

第1章 ミクロの世界の謎

1.1 知っていてほしい大事なこと

量子力学が誕生したのが1923年頃で、量子力学が完成したのがそれから5年以内の頃なのだから、もう100年近くも前のことだ。昔の人が何を考えて、どんな仮説を立てて、何に驚いて、どんなアイデアが失敗に終わったのか、そのようなことを説明してくれている本ならずでに沢山あるのでそちらに任せよう。大切なのは、現代の我々がミクロの世界について結局のところ何を理解したらいいかということだ。

ミクロの世界では我々の常識が通用しない法則が成り立っている、とはよく言われる話だ。しかし一体どこからがミクロの世界なのだろう？我々の常識が通用する世界と、通用しない世界の境い目はどこにあるというのだろうか？実のところ、そんなものはない。この世の全てが我々の常識の通用しない法則で動いている。しかし多数の粒子の乱雑な動きに隠されてしまって我々にはそのような法則が見えなくなっているだけなのだ。我々は非常識な法則に従って動く多数の粒子の平均的な振る舞いを見て、それを常識だと信じてしまっている。

一般向けに書かれた解説書では、波がどんなものか、粒子がどんなものであるかが語られる。そして波の性質と粒子の性質とが共存できないものであることが強調される。しかしその後で、ミクロの世界では「物質は波であり粒子でもある」と解説される。ミクロの世界の不思議さを面白おかしく説明するためだ。もちろん、100年前の科学者たちはそのようなことで頭を悩ませた。しかしもうそれから100年も経っているのだ。現代の科学者たちはそのような古臭い問題と格闘してはいない。

ミクロの物質はある数学で表されたルールに従う「何か」である。そのルールでは、ときに波に似た性質が現れることもあり、ときに粒子に似た

性質が現れることもある。それだけのことである。物質が実際に波であったり粒子であったりするわけではない。標語的に言えば『**物質は波でも粒子でもない**』のだ。

読者は量子力学が、ミクロの世界の全てを説明する理論だと思っはいけない。量子力学が一応の完成を見てからすでに100年近くも経っているのである。量子力学はその後、素粒子の反応を説明するための「場の量子論」と呼ばれる理論へと発展している。この本で説明しようとしている量子力学というのは、そこへ繋がるまでの過渡的な理論に過ぎない。量子力学では素粒子の振る舞いまでは説明できない。

しかし素粒子の反応だけがミクロの世界の全てではない。原子の中での電子の振る舞い、分子の結合、金属の結晶の中で起きる様々な不思議な現象、半導体、超伝導、超流動、レーザー、量子コンピュータなど……。量子力学にはそのような幅広い応用が広がっているのである。

さて、世の中では「物質は粒子でもあるし波でもある」と言われるわけだが、物質が粒子的な性質を持つことを本格的に説明するのは、量子力学をさらに発展させた「場の量子論」の役目である。この本で扱うような量子力学の範囲では「世の中みんな波だらけ！」と言いながら踊りだしたくなるような世界観が強調されることになるだろう。この辺りについてはもう少し言うっておかねばなるまい。実はミクロの世界での粒子性の例として語られる現象は、量子力学の範囲内で説明できてしまう話も多いのである。つまり波の性質だけを使って説明できてしまうものが意外と多いということである。

もう少し具体的に言うておこう。「電子はなぜ一定の質量を持った粒であるかのように観測されるのか」という話は「場の量子論」の範疇であり、この本の中では説明しない。一方、「原子の中にある電子はなぜ飛び飛びのエネルギーしか取れないのか」とか、「電子の角運動量はなぜ飛び飛びの値しか取れないのか」とかいう話は量子力学の範疇である。

光も物質も、粒子そのものではない。ただ粒子であるかのように振る舞うことのある何ものかである。同様に、波そのものでもない。ただ波であるかのように振る舞うことのある何ものかである。

— 古典の反対語は量子!?

「古典的 (クラシック)」の対義語は何かと聞かれれば、もちろん「現代的 (モダン)」と答えるのが普通であろう。ところが物理学者に同じ質問をすると大抵は「量子的」と答える。量子力学は物理の世界観を一変させた。それで量子力学登場以前の物理学をまとめて「古典物理学」と呼ぶようになったのである。「古典力学」と言えば、それは我々の日常で普通に成り立っているニュートン力学のことである。相対性理論も世の中を一変させたのだが、近頃ではすっかり古典物理学の仲間入りである。

1.2 光は波なのに粒々だった!?

電磁気学の基礎は 19 世紀の後半になってほぼ完成した。その真髄はマックスウェルの方程式と呼ばれる 4 つの方程式の組にまとめることができる。この 4 つを組み合わせると波動方程式と呼ばれる形になるのだが、これを解けば波の形の解が得られるのでそう呼ばれるのである。その波というのは電磁波のことであり、その速さが光の速さと同じであったことから光の正体は電磁波であるという強い証拠とされた。

と、この程度の解説しか書いてない本が多いのだが、速度が光と同じだというだけで同じものだと言い切ってしまったのであれば結論を急ぎすぎている。しかし少し考えればこれ以外にも証拠はいくらでもあって、電磁波と同様に光が横波であることや、物質を熱したときに出てくる放射 (赤外線や可視光線、紫外線) や、高エネルギーの電子を物質にぶつけたときに発生するエックス線などの発生原理が電磁波として説明できることから光が電磁波だと結論できるのである。とにかく、速度が光と同じであったことはその中でも決定的な証拠であったのだ。

光の回折現象や屈折現象などの観察により光が波であることが昔から分かっていたので、電磁波の発見は光の正体を説明する大発見であった。

ところがだ。光がただの波だと考えたのでは説明のできない現象が発見された。金属に光を当てたとき、金属表面の電子が光に叩き出されて飛び

出してくるのである。この現象は「**光電効果**」と呼ばれている。金属は言ってみれば電子の塊である。金属の表面に光沢があるのは、表面の電子が光の波の電場によって揺さぶられ、揺さぶられた電子が再び電磁波を発生するからであり、光の反射というのはそういうものである。このように、普通は金属に光を当てれば光が反射されるものだが、光を当てることで電子そのものがはじき出されてくる場合もあるのである。

この現象の不思議なところは、どんな光を当てても電子が飛び出してくるわけではないという点だ。必要な条件は振動数である。振動数の高い光でなければこの現象は起きない。いくら強い光を当てても無駄なのだ。金属の種類によってこの最低限必要な振動数は違っている。そして、その振動数以上の光であれば、光の強さに比例して飛び出してくる電子の数は増えるのである。

光が普通の波だと考えるなら、光の強さというのは波の振幅の激しさに相当する。強い光を当てればそれだけ波のエネルギーが強いので、電子はいくらでも飛び出してくるはずだ。しかし、現実はそうではない。これをどう考えたらいいのだろうか？

そこにアルバート・アインシュタインが登場する。彼がこれを見事に説明してのけたのだ。特殊相対論の発表と同じ年、1905年のことだった。彼がノーベル賞を取ったのはこの説明によってであって、相対性理論ではなかった。相対性理論は当時は科学者たちでさえ受け容れにくいもので、相対性理論を発表したことで逆にノーベル賞を危うくするところだったと言われている。

アインシュタインによる説明は簡単である。光は振動数に比例するエネルギーを持った粒のようなものであると考えた。ある振動数以上の光の粒は電子を叩き出すのに十分なエネルギーを持っているので金属にあたると電子が飛び出してくる。光の強さというのは電磁波の振幅の大きさではなく、光の粒の多さであると解釈する。エネルギーの低い粒がいくら多く当たっても電子を弾き出すことはできない。しかしあるレベルよりエネルギーが高ければ、光の粒の個数に比例した数の電子を叩き出すことができる。

この現象の他にも光がつぶつぶなものとして存在するのではないかという証拠は当時数多く出てきている。例えば、物を熱したときに光り出す現象がある。身の回りの物体は全て熱を持っており、普段からその温度に応

1.2. 光は波なのに粒々だった !?

