

量子力学A¹

1. 序論

1-1. 古典力学と量子力学

量子力学は、主に原子・分子などのミクロの世界を記述する力学であるが、実際はマクロの世界も含め自然を記述する最も基本的な力学と言える。20世紀の初めの頃から現在まで、ほとんど修正なしで様々な実験において精密に成り立っている。現在、基礎・応用に渡って最も重要な学問の一つであり、「CPUなどの半導体、量子コンピューターの原理、設計」から「宇宙論（宇宙の始まりの議論）」まで、その成果は及ぶ。

ミクロの世界の構成要素（電子、陽子、・・・）は、野球のボールなどと同じようにマクロの世界の力学で記述・理解することはできない。古典物理学は我々のマクロな世界の経験をもとに構築されているので直感的に理解しやすい。しかし、スケールを縮小していけば、そのままミクロの世界を理解できるのか、というと、そうはならない。マクロの世界のように、粒子の運動量や位置などの物理量はきちっと決まっていて、その時間変化を追っていけば良いというものではない。標準的な量子力学によると、きちっと決めることができるのは抽象的な「状態」だけである。その状態に対して観測という行為を通じて、観測可能な物理量の値が「確率的に」決まる。このように、量子力学では古典力学と全く異なる記述がなされ「实在論」にさえ話は及ぶ。

量子力学を学ぶのが難しいと感じる理由は二つある。一つは数学的な技術的側面。2階の偏微分方程式を解く数学的な技術や線形代数（無限次元の複素ベクトル空間）の理解などが必要となる。これに精通していたとしても、もう一つの問題は、我々の直感的な理解を許さない量子力学の枠組み。これは抽象的な形で数学的にしか記述できない。

次節では、まず、古典論の世界と激しくぶつかり合うような実験を紹介し量子力学的な世界を概観する。

1-2. 粒子性と波動性

1-2-1. 光の粒子性と二重スリットの実験

光の粒子性は20世紀の初頭に、1) 空洞放射に対するPlanckの理論 (1900)、2) 光電効果に対するEinsteinの理論 (1905)、などによって明らかにされていった。1個の光子(photon)のエネルギーを ε とすると $\varepsilon = h\nu$ (Einsteinの式) と書ける。ここで、 h は Planckの定数とよばれ、 $h = 6.6261 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{sec}$ である。 $\hbar \equiv h/2\pi$ もよく使われる。この記号を使うと

$$\varepsilon = \hbar\omega \quad (1-2-1)$$

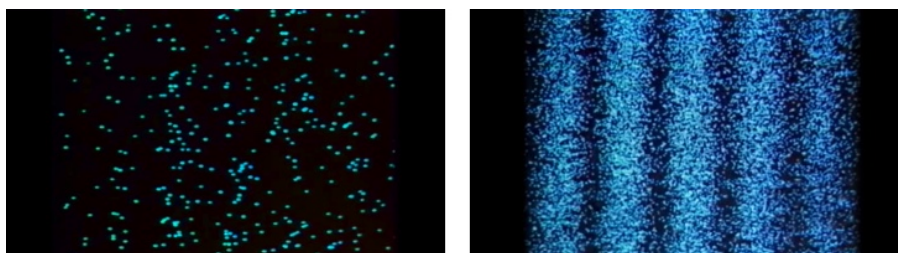
と書ける。ここで、 $\omega = 2\pi\nu$ である。

一方で、二重スリットを通った光がスクリーン上に干渉縞を作るYoungの実験（1800年代の初め）は、光の波動性を示す証拠としてよく知られている。

¹ 講義を受けることが主体であって、本稿は、あくまでも受講者が勉強しやすいように書いたメモにしか過ぎない。講義中に書いた図などものせていないものがたくさんある。また、どの人の本や書き物でも同じことであるが、思わぬ誤りを含んでいるかもしれない。これらのことを了承の上、使用してください。（ただし、本稿にある演習問題は演習の時間に実施します。）

この実験を光量を極限まで絞っておこなったらどうなるか、という思考実験が朝永振一郎によってなされている²。その後、この実験は、1982年、実際に浜松ホトニクス中央研究所にて行われた。それによると朝永の思考実験の通りとなった。

