

# 量子力学の基本法則 ( 1 )

filename=theorem080603.tex (R. Okamoto, Kyushu Institute of Technology)

( 本ファイルの活用法 : ♠ 印のついた項目は 1 回目の学習では勧めない。印の項目は 2 回目以降の学習で活用すること )

原子以下の世界の現象とその理解について、1900 年から 1923 年の間に、古典物理学では理解困難で、かつ衝撃的な実験的事実が明らかにされてきた。一方、特徴的な実験事実を説明するために仮説の導入など理論的には個別的な対応がなされた。しかし、結局、1925 年前後に定式化され、その後、無数の実験的、理論的な試練に耐えてきたことで、今日では量子力学の正しさを疑う研究者はほとんどいないであろう。量子力学は、原子分子の性質の説明から始まって、電子系、原子核・素粒子といった極微 ( ミクロ ) の世界の定量的な記述にことごとく成功してきた。直感的な理解がかなり困難であることも多いが、実は、量子力学はミクロな系だけではなくマクロな系も決める。

したがって、今日ではそれらの歴史的経過を捨象して、基本的には完成された理論体系として考えることが可能である。量子力学を種々の現象に適用するにはその基本的特徴 ( 基本的構成 ) を出発点にすることが有益であると考ええる。以下では量子力学の理論構造をいくつかの公理 ( または前提的条件 ) の形で整理する。[1, 2, 3, 4] 必要に応じて、理論的意味について補足する。

「 ( 中略 ) 量子力学の公理は試行と ( その多くは ) 錯誤の長い過程を経て導かれたものであり、創始者たちによる、かなりの手探りと推測に満ちている。公理に対する動機が常に明確でなくても驚かないで欲しい。専門家にとっても量子力学の基本公理は驚くべきものである。 ( 中略 ) 」 ( 文献 [4] の 112 ページ )

## 1 量子力学の公理による定式化

以下に述べる 7 つの公理 ( または基礎的原理 ) を理論的要請として予め認めることにする。これらの公理から矛盾なく導かれる結果が現実と整合的であれば、最初に設定した公理の正当性と理論全体の有用性を認めようとする立場を採用する。これはユークリッド幾何学や熱力学と同じ立場である。 ( 以下の説明では、簡単のために、断らない限り、粒子の位置は一次元の  $x$  座標のみを考える。2, 3 次元の場合は、演算子への置き換えをデカルト座標 ( 直交直線座標 ) で行った後、極座標に変換することに注意する。 )

公理 1 ( 量子状態と重ね合わせの原理 )

量子系の状態は ( 抽象的な ) ベクトルまたは関数 ( 波動関数 ) で表される。

ある状態 (  $\Psi$  ) は二つ以上の別の状態 (  $\Psi_1, \Psi_2, \dots$  ) の重ね合わせとして表すことができる。そして、重ね合わせの仕方は複数可能であり、一義的ではない。  $\{c_n, n = 1, 2, \dots\}, \{c'_n, n = 1, 2, \dots\}$  をそれぞれ一組の複素数とすれば

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 + \dots = \sum_n c_n \Psi_n, \quad (1.1)$$

$$= c'_1 \Psi'_1 + c'_2 \Psi'_2 + \cdots = \sum_n c'_n \Psi'_n \quad (1.2)$$

## 公理 2(波動関数の確率解釈)

波動関数  $\Psi(x, t)$  の絶対値の 2 乗は粒子の存在確率の密度に比例する。すなわち、 $x$  座標が  $(x, x + dx)$  の範囲内に存在する確率は  $|\Psi(x, t)|^2 dx$  に比例する。一般には波動関数は定数因子だけの任意性をもつ。粒子は空間のどこかに存在しなければならないから、その絶対値は次の規格化条件で決まる。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (1.3)$$

量子系の状態は任意の時刻、位置で確定しているが、その量子状態を表す波動関数は確率振幅 (probability amplitude) と呼ばれる。(ここで上付きの星印(\*)は特にことわらない限り、複素共役(ふくそきょうやく、complex conjugate)を意味する。すなわち、 $\Psi^*(x, t)$  は  $\Psi(x, t)$  の複素共役を意味する。以下同じ。)

## 公理 3(演算子としての物理量)

観測される物理量  $A$  は、ある特別な性質をもつ線形演算子  $\hat{A}$  で表される。

## 公理 4(量子化条件)

座標演算子  $\hat{x}$ 、運動量演算子  $\hat{p}_x$  は、(シュレディンガー形式(正準形式)においては) 次のような表現をとる。

$$\hat{x} \rightarrow x, \quad (1.4)$$

$$\hat{p}_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}. \quad (1.5)$$

これらの表現は次の関係式 正準交換関係 (canonical commutation relation) を満たす。

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad (1.6)$$

$$[\hat{x}, \hat{x}] = 0, \quad (1.7)$$

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_x] = 0. \quad (1.8)$$

ここで、二つの演算子の交換関係 (commutation relation) または交換子 (commutator) は次のように定義される。

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (1.9)$$

これらの関係式 (1.6、1.7、1.8) の意味について考える。これらの関係式 (1.6、1.7、1.8) は、それらの両辺に同じ波動関数を作用させるとして読むべきであることを注意する。例えば、式 (1.6) は、座標演算子と運動量演算子の積は別の演算子とみなせるが、その順序を変えると同じ結果をもたらさなく、その差は  $i\hbar$  という定数をか

けることになることを意味する。一方、式 ( 1.7、1.8 ) は座標演算子同士、運動量演算子同士の積の順を変えても同じ結果をもたらすことを意味する。

運動量演算子を波動関数に作用させると、その大きさは波動関数の空間的变化率に依存する。すなわち、量子力学における運動量 ( 演算子 ) は、粒子の質量かける速度という古典物理的な直観とは異なる意味があることに注意する。

#### 公理 5 ( 物理量の測定と演算子の期待値 )

物理量の測定によって得られる値は、量子状態が固有状態である場合には、その物理量に対応する演算子  $\hat{A}$  の特定の固有値  $a_n$  である。

$$\hat{A}\Phi_n(x, t) = a_n\Phi_n(x, t), (n = 1, 2, \dots). \quad (1.10)$$

固有状態ではない場合にはどうか。一般の量子状態は、物理量に対応する演算子を  $\hat{A}$ 、その  $n$  番目の固有値を  $a_n$ 、直交規格化された固有関数を  $\Phi_n(x, t)$  とすると、次のように表される。その展開係数の絶対値の 2 乗  $|C_n|^2$  は固有値  $a_n$  が測定される確率になる。

$$\Psi(x, t) = \sum_n C_n \Phi_n(x, t), \quad (1.11)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = 1, \quad (1.12)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_n^*(x, t) \Phi_{n'}(x, t) dx = \delta_{nn'}, \quad (1.13)$$

$$\sum_n |C_n|^2 = 1. \quad (1.14)$$

ここで、ある物理量の測定を多数回繰り返した場合に得られる平均値を考える。次のように定義される量を演算子  $\hat{A}$  の期待値と呼ぶ。

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \hat{A} \Psi(x, t) dx. \quad (1.15)$$

状態  $\Psi$  の重ね合わせの式を用いると

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_n |C_n|^2 a_n. \quad (1.16)$$

と書きなおせる。ここで、 $|C_n|^2$  は固有値  $a_n$  が測定される確率であるから、期待値が平均値の意味をもつことがわかる。物理量を毎回測定したときに得られる測定値は一般には確定していないことに注意する。状態、波動関数自体は物理量ではなく、直接に測定されることはない。

#### 公理 6 ( 閉じた量子系の時間発展を決定するシュレディンガー方程式 )

閉じた量子系の状態の時間変化はハミルトン演算子 ( ハミルトニアン ) により一義的に決定される。質量  $m$  の粒子が力のポテンシャル  $V = V(x, t)$  の下で、1次元 (  $x$  軸

方向に ) 運動している場合, 時間に依存するシュレディンガー方程式は次のように表される。

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (1.17)$$

$$\hat{H} \equiv \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \quad (1.18)$$

特に、ハミルトニアンが時間依存性をもたない場合 (  $V = V(x)$  )、波動関数  $\Psi(x, t)$  は、座標  $x$  だけの関数  $\psi(x)$  と時間  $t$  だけの関数  $T(t)$  の積

$$\Psi(x, t) = \psi(x)T(t) \quad (1.19)$$

に変数分離することができる。この関数形を時間に依存するシュレディンガー方程式 (1.17) に代入して、両辺を  $\Psi(x, t)$  で割ると

$$\begin{aligned} [\hat{H}\psi(x)]T(t) &= i\hbar \left[ \frac{\partial T(t)}{\partial t} \right] \psi(x) \\ \rightarrow \frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)} &= i\hbar \frac{\frac{\partial T(t)}{\partial t}}{T(t)} \end{aligned} \quad (1.20)$$

となる。すなわち、変数  $x, t$  のいずれにも依存しない定数となるので、その値を  $E$  とおくと

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\frac{\partial T(t)}{\partial t}}{T(t)} &= E \\ \rightarrow T(t) &= \exp(-iEt/\hbar), \end{aligned} \quad (1.21)$$

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \exp(-iEt/\hbar) = \psi(x) \exp(-i\omega t), \quad (\omega \equiv E/\hbar) \quad (1.22)$$

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.23)$$

という、時間に依存しないシュレディンガー方程式が導かれる。すなわち、式 ( 1.23 ) は、一定のエネルギー  $E$  をもつ定常状態  $\psi(x)$  に対するシュレディンガー方程式である。シュレディンガー方程式は座標変数についての 2 階微分方程式であるので、その具体的に解く場合、与えられた物理的状況において適当な境界条件などを考慮する必要がある。

公理 7 ( 同種粒子の識別不可能性と粒子交換に対する対称性 )

( 量子力学の対象になるような微視的な粒子のうち ) 同種の粒子は原理的に区別がつかない。複数の粒子系の波動関数については粒子の座標などの属性の交換に対して波動関数の符号が変化するか ( 反対称 ) 変化しない ( 対称 ) かのいずれかしかない。( 同じ交換を 2 度施すと元の状態にもどらなければならないため。 )

