Dも山）である。AB > CDであるために、上の部分では波面（山の連なり）がACと平行であったのに、下の部分では波面がBDと平行になってしまう。

この屈折現象を粒子の古典力学で考えると、上より下の方がポテンシャルが低いため、下の方にひっぱりこまれる、という現象である。つまり、古典力学で「落ちる」という現象が波動力学では「屈折する」という現象にとって変わっているのである。



たとえば重力下での粒子（図ではボールにしてある）の運動を考えると、高いところほど位置エネルギー mgh が大きいから、その分物質波の波長が長くなる（運動エネルギーが減る）。この場合はポテンシャルは連続的に変化していくが、図のように段階的に変化していくとしよう（図で書いた点線の境界線を上に超えるごとに $mg\Delta h$ ずつポテンシャルが高くなるとする）。つまり境界線を上に超

えるごとに波長が長くなっていくから、そのたび、波が下に下にと曲げられていく。これを重力場中で投げ上げられた物体が落下するという現象だと考えることができる。どちらの計算でも運動方程式が出てくるのだが、古典力学では力によって運動量が変化すると説明し、波動力学では波長の差が波を曲げる、と説明するのである。

[問い32] 図の角度に関して、屈折の法則から、

$$\frac{\sin \theta_0}{\lambda_0} = \frac{\sin \theta_1}{\lambda_1} = \frac{\sin \theta_2}{\lambda_2} = \frac{\sin \theta_3}{\lambda_3} = \dots$$

という式が成立する。一方エネルギー保存則

$$\frac{h^2}{2m(\lambda_n)^2} + nmg\Delta h = E(n \text{ によらず一定})$$

も成立する（位置エネルギーの原点を $n=0$ に取った。 n が大きくなるごとに位置エネルギーが $mg\Delta h$ ずつ増える）。これから、高さ $n\Delta h$ と角度 θ_n の関係式を作れ（初期状態を表す θ_0, λ_0 は結果に使うよい）。

[問い33] 最高点が (x_0, y_0) で x 方向の初速度が v_{0x} であるような斜め投射の軌道は、

$$y - y_0 = -\frac{g}{2(v_{0x})^2}(x - x_0)^2$$

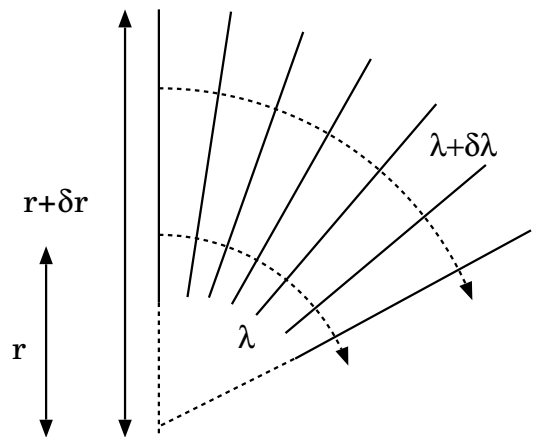
と書ける。この式から軌道の傾き $\frac{dy}{dx}$ を計算して y で表し、前問で求めた θ_n と $n\Delta h$ の関係式とを比較せよ。

あるいは図のように、ある物質波が円を描くように進行しているところを考えよう。内側（半径 r ）では波長が λ に、外側（半径 $r + \delta r$ ）では波長が $\lambda + \delta\lambda$ になっているとする。このように物体が円運動する理由は、粒子として考えると、中心に向かう力があるために曲ったと考えられるが、波動として考えると、「中心に近いところほど波長が短いから曲る」と解釈できる。

粒子と考えた時、この粒子は半径 r 、速さ v の円運動をしている。この場合の加速度は $\frac{v^2}{r}$ で中心向きであり、働く力は $\frac{dV}{dr}$ でやはり中心を向くので、運動方程式は

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{dV}{dr} \quad (4.5)$$

と書ける。この方程式を、波動としての関係式から求めることもできる（以下の問題参照）。



[問い34] 波動と考えた時、図から波長 λ と半径 r は比例すべきである。よって、 $\frac{\lambda + \delta\lambda}{\lambda} = \frac{r + \delta r}{r}$ が成立する。運動量は λ に反比例するので、 $\frac{p}{p + \delta p} = \frac{r + \delta r}{r}$ となる。内側を通る波と外側を通る波の振動数が等しいという式から、 p と $\frac{dV}{dr}$ の関係式を導き、それが運動方程式と同じ内容であることを確かめよ。

4.4 最小作用の原理と、波の重ね合わせ

次に、古典力学におけるハミルトンの原理との関係を述べる。ハミルトンの原理によると、作用の積分

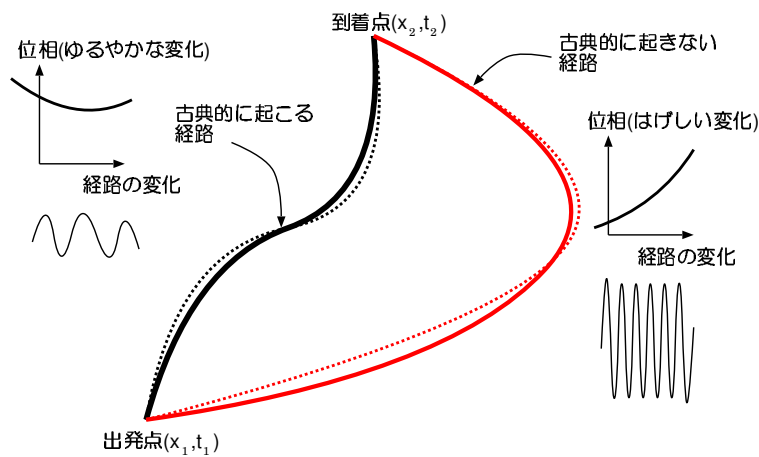
$$\int dt \left(p \frac{dx}{dt} - H \right) = \int (pdx - Hdt) \quad (4.6)$$

が極値となるのが実現する運動であるということが言えた。ここでド・ブロイとアインシュタインの関係式を使って $p = \frac{h}{\lambda}$, $H = E = h\nu$ と置き換えると、

$$\int \left(\frac{h}{\lambda} dx - h\nu dt \right) = h \int \left(\frac{dx}{\lambda} - \nu dt \right) \quad (4.7)$$

が極値になる運動が実現する、ということが言える。この積分の中身の意味を考えよう。波長 λ 、振動数 ν の波が $A \sin \left(2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \right)$ のように書ける (x 方向に波が進んでいる場合) ことを思い出せ。この式からわかるように、時刻 t 、場所 x での波と、時刻 $t + \delta t$ 場所 $x + \delta x$ での波の位相を比較すると、波の位相は $2\pi \left(\frac{\delta x}{\lambda} - \nu \delta t \right)$ だけ変化している。つまり、この量は、位相差 $\times \frac{h}{2\pi}$ である。

なお、今後よくこの $\frac{h}{2\pi}$ という組み合わせが登場するので、 h の上の方に横線を引っ張った記号を使って、 \hbar (「エッチバー」と読む) $= \frac{h}{2\pi}$ と書くことにする。



古典力学でのハミルトンの原理 (「作用の値が極値をとるべし」) に対応するものは、波動力学では、「波の位相が極値をとるべし」である。

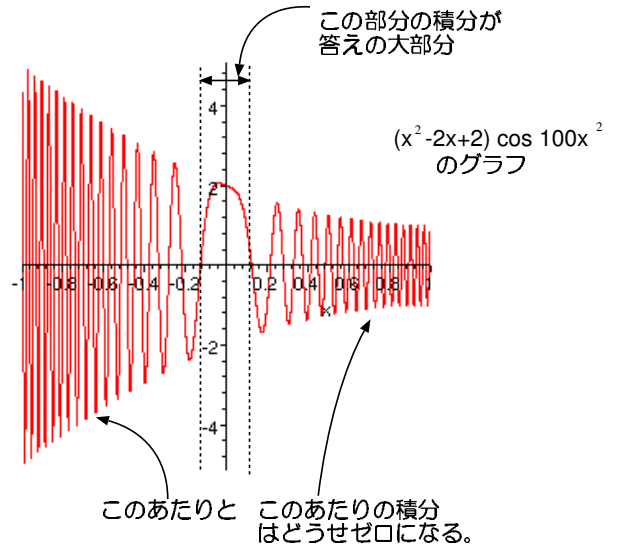
なぜ波の位相が極値を取らなくてはいけないのであろう。今、ある時空点 (x_1, t_1) から (x_2, t_2) へ、いろんな経路をたどって波が到達したとする。 (x_2, t_2) において観測される波は、そのいろんな経路をたどった波の和である。経路によって、波はいろんな位相を取る。そしてそのいろんな位相の波の足し算が行われることになるが、この時足される波それぞれの位相差が大きすぎると、波が互いに消しあってしまう。位相が極値を取るというのが重要なのではなく、極値を取るところでは変化が小さい、ということが重要なのである。変化が小さいところの足し算は、位相が消し合うことなく残る。それに対して位相が大きく変化しているところの足し算は、足し合わされて消えてしまうのである。

つまり、いろんな経路を伝わって波がやってくるが、実際にその場所にやってきた波を作っているのは、位相が極値を取っているような波が大部分である、と考えることができる。そしてそのような経路というのはつまり、古典力学で運動が実現する (作用が極値になる) 経路である。古典力学的立場では、我々は粒子がニュートンの運動方程式にしたがって運動していると考えていた。しかし、波動力学的立場では、進行していくのはたくさんの波の重なりあいである。たくさんの波の大多数は互いに消し合うが、古典力学で計算される経路を通る波は消されずに残る。これが、我々がこの世界で古典力学が成立している (そして、最小作用の原理という物理法則がある) と「錯覚」した理由なのである¹。

つまり、いろんな経路を伝わって波がやってくるが、実際にその場所にやってきた波を作っているのは、位相が極値を取っているような波が大部分である、と考えることができる。そしてそのような経路というのはつまり、古典力学で運動が実現する (作用が極値になる) 経路である。古典力学的立場では、我々は粒子がニュートンの運動方程式にしたがって運動していると考えていた。しかし、波動力学的立場では、進行していくのはたくさんの波の重なりあいである。たくさんの波の大多数は互いに消し合うが、古典力学で計算される経路を通る波は消されずに残る。これが、我々がこの世界で古典力学が成立している (そして、最小作用の原理という物理法則がある) と「錯覚」した理由なのである¹。

¹ 古典力学を一通り学習してのちに量子力学を学ぶので、「古典力学が基本であって、原子や分子のようなミクロな話

この波の重なる様子を具体的に考えるのは難しいので、だいたいのところどういう状況なのかを理解するために、簡単な積分の場合で変化のゆるやかな部分だけが生き残る例を示しておく。右のグラフは $(x^2 - 2x + 2) \cos 100x^2$ のグラフである。この関数は、 $x = 0$ 付近以外では非常に激しく振動している（位相が $100x^2$ という式であることを考えればわかる）。この積分を行うと、ほとんど $x = 0$ 付近だけの積分と同じになる。つまり、 $x = 0$ 付近以外の寄与は、結果にまったくといっていいほど影響されないのである。これと同様のことが、波動力学における波の重ね合わせでも起きている。ゆえに位相が極値となるような経路（古典力学的にはオイラー・ラグランジュ方程式の解となっているような経路）が主要な波の経路であると考えてよい。古典力学と波動力学はこのようにつながる。