すなわち、下の左の図のように干渉縞は薄くなっていくが、充分光量が落ちると、光子1個1個が個別にスクリーンのセンサーと反応して点として現れる（粒子性）。その点はスクリーン上の別々の位置に乱雑に現れていくように見えるが、下の右の図のように蓄積していくと不思議なことに最終的に干渉縞になる。（光子同士が衝突したり相互作用している訳でもないのに最終的に干渉縞になる。）³



個別にスクリーン上にやってくる光子は二つのスリットのどちらかを通り抜けてやってきたはずなのに、なぜ、最終的に干渉縞が現れるのか。常識に反するように見えるが、一つの光子がやってくる際にも、何らかの波が付随し、その波は両方のスリットを通り干渉し合っているのであろうか（一つの光子でも干渉を起こす?）。

近年、二つのスリットのすぐ後に、それぞれ、0度と90度の偏光板を置く実験もなされた。こうすると、光子はどちらのスリットを通過してやってきたかがわかる。これを実際に実行すると干渉縞は消えてしまった。また、0度と90度の偏光板に加えて、スリットとスクリーンの中に45度の偏光板を追加すると、45度の偏光板を通過した際、どちらのスリットからの光子かが再び不明になる。この時、干渉縞は観測された。このように、どちらのスリットを通過した経路かを判定するような実験をすると干渉縞は消えてしまうのである。最近では、遅延実験など、様々な工夫を加えた実験がなされている⁴がこの結論は変わらない。

これらの結果は後で電子の場合を述べた後に、さらに検討を進めることにする。

1-2-2. 電子の波動性と電子線回折

de Broglie（ド・ブロイ）は電子やそのほかのミクロの粒子は波動性を持つことを提案した。すなわち、運動量 p の粒子は、以下の式で表されるような何らかの波動性（de Broglie波長 λ ）を持つとした。

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (1-2-2)$$

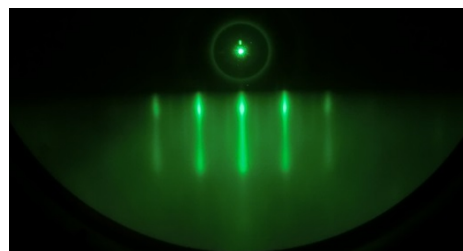
これらの事は、1927年、Germerらによって電子線をNiなどの結晶格子に当てた際、スクリーンに回折パターンを観測したことで実験的に確かめられた。電子線はフィラメントにおいて発

²朝永振一郎「光子の裁判」(1949): 朝永振一郎著「量子力学と私」(岩波文庫) p.285 に収録

³ 図は浜松ホトニクス(1982).

⁴ 興味のある人は、別冊日経サイエンス「量子の逆説」(2014)などを見よ。

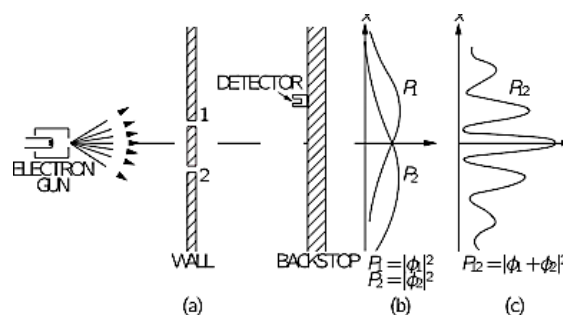
生した熱電子を真空中で加速する電子銃(e-gun)などで作られる。結晶格子は数Åの格子間隔 d を持つため、三次元の回折格子とみなせる。電子の運動量を適当に決めてやると式(1-2-2) より de Broglie波長が数Åになるようにできるので、 $\lambda \sim d$ となり、干渉縞が出現する。



このような電子線回折は、現在では、結晶の表面付近の構造を観測するために頻繁に利用されている。例えば、反射高速電子回折 RHEED (Reflection High Energy Electron Diffraction)は基板上に結晶軸をそろえてエピタキシャルに積層した単結晶の薄膜の表面構造などの、「その場観察」の実用的手法として広く使われている。⁵ 右図はCr(001)表面のRHEED像 (電子線回折像) である。⁶

