

ランダウ物理学概論

HY

2 量子力学

2.1 重ね合わせの原理

古典力学・電磁気学の議論をそのまま電子等のミクロな粒子に適用することはできない。^{*1}このようなミクロな粒子は、波動特有の挙動をとることが（2重スリットを用いた回折実験 etc.）あるからである。つまり、量子力学では粒子の軌道や速度といった概念は存在しないのである。この事実を不確定性原理と呼ぶ。^{*2}

量子（ミクロ）に関する情報は古典的（マクロ）な物質を通して得られる。要するに、量子自体は古典力学に従わないが、量子と相互作用するマクロな物質の挙動は古典力学で完全に記述できる。つまり、マクロな物質が量子との相互作用でどのように変化するかを調べることで、量子の状態を定量的に特徴づけられる。この一連の過程を測定と呼ぶ。^{*3}

不確定性原理が成り立つ以上、量子の位置に関する情報と速度に関する情報を同時に確定させることはできない。例えば、量子の位置を一定の時間間隔 Δt ごとに測定して、各時刻の観測位置を空間上にプロットしてみよう。測定の精度が高いほど、プロットする「ドット」は小さくなるが、各測定点を結んだ線は滑らかでなくなる（速度が計算できない）。逆に、「ドット」の大きさある程度大きくすると、測定点は滑らかな動きをして、速度も求まる。^{*4}結局、一般的な量子の未来予測は不可能である。ただし、ある特殊な状態の量子は未来の情報の一部が 100% 確定していると知られている。この予測可能な状態は固有状態と呼ばれる。固有状態では、その固有性に対応する物理量の値は必ず 1 つに定まる。その確定値を固有値と呼ぶ。

量子力学では、与えられた状態における系の各状態は座標 q の複素関数 $\psi(q)$ で記述される。^{*5} $\psi(q)$ は系の波動関数あるいは確率振幅と呼ばれ、その大きさの 2 乗が q の値の確率分布と対応するように定義される。実はこの波動関数の時間発展は「ある方程式」により定められるので、量子状態 $\psi(q, t)$ の未来予測は、初期状態 $\psi(q, t_0)$ が与えられれば可能である。ただし、これはあくまでも波動関数による確率での状態記述なので、量

^{*1} 例えば、電子が加速度運動する際、絶えず電磁波を放射し続ける必要があるが、原子内の電子がエネルギーを失って原子核に落ち込むことはない。

^{*2} 不確定性原理のために、量子の一切の力学的特徴は捨象される。そのため、量子力学においては（相対論的力学のように）閉じた理論体系を構築できず、古典的極限の場合を自身の基礎づけに用いざるをえない。

^{*3} 測定においてマクロな物質が必要というだけであり、人間の観測者の認識がその測定の結果に影響するはずもない。ただし、測定によって量子も同様の相互作用を受けるので、状態が測定の前後で変化してしまう。この点で、測定は不可逆的な操作といえる。

^{*4} 霧箱による放射線の測定がこれに当たる。

^{*5} 実は q は量子の位置に関する物理量でなくてもよい。例えば、運動量や角運動量でも問題はない。いずれの場合も $\psi(q)$ は q の値の確率分布を定める。

子自体の完全な未来予測は不可能であることを改めて注意しておく。

不確定性原理は古典力学的な考え方を拒む点でやや消極的な仮定といえるが、ここでより積極的な量子力学の基本原理として重ね合わせの原理を導入する。例えば、ある測定が固有状態 $\psi_1(q)$ に対して 100%「結果 1」をもたらし、固有状態 $\psi_2(q)$ に対して 100%「結果 2」をもたらすとする。このとき、 $c_1\psi_1(q) + c_2\psi_2(q)$ と表せる状態を測定すると「結果 1」か「結果 2」のいずれかが得られるだろう。この仮定は波動関数 ψ が満たすあらゆる方程式に対して ψ に対する線形性を要求する。