じた光を放っているのだが、我々の日常の温度で出てくるのは赤外線がメインなのでそれが目に見えていないだけである。温度が高くなるにつれて高い振動数の電磁波が多く含まれるようになり、目に見えるようになるわけだ。熱せられた鉄や溶岩が赤く光るのもこれである。このようにして出てくる電磁波のことを放射と呼ぶ。

温度と放射の強さの関係を一つの数式で表すのは難しく、ずっとできないうでいた。しかしマックス・プランクが光のエネルギーがつつぶであるという仮定をして見事に一つの数式にまとめ上げるのに成功した。これが1900年のことである。

先ほどから「つつぶなもの」という表現を使っているが、物理ではこれを「量子」と呼ぶ。そこには「一定の量を持った粒」という意味が込められている。しかし、これはとても大切なことなので覚えておいてほしいのだが、量子というのは粒子そのものであることを意味してはいない。あたかも粒子であるかのように、一定の量としてやりとりされるものであることを意味している。アインシュタインもプランクも「光が粒子である」とは断言していない。ただ「量子的だ」と表現したのである。それはつまり「一定の量ずつエネルギーをやりとりする存在」だという意味である。

現在では光子（フォトン）という言葉もあり、光の粒が空を弾丸のように飛んで行くイメージで説明される場面もよくあるが、それはそのようなイメージで説明してもあまり不都合がないし、むしろそうした方が説明が楽になるからそうするのである。しかし光は必ずしもそのような「実際の粒」として飛んで行くものとは言えない。それでも光を粒子だとみなすこのイメージはとても便利なので、不都合が起こらない限りは私も使っていくことにしよう。

とにかく、この他にも色々な実験により、光は振動数 ν に比例したエネルギー、

$$E = h\nu$$

を持つ「粒子的なもの」であることが確かになってきたのである。このときの比例定数 h を「**プランク定数**」と呼ぶ。

さて、光はエネルギーの他に運動量も持つ。そのことは電磁気学から導かれる。光は波だと考えられていたので、光の持つ運動量は空間に広がって分布するものとして表されていた。すなわち運動量密度 \mathbf{w} という形で表現されていた。また、光の持つエネルギーも同様にエネルギー密度 u として表されていた。これらの間には $u = c|\mathbf{w}|$ という関係が成り立っている。この c というのは光速のことである。この関係式も電磁気学の範囲で導き出される話だ。

しかし、光が粒としてやりとりされるといことが分かってきたので、光の粒の一つが持つエネルギー E と運動量 \mathbf{p} の関係は密度で表す必要がなくなり、

$$E = c|\mathbf{p}|$$

と表せることになった。運動量はベクトルで表される量であるから太字で \mathbf{p} のように書いているが、 $|\mathbf{p}|$ はそのベクトルの長さ、つまり絶対値を意味している。

1.3 ド・ブロイ波

光は波なのだから、振動数 ν と波長 λ と波の速度 c との間には

$$c = \nu\lambda$$

という関係がある。この波の速度 c というのはもちろん光速のことである。

ここまですてきた関係式を組み合わせることで、次のような変形ができる。

$$|\mathbf{p}| = E/c = h\nu/c = h/\lambda$$

光の粒のエネルギーは振動数に比例し、光の粒の持つ運動量は波長に反比例するということになる。別にこれは深遠な真理だというわけでもない。波の振動数と波長は反比例するものだし、光の粒のエネルギーと運動量は比例するというのだから、これは当たり前の話だ。当たり前ではあるが重

要な結果なので並べて書いてみよう。

アインシュタイン - ド・ブロイの関係式

$$E = h\nu$$

$$|p| = h/\lambda$$

これらは粒子性の特徴である「エネルギー E 、運動量 p 」と、波動性の特徴である「振動数 ν 、波長 λ 」を結ぶ関係式であるという見方ができる。

それで、この関係を光だけでなく物質にも当てはめてみようと考えるのは自然な成り行きであろう。光は電磁気学では波として説明されたのに、粒のようにやり取りされる性質を持つということは、粒として存在している物質にも実は波としての性質があるのではないか、というのである。私はこういう類推、こういう発想はとても好きである。これはフランスの名門貴族で物理学者でもあるルイ・ド・ブロイが提案したので「**ド・ブロイ波**」とか、あるいは「**物質波**」とか呼ばれている。

当時としてはそんな波に何の意味があるのだと思える考えだったかも知れない。ところが、ド・ブロイの提案から数年後、それまで粒子だと信じて疑わなかった電子が波としての性質を持つことを認めざるを得ない実験結果が発表され始めた。「G.P. トムソンの実験」や「デヴィソンとガーマーの実験」と呼ばれるものが有名である。金属結晶に照射した電子が、ある方向にだけ強められて散乱されるのを確認したのだ。これは波が干渉してある条件を満たす角度にだけ強く跳ね返る様子に非常に似ている。これはド・ブロイが予言した波と同じ波長の波を考えれば説明ができるのだった。

同様の現象はエックス線でも起こり、その場合には「ブラッグ反射」と呼ばれる。原理は全く同じである。

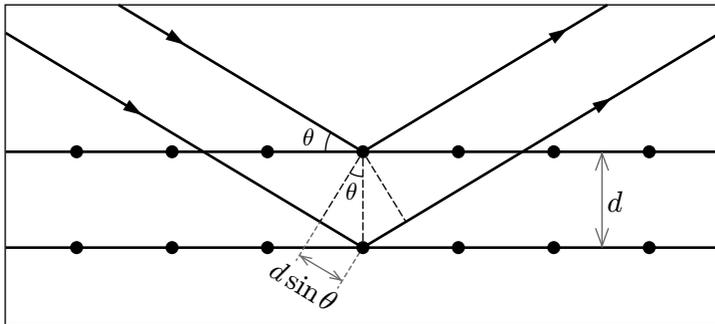
金属結晶というのは原子の並びが層状に積み重なったものだと見ることができる。その表面に並んだ層と二番目に並んだ層の間隔 d と、入射する波の波長 λ が同じくらいになっていると、この現象が見られる。具体的には次のような条件を満たす場合にだけ強く反射が見られ、そうでない場合

第1章 ミクロの世界の謎

にはほとんど反射されないのである。

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (n \text{ は整数})$$

表層で反射された波と、表層を通り抜けて二番目の層で反射された波とでは、再び合流するまでに進む距離に $2d \sin \theta$ だけの差が出ることになる。その距離がちょうど波長の整数倍ならば波の位相が一致して元と同じ強さに戻って出て行けるが、そうでなければ位相がズレて、再び合流したときに弱め合う結果となるのである。



