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

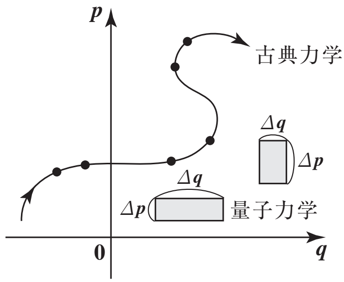


図 1 に示すように，位置 q と運動量 p を両軸とする位相空間で考えると，古典力学では，粒子のある時点における位置 q と運動量 p は決定され，位相空間内の 1 点が決まるんだね。そして，時刻 t の経過と共に，その運動の軌跡は，P156で解説したように，1 つの曲線 (トラジェクトリー) として描くことができるんだね。

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 $\Delta q \Delta p \gtrsim \hbar$ 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。

量子力学には，この曖昧な不確定性が常につきまとうんだね。しかし，これを逆手にとって，様々な物質量の大体の値を押さえることもできる。それでは不確定性原理で用いられる q や p のバラツキ Δq や Δp の数学的な意味をハッキリさせた上で，ある原子中の電子の運動エネルギー E の大体の大きさを推定してみよう。

● 物理量のバラツキとは標準偏差のことだ！

では次，q や p などの物理量のバラツキ Δq や Δp について解説しよう。このバラツキとは，数学的には標準偏差のことなんだね。高校数学で習った，確率密度 $f(x)$ に従う連続型の確率変数 X の平均 m_X，分散 $\sigma_X{}^2$，標準偏差 σ_X の公式を右に示しておこう。

確率密度 $f(x)$ の分布に従う確率変数 X の平均（期待値）m_X，分散 $\sigma_X{}^2$，標準偏差 σ_X は，次のようになる。

$\cdot\ m_X = E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x)\,dx$

$\cdot\ \sigma_X{}^2 = E(X^2) - \{E(X)\}^2$
$\qquad = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x)\,dx - m_X{}^2$

$\cdot\ \sigma_X = \sqrt{E(X^2) - \{E(X)\}^2}$

量子力学の q や p のバラツキ Δq と Δp も，表記の仕方が異なるだけで，右の標準偏差の公式とまったく同様に，次のように表せるんだね。

$$\begin{cases} \Delta q = \sqrt{<q^2> - <q>^2} & \cdots\cdots\cdots(*) \\ \Delta p = \sqrt{<p^2> - <p>^2} & \cdots\cdots\cdots(*)' \end{cases}$$

← $\sigma_X = \sqrt{E(X^2) - \{E(X)\}^2}$ と同じ

← $\sigma_P = \sqrt{E(P^2) - \{E(P)\}^2}$ と同じ

q や p だけでなく，一般の物理量を α とおくと，バラツキ $\Delta\alpha$ も同様に，

$\Delta\alpha = \sqrt{<\alpha^2> - <\alpha>^2}$ $\cdots\cdots(*e)''$ と表されるんだね。

つまり，量子力学における記号 “$<\ >$” は，統計数学における “E”（平均，期待値）のことなんだね。納得いった？

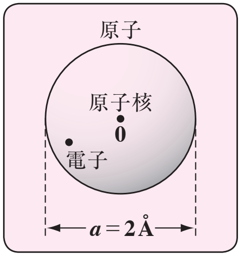
● 原子中の電子の運動エネルギー E を評価しよう！

不確定性原理：$\Delta q \cdot \Delta p \geqq \hbar$ $\cdots\cdots(**)$ は，

量子力学的な考察をする際，様々な面で遭遇することになるんだね。ここでは，次の例題で，このアバウトな考え方を身に付けていこう。

（例題） ある原子の大きさが $a = 2\text{Å}\,(=2\times10^{-10}(\text{m}))$ であるとき，この原子中にある電子の運動エネルギー E の大きさの程度を，不確定性原理の式：$\Delta q \cdot \Delta p \sim \hbar$ $\cdots\cdots\cdots$① を利用して求めてみよう。
（ただし，$\hbar = 1.05\times10^{-34}(\text{J}\cdot\text{s})$，電子の質量 $m = 9.1\times10^{-31}(\text{kg})$ とする。）

右図のように，電子は原子核を中心にして，運動していると考えられるので原子核の位置を原点 0 とすると，電子の位置 q と運動量 p の平均値はいずれも 0 となるはずだね。



$\therefore \langle q \rangle = 0$，かつ $\langle p \rangle = 0$

ここで，q のバラツキ（不確定性）Δq は，原子の半径の大きさ $\frac{a}{2}$ と同程度のはずだから，$\Delta q \sim \frac{a}{2}$ ……② が成り立つ。

②を①に代入すると，$\frac{a}{2}\cdot\Delta p \sim \hbar$ 　より，

$$\Delta p \sim \frac{2\hbar}{a} \quad \left(\Delta p \text{ は } \frac{2\hbar}{a} \text{ 程度の大きさ}\right)$$

ここで，$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \underbrace{\cancel{\langle p \rangle^2}}_{0^2}} = \sqrt{\langle p^2 \rangle}$ 　より，

p^2 の平均値 $\langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2 \sim \frac{4\hbar^2}{a^2}$ となるので，p^2 は平均として大体 $\frac{4\hbar^2}{a^2}$ 程度の値をとる。すなわち $p^2 \sim \frac{4\hbar^2}{a^2}$ ……③ と考えられる。

よって，電子の運動エネルギー $E = \frac{p^2}{2m}$ に③を代入すると，

$$E = \frac{2\hbar^2}{ma^2} \quad \cdots\cdots④$$ となるんだね。

ここで，$\hbar = 1.05\times10^{-34}(\mathrm{J\cdot s})$，電子の質量 $m = 9.1\times10^{-31}(\mathrm{kg})$，原子の大きさ $a = 2\times10^{-10}(\mathrm{m})$ を④の右辺に代入すると，電子の運動エネルギー E は，大体

$$E = \frac{2\times(1.05\times10^{-34})^2}{9.1\times10^{-31}\times(2\times10^{-10})^2} \fallingdotseq 6.06\times10^{-19}(\mathrm{J}) \fallingdotseq 3.79(\mathrm{eV})$$ 程度であることが

電子ボルト
$(1\mathrm{eV} = 1.6\times10^{-19}\mathrm{J})$

分かるんだね。どう？面白かったでしょう。

さらに学びたい方は「**量子力学キャンパス・ゼミ**」で学習して下さい。