

第1回：10月7日（金）

1 粒子と波動

19世紀後半から20世紀初頭にかけて、古典物理学では説明のできない現象がいくつも発見された。それらのうちのあるものは光速に近い運動や強い重力を含む現象に関するものであり、特殊および一般相対性理論によって解決された。相対性理論まで含めた、マクロな現象を扱う理論のことを古典論と呼ぶ。「マクロ」というのは物質を連続体とみなせるような大きなスケールを指す。

これに対し、「ミクロ」な物理現象、すなわち分子、原子レベルの小さなスケールにおいては古典論によって説明のつかない現象があることが明らかになった。古典論によって説明できないミクロな現象を扱うために生まれたのが量子論であり、とくに古典力学によって扱われてきた現象を量子論的に取り扱う枠組みを量子力学という。

1.1 プランク定数

まず、量子力学が生まれるきっかけとなった、古典力学では説明のつかない現象の代表例として黒体輻射について触れておこう。内部が空洞になった箱を温めると、壁から電磁波が放射され、空洞内に電磁波が満ちた状態になる。この内部の電磁波のエネルギー密度は壁の材質に依存しないことが知られており、黒体輻射と呼ばれる。

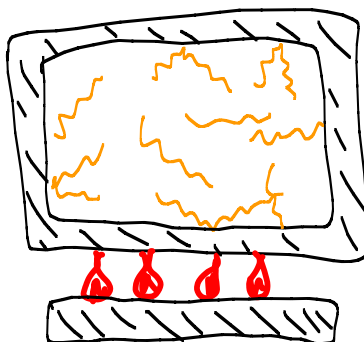


図 1: 黒体輻射

この電磁波のエネルギー密度 \mathcal{E} を測定してみると、温度 T の4乗に比例することが知られている。（ステファン・ボルツマンの法則）

$$\mathcal{E} \propto T^4 \quad (1)$$

この法則を古典電磁気学で説明できるかどうか考えてみよう。そのために、(1)に現れる量の次元(単位)を調べてみよう。 \mathcal{E} はエネルギー密度であるから、単位は (MKS 単位系では)

$$\mathcal{E} : \text{J/m}^3 \quad (2)$$

である。温度 T の単位はケルビン K であるが、統計力学によれば、温度はエネルギーに関係していて、ボルツマン定数

$$k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{J/K} \quad (3)$$

を用いれば、エネルギーに変換することができる。

$$k_B T : \text{J}. \quad (4)$$

従って、ステファン・ボルツマンの法則を

$$\mathcal{E} = a(k_B T)^4 \quad (5)$$

と表わすと、比例係数 a の単位は

$$a : \frac{1}{\text{J}^3 \text{m}^3} \quad (6)$$

である。古典電磁気学でこの比例係数を導出できるだろうか。黒体輻射は壁の材質等には依存しないので、計算に用いることのできる物理量は光速 c くらいしかない。従ってどうやっても比例定数 a を導出することは不可能である。つまり、黒体輻射は古典電磁気学では説明できない現象なのである。

この問題をきっかけとして量子力学が生まれた。詳細はここでは説明しないが、黒体輻射を説明するために、プランク (Max Planck) は今日プランク定数ばれ、と呼ばれる定数

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s} \quad (7)$$

を導入 (1899) することで黒体輻射の問題を解決した。(\hbar は角運動量や作用と同じ次元を持つ。)

プランク定数と光速を組み合わせることで、上記の数係数を次のように与えることができる。

$$a \sim \frac{1}{(\hbar c)^3} \quad (8)$$

量子力学を用いて黒体輻射を数係数まで含めて真面目に計算すると、次の結果が得られる。

$$\mathcal{E} = \frac{\pi^2}{15} \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c)^3} \quad (9)$$

これは、実験結果とぴったり一致している。

プランク定数には次の二つがあり、どちらもよく用いられる。

プランク定数

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}, \quad \hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.05 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}. \quad (10)$$

この定数は、ミクロとマクロの境目を与える、極めて重要なものである。ステファン・ボルツマンの法則の式のように、 \hbar を含む式は古典物理学では得ることができない。

古典力学は、量子力学において $\hbar = 0$ の近似を行ったものであるということが出来る。上記のステファン・ボルツマンの法則において $\hbar = 0$ とするとエネルギー密度が発散してしまうが、古典電磁気学を用いた計算を行うと、実際にエネルギーが発散してしまうことが知られている。

