

基礎方程式とその意味を考える (前半：量子力学)

松尾 泰 (前半担当)

平成30年5月17日

目次

1	はじめに	3
2	物理定数から見た現代物理学	3
2.1	光速と特殊相対論	4
2.2	プランク定数と量子論	4
2.3	重力定数と一般相対論	5
2.4	量子力学と相対論の統合	5
2.5	量子力学・相対論・重力の統合	5
3	シュレディンガー方程式概観	6
3.1	振動・波動の簡単なまとめ	6
3.2	量子化	7
4	解析力学と正準量子化	8
4.1	最小作用の原理	8
4.1.1	関数の極値	8
4.1.2	作用汎関数とその変分	9
4.1.3	作用汎関数を用いる利点	11

4.1.4	変分法のその他の応用: 最速降下線	13
4.2	ハミルトニアン定式化	14
4.2.1	一般化	15
4.3	量子化	16
5	量子力学の枠組み	17
6	簡単な系における量子力学の振る舞い	20
6.1	波束と不確定性原理	20
7	第二量子化とは	20

1 はじめに

この講義の趣旨は量子力学や相対性理論の解説を通じて物理学の基礎方程式について概観し、その基本的な構造について理解を深めてもらうことにある。私が担当する前半部分では量子力学について解説する。量子力学を理解するためには高校時代に勉強した古典力学を再考し、量子力学の枠組みに会うような形に再構成する必要がある。特に理解してもらいたい点としては

- 波と粒子の双対性
- 粒子描像からシュレディンガー方程式へ
- 最小作用の原理
- 量子化とは
- 波の量子化による粒子描像

特に決まった教科書を使うわけではないが、量子力学についての入門的教科書（薄いもので十分）を一冊手にとって勉強してもらえば、この講義を聴講した意味は十分あると思われる。色々あると思われるがわたしが知っているものでは以下のものが上げられる。

- 阿部龍蔵 「量子力学入門」
- ランダウ・リフシッツ 理論物理学小教程（ちくま学芸文庫）「力学・電磁気学」「量子力学」

ランダウ・リフシッツは大教程もあるが大学初年度に読むのは高度すぎる。

2 物理定数から見た現代物理学

物理学の基本単位として、MKSA系がある。長さ（m）、重さ（kg）、秒（s）、電流（A）を基本にして残りの単位はすべてこれらの基本単位から書くことが可能になる。実際には電流の単位は次元を持たない定数とその他の3つで書くことができるので、次元を持つ基本単位は3種類ということになる。

1m, 1kg, 1sなどの単位は人間のスケールで決められたものであり、必ずしも物理学から必然的に導かれるものではないことに注意する。実際、古典物理学から現代物理学に至る過程で、物理定数と呼ばれるものが発見され、これらの単位の自然な関係が導かれた。

2.1 光速と特殊相対論

現代物理への最初のステップは光速不変性の発見であろう。つまり、光の速度

$$c = 3.00 \times 10^8 \text{ [ms}^{-1}\text{]}$$

は観測者によらず一定である。対応する理論は特殊相対論である。特殊相対論は光速に近い高速度で動く物体の物理学である。典型的に現れるのは素粒子・原子核の運動や宇宙物理学である。特殊相対論では長さの単位 L と時間の単位 T を光速を用いて関連付けるのが便利である。例えば宇宙物理学では光が一年間 ($T = \text{一年}$) に伝搬できる距離を長さの単位 ($L = \text{一光年}$) とする。このように単位を取ると $L = cT$ すなわち $c = LT^{-1}$ となり、これらの単位をとったときの光速は 1 となる。

光速を基本にすると、様々な単位を比較することができるようになる。例えば、質量とエネルギーの単位は MKSA 系では異なるが、質量 m の物体に対して mc^2 はエネルギーの単位となり、質量とエネルギーの単位が同一視できることがわかる。この式は言うまでもなくアインシュタインの公式 $E = mc^2$ である。

2.2 プランク定数と量子論

現代物理学のもう一つの柱、量子力学はプランク定数の発見を導いた。量子力学とは原子のスケールでは粒子と波動という相反する概念が、互いに双対な描像になっていることを示した理論である。プランク定数、

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ [kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}\text{]}$$

は (運動量) \times (長さ)、あるいは (エネルギー) \times (時間) という単位を持っている。

波と粒子の双対性をあらわす実験として電子波の実験が有る。粒子であるはずの電子が干渉現象をおこすことをしめしたもので電子持つ運動量 p と電子波の波長 λ が

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

という関係式で結び付けられる。

一方光電効果の実験では波であるはずの電波 (= 光) を固体に照射したときに電子が飛び出る現象で、光を波と考えると矛盾に陥る実験結果が現れ、振動数 ν の光はエネルギー

$$E = h\nu$$

の粒子 (光子と呼ばれる) と解釈すると正しい説明が得られる。

このように粒子を波に、波を粒子と再解釈するときにプランク定数 h が現れる。プランク定数が非常に小さいことから理解できるように、粒子と波の双対性は非常に小さなスケール、典型的には原子のレベルよりも小さな領域で現れる。

