

量子力学の導入

Physics Lab. 2021 数理物理学班

顧 豪

この解説 PDF は紹介記事の中身を少しだけ膨らませたものになっております。弦理論などで使う量子力学の基礎を扱います。理系の高校生 2 年生程度の知識を持っていれば少し難しめではありますが、読めるように気をつけております。また、細かい式変形が追えなくても大丈夫です。今は「こんな結果があるんだ」ということを受け入れて、雰囲気を感じて頂ければ幸いです。

1 量子力学の基礎

シュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x, y, z, t)\right)\psi(x, y, z, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, y, z, t) \quad (1)$$

を眺めてみます。両辺に $\psi(x, y, z, t)$ (「プサイ」と呼びます) があります。これが「波動関数」です。量子力学では波動関数を求めたいことが結構あります。なぜなら、波動関数の 2 乗 $\psi^*\psi$ は粒子の存在確率 (密度) になっているからです。上の式を計算して、両辺がイコールになるような波動関数を求める必要があるのです。左辺右辺共に波動関数に対して偏微分を行なっています。偏微分とは、ある変数についてだけ微分することを言います。例えば、 $x = 2t$ と $y = x^2 + t$ に対して、全微分なら連鎖律で

$$\frac{dy}{dt} = 2x\frac{dx}{dt} + 1 = 4x + 1 = 8t + 1 \quad (2)$$

となりますが、 t に対する偏微分なら、

$$\frac{\partial y}{\partial t} = 1 \quad (3)$$

です。シュレディンガー方程式の両辺を見比べてみると、違う微分操作をしたのに同じ関数になるような波動関数 ψ を求める必要があるのです。

ここで、 $\psi(x, y, z, t)$ の時間部分と空間部分が

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z)e^{-i\omega t} \quad (4)$$

という風に分けられたとします (φ は「ファイ」と呼びます)。シュレディンガー方程式から時間部分をなくして、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x, y, z)\right)\varphi(x, y, z) = E\varphi(x, y, z) \quad (5)$$

という風になることが計算するとわかります (具体的な計算はできなくても大丈夫です)。 E がエネルギーを示しています。 E はなんでも良いわけではありません。この式を満たせる E とそれに対応した φ を固有値と

固有関数を求めます。ある固有値にはそれに対応した固有関数があります。ペアになっていることがわかるように、 E_n, φ_n などと書きます。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x, y, z)\right)\varphi_n(x, y, z) = E_n\varphi_n(x, y, z) \quad (6)$$

異なる n と m に対して $E_n = E_m$ となることもあります（「縮退している」と言います）が、以下の議論ではそのようなことはありません。一回の観測では、固有値の E_n のうちのどれか一つだけが観測されます。

今度は別なトピック、正準交換関係について説明します。もしなんのためにこの議論をするかわからないから先へ行ってからまた戻るといっているのであればまず第2節を読み始めてください。いずれ戻ってくるでしょう。

正準交換関係について説明します。量子力学では、様々な物理量（位置、運動量）を演算子（微分記号とか関数に作用できるもの）として取り扱います。この文章では、 \hat{A} のように頭に「ハット」を被ったものが演算子です。複数の演算子が関数に作用する順番が違っていると得られる結果が異なることが多々あります。それを評価するために、ある関数 X に対して、演算子 \hat{A}, \hat{B} の順番を逆にしたときに得られる結果の差

$$\hat{A}\hat{B}X - \hat{B}\hat{A}X \quad (7)$$

を求めます。この式を、 $[\hat{A}, \hat{B}]X$ と書きます。ここで、 $[\hat{A}, \hat{B}]$ も一つの演算子のように振る舞うことに注意します。

有名なものとしては、

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (8)$$

があります。特にこの関係を正準交換関係と言います。この関係は後ほど使います。

実は、

$$\hat{x} = x \quad (9)$$

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (10)$$

とすると、上の関係式を満たせます。これはよく使うので、覚えておいても損はないでしょう。

ここで一つコメントをしておきます。 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ となるような2つの演算子は、どの順番で作用させても関係がないのですが、 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ のように0にならないものは、演算子を作用させる順番を変えてしまうと得られる結果も変わってしまうのです。

