

# パーソナル・コンピュータによる確率波描像に基づく 水素原子模型理解のための CAI システムの作成

Construction of a CAI system for the understanding of the hydrogen atom based  
on the concept of probability wave with use of personal computer

大久保茂男・竹村明日香

Shigeo OHKUBO Asuka TAKEMURA

Department of Applied Science, Kochi Women's University

Kochi 780, Japan

(received 10 November 1989)

## Abstract

We have developed a CAI system which helps the beginners for understanding the hydrogen atom based on the concept of probability wave. The CAI system which consists of 73 pictures is found to be very useful for getting an intuitive understanding of the process of quantum measurement.

## §1 はじめに

量子力学<sup>1),2)</sup>は物理学の基礎理論であるばかりでなく、今日ではハイテクノロジーと言われる技術の殆どはこの理論を基盤としている。オーディオ、ビデオ、コンピュータなどあらゆるところで威力を発揮しているエレクトロニクスの技術は量子力学によるものである。量子力学は物理学者や物理学専攻の学生の高尚な学問分野でなく、人々の日々の世界に深くは入りこんでいる。しかし、量子力学はニュートン力学と違って観測理論の原理的問題<sup>3)</sup>が未だ解決していない論争の対象であり続けていることもあって、量子力学的世界像を正しく理解しているものはそれを専門とする研究者に限られていると言わざるを得ない。日本では、量子力学を計算の道具として使える人は多いけれども、原理を深く理解することはそれ程重視されていないように思われる。

量子力学の本質は確率波である。確率的な量子的世界を日常の常識——ニュートン力学の世界像——で理解することは容易ではない。観測という概念を抜きにして量子力学を正確に理解することはできない。しかし、パーソナル・コンピュータを活用するならば量子力学の“観測過程”をシミュレートでき、確率過程の本質を直観的に理解させることが可能となると思われる。

我々は水素原子模型をとりあげ、電子の状態についての量子力学的な理解を得る支援システムを構築した。そして、量子数の概念が確率的な電子の運動状態とどのように関係しているか理解できるようにした。このシステムは量子力学を本格的に学ぼうとする学生、教師等に有用であると思われる。以下にアウトラインを紹介する。

## §2 支援システム QUANTUM

### §2.1 従来の水素原子模型による教育の問題点

高校の物理での水素原子模型はニュートン力学による古典的世界像のもとで教えられる。教科書であらわれる典型的な水素原子模型が図1に示されている。電子は陽子のまわりを電気力で引かれて回転円運動をすると考えられている。向心力と遠心力のつりあいから、一定の円軌道がきまる。ここまでは全くニュートン力学的な説明であり、連続的な円軌道が許される。そこで、前期量子論の歴史的説明に従い、円軌道に対してド・ブロイ波長 $\lambda$

$$\lambda = 2n\pi \quad (n=1, 2, 3, \dots) \quad (1)$$

が導入され、 $\lambda$ は(1)式で許される飛び飛びの値しかとれないとされる。この結果、電子は量子化された円軌道をまわることになる。このような説明が通常行われているが、これは前期量子論的理解であって量子論的理解ではない。現実の水素原子の電子は一定の速さで円軌道を描いてまわっているわけではない。ところが、高校の物理では以上の教え方がされ、一応の直観的理解が得られるとされている。しかし、これが1つの先入観念のようになってしまい、量子力学的な確率波による正確な理解を妨げている面があることは否定できない。我々は確率波に基づく正しい理解を物理教育の中で行うことが必要であると考える。

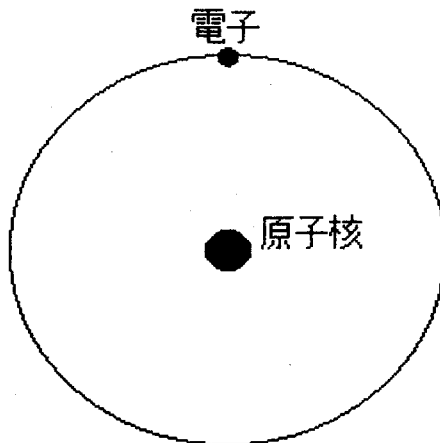


図1 古典的描像による水素原子模型。

量子論の授業はニュートン力学を教えたあと、解折力学に進み、前期量子論をへて量子力学へ入るのが普通のやり方である。しかし、高校あるいは大学でも前期量子論的描像をえた段階で留まり、そこから先へ進むのは仲々むづかしい。複雑な数式をもちこまないで確率的・量子的な見方を学習者に身につけさせることは是非とも必要である。パーソナル・コンピュータによる“観測”のシミュレーションはその事を可能にする。このことは教師がきちんと量子力学的描像をもつことができるならば、高校・大学初年次でも確率的な正しい水素原子の描像を学生に与えることができることを意味する。我々がこのCAIシステムを作成するにいたった動機もここにある。日常経験の常識ではとらえきれない量子論的な見方をパーソナル・コンピュータは可能にしてくれる。

