

シュレディンガー方程式の導出とクライン=ゴールドン方程式への拡張

しん

December 16, 2025

はじめに

本稿の目的は、格子 QCD を実装するために学ぶ過程として、シュレディンガー方程式を相対論的に拡張したクライン・ゴールドン方程式およびディラック方程式を導出することである。

まずはシュレディンガー方程式を導出し、その後クライン・ゴールドン方程式を導出する。ディラック方程式の導出は本稿では扱わない。

本稿では以下の条件で進める：

- 自然単位系 $\hbar = c = 1$ は用いない。
- 物理的直感（ド・ブロイ波など）や量子力学の基本公理は使わず、Stone の定理を用いて厳密に導出する。
- シュレディンガー方程式の導出には古典力学のハミルトニアンを用いる。
- クライン・ゴールドン方程式の導出には相対論的ハミルトニアンを用いる。

直感的には ψ の関数を仮定する方法が分かりやすいが、数学的定義の方が厳密である。

1 導出の直感

今回の要請は「量子状態の時間発展が連続であること」である。

1. 量子状態空間を複素ヒルベルト空間 \mathcal{H} とする。
2. $\Psi(t)$ を量子状態とする。
3. 量子状態の時間発展を表す演算子 $U(\epsilon)$ を定義する。
4. $\Psi(t)$ の時間微分の責務を $U(\epsilon)$ に任せる。
5. $U(\epsilon)$ が満たすべき物理的制約を考える。

6. Stone の定理を用いて $U(\epsilon)$ を自己共役演算子 A を用いて表現する。
7. $U(\epsilon)$ の微小変化を考え、 $\Psi(t)$ の時間発展を微分方程式として表す。
8. A をお好みのハミルトニアン H に置き換える。
9. 古典ハミルトニアンの場合はシュレディンガー方程式を得る。
10. 相対論的ハミルトニアンの場合はクライン=ゴルドン方程式を得る。

2 雛形となる微分方程式の導出

2.1 初めに

量子状態空間を複素ヒルベルト空間 \mathcal{H} とする。 $\Psi(t)$ は \mathcal{H} の元であり、

$$\Psi(t) \in \mathcal{H}.$$

時間発展演算子 U を

$$U(\epsilon) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$$

とする。量子状態の時間発展は

$$\Psi(t + \epsilon) = U(\epsilon)\Psi(t)$$

で表される。

2.2 時間発展演算子の性質

memo: $U(\epsilon)$ は物理的制約により以下を満たす

1. 線形性：時間が非線形に変化することはない。
2. ユニタリ性：全確率を正規化すると $\|\Psi\|^2 = 1$ 。
3. 1 パラメータ群：時間発展は連続的であり、 $U(t_0)U(t_1) = U(t_0 + t_1)$ 。

これがいわゆる強連続な 1 パラメータユニタリ群である。

さらに $U(0)$ は単位作用素 I に等しい：

$$U(0) = I \text{ e.g., } \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Stone の定理により、強連続な 1 パラメータユニタリ群 $U(\epsilon)$ に対して、自己共役演算子 A が存在し、以下のように記される。

$$U(\epsilon) = e^{-i\epsilon A}.$$

この時、 A は時間発展の生成子と呼ばれる。

memo: Stone の定理とは、強連続な 1 パラメータユニタリ群は必ず自己共役演算子を生成子として持つ、という定理である。

memo: A は自己共役演算子であるため、以下の性質を満たす

1. $A = A^\dagger$ (自己共役)
2. A の固有値は実数
3. A の固有ベクトルは直交する

テイラー展開すると微小変化は

$$U(\epsilon) = I - iA\epsilon + O(\epsilon^2)$$

と簡略化できる。

2.3 微分方程式の導出

量子状態の時間発展を表す式

$$\begin{aligned}\Psi(t + \epsilon) &= U(\epsilon)\Psi(t) \\ &= (I - iA\epsilon + O(\epsilon^2))\Psi(t)\end{aligned}$$

の時間微分について考えたいが、時間に対する微分は $\Psi(t)$ に対して行うべきであり、 $U(\epsilon)$ に対して行うべきではない。そこで、 $\Psi(t)$ の時間微分を $U(\epsilon)$ に任せることにする。すなわち、

$$\frac{\Psi(t + \epsilon) - \Psi(t)}{\epsilon} = \frac{U(\epsilon) - I}{\epsilon}\Psi(t) - \frac{O(\epsilon^2)}{\epsilon}\Psi(t)$$

