素粒子論研究・電子版 Vol. 24 (2016) No. 3

小川修三「量子力学」講義ノート 1

編集：　矢野　忠[1]

平成 28 年 11 月 7 日

[1]元愛媛大学工学部　yanotad@earth.ocn.ne.jp

はじめに

小川修三氏（名古屋大学名誉教授）夫人の敏子様から小川さんの量子力学講義ノートのコピーを送って頂いてからもう数年になる．これは広島大学と名古屋大学で小川さんがされた量子力学の講義のノートであり，もともと公表されることを前提としてはいない．

それで単なるメモに近い箇所もあるが，小川さんの量子力学の講義はその当時に講義を聞いた学生に感銘を与えたことで知られており，学生に量子力学をできるだけ納得できるように理解させたいという気持ちにあふれている[1]．

講義ノートを 3 部に分けて，pdf のファイルでこの『素粒子論研究』電子版に順次掲載をして行くことを考えているが，この「講義ノート 1 」にはその目次をご参考のために挙げておく．

送って頂いたコピーの中に目次が抜書きされてあるが，どうも講義ノートを見ると，抜書きの目次とは節のタイトルが一致していないものある．また，講義が数回されているためにいつかの版 (version) がある箇所もある．

目次はどうも Schiff の「量子力学」とほぼ同じようである．ただ，内容は小川さんの独自の見解が各所にみられる．

講義ノートであるから，口頭での説明があったと思われるので，文章による説明が欠けているところがある．特に最初の部分は予備知識をすでにもっていると前提されていると思われる．そこはあまり編者が余計なことを書くべきではないだろうが，最小限の説明をつけ加えた．もっともこれは数式の説明の補充のためであり，もし不必要と考えられる方々はそこはスキップして下さることをお願いする．もし必要ならば朝永の『量子力学』I（みすず書房）などで確認をお願いする．

編集をはじめてずいぶん時間が経つが，講義ノートの十分な編集ができていない．これから徐々にこの講義ノートを小川さんの真意に即してできるだけ改訂していくつもりなので，まずは不十分で荒っぽい復元であることをお許しいただきたい．

小川修三『量子力学講義ノート 1』では第 1 章から第 3 章までをとりあげる．

内容目次

[1]編者は小川さんが量子力学の講義をされる以前の学生であり，彼の原子核物理の講義を聞いた．

5. Schrödinger 方程式
電子密度の保存，Ehrenfest の定理

6. ψ の物理的意味
確率波，Schrödinger 方程式と観測における波束の収縮

第 3 章 固有状態と固有値

7. 物理量と演算子
運動量と固有状態 , 位置の固有関数，$\delta-$ 関数

8. 交換関係
$[q,p]=i\hbar$, 交換可能性と同時固有状態

9. 不確定性関係
位置と運動量，minimal wave packet, $\Delta E \Delta t$ の例 (Stern-Gerlach の実験)

10. 重ね合わせの原理
スリット実験の例

第 4 章 離散固有値問題

11. 井戸型ポテンシャル

12. 調和振動子
三次元，パリティ

13. 水素原子

14. 角運動量，磁気量子数

第 5 章 連続固有値の問題

15. 1 次元の壁による散乱-トンネル効果

16. 散乱の運動学
古典像，量子力学的像（beam の送り出し，漸近的振舞い）

17. 中心力による散乱
Coulomb 力，短距離力

第 6 章 行列力学

18. Matrix 力学の導入
（Matrix 力学の応用として）角運動量

19. 変換論
unitary 変換，状態関数，Heisenberg 表示と Schrödinger 表示，固有値問題の例

第 7 章 摂動論

20. 定常状態における摂動論
固有値問題　－ Stark 効果など，Born 近似

21. 時間的発展での摂動論

第 8 章　多粒子系

22. スピンと角運動量の合成
回転群の表現

23. 同種粒子系の波動関数
Pauli の原理，統計，密度行列

24. 原子構造論

第 9 章　相対論的量子力学

25. Dirac 方程式

26. 場の量子化

第1章　量子の発見

1.1　空洞輻射

Stefan の法則: U $\propto T^4$, U: 空洞輻射のエネルギー密度, T: 空洞の温度
Raleigh-Jeans 公式 : 古典論 (Classical) からのスペクトル (spectrum)

$$U(\nu)d\nu = \frac{8\pi}{c^3}kT\nu^2 d\nu, \quad \nu : \text{空洞輻射の振動数}, \quad k : \text{Boltzmann 定数}$$

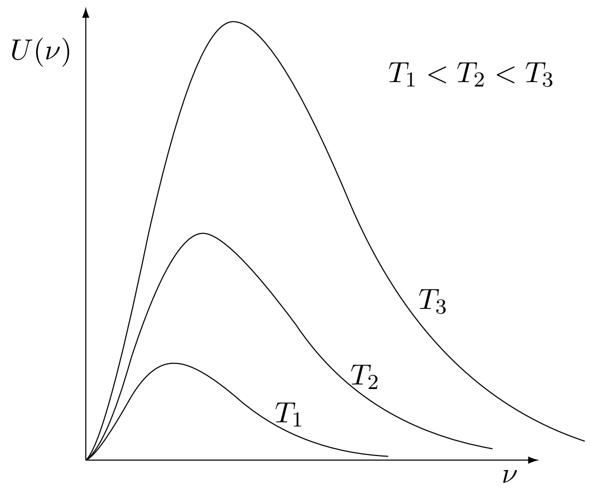


図 1.1: 空洞輻射のスペクトル

Planck の量子仮説

$$h\nu, \quad h = 6.626 \times 10^{-34}\mathrm{J \cdot s}$$

h は Planck 定数である.

Planck の公式

$$U(\nu)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{\mathrm{e}^{h\nu/kT}-1}d\nu, \quad k = 1.3807 \times 10^{-23}\mathrm{J/K}$$

k は Boltzmann 定数である.

1.2 光量子

光電効果

光電効果は金属の表面に光が照射されたとき，金属の表面から電子が飛び出すという現象である．このとき飛び出す電子のエネルギーを E_e，電子の数を n_e とし，金属に照射する光の強度を I，振動数を ν とすれば，

1. E_e independent of I
2. $n_e \propto I$
3. $E_e = E_e(\nu) \propto \nu$

が実験的に成り立っている．

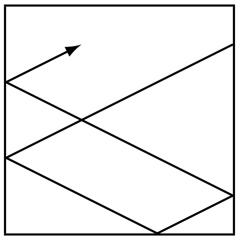
Einstein の光量子仮説では

$$E_e = h\nu - P$$

が成り立つとする．ここで，P は金属の種類毎に定まる仕事関数である．すなわち，飛び出す電子のエネルギー E_e と金属に照射する光の振動数との間には 1 次式の関係が成り立つ．これは実験的にも確かめられている関係である．

光量子の運動量

x 方向の光の速度 c_x，運動量 p_x とする．光を長さ L の立方体の箱の中に閉じ込めたとする（図 1.2 参照）．このとき毎秒当りの空洞の箱の壁への衝突回数は $\frac{c_x}{2L}$



L

図 1.2: 空洞中の光子の運動

$p_x = p\frac{c_x}{c}$ とおけるだろう．運動量の change は $2p_x$ だから，光の空洞の箱の壁におよぼす圧力は

$$P = \sum_{i=1}^{N} \frac{c_x^i}{2L}(2p_x^i)\frac{1}{L^2} = \frac{N}{L^3} < p_x c_x >$$

空洞の energy 密度 U と粒子数 N とは

$$N = \frac{UL^3}{h\nu}$$

の関係がある．

$$< p_x c_x > = \frac{p}{c} < c_x^2 > = \frac{1}{3}pc$$

となる．なぜなら光は等方的に運動しているとしてよいから，つまり x, y, z の同等性から $< c_x^2 >= \frac{1}{3}c^2$ と考えられる．

$$P = \frac{U}{3}\frac{cp}{h\nu}$$

一方，光が波動であることから $P = \frac{U}{3}$ が成り立つ．したがって

$$p = \frac{h\nu}{c}$$

が得られる．

ここで上で用いた空洞輻射の圧力 P が空洞のエネルギー密度 U の $1/3$ に等しいことを示す，$P = \frac{U}{3}$ の関係を導いておこう．

一辺の長さが L の立方体の空洞があってその中で輻射が固有振動しているとする．このとき空洞が立方体であることを保ちながら，中に押し込むという操作を行う．この空洞の変形操作は十分ゆっくり行われる，変化した後で空洞中の輻射はやはり固有振動を行っている．

