

不確定性原理

ハイゼンベルク(注)の仮想実験

物体を観測するといこうはどのようなことであろう。観測するためには、まず光を当てなければならない。暗闇の中では何も見えない。当たり前であるがこれが意外と見落とされる。

普段我々は既に光が当てられた状態で物を見ている。しかし今目に映っている光景が現実の真の姿だと保証できるだろうか？もしかしたらテレビの映像かもしれない。それを確かめるためには、意識的にこちらから特定された光を照射しなければならない。

さて光は波の性質と粒子の性質を合わせ持っている。物体に光(電磁波)を当てる際、その波長よりも小さい物体を観測することは出来ない。なぜなら光は回折するからである。そのため電子のような小さい物体を観測するには非常に小さい波長の電磁波を当てる必要がある。

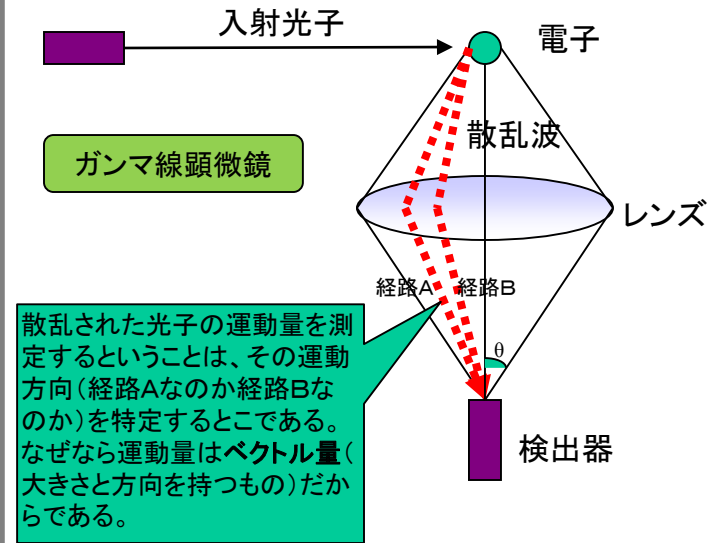
その時電子は、光子のエネルギー $h\nu$ を受けて弾き飛ばされる。(νは光子の周波数、hはプランク定数)

その際運動量とエネルギーが保存されることから、その連立方程式を解けば、衝突前後(観測前後)の電子の位置と運動量を計算することが出来る。その為には、散乱された光子の入射方向と運動量(波長)を正確に測定する必要がある。

散乱された光を観測するということは、波として広がった光をレンズによって集めることである。物の像を捉えるためには必ずレンズが必要になる。人間にもレンズ(瞳)があるからこそ物が見えるのであり、これがなければ、光を感じられても本を読むことができない。

ただしそのためには該当のレンズに光子が入射する必要がある。しかしレンズに入射した光がどの方向から届いているかは分からない。それを知るには、レンズの口径を小さくする必要がある。すると集められる光が弱められ、光の分解能が低下する(電子を点としてとらえられなくなり、像がぼやける)ことによって位置が不明確になる。注:ドイツの物理学者、量子力学を確立

電子の観測



電子に衝突して散乱された光子が、経路A、経路Bのいずれかを通ってきたのかは不明(ということは運動量が不明)である。それを知るためにレンズの入射角θを小さくする、即ちレンズの口径を小さくすることにする。すると、集められる光の波束が減り像がぼやける。つまりレンズの分解能が低下して、電子の位置が不明確になる。

散乱された光子の波長をλとすると、このレンズの分解能は、電子の位置の不明確の度合いを Δx とすると、
$$\Delta x \sim \lambda / \sin \theta \cdots (1)$$

この光子が電子と衝突した際、電子に与えてしまう運動量 ΔP は、
$$\Delta P \sim h \cdot \sin \theta / \lambda \cdots (2)$$

hはプランク定数
(1)と(2)より、
$$\Delta x \cdot \Delta P \sim h$$

(~は、イコール(=)ではなく、その程度と言う意味)

従って、電子の位置を正確に測定しようとするれば(大きなエネルギーの光子を当てれば)運動量が乱され、運動量を正確に測定しようとするれば、位置が不確定になる。

シュレディンガー方程式

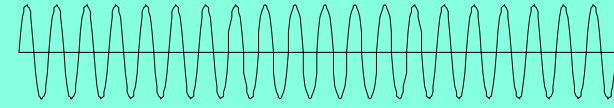
量子力学の原理に基づき、電子などの粒子を波として表す方法を考える。波を数学的に記述すると、それは時間と位置の関数(これを“波動関数”という)として表すことができる。さらにその波動関数が従う方程式は時間と位置の偏微分方程式になるものと推測できる。この方程式こそが、これまでのニュートン方程式に代わる量子力学的な法則に基づいた「シュレディンガー方程式」と呼ばれるものである。

波動関数を $\Psi = \Phi(r, t)$ と表す。即ち、位置 r と時間 t の関数である。

波動関数は、一般的に正弦波(右図参照)の重ね合わせとして、以下のように複素数の関数として表せる。

$$\Psi = A_1 \cdot \exp[i \cdot (k_1 \cdot r - \omega_1 \cdot t)] + A_2 \cdot \exp[i \cdot (k_2 \cdot r - \omega_2 \cdot t)] + A_3 \cdot \exp[i \cdot (k_3 \cdot r - \omega_3 \cdot t)] + \dots$$

※ $\exp\{\}$ は自然対数の底の指数関数、 A は振幅、 i は虚数単位、 k は波数、 ω は角振動数



正弦波とはこのような、サインカーブと呼ばれているもの

この一つの要素「 $\Psi = A \cdot \exp[i \cdot (k \cdot r - \omega \cdot t)]$ 」をとる。

ここで、 k と ω に、以下のアインシュタイン・ドブroyの関係式を当てはめる。

$$E = h \cdot \nu, \quad p = h / \lambda \quad \text{※} E \text{はエネルギー、} \nu \text{は振動数、} p \text{は運動量、} \lambda \text{は波長、} h \text{はプランク定数}$$

$$\nu = \omega / 2\pi, \quad \lambda = 2\pi / k \text{より、} \Psi = A \cdot \exp[i \cdot (r \cdot 2\pi p / h - t \cdot 2\pi E / h)] \quad \dots \textcircled{1}$$

エネルギーの関係式は、**粒子のエネルギー = 運動エネルギー + ポテンシャルエネルギー** である。運動エネルギー $K = 1/2 \cdot m \cdot v^2$ を運動量 $p = m \cdot v$ で書き直すと、

$$E = p^2 / 2m + U \quad \text{※} m \text{は粒子の質量、} U \text{はポテンシャルエネルギー} \quad \dots \textcircled{2}$$

