

量子論の基礎概念

MS 修士課程用

400-8511 甲府市武田 4-3-11 山梨大学 医学工学総合研究部 加藤初弘

(Received October 5, 2004)

量子論の概念が確立した 20 世紀初頭の自然界を踏まえて、量子論の必要性とその誕生についてまとめる。

KEYWORDS: 量子論 二重性 描象 光量子 量子 物質波 波動関数 状態 コペンハーゲン解釈 演算子 shoredinger 方程式

§1. 量子論の歴史的な流れ

— 20 世紀初頭は自然認識に関する転機である —

19 世紀の後半は古典力学では説明できない物理法則が発見され、長くその説明が出来ない状態が続いた。新しい力学の登場に端緒をつけたのが、1900 年に Plank が提案した量子仮説である。この段階では、単なる仮説と考えられていた、“量子”あるいは“光量子”の概念は、その後本質的な“事実”であることが理解された。量子力学あるいは量子論は、1935 年には一応の完成に至るとともに、その理論に対する疑問も提出された。量子論に対する有名な疑問は、Einstein, Rohsen, Podolvski によるものであり 1980 年代の中ごろまで議論が続いた。実際的な現象を理解するうえで、量子論は実用的には問題がないと現在では信じられている。そればかりか、量子論でしか説明できない現象を積極的に利用するコンピュータの研究も始められている。

量子論にかかわる発見の歴史を年表にまとめると次のようになる。多くの現象が 19 世紀末から 20 世紀の初頭に発見されたこと、1930 年代には理論がほぼ完成したことが分かる。20 世紀初頭は、社会・政治的にも激動の時代であったが、力学の上でも大きな転機があった。

発見の年	発見・理論提案事項
1687	Newton の万有引力 (古典力学の創始)
1864	Maxwell の電磁理論 (電磁波の予言)
1885	Balmer 系列の発見 (発光スペクトル)
1893	Wien の変位則の発見 (黒体輻射)
1894	J.J.Thomson の電子の発見 (陰極線)
1900	Plank の量子仮説 (黒体輻射)
1900	Rutherford 散乱 (原子核の存在)
1905	Einstein の光量子仮説 (光電効果)
1913	Bohr の水素モデル (発光スペクトル)
1922	Stern-Gel'rach の実験 (スピン)
1924	Compton 散乱 (電子での X 線の散乱)
1924	de Broglie の物質波 (二重性)
1925	Heisenberg 行列力学 (量子力学確立) Schoredinger 方程式 (量子力学確立)
1928	Dirac 方程式 (相対論的量子論)
1935	EPR パラドックス (疑問の提出)

§2. 量子論を誕生させた自然現象

ここでは、量子論が誕生するきっかけとなった典型的な現象について紹介し、何故量子論が必要なのかを明らかにする。

2.1 黒体輻射

黒体とは、加熱された物体であって自らが輻射する光 (=電磁波) を外に漏らさない物体のことである。典型的なものとしては、溶鉱炉が上げられる。このほか、蝋燭やガスバーナーの炎なども近似的に黒体とみなすことが可能である。経験的に物体を熱すると温度が上昇するに従って、小豆色の発光が次第に明るい赤色、橙色、黄色、青色、紫そして白色へと変化することが知られていた。この経験的な事実を古典力学では説明することが不可能である。

黒体輻射を最初に説明したのが、Plank である。彼の説明は実験的な現象をうまく説明したが、当時の常識では説明できない仮説すなわち量子仮説を用いていたため、一時的な解決案に過ぎないと思われていた。しかし、この量子仮説こそが、原子サイズの世界 (=ミクロな世界) を紐解く重要な発見であった。理論の詳細はさておきその量子仮説とは、「振動数 ν を持つ光には最小のエネルギー単位 ϵ があり、

$$\epsilon = h\nu \quad (2.1)$$

と表される」である。定数 h の値は実験で決定されるのもで $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{Js}$ である。量子仮説は、自然界への理解が進めば古典力学で説明可能な事実であると考えられていたので“仮説”と名づけられた。量子論の成立の過程では量子仮説は事実として説明不可能なものであり、この仮説のもとに量子論の理論が模索されてきた。現在、量子仮説は“波動関数”あるいは“状態”が満たす境界条件によって説明できる。しかし、 h の値自体が、何故 $6.62 \times 10^{-34} \text{Js}$ であるかは説明できない。現在、 h はプランク定数と呼ばれており、自然界に存在する普遍定数の一つであると考えられている。

2.2 光電効果

金属表面に光が当たると、電子がと出ることが実験的に知られていた。この現象を、光電子効果という。光も自然界に存在する、“実体”であると考えられるなら、物質である電子をはじき飛ばすこと自体は不思議なことではない。「エネルギー保存則」によりこの現象を考えると、光が持っているエネルギーが電子のエネルギーに変換されたと思な

