第１２回：１２月２０日（火）

11.4　座標表示と運動量表示

表示を指定するエルミート演算子として座標演算子 $\widehat{x}$ を用い、展開の基底としてその固有状態 $|x\rangle$ を用いよう。x の関数である波動関数を用いれば、固有状態 $|x_0\rangle$ の波動関数はディラックのデルタ関数を用いて次のように与えられる。

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \tag{503}$$

ここで、x_0 は状態の固有値を表し、座標変数 x とは区別するために添え字 0 をつけたが、以下では固有値を表すためにも文字 x を用いることにする。上記の波動関数は、次の正規直交条件を満足する。

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'). \tag{504}$$

以前も述べたように、座標 x の関数としての波動関数は、$\widehat{x}$-表示における状態ベクトルの成分であり、次のように定義される。

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \tag{505}$$

波動関数 $\psi(x)$ は、状態 $|\psi\rangle$ を $\widehat{x}$ の固有状態 $|x\rangle$ で展開したときの展開係数である。

これまで運動量演算子 $\widehat{p}$ は

$$\widehat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{506}$$

のように微分演算子として与えてきたが、これは波動関数が x の関数としてかかれることを前提としている。つまり、運動量演算子の座標表示における表現が (506) なのである。

座標表示以外の例として、基底として $\widehat{p}$ の固有状態を用いる運動量表示について調べてみよう。運動量の固有値 p を持つ固有状態を $|p\rangle$ と表す。その座標表示での波動関数 $\psi_p(x)$ は (306) に与えられている。ここにもう一度与えておこう。

$$\psi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}} \tag{507}$$

これは次の正規直交条件を満足する。

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p'). \tag{508}$$

p 表示の波動関数 $\psi(p)$ は x 表示の波動関数 $\psi(x)$ と次の関係にある。

$$\psi(p) = \langle p|\psi\rangle = \int dx\langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ipx/\hbar}\psi(x). \tag{509}$$

逆変換は

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int dp \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}\psi(p). \tag{510}$$

これらの変換は**フーリエ変換**に他ならない。すなわち、フーリエ変換は、二つの表示をつなぐユニタリー変換の一種である。

運動量表示における位置演算子 $\widehat{x}$ と運動量演算子 $\widehat{p}$ の具体的表示を求めよう。そのためには、波動関数 $\psi(p)$ で表される状態 $|p\rangle$ にこれらの演算子を作用させて得られる状態が、どのような成分を持つかを調べればよい。まず、運動量演算子 $\widehat{p}$ について見てみよう。$\widehat{p}|p\rangle$ の成分は次のようになる。

$$\langle p|\widehat{p}|\psi\rangle = p\langle p|\psi\rangle = p\psi(p). \tag{511}$$

従って、運動量表示においては $\widehat{p}$ は単に p を掛ける演算によって表される。$|p\rangle$ に位置演算子を作用させた状態 $\widehat{x}|p\rangle$ の成分は

$$\langle p|\widehat{x}|\psi\rangle = \int dx \langle p|x\rangle\langle x|\widehat{x}|\psi\rangle. \tag{512}$$

と書き換えた上で $\langle x|\widehat{x} = x\langle x|$ を用いると

$$\langle p|\widehat{x}|\psi\rangle = \int dx x\langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle \tag{513}$$

さらに、

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \tag{514}$$

であり、これを p で微分すると、$-ix/\hbar$ という因子が現れることを用いれば

$$\langle p|\widehat{x}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\int dx\langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\psi(p). \tag{515}$$

が得られる。従って、演算子 $\widehat{x}$ は p 表示においては次のような微分演算子として与えられる。

$$\widehat{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}. \tag{516}$$

まとめておこう。

$$\widehat{x}^{(x)} = x, \quad \widehat{p}^{(x)} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad \widehat{x}^{(p)} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}, \quad \widehat{p}^{(p)} = p. \tag{517}$$

(x) と (p) はそれぞれ座標表示と運動量表示を表わす。このように、p 表示においては、運動量と座標の役割が入れ替わる。交換関係はどちらで計算しても同じであることは、すぐに確認できる。

$$[\widehat{x}^{(x)}, \widehat{p}^{(x)}] = [x, -i\hbar\frac{d}{dx}] = i\hbar \tag{518}$$

$$[\widehat{x}^{(p)}, \widehat{p}^{(p)}] = [i\hbar\frac{d}{dp}, p] = i\hbar \tag{519}$$

11.5　シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示

時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$\widehat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle \tag{520}$$

は形式的に次のように解くことができる。

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{it}{\hbar}\widehat{H}}|\psi_0\rangle \tag{521}$$

ただし、$|\psi_0\rangle = |\psi(t=0)\rangle$ であり、演算子の指数関数は次のようにテーラー展開によって定義される。

$$\exp\widehat{A} = \widehat{\mathbf{1}} + \widehat{A} + \frac{1}{2}\widehat{A}^2 + \frac{1}{3!}\widehat{A}^3 + \cdots . \tag{522}$$