2 バネ (調和振動子) 生成消滅演算子の導入

この節では、今後度々使う「生成消滅演算子」の考え方を簡単に導入します。その過程で、古典力学では物理量は数（スカラー）ですが、量子力学では演算子として取り扱っていきます。その様子を見ていただきましょう。

まず、高校の物理で、バネにくっついた小球のエネルギー保存の式から復習します。 x 方向に伸びたバネを想像しましょう。バネの釣り合いの位置を0、バネ定数を k とすると、エネルギーは、

$$E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2 \quad (11)$$

です。 x の上についたドットは時間微分を表します。つまり、ここでは速度 v を \dot{x} で表しています。

このエネルギー E は外から力を加えない限り保存されます。この式を運動量と x に関する式に書き換えるために、

$$\dot{x} = \frac{p}{m} \quad (12)$$

をと書き換えます。すると、

$$E = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kx^2 \quad (13)$$

が導かれます。ここで、量子力学に翻訳しましょう。

$$E \rightarrow \hat{H} \quad (14)$$

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (15)$$

$$x \rightarrow x \quad (16)$$

とします。ここに、右から波動関数 $\varphi(x)$ をかけて、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (17)$$

となります。今は時間に依存しないシュレディンガー方程式を考えています。量子力学では、固有値が観測される量で、波動関数の大きさの2乗 $|\varphi(x)|^2 dx$ は、粒子が x から $x + dx$ の間に存在する確率を示してくれます。ここで、 $\omega = \sqrt{k/m}$ と置いて、上の式を書き換えると

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (18)$$

となります。この式の固有値は計算してみると、

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (19)$$

となることが知られています (固有関数 $\psi_n(x)$ は複雑な形をしていて、この後使わないので省略します)。ここで、 n は固有値の「番号」のようなものです。例えば、 $n = 2$ とすると

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\varphi_2(x) = \left(2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\varphi_2(x) \quad (20)$$

となります。また、固有関数を計算してみると、 n は0以上の整数しか取れないことが知られています。つまり、量子力学的なバネでは、どんなにエネルギーを下げても、0にはならず、何かしら有限の値を持つこととなります。この形の固有値は、今後どこかでお見かけするかもしれません。

ここからが本題です。式(18)をもっと簡単な形、さらには使い勝手の良い形に変形できたらいいなと思うでしょう。はい、できます。それをここから紹介していきます。

ここで、新しい演算子 \hat{a}, \hat{a}^\dagger (「生成消滅演算子*1」と呼びます) を以下のように導入します。

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \quad (21)$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \quad (22)$$

*1 昇降演算子、ラダー演算子とも言います。

ただし、 \hat{p} は $-i\hbar \frac{d}{dx}$ を示しています。このごちゃごちゃした式を覚える必要はありません。大事なのは、 \hat{a} などが位置演算子 \hat{x} や運動量演算子 \hat{p} が 1 次の線型結合で書けるということです。そして、固有関数にこれらの演算子を作用させると、

$$\hat{a}^\dagger \varphi_n(x) = \sqrt{n+1} \varphi_{n+1}(x) \quad (\text{for } n \geq 0) \quad (23)$$

$$\hat{a} \varphi_n(x) = \sqrt{n} \varphi_{n-1}(x) \quad (\text{for } n \geq 1) \quad (24)$$

