量子力学入門２： 早川尚男 (京大人環)

1　はじめに

古典量子論までを (その 1) に書いておいたが、本ノートではその 2 を tex で書くことにする。そのメリットは数式を苦もなく書けることであるが、一方で別のサイトへのリンク等、WEB ならでは使い方が出来なくなる。

その 2 では前期量子論からいよいよ量子力学の建設期にどういう考えで何が起こったかを解説する。少数の練習問題も入るかもしれないが、あくまで本ノートを読み物として捉え、読後に量子力学の考え方を学ぶ事が出来たらよしと考える。

本ノートでは次の節でド・ブロイの物質波の考え方を紹介し、次いでシュレディンガーの波動力学を紹介する。また波動関数の対称性に関連した統計性についても説明しよう。

2　ド・ブロイ波

光量子仮説は光が波としてだけでなく粒子の性質も併せ持つというものであった。この様な考え方は光のみに有効なのか普遍的なのかという疑問に答える事には出来ない。また一見関係ない話であるが、前期量子論で用いられた量子条件はその意味がはっきりしない。

ド・ブロイは 1923 年に粒子と思われていた電子にも波動的性質があると量子条件が説明できることに気がついた。ド・ブロイの発想の斬新さは光では既に認識されていた粒子と波の 2 重性を物質である電子にも持ち込んだ事である。この 2 重性は 1927 年に実験によって検証されている。ド・ブロイによって古典的な波と粒子の区別はなくなり、むしろその 2 重性がミクロな世界の本質である事が認識されるようになっていった。

その大枠をかいつまんで説明しよう。ボーアの量子条件は角運動量 l が

$$l = n\hbar : \quad \hbar = h/2\pi, \quad l = pr : \quad n : \text{整数} \tag{1}$$

である。ここで h はプランク定数、p は運動量、r は軌道半径である。一方、円軌道上に波長 λ の定在波があったとすると

$$2\pi r = n\lambda, \quad n : \text{整数} \tag{2}$$

が成立する。この条件を充たさないと干渉によって打ち消され、定常状態としては波が残らないからである。従って (1),(2) を両立させせると

$$p = h/\lambda = \hbar k, \quad k = 2\pi/\lambda \tag{3}$$

が成り立てばいい。この式はコンプトン効果の際に用いたものと同一である。一方、アインシュタインの光量子論ではエネルギー E は

$$E = h\nu = \hbar\omega : \quad \omega = 2\pi\nu \tag{4}$$

であった。仮にこの関係が電子についても使えるとしよう。ド・ブロイがよりどころとしたのは相対論ではエネルギーと運動量が同じ変換に従う点である。電子の速度が非常に遅い場合にはほぼ相対論効果は無視できるので $p = mv$ と近似できる。(ここで m, v は各電子質量、速度)。この式と (2) をバランスさせると

$$\lambda = \frac{h}{mv} \tag{5}$$

という式を得る。従って電子も (5) 式で表されるド・ブロイ波長 λ を持つ波の性質を持つ筈であろう。このド・ブロイの仮説は電子の回折の実験的発見で検証された (1927).

3 シュレディンガーの波動力学

シュレディンガーはド・ブロイの論文を読んで[1] 波動を扱うのであれば波動方程式が必要であると考えた (1926)。シュレディンガーはド・ブロイと同じく相対論的な式を出発点にして今日クライン・ゴルドン方程式として知られる方程式にたどりついたが、当時存在を知られていなかったスピンの影響でその解析の結果が水素原子の実験結果と一致しなかった。そこでシュレディンガーは非相対論的な式を採用し、実験結果を説明することに成功した。そこで用いられた方程式が今日シュレディンガー方程式として知られている。

シュレディンガーの論文は上記の様な紆余曲折を隠した形で書いているので必ずしも分かりやすくない。ここでは江沢の説明[2] にならってシュレディンガー方程式を導いてみよう。そのため自由粒子を考えてみよう。そのエネルギーは運動エネルギーのみで

$$E = \frac{p^2}{2m} = \hbar\omega, \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{6}$$

で与えられる。ポテンシャルの影響を受けない波動方程式の解は正弦波等で書けることが期待できる。従って

$$\psi(x,t) = Ae^{ikx-\omega t}, \quad : e^{ix} \equiv \cos x + i \sin x \tag{7}$$