これに、①を当てはめることを考える。運動量 p の二乗は Ψ を位置 r で2階微分すればよく、エネルギーは Ψ を時間で1階微分すればいい。従って、

$$E = -i(h/2\pi) \cdot \partial \Psi / \partial t, \quad p^2 = \{- (h/2\pi)^2\} \cdot \nabla^2 \Psi \quad \text{※} \nabla \text{はナブラ記号で、} \nabla^2 \text{は、} \partial^2 / \partial x^2 + \partial^2 / \partial y^2 + \partial^2 / \partial z^2$$

これを②に代入すると、

$$i(h/2\pi) \cdot \partial \Psi / \partial t = \{- ((h/2\pi)^2 / 2m) \cdot \nabla^2 + U\} \Psi \quad \dots \textcircled{3} \quad \text{これがシュレディンガー方程式}$$

例えば、水素原子における電子の状態を記述する場合、中心にある陽子とクローン力によって相互作用すると考えられるから、ポテンシャルエネルギー U は、

$$U = -1 / 4\pi\epsilon_0 \cdot e^2 / r \quad \text{※} \epsilon_0 \text{は真空の誘電率、} e \text{は電気素量、} r \text{は電子と陽子の距離}$$

とにおいて、③を解けばよい。因みに、③の“ $\{- (h/2\pi)^2 / 2m\} \cdot \nabla^2 + U$ ”の部分をハミルトニアンという。

ここで留意を。方程式③は、量子力学の基本原則より必然的なプロセスを経て導出されたものではないということ。方程式の形は他にいくらでも考えられるということです。重要な点は、その方程式が現実の状態を正確に記述可能であり、実際に役に立つかどうかということです。当然ですか、その方程式がいかにエレガントでも、役に立たないものは価値がないということです。研究のプロセスは、以下のような流れになると考えます。

(自然法則の基本原則の確認) → (理論の導出) → (理論の検証) → (理論体系の確立・発展) → (さらなる考察)

シュレディンガー方程式の意味

シュレディンガー方程式から導き出された波動関数 $\Psi = \Psi(r, t)$ は何を意味しているのだろうか？電子などの素粒子の存在(状態)を示しているものと思われる。即ちある時間 t 、ある空間 r における電子の存在密度を表している。密度は、波の振幅の二乗に比例するものとする。 Ψ が複素数であるならばその絶対値、つまりその共役複素数を掛け合わせたもの“ $\Psi^* \cdot \Psi$ ”に比例する。それを全空間で足し合わせたものが即ち電子そのものの存在を表す。もし一つの電子が見出されれば、それが空間内のどこかには存在するはずで、世界から消えてしまったり、あるいは二つや三つに増えてしまうことはない。ある時点で一人の人間であるA氏の存在が確認されたら、その後もA氏は世界のどこかにはいるはずである。あるいはA氏が二人や三人に増えることはない。のと同じ理屈である。(図4「エネルギー保存の法則」参照)。このことから、以下の式が成り立つ。

$$\int \Psi^* \cdot \Psi \, dV = \text{一定} \quad (\Psi^* \text{は} \Psi \text{の共役複素数})$$

右図のように、体積 V 、表面積 S のある空間の領域を考える。この中に一つの電子があったとして、電子は波としても振る舞うことから、この領域から波としての電子が出ていくと考える。エネルギー保存則より、領域内部の電子密度の時間による変化は、電子密度が領域の表面を超えて単位時間に出ていく量に等しいはず。よって、

$$d(\int \Psi^* \cdot \Psi \, dV) / dt = \int v \cdot \Psi^* \cdot \Psi \, dS \quad \dots \textcircled{3} \quad (v \text{は波動が領域から出ていく速度})$$

体積 V 、表面積 S の空間の領域から波動が流れ出る様子

$\Psi = A \cdot \exp[i(k \cdot r - \omega \cdot t)]$ と $k = p / \hbar$ 、 $p = m \cdot v$ (p は運動量、 m は電子の質量)
(\hbar はプランク定数 h を 2π で割ったもの。量子力学では h よりも、 \hbar の方がよく使われる)
よって、

$$v \cdot \Psi = (\hbar / im) \cdot \nabla \Psi \quad \dots \textcircled{4} \quad , \quad v \cdot \Psi^* = -(\hbar / im) \cdot \nabla \Psi^* \quad \dots \textcircled{5}$$

④、⑤の両辺にそれぞれ、 Ψ^* 、 Ψ をかけると、

$$v \cdot \Psi \cdot \Psi^* = (\hbar / im) \cdot \nabla \Psi \cdot \Psi^* \quad \dots \textcircled{6} \quad , \quad v \cdot \Psi^* \cdot \Psi = -(\hbar / im) \cdot \nabla \Psi^* \cdot \Psi \quad \dots \textcircled{7}$$

⑥=⑦となる。流れの密度 $J = (\hbar / 2im) \cdot (\nabla \Psi \cdot \Psi^* - \nabla \Psi^* \cdot \Psi)$ を定義すると③は、

$$d(\int \Psi^* \cdot \Psi \, dV) / dt = -\int J \, dS \quad \dots \textcircled{8} \quad (\text{波動が出ていくと密度は減るから“-”をつけた})$$

左辺にシュレディンガー方程式 [$i\hbar \cdot \partial \Psi / \partial t = -(\hbar^2 / 2m) \cdot \nabla^2 \Psi$]を代入すると、

$$\begin{aligned} d(\int \Psi^* \cdot \Psi \, dV) / dt &= \int (\partial \Psi / \partial t \cdot \Psi^* + \Psi \cdot \partial \Psi^* / \partial t) \, dV \\ &= \int \{ (-\hbar / 2im) \cdot \nabla^2 \Psi \cdot \Psi^* + (-\hbar / 2im) \cdot \nabla^2 \Psi^* \cdot \Psi \} \, dV = (-\hbar / 2im) \int (\nabla^2 \Psi \cdot \Psi^* + \nabla \Psi \cdot \nabla \Psi^* - \nabla^2 \Psi^* \cdot \Psi - \nabla \Psi^* \cdot \nabla \Psi) \, dV \\ &= (-\hbar / 2im) \int \nabla \cdot (\nabla \Psi \cdot \Psi^* - \nabla \Psi^* \cdot \Psi) \, dV = -\int \nabla \cdot J \, dV \end{aligned}$$

