

## 教育ノート

## 波動関数のわかりやすい説明

林 久史

日本女子大学 理学部 物質生物科学科

(2015年 8月26日受理)

**要旨** 標準的な物理化学の教科書に記述されている波動関数の解釈や、「電子の粒子-波動二重性」の説明は、やや公理的であり、量子力学を専門としない本学学生にとっては、必ずしもわかりやすいものではない。ほとんどの教科書に書かれていない量子ポテンシャル理論や、その発展である確率力学、さらに場の量子論の知見を活かすと、より生き生きとしたイメージで、波動関数、ひいては量子力学の面白さを伝えられる。

**キーワード**：波動関数、シュレーディンガー方程式、確率密度、電子の二重性、二重スリット実験、D. ボーム、量子ポテンシャル、連続の方程式、L. ド・ブロイ、パイロット波、非局所性、E. ネルソン、確率力学、ブラウン運動、電子の軌跡、場の量子論、真空、場

## 1. はじめに

清水 明の『量子論の基礎』<sup>1)</sup>のまえがきに次のような記述がある。「…物理系でない学科の学生に量子論の入門的な講義をする場合にも、…伝統的な教え方の初めの部分を教えることが多いのではないだろうか？ しかし、そのような学生の多くは、量子論をプロからきちんと学ぶのはそれが最初で最後になるわけで、いわば一期一会の量子論としてそれがふさわしい内容なのだろうか？」これを読んで、強い共感を覚えた。

筆者は、本学・物質生物科学科の学部2年生にむけて、『物理化学演習』という講義を、今城尚志先生と共同で後期に担当している。筆者の担当は、量子力学の基礎部分(←まさに「伝統的な教え方の初めの部分」)で、7回の講義の内訳は以下の通りである。

1. イントロダクション-高校物理のダイジェスト
2. 波としての光、粒子としての光
3. 光電効果とX線の発生
4. 前期量子論とシュレーディンガー方程式
5. 物質波と波動関数
6. 箱の中の粒子
7. 水素原子の電子状態

受講者は20～40人程度。多くの私立大学の学生もそうだと伺っているが、受講者の数学力には大きなばらつきがある。上位層は偏微分方程式や複素数の話をフォローできるが、下位層は指数・対数・三角関数はもとより、分数計算すら危うい。また、本学科は化学と生物学の融合学科であるので、学生の物理に関する知識レベルや関心は総じて低く、半数以上は波長と振動数の関係を知らないし、運動量や運動エネルギーという概念も怪しい。卒業後の進路は多様であり、金融や営業など、いわゆる文系就職も少なくない。3年次からは、生物学関連の履修を中心に据える者も半数を超える。そうした学生にとっては、この講義が量子力学の基礎を学ぶ、人生最後の機会かもしれない。このような学生に、どうすれば量子力学の面白さを、一端なりとも味わってもらえるだろうか？ そう感じながらも、思いを実現するには至らず、いつしか10年の月日が流れた。清水先生とは置かれた環境も対象とする学生も異なるが、その問題意識に共感したのは、こうした事情のためである。

筆者の演習講義における一番の難所は、波動関数の解釈である。学生は、初回に高校物理(古典力学)をおさらいする。ここでは、粒子は粒子、波は波として、ひとまず別々に説明される。ところが、2回目で急転直下、両者に関係があることが示される。3回～5回目で、その結びつきの鍵となるのが、どうやら「波動関数」や「シュ

レーディンガー方程式」なるものらしいことが提示される。しかし、これらの意味がよくわからない。自力で数学的に追うこともできない。「粒子（電子）に波動性があるのはなぜか」という、ごく「初歩的な」質問にも教師（＝筆者）は答えてくれない。参考書を読んでもよくわからない。かわりに言われるのは、こんなことである。『物質粒子に波動性がある』という事実は、容易には受け入れ難いことでしょう。しかし、実際に自然はそうにできています。大人の論理だけで子供の世界をすべて正しくとらえることが不可能なように、マクロな世界での経験だけでミクロな世界を正しくとらえることはできません<sup>2)</sup>。「(ミクロな世界に関する) 実験によると、我々は古い考え方（＝古典力学）を放棄せざるを得ない。したがって、新しい知識を得る方法や実験から結論を導く方法、また新しい実験の提案をもたらす方法に、新しい考え方を反映することが根本的に重要である<sup>3)</sup>。」要は、シュレーディンガー方程式や波動関数のように、「我々のあらゆる認識と科学とがその上に乗って支えられている基礎は、説明不可能なものである(ショーペンハウエル)<sup>4)</sup>」から、ともかく「それはそういうものとして、受け入れなさい」ということである。

ところで、物質生物科学科の多くの学生が言うには、高校理科（特に物理、しばしば化学）が嫌いになったのは、「受験までに時間がないから、ひとまず理由はおいといて、それはそういうものとして覚えなさい」と、たびたび言われたためらしい。上に記したような量子力学に関する声明は、妥当ではあるのだが、本学学生にとっては、高校時代の苦手科目の教師の言葉と大差なく聞こえる。これをなんとかできないものか。さきに挙げたショーペンハウエルの続きには、重要なヒントがあった。「大きすぎたり複雑すぎたりして一目で見渡せないようなものでも、それを本当に理解するには、少しずつ思い浮かべるか、さもなければ見渡しのきく複製によって思い浮かべるかなくてはならない。さらにこういうことさえ不可能な場合には、少なくともそれをある直観的な比喻によって受けとりやすくするように努めなければならぬ<sup>4)</sup>。」本学学生には、たとえば多くの演習問題を解くことによって、波動関数を少しずつ思い浮かべることを通じて理解するという道は、不可能ではないが、かなりの難行である。ならば、見通しのきく「複製(モデル)」を用意してやり、それについて数式をなるべく使わず、比喻や類推を通じて説明するほかにないではないか。最近、このような認識がようやく至ったので、本ノートを書くことにした。このノートが多くの学生に読まれることは思っていない。しかしながら、量子力学に興味を感じながらも挫折の瀬戸際にいる学生に対して、たった1人にでもよいから、裏技的な手助けになればと思っ

ている。このノートの寿命を長く見積もって50年として、毎年1人に役だったとすれば、50人を救済できる計算である。50人も「量子力学嫌い」を救えれば、自分としては上出来であろう。

## 2. 波動関数に対する、M. ボルンの確率解釈

まず、化学系の学生に対する標準的な波動関数の説明例として、『アトキンス物理化学』<sup>5)</sup>の記述を紹介する。「波動関数が、それによって記述される系に関するあらゆる力学的な情報を含んでいる、というのが量子力学の主張の中心にある。ここでは粒子の位置に関して波動関数もっている情報に注目しよう。粒子の位置によって波動関数を解釈しようという試みのもとになっているのは、M. ボルンの提案である。(中略) 波動関数に対するボルンの解釈は、波動関数 $\psi$ の2乗(または、もし $\psi$ が複素関数なら絶対値の2乗、 $|\psi|^2 = \psi^* \psi$ )に注目する。この解釈によると、ある1つの点における $|\psi|^2$ の値が、その点の付近にある領域に粒子を見いだす確率に比例する。具体的に、一次元の系については次のようにいえる。ある粒子の波動関数が、ある点 $x$ において $\psi$ という値をもつなら、 $x$ と $x+dx$ の間にその粒子を見いだす確率は $|\psi|^2 dx$ に比例する。だから、 $|\psi|^2$ は確率密度であって、確率を求めるにはこれに無限小の領域の長さ $dx$ をかけることが必要である。波動関数 $\psi$ 自身を確率振幅という。三次元で自由に動ける粒子(たとえば、原子の原子核近くにある電子)では、波動関数は座標が $x, y, z$ の点 $\mathbf{r}$ に依存し、その場合、 $\psi(\mathbf{r})$ の解釈はつぎのようになる。ある点 $\mathbf{r}$ において、ある粒子の波動関数が $\psi$ という値をもつなら、その点における無限小の体積 $d\tau = dx dy dz$ の中にその粒子を見いだす確率は $|\psi|^2 d\tau$ に比例する。(中略) 波動関数の負の(あるいは複素数)の値には直接の意味はない。正の量である絶対値の2乗だけが直接に物理的な意味があつて、波動関数の正の領域と負の領域とは、どちらもある領域に粒子を見いだす確率が高いことに相当していると考えてよい。」

