量子力学

TKG

2025年5月8日

目次

1	INTRODUCTION
2	数学的準備
2.1	導入
2.2	作用素
3	力学
3.1	シュレディンガー表示
3.2	ハイゼンベルク表示
4	物理的状態
5	さらに数学的諸性質
6	ベクトルの表現
7	多変数の場合
8	角運動量
9	量子力学における確率
10	束縛系と束縛状態
11	具体的な例
11.1	自由粒子
11.2	束縛状態のエネルギー固有値
12	確率の流れ

1 INTRODUCTION

1 古典論（正準力学系）では、簡単に n 個の粒子からなる系を考えた時、その系をとる状態の 1 つ 1 つが、 $6n$ 次元の相空間の点の 1 つ 1 つに対応した。

1 量子力学では系の取る状態の 1 つ 1 つは、波動関数と呼ばれる、系の状態を表す関数の 1 つ 1 つに対応する。

3 従って、量子力学では、相空間の代わりに波動関数全体からなる集合を扱うことになる。

2 数学的準備

2.1 導入

9 以下では簡単のため、波動関数を $\varphi(w)$ と書き、 w は任意の実数をとるものとする。また、一般に波動関数は $\mathbb{C}$ 上に値をとり、 $\varphi(w)$ に複素共役な関数を $\varphi^\dagger(w)$ と書く。

10 任意の 2 つの波動関数 $\varphi(w), \psi(w)$ に対し、一種の演算が定められる。それは

$$12 \quad \langle \psi | \varphi \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} dw \varphi^\dagger(w) \varphi(w) \quad (1)$$

13 で定められる。

13 また、時に波動関数 $\varphi(w)$ を

$$14 \quad |\varphi\rangle = \varphi(w) \quad (2)$$

とも書く。これに対し、波動関数 φ を用い、(2) の $|\varphi\rangle$ から (1) の $\langle \psi | \varphi \rangle$ へ対応するものとして

$$\langle \psi | := \int dw \varphi^\dagger(w) * \quad (3)$$

と定めておくと便利である（これは数学的には双対ベクトルである）。

明らかに、波動関数 $\varphi(w) = |\varphi\rangle$ 全体は各 $\langle\varphi|$ 全体と 1 対 1 に対応させられる。この時、 $|\varphi\rangle$ をケットベクトル、 $\langle\varphi|$ をブラベクトルという。

波動関数全体の集合を $\tilde{H}$ と書くことにする。この時、いくつかの波動関数の線形結合したものは、また波動関数となる。従って、 $\tilde{H}$ は $\mathbf{C}$ 上のベクトル空間となる。また、明らかにブラベクトル全体もまた、同じように $\mathbf{C}$ 上のベクトル空間とみなせる。

波動関数 φ に対し

$$\|\varphi\| := \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle} \quad (4)$$

を φ の大きさ、またはノルムという。ノルムは明らかに正の実数である。また、 φ の大きさが 1 の時、 φ は規格化されているという。

波動関数 ϕ, φ に対し、(1) が 0、つまり

$$\langle\phi|\varphi\rangle = 0 \quad (5)$$

の時、 ϕ と φ は直交するという。

この時、次の概念は重要である。 $i = 1, 2, 3, \dots$ に対し、波動関数 $\phi_i(w)$ があり

$$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij} \quad (6)$$

である時これら ϕ_i は規格直交系であるという。また、波動関数 ϕ_i が任意の波動関数 $\varphi(w)$ に対し

$$\varphi(w) = \sum_i a_i \phi_i(w) \quad (7)$$

と書ける時、 ϕ_i は完全系をなすという。また、 ϕ_i が (6) かつ (7) を満たす時、 ϕ_i は完全規格直交系という。その場合には (7) 式の各 a_i は

$$a_i = \langle\phi_i|\varphi\rangle \quad (8)$$

と書くことが出来る。

今度は波動関数 $\phi(w)$ が連続なパラメータ λ を含んでいるとする。即ち ϕ は正確には

$$\phi(w) = \phi_\lambda(w)$$

と書かれるとする。その場合にも同様に表せる。つまり (7) の代わりに

$$\varphi(w) = \int d\lambda a_\lambda \phi_\lambda(w) \quad (9)$$

と書かれる時も ϕ_λ は完全系をなすという。また、完全規格直交系の条件も (8) はそのままである。その時、 $\varphi = \phi_{\lambda_0}(w)$ とすると、(9) 式より

$$\phi_{\lambda_0}(w) = \int d\lambda \phi_\lambda(w) \langle\phi_\lambda|\phi_{\lambda_0}\rangle \quad (10)$$

となる。よってこの時規格直交条件 (6) は

$$\langle\phi_\lambda|\phi_{\lambda_0}\rangle = \delta(\lambda - \lambda_0) \quad (11)$$

と表される。この $\delta(x)$ はデルタ関数といい、その簡単な性質は

$$\begin{aligned} \cdot \int_a^b dx \delta(x) &= \begin{cases} 0 & : a \text{ と } b \text{ の間に } 0 \text{ がいない場合} \\ 1 & : a < 0 < b \end{cases} \\ \cdot \int_a^b dx f(x) \delta(x - c) &= \begin{cases} 0 & : a \text{ と } b \text{ の間に } c \text{ がいない場合} \\ f(c) & : a < c < b \end{cases} \\ \cdot x \delta(x) &= 0 \end{aligned}$$

などである。これはいわゆる超関数であり、普通の意味での関数ではない。

2.2 作用素

波動関数全体の集合 $\tilde{H}$ 上には作用素というものが定まる。それは、 $\tilde{H}$ の各波動関数 $\varphi(w)$ に対して、ある波動関数 $\Phi(w)$ を対応づけるもので、作用素を A と書けば、

$$\Phi(w) =: A\varphi(w) \quad (12)$$

と書かれる。またこれを表すケットも

$$|\Phi\rangle =: A|\varphi\rangle \quad (13)$$

と書く。作用素 A に対し、次のような作用素が定まる。それは、任意の波動関数 $\phi(w)$ に対し

$$\langle \Phi | \phi \rangle =: \langle \phi | A^\dagger | \phi \rangle \quad (14)$$