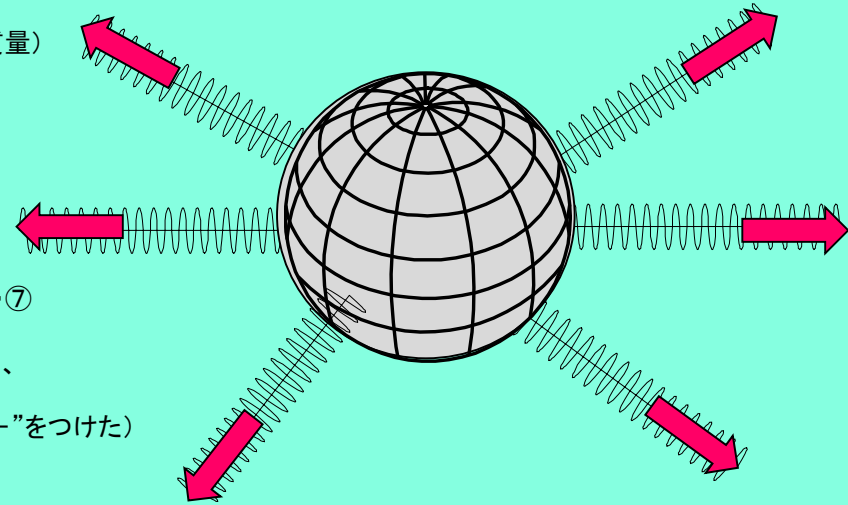
ここでガウスの公式を使うと、

$$= -\int \nabla \cdot J \, dV = -\int J \, dS$$

となり、⑧を満たすことになる。

すなわち、シュレディンガー方程式は、自然科学の最も基本的な法則を満たしている

ちなみに、 $dp / dt = -\nabla \cdot J$ (p は密度) を連続の方程式といい、流体力学や電磁気学でも使われる。



シュレディンガー方程式の拡張・関数空間

シュレディンガー方程式(波動力学)の理論を拡張してみる。シュレディンガー方程式では、エネルギーや運動量は、波動関数 Ψ にそれぞれ、 $i\hbar \cdot \partial/\partial t$ 、 $-i\hbar \nabla$ を作用させたものになっていた。この $i\hbar \cdot \partial/\partial t$ 、 $-i\hbar \nabla$ を**演算子**と呼ぼう。つまり量子力学では、物理量は演算子によって表される。これを拡張して位置や角運動量も併せて演算子で表してみると、

$$(1) \text{ エネルギー } E = i\hbar \cdot \partial/\partial t \quad (2) \text{ 運動量 } P = -i\hbar \cdot \nabla \quad (3) \text{ 位置 } r = r \quad (4) \text{ 角運動量 } J = r \times P = -i\hbar \cdot r \times \nabla$$

これらの演算子の性質について

1. 線形性

二つの波動関数が合成されたもの、即ち $\Psi+\Phi$ に演算子 A を作用させた場合、 $A(\Psi+\Phi) = A\Psi + A\Phi$ となる。この性質を有する演算子を**線形演算子**という。上記(1)~(4)はすべて線形演算子である。これは量子力学でいう波動の重ね合わせ(合成)の原理に対応する。

2. 演算子の合成

二つの演算子 A 、 B があったとき、まず A を作用させて次に B を作用させた場合と、反対に B を作用させた後に A を作用させた場合では、一般的に結果が異なる。(もちろん一致する場合もあるが) 即ち、 $B(A\Psi) \neq A(B\Psi)$

この BA と AB の差、 $BA-AB$ を交換関係といい、 $[A, B]$ で示す。 $[A, B]=0$ であるなら、 A 、 B は入れ替え可能ということになる。

3. 固有方程式 固有値 固有関数

$A\Psi_a = a\Psi_a$ を演算子 A に対する固有方程式、 a をこの方程式の固有値、 Ψ_a を固有値 a に対する固有関数といい、この方程式を解いて固有値と固有関数を求める問題を数学的には固有値問題という。(線形代数におけるベクトルに行列を作用させて固有値を求め、連立方程式を解く問題と同じ)

注意:ある固有方程式における固有値 a および固有関数 Ψ_a は一つとは限らない。複数存在するのが一般的。

4. 関数の内積

線形代数のベクトルと同じく、関数の内積を以下のように定義することができるものとする。関数 Ψ と Φ の内積($\Psi \cdot \Phi$)を

$$(\Psi \cdot \Phi) = \int \Psi^* \cdot \Phi \, dr \quad \text{なお、関数の積は入れ替えて構わないことから、} \quad (\Psi \cdot \Phi)^* = \int \Psi \cdot \Phi^* \, dr = \int \Phi^* \cdot \Psi \, dr = (\Phi \cdot \Psi)$$

もし内積($\Psi \cdot \Phi$)が、($\Psi \cdot \Phi$) = 0 ならベクトルと同様、関数 Ψ と Φ は直行する(垂直に交わる)と考える。

5. 期待値

観測された物理量(観測するたびに値が変わる)の平均値は理論から計算される。平均値(期待値) $\langle a \rangle$ は、

$$\langle a \rangle = \int \Psi^* \cdot A\Psi \, dr$$

※数理統計学での平均値とは、パラメータ i によって決まる値 a_i が様々に分布しているとして、 $\sum a_i \cdot f(i)$ と表される。 $f(i)$ は i における**確率密度**を示す。もちろん、 $\sum f(i) = 1$ である。これを連続的な積分で表したものを関数の期待値とした。

シュレディンガー方程式の拡張・関数空間

6. エルミート演算子

観測された物理量(固有値と期待値)は当然実数である。即ち、 $\langle a \rangle^* = \langle a \rangle$ 。

$$\langle a \rangle^* = \int \Psi^* \cdot A \Psi \, dr = \int A^* \Psi^* \cdot \Psi \, dr = \int (A \Psi)^* \cdot \Psi \, dr \quad \text{が} \quad \langle a \rangle \text{に等しいなら、} \int (A \Psi)^* \cdot \Psi \, dr = \int \Psi^* \cdot A \Psi \, dr$$

