

量子力学2006年度講義録

前野昌弘

平成19年2月10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	光は波か粒子か	1
1.2	二重スリットと波束の収縮	3
1.3	これからの学習で注意すべきこと	6
1.4	演習問題	6
第 2 章	光の粒子性の発見 — 黒体輻射	9
2.1	黒体輻射と等分配の法則	9
2.2	箱に閉じこめられた電磁波	11
2.3	等分配の法則の破れの原因 — 光のエネルギーの不連続性	16
2.4	演習問題	18
第 3 章	光の粒子性の確認 — 光電効果とコンプトン効果	21
3.1	光電効果	21
3.2	光子の運動量	22
3.3	コンプトン効果	25
3.4	粒子性と波動性の二重性	27
3.5	演習問題	27
第 4 章	ボーアの原子模型	31
4.1	原子模型の困難	31
4.2	ボーアの量子条件	33
4.3	状態の遷移と原子の出す光	35
4.4	ゾンマーフェルトの量子条件と位相空間	36
4.5	演習問題	39
第 5 章	物質の波動性	41
5.1	ド・ブロイの仮説	41
5.2	電子波の確認	42
5.3	波動力学と古典力学の関係	43
5.4	最小作用の原理と、波の重ね合わせ	45
5.5	演習問題	47
第 6 章	不確定性関係と、波の重ね合わせ	51
6.1	線頭微鏡の思考実験	51
6.2	不確定性関係の意味	53

6.3	円周上に発生する波の重ね合わせ	54
6.4	演習問題	57
第7章	シュレーディンガー方程式と波動関数	61
7.1	シュレーディンガー方程式	61
7.2	波動関数の意味	63
7.3	シュレーディンガーの猫	68
7.4	なぜ波動関数 ψ は複素数なのか?	69
7.5	演習問題	71
第8章	物理量と期待値	75
8.1	座標の期待値	75
8.2	座標期待値の運動	76
8.3	運動量の期待値	79
8.4	演習問題	82
第9章	量子力学における演算子	85
9.1	演算子と物理量	85
9.2	エネルギーの期待値と固有関数	87
9.3	期待値の意味で成立する古典力学・交換関係	91
9.4	演習問題	94
第10章	波束とデルタ関数	95
10.1	波束	95
10.2	波の群速度と位相速度	96
10.2.1	単色波の位相速度	96
10.2.2	二つの波の重ね合わせ	97
10.2.3	たくさんの波の重ね合わせと群速度	98
10.3	もっとも極端な局在—デルタ関数	100
10.4	演習問題	103
第11章	分散と不確定性関係	105
11.1	分散と標準偏差	105
11.2	不確定性関係と交換関係	107
11.3	演習問題	110
第12章	状態ベクトルとしての波動関数	111
12.1	波動関数をベクトルと見る	111
12.2	ベクトルと行列 \leftrightarrow 波動関数と演算子	112
12.3	直交関数系という考え方	116

第 13 章 1 次元の簡単なポテンシャル内の粒子	119
13.1 箱に閉じ込められた粒子	119
13.2 有限の高さのポテンシャル障壁にぶつかる波	122
13.3 波動関数の浸み出し	126
13.4 演習問題	131
第 14 章 1 次元の束縛状態と散乱	133
14.1 井戸型ポテンシャル：束縛状態	133
14.2 井戸型ポテンシャル：束縛されていない状態	136
14.3 ポテンシャルの壁を通過する波動関数	138
14.3.1 $E > V_0$ の場合	138
14.3.2 $E < V_0$ の場合	140
14.4 薄い壁を通過する波動関数	141
14.5 1 次元周期ポテンシャル内を通過していく波動関数	143
14.6 練習問題	147
第 15 章 調和振動子	149
15.1 1 次元調和振動子のシュレーディンガー方程式	149
15.2 級数展開によるエルミートの微分方程式の解	153
15.3 演算子による解法	155
15.4 電磁波のエネルギーが $h\nu$ であること	162
15.5 演習問題	164
第 16 章 2 次元のシュレーディンガー方程式	165
16.1 直交座標と極座標でのシュレーディンガー方程式	165
16.2 2 次元の極座標のラプラシアン of 計算法	167
16.3 2 次元における角運動量	171
16.4 動径方向の波動関数	173
16.5 ベッセル方程式を級数展開で解く	174
16.6 極座標での解	177
16.7 二つの波動関数の関係	178
第 17 章 球対称ポテンシャル内の粒子	181
17.1 3 次元極座標のシュレーディンガー方程式	181
17.1.1 3 次元極座標による古典力学	181
17.1.2 3 次元極座標におけるラプラシアン	185
17.2 3 次元の角運動量	189
17.3 Legendre 多項式: $m = 0$ の波動関数	193
17.4 Legendre 陪関数: $m \neq 0$ の波動関数	199
17.5 3 次元球に閉じ込められた粒子	203
17.6 演習問題	204

第 18 章 水素原子	205
18.1 相対運動のハミルトニアン	205
18.2 水素原子のシュレーディンガー方程式	206
付 録 A (量子力学を学習するための) 解析力学の復習	213
A.1 最小作用の原理	213
A.2 オイラー・ラグランジュ方程式	214
A.3 具体例	215
A.4 なぜ位置エネルギーを引くのか??	216
A.5 なぜ最小作用の原理が必要なのか?	217
A.6 一般運動量	218
A.7 作用と保存則の関係	219
A.8 正準方程式	222
A.9 位相空間	223
A.10 ハミルトン・ヤコビの方程式	225
A.11 ポアソン括弧	226
付 録 B 量子力学の歴史図	229

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 光は波か粒子か

19世紀頃、「物理はもうすぐ終わる」と言われていた¹。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、プランクの黒体放射に関する研究から量子力学が始まる。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²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。ニュートンは光が直進するということを根拠に、光は粒子であると考えた。波なら広がるはずであり、「光線」という言葉で呼ばれるような形状にはならないと考えたのである。

しかし、後に光が干渉現象を起こすということが明らかになり、「やはり光は波である」と考えられるようになった。また、マ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。つまり、光とは空間中の電場と磁場が振動して、それが伝わっていくものなのである(演習問題2-3~2-4を参照せよ)。

このようにして19世紀までは「光は波である」ということで決着がついたと思われていた。ところが1900年、プランクが以下のようなことを主張する³。

プランクの主張

振動数 ν を持った光が外界とやりとりするエネルギーは、 $h\nu$ の整数倍に制限される。

ここで h はプランク定数で、SI単位系での値は $6.62606876 \times 10^{-34} \text{J}\cdot\text{sec}$ である。プランクに続く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(なぜこんなことがわかったのか、という点は、第2章と

¹物理を志していた学生時代のプランクは先生から「物理なんてもうやることないから他のことやったら?」と勧められたらしい。そのプランクが20世紀の物理の扉を開くのとから、人生は面白い。

²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。

³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。

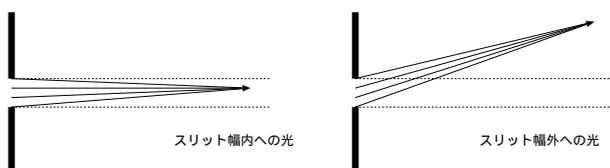
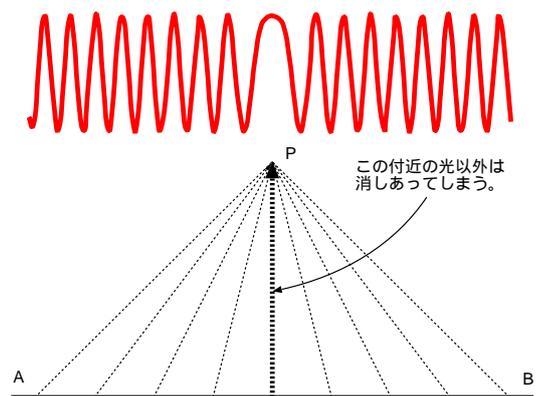
第3章でくわしく説明する)。プランク定数は非常に小さいゆえに、通常我々が目にする光は、たくさんの光子の集まりでできている。

光のエネルギーが不連続とか、光が粒子だとか言われてもにわかには納得しがたいと思うが、同様に連続に見えて実は連続でない例として、コップの水を考えよう。コップの水は見た目には連続的で、切っても切ってもいくらでも小さくなるように見える。けど、実際には水は H_2O 分子でできているのだから、切っていくと H_2O 一個になったら、もう切れない。同じように、光を切っていくとすると、これ以上切れない単位がある。たとえば向こうから光がやってくる時に、一瞬だけシャッター開けてすぐ閉める。シャッター速度を短くすればいくらでも小さいエネルギーの光を切り取れそうだけど、そうはいかない。 $h\nu$ の整数倍というエネルギーの光しか作れないのである⁴。

【補足】 この部分は授業では話さない可能性もあるが、その場合は読んでおいてください。

ニュートンは直進することを光が粒子である理由としていた。では、光は波であるのに、なぜ直進する(ように見える)のだろうか。波動説にしたがえば、光はいろんな方向に広がろうとするはずである。右の図のように、ある直線ABの上から出発した波が、ある一点Pにやってくることを考えよう。直線AB上では波の位相はそろっている(山なら全部山、谷なら全部谷)が、そこから離れた点にやってきた時、線上から点Pまでの距離の違いから、やってくる波の位相にずれが生じている(あるところからきた光は山、別のところからきた光は谷)。図の上の方に書いてある波形は、AB上からP点にやってきた波がどのような状態でやってくるかを書いたものである。

波は干渉するので、山と谷がぶつくと互いに消しあう。上のグラフのようになっていると、真ん中付近をのぞいてはほとんどすべての波が消しあって消えてしまう。真ん中付近は位相(つまり距離)の変化が比較的緩やかなので足し算しても消されずに残る。特に波長が短いと、この振動がより激しくなり、消しあう可能性がより高くなる。結局、中央付近のあまり消しあわない波だけが、現実はこの場所にやってくる波だということになる。



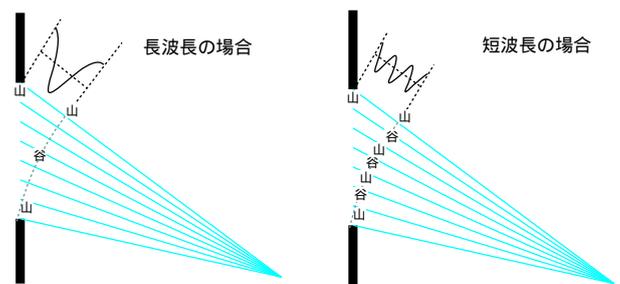
単スリットを通り抜けた後の光を考えよう。右側にやってくる光はスリットを通り抜けた光の和であるが、スリットの幅より外にやってくる光は、上で説明した、位相の変化の少ない部分を含まないで、互いに消しあってしまう。スリット幅より内側については光がある程度消されずに残る。実際に計算してみると、波長が短い時には図の点線より外側での光の振幅はほとんど0になってしまうことが確

認できる。

波長が長い場合スリットの幅が非常に小さいかどちらかの場合は、やってくる光の位相変化が小さいので、波は広い範囲で消されずに残る。

右図は波長が長い場合と短い場合で、単スリットを通り抜けた光がどのように重なるかを描いたものである。短波長の場合、図に示した点にやってくる光はたくさんの山と谷が集まってできたものとなり、必然的に小さな振幅になってしまう。

長波長の場合には、光は波として広がることになる。光学の方では「波長とスリット幅が同程度の時よく回折が起こる」と言われるが、それはこういう理由である。



⁴なお、水が H_2O で出来ているとなぜわかるのか、というのもそれはそれで長い話なのだが、ここでは触れない。

つまり、各点各点の波としての光は広がるとするのだが、光全体の進む路から離れたところへ来た波は互いに消しあってしまうので、全体としての光は広がることができないのである。厳密に言うと、少し広がっているのだが、その広がりが小さくて見えない⁵。これは、後で出てくる「波動関数 (これが何なのかはまだわからなくてよい) で表される、波であるところの粒子が、なぜ直進するように観測されるのか」という疑問に対する答でもある。覚えておこう。

【補足終わり】

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」という考えもできないではないが、現実にはうまく行かない。光を光子の集まりとして考え、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た方が実験に合う。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⁶ (演習問題 1-1 を参照せよ)。

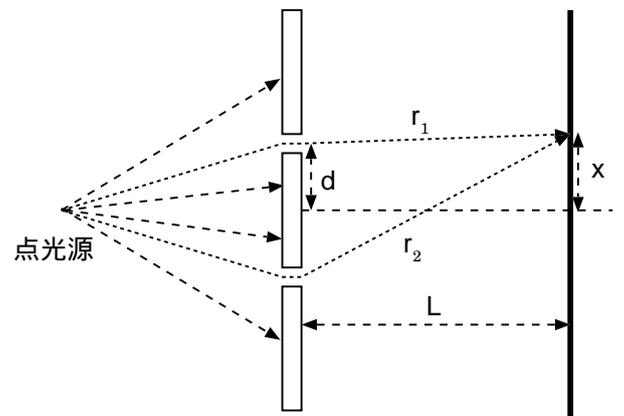
例えば、夜空の星を見上げればすぐに星が見えるが、これも光が光子という塊で降ってくるおかげである。眼が見える (人間が光を感知できる) のは、眼の中にある化学物質が光に反応して化学変化を起こすからである。しかし、光が連続的にやってきて、エネルギーがたまって始めて反応が起こるのだとすると、長い時間がたたないと感知できないことになる (演習問題 1-4 を参照せよ)。

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回折⁷してスクリーンにあたり、そこに干渉縞が生じる。

二つのスリットからスクリーン上にやってきた光の電場を $E_0 \sin(k(r_1 - ct))$ 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



⁵この広がり具合は波の波長に比例するが、光の波長は 10^{-7}m のオーダーであるから、日常において広がりほとんど見えない。一方、音の波長は 1m のオーダーであるから、音の広がり日常でもよくわかる。扉の陰にいる人でも部屋の中の話声が聞こえるのは、音の広がりのおかげ。

⁶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。

⁷スリットの幅が狭いがゆえに通り返けた光は直進せず、回折して広がる。

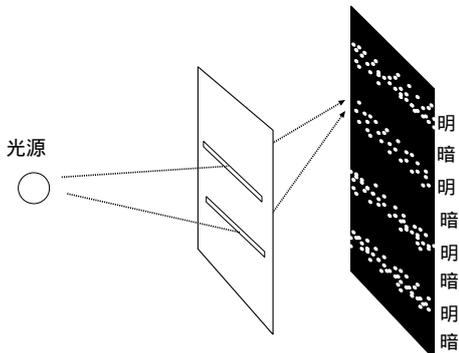
つの和なので、

$$E_0 (\sin(k(r_1 - ct)) + \sin(k(r_2 - ct))) \quad (1.1)$$

とおける。 x が変化すればそれに応じて r_1, r_2 も変化していく。二つの項 $\sin(k(r_1 - ct))$ と $\sin(k(r_2 - ct))$ もそれに応じて振動していくが、うまく両方の位相がそろったところは強めあって振幅の大きい電場となり、位相が反対になっていると弱めあって振幅が0になる。この和を具体的に計算すると、公式 $\sin A + \sin B = 2 \cos\left(\frac{A-B}{2}\right) \sin\left(\frac{A+B}{2}\right)$ を使って、以下のように書ける。

$$E_0 \left(\underbrace{\sin(k(r_1 - ct))}_{=A} + \underbrace{\sin(k(r_2 - ct))}_{=B} \right) = 2E_0 \cos\left(\underbrace{\frac{k}{2}(r_1 - r_2)}_{=\frac{A-B}{2}}\right) \sin\left(\underbrace{\frac{k}{2}(r_1 + r_2) - kct}_{=\frac{A+B}{2}}\right) \quad (1.2)$$

この式から、 $\cos\left(\frac{k}{2}(r_1 - r_2)\right) = 0$ となる点には光がこないことがわかる。



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。左の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⁸。この場合干渉は起こるだろうか。「干渉」というのは“常識”的な考え方からすれば、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。つまり、この場合“常識”は勝利しないのである。

【よくある質問】

「光子は壁には当たらないんですか？」

もちろん当たる。ほとんどの光子は壁に当たって遮られるが、遮られなかった幸運な光子が、その後の干渉現象に参加するのである。

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。

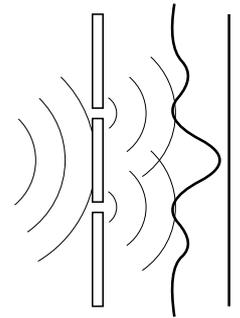
⁸可視光であっても弱い光を使ってこの条件を満たすことはできる。また、エックス線をつかってガイガー管などで計測すれば、一個の光子を測定することも可能である。なお、現在の技術であれば、光ではなく原子でこの二重スリットの実験を行うことも可能である。

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。ただし、「じゃあ、結局のところどっちを通ってきたんですか?」と尋ねることは無意味である。このスクリーンにあたった一つの光子は「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。

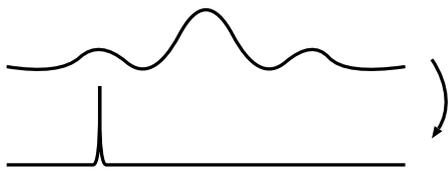
たとえば上のスリットをふさいだとする。すると、光子は「暗」の場所にも当たるようになる。この場合、光子は確実に下のスリットを通ってきているはずなのだが、「上のスリットが空いているのか空いていないのか」ということを知っているかのごとく、それに応じて挙動が変化することになる。

観測機器などの状況設定によって、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⁹。

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光子は、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¹⁰。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、彼の「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。この考え方を「隠れた変数の理論」と呼び、アインシュタイン以外にも多くの物理学者がこの立場をとっていたが、この隠れた変数の理論では説明できそうにない実験結果がある。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まいと考へなくてははいけないらしい。

⁹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

¹⁰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。

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。初めてこのような話を聞いた人にとっては、‘非常識’と感じられるだろう。しかし、我々の‘常識’は「光が粒子の集まりであることを実感することがあまりない世界(我々が見る光源はたいてい1秒に 10^{20} 個以上の光子を出している)」で作られたものである。実験が進むことによって知識が増え、世界が広がれば、常識というものは必然的に変わっていく。時には「常識」を吟味することも必要である¹¹。「光は粒子である」という実験結果が出た以上は、新しい「常識」を作らなくてはならない。

ポーアは「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。我々の住んでいるこの世界は、量子力学を知らない人が漠然と知っているよりもずっとずっと、不可思議なからくりを持っている。それを解き明かしていき、理解していくことこそが物理の勉強である。

また、ここで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¹²。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。

1.4 演習問題

[演習問題 1-1] 紫外線(波長が 5×10^{-8} m)と赤外線(波長が 1×10^{-6} 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 1.6×10^{-19} J)

(Hint: 光子のエネルギーは $\frac{hc}{\lambda}$ で計算できる。SI 単位系で計算すると J で出てくるから、eV に直そう。紫外線、赤外線は水素原子をイオン化できるだろうか??)

[演習問題 1-2] カップ焼きそばを一杯(150グラム)食べると、約750キロカロリーのエネルギーを摂取することができる。計算を簡単にするためにすべて炭素(分子量12)でできているとする。炭素原子一個あたり、何Jのエネルギーをもっていることになるか。

(注: 1 カロリーは約 4.2J。アボガドロ数は 6.0×10^{23})

この値はだいたい、生物が生活していく上で起こる化学変化でやりとりされる分子一個あたりのエネルギーである。このエネルギーが光子一個になったとすると、振動数がどのくらいの光となるか。この振動数がおおむね可視光の振動数と近いことには、どんな意味があるか。

¹¹もちろん、何がなんでも常識を捨てればよいというものではない。その「常識」がどんな経緯で成り立っていると思われているのかを考えた上で、捨てるべきか守るべきかが決められなくてはならない。

¹²これはもちろん、前野の自戒が込められた言葉である。

(Hint:150 グラムの焼きそばは、 $\frac{150}{12}$ モル、すなわち $\frac{150}{12} \times 6.0 \times 10^{23}$ 個の炭素原子できていると考えられる。)

[演習問題 1-3] 100W の電球が波長 $5 \times 10^{-7}\text{m}$ 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 $3 \times 10^8\text{m/s}$ 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なると、瞳に飛込む光子は 1 秒に何個か。

[演習問題 1-4] 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。

[演習問題 1-5] 「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。

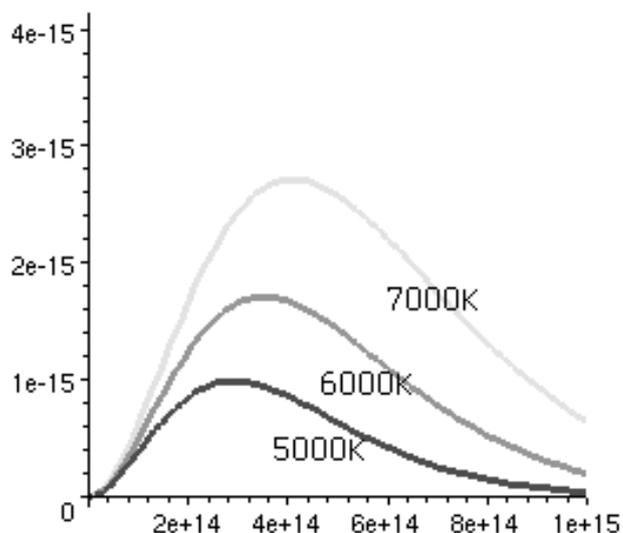
(Hint:0 等星の照度 (2.5×10^{-6} ルクス = $\frac{2.5}{683} \times 10^{-6}\text{W/m}^2$) から、人間の瞳 (0.5cm^2) にやってくる光のエネルギーを考えて、可視光一個のエネルギー (だいたい $4 \times 10^{-19}\text{J}$) で割ってみよう。)

第2章 光の粒子性の発見—黒体輻射

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、この章では、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。

2.1 黒体輻射と等分配の法則

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¹。空洞輻射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と、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。温度をあげるにしたがってグラフのピーク部分が振動数の高い(波長の短い)方向へ移動し、色が白青と変わる。これがなぜ問題なのかというと、古典力学を使って計算する限り、赤い色が理論的に導けないのである。



その理由を説明しよう。統計力学(ただし、古典統計力学)には

— 等分配の法則 —

「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。 $k = 1.380658 \times 10^{-23}$ 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

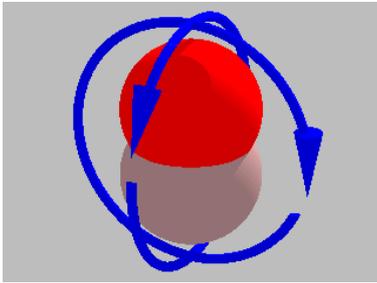
¹「黒体」とは、光を全く反射しない物体のことで、空洞もまた、一つの黒体である。光を反射する物体であれば、どの波長の光を反射するかによって、色がつく(赤色光を反射する物体は赤く見える)。空洞放射の色はそのような物質の属性とは関係ない。

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くなる。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、全自由度は6となり、1分子あたり $3kT$ のエネルギーを持つ。

【よくある質問】

「どうして、2原子分子の軸の回りの回転はないんですか？」

いい質問です。今の段階では「原子には大きさはなから、軸回りに回転してもエネルギーはかせがない」と考えておけばいいでしょう。実は原子だって全く構造がないわけではないので回転エネルギーを持ったってよさそうなんです、そういうエネルギーの割り当ては小さくなります。理由は、この後説明する話とほぼ同様です。この章が終わった後で考えてみてください。



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。上で述べたことから、二原子分子の気体の温度を1度あげると、1分子あたり $\frac{5}{2}k$ だけエネルギーが上昇する。ということは、温度1度上昇させるには $\frac{5}{2}k \times (\text{分子数})$ が必要である。固体の場合は、温度を1度上昇させるには $3k \times (\text{分子数})$ のエネルギーが必要である²。この値は、実測とだいたい一致する。

原子はさまざまな形態のエネルギーを持っている。そのさまざまな形態のエネルギー、たとえば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ているのだから、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。

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。しかし、なぜこんな法則が成立するのか、雰囲気だけでもつかむために、以下のようなたとえ話で考えよう。

6個のリンゴを3人でわける分け方を考える。3人に2個ずつ、と平等にわける分け方は何種類だろうか。まず最初の一人に2個渡す方法が ${}_6C_2 = 15$ 通り。次に残った2個をもう一人に渡す方法が ${}_4C_2 = 6$ 通り。最後の一人には残ったものを渡すしかないから、1通りだけ。結局「平等にわける」場合の数は90通りとなる。

では、特定の一人に6個あたえて、他の二人には与えない場合はというと、これは1通りしかない。3人のうち誰でもいいから一人に6個与えて他には与えないという場合でも3通りであり、平等にわけるよりもずっと場合の数

A君	B君	C君	場合の数
6	0	0	1
5	1	0	6
4	2	0	15
4	1	1	30
3	3	0	20
3	2	1	60
2	2	2	90

²これをデューロン・プチの法則と言う。

が少ない。いろいろな分けかたについて場合の数がいくらになるか、ざっと計算したのが右の表である (A 君 B 君 C 君の入れ換えで実現できるものは省いた)。より平等にわければわけほど、場合の数が大きくなるのわかるだろう。

たとえば気体を箱につめてしばらくほっておいたとすると、互いに気体分子が衝突しあってエネルギーのやりとりを行うだろう。エネルギーをリングに、気体分子を A 君 B 君 C 君に見立てる。気体分子が激しくエネルギーのやりとりを行っているという状態は、A 君 B 君 C 君がリングを投げあっているような状態である。その時、状態は刻一刻と変化を続けているだろう。しかし、その変化がでたらめに起こるとしたら、やはり数の多い (90 通りもある) 「平等にわけろ」状態が一番多く実現するに違いない。これがすなわち等分配の法則である。今リング 6 個で 3 人、という少ない数で話をしたが、実際の気体ではどちらもアボガドロ数程度のものであって、ますます「平等なわけ方」の割合が大きくなる。

つまりは「自然はえこひいきしない」という法則なのだが、その根拠が「物事がランダムに起こるならば、えこひいきされた状態は数が少ないがゆえに確率が小さい」という、言ってみれば単純な理屈であるところが統計力学の面白いところである。統計力学の基本は「場合の数が多い方が勝つ」なのである。これに「平等にエネルギーを配った方が場合の数は多くなる」という事実を加えると、「全ての自由度に平等にエネルギーが分配される (なぜならば、その場合の数が一番多いんだから)」という「等分配の法則」が出てくるのである。等分配の法則の厳密な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の雰囲気を理解し、かつ、この法則が成立していることが実験事実であるということ覚えておこう。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、だいたい同じ平均エネルギーを与えられている。これは実験的に確かめられていることである (具体的な数値による根拠は、演習問題 2-1 を見よ)。

以上の話からもわかるが、等分配の法則が成立するためには、各自由度が平等になるように、エネルギーのやりとりがスムーズに行われる必要がある。黒体輻射の場合、その前提が (量子力学のおかげで) 崩れることになる。どう崩れるのかを理解するために、等分配の法則を使って黒体輻射を考えるとどのような結果が出るのか、まず説明しよう³。

2.2 箱に閉じこめられた電磁波

等分配の法則が、溶鉱炉の中にある光 (電磁波) の場合にも適用できるとしよう。溶鉱炉の壁が温度 T を持っているとする、壁を作っている分子も一個あたり $\frac{3}{2}kT$ の運動エネルギーを持って分子運動している。さらに振動しているということは復元力が働くのだから、その力に関連した位置エネルギーも $\frac{3}{2}kT$ 程度持っているだろう。そして、そのエネルギーを壁の中の電磁波とやりとりする。激しいやりとりの末に、各自由度ごとに $\frac{1}{2}kT$ ずつのエネルギーを持った状態になると平衡に達するであろう (と考えるのが等分配の法則)。その状態では電磁波の振動の 1 自由度ごとに kT のエネルギーが分配されることになる (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、 $\frac{1}{2}kT$ の 2 倍になっている)。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。

³なお、歴史的順番はここで説明している順番とは少し違う。プランクが正しい輻射公式を出した 1900 年には、まだ次で説明するレイリー・ジーンズの式は導かれてはいなかった。

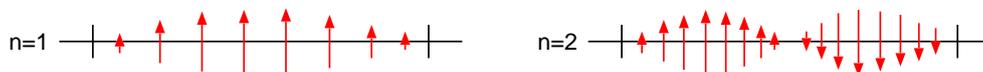
この考察のためには、溶鉱炉内の電磁波がどれだけの「自由度」を持っているのかをまず考えねばならない。とりあえず話を簡単にするため、溶鉱炉の中はからっぽとし、壁で電磁波が固定端反射していると考え。空洞輻射という名前がつけられているのはそういう意味がある。

まず1次元の空洞の中の電磁波を考えることから始めよう。両端を固定された振動であるから、ギターや琴の弦の振動と同じように考えることができる。その振動の様子を描いたのが次の図である。

端から端までの長さを L と考えると、 $n = 1, 2, 3, \dots$ と腹の数が増えていくにしたがって、波長は $2L, L, \frac{2L}{3}, \frac{L}{2}, \dots$ と短くなっていく。

腹の数	波長	波数	振動の様子
$n = 1$	$2L$	$\frac{\pi}{L}$	
$n = 2$	L	$\frac{2\pi}{L}$	
$n = 3$	$\frac{2L}{3}$	$\frac{3\pi}{L}$	
$n = 4$	$\frac{L}{2}$	$\frac{4\pi}{L}$	

なお、実際に振動しているのは電場と磁場であるので、上の、弦が振動しているかのごとき図はあくまでイメージである。 $n = 1, n = 2$ の場合の電場の様子を矢印で示して図に書くと



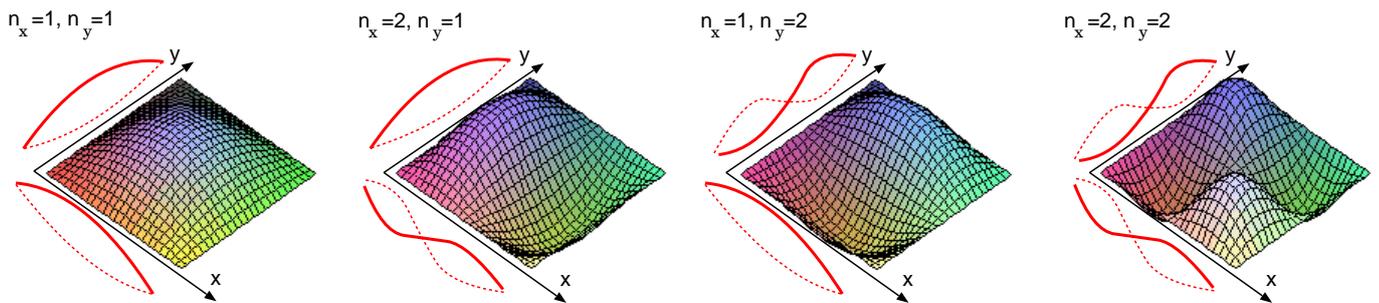
のようになる。矢印の長さはその場所の電場の強さを表す。

上の波を式で表せば $\sin \frac{\pi}{L}x, \sin \frac{2\pi}{L}x, \sin \frac{3\pi}{L}x, \dots$ のように書ける。このように \sin で書ける関数の \sin の中身のことを「位相」と呼ぶ。位相が x の1次関数である時、 x の前の係数を「波数」と呼ぶ。別の言い方をすると、この式を $\sin kx$ とまとめた時に k にあたるものが波数である。波数は単位長さあたりどれだけ位相が変化するかを表す。位相は、波一個（長さにして一波長）で 2π だけ変化するから、単位長さあたり、 $\frac{2\pi}{\text{波長}}$ だけ変化する。すなわち、 $(\text{波数}) = \frac{2\pi}{(\text{波長})}$ である。今後、この波数を使って波を分類することが多い⁴。波数で分類すると都合がいいのは、上の例であれば波数 k は $k = \frac{n\pi}{L}$ という形になって、 n に比例して増えていくからである。

⁴「波数」という言葉から「波の数」と勘違いする人がいるが、波数の定義は「単位距離あたりの位相の変化」である。「単位距離あたりの波の数」ならば $\frac{1}{\lambda}$ で計算できる。波数はこれの 2π 倍。

なお、実際に振動が起こる時は、図に書いたようなきれいな振動が起こるとは限らない。むしろこれらがまざりあったような振動が起こる。これはギターを鳴らした時に「倍音」が出るのと同じことである。倍音が出なければギターは音も琴の音も、音叉の出す音のような味気ないものになってしまう⁵。

以上は1次元での考察であった。実際には3次元の箱の中の振動を考えなくてはならないが、3次元の振動は図に書きにくいので、その前に2次元の振動を図示しながら考えていこう。2次元の場合、空間座標を x, y の二つとすると、この二つのそれぞれの方向について n_x 個、 n_y 個の腹ができるような波を考えることができる。図で表すならば



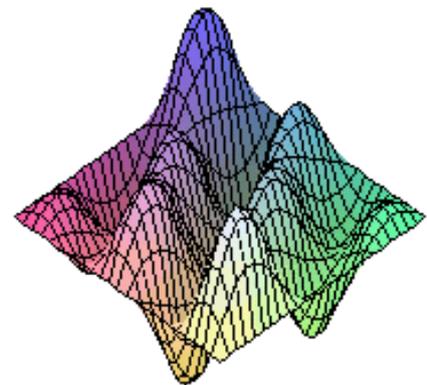
となる。式で表すならば、

$$\sin n_x \frac{\pi}{L} x \sin n_y \frac{\pi}{L} y \quad (2.1)$$

である。

図では $n = 2$ までを書いたが、実際には $n = \infty$ まで、任意の数を取ることができる。

黒体輻射の場合、まわりの壁とエネルギーをやりとりすることによって、振動の様子は刻一刻と変わっていく。実際に起こる振動はこれらのうちのどれかというわけではなく、いっせいに起こる。実現するのはいくつかの波の重ね合わせである。古典力学的に考えれば、波のエネルギーは任意の値をとることができるので、いろんな振幅の波の足し算が実現可能である。右の図は $(n_x, n_y) = (3, 5)$ の波と $(n_x, n_y) = (2, 4)$ の波の重なった状態である。



では次に、3次元の場合を式で示そう。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数は3つの方向それぞれごとに $n \frac{\pi}{L}$ のように、 $\frac{\pi}{L}$ の整数倍になる。

ここまで、電場がベクトルであることを無視して、壁のところ ($x = 0, x = L$ など) で固定端境界条件を

⁵ギターと琴の「音色」の違いは、倍音の混ざり具合の違いである。だから同じ「ド」でもギターと琴では違う音に聞こえる。

満たすように書いてきたが、実際はもう少し複雑である。今は周りの壁を完全な導体だと考えているので、導体内部で電場が0になる。また、電場は境界において接線成分が連続（マクスウェル方程式 $\text{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$ から出る）であるので、壁に平行な方向は壁のすぐ外でも0でなくてはならない。すなわち、壁と平行な方向は固定端条件を満たす。ゆえに x 成分 E_x は $y = 0, L$ および $z = 0, L$ で0になっていなくてはならない。同様に E_y は $x = 0, L$ および $z = 0, L$ で、 E_z は $x = 0, L$ および $y = 0, L$ で0となるようにしなくてはならない。これにマクスウェル方程式 $\text{div} \vec{D} = \rho$ すなわち、 $\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$ (真空中の場合) を加えて考えると、電場は

$$\begin{aligned} E_x &= E_{0x} \cos \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L} \\ E_y &= E_{0y} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \cos \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L} \\ E_z &= E_{0z} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \cos \frac{n_z \pi z}{L} \end{aligned} \quad (2.2)$$

のように、3つの0以上の整数 (n_x, n_y, n_z) (ただし $n_x = n_y = n_z = 0$ は省く。こうなると全成分が0になってしまう) を使って表される。なお、真空中なので $\text{div} \vec{E} = 0$ を満たさなくてはならないので、振幅 E_{x0}, E_{y0}, E_{z0} の間には、

$$n_x E_{x0} + n_y E_{y0} + n_z E_{z0} = 0 \quad (2.3)$$

の関係がある。ゆえにこの振幅のうち2つが独立である (E_{x0}, E_{y0}, E_{z0} のうち二つを決めれば、あとの一つも決まる)。これは、電磁波 (光) の偏りの成分 (つまり偏光の成分) が2つしかないということの意味している。

ということは、空洞内に存在できる電磁波は、(n_x, n_y, n_z) の取り得る数 $\times 2$ だけの自由度がある、ということになる。すなわち、無限大である。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る。もし、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」) 存在できるとすれば、空洞の持っているエネルギーは無限大になってしまう⁶。実際にはグラフにあるように、ピークを過ぎると短い波長 (高い振動数) の電磁波は少なくなっていくので、エネルギーが無限大という状況は避けられている。

では、いったい何が高い振動数の光へのエネルギー分配を妨げているのであろうか。それを考えるために、もう少し、振動数ごとにどれだけのエネルギーを持つべきかの計算を続けよう。

[問い 2-1] 上で求めた定常波解は時間依存性を持つので、たとえば z 成分は

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

と書ける。真空中の電場の満たす式

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

から $f(t)$ を求め、この電磁波の振動数が $\nu = \frac{c\sqrt{(n_x)^2 + (n_y)^2 + (n_z)^2}}{2L}$ であることを示せ。

⁶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。

次の図は (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 (+ の場所) 一つ一つが、空洞内に存在する電磁波の 2 モード (この「2」は偏光のおかげ) が対応する。

この空間で原点を中心とした一つの球面の上にあるモードは、同じ振動数を持つ。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、 ν が大きいほど大きい。

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) を勘定してみる。問い 2-1 から、 $\nu = \frac{c\sqrt{(n_x)^2 + (n_y)^2 + (n_z)^2}}{2L}$ であることはわかっているの、逆に考えると振動数 ν ならば、 n_x の最大値は $\frac{2L\nu}{c}$ に近い自然数となる。 (n_x, n_y, n_z) の空間で考えると、この空間内の体積 1 の立方体一つごとに格子点は一箇あるので、体積を計算すれば格子点の数を概算できる。振動数が ν から $\nu + \Delta\nu$ の間にある格子点の数は、半径 $\frac{2L(\nu + \Delta\nu)}{c}$ の 8 分の 1 球と、半径 $\frac{2L\nu}{c}$ の 8 分の 1 球の体積の差をとって、

$$\frac{1}{8} \times \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2L(\nu + \Delta\nu)}{c} \right)^3 - \frac{1}{8} \times \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2L\nu}{c} \right)^3 \quad (2.4)$$

となる。これから、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、単位振動数あたりのエネルギーは

$$E(\nu) = \frac{8\pi kT}{c^3} \nu^2 \quad (2.5)$$

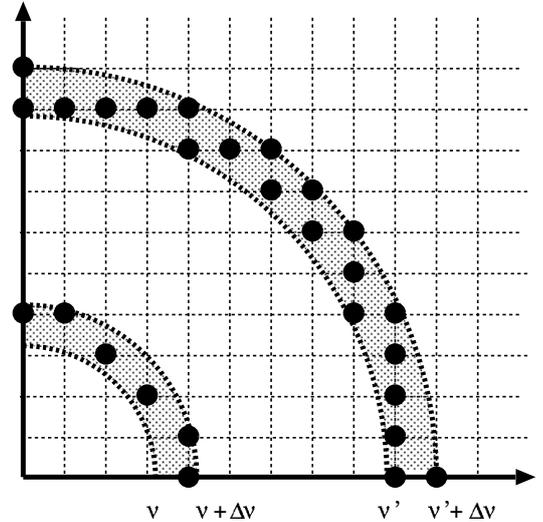
で表される。この式はレイリー・ジーンズの公式と呼ばれる⁷。

[問い 2-2] (2.4) から (2.5) を出す計算を実行せよ。ただし、電磁波 (光) が i 一つの (n_x, n_y, n_z) の組に対して 2 個の自由度があるので、モードの数が 2 倍になることを忘れないように。

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が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。

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。

⁷実は歴史的に言うと、このテキストでは後で出てくるプランクの式の方がレイリー・ジーンズの公式よりも先に出されている。しかもレイリー・ジーンズの式と呼ばれる式自体を導出したのは、アインシュタインの方が先である。その論文こそが、光量子仮説の論文なのである。

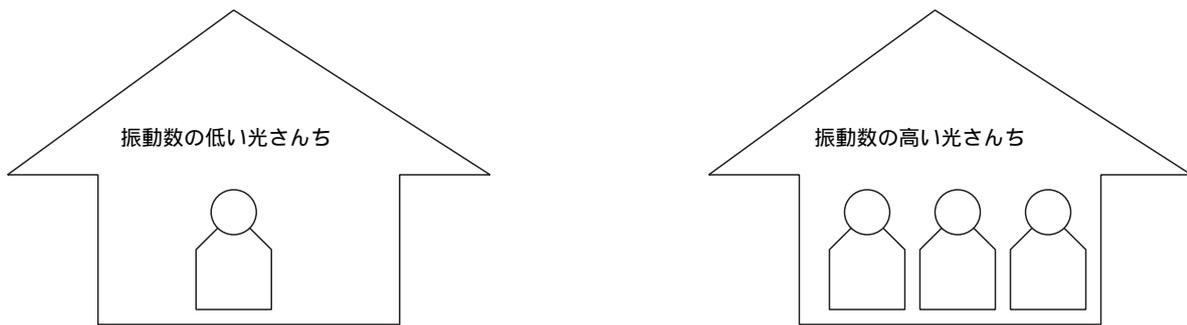


2.3 等分配の法則の破れの原因—光のエネルギーの不連続性

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。

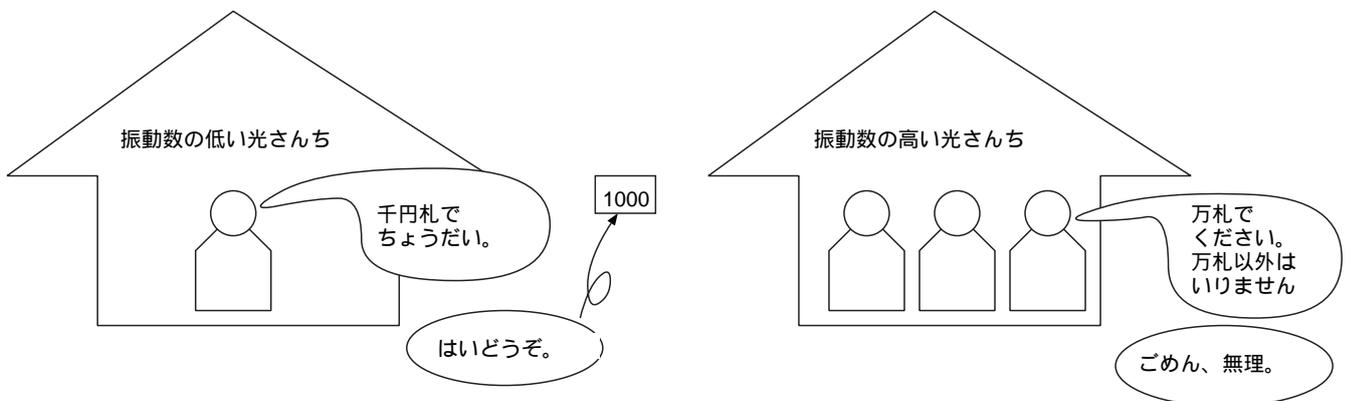
今考えているのは熱的平衡状態なので、「電磁波 ↔ 壁」のエネルギーのやりとりがある。この時電磁波が吸ったり吐いたりするエネルギーはどんな値をとってもよいのではなく、 $h\nu$ (ν は振動数) の定数倍に限るとする。すると振動数が大きい光は、やりとりするエネルギーの塊の単位が大きいということになる。等分配の法則はエネルギーを kT ずつ分配しようとするが、 $kT < h\nu$ となっていると、エネルギーが分配されにくい。その分高い振動数の光に与えられるエネルギーが少なくなってしまう。

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。



子供一人当たり1000円ずつおこづかいをあげると、、、
振動数の低い光さんちでは1000円、
振動数の高い光さんちでは3000円出すことになりそうだ。。。

と、思ったのに。



と言われたので、結局払うお金は1000円で済んでしまった。。。。

たとえば言えば、高い振動数成分の光は「1000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。低い振動数の光は喜んで1000円札を受け取る。ゆえに、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、実際の光の振動モード一個一個がちょうど kT の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。

ここでよく誤解されているので、一つ注意しておく。プランクは1900年の時点では「光のエネルギーが $h\nu$ の整数倍」と考えてはいない。「光が他の物体とエネルギーをやりとりする時、 $h\nu$ を単位として行う」とだけ考えていたのである。後に1905年のアインシュタインの光量子仮説によって、明確に光のエネルギーは $h\nu$ の整数倍だと考えられるようになる。とはいっても、他の物理学者たちがこのことを認めるには長い時間がかかっていて、プランクですら最初アインシュタインの光量子仮説を正当な仮説とは考えず、「真空のことはマックスウェル方程式で記述できるはずだ」と言って光量子を考えることを拒否している。光が粒子であると多くの物理学者が認めるようになるのは、アインシュタインの光量子仮説(1905年)から20年以上たってからである。

実際にやりとりされる光のエネルギーが $h\nu$ の整数倍であるという条件のもとにスペクトルを計算するには統計力学の知識が必要となる。

【補足】 この部分は授業では話さない可能性もあるが、その場合は読んでおいてください。

ここで統計力学の公式を使ってプランクの黒体放射の公式を導いておこう。統計力学を知らない人が大半だと思うのであくまで補足として書いておく。できれば統計力学を勉強した後でまたここを読み返して欲しい。統計力学は量子力学と並ぶ現代物理の柱と言ってよい重要な学問だが、この二つの柱が互いに補い合いながら発展したことを実感してもらいたいと思う。

統計力学のカノニカル分布⁸では、系のエネルギーが E である状態は確率 $Ne^{-\frac{E}{kT}}$ で実現すると考える。ここで N は規格化定数というもので、全確率を計算したら1になるように決められる。上で計算したように単位振動数当たり、単位体積あたりのモードの数は $\frac{8\pi}{c^3}\nu^2$ であった。その各自由度が、 $Ne^{-\frac{E}{kT}}$ の確率で E のエネルギーを持つ。これでエネルギーに「正の実数である」という以外には何の制限もないのなら、

$$\int_0^{\infty} dE \left(\underbrace{\frac{8\pi}{c^3}\nu^2}_{\text{モードの数}} \times \underbrace{E}_{\text{モード一個の持つエネルギー}} \times \underbrace{Ne^{-\frac{E}{kT}}}_{\text{それだけのエネルギーを持つ確率}} \right) \quad (2.6)$$

のようにして全てのエネルギーで積分することで、空洞内の全エネルギーの期待値を計算できるだろう。ところが今、エネルギーは $E = nh\nu$ のようにとびとびの値しか取らないので、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(\underbrace{\frac{8\pi}{c^3}\nu^2}_{\text{モードの数}} \times \underbrace{nh\nu}_{\text{モード一個の持つエネルギー}} \times \underbrace{Ne^{-n\frac{h\nu}{kT}}}_{\text{それだけのエネルギーを持つ確率}} \right) \quad (2.7)$$

のように、積分ではなく級数となる。

上の式から n に関連する部分だけ抜き出すと、 $\sum_{n=0}^{\infty} ne^{-n\alpha}$ である。ただし、 $\alpha = \frac{h\nu}{kT}$ とした。等比級数の和の公式 $\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha} = \frac{1}{1 - e^{-\alpha}}$ を α で微分すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} ne^{-n\alpha} = \frac{e^{-\alpha}}{(1 - e^{-\alpha})^2} \quad (2.8)$$

⁸等温の熱浴にひたされている系で確率を計算する時に使われる方法。熱浴にひたされているのでエネルギーは一定ではないが、エネルギーが高い状態の存在確率は低くなる。それが式 $e^{-\frac{E}{kT}}$ に現れている。

という公式ができるので、これを使うと、単位体積あたり単位振動数あたりのエネルギーは

$$\frac{8\pi}{c^3} h\nu^3 N \times \frac{e^{-\frac{h\nu}{kT}}}{\left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}\right)^2} \quad (2.9)$$

となる。あと計算すべきは規格化定数 N だが、全確率が1であることから、

$$\sum_{n=0}^{\infty} N e^{-n\alpha} = N \frac{1}{1 - e^{-\alpha}} = 1 \quad (2.10)$$

であるので、 $N = 1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}$ となり、最終結果はこの次の式となる。

【補足終わり】

以上の計算により、単位体積あたり、単位振動数あたりのエネルギー密度が

$$\frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (2.11)$$

になる。分母の $e^{\frac{h\nu}{kT}}$ のおかげで、 ν が大きくなると分母が急激に大きくなり、エネルギー密度が下がる式になっていることがわかる。これが「高い振動数の光が欲張りなために分配が減る」という効果の顕れである⁹。

光がやりとりするエネルギーが $h\nu$ の整数倍であるという仮定は非常に奇妙で、この時点ではなぜこうなるのかよくわからなかったわけだが、この式は実験で得られた値とぴったり一致した。

空洞放射と同じように、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」があることの証拠である。回転運動の方がエネルギーの単位が大きいために、低温では等分配の法則が崩れて、回転運動にエネルギーが分配されにくくなる。

2.4 演習問題

【演習問題 2-1】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

1グラムあたりを1分子あたりに直せということなので、1グラムに含まれる分子の数で割ればよい。グラムで測って分子量と同じだけの質量を持つ気体が、全部で 6.0×10^{23} 個である。水素、窒素は2原子分子。アルゴン、ヘリウムは単原子分子である。水蒸気は3原子分子であり、ベンゼンはもっと多い。

【演習問題 2-2】酸素分子一個の運動エネルギーが $\frac{3}{2}kT$ であるとして、酸素分子がだいたいどれぐらの速度で走り回っているかを計算せよ。結果を音速 (340m/s)、および脱出速度 (11.2km/s) と比較して、その物理的意味を述べよ。

⁹補足部分を見るとわかるように、 $\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$ という因子が現れる理由は等比級数の和をとったからである。すなわち、光のエネルギーが離散的であることが効いているのである。

計算は $\frac{3}{2}kT = \frac{1}{2}mv^2$ で考えればよい。酸素 O_2 は、 6.02×10^{23} 個で 32 グラムである。

[演習問題 2-3] 真空中のマックスウェル方程式

$$\operatorname{div} \vec{E} = 0, \quad \operatorname{div} \vec{B} = 0, \quad \operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (2.12)$$

と、真空中では $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$ 、 $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E}$ であることから真空中の電場 \vec{E} が満たすべき方程式を導け。

ヒント：ベクトル解析の公式

$$\operatorname{rot}(\operatorname{rot} \vec{A}) = \operatorname{grad}(\operatorname{div} \vec{A}) - \Delta \vec{A} \quad (2.13)$$

($\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$) を使って、なんとかして \vec{E} 以外の変数 (\vec{D} , \vec{H} , \vec{B}) を消去してしまおう。

[演習問題 2-4]

$$\vec{E} = E_0 \vec{e}_y \sin \left(k \left(x - \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} t \right) \right) \quad (2.14)$$

が演習問題 2-3 で出した方程式の解であることを示せ。この式はどのような速度で伝播する波を表しているか。MKSA 単位系で計算せよ。 $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{Fm}^{-1}$ 、 $\mu_0 = 1.257 \times 10^{-6} \text{NA}^{-2}$ である。答えの数字に見覚えはないか？

[演習問題 2-5] プランクの出した式 $\frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$ を振動数 0 から無限大まで積分すると、黒体輻射の持つ単位体積あたりのエネルギーが計算できる。その答えは T^4 に比例することを示せ (この関係をステファン・ボルツマンの法則と呼ぶ)。ただし、公式

$$\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15} \quad (2.15)$$

を使え。

[演習問題 2-6] プランクの出した式 $\frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$ を、 ν が小さいとして、あるいは h が小さいとして近似¹⁰すると、レイリー・ジーンズの式 $\frac{8\pi kT}{c^3} \nu^2$ に等しくなることを確かめよ¹¹

$e^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \dots$ と展開する。 x の 1 次まで取るとすると、 $e^x - 1 = x + \dots$ である。

¹⁰ ν が小さいという条件は、振動数が低いところでは二つの式が同じ結果を出すことを示している。一方、 h が小さいという条件は、量子力学的な効果が小さい、つまり古典力学的計算をしていることに対応する。

¹¹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いる。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。

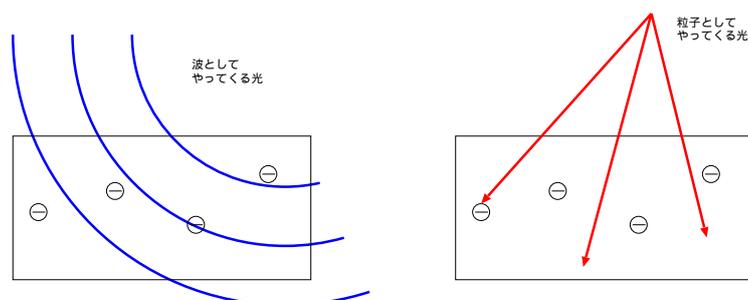
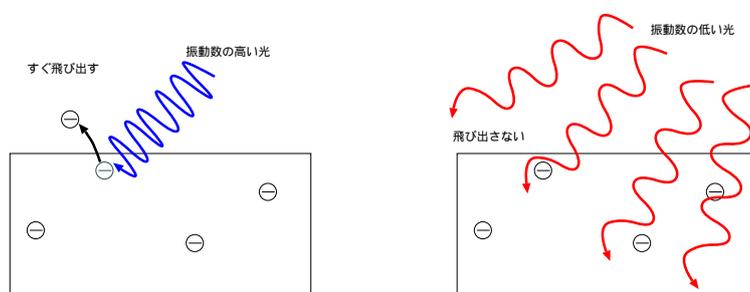
第3章 光の粒子性の確認—光電効果とコンプトン効果

プランクが光が $h\nu$ を単位としてエネルギーをやりとりしていると指摘したからと言って、即座に「光は粒子だ」という認識に至ったわけではない¹。光の粒子性が確認されるまでには、他にいくつもの実験、そして理論的研究が必要だったのである。この章では「光が粒子である」という認識が確立されるに至るまでを述べる。

3.1 光電効果

黒体輻射は光のエネルギーが離散的であることを間接的に示しているが、より直接的に光の粒子性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自体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きた。

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（光の「振幅」とは電場または磁場の強さで表される）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だろうと考えたくなる。また、大きな振幅（強い電場）で叩き出された電子はより大きい運動エネル



¹アインシュタインが光量子仮説を唱えた1905年の時点では、プランク本人を含めてほとんどの物理学者は光自体は連続的なものだという考えを変えておらず、エネルギーが不連続になることの重要性に気づいていない。自然に対する認識を変化させるには時間がかかるものである。

ギーを持って(速い速度で)出てくるだろうと予想したくなる。しかし現実はそうではなく、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。

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。

具体的な計算は章末の問題を解いてもらいたいですが、光のエネルギーが金属全部に広がった波の形でやってくるとすると、ある程度の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(連続的に広がった状態で金属にやってくるものだと)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²。

アインシュタインはこのような現象は、光が「光量子」(light quantum) 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る。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、外に出てくるのだ」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

$$E = h\nu - W \quad (3.1)$$

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³。

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確認し、光量子仮説の正しさを実証することになる⁴。

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 $h\nu$ の整数倍で変化する」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(光量子など使わなくても古典的に説明できるのではないかと四苦八苦しているのである)。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。

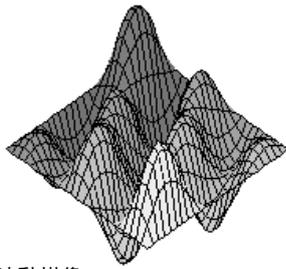
3.2 光子の運動量

光が粒子であると考え、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、光子にも圧力がある。光に圧力があることは電磁気学から理論的に導くことができるし、実験的にも確認されている。

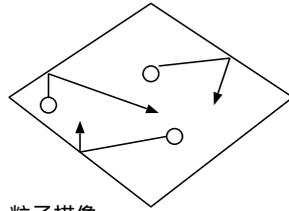
²光の粒子は最初の頃は「光量子(light quantum)」と呼ばれたが、現在ではもっと短く、「光子(Photon)」と呼ばれている。

³その場合、電子は加速するものの金属内にとどまる。最終的にはそのエネルギーは熱になるだろう。

⁴のではあるが、そのミリカンですら「光量子仮説は筋が通らないように思える」という言葉を残している!—「光は粒子だ」と認めることがどれほど難しかったのがわかるエピソードである。



波動描像

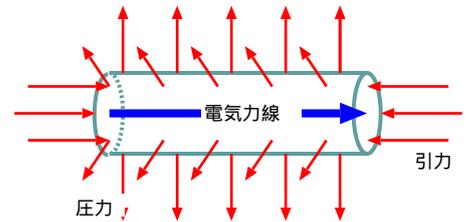


粒子描像

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。運動量は(質量) × (速度) のはず、と考えてしまうと「なんで光に運動量があるの?」と不思議だろう。しかし、そもそもの運動量の定義は運動方程式 $\frac{dp}{dt} = F$ であると考えたらどうだろう。こう考えれば、「力あるところには運動量の増減あり」ということになる。「光が力を出すの?」と不思議に思う人もいるかもしれないが、光は電磁波、すなわち電場と磁場の波である。電

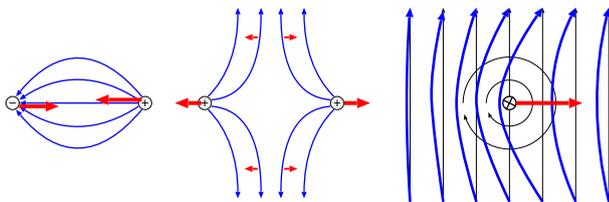
場や磁場がクーロン力やローレンツ力という力を生み出すことを考えれば、光が力を出すことも当然である。2物体が力を及ぼし合う時、必ず一方の運動量は増加し、もう一方の運動量は減少する(だからこそ運動量は保存する)。力を及ぼすのが物体でなく電磁場(光)だったとしても同様の関係が成立して欲しい。そのためには「電磁場の運動量」を考える必要がある。

光の運動量を知るために、まず光すなわち電磁波の持っている力を考えよう。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⁵。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。



[問い3-1] 極板間が真空である平行平板コンデンサー(面積 S 、極板間 d)に電荷 Q がたまっている時、コンデンサーの持つエネルギーは $\frac{1}{2} \frac{d}{\epsilon_0 S} Q^2$ であり、極板間に働く力は $\frac{1}{2} \frac{1}{\epsilon_0 S} Q^2$ である。この二つの式が、上で述べた電場のエネルギーと引力で説明できることを示せ。

これをマックスウェルの応力と呼ぶ。この言葉にはなじみが薄い人が多いかもしれないが、実は電磁力の正体は全てこの力であると解釈できる。

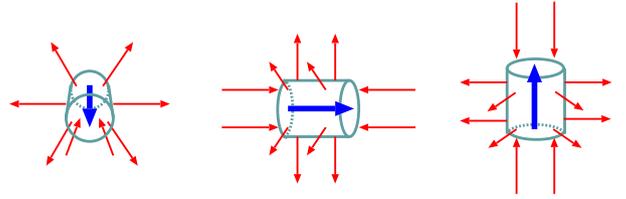


たとえば正電荷と負電荷の間に引力が働くのは、電気力線の引っ張り力のおかげである。逆に正電荷同士の間には斥力が働くのは、となりあう電気力線の反発による。磁場中の電流が力を受けるのは、電流の作る磁場によって導線の左右で磁力線の密度に差が生まれるからである(一番右の図の場合、導線の左側の磁束密度が大きくなるために右に押される)⁶。

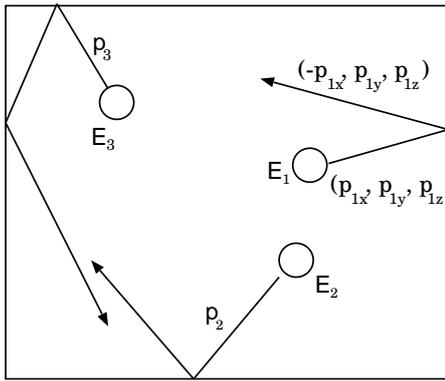
⁵ 3つとも同じ式であるが、単位体積あたりのエネルギー、単位面積あたりの引力、単位面積あたりの斥力、と物理的内容は違う。

⁶ この力の性質は「電気力線(磁力線)はなるべく短くなろうとする。またとなりあう2本は互いに離れようとする」とまとめることができる。そうなる理由は結局「エネルギーを下げる方向に力が働く」ということで理解できる。電気力線が短い方が、あるいはより拡散した方がエネルギーが小さくなるのである。

いま、ある方向に電場（電気力線）が走っているところを思い浮かべよう。この電気力線が6つの方向（ $\pm x, \pm y, \pm z$ ）の及ぼす力のうち、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ちへこちへと飛び回っていると考えると、電気力線もいろんな方向に伸びるだろう。この時にある一つの方向に働く力を考えると、 $\frac{1}{3}$ の確率で引力、 $\frac{2}{3}$ の確率で斥力となる。結局全体の平均をとれば $\frac{1}{3}$ 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年にレベデフによってはじめて実験的に確かめられている。つまり、光（電磁波）の圧力がエネルギー密度の $\frac{1}{3}$ であるということは実験事実である。このことから光子の運動量に関して何がわかるであろうか。

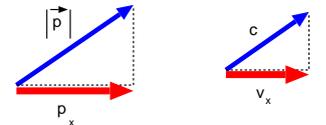


以下では、箱に N 個の粒子入れられて、それぞれ E_i のエネルギーと \vec{p}_i の運動量を持って飛び回っていると考えた時、箱にはどの程度の力が働くかを計算しよう ($i = 1, 2, \dots, N$ のように、粒子に番号がふってあるものとする)。

\vec{p}_i の運動量を持った粒子が x 方向に垂直な壁にぶつかってはなかえるとする。その時、 \vec{p}_i の x 成分 (p_{ix}) の2倍の力積を壁に与える。この粒子は x 方向に $2L$ 走るとこの壁に衝突する。今考えているのは光なので速さは c であるが、 x 方向の速度成分は $c \times \frac{p_{ix}}{|\vec{p}_i|}$ となる。なぜなら、速度ベクトル (v_x, v_y, v_z) と運動量ベクトル (p_x, p_y, p_z) は平行であると考えられるからである。よって、

$v_x : c = p_x : |\vec{p}|$ が成立するだろう。
ゆえに、光子は単位時間の中に

$$c \times \frac{p_{ix}}{|\vec{p}_i|} \div 2L = c \times \frac{p_{ix}}{2L|\vec{p}_i|} \tag{3.2}$$



回だけ壁に衝突することになり、単位時間にあたる力積（つまり力）は、これに1回の力積 $2p_{ix}$ をかけて $c \times \frac{(p_{ix})^2}{L|\vec{p}_i|}$ となる。 N 個の光子の出すこの力の和を計算したい。ここでまず、運動量の大きさ $|\vec{p}_i|$ が等しい光子の集団を考え、その集団に関する和を取ることにしよう（このように運動量の大きさを制限しても、なおじゅうぶんたくさんの光子がいるものとする）。この範囲で和をとると、力は、

$$\sum_{|\vec{p}_i|=P} c \times \frac{(p_{ix})^2}{L|\vec{p}_i|} = \frac{1}{PL} \sum_{|\vec{p}_i|=P} c \times (p_{ix})^2 \tag{3.3}$$

となる。ただし、 $\sum_{|\vec{p}_i|=P}$ は「運動量の大きさが P であるような光子を選んで和を取りなさい」という意味である。この範囲で和をとっているので、 $\frac{1}{P}$ が和記号の外に出せる。

$$|\vec{p}|^2 = (p_x)^2 + (p_y)^2 + (p_z)^2 \tag{3.4}$$

であるが、等方性⁷から、充分たくさん光子で和をとれば

$$\sum_{|\vec{p}_i|=P} (p_{x,i})^2 = \sum_{|\vec{p}_i|=P} (p_{y,i})^2 = \sum_{|\vec{p}_i|=P} (p_{z,i})^2 \quad (3.5)$$

と考えるとよいだろうから、

$$\sum_{|\vec{p}_i|=P} (p_{ix})^2 = \frac{1}{3} \sum_{|\vec{p}_i|=P} |\vec{p}_i|^2 = \frac{1}{3} \sum_{|\vec{p}_i|=P} P^2 \quad (3.6)$$

となる。よってこの範囲で力の和は $\frac{c}{3L} \sum_{|\vec{p}_i|=P} P$ となる。運動量の大きさ P はいろんな値をとれるが、どの値でもこの式が成立するので、 N 個全体が壁に及ぼす力は

$$\frac{c}{3L} \sum_i |\vec{p}_i| \quad (3.7)$$

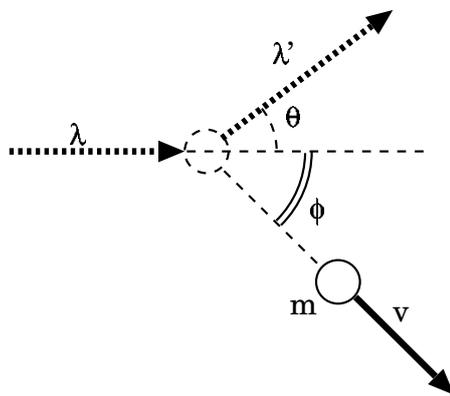
となる。圧力はこれを L^2 で割ったものであり、その圧力がエネルギー密度の $\frac{1}{3}$ すなわち、 $\frac{1}{3L^3} \sum_i E_i$ に等しいのだから、

$$\frac{c}{3L^3} \sum_i |\vec{p}_i| = \frac{1}{3L^3} \sum_i E_i \quad (3.8)$$

である。これから、 $c|\vec{p}_i| = E_i$ 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。

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。このことが実験的に確認できれば、光子の存在は確かなものとなる。

3.3 コンプトン効果



光の粒子性、特にその運動量が $\frac{h}{\lambda}$ であることをもっと直接的に示す実験がある。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、

$$\lambda' - \lambda = 0.024 \times 10^{-10} (1 - \cos \theta) [\text{m}] \quad (3.9)$$

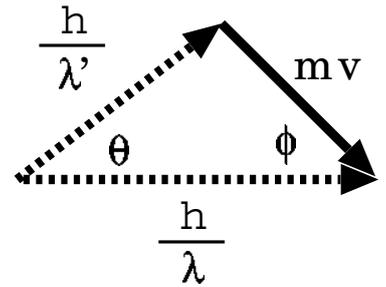
という関係があることを実験でしめした (この現象をコンプトン効果という)。この関係式が出てくるのは光が光子であり、エネルギー $h\nu$ 、運動量 $\frac{h}{\lambda}$ であるおかげであることを以下で示そう。

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、元の方向と角度 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 (光速度 c に比べ小さいとする) で飛び出すとする⁸。

⁷ x, y, z のそれぞれの方向はまったく同等で、特別な方向はない、ということ。つまり、「 x 方向にはびゅんびゅん走っているが、 y 方向にはゆっくり動いている」などという不平等なことは起きないとする。

⁸実際のコンプトンの実験では、「静止していた電子」を用意するわけではなく、金属の薄膜に X 線を当てて、いろん

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。 $\frac{h}{\lambda}$ という運動量を持った光が電子に運動量 mv を与えて自身の運動量が $\frac{h}{\lambda'}$ に変化している。このベクトル図で表される関係が常に成立するということは、光が $\frac{h}{\lambda}$ という運動量をもった一つの塊として電子にぶつかっていると考えなくては説明がつかない。



エネルギー $h\nu$ を持った光が電子に運動エネルギー $\frac{1}{2}mv^2$ をあたえ、自身のエネルギーが $h\nu'$ に減ったと考えれば、エネルギー保存則は

$$h\nu = h\nu' + \frac{1}{2}mv^2 \tag{3.10}$$

である。一方、運動量保存則をしめす三角形の図に対して余弦定理を使うと、

$$(mv)^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2\frac{h}{\lambda} \cdot \frac{h}{\lambda'} \cos \theta \tag{3.11}$$

という式が出る。この二つの式から v を消去する⁹。(3.10) から $v^2 = (h\nu - h\nu') \times \frac{2}{m}$ として (3.11) に代入し、

$$2m(h\nu - h\nu') = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2\frac{h}{\lambda} \cdot \frac{h}{\lambda'} \cos \theta$$

) (振動数は (光速) ÷ (波長) を使って)

$$2mhc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2\frac{h}{\lambda} \cdot \frac{h}{\lambda'} \cos \theta$$

) h^2 で割って $\lambda\lambda'$ をかけて

$$\frac{2mc}{h} (\lambda' - \lambda) = \frac{\lambda'}{\lambda} + \frac{\lambda}{\lambda'} - 2 \cos \theta \tag{3.12}$$

となる。2行目では $\nu = \frac{c}{\lambda}, \nu' = \frac{c}{\lambda'}$ を使った。ここで、実際にコンプトン効果で起こる波長の変化は小さいので、 $\lambda' = \lambda + \Delta\lambda$ とすると、 $\frac{\lambda'}{\lambda} = 1 + \frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ であり、かつ、 $\Delta\lambda$ の1次までで近似すれば、 $\frac{\lambda}{\lambda'} = \frac{1}{1 + \frac{\Delta\lambda}{\lambda}} = 1 - \frac{\Delta\lambda}{\lambda} + \left(\frac{\Delta\lambda}{\lambda}\right)^2 - \dots$ と展開できる。ゆえに $\left(\frac{\Delta\lambda}{\lambda}\right)^2$ 以上のオーダーを無視すれば $\frac{\lambda'}{\lambda} + \frac{\lambda}{\lambda'} = 2$ となる。この式の右辺は $2 - 2 \cos \theta$ と近似できることになる。まとめると、

$$\frac{2mc}{h} (\lambda' - \lambda) \simeq 2 - 2 \cos \theta$$

$$\lambda' - \lambda \simeq \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta) \tag{3.13}$$

な角度に散乱された X 線の波長を調べた。電子は衝突前から多少は運動していることになるが、そのエネルギーは X 線が運んでいるエネルギーに比べ小さい。X 線は原子核にも当たることになるが、原子核をはじき飛ばすだけのエネルギーは持っていない。そのため、原子核に散乱された X 線の波長はほとんど変化せず、電子によって飛ばされたものかどうかは明確に区別できる。

⁹なぜ v を消去するかというと、コンプトンの実験においては電子の速度は測定していないので、 v の入った式は実験と比較できなかったのである。もちろん、後の実験では電子の速度もちゃんと測定され、上の計算との一致も確認されている。

という式が出る。この式はコンプトンによる実験式 (3.9) と数値的にも一致する¹⁰。

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¹¹。以上のようないろんなことから、光の粒子性は疑いのないものになったと言える。

3.4 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」あるいは「粒子とはどうの二重性を持つ」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。

アインシュタインは光子がたくさん存在して光子と光子が相互作用することで干渉縞が発生するというモデルを考えて波動性と粒子性を両立させることを考えたが、1909年にテイラーが非常に弱い光¹²でヤングの実験を行って、光子が1度に1個しかこないような状態でも干渉縞が出現することを実験で示したので、この考え方は成立しない。

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。この問題に対する一つの答が「量子力学の確率解釈¹³」と呼ばれるものである。

しかし、その解決の前に、もっと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。

ここまで、1900年のプランクの発見から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。

3.5 演習問題

[演習問題 3-1] 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

¹⁰なお、ここで出てきた $\frac{h}{mc}$ という量を「質量 m の粒子のコンプトン波長」と呼ぶ。後で説明するが、これは質量 m の粒子が波として存在する時に必然的に持つ広がり大きさである。

¹¹なお、波長が変化すること自体はドップラー効果でも説明可能である (演習問題 3-7 参照)。しかしその変化量が (3.9) を満たすことを説明するには、どうしても「光子一粒の運動量 / エネルギー」を考えなくてはいけない。

¹²この実験では、写真乾板に像が得られるまで2ヶ月かかったと言う。

¹³確率解釈以外にも「多世界解釈」などのいろんな解釈があるが、主流となっているのは確率解釈である。

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。

[演習問題 3-2] この章でやったのとは別の計算で光の圧力がエネルギー密度の $\frac{1}{3}$ であることを計算してみよう。

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 (箱が伸びるにしたがって波長も伸びたことになる)。この時光子のエネルギーの減少を計算し、その減少分は光子が箱の壁を押す仕事に等しいと考えることで、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。

[演習問題 3-3] 通常物質であれば $p = mv, E = \frac{1}{2}mv^2$ である。気体を箱につめた場合、圧力とエネルギー密度の関係はどうか？

光子の場合とどこが変わってくるかを注意しつつ計算してみよ。

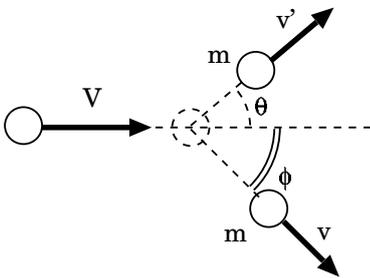
[演習問題 3-4] コンプトン効果について、このような質問をした人がいたとする。

「電磁波が電子にあたると電子が飛んでいくそうですが、電子はマイナス電気を持っていますね。じゃあ、プラス電気を持っている場合に比べて、逆向きにとばされるんでしょうか？」

実際には、プラスの電気を持っていようがマイナスの電気を持っていようが、電磁波の進行方向へとばされる。電子に働く力がどのようなものかを考えて、その理由を説明せよ。

電磁波の電場によって動かされると考えると、電磁波の進行方向と直角の方向に動く。しかし、電場は振動しているので、この力によって電子は振動するだけで一定方向には動かない。ここで、「電子が振動する」ということと「電磁波には磁場もある」ということを考えに入れれば、進行方向に働く力の正体がわかる。

[演習問題 3-5]



小球と小球の衝突の場合で運動エネルギーと運動量の保存則を式にしてみよう。

静止した質量 m の小球にもう一つの小球 (質量は同じく m とする) がぶつかったとすると、左の図のようになる。

- (a) この場合についてエネルギー保存則を式で表せ。
- (b) 運動量保存則を数式とベクトル図の両方を使って表せ。
- (c) 衝突後の二つの小球の運動方向が垂直であることをベクトル図を使って説明せよ。

[演習問題 3-6] 光を波動と見れば、コンプトン効果による振動数変化をドップラー効果と考えることができる。3.3 節であつた現象を、「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、速さ v で動きながら振動数 ν の光を出した」という現象だと解釈して、この光を外部から観測した場合の振動数 ν' を求める式を作れ。

[演習問題 3-7] 3.3 節の三角形の図 (つまり運動量保存則) とエネルギー保存則の中に、古典的なドップラー効果の式 (演習問題 3-6 の答) が含まれていることを示せ。つまり、運動量保存則とエネルギー保存則から演習問題 3-6 の答を導け (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含まれる角度を使う余弦定理の式をまず作る。

ヒントその 2：ドップラー効果の式には m が含まれていないから、これを消去する。

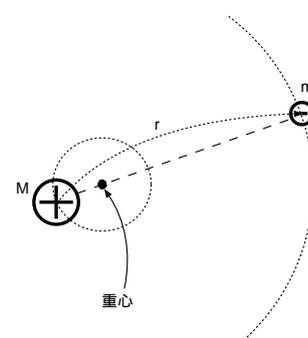
[演習問題 3-8] 3.4 節で述べたテイラーの実験では、1 秒あたり 5×10^{-13} J のエネルギーを持つ可視光が使われた。使われた光の振動数が 5×10^{14} Hz だったとして、光子は 1 秒に何個やってくるか。今来た光子と次に来る光子の間隔は何メートルか。

第4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。

4.1 原子模型の困難

ラザフォード (Rutherford) 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ように思われる。



[問い 4-1] 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う。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 4-2] 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)

上の問いを解くとわかるが、原子の持つエネルギーは電子・陽子間の距離(ほぼ、原子の半径と考えよう)だけで決まり、半径が小さいほどエネルギーも低くなる。原子核の半径は、原子の半径に比べ、 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行かないのだろうか?—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。

「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(章末の演習問題参照)。

しかし現実には、どの水素原子を見ても、電子は一定の場所を安定して回っているようである（実際の処電子が回っているところが見えるわけではないが、すくなくとも水素原子には「個性」はなさそうである）。何か電子に制限を加えているのである。しかし、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。

このことは今考えている物理現象に登場する量の次元を考えると分かる。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	$[\text{ML}^3 \text{T}^{-2} \text{Q}^{-2}]$	$9.0 \times 10^9 \text{F}^{-1} \text{m}$

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、 $e^2[\text{Q}^2]$ をかけて $r^2[\text{L}^2]$ で割ると力 $[\text{MLT}^{-2}]$ になるからである。

もし原子の半径が古典力学で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)。つまり、古典力学を使って計算している限り、原子核のまわりを電子がみな同じ軌道で運動していることを導くことはできそうにない。

こういうふうに定数の次元を考えることで物理的内容にある程度の目安をつけることを次元解析と言う。

【補足】 この部分は授業では話さない可能性もあるが、その場合は読んでおいてください。

次元解析は物理を考えるうえで強力なツールであり、いろいろな場面で役に立つ。たとえば演習問題 4-1 では、ケプラーの法則（惑星の公転周期の自乗と平均距離の3乗が比例する）が次元解析だけから導かれる。なぜこのような考え方がうまくいくのか、その理由は以下のように考えることができる。

たとえば SI 単位系では長さの単位にメートル、時間の単位に秒、質量の単位にキログラムを採用しているが、使う単位を変えたとすると何が起こるかを考えてみよう。物理というのはどんな単位を採用しているにかかわらず成立すべきものである。だから、単位系を変更した時、物理量の間の関係式の左辺と右辺が同じ変更を受けなくてはならないのである。たとえば、時間の基礎単位を秒から分に変えれば、時間を表す数値はすべて $1/60$ になるだろう。この時、速度は (m/s から m/分に変わるから) 60 倍になる。加速度は (mm/s² から m/分² になるから) $60^2 = 3600$ 倍になる。等加速度運動の式

$$x = x_0 + v_0 t + \frac{1}{2} a t^2 \quad (4.1)$$

は、ちゃんと両辺の次元があっており、 t が $1/60$ 倍になると同時に v が 60 倍、 a が 3600 倍になれば、両辺が変化しない。物理に出てくるどんな式もこのような関係を満たしている。このようにスケールの変換をした時に左辺と右辺が同じ変換をするためには「次元」がそろっていないといけない。たとえば、

$$x = v t^2 \quad (4.2)$$

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。

のような式があったとすると（もちろんこんな式はないのだが！）、時間の単位を秒から分に変えた時、左辺は変わらず右辺が $1/60$ になってしまうことになる。物理の式として、こんな不合理な話はない。

【補足終わり】

以上のような理由で、古典力学を使う限り、原子の中の電子が一定の距離のところしか回れないなどということは導出できない。こ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ミクロな領域では、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「光のエネルギーの変化は $h\nu$ 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 $[\text{ML}^2\text{T}^{-1}]$ であり、上の量と組み合わせることで次元が $[\text{L}]$ になる量を作れそうである²。

では、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 $[\text{T}]$ を消去せねばならない。 k に $[\text{T}^{-2}]$ 、 h に $[\text{T}^{-1}]$ 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 $[\text{MLQ}^2]$ であるから、 $[\text{MQ}^2]$ 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 $[\text{M}]$ 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違わない。換算質量の意味については、問い4-1を参照せよ）。

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

$$\frac{h^2}{k\mu e^2} = \frac{(6.6 \times 10^{-34})^2}{9.0 \times 10^9 \times 9.1 \times 10^{-31} \times (1.6 \times 10^{-19})^2} = 2.1 \times 10^{-9} [\text{m}] \quad (4.3)$$

となる。この値は水素原子の半径よりちょっと大きいのだが、実は次の節で出てくるボーアの量子条件というのを使って計算すると、この答えには無次元定数として $\frac{1}{(2\pi)^2} \simeq 0.0253$ がかかり、 $5.3 \times 10^{-11} \text{m}$

という答えが出て、現実の水素原子半径ぐらいになるのである。この値 $\frac{h^2}{4\pi^2 k\mu e^2}$ をボーア半径と呼ぶ。

4.2 ボーアの量子条件

前節では次元解析から原子の半径を予想したわけだが、その予想の拠り所になったのは「光のエネルギーが $h\nu$ の整数倍でなくてはならないという条件があるのなら、電子の運動にも何か h に関係する条件があるのではないか？」という考察だった³。その条件はボーア (Bohr) の量子条件と呼ばれる

²プランクは始めてプランク定数 h 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。余談であるが、 k で表される Boltzmann 定数（統計力学で出てくる）も、実際に最初に使ったのはプランクである。「 k もプランク定数と呼ぶべきでは？」と言われて「私は定数二つもいらぬよ」と答えたとか。

³実は電子の運動にプランク定数を使った条件を適用して原子の大きさを出すというアイデアはボーアが初めてだったわけではなく、1910年にハース (Haas) が考えている。ただし彼は電子が原子核の回りに運動しているというモデルではなく、原子がプラス電気を持った大きな球で、その内側を電子が運動しているという模型（トムソンの模型）で考えていた。

もので、電子が円軌道を描くと考えた場合には、

$$\mu v \times 2\pi r = nh \quad (4.4)$$

と書かれる⁴。 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、長〜〜い話があるのだが、ここではおおざっぱに、「 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 (de Broglie) の物質波の話や、シュレーディンガー (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。

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。次元解析から半径は $\frac{h^2}{k\mu e^2}$ に比例することがわかったのだから、結局半径は (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 (問い4-2参照) から、全エネルギーは

$$- (\text{未定の無次元数}) \frac{k^2 \mu e^4}{n^2 h^2} \quad (4.5)$$

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が、ちゃんとやれば $2\pi^2$ であることがわかる (章末演習問題4-5で実行せよ)。

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。

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。単に「ボーアの条件が満たされていれば電磁波が放出されない」とだけ本に書いてあることがよくあるが、より根本的な理由として「ボーアの条件によってエネルギーに最低値ができるので、その最低値になったらもうエネルギーをもった電磁波を放出できない」ということを理解すべきである。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)。

⁴ボーア本人は、プランクと同様に E と $h\nu$ が比例するという考え方から出発している (実際にボーアが使った式は $E = -\frac{1}{2}nh\nu$)。この場合の ν は電子の単位時間あたりの回転数である。 ν は当然場所によって違う。電子の古典的運動は惑星の運動と同様のケプラーの法則に従うので、 $E^3 = -k\nu^2$ という式が成立する (k は比例定数)。この二つの式からエネルギーが決まる。

4.3 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 $-\frac{\epsilon}{n^2}$ で表される ($E_1 = -\epsilon$ で、 $\epsilon = 13.6\text{eV}$)。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って、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

$$E_{n_2 \rightarrow n_1} = \epsilon \left(\frac{1}{(n_1)^2} - \frac{1}{(n_2)^2} \right) \tag{4.6}$$

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、

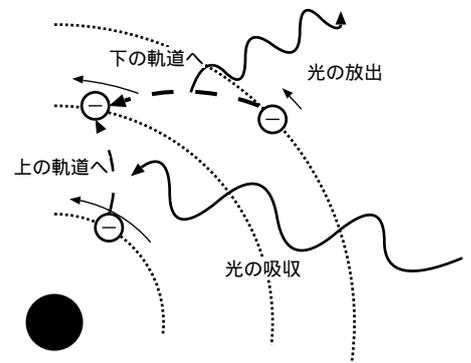
$$h\nu_{n_2 \rightarrow n_1} = \epsilon \left(\frac{1}{(n_1)^2} - \frac{1}{(n_2)^2} \right) \tag{4.7}$$

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

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{(n_1)^2} - \frac{1}{(n_2)^2} \right) \tag{4.8}$$

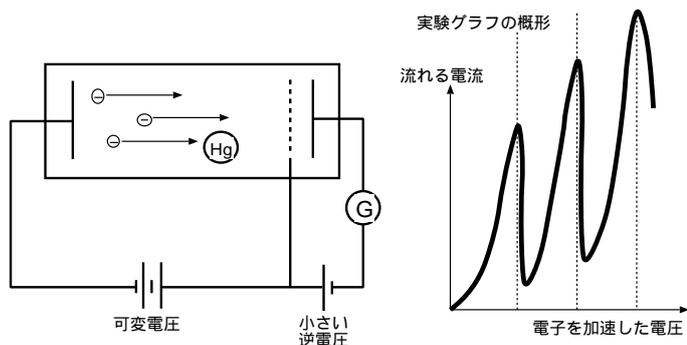
と比較された (R はリュドベリ定数)。 $\nu = \frac{c}{\lambda}$ を使うとこの二つの式は完璧に一致し、ボーアの原子模型が現実の水素原子を表していることが確実となった。と同時に、この原子模型における「遷移」の存在は、原子の内部では古典力学が役に立たないということを証明している。

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で話がずっと複雑になる)。



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



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。

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。黒体輻射の話の時も、高い振動数の光が大きいエネルギー単位 ($h\nu$) を要求するために逆にエネルギーをもらえない (分配されない) という状況があったが、ここでも同様の現象が起きている。水銀原子は 4.9eV 以上というエネルギーを要求するため、それより低いエネルギーを持った電子はエネルギーを奪われることはない (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 (14.7V 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。

4.4 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

$$\oint pdq = nh \quad (4.9)$$

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。 $2\pi r \times mv = nh$ という形だと、円運動にしか適用できないが、この条件なら周期的な運動であればすべて適用できる。実際、水素原子の電子の運動は円運動ばかりでなく、楕円運動もあると考えられるが、楕円運動に対してこの条件を適用すると水素原子の中の電子の軌道について正しい答が出てくる。 y

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。

ここで、なぜ q だけの空間ではなく、 p も含めた位相空間を考えなくてはならないかを説明しておく。運動方程式は

$$m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \vec{f} \quad (4.10)$$

で表される、二階微分方程式である。だから、ある瞬間の \vec{x} (物体の位置) がわかったとしても、それで未来における物体の位置はわからない。一方、もし物体の位置と運動量が両方わかっていると、任意の未来における物体の位置と運動量を予言することが可能である。なぜなら、位置と運動量のペア (位相空間内の点) は

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (4.11)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (4.12)$$

という二つの方程式(「正準方程式」と呼ばれる)で決められた方向に運動するからである。よって、位相空間に点を一つ打つと、その点が時間が経つとどこに移動するかは、ハミルトニアンを見るだけで完全にわかる。このように位相空間で考えると運動を位相空間内の線として考えることができる。この他にも位相空間を考えるとありがたいことはあるのだが、ここでは省略する。

[問い4-3] 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。すなわち、 H が p, q の関数であるとすれば、 $\frac{d}{dt}H(p, q) = 0$ である。正準方程式を使ってこれを証明せよ。実際に微分してみよう。 H は t を陽には含んでいないが、 $H(p(t), q(t))$ のように、 p, q が t を含んでいるので、その p, q を通じて t 依存性がある。これを時間微分すると、

$$\frac{dH}{dt} = \frac{dq}{dt} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{dp}{dt} \frac{\partial H}{\partial p}$$

であるが、ここで正準方程式を使うと、

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} = 0$$

となる。

たとえば、ハミルトニアンが

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \quad (4.13)$$

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。この物体はエネルギー保存則から、 $H = E$ (一定値)となる線の上を動くことになるが、それはつまり、 (p, q) 座標系でみると、 p 方向の径が $\sqrt{2mE}$ 、 q 方向の径が $\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$ の楕円である。

この場合の正準方程式は

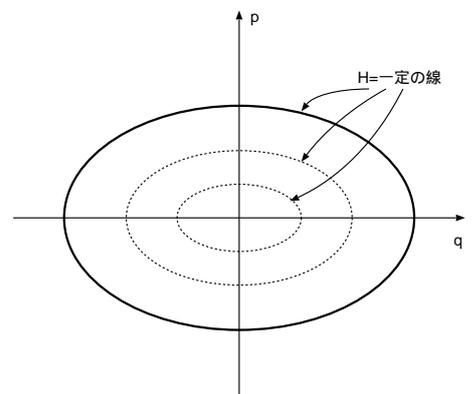
$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad (4.14)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega^2q \quad (4.15)$$

であるから、 $p > 0$ のところでは q が増加し、 $q > 0$ のところでは p が減少する。ゆえに、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、この積分の結果は

$$\oint pdq = \pi\sqrt{2mE} \times \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = 2\pi\frac{E}{\omega} \quad (4.16)$$

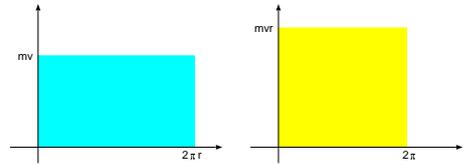
である。



[問い 4-4] この調和振動子が $q = A \sin \omega t$ で表される振動をしていると考えて、 $\oint pdq = \int_0^T p \frac{dq}{dt} dt$ となること (T は周期) を使って $\oint pdx$ を計算し、上の計算と同じ答えが出ることを確認せよ。

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、

$$E = nh \frac{\omega}{2\pi} = nh\nu \tag{4.17}$$



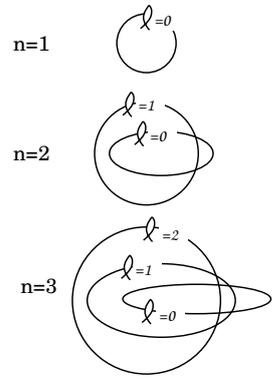
となる。このように、調和振動子のような系では、ゾンマーフェルトの量子条件は $E = nh\nu$ を与える。実は電磁波の場合でも同様の計算が成立して $E = nh\nu$ を与える。

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 (4.4) 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。つまり、ゾンマーフェルトの条件はボーアの条件を含んでいる。

以上からわかるように、ゾンマーフェルトの量子条件は光や電子や、いろんな場合で共通して使える一般的な条件なのであり、量子力学を作っていく上で大きな手がかりとなる式である。

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。 $\pm\ell$ の時もっとも z 軸周りの角運動量が大きい) 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⁶ 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



$$\underbrace{1}_{\ell=0} + \underbrace{3}_{\ell=1} + \underbrace{5}_{\ell=2} + \dots + \underbrace{(2n-1)}_{\ell=n-1} = n^2 \tag{4.18}$$

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。たとえば、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。ヘリウムは $n = 1$ の軌道がちょうど埋まっているし、ネオンは $n = 1$ と $n = 2$ の軌道がちょうど埋まっている⁷。このようにして、量子力学によって原子の構造が説明さ

⁶ $\ell = 0, 1, 2$ 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。

⁷電子がたくさんになると、いろいろと今の計算から外れたところが出てくる。たとえば、同じ n であっても ℓ が違うとエネルギーが違ってきたりする。

れていく。実際に量子力学に乗っ取って正しい計算を行うと「原子のまわりの電子は円軌道や楕円軌道を描いて回っている」などという考え方はできなくなる。そういう意味では上の図はほんとうではない。実際どうなのかは後で具体的計算と一緒に話す。

なお、上で「埋まっている」と書いたが、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。これをパウリの排他律と言う。

4.5 演習問題

[演習問題 4-1] 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。後、太陽の質量 M も使ってよいだろう)。

[演習問題 4-2] 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。

[演習問題 4-3] 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。(陽子の放出する電磁波は無視して考えよ)

[演習問題 4-4] 問い 4-2 で計算した電子の持つ全エネルギーの式で、時間によって変化するものは 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解き、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。

[演習問題 4-5]

問い 4-1 で作った古典力学での運動方程式とボーアの量子条件を使って、水素原子の持つ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) で表せ。

結果を数値で書くと、

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2} \text{eV} \quad (4.19)$$

であることを示せ。

[演習問題 4-6] 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?