で定まる作用素 $A^\dagger$ である。これは直接書けば

$$\int dw \left(A\phi(w) \right)^\dagger \cdot \phi(w) =: \int dw \phi^\dagger(w) \left(A^\dagger \phi(w) \right) \quad (15)$$

と書ける。つまり $A^\dagger$ も $\tilde{H}$ 内の波動関数に作用する作用素である。この $A^\dagger$ を A にエルミート共役な作用素という。また、 $A = A^\dagger$ である時、 A は自己エルミートであるという。

量子力学では、ハミルトニアンに代表される全ての物理量はこのような自己エルミートな線形作用素で表される。そして系の状態が ϕ で与えられた時、この状態での物理量 A の期待値を計算することが出来て、それは

$$\langle \phi | A | \phi \rangle \quad (16)$$

で与えられる。ここに量子力学の特徴を理解出来ると思う。即ち、量子力学では系の状態が与えられても、そこから引き出せる物理的な予言というものは、系がその状態にある時に物理量 A を観測した時に得られる測定量の期待値が $\langle \phi | A | \phi \rangle$ であるということである。そして測定量はその期待値からどれだけばらつくかを表す量は、確率論でおなじみの分散

$$\langle \Delta A^2 \rangle := \langle \phi | A^2 | \phi \rangle - \langle \phi | A | \phi \rangle^2 \quad (17)$$

で与えられる。この意味において、量子力学は確率的にしか予言をすることが出来ないといえる。しかし、断っておかなくてはいけないことは、系の状態の時間発展はシュレディンガー方程式 (22) で与えられ、従って系の初期状態とハミルトニアンさえ分かれば任意の時刻での系の状態を完全に決定出来て、その状態における物理量の期待値は厳密に計算出来るということである。

3 力学

3.1 シュレディンガー表示

正準力学系では、相空間上の関数 $F(\mathbf{z})$ がある時、それからハミルトニアン・ベクトル場

$$\mathbf{v}_F := \hat{\Omega}^t \cdot \nabla F$$

が定まり、それを用いて

$$\frac{d\mathbf{z}_\lambda}{d\lambda} = \mathbf{v}_F(\mathbf{z}_\lambda) \quad (18)$$

で系の発展が決まった。また、 $\lambda = 0$ での初期値 $\mathbf{z}_0$ を λ での位置 $\mathbf{z}_\lambda$ に対応させる写像

$$\phi_\lambda(\mathbf{z}_0) = \mathbf{z}_\lambda \quad (19)$$

をフローといった。

量子力学においては、相空間の代わりに、波動関数全体の集合 $\tilde{H}$ を扱うので、系の発展は $\mathbf{z}$ の代わりに $\phi(w)$ を使って表すことになる。ハミルトニアン・ベクトル場の代わりに、ある $\tilde{H}$ 上の作用素 η が用いられる。それによって (18) の代わりに

$$i\hbar \frac{d}{d\lambda} \phi_\lambda = \eta \phi_\lambda \quad (20)$$

で系の発展が定まる。また、そのフロー U_λ も (25) のように

$$U_\lambda \left(\phi(w) \right) := \phi_\lambda(w) \quad (21)$$

と表される。つまり U_λ もまた、 $\tilde{H}$ 上の1つの作用素とみなせる。(12) のように単に $U_\lambda \phi(w)$ と括弧を省いて書くことにする。

この時、正準力学系では、時間発展を表すフローの生成関数は系のハミルトニアン H であった。量子論でも同様に系の時間発展の生成作用素はハミルトニアン作用素 (或いは単にハミルトニアン) といわれる作用素 H により決まる。即ち、時刻 t での系の状態を表す波動関数 $\phi_t(w)$ の満たす方程式は

$$i\hbar \frac{d\phi_t}{dt} = H\phi_t \quad (22)$$

である。(22) 式をシュレディンガー方程式という。

ここで一般には、ハミルトニアン H 、或いは一般にフローの生成作用素 η は、それ自身のパラメータ t や λ を含んでいる。従って、正確には H_t 、 η_λ などと書いたほうがよい。

もし、ハミルトニアンが t を含んでいない場合は系は孤立系と呼ばれる。そうでないならば、その系は他の別の系に接触しているという。

$\tilde{H}$ 内の波動関数に作用する作用素全体の集合というものを考えれば、それは1つのベクトル空間をなす。即ち、2つの作用素 A, B に対し、 $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ として $\alpha A + \beta B$ を

$$(\alpha A + \beta B)\varphi := \alpha A\varphi + \beta B\varphi \quad (23)$$

として定められる。これによって作用素全体の線形結合が定められる。

また、作用素 A が線形作用素であるとは

$$\Phi(w) := \sum_i a_i \phi_i(w)$$

に対し、(連続でああってもよい。その時は $\sum_i$ は積分 $\int d\lambda$ になる)

$$A\Phi = \sum_i a_i A\phi_i$$

となることである。 A が線形作用素ならば、そのエルミート共役な $A^\dagger$ も線形作用素であることが容易に分かる。

ハミルトニアン H は、物理学で扱う多くの場合には線形作用素である。よって以下では常に H は線形作用素であるとしておく。

一般に作用素 η が線形作用素である時、 φ_λ が (20) 式の解ならば、 $\alpha\varphi_\lambda$ ($\alpha \in \mathbb{C}$) も (20) の解である。また、 ϕ_λ も解である時、

$$\alpha\varphi_\lambda + \beta\phi_\lambda \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{C})$$

も解である。これはフロー U_λ を用いて

$$\alpha U_\lambda \varphi(w) + \beta U_\lambda \phi(w) \quad (24)$$

と書ける。一方、フローの定義から $\lambda = 0$ では $U_0 = 1$ 。よって上の波動関数は

$$U_\lambda \left(\alpha\varphi(w) + \beta\phi(w) \right)$$

でもある。即ち、線形作用素 η によって生成されるフロー U_λ は、線形作用素である。従って時間発展を表すフロー (T_t と書くことにする) も線形作用素である。

同様にしてフロー U_λ が線形の時、その生成作用素 η も線形になる。

簡単な例として (20) の生成作用素 η が線形作用素で、パラメータ λ を含んでない場合について (物理学で扱う多くの場合、そうである)。

その時、 η に生成されるフロー U_λ は

$$U_\lambda = \exp\left(\frac{\eta}{i\hbar}\right) \quad (25)$$

となることが容易に分かる。ここで右辺の意味は、任意の作用素 A に対し

$$\begin{aligned} \exp A &:= 1 + \frac{A}{1!} + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!} \end{aligned}$$