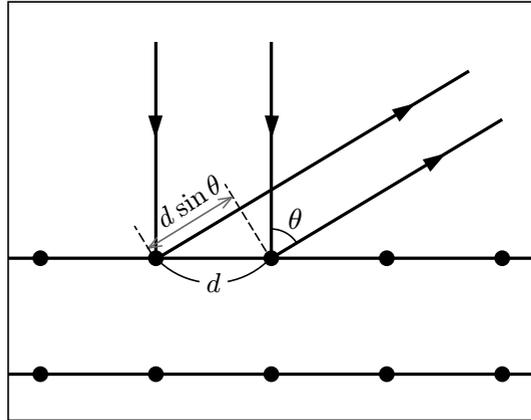
今は例として第一層と第二層だけを考えたが、さらに深い層まで入って反射した波についても同じことが起こる。それで上の条件が満たされていれば強い反射が起こるというわけだ。

ああ、申し訳ない。今の説明には少し誤解を誘う部分があった。「G.P. トムソンの実験」の方には今の説明が当てはまるのだが、「デヴィソンとガーマーの実験」の方はニッケルの単結晶の結晶面に向かって垂直に電子を照射する実験なので、説明図と条件式に少し違いがある。条件式は次の通りである。

$$d \sin \theta = n\lambda \quad (n \text{ は整数})$$

こちらには2がついていない。この角度 θ の意味も d の意味も先ほどとは違って、次の図のような状況である。

先ほどは、それぞれ結晶の第1層と第2層とで跳ね返る場合に波の進む距離に違いがあることを問題にしていたが、この実験では、ある原子に当たって跳ね返る場合と、その隣の原子に当たって跳ね返る場合とで



波の進む距離に $d \sin \theta$ だけの違いがあることが問題になっている。こちらの d は層間の距離ではなく、隣の原子との距離を意味している。このように多少の違いはあるものの、とてもよく似た原理で起こる現象だと言えるだろう。

この説明図を見ると真上から来た電子は真上に跳ね返るだけではないのかと不思議に思うかも知れないが、実際その通りで、ほとんどの電子は真上に跳ね返り、ほんの僅かな電子だけがあらぬ方向に飛び散る。角度が大きいくほど、その数は減る傾向があるわけだ。ところが先ほどの条件に当てはまる方向付近にだけはその数が少し増えるのである。

どちらの実験も同じ頃に行われ、どちらも同時にノーベル賞を受賞している。ちなみに G. P. トムソンというのは、電子を発見したことでノーベル賞をもらった J. J. トムソンの息子であり、親子でノーベル賞をもらう結果になったわけだ。

それで結局、ド・ブroy波の正体は何なのだろうか？ ある人はド・ブroy波は物質を運ぶ波である、と考えた。物質粒子はド・ブroy波に「波乗り」をして運ばれるのではないかという考えだ。これを「パイロット波仮説」と呼ぶ。パイロットというのは「水先案内人」という意味である。それに対して、物質そのものがド・ブroy波なのだ、という人もいた。しかしどちらも言うだけなら簡単だが、そのモデルでうまく計算ができることを示さなければならない。

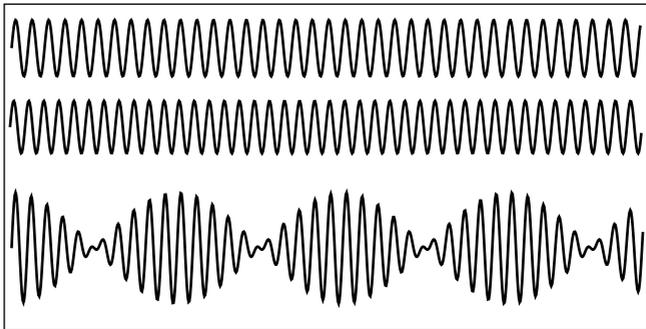
ド・ブROI波は光の粒子性と波動性の関係から類推されたものであった。光の場合には、波動性の部分は電磁波として完全に説明される。するとド・ブROI波の正体も電磁波かそれに非常に関わりのある何かではないかと考えたいところである。しかしながら、そう単純には言うことができない。問題はド・ブROI波の速度である。周波数と波長を掛け合わせれば波の速度が求められるのだが、ド・ブROI波の速度は光の速度にはならない。つまり、光の速度で進む「電磁波」と同じものとは考えられないのである。

ド・ブROI波の速度はどれくらいだろうか？ 質量 m の粒子が速度 v で進むとき、運動エネルギーは $\frac{1}{2}mv^2$ であるし、運動量は mv である。すると振動数については $E = h\nu = \frac{1}{2}mv^2$ という関係式を作ることにより、 $\nu = \frac{mv^2}{2h}$ であることが分かるし、波長については $|p| = h/\lambda = mv$ という関係式を作ることにより、 $\lambda = h/(mv)$ であることが分かる。波長と振動数を掛ければ波の速度になるわけで、ド・ブROI波の速度は

$$\nu\lambda = \frac{mv^2}{2h} \cdot \frac{h}{mv} = \frac{v}{2}$$

であることが分かる。これは粒子の速度 v のちょうど半分だ。物質を運ぶ波にしては粒子について行けてないし、もし物質そのものを表わすのだとしたらその速度は物質の速度と一致しているべきではなかろうか。このように、等速直線運動する粒子という最も単純な状況で考えてすら、どこかおかしい。

しかし、まだ逃げ道はある。波には「うなり」と呼ばれる現象があった。振動数の違う二つ以上の波が合わさったとき、波は「うなり」を生じる。



真空中を進む光や、空気中を進む音の場合には「うなり」も波と同じ速度で進む。しかし物質中を進む光や、物質中を進む振動の場合には状況が異なる。振動数の違いによって波の伝わる速度がわずかに異なるという現象が起こるのである。その結果として「うなり」は重ね合わせるそれぞれの波とは全く異なった速度で進むように見えることがある。この「うなり」の進む速度は「**群速度**」と呼ばれている。

先ほどの計算でも分かるように、ド・ブロイ波の速度は振動数によって違っているようだし、ひょっとすると、物質というのはド・ブロイ波の重ね合わせで出来た「うなり」が進む現象として説明できるのではないだろうか。

その通り！この説明はうまく行くのだ。実際、ド・ブロイ波の群速度は物質の速度と全く同じになることが計算できる！ド・ブロイが発表した論文に書かれている内容はそのようなことなのである。

さあ、この結果はなかなか感動的だ。だから、群速度というのが具体的にどんなもので、どういう計算をすれば今話した結果が導かれるのかという、少々長い説明をここに入れておきたい気もしてくる。しかしこれをあまり熱心に説明すると、この考え方こそが物質粒子の正体に迫る正しい道なのだと言者に期待させてしまいかねない。実は、残念ながらこのイメージは粒子が等速直線運動をしているようなかなり単純な場合にしかうまく当てはまらず、このままの形ではこれ以上の発展ができなかったのである。

