量子力学への導入（もう一つの道）

渡　辺　健　二

岡山理科大学大学院応用物理学専攻

(1991年9月30日　受理)

1．はじめに

50年におよぶ量子力学教科書の流れが存在する。最大の問題点はシュレーディンガー方程式が判ったと，学生に如何に思い込ませるか，が教科書として，またそれを用いて教える教官側の課題である。いろいろの工夫が重ねられてきた。(例えば，有名なポーリング，ディラック，Schiff の教科書等があるが，教える側の人間としてもう一つ納得がゆかない。) 学生に求める理解の仕方として今まで主流となって来た形態は，頭からシュレーディンガー方程式を”うのみ”にして，その方程式が示す結果を”受け入れて”量子力学世界のイメージを造り上げてゆく，というものである。あの時はこう，この時はああ，というように，”群盲象をなぜる”ということを地でゆくという形態と云わざるを得ない。(コンピュータに”馴れるという最近の教え方”と同じである，ということであろうか。ただし，限られたワープロ・ソフトを使う段階というべきであって，自分がコンピュータという道具を駆使しているというものではない。)

物事（ものごと）を物理的に考えてゆくという思考方法を教えるという教育の立場からは，その基礎となる古典力学的イメージ（日常周辺の経験事実の認識）からどのように発展し拡張してゆくのか，ということを跡づけて説明を与え，納得させてゆく形態を取らなければならない。実験科学の立場からは，文句を云わず頭から”うのみ”にしなければならないのは実験結果と数学論理（無限概念を除いた部分）だけである，というのが原則であろう。それにも拘らず，これまでの量子力学への教育的導入はこの原則に沿うていない，そのことが何時までも物理教育に従事する者の懸案の課題となっているわけである。

ここでは，”新しく発見された量子効果”を示す実験結果に対応するために，新たな現象記術の方法を採用して行かなければならなかったという必要性への対応という観点から，力学と光学（電磁気学）から量子力学に移って行った，という説明を与える試みを示す。

2．シュレーディンガー方程式への導入

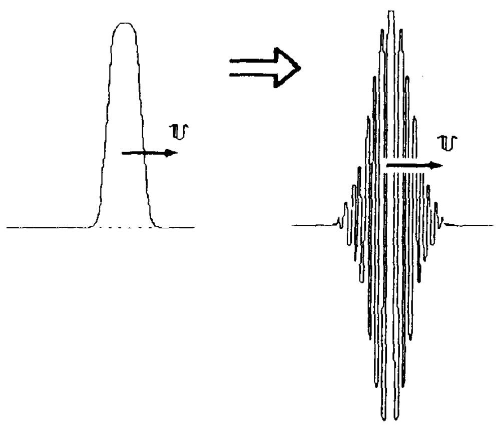
〈量子効果現象を含めること〉

光の本性も始めは粒子と考えられたが，それは自然の成行きであった。日常経験の中にある，完全に近い固い小球の自由運動の直進性，また固い板による弾性球の反射性等が光

の直進，反射と非常によく似ているからである。光の屈折もガラス中の光速と関連して説明されたが，光の回折・干渉現象が別に観測されて，それらの実験結果も含めて理解するために光の波動論に発展していったことは周知のことである。

波動の典型例は水の波である。それはよく見ると，直進するし反射もする，また散乱するし回折もする。したがって光も波動と同じように理解しようという努力が行なわれたわけである。光の場合も波動であるからには，エーテルという未知の媒体がまず存在するとし，その振動運動が波動として伝播すると想定された。100年余りの間，エーテルの存在を同定する努力が続けられて来たことは歴史の示すところであり，当時疑う余地のないと信じられていたそのエーテルがなかなか手中にできなかった。ところが電磁気学の発展とともに，真空中の電場が波動現象を示すことが新しく発見された。これは物理モデルを形成する基礎となる物理概念の重大な変更を惹き起した。すなわち，自然界に存在する振動・波動現象は何等かの媒体がまず振動しそれが空間的相互作用の下に波動として伝播してゆく現象のみである。媒体の振動が大前提である，とそれ迄考えられてきたのに対し，それ以外に真空中の電場という”場”の波動が基本事象として存在する，という認識が新しく加わったわけである。媒質がないのに自然界に存在する，この新しい”場”の波動の存在が実験的に電磁波として確立され，波動としての速度が等しいという事実から，光の本性が電磁波と同一であると理解されることになった。光波動の媒体としてのエーテルの存在をなかなか同定できないというそれ迄の難問が，新しい実験結果の発見で，波動概念の修正とともに一挙に解決された。すなわち，未知といわれたエーテルは存在しない架空の媒体であった，という結論である。

