量子力学入門

横浜国立大学　物理工学 EP　 3 年　 ぷらねっと（@memories_planet）

2025 年　5 月 19 日

目次

はじめに

ここで考える量子力学系は原則 1 つの電子の系である．物理量は位置，運動量，軌道角運動量，スピン角運動量，角運動量，エネルギーの 6 種類のみである．具体例や発展的な内容はほとんど扱っていない．

第 1 章で量子力学の数学的な枠組みを構築し，第 2 章ではその枠組みから導き出される定理について説明した．第 3 章では連続固有値を持つ物理量の取り扱いについて述べた．第 4 章で 6 つの物理量に対応する演算子を定義した．第 5 章と第 6 章では位置，運動量，角運動量の固有値と演算子の表現をそれぞれの定義から導出している．第 7 章では系の時間発展を扱い，最後に古典力学との対応について考察した．

全体を通じて，可能な限り厳密で体系的な議論を行うとともに，仮定や要請を必要最低限に留めて多くの事実を少ない仮定から導けるように心掛けた．

第 1 章　基本概念

この章では量子力学が対象とするミクロな系をどのような数学的対象に置き換えて解釈するのかを述べる．系を数学的対象に置き換えるとは，例えば古典力学でいえば，「質点の運動は時刻 t から実数への 3 つの関数の組 $(x(t), y(t), z(t))$ で記述できる」というようなことである．古典力学のこうした要請はあまりにも自明であるためほとんど意識されないが，量子力学では古典力学とは異なる数学的枠組みが必要となる．

1.1　ブラ・ケット・演算子

要請 1　量子状態

量子力学が対象とする粒子の状態は **Hilbert 空間** $\mathscr{H}$（内積が定義された完備な複素ベクトル空間）の**ノルムが 1 のベクトル** $|\psi\rangle$ で表されると要請する．

このベクトルのことを**ケット**と呼ぶ．粒子の「状態」というのはかなり抽象的なもので，例えば「位置 $\boldsymbol{x}$ に存在するという状態」，「スピンが 1/2 の確率で上向きであり 1/2 の確率で下向きである状態」などである．量子力学では物理量が確率的にしか分からないような状態も存在する．Hilbert 空間 $\mathscr{H}$ の次元は扱う物理系によって異なり，無限次元になる場合もある．

$|\chi\rangle$ と $|\psi\rangle$ の内積は次のように表される．

$$\langle\chi|\psi\rangle \tag{1.1}$$

$|\chi\rangle$ の双対ベクトル $\langle\chi|$ を**ブラ**と呼び，内積 (1.1) を**ブラケット**と呼ぶ．ケットの和とスカラー倍，ケットに $\mathscr{H}$ 上の線形変換 $\hat{A}$（これを**演算子**と呼ぶ）を作用させたものについて

$$a\,|\phi\rangle + b\,|\psi\rangle = |a\phi + b\psi\rangle \tag{1.2a}$$

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = |\hat{A}\psi\rangle \tag{1.2b}$$

であると約束する．これは単に左辺の線形結合を右辺のように表すという表記法に過ぎず，どちらを用いてもよい．

内積とは次の 4 つの条件を満たす $\mathscr{H} \times \mathscr{H} \to \mathbb{C}$ の 2 項演算である．

$$\textbf{第 2 引数の線形性} \quad \langle\chi|a\phi + b\psi\rangle = a\langle\chi|\phi\rangle + b\langle\chi|\psi\rangle \tag{1.3a}$$

$$\textbf{エルミート対称性} \quad \langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^* \tag{1.3b}$$

$$\textbf{非退化性} \quad \langle\psi|\psi\rangle = 0 \iff |\psi\rangle = 0 \tag{1.3c}$$

$$\textbf{半正定値性} \quad \langle\psi|\psi\rangle \geq 0 \tag{1.3d}$$

(1.3a) と (1.3b) から次が導ける．

$$\langle a\chi + b\phi|\psi\rangle = a^*\langle\chi|\psi\rangle + b^*\langle\phi|\psi\rangle \tag{1.4}$$

ここで

$$\langle a\chi| \neq a\langle\chi| \tag{1.5}$$

であることに注意したい．また (1.3d) より同じベクトルのブラケットは正の実数なので

$$\||\psi\rangle\| \equiv \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{1.6}$$

が定義できる．これを $|\psi\rangle$ の**ノルム**と呼ぶ．

要請 2　物理量

量子力学において物理量は Hilbert 空間 $\mathscr{H}$ の元に作用する**エルミート演算子**で表されると要請する．

エルミート演算子を定義する前に演算子のエルミート共役を定義する必要がある．任意の $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して

$$\langle\hat{A}^\dagger\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}\psi\rangle \tag{1.7}$$

を満たすような演算子 $\hat{A}^\dagger$ を $\hat{A}$ の**エルミート共役**と呼ぶ．エルミート演算子とはエルミート共役が自分自身と一致するような演算子である．すなわちエルミート演算子とは

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \tag{1.8}$$

が成り立つ演算子である．(1.2b) より一般の演算子 $\hat{A}$ は

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle \equiv \langle\phi|\hat{A}\psi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\phi|\psi\rangle \tag{1.9}$$

と表記されることに注意したい．

1.2　正規直交基底

状態の組 $\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \ldots, |\chi_n\rangle\}$ が次の 2 つの条件を満たすとき，その組を**基底**という．

$$\textbf{線形独立性} \quad |\chi_1\rangle + c_2|\chi_2\rangle + \cdots + c_n|\chi_n\rangle = 0 \iff c_1 = c_2 = \cdots = c_n = 0 \tag{1.10a}$$

完全性　　任意の $|\psi\rangle$ が $|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \ldots, |\chi_n\rangle$ の線形結合で $|\psi\rangle = \sum_{r=1}^{n} c_r|\chi_r\rangle$ と表せる．　(1.10b)

基底の個数 n をその Hilbert 空間の**次元**という．ここで基底が規格直交化されている場合を考える．すなわち

$$\langle\chi_s|\chi_r\rangle = \delta_{sr} \tag{1.11}$$

このとき線形独立性は満たされる．(1.10b) から

$$\langle\chi_r|\psi\rangle = \sum_{s=1}^{n} c_s \langle\chi_r|\chi_s\rangle = \sum_{s=1}^{n} c_s\delta_{rs} = c_r \tag{1.12}$$

これを再び (1.10b) に代入することで

$$|\psi\rangle = \sum_{r=1}^{n} |\chi_r\rangle c_r = \sum_{r=1}^{n} |\chi_r\rangle \langle\chi_r|\psi\rangle \tag{1.13}$$

が得られる．ここで $\sum_{r=1}^{n} |\chi_r\rangle\langle\chi_r|$ は演算子とみなせる．なぜなら $\sum_{r=1}^{n} |\chi_r\rangle\langle\chi_r|$ は，$|\psi\rangle$ を $|\chi_1\rangle\langle\chi_1|\psi\rangle + |\chi_2\rangle\langle\chi_2|\psi\rangle + \cdots + |\chi_n\rangle\langle\chi_n|\psi\rangle$ という状態に変換していて，かつ線形だからである．一般に $|\chi\rangle\langle\chi|$ の形で表される演算子を**ケットブラ**と呼ぶ．ケットブラはケットに対して

$$\big(|\chi\rangle\langle\chi|\big)|\psi\rangle = |\chi\rangle\langle\chi|\psi\rangle \tag{1.14}$$

と作用する演算子である．(1.13) で $|\psi\rangle$ は任意だから $\sum_{r=1}^{n} |\chi_r\rangle\langle\chi_r| = 1$（恒等演算子）であると分かる．逆に (1.13) が成り立っていれば任意の $|\psi\rangle$ は $|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \dots, |\chi_n\rangle$ の線形結合で表せる．従って $\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \dots, |\chi_n\rangle\}$ が正規直交基底であるための条件は次の 2 つにまとめられる．

正規直交性 $$\langle\chi_i|\chi_j\rangle = \delta_{ij} \tag{1.15a}$$

完全性 $$\sum_{r=1}^{n} |\chi_r\rangle\langle\chi_r| = 1 \tag{1.15b}$$

先ほど述べたように Hilbert 空間 $\mathscr{H}$ は有限次元とは限らないので，通常の線形代数学の理論を適用することはできない．しかし $\mathscr{H}$ が有限次元だと考えても大きな問題は生じない．状態 $|\psi\rangle = \sum_r c_r |\chi_r\rangle$ の展開係数の絶対値の 2 乗 $|c_r|^2$ がその状態を観測する確率を意味していることが後に分かる．例えば，位置やエネルギーに対応する状態を考えたとき，常識的に無限に遠い位置や無限に高いエネルギーを観測する確率は極めて 0 に近いといえるだろう．従って近似的には $|\psi\rangle$ は有限個の状態の線形結合で書けると考えてよい．

以上の理由から，$|\psi\rangle = \sum_r c_r |\chi_r\rangle$ は形式的には無限和だが，実際は非常に大きい有限個の和であると考えて差し支えない．今後は通常の線形代数学の理論を適用していくことになる．

1.3 行列表現

Hilbert 空間の正規直交基底 $\{|\chi_r\rangle\}$ が定まっているとき，ブラ，ケット，演算子は行列に対応することを示そう．ケットの左側に完全系 $\sum_r |\chi_r\rangle\langle\chi_r| = 1$ を挿入すると

$$|\psi\rangle = \sum_r |\chi_r\rangle\langle\chi_r|\psi\rangle \tag{1.16}$$

と表されるので，その展開係数を縦に並べて

$$|\psi\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle\chi_1|\psi\rangle \\ \langle\chi_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{1.17}$$

と表す．すなわち $|\psi\rangle$ **を** r **成分が** $\langle\chi_r|\psi\rangle$ **であるような列ベクトルに対応させる．**(1.17) における $\doteq$ は正規直交基底 $\{|\chi_r\rangle\}$ を介して 1 対 1 に対応しているという意味である．基底が変われば対応する列ベクトルは変

わってしまうが状態 $|\psi\rangle$ 自体は変化しない．この意味で両者は同じものではないが基準とする基底が明確な場合は同一視してもよい．ブラは

$$\langle\psi| = \sum_r \langle\psi|\chi_r\rangle \langle\chi_r| \tag{1.18}$$

と表されるのでその展開係数を横に並べて

$$\langle\psi| \doteq \Big(\langle\psi|\chi_1\rangle\,, \langle\psi|\chi_2\rangle\,, \ldots\Big) = \Big(\langle\chi_1|\psi\rangle^*\,, \langle\chi_2|\psi\rangle^*\,, \ldots\Big) \tag{1.19}$$

と表す．すなわち $\langle\psi|$ **を** r **成分が** $\langle\chi_r|\psi\rangle^*$ **であるような行ベクトルに対応させる．**ブラケット $\langle\phi|\psi\rangle$ に完全系を挿入することで

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_r \langle\phi|\chi_r\rangle \langle\chi_r|\psi\rangle = \sum_r \langle\chi_r|\phi\rangle^* \langle\chi_r|\psi\rangle = \Big(\langle\chi_1|\phi\rangle^*\,, \langle\chi_2|\phi\rangle^*\,, \ldots\Big) \begin{pmatrix} \langle\chi_1|\psi\rangle \\ \langle\chi_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{1.20}$$

となるため，ブラケットは数ベクトルの内積に一致する．演算子は完全系を 2 つ挿入し

$$\hat{A} = \sum_s \sum_r |\chi_s\rangle \langle\chi_s|\hat{A}|\chi_r\rangle \langle\chi_r| \tag{1.21}$$

と表されるので

$$\hat{A} \doteq \begin{pmatrix} \langle\chi_1|\hat{A}|\chi_1\rangle & \langle\chi_1|\hat{A}|\chi_2\rangle & \cdots \\ \langle\chi_2|\hat{A}|\chi_1\rangle & \langle\chi_2|\hat{A}|\chi_2\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{1.22}$$

となる．すなわち $\hat{A}$ **を** sr **成分が** $\langle\chi_s|\hat{A}|\chi_r\rangle$ **であるような正方行列に対応させる．**以上のようにケット，ブラ，演算子をそれぞれ列ベクトル，行ベクトル，正方行列に対応させたものを**行列表現**と呼ぶ．このときケットに演算子が作用したものは

$$|\phi\rangle = \hat{A}\,|\psi\rangle \tag{1.23}$$

$$\sum_s |\chi_s\rangle \langle\chi_s|\phi\rangle = \sum_s \sum_r |\chi_s\rangle \langle\chi_s|\hat{A}|\chi_r\rangle \langle\chi_r|\psi\rangle \tag{1.24}$$

$$\begin{pmatrix} \langle\chi_1|\phi\rangle \\ \langle\chi_2|\phi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\chi_1|\hat{A}|\chi_1\rangle & \langle\chi_1|\hat{A}|\chi_2\rangle & \cdots \\ \langle\chi_2|\hat{A}|\chi_1\rangle & \langle\chi_2|\hat{A}|\chi_2\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\chi_1|\psi\rangle \\ \langle\chi_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{1.25}$$

となり行列の積に対応する．また演算子を挟んだブラケットは

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \sum_s \sum_r \langle\psi|\chi_s\rangle \langle\chi_s|\hat{A}|\chi_r\rangle \langle\chi_r|\psi\rangle \\ &= \sum_s \sum_r \langle\chi_s|\psi\rangle^* \langle\chi_s|\hat{A}|\chi_r\rangle \langle\chi_r|\psi\rangle \\ &= \Big(\langle\chi_1|\psi\rangle^*\,, \langle\chi_2|\psi\rangle^*\,, \ldots\Big) \begin{pmatrix} \langle\chi_1|\hat{A}|\chi_1\rangle & \langle\chi_1|\hat{A}|\chi_2\rangle & \cdots \\ \langle\chi_2|\hat{A}|\chi_1\rangle & \langle\chi_2|\hat{A}|\chi_2\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\chi_1|\psi\rangle \\ \langle\chi_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{1.26}$$

となりエルミート形式に対応する．

1.4　ユニタリー変換

量子状態や演算子の行列表現は基底とする正規直交完全系を変えれば変化する．基底を $\{|\alpha_r\rangle\}$ から $\{|\chi_r\rangle\}$ に取り換えたときに行列表現がどのように変わるかを考える．$|\psi\rangle$ の左側に $\sum_r |\alpha_r\rangle\langle\alpha_r|$ を挿入した

$$|\psi\rangle = \sum_r |\alpha_r\rangle \langle\alpha_r|\psi\rangle \tag{1.27}$$

は $|\psi\rangle$ の基底 $\{|\alpha_r\rangle\}$ での展開を表していて，展開係数は $\langle\alpha_r|\psi\rangle$ である．さらにここに $\sum_s |\chi_s\rangle\langle\chi_s|$ を挿入すると

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \sum_s \sum_r |\chi_s\rangle \langle\chi_s|\alpha_r\rangle \langle\alpha_r|\psi\rangle \\ &= \sum_s |\chi_s\rangle \Big(\sum_r \langle\chi_s|\alpha_r\rangle \langle\alpha_r|\psi\rangle\Big)\end{aligned} \tag{1.28}$$

これは基底 $\{|\chi_s\rangle\}$ での展開を表している！展開係数は $\sum_r \langle\chi_s|\alpha_r\rangle \langle\alpha_r|\psi\rangle$ である．

$$\langle\chi_s|\psi\rangle = \sum_r \langle\chi_s|\alpha_r\rangle \langle\alpha_r|\psi\rangle \tag{1.29}$$

が成り立つことは $\sum_r |\alpha_r\rangle\langle\alpha_r| = 1$ からすぐに分かるがこれは $|\psi\rangle$ の $\{|\alpha_r\rangle\}$ による展開係数と $\{|\chi_s\rangle\}$ による展開係数を結び付ける式とみなすことができる．行列 $U_{sr} \equiv \langle\chi_s|\alpha_r\rangle$ はユニタリー行列である．なぜなら $U^\dagger_{rs} = \langle\chi_s|\alpha_r\rangle^* = \langle\alpha_r|\chi_s\rangle$ であり

$$(UU^\dagger)_{ij} = \sum_r U_{ir}U^\dagger_{rj} = \sum_r \langle\chi_i|\alpha_r\rangle \langle\alpha_r|\chi_j\rangle = \langle\chi_i|\chi_j\rangle = \delta_{ij} \tag{1.30a}$$

$$(U^\dagger U)_{ij} = \sum_s U^\dagger_{is}U_{sj} = \sum_s \langle\alpha_i|\chi_s\rangle \langle\chi_s|\alpha_j\rangle = \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij} \tag{1.30b}$$

だからである．演算子 $\hat{A}$ の行列要素も同様である．

$$\langle\chi_s|\hat{A}|\chi_u\rangle = \sum_r \sum_t \langle\chi_s|\alpha_r\rangle \langle\alpha_r|\hat{A}|\alpha_t\rangle \langle\alpha_t|\chi_u\rangle \tag{1.31}$$

この式変形だけで基底の取り換えが完了する！以上をまとめると $\{|\alpha_r\rangle\}$ から $\{|\chi_s\rangle\}$ への基底の取り換えに対し量子状態と演算子の行列要素は次の変換を受ける．

$$\langle\chi_s|\psi\rangle = \sum_r U_{sr} \langle\alpha_r|\psi\rangle \tag{1.32a}$$

$$\langle\chi_s|\hat{A}|\chi_u\rangle = \sum_r \sum_t U_{sr} \langle\alpha_r|\hat{A}|\alpha_t\rangle U^\dagger_{tu} \tag{1.32b}$$