[演習問題 4-7] 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。

[演習問題 4-8] 太陽 (質量 $M = 2.0 \times 10^{30} \text{kg}$ 。静止しているとみなす) のまわりを地球 (質量 $m = 6.0 \times 10^{24} \text{kg}$) が半径 $1.5 \times 10^{11} \text{m}$ の円運動しているとしよう。この運動に対してもボーアの量子条件が成立しているとする、 n はいくらぐらいになるだろうか? (万有引力定数 G は $6.7 \times 10^{-11} \text{Nm}^2 \text{kg}^{-2}$)

普通、太陽と地球の運動を量子力学を使って考えたりはしないのはなぜなのか、この n の数字を使って説明せよ。

[演習問題 4-9] 1 次元の箱 (箱内部の座標が $0 < x < L$ で表される) の中を壁と弾性衝突しながらいたりきたりしている質量 m の粒子について、位相空間の図を書け。

この運動にゾンマーフェルトの量子化条件を適用せよ。粒子の持つエネルギーにはどんな制限がつくか?

第5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?

5.1 ド・ブロイの仮説

ド・ブロイ (de Broglie) 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、

$$\frac{p^2}{2m} + V = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (5.1)$$

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。

この置き換えの理論的背景については後でまた振り返ることにして、ド・ブロイの行ったことの結果としてボーア-ゾンマーフェルトの量子条件に明確な物理的意味が生まれるという点をまず説明しよう。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、

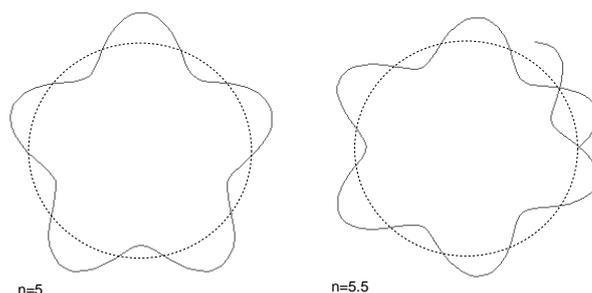
$$\frac{h}{\lambda} \times 2\pi r = nh \quad \text{すなわち} \quad 2\pi r = n\lambda \quad (5.2)$$

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。

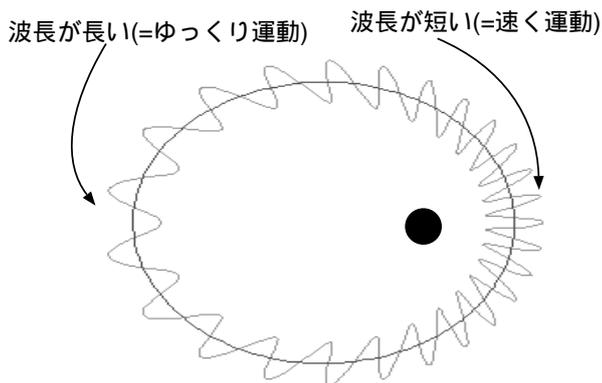
楕円軌道の場合、電子が原子核に近づくと p は大きくなる。なぜなら今、

$$E = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{ke^2}{r} \quad (5.3)$$

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)。

なお、このような図を見て「電子が外へ内へと振動している」というふうに勘違いする人がよくいるので念のため注意しておくが、

物質波には方向はない。

絵で外へ内へと振動しているように描かれているが、それはあくまで図を描く都合上であって、物質波は方向のない波(スカラー波)である。後で波動関数という形でこの波を表現するが、その波動関数にも方向はない¹。ではいったい何の波なのかということについては、後で述べる。

5.2 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。

エルザッサー(Elsasser)はド・ブロイの仮説を聞いて、「電子の波動性を示す実験はすでにある」と主張した。その一つは電子とアルゴン原子の衝突に関する実験で、遅い電子の方がアルゴン原子と衝突しにくくなるという結果(ラムザウアー効果と呼ばれる)である。ド・ブロイの説が本当ならば、遅い電子はすなわち波長の長い波であり、波長の長い波は散乱しにくい(一般に、波は自分の波長より短いものにはあまり散乱されない)。

電子の波動性をより直接的に示したのは1927年にダヴィッソン(Davisson)が行った電子線回折の実験である。ダヴィッソンとガーマー(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、ダヴィッソン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

¹よく「物質波って縦波ですか横波ですか?」という質問を受けるが、どちらでもない。空間内で振動しているわけではない。

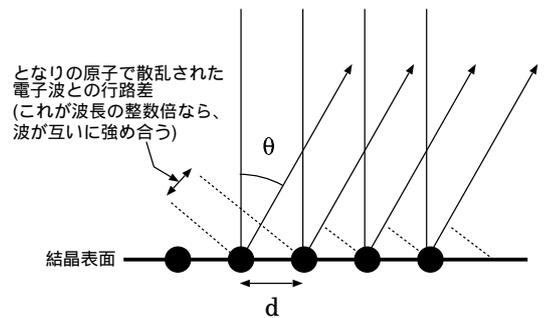
てから実験しているのだから、原子内の電子の運動が変化しているとは考えがたい。これは高温状態を経たニッケルが再結晶化した、つまりニッケル原子が加熱前より規則正しく並んだ結果ではないかと考えられた。

そこでダヴィットソンらは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り、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。

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。ダヴィットソンたちはいろいろ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。



5.3 波動力学と古典力学の関係

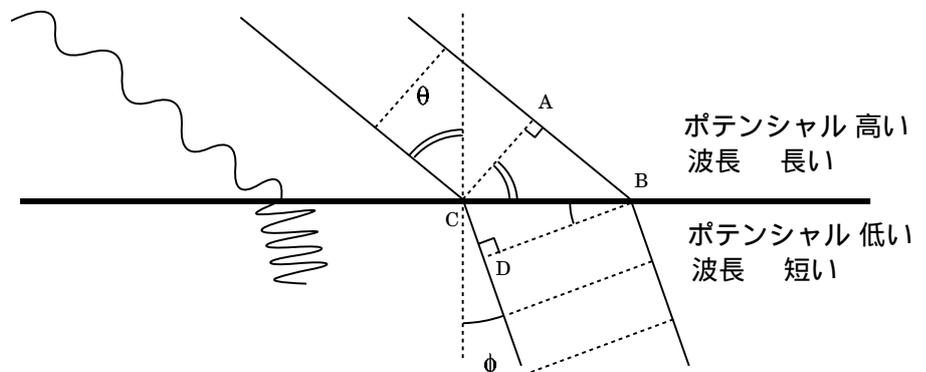
では、このような物質波のふるまいと、それを粒子として見た時のふるまいにはどのように関係がつくのであろうか。すでに説明したように、ド・ブロイの式が成立していると、エネルギーの保存が

$$\frac{h^2}{2m\lambda^2} + V = \text{一定} \quad (5.4)$$

という形になる。

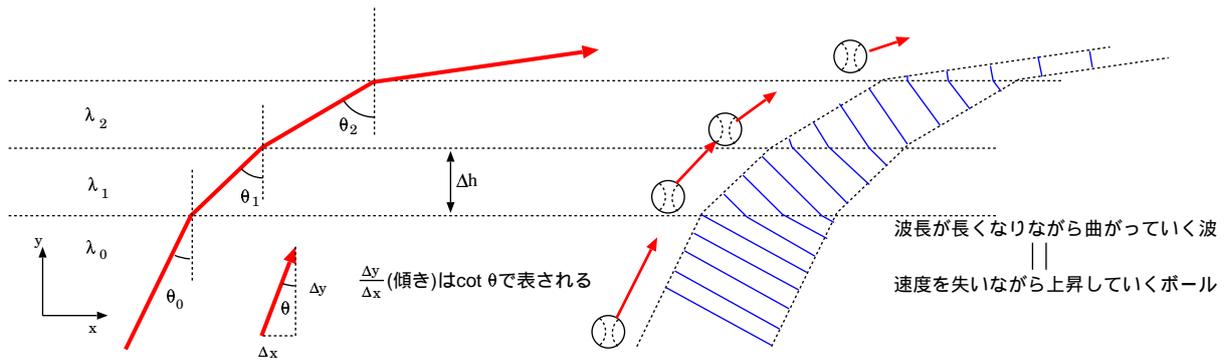
これは普通のエネルギー保存

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面を上を超えるごとに $mg\Delta h$ ずつポテンシャルが高くなるとする）。

[問い 5-1] 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 は結果に使うてよい）。

[問い 5-2] 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。

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。上の問題を解くとわかるように、これは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解釈できる。古典力学でも波動力学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。従って、古典力学における質量 m は、波動力学においては「位置エネルギーの変化に対して、波長がどの程度変化するか」を示す量だということになる。波長変化が大きい場合は質量が小さい。つまり、同じ位置エネルギー変化に対してよく曲がる（上の問題の場合、位置エネルギーも質量に比例しているのだから、曲がり方は質量によらなくなるが、それは重力という力の特徴である）。

5.4 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

$$\int dt \left(p \frac{dx}{dt} - H \right) = \int (p dx - H dt) \quad (5.5)$$

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、

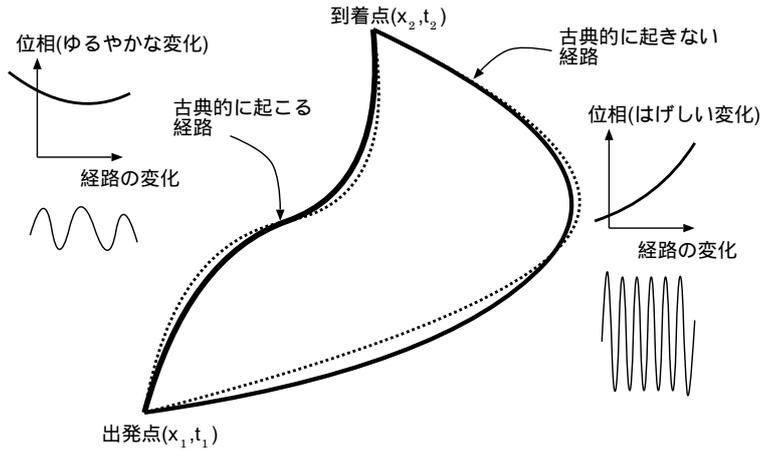
$$\int \left(\frac{h}{\lambda} dx - h\nu dt \right) = h \int \left(\frac{dx}{\lambda} - \nu dt \right) \quad (5.6)$$

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。この式の \sin の中身 $2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right)$ を「位相」と呼ぶ。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、 $2\pi \left(\frac{\delta x}{\lambda} - \nu \delta t \right)$ だけ変化している。つまり、作用 $h \int \left(\frac{dx}{\lambda} - \nu dt \right)$ は、位相差 $\times \frac{h}{2\pi}$ である。

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。

よって、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。

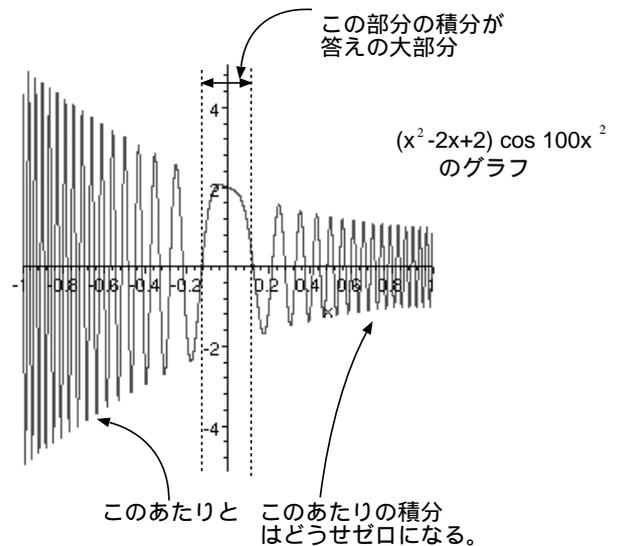
なぜ波の位相が極値を取らなくてはいけないのであろう。今、ある時空点 (x_1, t_1) から (x_2, t_2) へ、いろんな経路をたどって波が到達したとする。 (x_2, t_2) において観測される波は、そのいろんな経路をたどった波の和である。経路によって、波はいろんな位相を取る。そしてそのいろんな位相の波の足し算が行われることになるが、この時足される波それぞれの位相差が大きすぎると、波が互いに消しあってしまう。位相が極値を取るというのが重要なのではなく、極値を取るところでは変化が小さい、ということが重要なのである。変化が小さいところの足し算は、位相が消し合うことなく残る。それに対して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の主要部分は、位相が極値を取っているような波だと考えることができる。そしてそのような経路とはすなわち、古典力学での運動が実現する(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。

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 Euler-Lagrange 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。



ド・プロイが物質波というものを考えた背景には光学がある。光学においても幾何光学という立場と、波動光学という立場がある。幾何光学では「光線」を考え、光線がどのように進んでいくかを計算する。一方波動光学では「波」を考え、空間の各点各点に発生する波の重ね合わせによって波の運動を計算する。この二つのどちらを使っても光がどのように進行するかを考えることができる。

波動(光など)がどのように進行するかは、フェルマーの原理で考える(幾何光学)こともできるし、波の重ね合わせを使って考える(波動光学)こともできる。考えているスケールに比べて波長が短い場合(日常現象における可視光の場合など)は幾何光学を使う方が簡単である。逆に考えているスケールに比べ波長が comparable² であるか大きい場合は、波動光学を使わねばならない。

力学でも粒子の進行を、最小作用の原理を使って考えることができる。最小作用の原理に対応するのがフェルマーの原理すなわち幾何光学である。では波動光学に対応するものは何か??? —ド・プロイはこのような考え方から物質の波動説に到達し、自身のこの考え方を「波動力学」と呼んだ。

²comparable は「比較することができる」という意味。つまり同程度の大きさであることを表す言葉。

	波長が短い場合	波長が長い場合
光学の世界	幾何光学 (フェルマーの原理)	波動光学
力学の世界	古典力学 (最小作用の原理)	波動力学

ここで、量子力学を考える上で大切な一般的注意をしておく。何より忘れてはならないことは、現実の世界を司る法則は量子力学であって、「古典力学は量子力学の近似にすぎない」ということである。我々は物理を勉強する時まず古典力学から勉強し、その後で「実はミクロの世界では古典力学が成立せず…」ということで量子力学を勉強する。しかし、物理を勉強する順番、あるいは物理の発展してきた歴史とは逆に、量子力学こそが本質であり、古典力学が成立するというのは錯覚にすぎない。「たまたま量子力学的現象が顕著でないような場合に限りて古典力学を使ってもかまわない」³というのが正しい理解である。

ここまで、そしてこれからも、「どうして量子力学なんて妙ちくりんなものが成立するのか？」という疑問を感じる人が多いと思うが、逆に「どうして我々(の祖先)は古典力学なんてものが成立すると思ってしまったのか？」と考えてみて欲しい。上でも述べたように、量子力学は、考えているスケールが波動としてみた時の波長よりも充分大きいような時には、古典力学と同じ結果を出す(波長の短い波に対しては幾何光学と波動光学が同じ結果を出すことと同様である)。普段は量子力学と古典力学は同じ結果を出す場合ばかりなので、量子力学の存在に、我々はなかなか気づかない。

同じようなことが相対論にも言えて、我々の“常識”は物体が光速の何万分の1でしか動かないような世界で作られている。それゆえに $\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}$ (相対論におけるローレンツ短縮の因子) などという量は1としか実感できない。

我々は量子力学を実感するには大きすぎ、相対論を実感するには小さすぎる。別の言い方をすれば、我々にとってプランク定数 h は小さすぎるし、光速度 c は速すぎる。だから我々の“常識”は古典力学やニュートン力学を「正しい」と感じてしまう。しかし、だまされてはいけないのである。

ド・ブローイもボーアもアインシュタインも、狭い知見で作られた“常識”から離れて大きな視点を持つことができたからこそ、この世界の真実を知ることができた。21世紀に生きる我々も、思考を柔軟にして量子力学を学んでいこう。

5.5 演習問題

[演習問題 5-1] 5.2 節の図のように、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。0度を除いて最も小さい強められる方向の角度 θ が 30度であるためには電子波の波長はいくらであればよいか。

[演習問題 5-2] 電子の質量は 9.1×10^{-31} kg である。以下の表を埋めよ。

エネルギー (eV)	1	10	100	1000
運動量 (kg · m/s)				
波長 (m)				

³ どちらを使ってもいい状況なら古典力学を使う方が楽なのは当然のことである。橋を設計する時に量子力学を使う人はいない。逆にミクロな話をする時には量子力学がどうしても必要である。IC を設計するのは古典力学ではできない。

電子線を結晶にあてて干渉の様子を見るためには、どの程度のエネルギーの電子線を使えばよいか。表を見て判断せよ。

[演習問題 5-3] 波の進む道は直線であって変化しないとしても、波長が変化することによって位相は変化する。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

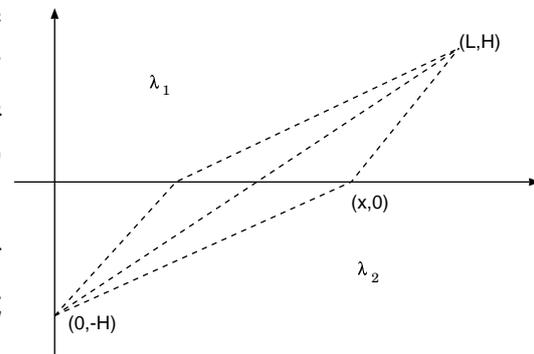
$$h\nu = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

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。その物理的意味は何か？

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。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と考える。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



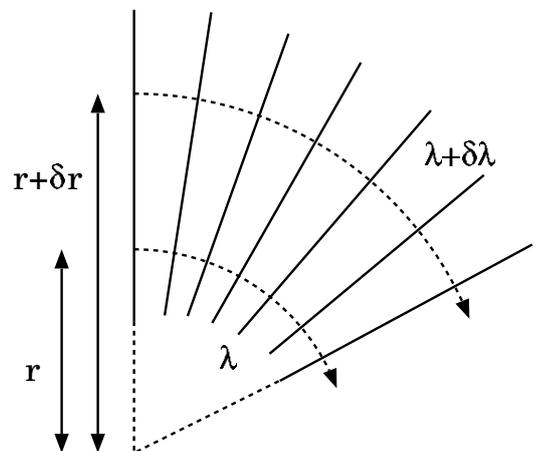
[演習問題 5-4] に引き直すとよい。

[演習問題 5-5] 屈折の法則を波を粒子と考えた時に持つ運動量に関する式で書き直してみよ。その式の物理的意味は何か？

[演習問題 5-6]

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



$$\frac{mv^2}{r} = \frac{dV}{dr} \tag{5.7}$$

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。

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。

第6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。不確定性関係は、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である。

6.1 線顕微鏡の思考実験

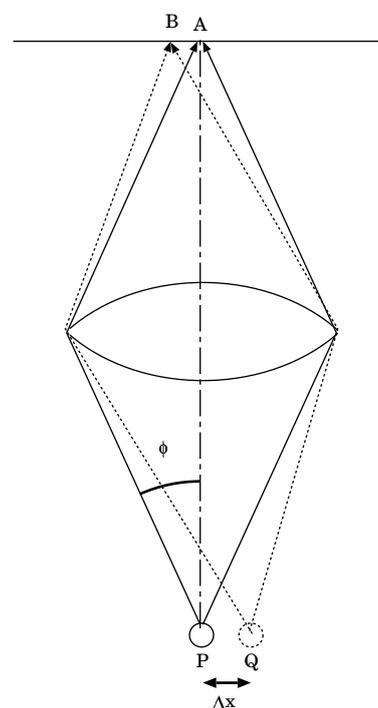
ハイゼンベルク (Heisenberg) は電子をガンマ線を使った顕微鏡で見るという思考実験から、不確定性関係を説明した。彼がこのような説明を思いついたのは、「原子核の周りをまわっている電子は波として広がっていてどこにいるかわからないと言うけど、X線か何かを使って場所をつきとめることはできないのか?」という疑問に答えようとしてのことであった。

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、光の波長程度よりも小さいものは見ることができないのである。その理由はだいたい、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「幾何光学的な考え方」と呼ぶ)、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)。

光を波だと考えた場合、P点から出た波がA点に到達する理由は上とは違って来る。波はいろんな方向に伝播する。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。これがA点から出た光がP点に到着する理由である(このような考え方が「波動光学的な考え方」である)。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過してきた光と、直進して近道を通ったかに見えるレンズ中心を通過し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。逆に、P点以外の場所にやってくる光は、位相がずれているために消し合ってしまう。

ここで注意すべきことは、P点より少し離れたQ点から出発した光も、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しかなかったなら、Aに到達することができることである。



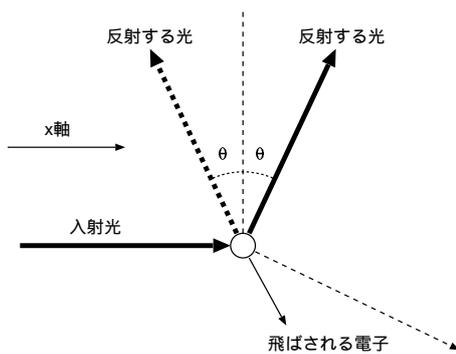
この場合も光は干渉によって消し合うが、完全に消えてしまうことはない。このため、A 点に光が到達したとしても、図の Δx 程度はどこから来たのかを判定できなくなる。近似をつかってくわしい計算をするとこの Δx は $\frac{\lambda}{2 \sin \phi}$ となる。 Δx を「離れた 2 点を分離していると認めることができる能力」という意味で、「分解能」と呼ぶわけである。

[問い 6-1] 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 が大きければ光路が大きくても干渉による消し合いが少なくなり、 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。

たとえば実際には P 点にだけ光源があったとして、この光源から連続的に光が出ているとしよう。この光は主に A 点に到着する。理想的には A 点だけに像ができるべきなのだが、だいたい B 点ぐらいまでは干渉によって消しきれない光がきてしまうため、像に広がりがあるのである。しかも今考えている場合、光は連続的ではなく、一個の光子がやってくる場所しかわからないので、A 点や B 点に光子一個が到着しても、P 点から出たとも Q 点から出たとも判定がつかないことになる。

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(天体望遠鏡が大きな口径のものほど性能がよくなる理由はこれ)。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。ハイゼンベルクは電子を見るための仮想的な機械を「線頭微鏡」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え、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、

$$\Delta x \Delta p = h \quad (6.1)$$

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。

という式が出る。この式は、 Δx を小さくしようとするとき 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、不確定性関係を説明した。 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

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (6.2)$$

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 (6.2) 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。

6.2 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、箱の中に定常波ができていいる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 $2L$ 」ということはずなわち、「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とき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。そのために、不確定性の意味を「観測しようとするとき乱されるから観測できない」という意味だと誤解する人が多いので、ここで強調しておく。

不確定性というのは観測する前の状態です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²。「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。

【補足】この部分は授業では話さない可能性もあるが、その場合は読んでおいてください。

コンプトン波長 $\frac{h}{mc}$ が出てきた時、「質量 m の粒子はコンプトン波長程度の広がりがある」という話をしたが、これもこの不確定性関係からくる。不確定性関係から、 $\Delta x \simeq \frac{h}{mc}$ になると、 $\Delta p \simeq mc$ くらいになる。こうなると粒子の持つ運動エネルギーの不確定度は $\frac{(\Delta p)^2}{2m} \simeq mc^2$ くらいとなる。つまり、運動エネルギーの広がり、粒子をもう一個作るのに必要なエネルギー mc^2 と同じ程度になってしまう。結果として、もし質量 m の粒子を $\frac{h}{mc}$ 以下の領域に閉じこめようとする、その大きな運動エネルギーによって粒子がもう一個生成されてしまう。一個の粒子が安定して存在するためには、 $\frac{h}{mc}$ 以上の広がりを持って存在していなくてはならないのである。

【補足終わり】

6.3 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 の円の上に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³。つまり、 $f(-\pi) = f(\pi)$ になるような関数

² $\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$ は粒子の存在の広がりについての式である。観測することによって状態が乱されることによる不確定性については、 $\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$ とは少し違う関係式が成立することがわかっている。

³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。

$f(x)$ は、

$$f(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos nx + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin nx \quad (6.3)$$

と書けるのである⁴。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、

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \sin mx \sin nx = \begin{cases} \pi & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases} \quad (6.4)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \cos mx \cos nx = \begin{cases} \pi & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases} \quad (6.5)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \cos mx \sin nx = 0 \quad (6.6)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \sin nx = 0 \quad (6.7)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \cos mx = 0 \quad (6.8)$$

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6-2] (6.4) から (6.8) までの式をできる限り計算をせずに証明せよ。

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、

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \sin mx f(x) = \pi b_m \quad (6.9)$$

であるから、

$$a_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx f(x) \cos mx \quad (6.10)$$

$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx f(x) \sin mx \quad (6.11)$$

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

$$f(x) = \begin{cases} H & -\delta < x < \delta \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (6.12)$$

のような関数で表される。

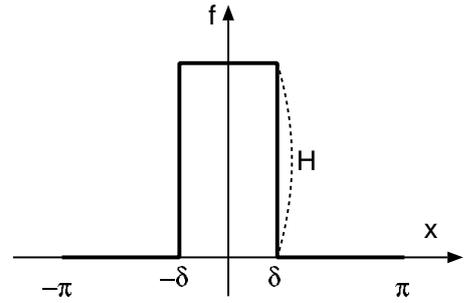
⁴ a_0 だけ前に $\frac{1}{2}$ をつけて特別扱いされているが、それは後で作る a_n を求める式が簡単になるようにであって、深い意味はない。

この関数を sin, cos の和で表した時の係数を求めよう。

$$\begin{aligned}
 a_m &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx \cos mx f(x) = \frac{H}{\pi} \int_{-\delta}^{\delta} dx \cos mx \\
 &= \frac{2H}{m\pi} \sin m\delta \tag{6.13}
 \end{aligned}$$

$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx \sin mx f(x) = 0 \tag{6.14}$$

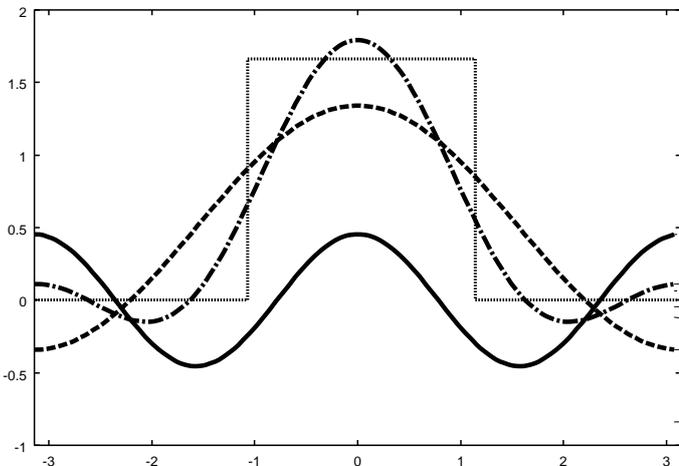
$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx f(x) = \frac{2H\delta}{\pi} \tag{6.15}$$



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、

$$f(x) = \frac{H\delta}{\pi} + \frac{2H}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin m\delta}{m} \cos mx \tag{6.16}$$

である。

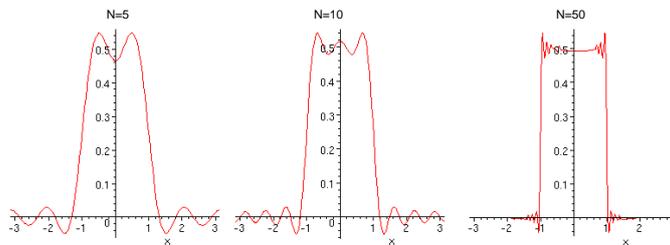


$0.5 + \sin(1) \cdot \cos(x)$ に
 $\sin(2)/2 \cdot \cos(2x)$ を足して
 $0.5 + \sin(1) \cdot \cos(x) + \sin(2)/2 \cdot \cos(2x)$ になったところ

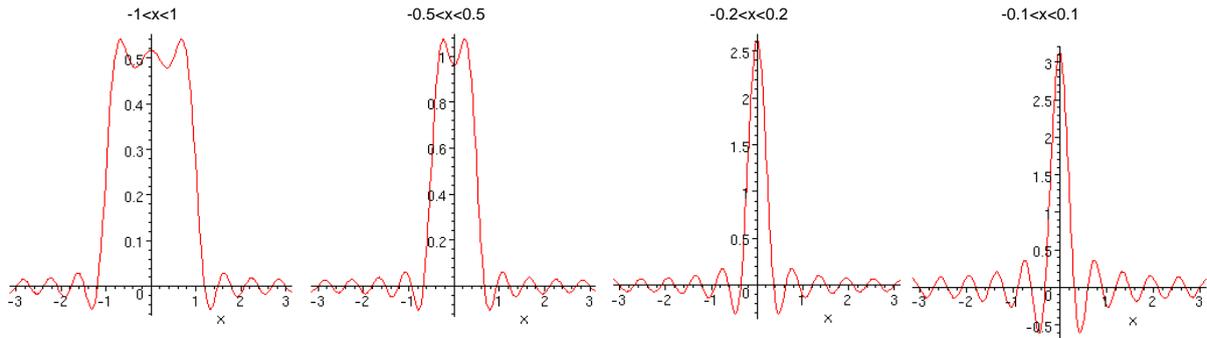
\$H = \frac{\pi}{2}, \delta = 1\$ の場合でこのグラフを書いてみる。左の図は、記号の第 1 項まで (\$\frac{1}{2} + \sin 1 \cos x\$) と、第 2 項 (\$\frac{\sin 2}{2} \cos 2x\$)、そしてそれを足して第 2 項まで (\$\frac{1}{2} + \sin 1 \cos x + \frac{\sin 2}{2} \cos 2x\$) にしたものである。

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。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。

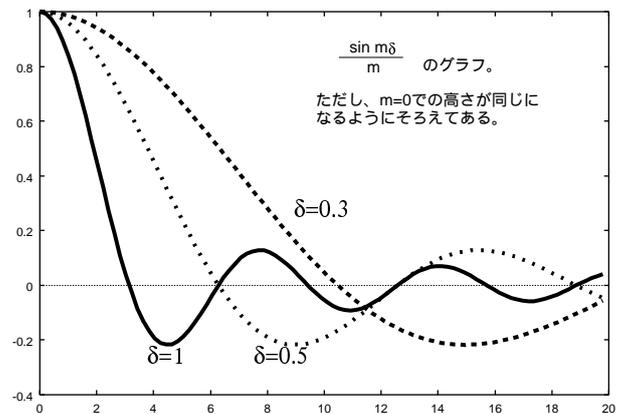
\$\delta = 1, H = 0.5\$ の場合で、第 5 項まで、第 10 項まで、第 50 項までのグラフを書いたものが下の図である。少しずつ矩形波に近づいていき、範囲外の波が小さくなっていくのがわかる。



第 10 項まで取ることは固定して、\$\delta\$ を 1, 0.5, 0.2, 0.1 と変化させていったのが下のグラフである。\$\delta\$ が小さいと、第 10 項までを足しただけでは矩形にならず、入って欲しい範囲の外でも波があることがわかる (どんどん項数を増やしていけば、やはり矩形に近づく)。



つまり δ が変化すると、重ね合わせるべき波も変化していく。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。

6.4 演習問題

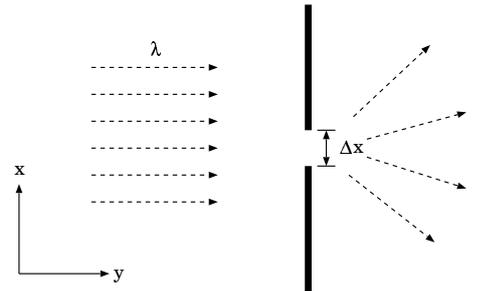
[演習問題 6-1] 以下の二つの現象が不確定性関係に即していることを確かめよ。

- (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 (= 10^6 eV) 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。

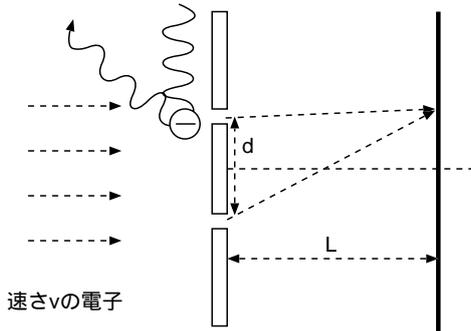
[演習問題 6-2] 波動光学では「光は自分の波長と同じくらいの間隙を通り抜けた後、よく回折する」ということが知られているが、この現象も不確定性関係の顕れと考えることができる。

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。



[演習問題 6-3]

電子の位置を測定するための光



電子を使ってヤングの実験をしたとすると、電子を波と考えた場合の波長 λ を使って $\frac{L\lambda}{d}$ で表せる幅の干渉縞ができる。これは光と全く同様の結果であり、一個の電子が両方のスリットを波の形で同時に通過していると考えなくては干渉が説明できない。そこでどちらを通過しているのかを測定してみたいと思ったとしよう。電子の質量を m とし、スリットに入る前は速度 v で真横に進んでいたとして、以下の問いに答えよ。

- (a) スリットの幅を d とする。電子がどちらを通ったかを測定するために、横から光をあてて反射を調べるとする。光の波長が d より短くなくては、電子がどちらを通ったか判定できない。この光は最低でもどの程度の運動量を持つか。
- (b) スリット通過時に電子に光があたったことにより、電子は光が持っていた横方向の運動量の一部(どれだけであるかは実験するたびに違う)をもらってしまうので、電子の横方向の運動量に不確定性が生じる。スクリーンまでの距離を L とし、これにより電子の到達場所がどの程度ずれるかを概算せよ。
- (c) 前問の答えを、光を使って場所を調べない場合にできる干渉縞の幅と比較せよ。この結果、光を使って場所を調べた場合の干渉はどのようになると考えられるか。

[演習問題 6-4]

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。

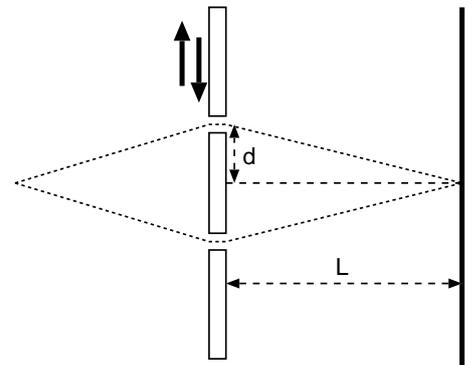
今図のように中央に光がやってきたとしよう。上のスリットを通った時ならば光はスリット部分で下向きの運動量を与えられたことになるし、下を通ったならば上向きの運動量を与えられたことになる。運動量は保存するから、その分スリットが上下動するはずだ。では、スリットの上下動を観測することで上のスリットを通ったのか下のスリットを通ったか判断できるのか？

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。

[演習問題 6-5] (6.16) で表される級数で、 $2H\delta$ (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。



第7章 シュレーディンガー方程式と波動関数

7.1 シュレーディンガー方程式

いよいよ我々は、量子力学の基本方程式と言って良いシュレーディンガー方程式に到達する¹。

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

$$E = h\nu \quad (7.1)$$

と、ド・ブロイの関係式

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (7.2)$$

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

$$\psi_\lambda = e^{2\pi i\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)} \quad (7.3)$$

という式で表すことができる。この指数関数の肩に乗っているものが $\frac{i}{\hbar} \times$ (古典力学的作用) であり、解析力学とつながりのあるものであることはすでに述べた。シュレーディンガーもこのつながりをヒントに方程式の形を決めている。

(7.3) 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。実際にこの世に存在している波はこれらの波のいろんな波長のものを足し算したもの (結果として、特定の部分だけに局在する) になるであろう。

今から作る方程式は線型方程式 (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。線型であれば、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。電磁場や、音などの波には重ね合わせの原理が成立する²。ここまで考えてきたことからすると、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 $\psi_\lambda = e^{2\pi i\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)}$ を考えるわけだが、この前では

$$p = \frac{h}{\lambda} \rightarrow -i\frac{h}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (7.4)$$

$$E = h\nu \rightarrow i\frac{h}{2\pi} \frac{\partial}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (7.5)$$

¹歴史的にはもちろん、もっと紆余曲折がある。特にこのテキストではハイゼンベルクの行列力学の流れについては完全に省略している。

²たとえば浅い水の表面にできる波など、方程式が線型でなく重ね合わせの原理が成立しない場合もある。

という置き換えができる。つまり、

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{2\pi i(\frac{x}{\lambda}-vt)} = -i\hbar \times \frac{2\pi i}{\lambda} e^{2\pi i(\frac{x}{\lambda}-vt)} = \frac{h}{\lambda} e^{2\pi i(\frac{x}{\lambda}-vt)} \quad (7.6)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{2\pi i(\frac{x}{\lambda}-vt)} = i\hbar \times (-2\pi i v) e^{2\pi i(\frac{x}{\lambda}-vt)} = h v e^{2\pi i(\frac{x}{\lambda}-vt)} \quad (7.7)$$

となる。このように(演算子) × (関数) = (値) × (関数)となるような関数を「固有関数」、右辺に出てくる(値)を「固有値」と呼ぶ。固有関数を考えることの意味については、後で述べる。

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、 $E = H = \frac{1}{2m} |\vec{p}|^2 + V(x)$ であるから、そのような粒子を表す波は

$$\underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}}_{E \text{ を表す部分}} \psi = \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x) \right)}_{H \text{ を表す部分}} \psi \quad (7.8)$$

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。

【以下長い註】この部分は、最初に勉強する時は理解できなくともよい。

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、

$$E^2 = |\vec{p}|^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (7.9)$$

という関係式が成立する。シュレーディンガーは最初この方程式を波動方程式に焼き直して

$$\left(-\hbar^2 \left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + c^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + c^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + m^2 c^4 \right) \phi = 0 \quad (7.10)$$

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ので、いったん書き上げた論文を撤回して、非相対論的な式である(7.8)を作った。

この相対論的な方程式(7.10)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・ゴルドン(Klein-Gordon)方程式と呼ばれている。1階の微分方程式であるシュレーディンガー方程式と違って、クライン・ゴルドン方程式は2階の微分方程式である。後で述べるが1階であることと ψ が複素数であることは関係があるので、クライン・ゴルドン方程式の場合は ϕ が複素数である必要はない。電子の相対論的な方程式としてはディラック(Dirac)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・ゴルドン方程式は電子に適用すると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。

【長い註終わり】

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}, q \right) \psi \quad (7.11)$$

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。たとえば直交座標での作用と極座標での作用は

$$\int dt \left(p_x \frac{dx}{dt} + p_y \frac{dy}{dt} + p_z \frac{dz}{dt} - H \right) \rightarrow \int dt \left(p_r \frac{dr}{dt} + p_\theta \frac{d\theta}{dt} + p_\phi \frac{d\phi}{dt} - H \right) \quad (7.12)$$

のように書ける。 $\frac{i}{\hbar} \times (\text{作用})$ が波動関数 ψ の \exp の肩に乗っていると思えば、 ϕ に対する運動量である角運動量 p_ϕ は、 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$ のように置き換えられることになる。その他の一般座標も同様である。曲線座標に対する運動量の中には単純に $-i\hbar \frac{\partial}{\partial X}$ と表すことができない場合があるが、それに関してはまた後で述べよう。

この考え方からすると、ポア・ゾンマーフェルトの量子化条件 $\oint pdq = nh$ は、以下のように考えることができる。 $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$ であり、波動関数が $e^{i(\text{位相})}$ という形でかけていると思えば、 p はすなわち、 $\hbar \frac{\partial(\text{位相})}{\partial q}$ ($-i$ と i が掛け算されて消えた) である。これに dq をかけて一周積分すれば、

$$\oint \hbar \frac{\partial(\text{位相})}{\partial q} dq = \hbar \times (\text{一周の位相差}) = nh \quad \rightarrow \quad \text{一周の位相差} = 2n\pi \quad (7.13)$$

という式になる。すなわち、任意の道を一周した時に、波動関数の位相が 2π の整数倍だけ変化するというを示している。 $e^{2\pi i} = 1$ であるから、波動関数の値は変化してないことになる。つまり、ポア・ゾンマーフェルトの条件は、波動関数の値が一価 (一つの場所に一つの値しかないということ) であれという条件なのである。

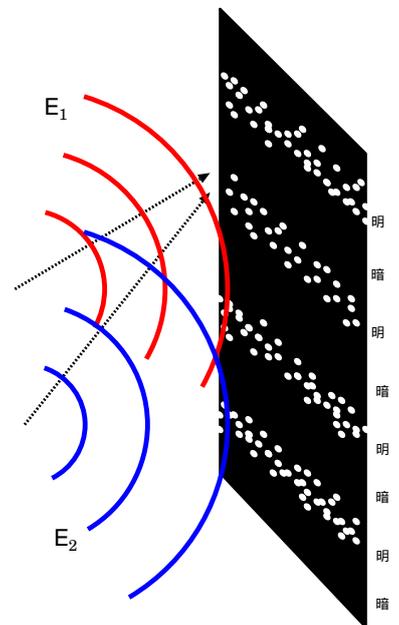
7.2 波動関数の意味

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。

光のヤングの実験 (第1章を参照) の類推から考えよう。ヤングの実験では、光すなわち電磁波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

$$\frac{1}{2} \epsilon_0 (\vec{E}_1 + \vec{E}_2)^2 = \frac{1}{2} \epsilon_0 (\vec{E}_1)^2 + \frac{1}{2} \epsilon_0 (\vec{E}_2)^2 + \underbrace{\epsilon_0 \vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2}_{\text{干渉項}} \quad (7.14)$$

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 (磁場に関しても同様の式が成立するが省略した)。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。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。この「古典力学的描像」であるところの電場・磁場と、「量子力学的描像」であるところの光子とは、いったいどのような関係にあるだろうか？



まず、電場 \vec{E} や磁場 \vec{B} は光子の数とは直接に結びつかない。電場・磁場はどちらもベクトル量（向きや正負がある）であり、光子の数という、負にならないスカラー量とは結びつかない。

ここで、光子は一個あたり $h\nu$ というエネルギーを持っていたことを思い起こそう。光の場合、エネルギー密度は $\rho h\nu$ というふうに、光子の個数密度 ρ と光子一個あたりのエネルギー $h\nu$ の積として書くことができるだろう。一方、電磁場の持つエネルギー密度は古典力学的には $\frac{1}{2}\epsilon_0(\text{電場})^2 + \frac{1}{2}\mu_0(\text{磁場})^2$ であった。この量が光子の個数を結びつく。

つまり、電磁場の場合は電磁場のうちある振動数を持つ成分について、

$$\frac{1}{2}\epsilon_0(\text{電場})^2 + \frac{1}{2}\mu_0(\text{磁場})^2 \propto (\text{光子数の密度}) \quad (7.15)$$

のような関係が成立している。

この式は、光子がたくさんある場合について、その密度と古典的な電場・磁場の関係を示した式となる。しかし、光子が一度に1個ずつしかこないような状況でも、ヤングの実験の結果は干渉が起こっている状態を示した。上の式を文字通り「光子がたくさんある場合の数密度」と解釈すると、このような実験の結果は説明できないことに注意しよう。一個だけの光子を使ってヤングの実験を行ったとしよう。そうすればスクリーンの上には一個だけ感光する点が現れるだろう。この場合の古典的電磁場は何を表すのだろうか？—光子の数密度ではない。

そこで、光子が一個しかないような場合に $\frac{1}{2}\epsilon_0|\vec{E}|^2 + \frac{1}{2}\mu_0|\vec{B}|^2$ という量は「光子がその場所に来ている確率」に比例していると考え（光子がたくさんいるならば、この量は数密度に比例していることはもちろんである）。

我々はたまたま光については波動的描像を先に知ったし、電子については粒子的描像を先に知った。実は光も電子も両方の性質を持っているのだから、電子の波動的描像を表す実体が必要となってくる。それが波動関数である。

光と物質粒子（たとえば電子）の、粒子的・波動的描像での表現をまとめると以下の表のようになる。

粒子的描像	波動的描像
光子 (エネルギー $h\nu$)	電場、磁場 (\vec{E}, \vec{H})
物質粒子 (エネルギー $\frac{1}{2}mv^2 + V$)	波動関数 (ψ)

この対応関係を信じて、波動関数 ψ と粒子の数密度の間には、電磁場の場合の式 (7.15) からの類推で、

$$(\psi\text{の実部})^2 + (\psi\text{の虚部})^2 \propto (\text{粒子の数密度}) \quad (7.16)$$

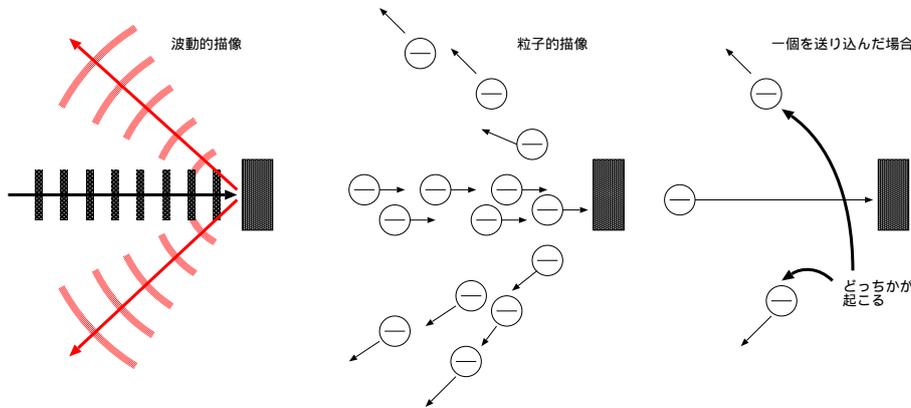
のような関係が成立するだろうと考える。電場 \vec{E} や磁場 \vec{B} が光子の数と直接結びつかなかったことと同様に、 ψ そのものを粒子数密度と考えることはできない。 ψ はプラスになったりマイナスになったり（どころか複素数にもなったり）する関数であるから、粒子数という絶対負にならない実数と直接に結びつかない。実際電子波の散乱実験で「電子が干渉によって消し合う」という現象が起きていることを思い起こそう³。

³何度も書いてはいるがもう一度確認しておく。このような干渉が起こったところを見て「エネルギーが保存してない」などと思ってしまうのはいけない。波は常に一定程度の広がりを持ち、その広がりの中である場所が弱め合うなら、他に強め合う場所が必ずある。トータルのエネルギーは決して増えも減りもしない。電子などの粒子の数に関しても同様である。

$(\psi\text{の実部})^2 + (\psi\text{の虚部})^2$ 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、

$$\psi^*\psi = (\psi_R + i\psi_I)(\psi_R - i\psi_I) = (\psi_R)^2 + (\psi_I)^2 \quad (7.17)$$

となって、 $\psi^*\psi$ 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、 $\psi^*\psi = (Re^{-i\theta})(Re^{i\theta}) = R^2$)。あとでこの量がちゃんと保存量になっていることを確認する。



波動関数の絶対値の自乗 $|\psi|^2$ も、「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。粒子が一個しか存在しない場合でも、 $|\psi|^2$ にはちゃんと物理的意味があるのである。その証拠に、実際に一個の粒子を見つけようとすると、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)。そして

波動関数はその粒子が見つかる確率を表しているのである。ヤングの実験において「明」となるポイントは見つかる確率が高い (波動関数の絶対値の自乗が大きい)。「暗」となるポイントは見つかる確率が低い (波動関数の絶対値の自乗が小さい)。光に対するヤングの実験の場合の波動関数に対応するのは電場と磁場である。つまり、光を電磁波と考えた時、電場と磁場が強くなっているところは「光子が到着する確率が高い場所」なのである。

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、 $|\psi|^2$ は密度そのものだと考えたかったらしい。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。電子を金属結晶で散乱させるような場合を考えてシュレーディンガー方程式を解いて ψ を求めたとしよう。たくさんの電子で実験すると、確かに $|\psi|^2$ が電子がやってくる数に比例している。では一個の電子を散乱させた時に何が起こるのかというと、別に一個の電子が分割されて届くわけではなく、 $|\psi|^2$ が 0 でないようなどこか一カ所に一個の電子が到着する。

たとえ波動関数が二つに分かれたとしても、観測してみると電子はどちらか片方で一個見つかるのである。つまり、「波動関数は、たくさんある粒子のうち何個がここにあるかを表している」という考え方は正しくない。非常に気持の悪い解決法なのではあるが、「波動関数はその絶対値の自乗 $\psi^*\psi$ が、一個の粒子が見つかる確率を表しているような関数である」と考えなくてはならない。これを確率解釈と言う。確率解釈はボルンによって始められて、ボーアら、コペンハーゲンにいた物理学者たちによって支持されて広まったため、「コペンハーゲン解釈」とも呼ばれる。

確率解釈はそれだけでも (古典力学的な常識を持った人間には) 気持ち悪い印象を残すのだが、この解釈を容認するためには、もっと気持ち悪い印象を残す物理現象を認めねばならない。ここで、ヤングの実験で「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」と解釈しなければならなかったことを思い出そう。このように何か (観測器など) に出会うことで波動関数の広がり小さくなることを「波動関数の収縮」と言う。この意味で

も、 $|\psi|^2$ が電子の密度だとすることは具合が悪い。電子が1点に届いた瞬間に広がっていた電子が(超光速で!)収縮することになってしまう。この収縮に関してはシュレーディンガー方程式では計算できない。というより、いかなるメカニズムでこの収縮が起こるのか、結論はまだ出ていない。

波動関数を計算しただけでは、「粒子がどこにいるか」はわからない。これが本質的にわからない(わかりようがない)のか、それとも本当はわかるのにただ量子力学が不完全であるためにわからないのか、ということはしばしば論争の種になっている。「ほんとうは粒子がどこにいるのかは決定しているのだが、量子力学では計算できない」という考え方は「隠れた変数の理論」と呼ばれる。その「隠れた変数」を知ればちゃんと粒子がどこにいるのかがわかるはずだ、という考え方である。

たとえば波動関数は粒子を導く場(guiding field)であって、粒子は其中を $|\psi|^2$ に比例する確率で動いていく、という考え方などがある。これは少なくとも「粒子が一点にいる」という点に関しては感覚的には納得しやすい考えなのだが、残念なことに「隠れた変数」の存在は実験的には否定⁴されており、「粒子がどこにいるのかは本質的に決定不可能」と考えるほかなさそうである。これについては詳しい話は難しいので述べない⁵。

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、

$$\int_{\text{考えている全空間}} dx \psi^* \psi = 1 \quad (7.18)$$

となるようにしておけばよい(これはすなわち「全確率が1」ということ)。このようにすることを規格化(normalization)と言う。具体的には、もし

$$\int_{\text{考えている全空間}} dx \psi^* \psi = N \quad (7.19)$$

となったならば、

$$\psi_{\text{新}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \psi \quad (7.20)$$

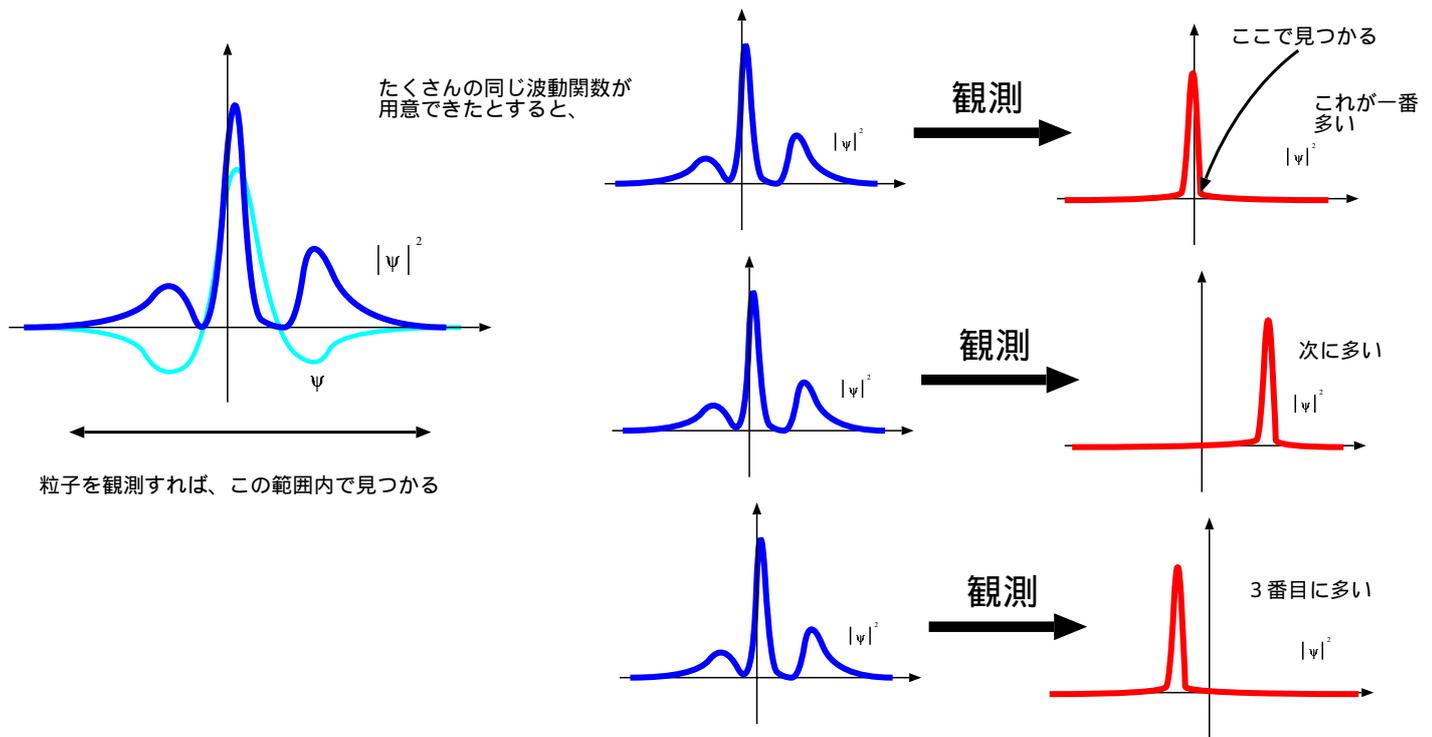
として新しい $\psi_{\text{新}}$ を作ればよい。

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。

ここで、もう一度まとめておく。量子力学では古典力学のように「粒子はどこにいる」と断言することができないのだが、その理由は二つある。「波動関数で表される量子状態では、粒子の位置や運動量が確定していない」という点と、「観測した時にいろんな波動関数の中から一つの状態が確率的に選ばれる」という点である。この二つは違う種類のものであることは理解しておかなくてはならない。特に後者の方が問題として大きい。これは量子力学ではある現象が起こる確率しか計算できないということの意味するからである(波動関数が収縮する前に「どこに収縮するか」を予言することは不可能なのである)。

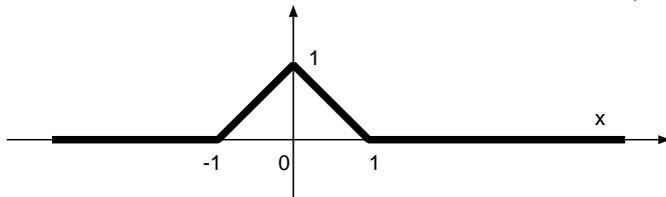
⁴なお、厳密に言えば、隠れた変数にあたる物理量が超光速で伝播すると考えれば、実験的に矛盾しない理論を作ることできる。しかし、超光速で伝播するようなものを考えるのは非常に難しい。

⁵ここを勉強したい人は、たとえば「量子力学論争」(フランコ・セリリ/共立出版)などを参照。



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。アインシュタインの「神はサイコロを振らない」という言葉は有名である。しかし、いろんな実験から確率解釈が妥当であること、少なくとも実験結果を説明するには十分であることは確認されている⁶。

下のグラフで表されるような波動関数がある (実数部分だけで虚数部分はない)。



[問い 7-1] 規格化せよ。

[問い 7-2] 確率密度 $\psi^*\psi$ のグラフの概形を書け。

このように量子力学というのは、ある意味我々の常識からは考えられないような現象を扱うものである。だが、このような「一般常識が通用しない」が「しかし真実」であったことは科学においてはこれまでもいくらでもある。たとえば「太陽が地球の回りを回っている」という常識は地動説にとってかわったし、「物体が運動している時はその物体に力が働いている」という常識は慣性の法則によって間違いであることがわかった。

我々のすんでいる世界は、我々が目で見て直感的に感じるとおりに動いているとは限らない。「地球が動いている」と悟ったコペルニクスのように、慣性の法則を発見したガリレイのように、世界を注意深く調べることができる者だけが、直感によって覆い隠されていた真実を見抜くことができる。

⁶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。

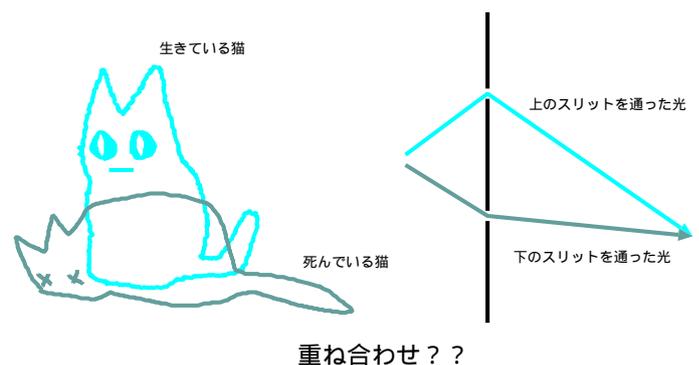
量子力学を勉強する時には、量子力学の常識破りな部分がある、どのように注意深く組み立てられてきたものであるかを学びとっていかなくてはならない。「誰かがこう言ったから」「教科書にそう書いてあるから」ではなく、どのような過程でこの不思議な量子力学ができてきたのか、そして物理学者達の苦勞の末にできた量子力学というものがどのようにこの世界を記述しているのか、を自分で納得しながら学習して行って欲しい。量子力学はなかなか納得できない、不思議な学問であるが、だからこそしっかり理解できた時の喜びは大きいと思う。

【補足】この部分は授業では話さない可能性もあるが、その場合は読んでおいてください。

7.3 シュレーディンガーの猫

波動関数の収縮の問題に関して、「シュレーディンガーの猫」という有名な話がある。シュレーディンガーが、上のような「観測するまでは重ね合わせ状態」という考え方を批判するために持ち出した、以下のような例え話である（シュレーディンガー自身は量子力学を確率的に解釈することを嫌っていた）。

放射性物質が崩壊すると毒ガスが出て、中にいる猫が死ぬような仕掛けのしてある箱があったとする。放射性物質の崩壊というのも量子力学的現象で崩壊がいつ起るかは確率的にしか予言できない。だから、放射性物質の状態は（観測する前は）「まだ崩壊していない」と「すでに崩壊した」の二つの状態の重ね合わせになっている。しかし、「まだ崩壊していない」は猫の生と、「崩壊した」は猫の死と結び付いている。だから、観測する前は「まだ崩壊していない」と「崩壊した」のどちらにあるかわからない—つまり二つの状態の重ね合わせになっている—という状態を認めるのであれば、同様に、観測する前は猫が「生」と「死」の二つの状態にどちらにあるかわからない—つまり二つの状態の重ね合わせになっている—という状態の存在も認めなくてはならない。しかし我々は「生」と「死」の二つの混ざりあった状態の猫なんて、見たことはない…。



この疑問をどう解決するのは難しい問題で、考え始めると夜も眠れないほどに「はまってしまう」問題である。それゆえとりあえずはあまり深く考えない方が精神衛生上はいいのだが、量子力学において「状態の重ね合わせ」という概念が非常に重要であり、ミクロな話をする時にはこのような考え方を避けることはできないということは理解しておいて欲しい。

量子力学の標準的解釈においては、最終的に人間が観測するまでのどこかの段階で、波動関数は重ね合わせの状態からいっきにどれか一つの状態へと収縮すると考える。そして、どの状態に収縮するかの確率が $\psi^*\psi$ によって表されると考える。

シュレーディンガーの猫の話の焦点は、『波動関数の収縮はいつ起こるのか』という疑問である。これに対する答えとして、一つ有り得るのは、「測定器が放射性物質の崩壊を測定した時点でもう波動関数は収縮している」という考えかたである。この考えかたならば、生きた猫と死んだ猫の重ね合わせなどを考えなくてもすむ。しかし、「ではいったい何が波動関数が収縮するかしないかを分ける境界なのか？」という点はあいまいである。

もう一つの考え方はウィグナーらによる「人間の意識に到達した時に波動関数は収縮する」という考え方である。人間が感知していない時に波動関数が収縮していきようがしてしまいがちである意味「知ったことではない」

と考えるとこの考え方には一理あるが、人間の意識など所詮は一連の化学反応ではないかという立場に立つと、「人間の意識が物理現象にとってそんなに重要だと考えるのは傲慢ではないか」とも思われる。

また一つの考えかたは、波動関数の収縮などを考えず、観測した後も「猫が死んだと観測する観測者」と「猫が生きていると観測する観測者」の重ね合わせができていていると考える。さらには観測者だけでなく、世界全体を重なり合っただくさんあると考えてしまう。観測者がそれぞれ別の世界に存在しているので、各々の観測者はけっして重ね合わせを見ない。この解釈では、ありとあらゆる世界が並列して（しかし、互いの間には何の干渉も相互作用もないままに）存在していることになる。これを多世界解釈と言う。

もう一つの立場としては、確率で決まるようなものはどこにもなく、実際には粒子がどの場所にいるかは最初から決まっているという考えかたであるが、この考えかたで実験を説明するには、非常に複雑で、かつ不自然な相互作用があると考えなくてはいけないため、主流とはなっていない。

大事なことは確率解釈でも多世界解釈でも、計算の結果出てくる答は変化しないということである。たてるべきシュレーディンガー方程式も同じであるし、結果を見て「なるほど、50%の確率でこの粒子は崩壊しているな」と判断するところも同じである。

したがって、実用の面からすれば、どの解釈を取るべきかということに悩む必要は、（一応）ない。そこでこの講義では今後はどの解釈を取るべきかという話はいっさいしないつもり（基本的にはもっともスタンダードな確率解釈の線にそって説明する）なので、興味のある人はいろんな本を読んでみることに⁷。

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。

7.4 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

$$m \frac{d^2 \vec{x}(t)}{dt^2} = \vec{f} \quad (7.21)$$

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。

古典力学のニュートン方程式は2階微分の方程式であるがゆえに、一つの座標 $x(t)$ に対して二つの初期条件が必要になった。古典力学でも、正準方程式は

$$\frac{dp_i(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}, \quad \frac{dx_i(t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (7.22)$$

という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、 $\vec{x}(t), \vec{p}(t)$ 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。多くの場合、古典力学の運動量は

$$\vec{p}(t) = m\vec{v}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{m(\vec{x}(t + \Delta t) - \vec{x}(t))}{\Delta t} \quad (7.23)$$

と表される。 $\vec{p}(t)$ 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。

⁷多世界解釈派の書いた読みものとしては「宇宙の究極理論は存在するか」(ドイッチェ)などが面白い。

	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。 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

$$A \sin \left(2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) + \alpha \right) \quad (7.24)$$

のように書けるだろう。逆方向へ進行する波の式は、上の式で $x \rightarrow -x$ という置き換えをすればよいので、

$$B \sin \left(2\pi \left(-\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) + \beta \right) \quad (7.25)$$

と書けるだろう。

ところがこの二つ、(7.24)と(7.25)は、 $t=0$ にしてしまうとどちらも

$$A \sin \left(2\pi \frac{x}{\lambda} + \alpha \right) \text{ と } B \sin \left(-2\pi \frac{x}{\lambda} + \beta \right) \quad (7.26)$$

となって区別がなくなってしまう。一見して違うように見えるかもしれないが、任意定数である A, B, α, β を適当に選ぶとこの二つは同じものになる(たとえば $B = -A$ として $\alpha = -\beta$ にしてもよいし、 $A = B$ にして $\alpha = \beta + \pi$ としてもよい)。

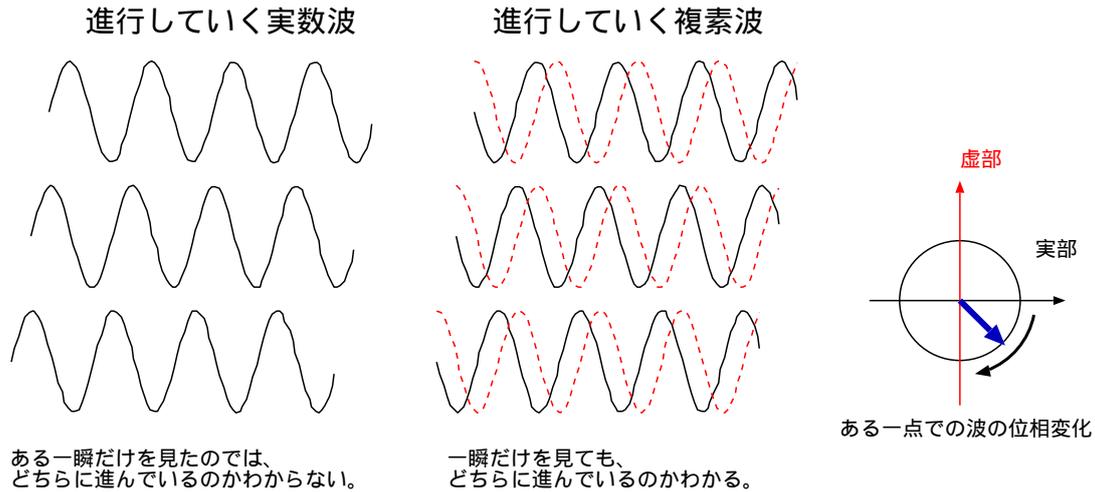
つまり、実数の波で考えると、初期状態の中に波の進行方向という情報が入らなくなってしまうのである。複素数であれば、

$$A e^{2\pi i \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) + \alpha} \quad \text{と} \quad B e^{2\pi i \left(-\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) + \beta} \quad (7.27)$$

は $t=0$ にしても、

$$A e^{2\pi i \frac{x}{\lambda} + \alpha} \quad \text{および} \quad B e^{-2\pi i \frac{x}{\lambda} + \beta} \quad (7.28)$$

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。



$e^{-2\pi i \nu t}$ 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、波がどっち向きに動かなくてはいけないか、と考えれば波の進む向きがわかる。

ここで、 $Ae^{2\pi i(\pm \frac{x}{\lambda} + \nu t)}$ 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」と右ネジを回した時に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。

[問い 7-3] 1 次元の波動関数を、 $\psi(x, t) = \psi_R(x, t) + i\psi_I(x, t)$ とおく。 ψ_R, ψ_I は各々実数関数である。このように分けて書いた時、シュレーディンガー方程式の実数部分と虚数部分はそれぞれどのような方程式になるか。

【補足終わり】

7.5 演習問題

[演習問題 7-1] 波動関数 $\psi(\vec{x}, t)$ が $\psi(\vec{x}, t) = \phi(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ と書ける時、 $\phi(\vec{x})$ が満たすべき方程式を求めよ。この方程式は「定常状態のシュレーディンガー方程式」と呼ばれる。

[演習問題 7-2] 波動関数 $\psi(\vec{x}, t)$ が $\psi(\vec{x}, t) = \phi(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ と書ける時は、 $\psi^* \psi$ が時間によらないことを示せ。また、エネルギーの原点をずらしても $\psi^* \psi$ には影響がないことを確かめよ。

[演習問題 7-3] 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)

$$\psi(x) = x \quad (\text{for } x \geq 0)$$

$$\psi(x) = -x \quad (\text{for } x < 0)$$

[演習問題 7-4] 質量 m を持つ自由粒子の波動関数が $\psi(x, t) = \sin x f(t)$ で表されるとする。シュレーディンガー方程式を解いて $f(t)$ を求めよ。

結果としてできあがる $\psi(x, t)$ は、右へ進行する波と左へ進行する波の重ね合わせであることを示せ。

[演習問題 7-5] 質量 m の物体が長さ L の棒につながれ、原点に固定された棒のもう一方の端を中心に回転しているとする。この時のラグランジアンは $L = \frac{1}{2}mL^2 \left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2$ 、ハミルトニアンは $\frac{1}{2mL^2}(p_\theta)^2$ である。波動関数を $\psi(\theta)$ として、この系に対する定常状態のシュレーディンガー方程式を作って解き、エネルギーの値を求めよ。 $\theta = 0$ と $\theta = 2\pi$ で波動関数の値が同じにならなくてはならないことに注意せよ。

[演習問題 7-6] ある面 ($x = 0$) を境界として上 ($x > 0$) ではポテンシャルが V (定数)、下 ($x < 0$) ではポテンシャルが 0 になっているとする。つまり、上では

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right] \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