## 2 公理 1 への補足—量子状態とは何か ♠

量子状態のイメージは長さ 1 の列ベクトルである。状態を位置  $x$  や時間  $t$  の関数として表したときに、波動関数という。[  $\Psi(x, t)$  ] 古典力学 ( ニュートン力学 ) において、系の状態は粒子の位置と運動量の組で指定できるが、量子力学では状態は関数 ( 波動関数 ) で表される。以下、量子力学において考える状態を量子状態とよぶことにする。

重ねあわせの原理のイメージは、あるベクトルは二つ以上のベクトルの和として表現できることである。または、この原理を逆に考えれば、あるベクトルは分解でき、その合成 ( 分解 ) の仕方は複数存在することを含む。

## 3 公理 2 への補足—波動関数の諸性質と条件 ♠

### 3.1 波動関数の一般的性質

#### 1. 波動関数の複素数性

シュレディンガー方程式の解は、ポテンシャル  $V = V(x, t)$  が存在するために、自由粒子に対応する平面波とは一般に異なる。方程式そのものに純虚数が含まれていることから、波動関数は本質的に複素数である。この点は便法として複素数を使用することとは質的に異なる。波動関数は重ね合わせの原理によって、一般に他の関数の一次結合で表される場合もあるが、重ね合わせの係数も複素数になる場合があることに留意する。

したがって、波動関数  $\Psi(x, t)$  の位相を  $\Theta(x, t)$  とすると、複素数をその絶対値と偏角で表すことと同様に

$$\Psi(x, t) = |\Psi(x, t)|e^{i\Theta(x, t)} \quad (3.1)$$

と表わせる。量子現象の干渉性が現れる場合、この位相が本質的な役割を果たす。簡単のために、二つの波の重ね合わせによる確率振幅の絶対値の 2 乗の空間的依存性を考える。

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t) \\ &= |\Psi_1(x, t)|e^{i\theta_1(x, t)} + |\Psi_2(x, t)|e^{i\theta_2(x, t)} \\ \rightarrow |\Psi(x, t)|^2 &= |\Psi_1(x, t)|^2 + |\Psi_2(x, t)|^2 + 2|\Psi_1(x, t)||\Psi_2(x, t)|\cos[\Delta\theta(x, t)], \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\Delta\theta(x, t) \equiv \theta_1(x, t) - \theta_2(x, t). \quad (3.3)$$

ここで、純虚数の指数関数に対するオイラーの公式 ( $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ ) を用いた。位相差  $\Delta\theta(x, t)$  に応じて、確率密度が最大値と最小値との間で大きく変化すること

$$[|\Psi_1(x, t)| - |\Psi_2(x, t)|]^2 \leq |\Psi(x, t)|^2 \leq [|\Psi_1(x, t)| + |\Psi_2(x, t)|]^2 \quad (3.4)$$

が理解されよう。

## 2. 波動関数の一価性、連続性、有限性、2階微分可能性

シュレディンガー方程式は、一般に、座標について2階の微分方程式であるから、解である波動関数  $\Psi(x, t)$  は2階微分可能でなければならない。

### (a) ポテンシャルが有限の領域(場合)においては1階微分係数は連続である。

ここでは、実例として、1次元系の定常状態の場合について考える。質量  $m$  の粒子の位置座標  $x$  における、定常状態の波動関数を  $\psi(x)$ 、ポテンシャルを  $V(x)$  とすると、シュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.5)$$

となる。。この式の両辺をある点  $x = a$  をはさむ狭い領域において積分すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=a+\varepsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=a-\varepsilon} \right] = E \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \psi(x) dx - \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} V(x)\psi(x) dx \quad (3.6)$$

となる。ここで、 $V(x)$  が点  $x = a$  において、有限の大きさにとどまるような関数であれば、無限小の値  $\varepsilon$  がゼロに近づくとともに、右辺の第2項はゼロに近づく。また、右辺の第一項も、波動関数の値が有限なので、ゼロに近づく。したがって、

$$\frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=a+\varepsilon} = \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=a-\varepsilon} \quad (3.7)$$

が得られ、波動関数の1次微分係数は連続になる。すなわち、境界面で、波動関数はなめらかである。

### (b) ポテンシャルが有限ではない場合、波動関数の1次微分係数は不連続になる

ポテンシャルがデルタ関数型、 $V(x) = V_0\delta(x)$  ( $V_0$ : 一定) であれば、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=a+\varepsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=a-\varepsilon} \right] = -V_0\psi(a) \quad (3.8)$$

となり、この場合、波動関数の1次微分係数は連続にはならず、有限のギャップがあることに注意しよう。

## 3. 波動関数の、大局的位相についての任意性

ある波動関数  $\Psi(x, t)$  は、 $\theta$  を任意の実数とすると、位相因子  $e^{i\theta}$  をかけても、 $\theta$  の値にもかかわらず、同じ確率密度を与えるので、等価である。あるいは、状態は複素空間のベクトルと考えた場合、そのベクトルの大きさの二乗をあらわすベクトルの内積は位相因子  $e^{i\theta}$  をかけても同じであると表現してもよい。(このことは、波動関数の位相が物理的意味を持たないということを必ずしも意味しない。空間的に変化しない位相(大局的位相)は物理的な意味はないが、空間的に変化する位相が現れる場合には、位相は重要な物理的な情報を与えることがある。)

## 4. 波動関数は2乗可積分であるべきこと [5, 1]

波動関数の絶対値の2乗は確率密度に比例する(公理2)ので、 $x_1 < x < x_2$  の範囲で時刻  $t$  において、粒子が存在する確率  $P(x_1, x_2)$  は

$$P(x_1, x_2) = N \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (3.9)$$

で与えられる。ここで、 $N$  は  $x$  に依存しない定数である。この定数  $N$  をどうしてきめるか？ それには、粒子がどこかに存在する確率の合計は 1 であること、すなわち次の式 (規格化条件) が成立することを要請すればよい。

$$1 = N \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (3.10)$$

さて、式 (3.10) の積分は一般には収束しない場合もあるだろう。もしそうであれば、定数  $N$  は 0 でなければならない。そして式 (3.9) から、あらゆる有限の間隔で粒子が存在する確率もまた 0 になり、物理的に意味のないものとなる。したがって、シュレディンガー方

程式の解である波動関数  $\Psi(x, t)$  は、すべての時刻  $t$  において、位置  $x$  について、2 乗可積分 (square-integrable, quadratically integrable) でなければならないという重要な結論が得られる。 ”2 乗可積分” とは、式 (3.10) の積分が収束するということである。ゆえに、波動関数  $\Psi(x, t)$  が 2 乗可積分であると仮定しよう。すると波動関数  $\Psi(x, t)$  をあらためて、次式により定義できる。

$$\Psi_n(x, t) \equiv \sqrt{N} \Psi(x, t). \quad (3.11)$$

この波動関数  $\Psi_n(x, t)$  は次のようなきれいな性質をもっている。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1, \quad P(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (3.12)$$

すなわち、波動関数の絶対値の 2 乗は確率密度に等しい。この第一式を満たす波動関数は規格化された波動関数といわれる。

ここで、式 (3.10) で定義された定数  $N$  が、時間  $t$  に依存するかどうか調べる必要がある。波動関数  $\Psi(x, t)$  は時間に依存するシュレディンガー方程式の解である。すなわち、量子的粒子の質量を  $m$ 、それに作用するポテンシャル  $V(x)$  とすれば

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (3.13)$$

を満たす。そして、新しい波動関数  $\Psi_n(x, t)$  は、定数  $N$  が時間に依存しなければ、この方程式 (3.13) の解である。もし波動関数  $\Psi(x, t)$  が式 (3.13) を満たし、 $x$  が  $+\infty$  または  $-\infty$  に近づいたとき、”十分に急速に” 0 になるならば、次式が得られる。

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 0. \quad (3.14)$$

ここで、”十分に急速に” ということは、とりわけ  $\Psi(x, t)$  が 2 乗可積分であることを意味する。式 (3.14) を証明するために、被積分関数を時間について偏微分する。

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 = \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} \Psi(x, t) + \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}. \quad (3.15)$$

式 (3.13) の両辺の複素共役をとると、次式になる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^*(x, t) + V(x) \Psi^*(x, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x, t). \quad (3.16)$$

ここで、 $V(x)$  が実関数であると仮定した。このことは、 $V(x)$  が、“対応する”古典的な問題のポテンシャルに相当するのだから当然である。ポテンシャルが実数であることは今の議論に重要であって、シュレディンガー方程式ではいつも実数と仮定されている。式 ( 3.13 ) と ( 3.16 ) を、式 ( 3.15 ) の右辺に代入すると、

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \Psi(x, t) \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \right] \quad (3.17)$$

が得られ、これを

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \Psi(x, t) \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \right]_{-\infty}^{+\infty}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

したがって、もし波動関数の ( $x$  に関する) 導関数が有界であれば、波動関数が無限遠で 0 になると、仮定したので、式 ( 3.18 ) の右辺は 0 となる。それゆえ式 ( 3.14 ) が成立する。式 (3.10) よりただちに、 $N$  は  $t$  に関係ない定数であることになる。したがって、新しい関数  $\Psi_n(x, t)$  はまた正しい波動関数、すなわちシュレディンガー方程式 ( 3.13 ) の解である。(これらの重要な結論はまた 3 次元の場合にも成り立つ。その証明は一次元の場合と全く同じである。)

