

### 3 章 調和振動子を例とした Schrödinger 波動方程式

前の章では、量子力学の発見される前の力学の理論の発展を簡単に述べてきた。さてわれわれは量子力学そのものの研究を始める。この章ではただ1つの自由度をもつ系の Schrödinger 波動方程式から始め、理論の一般原理を調和振動子という特別の例で説明する。調和振動子は多くの物理的問題で重要であるから詳しく取り扱う。そして次の章でこの理論を3次元の空間の質点系に一般化する。

#### 9. Schrödinger 波動方程式

Erwin Schrödinger は 1926 年 1 月 27 日に *Annalen der Physik* に送った論文<sup>1)</sup>『固有値問題としての量子化』の最初の節で大要を次のように述べた。

「この報告において、まず非相対論的でしかも摂動のない水素原子という最も簡単な場合について、普通の量子化の規則が整数については何も述べない他の仮定で置きかえられることを示したい。その代わり、たとえば振動する糸において、節の数が整数であるのと同じように、自然に整数が導入される。この新しい考えは一般化でき、かつそれは量子規則の本質に深く立ち入っていると信ずる。」

1926 の前半に発表されたこの論文と他の4つの論文で、Schrödinger は彼の波動方程式を報告し、それを水素原子、調和振動子、剛体回転子、2原子分子、および電場における水素原子 (Stark 効果) など多くの問題に適用した。彼は水素原子の Stark 効果の問題に摂動論を展開し、時間とともに変わる摂動の理論

1) E. Schrödinger, *Ann. d. Phys.* **79**, 361 (1926). および前ページに引用したその後の論文。これらの論文の英訳は E. Schrödinger, "Collected papers on Wave Mechanics." Blackie and Son. London and Glasgow. 1928 として出ている。

を発展させ分散を議論した。彼の方法はたちまち他の研究者に採用され、Schrödinger の研究に関係のない物理学や化学の分野がほとんど残っていないほどの成功をした。

Schrödinger の力学体系はその方法もねらいも Newton, Lagrange および Hamilton の体系と異なっている。Newton の方程式のように、与えられた運動の状態において系の粒子の正確な位置と速度を予言できるような方程式を求める代わりに、彼は系の座標と時間 (運動量や速度でなく) のある関数を計算する方法を考え出した。Born の解釈によれば<sup>1)</sup>、その関数を使って系の座標その他の力学量の確からしい値が予言できる。後になってわかったのであるが、このような力学方程式を受け入れることは、体系の様子を詳細に記述する望みをすてることを意味している。系の様子について量子力学的に議論できるし精密度は Heisenberg の不確定性原理<sup>2)</sup>の主題をなすもので、それについては 15 章でもう一度述べる。

Schrödinger の波動方程式とその補助仮定から系の座標と時間のある関数  $\Psi$  を決めることができる。これらの関数は **Schrödinger 波動関数**あるいは**確率関数**とよばれている。与えられた波動関数の絶対値の2乗は、10 a 節で議論されるように、この波動関数で表わされる状態における体系の座標の**確率分布関数**と解釈される。波動方程式は系の座標について2次の微分方程式で、古典理論の波動方程式にある程度似ているので、この名がある。しかしこの類似はあまり密接ではない。われわれはこの説明ではこの類推を使わない。

Schrödinger の方程式から確率振幅あるいは波動関数  $\Psi$  が出てくるばかりでなく、系の定常状態のエネルギーの値が計算できる。この値の存在は古い量子論に関係して述べた。この計算では量子数についてかってな仮定は何も必要でなく、整数は波動方程式を満足する解を求める過程でひとりではいつてくる。

ここでは Schrödinger 方程式、波動関数  $\Psi$  に対する補助制約および波動函

1) M. Born, *Z. f. Phys.* **37**, 863; **38**, 803 (1926).  
2) W. Heisenberg, *Z. f. Phys.* **43**, 172 (1927).

