

数学的量子力学への橋渡し

足立 匡義

タイトル通りにしっかり話すとなると、かなりの予備知識が必要となります。しかし、そのことを前提としたお話をするつもりはありません。高校までで学ぶ内容から完全に乖離したのではなく、それを基礎として研究が進んでいるのだということ、少しでも理解して頂ければ幸いと考えています。よって、タイトルからイメージされるところまで話が進まないかも知れませんが、そのときはご容赦下さい。

はじめに、この話の中で大きな役割を果たす複素数と指数関数について見ていくことにします。(「です・ます」調はここで終わります)

複素数

複素数とは、 $i^2 = -1$ となる虚数単位 i を用いて、

$$a + bi \quad (a, b \in \mathbf{R})$$

という形で表される数である。但し、 \mathbf{R} は実数全体を表している。

複素数の相等・和・積

$a, b, c, d \in \mathbf{R}$ とする。

$$a + bi = c + di \iff a = c \text{ かつ } b = d$$

$$(a + bi) + (c + di) = (a + c) + (b + d)i$$

$$(a + bi)(c + di) = (ac - bd) + (ad + bc)i$$

複素数 $\alpha = a + bi$ ($a, b \in \mathbf{R}$) に対して、 a を α の実部といい $\operatorname{Re} \alpha$ で表し、 b を α の虚部といい $\operatorname{Im} \alpha$ で表す。 $\operatorname{Im} \alpha = 0$ ならば α は実数である。 $\operatorname{Im} \alpha \neq 0$ のとき、 α は虚数であるという。特に、 $\operatorname{Re} \alpha = 0$ かつ $\operatorname{Im} \alpha \neq 0$ のとき、 α は純虚数であるという。また、 $\bar{\alpha} = a - bi$ で定義される複素数 $\bar{\alpha}$ のことを α の共役複素数という。

以後、複素数全体を C で表すことにする。

複素数が導入されると、実数を係数とする 2 次方程式 $ax^2 + bx + c = 0$ は、解の範囲を複素数に拡張しておくことで常に解をもつ。

解の公式

2 次方程式 $ax^2 + bx + c = 0$ の解：

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

根号内の $b^2 - 4ac$ (判別式) が負であっても困らない。実際、 $b^2 - 4ac < 0$ ならば、 $\sqrt{b^2 - 4ac}$ は $\sqrt{-(b^2 - 4ac)} i$ と表せる。また、この場合、

$$\frac{-b + \sqrt{-(b^2 - 4ac)} i}{2a}$$

とその共役複素数が $ax^2 + bx + c = 0$ の解となっていることがわかる。

疑問： $i^2 = -1$ となる実数でない数 i を勝手に考えても良いのだろうか？

複素数の存在を保証しておく必要があるということである。複素数を実体のあるものと対応させることによって、その存在を保証することにする。

複素数平面

複素数 $a + bi$ ($a, b \in \mathbf{R}$) と xy 平面の点 (a, b) とを対応させることにより、 \mathbf{C} と xy 平面 $\mathbf{R} \times \mathbf{R} = \mathbf{R}^2$ (複素数平面) を同一視することができる。 x 軸を実軸といい、 y 軸を虚軸という。

$$0 \leftrightarrow (0, 0), \quad 1 \leftrightarrow (1, 0), \quad i \leftrightarrow (0, 1)$$

複素数平面での相等・和・積

$a, b, c, d \in \mathbf{R}$ とする。

$$(a, b) = (c, d) \iff a = c \text{ かつ } b = d$$

$$(a, b) + (c, d) = (a + c, b + d)$$

$$(a, b)(c, d) = (ac - bd, ad + bc)$$

複素数の和

$$(a + bi) + (c + di) = (a + c) + (b + d)i$$

を複素数平面で考えるときには、 (a, b) , (c, d) を原点に関する位置ベクトル $\vec{\alpha} = (a, b)$, $\vec{\beta} = (c, d)$ と見なして、ベクトルの和

$$\vec{\alpha} + \vec{\beta} = (a + c, b + d)$$

を考えていることになっている。

複素数の積

$$(a + bi)(c + di) = (ac - bd) + (ad + bc)i$$

を複素数平面で考えるときには、複素数の極形式表示を導入すると考えやすい。

複素数の極形式

複素数 $\alpha = a + bi$ ($a, b \in \mathbf{R}$) に対して $\sqrt{a^2 + b^2}$ を α の絶対値といい $|\alpha|$ で表す。

複素数の絶対値の性質

$\alpha \in \mathbf{C}$ とする。

$$|\alpha| = 0 \iff \alpha = 0$$

$$|\alpha| = |-\alpha| = |\bar{\alpha}|, \quad \alpha\bar{\alpha} = |\alpha|^2$$

0 でない複素数 $\alpha = a + bi$ ($a, b \in \mathbf{R}$) に対して

$$\alpha = r(\cos \theta + i \sin \theta)$$

という形の表示を α の極形式表示という。但し、

$$r = |\alpha| = \sqrt{a^2 + b^2}, \quad \cos \theta = \frac{a}{r}, \quad \sin \theta = \frac{b}{r}$$