このとき，輻射の固有振動の振動数 ν は変化してくるし，またその振幅も変化する．したがって輻射の固有振動のエネルギー E も変化してくる．そのために空洞の変形の際にはそれだけの仕事を行わねばならない．このときにエネルギーの変化の割合と振動数の変化の割合が等しい．すなわち $E/\nu =$ 一定 が成り立つ．この E/ν のことを断熱不変量という．

すなわち，

$$\frac{\delta E}{E} = \frac{\delta \nu}{\nu}$$

が成り立つ．

外部からした仕事を δW と表すとこれは固有振動で増加したエネルギーの総和であるから，

$$\delta W = \sum_s \delta E_s$$

が成り立つ．

E/ν は断熱不変量であったから，

$$\frac{\delta E_s}{E_s} = \frac{\delta \nu_s}{\nu_s}$$

が成り立つ．

一方，立方体の大きさ L と固有振動数 ν_s とは

$$\nu_s = s\frac{c}{2L}$$

であるから

$$\frac{\delta \nu_s}{\nu_s} = -\frac{\delta L}{L}$$

が成り立つ．

立方体の空洞の体積を V とすると，$V = L^3$ であるから

$$\delta V = 3L^2\delta L$$

である．したがって

$$\frac{\delta E_s}{E_s} = -\frac{1}{3}\frac{\delta V}{V}$$

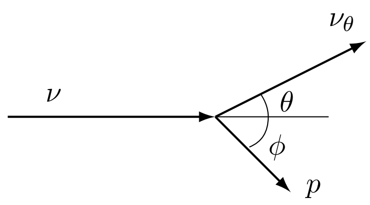


図 1.3: Compton 散乱

したがって

$$\delta W = -\frac{1}{3}\frac{\sum_s E_s}{V}\delta V$$

これを

$$\frac{\delta W}{\delta V} = -\frac{1}{3}U$$

と表せば，これは一辺 L の立方体の空洞の輻射が 6 つの壁に与える圧力の平均 P が

$$P = \frac{U}{3}, \quad U = \frac{\sum_s E_s}{V}$$

で表されることを示している．

断熱不変量 E/ν の存在する例として単振動する振り子の糸の長さをゆっくりと引っ張って短くする場合を考えている．これは朝永の『量子力学』I（みすず書房）pp.19-21 に説明が詳しいから省いた．

Compton 散乱

Compton 散乱は X 線の電子による散乱である．振動数 ν の X 線が水平に左から電子に入射してきたとき，この X 線は水平方向から上方に θ の角度に振動数 ν_θ で散乱される．静止していた標的の電子は入射 X 線によって跳ね飛ばされる．ここで，p は反跳電子の運動量である．電子の反跳された方向は水平方向と下向きに角度 ϕ をなすとする（図 1.3 参照）．

このときこの散乱の前後で X 線と電子の運動量とエネルギーとが保存されるとき，つぎの等式が成り立つ．

$$\begin{aligned} h\nu &= h\nu_\theta + E : \quad \text{energy の保存則} \\ \frac{h\nu}{c} &= \frac{h\nu_\theta}{c}\cos\theta + p\cos\phi \\ 0 &= \frac{h\nu_\theta}{c}\sin\theta + p\sin\phi \end{aligned}$$

これを解くと

$$\nu_\theta = \frac{\nu}{1 + \frac{2h\nu}{mc^2}\sin^2\frac{\theta}{2}}$$

すなわち

$$\Delta\lambda = \lambda_\theta - \lambda = \frac{c}{\nu_\theta} - \frac{c}{\nu} = \frac{2h}{mc}\sin^2\frac{\theta}{2}$$

Compton 散乱では入射 X 線が静止している電子と衝突してエネルギーを失うので，散乱された X 線の振動数は入射 X 線の振動数と比べて小さくなる．すなわち，散乱 X 線の波長は入射 X 線の波長と比べて大きくなる．このことを **Compton 効果**という．

1.3 原子模型

1. **電子: 真空放電による陰極線 (Thomson)**

$$e/m = 1.7589 \times 10^{11}\ \mathrm{C/kg}$$

これがすべての物質中に普遍的に存在することが明らかとなった.

Zeeman 効果 1897

原子から光が放出されるが，その光のスペクトルがもし単一（重なっていない）の場合でもその原子を磁場の中において発光させたときにその光のスペクトルが元の振動数のものに加えて元の振動数よりも大きい振動数の光と小さい振動数の光の 3 本のスペクトルに分かれる．これを Zeeman 効果という（図 1.4 参照）．その振動数の分離のしかたは加えられた磁場の大きさに比例する．すなわち，光の振動数を ν とするとき振動数の差 $\Delta\nu = \frac{eH}{4\pi mc}$ で与えられる．この式での e/m の値は陰極線の電子の実験から得られた e/m の値と同一であることがわかった.

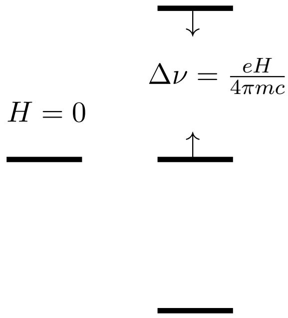


図 1.4: Zeeman 効果によるスペクトルの分離

e/m の値が陰極線電子で得られた値と同じであることがわかった.

2. **原子模型：Rutherford 模型**

Rutherford は原子によるアルファ粒子の散乱において頻度は少ないけれども大きな角度で屈

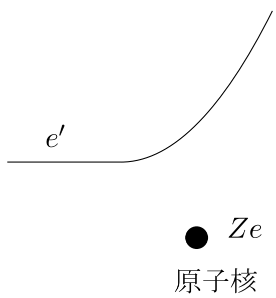


図 1.5: Rutherford 散乱

曲するアルファ粒子があることから，原子には正の電荷をもった質量の大きい芯があることを

発見し，これを原子核と名付けた．そして，この原子の中心にある原子核とそのまわりを周回している電子から，原子は成り立っていると考えた（Rutherford 原子模型）．

$$|\mathbf{F}| \le \frac{Zee'}{R^2}$$

しかし，このような原子が安定に存在することの理解が古典的には困難だった（原子の安定性の困難）！(図 1.5 参照)

3. **スペクトル**

$$\frac{1}{\lambda} = R\left[\frac{1}{(m+a)^2} - \frac{1}{(n+b)^2}\right] \quad R = 1.0974 \times 10^7 \mathrm{m}^{-1}$$

こ式の a, b は水素原子では $a = b = 0$ である．

4. **Bohr の理論**

(a) disrcete energy level $W_1, W_2, \cdots$ が stationary state として実現している

(b) $W_m \to W_n$ のときに光が放出または吸収される

$$\nu = \frac{W_m - W_n}{h}$$

水素原子の Balmer 系列から

$$W_m = -\frac{Rch}{m^2} \tag{1.1}$$

まず classical な議論をしよう．

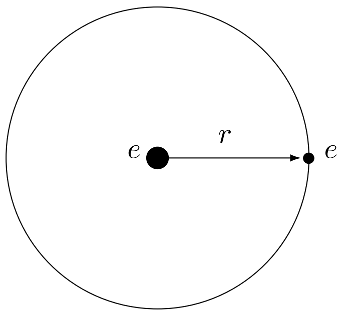


図 1.6: Bohr の水素原子模型

向心力が電子と陽子の引力に等しいから，電子の質量を M とし [1]，陽子と電子間の距離を r として電子の軌道運動の角速度を $\dot{\phi}$ とすれば

$$Mr\dot{\phi}^2 = \frac{e^2}{r^2}$$

$$\dot{\phi}^2 = \frac{e^2}{Mr^3}$$

[1]電子の質量を m と小文字で表したいところだが，すでに量子数として m を用いたので，しかたなく M を電子の質量に使っている．

である．ハミルトニアンは

$$H = \frac{M}{2}(r\dot{\phi})^2 - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r} = -W$$

周期 $T = \frac{1}{\nu}$ は $2\pi/\dot{\phi}$ に等しいから，$\nu = \dot{\phi}/2\pi$ である．

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{e^2}{Mr^3}} = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{2}{Me^4}}|W|^{3/2} \tag{1.2}$$

つぎに quantal な議論をしよう．

$$\nu_{n\to n-\tau} = \frac{2Rc}{n^3}\tau = \frac{2}{\sqrt{Rch^2}}|W|^{3/2}\tau \quad (n\to\infty) \tag{1.3}$$

ここで，(1.1) を用いた．さらに，(1.2) と (1.3) とを比べて

$$\frac{2}{\sqrt{Rch^2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi^2 Me^4}}$$

$$R = \frac{2\pi^2 Me^4}{ch^3} = 1.09\times 10^7\mathrm{m}^{-1}$$

こうして対応原理を用いると Rydberg の定数の数値を求めることができる．

1.4 電子の波動性

電子は古典的には粒子と思われていたが，L. de Broglie は電子の波動論 (1923) を提唱した．

Davisson-Germer の実験

金属面で反射させた回折像が得られた．これらの実験から質量 m, 速度 v の電子波の波長は

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad \text{（電子の波動性の確証）} \tag{1.4}$$