すなわち、 $(A \Psi \cdot \Psi)^* = (\Psi \cdot A \Psi)^* \dots \textcircled{9}$

⑨式で表される演算子をエルミート演算子という。すなわち量子力学で扱われる演算子は、すべてエルミート演算子である。ならば、固有方程式 $A \Psi_a = a \Psi_a$ と Ψ_a の内積を取ると、

$$(\Psi_a \cdot A \Psi_a)^* = \{a \cdot (\Psi_a \cdot \Psi_a)\}^* = a^* \cdot (\Psi_a \cdot \Psi_a)^* \quad \text{。} \quad (\Psi_a \cdot \Psi_a) \text{は実数であるから、} \quad (\Psi_a \cdot A \Psi_a)^* = a^* \cdot (\Psi_a \cdot \Psi_a) \dots \textcircled{10}$$

$$A \text{はエルミート演算子であるなら、} \quad (\Psi_a \cdot A \Psi_a)^* = (A \Psi_a \cdot \Psi_a) = a \cdot (\Psi_a \cdot \Psi_a) \dots \textcircled{11}$$

⑩と⑪より、 $a = a^*$ であることから、 a は実数。

7. 固有関数の直交性

固有方程式 $A \Psi_a = a \Psi_a$ の n 個の固有値($a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$)とそれに対応した n 個の固有関数($\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots, \Psi_n$)が得られたとして、

$$(\Psi_2 \cdot A \Psi_1) = a_1 \cdot (\Psi_2 \cdot \Psi_1) \dots \textcircled{12}, \quad (\Psi_1 \cdot A \Psi_2) = a_2 \cdot (\Psi_1 \cdot \Psi_2) \dots \textcircled{13} \quad A \text{はエルミート演算子で、} a_1 \text{は実数であるから、}$$

$$(\Psi_2 \cdot A \Psi_1) = (\Psi_1 \cdot A \Psi_2)^* = a_1^* \cdot (\Psi_1 \cdot \Psi_2)^* = a_1 \cdot (\Psi_2 \cdot \Psi_1) \dots \textcircled{14} \quad \textcircled{12} - \textcircled{14} \text{は、}$$

$$(a_2 - a_1) \cdot (\Psi_2 \cdot \Psi_1) = 0 \text{ となり、} a_2 \neq a_1 \text{ であるなら} \quad (\Psi_2 \cdot \Psi_1) = 0 \text{ すなわち、同じ固有方程式の異なる固有関数同士は直交する。}$$

シュレディンガーの波動力学と並んで、同じ量子力学の理論として行列力学がある。因みにこの二つの理論は数学的な表現方法が異なるだけで本質は同じである。ここでは、この行列力学の概要を簡単に述べる。(以下理解するには線形代数の知識が必要)

1. 関数とベクトルの対比

n 次元空間における任意のベクトル V は、それぞれの軸の基底ベクトルを $e_1, e_2, e_3, \dots, e_n$ とすると、

$$V = v_1 \cdot e_1 + v_2 \cdot e_2 + v_3 \cdot e_3 + \dots + v_n \cdot e_n \quad \text{※} \quad v_1, v_2, v_3, \dots, v_n \text{はベクトル} V \text{の成分}$$

なお、各基底ベクトルは互いに直行する。即ち内積 $(e_i \cdot e_j) = \delta_{ij}$ (=クロネッカーのデルタ記号: $i=j$ のとき1で、 $i \neq j$ のとき0) 同様に、直行する(つまり内積が0)かつ大きさが1の関数の組を作って、その合成(級数)により任意の関数を表せるとした場合、関数 Ψ は、

$$\Psi = a_1 \cdot \Phi_1 + a_2 \cdot \Phi_2 + a_3 \cdot \Phi_3 + \dots + a_n \cdot \Phi_n \quad \text{※} \quad a_i = (\Psi \cdot \Phi_i)$$

シュレディンガー方程式の拡張・参考：行列力学

2. 固有値 固有ベクトル

関数空間と同様に、ベクトル空間でも固有値 \mathbf{a} と固有ベクトル $V\mathbf{a}$ の関係を表すことができる。ベクトルに作用する行列を \mathbf{A} とすると、

$$\mathbf{A}V\mathbf{a} = \mathbf{a} \cdot V\mathbf{a} \quad \cdots \textcircled{15}$$

これは、関数空間での固有方程式と同じである。

⑮を、 n 次元のベクトルと $n \times n$ の正方行列の成分として展開して示すと、(\mathbf{A} の成分を a_{ij} とした)

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{23} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \cdots \\ v_n \end{pmatrix} = \mathbf{a} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \cdots \\ v_n \end{pmatrix}$$

これを解くには

$$\begin{aligned} (a_{11}-\mathbf{a}) \cdot v_1 + a_{12} \cdot v_2 + a_{13} \cdot v_3 + \cdots + a_{1n} \cdot v_n &= 0 \\ a_{21} \cdot v_1 + (a_{22}-\mathbf{a}) \cdot v_2 + a_{23} \cdot v_3 + \cdots + a_{2n} \cdot v_n &= 0 \\ a_{31} \cdot v_1 + a_{32} \cdot v_2 + (a_{33}-\mathbf{a}) \cdot v_3 + \cdots + a_{3n} \cdot v_n &= 0 \\ \cdots & \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \\ a_{n1} \cdot v_1 + a_{n2} \cdot v_2 + a_{n3} \cdot v_3 + \cdots + (a_{nn}-\mathbf{a}) \cdot v_n &= 0 \end{aligned}$$

の n 元連立方程式を

解けばよい。この方程式が ($V=0$ 以外の) 解を持つ条件は、

$$\begin{vmatrix} a_{11}-\mathbf{a} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}-\mathbf{a} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33}-\mathbf{a} & \cdots & a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn}-\mathbf{a} \end{vmatrix} = 0 \quad \cdots \textcircled{16}$$

である。 $||$ は行列式。⑯を永年方程式といい、これを解けば固有値 \mathbf{a} が求まる。

永年方程式は、 n 次方程式のため、一般に n 個の根を持つ。

3. エルミート行列

関数空間の演算子を行列に置き換えて、エルミート行列を定義できる。(エルミート行列 \mathbf{A} は、縦横入れ替えて複素共役をとったもの $=(\mathbf{A}^t)^*$ に等しい) 同様に、観測可能な物理量はエルミート行列となり、その固有値は実数となる。また固有関数に対応する複数の固有ベクトル(状態ベクトル)は互いに直交(内積が0)し、大きさを1(規格化)にすれば、基底ベクトルとなる。