正規直交基底の取り換えによる (1.32a) と (1.32b) の変換を**ユニタリー変換**と呼ぶ．

1.5　エルミート演算子

物理量は Hilbert 空間のエルミート演算子に対応することを要請した．エルミート演算子の行列表現はどのようになるだろうか．まず演算子 $\hat{A}$ のエルミート共役がどのような行列表現を持つか考えよう．エルミート共役の定義 (1.7) より

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\phi|\hat{A}\psi\rangle^* = \langle A^\dagger\phi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger\phi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle \tag{1.33}$$

が成り立つ．(1.33) は任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ に対して成り立っていたので，最左辺と最右辺に $|\psi\rangle = |\chi_s\rangle, |\phi\rangle = |\chi_r\rangle$ を代入すると

$$\langle\chi_r|\hat{A}|\chi_s\rangle^* = \langle\chi_s|\hat{A}^\dagger|\chi_r\rangle \tag{1.34}$$

が得られる．$\hat{A}^\dagger$ の行列表現の sr 成分が $\hat{A}$ の行列表現の rs 成分に複素共役をとったものになっているので $\hat{A}^\dagger$ の行列表現は $\hat{A}$ の行列表現に転置複素共役をとったものである．エルミート演算子とはエルミート共役が自分自身と一致するような演算子であったので**エルミート演算子の行列表現はエルミート行列である**．エルミート行列の主な性質は 3 つである．

- すべての固有値は実数．
- 異なる固有値を持つ固有ベクトルは直交する．
- 適当なユニタリー行列で対角化可能，すなわち適当なユニタリー行列 U が存在し，$UAU^\dagger$ を対角行列にすることができる．

証明は線形代数学の教科書を参照してほしい．

状態 $|\psi\rangle$ が

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = a\,|\psi\rangle \tag{1.35}$$

を満たすとき，$|\psi\rangle$ を物理量 $\hat{A}$ の**固有状態**という．このとき次が成り立つ．

定理 1　固有状態による基底

任意の物理量 $\hat{A}$ に対して，全ての元が $\hat{A}$ の固有状態であるような $\mathscr{H}$ の正規直交基底が存在する．

証明． $\{|\chi_r\rangle\}$ を $\mathscr{H}$ の正規直交基底とする．物理量 $\hat{A}$ の基底 $\{|\chi_r\rangle\}$ による行列表現を A とするとその sr 成分は

$$A_{sr} = \langle\chi_s|\hat{A}|\chi_r\rangle \tag{1.36}$$

で与えられる．A はエルミート行列であるから適当なユニタリー行列 U が存在し，$UAU^\dagger$ を対角行列にすることができる．$UAU^\dagger$ は対角行列だからその成分は $(UAU^\dagger)_{ij} = a_j\delta_{ij}$ と表すことができる．この U を用いて新しい正規直交基底 $\{|a_s\rangle\}$ を $|a_s\rangle = \sum_r |a_r\rangle\, U^\dagger_{rs}$ により定義するとこの基底の全ての元は $\hat{A}$ の固有状態になる．なぜなら

$$\langle a_s|\hat{A}|a_u\rangle = \sum_r\sum_t U_{sr}\,\langle\chi_r|\hat{A}|\chi_t\rangle\,U^\dagger_{tu} = (UAU^\dagger)_{su} = a_u\delta_{su} \tag{1.37}$$

であり，

$$\begin{aligned}\hat{A}\,|a_u\rangle &= \sum_s |a_s\rangle\,\langle a_s|\hat{A}|a_u\rangle \\ &= \sum_s |a_s\rangle\,a_u\delta_{su} \\ &= a_u\,|a_u\rangle \end{aligned}\tag{1.38}$$

これが任意の $|a_u\rangle$ について成り立つので，正規直交基底 $\{|a_s\rangle\}$ の全ての元は $\hat{A}$ の固有状態である．□

1.6 Born の確率解釈

これまでに状態 $|\psi\rangle$ と物理量 $\hat{A}$ の数学的枠組みを述べたが，その物理的意味については言及していなかった．状態 $|\psi\rangle$ の粒子に対して物理量 $\hat{A}$ を測定するとどんな値が得られるのだろうか．$\hat{A}$ の固有状態を $|a_r^m\rangle$ と表す．これは複数の固有状態が同じ固有値を持っている場合を考慮した記法で，$|a_r^1\rangle, |a_r^2\rangle, \ldots$ は互いに直交する固有状態であるが同じ固有値 a_r を持つとする．一般に複数の固有状態が同じ固有値 a_r を持っている場合，**固有値 a_r は縮退している**という．このとき

$$\langle a_s^n | a_r^m \rangle = \delta_{sr}\delta_{nm} \tag{1.39}$$

$$\sum_r \sum_m |a_r^m\rangle\langle a_r^m| = 1 \tag{1.40}$$

が成立する．$|a_r^1\rangle, |a_r^2\rangle, \ldots$ は A の固有値 a_r の固有空間の正規直交基底ならどのように選んでもよい．このとき $\hat{A}$ と $|\psi\rangle$ に次のような意味を与える．

要請 3 Born の確率解釈

状態 $|\psi\rangle$ の粒子に対して物理量 $\hat{A}$ を測定した時に a_r が得られる確率 $\mathbb{P}\big[\hat{A} = a_r, |\psi\rangle\big]$ を

$$\mathbb{P}\big[\hat{A} = a_r, |\psi\rangle\big] = \sum_m \Big|\langle a_r^m | \psi\rangle\Big|^2 \tag{1.41}$$

と解釈する．

(1.41) から分かることを述べよう．まず**物理量 $\hat{A}$ の値として観測できる可能性があるのは $\hat{A}$ の固有値だけ**である．そして $\hat{A}$ の固有値はすべて実数なので**観測できる値は実数**である．物理量に対応する演算子にエルミート性を要請したのは観測される物理量が実数でなければならないからである．

$$0 \le \sum_m \Big|\langle a_r^m|\psi\rangle\Big|^2 \le \sum_r \sum_m \Big|\langle a_r^m|\psi\rangle\Big|^2 = \sum_r \sum_m \langle\psi|a_r^m\rangle\,\langle a_r^m|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1 \tag{1.42}$$

に Born の確率解釈を適用すると

$$0 \le \mathbb{P}\big[\hat{A} = a_r, |\psi\rangle\big] \le 1 \qquad \sum_r \mathbb{P}\big[\hat{A} = a_r, |\psi\rangle\big] = 1 \tag{1.43}$$

すなわち **$\hat{A}$ の値として a_r が得られる確率は 0 以上 1 以下**である．さらに **$\hat{A}$ の観測により $\hat{A}$ の固有値のいずれかが得られる確率は 1** である．これらは物理量 $\hat{A}$ を観測しているのだから当たり前ではあるが，量子力学の要請が確率の基本的な要請に反していないことが分かるだろう．また

$$\mathbb{P}\big[\hat{A} = a_r, |a_r^n\rangle\big] = \sum_m \Big|\langle a_r^m|a_r^n\rangle\Big|^2 = \sum_m |\delta_{mn}|^2 = 1 \tag{1.44}$$

より**固有状態 $|a_r^n\rangle$ の粒子に対して $\hat{A}$ を測定すると必ず a_r が得られる．**逆に $\hat{A}$ の固有状態ではない状態の粒子に対して $\hat{A}$ を測定しても得られる値は確率的にしか決まらない．

Born の確率解釈は量子力学の数学的枠組みに物理的な意味を与える最も基本的な要請である．**量子状態 $|\psi\rangle$ は全ての物理量の確率分布の情報を含んでいる**のである．

1.7　量子状態の収縮

次に物理量の測定が量子状態に対してどのような影響を及ぼすか考えよう．そのために各 a_r に対して次のケットブラを定義する．

$$\hat{\Pi}_r \equiv \sum_m |a_r^m\rangle\langle a_r^m| \tag{1.45}$$

この演算子は $|\psi\rangle$ か固有値 a_r の固有空間の成分だけを取り出すため**固有値 a_r への射影演算子**と呼ばれる．射影演算子は次式を満たす．

$$\sum_r \hat{\Pi}_r = \sum_r \sum_m |a_r^m\rangle\langle a_r^m| = 1 \tag{1.46a}$$

$$\hat{\Pi}_r \hat{\Pi}_r = \sum_n \sum_m |a_r^n\rangle \langle a_r^n|a_r^m\rangle \langle a_r^m| = \sum_n |a_r^n\rangle\langle a_r^n| = \hat{\Pi}_r \tag{1.46b}$$

$$\hat{\Pi}_r^\dagger = \hat{\Pi}_r \tag{1.46c}$$

(1.46c) は次のように確認できる．$|\hat{\Pi}_r\phi\rangle = \sum_r |a_r\rangle \langle a_r|\phi\rangle$ であるから (1.4) より $\langle\hat{\Pi}_r\phi| = \sum_r \langle a_r| \langle a_r|\phi\rangle^*$．これより

$$\langle\hat{\Pi}_r\phi|\psi\rangle = \sum_r \langle a_r|\phi\rangle^* \langle a_r|\psi\rangle = \sum_r \langle\phi|a_r\rangle \langle a_r|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{\Pi}_r\psi\rangle \tag{1.47}$$

従って射影演算子はエルミート演算子であり (1.46c) が成立する．射影演算子を用いると Born の確率解釈 (1.41) は次のように書ける．

$$\mathbb{P}\big[\hat{A} = a_r, |\psi\rangle\big] = \langle\psi|\hat{\Pi}_r|\psi\rangle = \Big\|\hat{\Pi}_r\,|\psi\rangle\Big\|^2 \tag{1.48}$$

物理量の測定は量子状態に次のような影響を与える．

要請 4　　量子状態の収縮

状態 $|\psi\rangle$ の粒子の $\hat{A}$ を測定して a_r という値が観測されたとき，粒子の状態は

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\hat{A}=a_r} \frac{\hat{\Pi}_r\,|\psi\rangle}{\big\|\hat{\Pi}_r\,|\psi\rangle\big\|} \tag{1.49}$$

のように瞬間的に遷移する．

量子状態 $|\psi\rangle$ は観測結果に対応する固有空間に射影される．$\|\hat{\Pi}_r\,|\psi\rangle\,\|$ は規格化定数である．

$$\begin{aligned}\hat{A}\,\hat{\Pi}_r\,|\psi\rangle &= \sum_m \hat{A}\,|a_r^m\rangle\,\langle a_r^m|\psi\rangle \\ &= \sum_m a_r\,|a_r^m\rangle\,\langle a_r^m|\psi\rangle \\ &= a_r\,\hat{\Pi}_r\,|\psi\rangle\end{aligned} \tag{1.50}$$

(1.50) より，測定後の状態は確かに固有値 a_r の固有状態であることが分かる．すなわち，粒子に対して $\hat{A}$ を測定して a_r が得られた直後にその粒子に対してもう一度 $\hat{A}$ を測定すると必ず a_r が得られる．一般に**粒子に対してある物理量を測定すると量子状態をその物理量の固有状態に変えてしまう．**特に a_r に縮退がないときは $\hat{\Pi}_r = |a_r\rangle\langle a_r|$ となるから (1.49) は

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\hat{A}=a_r} |a_r\rangle \tag{1.51}$$

となる．ただし位相 $\frac{\langle a_r|\psi\rangle}{\|\langle a_r|\psi\rangle\|}$ は物理的性質（確率）とは関係ないので無視している．

1.8　期待値・ゆらぎ

物理量 $\hat{A}$ と状態 $|\psi\rangle$ に対して

$$\mathbb{E}\big[\hat{A}, |\psi\rangle\big] = \langle \hat{A} \rangle \equiv \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \tag{1.52}$$

を $\hat{A}$ の**期待値**と呼ぶ．期待値といえば，例えばサイコロの出る目の期待値は

$$1 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{6} + 3 \times \frac{1}{6} + 4 \times \frac{1}{6} + 5 \times \frac{1}{6} + 6 \times \frac{1}{6} = 3.5 \tag{1.53}$$

という風に出る目の値にその確率を掛けて和をとったものである．(1.52) も同じ意味を持っていることを示そう．$\hat{A}$ に右から $\hat{A}$ の固有状態であるような完全系 $\sum_r \sum_m |a_r^m\rangle\langle a_r^m|$ を挿入すると

$$\hat{A} = \sum_r \sum_m \hat{A}\, |a_r^m\rangle\langle a_r^m| = \sum_r a_r \sum_m |a_r^m\rangle\langle a_r^m| = \sum_r a_r\, \hat{\Pi}_r \tag{1.54}$$

となる．これを (1.52) に代入すると

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\big[\hat{A}, |\psi\rangle\big] &= \sum_r a_r\, \langle \psi | \hat{\Pi}_r | \psi \rangle \\ &= \sum_r a_r\, \mathbb{P}\big[\hat{A} = a_r, |\psi\rangle\big] \end{aligned} \tag{1.55}$$

が得られる．ただし (1.48) を用いた．確かに $\mathbb{E}\big[\hat{A}, |\psi\rangle\big]$ は出る目の値（固有値）にその確率を掛けて和をとったものになっていることが分かる．さらに

$$\Delta\hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \tag{1.56}$$

という演算子を定義する．$\langle \hat{A} \rangle$ の後ろには恒等演算子 1 が隠れていると理解する．この演算子もエルミート演算子である．$(\Delta\hat{A})^2$ の期待値

$$\mathbb{V}\big[\hat{A}, |\psi\rangle\big] \equiv \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle = \Big\langle \hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A}^2 \rangle \Big\rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \tag{1.57}$$

を $\hat{A}$ の**分散**と呼び，分散の正の平方根

$$\sigma[\hat{A}, |\psi\rangle] \equiv \sqrt{\mathbb{V}\big[\hat{A}, |\psi\rangle\big]} = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2} \tag{1.58}$$

を $\hat{A}$ の**ゆらぎ**と呼ぶ．ゆらぎ $\sigma[\hat{A}, |\psi\rangle]$ は確率分布のばらつき度合いを表す指標である．例えば，状態 $|\psi\rangle$ が $\hat{A}$ の固有状態である場合を考えよう．その固有値を λ とすると，

$$\sigma[\hat{A}, |\psi\rangle] = \sqrt{\langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2} = \sqrt{\lambda^2 - \lambda^2} = 0 \tag{1.59}$$

より $\hat{A}$ のゆらぎは 0 である．一般の状態は観測される値にばらつきがあるため，ゆらぎは 0 以上になる．

$\hat{A}$ の確率，期待値，分散，ゆらぎは $\hat{A}$ だけでなく観測する粒子の状態 $|\psi\rangle$ にも依存する．これは $|\psi\rangle$ が $\hat{A}$ の確率分布の情報を持っているので当然ではあるが，$\mathbb{E}\big[\hat{A}, |\psi\rangle\big], \sigma[\hat{A}, |\psi\rangle]$ のような記法を用いたのはそのためである．

第 2 章 可換性と同時観測可能性

量子力学では 2 つの物理量 $\hat{A},\hat{B}$ に対して

$$[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{2.1}$$

で定義される**交換子**が重要な意味を持つ．2 つの物理量が可換である場合とそうでない場合にどのような違いが生じるかを考えよう．

2.1 同時対角化

状態 $|\psi\rangle$ が

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = a\,|\psi\rangle \qquad \hat{B}\,|\psi\rangle = b\,|\psi\rangle \tag{2.2}$$

を満たすとき，$|\psi\rangle$ を物理量 $\hat{A},\hat{B}$ の**同時固有状態**という．

定理 2　同時固有状態による基底

2 つの物理量 $\hat{A},\hat{B}$ に対して，次が成り立つ．

$$[\hat{A},\hat{B}] = 0 \iff \text{全ての元が } \hat{A},\hat{B} \text{ の同時固有状態であるような正規直交基底が存在する．}$$

証明． ($\Longrightarrow$) 定理 1 より全ての元が $\hat{A}$ の固有状態であるような正規直交基底が存在する．この基底を $\{|a_r^m\rangle\}$ と表す．ただし $|a_r^1\rangle, |a_r^2\rangle, \ldots$ は互いに直交する固有状態であるが同じ固有値 a_r を持つ．このとき

$$\langle a_s^n|\hat{A}|a_r^m\rangle = a_r\delta_{sr}\delta_{nm} \tag{2.3}$$

が成り立つから $\hat{A}$ の行列表現は対角化されている．この基底における $\hat{B}$ の行列表現を考える．仮定より

$$\langle a_s^n|[\hat{A},\hat{B}]|a_r^m\rangle = \langle a_s^n|\,0\,|a_r^m\rangle = 0 \tag{2.4}$$

である．一方で

$$\langle a_s^n|[\hat{A},\hat{B}]|a_r^m\rangle = \langle a_s^n|\hat{A}\hat{B}|a_r^m\rangle - \langle a_s^n|\hat{B}\hat{A}|a_r^m\rangle = (a_s - a_r)\,\langle a_s^n|\hat{B}|a_r^m\rangle \tag{2.5}$$

であるから $a_s \neq a_r$ のとき $\langle a_s^n|B|a_r^m\rangle = 0$ である．従って $|a_1^1\rangle, |a_1^2\rangle, \ldots, |a_2^1\rangle, |a_2^2\rangle, \ldots$ のような順番で基底をとると $\hat{A}$ と $\hat{B}$ は次の行列表現を持つ．

$$\hat{A} \doteq A = \begin{pmatrix} a_1I_1 & 0 & \cdots \\ 0 & a_2I_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \qquad \hat{B} \doteq B = \begin{pmatrix} B_1 & 0 & \cdots \\ 0 & B_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.6}$$