光での関係

$$E = h\nu,\quad \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{h}{p},\quad \lambda = \frac{hc}{E}$$

電子では

$$E = \frac{mv^2}{2},\quad \lambda = \frac{h}{mv},\quad \lambda = \frac{hv}{2E} \quad \text{(Non-Relativistic)} \tag{1.5}$$

一般に $v < c$ であるから，電子波の方が波長 λ が小さい．したがって解像率が大きい．

こうして電子の波動性が明らかとなった．

電子に波動性があれば，その波動の振幅に対応する量 ψ を考えることができる．

一定の媒質を伝播位相速度 u で進む ψ に対して波動方程式

$$\frac{1}{u^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$$

が成り立つ [2]．

[2] この章の末尾に補遺 1 として**位相速度と群速度**について初等的説明とその後に著者（小川）の説明は述べる．

振動数 ν の波であるとすれば，その時間部分はたとえば $\sin(2\pi\nu t+\delta)$ で表されるから，

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t}^2 = -4\pi^2\nu^2\psi$$

とおくことができる．振動数は速度と波長で $\nu=\frac{u}{\lambda}$ と表せるから波動方程式は

$$\Delta\psi+\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi=0$$

いま電子がポテンシャル $V(x)$ で表される力場内を運動しているとすると $E=\frac{1}{2}mv^2+V$ が成り立っているから，

$$\lambda=\frac{h}{mv}=\frac{h}{\sqrt{2m(E-V)}}$$

が得られる．これを波動方程式に代入すると

$$\Delta\psi+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\psi=0$$

が得られる．これを時間に依存しない Schrödinger 方程式とよぶ．

1.5　補遺 1　位相速度と群速度

初等的説明

波動とは一つの場所で生じた振動がまわりの空間に伝わって行く現象である．この波を表すもっとも簡単な場合として x 軸の正の方向に速さ v, 振動数 ν で伝わる振幅 a の正弦波を考えよう．このとき，平衡の位置 0 からの波の変位を $u_1(x,t)$ で表せば，

$$u_1(x,t)=a\sin 2\pi\nu\left(t-\frac{x}{v}\right)$$

と表される．これからもう一つの波との重ね合わせを考えよう．この波を $u_2(x,t)$ で表せば，

$$u_2(x,t)=a\sin 2\pi\nu'\left(t-\frac{x}{v'}\right)$$

と表される．ここで波の速さ v と v' および振動数 ν と ν' とはそれぞれごくわずかだけ値が異なると仮定しよう．

これらの 2 つの波の全体の変位を $u(x,t)$ で表せば，

$$\begin{aligned} u(x,t) &= u_1(x,t)+u_2(x,t) \\ &= a\sin 2\pi\nu\left(t-\frac{x}{v}\right)+a\sin 2\pi\nu'\left(t-\frac{x}{v'}\right) \end{aligned}$$

となる．

いま波の速さ v が波長 λ によって異なるとき，すなわち，波の分散がある場合を以下では考えよう．数式をできるだけ簡単にするために角振動数

$$\omega=2\pi\nu$$

と（角）波数

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

とを導入すれば

$$u_1(x,t) = a\sin(\omega t - kx)$$
$$u_2(x,t) = a\sin(\omega' t - k' x)$$

となる．

v と v' および ν と ν' とはそれぞれごくわずかだけ値が異なるとの仮定から ω と ω' および k と k' とがわずかに値が異なる．したがって

$$\begin{aligned} u(x,t) &= a\sin(\omega t - kx) + a\sin(\omega' t - k' x) \\ &= 2a\cos\frac{(\Delta\omega)t - (\Delta k)x}{2}\sin\frac{(\omega+\omega')t - (k+k')x}{2} \\ &= A(x,t)\sin\frac{(\omega+\omega')t - (k+k')x}{2} \end{aligned}$$

上の式で

$$\Delta\omega = \omega - \omega', \quad \Delta = k - k'$$

とおいた．また

$$\Delta\omega \ll 1, \Delta k \ll 1$$

が成り立つと仮定する．また

$$A(x,t) = 2a\cos\frac{(\Delta\omega)t - (\Delta k)x}{2}$$

である．$A(x,t)$ の中の $\cos$ の中の $\Delta\omega, \Delta k$ は小さい量であるから，$A(x,t)$ は時間 t と位置 x に依存してゆっくりと変化する関数であり，波 $\sin\frac{(\omega+\omega')t-(k+k')x}{2}$ の一種の振幅と考えてもよい．

このとき $A(x,t)$ の時間と位置によって変化する部分 $\cos\frac{(\Delta)t-(\Delta)x}{2}$ の位相を一定としたとき

$$\frac{(\Delta\omega)t - (\Delta k)x}{2} = \text{一定}$$

が成り立つが，この式を時間 t で微分すれば

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$$

が得られる．したがって $\omega' \to \omega, k' \to k$ の極限では

$$U = \frac{dx}{dt} = \frac{d\omega}{dk}$$

が得られる．これは 2 つの波のかたまりがゆっくりと動く速さを示すもので，波の群速度とよばれる．

一方，$u(x,t)$ の部分

$$\sin\frac{(\omega+\omega')t - (k+k')x}{2}$$

は時刻 t と位置座標 x とによって時間的にはやく変化する．この $\sin$ 関数の位相

$$\frac{(\omega+\omega')t - (k+k')x}{2} = \text{一定}$$

とおき，この両辺を時間 t で微分すれば

$$v = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega + \omega'}{k + k'}$$

ここでまた $\omega' \to \omega, k' \to k$ の極限をとれば

$$v = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k}$$

となる．この速さ v を波の位相速度という．

普通に単一の波の速度とは波の位相速度のことである．また 2 つ以上の波の重ねあわせ（合成）をすることによって波のかたまりとしての速さ，すなわち，波の群速度が出てくる．

波の分散があるとき，すなわち，ω が k によって異なるとき，一般には，位相速度 v と群速度 U とは等しくない．

（例） $\omega = ck, \quad c = 一定$ のときには位相速度 v と群速度 U は同じとなるが，$\omega = ck^2, \quad c = 一定$ のときには

$$U = \frac{d\omega}{dk} = 2ck$$
$$v = \frac{\omega}{k} = ck$$

このとき

$$U = 2v$$

となる．このときは群速度と位相速度とは一致しない．(文責：編者)

以上は初等的な波の位相速度と群速度との説明であったが，もう少し高等な説明もある．以下は小川自身による説明である．

少し高等な説明

3 次元の空間 x 軸の正の方向にで平面波 ψ は

$$\psi = \exp[-i(\omega t - kx)], \quad \omega = 2\pi\nu$$

で表される．

ここで，ν は波の振動数であり，ω は角振動数とよばれる．

この単一の波の位相 $\omega t - kx = 一定$ とおいて時間 t で微分して得られる $v = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k}$ が位相速度の定義である．

群速度を定義するには平面波を重ね合わせて波束をつくる．平面波は $\exp i(kx - \omega t)$ と表されていたから，波束 ψ は

$$\begin{aligned}\psi &= \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} A(k) \exp i(kx - \omega t) dk \\ &= 2A(k_0) \frac{\sin(x - (\frac{d\omega}{dk})_0 t)\Delta k}{x - (\frac{d\omega}{dk})_0 t} \exp i(k_0 x - \omega_0 t)\end{aligned}$$

上の積分で

$$\omega(k) = \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 (k - k_0), \quad \omega_0 := \omega(k_0)$$

であるから最後の行のように積分ができる．ここで

$$\frac{\sin(x-(\frac{d\omega}{dk})_0 t)\Delta k}{x-(\frac{d\omega}{dk})_0 t}$$

の sin 関数の中の位相を

$$x-(\frac{d\omega}{dk})_0 t=\text{一定}$$

とおいて，これを時間 t で微分して得られる，

$$v_g=\frac{dx}{dt}=\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0$$

が群速度の定義である．群速度は波の重ね合わせできた，波束または波群の速さを示す．海の波などからもわかるように一般的には波の分散があるから，波束はいつまでも波のかたまりであり続けることはできず，いつかは波が崩れる．

（編者注）$\exp i(kx-\omega t)$ の変形だけ書いておこう．変数 k は k_0 の近傍だけの値がとられるので，

$$\begin{aligned}\exp i(kx-\omega t)&=\exp i\left[(k-k_0)x+k_0x-\left[\omega_0+\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0(k-k_0)\right]t\right]\\&=\exp i(k_0x-\omega_0 t)\exp i(k-k_0)\left[x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right]\end{aligned}$$