4. ユニタリー行列

基底ベクトル $e_1 e_2 e_3 \cdots e_n$ に行列 $\mathbf{U}(=u_{ij})$ を作用させて座標変換を行ったとする。その結果基底ベクトルが $e_1' e_2' e_3' \cdots e_n'$ となったとする。その逆変換(の行列)を $\mathbf{T}(=t_{ij})$ とすると、

$$e_i' = \sum_j u_{ij} \cdot e_j, e_i = \sum_j t_{ij} \cdot e_j' \quad t_{ij} = (e_i \cdot e_j') = (e_j' \cdot e_i)^* = u_{ji}^* \quad \text{よって、} e_i = \sum_j u_{ji}^* \cdot e_j' \quad \text{従って、} \sum_j u_{ij} \cdot u_{jk}^* = \delta_{ik} \quad \cdots \textcircled{17}$$

ここで、 e_i, e_i' は共に基底ベクトルであるから、 $(e_i \cdot e_j) = \delta_{ij}, (e_i' \cdot e_j') = \delta_{ij}$ を利用した。⑰を行列で表すと、

$$\mathbf{U}(\mathbf{U}^t)^* = \mathbf{I} \quad \cdots \textcircled{18}$$

\mathbf{U}^t は行と列を入れ替えた転置行列であり、 \mathbf{I} は単位行列(行番号と列番号が一致した場所($i=j$)の値は1、その他($i \neq j$)は0の行列)

上記⑱を満たすということは、すなわち、 $(\mathbf{U}^t)^* = \mathbf{U}^{-1} \quad \cdots \textcircled{19}$ (\mathbf{U}^{-1} は \mathbf{U} の逆行列) ⑲を満たす行列 \mathbf{U} をユニタリー行列という。

シュレディンガー方程式の拡張・参考：行列力学

行列Aにより、ベクトルV がW になったとして($W = AV$)、座標変換によりこの式が、 $W' = A'V'$ になったとする。座標変換のユニタリー行列をUとすると

$$W' = UW = UAV = UAIV = UAU^{-1}UV = UAU^{-1}V' \quad A' = UAU^{-1}$$

すなわち、座標変換により、行列A は UAU^{-1} に変換される。
この変換をユニタリー変換という。

5. 対角化

行列A に対する固有ベクトルは互い直行することから、それらを新たな基底ベクトルとして使用することを考える。n個の固有ベクトル V_i ($i=1,2,3,\dots,n$) の成分を V_{ij} ($j=1,2,3,\dots,n$) とすると、

$$V_i = \sum_j V_{ij} \cdot e_j \quad (e_j \text{は基底ベクトル})$$

この V_i を新たな基底ベクトル ($e_1', e_2', e_3', \dots, e_n'$) として採用すると、

$$e_i' = \sum_j V_{ij} \cdot e_j$$

これはユニタリー行列による座標変換である。すなわち、変換後の行列A' は、 $A' = UAU^{-1}$ となる。ここでユニタリー行列をU とおくと、

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_{n1} & u_{n2} & u_{n3} & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} \quad A \text{の固有値を } a_i \quad (i=1,2,3,\dots,n) \quad A' = U \begin{pmatrix} a_1 \cdot u_{11}^* & a_2 \cdot u_{21}^* & a_3 \cdot u_{31}^* & \cdots & a_n \cdot u_{n1}^* \\ a_1 \cdot u_{12}^* & a_2 \cdot u_{22}^* & a_3 \cdot u_{32}^* & \cdots & a_n \cdot u_{n2}^* \\ a_1 \cdot u_{13}^* & a_2 \cdot u_{23}^* & a_3 \cdot u_{33}^* & \cdots & a_n \cdot u_{n3}^* \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_1 \cdot u_{1n}^* & a_2 \cdot u_{2n}^* & a_n \cdot u_{3n}^* & \cdots & a_n \cdot u_{nn}^* \end{pmatrix}$$

固有値aは実数により
 $a_i = a_i^*$

$$\text{ここで、} A' \text{ の } i \text{行} j \text{列の成分は、} (u_{i1} \ u_{i2} \ u_{i3} \ \cdots \ u_{in}) \begin{pmatrix} a_1 \cdot u_{j1} \\ a_2 \cdot u_{j2} \\ a_3 \cdot u_{j3} \\ \vdots \\ a_n \cdot u_{jn} \end{pmatrix} = (u_i \cdot u_j) = \delta_{ij}$$

より、 $A' = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & a_3 & \cdots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_n \end{pmatrix}$ となり、対角行列の対角線上 (i行i列) のみに値を持ち、他は0。

A' の対角線上にはn個の固有値が入る。このような行列を対角行列という。すなわち上記操作(ユニタリー変換)によって、固有値が求められる。

上記、n成分のベクトルとn×nの行列を用いた演算を拡張して、「n → ∞」にして、無限次元のベクトル空間として表すこともできる。同様に、(無限次元の)関数空間としても表すことができる。すなわち、直交する(内積が0)関数の組を用いて、その一次結合により任意の関数を表すことができる。そのように任意の関数を、級数を使って展開できる例としては有名なフーリエ級数がある。一般に任意の関数を展開したとき、フーリエ級数のように無限級数となる。ただし、必ずしも展開可能とは言えない(級数が発散してしまう)ので注意。

■フーリエ級数

区間 $[-\pi, \pi]$ で定義される任意の関数 $f(x)$ について、 $f(x) = a_0/2 + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cdot \cos(nx) + b_n \cdot \sin(nx)] \cdots \textcircled{20}$

ただし、 $a_n = 1/\pi \cdot \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \cos(nx) dx$ 、 $b_n = 1/\pi \cdot \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \sin(nx) dx$ $n=0,1,2,3,\dots$

これらは皆抽象的なヒルベルト空間である。ヒルベルト空間は、n次元空間の次元nを無限大にしたもの。(ただし、空間内の2点の距離は収束すること) 関数空間もヒルベルト空間の一つの例である。

量子力学の理論・一般化角運動量の数学的考察

量子力学の理論の一つの例として、角運動量の一般化されたものについて考察する。角運動量 $\mathbf{J} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ を成分で書くと、

$$J_x = y \cdot p_z - z \cdot p_y, \quad J_y = z \cdot p_x - x \cdot p_z, \quad J_z = x \cdot p_y - y \cdot p_x$$