I_r, B_r の次元は固有値 a_r の固有空間の次元と等しい．各 B_r はエルミート行列であるのでこれを対角化するようなユニタリー行列 U_r が存在する．このユニタリー行列を用いると

$$U_r(a_rI_r)U_r^\dagger = a_rU_rU_r^\dagger = a_rI_r \qquad U_rB_rU_r^\dagger = D_r \tag{2.7}$$

ただし D_r は対角行列である．a_rI_r はユニタリー変換を行っても形を変えない．この U_r を対角ブロックにもつ行列は全体としてユニタリー行列である．この行列を用いて (2.6) をユニタリー変換し各ブロック

に対して (2.7) を適用すると

$$\begin{pmatrix} U_1 & 0 & \cdots \\ 0 & U_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 I_1 & 0 & \cdots \\ 0 & a_2 I_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 & 0 & \cdots \\ 0 & U_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} a_1 I_1 & 0 & \cdots \\ 0 & a_2 I_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.8a}$$

$$\begin{pmatrix} U_1 & 0 & \cdots \\ 0 & U_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 & 0 & \cdots \\ 0 & B_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 & 0 & \cdots \\ 0 & U_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} D_1 & 0 & \cdots \\ 0 & D_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.8b}$$

となり $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の行列表現は同時対角化される．このユニタリー行列を U とする．$\{|a_r^m\rangle\}$ を通し番号でラベルしなおして，$|\chi_j\rangle = \sum_i |a_i\rangle U_{ij}^\dagger$ により新しい正規直交基底を定義すると，定理 1 の議論より $\{|\chi_j\rangle\}$ の全ての元は $\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有状態になっている．

($\Longleftarrow$) $\{|\chi_r\rangle\}$ を $\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有状態による正規直交基底とすると任意の $|\chi_r\rangle$ に対して

$$\hat{A} |\chi_r\rangle = a_r |\chi_r\rangle \quad \hat{B} |\chi_r\rangle = b_r |\chi_r\rangle \tag{2.9}$$

が成り立つ．このとき

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] |\chi_r\rangle &= \hat{A}\hat{B} |\chi_r\rangle - \hat{B}\hat{A} |\chi_r\rangle \\ &= b_s a_s |\chi_r\rangle - a_s b_s |\chi_r\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \tag{2.10}$$

これが任意の $|\chi_r\rangle$ に対して成り立つので $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ である． □

定理 2 を繰り返し用いると，物理量の組 $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots\}$ が互いに可換であるとき全ての元が $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots$ の同時固有状態であるような正規直交基底が存在することが分かる．

1 つ注意がある．2 つの物理量が可換であるということはその 2 つの物理量の同時固有状態が Hilbert 空間の基底が張れるほど多く存在することを意味している．逆に 2 つの物理量が非可換であるとしても同時固有状態が 1 つも存在しないとはいえない．実際，軌道角運動量演算子 $\hat{L}_z$ と $\hat{L}_x$ は交換しないにもかかわらず $l = 0$ の状態 $|0, 0\rangle$ は $\hat{L}_z$ と $\hat{L}_x$ の同時固有状態である．軌道角運動量の固有状態は 6.4 節で扱う．

2.2 可換性と両立可能性

物理量 $\hat{A}, \hat{B}$ が

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \tag{2.11}$$

を満たすとき**物理量 $\hat{A}, \hat{B}$ は両立可能**といい

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \tag{2.12}$$

を満たすとき**物理量 $\hat{A}, \hat{B}$ は両立不可能**という．

$\hat{A}$ と $\hat{B}$ が可換であるとする．状態 $|\psi\rangle$ の粒子に対して最初に $\hat{A}$ を測定してその後 $\hat{B}$ を測定したとき，量子状態がどのように変化するか考えよう．$\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有状態 $\{|a_i, b_j\rangle\}$ を基底に取ると，物理量 $\hat{A}$ の固有値 a_r への射影演算子は次式で与えられる．

$$\hat{\Pi}_{a_r} = \sum_j |a_r, b_j\rangle\langle a_r, b_j| \tag{2.13}$$

一方で，物理量 $\hat{B}$ の固有値 b_s への射影演算子は次のように表せる．

$$\hat{\Pi}_{b_s} = \sum_i |a_i, b_s\rangle\langle a_i, b_s| \tag{2.14}$$

である．$\hat{A}$ を測定して a_r が得られ，その直後に $\hat{B}$ を測定して b_s が得られたとする．このときの射影演算子は

$$\hat{\Pi}_{a_r}\hat{\Pi}_{b_s} = \sum_j \sum_i |a_r, b_j\rangle \langle a_r, b_j|a_i, b_s\rangle \langle a_i, b_s| = |a_r, b_s\rangle\langle a_r, b_s| \tag{2.15}$$

となるため，量子状態は位相を無視して

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\hat{A}=a_r, \hat{B}=b_s} |a_r, b_s\rangle \tag{2.16}$$

とジャンプする．この状態に対して再び $\hat{A}$ を測定すれば a_r が得られるし $\hat{B}$ を測定すれば b_s が得られる．このように $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が両立可能ならば，2 つを続けて測定すると必ず $\hat{A}, \hat{B}$ の両方が確定した状態に遷移させることができる．この意味で $\hat{A}$ と $\hat{B}$ は“両立”している．

$\hat{A}$ と $\hat{B}$ が非可換であるときは上記は一般には成立しない．この簡単な例を挙げよう．2 次元の Hilbert 空間に対して 2 つの物理量 $\hat{A}, \hat{B}$ が次のような行列表現を持っているとする．（すなわち $\hat{A}$ や $\hat{B}$ は 2 種類の値しか取り得ない物理量である．）

$$\hat{A} \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \hat{B} \doteq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.17}$$

このとき

$$[\hat{A}, \hat{B}] \doteq 2\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \neq 0 \tag{2.18}$$

より $\hat{A}, \hat{B}$ は両立不可能である．それぞれの固有状態は

$$|a_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{固有値} +1 \qquad |a_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \text{固有値} -1 \tag{2.19a}$$

$$|b_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \text{固有値} +1 \qquad |b_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \qquad \text{固有値} -1 \tag{2.19b}$$

と求められる．状態 $|\psi\rangle$ に対して $\hat{A}$ を測定して $+1$ が得られたとする．このとき状態は $|a_+\rangle$ にジャンプする．この状態に対して $\hat{B}$ を測定すると

$$\mathbb{P}\big[\hat{B} = +1, |a_+\rangle\big] = \Big|\langle b_+|a_+\rangle\Big|^2 = \frac{1}{2} \qquad \mathbb{P}\big[\hat{B} = -1, |a_+\rangle\big] = \Big|\langle b_-|a_+\rangle\Big|^2 = \frac{1}{2} \tag{2.20}$$

であるから $\frac{1}{2}$ の確率で固有値 ± 1 が得られる．ここでは $+1$ が得られたとする．このとき状態は状態は $|b_+\rangle$ にジャンプする．この状態に対して再び $\hat{A}$ を測定すると

$$\mathbb{P}\big[\hat{A} = +1, |b_+\rangle\big] = \Big|\langle a_+|b_+\rangle\Big|^2 = \frac{1}{2} \qquad \mathbb{P}\big[\hat{A} = -1, |b_+\rangle\big] = \Big|\langle a_-|b_+\rangle\Big|^2 = \frac{1}{2} \tag{2.21}$$

であるから必ず $+1$ が得られるとは限らない！ $\hat{A}, \hat{B}$ が非可換のとき $\hat{A}$ の値と $\hat{B}$ の値は一般に同時に確定しない．$\hat{A}$ と $\hat{B}$ は“両立”しないのである．

2.3 同時固有状態による基底

物理量の固有状態による基底を考えよう．$\hat{A}$ の固有状態を単にその固有値 a でラベルして $|a\rangle$ と表すと便利である．固有値に縮退がある場合は複数の状態が 1 つのラベルに対応してしまうが $\hat{A}$ と可換な物理量を用いればこの問題を回避することができる．$\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有状態をその固有値の組でラベルして $|a,b\rangle$ と表すことにする．これでも縮退が除去できない場合は $\hat{A}$ と $\hat{B}$ のどちらとも可換な物理量 $\hat{C}$ を考え $|a,b,c\rangle$ とラベルする．

この操作を続けて，可換な物理量の極大の組 $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots\}$（すなわち，この組にどのような物理量を加えてもそれらは互いに可換にならない）を見つければ全ての状態を固有値の組でラベルすることができる．それぞれの演算子の固有値は縮退していてよいが，その組 $(a,b,c,\ldots)$ を指定すれば固有状態が 1 つに定まる．このとき正規直交性と完全性は次のようになる．

正規直交性 $$\langle a,b,c,\ldots|a',b',c',\ldots\rangle = \delta_{aa'}\delta_{bb'}\delta_{cc'}\cdots \tag{2.22a}$$

完全性 $$\sum_a\sum_b\sum_c\cdots|a,b,c,\ldots\rangle\langle a,b,c,\ldots| = 1 \tag{2.22b}$$

以上の議論では初めから $\hat{A}$ の固有値に縮退があるとしたが実際はむしろ逆である．物理量 $\hat{A}$ の固有値が縮退しているかは $\hat{A}$ を測定するだけでは分からない．これまで $|a\rangle$ だと思っていた状態に $\hat{A}$ と可換な $\hat{B}$ を測定し複数の値 b, b' が得られたとき我々は初めて $|a\rangle$ が $|a,b\rangle$ と $|a,b'\rangle$ の 2 つの状態の重ね合わせだったと知るのである．逆に $\hat{B}$ の値を問題としていなければこの 2 つの状態は区別する必要はない（むしろ区別できない）．このように**量子力学を構築する Hilbert 空間の次元はどの物理量を議論しているかによって変わる**のである．

2.4 不確定性関係

定理 3 Robertson の不確定性関係

任意の物理量 $\hat{A}, \hat{B}$ と任意の状態 $|\psi\rangle$ に対して次の不等式が成り立つ．

$$\sigma[\hat{A},|\psi\rangle]\cdot\sigma[\hat{B},|\psi\rangle] \geq \frac{1}{2}\left|\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle\right| \tag{2.23}$$

証明． $|\alpha\rangle = \Delta\hat{A}\,|\psi\rangle$ と $|\beta\rangle = \Delta\hat{B}\,|\psi\rangle$ に対して Cauchy-Schwarz の不等式 $\langle\alpha|\alpha\rangle\,\langle\beta|\beta\rangle \geq |\,\langle\alpha|\beta\rangle\,|^2$ を用いると

$$\langle\Delta\hat{A}\psi|\Delta\hat{A}\psi\rangle\,\langle\Delta\hat{B}\psi|\Delta\hat{B}\psi\rangle \geq \left|\langle\Delta\hat{A}\psi|\Delta\hat{B}\psi\rangle\right|^2 \tag{2.24}$$

$\Delta\hat{A}^\dagger = \Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}^\dagger = \Delta\hat{B}$ より

$$\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2|\psi\rangle\,\langle\psi|(\Delta\hat{B})^2|\psi\rangle \geq \left|\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle\right|^2 \tag{2.25}$$

が成り立つ．(2.25) の左辺はゆらぎの定義 (1.58) より $\sigma[\hat{A},|\psi\rangle]^2\cdot\sigma[\hat{B},|\psi\rangle]^2$ に等しい．(2.25) の右辺のブラケットの中身は

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\} \tag{2.26}$$

と書き直せる．ただし $\{\hat{A},\hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{B}$ は**反交換子**と呼ばれる．$\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}$ はエルミート演算子，$[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]$ は反エルミート演算子である．エルミート共役の性質 (1.33) より $\langle\psi|\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}|\psi\rangle$ は実数，

$\langle\psi|[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]|\psi\rangle$ は純虚数になる．これより

$$\begin{aligned}\left|\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle\right|^2 &= \left|\frac{1}{2}\langle\psi|[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]|\psi\rangle + \frac{1}{2}\langle\psi|\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}|\psi\rangle\right|^2 \\ &= \frac{1}{4}\left|\langle\psi|[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]|\psi\rangle\right|^2 + \frac{1}{4}\left|\langle\psi|\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}|\psi\rangle\right|^2\end{aligned} \tag{2.27}$$

さらに

$$\begin{aligned}[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}] &= \big(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle\big)\big(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle\big) - \big(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle\big)\big(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle\big) \\ &= \hat{A}\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\hat{B} + \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle - \hat{B}\hat{A} + \langle\hat{A}\rangle\hat{B} + \langle\hat{B}\rangle\hat{A} - \langle\hat{B}\rangle\langle\hat{A}\rangle \\ &= [\hat{A},\hat{B}]\end{aligned} \tag{2.28}$$

(2.25),(2.27),(2.28) より

$$\begin{aligned}\sigma[\hat{A},|\psi\rangle]^2\cdot\sigma[\hat{B},|\psi\rangle]^2 &\geq \left|\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle\right|^2 \\ &= \frac{1}{4}\left|\langle\psi|[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]|\psi\rangle\right|^2 + \frac{1}{4}\left|\langle\psi|\{\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}\}|\psi\rangle\right|^2 \\ &\geq \frac{1}{4}\left|\langle\psi|[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]|\psi\rangle\right|^2 \\ &= \frac{1}{4}\left|\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle\right|^2\end{aligned} \tag{2.29}$$

両辺の平方根をとると Robertson の不等式 (2.23) が得られる．□

Robertson の不等式は 2 つの物理量のばらつき度合いの下限を示している．$\hat{A}$ と $\hat{B}$ に位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ を代入すると興味深い結果が得られる．位置演算子と運動量演算子の間には次の交換関係が成り立つことが知られている．

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \tag{2.30}$$

この関係式は 4.5 節で扱う．$\hbar$ は**プランク定数**と呼ばれる作用の次元を持つ物理定数である．

$$\hbar = \frac{6.62607015}{2\pi}\times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}\quad\text{（定義値）} \tag{2.31}$$

この場合も $i\hbar$ の後ろに恒等演算子 1 が隠れていると理解する．これを (2.23) の右辺に代入すると

$$\frac{1}{2}\left|\langle\psi|i\hbar|\psi\rangle\right| = \left|i\hbar\langle\psi|\psi\rangle\right| = \frac{\hbar}{2} \tag{2.32}$$

不確定性の下限は量子状態 $|\psi\rangle$ に依らないことが分かる．そのため位置と運動量の不確定性関係は単に

$$\sigma[\hat{x}]\cdot\sigma[\hat{p}] \geq \frac{\hbar}{2} \tag{2.33}$$

と書かれる．位置と運動量に関する Robertson の不確定性関係 (2.33) は特に **Kennard の不確定性関係**と呼ばれる．位置のゆらぎを小さくすると運動量のゆらぎが大きくなり，運動量のゆらぎを小さくすると位置の運動量のゆらぎが大きくなる．Kennard の不確定性関係において特筆すべきは下限が 0 より大きいことである．位置や運動量の固有状態が存在すればゆらぎは 0 になってしまうため**粒子は位置の固有状態や運動量の固有状態をとることはできない．**

第 3 章　連続固有値

この章では連続的な固有値をもつ物理量を扱う．連続固有値を持つ物理量の演算子やその固有状態が満たす性質を離散固有値と比較しながら考える．

3.1　固有状態と波動関数

代表的な連続固有値を持つ物理量は位置である．連続固有値を持つ物理量の固有状態が存在すると仮定し，固有状態を固有値でラベルして $|x\rangle$ と表す．

$$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle \tag{3.1}$$

ただし $\hat{x}$ は演算子であり x は固有値である．離散固有値では状態 $|\psi\rangle$ に対してその展開係数が各 $|\chi_r\rangle$ ごとに一意的に定まっていた．連続固有値の場合も各 $|x\rangle$ ごとに展開係数 $\langle x|\psi\rangle$ が定まっており，$\langle x|\psi\rangle$ は実数から複素数への関数とみなすことができる．これより次を定義する．

$$\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle \tag{3.2}$$

この $\psi(x)$ を**物理量 x 表示の波動関数**と呼ぶ．波動関数とは固有状態を基底に取ったときの $|\psi\rangle$ の展開係数だったのである！ 1 つだけ離散固有値にはなかった要請が必要となる．

要請 5　波動関数の連続性

任意の連続固有値をもつ物理量に対してその表示の**波動関数は連続である**ことを要請する．

離散固有値の場合は関数の定義域が離散的だったのでこの要請は必要なかった．

3.2　連続固有値の正規直交基底

固有状態の正規直交性 (1.15a) と完全性 (1.15b) に対応して，連続固有値の固有状態 $|x\rangle$ は次を満たすと考える．

$$\textbf{正規直交性}\qquad \langle x|x'\rangle = \delta(x-x') \tag{3.3a}$$

$$\textbf{完全性}\qquad \int \mathrm{d}x\,|x\rangle\langle x| = 1 \tag{3.3b}$$

ただし，$\delta(x-x')$ は **Dirac の δ 関数**と呼ばれ

$$\delta(x-x') = 0 \quad \text{if } x \neq x' \tag{3.4a}$$

$$\int \mathrm{d}x'\delta(x-x')f(x') = f(x) \tag{3.4b}$$

を満たす関数として定義される．δ 関数は厳密には関数ではないが数学的に込み入った操作をしない限りは普通の関数と同じように扱うことができる．なぜ $\langle x|x'\rangle$ は $\delta_{xx'}$ ではなく $\delta(x-x')$ にしなければいけないのだろうか．固有状態 $|x'\rangle$ の粒子に対して $\hat{x}$ を測定して x' 以外の値が得られる確率は 0 だから

$$\textbf{直交性}\qquad \langle x|x'\rangle = 0 \quad \text{if } x \neq x' \tag{3.5}$$