である．

第2章　Schrödinger 方程式

2.1　Schrödinger 方程式

しばらく ψ については，電子に伴う**波動を表す量**であるとして，それが**電子**という粒子像とどういう関係にあるかを問わないで話を進めよう．しかし，ψ は電子の存在と切り離すわけにはいかない，すなわち電子という物質の存在するところで **0 でない値をもつ**と考えるべきである．

さて，電子波に対して得られた式

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -4\pi^2\nu^2\psi \tag{2.1}$$

および

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\psi = 0 \tag{2.2}$$

でふたたび

$$E = h\nu$$

を用いて，振動数 ν を消去してみよう．(2.2) で ν が 1 次で入っているから，それを保存するためには (2.1) の代わりの方程式でも t についての微分が 1 次であることが望ましい．それで (2.1) の代わりに

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i2\pi\nu\psi$$

を用いて ν を消去してみよう [1]．

$$-\frac{1}{2m}\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2\Delta\psi + V\psi = \left(\frac{h}{2\pi}\right)i\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{2.3}$$

以下，量子力学の式では h ではなく，$h/2\pi$ の形がよく出てくる．

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$$

と定義し，この $\hbar$ を Dirac の h とよぶ．この $\hbar$ を用いると (2.3) は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{2.4}$$

これを **Schrödinger の波動方程式**とよぶ．この方程式の解 ψ は**実数**ではありえない [2]．この点で ψ は電磁場の波動を表すポテンシャル $(\mathbf{A},\phi)$ や $\mathbf{E},\mathbf{H}$ とは異なっている．

---

[1] このとき $\mathrm{e}^{-2\pi i\nu t}$ をとりだす．このとき $\mathrm{e}^{2\pi i\nu t}$ をとりださない．しかし，もし $\mathrm{e}^{2\pi i\nu t}$ をとりだすことにして

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = i2\pi\nu\psi$$

を用いて ν を消去すれば，つぎの (2.4) の複素共役の式 (2.5) が得られる．要するにどちらか一方を首尾一貫して選びだすかぎり問題は起こらない．

[2] この波動方程式の複素共役は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + V\psi^* = -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \tag{2.5}$$

である．

（ψ の満たすべき性質）

ψ は電子の波動を表す，いわば**振幅**として導入されている．そこで ψ についてもう少しその性質を規定しておこう．

電磁波において，空間のある場所 $\mathbf{x}$ におけるエネルギー密度は電磁場 $\mathbf{E}, \mathbf{H}$ の二乗（の和）で与えられている．これに対応して電子波 ψ の二乗を電子の密度に関係する量と考えよう．ただし，ψ は複素数だから $\psi^*\psi$ と変更をしておこう．

$$\rho \equiv \psi(\mathbf{x})^*\psi(\mathbf{x}) \tag{2.6}$$

を点 $\mathbf{x}$ における**物質密度**と定義しよう．ρ が物質密度であるならば，例えば 1 個の電子のそれであるとすれば，ρ を全空間について積分したものは時間的に一定でなければならない．

証明

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\rho &= \dot{\psi}^*\psi + \psi^*\dot{\psi} \\
&= \frac{i}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + V\psi^*\right]\psi - \frac{i}{\hbar}\psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi\right] \\
&= \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)[\psi^*\Delta\psi - \Delta\psi^*\psi] \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\mathrm{div}[\psi^*\mathrm{grad}\psi - \mathrm{grad}\psi^*\psi]
\end{aligned} \tag{2.7}$$

ここで

$$\mathbf{i} = -\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi] \tag{2.8}$$

を物質の**流れ**を表す**ベクトル**と考えてよい．

$$\frac{d}{dt}\int \rho dv = -\int \mathrm{div}\,\mathbf{i}\,dv = -\oint \mathbf{i}_n dS$$

十分大きい空間を考えればその境界の周辺では $\mathbf{i} = 0$ であるから

$$\frac{d}{dt}\int \rho dv = 0$$

となる．また，(2.7) は (2.8) を用いて

$$\frac{d}{dt}\rho + \mathrm{div}\,\mathbf{i} = 0 \tag{2.9}$$

となるが，これを**物質の連続の方程式**という．その意味は sink も source もないことを意味している．

ρ が電子密度と理解できる根拠がつぎの例で与えられる．

電子の重心は

$$<\mathbf{r}> = \frac{\int \psi^*\mathbf{r}\psi dv}{\int \psi^*\psi dv} \tag{2.10}$$

で与えられる．いま $\int \psi^* \psi dv = 1$ として

$$
\begin{aligned}
\frac{d < \mathbf{r} >}{dt} &= \int \mathbf{r}(\dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi}) dv \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \int \mathbf{r}[\psi^* \nabla^2 \psi - (\nabla^2 \psi^*)\psi] dv \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \int \mathbf{r} \nabla \cdot [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*)\psi] dv \\
&= -\frac{i\hbar}{2m} \int [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*)\psi] dv \\
&= \frac{1}{m} < \mathbf{p} >
\end{aligned} \tag{2.11}
$$

ここで，(2.11) の 1 行目から 2 行目へは Schrödinger 方程式（2.4）を用いている．また，4 行目から 5 行目へはガウスの定理を用いて得られる関係

$$
\int (\nabla \psi^*) \psi dv = - \int \psi^* \nabla \psi dv
$$

と $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ を用いている．

さらに $\frac{d<\mathbf{r}>}{dt}$ をもう一度時間 t で微分すれば

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dt^2} < \mathbf{r} > &= -\frac{i\hbar}{2m} \int [\dot{\psi}^* \nabla \psi + \psi^* \nabla \dot{\psi} - (\nabla \dot{\psi}^*)\psi - (\nabla \psi^*)\dot{\psi}] dv \\
&= -\frac{i\hbar}{2m} 2 \int [\dot{\psi}^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*)\dot{\psi}] dv \\
&= -\frac{i\hbar}{m} \left(\frac{i}{\hbar} \right) \int \left(\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + V\psi^* \right] \nabla \psi + (\nabla \psi^*) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi \right] \right) dv \\
&= -\frac{i\hbar}{m} \left(\frac{i}{\hbar} \right) \int [(V\psi^*)\nabla \psi + (\nabla \psi^*)(V\psi)] dv \\
&= -\frac{1}{m} \int (\nabla V) \psi^* \psi dv \\
&= -\frac{1}{m} < \nabla V(\mathbf{r}) >
\end{aligned} \tag{2.12}
$$

ここで 1 行目から 2 行目は Gauss の定理から得られる

$$
\begin{aligned}
\int \psi^* \nabla \dot{\psi} dv &= - \int (\nabla \psi^*) \dot{\psi} dv \\
\int \nabla \dot{\psi}^* \psi dv &= - \int \dot{\psi}^* (\nabla) \psi dv
\end{aligned}
$$

を用いた．また同様に 3 行目から 4 行目にも同じような手続きをしている．

結局 (2.12) から

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dt^2} < \mathbf{r} > &= -\frac{1}{m} < \nabla V(\mathbf{r}) > \\
&\approx -\frac{1}{m} \nabla V(< \mathbf{r} >), \quad \text{if } \psi^* \psi \text{ is remarkable at} < \mathbf{r} >
\end{aligned} \tag{2.13}
$$

これは質量 m の電子の運動方程式にほかならない．これは Ehrenfest の定理と呼ばれる．またベクトル

$$
\mathbf{G} \equiv -\frac{i\hbar}{2} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*)\psi] = m\mathbf{i} \tag{2.14}
$$

を定義すると，(2.11) の下から 2 行目の積分の被積分関数と定数 $\frac{1}{m}$ を除いて，同一である．これから

$$\int \mathbf{G} dv = m\frac{d<\mathbf{r}>}{dt} =<\mathbf{p}>$$

であることがわかる．
　$V=0$ のときは，(2.12) から

$$\frac{d}{dt}\int \mathbf{G} dv = 0$$

$V \neq 0$ のときには

$$\frac{d}{dt}\int \mathbf{G} dv = \frac{d<\mathbf{p}>}{dt} = -\int (\mathrm{grad}V)\psi^*\psi dv = -\int (\mathrm{grad}V)\rho dv$$

となるから，**G** を**運動量密度**と解釈できる [3].