2.3 重力定数と一般相対論

特殊相対論や量子力学とは違い、重力は身近な物理として現れる。質量 m, m' を持つ物体の間に働く力は重力定数

$$G = 6.67 \times 10^{11} [m^3 kg^{-1} s^{-2}]$$

を通じて $F = G \frac{mm'}{r^2}$ (r は二体間の距離) のように書かれる。この法則は古典的であるが、アインシュタインによりより基本的な法則、一般相対論に昇華された。

2.4 量子力学と相対論の統合

量子力学の通常適用される範囲である原子のスケールよりも更に高エネルギー (= 小さなスケール) になると、量子論と相対論を同時に適用する (統合する) 必要がある。典型的には素粒子や原子核の物理学はこの範疇に入る。このような系を扱うためには3つの単位系を揃えて $c = \hbar = 1$ となるように取るのが便利である。つまり

$$c = L/T = 1, \quad \hbar = ML^2 T^{-1} = cML = 1 \quad \rightarrow \quad T = L/c, \quad M = \frac{\hbar}{cL} \quad (1)$$

このような単位系を自然単位系と呼ぶ。この場合、一つのスケール (例えば L) を決めると残りのスケールは全て自動的に決まってしまう。特に L を原子核の大きさ ($L = 10^{-15} \text{m} = 1 \text{fm}$) とすると質量のスケールは $M = 0.3 \times 10^{-27} \text{kg}$ となり核力を仲介する中間子程度の重さとなる。

2.5 量子力学・相対論・重力の統合

統合を更に進めて重力も含める、 $c = \hbar = G = 1$ となるような単位系が自然になる。この場合、

$$c = \frac{L}{T}, \quad \hbar = \frac{ML^2}{T}, \quad G = \frac{L^3}{MT^2}$$

となり、これからすべての単位が物理定数を用いて書くことが可能となる。

$$L = \sqrt{\frac{G\hbar}{c^3}}, \quad T = \sqrt{\frac{G\hbar}{c^5}}, \quad M = \sqrt{\frac{c\hbar}{G}}.$$

このようにして得られた単位はプランク長さ、プランクエネルギーなどと呼ばれ、 $L = 1.6 \times 10^{-35} \text{m}$ などのように原子核のスケールから見ても 10^{-20} ほど小さなスケールとなる。このような系はストリング理論などで記述され、ブラックホールの地平線近傍や初期宇宙のように超高エネルギーで強い重力が支配する非常に極端な系で成立する物理学である。

3 シュレディンガー方程式概観

量子力学の基礎方程式はシュレディンガー (Schrödinger) 方程式である。まず方程式を書き下してみよう。最も簡単な系として1次元自由粒子系を考えよう。質量を m とすると方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (2)$$

まずはこの方程式の記号の意味を説明する。

- $\psi(x, t)$ は2変数 x (1次元空間の座標)、 t (時間) に依存する2変数関数。複素数に値を取る。波動関数と呼ばれ、物体の点 x における存在確率をあらわす (あとで説明する)。
- ψ は「プサイ」と読む。 \hbar はプランク (ディラック) 定数で「エイチバー」。物理の方程式ではギリシャ文字がよく用いられるので読み方を覚えておこう。
- ∂ は偏微分をあらわす記号。偏微分とは多変数関数に対する微分を表していて、

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\psi(x, t + \epsilon) - \psi(x, t)}{\epsilon}, \quad \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\psi(x + \epsilon, t) - \psi(x, t)}{\epsilon} \quad (3)$$

分母に指定された変数以外の変数を定数と考えて、微分を行うことを意味している。シュレディンガー方程式 (2) は偏微分を用いて書かれているので偏微分方程式と呼ばれる。物理学に現れる方程式は偏微分方程式で書かれる事が多く、物理的な解釈とともにその解法を学ぶことは大事なステップとなる。

3.1 振動・波動の簡単なまとめ

自由粒子に対する方程式は振動・波動の知識を用いて解くことができる。振動・波動は三角関数で書かれるので基本的な公式を思い出しておく。

周期 T 、波長 λ の波動：

$$\psi_R(x, t) = A \cos(2\pi(t/T - x/\lambda)) + B \sin 2\pi(t/T - x/\lambda) \quad (4)$$

$$\psi_L(x, t) = A \cos(2\pi(t/T + x/\lambda)) + B \sin 2\pi(t/T + x/\lambda) \quad (5)$$

(A, B は複素数の定数) これらの関数は周期性 $\psi(x, t+T) = \psi(x, t)$, $\psi(x+\lambda, t) = \psi(x, t)$ を満たし、周期 T 、波長 λ の波動を表している。 $\psi_R(x, t)$ は x 軸正の方向 (右向き) に伝わる波、 $\psi_L(x, t)$ は負の向きに伝わる波をあらわす。 T と λ から振動数 $\nu = 1/T$, 角振動数 $\omega = 2\pi\nu$, 波数 $k = 2\pi/\lambda$ などが定義される。¹また波の進む速さは $V = \lambda/T = \omega/k$ で与えられる。 k と ω を用いると波動の式はやや簡明になる。例えば ψ_R は

$$\psi_R(x, t) = A \cos(\omega t - kx) + B \sin 2\pi(\omega t - kx) \quad (6)$$

波の反射・干渉などは高校で勉強したはず。これらの式は2回偏微分すると

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi_R(x, t) = -\omega^2 \psi_R(x, t), \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_R(x, t) = -k^2 \psi_R(x, t) \quad (7)$$