一方，電子等の粒子は文字どおり粒子である。運動している粒子は運動エネルギーの塊（カタマリ）として速度 $\boldsymbol{v}$ で動き，衝突すると相手にそのエネルギーを与える。(光現象も光強度というエネルギー密度の塊として最初考察が始ったという歴史的推移と丁度対応する。) しかし，有名な電子線の干渉模様という量子効果が観測されて，電子にも波動性を持たさなければならない，ということになった。



この”実験結果という自然”を記述する物理モデルとして，粒子性と波動性を両立させるために，素朴な質点という構造を持たない”デルタ関数的”粒子モデルから，波動パルスであるという構造を持った粒子モデルに変更されていった。

波動パルスであるということは，”構造のない”孤立している単一粒子という質点モデルではなく，単一粒子であってもそれは波動場の集中した系として（多体問題的な場）の記述にしなければならないということを意味する。そのような記述の具体例は光のパルス波動記述であって，デルタ関数的なニュートン粒子記述から粒子も場の記述に変更しなければならない，ということになった。(歴史をはなれて現在で考えるならば，パルス・レーザ光が丁度粒子に対応するであろう。レーザ光は皮膚に当ると痛みや損傷を与え，それは小さな固体粒子のそれと全く同様である。)

デルタ関数的なニュートン粒子，すなわち質点は，周知のように，時間の関数としての速度ベクトル $\boldsymbol{v}(\mathrm{t})$ とそれを時間積分した空間位置 $\boldsymbol{r}(\mathrm{t})$ で記述される。ところが多数の粒子が同時に存在する系は，独立変数を位置 $\boldsymbol{r}$ と速度 $\boldsymbol{v}$ とした粒子分布関数 $\mathrm{n}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}; \mathrm{t})$ の時間変化(時間 t はパラメタ)で表わされる。この場合は位置と速度を独立変数として指定し，粒子密度というスカラ量の場を表している状態関数（= 粒子分布関数）で記述される。それゆえ多数粒子（全粒子数 N）の運動は場の記述によらなければならない。この記述の枠組みを，干渉現象を示す粒子の考察にも援用することにする。1ヶの粒子の記述でも，それが最終的には構造を持つという含みを持たせて，多数粒子記述の特別の場合，すなわち N = 1 の場合として，やはり場の言葉で記述することにし，それを発展させてゆくことにしなければならない。

〈場の記述〉

場の記述は，電光ニュース掲示板で事象を記述しているというのがその典型例である。電光板でゴルフボールが飛んで行くのを写している場合を思い出すと，事情がはっきりするであろう。ゴルフボールは電光板の電燈1ヶがついていることで表示される。まづはじめの瞬間にゴルフボールは始めの場所を示す電燈だけが点灯状態 ($\equiv 1$) になっており，他の場所に対応するすべての電燈は消えている状態 ($\equiv 0$) である。つぎの瞬間には打出されて移動したゴルフボールのある，次の場所の電燈だけが点灯状態 ($\equiv 1$) になり他のすべての電燈は消えている状態 ($\equiv 0$) である。そのまた次の時間では，同じようにその時間にボールが存在する場所の電燈だけが点灯し他の電燈はすべて消えている。このように次々と点灯状態 ($\equiv 1$) の場所が移ってゆくということであるが，この電光板が十分に明確な画像を示すためには，ゴルフボールの存在する場所の電燈が点灯しているということだけでなく，他のすべての電燈が消えているということもすべて制御されていなければならない。他の場所の電燈がよく制御されないで，点灯したり消えたりすると明確な景色を示すことにならない，のは云うまでもない。