が、下では

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

が成立する。解の形を $\psi = Ae^{i(kx - \omega t)}$ と仮定して方程式を解け。両方で振動数が等しい (エネルギーが保存する) 場合を考えると、上から下へ入射した時、波長はどのように変化するか。

[演習問題 7-7] 平面波解 $\psi = Ae^{i(kx - \omega t)}$ においては、 $\psi^* \psi$ が場所によらないことを示せ。なぜこのようになるのかを、不確定性関係から説明せよ。

[演習問題 7-8] 3次元の自由粒子のシュレーディンガー方程式は

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

である。この式の解を $\psi = Ae^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}$ とした時、 ω を k_x, k_y, k_z で表せ。

[演習問題 7-9] 1次元の自由粒子のシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

にガリレイ変換 ($x' = x - vt, t' = t$) を施し、 ψ の満たすべき (x', t' を変数とした) 方程式を作れ。この式は、元々の座標系から見て速度 v で運動しているような座標系での方程式である。

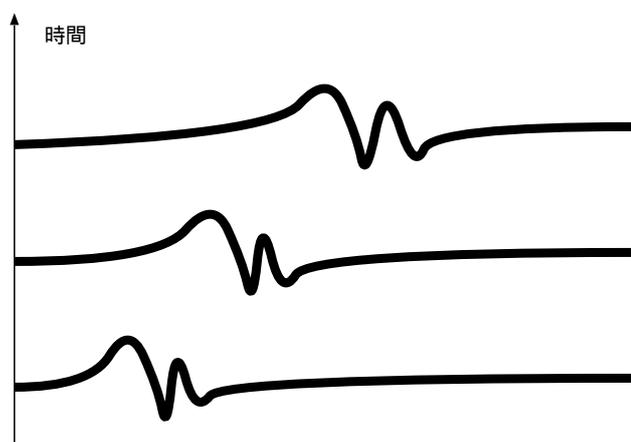
こうすると式の形が変わってしまうが、ここで波動関数を

$$\psi = e^{i(kx + \epsilon t)} \Psi$$

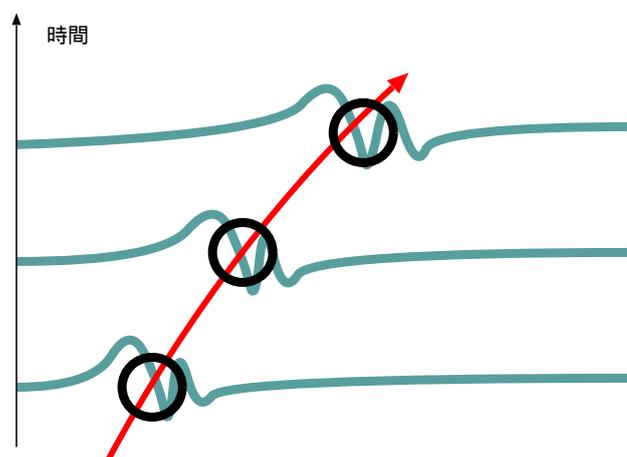
とおき、 k, ϵ を適当に選べば、 Ψ の満たす方程式は元のシュレーディンガー方程式と全く同じ形になる。 k, ϵ を求めよ。

第8章 物理量と期待値

8.1 座標の期待値



波動関数の“運動”



マクロな目からはこう見える

波動関数は常にある程度の広がりを持ちながら時間発展していく。その波動関数の時間変化こそが、いわば「運動」なのであるが、その波が一部に局在しているて、その位置が動いていくなれば、それを我々は「粒子が運動している」ととらえることができる。

古典的な「粒子の運動」と波動関数の動きを比較するために、「波動関数がある形をしている時、粒子はどのあたりにいると考えればよいのか」ということを示す量が必要である。

そのような指標として、期待値（記号では $\langle x \rangle$ ）を使うことが多い。波動関数が一つの山の塊（波束）を持つような時、 $\langle x \rangle$ はまさにその山の中心を指し示すことになる（複数個の塊があるならばその平均のところにくる）。

具体的には、期待値は以下のように計算される。まず一般的な「期待値」の定義を述べよう。

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、

$$\langle A \rangle = \sum_i f_i A_i \quad (8.1)$$

が「 A の期待値」である。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

$$f_{1000 \text{ 円当り}} \times 1000 + f_{100 \text{ 円当り}} \times 100 + f_{\text{外れ}} \times 0 = \frac{1}{100} \times 1000 + \frac{1}{10} \times 100 + \frac{89}{100} \times 0 = 20 \quad (8.2)$$

となる。もしくじを 100 回引けば、1000 円が 1 回、100 円が 10 回ぐらい当たるだろう。すると 100 回で 2000 円ぐらい賞金がもらえることになる。1 回あたり 20 円である。つまり期待値は、そのくじを何回も何回も引いた時にももらえるお金の平均値に等しい。

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。実験と比較するとしたら、何回も実験をしてその平均値と比較することになる。

量子力学では、ある量 A の期待値を $\langle A \rangle$ のように括弧でくくって表す。

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。たとえば、位置座標 x は連続的に変化する物理量である。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、

$$\langle x \rangle = \int x |\psi(x, t)|^2 dx = \int \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx \quad (8.3)$$

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3つめの式では、順番を並べ替えて x を ψ^* と ψ の間に置いている。これは後で出てくる「運動量の期待値」や「エネルギーの期待値」の時と順番を同じにするため、この段階では深い意味はない。

単純な矩形波

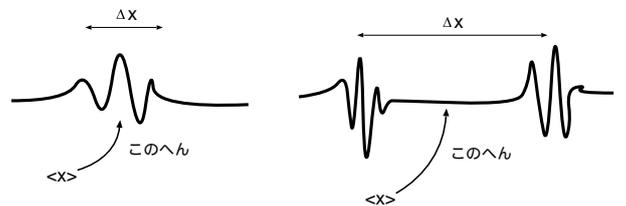
$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\delta}} & a < x < a + \delta \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \quad \begin{array}{c} |\psi|^2 \\ \text{1/}\delta \\ a \quad a + \delta \end{array} \quad (8.4)$$

のような場合 (ここでは時間依存性を無視している。実際には、このような波は時間がたつと形を変えていくはずである)、

$$\int dx \psi^* x \psi = \int_a^{a+\delta} dx \frac{1}{\delta} x = \frac{1}{\delta} \left[\frac{x^2}{2} \right]_a^{a+\delta} = \frac{1}{2\delta} ((a+\delta)^2 - a^2) = \frac{1}{2\delta} (2a\delta + \delta^2) = a + \frac{\delta}{2} \quad (8.5)$$

となって、確かに波の中心である。古典力学で「粒子の位置」と我々が観測するものはこのような $\langle x \rangle$ である。ただし、たいていの場合波の広がりや測定機器の誤差の中に埋もれてしまう。

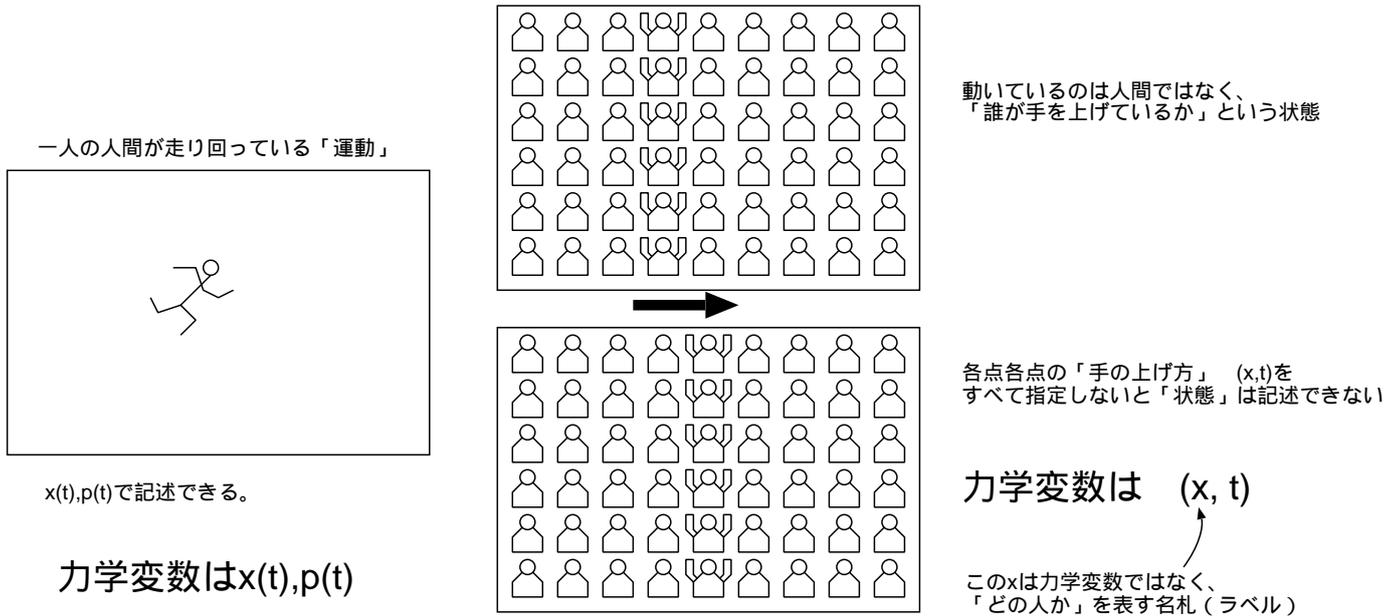
期待値はこのようにして全体の平均として計算するので、波動関数が二つの波に分かれてしまうような場合について計算すると、実際には波がほとんどいないような場所に期待値が来てしまう場合もある。そのため、波がどの程度広がっているかを示す数値 (右の図の Δx のようなもの) も必要になるが、それについては後で計算しよう。



8.2 座標期待値の運動

前節で定義された $\langle x \rangle$ が時間的にどう変化するかを見ておこう。そのために $\frac{d}{dt} \langle x \rangle$ という計算を行う。この場合、 x は時間に依存せず、依存するのは $\psi(x, t)$ の方であることに気をつける。量子力学では¹、時間によって変化していく力学変数は座標 x や運動量 p ではなく、波動関数 $\psi(x, t)$ なのである。量子力学では x はもはや力学変数ではない (だから $x(t)$ ではない!)。

¹正確に言うと「シュレーディンガー表示の量子力学では」なのだが、このテキストではシュレーディンガー表示以外 (たとえば「ハイゼンベルク表示」) は扱わない。



力学変数が $x(t), p(t)$ から $\psi(x, t)$ と変わったことをたとえ話で説明しておく。広い運動場に一人の人間が走り回っているのを見ているとしよう。この「状態」を知るには、その人がどこにいるか ($x(t)$) と、どれぐらいの運動量で動いているか ($p(t)$) を知ればよい。これが古典力学的運動に対応する。

これに対し、量子力学的な運動に対応するのは、運動場一杯にぎっしりと人が立っていて、サッカーの応援などでやる「ウェーブ」をやっているところである。ウェーブが動いていく姿が波束の動いていく姿すなわち粒子の動いていく姿に対応する。波動関数の山になっているところが移動していくことが古典的な意味の粒子の移動なのである。このように「波動関数が時間的に変化して、それによって粒子のいそうな場所(期待値)も変化していく」という考え方をすれば、波動関数 $\psi(x, t)$ は空間の各点各点に一個ずつ存在する「力学変数」であり、すべての $\psi(x, t)$ を決めてその時間発展を考えなくてはならない。そして、この立場では x は時間的に変化するものではなく、「たくさんある ψ のうち、どれを考えているのかを指定する名札(ラベル)」でしかない(ウェーブが移動しても着席している人は移動しない)。

したがって、 $\langle x \rangle$ を時間 t で微分する時、微分されるのは $\psi^*(x, t)$ と $\psi(x, t)$ の二つである。ゆえに、微分の結果は

$$\frac{d}{dt} \int dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) = \int dx \left(\psi^*(x, t) x \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) + \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) \right) \quad (8.6)$$

となる。

【以下長い註】この部分は、最初に勉強する時は理解できなくともよい。

たまに、「この式の左辺では微分が常微分 $\frac{d}{dt}$ なのに、右辺に行くと偏微分 $\frac{\partial}{\partial t}$ になっている。おかしいではないか」と質問する人がいるので、少し説明しておく。

左辺において微分されている $\int \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx$ においては、 x はすでに積分が終わっている(つまり、 x はいろんな値が代入されて足し算が終わっている)ので、実は x の関数ではなく、 t のみの関数なのである。だから、左辺の微分はあきらかに偏微分ではない。

「右辺の $\psi(x, t)$ の中には x がある。この x を t で微分したら $\frac{dx}{dt}$ は出てきそうな気がする」と不安に思う人もいるかもしれない。しかし、ウェーブの例えで説明したように、 $\psi(x, t)$ の中の x は時間によって変化する量ではないのであって、古典力学での場所を表す $x(t)$ とは違うものであることに注意しなくてはならない。この x は「場所 x 、時刻 t での波動関数 $\psi(x, t)$ 」のように ψ の場所を指定する、いわば「ラベル」または「番地」なのである。これに対し、古典力学の $x(t)$ は粒子の存在している位置であり、意味が違う。この二つの x の違いは、流体力学での Lagrange の方法と Euler の方法の違いと本質的に同じである。

【長い註終わり】

ここでシュレーディンガー方程式 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi$ が成立しているものとして、

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{-i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi \quad \text{および} \quad \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = \frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi^* \quad (8.7)$$

を代入する。すると、

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) \\ &= \int dx \left(\psi^*(x, t) x \frac{-i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t) + \frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi^*(x, t) x \psi(x, t) \right) \end{aligned} \quad (8.8)$$

となる。ここで $V(x)$ に比例する部分は同じものが逆符号になっているので消える。整理すると、

$$\frac{d}{dt} \int dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \int dx \left(\psi^*(x, t) x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^*(x, t) \right) x \psi(x, t) \right) \quad (8.9)$$

第2項の ψ^* の方にかかっている微分を部分積分を使って外していく。この時、積分範囲の端っこ(たいていの場合は $x = \pm\infty$ だろう)では ψ やその微分は0になっているとして、表面項²は無視しよう。部分積分の結果は

$$\begin{aligned} \int dx \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* x \psi &= - \int dx \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) \\ &= \int dx \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x \psi) \\ &= \int dx \psi^* \left(x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + 2 \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) \end{aligned} \quad (8.10)$$

となる。この第1項は最初からあった $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi$ の項と消し合う。残るのは、

$$\frac{d}{dt} \int dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) = \frac{-i\hbar}{m} \int dx \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \quad (8.11)$$

² 「表面項」とは、 $\int_a^b \frac{df(x)}{dx} dx = [f(x)]_a^b = f(a) - f(b)$ という形に書ける式のこと。 $x = a$ と $x = b$ が積分の端っこ (= 表面) なのでこう呼ぶ。

となる。この式をよく見ると、 $\frac{1}{m} \int dx \psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t)$ のように、 ψ^* と ψ の間に運動量演算子 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ がはさまった形になっている。これは「運動量の期待値」と考えてよい量になっている。これが妥当であることは後で示すとして、とりあえず $\int dx \psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t)$ を $\langle p \rangle$ と書いておくと、

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle \quad (8.12)$$

が示されたことになる。これはつまり、 $p = mv$ である。古典力学的にはあたりまえの式であるが、量子力学の中ではこのように期待値の形で実現することになる。運動方程式 $\frac{dp}{dt} = -\frac{dV}{dx}$ も、同様に期待値として実現することになるが、その計算も後に回そう。

なお、ここで行ったのは $\langle x \rangle$ の計算であるが、 x を挟まない $\int \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx$ を時間微分すると 0 になることが計算できる（章末の演習問題 8-4 を参照。しかし具体的に計算しなくても、ここでの計算がこうも複雑になったのは x が挟まっていたからであり、それがなければ答が 0 になることは理解できるだろう）。こうなるのは当然で、もしこうならなかったら、 $\int \psi^* \psi dx = 1$ 、つまり全確率が 1 であるという条件が、時間が経つと成立しなくなってしまう。

8.3 運動量の期待値

運動量の期待値が $\int \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx$ で計算できるということを確認しよう。ただし、この節では規格化の問題を簡単にするために、 x の範囲を $-\pi < x < \pi$ とし、周期境界条件をおく³。

$[-\pi, \pi]$ で周期的である関数は

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} F_n e^{inx} \quad (8.13)$$

のようにフーリエ級数で展開できる。前に出てきたフーリエ級数 (6.3) は $\cos nx, \sin nx$ を使っていたが、ここでは e^{inx} を使っている。 $e^{inx} = \cos nx + i \sin nx$ であることを思い出せば、上の式は

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} F_n (\cos nx + i \sin nx) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} F_0 + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} [(F_n + F_{-n}) \cos nx + i(F_n - F_{-n}) \sin nx] \end{aligned} \quad (8.14)$$

となる。

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} F_0 = \frac{1}{2} a_0, \quad \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (F_n + F_{-n}) = a_n, \quad \frac{i}{\sqrt{2\pi}} (F_n - F_{-n}) = b_n \quad (8.15)$$

とすればこの式は (6.3) と同じである。 a_n, b_n は実数とは限らないが、もし「実数であれ」という条件が課されているなら、 $(F_n)^* = -F_{-n}$ になっていなくてはならない。

³ x の範囲を $(-\infty, \infty)$ にしても、ここで行ったように e^{ikx} の重ね合わせで波動関数を表すことは可能である。ただその場合、 $\int \psi^* \psi dx = 1$ にすることが難しくなる。これについてはまた後で述べる。

このように波数 n を持った波 e^{inx} を適当な重み F_n をかけて足し算 (重ね合わせ) していくことで、いろんな形の関数を作ることができる⁴。この n は整数に限るが、それは周期境界条件 $\psi(\pi) = \psi(-\pi)$ を満足するようにである。

この関数 $f(x)$ を波動関数だと考えると、波数 n ということは運動量 $\hbar n$ を持っているということだから、 F_n は、「波動関数の中に運動量 $\hbar n$ を持った成分がどの程度含まれているか」を示す数だと言える。確率は $\psi^* \psi$ に比例するから、運動量が $\hbar n$ になる確率は $F_n^* F_n$ に比例する (F_n は一般に複素数であることに注意。うまく規格化されていれば、「比例する」ではなく $F^* F$ は確率そのものとなる)。

単純な例を考えよう。ある波動関数が

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (F_1 e^{ix} + F_2 e^{2ix} + F_3 e^{3ix}) \quad (8.16)$$

のように、3つの波動関数の和として与えられたとする。各成分であるところの e^{ix}, e^{2ix}, e^{3ix} はそれぞれ、 $\hbar, 2\hbar, 3\hbar$ の運動量を持っている粒子を表す波動関数と解釈でき、 F_1, F_2, F_3 はそれぞれの波がどの程度混じっているかを表す数字である。まず規格化条件を考える。 $\psi^* \psi$ を積分すると

$$\int_{-\pi}^{\pi} \psi^* \psi dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (F_1^* e^{-ix} + F_2^* e^{-2ix} + F_3^* e^{-3ix}) (F_1 e^{ix} + F_2 e^{2ix} + F_3 e^{3ix}) dx \quad (8.17)$$

となる。

ここで e^{inx} ($n \neq 0$) のような振動関数を範囲 $-\pi < x < \pi$ (n 周期分に対応する) で積分すると、答えはゼロになることを思い出そう。波の山と谷を足して行くことになるからである。これを使うと、かけ算の結果 e^{ix} が残るような項 (たとえば $F_1^* e^{-ix}$ と $F_2 e^{2ix}$ の積) はどうせゼロだから計算する必要はない。このように違う運動量を持った波動関数の積を積分すると0になる (同じ運動量を持つものどうしの積だけが残る) のはすぐ後で学ぶ一般的な法則「エルミートな演算子に対して異なる固有値を持つ固有関数は直交する」(「エルミート」という言葉の意味はすぐに出てくる) の一例である。

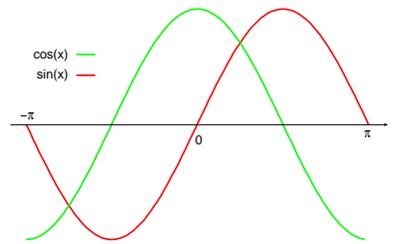
さて以上のような考察から、

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \psi^* \psi dx &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (F_1^* F_1 + F_2^* F_2 + F_3^* F_3) dx \\ &= F_1^* F_1 + F_2^* F_2 + F_3^* F_3 \end{aligned} \quad (8.18)$$

なので、規格化条件から、 $F_1^* F_1 + F_2^* F_2 + F_3^* F_3 = 1$ でなくてはならない。この時、 $F_1^* F_1, F_2^* F_2, F_3^* F_3$ という3つの数は、運動量がそれぞれ、 $\hbar, 2\hbar, 3\hbar$ になる確率を表す。よって、この場合の運動量の期待値は (値) \times (確率) の和として計算して、

$$\langle p \rangle = \hbar F_1^* F_1 + 2\hbar F_2^* F_2 + 3\hbar F_3^* F_3 \quad (8.19)$$

ということになる。



⁴ 「波数」という言葉は誤解を受けやすいが、単に「波の数」と思ってはいけない。正確な定義は「単位距離あたりの位相変化」ということになる。 e^{inx} の場合、距離 2π に対して $2\pi n$ 位相が変わる。

では、運動量の期待値を計算するには、まず波動関数を (8.13) のようにフーリエ級数で展開して、係数 F_n を求めておかななくてはならないのだろうか？⁵

実はその心配はない。「運動量を演算子 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ で置き換えることができる」ということのありがたさがここでも出てくる。波動関数にこの演算子をかけると、

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) (F_1 e^{ix} + F_2 e^{2ix} + F_3 e^{3ix}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (\hbar F_1 e^{ix} + 2\hbar F_2 e^{2ix} + 3\hbar F_3 e^{3ix}) \quad (8.20)$$

となる。つまり、波動関数の各成分の前に、それぞれの成分の持つ運動量がかけ算された形で出てくる。これに ψ^* をかけて積分すると、さっきと同じ理由で e^{ix} が残らない部分だけがノンゼロで残るから、

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (F_1^* e^{-ix} + F_2^* e^{-2ix} + F_3^* e^{-3ix}) (\hbar F_1 e^{ix} + 2\hbar F_2 e^{2ix} + 3\hbar F_3 e^{3ix}) \\ &= \hbar F_1^* F_1 + 2\hbar F_2^* F_2 + 3\hbar F_3^* F_3 \end{aligned} \quad (8.21)$$

である。もっと一般的な波動関数であっても同じことが言える。つまり、 F_n を計算しなくても、

$$\langle p \rangle = \int \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx \quad (8.22)$$

と計算すればよいのである。前に $\langle x \rangle$ の計算でわざわざ x を ψ^* と ψ の間に置いたのは、この式と同じ形になるようにである。 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ の方は微分演算子であるからどこにおいてもよいというわけにはいかない。

[問い 8-1] $-\pi < x < \pi$ で定義された波動関数が $\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin x$ だったとする。この場合の $\langle p \rangle$ を求めよ。

[問い 8-2] 前問での $\langle p \rangle$ の答えは、計算せずとも、 $\sin x = \frac{1}{2i}(e^{ix} - e^{-ix})$ という形を見れば簡単にわかる。どのようにわかるのか？

ここで、 e^{inx} という関数は $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ をかけると

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{inx} = \hbar n e^{inx} \quad (8.23)$$

のように、 $\hbar n \times$ (元の関数) という形にもどる。つまりこの関数は p の固有関数であり、固有値は $\hbar n$ である⁶。

上では3種類の運動量を持つ状態の足し合わされた状態になっている波動関数を考えた。このような波動関数は固有関数ではない(一個一個の成分は固有関数)。波動関数が運動量の固有関数になっている (e^{inx} 一項のみからなる) ということは、その波動関数で表されている量子力学的状態は運動量が一つの値 ($\hbar n$) に決まっいて、ゆらぎがないということである。

⁵ 今の場合最初から展開されている式 (8.16) から始めたからわからないかもしれないが、一般の関数が出てきた時にそれを (8.16) の形に直すのは、楽にできるとは限らない。

⁶ 歴史的事情から、英語の本でも、これらの「固有」はドイツ語である eigen(発音は仮名書きするとアイゲン) を使う。固有関数は eigen function、固有値は eigen value。

この時、 $\psi^*\psi$ を計算すると、 x によらない定数となる。なぜならば、 $e^{-inx}e^{inx} = 1$ という計算から x が消えてしまうからである。つまり、このような波動関数は確率密度が定数、すなわち、「どこにいるんだかさっぱりわからない」ということである。運動量が確定すると位置が不確定になるという不確定性関係が、ここでも実現している。

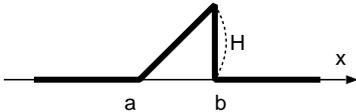
実際に存在する波動関数では、いろんな運動量を持った波動関数の重ね合わせになっており、運動量が一つの値に確定していない(それゆえ逆に x に関してはある程度は決まっている)。任意の関数がフーリエ変換によって e^{ikx} の和の形にかけるということはすなわち、任意の波動関数があるような運動量を持った波動関数の重ね合わせでかならず書けるということである。

8.4 演習問題

[演習問題 8-1] $\psi(x) = e^{3ix} + e^{ix}$ という波動関数 (x の範囲は $-\pi < x < \pi$) を規格化した後、運動量の期待値を求めよ。

[演習問題 8-2]

以下のように表される波動関数 ψ (実数部しかない) を規格化した後、 $\langle x \rangle$ を求めよ。



[演習問題 8-3] [演習問題 7-3] で計算した波動関数

(a)

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

(b)

$$\psi(x) = e^{inx} \quad (n \text{ は整数})$$

(c)

$$\psi(x) = x \quad (\text{for } x \geq 0)$$

$$\psi(x) = -x \quad (\text{for } x < 0)$$

(全て、 x は $-\pi < x < \pi$ の範囲とする)

それぞれの場合について $\langle x \rangle$ を計算してみよ。

[演習問題 8-4] $\int \psi^*(x, t)\psi(x, t)dx$ の値は時間が経っても変化しない(確率の保存則)ことを、シュレーディンガー方程式とその複素共役から作られる式 (8.7) を使って証明せよ。ただし、 $\psi(x, t)$ およびその微分は遠方では 0 になっているものとする。

[演習問題 8-5] $\int_a^b \psi^*(x, t)\psi(x, t)dx$ のように、積分範囲を一部分 ($a < x < b$) にすると、この量は一般に保存しない。なぜなら、 $x = a$ と $x = b$ という端っこから、粒子が逃げ出して行く(あるいは外から粒子が入って来る)からである。この式を微分すると

$$\frac{d}{dt} \int_a^b \psi^*(x, t)\psi(x, t)dx = [J(x, t)]_a^b = J(a, t) - J(b, t)$$

のかたちに直すことができるが、この $J(x, t)$ はすなわち、粒子の存在確率が正方向へどれくらい流れて行くかを表す量である。 $\psi(x, t)$ が (8.7) を満たしている場合について、 $J(x, t)$ を求めよ。

第9章 量子力学における演算子

9.1 演算子と物理量

量子力学では、古典力学での物理量に対応するものはなんらかの形で演算子となり、古典力学的な量はその演算子の期待値に対応する。「物理量が演算子になる」と言われると「いったいどういうこと？」と戸惑ってしまう人が多いと思うが、その意味はこういうことである。量子力学では、時間発展する力学変数は波動関数¹であって、観測によって得られる量(古典力学では力学変数だった量)は波動関数から得られる期待値や固有値に対応する。波動関数から期待値なり固有値なり、なんらかの値を取り出すために必要になる操作が今考えている「演算子」なのである。波動関数は空間の各点各点に値があるので、事実上無限の自由度を持っている。その無限の自由度の中から、ある特定の情報($\langle x \rangle$ だとか $\langle p \rangle$ だとか)を引き出すのが「期待値を取る」という演算である。

よって量子力学ではいろんな演算子の性質、関係が大事になる。以下では、量子力学における演算子の性質のうち、特に計算に役立つものを見ていこう。

二つの演算子 A, B が任意の ψ, ϕ に対して

$$\int \psi^* A \phi dx = \int (B \psi)^* \phi dx \quad (9.1)$$

を満たす時、「 B は A のエルミート共役である」と言い²、 $B = A^\dagger$ と記号 \dagger を使って表す。たとえば、微分演算子は(表面項が無視できる場合)

$$\int \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \phi dx = - \int \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi \right)^* \phi dx \quad (9.2)$$

が成立する。つまり、 $\frac{\partial}{\partial x}$ のエルミート共役は $-\frac{\partial}{\partial x}$ である。これを記号では $\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}$ と表す。

エルミートな演算子とは、エルミート共役が自分自身と等しい ($A = A^\dagger$) 演算子である(微分演算子はエルミートではない)。

以下で証明する定理があるので、実数の観測値を持つ物理量に対応する演算子はエルミートでなくてはならない³。

¹なお、正確に言うと「波動関数」というのは量子力学的「状態 (state)」の表示方法の一つであり、実は他にも状態を表現する方法はある。だから『力学変数は量子力学的状態である』とする方が正しい。しかもこれが成立するのはシュレーディンガー描像の場合であって、ハイゼンベルク描像(この講義では扱わない)の場合では演算子の方を力学変数にする。

²「エルミート」はもともとは人名。フランス人数学者でつづりは『Hermite』(フランス語なので H が発音されない)。英米人は『ハーミット』と読んだりするので注意。

³もし古典的に複素数で表されるような量を考えているのなら、それに対応する演算子はエルミートでなくてもよい。ただ、あまりそういう量を使う例はない。

[問い9-1] 演算子がエルミートであれば、その固有値はかならず実数であることを証明せよ。

$\int (A\psi)^* \psi dx = \int \psi^* A\psi dx$ に、固有値方程式 $A\psi = a\psi$ を代入する。もし a が複素数だったらどうなるだろう？

[問い9-2] 演算子がエルミートであれば、その期待値はかならず実数であることを証明せよ。

期待値 $\langle A \rangle = \int \int \psi^* A\psi dx$ の複素共役をとってみればよい。

さてここまでは座標 x や運動量 p の期待値を考えてきた。特に運動量は演算子 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ だと考えることができた。関数 e^{ikx} は

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} = \hbar k e^{ikx} \quad (9.3)$$

という方程式を満たすから、固有値が $\hbar k$ であるような運動量の固有関数である。一般の波動関数は

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \psi(k) e^{ikx} \quad (9.4)$$

のように、運動量の固有関数で展開することができた⁴。展開係数 $\psi(k)$ は、「今考えている状態が運動量 $\hbar k$ を持つ確率振幅」と考えることができる。つまり、この状態の運動量を観測すれば、 $\hbar k$ から $\hbar(k+dk)$ までの間の値が得られる確率が $|\psi(k)|^2 dk$ である。

波動関数がある物理量を表す演算子（今の例の場合は $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ）の固有関数（今の例の場合は e^{ikx} ）で展開した時の展開係数の絶対値の自乗は、その物理量を観測した時にその値が得られる確率に比例する。この考え方を量子力学の確率解釈と言う。この解釈が妥当かどうかは実験でチェックされるべきであるが、今のところはこの解釈を破棄しなくてはならないような実験結果はない。

確率解釈で考えるならば、たとえば最初 $\psi = F_1 e^{ik_1 x} + F_2 e^{ik_2 x} + F_3 e^{ik_3 x}$ という規格化された波動関数があったとして、運動量を精密に観測すれば、

- (a) 運動量 $\hbar k_1$ が測定され、結果として波動関数は $\psi = e^{ik_1 x}$ へと変化（収縮する）。
- (b) 運動量 $\hbar k_2$ が測定され、結果として波動関数は $\psi = e^{ik_2 x}$ へと変化（収縮する）。
- (c) 運動量 $\hbar k_3$ が測定され、結果として波動関数は $\psi = e^{ik_3 x}$ へと変化（収縮する）。

のどれかが起こることになる。そして、これらが起こる確率の比は $|F_1|^2 : |F_2|^2 : |F_3|^2$ である。

同じようなことが、他の物理量に対しても起こる。エネルギーを測定すれば波動関数はエネルギーの固有関数へと収縮するし、角運動量を測定すれば角運動量の固有関数に収縮する⁵。

ある物理量 A があり、それに対応する演算子 \hat{A} があったとする。 \hat{A} の固有関数になっているような波動関数 $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ があるとしよう。すなわち、

$$\hat{A}\psi_1 = a_1\psi_1, \hat{A}\psi_2 = a_2\psi_2, \hat{A}\psi_3 = a_3\psi_3, \dots \quad (9.5)$$

である。この時、

$$\psi = F_1\psi_1 + F_2\psi_2 + F_3\psi_3 + \dots \quad (9.6)$$

⁴念のために書いておくと、昔からの慣習で同じ文字をつかって $\psi(x), \psi(k)$ と書いているが、もちろん、 $\psi(k)$ は「 $\psi(x)$ の x に k を代入したもの」ではない。関数の形は全く違う。

⁵というのはもちろん、理想的な観測が行われた場合であって、実際には観測の後もなおいくつかの固有状態の重なりが残っている可能性も多いにある。

という状態があったとして、この状態で物理量 A の観測を行えば、 $|F_1|^2 : |F_2|^2 : |F_3|^2 : \dots$ という比で、測定値 a_1, a_2, a_3, \dots が得られるのである。そして、測定後の結果はどの測定値が得られたかに対応として、 $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ のどれかになる⁶。したがって、いったん観測値 a を得た後で何度も観測を繰り返すと、以後ずっと同じ観測値 a を得る（もちろん、波動関数が時間変化しなければの話）。つまりある演算子 \hat{A} の固有状態というのは「物理量 A を何度観測しても固有値 a が観測される状態」だと考えることができる。

9.2 エネルギーの期待値と固有関数

たとえばエネルギーの期待値は $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ あるいはハミルトニアン H を ψ^* と ψ の間にはさむことで計算できる（シュレーディンガー方程式があるので、どちらであっても結果は同じ）。

たとえば今ある波動関数を

$$\psi(x, t) = \phi_1(x)e^{-i\omega_1 t} + \phi_2(x)e^{-i\omega_2 t} + \phi_3(x)e^{-i\omega_3 t} + \dots \quad (9.7)$$

のように、各々が ω_i の角振動数を持った波 $e^{-i\omega_i t}$ の重ね合わせで表現したとする。

これらの各項はシュレーディンガー方程式の解になっていて、

$$\begin{aligned} H\phi_i(x)e^{-i\omega_i t} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\phi_i(x)e^{-i\omega_i t}) \\ H\phi_i(x)e^{-i\omega_i t} &= \hbar\omega_i \phi_i(x)e^{-i\omega_i t} \end{aligned} \quad (9.8)$$

という式を満たしている。最後の式は両辺を $e^{-i\omega_i t}$ で割ると

$$H\phi_i = E_i \phi_i \quad (9.9)$$

という形になる（ただし $E_i = \hbar\omega_i$ ）。この形の式は「定常状態のシュレーディンガー方程式」と呼ばれる。この解は、エネルギーが固有値 E で確定している状態を表す。なぜ $e^{-i\omega t}$ のような振動している解なのに、「定常状態」と呼ぶかということ、波動関数が $\psi(x, t) = \phi_i(x)e^{-i\omega_i t}$ という形をしていると、確率密度 $\psi^* \psi$ や、間に (t の微分を含まないような) 演算子 A をはさんだ $\psi^* A \psi$ などの式の中には時間依存性が入らない ($e^{i\omega_i t} \times e^{-i\omega_i t}$ となって消し合う) からである。

我々は波動関数そのものは観測できない。観測して実験と比較することができるのは $\int \psi^* A \psi dx$ のようにして計算される期待値だけである。よって、たとえ波動関数が $\psi(x, t) = \phi(x)e^{-i\omega t}$ のように時間的に変化していても、 $\psi^* A \psi$ と組み合わせた時にこの時間が消えてしまうのであれば、それは時間変化していないのと同じことである。それゆえ、波動関数が $\phi(x)e^{-i\omega t}$ という形で書ける時は「定常状態」なのである。つまり、量子力学においては「定常状態」は「エネルギーの固有状態」と同じ意味になる。

$\psi(x, t) = \phi_1(x)e^{-i\omega_1 t} + \phi_2(x)e^{-i\omega_2 t} + \phi_3(x)e^{-i\omega_3 t} + \dots$ と書けている場合はもちろん定常状態ではない。この式の各項がいろんな振動数で振動するので、 $\psi^* A \psi$ と計算しても時間が消えずに残る。もちろん、我々が普段見る古典力学的な物理現象（つまりほとんどの物理現象）は「定常状態」ではない。

⁶なお、なぜ波動関数が収縮してしまうのかについては、統一した答が出ていない。答が出ていないという意味で量子力学は不完全なのかもしれない。しかし、それは「使えない」ということではない。量子力学はいろんな物理現象を正しく記述できている。

このようにして展開した波動関数の各成分は $\hbar\omega_i$ ずつのエネルギーを持っている (そしてそれは演算子であるハミルトニアン H の固有値でもある)。このようなエネルギー固有値の違う波動関数の重ね合わせに対して、運動量固有値の違う波動関数の重ね合わせの場合と同様の計算ができる。

運動量の場合、波動関数を

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \psi(k) e^{ikx} \quad (9.10)$$

のように分解したとすると、その各成分 e^{ikx} は、 $\hbar k$ ずつの運動量 (演算子 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ の固有値でもある) を持っていて、それぞれの成分の前についている係数 $\psi(k)$ の絶対値の自乗が、運動量が $\hbar k$ になる確率となる。そして波動関数 ψ^* と ψ の間に $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ をはさんで積分することで期待値を計算できた。

エネルギーの場合も同じように、波動関数の間にエネルギーの演算子をはさんで積分する。すなわち

$$\begin{aligned} & \int \psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi dx \\ &= \int (\phi_1^*(x)e^{i\omega_1 t} + \phi_2^*(x)e^{i\omega_2 t} + \dots) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) (\phi_1(x)e^{-i\omega_1 t} + \phi_2(x)e^{-i\omega_2 t} + \dots) dx \\ &= \int (\phi_1^*(x)e^{i\omega_1 t} + \phi_2^*(x)e^{i\omega_2 t} + \dots) (\hbar\omega_1 \phi_1(x)e^{-i\omega_1 t} + \hbar\omega_2 \phi_2(x)e^{-i\omega_2 t} + \dots) dx \\ &= \underbrace{\hbar\omega_1 \int \phi_1^* \phi_1 dx}_{E=\hbar\omega_1 \text{ となる確率}} + \underbrace{\hbar\omega_2 \int \phi_2^* \phi_2 dx}_{E=\hbar\omega_2 \text{ となる確率}} + \underbrace{\hbar\omega_3 \int \phi_3^* \phi_3 dx}_{E=\hbar\omega_3 \text{ となる確率}} + \dots \end{aligned} \quad (9.11)$$

となって、これは期待値の定義通りのものとなる。

最後の行では、運動量同様、 H の固有値が違うものどうしをかけて積分すると0になる (直交する) すなわち、

$$\int \phi_i^* \phi_j dx = 0 \quad (i \neq j \text{ の時}) \quad (9.12)$$

という事実を使って計算を楽にしている。これは運動量やハミルトニアンでなくても、エルミートな演算子であれば成立する (下の問題参照)。波動関数に関する計算を簡単にしてくれるありがたい法則である。

[問い9-3] 演算子 A がエルミートであるとする。 ψ, ϕ が $A\psi = a\psi, A\phi = b\phi (a \neq b)$ のように、異なる固有値を持つ固有関数であった時、

$$\int \psi^* \phi dx = 0$$

となることを証明せよ。

(9.11) の最後の表現を見ると、エネルギーの値である $\hbar\omega_i$ に、エネルギーがその値を取る確率 $\int \psi_i^* \psi_i dx$ をかけ、全ての場合で足し算されている。すなわちエネルギーの期待値を計算したものになっている。ここでも、 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ なり H なりを ψ^* と ψ の間にはさむことでエネルギーの期待値が得られた。

時間依存性が $e^{-i\omega t}$ だけになっているような状態はエネルギーが確定している状態であるが、この場合、確率密度 $\psi^* \psi$ は時間によって変化しなくなってしまう。この事情は運動量の固有状態について考えた時に、 e^{ikx} 一つで表される状態 ($\Delta p = 0$) が、空間に均等に広がってしまい、 $\Delta x = \infty$ にな

ると同様である。この意味で、 $\Delta x \Delta p$ 同様に、 ΔE と Δt の間にも

$$\Delta E \Delta t > h \quad (9.13)$$

という制限 (不確定性関係) がある。なお、右辺の h は厳密な値ではない。

ここで一つ注意。不確定性関係についてはよく「一方を観測しようとするともう一方の観測誤差が大きくなる」という感じの表現が見られる。だから誤解してしまう人が多いのだが、不確定性関係自体は「観測しようとする」という前提があって成立するものではない。誰かが観測するかしないかとは関係なく、一つの状態における Δp と Δx (あるいは ΔE と Δt) の間の関係なのである。後で具体的に示すが、 Δx などの値は x の標準偏差として (観測とは無関係に) 計算される。 Δx は「 ψ がこれぐらいの範囲に広がっている」という意味での数値であって、観測誤差を示しているのではない。もちろん、そのように広がった状態を観測すれば x の観測値は Δx ぐらいの幅をもって広がってしまうのは当然であるから、「観測誤差は最良の実験装置でも Δx ぐらいになる」ということは間違っていない。間違っていないがしかし、ほんとうに大事なものは観測前からある「状態の広がり具合」であることを忘れてはいけない。

$\Delta E \Delta t > h$ の場合も $\Delta x \Delta p > h$ の時と話は同じで、 Δt は波動関数の「ある特定の状態」の時間的広がり、すなわち「この範囲では $\psi^* \psi$ にほとんど変化が見られない」という時間的長さなのだ と解釈すべきである。極端な場合、 $\Delta E = 0$ になっているのは、上にあげた $\psi(x, t) = \phi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$ のような関数になっていて、 $\psi^*(x, t) \psi(x, t) = \phi^*(x) \phi(x)$ となっている。この場合、状態の確率密度には全く変化が見られない。また、 $\int \psi^* x \psi dx$ のように間に x をはさんで積分すれば x の期待値が計算できるが、これもエネルギー固有状態ならば時間によらない。

一方、

$$\psi(x, t) = A_1 \phi_1(x) e^{-i\omega_1 t} + A_2 \phi_2(x) e^{-i\omega_2 t} \quad (9.14)$$

のような、二つの状態の重なり状態を考えて、その状態に対して x の期待値を計算すると

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int \psi^* x \psi dx = \int \left(A_1^* \phi_1^*(x) e^{i\omega_1 t} + A_2^* \phi_2^*(x) e^{i\omega_2 t} \right) x \left(A_1 \phi_1(x) e^{-i\omega_1 t} + A_2 \phi_2(x) e^{-i\omega_2 t} \right) dx \\ &= |A_1|^2 \int \phi_1^*(x) x \phi_1(x) dx + |A_2|^2 \int \phi_2^*(x) x \phi_2(x) dx \\ &\quad + A_1 A_2^* e^{-i(\omega_1 - \omega_2)t} \int \phi_2^*(x) x \phi_1(x) dx + A_1^* A_2 e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} \int \phi_1^*(x) x \phi_2(x) dx \end{aligned} \quad (9.15)$$

となる。今度は t は消えることなく、後ろ 2 項が時間的に変化する部分となる。つまり、これは定常状態ではないのである。

そして、その変化は

$$\omega_1 - \omega_2 = \frac{E_1 - E_2}{\hbar} \quad (9.16)$$

で表される振動数で起こる。一つの E しかない状態 (つまりエネルギー固有状態) は時間的変化がまるでないつまらない世界だが、いろんな E を持つ波を重ね合わせることで、なんらかの時間変化を作ることができるのである。このエネルギーの幅が $\Delta E = E_1 - E_2$ であると考えよう。すると、時間 $\frac{\hbar}{\Delta E}$ たつと確率密度が一回増減する。逆に言えば、これより小さい時間では確率密度はたいして変化しない。そういう意味でなんらかの状態変化が起こるには、 $\frac{\hbar}{\Delta E}$ 程度は待たなくてはならない。

$\Delta t = \frac{\hbar}{\Delta E}$ の範囲内には状態変化がほとんどない (その時間内ならどの時間も同等) のだから、何か実験を行った時、「何かが起こる時刻」はそれぐらいの幅の間のどこで起こるのか予測不可能にな

る(ゆらぎを持つ)だろう。だが、 Δt (時間的拡がり)は観測前からそこにあったのである。そしてその最初からあった不確定性が、 $\Delta E \Delta t > h$ という式を満たすのである。

【以下長い註】この部分は、最初に勉強する時は理解できなくともよい。

相対論では、3次元運動量 p^i とエネルギー E は一つの4元ベクトルにまとまる。いわば、エネルギー(正確には、エネルギー $\div c$)は「運動量の時間成分 p^0 」となってしまう。だから運動量を演算子で表すと $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ であるのに対してエネルギーを演算子で表すと $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ なのである。このようになるのは、波動関数 $\psi \simeq e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}$ の exp の肩が

$$i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t) = \frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et) = \frac{i}{\hbar}p_\mu x^\mu \quad (9.17)$$

と書けることに関連している。最後の式では $p^0 = -p_0 = \frac{E}{c}$ であって、 $x^0 = ct$ であることを使って4次元的に書き直している。

「運動量が $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ なのにエネルギーが $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ と、符号がひっくり返っているのはなぜですか?」という質問をされることもよくあるが、それは結局、上の式の位相部分に現れる組み合わせ

$$p_\mu x^\mu = -p^0 x^0 + p^i x^i = -Et + \vec{p}\cdot\vec{x} \quad (9.18)$$

の時間成分と空間成分の符号の違いにその理由があると思えばよい。それは相対論的4次元内積の符号だとも考えられるし、解析力学で作用が $S = \int (pdx - Hdt)$ と書けたからだと言ってもよい。解析力学、相対論、量子力学は互いにつながっている。

相対論的不変性を考えれば、 $\Delta x \Delta p > h$ なのなら $\Delta E \Delta t > h$ になることも当然のように思えてくる。ただし、今考えているのはシュレーディンガー方程式という「非相対論的な波動方程式」なので、その立場では $\Delta x \Delta p > h$ と $\Delta E \Delta t > h$ はあくまで別の種類の式である。

【長い註終わり】

ハミルトニアン H は今考えている系がどんなものかによって、いろんな形(調和振動子なら $\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$ 、クーロン力なら $\frac{p^2}{2m} - \frac{ke^2}{r}$)を取る。そのようなそれぞれの場合について、固有状態(エネルギーが確定した状態)がどのようなものを求めて行けば、実際に存在する状態はその固有状態の重ね合わせで得られる。よって、エネルギー固有値を求めることが今後行うべき計算の第一歩になる。実は量子力学で行う計算のほとんどはこれである。「量子力学の計算ってエネルギー固有値を求めるだけなのか。なんだつまらない」などと思っはいけない。エネルギー固有値や固有状態が求められれば、それを重ね合わせることでどんな状態の時間発展も計算できてしまうのだから、エネルギー固有値と固有関数を求める作業が完成すれば、完全な時間発展を求めたことと同じである。

古典力学でも量子力学でも、目標の一つは「最初こういう状態にあった。時間が経ったらどんな状態に変化するか」という問題を解くことである。古典力学では粒子の位置 x や運動量 p を与えることでその後の運動を計算できた。量子力学では、ある時刻の波動関数全体を与えて、それ以降の波動関数を計算していくことになる。量子力学の方が計算すべき者が多いことになるが、その計算すべき量を少しでも減らすために役に立つのが重ね合わせとその逆の分解である。最初にあった状態をエネルギーの固有関数に分解する。各々の固有関数は決まった振動数で時間発展する。時間発展した後の固有関数たちをまた重ね合わせれば、もとの波動関数がどう時間発展するかがわかるのである。

エネルギーに限らず、その他の物理量 (たとえば角運動量 $\vec{x} \times \vec{p}$ など、 x や p の組合せで表現できるものでもよい) も同様に ψ^* と ψ の間に対応する演算子をはさみこむという操作で計算できると考えられる。演算子であるということを強調するのに、文字の上にハット (^) を加えて、 $\hat{x}, \hat{p}, \hat{E}$ のように書くことがある。

一般の演算子 A に対して固有関数となる関数を $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ とする (すなわち $A\psi_i = a_i\psi_i$ のようにいろんな固有値 a_1, a_2, \dots を出す関数を考える)。一般の波動関数 ψ は、

$$\psi = f_1\psi_1 + f_2\psi_2 + f_3\psi_3 + \dots \quad (9.19)$$

のように重ね合わせで表現できる。 f_i は、どの波動関数がどの程度まざっているかを示す係数である。各々の波動関数 ψ_i が規格化済みだとすると、 f_i を求めるには以下のようにすればよい。

$$\begin{aligned} \int \psi_i^* \psi dx &= \int \psi_i^* (f_1\psi_1 + f_2\psi_2 + f_3\psi_3 + \dots + f_i\psi_i + \dots) dx \\ &= f_i \int \psi_i^* \psi_i dx = f_i \end{aligned} \quad (9.20)$$

このように、 ψ_i^* をかけて積分することによって、 ψ_i を含む部分以外はゼロになってくれるおかげで、 f_i を計算できる。これはさっき証明した「異なる固有値を持つ固有関数は直交する」という性質のおかげである⁷。この計算法は、波動関数をいろんな形で表示する時に役に立つ (フーリエ変換はまさにこの計算法の一例である)。

この後、いろんな波動関数をいろんな表現で表していくことになる。たとえばエネルギーの固有値を使って分解したり、角運動量の固有値をつかって分解したりする。そして分解した各成分を調べれば、現実にはそこにある波動関数 (一般には各成分が重ね合わされたもの) の運動を知ることができる。

9.3 期待値の意味で成立する古典力学・交換関係

すでに説明したように、量子力学においては力学変数が $\psi(x, t)$ であることに注意しよう。つまり量子力学においては物理法則 (この場合シュレーディンガー方程式) にしたがって時間発展していくものは x や p ではなく ψ である。そして、物体の位置だの運動量だのは、 ψ の状態から導かれる2次のな量である。

つまり、波動関数の中には「座標」「運動量」「エネルギー」など、古典力学ではおなじみの (比較的目で確認しやすい) 物理量が埋め込まれているわけである。古典力学では目で見えていた「座標」が量子力学では「期待値」に置き換えられてしまう。古典力学での「運動」は、「 x や p の値が変わる」ということであったが、量子力学での「運動」は、「 ψ の形が変わることによって x や p の期待値が変わる」ことの結果として表れる。

では、期待値 $\langle x \rangle$ はどんな「運動」をするのだろうか。それを調べるために、時間微分 $\frac{d}{dt} \langle x \rangle$ を計算してみよう。8.2節でもハミルトニアンが $\frac{p^2}{2m} + V(x)$ である場合について計算して、 $m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p \rangle$ という結果を得た。今度はより一般的なハミルトニアンの場合で計算してみる。この時微分されるものは x ではなく、 ψ である (時間の関数になっているのは ψ である)。シュレーディンガー方程式

⁷ただし、同じ固有値を持つ固有関数が複数個あるような場合には少々話が複雑である (いずれ出てくるので注意)。このような場合、「波動関数が (あるいは状態が) 縮退 (degenerate) している」と言う。

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi$ と、シュレーディンガー方程式の複素共役である $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = (H\psi)^*$ を使いつつ計算を行うと、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int \psi^*(x,t)x\psi(x,t)dx &= \int \left(\frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t} x\psi(x,t) + \psi^*(x,t)x \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \right) dx \\ &= \frac{1}{-i\hbar} \int ((H\psi(x,t))^* x\psi(x,t) - \psi^*(x,t)x (H\psi(x,t))) \end{aligned} \quad (9.21)$$

ここで、ハミルトニアンがエルミートであると仮定する。すなわち、

$$\int (H\phi(x,t))^* \psi(x,t)dx = \int \phi^*(x,t)H\psi(x,t)dx \quad (9.22)$$

という性質を持っているとする (ψ, ϕ は任意の関数)。 H は x 微分を含む演算子であるから、これは自明な関係ではない。実際物理的な状況で出てくるハミルトニアンはエルミートになっている。

この仮定を使うと、

$$\frac{d}{dt} \int dx \psi^*(x,t)x\psi(x,t) = \frac{1}{i\hbar} \int dx \psi^*(x,t) (xH - Hx) \psi(x,t) \quad (9.23)$$

という形に式をまとめることができる。ここで気をつけなくてはいけないことは $xH - Hx$ は0ではないということである。なぜなら、たいていの場合、 H は $\frac{p^2}{2m}$ を含んでいるが、 p は $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ のような微分演算子であるからである。

以後の計算で、 $xH - Hx$ のような演算子の順番を変えて引き算したものがよく出てくる。そこでこれを

$$[A, B] = AB - BA \quad (9.24)$$

のように記号で書いて「 A と B の交換関係」(commutation relation または commutator) と呼ぶことにする。 $[A, B] = 0$ の時、すなわち $AB = BA$ の時、「 A と B は交換する」と言う。

まず x と $\frac{\partial}{\partial x}$ の交換関係を計算しよう。任意の関数を f として、

$$\left[x, \frac{\partial}{\partial x} \right] f = x \frac{\partial}{\partial x} f - \frac{\partial}{\partial x} (xf) = x \frac{\partial f}{\partial x} - \left(f + x \frac{\partial f}{\partial x} \right) = -f \quad (9.25)$$

となるので、演算子の部分だけを取り出すと、

$$x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x = -1 \quad (9.26)$$

と書くことができる。時々、この式を見て、「第2項が -1 になるのはわかるが、第1項はどうすればいいのだろうか？」と悩んでいる人がいるので注意しておくが、この式は演算子に対する式なので、後ろに「演算されるもの」が(なんでもいいから)存在していないと意味をなさない。したがって第2項の頭にある微分 $\frac{\partial}{\partial x}$ は、後ろの x だけではなく、「さらにその後ろにある何か」も微分する。その部分が第1項とキャンセルするのである。(9.26) は、(9.25) から本来存在していた f を省略したものであることを忘れてはならない。

交換関係の記号を使って書くと

$$\left[x, \frac{\partial}{\partial x} \right] = -1 \quad (9.27)$$

である。これから

$$[x, p] = [x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}] = i\hbar \quad (9.28)$$

である。この x と p の交換関係は量子力学において非常に重要な式である⁸。

[問い 9-4] 交換関係に関する、以下の公式を証明せよ。

- (a) $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$
 (b) $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$
 (c) $[A, B^n] = nB^{n-1}[A, B]$ (ただし、 $[A, B]$ が B と交換する場合)
 (d) $[A, f(B)] = \frac{df(B)}{dB}[A, B]$ (ただし、 $[A, B]$ が B と交換する場合)

以上のような公式を使うと、量子力学の計算を少しずつ簡単にしながら実行することができる。

上の問題の第 2 問の式 $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$ については、「積 BC と何か (今の場合 A) との交換関係を取るときは、前にあるもの (今の場合 B) を前に出して後ろにあるもの (今の場合 C) を交換関係の中に残したものと、後ろにあるもの (今の場合 C) を後ろに出して前にあるもの (今の場合 B) を前に出したものになる」と覚える。「前にあるものは前に、後ろにあるものは後ろに出す」ことが大事。こうしないと演算子の順番が狂う。

$$\mathbf{B} [A, \mathbf{BC}] \mathbf{C} = \mathbf{B}[A, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \mathbf{C}$$

↙ ↘
↙ ↘
↙ ↘
↙ ↘

前にあるものは前に 後ろにあるものは後ろに

では、 $xH - Hx = [x, H]$ を公式を使って計算していくと、

$$[x, H(x, p)] = [x, p] \frac{\partial H}{\partial p} = i\hbar \frac{\partial H}{\partial p} \quad (9.29)$$

となる。これを代入すれば、

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p} \right\rangle \quad (9.30)$$

が成立する。これは正準方程式のうち一方が、期待値の意味で成立していることを示している。

[問い 9-5] 同様に $\frac{d}{dt} \langle p \rangle$ を計算し、もう一方の正準方程式も期待値の意味で成立していることを示せ。

一般の物理量演算子は、 $A(p, x, t)$ (時間にもあらわに依存している) のように x, p, t の関数として書けるので、この演算子の期待値 $\langle A \rangle$ を考えることができる。その時間微分 $\frac{d}{dt} \langle A(p, x, t) \rangle$ は

$$\frac{d}{dt} \langle A(p, x, t) \rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial t} A(p, x, t) + \frac{1}{i\hbar} [A, H] \right\rangle \quad (9.31)$$

⁸物理の各分野で「もっとも重要な式を選べ」と言われたとする。力学ならニュートンの運動方程式 $\vec{f} = m\vec{a}$ 、電磁気ならマックスウェル方程式、熱力学なら $dU = TdS - PdV$ 、統計力学なら $S = k \log W$ であろうが、量子力学ならば $[x, p] = i\hbar$ がもっとも重要な式といえる。この式の重要性は、量子力学をある程度勉強していくうちに実感していくだろう。

となる。

このようにして、古典力学の内容は（期待値の関係として）シュレーディンガー方程式の中に含まれている。よって波束の広がりが小さいという近似を考えれば量子力学と古典力学は一致する。水素原子の問題などでは量子力学は古典力学では出せない結果を出す。つまり、量子力学は古典力学を全て含みつつ、より広い範囲に適用できるのである。

9.4 演習問題

[演習問題 9-1] ある演算子 A (微分などを含んでいてよい) が任意の関数 ψ, ϕ に対し、

$$\int \psi^*(A\phi)dx = \int (A\psi)^*\phi dx$$

を満たすとき、エルミートな演算子であるという。

(a) 位置座標 x

(b) 運動量 $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

(c) ハミルトニアン $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$

がエルミートであることを証明せよ。ただし、 x の積分範囲は (a, b) として、 $x = a$ と $x = b$ では ψ, ϕ やその微分は 0 になっているという境界条件で考えよ。

[演習問題 9-2] 交換関係に関する、以下の公式を証明せよ。

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \quad (\text{この式を Jacobi の恒等式と呼ぶ})$$

[演習問題 9-3] (9.31) を証明せよ。

[演習問題 9-4] $AB + BA$ を $\{A, B\}$ と書いて「反交換関係」と呼ぶ。反交換関係についての以下の公式を証明せよ。

(a) $\{A, B + C\} = \{A, B\} + \{A, C\}$

(b) $\{A, BC\} = -B\{A, C\} + \{A, B\}C$

(c) $[A, BC] = -B\{A, C\} + \{A, B\}C$

[演習問題 9-5] 古典力学では、エネルギーの原点は任意であって、 $E \rightarrow E + E_0$ のようにエネルギーを定数だけずらしても物理的内容は変わらない。しかし、波動関数の場合、エネルギーが変われば振動数が変わってしまう。エネルギーをずらす前の波動関数を $\psi(x, t)$ とすると、ずらした後の波動関数は $e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t}\psi(x, t)$ となるだろう。量子力学でこのような波動関数の置き換えを行うと、物理的内容は変わるだろうか、変わらないだろうか。

第10章 波束とデルタ関数

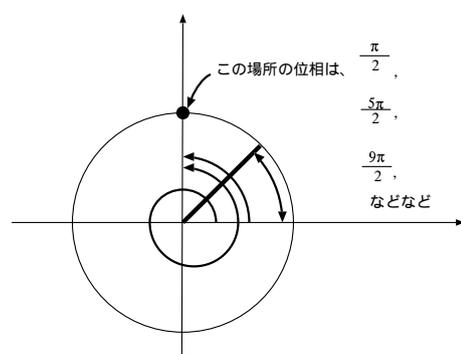
10.1 波束

この講義の中でもずっと、「物質には波動と粒子の二重性がある」ということを言ってきた。量子力学では全ての物体の運動を波動関数で表す。では、我々が「ここに粒子が存在している」というふうに認識している状態は、どのような波動関数に対応しているのだろうか？

特定の波長を持った波（「単色波」¹）を考えると、式で表現すれば e^{ikx} （これは波数 k 、波長 $\frac{2\pi}{k}$ の波）となるが、この波は空間のどこでも同じ振幅を持っている。振幅の自乗が粒子の存在確率だから、 e^{ikx} という波動関数で表される粒子は、空間のどこでも（宇宙の端から端まで！）同じ確率で存在していることになる。そんなことは有りそうにない。 e^{ikx} は、我々がとても出会うことがなさそうな波動関数なのである。

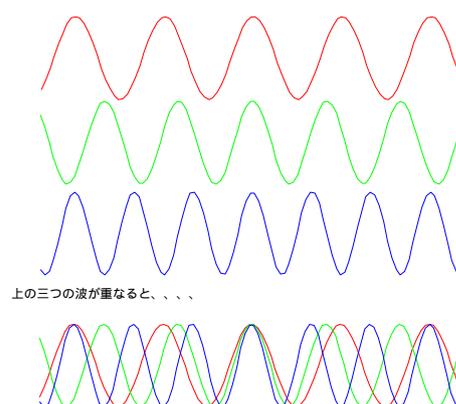
では「特定の場所にのみ存在する（局在する）波」はどのようなものかということ、いろんな波長を持った波が重なったものと考えることができる。右の図のように、いろんな波長の波を、ある場所に波の「山」が集中するように重ね合わせると、結果としてその場所が大きくもりあがった「波の塊」ができる。

このように波の重なりによってできた「波の塊」が我々が「局在する粒子」として感知する波動関数であろうと考えられる。この「波の塊」を波束 (wave packet) と呼ぶ。

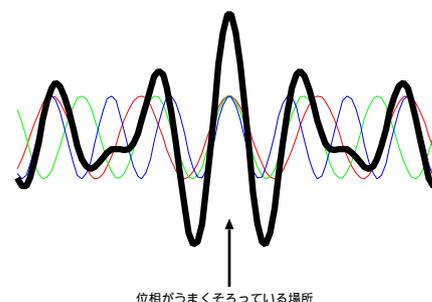


波束はどのように進行するであろうか？—今、単色波の足し算で波束を作ったわけであるが、この一個一個の単色波が同じ速度で進むなら、波束もその形を保ったまま、単色波と同じ速度で進む。しかし、各々の単色波の速度が違えば、波束は形を変えながら進むことになる。

なお、ここでは抽象的に「山」と表現したのは、 e^{ikx} という関数で $kx = \frac{\pi}{2} + 2n\pi$ (n は整数) と表現できるところのこと。逆に「谷」は $kx = -\frac{\pi}{2} + 2n\pi$ である。波が強め合う場合は、左のような複素平面上で同じ方向を向いている関数どうしが足し合わされ



合成波は



¹ 「特定の波長の波」ということは光で考えると「特定の色」なので、光でない場合でも「単色」という言葉を使って表現する。

た状態である。「複素平面上で同じ方向を向いている」ことを「位相がそろっている」と表現する。

以下で、時間が経つと波動関数がどのように変化していくかを考え、波束の運動を考える。先に答を述べておくと、「一個一個の単色波の速度と、その集合体である波束の速度は一致しない」のである。

10.2 波の群速度と位相速度

10.2.1 単色波の位相速度

この節では波の進行を考えるが、まず単色波（1種類の波長の波しか入っていない場合、つまり e^{ikx} ）について考えよう。今、波数（定義は $\frac{2\pi}{\text{波長}}$ ）が k で、角振動数（ $2\pi \times$ 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。

この式の形から、時間が Δt 増加すると位相（ $e^{i\theta}$ の θ の部分）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、 $\frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\omega}{k}$ である。

すなわち、波の「同位相の点」は速度

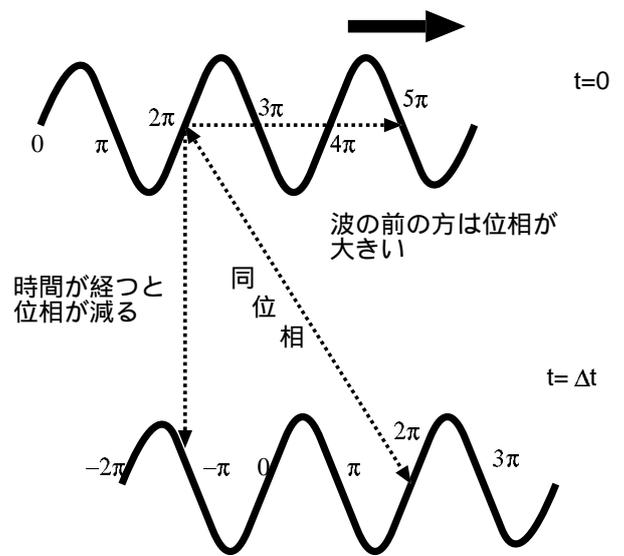
位相速度の公式

$$v_p = \frac{\omega}{k} \tag{10.1}$$

で移動することになる。 v_p は「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（あるいは「粒子」）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、波の「塊」になっていない。つまり単色波の速度を考えても、波の塊の速度はわからない。いろんな波長の波（いろんな k の波）を足し合わせて「塊」を作ってその速度を考えなくてはならない。

波長 $\lambda (= \frac{2\pi}{k})$ と振動数 $\nu (= \frac{\omega}{2\pi})$ を使って書くと、 $v_p = \lambda\nu$ となる。これは「一個の波の長さが λ で、これが単位時間に ν 個通り過ぎる。すると波が単位時間に $\lambda\nu$ だけ進行する」というふうに考えるとわかりやすい式である。

なお、位相速度が $\frac{\omega}{k}$ であることをなっとくするために、もう一つの考え方を示しておく。まず時刻 $t = 0$ で波動関数 e^{ikx} という形をしていたとしよう。 t だけ時間が経過すると、波が $v_p t$ だけ動くことになる。それは数学的には「関数を $v_p t$ だけ平行移動させる」ということである。関数 $f(x)$ を a だけ平行移動させると、関数 $f(x - a)$ になる（よくある間違いだが、 $f(x + a)$ ではない！）。つまり e^{ikx} は $e^{ik(x-v_p t)} = e^{ikx-ikv_p t}$ に変化する。この式と $e^{ikx-i\omega t}$ を比較すれば、 $v_p = \frac{\omega}{k}$ が確認できる。



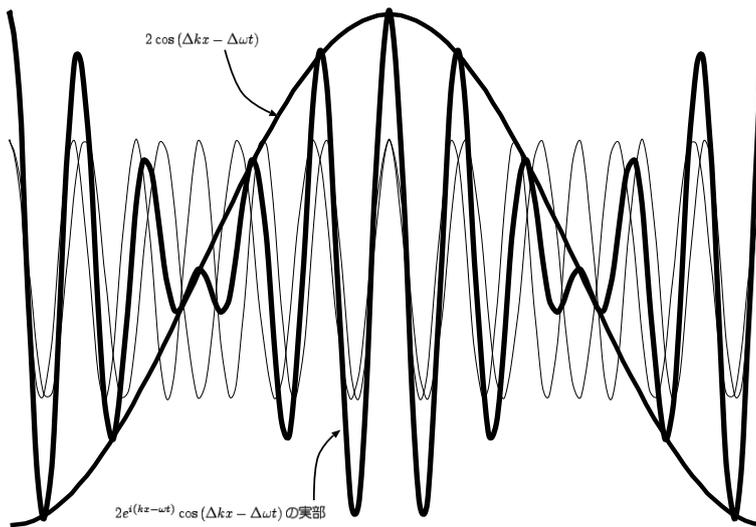
10.2.2 二つの波の重ね合わせ

次に単色波ではない簡単な例として、2種類の波長の波の和を考えよう。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 $\omega + \Delta\omega$ の二つの波を重ねてみる。この二つの波を同じ振幅として足すと、

$$\begin{aligned} e^{i((k-\Delta k)x - (\omega - \Delta\omega)t)} + e^{i((k+\Delta k)x - (\omega + \Delta\omega)t)} &= e^{i(kx - \omega t)} (e^{-i(\Delta kx - \Delta\omega t)} + e^{i(\Delta kx - \Delta\omega t)}) \\ &= 2e^{i(kx - \omega t)} \cos(\Delta kx - \Delta\omega t) \end{aligned} \tag{10.2}$$

となる。ここで、 $\frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2} = \cos \theta$ を使った。

この結果は二つの波 $2e^{i(kx - \omega t)}$ と $\cos(\Delta kx - \Delta\omega t)$ のかけ算である。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。

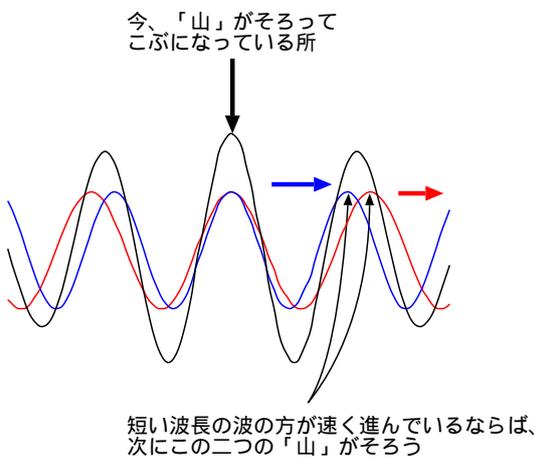


この波はいわば、平面波 $e^{i(kx - \omega t)}$ の振幅が $2 \cos(\Delta kx - \Delta\omega t)$ に応じて変化していると考えられることもできる。そしてこの振幅の変化は $\frac{\pi}{\Delta k}$ の幅の「波のこぶ」を作る。そのこぶは $\frac{\Delta\omega}{\Delta k}$ という速度で進行していくことになる。このこぶの速さは、位相速度 v_p とは一般には一致しない。

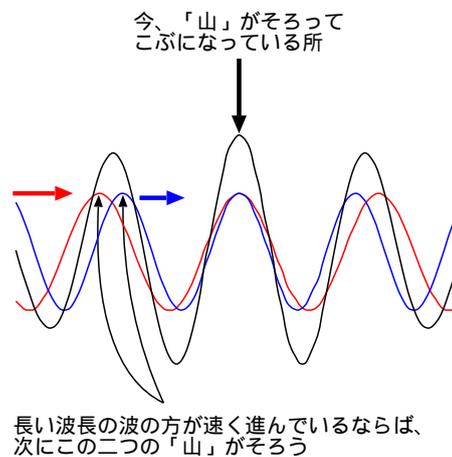
この「波のこぶ」の進む速度を v_g と書こう。 v_g の事は、「波の塊（グループ）の速度」という意味で、群速度 (group velocity) と呼ぶ。

今、二つの単色波を足したわけであるが、それぞれの位相速度は $\frac{\omega - \Delta\omega}{k - \Delta k}$ と $\frac{\omega + \Delta\omega}{k + \Delta k}$ である。この二つの位相速度が違う場合、群速度はどちらとも一致しない。

波の進行方向



位相速度より群速度の方が速い場合



位相速度より群速度の方が遅い場合

群速度と位相速度が違ってくる理由は、上の図を見るとわかる。まず、今「こぶ」になっているところ、つまり山と山が重なって高い山が出現している場所を考えよう。二つの単色波の位相速度は違っているから、次には違う場所で山と山が重なることになる。

波長の短い波の方が位相速度が速い場合（これはつまり、 k が大きいほど位相速度が速い場合）、次に重なる山は今重なっている山よりも前（図の右）にある。ということは、単色波が動くよりも速く、波のこぶ部分が動くことになる。つまり群速度の方が位相速度より速い。

逆に波長の長い波の方が位相速度が速い場合は、次に重なる山は今重なっている山よりも後ろであり、群速度は位相速度より遅くなる。

10.2.3 たくさんの波の重ね合わせと群速度

もう少し一般的に、二つ以上のたくさんの波が重なって波束を作っている場合を考えよう。ある波の塊が

$$\int dk f(k) e^{ikx - i\omega(k)t} \quad (10.3)$$

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。 ω と k の関係を「分散関係 (dispersion relation)」と呼ぶ²。

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

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \frac{d\omega}{dk}(k - k_0) + \dots \quad (10.4)$$

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 (10.3) に代入すると、

$$e^{ik_0x - i\omega(k_0)t} \underbrace{\int dk f(k) e^{i(k-k_0)x - i\frac{d\omega}{dk}(k-k_0)t}}_{x - \frac{d\omega}{dk}t \text{ の関数}} \quad (10.5)$$

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

$$e^{ik_0x - i\omega(k_0)t} F(x - \frac{d\omega}{dk}t) \quad (10.6)$$

と書ける。さっきやった二つの波の足し算の式で言うと、 $2 \cos(\Delta kx - \Delta\omega t)$ に対応する部分が $F(x - \frac{d\omega}{dk}t)$ である。

つまり、今考えた重ね合わされた波は、場所によって違う振幅 ($F(x - \frac{d\omega}{dk}t)$) を持っている、 $e^{ik_0x - i\omega(k_0)t}$ で表される波であると近似して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

²なぜ「分散」関係なのかというと、関数 $\omega(k)$ の形によって、進行していく波がどう変形するかが決まるからである（この変形は、広がることが多い）。後で出てくる「波動関数の分散」などの「分散」とはまた別もの。

群速度の公式

$$v_g = \frac{d\omega(k)}{dk} \tag{10.7}$$

という速度をもって移動していることになる。 $\omega(k) = ck$ という単純な比例関係の時は、群速度と位相速度も c となって一致し、波の形は進行しても変化しない(こうなる例は、真空中の光)。

古典力学と量子力学の対応を考えた時に、「波動関数の位相が極値を取るときが古典的運動である」と考えたが、群速度を考える時も同様にして考えることができる。波の位相が $\varphi = kx - \omega(k)t$ だとする。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。よって位相 φ を k で微分して 0 になる点では「位相変化が 0 になって、波が強め合っている点」だと考えることができる。この条件から、群速度を求めても同じ結果が出る。

自由なド・ブローイ波の場合、 $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ 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

$$v_p = \frac{\frac{\hbar k^2}{2m}}{k} = \frac{\hbar k}{2m} \tag{10.8}$$

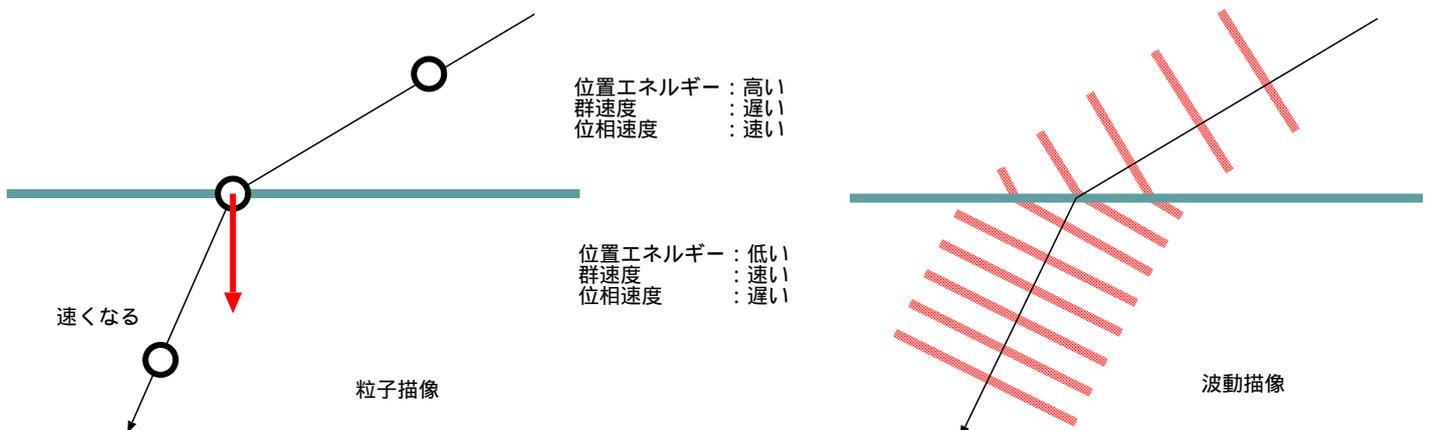
であり、群速度は

$$v_g = \frac{d}{dk} \left(\frac{\hbar k^2}{2m} \right) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{h}{m\lambda} \tag{10.9}$$

である。つまり、 $v_g = 2v_p$ である。群速度の方が位相速度より速くなったが、すでに述べたように、これは波数 k が大きいほど(波長が短いほど)位相速度が速くなる時の特徴である。

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。

落体の運動を量子力学的に考えると物体が落ちていくほど波長が短くなる(=運動量が大きくなる)ことによって屈折が起こると考えることができた。この時、波長が縮むと位相速度 $v_p = \frac{\omega}{k} = \lambda\nu$ は遅くなる。しかし、群速度の方は古典的な速度と同様、速くなっていく。



[問い10-1]

落体の問題は解くのがたいへんなので、位置エネルギーが不連続に変化する場所で、位相速度と群速度の変化を考えよう。

図の上側では角振動数 ω と波数 k の間に、

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (10.10)$$

という関係式が成立しているとしよう。一方、下側では、

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} - V \quad (10.11)$$

という式が成立するだろう。上下で波はつながっているのに、 ω は等しい。波数は $k < K$ で違う)。このような場合の位相速度と群速度をそれぞれ計算し、上下どちらの場合が大きくなるかを考えよ。

10.3 もっとも極端な局在—デルタ関数

粒子を局在させるためには、たくさんの波を重ね合わせる必要があった。この節では、もっとも極端な局在状態—つまり、粒子はある一点にのみ存在し、そこ以外の場所（ほんの少し離れても）存在確率が0になるような状態—を考えよう。

この場合の確率密度 $\psi^*\psi$ はデルタ関数（「ディラック（Dirac）のデルタ関数」とも呼ぶ）で表現される。

— デルタ関数の定義 —

デルタ関数とは、任意の関数 $f(x)$ とかけて積分することにより、

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)\delta(x)dx = \begin{cases} f(0) & (x_1 < 0 < x_2 \text{ の時}) \\ -f(0) & (x_2 < 0 < x_1 \text{ の時}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (10.12)$$

となるような関数である。

単純に考えると「 $x = 0$ 以外では0になっていて、 $x = 0$ でだけ無限大の高さを持っているが、積分すると1になるような関数」ということになる³。よって、積分範囲の中に $x = 0$ が入ってなければ結果は0になる。また、逆方向の積分の時には符号がひっくり返る。

デルタ関数にはいくつかの表現がある。もっとも単純な表現は

— 階段関数によるデルタ関数の表現 —

$$\delta(x) = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{\theta(x + \Delta) - \theta(x - \Delta)}{2\Delta} = \frac{d\theta(x)}{dx} \quad (10.13)$$

である。ただし $\theta(x)$ は階段関数と呼ばれ、その定義は

³デルタ関数 $\delta(x)$ は、クロネッカーデルタ δ_{ij} の連続変数バージョンであると考えても良いだろう。

階段関数の定義

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (10.14)$$

である。

この関数のグラフは図のようになるので、 $\Delta \rightarrow 0$ では $x = 0$ でのみ (無限大の) 値を持ち、0 を含む範囲で積分すれば答えは 1 である (グラフの四角形の面積を計算することになるから)。任意の関数 $f(x)$ をかけてから積分すれば $f(0)$ が出てくることも確かめることができる (ただし、それが成立するためには、 $\lim_{x \rightarrow 0} f(x)$ が有限で確定した値を持たなくてはだめ)。

デルタ関数は「関数」という名前がついているものの、本来の意味での関数とは言い難く、何かと積分されて始めてちゃんとした数学的意味があるものである。そういう意味で「関数」とは呼びがたいものなので、「超関数」⁴と呼ぶ。

デルタ関数を平行移動した $\delta(x - a)$ に対しては、

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x) \delta(x - a) dx = \begin{cases} f(a) & (x_1 < a < x_2 \text{ の時}) \\ -f(a) & (x_2 < a < x_1 \text{ の時}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (10.15)$$

が成立することに注意しよう。他にも

デルタ関数の性質

- (a) $\delta(-x) = \delta(x)$
- (b) $\delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x)$ (c は定数)
- (c) $\delta((x-a)(x-b)) = \frac{1}{|a-b|} (\delta(x-a) + \delta(x-b))$

のような性質がある。これらの性質は、両辺に任意の関数 $f(x)$ をかけて積分したとして、どちらも同じ結果になるということを使えば証明できる。

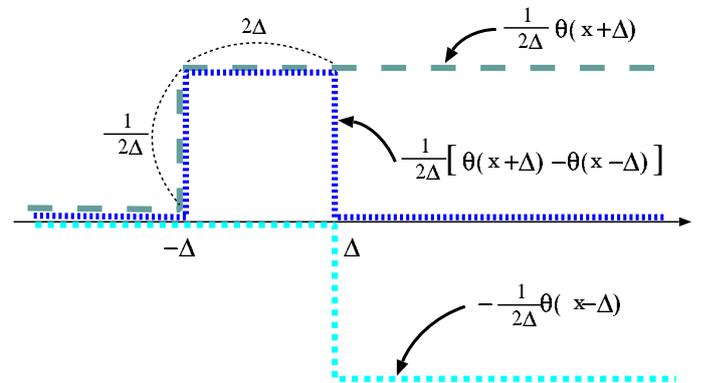
[問い 10-2] 上のデルタ関数の性質のうち、(a) と (b) を証明せよ。

量子力学でよく使われるデルタ関数の表現は

フーリエ変換によるデルタ関数の表現

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk = \delta(x) \quad (10.16)$$

⁴英語では distribution で、「分散」と区別がつかなくなるが、もちろん意味は違う。



である(これ以外にもデルタ関数の表現方法はたくさんある!)

