あもんノート

ユークリッド幾何学、ニュートン力学から、相対論、宇宙論、量子論、場の量子論、素粒子論、そして超ひも理論まで、理論物理学を簡潔にかつ幅広く網羅したノートです。TOP へは下の URL をクリックして行けます。専用の画像掲示板で、ご意見、ご質問等も受け付けております。

http://amonphys.web.fc2.com/

目 次

第11章　量子論の基礎

量子論はエネルギーの離散性や粒子の波動性などの実験事実を説明するために構築された、ミクロの世界に関する物理学です。この章ではまず古典力学と線形代数を簡単に復習し、次に正準量子化と確率解釈について一般的な説明を行います。これらは有限自由度の量子力学のみならず、無限自由度の場の量子論においても適用できる事柄です。後半では座標表示を紹介し、シュレーディンガー方程式を導出し、量子力学の礎とします。

11.1　量子論の歴史的背景

1900 年、プランクは黒体放射 (物質から熱的に生じる光) のスペクトルを説明するために、振動数 ν の光のエネルギーが $h\nu$ の単位で不連続になっているとする**光量子仮説**を提唱します。ここで、

$$h \sim 6.626\times 10^{-34}\,\mathrm{kg\,m^2/s}$$

は**プランク定数**と呼ばれます。プランク定数は角運動量の次元を持ちます。

1905 年、アインシュタインは同じ仮説により**光電効果**が説明されることを示します。光電効果は、光を物質に照射することにより、物質から電子が飛び出てくる現象をいいます。

1911 年、ラザフォードが原子の中心に原子核が存在することを突きとめると、1913 年、ボーアは、原子核の周りの電子の定常状態は、角運動量の大きさが、

$$|\boldsymbol{J}| = n\hbar \quad (n = 1, 2, 3, \cdots)$$

の不連続な円軌道に限って許されるとする、**量子条件**を提唱します。ここで、

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

は、**ディラック定数**、あるいは**エイチバー**と呼ばれます。ボーアのこの理論は**前期量子論**とも呼ばれます。

1923 年、ド・ブロイは、運動量 $\boldsymbol{p}$ の電子が、

$$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{p}/\hbar$$

という波数ベクトルで与えられる**波動性**を持つとする考えを打ち出し、これはボーアの量子条件にもっともらしい理由を与えます(*)。

従来の物理では説明できないこれら現象を総括的に説明する理論として、1925年、ハイゼンベルグは**行列力学**を提唱します。また、1926年、シュレーディンガーは**波動力学**を提唱し、これが行列力学と等価であることを示します。波動力学は**波動関数**と呼ばれる複素数場 $\psi(\boldsymbol{r})$ の運動という、従来の物理で馴染みある解析的形式をとっていて、比較的わかりやすいものです。

1929年、ディラックとヨルダンは、古典力学に**量子化**と呼ばれる処方をほどこすことで行列力学および波動力学が得られることを示し、このような理論は**量子力学**と総称されることになります。

ド・ブロイやシュレーディンガーが、物質波(ド・ブロイ波、波動関数)は実在的なものと考えていたのに対し、ボーアやハイゼンベルグをはじめとするコペンハーゲン学派は、波動関数の大きさ自乗 $|\psi(\boldsymbol{r})|^2$ の値は、考えている粒子が $\boldsymbol{r}$ の位置に存在する確率密度であるとする**確率解釈**を唱え、粒子の位置と速度は観測にかかわらず決まっているとする従来の決定論的な考えを否定します。実際、電子などの荷電粒子の位置を測定するためには、光量子を粒子に衝突させなければならず、このことを粒子の波動性を含めて考えると、粒子の位置と速度を同時に決定することが不可能であることがわかります。このことはハイゼンベルグにより指摘され、**不確定性原理**と呼ばれます。

アインシュタインは「神はサイコロ遊びをしない」との信念から、量子力学の確率解釈は不完全であるとし、決定論を保持しようとしますが、1927年と1930年のソルベイ会議でボーアにより事実上論破され、以後、確率解釈と不確定性原理が広く認められていくことになっていきます。

(*注) 円軌道にある軌道電子の運動量の大きさを p, 波長を λ とすると、ド・ブロイの式から $2\pi/\lambda = p/\hbar$. また、軌道半径を r とすると、周期的境界条件から軌道の長さは波長の整数倍になると考えられるので $2\pi r = n\lambda$. ここで n は正の整数です。これらからボーアの量子条件、$|\boldsymbol{J}| = rp = n\hbar$ が得られるでしょう。図 11.1 は $n = 5$ におけるド・ブロイ波です。

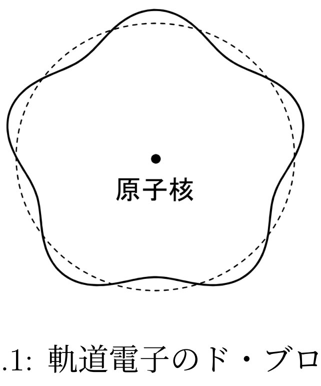

図 11.1: 軌道電子のド・ブロイ波

11.2　前期量子論

ボーアの前期量子論を水素原子に適用してみましょう。これは高校の物理でも習う事柄です。

水素原子において円軌道にある電子を考え、向心力を $\boldsymbol{F}$, 角運動量を $\boldsymbol{J}$ とすると、

$$|\boldsymbol{F}| = m\,\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \qquad |\boldsymbol{J}| = mrv = n\hbar.$$

ここで m は電子の質量、r は軌道半径、v は速さ、e は素電荷、ϵ_0 は真空の誘電率、n は正の整数です。これらの式から r は、

$$r = an^2, \qquad a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \sim 0.5292\,\text{Å}$$

と解かれます。a は**ボーア半径**と呼ばれます。これはおおよそ水素原子の半径と考えられます。$\text{Å} = 10^{-10}\,\mathrm{m}$ はオングストロームです (物理定数表参照)。一方、v は、

$$v = \frac{v_0}{n}, \qquad v_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \sim 2.188\times 10^6\,\mathrm{m/s}$$

となり、v_0 は光の速さと比べて 2 桁ほど小さく、このことは原子物理学が非相対論的な扱いでもぎりぎり大丈夫であることを意味しています。

また、軌道電子のエネルギーは、

$$E = \frac{m}{2}\,v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

ですが、これに上の r, v を代入して、

$$E = -\,\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2} \sim -\,\frac{13.61\,\mathrm{eV}}{n^2}$$