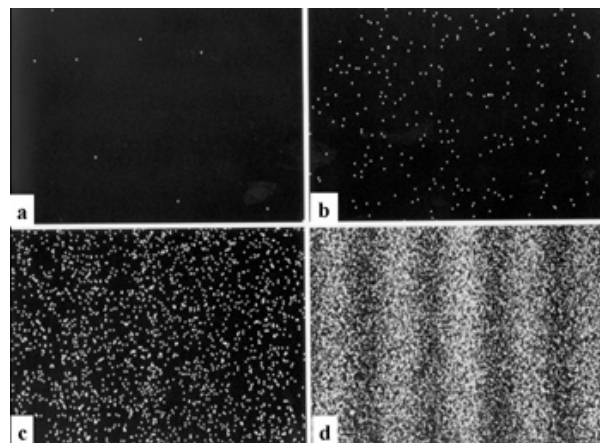
1-2-2. 電子の二重スリットの実験

電子の二重スリットの思考実験は Feynman (ファインマン) の有名な教科書、ファインマン物理学に掲載されている (右図はその挿入図)。⁷



彼はこの実験が実際に可能になるとは考えていなかったようだが、同等の実験が1989年、日立製作所中研の外村彰らによってなされた。右下図にそれを示す。⁸

外村らは、電子線バイプリズムという手法で二重スリット実験を行ったが、それによると、電子線の強度を充分弱くし、1回に1個の電子が飛んでくる場合、スクリーン上のどこかの場所に1度に1個の点が捕らえられ感光する (粒子性)。その点は、同じ条件で電子を放出しても、毎回、異なった場所で見つかる (確率が関与することを示唆) が、続けて実験を重ねると、光子の二重スリットの実験の場合と同様に最終的に干渉パターンが出現する (波動性)。



この結果は明らかに電子がマクロの世界の野球のボールを単純に小さくしていったのとは異なることを示している。1個の粒子であっても、何らかの波動性が付随し、同時に二つのスリットを通り、干渉効果を示しているように見える。しかし、観測されるときは、スクリーン上のどこか一箇所に限られるのである。こうした振る舞いは光子、電子に限らず、ミクロの粒子で一般的に見られるのであり⁹、マクロの世界とは異なる原理が働いていることを示唆している。

⁵ 実際、RHEEDは東邦大学理学部物理学学科の磁気物性研究室のMBE装置 (分子線エピタキシー装置) で日常的に使われている。

⁶ 東邦大学理学部物理学学科磁気物性研究室にて撮影

⁷ ファインマン物理学 <5> 量子力学 (砂川重信訳、岩波書店) 第1章を見よ。

⁸ この実験は、2002年にPhysics Worldの読者の投票で「最も美しい実験」に選ばれた。

⁹ 高分子のフラーレン (サッカーボールのような形状をした炭素からなる分子、C60) でさえ、同様の干渉縞が観測されたとの報告がある。M. Arndt et al., Nature **401** (1999) 680-682. 最近では、ウイルスの結晶での実験も計画されているらしい。

1-3. 二重スリット実験の検討

光子、電子について示してきた二重スリットの実験結果について、ここでまとめながら検討してみよう。

(1) スクリーン上で観測される時は必ず1個の粒子として出現 (粒子性)

(2) 同じ条件で入射しても観測される位置は毎回異なる。(これは、本質的に確率に支配されていることを示唆している。古典的な粒子が各瞬間に定まった位置を持つのは異なる。)

(3) 粒子間の相互作用を無くすために毎度1個の粒子が飛んでくるような条件で実験しても、最終的に干渉パターンが出現する。(この説明にはいろいろな解釈が提案されたが、標準的なものとしては、1個の粒子であっても何らかの波が空間的に広がって両方のスリットを通り干渉し、その干渉した状態(重ね合わさった状態)から、ある法則によって粒子が確率的にどこかスクリーン上一箇所で観測される、とする)

