

## 第2章 波を支配する方程式

### 2.1 波動関数とシュレディンガー方程式

#### 2.1.1 波動関数

波動性を持つ粒子を扱う方程式を、質点の運動を扱うニュートン力学との対比で考えていこう。ニュートン力学では、物質の運動は質点と質点周りの運動に分けて考えることができ、質点は体積を持たない点であるので、一つの空間座標により粒子の運動を規定できた。話を簡単にするために、 $x$  軸方向の1次元運動を考えると、時刻  $T$  における粒子の位置  $x$  は時刻  $T_0$  における粒子の位置と速度、そして  $F = ma$  という運動方程式により一意的に定められるものであった。

これに対して、粒子が波動性を持つとなると、時刻  $T$  における粒子の位置を単一の座標で表記できなくなる。もちろん、波の重心のようなものは定義できるが、同じ重心位置を持つ波でも、波長が異なっていれば、ドブロイの式より運動量が異なることになる。このため重心に相当する点の位置のみで波動性を持つ粒子を完全に規定できないのである。波動性を持つ粒子を扱うためには、ある時刻での波の広がりを示す関数（波動関数）が必要になる。通常、波動関数はギリシア文字の  $\psi$ （プサイ）で表わされる。1次元系なら、波の分布は  $x$  方向のみなので、波動関数は  $\psi(x)$  となる。

#### 2.1.2 シュレディンガー方程式

ニュートン力学では運動方程式により粒子の運動を定められたのと同様に、量子力学でも基本方程式により波動関数が定められる。量子力学の基本方程式の定式化には、いくつかの方法があるが、この授業では、シュレディンガーにより定式化された方法を用いる。この基本方程式は提案者の名前からシュレディンガー方程式と呼ばれている<sup>1</sup>。1次元のシュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.1)$$

<sup>1</sup>波動関数を求める方程式であることから波動方程式と呼ばれることもある。

である<sup>2</sup>。これは微分方程式で、その解として波動関数が得られる。ただし、 $\hbar = h/2\pi$  で<sup>3</sup>、 $V(x)$  は系のポテンシャルエネルギー、 $E$  は実定数で系のエネルギーである。

シュレディンガー方程式を眺めていても、方程式の意味するところを理解するのは困難だ<sup>4</sup>。まず、2つの関数を使って、それらをシュレディンガー方程式に代入すると何が起こるのかを調べてみることにしよう。

1つ目の関数は  $\psi = \sin kx$ 。ただし、 $k = 2\pi/\lambda$  は波数（はすう）と呼ばれる物で、ドブロイの波長と運動量の関係式  $\lambda = h/p$  より  $p = h/\lambda = \hbar k$  という関係が成立する<sup>5</sup>。この関数は普通の波を表すものだ。

2つ目の関数は  $\psi = e^{-ax^2}$  でこれは原点に極大を持ちなだらかに減衰する曲線である。この関数にはガウス関数という名前がついている。この関数は見た目は波の関数ではない。確かに極大付近を見ると、三角関数と似たような形状はしているけれども、三角関数のような周期性は存在していない。この関数は原点付近のみに有限の値を持っている。ある場所にのみ存在する粒子を数学的に表そうとするときに必要となる関数の一つだ。

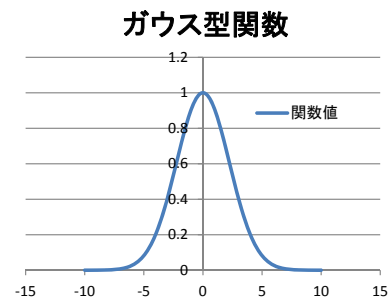


図 2.1: ガウス関数

### 自由空間の波動関数

最初に自由空間を考える。自由空間とは粒子に力が一切かからない空間である。粒子に力がかからないので、粒子は静止しているか等速直線運動をしているかである。エネルギー保存則より粒子の全エネルギーは (運動エネルギー+ポテンシャルエネルギー) であり、等速運動では運動エネルギーは一定なので、自由空間のポテ

<sup>2</sup>これからシュレディンガー方程式と波動関数が皆さんの頭を悩ますことになる。悩み疲れたら、「シュレディンガー音頭」の Web(<http://schrodinger.haun.org/>) を訪ねてみるのもよいだろう。

<sup>3</sup> $\omega = 2\pi\nu$  なので、 $E = h\nu = \hbar\omega$  となる。波動の式には、角周波数  $\omega$  の方が振動数よりなじみがよい（ $2\pi$  という因子をあらわに書かなくてよい）ので、 $\omega$  が標準的に用いられ、そのために  $h$  よりも  $\hbar$  の方が頻出するようになる。

<sup>4</sup>シュレディンガー方程式に関する質問の一つに「どうしてシュレディンガー方程式が成り立つのか」というものがある。これはよく分かる疑問ではあるのだけれど、シュレディンガー方程式はニュートンの  $F = ma$  という方程式とおんなじで、成り立っている理由は分からないけれども、その式を当てはめると世界で生じていることが記述出来るというものなので、慣れてもらうしかないものだろうと思う。

<sup>5</sup>今まで出てきた  $k$  はボルツマン定数で、ここに出てきた波数  $k$  とはまったく別物なのできちんと区別が必要である。本来なら、同じアルファベットを違った意味で使わない方がよいのだけれど、伝統的にボルツマン定数もプランク定数も、そしてバネ定数も  $k$  で表すことが多い。

ンシヤルエネルギーも空間の場所によらず一定になる<sup>6</sup>。ポテンシャルエネルギーの原点は任意にとってよいので、ここでは、 $V(x) = 0$  と設定する。

この時、正弦関数を代入したシュレディンガー方程式は

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \sin(kx)}{dx^2} &= E \sin(kx) \\
 -\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2) \sin(kx) &= E \sin(kx) \\
 \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \sin(kx) &= E \sin(kx) \\
 \frac{k^2 \hbar^2}{2m} &= E
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

と変形できる。ここで、下から2番目から一番下に移るときに両辺で  $\sin(kx)$  を相殺している。そしてその結果として、 $x$  に依存する項は消えて左辺も定数のみが残る<sup>7</sup>。右辺は  $k\hbar = p$  より  $p^2/2m = (mv)^2/2m = mv^2/2$  であり、粒子としての運動エネルギーである。つまり、この式は、自由空間を運動する粒子の持つエネルギーは運動エネルギーであることを意味している。

続いてガウス関数を自由空間のシュレディンガー方程式に代入する。

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dx}(e^{-ax^2}) &= -2ae^{-ax^2}x \\
 \frac{d^2}{dx^2}(e^{-ax^2}) &= 4a^2e^{-ax^2}x^2 - 2ae^{-ax^2}
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

なので、式の変形をしていくと

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar^2}{2m}(4a^2x^2 - 2a)e^{-ax^2} &= Ee^{-ax^2} \\
 -\frac{\hbar^2}{2m}(4a^2x^2 - 2a) &= E
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

となってしまう、正弦関数を代入した場合と同様に微分操作を行っ後で、もとの関数を両辺で相殺しても、左辺に変数  $x$  が残った式になってしまう。 $E$  は定数のはずなのに、この式では  $x$  に依存することになっており、等式として成立していない。ガウス関数は自由空間の粒子のシュレディンガー方程式の解ではない<sup>8</sup>。考

<sup>6</sup>一般論としてポテンシャル関数の微分が力なので、ポテンシャルが一定だと微分が0になり力は働かない。逆に力の積分がポテンシャルとなる。

<sup>7</sup>一番上の行でも両辺に  $\sin(kx)$  が存在しているが、この時点では、左辺は微分される存在なので、微分操作を行うまでは相殺してはいけない

<sup>8</sup>この例から分かるように、微分方程式を解くにはテクニックがいるけれども、ある関数が微分方程式の解であるかは、その関数を微分方程式に代入することにより、テクニックなしの努力で確認できる。

えてみれば、波がある範囲に収まるためには、波をそこに束縛する力が必要だ<sup>9</sup>。束縛力がない場合に、局在した波が安定に存在できるはずはなく、ガウス関数が自由空間の波動関数としては妥当ではないのは当然のことである。

### バネポテンシャル下の波動関数

続いて束縛力が働く場合として、バネで固定された粒子の問題を考える。ポテンシャルは  $V = \frac{1}{2}Kx^2$  なので<sup>10</sup>シュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{1}{2} K x^2 \psi = E \psi \quad (2.5)$$

である。

これに自由空間のシュレディンガー方程式の解であった  $\psi = \sin kx$  という三角関数を入れると

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \sin kx + \frac{1}{2} K x^2 \sin kx &= E \sin kx \\ -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{2} K x^2 &= E \end{aligned} \quad (2.6)$$

となる。

左辺に変数  $x$  が残った形になっており、正弦関数はバネのポテンシャルがある場合のシュレディンガー方程式の解ではないことが分かる。三角関数は無限の空間に広がった波だけれど、バネで押さえられた状態では波は空間のある領域にのみ存在しているので、その状態を記述する正しい関数にはなれないのは当然である。

バネのポテンシャルがあるシュレディンガー方程式にガウス関数を放り込むと

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} (4a^2 x^2 - 2a) e^{-ax^2} + \frac{1}{2} K x^2 e^{-ax^2} &= E e^{-ax^2} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} (4a^2 x^2 - 2a) + \frac{1}{2} K x^2 &= E \\ \left( \frac{1}{2} K - \frac{\hbar^2 4a^2}{2m} \right) x^2 + \frac{\hbar^2 a}{m} &= E \end{aligned} \quad (2.7)$$

となる。これより、

$$\frac{1}{2} K - \frac{\hbar^2 4a^2}{2m} = 0 \quad (2.8)$$

<sup>9</sup>力はバネでもクーロン引力でも何でも良い。

<sup>10</sup>この  $K$  は大文字だけれどもばね定数だ。  $K$  を小文字で書いてしまうことがあるかもしれないけれど、この形で出てきたらまずばね定数である。

すなわち

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2 4a^2}{2m} &= \frac{1}{2}K \\ a^2 &= \frac{mK}{4\hbar^2} \\ a &= \frac{\sqrt{mK}}{2\hbar}\end{aligned}\tag{2.9}$$

の時にエネルギーは

$$E = \frac{\hbar^2 a^2}{m} = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{K}{m}} = \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{h\nu}{2}\tag{2.10}$$

と定数となる。この場合にはガウス型関数がバネのポテンシャルがあるシュレディンガー方程式の解となっている。

$$\left(\frac{1}{2}K - \frac{\hbar^2 4a^2}{2m}\right)x^2 = 0\tag{2.11}$$

のところを見ると、エネルギーが定数となるのは、括弧内が0である時で、これは、運動エネルギーとバネエネルギーの変化分が相殺して合計としては変化しない状況である<sup>11</sup>。

## シュレディンガー方程式と波動関数

シュレディンガー方程式に解となる波動関数を代入するとエネルギーの値が出て来るのは、含まれる演算操作は、波動関数から運動エネルギーやポテンシャルエネルギーを抽出するように作られているためである。