という離散的なエネルギーの式を得ます。これは実は量子力学的にも正しい式です。

電子の軌道が $n' \to n$ と遷移することにより 1 個の光量子が放出されると仮定すると、プランクの光量子仮説とエネルギーの保存から、その光の波長 λ, 振動数 ν, 光の速さ c に対し、

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{\Delta E}{hc} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right), \qquad R = \frac{me^4}{64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3 c} \sim \frac{1}{911.3\,\text{Å}}$$

という関係を得ます。R は**リュードベリ定数**と呼ばれます。特に $n = 1, 2, 3$ が成すスペクトルは、順に、**ライマン系列**、**バルマー系列**、**パッシェン系列**と呼ばれ、これらは実際に水素原子のスペクトルとして観測されます。

11.3 古典力学

量子論に進む準備として、まず**古典力学**を解析力学の形式において復習しておきます。

時間変数を t とし、複数の**力学変数**を一般に $q_i(t)$ $(i = 1, 2, \cdots, N)$ と書きます。力学変数の汎関数 $S[q]$ を考え、これを**作用**と呼びます。作用が停留値性を持つという要請：

$$\delta S[q] = 0$$

は**作用原理**と呼ばれます。また、作用が、

$$S[q] = \int dt\ L(q, \dot{q})$$

と表されるとき、関数 $L(q, \dot{q})$ を**ラグランジアン**といいます。ドットは時間微分を意味します。このとき作用原理から、

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0$$

が得られ、これを**ラグランジュ方程式**といいます。この方程式から、力学変数の時間的振る舞いが決定されることになり、このような方程式を一般に**運動方程式**といいます。

ある無限小変換に対し、力学変数とラグランジアンが、それぞれ、

$$\delta q_i = \epsilon_a G_{ai}(q, \dot{q}), \qquad \delta L = \epsilon_a \dot{X}_a(q, \dot{q})$$

と振舞い、この変換に対し作用が不変であるとき、

$$Q_a = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} G_{ai} - X_a$$

が保存します。これを**ネーターの定理**といいます。例えば、時間並進に対する作用の不変性から、一般に、

$$E = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i - L$$

が保存し、これは**エネルギー**と呼ばれます。

力学変数 q_i に対して、

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

で定義される p_i をその**正準共役**と呼び、q_i, p_i を**正準変数**と呼びます。エネルギーを正準変数だけで書いた関数、

$$H(q, p) = p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q})$$

は**ハミルトニアン**と呼ばれます。このときラグランジュ方程式から、

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i,} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

が得られ、これを**正準方程式**といいます。正準変数を用いるこの力学の形式は**正準形式**と呼ばれます。

ラグランジアンもハミルトニアンも、通常、実数であると仮定されます。詳しくは解析力学の章を参照してください。

11.4 群とベクトル空間

次に線形代数を復習しておきましょう。

集合 X と演算 $\circ$ において、

$$\begin{aligned} \textbf{閉性}: &\ \forall ab \in X \ (a \circ b \in X), \\ \textbf{結合法則}: &\ \forall abc \in X \ ((a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c)), \\ \textbf{単位元}\text{の存在}: &\ \exists e \in X \ \forall a \in X \ (e \circ a = a \circ e = a), \\ \textbf{逆元}\text{の存在}: &\ \forall a \in X \ \exists b \in X \ (a \circ b = b \circ a = e) \end{aligned}$$

が成り立つとき、集合 X と演算 $\circ$ の組 $(X, \circ)$ を**群**といいます。単位元がただ一つであること、また、各元に対しその逆元がただ一つであることが以下のようにして証明されます。

[証明] e, e' が共に単位元であるとします。このとき $e \circ e' = e'$ ですが、e' も単位元なので左辺は e と等しく、$e = e'$. すなわち単位元はただ一つです。b, b' が共にある元 a の逆元であるとします。このとき $a \circ b = e \ \therefore \ b' \circ (a \circ b) = b' \ \therefore \ (b' \circ a) \circ b = b' \ \therefore \ b = b'$. よって逆元はただ一つです。[証明終]

群 $(X, \circ)$ が、さらに、

$$\textbf{可換性}: \ \forall ab \in X \ (a \circ b = b \circ a)$$

を満たすとき、$(X, \circ)$ を**可換群**、あるいは**アーベル群**といいます。例えば、整数全体の集合 $\mathbf{Z}$ と加法 $+$ に対し、$(\mathbf{Z}, +)$ は可換群を成し、その単位元は 0, 元 n の逆元は $-n$ ということになります。

ある可換群 $(V, +)$ と複素数全体の集合 $\mathbf{C}$ との間に、

$$\begin{aligned} &a\boldsymbol{v} \in V, \quad a(\boldsymbol{v} + \boldsymbol{u}) = a\boldsymbol{v} + a\boldsymbol{u}, \quad (a+b)\boldsymbol{v} = a\boldsymbol{v} + b\boldsymbol{v}, \\ &(ab)\boldsymbol{v} = a(b\boldsymbol{v}), \quad 1\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v} \qquad (\forall \boldsymbol{v}\boldsymbol{u} \in V \ \forall ab \in \mathbf{C}) \end{aligned}$$

を満たす積演算が定義されているとき、V を**複素ベクトル空間**といい、その元を**複素ベクトル**、あるいは単に**ベクトル**といいます。($\mathbf{C}$ を実数全体の集合 $\mathbf{R}$ に置き換えて**実ベクトル空間**が定義されます。)

$(V,+)$ の単位元を $\mathbf{0}$ と書き、**零ベクトル**と呼びます。このとき任意のベクトル $\boldsymbol{v}$ について、$\boldsymbol{v} = 1\boldsymbol{v} = (1+0)\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v} + 0\boldsymbol{v}$ ですから、

$$0\boldsymbol{v} = \mathbf{0}$$

がわかります。また、$\boldsymbol{v}$ の逆元が $-\boldsymbol{v} := -1\boldsymbol{v}$ であることも確かめられるでしょう。