は満たされるべきである．また $|x'\rangle$ は完全系を成すから

$$\textbf{完全性}\qquad \psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x'\,\langle x|x'\rangle\,\langle x'|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x'\,\langle x|x'\rangle\,\psi(x') \tag{3.6}$$

も成り立つはずである．しかし (3.5) と (3.6) を仮定すると $\langle x|x\rangle$ は有限の値を持たないことが分かる．もし $\langle x|x\rangle$ が有限ならば $\int \mathrm{d}x' \langle x|x'\rangle \psi(x') = 0$ となってしまうからである．固有状態に直交性と完全性を要請すると状態を規格化することができなくなる．(3.5) と (3.6) から考えれば δ 関数の定義は自然である．

$\||x\rangle\|^2 = \langle x|x\rangle$ の値は発散しているので $|x\rangle$ **は Hilbert 空間の元ではない．**(2.33) で粒子は位置や運動量の固有状態をとれないことを見たが，一般に連続固有値の固有状態は Hilbert 空間には属していない．しかし $|x\rangle$ という仮想的な固有状態を用いることで状態や物理量をうまく記述できるのだ．そもそも実験の精度は有限であるので，物理量が厳密に連続的であるかを議論することは意味がない．位置や運動量を扱う場面では形式的に δ 関数や積分を用いることになるが，実際は Δx を非常に小さい数として

$$\delta(x - x') \simeq \frac{\delta_{xx'}}{\Delta x} \qquad \int \mathrm{d}x \simeq \sum \Delta x \tag{3.7}$$

であると考えて差し支えない．

波動関数の空間で内積と規格化条件は次のように表される．

$$\textbf{内積} \qquad \int \mathrm{d}x\, \phi(x)^* \psi(x) \tag{3.8}$$

$$\textbf{規格化条件} \qquad \int \mathrm{d}x\, \left|\psi(x)\right|^2 = 1 \tag{3.9}$$

なぜなら以下が成り立つからである．

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\, \langle\phi|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\, \langle x|\phi\rangle^* \langle x|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\, \phi(x)^* \psi(x) \tag{3.10}$$

3.3 確率密度関数と確率解釈

次に Born の確率解釈がどのように変更されるか考えよう．0 から 9 の整数がランダムに選ばれるとき 1 が選ばれる確率は 1/10 である．では 0 から 1 の実数がランダムに選ばれるとき 1/2 が選ばれる確率はいくつだろうか？選ばれる可能性のある実数は無限に多いので 0 と答えざるを得ない．このような場合には，数直線上のある 1 点が選ばれる確率ではなく，選ばれた実数がある区間に入っている確率を考えればよい．すなわち

$$\mathbb{P}\big[a \leq x \leq b\big] = \int_a^b \mathrm{d}x\, f(x) \tag{3.11}$$

を満たすような関数 $f(x)$ を考える．この $f(x)$ を**確率密度関数**と呼ぶ．実数 x が選ばれる確率が $f(x)$ なのではなく，選ばれた実数が x 以上 $x + \mathrm{d}x$ 以下の範囲に入っている確率が $\mathrm{d}x\, f(x)$ なのである．そこで，連続固有値を持つ物理量の確率を Born の確率解釈 (1.41) に対応して以下のように解釈する．

$$\mathbb{P}\big[\hat{x} = x, |\psi\rangle\big] = \int \mathrm{d}y \Big|\langle x, y|\psi\rangle\Big|^2 \tag{3.12}$$

固有値 $\hat{x}$ に縮退がなければ単に

$$\mathbb{P}\big[\hat{x} = x, |\psi\rangle\big] = \Big|\langle x|\psi\rangle\Big|^2 \tag{3.13}$$

とできる．例えば x が位置を表す場合，粒子が x 以上 $x + \mathrm{d}x$ 以下の範囲に存在する確率が $\mathrm{d}x\, \mathbb{P}\big[\hat{x} = x, |\psi\rangle\big]$ となる．$\Big|\langle x|\psi\rangle\Big|^2 = \big|\psi(x)\big|^2$ は位置の確率密度関数を表す．粒子が a 以上 b 以下の範囲に存在する確率は

$$\mathbb{P}\big[a \leq \hat{x} \leq b, |\psi\rangle\big] = \int_a^b \mathrm{d}x\, \Big|\langle x|\psi\rangle\Big|^2 \tag{3.14}$$

と求められる．

3.4 連続的な物理量の測定

連続的な物理量は有限の精度でしか測定できない．状態 $|\psi\rangle$ の粒子に対して $\hat{x}$ を測定し，測定値が a 以上 b 以下の範囲に入ることが分かったとする．このときの射影演算子は

$$\hat{\Pi} = \int_a^b \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x| \tag{3.15}$$

のように幅を持ったものになり，その確率は次のように表せる．

$$\mathbb{P}\big[a \leq \hat{x} \leq b, |\psi\rangle\big] = \langle\psi|\hat{\Pi}|\psi\rangle \tag{3.16}$$

3.5 多変数への拡張

互いに可換な物理量の極大の組 $\{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \ldots\}$ を用いれば全ての状態を固有値でラベルできる．その正規直交性と完全性は (2.22a) と (2.22b) に対応して以下のようになる．

正規直交性 $$\langle x, y, z, \ldots | x', y', z', \ldots\rangle = \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z')\cdots \tag{3.17a}$$

完全性 $$\int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}y \int \mathrm{d}z \cdots |x, y, z, \ldots\rangle\langle x, y, z, \ldots| = 1 \tag{3.17b}$$

$|x, y, a, b\rangle$ のように状態を区別するラベルに連続固有値と離散固有値が混ざっていてもよい．

第 4 章 物理量と演算子

物理量の演算子として**位置演算子** $\hat{\boldsymbol{x}}$，**運動量演算子** $\hat{\boldsymbol{p}}$，**軌道角運動量演算子** $\hat{\boldsymbol{L}}$，**スピン角運動量演算子** $\hat{\boldsymbol{S}}$，**角運動量演算子** $\hat{\boldsymbol{J}}$ を導入する．これらの演算子は $\hat{\boldsymbol{x}} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$ のように 3 つの演算子の組であり**ベクトル演算子**と呼ばれる．さらに**エネルギー演算子 (Hamiltonian)** $\hat{H}$ を定義する．以上の物理量はまず演算子が定義され，固有値がその物理量の値であると考えなければならない．

4.1 交換関係

定義 1 交換関係

位置演算子 $\hat{x}_i$，運動量演算子 $\hat{p}_i$，軌道角運動量演算子 $\hat{L}_i$，スピン角運動量演算子 $\hat{S}_i$ を次の交換関係を満たすエルミート演算子と定義する．

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0 \tag{4.1a}$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij} \qquad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \tag{4.1b}$$

$$[\hat{x}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{x}_k \qquad [\hat{p}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{p}_k \qquad [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{L}_k \tag{4.1c}$$

$$[\hat{x}_i, \hat{S}_j] = 0 \qquad [\hat{p}_i, \hat{S}_j] = 0 \qquad [\hat{L}_i, \hat{S}_j] = 0 \qquad [\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{S}_k \tag{4.1d}$$

交換関係からこれらの物理量の様々な性質を導くことができる．というのも，演算子の行列表現はもとの演算子と同じ交換関係を満たさなければいけないが，交換関係が可能な表現に強い制約を与えているからである．運動量や角運動量には上の定義と等価な複数の定義が存在する．

4.2　空間的物理量とスピン的物理量

ここでは位置，運動量，軌道角運動量（計 9 個の物理量）を**空間的物理量**と呼び，スピン角運動量（計 3 個の物理量）を**スピン的物理量**と呼ぶことにする．粒子の角運動量は軌道角運動量とスピン角運動量の和で表されると知られている．古典的な描像では，軌道角運動量は粒子の“軌道”により生じる角運動量に，スピン角運動量は粒子の“自転”により生じる角運動量に対応している．

交換関係 (4.1a),(4.1d) から次の二つが読み取れる．

- 全ての空間的物理量は全てのスピン的物理量と可換である．
- 任意の方向の位置は可換である．

スピン的物理量を問題としない場合，$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ が可換な物理量の極大の組となる．よって Hilbert 空間の状態 $|\psi\rangle$ は $|\boldsymbol{x}\rangle \equiv |x, y, z\rangle$ で完全にラベルでき

$$\psi(x, y, z) = \langle \boldsymbol{x} | \psi \rangle \tag{4.2}$$

と表すことができる．$\psi(x, y, z)$ を**位置表示の波動関数**または単に**波動関数**と呼ぶ．また，$\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ も可換な物理量の極大の組となる．従って $|\boldsymbol{p}\rangle \equiv |p_x, p_y, p_z\rangle$ を基底として

$$\widetilde{\psi}(p_x, p_y, p_z) = \langle \boldsymbol{p} | \psi \rangle \tag{4.3}$$

と表すことも可能である．$\widetilde{\psi}(p_x, p_y, p_z)$ を**運動量表示の波動関数**と呼ぶ．

一方で空間的物理量を問題としない場合，Hilbert 空間の状態はスピン角運動量の固有値によってラベルできる．$\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ が互いに非可換だからいずれか 1 つの固有値でラベルすることになるが慣習的に $\hat{S}_z$ が用いられる．6.3 節で導出するが電子 1 つの $\hat{S}_i$ の固有値は離散的であり $\frac{\hbar}{2}$ と $-\frac{\hbar}{2}$ の 2 種類しかないことが知られている．ここでは，2 つの基底となる状態を $|+\rangle, |-\rangle$ のように書くことにする．

$$\hat{S}_z |\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \tag{4.4}$$

正規直交性と完全性は

$$\textbf{正規直交性} \qquad \langle \pm | \pm \rangle = 1 \quad \langle \pm | \mp \rangle = 0 \tag{4.5a}$$

$$\textbf{完全性} \qquad |+\rangle\langle+| \ + \ |-\rangle\langle-| = 1 \tag{4.5b}$$

で表される．一般の状態 $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \tag{4.6}$$

のように $|+\rangle, |-\rangle$ の線形結合で書ける．m を $+$ か $-$ のいずれかを表すものと約束すると

$$\psi(m) = \langle m | \psi \rangle \tag{4.7}$$

と表せる．$\psi(m)$ は $m = +$ と $m = -$ の 2 つの要素のみを定義域にもつ離散的な波動関数である．

全ての物理量を考慮する場合，$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{S}_z$ が可換な物理量の極大の組となる．従って Hilbert 空間の要素を完全にラベルするには $|\boldsymbol{x}, m\rangle$ を基底に取ればよく波動関数は

$$\psi(x, y, z, m) = \langle \boldsymbol{x}, m | \psi \rangle \tag{4.8}$$

とすればよい．(4.2) ではスピン的物理量が無視されており，$\psi(x, y, z, +)$ と $\psi(x, y, z, -)$ が両方とも $\psi(x, y, z)$ に対応している．逆に (4.7) は空間的物理量が無視されている．

4.3 ユニタリー演算子

色々な演算子を扱うにあたって有用な定理を証明しておこう．

定理 4　期待値と物理量の相等

$\hat{A}, \hat{B}$ を物理量とする．このとき次が成立する．

$$\text{任意の状態 } |\psi\rangle \text{ に対して } \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle \iff \hat{A} = \hat{B}$$

証明． ($\Longrightarrow$) $\hat{C} = \hat{A} - \hat{B}$ とする．任意の $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して $\langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle = 0$ であるとき $\hat{C} = 0$ であることを示せばよい．$|\chi\rangle, |\psi\rangle, |\chi+\phi\rangle, |\chi+i\psi\rangle$ に対して仮定を用いると，

$$\begin{aligned} 0 &= \langle\chi+\phi|\hat{C}|\chi+\phi\rangle \\ &= \langle\chi|\hat{C}|\chi\rangle + \langle\chi|\hat{C}|\phi\rangle + \langle\phi|\hat{C}|\chi\rangle + \langle\phi|\hat{C}|\phi\rangle \\ &= \langle\chi|\hat{C}|\phi\rangle + \langle\chi|\hat{C}|\phi\rangle^* \\ &= 2\,\mathrm{Re}\,\langle\chi|\hat{C}|\phi\rangle \end{aligned} \tag{4.9}$$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle\chi+i\phi|\hat{C}|\chi+i\phi\rangle \\ &= \langle\chi|\hat{C}|\chi\rangle + \langle\chi|\hat{C}|i\phi\rangle + \langle i\phi|\hat{C}|\chi\rangle + \langle i\phi|\hat{C}|i\phi\rangle \\ &= i\,\langle\chi|\hat{C}|\phi\rangle - i\,\langle\chi|\hat{C}|\phi\rangle^* \\ &= 2i\,\mathrm{Im}\,\langle\chi|\hat{C}|\phi\rangle \end{aligned} \tag{4.10}$$

途中でエルミート共役の性質 (1.33) を用いた．これより任意の状態 $|\chi\rangle, |\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して $\langle\chi|\hat{C}|\phi\rangle = 0$ だから $\hat{A} = \hat{B}$ が成立．
($\Longleftarrow$) 明らか． □

系を平行移動，回転移動，時間発展させる演算子を考えよう．それぞれの演算子を

平行移動演算子	$\mathscr{T}(a, \boldsymbol{e})$	(4.11a)
回転移動演算子	$\mathscr{D}(\phi, \boldsymbol{n})$	(4.11b)
時間発展演算子	$\mathscr{U}(t)$	(4.11c)

とする．ただし $\mathscr{T}(a, \boldsymbol{e})$ の a は移動距離，$\boldsymbol{e} = (e_1, e_2, e_3)$ は移動方向を表す単位ベクトル，$\mathscr{D}(\phi, \boldsymbol{n})$ の ϕ は回転角，$\boldsymbol{n} = (n_1, n_2, n_3)$ は回転軸を表す単位ベクトル，$\mathscr{U}(t)$ の t は経過時間を表している．

例えば，平行移動演算子 $\mathscr{T}(a, \boldsymbol{e})$ が量子状態 $|\psi\rangle$ に作用した状態を $|\phi\rangle = \mathscr{T}(a, \boldsymbol{e})\,|\psi\rangle$ とすると，$|\phi\rangle$ の期待値は次のようになる．

$$\mathbb{E}\big[\hat{x}_i, |\phi\rangle\big] = \mathbb{E}\big[\hat{x}_i, |\psi\rangle\big] + ae_i \tag{4.12a}$$

$$\mathbb{E}\big[\hat{A}, |\phi\rangle\big] = \mathbb{E}\big[\hat{A}, |\psi\rangle\big] \qquad \hat{A} \text{ は位置演算子以外の物理量} \tag{4.12b}$$

すなわち平行移動演算子とは位置の期待値のみ $+a\boldsymbol{e}$ させるような演算子である．

これらの演算子は**ユニタリー演算子**でなければならない．ユニタリー演算子とは

$$\mathscr{U}\mathscr{U}^\dagger = \mathscr{U}^\dagger\mathscr{U} = 1 \tag{4.13}$$

を満たす演算子でありユニタリー演算子の行列表現はユニタリー行列となる．例えば，$|\phi\rangle = \mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})\,|\psi\rangle$ とすると

$$\langle\phi|\phi\rangle = \langle\psi|\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})^\dagger\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})|\psi\rangle \tag{4.14}$$

であるが，$|\phi\rangle$ も規格化されていなければいけないので $\langle\psi|\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})^\dagger\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})|\psi\rangle = 1$ が成り立つ．さらに $\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})^\dagger\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})$ はエルミート演算子である．一方 $\langle\psi|1|\psi\rangle = 1$ であるから定理 4 より $\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})^\dagger\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e}) = 1$ が結論できる．

量子力学では平行移動演算子，回転移動演算子，時間発展演算子によりそれぞれ運動量演算子，角運動量演算子，Hamiltonian を定義することができる．

4.4 演算子の指数関数

量子力学では $\exp(\hat{A})$ のように演算子を引数に持つ指数関数が登場する．演算子の指数関数は

$$\exp(\hat{A}) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} = 1 + \hat{A} + \frac{\hat{A}^2}{2!} + \cdots \tag{4.15}$$

のようにべき級数で定義される．演算子の指数関数の主な性質は以下のとおりである．

$$\exp(\hat{A})\exp(-\hat{A}) = \exp(0) = 1 \tag{4.16a}$$

$$\frac{\mathrm{d}\exp(\hat{A}t)}{\mathrm{d}t} = \hat{A}\exp(\hat{A}t) = \exp(\hat{A}t)\hat{A} \tag{4.16b}$$

$$\exp(\hat{A}t)\hat{B}\exp(-\hat{A}t) = \hat{B} + t[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{t^2}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \cdots + \frac{t^n}{n!}[\hat{A}, [\hat{A}, \ldots, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \cdots \tag{4.16c}$$

特に (4.16c) は **Baker-Campbell-Hausdorff の公式**と呼ばれる．

$\hat{A}$ と $\exp(\hat{A})$ の関係について考えよう．h が微小量のとき，$f(x+h)$ の Taylor 展開の h の 2 次以上の項が無視できて

$$f(x+h) = f(x) + h\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x) = \left(1 + h\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)f(x) \tag{4.17}$$

