

新量子論の基本原理

伊東 由文

徳島大学総合科学部自然システム学科
770-8502 徳島市南常三島町 1-1, Japan

The Fundamental Principles of New Quantum Theory

Yoshifumi ITO

Department of Mathematical and Natural Sciences, Faculty of Integrated
Arts and Sciences, The University of Tokushima, Tokushima 770-8502, Japan

e-mail : y-ito@ias.tokushima-u.ac.jp

(Received August 9, 2005)

Abstract

In this article, we established the fundamental principles of new quantum theory.

At first, we mention the notion of quantum probability and its basic properties.

Next, we propose the axiom of new quantum theory, using the notion of quantum probability. The characteristic property of the quantum state is that the quantum state is determined by the L^2 -density of the quantum probability distribution of the position variables and the momentum variables of the quantum system.

At last, we derive the Schrödinger equations by the reasonable method based on the axiom of new quantum theory. Here we use the variational principle that the real L^2 -density determining the quantum state of the quantum system, which is, in practice, realized physically, should be determined among the admissible L^2 -densities so that the energy expectation value takes its stationary value.

Keywords : new quantum theory, quantum probability, axiom of new quantum theory, Schrödinger equation.

2000 Mathematics Subject Classification. Primary 81P10 ; Secondary 81P05, 81P99, 81S99.

序

現代の物理学は、自然界の物理現象を電子、原子や分子の運動にまで還元して理解しようという夢をも

つようになった。電子、原子や分子のような微粒子も一般的には質量や電荷をもった物質粒子の系である。物理学の基本原理によれば、このような物質粒

子は重力相互作用や電磁相互作用という力の相互作用によって、ニュートン力学にしたがって運動している。

実際、1個の電子もこのように運動しているから、現代の技術では、ナノテクノロジーによって、1個の電子を把捉して閉じ込めることができる。

しかし、19世紀末から20世紀初頭にかけて発見された量子現象というのは、このような1個1個の電子、原子や分子の運動ではなく、電子、原子や分子の集団としての振る舞いによって発現する物理現象であった。例えば、黒体放射の問題、固体や気体の比熱の問題や水素原子等のスペクトルの問題等であった。

そこで観測された現象は、ニュートン力学とマクスウェルの電磁気学という古典物理学の限界を感じさせるようなものであった。しかし、今になって分かったことは、これらは古典物理学の限界というより、これらの現象を正しく理解し、説明する仕方が発見されていなかったということである。

私の発見した新量子論によれば、これらの物質粒子は、依然としてニュートン力学にしたがって運動している。したがって、各々の物質粒子の位置変数と運動量変数は各時刻に定まった値をとる。しかし、これらの値は、一般に、各々の物質粒子に対して異なった値となることであろう。さらに、一般に、これらの変数の値は物質粒子毎にランダムに変動していると考えられる。そうすると、その確率分布が何であるかということが問題である。ここで、量子現象を特徴付けるのは、これらの位置変数と運動量変数が量子確率分布法則に従っているということである。これは、その位置変数の量子確率分布を決める確率密度が L^2 密度で、そのフーリエ変換が運動量変数の量子確率分布を決める L^2 密度になっているという条件によって特徴付けられる。この点が統計力学で扱う物理変数の確率分布と異なる点である。考える物理変数の種類とその確率分布の型が異なるのである。

しかも、物理的に実際に実現される量子系の量子状態を決める位置変数の量子確率分布を決める L^2 密度は、定常状態においては、エネルギー期待値あるいは局所エネルギー期待値を停留値にするという条件で定められる(一般化)固有関数を用いて(一般)

固有関数展開によって定められる。そのような L^2 密度はシュレーディンガー方程式に従って時間発展をしている。これを量子系の運動という。このとき、量子系の運動に関しては、物質粒子の位置変数と運動量変数の周辺分布に対する情報しか得られていないが、これだけの情報で、シュレーディンガー方程式が完全に決定されることが分かった。ある意味で、量子系の量子状態に関する情報はシュレーディンガー方程式によって完全に決定されている。その意味で、量子系の位置変数と運動量変数に対する周辺分布に関する情報だけで、量子系の量子状態に関する情報は完全に決定されていると考えられる。

量子系の量子状態に関する観測データを得ることは、この量子系に対する位置変数や運動量変数のような量子確率変数のサンプルを得ることであると考えられる。古典統計学で、確率変数のサンプルを得てもその分布関数は変化しないのと同様に、量子系の量子確率変数のサンプルをとったとしても、その量子確率分布法則が変化することはない。量子系の量子状態の観測とは、このようにある種の量子確率変数のサンプルをとることなのである。このことは、実験物理学者が実際の量子現象の観測に際して実行していることである。そういう意味で、我々の新量子論は実際の実験観測とよく合致するものである。

本論文では、まず、新量子論の公理の規定に用いられる量子確率の概念とその基本性質について述べる。これに関しては、伊東 [5], [9]-[12], [14] を参照。

ついで、新量子論の公理を提出する。これは新量子論の基本原理を確立するものである。これに関しては、伊東 [9]-[11], [16], [17] を参照。

最後に、この新量子論の公理と、量子系の量子状態を決定するための変分原理あるいは局所変分原理を用いて、変分問題あるいは局所変分問題を解くことによって、シュレーディンガー方程式を導出する。

これに関しては、伊東・萱間 [18], [19], 伊東・萱間・鴨下 [20], Ito-Uddin [21], [22] を参照。

ハミルトニアンが離散スペクトルをもつ場合と連続スペクトルをもつ場合のそれぞれに対応して、この導出の仕方が異なるので、それぞれの場合の導出法を述べた。

このとき、シュレーディンガー方程式は数学的に

全く合理的に導くことができる。これは、論理の飛躍も全くなく、自然で、合理的なものである。

このように、基本原理を用いて具体的な量子現象を理解し、説明するためには、個々の量子系に対して、具体的にハミルトニアンを決め、シュレーディンガー方程式を解いて、その位置変数と運動量変数の L^2 密度を具体的に決めなければならない。

現在までに、黒体輻射の問題、固体の比熱と理想気体の比熱の問題等が合理的に理解し、説明できるようになった。これに関しては、伊東 [16], [17], 伊東・萱間・鳴下 [20], Ito-Uddin [21], [22] を参照。

これらの問題は、新量子論によって、初めて真の理解が可能になったのである。

このように、物理学の基本原則に基づいて、自然に、合理的に、量子現象の理解が可能になったことは夢のような話しである。

1. 量子確率

1.1. 確率の定義と確率変数

最初に、コルモゴロフによる一般の確率と確率空間の概念について思い出しておく。これに関しては、伊藤 [2]-[4], 伊東 [8] を参照。

定義 1.1.1. 任意の空間 Ω とその上の集合の代数 (または σ 代数) \mathcal{B} と確率分布といわれる測度 P で、次の (I)~(III) を満たすものの複概念 $\Omega = \Omega(\mathcal{B}, P)$ を **確率空間** という。

(I) Ω は空でない集合である。

(II) \mathcal{B} は Ω の部分集合の族で、次の (B.1)~(B.3) を満たす。

(B.1) $\Omega \in \mathcal{B}$.

(B.2) $A \in \mathcal{B} \implies A^c \in \mathcal{B}$.

ここで、 A^c は A の余事象を表す。

(B.3) $A_n \in \mathcal{B}, (n = 1, 2, \dots)$ (有限 (または可算)) $\implies \cup_n A_n \in \mathcal{B}$.

このとき、 \mathcal{B} は **加法族** (あるいは **完全加法族**) であるともいわれる。

(III) \mathcal{B} の各元 A に一つの実数 $P(A)$ を対応させる集合関数 $P(A)$ が定義され、次の (P.1)~(P.3) が成り立つ。

(P.1) $0 \leq P(A) \leq 1$.

(P.2) $A = \sum_n A_n$ (有限直和 (または可算直和)) $\implies P(A) = \sum_n P(A_n)$ (加法性 (完全加法性)).

(P.3) $P(\Omega) = 1$.