§2.2 観測の体験

水素原子の電子の運動を記述する波動関数は次式で与えられる。

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{2}$$

ここで

$$R_{nl}(r) = - \left\{ \left( \frac{2}{na_0} \right)^3 \frac{(n-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \tag{3}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \quad \rho = \frac{2}{na_0} r$$

$L_{n+l}^{2l+1}$  はラグール関数,  $a_0$  はボーア半径である。  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  は球関数であり, 次式で与えられる。

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \left[ \frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \tag{4}$$

電子の運動は(1)式そのものであって, 決して図1のように円運動を行っているわけではない。このことは初学者には仲々わかりにくい。電子は観測を行うことによってのみ, ある時刻にどこにいるか知ることができる。点  $\mathbf{r}(r, \theta, \varphi)$  に存在する確率は

$$P = |\Psi(r, \theta, \varphi)|^2 \tag{5}$$

で与えられる。観測を何回もくり返すと電子がどのような点にいるかは(5)式で与えられるので, その分布を知ることができる。図2に量子数  $n=0, l=0, m=0$  の場合の最終結果が示されている。表示では電子の見つかる確率を3段階に分け濃淡で見やすく表現した。学生は画面で観測を時々刻々“体験”することにより, 電子の分布状況を知るのである。そして, 電子の運動については図

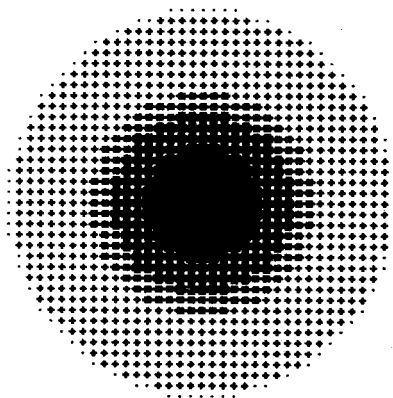


図2  $n=0, l=0, m=0$  の場合の水素原子の電子の確率密度分布図。

1 のようではなく, 観測すれば電子はどこか1点にしかいないということを実感できる。

図2に示されているように, 多数回観測を行った結果として電子の分布図を見ることにより, ニ

ニュートン力学による日常の常識的な目で電子の運動を記述しようとするれば、電子が濃度の濃い円環上をまわっていると近似的に理解してもよいことがわかる。現実の電子が円運動をしているのではないことは、それ以外の所でも電子が観測されることから容易にわかる。このように観測を“体験”することにより、量子力学的に正確な水素原子および電子の理解が得られる。このようなことは、従来の教科書と黑板による授業では到底望めないものである<sup>4)</sup>。

### §2.3 量子数の意味

(2)式で表わされる量子数の概念は初学者には仲々わかりにくいものである。これも日常的な感覚ではとらえがたい物理量である。前期量子論では(1)式で量子数  $n$  が導入されるが、確率波を記述するものでなく、厳密な量子論の観点からすれば意味が異なる。量子論では固有値を特徴づけるものとして  $n, l, m$  の量子数がある。量子数の理解にあたって重要なことは数学的な理解だけでなく実体的な理解を得ることである。そこで、我々は量子数  $n, l, m$  の役割をパーソナル・コンピュータ上で体験的に理解できるようにした。CAIシステムが  $n, l, m$  の値を尋ねてくるので、それに応じて値を入力することにより、色々な水素原子の分布図を比較しながら見るができる。そして、電子は円運動だけでなく、実に複雑な運動をしていることを知ることができる。図3、図4に例が示されている。図2-4の比較を通じて、これらを区別する識別子としての量子数の意味が実体的に理解される。CAIシステム QUANTUM では量子数  $n$  だけでなく、 $l, m$ 、について個別的に学習し理解を深められるようになっている。