である。 θ を α の偏角といい $\arg \alpha$ で表す。

複素数平面で考えると、 α の偏角 θ は原点と点 (a, b) とを結ぶ線分と、実軸の正の部分とのなす角である。

0でない2つの複素数 α_1, α_2 の極形式表示を

$$\alpha_1 = r_1(\cos \theta_1 + i \sin \theta_1),$$

$$\alpha_2 = r_2(\cos \theta_2 + i \sin \theta_2)$$

とする。このとき、積 $\alpha_1\alpha_2$ は

$$r_1 r_2 \{(\cos \theta_1 \cos \theta_2 - \sin \theta_1 \sin \theta_2) + i(\sin \theta_1 \cos \theta_2 + \cos \theta_1 \sin \theta_2)\}$$

に等しい。

三角関数の加法定理

$$\sin(\theta_1 + \theta_2) = \sin \theta_1 \cos \theta_2 + \cos \theta_1 \sin \theta_2$$

$$\cos(\theta_1 + \theta_2) = \cos \theta_1 \cos \theta_2 - \sin \theta_1 \sin \theta_2$$

これより

$$\alpha_1 \alpha_2 = r_1 r_2 \{\cos(\theta_1 + \theta_2) + i \sin(\theta_1 + \theta_2)\}$$

を得る。

今得られた結果を複素数平面で考えてみる。 $\alpha_1\alpha_2$ に対応する原点に関する位置ベクトル

$$(r_1r_2 \cos(\theta_1 + \theta_2), r_1r_2 \sin(\theta_1 + \theta_2))$$

は、 α_2 に対応する原点に関する位置ベクトル

$$(r_2 \cos \theta_2, r_2 \sin \theta_2)$$

を $|\alpha_1| (= r_1)$ 倍して、原点の周りに角 $\arg \alpha_1 (= \theta_1)$ だけ回転させたものであることがわかる。従って、複素数 α を掛けるという操作は、複素数平面では**原点に関する位置ベクトルを $|\alpha|$ 倍して、原点の周りに角 $\arg \alpha$ だけ回転させる操作**のことである。

これまで扱っていない差と商は次のようにして和と積に帰着させる: $a, b, c, d \in \mathbf{R}$ とする。

$$(a + bi) - (c + di) = (a + bi) + \{-(c + di)\}$$
$$\frac{a + bi}{c + di} = (a + bi)(c + di)^{-1} \quad (c^2 + d^2 \neq 0)$$

但し、 $(c + di)^{-1}$ は $c + di$ の逆数で、

$$(c + di)^{-1} = \frac{c - di}{c^2 + d^2} = \frac{\overline{c + di}}{|c + di|^2}$$

で与えられる。

行列との対応

複素数 $a + bi$ ($a, b \in \mathbf{R}$) と行列 $aE + bJ$ とを対応させることにより、 \mathbf{C} と \mathbf{C} を同一視することができる。但し、

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\mathbf{C} = \left\{ aE + bJ = \begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix} \mid a, b \in \mathbf{R} \right\}$$

である。行列の積は

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1a_2 + b_1c_2 & a_1b_2 + b_1d_2 \\ c_1a_2 + d_1c_2 & c_1b_2 + d_1d_2 \end{pmatrix}$$

で定義されているので、

$$E^2 = E, \quad EJ = JE = J, \quad J^2 = -E$$

が成立していることがわかる。この関係式が

$$1 \leftrightarrow E, \quad i \leftrightarrow J$$

という対応を考える動機となっている。

複素数の和・差・積は、この対応によって \mathcal{C} に属する行列の和・差・積に帰着される。実は、商についても対応していることがわかる： $a, b, c, d \in \mathbf{R}$ で、 $c^2 + d^2 \neq 0$ を満たしているとする。

$$(a + bi)(c + di)^{-1} \leftrightarrow (aE + bJ)(cE + dJ)^{-1}$$

但し、 $(cE + dJ)^{-1}$ は $cE + dJ$ の逆行列で、

$$(cE + dJ)^{-1} = \frac{1}{c^2 + d^2}(cE - dJ)$$

で与えられる。これは $(c + di)^{-1}$ に対応している。

逆行列

$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ の行列式 $\det A = ad - bc$ が 0 でないとき、 A の逆行列 A^{-1} は

$$A^{-1} = \frac{1}{\det A} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$$

で与えられ、 $AA^{-1} = A^{-1}A = E$ を満たす。

行列の積の順序は一般に交換可能ではないが、 \mathcal{C} に属する行列については積の交換法則

$$(aE + bJ)(cE + dJ) = (cE + dJ)(aE + bJ)$$

が成立していることにも注意しておこう。実際、両辺ともに

$$(ac - bd)E + (ad + bc)J$$

に等しい。

指数関数

指数関数 e^x を

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} x^k = 1 + \frac{1}{1!}x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \dots$$

で定義する。

指数関数の基本的性質

$$(e^x)' = e^x, \quad e^0 = 1,$$
$$e^x e^y = e^{x+y} \quad (\text{指数法則})$$

自然対数の底

$e = e^1$ を自然対数の底という。

$$e = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{1}{n}\right)^{-n} = \lim_{t \rightarrow 0} (1 + t)^{1/t}$$