し得る。不思議なことは、飛び出してくる電子のエネルギーが光の明るさ (= 強さ) に全く依存しないことであった。細いホースを流れる水よりも太いパイプを流れる水のエネルギーが大きな事は直感的に直ちに納得できる事実である。従って、パイプを流れる水からい大きな運動エネルギーをもつ飛沫を飛ばすことが可能なのではないだろうか。しかし、電子が関与するミクロな世界で実験事実は異なっていた。勿論、光を明るくすると飛び出してくる電子の個数は増加する、しかしそのエネルギーは一定であった。

飛び出す電子 (= 光電子) のエネルギー E を変化させる因子は、金属に照射する光の明るさではなくその振動数を ν である。 E と ν 関係は、

$$E = h\nu \quad (2.2)$$

で与えられており、Plank が導入した仮説の式 (2.1) と一致する。この一致は偶然ではなく、「光のエネルギーには離散化された単位がある」という物理的な事実を反映したものである。このようにエネルギーなどの物理量が離散化されている事実を”量子化”されているといい、量子化を担う物理的な実体のことを光量子と呼ぶ。光量子は、後に光に限らずさまざまな物理的な実体に適用され、一般に量子と呼ばれるようになった。

光量子の持つ性質は、光を粒子である考えることで一応の説明が可能である、しかし、一方で光には波動としての性質があり粒子として”描象”だけでえは波動現象を説明することは不可能である。光の及ぼす作用は捉えることが可能だがミクロな対象であるがゆえに光自体を見ることが出来ない。人間にとって光の”実体”を捉える”描象”は、古典力学的な”猫象”である粒子と波動しかなかった。電磁波の発見以来、光は波動であると考えられていたが、光電効果により光は粒子としても捉えなければならぬことになった。ある物理的对象 (今の場合は光である) を、波動であるとともに粒子であると考えなければならぬ事実を波動と粒子の「二重性」という。実は量子とは、このような二重性を有する新たな物理的な実体なのである。また、自然を捉える描象として、波動と粒子という二者択一の描象のほかに波動と粒子の二重性という描象が加わったことになる。この点が、光電効果が自然認識に与えた重要な点である。

2.3 Compton 散乱

光電効果は、光が波動であるとともに粒子であるという点が革新的であった。しかし、捕らえられた現象はエネルギーの量子化のみであり、粒子とみなせる直接的な現象を捕らえたものではなかった。Compton 散乱は、粒子としての光の性質を直接示す現象として重要な役割をになうものであった。この現象は、光が「運動量 p を持ち、あたかも粒子の様に電子と衝突して運動量が変化する」という現象である。より具体的には、X線が原子核近くの電子と衝突することによって波長の異なる X線に変化するものである。このよき、X線が衝突して跳ね飛ばす電子を反跳電子とよび現象を実証する上では重要な証拠となった。

まず、「光の運動量はどのように表されるのだろうか」という素朴な疑問からはじめる。この疑問に関する答えは、光が質量をもたないという事実を相対性理論で得られた関係式 $E = \sqrt{(mc^2)^2 + (pc)^2}$ と結びつけることで得られる (c は光速である)。このようにして、 $E = pc$ が得られるがこの値が、光量子 $\epsilon = h\nu$ と同じものを与えると考える

と、 $c = \lambda\nu$ を用いて

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (2.3)$$

得られる。ここに、 λ は光の波長である。

Compton 散乱は、式 (2.3) で表される運動量を持つ光量子が、まるで粒子のように電子と衝突し電子を跳ね飛ばし自らも運動量すなわち波長 λ を変化させるという現象である。単に光がその波長を変えずに散乱をうけるという現象なら、レイリー散乱あるいは弾性散乱として既知の現象であった。散乱で X線の波長が変化するという点がこの現象の重要な事象であり、実験的にこの事実が確認されたことにより、光量子の存在は確実なものとなった。

§3. 量子論の定式化

光量子は量子論の初期の段階から重要な役割を担ったが、最初の量子論の定式化が完成した対象は電子などの粒子に対してであった。歴史的には量子論は Heisenberg の行列力学が最初に提案されたが、波動現象に関連して定式化された Schrodinger の波動力学に従ってその理論の成り立ちをまとめる。

3.1 物質波と波動関数

光量子により光という対象の二重性が確立されると逆に粒子であると考えられていた電子や中性子も波動性をもつのではないかと考えられた。このような波を物質波という。では、物質波の波長はどの様に表されるであろうか。その答えは最終的には実験により確かめられるしかないものであるが、式 (2.3) がそのヒントを与えている。質量 m 速度 v をもつ粒子の運動量 p は、 $p = mv$ で与えられるが、この量が光量子という波動の運動量と同じ式に従うと考えるのである。すると、物質波の波長 λ は