エネルギーが求まると、何がうれしいのと思う人もいるかもしれない。でも、これは重要なことだ。例えば金属の電子についてシュレディンガー方程式を解いてエネルギーの値が定まると、これは、電子が自由な状態にいるのに比べて、どれだけのポテンシャルで金属にとらえられているかが分かった事になる。つまり、金

<sup>11</sup>繰り返しになるが、この作業では微分方程式を解いてはいなくて、解だと分かっている関数と解ではない関数を持ってきて、シュレディンガー方程式に代入して、解であるかを確認しているだけだ。シュレディンガー方程式の次元やポテンシャルによって、解となる関数は異なる。しかし、いずれにせよある関数が、与えられたポテンシャル関数を含むシュレディンガー方程式の解となっているかは、シュレディンガー方程式に代入して、最終的な式の左辺が波動関数を除けば変数は含まれずに定数だけの式となっているかを調べれば決められる。それじゃ気持ち悪いから微分方程式も解けるようになりたいという人は、学習院大学の田崎先生の物理数学のテキストを参考にするとうよいと思う。微分方程式以外に、物理や物理化学に出て来る多くの数学が扱われているテキストをWebで公開されている。

属の仕事関数を計算でもとめられるのだ<sup>12</sup>。それ以外にも分子の生成熱や燃焼熱も計算でもとめられることになる。さらに、ある化合物が安定に存在するかなども、シュレディンガー方程式からエネルギーをもとめれば知ることができる。

## 2.2 波動関数が表すもの

ここまで、波動関数という概念をきちんと定義することなく用いてきた。波動関数という名前は、粒子が波動関数が有限の値を持っているところに実体として広がっていくように感じさせるものである。しかし、そう考えると、二重スリットの回折実験の時に、電子がスクリーン全体を干渉パターンと同じ形状で弱く光らせるのではなく、1点で光を発したことが説明出来なくなる。電子が波動関数の形状で空間的に広がっているという考えは実験結果とは整合しない。電子を含むすべての粒子（そして光子も）は、観測されるときには、常に粒子として観測され、波動関数で規定されるような広がりを持って観測されることはない。では、波動関数とは何であろうか。それを考えるために、光の干渉計の実験を紹介することにしよう<sup>13</sup>。

### 2.2.1 干渉計の実験

干渉計はハーフミラーで光を二つに分けて、別々の光路を通した後に再び合体させる光学系である。干渉計にはいろいろな形式があるが、ここでは、シンプルなトワイマン-グリーン干渉計で議論を進める。光源からでた光はハーフミラーで二つに分かれ、分かれた先のミラーで反射してハーフミラーで合体する。一方のミラーは可動式になっていて光路長を変化できる。

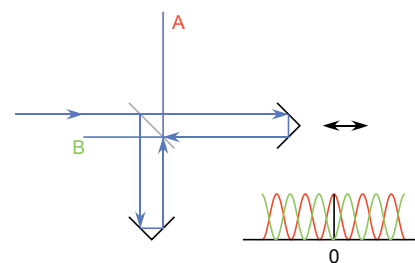


図 2.2: 干渉計と出射光強度の光路差依存性

ハーフミラーで合体する時の二つの光の位相差に応じて、出射側と、光源側の光強度は図 2.2 に示したようになる<sup>14</sup>。さて、出射側に光が戻るような条件で、干

<sup>12</sup>実際には、ここまで話は簡単ではないけれども（何しろ、計算がすごく大変だ）、原理的には間違っていない。

<sup>13</sup>波動関数の話からは電子の干渉の話を使いたいのだけれども、電子では図のような干渉計を作れないので、ここでは光を使った実験で話を進める。起こる事の気味の悪さは光子でも電子でも変わりはない。

<sup>14</sup>ハーフミラーで基板側からか、空気界面から来た波で反射後の位相差が 180 度になる（屈折率の低い方から高い方へが固定端、高い方から低い方が自由端になる）

渉計に入れる光をどんどん弱くしていこう。すると、それまで連続的にカウントされていた光は、やがてぽつぽつと、粒子として観察されるようになる<sup>15</sup>。しかし、必ず出射側からのみ出てきて、光源側方向では観察されない。逆に、合体位置で逆位相にすると、光源側のみ光が戻るようになる。

この結果は、ハーフミラーで波が二つに分かれて、そして戻ってきて干渉していることを示している<sup>16</sup>。

ここで、一方の腕にあるプリズムを外して、かわりに光検出器を取り付ける。すると、干渉計に入った光子の数の半分ほどが、光検出器で光が検出される。これはハーフミラーの特性を考えると当然のことだ。そして、それまでは、出射側（か光源側）にしか光が戻らなかったのが入射した光子の数の1/4程度の割合で両側で検出されるようになる。これは、干渉が起こっていないことを思えば当然の結果だ。でも、最初に光がハーフミラーに到達した瞬間には光はプリズムがちゃんとついているか、それとも、外されているかを知る術はないことを思い出して欲しい。プリズムがあると光は二つに分かれて、プリズムがなくなると波が二つに分かれなくなると考えるのは合理的とは思えない考え方だ。

干渉計の実験を整理すると、両方の腕にミラーがあって、どちらに光が行ったかをチェックしない状態では、光は、両方の腕に行って戻ってきて、そしてハーフミラーで干渉を起こして、腕の長さに応じて振り分けが起こる。しかし、どちらかのアームで光子が着たのをチェックしたり、光が戻らないようにすると、光は、ハーフミラーで、ある確率

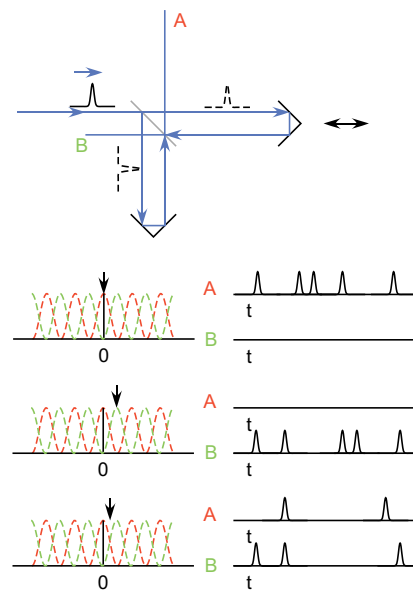


図 2.3: 光強度が弱い場合の干渉計の信号パターン

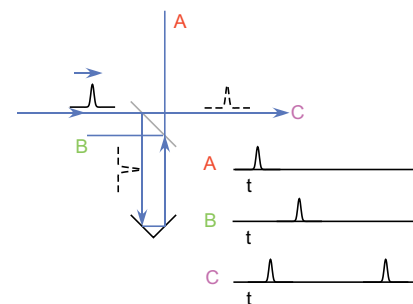


図 2.4: 可動式ミラーを外して替わりに検出器にした場合の信号パターン

<sup>15</sup> 光電子増倍管と呼ばれる高感度の光検出器を使うと、実際に微弱光を光子数として数えられる。

<sup>16</sup> 波が波束で有限の長さを持っているなら、二つの腕の長さの差が長くなっていくと、戻ってきた光が干渉できなくなるはずである。実際、干渉計で二つの腕の長さを変えていくと、だんだんと干渉縞のコントラストが落ちていき、最後には干渉が見られなくなる。どの程度の距離まで干渉が見られるかは光源の特性に依存している。

で一方の腕にのみ進んで行ったような結果を示す。セットアップにより、最初のハーフミラーでの光の別れ方が異なるように見えるのである<sup>17</sup>。

生じてしまったことに対する、直感的な理解が不可能だったとしても、一応は論理的に矛盾が生じないような解釈をして、さらに、整合性のある数学を作ることができる。それがボルンの確率解釈と量子力学の枠組みだ。

### 2.2.2 波動関数のボルンの解釈

ボルンによる確率解釈は1次元系では「ある粒子の波動関数が、ある点  $x$  において  $\Psi(x)$  という値を持つなら、 $x$  と  $x + \Delta x$  の間にその粒子を見いだす確率は  $|\Psi(x)|^2 \Delta x$  に比例する。」と記述できる。これが2次元ならある面積  $\Delta s$ 、3次元なら  $\Delta v$  に見いだす確率とは読み替えればよい。絶対値の記号がついているのは、波動関数は複素数の場合もあるからだ<sup>18</sup>。

なお、 $|\Psi(x)|^2$  は確率ではなく確率密度であることを注意しておく。というのは、これは長さを持たない点における値であり、長さを持たないが故に、その場所において粒子が存在する確率は数学的には0になるのである。確率を考える場合には、有限の幅を持つ領域が必要になる。

### 2.2.3 確率解釈による干渉計の挙動

最初に何の妨害もなく、最初の半透鏡で二つに分かれた光線が末端の鏡で反射して戻ってきて干渉を起こす場合を考える。この時、最初の半透鏡を通過した時点で、波動関数は、振幅が  $1/\sqrt{2}$  の二つの波動関数に分かれるはずである。というのは、それぞれの腕に光がいく確率は  $1/2$  なので、2乗して  $1/2$  になるような振幅になっているはずだからである。

この時に粒子がどちらに行ったのかは誰にもわからない。確率  $1/2$  でどちらかとしきいいようがない。そして、波動関数は末端のミラーで反射して戻ってきて、そして最初の半透鏡のところで干渉を起こす。その結果として半透鏡のあとでは光路長差に依存して、0から1の間の定まった割合である方向の光が出射する。波動関数は両方の腕にいつて戻って来ているように見えるのである。

続いて、光路の途中に検出器を置いて光子を検出する場合を考えてみよう。この場合も、半透鏡の後では、波動関数は両方の腕で  $1/\sqrt{2}$  の振幅で伝わっていく。

<sup>17</sup> 多分、このあたりで、頭が痛くなってくるのではないと思う。そして、それは、まったく正しい反応だ。光子や電子など、波動性を持った状態の振る舞いは、人間の直感的な理解の外にある。人にできることは、それらを実験事実として受け入れることぐらいだ。

<sup>18</sup> 波動関数が複素数となることについては、複素数の意味の再検討も含めて、あらためて説明する



何故なら、半透鏡に到達した時点で、光子は末端に鏡があるのかどうかを知り得ないからである。半透鏡を通過した後は、検出器で光子が検出されるまでは上の話と何ら違いはない。しかし、検出器で光子が検出された瞬間に光子の存在確率は、光子が検出された場所で1となるので、反対側の腕の方に飛んでいたはずの振幅が  $1/\sqrt{2}$  の波動関数の振幅は瞬時に0にならなければならない。このように、粒子が検出された場所で波動関数の絶対値の2乗が1になって、それ以外の場所で瞬時に波動関数が0となるのを「波動関数の収縮」と言う<sup>19</sup>。