しかしながら、「すべての物理的に意味のある波動関数は 2 乗可積分でなければならない」という我々の確かな結論が問題となる場合が知られている。

- (a) 自由粒子の量子状態としての平面波 (単色平面波) は  $\exp(ikx - iEt/\hbar)$  の形の波動関数を持ち、2 乗可積分ではなく、したがって厳密には 1 に規格化できないことは明らかである。 $\exp(ikx)$  という形の、はっきりと定まった運動量の値  $p = \hbar k$  をもつ波は、実は量子力学的に実現可能な運動状態を表さないという結論にならざるを得ない。(位置と運動量についての不確定性関係からも平面単色波について、運動量が確定していれば位置は確定しないという、上記と矛盾しない結論が導かれる。)
- 他方、 $x$  が  $+\infty$  または  $-\infty$  に近づくにしたがって、もしその波動関数が 0 に近づくならば、 $x$  軸上で極く大きな間隔にわたって  $\exp(ikx)$  という形の波を考えることは可能である。したがって、我々が”はっきりと定まった運動量の値  $p = \hbar k$  をもつ波”を議論する際に、波はどこでも  $\exp(ikx)$  の形であることではないとすれば、この困難を解決できる。すなわち、波動関数は無限遠で 0 に近づかなければならないが、問題になっている領域を含む  $x$  軸の極大きな区間で、この形であると仮定するのである。このようにして、“平面波 (単色平面波)”は “ほとんど平面波 (単色平面波)”であると理解すべきである。このように理解することにより、量子力学についてのほとんどすべての教科書で行われているように、因子  $\exp(ikx)$  という形の波について、安全に議論することができる。すなわち、(厳密には) 規格化されていない平面波は規格化されている波の極限の場合と見なすのである。
- (b) 原子核のアルファ崩壊の理論的説明の際に、1928 年、ガモフ ( G.Gamow ) により導入された量子共鳴状態の波動関数は 2 乗可積分ではなく、したがって厳密には 1 に規格化できないことが知られている。

量子的状態にある粒子は幾何学的な一点に存在することはない。この粒子の場所的存在についていえることは、この粒子がある空間的領域に存在する確率だけである。

### 3.2 確率密度、確率流れ密度と連続の方程式

電磁気学の法則に、ある系における電荷の時間保存を意味する連続の方程式

$$\frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (3.19)$$

がある。ここで  $j_x$  は電流密度 (= 単位断面積あたりの系から外向きの電流) で  $\rho$  は電荷密度 (= ある系における単位体積あたりの電荷) である。この関係式は、任意の時刻、任意の場所において、電荷密度が増加 (減少) する場合には、外から系に電流が流れ込む (系から外に流れ出る) ことを意味する。

以下のように、類似の方程式が波動関数について導出される。まず、電荷密度に対応して、存在確率密度  $P$

$$P \equiv \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) \quad (3.20)$$

を定義する。次に、ポテンシャル  $U(x)$  の値は実数であるとして、時間依存のシュレディンガー方程式とその複素共役を考える。

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x, t)\Psi \right], \quad (3.21)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + U(x, t)\Psi^* \right]. \quad (3.22)$$

式 (3.20) の両辺を時間  $t$  で微分して、式 (3.21, 3.22) とその複素共役を代入すると

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial P}{\partial t} &= \left( i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) \\ &= -\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + U(x, t)\Psi^* \right] \Psi + \Psi^* \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x, t)\Psi \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (3.23)$$

が得られる。ここで、確率流れ密度 (probability current density) ベクトルの  $x$  成分を次式で定義する。

$$\begin{aligned} J_x &\equiv \frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Psi^* \right] = \frac{\hbar}{2mi} \left[ \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Psi^* - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right] \\ &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[ \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] \\ &= \text{Re} \left[ \Psi^* \frac{\hbar}{im} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] = \text{Re} \left[ \Psi^* \frac{\hat{p}_x}{m} \Psi \right], \quad (\hat{p}_x \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}). \end{aligned} \quad (3.24)$$

最後の式の表現は確率流れ密度の物理的意味を理解しやすくするために記した。電流密度ベクトルの  $x$  成分に対応する演算子は  $(-e)J_x$  といえる。ここで、 $-e$  は電子の電荷である。

式 ( 3.24 ) を式 ( 3.23 ) に代入すると存在確率の保存則 ( 連続の方程式 )

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} = 0 \quad (3.25)$$

が得られる。この関係式は、任意の時刻、任意の場所において、確率密度が増加 ( 減少 ) する場合には、外から系に確率流れ密度が入ること ( 系から外に流れ出ること )、すなわち、粒子数の保存を意味する。

## 4 公理 3 への補足—量子力学で対象となる演算子とその性質



### 4.1 演算子一般の基本的性質

演算子は状態 ( 波動関数 ) に作用して、一般には、別の状態 ( 波動関数 ) に変換する。  
( 演算子の状態への作用のイメージ : あるベクトルに行列をかけて別のベクトルに変換する ) 演算子  $\hat{A}$  が位置演算子  $\hat{x}$  であれば、その波動関数への作用は単に  $x$  をかければよい。

$$\hat{x}\Psi(x, t) = x\Psi(x, t). \quad (4.26)$$

しかし、運動量演算子の  $x$  成分  $\hat{p}_x$  の場合にはその波動関数への作用は

$$\hat{p}_x\Psi(x, t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \quad (4.27)$$

のように微分演算子になる。(  $\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$ ,  $h$  : プランク定数 ).

量子力学で対象となる演算子の代数的性質をまとめる。

#### 線形演算子

演算子  $\hat{A}$  が線形であるというのは、状態 ( または波動関数 ) が、例えば二つの状態の線形結合で表されているとき、

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2, \quad (4.28)$$

それぞれ  $\Psi_1, \Psi_2$  のそれぞれに  $\hat{A}$  を作用させてから、線形結合を作ってよいことを意味する。すなわち

$$\hat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1(\hat{A}\Psi_1) + c_2(\hat{A}\Psi_2) \quad (4.29)$$

が成立する。演算子の線形性は量子状態、波動関数の重ね合わせの原理と対応している。

#### 演算子の和

二つの演算子  $\hat{A}, \hat{B}$  の和  $\hat{A} + \hat{B}$  は

$$(\hat{A} + \hat{B})\Psi(x, t) = \hat{A}\Psi(x, t) + \hat{B}\Psi(x, t) \quad (4.30)$$

で定義される。もちろん、 $\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}$  である。

## 演算子と定数の積

定数  $c$  と演算子  $\hat{A}$  の積  $c\hat{A}$  は

$$(c\hat{A})\Psi(x, t) = c(\hat{A}\Psi(x, t)) \quad (4.31)$$

で定義される。右辺は  $\Psi(x, t)$  とは一般には異なる波動関数  $\hat{A}\Psi(x, t)$  の  $c$  倍である。

## 演算子の積と演算子の関数

二つの演算子  $\hat{A}, \hat{B}$  の積  $\hat{A}\hat{B}$  は

$$(\hat{A}\hat{B})\Psi(x, t) = \hat{A}(\hat{B}\Psi(x, t)) \quad (4.32)$$

で定義される。左辺は演算子積  $\hat{A}\hat{B}$  を波動関数  $\Psi(x, t)$  に作用させて得られる新しい波動関数、右辺はまず  $\hat{B}$  を作用させて得られる別の波動関数  $\hat{B}\Psi(x, t) \equiv \chi(x, t)$  に、さらに  $\hat{A}$  を作用させて得られる波動関数  $\hat{A}\chi(x, t)$  を意味する。

同じ演算子に繰り返しの場合には

$$\hat{A}\hat{A} = \hat{A}^2, \hat{A}\hat{A}\hat{A} = \hat{A}^3, \dots \quad (4.33)$$

のように書く。

以上のように演算子の和、積を定義すれば、演算子  $\hat{A}$  の関数  $f(\hat{A})$  もまた、演算子とみなすことができる。古典的な変数  $x$  の関数  $f(x)$  はある展開係数  $\{c_n; n = 0, 1, 2, \dots, \infty\}$  を用いてテーラー展開される。

$$f(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n. \quad (4.34)$$

変数が演算子  $\hat{A}$  の関数  $f(\hat{A})$  も演算子となる。

$$f(\hat{A}) = c_0 + c_1\hat{A} + c_2\hat{A}^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{A}^n. \quad (4.35)$$

例えば、演算子  $\hat{A}$  の指数関数は

$$e^{\hat{A}} = 1 + \hat{A} + \frac{1}{2!}\hat{A}^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\hat{A}^n \quad (4.36)$$

と表される。

## 演算子の非可換性

次の式で交換関係（交換子、commutator）を定義する：

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (4.37)$$

一般には、演算子の積の順序は一般に非可換である。[イメージ：行列の積は一般に非可換である] すなわち、演算子  $\hat{A}, \hat{B}$  の積の順序を交換すると（複合）演算子とし

ては異なる効果をもたらす。この事実は数学的には交換関係がゼロではないとして表現される。( $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ .) 特に、座標  $\hat{x}$  とその正準共役運動量  $\hat{p}_x$  は正準交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad (4.38)$$

を満たす。これは特に重要な関係式である。次のようにして証明される。 $\Psi(x, t)$  を任意の波動関数とする。

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\Psi(x, t) = \hat{x}\hat{p}_x\Psi(x, t) - \hat{p}_x\hat{x}\Psi(x, t), \quad (4.39)$$

$$\hat{x}\hat{p}_x\Psi(x, t) = \hat{x}(\hat{p}_x\Psi(x, t)) = \frac{\hbar}{i}x\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x}, \quad (4.40)$$

$$\hat{p}_x(x\Psi(x, t)) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi(x, t)) = \frac{\hbar}{i}\Psi(x, t) + \frac{\hbar}{i}x\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x}, \quad (4.41)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\Psi(x, t) = i\hbar\Psi(x, t). \quad (4.42)$$

ここで  $\Psi(x, t)$  は任意であるから、式 (4.38) が成立する。

また、三つ以上の演算子  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$  の間の交換関係

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]. \quad (4.43)$$

が成立する。

有用な演算子の公式

逆演算子が存在する、そして互いに交換しない2個の演算子  $\hat{A}, \hat{B}$  を考えたとき、次の恒等式が成り立つ。

$$\frac{1}{\hat{A}} - \frac{1}{\hat{B}} = \frac{1}{\hat{A}}(\hat{B} - \hat{A})\frac{1}{\hat{B}} = \frac{1}{\hat{B}}(\hat{B} - \hat{A})\frac{1}{\hat{A}} \quad (4.44)$$