が解になるであろう。但し $e^x = d/dx(e^x)$ を充し、その虚数 $(i^2 = -1)$ のべきは上の式の右の式を定義とする。[3] 実際、

$$i\frac{d}{dt}e^{-i\omega t} = \omega e^{-i\omega t} \tag{8}$$

という関係があるので波動方程式として

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) \tag{9}$$

---

[1] シュレディンガーは最初、ド・ブロイの論文を評価していなかったが、アインシュタインの高い評価を聞くに及んで再評価したと伝えられる。

[2] 江沢洋：量子力学的世界像と古典物理 in アインシュタインとボーア：相対論・量子論のフロンティア (裳華房 1999)

[3] ここで考え始めると眠れなくなるかもしれない。初学者にはこのオイラーの関係式はバリアとなるだろう。その思いを綴った吉田の「オイラーの贈物」(海鳴社) という本がある。

と採用してよさそうである。但し偏微分は

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) \equiv \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\psi(x,t+\Delta t) - \psi(x,t)}{\Delta t} \tag{10}$$

で定義される。エネルギーの式にポテンシャル $V(x)$ が加わって

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{11}$$

となった場合でも

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right\}\psi(x,t) \tag{12}$$

とすれば良いであろう。実際この方程式が (1 次元の) シュレディンガー方程式であり、(任意の次元で) 無数の事例に適用されて成功を収めてきた。今日では相対論が効かない範囲では基礎方程式と見なされている。

また (6),(10) 式等から

$$p \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}: \quad E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{13}$$

という対応がある。また

$$\frac{d}{dx}(xf(x)) = f(x) + x\frac{d}{dx}f(x) \tag{14}$$

という関係より

$$[x,p] \equiv xp - px = i\hbar, \quad [x,x] = [p,p] = 0 \tag{15}$$

という交換関係があることになる。

実際には (15) 式はハイゼンベルクがボーアの対応原理を用いて導いた関係式である (1925)。最初の論文ではかなり分かりにくい議論をしていたが、ハイゼンベルクの指導教官であるボルンが当時物理学者にはあまりなじみのなかった行列演算である事を見出し、ヨルダンとの 3 人で立て続けに論文を発表していった。またイギリスではディラックがハイゼンベルクの量子力学を再解釈し、古典力学との関係を含めて独自のきれいな体系を作り上げた。その格子は名著である彼の量子力学の教科書に引き継がれている。しかし当時の物理学者が行列や関数解析に不慣れであったためにハイゼンベルクの量子力学は当時物理学者に大きな混乱をもたらした。一方、その 1 年後に発表されたシュレディンガー方程式は物理学者におなじみの偏微分方程式であるために大多数の物理学者にその登場を歓迎された。大多数の物理学者は波動力学のわかりやすさと問題を解く際の計算の簡便さからシュレディンガー方程式を受容し、積極的に使う様になっていった。シュレディンガーは波動力学の第 3 論文でハイゼンベルクの行列力学と波動力学との同等性を証明したが、その一方でボーア等のコペンハーゲン学派は行列力学の優位性を主張した。[4] 特にボーアのシュレディンガーに対する「説得」は執拗であり、シュレディンガーの病床でもその説得は続いたと言われる[5] 。

[4] 彼らはボーアの原子模型にある量子飛躍が本質的であり、また量子現象は連続体の物理学の概念では表現できないという考えに固執した。現在でも本当の意味で 2 つの理論が同等となった訳ではないようであるが、それ自体は筆者の理解を越えており、本講義では両者は同等であるとして話を進める。

[5] この討論はシュレディンガーのコペンハーゲン訪問 (1926 年 9 月末から 10 月初頭) の際に行われている。

4　波動関数の解釈とその性質

1925 年に生まれた量子力学は古典物理の直観と相反する様々な性質を持っている事が明らかになっていった。ここでは不確定性原理、確率解釈、統計性、トンネル効果等に簡単に触れよう。