常識的には、最初に半透鏡で波動関数が分かれた後は、二つの波動関数は半透鏡で再度合体するまでは、独立に伝播している。従って、一方の腕で生じたことが他方の腕の波動関数に何らかの影響を与えることはないはずである。それ故に、一方の腕の波動関数の値の変化が、もう一方の腕側を伝わっている波動関数の値を変化させるという考えは、感覚的に受け入れがたいものである。半透鏡から腕の末端までの長さは任意にとることができる。思考実験としては<sup>20</sup>、腕の長さを銀河系ほどに長くしても良い。すると、銀河系の一方で生じたことが、もう一方にいたはずの波動関数に瞬時に影響を与えるということになる。これは因果律に反することのように見える<sup>21</sup>。そこで、このような現象のことを「量子テレポーテーション」と呼ぶことがある。特殊相対性理論からは、光速度より早くエネルギーや情報が伝わることはないのだけれど、量子テレポーテーションは、これに反するように見えるのである。

こうしてみると、確率解釈でも、おこっていることの気持ち悪さは波動関数が物質の広がりを表すと考えた場合と変わらない。しかし、確率解釈では波動関数自体は物理的実体としての立場は持ち合わせていない。もし、波動関数を粒子自体の実体と考えるなら、実体を伴った物が、ある瞬間に変化すると考えなければならないけれども、実体を伴わない確率波なら、それが変化しても実体とは別の話なのである。実際問題として、波動関数自体は観測出来る物ではない<sup>22</sup>。また、銀河系ほど離れた腕の一方にいる観測者は、そちらで光子が観測された瞬間に、腕のもう一方での粒子の存在確率が0となることは知っていても、光速以上の速度

<sup>19</sup>干渉計の場合には光が検出されなかった側の波動関数が0になるが、二重スリットの実験の場合には、粒子が観測された点以外の全ての有限の値を持っていたはずの場所の波動関数が0になる。

<sup>20</sup>思考実験とは実際に行う実験ではなく、頭の中である状況を考えた場合の物事の振る舞いを考えるもので、実験では出来ないような極端な条件も考えられるために、特異な状況をあぶり出すことができる

<sup>21</sup>因果律とは、ある原因で結果が生じる場合には、原因が先にあるというルール。信号が光の速度  $c$  以上では伝わらないので、ある場所で生じたことは、 $t$  秒後に  $tc$  以上離れた場所で生じたことの原因にはなり得ない。

<sup>22</sup>波動関数自体は測定できないけれども、電子線ホログラフィー技術で、ある場所での波動関数の位相を可視化することはできる。ただし、それは干渉して実体を伴った画像化によってであり、波動関数そのものを見ている訳ではない。

で、そのことを腕のもう一方にいる人に伝えることはできない。反対側の腕の波動関数が0になったという情報は、光子が観測された腕側の局所的なものでしかない。量子テレポーテーションは相対性理論の要請とは矛盾はしていない。

半透鏡で波動関数が二つに分かれるように見えるのは、干渉が生じる場合で、それ以外の場合には、波動関数は二つに分かれていないかのように振る舞う。例えば、二つの腕の長さを大きく違えて、干渉が起こらないようにすると、戻ってきた光は透過な確率で光源側か出射側で観察されるようになるけれども、この時に光をいれてから観測されるまでの時間を計測すると、腕のどちらかを行って戻ってきた時間に対応する値となり、両方が混ざったような中間の値は出てこない。この時には光はどちらか一方の腕を行って帰っているように見えるのである。腕の距離差をへらしていくと、あるところから、干渉が生じて、二つの腕の両方に光が分かれたとしか思えない状況になっていく<sup>23</sup>。

ボルンの確率解釈は、量子力学が不完全なものだからで、完全な理論ができれば、確率解釈なしに粒子の挙動を記述出来ると信じている人もいた。完全な理論では現在の量子力学に $+\alpha$ の何か(変数)が加わることになるだろうから、そのような完全な理論は隠れた変数理論と呼ばれている。このような考えは量子力学が定式化されて、割とすぐに提案されたが、実験的に検証する手法がなく長らく忘れ去られていた。しかし、近年の技術の発達により隠れた変数が存在する場合と存在しない場合の違いを検証する実験が可能となり、実験が行われた結果、自然もどうなるのか分かっていないことが示された<sup>24</sup>。何度も繰り返すことになるけれども、人間はこの反常識的な自然の姿を受け入れるしかない<sup>25</sup>。

## 2.3 進行波の波動関数

### 2.3.1 自由空間を進む波の波動関数

自由空間を $z$ 軸方向に飛行する波の波動関数を改めてとりあげる。さて、ポテンシャルが一定の場合には、前にも触れたようにポテンシャルエネルギーの基準値はどこにおいても良いことから、0とする。よって、シュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \psi = E\psi \quad (2.12)$$

<sup>23</sup> どの程度の光路差があっても干渉が生じるかは、使っている光源の種類に依存する。

<sup>24</sup> そこから量子情報通信という新しい技術への道が開かれつつある。

<sup>25</sup> ボルンの解釈以外の非正統的な解釈もある。その一つは多元宇宙仮説で、干渉計の実験では、光子が半透鏡をまっすぐ透過した世界と半透鏡で反射した世界が発生し、その世界の間で干渉が生じるというものである。半透鏡だと世界が2つに分かれるだけだけれども、二重スリットの実験を考えると、1回の実験毎に世界が無数に分裂してしまい、確率解釈よりも更に気持ちが悪い状況になる。

であり、前に確かめたように、三角関数がこの方程式の解となっている。

$$\psi = \sin kz \quad (2.13)$$

をシュレディンガー方程式に代入して微分操作を行えば<sup>26</sup>、前にもやったように

$$\frac{k^2 \hbar^2}{2m} \sin kz = E \sin kz \quad (2.14)$$

と、方程式を満足する。この時のエネルギーは

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \quad (2.15)$$

である。エネルギーは、波数  $k$  の2乗に比例して、連続的に変化できる。つまり、自由空間では波の波長にはなんら制限はない。この波動関数から、空間における粒子の存在確率密度に比例する値は

$$|\psi^2| = \sin^2 kz \quad (2.16)$$

と求められる<sup>27</sup>。この関数は自由空間を運動する粒子の空間における存在確率密度が一定でないことを主張している。これは、明らかにおかしい。粒子の速度は一定なので、その粒子を空間のある場所で見つける確率は場所に依存せずに一定であるべきで、量子力学になったからといって、それが崩れる理由がないからである。

唯一空間的に分布がない答は  $\psi = \text{const}$  である。これを自由空間のシュレディンガー方程式に代入すると、微分して0になるので、

$$0 = E\psi \quad (2.17)$$

より、 $E = 0$  なら式が成立する。 $E$  が運動エネルギーであることを思い出すと、これは動いていない粒子に対応するものとなる<sup>28</sup>。

では、0でない運動エネルギーを持ち、空間的に確率密度分布が均一な波を表す数式を作り出すにはどうすればよいだろうか。実は、一つの面内で振動する波だけを考える限りは数式を作り出すのは不可能である。というのは、同じ周期をもつ任意の三角関数は合成して一つの三角関数にまとめることができるからで、その結果として振動のない構造を作り出すことは不可能だからだ。

---

<sup>26</sup>  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  は波数である。

<sup>27</sup> 空間が無限に長いと空間の一点で粒子を見つける確率は0になってしまう。つまり、この式の頭には比例係数として0がかかることになるけれども、それはここでは無視している。

<sup>28</sup> これは、動いていないものが一つの場所にいないことを示しているのだけれども、それについては、少しあとに不確定性関係のところで改めて採り上げることにする。

この困難を解消するためには、波の進行方向に垂直な、もう一つの座標軸を導入する必要がある。具体的には最初の波の振動面に垂直な方向に2番目の軸を取り、そちら側にも振動する波を考える。最初の軸を  $x$  軸、2番目の軸を  $y$  軸とおき、それぞれの軸への波の射影成分が

$$\begin{aligned} x &= \sin z \\ y &= \cos z \end{aligned} \quad (2.18)$$

である波を考える。 $x$  軸と  $y$  軸で位相が90度ずれた波で、これを図示すると図2.5のように、らせんを描く波となる。この

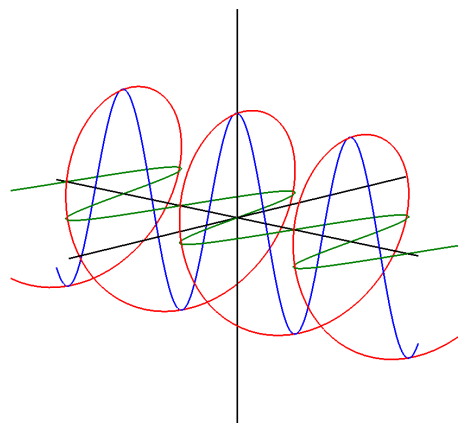


図 2.5: らせんを描いて進む波。  $z$  軸からの距離は一定となる。

時の波の振幅は、 $z$  軸から、らせんまでの距離になるから、 $z$  座標の値によらず

$$|\psi|^2 = x^2 + y^2 = \sin^2 z + \cos^2 z = 1 = \text{const} \quad (2.19)$$

であり、場所に依存せず一定となる。

これなら、空間を進行する波として文句はない。しかしながら、その代償として2変数関数になってしまっている。これは、大きな問題だ。そもそも、 $x$  軸と  $y$  軸の関数は数学的には独立なので、それで同一の粒子の運動をあらわそうとするのには本質的な困難がある。

### 2.3.2 2元数

二つの変数を用いることの困難を解消するために、数の拡張を行う。数の拡張は、算数や数学を習ってきた範囲でも何回も行われてきたことだ。まず、最初に習ったのは自然数のはずである。それから、0が加わって、負の数に加わり、そして有理数が加わりさらに無理数が加わってきている。そこで行われたのは基本的には数直線の穴を埋めていく作業である。つまり、1次元の線の範囲で数の拡張が行われてきたのである。それに対して、ここでは数を数直線から「数平面」に拡張する。別の言い方をすると、 $xy$  座標で表されるような領域の任意の点を一つの数として扱う手法の導入である。

拡張された数の表記法として、 $(a, b)$  のように二つの要素をかつこでくくった書き方を用いることにする。なにしろ、二つの直交した軸方向の成分を持つので、2つの要素が数の指定に必要な（それ故に2元数と呼ばれる）。さて、2元数であるけれども、このような書き方をすると、ベクトルのように思えるかもしれな

い。確かに、似たところはあるのだけれど、違うところもある。それは、数に対する計算規則である。

普通の1次元の数直線上の実数を考えると、数は足し算・かけ算・引き算・割り算の四則演算ができ、それから、 $a \times b = b \times a$  のような交換則や  $a(b + c) = ab + bc$  のような分配則も成立する。これから考える2元数でも四則演算ができ、さらに交換則や分配則が成立することとしよう。

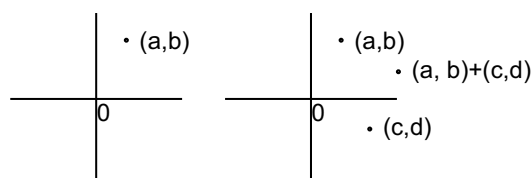


図 2.6: 2元数で表される数平面と足し算

2元数  $(a, b)$  を表記するにあたって、混乱を避けるために、 $a, b$  等の文字は全て正の値とし、負の数を示す時にはマイナス符号を頭につけるものとする。 $a, b$  の範囲は無理数も含んだ実数とする。