$$\hat{a} \varphi_0(x) = 0 \quad (25)$$

$$(26)$$

であることが計算するとわかります。これらの式をよく眺めてみると、 \hat{a}^\dagger は n 番目の固有関数に作用させると、定数倍された $n+1$ 番目の固有関数が得られます。固有関数一つ「ランクアップ」(高いエネルギー側にシフト)しているわけです。一方、 \hat{a} は逆に、 n 番目の固有関数を $n-1$ 番目にランクダウンしてしまいます。このように、 \hat{a}^\dagger と \hat{a} を作用させると固有関数の番号が上がり下がりすることから、はしご(ラダー)のようだからラダー演算子、あるいは昇降演算子と呼ばれたりします。また、エネルギー $\hbar\omega$ を持つ「粒子」を生み出したり、消したりする、と考えることによって生成消滅演算子とも呼ばれます。この観点の一般化は場の量子論で使われることになります。ちなみに最後の一式は、一番低いエネルギー状態の固有関数 $\varphi_0(x)$ をさらにランクダウンさせようとしても、何もない状態になってしまうことを意味します。このため、 $\varphi_0(x)$ に対応する状態は「粒子」が 1 つもない状態、すなわち「真空状態」とであると解釈することができます。

また、上の 2 式を使うと、

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} \varphi_n(x) = n \varphi_n(x) \quad (27)$$

$$\hat{a} \hat{a}^\dagger \varphi_n(x) = (n+1) \varphi_n(x) \quad (28)$$

ここで、交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ であることが上の式から下の式を引くとわかります。

さらに、この \hat{a}^\dagger と \hat{a} を使うと、ハミルトニアンが

$$H = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (29)$$

という簡潔で見やすい形(しかも意味もわかりやすい形!)に書き換えられます。

そして、

$$H \varphi_n(x) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \varphi_n(x) \quad (30)$$

が成立するのです。この生成消滅演算子の考え方は、場の量子論などで使うことになります。

3 場の量子化

古典力学の記事で解説記事で弦を光錐ゲージにおいて量子化します。その導入のために、まずはスカラー場の量子化を簡単に見てみましょう。

3.1 「場の量子論」とは

「場の量子論」とは何であるか、(少なくとも数学者向けには)一言で説明することはできない、とよく言われます。そんな場の量子論は、物理的には特殊相対性理論と量子力学の両方の要請を満たすようにして構築

されています*2。場の量子論は現代の物理の理論の根幹をなしています。あの標準模型も場の量子論に立脚しており、実験的にも検証されています。ここでは場の量子論の理論的な構造については議論せず、「場」の「量子論」の雰囲気を紹介してみます。

3.2 「場」とは

「場」については実はすでに古典力学の記事で概念の紹介はしているのですが、復習も兼ねてもう一度説明します。

「場」というのは「時空の各点で何らかの量が定まっているもの」のことを言います。「何らかの量」には色々種類があり、例えばスカラーやベクトルなどがあります。ここでいうスカラーとはローレンツ変換の下でスカラーになることを意味しています。考えている時空の各点にスカラー量を対応させるものをスカラー場といいます。同様に時空の各点に（ローレンツ変換の下での）ベクトル量を対応させるものをベクトル場といいます。

このように言われてもあまりどういうものか分かりにくいかもしれませんが、よく用いられる身近な例としては、スカラー場として、天気予報などで見る気温や気圧の図などを想像していただけると分かりやすいかと思います。天気図では地図上の各点にその点での気温や気圧が対応しています。ベクトル場としては風向きの図のようなものをイメージすると分かりやすいかもしれません。

以上のことを少し数式を用いてシンボリックに書くと、 P を任意の時空の点としてそこに $\varphi(P)$ という量が適切に定まっているとき、 φ のことを場といいます。一般相対性理論の記事でさらっと紹介した「(局所)座標系」というものを使うと、 P の周りで φ は座標 (t, \vec{x}) の関数として $\varphi(t, \vec{x})$ という風に書けます。ここで、カッコの中身に時間 t だけでなく位置 \vec{x} も入っていることに注意しておいてください。

この φ のような場が理論の主役となっている理論を場の理論といいます。高校物理で扱うニュートン力学では、質点の位置 $\vec{x}(t)$ を求めるのが主な目標だったと思います。一方、場の理論では $\varphi(t, \vec{x})$ を求めるのが目標の一つとなります。高校でも電磁気学では電場や磁場を求めることがあると思いますが、これも場の理論の一つの例です。