(3) の考えをもう少し詳しく述べる。

二つのスリットを S_1, S_2 とし、 S_1 を通った波を ψ_1 、 S_2 を通った波を ψ_2 とすると、スクリーン上に到達する際は、その重ね合わさった波、 $\Psi = \psi_1 + \psi_2$ となっているであろう。この Ψ がスクリーンでの粒子の到達する場所の確率分布を決めていると予想される。しかし、波は正にも負にもなり得るが確率は正の値しか持たないので、 Ψ 自体が確率の波にはなり得ない。そこで波の強度に対応する $|\Psi(\mathbf{r})|^2 (\geq 0)$ が $\mathbf{r} \sim \mathbf{r} + d\mathbf{r}$ で粒子が観測される確率密度と考える(確率自体は $|\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$)。このように仕方でも実験をうまく説明することができることがわかっている。

次章で述べるが、標準的な量子力学によれば、これらの波は抽象的な「波動関数」と呼ばれる「複素数」の波でならねばならず、実際には観測できない。なので、初期の頃考えられたような、ミクロの粒子が実空間で振動しながら飛んで行く、といった単純な描像とは異なる。¹⁰

演習1

(1) 電子線を結晶に当てて干渉の様子を見るためには、どの程度のエネルギー (eV) の電子線を使えば良いか。結晶の原子間隔は 1\AA とし、電子の質量は $9.1 \times 10^{-31}\text{kg}$ とする。(1eV = $1.6 \times 10^{-19}\text{J}$)

(2) 相対性理論によれば、静止質量 m_0 、運動量 p の粒子のエネルギーは $E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}$ と書ける。こ

こで、 c は光速である。今、光子の場合を考えると $p = \frac{h}{\lambda}$ を満たすことを示せ。($m_0 = 0$ 、 $E = h\nu$ 、 $\lambda\nu = c$ を使う)

(3) 二重スリットの実験で、スリット S_1 を通った波 ψ_1 とスリット S_2 を通った波 ψ_2 が「複素数の波」であるとしよう。 $\Psi = \psi_1 + \psi_2$ として、 $|\Psi(\mathbf{r})|^2 = (\psi_1 + \psi_2)^*(\psi_1 + \psi_2)$ を展開しなさい。 S_1 のみ開いている場合の確率分布 $|\psi_1|^2$ と S_2 のみ開いている場合の確率分布 $|\psi_2|^2$ の和以外の項を「干渉項」という。これを求めよ。今、 $\psi_1 = h_1 e^{i\omega t}$ 、 $\psi_2 = h_2 e^{i\omega t}$ 、 $h_1 = |h_1| e^{i\delta_1}$ 、 $h_2 = |h_2| e^{i\delta_2}$ (h_1 、 h_2 は複素数) で表される時、具体的に干渉項を計算しなさい。

¹⁰ ド・ブローイは粒子が「パイロット波」と呼ばれる波に運ばれて移動していくと考えた(1927)。Bohm (ボーム) は、この考えを発展させ、粒子が「量子ポテンシャル」と呼ばれる特別なポテンシャルの中を古典力学的な法則で軌道を描いて移動していくと考えた(1952)。

2. Schrödingerの方程式

2-1. 波動関数

古典的な粒子は各瞬間ごとに定まった「位置」を持つ。「位置」のその後の時間変化は、その時点での位置と運動量を初期条件として与えれば Newtonの運動方程式から 一義的に決まる (因果律を満たす)。

一方、量子力学的な粒子は、 $t = 0$ で同じ初期条件を与えても、 $t = t_1 > 0$ で観測される位置は毎回異なるので、どの時刻においても定まった「位置」というものを持たないし、粒子の経路も定める事が出来なさそうである。ミクロの粒子の運動は前の結果が後の結果を決めるという因果律を満たさないのであろうか？不連続的で一義的に定まらないのであろうか？また、極端な話、観測していない時はミクロな粒子は実在するのかどうか疑ってみる必要があるという主張もある。

ところで、前節でも述べたように、粒子は何らかの波動性を持つ。標準的な量子力学では、粒子自体が実際に振動しながら動くという訳ではなく、抽象的な波 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ (波動関数) を考え、 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 自体は連続的、一義的に時間変化して行くとする。また、 $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ により観測した場合の粒子の確率分布が求まる。 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ は普通、空間的に広がっているが、粒子を観測すると、その確率に従って、どこか一箇所に出現する。この時点で、不連続的な現象が起きる。