2元数の加法を

$$(a, b) + (c, d) = (a + c, b + d) \quad (2.20)$$

と定義すると、個々の要素に関しては  $a + b = b + a$  のように交換則が成立しているので、

$$(a, b) + (c, d) = (c, d) + (a, b) \quad (2.21)$$

は問題なく成立する。加法の単位元は  $(0, 0)$  であり、 $(a, b)$  の逆元は  $(-a, -b)$  となる。これは、ベクトルの加減算とまったく同じだ。

続いて乗法を考える。2元数は普通の数直線を拡張したものなので、2つめの要素が0である場合には、計算規則は普通の数計算と同一でなければならない。これより

$$\begin{aligned} (a, 0) \times (b, 0) &= (ab, 0) \\ (-a, 0) \times (b, 0) &= (-ab, 0) \end{aligned} \quad (2.22)$$

となる。ある数  $b$  を乗じることは、原点からの距離を  $b$  倍することに対応する。このルールが一2つめの要素に対する掛け算にも成立するとするならば

$$\begin{aligned} (0, 1) \times (a, 0) &= (0, a) \\ (0, b) \times (a, 0) &= (0, ba) \end{aligned} \quad (2.23)$$

となる。

さて、2元数の乗法でも交換則が成立するとしているので、2つめの要素に1つめの要素を掛けた式にそれを使って順番を入れ替えても計算結果は変わらないことになる。よって、

$$\begin{aligned}(a, 0) \times (0, 1) &= (0, 1) \times (a, 0) = (0, a) \\ (a, 0) \times (0, b) &= (0, b) \times (a, 0) = (0, ba)\end{aligned}\tag{2.24}$$

である。この計算結果は、1番目の数  $a$  に2番目の数の1をかけると、2次元平面で数の方向が反時計回りに90度回転することを意味している。さらに、2番目の式はより一般的に1番目の数  $a$  に2番目の数  $b$  をかけると、最初の数  $a$  の方向を90度回転した上で、原点からの距離を  $b$  倍することを意味している。

かけ算をすると数の方向が90度回転するなんていう数学は、これまで（明示的には）聞いたこともないかもしれない。でも数学は、その体系の中で論理矛盾がなければ良い世界なので、このような計算規則で問題が生じないかを、他の場合について検討してみる。

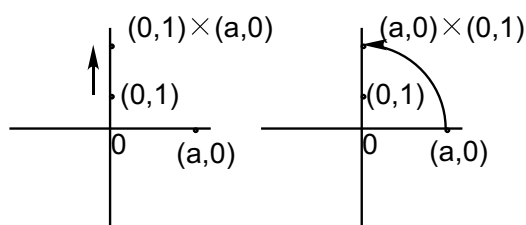


図 2.7: 2元数の掛け算

2番目の数をかけると90度反時計回りに回転するというルールが2番目の数どおしの掛け算や負の数に対する掛け算にも適用すると、

$$\begin{aligned}(0, 1) \times (0, 1) &= (-1, 0) \\ (-1, 0) \times (0, 1) &= (0, -1) \\ (0, -1) \times (0, 1) &= (1, 0)\end{aligned}\tag{2.25}$$

となる。2元数の乗法規則を一般的に記せば

$$(a, b) \times (c, d) = (ac - bd, ad + bc)\tag{2.26}$$

となる。乗法の単位元は

$$(a, b) \times (1, 0) = (a, b)\tag{2.27}$$

なので、 $(1, 0)$  である。よって逆元も計算可能で

$$(a, b) \times (c, d) = (ac - bd, ad + bc) = (1, 0)\tag{2.28}$$

となる  $(c, d)$  をもとめればよい。

$$\begin{aligned} ac - bd &= 1 \\ ad + bc &= 0 \end{aligned} \tag{2.29}$$

を  $c$  と  $d$  について解けば、結果は

$$\begin{aligned} c &= \frac{a}{a^2 + b^2} \\ d &= \frac{-b}{a^2 + b^2} \end{aligned} \tag{2.30}$$

で、 $(a, b)$  の逆元は  $(a/(a^2 + b^2), -b/(a^2 + b^2))$  と定まる。乗法の逆元が定義できるということは、除法も定義できる。これがベクトルの算法とは大きく異なるところである<sup>29</sup>。

## 2 元数の二番目の表記法

2 元数の 2 番目の項の 2 乗が  $(0, 1) \times (0, 1) = (-1, 0)$  となることから、 $(0, 1) = i$  であることが認識できる。いままでベクトル風に 2 元数を表記して行ってきた計算は、虚数単位  $i$  を使えば

$$\begin{aligned} (a + bi) + (c + di) &= (c + di) + (a + bi) = (a + b) + (c + d)i \\ (a + bi)(c + di) &= (c + di)(a + bi) = (ac - bd) + (ad + bc)i \end{aligned} \tag{2.31}$$

と表記できる。複素数の足し算と掛け算の一般的な式である。

$(0, 1)$  を虚数単位  $i$  としてではなく、2 元数の第 2 の要素として導入したのは、 $i$  の本性は 2 乗すると  $-1$  になるような現実に存在しない数ではなく、数平面において、今までの数直線の方に垂直に伸びる数直線の基本単位として 1 と同等な立場で出て来る数であることを強調したかったからである。

波動関数が複素数で表記されることに関して、「実際の粒子を記述するのになんで想像上の数である虚数を使うのか」という質問がよくやってくる。2 元数という視点からそれに対して答えるなら「複素数は 2 次元的な振動面を持つ波を表現するために拡張された数の表現形式であって、それで表現される波は決して想像上のものではなくらせん状の振動として描けるものである<sup>30</sup>。」という答えになる。

<sup>29</sup>ベクトル同士の掛け算は、内積とか外積とかあるけれども、普通の意味の掛け算ではないよね。ましてや、ベクトル同士の割り算なんて考えたこともないと思う

<sup>30</sup>とは記したけれども、確率波としての波動関数は直接測定できるようなものではないので、実際にらせん状になっているのかは分からない。でも、複素数を使うと数学的にきちんと取り扱える。

2元数として複素数を導入した理由をお話したところで、複素数の計算について、もう少し考えてみることにしよう。複素数を  $(a, b)$  と表記した場合の掛け算のルールから、 $i$  をかけるということは、かけられた数の方向を原点から反時計回りに90度回転することと理解される。さらに、 $-1 = i \times i$  なので、ある数に負の符号の数をかけることは、その数を原点回りに180度(90度を2回)回転する操作となる。1次元の数直線上だけで考えると、原点回りの180度回転は原点を挟んでの反転と等価で両者の区別はつかないけれど、数平面で考えると、 $a + bi \times -1 = -a - bi$  という計算を180度回転と解釈することは、 $a, b$  の値によらず一般的に成立するのに対して、反転では反転軸の方向が  $a, b$  に依存することになる。より一般性が高いのは180度回転する考え方だ。

同様に、 $-i$  をかけることは、 $a \times -i = a \times -1 \times i$  であるので、これは  $a$  を180度回して、それから反時計回りに90度回すという操作となる。180度の回転は時計回りでも反時計回りでも同じなので、それからすると、270度反時計回りに回す、もしくは90度時計回りに回すと言うことができる。

以上のことを、改めて整理してみよう。今、 $a$  を正の数とする。この時、もう一つの数  $b$  に対して  $a$  をかける事は、原点に対する  $b$  の方向は変えずに、大きさを  $a$  倍することを意味する。 $b$  に対して  $ai$  をかけるというのは、 $b$  の方向を反時計回りに90度回転して  $a$  倍する。 $-a$  をかけるのは、 $b$  の方向を180度回転して  $a$  倍する。 $-ai$  をかけることは、 $b$  の方向を反時計回りに270度回転して  $a$  倍するという操作を意味する。

## 2元数の3番目の表記方法

平面極座標を使うと、ある数  $A = (a + a'i)$  に別の数  $B = (b + b'i)$  をかける操作をより簡便に行うことができる。

$$\begin{aligned} A &= \alpha \cos \theta + \alpha i \sin \theta = \alpha(\cos \theta + i \sin \theta) \\ B &= \beta \cos \theta' + \beta i \sin \theta' = \beta(\cos \theta' + i \sin \theta') \end{aligned} \quad (2.32)$$

ただし、 $\alpha = \sqrt{a^2 + a'^2}$  と  $\beta = \sqrt{b^2 + b'^2}$  は両方の数の原点からの距離とすると、両者のかけ算は

$$\begin{aligned} &\alpha(\cos \theta + i \sin \theta)\beta(\cos \theta' + i \sin \theta') \\ &= \alpha\beta((\cos \theta \cos \theta' - \sin \theta \sin \theta') + i(\cos \theta \sin \theta' + \sin \theta \cos \theta')) \\ &= \alpha\beta(\cos(\theta + \theta') + i \sin(\theta + \theta')) \end{aligned} \quad (2.33)$$

となる。ここで

$$e^{\pm i\theta} = \cos \theta \pm i \sin \theta \quad (2.34)$$



を思い出すと<sup>31</sup>、上の計算は

$$\alpha e^{i\theta} \times \beta e^{i\theta'} = \alpha\beta e^{i(\theta+\theta')} \quad (2.35)$$

となる。つまり、係数のかかった指数の掛け合わせのルールで、2元数のかけ算は実行できる。そして、上の式は、数平面でのかけ算では、かけられる数の原点からの距離をかける数の原点からの距離倍した上で、かける数の角度分だけ回転する操作であることを示している。

ここまで  $i$  を掛けることは 90 度の反時計回り、 $-1$  を掛けるのは 180 度回転だと説明してきたけれども、もっと一般的に実軸から  $\theta$  の方向にかかる数を掛けるということは、掛けられる数を  $\theta$  回転することなのである。掛け算の単位元は 1 で、

$$\alpha e^{i\theta} \times \frac{1}{\alpha} e^{-i\theta} = 1 \quad (2.36)$$

であるから、逆元は極めてシンプルに求められる。

2元数の上には4元数や8元数という数がある。4元数は、ハミルトンという数理論理学者により見いだされ、現在ではコンピュータの3Dグラフィックスでよく使われている。というのは4元数は3次元空間での回転操作を簡単に表記・計算できるという特徴をもっている。4元数では1つの実数単位の外、3つの虚数単位がでてくる。また、素粒子を扱う超弦理論でも4元数や8元数は超弦理論などで使われている（らしい）<sup>32</sup>

<sup>31</sup> 思い出せない人や、見たことがなかった人は、付録 A を参照のこと。

<sup>32</sup> 2012 年の授業では、この後、「考え方の枠組み」に関係する話をした。2013 年は行っておらず、2014 年以降はどうか未定。以下の脚注は使うか分からない考え方の枠組みメモ