量子力学が提供する、実験で直接検証可能なものは確率密度 $|\psi|^2$ だから、実験を重視する化学で、アトキンスのように確率密度の役割を強調することに異論はない。ただし、上の説明では、波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ がもつ波動性が、物質としての電子がもつ波動性と結局、どういう関係にあるのか、よくわからない。電子の正体が何であり、その波動性は何に由来するのか? 電子の二重性を学んだばかりの初学者にとって、もっとも本質的なこの質問に、ボルンの確率解釈は答えてくれないのである。こうしたある種の不明瞭さがあるため、ボルンの確率解釈に基づいて、波動関数について(数学なしに)わかりやすく語れば語ろうとするほど、良く言って深淵、悪く

言って難しい話になる。たとえば、湯川秀樹らによる以下の記述<sup>6)</sup>を読みたい。「量子力学においては電子や陽子などの粒子の状態は1つの波動を表す関数によって表現されるが、その波動は通常の波動ではなく、確率が動く波動である。量子力学の適用される原子や素粒子の世界では…、すべての事象について確定的な予言をすることはできない。われわれのいいうるのはどういう確率でどういう事象が起こるかということだけである。そして、その確率が物質波の波動関数によって与えられるのである。物質波はいわば可能性の波動といったものであって、原子や素粒子を記述する際に現れる…まったく新しい物理的な量であり…可能性と実現された現実の事象との中間にある、奇妙な一種の物理的実在物である。」

こうした記述から、波動関数について生き生きとしたイメージをもと本学学生に要求するのは、いささか酷であろう。

我々のような末端の教育者にとってありがたいことに、すべての物理学者が、ボルンの確率解釈に満足したわけではなかった。以下に、電子の正体と波動性を「わかりやすく」提示しようとした試みをいくつか紹介する。ただし、ボルンの確率解釈をふくめて、波動関数の解釈について、万人が認める確実な説はまだないことに注意して読みたい。

### 3. 二重スリット実験

電子の二重性の奇妙さと、波動関数に関する解釈の面白さをあらわに示すのが、図1のような二重スリット

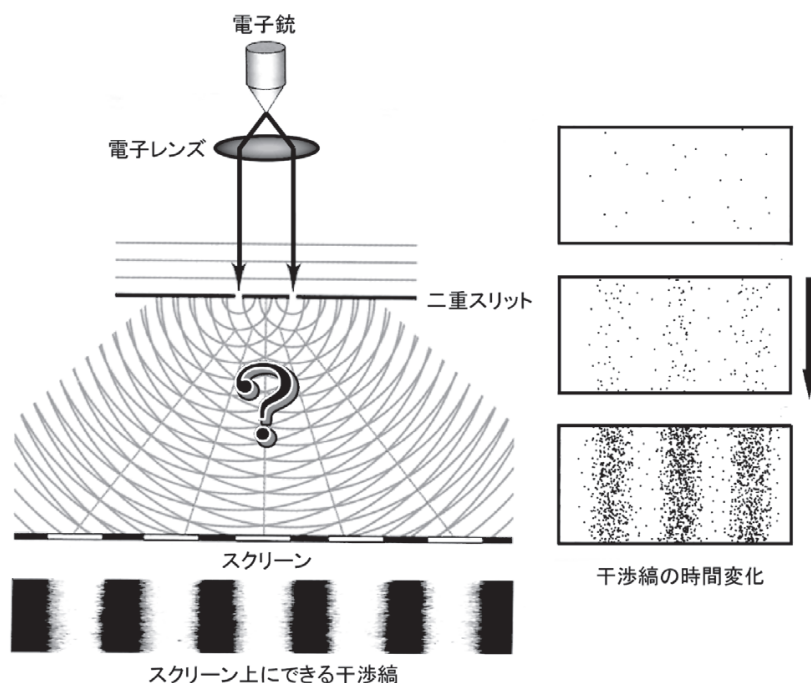


図1 電子の二重スリット実験

ト実験<sup>1,3,7-9)</sup>である。この実験は、実際に実施するのは難しいが、概念的には単純なもので、2つの穴(スリット)が開いた板に向かって、電子を飛ばしたとき、その奥のスクリーンに何が映るかを調べる実験である。電子銃から、電子1個を何度もくり返して発射する。すると、スクリーンには、電子が発射されるたびに、ポツポツと、少しずつ小さな点が増えていく。どこに点ができるかは予測できない。できるだけ同じ条件で、電子を飛ばしてみても、スクリーン上に映る点の位置は、ばらばらである。ところが、点の数が増えていくにつれて、その「点」の集まりが、電子を一時に大量発射したときに観測されるのと同じ「干渉縞の模様」があらわれる。こうしてできる干渉縞において、電子が飛んでくる確率が高い場所は、電子を波だと見立てたときに、その波が高い場所と同じである。一方、電子がほとんど飛んでこない場所は、電子を波だと見立てたときに、その波が低い場所と同じである。つまり、電子1個1個は、干渉縞という波形の確率分布にしたがって発見される。

二重スリット実験で最も興味深いのは、「干渉縞」の由来である。干渉縞は、「2つのスリット」を通り抜けた何らかの波が重なりあったときに観測される現象である。当然、スリットを1つにすると、干渉縞は発生しない。干渉縞ができるためには、2つのスリットが必須である。ところが、飛ばしている電子は1個なので、どちらか一方のスリットを通り抜け、もう1つのスリットには何も通っていないはずである。ならば、電子1個は何と干渉したのか? 仮に、「自分自身と干渉した」というのなら、1個の粒子として観測される電子が、なぜ、2つのスリットを「同時に」通り抜けられたのか? ここが、二重スリット実験の最大のポイントである。

2章に示したボルンの確率解釈とは、つまるところ、二重スリット実験の結果を、一種の公理(=ミクロの世界の約束事)として受け入れたものである。そこでは、科学理論の役割は、「矛盾なく実験結果を説明でき、実験結果を予測できること」だと強調され、この解釈の不思議な点、たとえば「スリットを通り抜けた「波」と、スクリーン上で観測される「粒子」の「切り替え」は、いつどんな風に起きるのか」という疑問は、不可知=無価値とされる。問題は、こうした「力技」で、我々や、我々の学生は本当に納得できるのかということである。