複素ベクトル空間 V において、2 つのベクトル $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{u}$ の**内積**：$< \boldsymbol{v}, \boldsymbol{u} > \in \mathbf{C}$ が定義され、

$$\begin{aligned} &< \boldsymbol{v}, \boldsymbol{u} + \boldsymbol{w} > = < \boldsymbol{v}, \boldsymbol{u} > + < \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} >, \\ &< \boldsymbol{v}, a\boldsymbol{u} > = \ a < \boldsymbol{v}, \boldsymbol{u} >, \quad < \boldsymbol{v}, \boldsymbol{u} > = < \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} >^* \end{aligned}$$

を満たすなら、V は**内積空間**と呼ばれます。さらに、

$$< \boldsymbol{v}, \boldsymbol{v} > \geq 0, \quad < \boldsymbol{v}, \boldsymbol{v} > = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{v} = \mathbf{0}$$

を満たすなら、V は**正定値内積空間**、あるいは**正定値計量空間**と呼ばれます。以後、ベクトル空間と言った場合は、この正定値内積空間を意味するものとします。$|\boldsymbol{v}| = \sqrt{< \boldsymbol{v}, \boldsymbol{v} >}$ でベクトルの大きさ (**ノルム**) を定義します。

ベクトル空間 V に対し、

$$A\boldsymbol{v} \in V, \quad A(\boldsymbol{v} + \boldsymbol{u}) = A\boldsymbol{v} + A\boldsymbol{u}, \quad A(a\boldsymbol{v}) = a(A\boldsymbol{v})$$

を満たす演算子 A は、V 上の**線形演算子**と呼ばれます。このとき、

$$(A+B)\boldsymbol{v} = A\boldsymbol{v} + B\boldsymbol{v}, \quad (AB)\boldsymbol{v} = A(B\boldsymbol{v}), \quad (aA)\boldsymbol{v} = a(A\boldsymbol{v})$$

により、線形演算子の和、積、複素数倍が定義されます。

(余談) 線形代数における複素ベクトルは、複素数を成分とする数ベクトル ($N \times 1$ 行列) や、複素数に値を取る関数を抽象化した概念です。一方、線形演算子は、複素行列や 2 変数関数を抽象化した概念です。これら抽象化が量子論の統一的な理解において重要になってくるのです。複素ベクトルや複素行列については関数論と応用数学の章で簡単に触れているので、あわせて参考にしてください。

11.5 ブラケット記法とエルミート演算子

ベクトル空間の元であるベクトルを $|\psi>$ などと書き、$|\psi>$ と $|\phi>$ の内積を $<\psi|\phi>$ という記号で表します。これを**ブラケット記法**といいます。

$<\psi|\psi>=1$ のとき $|\psi>$ は**規格化**されているといい、$<\psi|\phi>=0$ のとき $|\psi>$ と $|\phi>$ は**直交**しているといいます。また、あるベクトルの系 $\{\,|n>|\,n=1,2,\cdots\}$ があって、

$$<m|n>=\delta_{mn} \quad (\delta_{mn}\text{ はクロネッカーデルタ})$$

のとき、この系を**規格直交系**といいます。さらに、もし任意のベクトル $|\psi>$ が、

$$|\psi>=\sum_n c_n|n> \quad (c_n\text{ は複素数})$$

と展開されるなら、この系を**完全系**といいます。両辺に $<m|$ を作用させると $<m|\psi>=c_m$ を得るので、$|\psi>=\sum_n|n><n|\psi>$. ここで $|\psi>$ は任意だったので、完全系の条件は次のように書けます：

$$\sum_n|n><n|=1 \quad (1\text{ は恒等演算子}).$$

ベクトルに作用する線形演算子 A があって、任意のベクトル $|\psi>, |\phi>$ に対し、

$$<\psi|A^\dagger|\phi>=<\phi|A|\psi>^*$$

が成り立つとき、$A^\dagger$ を A の**エルミート共役**といいます。簡単に、

$$(A+B)^\dagger=A^\dagger+B^\dagger,\quad (cA)^\dagger=c^*A^\dagger,\quad (AB)^\dagger=B^\dagger A^\dagger$$

が確かめられます (c は複素数)。また、$A|\psi>=|A\psi>$ という表記を用いると、

$$<A\psi|=<\psi|A^\dagger$$

も確かめられるでしょう。特に $A^\dagger=A$ を満たす線形演算子は**エルミート演算子**と呼ばれます。これはエルミート行列を抽象化したものです。

一般に線形演算子 A に対し、

$$A|a>=a|a> \quad (a\text{ は複素数、}|a>\neq 0)$$

は A に関する**固有方程式**と呼ばれ、a を**固有値**、$|a>$ を固有値 a に関する**固有ベクトル**といいます。このとき次の定理を示すことができます。

> エルミート演算子の固有値は実数で、異なる固有値に関する固有ベクトルは互いに直交する.

[証明] 上の固有方程式に $|a>$ を内積し $<a|A|a>=a<a|a>$. 両辺複素共役をとると A はエルミート演算子なので $<a|A|a>=a^*<a|a>$. これらを辺々引いて $<a|a>\neq 0$ に注意すると $a^*=a$. すなわち固有値 a は実数。一方、a とは異なる固有値を b としその固有ベクトルを $|b>$ とします。このとき $<b|A|a>=a<b|a>$. 両辺複素共役をとって $<a|A|b>=a<a|b>$ $\therefore$ $b<a|b>=a<a|b>$. $b\neq a$ なので $<a|b>=0$. [証明終]

11.6　正準量子化とハイゼンベルグ方程式

正準変数 $q_i(t),\ p_i(t)$ を、**正準交換関係**：

$$[q_i(t), p_j(t)] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [q_i(t), q_j(t)] = [p_i(t), p_j(t)] = 0$$

を満たす線形演算子に置き換えます。また、複素共役はエルミート共役に置き換えます。この処方を**正準量子化**といいます。ここで $[a,b] = ab - ba$ は**交換子**です。

古典論からこうして得られる理論を**正準量子論**といいます。以下、式の簡単化のため、$\hbar = 1$ の単位系を用います。

一般に物理量 $A = A(q,p)$ に対して、次の性質がいえます：

$$[q_i, A] = i\,\frac{\partial A}{\partial p_i}, \quad [p_i, A] = -i\,\frac{\partial A}{\partial q_i}.$$