これはただ、演算子の順序を考慮しながら、左辺を通分したに過ぎない！ こんな単純なことであるにもかかわらず、この公式が理論的推論に絶大な威力を発揮する。例えば、文献 [9]。

## 4.2 エルミート演算子とその基本的な性質

演算子のエルミート性

演算子  $\hat{A}$  のエルミート共役演算子  $\hat{A}^\dagger$  は任意の二つの状態 (波動関数  $\Psi(x, t), \Phi(x, t)$ ) に対して

$$\langle\Psi|\hat{A}^\dagger|\Phi\rangle \equiv \left[\int_{-\infty}^{\infty}\Phi^*(x, t)\hat{A}\Psi(x, t)dx\right]^*, \quad (4.45)$$

$$(\equiv [\langle\Phi|\hat{A}|\Psi\rangle]^*). \quad (4.46)$$

として定義される。演算子  $\hat{A}$  が次の式を満たす場合、エルミート演算子であるという。

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}. \quad (4.47)$$

ここで、演算子の性質は、一般には、それ自身だけでは決まらずに、関数（状態ベクトル）への作用という形で、すなわち、行列要素の性質として決まることに注意する。実用性のために複数の表現を与える。

$$\langle \Psi | \hat{A}^\dagger | \Phi \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Phi \rangle, \quad (4.48)$$

$$[\langle \Phi | \hat{A} | \Psi \rangle]^* = \langle \Psi | \hat{A} | \Phi \rangle, \quad (4.49)$$

$$\left( \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x, t) \hat{A} \Psi(x, t) dx \right)^* = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \hat{A} \Phi(x, t) dx. \quad (4.50)$$

なぜ物理量に対応する演算子がエルミート性を持たねばならないかを具体的な例で確認してみよう。演算子はある時刻で考えるとして、時間に依存しない、任意の波動関数を  $\psi_1(x), \psi_2(x)$  とする。波動関数の性質として、微分可能で、かつ無限遠方ではゼロに収束するという性質を持つと仮定する

位置演算子  $\hat{x}$  の場合

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \hat{x} \psi_2(x) dx &= \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^*(x) \hat{x} \psi_1(x) dx \right]^* = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2(x) x \psi_1^*(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) x \psi_2(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \hat{x} \psi_2(x) dx. \end{aligned} \quad (4.51)$$

よって、 $\hat{x}^\dagger = \hat{x}$  となる。

運動量演算子  $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$  の場合

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \left[ \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right]^\dagger \psi_2(x) dx &= \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_1(x) dx \right]^* \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2(x) \frac{\hbar}{-i} \frac{d\psi_1^*(x)}{dx} dx \\ &= \left[ \psi_2(x) \frac{\hbar}{-i} \psi_1^*(x) \right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi_2(x)}{dx} \frac{\hbar}{i} \psi_1^*(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \left[ \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right] \psi_2(x) dx, \\ \rightarrow \left[ \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right]^\dagger &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

ここで、 $x \rightarrow \pm\infty$  のとき、 $\psi_1(x), \psi_2(x) \rightarrow 0$  であることを用いた。このように、運動量演算子は純虚数でなければエルミート演算子にはならないことがわかる。

さらに、 $\Psi = \Phi$  とすれば、

$$[\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle]^* = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \quad (4.53)$$

となり、エルミート演算子  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$  の期待値は実数になることがわかる。この性質は物理量に対応する演算子がエルミート性をもつことを論理的に保障していることになる。

エルミート演算子の固有値は実数であること。

エルミート演算子  $\hat{A}$  の固有値を  $a_n$ , 対応する固有関数を  $\phi_n(x)$  とする。エルミート演算子の性質  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$  より

$$\hat{A}\phi_n = a_n\phi_n, \quad (4.54)$$

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \hat{A}\phi_n(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) a_n \phi_n(x) dx. \quad (4.55)$$

ここで式 (4.55) の左辺は, エルミート演算子の定義を用いて、

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\phi_n^*(x) \hat{A}\phi_n(x))^* dx = a_n^* \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \phi_n(x) dx \quad (4.56)$$

と書きなおされる。式 (4.56) と式 (4.55) の右辺を比較すると

$$a_n^* = a_n \quad (4.57)$$

となり、エルミート演算子の固有値は実数であることが証明された。

任意の複素数を  $c$ 、2つのエルミート演算子を  $\hat{A}, \hat{B}$  とすると、

$$(c\hat{A})^\dagger = c^* \hat{A}^\dagger \quad (4.58)$$

$$(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \quad (4.59)$$

が成立する。

### エルミート演算子の固有関数系の直交性

エルミート演算子  $\hat{A}$  の固有値を  $a_n$ , それに属する固有関数を  $\phi_n(x)$  とする。最初に、エルミート演算子が離散的な固有値だけをもつ場合を考える。

$$\hat{A}\phi_n(x) = a_n\phi_n(x). \quad (4.60)$$

この式の両辺に別の固有関数  $\phi_m$  の複素共役をかけて積分すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \hat{A}\phi_n(x) dx = a_n \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx. \quad (4.61)$$

ここで左辺はエルミート演算子の性質などを用いて次のように書きなおせる。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \hat{A}\phi_n(x) dx &= \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \hat{A}^\dagger \phi_m(x) dx \right]^* = \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \hat{A}\phi_m(x) dx \right]^* \\ &= \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) a_m \phi_m(x) dx \right]^* = a_m \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx \end{aligned} \quad (4.62)$$

したがって、

$$(a_n - a_m) \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = 0. \quad (4.63)$$

ここで、2つの固有値が異なる、すなわち、 $a_n \neq a_m$  のとき、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = 0 \quad (4.64)$$

となる。すなわち、エルミート演算子の(異なる固有値に対応する)固有関数系  $\{\phi_n(x); n = 1, 2, \dots\}$  は直交する。波動関数の確率解釈を考慮して、直交規格化された固有関数

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (\delta_{mn} : \text{Kronecker のデルタ記号}) \quad (4.65)$$

がしばしば使用される。

#### エルミート演算子の固有関数系の完全性

エルミート演算子  $\hat{A}$  がオブザーバブルになるのは  $\hat{A}$  の固有関数(固有ベクトル)の重ね合わせによって作られる、規格化定数(ノルム)が有限なベクトル空間がヒルベルト空間に一致する場合である。この数学的な表現は以下に説明するように、完全性か(完備性、閉包性ともいう)で表現される。[16] エルミート演算子  $\hat{A}$  に対応する物理量の測定過程が現実存在するためには  $\hat{A}$  の固有関数の組が完全性を満たさなければならないということが、この物理的な意味である。[7]

最初に、エルミート演算子が離散的な固有値だけをもつ場合を考える。任意の関数  $\psi(x)$  が直交規格化された固有関数  $\{\phi_n(x); n = 1, 2, \dots\}$  により展開されるとする。

$$\psi(x) = \sum_n c_n \phi_n(x). \quad (4.66)$$

この関係式の両辺に固有関数の複素共役を左からかけて積分すると

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \psi(x) dx \quad (4.67)$$

が得られる。この結果(4.67)を式(4.66)に代入すると

$$\psi(x) = \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x') \psi(x') dx' \phi_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \sum_n \phi_n^*(x') \phi_n(x) \right) \psi(x') dx' \quad (4.68)$$

が得られる。この関係式が任意の関数  $\psi(x)$  に対して成立するためには

$$\sum_n \phi_n^*(x') \phi_n(x) = \delta(x - x') \quad (4.69)$$

が成立しなければならない。これを固有関数系  $\{\phi_n(x); n = 1, 2, \dots\}$  の完全性(または完備性, completeness)という。ここで、 $\delta(x)$  はディラックのデルタ関数であり、Kronecker のデルタ記号を連続変数の場合に拡張したものを見なすことができる。

デルタ関数の定義の仕方はいくつかあるが、ここでは階段関数  $\theta(x)$  と実際的な計算で有用な指数関数型の両方を与えておく。

$$\theta(x) \equiv \begin{cases} 1 & \text{if } 0 \leq x, \\ 0 & \text{if } 0 > x. \end{cases} \quad (4.70)$$

を用いる。この階段関数の微分によってデルタ関数は

$$\delta(x) \equiv \frac{d\theta(x)}{dx}. \quad (4.71)$$

と定義される。デルタ関数は指数関数によって、次のようにも表される。

$$\delta(x - x') \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(x - x')k] dk (= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(x-x')k} dk). \quad (4.72)$$

デルタ関数は次のような性質をもつ。

$$\delta(x) = \delta(-x), \quad (4.73)$$

$$\delta(x) = 0 \quad (x \neq 0), \quad (4.74)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1, \quad (4.75)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0). \quad (4.76)$$

ここで  $f(x)$  は任意の関数である。

可換な演算子と同時固有関数

今、2つの演算子  $\hat{A}, \hat{B}$  が可換である ( $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ) として、 $\hat{A}$  の固有値を  $a$ 、対応する固有関数を  $\phi$  とする。

$$\hat{A}\phi(x) = a\phi(x) \quad (4.77)$$

$$\rightarrow \hat{A}\hat{B}\phi(x) = \hat{B}\hat{A}\phi(x) = \hat{B}[a\phi(x)] = a\hat{B}\phi(x) \quad (4.78)$$

$$\rightarrow \hat{A}[\hat{B}\phi(x)] = a[\hat{B}\phi(x)]. \quad (4.79)$$

ここで

$$\hat{B}\phi(x) \equiv \psi(x) \quad (4.80)$$

を導入すると、式 (4.79) は次のように書きなおせる。

$$\hat{A}\psi(x) = a\psi(x). \quad (4.81)$$

もし、式 (4.77) を満たす固有関数がひとつしかないとすれば、 $\phi(x)$  と  $\psi(x)$  は比例しなければならないので、

$$\psi(x) = b\phi(x), \quad (b: \text{定数}) \quad (4.82)$$

とかける。式 (4.81, 4.82) より、

$$\hat{A}\psi(x) = \hat{A}[b\phi(x)]. \quad (4.83)$$

ここで左辺と右辺はそれぞれ以下のように書き直せる。

$$\hat{A}\psi(x) = \hat{A}[\hat{B}\phi(x)] = \hat{B}\hat{A}\phi(x) = \hat{B}[a\phi(x)] = a[\hat{B}\phi(x)], \quad (4.84)$$

$$\hat{A}[b\phi(x)] = b[\hat{A}\phi(x)] = ba\phi(x). \quad (4.85)$$

両辺を比較すると

$$\hat{B}\phi(x) = b\phi(x). \quad (4.86)$$

このように、演算子  $\hat{A}$  の固有関数  $\phi(x)$  は、 $\hat{A}, \hat{B}$  が可換ならば、同時に、演算子  $\hat{B}$  の固有関数でもある。