#### 4. D. ボームの量子ポテンシャル

歴史を振り返ってみると、納得できない人は少なくなかった。その中には、シュレーディンガー方程式をつくった E. シュレーディンガー<sup>8, 10-12)</sup> や、相対性理論と量子力学のパイオニア A. アインシュタイン<sup>11, 12)</sup>、電子の二重性を説いた L. ド・ブロイ<sup>11-13)</sup> がいる。錚々たる顔ぶれであり、筆者が『物理化学演習』で紹介している人たちばかりである(笑)。彼らの考え方を継承・発展させ、はじめて数学的に整った対案を提出したのは、プリンストン大学の D. ボーム<sup>11, 14, 15)</sup> であった(1952年)。ボームの考え方は、ある意味、とてもわかりやすい。以下、ボームの理論<sup>14-18)</sup> の概略を述べる。

標準的な量子力学が教える通り、時間 ( $t$ ) に依存するシュレーディンガー方程式は (1) 式で与えられる：

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \nabla^2 \psi + V \cdot \psi \quad (1)$$

ここで  $\hbar$  は換算プランク定数 (プランク定数  $h$  を  $2\pi$  で割ったもの) で  $i$  は虚数単位、 $m$  は電子の静止質量、 $V$  は系のポテンシャル、 $\psi$  が電子の波動関数、 $\nabla^2$  はラプラシアンと呼ばれる微分演算子で、 $\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  で定義される。なお、ラプラシアンは  $\Delta$  と書かれることもある。(1) 式に波動関数として、

$$\psi = R \cdot \exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right) \quad (2)$$

を代入する。ここで  $R$  と  $S$  は実数の関数とする。代入して整理すると、虚数部から

$$\frac{\partial R^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left( R^2 \cdot \frac{\nabla S}{m} \right) = 0 \quad (3)$$

が得られる<sup>14, 17)</sup>。ここで、「 $\cdot$ 」はベクトルの内積を示し、微分演算子  $\nabla \cdot$  は  $\nabla \cdot \equiv \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$  で定義される。 $\nabla \cdot$  は「空間上のある点において、関数の変化量を  $x, y, z$  の各方向でとってたしあわせる」という操作であり、変化量が正ならその点における関数の「湧き出し」、負なら「吸い込み」をあらわす。関数量の「発散 (divergence)」をあらわすところから、 $\text{div}$  と書かれることもある。記法が似ていて混乱する学生が多いが、 $S$  の前にある、「 $\cdot$ 」がない微分演算子  $\nabla$  の意味は、まったく異なる。 $\nabla$  は、 $\nabla \equiv \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$  で定義される微分演算子で、大きさだけをもち方向をもたない関数(「スカラー」という)から、 $x, y, z$  それぞれの方向の偏微分をとって、その関数の「傾斜」についてのベクトル(方向をもつ量)をつくる操作である。「勾配 (gradient)」を生み出すところから、 $\text{grad}$  と書かれることもある。これらの微分演算子は通常、電磁気学ではじめて学ぶも

のだが、物質生物科学科では電磁気学が必修でないので、あえて詳しく説明した。

(3) 式が虚数部から得られる一方、実数部からは

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\nabla^2 R}{R} = 0 \quad (4)$$

が得られる<sup>14, 17)</sup>。ここで、 $S$  を解析力学の「ハミルトンの主関数」に等しいと仮定してみる。ハミルトンの主関数とは、定性的には、粒子があるポテンシャル  $V$  の中を移動したときに、ポテンシャルからうける作用の合計値のことであり、「作用積分」とよばれることもある。 $S$  をハミルトンの主関数とみなせば、解析力学によって、 $S$  から系の全エネルギー  $E$  と粒子(今の場合は電子)の運動量  $\mathbf{p}$  が以下のように導ける<sup>14, 19)</sup>。

$$E = -\frac{\partial S}{\partial t} \quad (5)$$

$$\mathbf{p} = \nabla S \quad (6)$$

(4) 式に (5) 式と (6) 式を代入すると、

$$E = \frac{p^2}{2m} + V - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\nabla^2 R}{R} \quad (7)$$

となる。(7) 式の第 1 項は電子の運動エネルギー、第 2 項は系の古典的なポテンシャルエネルギーである。第 3 項を  $Q$  とおき、

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\nabla^2 R}{R} \quad (8)$$

とする。 $Q$  も一種のポテンシャルエネルギーとみなせば、(7) 式はエネルギー保存則をあらわすことになる。

$Q$  の位置づけを別の点から検討してみよう。(4) 式を移項して、両辺の  $\nabla$  をとると (9) 式が得られる。

$$\frac{\partial (\nabla S)}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \frac{(\nabla S)^2}{2m} \right) = -\nabla (V + Q) \quad (9)$$

これに (6) 式を代入すると、(9) 式の左辺は、

$$\frac{\partial (\nabla S)}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \frac{(\nabla S)^2}{2m} \right) = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}}{2m} \right) = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} \quad (10)$$

となる。ここで、 $\nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}}{2m} \right) = 0$  となったのは、偏微分をとる位置座標 ( $x, y, z$ ) と運動量の成分 ( $p_x, p_y, p_z$ ) が、お互いに独立な変数だからである。(9) 式と (10) 式より、

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla (V + Q) \quad (11)$$

を導ける<sup>14, 17)</sup>。(7) 式のエネルギー表示に対応して、(11) 式は、古典的なニュートンの運動方程式に、新たなポテンシャル  $Q$  を追加した形になっている。このように、エネルギー保存則においても運動方程式においても、ポテンシャル  $Q$  の追加が、古典力学と「ボーム流の量子力学」を区別している。この  $Q$  を量子ポテンシャルと言う。

(6) 式によって電子の運動量  $\mathbf{p}$  が定義できれば、電子

の速度  $v$  は

$$v = \frac{p}{m} \quad (12)$$

で与えられる。また、 $R$  は標準的な意味での波動関数なので ( $S=0$  なら、 $\psi=R$ )、位置の確率分布  $P$  は、

$$P = |\psi|^2 = R^2 \quad (13)$$

である。(6) 式、(12) 式、(13) 式を (3) 式に代入すると

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot (Pv) = 0 \quad (14)$$

を得る。(14) 式は、流体力学における質量保存則の式<sup>20)</sup> そのものであり、「流体」が湧いたり消えたりしないことを意味する。さらに、(6) 式と (12) 式を用いて、流体力学の「流れの密度」に相当する量  $J$ <sup>21)</sup> :

$$J = \frac{P \nabla S}{m} = P \left( \frac{p}{m} \right) = Pv \quad (15)$$

を定めてみる。(15) 式は、「波動関数の位相  $S$ 」の空間変化 ( $\nabla S$ ) が、「確率の流れの密度」に対応することをあらわに示した式である。(15) 式から、位相の変化が大きいほど、確率の流れは強まること、ひいては (12) 式より、「粒子」の「速度」が速くなる<sup>21)</sup> ことがわかる。この  $J$  を (14) 式に代入すると、

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0 \quad (16)$$

となる。(16) 式は、「連続の方程式」と呼ばれる、スカラー物理量についての一般的な保存則 ( $P$  がその物理量の密度で、 $J$  が流束) そのもの<sup>20)</sup> である。

ここまで見てきたことから明らかなように、ボームの議論は、「確率分布をあたえる波動関数の振幅  $R$  だけでなく、その位相  $S$  にも注目する」ことに基礎をおいている。波動関数の位相は、確率の流れに関係していて [(15) 式]、不確定性原理に注意する必要はあるが、粒子の「速度」に関する情報を与える。古典力学では、速度のベクトルは、粒子の軌跡の接線方向にある。よって、速度ベクトルの方向を連続的に追っていくと、粒子の「軌跡」をたどることができる。ボームの理論や後述する確率力学は、波動関数の位相から「電子の速度」、ひいては「電子の軌跡」を導出する道筋を与えるものである。