これを証明するには数学的帰納法を用います。A が定数のときは上式は自明ですから、上式を仮定したときに $A \to q_j A,\ A \to p_j A$ においてやはり上式が成り立つことを示せばよいわけです。このとき正準交換関係や、交換子のライプニッツ則 $[a, bc] = [a,b]c + b[a,c]$ を用います。こうして正準変数の任意の単項式 A について上式が示されますが、交換子も微分演算子も線形性を持つため、その証明は任意の多項式 A へと拡張されます。

A としてハミルトニアン H を選べば、正準方程式を用いて、

$$\dot{q}_i = i\,[H, q_i], \quad \dot{p}_i = i\,[H, p_i]$$

を得ます。上と同様な数学的帰納法で、これは、

$$\dot{A} = i\,[H, A]$$

と拡張されるでしょう。これが量子論における運動方程式で、**ハイゼンベルグ方程式**と呼ばれます。

(余談)　古典論における**ポアソン括弧**：$\{A,B\}_P = \dfrac{\partial A}{\partial q_i}\dfrac{\partial B}{\partial p_i} - \dfrac{\partial B}{\partial q_i}\dfrac{\partial A}{\partial p_i}$ の $i\hbar$ 倍を交換子 $[A,B]$ に置き換えることで正準量子化を定義する立場もあります。この場合は、ポアソン括弧と交換子が共に双線形性やライプニッツ則を満たすことを確認する必要があります。

11.7　固有ベクトル

複数のエルミートな (古典論で実数の) 物理量 $A,\ B,\ \cdots$ があって、その固有値がそれぞれ $a_n,\ b_n,\ \cdots$ となるような固有ベクトルを $|n>$　$(n = 1, 2, \cdots)$ と書きます。すなわち、

$$A|n> = a_n|n>, \quad B|n> = b_n|n>, \quad \cdots.$$

固有値 $a_n, b_n, \cdots$ は実数です。また、$\{|n{>}\}$ は直交系を成します。全ての固有ベクトルを規格化すれば、$<m|n>=\delta_{mn}$ であり、さらに適当に物理量を選ぶことで、完全系を成すものと仮定します：$\sum_n |n{>}{<}n|=1$. このとき、

$$[A,B]\ \sum_n |n{>}{<}n| = \sum_n\ [a_n,b_n]\ |n{>}{<}n| = 0 \quad \therefore\ [A,B]=0$$

なので、物理量 $A, B, \cdots$ は互いに可換でなければなりません。

固有方程式 $A|n>=a_n|n>$ において A が時間に依存するので、固有ベクトル $|n>$ も時間に依存します。固有方程式の両辺を時間で微分すれば、

$$\dot{A}|n> +A|\dot{n}>=a_n|\dot{n}>$$

ですが ($|\dot{n}>=(d/dt)|n>$)、ハイゼンベルグ方程式を用いるとこれは、

$$(A-a_n)(|\dot{n}> -iH|n>)=0$$

と整理され、他の物理量 $B,\cdots$ についても同様なので、それらは、

$$|\dot{n}>=iH|n>$$

において満たされます。ハミルトニアン H がエルミート演算子であることに注意すると、これは規格直交条件 $<m|n>=\delta_{mn}$ を保存することがわかるでしょう。上式を**固有ベクトルの運動方程式**といいます。

特に力学変数 q_i は互いに可換ですから、その固有ベクトルを考えることができます：

$$q_i|x>=x_i|x>\,.$$

通常このとき、固有値 x_i は古典論と定義域を同じくする連続スペクトルとなり、固有ベクトル $\{|x{>}\}$ が完全系となることを仮定します。この仮定により、ベクトル空間を具体的に定義するわけです。連続スペクトルですから、規格直交性と完全性の条件は、それぞれ、

$$<x|x'>=\delta^N(x-x'), \quad \int d^Nx\ |x{>}{<}x|=1$$

と書かれます $^{(*)}$。運動方程式は、$|\dot{x}>=iH|x>$ です。

(*注) 離散から連続へのこのような飛躍は、特に量子物理学では普通に行われます。このことを数学的にちゃんとやると少し面倒なのですが、物理の世界ではあまり気にしないのが普通です。このことは、散乱問題における超関数の扱い方、経路積分 (汎関数積分) などにおいても見られます。おしなべて、細かいことを気にし厳密化するのが数学、気にしないで矛盾が見つかるまでどんどん先に進むのが理論物理の方針といえるでしょう。

11.8　確率解釈とエーレンフェストの定理

正準量子論は抽象的な代数の理論ですが、その意味を与えるために、次のような物理的解釈を行います：

- 物理的な状態はある規格化されたベクトル $|\psi>$ に対応する。
- 状態ベクトル $|\psi>$ は時間に依存しない。
- $A|a>=a|a>$ ならば状態 $|a>$ における物理量 A の値は a.
- 観測により $|\psi>$ が $|a>$ に変化 (収縮) する確率は $|<a|\psi>|^2$.

これを**確率解釈**といいます。

状態 $|\psi>$ において、互いに可換な物理量 $A, B, \cdots$ の観測値が $a_n, b_n, \cdots$ となる確率は、

$$P_n = |<n|\psi>|^2$$

です。$|\psi>$ が規格化されていることと $\{|n>\}$ が完全系であることに注意すれば、

$$\sum_n P_n = \sum_n |<n|\psi>|^2 = \sum_n <\psi|n><n|\psi> = <\psi|\psi> = 1$$

がわかりますが、これは全確率が 1 であることを意味しています。

また、状態 $|\psi>$ における物理量 A の期待値は、

$$\begin{aligned}<A> &= \sum_n a_n P_n = \sum_n a_n <\psi|n><n|\psi> = \sum_n <\psi|A|n><n|\psi> \\ &= <\psi|A|\psi>\end{aligned}$$

で与えられます。そうすると正準方程式から、

$$\frac{d}{dt}<q_i> = <\frac{\partial H}{\partial p_i}>, \qquad \frac{d}{dt}<p_i> = -<\frac{\partial H}{\partial q_i}>$$

がわかります。これは期待値において古典論の運動方程式が成立することをいっていて、**エーレンフェストの定理**と呼ばれます。この定理は、量子論が巨視的な視点において古典論に還元することを保障しています。