によって定まる作用素である。また、このフロー U_λ は任意の λ_1, λ_2 に対し

$$U_{\lambda_1} U_{\lambda_2} = U_{\lambda_1 + \lambda_2} \quad (26)$$

を満たしている。また、当然 $\lambda = 0$ では

$$U_0 = 1 \quad (27)$$

である。上の2つの性質を持つフローは一般に半群をなすという。

逆に上の (26)(27) の条件を満たす任意のフローについては (右側から $\varphi(w)$ をかけるのを省略して書いて)

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} U_\lambda &= \lim_{\Delta\lambda \rightarrow 0} \frac{U_{\lambda+\Delta\lambda} - U_\lambda}{\Delta\lambda} \\ &= \lim_{\Delta\lambda} \frac{U_{\Delta\lambda} - 1}{\Delta\lambda} U_\lambda \end{aligned}$$

$U_\lambda \varphi = \varphi_\lambda$ であることを思えば (20) から

$$\lim_{\Delta\lambda} \frac{U_{\Delta\lambda} - 1}{\Delta\lambda} = \frac{\eta}{i\hbar} \quad (28)$$

が分かる。よって η はパラメータ λ を含んでいない。また、フローが線形作用素であったなら (28) 式から分かるように η も線形作用素になる。

つまり、前の結果と合わせると、生成作用素が線形でパラメータを含んでないことと、フローが線形でかつ (26)(27) の条件を満たすことは同値である。また、その時フローは (25) で与えられる。

ここで物理的な計算をする際における注意点を強調しておく。系の時間発展を表す方程式はシュレディンガー方程式 (22) で与えられる。今このシュレディンガー方程式の解 φ_t で表される状態における、物理量 A の期待値は $\langle \varphi_t | A | \varphi_t \rangle$ で与えられた。従って物理量は t を頭を含んでいなければ t には依存しない。系の状態を表す状態ベクトルが時間発展するということである。次節では、逆に状態ベクトルは時刻 t に依存せず物理量が時刻に依存するように表示することも出来ることを説明する。そのような表示とを区別するために、この節で説明したような表示のことをシュレディンガー表示と呼ぶ。

3.2 ハイゼンベルク表示

2つの作用素 A, B に対し、それらの交換関係について。

$$AB - BA =: [A, B] \quad (29)$$

と記すことにする。この時作用素 A が固有値を、従って固有解を持つ時、固有値を $\hat{A}$ 、固有解を $|\hat{A}\rangle$ と書くことにする。今作用素 A, B が交換する、即ち $[A, B] = 0$ の時

$$\begin{aligned} AB|\hat{A}\rangle &= BA|\hat{A}\rangle \\ &= \hat{A}B|\hat{A}\rangle. \end{aligned} \quad (30)$$

つまり、 $B|\hat{A}\rangle$ はまた、 A の固有解となりその固有値は $\hat{A}$ であることが分かる。

次に生成作用素とフローの交換関係について。フローが (26)(27) を満たすとする。よってその生成作用素は (28) 式で与えられる。一方、(28) の左側から $U_{-\lambda}$ を、右側から U_λ をかけても (28) の左辺は変わらない。よって

$$U_{-\lambda} \eta U_\lambda = \eta \quad (31)$$

これに左から U_λ をかければ、

$$[\eta, U_\lambda] = 0 \quad (32)$$

を得る。即ち、フローが半群をなす、つまり (26)(27) である時、そのフローと生成作用素は交換する。

次に任意の作用素を V とし、

$$V_\lambda := U_{-\lambda} V U_\lambda$$

と書いておく。この時、フローが (26)(27) を満たしている時、(右から $\varphi(w)$ をかけるのを省略して書く。また、今後もそのように省いて書くこともある)

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} V_\lambda &= \frac{dU_{-\lambda}}{d\lambda} V U_\lambda + U_{-\lambda} V \frac{dU_\lambda}{d\lambda} \\ &= -\frac{\eta}{i\hbar} U_{-\lambda} V U_\lambda + U_{-\lambda} V \frac{\eta}{i\hbar} U_\lambda \end{aligned}$$

(32) を使えば

$$i\hbar \frac{dV_\lambda}{d\lambda} = [V_\lambda, \eta] \quad (33)$$

が導かれる。この式から V_λ を λ で冪級数に展開するのはたやすい。特に、 V がハミルトニアン H の時、従ってフローが時間発展作用素 T_t の場合には (33) は

$$i\hbar \frac{dV_t}{dt} = [V_t, H] \quad (34)$$

となるが、これをハイゼンベルク方程式という。

以上の事柄によっていくつかの基本的かつ重要な結果が出る。もし作用素 V と η が交換する時、容易に分かるように

$$V_\lambda = V$$

となり、よって V が固有値と固有解を持っていれば V_λ の定義、及び (30) から V の固有解での固有値が $\dot{V}$ である時、 η により生成されるフローをその固有解に作用させても、やはりそれは V の固有解でその固有値は $\dot{V}$ である。

次に作用素 V と η の交換関係が

$$[V, \eta] = i\hbar \quad (35)$$

である場合について。この時 (32) に注意して (33) に (35) を繰り返し適用すれば、 λ の 2 次以降は全て 0 なのが分かり、よって

$$V_\lambda = V + \lambda$$

が分かる。よって左から U_λ をかけて (30) と同様にすれば、 V の固有解で $\dot{V}$ であったものは、 η により生成されるフローによって、固有値は $\dot{V} + \lambda$ になる。

ハミルトニアンが生成作用素である時、つまりフローが時間発展作用素 T_t である場合、以前にもいったように T_t は (26)(27) を満たす。よってハミルトニアン作用素と交換する作用素は、それが固有値を持つ時、その固有解は、時間発展に対しその固有値は変わらない。また、逆にその作用素により生成されるフローに対してハミルトニアンの固有値も変化しない。このようなハミルトニアンと交換する作用素及び、その固有値は保存量であるという。