1.2 二重スリットの実験

量子力学の特徴は、全ての運動を「波」として扱うことにある。このことを最も分かりやすい形で見せてくれるのが二重スリットの実験である。

電子がどこに当たったかを検出できるスクリーンに向けて電子銃から電子を放出する。電子銃の出力を十分弱くして、個々の電子が十分識別できるだけの時間的間隔においてスクリーンにぶつかるようにする。電子銃とスクリーンの間に細い穴が一つ空いたスリット（単スリット）を配置した場合には、電子銃とスリットを結ぶ線の延長線とスクリーンが交わる位置を中心として、電子の衝突した位置が分布するのが観測されるであろう。これは電子が波であるとしても、粒子であ

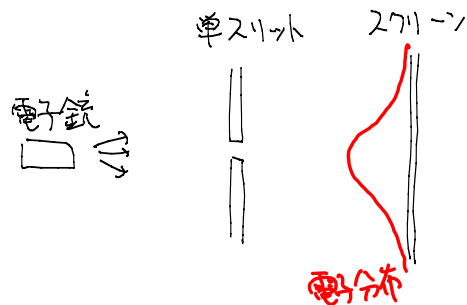


図 2: 単スリット

るとしても説明することができる。粒子が波であれば、スリットを通り抜けたときに波が回折によって広がるであろうし、電子が粒子であったとしても、スリットの影響を受けてその軌道が変化したとすれば説明できそうである。

粒子と波の違いが顕著に表れるのは、スリットが二つある場合である。電子銃とスクリーンの間に置くスリットを二重スリット（二つのスリット A と B が平行に開いたもの）に置き換えて同じ実験を行ってみる。古典的な粒子の描像をそのまま当てはめれば、実験結果は単スリットの結果を二つ重ね合わせたものにな



図 3: 二重スリット (左) 電子が古典的粒子であった場合に期待される観測結果 (右) 実際に観測される結果

ると期待される。しかしながら実際に実験してみると、スクリーン上の電子の分布はあたかも電子が波であるような、干渉縞を生成する。

この実験結果は、電子が粒子としてある軌道にそって電子銃からスクリーンまで到達したと考えてしまうと説明することができない。もしそのような解釈が可能であるとすれば、全ての電子は A の穴を通った電子と B の穴を通った電子の二つのグループに分けられるはずである。そうすると、それぞれのグループの電子のスクリーン上での分布は単スリットの場合と同じになるはずであり、二つのグループの分布をあわせたものは、単スリットの場合の結果を単に重ね合わせたものになるはずである。しかし実際の実験結果はそうはならず、干渉縞が現れるのである。

このような干渉縞は、電子を一つずつ発射したときにも現れるということを強調しておこう。このことから、異なるスリットを通り抜けた二つの電子が何らかの相互作用をして干渉縞を生成するという可能性は除外される。また、干渉縞は、多数の電子が衝突した点を統計的に処理して初めて得られることも協調しておこう。それぞれの電子が衝突するのはスクリーン上の一点であり、その点の多い場所と少ない場所をグラフで表した結果として干渉縞が現れる。従って、干渉縞が表しているのは、そこに電子が到達する確率のようなものを表していると考えることができる。

このように、電子は古典的な粒子や波としては解釈できない、それら両方の性質を併せ持つものである。このような、電子などの粒子が粒子性と波動性を持つという考え方は 1924 年にルイ・ド・ブローイによって提案された。粒子の運動に付随する波の事は「ド・ブローイ波」(de Broglie wave) または「物質波」と呼ばれる。

ド・ブローイ波が提唱された背景には、それまで波であると信じられてきた光が実は粒子の性質も併せ持つことが明らかになったということがある。(アインシュタインの光量子説 (1905) やコンプトン効果の発見 (1923) など。) 二重スリットの実験は、電子だけではなく、光に対しても行われている。この場合にも干渉縞が現れるのはもちろんであるが、光を十分弱くすると、電子の場合と同様にポツポツとあたかも粒子のように光がぶつかるのが観測される。つまり、光も電子も

同じように、粒子と波の性質を併せ持つようにふるまう。

実は量子力学においては全ての粒子が波の性質と粒子的な性質を持っているものとして扱われる。そして波としての性質と粒子としての性質は密接に関係している。古典的な粒子の運動状態を表わす重要な物理量としてエネルギーと運動量がある。また、波の状態は波長や振動数によって表わされる。ものが粒子と波の両方の性質を併せ持つとすれば、これら粒子としての性質を表す量と波としての性質を表す量の間には何らかの関係があるのが自然である。