科学史上の失敗についてじっくり考えることも大切だが、今の私は先を急いで、量子力学の本質に関わるもっと大事な話をさっさと終わらせてしまいたいと考えている。この辺りはまだ量子力学を理解するために必須の知識だというわけではないのである。こんなところで長々と時間を費やして読者を疲れさせるべきではないだろう。群速度のことが気になる読者のために巻末の付録 A に「位相速度と群速度」という見出しでまとめておいたので、あまり無理せず、暇なときに読んでもらえればと思う。ド・ブロイの考察は結局はうまく行かなかったが、量子力学へと繋がる重要なヒントを与えてくれたのだった。

ド・ブロイのイメージの弱点をもう少し話しておこう。もし物質の正体が、速度の微妙に異なるド・ブロイ波が重ね合わされることによって生じる「うなり」だとしたなら、いずれ二つの波はすれ違って離れてしまい、

重ね合わせは消滅してしまわないだろうか？ かと行って、無限の長さの波を考えていたのでは、「うなり」は無限に続くことになり、粒子はどこにでも同じように存在してしまうことになる。では、二つきの波を考えるのではなく、幾つもの波を重ね合わせることにすればどうだろう？ そうすることで、ある場所にだけ「こぶ」のような形になる波を作ることができる。このようなひとかたまりになった波を「**波束**」と呼ぶ。しかし悲しいかな、速度の異なる波を重ね合わせて作っているがゆえに、これもいずれ形が崩れて行ってしまうのである。「**波束の崩壊**」と呼ばれる問題である。物質というのは長時間に渡って安定して存在し続けるものだが、その性質を再現することはできそうにない。

私の説明の微妙な嘘

私の説明は史実とは微妙に異なるので、時々こうして反省を入れずにはいられない。ここまで「**アインシュタイン-ド・ブロイの関係式**」という荒唐無稽な思い付きの方が最初にあったかのように話してきた。しかしド・ブロイは、ド・ブロイ波の群速度が物質粒子と同じ速度になるように調整しようとすれば、その結果として「**アインシュタイン-ド・ブロイの関係式**」が得られる、と主張したのである。順番が逆だ。しかしそのような説明をすると、なぜわざわざ群速度なるものを持ち出してそれが物質粒子の速度と同じになるようにしようとするに至ったのか、その必然性がうまく伝わらない気がしたのだった。

1.4 シュレーディンガー方程式

物質の正体を説明することまではできなかったが、ド・ブロイ波らしきものが存在することは実験で確認され始めた。そうすると単なる面白い思い付きだと笑ってはいられなくなる。それは一体どんな形をした波なのだろうということを実際に考えざるを得ない。ある運動量を持つ物質のド・ブロイ波の波長はいくつだろうか、とか、あるエネルギーのときは振動数がいくつだというくらいの単純な計算では満足してはいられない。一体どんな条件の波が存在してどのように伝わっていくのだろうか？

説明を簡単にするために、ここからしばらくは物質の移動方向を一方向だけに限定して考えよう。先ほどまでは運動量の大きさを $|p|$ のように表していたが、一方向を考えるだけならベクトルを使う必要がないので太字ではない p で表すことにする。

これまでに得ているヒントは「物質のエネルギーと運動量」と「ド・ブロイ波の振動数と波長」との間に次の関係があるということ。

$$E = h\nu$$

$$p = h/\lambda$$

そして、古典力学では物質のエネルギーと運動量の間には次の関係があるということ。

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

これは高校生には $E = \frac{1}{2}mv^2$ という形式でよく知られている運動エネルギーの公式を、エネルギーと運動量の関係式になるように変形しただけのものである。もし運動エネルギーの他に位置エネルギー $V(x)$ まで考慮したければ、それを加えて、

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

と書いてやればいい。

これらの条件を頼りにしてド・ブロイ波の形を求める方程式を作ってやることができるのだ。これからその方法を説明しよう。思わず「そんなのありかよ！」と叫んでしまうかもしれないような方法だ。

まず、振動数 ν 、波長 λ の波動は、人によって慣れた形式は少々違うかも知れないが、

$$\psi(x, t) = A \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \right]$$

という式で表現できる。高校物理でも出てくるような式である。これは x 軸の正の方向に進む波動を表している。ここでちょっと代入をしてやって、 λ と ν の代わりに p と E を使うことにしてやれば、

$$\psi(x, t) = A \cos \left[2\pi \left(\frac{px}{h} - \frac{Et}{h} \right) \right]$$

と書き直せる。さて、こいつと $E = \frac{p^2}{2m} + V$ の関係式とを組み合わせたいのだが、そのために上の式の中から p だけ、あるいは E だけを取り出すことをしたい。偏微分を使えばそれができるのである。

偏微分というのは $\psi(x, t)$ のように変数が二つ以上含まれる関数を、そのうちのどれか一つの変数だけで微分することである。他の変数は定数のように見なして計算してやればいい。

関数 ψ を x で偏微分すれば p が \cos 関数の外に出てくるし、 t で偏微分すれば E が出てくる。係数も一緒に出てきてしまうのだが、それは後で割ってやれば消える。どういうことか、実際にやってみることにしよう。

関数 ψ を x で偏微分してやると、

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -\frac{2\pi}{h} p A \sin \left[2\pi \left(\frac{px}{h} - \frac{Et}{h} \right) \right]$$

となる。この左辺の記号が偏微分の記号である。高校の数学で習う微分の記号に似ているが、少しだけ違っている。今日初めて偏微分というものを見たという読者は、こんな風に偏微分のためにわざわざ普通の微分とは別の記号を用意しなくてもいいのではないかと思うかも知れない。しかしちゃんと区別して書いておかないと全く別の意味になってしまう場面が出てくるのである。それについてもきちんと話しておきたい気がするが、今はそんな心配は要らないのでこのまま話を進めることにしよう。

\cos 関数だったものが \sin 関数に変わってしまうという副作用があるが、中に入っていた p を外に出してあげることができた。係数が邪魔なのであらかじめ掛けておけばもっとすっきりする。

$$-\frac{h}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial x} = p A \sin \left[2\pi \left(\frac{px}{h} - \frac{Et}{h} \right) \right]$$

しかし、もっとすっきりした形で書き表したいのだ。 \cos 関数が \sin 関数に変わりさえしなければ、右辺も ψ を使って表せるのだが……。

そう言えば、微分しても形が変わらない関数があった。それは「指数関数」である。もし \cos 関数の代わりに指数関数を使えたら……。ここで数学のトリックを使う。「**オイラーの公式**」という大変便利な公式があるのだ。それは、

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$$

というもので、複素関数論を学ばずに出てくる公式である。 i は2乗すると -1 になる虚数を意味している。ここでもし、先ほどの波の式の代わりに

$$\psi = A e^{\frac{2\pi i}{h}(px - Et)}$$

というものを採用すれば、これはオイラーの公式により

$$\psi = A \cos \left[2\pi \left(\frac{px}{h} - \frac{Et}{h} \right) \right] + iA \sin \left[2\pi \left(\frac{px}{h} - \frac{Et}{h} \right) \right]$$

