教科書の問題点を鑑定するタブーへのチャレンジ

どの教科書でも、基本的なことは同様に扱われていると思われがちですが、実は、そうでないケースがたくさんあります。たいへん残念なことに、正統な書かれ方をしているケースがほとんどない場合すらあります。これは、学生に戸惑いや混乱をもたらしますし、教師にとっても難所となります。この小論では、テキストに潜む危険箇所にスポットライトを当て、どういう問題があり、どう考えればよいかについて、詳しく述べていくことにします。

ここで指摘された問題点について「突っ込み」を入れると、怒り出したりパニくったりするケースが出るかもしれません。大事なことは、他人を批判することではなく、各自の学問を、より高くより深く進展させることです。精密な思考力は、既知事項の正確な習得に役立つのみならず、未知へのチャレンジへの強力な推進力となります。

人跡未踏の頂を目標に、足腰を鍛え、鋭さを磨きましょう！

テキスト鑑定 「箱の中の粒子」

「箱の中の粒子」（「無限に深い井戸型ポテンシャルの中の粒子」ということもある）は、量子力学や量子化学のテキストで、内外を問わず、非常によく取り上げられている。ところが、その記述に問題がまったくないテキストは、著名なテキストも含めて、非常に稀であり、ほとんどのテキストに、以下に示すような問題点が、かなりの程度、含まれている。

1. 「箱の中の粒子」とは

まず、「箱の中の粒子」とは、何を意味するのだろうか。そのことが、明確に記述されているテキストは、意外なことに非常に少ない。

粒子としては一定の質量 m (m>0)をもち、大きさは無視できるとする。問題を簡単にするため、ここでは 1 次元の場合に話を限り、座標軸として x 軸をとることにする。「1 次元の箱の中の粒子」とは何かというと、一定区間（たとえば、長さ L (L>0)の区間、$0<x<L$）内で自由運動（力を受けずに運動）し、区間（箱）の外には出られない粒子のことである。このとき、箱の中（$0<x<L$ の区間内）では、力を受けないが、箱の両端(x=0, x=L)では、箱の内側向きに反発力を受けて跳ね返される。これは、この粒子が入れられた箱の物理的状況によってもたらされる。このような状況は、位置エネルギーU が、$x\leq 0$ および $x\geq L$ で $U=\infty$、$0<x<L$ で U=0 となるものとして設定するとよい。このようにすると、下で述べるように、粒子が箱の外（x<0 または x>L)の区間に出ることはない。(注：箱の境界 x=0 と x=L を箱の中に含めて U=0 としても、波動関数の連続性を用いると、上のように U を設定した場合と同じ結果を与える。)

質量 m の粒子の 1 次元の運動に対するシュレーディンガー方程式は次のように表される。

$$-(\hbar^2/2m)\, d^2\psi/dx^2 + U\,\psi = E\,\psi \qquad (1)$$

ここで、E はエネルギー、U は位置エネルギー、ψ は波動関数である。$\hbar$ はプランク定数 h を円周全体の角度 2π で割った量 $h/2\pi$ である。

$$\hbar = h/2\pi \qquad (2)$$

この場合、１次元の変数を x としているので、位置エネルギーU や波動関数 ψ は、x の関数である。

(1)に含まれる数量にどのような制約があるか、明記しているテキストは、困ったことに、非常に少ない。プランク定数 h、質量 m、座標変数 x、エネルギーE、位置エネルギーU は、すべて実数である。これらの量のうち、h と m は正の定数である。U は、粒子が置かれた物理的環境に依存する。x と E は定数ではないので、とりうる値の範囲すなわち変域が問題になるが、$-\infty$から$+\infty$まで実数全体としておく。残りの量として量子論で重要な波動関数 ψ は、他の量とちがって実数に限定することはできないため、複素数として扱わなければならない。このことは、非常に重要で、波動関数 ψ を表す式に含まれる定数は、実数であることがはっきりしている量を除き、すべて複素数として扱う必要がある。また、波動関数の絶