2.2 ψ の物理的意味

　いままで，ψ は

1. 電子に付随する波動を表す，波の振幅である
2. その絶対値の 2 乗 $|\psi|^2$ は電子に伴う物質密度を表す

ものであると考えてきた．
　しかし，この考えは正しくない．それはつぎのことを考えてみれば明らかである．すなわち，電子を空間のある領域 $dxdydz$ に見出す実験を考えてみよう．そこでは電子は存在するかしないかであり，電子のかけらのような電子の一部分が見出されることではない．
　われわれはつぎのように解釈しなおさなければならない．すなわち，

$$|\psi(x)|^2 dxdydz \tag{2.15}$$

は，電子を $dxdydz$ 内に見出す確率を与えるものである．この意味で，ψ は確率波 (probability amplitude) とよぶ．ψ は (2.15) が ψ で指定される状態にある電子を観測したときの検出確率 (detection probability) を与えるような，電子に関係した something である．
　ψ に対する Schrödinger eq. は，ψ に関するこの解釈と consitent である．すなわち，電子を空間のどこかに見出す確率は 1, したがって時間的に一定，

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \psi^*\psi dv = 0, \qquad \int \psi^*\psi dv = 1, \text{ここで } dv = dxdydz,$$

またこの解釈によって，すでに得た**物理量の平均値**は**期待値 (expectation value)** と解釈しなおせばよい．すなわち，電子の位置の平均値

$$<\mathbf{r}>=\int \mathbf{r}\psi^*\psi dv$$

[3] 上式では当然のことながら

$$\int (\mathrm{grad}V)\psi^*\psi dv = \int \psi^*(\mathrm{grad}V)\psi dv = \int \psi^*\nabla\psi dv$$

であるから，(2.12) と同じである．

は，電子が ψ で**指定されるような状態**にあるとき，その電子の位置を多数回測定したとき，得られる測定値の平均を与えるものである．

(2.13) の関係（古典力学の関係）

$$\frac{d^2 < \mathbf{r} >}{dt^2} = -\frac{1}{m} < \nabla V(\mathbf{r}) >$$

は，電子の運動が上に述べた期待値, または平均値については依然として量子力学においても成立している．

このように解釈される ψ を**状態関数 (state function)**，もしくは**波動関数 (wave function)** とよぶ．量子力学においては力学系の運動状態を指定するものがこの状態関数である．

つまり，古典力学においてはある時刻の力学系（たとえば質点）の運動状態は，その時刻における質点の位置と速度（または運動量）を与えることによって指定されている．

これに対して，量子力学においては**状態関数**を与えることで指定される．

（編者注）ここにスリットの実験の図が入るが，図を描かなかった．理由は以下に説明する．

左に電球（とそのフィラメント）が電池に繋がれた回路図が描かれており，そこから光か電子が出る．そして，そのすぐ近くの右に二重スリットがある．さらに，右側の離れた所に蛍光板かフィルムがありそこに同心円の回折パターンらしきものが描かれている．

編者の解釈がわるいのかもしれないが，これはなかなかわかりずらい図である．それで他のものにおきかえるべきかと思うのだが，それが正しいかどうかもいまのところ判断ができない．一応編者の解釈と補足を述べておく．

二重スリットのあることを重視するならば，電子の場合には外村彰『目で見る美しい量子力学』（サイエンス社，2010）の第 6 章の図 6.5(p.67) を参照されたい．また，光の場合には H. D. Young and R. A. Freedman, “Sears and Zemansky’s University Physics” 10th ed. (Addison-Wesley Pub. Co., 2000) p. 1262, Fig. 40-27 の下の方の 3 つの写真を参照されたい．これらは縦長または横長の二重スリットによる干渉縞の写真である．

もし，二重スリットがあることを無視した方がよければ，円形の一つの穴が開いており，そこから円形の回折像が得られる．

X 線または電子線による結晶による Debye-Scherrer 型の干渉パターンは，たとえば朝永振一郎著『量子力学 II』（みすず書房）口絵写真にある．

観測における波束の変化

1. 統計的性格
2. Schrödinger eq. で記述できない変化をする

波と粒子の dualism

まとめ

1. 電子の本質的状態は状態関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ で規定される．　（物理量の値によって規制されるのではない）

2. 観測にあたっての確率を与える.
$$|\psi|^2 dv \tag{2.16}$$
   たとえば位置についての平均値は
$$平均値 = \int \mathbf{x}|\psi|^2 dv \tag{2.17}$$

3. 観測にあたっての ψ の変化，いわゆる波束の収縮（非決定論的性格をもつ）と Schrödinger 方程式による因果的な（記述）変化の二つの変化がある

第3章　固有状態と固有値

3.1　物理量と演算子

さきに質点の位置の平均値（または期待値 expectation value ともよぶ）が

$$< \mathbf{r} >= \int \psi^* \mathbf{r} \psi d\mathbf{r} \tag{3.1}$$

で与えられることを見た．また運動量の平均値は

$$< \mathbf{p} >=< m\frac{d\mathbf{r}}{dt} >$$

であるから，(2.11) から

$$< \mathbf{p} >= \int \psi^* (-i\hbar) \nabla \psi d\mathbf{r} \tag{3.2}$$

で与えられる．

このことから状態 ψ にある質点の運動量の平均値は ψ に対する演算

$$-i\hbar\nabla \tag{3.3}$$

を行って平均をとればよいことになる．それに対して位置の平均値は ψ に対する演算

$$\mathbf{r} \tag{3.4}$$

をかけて平均をとればよいことになる．これらの**平均値は実数であること**に注意しておこう．位置の平均値は $\mathbf{r}$ がもともと実数であるから自明である．

ここでは運動量の平均値が実数であることのみ示しておこう．

$$\begin{aligned} < \mathbf{p} >^* &= \left(\int \psi^* (-i\hbar\nabla) \psi d\mathbf{r} \right)^* \\ &= \int \psi (i\hbar\nabla) \psi^* d\mathbf{r} \end{aligned}$$

部分積分をおこなって，$\psi(\mathbf{r} \to \infty) = 0$ の条件を考えると

$$< \mathbf{p} >^*= \int \psi^* (-i\hbar\nabla) \psi d\mathbf{r} =< \mathbf{p} >$$

したがって，運動量の平均値は実数であることが示された．

つぎに一般の物理量の平均値はどうなるか．まず古典的な力学的物理量は，基本的には正準共役な位置 q と（広義の）p であり，その他の物理量は p と q との関数として表される．

たとえば

系の全エネルギー：$E = \frac{p^2}{2m} + V(q)$

角運動量　　　　：$\mathbf{L} = \mathbf{q} \times \mathbf{p}$

一般の物理量

$$A(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \tag{3.5}$$

に対して，上述の議論を一般化すれば

$$< A >= \int \psi^* A(-i\hbar\nabla, \mathbf{q})\psi d\mathbf{q} \tag{3.6}$$

が推論される．量子力学ではこれを仮定する．ただし，いくつかの注意を以下にしておこう．

1. 古典論では p と q との積の順序は問題にならないが，量子力学では重要な問題である．すなわち，古典力学では

$$pq = qp$$

であるが，しかし量子力学では

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x\psi = -i\hbar\psi + x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi$$

となり，積の順序によって答えが変わる．したがって，古典的な物理量の平均値を量子力学によって計算する場合には p, q の積が現れたとき特別の注意を必要とする．しかし，量子力学の原理の中にこの順序を決めるものはない．結果的に実験と一致するように選ぶということで満足するしかない．

2. $< A >$ は観測された値の平均値であるから，必ず実数でなければならない．このことは演算子としてみたときの $A(-i\hbar\nabla, \mathbf{q})$ に対して，一定の条件を課することになる．つまり，物理量となるべき**演算子**は (3.6) が**実数**となる性質がなければならない．

3. (3.6) の条件を満たしている演算子を逆につくることができれば，対応する古典的な量がなくても，量子力学では物理量としての資格をもつことができる．例としてはパリティ(parity) がある．

さて以上で量子力学での問題の立て方がうかがわれる．すなわち，

「力学系の状態が $\psi(\mathbf{x}, t)$ で代表されるとき，その状態で物理量 A を測定したときの平均値はいくらであるか」

という形である．

ところで平均値しか問題にできないのか？　答えは no !である．

状態 ψ によっては A を測定すると常に平均値に一致する場合がありうる．例を運動量にとろう．

いま状態 $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})$ が

$$-i\hbar\nabla\psi_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{p} \quad : \quad \text{定数ベクトル} \tag{3.7}$$

をみたしているとしよう．これは簡単な微分方程式であって，

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = N e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \tag{3.8}$$

が解である．ここで N は

$$\int \psi_{\mathbf{p}}^* \psi_{\mathbf{p}} d\mathbf{x} = 1$$

にするための規格化定数である．この状態に対しては

$$\int \psi_{\mathbf{p}}^*(-i\hbar\nabla - \mathbf{p})^2\psi_{\mathbf{p}}d\mathbf{x} = 0$$