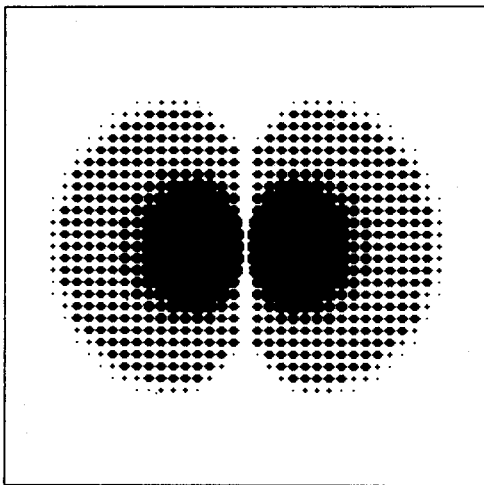


図3  $n=2, l=1, m=0$  の場合の水素原子の電子の確率密度分布図。

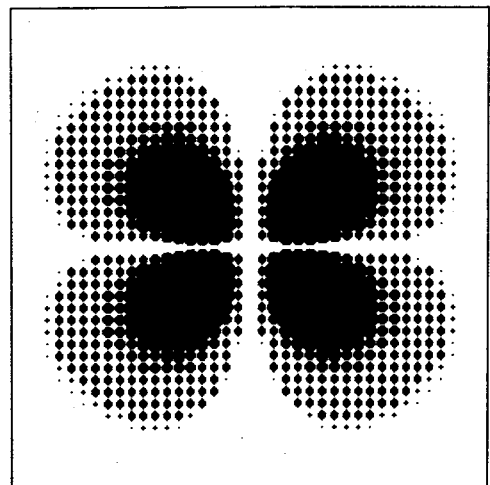


図4  $n=4, l=3, m=2$  の場合の水素原子の電子の確率密度分布図。

図3、図4では静的な印象を受けるが、実際は画面上に約1分かけて電子の観測結果の分布図が描かれるので、学習者は自分が観測を行いつつ電子を見ているという臨場感がある。

### §2.4 電子の分布図の構造と波動関数

波動関数の極座標での角度部分と動径部分を別々に分析することにより、電子の分布図がどのように生じるかを理解することができる。画面に図5のような説明が現われたのち、コンピュータに

**\* 密度の角度分布**

方位量子数  $l$  は原子内の電子の軌道角運動量に対する量子数であり、方位量子数  $m$  は角運動量ベクトルの  $Z$  成分の値に対する量子数である。

シュレーディンガー方程式を構成する関数の一つに、方位量子数  $l$  と磁気量子数  $m$  で決定されるルジャンドル関数がある。

このルジャンドル関数の二乗は、電子の存在する確率密度の角度分布を表す。

ここでは、ルジャンドル関数を用いて、いろいろな量子数の状態のときの密度分布と角度との関係を観察してみよう。

図5

よる実験に入る。学習者は図6のような画面に入って、 $l$  の変化による密度分布の概形を知ることができる。

$M$  を一定にしておいて、 $l$  を変化させてみよう。角度分布の様子はどのように変化するだろうか。

図6

今、次のように  $m=0$  を入力すると、図7のような各  $l$  に対する結果が表示される。 $l$  の変化に伴っ

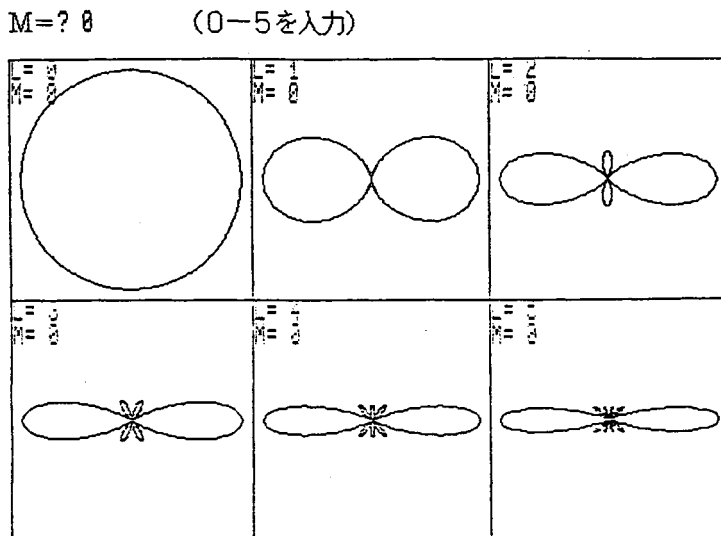


図7  $m=0$  で  $l$  を変化させた場合の電子の確率密度の角分布の変化の様子。

て角度分布が変化していく様子がわかる。学習者は興味があれば他の  $m$  の値を入れて、更に実験を続けることができる。1つの画面ができあがるのに約30秒かかり、学習者は目の前で動的に分布図を追うことができる。