このとき、 P は可測空間 $\Omega(\mathcal{B})$ 上の **確率分布** といわれる。ここで、 Ω とその上の代数 (σ 代数) \mathcal{B} の複概念を **可測空間** といっている。

Ω の元 ω を **根元事象** といい、 \mathcal{B} の元 A を **確率事象** という。確率事象のことを単に **事象** ということがある。

$\Omega = \Omega(\mathcal{B}, P)$ を確率空間とする。 $X = X(\omega)$ は Ω において定義された実数値 1 価関数とする。このとき、任意の実数 x に対して、 $\{\omega; X(\omega) < x\}$ が常に \mathcal{B} に属するとき、 ω の関数 $X = X(\omega)$ を **確率変数** という。

確率変数 $X = X(\omega)$ に対して、実数 x の関数

$$F(x) = P(\{\omega; X(\omega) < x\}), \quad (-\infty < x < \infty)$$

を X の **分布関数** という。

ランダムに変動する量である確率変数の値の分布状態に関する情報はすべてこの分布関数によって得られる。

いま、 $\mathbf{R}^n, (n \geq 1)$ を n 次元ユークリッド空間とし、 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, dr)$ を \mathbf{R}^n 上のルベグ測度空間とする。すなわち、 \mathcal{M}_n は \mathbf{R}^n 上のルベグ可測集合全体の族を表し、 dr は \mathbf{R}^n 上のルベグ測度を表す。ルベグ測度とルベグ積分に関しては、伊東 [14], [15] を参照。ここで、 n 次元ユークリッド空間とは n 次元計量ベクトル空間のことであると考える。これに関しては、伊東 [6] を参照。今後、 n 次元ユークリッド空間を単に n 次元空間という。

今後、本論文において n 次元空間やその双対空間を考えるときにはいつでもある一つの直交座標系が適当に選ばれていて、それが固定されていると考える。

このとき、 \mathbf{R}^n に値をとる Ω 上のベクトル値関数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\omega)$ が **ベクトル値確率変数** であるとは、任意の $A \in \mathcal{M}_n$ に対し、 $\{\omega; \mathbf{r}(\omega) \in A\}$ が常に \mathcal{B} に属することをいう。このとき、 $A \in \mathcal{M}_n$ に対し、

$$\mu(A) = P(\{\omega; \mathbf{r}(\omega) \in A\})$$

とおくと、 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, \mu)$ は確率空間になる。これを、**ベクトル値確率変数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\omega)$ の確率分布** という。

定理 1.1.1. 上の記号を用いる. このとき, ベクトル値確率変数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\omega)$ の確率分布 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, \mu)$ において, μ がルベグ測度に関して絶対連続であるとすると, ある非負ルベグ可積分関数 $p(\mathbf{r})$ が存在して, $A \in \mathcal{M}_n$ に対し,

$$\mu(A) = P(\{\omega; \mathbf{r}(\omega) \in A\}) = \int_A p(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

が成り立つ. このとき,

$$\int p(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1$$

が成り立つ.

定理 1.1.1 において, 積分の積分領域を明記していないとき, 積分は \mathbf{R}^n 上のルベグ積分を表す. 本論文においてはいつでもこの約束に従う.

このとき, 実関数 $p(\mathbf{r})$ をベクトル値確率変数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\omega)$ の確率密度関数あるいは確率密度という. これが古典的な確率変数に対して成り立つ一般的な性質である.

この意味で古典的な意味の確率密度は L^1 密度になっている.

ベクトル値確率変数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\omega)$ に対し, 確率分布 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, \mu)$ あるいは確率密度 $p(\mathbf{r})$ がベクトル値確率変数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\omega)$ の分布状態に関する情報を与える.

いま, 期待値の定義を与える.

定義 1.1.2. ベクトル \mathbf{r} の関数 $\Phi(\mathbf{r})$ は \mathbf{R}^n 上のルベグ可測関数であるとする. このとき, \mathbf{R}^n に値をとる Ω 上のベクトル値確率変数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\omega)$ と $\Phi(\mathbf{r})$ の合成関数である確率変数 $\Phi(\mathbf{r}(\omega))$ の期待値 $E[\Phi(\mathbf{r}(\omega))]$ を関係式

$$E[\Phi(\mathbf{r}(\omega))] = \int_{\Omega} \Phi(\mathbf{r}(\omega)) dP(\omega)$$

であるとして定義する. これは右辺の積分が絶対収束するとき意味をもつ.

このとき, 次の定理が成り立つ.

定理 1.1.2. 定理 1.1.1 の記号を用いる. このとき, 確率変数 $\Phi(\mathbf{r}(\omega))$ の期待値に対し,

$$E[\Phi(\mathbf{r}(\omega))] = \int \Phi(\mathbf{r}) p(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

が成り立つ. ここで, この関係式は, 右辺の積分が絶対収束するとき意味をもつ.

ここで, この定理 1.1.2 の関係式の証明の方針を述べる.

まず, $\Phi(\mathbf{r})$ が単関数である場合にこの定理 1.1.2 の関係式を証明する. ついで, $\Phi(\mathbf{r})$ が単関数列の各点収束極限であるような可測関数である場合にこの定理 1.1.2 の関係式を証明する.

このとき, 次の定理が成り立つ.

定理 1.1.3. $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\omega)$ を \mathbf{R}^n に値をとる Ω 上のベクトル値確率変数とする. $\Phi(\mathbf{r})$ と $\Psi(\mathbf{r})$ をベクトル \mathbf{r} のルベグ可測関数とする. このとき, 次が成り立つ:

- (1) $E[\Phi(\mathbf{r}(\omega)) + \Psi(\mathbf{r}(\omega))] = E[\Phi(\mathbf{r}(\omega))] + E[\Psi(\mathbf{r}(\omega))].$
- (2) $E[\alpha\Phi(\mathbf{r}(\omega)) + \beta] = \alpha E[\Phi(\mathbf{r}(\omega))] + \beta.$

ここで, α と β は実定数とする.

系. $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\omega)$ を定理 1.1.3 と同じとする. $\Phi_1(\mathbf{r}), \dots, \Phi_m(\mathbf{r})$ をベクトル \mathbf{r} のルベグ可測関数とする. $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_m$ は実定数とする. このとき, 次が成り立つ:

$$\begin{aligned} E[\alpha_0 + \alpha_1\Phi_1(\mathbf{r}(\omega)) + \dots + \alpha_m\Phi_m(\mathbf{r}(\omega))] \\ = \alpha_0 + \alpha_1[E[\Phi_1(\mathbf{r}(\omega))] + \dots + \alpha_m[E[\Phi_m(\mathbf{r}(\omega))]]. \end{aligned}$$

1.2. 量子確率の概念とその基本性質

本小節において量子確率の概念とその基本性質について述べる. 詳細については伊東 [5], [9]-[12] を参照のこと.

$\mathbf{R}^n, (n \geq 1)$ は n 次元空間とする.

$L^2 = L^2(\mathbf{R}^n)$ は \mathbf{R}^n 上の複素数値 2 乗可積分関数全体の作るヒルベルト空間とする. $\varphi, \psi \in L^2$ に対し, 内積 (φ, ψ) は

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

によって定義されているとする. ここで, $\varphi(\mathbf{r})^*$ は $\varphi(\mathbf{r})$ の複素共役を表す.

$\psi \in L^2$ のノルム $\|\psi\|$ は

$$\|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)} = \left\{ \int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \right\}^{\frac{1}{2}}$$

によって定義されているとする. L^2 関数 ψ は $\|\psi\| = 1$ のとき規格化されているという.

伊東 [9], [10] の公理 II によれば, ある量子系の量子状態は \mathbf{R}^n 上の規格化された L^2 関数によって決定される位置変数と運動量変数の確率分布状態である. この確率分布を特に量子確率分布と呼ぶ. いま, 規格化された L^2 関数を L^2 密度とすることになると, L^2 密度によって定まる確率分布を量子確率分布というのである. L^2 密度のことを量子確率密度ということがある.

いま, \mathbf{R}^n の部分集合 A の特性関数 $\chi_A(\mathbf{r})$ は

$$\chi_A(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & (\mathbf{r} \in A), \\ 0, & (\mathbf{r} \notin A) \end{cases}$$

によって定義されているとする.

ここで, 量子確率の概念について思い出しておく.

定理 1.2.1. 測度空間 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, d\mathbf{r})$ は \mathbf{R}^n 上のルベグ測度空間とする. 関数 ψ は \mathbf{R}^n 上の L^2 密度とする. このとき, $A \in \mathcal{M}_n$ に対し,

$$\mu(A) = \int_A |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$$

とおくと, μ は \mathcal{M}_n 上の確率測度である. このとき, 測度空間 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, \mu)$ は確率空間になる.

定理 1.2.2. 定理 1.2.1 の記号を用いる. いま, $A \in \mathcal{M}_n$ に対し, $\xi_A(\mathbf{r}) = \xi(A; \mathbf{r}) = \chi_A(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$ とおくと, 写像 $\xi: A \rightarrow \xi_A$ は L^2 値集合関数である. ここで, $\chi_A(\mathbf{r})$ は集合 A の特性関数である. このとき任意の $A, B \in \mathcal{M}_n$ に対し,

$$(\xi_A, \xi_B) = \mu(A \cap B),$$

すなわち,

$$\int \xi_A(\mathbf{r})^* \xi_B(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{A \cap B} |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \mu(A \cap B)$$

が成り立つ.

系. 定理 1.2.2 の記号を用いる. このとき, 次が成り立つ:

(1) $\xi: A \rightarrow \xi_A$ は L^2 に値をもつ \mathcal{M}_n 上の集合関数である.

(2) \mathcal{M}_n の集合列 A_1, A_2, \dots がどの二つも互いに素ならば,

$$A = \sum_{m=1}^{\infty} A_m$$

に対し,

$$\xi_A = \sum_{m=1}^{\infty} \xi_{A_m} \quad (1.2.1)$$

が L^2 収束の意味で成り立つ.

(3) $A, B \in \mathcal{M}_n$ で, $A \cap B = \emptyset$ ならば, $\xi_A \perp \xi_B$ が成り立つ.