数の解釈を、便宜上、他の必要な原理からは導かれない基本仮定と考えよう。

この考えは物理学の他の部門と比較すれば明らかになる。演繹的科学のすべての部門は、必ず基本とみなされるある仮定の上に立てられなければならない。しばしばこれらの基本仮定は実験と密接に関係し、その仮定がより所にする実験を認めることは直接その仮定を受け入れることになる。たとえば電気引力に関する逆2乗の法則のようなものである。またある場合には、初めの仮定は実験からそうすぐに明らかでないが、その仮定から導かれた結論が、しばしば長い推論によって導かれることもあるが、今までになされたすべての吟味のための実験と合うという事実があるので受け入れられる。熱力学の第2法則はこの種の仮定の代表的なものである。一般の系について第2法則は何か他のもっと根本的な仮定から導かれないことが普通で、また、明らかにそれが何かある簡単な実験から直接に導かれるものでもない。それにもかかわらず第2法則から導かれる推論が実験と合うので正しいと認められる。第2法則は単にそれに基づいた結果が成功しているので正当とみられる仮定である。

Schrödinger の波動方程式は基本仮定として後者に属している。それは他の物理法則からも導かれず、実験からの必然の結果としても得られない。波動方程式は正しいと仮定され、それから予言された結果が実験室の資料と比較される。

発見者がある仮説に達する道と、理論が完成し順序立てられ演繹的になったときにこの仮説が占める論理上の立場とは、はっきり区別しなければならない。発見の途中では類推がしばしば大切な役割をする。そういうわけで幾何光学と古典力学、また波動光学と波動力学との類似は、Schrödinger が現在有名になった彼の方程式をつくり上げるのを助けたかもしれないが、これらの類似は決してこの方程式の論理的導き方を与えるものではない。

多くの場合、基本仮定を述べる方法は1とおりではない。たとえば Lagrange の運動方程式と Hamilton の運動方程式のどちらかが古典力学の基礎とみなされる。そして一方を選べば他はそれから導き出される。同じように量子力学の基本仮定を表す他の方法がある。もしもそれを用いると波動方程式はそれから導

かれる。しかしどのように理論を表わしても、他のどんな深遠な原理からも出てこない1組の仮定を出発点にしなければならない。

理論の全部門の基礎であった原理が、もっと広く用いられる他の原理で置き換えられることがしばしば起こる。Newton の法則は遊星の運動を予言し、天体と地上の現象を結びつけるのに成功したので採用されたが、Lagrange および Hamilton の方程式はもっと一般的であるので、それに置き換えられたこれらの方程式は Newton の法則を特別の場合として含み、さらに電気、磁気および相対論的現象を含む運動を取り扱うのに役立つ。同様に量子力学は重い物体という特別の場合に Newton の法則を含み、原子や電子の関係する問題においても成功している。Schrödinger の理論よりもっと一般的な理論が展開されたが(15章で論じよう)、殆どすべての目的に波動方程式は便利で十分な出発点である。

9a. 時間を含む波動方程式——はじめに、1直線上を動く質量  $m$  の粒子からなる1自由度の Newton 系を考えよう。この直線を  $x$  軸とする。系はさらに  $-\infty < x < +\infty$  の間で位置エネルギー関数  $V(x)$  で記述されるものと仮定しよう。この系について Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) = -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (9-1)$$

となる。この方程式では  $\Psi(x, t)$  は時間を含む Schrödinger 波動関数あるいは確率振幅関数といわれている。この方程式の形はある点で弦の振動のような、理論物理の他の部門に出てくる波動方程式に形式において似ていることに気がつくだろう。物理数学のできる学生はこの類似性を、一方においては古典力学と幾何光学、他方においては波動力学と波動光学の類似<sup>1)</sup>と比較して調べると大いに

1) たとえば次の書

Condon and Morse, "Quantum Mechanics" p. 10, McGraw-Hill Book Company, New York 1929; Ruark and Urey, "Atoms, Molecules and Quanta," Chap. XV, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1930; E. Schrödinger, *Ann. d. Phys.* 79, 487 (1926); K. K. Darrow, *Rev. Mod. Phys.* 6, 23 (1943); またはこの章の終わりに掲げた波動力学に関する他の論文を見よ。