自然対数の底を導入する動機みたいなもの

関数 $f(x)$ で、 $f(0) = 1$ を満たし、その導関数 $f'(x)$ が $f(x)$ そのものになっているものを探すことにする。つまり微分方程式の初期値問題

$$\begin{cases} f'(x) = f(x) \\ f(0) = 1 \end{cases}$$

を解くことを考える。解法の1つに差分近似を用いるものがある。簡単のために $x > 0$ としておく。自然数 n に対して

$$h_n = \frac{x}{n}$$

とおき、前進差分による差分方程式

$$\begin{cases} \frac{f_n((j+1)h_n) - f_n(jh_n)}{h_n} = f_n(jh_n) & (j = 0, 1, \dots, n-1) \\ f_n(0) = 1 \end{cases}$$

を満たすように f_n を求める。

$$f_n((j+1)h_n) = (1 + h_n)f_n(jh_n) \quad (j = 0, 1, \dots, n-1)$$

より

$$f_n(x) = f_n(nh_n) = (1 + h_n)^n f_n(0) = (1 + h_n)^n$$

が得られる。従って、 $f(x)$ は $f_n(x)$ の $n \rightarrow \infty$ のときの極限

$$f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n}\right)^n$$

として得られる。 $x < 0$ のときも同様である。二項定理を用いると

$$\left(1 + \frac{x}{n}\right)^n = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!n^k} x^k = 1 + \frac{1}{1!}x + \sum_{k=2}^n \frac{n!}{(n-k)!n^k k!} x^k$$

のように、2以上の自然数 n に対して表される。2以上の自然数 k に対して

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n!}{(n-k)!n^k} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \cdots \left(1 - \frac{k-1}{n}\right) = 1$$

となることから、

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} x^k$$

という表現式が得られる。この表現式から

$$\begin{aligned} f(x)f(y) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} y^m = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \sum_{n=0}^l \frac{l!}{n!(l-n)!} x^n y^{l-n} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} (x+y)^l = f(x+y) \end{aligned}$$

という指数法則が得られる。あるいは、 y を固定して $F(x) = f(x+y)$ という x の関数を考えると、微分方程式の初期値問題

$$\begin{cases} F'(x) = F(x) \\ F(0) = f(y) \end{cases}$$

の解は一意的に $F(x) = f(x)f(y)$ で与えられるので、これからも指数法則が得られる。このような $f(x)$ をオイラーに従って e^x と表し、(e を底とする) 指数関数という。また、前進差分の代わりに後退差分を用いて、差分方程式

$$\begin{cases} \frac{g_n((j+1)h_n) - g_n(jh_n)}{h_n} = g_n((j+1)h_n) & (j = 0, 1, \dots, n-1) \\ g_n(0) = 1 \end{cases}$$

を満たすように g_n を求めてみる。

$$g_n(jh_n) = (1 - h_n)g_n((j + 1)h_n) \quad (j = 0, 1, \dots, n = 1)$$

より、 x より大きな自然数 n に対して

$$g_n(x) = g_n(nh_n) = (1 - h_n)^{-n}g_n(0) = (1 - h_n)^{-n}$$

が得られる。従って、 $f(x)$ は $g_n(x)$ の $n \rightarrow \infty$ のときの極限

$$f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{x}{n}\right)^{-n}$$

としても得られる。

e^x の存在の保証の下に、自然対数 $\log_e x$ の存在が保証され、それを基に一般の底の指数関数・対数関数が定義される。

$$a^x = e^{x \log_e a}, \quad \log_a x = \frac{\log_e x}{\log_e a}, \quad a > 0, a \neq 1.$$

疑問： e^x は数列の極限として与えられていたが、その極限値の存在はどのようにして保証されるのだろうか？

指数関数の存在の保証

例えば $x = 1$ として、

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} = \lim_{n \rightarrow \infty} T_n, \quad T_n = \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!}$$

がある実数（それを e と書いている）として定まることを見ていこう。明らかに

$$T_n = \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!} < \sum_{k=0}^{n+1} \frac{1}{k!} = T_{n+1}$$

が成立するので、実数列 $\{T_n\}$ は単調増加である。また、

$$T_n = \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!} \leq 1 + \sum_{k=1}^n \frac{1}{2^{k-1}}$$

となるので、右辺を $1 + S_n$ とおき、 $\frac{1}{2}$ を r で表せば、

$$S_n - rS_n = \sum_{k=1}^n r^{k-1} - \sum_{k=2}^{n+1} r^{k-1} = r^0 - r^n = 1 - r^n$$

より

$$S_n = \frac{1 - r^n}{1 - r} < \frac{1}{1 - r} = 2$$

を得る。よって $T_n < 1 + 2 = 3$ が成立するので、 $\{T_n\}$ は上に有界である。**実数の連続性**により、上に有界な単調増加実数列は収束するので、 $\{T_n\}$ は実数の極限值をもつことがわかる。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} U_n, \quad U_n = \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n$$

