この $(*a_2)$ は，$\Psi(x,\ t)=\psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ とおいて，

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+U\Psi \quad \cdots\cdots\cdots(*a_1)$$ に代入することによっても

求められる。実際に実行してみると，

$$i\hbar\psi\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\right)}_{\boxed{-i\frac{E}{\hbar}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}}=-\frac{\hbar^2}{2m}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U\psi e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$E\psi\cancel{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\cdot\cancel{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}+U\psi\cancel{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}$$

よって，両辺を $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ で割ると，$(*a_2)$ が導けるんだね。

このように，$\Psi(x,t)=\psi(x)\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ で表されるとき，これは，エネルギーが一定の値 E(定数)をとる定常状態と考えることができる。

そして，単にシュレーディンガー方程式と呼ぶ場合，$(*a_2)$ を指すことが多いことも知っておくといい。

それでは，Ψ と ψ についてのシュレーディンガー方程式をもう 1 度ここにまとめておこう。

(Ⅰ) 時刻 t を含む波動関数 $\Psi(x,\ t)$ の波動方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+U(x)\Psi \quad \cdots\cdots\cdots(*a_1)$$ で表され，

(Ⅱ) $(*a_1)$ の解の 1 つとして，$\Psi(x,\ t)=\psi(x)\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ と表され，時刻 t を含まない波動関数 $\psi(x)$ の波動方程式は，

$$E\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U(x)\psi \quad \cdots\cdots\cdots(*a_2)$$ で表されるんだね。

以上で，シュレーディンガー方程式の導き方は分かったと思う。けれど，何故，古典力学の力学的エネルギーの保存則と演算子を組み合わせるのか？その理論的な根拠については誰も答えることができないと思う。シュレーディンガー方程式は，不思議な量子の世界を記述する不思議な方程式と言ってもいいかもしれない。

● ハイゼンベルグの行列力学と不確定性原理についても概説しよう!

量子力学の基礎を確立した科学者として，シュレーディンガー以外に，ハイゼンベルグ (**W.K.Heisenberg**) を挙げることができる。ハイゼンベルグは，シュレーディンガーより少し早く **“行列力学”** (***matrix mechanics***) という手法を創出した。この行列力学についても，簡単に概説しておこう。

物理量を表す変数として，行列を用いることにし，運動量を表す行列を P，位置を表す行列を Q とおくと，行列の積では交換法則が成り立たないので，当然

$PQ \fallingdotseq QP$ ……………① すなわち，

$PQ - QP \fallingdotseq O$ ………①´ となる。 (P, Q : 無限行無限列の行列)

ここでさらに，ハイゼンベルグは，$PQ - QP$ を，虚数単位 i と $\hbar\left(=\dfrac{h}{2\pi}\right)$ と

単位行列 $E = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$ を用いて，①´ を

$PQ - QP = -i\hbar E$ ………② と表した。

そして，ハイゼンベルグは古典力学の方程式の中の通常の変数を，行列変数に置き換え，さらに②の条件を与えることにより，水素原子のスペクトルを算出した。そして，その結果が実験結果と一致することが，確認されたんだね。後に，シュレーディンガー方程式による波動力学と，この行列力学は数学的に等価であることが，シュレーディンガーにより示されたんだね。

ここで，ハイゼンベルグの量子力学におけるもう **1** つの大きな功績として，**“ハイゼンベルグの不確定性原理”** (***Heisenberg uncertainty principle***) が挙げられる。量子力学では，古典力学と違って，粒子の位置 q と運動量 p を同時に確定することはできない。粒子の位置 q と運動量 p を観測したときに生じるバラツキを Δq と Δp とおくと，次の不等式が成り立つ。

$\Delta q \cdot \Delta p \gtrsim \hbar$ ……③ $\left(\hbar = \dfrac{h}{2\pi} = 1.055 \times 10^{-34} (\mathrm{J \cdot s})\right)$

$\left(\text{より正確には，} \Delta q \cdot \Delta p \geqq \dfrac{\hbar}{2} \text{ が成り立つ。}\right)$

この③の記号 “$\sim$” は “大体これくらい” という意味で，この不等式が，不

確定性原理を表している。$\hbar$ は，プランク定数 h を 2π で割ったもので，非常に小さな値であるんだけれど，これが正の値であることがポイントなんだね。つまり，q の位置を確定させようとして $\Delta q \to +0$ とすると，$\Delta p \to +\infty$ に発散してしまう。同様に，$\Delta p \to +0$ にすると，$\Delta q \to +\infty$ となって，位置をまったく特定できなくなるんだね。この不確定性原理は，量子力学を学ぶとき様々な分野で現れてくる重要な原理なので，是非頭に入れておこう。

これまでの議論から明らかなようにマクロな粒子を扱う古典力学とミクロ(量子的)な粒子を扱う量子力学とは，本質的に考え方を変えないといけない。

図1　位相空間における
古典力学と量子力学

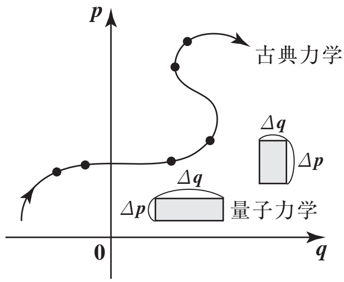

図 **1** に示すように，位置 q と運動量 p を両軸とする位相空間で考えると，古典力学では，粒子のある時点における位置 q と運動量 p は決定され，位相空間内の **1** 点が決まるんだね。そして，時刻 t の経過と共に，その運動の軌跡は，**P156**で解説したように，**1** つの曲線(トラジェクトリー)として描くことができるんだね。

これに対して，量子力学では，粒子の位置 q と運動量 p を同時に決定することはできず，ハイゼンベルグが提示した不確定性原理 $\Delta q \Delta p \geq \hbar$ に従って，漠然とした確率論的な情報しか得られないんだね。これはミクロな粒子が，波動としての性質から空間内にある広がりをもって存在していると考えないといけないからだ。この古典力学と量子力学の本質的な違いを頭に入れておくと，量子力学の学習もはかどると思う。

これまで，量子力学の基本について解説してきたけれど，興味を持って頂けただろうか？マセマの「**量子力学キャンパス・ゼミ**」では，様々なポテンシャルや境界条件の下で，シュレーディンガー方程式を解いて，具体的な波動関数を求めたり，また，ハイゼンベルグの不確定性原理も，その証明も含めて詳しく解説しています。量子力学に興味を持たれた方は是非更に学習を進めていって下さい。