

なるほど量子力学 II の案内

ハイゼンベルグ、ボルン、ヨルダンによって建設された行列力学は、ミクロ粒子の運動を記述する学問として大成功を収めた。しかし、その手法は多くの物理学者にとって不慣れであっただけでなく、無限の成分からなる行列を扱う必要があったため、取り扱いが非常に困難であった。

行列力学の誕生からまもなく、シュレディンガーが微分方程式によって、ミクロの粒子の運動が解析できるということを提唱する。その手法が、行列力学とまったく異なっていたこと、また、シュレディンガーが粒子であるはずの電子が波であるという仮定のもとに微分方程式を導出したため、当初は、行列力学の信奉者からの批判にさらされた。しかし、すぐに、その手法が行列力学を凌駕する素晴らしいものであることが多くのひとに認識されるようになる。電子を波と仮定していることからシュレディンガーの手法は波動力学と呼ばれている。

波動力学が多くの物理学者に受け入れられた理由の第一は、シュレディンガーの微分方程式がいとも簡単に解法できるうえ、それによって得られる解が行列力学のものと一致したからである。さらに、行列力学ではハイゼンベルグでさえ解くことのできなかつた水素原子の電子軌道を、シュレディンガー方程式は見事に解法することができたからである。

ただし、ここにはトリックがある。それは、シュレディンガー方程式を解法するためには、かなり面倒なステップが必要となるが、これら微分方程式は、すでに100年以上も前に数学者によって解法されていたため、その解の性質も、よく研究されていたのである。この数学的果実のおかげで、波動力学はあっという間に、その確固たる地位を確立することになる。

しかし、波動力学の創始者であるシュレディンガーは、微分方程式の解として得られる波動関数に関して、必ずしも正しい理解をしていたわけではなかった。シュレディンガーは、電子が波であるという仮定から出発してシュレディンガー方程式を導出した。よって、当然の帰結として、得られる解である波動関数が、そのまま電子の姿を表していると考えたのである。シュレディンガーの考えを完全否定できるものではないが、現在、主流となっている考え方は確率解釈である。

皮肉なことに、量子力学の主流となっている確率解釈は行列力学の創始者のひとりであるボルンによって提唱されたものである。その考えは、波動関数そのものは電子軌道に関係なく、その絶対値の2乗が電子の存在確率を与えるというものである。

確率解釈を採用すれば、波動関数の任意定数が一意に定まるという利点もある。シュレディンガー方程式は、同次線形微分方程式であるので、その解の定

数は任意である。しかし、波動関数の絶対値の 2 乗が、電子の存在確率を与えるのであれば、全空間にわたって積分すると、その値は 1 にならなければならない。この条件を課すと、定係数が決まる。この条件を規格化条件、得られた定数を規格化定数と呼んでいる。

波動力学を中心とする量子力学は、現在、半導体工学や超伝導工学など、数多くの分野に波及効果を及ぼしている。しかし、科学の基礎という観点から言えば、その最も大きな貢献は、原子構造を明らかにしたということであろう。しかも、その電子軌道は、ボーアが予想した太陽系惑星のように、電子が原子核のまわりを周回しているという描像とは、まったく異なるものであった。そして、この成果は、あらゆる元素の性質を理解するうえで不可欠のものとなっている。

残念ながら、ほとんどの教科書では、いかに水素原子（そして、その結果の類推としてのすべての元素）の電子構造がシュレディンガー方程式によって明らかにされたかという過程を詳らかにしていない。水素原子の微分方程式がどのようなものかと、その解の最終形が与えられているだけである。

もちろん、その解を利用することで、化学反応や化合物の性質の理解などへの応用が可能であり、量子力学を応用するという立場からは、むしろ、その導出過程に時間を割くのは得策ではないという考えもあるかもしれない。しかし、基本を理解しないままでは、本質を知ることができないのも事実である。

そこで、本書では、いかに水素原子の電子軌道が明らかにされたかの過程をできるだけ詳細に示すことを目的とした。その理解のためには、ラゲール陪微分方程式やルジャンドル陪微分方程式、その解であるラゲール陪関数、ルジャンドル陪関数などの性質を知る必要がある。よって、かなりのページ数を割いて、これら関数の説明を行った。少し冗長と思われるほどの解説を行ったのは、それが本質の理解に不可欠と感じたからである。

ただし、すべての学問に共通したことであるが、量子力学といえども完璧ではない。シュレディンガー方程式で、電子軌道の厳密解が得られるのは水素原子のみである。これは、電子数が 2 個以上になると、電子どうしのクーロン相互作用を考慮する必要があり、解析解が得られなくなるためである。

したがって、現在、ヘリウムよりも重い元素で提唱されている電子構造は、水素原子の励起状態の p 軌道や d 軌道が多電子原子にも適用できるとして提案されたものである。この事実を忘れてはならない。

量子力学は、その限界を理解したうえで応用すれば、その利用価値は計り知れない。また、ミクロの世界が直接デバイスの性質を左右するナノテクノロジーが進展している現在、その重要性は、さらに増すであろう。