が成立する．同じことを有限の a について考える．n を十分大きな数に取れば $a/n << 1$ と考えることができて，(4.17) を繰り返し用いると

$$\begin{aligned} f(x+a) &= f\left(x + (n-1)\frac{a}{n} + \frac{a}{n}\right) \\ &= \left(1 + \frac{a}{n}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)f\left(x + (n-1)\frac{a}{n}\right) \\ &= \left(1 + \frac{a}{n}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2 f\left(x + (n-2)\frac{a}{n}\right) \\ &\;\;\vdots \\ &= \left(1 + \frac{a}{n}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n f(x) \end{aligned} \tag{4.18}$$

(4.18) は指数関数の定義と同じ形をしている．

$$\lim_{n\to\infty}\left(1 + \frac{x}{n}\right)^n = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!} = \exp(x) \tag{4.19}$$

よって (4.18) に $n \to \infty$ の極限をとれば

$$f(x+a) = \exp\Big(a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)f(x) \tag{4.20}$$

と結論できる．(4.20) は $f(x+a)$ の Taylor 展開

$$f(x+a) = f(x) + a\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} + \frac{a^2}{2!}\frac{\mathrm{d}^2 f(x)}{\mathrm{d}x^2} + \cdots = \sum_n \frac{a^n}{n!}\frac{\mathrm{d}^n f(x)}{\mathrm{d}x^n} \tag{4.21}$$

を考えても明らかだろう．これは微分演算子を引数に含む指数関数である．無限小変換の演算子 $\big(1+h\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\big)$ の有限変換に対応するものが $\exp\big(a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\big)$ である．指数関数は**無限小変換を無限回行うことにより有限の操作を導く**という意味を持っている．例えば次のような微分方程式があるとしよう．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}v(t) = -\gamma v(t), \quad v(0) = v_0 \tag{4.22}$$

演算子の指数関数を用いると $v(t+t')$ は形式的に次のように表せる．

$$v(t+t') = \exp\Big(t'\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big)v(t) \tag{4.23}$$

与えられた微分方程式から $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$ を $-\gamma$ に置き換えて $t=0$ を代入すると

$$v(t') = \exp(-\gamma t')v_0 \tag{4.24}$$

となり方程式を解くことができた！この解は $-\gamma$ という無限小の時間発展を無限回繰り返すことによって有限時間 t' が経過した後の速度を求めたものだといえる．

4.5 平行移動演算子と運動量演算子

平行移動演算子 $\mathscr{F}(a,\boldsymbol{e})$ は位置の期待値を

$$\begin{pmatrix}\langle\hat{x}\rangle\\ \langle\hat{y}\rangle\\ \langle\hat{z}\rangle\end{pmatrix} \xrightarrow{\mathscr{F}(a,\boldsymbol{e})} \begin{pmatrix}\langle\hat{x}\rangle\\ \langle\hat{y}\rangle\\ \langle\hat{z}\rangle\end{pmatrix} + a\begin{pmatrix}e_x\\ e_y\\ e_z\end{pmatrix} \tag{4.25}$$

のように変換するユニタリー演算子である．任意の $|\psi\rangle$ に対して

$$\langle\psi|\mathscr{F}(a,\boldsymbol{e})^\dagger\hat{x}_i\mathscr{F}(a,\boldsymbol{e})|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{x}_i|\psi\rangle + ae_i = \langle\psi|\hat{x}_i + ae_i|\psi\rangle \tag{4.26}$$

が成り立つので定理 4 より

$$\mathscr{F}(a,\boldsymbol{e})^\dagger\hat{x}_i\mathscr{F}(a,\boldsymbol{e}) = \hat{x}_i + ae_i \tag{4.27}$$

が成り立つ．(4.27) より $\hat{x}_i\mathscr{F}(a,\boldsymbol{e}) = \mathscr{F}(a,\boldsymbol{e})(\hat{x}_i + ae_i)$．この演算子を $|\boldsymbol{x}\rangle \equiv |x,y,z\rangle$ に作用させると，

$$\hat{x}_i\mathscr{F}(a,\boldsymbol{e})\,|\boldsymbol{x}\rangle = \mathscr{F}(a,\boldsymbol{e})(\hat{x}_i + ae_i)\,|\boldsymbol{x}\rangle = (x_i + ae_i)\mathscr{F}(a,\boldsymbol{e})\,|\boldsymbol{x}\rangle \tag{4.28}$$

これより

$$\mathscr{F}(a,\boldsymbol{e})\,|\boldsymbol{x}\rangle = |\boldsymbol{x} + a\boldsymbol{e}\rangle \tag{4.29}$$

が成り立つ．これは直感的にも明らかだろう．(4.27) は $\mathscr{F}(a,\boldsymbol{e})$ が演算子を変化させるという見方，(4.29) は $\mathscr{F}(a,\boldsymbol{e})$ が状態を変化させるという見方である．どちらの解釈でも期待値は (4.25) となる．

平行移動演算子 $\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})$ で重要なのは次のような表示を持つものである．

$$\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e}) = \exp(-i\hat{\boldsymbol{K}} \cdot a\boldsymbol{e}) \tag{4.30}$$

ただし $\hat{\boldsymbol{K}} = (\hat{K}_1, \hat{K}_2, \hat{K}_3)$ はそれぞれ**エルミート演算子**であるとする．この $\hat{K}_i$ は x_i 軸方向の無限小の平行移動の演算子であり**平行移動の生成子**と呼ばれる．因子「$-i$」を前に出した理由は後に分かる．(4.30) によって平行移動演算子を定義すればユニタリー性は自動的に満たされる．

$$\begin{aligned}\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})^\dagger \mathscr{F}(a, \boldsymbol{e}) &= \exp(-i\hat{\boldsymbol{K}} \cdot a\boldsymbol{e})^\dagger \exp(-i\hat{\boldsymbol{K}} \cdot a\boldsymbol{e}) \\ &= \exp(i\hat{\boldsymbol{K}} \cdot a\boldsymbol{e}) \exp(-i\hat{\boldsymbol{K}} \cdot a\boldsymbol{e}) \\ &= 1\end{aligned} \tag{4.31}$$

$\hat{K}_i^\dagger = \hat{K}_i$ と (4.16a) を用いた．$\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})^\dagger = 1$ も同様である．x_j 軸方向の平行移動演算子を考えると (4.27) は次のようになる．

$$\exp(i\hat{K}_j a)\hat{x}_i \exp(-i\hat{K}_j a) = \hat{x}_i + a\delta_{ij} \tag{4.32}$$

ここで (4.16b) を用いて両辺を a で微分すると

$$\exp(i\hat{K}_j a)\,\hat{x}_i(-i\hat{K}_j)\;\exp(-i\hat{K}_j a) + \exp(i\hat{K}_j a)\,(i\hat{K}_j)\hat{x}_i\;\exp(-i\hat{K}_j a) = \delta_{ij} \tag{4.33}$$

$$\exp(i\hat{K}_j a)[\hat{x}_i, \hat{K}_j] \exp(-i\hat{K}_j a) = i\delta_i j \tag{4.34}$$

$a = 0$ を代入すると

$$[\hat{x}_i, \hat{K}_j] = i\delta_{ij} \tag{4.35}$$

位置演算子と平行移動の生成子の交換関係が得られた．また (4.25) で示されているように平行移動は期待値に定ベクトルを加える操作を表している．当然複数の平行移動は可換でなければいけない．x_i 軸方向と x_j 軸方向の平行移動演算子の可換性より

$$[\exp(-i\hat{K}_i a), \exp(-i\hat{K}_j a)] = 0 \tag{4.36}$$

が要請されるが左辺は

$$[\exp(-i\hat{K}_i a), \exp(-i\hat{K}_j a)] = -a^2[\hat{K}_i, \hat{K}_j] + \mathcal{O}\big(a^3\big) \tag{4.37}$$

と展開されるので

$$[\hat{K}_i, \hat{K}_j] = 0 \tag{4.38}$$

が必要である．逆に (4.38) が満たされれば任意の方向の平行移動演算子は可換になる．以上より平行移動の生成子が満たすべき交換関係は以下のようにまとめられる．

$$[\hat{x}_i, \hat{K}_j] = i\delta_{ij} \qquad [\hat{K}_i, \hat{K}_j] = 0 \tag{4.39}$$

以上を踏まえると運動量演算子を以下のように定義することもできる．

定義 2　平行移動生成子としての運動量演算子

$\hat{\boldsymbol{K}}$ を平行移動の生成子とする．**運動量演算子**を次のように定義する．

$$\hat{p}_i \equiv \hbar\,\hat{K}_i \qquad \hat{\boldsymbol{p}} \equiv \hbar\,\hat{\boldsymbol{K}} \tag{4.40}$$

平行移動の生成子 $\hat{\boldsymbol{K}}$ はエルミート演算子であったので運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ もエルミート演算子になっている．また $\hat{\boldsymbol{K}}$ の次元が $\mathrm{m^{-1}}$ であり $\hbar$ の次元は $\mathrm{kg\,m^2\,s^{-1}}$ であるから $\hat{\boldsymbol{p}}$ の次元は $\mathrm{kg\,m\,s^{-1}}$ となり運動量の次元に一致する．運動量演算子の交換関係は次のようになる．

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij} \qquad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \tag{4.41}$$

平行移動生成子としての定義から交換関係 (4.1b) を導くことができた．

逆に，交換関係 (4.1b) から $\hat{p}_j/\hbar$ が平行移動の生成子であることを導くこともできる．Baker-Campbell-Hausdorff の公式 (4.16c) を用いると

$$\begin{aligned}\exp\!\Big(\frac{i\hat{p}_j a}{\hbar}\Big)\,\hat{x}_i\,\exp\!\Big(\frac{-i\hat{p}_j a}{\hbar}\Big) &= \hat{x}_i + \frac{ia}{\hbar}[\hat{p}_j, \hat{x}_i] + \frac{1}{2!}\Big(\frac{ia}{\hbar}\Big)^2[\hat{p}_j, [\hat{p}_j, \hat{x}_i]] + \cdots \\ &= \hat{x}_i + \frac{ia}{\hbar}(-i\hbar\,\delta_{ij}) + \frac{1}{2!}\Big(\frac{ia}{\hbar}\Big)^2[\hat{p}_j, (-i\hbar\,\delta_{ij})] + \cdots \\ &= \hat{x}_i + a\delta_{ij}\end{aligned} \tag{4.42}$$

4.6 回転移動演算子と角運動量演算子

古典力学において各軸周りの回転行列は次のように与えられる．

$$R_x(\phi) = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\phi & -\sin\phi\\ 0 & \sin\phi & \cos\phi\end{pmatrix}\ R_y(\phi) = \begin{pmatrix}\cos\phi & 0 & \sin\phi\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\phi & 0 & \cos\phi\end{pmatrix}\ R_z(\phi) = \begin{pmatrix}\cos\phi & -\sin\phi & 0\\ \sin\phi & \cos\phi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{4.43}$$

例えば z 軸周りの回転であれば

$$\begin{pmatrix}M_x\\ M_y\\ M_z\end{pmatrix} \xrightarrow{R_z(\phi)} \begin{pmatrix}M_x\cos\phi - M_y\sin\phi\\ M_x\sin\phi\ + M_y\cos\phi\\ M_z\end{pmatrix} \tag{4.44}$$

のように変換される．回転移動演算子 $\mathscr{D}(\phi, \boldsymbol{n})$ において回転軸 $\boldsymbol{n}$ を z 軸に取ったものを $\mathscr{D}_z(\phi)$ とおく．古典的なベクトルの回転に対応させると $\mathscr{D}_z(\phi)$ はベクトル演算子の期待値を

$$\begin{pmatrix}\langle\hat{M}_x\rangle\\ \langle\hat{M}_y\rangle\\ \langle\hat{M}_z\rangle\end{pmatrix} \xrightarrow{\mathscr{D}_z(\phi)} \begin{pmatrix}\langle\hat{M}_x\rangle\cos\phi - \langle\hat{M}_y\rangle\sin\phi\\ \langle\hat{M}_x\rangle\sin\phi\ + \langle\hat{M}_y\rangle\cos\phi\\ \langle\hat{M}_z\rangle\end{pmatrix} \tag{4.45}$$

のように変換するユニタリー演算子である．(4.27) のように回転移動演算子が演算子に作用するものと考えると，定理 4 よりベクトル演算子 $(\hat{M}_1, \hat{M}_2, \hat{M}_3)$ は

$$\mathscr{D}_z(\phi)^\dagger\hat{M}_x\mathscr{D}_z(\phi) = \hat{M}_x\cos\phi - \hat{M}_y\sin\phi \tag{4.46a}$$

$$\mathscr{D}_z(\phi)^\dagger\hat{M}_y\mathscr{D}_z(\phi) = \hat{M}_x\sin\phi + \hat{M}_y\cos\phi \tag{4.46b}$$

$$\mathscr{D}_z(\phi)^\dagger\hat{M}_z\mathscr{D}_z(\phi) = \hat{M}_z \tag{4.46c}$$

のような変換則を満たす．

平行移動のときと同様に指数関数の形で表される回転移動演算子を考える．

$$\mathscr{D}(\phi, \boldsymbol{n}) = \exp(-i\hat{\boldsymbol{T}}\cdot\phi\boldsymbol{n}) \tag{4.47}$$

$\hat{\boldsymbol{T}} = (\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_3)$ はそれぞれエルミート演算子であり，**回転移動の生成子**と呼ばれる．特に

$$\mathscr{D}_z(\phi) = \exp(-i\hat{T}_3\phi) \tag{4.48}$$

とする．これを用いると回転移動の変換則は

$$\exp(i\hat{T}_3\phi)\hat{M}_1\exp(-i\hat{T}_3\phi) = \hat{M}_1\cos\phi - \hat{M}_2\sin\phi \tag{4.49a}$$
$$\exp(i\hat{T}_3\phi)\hat{M}_2\exp(-i\hat{T}_3\phi) = \hat{M}_1\sin\phi + \hat{M}_2\cos\phi \tag{4.49b}$$
$$\exp(i\hat{T}_3\phi)\hat{M}_3\exp(-i\hat{T}_3\phi) = \hat{M}_3 \tag{4.49c}$$

のように表せる．両辺を ϕ で微分すると

$$\exp(i\hat{T}_3\phi)[\hat{M}_1,\hat{T}_3]\exp(-i\hat{T}_3\phi) = -i\hat{M}_1\sin\phi - i\hat{M}_2\cos\phi \tag{4.50a}$$
$$\exp(i\hat{T}_3\phi)[\hat{M}_2,\hat{T}_3]\exp(-i\hat{T}_3\phi) = i\hat{M}_1\cos\phi - i\hat{M}_2\sin\phi \tag{4.50b}$$
$$\exp(i\hat{T}_3\phi)[\hat{M}_3,\hat{T}_3]\exp(-i\hat{T}_3\phi) = 0 \tag{4.50c}$$

$\phi = 0$ を代入すると

$$[\hat{M}_1,\hat{T}_3] = -i\hat{M}_2 \tag{4.51a}$$
$$[\hat{M}_2,\hat{T}_3] = i\hat{M}_1 \tag{4.51b}$$
$$[\hat{M}_3,\hat{T}_3] = 0 \tag{4.51c}$$

$\mathscr{D}_x(\phi), \mathscr{D}_y(\phi)$ に対しても同じことを行うと

$$[\hat{M}_1,\hat{T}_1] = 0 \qquad [\hat{M}_1,\hat{T}_2] = i\hat{M}_3 \qquad [\hat{M}_1,\hat{T}_3] = -i\hat{M}_2 \tag{4.52a}$$
$$[\hat{M}_2,\hat{T}_1] = -i\hat{M}_3 \qquad [\hat{M}_2,\hat{T}_2] = 0 \qquad [\hat{M}_2,\hat{T}_3] = i\hat{M}_1 \tag{4.52b}$$
$$[\hat{M}_3,\hat{T}_1] = i\hat{M}_2 \qquad [\hat{M}_3,\hat{T}_2] = -i\hat{M}_1 \qquad [\hat{M}_3,\hat{T}_3] = 0 \tag{4.52c}$$

が得られる．これらはまとめて

$$[\hat{M}_i,\hat{T}_j] = i\varepsilon_{ijk}\,\hat{M}_k \tag{4.53}$$

と表すことができる．回転移動の生成子の交換関係が得られた．以上を踏まえると角運動量演算子を以下のように定義することもできる．

定義 3 回転移動生成子としての軌道・スピン角運動量演算子

$\hat{\boldsymbol{T}}^L$ を空間的物理量に対する回転移動の生成子とする．**軌道角運動量演算子**を次のように定義する．

$$\hat{L}_i \equiv \hbar\hat{T}^L_i \qquad \hat{\boldsymbol{L}} \equiv \hbar\hat{\boldsymbol{T}}^L \tag{4.54}$$

$\hat{\boldsymbol{T}}^S$ をスピン的物理量に対する回転移動の生成子とする．**スピン角運動量演算子**を次のように定義する．

$$\hat{S}_i \equiv \hbar\hat{T}^S_i \qquad \hat{\boldsymbol{S}} \equiv \hbar\hat{\boldsymbol{T}}^S \tag{4.55}$$