11.9　座標表示と波動関数

状態ベクトル $|\psi>$, 力学変数 q_i の固有ベクトル $|x>$ に対して、

$$\psi(x) = <x|\psi>$$

を $|\psi>$ の**座標表示**、あるいは**波動関数**といいます。このとき、

$$<\psi|\psi>=\int d^N x <\psi|x><x|\psi>=\int d^N x\ |\psi(x)|^2$$

なので、状態ベクトルの規格化条件 $<\psi|\psi>=1$ は、

$$\int d^N x\ |\psi(x)|^2 = 1.$$

また、状態 $|\psi>$ において、q_i の値が力学変数の空間のある領域 V に見つかる確率は、

$$P(V)=\int_V d^N x\ |<x|\psi>|^2=\int_V d^N x\ |\psi(x)|^2$$

となります。すなわち、波動関数の大きさ自乗 $|\psi(x)|^2$ の値は、力学変数が x_i である "確率密度" という意味になります。

一方、物理量 A に対して、$|A\psi>$ の座標表示は、

$$\begin{aligned} A\psi(x)=<x|A\psi> &= \int d^N x' <x|A|x'><x'|\psi> \\ &= \int d^N x' <x|A|x'>\psi(x') \end{aligned}$$

と表され、物理量 A は 2 変数関数 $<x|A|x'>$ で表現されることがわかります。特に、

$$q_i\psi(x)=\int d^N x' <x|q_i|x'>\psi(x')=\int d^N x'\, x'_i\, \delta^N(x-x')\psi(x')=x_i\psi(x).$$

すなわち、<u>演算子 q_i は波動関数の上で x_i を乗じること</u>と解せます。

また、正準交換関係より、

$$<x|[q_i,p_j]|x'>=i\delta_{ij}<x|x'> \quad \therefore (x_i-x'_i)<x|p_j|x'>=i\delta_{ij}\delta^N(x-x')$$

ですが、この式は、

$$(x_i-x'_i)\delta^N(x-x')=0$$

およびこれを x_j で微分して得られる式：

$$\delta_{ij}\delta^N(x-x')+(x_i-x'_i)\,\partial_j\delta^N(x-x')=0 \quad (\partial_j=\partial/\partial x_j)$$

に注意すると、

$$<x|p_i|x'>=-i\partial_i\delta^N(x-x')+C_i\delta^N(x-x')$$

と解けます。C_i は任意の複素数ですが、簡単のためこれを 0 に選びます。そうすると、

$$\begin{aligned} p_i\psi(x) &= \int d^N x' <x|p_i|x'> \psi(x') = -i\int d^N x'\, \partial_i \delta^N(x-x')\psi(x') \\ &= -i\int d^N x'\, \delta^N(x-x')\, \partial'_i\psi(x') = -i\partial_i\psi(x). \end{aligned}$$

すなわち、演算子 p_i は波動関数の上で微分演算子 $-i\partial_i$ であると解せます。

よって、一般に物理量 $A = A(q,p)$ に対して、

$$A\psi(x) = A(x, -i\partial)\psi(x).$$

この意味で $A(x,-i\partial)$ を物理量 A の**座標表示**といいます。

11.10 シュレーディンガー方程式

座標表示された物理量 $A(x,-i\partial)$ は明らかに時間に依存しません。一方、座標表示された状態ベクトル、すなわち波動関数 $\psi(x)$ は時間に依存します。実際、固有ベクトルの運動方程式 $|\dot{x}>= iH|x>$ に注意すると、

$$\dot{\psi}(x) = <\dot{x}|\psi> = -i <x|H|\psi> = -iH(x,-i\partial)\psi(x)$$

$$\therefore\ i\dot{\psi}(x) = H(x,-i\partial)\psi(x).$$

波動関数に関するこの運動方程式は、**時間を含むシュレーディンガー方程式**と呼ばれます。

量子論においては、もともと物理量が時間依存性を担い、状態 $|\psi>$ は時間に依存しないものと仮定されていました。この描像を**ハイゼンベルグ描像**と言います。しかしその座標表示を考えると、時間依存性は物理量から状態 $\psi(x)$ へと移行します。この新しい描像は、**シュレーディンガー描像**と呼ばれます。

物理量 $A = A(q,p)$ に関する固有方程式 $A|n>= a_n|n>$ は、座標表示においては、

$$A(x,-i\partial)\phi_n(x) = a_n\phi_n(x).$$

ここで、

$$\phi_n(x) = <x|n>$$

は**固有関数**と呼ばれます。規格直交条件 $<m|n>= \delta_{mn}$ は、

$$\int d^N x\ \phi_m^*(x)\phi_n(x) = \delta_{mn}.$$

完全系の条件 $\sum_n |n\!><\!n| = 1$ は、

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

と、それぞれ座標表示に書きうつされるでしょう。

特にエネルギーに関しては、その固有値を E_n として、

$$H(x, -i\partial)\phi_n(x) = E_n\phi_n(x).$$

これを単に**シュレーディンガー方程式**と呼びます。この方程式を $\phi_n(x)$ について解くことができれば、時間を含むシュレーディンガー方程式の解として、

$$\psi(x) = \phi_n(x)e^{-iE_nt}$$

が得られます。位相因子は確率解釈においては観測されないと考えられるため、これらの解は定常状態を意味しています。

(余談) 時間を含むシュレーディンガー方程式を $i\hbar(d/dt)|\psi\!> = H|\psi\!>$ などとケットベクトルで書く教科書がありますが、これは正準量子論においてシュレーディンガー描像を採用していて、やや悪質です。量子力学とその座標表示である波動力学とを混同している可能性もあります。波動力学は解析的で理解しやすいため、最初にこれを量子力学という名で習うことが多いのですが、このことにより “シュレーディンガー描像への固執” を招きやすいので注意が必要です。この固執は実際、場の量子論を学ぶ際に弊害となります。波動力学による計算演習はそこそこにして、できるだけ早く正準量子論と場の量子論を学ぶことが大事です。波動力学をずるずると延長して、スピン、多体系 (スレイター行列式)、相対論的量子力学を学ぶことは、まったくナンセンスで、時間の無駄といえます。これらは場の量子論で理解した方がずっと簡単なのです。