量 f の固有値を $\{f_n\}$ 、 f が f_n をとる固有状態を ψ_n とおくと、*6測定される f の値は $\{f_n\}$ のいずれかである。よって、重ね合わせの原理に従えば、任意の波動関数は $\{\psi_n\}$ の線形結合で表せると分かる。

波動関数 $\psi = \sum_n a_n \psi_n \cdots (1)$ について、 $|a_n|^2$ は $f = f_n$ となる確率に対応するので、規格化された波動関数は $\sum_n |a_n|^2 = \int |\psi|^2 dq = 1$ を満たす。

よって、式 (1) の両辺に ψ^* をかけて q について積分すると

$$1 = \sum_n a_n \int \psi^* \psi_n dq \rightarrow a_n = \left(\int \psi^* \psi_n dq \right)^* = \int \psi \psi_n^* dq \cdots \cdots (2)$$

式 (1) の両辺に ψ_m^* をかけて q について積分すると、式 (2) より

$$a_m = \sum_n a_n \int \psi_m^* \psi_n dq \rightarrow \int \psi_m^* \psi_n dq = \delta_{mn} \cdots \cdots \cdots (3)$$

式 (3) から、任意の物理量の規格化された固有関数系 $\{\psi_n\}$ は完全な正規直交系をなすと分かる。*7この通り、重ね合わせの原理は量子状態に線形性という強い性質を付与することで、固有関数同士の積の積分を無限次元ベクトルの内積（射影）として意味づける。しかし、この仮定だけで量子力学の閉じた理論構築を行うのは不可能である。そのため、量子力学ではしばしば古典的極限の場合から逆算して自身の基礎づけを行う。

量子力学の基本方程式（Schrodinger 方程式、線形 PDE）を解いても確率的な表示（波形）しか得られないにもかかわらず、古典的極限においては粒子の軌道は最小作用の原理に基づいて完全に確定する。この事実は「波動光学の基本方程式（Maxwell 方程式、線形 PDE）の解は波形になるが、短波長極限においては光の軌道は光路長最短の原理に基づいて完全に確定する」ことと非常によく対応している。

古典力学と幾何光学の対応

波動光学 $\cdots \psi = Ae^{i\frac{d}{\lambda}}$ において、 $\lambda \rightarrow 0$ とすれば光の幾何的軌道が求まる。

幾何光学 \cdots 光路長 d が最小になるような経路が実現する。

量子力学 $\cdots \psi = Ae^{i\frac{S}{\hbar}}$ において、 $\hbar \rightarrow 0$ とすれば粒子の古典的軌道が求まる。^a

古典力学 \cdots 作用 S が最小になるような運動が実現する。

^a 比例定数 \hbar は電磁波における波長に対応する物理量。古典・量子力学における 1 種の長さのスケール（基準）であり、一般にプランク定数と呼ばれる。

*6 固有値の分布スペクトルは離散的なものもあれば、連続的なものもある。例えば、束縛された粒子のエネルギー固有値分布は離散的だが、位置の固有値分布は連続的である。今回は簡単のため離散スペクトルで考えているが、連続の場合は $\sum_n \rightarrow \int df$ とすればよい。固有値が連続的な場合も式 (2), (3) と同様の成果が得られる。この場合、各固有状態 ψ_f の係数 a_f は波動関数の満たすべき条件をいずれも満たすため、 f 表示の波動関数と呼ばれることがある。

*7 実は、大学数学で頻出のフーリエ関数系も運動量の固有関数系である。また、角運動量の固有関数系の球面調和関数系は球座標ラプラシアン固有関数系として有名である。

2.2 演算子

前節で述べた通り、波動関数の時間発展は ψ の線形方程式で記述できる。これをある線形演算子 \hat{L} を用いて

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{L}\psi \cdots (*)$$

と表記し、 \hat{L} の具体的な形式を求めたい。ただその前に（線形）演算子を測定する物理量とどのように対応させるべきかを考えねばならない。

演算子の定義

$$(\text{量 } f \text{ の期待値}) = \int \psi^*(\hat{f}\psi) dq$$

を満たすような線形演算子 \hat{f} を f の演算子とする。ただし、 f の期待値とは十分な回数 f を測定したときの測定値の平均値とする。

(例 1)