係数は運動量演算子と同じ $\hbar$ である！回転移動の生成子は無次元量だから $\hat{\boldsymbol{L}}$ と $\hat{\boldsymbol{S}}$ の次元は $\hbar$ と同じ $\mathrm{kg\,m^2\,s^{-1}}$ となり角運動量の次元に一致する．$\hat{M}^L_i$ は空間的物理量の演算子であり具体的には位置演算子，運動量演算子，そして角運動量演算子自身も該当する．すなわち

$$[\hat{x}_i,\hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{x}_k \qquad [\hat{p}_i,\hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{p}_k \qquad [\hat{L}_i,\hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{L}_k \tag{4.56}$$

が成立する．軌道角運動量演算子の定義から交換関係 (4.1c) を導くことができた．スピン的物理量の演算子はスピン角運動量演算子自身しかないため交換関係は

$$[\hat{S}_i,\hat{S}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{S}_k \tag{4.57}$$

となる．スピン角運動量演算子の定義から交換関係 (4.1d) を導くことができた．

逆に，交換関係 (4.1c),(4.1d) から $\hat{L}_j/\hbar$ と $\hat{S}_j/\hbar$ が回転移動の生成子であることを導くこともできる．$\hat{M}_x$ と $\hat{L}_z$ の場合にこれを示す．Baker-Campbell-Hausdorff の公式 (4.16c) を用いると

$$\begin{aligned}\exp\Big(\frac{i\hat{L}_z\phi}{\hbar}\Big)\,\hat{M}_x\,\exp\Big(\frac{-i\hat{L}_z\phi}{\hbar}\Big) &= \hat{M}_x + \frac{i\phi}{\hbar}[\hat{L}_z,\hat{M}_x] + \frac{1}{2!}\Big(\frac{i\phi}{\hbar}\Big)^2[\hat{L}_z,[\hat{L}_z,\hat{M}_x]] + \cdots \\ &= \hat{M}_x\Big(1 - \frac{\phi^2}{2!} + \cdots\Big) - \hat{M}_y\Big(\phi - \frac{\phi^3}{3!} + \cdots\Big) \\ &= \hat{M}_x\cos\phi - \hat{M}_y\sin\phi \end{aligned} \tag{4.58}$$

定義 4 角運動量演算子

角運動量演算子を次のように定義する．

$$\hat{J}_i \equiv \hat{L}_i + \hat{S}_i \qquad \hat{\boldsymbol{J}} \equiv \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}} \tag{4.59}$$

これは，全てのベクトル演算子に対する回転移動の生成子を $\hat{\boldsymbol{T}}$ として，角運動量演算子を以下のように定義することと等価である．

$$\hat{J}_i \equiv \hbar\hat{T}_i \qquad \hat{\boldsymbol{J}} \equiv \hbar\hat{\boldsymbol{T}} \tag{4.60}$$

定義より角運動量演算子は次の交換関係を満たす．

$$[\hat{M}_i,\hat{J}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{M}_k \tag{4.61}$$

古典的な描像によると，$\hat{\boldsymbol{T}}^L$ は粒子の“軌道”（位置，運動量，軌道角運動量）のみを回転させる生成子，$\hat{\boldsymbol{T}}^S$ は粒子の“自転”（スピン角運動量）のみを回転させる生成子，$\hat{\boldsymbol{T}}$ はその両方を回転させる生成子である．

4.7 時間発展演算子と Hamiltonian

$\mathscr{U}(t)$ は系の時刻を t だけ進めるユニタリー演算子である．$\mathscr{U}(t)$ は状態に作用すると考えても良いし演算子に作用すると考えてもよい．いずれの解釈にせよ物理量 $\hat{A}$ の期待値は

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\mathscr{U}(t)^\dagger\hat{A}\mathscr{U}(t)|\psi\rangle \tag{4.62}$$

で与えられる．ここで $|\psi\rangle$ や $\hat{A}$ は時刻 t には依存しておらず，時間依存性があるのは $\mathscr{U}(t)$ だけであることに注意したい．$\langle\hat{A}\rangle$ はどちらの解釈でも同じなので (t) は省略しているが当然ながら時間に依存している．2 つの見方を整理しよう．

- 時間発展演算子が状態に作用する見方

$$|\psi(t)\rangle = \mathscr{U}(t)\,|\psi\rangle\,, \quad \text{演算子は不変,} \quad \langle\hat{A}\rangle = \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle \tag{4.63a}$$

- 時間発展演算子が演算子に作用する見方

$$\hat{A}(t) = \mathscr{U}(t)^\dagger\hat{A}\mathscr{U}(t), \quad \text{状態は不変,} \quad \langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}(t)|\psi\rangle \tag{4.63b}$$

前者の見方を **Schrödinger 描像**と呼び，後者の見方を **Heisenberg 描像**と呼ぶ．2 つの描像は $t=0$ のときに一致する．

例によって指数関数の形で表される時間発展演算子を考える．

$$\mathscr{U}(t) = \exp(-i\hat{\Omega}t) \tag{4.64}$$

ただし $\hat{\Omega}$ はエルミート演算子で**時間発展の生成子**と呼ばれる．Schrödinger 描像の状態 $|\psi(t)\rangle$ がどのように時間変化するのか考える．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathscr{U}(t)\,|\psi\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\exp(-i\hat{\Omega}t)\,|\psi\rangle = -i\hat{\Omega}\exp(-i\hat{\Omega}t)\,|\psi\rangle \tag{4.65}$$

より Schrödinger 描像の状態 $|\psi(t)\rangle$ は次を満たす．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\psi(t)\rangle = -i\hat{\Omega}\,|\psi(t)\rangle \tag{4.66}$$

一方で Heisenberg 描像の演算子 $\hat{A}(t)$ がどのように時間変化するのかを考える．

$$\hat{A}(t) = \exp(i\hat{\Omega}t)\hat{A}\exp(-i\hat{\Omega}t) \tag{4.67}$$

の両辺を時刻 t で微分すると

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} = \exp(-i\hat{\Omega}t)[\hat{A}, -i\hat{\Omega}]\exp(-i\hat{\Omega}t) = -i[\hat{A}(t), \hat{\Omega}] \tag{4.68}$$

Schrödinger 描像の状態 $|\psi(t)\rangle$ と Heisenberg 描像の演算子 $\hat{A}(t)$ が満たすべき運動方程式が得られた．

定義 5　エネルギー演算子 (Hamiltonian)

$\hat{\Omega}$ を系の時間発展生成子とする．エネルギー演算子 **Hamiltonian** を次のように定義する．

$$\hat{H} \equiv \hbar\hat{\Omega} \tag{4.69}$$

またもや係数は $\hbar$ である！時間発展の生成子の次元が s^{-1} であるから $\hat{H}$ の次元は J となりエネルギーの次元に一致する．Schrödinger 描像と Heisenberg 描像の運動方程式を Hamiltonian を用いて表そう．まず Schrödinger 描像の場合，(4.66) の両辺に $i\hbar$ を掛けると

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle \tag{4.70}$$

となる．(4.70) で表される微分方程式を**時間に依存する Schrödinger 方程式**と呼ぶ．次に Heisenberg 描像の場合を考える．(4.68) の両辺に $i\hbar$ を掛けると

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{A}(t), \hat{H}] \tag{4.71}$$

が得られる．(4.71) を **Heisenberg の運動方程式**と呼ぶ．

Hamiltonian の具体的な形は系によって異なる．系の Hamiltonian が分かればその系の時間発展を求めることができるが，**$\hat{H}$ は実験結果と一致するように選ばれるものでそれ以上に具体的な定義があるわけではない．**これはおかしなことではない．Newton 力学は物体に作用する力さえ分かれば運動を予測できるという体系である．解析力学は系の Lagrangian さえ分かれば運動を予測できるという体系である．これらと全く同様に，量子力学は系のエネルギー演算子さえ分かれば系の時間発展を予測できるという体系である．多くの系に対して系の Hamiltonian の形を知ることで，様々な系の時間発展を予想できるようになるのだ．

第 5 章 位置・運動量

位置や運動量などの連続固有値を持つ物理量は波動関数との関係が深い．位置演算子や運動量演算子が位置固有状態 $|\boldsymbol{x}\rangle$ を基底に取ったとき，どのような表現を持つのかを求めてその性質を確認する．

5.1 位置演算子・運動量演算子の表現

位置固有状態を基底に取ったときの位置演算子の表現を求めよう．$\hat{x}_i$ がエルミート演算子であり固有値が実数であることを踏まえると

$$\langle \boldsymbol{x}|\hat{x}_i|\psi\rangle = \langle \hat{x}_i\boldsymbol{x}|\psi\rangle = x_i \langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle \tag{5.1}$$

が得られる．(5.1) は位置表示の波動関数空間で $\hat{x}_i$ が実数の掛け算 x_i に対応していることを示している．波動関数空間上の演算子「x_i」を**位置表示の位置演算子**と呼ぶ．(5.1) に $|\psi\rangle = |\boldsymbol{x'}\rangle$ を代入することで位置演算子の行列要素は次のようになる．

$$\langle \boldsymbol{x}|\hat{x}_i|\boldsymbol{x'}\rangle = x_i\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x'}) \tag{5.2}$$

次に運動量演算子の表現を求めよう．

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{x}|\exp(-i\hat{K}_i a)|\psi\rangle &= \langle \exp(i\hat{K}_i a)\boldsymbol{x}|\psi\rangle \\ &= \langle \boldsymbol{x} - a e_i|\psi\rangle \\ &= \exp\Bigl(-a\frac{\partial}{\partial x_i}\Bigr)\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle\end{aligned} \tag{5.3}$$

両辺の a の 1 次の項を比較して，$i\hbar$ を掛けると

$$\langle \boldsymbol{x}|\hat{p}_i|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle \tag{5.4}$$

が得られる．(5.4) は位置表示の波動関数空間で $\hat{p}_i$ が微分演算子 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}$ に対応していることを示している．波動関数空間上の演算子「$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}$」を**位置表示の運動量演算子**と呼ぶ．$a$ の n 次の項も同様にして比較すると

$$\langle \boldsymbol{x}|\hat{p}_i^n|\psi\rangle = (-i\hbar)^n\frac{\partial^n}{\partial x_i^n}\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle \tag{5.5}$$

と結論できる．(5.4) に $|\psi\rangle = |\boldsymbol{x'}\rangle$ を代入すると，運動量演算子の行列要素は次のようになる．

$$\langle \boldsymbol{x}|\hat{p}_i|\boldsymbol{x'}\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x'}) \tag{5.6}$$

これらを用いると

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{x}|[\hat{x}_i,\hat{p}_j]|\psi\rangle &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{x'}\langle \boldsymbol{x}|\hat{x}_i|\boldsymbol{x'}\rangle\langle \boldsymbol{x'}|\hat{p}_j|\psi\rangle - \int \mathrm{d}\boldsymbol{x'}\langle \boldsymbol{x}|\hat{p}_j|\boldsymbol{x'}\rangle\langle \boldsymbol{x'}|\hat{x}_i|\psi\rangle \\ &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{x'}x_i\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x'})\Bigl(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'_j}\Bigr)\langle \boldsymbol{x'}|\psi\rangle - \int \mathrm{d}\boldsymbol{x'}\Bigl(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\Bigr)\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x'})x'_i\langle \boldsymbol{x'}|\psi\rangle \\ &= \Bigl[x_i, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\Bigr]\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle\end{aligned} \tag{5.7}$$

となるが

$$\Bigl[\frac{\partial}{\partial x_j}, x_i\Bigr]\psi(\boldsymbol{x}) = x_i\frac{\partial\psi(\boldsymbol{x})}{\partial x_j} + \delta_{ij}\psi(\boldsymbol{x}) - x_i\frac{\partial\psi(\boldsymbol{x})}{\partial x_j} = \delta_{ij}\psi(\boldsymbol{x}) \tag{5.8}$$

であるから結果的に

$$\langle \boldsymbol{x}|[\hat{x}_i, \hat{p}_j]|\psi\rangle = i\hbar\,\delta_{ij}\,\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle \tag{5.9}$$

が得られる．ただし

$$\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x'}) \equiv \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') \tag{5.10}$$

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{x'} \equiv \int \mathrm{d}x' \int \mathrm{d}y' \int \mathrm{d}z' \tag{5.11}$$

である．そのほかの交換関係も同様に求めることができ，次のようにまとめられる．

$$\langle \boldsymbol{x}|[\hat{x}_i, \hat{x}_j]|\psi\rangle = \Big[x_i, x_j\Big]\,\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle = 0 \tag{5.12a}$$

$$\langle \boldsymbol{x}|[\hat{p}_i, \hat{p}_j]|\psi\rangle = \left[-i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x_i}, -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x_j}\right]\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle = 0 \tag{5.12b}$$

$$\langle \boldsymbol{x}|[\hat{x}_i, \hat{p}_j]|\psi\rangle = \left[x_i, -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x_j}\right]\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle = i\hbar\,\delta_{ij}\,\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle \tag{5.12c}$$

位置と運動量の交換関係は位置固有基底における表現でも成り立っていることが確認できた．

5.2 演算子の表現のエルミート性

位置表示の位置演算子と運動量演算子は次式を満たす．

$$\int \mathrm{d}x\ \phi(x)^* x\psi(x) = \int \mathrm{d}x\ x\phi(x)^*\psi(x) \tag{5.13a}$$

$$\int \mathrm{d}x\ \psi(x)^*\left(-i\hbar\,\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right) = -\int \mathrm{d}x\ \left(-i\hbar\,\frac{\mathrm{d}\phi(x)^*}{\mathrm{d}x}\right)\psi(x) = \int \mathrm{d}x\ \left(-i\hbar\,\frac{\mathrm{d}\phi(x)}{\mathrm{d}x}\right)^*\psi(x) \tag{5.13b}$$

(5.13b) には部分積分を用いた．その際 $[\phi(x)^*\psi(x)]_{-\infty}^{+\infty} = 0$ としたが，$\langle\psi|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\,|\psi(x)|^2$ が有限の値に収束するためには $\lim_{x\to\pm\infty}\psi(x) = 0$ である必要があるからである．(5.13a) と (5.13b) は x **と** $-i\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ **が波動関数空間上の演算子としてエルミート演算子になっている**こと，すなわち

$$x^\dagger = x \tag{5.14a}$$

$$\left(-i\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^\dagger = -i\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \tag{5.14b}$$

であることを意味している．波動関数空間上の演算子のエルミート共役はあくまで内積を表す積分で定義される．安易に

$$\left(-i\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^\dagger = \left(-i\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^* = i\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \tag{5.15}$$

などとしてはいけない．

5.3 Fourier 変換

位置固有状態 $|x'\rangle$ と運動量固有状態 $|p'\rangle$ の位置表示の波動関数を求める．位置固有状態の波動関数は

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x') \tag{5.16}$$

となるから δ 関数である．運動量固有状態の波動関数 $\langle x|p'\rangle$ はどのようになるだろうか？

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = p'\,\langle x|p'\rangle \tag{5.17a}$$

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{p}|p\rangle &= \int \mathrm{d}x'\,\langle x|\hat{p}|x'\rangle\,\langle x'|p'\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x'\Big(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)\delta(x-x')\,\langle x'|p'\rangle \\ &= -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\langle x|p'\rangle \end{aligned}\tag{5.17b}$$

であるから $\langle x|p'\rangle$ は次の微分方程式を満たす.

$$-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\langle x|p'\rangle = p'\,\langle x|p'\rangle \tag{5.18}$$

その解は

$$\langle x|p'\rangle = Ce^{\frac{i}{\hbar}p'x} \quad C\text{ は任意定数.} \tag{5.19}$$

この任意定数 C を $|p\rangle$ の規格化条件から求めよう．

$$\begin{aligned}\langle p|p'\rangle &= \int \mathrm{d}x\,\langle p|x\rangle\,\langle x|p'\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x\Big(Ce^{\frac{i}{\hbar}px}\Big)^*\Big(Ce^{\frac{i}{\hbar}p'x}\Big) \\ &= |C|^2\int \mathrm{d}x\,e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x}\end{aligned}\tag{5.20}$$

運動量演算子は連続的な固有値を持つから

$$\int \mathrm{d}x\,e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} \propto \delta(p-p') \tag{5.21}$$

となることが推測される．積分区間を $(-n,n)$ に制限したものを $g_n(p-p')$ とすると

$$\begin{aligned}g_n(p-p') &= \int_{-n}^{n}\mathrm{d}x\,e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} \\ &= \frac{-\hbar}{i(p-p')}\Big(e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')n}-e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')n}\Big) \\ &= \frac{-\hbar}{i(p-p')}(2i)\sin\Big(-\frac{p-p'}{\hbar}n\Big) \\ &= 2\frac{\hbar}{p'-p}\sin\Big(\frac{p'-p}{\hbar}n\Big)\end{aligned}\tag{5.22}$$

ここで $k=\frac{p'-p}{\hbar}n$ と変数変換して，Dirichlet 積分の公式

$$\int_0^\infty \mathrm{d}k\,\frac{\sin k}{k} = \frac{\pi}{2} \tag{5.23}$$

を用いると n の値に関わらず

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p'\,g_n(p-p') \equiv \int_{-\infty}^{p}\mathrm{d}p'\,g_n(p-p') + \int_{p}^{\infty}\mathrm{d}p'\,g_n(p-p') = 2\pi\hbar \tag{5.24}$$

が得られる．これより

$$\int \mathrm{d}x\,e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = 2\pi\hbar\,\delta(p-p') \tag{5.25}$$

であると考えて問題ないだろう．従って $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ とすれば

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px} \qquad \langle p|p'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}x\, e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = \delta(p-p') \tag{5.26}$$

