量子力学の基礎
北野正雄 (京都大学大学院工学研究科)
kitano@kuee.kyoto-u.ac.jp　2007 年 10 月 16 日
この内容は京都大学工学部電気電子工学科における授業「電気電子工学のための量子論」の補助的資料として準備されたものです．個人使用以外の目的で利用される場合には著者の許諾を得てください．

第 1 章
量子の発見

量子論は 20 世紀冒頭に物理学の世界に登場した概念であるが, その発見の経緯について簡単に見ておく．また, 量子論を特徴づける唯一の定数であるプランク定数 h についても, その重要性と予想外の波及効果に触れておく．プランク定数の, 現時点でもっとも信頼できる値は, つぎのとおりである:*1)

$$h = 6.626\,068\,96(33) \times 10^{-34}\,\mathrm{Js}$$
$$\hbar = h/2\pi = 1.054\,571\,628(53) \times 10^{-34}\,\mathrm{Js}$$

キーワード: プランク定数, 黒体輻射, 作用, 自然単位系

1.1 発見の経緯 — プランク定数

19 世紀後半において, マクスウェルの電磁理論が確立され, 従来のニュートン力学を組み合わせることで, 物理学は完成の域に達したと考えられていた．すなわち, すべての物理現象が理論的に説明可能であり, さらに方程式を解くことによって予測可能な状態になったと信じられていた．しかし, 熱力学と電磁気学を組み合わせて計算される空洞の比熱が無限大になったり, 黒体輻射のスペク

*1) 2006 CODATA 推奨値 (http://www.codata.org/). “( )” 内の数字は対応する末尾の桁の不確かさを表している．$x = 1.234(23)$ は $x = 1.234 \pm 0.023$ を意味する．

トルが, どうしても実験結果に合わないことが明らかになってきた. これは, 物理学の上に覆いかぶさる暗雲ともいうべき深刻な問題であった.

このあたりの事情を見ておこう. 空洞共振器の体積あたり周波数あたりのモード数は, 周波数 nu の関数として

$$D(\nu) = \frac{8\pi}{c^3}\nu^2 \tag{1.1}$$

と表される[*2]. 共振器内の電磁場が外部とエネルギーをやりとりして, 温度 T の熱平衡状態にあると仮定すると, (偏光の自由度を考慮して) モードあたり $2 \times kT/2$ のエネルギーが分配されるので, 体積あたり周波数あたりのエネルギーは

$$E_{\mathrm{cl}}(\nu) = kTD(\nu) = \frac{8\pi}{c^3}\nu^2(kT) \tag{1.2}$$

となる. しかし, これは少し困った結果である. なぜなら, 周波数とともにエネルギーが ν^2 に比例して増加して発散してしまうからである. 実際の黒体輻射のスペクトルはある程度高い周波数ではむしろ小さくなることが, 実測で知られている. つまり, 高い周波数に対してはエネルギーが分配されない傾向にあるということである. プランクは試行錯誤の結果, 式 (1.2) に代わるものとして,

$$E_{\mathrm{qu}}(\nu) = E_{\mathrm{cl}}(\nu)F(\nu,T), \quad F(\nu,T) = \frac{h\nu}{kT}\frac{1}{\mathrm{e}^{h\nu/kT}-1} \tag{1.3}$$

という式を導いた. すなわち, 付加的な因子 F を付け加えると, 実験と, ぴたりと合うことを発見した. 彼は, この経験式の意味をさらに追求した. そして, 各モードがとりうるエネルギーの値が連続ではなく, ある値 ϵ の整数倍に限ると仮定してみた. すると, 周波数 ν のモードのエネルギーの期待値は

$$\langle E\rangle = \frac{\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} n\epsilon \mathrm{e}^{-n\epsilon/kT}}{\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-n\epsilon/kT}} = \epsilon\frac{1}{\mathrm{e}^{\epsilon/kT}-1} = \begin{cases} kT & (\epsilon \ll kT) \\ 0 & (kT \ll \epsilon) \end{cases} \tag{1.4}$$