対値の２乗$|\psi|^2$は、ψとその共役複素数ψ^*（ψに含まれる虚数単位iをすべて$-i$で置き換えて得られる）の積$\psi\psi^*$で与えられる。

$$|\psi|^2=\psi\psi^* \qquad (3)$$

「箱の中の粒子の問題」に対するシュレーディンガー方程式(1)は、位置エネルギーUに対する設定により、つぎの２通りにわけて扱う必要がある。

まず、１次元の箱の両端と外部に相当する$x\leq0$および$x\geq L$の領域では$U=\infty$である。すると、(1)の左辺第２項は$\psi=0$でない限り無限大に発散してしまう。左辺が発散してしまうと、(1)を満たすエネルギーEとして有限な値をもつ場合を扱うことができなくなる。このため、$x\leq0$および$x\geq L$では、$\psi=0$であり、粒子を見出す確率は 0 である。すなわち、有限なエネルギーEに対し、１次元の箱の境界および外側には、粒子はまったく出現せず、粒子は箱の中に閉じ込められる。

次に、箱の中に相当する$0<x<L$の領域では、$U=0$とすると、(1)は次のように簡単になる。

$$-(\hbar^2/2m)\, d^2\psi/dx^2 = E\,\psi \qquad (4)$$

これが、１次元の箱の中の粒子に対するシュレーディンガー方程式である。粒子が、箱の中でどのように振舞うかは、(4)をていねいに解いてみればよい。この問題については、次節で詳しく議論する。

以上述べたことは、箱の中の粒子の問題において重要であるが、明確に記述されているテキストは非常に少ない。これはテキスト鑑定の Check Point となる。

Check Point 1: 問題設定や用語・数量の記述が十分になされているか？

「箱の中の粒子」の代わりに「無限に深い井戸型ポテンシャルの中の粒子」として扱っているテキストも多数ある。この場合は、粒子を閉じ込める空間領域のことを、位置エネルギー（ポテンシャル）の特徴を用いて「井戸」とみなしている。井戸は、地下水を汲み取るために、地表に空けた穴の縁が崩れないように囲ってあり、穴の中には地下水が溜まっていて、必要に応じ、桶やバケツを紐でつるして穴の中から水を汲み出す。無限に深い井戸など実際にはありえないが、井戸の底の位置エネルギーを０とし、井戸の開口部に当たる場所の位置エネルギーを無限大とみなす。

一次元の「箱」も「井戸」も現実の存在として理解しにくい面があるが、粒子が置かれた環境の位置エネルギーの状況を比喩的に表現したものである。この問題を考えるときには、位置エネルギーがどうなっているかを、きちんと把握することが大切である。

２． 微分方程式の一般解

１次元の箱の中の粒子のシュレーディンガー方程式(4)は、座標変数をx、波動関数をψとして、つぎのようにψの 2 次微分がψに比例する形になる。

$$d^2\psi/dx^2 = -a\psi \qquad (5)$$

右辺のaは、粒子の質量をm、エネルギーをEとして、次式で与えられる。

$$a = 2mE/\hbar^2 \qquad (6)$$

式(5)は、2 階の微分方程式として量子力学誕生以前からよく知られており、その一般解は、右辺に含まれる定数aの符号（すなわちEの符号）にしたがって、$a>0$ $(E>0)$、$a=0$ $(E=0)$、$a<0$ $(E<0)$の３通りに分け、次のように表現することができる。