- 複素数について 2 元数という見せ方をしたのは、物事を理解するのに使う枠組みによって、目の前にある事柄の意味合いが違うことを示したかったから。複素数として波動関数を考えると、直感的に考えることが困難だけれども、2 元数という言い方をすると、らせん状に進む波という、リアルなイメージを持ちやすくなる。
- 枠組みが変わると見え方が変わることに限っては、前回の初めに行った、放送事故ごっこも一つの例。調整室では、マイク関連のトラブルと判断したけれども、私の性分を知っている人がいたら、マイクのトラブルではなく、本人が口パクをやっていると考えただろうと思う。それによって対処の仕方も大きく違う。(2013 年以降の注：2012 年には、何回目かの授業の初めの時に、声を出さずにしゃべるふりをして、マイクにトラブルがある（かもしれない）状況をつくって、遊んでいた。放送を担当する人は、かなり焦ったようだが、学生さんには受けなかった。)
- 前回の口パクはしょうもないいたずらであるけれども、実は研究をやっていると目の前に見えている現象をどのような枠組みでとらえるかによって、その先が大きく異なってしまうことがしばしば起こる。
- こんな話をしている理由は、知識だけでなく考え方も、学んだだけでは使えない実例を知ったから。岡山の SSH を見学したときに、きちんと習ったはずの、実験条件の統制が課題研究ではできていなかった。

### 2.3.3 進行波の波動関数

随分と長い寄り道をしてしまったが、数学的な準備ができたので、進行波の波動関数に話を戻すことにしよう。

先ほどは  $x = \cos \theta, y = \sin \theta$  という具合に  $x$  と  $y$  という独立な座標を使って書き表したらせん状の波は、複素数（2元数）を用いれば、一つの数として  $\psi = \cos \theta + i \sin \theta$  と表記できる。さらに、オイラーの式を使えば、さらにすっきりと書き表すことができる。

実際にこの関数をシュレディンガー方程式に代入してみると  $\frac{d^2}{dz^2} e^{ikz} = -k^2 e^{ikz}$

- 
- 日本の教育は知識重視で、考えることが弱いと言われていて、そのための方策なども提言されているけれども、上の経験からすると、考えることについても、限られた範囲で考え方を適用することと、より広い範囲で考え方を適用することは違う。
  - 余談になるけれども、大学時代に教わったことで覚えていることの一つに（社会心理学だった）、「水平思考」という話が流行ったことがあり、それは、有る事柄に対して、事なった視点から考えるという話で、一頃は、企業も「水平思考」の講師を呼んで講演してもらうのが流行ったらしい。すると、そのすぐ後は、新しいアイデアが出て来るけれども、そのうちに元のレベルに戻るといふ。講師が教えられたのは、いくつかの新しい考え方のパターンで、新しい考え方を作り出す方法ではなかったという落ち。
  - 現在問題になっている、考え方の育成は、どうしても、狭い範囲の話になっていて、課題研究などでの考え方の枠組みの構築の話にはつながらない印象がある。理科離れが言われて、科学教室が盛んに行われるようになってはいるけれども、日本の理科教育の問題は、小学校での理科好きが中学から高校で理科の内容が抽象化するとついて行けなくなるところにあるような印象があり、押さえるポイントをもっと考え直す必要があるだろう。
  - 個人的偏見の範囲では、教育学で、広い意味での考え方の枠組みについての学習法に関する定まった考え方はない。実は、この問題は、人工知能における「フレーム問題」に関係している気がする。
  - 一方、米国の大学の物理教育の現場では「フェルミ問題」と言われる見積もり問題が、使われているような印象がある。フェルミはイタリア生まれの物理学者で、理論・実験の両面で卓越した業績を残した人だ。彼は米国に亡命後にシカゴ大学の先生となったけれど、物理の授業で「シカゴ市にいるピアノ調律師の数を求める」といった問題を扱っている。この問題を考えるのには、シカゴ市内の人口から世帯数を概算し、その上で、ピアノの所持率を仮定し、さらにピアノの調律間隔を推定して、それから、ピアノ調律にかかる時間から、何人の調律師が必要かを推定していくような流れになる。一見、物理とはまったく関係ない話であるが、実は、そこで使われている頭の流れは、物理（に限らず科学の）問題を解くときにも行われるようなプロセスになっている。（2013年注：フェルミ問題系は、グーグルが採用試験で行っていたこともあり、結構話題となり、日本の会社でも面接で行う所もあるらしいけれど、2013年になって、グーグルが「奇問は面接担当者の自己満足」で、それによって人を採用することに関して「効果は全くなかった」と言い出したらしい。なので、このあたりをどう扱うか、いまのところ未定）
  - 当初はゲーデルの不完全性定理の話に持ち込むことを考えていたけれど、それは、やらないことにする。不完全性定理と不確定性原理は20世紀前半に知識人にインパクトを与えた2つの重要な話であり、それらを同じ時期に出すのは悪いことではないのだけれど。

より

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi = E\psi \quad (2.37)$$

と、 $\sin kz$  の場合と同じエネルギーがもとめられる。一方、存在確率密度は、複素数の絶対値の2乗は、複素共役を掛ければよいので、

$$|\psi|^2 = e^{ikz} e^{-ikz} = e^0 \quad (2.38)$$

と、定数となり、等速直線運動をする粒子の波動関数として物理的にも大丈夫なものであることが分かる。

## 2.4 波動関数の規格化

ある関数  $\Psi(x)$  がシュレディンガー方程式の解になるのなら、その関数を定数倍した  $N\Psi(x)$  もシュレディンガー方程式の解になる。シュレディンガー方程式では数学的に定数を定めるすべはないのである。しかし、波動関数の絶対値の2乗が確率密度を表すなら、定数は一意的に定められる。

今一次元上に1個の粒子が存在する場合を考えよう。区間  $-\infty$  から  $\infty$  の間で粒子を発見する確率は1である。従って、

$$\int_{-\infty}^{\infty} |N\Psi(x)|^2 dx = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x) dx \equiv 1 \quad (2.39)$$

$$N = \frac{1}{\sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x) dx}} \quad (2.40)$$

である。このようにして定数を定めた波動関数を「規格化した波動関数」と呼ぶ。

ここで、実際に規格化操作を行ってみるが、これまで出てきている進行波の波動関数は定義域が全空間なので規格化しようとすると、規格化因子が0になってしまう<sup>33</sup>。そこで、空間のある領域に閉じ込められた波を使って規格化操作を行う。

今、自由空間の波がある領域内に閉じ込められているとする。閉じ込められた状態で波は定常波となり、両末端は自由端か固定端のいずれかになる。自由端の波と固定端の波を2乗と共に描くと図2.8となる。

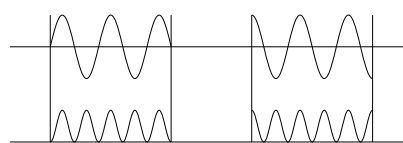


図 2.8: 固定端（右）と自由端（左）の定常波

<sup>33</sup>物理的には全宇宙のどこかにいる粒子を、今、ここで見つける確率は0ということに対応する。

閉じ込められている空間の長さを  $L$  とすると、さらっと眺める限りで積分は  $L/2$  になるので<sup>34</sup>、これより、

$$N = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (2.41)$$

と規格化因子を求める事ができる<sup>35</sup>。

### 2.4.1 波動関数の規格化が必要な場合と不必要な場合

ここまでの、いくつかの計算結果から分かるように、規格化されていない波動関数でも、その波動関数の状態に対応するエネルギーを正確に求められる。波動関数が左右両辺で相殺するので、波動関数を定数倍する項があっても、それも相殺されてしまうのである。これと同様に（後に出て来る手法で）運動量などの値を求める場合には、波動関数は規格化されていなくても問題ない。

これに対して、存在確率に関する情報が関与する場合には、規格化した波動関数を用いないと正しい結果が得られない。例えば、粒子がある領域に存在する確率を求める場合には、全空間で絶対値の2乗を積分して1になるものでなければ、正しい値が出てこない。シュレディンガー方程式を使って分子の永久双極子を求める時には（これは、原子核を固定して、電子の波動関数を求めれば計算できる）規格化した波動関数を使わないと正しい値にならないのだ。

また、（そのうちに出て来るけれど）複数の波動関数が混ざった状態を扱う時には、混ぜるのに使う波動関数が規格化されていないと、それぞれの波動関数の重み付け因子が意味が無くなるので規格化したものを用いる必要がある。

<sup>34</sup>本当は積分をしきちんとやらなければならないのだけれど、ここは手を抜いている。

<sup>35</sup>教科書では、規格化した波動関数を示すのに  $\int \psi^* \psi d\tau = 1$  のように積分変数として  $\tau$  を用いているが、これは、座標系や次元によらない積分を示すために用いられている。その説明のために2次元系を考えてみよう。2次元面内に存在する粒子に関しては、積分範囲は面になるので、波動関数が規格化されているなら  $\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx dy = 1$  が成立する。ここで、引力で太陽の周りを回転する惑星のような運動を考えると、この運動を記述するには、通常の直交座標系よりも極座標系の方が都合が良い。通常の座標と極座標は  $x = r \cos \phi$ 、 $y = r \sin \phi$  で結ばれる。 $r$  の定義域は0から $\infty$ 、 $\phi$  の定義域は  $0 \sim 2\pi$  である。この座標系においては、上式に対応する積分は  $\int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \psi^* \psi r dr d\phi = 1$  最後に出てきた余計な  $r$  は、原点から  $r$  離れた距離では、 $\Delta \phi$  の方位角変化に対応する周長変化が  $r \Delta \phi$  であることから出現している。この例のように、座標系により積分範囲も、式の形も異なるのだけれど、積分範囲を明示せずに、 $\tau$  を用いれば、これらを気にしないでとりあえずの表記が可能となる。

## 2.5 波動関数に対する物理的な制限

波動関数の絶対値の2乗がある点における粒子の存在確率密度を与えるというのは、物理的な要請であり、それに反する関数は、たとえシュレディンガー方程式の数学的な解であったとしても、実世界の波動関数とはなりえない。物理的要請から波動関数に科せられる制限には次の4つがある。

1. 波動関数は、有限の領域で絶対値が無限大になってはいけない
2. 波動関数は一価の関数でなければならない
3. 波動関数は連続した関数でなければならない
4. 波動関数はなめらかな関数でなければならない

最初の条件は、波動関数の絶対値の2乗が確率密度であることから来ている。有限の範囲で絶対値が無限大になると規格化ができなくなる<sup>36</sup>。

二番目の条件である一価という言葉はある与えられた $x$ の値に対して $\psi(x)$ が一つの値を返す関数であるという意味である。これは、波動関数の絶対値の2乗が確率密度を表しており、もし、ある $x$ に対して2つ以上の波動関数値があると、その点での存在確率密度を定義できなくなることから出ている。