11.11　1粒子の系

具体的な例として、N 次元空間に質量 m の粒子が1個だけある系を考えます。粒子の位置をデカルト座標で q_i $(i = 1, 2, \cdots, N)$ としたとき、ラグランジアンは、

$$L = \frac{m}{2}\,\dot{q}_i\dot{q}_i - U(q).$$

ここで $U(q)$ は外部ポテンシャルです。ラグランジュ方程式、

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0$$

は、

$$m\ddot{q}_i = -\frac{\partial U}{\partial q_i}$$

となり、これはニュートンの運動方程式に他なりません。正準共役変数、およびハミルトニアンは、

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i, \qquad H = p_i\dot{q}_i - L = \frac{1}{2m}\,p_ip_i + U(q)$$

となります。ここまでは古典論です。

正準量子化すれば、正準変数について $[q_i, p_j] = i\delta_{ij}$ (他は可換) であり、q_i の固有値を x_i と書けば、正準共役変数とハミルトニアンはそれぞれ座標表示で、

$$p_i = -i\partial_i, \qquad H = -\frac{1}{2m}\triangle + U(x)$$

という演算子になります。ここで $\triangle = \partial_i\partial_i$ はラプラシアンです。よってシュレーディンガー方程式は、

$$\left(-\frac{1}{2m}\triangle + U(x)\right)\phi_n(x) = E_n\phi_n(x)$$

となります。特に $U(x)$ が遠方で大きくなるような束縛された系においては、固有関数 $\phi_n(x)$ に関する境界条件により、E_n は離散的な値を取ることになります。具体的な計算は量子力学の章で行います。

一方、ポテンシャル $U(x)$ が 0 である場合、粒子は外力を受けず自由であると考えられます。このような粒子は**自由粒子**と呼ばれます。このときラグランジアンは、空間並進：

$$\delta q_i = \epsilon_i = \epsilon_j\delta_{ji} \quad (\epsilon_i \text{ は無限小パラメータ})$$

に関して不変であり、ネーターの定理から、

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta_{ji} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}$$

が保存します。これは正準共役変数 p_j に他ならず、**運動量**と呼ばれます。

$$\phi(k, x) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} e^{ik\cdot x}$$

は、規格直交条件：

$$\int d^N x \ \phi^*(k, x)\phi(k', x) = \delta^N(k-k')$$

を満たす運動量 $p_i = -i\partial_i$ の固有関数になっていて、その固有値は k_i です。すなわち、運動量 k_i を与える固有関数は波数ベクトルが k_i の複素平面波であり、これを**ド・ブロイの関係**といいます。

また、上の平面波はエネルギー $H = -(1/2m)\triangle$ の固有関数にもなっていて、その固有値は $E = |k|^2/(2m)$ です。自由粒子におけるエネルギーと運動量の関係は、古典論と変わらないわけです。

11.12　2重スリット実験

ド・ブロイの関係 (粒子の波動性) は次のような**2重スリット実験**で実際に確かめることができます。

図 11.2 のような 2 つのスリットを持つ遮蔽板に、運動量の大きさが k の電子を 1 個送り込むと、電子の波動関数は 2 つのスリットを通ってスクリーンに到達し、スクリーン上で重なり合うと考えられます。

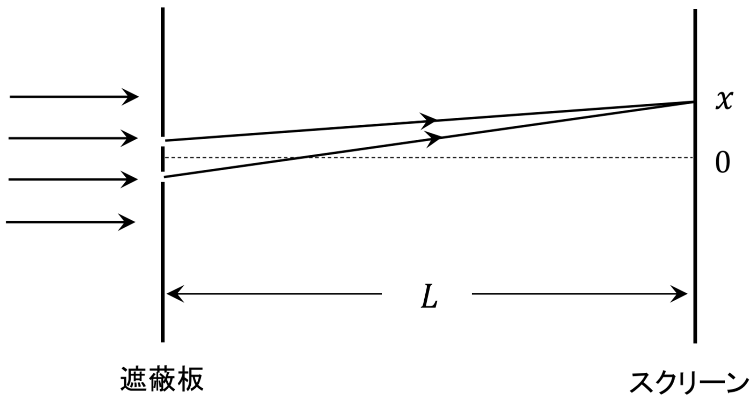

図 11.2: 2 重スリット実験

スリットの間隔を 2ε, 遮蔽板からスクリーンまでの距離を L とすると、2 つのスリットからスクリーン上の座標 x の点までの経路の長さは、それぞれ、

$$l' = \sqrt{L^2 + (\varepsilon + x)^2}, \quad l = \sqrt{L^2 + (\varepsilon - x)^2}$$

と書けますが、$L \gg \varepsilon,\ L \gg x$ においてその差は、

$$\Delta l = l' - l = \frac{2\varepsilon x}{L}$$

と近似されるでしょう。そうすると、スクリーン上の波動関数は、

$$\psi \propto e^{ikl' - iEt} + e^{ikl - iEt} = e^{ikl - iEt}\left(e^{ik\Delta l} + 1\right)$$

となり、ここで $E = k^2/(2m)$ は電子の運動エネルギーで、m は電子の質量です。特に波動関数の大きさ自乗は、

$$|\psi|^2 \propto |e^{ik\Delta l} + 1|^2 \propto \cos^2 \frac{k\Delta l}{2} = \cos^2 \frac{\varepsilon k x}{L}$$

となり、これは波長が $\pi L/\varepsilon k$ の縞模様を成します。波が重なり合うことでできるこのような縞模様は、一般に**干渉縞**と呼ばれます。

上式は電子がスクリーン上の座標 x の点に到達する確率密度 (頻度) を意味していることに注意してください。1 回の実験では電子はスクリーンまたは遮蔽板のど

こかに当たるだけで、電子の波動性はまったく見えてきませんが、実験を多数行い結果を集積することで、スクリーン上にこのような縞模様が現れるのです。また、電子は2つのスリットを、いわば “両方同時に通った” と考えるべきであることに注意してください。例えば電子がスリットのどちらを通ったかを特定するような装置を加えれば、波動関数はそのような観測により収縮してしまうと考えられ、干渉縞は現れなくなるのです。

このような実験は、最初は思考実験でしたが、1960年代になると実際に行われ、粒子の波動性と量子論の正しさを裏付ける結果を与えています。

(余談) 電子などの粒子が波動性を持つことがわかりましたが、逆に電磁波が粒子性を持つことも光電効果などにより確かめられています。その粒子は**光子**と呼ばれます。しかしその数学的な理解には相対論的場の量子論を要し、量子電磁気学の章までその説明はおあずけになります。生半可な知識で光子について語ることは、様々な誤解を生む可能性があり危険です。