$a>0$ $(E>0)$の場合：　$k=a^{1/2}=(2mE/\hbar^2)^{1/2}$ とおき

$$\psi = A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx} \qquad (7)$$

$a=0$ $(E=0)$の場合：

$$\psi = A\,x + B \qquad (8)$$

$a<0$ $(E<0)$の場合：　$k=(-a)^{1/2}=(-2mE/\hbar^2)^{1/2}$ とおき

$$\psi = A\,e^{kx} + B\,e^{-kx} \qquad (9)$$

それぞれ、２階の微分方程式であることに対応する２つの定数A, Bは、任意の複素数である。ここで、

(7)(9)に含まれる定数 k は正 ($k>0$) であることに注意する必要がある。k の定義を、上の定義の-1 倍にしても、(7)や(9)では、指数の肩に k を含む項と $-k$ を含む項の両方が含まれるため、２項の線形結合が表す一般式としての意味は、まったく同等である。数学的な意味がまったく同等のものを、２通り扱う必要はなく、上のように根号の前の符号を正にとる方だけを採用しても、一般性は失われない。あまのじゃくに、上の定義の-1 倍を採用すると、$k<0$ となり、あとでわかるが、量子数 n が負の整数になってしまう。それでも、同一のエネルギー準位を与えるので、困ることはないが、量子数として正の整数（自然数）になる方を選ぶのが「自然な選択」である。

なお、オイラーの関係式（$\sin kx=(e^{ikx}-e^{-ikx})/2i$, $\cos kx=(e^{ikx}+e^{-ikx})/2$）を用いると(7)は三角関数 $\cos kx$ と $\sin kx$ を用いて表すこともでき、(9)も同様に双曲線関数 $\cosh kx$ と $\sinh kx$ を用いて表すこともできる。

$a>0$ ($E>0$)の場合：　$k=a^{1/2}=(2mE/\hbar^2)^{1/2}$ とおき

$$\psi = A\cos kx + B\sin kx \qquad (7)'$$

$a<0$ ($E<0$)の場合：　$k=(-a)^{1/2}=(-2mE/\hbar^2)^{1/2}$ とおき

$$\psi = A\cosh kx + B\sinh kx \qquad (9)'$$

以上のことからわかるように、一般解の形は、シュレーディンガー方程式を微分方程式として取り扱うときの定数 a（または E）の符号によって異なる。とくに $a=0$ ($E=0$)の場合の一般解は、単なる 1 次関数になるが、このことを正しく記述しているテキストは極めて稀である。

Check Point 2: 一般解が x の一次関数になるケースが示されているか？

次に、微分方程式の一般解として $a<0$ ($E<0$)の場合についてまったく記述していないテキストが非常に多い。エネルギーE は負にはならないとしているテキストもあるが、これは自明なことではない。

古典力学で考えると、箱の底の位置エネルギー（多くの場合 0 としている）を基準にして測った粒子のエネルギーE は、粒子の運動エネルギーを意味するので、運動エネルギーが負になることは考えにくい。ただし、これは、古典力学に基づく推論なので、量子力学において、位置エネルギーより低いエネルギーの解がありうるかどうかは自明でない。量子力学では、粒子がその場所の位置エネルギーより低いエネルギーで運動する（その場所を通って移動する）現象（トンネル効果）が知られている。

Check Point 3: エネルギーが負になる場合の一般解が示されているか？

多くのテキストでこの点が満たされていないが、テキストによっては、(7)や(7)'の形の解を、

$$k=a^{1/2}=(2mE/\hbar^2)^{1/2} \qquad (10)$$

として、$E<0$ の場合にも拡張して適用しているケースがある。その場合、$E<0$ では、(10)で定義される k は純虚数になり、(7)や(7)'の形が(9)や(9)'の形に該当することになる。そうすると、$E<0$ の場合についても議論ができるため、この問題は回避されているとみなしてよい。

なお、(10)の右辺の平方根に含まれる E に正負の制限をつけずに議論しているケースでは、$E=0$ の場合についても(7)や(7)'を適用することができるが、その場合、$E=0$ では、ψ=定数となるので、(8)の一次関数の形の一般解のうち、定数部分だけにしか対応できない。このため、(7)や(7)'を $E=0$ の場合にも拡張して議論しているケースでは、$E=0$ の場合の量子力学的適否についての議論が、後で見るように正しく行えるので、Check Point 2 を量子論的には補うことができるが、微分方程式の一般解を $E=0$ の場合について正しく示していないという数学的欠陥は回避されない。

３．境界条件の適用

数学的には、箱の中の粒子の解として、$E<0$ や $E=0$ を、最初から排除することはできない。古典力学では、運動エネルギーは負にはならないから $E<0$ を排除できるが、運動エネルギーが０になることは粒

