

【物理量を測定するという事】

「不確定性」は量子力学の基本原則です。これは電子の波動性、つまり電子の波動関数が e^{ikx} という形の周期的な波を表す関数で与えられるということが、一番良く物語っているといえますが、進行波でも後退波でも、波は空間的に広がっていますから、波の「位置」を具体的に、ここだ・・・と決めることが出来ないことで直感的には理解できます。

歴史的には、**1927年のハイゼンベルグ**の思考実験(頭の中で考える実験)で初めて導入された結果です。ハイゼンベルグの思考実験は、電子を観察して場所などを決めようという状況を考えたものです。電子に限らず、何かの場所あるいは位置を決めようとするときには、例えば遠く離れて動いている車の場所を決めるときには、まずは望遠鏡などでその車を見ます。この車を見るということは、実は詳しく考えると、昼間であれば太陽からの光が車に当たって、その車から反射する光の一部を望遠鏡に集め、自分の目の網膜に焦点を結び、自分の視神経から脳に信号が伝わって、何かの演算が脳の中でなされて、・・・この場所に車がいる・・・と認識できるわけです。つまり車に太陽の光が当たっているから、車の場所が分かります。もし夜の暗闇であったら、光は当たりませんから車の姿は見えません。その場合は、ライトの光やレーザー光を車に当てて、車から反射してくる光を見る、あるいは測定する必要があるわけです。つまり、電子に限らず何かの物を見て場所を決めるには、この場合光でしたが、何かの刺激を物に当てて、その反応(この場合光の反射です)を求める必要がある。車はとても重いですから、光が当たったとしても、その光のエネルギーで車が動いたりしませんが、電子の場合は、とても軽いので(電子の質量は $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$)、光のエネルギー $E = \hbar\omega$ を与えると、その動きに影響を与えてしまいます。これが、車のような大きな日常的世界の話と、電子のような微小な世界との違いです。

今の場合、場所を観察することでしたが、一般的には、場所・位置に限らず、運動量つまり速度やエネルギーといった物理量を測定するためには、何かの刺激を測定したいものに与えて、その反応を観察することになります。車の場所・形を目で見る・・・という動作は、一見何も車に刺激を与えていないように思いますが、これはちゃんと昼間であれば太陽の光が車に当たるという刺激を与えています。その刺激がなければ、車の場所を見ることはできません。電子の場合も同じで、何かの刺激を電子に与えないと場所は分からない・・・そして何かの刺激は電子の場所などに影響を与えてしまうこととなります。

【物理量の測定精度】

次にどれくらい詳しく場所を決めることができるかという問題です。今、目が見えない人が近くにある車の大きさを分かろうとしているとします。何をするかというと、例えば何か木の棒を持って、その棒で車の端から端まで触って、大体これくらいの長さだと認識します。このとき、木の棒の太さが例えば10cmくらいであれば、かなり正確に、厳密には太さの半分くらいの精度で、車の大きさを知ることができるようでしょう。しかし、もし木の棒の先の太さが例えば1mもあつたら、例え木の棒の先で車の端を触ったとしても、車の場所は、太さの半分のプラスマイナス50cmは誤差になって、正確な車の大きさが分からないこととなります。光の場合に置き換えると、この場合、棒の太さに相当するのが光の波長です。光の波長が長ければ、つまり棒の太さが太ければ、その光の波長以下の位置精度で求めることができません。光学顕微鏡で、細かいものをちゃんとみるために、普通の電球の光、これは大体波長が2ミクロンくらいの赤外線が最も強く出ているのですが、普通の電球を使うよりも、波長が短い青いフィルターを使って波長を短くして観察すると、細かい小さなものが見えるようになります。もっと小さいものを見るためには、もっと波長が短い電子線でみるようにしたのが、電子顕微鏡です。このように、どんどん光の波長を短くしていけば、つまり触る

棒の太さを細くしていけば、どんどん物の場所が詳しく分かるような気がします。しかし、一方、光の波長を短くしていくということは、光の運動量 p が $p = \frac{h}{\lambda}$ あるいは、光のエネルギー E が

$$E = \hbar\omega = \hbar 2\pi\nu = \frac{h}{2\pi} \times 2\pi \times \nu = h\nu$$
 ここで、光の波長 λ と周波数・振動数 ν の間には $c = \nu \times \lambda$ とい

