量子力学とは何か

或る未知の学問領域に進入しようという時、その如何を問わず、最初に為すべきことは、その学問領域がどういうものか知ることである。つまり、それが一体何で、何処の、いつの時代の、どのような状況において発生した代物か、ということだ。

これは、戦術についても同じことがいえる。そのことは、『孫子』の有名な一節の一つ、「知彼知己者、百戰不殆」、即ち「彼を知り己を知れば、百戦して殆(あや)うからず」に現れている。というわけで我々が、量子力学という「敵」を攻略するに当たり最初に為すべき最も基本的事柄は「量子力学とは何か」ということであるから、本論へ進む前に、ここを説明しておきたい。

然し量子力学というが、「量子」とは一体何なのか。先ずはそこから出発して、これを本書における量子力学物語への序曲とする。

量子とは、「或る単位量の整数倍の値しかとらない量について、その単位量」などと定義されている。当然間違ってはいないのだが、この分野に入って間もない初心の人々にとって、これは不親切極まる。

序文でも述べた通り、本書はほぼ厳密性を考慮していないため、ここでも正確さよりも読者の方の理解を優先して、量子をざっくりと「一定量を持った物理量の最小基準」（「物理量」とは、数値と単

位のセットで表される量の総称である）と考える。

つまり量子とは最小単位のようなものであると考えて差し支えない。

これから先、量子力学を学ぶに当たり「光量子」や「エネルギー量子」といった単語が出現するが、これらはそれぞれ「光の最小単位」、「エネルギーの最小単位」という意味である。「最小単位」なので、量子という名の物体（物質）はない。これは「物体」という名の「物体」が存在しないことと同じ理由で、量子は物理量を区別するための「基準」でしかないのである。

勿論、最小基準というわけだから、量子に含まれるのは極めて小さい物理量である。この「極めて小さい」というのは塵や埃のようなレベルではなく、原子や原子核、電子、陽子、中間子、光子、陽電子、ニュートリノ等のレベルである。この意味で、量子は「万物の根源」と形容しても良いであろう。

この中に挙げた原子については、「地球と林檎の大きさの比は、林檎とその林檎の中に在る原子の大きさの比とほぼ等しくなる」（地球を E、林檎を A、原子を a とすると、$E:A \approx A:a$）というほど小さいにも関わらず、先ほど挙げた量子の種類の中では、原子が最大の大きさなのだ（場合にもよるが、実際の原子半径はおおよそ$10^{-10}\,\mathrm{m} = 1\,\text{Å}$、即ち 100 億分の 1m）。

先ほど述べた正確な定義については、もう少し本格的に学んだら戻ってこようと思っている。そのころにはこれの意味する所が理解できるはずである。

VIII 行列力学

26 行列の基本

さてここからがメインテーマである。これまでの理論を基に、数学的定式化を行なうわけだが、こうした操作を経て、はじめて量子力学ということができる。量子力学の定式化の形式は主に二つあり、それが**行列力学**と**波動力学**である。この内行列力学は、行列を英語で matrix というので、**マトリックス力学**という人もいる。

歴史的には行列力学が先に誕生し、それを追うように波動力学が生まれたが、一般に行列力学は分かりにくいものとされ、波動力学は物理的イメージを得やすく、より良く理解できるものとされている。

このため、現代の量子力学の本では、行列力学をほとんど扱わないが、量子力学が行列表示でどのように表されるかを知ることは勿論無駄ではない。

それどころか、量子力学の物理量が行列で表せることを知らないとスピンや相対論的量子力学（後述）を理解するのに支障が出る上、量子力学の最も主要な原理の一つである不確定性原理において「交換関係」なるものが出てくるが、これが出てくる所以は行列力学の基本を学んでおかないと分からなかったりする（交換関係について

は、あえて次の節で扱う)。

そうはいっても、行列力学は難しいので、ここでの解説はあくまで初歩の初歩である。また、ここでのことがさっぱり分からなくても波動力学に進む上で特に不都合なことはないが、量子力学の物理量が行列でどのように表されるのか、ということだけは理解して頂きたい。然し、行列が何かを説明しないまま行列力学を進めると不親切なので、先ずは数学的準備ということで、行列の数学を整理しておきたい。

ご存知の方も多いと思うが、行列はつい最近まで**数学C**の一分野として高校で教えられていた。然し、この科目は現在廃止されており(近々復活するという話もあるようだが)、数C廃止に伴い行列分野が高校の範囲から消えてしまったのだ。よって現在、行列は大学の数学だが、もとは高校の範囲だったこともあり、あまり難しくはない。

我々は日常、複数のデータが繁雑になっているとき、しばしば表を書いて理解し易くしているが、行列はそれを抽象化したものと考えて良い。例えば次のようなものである。

$$\begin{array}{cc} & \text{3列} \\ \text{2行} & \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} \end{array} \tag{8.1}$$

中に入っている $a \sim f$ は何らかの数字或いは文字で、ベクトルと同様に**成分**と呼ばれる。ここで、横の並びを**行**といい、順に第1行($a \sim c$)、第2行($d \sim f$)と続く。これに対して縦の並びを**列**と

IX 波動力学

34 シュレーディンガー方程式

以前から述べていることではあるが、量子の状態を数学的に知るためには、ド・ブロイ波を一つの関数とみて式を立てることが必要である。前節で扱った行列力学はその手段の一つであるが、前節で少しみたように、計算が難しく、物理的イメージが得にくい。

そこで求められたのはド・ブロイ波に対する方程式、つまり波動方程式である。古典力学の波動方程式は、与えられた波源と初期条件、境界条件に従ってこれを解くと、波が時間によってどのように伝搬していくか、波の媒質がどのように振動するかといったことが分かるが、ド・ブロイ波も波である以上波動方程式が存在し、そしてそれは古典力学のときと同様、ミクロの世界における量子の状態を明瞭に示すはずである。

こうした考えのもと、解析力学を用いて、オーストリアの**エルヴィン・ルドルフ・ヨーゼフ・アレクサンダー・シュレーディンガー**は、ド・ブロイ波の運動を支配する新しい方程式を見出し、1926年、それを論文『**固有値問題としての量子化**』の中で示した。それは、次のような形をしている。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V\psi \qquad (9.1)$$

これが現在**シュレーディンガー方程式**と呼ばれる方程式の基本形であり、量子力学の基礎方程式として、物理学の数式の中でも特に重要な式の一つに位置付けられるものである。

シュレーディンガー方程式は波動関数を解に持ち、行列力学同様それを普通 ψ と書く。シュレーディンガー方程式を基礎とする量子力学が**波動力学**である。

これからこの方程式を考察していくが、先ずこれを直感的に導出することを試みたい。シュレーディンガーは解析力学を使って導いたが、その方法はたいへん抽象的なので、ここではもっと直観的な方法で導いてみよう。

前提条件として、次の式を用いる。

$$E = h\nu \qquad (9.2)$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \qquad (9.3)$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \qquad (9.4)$$

（9.2）や（9.3）は見飽きているはずであるから説明の必要はないであろう。（9.4）はニュートン力学でいう所の**力学的エネルギー**で、運動エネルギー $\frac{1}{2}mv^2$ を、運動量 p を用いて $\frac{p^2}{2m}$ と書き直したものとポテンシャルエネルギー（位置エネルギー）V との和を示