子が静止すれば実現する。古典力学に基づく推論が量子力学の世界に通用するかどうかは、自明ではないので E<0 や E=0 に対して、解が存在するかどうかは、量子力学の基本に則って考察しなければならない。

量子力学では、波動関数は、粒子を見出す確率と関係しており、任意の場所で連続した関数でなければならない。このため。箱の中の粒子に対し、箱の両端で箱の内部と外部の波動関数が連続しなければならないことが、境界条件として課される。

前々節で議論したように、箱の外側および箱の両端では、ψ=0 であるから、箱の内部の波動関数を表す $\psi(x)$が、箱の両端 x=0 と x=L で連続な関数となるためには、

$\psi(0)=0$、

$\psi(L)=0$

でなければならない。これが、１次元の箱の中の粒子に対する**境界条件**である。

この境界条件が、満たされうるかどうか、E<0、E=0、E>0 の３通りに分けて検討する。

（E<0 **の場合**）

(9)を用いると、

$\psi(0)=A\,\mathrm{e}^0 + B\,\mathrm{e}^0 = A+B=0$

$\psi(L)=A\,\mathrm{e}^{kL} + B\,\mathrm{e}^{-kL} =0$

上の式より $B=-A$ なので、下の式は、

$A(\mathrm{e}^{kL} - \mathrm{e}^{-kL})=0$

となる。ここで、k はその定義式から、k>0 であり、k=0 にはならないので、e^{kL} と e^{-kL} は等しくなることはない。よって、左辺のカッコ内は 0 になりえないから、A=0 となる。すると、$B=-A$ なので、B=0 となるため、(9)の ψ は恒等的に 0（どの場所でも 0）となってしまい、粒子が存在しなくなり、不合理となる。よって、E<0 の場合には、箱の中の粒子に対する解は、存在しないことが示された。

（E=0 **の場合**）

(8)より、

$\psi(0)=A\cdot 0 + B = B = 0$

$\psi(L)=AL + B = 0$

上の式から B=0 なので、下の式は、AL = 0 となり、L>0 であるから、A=0 が得られる。すなわち、

$A=B=0$

となるので、(8)の ψ は恒等的に 0（どの場所でも 0）となってしまい、粒子が存在しなくなり、不合理となる。よって、E=0 の場合には、箱の中の粒子に対する解は、存在しないことが示された。

（E>0 **の場合**）

(7)'を用いると（(7)と(7)'は一般式として同等であるから、どちらを用いてもよい）、

$\psi(0)= A\cos 0 + B\sin 0 =A=0$

$\psi(L)= A\cos kL + B\sin kL =0$

下の式に、上の式から得られる A=0 を代入すると、

$B\sin kL =0$

が得られる。

ここで、B が 0 であるとすると、A も 0 であるから、$\psi(x)$が恒等的に 0（どの場所でも 0）となってしまい、粒子が存在しなくなり、不合理となる。よって、$B\neq 0$ であり、

$$\sin kL =0 \qquad (11)$$

この三角関数方程式の解は、sin 関数の周期性から、

$$kL=n\pi \quad (n=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots) \qquad (12)$$

である。ここで、E>0 の場合の k の定義、$k = a^{1/2} = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$、から、$k$>0 であることを用いると、

$$kL=n\pi \quad (n= 1, 2, 3, \cdots) \qquad (13)$$

となる。よって、E>0 の場合は、解が存在し、エネルギーの値（**エネルギー準位**）は（$h/2\pi = \hbar$ であることを用いると）、次式に従うことが導かれる。

$$E= n^2h^2/8mL^2 \quad (n= 1, 2, 3, \cdots) \qquad (14)$$

ここで、n は**量子数**であり、上の議論から正の整数（自然数）に限られる。

以上の議論によって、1 次元の箱の中の粒子のエネルギー準位と量子数が求められるが、ほとんどのテキストで、このようなていねいな議論か行われていないのは残念である。

Check Point 4: E<0 となる解が存在しないことが量子力学に基づいて吟味されているか？

古典論に基づいて E<0 を排除しているのは、量子論（量子力学）を考慮していないので妥当でない。E<0 となる場合に対して(5)の一般解が示されていないと、必然的にこの問題が生じる。ただし、(5)の一般解として、(7)または(7)’が示されていて、(10)の $k = a^{1/2} = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ において、E<0 の場合、k が純虚数になることを用いれば、E<0 の場合には解が存在しないことを導くことができ、この問題は回避される。