粒子の位置座標 q の期待値は $\int q|\psi(q)|^2 dq$ で求まるので、演算子の定義から $\int \psi^*(\hat{q}\psi) dq = \int q|\psi(q)|^2 dq$ よって、演算子 \hat{q} の波動関数 $\psi(q)$ に対する作用は単なる q の掛け算である。^{*8} このことから、 \hat{q} の固有値 q_0 に属する固有関数 ψ_0 は $q\psi_0 = q_0\psi_0$ を満たす、すなわち $\psi_0 = \delta(q - q_0)$ であると分かる。

(例 2)

f が物理量な場合、 f の期待値は必ず実数。これと演算子の定義から

$$\int (\psi^*(\hat{f}\psi))^* dq = \int \psi^*(\hat{f}\psi) dq \longrightarrow \hat{f}^\dagger = \hat{f}$$

つまり、 f が物理量であることとその演算子がエルミート性を持つことは等価である。

一方、規格化条件は時間によらず成り立つので、 $\frac{d}{dt} \left(\int |\psi(q)|^2 dq \right) = 0$ 。これと (*) より、

$$\int \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} dq + \int \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* dq = \int (\psi \hat{L}^* \psi^* + \hat{L} \psi \psi^*) dq = \int \psi^* (\hat{L}^\dagger + \hat{L}) \psi dq = 0 \longrightarrow \hat{L}^\dagger + \hat{L} = 0$$

つまり、 $i\hat{L}$ はエルミート性を持ち、何らかの物理量と対応すると推測できる。

^{*8} もし波動関数が位置座標の確率分布ではなく、運動量や角運動量などの別の物理量の確率分布である場合は当然異なる結果が現れる。例えば、運動量演算子 \hat{p} は $\psi(p)$ に対しては単なる p の掛け算であるが、 $\psi(q)$ に対しては位置微分のはたらきをする。

$i\hat{L}$ と対応する物理量を推測する際、古典極限への移行は有効である。(*) に $\psi = Ae^{i\frac{S}{\hbar}}$ を代入すると

$$i\hat{L}\psi = -\frac{A}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} e^{i\frac{S}{\hbar}} = \frac{H}{\hbar} \psi$$

となる。ただし、最後の式変形で系の作用 S の時間による偏微分が $-H(=L-pq)$ であることを用いた。^{*9} この結果から、 $i\hat{L}$ と対応する物理量はハミルトニアン（のスカラー倍）であると分かる。 $\hat{H} = i\hbar\hat{L}$ とおくと、

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

が得られる。この式を波動方程式と呼ぶ。量子レベルでも系全体のエネルギー・運動量は保存するので、エネルギーと運動量の値は同時に確定可能である。この事実を用いて、波動方程式におけるハミルトニアンの具体的な形式を定めたものを特に **Schrodinger 方程式** と呼ぶ。

前章で行った運動の積分に関する議論は量子力学のスケールにも反映させることができる。例えば、静的な場においては各時刻は同等な意味を持つので、 $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ は t に依存しない。これと波動方程式より、ハミルトン関数が時間の一様性により保存されたと分かる。 \hat{H} は保存量演算子であるだけでなく、各演算子に対応する量が保存量かどうかの判断材料にもなる。というのも、任意の演算子 \hat{f} について以下の等式が成り立つからである。

$$\langle \dot{f} \rangle = \frac{d}{dt} \langle f \rangle = \frac{d}{dt} \int \psi^* (\hat{f}\psi) dq = \int \psi^* \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{f} - \frac{i}{\hbar} \hat{f} \hat{H} \right) \psi dq$$