ここでまた前節の描像に対する別の描像を得る準備が出来た。前節までのシュレディンガー表示においては、系の状態は $\varphi_t = T_t \varphi$ であり、物理量は時間によらない作用素 A であった。そして予言出来る観測量は A の期待値 $\langle \varphi_t | A | \varphi_t \rangle$ であった。ここで線形代数でいうところのユニタリー変換

$$|\varphi\rangle = T_t^\dagger |\varphi_t\rangle \quad (36)$$

$$A_t := T_t^\dagger A T_t \quad (37)$$

を試みる。このようにして系の状態は初期状態のまま、物理量だけが時間発展するものと約束すれば、これはこれで整合性がとれていることが分かる。つまり期待値は $\langle \varphi | A_t | \varphi \rangle$ とも書けるからである。こ

の時には系の時間発展を表す方程式はハイゼンベルク方程式 (34) にとってかわる。このような表示をハイゼンベルク表示と呼ぶ。前節で説明したシュレディンガー表示とこのハイゼンベルク表示との関係はこのようには一方をユニタリー変換して得られる。そしてそれらの表示は同値である。

4 物理的状态

今までは、任意の波動関数が系のある状態を表すものとしてきたが、多くの場合には、系の状態を表す波動関数には付加条件が付く。例えば、境界条件がその 1 つである。また、フェルミオン系やボソン系では対称性についての条件が付く。

そこでこのような与えられた付加条件を満たす波動関数全体の集合を $\tilde{H}_2$ と書くことにする。つまり、この $\tilde{H}_2$ が系の状態を表す波動関数全体の集合である。この付加条件は当然考えている系によって変わるのだから $\tilde{H}_2$ も考える系によって変わる。

また、ほとんど多くの場合付加条件は、 $\tilde{H}_2$ が線形空間（ベクトル空間）となるように付けられる。よって一般に $\tilde{H}_2$ はベクトル空間であるとしておいてよい。また、ある 1 組の関数系が完全系をなすというのも、 $\tilde{H}_2$ の任意の波動関数がそれらの線形結合で表される時であるとしておいてよい。また、 $\tilde{H}$ のある完全系があれば、その完全系の線形結合によって $\tilde{H}_2$ の波動関数が表される。しかし、その場合においても、必ずしも完全系をなすそれぞれの波動関数もまた $\tilde{H}_2$ に属するかというと、そうとも限らないことを断っておく。

通常、 $\tilde{H}_2$ は $\langle \phi | \varphi \rangle$ を内積としたヒルベルト空間であるとされる。即ち、 $\tilde{H}_2$ の任意の波動関数 $\varphi(w)$ に対して

$$\langle \phi | \varphi \rangle = 0 \Leftrightarrow \varphi(w) = 0 \quad (38)$$

であるように定められる。（その他の性質は、すでに $\langle \phi | \varphi \rangle$ の定義から得られる。）

以下では常に $\tilde{H}_2$ は (38) の条件があるとしておく（ $\langle \phi | \varphi \rangle$ などが収束することは仮定していない）。こ

の時、2つの作用素 A, B があるとする。これらが任意の $\tilde{H}_2$ 内の波動関数 ϕ, φ に対し

$$\langle \phi | A | \varphi \rangle = \langle \phi | B | \varphi \rangle \quad (39)$$

であったとしよう。すると

$$\langle \phi | (A - B) | \varphi \rangle = 0.$$

今、 $A | \varphi \rangle$ も $B | \varphi \rangle$ も $\tilde{H}_2$ の元であるならば、 $(A - B) | \varphi \rangle$ も $\tilde{H}_2$ の元となり、よって $\phi = (A - B) | \varphi \rangle$ にとれば (38) から

$$(A - B) | \varphi \rangle = 0$$

が得られる。 φ も $\tilde{H}_2$ 内の任意の元なので、結局 $A - B$ は $\tilde{H}_2$ 上では 0、つまり、 $\tilde{H}_2$ 上では $A = B$ である。

多くの場合、 $\varphi \in \tilde{H}_2$ ならば $A\varphi \in \tilde{H}_2$ であり、よって以下では特に断らなければ、任意の作用素に対してもそうであると仮定する。従って (39) から、 $\tilde{H}_2$ 上では $A = B$ としてよい。

これは時に $A \approx B$ と書かれ、弱符号と呼ばれる。混乱の恐れがなければ、ただ $A = B$ と書くことにする。また、 $\approx$ は波動関数の間の符号にも使われる。意味は同じである。

時に、ある付加条件に対して、 $\tilde{H}_2$ が定められている時、さらに他の付加条件を付け $\tilde{H}_2$ のうちからさらに波動関数の種類を絞ることがある。その場合にも同じように新しく $\tilde{H}_3$ を定めればよい。その場合には、弱符号 $\approx$ はどちらのものに対してなのかはつきりとさせておかななくてははいけない。

5 さらに数学的諸性質

ある1組の関数系 $\phi_\mu(w)$ が与えられているとする。ここでパラメータ μ は任意の実数で、 ϕ_μ は μ に関しても滑らかであるとする。この ϕ_μ が ($\tilde{H}_2$ 上で) 完全規格直交系をなしているとする。この時、次のようなフローを考える。つまり、任意の ϕ_μ, λ に対し

$$U_\lambda \phi_\mu = \phi_{\mu+\lambda} \quad (40)$$

となるような線形なフローである。この U_λ は ϕ_μ の完全性から、これだけで完全に定まる。

また、任意の ($\tilde{H}_2$ 上の) 波動関数 $\psi(w)$ は

$$\psi(w) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \phi_\mu(w) \langle \phi_\mu | \psi \rangle$$

と書ける。よってこれに U_λ を作用すると、

$$\begin{aligned} U_\lambda \psi &= \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \phi_{\mu+\lambda} \langle \phi_\mu | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \phi_\mu \langle \phi_{\mu-\lambda} | \psi \rangle \end{aligned}$$

よって、任意の ν に対し

$$\begin{aligned} \langle \phi_\nu | U_\lambda | \psi \rangle &= \langle \phi_{\nu-\lambda} | \psi \rangle \\ &= \langle \phi_\nu | U_{-\lambda}^\dagger | \psi \rangle \end{aligned}$$

ϕ_μ の完全性から任意のブラベクトルに対しても上式が成り立つ。つまり

$$\langle \psi | U_\lambda | \psi \rangle = \langle \psi | U_{-\lambda}^\dagger | \psi \rangle$$