う関係がありますから、結局、光のエネルギー E は $E = h \times c \times \frac{1}{\lambda}$ という関係があるので、位置を詳しく見ようとして、光の波長 λ を短くしていくと、光のエネルギーが大きくなりますから、相手に与える影響も大きくなり、例えば電子を動かしてしまって、場所が分からなくなる結果になります。つまり、電子の場所を正確に知ろうとすると、電子にエネルギー・運動量を与えてしまって速度が変わってしまうし、速度を正確に知ろうとして電子にあまりエネルギーを与えないようにして・つまり光の波長を長くしてエネルギー・運動量を小さくしていくと、波長が長いですから、今度は場所がどんどん分からなくなってくるジレンマに陥る・・・つまり、**位置・場所と運動量・速度の両方を同時に正確に求めることはできない**というのが**ハイゼンベルグの思考実験で、不確定性原理**といわれています。

【不確定性原理】

この思考実験を、数式化してみます。大雑把に言って、光の運動量と波長の間には $p = \frac{h}{\lambda}$ という関係がありますから、位置の測定誤差が波長 λ 程度だとすると、プランク定数 h は定数ですから、

$$\Delta p \approx \frac{h}{\Delta x} \quad \text{つまり} \quad \Delta p \times \Delta x \approx h$$
 の誤差がどうしても生まれてしまうと考えられます。ですから、位置の誤

差 Δx を小さくして正確な場所を求めようとする、 Δp つまり運動量つまり速度の誤差が大きくなり、速度の誤差を小さくしようとする、今度は位置の誤差が大きくなってしまいう結果になります。

ここで、場所を決める・・・ということは、量子力学的に言うとなんを求めたかかを復習してみましょう。量子力学の世界では、運動量やエネルギー、そして位置などの物理量は、演算子で与えられました。波動関数に演算子を作用させて、その結果、同じ波動関数が得られる関係でした。例えば、エネルギーに相当する演算子：ハミルトニアンは $H\psi = E\psi$ などです。これは、波動関数にハミルトニアン H を作用させると、期待値と $\langle H \rangle$ として、確定したエネルギー E が得られるということでした。運動量も同じように演算子で表されますし、位置 x も x をかけるという意味で波動関数に x を作用させることになります。

【同時観測可能性を測る；交換子】

ここで、位置や運動量というような、ある物理量 \hat{A}, \hat{B} が、同じ固有関数（波動関数）を共有している場合、固有関数は同じでも、固有値は違っているのが一般的だから、それぞれ固有方程式を満たします。

$$\begin{aligned} \hat{A}\varphi &= a\varphi \\ \hat{B}\varphi &= b\varphi \end{aligned}$$
 このような場合、はじめに物理量 A を観測して、その後物理量 B を観測すると、どのような結

$$\text{果が得られるかを考えてみると} \quad \hat{B}(\hat{A}\varphi) = \hat{B}(a\varphi) = a\hat{B}\varphi = ab\varphi$$

となって、波動関数は変化しないまま、 a, b という確定した期待値が得られることが分かります。これは、物理量 A, B が同時に確定した値を取ることができる・・・といつてよいでしょう。この場合は、不確定性

はありません。

このように同じ波動関数を共有している場合、観測する順番を逆にしても、得られる結果は同じです。このことを演算子の形で表すと、 $\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{B}\widehat{A}$ です。これは普通の掛け算なら当たり前ですが、演算子の場合、ベクトルの外積のように、順番を変えると結果が違ってくる場合もあります。

この式は少し変形して、 $\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A} \equiv [\widehat{A}, \widehat{B}]$ とかいて**交換子**といいます。

この交換子という言葉を使えば、**交換子がゼロの場合は、二つの物理量AとBは、同時に確定した値をとることができる**・・・ということになり不確定性原理は成り立ちません。逆に言えば、不確定性原理は、交換子がゼロでないとき成り立つ。これを具体的に確かめましょう。位置 x と運動量 p の交換子の値を計算

してみましょう。ある波動関数 ψ として、それに演算子 $\widehat{x} = x$ $\widehat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ を順番に作用させる・・・つまり

かけてみればよい。 $\widehat{x}\widehat{p}\psi = x\left(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}\right) = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x}$ 逆の場合は

$$\widehat{p}\widehat{x}\psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = -i\hbar\left(\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)$$

となりますから、交換子は $(\widehat{x}\widehat{p} - \widehat{p}\widehat{x})\psi = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} - -i\hbar\left(\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x}\right) = i\hbar\psi$ となって、これはゼロに

なりません。**不確定性原理がなりたつ**場合です。そして、交換子の値が不確定性の度合いを示していることとなります。もうひとつ具体的に、ふたつの物理量の間**の交換関係を調べてみましょう**。つまり不確定性原理が成り立つかどうかを調べます。運動量演算子 p とエネルギー演算子 H の交換関係を調べます。つまり運動量とエネルギーは同時にその値を決められるかどうかを調べるわけです。一次元問題です。一次元の運動

量演算子は $\widehat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ でした。そして1次元のエネルギー演算子、これはハミルトニアン H ですが、