[問い35] 上では波の進む道が変化する場合について考えたが、次に、波の進む道は直線であって変化しないとして、波長が変化することによって位相がどう変わるかを考える。自由粒子（粒子には何の力も働いていない）の場合、波の振動数は

$$h\nu = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

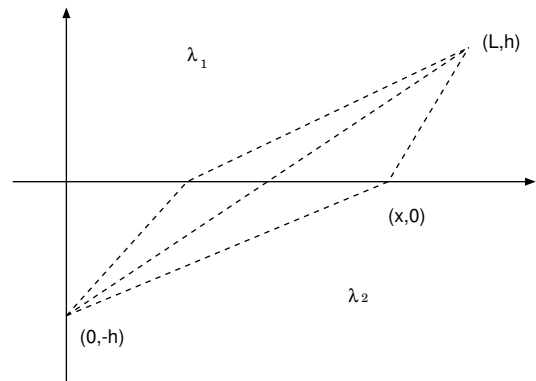
で計算される。今、 $x = 0$ から $x = L$ まで、 $t = 0$ から $t = T$ までの時間をかけて波長 λ の波が直線的に進行したとする。 $t = 0, x = 0$ で位相が 0 だったとすると、 $t = T, x = L$ での位相は

$$2\pi \left(\frac{L}{\lambda} - \left(\frac{h}{2m\lambda^2} \right) T \right)$$

である。 λ の違ういろいろな波が重なったと考えると、この位相が極値となるような波長の波が消されずに残ると考えられる。位相が極値となる条件を求め、その時の $\frac{h}{\lambda}$ を求めてみよう。その物理的意味は何か？

[問い36]

屈折の法則を、位相が極値になるという条件から導出してみよう。2次元平面を考え、 $(0, -h)$ から、 (L, h) まで波が伝播するとする。上半面 $y < 0$ では波長が λ_1 、下半面 $y > 0$ では波長が λ_2 になっているとする。波が $(x, 0)$ において、下半面から上半面に入るとし、そこでは屈折するが、それ以外の場所では直線的に伝播する考える。出発点から到着点までの、距離による位相差 $2\pi \times \frac{\text{距離}}{\text{波長}}$ を計算して、極値となる条件を求め、それを角度の式に置き直すとよい。



をするときだけ量子力学が関係してくる」と思っている人が多いが、実際には量子力学こそが基本であり、たまたま量子力学的現象が顕著でないような場合に限って古典力学を使ってもかまわない、というのが正しい理解である。

第5章 不確定性関係と、波の重ね合わせ

この章では、量子力学における大事な関係式である不確定性関係について述べる。不確定性関係は「不確定性原理」と呼ばれることもある。この関係は、物質（光を含む）の波と粒子性によって必然的にもたらされる性質なのである。

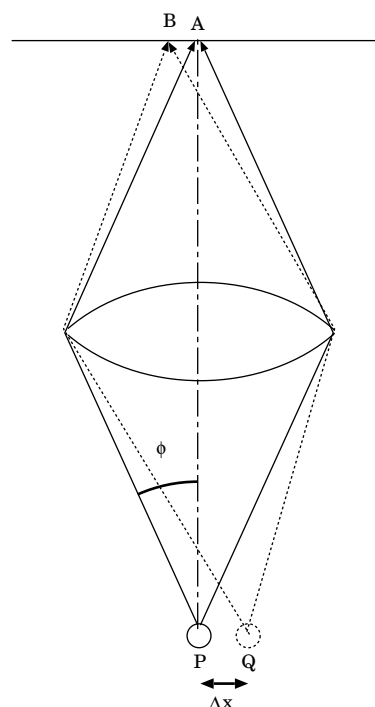
5.1 ハイゼンベルグの思考実験

今電子を顕微鏡で見ることを考えよう。普通の顕微鏡では電子を見ることはできない。顕微鏡あるいはカメラなどの光学系には分解能というものがあ、りたい光の波長よりも小さいものは見ることができないのである。その理由は、以下のように考えることができる。

横から光（この場合、光子という粒子と考える）を当てて、その反射をレンズで集め、スクリーンで見るとする。光を直線的に進んでいく光線のように考えるならば（このような考え方を「幾何光学的」と言う）、レンズの中心の真下 P 点から出た光はちょうどその真上にあたる A 点に到達する。また、レンズの真下より少し離れた点 Q 点から出発した光は、A より少し離れた B 点に到着する。スクリーン上のどこに光がきたかによって、光がどの場所から発せられたかがわかる（カメラであればこの場所にはフィルムがあり、フィルムに塗られた感光物質が化学変化を起こす。目であれば視覚細胞が反応する）。

しかし波だと考えると、P 点から出た波が A 点に到達する理由は、A 点では P 点から来たいろんな光の位相がぴたりと揃い、互いに強め合うからである（このような考え方を「波動光学的」と言う）。いろんな路を通ってきた光の位相が揃う理由は、レンズ中では光速が遅くなるからである。一見遠回りしているかに見える、レンズ周辺を通ってきた光と、直進して近道を通ったかに見えるレンズ中心を通ってきた光は同じ時間をかけて伝播している。それゆえ、P 点でこれらの光の位相はぴったり同じになる。

このように考えると、P 点より少し離れた Q 点から出発した光も、もしも図に書いた二つの光線（破線で表した）の光路差が一波長程度までなら、A に到達することができる（この場合は光は干渉によって消し合うが、完全に消してしまうことはない）。このため、A 点に光が到達したとしても、図の Δx 程度はどこから来たのかを判定できなくなる。近似をつかってくわしい計算をするとこの Δx は $\frac{\lambda}{2 \sin \phi}$ となる。

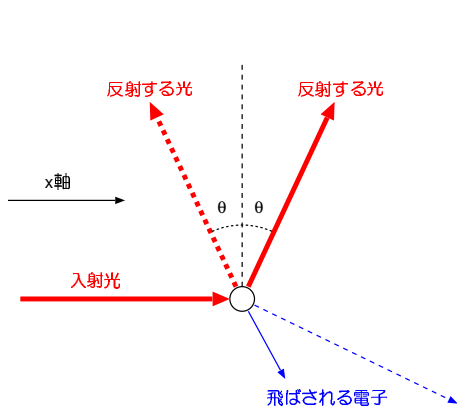


[問い37] Δx を具体的に計算せよ。

くわしい計算をしなくても λ に比例することと、 ϕ が大きければ小さくなることはすぐ理解できる。 λ が大きければ「半波長」も大きくなるので Δx は大きくなる。また、 ϕ が大きいとそれだけた

くさんの光を集めたことになるので、干渉によって光が消される条件がよりシビアになり、 Δx が小さくなる。

では、この Δx を可能な限り小さくするためにはどうすればよいだろうか。一つは ϕ を大きくする、つまりレンズを大きくすればよい。もう一つの方法は波長 λ の短い光（もしくは光でなくても、スクリーン部分で感知可能な波であればよい¹）を使うことである。ハイゼンベルクはこの機械をガンマ線顕微鏡と呼んだが、それは知られている限りもっとも波長の短い電磁波を使うことを考えたからである。



ところがここで $p = \frac{h}{\lambda}$ を思い出すと、 λ が短いということは運動量が大きいということに他ならない。つまり、あまり波長の短い光を使うと、位置を確かめようとしていた物体がどこかへ飛んでいってしまうことになる（ガンマ線の危険性を思い起こせ）。また、 ϕ が大きいということは、その時光がどの方向に反射したかが測定できない、ということである。我々は A 点もしくは B 点のような、スクリーン上でのみ光を測定する。それゆえ、レンズのどの部分を光が通ってきたのかを特定することはできない。特定しようとするならば、それは小さいレンズを使い、と言っているのと同じことになる。

真横から光があたったとする。この時、電子がどれだけの x 方向の運動量を持つかを計算してみよう。光子（線）の運んでくる運動量は $\frac{h}{\lambda}$ である。そして衝突後の光子の運動量の x 成分は

光が図の実線矢印方向に反射した場合ならば $\frac{h}{\lambda} \sin \theta$ であり、破線矢印方向に反射した場合ならば、 $-\frac{h}{\lambda} \sin \theta$ である。電子の持つ運動量の x 成分は $\frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda} \sin \theta$ から、 $\frac{h}{\lambda} + \frac{h}{\lambda} \sin \theta$ までの範囲にある、ということになる。つまり、電子に光を当てた結果、電子の持つ運動量に不確定さ Δp が生じてしまう。この運動量の不確定性は $\Delta p = 2 \frac{h}{\lambda} \sin \theta$ となる。この時、 Δx と Δp の積を計算すると、

$$\Delta x \Delta p = h \quad (5.1)$$

という式が出る。この式は、 Δx を小さくしようとすると Δp が大きくなる、ということを表している。つまり、この電子の位置の測定を精密にやればやるほど、電子の運動量が大きな幅で変化してしまうことになる。

ハイゼンベルクは以上のような思考実験（実際にガンマ線顕微鏡を作って実験したわけではない）によって、不確定性関係を導いた。 Δx や Δp は上で求めたよりも大きな値になることもあり得る。そして理想的な場合の最小値でも、この積は $\frac{\hbar}{2} = \frac{h}{4\pi}$ であることが計算できる（具体的な計算は後で行う）。よって

$$\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2} \quad (5.2)$$

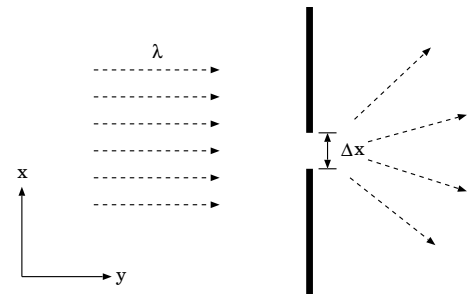
というのが一般的法則である。

結論として、我々が何かの物体の位置と運動量を測定しようとした時、その両方を確定的に決めることはできず、位置には Δx ぐらいの、運動量には Δp ぐらいの不確定さが存在し、その間に (5.2) が成立する。一方を小さくするともう一方が必然的に大きくなってしまふ。

このような不確定性は、ガンマ線顕微鏡（あるいは光学的顕微鏡でも同じ）だけで起こるものではなく、ありとあらゆる観測機器についてまわる一般的な問題である。

¹電子顕微鏡は電子波を使って微小なものを見る。電子波の波長は光よりはるかに短い。

[問い38] 波動光学では「光は自分の波長と同じくらいの隙間を通り抜けた後、よく回折する」ということが知られているが、この現象も不確定性関係の顕れと考えることができる。幅 d のスリットを波長 λ の光が通り抜けたとする。この時、光子の存在位置は、 $\Delta x = d$ という不確定性を持って決められたことになる(ただし、決まったのは x 方向、すなわち進行方向に垂直な方向)。このため、光子の x 方向の運動量は $-\frac{\Delta p}{2} < p < \frac{\Delta p}{2}$ のような不確定さを持つ。 Δp はどのくらいとなるか。光子の全運動量の大きさ(変化しないはず)と上の答を比べることにより、光子の進行方向の不確定性(光の進行方向に対する広がり角度)を角度の正弦の不確定性 $\Delta(\sin \phi)$ で求めよ。広がり角度が 30 度になるのはどんな時か。