すなわち，$-i\hbar\nabla - \mathbf{p}$ についての観測量は必ず 0 である．なぜなら，ある物理の 2 乗の平均値が 0 であるのは，値そのものが 0 でなければならない [1]．すなわち，状態 $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})$ において運動量を観測すれば必ず $\mathbf{p}$ という値が得られる [2]．

この状態をわれわれは運動量の**固有状態**といい，$\mathbf{p}$ をこの状態における**固有値 (eigen value)** とよぶ．これを一般化して物理量 $A(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ を測定したとき，常に a なる値が得られるような**状態** $\psi_a(\mathbf{x})$ **を物理量** A **に関する固有状態 (eigen state)** とよび，a **をその固有値**という．この状態に対して

$$A\psi_a(\mathbf{x}) = a\psi_a(\mathbf{x}) \tag{3.9}$$

なる方程式が成立しなければならない．(3.9) のような式を固有値方程式という．固有値 a は**実数**である [3]．

以上から量子力学における物理量の役割がわかる．すなわち，

1. 古典的な物理量 $A(p, q)$ に対応する量子力学的な物理量＝オブザーバブル (Observable) は

$$\begin{aligned} p &\to -i\hbar\frac{\partial}{\partial q} \\ q &\to q \\ A(p, q) &\to A(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q}, q) \end{aligned} \tag{3.10}$$

によって与えられる状態関数に対する Hermite 演算子とみなされる [4]．

[1]

$$\int \psi_{\mathbf{p}}^*(-i\hbar\nabla - \mathbf{p})^2\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \int [(-i\hbar\nabla - \mathbf{p})\psi_{\mathbf{p}}]^*(-i\hbar\nabla - \mathbf{p})\psi_{\mathbf{p}}d\mathbf{x}$$

[2] 観測の手続きは問わない．$\psi_{\mathbf{p}}(x)$ で運動量の観測をしたとき $\mathbf{p}'$ の値を得たとし，$\mathbf{p}' \neq \mathbf{p}$ ならば，$(\mathbf{p}' - \mathbf{p})^2 > 0$ となり矛盾に導かれる．

[3]

$$A\psi_a = a\psi_a$$

が成り立つとき，その複素共役をとった式

$$(A\psi_a)^* = a^*\psi_a^*$$

が成り立つ．したがって

$$\psi_a^* A\psi_a = a\psi_a^*\psi_a$$

および

$$(A\psi_a)^*\psi_a\psi_a = a^*\psi_a^*\psi_a$$

が成り立つ．この二つの式を積分して辺々引けば

$$\int \psi_a^* A\psi_a d\mathbf{x} - \int (A\psi_a)^*\psi_a\psi_a = (a - a^*)\int \psi_a^*\psi_a d\mathbf{x} = 0$$

となる．したがって等式 $a^* = a$ が成立する．すなわち a は実数である．

[4] **Hermite 演算子**

(3.6) を拡張して

$$\begin{aligned} < A_{a,b} > &\equiv \int \psi_a^* A\psi_b d\mathbf{x} \\ &= \left[\int \psi_b^* A\psi_a d\mathbf{x}\right]^* \\ &=< A_{b,a} >^* \end{aligned} \tag{3.11}$$

の条件をもつ演算子を Hermite 演算子という．(3.11) をみたしていれば，(3.6) は自明である．

2. 物理量 Observable A の取り得る値は（古典論のように自明ではなくて）状態関数に対する固有値方程式の固有値として与えられる．たとえば，原子のエネルギー準位はつぎの式の E で与えられる．

$$A(p,q) = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \to H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r}, \quad \text{ここで} \quad q = r$$
$$H\psi = E\psi$$

3. 状態 $\psi(\mathbf{x},t)$ にある系について，Obserbvable $A(p,q)$ を観測するとその固有値のいずれかが得られる（固有値以外の値が観測されることはない）．また一般に観測ごとに得られる固有値の値は異なりうる．しかしながら，多数回の観測をくり返せば，その平均値は一定の値となって

$$< A >= \int \psi^*(\mathbf{x},t) A(-i\hbar\nabla, \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x},t) d\mathbf{x} \tag{3.12}$$

で与えられる．特に $\psi(x)$ が A の固有状態の一つに（その固有値 a）にあるときは，A を観測すれば，必ず a なる値が得られ，この状態 $\psi_a(x)$ は (3.9) をみたす．

つぎに**運動量の固有状態**について少し詳しく述べておこう．

三次元に拡張するのは容易だから，一次元の運動について考える．いま一辺 L の箱を考える．方程式 (3.7) を一次元にすれば

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = p\psi(x), \quad \psi(x) = N\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{3.13}$$

が得られるが，

$$\begin{aligned}
< p >^* &= \int_{-L/2}^{L/2} \psi(x) i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x) dx \\
&= \int \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(\psi^*\psi) - i\hbar\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi \right] \\
&= i\hbar \left. (\psi^*\psi)\right|_{-L/2}^{L/2} + \int \psi^* \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx \\
&=< p > + i\hbar \left. (\psi^*\psi)\right|_{-L/2}^{L/2}
\end{aligned}$$

ところで $< p >^* =< p >$ がみたされるためには $\left.(\psi^*\psi)\right|_{-L/2}^{L/2} = 0$ でなければならない．これをみたすために

$$\psi(L/2) = \psi(-L/2) \tag{3.14}$$

という周期的条件を課すとよい．このとき (3.13) から

$$\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}pL} = 1, \quad p = \frac{2\pi}{L}\hbar n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots \tag{3.15}$$

が得られる．こうして運動量に対してとびとびの固有値が得られることになる．$L \to \infty$ とすれば固有値の差は限りなく小さくすることができ，連続な実数値を近似的に覆うことができる．また

$$\int_{-L/2}^{L/2} |\psi|^2 dx = 1 \quad \Rightarrow \quad N = \frac{1}{\sqrt{L}} \tag{3.16}$$

が得られる．このようにして固有状態および固有値

$$
\begin{aligned}
\psi_p(x) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}px} \\
p &= \frac{2\pi\hbar}{L} n, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots
\end{aligned}
\tag{3.17}
$$

が得られた．

3 次元に拡張すると

$$
\begin{aligned}
\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp^{(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x})} \\
p_j &= \frac{2\pi\hbar}{L} n_j, \qquad n_j = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \qquad\qquad (j = 1, 2, 3)
\end{aligned}
\tag{3.18}
$$

となる．またこれから $\mathbf{p}$ と $\mathbf{p} + d\mathbf{p}$ との間にある状態数は

$$
\left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 p^2 dp d\Omega \tag{3.19}
$$

であることが示せる．これは格子点の数が体積に等しいからである．

直交性：　一次元で議論をする．運動量の固有関数列

$$
\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ipx/\hbar), \qquad p = \frac{2\pi\hbar}{L}, \qquad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)
$$

からつぎの積をつくる．

$$
\int \psi^*_{p_n}(x) \psi_{p_m}(x) dx = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(p_n - p_m)x} dx \overset{L\to\infty}{=} \delta_{nm} \tag{3.20}
$$

したがって，異なった固有値に属する固有関数は上記の意味で直交する．

しかし，$L \to \infty$ の操作によって p を連続にするには少し立ち入った議論が必要である．

$$
\sum_n \int \psi^*_{p_n}(x) \psi_{p_m}(x) dx = \begin{cases} 1 & \sum_n \text{ が } m \text{ を含むとき} \\ 0 & \text{それ以外のとき} \end{cases}
$$

この式で p を連続にもっていくためには

$$
\sum_n \to \int dn \quad (\quad) = \frac{L}{2\pi\hbar} \int dp \quad (\quad) \tag{3.21}
$$

とする手続きが必要である．(3.20) を積分してそれを形式的に p, p' の連続関数と考える．これに連続関数 $f(p')$ をかけて積分すると

$$
\begin{aligned}
&\frac{L}{2\pi\hbar} \int dp' f(p') \lim_{L\to\infty} \int_{-L/2}^{L/2} \psi^*_p(x) \psi_{p'}(x) dx \\
&= \frac{L}{2\pi\hbar} \int dp' f(p') \lim_{L\to\infty} \frac{2\hbar}{L} \frac{1}{p - p'} \sin \frac{(p - p')L}{2\hbar} \\
&= \lim_{L\to\infty} \frac{1}{\pi i} \int_C \frac{\mathrm{e}^{iZ}}{Z} f\left(\frac{2\hbar}{L}(Z_0 - Z) \right) dZ, \qquad Z = \frac{p - p'}{2\hbar} L, \quad Z_0 = \frac{pL}{2\hbar} \\
&= f(p),
\end{aligned}
$$