の存在も同様にしてわかる。実際、 $U_1 = 2$ で、前に見たように2以上の自然数 n に対して

$$\begin{aligned} U_n &= 2 + \sum_{k=2}^n \left(1 - \frac{1}{n}\right) \cdots \left(1 - \frac{k-1}{n}\right) \frac{1}{k!} \\ &< 2 + \sum_{k=2}^n \left(1 - \frac{1}{n+1}\right) \cdots \left(1 - \frac{k-1}{n+1}\right) \frac{1}{k!} \\ &< 2 + \sum_{k=2}^{n+1} \left(1 - \frac{1}{n+1}\right) \cdots \left(1 - \frac{k-1}{n+1}\right) \frac{1}{k!} = U_{n+1} \end{aligned}$$

が成立するので、 $\{U_n\}$ は単調増加であり、また明らかに $U_n \leq T_n < 3$ なので、 $\{U_n\}$ は上に有界である。よって、 $\{U_n\}$ は実数の極限值をもつことがわかる。これまでの議論では、 $\{T_n\}$ と $\{U_n\}$ の極限值が一致することを見ていたことになる。

弧度法

三角関数 $\sin x$, $\cos x$ も指数関数と同様に級数によって定義することを考える。そのために角度の表し方として度数法ではなく、弧度法を導入する。

— 弧度法 —

単位円周上で弧の長さが 1 になる弧に対応する角度を 1 ラジアンという。ラジアンを単位とする角度の表し方を弧度法という。弧度法で角度を表すときには、単位であるラジアンを省略して書く。

$$1(\text{ラジアン}) = \left(\frac{180}{\pi}\right)^\circ, \quad \pi(\text{ラジアン}) = 180^\circ$$

以後、三角関数は弧度法で表されているものとする。

三角関数

三角関数 $\cos x$, $\sin x$ を

$$\cos x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n} = 1 - \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{4!}x^4 - \frac{1}{6!}x^6 + \dots,$$

$$\sin x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1} = x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \frac{1}{7!}x^7 + \dots$$

で定義する。

三角関数の基本的性質

$$(\cos x)' = -\sin x, \quad (\sin x)' = \cos x$$

$$\cos 0 = 1, \quad \sin 0 = 0$$

オイラーの公式

e^{ix} の級数表示において $i^2 = -1$ を用いて変形すると、次のオイラーの公式を得る。

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x$$

実際、

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} (ix)^m = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n} + i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1}$$

である。

このとき、指数関数の指数法則からド・モアブルの定理

$$(\cos x + i \sin x)^n = \cos nx + i \sin nx \quad (n : \text{整数})$$

が得られる。また、実部と虚部に分けて考えれば三角関数の加法定理

$$\sin(x + y) = \sin x \cos y + \cos x \sin y$$

$$\cos(x + y) = \cos x \cos y - \sin x \sin y$$

も得られる。

行列の指数関数

正方行列 A の指数関数 e^{tA} を

$$e^{tA} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n A^n = E + \frac{1}{1!} tA + \frac{1}{2!} t^2 A^2 + \frac{1}{3!} t^3 A^3 + \dots$$

で定義する。但し、 E は単位行列である。

行列の指数関数の基本的性質

$$\begin{aligned} (e^{tA})' &= A e^{tA}, & e^{0A} &= E, \\ e^{tA} e^{sA} &= e^{(t+s)A} & (\text{指数法則}) \end{aligned}$$

オイラーの公式の行列による表現

e^{ix} に対応する行列は e^{xJ} なので、それを計算することを考える。 $J^2 = -E$ であることに注意する。

$$\begin{aligned}
e^{xJ} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n} E + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1} J \\
&= (\cos x)E + (\sin x)J = \begin{pmatrix} \cos x & -\sin x \\ \sin x & \cos x \end{pmatrix} = R(x)
\end{aligned}$$

$R(x)$ は R^2 において**原点の周りに角 x だけ回転させる変換**を表す回転行列である。指数関数 e^{xJ} の指数法則から $R(x+y) = R(x)R(y)$ すなわち

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \cos(x+y) & -\sin(x+y) \\ \sin(x+y) & \cos(x+y) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos x & -\sin x \\ \sin x & \cos x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos y & -\sin y \\ \sin y & \cos y \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos x \cos y - \sin x \sin y & -\sin x \cos y - \cos x \sin y \\ \sin x \cos y + \cos x \sin y & \cos x \cos y - \sin x \sin y \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

が成立していることがわかる。これからも三角関数の加法定理を確認することができる。

ここで、 $e^{ix} = \cos x + i \sin x$ を掛けるという操作は、複素数平面上では原点の周りに角 x だけ回転させるという操作に対応していたことを思い出しておこう。

シュレーディンガー方程式

電子や原子などの小さな対象を支配する力学は量子力学である。その基礎方程式であるシュレーディンガー方程式を定式化する。

簡単のために、3次元ユークリッド空間 R^3 の中で2個の粒子が運動している系を考える。 $j = 1, 2$ で粒子に番号を付けておく。

質量： m_j

運動量： $p_j = (p_j^{(1)}, p_j^{(2)}, p_j^{(3)})$

位置： $x_j = (x_j^{(1)}, x_j^{(2)}, x_j^{(3)})$

この2粒子間に働く相互作用ポテンシャルを実数値関数 $V(x_1 - x_2)$ で表すことにすると、この系のハミルトニアン \tilde{T} は、

$$\tilde{T} = \sum_{j=1}^2 \frac{1}{2m_j} p_j^2 + V(x_1 - x_2)$$

で表される。

ハミルトニアン役割

古典力学では、ハミルトニアンはニュートンの運動方程式を生み出す重要な関数である。実際、ハミルトンの正準方程式

$$\frac{dx_j^{(k)}}{dt} = \frac{\partial \tilde{T}}{\partial p_j^{(k)}} = \frac{p_j^{(k)}}{m_j},$$
$$\frac{dp_j^{(k)}}{dt} = -\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j^{(k)}} = -\frac{\partial}{\partial x_j^{(k)}}(V(x_1 - x_2))$$