次に、 $l$  を一定にして  $m$  を変化させ、各量子数と密度の角分布の関係に移る。前と同様に次の図

8のような画面が出て、 $l$ の入力を促す。

Lを一定にしておいて、Mを変化させてみよう。

図8

今、 $l=5$ を入力すると、図9の画面が現われる。画面は各 $l$ ごとに図が描かれ、しかも学習者が十分ついていけるスピードで表示されるので、 $m$ の変化に伴う角度分布の変化の様子が十分に観察できる。

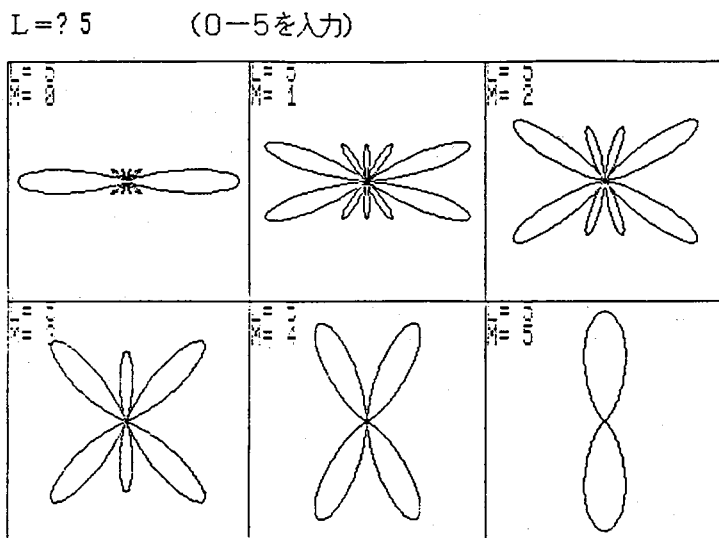


図9  $l=5$ で $m$ を変化させた場合の電子の確率密度の角分布の変化の様子。

### §3 QUANTUMの運用

物質科学概論等の授業では通常ミクロの世界の実体的理解に重点がおかれている。講義の中で確率波による描像を自己完結的に理解させるには多くの工夫を必要とする。このCAIプログラムQUANTUMは次の利点があり、授業を相補うものとして有効である。

- (1) 学習者自身が必要に応じて模擬実験をくり返すことができる。
- (2) グラフィックスで表示されるので学生が楽しく学習できる。
- (3) 観測体験をコンピュータ上で実現できる。

CAIシステムQUANTUMは全部で73画面から構成されており、プログラムはBASICで書かれている。プログラムはモジュール化されているため、拡張・追加が容易に行える。QUANTUM 1回の平均的な使用は約50分であるが、何回かくり返して使用することもでき理解をより一層深めることもできる。QUANTUMは独習システムであるが、学習者自らが教科書を併用してこのシステムを使用すれば一層の効果があがるものと思われる。

### §4 まとめ

我々はBASIC言語を用いて量子力学の確率波の概念を水素原子模型を通じて理解できる支援シ

システム QUANTUM を開発した。量子力学の特徴である観測過程をパーソナル・コンピュータ上で模擬実験することにより、水素原子模型の視覚的理解が可能となった。常識的・直観的な理解がむずかしい量子的世界の学習において、このCAIシステムが大変効果的であることが判明した。今後、量子論の波動性を経路積分の考えから理解するシステムを開発する予定である。

## 文 献

- 1) A. メシア, 量子力学 (小出・田村訳), 東京図書, 1972.
- 2) D. ボーム, 量子論 (高林・河辺・後藤・井上訳), みすず書房, 1964.
- 3) Proceedings of the International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics, ed. by S. Kamefuchi et al. (Physical Society of Japan, Tokyo, 1984).
- 4) S. プラント, H. D. ダーメン, コンピュータによる図説量子力学 (平田邦男訳), 共立出版, 1986.