を満たすので ψ_R, ψ_L 共通に満たされる方程式は

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - V^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0 \quad (8)$$

これは速度が V の波を記述する方程式であり、**波動方程式**と呼ばれる。

指数関数と三角関数の関係 シュレディンガー方程式を偏微分方程式を用いて理解しようとする、三角関数をオイラーの公式

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta \quad (9)$$

を用いて指数関数にするほうが便利である。幾つか証明があるが講義では微分方程式を用いた方法と、Taylor 展開を用いた証明を行った。(あとで書き込む予定)

3.2 量子化

波動関数は指数関数を用いると次のように書ける。

$$\psi(x, t) = C e^{ikx - i\omega t} \quad (10)$$

この形の波動関数に偏微分を作用させると、

¹ギリシャ文字の読み方： λ は「ラムダ」、 ν は「ニュー」、 ω は「オメガ」

- 時間微分： $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hbar\omega\psi$ 。つまり時間微分を行うと $\hbar\omega$ という因子が現れるが、これはエネルギーと振動数の関係 $E = \hbar\omega$ を用いるとエネルギーにほかならない。
- 空間微分： $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi = \hbar k\psi$ 。つまり空間微分からは $\hbar k$ を得るが、これは $p = \hbar k$ より粒子の運動量と解釈できる。

これから指数関数を用いて書かれた波の式に対しては粒子の物理量と偏微分の間

$$E \leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad p \leftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad (11)$$

のように関係づけられる。

古典力学系で自由粒子の運動量とエネルギーの関係は

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

となるがシュレディンガー方程式は上記のような置き換えを行ってエネルギーと運動量をそれぞれ微分に置き換えた式と考えられる。平面波に対しては振動数と波数の関係は通常とは異なり

$$\hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$$

となることに注意する。(11) のような置き換えを行うことを量子化と呼ぶ。このような置き換えをどうして行うのかについては次の解析力学の項で説明する。

4 解析力学と正準量子化

4.1 最小作用の原理

物理学に現れる多くの方程式は作用汎関数と呼ばれる量を最小化（より正確には極値）により得られる。まずこれについて説明する。

4.1.1 関数の極値

汎関数に行く前に関数の極値がどのようにして得られるのかを復習する。まず、一変数関数の場合は、関数 $f(x)$ が極大・極小値をとる x に対する方程式は

$$\frac{df}{dx} = 0 \quad (12)$$

から導かれる。この方程式は関数が極値をとるためには隣り合う点 x と $x + \Delta x$ で関数の値が等しい

$$f(x + \Delta x) - f(x) = \Delta x \frac{df}{dx} = 0$$

ということを表している。多変数関数 $f(x_1, \dots, x_N)$ に対してこの考え方を適用すると、

$$f(x_1 + \Delta x_1, \dots, x_N + \Delta x_N) - f(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i} \Delta x_i + \text{高次の項}$$

となるため (12) の代わりにその一般化

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \dots = \frac{\partial f}{\partial x_N} = 0 \quad (13)$$

を要請することになる。 N の未知変数 x_1, \dots, x_N に対して N 個の方程式がたつため、一変数の場合と同様に解は離散的な点の集合を表すように思えるが実際にはそれほど簡単ではない。それを説明するために以下のような例を取り上げる。

例 2変数に依存する次のポテンシャルエネルギーが最小になる点を求めなさい。

$$V(x, y) = \frac{a}{2}(x^2 + y^2) + \frac{1}{4}(x^2 + y^2)^2$$

解: 偏微分を行うと条件は

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial x} &= ax + (x^2 + y^2)x = x(x^2 + y^2 + a) = 0 \\ \frac{\partial V}{\partial y} &= ay + (x^2 + y^2)y = y(x^2 + y^2 + a) = 0 \end{aligned} \quad (14)$$

$a > 0$ の場合は $x^2 + y^2 + a > 0$ となるため解は $x = y = 0$ のみ。

一方 $a < 0$ の場合は $x = y = 0$ という点以外に $x^2 + y^2 = -a = |a|$ という円も解になる。つまり半径 $\sqrt{|a|}$ の円周上の点はすべてポテンシャルエネルギーを極小にしている。このようなポテンシャルエネルギーは対称性の破れという現象と深い関連がある。(もともとのポテンシャルエネルギーは2次元の回転に対して不変、一方一旦極小値を円上の何処かに取ると回転対称性が破れる)

4.1.2 作用汎関数とその変分

力学系の場合、極値を取るべき対象は作用汎関数と呼ばれ、 \hbar の次元を持つ。ポテンシャルエネルギー $V(x)$ の下での自由粒子の運動の場合、作用汎関数は次のように与えられる。

$$S[x(t)] = \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right) dt \quad (15)$$