ということであって、虚数部分がおまけに付いてきたことを除けばさつきまでの関数と同じである。虚数部分の \sin 関数が邪魔だが、虚数部分はとりあえず無視してやることにしよう。そんなことをしてもいいのかと気になるかも知れないが、そこを考えるのは後回しだ。まずは生まれ変わった指数形式の波動関数 ψ を偏微分してみよう。すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= \frac{2\pi i}{h} p A e^{\frac{2\pi i}{h}(px - Et)} \\ &= \frac{2\pi i}{h} p \psi \end{aligned}$$

と書ける。右辺の係数が邪魔に見えるのであらかじめ割っておけば、

$$-i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial x} = p \psi$$

とすっきりした形になった。

ところで、ここまでの変形を見ると、いつも h と 2π が一緒に現れていることに気付くだろう。毎回これらを分数の形式で書かなければならないのは非常に面倒臭いし、式も分かりにくくなるというので、次のような記号を定義することにする。

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$$

この \hbar は「エイチ・バー」と呼ばれている。 h に横棒を付けたものだからだ。この値を「ディラック定数」と呼ぶ人もいる。これを使えば、先ほどの式はさらに簡単に、

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p \psi$$

と表せるようになる。

同じことを E についてもやりたければ x の代わりに t で偏微分して計算することで、

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi$$

という関係を得ることができる。

つまり、波動関数 $\psi(x, t)$ を x で偏微分して $-i\hbar$ をかけてやれば運動量 p がいつでも式の中から飛び出してくるし、 t で偏微分して $i\hbar$ をかけてやればエネルギー E の値がいつでも式の中から取り出せるというわけである。しかも関数 ψ の中身の形を変えずに！

このことを利用して古典力学の関係式 $E = \frac{p^2}{2m} + V$ に当てはめてみよう。この両辺に ψ を掛けると次のようになる。

$$E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi + V\psi$$

これに上の関係式を代入してやればいい。 p^2 の部分をどうしたらいいかと困るかも知れないが、 ψ から p^2 を取り出すには ψ を x で偏微分することを2回連続して行い、 $-i\hbar$ を2回かけてやればいい。

$$(-i\hbar)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = p^2 \psi$$

そのようにして作ったのが次の式だ。

1次元のシュレーディンガー方程式

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

これは「古典力学の関係を満たす運動量とエネルギーの組を同時に取り出すことのできる波動関数 ψ はどのような形のものか」という意味の方程式になっている。

歴史的にはド・ブローイ波の存在が実験で確かめられる以前にシュレーディンガー方程式が発表されている。やはり世の名声を勝ち取るためには時代を先取りしないとダメだということなのだろう。

本当のところを言うと、シュレーディンガーはここで説明したような理屈でこの方程式を導いたのではなかった。解析力学という分野に出てくる式を元にして導き出したことになっている。解析力学というのは数学のテクニックを駆使してニュートン力学をまとめ直したものであり、複雑な問題にも対処できる代わりに抽象的な概念があれこれ登場するのである。シュレーディンガーがこの方程式を導き出した最初の論文では、そのような抽象的な概念を使っていることに加えて、さらに独自の奇妙な細工を施してあるために、どうにも難解なものとなっている。その内容を現代の観点から解釈してやることはできるのだが、本当に最初からそのような考えで作ったのか疑わしいほどに考え方が飛躍している部分がある。しかし彼の論文からは、他人にはよく理解できない独自の思想のようなものが窺えもする。新しいアイデアというものは理路整然とはしておらず、試行錯誤の混沌の中から生まれるものだとも言えるかも知れない。

これは私の考えだが、ひょつとすると、当時はまだド・ブロイのアイデアは怪しいものだと思われていたので、すでに正統な学問として広く受け入れられていた解析力学の式を経由することで理論の信憑性を高めるという戦略を取ったのかも知れない。それ以降のシュレーディンガーの論文ではド・ブロイ波のイメージを前面に押し出し始めているのでド・ブロイのアイデアが彼を励ましたことは間違いないだろう。

ところで、先ほどの方程式を導く説明の途中から「**波動関数**」という言葉を使い始めているのに気付いたかも知れない。専門用語のような響きがあるが、この単語自体にはそれほど深い意味はない。波の形を数式で表した関数のことを波動関数と呼ぶのである。これは量子力学に限ったことではなくて、空気中を伝わる音波を表す式であっても、電磁波を表す式であっても、波動関数と呼んで差し支えない。ところがこの単語は量子力学で特に頻繁に使われるようになっていたので、何の前置きもなく「波動関数」と言った場合、それはほとんどの場合シュレーディンガー方程式の解である関数のことを意味していると考えて間違いないといった状況になっている。実は私自身も、量子力学以外の本の中で波動関数という語が使われているのを目にすると、まるで量子力学の話がされているような違和感を覚えたりするほどである。

先ほどの導出過程について少し補足しておこう。波を指数関数で表すことに慣れていない読者は、最初の実数で表していた波動関数に虚数を取り入れた部分をかなり怪しく思うことだろう。そのような思いを軽減するために簡単な確認をしておくことにしよう。

先ほども計算したように、 \cos 関数を使った波動関数 ψ を偏微分すると、

$$-\frac{2\pi}{h} p A \sin \left[2\pi \left(\frac{px}{h} - \frac{Et}{h} \right) \right]$$

のように \sin 関数に変わるのだった。一方、 $Ae^{\frac{2\pi i}{h}(px-Et)}$ を x で偏微分してやった結果は、

$$\frac{2\pi i}{h} p A e^{\frac{2\pi i}{h}(px-Et)}$$

となるが、これはオイラーの公式を使って書き直せば、

$$\frac{2\pi i}{h} p A \left\{ \cos \left[2\pi \left(\frac{px}{h} - \frac{Et}{h} \right) \right] + i \sin \left[2\pi \left(\frac{px}{h} - \frac{Et}{h} \right) \right] \right\}$$

ということである。係数として飛び出してきた虚数 i を括弧の中にかけてやれば

$$\frac{2\pi}{h} p A \left\{ i \cos \left[2\pi \left(\frac{px}{h} - \frac{Et}{h} \right) \right] - \sin \left[2\pi \left(\frac{px}{h} - \frac{Et}{h} \right) \right] \right\}$$

となつて、第2項の方が実数になっている。つまり実数部分だけを見るようにしていればこちらも \sin 関数に変化しており、微分した結果は全く同じであることが分かる。

このように、虚数部分はおまけのように付いているように見えて、実は微分計算をしたときに実数の三角関数の微分と結果が同じになるように助けてくれている、という見方もできる。指数形式で表した波の実数部分だけを見ていれば、実数だけで計算したときと同じなのである。三角関数の代わりにわざわざ虚数を導入してまで指数関数を用いるのは、微分しても関数の形が変わらないので計算が楽だという利点のためであると言えるだろう。

実際、色々な分野でこの利点を利用した実用的計算が行われている。波の計算をするときに指数関数で表しておいて、最終的に得られた結果の実

数部分だけを見るようにするのである。

こういう説明を聞かされると、波動関数に虚数が出てくるのは何か理解できない深い意味があると考えるより、単に数学を使った計算テクニックの結果だという気もしてくる。ところが量子力学の場合どうやらそうではなく、複素数として出てくる解にこそ本質的に意味があるらしいのだ。