(4) $A \in \mathcal{M}_n$ に対し,

$$\mu(A) = \|\xi_A\|^2 = \int_A |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}.$$

が成り立つ.

定理 1.2.2 の系の (2) における (1.2.1) 式の右辺の級数の L^2 収束は無条件収束になっている.

このとき, 次の定義を与える.

定義 1.2.1. 定理 1.2.2 の系の記号を用いる. 定理 1.2.2 の系の条件 (1)~(4) を満たす \mathcal{M}_n 上の L^2 値集合関数 $\xi_A = \chi_A \psi$ は, 確率空間 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, \mu)$ 上の直交確率測度であるという. これを L^2 密度 ψ の定める量子確率という.

このとき, ある量子系の量子状態がこのような量子確率分布状態として記述されるのである.

このように, 話しを具体的にするために, ここで考えている量子確率は新量子論を構築するために必要な L^2 密度によって定められるものに限っている.

ここで, 確率空間 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, \mu)$ 上の複素数値 2 乗可積分関数の空間を L^2_μ とする. これは

$$L^2_\mu = \left\{ f(\mathbf{r}); \int |f(\mathbf{r})|^2 d\mu(\mathbf{r}) = \int |f(\mathbf{r})|^2 |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} < \infty \right\}$$

によって定義されている. このとき, L^2_μ の元を L^2 量子確率変数という.

L^2 値集合関数 $\xi_A = \chi_A \psi$ が確率空間 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, \mu)$ 上の量子確率であるとき, 確率空間 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, \mu)$ 上の L^2_μ に属する μ 可測関数 f の ξ_A に関する量子期待値を以下のように定義する.

定義 1.2.2. (1) 関数 $f(\mathbf{r})$ が L^2_μ の単関数であるとき, すなわち,

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m \chi_{A_m}(\mathbf{r}), \quad (a_m \in \mathbf{C}),$$

$$\mathbf{R}^n = A_1 + A_2 + \cdots, \text{ (可算直和),}$$

$$A_i \in \mathcal{M}_n, (i = 1, 2, \cdots)$$

であるとき、関数 $f(\mathbf{r})$ の量子期待値を

$$\int f(\mathbf{q})\xi(d\mathbf{q}; \mathbf{r}) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m \xi(A_m; \mathbf{r})$$

と定義する。そのノルムは

$$\begin{aligned} \left\| \int f(\mathbf{q})\xi(d\mathbf{q}; \mathbf{r}) \right\|^2 &= \sum_{m=1}^{\infty} |a_m|^2 \int_{A_m} |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \\ &= \int |f(\mathbf{r})|^2 |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \end{aligned}$$

によって与えられる。

(2) 関数 f が一般の L^2_μ の関数のとき、 L^2_μ において $f_m \rightarrow f$ となる L^2_μ の単関数列 $\{f_m\}$ が存在する。このとき、関数 $f(\mathbf{r})$ の量子期待値を

$$\int f(\mathbf{q})\xi(d\mathbf{q}; \mathbf{r}) = \lim_{m \rightarrow \infty} \int f_m(\mathbf{q})\xi(d\mathbf{q}; \mathbf{r})$$

によって定義する。そのノルムは

$$\left\| \int f(\mathbf{q})\xi(d\mathbf{q}; \mathbf{r}) \right\|^2 = \int |f(\mathbf{r})|^2 |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$$

によって与えられる。

定理 1.2.3(重ね合わせ). $n \geq 1$ とする。 \mathbf{R}^n 上の二つの L^2 密度 ψ_1, ψ_2 に対して、

$$\psi = \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2, (\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbf{C})$$

とおく。いま、 ψ も \mathbf{R}^n 上の L^2 密度とする。このとき、 \mathbf{R}^n 上のルベーク可測集合 A に対し、等式

$$\begin{aligned} &\int_A |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \\ &= |\alpha_1|^2 \int_A |\psi_1(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} + \alpha_1^* \alpha_2 \int_A \psi_1(\mathbf{r})^* \psi_2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &\quad + \alpha_2^* \alpha_1 \int_A \psi_2(\mathbf{r})^* \psi_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + |\alpha_2|^2 \int_A |\psi_2(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \end{aligned}$$

が成り立つ。ここで、積分は \mathbf{R}^n 上のルベーク積分を表す。

この重ね合わせの原理を用いて、二重スリットの実験のように、粒子である電子が振動運動をして密に集まったり疎に集まったりしてできる縞模様が観測されるということが理論的に説明できる。

1.3. 量子確率変数とその期待値

ここで、量子確率変数とその期待値の定義を与える。

いま、 $\Omega = \Omega(\mathcal{B}, P)$ を確率空間とする。

定義 1.3.1. $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, d\mathbf{r})$ は \mathbf{R}^n 上のルベーク測度空間とする。このとき、 \mathbf{R}^n に値をとる Ω 上のベクトル値関数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\omega)$ がベクトル値量子確率変数であるとは、次の条件 (i)~(iii) が満たされることをいう：

(i) 任意の $A \in \mathcal{M}_n$ に対して、 $\{\omega; \mathbf{r}(\omega) \in A\}$ が常に \mathcal{B} に属する。

(ii) 任意の $A \in \mathcal{M}_n$ に対し、

$$\mu(A) = P(\{\omega; \mathbf{r}(\omega) \in A\})$$

とおくと、 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, \mu)$ は確率空間になる。

(iii) μ はルベーク測度に関して絶対連続で、ある L^2 密度 $\psi(\mathbf{r})$ が存在して、

$$\mu(A) = \int_A |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$$

が成り立つ。

このとき、 $\Phi(\mathbf{r})$ を \mathbf{r} のルベーク可測関数とすると、量子確率変数 $\Phi(\mathbf{r}(\omega))$ の期待値 $E[\Phi(\mathbf{r}(\omega))]$ は定義 1.1.2 と同様に定義される。この期待値に対して、定理 1.1.2 の関係式が、 $p(\mathbf{r})$ の代わりに $|\psi(\mathbf{r})|^2$ を用いて成り立つ。

すなわち、次の定理が成り立つ。

定理 1.3.1. 上の記号を用いる。このとき、確率変数 $\Phi(\mathbf{r}(\omega))$ の期待値に対し、

$$E[\Phi(\mathbf{r}(\omega))] = \int \Phi(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$$

が成り立つ。ここで、この関係式は、右辺の積分が絶対収束するとき意味を持つ。

この意味で、考える期待値 $E[\Phi(\mathbf{r}(\omega))]$ は、確率密度の形の違いを除いて古典的確率変数の期待値と同様に計算できる。

したがって、定理 1.1.3 とその系の類似も成り立っている。

すなわち、次の定理が成り立つ。

定理 1.3.2. $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\omega)$ を R^n に値をとる Ω 上のベクトル値量子確率変数とする. $\Phi(\mathbf{r})$ と $\Psi(\mathbf{r})$ をベクトル \mathbf{r} のルベグ可測関数とする. このとき, 次が成り立つ:

- (1) $E[\Phi(\mathbf{r}(\omega)) + \Psi(\mathbf{r}(\omega))]$
 $= E[\Phi(\mathbf{r}(\omega))] + E[\Psi(\mathbf{r}(\omega))].$
- (2) $E[\alpha\Phi(\mathbf{r}(\omega)) + \beta] = \alpha E[\Phi(\mathbf{r}(\omega))] + \beta.$

ここで, α と β は実定数とする.

系. $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\omega)$ を定理 1.3.2 と同じとする. $\Phi_1(\mathbf{r}), \dots, \Phi_m(\mathbf{r})$ をベクトル \mathbf{r} のルベグ可測関数とする. $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_m$ は実定数とする. このとき, 次が成り立つ:

$$E[\alpha_0 + \alpha_1\Phi_1(\mathbf{r}(\omega)) + \dots + \alpha_m\Phi_m(\mathbf{r}(\omega))]$$

$$= \alpha_0 + \alpha_1[E[\Phi_1(\mathbf{r}(\omega))] + \dots + \alpha_m[E[\Phi_m(\mathbf{r}(\omega))]].$$

2. 新量子論の公理

2.1. 新量子論と物理学の基本原理解

物理学は物体の運動, すなわち, 物体の状態の時間発展を探究する学問である. 対象とする物体は, 古典力学すなわちニュートン力学では, 1 粒子, 多体系, 剛体から天体までにわたり, 電磁気学では, 電磁場である. 新量子論の対象は原子, 分子や電子などの微粒子系の集団である量子系である. 物理学の基本原理解は, 物体の運動が力の相互作用によって引き起こされるということである. 自然界には次の四つの力の相互作用が存在することが知られている. すなわち, 1. 重力相互作用, 2. 電磁相互作用, 3. 弱い力の相互作用と, 4. 強い力の相互作用の四つである. 弱い力と強い力の相互作用は核力に関係した相互作用で, それによって粒子の生成消滅現象が発現する.

上述の四つの力の相互作用に関しては, 益川 [26] を参照.