こうして、現時点での標準的な量子力学による自然界の記述は二重構造を持ち、波動関数のレベルと現象 (観測) のレベルの「二つのレベル」で行われる。

(1) 波動関数のレベル

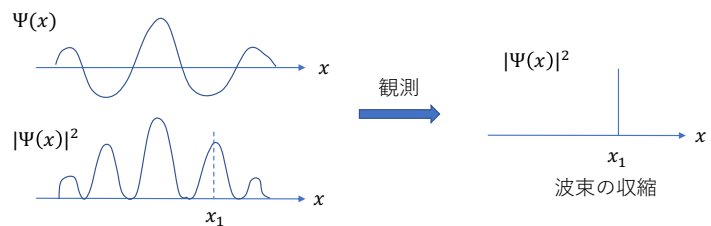
波動関数 Ψ で表される「状態」は各瞬間ごとに一義的に定まったものとなる。 Ψ の変化は Schrödinger (シュレディンガー) の方程式 と呼ばれる方程式で表され、連続的、因果的に起こる。

(2) 現象 (観測) のレベル

しかし、この「状態」において粒子の位置を観測すると、どこか一箇所の位置に出現する。同じ初期条件から始めて、この観測を何度も繰り返すと確率密度の分布 $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ に従った結果が得られる。(時刻 t に $\mathbf{r} \sim \mathbf{r} + d\mathbf{r}$ の区間に見出される確率は $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}$)

一旦観測すると、粒子はどこかにある確率で見出されるが、その直後は、その粒子はその位置にあることが決まってしまうので、その時点で、波動関数は見出された粒子の位置に収縮する (リセットされる) と考えねばならない。

今、右図の左上のような波動関数 $\Psi(x)$ の場合を例にとろう。この時、粒子が見つかる確率分布 $|\Psi(x)|^2$ は下図の左下のような形になる (図は正確には書いてないが、節と呼ばれる元の波動関数がゼロの位置は $|\Psi(x)|^2$ もゼロになるので粒子が観測されない場所である)。この「状態」の時、粒子を観測すれば、 $|\Psi(x)|^2$ の確率である点に粒子が出現する。これを x_1 としよう。この瞬間、粒子が x_1 にいるのが確定するので、波動関数、あるいはその2乗は x_1 だけに値を持つようになるだろう (右図の右側)。



この一見不自然で、その機構が不明な過程は「波束（波動関数）の収縮」と呼ばれていて、これまで述べてきた標準的な量子力学の解釈、いわゆる「コペンハーゲン解釈」¹¹における未解決の問題である。

この観測行為による突然の波束の収縮は、「Schrödingerの方程式自身には解として含まれていない」、すなわち、「量子力学の枠組みの外にある」ように見える。これに対しては、いろいろな説が提案されてきた。例えば、観測機器との相互作用まで詳細に組み込めば量子力学の枠組みに収まる、とか、多世界解釈などのようにコペンハーゲン解釈と全く異なる解釈も提案されている。他にも、1-3節の注釈で述べたBohmの提案のように、粒子が単に量子ポテンシャルなる場の中を進行するとするものでは粒子の経路が定まるので波動関数の収縮を考える必要はなくなる。何れにしても、これについては、未だ解決しない基本問題として残っている。

ところで、「確率」が持ち込まれること自体に違和感を感じる人も多いだろう。我々は厳密に様々な条件をおさえきれなかったり、情報が不十分である時に確率的な考えを持ち出す。例えば、サイコロを振って投げ出し一つの目が出る過程を考えたとき、初期条件は毎回変わるだろうし、空気の抵抗や転がる時の床との摩擦や様々な複雑な過程を踏むので、全て厳密に追って行くことはできない。もし可能であれば（理想的には）次にどんな目が出るかを完全に力学的に計算できるであろう。しかし、それが実際上不可能なので、我々はサイコロを振った時の事象を確率的に考えるのである。

量子力学に確率が持ち込まれた時、量子力学が真に基本的な理論ではないのではないか、もっと背後に根本的な理論が隠されているのではないか、という考え方もあった。例えば、Einsteinは「神様はサイコロを振らない」と言った、という有名な話がある。