右辺の時間に依存するユニタリー演算子

$$\widehat{U}(t) = e^{-\frac{it}{\hbar}\widehat{H}} \tag{523}$$

は**時間発展演算子**と呼ばれる。これを用いて別の表示へ移ることができる。

$$|\psi\rangle_H \equiv U^\dagger(t)|\psi(t)\rangle = |\psi_0\rangle \tag{524}$$

$$\mathcal{O}_H(t) \equiv U^\dagger(t)\mathcal{O}U(t) \tag{525}$$

このユニタリー変換で定義される表示を**ハイゼンベルグ表示**と呼ぶ。これに対し、元の表示のことを**シュレーディンガー表示**と呼ぶ。二つの表示は期待値については同じ結果を与える。

$${}_H\langle\psi|\mathcal{O}_H|\psi\rangle_H = \langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle \tag{526}$$

これまで用いてきたシュレーディンガー表示においては、系の時間発展は状態ベクトルの変化として表される。その変化を決定するのは時間に依存するシュレーディンガー方程式 (520) である。それに対してハイゼンベルグ表示では、状態ベクトルは変化せず、物理量の時間変化は演算子の変化として表わされる。(525) の両辺を時間微分することで、演算子の時間変化を与える式（**ハイゼンベルグ方程式**）

$$\frac{d}{dt}\widehat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar}[\widehat{A}_H(t), \widehat{H}] \tag{527}$$

を得ることができる。以前にシュレーディンガー表示を用いて得られた期待値の時間発展の式（エーレンフェストの定理）

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|\widehat{A}|\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|[\widehat{A}, \widehat{H}]|\psi\rangle \tag{528}$$

はシュレーディンガー表示でもハイゼンベルグ表示でも同じ形になるが、ハイゼンベルグ表示では演算子に対する式 (527) を時間変化しない状態ではさんだものとして解釈できる。

シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示は互いに等価であり、どちらを用いても同じ物理を記述することができるが、それぞれに利点がある。シュレーディンガー表示では状態ベクトルが時間変化するので、系の状態が変化する様子をイメージしやすい。それに対してハイゼンベルグ表示では古典論との対応が見やすいという利点がある。たとえば、ハイゼンベルグ方程式は古典解析力学におけるハミルトン方程式

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\}. \tag{529}$$

と類似した形をしている。

12 対称性と保存量

12.1 無限小変換

正準形式の古典力学において、時間発展はハミルトン方程式

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} \tag{530}$$

によって与えられた。(ここでは A や H はあらわに時間に依存しないものと仮定する。つまり、これらは運動量変数 p_i と座標変数 q_i の関数であり、p_i や q_i の時間変化を通してのみ時間に依存するものとする。) ただし $\{\cdots\}$ はポアソン括弧

$$\{A, B\} = \sum_i \frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i}\frac{\partial A}{\partial p_i} \tag{531}$$

である。

ある物理量 G に対して右辺が 0 である場合、つまり、

$$\{G, H\} = 0 \tag{532}$$

が恒等的に成り立つとき、G は時間的に変化しない**保存量**である。

G が**生成する**(G を**母関数**とする)**無限小変換**を

$$\begin{aligned} q_i \to q_i' = q_i + \delta q_i, &\quad \delta q_i = -\epsilon\{G, q_i\} = \epsilon\frac{\partial G}{\partial p_i}, \\ p_i \to p_i' = p_i + \delta p_i, &\quad \delta p_i = -\epsilon\{G, p_i\} = -\epsilon\frac{\partial G}{\partial p_i} \end{aligned} \tag{533}$$

によって定義する。このとき、q_i と p_i の関数として与えられる任意の物理量 $A(q_i, p_i)$ の δ による変換は

$$\delta A = \frac{\partial A}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial A}{\partial p_i}\delta p_i = \epsilon\{A, G\} \tag{534}$$

のようにポアソン括弧を用いて与えることができる。

ハミルトニアン H がこの変換のもとで不変であるとき、すなわち $\{H, G\} = 0$ であるとき、G が生成する変換は系の**対称性**であるという。G が生成する変換が系の対称性であることと、G が保存量であることは等価である。

$$G \text{ が生成する変換が系の対称性} = G \text{ が保存量} \tag{535}$$

例題 12.1 ハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2m}p^2 \tag{536}$$

によって与えられる 1 次元の系において、運動量 p は保存する。対応する無限小変換を求めよ。

$$\begin{aligned} \delta x &= -\epsilon\{p, x\} = \epsilon, \\ \delta p &= -\epsilon\{p, p\} = 0. \end{aligned} \tag{537}$$

つまりこれは並進対称性である。

ポアソン括弧と交換関係の対応

$$\{A, B\} \to \frac{1}{i\hbar}[\widehat{A}, \widehat{B}] \tag{538}$$

を通して、全く同様なことが量子力学においても成り立つ。

$\widehat{G}$ が生成する変換は古典的な変換の式 (534) に対して (538) の置き換えを行うことで、期待値を次のように変化させる変換として定義する。

$$\delta\langle\psi|\widehat{A}|\psi\rangle = \frac{\epsilon}{i\hbar}\langle\psi|[\widehat{A}, \widehat{G}]|\psi\rangle \tag{539}$$