11.13 不確定性原理

以下、正準量子論に関してやや補足的な事柄を述べておきます。

複数の物理量 $A, B, \cdots$ の固有ベクトルが完全系を成すとき、これら物理量は互いに可換でした。この命題の対偶をとると、可換でない物理量の完全系を成す固有ベクトルは存在しない、すなわち、可換でない物理量は同時に決定できない、ということがわかります。量子論が持つこの性質は**不確定性原理**と呼ばれます。

いま、物理量 A の偏差を $\triangle A$ と書くと、

$$(\triangle A)^2 = <(A - <A>)^2> = <\alpha^2> = <\alpha\psi|\alpha\psi>, \quad \alpha = A - <A> .$$

同様に物理量 B に関して $(\triangle B)^2 = <\beta\psi|\beta\psi>,\ \beta = B - <B>$ ですから、**シュワルツの不等式** $^{(*)}$:

$$<a|a><b|b> \geq |<a|b>|^2$$

に注意して、

$$\begin{aligned}(\triangle A \triangle B)^2 &\geq |<\alpha\psi|\beta\psi>|^2 = |<\psi|\alpha\beta|\psi>|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} <\psi|(\alpha\beta - \beta\alpha)|\psi> + \frac{1}{2} <\psi|(\alpha\beta + \beta\alpha)|\psi> \right|^2\end{aligned}$$

を得ます。最後の式の絶対値の中身ですが、その第1項は純虚数、第2項は実数であることがわかるので、$(\triangle A \triangle B)^2 \geq (1/4)|<\psi|(\alpha\beta - \beta\alpha)|\psi>|^2$ となり、ここで $[\alpha, \beta] = [A, B]$ に注意して、

$$\triangle A \triangle B \geq \frac{1}{2} |<[A, B]>|$$

を得ます。この不等式は**不確定性関係**と呼ばれます。正準交換関係を用いれば、特に、

$$\triangle q_i \triangle p_j \geq \frac{1}{2}\,\delta_{ij}.$$

この不等式により、q_i と p_i が同時に決定できないのはもちろんですが、さらに、どちらかを決定してしまうと、もう一方の偏差 (ゆらぎ) が無限大になってしまうことがわかるでしょう。

(*注) シュワルツの不等式は、通常の線形代数の記法で、

$$|\boldsymbol{a}|\,|\boldsymbol{b}| \geq |< \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} >|.$$

これは一般に正定値内積空間において成り立ちます。証明ですが、$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{0}$ のときは自明、そうでないときは、

$$\begin{aligned}
|\,c\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}\,|^2 &= < c\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}, c\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b} > \\
&= < c\boldsymbol{a}, c\boldsymbol{a} > + < c\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} > + < \boldsymbol{b}, c\boldsymbol{a} > + < \boldsymbol{b}, \boldsymbol{b} > \\
&= c^* c\,|\boldsymbol{a}|^2 + c^* < \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} > + c < \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} >^* + |\boldsymbol{b}|^2 \\
&= \left(c^*|\boldsymbol{a}| + \frac{< \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} >^*}{|\boldsymbol{a}|} \right) \left(c|\boldsymbol{a}| + \frac{< \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} >}{|\boldsymbol{a}|} \right) - \frac{|< \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} >|^2}{|\boldsymbol{a}|^2} + |\boldsymbol{b}|^2 \\
&= \left| c|\boldsymbol{a}| + \frac{< \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} >}{|\boldsymbol{a}|} \right|^2 - \frac{|< \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} >|^2}{|\boldsymbol{a}|^2} + |\boldsymbol{b}|^2
\end{aligned}$$

が任意の複素数 c に対して 0 以上であることから示されます。

11.14 固有ベクトルの変換

力学変数 q_i の無限小変換が、ϵ_a を無限小の変換パラメータとして、

$$\delta q_i = \epsilon_a G_{ai}(q)$$

のように q_i だけの関数として与えられ、この変換に対しラグランジアン L が不変な場合、ネーターの定理から $Q_a = p_i G_{ai}(q)$ が保存しますが、このとき正準交換関係から、

$$[q_i, Q_a] = [q_i, p_j]\, G_{aj}(q) = i\delta_{ij} G_{aj}(q) = iG_{ai}(q)$$

であることに注意して、無限小変換の式は、

$$\delta q_i = i\epsilon_a [Q_a, q_i]$$

と書けます。また、交換子のライプニッツ則に注意すると、一般に多くのモデルにおいて、物理量 $A(q,p)$ に対し、

$$\delta A = i\epsilon_a [Q_a, A]$$

がいえます。例えばハイゼンベルグ方程式 : $dA = idt\,[H, A]$ は、この式を時間並進変換に適用したものになっていることに注意してください。

上式は、

$$A' = A + i\epsilon_a Q_a A - i\epsilon_a A Q_a = (1 + i\epsilon_a Q_a)A(1 - i\epsilon_a Q_a) = e^{i\epsilon_a Q_a} A\, e^{-i\epsilon_a Q_a}$$

と表せるので、有限の変換においては、有限の変換パラメータを θ_a として、

$$A' = UAU^{-1}, \quad U = e^{i\theta_a Q_a}$$

と書けます。Q_a がエルミートなら U は**ユニタリ演算子**である ($U^\dagger U = 1$ を満たす) ことに注意。

一方、固有方程式 $A|n\!>= a_n|n\!>$ の無限小変換を考えると、

$$\delta A|n\!> + A\delta|n\!> = a_n \delta|n\!>$$

ですが、これに δA の式を代入し、整理すると、

$$(A - a_n)(\delta|n\!> - i\epsilon_a Q_a|n\!>) = 0$$

を得ます。よって固有ベクトルの変換式は、位相の不定性を除き、

$$\delta|n\!> = i\epsilon_a Q_a|n\!>$$

で与えられます。有限の変換においては、

$$|n\!>' = U|n\!>, \quad U = e^{i\theta_a Q_a}.$$

ネーターの保存量 Q_a は、正準量子論においては、固有ベクトルに対する変換の**生成子**になっているというわけです。($U = e^{i\theta_a Q_a}$ で θ_a が実パラメータのとき、Q_a は U を生成するといいます。)