これまでに、背後に根本的な理論が隠されているかどうかを実験的に調べることがなされている。Bell（ベル）の不等式（1964）と呼ばれる式を検討するAspect（アスペ）らの実験（1980年代）によれば、少なくとも「局所的な隠された変数を持つ理論」（古典力学的な決定論的な理論）については否定された¹²。標準的な量子力学は「確率」をミクロの世界に本質的なものとして受け入れる必要があることを主張している。

2-2. Schrödingerの方程式の導出

1925年、Schrödingerはde Broglieの関係式 (1-2-2) とEinsteinの関係式 (1-2-1) を基礎として波動関数 Ψ の従うべき方程式を提唱した。今、de Broglieの関係式に波数 $k \equiv \frac{2\pi}{\lambda}$ を導入

すると、

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad (2-2-1)$$

と書ける。これとEinsteinの関係式 $E = \hbar\omega$ より、力学的エネルギー $E = \frac{p^2}{2m} + V$ は

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

となる。この ω と k の関係を分散関係(dispersion relation)という。ここで、 V はポテンシャルエネルギーである。求めるSchrödinger方程式は、この分散関係を満たさなければならない。

¹¹ Copenhagenはデンマークの首都。この学派のBohr（ボーア）研究所があったことに由来。

¹² ただし、大局的な理論は否定されていない（Bohmの理論）

2-2-1. 自由粒子の1次元のSchrödinger方程式

最初に、自由粒子の1次元のSchrödinger方程式を導く。この場合、 $V = 0$ なので、満たすべき分散関係は(2-2-2)より

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (2-2-3)$$

となる。すなわち $\omega \propto k^2$ なる分散関係となる。

$k = p/\hbar$ 、 $\omega = E/\hbar$ で進む波として次の最もシンプルな波動関数（正弦波）を仮定する。

$$\psi(x, t) = A \sin(kx - \omega t) \quad (2-2-4)$$

ここで、 A は定数である。

さらに次式で表される通常の波の波動方程式が成立すると仮定してみよう。

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{1}{v_{ph}^2} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (2-2-5)$$

ただし、 v_{ph} はこの波の位相速度(phase velocity)を表す。(2-2-4)を(2-2-5)に代入することにより、 ω と k の関係を求めることができる。実際にやってみると、 $\omega^2 \propto k^2$ となってしまう、 $\omega \propto k^2$ なる分散関係、(2-2-3)を満たさないことがわかる（演習）。すなわち、自由粒子の波動関数として(2-2-4)も、また、それが満たすべき波動方程式として(2-2-5)も、適当でないことがわかる。

それでは、いかなる形の波動関数と波動方程式を導入すれば良いのであろうか。 ω^2 は(2-2-4)を時間で2回微分したことにより出てきた。であれば、時間に関しては一階微分のみを含めば ω^2 ではなく ω になり、正しい分散関係が得られることが予想される。すなわち、以下のような時間に関しては1階、 x に関して2階微分を含む波動方程式を仮定してみよう。

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} - \alpha \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = 0 \quad (2-2-6)$$

ここで、 α は定数である。しかし、この場合、(2-2-4)の形の波動関数はもはや方程式(2-2-6)を満たさない。時間に関して1階、 x に関して2階微分なので、両者の微分の結果の関数は異なる形になるからである。そこで以下の形の波動関数を仮定する。

$$\psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + A \sin(kx - \omega t) \quad (2-2-7)$$

cosとsin両方の関数を含めば、この要求を満たせそうである。(2-2-7)を(2-2-6)に代入し変形すると、sinの係数が両辺等しいという条件から、 $A = -\frac{\alpha \omega}{k^2}$ が得られる。一方、cosの係数が両辺等しいという条件から、 $A = \frac{k^2}{\alpha \omega}$ が得られる。 $-\frac{\alpha \omega}{k^2} = \frac{k^2}{\alpha \omega}$ より、 $\alpha = \pm i \frac{2m}{\hbar}$ が得られる。

Schrödingerが行ったのと同じく、この式のうち、負の符号を選び、分散関係(2-2-3)を要求すると、 $\alpha = -i\frac{2m}{\hbar}$ 、 $A = i$ となる。

結局、求める自由粒子の時間に依存する一次元のSchrödinger方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} \quad (2-2-8)$$