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (3.1)$$

となる。この波長を用いると、粒子に伴って波数 $k = 2\pi/\lambda$ をもつ波動

$$\psi(x, t) \propto \exp[i(kx - \omega t)] \quad (3.2)$$

が”存在”すると考えることができる。こお波は物質波と呼ばれた。物質波により実験的な事実、例えば水素原子の跳び跳びの軌道などを程度説明することが出来る。しかし、この物質波の理論は論理的な整合性を保つことができず木に竹を接いだ感があった。

物質波は粒子と波動の二重性に深く関連した概念であり、量子論の誕生には大きな役割を担ったが現在ではその存在は否定されている。その代わりに登場したのが波動関数という概念である。現象を理解するとき、粒子や波動という物理的描象は重要であるが、この描象とは独立にあるいはこのような描象以前に波動関数で表される物質の”状態”があると考えられる。このとき「物質の存在位置はこの波動関数 $\psi(x, t)$ の絶対値の 2 乗：

$$|\psi(x, t)|^2 \quad (3.3)$$

に従って確率的に観測される」と考えるのである。波動関数に関するこのような理解の仕方を、コペンハーゲン解釈という。当時、この考え方を提案していた Bohr を中心とした学派がコペンハーゲンに拠点を置いていたことからつけられた名称である。

コペンハーゲン解釈は、粒子の存在以前に波動関数で表現された”状態”という概念を前提としている。この状

態の導入により、粒子と波動の二重性に関する概念に一定の解決をあたえたが、確率的にしたその存在を予言することが出来ないという点に多くの学者たちが反感をもった。この点に関して例えば隠れた変数などのような多くの議論が積み重ねられてきたが、現在でもコペンハーゲン解釈を否定する事実は見つかっていない。少なくとも、現象を説明する実用的な方法としてコペンハーゲン解釈は申し分がない考え方である。

3.2 Schoredinger 方程式

古典論では粒子の存在位置や運動量などは何の疑問もなる初めから存在する基礎概念であった。量子論では、存在位置や運動量は波動関数により表される”状態”から立ち現れてくる2次的な性質である。コペンハーゲン解釈により確率的に至る所に粒子が存在する。粒子がどこに存在するかは観測によって決定されるものである。また、運動量は波動関数 $\psi(x,t)$ から抽出するものである。このために演算子 $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ を用いる。波動関数 (3.2) に \hat{p} 作用すると、

$$\hat{p}\psi(x,t) = \hbar k\psi(x,t) \quad (3.4)$$

を得る。ここで、 $\hbar k$ は h/λ であることより運動量であることが分かる (式 (2.3) 参照)。すなわち、演算子 \hat{p} を用いて波動関数 $\psi(x,t)$ から運動量が抽出できたのである。

同様にエネルギーを波動関数から抽出することができる。このために、演算子 $i\hbar\partial/\partial t$ を用いる：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \hbar\omega\psi(x,t) \quad (3.5)$$

である。ここで、 $\hbar\omega = h\nu$ であることからこの量は粒子の運動エネルギーであることが分かる (式 (2.1) 参照)。一方、運動エネルギーは別の演算子 $\hat{p}^2/2m = \hbar^2\partial^2/\partial x^2$ を用いても抽出することが可能である：

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(x,t) = \frac{(\hbar k)^2}{2m}\psi(x,t) \quad (3.6)$$

ここで、自由粒子では $E = p^2/2m$ であることを用いる、上式は運動エネルギーであることが分かる。運動量やエネルギーに限らず、全ての物理量は波動関数から抽出することが出来るものである。これが量子論の基本的な考え方である。

では、波動関数はどのような方程式に支配されているのであろうか。この答えは、自由粒子のエネルギー保存式 $E = p^2/2m + V(x)$ を利用して導くことができる。すなわち、方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right]\psi(x,t) \quad (3.7)$$

である。ポテンシャルエネルギー $V(x)$ がない場合、上式は $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi$ となり、 $\hbar\omega = (\hbar k)^2/2m$ を表している。この方程式がポテンシャルが存在するときにも成立するかは、論理的な考察だけでは導くことはできない。実験と上式から得られる関係式とを通じて確かめるしかない。このような検証の結果は肯定的であり、方程式 (3.7) はミクロな世界において粒子の運動を記述する方程式一つであることが分かっている。この方程式を、提案者の名前をとって Schoredinger 方程式と呼ぶ。

課題 Newton の運動方程式と Schoredinger 方程式の関係を示すエーレンフェストの定理について調べこれを説明

せよ：

$$\langle \hat{p} \rangle = m \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = - \left\langle \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle.$$