実は、波の性質と粒子の性質を結びつける役割を果たしているのがプランク定数である。運動量 p と波長 λ の間に以下の関係があることが知られている。

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k. \quad (11)$$

この関係式によって運動量によって決まる波長はド・ブローイ波長と呼ばれる。また、エネルギー E と振動数 ν の間にも次の比例関係がある。

$$E = h\nu = \hbar\omega. \quad (12)$$

波長 λ や振動数 ν の代わりに、次の関係式によって定義される波数 k や角振動数 ω を用いるのが便利である。

$$\text{波数 } k = \frac{2\pi}{\text{波長}\lambda}, \quad \text{角振動数}\omega = 2\pi\text{振動数}\nu. \quad (13)$$

(角振動数のことを単に振動数と呼ぶ場合もある。)

1.3 量子論を用いて説明のできる代表的な現象

光や電子が波と粒子の性質を併せ持つとすることで初めて説明できる代表的な現象について触れておこう。以下では古典論においてどのような困難が存在し、それが量子論においてどのように解決されるのかについて述べるが、以下の説明は非常に大雑把なものであり、正確さを欠くことを断わっておく。量子論においてこれらの問題がどのように解決されるかを正しく理解するには、量子力学はもとより統計力学や電磁気学をしっかりと学習していくことが必要である。

原子内の電子の安定性

古典論における困難 古典電磁気学によると、加速度運動する荷電粒子は電磁波を発生させる。この現象は制動放射と呼ばれる。制動放射によって単位時間あたりに放出されるエネルギーは次の公式によって与えられる。

$$P = \frac{q^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \quad (14)$$

ただし q は粒子の電荷、 a は粒子の加速度である。これを原子核の周りを円運動する電子に適用すると、電子は電磁波を放射してエネルギーを失い、原子核に落下していくはずである。これは実際に観測される原子の安定性と合致しない。

問題 1.1 原子内の電子の運動を古典的に扱った時に電子が原子核に落下するまでの時間の程度を見積もれ。

量子論による説明 量子力学によると、粒子のエネルギーは状況によっては離散的な値しか取ることができない。原子中の電子についてはボーアの量子化条件

$$m_e v r = n \hbar \quad (15)$$

を満足する運動だけが許される。これにより電子はエネルギーを放出することができなくなり、電子が安定であることが説明される。

光電効果

古典論における困難 振動数 ν の光を金属に当てたときに放出される電子のエネルギーは

$$E = h\nu - W \quad (16)$$

と与えられる。放出される電子の個数は光の強度に依存するが、それぞれの電子のエネルギーは光の振動数のみに依存する。 W は仕事関数と呼ばれ、金属の種類によって決まる。これは古典電磁気学では説明できない。

量子論による説明 電磁波が当たった電子にはエネルギー量子 $h\nu$ に一致するエネルギーが与えられると仮定し、仕事関数 W は金属内部から外部へ出てくるときに費やされるエネルギーであると仮定すればこの実験結果は説明される。アインシュタインは、このようなことが起こるのは電磁波がエネルギー $h\nu$ を持つ粒子の集まりであるためであるという説を唱えた。(1905) この粒子は光量子または光子と呼ばれる。

コンプトン効果

古典論における困難 物質中の電子による X 線の散乱により、X 線の波長が以下のように変化する。(1923, コンプトン)

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta) \quad (17)$$

ただし θ は X 線の散乱角である。これも古典電磁気学では説明が困難な現象である。

量子論による説明 光子はエネルギーだけではなく、波長によって定まる運動量

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k. \quad (18)$$

を持つ粒子であると仮定すれば、電子との散乱による波長の変化は電子の持つ運動量の変化としてうまく説明することができる。

問題 1.2 光子が (11) や (12) で与えられる運動量、エネルギーを持つとして、コンプトン効果の式 (17) を光子と電子の弾性衝突の結果として導出せよ。