このように電光板（M 行 N 列の電燈の集合）が非常に多くの（MN）ヶの電燈から作ら

れているから，このすべての多数ヶの電燈が点燈状態$(\equiv 1)$か，消えている状態$(\equiv 0)$かを指示することが勿論必要である。この多くの指示情報を与えるのが，各瞬間瞬間の電光板の状態を示す状態関数ということになる。それは電燈の場所場所に応じて，0か1を与えるという関数である。m行n列のところにある1つ1つの電燈が座標(m, n)に存在すると呼ぶことにすると，状態関数は例えば$f(m, n)$と書かれる。独立変数がm, nで与えられる2次元のスカラ関数［普通は$f(x, y)$と書く］である。

このように場の記述では空間全体をいつも記述していなければならないのであるが，これに対して，$\boldsymbol{v}(t\,;\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{v}_0)$と$\boldsymbol{r}(t\,;\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{v}_0)$による古典力学的記述($\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{v}_0$はそれぞれ初期値)は，粒子の存在する場所だけに注目している記述ということであって，それ以外の場所の情報には無関心であるという記述である。

この例を含め多くの経験で示されるように，場のすべての点で電燈がついているか，ついていないか，を指示しなければならない。それはすべての場所の情報を，すなわちすべての場所の値，多くの値を同時に与える必要があるということであって，具体的には関数で記述するということになる。これが，状態関数$\Psi(\boldsymbol{r}\,;\mathrm{t})$という基本的な概念が必要になった事情である。独立変数は$\boldsymbol{r}$で，時間tはパラメタである。

ところで，多数粒子系や電磁場等で記述される一般の物理系において，その物理法則を記述する基本形態は，事象を

記述の基礎となる定常状態

および

1つの定常状態から他の定常状態へ時間的に移って行くこと

と規定し，

力が原因になって定常状態の間の移動という結果を生ずる，

というように記述する。原因と結果の因果関係，その応答関係が一般化されたものがすなわち法則である。以後の記述もこの記述枠の中に入れ込まなければならない。

状態関数で記述する粒子の定常状態，すなわち時間的に変化しない状態関数であらわされる物理状態とはどのような事象になるのであろうか。古典力学の出発点であった定常状態（あまり力点をおいて教えられていない）は，力が作用しないときの質点の状態であり，それは等速直線運動をするという事象であったが，それを場の記述法による定常状態に”変更”して記述しなければならない。それは等速直線運動をする質点が次々と”切れ目なく流れてくる”状態である。これが場の記述としては振幅の一定な平面波で表わされるわけである。これは，お手本とする光現象のとき，光エネルギー密度（一定）がc速度でつぎつぎ伝播している状態を平面波で記述したことに対応させている。古典的イメージに固執して，粒子の動きを孤立した1つのパルス波動が進行するとしようとすると，その状態関数は当然時間変化を示し，時間変化をしないという定常状態にはならない。時間変化しない関数による記述に作り上げようとすると波動パルスがつぎつぎに流れている状態にな

ってしまって，結局平面波という記述に帰着する。光の波動場記述で”時間変化”をするというのは，振幅がゆっくりと空間的変化をすることであって，所謂光の振動数による早い変化（それは空間全体にわたってほぼ一様に行なわれる変化である）は状態の時間変化とは認識しない，ということもお手本にしなければならない。これらのことは後に示す状態関数の特性によって，量子力学になっても矛盾なく組込まれている。（3．参照）

