この章では解析力学から量子力学への接続を駆け足で書く．座標と運動量に依存するある物理量 $\omega(x_i, p_i)$ を考える．ω の時間微分は

$$\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \omega}{\partial x_i}\dot{x}_i + \frac{\partial \omega}{\partial p_i}\dot{p}_i \tag{0.0.1}$$

である．ここで正準方程式

$$\begin{cases} \dot{x}_i = \dfrac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\dfrac{\partial H}{\partial x_i} \end{cases} \tag{0.0.2}$$

より，式 (0.0.1) の右辺は

$$\frac{\partial \omega}{\partial x_i}\dot{x}_i + \frac{\partial \omega}{\partial p_i}\dot{p}_i = \frac{\partial \omega}{\partial x_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \omega}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial x_i} \tag{0.0.3}$$

と書ける．上式の右辺を

$$\{\omega, H\} \equiv \frac{\partial \omega}{\partial x_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \omega}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial x_i} \tag{0.0.4}$$

とおき，これを **Poisson 括弧**という．つまり，ω の時間微分は

$$\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}t} = \{\omega, H\} \tag{0.0.5}$$

と書ける．Poisson 括弧は一般の物理量 λ で

$$\{\omega, \lambda\} \equiv \frac{\partial \omega}{\partial x_i}\frac{\partial \lambda}{\partial p_i} - \frac{\partial \omega}{\partial p_i}\frac{\partial \lambda}{\partial x_i} \tag{0.0.6}$$

と定義される．

ω の時間発展

$$\omega(t) = \omega(t+\varepsilon) = \omega(t) + \varepsilon\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}t} \tag{0.0.7}$$

を考える．これは式 (0.0.5) を用いると，

$$\omega(t+\varepsilon) = \omega(t) + \varepsilon\{\omega, H\} \tag{0.0.8}$$

と書くことができる．つまり，ω の時間発展による変化量 $\delta\omega = \varepsilon\dfrac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}t}$ は Poisson 括弧により，

$$\delta\omega = \varepsilon\{\omega, H\} \tag{0.0.9}$$

と表される．式 (0.0.9) から，**ω の時間発展が ω と H の Poisson 括弧をとることにより生み出される**ことがわかる．もし ω が保存量であれば

$$\{\omega, H\} = 0 \tag{0.0.10}$$

である．

この概念を一般化する．物理量 ω が何らかの変換により，

$$\omega \to \omega + \delta\omega = \omega + \varepsilon\left[\frac{\partial \omega}{\partial x_i}\delta x_i + \frac{\partial \omega}{\partial p_i}\delta p_i\right] \tag{0.0.11}$$

と変化したとする．ここである関数 $Q(x_i, p_i)$ が $\delta x_i, \delta p_i$ を生み出したとする．つまり，

$$\delta x_i = \frac{\partial Q}{\partial p_i} \tag{0.0.12}$$

$$\delta p_i = -\frac{\partial Q}{\partial x_i} \tag{0.0.13}$$

とすると，ω の変化は，

$$\omega + \varepsilon\{\omega, Q\} \tag{0.0.14}$$

と書ける．Q は Poisson 括弧をとることにより変換を生み出したとみなせるので，Q は **Generator** と呼ばれる．

例題 0.1

$\omega = x_i$，$Q = p_j$ とする．

$$\{x_i, p_j\} = \frac{\partial_i}{\partial x_i}\frac{\partial p_j}{\partial p_i} + \frac{\partial_i}{\partial p_i}\frac{\partial p_i}{\partial x_i} \tag{0.0.15}$$

$$= \delta_{ji} \tag{0.0.16}$$

よって，

$$x_i \to x_i + \delta x_i = x_i + \varepsilon\delta_{ji} \tag{0.0.17}$$

したがって，j 方向の運動量は j 方向への並進操作を生成する．

まとめると，H の Poisson 括弧は時間発展，p の Poisson 括弧は並進操作を生み出す．同様に角運動量 l の Poisson 括弧が回転操作に対応することも確認できる．また，x と p の間には

$$\{x, p\} = 1 \tag{0.0.18}$$

が成り立つ．

量子力学の世界に入る．p は並進操作を生むので，運動量演算子 $\hat{p}$ が並進操作の generator と考える．並進操作の演算子を

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{a\hat{p}}{\hbar}} |x\rangle = |x + a\rangle \tag{0.0.19}$$

と定義する．a が微小量 ε のとき，

$$\left(\hat{I} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon\hat{p}\right)|x\rangle = |x + \varepsilon\rangle \tag{0.0.20}$$

と書ける．これを用いて座標空間での $\hat{p}$ の形を導出する．ここで，座標空間では

$$\hat{x}|\psi\rangle \to x\psi(x) \tag{0.0.21}$$

である．

一般の量子状態 $|\psi\rangle$ に $|x+\varepsilon\rangle$ を作用させて，

$$\langle x + \varepsilon|\psi\rangle = \langle x|\left(\hat{I} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon\hat{p}\right)|\psi\rangle \tag{0.0.22}$$

$$= \langle x|\psi\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon\langle x|\hat{p}|\psi\rangle \tag{0.0.23}$$

$$= \langle x|\psi\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon\int \mathrm{d}x'\,\langle x|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle \tag{0.0.24}$$

を得る．また，$\langle x+\varepsilon|\psi\rangle$ は波動関数 $\psi(x)$ を用いて，

$$\langle x + \varepsilon|\psi\rangle = \psi(x + \varepsilon) \tag{0.0.25}$$

$$= \psi(x) + \varepsilon\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} \tag{0.0.26}$$

$$= \psi(x) + \varepsilon\int \mathrm{d}x'\,\delta(x - x')\frac{\mathrm{d}\psi(x')}{\mathrm{d}x'} \tag{0.0.27}$$

$$= \psi(x) - \varepsilon\int \mathrm{d}x'\,\frac{\mathrm{d}\delta(x - x')}{\mathrm{d}x'}\psi(x') \tag{0.0.28}$$

とも書ける．これら 2 式を見比べると，

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\delta(x - x')}{\mathrm{d}x} \tag{0.0.29}$$

が得られる．よって，

$$\langle x|\,\hat{p}\,|\psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} \tag{0.0.30}$$

である．したがって，

$$\hat{p} \to -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{0.0.31}$$

とできる．さらに，$\hat{x}$ と $\hat{p}$ の間には交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \mathrm{i}\hbar \tag{0.0.32}$$

が成り立つ．これは解析力学での Poisson 括弧**式** (0.0.18) の $\mathrm{i}\hbar$ 倍である．