[イメージ：可換な行列は同時対角化可能]

逆に、非可換な演算子には同時固有関数は存在しない。ここで、公理 ( 物理量の測定値と演算子の期待値 ) を用いれば可換な演算子に対応する 2 つの測定の順序を入れ替えても、測定結果は同じであることといえる。逆に、非可換な演算子に対応する物理量の測定の順序を入れ替えると、最終測定結果は異なることになる。

### 4.3 自己共役演算子とエルミート 演算子 ♠♠

従来、物理量の測定値が実数であるためには、演算子は線形で、エルミート性をもつことが必要であると言われてきたが、正しくは自己共役演算子 (self-adjoint operator) であることが明らかになってきている。[8, 6, 1]

1. 自己共役演算子とは、量子力学の公理体系の数学的な基礎としてのヒルベルト空間上の線形演算子の中でも特別なクラスに属する演算子であり、他の一般の演算子に比べて著しい性質を備えている。例えば、一般に、演算子にはスペクトルとよばれる複素数の部分集合が対応するが、自己共役演算子のスペクトルは実数の閉部分集合である。
2. 量子系の状態はヒルベルト空間の零ではないベクトルによって記述され、物理量は同じヒルベルト空間上で働く自己共役演算子によって表される。
3. ヒルベルト空間が有限次元の場合、自己共役演算子は、行列表現をすれば、エルミート行列によって表される演算子である。
4. ヒルベルト空間が無限次元の場合、自己共役演算子は、行列表現をすれば、有限次元エルミート行列のある種の無限次元版で表される演算子である。
5. 有限次元エルミート行列はユニタリ行列によって対角化が可能であり、固有値と固有空間への射影演算子を用いて、スペクトル分解できる。
6. ヒルベルト空間が無限次元であっても、自己共役演算子に対しては、このスペクトル分解の一般化が成立し、それはスペクトル定理と呼ばれる。この定理はヒルベルト空間論における最も深くかつ重要な定理のひとつである。スペクトル定理のおかげで、物理量が連続スペクトルをもつ場合にも、量子力学における確率解釈の厳密な定式化が可能になる。この意味で、スペクトル定理は量子力学のもっとも深い本質に関わっている。

厳密には、演算子の性質はその関数形で表される作用だけではなく、演算子が作用する関数空間である定義域 ( domain of definition ) まで指定して決まる。したがって、ある演算子  $\hat{A}$  が自己共役 ( self-adjoint ),  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$  であることを示すには、それぞれの定義域である  $D(\hat{A})$  と  $D(\hat{A}^\dagger)$  が同じであること、作用が同じであることの両方を示す必要がある。

## 5 公理 4 への補足－演算子の非可換性と不確定性関係 ♠

### 5.1 物理量の標準偏差

エルミート演算子  $\hat{A}$  とその期待値  $\langle \hat{A} \rangle$  とのずれの演算子  $\Delta \hat{A}$  を定義する：

$$\Delta \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle, (\Delta \hat{A})^\dagger = \Delta \hat{A}. \quad (5.1)$$

状態  $\psi(x)$  における物理量  $\hat{A}$  の標準偏差  $\Delta A$  ( standard deviation ) を次の式で定義する。

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &\equiv \langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 - 2\langle \hat{A} \rangle \hat{A} + \langle \hat{A} \rangle^2 \rangle \\ &= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A}^2 \psi(x) dx - \left( \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx \right)^2. \end{aligned} \quad (5.2)$$

ここで、演算子の期待値は数であることを用いた。物理量  $\hat{A}$  の固有値を  $a_n$  と直交規格化された固有関数を  $\psi_n(x)$ , ( $n = 1, 2, \dots$ ) とする。簡単のために、演算子は特定の時刻において考えることにして、波動関数の時間依存性のことを考えないことにする。このとき、

$$\hat{A} \psi_n(x) = a_n \psi_n(x). \quad (5.3)$$

系が固有状態 (eigen state) であれば、標準偏差は明らかにゼロである。

$$(\Delta A)_n^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle_n - (\langle \hat{A} \rangle_n)^2 = a_n^2 - (a_n)^2 = 0. \quad (5.4)$$

しかし、系が固有状態ではなく、一般の状態の場合

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x), \quad \left( \sum_n |c_n|^2 = 1 \right). \quad (5.5)$$

標準偏差はゼロではなくなる。

$$(\Delta A)^2 = \sum_n |c_n|^2 a_n^2 - \left( \sum_n |c_n|^2 a_n \right)^2 \neq 0. \quad (5.6)$$

### 5.2 非可換演算子と不確定性関係

すでに述べたように、

1. 2つの演算子  $\hat{A}, \hat{B}$  は一般には非可換である,
2. 非可換な演算子には同時固有状態はない。

一般に、2つのエルミート演算子が非可換

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \equiv i\hat{C} \quad (5.7)$$

であれば、2つの物理量の標準偏差の積は次式 ( 不確定性関係 ) を満たす。

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle| = \frac{|[\hat{A}, \hat{B}]|}{2}. \quad (5.8)$$

可換ではない演算子に対する物理量は同時には精確には決めることができないことを意味する。片方ずつは精確に決められるが。

{ 証明 }

期待値は数であることを用いると、ずれの演算子の交換関係は

$$[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \quad (5.9)$$

となる。任意の実数のパラメタ  $\alpha$  を含む積分 (  $= (\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})\psi(x)$  というベクトルの内積 )

$$I(\alpha) \equiv \int |\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})\psi(x)|^2 dx \geq 0 \quad (5.10)$$

を考え、これを書き直すと、

$$\begin{aligned} I(\alpha) &= \int [(\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})\psi(x)]^* [(\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})\psi(x)] dx \\ &= \int \psi^*(x) [\alpha\Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B}] [\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B}] \psi(x) dx \\ &= \int \psi^*(x) \{ \alpha^2(\Delta\hat{A})^2 - i\alpha\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} + i\alpha\Delta\hat{B}\Delta\hat{A} + (\Delta\hat{B})^2 \} \psi(x) dx \\ &= \int \psi^*(x) \{ \alpha^2(\Delta\hat{A})^2 + \alpha\hat{C} + (\Delta\hat{B})^2 \} \psi(x) dx \\ &= \alpha^2 \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle + \alpha \langle \hat{C} \rangle + \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle \\ &= \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle \left[ \alpha + \frac{\langle \hat{C} \rangle}{2\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle} \right]^2 + \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle - \frac{\langle \hat{C} \rangle^2}{4\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

ここで、 $I(\alpha)$  を最少にする (=第1項をゼロにする)  $\alpha$  の値を  $\alpha_{\min}$  とすると

$$\alpha_{\min} = -\frac{\langle \hat{C} \rangle}{2\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle}. \quad (5.12)$$

ここで

$$\begin{aligned} 0 \leq I(\alpha_{\min}) &= \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle - \frac{\langle \hat{C} \rangle^2}{4\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle}, \\ \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle &\geq \frac{\langle \hat{C} \rangle^2}{4}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

標準偏差の定義を用いて

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{|[\hat{A}, \hat{B}]|}{2}. \quad (5.14)$$

証明終わり。

特に、位置と運動量の交換関係 ( $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ ) に適用すると

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar \quad (5.15)$$

という重要な不確定性関係が得られる。ここで問題にしている不確定性とは量子的状態そのものが本質的にもつ不確定性であって、測定の反作用 ( とその結果、生じる誤差 ) ではないことを注意する。[1]

ここで、不確定性関係の意味を考えてみよう。位置を精確に決める（または狭いところに粒子を閉じ込める）と運動量の不確定性は非常に大きくなる（または運動量が非常に大きくなる）。逆に、運動量を精確に決めようとする、どこにいるのか決めることができない。位置と運動量の不確定性関係がどうして生じるのか、別の方法で定性的に考えることもできる。粒子を局在させるときは存在確率 1 を可能にするためには波動関数はより大きな値をとる必要がある。波動関数の座標についての微分係数は大きくならざるをえない。ところが、運動量演算子は波動関数の位置座標についての微分係数（空間的变化率）に比例する。したがって、粒子を局在させると運動量が大きくならざるをえなくなる。

## 6 公理 5 についての補足 ♠

文献 [1, 4] を参照。

## 7 公理 6 についての補足 ♠

1. 閉じた量子系について：考察の対象になっている系が、他の系とは一切、相互作用しないとみなせるような場合、その系を閉じた系ということにする。そうではない場合には、開いた系と呼ぶ。[1, 4]（閉じた量子系の明確な定義については、閉じた古典系と同じでよいかどうか、議論の余地があるかもしれない）。
2. 古典力学のニュートンの運動方程式は加速度という物理量と力という物理量を等価（その比例定数が質量である）と置いて得られた。量子力学においては、シュレディンガー方程式はエネルギー演算子であるハミルトニアン  $\hat{H}$ （を波動関数に作用させたもの）と時間微分演算子（を波動関数に作用させたもの）を等価と置いたといえる。その際の比例定数が純虚数とプランク定数  $\hbar (= h/2\pi)$  である。
3. 波動関数は確率振幅の意味をもち、物理量の毎回の測定値は確定していないが、期待値をきめる波動関数の時間変化はシュレディンガー方程式で確定的に決まることに注意する。
4. ポテンシャルが時間に依存しない場合（束縛状態）では、与えられる境界条件（ポテンシャルの関数形）のもとでエネルギーと波動関数を求めるという固有値問題の解法が主な課題になる。関数  $\Psi(x, t) = \psi(x) \exp(-i\omega t)$  は一定のエネルギー  $E$ （また固有角振動数  $\omega$ ）をもつ 定常状態 (stationary state) の波動関数である。
5. ここで、量子力学的な定常状態の意味を考えてみる。古典的な波動（力学的波動）の中で、同一の波数  $k$  と角振動数  $\omega$  をもつ、右向きに進行する平面波  $\Psi_+(x, t) = \sin(kx - \omega t)$  と後退する平面波  $\Psi_-(x, t) = \sin(kx + \omega t)$  の合成波は  $\sin kx \cos \omega t$  に比例することが分かる。これは波形は時間的には三角関数的に変化するが、空間的には移動しない波、すなわち定在波または定常波である。。量子力学的な定常状態の波動関数の実数部分は  $|\psi(x)| \cos(\omega t)$  となることから、定常状態が古典的な定在波に対応していると理解することができる。