新量子論で扱う量子系の運動は, 粒子の生成消滅を伴わないもので, したがって, 核力には関係しないと考えてよい. その運動状態は位置や運動量, エネルギー, 角運動量やスピンのような変数や物理量の時間的変動によって表される. この場合, 量子系の運動を引き起こす力の相互作用は重力相互作用と

電磁相互作用である. 量子系を構成する微粒子の質量は非常に小さいので, 重力相互作用はしばしば無視し得ることが多い. したがって, とくに電磁相互作用が主要な力の相互作用になる. 量子系を構成する微粒子系の運動はニュートンの運動方程式に従って決まる. したがって, 各々の微粒子系の位置変数や運動量変数は各時刻において確定した値をもつと考えることができる. 量子系を構成する微粒子系は無数にあると考えるから, たとえ 1 個 1 個の微粒子系はニュートンの運動方程式に従って運動しているとしても, 量子系を構成する微粒子系の集団としての振る舞いはニュートンの運動方程式だけでは追跡できない. 新量子論ではこのような量子系を構成する微粒子系の集団としての振る舞いを探究する. 微粒子系の集団としての振る舞いは微粒子系の位置変数や運動量変数の量子確率分布状態によって記述される.

この項に関しては, 伊東 [16], [17] を参照.

2.2. 新量子論の公理

量子現象を新量子論によって研究するとき, (1) 量子系, (2) 量子状態, (3) 量子系の運動という概念を規定しなければならない. この規定を新量子論の公理という.

新量子論の公理は次のように述べられる. これについては, 伊東 [9]-[11], 伊東・萱間 [18], [19], 伊東・萱間・鴨下 [20], Ito-Uddin [21], [22] を参照.

新量子論の公理は伊東 [9] において初めて定式化された. これは, 伊東 [11] において言葉で述べられている新量子論の考え方に数学的表現を与えたものである.

公理 I (量子系). 量子系 Ω は確率空間 (Ω, \mathcal{B}, P) であると仮定する. ここで, Ω は微粒子系 ρ の集合で, \mathcal{B} は Ω の部分集合からなる σ 代数で, P は \mathcal{B} 上の完全加法的確率測度である.

公理 II (量子状態). 量子系 $\Omega = \Omega(\mathcal{B}, P)$ ($= (\Omega, \mathcal{B}, P)$) の量子状態は量子系を構成する微粒子系 ρ の位置変数 $\mathbf{r}(\rho)$ と運動量変数 $\mathbf{p}(\rho)$ の量子確率分布状態であると定義する. ここで, $\mathbf{r}(\rho)$ は n 次元空間 R^n において変動し, $\mathbf{p}(\rho)$ はその双対空間 R_n に

において変動すると考える。ここで、 $n = dM$ とおいた。ただし、 d は物理空間の次元を表し、 M は一つの根元事象 ρ を構成する微粒子の個数を表す。

(II₁) 位置変数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\rho)$ の量子確率分布は \mathbf{R}^n 上の L^2 密度 $\psi(\mathbf{r})$ によって決定される。

(II₂) 運動量変数 $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\rho)$ の量子確率分布は、 ψ のフーリエ変換 $\hat{\psi}$ によって決定される。ここで、

$$\hat{\psi}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int \psi(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} d\mathbf{r},$$

$$\psi(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int \hat{\psi}(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} d\mathbf{p},$$

$$\mathbf{r} = (x_1, x_2, \dots, x_n), \mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n),$$

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} = p_1x_1 + p_2x_2 + \dots + p_nx_n$$

とおいている。ここで、 $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ で、 h はプランクの定数を表す。

これらの定数の値は次の通りである：

$$h = 6.626176 \times 10^{-34} J \cdot s,$$

$$\hbar = 1.0545887 \times 10^{-34} J \cdot s.$$

ここで、 $J = \text{ジュール}$ と $s = \text{秒}$ は物理量の単位を表す。

(II₃) \mathbf{R}^n のルベグ可測集合 A に対し、

$$\mu(A) = \int_A |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$$

とおく。このとき、

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{r}(\rho) \in A\}) = \mu(A)$$

が成り立つ。そのとき、 $\mu(A)$ は “ $\mathbf{r}(\rho)$ が A に属する” という事象の確率を表す。これによって確率空間 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, \mu)$ が得られる。ここで、 \mathcal{M}_n は \mathbf{R}^n のルベグ可測集合全体の族を表す。

(II₄) \mathbf{R}_n のルベグ可測集合 B に対し、

$$\nu(B) = \int_B |\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}$$

とおく。このとき、

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{p}(\rho) \in B\}) = \nu(B)$$

が成り立つ。このとき、 $\nu(B)$ は “ $\mathbf{p}(\rho)$ が B に属する” という事象の確率を表す。これによって確率空間 $(\mathbf{R}_n, \mathcal{N}_n, \nu)$ が得られる。ここで、 \mathcal{N}_n は \mathbf{R}_n のルベグ可測集合全体の族を表す。

公理 III (量子系の運動). 時刻 t に依存する量子系の L^2 密度 $\psi(\mathbf{r}, t)$ の時間発展を量子系の運動という。量子系の運動法則はシュレーディンガー方程式によって記述される。シュレーディンガー方程式をこの量子系の運動方程式という。

シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

の形の方程式で表される。作用素 H をハミルトニアンという。 H はあるヒルベルト空間上の自己共役作用素になっている。

公理 III におけるハミルトニアン H は、種々の量子系に対応して種々の形が考えられる。すなわち、各量子系に対して一つのハミルトニアン H が定まっている。

新量子論の公理は、数の公理や幾何学の公理のように定型的なものではなく、群や環の公理のように類型的なものである。上述の新量子論の公理は考察の対象とする量子系の量子現象を理解し、説明する枠組みである。この新量子論の公理は具体的な量子系のそれぞれによって具体的内容が定まるものである。

この公理 III のシュレーディンガー方程式の解 $\psi(\mathbf{r}, t)$ が時間に依存する L^2 密度であるためには、この L^2 密度は複素数値関数でなければならないことがわかる。すなわち、実数値の L^2 密度を用いて、時間に依存するシュレーディンガー方程式の解は表せないのである。

また、公理 III のシュレーディンガー方程式の解 $\psi(\mathbf{r}, t)$ は各時刻 t において L^2 密度であるから、これは実変数 \mathbf{r} と t に依存する複素数値の実関数であることがわかる。

定理 2.2.1 (確率の保存則). 時刻 t に依存する量子系の L^2 密度 $\psi(\mathbf{r}, t)$ がシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

に従って時間発展しているとする。このとき

$$\frac{d}{dt} \int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 0$$

が成り立つ。すなわち、 L^2 密度 $\psi(\mathbf{r}, t)$ の全確率が保存される。

定理 2.2.1 の確率の保存則が成り立つためには、シュレーディンガー方程式においてハミルトニアンは自己共役作用素であり、時間変数に関しては 1 階の偏導関数を含むことが必要で、シュレーディンガー方程式は公理 III で与えられる形しか許されないことがわかる。

定理 2.2.2 (重ね合わせ). 二つの L^2 密度 ψ_1 と ψ_2 は一つの量子系のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

の二つの解であるとする。このとき、

$$\psi = \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2, \quad (\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C})$$

が L^2 密度であるように定数 α_1, α_2 を定めると、 ψ も上のシュレーディンガー方程式の解である。

実際に、二重スリットの実験を説明するために必要なのはこの定理 2.2.2 である。定理 2.2.2 の L^2 密度 ψ_1, ψ_2, ψ に対して定理 1.2.3 の結果を適用して二重スリットの実験における縞模様の説明ができるのである。これは単なる数学的な計算ではなく、実際の量子系を構成する微粒子系の量子確率分布状態が問題なのである。したがって、 L^2 密度 ψ_1, ψ_2, ψ は実際にこの量子系のシュレーディンガー方程式の解である場合にのみ、実際に起っている二重スリットの実験のような量子現象が正しく理解できるのである。

この重ね合わせの原理において、 L^2 密度 ψ_1, ψ_2 や ψ の複素位相が重要な役割を演ずる。したがって、量子系の量子状態を決定する L^2 密度はその複素位相まで含めて決定しなければならない。しかし、このことを、実際の量子系に対して行うことは一般に大変難しい。

実際の量子系の量子状態についてのいくつかの物理的情報は、このような複素位相には関係せずに、 L^2 密度の絶対値に関する情報だけで分かることが多い。

2.3. 量子系の例

2.2 節の公理 I で考えた、微粒子系 ρ の集合である一つの量子系 Ω は一般に無限集合である。自然的存

在としては、このような無限集合からなる量子系は存在していない。これは理論的研究における一つの理想化された物理系のモデルである。言い換えると、実在の量子系の一つの近似モデルである。

量子系の例としては、電子の集合、原子の集合や分子の集合が考えられる。これらの集合を集団ということもある。

例 2.3.1 (量子系の例).