となり連続固有値の正規直交条件を満たす．

状態 $|\psi\rangle$ を波動関数として表すときの基底を位置と運動量で互いに入れ替えることを考える．

$$\langle p|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\, \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}x\, e^{-\frac{i}{\hbar}px} \langle x|\psi\rangle \tag{5.27a}$$

$$\langle x|\psi\rangle = \int \mathrm{d}p\, \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}p\, e^{\frac{i}{\hbar}px} \langle p|\psi\rangle \tag{5.27b}$$

$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle\,, \widetilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$ とすると

$$\widetilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}x\, \psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px} \tag{5.28a}$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}p\, \widetilde{\psi}(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{5.28b}$$

これは **Fourier 変換**を表している．Fourier 変換とは位置と運動量の基底の入れ替えだったのだ！ $\widetilde{\psi}(p)$ は運動量表示の波動関数である．$\langle x|p\rangle$ はユニタリー行列である．これは離散固有値の場合にユニタリー行列 $U_{sr} = \langle \chi_s|\alpha_r\rangle$ によって基底の取り換えが出来たのと全く同じである．

第 6 章　角運動量

角運動量演算子は次の交換関係を満たしていた．

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{J}_k \tag{6.1}$$

位置や運動量と違い角運動量の固有値は離散的であるが，実はこの交換関係が可能な固有値に大きな制約を与えているが分かる．角運動量の固有状態や演算子の行列表現を定義から導出しよう．

6.1　角運動量の固有状態

まず次の演算子を定義する．

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 \equiv \hat{J}_1\hat{J}_1 + \hat{J}_2\hat{J}_2 + \hat{J}_3\hat{J}_3 \tag{6.2}$$

この演算子は $\hat{J}_i$ のいずれとも可換である．

$$[\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_i] = 0 \qquad i = 1, 2, 3 \tag{6.3}$$

$i = 3$ の場合にこれを示す．

$$\begin{aligned}
[\hat{J}_1\hat{J}_1 + \hat{J}_2\hat{J}_2 + \hat{J}_3\hat{J}_3, \hat{J}_3] &= \hat{J}_1\hat{J}_1\hat{J}_3 - \hat{J}_3\hat{J}_1\hat{J}_1 + \hat{J}_2\hat{J}_2\hat{J}_3 - \hat{J}_3\hat{J}_2\hat{J}_2 \\
&= \hat{J}_1[\hat{J}_1, \hat{J}_3] + [\hat{J}_1, \hat{J}_3]\hat{J}_1 + \hat{J}_2[\hat{J}_2, \hat{J}_3] + [\hat{J}_2, \hat{J}_3]\hat{J}_2 \\
&= \hat{J}_1(-i\hbar\,\hat{J}_2) + (-i\hbar\,\hat{J}_2)\hat{J}_1 + \hat{J}_2(i\hbar\,\hat{J}_1) + (i\hbar\,\hat{J}_1)\hat{J}_2 \\
&= 0
\end{aligned} \tag{6.4}$$

$\hat{J}_1, \hat{J}_2$ も同様である．$\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ は互いに非可換なのでそのうち 1 つだけ $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と同時に対角化することができるが，慣習上 $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の同時固有状態を考える．それぞれの固有値を a, b とおく．

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 |a,b\rangle = a\,|a,b\rangle \tag{6.5a}$$

$$\hat{J}_z |a,b\rangle = b\,|a,b\rangle \tag{6.5b}$$

ここでさらに新しい演算子を定義する．

$$\hat{J}_\pm \equiv \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \tag{6.6}$$

$\hat{J}_+$ を**上昇演算子**，$\hat{J}_-$ を**下降演算子**と呼ぶ．これらは定義より次の交換関係を満たす．

$$[\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_\pm] = 0 \tag{6.7}$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\,\hat{J}_\pm \tag{6.8}$$

$\hat{J}_\pm |a,b\rangle$ に $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ や $\hat{J}_z$ を作用させるとどうなるか調べよう．$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_\pm$ は可換だから

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2(\hat{J}_\pm |a,b\rangle) = \hat{J}_\pm \hat{\boldsymbol{J}}^2 |a,b\rangle = a(\hat{J}_\pm |a,b\rangle) \tag{6.9}$$

一方で (6.8) を用いることで

$$\hat{J}_z(\hat{J}_\pm |a,b\rangle) = (\hat{J}_\pm \hat{J}_z \pm \hbar\,\hat{J}_\pm)\,|a,b\rangle = (b \pm \hbar)(\hat{J}_\pm |a,b\rangle) \tag{6.10}$$

が成り立つ．$\hat{J}_\pm |a,b\rangle$ も $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の同時固有状態となっておりその固有値は $a, b \pm \hbar$ である．昇降演算子は $\hat{J}_z$ の固有値を $\pm\hbar$ だけ上昇あるいは下降させる演算子である．これより

$$\hat{J}_\pm |a,b\rangle = N_\pm |a, b \pm \hbar\rangle \tag{6.11}$$

と表せる．規格化定数 $N_\pm$ は後で定める．2 種類の固有値 a, b は独立に値をとれるわけではない．

$$\begin{aligned} \hat{J}_- \hat{J}_+ &= (\hat{J}_x - i\hat{J}_y)(\hat{J}_x + i\hat{J}_y) \\ &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] \\ &= \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\,\hat{J}_z \end{aligned} \tag{6.12}$$

が成立する．ここで $(\hat{J}_-)^\dagger = \hat{J}_+$ であることを用いると

$$\langle a,b|\hat{J}_- \hat{J}_+|a,b\rangle = \left\| \hat{J}_+ |a,b\rangle \right\|^2 \geq 0 \tag{6.13}$$

となる．一方で

$$\langle a,b|\hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\,\hat{J}_z|a,b\rangle = a - b(b+\hbar) \tag{6.14}$$

これより

$$a \geq b(b+\hbar) \tag{6.15}$$

が成り立つ．a を固定すると b には最大値 b_{max} が存在し次を満たすはずである．

$$\hat{J}_+ |a, b_{\mathrm{max}}\rangle = 0 \tag{6.16}$$

なぜなら $\hat{J}_+ |a, b_{\mathrm{max}}\rangle \neq 0$ と仮定すると固有値 $b_{\mathrm{max}} + \hbar$ を持つ固有状態が Hilbert 空間に存在していることになり b_{max} が最大の固有値であることに矛盾するからである．ゆえに

$$a = b_{\mathrm{max}}(b_{\mathrm{max}} + \hbar) \tag{6.17}$$

が成立する．同様に

$$\hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\,\hat{J}_z \tag{6.18}$$

を用いると a, b は

$$a \geq b(b-\hbar) \tag{6.19}$$

満たさなければいけないことが分かる．従って a を固定すると b には最小値 $b_{\min}$ が存在し次を満たす．

$$a = b_{\min}(b_{\min}-\hbar) \tag{6.20}$$

(6.17) と (6.20) から a を消去すると

$$b_{\max}^2 + \hbar\,b_{\max} - b_{\min}^2 + \hbar\,b_{\min} = 0 \tag{6.21}$$

$$(b_{\max}+b_{\min})(b_{\max}-b_{\min}+\hbar) = 0 \tag{6.22}$$

左辺第 2 項は正だから $b_{\max}$ を正として

$$b_{\max} = -b_{\min} \tag{6.23}$$

であることが分かる．$|a, b_{\min}\rangle$ に $\hat{J}_+$ を作用させるとその固有値が $\hbar$ ずつ上昇していく．しかし b の値には最大値があるためこの操作は無限に続けることはできない．上昇演算子を n 回作用させたところで固有値 b の上限に達する．固有値 $b_{\min}+(n+1)\hbar$ を持つ固有状態は Hilbert 空間に存在しないので

$$\hat{J}_+\,|a, b_{\min}+n\hbar\rangle = 0 \tag{6.24}$$

でなければならないが，これは $|a, b_{\max}\rangle$ の満たす式 (6.16) と同じである．従って固有値 $b_{\min}$ を $\hbar$ ずつ上昇させていくといずれ $b_{\max}$ にちょうど一致する，すなわち，ある自然数 n が存在し

$$b_{\min} + n\hbar = b_{\max} \tag{6.25}$$

が成り立たなければいけない．**さらに b の取りうる値は $b_{\min}$ から $b_{\max}$ までの $\hbar$ 刻みの離散的な値に限られる．**(6.23) と (6.25) より

$$b_{\max} = \frac{n}{2}\hbar \tag{6.26}$$

ここで

$$j \equiv \frac{n}{2} \tag{6.27}$$

により j を定義すると j は**自然数または正の半整数**となり，$\hat{J}_z$ の最大の固有値は $j\hbar$ と表せる．(6.17) より

$$a = j(j+1)\hbar^2 \tag{6.28}$$

が成立する．さらに m を

$$b = m\hbar \tag{6.29}$$

により定義する．m として許されるのは

$$m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j \tag{6.30}$$

の $2j+1$ 個の値に限られる．j が自然数のとき m は整数であり j が正の半整数のとき m は半整数となる．$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の同時固有状態はその固有値の a, b によってではなくむしろ j, m によってラベルしたほうが分かりやすい．同時固有状態を $|j, m\rangle$ とすると

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2\,|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2\,|j, m\rangle \tag{6.31a}$$

$$\hat{J}_z\,|j, m\rangle = m\hbar\,|j, m\rangle \tag{6.31b}$$

と書ける．ただし j は自然数または正の半整数であり，m は (6.30) によって定められるの $2j+1$ 個の値である．これらの結果は全て角運動量演算子の交換関係 (6.1) から導かれたものである．

$$\hat{J}_{\pm}\,|j,m\rangle = N_{\pm}\,|j,m\pm 1\rangle \tag{6.32}$$

の規格化定数 $N_{\pm}$ を求めよう．

$$\begin{aligned}\left\|\hat{J}_{\pm}\,|j,m\rangle\right\|^2 &= \langle j,m|\hat{J}_{\mp}\hat{J}_{\pm}|j,m\rangle \\ &= \langle j,m|(\hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar\,\hat{J}_z)|j,m\rangle \\ &= \{j(j+1) - m(m\pm 1)\}\hbar^2 \end{aligned} \tag{6.33}$$

一方で

$$\left\|N_{\pm}\,|j,m\pm 1\rangle\right\|^2 = |N_{\pm}|^2 \tag{6.34}$$

であるから 2 つを比較することで $N_{\pm}$ を求めることができる．位相の自由度があるが通常は正の実数に取る．結果として

$$\hat{J}_{+}\,|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar\,|j,m+1\rangle \tag{6.35a}$$

$$\hat{J}_{-}\,|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar\,|j,m-1\rangle \tag{6.35b}$$

が得られる．$m=\pm j$ としたときに $\hat{J}_{\pm}\,|j,\pm j\rangle$ のノルムが 0 となる必要があるのでこの式は覚えやすい．

6.2 角運動量演算子の表現

角運動量の固有状態 $|j,m\rangle$ によって Hilbert 空間の基底を張ったときの角運動量演算子の行列表現の行列要素を求めよう．この基底で $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ は対角化されており

$$\langle k,n|\hat{\boldsymbol{J}}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\,\delta_{kj}\delta_{nm} \tag{6.36a}$$

$$\langle k,n|\hat{J}_z|j,m\rangle = m\hbar\,\delta_{kj}\delta_{nm} \tag{6.36b}$$

が成り立つ．$\hat{J}_{+}$ と $\hat{J}_{-}$ の行列要素は (6.35b) より

$$\langle k,n|\hat{J}_{+}|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar\,\delta_{kj}\delta_{nm+1} \tag{6.36c}$$

$$\langle k,n|\hat{J}_{-}|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar\,\delta_{kj}\delta_{nm-1} \tag{6.36d}$$

$\hat{J}_x = (\hat{J}_{+} + \hat{J}_{-})/2, \hat{J}_y = (\hat{J}_{+} - \hat{J}_{-})/2i$ を用いると

$$\langle k,n|\hat{J}_x|j,m\rangle = \frac{\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar}{2}\,\delta_{kj}\delta_{nm+1} + \frac{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar}{2}\,\delta_{kj}\delta_{nm-1} \tag{6.36e}$$

$$\langle k,n|\hat{J}_y|j,m\rangle = \frac{\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar}{2i}\,\delta_{kj}\delta_{nm+1} - \frac{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar}{2i}\,\delta_{kj}\delta_{nm-1} \tag{6.36f}$$

6.3 スピン角運動量

前節で一般の角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}$ の固有状態を議論したがスピン角運動量 $\hat{\boldsymbol{S}}$ も同じ交換関係を持っている．それゆえスピン角運動量もその固有状態は $|j,m\rangle$ とラベルされ，加算無限個存在すると思うかもしれない．しかし実

際は **1 つの電子のスピンとして許されるのは** $j=\frac{1}{2}$ **だけである**ことが数々の実験から分かっている．固有状態は $\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$ と $\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$ の 2 種類だけであり，それぞれ $|+\rangle, |-\rangle$ と書かれる．

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2 |\pm\rangle = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2 |\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\pm\rangle \tag{6.37a}$$

$$\hat{S}_z |\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \tag{6.37b}$$

一般の状態 $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \tag{6.38}$$

のように 2 つの状態の線形結合で書けるので，状態 $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle \doteq \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \tag{6.39}$$

のような行列表現をもつ．この 2 次元数ベクトルを**スピノル**と呼ぶ．さらにスピン角運動量演算子の行列表現を求めよう．次元が 2 だから行列表現は 2 次正方行列になる．(6.36a)〜(6.36f) に $j=k=\frac{1}{2}$ を代入すると

$$\langle n|\hat{\boldsymbol{J}}^2|m\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\,\delta_{nm} \tag{6.40a}$$

$$\langle n|\hat{J}_z|m\rangle = m\hbar\,\delta_{nm} \tag{6.40b}$$

$$\langle n|\hat{J}_x|m\rangle = \frac{\hbar}{2}\left\{\quad\sqrt{\frac{3}{4}-m(m+1)}\,\delta_{nm+1} + \sqrt{\frac{3}{4}-m(m-1)}\,\delta_{nm-1}\right\} \tag{6.40c}$$

$$\langle n|\hat{J}_y|m\rangle = \frac{\hbar}{2}\left\{-i\sqrt{\frac{3}{4}-m(m+1)}\,\delta_{nm+1} + i\sqrt{\frac{3}{4}-m(m-1)}\,\delta_{nm-1}\right\} \tag{6.40d}$$

上式に $n,m=\pm\frac{1}{2}$ を代入してそれぞれの行列表現を求めると次のようになる．

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2 \doteq \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} \quad \hat{S}_x \doteq \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix} \quad \hat{S}_y \doteq \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix} \quad \hat{S}_z \doteq \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{6.41}$$

これらはすべてエルミート行列である．これは**各々の行列表現が 2 次元 Hilbert 空間の演算子としてエルミート演算子である**ことを意味している．$\hat{S}_x,\hat{S}_y,\hat{S}_z$ の行列表現から $\frac{\hbar}{2}$ を除いたものは **Pauli 行列**と呼ばれ次のように定義される．

$$\sigma_x \equiv \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix} \qquad \sigma_y \equiv \begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix} \qquad \sigma_z \equiv \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{6.42}$$

$\hat{S}_x,\hat{S}_y,\hat{S}_z$ は演算子であるのに対し Pauli 行列 $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ は 2 次正方行列である．具体的な計算により Pauli 行列は次の交換関係を満たしていることが確認できる．

$$[\frac{\hbar}{2}\sigma_i, \frac{\hbar}{2}\sigma_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\frac{\hbar}{2}\sigma_k \tag{6.43}$$

スピン角運動量演算子の交換関係は行列表現でも成り立っていることが確認できる．このように，演算子の交換関係が分かれば Hilbert 空間や行列表現を具体的に構成することができる．

一般の $\boldsymbol{n}$ 方向のスピン角運動量演算子 $\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$ の固有状態を求める．そのためには行列表現

$$\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}} \doteq \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{6.44}$$

の固有値と固有スピノルを求めればよい．$\boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ とおくと

$$\begin{aligned}\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\cos\phi - i\sin\theta\sin\phi \\ \sin\theta\cos\phi + i\sin\theta\sin\phi & -\cos\theta\end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{6.45}$$

この行列の固有値と単位固有スピノルは

$$\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} \qquad \text{固有値} + \frac{\hbar}{2} \tag{6.46a}$$

$$\begin{pmatrix}-\sin\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} \qquad \text{固有値} - \frac{\hbar}{2} \tag{6.46b}$$

と求められる．従って $\boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ 方向のスピン固有状態 $|\boldsymbol{n}\rangle$ は

$$|\boldsymbol{n}\rangle \;=\; \cos\frac{\theta}{2}\,|+\rangle \;+\; e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\,|-\rangle \;\doteq\; \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} \tag{6.47}$$

と表すことができる．状態 $|\boldsymbol{n}\rangle$ の x, y, z 方向のスピンの期待値は

$$\langle\hat{S}_x\rangle = \left(\cos\tfrac{\theta}{2}, e^{-i\phi}\sin\tfrac{\theta}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\phi \tag{6.48a}$$

$$\langle\hat{S}_y\rangle = \left(\cos\tfrac{\theta}{2}, e^{-i\phi}\sin\tfrac{\theta}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i \\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin\phi \tag{6.48b}$$

$$\langle\hat{S}_z\rangle = \left(\cos\tfrac{\theta}{2}, e^{-i\phi}\sin\tfrac{\theta}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\cos\theta \tag{6.48c}$$