からニュートンの運動方程式

$$m_j \frac{d^2 x_j^{(k)}}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial x_j^{(k)}}(V(x_1 - x_2))$$

が得られる。これは、**粒子の運動状態が運動量と位置によって決まる**ことを示している。

対応原理

古典力学におけるエネルギー保存則から、対応原理によってシュレーディンガー方程式を得ることができる。

E で系の全エネルギーを表すことにすると、古典力学におけるエネルギー保存則は

$$E = \tilde{T}$$

で表される。ここで、対応原理

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad p_j \longrightarrow -i\hbar \nabla_{x_j},$$
$$\nabla_{x_j} = \left(\frac{\partial}{\partial x_j^{(1)}}, \frac{\partial}{\partial x_j^{(2)}}, \frac{\partial}{\partial x_j^{(3)}} \right)$$

に従って置き換えることで得られる微分作用素から、次のシュレーディンガー方程式を導くことができる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x_1, x_2) = \sum_{j=1}^2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m_j} \Delta_{x_j} \Psi(t, x_1, x_2) \right) + V(x_1 - x_2) \Psi(t, x_1, x_2)$$

但し、 $h = 2\pi\hbar$ はプランク定数、微分作用素 Δ_{x_j} は

$$\Delta_{x_j} = \sum_{k=1}^3 \left(\frac{\partial}{\partial x_j^{(k)}} \right)^2$$

で定義されるラプラシアンで、 $\Psi(t, x_1, x_2)$ は波動関数と呼ばれる、系の状態を表す複素数値関数である。

非相対論的量子力学の理論では、この波動関数が満たすべきシュレーディンガー方程式を解くことが、系内の粒子の運動を完全に把握することになる。

シュレーディンガー方程式の右辺の微分作用素を

$$\tilde{H} = \sum_{j=1}^2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m_j} \Delta_{x_j} \right) + V(x_1 - x_2)$$

とおき、実験室系 2 体シュレーディンガー作用素と呼ぶ。このとき、シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar\Psi'(t) = \tilde{H}\Psi(t)$$

と略記される。これは、適当な関数空間で

$$\Psi(t) = e^{-it\tilde{H}/\hbar}\Psi(0)$$

のように作用素の指数関数を用いて解ける。このことを見ていこう。

関数空間 L^2

波動関数 $\Psi(t, x_1, x_2)$ は、その確率的解釈のため、配位空間 $R^{3 \times 2}$ 上で定義された 2 乗可積分な関数、つまり

$$\iint_{R^{3 \times 2}} |\Psi(t, x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2 < \infty$$

を満たす関数であることが要請されている。そこで、2 乗可積分な関数全体がなす関数空間 $L^2(R^{3 \times 2})$ においてシュレーディンガー方程式を解くことになる。この関数空間 $L^2(R^{3 \times 2})$ は、

$$(f, g) = \int_{R^{3 \times 2}} f(x) \overline{g(x)} dx$$

$(f, g \in L^2(\mathbf{R}^{3 \times 2}), x = (x_1, x_2))$ によって定義される内積をもつヒルベルト空間である。

ヒルベルト空間とは、内積を備えたベクトル空間で、完備性をもつものである。端的に言えば、完備性とは、内積から導かれるノルム $\|f\| = \sqrt{(f, f)}$ に関する収束について閉じているという重要な性質である。

自己共役作用素

ヒルベルト空間 $L^2(\mathbf{R}^{3 \times 2})$ 上の作用素として \tilde{H} を考えたとき、相互作用ポテンシャルが適当な条件を満たしていれば、自己共役性という重要な性質をもつ。

実際、量子力学の数学的理論の基本原理では、位置、運動量、ハミルトニアンなど物理量はすべて、ヒルベルト空間上の自己共役作用素として実現されることが掲げられている。ここでは、自己共役性の一面である対称性についてのみ述べておく。

$\mathbb{R}^{3 \times 2}$ 上で無限回微分可能で、有界集合の外側で 0 となるような関数全体がなす空間を $C_0^\infty(\mathbb{R}^{3 \times 2})$ で表す。これは $L^2(\mathbb{R}^{3 \times 2})$ の部分空間である。 $V(x_1 - x_2)$ が実数値で適当な条件を満たしていれば、 $f, g \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{3 \times 2})$ に対して

$$(\tilde{H}f, g) = (f, \tilde{H}g)$$

が成立することが部分積分によって示される。このような性質を対称性という。

自己共役作用素の例

自己共役作用素の例として、実対称行列を挙げる。

$$A = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

とおく。これは実対称行列の一例である。このとき、 A の固有値は A の固有方程式

$$\begin{aligned} \det(\lambda E - A) &= \det \begin{pmatrix} \lambda - \frac{3}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \lambda - \frac{3}{2} \end{pmatrix} = \left(\lambda - \frac{3}{2}\right)^2 - \left(\frac{1}{2}\right)^2 \\ &= \lambda^2 - 3\lambda + 2 = 0 \end{aligned}$$