(1) **1 粒子系 (自由粒子系).** これは、その根元事象がただ 1 個の微粒子であるような量子系である。例えば、自由電子の集団がその例である。その 1 個の電子がこの量子系の根元事象である。

(2) **2 粒子系.** これは、その根元事象が 2 個の微粒子の結合系である微粒子系からなる量子系である。例えば、水素原子の集団がその例である。1 個の水素原子は 1 個の原子核と 1 個の電子の結合系である。1 個の水素原子がこの量子系の根元事象である。

(3) **n 粒子系.** これは、その根元事象が n 個の微粒子の結合系であるような微粒子系からなる量子系である。例えば、一般の原子の集団がその例である。1 個の原子は 1 個の原子核と $n - 1$ 個の電子の結合系である。その 1 個の原子がこの量子系の根元事象である。

この項に関しては、伊東 [9]-[11] を参照。

2.4. 力学変数の期待値

2.2 節の公理 I~III に従う一つの量子系 Ω を考えよう。

量子系を構成する一つ一つの微粒子系 ρ はニュートン力学にしたがって運動しているから、各々の微粒子系 ρ に対して、各時刻毎に位置変数 $\mathbf{r}(\rho)$ と運動量変数 $\mathbf{p}(\rho)$ が一定のベクトルとして定まる。

いま、一つの時刻を固定して考えると、 $\mathbf{r}(\rho)$ と $\mathbf{p}(\rho)$ は微粒子系 ρ 毎に様々な値をとることができるので、 ρ にランダムに依存する確率変数と考えられる。それらの量子確率分布法則がそれぞれ L^2 密度 $\psi(\mathbf{r})$ とそのフーリエ変換 $\hat{\psi}(\mathbf{p})$ で定まっている量子確率変数である。これらは、公理 (II₃), (II₄) によれば、それぞれ確率密度 $|\psi(\mathbf{r})|^2$ と $|\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2$ を持つ古典的な意味の確率分布にしたがっていると考えられる。した

がって、 $\mathbf{r}(\rho)$ あるいは $\mathbf{p}(\rho)$ の関数であるような力学変数 $M(\mathbf{r}(\rho))$ あるいは $N(\mathbf{p}(\rho))$ の期待値は古典的
確率変数の期待値と同様に計算される。

すなわち、次の定理が成り立つ。

定理 2.4.1. 上の記号を用いる。微粒子系 ρ の位置変数 $\mathbf{r}(\rho)$ と運動量変数 $\mathbf{p}(\rho)$ の関数であるような力学変数 $M(\mathbf{r}(\rho))$ と $N(\mathbf{p}(\rho))$ の時刻 t における期待値は、それぞれ、

$$E[M(\mathbf{r}(\rho))] = \int M(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r},$$

$$E[N(\mathbf{p}(\rho))] = \int N(\mathbf{p}) |\hat{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p},$$

によって与えられる。

定理 2.4.1 で与えられた期待値の計算は次の定理 2.4.2 のように書き換えることができる。

定理 2.4.2. 定理 2.4.1 の記号を用いる。このとき、次の関係式が成り立つ：

$$E[M(\mathbf{r}(\rho))] = \int \hat{\psi}^*(\mathbf{p}, t) M(i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}) \hat{\psi}(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p},$$

$$E[N(\mathbf{p}(\rho))] = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) N\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{r}}\right) \psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}.$$

ここで、 $\nabla = \nabla_{\mathbf{r}}$ と $\nabla_{\mathbf{p}}$ は、それぞれ \mathbf{r} と \mathbf{p} に関するグラジエント作用素を表す。また、これらは、それぞれ、 $\text{grad}_{\mathbf{r}}$ 、 $\text{grad}_{\mathbf{p}}$ と表すことがある。

上の定理 2.4.2 において、作用素 $N\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{r}}\right)$ と $M(i\hbar\nabla_{\mathbf{p}})$ は、それぞれ右側にある ψ と $\hat{\psi}$ に作用する自己共役作用素であると考えられている。

この定理 2.4.2 はフーリエ変換の性質を用いて、定理 2.4.1 より導かれる。

例 2.4.1. 定理 2.4.1 の記号を用いる。 \mathbf{r} の一つの成分を x とし、 \mathbf{p} の x に対応する一つの成分を p_x とすると、次が成り立つ：

$$E[x(\rho)] = \int x |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r},$$

$$E[p_x(\rho)] = \int p_x |\hat{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p}$$

$$= \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}.$$

いま、記号 \bar{x} 、 $\overline{p_x}$ を

$$\bar{x} = E[x(\rho)], \quad \overline{p_x} = E[p_x(\rho)]$$

と定義するとき、 \bar{x} 、 $\overline{p_x}$ をそれぞれ $x(\rho)$ と $p_x(\rho)$ の平均値あるいは期待値という。これに対し、

$$\Delta x^2 = E[(x(\rho) - \bar{x})^2],$$

$$\Delta p_x^2 = E[(p_x(\rho) - \overline{p_x})^2]$$

をそれぞれ $x(\rho)$ と $p_x(\rho)$ の分散という。

一つの量子系 Ω に対し、それを構成する微粒子系 ρ の位置変数 $\mathbf{r}(\rho)$ と運動量 $\mathbf{p}(\rho)$ の量子確率分布を定める L^2 密度 $\psi(\mathbf{r}, t)$ と $\hat{\psi}(\mathbf{p}, t)$ は一意に定まってしまう。したがって、 $\mathbf{r}(\rho)$ と $\mathbf{p}(\rho)$ の各成分 $x(\rho)$ と $p_x(\rho)$ に対し、それぞれの平均値 \bar{x} 、 $\overline{p_x}$ や分散 Δx^2 、 Δp_x^2 はある時刻 t においては実定数として定まってしまう。

微粒子系の運動に従って、 $\psi(\mathbf{r}, t)$ や $\hat{\psi}(\mathbf{p}, t)$ が時間と共に変動するのに従って、 \bar{x} 、 $\overline{p_x}$ 、 Δx^2 、 Δp_x^2 等の値も時間と共に変動することになる。これが量子系の運動に関する情報を与えるのである。

2.5. 一般化量子状態の公理

考える量子系の位置変数と運動量変数の量子確率分布状態を決めるためには定常状態にある固有量子系あるいは一般化固有量子系の量子確率分布状態に関する知識が必要になる。これに関しては、Ito-Uddin [22]、伊東 [16]、[17] を参照。

まず、固有量子系あるいは一般化固有量子系を規定するために次の公理 I' を定式化する。

公理 I' ((一般化)) 固有量子系). 固有量子系あるいは一般化固有量子系 Ω' は全量子系 Ω の部分確率空間すなわち部分量子系である。これは以下の公理 II' と公理 III' を満たすとす。

考えている量子系のハミルトニアンが離散スペクトルのみを持つ場合には、この部分量子系は固有量子系といわれる。

しかし、考える量子系によっては、ハミルトニアンが連続スペクトルを持つ場合を考察する必要が生じる。量子系のハミルトニアンが連続スペクトルを含

む場合には上の部分量子系として、一般化固有量子系というものを考える必要が生じる。この一般化固有量子系の量子状態を一般化量子状態という。このような一般化量子状態は局所 2 乗可積分関数で決定される。

ここで、 \mathbf{R}^n 上のルベーク可測関数 $\psi(\mathbf{r})$ が局所 2 乗可積分関数であるとは、 \mathbf{R}^n の任意のコンパクト集合 S に対し、

$$\int_S |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} < \infty$$

が成り立つことをいう。

\mathbf{R}^n 上の局所 2 乗可積分関数全体の空間を L_{loc}^2 と表す。

これらの固有量子系あるいは一般化固有量子系の量子状態を規定する公理 II' は次のように定式化される。

公理 II' ((一般化) 固有量子状態). (1) 全量子系のハミルトニアンが離散スペクトルのみを持つ場合、固有量子系 Ω' の固有量子状態は、そのハミルトニアンの固有関数 ψ を用いて、公理 II と同様に決定される。

(2) 全量子系のハミルトニアンが連続スペクトルを持つ場合、一般化固有量子系 Ω' の一般化固有量子状態は、そのハミルトニアンの一般化固有関数 ψ を用いて次のように決定される。

(II₁) 位置変数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\rho)$ の一般化量子確率分布は、 \mathbf{R}^n 上の L_{loc}^2 関数 ψ で決定される。

(II₂) 運動量変数 $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\rho)$ の一般化量子確率分布は、 $\hat{\psi}$ で決定される。ここで、 $\hat{\psi}$ は ψ を局所フーリエ変換したものである。すなわち、 $\hat{\psi}$ は局所的には、関係式

$$\hat{\psi}_S(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int \psi_S(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} d\mathbf{r},$$

$$\psi_S(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int \hat{\psi}_S(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} d\mathbf{p},$$

$$\mathbf{r} = (x_1, x_2, \dots, x_n), \mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n),$$

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} = p_1x_1 + p_2x_2 + \dots + p_nx_n$$

によって決定される。ここで、 ψ_S は、 S を \mathbf{R}^n の任意のコンパクト集合としたとき、 ψ の S 上の切断を

意味する。すなわち、 $\psi_S(\mathbf{r})$ は、特性関数 $\chi_S(\mathbf{r})$ を用いて、 $\psi_S(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})\chi_S(\mathbf{r})$ と定義される。上で用いたフーリエ変換は、局所的には、古典的フーリエ変換である。