状態関数の重要な特性として，関数全体に掛かる空間的に一様な係数は実質的な意味を持たない，ということがある。いま電光板の状態関数に $\cos(2x)$ を与えたとしよう。電光板の座標 (m, n) with $0<m<M$ and $0<n<N$ を1直線上に配置し直して x 座標と対応させておくとする。また関数 cos (2 x) の大きさは x に存在する電燈の（電流の大きさ）^{2}を示し電燈の明るさを与えると設定しても一般性を失わないであろう。そうすると，この状態関数 $\cos(2x)$ で表示される電光板の景色図形と，もう一つの状態関数 $3\cos(2x)$ で表示される電光板の景色図形とを比較すると，後者は前者の景色と全く同じであって明るさだけが3倍に明るくなった景色を与える。それゆえ，景色を記述すると云う状態関数の役割を基本に判断すると，これら2つの状態関数は同一である，ということになる。その意味で $\cos(2x)$ と $3\cos(2x)$とは同じ状態関数と認識しなければならないことになる。

（注意：いろいろな場合に，状態関数が適当に規格化されて用いられているのはこのためである。また，独立変数という言葉と時間を示すパラメタという言葉の実質的な意味の違いも，これらのことに関連して理解されるであろう。）

〈光平面波と粒子平面波〉

場の記述として，真空中に光の平面波が”定常的に”存在するときは

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r}, t) &= \{E_{perp}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-i\omega t)+c.c.\}/2 \\ &= \{(E_{perp}+E^*{}_{perp})/2\}\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)\end{aligned} \tag{1}$$

という表記法を用いることはよく知られている［ここでは同時に $\omega = ck$ が成立っているとしなければならない］。光は電磁波であるから，ψ の代りに $\boldsymbol{k}$ ベクトルに垂直な電場ベクトルを用いるのが論理的であろうが，波動光学で専ら用いられてきたスカラ場で説明を進めるため，その成分スカラ量 E_{perp} を用いることとする。この文章の趣旨に沿うてはそれで十分であって，説明を簡明に行なえるからである。

(1)式の振幅 E_{perp} が時間空間的に変化しないことが，”定常”であるという条件を表わしている。光の存在するところには光波動（電磁波）の場のエネルギー密度があり，光は光速 c でその光エネルギーを伝播している。光強度はそのエネルギー密度である（アイコナールとの関連考察は省略する）。そして，その場のエネルギー保存則は，一般的な形の式として

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{P}=0 \tag{2}$$

ここに $W\equiv(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}+\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{B})/2=\varepsilon_0(E_{perp})^2$: エネルギー密度 (3)

$\boldsymbol{P}\equiv\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}$: エネルギー流れ (4)

と記されることは電磁気学の教科書に記されている。ここに $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{B}$ はそれぞれ普通に使われる電場，磁場，電気誘導，磁気誘導である。

(1)式で示されるこの波動振幅の特性を記述しているのは，定数ベクトル $\boldsymbol{k}$ と定数スカラ ω だけである。それらを規定するのは時間発展を記述する電磁気学の基礎方程式，すなわちマックスウェルの方程式から導かれる波動方程式の

$$\varepsilon_0\mu_0\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\nabla\cdot\nabla\psi \qquad \text{in}\,(\boldsymbol{r},t)\,\text{space} \tag{5'}$$

であって，(1)式がこの方程式の解になっていなければならない。このことから

$$\omega^2=c^2k^2 \qquad \text{with } c^2=1/(\varepsilon_0\mu_0) \qquad \text{in}(\boldsymbol{k},\omega)\,\text{space} \tag{5}$$

という分散関係式が得られる，すなわち ω が $\boldsymbol{k}$ の関数となる。ω が $\boldsymbol{k}$ の関数となっているというそのことが，(1)式を波動の表現式と理解することが出来る基本条件である。ω と $\boldsymbol{k}$ が無関係であれば(1)式は波動を表さないことを改めて指摘しておこう。

また，この(5)式が実質的に波動方程式そのものを表している，と認識することが1つのキーポイントである，ことも強調しておかなければならない。(後記参照)

この特性を用ると(4)式は

$$\boldsymbol{P}=(\boldsymbol{k}/k)\,\mathrm{Wc} \tag{6}$$

となり，エネルギー流れ $\boldsymbol{P}$ の速度は $\boldsymbol{k}$ ベクトルの方向に向っていて速さが c である。

この(6)式が示すことは $\boldsymbol{P}$ が W に比例するということで，もともと W は $(E_{perp})^2$ だけに比例した量であるから，場の量（一般に ψ で表わされる）の2乗で記述されている。これは光物理としては幾何光学で用いていた光強度のことである。