の解で、 $\lambda = 1, 2$ である。 $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 2$ とおくことにする。各固有値 λ_j に属する固有ベクトルは

$$c \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{2}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{2} \end{pmatrix} (\lambda = \lambda_1) \quad c \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{2}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{2} \end{pmatrix} (\lambda = \lambda_2)$$

($c \in \mathbf{R}$) の形で表される。以上のことから、行列の対角化を行うことができる。

$$\mathbf{u}^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{2}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}^{(2)} = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{2}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{2} \end{pmatrix},$$
$$U = (\mathbf{u}^{(1)} \ \mathbf{u}^{(2)}) = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{2}{\sqrt{2}} & \frac{2}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{2} & \frac{2}{2} \end{pmatrix} = R\left(\frac{\pi}{4}\right)$$

とおくと、

$$U^{-1}AU = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

を得る。実際、**実対称行列は直交行列を用いて対角化可能である**ことが知られている。ここで、 U が直交行列であるとは、 U が ${}^tUU = U{}^tU = E$ を満たす実正方行列であることであり、回転行列はその一例である。ただし、 tU は U の転置行列のことで、例えば

$${}^t \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}, \quad {}^t \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}$$

というようになる。

スペクトル分解

この対角化を別の観点から見てみよう。まず、 R^2 に内積を導入しておく。

$$\boldsymbol{v}^{(1)} \cdot \boldsymbol{v}^{(2)} = \sum_{j=1}^2 v_j^{(1)} v_j^{(2)}, \quad \boldsymbol{v}^{(k)} = \begin{pmatrix} v_1^{(k)} \\ v_2^{(k)} \end{pmatrix}$$

このとき、先程得られた $u^{(k)}$ ($k = 1, 2$) は、

$$\begin{aligned}u^{(1)} \cdot u^{(1)} &= u^{(2)} \cdot u^{(2)} = 1, \\u^{(1)} \cdot u^{(2)} &= 0\end{aligned}$$

を満たす正規直交系である。 $v \in R^2$ に対して

$$P^{(k)}v = (v \cdot u^{(k)})u^{(k)} \quad (k = 1, 2)$$

とおく。これによって定義される $P^{(k)}$ は $u^{(k)}$ への正射影作用素と呼ばれる。このとき、

$$v = P^{(1)}v + P^{(2)}v$$

が成立する。これは、行列 U を用いて考えると

$$U^t U = E$$

と同値であるからである。実際、

$$\begin{aligned}P^{(1)}v + P^{(2)}v &= (u^{(1)} \ u^{(2)}) \begin{pmatrix} (v \cdot u^{(1)}) \\ (v \cdot u^{(2)}) \end{pmatrix} = (u^{(1)} \ u^{(2)}) \begin{pmatrix} {}^t u^{(1)} \\ {}^t u^{(2)} \end{pmatrix} v \\ &= U^t U v = \begin{pmatrix} u^{(1)} \cdot u^{(1)} & u^{(1)} \cdot u^{(2)} \\ u^{(1)} \cdot u^{(2)} & u^{(2)} \cdot u^{(2)} \end{pmatrix} v = E v = v\end{aligned}$$

となる。従って、両辺に左から A を掛けて

$$Av = \lambda_1 P^{(1)}v + \lambda_2 P^{(2)}v$$

を得る。このようにして、 A のスペクトル分解

$$A = \lambda_1 P^{(1)} + \lambda_2 P^{(2)}$$

が得られる。

一般の自己共役作用素 H もスペクトル分解

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_H(\lambda)$$

をもつ。この意味を説明するのは簡単ではないが、 A のスペクトル分解の概念を拡張したもので、正射影作用素の和と考えてもらいたい。

\tilde{H} が自己共役であるとき、 \tilde{H} に対するスペクトル分解を用いて、 \tilde{H} の指数関数 $e^{-it\tilde{H}/\hbar}$ を

$$e^{-it\tilde{H}/\hbar} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-it\lambda/\hbar} dE_{\tilde{H}}(\lambda)$$

で定義する。このとき、シュレーディンガー方程式は、

$$\Psi(t) = e^{-it\tilde{H}/\hbar}\Psi(0)$$

のように $e^{-it\tilde{H}/\hbar}$ を用いて解くことができる。

$e^{-it\tilde{H}/\hbar}$ はスペクトル分解に基づいた作用素解析によって定義されたが、 $e^{-it\tilde{H}/\hbar}$ の存在はヒレ・吉田の定理によっても保証される。ここでは、その定理には深入りしないが、作用素の指数関数の存在を保証するために、等式