となる. これは, $\mathrm{e}^{-\epsilon/kT} = r$ を公比とする等比級数の公式を用いると簡単に求めることができる. $\epsilon = h\nu$ とし, 式 (1.2) の kT を $\nu \ll kT/h$ における平均エネルギーだと考えて, この式で置き換えると,

$$E_{\mathrm{qu}}(\nu) = h\nu\frac{1}{\mathrm{e}^{h\nu/kT}-1}D(\nu) = \frac{8\pi}{c^3}\nu^2\frac{h\nu}{\mathrm{e}^{h\nu/kT}-1} \tag{1.5}$$

---

*2) 周波数 ν_{c} に対応する波長を λ_{c} とする. ν_{c} 以下の周波数をもつ共振器モードでつくることのできる最も小さい空間的波束のサイズ (体積) は λ_{c}^3. 共振器の体積を V とすると, 互いに独立な, つまり重ならない波束の数は $N(\nu_{\mathrm{c}}) \sim V/\lambda_{\mathrm{c}}^3 = V\nu_{\mathrm{c}}^3/c^3$ である. この数は ν_{c} 以下の周波数をもつ共振器モードの数に等しいと考えてよい. ν_{c} 付近の周波数あたりのモード数はこれを ν_{c} で微分すれば求めることができる. すなわち, $D(\nu_{\mathrm{c}}) = (\mathrm{d}N(\nu_{\mathrm{c}})/\mathrm{d}\nu_{\mathrm{c}})/V \sim c^3/\nu_{\mathrm{c}}^2$. これは数因子を除いて式 (1.1) に等しい.

が得られる．

古典的な公式からのずれを与える因子 F はモード周波数 ν と熱エネルギー kT の比 (無次元量) $x = h\nu/kT$ に依存している．ここで導入された係数 h は，(エネルギー) × (時間) の次元を持ち，その値は実験との比較により $h = 6.62 \times 10^{-34}\,\mathrm{Js}$ と定められた．これがプランク (Planck) 定数である．

式 (1.5) と実験データとの見事な一致によって, 周波数 ν をもつ系のエネルギーは $E = n\epsilon = nh\nu$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ のように, 離散的な値しかとりえないということを認めざるを得なくなった．$h\nu$ をエネルギー量子とよぶ．ν で振動する光 (電磁波) は $h\nu$ のエネルギーを単位に離散化されている可能性があるという結論が得られた．これが光量子仮説である．

問題 1.1 各温度に対して, 黒体輻射のスペクトルが極大となる周波数をもとめよ．波長に換算するとどうなるか.

その後, 光電効果やコンプトン効果の説明において, この考えの有効性が確認された．すなわち, 角周波数 ω, 波数 $\boldsymbol{k}$ の光はエネルギー $\hbar\omega$, 運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ をもつ粒子とみなせる場面があるということである[*3)].

通常の単位系 (SI や cgs 単位系) で表すと，プランク定数は非常に小さい数値である．これは，日常，われわれが量子的な効果にほとんど気づかない原因でもある．光の周波数 $\nu = 10^{14}\,\mathrm{Hz}$，アボガドロ定数 $N_\mathrm{A} = 6.0 \times 10^{23}\,/\mathrm{mol}$ を掛けてようやく $N_\mathrm{A}h\nu = 1\,\mathrm{kJ/mol}$ という日常的な量に達する．

1.2 電子の波動性

光が量子であることを認めることによって, 暗雲が少し晴れたわけであるが, 原子が発する光のスペクトルがとびとびであることや, その周波数を決める手だてがないことが依然問題として残っていた．発光スペクトルは, 原子内の電子の運動によって決まっているはずであるが, これを古典的に解いても, 離散的なスペクトルは出てこない. それどころか, 電子は電磁波を放出しながら, エネルギーを失って, ついには原子核に落下してしまうという, 現実にはありえない状況を予言してしまう.