4.1　位置と運動量の不確定性

古典力学では、ある時刻に粒子の位置と運動量を与えると運動方程式によって粒子軌道は一意に定まる。しかし量子力学では位置と運動量を独立に決められない。この不確定性原理の数学的証明はそれほど難しくないが、ここでは波動力学を用いた直観的な説明な説明を試みる。一辺の長さ L の箱に入っている定在波を考える。このとき、$E = p^2/2m$ 及び $p = h/\lambda$ の関係式より、最もエネルギーの低い波は最も波長の大きい波でその波長は $\lambda = 2L$ である。このとき運動量はゼロではなく $p = h/(2L)$ という有限の値を持つ。つまり最低エネルギーでも有限の運動量を持つ振動が存在することになる。このような最低エネルギーの振動はゼロ点振動と呼ばれ、前期量子論では説明できなかったことであり、またボーア・ゾンマーフェルトの量子条件と実験のずれの説明にも有効な概念である。

基底状態 (最低エネルギーの状態) では、粒子は運動量 $p = h/(2L)$ をもって右に行き、$-h/(2L)$ で左に帰る。従って運動量の平均はゼロであるが、運動量の取る値の偏差は h/L である。これは運動量の不確定性の表現であり $\Delta p = h/L$ と書ける。一方、粒子は長さ L の区間上のどこにいるのか分からないので、位置の不確定性 Δx は $\Delta x = L$ と考えられる。従って位置と運動量の不確定性の積は

$$\Delta x \Delta p = h \tag{16}$$

という関係式を充たすことになる。或はこの積は最小値を表しているので $\Delta x \Delta p \geq h$ という方がより適切な表現かもしれない。より正確な表現でもおおよそ (16) 式と変わらない結果を得る。

(16) 式はハイゼンベルクが 1927 年に導いたもので不確定性原理の式と呼ばれる。この式は量子力学の奇妙な性質を余すところなく表現している。例えば、粒子の位置を非常に正確に測定したとすると運動量の不確定性は∞になってしまう。逆に運動量を正確に定めると位置の不確定性が発散する。このように位置と運動量は不確定性原理によって精密に決定することは出来ない。この事実は (15) 式の交換関係の別の表現とも見做す事が可能である。尚、エネルギーと時間の間にも同様の関係式 $\Delta E \Delta t \geq h$ が成り立つ。

議論は一致点を見出せないまま昼夜を問わず続けられ、数日後、シュレディンガーは熱を出して倒れてしまった。ボーア夫人は看病したが、ボーアは枕元に座って議論を続けた。ここでの討論が後のハイゼンベルクの不確定性原理やボーアの相補性原理を生み、ボルンの確率解釈と併せて、正統的なコペンハーゲン解釈に結実していく。

4.2 確率解釈

不確定性原理の意味するところは1つの状態がある物理量に対して確定した値を持たないということである。逆に言えば、その状態で物理量を測定しても、試行毎に結果が異なりまちまちの値になることを意味する。こういう状態を定量的に表現するには物理量に対する確率を用いると良い。こうした考えはボルンによって比較的初期 (1926) に提唱された。その骨子は 1。波動関数は同じ状態にある集団に関して統計的予言をする。2。波動関数に対して $|\psi(x,t)|^2dx$ が $(x, x+dx)$ の間で電子を発見する確率である。その規格化は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi(x,t)|^2 = 1$$

となるように行う, というものであった。

確率解釈に基づくと2重スリットを用いた干渉実験の結果を自然に解釈できる。例えば 1,2 の単独のスリットのみが存在するときの波動関数を $\psi_1(\vec{x})$,$\psi(\vec{x})$ としよう。2つのスリットがあるときは合成波動状態が

$$\psi_3(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}}(\psi_1(\vec{x}) + \psi_2(\vec{x})) \tag{17}$$

で表されるとする。[6] スリットは $z=0$ の衝立上にあり、電子は $z<0$ から入射してくるものとする。位置 $z=L$ 上にスクリーンを置き、位置を測定したとする。そこでの確率密度は

$$\rho_3 = \frac{1}{N}(\rho_1+\rho_2) + \frac{2}{N}Re(\psi_1(x,y,L)^*psi_2(x,y,L)) \tag{18}$$

で与えられる。但し $\rho_i = |\psi_i(x,y,L)|^2$ であり、$Re(a), Im(a)$ は複素数 a の実部、虚部を表し、a^* は a の複素共役量、即ち、$a = Re(a) + iIm(a)$ に対して $a^* = Re(a) - iIm(a)$ である。