さて、ここまでの作業は、シュレーディンガー方程式の「近似」、あるいは「変形」というより、むしろ「拡張」である。(8) 式で与えられる量子ポテンシャルがどれほど奇妙に見えようとも、シュレーディンガー方程式から直接導きだされている以上、この理論の予想する実験結果は、標準的な量子力学と等価である。この「拡張」が面白いのは、その解釈論であり、次のような主張が可能などころにある：従来の量子力学は、波動関数の振幅—実数部しか利用していないから、確率密度のような統計的物理量しか得られなかった。位相—虚数部も利用する

ことで、古典力学のような運動学的な情報も得られるようになる。これは意味深長と思う。筆者自身、「波動関数の虚数部に注目せよ」というボームの考えには、はっとした。そして、なぜ、そういうことを意識しなかったかについて思いを巡らせた。そこではじめて、原子・分子の軌道計算で重要な関数はすべて実数関数 ( $S=0$ ) だったことに気がついた。量子化学を通じて、量子力学を理解したつもりになっていたが、とんだ視野狭窄に陥っていたものである。

ボームの理論の最大の特徴は、「粒子」である電子の軌跡が追跡できる点にある。以下、詳しく見ていこう。ある系におけるシュレーディンガー方程式が解けて、電子の波動関数が得られたとする。ここで、電子がはじめていた位置を決めれば、(6) 式と (12) 式から電子の速度が得られる。位置と速度がわかれば、それから微小時間  $dt$  後の電子の位置を計算できる。その位置での速度は、新しい位置での波動関数に従って、あらためて計算できる。この操作を繰り返すことで、ある地点から動きはじめる電子の「軌跡」を組み立てられる。「波動関数が 1 価の (ある位置で 1 つの値しかもたない) 関数で、それぞれの位置で微分可能」という標準的な量子力学の要請から、「(ボーム流の) 電子の軌跡は交わらない」という興味深い結果が得られる。

二重スリット実験に対する、電子の軌跡の計算結果を模式的に図 2 に示す。二重スリット実験では、静電ポテンシャルはかかっていないので  $V=0$  である。 $V=0$  だから、電子の動きは、量子ポテンシャル  $Q$  だけで決まる。 $V=0$  から得られる電子の波動関数は、よく知られているように、振幅一定の平面波である。平面波に対する量子ポテンシャルは、どこでも一定となる。一般に、一定のポテンシャル中では粒子は力を感じないので、一定の速度で動く (=慣性の法則)。このように、二重スリット実験は、電子に対する (一定の) 量子ポテンシャルの効果を明確にするものでもある。図 2 の計算では、スリットが 2 つあることをふまえ、経路計算の開始点を 2 点とし、経路の数を均等に分配している。電子の波動関数としては、もっとも粒子に近い波として、平面波をたしあわせてつくった「波束」(これも  $V=0$  に対するシュレーディンガー方程式の解である) を仮定している。

図 2 に示したように、スクリーンに到達した (多数の) 電子の分布は、干渉縞を再現できる。注目すべきは、標準的な量子力学と違い、個々の電子は、古典的な粒子のように、明確に定められた軌道を通っていることである。そして、どちらか一方のスリットだけを通過している。ただし、電子の軌道は多数あるので、ある電子が「どの経路にのるか」は予言できない (←不確定性原理に

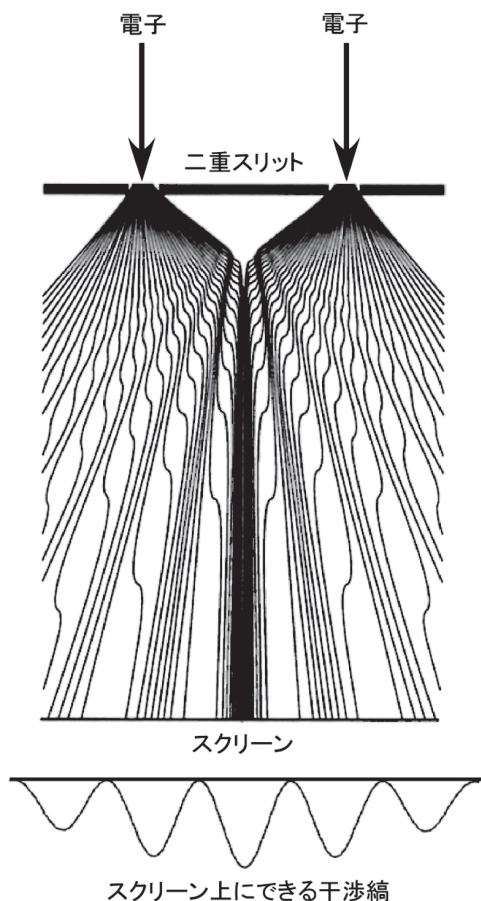


図2 ポームの量子ポテンシャルを使って計算した、二重スリット実験に対する電子の軌跡<sup>15, 18)</sup>。

対応している)。ここには何の不明確さもない：すなわち、電子は粒子で、どちらか一方のスリットを通る。干渉縞は量子ポテンシャルによる。

それでは、二重スリット実験ではなく、原子や分子の波動関数にポームの理論を適用すると、どうなるであろうか？ この結果も非常に面白い。標準的な量子力学でよく知られている通り、原子や分子中の電子のような「束縛状態」にある波動関数は実数関数である。このことから、(2) 式より、空間のどこでも  $S=0$  となる。これは、(6) 式より、 $\mathbf{p}=\nabla S=0$ 、つまり、その電子が静止していることを意味する。原子中の1電子は、基底状態では、静止している！ これは、前期量子論でポーアを悩ませた問題、「なぜ水素原子の電子は、放射しながら、原子核に吸い込まれないのか」に対する明確な回答を与える—すなわち、「静止していて、運動していないから」<sup>14, 18)</sup> である。電子は静止しているが、どこで静止しているかは、わからない。静止場所は、個々の原子ごとに違う。多数の原子を集めて、静止場所の確率分布を求めると、標準的な量子力学が与えるのと同じ、確率分布になる<sup>18)</sup>。

読者は、これほど面白いポームの理論が、どうして、標準的な量子力学で教えられないのかと疑問に思うかもしれない。それには、いくつかの理由がある<sup>16)</sup>。

まず、第一に、キーアイテムである「量子ポテンシャル」の奇妙さが挙げられる。通常のポテンシャルは、物体間の何らかの物理的な相互作用の結果として生ずる。しかし、量子ポテンシャルには、それを生み出す相互作用がない。量子ポテンシャルは、シュレーディンガー方程式を数学的に扱う中から出てきた量であり、電子（粒子）がそこにあるだけで発生する。しかも、量子ポテンシャルを実験で観測することもできない。

第二に、束縛状態の電子状態に実験とあわない点がある。先に挙げた水素原子がよい例である。ポームの理論では、1つの水素原子の電子は、どこかわからない場所で止まっている。それならば、必ず、双極子モーメントが発生し、実験で観測できるはずである<sup>16)</sup>。しかし、実際には、水素原子の双極子モーメントはゼロであり、水素原子中の電子は静止していないと結論される。

第三に、ポームの理論が与える最終的な計算結果（＝実験と比較可能な結果）は、結局は通常の量子力学と同じものである。電子の軌跡も、実際には、不確定性原理の制限を超えては、観測できない。よって、電子の状態計算においては、ポームの理論は煩雑さを増やすだけのものである。