5.2 不確定性関係の意味

不確定性関係は非常に神秘的な関係式と思えるかもしれないが、ド・ブロイの式 $p = \frac{h}{\lambda}$ を認めて、「物質は波動性を持つ」ということを考えれば、実はしごく当然の関係式である。

今、一個の粒子が箱に入っているとす。話を簡単にするために 1 次元で考えて、この箱の端から端まで L としよう。この粒子の位置を観測しなかったとすると、箱のどの位置にいるのかわからないので、この粒子の Δx は L である。この粒子を波だと考えると、箱の中に定常波ができていた状態だと考えられる。すると、その波の波長は最大でも $2L$ である。「波長が最大で $2L$ 」ということはすなわち、「運動量が最小でも $\frac{h}{2L}$ 」ということになる。実際には(定常波状態になっているので)箱の中には最低でも、 $\frac{h}{2L}$ の運動量を持った粒子(正方向に進む波)と $-\frac{h}{2L}$ の運動量を持った粒子(負方向に進む波)が入っている、ということになる。つまり $\Delta p = \frac{h}{L}$ である。ここでも $\Delta x \times \Delta p \simeq h$ が成立している。より一般的には、もっと波長の短い(運動量の大きい)波が入ってもいいので、 Δp がもっと大きくなる可能性はある。

箱を押して大きさを小さくしていったとしよう。 L が小さくなるので Δx は小さくなるが、 Δp の方は逆に大きくなっていく。つまり、粒子の位置を確定しようとする運動量の幅が広がってしまう(逆も同様)。

ガンマ線顕微鏡の例では「 x を観測すると p が乱される」という形での不確定性を論じたが、実は不確定性というのは観測する前の状態ですでに存在している。誰がどのように観測するか否かにかかわらず、 $\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$ という関係は成立しているのである。 Δx や Δp は測定誤差ではなく、「値の広がり」を表す。つまり、「粒子は Δx の幅のどこにいるのかわからない」というよりも「 Δx の範囲に広がっている」と考えるべきである。「どこにいるのかわからない」という考え方をすると、測定手段(実験機器など)の責任で Δx が生じているような印象を与えるが、不確定性関係は、実験機器の責任によって生じるのではなく、物質の波動的性質によって必然的に生じるものと考えなくてはならない。

現実において存在している粒子も、不確定性関係を守っている。我々は原子や原子核の大きさをこれくらい、と測定しているが、実際にその物質がそれだけのサイズを持っているというより、その粒子がだいたいそれくらいの範囲の中に広がって存在している(Δx がその程度の大きさである)と判断せねばならない。

[問い39] 以下の二つの現象が不確定性関係に即していることを確かめよ。

- (a) 原子を回っている電子はだいたい 10eV 程度のエネルギーを持っている。原子の半径は 10^{-10}m 程度である。
- (b) 原子核内の核子は 1MeV(=10⁶eV) 程度のエネルギーを持っている。原子核の半径は 10^{-14}m 程度である。

註：1eV=1.6 × 10⁻¹⁹J。電子の質量は 9.1 × 10⁻³¹kg。核子の質量は 1.7 × 10⁻²⁷kg。

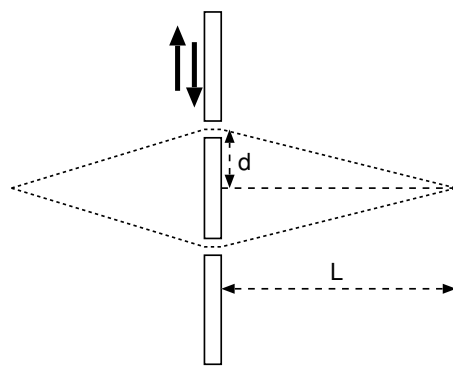
[問い40]

二重スリットの実験（ヤングの実験）では、どちらのスリットを光が通ったかわからない、という話がある。

今図のように中央に光がやってきたとしよう。上のスリットを通った時ならば光はスリット部分で下向きの運動量を与えられたことになるし、下を通ったならば上向きの運動量を与えられたことになる。運動量は保存するから、その分スリットが上下動するはずだ。では、スリットの上下動を観測することで上のスリットを通ったのか下のスリットを通ったか判断できるのか？

光子の持つ運動量を $\frac{h}{\lambda}$ として、この問題を考察せよ。

ヒント：スリットの上下動を観測するためには、スリット自体の運動量をどの程度正確に測定しなければいけないかをまず考えよ。その時、スリットの位置はどの程度正確に測定できるかを考えよ。



5.3 円周上に発生する波の重ね合わせ

上では狭い空間に閉じ込められた波に関して、不確定性関係が成立することを示した。閉じ込められていないが、空間の一部にだけ分布している波の場合にはどのように考えればいだろうか。その場合、いろんな波長の波が重なり合うことで「空間の一部にだけ分布している波」ができていいると考えることができる。

波の重ね合わせを考える簡単なモデルとして、半径 1 の円の上で発生している波を考えよう。円周にそっての座標を x としてその範囲を $[-\pi, \pi]$ としよう。すると、 $x = -\pi$ と $x = \pi$ は同一点である。この波の、ある一瞬での形を $f(x)$ という関数で表すと、この関数は $\sin x, \sin 2x, \sin 3x, \dots$ および $\cos x, \cos 2x, \cos 3x, \dots$ で表されるような、いろんな波長（ただし、 $\frac{2\pi}{\text{自然数}}$ に制限される）の三角関数（および定数）の和で書かれることが知られている²。つまり、 $f(0) = f(2\pi)$ になるような関数 $f(x)$ は、

$$f(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos nx + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin nx \tag{5.3}$$

と書けるのである³。このように関数を三角関数の和で表したものを「フーリエ級数」と言う。ここで、

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \sin mx \sin nx = \begin{cases} \pi & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases} \tag{5.4}$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \cos mx \cos nx = \begin{cases} \pi & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases} \tag{5.5}$$

²証明はややこしいので略すが、これらの級数和と $f(x)$ の違いはいくらでも（つまり 0 になるまで）小さくできることが数学的に示せる。

³ a_0 だけ前に $\frac{1}{2}$ をつけて特別扱いされているが、それは後で作る a_n を求める式が簡単になるようにであって、深い意味はない。

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \cos mx \sin nx = 0 \quad (5.6)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \sin nx = 0 \quad (5.7)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \cos mx = 0 \quad (5.8)$$

である。すなわち、この式の各項は、自分自身以外とかけて積分すると答は0になっている。

[問い 41] 上の式を証明せよ。

波を一周期分積分すると、山(プラス変位)と谷(マイナス変位)を足していくことになるので、必ず0となるというのが、上のような式が成立する理由である。二つの波を掛け算する時も同様だが、同じ波を掛け算した場合に限って、谷×谷もプラスになるので結果は0にならない。

この性質を利用して、フーリエ級数の係数である a_n, b_n を求めていくことができる。

たとえば、 $f(x)$ に $\sin mx$ をかけて積分すると、 $f(x)$ の中の $\sin mx$ を含む項以外は全て0となり、

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \sin mx f(x) = \pi b_m \quad (5.9)$$

であるから、

$$a_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx f(x) \cos mx \quad (5.10)$$

$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx f(x) \sin mx \quad (5.11)$$

と求められる (a_0 の前の $\frac{1}{2}$ は、上の式が $m=0$ でも成立することに役立っている)。

具体的な関数として、高さ H で幅 2δ の矩形波を考えよう。この波は

$$f(x) = \begin{cases} H & -\delta < x < \delta \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (5.12)$$

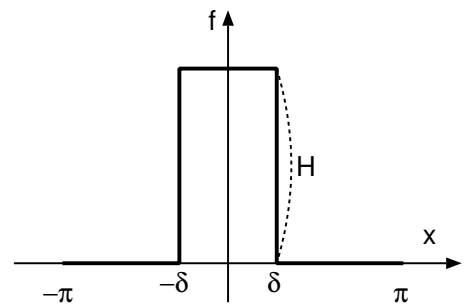
のような関数で表される。

この関数を \sin, \cos の和で表した時の係数を求めよう。

$$\begin{aligned} a_m &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx \cos mx f(x) = \frac{H}{\pi} \int_{-\delta}^{\delta} dx \cos mx \\ &= \frac{2H}{m\pi} \sin m\delta \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx \sin mx f(x) = 0 \quad (5.14)$$

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx f(x) = \frac{2H\delta}{\pi} \quad (5.15)$$

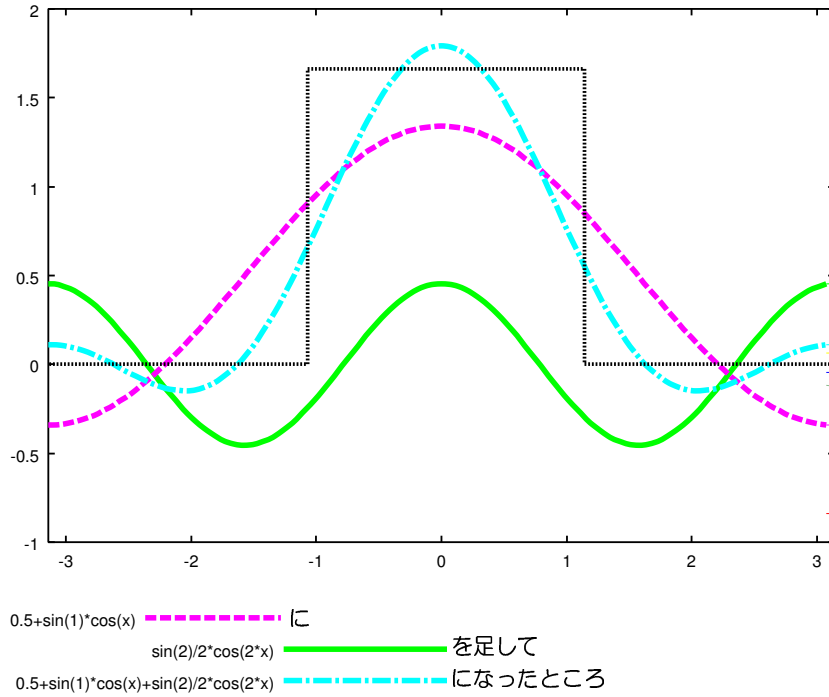


となる。 b_m が0になるのは、 \sin が奇関数で、 $f(x)$ が偶関数であることからくる。つまり、

$$f(x) = \frac{H\delta}{\pi} + \frac{2H}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin m\delta}{m} \cos mx \quad (5.16)$$