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{x}{n}\right)^{-n}$$

を頼りにした議論がなされているのは興味深い。

$e^{-it\tilde{H}/\hbar}$ の性質

$$\|e^{-it\tilde{H}/\hbar} f\| = \|f\| \quad (\text{等長性})$$

$$e^{-i0\tilde{H}/\hbar} = I \quad (\text{恒等作用素})$$

$$e^{-is\tilde{H}/\hbar} e^{-it\tilde{H}/\hbar} = e^{-i(s+t)\tilde{H}/\hbar} \quad (\text{指数法則})$$

等長性をもつ全射作用素はユニタリー作用素と呼ばれる。自己共役作用素 \tilde{H} の指数関数 $e^{-it\tilde{H}/\hbar}$ はユニタリー作用素であることが知られている。

波動関数の確率的解釈

波動関数 $\Psi(t, x_1, x_2)$ が与えられると、粒子がある範囲にいる確率が定められる。実際、 V_1, V_2 を R^3 の部分集合とすると、時刻 t に j 番目の粒子が V_j 内にいる確率は

$$\iint_{V_1 \times V_2} |\Psi(t, x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2$$

で定められる。但し、 $V_1 = V_2 = R^3$ のときには確率が1となるので、

$$\iint_{R^{3 \times 2}} |\Psi(t, x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2 = 1$$

という規格化がなされている。 $\Psi(t) = e^{-it\tilde{H}/\hbar}\Psi(0)$ と表されているので、 $e^{-it\tilde{H}/\hbar}$ の等長性から初期データ $\Psi(0)$ に対する規格化条件

$$\iint_{R^{3 \times 2}} |\Psi(0, x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2 = 1$$

のみ仮定すれば良い。0でない波動関数の規格化は、ノルムで割ることによって容易にできるので、解析の上では規格化条件に拘らず、関数空間 L^2 全体を波動関数の空間として理論を構成していくことになる。

フーリエ変換による波動関数の運動量表示

これまでに見た波動関数は位置を変数とするものであったが、フーリエ変換という積分変換を用いると、運動量を変数とする波動関数が得られる。

$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2)$, $\boldsymbol{p} = (p_1, p_2) \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$ と書くことにする。 $\Psi(t, \boldsymbol{x})$ のフーリエ変換 $\Phi(t, \boldsymbol{p})$ を

$$\Phi(t, \boldsymbol{p}) = (2\pi\hbar)^{-3} \int_{\mathbb{R}^{3 \times 2}} e^{-i\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p} / \hbar} \Psi(t, \boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}$$

で定義する。但し、 $\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p}$ は

$$\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p} = \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^3 x_j^{(k)} p_j^{(k)}$$

で定義される x と p との内積である。この $\Phi(t, p)$ が波動関数 $\Psi(t, x)$ の運動量表示である。

フーリエ変換はユニタリー作用素であるので、規格化された $\Psi(t, x)$ のフーリエ変換 $\Phi(t, p)$ は

$$\int_{R^{3 \times 2}} |\Phi(t, p)|^2 dp = 1$$

という規格化条件を満たしており、運動量に関する波動関数の確率的解釈も成立する。逆に、波動関数の運動量表示 $\Phi(t, p)$ が与えられているとする。このとき、波動関数の位置表示 $\Psi(t, x)$ は、 $\Phi(t, p)$ の逆フーリエ変換

$$\Psi(t, x) = (2\pi\hbar)^{-3} \int_{R^{3 \times 2}} e^{+ix \cdot p/\hbar} \Phi(t, p) dp$$

によって得られる。フーリエ変換を通じて、位置と運動量は同等の役割を演じていることがわかる。

フーリエ変換の動機付け

フーリエ変換は、 L^2 関数を $e^{+ix \cdot p/\hbar}$ の重ね合わせで表現するために導入されているが、この発想を見るにはフーリエ級数から始めるのが良い。

区間 $(-\pi, \pi)$ で定義された 2 乗可積分な関数全体がなす関数空間 $L^2(-\pi, \pi)$ に属する f を考える。そのフーリエ係数を

$$a_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos mx \, dx \quad (m = 0, 1, 2, \dots)$$
$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin mx \, dx \quad (m = 1, 2, \dots)$$

で定義する。このとき、 f は

$$f(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (a_m \cos mx + b_m \sin mx)$$

で表されることが知られている。この右辺を f のフーリエ級数展開という。

$L^2(-\pi, \pi)$ は内積

$$(f, g) = \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \overline{g(x)} dx \quad (f, g \in L^2(-\pi, \pi))$$

をもつヒルベルト空間である。任意の $f \in L^2(-\pi, \pi)$ がフーリエ級数展開されるということは、 $\{(2\pi)^{-1/2}\} \cup \{\pi^{-1/2} \cos mx, \pi^{-1/2} \sin mx\}_{m=1}^{\infty}$ が $L^2(-\pi, \pi)$ の完全正規直交系をなすということと同値である。実際、

$\phi_0(x) = (2\pi)^{-1/2}$, $\phi_m(x) = \pi^{-1/2} \cos mx$, $\psi_m(x) = \pi^{-1/2} \sin mx$
と書くと、

$$(\phi_m, \phi_n) = \delta_{mn}, \quad (\psi_m, \psi_n) = \delta_{mn}, \quad (\phi_m, \psi_n) = 0$$