ただし、 \dot{f} は量 f の時間微分であり、^{*10} 途中の式変形で波動方程式を用いた。この式から

$$\dot{\hat{f}} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \{ \hat{H}, \hat{f} \}$$

が導かれる。つまり、演算子 \hat{f} が時間に陽に依存せず、ハミルトニアンと可換であれば、 $\dot{\hat{f}} = 0$ 。すなわち、物理量 f は保存される。以降、このハミルトニアンの性質を利用して、他の保存量演算子を導出する。

^{*9} 作用 $S = \int_{t_1}^{t_2} L dt$ の時間による全微分はラグランジアンに一致するが、時間による偏微分の場合はハミルトン形式で考える必要がある。 S は $t_1, t_2, q(t_1), q(t_2)$ の関数として捉えられる。以下、 $q(t_1) = q_1, q(t_2) = q_2$ と表記する。

t_1, t_2, q_1 を固定すると Euler-Lagrange の運動方程式より、 $\delta S = \left[\frac{\partial L}{\partial q'} \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial q'} \right) \delta q dt = p(t_2) \delta q_2$ となる。

よって、 $\frac{\partial S}{\partial q_2} = p_2$ である。次に t_2 の固定を外すと、 $L = \frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial q_2} q_2' = \frac{\partial S}{\partial t} + p_2 q_2$ となる。

したがって、 $dS = p_2 dq_2 + (L - p_2 q_2) dt_2 = p_2 dq_2 - H_2 dt_2$ が成り立つ。この「作用の時間による偏微分とハミルトニアンの和はゼロ」という関係式は一般に **Hamilton-Jacobi の方程式** と呼ばれる。この方程式は運動方程式を解く一般的な形式の一つであり、変数分離法を用いた完全な解（独立変数と同量の任意変数を含む解）の導出法が知られている。

^{*10} 量子力学では、異なる時刻における物理量の差は大体的場合不確定なので、物理量の時間微分の期待値を測定することはできない。そのため、各演算子 \hat{f} の時間微分の定義は $\langle \dot{f} \rangle = \frac{d}{dt} \langle f \rangle$ のように物理量の期待値の時間微分を用いてなされる。

2.3 不確定関係

外場の中に置かれていない粒子系では系全体の空間内での位置が同等なので、無限小移動は系の状態に何ら影響を与えない。つまり、ハミルトニアンと無限小移動は可換である。このことから、無限小移動に関する何かしらの保存量が存在すると考えられる。無限小移動の演算子は

$$\psi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) + \delta\mathbf{r} \cdot \nabla\psi = (1 + \delta\mathbf{r} \cdot \nabla)\psi$$

より、 $1 + \delta\mathbf{r} \cdot \nabla$ である。これとハミルトニアンが可換なので、

$$(1 + \delta\mathbf{r} \cdot \nabla)\hat{H} - \hat{H}(1 + \delta\mathbf{r} \cdot \nabla) = 0 \longrightarrow \nabla\hat{H} - \hat{H}\nabla = 0$$

となる。つまり、 ∇ に比例する保存量演算子が存在すると分かる。この結果は解析力学における「運動量保存則」に対応しているので、これを運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}} = c\nabla$ とおく。比例定数 c の値を導く際、古典極限への移行は有効である。 $\psi = Ae^{i\frac{S}{\hbar}}$ に演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ を作用させると

$$\hat{\mathbf{p}}\psi = c\nabla\psi = c\frac{i}{\hbar}Ae^{i\frac{S}{\hbar}}\nabla S = c\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\psi$$

となる。ただし、最後の式変形で作用の位置による偏微分が運動量に一致することを用いた。(注釈 *17 参照) 古典極限において運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ のはたらきは単なる「 p の掛け算」になるはずなので、 $c = -i\hbar$ が導かれる。したがって、 $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ である。^{*11} この固有値及び固有関数を求めてみよう。