シュレーディンガー方程式を作ったときの意味に従うのなら指数形式で表された解のみが許されるべきであって、さらにその実数部分のみがド・ブロイ波としての意味を持つはずである。しかし指数形式の解（単純な基本波）のみを認めるという制限をつけると、全く当たり前すぎて面白みのない解しか出てこないことになってしまう。それどころか、条件に合わないために解けないことの方が断然多くなってしまふのだ。そんな応用に使えないようなことではシュレーディンガー方程式がこれほど有名になることもなかったであろう。

そこで元の意味を離れて指数形式以外の解も解として認めることにしたのであるが、その結果、何とも解釈の難しい複素数で表された解があれこれと出てきてしまうことになってしまった。

では、適用範囲を広げて求められたこの複素数の解はどうやって解釈したらいいのだろうか？ 虚数部分は一体何を表すのだろうか？ 不思議なことに、求められた波動関数の複素数値の絶対値の2乗が粒子の存在確率を表すと考えると計算結果が事実と合うのである。素直に認めるべきか、うまく行く理由を考え直すべきなのか……。多分これが、シュレーディンガー方程式が発表された当時の人々の反応だったのではなかろうか。

確率解釈

波動関数の絶対値を2乗したものが粒子の存在確率を表す

正直なところ、これはもう受け入れるしかない部分だ。この世界がなぜか複素数を使った論理を自然法則として採用しているようなのである。どうせ受け入れろと言うなら最初から指数形式で表した複素数の波を使って説明した方が話はずっと簡単に済んだのかも知れない。しかしそれではい

かにも唐突過ぎて不親切ではないか。

私は初めて量子力学を学ぶ人が抱く「自然現象に複素数が出てくることに対する拒絶感」というものを知っている。かつての私がそうだったし、それを克服するのにとても時間がかかった。あまりカッコ良くない説明であることは分かっているが、拒絶感を少しでも和らげるため、どうしてもこのような説明の仕方をせずにはいられなかった。

量子力学というのはシュレーディンガー方程式を解くことがほとんど全てである。これを実際に解くためには位置エネルギー $V(x)$ として具体的な形の関数を指定してやる必要がある。この関数の形によって、非常に楽に解けたり、ほとんど無理だと思える難しさになったりする。解いてみると予想しなかったような結果が得られることがあるので、その解釈に困ったりもする。それで、慣れるまでの間は案内人が必要になるわけだ。

—— ハイゼンベルクの行列力学 ——

ここまで全く触れなかったが、量子力学の発展にはもう一つの流れがあった。ハイゼンベルクの提案した行列力学というものである。

19世紀末頃から様々な真空放電の実験が行われており、その放電の光をプリズムで分けたときの色の強さの分布を詳しく調べることが行われていた。これを「分光学」と呼ぶ。真空放電とは言っても完全な真空なのではなく、ガラス管の中にわずかな気体を入れて高電圧を掛ける。その気体物質の違いによって特徴的な光の筋が幾つも見られるのである。この観察によって原子内部のエネルギー状態についてかなり多くのことが分かっていた。

ハイゼンベルクは波動関数のような直接の観測にかからないものを理論に導入することを嫌い、この分光学的な観測結果を説明できることを目標に理論を作り上げて行ったのである。しかしその計算にはとても難解な手順が必要であり、大変説明しにくいものである。やがてこの理論はシュレーディンガーの理論と同等であることがシュレーディンガーによって示されたのだった。

1.5 変数分離法

シュレーディンガー方程式は微分方程式である。微分方程式を解くためには決まり切った方法なんかはなくて、方程式の形に応じてやり方を変えないといけない。あまりに多くの解き方があるので、この本ではそれら全てについて説明している余裕はない。一冊まるごと微分方程式の解き方について説明した本が出ているので、詳しくなりたければそういうもので学ぶ必要がある。また、紙の上の計算ではとうてい解けないようなものも多い。そういうものはコンピュータを使って解くのである。

しかしシュレーディンガー方程式については、まず最初に必ずやっておくべき計算手順が存在している。「変数分離法」と呼ばれるものである。まだ量子力学について右も左も分からないうちから、どうしてこのような技術的なことを学ばせられなければならないのだろうと思うかも知れない。計算技術なんかよりも、本質を手っ取り早く知りたいという気持ちも分かる。しかし、最初にこれくらいは知っておかないと話にならないのだ。決して無駄にはならないので、是非とも身に付けてもらいたい。

先ほど導いた「1次元のシュレーディンガー方程式」を使って説明しよう。

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

$V(x)$ の部分には具体的な位置エネルギーの形を入れて解くことになるわけだが、今回の説明ではまだそれを指定する必要はない。ただし位置エネルギーの形は時間が経過しても変化しないことにしておく。変化する場合を考えると難易度がぐっと上がってしまうのである。そういうわけで、ここでは $V(x, t)$ ではなく、 $V(x)$ と書いてある。

波動関数 $\psi(x, t)$ が座標 x に依存する部分と時間 t に依存する部分の積で表せるとしよう。

$$\psi(x, t) = f(x) g(t)$$

うまい具合にこんな形になっていなかったらどうするんだと思うかもしれない。みんな初めはそんな心配をするものだ。もちろんこの形で表せな

い解もあるだろうが、そういう解はここでは見捨てることにする。微分方程式を解くときにはよくあることだ。

その見捨てられた解の中に重要な意味を持つものが含まれていたらどうするのかって？ なかなかしつこいな。そういうものがあればとにかく工夫して探すしかない。本当に必要なら誰かがもう見つけていることだろう。それがないと説明できないような現象が見つまっているならなおさらだ。

ここではひとまず上のような形になっている「**変数分離解**」を探すことに専念する。そのためにこれをシュレーディンガー方程式に代入してやる。

$$i\hbar \frac{\partial(fg)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2(fg)}{\partial x^2} + V(x)fg$$

t で偏微分するところでは $f(x)$ は t を含まないのでただの定数みたいなものだし、 x で偏微分するところでは $g(t)$ は x を含まないのでただの定数みたいなものである。それで、この式は次のようになる。

$$i\hbar f \frac{\partial g}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} g \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + V(x)fg$$

この両辺を fg で割ってやれば、

$$i\hbar \frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + V(x)$$

となり、面白いことに左辺には x が含まれず t のみに関する式になっており、右辺には t が含まれず x のみに関する式になっている。

それらが等号で結ばれているのだから、両辺とも x にも t にも依存しないある値に等しいに違いない。その定数を E と表すと、

$$i\hbar \frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial t} = E \quad , \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + V(x) = E$$

という二つの式に分離することができる。これらの式を整理してやると、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial g}{\partial t} &= E g(t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= [E - V(x)] f(x) \end{aligned}$$

という、以前よりはるかに解きやすそうな形になっているだろう。どちらの式も考えるべき変数が一つだからだ。これで変数分離は完了である。

ここで導入した定数 E の意味は何だろうか。これがポテンシャルエネルギー $V(x)$ と同じ次元の量であることは式を観察すればすぐに分かる。よって E は系のエネルギーを表すと考えておけばいいのではなかろうか。

このことは1番目の式

$$i\hbar \frac{\partial g}{\partial t} = E g(t)$$

を解いてみればもっとはっきりする。いかにも簡単そうな形であり、実際すぐ解ける。

$$\begin{aligned} g(t) &= A e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ &= A \left(\cos \frac{E}{\hbar}t - i \sin \frac{E}{\hbar}t \right) \end{aligned}$$