低周波の電磁波の場合とは異なり，光周波数の電磁波，即ち光については，周波数が大きいからその電場を直接測定することは殆ど不可能であって，$(E_{perp})^2$ の時間平均すなわち強度が実際に測定されて来た。そのことが光強度という物理量，W と $\boldsymbol{P}$，による記述が主流をなしてきたということの背景になっている（幾何光学の立場)。

それに対して，(1)式を用いて場そのもの，すなわち ψ の1乗で記述するようにしたのは，強度でなく場の振幅で記述し，干渉等の現象をも記述出来るようにしたという波動光学の趣旨を反映していることである。この表し方を手本にして，電子等粒子についても干渉現象を示す事実を説明するために ψ の1乗で記述する仕方を用いてゆくわけである。そのた

めには，(1)式の ψ 表示式のなかに，エネルギー伝播の関係式(6)がどの様に内包されているのか，ということを認識することが2つ目のキーポイントである。

(1)&(5)式は空間内で一様に光平面波が伝播していること，すなわち光エネルギーを $\boldsymbol{k}$ ベクトルの方向に速度 c で空間内一様に運んでいる状態を表記している。これに対応して，上に記したように粒子運動の定常状態は，粒子エネルギーを $\boldsymbol{p}$ ベクトルの方向に速さ p/m で空間的に一様に運ぶ状態である。それゆえ光の場合と同じような場の記述法を（対応させて）用いることが出来る筈である。

その対応を考えるとき，ベクトル同志の $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{p}$ が対応しなければならない，それぞれの記述において唯一のベクトルだからである。またそれらが関連する関係式として，夫々で

$$\omega = ck \tag{7}$$

$$E = pc \text{（相対論的粒子）} \tag{8}$$

が成立つことも周知のことである。(光は勿論光速 c で進み相対論的であるから，粒子運動もそれに対応して相対論的粒子の関係式を使っている。) この対応は非常に重要な意味を含んでいるのであって，

$$\boldsymbol{p} \propto \boldsymbol{k} \quad \& \quad E \propto \omega \tag{9}$$

ということを強く示唆している。すなわち，粒子の運動量ベクトルが光の波動ベクトルに比例すると同時に，粒子のエネルギーが光の振動数に比例する，ということである。

> (注意) 電磁気学の方程式からは，(3)式のようにエネルギー密度は $(E_{perp})^2$ に比例するということだけが導かれ，ω 依存性は a priori には出てこない。それ故，可視光も紫外線も X 線，ガンマ線もすべて電磁波であるとよく表現されるが，これら高い周波数の電磁波が示す放射線効果は電磁気学では説明出来ない。

一方周知のように，前期量子論の歴史で，とくに黒体輻射現象の研究から，プランクの量子仮説が生れ量子力学の基礎となった。それは

$$E = \hbar\omega \text{（プランクの量子仮説）}$$

と書かれる。

それゆえ，(9)の比例定数としてプランク定数 $\hbar$ がとられることとなり

$$E \propto \omega, \quad \therefore \quad E = \hbar\omega \text{（プランクの量子仮説）} \tag{10}$$

$$\boldsymbol{p} \propto \boldsymbol{k}, \quad \therefore \quad \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k} \tag{10$'$}$$

と設定される。古典力学と量子力学の対応関係そのものである。

対応というときに注意すべきことは，この対応関係をガイドラインにして，古

典物理の概念を原子スケールの現象にまで拡張して，より広範な適用範囲をもつ量子物理概念にひろげたということである。故に量子力学のなかで古典的極限 Classical Limit という操作を行うと古典力学に戻る。

さらに，留意すべきことは原子スケールの現象を日常経験する古典力学的概念で考察するとき，たとえば質量など直接観測することが出来なくなるという，概念拡張に伴う"新しい"事情が入ってくる。そのため可観測量 Observable という概念が新しく導入されて，考察の枠組みに制限が加えられるようになる，ということがある。不確定性関係などもその1つと云えよう。古典力学的概念を新しい領域に拡張してゆくときには，当然そのままの拡張は出来ないであろうから，どのような制限が加わって来るのかを定量的に認識することは，考察を進めるときの要点である。