三番目と四番目の条件は、シュレディンガー方程式が2階の微分方程式であるために、解を持つためにはなめらかで連続した関数であるという必然から説明することは可能である。物理的には、波は連続であるべきものだから、不連続な波を考えることは困難であるし、なめらかでない波というのも普通は考えられない<sup>37</sup>。

## 2.6 量子力学的原理

### 2.6.1 波動関数に含まれる情報

ここまでで、波動関数という概念と、それを求めるためのシュレディンガー方程式という枠組みが呈示された。では、ある物質について、シュレディンガー方程

---

<sup>36</sup>教科書のコメントにもあるとおり、ある一点でのみ無限大で、それ以外の場所では値が0の関数（ディラックの $\delta$ 関数）は有限の値に規格化できるので、これは波動関数となりうる。ただし、それはこの授業の範囲内では明示的には出てこない

<sup>37</sup>古典的にも波がなめらかでない状況が出現する場合はある。それは、固定端による反射である。固定端の反対側の波の振幅が0であるとする、固定端で波は連続だが、なめらかではない。これに対応する状況は量子力学では無限大のポテンシャルが存在する場合に出現する。その例は次の章で現れる

式を解いて波動関数を求めると、エネルギーが、そして波動関数の全体値の2乗から、空間のある点における粒子の存在確率密度が分かるという話をしてきた。では、それ以外には何が分かるのだろうか。

原理的には系のすべてが求められる。そもそもシュレディンガー方程式を解いて波動関数を求めるということは、ある与えられたポテンシャル条件下で粒子が存在できる関数型を求めることである。通常は波というと、三角関数になってしまうけれども、例えばバネで固定された粒子を考えると、平衡位置を中心にその回りで振動運動している。従って空間的には無限に続く三角関数ではなく、有限の範囲に収まる形状の関数になっているはずである。水素原子も同じで、クーロンポテンシャルのもとで原子核の回りに閉じ込められた電子の波動関数は決して単純な三角関数にはなっていない。

あるポテンシャル（境界条件）下でシュレディンガー方程式を解く数学的な方法はよく研究されている。前にも述べたように、この授業では、その数学的過程に深入りすることなく、その結果を扱うことに注力する。

求めた波動関数（規格化されている必要はない）を再びシュレディンガー方程式に代入することにより、これまでもいくつかの例で示したようにエネルギーが求められる。シュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V(x)\psi = E\psi$$

であるが、これを

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi = E\psi$$

と記すと、 $\psi$  という関数に微分演算とポテンシャルをかけると  $\psi$  に定数をかけた物になるという形になっている。この大きな括弧をまとめて「演算子」と呼ぶことにする。すると、これは

$$(\text{演算子})(\text{関数}) = \text{定数} \times ((\text{同じ}) \text{関数}) \quad (2.42)$$

という形式になっている。ここで、この関数を、この演算子の固有関数、定数を固有値と呼ぶ。前に示したように、シュレディンガー方程式で使われている演算子部分を波動関数に作用させると、その波動関数のエネルギーが定数として頭に出て来る。この演算子はエネルギー演算子または、ハミルトニアンと呼ばれるもので、時には  $H$  と記される。この書き方を使うとシュレディンガー方程式は

$$H\psi = E\psi \quad (2.43)$$

と一見シンプルになる。何でこんな事でその粒子のエネルギーと波動関数が求まるのかというと、微分の部分から運動エネルギーが、そして、ポテンシャルの所からポテンシャルエネルギーが出て来るからである。波動関数にハミルトニアン演算子を作用させると、もとの関数にエネルギーが定数としてかかったものが出て来るようにハミルトニアンが作られているのである。

## 2.6.2 エネルギー以外の値を求める

ハミルトニアンを波動関数に作用させると、固有値としてエネルギーが求まる。では、それ以外の情報はどのようにして得られるかというと、ハミルトニアンと同様に、波動関数に作用させると固有値として、ある情報が得られるような関数を用意してやればよいだろうという気分になれる。

たとえば、運動量は  $k\hbar$  で与えられるので、波動関数に作用させると、この値が定数としてくり出されるような関数を考えればよい。自由空間の波  $\psi = e^{ikx}$  について考えると、 $\psi' = ike^{ikx}$  なので、これより

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (2.44)$$

という関数操作を考えると

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{ikx} = \frac{\hbar}{i} ike^{ikx} = k\hbar\psi = p\psi \quad (2.45)$$

とこの操作により左辺は定数×波動関数となるので、運動量の値として  $k\hbar$  が出て来る。そこで、これに運動量演算子という名前をつけることにする<sup>3839</sup>。

<sup>38</sup> これ以外に教科書には位置演算子が出て来るのだけれども、この位置演算子は普通の関数で固有関数となるものがなく、混乱を引き起こすだけなので、ここでは省いている。

<sup>39</sup> もし、手元に規格化された波動関数があるなら、  
 $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H \psi dx$   
 という計算でエネルギーが求められる。ただし、 $\psi^*$ は波動関数の複素共役を示す。何故なら、波動関数にハミルトニアンを作用するとエネルギー値×波動関数になるので、  
 $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* E \psi dx = E \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = E$   
 となるからである。エネルギーは定数なので、積分の外側に出すことができる。そして、波動関数が規格化されているので、積分値は1になる。波動関数が規格化されていないと積分が1にならないので正しいエネルギー値にはならない。

この場では、このような計算をすることの意味は分からないと思う。しかし、少し後に複数の波が混ざった状態での期待値を求める時に、この計算手法は非常に有効になる。その時には、改めてこの計算のやり方のことにふれることになると思う。

### 2.6.3 エルミート演算子

ハミルトニアン演算子では、固有値が実数である必要がある。何故なら、エネルギーは物理的に実数値であるべき（単一の数であるから、2元数、即ち複素数ではなく、数直線上に現される1元数である）だからである。また、異なるエネルギーの値（固有値）となる波動関数は、関数として直交していることが知られている。

関数が直交していると言われてもイメージはわからないかもしれないけれど、ベクトルの内積の延長みたいなもので、二つの関数を掛け合わせたものを定義域全体にわたって積分したときに、積分値が0になる場合に、二つの関数は直交しているという。具体例を挙げるなら、二つの進行波の波動関数  $\psi = e^{ikx}$  と  $\psi' = e^{ik'x}$  において、 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} e^{ik'x} dx$  が  $k = k'$  の場合のみ有限になり、異なる場合には0となるので、異なる周期の三角関数は直交していることになる<sup>40</sup>。このことは後ほどの重ね合わせのところの計算で活用される。

固有値が実数になり、また、異なる固有値を与える関数が直交するようになる演算子を「エルミート演算子」と呼ぶ。アルファベット表記だと「Hermitian operator」なのだけれど、エルミートさんはフランス人らしく、最初のHは発音しない。量子力学ではハミルトニアン以外にも、いくつかの演算子が出て来るけれども、いずれもエルミート演算子であることが知られている。

## 2.7 重ね合わせと期待値

続いて、 $\psi = \cos kx$  に運動量演算子を作用させることを考える。すると、

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \cos kx = \frac{\hbar}{i} - k \sin kx = p \cos kx \quad (2.46)$$

となってしまう、式が成立しなくなる。そもそも、左辺と右辺で関数の形が変わってしまっているから、相殺すらできない。この関数は運動量演算子の固有関数ではないのである。これは、物理的には三角関数の波動関数では、運動量が一定の値にならないことを意味している<sup>41</sup>。

これは、物理的には三角関数の波が定常波であることに由来する。ご存じのように、定常波は逆方向に進行する二つの進行波の重ね合わせで出現する。

$$\cos kx = \frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2} \quad (2.47)$$

<sup>40</sup>  $\psi$  の関数が  $e^{ikx}$  ではなく  $e^{-ikx}$  となっているのは、複素共役 ( $a+ib \rightarrow a-ib$ ) をとっているため

<sup>41</sup> もちろん、バネの運動の波動関数として示したガウス型関数も運動量演算子の固有関数ではない。



で、先ほど確認したように、足しあわせの第1成分は  $k\hbar$  という運動量を持つ成分で、2番目は容易に確かめられるように  $-k\hbar$  という、大きさは同じで符号が逆の運動量を持つ成分となっている。このため、何らかの方法で定常波状態で表される粒子の運動量の測定を行うと、 $+k\hbar$  か  $-k\hbar$  のいずれかの値が測定値として出て来る。では、その割合はというと、今の場合は1対1になることは直感的に明らかだろうと思う。

より一般的に、規格化された波動関数  $\psi$  を考える。 $\psi$  自体は  $\sin kx$  と同様に、運動量演算子の固有関数ではないけれども、運動量演算子の固有関数である  $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n$  (いずれも規格化された波動関数) の和として

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + \dots + c_n\phi_n \quad (2.48)$$

と表記出来る物としよう。この時  $\psi$  は規格化されているので、 $c_1^2 + c_2^2 + \dots + c_n^2 = 1$  となる。ここで、少し前にやった積分でエネルギー固有値を求める式を転用して

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* P \psi dx &= \\ \int_{-\infty}^{\infty} (c_1\phi_1^* + c_2\phi_2^* + \dots + c_n\phi_n^*) P (c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + \dots + c_n\phi_n) dx &= \\ \int_{-\infty}^{\infty} (c_1\phi_1^* + c_2\phi_2^* + \dots + c_n\phi_n^*) (c_1P_1\phi_1 + c_2P_2\phi_2 + \dots + c_nP_n\phi_n) dx &= \\ \int_{-\infty}^{\infty} (c_1^2P_1\phi_1^*\phi_1 + c_2^2P_2\phi_2^*\phi_2 + \dots + c_n^2P_n\phi_n^*\phi_n) + (CrossTerm) dx &= \\ c_1^2P_1 + c_2^2P_2 + \dots + c_n^2P_n \end{aligned} \quad (2.49)$$

となる。クロスタームはエルミート演算子の性質から個々の波動関数が直交しているので積分の結果0になるので計算結果に影響しない。

最後の式はそれぞれの波動関数から計算される値に、その値を取る確率を掛け合わせたものの和になっており、期待値を求める式そのものになっている。

## 2.8 波の足しあわせ

### 2.8.1 フーリエ展開

前節より運動量が単体では計算できない任意の波形の波動関数でも、運動量演算子の固有関数の和に分解出来れば、運動量の期待値が計算できることが分かった。しかし、運動量演算子の固有関数となりそうなのは  $e^{ikx}$  しか思い当たる物がなく、それを分解の目標にせざるをえない。そこまで一気に分解を進めるのは、直

感的に困難そうなので、ここでは、間に三角関数をはさむことにする。一度三角関数に分解できれば、三角関数は容易に  $e^{ikx}$  に持ち込めるので、最終目標に到達できる。

さて、ある関数が無限回微分可能なら、マクローリン展開（もう一寸一般的にはテイラー展開）で、べき関数の和に分解できる。べき関数が周期性を持たない関数であるのに対して、三角関数はご存じのように、周期関数であるけれども、その三角関数がマクローリン展開によって、非周期関数の和で記述できるからには、その逆も可能性としては否定できなような気分になる。とはいえ、最初から非周期関数を三角関数で展開するのは、困難なので、まずは周期関数を三角関数で展開するところから話を始めることにしよう。