ポテンシャルの場合がある場合には $\widehat{H} = T + U = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ でした。

このとき、もしポテンシャルエネルギー部分が無ければ、 p と H は交換可能であることは明らかです。なぜなら、一階の微分と二階の微分をどちらを先にするかは、同じ結果を与えるからです。順番によりませんから、交換可能です。つまり、**ポテンシャルエネルギーが無い場合には、運動量（速度）とエネルギーは同時に値を決めることができることになり、不確定性はありません**。しかし、ポテンシャルエネルギー項がある場合にはどうなるのでしょうか。ポテンシャルの部分だけを調べれば事足りるから、そちらだけ調べてみます。まず

$\widehat{p}\widehat{H}\psi = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)V\psi = -i\hbar\left(\frac{\partial V}{\partial x}\psi + V \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)$ となります。一方、逆は

$\widehat{H}\widehat{p}\psi = V\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\psi = -i\hbar V \frac{\partial \psi}{\partial x}$ となりますから、交換子は $[\widehat{p}, \widehat{H}] = \widehat{p}\widehat{H} - \widehat{H}\widehat{p} = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$ となりま

す。このとき、 V の**ポテンシャルが位置の変数の x に寄らずに一定ならば**、微分はゼロですから、**交換関係がなりたちます**。これはポテンシャルエネルギーは相対的な量であって、ゼロをどこにとってもよいという意味と同じですが、力学の基本的な考えと整合性が取れています。例えば、地球の重力というポテンシヤ

ルなら、地球表面をゼロと普通はとって、あるいは電圧ポテンシャルのゼロは、普通は地球の表面での電圧をゼロとして、アースを取っていますということを意味しています。

運動量とエネルギーの交換関係を調べていえることは、もしポテンシャルエネルギーが無い・あるいは場所に寄らずに一定であれば、運動量とエネルギーは同時に値を確定できて、不確定性は生じないが、もしポテンシャルエネルギーが場所によって変化するものが働いていれば、例えば、水素原子の場合のクーロンポテンシャルのようであれば、交換関係は成立しないので、不確定性原理が成り立ち、運動量とエネルギーは同時にははっきりした値を決めることができないことになります。この交換子について、少し一般化しておきます。交換子については、四則演算の関係式のような関係があります。例えば

$$[\hat{B}, \hat{A}] = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = -[\hat{A}, \hat{B}]$$

$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = (\hat{A} + \hat{B})\hat{C} - \hat{C}(\hat{A} + \hat{B}) = \hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A} - \hat{C}\hat{B} \\ = (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) + (\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$$

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = \hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) - (\hat{B} + \hat{C})\hat{A} = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{A} - \hat{C}\hat{A} \\ = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})\hat{B} \\ = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) + (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} \\ = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$$

【電子スピン】

電子の軌道角運動量に起因するボア磁子 $\mu_B = \frac{\mu_0 q \hbar}{2m_e}$ ($1.165 \times 10^{-29} \text{ Wb m}$) これがいわば、1個の電子でできる

一番小さな磁石です。いわば電子の軌道運動による角運動量が量子化されて、磁場を発生することを量子力学的に考えたものですが、電子は古典的な意味では、軌道運動だけでなく、自転運動に相当する運動による角運動量を生じます。これもやはり量子化されて、これを「スピン角運動量」といいます。通常sで表されます。これははじめ、ディラックが、相対論的な量子力学、これは時間に依存したシュレジンガーの波動方程式に対応します・・・を展開した結果、軌道角運動量のほかに、内部角運動量として必然的に出てきたものですが・・・、ここでは詳しくは述べません。

電子や陽子、中性子は、スピンの大きさが $\hbar\sqrt{S(S+1)}$ ここで、 $S = \frac{1}{2}$ そのz軸方向の成分 S_z が

$S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ の2つの状態が存在するものです。これをスピン上向き($+\frac{\hbar}{2}$)と下向き($-\frac{\hbar}{2}$)と呼んでいます。このよう

に、電子にはスピンという内部自由度がある(つまり異なる状態がある)ので、1個の原子軌道にはスピンが異なる2個の電子まで入ることが出来ます。つまり、スピンによる縮退度は2であるということが出来ます。縮退とは、状態は異なるがエネルギーは同じである事を言います。

これをパウリの排他律、あるいはパウリの原理といいます。

他の量子数、つまり主量子数n、磁気量子数m、そして方位量子数エルを含めて、スピン角運動量sの $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ の

全てが同じ状態の電子は、ただ一つのエネルギー準位を占める・・・ということです。これは、量子力学では、同じ粒子、例えば二つの電子は、それぞれ区別できないことから来ています。