この関数は、 e^{ikx} という単色波を、いろんな波数について足し算していった結果である。その結果、いろんな位相の波を足し算することになるので、ほとんどの場所で答は0となる。ただし唯一、 $x=0$ でだけは k の値に関係なく e^{ikx} の位相が0である。この点に関してだけは無限個の波が同位相で足されることになり、結果として発散する。具体的証明については演習問題10-4を参照せよ。

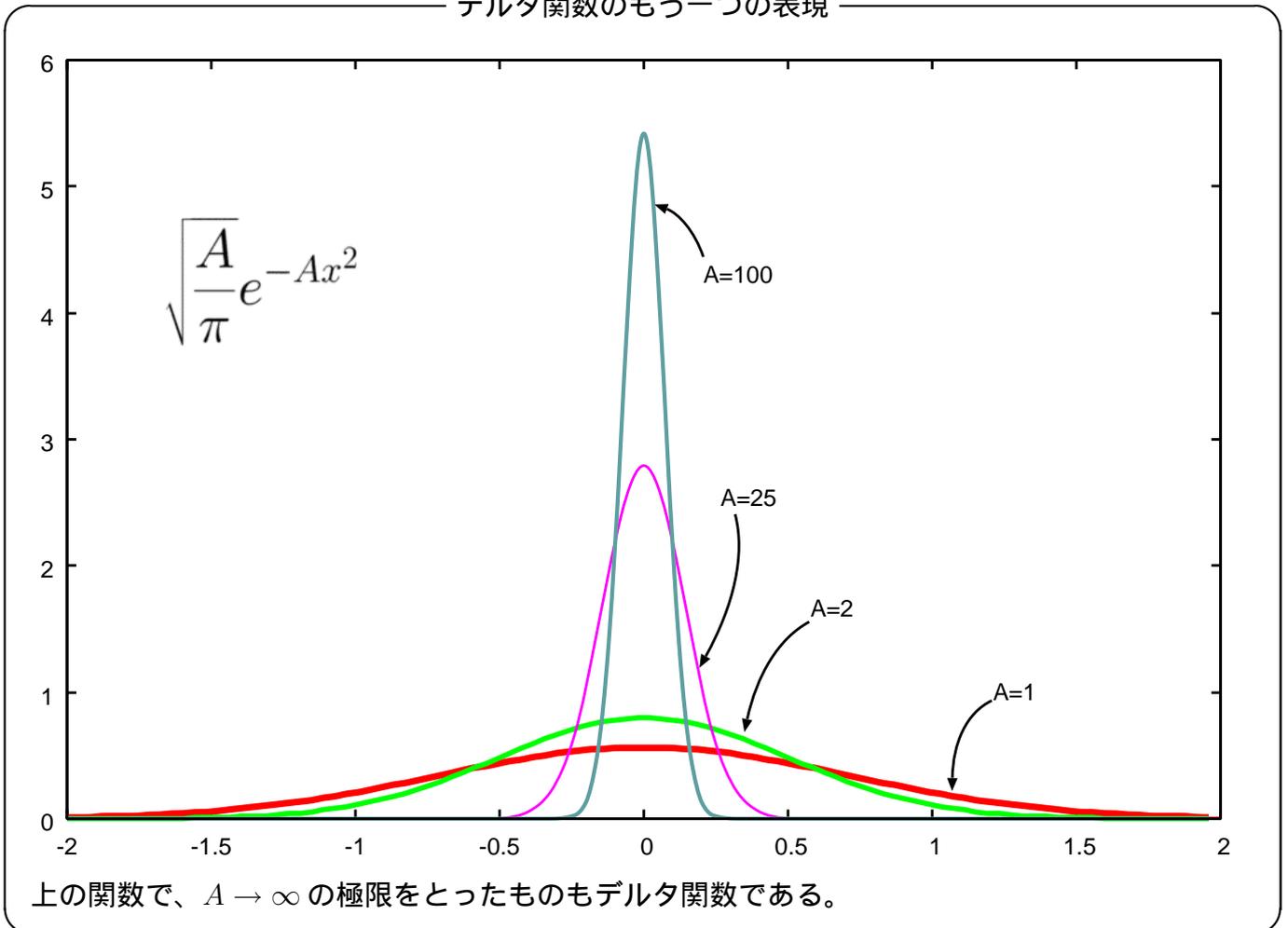
波動関数が

$$\psi(x) = \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \quad (10.17)$$

のようになっているとする⁵と、これはすなわちある一点 $x=0$ に波動関数が集中した状態であるから、 $\Delta x=0$ である。そのかわり、 k が $-\infty$ から ∞ までの全ての値を、同じ係数で積分されているということは、 $p = \hbar k$ が全く決定できないということになるので、 $\Delta p = \infty$ になっている。

逆に $\Delta p=0$ になるのは p の固有状態である $\psi(x) = e^{ikx}$ の時であるが、この時は $\psi^* \psi = 1$ という定数になって、粒子がどこにいるのか全くわからず、 $\Delta x = \infty$ である。このように、不確定性関係は波の性質と深く結びついている。

デルタ関数のもう一つの表現



⁵実はこれでは規格化されていないが、それについては後で述べる。

10.4 演習問題

[演習問題 10-1] 相対論的粒子の場合、エネルギーと運動量の関係は $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ である。 $E = \hbar\omega, p = \hbar k$ はこの場合でも成立するので、 ω と k の関係は $\hbar\omega = \sqrt{\hbar^2 k^2 c^2 + m^2 c^4}$ である。この場合の位相速度 v_p と群速度 v_g を波数 k の関数として求め、 $v_p v_g = c^2$ であることを確認せよ。 v_p と v_g のうち一方は光速を超えることになるが、それはどちらか。これは物理的に許される結果だろうか？

[演習問題 10-2] デルタ関数の微分 $\frac{d}{dx}\delta(x)$ をどう定義すればよいかを考えよう。そもそもデルタ関数も何か関数をかけて積分しないと定義できなかった。ので、 $\int f(x) \frac{d}{dx}\delta(x) dx$ のような量を考えなくてはならない。部分積分ができるとすれば、

$$\int_a^b f(x) \frac{d}{dx}\delta(x) dx = [f(x)\delta(x)]_a^b - \int_a^b \frac{df}{dx}(x)\delta(x) dx$$

となる。これから、 $\int f(x) \frac{d}{dx}\delta(x) dx$ を求めよ。

[演習問題 10-3] デルタ関数に関する公式

$$\delta(f(x)) = \frac{1}{|f'(x)|} \delta(x - x_0)$$

を証明せよ。ただし、 x_0 は $f(x) = 0$ となる点で、今考える積分範囲ではこの一点しかないものとする。また、これを使って「デルタ関数の性質」の (c) を証明せよ。

[演習問題 10-4] (10.13) と (10.16) が同じ意味を持つことを、以下の手順で示せ。

(a) (10.13) の極限 $\Delta \rightarrow 0$ をとらずに、フーリエ変換 $F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$ する。

(b) フーリエ変換の結果の、 $\Delta \rightarrow 0$ の極限をとる。

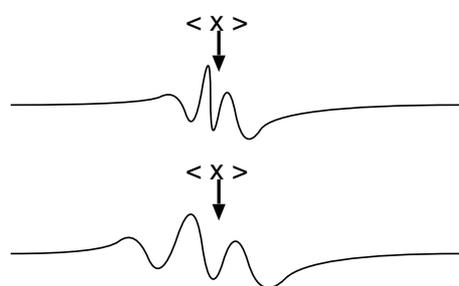
(c) 逆フーリエ変換 $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} dk$ で戻す。

第11章 分散と不確定性関係

前章の最後で、波を局在させるには波数（運動量）の違うたくさんの波を重ね合わせなければいけないことを述べ、それが不確定性関係と関連する、ということを書いた。この章ではより具体的に、波の局在と不確定性関係の間の関係を述べよう。そのためにまず、前に考えた時にはあいまいに定義していた $\Delta x, \Delta p$ を明確に定義するところから始める。

11.1 分散と標準偏差

さてここまでで、波動関数あるいは存在確率は、座標の期待値 $\langle x \rangle$ の回りに広がって存在することを述べてきた。



左の図のように、おなじ $\langle x \rangle$ を持っていても、拡がりかたが全然違う波動関数もある。このような波動関数の拡がりの目安となる数字を計算する方法を考えよう。

このような目安が必要になるのは量子力学に限ったことではない。たとえば、

97, 95, 101, 103, 99, 105, 103, 98, 101, 98

という数列も、

82, 98, 125, 76, 131, 110, 87, 82, 103, 106

という数列も、平均値を取るとどちらも 100 になるが、後者の方が「ばらつきが大きいなあ」と感じるであろう。そのようなばらつきの違いを数字で表しておきたいのである。

そこでまず、ある値 x と平均値 $\langle x \rangle$ とのずれ $(x - \langle x \rangle)$ を考える。しかし、単純に $x - \langle x \rangle$ の平均を取ると 0 になってしまう。

平均値からのずれはプラスとマイナスが均等に表れるので足し算するとゼロになるのは当然であるし、

$$\langle x - \langle x \rangle \rangle = \langle x \rangle - \langle x \rangle = 0 \quad (11.1)$$

という計算をしてみても、これがゼロになるのは自明である。そこでずれを自乗して（プラスになるようにして）から平均をとる。つまり、下の表のような計算をする。

まず、（ずれ）そのものではなく、（ずれ）² の平均の大きさでばらつきの度合いを表すことにする。これが「分散（distribution）」¹で、式で書くなれば、 $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$ となる。つまり、「 x と、その期待値 $\langle x \rangle$ の差を自乗して、その期待値をとったもの」である。

¹位相速度と群速度の話で出てきた分散関係の分散とは別。あっちの分散は dispersion。

結果を表にすると、

											平均値
値	97	95	101	103	99	105	103	98	101	98	100
ずれ	-3	-5	+1	+3	-1	+5	+3	-2	+1	-2	0
(ずれ) ²	9	25	1	9	1	25	9	4	1	4	8.8

のようになる。分散は 8.8 ということになる。

「ばらつき具合の目安にする」という条件だけならば絶対値 $|x - \langle x \rangle|$ の平均でもよいし、自乗でなく 4 乗にしてもよさそうである。しかし計算する時は自乗平均が一番楽であるし、昔から使われているので、この計算をする。分散を計算するには、

分散の計算式

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (11.2)$$

という計算をした方が簡単にできることもある。

なお、分散の平方根を標準偏差 (standard deviation) と言う (さっきの例の場合、 $\sqrt{8.8} \simeq 2.966$)。標準偏差は x と同じ次元になり、 x の拡がり具合と直接結び付いた量となる²。量子力学の世界では分散を $(\Delta x)^2$ と書いて、標準偏差にあたる Δx を x の不確定性 (uncertainty) を表す数字として使う³。実験などの結果を整理するときには値の広がり具合を示すときにも標準偏差がよく使われる。

期待値 ($\langle x \rangle$) や分散 ($\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$ または $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$) あるいはその平方根である Δx は、波動関数がかんでいる情報のうち、ほんの一部分にすぎない。古典力学においては、位置 x と運動量 p がわかり、運動方程式を知っていればその系について全てを予言することができた。しかし量子力学では $\langle x \rangle$ や $\langle p \rangle$ がわかっただけでは、全体がわかっただけとは言えない。しかも観測できるのは固有値およびその平均としての期待値だけ⁴であって、波動関数 ψ そのものは我々には見えない。つまり、我々が「見ている」世界というのはその裏に隠れている波動関数というものの、ほんの一部に過ぎないのである。「物理量に対応する演算子をもってきて、その期待値を取る」という計算は、波動関数という非常にたくさんの情報を含むものの中の一部の情報を引き出す計算であるということを心にとどめておくべきである。

さて、ここで、

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\delta}} & a < x < a + \delta \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \quad \begin{array}{c} |\psi|^2 \\ \text{---} \\ \text{a} \quad \text{a} + \delta \end{array} \quad (11.3)$$

²受験で悪名高い偏差値というのは、平均 (期待値) を偏差値 50 と定め、平均点から標準偏差分だけ外れたら偏差値が 10 違う、というふうに決めた数字。平均点が 72 点で標準偏差が 15 という分布があったとすると、87 点取った人が偏差値 60、57 点取った人は偏差値 40 ということになる。平均点と同じだったとしても、標準偏差が小さい分布の時のほうが「平均より 10 点だけ高得点を取る」ことの価値は大きい。それを示するのが偏差値の役割。

³不確定性関係の話をする時、特に厳密な定義を与えずに $\Delta x, \Delta p$ を用いたが、厳密には分散で定義するべきであった。

⁴実際に「観測」を行う時を考えると、我々はある粒子の位置だの座標だのを、また別の粒子に対する反応で測っている (たとえば、粒子の運動量を知るには別の粒子にぶつかった時にどれだけその粒子を跳ね飛ばすかで測る)。厳密な意味では、固有値や期待値そのものさえ、観測しているとは言えない。

のような単純な矩形波の場合で分散や標準偏差を計算しておく、

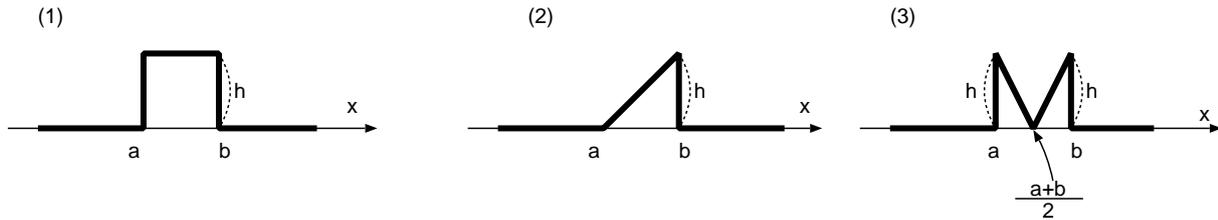
$$\int dx \psi^* x^2 \psi = \frac{1}{\delta} \left[\frac{x^3}{3} \right]_a^{a+\delta} = \frac{1}{3\delta} \left((a+\delta)^3 - a^3 \right) = \frac{1}{3\delta} (3a^2\delta + 3a\delta^2 + \delta^3) = a^2 + a\delta + \frac{\delta^2}{3} \quad (11.4)$$

となり、分散はこれから $(\langle x \rangle)^2 = \left(a + \frac{\delta}{2} \right)^2$ を引くので、

$$\Delta x^2 = a^2 + a\delta + \frac{\delta^2}{3} - \left(a + \frac{\delta}{2} \right)^2 = \frac{\delta^2}{3} - \frac{\delta^2}{4} = \frac{\delta^2}{12} \quad (11.5)$$

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 11-1] 確率密度 $\psi^*\psi$ が以下のようなグラフで表される波動関数がある。それぞれについて、 h の値を規格化条件に合うように決めたのち、期待値と分散を計算せよ。



計算の前に各々の分散の大小関係を予測し、結果と比較すること。

(Hint: 馬鹿正直に計算しようとする、ちょっとたいへんかもしれない。こういう時は、計算に都合がいいような座標系を自分で設定してから計算するのが楽である。たとえば、上の (2) であれば、 $x = a$ が原点になるような座標系 $x' = x - a$ を使って計算するとよい。)

11.2 不確定性関係と交換関係

位置の不確定度 Δx と運動量の不確定度 Δp の間には、 $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ という関係⁵があった。これを期待値および分散という考えかたから導こう。まず、不確定度を標準偏差（分散の平方根）であるとして、

$$(\Delta p)^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \int \psi^* (p - \langle p \rangle)^2 \psi dx \quad (11.6)$$

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \int \psi^* (x - \langle x \rangle)^2 \psi dx \quad (11.7)$$

としよう。これの積が一定値よりも大きいことを証明する。このふたつの量は、

$$\psi_1 = (p - \langle p \rangle)\psi, \quad \psi_2 = (x - \langle x \rangle)\psi \quad (11.8)$$

のような形の波動関数を考えると、

$$(\Delta p)^2 = \int \psi_1^* \psi_1 dx = (\psi_1, \psi_1), \quad (\Delta x)^2 = \int \psi_2^* \psi_2 dx = (\psi_2, \psi_2) \quad (11.9)$$

⁵たいていの場合、 $\Delta x \Delta p > \hbar$ と書いてあるが、正確にはこう。

と書ける。ただし $(\psi, \phi) = \int \psi^* \phi dx$ という、ベクトルの内積の真似をした記法を使って書いている(波動関数はベクトルの的に扱うことができる)。記号 (ψ, ϕ) は「 ψ の複素共役と ϕ をかけてから積分する」という意味であるので、 $(\psi, \phi) = (\phi, \psi)^*$ という性質を持つ。特に $(\phi, \phi) \geq 0$ である(もちろん (ϕ, ϕ) は実数。等号が成立するのは ϕ がいたるところで0である場合のみ)⁶。

波動関数 ψ に対し、 $\sqrt{(\phi, \phi)}$ のことを波動関数のノルム (norm) と呼ぶ。ノルムはベクトルの長さに対応し、規格化されているならば1である。

物理においてよく使われる空間ベクトルに関する公式として

$$(\vec{a} \cdot \vec{a})(\vec{b} \cdot \vec{b}) \geq (\vec{a} \cdot \vec{b})^2 \quad (11.10)$$

というものがある。この式は内積の定義 $\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}||\vec{b}| \cos \theta$ から導けるし、二つのベクトルを任意に実数 α をかけて引いたベクトル $\vec{a} - \alpha \vec{b}$ の長さが、 α の値にかかわらず常に0以上であること(式で書けば $(\vec{a} - \alpha \vec{b})^2 \geq 0$) から証明できる。すぐ後でこの波動関数バージョンの証明をする。

[問い 11-2] (11.10) を、任意のベクトル \vec{a}, \vec{b} と任意の実数 α について、 $(\vec{a} - \alpha \vec{b})^2 \geq 0$ が成立することをを使って証明せよ。

この式の左辺が二つのベクトルの長さの自乗の形になっていることに注意せよ。今求めたい $\Delta p \Delta x$ も自乗すれば、 $(\Delta p)^2 (\Delta x)^2 = (\psi_1, \psi_1)(\psi_2, \psi_2)$ となって、(11.10) の左辺に似た形となる。この式の波動関数バージョンの式を使うと、 $\Delta x \Delta p$ の最小値への手がかりが得られそうである。

そこでまず、以下で (11.10) の波動関数バージョンとなる一般的な式を証明しよう。まずは ψ_1, ψ_2 を一般の波動関数として、 $\psi_1 - \alpha \psi_2$ という波動関数を作る。 α は複素数としよう。自分自身との内積(ノルムの自乗)は0以上になるということから、

$$\begin{aligned} (\psi_1 - \alpha \psi_2, \psi_1 - \alpha \psi_2) &\geq 0 \\ (\psi_1, \psi_1) - \alpha (\psi_1, \psi_2) - \alpha^* (\psi_2, \psi_1) + \alpha \alpha^* (\psi_2, \psi_2) &\geq 0 \end{aligned} \quad (11.11)$$

になる。ここで、内積の定義から $(\psi_1, \alpha \psi_2) = \alpha (\psi_1, \psi_2)$ および $(\alpha \psi_2, \psi_1) = \alpha^* (\psi_2, \psi_1)$ が言えることに注意。すなわち、定数が内積の中から外に出る時は、後ろから出るならそのままだが、前から出るなら複素共役になって出てくる(定義 $(\psi, \phi) = \int \psi^* \phi dx$ をよく見よ)。

ここで $\alpha = k$ として k が実数であるとすれば、

$$(\psi_1, \psi_1) - k ((\psi_1, \psi_2) + (\psi_2, \psi_1)) + k^2 (\psi_2, \psi_2) \geq 0 \quad (11.12)$$

となるし、 $\alpha = ik$ のように α が純虚数だとすれば、

$$(\psi_1, \psi_1) - ik ((\psi_1, \psi_2) - (\psi_2, \psi_1)) + k^2 (\psi_2, \psi_2) \geq 0 \quad (11.13)$$

という式が出る。

どちらの式も、 $ak^2 + bk + c \geq 0$ という k に関する二次不等式の形に書けた。双方とも、 $a = (\psi_2, \psi_2)$ 、 $c = (\psi_1, \psi_1)$ であり、 b は上の式では、 $-((\psi_1, \psi_2) + (\psi_2, \psi_1))$ 、下の式では $-i((\psi_1, \psi_2) - (\psi_2, \psi_1))$ である。係数 a, b, c は全て実数であることに注意せよ。だから実数係数の二次不等式での公式がすべて使える。

⁶ 「場の量子論」と呼ばれる量子力学の無限自由度系バージョンにおいては、自分自身との内積が負になるような場合を考えなくてはならない場合もある。量子力学では $(\phi, \phi) \geq 0$ と考えてよい。

これらの式は k の値によらず成立しなくては行けないが、もし (左辺) = 0 という方程式が二つの実数解を持つと、右のようなグラフが書けることになってしまっ負になってしまう。それゆえこの式は実数解をせいぜい一つしかもたない。その条件は判別式が 0 以下であるということ、すなわち $b^2 - 4ac \leq 0$ である。ゆえに



$$[-((\psi_1, \psi_2) + (\psi_2, \psi_1))]^2 - 4(\psi_1, \psi_1)(\psi_2, \psi_2) \leq 0 \tag{11.14}$$

または

$$[-i((\psi_1, \psi_2) - (\psi_2, \psi_1))]^2 - 4(\psi_1, \psi_1)(\psi_2, \psi_2) \leq 0 \tag{11.15}$$

という式が出る。一見二つの式のようなだが、実は (11.14) で $\psi_2 \rightarrow i\psi_2$ と置き換えを行えば (11.15) が出てくる。以下では (11.15) だけ計算する。

ここまでは一般式だったが、ここで (11.15) の中の ψ_1, ψ_2 に (11.8) で定義された波動関数を代入する。

第二項は $-4(\Delta x)^2(\Delta p)^2$ となる。第一項を計算しよう。

$$\begin{aligned} [-i((\psi_1, \psi_2) - (\psi_2, \psi_1))]^2 &= \left[-i \int \psi^*(p - \langle p \rangle)(x - \langle x \rangle)\psi dx - \int \psi^*(x - \langle x \rangle)(p - \langle p \rangle)\psi dx \right]^2 \\ &= \left[-i \int \psi^* \underbrace{[p - \langle p \rangle, x - \langle x \rangle]}_{=-i\hbar} \psi dx \right]^2 \\ &= \left[-\hbar \int \psi^* \psi dx \right]^2 = \hbar^2 \end{aligned} \tag{11.16}$$

となる。ここで $[p - \langle p \rangle, x - \langle x \rangle]$ を計算する時には、 $\langle x \rangle, \langle p \rangle$ はもはや数であって演算子ではないので、 x や p と交換することを用いた。よって、

$$\hbar^2 - 4(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \leq 0 \tag{11.17}$$

である。これからただちに、

厳密に証明された不確定性関係

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad \text{すなわち} \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{11.18}$$

が導かれる。

[問い 11-3] 導出方法からわかるように、 $\Delta x \Delta p$ が最小値である $\frac{\hbar}{2}$ になる時は、 $\psi_1 = (p - \langle p \rangle)\psi, \psi_2 = (x - \langle x \rangle)\psi$ のような形の波動関数の間に $\psi_1 - ik\psi_2 = 0$ (k はある実数) が成立する時である (この時にのみ $(\psi_1 - ik\psi_2, \psi_1 - ik\psi_2) = 0$ になる)。簡単のために $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$ の場合についてこの式を解いて、 $\Delta x \Delta p$ が最小になる時の波動関数がどんな形になるか、求めよ。この波動関数は、「不確定性が最小になっている」ということで、最小波束 (minimum packet) と呼ばれる。

以上の導出方法からわかるように、別に x, p でなくても、演算子 A, B があって、 $[A, B] = k$ (k は定数) であったならば、 $\Delta A \Delta B \geq \frac{|k|}{2}$ を導くことができる。よって、量子力学において交換しないような二つの物理量の不確定度の両方をゼロにすることはできない。

たとえば二つの演算子を \hat{A}, \hat{B} として、

$$\hat{A}\psi = a\psi, \quad \hat{B}\psi = b\psi \quad (11.19)$$

(a, b は固有値であって、数である) になるような状態 ψ があつたら、この ψ は「演算子 \hat{A} と演算子 \hat{B} の同時固有状態」と言う。

—— 同時固有状態に関する定理 ——

交換しない二つの演算子は同時固有状態を持ってない。

(ただし、以下に示す例外を除く)

というのはたいへん大事な定理である。以下のように証明できる。

$[\hat{A}, \hat{B}] = c$ (c は 0 でない) とする。もし、同時固有状態があつたとすると、

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B}\psi &= \hat{A}(b\psi) = ab\psi \\ \hat{B}\hat{A}\psi &= \hat{B}(a\psi) = ba\psi \end{aligned} \quad (11.20)$$

となる。数であるところの a, b は当然交換するので、この式から $\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{B}\hat{A}\psi$ となってしまうが、これは $[A, B] = c$ に反する (ただし、この証明には抜け道がある。下の問題参照)。

[問い 11-4] $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$ (\hat{C} は演算子) である場合は、 \hat{A}, \hat{B} の両方の固有状態があつてもよい。ただし、その状態は \hat{C} のゼロ固有値状態 (つまり、 $\hat{C}\psi = 0$) でなくてはならないことを証明せよ。

この抜け道の部分を除くと、交換しない演算子に対応する物理量は、同時に確定できないということがわかる。したがってこのような物理量の両方を同時測定するような実験は不可能だということになる。一方を測定して確定させると状態はその物理量に対応する演算子の固有状態となつてしまい、その状態はもう一つの物理量に対応する演算子の固有状態ではないので、大きな不確定性を持つことになるのである。演算子の交換関係が 0 となるか否かは、大きな物理的意味を持っている。

11.3 演習問題

[演習問題 11-1] 波動関数が

$$\psi = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$$

である時、 x の期待値と分散を計算せよ。 x の範囲は $-\infty < x < \infty$ である。

(hint: 公式 $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$)

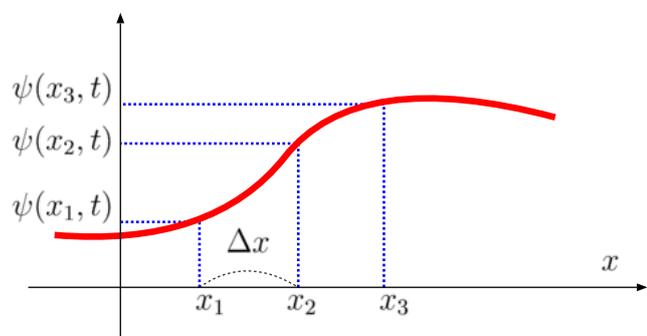
(hint その 2: 上の公式を a で微分することで、 $\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-ax^2}$ がどうなるかを計算することが可能。)

[演習問題 11-2] 演習問題 11-1 の波動関数にたいし、 p の期待値と分散を計算せよ。 Δx と Δp の間にはどんな関係があるか??

第12章 状態ベクトルとしての波動関数

ここまでで何度か、波動関数 ψ を $\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k f_k e^{ikx}$ と「分解」したり、 $(\psi, \phi) = \int \psi^* \phi dx$ のことを「内積」と呼んだり、まるで波動関数 ψ を一個のベクトルであるかのごとく扱ってきた。特に前章では波動関数（ベクトル）の自分自身との内積が0以上であるということを使って不確定性関係を証明した。波動関数をベクトルとみなす効用についてはおぼろげながらも理解できると思う。この章では、もっと具体的に波動関数とベクトルの関連性を見ていこう。このような考え方に慣れると、量子力学の考え方が少しずつ見えやすくなるはずである。

12.1 波動関数をベクトルと見る



波動関数がなぜベクトルと考えられるか¹がわかりにくいならば、関数 $\psi(\vec{x}, t)$ を

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi(x_1, t) \\ \psi(x_2, t) \\ \psi(x_3, t) \\ \vdots \\ \psi(x_N, t) \end{pmatrix} \quad (12.1)$$

のような複素 N 成分を縦に並べたもの（列ベクトル）と考えてやればよい。ただしこの x_1, x_2, \dots, x_N は今考えている空間内の全ての場所各点各点に1から順に番号を振っていったものとする。実際にはもちろん、 $N = \infty$ と考えなくては行けない²。つまり、 ψ は無限個の複素数成分を持つベクトルであると考えてよい。

この列ベクトルに対してエルミート共役であるような行ベクトルは

$$\Psi^\dagger = (\psi^*(x_1, t), \psi^*(x_2, t), \psi^*(x_3, t), \dots, \psi^*(x_N, t)) \quad (12.2)$$

である。3次元空間のベクトル $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$ と $\vec{b} = (b_x, b_y, b_z)$ の内積は

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \begin{pmatrix} a_x & a_y & a_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_x \\ b_y \\ b_z \end{pmatrix} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z \quad (12.3)$$

¹元々数学的には、足し算ができて定数倍できるものはなんでもベクトルである。「向きと大きさがある量」というのは高校生向けのベクトルの定義。

²念の為に補足しておく、実際には空間内の点の数は連続無限個、すなわち数え上げることが不可能な無限大であるので、このように1から順番に数を割り振ることはほんとうはできない。

と書けたことを思い出そう。これを「無限次元のベクトル」である波動関数の場合に拡張する。

この拡張により、 x, y, z の各成分の足し算は、空間の各点各点の波動関数の和に変わる。

この二つの無限次元ベクトルの内積を取って、結果に空間の各点各点の間の距離 Δx をかけてから $N \rightarrow \infty$ の極限を取れば、

$$\Psi^\dagger \Psi \Delta x = \sum_{n=1}^N \psi^*(x_n, t) \psi(x_n, t) \Delta x \rightarrow \int \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx \quad (12.4)$$

という形になる。つまり、いつも計算している $\int \psi^* \psi dx$ は、ベクトルの内積と本質的には同じものなのである³。だから、不確定性関係の証明の計算でも、二つの波動関数 ψ と ϕ の内積を $(\psi, \phi) = \int \psi^* \phi dx$ と内積であるかのように表記しておいたのであった⁴。

なお、なぜ複素共役をとるのが不思議な人もいるかもしれないが、 $\psi = a + ib$ の時、 $\psi^* = a - ib$ であり、 $\psi^* \psi = a^2 + b^2$ となることを考えると、複素数1個 (ψ) を、実数2個のベクトル $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ と考えれば、 $\psi^* \psi = \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ と思って良い。 $\psi^* \psi$ だけで実数2成分ぶんの行列計算をしているのである。

12.2 ベクトルと行列 \leftrightarrow 波動関数と演算子

次に、ベクトルにかけ算される行列について勉強しよう。量子力学ではベクトルが波動関数に“出世”するので、行列が演算子へと出世する。

線型代数を勉強した人は、「エルミート共役」とか「エルミートな演算子」などの言葉が、行列に関する言葉として出てきたことを覚えていると思う。ここで行列の場合のエルミート性の定義と、それからどのような結果が得られるかをまとめておく（そんなにややこしい話ではないから、線型代数を勉強してない人も心配しなくてよい）。量子力学でも行列的思考かたは役に立つからである。

行列におけるエルミート共役とは、行と列を入れ換えた後で各成分の複素共役をとることを意味する。 2×2 行列なら

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} \quad (12.5)$$

である。エルミート共役をとると自分自身にもどる行列を「エルミート行列」と呼ぶ。列ベクトルのエルミート共役は

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}^\dagger = (x^* \ y^*) \quad (12.6)$$

となって、行ベクトルとなる。二つの列ベクトル $X = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ と $U = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ の内積 (U, X) は

$$(U, X) = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = (u^* \ v^*) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = u^* x + v^* y \quad (12.7)$$

³ Δx をかけておく必要があるのは、そうしないと「無限成分の和」が発散するから。 Δx は $N \rightarrow \infty$ で0に向かうので、掛け算は収束し、それは積分と同じものになる。

⁴もう一つ有名な表記方法として、 $\int \psi^* \phi dx = \langle \psi | \phi \rangle$ というのもある。ディラックのブラとケットと言う。

のように、一方のエルミート共役をとってからかけ算したものと定義されている（もしベクトルの成分が実数ならば、これは普通の2次元ベクトルの内積である）。演算子に固有値や固有関数があったように、行列にも固有値や固有ベクトルがある。

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (12.8)$$

となるならば、 α が固有値、 $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ が固有ベクトルである。行列 $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ を A と書くと、

$$(AU)^\dagger = U^\dagger A^\dagger \quad \text{すなわち} \quad \left[\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right]^\dagger = (x^* \ y^*) \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} \quad (12.9)$$

となることに注意しよう。左辺はベクトル U に行列 A をかけるという計算が終了したのちに、結果のエルミート共役を取るという計算を意味している。具体的に計算してみると、左辺は $\begin{pmatrix} ax + by \\ cx + dy \end{pmatrix}^\dagger$ となり、右辺は $(a^*x^* + b^*y^* \quad c^*x^* + d^*y^*)$ となり、等式が成立することが確認できる。

行列がエルミート行列であれば、 $(AU)^\dagger X = U^\dagger AX$ 、すなわち

$$\left[\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right]^\dagger \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = (u^* \ v^*) \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right]^\dagger \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (12.10)$$

が成立する。演算子の場合のエルミート性

$$\int (A\psi)^* \psi dx = \int \psi^* A\psi dx \quad (12.11)$$

と、行列のエルミート性は同様の性質を持つ条件であることがわかる。

[問い 12-1] このように定義されている時、これまで波動関数や演算子について成立していた性質が行列に対しても成り立っていることを確かめることができる。以下のことを証明してみよう。

- (a) 列ベクトルの、自分自身との内積は常に0以上である。
- (b) 任意のベクトル U, X に対して、 $(U, X) = (X, U)^*$ である。
- (c) エルミート行列の固有値は常に実数である。
- (d) エルミート行列に対して固有値が異なる二つのベクトルが直交する。

【以下長い註】 この部分は、最初に勉強する時は理解できなくともよい。

このように行列的に考えると、座標 x の演算子は

$$X = \begin{pmatrix} x_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & x_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & x_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & x_N \end{pmatrix} \quad (12.12)$$

という行列である。こうすれば、

$$X\Psi = \begin{pmatrix} x_1\psi(x_1, t) \\ x_2\psi(x_2, t) \\ \vdots \\ x_N\psi(x_N, t) \end{pmatrix} \quad (12.13)$$

となる。これまでの量子力学の表示において「 ψ に x をかけたら $x\psi$ 」のように計算していたのは、実はこのような行列計算を暗黙のうちに行っていたのであった。

行列表示では、 p すなわち $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ は

$$P = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{-i\hbar}{\Delta x} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & -1 & 1 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & -1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \end{pmatrix} \quad (12.14)$$

となる。ただし、 $\Delta x (= x_2 - x_1 = x_3 - x_2 = \cdots = x_N - x_{N-1})$ は空間を N 等分した一個の長さである。残念なことにこの行列 P はエルミートでないが、連続極限 ($\Delta x \rightarrow 0$) ではエルミートである。

このような行列を (12.1) にかけて、

$$P\Psi = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{-i\hbar}{\Delta x} \begin{pmatrix} \psi(x_2) - \psi(x_1) \\ \psi(x_3) - \psi(x_2) \\ \psi(x_4) - \psi(x_3) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (12.15)$$

となって、これは確かに微分である ($\Delta x \rightarrow 0$ の極限において)。この行列で表した x と p の間にも、交換関係 $[x, p] = i\hbar$ が成立している (実際に計算すると少しだけ $i\hbar \times$ 単位行列とはずれた形で出てくるが、その理由は本来連続的なものである微分を不連続に置き換えたせいである)。

【長い註終わり】

演算子 A の場合でも、 $(A\phi, \psi) = (\phi, A^\dagger\psi)$ 、すなわち、

$$\int (A\phi)^*\psi dx = \int \phi A^\dagger\psi dx \quad (12.16)$$

として A のエルミート共役 A^\dagger を定義できる。エルミートな演算子の場合、 $A^\dagger = A$ である。 $A^\dagger = -A$ となる演算子を反エルミートな演算子と言う。

[問い 12-2] 演算子 A, B の積 AB のエルミート共役 $(AB)^\dagger$ は $B^\dagger A^\dagger$ であることと、行列でもそうであることを証明せよ。

[問い 12-3] エルミートな演算子の交換関係は反エルミートであることを証明せよ。

前に波動関数 $\psi(x, t)$ を運動量の固有状態で分解すること (ということはすなわちフーリエ変換すること) を行ったが、その手順の概略は以下のようなものだった。

運動量演算子の固有関数を求める。運動量演算子は $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ だから、固有関数は $e^{\frac{i}{\hbar} p x}$ であった。

任意の波動関数を運動量の固有状態の和で書く。運動量が離散的である時は

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \left(F_1 e^{\frac{i}{\hbar} p_1 x} + F_2 e^{\frac{i}{\hbar} p_2 x} + F_3 e^{\frac{i}{\hbar} p_3 x} + \dots \right) \quad (12.17)$$

(L は考えている空間の大きさ) であり、連続的であれば、

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(p) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp \quad (12.18)$$

と展開できる。

係数 F_n を求める。こうやって分解された波動関数に前から $e^{-\frac{i}{\hbar} p_n x}$ をかけて積分すれば係数 F_n (あるいは $\psi(p)$) を求めることができた。この積分によって運動量 p_n を持っている成分以外は消えてしまうからである。

運動量の期待値を計算する。任意の運動量の固有状態 $e^{\frac{i}{\hbar} p x}$ の和で書き表された状態に運動量演算子をかけると、

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \left(p_1 F_1 e^{\frac{i}{\hbar} p_1 x} + p_2 F_2 e^{\frac{i}{\hbar} p_2 x} + p_3 F_3 e^{\frac{i}{\hbar} p_3 x} + \dots \right) \quad (12.19)$$

のように、各固有状態の波動関数に対応する固有値をかけたものになる。これにさらに前から ψ^* をかけて積分すると、波動関数の直交性から、答えは

$$p_1 F_1^* F_1 + p_2 F_2^* F_2 + p_3 F_3^* F_3 + \dots \quad (12.20)$$

に比例した形となる。つまり、 $F_n^* F_n$ のように同じ成分どうしの積になっているところ以外は、最終的な答えの中に入ってこない。

このような計算は、行列で見るとどのような計算をしていることになるのかを見ておこう。

行列の固有ベクトルを求める。エルミートな行列 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ に対して

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \lambda_1 \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \lambda_2 \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} \quad (12.21)$$

のように、二つの固有ベクトルが見つかったとする⁵。ここでは $\lambda_1 \neq \lambda_2$ としよう⁶。さらにこの固有ベクトルはともに規格化済みとする。

任意のベクトルを固有ベクトルの和で書く。任意のベクトルは

$$X = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = k_1 \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + k_2 \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} \quad (12.22)$$

のように固有ベクトルに適当な複素数の係数 k_1, k_2 をかけて足し算することで作ることができる。

⁵ 2×2 行列ならば、固有ベクトルは二つしかない。

⁶ $\lambda_1 = \lambda_2$ の時は、この二つのベクトルが直交するようにとるものとする。

係数 k_1 を求める。ベクトルの分解の係数 k_1 は、 $\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}$ の前から $(x_1^* \ y_1^*)$ をかけることで求めることができる。この行ベクトルは異なる固有値を持つ $\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix}$ と直交し、 $\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$ との内積が1だからである。

行列を対角化する。この二つのベクトルを並べて作った行列 $U = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ y_1 & y_2 \end{pmatrix}$ を作る。

U のエルミート共役 U^\dagger は $\begin{pmatrix} x_1^* & y_1^* \\ x_2^* & y_2^* \end{pmatrix}$ であるが、 $U^\dagger U = I$ となることは二つのベクトルの直交性と規格化から明らかである(行列を作っているベクトルが互いに直交して長さが1になっていることに注意)。一般に $A^\dagger A = I$ (単位行列) となる行列をユニタリ行列と呼ぶ。 U はユニタリ行列である。 U を使って、 $U^\dagger A U$ という新しい行列を作る。このような変換をユニタリ変換と呼ぶ。

$$\begin{pmatrix} x_1^* & y_1^* \\ x_2^* & y_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ y_1 & y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (12.23)$$

となって、この行列は対角行列(対角要素以外は0になっている行列)になる。こうなる理由は、 U を $\left(\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} \right)$ のように考えると、行列 A をかけると、 $\left(\lambda_1 \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} \ \lambda_2 \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} \right)$ となることから納得できる。ここでも、 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (F_1 e^{\frac{i}{\hbar} p_1 x} + F_2 e^{\frac{i}{\hbar} p_2 x} + F_3 e^{\frac{i}{\hbar} p_3 x} + \dots)$ が $p_1 F_1 e^{\frac{i}{\hbar} p_1 x} + p_2 F_2 e^{\frac{i}{\hbar} p_2 x} + p_3 F_3 e^{\frac{i}{\hbar} p_3 x} + \dots$ のようになることと同様の計算を行列で行っていることになる。

結局、フーリエ変換(あるいは x -表示から p -表示への変換)というのは「無限行無限列行列を使ったユニタリ変換」ととらえることができる。

ここではフーリエ変換の場合で話をしたが、量子力学では「何かの演算子(ハミルトニアンでもいいし角運動量でもいい)の固有関数」の形で任意の関数を分解して計算するという方法をよく使う。このような計算方法を「演算子を対角化する」という言いかたをする。演算子を行列と考えた時、 $\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$ のような形に行列をユニタリ変換していることに対応しているからである。

ベクトルに対して使える公式などが適用できるためには、その量が足し算および定数倍ができること、内積が定義できることが重要である。つまり、このようなベクトル的な計算ができるのは、量子力学的な状態を表す波動関数が「重ね合わせ」という形で「足し算」ができるおかげである。

このため、波動関数で表される一つの量子力学的な状態を「状態ベクトル」という言葉で呼ぶ。状態ベクトルは無限次元のベクトルで、その一つのベクトルが、一つの波動関数 $\psi(x)$ を表現する。波動関数の重ね合わせ $\psi_1(x) + \psi_2(x)$ は、状態ベクトルの和と考えることができる。

【以下長い註】この部分は、最初に勉強する時は理解できなくともよい。

12.3 直交関数系という考え方

波動関数を運動量の固有値で分類する時、結果的にフーリエ級数のテクニックを使っている。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

$$\vec{e}_x \cdot \vec{e}_y = \vec{e}_y \cdot \vec{e}_z = \vec{e}_z \cdot \vec{e}_x = 0 \quad (12.24)$$

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。

\vec{e}_x は単位ベクトルであり、 $\vec{e}_x \cdot \vec{e}_x = 1$ であった。直交関数系でも同様に考えて、「自分自身との内積が 1 である」という条件も満たしている直交関数系を作る。これを「規格直交関数系」と呼ぶ。たとえば上の 1 は $\int_0^{2\pi} 1 dx = 2\pi$ となるので、規格化されていない。規格化するには $\sqrt{2\pi}$ で割って $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ にする。同様に $\sin x$ は $\int_0^{2\pi} \sin^2 x dx = \pi$ となって規格化されていないので、 $\frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin x$ として規格化する。

規格直交系

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin x, \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin 2x, \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin 3x, \dots, \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos x, \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos 2x, \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos 3x, \dots \quad (12.25)$$

が関数の「基底ベクトル」にあたるものなのである。

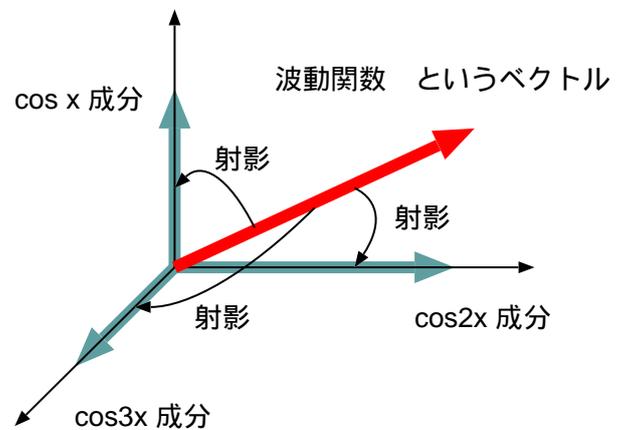
あるベクトル $\vec{A} = A_x \vec{e}_x + A_y \vec{e}_y + A_z \vec{e}_z$ があつた時、 A_x を求めたいと思えば、

$$\vec{e}_x \cdot \vec{A} = \vec{e}_x \cdot (A_x \vec{e}_x + A_y \vec{e}_y + A_z \vec{e}_z) = A_x \quad (12.26)$$

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 F_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うが、フーリエ級数はその基本的な例である。



【よくある質問】

「 $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ や $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ を演算子扱いするのはわかるが、 x は単に数だとして扱ってもいいのではないのか。なぜ演算子だと思わなくてはいけないのか」

こう思うのは我々が波動関数を $\psi(x, t)$ のように x の関数として表しているため、 x に関しては順序をどう入れ換えても問題ないからである。しかし、例えば、 ψ をフーリエ変換^a

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(p, t) e^{\frac{i}{\hbar} px} dp \quad (12.27)$$

して、 p の関数 $\psi(p, t)$ を「波動関数」と考える立場もとれる。 $\psi(x, t)$ が決まれば $\psi(p, t)$ は決まるし、この逆も真だから、この二つは同等なのである。

このような書き直しをすると、たとえばある演算子 $A(x)$ の期待値 $\langle A \rangle$ は

$$\begin{aligned} \langle A(x) \rangle &= \int \psi^*(x, t) A(x) \psi(x, t) dx \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \left(\int \psi^*(p', t) e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} dp' \right) A(x) \left(\int \psi(p, t) e^{\frac{i}{\hbar} px} dp \right) \end{aligned} \quad (12.28)$$

のようにして $\psi(p, t)$ を使った式に書き換えていくことができる。さらに後ろに $e^{\frac{i}{\hbar} px}$ がある時には

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial p} e^{\frac{i}{\hbar} px} = x e^{\frac{i}{\hbar} px} \quad (12.29)$$

となることを使って、 $A(x) \rightarrow A\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right)$ と置き換える。ただし、ここの微分は $e^{\frac{i}{\hbar} px}$ にかかっている。つまり、

$$\int \psi(p, t) \left[A\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right) e^{\frac{i}{\hbar} px} \right] dp \quad (12.30)$$

という形になっている。ここで部分積分をして、微分が $\psi(p, t)$ の方にかかるようにする。こうすると部分積分のおかげでマイナス符号が一個出て、さらに $-i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$ と置き換わる。これで $e^{\frac{i}{\hbar} px}$ には微分がかからなくなったから前にもっていくことができ、

$$\begin{aligned} \langle A(x) \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \left(\int \psi^*(p', t) e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} dp' \right) \int \left[A\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right) \psi(p, t) \right] e^{\frac{i}{\hbar} px} dp \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \int \underbrace{\left(\int e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} dx \right)}_{=2\pi\hbar\delta(p-p')} \psi^*(p', t) A\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right) \psi(p, t) dp dp' \\ &= \int \psi^*(p, t) A\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right) \psi(p, t) dp \end{aligned} \quad (12.31)$$

のように x 積分を実行して、 p を変数とする表示に書き直すことができる。こうなってしまうと今度は x の方が p を微分する演算子となり、むしろ p の方が「数」に見えてくる。 $\psi(x, t)$ を使うのは x -表示、 $\psi(p, t)$ を使うのは p -表示などと言うが、これ以外にも他の表示もあり、その時その時で便利な表現を使って問題を解くのがよい。一般的には (x -表示以外では) x も立派な演算子なのである。

^aここで前についている係数に \hbar がついていないのは、 $e^{\frac{i}{\hbar} px}$ の方にも \hbar がついていないため。

第13章 1次元の簡単なポテンシャル内の粒子

前章までで、量子力学の基本的な事項の説明をした。以下では、より具体的な問題に量子力学を適用していく。この章では、1次元でポテンシャルの中での波動関数を考える。現実(3次元)に比べ簡単すぎてつまらないように感じるかもしれないが、1次元に限っても量子力学にはいろいろと面白い現象がある。

13.1 箱に閉じ込められた粒子

以下では1次元の箱(長さ L)に閉じ込められた質量 m の粒子の運動を量子力学的に考える。まずこの粒子の持つエネルギーをシュレーディンガー方程式を解くことなしにおおざっぱに評価しよう。計算結果に現れる量は \hbar, L, m のみのはずである。 L は文字通り [L] の次元を、 m も [M] の次元を持つ。 \hbar は時間で割る(振動数をかける)とエネルギー $[\text{ML}^2\text{T}^{-2}]$ になるのだから、 $[\text{ML}^2\text{T}^{-1}]$ という次元を持っている。この3つの量からエネルギーの次元を持った量を作ろうとすると、 $[T]$ を含むのは \hbar のみだから、 $\hbar^2[\text{M}^2\text{L}^4\text{T}^{-2}]$ に比例させなくてはならない。後 L と m を適当にかけることで次元あわせをすると、 $\frac{\hbar^2}{mL^2}$ でエネルギーの次元となる。実際に計算した結果はこれの数倍程度の量になるだろう。

この結果は不確定性関係を用いた考察からも出てくる。長さ L の箱に閉じ込められているということは、位置の不確定性は最大でも $\Delta x = L$ である。一方 $\Delta x \Delta p > \hbar$ であるから、運動量は $\Delta p = \frac{\hbar}{L}$ 程度の不確定性を持たなくてはならない。この場合、エネルギーも $\frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$ 程度を持っているはずである。

[問い 13-1] ばね定数 k のばねにつながれた質量 m の粒子(エネルギーは $\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$ と書ける)について、次元解析および不確定性関係から、最小のエネルギーの値を予想せよ。

以上の考察をした後、具体的にシュレーディンガー方程式を解いていってみよう。1次元の空間 ($0 \leq x \leq L$) 内に閉じ込められた、自由な粒子 ($V(x) = 0$) を考える。粒子の質量を m とする。

解くべき方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (13.1)$$

である。ここで、エネルギーが確定した値を取る(つまり、エネルギーの固有状態である)状態を考えることにすれば、

$$\psi(x, t) = \phi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (13.2)$$

のような形に解を制限することになる。これを代入して、

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\phi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\phi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} &= E\phi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) &= E\phi(x) \end{aligned} \quad (13.3)$$

となるので、解くべき式は $\phi(x)$ に関する常微分方程式になる。このような定数係数の線型同次微分方程式の場合、解は $e^{\lambda x}$ と置くことができる。 λ の値を求めるためにこの解を代入すると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 e^{\lambda x} = E e^{\lambda x} \quad (13.4)$$

となるから、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 = E \quad (13.5)$$

を解いて、 $\lambda = \pm i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ となる。

これから、境界条件を考慮しなければ、 $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ と置いて、

$$\phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (13.6)$$

という解が出る。

ここで波動関数に境界条件を与えよう。粒子は $0 \leq x \leq L$ に閉じ込められているとしたのだから、この範囲の外側では $\phi = 0$ である。その外側の波動関数とつながるためには $\phi(0) = \phi(L) = 0$ でなくてはならない。これから、

$$A + B = 0, \quad A e^{ikL} + B e^{-ikL} = 0 \quad (13.7)$$

という式が出てくる。第一式より $B = -A$ であるから、

$$A (e^{ikL} - e^{-ikL}) = 2Ai \sin kL = 0 \quad (13.8)$$

A が 0 では波動関数が全部 0 になってしまうので、 $\sin kL = 0$ ということになる。ゆえに、

$$kL = n\pi \quad (n \text{ は自然数}) \quad (13.9)$$

という条件がつく。つまり、

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L &= n\pi \\ \frac{2mEL^2}{\hbar^2} &= n^2 \pi^2 \\ E &= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \end{aligned} \quad (13.10)$$

のようにエネルギーが決まった (最初の予想と比較してみよう。多少数はずれているがだいたい値は出ている)。結局波動関数は

$$\phi_n(x) = 2Ai \sin \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \quad (13.11)$$

となり、 n の値に応じて $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ というエネルギーを持つことになる。エネルギーが任意の値を取れず、何か整数 n を使って表せるようなとびとびの値を取る (量子化される) ことは量子力学でよく現れる現象であるが、これは束縛状態 (粒子が空間の一部に集中して存在している状態) の特徴である¹。

規格化条件 $\int \phi^* \phi dx = 1$ を満たすように A を決めよう。

$$\begin{aligned} \int_0^L \phi^* \phi dx &= \int_0^L \left(-2A^* i \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right) \left(2Ai \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right) dx \\ &= 4A^* A \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx \end{aligned} \tag{13.12}$$

この式の積分は $\sin^2 \theta = \frac{1 - \cos 2\theta}{2}$ を使って積分することもできるが、グラフを思い浮かべれば右のようになり、「山と谷が消し合う」ということを考えればちょうど底辺 L 、高さ $\frac{1}{2}$ の長方形の面積になることがわかって、答えは $\frac{L}{2}$ になる。これから、

$$2A^* AL = 1 \tag{13.13}$$

よって $A = \frac{1}{\sqrt{2L}} e^{i\alpha}$ となる。 $A^* = \frac{1}{\sqrt{2L}} e^{-i\alpha}$ なので、 $A^* A$ という組合せの中には位相 α は入っていない。つまりこの α は規格化条件をつけても決まらないのである。ここでは

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{13.14}$$

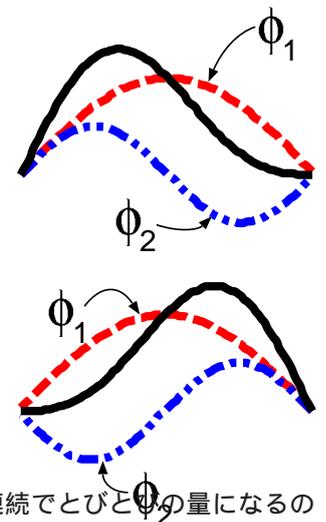
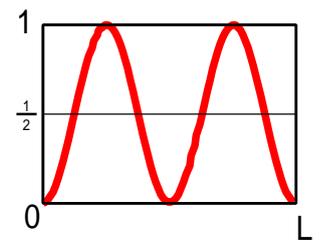
となるように、つまり最初ついていた i が消えるように選んでおこう (こうしなくてもまったく問題ないが)。

こうして $n = 1$ に始まって $n = \infty$ まで続く、無限個の波動関数が得られた。各々は違う大きさのエネルギー固有値を持つ固有関数になっている。したがって、状態をエネルギーの固有値で分類した、と考えることができる。

今求めたエネルギー固有状態では、粒子の存在確率 ($\phi_n^* \phi_n$) は時間によらない。つまり、粒子は動いていない。それはあたりまえで、エネルギーの固有状態であるということは $\psi(x, t) = \phi(x) e^{-i\omega t}$ という形で時間依存性 $e^{-i\omega t}$ が空間依存性 $\phi(x)$ と分離してしまっている。だから、 $\psi^*(x, t) \psi(x, t) = \phi^*(x) \phi(x)$ となって、時間がたったときに確率分布が変化しなくなっている。

それでは、古典力学における‘運動’はどこへ行ってしまったのか。これが気になる人のために、エネルギー固有状態でない状態ではどうなるのかを考えよう。一番簡単な例として、以上で求めた波動関数のうち、もっともエネルギーの低いものから二つ ($\phi_1 = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$ と、 $\phi_2 = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)$) を考えよう。

$$\phi_{sup} = C_1 \phi_1 + C_2 \phi_2 \tag{13.15}$$



¹量子力学だからといって、何がなんでも不連続になるわけではない。エネルギーが不連続でとびとびの量になるのは、束縛されている場合だけである。

のように二つの状態が重ね合わされた状態として作ることができる²。このように二つの波が重なりあい、しかも ϕ_1 と ϕ_2 は違うエネルギーを持っていて違う振動数で振動している場合、重ね合わされた結果の波動関数は状況によって左側が強め合ったり、右側が強め合ったりするのである(右の図参照)。つまり、「いったりきたり」という現象が表れている。つまり、古典力学的な意味で動いている(期待値が振動している)状態というのは、エネルギー固有状態でない状態(複数のエネルギー固有状態の重ね合わせ)として実現しているわけである。

[問い13-2] ϕ_{sup} が規格化されているための C_1, C_2 の条件を求めよ。

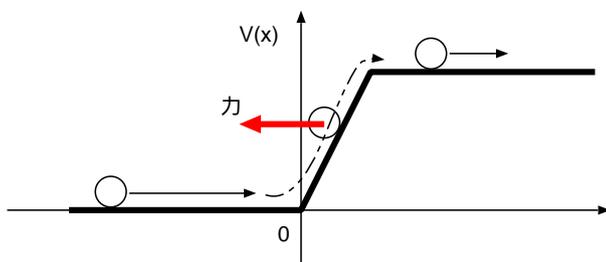
[問い13-3] 時間発展を考慮して、

$$\psi_{sup} = C_1 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} + C_2 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t}$$

とする。 x の期待値 $\langle x \rangle$ を計算し、振動するような答えであることを確認せよ。

[問い13-4] エネルギーの期待値を計算してみよ。

13.2 有限の高さのポテンシャル障壁にぶつかる波

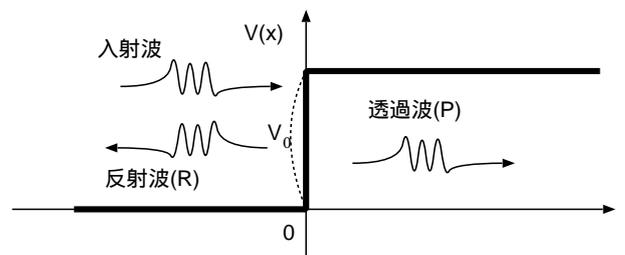


前節で考えたのは、粒子が箱の中に閉じ込められている場合であった。ここでは「境界より外では波動関数が0になる」と考えたが、これはつまりそこに「無限の位置エネルギーの、越えられない壁」があって、波動関数がそちらに侵入できないのだと考えられる。別の言い方をすれば、「壁」の部分では粒子に無限の大きさの力が一瞬働いて、方向を変えてしまったと考えよう。

「壁にぶつかったから跳ね返っただけのことじゃないんですか、なんでポテンシャルなんて出てくるんですか？」と疑問に思う人が時々いるが、そもそも「壁にぶつかったから跳ね返る」という現象が起こるのは壁から力を受けるからであり、力が働く時には(その力が保存力であれば)必ずそれに対応するポテンシャルが存在する。たとえば陽子と陽子が衝突する時、実際に粒子どうしが接触したりはしない。実際にぶつかるよりもずっと前にクーロン力による反発で跳ね返る。また別の考え方をすると、粒子に力が働いて跳ね返るわけだが、その力が保存力であると仮定したら、力が働く場所にはポテンシャルに傾斜があるということになる(上図参照)。

実際に起こる現象としては、おそらく位置エネルギーの差にしる力にしる、無限のエネルギー差や無限の力が働くとは考えがたい。そこで以下では、有限の高さのポテンシャルの障壁に波があたった時に何が起こるかを考えよう。

ただし、ポテンシャルの変化はある地点で急激に起こるとして計算を簡単にする(傾きを有限にしても解



²重ね合わせは英語で superposition なので、添字 $_{sup}$ をつけた。

けないわけではないが計算が面倒になる)。結果として粒子には（古典的に考えれば）一瞬の間に力を受けることになる。その状況を右図のような

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (13.16)$$

という式で表される $x = 0$ を境に階段状に増加するポテンシャルで表現する。この状況で、 x 軸負の方向から粒子を入射させてみよう（図では $V_0 > 0$ として書いているが、場合によっては負であってもよい）。解くべきシュレーディンガー方程式は $x < 0$ 領域では

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (13.17)$$

であり、 $x > 0$ 領域では

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \right) \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (13.18)$$

である。とりあえず定常状態解（つまりエネルギー固有関数）を求めることにして、左辺を $E\psi$ と置き換える。すると結局、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = \begin{cases} E\psi & x < 0 \\ (E - V_0)\psi & x > 0 \end{cases} \quad (13.19)$$

を解けばよいことになる。 $E - V_0$ の符号に注意せねばならないが、まずは $E - V_0 > 0$ だとするならば、解は

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & x < 0 \\ Pe^{ik'x} & x > 0 \end{cases} \quad (13.20)$$

となる。ただし、 $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$, $\frac{\hbar^2 (k')^2}{2m} = E - V_0$ である。ここで、 $x > 0$ の領域にいるのは、左からやってきた波 e^{ikx} の一部が壁を乗り越えてやってきているのだから、どれくらい透過したかを示す係数 P をつけて表した。一方 $x < 0$ では、壁のところで一部反射して左行きの波ができる可能性があるため、その波が R という係数をもっているとして足し合わせた。 P, R は一般に複素数でよいが、その値は $x = 0$ における接続で決まる。 $|P|$ は透過波の、 $|R|$ は反射波の振幅に対応する。

なお、係数を簡単にするために入射波の振幅を 1 にしたので、この波動関数は規格化されていないことに注意せよ。実際このように無限に広がった波動関数を考える時、運動量の固有状態である e^{ikx} を 1 に規格化することはできない。有限の体積であれば、

$$\int_V \psi^* \psi dx = \int_V e^{-ikx} e^{ikx} dx = \int_V dx = V \quad (13.21)$$

であるから、 $\frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikx}$ と規格化しておくことができる。しかし $V = \infty$ ではこれは不可能である。

しかし我々が今計算したいのは、「入射してきた波のうちどの程度が反射し、どの程度が透過していくのか」という割合であって、割合を計算する分には規格化は必要ない。そこで以下では規格化はおこなわず、入射波の振幅を 1 として他の波の相対的な大きさだけを考えることにする³。この場合は $\psi^* \psi$ は確率密度を表さないが、確率密度に比例した量にはなっている。

³体積無限大でなんらかの規格化をしたい時は、デルタ関数を使って、 $\int \psi_k^* \psi_{k'} dx = \delta(k - k')$ となるように規格化（デルタ関数的規格化と呼ぶ）することが多い。

(13.20)で $x > 0$ と $x < 0$ にわけてシュレーディンガー方程式の解を求めた。 $x = 0$ では、この二つの解の、 ψ と $\frac{d\psi}{dx}$ が連続的になっているという条件を置こう。 ψ や一階微分がつながってなかったとしたら、シュレーディンガー方程式は絶対に満足できない⁴。一方、シュレーディンガー方程式を見るとわかるが $V(x)$ が不連続なのだから、二階微分 $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ は必然的に不連続となる(ということは三階以上の微分は定義できない)。 $\psi(x=0)$ の接続条件から、

$$1 + R = P \quad (13.22)$$

という式が出る。また微分 $\frac{d\psi}{dx}|_{x=0}$ の接続から、

$$ik(1 - R) = ik'P \quad (13.23)$$

が成立する。この二つを解く。 $ik' \times (13.22) - (13.23)$ により、

$$ik'(1 + R) - ik(1 - R) = 0 \quad \rightarrow \quad R = \frac{k - k'}{k + k'} \quad (13.24)$$

が出るし、 $ik \times (13.22) + (13.23)$ によって、

$$2ik = i(k + k')P \quad \rightarrow \quad P = \frac{2k}{k + k'} \quad (13.25)$$

が出る。

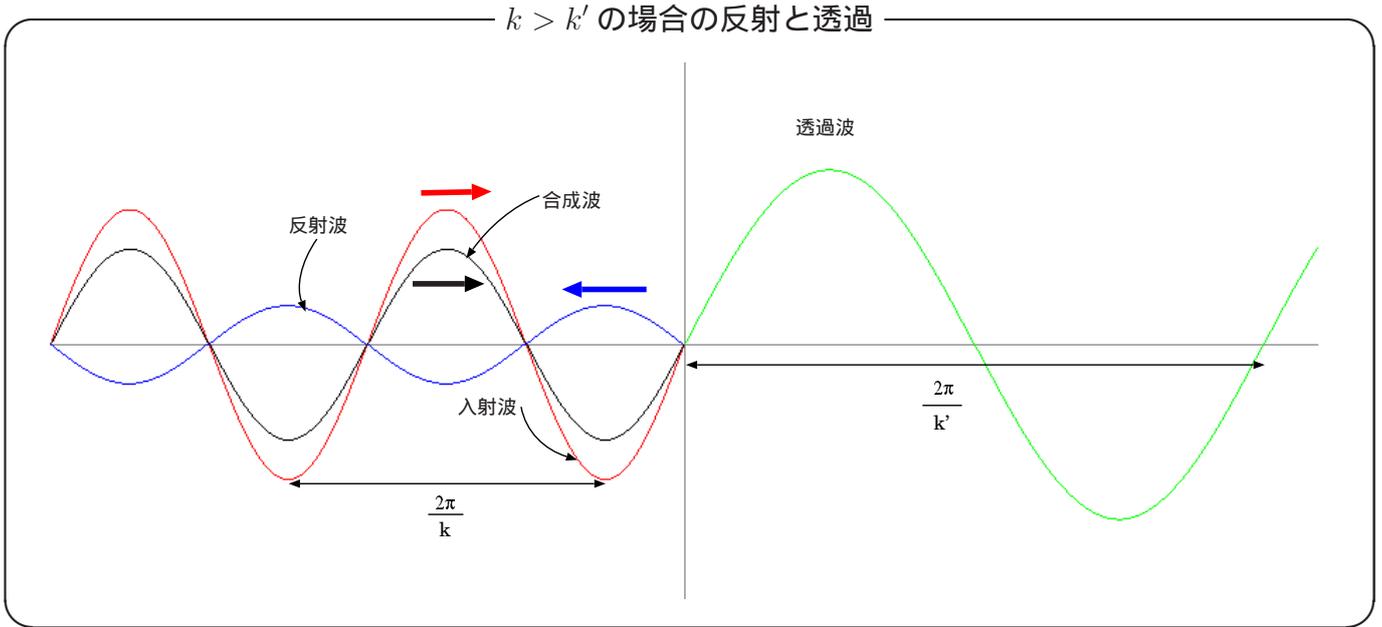
ここで、 P は常に正であるが、 R は $k > k'$ なら正、 $k < k'$ なら負である。 $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$, $\frac{\hbar^2 (k')^2}{2m} = E - V_0$ なので、 $V_0 > 0$ ならば $k > k'$ である。この場合はポテンシャル的には「壁を登る」ということになる。逆に $V_0 < 0$ の時 $k < k'$ となるが、この場合は壁を登るというよりは「階段を下りる」感じになる。この二つで反射の様子は大きく異なる。たとえば電子が金属内から空気中に飛び出す時などが $V_0 > 0$ の状況に値する。ポテンシャルは空気中の方が高い(金属は電子を引っ張りこもうとする)ので、飛び出した後、電子の運動エネルギーが減少する。もし十分な運動エネルギーを持たなければ空気中には出て行けない(光電効果の話思い出せ)。

まず、 $k > k'$ の場合のグラフを見よう。この場合、粒子はポテンシャルの高い方向に向けて入射・透過するので、透過後は運動エネルギーを減らして波長がのびる。そして、反射波の位相はずれていない。このことを理解するには、「グラフの入射波が壁にあらずにそのまま続いたとしたらどんな波ができたのか」と考えるとよい。このグラフの場合、もし壁がなければ、境界のすぐ右には山ができていたはずである。実際には境界があって反射が起こったわけであるが、本来境界のすぐ右にできるはずだった山は向きをかえて、境界のすぐ左に存在している。つまり、「山が山として跳ね返った」ということである。

ここで、 $k > k'$ のグラフをよく見ると、透過波の振幅は入射波の振幅より大きくなっている。これは透過波の振幅の絶対値 $\frac{2k}{k + k'}$ という式からもわかる。しかし入射波が透過波と反射波に分かれると考えると、振幅が増えるのはおかしいような気がする。なぜ振幅が大きくなるのだろうか？

この理由は、古典的な場合と対応させてみるとわかる。古典的に考えると、 $k > k'$ ということは、透過後の方が粒子の運動量が小さくなっているということである。つまり図の左側の方が粒子の進む

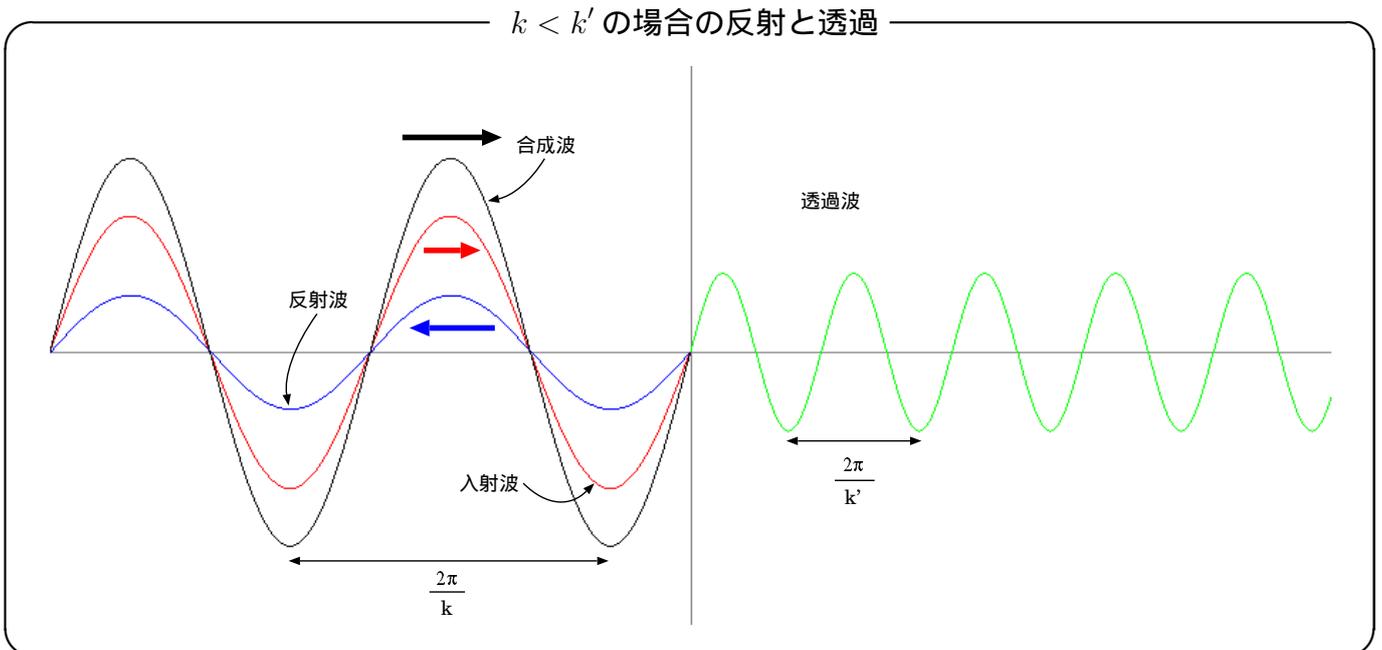
⁴シュレーディンガー方程式自体に $\delta(x)$ のような発散項が入っている場合は別。



速さが速い。速さが速いということは、ある範囲に存在している時間が短いということであり、それだけ「単位長さあたり、単位時間あたりの存在確率」は小さくなる。逆に遅くなれば、それだけ粒子がある範囲にいる時間が長くなるから、存在確率密度は上がる。

上のグラフで書かれている状況は、古典的に見ると「ボールが左から床を転がってきて、坂を登ってスピードが遅くなりつつ、また走っていく」ということであるから、右の方が遅くなる分だけ、確率密度が大きくなっているのである。

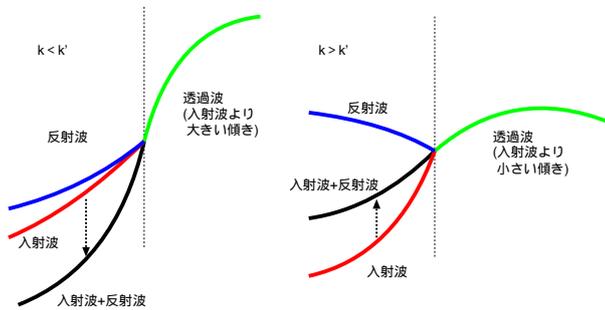
なお、「遅くなる」のは古典的運動あるいは群速度の場合であって、波長が長くなっているので位相速度の方は速くなっている。



$k < k'$ の時 R は負の実数である。つまり、 e^{ikx} と Re^{-ikx} は、 $x = 0$ において符号反転している。

$e^{i(\theta+\pi)} = -e^{i\theta}$ であるので、このことを「位相が π ずれる」という言いかたをする⁵。グラフ上で符号が反転していることは次のように確認できる。この $k < k'$ の場合も、グラフでは境界のすぐ左には入射波が谷になっている。もし壁がなかったとするならば、境界のすぐ右には山ができていたはずである。ところが壁があるので波が反射された。反射波は壁のすぐ左で谷となっている。つまり「山が谷になって跳ね返って来た」のである。

$k < k'$ で符号反転し、 $k > k'$ ではしない理由をおおざっぱに言うと以下のような説明ができる。



透過波の微係数の絶対値 $k'P = \frac{2kk'}{k+k'}$ は、入射波の傾きの絶対値 k に比べ、 $k < k'$ では大きくなり、 $k > k'$ では小さくなる。これは、 $k < k'$ では波長が短くなり、波が圧縮された形になる(当然、傾きは増える)ということの反映である。入射波より透過波の方が傾きが急になっているが、合成波(入射波+反射波)の傾きは透過波と同じでなくてはならない。そのため、反射波は入射波の傾きを強める波でなくてはならない。 $k > k'$ では逆に傾きを弱めなくてはならない。

もう一つの説明は、 $k > k'$ では透過波は入射波より大きい振幅を持つことを使う。透過波と合成波はつながっているのだから、合成波が境界で強め合っていないと困る。つまり反射波は符号反転せずに足し算されねばならない(なぜ振幅が大きくなるのかについては上で説明した通り)。

まとめると、ここで起こった現象は以下の表のようになる⁶。

波数の関係	ポテンシャル	波長	位相速度	群速度	反射波の位相	境界で波は
$k > k'$	高い方へ	長くなる	速くなる	遅くなる	ずれない	強め合う
$k < k'$	低い方へ	短くなる	遅くなる	速くなる	π ずれる	弱め合う

[問い 13-5] $x < 0$ 、 $x > 0$ のそれぞれの領域での $\psi^*\psi$ を計算せよ。これは確率密度に比例する。 $x < 0$ の領域において、 $\psi^*\psi$ が極大となるのはどんな点か。

13.3 波動関数の浸み出し

前節で問題を解く時、 $E - V_0 >$ を仮定した。そうでないと $\frac{\hbar^2(k')^2}{2m} = E - V_0$ から決まる k' が虚数になってしまうからである。しかし、物理的状況としては $E - V_0 < 0$ という状況だって有り得る。その場合どうなるのだろうか。もう一度シュレーディンガー方程式を解き直そう。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = (E - V_0)\psi \tag{13.26}$$

であるが $E - V_0 < 0$ なので、この解は

$$\psi = De^{-\kappa x} + Fe^{\kappa x} \tag{13.27}$$

⁵この場合は「反転する」というもっとわかりやすい言葉があるんだから、かっこつけて「位相が π ずれる」なんて言わなくていいのになあ、と思うかもしれない。こんな言葉を使うのは、後で π ではない「位相のずれ (phase shift)」が出てくるからである。

⁶ $k > k'$ の場合を自由端反射、 $k < k'$ の場合を固定端反射と分類する場合もあるが、この場合は $k < k'$ でも、端にあたる壁の部分の波は固定されているわけではない。

となる。ただし、 κ は

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = V_0 - E \tag{13.28}$$

を満たす正の実数である。二つの解ではあるが、 $F e^{\kappa x}$ の方は無限遠で発散してしまうので、物理的にこんな答えは有り得ないということで捨ててしまおう。すると、今度は接続条件として、

$$1 + R = D \tag{13.29}$$

$$ik(1 - R) = -\kappa D \tag{13.30}$$

という式が出ることになる。

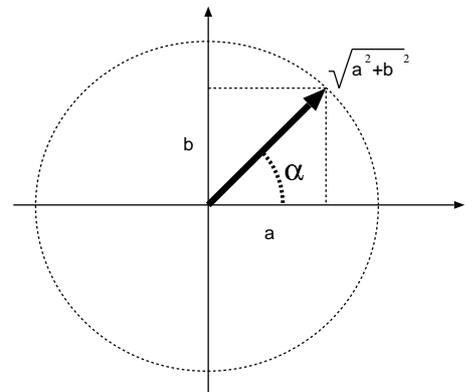
この式を解けば、

$$D = \frac{2k}{k + i\kappa}, \quad R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \tag{13.31}$$

となる。この場合、 D, R が複素数となることに注意しよう。なお、結果だけを見ていると、 $E - V_0 > 0$ であった時の P, R の k' の部分を単純に $k' \rightarrow i\kappa$ と置き換えた形になっている。

まず、 R の位相を計算しておこう。一般の複素数 $a + ib$ は

$$\begin{aligned} a + ib &= \sqrt{a^2 + b^2} \left(\frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}} + i \frac{b}{\sqrt{a^2 + b^2}} \right) \\ &= \sqrt{a^2 + b^2} (\cos \alpha + i \sin \alpha) \\ &= \sqrt{a^2 + b^2} e^{i\alpha} \end{aligned} \tag{13.32}$$

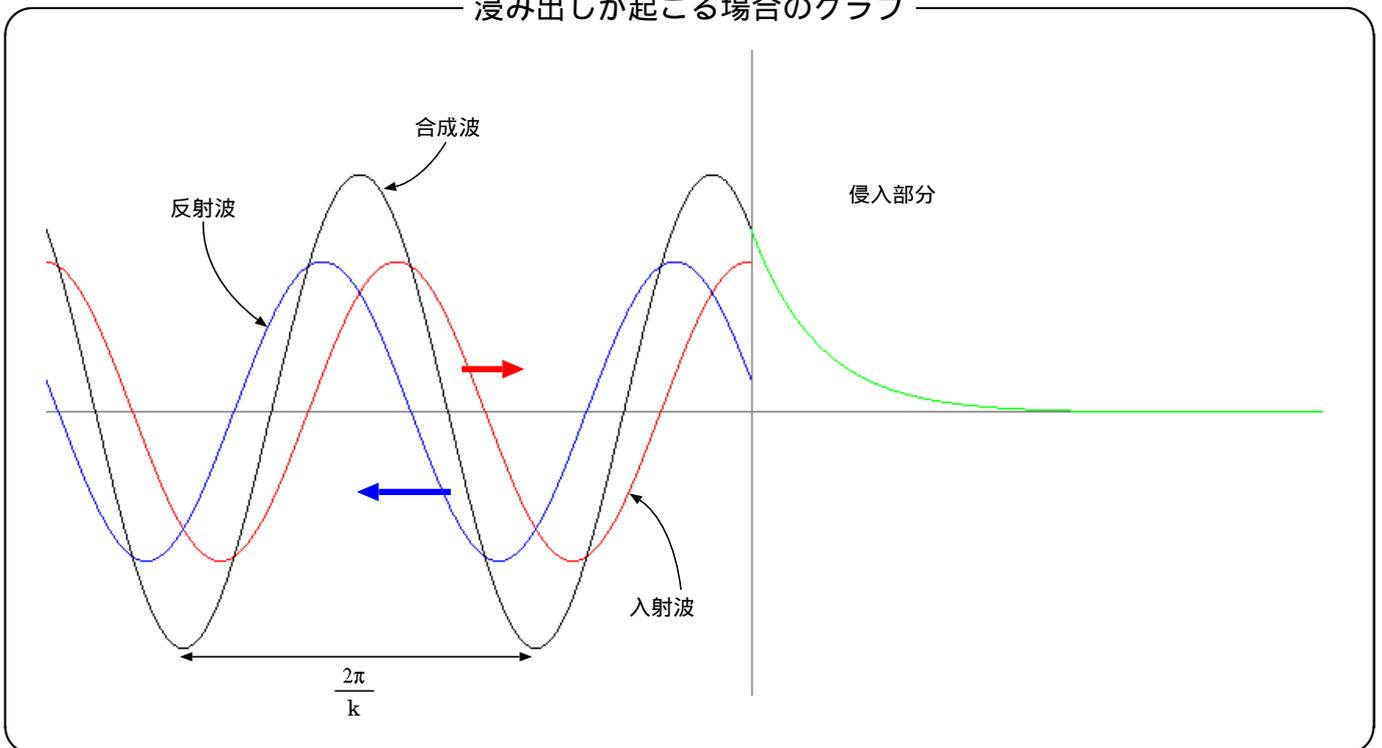


のようにして絶対値 $\sqrt{a^2 + b^2}$ と、位相部分 $e^{i\alpha}$ に分離できる。ただし α は

$$\cos \alpha = \frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}}, \quad \sin \alpha = \frac{b}{\sqrt{a^2 + b^2}} \tag{13.33}$$