ここで初項は粒子の運動エネルギー、第二項はポテンシャルエネルギー（の符号を反転したもの）を表す。 $S[x(t)]$ は時間 t の関数である粒子の座標 $x(t)$ が与えられたとき、積分を通じてある値を返すので、関数の関数、すなわち汎関数と呼ばれるものである。

多変数関数の場合と同様にこの汎関数の極値を求めるためには時間に依存する粒子の座標 $x(t)$ を $x(t) + \Delta x(t)$ のように少しずらしたときに作用汎関数が不変になるような $x(t)$ が満たす条件を求める必要がある。（ $\Delta x(t)$ は時間に依存する微小な関数）実際に $x(t)$ をずらしたときに作用汎関数がどの程度変化するか以下のように評価してみよう。

$$\begin{aligned}
S[x(t) + \Delta x(t)] - S[x(t)] &= \int dt \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} + \frac{d\Delta x}{dt} \right)^2 - V(x(t) + \Delta x(t)) \right) \\
&\quad - \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right) dt \\
&= \int_{t_0}^{t_1} \left(m \frac{dx}{dt} \frac{d\Delta x}{dt} - \frac{dV(x(t))}{dx} \Delta x(t) \right) dt \\
&= m \frac{dx}{dt} \Delta x(t) \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_{t_0}^{t_1} \left(m \frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{dV(x(t))}{dx} \right) \Delta x(t) dt
\end{aligned} \tag{16}$$

ここで最後の式変形は部分積分を用いた。ポテンシャル $V(x)$ は一変数関数であるが引数に時間に依存する関数 $x(t)$ を取るので変化量を評価するときは通常 of 微分を用いて良い。最後の式の第一項は境界の値の依存性を表しているが $\Delta x(t_0) = \Delta x(t_1) = 0$ と仮定するとこの項はゼロになる。このような境界条件を持つ任意の微小変動に対して作用汎関数が不変になるための条件は $\Delta x(t)$ の係数をゼロとおいたもの、すなわち

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{dV(x(t))}{dx} = 0 \tag{17}$$

である。これはポテンシャル $V(x)$ の中を運動する質量 m の粒子に対する運動方程式にほかならない。

これを一般化してみよう。 $x_1(t)$ から $x_N(t)$ を力学変数とするとき作用汎関数は一般には次のような形で書けると仮定する（殆どの例で成立している）。

$$S[x_1(t), \dots, x_N(t)] = \int_{t_0}^{t_1} L(x_1(t), \dots, x_N(t), \dot{x}_1(t), \dots, \dot{x}_N(t)) dt \tag{18}$$

ここで $\dot{x}_i(t) = \frac{dx_i(t)}{dt}$ という略号を導入している。 $x_i(t)$, $\dot{x}_i(t)$ の関数である L はラグランジアンと呼ばれる。各 $x_i(t)$ を微小に変化させたときの作用汎関数の変化を評価してみよう。

$$\begin{aligned}
S[x(t) + \Delta x(t)] - S[x(t)] &= \int dt \left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial x_i} \Delta x_i(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \Delta \dot{x}_i(t) \right) \\
&= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \Delta x_i \Big|_{t_0}^{t_1} + \int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) \Delta x_i(t) dt = 0
\end{aligned} \tag{19}$$

一変数の場合と同様に境界、つまり $t = t_0, t = t_1$ において $\Delta x_i(t) = 0$ と仮定すると第一項はゼロとなる。第二項がゼロになるための条件は

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = 0 \quad (20)$$

この方程式はオイラー・ラグランジ方程式と呼ばれ、物理学に現れる殆どの方程式はこの形に導かれる。

4.1.3 作用汎関数を用いる利点

(i) 力学変数を自由にとれる 例：振り子運動。長さ l の紐の先に重さ m の重りを吊るす。ひもと鉛直方向のなす角度を θ 、地表の重力定数 g として、重りの速度は $l\dot{\theta}$ 、これから重りの運動エネルギーは $\frac{m\ell^2}{2}\dot{\theta}^2$ と書ける。一方重力によるポテンシャルエネルギーは $-mgl \cos \theta$ 。これからラグランジアンは

$$L = \frac{m\ell^2}{2}\dot{\theta}^2 + mgl \cos \theta$$

オイラー・ラグランジ方程式（運動方程式）は

$$m\ell^2 \frac{d\theta}{dt^2} + mgl \sin \theta = 0$$

この例の場合、系を最も簡単に記述する力学変数は θ なのでそれを用いてラグランジアンを書き下した。

(ii) 保存則と対称性の対応が明らかになる 一般に系がある変換に対して対称であればそれに対応する保存則が存在する。よくあげられる例としては

- 時間と空間の並進対称性に対応するエネルギー・運動量保存則
- 回転に対する不変性に対応する角運動量保存則
- 素粒子の内部対称性に対応する電荷保存則

まずは、一般論から。作用汎関数を $S = \int dt L(q, \dot{q})$ (ただし q は一般には N 個の力学変数 q_1, \dots, q_N の略号とする) 系が変換に対して不変であるとは、変換を $\delta q_i = \epsilon a_i(q)$ と書いたとき $S[q + \delta q] - S[q] = 0$ すなわち

$$L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}) - L(q, \dot{q}) = \epsilon \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} a_i(q) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{a}_i(q) \right) = \epsilon \frac{d}{dt} X(q, \dot{q})$$