ところで, プランク定数は，古典力学における作用量 (action) とよばれる物理量と同じ次元をもつ．作用量は (一般化) 座標 q と運動量 p を用いて $J = \oint p\mathrm{d}q$ のように定義されるが，座標変換や断熱変化に対して不変であり，重要な量である．角運動量も同じ次元をもつ．幾何学的には，(p, q)-平面の面積に対応す

*3) その後, 光電効果やコンプトン効果は光を量子化せずとも, 古典電磁場として考えても説明がつくことが判明した. それでも, プランク定数の登場は新しい物理の存在を確信させるものであった．すなわち, 物質を量子論で, 電磁場を古典論で記述する半古典理論で大半の現象が説明できる．電磁場の量子化の効果が顕在化する場面は意外に少ない.

るものである．このことから, プランク自身は h のことを作用量子と名付けていた.

したがって, 電子の状態や運動に対する理解も, 光の場合と同じくプランク定数に関連した本質的な変更が必要であると考えられるようになった.

原子内の電子は周期的な運動をしている. 簡単のために 1 次元の周期運動 (q_1, q_2 間) を考える. 作用量は

$$J(E) = \int_{q_1}^{q_2} p_E(q)\mathrm{d}q + \int_{q_2}^{q_1} [-p_E(q)]\mathrm{d}q = \oint p_E(q)\mathrm{d}q \tag{1.6}$$

と表すことができる．ただし, $p_E(q) = \sqrt{2m(E - V(q))}$ である．E は全エネルギー, $V(q)$ はポテンシャルエネルギーである.

量子化条件として

$$J(E_n) = nh, \quad (n = 1, 2, \ldots) \tag{1.7}$$

を課して, エネルギー E_n を持つ運動だけが許されるとする．これによって, 離散化されたエネルギー準位という概念が導入される．さらに, 系が n 番目の準位にある場合に,

$$\nu = (E_n - E_{n'})/h, \quad (n > n') \tag{1.8}$$

のような周波数の光を放射して, n' 番目の準位に移動すると考えると, 実験結果とよく一致することが分かってきた．つまり, 原子のエネルギーが減少して, その分が光子のエネルギー $h\nu$ として放出されるという考え方である．$n = 1$ が下限であることから, 原子の崩壊も回避できている.

量子化条件の意味を考えてみる．電子の代わりに光が周期運動をしている場合を考える．$z = z_1$, z_2 に鏡があり, その間の空間の屈折率が $n(z)$ であるとする．この共振器の共振条件は

$$\phi(\omega_m) = \int_{z_1}^{z_2} k(z)\mathrm{d}z + \phi_{\mathrm{ref2}} + \int_{z_2}^{z_1} [-k(z)]\mathrm{d}z + \phi_{\mathrm{ref1}} = 2\pi m \tag{1.9}$$

である．ただし, $k(z) = \omega n(z)/c$, m は整数．ϕ_{ref1}, ϕ_{ref2} は鏡の反射に伴う位相変化でそれぞれ π と考えておけばよい．$\phi(\omega_m) = 2\pi m$ を満たす角周波数の光だけが共振器に蓄えられる.

この類似性から, 原子の中の電子が波として振舞っていると考えられるようになってきた．電子を表す波については, $J/\hbar$ が位相, $p/\hbar$ が波数, $E/\hbar$ が周波数に対応することが明らかになってきた.

ただし, k と ω の関係 (分散関係) は両者でかなり異なっており, 光の場合が $k = n(z)\omega/c$ であるのに対して, 電子の場合は,

$$\begin{aligned} k &= \frac{p}{\hbar} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V(q))} = \frac{1}{c}\sqrt{\frac{mc^2}{\hbar}\frac{E - V(q)}{\hbar}} \\ &= \frac{1}{c}\sqrt{\omega_{\mathrm{c}}(\omega - \omega_V(q))} \end{aligned} \tag{1.10}$$

波動		粒子	
角周波数	ω	エネルギー	$E = \hbar\omega$
波数	$\boldsymbol{k}$	運動量	$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$
位相	ϕ	作用	$J = \hbar\phi$