第四の、そしておそらく最大の理由が、ポームの理論が「非局所的な理論」だからである<sup>16)</sup>。ここで、非局所的というのは、ある粒子が自分のいる場所の量子ポテンシャルだけでなく、空間のありとあらゆる場所の量子ポテンシャルの影響をうける、という意味である。こうした非局所性は、1電子を扱う上では大きなほころびを見せないが、多電子系に拡張すると、問題をひきおこす<sup>16)</sup>。たとえば、2電子系の波動関数は、それぞれの電子の位置座標の関数であるため、波動関数から構成される量子ポテンシャルも、2つの電子それぞれの位置座標の関数となる。どちらかの電子について、周囲の「実際のポテンシャル」 $V$ が変化すれば、その電子の波動関数は変化する。すると、量子ポテンシャルも変化する。これは、どんなに2つの電子が離れていても、同じことである。つまり、どんなに距離が離れていても、1つの電子に対する量子ポテンシャルは、もう1つの電子の変化に対し、いかなる媒体も経由しないで、瞬間的に（場合によっては光速を越えて！）反応することになる。こうした「遠隔作用」は、多くの物理学者に忌避されるし、「光速を超える事は出来ない」という相対性理論とも衝突する<sup>11, 12)</sup>。

以上のようにポームの理論を概観してみると、この理論は、「電子を粒子とみなす」という「わかりやすい」

イメージを得る代償を (つまりは、電子の波動性を)、量子ポテンシャルにおしつけたものと解釈できる。量子ポテンシャルとよく似た考えは、ド・ブロイも提案しており、彼は量子ポテンシャルに相当するものを「パイロット波」<sup>12,13)</sup>と呼んだ。この章のしめくりに、パイロット波の概念を借りて、量子ポテンシャルを模式化してみよう。(1) 電子は、そこにあるだけで、ある種の「波 (パイロット波)」を出している。(2) この波は量子ポテンシャルをつくり、空間を歪めて、パイロットのように粒子 (電子) を導く。(3) ただし、パイロット波も、量子ポテンシャルも、歪められた空間も、実験では観測できない。(4) パイロット波や量子ポテンシャルには非局所性があり、どんなに距離が離れていても、瞬時に (超光速で) 情報を伝えることができる。こうして記述してみると、確かに量子ポテンシャルとは奇妙なものである。しかし、そうではあるが、(1) 電子を「粒子」に還元するには、こうした「無理」が必要なこと、しかし一方、(2) 量子ポテンシャルを認めさえすれば、「電子を1個だけ飛ばしたにもかかわらず、その電子が観測される場所の確率が、波が2つのスリットを同時に通ったときにできる干渉縞と同じになる (図2)」現象を合理的に説明できることを、(物質生物科学科の学生のような) 量子力学の入門者にきちんと伝えることは重要と思う。「電子の波動性は、『観測できない何か (量子ポテンシャル=パイロット波)』による、『電子間の超光速通信』に支えられている」というイメージには、入門者の心をわくわくさせる何かがあるではないか!

### 5. E. ネルソンの確率力学

ボームの量子ポテンシャル理論の発展型とみなせる理論の1つに、ボームと同じプリンストン大学の E. ネルソンが1966年に発表した確率力学<sup>17,22)</sup>がある。この理論は、量子ポテンシャルより、さらに「もっともらしい」波動関数の解釈を提示してくれる。以下、概略を説明する。

速度  $\mathbf{v}$  が位置座標の時間微分 ( $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$ ) であることから、ボームの理論における電子の位置座標  $\mathbf{r}$  の微小変化  $d\mathbf{r}$  は、(6) 式、(12) 式より、以下のように書き換えられる。

$$d\mathbf{r} = \frac{\nabla S}{m} \cdot dt \quad (17)$$

一方、ネルソンの確率力学では、 $d\mathbf{r}$  は

$$d\mathbf{r} = \left( \frac{\nabla S}{m} + \frac{\hbar}{2m} \cdot \frac{\nabla P}{P} \right) \cdot dt + \sqrt{\frac{\hbar}{2m}} dW \quad (18)$$

与えられる<sup>17)</sup>。確率力学では、(18) 式の第1項は流れ速度の場、第2項は拡散速度の場、第3項はウィー

ナー過程 (ブラウン運動を作り出す確率過程と考えてよい) を表し、 $W$  がブラウン運動を表す正規確率変数で、 $\frac{\hbar}{2m}$  がブラウン運動の拡散係数に相当する。(18) 式第1項の流れ速度の場は、量子ポテンシャルと同じ運動を生じさせる (式の形も同じである)。確率力学とは、ボームの理論が与える第1項の変位成分に、第2項と第3項という、新たな変位成分をつけ加えた理論といえる。第2項の拡散速度の場は、 $\frac{\nabla P}{P} = \nabla \ln P$  と変形するとはつきりするように、確率分布密度  $P$  が小さいところから大きいところ (=  $\ln P$  の傾斜がより大きい方向) に電子を動かす。そして、第3項によって、ブラウン運動のようなランダムな動きが生じる。(18) 式が示唆する、電子の運動イメージは、したがって、次のようなものになる<sup>17)</sup> (図3の模式図参照) : 電子の動きは、大まかには、流れ速度の場 [量子ポテンシャル : (18) 式第1項 : 図2] によって決定される。ただし、瞬間的には、ウィーナー過程 [(18) 式第3項] により、この流れの場からランダムに逸脱することもある。ところが、逸脱した電子は、拡散速度の場 [(18) 式第2項] により、「主流」の方にもどされる。その結果、電子は、確率分布密度の高い領域の近傍を、ブラウン運動的にジグザグに揺れ動きながら、全体としては量子ポテンシャルの示す方向 (図2) へ動き続けることになる。わかりやすく、教えやすいイメージと思うが、いかがであろうか。

数式の展開の詳細はやや複雑なので文献<sup>17,22)</sup>に譲るが、ネルソンは、(18) 式で記述される確率過程の式から、見事、シュレーディンガー方程式を導いた。これは、「ランダムにジグザグ運動する粒子」を想定すれば、個々の粒子の波動性をあらわに考慮せずとも、後述のように、標準的な量子力学と矛盾することなく、観測される粒子と波動の二重性が解釈できるということである。理論物理学者の並木美喜雄は、ネルソンの仕事を、「量子力学のブラウン運動論的解釈を完成させた見事な理論」と評価し、「説明学的な面白さ」を認め、「量子力学の内容理解を深めたことは間違いない」としている<sup>7)</sup>。

ここで、「電子がブラウン運動をしている」ことは、「運動がなめらかではない」ことを意味しているのに気づく読者もいるだろう。なめらかでない運動=ジグザグ運動は、一般に微分で表すことができない<sup>23)</sup>。シュレーディンガーがシュレーディンガー方程式を導出した時代には、微分不可能な関数を扱える数学 (確率解析学) が十分発達していなかった<sup>8)</sup>。ネルソンの成功の裏には、確率解析学の発達があった。これを量子力学に上手く応用することで、シュレーディンガーが到達しえなかった