となる。その解である自由粒子の波動関数は $\psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)$ となる。ここでEuler (オイラー) の公式を使えば

$$\psi(x,t) = e^{i(kx - \omega t)} = e^{i(px - Et)/\hbar} \quad (2-2-9)$$

となる。

逆に(2-2-9)は、正しい分散関係(2-2-3)が成り立つなら、(2-2-8)のSchrödinger方程式を満たす (演習)。

これらの結果をみると、Schrödinger方程式も、その波動関数 Ψ も複素数を本質的に含むことがわかる。そのため、 Ψ 自体は観測できない抽象的な波である。しかし、確率密度は $|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*\Psi$ で計算されるので正の実数となり観測と関わって良い。ここで Ψ^* は Ψ の複素共役である。

2-2-2. ポテンシャルがある場合の1次元のSchrödinger方程式

(2-2-2)の分散関係を満たす「時間に依存するSchrödinger方程式」は以下の様になる。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x,t) \quad (2-2-10)$$

(2-2-8)の右辺に $V(x)\psi(x,t)$ の項が加わっている。

ここで、ハミルトニアン演算子 \hat{H} (単にハミルトニアンと呼ぶことにする) を定義する。

$$\hat{H} \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x)\right] \quad (2-2-11)$$

これを使うと、1次元のSchrödinger方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t) \quad (2-2-12)$$

のように書ける。 \hat{H} は Ψ に作用する演算子である。(演算子は今後 \hat{H} のように、その記号の上にハット記号をつけて表すことにする。) \hat{H} の第一項は微分演算子からなる。第2項はポテンシャル演算子 $\hat{V}(x)$ が書かれているが、これは単に実数の関数 $V(x)$ を Ψ に掛けることを意味する。

(2-2-12)をみると、 Ψ の時間変化は Ψ にハミルトニアン演算子を作用させたものになることがわかる。これについては別の章で詳しく扱う。

古典力学的なハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (2-2-12)$$

と書けるが、量子力学的なハミルトニアン演算子(2-2-11)と比較すると、形式的に以下のような置き換えになっているとみなせる。

$$p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (2-2-13)$$

$$V(x) \rightarrow \hat{V}(x) \quad (2-2-14)$$

こうしてみると、量子力学では物理量は演算子で表されていることがわかる。

2-3. 古典的なハミルトニアンからSchrödingerの方程式を作る方法¹³

古典力学のハミルトニアンから時間に依存するSchrödinger方程式を形式的に作る方法を述べる。

(1) 古典力学的なハミルトニアンを書き出す

$$(例) H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

(2) 運動量を $p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ の規則に従って演算子に置き換える。 $V(x)$ はそのままで良い

$$(例) H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \rightarrow \hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]$$

(3) $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t)$ を作る

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

2-4. 3次元のSchrödingerの方程式

直交座標系においては、古典力学的なハミルトニアンを書き出し、 $p_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $p_y \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$, $p_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ の置き換えを行えば良い。古典的なハミルトニアンは $H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(\mathbf{r})$ なので、

ハミルトニアン演算子は $\hat{H} \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(\mathbf{r})\right]$ となる。よって、求める3次元のSchrödingerの方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(\mathbf{r})\right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2-4-1)$$

と書ける。

¹³ 詳細は4-1節で扱う

ナブラ ∇ やラプラシアン Δ を使って、(2-4-1)は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad \text{や} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad \text{と書いても良い。}$$

自由粒子 ($V(\mathbf{r}) = 0$) の場合、 $\psi(\mathbf{r}, t)$ は (2-2-9) に対応して、

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \quad (2-4-2)$$

となる。ここで、 $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ 、 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ である。 \mathbf{k} は波数ベクトルと呼ばれる。(2-4-2)を(2-4-1)に

代入すると、 $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ なので、 $E = \hbar\omega$ 、 $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ の関係を満たすことがわかる。

