

原子核のまわりの電子の状態によって、分子（蛋白質なども含む）や原子の性質の多くが決まる。しかし、ニュートンの運動方程式はこのミクロの世界では成り立たず、電子は別の法則に支配されている。電子の状態は量子力学によって求めることができる。

量子力学の完成 ～ミクロの世界で成り立つ法則～

1925年 ハイゼンベルグによる行列力学

1926年 シュレディンガーによる波動力学

→例：x軸上を動く1個の電子の運動状態は、位置xと速度vでは表現できない。関数 $\Psi(x,t)$ によって表現される（ Ψ を**波動関数**と呼ぶ。tは時刻である）。そして、

$|\Psi|^2$ は電子が見つかる確率密度であり、

$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx$ は電子の位置の期待値、

$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-\frac{i\hbar}{m}\right) \frac{d}{dx} \Psi dx$ は電子の速度の期待値

（ここで i は虚数単位、 Ψ^* は Ψ の複素共役、 \hbar はプランク定数を 2π で割った値 1.05×10^{-34} J s、 m は電子の質量 9.10×10^{-31} kg）

などを求めることができる [2][3]。

なお、3次元空間に電子がN個あるとき、 Ψ は

$$\Psi(x_1, y_1, z_1, \sigma_1, x_2, y_2, z_2, \sigma_2, x_3, y_3, z_3, \sigma_3, \dots, x_N, y_N, z_N, \sigma_N, t)$$

の形である！

Ψ をどのようにして求めるのか？ ～エネルギーが変化しない場合(定常状態)～

時間が経ってもエネルギーが一定で保存されている場合、

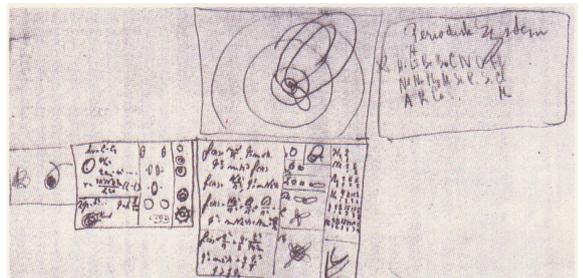
$$\hat{H}\psi = E\psi$$

を成り立たせる定常状態の波動関数 ψ と、そのエネルギーの値 E の組みを見つける（たくさんある）。 \hat{H} はエネルギーに対応する演算子である。

x軸上を動く1個の電子の場合は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x)$$

を成り立たせる関数 $\psi(x)$ と値 E の組みを見つける [5]。



量子力学の発展に大きな貢献をしたボーアがアイデアを記したノート(1921年)[1]

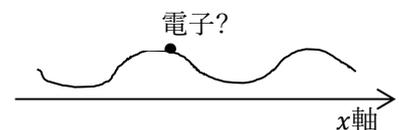
量子力学では、物理量を観測したときいつも特定の値が得られる訳ではない（そういう時もある）。我々が知りうるのはどのような値が得られるか、その確率はいくらか[4]、それからそれらの平均値(期待値)である！

物理量Aには対応する演算子 \hat{A} がある（位置は x 、速度は $-\frac{i\hbar}{m} \frac{d}{dx}$ ）。 Ψ がわかれば、Aの期待値は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi dx$$

で求められる。

時間に依存しないシュレディンガー方程式と呼ばれます。



ぶちクイズ：関数 $\psi(x)$ と値 E の組みとしてどのようなものがありますか？

[1] 小出昭一郎ら, "最新量子論 量子力学:コペンハーゲン解釈", p54, 学研 (1991).

[2] 本当は、スピン座標 σ も考えて $\Psi(x, \sigma, t)$ とする必要があるが、ここでは電子は上向きのスピン状態であるとして σ に関する和を略している。なお、電子の場合 σ は $\frac{1}{2}$ か $-\frac{1}{2}$ の値をとる変数である。

[3] 例として挙げている表式は Ψ が規格化されているとした場合の表式です。

[4] どのような値が得られるのか。これは演算子の固有値のいずれかである。そしてその値が得られる確率はその値(固有値)に属す固有関数 ϕ を使って $|\int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \Psi dx|^2$ である。

[5] $\psi(x)$ は定常波として振動する。 $\psi(x)$ 自身も波動関数と呼ぶが、 $\Psi(x, t) = \psi(x) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} Et\right]$ である。