によって決まる (この式は $\cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha = 1$ を満たしていることに注意)。

浸み出しが起こる場合のグラフ

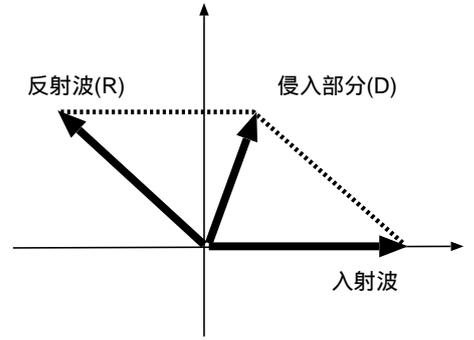


$R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}$ の位相を求めるために、まず分母を

$$k + i\kappa = \sqrt{\kappa^2 + k^2} e^{i\phi} \quad \text{つまり、} \cos \phi = \frac{k}{\sqrt{\kappa^2 + k^2}}, \sin \phi = \frac{\kappa}{\sqrt{\kappa^2 + k^2}} \quad (13.34)$$

とおく。すると、

$$\begin{aligned} k + i\kappa &= \sqrt{\kappa^2 + k^2} e^{i\phi} \\ k - i\kappa &= \sqrt{\kappa^2 + k^2} e^{-i\phi} \end{aligned} \quad (13.35)$$



となる。よって、 R は、

$$R = \frac{\sqrt{\kappa^2 + k^2} e^{-i\phi}}{\sqrt{\kappa^2 + k^2} e^{i\phi}} = e^{-2i\phi} \quad (13.36)$$

つまりこの場合、反射波の位相は -2ϕ だけずれることになる。定義からして、 ϕ は $0 < \phi < \frac{\pi}{2}$ を満たす角度 (第一象限内) である。この計算でわかったように、 $E < V_0$ の場合、反射波の振幅を表す R の絶対値が1になる。つまり、結局は全部が跳ね返っていることになる。

同様に計算すると D は

$$\begin{aligned} D &= \frac{2k}{\sqrt{\kappa^2 + k^2} e^{i\phi}} \\ &= 2 \cos \phi e^{-i\phi} \end{aligned} \quad (13.37)$$

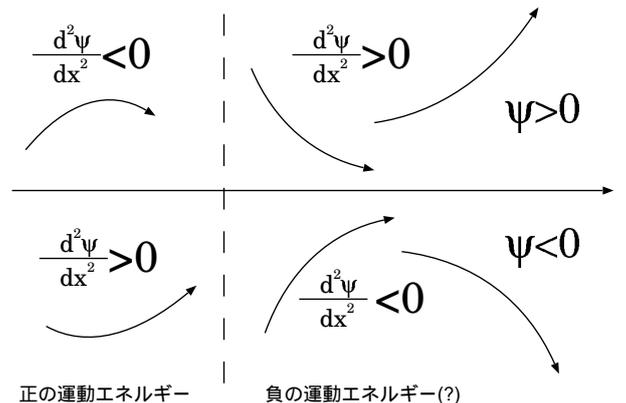
となる。 D の位相のずれは $-\phi$ となり、 R の位相のずれのちょうど半分である。複素平面上に図を書いてみると、 $1 + R = D$ という式が右のように書ける。 $|R| = 1$ を考えると、 D の位相が R の位相のちょうど半分であること、長さが $2 \cos \phi$ であることの両方が、グラフ上でも理解できる。

[問い13-6] $\psi^* \psi$ の値を計算し、極大になる点と極小になる点がどこか求めよ (ϕ を使って答えてよい)。

$D = 0$ でないから、壁の内側でも粒子の存在確率はゼロにならない。ただし、その確率は壁の中に入るにしたがってどんどん小さくなる。「大きくなる方の解を捨てたから、小さくなる解だけが残ったのではないか。大きくなる解が残ったらどうなるのか」と気にする人がたまにいる。しかし、 $\psi^* \psi$ が確率密度を表すことを思い出して欲しい。壁の内側でどんどん確率密度が大きくなってしまおうとすると、 $\int \psi^* \psi dx$ が無限大になってしまう。相対的に考えると、入射波 (振幅が1) の存在確率は0である。つまり、そんな粒子は入射してこれない。

このようにシュレーディンガー方程式を解くと、古典力学的にはありえない、「運動エネルギーが負の状態」が解として出てきて、古典力学的には到達し得ないところにまで波動関数が浸み出してくることになる。13.1節で考えた、波動関数が壁でぴたりと0になるような場合というのは、ポテンシャルの高さ V が無限大の極限になっている。この場合は $\kappa = \infty$ であって壁に入るなり波動関数は0になる。

ここで、古典的に見て運動エネルギーがプラスの時とマイナスの時の波動関数のグラフの違いを指摘して



おこ。グラフ上の違いの話なので、波動関数の実部の部分だけを考える。運動エネルギーが $E_{\text{運}}$ という固有値を持っているとすると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = E_{\text{運}} \psi \quad \text{つまり、} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = -\frac{2mE_{\text{運}}}{\hbar^2} \psi \quad (13.38)$$

という式が成立する。 $E_{\text{運}} > 0$ ならば、 ψ と $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi$ の符号が反対になる。二階微分はグラフで書いた時、線の曲がり具合を表す(もし二階微分が正ならば傾きが大きくなっていくし、負ならば小さくなっていく)。つまり $E_{\text{運}} > 0$ の時、 ψ は正の領域では傾きが小さくなる方向に曲がり、負の領域では傾きが大きくなる方向に曲がる。これは結局、 ψ がプラス側にある時はマイナス側に曲がり、マイナス側にある時はプラス側に曲がるということであるから、振動が起こることになる。

$E_{\text{運}} < 0$ ならば、この傾向がまったく逆になり、むしろ 0 から離れる方向に曲がる。結果として、もし最初に 0 から離れる方向へ変化していたとすると、 ψ はどんどん 0 から遠い方へ離れて行き、最終的には発散する。もし最初に 0 に近づく方向へ変化していたなら、その変化がどんどん減るが、曲がり具合(二階微分)も 0 に近付いて行くため、 $\psi = 0$ という直線に漸近的に近付いていくことになる。いずれにせよ、 x の関数としての ψ は振動しない。そういう意味では波動関数が「波動」であるのは $E_{\text{運}} > 0$ の場合だけである。

もともとシュレーディンガー方程式を作った時は、アインシュタインとド・ブロイの関係式 ($E = h\nu, p = \frac{h}{\lambda}$) を満たすような波動方程式として作ったのだから、解として「波ではない関数」が出てきた時に、「こんな状況でもシュレーディンガー方程式を信用してもいいのか?」ということが気になるかもしれない⁷。実際のところこういう状況でもシュレーディンガー方程式が成立してくれるのかどうかは実験で確かめるべきことである。なお、シュレーディンガーが最初にシュレーディンガー方程式を使って解いた具体的問題は後で説明する水素原子の電子であるが、その解は、古典力学的には運動できないところまで波動関数が広がっていることを示している。この解が水素原子のエネルギースペクトルについて正しい答えを出すのであるから、シュレーディンガー方程式を「運動エネルギーがマイナスになる領域」に使用することは間違いではなさそうである

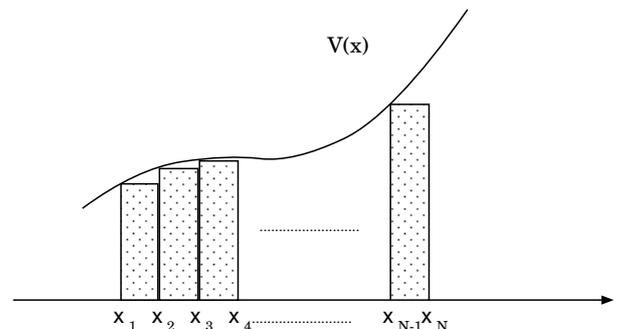
【補足】 この部分は授業では話さない可能性もあるが、その場合は読んでおいてください。

ここでは階段状のポテンシャルを考えた。もっと複雑なポテンシャルの場合、シュレーディンガー方程式を解くのは難しくなるが、波動関数がどう減衰して行くかを近似計算することができる。

まず考えている空間 $x_0 < x < x_N$ を N 等分して、 $\Delta x = \frac{x_N - x_0}{N}$ ごとに刻む。その一区画 $x_n < x < x_n + \Delta x$ の中ではポテンシャル $V(x)$ が定数であると近似する(つまり、ポテンシャルを細かい階段状ポテンシャルで置き換える)。そうすれば波動関数の振幅は、その区画内で $e^{-\kappa_n \Delta x}$ 倍に減衰することになる。ただし、 $\kappa_n = \frac{\sqrt{2m(V(x_n) - E)}}{\hbar}$ である。

$x = x_0$ から $x = x_N$ まででの波動関数の減衰を考えると、

$$e^{-\kappa_1 \Delta x} e^{-\kappa_2 \Delta x} \dots e^{-\kappa_N \Delta x} = e^{-(\kappa_1 + \kappa_2 + \dots + \kappa_N) \Delta x} \quad (13.39)$$



⁷ というより、物理をやる人はこういうことを気にして欲しい。たとえ方程式が解けても、答えとして出てきたものが妥当ではない場合だっていくらでもあるのだから。

となるが、 $\Delta x \rightarrow 0$ とすれば

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} (\kappa_1 + \kappa_2 + \cdots + \kappa_N) \Delta x \rightarrow \int_{x_0}^{x_N} \frac{\sqrt{2m(V(x) - E)}}{\hbar} dx \quad (13.40)$$

と置き換えられる。すなわち、 x_0 での波動関数は x_N での波動関数の

$$\exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_N} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx \right] \quad (13.41)$$

倍に減衰していることになる。exp の肩の $\frac{1}{\hbar}$ という (日常生活レベルにおいては) 大きな数字が来ているおかげで、この減衰は非常に速い。

たとえば、 E, m, V や x の積分域がオーダー 1 の量 (1 キログラムとか 1 ジュールとか 1 メートル) だったとすると、exp の肩には \hbar の逆数である 10^{33} ぐらいの負の数が載っていることになる。だいたい、 $e^{-10^{33}}$ ぐらいである。この確率はものすごく小さい。0.0000000... と 0 を並べて書いていくと、 10^{32} 個以上の 0 が並んだ後でやっと 0 でない数字が出てくるほどになる⁸。

なお、今行った計算は近似計算であり、厳密解ではない。一般に $e^{F(x)}$ のような関数を二階微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} e^{F(x)} &= \frac{d}{dx} \left(\frac{dF}{dx}(x) e^{F(x)} \right) \\ &= \left(\frac{d^2 F}{dx^2}(x) + \left(\frac{dF}{dx}(x) \right)^2 \right) e^{F(x)} \end{aligned} \quad (13.42)$$

という形になる。今の場合

$$F(x) = -\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m(V(x') - E)} dx' \quad (13.43)$$

$$\frac{dF}{dx}(x) = -\frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V(x) - E)} \quad (13.44)$$

$$\frac{d^2 F}{dx^2}(x) = -\frac{1}{\hbar} \frac{m \frac{dV}{dx}}{\sqrt{2m(V(x) - E)}} \quad (13.45)$$

となる。この $\frac{d^2 F}{dx^2}$ の項はシュレーディンガー方程式を成立させるにはじゃまな項になる。シュレーディンガー方程式の左辺の ψ に $e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m(V(x') - E)} dx'}$ を代入すると、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi = \left(E + \frac{1}{2} \frac{\frac{dV}{dx}}{\sqrt{2m(V(x) - E)}} \right) \psi \quad (13.46)$$

となり、答えは $E\psi$ とならず、 $\frac{dV}{dx}$ に比例する項が残る。この項を無視する近似をすれば、これが解となるのである。つまり、以上のような計算は $V(x)$ の変化が十分ゆっくりな時のみ使える近似である。

[問い 13-7] 垂直投げ上げ運動を量子的に扱おうと、そのシュレーディンガー方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + mgx \right) \psi = E\psi \quad (13.47)$$

である。 $mgH = E$ とする。古典力学的に考えると $x = H$ が最高点である。その最高点より ΔH 上での波動関数は $x = H$ の場所の何倍になっているか? 上で説明した近似計算で求めてみよ。

$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ 、 $m = 1 \text{ kg}$ 、 $g = 9.8 \text{ m/s}^2$ 、 $\Delta H = 0.001 \text{ m} (= 1 \text{ mm})$ として、数値を出してみよ。

⁸私が学生の頃、「掌に指を何度も何度も何度も突き刺せば、波動関数は少しだけ向う側に浸み出すので、いつか向う側に指の先端が通り抜ける状態が観測される」という話を聞いて、何度も何度も試してみたことがある。しかし、この確率では宇宙の始まりから最後まで突き続けても無理そうである。

13.4 演習問題

[演習問題 13-1] 確率密度 $\rho = \psi^* \psi$ に対し、確率の流れ密度 J は

$$J = \frac{i\hbar}{2m} (\partial_x \psi^* \psi - \psi^* \partial_x \psi) \quad (13.48)$$

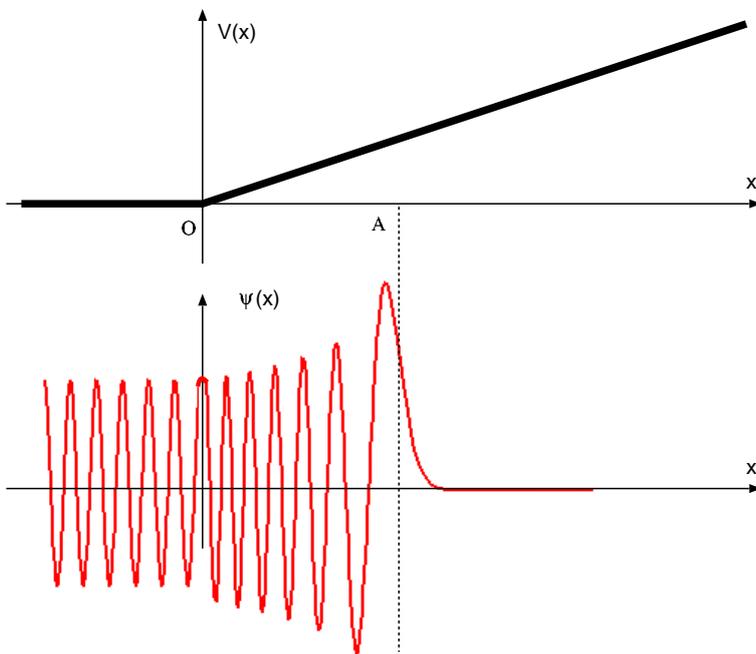
で定義される。シュレーディンガー方程式が成立する時、連続の式

$$\partial_t \rho + \partial_x J = 0 \quad (13.49)$$

が成立することを示せ。

[演習問題 13-2] 13.2 節で求めた波動関数について、前問で定義した確率の流れ密度 J を計算し、入射波の流れが反射波の流れと透過波の流れに分かれていることを確認せよ。

[演習問題 13-3] 下のグラフで表したポテンシャルの中で、波動関数 $\psi(x)$ がさらにその下のグラフで表せるような定常状態ができあがっている。 $\psi(x)$ は実数であり、虚数部はないとする。



- (a) 波動関数の二階微分 $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ を ψ で割ったもの $\left(\frac{d^2\psi}{\psi dx^2}\right)$ の符号は、図の点 A より左では負、右では正になっている。点 A は古典力学的に考えるとどのような点か。
- (b) 点 O の右、点 A の左では、右へ行くほど波動関数の波長がだんだん長くなっているが、これはなぜだろうか。物理的解釈をのべよ。
- (c) 点 O の右、点 A の左では、右へ行くほど波動関数の振幅がだんだん大きくなっているが、これはなぜだろうか。物理的解釈をのべよ。

[演習問題 13-4] 太陽の中心部では、 $1.5 \times 10^7 \text{K}$ 程度の温度になっていて、陽子と陽子の核融合が起こっている。単純に考えると陽子は一個あたり $\frac{3}{2}kT$ (k はボルツマン定数 $1.38 \times 10^{-23} [\text{J/K}]$ 、 T は絶対温度) ぐらいのエネルギーを持っているはずである。このエネルギーではたとえ二つの陽子がうまく正面衝突したとしても、(古典力学的に考えるかぎり) 陽子どうしが接触できないことをしめせ。電荷 e を持つ荷電粒子が距離 r にある時、ポテンシャルエネルギーは $\frac{ke^2}{r}$ である。陽子の電荷 e は $1.6 \times 10^{-19} \text{C}$ 、クーロンの法則の比例定数 k は 9.0×10^9 、陽子の半径は $R = 1.0 \times 10^{-15} \text{m}$ とする。

[演習問題 13-5] 前問の状況では、陽子が接触する確率は (13.3 節で使った近似を使って)

$$e^{-2 \int_r^{\Delta r} \frac{\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\hbar} dx}$$

となる。ただし、 E は陽子の持っているエネルギー、 $V(x)$ がポテンシャルエネルギーであり、 r は陽子の半径、 Δr は古典的な場合に陽子がもっとも近づく距離である。

この積分を計算するのはたいへんなので、 $V(x) = V(r)$ 、すなわち $V(r)$ は一定で、陽子の半径でのクーロンポテンシャルの値に等しいと近似する。さらに、 $V(r)$ に比べて E は小さいので、これも無視する。こうすると、積分は

$$-2 \frac{\sqrt{2mV(r)}}{\hbar} (\Delta r - r)$$

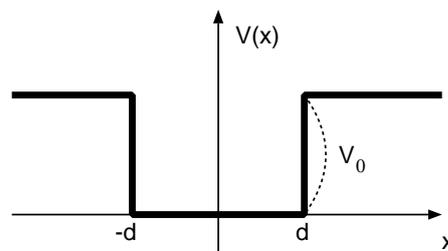
となる。以上の近似をして、だいたいの確率を計算してみよ。陽子の質量を $1.7 \times 10^{-27} \text{kg}$ とする。

第14章 1次元の束縛状態と散乱

14.1 井戸型ポテンシャル：束縛状態

2枚の有限なポテンシャルの壁にはさまれた領域での波動関数を考えてみる。この領域を「井戸の穴」と見て「井戸型ポテンシャル」と呼ばれることが多い¹。具体的には、下のようなポテンシャルの中にある質量 m の粒子に対しての量子力学を考える。

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -d \\ 0 & -d < x < d \\ V_0 & d < x \end{cases} \quad (14.1)$$



井戸内部の方が位置エネルギーが小さいので、粒子はこの井戸に引っ張り込まれるような力を受けることになる。井戸が十分深ければ粒子はこの井戸にとらえられ、井戸から遠い場所には存在できない。このような場合を「ポテンシャルに束縛されている」と呼ぶ。井戸が浅い場合は束縛は起こらないが、その場合については次の節に回し、まず束縛される場合を考えよう。その場合、 $|x| \rightarrow \infty$ で $\psi \rightarrow 0$ という境界条件で問題を解くことになる。

解は $|x| > d$ の範囲では

$$e^{\pm\kappa x} \quad \text{ただし、} \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (14.2)$$

$|x| < d$ の範囲では

$$e^{\pm ikx} \quad \text{ただし } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (14.3)$$

となる。遠方で減衰する、という条件を満たすためには、 $E < V_0$ である (κ の式のルートの中が正になる条件) ことがわかる。また $E > 0$ になっているとしよう。

計算を簡単にするために以下の定理を証明しよう。

—— 対称ポテンシャルのシュレーディンガー方程式の解に関する定理 ——

ポテンシャルが左右対称になっている時 ($V(-x) = V(x)$ の時)、シュレーディンガー方程式の解は偶関数 ($\psi(-x) = \psi(x)$) であるか、奇関数 ($\psi(-x) = -\psi(x)$) であるか、どちらかである。

この定理を証明するにまず、「ポテンシャルが左右対称になっている時、シュレーディンガー方程式の解 $\psi(x)$ が見つかったとすると、 $\psi(-x)$ も解である」ということを示す。そのために、以下のように方程式の中に出てくる x をすべて $-x$ に置き換えた式を作る。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x) \rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial (-x)^2} + V(-x) \right) \psi(-x) = E\psi(-x) \quad (14.4)$$

¹13.1 で考えたようなポテンシャルは「無限に深い井戸型ポテンシャル」と呼ばれる。

仮定から位置エネルギーの部分は変化しない ($V(-x) = V(x)$)。また運動エネルギーの部分は $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ のように自乗の形になっているので、符号が変化しても変わらない。よって、 $\psi(x)$ が解ならば $\psi(-x)$ も解である。

$\psi(x)$ と $\psi(-x)$ が独立であるか独立でないかによって場合分けする。「独立ではない」ということは、

$$\psi(-x) = P\psi(x) \quad (14.5)$$

のように、 P という係数をつけて比例しているという意味である。ここで、

$$\psi(-(-x)) = P\psi(-x) = P^2\psi(x) \quad (14.6)$$

のように、 x の反転を2回行ったとすると、結果は元にもどるので、 $P^2 = 1$ である。必然的に、 $P = \pm 1$ となり、偶関数 ($P = 1$) か奇関数 ($P = -1$) かのどちらかとなる。

もし $\psi(x)$ と $\psi(-x)$ が独立ならば、その和や差もやはりシュレーディンガー方程式の解であるから、

$$\psi_E(x) = \frac{1}{2}(\psi(x) + \psi(-x)), \quad \psi_O(x) = \frac{1}{2}(\psi(x) - \psi(-x)) \quad (14.7)$$

という重ね合わせも解である。つまり、解は偶関数 (ψ_E) であるか、奇関数 (ψ_O) であるかのどちらかだと考えてよい。

この定理を使えば、最初から偶関数もしくは奇関数を仮定して計算をすればよいことになる。偶関数の場合、「波動関数は偶 (even) のパリティを持つ」あるいは「正のパリティを持つ」と言い、奇関数の場合は「奇 (odd) のパリティを持つ」あるいは「負のパリティを持つ」と言う。 P の値 (± 1) をパリティと呼ぶ場合もある。

ではまず偶関数の場合を考える。波動関数を

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & x < -d \\ \cos kx & -d < x < d \\ Ae^{-\kappa x} & x > d \end{cases} \quad (14.8)$$

と置く。ここでも規格化は気にしないことにしたので、中央の波動関数を $\cos kx$ と、係数 1 に選んだ。 $x < -d$ では $e^{\kappa x}$ 、 $x > d$ では $e^{-\kappa x}$ と選んだことにより、無限遠 ($x = \pm\infty$) で波動関数は 0 となる。また、この選び方により波動関数は確かに偶関数である。

接続条件として、 $x = d$ の両側で波動関数 ψ が一致しなくてはならない (微分 $\frac{d\psi}{dx}$ についても同様) ないから、

$$Ae^{-\kappa d} = \cos kd, \quad -\kappa Ae^{-\kappa d} = -k \sin kd \quad (14.9)$$

の二つの式が出る ($x = -d$ での接続は上と同じ式になるので改めて要求する必要はない)。辺々割り算すると、

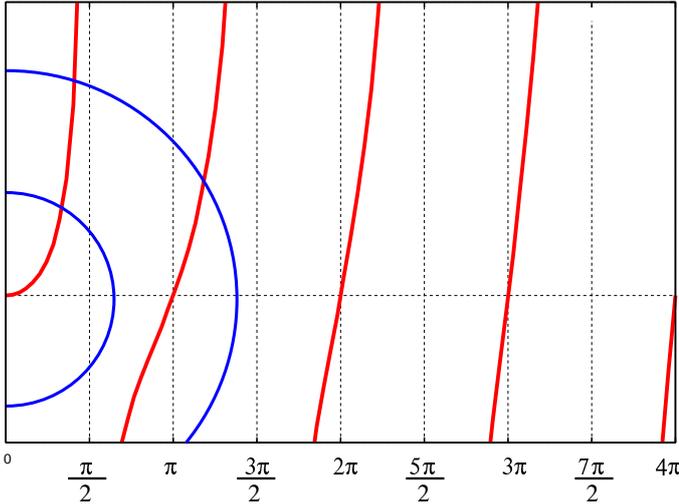
$$\frac{-\kappa Ae^{-\kappa d}}{Ae^{-\kappa d}} = \frac{-k \sin kd}{\cos kd} \quad (14.10)$$

$$\kappa = k \tan kd$$

という式が成立しなくてはならないことがわかる。 k も κ もエネルギー E で決まる量なので、この式が成立するのかどうかはちゃんと計算する必要がある。エネルギーの関係式から、 $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$, $\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = V_0 - E$ であるから、

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = V_0 \quad \text{すなわち} \quad k^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (14.11)$$

となる。



結局我々が求めるべきは $\kappa = k \tan kd$ と $k^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ という連立方程式の解である。質量 m やポテンシャルの深さ V_0 が与えられれば、この式から k, κ が計算でき、つまりは許されるエネルギー E が決まることになる。

とはいえ、この連立方程式は解析的に解を求められない(式変形で答えは出せない)ので、グラフか数値計算に頼ることになる。左の図は $\kappa = k \tan kd$ と $k^2 + \kappa^2 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$ の両方をグラフに書き込んだもの(もちろん、 $k^2 + \kappa^2 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$ が円の方)で、少しスケールを変えて横軸は kd 、縦軸は κd になっている。タンジェントの性質に

より、 $kd = m\pi$ (m は整数) では $\kappa = 0$ となる。グラフでは $\kappa < 0$ の部分も書いているが、実際にはもちろん $\kappa > 0$ でなくてはならない。

図に二つの円が書いてあるが、これは V_0 がいろんな値をとっている場合での $k^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ を表している。小さい円では $\kappa = k \tan kd$ との交点は一つしかない。一方、大きい方の円では交点は二つある。円の半径が大きくなれば (V_0 が大きくなれば) 交点の数はどんどん増えて行く。この交点の位置のエネルギーだけが許されるわけであるから、やはりエネルギーが量子化されていることになる。それゆえ、束縛されている状態の時「離散スペクトルを持つ」とか「離散的固有値を持つ」というふうに言う。グラフの形から、かならず一つは交点があることになるが、いくつあるかは d や V_0 など、問題設定によって変わる。

次に奇関数の場合を考えてみよう。

$$\psi(x) = \begin{cases} -Be^{\kappa x} & x < -d \\ \sin kx & -d < x < d \\ Be^{-\kappa x} & x > d \end{cases} \quad (14.12)$$

とおけばよい。

[問い 14-1] 接続条件を式で書け。

[問い 14-2] k と κ のグラフの概形を書いてみよ。

[問い 14-3] 偶関数解と違って、 V_0 の値によっては一つも解がない場合がある。一つも奇関数解がない条件を求めよ。

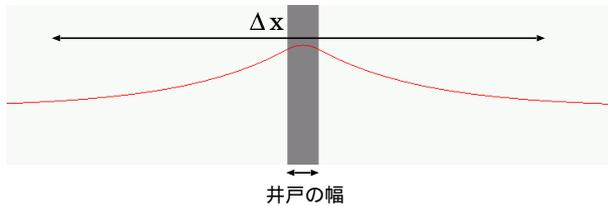
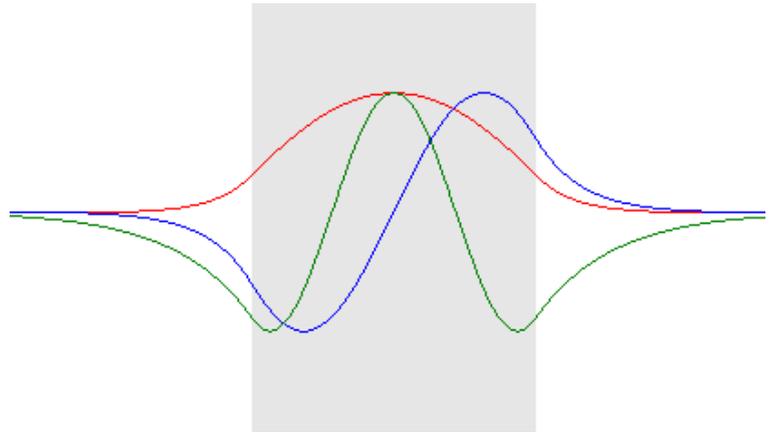
[問い 14-4] 奇関数解の中に、偶関数解と同じエネルギーを持つものがない(縮退がない)ことを示せ。

[問い 14-5] ポテンシャルの高さ V_0 が無限大の時、偶関数および奇関数の場合のエネルギー固有値が 13.1 節の答えと同じになることを示せ。

下の図はエネルギー固有値の低い方から3つ(偶関数二つ、奇関数一つ)の解をグラフで表したものである。真中の薄く塗られた部分が井戸の穴である。この中では $E_{\text{運}} > 0$ となっている(グラフの曲がり具合を確認しよう)。井戸の外では $E_{\text{運}} < 0$ となり、波動関数は急速に減衰せねばならない。エ

エネルギー固有値の大小は k の大小、つまりは運動量の大小で決まる。これより運動量の大きい、つまり波長の短い波は、この井戸の内部に閉じ込めることはできない。

この時、偶関数の最低エネルギー状態と奇関数の最低エネルギー状態では、偶関数の方がエネルギーが低い。こうなる理由としては中に入る波の山&谷の数が、偶関数の場合 1 個から、奇関数の場合 2 個から始まるということが効いている。必然的に奇関数の最低エネルギー状態の方が短い波長の波となるのである。自然はエネルギーの低い状態に落ち着こうとするという観点からすると、この場合では偶関数になりたがることになる。このような、エネルギーと波動関数の偶奇性の関係から、原子どうしの結合の時の電子の配置などに影響を与える。



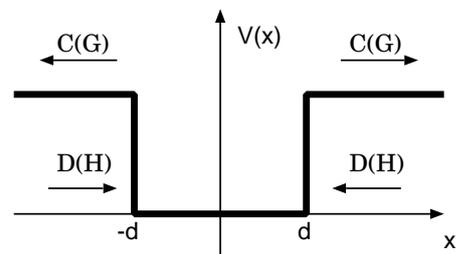
不確定性関係を使って見積もると、井戸の幅が $2d$ なので、この中に入る波は最小でも $\Delta p = \frac{h}{2d}$ ぐらいの運動量の不確定性をもたなくては行けない。そのため $\frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{h^2}{8md}$ ぐらいのエネルギーはもってしまう。そのエネルギーが井戸の深さよりも大きいと、波は外

に広がってしまうわけである。基底状態 (偶関数解で、もっともエネルギーが低く波長の長いもの) は、井戸の外まで広がるような波の形になっているおかげでこの制約をまぬがれていると言える。上の図は、狭い井戸に束縛された粒子の基底状態を示している。波の Δx が井戸の幅よりもかなり大きくなっている。

14.2 井戸型ポテンシャル：束縛されていない状態

前節では遠方で減衰する解を計算した。その条件は $V_0 > E$ であった。この条件が満たされない時は、遠方でも減衰せずに波が進行していくことになる。このような場合の解を求めよう。やはり偶関数解を仮定すると、

$$\psi(x) = \begin{cases} Ce^{-ik'(x+d)} + De^{ik'(x+d)} & x < -d \\ \cos kx & -d < x < d \\ Ce^{ik'(x-d)} + De^{-ik'(x-d)} & x > d \end{cases} \quad (14.13)$$



となる。井戸の中 ($-d < x < d$) の波動関数は偶関数であることから \cos でなくてはならない。井戸の外に関しては「偶関数だから \cos 」などと短絡的に考えてはいけない。 $x \rightarrow -x$ をすると、 $x < -d$ の領域と $x > d$ の領域が入れ替わることに注意しよう。それぞれの領域での波動関数を $\psi_{左}$ と $\psi_{右}$ とすれば、この二つの関数について $\psi_{左}(x) = \psi_{右}(-x)$ が成立せねばならない²。この条件は、二つの関数の間に関係があることを示しているのであって、けっして

²井戸内については $\psi_{内}(x) = \psi_{内}(-x)$ のように一つの関数に対して要求している。

$\psi_{\text{左}}(x) = \psi_{\text{左}}(-x)$ のような条件をつけない。だから、 $|x| > d$ の領域の関数は \cos でも \sin でもなく、一般的な波である。

また、ここでも規格化をせず（どうせこのように無限に広がった波を $\int \psi^* \psi dx = 1$ にはできない）、原点での波の振幅を 1 にしておいた。後で $x = \pm d$ を代入して接続条件を計算するので、 $Ce^{ik'(x-d)}$ のように、 $x = \pm d$ を代入した時に答えが簡単になるような形に式を選んでいる（定数 C はまだその値を決められていないので、 $Ce^{ik'x}$ と置くのと本質的には何のの違いもない）。

さて接続条件を計算すると、

$$C + D = \cos kd, \quad ik'(C - D) = -k \sin kd \quad (14.14)$$

という二つの式が出るので、これで C, D を求められる。

$$C = \frac{1}{2} \left(\cos kd + i \frac{k}{k'} \sin kd \right) \quad (14.15)$$

$$D = \frac{1}{2} \left(\cos kd - i \frac{k}{k'} \sin kd \right) \quad (14.16)$$

というのが答である。

奇関数解は同様の考察のもと、

$$\psi(x) = \begin{cases} -Ge^{-ik'(x+d)} - He^{ik'(x+d)} & x < -d \\ \sin kx & -d < x < d \\ Ge^{ik'(x-d)} + He^{-ik'(x-d)} & x > d \end{cases} \quad (14.17)$$

とにおいて、接続条件

$$G + H = \sin kd, \quad ik'(G - H) = k \cos kd \quad (14.18)$$

から、 G, H が求められる。

$$G = \frac{1}{2} \left(\sin kd - i \frac{k}{k'} \cos kd \right) \quad (14.19)$$

$$H = \frac{1}{2} \left(\sin kd + i \frac{k}{k'} \cos kd \right) \quad (14.20)$$

となった。 C, D および G, H は互いに複素共役である ($C^* = D, G^* = H$) ことに注意せよ。これは、左行きの波と右行きの波は位相がずれているだけで同じ振幅であることを意味する（そういう答えが出てくるのは当然である）。

ここで束縛されていた状態との大きな違いは、 k, k' の値にはなんら制限が付かないということである。よってエネルギー固有値 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ も $E > V_0$ であるという以外には、なんの制限もつかない。束縛状態で起こった、エネルギーの量子化は、ここでは起きない。数式上そのようになる理由は、束縛されている場合には加えられていた「遠方で増大する解が落ちる」という条件が課されていないからである。よってエネルギーは連続的な値を取れる。これを「連続スペクトルを持つ」とか「連続的固有値を持つ」とか言う。

なお、ここで求めた解は偶関数または奇関数であるため、必然的に左行きの波と右行きの波が同じ重みで（同じ振幅で）入っている。よって、「左から粒子が入射して、真中のポテンシャルで反射す

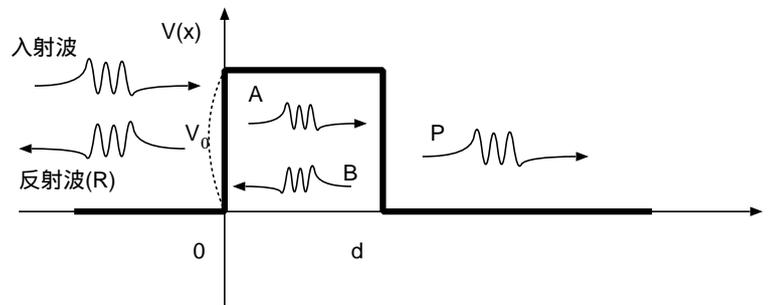
る波と、ポテンシャルを通り抜ける波に分かれる」という状況は、上の答えの中には入っていない。そのような状況にするためには、偶関数解と奇関数解を適当に組み合わせる必要がある。たとえば、(偶関数解) - $\frac{D}{H}$ (奇関数解) とすることで、

$$\psi(x) = \begin{cases} \left(C + \frac{GD}{H}\right) e^{-ik'(x+d)} + 2De^{ik'(x+d)} & x < -d \\ \cos kx - \frac{D}{H} \sin kx & -d < x < d \\ \left(C - \frac{GD}{H}\right) e^{ik'(x-d)} & x > d \end{cases} \quad (14.21)$$

という解が作れる。この解では $x > d$ の領域には左行きの波が存在しないので、左側から入射して波が反射している場合を計算していることになる。このような状況での計算については次節でより詳しく行う。

14.3 ポテンシャルの壁を通過する波動関数

次に、図のように有限の長さで有限の高さを持つ壁を考えよう。 $0 < x < d$ の間だけ $V(x) = V_0$ となり、通り抜けた後は再び $V(x) = 0$ となるようなポテンシャルである。前節の最後の計算では一部がくぼんでいたが、この節で行う計算では一部が盛り上がっている。ポテンシャルの符号が逆になっていると思えばよい。ポテンシャルの高さと入射波の運動エネルギーの大小により、ポテンシャルの高いところ(壁の内部)では古典的には運動エネルギーが正になったり負になったりすることになる。以下では二つの場合に分けて計算しよう。



14.3.1 $E > V_0$ の場合

まず、壁の左側では入射波を e^{ikx} (これを振幅1として基準にする)、反射波を Re^{-ikx} とおく。壁の内部では $Ae^{ik'x} + Be^{-ik'x}$ のように、左行きと右行きの波が共存している。壁を抜けて透過して行く粒子の波動関数が $Pe^{ik(x-d)}$ (これは右行きのみ) で表せるとしよう。例によって透過波は $Pe^{ik(x-d)}$ と書いて $x = d$ の時の値が簡単に表現できるようにした。 Pe^{ikx} と書いてももちろん支障はない。

ここで k' は

$$k' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \quad (14.22)$$

である。今の状況では虚数にならない。

次に波動関数が $x = 0$ と $x = d$ でどのように接続されるかという条件を考える。この条件は4つ出て、

$$\begin{aligned} x=0 \text{ での } \psi & 1 + R = A + B \\ x=0 \text{ での } \frac{\partial \psi}{\partial x} & ik(1 - R) = ik'(A - B) \\ x=d \text{ での } \psi & Ae^{ik'd} + Be^{-ik'd} = P \\ x=d \text{ での } \frac{\partial \psi}{\partial x} & ik'(Ae^{ik'd} - Be^{-ik'd}) = ikP \end{aligned} \quad (14.23)$$

となる。未知数4つで条件も4つなので、これで R, A, B, P はすべて求められる。計算は少々面倒であるが、ここでは結果を書いておくことにする。計算の答は

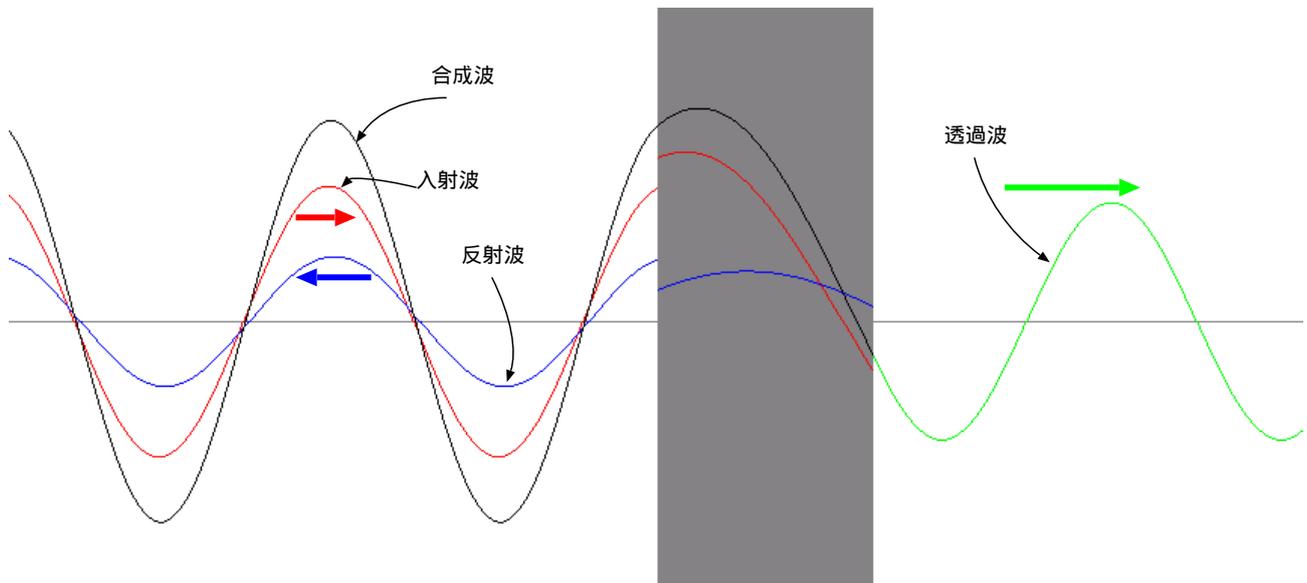
$$\begin{aligned} P &= \frac{4kk'}{D}, & A &= \frac{2k(k+k')e^{-ik'd}}{D} \\ R &= \frac{((k')^2 - k^2)(e^{ik'd} - e^{-ik'd})}{D}, & B &= \frac{2k(k'-k)e^{ik'd}}{D} \end{aligned} \quad (14.24)$$

である。ただし、共通分母 D は

$$D = (k+k')^2 e^{-ik'd} - (k-k')^2 e^{ik'd} \quad (14.25)$$

である。

この場合の波動関数のグラフの一例を下に挙げておく。



(14.24) の R の式を見るとわかるように、 $k = k'$ になるか、 $e^{ik'd} = e^{-ik'd}$ になると、反射波がなくなってしまう。 $k = k'$ になる時は、つまりポテンシャルに段差がないという場合であり、そもそも反射が起こる理由がない。また、 $e^{ik'd} = e^{-ik'd}$ になる場合というのは、 $e^{2ik'd} = 1$ になるということであり、これはつまり、壁(幅 d)を反射して返ってきた波と壁に入る前に反射した波の、経路の差による位相差 $2k'd$ が、ちょうど 2π の整数倍になるということである。これにプラスして反射による位相差 π があるため、壁の左端で反射した波と壁の右端で反射した波(この二つは一方が固定端反射ならもう一方は自由端反射する)は互いに消し合う関係にある。この干渉によってちょうど反射波が消えてしまうのである。

なお、反射波がなくなってしまう時、透過波の振幅 P はちょうど1になる。つまり、そこに壁があるにもかかわらず、まるで壁がないかのごとく粒子が通り抜けるという現象が起こりえる³。

14.3.2 $E < V_0$ の場合

$E < V_0$ の場合、すなわち $k' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$ が虚数になる場合は $k' = i\kappa$ (すなわち、 $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$) と置き換えて、

$$\begin{aligned} P &= \frac{i4k\kappa}{D}, & A &= \frac{2k(k + i\kappa)e^{\kappa d}}{D} \\ R &= \frac{(-\kappa^2 - k^2)(e^{-\kappa d} - e^{\kappa d})}{D}, & B &= \frac{2k(i\kappa - k)e^{-\kappa d}}{D} \end{aligned} \quad (14.26)$$

となる。この場合の共通分母は

$$D = (k + i\kappa)^2 e^{\kappa d} - (k - i\kappa)^2 e^{-\kappa d} \quad (14.27)$$

となる。

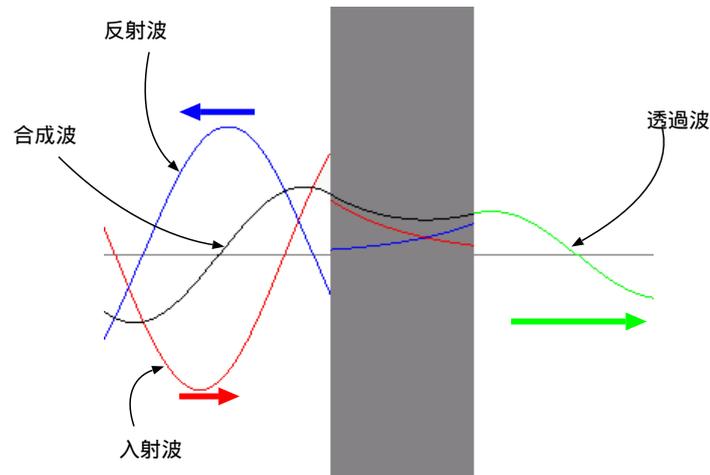
たとえ $V_0 > E$ でも、 P は0にはならない。つまり、古典的には通過できないはずの壁がそこにあっても、粒子が向こう側へ通り抜ける確率は存在しているのである。ただし、その確率振幅には $e^{-\kappa d}$ の因子がかかっているから、 d が大きい時や κ が大きい(つまり E より V_0 の方がずっと大きい) 時にはその確率は非常に0に近くなる。

なお、この場合、壁の中の波動関数は

$$Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} \quad (14.28)$$

となる。この場合、どんどん振幅が増大する波である $e^{\kappa x}$ も解の中に入って来る。壁が有限の距離しかないので、このような場合でも発散しなくてすむからである。もっとも、式の形からわかるように係数 B はだいたい $e^{-2\kappa d}$ ぐらいの大きさを持つ⁴ので、その値は A よりも小さい。

このような状態の一例が右の図である。壁内部(濃く塗られた部分)では波は振幅が減衰する波と振幅が増大する波の和になっているが、増大する方の波は小さく、全体の波の形にあまり大きな影響を与えていない。

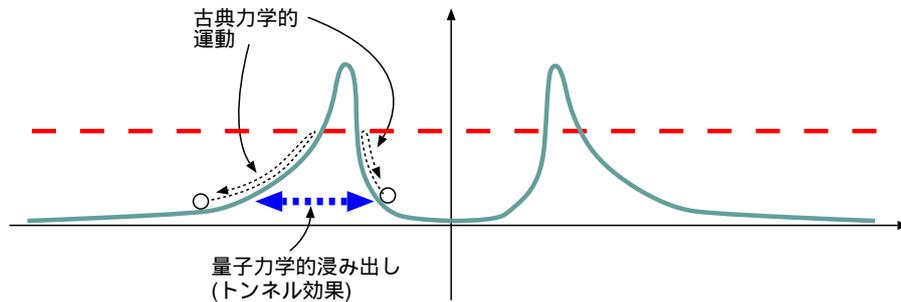


[問い14-6] k' が実数の場合も虚数の場合も、反射波の振幅 $|R|$ と透過波の振幅 $|P|$ の間には、 $|R|^2 + |P|^2 = 1$ が成立することを確かめよ。

³同様の現象を光の場合に応用した例として、ガラスなどに光の波長程度の薄膜をつけることで特定の波長の光だけが通過できるようにする技術がある。

⁴分子に $e^{-\kappa d}$ があり、分母 D の主要項は $e^{\kappa d}$ である。

このように、古典的には通り抜けることができない障壁を粒子が(まるで誰かがトンネルを掘ってくれたがごとく)通り抜けることを「トンネル効果」と呼ぶ。半導体などの中を走る電子のトンネル効果は現代のエレクトロニクスの基礎となっている。



実際にこんな現象が起きていることがいろいろな現象で確認されている。例えば原子核の崩壊(原子核内部から粒子すなわち ${}^4_2\text{He}$ の原子核が飛び出してくるという現象)は、古典的には起こり得ない。原子核の結合エネルギー(核力という力で陽子や中性子どうしが互いに引っ張りあう引力による)を計算すると、粒子は外に出ることはできない。しかし量子力学的な浸み出しによって外に出る。いったん外に出てしまうと粒子と原子核(どちらもプラスに帯電)はクーロン斥力によって離れていくので、粒子の放出が起こる(上の図参照)。

さらには、実は太陽が輝いていられるのもトンネル効果のおかげである。太陽内部では陽子(水素原子核)が衝突して核融合しているが、実は古典力学的に計算すると陽子は衝突できない。プラス電気を持っているために反発して、衝突前に離れてしまうのである。この場合のポテンシャルの壁はクーロンポテンシャル $\frac{ke^2}{r}$ である。ところが、この場合も波動関数の浸み出しによって小さい確率だが陽子と陽子が接触することができて、核融合が起こる。小さい確率なのに太陽があのように光輝いていられる理由は、その小さい確率を補うにあまりあるほど、太陽が多くの陽子を含んでいるからである。通常、ミクロな世界にだけ顔を出すとされている量子力学だが、太陽の光という、目に見える恩恵をもたらしてくれるものでもあるのである⁵。

14.4 薄い壁を通過する波動関数

このような長方形ポテンシャルで、長方形の面積を変えずに壁の幅を少しずつ狭くしていく(つまり壁の高さは高くしていく)と何が起こるかを考えておこう。シュレーディンガー方程式を $-d$ から d までという、狭い範囲で積分する。

$$\begin{aligned} \int_{-d}^d dx \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi &= \int_{-d}^d dx E \psi \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \psi \right]_{-d}^d &= \int_{-d}^d dx (E - V(x)) \psi \\ \frac{d}{dx} \psi(d) - \frac{d}{dx} \psi(-d) &= -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{-d}^d dx (E - V(x)) \psi \end{aligned} \quad (14.29)$$

⁵さらには宇宙の始まりすら「無」からトンネル効果で産まれたなどと言う人もいる。何年か前に「虚数の時間で考えれば、宇宙には始まりも終わりもない」と言うホーキングの言葉がCMで使われていたが、あの「虚数の時間」というのはトンネル効果を意味している。ここまでの式でも、 $k \rightarrow i\kappa$ と波数(運動量)を虚数にするとトンネル効果が記述できている。これは虚数の時間を使っていることに対応する。もっとも、ほんとうに宇宙がトンネル効果で始まったのかどうかはまだわからない。

この式の右辺はもし $V(x)$ に発散がないなら $d \rightarrow 0$ で 0 になり、微分 $\frac{d}{dx}\psi$ は連続的につながる。しかしもしこの範囲で $V(x) = V_0\delta(x)$ のような発散があれば、

$$\lim_{d \rightarrow 0} \left(\frac{d}{dx}\psi(d) - \frac{d}{dx}\psi(-d) \right) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) \quad (14.30)$$

となり、微分が $x = 0$ の点で不連続となる (だいたい、右の図のような状況となる)。

$x = 0$ の点にだけこのデルタ関数的発散をするポテンシャルがある場合、つまり定常状態のシュレーディンガー方程式が

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0\delta(x) \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (14.31)$$

で表される場合を考えよう。 $x = 0$ 以外では自由なシュレーディンガー方程式が成立しているのだから、解は $Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ の形になる (当然、 $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$)。 $x > 0$ と $x < 0$ で係数 A, B が変化するだろう。これまで同様、入射波+反射波を $e^{ikx} + Re^{-ikx}$ 、透過波を Pe^{ikx} とおけば、接続条件は

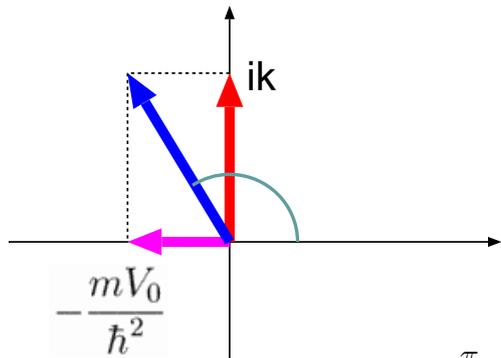
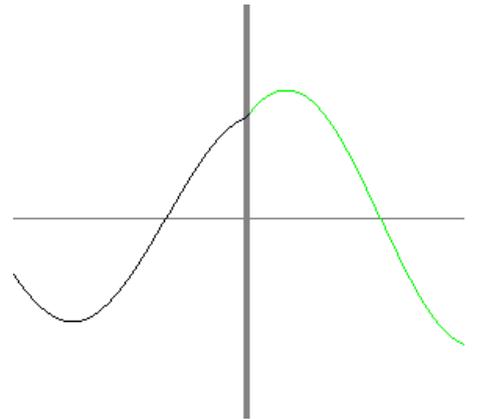
$$1 + R = P, \quad ikP - ik(1 - R) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}P \quad (14.32)$$

となる。二つめ (微係数の接続) にデルタ関数的ポテンシャルの影響が現れている。

この式の右辺は (境界の右の領域での $\frac{d\psi}{dx}$) - (境界の左の領域での $\frac{d\psi}{dx}$) という形になっていることに注意せよ。この解は

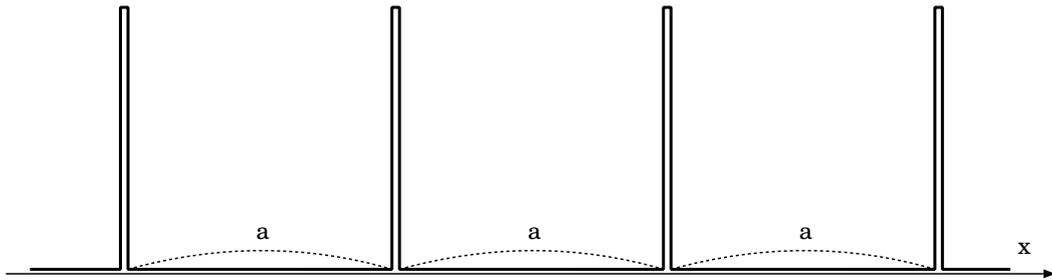
$$P = \frac{ik}{ik - \frac{mV_0}{\hbar^2}}, \quad R = \frac{\frac{mV_0}{\hbar^2}}{ik - \frac{mV_0}{\hbar^2}} \quad (14.33)$$

となる。 P, R はどちらも複素数になるので、反射、透過の際に位相がずれることがわかる。左の図は、 P の分子と分母の持つ位相を表現したものである ($V_0 > 0$ として書いた)。この位相は P の分子の持つ位相 $\frac{\pi}{2}$ より大きいので、割り算の結果である P はマイナスの位相を持つ⁶。 $V_0 > 0$ のポテンシャルはその場所で位相を減らす (つまり、波が進行方向に対してバックする)。逆に $V_0 < 0$ のポテンシャルはその場所の位相を増やす (波を少し進行方向にシフトする)。この関係は、次の節で波が存在できる条件に効いてくる。



⁶ $\frac{e^{i\alpha}}{e^{i\beta}} = e^{i(\alpha-\beta)}$ となることに注意。

14.5 1次元周期ポテンシャル内を通過していく波動関数



位置エネルギー $V(x)$ が

$$V(x+a) = V(x) \quad (14.34)$$

のような周期性を持つ場合のシュレーディンガー方程式を解こう。このような周期的ポテンシャル内での波動関数は、「固体中の電子が、規則正しく並んだ原子核の間を通り抜けて行く」ような現象をモデルにしたものと考えることができ、固体の電氣的性質を量子力学を用いて考える手がかりとしては有用である。もちろん、まじめにやるにはここでやるように1次元でやっていたのではだめで、3次元でちゃんとシュレーディンガー方程式を解かなくてはならない。しかし、1次元でも面白い現象はちゃんと起こる。

上の周期的条件はポテンシャルに対するもので、波動関数に対するものではない。前に周期境界条件を考えた時には波動関数自体に $\psi(x+a) = \psi$ という条件を置いたが、ここでは少しだけ条件をゆるめて、

$$\psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x) \quad (14.35)$$

と置く (Bloch の条件と呼ばれる)。 K は定数であり、一周ごとに Ka だけ位相が変化すると考えていることになる。波動関数に周期境界条件を置いた時はいわば空間自体をまるめて左端と右端がつながっているような状況を考えてののだが、今は空間自体は無限にひろがっていて、その空間内に周期的なポテンシャルがおかれている状態を考えている。だから波動関数が一致する必要はない。問題設定が周期的なのだから、波動関数も観測の範囲内では同じ状態になっているだろう。しかし上のように位相がずれることは許される。この位相差があっても、

$$\psi^*(x+a)\psi(x+a) = \psi^*(x)\psi(x) \quad (14.36)$$

は成立しているからである。このように考えると Bloch の条件が出てくるのが納得できる⁷。この K は $x = na$ (n は整数) で表される点だけに着目した時に波数 (すなわち、位相変化 ÷ 距離で計算される量) のように見える量である。 $x = na$ 以外の点もみると、複雑な波ができていたのだが、そこを見ずに $x = na$ のポイントだけをみて判断すると、波動関数は e^{iKx} であるかのごとく見える。

計算を簡単にするため、ポテンシャルとしては前節の最後に示したようなデルタ関数的ポテンシャルが周期的にならんでいるものを考えよう。 $x = ma$ (m は整数) に $V_0\delta(x - ma)$ で表現される「幅は狭いが高さの高い壁」があるという状況である。この時の波動関数の解を

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (14.37)$$

⁷波動関数がこの形になることは Bloch の定理と呼ばれ、厳密な証明があるが、ここではだいたいの雰囲気としてこう考えておくことにする。

とおく。 $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$ なのはこれまで通りである。ただしこの式が成立するのは $0 \leq x < a$ の範囲である ($x=0$ や $x=a$ では波動関数がなめらかにつながらない)。 $a \leq x$ の範囲や $x < 0$ の範囲には別の関数となる。たとえば $a \leq x < 2a$ の範囲にあったならば、その時の波動関数の値は

$$\begin{aligned}\psi(x) &= e^{iKa} \psi(x-a) \\ &= e^{iKa} (Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)})\end{aligned}\quad (14.38)$$

となる。 $0 \leq x-a < a$ であるため、 $\psi(x-a) = Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)}$ と書くことができることに注意。同様に $ma \leq x < (m+1)a$ (m は整数) であったならば、 $\tilde{x} = x - ma$ として、 \tilde{x} が $0 < \tilde{x} < a$ の範囲に入るようにする。この領域での $\psi(x)$ は

$$\psi(x) = \psi(\tilde{x} + ma) = (e^{iKa})^m \psi(\tilde{x}) = e^{imKa} (Ae^{ik\tilde{x}} + Be^{-ik\tilde{x}})\quad (14.39)$$

となる。

今考えている波動関数は、 $x=0$ や $x=a$ (一般には $x=ma$) の左右で関数形が変わるから、そこでうまくつながるように接続条件を設定しよう。つまり、(14.37) で $x \rightarrow a$ としたものと、(14.38) で $x \rightarrow a$ としたものを比較する。

結果は

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = e^{iKa} (A + B)\quad (14.40)$$

$$ike^{iKa} (A - B) - ik (Ae^{ika} - Be^{-ika}) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} (Ae^{ika} + Be^{-ika})\quad (14.41)$$

という式である。この式を解いて A, B を求めるわけであるが、この式を行列を使って書くと、

$$\begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ e^{iKa} - e^{ika} & -e^{iKa} + e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{iKa} & e^{iKa} \\ \frac{2mV_0}{ik\hbar^2} e^{ika} & \frac{2mV_0}{ik\hbar^2} e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}\quad (14.42)$$

であり、整理すると、

$$\begin{pmatrix} e^{ika} - e^{iKa} & e^{-ika} - e^{iKa} \\ e^{iKa} - e^{ika} - \frac{2mV_0}{ik\hbar^2} e^{ika} & -e^{iKa} + e^{-ika} - \frac{2mV_0}{ik\hbar^2} e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0\quad (14.43)$$

である。もしこの行列に逆行列が存在したら、それを両辺にかけることで A も B も 0 という答えが出てしまう。これは粒子がどこにもいないということになって意味のない解である。そこで逆行列が存在しない、つまり行列式=0 という条件をおく。

行列式の基本変形などを使って整理すると、

$$\cos Ka = \cos ka + \frac{mV_0}{\hbar^2 k} \sin ka\quad (14.44)$$

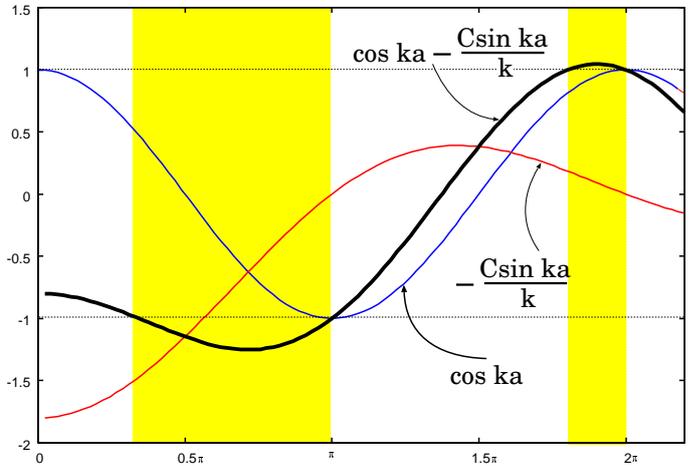
という式ができる⁸。

⁸ここでは k が実数として考えたが、もちろん k が虚数になる事もありえて、その場合、 $k = i\kappa$ とすると、 $\cos Ka = \cosh \kappa a + \frac{mV_0}{\hbar^2 \kappa} \sinh \kappa a$ という式になる。 κ がある値より小さいところでしか解は存在しない。

[問い 14-7] 確認せよ。

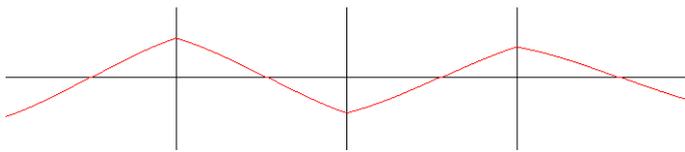
この式の右辺は、 $\cos ka$ という振幅 1 の振動と、振幅が $\frac{1}{k}$ に比例する $\sin ka$ による振動の和であり、 k などの値によっては絶対値が 1 より大きくなることは有り得る。一方左辺は $-1 < \cos Ka < 1$ という範囲の量である。それゆえ、 k の値によってはこの方程式に解がなくなり、そのような波数 k を持った波はこの空間内に存在できない。

具体的に数値をいれて (14.44) の右辺のグラフを書いてみると例えば右の図のようになり、 $|\cos Ka|$ が 1 を越えないと条件が満たせない領域が現れる (グラフに網掛けで表した)。この粒子が存在し得ない領域を「禁止帯」と呼ぶ。粒子のエネルギー・運動量のこのような制限を「バンド構造」と呼ぶ。束縛された状態については、エネルギーの値が離散的に制限されるという条件がついたのであるが、この場合には離散的ではないがやはりエネルギーの値に制限が加えられたことになる。



なお、グラフでは、定数 $\frac{mV_0}{\hbar^2}$ を $-C$ と書いていて、 $V_0 < 0$ の場合である⁹。

禁止帯に近いところで実際にどのような波ができていくかのグラフを示そう。



左の図はもっとも k が小さい (エネルギーの低い) ところにある禁止帯より、少しだけエネルギーが低い状態の波動関数の実数部分のグラフである。デルタ関数ポテンシャルが存在しているところで、波動関数が折れ曲がっている (一階微分が繋がっていない) ことが確認できる。

この折れ曲がりがあるせいで、このポテンシャル内を通り抜ける波は波長 $\frac{2\pi}{k}$ よりも短い距離で一回振動することになる。この折れ曲がりが大きくなると、もはやちゃんとつながる波を作ることができなくなり、波が存在できなくなるわけである。

なお、この時の波の状態はほとんど定常波に近い。この付近ではほとんど $|A| = |B|$ (つまり左行きの波と右行きの波の振幅が同一に近い) になっているのである。このことは以下の計算でわかる。

(14.43) の行列の行列式が 0 になるということは、この行列から得られる二つの式 (A, B の一次式) が独立な式にならないということなので、簡単な方だけを考えてもよい。 A, B が満たすべき式は

$$(e^{ika} - e^{iKa}) A + (e^{-ika} - e^{iKa}) B = 0 \tag{14.45}$$

をとって考えると、

$$B = -\frac{e^{ika} - e^{iKa}}{e^{-ika} - e^{iKa}} A \tag{14.46}$$

⁹電子と原子核の場合、引力が働くから $V_0 < 0$ と考えられる。

となる。グラフからわかるように、最初の禁止帯に近い位置というのは $\cos Ka = -1$ になろうとすると、この時 $\frac{e^{ika} - e^{iKa}}{e^{-ika} - e^{iKa}}$ は絶対値1に近づく。

なお、上の式は、

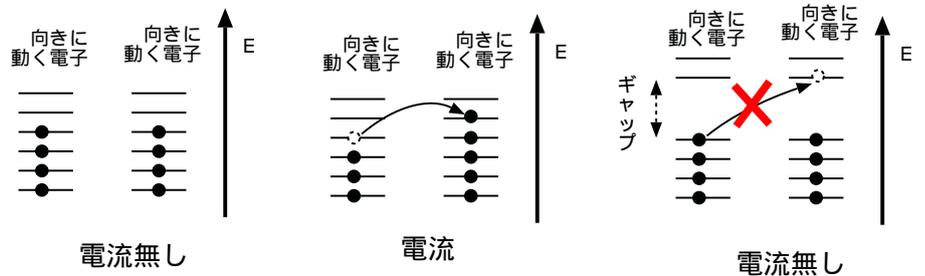
$$\frac{B}{A} = \frac{e^{i(k+K)a/2} (e^{i(k-K)a/2} - e^{i(K-k)a/2})}{e^{i(-k+K)a/2} (e^{i(-k-K)a/2} - e^{i(K+k)a/2})} = e^{ika} \frac{\sin \frac{(k-K)a}{2}}{\sin \frac{(K+k)a}{2}} \quad (14.47)$$

のように表示できる。分子と分母の \sin は位相が Ka だけ違うので、 $Ka = n\pi$ の時 (すなわち、ちょうど禁止帯の境界 $\cos Ka = \pm 1$ のところ) に分子と分母の絶対値が等しくなり、 $|A| = |B|$ となることが確認できる。

すでに述べたようにこのようなポテンシャルは結晶のように規則的に並んだ原子の間に存在する電子の感じるポテンシャルをモデル化したものと考えることができる。実際に物質中の電子の状態にはバンド構造が現れる。自由に空間内を飛び回っている電子はどんなエネルギーでも持つことができるが、物質中ではそうではない。この空白部分を「エネルギーギャップ」などと呼ぶ。

物質内部の電子一個一個はここで求めたような波動関数で表せる状態にある。この物質に電流が流れていない時は、いろいろな方向へ進む電子それぞれの持つ運動量が互いに打ち消し合って、全体としては運動していない。電圧をかけるなどすると電流が流れるが、その時は電子のうち一部が最初持っていたよりも大きなエネルギーを持つ必要がある (下図左から中央への変化)。

ここでは詳しく述べないが、電子はフェルミ統計に従う (つまり、二つ以上の電子が同じ状態に属せない)。そして、電流が流れていない (外からエネルギーが与えられていない) 時の電子群は、エネルギーの低い状態に詰まったような状態になっている。

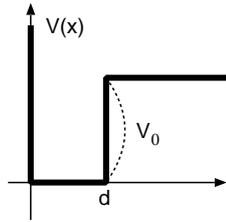


その状態から電流が流れる状態に変化するためには、電子のうちどれかの状態が、最初持っているよりも少しだけ大きいエネルギーの状態に変化しなくてはならない。

しかし、ちょうどその「最初持っていたよりも少しだけ大きいエネルギー」の状態にエネルギーギャップがある (つまり、今より運動量の大きい状態に変化するためには、禁止帯を越えなくてはならない) と、電子は簡単には動き出すことができない (一番右の図)。このような場合、電子は大きなエネルギーを与えない限りは自由に動けず、電気が流れない。物質が絶縁体になったり導体になったり、あるいは半導体になったりする理由は、このような電子の波動関数の持ち得る状態に深く関与しているのである。

14.6 練習問題

[演習問題 14-1]



$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < d \\ V_0 & d < x \end{cases} \quad (14.48)$$

と表現される、ポテンシャル（左のグラフで表される）の中に束縛された粒子のシュレーディンガー方程式を解け。

束縛状態が存在する条件は何か？

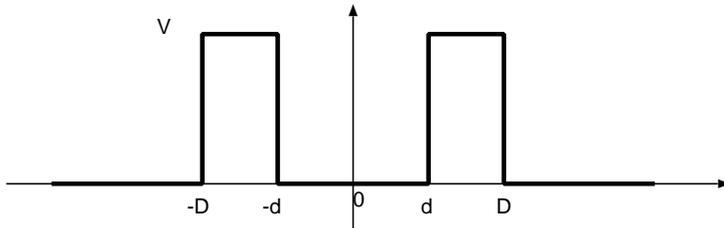
(hint: 計算の筋道は 14.1 節の奇関数の場合と同様になる)

[演習問題 14-2]

系が空間反転 $x \rightarrow -x$ に対して対称であるときには波動関数が偶関数または奇関数であるという定理を証明することができた。同様に系が時間反転 $t \rightarrow -t$ に対して対称である時、波動関数はどのような性質を持つか、考察せよ。

[演習問題 14-3]

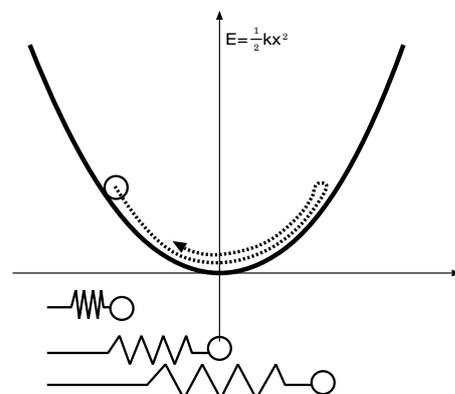
図のように二つのポテンシャル壁がある。ポテンシャルの高さ V は、粒子の持つエネルギー E より大きいとする。



E, V, m, d (m は粒子の質量) がある条件を満たすと、壁にはさまれた領域 ($-d < x < d$) の波動関数は外側に比べて大きい振幅を持つことができる。偶関数定常解の場合で、その条件を求めよ。

第15章 調和振動子

この章では粒子がポテンシャルエネルギー $\frac{1}{2}kx^2$ で表されているようなポテンシャル内に存在している場合について解く。古典的に考えるならばこれはばねにつながれた粒子の運動である。「ばねにつながれた量子力学的粒子なんてないから、こんな問題は単なる練習問題であって、現実的な物理と関係ないだろう」などと思っはいけない。むしろ逆に、現実的な物理のいろんなところでこの調和振動子は顔を出すのである。というのは近似的に考えれば多くの力学系が平衡点を中心として変位に比例するような力を受けている物体と考えることができるからである。たとえば固体の分子に発生する振動も調和振動子と考えてよい。



また、電磁場など、連続的に空間に広がっているような系も、フーリエ変換などの技法を用いてうまく分解してやることで調和振動子の集まりと考えることができる場合が多い。そもそも量子力学の始まりはプランクが光（電磁場）のエネルギーの変化量が $nh\nu$ のように $h\nu$ の整数倍に「量子化」されることに気づいたからであった。以下で具体的計算を述べるが、 $nh\nu$ のようにエネルギーが量子化されることはまさに調和振動子の特徴である。つまり調和振動子は最初に見付けられた量子力学的系であるとも言える。理論的にも応用的にも、調和振動子の量子力学は非常に重要なのである。

15.1 1次元調和振動子のシュレーディンガー方程式

1次元調和振動子を古典力学で扱う場合、ハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (15.1)$$

である（ばね定数 k を $m\omega^2$ と置いた）。これを量子力学で考えるには、シュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (15.2)$$

を、無限遠で0になるという境界条件で解いていけばよい。この境界条件は、無限遠では位置エネルギー $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ が無限大となることを考えれば当然である。

まず方程式の無次元化を行っておくと便利である。無次元化とは、方程式の変数（今の場合 x で、長さの次元を持っている）を次元のない変数に変更することである。

無次元化のために、 $x = \alpha\xi$ として、 ξ が無次元の量であり、 α が長さの次元を持っているとする。
 $\frac{d}{dx} = \frac{1}{\alpha} \frac{d}{d\xi}$ と変化するから、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m\alpha^2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\alpha^2\xi^2 \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (15.3)$$

ここで両辺を $\hbar\omega$ で割って右辺の係数を無次元化する（なぜ $\hbar\omega$ を使うのかについては、下の問いを参照）

$$\left(-\frac{\hbar}{2m\omega\alpha^2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{m\omega\alpha^2}{2\hbar}\xi^2 \right) \psi(x) = \frac{E}{\hbar\omega}\psi(x) \quad (15.4)$$

$\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, $E = \left(\lambda + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ としておく¹と係数が簡単になって

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \psi = \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) \psi(x) \quad (15.5)$$

という形になる。ここではちゃんと代入しながら無次元化を行ったが、実は無次元化することとは「 \hbar や m や ω など、次元を持った定数をすべて1だとする（これらが1になるような単位系を使って問題を解く）」と同じことなので、(15.2)を見て、「はい、今から \hbar と m と ω が1になるような単位系で計算しますよ！」と宣言して、いっきに

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \psi = \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) \psi(x) \quad (15.6)$$

無次元化

と書き下してもよい（計算としてはもちろんこっちの方が楽である）。

【よくある質問】

「なんでもかんでも1にしてしまっって、後で測定値と比較する時に困らないのですか？」

大丈夫。計算結果が出た後で、次元のある元の単位系にちゃんと戻ってこれるので心配する必要はない。今、「長さ」「時間」「質量」と3つの次元があり、1にしてしまった定数も \hbar, m, ω と3つある。しかも、この3つの定数の次元は独立であり、長さの次元を2通りの方法で作れたりはいしない。このような場合、後で「次元があうように定数の組み合わせをかける」という作業をやれば、通常の単位系での表現に戻る。たとえば無次元化した後エネルギーを計算して1.5という答えが出たのであれば、これに $\hbar\omega$ をかけて $1.5\hbar\omega$ としたものが次元のある単位系でのエネルギーである。 \hbar, m, ω を使ってエネルギーの次元の量を作ろうとすると、 $\hbar\omega$ 以外にないことはすぐにわかる。

[問い15-1] \hbar, m, ω を使って作ることができるエネルギーの次元の量は $\hbar\omega$ (の定数倍) しかないことを示せ。

[問い15-2] 長さの次元のある量を作れ。上で使った α と同じであることを確認せよ。

[問い15-3] 計算の結果、周期が 2π と出たとする。次元を復活させるとどうなるか。

¹ λ は無次元の定数。 $+\frac{1}{2}$ をつけて定義したのは、後で出てくる式を簡単にするため。

このようにして無次元化することには、「計算式が簡単になる」という自明の利点の他に、一般的な問題になる。物理においては、一見違うように見える現象が、同じ方程式で記述できることがよくある。無次元化しておくともこれを見つけやすい。無次元になるということは、その系に特有な情報(長さ何オングストロームだとか質量何グラムだとか)が消え失せて、数学的な表現だけが残るということである。実際、ここで求める方程式はいくつかの変形の後、エルミートの微分方程式²と呼ばれる有名な式になる。

変数の大きさに普遍的意味がある。長さの次元のある変数の場合、「1より小さい」とか「大きい数である」ということにはあまり意味がない。メートルを単位とするかミリメートルを単位とするかで、値そのものは1000倍違ってしまう。問題によっては『0.001メートルだから短い』と考えることもあれば『1ミリだから無視できない』と考えることもある。無次元化することで「今考えている問題にとって、この数字は大きいのか小さいのか」を判断できる。

というようなメリットがある。

【補足】 この部分は授業では話さない可能性もあるが、その場合は読んでおいてください。

ここで、全エネルギーよりも大きいポテンシャルエネルギーの壁にあたった時、波動関数がどのようにふるまったかを思い出そう。全エネルギー E 、位置エネルギー V で、 $V > E$ の時、波動関数は $e^{-\kappa x}$ のような減衰関数になり、その $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$ であった。この時は V が定数であったが、今は $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ と x の関数になっている。定数 κ に対して \exp の肩が $-\kappa x$ となったのだから、 κ が x の関数 $\kappa(x)$ となれば、 \exp の肩は $-\int \kappa(x) dx$ 、すなわち

$$-\int \sqrt{\frac{2m\left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - E\right)}{\hbar}} dx \quad (15.7)$$

のような積分になるだろうと予想される。ここで $x \rightarrow \infty$ での状況を考えるならば、 E は無視できるので、

$$-\int \frac{\sqrt{m^2\omega^2 x^2}}{\hbar} dx = -\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2 + C = -\frac{1}{2} \xi^2 + C \quad (15.8)$$

と予想される。よって無限遠でのこの波動関数は $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ に比例するだろう。

【補足終わり】

無限遠でのこの波動関数は $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ に比例することは方程式の形からもわかる。無限遠方すなわち $|\xi| \rightarrow \infty$ では、 ξ に比べて他の定数部分は無視できるから、この方程式は近似的に

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \psi = \xi^2 \psi \quad (15.9)$$

という形になる。それゆえ、「二階微分すると ξ^2 が前に出てくるような関数」になっているだろう。 $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ は一階微分すると $-\xi$ が前に出てくる関数であるから、これを満たしている(厳密に計算すると多少ずれるが、そのずれは $|\xi| \rightarrow \infty$ で無視できる量)。この条件だけならば $e^{\frac{1}{2}\xi^2}$ も OK だが、この解は遠方で発散するので有り得ない。

²同一人物の仕事なのでこういう名前と呼ばれるわけであるが、エルミート演算子とは別に関係ない。実は量子力学ができる前から知られていた。

こうやって求めた漸近解 $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ を元の方程式の左辺に代入すると、

$$\begin{aligned} \left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}\xi^2\right)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} &= -\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\xi^2}e^{-\frac{1}{2}\xi^2} + \frac{1}{2}\xi^2e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ &= -\frac{1}{2}\frac{d}{d\xi}\left(-\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right) + \frac{1}{2}\xi^2e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ &= \frac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}\xi^2} - \frac{1}{2}\xi^2e^{-\frac{1}{2}\xi^2} + \frac{1}{2}\xi^2e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ &= \frac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \end{aligned} \quad (15.10)$$

となり、この関数が $\lambda = 0$ すなわち $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ の時の解になっていることがわかる。これでとりあえず、一つの解

$$\psi = Ae^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (15.11)$$

が求まった。この場合、 $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ である。実はこれが解の中では最低のエネルギー固有値を持つもので、基底状態の波動関数である。

【補足】 この部分は授業では話さない可能性もあるが、その場合は読んでおいてください。

具体的に解く前に、前に調和振動子の場合のエネルギーがどのようになるかをボーア・ゾンマーフェルトの量子化条件を使って計算したときのことを思いだそう。エネルギーが E の時、調和振動子の運動の位相空間での表現は右の図のようになり、 p 方向の径が $\sqrt{2mE}$ 、 x 方向の径が $\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$ の楕円で表された。この楕円の面積が h の整数倍で表されるというのがボーア・ゾンマーフェルトの条件であった。長径 a 、短径 b の楕円の面積は πab であるから、これから出る条件は

$$\pi\sqrt{2mE} \times \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = n \quad (15.12)$$

となつて、これから $E = n\hbar\omega$ という解が得られることになる。

ところで今求めた解はエネルギーが $\frac{1}{2}\hbar\omega$ であった。ボーア・ゾンマーフェルトの条件から出した式と比較すると、エネルギーの原点が $\frac{1}{2}\hbar\omega$ だけずれていると解釈できる。今から方程式を解いていくわけだが、結果として求められるエネルギー固有値は