それ故，光現象と相対論的粒子のこの対応を，非相対論的な普通の粒子の場合にも拡張して

$$E = pc \qquad \text{for } \beta = v/c \fallingdotseq 1 \quad (\text{相対論的})$$

から

$$E = mc^2 + \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}}{2m} \qquad \text{for } \beta = v/c \ll 1 \quad (\text{非相対論的})$$

が得られ，静止質量エネルギーは非常に大きな定数であるから E として変化分だけ取り出すことにすると，この式は

$$E = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}/(2m) \tag{11}$$

になる。この式は(10)と(10)′の対応によって

$$\hbar\omega = \hbar^2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}/(2m) \qquad \text{in } (\boldsymbol{k}, \omega) \text{ space,} \tag{12}$$

と導かれる。これを物理空間に戻すと

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\nabla\psi \qquad \text{in } (\boldsymbol{r}, t) \text{ space} \tag{13}$$

と得られることになった。これが周知のように，自由運動粒子のシュレーディンガー方程式そのものである。なお(12)式の基礎になった $E = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}/(2m)$ という(11)式の右辺は自由粒子のハミルトニアンであることを注意しておこう。

この(12)式の ω と $\boldsymbol{k}$ の関係式が波動性を示す粒子の"特性"を示しているのであり，光平面波の場合には(7)式の $\omega^2 = c^2k^2$ という関係式が波動方程式(5)′そのものを表わしたと同じように，粒子"平面波"の場合には，(12)式が波動方程式に対応して(13)式を与え，この式が ψ を決める式となることが判る。

以上の導出は ψ が平面波 $exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-i\omega t)$ と表されるとすると

$$\partial\psi/\partial t = -i\omega\psi \quad \& \quad \nabla\psi = i\boldsymbol{k}\psi$$

という式が成立つから，この関係を逆に辿っただけであって必然性に乏しい，という懸念が当然生ずるが，状態関数をいかに記述し得るかという一般論の立場からも，これらの対応は十分に一般性のある推論として立証されることを付記しておこう。(次の節3.を参照。)
このようにしてシュレーディンガー方程式 schroediger Equation は，古典的考察の発展的拡張として量子効果を示す実験結果をも説明し理解するために，現象記述が複雑になったことを考慮して場の記述法に変換したということを踏まえながら，光現象と(相対論的)粒子との対応論的拡張によって導かれるわけである。

3．状態関数と関数ベクトル

以上記してきたように，状態関数ですべての物理過程が記述されるとすると，この状態関数とその関数形の変化をどのように理解してゆくか，ということが重要になる。関数といえば $x^2, \cos x, \sin kx, exp(-gx)$ 等の初等関数から関数概念が形成されているのが普通であるが，最近はコンピュータを用いて微分方程式を解くことを経験した人も多く，その人達は関数とは数字の並びというリスト，すなわち

$$(f_1, f_2, f_3, \cdots, f_n, \cdots\cdots, f_{N-2}, f_{N-1}, f_N)$$

である，ということを体験して把握したことであろう。これを一括して

$$0 < x_1 < x_2 < x_3 < \cdots < x_n < \cdots < x_{N-3} < x_{N-1} < x_N = L$$

に対応するとしてお互い組合せて，$f(x)$ for $0 < x \leqq L$ と普通は書いているのであって，関数の実体はあくまでも数字のリストである。初等関数はそういうなかにあって特殊な位置を与えられている，ということである。

状態関数の（形の）変化とは，それゆえ，数字の並びの変化であって，それを如何に直観的に理解してゆくか，如何に実体として記述してゆくか，を考えることになる。

これと丁度同じような課題を取扱ったこととしてよく知られているのは，3つの数字並びとその変化を，3次元のベクトルとその変化（テンソルで表す）で理解した，という経験である。詳細は他の資料を参考にすることとして，以後の考察に必要な要点だけをまとめると次のようになる。