の形に書けるはずである。(作用積分の変分がゼロになればよいが、全微分の積分はゼロなので)この時、

$$Q = \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} a_i - X$$

と置くと、 Q は保存する。すなわち $\frac{d}{dt}Q = 0$ が成立する。

証明：

$$\begin{aligned} \frac{dQ}{dt} &= \sum_{i=1}^N \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} a_i - X \right) \\ &= \sum_{i=1}^N \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) a_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{a}_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} a_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{a}_i \right] \\ &= \sum_{i=1}^N a_i \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} \right] = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

最後の等式ではオイラー・ラグランジ方程式を用いた。

実際にどのように保存則が得られるか考えてみよう。

運動量：空間の並進対称性とは座標変数を x_i ($i = 1, \dots, N$) とするとき $x_i \rightarrow x_i + \epsilon$ の下で作用が不変であることを意味している。具体的な例として

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (\dot{x}_i)^2 - \sum_{i < j} V(x_i - x_j)$$

のように与えられる場合を考える。第一項は運動エネルギーを表していて座標 x_i の時間微分で書かれているため不変である。第二項はポテンシャルエネルギーであるが、各質点の座標の差にしか依存していないので x_i と x_j を ϵ ずつずらしても不変である。上記の変分に対する保存チャージはラグランジアンが不変なので $X = 0$ となり、

$$Q = \sum_{i=1}^N m_i \dot{x}_i$$

この量は系の全運動量に対応している。物理法則は宇宙のどの場所でも同じように成立していなくてはならないので、系の全運動量は保存していると考えられる。

角運動量：簡単のため空間回転を $\delta x = -\epsilon y$, $\delta y = \epsilon x$ と書く。このような変換で不変な系のラグランジアンとして次のようなものを考える。

$$L = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - V(r), \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

半径 r のみに依存しているポテンシャルエネルギーは回転に対して不変である。また、第一項も不変であり $X = 0$ となる。保存チャージは

$$Q = m(-y\dot{x} + x\dot{y}) = xp_y - yp_x$$

これは角運動量にほかならない。

エネルギー：時間に対する並進対称性は $t \rightarrow t + \epsilon$ と書ける。物理変数を q_i と書くと、変数の変分としては $\delta q_i = \epsilon \dot{q}_i$ と書ける。ラグランジアンが力学変数 q_i, \dot{q}_i のみに依存しているとする

$$\delta L(q, \dot{q}) = \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right) = \frac{dL}{dt}$$

すなわち時間に対する並進対称性が存在していて $X = L$ となる。この場合の保存チャージは

$$E = \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L = \sum_i p_i \dot{q}_i - L \quad (22)$$

となる。これは系のエネルギーにほかならない。なお $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ は一般化された運動量と呼ばれる。

具体的な例として $L = \sum_i \frac{m_i}{2} \dot{x}_i^2 - V(x)$ と置くと $E = \sum_i \frac{1}{2m_i} p_i^2 + V(x)$ となり、通常考えるエネルギーと一致していることがわかる。

4.1.4 変分法のその他の応用：最速降下線

一般に関数に依存している量の極値を与える関数を求める方法を変分法と呼ぶ。このような問題の例としてよく取り上げられるものとして再速降下線の問題があげられる。空間の2点、例えば重力が y 方向にかかって（重力ポテンシャル $V(x, y) = mgy$ ）いる場合を考える。原点 $O(0, 0)$ と点 $P(1, -h)$ を ($h > 0$) をある曲線 $y = -f(x)$ ($f(0) = 0, f(1) = h$) で結び、この曲線上を質点が摩擦無しで運動したとき点 O から点 P に至る時間が最も速くなる曲線 $y = f(x)$ はどのようなものか考える。

鉛直位置が $y (< 0)$ での速度はエネルギー保存則により $\frac{1}{2}mv^2 = -mgy$, すなわち $v = \sqrt{-2my}$ となる。一方 x 座標 x から $x + \delta x$ の間の距離を δs とすると $\delta s^2 = \delta x^2 + \delta y^2 = (1 + f'(x)^2)\delta x^2$ となる。これから質点が点 O から点 P に到達するために必要な時間は

$$T = \int_0^1 dx \sqrt{\frac{1 + f'(x)^2}{2gf(x)}}$$

となる。 T を最小とするような $f(x)$ をオイラー・ラグランジ方程式を用いて求める。

この問題ではラグランジアンに相当するものが $L = \sqrt{\frac{1+f'(x)^2}{f(x)}}$ となり (定数である $2g$ は省いた) 時間 t に相当するものが座標に置き換わっている。このとき L は x に陽に依存していないのでエネルギー (22) に相当している

$$\frac{\partial L}{\partial f'} f' - L = \frac{1}{\sqrt{f(1+f'^2)}}$$

は x に依存しない。つまり $f(1+f'^2) = 2a$ (a は定数) と書ける。これが最速降下線を与える微分方程式となる。解法は技術的になるので省略するが、解は以下の形にかける。

$$x(\theta) = a(\theta - \sin \theta), \quad f(x(\theta)) = y = a(1 - \cos \theta) \quad (23)$$