この解が振動解であることが初心者にもイメージしやすいように、わざわざオイラーの公式を使って三角関数にまで直してみた。ところで高校物理の波のところでやったと思うが、三角関数で波を表すときには E/\hbar の部分は角振動数 ω の意味を持つ。すなわち、

$$E = \hbar\omega$$

だということだ。これを見覚えのある形に変形してやれば、

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar}{2\pi} 2\pi\nu = h\nu$$

である。前に出てきた粒子性と波動性を結ぶ式だ。ド・ブローイ波の振動数にプランク定数を掛けたものが、その粒子のエネルギーを表しているのだった。やはり、ここで導入した定数 E を系のエネルギーと解釈するのは正しいようだ。振動解を上のような \hbar やら E やらを使った形式で表すとごちゃごちゃして見にくいので、

$$g(t) = A e^{-i\omega t}$$

と書き表すことが多い。エネルギーが高いほど ω が大きく、位相の変化が激しいことを表している。そう言えば、自分が量子力学を学び始めた頃には「位相の変化」と言われても何のことやらさっぱり分からなかったなあ。これについては後でもっと詳しく話すことにしよう。具体例を見ていく

ちに分かるようになるだろう。第2章の終わりか、第3章の終わり頃までには何となくイメージがつかめるようになってきていると思う。

次に2番目の式に目を移そう。これは「**時間に依存しないシュレーディンガー方程式**」と呼ばれている。式の中に時間的な要素が一切含まれていないからだ。大事な式なので後で探しやすいように丸囲みしておこう。

時間に依存しない1次元のシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = [E - V(x)] f(x)$$

これをここで解くことはしない。 $V(x)$ を具体的に決めない限りは解けないからである。具体的な例について解くことはもう少し後でやるつもりなので、今回は一般論を軽く説明するだけにしておこう。

微分方程式には面白い性質を持つものが多く、例えば、エネルギー E がある値のときだけその値に応じた解 $f(x)$ を持つが、 E がそれ以外の値のときには解を持たないというものがある。高校までで扱うような方程式とは一風変わった振る舞いである。

例えば、解が存在することが許されたエネルギーの値が E_1, E_2, \dots のように幾つかあったとして、それぞれの値に対応して存在する解をそれぞれ $f_1(x), f_2(x), \dots$ と表すとしよう。

この特別なエネルギーの値 E_n を「**エネルギー固有値**」と呼び、そのときの解 $f_n(x)$ をその固有値に属する「**固有関数**」と呼ぶ。エネルギー固有値は飛び飛びのこともあれば、連続のこともある。それはポテンシャル $V(x)$ の形次第だ。

ここでの $f_n(x)$ は「時間に依存しないシュレーディンガー方程式」の解のことを言っているのであって、これはこのままでは元の「時間を含む」方程式の解にはなっていない。「時間を含む」方程式の解にするためには、 $f_n(x)$ に時間に依存する部分である $g(t)$ を繋げてやる必要がある。そのときに、 $g(t)$ の方も、 $f_n(x)$ で許されたのと同じ E_n の値を使うわけだから次

のようになる。

$$\begin{aligned}\psi_n(x,t) &= f(x)g(t) \\ &= f_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\end{aligned}$$

これが「時間を含む」方程式の正式な解となる。このような解は複数、多ければ無限にでもある。許された固有エネルギー E_n が存在するのと同じ数だけ解が求まるのである。 $\psi(x,t)$ ではなく $\psi_n(x,t)$ としてあるのは解は一つきりではないというニュアンスである。そのいずれも「時間を含む」シュレーディンガー方程式の解である。もう少し簡素に見えるように

$$\psi_n(x,t) = f_n(x) e^{-i\omega_n t}$$

と書くこともあるが、こういう書き方にも慣れてもらいたい。

1.6 重ね合わせの原理

ところで、微分するという操作には線形性がある。線形性というのを正確に説明するのは面倒くさいが、式で書けばこういうことだ。

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}[a u(x)] &= a \frac{d}{dx} u(x) \\ \frac{d}{dx}[u(x) + w(x)] &= \frac{d}{dx} u(x) + \frac{d}{dx} w(x)\end{aligned}$$

ある関数 $u(x)$ を a 倍したものを微分した結果は、 $u(x)$ を微分した後で a 倍しても変わらない。また、ある関数 $u(x)$ と別の関数 $w(x)$ の和を取って作った関数を微分した結果は、それぞれの関数を微分してから和を取っても変わらない。この性質は偏微分の場合であっても同じく成り立っている。2回微分した場合にはどうか？ それでも同じ性質が成り立っている。

そこでシュレーディンガー方程式を眺めてみよう。偏微分が線形性を持っている上に、さらにシュレーディンガー方程式もその定数倍や和だけで構成されている。そのため、例えば関数 $u(x,t)$ がシュレーディンガー方程式の解であった場合、それを定数倍して作った関数 $a u(x,t)$ もまたシュレーディンガー方程式の解になっているだろう。

さらに別の関数 $w(x, t)$ もシュレーディンガー方程式の解であった場合、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(u+w) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(u+w) + V(x)(u+w)$$

という等式もまた成り立つことが分かるだろう。つまり $u(x, t) + w(x, t)$ という関数もまた、シュレーディンガー方程式の解であるということだ。

このような性質があるため、シュレーディンガー方程式は線形性を持つ、だとか、シュレーディンガー方程式は線形微分方程式である、とか言われる。

前節の変数分離法の説明のところで、シュレーディンガー方程式の解が

$$\psi_n(x, t) = f_n(x) e^{-i\omega_n t}$$

と表せるという結論だったが、このような多数の解のそれぞれに好きな定数 C_n を掛けて足し合わせたものを作ってやろう。

$$\Phi(x, t) = \sum_n C_n \psi_n(x, t)$$

定数 C_n は実数でも複素数でも良い。このような関数 $\Phi(x, t)$ もまたシュレーディンガー方程式の解になっていることが言える。これが「**重ね合わせの原理**」である。形もエネルギーも異なる波が重なって存在していることになるが、つまりこれは確定したエネルギー値を持たない状態であり、複数のエネルギーの値を同時に持っているという奇妙な状態であるとも言えそうだ。

変数分離法の説明の最初の部分で、 $\psi(x, t) = f(x) g(t)$ と表せるような解以外は見捨てようと言ったが、上で作った $\Phi(x, t)$ はまさにこの形で表せなかった関数であって、見捨てられそうになっていた解である。こうして多数の解が救われたことになる。

さて、時々次のような考え違いが起きている。前節で話した「時間に依存しないシュレーディンガー方程式」を解いたときに出てくる多数の固有関数の線形和を取ったもの、つまり波の重ね合わせをしたものを次のよう

に作る。

$$\phi(x) = \sum_n C_n f_n(x)$$

これはシュレーディンガー方程式の解になっているだろうか？ 間髪を入れずに言ってしまうが「なっているはずが無い」というのが答である。しかし「重ね合わせの原理」があるのだからこのことは言えるのではないかと漠然と信じてしまっている人が時々いる。