2-5. Schrödingerの方程式の満たす性質

以下にSchrödingerの方程式の性質を列挙する。

(1) 線形性。重ね合わせの原理が成り立つ

線形の微分方程式なのでその解も重ね合わせの原理が成立。

(2) 粒子の存在確率の保存

時間が変化しても、全領域での確率の総和は変化してはいけない。

確率流の保存に対応した「連続の方程式」が成り立つことを示すことができるので、これを満たしている。¹⁴

(3) 因果律を満たす

波動関数のレベルでは時間変化は一義的、連続的、因果的である

(4) 古典力学との何らかの対応

Schrödingerの方程式の期待値をとることで近似的なNewtonの運動方程式（以下の式）が得られる（Ehrenfest(エーレンフェスト)の定理）¹⁵

$$\frac{d \langle p \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle = \langle F(x) \rangle \quad (2-5-1)$$

ここで、 $\langle \dots \rangle$ は $\langle \dots \rangle$ の中の物理量の期待値を表す。

¹⁴4-4節で扱う

¹⁵ 演習2(6)の（参考）を見よ

演習2

(1) 式(2-2-4)の正弦波で表される波動関数を式(2-2-5)の通常の波動方程式に代入すると、 $\omega^2 \propto k^2$ となつてしまい、正しい分散関係(2-2-3)を満たさないことを示せ。

(2) 2-2-1節に示したやり方で実際に(2-2-6)(2-2-7)の定数が $\alpha = -i \frac{2m}{\hbar}$ 、 $A = i$ となることを導びけ。

(3) 自由粒子の一次元の波動関数 $\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} = e^{i(px - Et)/\hbar}$ (2-2-9) は、分散関係(2-2-3)が成り立つなら、(2-2-8)のSchrödinger方程式を満たす。これを確かめよ。

(4) 1次元調和振動子の古典的なハミルトニアンを書いて、2-3節の規則により、この系のハミルトニアン演算子と時間に依存したSchrödinger方程式を求めなさい。

(5) 角運動量 $\mathbf{L} \equiv \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ の各成分 L_x, L_y, L_z に対応する量子力学的な演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ を求めなさい。

(L_x, L_y, L_z を x, y, z, p_x, p_y, p_z で表し、 $p_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, p_y \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, p_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ の規則で置き換えよ)

(6) 位置と運動量の期待値について以下のことを求めなさい。

(a) 位置の期待値 $\langle x \rangle$ は $\int \psi^*(x, t)x\psi(x, t)dx$ で与えられることを示せ。

(b) 運動量の期待値 $\langle p \rangle$ を $m \frac{d\langle x(t) \rangle}{dt}$ から求めよ。

(c) (b)の結果は $\int \psi^*(x, t)p\psi(x, t)dx$ で運動量 p を演算子 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ で置き換えたものと等しいことを

確かめよ。

(参考) この $\langle p \rangle$ の時間微分を計算することにより、次のEhrenfestの定理が成り立つことを示せる¹⁶。

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle = \langle F(x) \rangle \quad (2-5-1)$$

古典力学との対応関係が成立するためには、広がっている波束にわたって $V(x)$ の変化が十分緩やかである必要がある。

(7) 時間 $t = 0$ の時、粒子の存在確率密度 $|\Psi(x)|^2$ が幅 Δ のガウス分布を持つような波 (波束と呼ぶことにする) を考える。この波束を実現するためには、重み $g(k)$ で様々な波数 k の波を重ね合わせねばならない。この時、 $|g(k)|^2$ は、中心が k_0 で幅が $\frac{1}{\Delta}$ であるようなガウス分布となる。この波束は時間がたつと、その中心は一定の速度 $v_g = \frac{\hbar k_0}{m}$ で運動するが、様々な波数 (運動量) の波が重なっているため、その波束の幅 ($|\Psi(x)|^2$ の幅) は次第に広がっていく。その幅の変化は $\sigma = \left(\frac{\hbar}{m\Delta}\right)t$ で与えられる (これは求めなくて良い)。以下の問いに答えよ。

(a) 電子 ($m = 9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$) の場合、 $\Delta \sim 10^{-10} \text{m}$ として $\left(\frac{\hbar}{m\Delta}\right)$ を計算しなさい。 10^{-10}sec で波束の幅の変化 σ はどのくらいになるか求めよ。

(b) もし、 $m = 1 \text{g}$ なら、波束の幅の変化 $\sigma \sim 1 \text{mm}$ になるまで、その程度の時間がかかるか。

¹⁶ 別の方法でも導ける (第3章、演習7の(4)参照)