なお、 J_x, J_y, J_z 同士の交換関係は、 $[J_x, J_y] = (y \cdot p_z - z \cdot p_y)(z \cdot p_x - x \cdot p_z) - (z \cdot p_x - x \cdot p_z)(y \cdot p_z - z \cdot p_y) = (y \cdot p_z \cdot z \cdot p_x - z \cdot z \cdot p_y \cdot p_x - y \cdot x \cdot p_z \cdot p_z + z \cdot x \cdot p_y \cdot p_z) - (z \cdot y \cdot p_x \cdot p_z - x \cdot y \cdot p_z \cdot p_z - z \cdot z \cdot p_x \cdot p_y + x \cdot p_z \cdot z \cdot p_y) = y \cdot p_z \cdot z \cdot p_x + x \cdot p_y \cdot z \cdot p_z - y \cdot p_x \cdot z \cdot p_z - x \cdot p_z \cdot z \cdot p_y = y \cdot p_x \cdot p_z \cdot z - x \cdot p_y \cdot p_z \cdot z - y \cdot p_x \cdot z \cdot p_z + x \cdot p_y \cdot z \cdot p_z = (y \cdot p_x - x \cdot p_y) \cdot (p_z \cdot z) - (y \cdot p_x - x \cdot p_y) \cdot (z \cdot p_z) = -J_z \cdot [p_z, z] = i\hbar \cdot J_z$ ※ $[p_z, z] = (-i\hbar \cdot \partial / \partial z) \cdot z - z \cdot (-i\hbar \cdot \partial / \partial z) = -i\hbar$ 同様にして、以下のように求まる。

$$[J_x, J_y] = i\hbar \cdot J_z, \quad [J_y, J_z] = i\hbar \cdot J_x, \quad [J_z, J_x] = i\hbar \cdot J_y, \quad [J_y, J_x] = -i\hbar \cdot J_z, \quad [J_z, J_y] = -i\hbar \cdot J_x, \quad [J_x, J_z] = -i\hbar \cdot J_y \quad \dots \textcircled{1}$$

ここで昇降演算子、 $J_+ = J_x + iJ_y, J_- = J_x - iJ_y$ を定義する。また、角運動量の大きさ(ノルム)に対応するノルム演算子を $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ とする。

$$\textcircled{1} \text{を用いて、} [J_+, J_z] = J_+ J_z - J_z J_+ = -\hbar \cdot J_+, \quad [J_-, J_z] = J_- J_z - J_z J_- = \hbar \cdot J_-, \quad [J_+, J_-] = J_+ J_- - J_- J_+ = 2\hbar \cdot J_z \quad \dots \textcircled{2}$$

$$\text{また、} J^2 = (J_+ \cdot J_- + J_- \cdot J_+) / 2 + J_z^2 = J_- \cdot J_+ + \hbar \cdot J_z + J_z^2 = J_+ \cdot J_- - \hbar \cdot J_z + J_z^2 \quad \dots \textcircled{3}$$

今、ある二つの変数 l, m に対応した固有関数 Ψ_{lm} のベクトル表示を $|\Psi_{lm}\rangle$ と記す。(このようなベクトル表記を“ケット”という)

$$J^2 \text{ と } J_z \text{ の固有方程式を、} J^2 |\Psi_{lm}\rangle = l(l+1)\hbar^2 |\Psi_{lm}\rangle, \quad J_z |\Psi_{lm}\rangle = m\hbar |\Psi_{lm}\rangle \text{ とおく。} (l(l+1)\hbar^2, m\hbar \text{ は } J^2, J_z \text{ の固有値である(※))$$

$$J^2 \text{ のノルムを } \langle \Psi_{lm} | J^2 | \Psi_{lm} \rangle \text{ と表すと(ベクトル表記 } \langle \Psi_{lm} | \text{ を“ブラ”という)、} \langle \Psi_{lm} | J^2 | \Psi_{lm} \rangle = l(l+1)\hbar^2 \langle \Psi_{lm} | \Psi_{lm} \rangle \geq 0 \text{ より } l \geq 0$$

$$J_z \cdot J_+ |\Psi_{lm}\rangle = (J_+ \cdot J_z + \hbar J_+) |\Psi_{lm}\rangle = (m+1)\hbar J_+ |\Psi_{lm}\rangle \quad \dots \textcircled{4}$$

$$J_z \cdot J_- |\Psi_{lm}\rangle = (J_- \cdot J_z - \hbar J_-) |\Psi_{lm}\rangle = (m-1)\hbar J_- |\Psi_{lm}\rangle \quad \dots \textcircled{5}$$

④と⑤より、 J_+, J_- はそれぞれ J_z の固有値を \hbar だけ増加または減少させる演算子であることが分かる。また、 J_x, J_y は、エルミート演算子であることより、

$$((J_+)^*)^t = ((J_x + iJ_y)^*)^t = ((J_x)^*)^t - i((J_y)^*)^t = J_x - iJ_y = J_-$$

同様に、 $((J_-)^*)^t = J_x + iJ_y = J_+$ よって、 J_+ のノルムは③を用いて、

$$\langle \Psi_{lm} | J_- \cdot J_+ | \Psi_{lm} \rangle = \langle \Psi_{lm} | J^2 - \hbar \cdot J_z - J_z^2 | \Psi_{lm} \rangle = l(l+1)\hbar^2 \langle \Psi_{lm} | \Psi_{lm} \rangle - m\hbar^2 \langle \Psi_{lm} | \Psi_{lm} \rangle - m^2 \hbar^2 \langle \Psi_{lm} | \Psi_{lm} \rangle = (l-m)(l+m+1)\hbar^2 \langle \Psi_{lm} | \Psi_{lm} \rangle \quad \dots \textcircled{6}$$

同様に、 J_- のノルムとして、

$$\langle \Psi_{lm} | J_+ \cdot J_- | \Psi_{lm} \rangle = \langle \Psi_{lm} | J^2 + \hbar \cdot J_z - J_z^2 | \Psi_{lm} \rangle = (l+m)(l-m+1)\hbar^2 \langle \Psi_{lm} | \Psi_{lm} \rangle \quad \dots \textcircled{7} \text{ を得る。}$$

※なぜ、固有値として、 $l(l+1)\hbar^2, m\hbar$ などを設定しているのか？
 角運動量とはある支点を中心とした回転運動の強さを表現したもので、回転運動を記述する際、方程式は直交座標より極座標に変換した方が扱いやすい。回転運動を表す方程式を極座標にしものが、数学でいうところの以下⑥のルジャンドル方程式となり、その解が有名なルジャンドルの多項式となる。

$$d/dw(1-w) \cdot dF/dw + l(l+1) \cdot F = 0 \quad \dots \textcircled{6}$$

解が発散しないためには、多項式はどこかで0となり無限級数にならないことが求められる。その条件として、 $l=0, 1, 2, 3, \dots$ すなわち $l \geq 0$

量子力学の理論・一般化角運動量の数学的考察

$l \geq 0$ であるとして、⑥と⑦がともに ≥ 0 であるためには、 $l \geq m$ かつ $-l \leq m$ すなわち、 m の範囲は、 $-l \leq m \leq l$