(II₃) \mathbf{R}^n 上のルベーク可測集合 A に対して、

$$\begin{aligned} P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{r}(\rho) \in A \cap S\}) \\ = \frac{\int_{A \cap S} |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}{\int_S |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}} = \mu_S(A) \end{aligned}$$

が成り立つ。そのとき、 $\mu_S(A)$ は“領域 S において運動している微粒子系 ρ の位置変数 $\mathbf{r}(\rho)$ が $A \cap S$ に属する”という事象の確率を与える。これによって、 ψ_S によって決定される相対確率空間 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n \cap S, \mu_S)$ を得る。ここで、 \mathcal{M}_n は \mathbf{R}^n 上のルベーク可測集合全体の族である。

(II₄) \mathbf{R}_n 上のルベーク可測集合 B に対して、

$$\begin{aligned} P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{r}(\rho) \in S, \mathbf{p}(\rho) \in B\}) \\ = \frac{\int_B |\hat{\psi}_S(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}}{\int |\hat{\psi}_S(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}} = \nu_S(B) \end{aligned}$$

が成り立つ。そのとき、 $\nu_S(B)$ は“領域 S において運動している微粒子系 ρ の運動量変数 $\mathbf{p}(\rho)$ が B に属する”という事象の確率を与える。これによって、 $\hat{\psi}_S$ によって決定される相対確率空間 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{N}_n, \nu_S)$ を得る。ここで、 \mathcal{N}_n は \mathbf{R}_n 上のルベーク可測集合全体の族である。

この公理 II' より、一般化量子状態を表す L_{loc}^2 密度 $\psi(\mathbf{r})$ は複素数値の実変数関数であることがわかる。

固有量子状態あるいは一般化固有量子状態の時間発展を規定する公理 III' は次のように定式化される。

公理 III' ((一般化) 固有量子系の運動). (1) ハミルトニアンが離散スペクトルのみを持つ場合、公理 II' の (1) を満す、時刻 t に依存する固有量子系の L^2 密度 $\psi(\mathbf{r}, t)$ の時間発展を固有量子系の運動という。

(2) ハミルトニアンが連続スペクトルを持つ場合、公理 II' の (2) を満す、時刻 t に依存する一般化固有量子系の L_{loc}^2 密度 $\psi(\mathbf{r}, t)$ の時間発展を一般化量子系の運動という。

固有量子系あるいは一般化固有量子系の運動法則はシュレーディンガー方程式によって記述される。シュレーディンガー方程式をこの固有量子系あるいは一般化固有量子系の運動方程式という。

シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

の形の方程式で表される。ここで、作用素 H は全量子系のハミルトニアンと同じものである。

H が離散スペクトルをもつ場合と連続スペクトルをもつ場合のいずれの場合にも、シュレーディンガー方程式は形式的には同じ形をしている。

全量子系の量子状態を決定する L^2 密度 $\psi(\mathbf{r}, t)$ は、ハミルトニアンが離散スペクトルのみを持つ場合、固有量子状態を決定する L^2 密度を用いて、固有関数展開することによって決定される。

また、これは、ハミルトニアンが連続スペクトルを含む場合には、一般化固有量子状態を決定する L^2_{loc} 密度を含んだ一般固有関数展開によって決定される。

このように、部分量子系の量子状態としては、 L^2 密度や L^2_{loc} 密度が現れるとしても、全量子系の量子状態は L^2 密度で決定されるのである。

3. シュレーディンガー方程式の導出

3.1. 微粒子系の運動と全エネルギーの保存則

いま、 d は 1, 2 あるいは 3 のいずれか一つに等しいとする。考える物理空間は d 次元空間 \mathbf{R}^d であるとする。とくに、 $d = 1$ のとき、 \mathbf{R}^1 を \mathbf{R} と表すことがある。

何次元の物理空間を考えるべきであろうか。これに関しては、考察の対象とする量子現象が 1 次元的であるか、2 次元的であるか、あるいは 3 次元的であるかということに対応していずれの物理空間を考えるか決めればよいということである。

それに加えて、時間の変数の空間として、1 次元空間 \mathbf{R} を考えることにする。

一つの微粒子系が M 個の微粒子から構成されているとき、その微粒子系の力学的状態を決定する位置変数の個数は、その物理空間の次元 d と微粒子系

を構成する微粒子の個数 M の積である $n = dM$ ということになる。それと同数の運動量変数も必要である。このことを考慮して、以下のような数学的表現を考える。

$M \geq 1$ は自然数として、 $n = dM$ とおく。このとき、

$$\mathbf{R}^n = \mathbf{R}^d \times \cdots \times \mathbf{R}^d$$

は M 個の \mathbf{R}^d の直積空間とする。このとき、 \mathbf{R}^n のベクトル \mathbf{r} を次のように表わす：

$$\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_M),$$

$$\mathbf{r}_i \in \mathbf{R}^d, (i = 1, 2, \cdots, M),$$

$$\mathbf{r}_i = (x_{i1}, \cdots, x_{id}), (i = 1, 2, \cdots, M),$$

$$x_{ij} \in \mathbf{R}, (i = 1, 2, \cdots, M; j = 1, 2, \cdots, d).$$

このとき、 \mathbf{r} の成分は、上の表記法に従った順番に番号付けをして、

$$\mathbf{r} = (x_1, \cdots, x_n)$$

と表わすことがある。ここで、 x_1, \cdots, x_n は実数を表す。

\mathbf{R}^d と \mathbf{R}^n の双対空間をそれぞれ \mathbf{R}_d と \mathbf{R}_n と表すとき、双対空間 \mathbf{R}_d と \mathbf{R}_n のベクトルについても同様の表記法を用いることにする。すなわち、 \mathbf{R}_n のベクトル \mathbf{p} を次のように表す：

$$\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1, \cdots, \mathbf{p}_M),$$

$$\mathbf{p}_i \in \mathbf{R}_d, (i = 1, 2, \cdots, M),$$

$$\mathbf{p}_i = (p_{i1}, \cdots, p_{id}), (i = 1, 2, \cdots, M),$$

$$\mathbf{p} = (p_1, \cdots, p_n),$$

$$p_{ij} \in \mathbf{R}, (i = 1, 2, \cdots, M; j = 1, 2, \cdots, d),$$

$$p_i \in \mathbf{R}, (i = 1, 2, \cdots, n).$$

空間 $\mathbf{R}^d, \mathbf{R}^n, \mathbf{R}_d, \mathbf{R}_n$ 等において、ベクトルの内積を (\cdot, \cdot) と表し、ベクトルのノルムを $|\cdot|$ と表すことにする。

いま、空間 \mathbf{R}^d の中で一つの量子系 Ω を考える。 Ω の中の一つの根元事象 ρ は M 個の微粒子の結合系である微粒子系とする。この微粒子系を構成する微粒子の質量と位置変数および運動量変数を

$$m_i, \mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, (i = 1, 2, \cdots, M)$$

とし、微粒子系 ρ の位置変数および運動量変数を

$$\mathbf{r}(\rho) = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_M), \mathbf{p}(\rho) = (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_M)$$

と表す。ここで、 $\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, (i = 1, 2, \dots, M)$ は

$$\mathbf{r}_i \in \mathbf{R}^d, \mathbf{p}_i \in \mathbf{R}_d, (i = 1, 2, \dots, M)$$

を満たし、 $\mathbf{r}(\rho)$ と $\mathbf{p}(\rho)$ は

$$\mathbf{r}(\rho) \in \mathbf{R}^n, \mathbf{p}(\rho) \in \mathbf{R}_n$$

を満たす。また、質量 m_i の微粒子の速度を \mathbf{v}_i とすると、

$$\mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}, (i = 1, 2, \dots, M),$$

$$\mathbf{p}_i = m_i \mathbf{v}_i, (i = 1, 2, \dots, M)$$

が成り立っている。ここで、 t は時間変数を表している。

各微粒子系 ρ は \mathbf{R}^d の中で、ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ の作用のもとに運動しているとする。このとき、各微粒子系 ρ は力

$$\mathbf{F} = -\text{grad} V(\mathbf{r})$$

の作用のもとにニュートンの運動方程式に従って運動している。この運動方程式は

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} m_1 \mathbf{v}_1 \\ m_2 \mathbf{v}_2 \\ \vdots \\ m_M \mathbf{v}_M \end{pmatrix} = -\text{grad} V(\mathbf{r})$$

と表される。これより、関係式

$$\sum_{i=1}^M m_i (\mathbf{v}_i, \frac{d\mathbf{v}_i}{dt}) = - \sum_{i=1}^M (\mathbf{v}_i, \text{grad}_{\mathbf{r}_i} V(\mathbf{r}))$$

が従う。ゆえに、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^M m_i |\mathbf{v}_i|^2 \right) &= - \sum_{i=1}^M \left(\frac{d\mathbf{r}_i}{dt}, \text{grad}_{\mathbf{r}_i} V(\mathbf{r}) \right) \\ &= - \frac{d}{dt} V(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

ゆえに、

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^M m_i |\mathbf{v}_i|^2 + V(\mathbf{r}) \right) = 0.$$