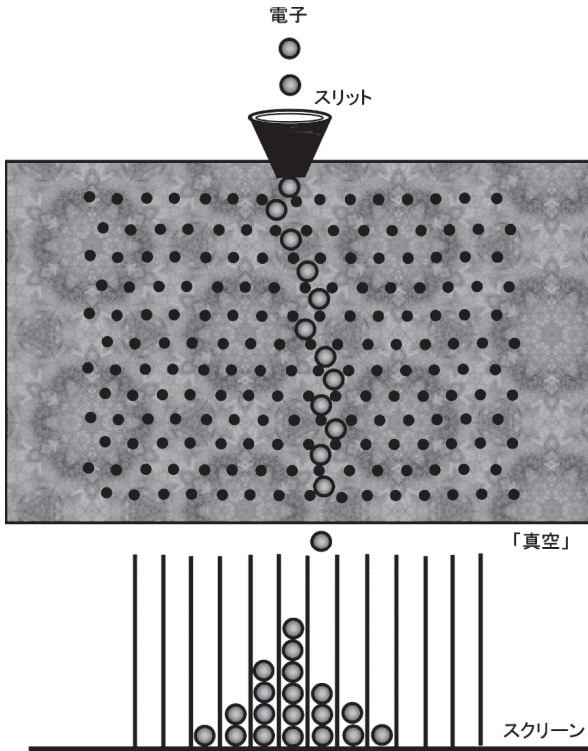


図3 確率力学で想定している電子の動きの模式図。電子は、真空中でブラウン運動のようなジグザグ運動をする。そのため、スクリーン上での強度分布に幅ができる。

「電子のブラウン運動的な動き」にネルソンは到達できたのである。

確率力学の立場から見ると、ボームの理論は、「電子のジグザグ運動による逸脱と、拡散速度場による復元がちょうどつりあっていると近似して両者を無視し、流れ速度場だけで近似して、統計的平均値を求めた理論」と位置づけられる<sup>17)</sup>。確率力学を採用することで、ボームの理論の問題点のうち、2番目のもの（水素原子内で、電子は静止していることになるが、これは実験とあわない）は是正される。確率力学によれば、水素原子内の電子は、(16)式第2項と第3項により、その平均位置まわり（確率分布密度の高い位置まわり）を、常に揺動しながら動き続ける<sup>8)</sup>からである。揺動が十分大きければ、分極はおこらない。また、電子の揺動（＝ジグザグ運動）によって、トンネル効果<sup>9)</sup>やゼロ点エネルギーも自然に説明できる。

では、確率力学は、二重スリット実験をどう説明するのであろうか？ 確率力学から得られる電子の軌跡は、大まかにいって、量子ポテンシャルが与える軌跡をジグザクに揺動しながら進むというものである。よって、量子ポテンシャルから得られる結果は、およそ保持される。つまり、確率力学でも、電子はどちらか一方のスリットしか通らない。そして、線源から見て左側の

スリットを通ったものはほぼスクリーンの左側に到達し、右側のスリットを通過したもののスクリーンの右に到達する<sup>17)</sup>。ただし、2つの理論間には違いもある。たとえば、確率力学では、電子のジグザグ運動のため、中央付近に進んだ電子は、左右が入れ替わることもある<sup>17)</sup>。このことが示唆するように、ボームの量子ポテンシャル理論では、電子がたどる軌跡が決まれば、スクリーンのどこに到達するかは一意的に決まるが、確率力学では電子の揺動のため、一意的に決まらない。このように、確率力学は、量子ポテンシャル理論よりも、不確定性が大きな理論である。

ボームの理論において、電子の波動性が観測不可能な量子ポテンシャルにおしつけられたように、確率力学では電子の波動性は観測不可能な電子の「ブラウン運動」、ひいてはブラウン運動を起こさせる「真空」の性質におしつけられる。二重スリット実験に則して言えば、スクリーン上での干渉をおこすものは、ジグザグ運動をしながら進む軌跡（確率過程）間の干渉である。この「軌跡」は量子ポテンシャルによく似ており、電子が通るべき、「空の」軌跡であることに注意しよう。電子が自分自身と干渉するのではない。

大まかに言って、確率力学は、ボームの量子ポテンシャルを、「ブラウン運動する電子の（空の）軌跡」とおきかえて、量子力学を組み直したものである。前述のボームの理論の問題点1, 3, 4は未解決のまま残される。すなわち、量子ポテンシャルがそうであったように、確率力学それ自身は、「電子のブラウン運動」をもたらす原因を明らかにしない。しかし、これについては、重要な傍証があるので、6章であらためて議論する。また、ボームの理論同様、確率力学が最終的に与える計算結果（＝実験と比較可能な結果）は、標準的な量子力学と同じものである。電子のブラウン運動的な軌跡は、実際には観測できない。ボームの理論の最大の難所<sup>16)</sup>であった「非局所性」もそのままである。ゆえに、確率力学も、多電子系に拡張すると、色々と奇妙な側面をみせはじめる。たとえば2電子系の場合、どんなに2つの電子が離れていても、電子の（空の）軌跡は、もう1つの電子の状態変化に対し、いかなる媒体も経由しないで、瞬間的に（＝超光速のスピードで）変化することになる。その結果、自由電子のブラウン運動が、はるか遠く離れた他の電子のブラウン運動の影響をうける<sup>24)</sup>。こうした奇妙な「電子相関」は、フェルミ統計などを考慮する、固体の電子論では障害になると懸念されている<sup>24)</sup>。この問題についても6章で簡単にふれたい。

## 6. 場の量子論

我々のような量子力学の入門者が、確率力学を学ぶ時

にどうしても気になるのが、上記の「問題点1」に関係する、「真空中の電子がブラウン運動することを支持する証拠はあるのか？ また、あるとしたら、電子にブラウン運動を起こさせる実体は一体何なのか？」ということである。前述の通り、確率力学は、それらの疑問に答えない。確率力学はただ、「電子がブラウン運動をすると仮定すると、シュレーディンガー方程式が導けること」を示すだけである（これだけでも相当すごいが）。ネルソン自身は、(おそらく皮肉もこめて)「エーテル」の概念にふれている<sup>22)</sup>。一方、確率力学の研究者、長澤正雄は、「こだわる必要はない」と前置きしながら、「真空では目にとまらない非常に短い時間に粒子が生まれたり死んだりしている。この生まれたり死んだりがノイズ(電子のジグザグ運動)の原因だと考えることもできる」と述べている<sup>8)</sup>。

実は、こうした長澤のコメントとよく似た記述は、「場の量子論」<sup>20, 25)</sup>の中に見いだせる。通常の物理化学の講義や教科書では、場の量子論にふれられることはほとんどない。このノートでも、場の量子論について詳しく説明する余裕はないが、以下のことだけは述べておきたい。物理化学が基本原理とする量子力学では、基本変数として、位置や運動量といった「粒子や剛体の古典力学と同じもの」を採用する。一方、素粒子物理学など、より高エネルギーの系を扱う分野では場の量子論を基本原理とし、基本変数として、「場とその時間微分または共役運動量」を採用する。量子力学は、場の量子論を低エネルギー状態に限った時の近似であり、場の量子論の下位理論である。

場の量子論の最大の特徴は、電子が生成したり、消滅したりすることである(量子力学では、電子は $P$ という存在確率で記述され、発生したり消滅したりすることはない)。長澤のコメントでも暗示されているように、粒子(電子)の生成消滅は、ジグザグ運動と強く関連している。実際、以下に抜粋する高橋 康の教科書<sup>20)</sup>の記述は、我々の問題に対してきわめて示唆的である。「…自由な電子が1個の光子を放出する過程は現実には起こりえないが、しかしきわめて短い時間の間なら、自由な電子は1個の光子を放出することができる。その短い時間に放出された光子は、エネルギー保存則を満たしていないので、またすぐもとの電子に吸収されてしまう(筆者注：こうした光子の放出-吸収過程で、電子は不連続的なジグザグ運動をすると考えられる)。…(この)過程は電子と光子が別々に存在するとは見えない。はじめとおわりに電子が1個存在しているのにすぎない。微視的な短い時間の中に電子が2個の光子を放出したり、3個の光子を放出したりすることももちろんできる。つまり電子のまわりには、短い時間の間、光子がうじゃうじゃ