ほとんどのテキストで、エネルギー準位(14)が正しく示されていて、それには、E<0 となる解は含まれていないが、(14)を導く議論が正しく示されていないので、この問題点は回避されていない。

Check Point 5: E=0 となる解が存在しないことが量子力学に基づいて吟味されているか？

古典論では E=0 が許されるのに、量子論では E=0 が許されないことは、極めて重要であり、この議論が欠けていることは重大である。

正しい議論は、E=0 となる場合に対して(5)の一般解(8)を示して行うべきであるが、それを正しく行っているテキストは、非常に稀である。(7)または(7)’を一般解として示し、E=0 の場合に ψ=定数（(8)の一般解に含まれる特殊解の１つ）となることを利用して量子論の境界条件を満たす合理的な解が得られないことを示すと、この問題は回避される。

(11)の三角関数方程式 $\sin kL = 0$ の解は、(12)のように $kL = n\pi$　(n=0, ±1, ±2, ±3, ‥‥) であるが、非常に多くのテキストで、理由をまったく示さずに、$kL = n\pi$　(n= 1, 2, 3, ‥‥) としている。これには、n=0 が含まれないので、E=0 の解が排除されているが、まったくその根拠が示されておらず、Check Point 5 の問題点は解消しない。

Check Point 6: 量子数 n が自然数に限られることの根拠が明確か？

すでに、Check Point 5 のところでも述べたが、(11)の三角関数方程式 $\sin kL = 0$ の解は、(12)のように $kL = n\pi$ (n=0, ±1, ±2, ±3, ‥‥) となるが、非常に多くのテキストで、理由をまったく示さずに、$kL = n\pi$　(n= 1, 2, 3, ‥‥) としている。結論は正しいが、n=0 および n として負の整数が排除されることの根拠が、非常に多くのテキストにおいて、まったく述べられていない。

上で行った議論のように、$k = a^{1/2} = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ と定義していれば、E>0 に対し、k>0 となるので、(11)の三角関数方程式の解から、n として、0 及び負の整数は自ずと排除され、(13)が得られる。

テキストによっては、$k^2 = 2mE/\hbar^2$ としているケースがある。この場合、$k = \pm(2mE/\hbar^2)^{1/2}$ の２通りの解が形式的に得られ、k>0 の方からは n として正の整数（自然数）、k<0 の方からは n として負の整数が、エネルギー準位の正解を与える。ただし、このことは、同じエネルギー準位を与える波動関数が２種類ある（２重に縮重している）ことを意味しているわけではない。たとえば、(7)や(9)において、k の定義式が - 1 倍になったとしても、波動関数を表す式の意味はまったく変わらない。したがって、k の定義式の符号によって、２種類の線形独立な解が導かれることはなく、どちらの定義を採用しても、まったく同等な解が得られる。つまり、$k = \pm(2mE/\hbar^2)^{1/2}$ の複号の両方を考慮する必要はなく、一方だけを取り上げても、一般性は失われない。わざわざ、n として負の整数になる解を選ぶ必要はないので、通常、n が自然数となる k>0 の場合が採用されている。k>0 を選んでも、k<0 を選んでも、どちらの場合にも、同じエネルギー準位に対して、同等な波動関数が１つだけ得られる。このことは、規格化と関連し、以下でも議論する。

4．波動関数の規格化と位相因子

箱の中における波動関数は、(13)の $kL=n\pi$ (n= 1, 2, 3, ‥‥)を(7)または(7)'に代入すると得られる。すでに述べたように、(7)と(7)'は一般式として同等であるから、どちらを用いてもよい。ここでは、(7)'を用いる。(7)'より