$l \geq 0$ であるから、 m の最大値 m_{\max} は l である。ベクトルで表記すると、 $|\Psi_{lm_{\max}}\rangle = |\Psi_{ll}\rangle$ 。これに演算子 J_- を作用させると、

$J_- |\Psi_{ll}\rangle = a_1 |\Psi_{l, l-1}\rangle$ さらに、 J_- を作用させると、 $J_-^2 |\Psi_{ll}\rangle = a_2 |\Psi_{l, l-2}\rangle$ 続けて、 $J_-^3 |\Psi_{ll}\rangle = a_3 |\Psi_{l, l-3}\rangle$ (a_1, a_2, a_3, \dots は比例定数)

この操作 (J_-) 続けていくと、どこかで (n 回の操作で) m の最小値 m_{\min} は、 $-l$ に達するはずである。すなわち、

$J_-^n |\Psi_{ll}\rangle = a_n |\Psi_{l, l-n}\rangle = a_n |\Psi_{l, -l}\rangle$ よって、 $l-n = -l$ 、すなわち、 $2l=n$ 、 n は整数であるから、 l の値は、 $l=0, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3, 7/2, \dots$

つまり、 l は、0 および 正の整数、正の半整数となる。その際、 m は一つの l に対して、 $m=-l, -l+1, -l+2, -l+3, \dots, 0, \dots, l-3, l-2, l-1, l$ と $2l+1$ 個の値をとる。

すなわち、 J_z が取りえる角運動量 (の固有値) は、 $0, \hbar/2, \hbar, 3\hbar/2, 2\hbar, 5\hbar/2, 3\hbar, 7\hbar/2, \dots$ ・・・⑧ に限定される。

1

つまり、我々が観測したときの角運動量とはびとびの値しか得られず、たとえば、 $\hbar/3$ という観測値は得られない。通常観測値は連続的で、どんな値も許されると思うが、これが古典論 (量子力学以前の物理学) と量子論との大きな違いである。このように観測可能な値が連続的ではない。すなわち離散的なものしか許されない (これを量子化という) のが、量子力学の大きな特徴である。

さらに、それらのことが、我々の日常の感覚ではなく、**数学の規則** から導かれるのも、量子力学の特徴である。そういう意味で、数学はこの宇宙に貫ぬく、普遍的な**科学言語** と言える？

角運動量の一つの例に、電子の自転がある。つまり電子は磁気を帯びている。この電子の角運動量を測定すると、 $\hbar/2$ または $-\hbar/2$ の二つの値しか観測されない。つまり、観測値は量子化されているということ。(その理由は相対性理論に基づく。正確には、相対性理論を考慮したディラック方程式を解くことにより得られる。その話は後程)

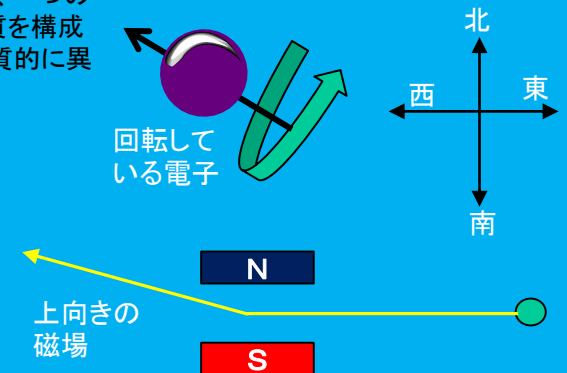
素粒子は一般的にある回転軸の周りを自転している。これをスピンという。ちなみに、スピンが整数の素粒子をボーズ粒子、半整数のものをフェルミ粒子と呼ぶ。ボーズ粒子としては、主に力を媒介するゲージ粒子 (その中には、電磁力を司る光子などがある) があり、一つの状態を複数の粒子が共有できる。それに対して、フェルミ粒子は、電子や陽子、あるいは中性子のように物質を構成している粒子が主で、一つの状態を複数の粒子が共有することができない。ボーズ粒子とフェルミ粒子は本質的に異なっている。

ここで問題は、ある一つの電子を取りだした際、その電子の自転軸は、**地球に対して**、どの方向を向いているのか？

答え: 観測する以前に、何人もそれを知ることはできない。

観測して初めてそれは分かる。観測するということは、電子に何らかの作用を与えることである。例えば磁場の中を通す。観測対象 (単独の電子) に何らかの作用を与えると、それに相応した反跳 (アウトプット) を得る。その対象からの反作用は、理論的に限定されたもの (量子化されたもの) しか検知されない。(検知された観測値は、計算された確率値に基づく)

これが量子力学での観測という事象である。すなわち、そこで初めて回転軸が設定されて、回転方向が決まる。それ以前には電子は回転運動をしていないものとみなす。観測行為が終了した時点で、電子は回転運動を止める。



ディラック方程式

以上、シュレディンガー方程式を拡張した理論の内容を見てきた。ただし、シュレディンガー方程式は万能ではない。シュレディンガー方程式は、相対性理論の要請に従っていない。すなわち、電子が高速(光の速度に近いスピード)で運動している時は成り立たないのである。そこで別の方程式を導出してみよう。

相対性理論のところの図9「**相対性理論から言えること(その3)**」にある式⑩を積分して、速度 v で運動している電子が持つエネルギー E と運動量 p の関係を導くと、以下となる。

$$E^2 = m^2 \cdot c^4 + p^2 \cdot c^2 \quad \dots \textcircled{9} \quad (m \text{ は電子が静止している時の質量})$$

シュレディンガー方程式を導出したときと同じように、波動関数 $\Psi = A \cdot \exp[i(k \cdot r - \omega \cdot t)]$ から考察すると、エネルギー E の2乗は時間による2階の偏微分、運動量 P の2乗は位置による2階の偏微分で得られることが分かる。⑨の右に Ψ をかけると、

$$E^2 \Psi = m^2 \cdot c^4 \Psi + p^2 \cdot c^2 \Psi \quad \text{右辺に移行して並び替えると、} \quad p^2 \cdot c^2 \Psi - E^2 \Psi + m^2 \cdot c^4 \Psi = 0 \quad \dots \textcircled{10}$$