## 8 公理7についての補足 ♠

巨視的な粒子ではなく、量子力学の対象になるような微視的な粒子のうち、同種の微視的な粒子を実験的に区別する方法は全くない。例えば、2個の同種の粒子の衝突の場合を考えてみる。古典的な粒子（巨視的な粒子）の場合にはそれぞれの軌道 (orbit) を一般には曲線で追跡できるので、粒子1、粒子2と明らかに区別できる。しかし、量子力学では粒子の軌道を古典力学のように追跡できず、確率波束（後述する、自由粒子を表す平面確率波の重ね合わせの結果の局在確率波束）としてしか把握できない。両者が接近して相互作用をしているときには、お互いの確率波も重なっているのでどちらが、どこにいるか区別しようがない。したがって、同種の複数個の粒子から構成される系に波動関数に同種粒子の不可弁別性を正しく取り込むには、上述のように、粒子の属性の交換についての統計性を満足する波動関数だけが許される。

定数  $\hbar$  の半整数倍のスピン（または固有スピン）をもつ粒子（フェルミ粒子；電子、陽子、中性子など）は粒子交換操作に対して反対称関数でなければならない。この結果、（スピン量子数もふくめた量子数の組で決まる）ひとつの量子力学的状态はひとつの粒子しか占有できないというパウリの排他原理が出てくる。

## 9 電磁場の中のスピンを持つ荷電粒子の場合 ♠

これまでの議論はポテンシャル  $U(x, y, z)$  が直接に、時刻の関数であるような場合だけではなく、もっと一般の場合に拡張できる。[15, 16] ポテンシャル  $U(x, y, z)$  だけではなく、スカラー・ポテンシャル  $\phi(\vec{r}, t)$ 、ベクトル・ポテンシャル  $A(\vec{r}, t)$  から導かれる電磁場の中に、電荷  $q$  と磁気モーメント・ベクトル  $\mu$  をもつ粒子が置かれた場合のハミルトニアン演算子  $\hat{H}$  は、対応する古典的なハミルトニアンをシュレディンガーの処方で量子化することにより、次のように与えられる。

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A})^2 + q\phi - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla - \frac{iq}{c\hbar}\mathbf{A})^2 + q\phi - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}.\end{aligned}\tag{9.16}$$

ここで、 $c$  は真空中の光速で、磁束密度ベクトル  $\mathbf{B}$  はベクトル・ポテンシャル  $\mathbf{A}$  により、 $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  と与えられる。

## 10 演算子とシュレディンガー方程式の行列表現 (座標表示)



歴史的には量子力学の最初の定式化はハイゼンベルクにより物理量を行列として見なす考え方をういてなされた。[11] 量子力学のそのような理論形式をハイゼンベルク形式 (描像) という。そこでは時間変化は物理量において考慮される。

一方、その後、シュレディンガーが量子力学を波動方程式を用いて定式化し、それはシュレディンガー形式 (描像) と呼ばれる。そこでは物理量自体は時間的には変化せず、時間的变化は波動関数において考慮される。後に、ハイゼンベルク形式 (描像) とシュレディンガー形式 (描像) は等価であることがディラックにより証明され、量子力学に複数の表現がありうるということが明らかにされた。

量子力学のシュレディンガー形式 (描像) は波動方程式とその境界条件付きの解法という意味では、固有値方程式の解法と類似しているので、よく使用される。しかし、近年、コンピュータの性能が飛躍的にたかまっているので、行列の対角化の方法は大規模計算の場合には現実的な方法となる。

## 10.1 波動関数、演算子とシュレディンガー方程式の行列表現

簡単のために、特にことわらない限り、1次元の場合を議論する。

### 1. 波動関数の行列 (ベクトル) 表現

任意の波動関数  $\psi(x)$  は完全直交規格化された基底関数系または基底 (basis)  $\{\phi_i(x), i = 1, 2, \dots, n\}$  により展開できる、すなわち基底の線形結合で表される。基底関数の個数  $n$  は有限とは限らない。

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^n c_i \phi_i(x). \quad (10.1)$$

ここで

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_i^*(x) \phi_j(x) dx = \delta_{ij} \text{ (直交規格性)}, \quad (10.2)$$

$$\sum_{i=1}^n \phi_i^*(x) \phi_i(x') = \delta(x - x') \text{ (完全性、または完備性)} \quad (10.3)$$

が成立する。波動関数  $\psi(x)$  は列ベクトル  $(c_1, c_2, \dots, c_n)^t$  と 1 対 1 に対応する。

$$\psi(x) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}. \quad (10.4)$$

また、波動関数の規格性より

$$\sum_{i=1}^n |c_i|^2 = 1 \quad (10.5)$$

が成り立つ。

### 2. 演算子の行列表現 (表現行列)

一般に、演算子  $\hat{A}$  はある関数  $\phi(x)$  に作用して、別の関数  $\varphi(x)$  に変換する。

$$\hat{A}\phi(x) = \varphi(x). \quad (10.6)$$

演算子  $\hat{A}$  は基底関数へ作用の全体により特定できる。すなわち、演算子  $\hat{A}$  の基底 (basis)  $\{\phi_i(x), i = 1, 2, \dots, n\}$  における行列要素を

$$\int \phi_i^*(x) \hat{A} \phi_j(x) dx \equiv A_{ij} \quad (10.7)$$

で定義すると、演算子  $\hat{A}$  は行列  $\{A_{ij}, i, j = 1, 2, \dots, n\}$  と 1 対 1 に対応する。

$$\hat{A} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{bmatrix}. \quad (10.8)$$

3. 量子力学の対象となるエルミート演算子の表現行列はエルミート行列になる。  
行列  $A (= A_{ij}, n \times n)$  がエルミート (Hermite) であるとは、その行列要素が

$$A_{ij} = A_{ji}^*, \quad (\text{complex conjugate, 複素共役}) \quad (10.9)$$

を満たすことである。記号的には

$$A = A^\dagger \quad (\dagger: \text{dagger ダガー、(短剣の意味)}) \quad (10.10)$$

と記される。実際、エルミート演算子の表現行列を計算すれば、エルミート演算子の定義より

$$A_{ji}^* = \left[ \int \phi_j^*(x) \hat{A} \phi_i(x) dx \right]^* = \int \phi_j(x) [\hat{A}]^* \phi_i^*(x) dx \quad (10.11)$$

$$= \int \phi_i^*(x) \hat{A} \phi_j(x) dx \quad (10.12)$$

$$= A_{ij} \quad (10.13)$$

のように、エルミート行列の性質が得られる。

4. エルミート行列の固有値は実数

定義により、エルミート行列の対角要素は実数である ( $A_{ii}^* = A_{ii}$ ) が、非対角要素は複素数である。(エルミート行列のすべての行列要素が実数の場合には、実対称行列と呼ばれる。) 線形代数学によれば、エルミート行列はユニタリ行列により対角化できる。このとき、エルミート行列の固有値は必ず実数になることが証明される。行列  $A$  の  $i$  番目の固有値  $\lambda_i$  を固有行列  $x_i$  をとすると

$$\sum_{k=1}^n A_{jk} \cdot x_{ki} = \lambda_i \cdot x_{ji} \quad (i, j = 0, 1, 2, \dots, n). \quad (10.14)$$

式 (10.14) の両辺に左から  $x_{ji}^*$  をかけて、 $j$  について和をとると

$$\sum_{j,k=1}^n x_{ji}^* \cdot A_{jk} \cdot x_{ki} = \lambda_i \sum_{j,k=1}^n |x_{ji}|^2. \quad (10.15)$$

式 (10.15) の両辺の複素共役をとると

$$\sum_{j,k=1}^n x_{ji} \cdot A_{jk}^* \cdot x_{ki}^* = \lambda_i^* \sum_{j,k=1}^n |x_{ji}|^2 \quad (10.16)$$

$$\begin{aligned} \text{式 (10.16) の左辺} &= \sum_{j,k=1}^n x_{ji} \cdot A_{kj} \cdot x_{ki}^* = \sum_{j,k=1}^n x_{ki} \cdot A_{jk} \cdot x_{ji}^* \\ &= \sum_{j,k=1}^n x_{ji}^* \cdot A_{jk} \cdot x_{ki} \\ &= \lambda_i \sum_{j,k=1}^n |x_{ji}|^2 \end{aligned} \quad (10.17)$$

式 (10.16), (10.17) より

$$(\lambda_i - \lambda_i^*) \sum_{j=1}^n |x_{ji}|^2 = 0 \quad (10.18)$$

ここで、固有ベクトルは通常すべての成分がゼロとなる自明なベクトル以外のベクトルを考えるので、 $\sum_{j=1}^n |x_{ji}|^2 \neq 0$  となる。従って

$$\lambda_i = \lambda_i^* \quad (\lambda_i : \text{実数}) \quad (\text{証明終了}) \quad (10.19)$$

## 5. シュレディンガー方程式の行列表現

時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (10.20)$$

に波動関数の展開式 (10.1) を代入すると

$$\hat{H}[\sum_{j=1}^n c_j \phi_j(x)] = E[\sum_{j=1}^n c_j \phi_j(x)]. \quad (10.21)$$