ここで θ は補助変数。微分方程式を満たすことを示すには $f'(x(\theta)) = \frac{df}{d\theta} \left(\frac{dx}{d\theta}\right)^{-1}$ などを用いると $f'(x(\theta)) = (a \sin \theta)(a(1 - \cos \theta))^{-1} = \cot(\theta/2)$ 。この式を代入すると $f(x(\theta))(1+f'(x(\theta))^2) = 2a$ となり与えられた微分方程式と一致する。補助変数で与えられる曲線 (23) はサイクロイドと呼ばれる。

4.2 ハミルトニアン定式化

ラグランジアンによる定式化は抽象的ではあったが座標変数を任意に取れるという長所があった。量子力学への橋渡しを行うためには更に方程式を書き換えるほうが見通しが良い。

説明をある程度具体的に述べるためにこれまでよく取り上げてきたラグランジアン $L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)$ について考察しよう。前に述べたようにこの系の運動量は $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$ により定義される。この時運動方程式 $m\ddot{x} + V'(x) = 0$ は次の2つの方程式に分解することができる。

$$\dot{x} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -V'(x) \quad (24)$$

この方程式を形式的ではあるが以下のように書き換える。運動量と座標変数で書き下したエネルギーをハミルトニアンと呼ぶ。

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

この時、運動量の定義と運動方程式は以下のような方程式に書き換えることができる。

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (25)$$

座標変数と運動量変数がハミルトニアン関数を通して対称に入っているのが特徴的である。この対称性をより明確に見るためにポアソン括弧式と呼ばれるものを x と p に依存する関数に対して次のように定義する。

$$\{f(x, p), g(x, p)\} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial x} \quad (26)$$

この記号を用いると運動方程式はより対称な形に書ける。

$$\dot{x} = \{x, H\}, \quad \dot{p} = \{p, H\} \quad (27)$$

より一般に x と p に依存する関数 $f(x, p)$ の時間変動は同じ形で書ける。

$$\dot{f}(x, p) = \frac{\partial f}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial f}{\partial p} \dot{p} = \{f, H\}. \quad (28)$$

以上のハミルトニアンとポアソン括弧を用いた定式化は座標変数 x と運動量変数 p を対等に取り扱うという意味で x と p を双対な変数として取り扱う量子力学への自然な橋渡しとなる。

4.2.1 一般化

ハミルトニアン定式化は一般の力学変数 q_i ($i = 1, \dots, N$) を用いる系に自然に拡張できる。系のラグランジアンを $L(q, \dot{q})$ とする。運動方程式は Euler-Lagrange 方程式 (20) である。この系の一般化された運動量は

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad (i = 1, \dots, N) \quad (29)$$

で定義される。この方程式の左辺は q, \dot{q} の関数である。上記の方程式は N 個の代数方程式に書き換えられるので、 $\dot{q}_i = f_i(q, p)$ の形に解くことが可能のはず。それを使うとハミルトニアンが q_i, p_i の関数として書かれるはずである。

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}) = \sum_i p_i f_i(q, p) - L(q, f(q, p)) \quad (30)$$

この時、オイラー・ラグランジ方程式 (20) と一般化された運動量 (29) の表式は (28) と同じ次の形に書くことが可能である。

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\}, \quad \dot{p}_i = \{p_i, H\}, \quad i = 1, \dots, N \quad (31)$$

証明 :

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = f_i + \sum_j p_j \frac{\partial f_j}{\partial p_i} - \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \cdot \frac{\partial f_j}{\partial p_i} = f_i = \dot{q}_i \quad (32)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = \sum_j p_j \frac{\partial f_j}{\partial q_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} - \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \cdot \frac{\partial f_j}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \quad (33)$$

ここで $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i$ となることを用いた。 □

一般化されたポアソン括弧式を

$$\{f(x, p), g(x, p)\} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial x_i} \right) \quad (34)$$

を用いると q_i, p_i に依存する関数の時間微分は (25) と同じ形に書くことができる。

$$\frac{df(q, p)}{dt} = \{f, H\} \quad (35)$$

となる。

4.3 量子化

古典的な力学方程式をハミルトニアン形式で書き換えると、量子化の手続きが明快になる。以前行った運動量変数の書き換えを思い出す。

$$p \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

左辺の微分演算子を $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ と書くことにする。ここで p の上に付けた $\hat{}$ は下の変数が演算子であることを意味する。同様に座標 q も関数 $\psi(q)$ に対する演算子 $\hat{q}\psi(q) = q\psi(q)$ を導入する。つまり

$$\hat{q}\psi(q) = q\psi(q), \quad \hat{p}\psi(q) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial q} \quad (36)$$