アインシュタイン・ドブロイの関係式、 $E = \omega \cdot \hbar$ 、 $p = k \cdot \hbar$ より、⑩は、

$$k^2 \cdot \hbar^2 \cdot c^2 \Psi - \omega^2 \cdot \hbar^2 \Psi + m^2 \cdot c^4 \Psi = -\hbar^2 \cdot c^2 \cdot \nabla^2 \Psi + \hbar^2 \cdot \partial^2 \Psi / \partial t^2 + m^2 \cdot c^4 \cdot \Psi = 0 \quad \text{両辺を } -(\hbar \cdot c)^2 \text{ で割ると、}$$

$$\nabla^2 \Psi - (1/c)^2 \cdot \partial^2 \Psi / \partial t^2 - (m \cdot c / \hbar)^2 \cdot \Psi = 0 \quad \dots \textcircled{11} \quad \text{これをクライン-ゴールドン方程式という。}$$

ここで、 $m=0$ とおくと、⑪は、 $\nabla^2 \Psi - (1/c)^2 \cdot \partial^2 \Psi / \partial t^2 = 0$ となり、電磁波の波動方程式となる。つまり静止質量ゼロの光子の波動方程式である。これは**マクスウェル方程式**から導き出すことができる。即ちマクスウェルの電磁気学は相対性理論を満たしていたことになる。

ただし、式⑪は、時間 t についての2階の微分になっていることから、シュレディンガー方程式のように、連続の方程式を満たせることが難しい。そこでイギリスの物理学者ディラック(1902~1984)が式の変形を試みた。係数 a 、 b を用いて、時間 t に関する1階の偏微分方程式になるよう以下のように式を書き換える。(式を簡易にするため、空間を x 方向だけにして、 ∇^2 を $\partial^2 / \partial x^2$ とする)

$$(1/c) \cdot \partial \Psi / \partial t + a \cdot \partial \Psi / \partial x + (m \cdot c / \hbar) \cdot b \Psi = 0 \quad \dots \textcircled{12} \quad (\text{相対性理論として、時間と空間は同じ性質を持つため、対称性を持たせる上で、} x \text{も1階微分とした。またそれぞれの係数}(1/c, m \cdot c / \hbar) \text{も2乗} \rightarrow 1 \text{乗にした。})$$

当然⑫は上記クライン-ゴールドン方程式を満たさなければならない。⑫の左から、演算子、 $(1/c) \cdot \partial / \partial t + a \cdot \partial / \partial x + (m \cdot c / \hbar) \cdot b$ を作用させると、

$$(1/c)^2 \cdot \partial^2 \Psi / \partial t^2 + (a/c) \cdot \partial^2 \Psi / \partial x \cdot \partial t + (m/\hbar) \cdot b \cdot \partial \Psi / \partial t - (a/c) \cdot \partial^2 \Psi / \partial t \cdot \partial x - a^2 \cdot \partial^2 \Psi / \partial x^2 - (m \cdot c / \hbar) \cdot a \cdot b \cdot \partial \Psi / \partial x - (m/\hbar) \cdot b \cdot \partial \Psi / \partial t - (m \cdot c / \hbar) \cdot a \cdot b \cdot \partial \Psi / \partial x - (m \cdot c / \hbar)^2 \cdot b^2 \cdot \Psi = 0$$

ここで2項と4項で消去、3項と7項で消去されるから、

$$(1/c)^2 \cdot \partial^2 \Psi / \partial t^2 - a^2 \cdot \partial^2 \Psi / \partial x^2 - 2(m \cdot c / \hbar) \cdot a \cdot b \cdot \partial \Psi / \partial x - (m \cdot c / \hbar)^2 \cdot b^2 \cdot \Psi = 0 \quad \dots \textcircled{13}$$

これが⑪と一致するためには、 $b=1$ 、 $a \cdot b=0$ 、よって $a=0$ 、ならば、 $\partial^2 \Psi / \partial x^2$ の項が消えてしまい、クライン-ゴールドン方程式が成り立たない。

ディラック方程式

そこで、波動関数“ ψ ”が複数の成分からなるものとする。
 Ψ はN個の成分を持つ。即ち、

$$\Psi = [\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots, \Psi_N]$$

また、 a, b は係数ではなく、 $N \times N$ の正方行列 A および B とすると、⑩は、

$$(1/c) \cdot \partial^2 \Psi / \partial t^2 - (A \times A) \cdot \partial^2 \Psi / \partial x^2 - (A \times B + B \times A) \cdot (m \cdot c / \hbar) \cdot \partial \Psi / \partial x + (B \times B) \cdot (m \cdot c / \hbar)^2 \Psi = 0$$

ここで、クライン-ゴールドン方程式⑩に一致させるためには、 $B \times B = I, A \times B + B \times A = 0, A \times A = I$ が成り立つことが条件となる。 $(I$ は単位行列、 0 はゼロ行列)
その際、⑫式において、虚数単位 i を移行して、空間 x 座標を3次元 (X, Y, Z) に拡張した以下の式、

$$(1/c) \cdot \partial \Psi / \partial t + A_k \cdot \nabla \Psi + (im \cdot c / \hbar) \cdot B \Psi = 0 \quad (A_k \times A_i + A_i \times A_k = 2\delta_{ki}, A_k \times B + B \times A_k = 0, B \times B = I, k, i = 1, 2, 3)$$

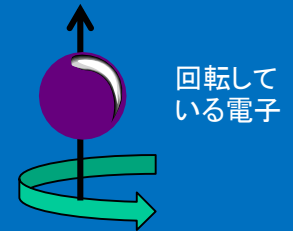
をディラック方程式という。

参考図書:「量子力学 I、II」高田健次郎著(1983 朝倉書店)

このディラック方程式、つまり量子力学に相対性理論の要件を満たした理論によって、以下のことが導かれた。

1. 電子などの素粒子は自転しており、固有の角運動量を持つ
つまり電子は磁気を持つ。その角運動量に対応した状態数をスピンという。スピン S は、角運動量 L に対して

$$L = S \cdot \hbar \text{ となる。その際電子のスピン } S \text{ は、 } 1/2 \text{ となる。 (逆回りの回転では、 } -1/2 \text{ となる)}$$



2. 反粒子の予言

電子などの素粒子には、反対の性質を持つ反粒子が存在する。
(電子がマイナスの電気を持つなら、反粒子はプラスの電気を持つ。電子の反粒子を陽電子という)



粒子と反粒子が出会うとエネルギーとなって消滅してしまう。反粒子には、その他にも、陽子の反粒子、反陽子、中性子の反粒子、反中性子などがある。陽子、中性子、そして電子からなる原子には、反陽子、反中性子、陽電子からなる反原子が存在する可能性がある。もし、人間であるA氏とその反原子からできている反A氏が宇宙のどこかで出会ったら、二人とも光エネルギーとなって消滅する。