となる．これから

$$\lim_{L\to\infty}\int_{-L/2}^{L/2}\psi_p^*(x)\psi_{p'}(x)dx := \frac{2\pi\hbar}{L}\delta(p-p')$$
$$= \lim_{L\to\infty}\frac{2\hbar}{L}\frac{1}{p-p'}\sin\frac{(p-p')L}{2\hbar} \tag{3.22}$$

によって関数 $\delta(p-p')$ を定義する．そうすると $\delta(x)$ はつぎの式で定義される．

$$\delta(x) := \frac{1}{\pi}\lim_{g\to\infty}\frac{\sin gx}{x}$$

このとき $\delta(x)$ はつぎの性質をみたす．

$$\begin{aligned}
\delta(x) &= 0, \quad x \neq 0 \text{ のとき} \\
\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\delta(x)dx &= 1, \quad (-\epsilon,\epsilon) \text{ の区間内に } 0 \text{ を含むとき} \\
\int f(x)\delta(x)dx &= f(0) \\
\delta(x) &= \delta(-x) \\
x\delta(x) &= 0 \\
\int \delta'(x)f(x)dx &= -f'(0) \\
\delta'(x) &= -\delta'(-x) \\
\delta(ax) &= \frac{1}{a}\delta(x) \\
\delta(x^2-a^2) &= \frac{1}{2a}[\delta(x-a)+\delta(x+a)] \\
f(x)\delta(x-a) &= f(a)\delta(x-a)
\end{aligned} \tag{3.23}$$

これを **Dirac の δ 関数**という．

これを用いて運動量の値を連続的とみなしたときの固有関数の直交規格性は (3.20) の代わりに

$$\int \psi_p^*(x)\psi_{p'}(x)dx = \frac{2\pi\hbar}{L}\delta(p-p') \tag{3.24}$$

とおきかえるのがよい．連続固有値をもつ固有関数の規格直交化には必ず Dirac の δ 関数がでてくる．

位置の固有関数

前述の Dirac の δ 関数を用いると，x_0 なる固有値をもつ 1 次元の場合の位置の固有関数は $\delta(x-x_0)$ と表される．実際

$$x\delta(x-x_0) = x_0\delta(x-x_0) \tag{3.25}$$

である．1 次元の場合の位置の固有関数である．3 次元にすれば

$$\psi_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}) = \delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0) \tag{3.26}$$

が位置の固有関数である．固有関数の正規直交性は

$$\begin{aligned}\int \psi^*_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x})\psi_{\mathbf{x}'}(\mathbf{x})d\mathbf{x} &= \prod_{x,y,z}\int \delta(x-x_0)\delta(x'-x)dx \\ &= \delta(x_0-x'_0)\delta(y_0-y'_0)\delta(z_0-z'_0)\end{aligned} \tag{3.27}$$

で与えられる．

3.2　交換関係

物理量は状態関数 $\psi(x)$ に対する演算子として機能するが，特に物理量である，位置 $\mathbf{x}$ と運動量 $\mathbf{p}$ に対して

$$[xp_x - p_x x]\psi(\mathbf{x}) = \left[x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x\right]\psi(\mathbf{x}) = i\hbar\psi(\mathbf{x})$$

が成り立つ．ここで記号 $[A,B] := AB - BA$ で交換子を定義しよう．ただし，A, B は演算子とする．

すなわち，演算子としての関係は上の関係から

$$\begin{aligned}[x, p_x] &= i\hbar \\ [y, p_y] &= i\hbar \\ [z, p_z] &= i\hbar\end{aligned} \tag{3.28}$$

が得られる．すでに述べた演算子の積はその順序が問題であることの特殊な表現である，この関係を**交換関係**という．２つの物理量 A, B があって $[A,B] = 0$ のとき，これらは交換可能であるという．

1. 交換可能でない演算子は固有状態を共有することができない．

   (証明)
   $[A,B] = AB - BA \neq 0$ とする．もし**固有関数を共有できたとすると** A の固有値を $a_1, a_2, \cdots$ とし，B の固有値を $b_1, b_2, \cdots$ として，同時固有状態を ψ_{a_i,b_j} を表せば，

   $$\begin{aligned}AB\psi_{a_i,b_j} &= Ab_j\psi_{a_i,b_j} = a_ib_j\psi_{a_i,b_j} \\ BA\psi_{a_i,b_j} &= Ba_j\psi_{a_i,b_j} = a_ib_j\psi_{a_i,b_j}\end{aligned}$$

   したがって

   $$(AB - BA)\psi_{a_i,b_j} = (a_ib_j - a_ib_j)\psi_{a_i,b_j} = 0 \tag{3.29}$$

   となって，仮定と矛盾する．Q.E.D.

2. 交換可能な演算子は固有関数を共有できる．

   (証明)
   任意の ψ_a, ψ_b に対して，A と B のエルミート演算子であるために

   $$\begin{aligned}\int \psi^*_a A\psi_b d\mathbf{x} &= \left[\int \psi^*_b A\psi_a d\mathbf{x}\right]^* = \int \psi_b (A\psi_a)^* d\mathbf{x} \\ \int \psi^*_a B\psi_b d\mathbf{x} &= \left[\int \psi^*_b B\psi_a d\mathbf{x}\right]^* = \int \psi_b (B\psi_a)^* d\mathbf{x}\end{aligned}$$

が成り立つ．このとき

$$
\begin{aligned}
\left[\int \psi^* AB\psi d\mathbf{x}\right]^* &= \int \psi(AB\psi)^* d\mathbf{x} \\
&= \int (B\psi)^* A\psi d\mathbf{x} \\
&= \int \psi^* BA\psi d\mathbf{x} \\
&= \int \psi^* AB\psi d\mathbf{x}
\end{aligned}
$$

最後の $=$ は B と A とが交換可能であるためである．よって AB は Hermite 演算子である．したがって，AB は固有値と固有状態が得られる．さきの $a_i b_j$ はその固有値であり，$\psi_{a_i b_j}$ は固有状態である．$AB = BA$ であるから，これらは共通の固有状態である．

3. 交換関係 (3.28) からつぎのような式が導くことができる．

$$
\begin{aligned}
[f(x), p_x] &= i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x} \\
[x, f(p_x)] &= i\hbar \frac{\partial f(p_x)}{\partial p_x}
\end{aligned}
$$

3.3 不確定性関係

交換関係 (3.28) から導かれる結果を具体的に思考実験で示した Heisenberg の例をまず考えよう．ここでは，x と p_x とが決して同時に測定される（x と p_x の同時固有関数が実現する）ことがないことを示す.

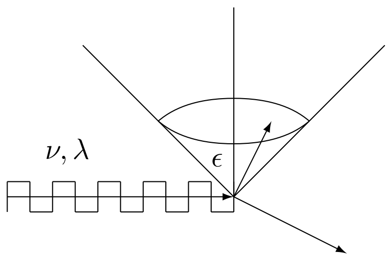


図 3.1: ガンマ線顕微鏡による電子の位置の測定

光学（ガンマ線）顕微鏡による電子の位置を測定することを考える．光学的な像の分解能は

$$
\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \epsilon} = \frac{c}{\nu \sin \epsilon} \tag{3.30}
$$

ここで ϵ は顕微鏡の開口部 (aperture) のなす角の半角であり，$\lambda = c/\nu$ は入射光の波長である．(3.30) は光の波動性による制約を示している．

反射した光が顕微鏡の中に入らなければならないから，電子に移行した運動量の不確定部分 Δp_x は

$$\Delta p_x \sim \frac{h\nu}{c}\sin\epsilon \tag{3.31}$$

これは光が光子としての性質をもつことによる．

よって (3.30) と (3.31) から

$$\Delta x \Delta p_x \sim h \tag{3.32}$$

なる関係が出てくる．つまり位置の測定における不確定さ Δx と運動量測定における不確定さ Δp_x とは (3.32) の関係によって制約され， Δx を限りなく小さくしようとすると Δp_x は限りなく大きくせざるをえないということを示している．その逆も真である (vice versa)．この (3.32) で示される関係を**不確定性関係**という．この関係は極めて原理的なもので，その意味で不確定性原理 (uncertainty principle) ということがある．

Stern-Gerlach の実験

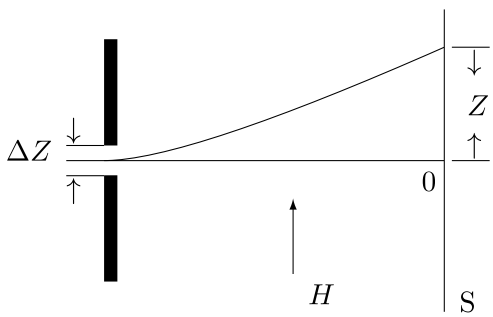


図 3.2: Stern-Gerlach の実験の概念図

もう一つの別の不確定性関係を与える実験を考える．

磁気モーメント μ，質量 m の原子線を一様ではない (不斉) 磁場内に射出したときの運動を考える．磁場は $z-$ 軸に向いていて，原子線は図のスリット（Δz の幅をもつ）から磁場に垂直に射出される．