1.4 分散関係と波動方程式

量子力学は波を用いてミクロな現象を記述する。その波のことを波動関数と呼ぶ。これはド・ブロー波、物質波などと呼ばれていたが、今日では波動関数と呼ばれる。

量子力学によって物理現象を扱うためには、次の二つを明らかにする必要がある。

- 波動関数がどのような法則によって変化していくのか。
- 波動関数が与えられたときに、そこから系の情報をどのように引き出すのか。

前者は古典力学における運動方程式に相当するものである。後者における「系の情報」というのは、エネルギーや運動量など、測定によって得られる量のことである。波長や振動数が定義できるような単純な波の場合には、関係式 (12) および (11) によって運動量とエネルギーが得られることはすでに述べたとおりである。もう一度書いておこう。

$$p = \hbar k, \quad E = \hbar \omega. \quad (19)$$

力が作用していない自由粒子に対しては、運動量 p とエネルギー E の間には次の関係が成り立つ。

$$\frac{1}{2m} p^2 = E \quad (20)$$

エネルギーと振動数、運動量と波数の関係を用いると、波の波数と振動数の間の関係式（分散関係）を得ることができる。

$$\frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \hbar \omega. \quad (21)$$

この分散関係を満たすような波の代表例は単色波

$$\psi(x, t) = A e^{ikx - i\omega t} \quad (22)$$

である。ただし、右辺の k と ω は分散関係を満足するものとする。

時刻 $t = 0$ において、これは次のように与えられる。

$$\psi(x, t = 0) = Ae^{ikx} \quad (23)$$

一般に、ある時刻での任意の波の形が与えられると、次のように平面波の重ね合わせとして表わすことができる。¹ (フーリエ展開、フーリエ変換)

$$\psi(x, t) = \sum_k A(k)e^{ikx} \quad (24)$$

(より一般には、無限個の k の波を重ねる必要があるため、そのような場合は k の和は積分によって表される。)そして、分散関係はそれぞれの平面波がそれ以降の t に対して (22) のように時間発展すべきこと表わしている。(ただし、重ね合わせたそれぞれの平面波が互いに影響を及ぼさずに独立に時間発展することを仮定している。)つまり、分散関係が分かると、波の時間発展が分かる。

(22) の平面波は常に波動方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (25)$$

を満足する。この方程式は線形であるから、(22) の重ね合わせもやはりこの式を満足する。(25) は自由粒子の波動関数の時間発展を与える波動方程式である。

2 シュレーディンガー方程式

シュレーディンガー方程式は、古典力学における運動方程式に相当するものであり、量子力学的な解析を行う上での出発点となる。ここではまずシュレーディンガー方程式を導入し、そのあとで波動関数と物理量との関係について触れる。

2.1 シュレーディンガー方程式

§1 においては、ミクロな系におけるさまざまな現象が、粒子が波の性質を併せ持つことを示唆していることを述べた。この波は波動関数と呼ばれる。

量子力学においては、系の状態は波動関数を与えることによって決まる。このような状態のことを、(位置や運動量などを与えることによって決まる古典的な状態と区別して)量子状態と呼ぶ。古典力学における典型的な問題は、ある時刻における粒子の位置や運動量を与えたときに、それ以降の時刻で粒子がどのように運動するかを決めるというものである。量子力学においては波動関数が系の全ての情報を与えるから、ある時刻における波動関数を与えられたときにそれ以降の

¹これは物理数学第2 (第4学期)で学びます。

波動関数が時間とともにどのように変化するかを決めるということが重要な問題となる。

まず、最も基本的な場合として、ある運動量 p を持って一定の速度で運動する自由粒子に対応する波動関数を考えよう。関係式 (11) によれば、波動関数は波長 $\lambda = h/p$ の波である。このような波としては、たとえば正弦波が考えられる。

$$\psi(x) = A \sin(kx + \delta), \quad A, \delta \in \mathbf{R}. \quad (26)$$

k は運動量 p に対応する波数 $k = p/\hbar$ である。これを運動量 p の粒子に対応する波動関数とみなすことができるであろうか？

波動関数は運動の全ての情報を含んでいる。従って、波動関数を見れば粒子が左右どちらに進んでいるのか判定できなければならない。しかし、正弦波 (26) は左右を入れ替えてもやはり正弦波であり、座標 x の原点をずらせば左右を入れ替える前と全く同じ形にすることができる。このため、(26) の波動関数は運動量 p の粒子の波動関数としては不適當である。