細いスリットを $y = \pm d/2$ においたとする。このとき

$$\psi_1 \sim \exp[\frac{ip}{\hbar}(L + \frac{(y-d/2)^2}{2L})], \quad \psi_2 \sim \exp[\frac{ip}{\hbar}(L + \frac{(y+d/2)^2}{2L})] \tag{19}$$

である。但しここで $L \geq d, y$ を仮定し、$k = k/\hbar$, $\sqrt{L^2 + (y \pm d/2)^2} \simeq L + \frac{(y\pm d/2)^2}{2L}$ を用いている。従ってこの軌道に沿っての位相差から干渉項は

$$Re(\psi_1(x,y,L)^*\psi_2(x,y,L)) \propto \cos(\frac{pyd}{L\hbar}) \tag{20}$$

となる。[7] この表式は実際の実験の結果を説明している。

この確率解釈は間もなくボーアによって取り上げられ、標準的なコペンハーゲン解釈と呼ばれるようになった。しかしアインシュタインの「神様はさいころを振らない」という言葉に象徴されるように反対論も根強くあり、今日に至るまで論争の種となっている。

[6] 但し N は規格化 $\int d^3x|psi_3|^2 = 1$ から決まり、$N = 2 + 2Re\int d^3x\psi_1\psi_2^*$ である。

[7] (19) 式より $\psi_1^* = e^{-i\theta}\exp[\frac{ipyd}{2L\hbar}]$ 及び $\psi_2 = e^{i\theta}\exp[\frac{ipyd}{2L\hbar}]$ である。ここで θ は位相の共通部でありその積は1となる。従って $\psi_1^*\psi_2 = \exp[\frac{ipyd}{L\hbar}]$ となり、その実部は (20) 式で与えられる。

4.3 統計性とスピン

多粒子状態を考えると 2 通りの統計 (のみ) が可能であることが直ちに分かる。i 粒子の位置 (とスピン) を x_i で表すと N 粒子状態の波動関数は

$$\psi(x_1, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_N) \tag{21}$$

と表現できる。$\mathcal{P}_{ij}$ を i,j 粒子の入れ換えの演算子とすると

$$\mathcal{P}_{ij}\psi(x_1, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_N) = \lambda\psi(x_1, \cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots, x_N) \tag{22}$$

となる。ここで λ は演算を施す事で現われる固有値というスカラー量である。2 回粒子の入れ換えをすると元に戻るので $\lambda^2 = 1$ が成り立ち、固有値は ± 1 の値を取る。固有値$+1$ の粒子系をボーズ粒子、-1 をフェルミ粒子と呼ぶ。それぞれ発見者の名前に由来している。

ボース (Bose) はインドの学者で量子力学発見前夜の 1924 年 6 月にアインシュタインに手紙と論文を送った。その論文はフィロソフィカル・マガジンに掲載を拒否されたもので、この仕事に十分な意味があれば当時、世界で最も権威のある雑誌のツァイトシュリフト・フュア・フィジークに刊行できるように取り計らって貰えないかという厚かましいものであった。アインシュタインは直ちにその重要性を認め、ドイツ語に翻訳し、注釈を加えて投稿した[8]。ボースの論文はプランクの前期量子論の最初の論文から、電磁気学の要素を取り除き、本質的な部分 (粒子は質量 0、2 つの偏極状態、粒子数が非保存、新しい統計則に従う) だけで再導出し、基礎づけをしようというものであった。この仕事は前期量子論における 5 番目 (つまり、プランク、アインシュタイン、ボーア、ド・ブロイに継ぐ) かつ最後の革命的論文であった。アインシュタインは翻訳をしたばかりでなく興味がそそられ、新しい統計法則に関する論文を矢継ぎ早に 3 つ刊行している。そこでは、ボースの仕事の再定式化を試み成功したばかりでなく、1925 年の初めに刊行された第 2 論文では、相互作用のないボース粒子が凝縮するという驚くべき理論的帰結を導いた。通常の相転移は引力相互作用の結果、凝縮するのであるが、ここでは引力がないのにもかかわらず凝縮するという現象は非常に興味深いものがある。今日ではこの現象はボース・アインシュタイン凝縮と呼ばれている。現実の対応物はしばらく前までは超流動にその答えも求めていたが、1995 年に至って、レーザートラップの技術を用いてかなり理想的状況での凝縮実験に成功し、その後、物理業界はボース・アインシュタイン凝縮の話題で活況を呈している。