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (15.13)$$

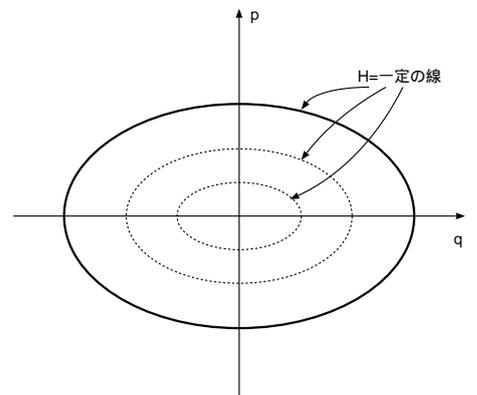
という形になるだろうと予想することができるだろう。

【補足終わり】

今求めた解、すなわち $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ の時以外でも、解は遠方では $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ の形になると考えられるので、

$$\psi = H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (15.14)$$

と置いてみよう。ただし、 $H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ は $|\xi| \rightarrow \infty$ で 0 に収束すると条件を満たしている ($H(\xi)$ をかけたことで「無限遠で 0」という性質を失わない) とする。元の微分方程式にこれを代入して $H(\xi)$ に対



する微分方程式を作ると、

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2}(\xi) - 2\xi \frac{dH}{d\xi}(\xi) + 2\lambda H(\xi) = 0 \quad (15.15)$$

となる。この式は量子力学の誕生以前に知られていたエルミートの微分方程式である。

[問い 15-4] 実際に (15.15) という結果が出ることを確かめよ。

後はこの $H(\xi)$ を求めればよい。よく使われるのは、 $H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \xi^n$ のように級数展開を使って、 C_n を一個一個決めていくという方法である。実はもう少し楽な方法があるのだが、それは後に回して、まず級数展開を使った解法を記しておく。

【補足】 この部分は授業では話さない可能性もあるが、その場合は読んでおいてください。

15.2 級数展開によるエルミートの微分方程式の解

まず、未知の関数 $H(\xi)$ が

$$H(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j \quad (15.16)$$

と展開されていると仮定する。 $\xi = 0$ で $H(\xi)$ は正則でなくてはならないから、この展開は ξ の 0 次以上のべきだけを含む。

ポテンシャルが偶関数なので、解は偶関数または奇関数に限られることになるが、ここでは一般的に書いた(後でどちらかになることがわかる)。

式 (15.15) は、 ξ に関する恒等式であるから、 ξ の各次数ごとに成立しなくてはならない。そこでこれに (15.16) を代入して、 ξ の $m-2$ 次になる項を考えよう。

$\frac{d^2 H}{d\xi^2}$ の項からは、 $a_m \xi^m$ の項を 2 階微分して得られる $m(m-1)a_m \xi^{m-2}$ という項が出る。 $2\xi \frac{dH}{d\xi}$ の項からは、 $a_{m-2} \xi^{m-2}$ を 1 階微分してから 2ξ をかけた、 $2(m-2)a_{m-2} \xi^{m-2}$ が、 $2\lambda H(\xi)$ の項からは $2\lambda a_{m-2} \xi^{m-2}$ が出るから、

$$m(m-1)a_m - (2(m-2) - \lambda)a_{m-2} = 0 \quad (15.17)$$

となる。これはつまり、 $a_m = \frac{2(m-2) - \lambda}{m(m-1)} a_{m-2}$ ということである。ここで、この式の $m \rightarrow m-2$ とずら

すと、 $a_{m-2} = \frac{2(m-4) - \lambda}{(m-2)(m-3)} a_{m-4}$ という式を作ることができる。つまり、「 a_m を、 a_{m-2} を使って表す。その a_{m-2} を、 a_{m-4} を使って表す」という計算をしていくと、 a_m をどんどん「より m の小さい a_m 」で書き表すことができる。結果として、

$$a_m = \frac{2(m-2) - \lambda}{m(m-1)} a_{m-2} = \frac{(2(m-2) - \lambda)(2(m-4) - \lambda)}{m(m-1)(m-2)(m-3)} a_{m-4} \\ = \begin{cases} \frac{(2(m-2) - \lambda)(2(m-4) - \lambda)(2(m-6) - \lambda) \cdots (2 \times 2 - \lambda)(-\lambda)}{m(m-1)(m-2)(m-3)(m-4) \cdots 3 \times 2 \times 1} a_0 & m \text{ が偶数} \\ \frac{(2(m-2) - \lambda)(2(m-4) - \lambda)(2(m-6) - \lambda) \cdots (2 \times 3 - \lambda)(2 \times 1 - \lambda)}{m(m-1)(m-2)(m-3)(m-4) \cdots 3 \times 2 \times 1} a_1 & m \text{ が奇数} \end{cases} \quad (15.18)$$

という風に a_m が求められるということである。 m が偶数ならば a_0 に比例し、 m が奇数ならば a_1 に比例することになる。

ここで、この級数が $m \rightarrow \infty$ まで続くと困るということを指摘しておこう。もし続いたとする。 $\frac{a_m}{a_{m-2}} = \frac{2(m-2) - \lambda}{m(m-1)}$ の、 $m \rightarrow \infty$ での極限は $\frac{2}{m}$ である。これは

$$e^{\xi^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \xi^{2n} \quad (15.19)$$

の m 次の項である $\frac{1}{(m/2)!} \xi^m$ と $m-2$ 次の項である $\frac{1}{(m/2-1)!} \xi^{m-2}$ の係数の比に等しい。つまり、次数の高いところではこの級数は e^{ξ^2} に比例するような増大の仕方をするようになる。これは $H(\xi)$ の後ろに $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ がかかっていることを考えにいれてもなお、 $\xi \rightarrow \infty$ で発散する量となっており、今考えている問題の解として不適である。せっかく $H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ という無限遠で減衰するような形の解を仮定したのに、 $H(\xi) \simeq e^{\xi^2}$ になってしまったら、結局解は $e^{\frac{1}{2}\xi^2}$ になってしまう³。そうならないために、 $H(\xi)$ は有限次の多項式にならなくてはならないのである⁴。

そこで、

$$H_n(\xi) = \sum_{i=0}^n a_i \xi^i \quad (15.20)$$

のように、 ξ の展開は n 次で終わるものとする。そのための条件を求めよう。微分方程式に現れる項のうち次数の高い部分を並べてみると、

$$\begin{aligned} \frac{d^2 H_n(\xi)}{d\xi^2} &= n(n-1)a_n \xi^{n-2} + \dots \\ -2\xi \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} &= -2na_n \xi^n - 2(n-1)a_{n-1} \xi^{n-1} - 2(n-2)a_{n-2} \xi^{n-2} + \dots \\ 2\lambda H_n(\xi) &= 2\lambda a_n \xi^n + 2\lambda a_{n-1} \xi^{n-1} + 2\lambda a_{n-2} \xi^{n-2} + \dots \end{aligned} \quad (15.21)$$

となるが、この ξ^n の項が消えるためには、 $\lambda = n$ でなくてはならない。この場合、 ξ^{n-1} の項は $(-2(n-1) + 2n)a_{n-1} \xi^{n-1}$ となるから、 $a_{n-1} = 0$ でなくてはならない。漸化式から必然的に a_{n-3} も a_{n-5} も 0 となる。つまり、 n が偶数なら奇数次の係数はすべて 0、 n が奇数なら偶数次の係数はすべて 0 である。偶関数が奇関数が解になるという最初の予想が確認された。

その次を考えると、

$$n(n-1)a_n - 2(n-2)a_{n-2} + 2na_{n-2} = 0 \quad \text{ゆえに} \quad a_{n-2} = -\frac{n(n-1)}{4}a_n \quad (15.22)$$

が成立することになり、これから a_{n-2} が求められる。

このようにして順番に a_n を求めていけば、 $H(\xi)$ を求めることができる。具体的に求めると、 n 次式である $H(\xi)$ を $H_n(\xi)$ と表すことにすれば、

$$H_0(\xi) = 1 \quad (15.23)$$

$$H_1(\xi) = 2\xi \quad (15.24)$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 \quad (15.25)$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \quad (15.26)$$

$$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \quad (15.27)$$

\vdots

³ さっき「これは不適」として捨て去った $e^{\frac{1}{2}\xi^2}$ がゾンビのように復活しているのである。

⁴ 波動関数が無限遠まで広がらない、という条件をつけたことで、エネルギー固有値が制限された。井戸型ポテンシャルでも同様にエネルギーが離散的になったのは無限に広がらない場合であったことを思いだそう。エネルギーが量子化されるのは、粒子が束縛されている場合に限るのである。

のような感じになる。一般式は

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \quad (15.28)$$

である。この一般式の導出はここでは省略する。後で示す演算子での計算法を使って求めた方がずっと楽だからである。この $H_n(\xi)$ をエルミート多項式と呼ぶ。

ここでは規格化がされておらず、エネルギー $(m + \frac{1}{2})\hbar\omega$ を持つ波動関数とエネルギー $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ を持つ波動関数の内積は

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi (H_m(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2})^* H_n(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi H_m(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2} = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn} \quad (15.29)$$

となっている。この式の導出もここでは省略する。(15.29) を見るとわかるように、 $m \neq n$ の時は二つの波動関数は直交する。これは具体的に計算することもできるが、「異なるエネルギー固有値を持つから」と考えれば自明な関係である。

$H_n(\xi)$ は $\lambda = n$ (n は 0 以上の整数) とした時の (15.15) の解である。 n が「0 以上の整数」でない場合、この方程式は無窮遠で発散しないような解をもてない。 λ はエネルギーと関係した固有値なので、エネルギーが量子化されたことになる。どのように量子化されたかは、演算子形式での解を求めた後で考えよう。

【補足終わり】

15.3 演算子による解法

すでに述べたように、エネルギー固有値は $\frac{1}{2}\hbar\omega$ を最低値として、 $\hbar\omega$ ずつ大きくなっていくだろうと推測することができる。そこで以下では、「エネルギー固有値を $\hbar\omega$ だけ上昇させる演算子」を作っていくことにする。もしそんな演算子を作ることができれば、その演算子 (a^\dagger と名付ける) をどんどんかけていくことで、いろんなエネルギーを持った状態を求めることができる。

エネルギーは演算子 H の固有値であるから、エネルギー E を持つ状態 (波動関数を ψ_E と書こう) があったとして、この状態の波動関数に a^\dagger をかけると、エネルギー $E + \epsilon$ を持つ状態 (波動関数を $a^\dagger\psi_E$ と書こう) になるわけである。 ϵ は後で決まる定数である (実は $\hbar\omega$ になるということはずでに述べたとおり)。つまり「 ψ_E に H をかけると固有値 E だが、 a^\dagger をかけて $a^\dagger\psi_E$ にしてから H をかけると固有値は $E + \epsilon$ になる」ような演算子を作るわけである。さらに別の言い方をすると「 H をかけてから a^\dagger をかけたのと、 a^\dagger をかけてから H をかけたのでは、 ϵ だけ固有値が違う」ということになる。これを式で表せば、

$$Ha^\dagger\psi_E - a^\dagger H\psi_E = \epsilon a^\dagger\psi_E \quad (15.30)$$

である。ゆえに、

$$Ha^\dagger - a^\dagger H = \epsilon a^\dagger \quad \text{すなわち} \quad [H, a^\dagger] = \epsilon a^\dagger \quad (15.31)$$

となるような演算子が作ればよいということになる。

この a^\dagger を「エネルギーをあげる演算子」ということで「上昇演算子」と呼ぶ。上昇演算子をわざわざ a^\dagger と \dagger つきで書いているのは、昔から下降演算子 (エネルギーを下げる方の演算子) の方を a と書くのが習慣だからである。つまり、上昇演算子と下降演算子は互いにエルミート共役である。

$[H, a^\dagger] = \epsilon a^\dagger$ の式の両辺のエルミート共役をとると、 $[a, H] = \epsilon a$ となる (交換関係のエルミート共役を取ると順番がひっくりかえることに注意)。これはつまり $[H, a] = -\epsilon a$ だということである。つまり、 a はエネルギーを $-\epsilon$ あげる (ϵ 下げる) 演算子である。以上から、 a^\dagger が上昇演算子ならば a が下降演算子ならであることがわかった。

a^\dagger を求めるのはそんなに難しくない。まず、

$$a^\dagger = C(x + ap) \quad (15.32)$$

のように x, p の一次式で書けることを仮定する (C, a は後で決めるが、複素数の定数)。係数が簡単になるようにここでも無次元化した表記を使うことにして、

$$a^\dagger = A\left(\xi + \alpha \frac{\partial}{\partial \xi}\right) \quad (15.33)$$

としよう (A, α もまた、複素数の定数)。今 $H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2$ であるから、交換関係をとってやると、

$$[H, a^\dagger] = A \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2, \xi + \alpha \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \quad (15.34)$$

である。交換関係の後ろの ξ に関係する部分を計算する。まず ξ は自分自身とは交換するので、自分自身の自乗とも交換 ($[\xi^2, \xi] = 0$) し、

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2, \xi \right] = -\frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}, \xi \right] \quad (15.35)$$

となる。次に公式 $[AB, C] = [A, C]B + A[B, C]$ を使うと、

$$-\frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}, \xi \right] = -\frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial \xi}, \xi \right] \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{\partial}{\partial \xi}, \xi \right] \quad (15.36)$$

であるが、 $\left[\frac{\partial}{\partial \xi}, \xi \right] = 1$ である⁵から、結果は

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2, \xi \right] = -\frac{\partial}{\partial \xi} \quad (15.37)$$

である。同様に、

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2, \frac{\partial}{\partial \xi} \right] = -\xi \quad (15.38)$$

となるので、

$$[H, a^\dagger] = \left[H, A \left(\xi + \alpha \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \right] = -A \left(\frac{\partial}{\partial \xi} + \alpha \xi \right) \quad (15.39)$$

という結果が出る。

この式の右辺が元の演算子の ϵ 倍だという条件を置くと、 $-A \left(\frac{\partial}{\partial \xi} + \alpha \xi \right) = \epsilon A \left(\xi + \alpha \frac{\partial}{\partial \xi} \right)$ から、

$$-1 = \epsilon \alpha \quad (15.40)$$

$$-\alpha = \epsilon \quad (15.41)$$

⁵念のためにくどいようだがもう一度書いておくと、こういう計算の時にはさらに後ろに任意の関数 $f(\xi)$ がいると考える。つまり、 $\left[\frac{\partial}{\partial \xi}, \xi \right] = 1$ とは、 $\frac{\partial}{\partial \xi} (\xi f) - \xi \frac{\partial}{\partial \xi} f = f$ ということ。

という式が出る。

まず (15.40) に (15.41) を代入すると

$$1 = \alpha^2 \quad (15.42)$$

となり、結果 $\alpha = \pm 1$ とわかる。これを (15.41) に代入して $\mp 1 = \epsilon$ となるが、 ϵ が正の数になる方をとって、 $\alpha = -1$ とすることにする。結局、

$$a^\dagger = A \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \quad (15.43)$$

となる。 a の方は

$$a = A^* \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \quad (15.44)$$

となる⁶。

もし、上で ϵ が負になる解をとったとすると、 a と a^\dagger が入れ替わるような答えになってしまったことになる。 a^\dagger がエネルギーを上昇させる演算子になるようにしたかったのだから、 ϵ を正と取ったのは正しかった。

ここで a と a^\dagger の交換関係をとってみると、

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= AA^* \left[\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}, \xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \\ &= AA^* \left(\left[\frac{\partial}{\partial \xi}, \xi \right] - \left[\xi, \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \right) \\ &= 2AA^* \end{aligned} \quad (15.45)$$

となる。 $A = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\beta}$ とすれば右辺は 1 となって後々楽なので、そうすることにする。 A の位相 β は決まらないので、これまた簡単のため $\beta = 0$ と選んでおく。 a と a^\dagger の交換関係は

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (15.46)$$

となった。まとめると、

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \quad (15.47)$$

である。これを逆に解くと、

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \quad \frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger) \quad (15.48)$$

となる。ハミルトニアンにこの式を代入すれば、

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \right)^2 \\ &= -\frac{1}{4} (a^\dagger - a)^2 + \frac{1}{4} (a + a^\dagger)^2 \\ &= -\frac{1}{4} ((a^\dagger)^2 - aa^\dagger - a^\dagger a + a^2) + \frac{1}{4} (a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + (a^\dagger)^2) \\ &= \frac{1}{2} (aa^\dagger + a^\dagger a) = a^\dagger a + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (15.49)$$

⁶ $\left(\frac{\partial}{\partial \xi} \right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial \xi}$ に注意。† すなわちエルミート共役の定義は $\int (A\psi)^* \phi d\xi = \int \psi^* A^\dagger \phi d\xi$ である。 $A = \frac{\partial}{\partial \xi}$ の場合、† を取る時に部分積分のマイナスが出る。

となる。最後は交換関係 (15.46) から $aa^\dagger = a^\dagger a + 1$ となることを使っている。

ここで、次元を復活させよう。 a, a^\dagger は無次元のままとする。 ξ を x に直すには、長さの次元を持つ量 $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ をかければよい。運動量は $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ であるから、 $-i\hbar$ をかけた後、長さの次元を持つ量 $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ で割ればよい。ゆえに、

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger), \quad p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a^\dagger - a) \quad (15.50)$$

である。これから a, a^\dagger を出すと、

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + i\frac{1}{m\omega} p \right), \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - i\frac{1}{m\omega} p \right) \quad (15.51)$$

となる。ハミルトニアンは

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (15.52)$$

とまとまる (H はエネルギーの次元を持っているから、 $\hbar\omega$ をかけてその次元を復活させる)。

この形になると、 $[H, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger$ は自明である ($[a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] = a^\dagger$)。

エネルギー固有値には下限がなくてはならない。そうでない(底無し)場合、「物事はエネルギーの低い方に落ちていく」という法則⁷にしたがってどんどんエネルギーが低くなっていってしまう。

最低状態があるとすると、それに a をかけて新しい状態を作ることはいできない(もしできたら、その状態は「最低状態よりも低い状態(?)」になってしまう)。そこで、最低状態の波動関数 ψ_0 は $a\psi_0 = 0$ をみたすとしてしよう。

すなわち、

$$\left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \psi_0 = 0 \quad (15.53)$$

である。こうなるような関数は

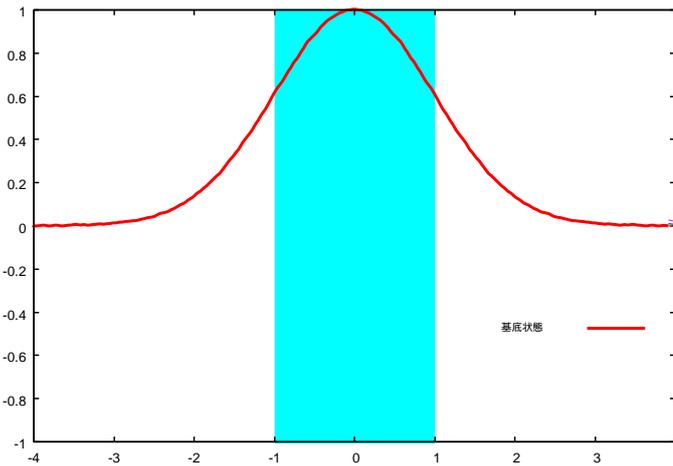
$$\psi_0 = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (15.54)$$

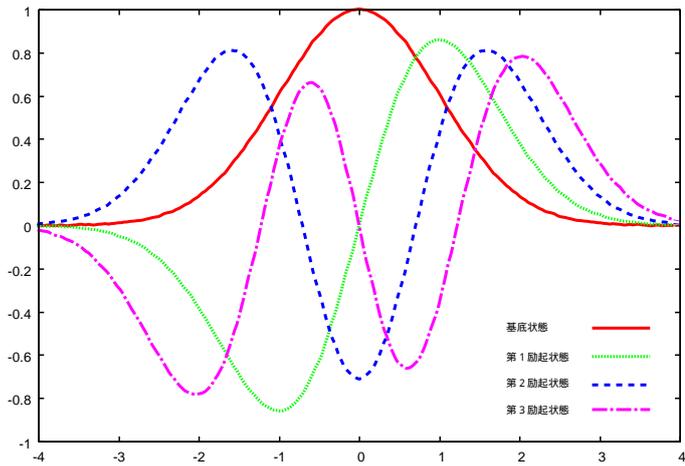
である。この ψ_0 で表される状態を「基底状態」と呼ぶ。

左のグラフは基底状態のグラフである。グラフの目盛りは無次元化した座標 ξ で書かれている。基底状態はエネルギーが $\frac{1}{2}\hbar\omega$ 、無次元化し

て考えた場合で $\frac{1}{2}$ である。位置エネルギーが無次元化して書くと $\frac{1}{2}\xi^2$ であることを考えると、古典的には $-1 < \xi < 1$ のところまでしか粒子は存在できないはずである(振り子として考えたならば、 $\xi = \pm 1$ が振り子が戻る位置)。波動関数はその外側にも存在する。ただし、これまでの「運動エネルギーが負になる領域」と同様、波動関数の曲がり具合が変わっている(具体的に言うならば、2階微分の符号が違う)。図では網掛けで「古典的に許される領域」を示した。

⁷よくこういう法則があると言われるが、実際には物理にはこんな法則はない。エネルギーは保存するのだから、どこかのエネルギーが低くなれば必ずどこか別の場所のエネルギーが大きくなっている。ゆえに「エネルギーが低くなるから」という説明をするのなら、「なぜ周りのエネルギーは増えてもいいのか」に答えなくてはいけない。実際に物理に存在する法則は「一個の物体がエネルギーを占有しているとエントロピーが低いから、回りにエネルギーをばらまいてエントロピーがあがった状態に変化する傾向がある」という法則(つまりは熱力学第2法則)である。





基底状態の波動関数に a^\dagger をかけていくことでそれよりも $\hbar\omega$ だけエネルギーが高い状態を次々と作り出していくことができる。左のグラフは基底状態から第3励起状態までの波動関数(の実数部)を表したものである。基底状態から、エネルギーが高くなるごとに (n が増加するごとに) 波動関数の波の数が増えていくと同時に、空間的広がりも大きくなっている。

具体的に a^\dagger をかけるという計算を実行すると、

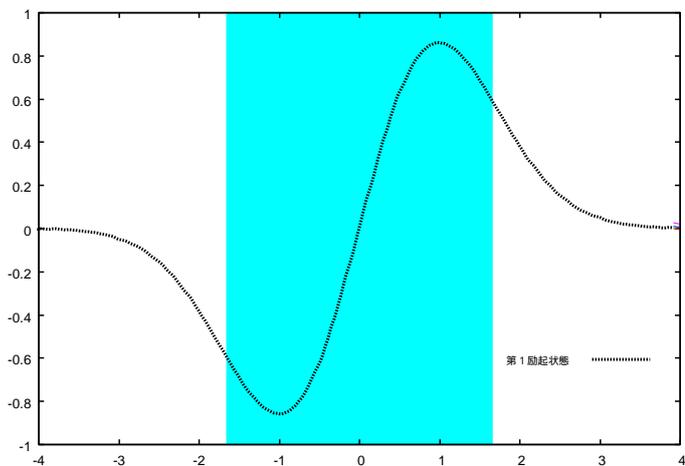
$$a^\dagger e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \sqrt{2}\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (15.55)$$

$$\begin{aligned} a^\dagger (\sqrt{2}\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2}) &= \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) (\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2}) \\ &= (2\xi^2 - 1) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (15.56) \end{aligned}$$

となる。以下同様にエネルギー固有値と固有関数を求めていくことができる。当然、この答はまじめに微分方程式を級数展開を使って解いた結果と一致する。

空間的広がりが大きくなることは、単振動の振幅が大きくなることに対応する。また、波の数が多くなるということは波長が短くなるということで、平衡点を通過する時の運動エネルギーが大きくなっていることに対応している。

なお、図に書かれた波動関数はすべて定常状態であって、この状態では古典的な意味での「運動」は見えない。二つ以上のエネルギー固有状態が重ね合わされると、波動関数は定常状態ではなくなり、粒子の存在確率が右へ左へと動く様子が見えてくる。このあたりは壁に閉じこめられた粒子の場合と同じである。



第1励起状態ではエネルギーが $\frac{3}{2}\hbar\omega$ であり、基底状態の3倍あるので、古典的に存在できる場所も $\sqrt{3}$ 倍広がり、 $-\sqrt{3} < \xi < \sqrt{3}$ となる。やはりこの場所で波動関数の2階微分が符号を変えていることが見て取れる。

古典的に許される領域では波動関数はまさに「波」となって振動するように振る舞い、その外では急速に減衰する関数になっているのである。

基底状態は $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ だけのエネルギーを持つ。この最低エネルギーのことを「零点振動のエネルギー」と呼ぶ。古典力学的には最低エネルギーとは粒子が原点に静止した状態であり、エネルギーは0である。しかし量子力学的には原点

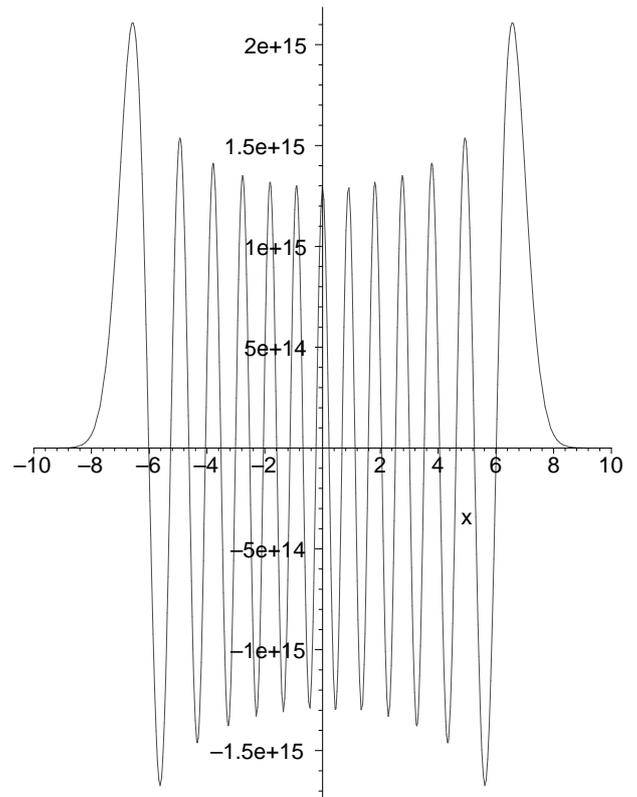
で静止している (つまり運動量も位置も0という値に確定している) ということは有り得ない。これは不確定関係のおかげであるとも言える。

$n = 24$ の場合の波動関数の様子を示したグラフが右の図である。この場合の全エネルギーは $24 + \frac{1}{2} = \frac{49}{2}$ であるから、古典的に運動が許される領域は $-7 < \xi < 7$ である。その範囲内では波動となっており、中心点付近では波長が短くなっていることがわかる。

波動関数の振幅は古典的領域との境界にあたるあたりが最大になっている。これは、古典力学での振り子が、折り返し点でいったん静止することに対応する(ただし、この波動関数の場合は確率密度は定数である)。

我々に観測できるのは常にエネルギーの変化量なので、エネルギーの原点はどこを選んでよい⁸。よって、零点振動のエネルギーを 0 と置いてよい。ただしその場合は古典的な調和振動子のエネルギー $H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ に比べ、 $\frac{1}{2}\hbar\omega$ だけ小さい量になっている。量子力学ではエネルギーは $h\nu$ で表せるので、「エネルギーの原点を変えるということは波動関数の振動数を変えることになってしまうが、それはいいのか?」という心配が起きるかもしれない。しかし、量子力学においても、エネルギーの原点を E_0 ずらすということは大きな意味を持ってはいない。なぜなら、

エネルギーの原点ずらしは波動関数の $\psi \rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t}$ という置き換えに対応するからである。量子力学で観測結果に関係する量では常に ψ と ψ^* がペアで掛け算の形で現れるため、この変化は(エネルギーの期待値の原点がずれたということ以外には)観測結果に影響を与えない。



「零点振動」は「運動」か?

この「零点振動」という言葉をあまり深刻に受け取らないよう、注意しておきたい。そもそも古典力学での「運動」に対応するのは、エネルギー固有状態を何個か重ね合わせることで「波束」を作り、その波束の中心が移動するという現象である。そういう意味では、零点振動に限らず、ここまでで求めた「エネルギー固有状態」には、全く「運動」はないのである。ある程度の異なるエネルギーを持った状態を重ね合わせることで初めて古典力学で言う「運動」という概念と結びつくのだということを考え合わせると、「零点振動」は「動いている」とは言い難い状態なのである。「零点振動からエネルギーを取り出すことはできないのですか?」という質問もよくあるが、もちろん不可能である。零点振動は定義からしてエネルギー最低である。エネルギーを取り出すことができるのは、「それより低いエネルギー」の状態に「落とす」ことができる時だけである。

ここまで、波動関数の規格化は考えていなかった。基底状態から順に規格化を考えていこう。公式 $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{\pi}$ があるので、基底状態は

$$\psi_0 = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (15.57)$$

⁸蛇足ながら、相対論的に考える時はエネルギーは「時間方向の運動量」ということになるので、「原点はどこを選んでよい」というわけにはいかない。相対論的不変性の要求から決まってくることになる。

と規格化される。ただし、この状態が規格化されるのは $\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \psi^*(\xi)\psi(\xi)$ という積分に関してである。積分を x で行うならば、 $d\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} dx$ という違いの部分吸収するために、

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (15.58)$$

としておく必要がある。 ξ は無次元なので、 $\psi(\xi)$ にも次元はない。しかし x は長さの次元を持つので、 $\int dx \psi^* \psi = 1$ となるためには $\psi(x)$ は(長さ) $^{-\frac{1}{2}}$ の次元を持たなくてはならない。(15.57)と(15.58)の違いの因子はちょうど次元の分である。

これで ψ_0 は規格化されたので、次に第1励起状態 ($\psi_1 = a^\dagger \psi_0$)を考へてみる。具体的に積分することでも計算できるが、 a, a^\dagger の交換関係を使った方が簡単である。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi (a^\dagger \psi_0)^* a^\dagger \psi_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \psi_0^* a a^\dagger \psi_0 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \psi_0^* (a^\dagger a + 1) \psi_0 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \psi_0^* \psi_0 = 1 \end{aligned} \quad (15.59)$$

となつて、ちょうど規格化されていることがわかる。ここでは、交換関係から $aa^\dagger = a^\dagger a + 1$ となることと、 $a\psi_0 = 0$ であることを使っている。

第1励起状態は規格化しなくてもよかったが、第2励起状態から先はそうはいかない。上の計算との大きな差は $a\psi_0 = 0$ であったが $a\psi_1 \neq 0$ だということである。第2励起状態をとりあえず $\psi_2 = (a^\dagger)^2 \psi_0$ とおくと、

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi ((a^\dagger)^2 \psi_0)^* (a^\dagger)^2 \psi_0 = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \psi_0^* a a a^\dagger a^\dagger \psi_0 \quad (15.60)$$

であるから、演算子 $aaa^\dagger a^\dagger$ の部分を考えて、「 a を右に寄せていく」という計算をする。

$$a \underbrace{aa^\dagger}_{a^\dagger a + 1} a^\dagger = aa^\dagger \underbrace{aa^\dagger}_{a^\dagger a + 1} + aa^\dagger = aa^\dagger a^\dagger a + 2aa^\dagger \quad (15.61)$$

となる。第1項は ψ_0 にかかると0となり、第2項は ψ_1 と同じ方法で計算できるが、係数2の分だけ、答えが大きくなり、 $\int d\xi \psi_2^* \psi_2 = 2$ であることがわかる。ゆえに規格化された ψ_2 は $\frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger)^2 \psi_0$ であることがわかる。

同様の計算を繰り返すと、規格化された第 n 励起状態が $\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n \psi_0$ であることが確認できる。よつて、 $\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}}(a^\dagger)^{n-1} \psi_0$ に a^\dagger をかけて \sqrt{n} で割ったものが ψ_n である。

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger \psi_{n-1} \quad (15.62)$$

[問い 15-5] 数学的帰納法を使って $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n \psi_0$ が規格化されていることを証明せよ。

$n = 5$ までの規格化された波動関数は以下の通り。

$$\psi_0 = \pi^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (15.63)$$

$$\psi_1 = \pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{2} \xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (15.64)$$

$$\psi_2 = \frac{\pi^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2}} (2\xi^2 - 1) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (15.65)$$

$$\psi_3 = \frac{\pi^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{3}} (2\xi^3 - 3\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (15.66)$$

$$\psi_4 = \frac{\pi^{\frac{1}{4}}}{2\sqrt{6}} (4\xi^4 - 12\xi^2 + 3) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (15.67)$$

$$\psi_5 = \frac{\pi^{\frac{1}{4}}}{2\sqrt{15}} (4\xi^5 - 20\xi^3 + 15\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (15.68)$$

これ以降も同様に計算される。

なお、古典力学的にこの調和振動子を考えると角振動数は ω である。量子力学的に考えた時の波動関数の角振動数は $(n + \frac{1}{2})\omega$ であり、一致しない。それは当然である。今考えた量子力学的状態は定常状態（エネルギーの固有状態）であって、古典力学的な運動は「定常状態の波動関数」では表せない。古典力学的運動に対応するような状態は複数のエネルギー固有状態の重ね合わせが必要なのである。たとえば $n = 0$ の状態（基底状態。角振動数 $\frac{1}{2}\omega$ ）と $n = 1$ の状態（第 1 励起状態。角振動数 $\frac{3}{2}\omega$ ）を重ね合わせれば、その時の x の期待値 $\langle x \rangle$ は、二つの状態の角振動数の差であるところの $\frac{3}{2}\omega - \frac{1}{2}\omega = \omega$ の角振動数で振動する。

【補足】この部分は授業では話さない可能性もあるが、その場合は読んでおいてください。

15.4 電磁波のエネルギーが $h\nu$ であること

最後に量子力学の始まりとなった事実、「光のエネルギーが $h\nu$ の整数倍」ということを確認しておこう。 z 方向に進行する電磁波の場合、電場の x 成分 E_x の満たす方程式は

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) E_x = 0 \quad (15.69)$$

この E_x をフーリエ変換して

$$E_x(x, y, z, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int dk_x dk_y dk_z E_x(k_x, k_y, k_z, t) e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \quad (15.70)$$

としよう。これを方程式に代入すると、

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int dk_x dk_y dk_z E_x(k_x, k_y, k_z, t) e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \right) &= 0 \\ \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int dk_x dk_y dk_z \left(-(k_z)^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) E_x(k_x, k_y, k_z, t) e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} &= 0 \end{aligned} \quad (15.71)$$

これはつまり、

$$\left(-k_z^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) E_x(k_x, k_y, k_z, t) = 0 \quad (15.72)$$

あるいは、

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} E_x(k_x, k_y, k_z, t) = -c^2 k_z^2 E_x(k_x, k_y, k_z, t) \quad (15.73)$$

ということであり、調和振動子の運動方程式

$$\frac{d^2}{dt^2} x(t) = -\omega^2 x(t) \quad (15.74)$$

と比べると、 $\omega = ck_z$ とすれば、 $E_x(k_x, k_y, k_z, t)$ が $x(t)$ に対応していることになる。つまり、電場をフーリエ展開した各成分が一個一個、調和振動子に対応していることになるのである。

粒子の量子力学で「座標 x 、運動量 p を演算子と考える」という方法でシュレーディンガー方程式を作ったように、電磁場にたいしても「電場 \vec{E} 、磁場 \vec{H} を演算子と考える⁹」という方法で「電磁場の量子論」を作ることができるが、上に述べたように方程式が同じ形をしているので、結果も同様になる。ただ電磁場の方が (k_x, k_y, k_z) の関数である分だけ「数が多い」だけのことである。

光のエネルギーが $\hbar\omega$ を単位として量子化されたのは、光（電磁場）が無数個の調和振動子のあつまりでできているからであると考えることができる。光に限らず、電子などその他の物質についても、空間に分布した物質場を調和振動子の集まりと考えて量子化することができる。これを「量子場の理論」と呼び、現代の素粒子論、物性理論などの基礎となる考え方である。

【よくある質問】

「ここでは電磁場（光子）の持つエネルギーが $\hbar\omega$ という値を取っている。一方、前節では「量子力学でもエネルギーは差だけが重要で、原点はずらしてよい」とあったが、これと矛盾しないのか？」
 この場合、物質と相互作用することで、光子はどんどん生まれたり、あるいは吸収されたりする。つまり光子一粒のエネルギー $\hbar\omega$ というのは、光子と相互作用している物質（黒体輻射における「壁」とか）に取っては「エネルギーの変化量」なのであり、いかに量子力学といえども「エネルギーの変化量」を任意に変えることは許されない。他とのエネルギーのやりとりによって粒子ができたり消えたりするような時は、その粒子一個のエネルギーの原点を勝手にずらすわけにはいかないのである。

【補足終わり】

⁹実際には電場や磁場より、ベクトルポテンシャル \vec{A} と静電ポテンシャル ϕ を基本に考えることが多い。

15.5 演習問題

[演習問題 15-1] 調和振動子の基底状態 ψ_0 と第1励起状態 ψ_1 の重ね合わせの状態

$$\Psi = C_0\psi_0 + C_1\psi_1$$

を考える。 ψ_0, ψ_1 は規格化されているとして、この状態に対する x の期待値、 p の期待値を計算し、古典的な単振動と比較せよ。

[演習問題 15-2] エルミート多項式は

$$\exp(2\xi t - t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)t^n}{n!} \quad (15.75)$$

という式を満たす。左辺の関数を t の関数としてみてテイラー展開した時の n 次の係数が $H_n(\xi)$ だということになる。この式から、

$$H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} \left(\exp(-\xi^2) \right) \quad (15.76)$$

を導け。

[演習問題 15-3] エルミート多項式の間、以下の関係式が成立することを証明せよ。

$$(a) \frac{d}{d\xi} H_n(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi)$$

$$(b) H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi)$$

[演習問題 15-4] 調和振動子の、二つのエネルギー固有状態の重ねあわせ $\psi = C_m \psi_m(\xi, t) + C_n \psi_n(\xi, t)$ を考えよう ($|C_m|^2 + |C_n|^2 = 1$ とする)。

$$\psi_k(\xi, t) = \phi_k(\xi) e^{-i(k+\frac{1}{2})\omega t} \quad (15.77)$$

と書けること、

$$\int d\xi \phi_m^*(\xi) \phi_n(\xi) = \delta_{mn} \quad (15.78)$$

という直交関係が成立することを使って、 $\langle \xi \rangle$ を計算せよ。

[演習問題 15-5] 調和振動子の第 n 励起状態の場合で運動エネルギーの期待値と位置エネルギーの期待値を計算せよ。

第16章 2次元のシュレーディンガー方程式

16.1 直交座標と極座標でのシュレーディンガー方程式

この次の章から3次元のシュレーディンガー方程式を解く。そのためこの章ではそのための練習として2次元のシュレーディンガー方程式を考える。自由粒子を考えて、それを直交座標と極座標と、2種類の座標で解いてみる。

直交座標 (x, y) で解くのは簡単である。2次元の自由粒子のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m} \left((p_x)^2 + (p_y)^2 \right) \quad (16.1)$$

である。

これに対応するシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi \quad (16.2)$$

であり、これは1次元の時と全く同様に、

$$\psi = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(p_x x + p_y y - \frac{(p_x)^2 + (p_y)^2}{2m} t \right) \right] \quad (16.3)$$

という解を持つ。これは1次元の解である $\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(p_x x - \frac{(p_x)^2}{2m} t \right) \right]$ と、この中の x を y で置き換えたもの $\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(p_y y - \frac{(p_y)^2}{2m} t \right) \right]$ の単純な積である。この場合、エネルギーは $E = \frac{1}{2m} \left((p_x)^2 + (p_y)^2 \right)$ (つまり x 方向だけ考えたときのエネルギーと、 y 方向だけ考えたときのエネルギーの和) となる。

では次に、同じ方程式を極座標 (r, θ) を使って解いてみる。

$\dot{x}, \dot{y}, \dot{r}, \dot{\theta}$ の間には、

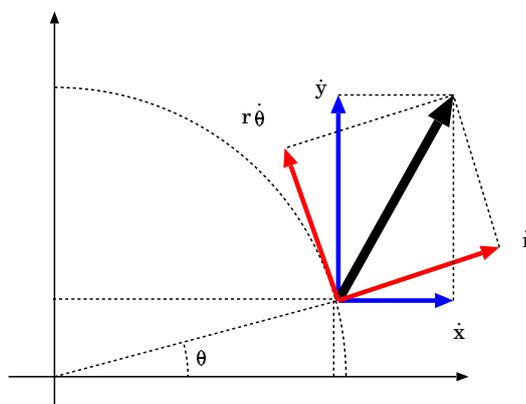
$$(\dot{x})^2 + (\dot{y})^2 = (\dot{r})^2 + (r\dot{\theta})^2 \quad (16.4)$$

という関係がある。なぜなら二つの座標系で速度の自乗を考えればこの式の左辺と右辺になるからである(右図参照。 θ 方向の「速度」(単位時間の移動距離)は $\dot{\theta}$ ではなく $r\dot{\theta}$ であることに注意)。よって極座標でのラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2} m \left((\dot{r})^2 + (r\dot{\theta})^2 \right) \quad (16.5)$$

であり、これから運動量を求めると、

$$r \text{ 方向} : p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, \quad \theta \text{ 方向} : p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta} \quad (16.6)$$



である。

ここで注意すべきことがある。以下のようにやると間違えるのである。

—以下は間違い—

極座標でのハミルトニアンは

$$H = p_r \dot{r} + p_\theta \dot{\theta} - L = \frac{1}{2m} \left((p_r)^2 + \frac{1}{r^2} (p_\theta)^2 \right) \quad (16.7)$$

である。 $p_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$, $p_\theta = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}$ と書き直すと、シュレーディンガー方程式に現れるハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \quad (16.8)$$

となる。 —以上は間違い—

—見何も悪いことをしていないように思えるが、上の計算は間違えている。古典的なハミルトニアン(16.7)を出すところまでは間違っていない。その量子力学版が(16.8)だと考えるのが間違いなのである。問題は $(p_r)^2$ を単純に $-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2}$ と置き換えたところにある。

【以下長い註】この部分は、最初に勉強する時は理解できなくともよい。

実は $p_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$ というのも間違い。これだとエルミートな演算子になっていない。エルミートなのは $p_r = -\frac{i\hbar}{\sqrt{r}} \frac{\partial}{\partial r} (\sqrt{r})$ である。こういう変な微分演算子にしないといけない理由は、2次元の極座標での体積積分が $dV = dr d\theta r$ という形になっていることである。積分要素の中についている r のせいで、単なる $-i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$ はエルミートな演算子にならない。 $-\frac{i\hbar}{\sqrt{r}} \frac{\partial}{\partial r} (\sqrt{r})$ ならば、

$$\begin{aligned} \int dr d\theta r \psi^* \left(-\frac{i\hbar}{\sqrt{r}} \frac{\partial}{\partial r} (\sqrt{r} \phi) \right) &= -i\hbar \int dr d\theta \sqrt{r} \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial r} (\sqrt{r} \phi) \right) \\ &= i\hbar \int dr d\theta \frac{\partial}{\partial r} (\sqrt{r} \psi^*) \sqrt{r} \phi \\ &= \int dr d\theta r \left(\frac{-i\hbar}{\sqrt{r}} \frac{\partial}{\partial r} (\sqrt{r} \psi) \right)^* \phi \end{aligned} \quad (16.9)$$

となるので、エルミートである。このような演算子でも、

$$\begin{aligned} \left[r, -\frac{i\hbar}{\sqrt{r}} \frac{\partial}{\partial r} \sqrt{r} \right] &= -\frac{i\hbar}{\sqrt{r}} \left[r, \frac{\partial}{\partial r} \right] \sqrt{r} \\ &= -i\hbar \end{aligned} \quad (16.10)$$

は満たしている。

【長い註終わり】

古典論においては r と p_r は可換であるので、たとえば $\frac{1}{r} (p_r)^2 r$ と書いても $(p_r)^2$ と書いても同じである。ところが量子論では同じではない。 r と p_r は交換しないからである。古典論から量子論への

翻訳を行う時には「演算子の順序をどうするか」に注意しなくてはならない。上の「間違い」は「座標と運動量は交換しない」ということを尊重しない計算をしていることになっているのである¹。

【以下長い註】この部分は、最初に勉強する時は理解できなくともよい。

16.2 2次元の極座標のラプラシアンの計算法

では、正しい計算をどのようにすればよいかを以下で述べよう。ここで紹介する方法は

- (a) 「直交座標形での形を正解と考えて、それから変換していく」方法。ちょっと面倒だが正攻法。
- (b) 「極座標での $\vec{\nabla}$ をちゃんと考えて、それを自乗する」方法。計算量は少し減る。
- (c) 「変分原理を使って座標変換を行う」方法。計算量は一番少ない。その代わり、変分に関する知識が必要。

の3つである。

直交座標系の微分 $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}$ と、極座標系での微分 $\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial \theta}$ の関係は、

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (16.11)$$

および

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} = \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (16.12)$$

のようにして求めることができる。

演算子の順番に注意しつつ、ラプラシアンを書き直そう。 $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ は

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (16.13)$$

と書ける。演算子の場合一般には $ab \neq ba$ であるから、 $(a+b)^2 = a^2 + 2ab + b^2$ という計算は成立しない。

$$(a+b)^2 = a^2 + ab + ba + b^2 = \underbrace{a^2 + 2ab + b^2}_{\text{古典力学的計算}} + \underbrace{[b, a]}_{\text{量子力学的おつり}} \quad (16.14)$$

なのである。

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - 2 \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \left(\frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \left[-\frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} \right] \quad (16.15)$$

¹直交座標の場合にそういうことを考えなくてもうまく行ったのは、直交座標がそれだけ“素直な座標”だったからだと言える。

最後の交換関係を計算しておく、

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} \right] &= -\frac{\sin \theta}{r} \left[\frac{\partial}{\partial \theta}, \cos \theta \right] \frac{\partial}{\partial r} - \sin \theta \cos \theta \left[\frac{1}{r}, \frac{\partial}{\partial r} \right] \frac{\partial}{\partial \theta} \\ &= \frac{\sin^2 \theta}{r} \left[\frac{\partial}{\partial \theta}, \theta \right] \frac{\partial}{\partial r} + \sin \theta \cos \theta \frac{1}{r^2} \left[r, \frac{\partial}{\partial r} \right] \frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\sin^2 \theta}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \cos \theta \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned} \quad (16.16)$$

ゆえに、

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - 2 \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \left(\frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\sin^2 \theta}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \cos \theta \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (16.17)$$

同様の計算により $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ は

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + 2 \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \left(\frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\cos^2 \theta}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cos \theta \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (16.18)$$

となる。 $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ を計算すると、(16.17) と (16.18) の第2項どうし、第5項どうしが同じものの逆符号なのでキャンセルする。それ以外の項は $\cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1$ を使うと簡単にまとまる。結果として、古典的には出ない項が一つ出て、

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \left(\frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \quad (16.19)$$

となる。

[問い 16-1] この微分演算子は

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right)$$

とも書けることを示せ。

次に $\vec{\nabla}$ を使った方法で導く。まず、直角座標の x 方向、 y 方向を向いた単位ベクトルをそれぞれ \vec{e}_x, \vec{e}_y とする。極座標の r 方向、 θ 方向を向いた単位ベクトルを $\vec{e}_r, \vec{e}_\theta$ とする。

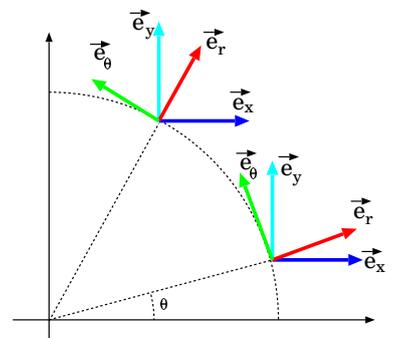
$\vec{e}_r, \vec{e}_\theta$ を \vec{e}_x, \vec{e}_y で表すと、右の図を参考にして、

$$\begin{aligned} \vec{e}_r &= \cos \theta \vec{e}_x + \sin \theta \vec{e}_y \\ \vec{e}_\theta &= -\sin \theta \vec{e}_x + \cos \theta \vec{e}_y \end{aligned} \quad (16.20)$$

となることがわかるだろう。

ここで、 \vec{e}_x, \vec{e}_y は定数ベクトル(どこでも同じ方向を向いているベクトル)だが、 $\vec{e}_r, \vec{e}_\theta$ はそうではないことに注意しよう。ゆえに、 \vec{e}_x, \vec{e}_y は x, y, r, θ のどれで微分しても0となるが、 $\vec{e}_r, \vec{e}_\theta$ の微分は0ではない場合もある。具体的に計算すると、

$$\frac{\partial}{\partial r} \vec{e}_r = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{e}_r = \vec{e}_\theta, \quad \frac{\partial}{\partial r} \vec{e}_\theta = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{e}_\theta = -\vec{e}_r \quad (16.21)$$



である。

[問い 16-2] 上の4つを具体的に確認せよ。

[問い 16-3] 実は図形的に考えてもこの式を出すことができる。 r 微分 (θ 微分) というのは、 $r(\theta)$ をほんの少しだけ変化させた時の変化の割合だという点に注意して、上の4つの式を図形的に導出せよ。

直交座標ではナブラ記号は $\vec{\nabla} = \vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y}$ と定義されているが、極座標では

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (16.22)$$

である。 \vec{e}_θ の項は単なる θ 微分ではなく、 $\frac{1}{r}$ がかかっている。なぜなら、 $\vec{\nabla}$ は

$$\vec{a} \cdot \vec{\nabla} f(\vec{x}) = \lim_{|\vec{a}| \rightarrow 0} \frac{f(\vec{x} + \vec{a}) - f(\vec{x})}{|\vec{a}|} \quad (16.23)$$

となるように定義されている。すなわち、任意のベクトル \vec{a} の方向へに移動した時の関数 $f(\vec{x})$ の単位長さあたりの変化量が $\vec{a} \cdot \vec{\nabla} f(\vec{x})$ なのである。この \vec{a} を θ 方向に取る。つまり (r, θ) から $(r, \theta + \delta\theta)$ への変化を考える。この時 $|\vec{a}|$ は $\delta\theta$ ではなく、 $r\delta\theta$ である。ゆえに \vec{a} が \vec{e}_θ であった時は、

$$\vec{e}_\theta \cdot \vec{\nabla} f(\vec{x}) = \lim_{\delta\theta \rightarrow 0} \frac{f(r, \theta + \delta\theta) - f(r, \theta)}{r\delta\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} f(r, \theta) \quad (16.24)$$

となる。つまりは θ 方向の移動距離が $\delta\theta$ ではなく $r\delta\theta$ で表されることを反映して、 $\frac{\partial}{\partial \theta}$ ではなく $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$ を使わねばならない。

こうして作った $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$ は「 θ 方向に h だけ進んだ場所との差を計算して h で割り、最後に $h \rightarrow 0$ の極限を取る」という計算になっている。 θ 方向に h だけ進むと、 θ が $\frac{h}{r}$ だけ変化するところが大事である。

こうしておいて、 $\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$ を計算してみる。直交座標では \vec{e}_x, \vec{e}_y は定ベクトルなので微分がかからない(かかっても0)だが、極座標ではそうはならない。

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}(\text{何か}) = \left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \cdot \left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (\text{何か}) \quad (16.25)$$

を計算する。こういう演算子の計算の時には書かれていなかったとしても、その後ろに何か任意の関数があると思って計算しなくてはいけない(そのことを忘れないように、上の式ではわざわざ「何か」と書いた)。もし微分が全部後ろの「何か」にかかるのならば、結果は

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) (\text{何か}) \quad (16.26)$$

となる。ところが1個目の括弧の微分は「何か」だけではなく2個目の括弧にもかかるので、その分おつりが出る。 $\frac{\partial}{\partial r}$ の方はどうせ0なので関係ない。 $\frac{\partial}{\partial \theta}$ が問題である。2番目の括弧を $\frac{\partial}{\partial \theta}$ が微分した結果は

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) = \vec{e}_\theta \frac{\partial}{\partial r} - \vec{e}_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (16.27)$$

となるが、 $\frac{\partial}{\partial \theta}$ の前には $\vec{e}_\theta \frac{1}{r}$ があったので、生き残るのは $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}$ である。このおつりを加えたものが、正しい2次元の $\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$ である。

さらにもう一つの方法を示そう。古典力学で座標変換を行う時、ラグランジュ形式を経由するという方法があったことを思い出そう。運動方程式を座標変換するのは骨が折れる作業だが、「運動方程式を導くような作用を考え、その作用を座標変換してから新しい座標形での運動方程式を出す」という方法で少し作業を軽減できる。たとえば2次元の粒子の運動方程式は、ラグランジアンを

$$L = \frac{1}{2}m \left((\dot{x})^2 + (\dot{y})^2 \right) = \frac{1}{2}m \left((\dot{r})^2 + (r\dot{\theta})^2 \right) \quad (16.28)$$

として、作用 $\int L dt$ が停留値を取るという条件から Euler-Lagrange 方程式

$$\frac{\partial L}{\partial X} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \left(\frac{dX}{dt} \right)} \right) = 0 \quad (16.29)$$

を使って導くことができる(X には x, y, r, θ のどれかが入る)。

量子力学でも同じようにして座標変換を簡単にすることができる。シュレーディンガー方程式を導くような作用として、

$$\int L dx dy dt = \int \left(i\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi + \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \psi^* \cdot \vec{\nabla} \psi \right) dx dy dt = \int \left(i\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi^*}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \right) dx dy dt \quad (16.30)$$

を考える。これに対するオイラー・ラグランジュ方程式

$$\frac{\partial L}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)} \right) = 0 \quad (16.31)$$

または、

$$\frac{\partial L}{\partial \psi^*} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right)} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right)} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial y} \right)} \right) = 0 \quad (16.32)$$

からシュレーディンガー方程式が導ける²。

ここで、作用を極座標に書き直す(上の問題で計算した極座標での $\vec{\nabla}$ を使えばすぐできる)と、

$$\int \left[i\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial \psi^*}{\partial \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \right] r dr d\theta dt \quad (16.33)$$

となる。これを $\int L dr d\theta dt$ と書くと、

$$L = \left[i\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial \psi^*}{\partial \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \right] r \quad (16.34)$$

² 「 ψ が変化すれば ψ^* も変化するだろうに、 $\frac{\partial}{\partial \psi}$ する時、 ψ^* は微分しなくてよいのか？」と疑問(不安?)に思う人がいるかもしれない。しかし複素数 $z = x + iy$ による微分は $\frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right)$ が定義である。この微分演算子を z にかけたら答は1であり、 $z^* = x - iy$ にかけたら答が0であることはすぐ確かめられる。安心して、 $\frac{\partial}{\partial \psi} \psi^* = 0$ としてよい。

となる。積分が $dx dy dt$ から $r dr d\theta dt$ に変わった分だけ、 r が後ろにくっついていることに注意しよう。この L に対して Euler-Lagrange 方程式を作ると、

$$\frac{\partial L}{\partial \psi^*} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right)} \right) - \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial r} \right)} \right) - \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial \theta} \right)} \right) = 0 \quad (16.35)$$

であるが、これをちゃんと計算すれば、

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \psi \quad (16.36)$$

となる。2回めの r 微分をする時に L についている因子 (直交座標の時にはなかった) である r を含めて微分することになるので、「量子力学のお釣りの」部分が出てくることになっている³。

[問い 16-4] (16.35) から (16.36) が出てくることを確かめよ。

【長い註終わり】

結局解くべきシュレーディンガー方程式は (定常状態で考えて)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \psi = E\psi \quad (16.37)$$

ということになった。

16.3 2次元における角運動量

直交座標での運動量は p_x, p_y 、極座標での運動量は p_r, p_θ となったが、このうち p_θ は原点回りの角運動量である。古典力学では角運動量は $xp_y - yp_x$ のように位置ベクトルと運動量ベクトルの外積で書かれる⁴。実際に計算してみると、

$$xp_y - yp_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (16.38)$$

となってちゃんと対応していることがわかる。

³ 3次元の極座標でやれば、余分な因子は $r^2 \sin \theta$ である。これから3次元の極座標でのラプラシアンがどういう形になるかがわかる。

⁴ 2次元なので外積は1成分の量 (スカラー) となる。3次元ならば $yp_z - zp_y, zp_x - xp_z, xp_y - yp_x$ の3成分となって、外積はベクトルになる。

[問い 16-5] 具体的計算により (16.38) を確かめよ。具体的に代入すればいいのだから、

$$\begin{aligned} xp_y - yp_x &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &= -i\hbar \left(r \cos \theta \left(\frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - r \sin \theta \left(\frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right) \\ &= -i\hbar \left(\left(x \frac{\partial r}{\partial y} - y \frac{\partial r}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \left(x \frac{\partial \theta}{\partial y} - y \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \end{aligned} \quad (16.39)$$

ここで、 $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ から、 $\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}$ であることを使うと、 $\frac{\partial}{\partial r}$ の前の係数は

$$x \underbrace{\frac{\partial r}{\partial y}}_{=\frac{y}{r}} - y \underbrace{\frac{\partial r}{\partial x}}_{=\frac{x}{r}} = 0 \quad (16.40)$$

というふうに 0 になる。

$\frac{\partial}{\partial \theta}$ の前の係数は

ここで、ハミルトニアンは θ を含まないから、 $[p_\theta, H] = 0$ である。この事実 (角運動量とハミルトニアンが交換すること) から重要なことが二つわかる。

一つは「角運動量は保存する」ということである。一般の演算子 $A(x, p, t)$ の期待値の時間微分が

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial t} A \right\rangle + \left\langle \frac{1}{i\hbar} [A, H] \right\rangle \quad (16.41)$$

で表せたことを思い出そう。今考えている角運動量の場合、 t には依存していないので右辺第一項はない。 p_θ と H は交換するから第 2 項もない。結果として、角運動量の期待値は保存する。

これは今の場合に限らず、「ハミルトニアンが特定の座標を全く含まない時にはその座標に対応する運動量が保存する」と常に言える。

もう一つはエネルギーと角運動量の同時固有状態が存在するということである (互いに交換する演算子には同時固有状態が許されるということを思い出せ)。逆に言えば、「 p_r と H の同時固有状態」は存在しない。直角座標では p_x, p_y, H の全ての同時固有状態が存在する (ただし、 p_x, p_y, H の固有値のうち、独立なものは 2 つだけである)。

以下では p_θ と H の同時固有状態を求めて行くことにする。まず角運動量の固有状態を考えると、

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} e^{in\theta} = \hbar n e^{in\theta} \quad (16.42)$$

となることから、固有関数は $e^{in\theta}$ で固有値は $\hbar n$ である。

$\theta = 0$ と $\theta = 2\pi$ は同じ点だから、そこで波動関数は等しくならなくてはならない。つまり θ が周期 2π の周期関数でなくてはならない。つまり、

$$e^{i2\pi n} = 1 \quad (16.43)$$

であるから、 n は整数であることがわかる。つまり、角運動量は $\hbar \times (\text{整数})$ という値に量子化される。角運動量の値が \hbar の整数倍になるということは、後でやる 3次元の場合でも (一般の次元でも) 成立

する。実はこの世の中には \hbar の半整数倍⁵の角運動量(電子のスピンなど)も存在しているのだが、この講義では触れない。

16.4 動径方向の波動関数

エネルギーと角運動量の同時固有状態を考えることにすれば、

$$\psi(r, \theta) = R(r)e^{in\theta} \quad (16.44)$$

という形の解を探すことになる。これをシュレーディンガー方程式に代入すると、

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) R e^{in\theta} &= E R e^{in\theta} \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{n^2}{r^2} \right) R e^{in\theta} &= -\frac{2mE}{\hbar^2} R e^{in\theta} \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{n^2}{r^2} \right) R &= -\frac{2mE}{\hbar^2} R \end{aligned} \quad (16.45)$$

となる。

ここでも方程式の無次元化を行う。この方程式の変数 r は長さの次元を持っているが、 $r = \alpha\xi$ として、長さの次元を持つ定数 α と、次元のない変数 ξ を導入する。そして、以後は ξ を変数と考えて式を解いて行くことにする。

なお、前に述べたように実際の計算においては具体的に α をいくつにするとか決める必要はない。「無次元化したのだから、ややこしい定数は全部1になるだろう」と考えればこの式はすぐに出る。定数ではない(時と場合によって変わるパラメータになっている)数だけは、無次元のパラメータにおきかえればよい。

下の問題は、単なる確認のためである。

[問い 16-6]

ξ を使って式を書き換え、かつ $\alpha = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$ と選ぶと、我々が解くべき方程式は

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \right) R + \left(1 - \frac{n^2}{\xi^2} \right) R = 0 \quad (16.46)$$

という式になることを示せ。

この方程式を具体的に解くには、級数展開の方法を使う。

【以下長い註】この部分は、最初に勉強する時は理解できなくともよい。

⁵半整数とは、 $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ などのように、 $\frac{(\text{奇数})}{2}$ で表せる数字。言葉の原義(整数の半分)からすると、半整数の中には $\frac{(\text{偶数})}{2}$ (つまりは整数)が入ってもよさそうだが、普通は入れない。厳密に言いたい人は「半奇数」という言葉を使う。

16.5 ベッセル方程式を級数展開で解く

この方程式を解いてみよう。方程式が簡単に積分できるような形になっていない場合に線型微分方程式を解く方法としてよく使われるのが級数展開である。この後の計算でも解くのが難しい微分方程式をこの方法を使って解くことがあるので、ここで級数展開を使って微分方程式を解く方法について述べておく。

方程式が $\xi = 0$ で発散する係数を持っていない場合、その解は

$$f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} A_k \xi^k \quad (16.47)$$

と展開される (この場合 A_k は $f(\xi)$ の微係数で表すことができる)。そうでなく、微分方程式が $\xi = 0$ が確定特異点⁶ になっている場合 (ベッセルの微分方程式もそう) は、その解は

$$R(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^{k+k_0} \quad (16.48)$$

のように展開できることが知られている。 k_0 は後で定まる。

級数展開で微分方程式を解くということはすなわち、この展開係数 a_k を一つずつ決めて行くということである。

ベッセルの微分方程式に級数展開された関数を代入すると、

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} + \left(1 - \frac{n^2}{\xi^2} \right) \right) \left(\sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^{k+k_0} \right) &= 0 \\ \sum_{k=0}^{\infty} a_k \left(\frac{d^2}{d\xi^2} \xi^{k+k_0} + \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \xi^{k+k_0} + \left(1 - \frac{n^2}{\xi^2} \right) \xi^{k+k_0} \right) &= 0 \\ \sum_{k=0}^{\infty} a_k \left((k+k_0)(k+k_0-1) \xi^{k+k_0-2} + (k+k_0) \xi^{k+k_0-2} + \xi^{k+k_0} - n^2 \xi^{k+k_0-2} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (16.49)$$

となって、

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left((k+k_0)^2 a_k \xi^{k+k_0-2} + a_k \xi^{k+k_0} - n^2 a_k \xi^{k+k_0-2} \right) = 0 \quad (16.50)$$

という式を解いて行けばよいことがわかる。この式は ξ に関する恒等式だから、 ξ の各次数で 0 になる必要がある。

真中の $a_k \xi^{n+k_0}$ だけ ξ の次数が 2 大きいことに注意して、

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^{k+k_0} = \sum_{k=2}^{\infty} a_{k-2} \xi^{k+k_0-2} \quad (16.51)$$

と書き換える⁷。結局、

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left((k+k_0)^2 - n^2 \right) a_k \xi^{k+k_0-2} = - \sum_{k=2}^{\infty} a_{k-2} \xi^{k+k_0-2} \quad (16.52)$$

⁶微分方程式を

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} + P(\xi) \frac{df}{d\xi} + Q(\xi) = 0$$

と書いた時、 $P(\xi)$ や $Q(\xi)$ は $\xi = 0$ で極になっているが、 $\xi P(z)$ と $\xi^2 Q(z)$ が正則である場合、 $\xi = 0$ は確定特異点であると言う。

⁷ $k \rightarrow k-2$ と置換えたので、「新しい k 」の和は 0 からではなく 2 からになる。こうすれば「古い k 」および「新しい $k-2$ 」はどちらも、 $0, 1, 2, 3, \dots$ になる。

という式になる。これから、 $k \geq 2$ に対しては、

$$\left((k + k_0)^2 - n^2\right) a_k = -a_{k-2} \quad (16.53)$$

という式が出る。 $k = 0, 1$ だけは右辺の寄与がないので特別で、

$$(k_0^2 - n^2)a_0 = 0 \quad (16.54)$$

$$\left((k_0 + 1)^2 - n^2\right) a_1 = 0 \quad (16.55)$$

という式になる。 a_0 は0ではない(もし0だったとしたら、級数は ξ^{k_0} の項からではなく ξ^{k_0+1} から始まるということだから、 $k_0 + 1$ を改めて k_0 と置いて問題を解き直すことになる)ので、 $k_0^2 = n^2$ すなわち $k_0 = \pm n$ ということになる。しかし実は k_0 が負の数、すなわち $-|n|$ の場合は仮定に矛盾することが以下のようにしてわかる。

(16.53) で $k_0 = -|n|$ とすると

$$\begin{aligned} \left((k - |n|)^2 - n^2\right) a_k &= -a_{k-2} \\ k(k - 2|n|) a_k &= -a_{k-2} \end{aligned} \quad (16.56)$$

となるが、 $k = 2|n|$ の時、上の式は

$$0 = -a_{2|n|-2} \quad (16.57)$$

となってしまう。(16.53) からわかるように $a_{2|n|-2}$ がゼロならば添字がそれよりも2少ない $a_{2|n|-4}$ もゼロになる。同じことを $|n|$ 回続ければ、結局 $a_0 = 0$ になってしまう。しかし a_0 は0ではない。

よって $k_0 = |n|$ としよう。結果、 a_1 は0にならなくてはならない⁸。

一般式から

$$a_k = \frac{1}{n^2 - (k + |n|)^2} a_{k-2} = \frac{-1}{k(2|n| + k)} a_{k-2} \quad (16.58)$$

が出る。この式を次々と使うと、 $a_{\text{奇数}}$ は結局は a_1 に比例することがわかる。 $a_1 = 0$ なのだから、すべての $a_{\text{奇数}} = 0$ である。 $a_{\text{偶数}}$ に関しては $k = 2j$ (j は整数) とおいて、

$$\begin{aligned} a_{2j} &= \frac{-1}{2j(2|n| + 2j)} a_{2j-2} = \frac{-1}{2j(2|n| + 2j)} \frac{-1}{(2j-2)(2|n| + 2j-2)} a_{2j-4} = \cdots \\ &= \frac{(-1)^j}{2j(2j-2)(2j-4) \cdots 6 \times 4 \times 2 \times (2|n| + 2j)(2|n| + 2j-2) \cdots (2|n| + 4)(2|n| + 2)} a_0 \end{aligned} \quad (16.59)$$

と求めることができる。

$$\begin{aligned} &2j(2j-2)(2j-4) \cdots 6 \times 4 \times 2 \\ &= 2j \times 2(j-1) \times 2(j-2) \cdots (2 \times 3) \times (2 \times 2) \times (2 \times 1) \\ &= 2^j j(j-1)(j-2) \cdots 3 \times 2 \times 1 = 2^j j! \end{aligned} \quad (16.60)$$

⁸本来、二階微分方程式を解いているのだから、独立な解は二つであるはずである。もう一つの解はノイマン関数と言って、 $\log \xi$ を含む複雑な関数だが、原点で発散するので今考えている問題の解にはならない。

と書き直そう。同様にして、

$$\begin{aligned}
 & (2|n| + 2j)(2|n| + 2j - 2) \cdots (2|n| + 4)(2|n| + 2) \\
 = & \frac{(2|n| + 2j)(2|n| + 2j - 2) \cdots (2|n| + 4)(2|n| + 2)2|n| \times (2|n| - 2) \times (2|n| - 4) \cdots 6 \times 4 \times 2}{2|n| \times (2|n| - 2) \times (2|n| - 4) \cdots 6 \times 4 \times 2} \\
 = & \frac{2^{|n|+j}(|n| + j)!}{2^{|n|}|n|!} = \frac{2^j(|n| + j)!}{|n|!}
 \end{aligned} \tag{16.61}$$

となるので、

$$a_{2j} = \frac{(-1)^j |n|!}{2^{2j} j! (|n| + j)!} a_0 \tag{16.62}$$

である。

よって解は

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j |n|!}{2^{2j} j! (|n| + j)!} \xi^{2j+|n|} a_0 \tag{16.63}$$

とまとまる。方程式は R に関して線型だから、全体を定数倍しても解になる。つまり a_0 は決定できない。 a_0 は全体の規格化によって決まることになる。ここでは $a_0 = \frac{1}{2^{|n|}|n|!}$ と選ぶと、この関数は

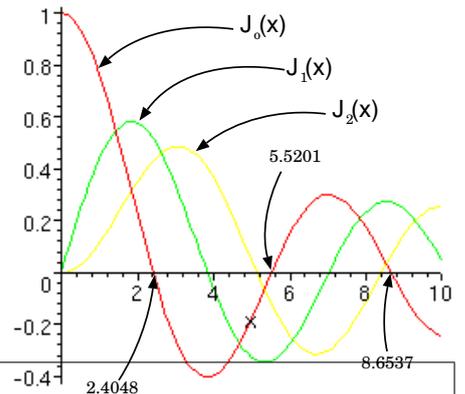
$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! (|n| + j)!} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{2j+|n|} \tag{16.64}$$

と書ける。

一方、

$$J_n(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! (n + j)!} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{2j+n} \tag{16.65}$$

はよく知られているベッセル関数の定義式の一つである⁹。解は $J_{|n|}(\xi)e^{in\theta}$ と書けることになる。次の問題で示すように $J_n(\xi)$ と $J_{-n}(\xi)$ は符号を除いて同じ関数なので、 $J_n(\xi)e^{in\theta}$ と書いてもよい。右は $J_0(x), J_1(x), J_2(x)$ のグラフである。グラフの形は \sin や \cos に似た振動であるが遠方に行くほど(原点から離れるほど)振幅が減衰しているし、周期も一定ではない。



[問い 16-7] ベッセル関数の定義式から

$$(-1)^n J_{-n}(x) = J_n(x)$$

を証明せよ。ただし、計算の中で(負の整数)!が出てきた時は ∞ と考え、 $\frac{1}{(\text{負の整数})!} = 0$ としてよい。

【長い註終わり】

⁹この式では n は整数だが、一般のベッセル関数ではこれは任意の実数である(その場合、 $(n + j)!$ は $\Gamma(n + j + 1)$ に変わる)。

16.6 極座標での解

級数展開によって、解はベッセル関数と呼ばれる $J_n(x)$ を用いて

$$J_n(\xi)e^{in\theta} \quad (16.66)$$

と書けることがわかった。ただし、 $\xi = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}r$ である。

以上で、直交座標の場合と極座標の場合で自由粒子のシュレーディンガー方程式を解いた。この計算だけを見たら、直交座標の方が圧倒的に簡単で、極座標で解くメリットは感じられないかもしれない。しかし、たとえば、 $\psi|_{r=r_0} = 0$ のような境界条件が与えられた場合（つまり、半径 r_0 の円内に閉じ込められた粒子の波動関数を求めなくてはならない場合）などは、直交座標で計算することは難しい。極座標を使った場合では、ベッセル関数の零点がちょうど $r = r_0$ に来るようにエネルギーを調整してやればよい。

$J_n(x)$ が 0 になる場所は、（たとえば $\sin x$ の零点が $x = n\pi$ であるようには）簡単な式で表すことはできない。以下の表の数字は数値的に求めたもので、厳密ではない。また、 $n = 0$ 以外の $J_n(x)$ は $J_n(0) = 0$ となるが、それは表にいれていない。

	1 番め	2 番め	3 番め	4 番め	...
$J_0(x)$	2.40482556	5.52007811	8.65372791	11.7915344	...
$J_1(x)$	3.83170597	7.01558667	10.1734681	13.3236919	...
$J_2(x)$	5.13562230	8.41724414	11.6198412	14.7959518	...
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

$r = r_0$ の場所で波動関数が 0 になるような境界条件が置かれたとすると、その場所の ξ が上にあげた数値のどれかにならなくてはならない。上の表の数値、すなわち「 $J_n(x)$ の m 番めの零点 ($x = 0$ を含まない)」を $Z_{n,m}$ と書くことにすると、 $\xi = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}r$ であるから、

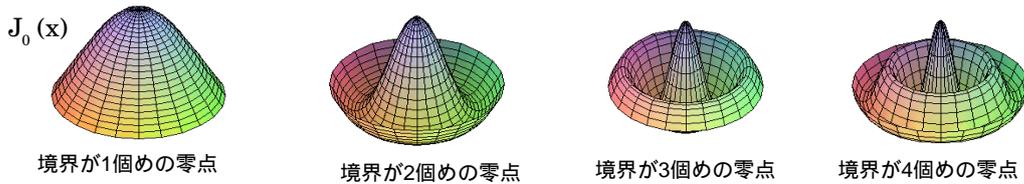
$$Z_{n,m} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}r_0 \quad (16.67)$$

である。これから、エネルギー固有値 E が

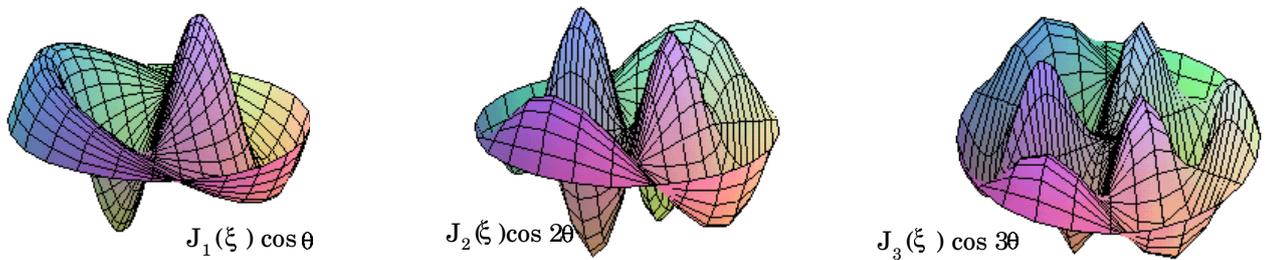
$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{Z_{n,m}}{r_0} \right)^2 \quad (16.68)$$

と求められる。エネルギーの値は、 n, m が大きいほど大きくなる。 n は角運動量の大きさを示す。 m は $r = 0$ から $r = r_0$ までの間に波動関数が何回 0 になるかを示す数字（ただし、 $n \neq 0$ の時の原点での 0 は含まない。端での 0 は含む）であるから、これが大きいほど、動径方向にたくさんの波が入っていることになる。

角運動量を持たない $J_0(x)$ の場合で、 m が大きくなるにつれて波動関数がどう変化していくか、グラフで示すと以下のようなになる。



また、 m を変えることなく n を増やす、つまり角運動量を増やして行くと以下のようなグラフで表せる波動関数になる (ただし、実部のみをグラフにしている)。



[問い16-8] $n \neq 0$ の時 $J_n(0) = 0$ であること、つまり「角運動量がゼロでない時、原点での波動関数は0である」ということには、どのような物理的意味があるだろうか？

16.7 二つの波動関数の関係

ここで直交座標で表した波動関数、極座標で表した波動関数、二つの表示が出てきた。

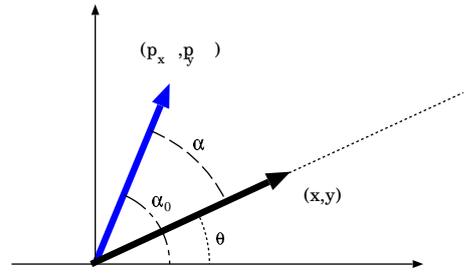
$$\begin{aligned} \text{直交座標: } \psi &= A \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_x x + p_y y) \right] \\ \text{極座標: } \psi &= A' J_n \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r \right) e^{in\theta} \end{aligned} \quad (16.69)$$

である。どちらも $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ という時間依存性を持つ (直交座標形の場合、 $E = \frac{(p_x)^2 + (p_y)^2}{2m}$)。この二つはまったく違って見えるが、同じ方程式の解なのだから関係がある。実は

$$\exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_x x + p_y y) \right] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A'_n J_n \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r \right) e^{in\theta} \quad (16.70)$$

のように、 J_n の適当な線型結合によって平面波を作ることができるのである (もちろん、逆も可)。

この式の両辺に $e^{-in\theta}$ をかけて積分すると、 $e^{in\theta}$ に比例する成分を取り出すことができる。そのために左辺を極座標で書いておこう。 $p_x x + p_y y$ はベクトル (p_x, p_y) と (x, y) の内積であるから、 $= \sqrt{(p_x)^2 + (p_y)^2} \sqrt{x^2 + y^2} \cos \alpha = \sqrt{2mEr} \cos \alpha$ と書ける。 α は二つのベクトルのなす角度である。 θ の方はベクトル (x, y) が x 軸となす角である。 θ を変化させていくと、 α もそれにつられて変化する(図参照)。ここでは $\theta = 0$ の時の α を α_0 とおいて、 $\alpha = \alpha_0 - \theta$ と書いておこう。



$$\int d\theta e^{-in'\theta} \exp \left[i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r \cos(\alpha_0 - \theta) \right] = \int d\theta e^{-in'\theta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} A'_n J_n \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r \right) e^{in\theta} \quad (16.71)$$

$$\int d\theta e^{-in'\theta} \exp \left[i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r \cos(\alpha_0 - \theta) \right] = 2\pi A'_{n'} J_{n'} \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r \right)$$

α_0 は座標軸の取りかたを変えることで自由に選ぶことができるので、ここでは $\alpha_0 = \frac{\pi}{2}$ と選んでおく(こうすると A'_n が簡単になるのを知っているのだから)。この時、 $\cos(\alpha_0 - \theta) = \sin \theta$ となる。さらに、 $\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r = \xi$ とおいて、

$$\int_0^{2\pi} d\theta e^{-in'\theta} \exp [i\xi \sin \theta] = 2\pi A'_{n'} J_{n'}(\xi) \quad (16.72)$$

という式が成立する。

[問い 16-9] (16.72) の両辺から ξ^k の項の係数を取り出して比較して、 A'_n を求めよ。 $\sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}$ と、 $\int_0^{2\pi} d\theta e^{-in'\theta} e^{im\theta} = 2\pi \delta_{mn}$ を使えばよい。

上で求めた関係をうまく使うと、

$$e^{i\xi \sin \theta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(\xi) e^{in\theta} \quad (16.73)$$

という式を作ることができる。この式で $e^{i\theta} = t$ と置くと、

$$e^{\frac{\xi}{2}(t - \frac{1}{t})} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(\xi) t^n \quad (16.74)$$

となる。つまり、 $e^{\frac{\xi}{2}(t - \frac{1}{t})}$ を t の関数と見て級数展開した時の t^n の係数が $J_n(\xi)$ である。

一般に級数展開するとその各項の係数が関数列になるような関数を「母関数」と呼ぶ。 $e^{\frac{\xi}{2}(t - \frac{1}{t})}$ は $J_n(\xi)$ の母関数である。

母関数の式 (16.74) を使うと、便利な公式をいろいろ作ることができる。たとえば (16.74) の式の $t \rightarrow -\frac{1}{t}$ と置き換える。こうしても、 $t - \frac{1}{t}$ という組み合わせは不変なので、左辺は変化しない。一方右辺は

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(\xi) t^n \xrightarrow{t \rightarrow -\frac{1}{t}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(\xi) (-t)^{-n} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{-n}(\xi) (-1)^n t^n \quad (16.75)$$

と変化する。これから、前に証明した $(-1)^n J_{-n}(x) = J_n(x)$ が証明できる。

[問い 16-10] ベッセル関数の加法定理 $J_n(x+y) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(x)J_{n-m}(y)$ を証明せよ。

[問い 16-11] ベッセル関数の漸化式 $2\frac{d}{dx}J_n(x) = J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x)$ を証明せよ。

量子力学の計算ではいろんな演算子の固有関数を求めて、波動関数とその固有関数で展開するというをよく行う。簡単なポテンシャルの場合ならば、運動量やエネルギーの固有関数は $\sin kx$ だったり e^{ikx} だったり、比較的簡単な関数で表すことができたのだが、実際に具体的な問題を解こうとすると、エルミート多項式やベッセル関数のようなややこしい関数も必要となってくる。次の章の3次元の場合でも同様の計算を行う。面倒ではあるが、現実的な問題を解くためには必要なことである。