よって、 $\tilde{H}_2$ 上で

$$U_\lambda = U_{-\lambda}^\dagger \quad (41)$$

であることが分かる。或いは、

$$U_{-\lambda} = U_\lambda^\dagger \quad (42)$$

とも書ける。ここで U_λ は (40) から、(26)(27) の条件を満たしていることが分かる。よって

$$U_\lambda U_\lambda^\dagger = U_\lambda^\dagger U_\lambda = 1. \quad (43)$$

このような作用素は一般 n にユニタリー作用素と呼ばれる。また、(26)(27) 及び、 U_λ の線形性から U_λ は (25) の形に書けることが分かる。

このようなフローは多くの場合に現れ、重要である。特に、 $\phi_{\dot{\mu}}$ が作用素 μ の固有値 $\dot{\mu}$ に属する固有解である場合を考えてみる。(40) より

$$\begin{aligned} \mu U_\lambda \phi_{\dot{\mu}} &= \mu \phi_{\dot{\mu}+\lambda} \\ &= (\dot{\mu} + \lambda) \phi_{\dot{\mu}+\lambda} \\ &= U_\lambda (\dot{\mu} + \lambda) \phi_{\dot{\mu}} \\ &= U_\lambda (\mu + \lambda) \phi_{\dot{\mu}} \end{aligned}$$

ϕ_μ は ($\tilde{H}_2$ 上で) 完全系なので

$$U_{-\lambda}\mu U_\lambda = \mu + \lambda \quad (44)$$

となる。 $(\phi_\mu$ が $\tilde{H}$ 上でも完全系をなしていたなら (44) は普通の符号として成立する。しかしここでは (42)(43) は一般には成立しない。) よって、(33) 式は

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\mu_\lambda}{d\lambda} &= [\mu_\lambda, \eta] \\ &= i\hbar \end{aligned} \quad (45)$$

となり、(35) の形となった。また、その時の結論はこのものと一致している。

さらに η について、 $\tilde{H}_2$ の任意の 2 つの波動関数 ψ, ψ' に対し

$$i\hbar \frac{d}{d\lambda} \langle \psi' | U_\lambda | \psi \rangle = \langle \psi' | \eta U_\lambda | \psi \rangle \quad (46)$$

一方、 $\tilde{H}_2$ 上で (42) であるので

$$-i\hbar \frac{d}{d\lambda} \langle \psi | U_\lambda^\dagger | \psi' \rangle = \langle \psi | U_\lambda^\dagger \eta | \psi' \rangle \quad (47)$$

(46) 式の複素共役を取れば、(47) 式に一致するので

$$U_\lambda^\dagger \eta^\dagger = U_\lambda^\dagger \eta.$$

(46) を用いて、結局 $\tilde{H}_2$ 上で

$$\eta^\dagger = \eta \quad (48)$$

が得られる。つまり η は $\tilde{H}_2$ 上で自己エルミートとみなせる。

ここまでのものの 1 例として作用素 μ が座標 w の場合を取り上げる。 w に対しては、その固有解 ϕ はデルタ関数であり、固有値 $\acute{w}$ に対して

$$w\delta(w - \acute{w}) = \acute{w}\delta(w - \acute{w})$$

である。これは明らかに完全規格直交系をなしている、フロー U_λ は

$$\begin{aligned} U_\lambda \psi(w) &= \int d\acute{w} \delta(w - \lambda - \acute{w}) \psi(\acute{w}) \\ &= \psi(w - \lambda) \end{aligned}$$

であるので、その生成作用素は

$$i\hbar \frac{d}{d\lambda} \psi(w - \lambda) = -i\hbar \frac{d}{dw} \psi(w - \lambda).$$

より、

$$-i\hbar \frac{d}{dw} =: P$$

が生成作用素である。またフロー U_λ は

$$\begin{aligned} U_\lambda &= \exp\left(\frac{P\lambda}{i\hbar}\right) \\ &= \exp\left(-\lambda \frac{d}{dw}\right). \end{aligned} \quad (49)$$

と書ける。 P は (48) から $\tilde{H}_2$ 上で自己エルミートである。

逆に、この P に対してはその固有値を p とすると

$$-i\hbar \frac{d}{dw} \phi_p = p \phi_p$$

の解が固有解であり、解けば

$$\phi_p(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}w}$$

となる。これはフーリエ積分論より完全規格直交系をなしていることが知られている。また、容易に分かるように

$$i\hbar \frac{d}{d\lambda} U_\lambda \varphi = -w U_\lambda \varphi.$$

よって、生成作用素は $-w$ である。従ってこの時のフローは

$$U_\lambda = \exp\left(-\frac{w}{i\hbar}\lambda\right) \quad (50)$$

である。もちろんこれは、 ϕ_p を見れば直接分かる。

ここで、 w の関数 $f(w)$ を、作用素として考えることが出来る。この時、(49) のフローに対して、(44) を導いたのと同じようにして

$$U_{-\lambda} f(w) U_\lambda = f(w + \lambda) \quad (51)$$

となるのが分かる。これは $\tilde{H}$ 上で成立する。((51) の結果は一般の場合に拡張することが出来る。) また、(33) 式から

$$i\hbar \frac{df(w)}{dw} = [f(w), P] \quad (52)$$

となる (これも拡張出来る)。

6 ベクトルの表現

次にパラメータによらない線形作用素 M と作用素 V^i ($i = 1, 2, 3, \dots, n$) が与えられていて、交換関係

$$[M, V^i] = i\hbar \sum_j a_{ij} V^j \quad (53)$$

が成立しているとする ($a_{ij} \in \mathbb{C}$)。 M により生成されるフロー U_λ は

$$U_\lambda = \exp\left(\frac{M}{i\hbar} \lambda\right)$$

である。(33) から (53) は

$$-\frac{dV_\lambda^i}{d\lambda} = \sum_j a_{ij} V_\lambda^j \quad (54)$$

と書ける。ここで $A := (a_{ij})_{ij}$ (行列の意味) と置き

$$\mathbf{V} := \begin{pmatrix} V^1 \\ V^2 \\ \vdots \\ V^n \end{pmatrix} \quad (55)$$