例えば、N 次元空間の粒子の系において、座標並進変換 : $q_i' = q_i + a_i$ を行うと、座標並進に関する保存量が運動量 p_i であることに注意して、新しい系における位置の固有ベクトルは、

$$\begin{aligned}|x\!>' &= e^{ia_i p_i}|x\!> = \int d^N k\ e^{ia_i p_i}|k\!><\!k|x\!> = \int d^N k\ e^{ia_i k_i}|k\!> \frac{e^{-ik_i x_i}}{(2\pi)^{N/2}} \\ &= \int d^N k\ |k\!> \frac{e^{-ik_i(x_i - a_i)}}{(2\pi)^{N/2}} = \int d^N k\ |k\!><\!k|x - a\!> = |x - a\!>\end{aligned}$$

となります。

11.15 猫のパラドックスと多世界解釈

1935 年、シュレーディンガーは量子論における確率解釈が甚だ理解しがたいものであることを示すため、以下のようなパラドックスを提示しました。

いま、放射性物質とそこから生じる高エネルギー粒子を感知するガイガーカウンターを用意し、ガイガーカウンターが粒子を 1 個でも感知すると毒ガスが噴出される装置を作ります。少々残酷ですが、この危険な装置と生きた猫を一緒に箱に収め、箱の扉を閉じて外系から完全に遮断します (図 11.3)。

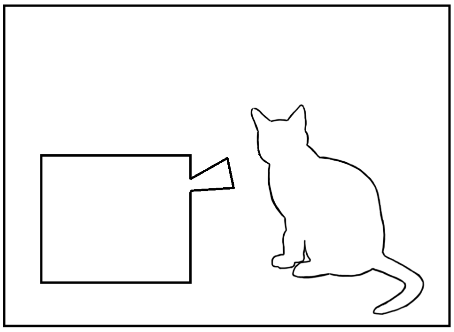

図 11.3: 猫のパラドックス

量子論の確率解釈によれば、放射性物質が高エネルギー粒子を生じるか否かは確率においてしか決まらず、扉を閉じてから時間 t 後の箱の中の状態は、

$$\psi(t) = \sum_k c_k^{生}(t)\,\phi_k^{生} + \sum_l c_l^{死}(t)\,\phi_l^{死}$$

といった波動関数で表されるはずです。ここで $\phi_k^{生}$ は猫が生きている状態の固有関数で、k は他の状態パラメータ (量子数) を意味します。また、$\phi_l^{死}$ は猫が死んでいる状態のそれです。$c_k^{生}(t)$, $c_l^{死}(t)$ は複素数に値をとり、$t = 0$ では $c_l^{死}(t) = 0$ ですが、$t > 0$ では $c_l^{死}(t) \neq 0$ となるでしょう。すなわち $t > 0$ において、猫は "生きた状態と死んだ状態の重ね合わせ" といった奇妙な状態になると考えられるわけです。これを**猫のパラドックス**といいます。

このパラドックスに対する保守的で実践的な回答は、放射性物質から発せられた粒子をガイガーカウンターが感知したときに粒子の波動関数が収縮し、その後の猫が死ぬまでの事柄はマクロな現象であり、量子論で扱うべきではないとするものです。しかしガイガーカウンターも猫も究極的には素粒子からできていて、ミクロとマクロの境界は原理的には存在しません。すなわち箱の中を 1 つの量子系とみなすことが可能なはずで、このような回答は問題の完全な解決にはなっていないでしょう。

別のやや過激な回答として、箱の扉を開けるまで確かに猫は生死の重ね合わせにあり、扉を開けて観測者が猫を観測したとき、はじめてその観測者にとっての

猫の波動関数が収縮し、猫の生死が確定するとする解釈があります。しかしこれでは波動関数が観測者に固有な量になり、物理的な客観性を失います。例えば扉を開けたことを知らない別の人にとっては、猫はいまだ生死の重ね合わせにあり、波動関数は人 (意識?) によって異なることになってしまいます。哲学的には面白いでしょうが、物理としては到底許容できません。

こういった問題は一般に**観測問題**と呼ばれます。突き詰めれば、

一体どの段階で波動関数が収縮するのか

という問題とみなせます。

近年主流になっている回答は、**多世界解釈**と呼ばれるもので、波動関数の収縮はいわば観測者の錯覚であり、一切起こらないとする大胆な解釈です。多世界解釈では、箱の扉を開けるまでは猫は生死の重ね合わせにあり、扉を開けると箱の外部の系 (環境) が内部の系と相互作用し、外部の系も内部の系と量子論的な相関 (**量子もつれ**) を持った重ね合わせの状態になると考えます。すなわち猫の生死を確認した観測者は、生きた猫を確認した観測者と死んだ猫を確認した観測者の重ね合わせになると考えるわけです。

この解釈によれば、宇宙全体の波動関数はその始まり以来一度も収縮せず、シュレーディンガー方程式に従ってユニタリ発展しているだけです。そしてそれはあらゆる可能な世界の固有関数の重ね合わせになっています。太陽系ができなかった世界の固有関数、地球はあるがそこに生命体が生まれなかった世界の固有関数など、様々な世界の重ね合わせです。そのうちの 1 つを貴方は認識しているわけです。もちろん別の世界を認識している貴方も無数にいます。少し狂気じみていますが、数学的にはこの解釈が一番スマートであると考えられるのです。

(余談)　観測問題は若い人が取り組むべき問題ではないとよく言われます。形而上学的側面 (哲学的側面) が強く、生産的でないとみなされているからです。逆にいえば、時間に余裕のある老人の趣味としては適当でしょう。若いうちは最先端の物理やハイレベルな数学をがっつりやり、齢をとって脳が働かなくなると観測問題や科学史をやる、というのがよくあるパターンのようです。ちなみに多世界解釈は狂気じみているようですが、一方で決定論においては、宇宙が始まったときにすでに「貴方が明日どこどこのレストランでなになにを注文する」ということまで決まっていることに注意。これはこれで狂気じみています。あるいはこれと比較すれば、まだ多世界解釈の方が穏便と考える人も多いでしょう。理論物理学を追及すると、どのみち「小説よりずっと奇な事実」に行きついてしまうわけです。

索 引

や

ら