第17章 球対称ポテンシャル内の粒子

17.1 3次元極座標のシュレーディンガー方程式

この章では3次元で球対称なポテンシャル $V(r)$ が存在している場合のシュレーディンガー方程式を極座標で解いていくことにする。3次元で直交座標を使った場合、定常状態のシュレーディンガー方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V \left(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \right) \right] \psi = E\psi \quad (17.1)$$

である¹。

もし位置エネルギーの項も $U(x) + V(y) + W(z)$ のように x, y, z それぞれに関する部分に分かれるならば、

$$\begin{cases} \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] X(x) = E_x X(x) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dy^2} + V(y) \right] Y(y) = E_y Y(y) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dz^2} + W(z) \right] Z(z) = E_z Z(z) \end{cases} \quad (17.2)$$

のように3つの方程式に変数分離して解くことができるだろう ($\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ であり、 $E = E_x + E_y + E_z$)。このようにできる場合は1次元の問題を組み合わせることで解くことができる。

しかしここでは位置エネルギーが $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ の関数である場合を考えているので、上に書いたような変数分離はできない。むしろ、波動関数を r, θ, ϕ (極座標) の関数として考えた方が解きやすそうである。一般に、問題に球対称性がある場合²には、極座標の方が解きやすくなる場合が多い。そこでシュレーディンガー方程式を極座標で表したい。まず、極座標での古典力学を復習しよう。

17.1.1 3次元極座標による古典力学

3次元空間内の力学では、物体の位置、速度、加速度、運動量などをベクトルで表現する。ベクトルを成分表示するには座標系が必要である。もっともよく使われる座標系は「直交座標系」である。あるベクトル \vec{A} が (A_x, A_y, A_z) という成分を持つ、という時、それは \vec{A} を

$$\vec{A} = A_x \vec{e}_x + A_y \vec{e}_y + A_z \vec{e}_z \quad (17.3)$$

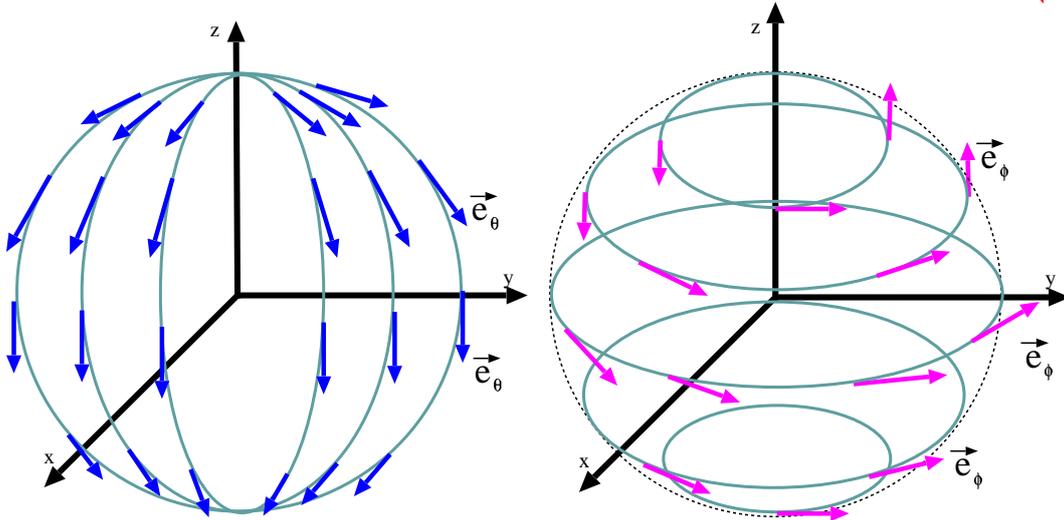
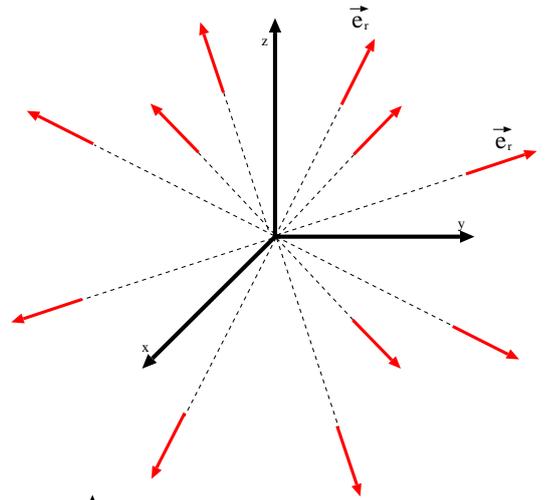
のように、 $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ という基底ベクトル (座標軸の方向を向いて、長さが1であるベクトル) に成分をかけて足したものに分解されることを意味する。

¹以下では、考えている粒子の質量を μ とする。 m を別の意味で使うからである。

²たとえば、球形の領域に閉じこめられた粒子の量子力学、あるいは次で考える、水素原子の問題など。

極座標では場所は r, θ, ϕ で表現されるから、それぞれの方向を向いた単位ベクトルを基底ベクトルとして、ベクトルを表す。3つの基底ベクトル $\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi$ は、空間の各点各点でそれぞれの対応した座標が増加する方向を向く（たとえば \vec{e}_r は θ, ϕ を一定として、 r が増加する方向を向く）。

3つの基底ベクトルがどんな方向を向くかは、右および下の図で表した通りである。直交座標の場合とは違い、場所によって違う方向を向いていることに注意しよう。定義からすれば当然なのだが、これは直交座標の場合の基底ベクトルとは大きく違うところであり、これがゆえにちょっと面倒になる部分もある³。それについてはすぐ後で出てくる。



$\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi$ は、それぞれ r 方向、 θ 方向、 ϕ 方向の $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ の関係を出すと、

$$\vec{e}_r = \sin \theta \cos \phi \vec{e}_x + \sin \theta \sin \phi \vec{e}_y + \cos \theta \vec{e}_z \quad (17.4)$$

$$\vec{e}_\theta = \cos \theta \cos \phi \vec{e}_x + \cos \theta \sin \phi \vec{e}_y - \sin \theta \vec{e}_z \quad (17.5)$$

$$\vec{e}_\phi = -\sin \phi \vec{e}_x + \cos \phi \vec{e}_y \quad (17.6)$$

である。これは行列で書けば、

$$\begin{pmatrix} \vec{e}_r \\ \vec{e}_\theta \\ \vec{e}_\phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \\ \cos \theta \cos \phi & \cos \theta \sin \phi & -\sin \theta \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{e}_x \\ \vec{e}_y \\ \vec{e}_z \end{pmatrix} \quad (17.7)$$

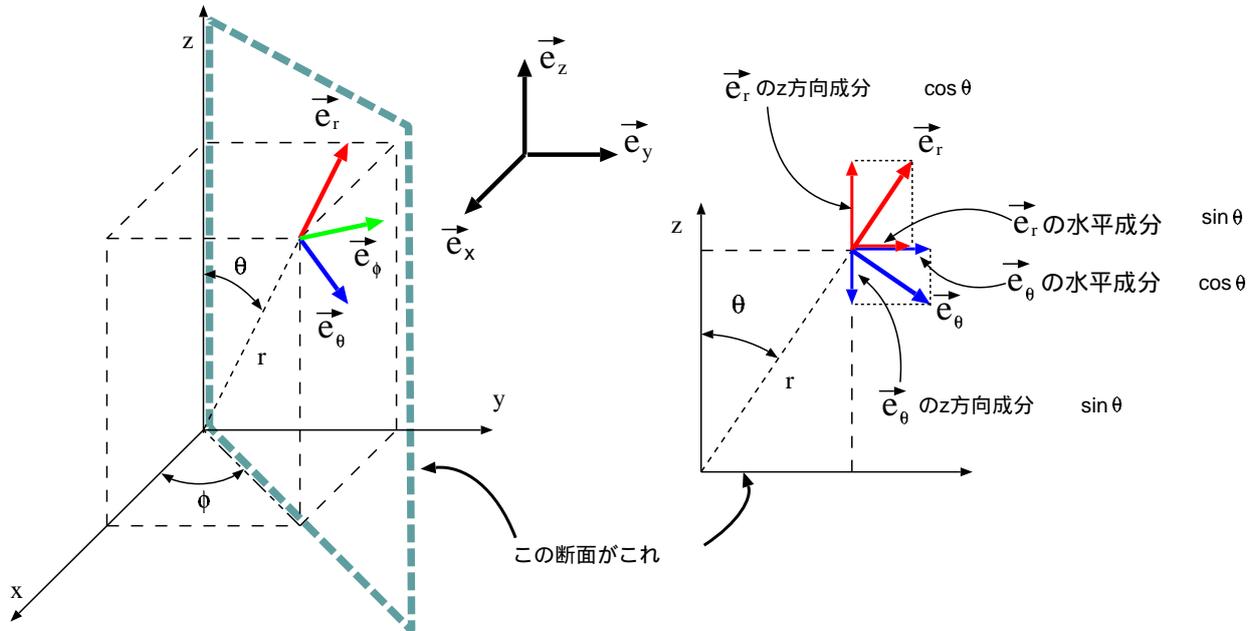
であり、一種の直交変換であるから、逆変換はこの行列の転置行列で表現され、

$$\begin{pmatrix} \vec{e}_x \\ \vec{e}_y \\ \vec{e}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & \cos \theta \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \sin \phi & \cos \phi \\ \cos \theta & -\sin \theta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{e}_r \\ \vec{e}_\theta \\ \vec{e}_\phi \end{pmatrix} \quad (17.8)$$

³極座標は直交座標に比べて不便なところもあれば、便利なところもある。メリットとデメリットを秤にかけてどっちを使うべきかを決めなくてはならない。

となる。

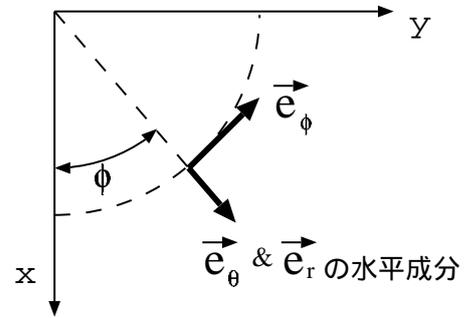
(17.4) ~ (17.6) は、下の図を見ながら考えると出てくる。



まず上左の図が、ある点における $\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi$ の向いている方向を書いたものである。

左図の点線で書いた部分の断面を書いたのが右の図である (\vec{e}_ϕ は断面に垂直なので図には書かれていない)。 \vec{e}_r は z 方向成分 $\cos \theta$ 、水平成分 $\sin \theta$ であり、 \vec{e}_θ は z 成分が $-\sin \theta$ 、水平成分が $\cos \theta$ であることがわかる。

次に、上の左図を真上から見たものが右の図である。これから、 \vec{e}_ϕ が x 成分 $-\sin \phi$ と y 成分 $\cos \phi$ を持つことがわかる。また、 \vec{e}_r および \vec{e}_θ は先に求めて置いた水平成分に $\cos \phi$ をかけた x 成分と、 $\sin \phi$ をかけた y 成分を持つこともわかる。以上をまとめて (17.4) から (17.6) ままでが出る。



一般のベクトルは 3次元直交座標の基底ベクトルを $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ で表してもよいし、極座標の基底ベクトルを $\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi$ で表してもよい。極座標では \vec{A} は

$$\vec{A} = A_r \vec{e}_r + A_\theta \vec{e}_\theta + A_\phi \vec{e}_\phi \tag{17.9}$$

と表現される⁴。 A_x, A_y, A_z と A_r, A_θ, A_ϕ の相互関係を見つけることができる。たとえば A_r を A_x, A_y, A_z で表したかったら、(17.3) と (17.9) という二つの \vec{A} の表現を等しいとして、

$$A_x \vec{e}_x + A_y \vec{e}_y + A_z \vec{e}_z = A_r \vec{e}_r + A_\theta \vec{e}_\theta + A_\phi \vec{e}_\phi \tag{17.10}$$

という式を作る。この式の両辺と \vec{e}_r との内積をとると、右辺では $A_r \vec{e}_r$ の項以外は 0 となり、 A_r のみが残る。すなわち、

$$A_x \vec{e}_r \cdot \vec{e}_x + A_y \vec{e}_r \cdot \vec{e}_y + A_z \vec{e}_r \cdot \vec{e}_z = A_r \tag{17.11}$$

⁴ここでは基底ベクトルが長さ 1 であるように決めて考えている。一般的には、基底ベクトルは長さ 1 とは限らない。基底ベクトルの長さが 1 とこだわらない方が計算が簡単になる部分もあるのである。

である。上で求めた関係から、 $\vec{e}_r \cdot \vec{e}_x = \sin \theta \cos \phi$, $\vec{e}_r \cdot \vec{e}_y = \sin \theta \sin \phi$, $\vec{e}_r \cdot \vec{e}_z = \cos \theta$ がわかるから、

$$A_r = \sin \theta \cos \phi A_x + \sin \theta \sin \phi A_y + \cos \theta A_z \quad (17.12)$$

となる (その他の関係式も同様なので省略する)。

【補足】 この部分は授業では話さない可能性もあるが、その場合は読んでおいてください。

物体の位置ベクトル \vec{x} は、直交座標と極座標のそれぞれで表すと

$$\vec{x} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z = r\vec{r} \quad (17.13)$$

である。極座標では $\vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi$ は現れない。速度はこの時間微分である。

$$\vec{v} = \frac{dx}{dt}\vec{e}_x + \frac{dy}{dt}\vec{e}_y + \frac{dz}{dt}\vec{e}_z \quad (17.14)$$

は正しいが、

$$\vec{v} = \frac{dr}{dt}\vec{e}_r \quad (17.15)$$

は正しくないことに注意しよう。極座標の基底ベクトルは場所によって違う方向を向いている。今物体の位置が移動すれば、基底ベクトルの向きも変わってしまう。正しい計算は、

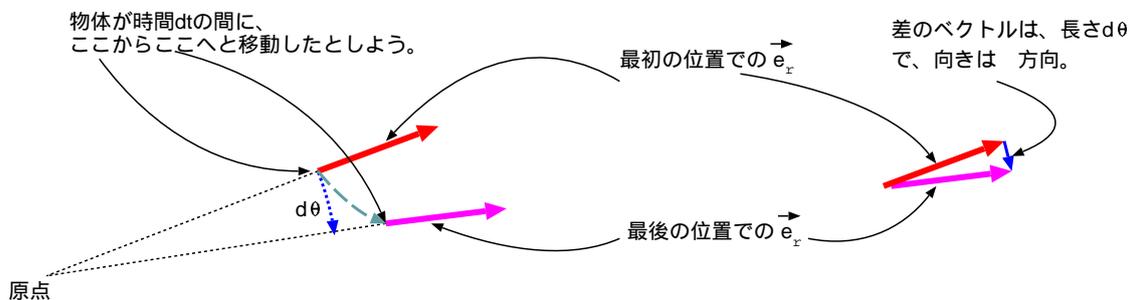
$$\vec{v} = \frac{dr}{dt}\vec{e}_r + r\frac{d\vec{e}_r}{dt} \quad (17.16)$$

である (直交座標の時は、 $\frac{d\vec{e}_x}{dt} = \frac{d\vec{e}_y}{dt} = \frac{d\vec{e}_z}{dt} = 0$ だったので関係なかった)。

$\vec{e}_r = \sin \theta \cos \phi \vec{e}_x + \sin \theta \sin \phi \vec{e}_y + \cos \theta \vec{e}_z$ であったので、これを微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{e}_r}{dt} &= \frac{d}{dt} (\sin \theta \cos \phi \vec{e}_x + \sin \theta \sin \phi \vec{e}_y + \cos \theta \vec{e}_z) \\ &= \frac{d\theta}{dt} (\cos \theta \cos \phi \vec{e}_x + \cos \theta \sin \phi \vec{e}_y - \sin \theta \vec{e}_z) + \frac{d\phi}{dt} (-\sin \theta \sin \phi \vec{e}_x + \sin \theta \cos \phi \vec{e}_y) \\ &= \frac{d\theta}{dt} \vec{e}_\theta + \sin \theta \frac{d\phi}{dt} \vec{e}_\phi \end{aligned} \quad (17.17)$$

である。このような結果になる理由は、下のような図で納得することができる。



上の図では ϕ 方向の動きは省略している。微小時間 dt の間に θ が $d\theta$ だけ増えたとすると、それによって「粒子のいる場所の \vec{e}_r 」は角度 $d\theta$ だけ回転することになる。これが上の微分の式の意味である。なお、 ϕ が $d\phi$ 変化した時は、 \vec{e}_r は $d\phi$ ではなく、 $\sin \theta d\phi$ だけ回転するという点に注意すれば、第 2 項も同様に考えることができる。

この、「一般の曲線座標では、基底ベクトルの微分が 0 ではない」という性質は、後でシュレーディンガー方程式を作るときでも重要であるので、このあたりの計算方法についてはその時にもう一度くわしく述べよう。

これから、

$$\vec{v} = \frac{dr}{dt} \vec{e}_r + r \frac{d\theta}{dt} \vec{e}_\theta + r \sin \theta \frac{d\phi}{dt} \vec{e}_\phi \quad (17.18)$$

となる。同様に加速度を計算すると、

$$\begin{aligned} \vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = & \vec{e}_r \left(\frac{d^2 r}{dt^2} - r^2 \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 - r^2 \sin^2 \theta \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right) \\ & + \vec{e}_\theta \left(\frac{d^2 \theta}{dt^2} + 2 \frac{dr}{dt} \frac{d\theta}{dt} - r \sin \theta \cos \theta \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right) \\ & + \vec{e}_\phi \left(r \sin \theta \frac{d^2 \phi}{dt^2} + 2 \sin \theta \frac{dr}{dt} \frac{d\phi}{dt} + 2r \cos \theta \frac{d\theta}{dt} \frac{d\phi}{dt} \right) \end{aligned} \quad (17.19)$$

という答が出る。このややこしさゆえに曲線座標でニュートン力学を考えると少々面倒になる。速度の式から運動エネルギーの式を作ると、

$$\frac{1}{2} m |\vec{v}|^2 = \frac{1}{2} m \left(\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + r^2 \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + r^2 \sin^2 \theta \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right) \quad (17.20)$$

となる。今考えている球対称ポテンシャル内の運動の古典力学的ラグランジアンは上の式から位置エネルギー $V(r)$ をひいたものであり、一般座標 r, θ, ϕ に対する一般運動量はそれぞれ、

$$p_r = m \frac{dr}{dt}, \quad p_\theta = mr^2 \frac{d\theta}{dt}, \quad p_\phi = mr^2 \sin^2 \theta \frac{d\phi}{dt} \quad (17.21)$$

となり、ハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m} \left((p_r)^2 + \frac{1}{r^2} (p_\theta)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} (p_\phi)^2 \right) + V(r) \quad (17.22)$$

となる。この p_θ, p_ϕ は角運動量に対応する。あとでこのハミルトニアンの量子力学バージョンを考えていくことになるだろう。

【補足終わり】

17.1.2 3次元極座標におけるラプラシアン

直交座標でのシュレーディンガー方程式には、

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (17.23)$$

という二階微分演算子が現れた。この演算子 Δ はラプラシアンと呼ばれる。ラプラシアンはナブラと呼ばれるベクトル演算子 $\vec{\nabla}$ の自分自身との内積として計算される（すなわち、 $\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$ ）。3次元直交座標での $\vec{\nabla}$ は

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \quad (17.24)$$

と書ける。一次元の量子力学で運動量 p が $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ と対応したように、3次元の量子力学では運動量 $\vec{p} = p_x \vec{e}_x + p_y \vec{e}_y + p_z \vec{e}_z$ は $-i\hbar \vec{\nabla}$ に対応する。 $\vec{\nabla}$ の自乗というのは $(-i\hbar)^2 = -\hbar^2$ という因子を除いて) 運動量の自乗 $|\vec{p}|^2$ に他ならない。

ここで、今から求めようとしているラプラシアンの極座標での表示を、先に書いておく。

3次元極座標のラプラシアン

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (17.25)$$

または

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (17.26)$$

この式を導出するための計算は2次元の時と同様、注意深く行わないと間違ふ。やり方は2次元の場合と本質的に同じであるので、ここでは $\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$ を使って計算する方法のみを示す。

まず極座標での $\vec{\nabla}$ を求めよう。このベクトル演算子 $\vec{\nabla}$ の意味するところは、

$$f(\vec{x} + \vec{a}) - f(\vec{x}) = \vec{a} \cdot \vec{\nabla} f(\vec{x}) + \dots \quad (17.27)$$

である (\dots の部分は、 \vec{a} の二次以上)。つまり、 \vec{a} の向いている方向に移動した時の関数 $f(\vec{x})$ の変化量が $\vec{a} \cdot \vec{\nabla} f(\vec{x})$ となるように定義されている。たとえば x 方向に距離 ϵ だけ移動するならば、 $\vec{a} = (\epsilon, 0, 0)$ を上の式に代入して、

$$f(x + \epsilon, y, z) - f(x, y, z) = \epsilon \frac{\partial f(x, y, z)}{\partial x} \quad (17.28)$$

である。すなわち、 $\vec{e}_x \cdot \vec{\nabla} f = \frac{\partial}{\partial x} f$ であり、同様に、 $\vec{e}_y \cdot \vec{\nabla} f = \frac{\partial}{\partial y} f$, $\vec{e}_z \cdot \vec{\nabla} f = \frac{\partial}{\partial z} f$ である。この3つの式を見れば、 $\vec{\nabla} = \vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$ という表現になることが納得できる。

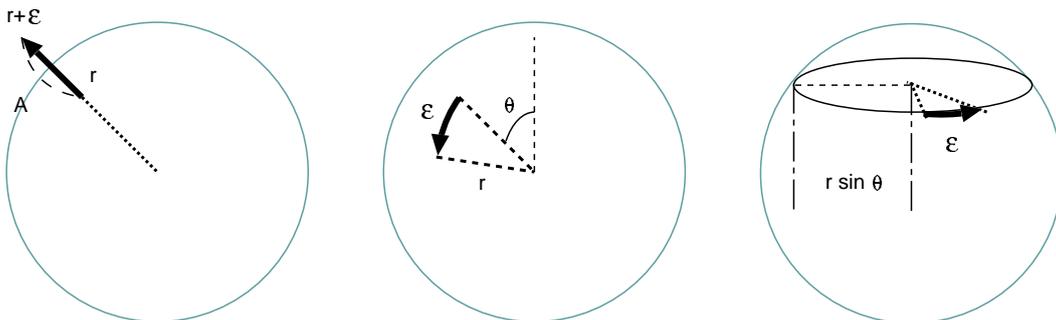
極座標を使って同様に「ある方向に距離 ϵ だけ移動して差を取る」という計算をすると、それぞれ、 r 方向、 θ 方向、 ϕ 方向に ϵ 移動した時の関数 $f(r, \theta, \phi)$ の変化は、

$$f(r + \epsilon, \theta, \phi) - f(r, \theta, \phi) = \epsilon \frac{\partial f(r, \theta, \phi)}{\partial r} \quad (17.29)$$

$$f\left(r, \theta + \frac{\epsilon}{r}, \phi\right) - f(r, \theta, \phi) = \frac{\epsilon}{r} \frac{\partial f(r, \theta, \phi)}{\partial \theta} \quad (17.30)$$

$$f\left(r, \theta, \phi + \frac{\epsilon}{r \sin \theta}\right) - f(r, \theta, \phi) = \frac{\epsilon}{r \sin \theta} \frac{\partial f(r, \theta, \phi)}{\partial \phi} \quad (17.31)$$

となる。 r 方向は素直に考えればよいが、 θ 方向に関しては、「 θ が $\frac{\epsilon}{r}$ 増加すると距離 ϵ 進む」という計算になることに注意 (ϕ 方向に関しては「 ϕ が $\frac{\epsilon}{r \sin \theta}$ 増加すると距離 ϵ 進む」と考えれば以上の結果は理解できる。



このため、極座標で表した $\vec{\nabla}$ は

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (17.32)$$

となる。これの自乗（ベクトル内積の意味で自乗）を任意の関数 ψ にかけてものを計算してみる。ここでうっかりすると、

これは間違いです !!

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \psi &= \left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_r \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \cdot \left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi \\ &= \left(\vec{e}_r \cdot \vec{e}_r \left(\frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \vec{e}_\theta \cdot \vec{e}_\theta \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \vec{e}_\phi \cdot \vec{e}_\phi \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^2 \right) \psi \\ &= \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi \end{aligned} \quad (17.33)$$

という間違った計算をすることになる。どこが間違っているかというと、「 $\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi$ は場所によって違う方向を向いている。ゆえにこれらの微分は0ではない⁵」ということをおぼえているのである。

古典力学では座標 \vec{r} と運動量 \vec{p} はともに「数⁶」であるが、量子力学では演算子となり、 \vec{p} が $-i\hbar \vec{\nabla}$ のようになる。上の間違った計算は、「もし \vec{r} と $\vec{\nabla}$ が交換したら」のような仮定が成立していれば正しい。しかしそうではないのである。

なお、左の括弧内の $\frac{\partial}{\partial r}$ が右の括弧内の r を微分するという可能性もある。しかしその結果は左の括弧内のベクトルは \vec{e}_r 、右の括弧内のベクトルは (\vec{e}_r の係数は r を含んでないので) $\vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi$ になり、ベクトルの直交性から0になり、関係ない。他の可能性も同様なので、以下では基底ベクトルを微分した結果だけ考えればよい。

たとえば \vec{e}_r を θ で微分すると、

$$\frac{\partial \vec{e}_r}{\partial \theta} = \frac{d \sin \theta}{d \theta} \cos \phi \vec{e}_x + \frac{d \sin \theta}{d \theta} \sin \phi \vec{e}_y + \frac{d \cos \theta}{d \theta} \vec{e}_z = \cos \theta \cos \phi \vec{e}_x + \cos \theta \sin \phi \vec{e}_y - \sin \theta \vec{e}_z \quad (17.34)$$

となり、これは \vec{e}_θ そのものである。同様の計算をすると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{e}_r &= \vec{e}_\theta, & \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{e}_\theta &= -\vec{e}_r \\ \frac{\partial}{\partial \phi} \vec{e}_r &= \sin \theta \vec{e}_\phi, & \frac{\partial}{\partial \phi} \vec{e}_\theta &= \cos \theta \vec{e}_\phi, & \frac{\partial}{\partial \phi} \vec{e}_\phi &= -\sin \theta \vec{e}_r - \cos \theta \vec{e}_\theta \end{aligned} \quad (17.35)$$

という式が出る（これ以外の組み合わせは0）。

[問い17-1] 上の式は計算によらずとも、ベクトルの変化を見て考えることができる。図で説明せよ。

このように基底ベクトルの微分が0でないせいで、(17.33)では出ていないよけいな項が出る。以下ではそのような「おつり」の部分だけを計算する。そのために、左の括弧内がの微分演算子が基底ベクトルを微分した項がどのような結果を出すかを考える。

⁵ 直交座標の場合は $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ が全てどこでも同じ方向を向いているので、この点を心配する必要はない。

⁶ ディラックは、普通の数を経典的 (classical) な数ということで c -数と呼び、量子力学での演算子を q -数と呼んだ。

まず、基底ベクトルの r 微分は0なので、 $\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r}$ はおつりを出さない。 $\vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$ に関しては、微分の結果が \vec{e}_θ と同じ方向を向いている成分だけが残る。 $\frac{\partial}{\partial \theta} \vec{e}_r = \vec{e}_\theta$ という部分から「おつり」が出る。どれだけ出るかというと、

$$\vec{e}_\theta \cdot \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) \psi = \frac{1}{r} \vec{e}_\theta \cdot \frac{\partial \vec{e}_r}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial r} \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \psi \quad (17.36)$$

である。 θ 微分が ψ にかかった部分は、 $\vec{e}_\theta \cdot \vec{e}_r = 0$ であるおかげで結果に寄与しない。

次に左の括弧内の第3項 $\vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$ の部分である。

$$\vec{e}_\phi \cdot \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right) \psi = \frac{1}{r \sin \theta} \vec{e}_\phi \cdot \left(\sin \theta \vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial r} + \cos \theta \vec{e}_\phi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \psi = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \psi \quad (17.37)$$

となる。失敗だった式 (17.33) に、足りない部分である (17.36) と (17.37) を足してやると、(17.26) が出てくる。

以上により、解くべきシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi + V(r) \psi = E \psi \quad (17.38)$$

となる。

これを解いて行きたい。左辺の第一項は運動エネルギーを表現した項、第二項は位置エネルギーを表現した項である。ここで2次元の場合にシュレーディンガー方程式が次のようになったことを思い起こそう。

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \psi \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \psi = E \psi \quad (17.39)$$

この式で第2項の $-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \psi$ は $\frac{1}{2\mu r^2} (L_z)^2 \psi$ のように角運動量を使って書くことができた。さらにこの L_z の固有値が $n\hbar$ であることを使って式を簡単にしていくことができた。

古典論では、以下のようにして運動エネルギーを動径方向 (r 方向) の運動エネルギーと角運動量に由来する運動エネルギーに分割することができた。

まず、ベクトルの公式 $(\vec{A} \times \vec{B}) \cdot (\vec{C} \times \vec{D}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})(\vec{B} \cdot \vec{D}) - (\vec{A} \cdot \vec{D})(\vec{B} \cdot \vec{C})$ を使って、角運動量 $\vec{r} \times \vec{p}$ の長さの自乗を計算する。

$$(\vec{r} \times \vec{p})^2 = r^2 |\vec{p}|^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 \quad (17.40)$$

両辺を $2\mu r^2$ で割ってから整理して、 $\frac{1}{2\mu} |\vec{p}|^2$ を求めると

$$\frac{1}{2\mu} |\vec{p}|^2 = \frac{1}{2\mu r^2} (|\vec{L}|^2 + (\vec{r} \cdot \vec{p})^2) = \frac{1}{2\mu r^2} |\vec{L}|^2 + \frac{1}{2\mu} \left(\frac{\vec{r} \cdot \vec{p}}{r} \right)^2 \quad (17.41)$$

となる。 $\frac{\vec{r} \cdot \vec{p}}{r}$ は運動量の r 方向成分であるから、 $\frac{1}{2\mu r^2} (\vec{r} \cdot \vec{p})^2$ が動径部分の運動エネルギー、 $\frac{1}{2\mu r^2} |\vec{L}|^2$ が角運動量による運動エネルギーと考えられる。

その類推から、3次元の自由粒子のシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi \right) + \frac{1}{2\mu r^2} \left((L_x)^2 + (L_y)^2 + (L_z)^2 \right) \psi = E\psi \quad (17.42)$$

という形になるであろうと考えられる。 L_x, L_y, L_z は3次元の角運動量を表す演算子である。次の節で、角運動量について考えよう。

17.2 3次元の角運動量

古典力学においては、角運動量 \vec{L} は $\vec{x} \times \vec{p}$ のように、原点からの位置ベクトルと運動量ベクトルの外積であった。2次元の角運動量は $xp_y - yp_x$ の一成分しかないが、3次元では角運動量は3つの成分を持ち、 \vec{L} の向く方向は回転の軸の方向である。3成分 $L_x = yp_z - zp_y$ 、 $L_y = zp_x - xp_z$ 、 $L_z = xp_y - yp_x$ は、それぞれが x 軸回りの角運動量、 y 軸回りの角運動量、 z 軸回りの角運動量である。ベクトル的に表現するならば、 $\vec{L} = -i\hbar \vec{x} \times \vec{\nabla}$ となる。

この角運動量の量子力学での表現を求めよう。これも、ベクトルで表現した方が計算しやすい。 $\vec{x} = r\vec{e}_r$ と $\vec{\nabla}$ の式を代入して、

$$\begin{aligned} \vec{L} &= -i\hbar r\vec{e}_r \times \left(\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= -i\hbar \left(r \underbrace{\vec{e}_r \times \vec{e}_r}_{=0} \frac{\partial}{\partial r} + \underbrace{\vec{e}_r \times \vec{e}_\theta}_{=\vec{e}_\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} + \underbrace{\vec{e}_r \times \vec{e}_\phi}_{=-\vec{e}_\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= -i\hbar \left(\vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \end{aligned} \quad (17.43)$$

となる。これから各成分 L_x, L_y, L_z を計算するには、 \vec{L} と $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ の内積をとればよい。後で使うのは L_z だけなので、そのみを書くと、

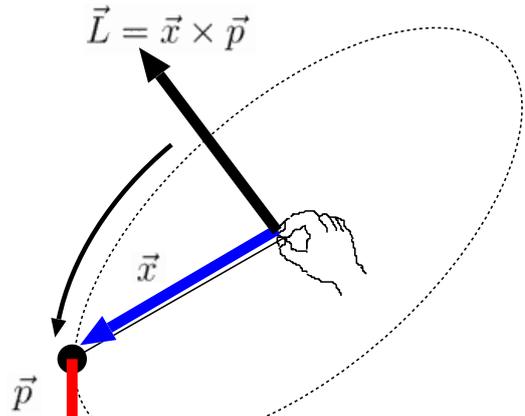
$$L_z = \vec{e}_z \cdot \vec{L} = -i\hbar (\cos \theta \vec{e}_r - \sin \theta \vec{e}_\theta) \cdot \left(\vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (17.44)$$

となることがわかる。

L_z は ϕ 微分のみで作られているが、 z 軸周りの角運動量ということは、 ϕ に共役な運動量なのであるから、この結果は当然である。

角運動量の絶対値の自乗 $|\vec{L}|^2 = (L_x)^2 + (L_y)^2 + (L_z)^2$ を計算してみよう。これもベクトル式を使って、

$$\begin{aligned} |\vec{L}|^2 &= -\hbar^2 \left(\vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \cdot \left(\vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \vec{e}_\phi \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) - \frac{1}{\sin \theta} \vec{e}_\theta \cdot \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right) \end{aligned} \quad (17.45)$$



となる。この左側の θ 微分、 ϕ 微分は、右の括弧内、特に \vec{e}_θ と \vec{e}_ϕ も微分することを忘れてはならない。ただし、 θ 微分に関しては \vec{e}_θ を微分すると $-\vec{e}_r$ になるし、 \vec{e}_ϕ は θ で微分すると 0 なので、結果には効かない。 ϕ 微分は $\frac{\partial}{\partial\phi}\vec{e}_\phi = -\sin\theta\vec{e}_r - \cos\theta\vec{e}_\theta$ のうち \vec{e}_θ に比例する部分は生き残り、

$$|\vec{L}|^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \quad (17.46)$$

である。これを見ると確かに、ラプラシアンから求めたハミルトニアンの中には $\frac{1}{2\mu r^2} |\vec{L}|^2$ に対応する項が入っている。

2次元の場合にハミルトニアンと角運動量 L_z との同時固有状態を考えたように、3次元でもハミルトニアンと角運動量の同時固有状態を考えて行きたい。しかし同時固有状態であるためには互いに交換する演算子でなくてはならない。

そこで、ここで出てきた演算子 $|\vec{L}|^2, L_x, L_y, L_z$ およびハミルトニアン H との相互の交換関係を考えておこう。まず L_x と L_y の交換関係を計算する。 $[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z]$ であるが、交換関係の中身を見ると、交換しない組み合わせは「 yp_z の中の p_z と zp_x の中の z 」、 $「-zp_y$ の中の z と $-xp_z$ の中の p_z 」の二つだけである。ゆえに、

$$[L_x, L_y] = y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y = i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z \quad (17.47)$$

である。サイクリックな交換 ($x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$) を行うことで、 $[L_y, L_z] = i\hbar L_x, [L_z, L_x] = i\hbar L_y$ が求められる。自分自身とは当然交換する (たとえば $[L_x, L_x] = 0$) し、これ以外のものは上で求めたものの逆符号になる (たとえば $[L_y, L_x] = -[L_x, L_y] = -i\hbar L_z$) ので、これで L_x, L_y, L_z の組み合わせについてはすべて計算した。

$|\vec{L}|^2$ と L_x との交換関係を計算すると、

$$[|\vec{L}|^2, L_x] = [(L_x)^2, L_x] + [(L_y)^2, L_x] + [(L_z)^2, L_x] \quad (17.48)$$

であるが、 $[L_x, L_x] = 0$ だから第 1 項は 0。第 2 項は

$$[L_y L_y, L_x] = L_y [L_y, L_x] + [L_y, L_x] L_y = -i\hbar [L_y L_z + L_z L_y] \quad (17.49)$$

となり 0 ではないが、第 3 項が

$$[L_z L_z, L_x] = L_z [L_z, L_x] + [L_z, L_x] L_z = i\hbar [L_z L_y + L_y L_z] \quad (17.50)$$

となって互いに逆符号でキャンセルし、 $[|\vec{L}|^2, L_x] = 0$ である (L_y, L_z に関しても同様)。今考えているハミルトニアンは $H = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2\mu r^2} |\vec{L}|^2 + V(r)$ となっている。 $L_x, L_y, L_z, |\vec{L}|^2$ は全て r 微分を含まず、かつこれらは全て $|\vec{L}|^2$ と交換するのだから、 $L_x, L_y, L_z, |\vec{L}|^2$ はハミルトニアンと交換する。

L_x, L_y, L_z は互いの交換関係が 0 でないことに注意すると、 H との同時固有状態を持てるのは $|\vec{L}|^2$ と、 L_x, L_y, L_z のうちどれか一つである (通常は L_z を選ぶ)。

L_z の固有状態については 2次元の時と同じで、 $e^{im\phi}$ という形の固有関数に対して、 L_z の固有値が $m\hbar$ となる (m は整数)。よって $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)e^{im\phi}$ とおいて、波動関数を動径部分と角運動量部分に、さらに角運動量部分は z 成分の固有関数部分とそれ以外の部分に分離する。

$|\vec{L}|^2$ の固有値が $\hbar^2\lambda$ であるとして、 Θ 部分の方程式を

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta \right) + \frac{\hbar^2 m^2}{\sin^2 \theta} \Theta &= \hbar^2 \lambda \Theta \\ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta &= -\lambda \Theta \end{aligned} \tag{17.51}$$

と書き直す。

波動関数は、 H の固有値 E (エネルギー) と $|\vec{L}|^2$ の固有値 $\hbar^2\lambda$ 、 L_z の固有値 $m\hbar$ で分類されることになる。

次の節で $|\vec{L}|^2$ の固有値方程式を解くが、その前に、 L_z の固有値に関する、有用な式を示しておく。

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \tag{17.52}$$

$$[L_z, L_y] = -i\hbar L_x \tag{17.53}$$

という二つの式は (17.52) $\pm i \times$ (17.53) と組み合わせることで、

$$[L_z, L_x \pm iL_y] = i\hbar L_y \pm \hbar L_x = \pm \hbar (L_x \pm iL_y) \tag{17.54}$$

とまとめることができる。 $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ として新しい演算子 L_{\pm} を定義すると、

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm} \tag{17.55}$$

である。この式は

$$L_z L_{\pm} = L_{\pm} L_z \pm \hbar L_{\pm} = L_{\pm} (L_z \pm \hbar) \tag{17.56}$$

とも書ける。この $L_z L_{\pm} = L_{\pm} (L_z \pm \hbar)$ は、 L_{\pm} をかけることで L_z の固有値が \hbar だけ上がったり下がったりする、ということを示す式になっている。

今、 L_z の固有値が $m\hbar$ であるような波動関数 ψ_m が求められたとしよう ($L_z \psi_m = m\hbar \psi_m$)。この時、

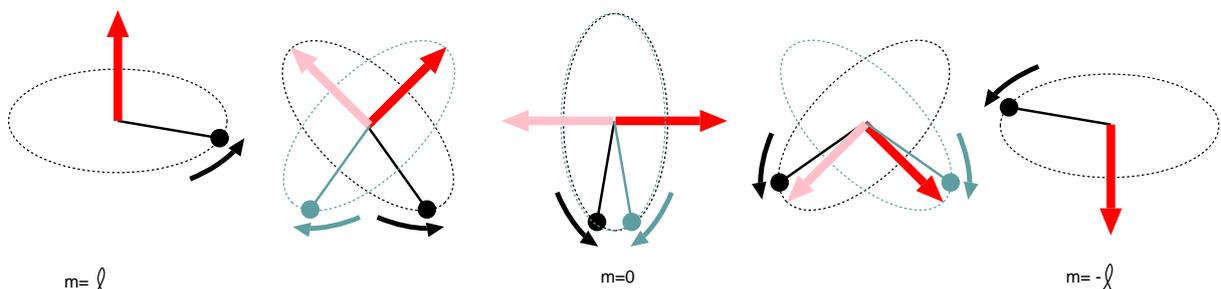
$$L_z L_{\pm} \psi_m = L_{\pm} \left(\underbrace{L_z}_{\rightarrow m\hbar} \pm \hbar \right) \psi_m = (m \pm 1) \hbar L_{\pm} \psi_m \tag{17.57}$$

となる。つまり、 $L_{\pm} \psi_m$ の L_z 固有値は $(m \pm 1)\hbar$ である。 L_x, L_y は $|\vec{L}|^2$ と交換するから、 L_{\pm} は L_z の固有値を \hbar だけ変化させるが、 $|\vec{L}|^2$ の固有値は変えない。調和振動子の a, a^\dagger と同様に、この演算子はたいへん便利な演算子である。なぜなら、 ψ_m を一つ求めておけば、 L_{\pm} をかけることで次々と $\psi_{m\pm 1}, \psi_{m\pm 2}, \dots$ を求めることができるからである。

$L_+(L_-)$ を「 L_z の固有値を上げる (下げる) 演算子」ということで、上昇 (下降) 演算子と呼ぶ。

[問い 17-2] L_+, L_- の微分演算子による具体的な表現を求めよ。

[問い 17-3] L_{\pm} と L_z の交換関係を、具体的な表現を使って確かめよ。



演算子 L_+ を使って L_z の固有値をどんどんあげていけるわけであるが、どこまでもあげることができるかという、そうはいかない。なぜなら、 L_+ は $|\vec{L}|^2$ と交換するので、 L_+ をかけても $|\vec{L}|^2$ の固有値は変化しないからである。古典的に考えると $|\vec{L}|^2 = (L_x)^2 + (L_y)^2 + (L_z)^2$ であるから、 L_z の固有値は $|\vec{L}|$ を超えられない。ただしこれは古典論の話であって、量子論では少し事情が異なる（詳しいことは後で述べる）。

なお、 ℓ は方位量子数または軌道量子数と呼ばれ、 L_z の固有値を $m\hbar$ とした時の m を磁気量子数と呼ぶ⁷。

古典論にしろ量子論にしろ、 L_z の固有値にはある値 $\ell\hbar$ が最大値になっていなくてはならない。その最大固有値を持つ状態を ψ_ℓ と書く。つまり、 $L_+\psi_\ell = 0, L_z\psi_\ell = \ell\hbar\psi_\ell$ を満たす状況を考える。この状態が $|\vec{L}|^2$ の固有状態になっているとして、固有値を求めてみる。

$$\begin{aligned} |\vec{L}|^2 &= (L_x)^2 + (L_y)^2 + (L_z)^2 = \left(\frac{1}{2}(L_+ + L_-)\right)^2 + \left(\frac{1}{2i}(L_+ - L_-)\right)^2 + (L_z)^2 \\ &= \frac{1}{4} \left((L_+)^2 + L_+L_- + L_-L_+ + (L_-)^2 \right) - \frac{1}{4} \left((L_+)^2 - L_+L_- - L_-L_+ + (L_-)^2 \right) + (L_z)^2 \\ &= \frac{1}{2} (L_+L_- + L_-L_+) + (L_z)^2 \end{aligned} \quad (17.58)$$

と展開してから ψ_ℓ にかける。 ψ_ℓ に L_+ がかかると 0 になるので、

$$\left[\frac{1}{2} (L_+L_- + L_-L_+) + (L_z)^2 \right] \psi_\ell = \left[\frac{1}{2} L_+L_- + \ell^2\hbar^2 \right] \psi_\ell \quad (17.59)$$

となる。ここでどうせ ψ_ℓ に L_+ をかけると 0 になるので、上の式の L_+L_- を $L_+L_- - L_-L_+ = [L_+, L_-]$ と書き換えてもよい。この交換関係は

$$[L_+, L_-] = [L_x, -iL_y] + [iL_y, L_x] = 2\hbar L_z \quad (17.60)$$

となり、この L_z も固有値 $\ell\hbar$ に書き換えられるので、結局、

$$|\vec{L}|^2 \psi_\ell = \hbar^2 \ell(\ell + 1) \psi_\ell \quad (17.61)$$

となる。よって、 $|\vec{L}|^2$ の固有値は $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ という決まった値になる。

この時、 L_z の固有値の最大値は $\ell\hbar$ である。 L_+ の部分を L_- に変えてほぼ同じ計算をやってやれば、最小値が $-\ell\hbar$ であることもすぐに証明できるので、 L_z の固有値は $-\ell\hbar$ から $\ell\hbar$ までの範囲であることがわかる。最大値 $\ell\hbar$ と最小値 $-\ell\hbar$ の差は $2\ell\hbar$ である。 L_+ をかけることで固有値が \hbar ずつ上がったことを考えると、 2ℓ は 0 以上の整数でなくてはならない。実際に微分方程式を解いてみると、 ℓ が 0 以上の整数であることがわかる⁸。波動関数の何らかの演算子の固有値が決まった値しかとれないことを「量子化される」というが、角運動量の固有値も量子化されているのである。

ここで、 L_z の最大値が $\ell\hbar$ で、 $|\vec{L}|^2 = (L_x)^2 + (L_y)^2 + (L_z)^2$ が $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ だったわけだが、これを見て、

$$(L_x)^2 + (L_y)^2 = |\vec{L}|^2 - (L_z)^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1) - (\hbar\ell)^2 = \hbar^2 \ell \quad (17.62)$$

⁷「磁気」量子数と呼ばれる理由は、今考えている粒子が荷電粒子であれば、角運動量を持って回転しているという状態は小さな円電流ができておりと解釈でき、これが磁気モーメントと関係してくるからである。

⁸ 2ℓ が 0 以上の整数という条件からすると、 $\ell = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ などともよさそうだが、今考えている微分方程式の解としては出てこない。だが、フェルミ粒子の持つ角運動量を考える時、こういう半端な値も出てくる。

などという計算をやってはいけない。 L_x, L_y, L_z は演算子であり、今 L_z の固有状態を考えている。固有状態を考えているから、 $L_z \rightarrow \hbar l$ というふうに、「演算子 \rightarrow 固有値」と置き換えることができる。しかし L_x, L_y は L_z と交換しないので、 L_z の固有状態は L_x, L_y の固有状態ではない。だから数字に置き換えることができないのである。

正確に言うと、 L_x, L_y, L_z の同時固有状態はたった一つだけ存在する。その場合は全ての固有値が 0 であり、必然的に $|\vec{L}|^2$ の固有値も 0 である。この波動関数は定数であり、 θ にも ϕ にもよらない。

17.3 Legendre 多項式: $m = 0$ の波動関数

前節で出した微分方程式 (17.51) において、 $x = \cos \theta$ という座標変換をすると、

$$dx = \sin \theta d\theta \quad \text{ゆえに} \quad \frac{d}{d\theta} = \sin \theta \frac{d}{dx} \quad (17.63)$$

なので、

$$\frac{d}{dx} \left(\sin^2 \theta \frac{d}{dx} \Theta \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta + \lambda \Theta = 0 \quad (17.64)$$

となる。ここで $\sin^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta = 1 - x^2$ と書き直すと全部 x の式となり、

$$\frac{d}{dx} \left((1 - x^2) \frac{d}{dx} \Theta \right) - \frac{m^2}{1 - x^2} \Theta + \lambda \Theta = 0 \quad (17.65)$$

この方程式は Legendre (ルジャンドル) の方程式という有名な方程式である。ある一つの m の値の解がわかれば、 L_{\pm} を使って m がそれ以外の場合の解を作ることができるから、まず一番簡単そうな $m = 0$ の場合について解く。

今求めようとしている関数は $x = 0$ すなわち $\theta = \frac{\pi}{2}$ において発散しないはずであるから、その点を中心に

$$\Theta = \sum_{k=0} A_k x^k = A_0 + A_1 x + A_2 x^2 + \dots \quad (17.66)$$

と展開できるだろう。これを計算していく。まず微分して、

$$\frac{d}{dx} \Theta = \sum_{k=1} k A_k x^{k-1}$$

)} $1 - x^2$ をかけて

$$(1 - x^2) \frac{d}{dx} \Theta = \sum_{k=0} k A_k x^{k-1} - \sum_{k=0} k A_k x^{k+1}$$

)} さらに微分して

$$\frac{d}{dx} \left((1 - x^2) \frac{d}{dx} \Theta \right) = \sum_{k=0} k(k-1) A_k x^{k-2} - \sum_{k=0} k(k+1) A_k x^k$$

)} 両辺に $\lambda \Theta$ を足して

$$\frac{d}{dx} \left((1 - x^2) \frac{d}{dx} \Theta \right) + \lambda \Theta = \sum_{k=0} k(k-1) A_k x^{k-2} + \sum_{k=0} (\lambda - k(k+1)) A_k x^k$$

(17.67)

ここで、第一項をよく見ると、 $k = 0, k = 1$ の場合は 0 になっている (この項は 2 階微分された項だから定数項と x の 1 次項が消えているのは当然のことである)。だからこの和は $\sum_{k=2} k(k-1)A_k x^{k-2}$ と書いても同じことである。こうしておいて、 $k \rightarrow k+2$ と置き直す。すると、

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} \Theta \right) + \lambda \Theta = \sum_{k=0} (k+2)(k+1)A_{k+2}x^k + \sum_{k=0} (\lambda - k(k+1))A_k x^k \quad (17.68)$$

となる (k の和が再び 0 からに戻ったことに注意)。この式は任意の x で成立せねばならないから、各次数で 0 となる必要がある。そこで x^k 次の係数を取り出して

$$A_{k+2}(k+2)(k+1) + A_k(\lambda - k(k+1)) = 0 \quad (17.69)$$

となることがわかる。この式をくり返し使えば、

$$A_{k+2} = \frac{k(k+1) - \lambda}{(k+2)(k+1)} A_k = \frac{k(k+1) - \lambda}{(k+2)(k+1)} \frac{(k-1)(k-2) - \lambda}{k(k-1)} A_{k-2} = \dots \quad (17.70)$$

のようにして、 k が偶数なら最後は A_0 に、 k が奇数なら最後は A_1 にたどり着く。

しかし、ここで $k \rightarrow \infty$ を考えてみると、係数 $\frac{k(k+1) - \lambda}{(k+2)(k+1)}$ が 1 に収束する。つまり、 k が大きいところではこの級数は $1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + \dots$ と同じような形になる。この級数は $x = 1$ 付近では収束しない⁹。そこで、「この級数は無限次まで行かず、途中で止まらなくてはならない」という条件をつける。この条件が成立するためには、 $k = \ell$ のところで、

$$\lambda = \ell(\ell + 1) \quad (17.71)$$

となって $A_{\ell+2}$ 以降が全て 0 にならねばならない。これで $\lambda = \ell(\ell + 1)$ と決定される。最初に演算子の関係から求めた式が確認された。

今求めたように、 $A_{\text{偶数}}$ は全て A_0 に比例し、 $A_{\text{奇数}}$ は A_1 に比例している。今求めた条件が満たされているとすると、 ℓ が偶数ならば $A_{\text{偶数}}$ が有限次で終わる。その時に $A_{\text{奇数}}$ が無限に続いてしまっただけで困るから、 ℓ が偶数の時には $A_1 = 0$ として、すべての $A_{\text{奇数}} = 0$ にしよう。同様に、 ℓ が奇数ならば $A_{\text{奇数}}$ が有限次で終わり、 $A_{\text{偶数}} = 0$ とする。こうすれば全ての関数が有限次の多項式となる (もともとの方程式が $x \rightarrow -x$ という置き換えで不変な時、解が偶関数もしくは奇関数の形になるというのは前にも説明した通りである)。

A_m の一般式を求めよう。

$$A_{k+2} = \frac{-\ell(\ell+1) + k(k+1)}{(k+2)(k+1)} A_k = -\frac{(\ell+k+1)(\ell-k)}{(k+2)(k+1)} A_k \quad (17.72)$$

となることを使うと、 ℓ が偶数の場合、

$$A_2 = -\frac{(\ell+1)\ell}{2 \times 1} A_0 \quad (17.73)$$

$$A_4 = -\frac{(\ell+3)(\ell-2)}{4 \times 3} A_2 = \frac{(\ell+3)(\ell+1)\ell(\ell-2)}{4 \times 3 \times 2 \times 1} A_0 \quad (17.74)$$

$$A_6 = -\frac{(\ell+5)(\ell-4)}{6 \times 5} A_4 = -\frac{(\ell+5)(\ell+3)(\ell+1)\ell(\ell-2)(\ell-4)}{6 \times 5 \times 4 \times 3 \times 2 \times 1} A_0 \quad (17.75)$$

⁹ベッセル関数の場合は $a_k = \frac{-1}{k(2|n|+k)} a_{k-2}$ だったので、 a_k は $k \rightarrow \infty$ でどんどん小さくなるので、発散する心配はしなくてよかった。

となる。

同じように、

$$\begin{aligned} \ell(\ell-2)\cdots(2j+2) &= 2^{\frac{\ell}{2}-j} \left(\frac{\ell}{2}\right) \left(\frac{\ell}{2}-1\right) \cdots (j+1) \\ &= 2^{\frac{\ell}{2}-j} \frac{\left(\frac{\ell}{2}\right)!}{j!} \end{aligned} \quad (17.85)$$

となるので、まとめて、

$$A_0 \sum_{j=0}^{\frac{\ell}{2}} (-1)^{\frac{\ell}{2}-j} \frac{\left(\left(\frac{\ell}{2}\right)!\right)^2 (2\ell-2j)!}{\ell! j! (\ell-j)! (\ell-2j)!} x^{\ell-2j} \quad (17.86)$$

となる。 A_0 を後で出てくる境界条件を充たすように、適当に選んで、

$$P_\ell(x) = \sum_{0 \leq j \leq \frac{\ell}{2}} (-1)^j \frac{(2\ell-2j)!}{2^\ell j! (\ell-j)! (\ell-2j)!} x^{\ell-2j} \quad (17.87)$$

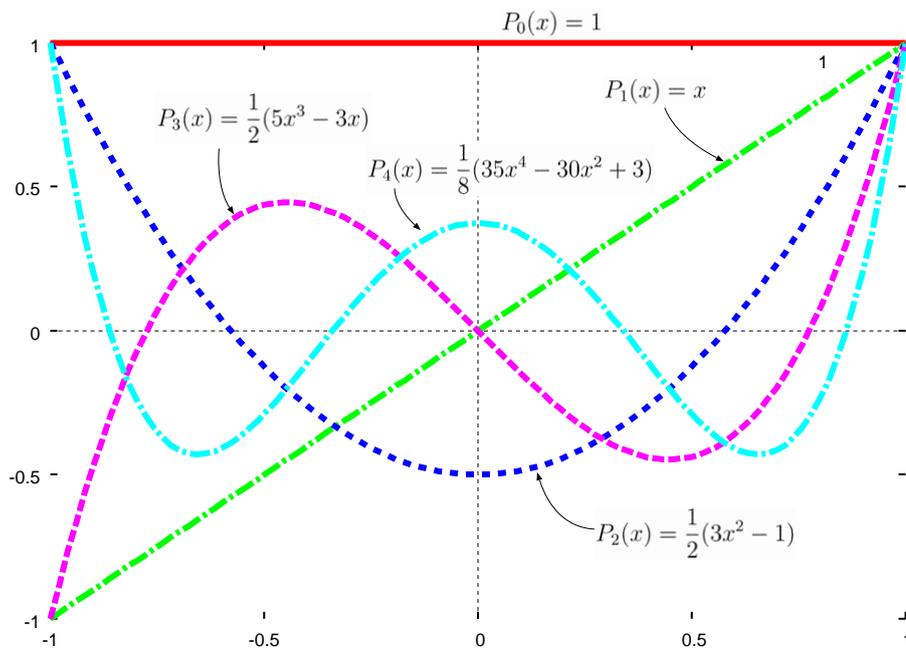
となる。

この多項式を Legendre 多項式と呼び、 $P_\ell(x)$ で表す¹⁰。全体の規格化は Legendre 方程式からは決まらないが、 $P_\ell(1) = 1$ となるように決めるのが昔からの習慣で、ここでもそれにしている。

証明は略すが、この展開は

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2 - 1)^\ell \quad (17.88)$$

とまとめられる (Rodrigues の公式)。



ℓ が小さい場合について、具体的な形は左のグラフの通りである。 ℓ が偶数の時 $P_\ell(x)$ は偶関数となり、 ℓ が奇数の時奇関数となる。グラフでもわかるように、 ℓ が大きくなるにつれて複雑になっていく。波動関数としてみると、 ℓ が大きくなるほど、波の山・谷が増えて行く。

各々の $P_\ell(x)$ は ℓ の値に応じてそれぞれ違う $|\vec{L}|^2$ の固有値を持った波動関数 (実際には「波動関数のうち θ 依存する部分」と言うべき) と考えることができる。今は $m=0$ の場合を特に考えているので、 $\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} \right)$ という演算子の固有値が $\ell(\ell+1)$

¹⁰方程式の解としてはもう一つ、 $Q_\ell(x)$ と表される関数があるが、この関数は $x=0$ で発散するのでシュレーディンガー方程式の解としては採用しない。

だということである。この演算子はエルミートであるから、「エルミートな演算子に対して異なる固有値を持つ固有関数は直交する」という定理のおかげで、

$$\int_{-1}^1 dx P_m(x) P_n(x) = 0 \quad (m \neq n \text{ の時}) \tag{17.89}$$

がわかる。あるいは $x = \cos \theta$ であることを思い出せば、

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta P_m(\cos \theta) P_n(\cos \theta) = 0 \quad (m \neq n \text{ の時}) \tag{17.90}$$

である¹¹。

θ 積分の形にすると、積分の中に $\sin \theta$ という因子が入るが、3次元の体積要素が $dr d\theta d\phi r^2 \sin \theta$ であったためであり、これで正しい。

[問い17-4] θ を使って書いた微分演算子は $\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right)$ であった。この演算子がエルミートであることを示せ。この場合、エルミートの定義は、任意の関数 ψ, ϕ に対し、演算子 A が

$$\int d\theta \sin \theta (A\psi)^* \phi = \int d\theta \sin \theta \psi^* (A\phi)$$

を満たすことである。

なお、計算は略すが、 $m = n$ の時は

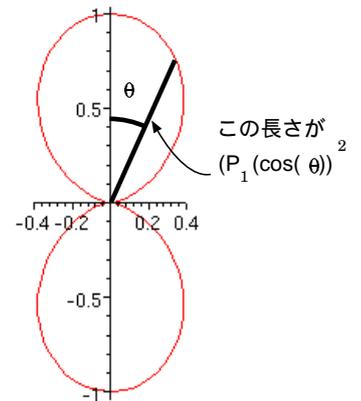
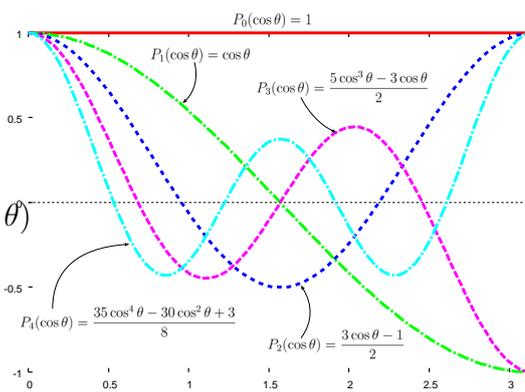
$$\int_{-1}^1 dx P_n(x) P_n(x) = \frac{2}{2n + 1} \tag{17.91}$$

となる。

角度 θ の関数としてグラフを書くと、右図のようになる。 $\theta = 0$ (北極) が $x = 1$ に、 $\theta = \pi$ (南極) が $x = -1$ に対応することに注意せよ。

さらに右の図では、 $P_1(\cos \theta)$ で表せる波動関数の確率分布の様子を平面的に表した。図の曲線は、「中心からの距離」が「その角度の方向に粒子のいる確率

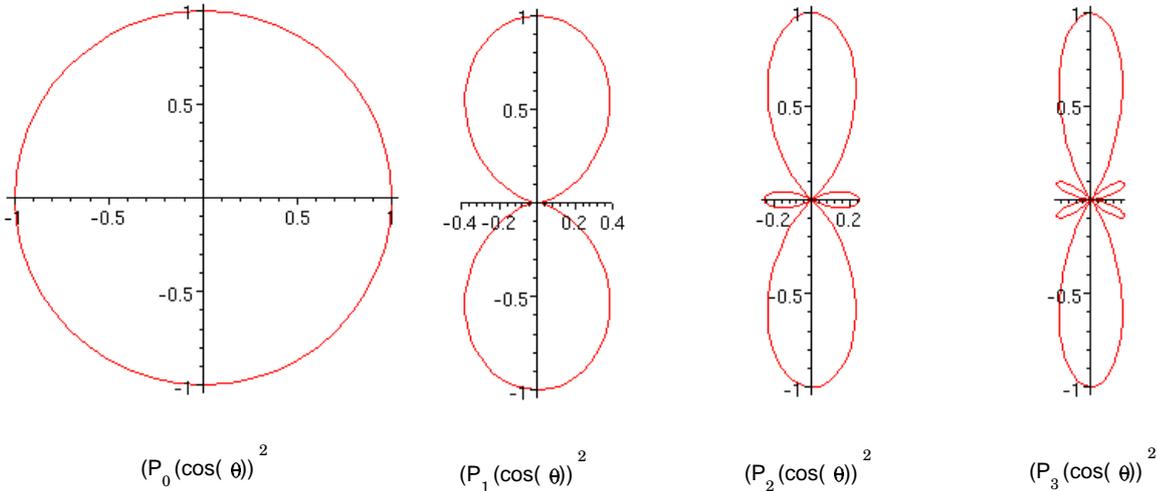
密度」になるように書かれている。「このグラフの線の上に粒子がいる」とか「この線の内側に粒子が集中している」という意味ではないので勘違いしないように!¹²



¹¹積分の変換 $\int_0^\pi d\theta \sin \theta = \int_{-1}^1 dx$ はよく使う計算なので、覚えておくとよい。 $\theta = 0$ で $x = 1$ 、 $\theta = \pi$ で $x = -1$ であり、積分の方向が逆になっているが、その符号は $dx = -\sin \theta d\theta$ の符号とキャンセルするので、この置き換えでちょうどよい。

¹²そもそも、まだ動径方向の波動方程式は解いていないので、 r がどれくらいのところに粒子がいるとかいないとか、判定することもまだできないのである。

このグラフからわかることは、 $P_1(\cos \theta)$ で表せる状態では、南極部分と北極部分にたくさん粒子がいて、赤道部分には全くいない状態になっているということである。 $\ell = 1$ 以外で確率分布の様子を同様のグラフで書くと、



になる。

われわれが求めることができるのは、 L_x, L_y, L_z のうち、一つの演算子にたいしてのみ固有状態であるということ、今求めているのは L_z の固有状態であり、それゆえ L_x や L_y に関してはまったく決定できない¹³ ということに注意しよう。この節で計算したのは $|\vec{L}|^2 > 0$ で $L_z = 0$ という状態である。古典論なら「この状態は x 方向か y 方向か、あるいはその中間とか、とにかく z 軸と垂直な軸の回りの回転をしている」と考えるところだが、波動関数を見ると、 x 方向や y 方向に回っているというイメージは見えない。それは L_x や L_y に関しては全く固有状態になっていないからである。

Legendre の多項式にはベッセル関数同様に母関数があり、

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xz+z^2}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} z^{\ell} P_{\ell}(x) \quad (17.92)$$

である。

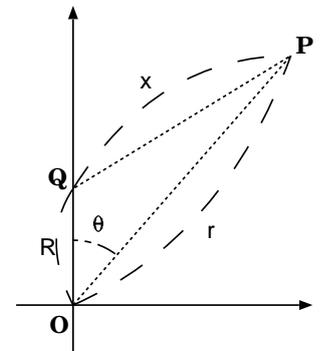
【以下長い註】この部分は、最初に勉強する時は理解できなくともよい。

この母関数の幾何学的意味を述べておく。今平面に極座標を取り、原点から $\theta = 0$ 方向に R だけ離れた位置に点 Q を置く。点 P を極座標で (r, θ) と表される位置に置く。PQ の長さを x とすると、

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{(r \cos \theta - R)^2 + (r \sin \theta)^2} = \sqrt{R^2 - 2rR \cos \theta + r^2} \\ &= R \sqrt{1 - 2 \frac{r}{R} \cos \theta + \left(\frac{r}{R}\right)^2} \end{aligned} \quad (17.93)$$

となる。これから、

$$\frac{1}{x} = \frac{1}{R \sqrt{1 - 2 \frac{r}{R} \cos \theta + \left(\frac{r}{R}\right)^2}} = \frac{1}{R} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{r}{R}\right)^{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (17.94)$$



¹³例外として「全部固有値 0」だけがあり得る。これは不確定性関係の話のところ注意した通り。

となる。たとえば Q 点に電荷 e が存在している時、P 点の電位は $V_{PQ} = \frac{e}{4\pi\epsilon x}$ であるから、

$$V_{PQ} = \frac{e}{4\pi R} \left(1 + \frac{r}{R} \cos \theta + \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^2 (3 \cos^2 \theta - 1) + \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^3 (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) + \dots \right) \quad (17.95)$$

と展開されるということがわかる。極座標を使ってポテンシャル問題を考える時などによく使われる展開である。

【長い註終わり】

17.4 Legendre 陪関数: $m \neq 0$ の波動関数

$m = 0$ の場合の解が求まったので、 $m \neq 0$ の場合の解をこれから作っていこう。そのためには L_+ を使えばよい(もちろん、級数展開を使ってごりごりと解いて行くことも可能である。ただし、その時は、 $m \neq 0$ では $x = \pm 1$ が確定特異点であることに注意が必要)。

さて、 $m = 0$ の固有関数は $P_\ell(\cos \theta)$ である。これにまず L_+ の具体的表現 $\hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$ をかける。答えは

$$L_+ P_\ell(\cos \theta) = \hbar e^{i\phi} \frac{d}{d\theta} P_\ell(\cos \theta) \quad (17.96)$$

である。これが L_z の固有値が \hbar である状態となる。さらに L_+ をかけると、

$$\begin{aligned} (L_+)^2 P_\ell(\cos \theta) &= \hbar^2 e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \underbrace{\frac{\partial}{\partial \phi}}_{\text{固有値が } i} \right) \left(e^{i\phi} \frac{d}{d\theta} P_\ell(\cos \theta) \right) \\ &= \hbar^2 e^{2i\phi} \left(\frac{d}{d\theta} - \cot \theta \right) \frac{d}{d\theta} P_\ell(\cos \theta) \end{aligned} \quad (17.97)$$

となる。 L_z の固有値が $m\hbar$ である状態は因子 $e^{im\phi}$ を持っているのだから、その状態にかかる時には L_z の中の $\frac{\partial}{\partial \phi}$ は im に置き換えられることになる。つまり、 L_z の固有値が $m\hbar$ から $(m+1)\hbar$ に変わる時に作用した L_+ は、

$$L_+ \Big|_{m \rightarrow m+1} = \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - m \cot \theta \right) \quad (17.98)$$

と書ける。

ここで微分演算子の関係として、

$$\left(\frac{d}{d\theta} - m \cot \theta \right) f(\theta) = \sin^m \theta \frac{d}{d\theta} \left(\frac{1}{\sin^m \theta} f(\theta) \right) \quad (17.99)$$

が成立することに注意する。 $\frac{d}{d\theta} \left(\frac{1}{\sin^m \theta} \right) = -m \frac{\cos \theta}{\sin^{m+1} \theta}$ ということに気をつければ上の式が成立することはすぐわかる。これを使うと、

$$L_+ \Big|_{m \rightarrow m+1} = \hbar e^{i\phi} \sin^m \theta \frac{d}{d\theta} \left(\frac{1}{\sin^m \theta} \right) \quad (17.100)$$

である。さらに $\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} = \frac{d}{dx}$ と、 $\sin \theta = \sqrt{1-x^2}$ を使って、

$$L_+ \Big|_{m \rightarrow m+1} = \hbar e^{i\phi} (1-x^2)^{\frac{m+1}{2}} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{(1-x^2)^{\frac{m}{2}}} \right) \quad (17.101)$$

と書ける。

$$\begin{aligned} L_+ \Big|_{m+1 \rightarrow m+2} L_+ \Big|_{m \rightarrow m+1} &= \hbar e^{i\phi} (1-x^2)^{\frac{m+2}{2}} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{(1-x^2)^{\frac{m+1}{2}}} \right) \hbar e^{i\phi} (1-x^2)^{\frac{m+1}{2}} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{(1-x^2)^{\frac{m}{2}}} \right) \\ &= \hbar^2 (1-x^2)^{\frac{m+2}{2}} \frac{d^2}{d\theta^2} \left(\frac{1}{(1-x^2)^{\frac{m}{2}}} \right) \end{aligned} \quad (17.102)$$

のように、 L_+ をどんどんかけていくと、 $(1-x^2)^{\frac{\hbar n \pm \hbar}{2}}$ の因子は一個ずつ消しあっていく。よって、

$$L_+ \Big|_{m-1 \rightarrow m} L_+ \Big|_{m-2 \rightarrow m-1} \cdots L_+ \Big|_{1 \rightarrow 2} L_+ \Big|_{0 \rightarrow 1} = \hbar^m e^{im\phi} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} \quad (17.103)$$

とまとまる。同じように $P_\ell(\cos \theta)$ に L_- をどんどんかけていけば、

$$L_- \Big|_{-m+1 \rightarrow -m} L_- \Big|_{-m+2 \rightarrow -m+1} \cdots L_- \Big|_{-1 \rightarrow -2} L_- \Big|_{0 \rightarrow -1} = \hbar^m e^{-im\phi} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} \quad (17.104)$$

となることはすぐわかる。

まとめると、 m が $-\ell \leq m \leq \ell$ の範囲で変化するとして、

$$P_\ell^m(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_\ell(x) \quad (17.105)$$

という関数が $|\vec{L}|^2$ と L_z の同時固有関数 ($|\vec{L}|^2$ の固有値が $\hbar\ell(\ell+1)$ 、 L_z の固有値が $m\hbar$) の θ 依存部分であることがわかる。 $P_\ell^m(x)$ を Legendre 陪関数と呼ぶ。 $m=0$ は Legendre 多項式 $P_\ell(x)$ と一致する。

ここで、 m の最大値が ℓ であることを確認しておこう。もし $P_\ell^{\ell+1}(x)$ という関数が存在するとすれば、

$$P_\ell^{\ell+1}(x) = (1-x^2)^{\frac{\ell+1}{2}} \frac{d^{\ell+1}}{dx^{\ell+1}} P_\ell(x) \quad (17.106)$$

のような形になるわけだが、 $P_\ell(x)$ は x の ℓ 次の多項式なので、上のように $\ell+1$ 回微分すれば答えは 0 である。つまり、 $P_\ell^{\ell+1}(x)$ は存在できない。よって最初の予想どおり、 m の最大値は ℓ である (最小値が $-\ell$ であることも同様)。

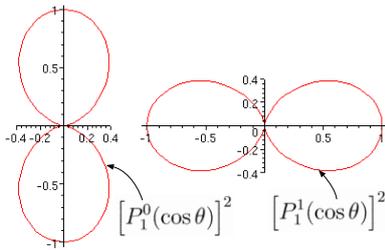
低い次数での Legendre 陪関数を書いておくと、

$$P_1^1(x) = \sqrt{1-x^2}, P_2^1(x) = 3x\sqrt{1-x^2}, P_2^2(x) = 3(1-x^2), P_3^1(x) = \frac{3}{2}\sqrt{1-x^2}(5x^2-1), \cdots \quad (17.107)$$

のようになる。三角関数で表せば、

$$P_1^1(\cos \theta) = \sin \theta, P_2^1(\cos \theta) = 3 \cos \theta \sin \theta, P_2^2(\cos \theta) = 3 \sin^2 \theta, P_3^1(\cos \theta) = \frac{3}{2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1), \cdots \quad (17.108)$$

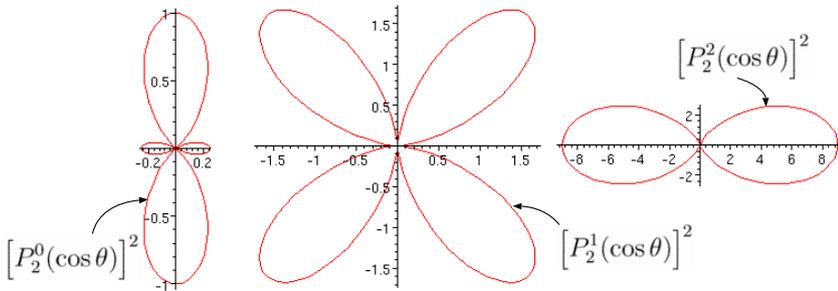
のようになる。



Legendre 陪関数には、 m が等しい場合について、

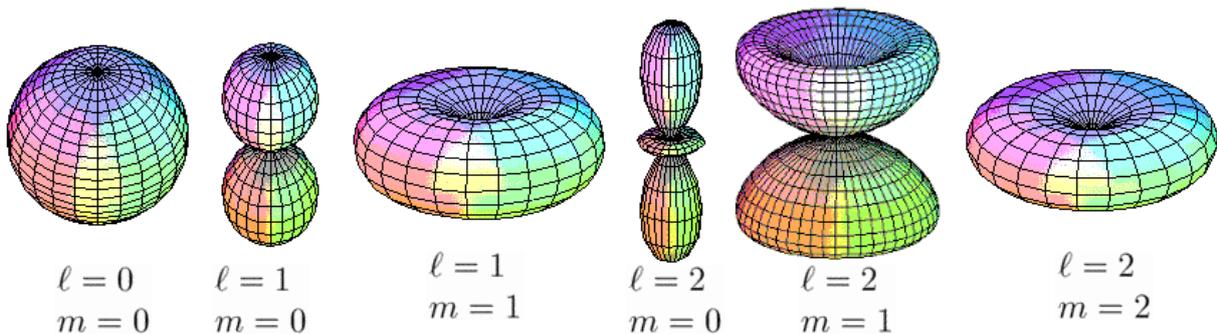
$$\int_{-1}^1 dx P_n^m(x) P_{n'}^m = \delta_{nn'} \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (17.109)$$

という直交関係がある。 $n \neq n'$ で答えが 0 になるのは、異なる固有値に属するからである。なお、 m が等しくない場合は ϕ 積分の方で直交してしまうので、 θ 積分 (x 積分) をする必要はない。



$P_n(\cos \theta)$ の時と同様に、原点からの距離がその角度方向の確率密度であるようにして書いたグラフが左の一連の図である。 P_1^0, P_1^1 および P_2^0, P_2^1, P_2^2 の自乗が示されている。 m が大きくなるほど角運動量が大きいので、波動関数はより「外」つまり赤道部にひっぱられている様子がグラフで確認できる。また、 m が大きくなるほどこのグラフに現れる「波の山」の数が減っているが、その分、グラフに現れていない回転方向の「波の山」は増えている。

三次元的な絵にしたのが以下の図である。くどいようだが、この図の原点からの距離は「本当の距離」である r ではなく、「 $|\theta$ 方向の波動関数²」であるので、その点を勘違いしないように！



なお、上の図が表現しているものは「波動関数の自乗」であるので位相の情報が入っていない。波動関数で考えると、 ϕ 方向に一周する間に、位相が $2\pi m$ だけ回転する。 $m \neq 0$ の時は北極と南極では波動関数が 0 になっていることに注意しよう。角運動量を持っていると粒子のいる場所は外へとふくらむ¹⁴ので、回転軸上には粒子は存在できないということである。

結局、 $|\vec{L}|^2$ の固有値が $\hbar^2 \ell(\ell+1)$ で L_z の固有値が $m\hbar$ であるような状態は、

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\left(\frac{2\ell+1}{4\pi}\right) \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (17.110)$$

¹⁴日常会話ではこれをよく「遠心力で外に飛ばされる」と表現する。物理的に正確に述べるならば、遠心力がかかるのは粒子の静止する座標系で方程式を考えた場合のみであるから、「遠心力で飛ばされる」というのは少々厳密さを欠く表現である。

と書ける。前についている係数は規格化などのためにつけたもので、あまり深い意味はない。この Y_ℓ^m を「球面調和関数」と呼ぶ。球対称な 3 次元問題を考える時は、解は球面調和関数を使って表現すると便利ことが多い。

なお、ここでは伝統的手法にしたがって(ルジャンドル多項式も学習しておきたかったので)、 $m = 0$ の状態を表す $P_n(\cos \theta)$ を求めてからそれを L_\pm で上げたり下げたりして $m \neq 0$ の状態を作ったが、もう一つの方法として、 $m = \ell$ 、すなわち L_z が最大の状態から出発するという方法もある。その状態は $L_+ \psi_\ell = 0$ を満たす。 L_z の固有値が $\ell \hbar$ なので、 $\psi_\ell = e^{i\ell\phi} f(\theta)$ とおいて、

$$L_+ e^{i\ell\phi} f(\theta) = e^{i\ell\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) e^{i\ell\phi} f(\theta) = e^{i(\ell+1)\phi} \left(\frac{d}{d\theta} - \ell \cot \theta \right) f(\theta) = 0 \quad (17.111)$$

という式を解く。 $f(\theta)$ に関する部分を取り出して解けば

$$\begin{aligned} \frac{df}{d\theta} &= \ell \cot \theta f \\ \frac{df}{f} &= \ell \cot \theta d\theta \\ \log f &= \ell \log(\sin \theta) + C \\ f &= A \sin^\ell \theta \end{aligned} \quad (17.112)$$

が解である。よって、 $P_\ell^\ell(\cos \theta) = A \sin^\ell \theta$ ということがわかる。後はこうやって作った $Y_\ell^\ell = A \sin^\ell \theta e^{i\ell\phi}$ に次々と ($Y_\ell^{-\ell}$ に達するまで) L_- をかけていけばよい。

[問い 17-5] Y_ℓ^ℓ で表される状態について、 L_x, L_y の期待値が 0 になることを示せ。

(hint: L_+, L_- をうまく使おう)

[問い 17-6] 同じく、 $(L_x)^2, (L_y)^2$ の期待値を計算せよ。

以上で、波動関数を $|\vec{L}|^2$ と L_z の固有値で分類するという作業が終わったわけであるが、ここで、

「 z 軸などというものは人間が勝手に定めたものであって、どんなふうに座標軸を取ろうが物理は変わらないはず。それなのにその座標軸方向の角運動量である L_z の固有値で状態が分類される(量子化される)のは何か変だ」

と感じるかもしれない。これはもっともな疑問であって、たとえば L_z ではなく L_x の固有値を使って状態を分類してもよいはずである。もちろん、 $\frac{1}{\sqrt{2}}(L_x + L_z)$ のように適当な線型結合で考えてもよいだろう。

実は L_z 固有値で分類したのと、 L_x 固有値で分類したのは本質的には同じである。 L_x を使って分類すれば、上で求めた Y_ℓ^m とは違った波動関数 y_ℓ^m ができあがるだろう。しかしその場合も、新しい波動関数は独立なものではなく、

$$y_\ell^m = \sum_{m'} A_{m'} Y_\ell^{m'} \quad (17.113)$$

のように $Y_\ell^{m'}$ の線型結合で表されるものになっている。

これまで同様、現実的に起こる現象の波動関数が一つの状態で書かれていることはむしろ稀であり、一般にはいろんな角運動量を持った状態の重ね合わせであることが多いだろう。どのような状態を使って重ね合わせを表現しても、実際の物理は変わらない。

【補足】 この部分は授業では話さない可能性もあるが、その場合は読んでおいてください。

17.5 3次元球に閉じ込められた粒子

自由粒子の場合について動径方向の波動関数を求めておく。ポテンシャルの項はなくなるので、

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R \right) + \hbar^2 \frac{\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} R = ER \quad (17.114)$$