フェルミ (Fermi) はイタリアの研究者であり、統計の仕事の他に β 崩壊の理論と弱い相互作用の導入、更に原子核分裂の連鎖反応の成功等顕著な業績を次々と挙げている。1926 年に後で述べるパウリの排他律 (1925) を統計則に応用したらどうなるかという論文を書いている。同じ年にやや遅れてフェルミの仕事を知らなかったディラックも全く同様の結果を導いている。今日では電子等の半整数スピンを持つ粒子はフェルミ・ディラック統計に従う事が知られ、エレクトロニクス等の基礎となっている。[9]

[8] アインシュタインが他人の手紙等を論文にまとめて投稿した例としては他に一般相対論の厳密解と (後に) ブラックホールの発見に繋がったシュバルツシュルトの論文がある。

[9] フェルミはディラックに手紙を送り、ディラックはフェルミに論文の存在に気がつかなかったことを詫びている。

ではパウリの排他律とはどんなルールであろうか。実はこの論文も量子力学誕生前夜のものであるが、ここでは量子力学の知識を使って説明しよう。(22) 式に戻って $\lambda = -1$ としよう。そうすると驚くべき性質があることが分かる。今、仮に i,j 粒子が同じ状態 $x_i = x_j = X$ を占めていたとしよう。そのとき波動関数は $\psi(\cdots, X, \cdots, X, \cdots) = -\psi(\cdots, X, \cdots, X, \cdots)$ を充たす。この解は $\psi = 0$ しかない。従って同一の量子状態を占める事ができないのである。この性質が量子数によって系が特徴づけられること、ひいては周期律表等に現われる物質毎の性質の違いの原因となっている。

これらの 2 種類の統計はスピンと呼ばれる角運動量に似た新しい量子数によって区別される。スピンの古典的イメージは電子の自転である。しかし電子には大きさがないのでそのイメージに固執すべきではない。フェルミ粒子は 1/2,3/2,.. 等の半整数の値を持ち、ボース粒子は整数値を持つ。スピンと磁場は線形結合をしており、そのため磁場をかけることでエネルギー準位が分裂する。これがゼーマン効果の正体である。その他、前期量子論で謎であった諸々の事がスピンの導入によって解決された。スピンそのものが現われる理由はディラックによる相対論的量子力学によって明らかになった (1928)。

スピンの誕生にも裏話がある。スピン (ここでは自転する電子) の存在の着想は 20 歳そこそこの若者であったクローニッヒが 1925 年の正月頃に思い付いた。早速この発想をパウリに聞いてもらったところ、冷淡な態度を取られ、またコペンハーゲンでも評判がよくなく、古典的に考えると様々な問題があること、準位間隔が 2 倍ずれることなどで発表をやめてしまった。一方、同じ年の秋にウーレンベックとカウシュミットの 2 人が全く同じ発想で論文を発表した。ここでも若い 2 人がローレンツに意見を聞いた際に否定的な意見が出て、発表をやめようと指導教授のエーレンフェスト (ボルツマンの後継者) に尋ねたが、エーレンフェストは「既に論文を送ってしまった」とのことであった。やがてトーマスが 2 倍の違いは座標系の取り方に起因するものということを示し、さすがのパウリも自説をひっこめざるを得なくなった。むしろその後はパウリは排他律やスピンのパウリ行列等、スピンに関連した研究を次々に発表し、汚名を雪いだ感がある。

4.4 トンネル効果

トンネル効果は量子論特有の現象である。しかしそのことをあまりにも強調すると難しい現象のように感じるが、波の性質としてはそれほど驚くべき事ではない。つまり波の透過現象が電子等の物質でも起こると言っても間違いではない。

トンネル効果はしかしながら古典粒子の運動では起こり得ない。例えば粒子を

$$V(x) = V_0 \quad (0 \leq x \leq d), \quad V(x) = 0 \quad (x < 0, x > d) \tag{23}$$

という壁に当ててみよう。古典粒子では運動エネルギーが V_0 を越えていれば壁を乗り越えて反対側に行くが、それ以下では跳ね返ってしまう。

ところが量子力学に基づく計算をしてみると粒子は波であるために運動エネルギーが V_0 以下の場合でも入射波、反射波の他に透過波が現われてくる。計算自体は簡単だがここでは省略をする。