その一つの例として、矩形波を<sup>42</sup>三角関数の和に分解することを考えてみる<sup>43</sup>。この分解は、フーリエ展開として知られた手法により実現出来る。矩形波の場合は、まず、最初に同じ周期の三角関数波を当てはめる（図として、真中が矩形波より上下に出っ張るようにしておく）。これでは、真中が出ていて、両側の値が足りていない。そこで、これを補正するために波長が  $1/3$  の波を足しあわせることにしよう。そして、次は  $1/5$ 。波長でいうと  $1/(2n-1)$  倍になっていくけれども、波数で考えれば、単純に  $(2n-1)$  倍になっていくので、そちらの方が筋がよいので、以後、波数で示すことにすると、とにかく、補正に必要な波数はもとの波数  $k_0$  の  $(2n+1)$  倍になりそうで、これを最終的には  $n=\infty$  まで足しあわせればよい。矩形波の一般式は

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{(2n-1)\pi} \sin((2n-1)x) \quad (2.50)$$

となる<sup>44</sup>。

本当にこれでいいのかは、実際に計算をしてみればよい。大昔は、これを手計算しなければならなかったけれど、現在ではコンピュータという便利な物がある。とはいえ、便利なものはそれなりに習熟しないと使えない<sup>4546</sup>。とはいえ、最初か

<sup>42</sup>実際に矩形波の波動関数があるかと言われると、あんまりない気がする。だいたい、矩形波は、なめらかな曲線ではないので、波動関数としての要請を満たしていないのだ。でも、ここでは、それに目をつぶってもらって、とにかく先に進ませてほしい

<sup>43</sup>えっと、運動量の期待値は計算するまでもなく 0 である。だって、どう見ても定常波のなれの果てなのだから…、でも、まあ、それも無視してつきあってほしい

<sup>44</sup>ついでに三角波のフーリエ展開は  $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{8}{\pi n^2} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \sin(nx)$  となる。

<sup>45</sup>コンピュータの活用というと SNS やインターネットでの調べ物が標準的な活用法になっているかのような印象があるけれども、やはりプログラマ的なことやらないと本当にコンピュータを活用しているとはいいたげだろうと思う。プログラムというのは、ある論理に従って行う計算を、アホな機械にも分かるような形で翻訳して渡す作業で、これをやることにより、自分のやろうとしていることを論理的に分解する修練となる。これは、単にプログラムだけでなく、実験計画を立てるにも、人に何かを説明するときにも非常に有効な技術の訓練になっている。

<sup>46</sup>だいぶ前にアメリカから来たポスドクさんに聞いた話（現在 40 才ぐらい）では、彼が学部

ら、わけの分からない高度なものを使う必要はなく、とりあえず、そこら辺に転がっているエクセルでも、随分といろいろなことができる<sup>47</sup>。

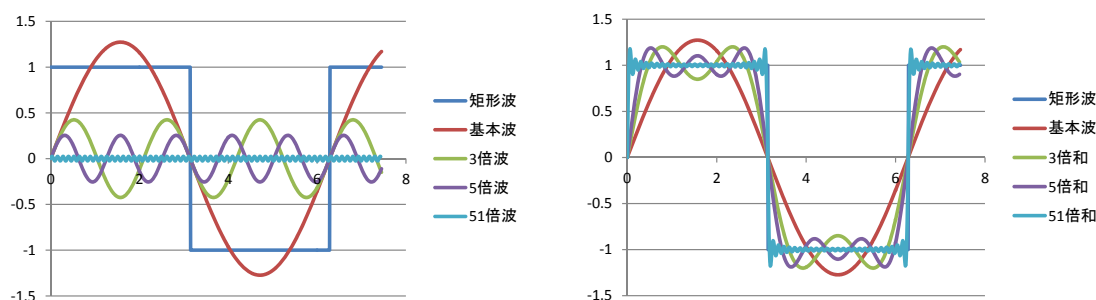


図 2.9: 矩形波と、それを再現するための正弦波の幾つかの成分。正弦波の成分を足しあわせて矩形波を再現していくプロセス。最終的には $\infty$ 倍波まで足しあわせる必要がある。

実際に上の矩形波の式をエクセルを使って計算してみた。表の作りは簡単で、各列は先ほどの式の  $n$  次の項を計算して、それに  $n-1$  次までの項（一つ前の列）を足す作りになっている<sup>48</sup>。加算する項を増やしていくと、確かに矩形波に近づいていく。

矩形波の場合は、波数は  $2n+1$  倍の波数のみだったけれど鋸波だと偶数成分も必要となる。また、矩形波でも原点を上に出っ張っている部分の中心にとると、正弦関数ではなく余弦関数で展開することになる。それ故、任意の位相の矩形波を

入った当時はレポートは電卓を使った手計算が中心だったけれど、修士の頃にはコンピュータの解析ソフトの使用が可能になっていて、博士のころは学部でのレポートはコンピュータの解析ソフトの使用が必須になっていたという。確かに、解析ソフト類は非常に強力なツールで、これを使いこなす相手に電卓で対抗するのは、機関銃を持っている相手に竹槍で突っ込むようなものだろうと思う。

<sup>47</sup>昔、1 年次の計算機教育を立ち上げるために WG で、計算科学の人々がワードを教える気はないけれど、エクセルにはプログラムの概念があるから教えても悪くないと言っていた。確かに、VB を使わなくても、1 次元の熱伝導のシミュレーションは可能で、使い方によっては悪くないと思う。ちなみに、そんな WG が出来たのは、当時は 1 年次の計算機教育がなく、その遅れを文部省（当時）視学官という人から文書で指摘されて、突然にやらなければならなくなったためである。その結果として現在の 1 年次のコンピュータ関連科目があるけれども、2 年次以降のものは、特に手をつけられていなくて、そのままになっている。ということは平均として非常に遅れた状況にある。

<sup>48</sup>授業中に、その場でエクセルでグラフを描こうと思ったのだけれど、妙に時間がかかってまた、望みのグラフの切替ができないことが分かった。そこで授業中には igor というソフトを使うことにした。別にグラフを描くだけなので igor でなくてもかまわないのだけれど、ついでにソフトの紹介をしておくなら、igor はデータ解析ソフトと言われる類のソフトの一種で、エクセルなどの表計算ソフトに比べて、データ解析に特化した優れた機能を持っている。例えば、測定データのフィッティングは igor ではフィッティング関数も自分で作れるし、一つのデータを領域を区切って別の関数でフィットするなんてことも出来る。

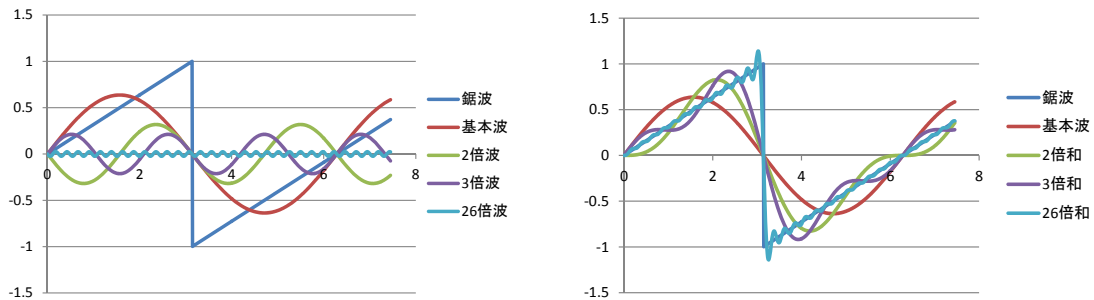


図 2.10: 鋸波と、それを再現するための正弦波の幾つかの成分。正弦波の成分を足しあわせて鋸波を再現していくプロセス。最終的には $\infty$ 倍波まで足しあわせる必要がある。

展開するのには、正弦・余弦両関数が必要になる。こうしてみると、一般論としてある繰り返し波数  $k_0$  の波  $F(x)$  は

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \sin nk_0x + b_n \cos nk_0x \quad (2.51)$$

という具合に、もとの波数の整数倍の三角関数波を足しあわせていけば再現できることが想像できる。係数  $a_n$  と  $b_n$  は一意的に定められ、その数学的手法も確立している。

### 2.8.2 フーリエ変換

ところで、この矩形波の波長を無限大、あるいは波数を 0 にするとステップ関数になる。

この時は、 $k_0$  が 0 なので、その  $n$  倍の波数も、離散的ではなく連続変化するものになる。このため、先ほどと同様に三角関数による展開を行うと、倍波の波数が連続的な値になることを受けて、和ではなく積分の形で書かなければならなくなる。上のフーリエ展開の式の  $k_0$  が 0 になるわけだけでも、 $nk_0$  は常に 0 でなくちゃんと無限大まで変化するはずなので、そこを  $y$  と書くと (そして、ごまかしがあるの

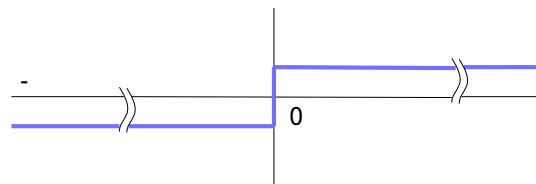


図 2.11: ステップ関数

だけれど  $a_n$  などの係数項については、さらっと  $y$  の関数であることにすると)

$$F(x) = \int_{y=0}^{\infty} a(y) \sin yx + b(y) \cos yx \, dy \quad (2.52)$$

となる。これはフーリエ変換として知られるものである<sup>49</sup>。  $k_0=0$  の関数は、もはや周期関数ではない。それが三角関数の積分で書き表されるわけで、フーリエ変換と、オイラーの関係式を使えば、このような変換が可能なすべての関数について、運動量の期待値を求める事が出来る。

フーリエ変換はフーリエ展開とともに、2年の基礎工業数学で学ぶはずだけれども、ここでは、ガウス型関数のフーリエ変換を先走って示そうと思う。フーリエ変換の結果を知るのには、適当な公式集を探してもよいのだけれど、今だと *mathematica* にお伺いを立てる方がよいだろうと思う。すると

$$e^{-ax^2} \quad (2.53)$$

をフーリエ変換すると

$$\frac{1}{\sqrt{2a}} e^{-\frac{k^2}{4a}} \quad (2.54)$$

になるというご託宣がくだる<sup>50</sup>。これもついでに、エクセルで波を加えていく過程を計算してみた。確かに、ガウス型に分布した波数の波を足しあわせると、ガウス型関数が再現できるようだ。