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx$$

この式に、前節の境界条件の議論で得られた、A=0、B≠0、$kL=n\pi$ (n= 1, 2, 3, ‥‥) を用いると、

$$\psi(x) = B\sin(n\pi x/L) \qquad (B\neq 0,\ n= 1, 2, 3, \cdots) \qquad (15)$$

B は 0 でない定数であれば何であってもよく、実数に限らず、任意の複素数でよい。ただし、$|\psi(x)|^2$ が、量子論の要請をうけて、粒子を見出す確率密度となるためには、次の規格化条件を満たすように B を定める必要がある。

（規格化条件） $$\int|\psi(x)|^2 dx=1 \qquad (16)$$

ここで、積分の範囲は、座標変数 x の全変域-∞から+∞までとする。箱の外ではどの位置でも波動関数 ψ =0 であるから、規格化条件(16)の積分範囲は、箱の両端で切り出される線分の範囲、すなわち、x=0 から $x=L$ までとしてよい。よって、

$$\int_0^L |\psi(x)|^2 dx=1 \qquad (17)$$

これに(15)を代入すると、

$$|B|^2\int_0^L \sin^2(n\pi x/L)dx=1 \qquad (18)$$

この式の積分の値は、（三角関数の半角公式を用い、三角関数を周期の整数倍の区間で積分すると 0 になることを用いると、）$L/2$ になる。

よって、

$$|B|^2 (L/2) =1 \qquad (19)$$

$$B=e^{i\theta}(2/L)^{1/2} \qquad (20)$$

ここで、θ を任意の実数として、$e^{i\theta}$ の共役複素数は $e^{-i\theta}$ であり、$|e^{i\theta}|^2= e^{i\theta}e^{-i\theta}= e^{i\theta-i\theta}= e^0 =1$ となることを、用いた。$e^{i\theta}$ は、絶対値が 1 に等しい複素数の一般式であり、θ は位相（または偏角）とよばれ、波動関数の比例係数に含まれる $e^{i\theta}$ を、**位相因子**という。規格化条件を用いて、波動関数の比例係数を、実数には限定せずに、複素数として求めると、このように位相 θ が含まれた形になる。θ は任意なので、規格化条件を満たす波動関数 $\psi(x)$は、θ の値を変えることで無数にあり得るが、確率密度を表す$|\psi(x)|^2$ は θ の値を変えてもまったく同じになる。同一の確率密度を与える波動関数は、同じ量子力学的状態を表すので、複数示す必要はなく、１つだけ示せばよい。そこで、θ=0 とすると、e^0 =1 であるから、$B= (2/L)^{1/2}$ となる。結論として、1 次元の箱（x 軸上の x=0 から $x=L$ (L>０)までの区間を「箱」とする）の中の粒子の波動関数は次式で与えられることとなる。

$$\psi(x) = (2/L)^{1/2}\sin(n\pi x/L) \qquad (n= 1, 2, 3, \cdots) \qquad (21)$$

なお、求める波動関数の式の係数の B を任意の複素数として(19)から (20)を得たが、B を実数に限定すると、(20)において θ=0 と $\theta=\pi$ とした場合に相当する次式が得られる。

$$B = \pm(2/L)^{1/2} \qquad (20)'$$

この式の複号がマイナスの場合は、(21)のちょうど-1 倍の波動関数を与える。波動関数を-1 倍しても、エネルギー準位や確率密度は+1 倍の場合とまったく同じであり、両者を別個の解とみなすことはできないので、片方を任意に選んでよい。わざわざ、- 1 倍の形の解を選ぶ必要はないので、どのテキストでも、+1 倍の方が選ばれ、

$$B = (2/L)^{1/2} \qquad (20)''$$

として、(21)が 1 次元の箱の中の粒子の波動関数として与えられている。

大半のテキストでは、以上の議論の多くが省略され、いきなり(20)"を得ている。

Check Point 7: 規格化条件を満たす波動関数を 1 つだけ求める理由が示されているか？