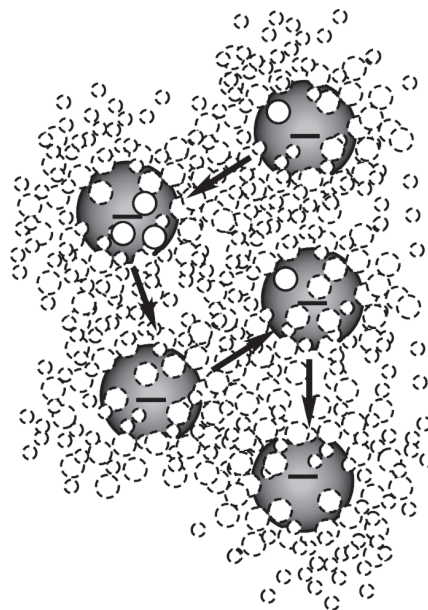


図4 真空中の電子のジグザグ運動のイメージ。白丸は、真空中で瞬間的に生成・消滅する(仮想的な)光子。

とつきまとっていると考えることができる。」高橋が示唆するイメージを図4で模式的に示した。

真空の扱いは、アリストテレスの昔から哲学者や科学者の関心をひいてきた。たとえば、『リヴァイアサン』で有名なホッブスも「真空は哲学的に不可能である。真空とは何もないことであって、何もないものが存在するはずがない」という立場から、ボイルの「真空」実験を批判している<sup>26)</sup>。この「真空」に対して、確率力学は、理論上の要請として、電子にブラウン運動をおこさせる「何らかの外力」を仮定した。真空中でのそうした外力の存在は、荒唐無稽に思えたかもしれないが、実は量子力学の上位理論である場の量子論では、すでに具体的な力の実体—光子—が、確定的に提示されていた。場の量子論の「真空」は、何もないどころか、「場」に満たされており、様々な粒子(←光子を含む)の生成消滅がおこっている、きわめてアクティブな領域である。

場の量子論では、主役は「場」であって、粒子(電子)は派生的なものである<sup>25)</sup>。場の量子論では、電子の実体は、光子と同じように場の振動である。しかし、光子と違って、質量をもっており、静止できるので、古典的な粒子として振る舞える。場の量子論では、厳密には1つの粒子を1つの粒子として同定はできない。粒子はいつでも仮想的な他の粒子につきまとわれているし(図4)、場の振幅はいつでも平均値のまわりをゆらいているので、粒子はいつでも消えたり生まれたりしているからである。それでも、近似的に電子を波と見た方がよいか、粒子と見た方がよいかと問われたら、普通には

(=化学で扱うようなエネルギーの世界 [meV~keV] では)、「粒子」と答えてよい。それが、確率力学と場の量子論の教えるところと思う。

「場こそ主役」という場の量子論の立場に立てば、確率力学を無理に固体などの多電子系に拡張する必要はないと思われる。二重スリット実験のような「真空中を飛ぶ1個の電子」では、電子と光子場の相互作用—ジグザグ運動—が重要であった。こうした系を記述するには、確率力学が適している。しかし、固体のような多数の電子の中の電子を扱うときに重要なのは、「真空」(量子ポテンシャル)との相互作用より、電子場(古典的なポテンシャル： $V(r)$ )との相互作用である。電子場中の電子の運動が、真空中の電子の運動と異なることは不思議ではない。そうした系に、「真空」との相互作用に力点を置いた確率力学を拡張適用しても、無理が生じるのは避けられない気がする。あえて多電子系に確率理論を持ち出すことはないと思う<sup>ゆえん</sup>所以である。

## 7. まとめ：電子の二重性と波動関数の「わかりやすい」説明

以上のことから、電子の粒子—波動二重性、ひいては電子の波動関数の意味は、大略、以下のようにまとめられる。

化学の世界では、電子は基本的に「粒子」と思ってよい。1個の電子は、空間のどこかに粒子として局在しており、電子の質量や電荷は全部そこにある。電子が局在している場所をこえて、質量や電荷がわかれて分布すること、すなわち、電子が「波」として大きく広がることはない。ゆえに、電子が、自分自身と干渉することもない。真空は、空っぽではなく、光(電磁波)の場で満たされており、光子が生まれたり消えたりしている。真空中を電子が通ると、これら光子(実験では観測されない、「仮想的な光子」)であることに注意)によって、電子はブラウン運動に似たジグザグ運動をおこす。こうしたランダムな動きによって、電子の位置や速度は確定できなくなり、確率でしか物事がいえなくなる。電子の波動性は、1つの電子に対する観測を幾千回、幾万回くり返し、多数の電子の挙動を平均化した結果として、すなわち、統計的な性質として現れる。波動関数は、電子のこうした統計的な行動を定めるものであり、位置の確率分布を振幅の2乗で、また、確率的な運動経路(=軌跡)を位相で、それぞれ表現する。ただし、これらのうち、実験で直接観測できるのは、位置の確率分布だけである。

電子が二重スリットを通過するときに見いだされる干渉縞も、電子のランダムな運動による統計的な結果とみなせる。ただし、「ランダムに運動する粒子」という「近似」を押し進めると、電子に統計的な波動性を与える

「道筋(=軌跡)」に、奇妙な「非局所性」があらわれる。この非局所性の正体は、まだよくわかっていない。そこで、とりあえず、実験で検証できる波動関数の性質(=その2乗が、「粒子である電子」の位置の確率分布を与える)だけを抽出し、公理として提出した。これが、ボルンの確率解釈である。

このように説明することで、ボルンの確率解釈につきものの、ある種の不明瞭さを補え、その意義を明確にし、波動関数への理解も深められると思うが、いかがであろうか？

## 8. おわりに

このノートを書きながら脳裡をよぎったのは、物理化学(量子化学)の導入部を、「基本的な場の量子論→確率力学/量子ポテンシャル→確率解釈」という、7章にまとめたようなプロセスで教えてはまずいのか? ということである。実際、「一見奇妙な“粒子”、“波動”の二重性は、場の量子力学によって解明される」ことは、50年以上前の一般向けのテキスト<sup>27)</sup>にも書かれていることである。こうした「慣らし」、あるいは「イメージづくり」の段階を省いて、はじめからシュレーディンガー方程式を与え、それに基づいてひたすら分子軌道を計算することだけが「量子化学」であるならば、少なくとも本学学生には、大きな実りをもたらさないと思う。第一、分子軌道計算の達人・藤永茂でさえ、「(計算を通じて、波動関数の)奇妙なイメージに私たちの方の頭の方のなれてきて(筆者注：第1章の「波動関数を少しずつ思い浮かべることを通じて理解する道」である)、少なくともそれを正しく取り扱うことができるようになるものだが、奇妙な感じはいつまでも残る」<sup>28)</sup>と、貴重な証言をしてくれている。