となる．

6.4　軌道角運動量

軌道角運動量演算子は次のように定義することも可能である．

定義 6　　位置演算子・運動量演算子の関数としての軌道角運動量演算子

$$\hat{\boldsymbol{L}} \equiv \hat{\boldsymbol{x}} \times \hat{\boldsymbol{p}} \qquad \hat{L}_i \equiv \varepsilon_{ijk}\,\hat{x}_j\,\hat{p}_k \tag{6.49}$$

なぜなら，この定義と位置と運動量の交換関係

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0 \qquad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \qquad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij} \tag{6.50}$$

から軌道角運動量の交換関係 (4.1c) を導くことができるためである．軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}$ も角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}$ と同じ交換関係を持っている．しかし**軌道角運動量として許されるのは整数のみであり半整数は取れない**ことが多くの実験から知られている．軌道角運動量の固有状態 $|l, m\rangle$ は次を満たす．

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2\,|l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2\,|l, m\rangle \tag{6.51a}$$

$$\hat{L}_z\,|l, m\rangle = m\hbar\,|l, m\rangle \tag{6.51b}$$

ただし l, m は次のように表される．

$$l = 0, 1, 2, \ldots \qquad m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l \tag{6.52}$$

第 7 章　運動方程式

量子力学において運動方程式は Schrödinger 方程式あるいは Heisenberg の運動方程式で表される．系の対称性や保存則を考えるうえで，交換関係がまたもや本質的な役割を果たしていることが分かる．系の時間発展を求めるためには Hamiltonian の具体的な形を与える必要があるが，その際に古典力学との対応が重要になる．

7.1　保存量

Heisenberg 描像では物理量 $\hat{A}$ の時間変化は次の微分方程式に従う．

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{A}(t), \hat{H}] \tag{7.1}$$

もし $\hat{A}$ と $\hat{H}$ が可換，すなわち $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ であれば

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{A}(t), \hat{H}] = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)[\hat{A}, \hat{H}]\exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right) = 0 \tag{7.2}$$

となり物理量 $\hat{A}(t)$ は時間変化しない．Heisenberg 描像の状態 $|\psi\rangle$ は時間変化しないので当然，期待値 $\langle\hat{A}\rangle$ も時間変化しない．このとき物理量 $\hat{A}$ は**保存量**であるという．特に Hamiltonian はそれ自身と可換 $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$ であるから**エネルギーは保存量**である．

7.2　対称性と保存則

Hamiltonian が

$$\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})^\dagger \hat{H} \mathscr{F}(a, \boldsymbol{e}) = \hat{H} \tag{7.3}$$

を満たすとき**系は $\boldsymbol{e}$ 方向の空間並進対称性を持つ**という．基底となる位置固有状態 $\{|\boldsymbol{x}\rangle\}$ に $\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})$ を作用させて

$$|\boldsymbol{y}\rangle \equiv \mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})\,|\boldsymbol{x}\rangle = |\boldsymbol{x} + a\boldsymbol{e}\rangle \tag{7.4}$$

で定義される $\{|\boldsymbol{y}\rangle\}$ を新しい基底とする．系が並進対称性を持つとき

$$\langle\boldsymbol{y}|\hat{H}|\boldsymbol{y}'\rangle = \langle\boldsymbol{x}|\mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})^\dagger \hat{H} \mathscr{F}(a, \boldsymbol{e})|\boldsymbol{x}'\rangle = \langle\boldsymbol{x}|\hat{H}|\boldsymbol{x}'\rangle \tag{7.5}$$

となるから $\hat{H}$ の行列表現は変換前後で変化しない．これは，ある系とその系を $+a\boldsymbol{e}$ 平行移動した系が全く同じ時間発展をするということ，つまり物理法則が空間並進に対して不変であることを意味している．

$$\exp(-i\hat{\boldsymbol{K}} \cdot a\boldsymbol{e})\hat{H}\exp(i\hat{\boldsymbol{K}} \cdot a\boldsymbol{e}) = \hat{H} \tag{7.6}$$

の両辺を a で微分し $a = 0$ を代入すると

$$[\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{e}, \hat{H}] = 0 \tag{7.7}$$

が得られる．7.1 節の結果より $\boldsymbol{e}$ 方向の運動量 $\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{e}$ は保存量となる．系の空間並進対称性の帰結として運動量保存則が得られる．

Hamiltonian が

$$\mathscr{D}(\phi, \boldsymbol{n})^\dagger \hat{H} \mathscr{D}(\phi, \boldsymbol{n}) = \hat{H} \tag{7.8}$$

を満たすとき**系は $\boldsymbol{n}$ 軸周りの回転対称性を持つ**という．このとき

$$[\hat{\boldsymbol{J}} \cdot \boldsymbol{n}, \hat{H}] = 0 \tag{7.9}$$

より $\boldsymbol{n}$ 方向の角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}} \cdot \boldsymbol{n}$ は保存量となる．系の回転対称性の帰結として角運動量保存則が得られる．

これまでの議論から

$$[\hat{H}, \hat{H}] = 0 \tag{7.10}$$

より導かれるエネルギー保存則が系の時間並進対称性の帰結であることは明らかであろう．一般に**系に連続パラメータによる対称性が存在するとき，その生成子が系の保存量となる．**

7.3　エネルギー固有状態

Hamiltonian $\hat{H}$ はエネルギーの演算子であり時間発展の生成子として定義されていた．時間発展の仕方は系に依存するため，Hamiltonian の具体的な形も系に依存する．そこで Hamiltonian の固有状態 $|n\rangle$ を考えよう．

$$\hat{H}\,|n, b\rangle = E_n\,|n\rangle \tag{7.11}$$

Hamiltonian の固有方程式 (7.11) を**時間に依存しない Schrödinger 方程式**と呼ぶ．n は複数の**エネルギー固有値** E_n を区別するラベルである．エネルギー固有値は系によって離散的な値しか取らない場合と連続的な値をとる場合がある．この系の時間発展演算子は

$$\mathscr{U}(t) = \exp(-i\hat{\Omega}t) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right) \tag{7.12}$$

となる．Schrödinger 描像での時刻 t におけるエネルギー固有状態を $|n, t\rangle$ とおき，(7.11) を用いると

$$|n, t\rangle = \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right)|n\rangle = \exp\left(\frac{-iE_n t}{\hbar}\right)|n\rangle \tag{7.13}$$

エネルギー固有状態 $|n\rangle$ に対しては時間発展演算子は絶対値が 1 の複素数という非常に単純なものになる．状態の位相の変化は物理的性質に関与しない．例えば状態 $|n, t\rangle$ の粒子に対して物理量 $\hat{A}$ を測定した時に a_r が得られる確率は次のようになる．

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}\big[\hat{A} = a_r, |n, t\rangle\big] &= \sum_m \Big|\langle a_r^m | n, t\rangle\Big|^2 \\
&= \sum_m \Big|\exp\left(\frac{-iE_n t}{\hbar}\right)\langle a_r^m | n\rangle\Big|^2 \\
&= \sum_m \Big|\langle a_r^m | n\rangle\Big|^2 \\
&= \mathbb{P}\big[\hat{A} = a_r, |n\rangle\big]
\end{aligned} \tag{7.14}$$

系の物理的性質（＝確率）が全く時間変化しないためエネルギー固有状態は**定常状態**とも呼ばれる．

系の初期状態が定常状態でなくても，系の時間に依存しない Schrödinger 方程式 (7.11) を解くことは重要である．系の初期状態を $|\psi\rangle$ とすると時刻 t における状態は

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right)|\psi\rangle \tag{7.15}$$

と表される．ここにエネルギー固有状態の完全系 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ を挿入すると

$$
\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \sum_n \exp\Bigl(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\Bigr)|n\rangle\langle n|\psi\rangle \\
&= \sum_n \exp\Bigl(\frac{-iE_n t}{\hbar}\Bigr)\langle n|\psi\rangle|n\rangle
\end{aligned}
\tag{7.16}
$$

$\exp\bigl(\frac{-iE_n t}{\hbar}\bigr)$ や $\langle n|\psi\rangle$ はただの複素数なので状態 $|\psi(t)\rangle$ を具体的に計算することができる．系のエネルギー固有状態が分かるということは Hamiltonian を対角化する基底を見つけたということであり，系の時間発展の全容を把握したことを意味している．

7.4 Hamiltonian

系の時間発展を求めるためには Hamiltonian の具体的な形を定める必要がある．古典力学では Hamiltonian は位置 $\boldsymbol{x}$ と運動量 $\boldsymbol{p}$ の関数として

$$
H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{x}) \tag{7.17}
$$

と表される．ただし $V(\boldsymbol{x})$ は系のポテンシャルである．多くの場合，古典力学の Hamiltonian の位置 $\boldsymbol{x}$ と運動量 $\boldsymbol{p}$ を位置演算子 $\hat{\boldsymbol{x}}$ と運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ に置き換えて作った演算子を量子力学の Hamiltonian とすれば，系の時間発展をうまく再現することができる．この経験則は 7.5 節の議論で正当化できる．

量子力学における Hamiltonian の具体的な形を次のように仮定しよう．

$$
\hat{H}(\hat{\boldsymbol{x}},\hat{\boldsymbol{p}}) = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}}) \tag{7.18}
$$

$\hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})$ は位置演算子の関数であり次のように定義される．

$$
\hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}}) \equiv \int \mathrm{d}\boldsymbol{x}\,|\boldsymbol{x}\rangle V(\boldsymbol{x})\langle\boldsymbol{x}| \tag{7.19}
$$

$V(\boldsymbol{x})$ は古典力学のポテンシャルである．このように $\hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})$ を定義すれば

$$
\begin{aligned}
\langle\boldsymbol{x}|\hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})|\psi\rangle &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{x'}\,\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x'}\rangle V(\boldsymbol{x'})\langle\boldsymbol{x'}|\psi\rangle \\
&= \int \mathrm{d}\boldsymbol{x'}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x'})V(\boldsymbol{x'})\langle\boldsymbol{x'}|\psi\rangle \\
&= V(\boldsymbol{x})\langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle
\end{aligned}
\tag{7.20}
$$

となるため，$\hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})$ の位置表示は古典力学のポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ に一致する．この Hamiltonian を時間に依存する Schrödinger 方程式 (4.70) に代入すると

$$
i\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \left\{\frac{\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})\right\}|\psi(t)\rangle \tag{7.21}
$$

ここに $\langle\boldsymbol{x}|$ を作用させて $\hat{p}_i^2$ と $\hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})$ を位置表示に変換する．さらに $\Psi(x,y,z,t) = \langle\boldsymbol{x}|\psi(t)\rangle$ とおくと次式が得られる．

$$
i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z,t)}{\partial t} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Bigl(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Bigr) + V(x,y,z)\right\}\Psi(x,y,z,t) \tag{7.22}
$$

この方程式は多くの量子力学の教科書の出発点となっている．

7.5 古典力学との対応

$\hat{F}(\hat{\boldsymbol{x}})$ を位置演算子の関数とする．

$$\begin{aligned}\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i, \hat{F}(\hat{\boldsymbol{x}})] &= \frac{1}{i\hbar}\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}\,|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|\,[\hat{p}_i, \hat{F}(\hat{\boldsymbol{x}})] \\ &= \frac{1}{i\hbar}\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}\,|\boldsymbol{x}\rangle\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}, F(\boldsymbol{x})\right]\langle\boldsymbol{x}| \\ &= -\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}\,|\boldsymbol{x}\rangle\,\frac{\partial F(\boldsymbol{x})}{\partial x_i}\,\langle\boldsymbol{x}| \end{aligned} \tag{7.23}$$

より，ここで

$$\frac{\partial\hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})}{\partial\hat{x}_i} \equiv \int \mathrm{d}\boldsymbol{x}\,|\boldsymbol{x}\rangle\,\frac{\partial V(\boldsymbol{x})}{\partial x_i}\,\langle\boldsymbol{x}| \tag{7.24}$$

という演算子を定義すると次式が成り立つ．

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i, \hat{F}(\hat{\boldsymbol{x}})] = -\frac{\partial\hat{F}(\hat{\boldsymbol{x}})}{\partial\hat{x}_i} \tag{7.25}$$

同様に $\hat{G}(\hat{\boldsymbol{p}})$ を運動量演算子の関数とすると次式が成り立つ．

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_i, \hat{G}(\hat{\boldsymbol{p}})] = \frac{\partial\hat{G}(\hat{\boldsymbol{p}})}{\partial\hat{p}_i} \tag{7.26}$$

Hamiltonian が $\hat{H} = \hat{F}(\hat{\boldsymbol{x}}) + \hat{G}(\hat{\boldsymbol{p}})$ のように位置演算子の関数と運動量演算子の関数の和で書けると仮定する．このとき (7.25) と (7.26) より

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_i, \hat{H}] = \frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}_i} \qquad \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i, \hat{H}] = -\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{x}_i} \tag{7.27}$$

が成立する．一方で Heisenberg の運動方程式の両辺に $\langle\psi|$ と $|\psi\rangle$ を作用させると

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{x}_i\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\,\langle\psi(t)|\big[\hat{x}_i, \hat{H}\big]|\psi(t)\rangle \qquad \frac{\mathrm{d}\langle\hat{p}_i\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\,\langle\psi(t)|\big[\hat{p}_i, \hat{H}\big]|\psi(t)\rangle \tag{7.28}$$

のようになる．ただし右辺は時間発展演算子 $\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ を状態 $|\psi\rangle$ に押し付けて $|\psi(t)\rangle$ としている．(7.27) と (7.28) より次式が成り立つ．

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{x}_i\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}_i}\right\rangle \qquad \frac{\mathrm{d}\langle\hat{p}_i\rangle}{\mathrm{d}t} = -\left\langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{x}_i}\right\rangle \tag{7.29}$$

この方程式は解析力学の正準方程式と酷似している．さらに $\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})$ と仮定すると

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{x}_i\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle\frac{1}{2m}\frac{\partial\hat{\boldsymbol{p}}^2}{\partial\hat{p}_i}\right\rangle = \frac{\langle\hat{p}_i\rangle}{m} \qquad \frac{\mathrm{d}\langle\hat{p}_i\rangle}{\mathrm{d}t} = -\left\langle\frac{\partial\hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})}{\partial\hat{x}_i}\right\rangle \qquad \therefore\quad m\frac{\mathrm{d}^2\langle\hat{x}_i\rangle}{\mathrm{d}t^2} = -\left\langle\frac{\partial\hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})}{\partial\hat{x}_i}\right\rangle \tag{7.30}$$

この方程式は Newton 力学の運動方程式と酷似している．

方程式の形は似ているが，まだ $\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})$ とすべき理論的根拠はない．ここで古典力学が扱うようなマクロな系を考えよう．マクロな系ではポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ の変化に比べて粒子が十分に局在しているので近似的に

$$\left\langle\frac{\partial\hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})}{\partial\hat{x}_i}\right\rangle \simeq \frac{\partial V(\langle\hat{\boldsymbol{x}}\rangle)}{\partial x_i} \tag{7.31}$$

が成り立っている．またこの系では古典力学が通用するので Newton の運動方程式

$$m\frac{\mathrm{d}^2 x_i}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{\partial V(\boldsymbol{x})}{\partial x_i} \tag{7.32}$$

も十分な精度で成り立っている．当然，古典力学の位置 $\boldsymbol{x}$ が量子力学の位置の期待値 $\langle\hat{\boldsymbol{x}}\rangle$ に対応すると考えられるので，(7.31) と (7.32) より

$$m\frac{\mathrm{d}^2 \langle\hat{x}_i\rangle}{\mathrm{d}t^2} \simeq -\left\langle\frac{\partial \hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})}{\partial \hat{x}_i}\right\rangle \tag{7.33}$$

が（少なくとも近似的に）成り立っていなければならない．そうでなければ古典力学に矛盾した理論になってしまうからである．$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})$ はこの必要条件を満たしている．実際このように $\hat{H}$ を置けば，多くの系の時間発展を再現できることが知られている．しかしながら，$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})$ はあくまで Hamiltonian の有力な候補に過ぎない．対応する古典系が存在しない場合や古典極限で消失する因子がある場合は，様々な Hailtonian を試して実験結果と一致するものを探さなければいけない．古典力学の Hamiltonian はあくまで量子力学の Hamiltonian を探す際の“ヒント”を与えるだけであり，**古典力学から量子力学が厳密に導かれるわけではない．**

参考文献

[1] J.J. サクライ・ナポリターノ，桜井明夫・常次宏一訳，『現代の量子力学（上）』，第 3 版，2022 年，吉岡書店.
（原著: J.J. Sakurai and Jim Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, 3rd Edition, 2020, Cambridge University Press）

[2] 谷村省吾,『量子力学 10 講』，2021 年，名古屋大学出版会.

[3] 清水明,『新版 量子論の基礎: その本質のやさしい理解のために』，2004 年，サイエンス社.

[4] ディラック，朝永振一郎ほか訳，『量子力學』，原書第 4 版，1968 年，岩波書店.
（原著: P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th Edition, 1958, Oxford University Press）

[5] 猪木慶治・川合光,『量子力学 I 』，1994 年，講談社サイエンティフィック.

[6] 国広悌二,『演算子の積の順序：Weyl 順序、Weyl 対応』，2018 年,
`https://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~teiji.kunihiro/QM_suppl/Weyl-ordering.pdf` （2025 年参照).