である。

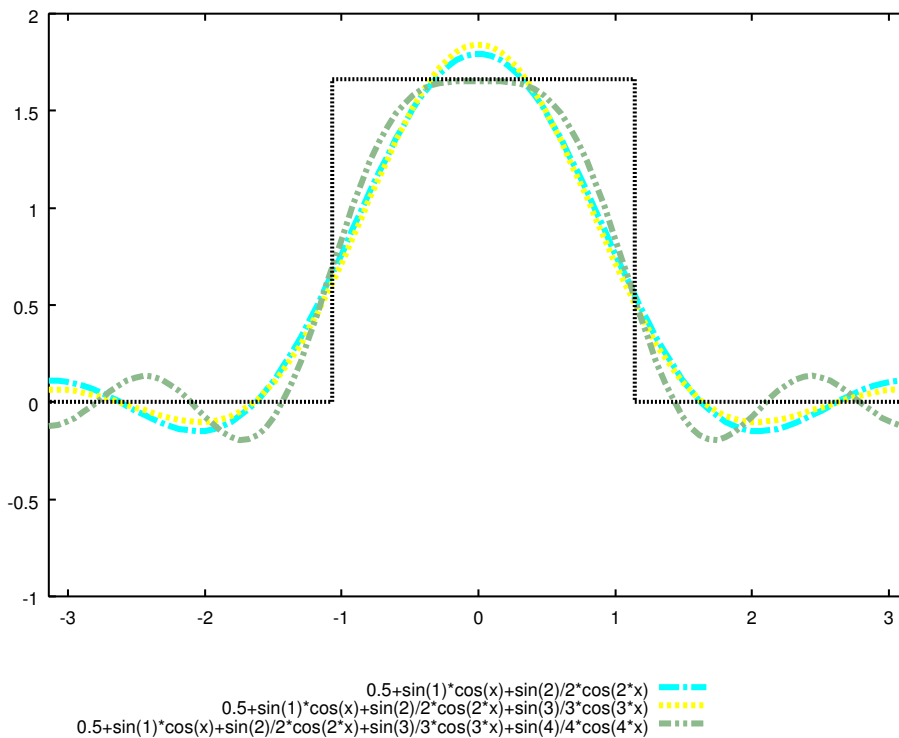
$H = \frac{\pi}{2}, \delta = 1$ の場合でこのグラフを書いてみる。次の図は、級数の第2項まで ($\frac{1}{2} + \sin 1 \cos x$) と、第3項 ($\frac{\sin 2}{2} \cos 2x$)、そしてそれを足して第3項まで ($\frac{1}{2} + \sin 1 \cos x + \frac{\sin 2}{2} \cos 2x$) にしたものである。



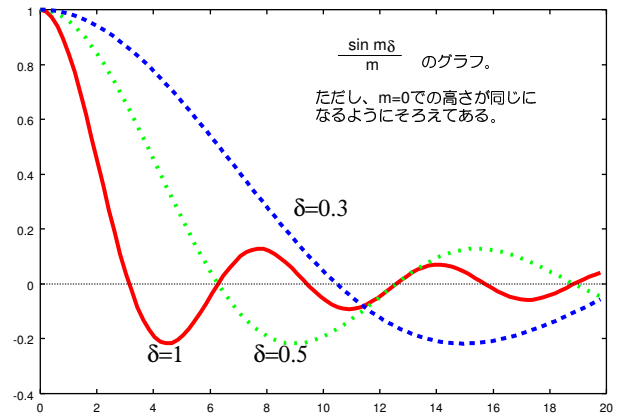
四角い点線は $f(x)$ を表す。第3項が足されたことで、関数がより $f(x)$ に近い形になっていることがわかるであろう。

[問い42] $2H\delta$ (この矩形の面積) を1に保ったままで $\delta \rightarrow 0$ の極限をとるとどんな関数になるか。結果は後で出てくるデルタ関数となる。

この後も次の関数、次の関数が足されていくごとに級数は $f(x)$ に近づいていく。そのようすを示すグラフが下の図である。



δ が変化すると、重ね合わせる波も変化していく。重ね合わせる波の振幅を表すのが係数 $a_m = \frac{\sin m\delta}{m}$ であるが、 a_m の様子をグラフにしたのが右のグラフである。 δ が小さくなると、より大きい m の波をたくさん加えなくてはいけないことがわかる。これはつまり「小さい矩形波を作るためにはより波長の短い波を重ね合わせなくてはいけない」ということである。逆に、矩形より大きい波をいくら足しても矩形が作り出せないことは容易にわかる。



実際にはグラフの通り、波長が無限に小さい波までをどんどん足していかななくてはいけないのだが、おおざっぱに考えると $m\delta = 2\pi$ となるまでを取れば、だいたいの形は再現できると考えていいだろう。つまり $m = 0$ から $m = \frac{2\pi}{\delta}$ までの広がりのある波を足し合わせていると考える。波長は $\lambda = \frac{2\pi}{m}$ で表され、 $p = \frac{mh}{2\pi}$ となることから、今足している波は $\Delta p = 2 \times \frac{h}{2\pi} \times \frac{2\pi}{\delta} = \frac{2h}{\delta}$ ぐらいの幅を持つ。一方、矩形波が存在している幅 Δx は 2δ である。つまり波束の幅を縮めれば波数の幅が広がり、波数の幅を縮めれば波の広がりが大きくなる。この場合は $\Delta x \Delta p = 4h$ となり、不確定性関係に則している。

不確定性関係は、「 Δx と Δp の積が h より大きい」という述べ方をするとずいぶん神秘的に聞こえるが、いったん波動力学的立場を認めて、「 Δx と $\Delta \left(\frac{1}{\lambda}\right)$ の積が 1 より大きい」という述べ方をすれば不思議でもなんでもない関係であることがわかる。

5.4 直交関数系という考え方

前節で計算したフーリエ級数は「直交関数系」というものの基本的な例である。直交関数系は今後も量子力学でよく使うので、その意味するところを説明しておく。

フーリエ級数の各成分にあたる $\cos mx, \sin nx$ は違うもの同士をかけて積分すると 0 になるという性質を持っていた。これは、直交座標系の基底ベクトル $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ が自分自身以外との内積が 0 であること

$$\vec{e}_x \cdot \vec{e}_y = \vec{e}_y \cdot \vec{e}_z = \vec{e}_z \cdot \vec{e}_x = 0 \quad (5.17)$$

に似ている。そういう意味で、このような関数列を「直交関数系」と呼ぶ。つまり、

$$1, \sin x, \sin 2x, \sin 3x, \dots, \cos x, \cos 2x, \cos 3x, \dots$$

が関数の「基底ベクトル」にあたるものなのである。関数がベクトルになる、と言われると不思議な感じがするが、以下のように考えると良い。

関数というのは、「数字 x ($-\pi$ から π までから選ぶ) を一つ選ぶと一つの数 $A(x)$ が決まる」という関係を表したものである。

x が連続的に変化する量だとするとベクトルと対応つけにくいので、 Δ という刻み幅を持って不連続に変化する量だとしよう。すると、関数 $A(x)$ というのは、全部で $\frac{2\pi}{\Delta}$ 個ある x の一個一個に対して対応する $A(x)$ の値を与えるもの、ということになる。これを数式で表現すれば、

$$(A(\pi), A(\pi + \Delta), A(\pi + 2\Delta), \dots, A(-\Delta), A(0), A(\Delta), \dots, A(\pi - \Delta), A(\pi)) \quad (5.18)$$

のような数列である。後で $\Delta \rightarrow 0$ とするから、「全部で $\frac{2\pi}{\Delta}$ 個」というのは事実上無限個だと考えることができる。この一個一個の $A(x)$ をベクトルの x 成分、 y 成分のように考えれば、「関数 $A(x)$ は無限個の成分を持つベクトルである」と考えることができる。つまり、「 $A(-\pi)$ はベクトル A の $-\pi$ 成分（第1成分）」、「 $A(-\pi + \Delta)$ はベクトル A の $-\pi + \Delta$ 成分（第2成分）」のように考えるのである。

二つの関数をかけて積分する、ということはこの無限成分ベクトルの内積をとっていることに相当する。実際関数 $A(x)$ と関数 $B(x)$ を上と同様にベクトルで表現して内積をとってみると、 $\vec{A} \cdot \vec{B} = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z$ となるのと同様に、

$$\underbrace{A(-\pi)B(-\pi)}_{\text{第1成分}} + \underbrace{A(-\pi + \Delta)B(-\pi + \Delta)}_{\text{第2成分}} + \cdots + \underbrace{A(\pi)B(\pi)}_{\text{第}(\frac{2\pi}{\Delta}+1)\text{成分}} \quad (5.19)$$

となるが、これに Δ をかけてから $\Delta \rightarrow 0$ という極限を取れば、

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} \Delta (A(-\pi)B(-\pi) + A(-\pi + \Delta)B(-\pi + \Delta) + \cdots + A(\pi)B(\pi)) = \int_{-\pi}^{\pi} dx A(x)B(x) \quad (5.20)$$

となってこれは積分の定義そのものである。つまり、「二つの関数をかけて積分すると0」ということは、関数 = 無限成分ベクトルと見る立場では「二つの無限成分ベクトルの内積が0になる。すなわち、直交する」と見ることができる。

あるベクトル $\vec{A} = A_x \vec{e}_x + A_y \vec{e}_y + A_z \vec{e}_z$ があつた時、 A_x を求めたいと思えば、

$$\vec{e}_x \cdot \vec{A} = \vec{e}_x \cdot (A_x \vec{e}_x + A_y \vec{e}_y + A_z \vec{e}_z) = A_x \quad (5.21)$$

のように、 \vec{e}_x をかけることで求めることができる。 \vec{e}_x をかけると \vec{e}_y, \vec{e}_z の部分 (y 成分と z 成分) が消えてしまうおかげで、 x 成分だけを取り出すことができるのである。

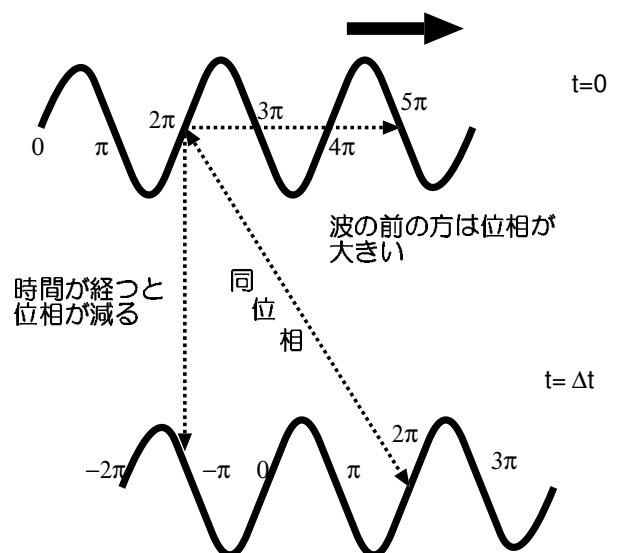
関数に対してもこれと同様のことが行つたのが、前節で a_n, b_n を求めた計算であつた。

ここでは三角関数の列を「基底ベクトル」として用いたが、問題によっては他の関数列を使った方が計算が簡単になる場合もある。量子力学ではこのように関数を直交関数系を使って分解する、ということをよく行つたが、フーリエ級数はその基本的な例である。

5.5 波の群速度と位相速度

前節で書いたように、一般の波はいろんな波長を持った波が重なつたものと考えられる。そして、波の重なりによってできた「波の塊」が我々が粒子として感知するものであろうと考えられる。この「波の塊」を波束 (wave packet) と呼ぶ。波束がどの程度の速さで進むのかを考えてみよう。

今、波数 ($\frac{2\pi}{\text{波長}}$ で定義される) が k で、角振動数 ($2\pi \times \text{振動数}$ で定義される) が ω であり、 x 軸正方向に進行している波を考えると、その波は $e^{ikx - i\omega t}$ のような式で表すことができる。この波の速度は $v_p = \frac{k}{\omega}$ である。この式の形から、時間が Δt 増加すると位相が $\omega \Delta t$ 減少すること、 x 軸正方向に Δx 移動すると位