として、作用素をベクトル表現する。こうすると (53) はまとめて、簡単に

$$-\frac{d\mathbf{V}_\lambda}{d\lambda} = A\mathbf{V}_\lambda \quad (56)$$

と書ける。これを解けば、

$$\mathbf{V}_\lambda = \exp(-A\lambda)\mathbf{V} \quad (57)$$

となることが容易に分かる。

今度はパラメータによらない線形作用素 M^μ ($\mu = 1, 2, \dots, m$) があり、作用素 V^i ($i = 1, 2, \dots, n$) との交換関係

$$[M^\mu, V^i] = i\hbar \sum_j a_{ij}^\mu V^j \quad (58)$$

が成立していたとする。ここでも作用素の行列表現をする。つまり

$$A^\mu := (a_{ij}^\mu)_{ij} \quad (59)$$

とする。この時、複素数 e_μ ($\mu = 1, 2, \dots, m$) があり、それらもまとめて

$$\mathbf{e} := \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_m \end{pmatrix} \quad (60)$$

とベクトルで書くとする。また、 M^μ もまとめて

$$\mathbf{M} := \begin{pmatrix} M^1 \\ M^2 \\ \vdots \\ M^m \end{pmatrix} \quad (61)$$

と書く。この時、

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{M} := \sum_\mu e_\mu M^\mu \quad (62)$$

により生成されるフローについて考える。この時フロー U_λ は

$$U_\lambda = \exp\left(\frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{M}}{i\hbar} \lambda\right) \quad (63)$$

である。この時 (33) より

$$-i\hbar \frac{dV_\lambda^i}{d\lambda} = \sum_\mu e_\mu [M^\mu, V_\lambda^i]$$

が分かる。 V^i について、ベクトルでまとめて書けば (58)(59) より

$$-\frac{d\mathbf{V}}{d\lambda} = \sum_\mu e_\mu A^\mu \mathbf{V}. \quad (64)$$

そこで

$$\hat{A} := \begin{pmatrix} A^1 \\ A^2 \\ \vdots \\ A^n \end{pmatrix} \quad (65)$$

とすれば (64) は

$$-\frac{d\mathbf{V}_\lambda}{d\lambda} = (\mathbf{e} \cdot \hat{A})\mathbf{V}_\lambda \quad (66)$$

となる。これを解くと

$$\mathbf{V}_\lambda = \exp(-\mathbf{e} \cdot \hat{A})\mathbf{V} \quad (67)$$

となることが分かる。

7 多変数の場合

ここまでは、波動関数は1変数 w の関数であるとしてきたが、一般には波動関数は多変数関数で $\mathbf{x} = (x^1, x^2, \dots, x^n)$ の関数 $\varphi(\mathbf{x})$ である。しかし、その場合でも (1) 式は

$$\langle \phi | \varphi \rangle := \int \dots \int dx^1 \dots dx^n \phi^\dagger(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}) \quad (68)$$

であり、(3) 式は

$$\langle \phi | := \int \dots \int dx^1 \dots dx^n \phi^\dagger(\mathbf{x}) * \quad (69)$$

と書き直されるだけである。ここで (68)(69) の積分は変数 x^i のそれぞれの取る範囲の全域にわたるものである。 $\mathbf{x}$ が直交座標系ならば、(系が $\mathbb{R}^n$ として) それぞれの x^i は $-\infty$ から ∞ の範囲の積分である。

しかし、一般には x^i は実数値全体とは限らない。その時は次の点に注意しないといけない。それは前の section において、 x^i を作用素と見たときの、その固有値を”ずらす”フローについての性質が、よってその生成作用素の性質がそのまま成り立つとは限らなくなるということである。実際、波動関数が極座標 (r, θ, φ) の関数である時、 $r \geq 0$ であり、 $P_r := -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$ は自己エルミート ($\tilde{H}_2$ 上で) ではない。この時には、実は

$$P_r - i\hbar \frac{1}{r}$$

が自己エルミートになる。

基本的な場合は $\mathbf{x} = (x, y, z)$ の直交座標系である。この時、これらに対して

$$\begin{aligned} P_x &:= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ P_y &:= -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ P_z &:= -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned}$$

が定まり、これらについては前 section の議論がそのまま成り立つ。従って基本的な交換関係

$$[x^i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (70)$$

(ただし $i, j = 1, 2, 3$ に対し x, y, z が対応する) が成立する。

(70) はもっと一般的な場合にももちろん拡張できる。即ち $i = 1, 2, 3, \dots, n$ に対し x^i 及び $P_i := -i\hbar \frac{\partial}{\partial x^i}$ とした時、波動関数が $\mathbf{x} = (x^1, \dots, x^n)$ 上の関数である時

$$[x^i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (71)$$

である。即ち前に注意した場合においても (70) は成立する。それは、常に

$$\left[\frac{\partial}{\partial x^j}, x^i \right] = \delta_{ij}$$

となるからである。しかし、前にも注意した通り、だからといって P_i が自己エルミートであるとは限らない。

8 角運動量

section 6 の数学的な性質を持つ例として、角運動量作用素がある。それは、波動関数が簡単に x, y, z の関数であるとし、また

$$\mathbf{P} := -i\hbar \nabla \quad (72)$$

として、作用素のベクトルを定める。ちなみに (72) は運動量ベクトルといわれ、その成分 P_i は運動量に i 成分といわれる。この時、角運動量ベクトルは

$$\mathbf{m} := \mathbf{x} \times \mathbf{P} \quad (73)$$

で定められる ($\times$ は通常のベクトルの外積である)。その成分は

$$m_i := \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} x^j P_k \quad (74)$$

となる。これを角運動量の成分という。

この時、第3成分、即ち m_z に対して (53) は

$$\begin{aligned} \cdot [m_z, x] &= i\hbar y \\ \cdot [m_z, y] &= -i\hbar x \\ \cdot [m_z, z] &= 0 \end{aligned} \quad (75)$$

であることが確かめられる。よって A は

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (76)$$

となる。このとき (75) で、 x, y, z の代わりに m_x, m_y, m_z を用いても、それに対する A は (76) と同じであることが確かめられる。

また、(57) は、(λ を θ と書いて)

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_\theta &= \exp(-A\theta)\mathbf{x} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{x} \end{aligned} \quad (77)$$

となることが分かる。ここで2つの作用素ベクトル

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &:= \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} \\ \mathbf{w} &:= \begin{pmatrix} w_x \\ w_y \\ w_z \end{pmatrix} \end{aligned}$$