が得られる。ここで A とハミルトニアン H は

$$A = \frac{H}{\hbar}$$

により対応し、整理すると

$$i\hbar \frac{d}{dt}\Psi(t) = H\Psi(t)$$

となる。

3 正準交換関係と演算子の表現

古典力学における位置 x と運動量 p は、量子力学においては演算子 \hat{x}, \hat{p} となり、ハイゼンベルクの正準交換関係 (Canonical Commutation Relation, CCR)

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar I$$

を満たすことが要請される (I は恒等作用素)。

ここで、この交換関係を満たす演算子の具体的な表現形式が必要となる。
ストーン・フォン・ノイマンの定理 (Stone-von Neumann Theorem) によれば、有限次元の正準交換関係 (厳密にはその指数形式であるワイルの関係式) を満たす既約なユニタリ表現は、ユニタリ同値を除いて一意に定まる。

この定理により、我々は最も一般的な「シュレディンガー表現」を採用することができる。位置演算子 \hat{x} を座標空間における掛け算演算子として対角化する表現をとると、

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$$

となる。このとき、交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を満たす運動量演算子 \hat{p} の表現は、微分演算子として一意に定まる：

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

- **証明の概略**：波動関数 $\psi(x)$ に対して $(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi = i\hbar\psi$ を満たす \hat{p} を $\hat{p} = A\frac{\partial}{\partial x} + B$ の形で探索すると、係数が定まる。

これにより、ハミルトニアン H を演算子化する準備が整った。

4 シュレディンガー方程式の導出

古典力学ハミルトニアン H は全エネルギー E として

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

を持つ。運動量演算子は

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

よって

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

となる。これを微分方程式に代入すると

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

となる。これがシュレディンガー方程式である。

5 クライン＝ゴルドン方程式の導出

相対論的ハミルトニアン H は全エネルギー E として

$$H = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$$

$$\mathbf{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

を持つ。運動量演算子は

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

よって

$$\hat{H} = \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4} = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4}$$

となる。

根号付き演算子の定義について

根号付き演算子 \sqrt{A} は定義が難しい。一般に、自己共役演算子 A に対して、スペクトル分解を用いて定義されるが、ここでは詳細を省略する。

また、定義が複雑なため、一般には付録に示している $E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$ を直接置換する方法が一般的である。

これを微分方程式に代入すると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4} \Psi(x, t)$$

となる。ここで、根号を外すために両辺を2乗すると

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \Psi = (-i\hbar \nabla)^2 c^2 \Psi + m^2 c^4 \Psi$$

が得られる。これを上記の式に代入すると

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 \Psi + m^2 c^4 \Psi$$

となり、整理すると

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi - \nabla^2 \Psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi = 0$$

となる。これがクライン=ゴールドン方程式である。ここでダランベルシアン \square を以下のように定義する

$$\square := \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2.$$

すると、クライン=ゴールドン方程式は

$$\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \Psi = 0$$

と簡潔に表される。また、付録にて $E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$ を直接置換する方法も示す。

6 付録

6.1 Stone の定理

Stone の定理は、強連続な 1 パラメータユニタリ群が必ず自己共役演算子を生成子として持つ、という定理である。具体的には、強連続な 1 パラメータユニタリ群 $U(t)$ に対して、自己共役演算子 A が存在し、

$$U(t) = e^{-itA}$$

と表される。

6.2 ランダウの記法

ランダウの記法は、関数の漸近的な振る舞いを表すための記法である。例えば、関数 $f(x)$ をテイラー展開したとき、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n = f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \frac{f'''(0)}{3!}x^3 + \dots$$

と表されるが、微小な x に対しては高次の項は相対的に極めて小さくなるため、これらをまとめて無視できるほど小さいとすることができる。このとき、 $f(x)$ の高次の項をまとめて

$$f(x) = O(x^n) \quad (x \rightarrow 0)$$

と表す。ここで、 $O(x^n)$ は「 x が 0 に近づくと、 $f(x)$ の高次の項は x^n に比例するほど小さい」という意味である。

6.3 正準交換関係とストーン・フォン・ノイマンの定理

量子力学における位置演算子 \hat{x} と運動量演算子 \hat{p} は、ハミルトン力学における位置 x と運動量 p の正準交換関係

$$\{x, p\} = 1$$

を量子化したものであり、以下の交換関係を満たす：

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar I.$$

ここで、 I は恒等作用素である。

6.4 クライン＝ゴルドン方程式の直接置換

相対論的ハミルトニアンの場合、エネルギー E と運動量 p の関係は

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$$

エネルギー・運動量演算子を

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

とすると

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \Psi = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 c^2 \Psi + m^2 c^4 \Psi$$

が得られる。これを上記の式に代入すると

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = -\hbar^2 c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + m^2 c^4 \Psi$$

となり、整理すると

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi = 0$$

となる。これがクライン=ゴルドン方程式である。