この式の両辺に  $\phi_i^*(x)$  をかけて積分すると

$$\sum_{j=1}^n H_{ij} c_j = E c_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (10.22)$$

という係数 ( $c_1, c_2, \dots, c_n$ ) についての連立方程式が得られる。まとめると、シュレディンガー - 方程式は、次のように

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \quad (10.23)$$

ベクトル方程式と 1 対 1 に対応する。ここでハミルトニアンの行列要素の定義

$$H_{ij} \equiv \int \phi_i^*(x) \hat{H} \phi_j(x) dx \quad (10.24)$$

を用いた。この連立方程式 (10.22) が自明な解 ( $c_1 = c_2 = \cdots = c_n = 0$ ) 以外の解をもつためには、固有値方程式 ( $\sum_{j=1}^n H_{ij}c_j - Ec_i = 0$ ) の係数行列の行列式がゼロでなければならない。

$$|H_{ij} - E\delta_{ij}| = 0, \quad (10.25)$$

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} - E & \cdots & H_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} - E \end{vmatrix} = 0. \quad (10.26)$$

この固有値方程式だけでは解 ( $c_1, c_2, \cdots, c_n$ ) の相対的な値しか決めることができない。しかし、波動関数の規格性 (10.5) より大域的な位相因子を除いて、解は確定する。一般には、ハミルトニアン行列の次元数 ( $n$ ) と同じ個数の固有エネルギー  $\{E_k; k = 1, 2, \cdots, n\}$  が存在する。このとき、 $k$  番目の固有値  $E_k$  に対するシュレディンガー方程式は

$$\hat{H}\psi_k(x) = E_k\psi_k(x) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{1k} \\ c_{2k} \\ \vdots \\ c_{nk} \end{bmatrix} = E_k \begin{bmatrix} c_{1k} \\ c_{2k} \\ \vdots \\ c_{nk} \end{bmatrix}, \quad (10.27)$$

のようなベクトル方程式 ( $k = 1, 2, \cdots, n$ ) に対応することになる。ここで、一般には、同一のハミルトニアン行列に対して、複数の固有値と固有ベクトルが存在することに注意する。

#### 6. 異なる基底関数系間の関係

基底関数系は一般に複数組、存在する。異なる基底関数系  $\{\varphi_k(x), k = 1, 2, \cdots, n\}$  を選ぶと、波動関数に対応する列ベクトルや演算子の行列表現は異なる。

$$\psi(x) = \sum_{k=1}^n d_k \varphi_k(x) \quad (10.28)$$

しかし、2つの基底関数系による表現はユニタリ行列により相互に変換される。

元の基底関数系が別の完全規格直交関数系 (基底関数系) により変換されるとする:

$$\phi_i(x) = \sum_{k=1}^n U_{ki} \varphi_k(x), \quad (i = 1, 2, \cdots, n), \quad (10.29)$$

$$U_{ki} \equiv \int \varphi_k^*(x) \phi_i(x) dx. \quad (10.30)$$

式 (10.1) に展開式 (10.28) を代入すると、

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^n c_i \left( \sum_{k=1}^n U_{ki} \varphi_k(x) \right) \quad (10.31)$$

$$= \sum_{k=1}^n \left( \sum_{i=1}^n U_{ki} c_i \right) \varphi_k(x) \quad (10.32)$$

と書き直せる。したがって

$$d_k = \sum_{i=1}^n U_{ki} c_i \quad (10.33)$$

という関係がある。波動関数の規格性より、

$$\sum_{k=1}^n |d_k|^2 = 1 \quad (10.34)$$

が満たされなければならないので、二つのベクトル  $(c_1, c_2, \dots, c_n)^t, (d_1, d_2, \dots, d_n)^t$  の大きさが同じになる。したがって、行列  $\{U_{ij}, i, j = 1, 2, \dots, n\}$  はユニタリ行列になる。

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{I} \quad (\hat{I}: \text{単位行列}), \quad (10.35)$$

$$\sum_{k=1}^n U_{ki}^* U_{kj} = \sum_{k=1}^n U_{ik} U_{jk}^* = \delta_{ij}, \quad (i, j = 1, 2, \dots, n). \quad (10.36)$$

さらに、ある演算子の別の基底における行列表現は元の基底における表現行列をユニタリ変換したものであることが次のように示される：

$$A'_{ij} \equiv \int \varphi_i^*(x) \hat{A} \varphi_j(x) dx \quad (10.37)$$

$$= \sum_{kk'} \int \phi_k^*(x) U_{ki}^* U_{k'j} \phi_{k'}(x) dx = \sum_{kk'} U_{ki}^* \left( \int \phi_k^*(x) \hat{A} \phi_{k'}(x) dx \right) U_{k'j} \quad (10.38)$$

$$= \sum_{kk'} U_{ki}^* A_{kk'} U_{k'j} \quad (10.39)$$

$$= (\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U})_{ij}. \quad (10.40)$$

## 10.2 直交規格系と行列表現の例

### 10.2.1 直交規格系の例

1. (有限区間における無限大井戸型ポテンシャルの固有関数としての) 三角関数系
2. 調和振動子の波動関数の系  $(-\infty < x < \infty)$
3. 軌道角運動量の 2 乗演算子と角運動量演算子の  $z$  成分の同時固有関数: 球面調和関数  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell' m'}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{\ell \ell'} \delta_{mm'} \quad (10.41)$$

4. ルジャンドル多項式は  $-1 \leq x \leq 1$  の範囲で直交関数系となる。

$$\int_{-1}^{+1} P_\ell(x) P_{\ell'}(x) dx = \delta_{\ell \ell'} \frac{2}{2\ell + 1} \quad (10.42)$$

## 11 量子力学から見た古典力学 ♠

種々の面で不思議な結果をもたらす量子力学と、日常的な経験とよく合致する結果をもたらす古典力学が一体どのような関係があるのかいくつかの面から調べてみよう。

## 11.1 エーレンフェストの定理

ニュートン力学（古典力学）においては、運動方程式が力学系の運動を決定し、ある時刻における粒子の位置と運動量（速度）を与えるとその後の運動は一義的に決まる。一方、量子力学においては、力学系の状態は波動関数で表され、その値は時間依存のシュレディンガー方程式により一義的に決定されるが、位置と運動量は確定した値をもたない。しかし、量子力学においても、物理量の期待値は古典力学と同じ方程式を満たすことが以下のようにしてわかる。

位置演算子の期待値の時間変化率

位置演算子の期待値の時間変化率を計算する。

$$\begin{aligned}
 \frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} x \Psi(x, t) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) x \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} dx \\
 &= -\frac{i \hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} x \Psi(x, t) - \Psi^*(x, t) x \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \right\} dx \quad (11.1)
 \end{aligned}$$

ここで、時間依存のシュレディンガー方程式とその複素共役を用いた。

$$\begin{aligned}
 (\text{右辺第1項の積分}) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} x \Psi(x, t) dx \\
 &= \left[ \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} x \Psi(x, t) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial x} [x \Psi(x, t)] dx \\
 &= -\left[ \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} [x \Psi(x, t)] dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \left[ 2 \left( \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t) + x \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \right] dx. \quad (11.2)
 \end{aligned}$$

ここで、波動関数が無限遠方でゼロに近づくことを用いた。この中間結果を式(11.1)に代入すると

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{\langle \hat{p}_x \rangle}{m}, \quad (\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}) \quad (11.3)$$

となり、運動量が速度かける質量であるという古典力学に対応する関係が得られる。

運動量演算子の期待値の時間変化率

同様に、運動量演算子の期待値の時間変化率を計算する。

$$\begin{aligned}
 \frac{d\langle \hat{p}_x \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} + \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right) \right] dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U \right] \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right. \\
 &\quad \left. + \Psi^*(x, t) \frac{i}{\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U \right] \Psi(x, t) \right\} dx
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \left[ -\frac{\partial U}{\partial x} \right] \Psi(x, t) dx \\
\rightarrow \frac{d\langle \hat{p}_x \rangle}{dt} &= \left( m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{x} \rangle \right) = -\left\langle \left[ \frac{\partial U}{\partial x} \right] \right\rangle.
\end{aligned} \tag{11.4}$$

質量かける加速度が力の  $x$  成分 (=ポテンシャルの  $x$  についての偏微分係数) に等しいというニュートンの運動方程式に対応する関係が得られた。これらの例のように、物理量に対応する演算子の期待値がニュートン力学に対応する関係式を満たすことをエーレンフェストの定理 (Ehrenfest's theorem) という。

## 11.2 波束とその運動

量子力学でしばしば対象となる電子などは古典力学の立場から考えると、非常に小さな粒子である。したがって、量子力学的な存在確率は狭い範囲に局在しなければならない。ところが、古典力学では粒子の「軌道」が無限まで続く運動を考えると、対応する波動関数は全空間に広がっているはずである。このような状況を表現するには、無限遠まで広がった多数の平面波をうまく重ねあわせて、局在しているはずの領域以外ではそれらの平面波が干渉して振幅が小さくなる波動関数をつくる必要がある。

このように重ね合わせてつくった波を波束 (wave packet) という。波束の性質を 1 次元の場合に調べてみよう。時間依存のシュレディンガー方程式の解は

$$\Psi_k(x, t) = c(k) e^{i(kx - \omega t)} \tag{11.5}$$

と書ける。振幅  $c(k)$  を波束を作るように自由に選ぶ。自由粒子の場合には、波数  $k$  と角振動数  $\omega$  には  $\hbar\omega = \hbar^2 k^2 / (2m)$  ( $m$ : 粒子の質量) の関係がある。ここで  $k$  の値は任意であるから、いろいろな  $k$  について式 (11.5) を重ね合わせた

$$\Psi(x, t) = \int c(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \tag{11.6}$$

が積分として波束を表す。

特に、時刻  $t = 0$  で、位置  $x = 0$  の近傍だけで存在確率がゼロではなく、かつ  $\hbar k_0 = p_0$  の運動量をもつ波束として、ガウス分布型

$$\Psi(x, 0) \equiv A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x\right) \tag{11.7}$$