表 1.1 波動と粒子の対応

とやや複雑なものになっている．ただし, $\omega_{\mathrm{c}} = mc^2/\hbar$ はコンプトン周波数, $\omega_V = V/\hbar$ はポテンシャルエネルギーを周波数に換算したものである．

問題 1.2 $V(q) = kq^2$ の場合の作用をエネルギー E の関数として求めよ．それが, (p, q) 平面において閉じた軌道が囲む面積に等しいことを示せ．

1.3 波動性と粒子性の橋渡

プランク定数は，粒子と波動の橋渡をする量である (表 1.3)．運動量と波数の関係 $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$，エネルギーと角周波数の関係 $E = \hbar\omega$ において左辺は粒子に付随する量，右辺は波動に関する量になっている．粒子的な式 $J = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x} - Et$ は波動的な式 $\phi = J/\hbar = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \omega t$ に書き換えることができる．

また粒子の質量 m に対しては $mc^2 = \hbar\omega_{\mathrm{c}}$ を用いて，$m = \hbar(\omega_{\mathrm{c}}/c^2) = \hbar(k_{\mathrm{c}}/c) = \hbar\mu$ のように波動的対応物 μ を考えることができる．$\omega_{\mathrm{c}} = ck_{\mathrm{c}}$ はコンプトン角周波数と呼ばれる量である．μ の次元は，(長さ)$^{-2}$ × (時間) であり, 分散関係の曲率の逆数に対応している．この量を用いるとシュレディンガー方程式が波動的な量のみで表されることになり $\hbar$ が消去される*4)．

1.4 プランク長さ — 最小の長さ

プランクはプランク定数 $\hbar$，光速 c，重力定数 G の組み合わせで, l_{p}, t_{p}, m_{p} という, ぞれぞれ, 長さ，時間，質量の次元をもつ定数を構成できることに気づいた．すなわち, 次元を考慮して,

$$\hbar = l_{\mathrm{p}}^2 m_{\mathrm{p}} t_{\mathrm{p}}^{-1}, \quad c = l_{\mathrm{p}} t_{\mathrm{p}}^{-1}, \quad G = l_{\mathrm{p}}^3 m_{\mathrm{p}}^{-1} t_{\mathrm{p}}^{-2} \tag{1.11}$$

とおき, これらを逆に解くことで,

*4) 方程式に $\hbar$ が現れるのは, 粒子的な量と波動的な量が混在しているためである．シュレディンガー方程式は本来的には波動的な式であるが, そこに質量 m という粒子的な量が含まれるために, $\hbar$ が登場している．これを波動量 μ で置き換えると, $\hbar$ は消えてしまう．実は, シュレディンガー方程式はマクスウェル方程式に対応するものであり, 古典的な場の方程式と考えるべきものである．

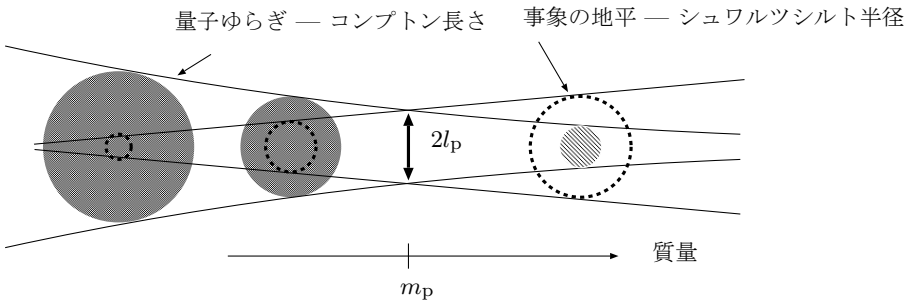

図 1.1 素粒子の質量 m の大きいもの考えると, その量子ゆらぎによるサイズ（コンプトン長さ）より, ブラックホールの事象の地平 (シュワルツシルト半径) が大きくなる. このようなものは存在しそうにないので, 質量には上限がある. それに伴って, 長さや時間には下限が存在することが予想される.