これは二通りに解釈できる。一つの解釈は δ が演算子に対して作用し、状態ベクトルに対しては作用しないとみなすものである。その場合の変換則は

$$\delta\widehat{A} = \frac{\epsilon}{i\hbar}[\widehat{A}, \widehat{G}], \quad \delta|\psi\rangle = 0. \tag{540}$$

である。これが期待値に対する変換則 (539) を与えることは明らかであろう。

もう一つの解釈は、δ が状態ベクトルに作用し、演算子には作用しないとみなすものである。その場合の変換則は次のように与えられる。

$$\delta|\psi\rangle = \frac{\epsilon}{i\hbar}\widehat{G}|\psi\rangle, \quad \delta\widehat{A} = 0. \tag{541}$$

これが期待値に対する変換 (539) を再現することはすぐに確かめることができる。どちらの見方においても、演算子 $\widehat{G}$ は変換の**生成子**と呼ばれる。

特に $\widehat{G}$ がハミルトニアン自身である場合には、δ は時間並進

$$\delta = \epsilon\frac{d}{dt} \tag{542}$$

となり、(540) はハイゼンベルグ表示におけるハイゼンベルグ方程式、(541) はシュレーディンガー表示における時間に依存するシュレーディンガー方程式を与える。
　ある物理量 $\widehat{G}$ がハミルトニアンと可換

$$[\widehat{G}, \widehat{H}] = 0 \tag{543}$$

であるとき、$\widehat{G}$ が生成する変換は系の**対称性**である（あるいは単に $\widehat{G}$ は系の対称性である）という。
　$\widehat{G}$ が生成する変換が系の対称性であるとき、以下のことが成り立つ。

- $\widehat{G}$ の期待値は時間変化しない。（ハイゼンベルグ方程式より明らか）
- ψ が定常状態であれば、$\psi' = \widehat{G}\psi$ も（0 でなければ）同じエネルギー固有値を持つ定常状態である。
- G とエネルギーは同時測定可能。（これは、定常状態の完全系として $\widehat{H}$ と $\widehat{G}$ の同時固有状態を取れることを意味する。）

　シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示がそうであったように、これら二つの見方は互いにユニタリー変換で結びついており、期待値はどちらで計算しても同じになる。簡単な例として $\widehat{G}$ が運動量演算子

$$\widehat{G} = \widehat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx} \tag{544}$$

である場合に、この二つの違いを見てみよう。
　まず、一つ目の見方、すなわち、変換が演算子にのみ作用する場合を考えてみよう。この場合、運動量演算子 $\widehat{p}$ は変化しないが、位置演算子が次のように変換される。

$$\widehat{x}' = \widehat{x} + \frac{i\epsilon}{\hbar}[\widehat{p}, \widehat{x}] = \widehat{x} + \epsilon \tag{545}$$

波動関数 $\psi(x)$ は不変である。これは、図 49 の (a) に与えたように、波動関数自体は変化しないが、座標の原点を ϵ だけずらしたと解釈することができる。

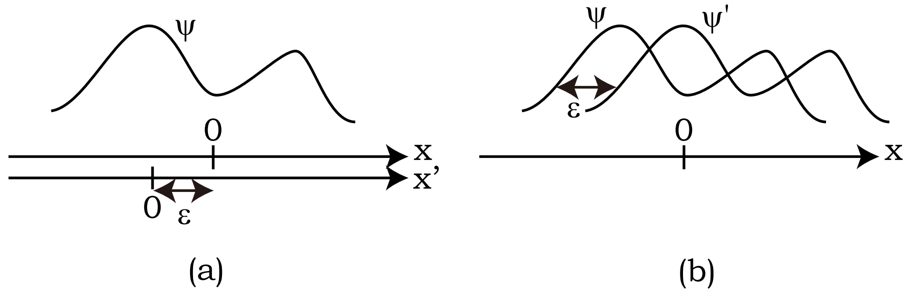

図 49: 座標の変換

これに対して二番目の見方、すなわち波動関数が変換される見方では、演算子 $\widehat{x}$ は不変であるのに対して波動関数は

$$\psi'(x) = \psi(x) + \frac{\epsilon}{i\hbar}\widehat{p}\psi(x) = \psi(x) - \epsilon\frac{d}{dx}\psi(x) = \psi(x-\epsilon) \tag{546}$$

のように変換される。今度は、座標のとり方は変化しないが、波動関数自体が図 49 の (b) のように変化したとみなすことができる。

つまり、これら二つの違いは座標を動かしたと見るか、関数を動かしたとみるかという違いである。物理量の計算には、座標軸と波動関数の相対的な関係だけが問題であるから、これら二つの見方は本質的には同じである。