このように場を理論の主役として捉えることのメリットの一つとして、「時間と空間を対等に扱える」というものがあります。特殊相対性理論や一般相対性理論の記事で紹介したように、本来、時間と空間というのは対等な存在であると考えられています。したがってニュートンの運動方程式のように、時間はただのパラメーターとして扱い、位置は物理量として扱うのは不自然です。相対論的には「時間も空間もともにただのパラメーター」として扱うか、または「時間も空間も物理量」として扱ったほうが自然です。今日、場の量子論と呼ばれている理論では、 $\varphi(t, \vec{x})$ のように「時間も空間もともにただのパラメーター」として扱う方法を用いています。一方、「時間も空間も物理量」として扱う理論も存在します。それが弦理論です*3。弦理論については古典弦の運動や古典弦の運動方程式の解、弦の量子化で紹介していますのでぜひご覧ください。

*2 非相対論的場の量子論というものも存在します。

*3 点粒子の相対論的な量子力学でも「時間も空間も物理量」として扱うことは可能です。

3.3 自由スカラー場の量子化^{*4}

古典的な自由スカラー場 φ を考えます。自由スカラー場とは電磁相互作用などの相互作用を考えないスカラー場のことです。アインシュタインの関係 $p^\mu p_\mu = m^2$ の類推から、 φ はクライン・ゴールドン方程式

$$(\partial_\mu \partial^\mu - m^2)\varphi = 0 \quad (31)$$

を満たします。

この解は平面波解

$$\varphi(t, x) = a e^{-iE_p t + i\vec{p}\cdot\vec{x}} + a^* e^{iE_p t - i\vec{p}\cdot\vec{x}} \quad (32)$$

の重ね合わせで与えられることが計算の結果分かります。

3.3.1 正準量子化

それではさっそく場を量子化してみましょう。他の解説記事でも見たかと思いますが、量子力学ではハミルトニアンが与えられたとき、古典的な力学変数は演算子で表現され、正準座標と運動量の間には正準交換関係

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

を要請することで量子化することができます。

この方法を正準量子化といいます。同じことを自由スカラー場に対して実行します。

まずは先の古典場に規格化因子を加えた

$$\varphi_p(t, x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{2E_p}} (a(t) e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} + a^*(t) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}) \quad (33)$$

を考えます。考えている空間を各辺が L_i の箱を想定し、周期的境界条件を課すことで、スカラー場の作用を書き換えると、空間依存性を持つ項が消えて、

$$S = \int dt \left(\frac{1}{2E_p} \dot{a}^*(t) \dot{a}(t) - \frac{1}{2} E_p a^*(t) a(t) \right) \quad (34)$$

と書き換えられます。ここで $a(t)$ は複素力学変数より実数変数 q_1, q_2 を用いて表すと $a(t) = q_1(t) + i q_2(t)$ と表せるので、先の作用を書き換えると、

$$S = \sum_{i=1}^2 \int dt \left(\frac{1}{2E_p} \dot{q}_i^2(t) - \frac{1}{2} E_p q_i^2(t) \right) \quad (35)$$

となります。これを見ると各 q_i が調和振動子の座標になっている。

この作用から運動方程式を求めると

$$\ddot{a}(t) = -E_p^2 a(t) \quad (36)$$

となります。これは2階斉次微分方程式であり、一般解は二つの独立な複素定数 a_p, a_{-p}^* を用いて

$$a(t) = a_p e^{-iE_p t} + a_{-p}^* e^{iE_p t} \quad (37)$$

^{*4} このセクションは河井力氏の執筆によるものです。

と表せます。そうすると先のハミルトニアンは、

$$H = E_p(a_p^* a_p + a_{-p}^* a_{-p}) \quad (38)$$

と書き換えられます。

これを元に量子論に移行しましょう。調和振動子からの類推で a_p, a_{-p} は消滅演算子、 a_p^*, a_{-p}^* は生成演算子 $a_p^\dagger, a_{-p}^\dagger$ に対応することが予想されます。よって次の交換関係 $[a_p, a_p^\dagger] = 1$ を満足することになります。このことの正当性を見てみましょう。演算子 $a(t)$ などは先の (37) 式の各 a_p などを演算子に置き換えたものになります。これを先の座標 q_i と共役な運動量 p_i に対してとくと、座標とそれに共役な運動量は自然な交換関係 $[p_i(t), q_i(t)] = i$ を満たしていることが確認できます。

