シュレーディンガー方程式定式化の論理

松原邦彦

2024.3.10

1　はじめに

量子力学を初めて学ぶ学生にとってその奇妙な性質の理解にまず戸惑う。量子力学を切り開いた先駆者たちにとってもこの思いは同じであった。そしてその論理の展開に大変な苦労をして現在の量子の論理が出来上がっている。この中でもシュレーディンガー方程式の成り立ちは特に理解が一筋縄ではいかない。それはもちろん波動と粒子の二重性の解釈の問題からきているのであるが、どの教科書をフォローしても判然としないことが多く、中には最初にのように書かれると方程式の形を天下りに与えて、その計算方法などを解説し、それが持つ意味やら理屈をを後付けで解説するものがある。理論というものは必ず何らかの仮説を前提にしているものである。シュレーディンガー方程式と言えども例外ではない。どのような論理、つまり仮説から成り立っているか詳細に検討してみよう。そうすることで量子力学の奇妙な論理の謎に迫ることができよう。

2　シュレーディンガー方程式の定式化

2.1　波動の仮説

まず第 1 の前提は何らかの波動を仮定することである。その波動はどのような内容を持つかはとりあえず問わないとして何らかの波動が粒子に伴っている、あるいは粒子そのものが波動の形態を採っていると想定することから始まる。現在の波動の物理的解釈は実は後付けで与えたものである。古典論における波動は一般的には波動の伝達する速度を c とすると

$$\nabla^2 u(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u(\boldsymbol{x},t)}{\partial t^2}$$

の形をとる。しかし量子の場合にはこのような形式である証拠は見当たらない。判っているのはド・ブロイが波動を仮定したときの周波数 ν とエネルギー E の関係と運動量 p と波長 λ との関係

$$E = h\nu \tag{1}$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \tag{2}$$

だけである。(1) 式のエネルギーがこの形式で与えられる領域は全てのエネルギーに対して当てはまるものでなく、微視的世界ということはわかっているが、その境界はきわめて曖昧である。

波の物理的内容は不明のまま波動の振幅を表す変数を時間、空間の関数 $\phi(\boldsymbol{x},t)$ とし、飛行する自由粒子が周期性を有する複素関数

$$\phi = Aexp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - i\omega t) \tag{3}$$

を持つと仮定する。ここに $\boldsymbol{k}$ は波数ベクトルで、$\boldsymbol{x}$ は位置ベクトル、$\omega = 2\pi\nu$ で、ν は波動の周波数であるとして、極く一般的な表現形式で与えたものである。

2.2 物理量と演算子

式 (3) に与えた波動関数を位置座標 x, y, z および時間 t で偏微分すると

$$\frac{\partial\phi}{\partial x} = ik_x\phi, \quad \frac{\partial\phi}{\partial y} = ik_y\phi, \quad \frac{\partial\phi}{\partial z} = ik_z\phi, \quad \frac{\partial\phi}{\partial t} = -i2\pi\nu\phi \tag{4}$$

を得る。ベクトル $\boldsymbol{k}$ と運動量 $\boldsymbol{p}$ は (2) 式を 3 次元に拡張した関係式

$$\boldsymbol{p} = h\boldsymbol{k} \tag{5}$$

$$E = h\nu \tag{6}$$

で与えられるから (4) は

$$\nabla\phi = \frac{i}{h}\boldsymbol{p}\phi \tag{7}$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -2\pi\frac{i}{h}E\phi \tag{8}$$

となる。これらの式からそれぞれの演算子を物理量と関係づけて

$$\nabla = \frac{i}{h}\hat{\boldsymbol{p}}, \quad or \quad \hat{\boldsymbol{p}} = \frac{h}{i}\nabla \tag{9}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = -2\pi\frac{i}{h}\hat{E}, \quad or \quad \hat{E} = -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t} \tag{10}$$

と置く。ハットを付けた量は演算子化した物理量を意味する。次に述べるようなエネルギー保存則を表している物理量をこのような演算子で置き換えて微分方程式を構成することができると考えるのである。

上記のほかにポテンシャルエネルギーなど単純に場所 x, y, z の関数があるがこれらについては

$$x\phi = \hat{x}\phi, \quad y\phi = \hat{y}\phi, \quad z\phi = \hat{z}\phi \tag{11}$$

のように単純に変数を掛けるだけの演算子として置き換えればよい。

2.3 エネルギー保存則

方程式を立てる方法としてエネルギー保存則を用いることは一般に行われる方法である。位置ポテンシャル $V(x, y, z)$ の中を飛行する自由な粒子のエネルギーは

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V(x, y, z) = \frac{p^2}{2m} + V(x, y, z) \tag{12}$$

と表される。エネルギーを座標 x, y, z と運動量 p_x, p_y, p_z の関数として表した量、即ちハミルトニアンを用いて系のエネルギー保存則を表すと

$$\hat{E} = \hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \tag{13}$$

である。

2.4　シュレーディンガー方程式の組み立て

式 (13) の運動量とエネルギーを演算子と見立て、(9), (10) を用いると

$$\frac{ih}{2\pi}\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m}\boldsymbol{\Delta} + V(x,y,z) \tag{14}$$

を得る。これに波動関数 ϕ に作用させると

$$\frac{ih}{2\pi}\frac{\partial}{\partial t}\phi = -\frac{h^2}{2m}\boldsymbol{\Delta}\phi + V(x,y,z)\phi \tag{15}$$

となってシュレーディンガー方程式が得られる。ここまでのこの方程式の組み立てをまとめてみると、次の 4 つの前提からなることが判る。

(1) 波動の仮定　ある種の波動を想定する。設定する波動の媒体を直接を観察することはできない。例えば水面波であったらその波を構成する波形を形成する媒体として液体とその表面があり、具体的な形を物理事象として観察できるが、ここに仮定する波はそのような媒体が確認されたわけではない。現在は波は確率の波として解釈されているが、決して実在する物理的な媒体ではない。

(2) 物理量と波動のパラメータとの関係　運動量と波長との関係はド・ブロイ、運動エネルギーと周波数との関係はプランクの輻射式、アインシュタインの光子の取り扱いに導入した関係式である。後者ではそこで取り扱う波動は電磁場という波動の媒体を有する波動事象であり、実験結果と整合している。

(3) エネルギー保存　物理学における原理の一つ。ただし非相対論的古典力学で計算される範囲のエネルギーであって、運動エネルギー、ポテンシャルエネルギー、電磁ポテンシャｌルエネルギーである。

(4) 物理量と演算子の関係　解析の数学的な性質から導かれる関係式。関数 ϕ が時空間で連続である限り成立する。

シュレーディンガー方程式はいくつもあるエネルギーのうち運動エネルギーとポテンシャルエネルギーを対象にして (13) の形に書かれた場合を指すことが多く、

$$ih\frac{\partial\phi}{\partial t} = \hat{H}\phi \tag{16}$$

をもってシュレーディンガー方程式と称することも多いが、これは結局エネルギー保存則物理量と演算子の関係を組み合わせたものを指しているに他ならない。

この 4 大前提のうち (3) と (4) についてはほぼ疑問を挟む余地がなく、広く物理学の理論に取り入れられているので、謎めいた部分はまず無いと言ってよい。問題は (1) と (2) にあり、現代の量子力学の解釈問題の根底をなしている。

参考文献

[jos01] .O. スレーター 「物質の量子論」、大森恭輔、竹田　宏、中村　伝　訳、共立出版（株)、(昭和 31 年 11 月 20 日）