したがって、1 個の微粒子系 ρ の持つ全エネルギー

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \sum_{i=1}^M m_i |\mathbf{v}_i|^2 + V(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \frac{1}{m_i} |\mathbf{p}_i|^2 + V(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

は時間 t に依存しないことが分かる。

ここで、両辺の第 1 項は微粒子系 ρ の運動エネルギーを表し、両辺の第 2 項はポテンシャルエネルギーを表している。

すなわち、考えている量子系を構成する各微粒子系 ρ の全エネルギーの保存則が成り立つことが示された。

3.2. シュレーディンガー方程式の導出 (1)

この節においては、変分原理と局所変分原理を用いてシュレーディンガー方程式を導出する方法について述べる。これに関しては、伊東 [16], [17], 伊東・萱間 [18], [19], 伊東・萱間・鴨下 [20], Ito-Uddin [21] を参照。

確率空間 $\Omega = \Omega(\mathcal{B}, P)$ は一つの量子系であるとす。 Ω の根元事象 ρ はいくつかの微粒子の結合系すなわち微粒子系を表す。このとき微粒子系 ρ の位置変数を $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\rho) = (x_1(\rho), \dots, x_n(\rho))$, 運動量変数を $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\rho) = (p_1(\rho), \dots, p_n(\rho))$ と表す。変数 \mathbf{r} は空間 \mathbf{R}^n において変動し、変数 \mathbf{p} は空間 \mathbf{R}_n において変動すると考える。このとき、2.2 節の公理 II によって、 L^2 密度 $\psi(\mathbf{r})$ は位置変数 \mathbf{r} の量子確率分布法則を表し、そのフーリエ変換 $\hat{\psi}(\mathbf{p})$ は運動量変数 \mathbf{p} の量子確率分布法則を表す。

各微粒子系 ρ の全エネルギーは古典力学によって定まっているもので、その値は

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i(\rho)^2 + V(\mathbf{r}(\rho))$$

によって与えられる．ここで， m_i は微粒子の質量を表す．一つの微粒子に対応する m_i の値は同じと考える．このエネルギー変数は量子系を表す確率空間 Ω で定義されている量子確率変数と考えられる．これは，一般的には連続確率変数であることが多い．すなわち，この量子確率変数の変域は一般に連続体である．

このエネルギー変数の期待値，すなわち，エネルギー期待値の計算は次のように行われる．

まず，考える量子系の運動法則を表すシュレーディンガー方程式に現れることになるハミルトニアン H は，一般に，

$$H = - \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V$$

の形をしていることが後で分かる．

このようにして，結果として導かれるハミルトニアン H が離散スペクトルを持つ場合と連続スペクトルを持つ場合では計算の仕方が異なることを注意する．したがって，二つの場合を別々に考察する必要がある．

本小節では，まず，ハミルトニアン H が離散スペクトルを持つ場合を考える．このとき，エネルギー期待値の計算は公理 II を用いて次のように行われる．すなわち， A を \mathbf{R}^n の領域， B を \mathbf{R}_n の領域とするとき，関係式

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{r}(\rho) \in A\}) = \int_A |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r},$$

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{p}(\omega) \in B\}) = \int_B |\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}$$

が成り立つことを用いて，次のように計算が行われる．すなわち，

$$\begin{aligned} & E \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i(\rho)^2 + V(\mathbf{r}(\rho)) \right] \\ &= E \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i(\rho)^2 \right] + E[V(\mathbf{r}(\rho))] \\ &= \int \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i^2 \right) |\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p} + \int V(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \end{aligned}$$

$$= \int \left(\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} |\psi_{x_i}(\mathbf{r})|^2 + V(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 \right) d\mathbf{r}.$$

ここで，フーリエ変換に対するプランシュレルの等式が用いられている． ψ_{x_i} は ψ の変数 x_i に関する偏導関数を表す．ここで，このエネルギー期待値を

$$J[\psi] = \int \left(\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} |\psi_{x_i}(\mathbf{r})|^2 + V(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 \right) d\mathbf{r}$$

とおく．この $J[\psi]$ をエネルギー汎関数ということがある．許容し得る量子状態の中から物理的に実際に実現される量子状態を決定するために，ここで，一つの原理として，次の原理 I を考える．

原理 I (変分原理)． 量子系の定常状態は，その量子系のエネルギー期待値が停留値を取るような状態として実現される．

この原理 I にもとづいて次の変分問題を解いて，シュレーディンガー方程式が導かれることを示す．

問題 I． 許容し得る L^2 密度 ψ の中で，エネルギー汎関数 $J[\psi]$ を停留値とするように L^2 密度 ψ を決定せよ．

この変分問題を解いて，オイラー方程式として，次の方程式

$$- \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2} + V\psi = \mathcal{E}\psi$$

が得られる．ここで， \mathcal{E} はラグランジュの未定乗数である．これこそシュレーディンガーが試行錯誤の後に発見したシュレーディンガー方程式である．我々の考察においては，全く合理的にシュレーディンガー方程式が導かれるところに著しい特徴がある．

このシュレーディンガー方程式の解として上の問題 I の解である L^2 密度 ψ が求められる．

一般に，一つの量子系で，エネルギー期待値を停留値とする定常状態は沢山ある．この定常状態を表す L^2 密度は上のシュレーディンガー方程式の固有関数であり，そのエネルギー汎関数の停留値は固有値である．このような固有関数の表す量子確率分布に従う部分量子系を固有量子系ということにする．このとき，考えている量子系はそのような固有量子系の混合状態と考えられる．このとき全量子系を表

す L^2 密度は固有関数を用いて固有関数展開されている。このとき各固有量子系のエネルギー期待値は対応する固有値に等しい。

1 個の微粒子系で見ると位置変数は時間的には連続に変動する量であるし、運動量変数は時間的にはほとんどいたるところ連続に変動する量である。しかも、量子系を構成する微粒子系の位置変数や運動量変数は一定時刻には微粒子系毎にランダムに変動する量である。

このとき、変数分離の方法の逆の過程をたどることによって、時間依存のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ - \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V \right\} \psi$$

が得られる。

3.3. シュレーディンガー方程式の導出 (2)

次に、本小節では、ハミルトニアンが連続スペクトルをもつ場合を考える。これに関しては、伊東 [16], [17], Ito-Uddin [22] を参照。

このときは、ハミルトニアンの固有関数に相当するものは、一般に L^2 ではなくなって、 L^2_{loc} に属する関数となる。そのために、2.2 節の公理 II の規定する量子状態の代わりに、2.5 節で述べた一般化量子状態を考える必要が生じる。

そこで、2.5 節の公理 I', 公理 II', 公理 III' の枠組みで考えることにする。

このとき、公理 II' によって L^2_{loc} 密度 $\psi(\mathbf{r})$ は位置変数 \mathbf{r} の一般化量子確率分布法則を決定し、その局所フーリエ変換 $\hat{\psi}_S(\mathbf{p})$ は運動量変数 \mathbf{p} の一般化量子確率分布法則を決定する。このとき、各微粒子系 ρ の全エネルギーは古典力学によって決定される。その値は

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i(\rho)^2 + V(\mathbf{r}(\rho))$$

によって与えられる。

このエネルギー変数は部分量子系を表す確率空間 Ω' 上で定義された一般化量子確率変数であると考えられる。このエネルギー変数の局所期待値、すな

わち局所エネルギー期待値の計算は公理 II' を用いて行われる。すなわち、 \mathbf{R}^n の任意のコンパクト集合 S と \mathbf{R}^n の部分集合 A と \mathbf{R}^n の部分集合 B に対する関係式

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{r}(\rho) \in A \cap S\}) = \frac{\int_{A \cap S} |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}{\int_S |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}},$$

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{r}(\rho) \in S, \mathbf{p}(\rho) \in B\}) = \frac{\int_B |\hat{\psi}_S(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}}{\int |\hat{\psi}_S(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}}$$

を用いる。そのとき局所エネルギー期待値 \bar{E}_S として、

$$\bar{E}_S = E_S \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i(\rho)^2 + V(\mathbf{r}(\rho)) \right]$$

$$= E_S \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i(\rho)^2 \right] + E_S [V(\mathbf{r}(\rho))]$$

$$= \frac{\int \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i^2 \right) |\hat{\psi}_S(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}}{\int |\hat{\psi}_S(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}} + \frac{\int_S V(\mathbf{r}) |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}{\int_S |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}$$

$$= \frac{\int_S \left(\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \left| \frac{\partial \psi_S(\mathbf{r})}{\partial x_i} \right|^2 + V(\mathbf{r}) |\psi_S(\mathbf{r})|^2 \right) d\mathbf{r}}{\int_S |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}$$

を得る。ここで、フーリエ変換に対するプランシュレルの等式が用いられている。ここで、この局所エネルギー期待値を

$$J_S[\psi_S] = \frac{\int_S \left(\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \left| \frac{\partial \psi_S(\mathbf{r})}{\partial x_i} \right|^2 + V(\mathbf{r}) |\psi_S(\mathbf{r})|^2 \right) d\mathbf{r}}{\int_S |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}$$

と表す。 $J_S[\psi_S]$ を局所エネルギー汎関数という。

ここで次の原理を提示する。

原理 II (局所変分原理). 量子系のハミルトニアンが連続スペクトルを持つ場合、定常状態は、局所的に考えられたその部分量子系のエネルギー期待値が停留置をとる状態として実現される。

この原理を用いて、この量子系に対して許容し得る L^2_{loc} 密度の中から物理的に実際に実現される L^2_{loc} 密度を選び出す。そこで、次の問題 II を考える。ここでは、話を確定するために、ハミルトニアン連続スペクトルが非負実数である場合を考える。具体的な量子系に対しては、ハミルトニアンに形に応じて種々の場合が考えられるところである。

問題 II(局所変分問題). $\{K_j\}$ は \mathbf{R}^n の零集合でないコンパクト集合のある取り尽くし単調増大列とする。すなわち、それは次の条件 (i) と (ii) を満たしているとする：

- (i) $K_1 \subset K_2 \subset \cdots \subset K_j \subset \cdots \subset \mathbf{R}^n$,
- (ii) $\cup_{j=1}^{\infty} K_j = \mathbf{R}^n$.