以上から量子場 $\varphi(t, \vec{x})$ は

$$\varphi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{2E_p}} \sum_{\vec{p}} (a_p e^{-iE_p t + i\vec{p} \cdot \vec{x}} + a_p^\dagger e^{iE_p t - i\vec{p} \cdot \vec{x}}) \quad (39)$$

と表せます。各演算子に課される交換関係は $[a_p, a_k^\dagger] = \delta_{p,k}$ です。

3.3.2 一粒子状態

今考えている量子系の状態空間は調和振動子を考えた時と同様に構成できます。

振動子のエネルギーが最低となる基底状態 $|0\rangle$ は消滅演算子 \hat{a} を作用させると $\hat{a}|0\rangle = 0$ となる状態として考えました。同様に消滅演算子を作用させると $\hat{a}|\Omega\rangle = 0$ となる真空状態の存在を仮定します。すると運動量 \vec{p} を持つ一粒子状態は生成演算子を用いて、

$$\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger |\Omega\rangle$$

で表すことができます。また複数粒子がある状態を表すこともできます。各運動量が $\vec{p}_i (i = 1, \dots, N)$ である粒子を持つ状態は各演算子 $\hat{a}_{\vec{p}_i}^\dagger$ を $|\Omega\rangle$ に作用させることで表すことができます。

このように任意の粒子数の状態を表せるので対生成対消滅を含む過程を記述できるという点が場の量子論のメリットです。

3.3.3 光錐ゲージとマクスウェル場

次にスカラー場ではなくマクスウェル場（電磁場）と対応する量子状態をを考えてみましょう。スカラー場の場合と異なり特殊相対論の記事で見たかと思いますが、ゲージ不変性を考える必要性が出てきます。

古典弦の記事で、世界面のパラメータ付けには任意性がありゲージを固定することで、運動方程式として具体的な波動方程式が得られることを見ました。同じように光錐ゲージを設定することで運動方程式を簡単にすることができます。

今フーリエ変換したゲージ場の光錐成分 A^+ に対してゲージ変換のパラメータ ϵ だけゲージ変換すると、 $A'^+ = A^+ + ip^+ \epsilon$ と変換され、適切にパラメータ ϵ を決定することで $A^+ = 0$ にできることがわかります。するとマクスウェル方程式を簡単にできて、 $p \cdot A = 0$ を得ることができます。これを解くと A^- も決定できて、結局独立な成分は横方向場 A^I のみになります。

独立な成分 A^I に対して先のスカラー場の場合と同様に量子化をすると、 $D - 2$ 個だけ独立な偏光状態を持つことになり、結局先のように生成子を用いて一光子状態は、

$$\sum_{I=2}^{D-1} \xi_I a_{p^+, p^T}^{I\dagger} |\Omega\rangle$$

と表せます。

参考文献

- [1] 小出「量子力学 (I)」、裳華房 (2013) 特に 3 章
- [2] 牟田、山本「量子力学、現代的アプローチ」、裳華房 (2017)
- [3] J.J.Sakurai, J.Napolitano「第 2 版 現代の量子力学 (上)」、吉岡書店 (2019)
- [4] Zwiebach, B. (2013). *A first course in string theory* (『初級講座 弦理論』(樺沢宇紀 訳)). 丸善プラネット. (Original work published 2009)
- [5] Srednicki, M. (2007). *Quantum Field Theory*. Cambridge: Cambridge University Press.