なぜ、場の量子論や確率力学(←もちろん「非局所性」の難点にもきちんと言及した上で)を使って、波動関数や粒子—波動の二重性のイメージづくりをすることに、ほとんどの物理化学の教科書が消極的なのか? 勉強不足で、筆者にはよくわからない。ただし、日本に量子化学が輸入される際、大きな役割を果たしたアイリング・ウォルター・キムボールの『量子化学』<sup>29)</sup>の序文に、以下のような記述があることは注意しておきたい(太字・下線は筆者による)。「量子化学が正しいものであるかぎり、化学の諸問題は応用数学の課題に他ならない。…本書において我々は、化学や物理学の概念を理解し発展させようと努力する際に役立つことの明らかになった“道具”を、系統的でしかも集約された形にまとめようと試みたのである。…特に努力をはらった点は、一応完全で統一のある論理体系を組み立てて、本気でこの方面に進もうとする学生ならば、これを基として更に深く

研修を続けていくことができるようにするということがあった。このためには多少形式的、数学的な書き方が必要であった。」アイリングたちにとっては、量子化学は数学に近いもので、読者には専門家の卵（それもプリンストン大学などで学ぶ最高レベルの学生）を想定していたのである。「三つ子の魂百まで」ではないが、もし、こうした教科書で学んだ偉い先生方が、自身の経験をもとに教科書を書いたとしても、根本思想—量子力学の公理性—は残るのではあるまいか。そうだとしたら、公理はそれ自体が一種の「行き止まり」であるから、「場の量子論までさかのぼったイメージづくりなど不要」のまま、物理化学の教科書が延々と出版されつづけることになる。本学学生には、可哀想な話である。もちろん、全ての教科書がそうというわけではない。たとえば、国内にも、ボームやネルソンの理論までとりあげている『量子分光化学』<sup>30)</sup>のような本もある。興味をもった学生は、挑戦してほしい。

もちろん、場の量子論や確率力学の導入は、本学学生にとって万能薬ではないだろう。実際、筆者の恩師でもある学習院大学・飯島孝夫名誉教授に、場の量子論や確率力学の教育についてお話を伺ったところ、「ボームの理論やネルソンの確率力学を勉強して、悪いことは何もない。しかし、こういう話を学ぶには、それなりの下地が必要。まずは、(教科書に書かれているような) 基本的な理論に慣れて、その問題点を知った上でないと空回りしてしまうだろう。場の量子論のような高位の理論をもとにして全体を説明するほうが理論的には綺麗だが、初学者にとってそれがよいかどうかは極めて疑問である。」というコメントをいただいた(文責はすべて筆者)。「どういう説明がわかりやすいのか?」は、筆者自身、いつも悩むところである<sup>31)</sup>。このノートを読んでも「わからない」と感じた学生は、飯島先生のようなご意見もあることを思い出し、決して落ち込まず、あらためて『アトキンス物理化学』などの参考書と格闘してほしい。

それでも、わからなかったら、どうすればよいか? 飯島先生は、以下のようなコメントも寄せられた。「量子力学を学ぶのはこれが最初で最後という学生にとっては、『どうしてこういうことを考える必要があるのか』を自分なりに考えることと、『いろいろ学問が進んでもまだまだわからないことがたくさんある』のを理解することが、何より重要である。その意味で、本学学生が、量子力学にふれたとき、『さっぱりわからない』と言ってくるのは、たいへん良いことだ。講義は、わからなくてもよい。ただし、『わからなくてつまらなかった』ではいけない。『わからないけれど、面白かった』でなければいけない。」本学学生と教員への、強く温かい激励で

ある。わからない学生は、わからないことを十分楽しんでほしい。

## 謝辞

本ノートを丁寧に読んでいただいた上、有意義なコメントをお寄せいただいた飯島孝夫名誉教授に、厚く御礼申し上げます。京都大学における量子化学の講義、ならびにボームに関する資料について貴重な示唆をいただいた河合 潤教授、元学生の視点から興味深い感想を送ってくれた金井典子教諭にも心から感謝する。

## 参考文献

- 1) 清水 明：新版 量子論の基礎 その本質のやさしい理解のために。サイエンス社 (2004)。
- 2) 福間智人：単位が取れる量子化学ノート。講談社サイエンティフィック (2004)。
- 3) H. Kuhn, H.-D. Försterling, 小尾欣一 監訳：クーン・フェルスターリンク物理化学 I. 丸善 (2002)。
- 4) ショーベンハウエル, 細谷貞雄 訳：知性について。岩波文庫, 岩波書店 (2001)。
- 5) P. Atkins, J. de Paula, 千原秀昭, 中村巨男 訳：アトキンス物理化学 (上) 第 8 版。東京化学同人 (2009)。
- 6) 湯川秀樹, 片山泰久, 福留秀雄：素粒子 第二版。岩波新書, 岩波書店 (1969)。
- 7) 並木美善雄：量子力学入門—現代科学のミステリー—。岩波新書, 岩波書店 (1992)。
- 8) 長澤正雄：シュレーディンガーのジレンマと夢—確率過程と波動力学—。森北出版 (2003)。
- 9) M.P. Silverman, 村山良昌 訳：量子論と宇宙論の世界。シュプリンガー・フェアラーク東京 (2004)。
- 10) 「20世紀の物理学」編集委員会 編：20世紀の物理学 I. 普及版, 丸善 (1999)。
- 11) J. Baggott: *The Quantum Story*, Oxford University press, New York (2011)。
- 12) A. Whitaker: *The New Quantum Age From Bell's Theorem to Quantum Computation and Teleportation*, Oxford University press, New York (2012)。
- 13) L. de Broglie, 河野与一 訳：物質と光。岩波文庫, 岩波書店 (1972)。
- 14) D. Bohm: *Phys. Rev.* **85**, 166 (1952)。
- 15) D. Bohm, B.J. Hiley: *The Undivided Universe*, Routledge, London (1995)。
- 16) A.I.M. Rae: *Quantum Mechanics*, IOP Publishing, Bristol (2002)。
- 17) 大崎敏郎：核データニュース。 **76**, 35 (2003)。
- 18) D. Dürr, S. Teufel: *Bohmian Mechanics The Physics and Mathematics of Quantum Theory*, Springer, New York (2009)。
- 19) 高橋 康：量子力学を学ぶための解析力学入門。講談社サイエンティフィック (1978)。
- 20) 高橋 康：古典場から量子場への道—これから‘場’を学ぶ人のために。講談社サイエンティフィック (1979)。
- 21) J.J. Sakurai, San Fu Tuan 編, 桜井明夫 訳：現代の量子力学。物理学叢書56, 吉岡書店 (1989)。

- 22) E. Nelson: Phys. Rev. **150**, 1079 (1966).  
23) 高安秀樹：フラクタル. 朝倉書店 (1986).  
24) 中村孔一：明治大学教養論集. **230**, 11 (1990).  
25) 吉田伸夫：光の場, 電子の海. 量子場理論への道. 新潮選書, 新潮社 (2008).  
26) M.J. Moore, 藤代亮一 訳：ムーア物理化学（上）第4版. 東京化学同人 (1972).  
27) 山内恭彦：新物理学講座 B篇 物理学の方法9 現代物理学の理論. ダイヤモンド社 (1963).  
28) 藤永 茂：入門分子軌道法 分子計算を手がける前に. 講談社サイエンティフィク (1990).  
29) H. Eyring, J. Walter, G.E. Kimball, 小谷正雄, 富田和久 訳：量子化学. 内外印刷 (1953).  
30) 河合 潤：量子分光化学—分光分析の基礎を学ぶ—. アグネ技術センター (2008).  
31) 林 久史：日本女子大学紀要. 理学部, **20**, 43 (2012).

---

## A Descriptive Explanation of Wave Function in Quantum Mechanics

Hisashi Hayashi

Department of Chemical and Biological Sciences,  
Faculty of Science, Japan Women's University

(Received August 26, 2015)