である。例によって無次元化を行うと、

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{d}{d\xi} R \right) + \left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} \right) R = 0 \quad (17.115)$$

となる。ここでは、 \hbar, μ のみならず、エネルギー E まで1にしている。よって無次元化された座標と元々の座標の関係は $\xi = \frac{2\mu E}{\hbar^2} r$ である。この微分方程式は $R = \frac{Q}{\sqrt{\xi}}$ とおくことで、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{d}{d\xi} \left(\frac{Q}{\sqrt{\xi}} \right) \right) + \left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} \right) \frac{Q}{\sqrt{\xi}} &= 0 \\ \frac{1}{\xi^{\frac{3}{2}}} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^{\frac{3}{2}} \frac{dQ}{d\xi} - \frac{1}{2} \sqrt{\xi} Q \right) + \left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} \right) \frac{Q}{\sqrt{\xi}} &= 0 \\ \frac{d^2}{d\xi^2} Q + \frac{1}{\xi} \frac{dQ}{d\xi} + \left(1 - \frac{\left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2}{\xi^2} \right) Q &= 0 \end{aligned} \quad (17.116)$$

と変形できる。これは第16章で解いたベッセル方程式の n に $\ell + \frac{1}{2}$ が代入されたものである。ベッセル方程式およびその解はすでに計算した通り、

ベッセルの微分方程式とその解

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \right) R + \left(1 - \frac{n^2}{\xi^2} \right) R = 0 \quad \text{この解は } J_n(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!(n+j)!} \left(\frac{\xi}{2} \right)^{2j+n} \quad (17.117)$$

である。この解の n に $\ell + \frac{1}{2}$ が代入されたもの ($J_{\ell+\frac{1}{2}}(\xi)$) が今考えている微分方程式の解となる¹⁵。なお、 $\ell \geq 0$ に対する $\sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(x)$ を $j_\ell(x)$ と書いて「球ベッセル関数」と呼ぶこともある。三次元問題用のベッセル関数だから、「球」を頭につけるのである。 $j_0(x)$ から $j_2(x)$ までを次のグラフに示した。グラフにも書いたように、球ベッセル関数は実は三角関数でも表現することができる。

¹⁵ $\left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2$ の形になっているので、 $-\ell - \frac{1}{2}$ を代入したのも解になりそうだが、原点で正則でなくなるのでここでは考えない。場合によってはこちらを使う必要がある。この、負の次数に対応する関数は「球ノイマン関数」と呼ばれる。

関数の形としては、振動しつつ減衰するという形になっている。 ℓ が 0 の時以外は $x = 0$ ($r = 0$) で波動関数は 0 になっているが、 $\ell \neq 0$ では角運動量を持って回転しているということを考えると、もっともな話である。

今ある半径 R のところに壁があって、そこで波動関数が 0 となるという境界条件で考えているので、 $j_\ell \left(\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} R \right) = 0$ となるように E を調整する。 $j_\ell(x)$ の零点は一つではないから、 ℓ, m を固定しても E の取り得る値はいくつか存在する。その値は不連続であり、エネルギーはその条件を満たす値に制限されるわけである。ここでも波動関数が有限の領域に閉じこめられることでエネルギーの量子化が起こった。

結局、 ℓ, m, E を一つ指定したとすると解は

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{A}{\sqrt{r}} J_{\ell+\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} r \right) P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi} = A' j_\ell \left(\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} r \right) P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (17.118)$$

である。与えられた境界条件に応じて適切な E を選びつつ、いろんな ℓ, m, E の値に関して線型結合を取ることによって一般解が得られる。

次の章で球対称ポテンシャルの場合の具体例として、水素原子の中の電子の問題を解こう。

【補足終わり】

17.6 演習問題

[演習問題 17-1] どんな方法でもよいので、円筒座標の場合のラプラシアンを求めよ。

[演習問題 17-2] 古典的角運動量の式 $L_x = yp_z - zp_y, L_y = zp_x - xp_z, L_z = xp_y - yp_x$ を座標変換することで、 L_x, L_y, L_z を極座標で計算せよ。

さらに $|\vec{L}|^2 = (L_x)^2 + (L_y)^2 + (L_z)^2$ を計算して、答えが

$$-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

となることを示せ。

[演習問題 17-3] Rodrigues の式 (17.88) が境界条件 $P_\ell(1) = 1$ を満たしていることを示せ。

(hint: $(x^2 - 1)^\ell$ は因数分解すると $(x - 1)^\ell (x + 1)^\ell$ となる。これを ℓ 階微分する時、微分がすべて $(x - 1)$ の方にかからない限り、最後に $x = 1$ を代入すると 0 になる)

[演習問題 17-4]

$$\int_{-1}^1 P_n(x) P_n(x) = \frac{2}{2n + 1}$$

を証明せよ。(17.88) を使って、部分積分を n 回やると証明できる。

[演習問題 17-5] Y_ℓ^m が規格化されていること

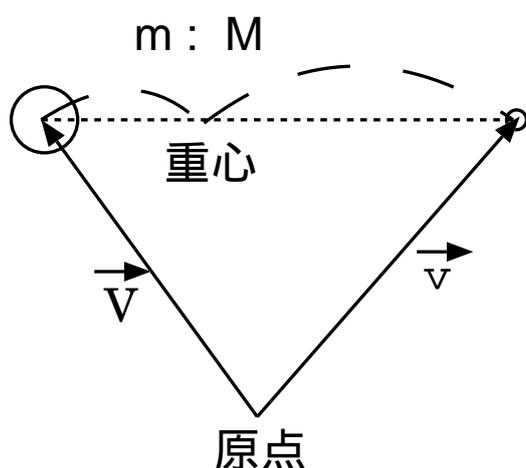
$$\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \sin \theta Y_n^m Y_{n'}^{m'} = \delta_{nn'} \delta_{mm'} \quad (17.119)$$

を証明せよ。

第18章 水素原子

この章では水素原子の回りの電子のシュレーディンガー方程式を具体的に解いて、電子がどのような波動関数で表せるかを計算し、原子の構造を量子力学で考えていく。

18.1 相対運動のハミルトニアン



そのためにまず、古典力学での原子のまわりの電子の運動をどう扱うかについて、一つ注意しておく。高校の教科書などの初等的な本では、まるで原子核(水素の場合は陽子)が静止していて、そのまわりを電子が回っていると考えるが、陽子と電子が引っ張りあって運動しているのだから、陽子が静止しているということとはあり得ない。静止することができるとしたら、2粒子の重心である。

ここで陽子の質量を M 、電子の質量を m とする。それぞれの位置ベクトルを \vec{X} および \vec{x} とし、その速度を \vec{V} および \vec{v} とする。二つの粒子の間の引力のポテンシャルは $-\frac{ke^2}{|\vec{X} - \vec{x}|}$ で表されるので、電子と陽子の運動を表すラグランジアンは

$$\frac{1}{2}M|\vec{V}|^2 + \frac{1}{2}m|\vec{v}|^2 + \frac{ke^2}{|\vec{X} - \vec{x}|} \quad (18.1)$$

と書ける。この中には、重心の運動と相対的な運動が両方入っているので、まず重心運動の部分を取り出してみる。質量 $M + m$ の物体が速度 $\frac{M\vec{V} + m\vec{v}}{M + m}$ を持っていると考えれば、重心運動のラグランジアンは

$$\frac{1}{2}(M + m) \left| \frac{M\vec{V} + m\vec{v}}{M + m} \right|^2 = \frac{M^2}{2(M + m)} |\vec{V}|^2 + \frac{m^2}{2(M + m)} |\vec{v}|^2 + \frac{Mm}{M + m} \vec{V} \cdot \vec{v} \quad (18.2)$$

である。これを全ラグランジアンから引くと、

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}M|\vec{V}|^2 + \frac{1}{2}m|\vec{v}|^2 + \frac{ke^2}{|\vec{X} - \vec{x}|} - \frac{M^2}{2(M + m)} |\vec{V}|^2 - \frac{m^2}{2(M + m)} |\vec{v}|^2 - \frac{Mm}{M + m} \vec{V} \cdot \vec{v} \\ &= \frac{Mm}{2(M + m)} |\vec{V}|^2 + \frac{Mm}{2(M + m)} |\vec{v}|^2 - \frac{Mm}{M + m} \vec{V} \cdot \vec{v} + \frac{ke^2}{|\vec{X} - \vec{x}|} \\ &= \frac{1}{2} \frac{Mm}{(M + m)} |\vec{V} - \vec{v}|^2 + \frac{ke^2}{|\vec{X} - \vec{x}|} \end{aligned} \quad (18.3)$$

となって、残るものは $\vec{X} - \vec{x}$ と $\vec{V} - \vec{v}$ の関数となる。このベクトルは相対運動の位置ベクトルおよび速度ベクトルであるから、全ラグランジアンは(重心運動のラグランジアン) + (相対運動のラグランジアン) に分離できたことになる。

以後で興味があるのは相対運動の部分である。そして、そのラグランジアンを見ると、あたかも質量 $\mu = \frac{Mm}{M+m}$ の粒子が中心力ポテンシャルの中を動いているかのように思える。

μ を換算質量と呼ぶ。水素原子の場合、陽子は電子の1800倍ぐらいの質量を持っているので、換算質量と実際の質量の差は1800分の1程度しかない。以後の方程式はすべて換算質量を用いて、原点にある陽子が静止していると考えて行う。

18.2 水素原子のシュレーディンガー方程式

電子の換算質量を μ とし、電子と陽子の間のクーロン力のポテンシャルエネルギーを $-\frac{ke^2}{r}$ とし、シュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi \right) + \frac{1}{2\mu r^2} |\vec{L}|^2 \psi - \frac{ke^2}{r} \psi = E\psi \quad (18.4)$$

を解こう。球対称な問題であるから、前の章で計算した球面調和関数を使って波動関数を

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_\ell(r) Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (18.5)$$

のように、角運動量演算子 $|\vec{L}|^2$ と L_z の固有状態 (ℓ は0から ∞ まで、 m の和は $-\ell \leq m \leq \ell$ の範囲) と考えて計算を進めることができる。

求めるべきは $R_\ell(r)$ であり、そのみたすべき方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R_\ell \right) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \ell(\ell+1) R_\ell - \frac{ke^2}{r} R_\ell = ER_\ell \quad (18.6)$$

である(角運動量部分はすでに固有値 $\hbar^2 \ell(\ell+1)$ に置き換えた)。これを解くためにまた無次元化をする。まず $r = \alpha \rho$ として、

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu \alpha^2 \rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{d}{d\rho} R_\ell \right) + \frac{\hbar^2}{2\mu \alpha^2 \rho^2} \ell(\ell+1) R_\ell - \frac{ke^2}{\alpha \rho} R_\ell = ER_\ell \quad (18.7)$$

として、両辺に $-\frac{2\mu \alpha^2}{\hbar^2}$ をかけて、

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{d}{d\rho} R_\ell \right) - \frac{1}{\rho^2} \ell(\ell+1) R_\ell + \frac{2\mu \alpha ke^2}{\hbar^2 \rho} R_\ell = -\alpha^2 \frac{2\mu E}{\hbar^2} R_\ell \quad (18.8)$$

となる。

以下では、電子が原子核の近くに束縛されて遠くへいけない状態を考えることにする。 $r \rightarrow \infty$ に粒子が脱出できない条件は $E < 0$ なので、 $\alpha = \sqrt{-\frac{\hbar^2}{8\mu E}}$ とする(ルートの中はこれでプラス)。さら

に $\frac{2\mu\alpha ke^2}{\hbar^2} = \lambda$ (λ は無次元の定数。あとで自然数になることがわかる) とおく。こうすると左辺最終項は $\frac{\lambda}{\rho} R_\ell$ に、右辺は $\frac{1}{4} R_\ell$ となる¹。

解くべき式は

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{d}{d\rho} R_\ell \right) - \frac{1}{\rho^2} \ell(\ell+1) R_\ell + \frac{\lambda}{\rho} R_\ell - \frac{1}{4} R_\ell = 0 \quad (18.9)$$

である。まずこの式が $\rho \rightarrow \infty$ および $\rho \rightarrow 0$ の極限でどのような形になるかを考えて、解を予想しよう。

$\rho \rightarrow \infty$ では方程式が

$$\frac{d^2}{d\rho^2} R_\ell = \frac{1}{4} R_\ell \quad (18.10)$$

となるので、遠方での解は $R_\ell = e^{\pm \frac{1}{2}\rho}$ となる。例によって $e^{+\frac{1}{2}\rho}$ は発散するから捨てる。よって解は $e^{-\frac{\rho}{2}}$ という因子をもつであろう。

次に $\rho \rightarrow 0$ では、

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{d}{d\rho} R_\ell \right) = \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} R_\ell \quad (18.11)$$

を考えればよい ($\frac{1}{\rho^2}$ の項が一番効く)。 ρ^s という解を入れてみると、

$$s(s+1)\rho^s = \ell(\ell+1)\rho^s \quad (18.12)$$

という式になる。 $s(s+1) = \ell(\ell+1)$ ということは $s = \ell$ または $s = -\ell - 1$ となるが $\rho^{-\ell-1}$ では原点で発散してしまうから、原点付近での解は ρ^ℓ とする。

以上の二つから、

$$R_\ell(r) = e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^\ell L_\ell(\rho) \quad (18.13)$$

と置いてみる。これを元の式に代入して整理して、 L_ℓ に対する方程式は

$$\frac{d^2 L_\ell(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{2\ell+2}{\rho} - 1 \right) \frac{dL_\ell(\rho)}{d\rho} + \frac{\lambda - \ell - 1}{\rho} L_\ell(\rho) = 0 \quad (18.14)$$

となった。これを例によって級数展開で解く。

$$L_\ell(\rho) = \sum_k a_k \rho^k \quad (18.15)$$

とおく。

$$\begin{aligned} \sum_k \left(k(k-1)a_k \rho^{k-2} + 2k(\ell+1)a_k \rho^{k-2} - k a_k \rho^{k-1} + (\lambda - \ell - 1)a_k \rho^{k-1} \right) &= 0 \\ \sum_k \left(k(2\ell+k+1)a_k \rho^{k-2} + (\lambda - \ell - k - 1)a_k \rho^{k-1} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (18.16)$$

となるので、 k のずらしを行ってから ρ^k の項を取り出すことによって、

$$(\lambda - \ell - k)a_{k-1} + k(2\ell+k+1)a_k = 0 \quad (18.17)$$

¹係数を $\frac{1}{4}$ にするのは昔からの慣習。

という漸化式が出る。これから、

$$\begin{aligned}
 a_k &= -\frac{\lambda - \ell - k}{k(2\ell + k + 1)} a_{k-1} \\
 &= \frac{\lambda - \ell - k}{k(2\ell + k + 1)} \times \frac{\lambda - \ell - k + 1}{(k-1)(2\ell + k)} a_{k-2} \\
 &= \vdots \\
 &= (-1)^k \frac{(\lambda - \ell - k)(\lambda - \ell - k + 1) \cdots (\lambda - \ell - 1)}{k!(2\ell + k + 1)(2\ell + k)(2\ell + k - 1) \cdots (2\ell + 2)} a_0
 \end{aligned} \tag{18.18}$$

のように a_k を求めていくことができる。 k の大きいところでは $\frac{k + \ell - \lambda}{2k(\ell + 1) + k(k-1)} \simeq \frac{1}{k}$ であり、その場合 $a_k \simeq \frac{1}{k!} a_0$ と考えてよいから、この関数はほぼ $e^\rho = \sum_k \frac{1}{k!} \rho^k$ と同じように無限遠で発散することになってしまう。今考えている波動関数はさらに $e^{-\frac{1}{2}\rho}$ という関数がかけているが、これをいれてもまだ $e^{\frac{1}{2}\rho}$ の発散が残る²。よってこの係数がどこかで0にならなくてはいけない。 $k = n' + 1$ になったところで、

$$a_{n'+1} = \frac{\lambda - \ell - n' - 1}{(n' + 1)(2\ell + n' + 2)} a_{n'} = 0 \tag{18.19}$$

になるためには $n' = \lambda - \ell - 1$ でなくてはならない。これが λ の値に制限を加える式となる。以後、 $\lambda = n' + \ell + 1$ を n と書くことにしよう。

この制限の物理的意味を考えよう。もともとの λ の定義から、 $\frac{2\mu\alpha k e^2}{\hbar^2} = n$ であるから、 $\alpha = \frac{n\hbar^2}{2\mu k e^2}$ となる。 $\alpha = \sqrt{-\frac{\hbar^2}{8\mu E}}$ (E は負であることに注意) であったから、

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{-8\mu E}} = \frac{n\hbar^2}{2\mu k e^2} \quad \text{より} \quad E = -\frac{\mu k^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} \tag{18.20}$$

となる。つまり、エネルギーがとびとびの値に量子化された。その値はボーア模型でのエネルギーの値を再現している。

これで a_k は全て求めることができた。結果は

$$a_k = (-1)^k \frac{(n - \ell - 1)!(2\ell + 1)!}{k!(2\ell + k + 1)!(n - \ell - k - 1)!} a_0 \tag{18.21}$$

となる。 k は0から $n' = n - \ell - 1$ までの範囲である。

$a_0 = \frac{((n + \ell)!)^2}{(n - \ell - 1)!(2\ell + 1)!}$ と選ぶことにすれば、微分方程式の解は

$$a_k = \sum_{k=0}^{n-\ell-1} (-1)^k \frac{((n + \ell)!)^2}{k!(2\ell + k + 1)!(n - \ell - k - 1)!} \rho^k \tag{18.22}$$

である。これは

$$L_p^q(x) = \sum_{s=0}^p (-1)^s \frac{((p + q)!)^2}{(p - s)!(q + s)!s!} x^s \tag{18.23}$$

²これはつまり、さっき落とした $e^{+\frac{1}{2}\rho}$ がしびとく生き残っていたということ。

で定義される Laguerre の陪多項式の、 $p = n - \ell - 1, q = 2\ell + 1$ としたものに一致する。よって動径方向の方程式の解は

$$R_\ell(\rho) = L_{2\ell+1}^{n-\ell-1}(\rho) \quad (18.24)$$

と書ける。ここまでの話をまとめると、波動関数は

$$\psi_{n\ell m} = N L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) \rho^\ell e^{-\frac{1}{2}\rho} Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (18.25)$$

とかける。 N は規格化定数であり、今から定める。規格化の条件は

$$\int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} r^2 \sin\theta \psi_{n\ell m}^* \psi_{n'\ell'm'} = \delta_{nn'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (18.26)$$

である。 r に関する積分は ρ に関する積分に以下のように書き換えられる。

$$\int_0^\infty dr r^2 \rightarrow \left(\frac{nr_B}{2}\right)^3 \int_0^\infty d\rho \rho^2 \quad (18.27)$$

ここで r_B はボーア半径 $\frac{\hbar^2}{\mu k e^2}$ であり、前期量子論（シュレーディンガー方程式より前の量子力学）に

において「電子の基底状態での公転半径」と考えられていた量である。なお、 $\rho = \frac{r}{\alpha} = \frac{2\mu k e^2}{n\hbar^2} r$ であり、 n の値によって定義が違い、ボーア半径を使って書くと $\rho = \frac{2r}{nr_B}$ であることを使っている。

角度積分に関しては Y_ℓ^m の規格化条件により $\delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$ が出るので、残りで $\delta_{nn'}$ が出ればよい。Laguerre の陪多項式の規格化条件は

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2\ell} \left(L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)\right)^2 \rho^2 d\rho = \frac{2n((n+\ell)!)^3}{(n-\ell-1)!} \quad (18.28)$$

となっているので、 $n = n'$ の時の積分の結果は、

$$|N|^2 \frac{2n((n+\ell)!)^3}{(n-\ell-1)!} \left(\frac{nr_B}{2}\right)^3 = |N|^2 \frac{2n^4((n+\ell)!)^3}{4(n-\ell-1)!} (r_B)^3 \quad (18.29)$$

となる。これが1になることから N が求められる（例によって位相は決まらないが、そこは適当に定めればよい）。

結局まとめると、水素原子のシュレーディンガー方程式の解は規格化定数をつけて、

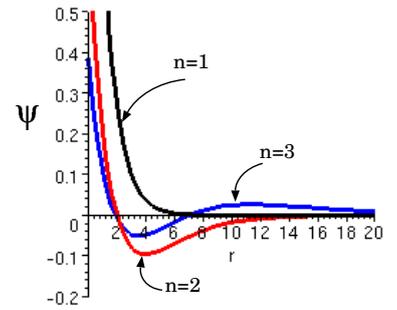
$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = -\sqrt{\frac{4(n-\ell-1)!}{n^4[(n+\ell)!]^3}} (r_B)^{-\frac{3}{2}} \rho^\ell e^{-\frac{1}{2}\rho} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho) Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (18.30)$$

と書ける³。波動関数 ψ は $[L^{\frac{3}{2}}]$ の次元を持っている。 $\int |\psi|^2 d^3x = 1$ のように、空間積分して1(無次元)になるように規格化されているからである。

$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ であり、 $-\ell \leq m \leq \ell$ であることはすでにのべた。 n' は $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho)$ の最高幕の次数なので、 $n' = 0, 1, 2, \dots$ であり、以上から $n = 1, 2, 3, \dots$ であることがわかる。

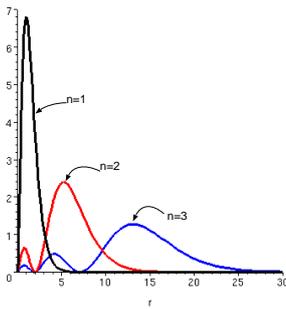
³最初にマイナス符号があるのは $\rho = 0$ 付近で正の値を取るようにしている。しかし、どうせ波動関数の符号には深い意味はない。

n を主量子数と呼ぶ。これが全エネルギーに関連する量子数である。 n' は動径量子数と呼ばれ、動径方向の運動に関連する量子数となる。右のグラフは $n = 1, 2, 3$ で $\ell = 0$ であるような波動関数をプロットしたものである。 $n = 1$ (基底状態) は原点に集中した形であるが、 $n > 1$ では原点以外にも波動関数の山もしくは谷がある。 $\ell = 0$ ということは球面調和関数の部分は $P_0^0(\cos\theta) = 1$ であって角度依存性がない。つまりこのような分布で球対称な形の波動関数になっている。この状態は「s 波状態」と呼ばれる⁴。なお、 $\ell = 1$ の状態は「p 波状態」、 $\ell = 2$ の状態は「d 波状態」と呼ばれ、以下は f, g, h, ... と続く。



なお、上のグラフではいかにも原点に確率が集中しているように見えるが、「半径 r から $r + dr$ のところに粒子がいる確率」を計算したいとすると、 $\psi^*\psi$ にさらに厚さ dr で半径 r の球殻の体積である $4\pi r^2 dr$ をかけなくてはならない。

そのようにしてかけ算して作ったグラフが左のものである。グラフの横軸はボーア半径 $r_B = 1$ になる単位で書いてある。これを見ると、 $n = 1$ の場合、粒子がいる確率ももっとも大きいところにボーア半径がくる。つまり、「原点から距離 r_B 離れたある1点にいる確率」は「原点にいる確率」より小さいが、「原点から距離 r_B 離れた点のどこかにいる確率」だと「原点にいる確率」より大きくなるわけである（「原点」は一点しかないが、「原点から距離 r_B 離れた点」は一点ではないことに注意）。 r_B は「電子がその場所を回っている」というような古典的な意味合いではなく、「波動関数の広がり」の大きさを表すものであった



ことがわかる。

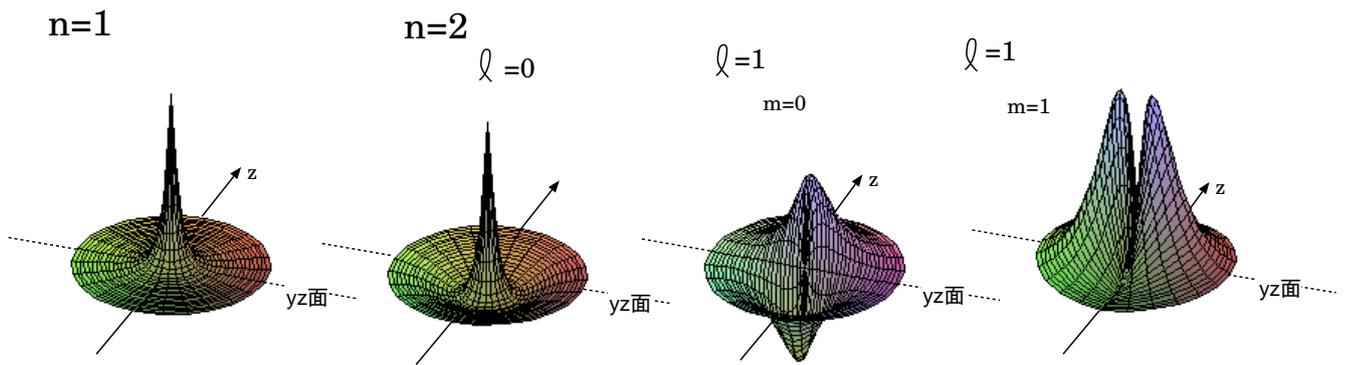
$n = 2, 3, \dots$ とあがるにつれ、粒子がより外側に分布するようになっている。つまりは「電子がより外側の軌道にいる」。ボーア-ゾンマーフェルトの量子化条件を使って計算していた時にはあくまで古典力学と対応づけて考えていたのだが、実際はこのような波動関数という形で粒子が存在している、というのが正しい描像である。

ただし、ここで考えているのは $\ell = 0$ だから「回っている」のではないことに注意しよう。もっとも、 $\ell \neq 0$ なら回っているのかというと、そうも言えない。今考えているのは定常状態のみなので、そういう意味ではどの状態も「確率密度が時間的に変化していく」という意味の運動は起こっていないので、「回っていない」。しかし、角運動量を持っているという意味では「回っている」のである⁵。

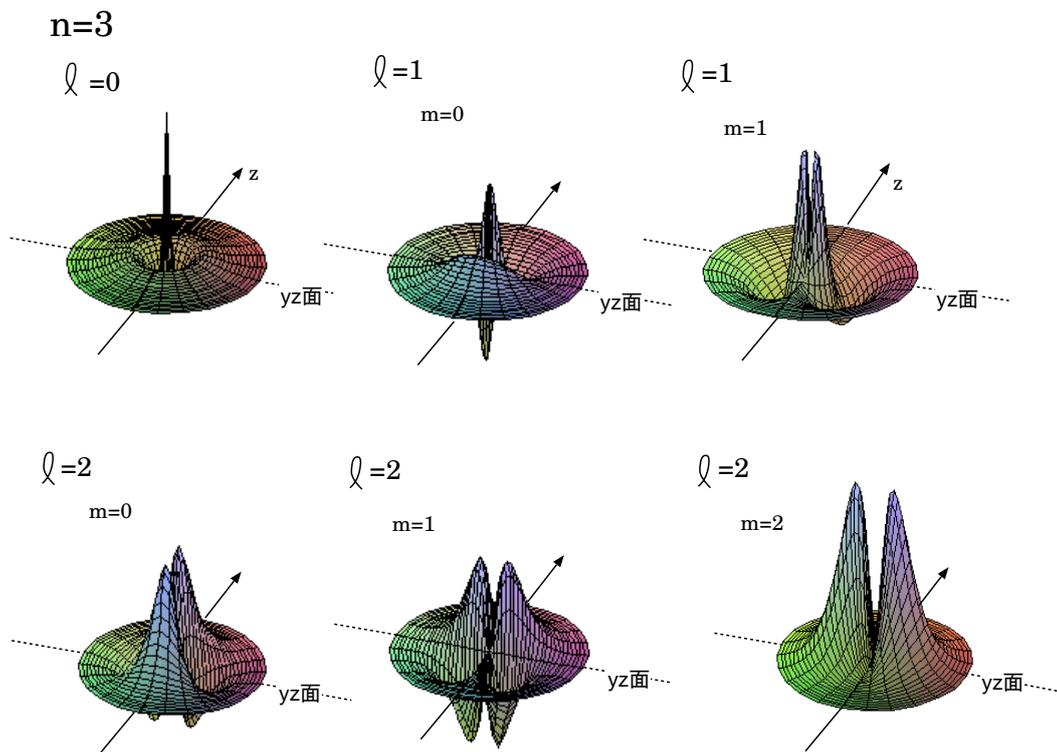
以下は、 z 軸を通りその面上で $\phi = 0, \pi$ であるような平面で切った断面上で $n = 1, 2$ の波動関数が、どのような値をとっているかをグラフで表わしたものである。この図の上下方向は ψ であって、3次元的な「波動関数の形」を書いたものではないので注意しよう。

⁴ 「s」は「sharp」の略。分光学からくる。分子の出す光のうち、鋭いピークを持つ成分という意味であり、後にこれがs状態の出す光だとわかった。「球(spherical)対称」なので「s波状態」と言うのは、覚え方としては便利だが、歴史とは違う。

⁵ これは運動量の固有状態である $\psi = e^{ikx}$ の場合も確率密度 $\psi^*\psi$ が空間にも時間にもよらない一定値になるのと同じである。



同様に $n = 3$ について書いた図が以下のようになる。



水素原子の持つエネルギーは主量子数 n だけで決まる。 n が決まると、 l は 0 から $n - 1$ までの数字をとり、それに応じて n' の値が決まる。 n, l が決まっても、 $l \neq 0$ ならば m の値が $-l$ から l まで、 $2l + 1$ 段階に変化できる。それゆえ、主量子数 n の状態が何個あるかを数えると、

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2 \tag{18.31}$$

となる。

つまり、主量子数 n の状態は n^2 重に縮退している。電子にはスピンという自転に対応する自由度がある。スピンは角運動量 \vec{L} と同様の性質を持っていて、その z 成分の固有値が $S_z = \frac{1}{2}\hbar$ と $S_z = -\frac{1}{2}\hbar$ の二つある。それゆえスピンも考慮すると状態の数が2倍となり、主量子数 n の状態は $2n^2$ 個あることになる。

原子番号	元素記号	$n=1$		$n=2$		$n=3$		
		$\ell=0$		$\ell=0$	$\ell=1$	$\ell=0$	$\ell=1$	$\ell=2$
1	H	1						
2	He	2						
3	Li	2	1					
4	Be	2	2					
5	B	2	2	1				
6	C	2	2	2				
7	N	2	2	3				
8	O	2	2	4				
9	F	2	2	5				
10	Ne	2	2	6				
11	Na	2	2	6	1			
12	Mg	2	2	6	2			
13	Al	2	2	6	2	1		
14	Si	2	2	6	2	2		
15	P	2	2	6	2	3		
16	S	2	2	6	2	4		
17	Cl	2	2	6	2	5		
18	Ar	2	2	6	2	6		
19	K	2	2	6	2	6	1	
20	Ca	2	2	6	2	6	2	

$n=1$ の状態は2個、 $n=2$ の状態は8個、 $n=3$ の状態は18個ある。 n が小さいほどエネルギーが低いので、電子が原子の回りに束縛される時には、なるべく n の小さい状態を占めようとする。ところが電子には(この講義では説明していないが)「パウリの排他律」という法則が働いて、すでに電子が入っている状態にはそれ以上電子が存在できないため、電子は下の方の状態から順に「詰まって行く」ことになる。原子番号の小さい方から、電子が順に詰まって行く様子を表したのが左の表である。 $\ell=0, 1, 2$ の箱には、それぞれ2個、6個、10個までの電子が入ることができる。実際の原子では、電子と電子の

間の相互作用などの関係で、主量子数 n が等しくてもエネルギーが同じとは限らない⁶。実際には同じ n どうしでは ℓ が大きいほどエネルギーが高くなるので、表のように ℓ の小さい方から順に詰まっていく。

これを見ると、不活性元素 (He, Ne, Ar) は、くぎりのいいところまでの電子状態がぴったりと埋められていることがわかる。また、アルカリ金属 (Li, Na, K) には「ぴったり埋まった状態に、さらに電子が1個だけ入っている」という共通点があるし、ハロゲン (B, Cl) には「あとひとつ電子を足せばちょうど埋まる」という共通点がある。電子の状態が物質の化学的性質 (アルカリ金属は電子を放出して陽イオンになりやすい、ハロゲンは電子を獲得して陰イオンになりやすい、など) を決めていることがわかる。

以上のように、量子力学によって水素原子の構造を解いていくことができた。現実には存在するのは水素原子のような簡単なもの (これでも「簡単」なのである!) ばかりではない。原子の回りの電子も一つではないことの方が多いし、複数の原子があつまって分子をつくったりもする。このような場合については適当な近似を行わないと計算はできない。しかし、量子力学的な計算を行うことで原子や分子の構造や性質を解き明かしていくことができるのである。

⁶この章で行った計算では、電子は一個として考えていて、電子と電子の間の力は考慮されていない。

付録A (量子力学を学習するための) 解析力学の復習

この付録では、量子力学のために必要な解析力学の知識をまとめておく。あくまで「量子力学のために必要な」部分だけをまとめたものであるし、説明も短くなっているの、まじめに解析力学を復習したい人はそれ相応の本を読んで勉強するように。

A.1 最小作用の原理

通常のニュートン力学では運動方程式

$$m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \vec{F} \quad (\text{A.1})$$

が中心的役割を果たすが、解析力学においては、「作用」と呼ばれる量が重要な役割を果たす¹。作用は「作用が極値をとるべし」という条件が運動方程式を導くように作る。

この章では1次元の質点系で考えよう。運動方程式が

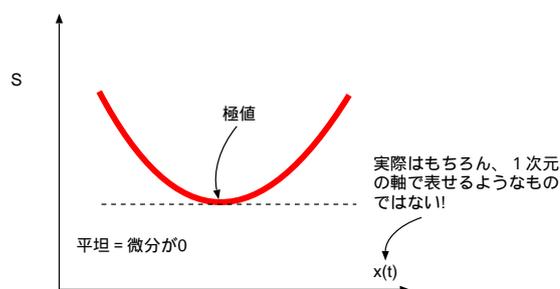
$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = - \frac{dV(x)}{dx} \quad (\text{A.2})$$

となる場合の作用は

$$S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x) \right) \quad (\text{A.3})$$

である。よく「なぜこんなものが極値になるということから運動方程式が出てくるのか？」という質問を受けるが、話は逆で「運動方程式が成立するときに極値になるようなものを探したらこれだった」と考えるべきである。

では、作用が極値である時に運動方程式が出ることを確認しよう。極値であるということは「ほんの少し $x(t)$ を変化させた時に、 I の値が変化しない」ということ (実際にはとても図には書けないのだが、無理矢理書いたのが右の図。極値である場所の $x(t)$ では、「傾き」すなわち変化率が0になっている) だから、 $x(t) \rightarrow x(t) + \delta x(t)$ と変化させたとして (もちろん $\delta x(t)$ は微量として、2次以上は無視する)、



$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{d(x + \delta x)}{dt} \right)^2 - V(x + \delta x) \right) - \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x) \right) \\ &= \int_{t_i}^{t_f} \left(m \frac{dx}{dt} \frac{d(\delta x)}{dt} - \delta x \partial_x V(x) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

¹ 困ったことに、「作用・反作用の法則」の「作用」とは何の関係もない。

と作用の変化量が計算できるが、第 1 項

$$\int_{t_i}^{t_f} \left(m \frac{dx}{dt} \frac{d(\delta x)}{dt} \right) dt = \left[m \frac{dx}{dt} \delta x \right]_{t_i}^{t_f} - \int_{t_i}^{t_f} \left(m \frac{d^2 x}{dt^2} \delta x \right) dt \quad (\text{A.5})$$

のように部分積分することで、

$$\delta S = \int dt \delta x \left(-m \frac{d^2 x}{dt^2} - \partial_x V(x) \right) \quad (\text{A.6})$$

とまとめることができる。ただし、いわゆる表面項 $\left(m \frac{dx}{dt} \delta x \right)_{t_i}^{t_f}$ は、両端 ($t = t_i$ および $t = t_f$) では δx が 0 であるとしてないことにした。

δx は微小で、両端で 0 になるという境界条件を満たせばどんな関数であってもよい。 δx がどんな関数であっても $\delta S = 0$ になるためには、

$$-m \frac{d^2 x}{dt^2} - \partial_x V(x) = 0 \quad (\text{A.7})$$

でなくてはならない。すなわち、運動方程式が再現された。

ここで、「運動方程式が再現された！」などと喜んではいけな。そうなるように作ったのだから当然なのである。喜ぶべきことはそこではなく、これによって運動方程式をこれまでとは違う形で導くことができるようになったことである。その「違う形」のメリットを知ってから、そこを喜んでほしい。

作用を使うメリットの一つは、「座標変換に強い」ということがある。たとえば直交座標で書かれた運動方程式を極座標に直せ、と言われるとこれはかなりめんどくさい作業が必要になる。しかし、いったん作用が書けてしまえば、その作用を極座標で表現することは比較的容易である（容易になる理由は運動方程式がベクトルの方程式なのに対し、作用がスカラーであることが大きい）。

そしてもう一つのメリットが、量子力学との対応がわかりやすいということがある。

このようにして「作用が極値になるのが実現する運動である」と考える力学を「ラグランジュ形式の力学」と言う。またこの考え方を「最小作用の原理」と呼ぶ。なお、実際には「最小」ではなく「極値」なのだが、なぜか昔から「最小作用の原理」と呼ばれている。

A.2 オイラー・ラグランジュ方程式

ラグランジュ形式の力学では、

$$S = \int L dt \quad (\text{A.8})$$

としてラグランジアン L を定義してやると、運動方程式にあたるものは

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) = 0 \quad (\text{A.9})$$

である（オイラー・ラグランジュ方程式）。この式は前節のような計算をやればすぐ出せる。具体的には、 L を、 x_i, \dot{x}_i の関数と見て、

$$\delta S = \int L(x_i + \delta x_i, \dot{x}_i + \delta \dot{x}_i) dt - \int L(x_i, \dot{x}_i) dt \quad (\text{A.10})$$

として変分を考えると、

$$\begin{aligned}\delta S &= \int (L(x_i + \delta x_i, \dot{x}_i + \delta \dot{x}_i) - L(x_i, \dot{x}_i)) dt \\ &= \int \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} \delta x_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \delta \dot{x}_i \right) dt\end{aligned}\quad (\text{A.11})$$

上同様に部分積分

$$\int \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \delta \dot{x}_i = - \int \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) \delta x_i \quad (\text{A.12})$$

を行い（やはり表面項は無視）

$$\delta S = \int \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) \right) \delta x_i dt \quad (\text{A.13})$$

となるので、方程式 (A.9) が出る。

A.3 具体例

いくつかの具体例で、作用の極値が実際の運動となることを確かめておこう。簡単のため、落体の運動を考える。重力の位置エネルギーは mgx と表すことができるので（ x 座標は上向きを正と取った）作用は

$$I = \int \left(\frac{1}{2} m (\dot{x})^2 - mgx \right) dt \quad (\text{A.14})$$

である。ここで、 $t = 0$ （出発時点）と $t = T$ （到着時点）で $x = 0$ とする（つまりは単純な投げ上げ運動をして、 T 後に物体が元の高さに戻ってきたということ）。

途中、どんな運動するか、考えるだけならいろいろと考えることができる。しかし、作用の値が極値になるような運動こそが「本当に起こる運動」である。

最小作用の原理の精神からすると、ありとあらゆる経路を考えてその中で作用の値が極値になっていることを示す必要があるが、それはとつてもたいへんなことなので、特に簡単な経路の場合を考えて確かに極値となっていることを示そう。これは厳密な証明ではもちろんないが、雰囲気をつかむにはいいだろう。

簡単な経路として、

$$x(t) = at(T - t) \quad (\text{A.15})$$

という関数を使おう。これは2次関数であって、 $t = 0, t = T$ で0になるという条件を満たしている関数である。この経路の場合の作用を計算してみる。まず、

$$\dot{x}(t) = a(T - 2t) \quad (\text{A.16})$$

であるから、運動エネルギーは $\frac{1}{2} m (\dot{x})^2 = \frac{1}{2} ma^2 (T - 2t)^2$ である。位置エネルギーは $mgx = mgat(T -$

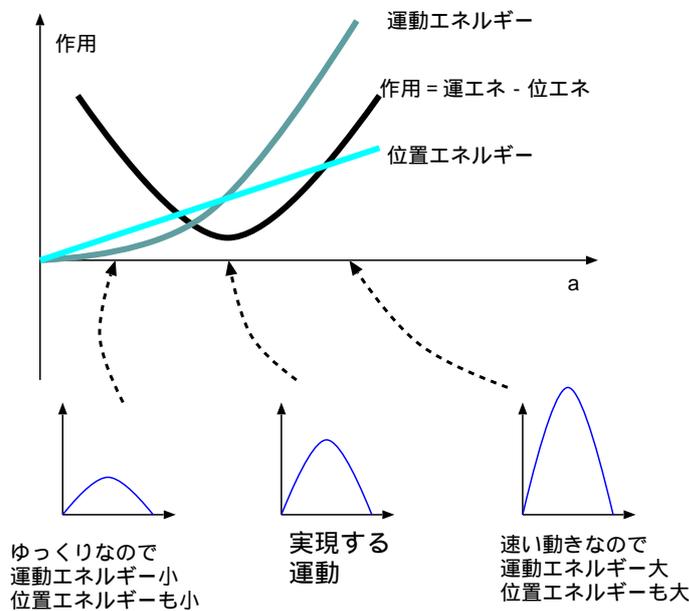
t) であるから、作用を計算すると、

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \left(\frac{1}{2}ma^2(T-2t)^2 - mgat(T-t) \right) dt \\
 &= \left[\frac{1}{2}ma^2 \frac{(T-2t)^3}{-6} - mga \left(T \frac{t^2}{2} - \frac{t^3}{3} \right) \right]_0^T \\
 &= \underbrace{\frac{ma^2T^3}{6}}_{\text{運動エネルギーからくる部分}} - \underbrace{\frac{mgaT^3}{6}}_{\text{位置エネルギーからくる部分}} \\
 &= \frac{mT^3}{6} (a^2 - ga)
 \end{aligned} \tag{A.17}$$

ここで、 $a^2 - ga = \left(a - \frac{1}{2}g\right)^2 - \frac{1}{4}g^2$ であることから、 $a = \frac{1}{2}g$ の時作用の値が最小となることがわかる。実現する経路は

$$x(t) = \frac{1}{2}gt(T-t) = \frac{1}{2}gTt - \frac{1}{2}gt^2 \tag{A.18}$$

であるから、これは初速度 $\frac{1}{2}gT$ 、加速度 $-g$ の等加速度運動である。つまり、実現する運動である。



この作用の値を見てみると、実現する運動より a が大きくとも小さくとも、作用の値は大きくなる。 a が大きくなると、運動エネルギーも増えるし位置エネルギーも増える。作用はこの引き算であるから、ちょうど運動エネルギーの増加と位置エネルギーの増加が打ち消し合うところが極値となる。

A.4 なぜ位置エネルギーを引くのか??

「どうして位置エネルギーを足さずに引くんですか?」ということが気になる人が多いようなので、これに対する答を書いておこう。何度も書いているように、作用というのは「最小であるという条

件が運動方程式になるように」作るのだから、これの答としては「ちゃんと運動方程式出すためにはマイナス符号がついてちょうどいいんだよ！」と言ってしまえばそれで終わりではある。

しかし、どうせなら図なりなんなり、目に見える形で納得したいというのも人情であろう。そこで、こう考えると納得できるかもしれない説明を以下に書く。実は、

下向きの力によって、経路は上向きに引っ張られる。

のである。

そんなばかなと思うかもしれないが、「ばかな」という前によく考えて欲しいのは、ここで考えている経路は「出発点と到着点を固定して、いろいろな経路を考えると」という前提付きの「経路」なのだ、ということである。

重力などの外力がなければ、出発点と到着点を固定したら、そこをまっすぐにつないだ経路（つまりは、等速直線運動）が実現する経路である。では重力があったら???

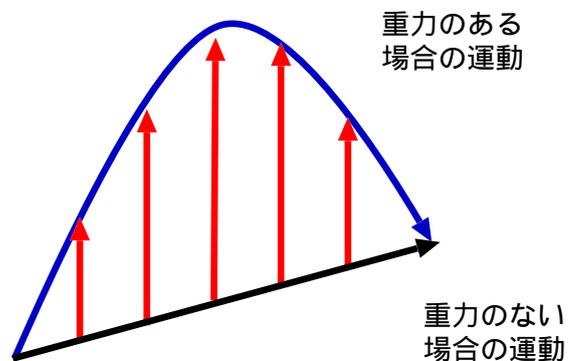
その場合、「いったん上に登って、また落ちてくる」という経路が実現する。その経路は、等速直線運動に比べ、上方向にずれていることになる。「経路は上向きに引っ張られる」と書いたのはそういう意味である。

だから、普通の力学の場合で考えているのとは位置エネルギーの役割が逆になり、作用に入る位置エネルギーの前にマイナス符号が入ることになるのである。

以上から、作用というものを少しでもイメージしたかったら、こんなふうにと考えるとよいだろう。

まず上のような $x-t$ グラフに書かれた経路をゴムひものようなものとする。そしてそのゴムひもの両端を固定する。ゴムひものようなものだから、他に力がなければまっすぐの直線になるだろう。もし力が働いたとしたら、力は経路を「力の働く向き」とは逆に引っ張るので、上に書いた図のように、経路が「いったん位置エネルギーの大きいところ（ ）に行ってまた帰ってくる」という形になる。

「経路をゴムひもと考えた時の弾性エネルギー」と「通常とは逆向きに働く力による位置エネルギー」の和が「作用」である。これが極値になるような経路が、実際に実現する運動になる。



A.5 なぜ最小作用の原理が必要なのか？

さて、この最小作用の原理、これまた多い疑問が「なぜこんなことを考えなくてはいけないのですか？」ということだ。今までの話からすると、結局は運動方程式を出すためらしい。しかしそれなら最初から運動方程式を出せばいいじゃないか、と思うかもしれない。わざわざ遠回り（に見える）作用なるものを導入するのはなぜなのか。

まず、最初から運動方程式を出す、というのがそんなに簡単ではない場合がよくある、ということ。これは実際に難しい問題をラグランジュ形式で解いてみると実感できる。

もう一つは、（静力学のポテンシャルと同じだが）座標変換に強いということ。直交座標から極座標へというような座標変換はもちろんのこと、もっと複雑怪奇な座標変換に対しても、ラグランジュ形式（最小作用の原理）は強い。

たとえば、2次元面上で中心力 $F(r)$ が働く場合の運動方程式は、極座標で表現すると、

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = F(r) + mr \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2, \quad \frac{d}{dt} \left(mr^2 \frac{d\theta}{dt} \right) = 0 \quad (\text{A.19})$$

なのだが、これを力と加速度の考察から求めるのは、ごちゃごちゃして見通しのよくない計算になる。しかし、ラグランジアン

$$L = \frac{1}{2} m \left(\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + r^2 \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \right) - U(r) \quad (\text{A.20})$$

からオイラー・ラグランジュ方程式を使って求めると、ほとんど頭を使うことなく機械的に上の式が得られる(ただし、 $F = -\frac{dU}{dr}$ という関係がある)。

そしてもう一つは、作用の形からいろんなことがわかったりするという。作用の不変性から何かの保存則が導かれたり(たとえば運動量保存則が作用の形から導かれたりする)、作用の形が似ていることから違う物理現象を同じ方法で調べることができたり。一般的に現象を記述する方法として便利だということが言える。

何にせよ、簡単な問題を考えている限りは、最小作用の原理のありがたみはわかりにくいかもしれない。しかしいつか難問に立ち向かう時に、いろんな手助けをしてくれるのが最小作用の原理なのである。

A.6 一般運動量

ここで、 $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}$ という量に着目する。 $L = \frac{1}{2} m \sum_i (\dot{x}_i)^2 - V(x)$ の場合であれば、 $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i$ となり、運動量である。作用は別の形であることもあるので、この量が常に $m\dot{x}_i$ になるわけではない。しかし、運動量みたいなものではあるので、これを「一般座標 x_i に対応する一般運動量」と呼ぶ(以下では p_i と書こう)。

たとえば、質量 m の物体が半径 r の円運動を行っている時、その回転角度を θ とすれば、円運動の速度は $r\dot{\theta}$ であり、運動エネルギーは $\frac{1}{2} mr^2 (\dot{\theta})^2$ であるから、角度 θ に対応する一般運動量は

$$\frac{\partial}{\partial \dot{\theta}} \left(\frac{1}{2} mr^2 (\dot{\theta})^2 \right) = mr^2 \dot{\theta} \quad (\text{A.21})$$

である。これは角運動量そのものである。

座標と、それに対応する運動量は「互いに共役な量」と呼ばれる。量子力学においては、座標 x に対し、それに対応する運動量は $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ と置き換えられることになる。

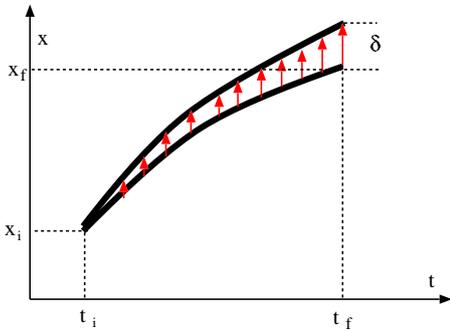
もし、ラグランジアン L が x_i をふくまなければ、上の式から、 $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) = \frac{dp_i}{dt} = 0$ となる。つまり、ラグランジアンが x_i をふくまないならば、 p_i は保存する。

このような座標を「循環座標」と呼ぶ(別に循環してなくてもこう呼ぶ)。

A.7 作用と保存則の関係

積分の上限・下限にあたる端点を固定するという条件のもとで作用を変分して0になるということから運動方程式が出る。端点を動かさないのは当然で、そんなことをしたら運動自体が変わってしまう（大砲の弾丸を撃つとき、目標位置が違えば最初から弾丸の運動は違って来る）。両端を止めて「どんな運動が実現するか？」と問うからこそ、運動方程式が出てくるのである。

では、端点を動かすと、作用はどう変化するのか、ということを考えていこう。



一次元の粒子の運動を考えて、 $t = t_i, x = x_i$ から出発した粒子が $t = t_f, x = x_f$ に到着するという状況を考える。ここで、到着点 (t_f, x_f) を少しずらしてみる。まず t_f を変えずに x_f を $x_f + \epsilon$ に変化させてみる。こうすることで二つの経路ができることになる。このどちらの経路も、運動方程式を満たしているとしよう。

通常、作用という量を考えるときは、中に代入される $x(t)$ は運動方程式の解とは限らない（作用の変分原理から運動方程式が出てくるのだから、運動方程式を出す前の作用に入っている $x(t)$ は運動方程式を満たしているとは限らない）。一方、以下で考える作用で、経路が運動方程式を満たしていると考えている場合は文字を変えて \bar{S} と書こう。 \bar{S} は「 $x(t)$ が運動方程式を満たしている」という条件のもとで計算した作用の値である。 S は経路全体 $x(t)$ ($t_i < t < t_f$) の関数（関数の関数）であったが、 \bar{S} は出発点 $x_i = x(t_i)$ と到着点 $x_f = x(t_f)$ のみの関数である（この2点を決めれば、間の運動は決まるはずなので）。

二つの経路を $x(t)$ という関数と $x(t) + \delta(t)$ という関数で表したとする（当然 $\delta x(t_f) = \epsilon$ ）。するとこの二つの経路の作用の差は

$$\int L(x(t) + \delta(t), \dot{x}(t) + \dot{\delta}(t)) dt - \int L(x(t), \dot{x}(t)) dt \tag{A.22}$$

であり、テイラー展開してまとめると、

$$\int \left(\frac{\partial L}{\partial x} \delta(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{\delta}(t) \right) \tag{A.23}$$

である。ここで運動方程式から $\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right)$ を使うと、

$$\int \left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \delta(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{\delta}(t) \right) = \int \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta(t) \right) dt \tag{A.24}$$

とまとめることができる。この式は「 t で微分してから t で積分する」という形になっているので、積分がすぐに実行できて、結果は $\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \right]_{t_i}^{t_f}$ である。 $\delta(t_i) = 0$ であることを考えれば、結果は

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{t=t_f} \delta(t_f) = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{t=t_f} \epsilon = p \Big|_{t=t_f} \epsilon \tag{A.25}$$

である。以上から「経路が運動方程式の解であるという条件をつけて、作用を到着点の x 座標で微分した答は、その時刻での運動量である」ということ、式で表せば、

$$p(t_f) = \frac{\partial}{\partial x_f} \bar{S}(x_i, x_f) \tag{A.26}$$

がわかる。

ここで、同じことを到着点ではなく出発点で行ったとすると、答はやはり運動量であるが、出発点は積分の下限なので、マイナス符号が付き²、

$$p(t_i) = -\frac{\partial}{\partial x_i} \bar{S}(x_i, x_f) \quad (\text{A.27})$$

となる。

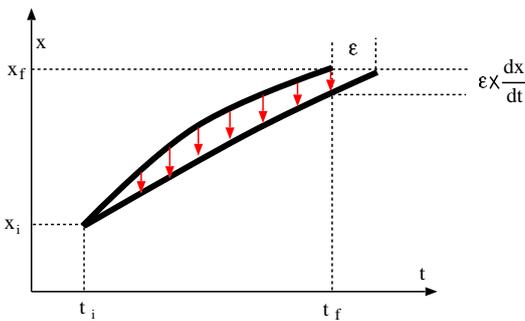
では、到着点と出発点を同じ量 ϵ だけずらしたらどうなるだろう。その時の作用の変化は

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_f} + \frac{\partial}{\partial x_i} \right) S(x_i, x_f) \epsilon = (p|_{t=t_f} - p|_{t=t_i}) \epsilon \quad (\text{A.28})$$

となる。もし「到着点と出発点を同じだけずらしても、作用の値が変化しない」すなわち、

$$\bar{S}(x_i + \epsilon, x_f + \epsilon) = \bar{S}(x_i, x_f) \quad \text{または} \quad \left(\frac{\partial}{\partial x_f} + \frac{\partial}{\partial x_i} \right) S(x_i, x_f) = 0 \quad (\text{A.29})$$

が成立する(このような状況を「作用が空間並進に対して不変である」と言う)とすれば、その場合は $p|_{t=t_f} = p|_{t=t_i}$ となり、運動量が保存することが言える。たとえば $L = \frac{1}{2}m(\dot{x})^2 - V$ の時、位置エネルギー V が x によらなければ、作用の値は x の平行移動によって不変である。その場合、運動量は保存する。作用が座標 x をあらわに含んでいない場合(つまり x が循環座標な場合)は「到着点と出発点を同じだけずらしても、作用の値が変化しない」という状況になる。この場合は運動量が保存するのは上でも説明した通りである。



さて、次に到着点の時刻をずらす ($t_f \rightarrow t_f + \epsilon$) と作用がどう変化するかを考えよう。

この時は積分域も変化する。積分域の変化による作用の変化は $\int_{t_f}^{t_f+\epsilon} L dt$ であるから、 ϵ が小さい場合は

$$\epsilon L|_{t=t_f} \quad (\text{A.30})$$

と考えてよい。一方、 $t_i < t < t_f$ の範囲についても(図に示したように)経路が変わっている。経路の変化は「 $t = t_f$ の場所での x が $-\epsilon \frac{dx}{dt}$ だけ変化している」と考えてやれば

計算できて、それはさっきの x_f を変化させる計算で変化量を $-\epsilon \frac{dx}{dt}$ とすればよいので、

$$-\epsilon \frac{dx}{dt} \frac{\partial L}{\partial x} \quad (\text{A.31})$$

この二つを足して、

$$-\epsilon \left(p \frac{dx}{dt} - L \right) \quad (\text{A.32})$$

²積分 $\int_a^b f(x) dx$ は $f(x)$ の原始関数を $F(x)$ とすると $F(b) - F(a)$ と書けることに注意。

とまとめることができる。ここで、 $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$ を使った。マイナス符号を前に出しているのは、その方が我々にとってなじみのある量に一致するからである。作用が空間並進で不変なときに運動量が保存したように、作用が時間並進で不変な時にはこの量 $p \frac{dx}{dt} - L$ が保存する。

これは何であるかを $L = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x)$ の場合で計算してみる。まずこの場合 $p = m \frac{dx}{dt}$ である。ゆえに、

$$m \frac{dx}{dt} \times \frac{dx}{dt} - \left(\frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x) \right) = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + V(x) \quad (\text{A.33})$$

となる。これはエネルギー（運動エネルギー + 位置エネルギー）である。

つまり、作用の時間並進不変性は、エネルギー保存則を導く。なお、作用に何か連続的な変換に対する不変性がある時は、対応する保存量がある、という一般的定理（ネーターの定理と呼ばれる）があり、ここで示したのはその一例である。他にも角運動量保存則や電荷保存則が、それぞれ回転の不変性、位相変換の不変性から導かれる。

なお、解析力学ではこの量 $p \frac{dx}{dt} - L$ をハミルトニアンと呼び、 H という記号で表す。 L が x, \dot{x} の関数であったのに対し、 H は x, p の関数である（この関係はルジャンドル変換と呼ばれる関係であるが、その説明はここでは省略）。

$H(x, p) = p\dot{x} - L(x, \dot{x})$ は p と x の関数として表されるので、 $L = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x)$ の場合、

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + V(x) \quad (\text{A.34})$$

と書かれる。

作用は

$$S = \int_{t_i}^{t_f} \left(p \frac{dx}{dt} - H \right) dt \quad (\text{A.35})$$

となるが、 $p \frac{dx}{dt} dt = p dx$ だから、

$$\bar{S} = \int_{x_i}^{x_f} p dx - \int_{t_i}^{t_f} H dt \quad (\text{A.36})$$

と書き直すことが出来る。この式から、

$$\frac{\partial \bar{S}}{\partial x_f} = p, \quad \frac{\partial \bar{S}}{\partial t_f} = -H \quad (\text{A.37})$$

となる。つまり作用を終端点の位置座標で微分すれば運動量が、終点の時間座標で微分すれば（マイナス符号つきで）エネルギーが出る。このような関係を、「運動量と座標は互いに共役である」とか「エネルギーと時間は互いに共役である」などと言う。量子力学を学ぶうちに、この「運動量 \leftrightarrow 空間」という対応、「エネルギー \leftrightarrow 時間」という対応の持つ意味の深さがわかってくると思う。また、この対応はあたかも、「時間方向の運動量がエネルギーである」と言わんばかりであるが、相対論を学ぶと、まさにその通りであることがわかる。量子力学や相対論よりもずっと前に作られた解析力学において、すでにそのような対応がわかっていたということは面白い。

A.8 正準方程式

オイラー・ラグランジュ方程式は、作用が極値を取るという条件から導かれたが、ハミルトニアンを使って書き直すことができる。作用を $\int \left(p \frac{dx}{dt} - H(x, p) \right) dt$ と書いて、これにたいして x および p が一つの力学変数であるかのごとく考えて変分をとって極値になる条件を出す。 x に関しては、

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(p \frac{dx}{dt} - H(x, p) \right) - \frac{d}{dt} \left(\underbrace{\frac{\partial}{\partial \left(\frac{dx}{dt} \right)} \left(p \frac{dx}{dt} - H(x, p) \right)}_{\text{答えは } p} \right) = 0 \quad (\text{A.38})$$

p に関しては

$$\frac{\partial}{\partial p} \left(p \frac{dx}{dt} - H(x, p) \right) - \frac{d}{dt} \left(\underbrace{\frac{\partial}{\partial \left(\frac{dp}{dt} \right)} \left(p \frac{dx}{dt} - H(x, p) \right)}_{\frac{dp}{dt} \text{ はないから答えは } 0} \right) = 0 \quad (\text{A.39})$$

となつて、結果は

$$\frac{dp}{dt} = - \frac{\partial H}{\partial x} \quad (\text{A.40})$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (\text{A.41})$$

という二つの対称性のいい方程式になる。これを正準方程式と呼ぶ。量子力学のシュレーディンガー方程式では、この正準方程式が期待値の意味で実現する。

別の書き方で正準方程式を書くと、

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial x} \\ \frac{\partial H}{\partial p} \end{pmatrix} \quad (\text{A.42})$$

となるが、これがもし、

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial x} \\ \frac{\partial H}{\partial p} \end{pmatrix} \quad (\text{A.43})$$

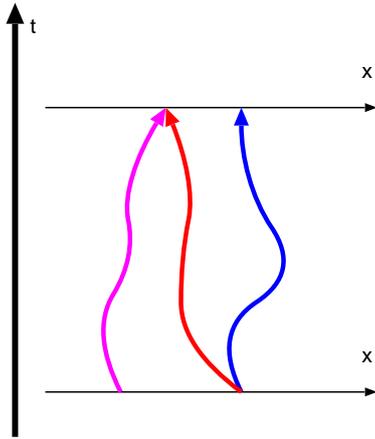
のように行列 $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ を含まないものだったとすると、 x や p の変化する方向は H の勾配の方向

(H が標高だとすると、坂を登っていく方向) だということになる。しかし実際には行列 $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ がはさまれており、この行列は 90 度回転の行列³だから、勾配と直交する方向、すなわち H が変化しない方向を向いている。 (x, p) は H を変化させない方向へ運動していくことになる。つまり位相空間での「運動」によって、 H は保存する(念のために書いておくと、 H が t をあらわに含む場合はこの限りではない)。

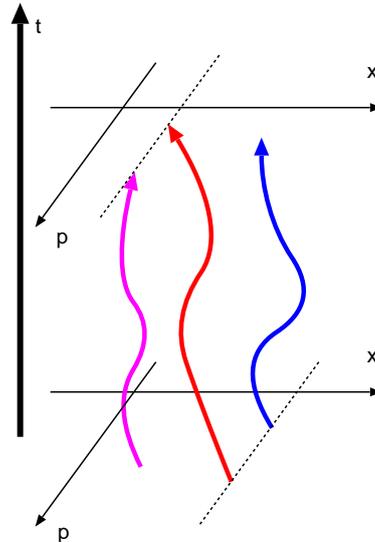
³ $\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$ に、 $\theta = \frac{\pi}{2}$ を代入したもの。

A.9 位相空間

「位相空間」の定義をちゃんと述べよう。

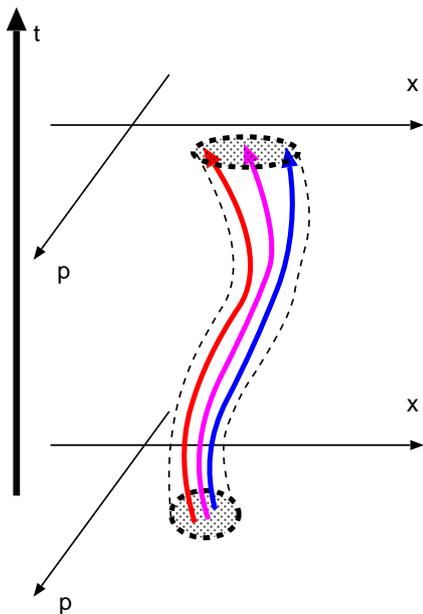


同じ座標から出発しても
同じ場所に到着するとは限らない



位相空間で同じ点ならば、必ず
(位相空間で)同じ点に到着する。

座標 x と運動量 p を一組にして考えた 2 次元の空間を「位相空間」(phase space) と呼ぶ。ここでは 1 次元の運動しか考えてないので位相空間は 2 次元だが、3 次元で座標を x, y, z 、運動量を p_x, p_y, p_z としたならば位相空間の次元は 6 である (一般に N 次元の自由度を持つ力学系に対して $2N$ 次元の位相空間がある)。



なぜ位相空間というものを考えるかという、ある時刻に粒子のいる座標だけを決めたのでは、物体がその後どちらに動くかはわからないからである。出発点が同じでも初速度が違えば、後の運動は全く違う (逆に、到着点があってもたどってきた履歴が違うということもある)。

座標だけでなく運動量も定めてやると、その後の運動がすべて決まる。 x と p の両方が決まれば、後は一階微分方程式である正準方程式に従って時間発展していただくだけで、以後の運動は一意的に決まる。つまり、位相空間の上では運動が互いに交わらない線で表すことができる (交わってしまったら、その一点から後の運動が 2 種類あり得ることになってしまう)。つまり、ある時刻における位相空間一点一点が、それぞれ少しずつ違う運動をして、結果として未来の時刻においてはそれぞれ違う (1 対 1 対応の) 位相空間の一点に達するということになる。左図のように、位相空間上の 1 塊の物理的状態が時間発展していくことを思い浮かべてほしい。位相空間の面白い (そしてありがたい) 性質の一つは、今考えた「位相空間の塊」の面積⁴が時間がたっても変化しないことである。

⁴もちろん、「面積」と呼んでいいのは位相空間が 2 次元の時だけで、もっと一般的には $2N$ 次元体積ということになる。

今、ある時刻 t に $(x \sim x + \Delta x, p \sim p + \Delta p)$ の範囲にある系の状態を追跡するとする。ある時刻で位相空間の場所が違う点は、必ず後の時刻でも違う点に移るので、この状態の占める面積はまた別の位相空間の一部へと移動することになる。

最初 (x, p) という場所にいた粒子は、 δt 後には

$$\left(x + \frac{dx}{dt}\delta t, p + \frac{dp}{dt}\delta t\right) = \left(x + \frac{\partial H(x, p)}{\partial p}\delta t, p - \frac{\partial H(x, p)}{\partial x}\delta t\right) \quad (\text{A.44})$$

の位置にいる (右辺では正準方程式を使って書き直しを行った)。

同様に考えると、最初 $(x + \Delta x, p)$ にいた粒子は

$$\begin{aligned} & \left(x + \Delta x + \frac{\partial H(x + \Delta x, p)}{\partial p}\delta t, p - \frac{\partial H(x + \Delta x, p)}{\partial x}\delta t\right) \\ = & \left(x + \Delta x + \frac{\partial H(x, p)}{\partial p}\delta t + \frac{\partial^2 H(x, p)}{\partial p \partial x}\Delta x \delta t, p - \frac{\partial H(x, p)}{\partial x}\delta t + \frac{\partial^2 H(x, p)}{\partial x^2}\Delta x \delta t\right) \\ = & \left(x + \frac{\partial H(x, p)}{\partial p}\delta t, p - \frac{\partial H(x, p)}{\partial x}\delta t\right) + \left(\Delta x + \frac{\partial^2 H(x, p)}{\partial p \partial x}\Delta x \delta t, \frac{\partial^2 H(x, p)}{\partial x^2}\Delta x \delta t\right) \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

の場所にいることになる。最初の位置では (x, p) にいた粒子と $(x + \Delta x, p)$ にいた粒子の位置のずれは $(\Delta x, 0)$ であったが、 δt 後には $(\Delta x + \frac{\partial^2 H(x, p)}{\partial p \partial x}\Delta x \delta t, \frac{\partial^2 H(x, p)}{\partial x^2}\Delta x \delta t)$ に変わっているわけである。

同様の計算を $(x, p + \Delta p)$ の場所にいた粒子に対して行えば、位置のずれは、 $(-\frac{\partial^2 H(x, p)}{\partial p^2}\Delta p \delta t, \Delta p - \frac{\partial^2 H(x, p)}{\partial p \partial x}\Delta p \delta t)$ になる。この二つのずれの外積を計算すると、 δt の 1 次のオーダーまでを考えれば、

$$\left(\Delta x + \frac{\partial^2 H(x, p)}{\partial p \partial x}\Delta x \delta t\right) \left(\Delta p - \frac{\partial^2 H(x, p)}{\partial p \partial x}\Delta p \delta t\right) - \left(\frac{\partial^2 H(x, p)}{\partial x^2}\Delta x \delta t\right) \left(-\frac{\partial^2 H(x, p)}{\partial p^2}\Delta p \delta t\right) = \Delta x \Delta p \quad (\text{A.46})$$

となって最初の時刻での外積と一致する。つまり、位相空間内の体積 (今は 2 次元なので面積だが) は時間がたっても変化しないのである。

この「ある状態が位相空間内で占める体積は時間変化しない」という定理 (リウビルの定理と呼ばれる) は、量子力学で大事な役割を果たす。なぜなら、量子力学における不確定性関係は位相空間の言葉を使うと以下のように表現できるのである。

古典的な系の状態が位相空間内では「点」であるのに対して、量子力学的な「一つの状態」は位相空間の中でちょうど h の体積を占めている。

これはすなわち、 $\delta x \delta p = h$ を意味している。また、この式はゾンマーフェルトの量子条件 $\oint p dx = nh$ とも関連している。

この体積が時間変化してしまったら、不確定性の積 $\Delta x \delta p$ は時間によって違う値になるということになり、不確定性関係を崩してしまう。

また、正準変換と呼ばれる変換を用いて座標変換を行うと、変換の前後で位相空間の体積が変化しないことを、リウビルの定理と同様に証明することができる。物理的状態の「数」などというものは座標変換によって変わってはいけなはずなので、位相空間の考え方が非常に基本的なものであることがわかるだろう。

A.10 ハミルトン・ヤコビの方程式

量子力学の「運動方程式」に対応するシュレーディンガー方程式と密接な関係にあるハミルトン・ヤコビの方程式を出しておく。歴史的には、ド・ブロイやシュレーディンガーはハミルトン・ヤコビの方程式を手がかりにシュレーディンガー方程式を作ったのである。

既に述べたように、 \bar{S} を「経路が運動方程式を満たしている時の作用積分の値」とすると、エネルギーは $-\frac{\partial \bar{S}}{\partial t}$ に、運動量は $\frac{\partial \bar{S}}{\partial x}$ に置き換えられる。一方エネルギーとはハミルトニアンのことであるから、 $-\frac{\partial \bar{S}}{\partial t} = H(p, x)$ である。 H は p, x の関数であるが、その p は $\frac{\partial \bar{S}}{\partial x}$ に置き換えられるのだから、

$$-\frac{\partial \bar{S}}{\partial t} = H\left(\frac{\partial \bar{S}}{\partial x}, x\right) \quad (\text{A.47})$$

と書くことができる。この方程式は \bar{S} が求められている（その前提として当然、運動方程式を満たすような経路がすでに知られている）として導いたわけであるが、逆にこの方程式を手がかりにして、 \bar{S} を求め、結果として運動方程式を満足するような経路を見つける、という手順で力学の問題を解くこともできる。この方程式がハミルトン・ヤコビの方程式である。ハミルトン・ヤコビ方程式はただ1本の方程式であり、オイラー・ラグランジュ方程式や正準方程式のような連立方程式ではない。よって力学系全体を見通しながら問題を解くのに適している。

なお、この方程式で特にエネルギー E が保存量になるような場合は、

$$\bar{S}(x, t) = W(x) - Et \quad (\text{A.48})$$

という形の解となることが知られている。この場合は

$$E = H\left(\frac{dW}{dx}, x\right) \quad (\text{A.49})$$

という形になるが、これもハミルトン・ヤコビ方程式と呼ばれる。ハミルトニアンが $\frac{p^2}{2m} + V$ の形であれば、上の式の右辺は $\frac{1}{2m} \left(\frac{dW}{dx}\right)^2 + V$ であるから、

$$\frac{dW}{dx} = \pm \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (\text{A.50})$$

となる。複号は+を取ることになると、これから、

$$W = \int \sqrt{2m(E - V(x))} dx \quad (\text{A.51})$$

という式が出る。いろんな経路の中で W が極値になるような経路が実現するわけだが、これと光学におけるフェルマーの定理との類似は古典力学の時代から知られていた。場所 x における光の速さが $u(x)$ であったとすれば、

$$\int_a^b \frac{1}{u(x)} dx \quad (\text{A.52})$$

は a から b まで光の進むのに要する時間であり、これが極値になるのが実現する光路であるというのがフェルマーの定理である。ゆえに、波と見た時の速度との間に

$$u(x) = \frac{k}{\sqrt{2m(E - V(x))}} \quad (\text{A.53})$$

という関係式が出る (k は比例定数)。速さ $u(x) = \nu\lambda(x)$ のように振動数 \times 波長で書かれていたとすれば、

$$\frac{k}{\nu\lambda(x)} = \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (\text{A.54})$$

という式が出る。右辺は古典的運動量であるから、 $k = h\nu$ とすれば、これはまさにド・ブロイの関係式なのである。

ここでは実際にこの方程式を解くことはせず、シュレーディンガー方程式との関連を述べるにとどめる。シュレーディンガー方程式では、エネルギーは $i\hbar \times$ 時間微分に、運動量は $-i\hbar \times$ 空間微分に置き換えられて、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, x \right) \psi \quad (\text{A.55})$$

となる。上の式との類似性は明らかであろう。 $\psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$ という関係⁵があるとすると、この二つの式はほぼ対応する式になる。シュレーディンガーはこのような類推から波動方程式を作った。

A.11 ポアッソン括弧

x と p の関数である $A(x, p)$ を時間微分するとどうなるかを考えると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A(x, p) &= \frac{\partial A}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial A}{\partial p} \frac{dp}{dt} \\ &= \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

となる。ポアッソン括弧 $\{A, B\}_{P.B.}$ を

$$\{A, B\}_{P.B.} = \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial x} \quad (\text{A.57})$$

と定義すれば、

$$\frac{d}{dt} A(x, p) = \{A(x, p), H\}_{P.B.} \quad (\text{A.58})$$

と書くことができる。このポアッソン括弧は、ハミルトニアンを使った解析力学の計算のあちこちで顔を出す式なのだが、量子力学ではこれが交換関係に置き換えられる。

ポアッソン括弧を使って書くと、ハミルトニアン (エネルギー) が時間に依存しないことは、

$$\frac{dH}{dt} = \{H, H\}_{P.B.} = 0 \quad (\text{A.59})$$

⁵または $S = -i\hbar \log \psi$ 。シュレーディンガーはこの式が Boltzmann の式 $S = k \log W$ (こっこの S はエントロピーである) に似ていることに何か意味があると考えていたらしい。

のようにして示すことができる。ポアッソン括弧は定義により反対称 ($\{A, B\} = -\{B, A\}$) だから、これは自明な式である。これも、量子力学においてハミルトニアンが自分自身と交換することと同じである。

また一つの例として、ポアッソン括弧の右側に H ではなく運動量 p を入れた場合を考えると、

$$\{A, p\}_{P.B.} = \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial A}{\partial x} \quad (\text{A.60})$$

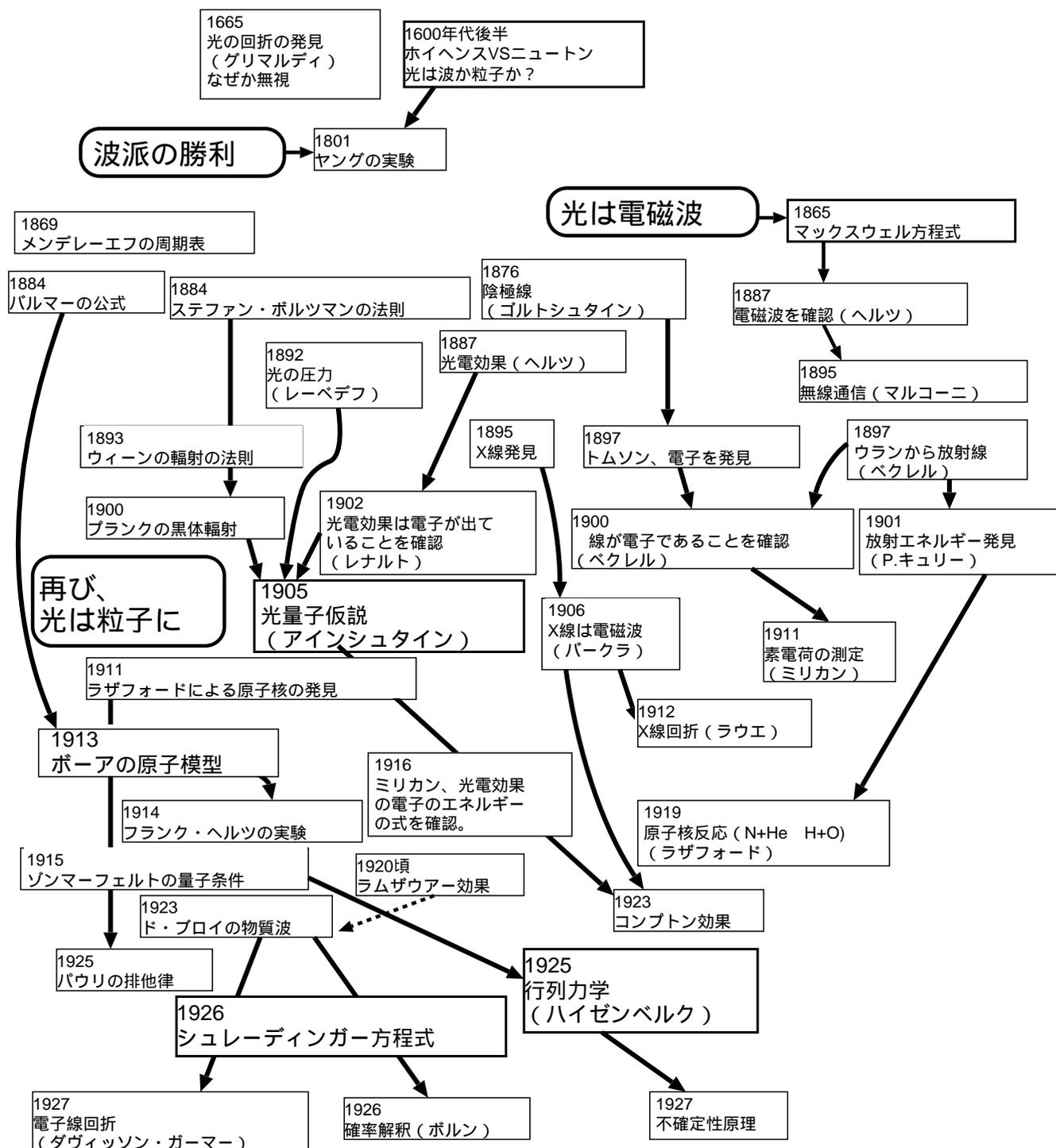
となる。つまり p とのポアッソン括弧を取るということは、 x 微分するということと同じである。ここでも「エネルギーは時間と、運動量は空間と対応する」という形になっている。特に大事なことは、

$$\{x, p\}_{P.B.} = 1 \quad (\text{A.61})$$

であることで、これは量子力学では $[x, p] = i\hbar$ に対応する式なのである。

ポアッソン括弧を使って、 $\{A, H\}_{P.B.}$ とすることで A の時間微分が計算できるのだから、 $\{A, H\} = 0$ となるような量 A は保存量である。

付録B 量子力学の歴史図



量子力学が完成するまでの歴史を図で表現したもの。

索引

- Bloch の条件, 143
 Bloch の定理, 143
 Legendre 多項式, 196
 Rodrigues の公式, 196
 アインシュタイン, 5
 位相速度, 96
 ウィグナー, 68
 エネルギーギャップ, 146
 エルザッサー, 42
 エルミート演算子, 80
 エルミート多項式, 155
 線顕微鏡, 51
 期待値, 75
 禁止帯, 145
 空洞輻射, 9
 クライン・ゴルドン方程式, 62
 交換関係, 92
 光子, 3
 光子の運動量, 22
 光電効果, 21
 光量子, 22
 黒体輻射, 1, 9
 コンプトン効果, 25
 最小作用の原理, 45
 シュレーディンガー方程式, 61
 主量子数, 209
 シュレーディンガーの猫, 68
 多世界解釈, 69
 ダヴィッソン・ガーマーの実験, 42
 超関数, 101
 Dirac のデルタ関数, 100
 ディラック方程式, 62
 デルタ関数, 100
 等分配の法則, 9
 動径量子数, 209
 ド・プロイ, 41
 二重スリット, 3
 ハイゼンベルク, 51
 波動力学, 46
 反交換関係, 94
 バンド構造, 145
 標準偏差, 106
 フーリエ級数, 55
 フェルマーの原理, 46
 不確定性関係, 51
 フランク・ヘルツの実験, 35
 プロッホの条件, 143
 分散, 105
 分散関係, 98
 プランク, 1, 9
 ヘルツ, 21
 ボーア, 6, 31, 33
 ボルン, 27
 ヤングの実験, 3
 ラザフォード, 31
 量子条件, 33
 零点振動, 159
 レナルト, 21
 ロドリーグの公式, 196