相が $k\Delta x$ 増加することがわかる。波の同位相の点は、

$k\Delta x = \omega\Delta t$ を満たす場所に移動する。つまり、 $\frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{k}{\omega}$ である。

この速度 v_p は $e^{ikx-i\omega t}$ で表される波の、同位相の点がどのように動いていくかを示す速度なので「位相速度」(phase velocity) と呼ぶ。そしてこれは「波束の動く速度」とは一致しない。そもそも、 $e^{ikx-i\omega t}$ という波は、宇宙の端から端まで ($x = -\infty$ から $x = \infty$ まで) 常に同じ振幅 1 で振動している波であって、そもそも波の「塊」になっていない。

波束を作るには、いろんな波長の波 (いろんな k の波) を足し合わせなくてはならない。ある波の塊が

$$\int dk f(k) e^{ikx-i\omega(k)t} \quad (5.22)$$

のように、いろんな k を持つ波の和で書かれているとしよう。 $f(k)$ は、いろんな k の波をどの程度の重みをもって足し算していくかを表す関数である。ここで、 ω を $\omega(k)$ と書いて k の関数であるとした。 ω と k にはなんらかの関係があるのが普通である (「分散関係」と呼ぶ)。

この波が $k = k_0$ を中心としたせまい範囲でだけ $f(k) \neq 0$ であるような波だとする。そのような時は

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \frac{d\omega}{dk}(k - k_0) + \dots \quad (5.23)$$

と展開して、 \dots で示した $(k - k_0)^2$ のオーダーの項は無視できる。それを (5.22) に代入すると、

$$e^{ik_0x-i\omega(k_0)t} \underbrace{\int dk f(k) e^{i(k-k_0)x-i\frac{d\omega}{dk}(k-k_0)t}}_{x - \frac{d\omega}{dk}t \text{ の関数}} \quad (5.24)$$

となる。この後ろの部分は $x - \frac{d\omega}{dk}t$ の関数になっているので、これを $F(x - \frac{d\omega}{dk}t)$ と書くと波は

$$e^{ik_0x-i\omega(k_0)t} F(x - \frac{d\omega}{dk}t) \quad (5.25)$$

と書ける。つまり、 $F(x - \frac{d\omega}{dk}t)$ という場所によって違う振幅を持っている、 $e^{ik_0x-i\omega(k_0)t}$ という波であると考えることができる。

この振幅の部分は $F(x)$ という関数を x 方向に $\frac{d\omega(k)}{dk}t$ だけ平行移動させたもの、と考えることができる。ゆえに、この振幅は

$$v_g = \frac{d\omega(k)}{dk} \quad (5.26)$$

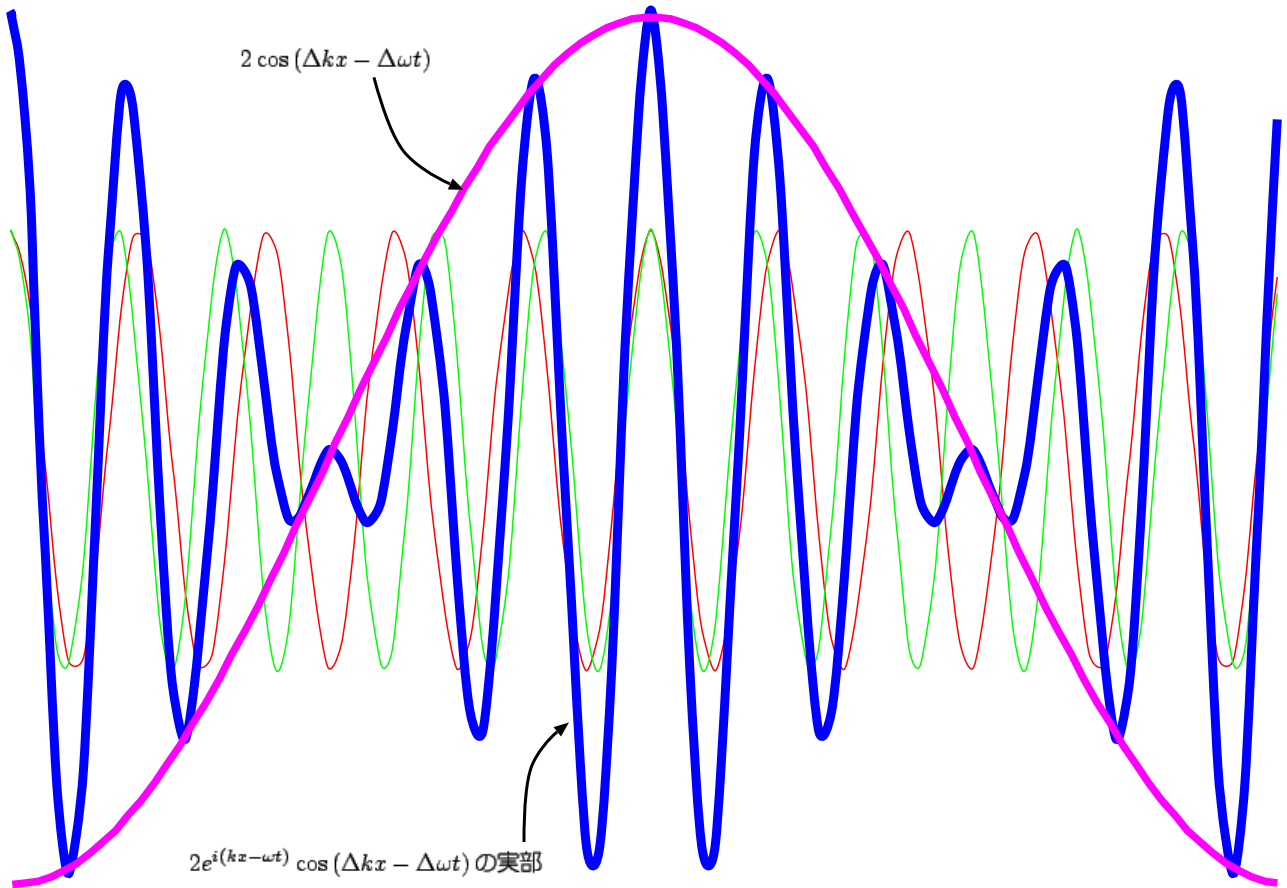
という速度をもって移動していることになる。この速度 v_g を群速度 (group velocity) と呼ぶ。

非常に単純な例として、波数 $k - \Delta k$ で角振動数 $\omega - \Delta\omega$ の波と波数 $k + \Delta k$ で角振動数 $\omega + \Delta\omega$ の二つの波が重なった場合を考えよう。この二つの波を同じ振幅として足すと、

$$\begin{aligned} e^{i((k-\Delta k)x-(\omega-\Delta\omega)t)} + e^{i((k+\Delta k)x-(\omega+\Delta\omega)t)} &= e^{i(kx-\omega t)} \left(e^{-i(\Delta kx-\Delta\omega t)} + e^{i(\Delta kx-\Delta\omega t)} \right) \\ &= 2e^{i(kx-\omega t)} \cos(\Delta kx - \Delta\omega t) \end{aligned} \quad (5.27)$$

となる。 $\cos(\Delta kx - \Delta\omega t)$ が一般論における $F(x - \frac{d\omega}{dk}t)$ に対応し、この部分の速度は $\frac{d\omega}{dk}$ である。

このような波は空間全体に広がるので波束とは言えないが、振幅が $\cos(\Delta kx - \Delta\omega t)$ であるから、 $\frac{\pi}{\Delta k}$ の幅のこぶがで、そのこぶが $\frac{\Delta\omega}{\Delta k}$ という速度で進行していくことになる。この波の実数部分をグラフ化して示したのが次の図である。



群速度を求めるには、前に解析力学と波動力学の関係を述べる時に使った「いろんな波が重なる時には位相が極値になっている波が生き残る」という考え方と本質的に同じ方法を使ってもよい。つまり位相 $\varphi = kx - \omega t$ を k で微分して 0 とおけば、

$$x - \frac{d\omega}{dk}t = 0 \quad (5.28)$$

となって v_g の式を得る。群速度というのは「波の振幅が大きくなっている部分」の進行速度であるが、振幅が大きくなるためには、その波束を構成している一個一個の波 $e^{i\varphi}$ の位相がそろっていればよい。

ド・ブロイ波の場合、 $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ で $\hbar\omega = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$ であるから、 $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ となり、位相速度は

$$v_p = \frac{\frac{\hbar k^2}{2m}}{\frac{2\pi}{\lambda}} = \frac{h}{2m\lambda} = \frac{\hbar k}{2m} \quad (5.29)$$

であり、群速度は

$$v_g = \frac{d}{dk} \left(\frac{\hbar k^2}{2m} \right) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{h}{m\lambda} \quad (5.30)$$

である。つまり、 $v_g = 2v_p$ である。この式から $mv_g = \frac{h}{\lambda}$ が成立していることがわかる。つまり、波束を粒子と見た時の運動量 mv_g が $\frac{h}{\lambda}$ に対応する。このように波の伝わる速度には 2 種類あるが、古典力学での粒子の運動と対応しているのは群速度の方である。

第6章 Schrödinger 方程式と波動関数

6.1 Schrödinger 方程式

いよいよ我々は、量子力学の基本方程式と言って良い Schrödinger 方程式に到達する。

量子力学の初期段階において、量子化という作業の手がかりとなったのは、プランクの関係式からアインシュタインが光量子のエネルギーの式として出した

$$E = h\nu \quad (6.1)$$

と、ド・ブロイの関係式

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (6.2)$$

である。この2式は光や物質で一般に成立する。

ところで、振動数 ν で波長 λ をもち、 x 軸の正方向へと伝播する波は

$$\psi_\lambda = e^{2\pi i\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)} \quad (6.3)$$

という式で表すことができる。この式で表される波は平面波であって、宇宙の端から端まで同じ振幅で振動している波である。実際にできるのはこれらの波のいろんな波長のものを足し算したものになるであろう。

今からつくる方程式は線形方程式（変数に関して1次の量のみを含む方程式）であることを要求する。線形であれば、解の重ね合わせができる。つまり、 A という解と B という解を見つけたならば、 $\alpha A + \beta B$ (α, β は適当な定数) も解である。したがっているような λ に対して ψ_λ を求めれば、その重ね合わせでさらにたくさんの解を作ることができるであろう。これを「重ね合わせの原理」(principle of superposition) と呼ぶ。前章で考えたことからすると、重ね合わせの原理は量子力学でも成立していて欲しい。

逆に重ね合わせの原理が満たされているならば、複雑な波も簡単な平面波の重ね合わせで表現できるということになるので、とりあえず平面波をとりあげて考えていけばよいことになる。

というわけで一つの関数 ψ_λ を考えるわけだが、この前では

$$p \rightarrow -i\frac{h}{2\pi}\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad (6.4)$$

$$E \rightarrow i\frac{h}{2\pi}\frac{\partial}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad (6.5)$$

という置き換えができる。

[問い 43] 実際に演算子 (6.4) と (6.5) を平面波を表す ψ_λ にかけてやって、運動量やエネルギーが出ることを示せ。また、 ψ_λ の式を p, E を使った形で書き直せ。