$$
\begin{aligned}
l_{\rm p} &= \sqrt{G\hbar/c^3} \sim 1.6\times 10^{-35}\,{\rm m},\\
t_{\rm p} &= \sqrt{G\hbar/c^5} \sim 5.4\times 10^{-44}\,{\rm s},\\
m_{\rm p} &= \sqrt{\hbar c/G} \sim 2.2\times 10^{-8}\,{\rm kg}
\end{aligned}
\tag{1.12}
$$

を得た. それぞれプランク長さ, プランク時間, プランク質量とよばれる量である. これらは, 自然が定義した単位と見なすことができる. われわれが日常使っている単位は, 人間が勝手に決めたものであり, その大きさに物理的な必然性はない. そのために, 長さひとつをとってみても, メートル, ヤード, 尺など, 多数の単位が存在する. それに対して, プランク長さは自然に内包される量であり, 自然を構築している素材の典型的な大きさを与えていると考えられる. このような量によって構成される単位系を「自然単位系」とよぶ.

これらの定数の物理的な意味を見ておこう. 粒子の質量 m を調節可能なパラメータと考える (図 1.1).

粒子の位置のゆらぎ Δx と, 運動量のゆらぎ Δp の間には不確定関係

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 \tag{1.13}$$

が成り立っている. 質量 m の粒子の運動量の上限は mc なので,

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2mc} = \frac{\lambda_{\rm c}}{4\pi} \tag{1.14}$$

となる. $\lambda_{\rm c} = h/mc$ はコンプトン波長とよばれ, 質量 m の粒子の大きさに対応する. (コンプトン波長に相当する光子のエネルギーは, その粒子の静止質量に等しい. つまり, $hc/\lambda_{\rm c} = mc^2$ が成り立つ.)

質量 m の天体を考える. 質量 μ の小物体が中心から r の点で接線方向に速度 v で運動しているとする.

$$\frac{\mu v^2}{r} > G\frac{\mu m}{r^2} \tag{1.15}$$

が成り立てば, 物体は天体から離脱することができる. 速度の上限は c なので, 離脱可能な最小半径は

$$r > \frac{Gm}{c^2} = L_{\mathrm{S}} \tag{1.16}$$

と決まる. これはシュワルツシルト (Schwartzchild) 半径と呼ばれる量であり, 質量 m に対するブラックホールの大きさを与えている. (地球の質量に対するシュワルツシルト半径は 1 cm 程度のものなので, 我々は安心して生活しているのである. 密度が高い物質でできている天体ではシュワルツシルト半径がその半径を上回り, 事象の地平となり, 外界と切り離されてしまうのである.

シュワルツシルト半径は, 素粒子程度の質量に対しては非常に小さいものである. それでも, 粒子の質量をどんどん大きくしてゆくと, 減少するコンプトン波長と増大するシュワルツシルト半径がついに交わるようになる (図 1.1). 交点は,

$$\frac{\hbar}{m_{\mathrm{p}}c} = Gm_{\mathrm{p}}/c^2 \tag{1.17}$$

で決まるが, これがプランク質量

$$m_{\mathrm{p}} = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}} \tag{1.18}$$

を与える. (数因子は無視した.) この質量より重い粒子を考えると, ブラックホールの大きさ (事象の地平) が量子ゆらぎによる粒子の大きさ (コンプトン波長) より大きいため, 粒子としての存在が疑わしくなる. したがって, 素粒子の質量には上限があるということであり, それに伴って, 長さや時間にも下限が設定されている. これがプランク長さ $l_{\mathrm{p}} = \hbar/m_{\mathrm{p}}c = Gm_{\mathrm{p}}/c^2$ とプランク時間 $t_{\mathrm{p}} = l_{\mathrm{p}}/c$ である.

これらは量子論を遥かに超える議論であるが, プランク定数の導入は単に物理的なパラメータが 1 つ増えたという以上の深い含意があることを紹介しておく.