固有値 $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ に属する固有関数を ψ をとると、運動量演算子の定義より

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = p_x\psi \longrightarrow \psi = f(y, z)e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}$$

が成り立つ。他の成分についても同様なので、 $\psi = Ce^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}$ が導かれる。規格化条件より $C = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}$ となる。この固有関数 ψ を特に $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ と表記すると、任意の波動関数を正規直交関数系 $\{\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\}$ で展開できる。これはまさしく **Fourier 展開**そのものであり、展開時の各係数(スペクトル分布) $a(\mathbf{p})$ は **Fourier 変換** に対応する。つまり、

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int a(\mathbf{p}) \exp\left(i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) d\mathbf{p} \\ a(\mathbf{p}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int u(\mathbf{r}) \exp\left(-i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) dV\end{aligned}$$

^{*11} この演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ のエルミート性は容易に確かめられる。また、全く同様の議論で位置に関して等方的な場では角運動量演算子 $\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar[\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$ が保存量演算子であることが導ける。

運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ は位置演算子 $\hat{r} = r$ と可換でないことが簡単な計算で示せる。^{*12}このように、量子力学では「同時に値が確定されてしまえば、他のいかなる物理量も確定値をとりえない」ような物理量のペアが存在し、これらは共役物理量と呼ばれる。一方で、これらの物理量は同時に値を確定させられないような関係（不確定関係）を持つ。^{*13}

共役物理量と不確定関係

$$\begin{aligned} \text{時間の一様性 } \left(\frac{\partial L}{\partial t} = 0\right) &\iff \text{エネルギー保存則 } (\partial E = 0) \cdots \cdots \Delta E \Delta t \sim \hbar \\ \text{空間の一様性 } \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} = 0\right) &\iff \text{運動量保存則 } (\partial \mathbf{p} = 0) \cdots \cdots \Delta \mathbf{p} \Delta \mathbf{r} \sim \hbar \\ \text{空間の等方性 } \left(\frac{\partial L}{\partial \phi} = 0\right) &\iff \text{角運動量保存則 } (\partial l = 0) \cdots \cdots \Delta l \Delta \phi \sim \hbar \end{aligned}$$

量子力学において不確定関係が成り立つ理由は「各演算子が可換でないから」であるが、この説明は演算子の可換性という非直観的な要素に頼ったものである。そこで、より直接にイメージしやすい説明を試みる。

例えば、平均運動量 \mathbf{p}_0 の粒子の位置が下図のような領域 V 内で観測されると仮定。このとき、波動関数は $\psi = u(\mathbf{r})\exp\left(i\frac{\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right)$ と表せる。ただし、 $u(\mathbf{r})$ は領域 V の外で 0 である。 ψ の各 \mathbf{p} ごとのスペクトル分布は、上で得た式を用いると

$$a(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int u(\mathbf{r}) \exp\left(i\frac{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) dV$$

である。粒子が分裂しないことから、この分布は $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0$ の周りである程度まとまっていなければならない。つまり、振動因子の中身はあまり小さすぎてはならない。しかし、大きすぎても今度は積分結果がいずれの \mathbf{p} においても 0 になってしまう。結果として $\frac{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}}{\hbar} \sim 1$ が要求される。他の共役物理量に関しても同様である。物理量の値が確定しない、すなわちスペクトル分布をする以上、不確定関係は成り立たざるを得ないのである。

(図挿入)

^{*12} $-i\hbar\nabla(\mathbf{r}\psi) + i\hbar r(\nabla\psi) = -i\hbar\psi$ より、両演算子の交換関係は $-i\hbar(\neq 0)$ だと分かる。

^{*13} E と t の関係は他の 2 つと比べてやや異質である。これは時刻 t に対応する演算子が存在しないことに由来する。