まず最初に指摘したいのは、ここでの $f_n(x)$ は「時間に依存しないシュレーディンガー方程式」の解であって、 $e^{-i\omega_n t}$ が付加されていないから、まだ「時間を含む方程式」の解にはなっていないという点だ。次に指摘したいのは、「時間に依存しない方程式」の方にはエネルギー E が含まれているという点だ。 $f_n(x)$ というのはそのエネルギーが特別な値 E_n を取る時だけの解である。 E の値が異なれば、それはそれぞれに異なる方程式のようなものだろう。それぞれに異なる E に属する解を足し合わせても、それはエネルギーがどんな値のときの解なのか判然としない。

具体的に式で書けばもっと簡単に分かる話で、「時間に依存しない方程式」の場合には

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (f_1 + f_2) = [E_1 - V(x)] f_1 + [E_2 - V(x)] f_2$$

とまでは言えるが、右辺はこれ以上はまとまらず、元の方程式と同じ形にはできない。先ほどのようなことは成り立っていないのである。

「時間に依存しないシュレーディンガー方程式」はどのようなエネルギー状態が存在を許されるかを知りたいときに使われる。そういうときには、その重ね合わさった状態にはあまり興味がない。エネルギー固有値 E が確かに定まった状態を仮定していると言えるだろう。

あまり教育熱心ではない学校ではほとんど説明も無く、ただ形式的に変数分離法が説明されて、後はそれを解くことだけが求められる。そして、求めた波動関数の絶対値を2乗したものが「粒子がそこに存在する確率」なのだと言えられる。ここで誤解があると次のような疑問を持つことになる。「位置は確率的にしか決まらないのに、なぜエネルギーや運動量は飛び飛びの値として確定するのだろうか？」

このような疑問を持って追求を続けるなら、その学生はやがては本当のことを知って救われるだろう。しかし大半の学生は疑問さえ持たずに、問題集の解答と同じ結果になることだけを求めて計算を続ける。

実際には求まった複数の解のうち、どの状態をどんな組み合わせでどの程度含んでいるかについては確定してはいないのだ。

1.7 3次元への拡張

普通の教科書ならば、この後しばらくは1次元のシュレーディンガー方程式に具体的な $V(x)$ を当てはめて、幾つかの例題を解いてみせたりすることだろう。しかし現実の世界は3次元だ。1次元の話をしてもらってもそれが何を意味しているのかまだよく分からないし、退屈なのである。少なくとも私が初めて量子力学を学び始めた頃にはひどく退屈に思えたものだった。1次元の問題といえども慣れない計算ばかりで不安になってくるし、力尽きる前に本題にまでたどり着くことができるのだろうか心配になってくる。どうせ数学で苦しむのなら楽しく苦しもうではないか。本当は1次元の話も重要なのだが、私にはそれよりも先に見せたいものがある。というわけで、そのために必要な3次元のシュレーディンガー方程式を急いで用意しよう。

3次元のシュレーディンガー方程式を作るためには3次元の波を考えなくてはならない。3次元の波と言っても想像するイメージは人それぞれだろう。しかし空間を縦横無尽に行き交い重なり合うような波を考えるのではなく、ここでは1次元のときに考えた波を素直に拡張したものを考えたのである。空間のある方向へ真っ直ぐに進む波である。

空間の一点から発生して広がる波の波面は球面になっているだろう。こういうものは「**球面波**」と呼ぶのだった。しかしその球面波が無限の距離にまで広がると、その波面はほぼ平面と区別が付かなくなるほど平らになる。こういうものを「**平面波**」と呼ぶのである。今から考えたいのは「球面波」ではなく「平面波」の方であるが、それはどこか一点から発生したような波ではなく、波面が完全に平らであるために、どこまで進んでも、どこま

できかのぼっても、平面波のまま終わりがなく続くような波である。空間の一定方向を目指して進む、全空間を満たしているような波である。

そのようなものを式で表すためには「**波数**」というものを取り入れると都合が良い。波数 k は波長 λ の逆数に 2π を掛けたものである。

$$k \equiv \frac{2\pi}{\lambda}$$

つまり、 2π メートルの中に何波長分の波が収まるか、という意味の量である。なぜ 2π なのかと言えば、この定義に従うと、波が簡単な式で表せるようになるからである。例えば以前に使った1次元の波はこの k を使うことによって次のように表せることになる。

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= A \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \right] \\ &= A \cos (kx - \omega t)\end{aligned}$$

前に紹介した「**アインシュタイン-ド・ブロイの関係式**」では波長 λ や振動数 ν を使っていたが、このシンプルな波の式に似合うように波数 k や角振動数 ω を使うことにすれば、次のように書き換えることができる。

アインシュタイン - ド・ブロイの関係式 (書き換え)

$$E = \hbar \omega$$

$$|p| = \hbar k$$

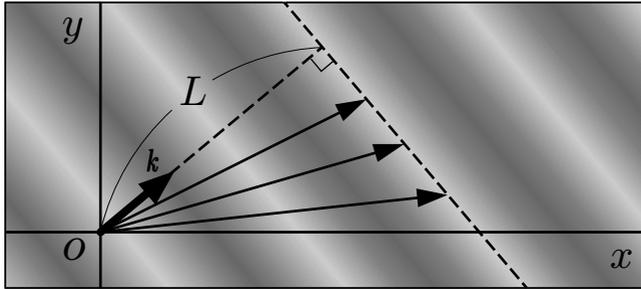
こうして波数 k というのは粒子の運動量の大きさに比例する量だというイメージが出来上がる。初めからこの関係を導入していれば、1次元のシュレーディンガー方程式を導くための説明は終始シンプルな式変形に進んだに違いない。しかし、たかが1次元のシュレーディンガー方程式を導くためだけにそんな下準備をすれば、必要以上に大げさな印象を与えてしまって読者に警戒感を抱かせてしまったことであろう。ところが、3次元を考える場合にはこのような新しい概念の導入は是非とも必要なのである。

第1章 ミクロの世界の謎

さて、さらに一歩進んで「波数ベクトル」というものを考えよう。これは平面波が進む方向を指すベクトルで、そのベクトルの大きさは平面波の波数に等しいものだとする。

$$|\mathbf{k}| = k$$

この波数ベクトル \mathbf{k} と位置ベクトル $\mathbf{r} = (x, y, z)$ の内積 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ を作ると、これはベクトル \mathbf{r} の \mathbf{k} 方向成分の長さ L と k との積を計算したことに相当する。



つまり、様々な位置ベクトル \mathbf{r} があつたとして、それらが全て同一波面上を示している限りは、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ の値はどれも同じである。逆に考えれば、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ が同じ値になるような点は同一波面を意味していることになる。

それで次のような式を作れば1次元の波の素直な拡張になっており、 \mathbf{k} 方向へ進む波数 $|\mathbf{k}|$ の波を意味することになるだろう。

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

波数ベクトル \mathbf{k} の各成分を (k_x, k_y, k_z) で表すことにすれば、次のようにも表せる。

$$\psi(x, y, z, t) = A \cos(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)$$

こうして普通の平面波を式で表すことができたわけだが、前にも言ったように量子力学に出てくる波は本質的に複素数成分の波なのだった。それで指数を使って次のように表すことにする。

$$\psi(x, y, z, t) = A e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}$$