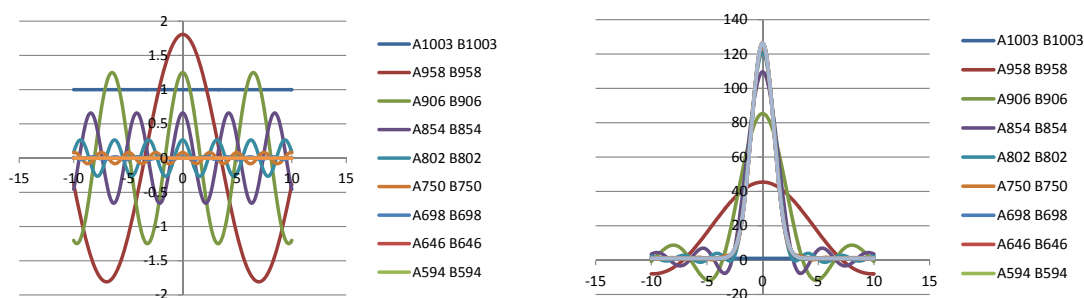


図 2.12: ガウス関数を再現するための正弦波の幾つかの成分。余弦波の成分を足しあわせてガウス関数を再現していくプロセス。本来は波数が連続で積分でなければならない。

ガウス型関数はガウス型関数のままだけれども、 $a$  が大きくなって、もとの関数の幅が狭くなると、それを再現するためには、より広い波数の波を足しあわせ

<sup>49</sup>実は、積分自体にかかる係数が無視されており、正しいフーリエ変換の式にはなっていない

<sup>50</sup>*mathematica* は文字の数式を扱えるソフトで、たいていの人間よりは、微分や不定積分の計算を上手にこなす。大学のコンピュータには入っているの、これを使ってみない手はないと思う。

る必要がある。ここで、関数の幅（値がピーク値に対して適当な小ささ（ $1/2$  とか  $1/e$  など）になる幅を考えると、一方は  $a$  が分子に、もう一方は分母にはいる形になっているはずで、両方の値を掛けると  $a$  によらず（ピーク値の何分の一の高さを基準にしたかだけで定まる）ある値になることが示せる。

## 2.9 不確定性関係

### 2.9.1 位置と運動量の不確定性関係

古典物理学の枠組みでは、質点の位置は正確に定められた。もちろん、現実の世界では測定精度の問題があるから、無限に正確に位置を決定できるわけではないけれども、物質の運動を記述する物理理論においては、数学的な厳密さでもって、物質の位置を扱っているのである。

ところが、量子力学の枠組みでは、粒子は波動関数が有限の値を持つ領域のどこかにいて、そして、ある場所で粒子を見つける確率は波動関数の絶対値の2乗に比例するとされている。粒子がどこにいるかは、測定されるまでは定まらないのである。

とは言え、粒子が存在出来るのは、波動関数が0ではない領域に限られている。それ故、空間の一点だけで有限の値をもつ波動関数を作り出せるなら、古典力学的な意味で粒子の場所を確定出来ることになる。それを実現する数学的手法は簡単で、前の節で出てきたガウス型関数の指数の方にある係数  $a$  の値を無限大に大きくすれば良いのである。こうすると、 $x = 0$  の時だけ関数は0でない値を持ち、 $x$  が有限になった瞬間に関数値は0となる。物質が波動性を持っていたとしても、ある場所に局在した状態を考えることは出来るのである。

ただし、これには、ある代償が伴っている。式 2.53 と 2.54 の関係を見れば分かるように、係数  $a$  はフーリエ変換後の式では指数関数の分母に入っているのもので、これが無限大になってしまうと、全ての  $k$ <sup>51</sup> の値が等しく含まれる波となってしまうのである。波数  $k$  と運動量  $p$  の間には  $p = k\hbar$  という比例関係がある。全ての  $k$  が等しく含まれるということは、全ての運動量の運動状態が等しく重ね合わされているということである。物理的な言葉で言うなら、空間の一点に局在している粒子の運動量は全ての値をとる可能性があるということだ。

逆に波数  $k$  がある単一の値をもつ状態を考えよう。この場合には、式 2.54 の  $k$  を  $k - k_0$ 、 $a = 0$  とすれば、 $k_0\hbar$  という単一の運動量をもつ状態を記述できる。しかし、その結果として、粒子の位置に関しては、全空間を通して均一であるという状況になってしまう。

---

<sup>51</sup> この  $k$  は波数の  $k$  だ。

式2.53と2.54とで、指数関数への  $a$  の入り方が逆であることに注意すると、この二つを掛け合わせると、 $a$  に独立な式となることが見て取れる。そして、式2.53は粒子の位置に、式2.54は波数を通して粒子の運動量に不確定さを規定する式なので、両方の掛け算が  $a$  に独立ということは、位置の不確かさと運動量の不確かさの積には、ある制限値があることが理解できる。もちろん、このような一般化をしてしまう前に、ガウス関数以外の関数系を用いた場合にも同様のことが生じるかを確かめておかなければならないのだけれども、それは確かめられていて、ガウス関数以外の関数では位置と運動量の不確かさの積がガウス関数の場合より大きくなってしまっていることが知られている。位置の不確かさを  $\Delta x$ 、運動量の不確かさを  $\Delta p$  とすると、

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 \quad (2.55)$$

となる<sup>52</sup>。これがハイゼンベルグの不確定性関係として、知られている事柄である<sup>53</sup>。

ニュートン力学の枠組みでは、質点の位置と運動量を初期状態として与えれば、その後の質点の運動は数学的厳密さで計算出来る<sup>54</sup>。しかし、量子力学の枠組みでは、位置と運動量を同時に、数学的正確さで決定することは出来ない。別の言い方をするなら、未来を確実に計算することは出来ない<sup>55</sup>。

位置と運動量の不確定性関係は、取り扱いに悩む項目だ。何故悩むかという、教えることの意味あいが、複数あって、それをどのように整理するかが簡単ではないのだ。一番目の意味合いは、上に記した人間の認識の問題にも絡む事柄で、これにより決定論的な世界観が否定されたことである。例えば、古典的なモンキーハンティングなどの例題では、砲弾の方向は初期状態で厳密に定まっている。しかし、不確定性関係があると、発射後の砲弾の位置は、もはや、天気予報における台風の予想円みたいな感じで、ある点を中心とした円の内部（それも100%確

<sup>52</sup>最近では、有限値はもう少し小さいという話もある。が、とにかく重要なのは、有限の制限があることである。

<sup>53</sup>ハイゼンベルグはドイツの物理学者。量子力学の成立に大きく関わった人物で、この授業では触れない量子力学の定式化（行列力学）の創始者。不確定性関係は、粒子が波動性を持っているにもかかわらず、霧箱の中で、あたかも粒子であるかのように軌跡が見えることが何故かを考える中から出てきたと、何かで読んだ記憶がある。ハイゼンベルグは、戦時中にナチスドイツの政策に対して親和的と見える態度を取ったことから（本人の意識がどうだったかは分からないが）、かなりの顰蹙を買った。

<sup>54</sup>計算できるのは、ただしくはその質点と相互作用をする他者が1つ以下の場合である。ある質点がそれ以外の2つの質点と相互作用をする3体問題は、厳密には解けない問題であり、ニュートン物理学の枠組みでも近似的な答えしか得られない。

<sup>55</sup>波動関数の確率解釈の時点で、ニュートン力学的な意味での決定論は失われているのだけれども、ハイゼンベルグの不確定性関係も、人間の知りうることの限界を与える物として、自然科学者だけでなく文系の人間にも影響を与えたい。これ以外に、アインシュタインの相対性理論も専門家以外にも波及したし、ゲーデルの不完全性定理も同様のインパクトがある話である。

率ではなく)という形になる。これは、未来予想ができなくなるという意味で大きな話になる<sup>56</sup>。

不確定性関係に含まれる2番目の意味合いは、粒子が有限の領域に閉じ込められると運動量の不確定性が生じ、その不確定性を生じると言うことは粒子が動いている事だから、粒子は運動エネルギーを持たなければならないと言うところから出てくる。この考えにより、いわゆる零点エネルギーとか、水素原子が潰れない理由を説明することが出来る。一方で零点エネルギーは最低次の波動関数がエネルギーを持っていることから出てくるのだけれど、不確定性関係を使うと、正確さは低いけれども概算の値として目安をつけることが出来る。

## 演習

1. 日常的には物がある場所で静止している。これが不確定性関係に反していないのかを考えることにする。一円玉(質量1g)の位置の決定精度が原子サイズ程度(0.1nm)であるとし、どの程度以上の速度を持つ必要があるかと、その速度が検出可能かを議論せよ。
2. ライフル銃の射撃に対して不確定関係が問題になるかを考える。銃口を発射するときに弾丸の重心位置には銃身と垂直方向に0.1mmの不確定さがある。話を簡単にするために、射撃は宇宙空間で行われており、重力と空気抵抗の影響は考えなくてよい物とする。不確定性関係の制限がない場合に400m先の直径1cmの的の中心にあてることのできる狙撃手による狙撃で、不確定性関係を入れると、どの程度の確率で的に当てられなくなるかを見積もれ。ただし、弾丸の質量は10g、初速度は800m/秒とする。
3. 鉛の原子核の半径は $10^{-14}m$ 程度である。鉛の原子核において、陽子どうしのクーロン反発と不確定性関係由来の運動エネルギーのどちらが重要であるかを議論せよ

### 2.9.2 時間とエネルギーの不確定性関係

位置と波数のフーリエ変換の関係式と $k\hbar = p$ という式から位置と運動量の不確定性関係が出て来るのだけれど、時間と振動数のフーリエ変化の関係式と、 $E = h\nu$ という式から、時間とエネルギーの不確定性関係が出て来る。それは

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$$

<sup>56</sup>また、この系統で試験問題を作るのはそれほど大変ではない



という物で、時間とエネルギーの不確定性関係と呼ばれている。この関係式より、非常に短い時間に生じることでは、大きなエネルギーの不確かさがあることになる。これは、真空がダイナミックなものであるという自然観のもとになる概念である。

## 2.10 時間依存のあるシュレディンガー方程式

先に進む前に、この授業で取り上げるシュレディンガー方程式についての一寸した注意にふれておこう。ここまでで示しているシュレディンガー方程式には時間が含まれていない。実は、この方程式は「時間に依存しないシュレディンガー方程式」と呼ばれているもので、時間とともに変化しない定常状態を扱う方程式である。時間に依存しないと言われると、運動方程式の流儀の力学から考えると、極めて限られた状態しか扱えないような気がするかもしれない。確かに、粒子の運動で、時間に依存しない場合というのは、粒子が静止している場合であり、極めて限られた状態でしかない。

しかしながら、幸か不幸か時間に依存しないシュレディンガー方程式では、等速直線運動、回転運動、単振動などの様々な運動を扱うことができる。これらの運動は、時間によって形を変えない波で記述できるのである。そして、これらの運動の延長にある原子核の周りを回る電子も時間に依存しないシュレディンガー方程式で記述できる。つまり、原子や分子の状態を記述できるのである。

では、現実の世界の事象で時間に依存するものは何かと言うと、2つの粒子の相互作用が関与する事象である。たとえば、2つの粒子の衝突、あるいは化学反応、光の吸収などである。これらを扱うためには、時間に依存したシュレディンガー方程式を用いる必要があるのだけれど、それは、この授業の枠組みの外にある。