古典力学においては、エネルギーはハミルトニアン $H(p, x)$ として、運動量や座標の関数として表された。量子力学におけるエネルギー $E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ も、同様に運動量や座標と関係付けられるはずである。その関係を、波動方程式の形で表したものがシュレーディンガー方程式なのである。

非相対論的な古典粒子の場合、 $E = H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ であるから、そのような粒子を表す波は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi \quad (6.6)$$

のような方程式を満たすであろうと考えることができる。これがシュレーディンガー方程式である。この ψ は複素数で表され、「波動関数」と呼ばれる。

より一般的には、解析力学の手法にのっとり、一般化座標 q_i とそれに対する運動量 p_i を使ってハミルトニアン $H(p_i, q_i)$ を書き下し、 $p_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}$ と置き換えたうえで

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}, q \right) \psi \quad (6.7)$$

としたものが波動関数となる。一般化座標 q_i には、 x, y, z の他、 θ, ϕ のような角度座標も入ってくる。角運動量 p_ϕ は ϕ に対する運動量であるから、 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$ のように置き換えられる。

6.2 なぜ波動関数 ψ は複素数なのか？

シュレーディンガー方程式の波動関数は、複素数であることが不可欠である。その理由を知るために、話を少し古典力学に戻す。

古典的なニュートン力学で、粒子の運動をどのように解いていたかを思い出そう。「運動を解く」とは、任意の時間における粒子の座標 $\vec{x}(t)$ を求めることである。

ニュートン力学の中心となる方程式は運動方程式

$$m \frac{d^2 \vec{x}(t)}{dt^2} = \vec{f} \quad (6.8)$$

である。 \vec{x} の 2 階微分がこの式によって決定されるので、この式を 2 回積分すれば、それより未来の全ての時間での $\vec{x}(t)$ を計算することができる。そのためには初期値としてある時刻での $\vec{x}(t)$ と $\frac{d\vec{x}(t)}{dt}$ を与える必要がある。

つまり古典力学は 2 階微分の方程式であるがゆえに、一つの座標 \vec{x} に対して二つの初期条件が必要になった。古典力学でも、ハミルトン形式では基本方程式は正準方程式

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \frac{dx(t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (6.9)$$

であり、これは 1 階微分方程式である。しかしこの場合は力学変数が座標と運動量の二つに増えていて、初期値はやはり、 $x(t), p(t)$ の二つについて与える必要がある。

一方、量子力学では運動量 \vec{p} がド・ブロイの式によって波長 λ と関係付けられている。そしてこの波長というのは、ある瞬間の波の形から決まるものであるから、量子力学における運動量は、ある瞬間で定義されているものである。これは古典力学との大きな違いである。古典力学の運動量は

$$p(t) = mv(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{m(x(t + \Delta t) - x(t))}{\Delta t} \quad (6.10)$$

と表される。 $p(t)$ は Δt という (短い) 時間間隔の間での引き算で定義されている。

	力学変数	基本方程式	初期条件
古典力学 (ニュートン)	$x_i(t)$	$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} = f_i$	$x_i(t=0), \frac{dx_i}{dt}(t=0)$
古典力学 (ハミルトン)	$x_i(t), p_i(t)$	$\frac{dp_i(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}, \frac{dx_i(t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$	$x_i(t=0), p_i(t=0)$
量子力学	$\psi(\vec{x}, t)$	$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H\psi$	$\psi(\vec{x}, t=0)$

シュレーディンガー方程式は1階微分方程式なので、 $\psi(\vec{x}, t)$ の中には、 \vec{x}, \vec{p} に対応する量が両方入っていないてはいけない。

さて、では ψ が複素数でなくてはならない理由を説明しよう。もし ψ を実数で表すことができたとする。簡単のため1次元問題で考えると、 x の正方向へ進行する波は

$$A \sin \left(2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) + \alpha \right) \quad (6.11)$$

のように書けるだろうし、逆方向へ進行する波は

$$A \sin \left(2\pi \left(\frac{x}{\lambda} + \nu t \right) + \alpha \right) \quad (6.12)$$

と書けるだろう（実際にそこにある波はいろんな波長、いろんな振動数の重ね合わせになっているだろうけれど）

ところがこの二つ、(6.11) と (6.12) は、 $t = 0$ にしてしまうとどちらも

$$A \sin \left(2\pi \frac{x}{\lambda} + \alpha \right) \quad (6.13)$$

となって区別がなくなってしまう。つまり、実数の波で考えた場合、初期状態の中に波の進行方向という情報が入らなくなってしまうのである。複素数であれば、

$$A e^{2\pi i \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right)} \quad (6.14)$$

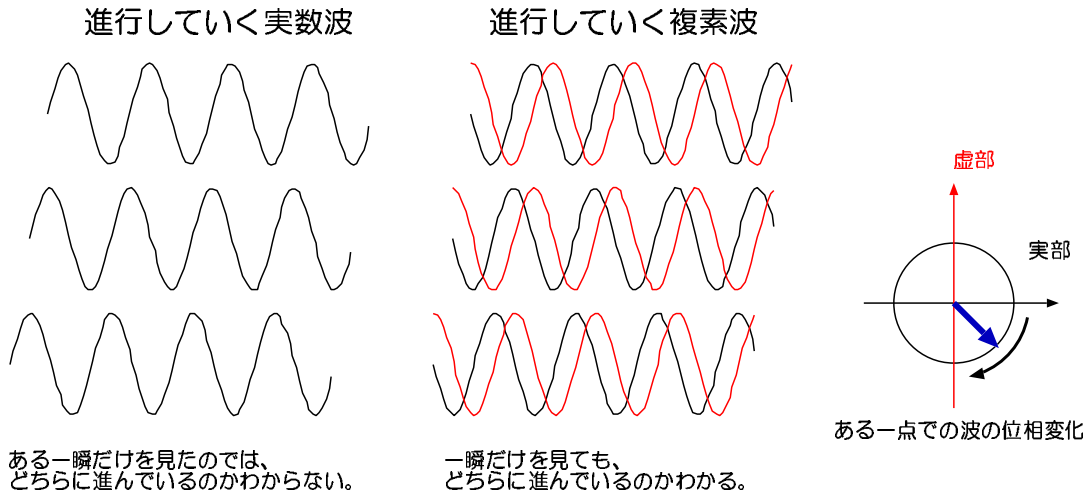
と

$$A e^{2\pi i \left(-\frac{x}{\lambda} - \nu t \right)} \quad (6.15)$$

は $t = 0$ にしても、

$$A e^{2\pi i \frac{x}{\lambda}} \quad \text{および} \quad A e^{-2\pi i \frac{x}{\lambda}} \quad (6.16)$$

というふうに違いが出る。つまり、初期値 ($t = 0$ での瞬間の値) の中に「運動量の向き」という情報が含まれるようにするためには、複素数であることが必要なのである。



$e^{-2\pi i vt}$ という形の式になっているので、ある一点に着目すると、波の位相は常に減少していく。よって上の図のように実部と虚部が変化する（たとえば実部が最大値（プラス）を迎えた後、虚部が最小値（マイナス）を迎える）ためには、波がどちら向きに動かなくてはならないか、と考えれば波の進む向きがわかる。

ここで、 $Ae^{2\pi i(\pm \frac{x}{\lambda} + vt)}$ のような形の波は考えなかったが、これはマイナスのエネルギーを持っていることに対応するので、物理的には出てこない。

電気回路の問題で交流を考える時にも $I_0 \cos \omega t \rightarrow I_0 e^{i\omega t}$ と拡張して電流を複素数化して計算することがあったが、あれはあくまで計算の便法であり、付け加えられた虚数部 $iI_0 \sin \omega t$ には物理的意味はない。しかし量子力学での波動関数の虚数部は、立派な物理的意味がある。

なお、正確には、波の方向を表すものが波動関数の中に入ってくるようになってさえいれば、波動関数が複素数である必要はない。しかし、実数 1 成分の場合には波の方向を表すものは作れない。たとえば電磁波は実数の波であるが、常に電場と磁場という二つの場がセットになって出てきており、波の進む方向は $\vec{E} \times \vec{H}$ の方向として求めることができる。電磁波のうちある一瞬の電場部分だけ（あるいはある一瞬の磁場部分だけ）を見たのでは波の進む方向はわからない。電場と磁場の両方を見ると、「電場 磁場」とねじを回した時に右ネジの進む向きが電磁波の方向であるとわかる。

つまり波の進行を表すためには、複素数というよりは実数 2 成分分の自由度が必要なのである。波動関数も、複素数で書くのがどうしても嫌なら、実数 2 成分の関数を使って表すこともできる。ただしその場合、運動量は行列で表されることになって計算がややこしくなる。

余談ではあるが、相対論的にはエネルギーと運動量の間には、

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \tag{6.17}$$

という関係式が成立する。Schrödinger は最初この方程式を波動方程式に焼き直して

$$\left(-\hbar^2 \left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) + m^2 c^4 \right) \phi = 0 \tag{6.18}$$

という式を作ったそうである。ところがこれを使って電子の運動を計算してみると、実験にあった答えが出なかったので、非相対論的な式である (6.6) を作った。

この相対論的な方程式 (6.18) は後に電子ではない、別の粒子に対する波動方程式として使われ、クライン・ゴールドン方程式と呼ばれている。クライン・ゴールドン方程式は 2 階の微分方程式なので、 ϕ は複素数である必要はない。その代り、初期値は ϕ と ϕ の時間微分、二つを与える必要がある。電子の相対論的な方程式としてはディラック方程式という、全く別の式があり、相対論的な計算ではそちらを使う必要がある。クライン・ゴールドン方程式は実験に合わないとして述べたが、ディラック方程式はぴったり実験に合う。

6.3 波動関数の意味

これで方程式ができたが、ではこの方程式の解となる、 ψ とはいったい何なのか。

ヤングの実験 (第 1 章を参照) の類推から考えよう。ヤングの実験では光を使い、電場や磁場が重ね合わされた結果の干渉により、干渉縞ができる。電場 \vec{E}_1 と電場 \vec{E}_2 が重なると $\vec{E}_1 + \vec{E}_2$ という電場ができる。この電場の持つエネルギー密度は

$$\frac{1}{2}\epsilon_0 (\vec{E}_1 + \vec{E}_2)^2 = \frac{1}{2}\epsilon_0 (\vec{E}_1)^2 + \frac{1}{2}\epsilon_0 (\vec{E}_2)^2 + \underbrace{\epsilon_0 \vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2}_{\text{干渉項}} \quad (6.19)$$

となる。最後の項が二つの電場が重なったことによって強めあったり弱めあったりする効果の表れる項である。古典電磁気学で考えれば、この干渉項がプラスとなる部分は強い光となり、マイナスとなる部分は弱い光となる。

量子力学的に考えれば、この電場や磁場はたくさんの光子によって作られているものである。そしてそのエネルギー密度が $\rho h\nu$ というふうに、光子の個数密度 ρ に光子一個あたりのエネルギー $h\nu$ をかけたものとして書くことができるだろう。つまり、電磁場の場合は

$$(\text{電場})^2 + (\text{磁場})^2 \propto (\text{光子数の密度}) \quad (6.20)$$

のような関係がたっている。そこで一般の波動関数もこの類推で、

$$(\psi \text{の実部})^2 + (\psi \text{の虚部})^2 \propto (\text{粒子の数密度}) \quad (6.21)$$