により定義される。この時

$$\hat{q} \cdot \hat{p} \cdot \psi(q) = \hat{q} \left(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial q} \right) = -i\hbar q \frac{\partial \psi}{\partial q}, \quad \hat{p} \cdot \hat{q} \cdot \psi(q) = \hat{p}(q\psi(q)) = -i\hbar \frac{\partial (q\psi(q))}{\partial q} = -i\hbar \psi(q) - i\hbar q \frac{\partial \psi}{\partial q}$$

両者の差を取ると

$$\hat{q} \cdot \hat{p} \cdot \psi(q) - \hat{p} \cdot \hat{q} \cdot \psi(q) = i\hbar \psi(q)$$

この関係式は任意の関数 $\psi(q)$ に対して成立するので \hat{q}, \hat{p} の間には次の関係をもつ。

$$\hat{q} \cdot \hat{p} - \hat{p} \cdot \hat{q} = [\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \quad (37)$$

$[A, B] = A \cdot B - B \cdot A$ は交換関係と呼ばれる。数の掛け算とは違い演算子の作用は、順番により結果が異なる。ポアソン括弧 $\{q, p\} = 1$ と交換関係はよく似ており、古典力学から量子力学を定義する指針を与える。すなわち、

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] \quad (38)$$

ポアソン括弧から交換関係を定義することを正準量子化と呼ぶ。

交換関係式を用いて量子力学の運動方程式を (31) の形に書き下すことができる。

$$i\hbar \frac{d\hat{x}}{dt} = [\hat{x}, \hat{H}], \quad i\hbar \frac{d\hat{p}}{dt} = [\hat{p}, \hat{H}]. \quad (39)$$

この方程式はハイゼンベルグ方程式と呼ばれる。ここで \hat{H} は古典論のハミルトニアン $H(x, p)$ を量子変数に置き換えたものである $\hat{H} = H(\hat{x}, \hat{p})$ 。²波動方程式を用いて定義されるシュレディンガー方程式と、演算子を用いて書かれるハイゼンベルグ方程式は同等であるが少し違う観点で物理系を記述する。シュレディンガー描像では演算子は固定、波動関数が時間発展する。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi, \quad \frac{d}{dt} \hat{x} = \frac{d}{dt} \hat{p} = 0 \quad (40)$$

ハイゼンベルグ描像では演算子が時間発展し (39)、波動関数は固定される。詳しい説明は教科書などを参照。以下ではシュレディンガー描像で解説を行う。

5 量子力学の枠組み

- 古典力学では $x(t)$, $p(t)$ などが粒子の状態を表す。(時間 t における座標・運動量)
- 量子力学では波動関数 $\psi(x, t)$ が粒子の状態を表す。物理量、例えば座標 x を測定するとき、量子力学では確定した値を取らず測定のたびに異なる値を返すが、特定の値 x を取る確率(密度)が $|\psi(x)|^2$ により与えられる。例えば領域 $[a, b]$ に粒子が存在する確率は

$$\int_a^b dx |\psi(x)|^2$$

で与えられる。全領域 $x \in (-\infty, \infty)$ のどこかに粒子はいなくてははいけないので、確率密度の積分は1でなくてははいけない。

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

この式は波動関数の規格化条件と呼ばれる。波動関数の時間発展はシュレディンガー方程式 (40) により与えられる。

- 座標や運動量など、古典力学の力学変数は量子力学では波動関数に作用する演算子とみなされる (36)。波動関数が与えられた時に、座標や運動量の平均値は

$$\bar{x} = \int dx \psi^*(x) x \psi(x), \quad \bar{p} = \int dx \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) = \int dx \psi^*(x) (-i\hbar) \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

²ハミルトニアンが x と p に複雑に依存する関数の場合には変数の順番によりハミルトニアンの定義が変わる。通常の定義では Weyl ordering というものが用いられる。

等のように演算子の波動関数への作用を用いて得られる。座標の広がりなども

$$\langle (\hat{x} - x)^2 \rangle = \int dx \psi^*(x) x^2 \psi(x) - \left(\int dx \psi^*(x) x \psi(x) \right)^2$$

等を用いれば得られる。

- ある演算 \hat{A} に対して決まった値を返す、

$$\hat{A}\psi = a\psi, \quad a \in \mathbb{C}$$

このような状態 ψ を演算子 \hat{A} に対する固有状態とよび、 a を固有値と呼ぶ。波動関数を固有関数と呼ぶ。波動関数が固有関数の場合には物理量 \hat{A} の測定では固有値 a が確定的に得られる。

- 運動量が p の固有関数は

$$\hat{p}\psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p\psi \quad \rightarrow \quad \psi(x) \propto e^{ipx/\hbar}$$

で与えられる。

- 座標演算子 \hat{x} の (固有値 a に対する) 固有関数は $x\psi(x) = a\psi(x)$ を満たす必要がある。解は Dirac のデルタ関数を用いて $\psi(x) = \delta(x - a)$ と書かれる。なお Dirac のデルタ関数は、次の性質を満たす。

$$\delta(x) = 0, \quad (x \neq 0), \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) = 1 \quad (41)$$