原子線が磁場内でうける力

$$F = \mu\frac{\partial H(z)}{\partial Z}$$

は $Z-$ 軸方向である．この力が一定であると仮定すると，スクリーン上に到達した点の座標 Z は

$$Z = \frac{1}{2}\mu\frac{\partial H}{\partial Z}\frac{t^2}{m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial E(Z)}{\partial Z}\right)t^2$$

原子線のエネルギー $\tilde{E}$ は

$$\tilde{E} = \frac{p^2}{2m} + \mu H(z) = \frac{p^2}{2m} + E(Z)$$

スリットのところでの不確定性関係から $z-$ 軸方向に対する速度の不確定による到達点の不確定さは

$$Z' = \frac{1}{m}\frac{h}{\Delta Z}t$$

したがって測定が意味があるためには

$$Z \gg Z' \quad \text{すなわち} \quad \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial E(Z)}{\partial Z}\right)t^2 \gg \frac{1}{m}\frac{h}{\Delta Z}t$$

少し整理すると

$$\Delta E\ \Delta t > h \tag{3.33}$$

が得られる [5]．これは測定に要する時間と測定されるエネルギー値との不確定性関係を示している．この関係も原理的一般的なものであって，系のエネルギーを限りなく正確に定めようとすれば，限りなく長い測定時間を必要とする．

ここで，なお注意すべきことは (3.33) の関係は (3.32) のように物理量の間の交換関係から導かれたものではない．むしろ (3.32) を媒介として得られたものである．

3.4 重ね合わせの原理

minimal wave packet

その状態で位置および運動量を測定したとき，その不確定さ $\Delta x \cdot \Delta p$ の積が最小になる状態を求めよう．

一次元で考える．

$$\begin{aligned} <(\Delta x)^2> &\equiv <(x-<x>)^2> \\ <(\Delta p)^2> &\equiv <(p-<p>)^2> \end{aligned}$$

を定義すると

$$<(\Delta x)^2><(\Delta p)^2 \geq |<\Delta x \cdot \Delta p>|^2 \tag{3.34}$$

(証明)

$$A \equiv x-<x>, \quad B \equiv p-<p>= -i\hbar\left[\frac{d}{dx}-<\frac{d}{dx}>\right]$$

$$A\psi = \phi_A, \quad B\psi = \phi_B, \quad (A\psi)^* = \phi_A^*, \quad (B\psi)^* = (\phi_B)^*$$

とおけば

$$0 \leq \int dx \left|\phi_A - \phi_B \frac{\int \phi_A \phi_B^* dx}{\int |\phi_B|^2 dx}\right|^2$$

である．いま $N = \int |\phi_B|^2 dx$ と表せば

$$\left|\phi_A - \phi_B \frac{\int \phi_A \phi_B^* dx}{N}\right|^2 = |\phi_A|^2 + |\phi_B|^2 \frac{|\int \phi_A \phi_B dx^*|^2}{N^2} - \phi_A^* \phi_B \frac{\int \phi_A \phi_B^* dx}{N} - \phi_B^* \phi_A \frac{\int \phi_A^* \phi_B dx}{N}$$

[5] 編者注：(3.33) の上の右の式の両辺に ΔZ をかけ，t/m でわれば，

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial E(z)}{\partial Z}\right)\Delta Z\ t \gg h$$

ここで t を Δt とおきかえ，因子 1/2 を除いた量はもちろん 1/2 のついた量よりも大きいことを用いれば，(3.33) が得られる．

であるから，これを積分すれば

$$
\begin{aligned}
&\int |\phi_A|^2 dx + \frac{1}{N^2}|\int \phi_A\phi_B^* dx|^2 N - \frac{1}{N}\left(\int \phi_A^*\phi_B dx\right)\left(\int \phi_A\phi_B^* dx\right)\\
&-\frac{1}{N}\left(\int \phi_A\phi_B^* dx\right)\left(\int \phi_A^*\phi_B dx\right)\\
&= \int |\phi_A|^2 dx + \frac{1}{N}|\int \phi_A^*\phi_B dx|^2 - \frac{1}{N}|\int \phi_A^*\phi_B dx|^2 - \frac{1}{N}|\int \phi_A^*\phi_B dx|^2\\
&= \int |\phi_A|^2 dx - \frac{1}{N}|\int \phi_A^*\phi_B dx|^2
\end{aligned}
$$

となる．これは常に正であるから

$$\int |\phi_A|^2 dx \cdot \int |\phi_B|^2 dx \geq \left|\int \phi_A^*\phi_B dx\right|^2 \tag{3.35}$$

が成り立つ．また

$$
\begin{aligned}
\left|\int \phi_A^*\phi_B dx\right|^2 &= \left|\int \psi^* AB\psi dx\right|^2\\
&= \left|\int \psi^*\left[\frac{1}{2}\underbrace{(AB-BA)}_{i\hbar}+\frac{1}{2}(AB+BA)\right]\psi dx\right|^2\\
&= \frac{1}{4}\left|i\hbar + \int \psi^*\underbrace{(AB+BA)}_{\text{Hermite}}\psi dx\right|^2 \geq \frac{1}{4}\hbar^2
\end{aligned}
$$

であるから，

$$< (\Delta x)^2 >< (\Delta p)^2 > \ \geq \frac{1}{4}\hbar^2 \tag{3.34}$$

(3.35) で等号が成立するときは

$$\phi_A - \phi_B\frac{\int \phi_A\phi_B^* dx}{\int |\phi_B|^2 dx} = 0$$

すなわち

$$A\psi = \gamma B\psi, \quad \gamma = \frac{\int \phi_A\phi_B^* dx}{\int |\phi_B|^2 dx} = \text{const} \tag{3.36}$$

が成立していなければならない．さらに (3.34) が成り立つためには γ が虚数である．

さて (3.36) は

$$\frac{d\psi}{dx} = \left[\frac{i}{\gamma\hbar}(x- < x >) + \frac{i < p >}{\hbar}\right]\psi$$

この解は

$$\psi(x) = N\exp\left[\frac{i}{2\gamma\hbar}(x- < x >)^2 + \frac{i < p >}{\hbar}x\right] \tag{3.37}$$

規格化の条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi dx = 1$$

があるので，γ と N は次のように決められる．

$$\gamma = \text{negative imaginary}, \quad N = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\hbar|\gamma|}} \tag{3.38}$$

となる．

$$<\Delta x>^2 = \int \psi^*(x - <x>)^2 \psi dx = \frac{|\gamma|\hbar}{2}$$

から

$$|\gamma| = \frac{2}{\hbar} <\Delta x>^2$$

したがって最終的に

$$\psi(x) = [2\pi <\Delta x>^2]^{-1/4} \exp\left[-\frac{1}{4<\Delta x>^2}(x - <x>)^2 + \frac{i}{\hbar} <p> x\right] \tag{3.39}$$

さて (3.39) の状態で**位置を観測する**と，粒子が x と $x + dx$ の間に見出される確率は

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

で与えられる．ところで**運動量を観測する**と何が期待されるか？

すでに運動量 $p_x = p$ の状態は

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{L}} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{3.17}$$

で与えられることを述べた．この状態では 100% 運動量が p の値が観測される．そこで (3.39) については，(3.17) がどれだけ含まれているかその割合に応じて p の得られる確率が決まると考えてよかろう．

(3.39) を (3.17) で展開する [6] と

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \int A(p) \exp(\frac{i}{\hbar}px) \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right) dp \tag{3.40}$$

$$\begin{aligned} A(p) &= \int \psi_p^*(x)\psi(x) dx \\ &= \left[\frac{8\pi <\Delta x>^2}{L^2}\right]^{1/4} \exp\left[-\frac{1}{\hbar^2} <\Delta x>^2 (p - <p>)^2 + \frac{i}{\hbar}(<p> - p) <x>\right] \end{aligned} \tag{3.41}$$

このようにして電子が (3.40) の状態にあるとき，その運動量を観測して p と $p + dp$ の間に値を見出す確率は

$$|A(p)|^2 \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right) dp \tag{3.42}$$

で与えられることになる．

つぎに (3.40) において，ある状態 $\psi(x)$ が運動量の固有関数で展開されているが，このように状態が他の固有状態の一次結合で表されることが量子力学的状態の基本的性質の一つであって，状態関数のみたすべき原理的な性格である．この性質を重ね合わせの原理 (superposition principle) という．

[6] 数学的には Fourier 展開である．