のような関係が成立するだろうと考える。

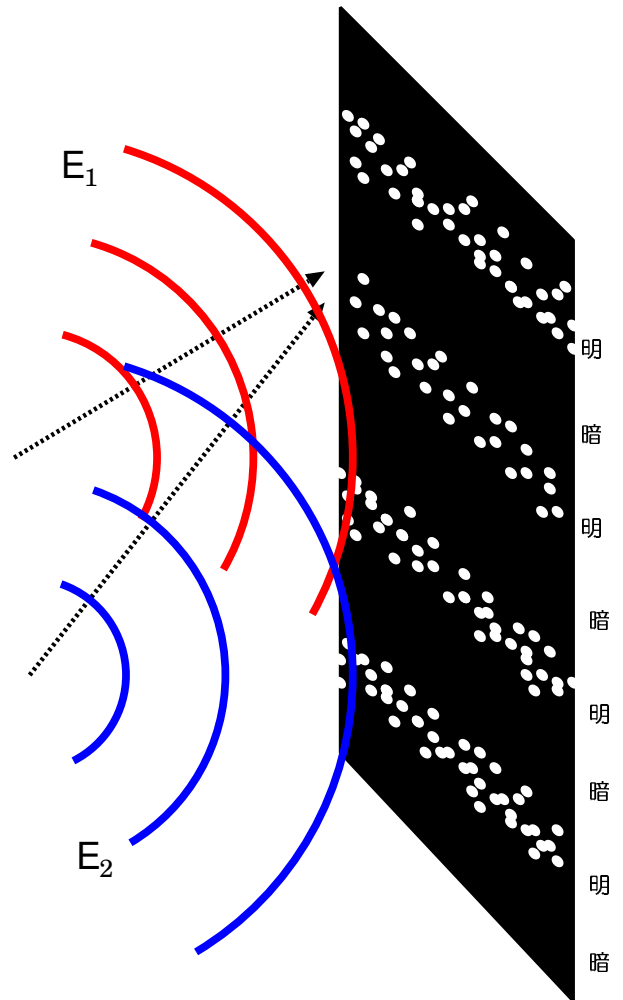
$(\psi \text{の実部})^2 + (\psi \text{の虚部})^2$ は $\psi = \psi_R + i\psi_I$ (ψ_R, ψ_I はどちらも実数) と書けば $\psi^* = \psi_R - i\psi_I$ なので、

$$\psi^* \psi = (\psi_R + i\psi_I)(\psi_R - i\psi_I) = (\psi_R)^2 + (\psi_I)^2 \quad (6.22)$$

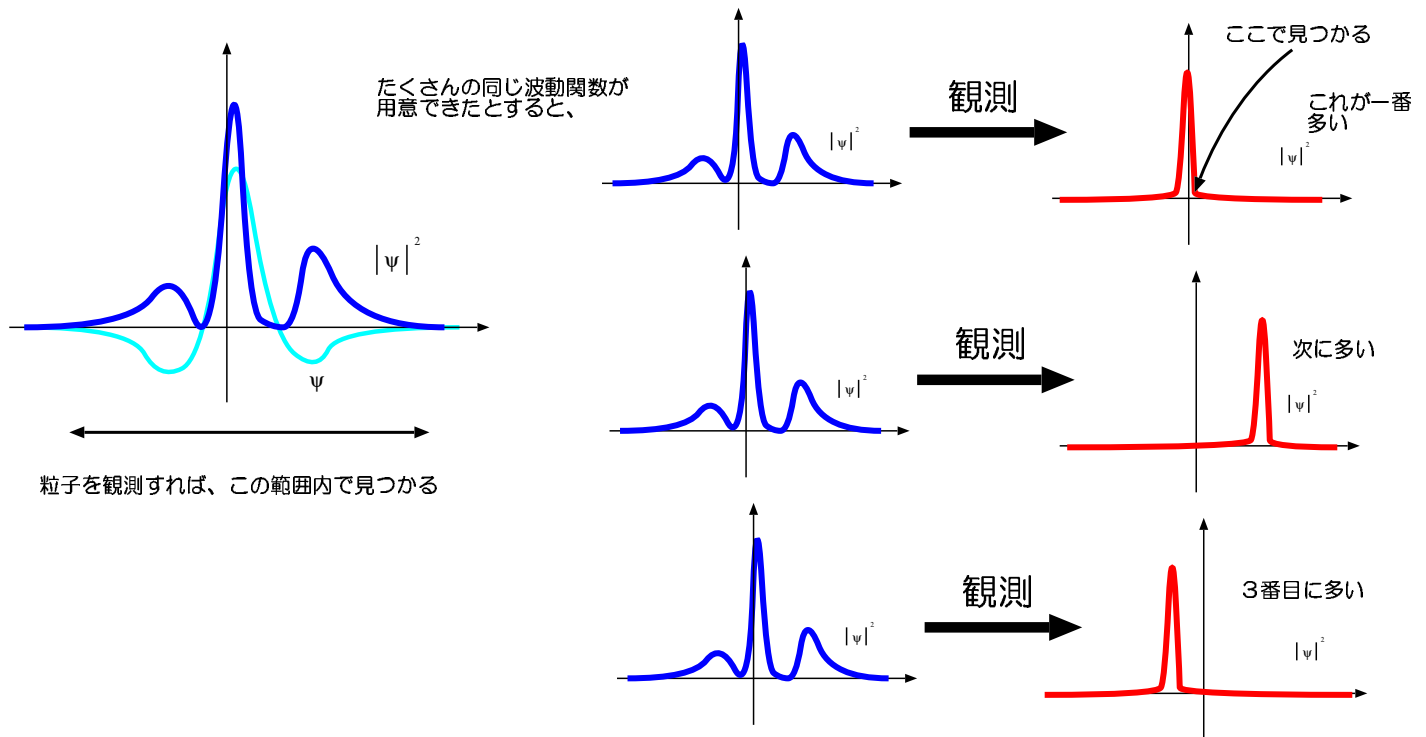
となつて、 $\psi^* \psi$ と書くことができる。これは複素数 ψ の絶対値の自乗になっている ($\psi = Re^{i\theta}$ と書いたならば、 $\psi^* \psi = (Re^{-i\theta})(Re^{i\theta}) = R^2$)。

上では粒子の数密度だと書いたが、今考えている系に粒子が一個しかないような場合 (この後考えるのはたいていこのような系)、数密度と考えるより、その粒子がここにいる確率密度と考えた方がよい。実際、ヤングの実験であっても、一度に一つしか光子がこないような弱い光で実験しても明暗は表れる。つまり、波動関数というものを「粒子がたくさんいて、そのたくさんいる粒子の密度を表すもの」と考えるのは実験にそぐわない。実際に粒子を見つけようとする、どこか一点に見つかる (ヤングの実験であれば、スクリーンのどこか一カ所だけが感光する)。

シュレーディンガー本人は、電子などの粒子が実際に広がっていて、 ψ^2 は密度そのものだと思っていた。ゆえに彼は確率密度という解釈には反対していた。しかし、 ψ を実体のともなった密度のようなものだとすると、波を分割することで「電子 $\frac{1}{2}$ 個」が作れてしまうことになるが、そんな現象は決しておきない。たとえ波動関数が二つに分かれたとしても、電子はどちらか片方で一個見つかる



のである。よって、(非常に気持ち悪い解決法なのではあるが)波動関数は「一個の粒子がどこで見つかるか」という確率を表すものであると考えなくてはならない。これを確率解釈と言う。ヤングの実験の場合でも、スクリーンにあたるまでは光子の波動関数は広がっており、あたると瞬時に一点のみに光子が表れる。このように波動関数の広がりが小さくなることを「波動関数の収縮」と言う。



以上のように、波動関数の絶対値の自乗 $\psi^*\psi$ がその場所に粒子がやってくる確率に比例するだろうと考えられる。「比例」ではなく厳密に「確率密度」にするためには、

$$\int_{\text{考えている全空間}} dx \psi^* \psi = 1 \tag{6.23}$$

となるようにしておけばよい。このようにすることを規格化 (normalization) と言う。

簡単のため、以下ではしばらく、空間を x の一次元として、その範囲は $[-\pi, \pi]$ であるとして、 $x = -\pi$ と $x = \pi$ は同一点であるとして考える (円周上に伝わる波と同様である)。同一点であるから $\psi(-\pi) = \psi(\pi)$ という周期的境界条件を置く。より一般的な範囲については後の章で考える。

[問い44] 以下のような関数で表される波動関数を考える (考える範囲は $[-\pi, \pi]$ としよう)。それぞれを規格化し、確率密度のグラフの概形を書け。

(a)

$$\psi(x) = \sin(x)$$

(b)

$$\psi(x) = e^{inx} (n \text{ は整数})$$

(c)

$$\begin{aligned} \psi(x) &= x \quad (\text{for } x \geq 0) \\ \psi(x) &= -x \quad (\text{for } x < 0) \end{aligned}$$

量子力学では、波動関数が与えられても、「粒子がどこにいるか」は判定できない。「このあたりにいる確率は80%」というような曖昧な予測しかできないことになる。そのような予測ができないの

は「観測機器が悪いから」とか「誤差が入ってくるから」というような二次的な理由からではない。すでに何度か述べたように、物質波はいろんな波の重ね合わせでできている。つまりもともと波動関数は「いろんな状態の重ね合わせ」であり、何かを観測した時にその状態のうち特定のものが選ばれることになる。そして、どの状態が選ばれるのかを決める方法がないのである。

このように量子力学で計算できるのが確率だけであることには昔から批判が多かったが、いろんな実験からこのような解釈が妥当であることは確認されている¹。波動関数がどのように収縮するのか、そのメカニズムは何なのかということも古くから論争の種であって、いまだ決着がついていない状況である。とりあえずその難しい部分に踏み込むのはやめて、波動関数を確率と解釈する枠組みで考えて、シュレーディンガー方程式がどのような物理を記述することになるのか、それを考えていこう。

6.4 座標の期待値と分散

ある物理量 A がある値 A_i を取る確率が f_i (i はいろんな現象を区別する添字であるとする) である時、

$$\langle A \rangle = \sum_i f_i A_i \quad (6.24)$$

で計算される量を「 A の期待値」と呼ぶ。たとえば 100 分の 1 の確率で 1000 円あたり、10 分の 1 の確率で 100 円あたるクジであれば、もらえる賞金の期待値は