つまり $x = 0$ でのみゼロでない値 (実際には無限大) をもち、積分すると 1 になる関数であり、点粒子があったときの質量密度などがデルタ関数を用いて表現される。ただ、通常関数とは性質が大きく異なるため超関数 (hyperfunction, distribution) などと呼ばれる。デルタ関数は次のような性質を持つ。

$$f(x)\delta(x) = f(0)\delta(x), \quad (42)$$

$$x \frac{d\delta(x)}{dx} = -\delta(x), \quad (43)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (44)$$

- 任意の波動関数は物理量 \hat{A} の固有状態の線形和 (積分) として表現できる。

$$\psi(x) = \sum_a C_a \psi_a, \quad \int dx \psi_a^*(x) \psi_b(x) = \delta_{ab}$$

第二式のような規格化が可能な場合 (固有値が離散的な値を取るときに対応する) には、物理量 \hat{A} の固有値を測定したときに値が a となる確率は固有関数の係数を用いて $|C_a|^2$ となる。

- \hat{x} や \hat{p} のように連続固有値を取る場合には線形和は積分で書き換えられる。例えば、 \hat{x} の場合は

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} da \psi(a) \delta(x - a), \quad \int dx (\delta(x - a))^* (\delta(x - b)) = \delta(a - b)$$

のように固有関数 $\delta(x - a)$ で書かれ、係数 $|\psi(a)|^2$ は座標が a となる確率密度を表すことになる。

- 運動量 \hat{p} に対しては $\chi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ と置くと

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \chi_{p_1}(x)^* \chi_{p_2}(x) = \delta(p_1 - p_2)$$

となることが知られている。波動関数は $\chi_p(x)$ を用いて次のような積分で表現される。

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \chi_p(x) \tilde{\psi}(p), \quad \tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi_p(x)^* \psi(x) \quad (45)$$

このとき $|\tilde{\psi}(p)|^2$ が運動量が値 p を取る確率密度を与える。 $\tilde{\psi}(p)$ は運動量表示の波動関数と呼ばれる。

- 運動量に対する波動関数の書き換えは波動関数が平面波 e^{ikx} の線形結合（実際には積分）で書かれることを意味しているが、これは関数 $\psi(x)$ に対する Fourier 変換と呼ばれるものである。一般に任意の実関数 $f(x)$ は平面波の和として

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \tilde{f}(k)$$

のように書かれ、係数 $\tilde{f}(k)$ はもともとの関数の積分として

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} f(x)$$

のように書かれる。この公式は Fourier 変換と呼ばれ、大学で勉強する数学の中では最も有用な公式の一つである。上記の波動関数の運動量表示は $\hbar = 1$ とすると Fourier 変換の公式と一致する。

- 演算子の中で最も重要なものはハミルトニアン \hat{H} であり、その固有関数をエネルギー固有関数、固有値をエネルギー固有値と呼ぶ。量子力学を「解く」というのは基本的にはハミルトニアンに対するエネルギー固有関数・固有値を解くことを意味している。いったんそれらが以下のように求まったとすると

$$\hat{H}\psi_a = E_a\psi_a \quad (46)$$

波動関数は ψ_a の線形和として書かれる。

$$\psi(x, t) = \sum_a C_a(t) \psi_a(x)$$

この波動関数をシュレディンガー方程式 (40) に代入すると、

$$\sum_a (i\hbar \dot{C}_a(t)) \psi_a(x) = \sum_a C_a(t) E_a \psi_a(x)$$

$\psi_a(x)$ の係数を両辺等しいと置くと、 $i\hbar \dot{C}_a(t) = E_a C_a(t)$ となるが、この微分方程式は $C_a(t) = C_a(0) e^{-iE_a t}$ のように解くことができる。すなわち一旦ハミルトニアン固有値方程式 (46) が解ければ、もともとのシュレディンガー方程式 (40) は自動的に解ける。

6 簡単な系における量子力学の振る舞い

6.1 波束と不確定性原理

量子力学と聞いて最初に思い出す重要な関係として Heisenberg の不確定性関係式と呼ばれるものがある。これは座標を観測して得られる不確定性 Δx と運動量に対する不確定性 Δp に対して不等式

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$$

が成立するというものである。中心が $x = 0$ にあり、 $\Delta x = \sigma$ 程度の広がりを持つ波動関数としてガウス型の分布を仮定する。

$$\psi(x) \propto e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

この波動関数の運動量表示は (45) より

$$\tilde{\psi}(p) \propto \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} e^{-x^2/2\sigma^2} dx \propto e^{-\frac{\sigma^2}{2\hbar^2} p^2}$$

(積分の評価法は講義中に行う) 運動量表示での広がり $p = 0$ を中心として幅 $\Delta p = \frac{\hbar}{\sigma}$ 程度の大きさとなる。これから $\Delta x \Delta p = \hbar$ となる。ガウス型の波動関数は最も理想的な広がりをしていて、一般の形の波動関数では左辺は常に \hbar よりも大きくなる。

7 第二量子化とは