がそれぞれ m_z との交換関係 (75) であるとする。従って $\mathbf{v}$ も $\mathbf{w}$ も (77) が成立するが、その時

$$[m_z, \mathbf{v}] := \begin{pmatrix} [m_z, v_x] \\ [m_z, v_y] \\ [m_z, v_z] \end{pmatrix} \quad (78)$$

と書くと、

$$\begin{aligned} [m_z, \mathbf{v} \cdot \mathbf{w}] &= [m_z, \mathbf{v}] \cdot \mathbf{w} + \mathbf{v} \cdot [m_z, \mathbf{w}] \\ &= i\hbar(A\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} + \mathbf{v} \cdot A\mathbf{w}) \\ &= 0 \end{aligned}$$

となることが分かる¹。つまり (作用素の) ベクトルの内積は角運動量と交換し、よって回転のフローにより回転しないスカラーである。

¹これは (77) より

$$\begin{aligned} e^{-\frac{m_z}{i\hbar}\theta} \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} e^{\frac{m_z}{i\hbar}\theta} &= \mathbf{v}_\theta \cdot \mathbf{w}_\theta \\ &= \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} \end{aligned} \quad (79)$$

となることから分かる。

9 量子力学における確率

量子力学では物理量 A の作用素は自己エルミートであり、その固有状態 $|a_i\rangle$ は完全系をなす。また異なる固有値 a_i に属する固有解 $|a_i\rangle$ は

$$(A - a_i)|a_i\rangle = 0$$

一方、左から他の A の固有値 a_j に属する固有解 $|a_j\rangle$ を左からかけると

$$(a_j - a_i)\langle a_j|a_i\rangle = 0$$

となる。 $a_i \neq a_j$ なので $\langle a_j|a_i\rangle = 0$ ($i \neq j$) となる。 $i = j$ の時は0にはならないので規格化すると

$$\langle a_j|a_i\rangle = \delta_{ij} \quad (80)$$

となる。即ち直行する。

もし固有値が連続的の時は右辺はデルタ関数であり、

$$\langle \hat{a}|a\rangle = \delta(\hat{a} - a) \quad (81)$$

となる。

以下では簡単のため固有値が離散的であるとする。系の状態が φ で与えられた時、 A の固有解は完全規格直交系をなすので、

$$|\varphi\rangle = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i|\varphi\rangle \quad (82)$$

で与えられる。物理量 A の期待値は (16) より

$$\begin{aligned} \langle \varphi|A|\varphi\rangle &= \sum_{ij} \langle \varphi|a_j\rangle \langle a_j|A|a_i\rangle \langle a_i|\varphi\rangle \\ &= \sum_{ij} a_i \delta_{ij} \langle \varphi|a_j\rangle \langle a_i|\varphi\rangle \\ &= \sum_i a_i |\langle a_i|\varphi\rangle|^2 \end{aligned} \quad (83)$$

と表すことができる。従って系の状態が φ にある時に、物理量 A を観測して観測量 a_i が得られる確率 P_i は

$$P_i = |\langle a_i|\varphi\rangle|^2 \quad (84)$$

で与えられる。特に $|\varphi\rangle = |a_j\rangle$ の時、 a_i が観測される確率は $i = j$ の時 1、 $i \neq j$ の時 0 となる。即ち必ず a_j が観測される。

固有値が連続的である場合は確率密度であり、固有値が $a_0 \sim a_1$ の範囲に観測される確率は

$$\int_{a_0}^{a_1} |\langle a|\varphi\rangle|^2 da \quad (85)$$

で表される。

特に系がひとつの粒子が存在する系であり、物理量として位置座標 x をとった場合は、

$$P(x) = |\langle x|\varphi\rangle|^2 \quad (86)$$

は位置を観測した時に粒子が x に観測される確率密度を表す。

時間発展作用素を T_t とする。系の初期状態が $|a_i\rangle$ であった時、時刻 t には系の状態は $T_t|a_i\rangle$ となる。従って物理量 A に対してその固有解 $|a_j\rangle$ が系の初期状態であった時、時刻 t に物理量 A を観測した時に a_j である確率は

$$P_{ij} = |\langle a_j|T_t|a_i\rangle|^2 \quad (87)$$

で与えられる。これを状態 $|a_i\rangle$ から状態 $|a_j\rangle$ への遷移確率という。容易にわかるように $P_{ij} = P_{ji}$ である。即ち状態 $|a_i\rangle$ から $|a_j\rangle$ への遷移確率と $|a_j\rangle$ から $|a_i\rangle$ への遷移確率は等しい。これは量子力学の一般的な性質である。

10 束縛系と束縛状態

量子力学の系は、大きく分けて**束縛系**か**散乱系**かに分けることができる。以下で、それぞれについて説明をする。

簡単のために、ひとつの粒子が存在する系を考える。波動関数を位置 $\mathbf{x}$ の関数 $\varphi(\mathbf{x})$ として表した時、粒子が領域 D の中に存在する確率は

$$\int_D |\varphi(\mathbf{x})|^2 d^3\mathbf{x} \quad (88)$$

で与えられる。今、領域 D の外側の領域 D^c における粒子の存在確率が

$$\int_{D^c} |\varphi(\mathbf{x})|^2 d^2\mathbf{x} \sim 0 \quad (89)$$

であるならば、粒子は領域 D の中にほとんど必ず見出すことができ、領域 D の外側に見出す確率はほとんどないことを意味する。このことは、粒子を領域 D の中に見出す確率が

$$\int_D |\varphi(\mathbf{x})|^2 d^2\mathbf{x} \sim 1 \quad (90)$$

であるとも表すことができる。さて波動関数の時間依存はシュレディンガー方程式により決まり、従って時刻 t の依存性をあらわに書いて、波動関数を $\varphi_t(\mathbf{x})$ と表すことにする。この時、任意の時刻 t に対しての、粒子を領域 D の中に見出す確率が

$$\int_D |\varphi_t(\mathbf{x})|^2 d^3\mathbf{x} \sim 1 \quad (91)$$

である時に、粒子は領域 D に**束縛されている**という、粒子は**束縛状態**にあるという。また、このような系を**束縛系**と呼ぶ。

逆に、系が束縛系でない場合はどのような状態がありうるであろう。全空間での積分が

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\varphi(\mathbf{x})|^2 d^3\mathbf{x} = \infty \quad (92)$$