を考える。ここで確率密度  $P = |\Psi(x, 0)|^2$  と確率流れ密度  $S_x$  を計算すると

$$P = |\Psi(x, 0)|^2 = |A|^2 \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right), \tag{11.8}$$

$$S_x = |A|^2 \frac{\hbar k_0}{m} \tag{11.9}$$

となる。波束は領域  $|x| \simeq a$  以内に局在していること、波束は  $\hbar k_0$  の運動量をもっていることがわかる。式 (11.6) より、

$$\Psi(x, 0) = \int c(k) e^{ikx} dk \tag{11.10}$$

と書ける。これをフーリエ変換すると

$$\begin{aligned} c(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int \exp\left\{-\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x\right\} dx \\ &= \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}a^2(k - k_0)^2\right\} \end{aligned} \quad (11.11)$$

を得る。この結果は時刻  $t = 0$  で、座標に  $\Delta x \approx a$  程度の不確定さをもつ粒子が、波数  $k$  については  $k = k_0$  の近傍で  $\Delta k \approx 1/a$  の幅で分布していることを示している。式(11.11)を式(11.6)に代入すると

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2}a^2(k - k_0)^2 + ikx - i\frac{\hbar t}{2m}k^2\right\} dk \\ &= \frac{A}{\sqrt{1 + (\frac{i\hbar}{ma^2})t}} \exp\left\{-\frac{x^2 - 2ia^2k_0x + i(\frac{\hbar k_0^2 a^2}{m})t}{2a^2(1 + i\frac{\hbar}{ma^2}t)}\right\}, \end{aligned} \quad (11.12)$$

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{|A|^2}{\sqrt{1 + (\frac{\hbar t}{ma^2})^2}} \exp\left\{-\frac{(x - \frac{\hbar k_0}{m}t)^2}{a^2[1 + (\frac{\hbar t}{ma^2})^2]}\right\}. \quad (11.13)$$

ゆえに、時刻  $t \neq 0$  においても確率密度はガウス分布をしているが、その中心は時間とともに、 $\hbar k_0/m$  で変化する。すなわち、 $v_0 = \hbar k_0/m$  の群速度 (group velocity) で伝播する。さらに、指数関数の分母は、波束の幅が  $t = 0$  での値  $a$  から時間  $t$  とともに  $a\{1 + (\hbar t/ma^2)^2\}^{1/2}$  で広がることを示している。

波束の広がりを例にとって、古典力学における粒子の基本的な特徴である空間的局在性の保持がどのような場合に再現されるかを評価してみよう。

1. まず電子を考えて見る。電子の場合、 $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$ ,  $a \approx 10^{-15} \text{m}$  (古典電子半径) であるとして、まず経過時間を  $t = 1 \text{s}$  とすると

$$\begin{aligned} \frac{\hbar t}{ma^2} &= \frac{1.05 \times 10^{-34} \text{joule} \cdot \text{s}^2}{0.9 \times 10^{-30} \text{kg} \times (10^{-15} \text{m})^2} \\ &\approx 10^{54}. \end{aligned} \quad (11.14)$$

$$a\sqrt{1 + (\frac{\hbar t}{ma^2})^2} \approx a(\frac{\hbar t}{ma^2}) \approx 10^{39} \text{m} \quad (11.15)$$

これは宇宙の大きさ (約 150 億光年  $= 0.95 \times 10^{26} \text{m}$ ) よりもはるかに大きい! しかし、電子の運動の経過時間として  $1 \text{s}$  はあまりにも長い。水素原子の電子の運動の「周期」 (約  $10^{-16} \text{s}$ ) を経過時間として採用すると

$$a\sqrt{1 + (\frac{\hbar t}{ma^2})^2} \approx a(\frac{\hbar t}{ma^2}) \approx 10^{23} \text{m} \quad (11.16)$$

となり、やはり膨大な大きさとなり、電子は古典的な粒子と見なすことはできない。

2. 次に、水素原子を考える。水素原子の場合、 $m = 1.67 \times 10^{-27} \text{kg}$ ,  $a \approx 10^{-10} \text{m}$  (ボーア半径程度) であるとして、まず経過時間を  $t = 1 \text{s}$  とすると

$$\frac{\hbar t}{ma^2} = \frac{1.05 \times 10^{-34} \text{joule} \cdot \text{s}^2}{1.67 \times 10^{-27} \text{kg} \times (10^{-10} \text{m})^2}$$

$$\approx 0.59 \times 10^{13}. \quad (11.17)$$

$$a\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2} \approx a\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right) \approx 0.59 \times 10^3 \text{m} \quad (11.18)$$

となり、波束の幅は約 600m と非常に大きくなる。この場合には、水素原子は古典的な粒子と見なすことができない。しかし、水素原子の電子の運動の「周期」(約  $10^{-16}\text{s}$ ) と同じ程度に経過時間が十分に短い場合には、波束の幅の広がりは無視できて、古典的な粒子と見なすことができる。(水素原子の電子は古典的な粒子と見なすことはできないが、水素原子全体は経過時間が十分に短いならば、古典的に運動すると近似してもよい。)

3. 最後に、1 円玉を考えてみよう。この場合、 $m = 10^{-3}\text{kg}$ ,  $a \approx 10^{-2}\text{m}$  であるとして、経過時間を  $t = 1\text{s}$  とすると

$$\begin{aligned} \frac{\hbar t}{ma^2} &= \frac{1.05 \times 10^{-34} \text{joule} \cdot \text{s}^2}{10^{-3} \text{kg} \times (10^{-2} \text{m})^2} \\ &\approx 10^{-27}. \end{aligned} \quad (11.19)$$

$$a\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2} \approx a \quad (11.20)$$

となり、1 円玉の波束の幅はほとんど変化しないので、1 円玉は古典的な粒子と見なすことができる。同様に、質量が大きいかまたは大きな粒子では波束の幅の変化率を決める因子の分母  $ma^2$  がプランク定数  $\hbar$  に比べて極めて大きいという事実から、古典的な粒子と見なすことができる。

### 11.3 マクロな系と量子力学 ( 普遍的理論としての量子力学 ) \*

量子力学の形成当時から議論されてきたことであるが、その論理構造が古典的なニュートン力学とはあまりにも異なることは、われわれを当惑させる。しかも、われわれは日常生活を含む巨視的な ( マクロな ) 系はニュートン力学で記述されることを熟知している。とすれば、なるほどミクロの世界は量子力学を必要とするであろうが、マクロな世界はニュートン力学で殆ど解決済みであると一般には考えられている。それでは、古典力学を適用できる範囲はマクロな系に限定され、量子力学はミクロな系にのみ適用できると考えるべきであろうか。また、マクロな系とミクロな系の境界、またはそれらの違いはどこにあると考えるべきであろうか。

エーレンフェストの定理などで示されるように、量子力学はその特別な場合として古典力学を含む。「量子力学の成立は古典力学の完全否定または切り捨てを意味するものではない。古典力学を内包した上で、古典力学の適用可能領域外へ拡張的に発展していったものが量子力学である。…物理学の発展はいつもこのように進む。」[13] 特殊相対論が古典電磁気学を変更せず、ニュートン力学を光速無限大の極限として含む形で形成されたように。

端的に言えば、マクロな場合には古典力学を適用してもその定量的な不正確さは問題にならないくらいに小さいと考えるべきである。[17] 換言すれば、「ミクロの粒子のもつ波

動的性格が、粒子が多いと多数の波の間でほとんど打ち消し合ってしまう、(量子性が)現れにくくなるのである。」[18]

他方、マクロな系においても、量子力学によって初めて理解できる現象も、超伝導、超流動をはじめ多数見つかっているし、これからもさらに明らかにされるであろう。量子力学はマクロな世界もミクロな場合でも正しいのである、すなわち、量子力学は普遍的であって、対象がミクロな系であろうがマクロな系であろうが、厳密には量子力学を用いなければならないといえる。

## 参考文献

- [1] 清水 明、「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、2003 年。
- [2] 大澤映二編「計算化学入門」(講談社サイエンティフィック社、1996 年)
- [3] 藤田重次著、原他訳、「量子統計力学」,1990 年、2003 年再版)裳華房。特に、1.13 節参照。
- [4] M. Nielsen, I. L. Chuang, 『量子』コンピュータと量子通信 I(量子力学とコンピュータ科学)」、2004 年、オーム社。特に、第 2 章、量子力学入門。
- [5] バークレイ物理学コース 4、「量子物理(下)」,丸善、1972 年。
- [6] 新井朝雄、江沢 洋「量子力学の数学的構造 1, 2」,朝倉書店、1999 年。
- [7] 岩波講座,現代物理学の基礎,「量子力学 I」(第 2 版),1978 年、岩波書店。特に第 3 章、量子力学の構成。
- [8] 岩波講座,現代物理学の基礎,「量子力学 II」(第 2 版),1978 年、岩波書店。特に第 16 章(状態と力学変数)、18 章(無限自由度の問題)。
- [9] 砂川重信「散乱の量子論」,岩波全書、1977 年。
- [10] 江沢 洋,「量子力学(I)」,2003 年、裳華房。特に第 6, 7 章。
- [11] 朝永振一郎「量子力学(I),(II)」,みすず書房。(量子電磁力学の定式化に対してノーベル物理学賞受賞。)
- [12] 中嶋貞雄(物理入門コース 6),「量子力学 II」,(1984 年
- [13] 岩波講座(現代物理学),「量子力学 I(第 2 版)」,(1978 年)。
- [14] 田中 一「量子力学」(近代科学社、1994 年)
- [15] エリ・ランダウ,量子力学 2、東京図書、1970 年。15 章、110 節。

- [16] アルベール・メシア量子力学 1、東京図書、1972 年。7 章。2 章、14 節。
- [17] 福田礼次郎、「マクロ系の量子力学」、丸善、1991 年。
- [18] 町田 茂、「量子の反乱ー自然は実在するかー」、学習研究社、1994 年。