このとき、任意の非負実数 $\mathcal{E} \geq 0$ に対し、 L^2_{loc} 密度 $\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) (\neq 0)$ を、次の条件 (1)~(5) が満たされるように決定せよ。

- (1) $\psi^{(\mathcal{E})}|_{K_j} = \psi_j$, ($j = 1, 2, \dots$).
- (2) $\psi_{j+1}|_{K_j} = \psi_j$, ($j = 1, 2, \dots$).
- (3) $j = 1, 2, \dots$ に対し、次の (a) または (b) のいずれかが成り立つ：
- (a) 汎関数

$$J_j[\psi_j] = \frac{\int_{K_j} \left(\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \left| \frac{\partial \psi_j(\mathbf{r})}{\partial x_i} \right|^2 + V(\mathbf{r}) |\psi_j(\mathbf{r})|^2 \right) d\mathbf{r}}{\int_{K_j} |\psi_j(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}$$

が停留値をとる。

- (b) $\psi_j = 0$.
- (4) $\int \psi^{(\mathcal{E}')*}(\mathbf{r}) \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta(\mathcal{E}' - \mathcal{E})$,
($\mathcal{E}', \mathcal{E} \geq 0$).

ここで、 $\delta(\mathcal{E})$ はデルタ関数を表す。

- (5) $\int_0^{\infty} \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}')^* \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) d\mathcal{E} = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$,
($\mathbf{r}, \mathbf{r}' \in \mathbf{R}^n$).

この局所変分問題を解いて、オイラー方程式として、次のシュレーディンガー方程式

$$-\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2 \psi_j(\mathbf{r})}{\partial x_i^2} + V(\mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}) = \mathcal{E} \psi_j(\mathbf{r}),$$

$$(\mathbf{r} \in K_j; j = 1, 2, \dots)$$

を得る。ここで、 \mathcal{E} はラグランジュの未定乗数である。このとき、問題 II の条件 (1), (2), (3) を満たすような L^2_{loc} 密度 $\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})$ で、ある $\mathcal{E} \geq 0$ に対し、

$$\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) = \psi_j(\mathbf{r}), \mathbf{r} \in K_j, (j = 1, 2, \dots)$$

を満たすものを得る。その時、 $\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})$ はシュレーディンガー方程式

$$-\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2 \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})}{\partial x_i^2} + V(\mathbf{r}) \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) = \mathcal{E} \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}),$$

$$(\mathbf{r} \in \mathbf{R}^n)$$

を満たす。

一般展開定理によって、任意の L^2 密度 $\psi(\mathbf{r})$ に対し、 $c(\mathcal{E})$ を

$$c(\mathcal{E}) = \int \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

と定義すると、

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_0^{\infty} c(\mathcal{E}) \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) d\mathcal{E}$$

が成り立つ。

ここで変数分離の方法を逆にたどる。まず、関数

$$\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}, t) = \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) \exp[-i \frac{\mathcal{E}}{\hbar} t]$$

を考える。この関数を t で偏微分して、

$$i\hbar \frac{\partial \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \mathcal{E} \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) \exp[-i \frac{\mathcal{E}}{\hbar} t]$$

を得る。ここで、定常状態のシュレーディンガー方程式のハミルトニアンを

$$H = -\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V(\mathbf{r})$$

と表す。このとき、

$$H \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) = \mathcal{E} \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})$$

を得る。ゆえに、

$$i\hbar \frac{\partial \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \{H \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})\} \exp[-i \frac{\mathcal{E}}{\hbar} t]$$

$$= H \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}, t)$$

を得る。ゆえに、

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty c(\mathcal{E})\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}, t)d\mathcal{E}$$

とおくと、

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H\psi(\mathbf{r}, t)$$

を得る。すなわち、

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left\{ -\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}, t)$$

が成り立つ。

これは全量子系 Ω の時間発展のシュレーディンガー方程式である。すなわち、2.2 節の公理 III を満たす。

ハミルトニアンが連続スペクトルをもつ場合にも、全量子系の量子状態を決めるシュレーディンガー方程式の解 $\psi(\mathbf{r}, t)$ は各時刻に L^2 密度である。

確率保存の法則によって、時間発展のシュレーディンガー方程式は上の形以外にはないことが分かる。

新量子論の公理によれば、シュレーディンガー方程式の解である関数 ψ は、位置変数の量子確率分布を定める L^2 密度である。したがって、関数 $\psi = \psi(\mathbf{r}, t)$ が複素数値の実変数関数であることが自然に理解される。

文 献

- [1] S. P. Gudder, Quantum Probability, Academic Press, Boston, 1988.
- [2] 伊藤清, 確率論, 岩波書店, 東京, 1953.
- [3] 伊藤清, 確率論 I-III(岩波講座, 基礎数学), 岩波書店, 東京, 1976-1978.
- [4] 伊藤清, 確率論の基礎 [新版], 岩波書店, 東京, 2004.
- [5] 伊東由文, 準確率測度の理論, 数理解析研究所講究録 No.558, pp.96-113, April 1985.
- [6] 伊東由文, 線形代数学, 共立出版株式会社, 東京, 1987.
- [7] 伊東由文, 解析学 (上), サイエンスハウス, 東京, 1991.
- [8] 伊東由文, 数理統計学, サイエンスハウス, 東京, 1991.
- [9] 伊東由文, New Axiom of Quantum Mechanics–Hilbert’s 6th Problem–, J. Math. Tokushima Univ., Vol.32, pp.43-51, 1998.
- [10] 伊東由文, New Axiom of Quantum Mechanics–Hilbert’s 6th Problem– 実解析学シンポジウム 1998 高松, pp.96-103, November 1998.
- [11] 伊東由文, 量子力学の数学的原理. 新理論, サイエンスハウス, 東京, 2000.
- [12] 伊東由文, Theory of Quantum Probability, J. Math. Tokushima Univ., Vol.34, pp.23-50, 2000.
- [13] 伊東由文, 解析学の基礎, サイエンスハウス, 東京, 2002.
- [14] 伊東由文, 測度論・積分論, サイエンスハウス, 東京, 2002.
- [15] 伊東由文, 解析学 (下巻), 改訂版, サイエンスハウス, 東京, 2002.
- [16] 伊東由文, 新量子論. 現状と課題, Natural Science Research, Faculty of Integrated Arts and Sciences, The University of Tokushima, Vol.18, pp.1-14, December 2004.
- [17] 伊東由文, 新量子論. 現状と課題, 実解析学シンポジウム 2004 大阪, pp.181-199, 2004.
- [18] 伊東由文・萱間顕誠, 変分原理とシュレーディンガー方程式, Natural Science Research, Faculty of Integrated Arts and Sciences, The University of Tokushima, Vol.15, pp.1-7, February 2002.

- [19] 伊東由文・萱間顕誠, 変分原理とシュレーディンガー方程式, 数理解析研究所講究録 No.1278, pp.86-95, August 2002.
- [20] 伊東由文・萱間顕誠・鴨下豊, 新量子論とプランクの輻射公式の新しい意味, Natural Science Research, Faculty of Integrated Arts and Sciences, The University of Tokushima, Vol.16, pp.1-10, February 2003.
- [21] Y. Ito and Md Sharif Uddin, New Quantum Theory and New Meaning of Specific Heat of a Solid, J. Math. Univ. Tokushima, Vol.38, pp.17-27, December 2004.
- [22] Y. Ito and Md Sharif Uddin, New Quantum Theory and New Meaning of Specific Heat of an Ideal Gas, J. Math. Univ. Tokushima, Vol.38, pp.29-40, December 2004.
- [23] T. Kato, Perturbation Theory for Linear Operators, Springer, Berlin, 1995.
- [24] E. H. Lieb and M. Loss, Analysis, Second edition, American Mathematical Society, Rhode Island, 2001.
- [25] P. Masani, Orthogonally Scattered Measures, Adv. in Math., 2(1968), 61-117.
- [26] 益川敏英, 現代の物質観とアインシュタインの夢, 岩波書店, 東京, 1995.