この効果で説明できる現象は沢山あるが、最初に注目を集めたのはビッグバンの提唱者として有名なガモフによる α 崩壊の説明である。この現象は重い原子が α 粒子を放出してより軽い原子に崩壊する現象でありラザフォードによって発見されていたが、その機構は謎だった。α 粒子とより軽い原子核の間には核力が引力として存在するが、それをトンネル効果によって乗り越えるのである。こうした機構はもっと激しい原子核反応、例えば核融合でも、核分裂でも共通である。最近は巨視的な量子現象の発現メカニズムとしてトンネル効果が注目を集めている。

5　その後の発展

量子力学は 1925 年に提唱されて以来、瞬く間に普及し、数多くの基本的問題が解かれた。それらの多くは練習問題としての簡単さを持つと同時に現在にも通用する重要性を持ち合わせている。こうした動きの中でボルンは「6ヶ月以内に物理学は終ってしまうだろう」と熱っぽく語ったのである。しかし既に触れた通りにこの考えは間違いであった。以下でその後の大きな流れをごく簡単に述べよう。

5.1　相対論的量子力学

(特殊) 相対論と量子力学の合体は直ちに思い付くことであろう。実際、シュレディンガーは相対論の式を先に得ていたのであるから、相対論を考慮して量子力学を再考することは自然な流れである。

ディラック方程式の導出はそれほど難しくはないが、既に文系物理の範囲を逸脱している[10] ので考え方の要点だけをまとめよう。まずシュレディンガー方程式 (12) を眺めると

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi \tag{24}$$

と書ける。右辺の E は全エネルギーである[11] 。エネルギーは相対論に従えば $E = c\sqrt{p^2 + (m_0c)^2}$ で表される。このとき左辺に時間だけが現われているのは相対論の精神からすると不自然である。また確率の保存を充たすためには空間も時間と同様に 1 階微分で書ける必要がある。そこで 4×4 の反交換関係を充たす行列

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu} \tag{25}$$

を導入して[12] 、確率密度の連続の式と確率が正定値であることを用いて波動方程式を

$$(\gamma_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{m_0c}{h})\psi = 0 \tag{26}$$

[10] そんなものは最初からだという突っ込みはなしね。
[11] 本当は演算子なのでハミルトニアンとしてエネルギーとは区別すべき。
[12] 実際には α と β という行列が用いられたが、今日では γ が用いられる。またここで用いた $\delta_{\mu\nu}$ はクロネッカーのデルタ記号と呼ばれ、$\mu = \nu$ のときのみ 1、それ以外では 0 になる量である。

という形に書き直す事に成功した。ここで ψ は 4 つの成分を持った量に変わっている。また同時にディラック行列が電子のスピンを表現するパウリ行列と密接な関係があることが分かり、スピンの起源が空間座標の相対論的共変性に根ざしたものであることも明らかになった。

ディラックのアクロバティックかつ鮮やかな導出に唖然とした人々はディラック方程式には奇妙な解が含まれている事に困惑した。即ち、その方程式を信じると負のエネルギーの状態も許されてしまう。そうすれば粒子は輻射等のエネルギーを失うべき現象でエネルギーを貰って収拾がつかなくなるであろう、という反論である。ここでもディラックは天才的な発想でその難点をクリアした。まず真空というのは何もない状態と考えるのではなく、ぎっしり状態が詰まった状態であると考える。負のエネルギー状態はそのぎっしり詰まった状態の空孔の様なものであり、電子と反対の電荷を持った粒子である[13]。またその空孔粒子は電子と衝突すると電磁波を出して消滅するという考えであった。この考えはディラック方程式の解の解釈として自然であるばかりでなく、やがて陽電子 (正の電荷を持った電子) の発見によってその正しさは立証された。

5.2 場の量子論

今まで紹介してきた量子力学は基本的に一体問題に関するものである。また陽に述べなかったが、シュレディンガー方程式にしろディラック方程式にしろ配位空間の方程式、即ち N 粒子シュレディンガー方程式であれば 3N 個の座標に依存した方程式であった。この状況は考えにくい。従って、3 次元空間の場所の関数として方程式を書き直す事はできないかというのは自然な発想である。そこでも先鞭をつけたのはディラックであった。彼はボース粒子に対するシュレディンガー方程式の第 2 量子化を行い、場の方程式に書き直した。また 1928 年にはヨルダンとウィグナーがフェルミ粒子に対しても同様の場の方程式への書き換えを行った。