(26) の代わりに次の関数を考えてみよう。

$$\psi(x) = A \exp(ikx), \quad A \in \mathbf{C}. \quad (27)$$

今度は、左右の向きを入れ替えると、

$$\psi(x) = A \exp(i(-k)x), \quad A \in \mathbf{C}. \quad (28)$$

となり、 x をずらしても元に戻すことはできない。また、(27) と (28) を比較すると、 k が $-k$ になっており、向きをひっくり返すと運動量の向きが反転することとつじつまが合っている。従って、(27) を運動量 $p = \hbar k$ の粒子の波動関数と見なすのが良いように思われる。(27) と (28) のどちらが運動量 $p = \hbar k$ の粒子で、どちらが $p = -\hbar k$ の粒子を表わしているのかということはここでの議論だけでは決めることができない。実は、この二つは $i = \sqrt{-1}$ の定義を変えれば互いに入れ替わるから、どちらを運動量 $p = \hbar k$ の粒子と思っても全く問題ない。この授業では、(27) のほうが運動量 $p = \hbar k$ の粒子を表わしているという約束にしておく。(27) のような波を単色波と呼ぶ。

単色波 (27) が時刻 $t = 0$ における波の形を与えているとしよう。 $t \geq 0$ における波の時間変化は、波の振動数 ω が与えられれば次の式によって与えられる。

$$\psi(x) = A \exp(ikx - i\omega t), \quad A \in \mathbf{C}. \quad (29)$$

ここで、 ω は正であるとする。 $i\omega t$ の前の符号は、波の進行方向が粒子の進行方向に一致するように選んだ。すなわち、 k が正 (負) であればこれは x 軸の正 (負) の方向に進行する波を表わしており、対応する粒子の運動の向きに一致する。(ただし、この速度は実は粒子の運動の速度とは一致しない。これについては後に詳しく述べる。)

波動関数 (29) から運動量やエネルギーの情報を引き出すには、次の演算子を定義するのが便利である。

ただし、 \hat{k} や $\hat{\omega}$ は、次のような演算子を表している。

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (30)$$

演算子とは、関数に作用してそれを別の関数へと変化させるもののことである。(30) のように、微分を含む演算子は微分演算子と呼ばれる。変数や関数と区別するために、しばしばハット付の文字によって表される。(??) に与えた単色波にこれらの演算子を作用させると次のようになる。

$$\hat{p}\psi = \hbar k\psi, \quad \hat{E}\psi = \hbar\omega\psi. \quad (31)$$

あるいは

$$\hat{p}\psi = p\psi, \quad \hat{E}\psi = E\psi. \quad (32)$$

が成り立つ。(30) において定義された演算子 \hat{p} と \hat{E} はそれぞれ運動量演算子およびエネルギー演算子と呼ばれる。

(25) に与えた自由粒子の波動方程式は次のように表すことができる。

$$\frac{1}{2m} \hat{p}^2 \psi(x, t) = \hat{E} \psi(x, t) \quad (33)$$

これに単色波 (29) を代入すると、演算子 \hat{p} と \hat{E} は運動量 p とエネルギー E に置き換わる。 $E = p^2/(2m)$ が成り立つから、この波動方程式が確かに成り立つことがわかる。逆に、エネルギーと運動量の関係式において

$$p \rightarrow \hat{p}, \quad E \rightarrow \hat{E} \quad (34)$$

という置き換えを行った上で波動関数に作用させれば、波動方程式が得られる。

ここまでは、自由粒子の場合について考えてきたが、ポテンシャルを含むような場合に一般化しよう。古典力学において、エネルギーを運動量 p と位置 x の関数として表したものはハミルトニアンと呼ばれる。自由粒子の場合には

$$H(p, x) = \frac{1}{2m} p^2 \quad (35)$$

であるが、ポテンシャル $U(x)$ によって表される保存力を受けて運動する粒子の場合にはハミルトニアンは

$$H(p, x) = \frac{1}{2m} p^2 + U(x) \quad (36)$$

と与えられる。右辺第 1 項は運動エネルギー、第 2 項は位置エネルギーである。この場合に波動関数が従うべき方程式もやはり (34) の置き換えによって得られる。

$$\hat{H}\psi(x, t) = \hat{E}\psi(x, t) \quad (37)$$

ただし、 $\widehat{H} = H(\widehat{p}, x)$ である。 \widehat{H} はハミルトニアン演算子と呼ばれる。演算子の具体形を代入すれば次の微分方程式が得られる。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (38)$$

この式は（1次元上の粒子に対する）シュレーディンガー方程式と呼ばれる。

ある時刻 $t = t_0$ における波動関数 $\psi(x, t_0)$ が与えられると、それ以降の波動関数はこのシュレーディンガー方程式によって一意的に定まる。