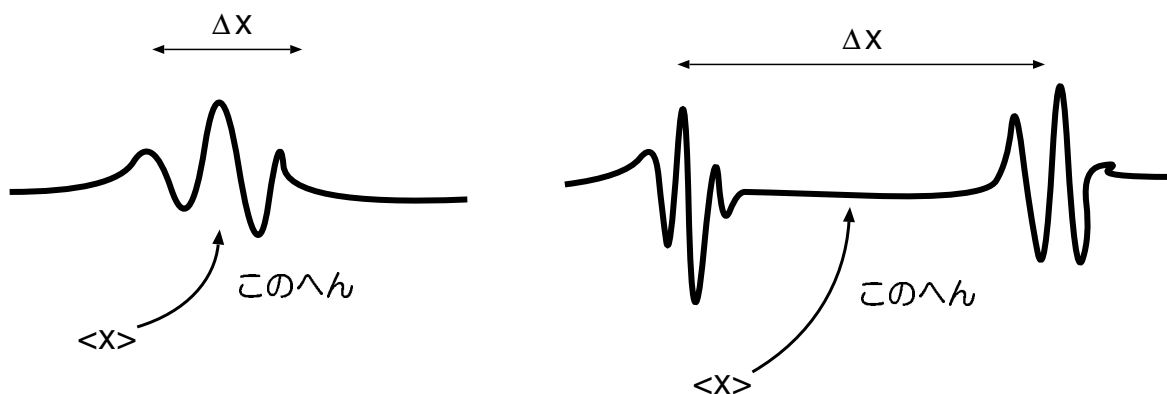
$$f_{1000 \text{ 円当り}} \times 1000 + f_{100 \text{ 円当り}} \times 100 + f_{\text{外れ}} \times 0 = \frac{1}{100} \times 1000 + \frac{1}{10} \times 100 + \frac{89}{100} \times 0 = 20 \quad (6.25)$$

となる。量子力学では確率しか計算できないので、物理量そのものではなく、物理量の期待値が計算できることになる。ここでは i という不連続な添字で物理量のいろんな値を表したが、連続な変化をする場合ももちろんある。

粒子が位置座標 x から $x + dx$ の間に存在している確率は $|\psi(x)|^2 dx$ であるから、期待値 $\langle x \rangle$ は、

$$\langle x \rangle = \int dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) \quad (6.26)$$

のようにして計算することができる (ただし ψ は規格化されていなくてはならない)。ここで x を ψ^* と ψ の間に置いているが、この場合は別に $x\psi^*\psi$ でも、 $\psi^*\psi x$ でもよい。



¹量子力学の解釈は一つではなく、他にも多世界解釈とか、ボームによるパイロット波による理論などもあるが、確率解釈に比べるとマイナーである。

となる。 $\Delta x = \frac{\delta}{2\sqrt{3}}$ ということ、波の幅に比例した答えが出てくる（あくまで目安なので、ぴったり δ にならないからと目くじらをたてることはない）。

[問い46] [問い44] で計算した波動関数それぞれの場合について x の分散 $\langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2$ を計算してみよ。計算する前にどの場合が分散が一番大きくなるか、予想をしてから計算してみる。

6.5 運動量、その他の物理量の期待値

上のような考え方は、波動関数を「いろんな場所 x に粒子が存在している波動関数」の重ね合わせとして表現していることになる。しかし一方で、「いろんな運動量を持った粒子が存在している波動関数」の重ね合わせで波動関数を表現することもできる。たとえば、

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(a_1 e^{\frac{i}{\hbar}(p_1 x - E(p_1)t)} + a_2 e^{\frac{i}{\hbar}(p_2 x - E(p_2)t)} \right) \quad (6.33)$$

は、運動量 p_1 を持った波と、運動量 p_2 を持った波の重ね合わせを表す波動関数である。 a_1, a_2 はそれぞれの波がどのくらいの重みで入っているかを表す文字となる²。

周期境界条件 $\psi(-\pi) = \psi(\pi)$ を使っているので、 p_1, p_2 は (整数) $\times \hbar$ でなくてはならない。 ψ の規格化から、

$$\begin{aligned} \int \psi^* \psi &= \frac{1}{2\pi} \int dx \left(a_1^* e^{-\frac{i}{\hbar}(p_1 x - E(p_1)t)} + a_2^* e^{-\frac{i}{\hbar}(p_2 x - E(p_2)t)} \right) \left(a_1 e^{\frac{i}{\hbar}(p_1 x - E(p_1)t)} + a_2 e^{\frac{i}{\hbar}(p_2 x - E(p_2)t)} \right) \\ 1 &= \frac{1}{2\pi} \int dx (a_1^* a_1 + a_2^* a_2) \\ 1 &= a_1^* a_1 + a_2^* a_2 \end{aligned} \quad (6.34)$$

となる ($p_1 \neq p_2$ ならば一周分積分すると 0 になることに注意)。この式の $a_1^* a_1$ は粒子が運動量 p_1 を持っている確率であり、 $a_2^* a_2$ は運動量 p_2 を持っている確率である。よって、運動量の期待値は

$$\langle p \rangle = p_1 a_1^* a_1 + p_2 a_2^* a_2 \quad (6.35)$$

と書ける。

運動量の期待値を一般の波動関数で計算するには、

$$\langle p \rangle = \int dx \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \quad (6.36)$$

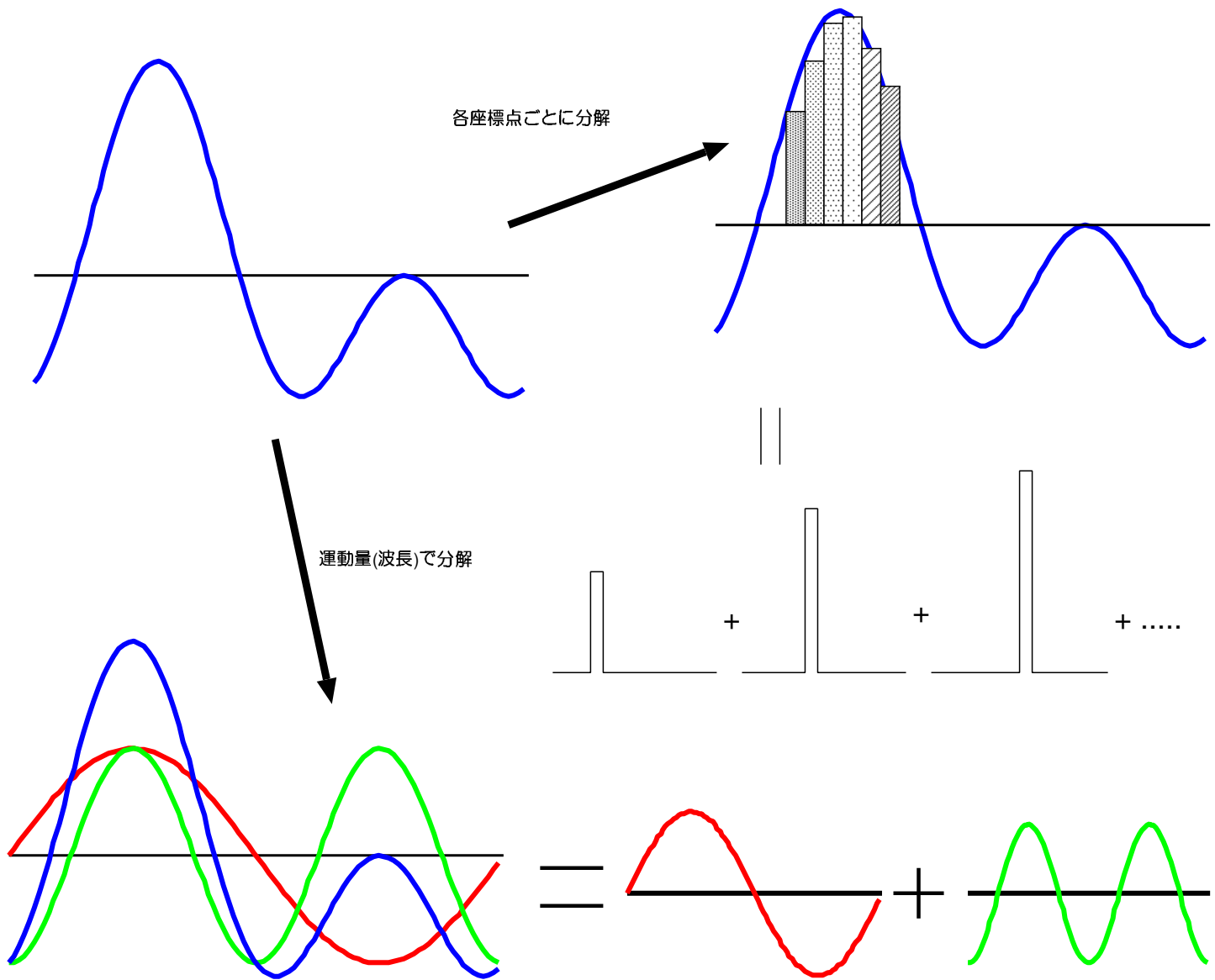
のように、 ψ^* と ψ の間に運動量を表す演算子 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ をはさんでおくとよい ($\langle x \rangle$ を計算する時に、どこにおいてもよい x をわざわざ ψ^* と ψ の間に置いたのは、これと統一を取るためである)。 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ は波動関数にかかることによって、運動量 p を出す演算子だからである。

[問い47] [問い44] で計算した波動関数それぞれの場合について運動量 $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ の期待値を求めよ。

ここで x の期待値を p の期待値を計算したが、ここで波動関数という一つの量を、2種類の捉え方で考えていることに注意しよう。 $\langle x \rangle$ を計算する時、波動関数は「各点各点に粒子が存在する確率を表すもの」と考えて、その「各点各点」での和を取っていくことで $\langle x \rangle$ が計算できた。

一方、 $\langle p \rangle$ を計算するときは、波動関数を「特定の波長 (運動量) を持った波の重ね合わせ」と考えてその「各々の運動量を持った成分」での和を取っていくことで $\langle p \rangle$ を計算した。

²一般に a_1, a_2 は複素数であり、二つの波の位相のずれをも表していることになる。



つまり波動関数 ψ は、「ある点に物体がどれぐらいの確率で存在しているのか？」と「ある運動量を持った物体がどれぐらいの確率で存在しているのか？」の両方を表している物理量である。

現実に存在する粒子を記述する ψ は x で見ても p で見ても、特定の一つの値を取ってはいない。 x も p もある程度の広がりを持ち、その広がりの度合いは不確定性関係によって制限を受けていることになる。

x, p や x^2 などに限らず、一般の演算子 A に対しても $\langle A \rangle = \int dx \psi^*(x, t) A \psi(x, t)$ のようにして期待値を計算することができる (A が微分を含むような時は、 A をはさむ位置に注意する)。

たとえばエネルギーの期待値は間に $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ をはさむ。さっきの波動関数でこれを計算すると、

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int dx \left(a_1^* e^{-\frac{i}{\hbar}(p_1 x - E(p_1)t)} + a_2^* e^{-\frac{i}{\hbar}(p_2 x - E(p_2)t)} \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \left(a_1 e^{\frac{i}{\hbar}(p_1 x - E(p_1)t)} + a_2 e^{\frac{i}{\hbar}(p_2 x - E(p_2)t)} \right) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int dx \left(a_1^* e^{-\frac{i}{\hbar}(p_1 x - E(p_1)t)} + a_2^* e^{-\frac{i}{\hbar}(p_2 x - E(p_2)t)} \right) \left(E(p_1) a_1 e^{\frac{i}{\hbar}(p_1 x - E(p_1)t)} + E(p_2) a_2 e^{\frac{i}{\hbar}(p_2 x - E(p_2)t)} \right) \\
 &= E(p_1) a_1^* a_1 + E(p_2) a_2^* a_2
 \end{aligned}$$

(6.37)

となる。この答えは $a_1^* a_1$ という確率でエネルギーが $E(p_1)$ となり、 $a_2^* a_2$ という確率でエネルギーが $E(p_2)$ になるということからも当然である。

後期の「量子力学」に続く