相対論的な場の量子論についてはハイゼンベルクとパウリの仕事がそのきっかけになっている (1929)。しかしその方程式系はそのまま計算すると輻射による反作用によって自己エネルギー (質量) が発散するという基本的な問題があった。この問題は朝永、シュウィンガー等によって提唱された繰り込み理論によって一応の解決を見たであるが、そこに至る道筋を紹介するのは本講義の範囲を逸脱しているであろう。

5.3 固体の量子論

量子力学が電子運動の記述をしているのであるから、固体への適用もごく自然に行われた。そこでは統計力学も主要な役割を果たしている。物質が多様なだけに極めて多彩な現象と理論があるのでいちいちその内容を紹介するのはやめよう。ここでは 2 つの特徴的な現象に簡単に触れて、そのどちらでも決定的に重要な役割を果たして 2 つのノーベル賞を取ったバーディーンを紹介しよう。

[13] 最初は陽子と考えていた。

その一つ目はトランジスタの発見と半導体物理の発展である。従来は金属のような良導体、プラスチックの様な絶縁体があることが知られていたが、その区別の理由はよく分かっていなかった。量子力学で近似的に電子の運動を記述するとほぼ自由電子の状態にわずかにポテンシャルの影響がある状態になる。しかし結晶格子は周期ポテンシャルであり、エネルギーにギャプが出来る。一方、電子はフェルミ粒子なので同じ量子状態を占有できない。従ってエネルギーの低い方から順に準位をつめていくとあるエネルギーまでほぼ充填された状態になると考えて良い。そのエネルギー表面 (フェルミ面) が (ギャップから離れて) エネルギーバンドの中にあれば充填した状態から (電圧をかけるなどで) 弱い励起を受けると電子は自由電子となって流れ出す、しかしそのフェルミ面がギャップにあると励起に多大なエネルギーが必要で電気が流れない。言うまでもなく前者が良導体であり、後者が絶縁体である。

半導体は両者の中間である。真性半導体ではそのギャップが小さいものという捉え方が出来るかもしれない。また不純物や格子欠陥を利用してギャップ間に人工的に準位を作ることもしばしば行われる。そうすれば新たに出来た準位を通して電気の流れが容易に生じる事になる。半導体の特性は電流を制御するのに適している点である。良導体では電圧をかけると直ちに電流が流れてしまい制御することが難しい。一方、絶縁体では使いものにならない。電流を制御する (整粒作用) という点で半導体は理想的な物質である。その特性を利用して電化製品が作られている。その基礎はトランジスタやダイオードといった整流作用を持った半導体でショックレー、バーディーン、ブラッタンはトランジスタの発見でノーベル賞を受け (1956)、江崎玲於奈等も 1973 年にダイオードの発見とトンネル効果の研究でノーベル賞を受けている。

バーディーンがショックレー等とトランジスタの研究に精を出していたのはベル研究所であった。その後、彼はイリノイ大学に移り、より基礎的な問題である超伝導の理論的解明に取り組む事になった。超伝導はカロリン・オネスが 1911 年に発見した現象であり、多くの金属で低温にすると突然抵抗が無くなる現象である。バーディーンがイリノイ大学に移った頃はソ連ではギンツブルク・ランダウの現象論が発表される (西側にはあまり知られていなかったにせよ) 等していよいよ解決の機が熟していたと言える。その最も大きな問題は同じ状態を占められないフェルミ粒子がどうして同じ様な状態を占めて凝縮を起こすのかというメカニズムを明らかにすることであった。バーディーンは原子核理論の研究をしていたクーパーを招き、大学院生のシュリファーと一緒に研究を進め、遂にその全容を明らかにした。まず問題の引力はフェルミ面より励起された電子の影響が格子振動を介して伝わり、結合しクーパー対と呼ばれる電子のペアが安定に存在することを明らかにした。この電子対が実質的にボース粒子として振舞い、凝縮し得るのである。最大の懸案を解決した彼らは精力的に計算をして実験結果の多くを説明し得る、素晴らしい理論体系を作り上げた。彼ら 3 人はこの業績でノーベル賞を 1972 年に受けている。