と発散する場合には、どのような場所においても一般には粒子の存在確率密度は 0 にはならず、従ってどの領域にも束縛されていないことがわかる。また粒子が各時刻 t においては、束縛系の説明であったような、領域 D を見いだすことができても、時刻によってそのような領域 D が変わる場合も考えられる。従って領域を D_t と書いて、

$$\int_{D_t} |\varphi_t(\mathbf{x})|^2 d^3\mathbf{x} \sim 1 \quad (93)$$

となる。領域 D_t は時刻 t が変化すれば移動する。もしすべての時刻 t において、より広い領域 V ($D_t \subset V$) の中に粒子を常に見出すことができるのであれば、それはやはり束縛系ということができるかもしれない

い。そのような V が見いだせない、または見出すことができても考える問題に対して広すぎて束縛されているとみなせない場合にも、やはり束縛されていない状態といえる。

11 具体的な例

11.1 自由粒子

質量 m の自由粒子の系のハミルトニアン H は、自由粒子の運動量を p とした時、

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dx} \right)^2 \end{aligned} \quad (94)$$

で与えられる。エネルギーの固有状態を E とした時、エネルギーの固有解は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dx} \right)^2 |E\rangle = E |E\rangle \quad (95)$$

を満たす解である。これはすぐに解くことが出来て、

$$|E\rangle = C \exp \left(\pm i \frac{\sqrt{2mE}x}{\hbar} \right) \quad (96)$$

を得る。 C は適当な定数である。時間発展は $|E, t\rangle = T_t |E\rangle$ であるので

$$i\hbar \frac{d}{dt} |E, t\rangle = E |E, t\rangle \quad (97)$$

の解であり、解くと

$$\begin{aligned} |E, t\rangle &= e^{-i\frac{Et}{\hbar}} |E\rangle \\ &= C \exp \left(i \frac{\pm \sqrt{2mE}x - Et}{\hbar} \right) \end{aligned} \quad (98)$$

となる。

11.2 束縛状態のエネルギー固有値

ポテンシャルエネルギー V の中で運動する質量 m の粒子の系のハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{2m} + V \quad (99)$$

で与えられる。従ってエネルギーの固有解 φ_E は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dx} \right)^2 \varphi_E = (E - V)\varphi_E \quad (100)$$

の解である。従ってこの微分方程式の形式解は

$$\varphi_E = C \exp \left(\pm i \int_{x_0}^x \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar} dx \right) \quad (101)$$

となる。

ここで、ポテンシャルエネルギーがある有界な領域 D 内で $E > V$ で、 D の外側では $E < V$ であるとする。 D の外側にある適当な点 p をとり、 p の十分近傍では V はほぼ一定値であるとみなせるので、その領域内では微分方程式 (100) の解は近似的に

$$\varphi_E \sim C \exp \left(\pm \frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar} x \right) \quad (102)$$

のように振る舞う。 $x > 0$ では、粒子が領域 D 内に束縛されている時は、

$$\varphi_E \sim C \exp \left(-\frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar} x \right) \quad (103)$$

となる。もう一方の符号の場合は波動関数が指数的に増大することになり、粒子が領域 D 内に観測される確率は ~ 0 になり、無限遠でのみ観測される状態を表している。 $x < 0$ の時も同様である。従って D の外側の領域では $|\varphi_E(x)|^2$ が指数関数的に減衰するために積分は収束する。

$$\int_{D \text{ の外側}} |\varphi_E(x)|^2 dx < \infty \quad (104)$$

また、 $|\varphi_E(x)|^2$ は D の内部では有限の値をとるので、 D の内部での積分も有限の値となる。従って $\langle \varphi_E | \varphi_E \rangle$ は有限の値をとることになる。

一方、 E が連続固有値であるとする、固有状態の規格直交条件は $\langle \varphi_{\hat{E}} | \varphi_E \rangle = \delta(\hat{E} - E)$ であるために、 $\langle \varphi_{\hat{E}} | \varphi_E \rangle$ は発散しないといけない。このことから、束縛状態のエネルギー固有値は連続固有値とはなりえない。即ち、束縛系のエネルギー固有値はとびとびの値をとることになる。

逆に系のエネルギー固有値が連続的であるとする $\langle \varphi_{\hat{E}} | \varphi_E \rangle$ が発散することから、どのような有界な領域 D を選んでも

$$\int_{D \text{ の外側}} |\varphi_E(x)|^2 dx = \infty \quad (105)$$

となってしまう。従って、連続的なエネルギー固有値に属する固有状態 φ_E は束縛状態ではない。

12 確率の流れ

ポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{x})$ の中を運動する質量 m の粒子の系のシュレディンガー方程式は

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\varphi}{dt} &= H\varphi \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x}) \right) \varphi \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} *d *d + V \right) \varphi \end{aligned} \quad (106)$$

と書ける。最後の等式は微分形式を使って表現している。シュレディンガー方程式を用いて、領域 D に存在する確率の時間微分を計算すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_D *|\varphi|^2 &= \frac{1}{i\hbar} \int_D *(-H\varphi^* \cdot \varphi + \varphi^* \cdot H\varphi) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_D (-d *d\varphi^* \wedge \varphi + \varphi^* \wedge d *d\varphi) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_D d *(\varphi^* \wedge d\varphi - d\varphi^* \wedge \varphi) \end{aligned} \quad (107)$$

となる。ここで

$$J = -\frac{i\hbar}{2m} (\varphi^* \wedge d\varphi - d\varphi^* \wedge \varphi) \quad (108)$$

は確率の流れベクトルと解釈できる。確率流れを使って書くと

$$\frac{d}{dt} \int_D *|\varphi|^2 = - \int_{\partial D} *J \quad (109)$$

と書ける。積分を使わないで書くと、

$$* \frac{\partial}{\partial t} |\varphi|^2 + d * J = 0 \quad (110)$$

となる。これはいわゆる連続の方程式である。特に、粒子が領域 D の内側に束縛されており、 D の外側には粒子が存在しない場合には領域 D の境界面 ∂D で J の積分は 0 となるため、確率の保存則

$$\frac{d}{dt} \int_D *|\varphi|^2 = 0 \quad (111)$$

が得られる。