を満たし、 f のフーリエ級数展開は

$$f(x) = (f, \phi_0) \phi_0(x) + \sum_{m=1}^{\infty} \{(f, \phi_m) \phi_m(x) + (f, \psi_m) \psi_m(x)\}$$

と表される。ここで、 δ_{mn} はクロネッカーの δ で

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & (m = n) \\ 0 & (m \neq n) \end{cases}$$

で与えられる。

f のフーリエ級数展開

$$f(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (a_m \cos mx + b_m \sin mx)$$

において

$$\cos mx = \frac{e^{imx} + e^{-imx}}{2}, \quad \sin mx = \frac{e^{imx} - e^{-imx}}{2i}$$

を用いると、

$$c_0 = \frac{1}{2}a_0, \quad c_m = \frac{1}{2}(a_m - ib_m), \quad c_{-m} = \frac{1}{2}(a_m + ib_m) \quad (m = 1, 2, \dots)$$

とおくことにより、

$$f(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m e^{imx}$$

と表せることがわかる。これを f の複素フーリエ級数展開という。

$$\Phi_m(x) = (2\pi)^{-1/2} e^{imx} \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

とおくと、

$$(\Phi_m, \Phi_n) = \delta_{mn}, \quad (2\pi)^{1/2} c_m = (f, \Phi_m)$$

を満たすことは容易にわかるので、 f の複素フーリエ級数展開は

$$f(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (f, \Phi_m) \Phi_m(x)$$

と書き直せる。 $\{\Phi_m\}_{m=-\infty}^{\infty}$ も $L^2(-\pi, \pi)$ の完全正規直交系であることが知られている。

さて、フーリエ変換をこのフーリエ級数展開の形式的な極限として導入してみよう。 N を自然数とし、 $g \in L^2(-N\pi, N\pi)$ とする。このとき、 $f(x) = g(Nx)$ によって $f \in L^2(-\pi, \pi)$ を定義すると、

$$f(x) = (2\pi)^{-1/2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \tilde{c}_m e^{imx}, \quad \tilde{c}_m = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) e^{-imx} dx$$

と表されることは既に見た。 $Nx = y$ と変数変換すると

$$\tilde{c}_m = (2\pi)^{-1/2} \int_{-N\pi}^{N\pi} g(y) e^{-imy/N} dy \times \frac{1}{N}$$

と計算される。 g は区間 $(-N\pi, N\pi)$ の外側では 0 であるとして、

$$\hat{g}(\xi) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} g(y) e^{-iy\xi} dy$$

と書くことにする。実は \hat{g} は R 上の関数 g のフーリエ変換である。ただし、 $\hbar = 1$ としている。このとき、 g は

$$g(y) = (2\pi)^{-1/2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{g}\left(\frac{m}{N}\right) e^{imy/N} \times \frac{1}{N}$$

と表される。ここで $N \rightarrow \infty$ とすれば、右辺は積分で表され、

$$g(y) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{g}(\xi) e^{iy\xi} d\xi$$

が導かれる。これはフーリエ変換の反転公式と呼ばれるもので、 g のフーリエ変換による展開とでも言うべきものである。

2 体散乱理論

これまでは実験室系シュレーディンガー作用素について話を進めてきた。しかし、散乱理論においては、いくつかの系の運動を比較する際、系の重心は共通であり、相互作用は重心の運動に無関係であるため、系の重心運動を比較する必要はない。そこで、実験室系シュレーディンガー作用素から重心運動を支配する部分を分離した、重心系シュレーディンガー作用素を導入する。

$$\text{重心の質量} : M = m_1 + m_2$$

$$\text{換算質量} : m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

$$\text{重心の位置} : R = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$$

$$\text{相対位置} : r = x_1 - x_2$$

$$\text{重心の運動量} : P = p_1 + p_2$$

$$\text{相対運動量} : p = \frac{m_2 p_1 - m_1 p_2}{m_1 + m_2}$$

このとき、運動エネルギーに関して

$$\frac{1}{2m_1}p_1^2 + \frac{1}{2m_2}p_2^2 = \frac{1}{2M}P^2 + \frac{1}{2m}p^2$$

が成立する。そこで、重心系 2 体シュレーディンガー作用素 H を、 $L^2(\mathbb{R}^3)$ 上の作用素として

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + V(r)$$

で定義する。また、

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r$$

とおく。

H のスペクトル

H において

$$m = m_e, \quad V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{|r|^2}$$

とする。但し、 m_e は電子の質量、 e は電気素量、 ϵ_0 は真空の誘電率である。このとき、 H は水素原子のハミルトニアンであり、水素原子のエネルギー準位 (H の固有値) は

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2} \quad (n \in \mathbf{N})$$

で表されることが知られている。但し、 c は光の速度で、

$$R = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}$$

はリュードベリ定数である。

このように、ポテンシャル V によって、 H は固有値をもつこともあれば、 H_0 のように固有値をもたずに、絶対連続スペクトルと呼ばれるスペクトルのみもつこともある。一般に、 H のスペクトルは固有値と連続スペクトルからなる。

H のスペクトルに関する性質を研究すること自体も、大きな数学的課題の1つであり、自己共役作用素 H に対するスペクトル理論として研究がさかんに進められている。