数値の並び (x, y, z) が変化してもう一つの数値の並び (x', y', z') になったときは

$$\begin{aligned} x' &= \alpha_{11}x+\alpha_{12}y+\alpha_{13}z \\ y' &= \alpha_{21}x+\alpha_{22}y+\alpha_{23}z \\ z' &= \alpha_{31}x+\alpha_{32}y+\alpha_{33}z \end{aligned} \tag{1}$$

と書かれる。α_{11}, α_{12}, 等は数値である。この式を一括して理解するために

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \tag{2}$$

と整理して書き，左辺がベクトル $\boldsymbol{r}'(x', y', z')$であり，右辺にも $\boldsymbol{r}(x, y, z)$が存在する，そして，$\boldsymbol{r}$ が3行3列の行列で表される量によって"回転"させられて $\boldsymbol{r}'$ となった，と理解する。この行列を $\mathbf{T}$ と書くと(2)式は

$$\boldsymbol{r}' = \mathbf{T}\cdot\boldsymbol{r} \tag{3}$$

と書かれる。この同じ(2)式の内容を別のもう一つの書き方で，まずベクトルは

$$\boldsymbol{r} = \hat{x}x+\hat{y}y+\hat{z}z, \quad \boldsymbol{r}' = \hat{x}x'+\hat{y}y'+\hat{z}z' \tag{4}$$

と書き，$\mathbf{T}$ を

$$\begin{aligned} \mathbf{T} = \quad & \hat{x}\hat{x}\alpha_{11}+\hat{x}\hat{y}\alpha_{12}+\hat{x}\hat{z}\alpha_{13} \\ & +\hat{y}\hat{x}\alpha_{21}+\hat{y}\hat{y}\alpha_{22}+\hat{y}\hat{z}\alpha_{23} \\ & +\hat{z}\hat{x}\alpha_{31}+\hat{z}\hat{y}\alpha_{32}+\hat{z}\hat{z}\alpha_{33} \end{aligned} \tag{5}$$

と書く仕方があり得る。この右辺の $\hat{x}\hat{x}$ 等はベクトルを2つ並べた（ベクトルとは異なる，別の）テンソルという量である。ここで $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$ はお互い直交している座標軸をあらわす単位ベクトルであって，それら同志のスカラ積は $\hat{x}\cdot\hat{y}=0$, $\hat{y}\cdot\hat{z}=0$, $\hat{z}\cdot\hat{x}=0$,および $\hat{x}\cdot\hat{x}=\hat{y}\cdot\hat{y}=\hat{z}\cdot\hat{z}=1$である。これらの関係を用いると(3)式がそのまま(1)式を与えていることが判る。

ゆえに数値並び（ベクトル）の変化をテンソルで一括して考えてゆく，という方法である。さらに任意のテンソルがあるときを考えよう。すべての3次元ベクトルはこのテンソルによって"回転"させられ，別の方向を向いたベクトルになる。そういうテンソルのなかにあって，特に対称テンソル $\mathbf{S}(\alpha_{jk}=\alpha_{kj})$の場合には，

$$\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{u}_n = \mathrm{S}_n\boldsymbol{u}_n$$

という関係が成立つようなベクトル $\boldsymbol{u}_n$ が必ず存在し，それは $\mathbf{S}$ に固有のベクトル方向を持っている。すなわちテンソル $\mathbf{S}$ で"回転"させても方向が変らないで，その方向にベクト

ル長さだけが S_n 倍になるだけである。この $\boldsymbol{u}_n$ を $\mathbf{S}$ の固有ベクトルといい，S_n をそれに対応する固有値という。そして固有ベクトルは各対称テンソルに必ず 3 つ ($n=1,2,3$)存在し，それぞれはお互いに直交するし，しかも対応する固有値はすべて実数である。
この $\mathbf{S}$ は

$$\mathbf{S}=\sum_n S_n\hat{u}_n\hat{u}_n \qquad \text{with} \qquad \hat{u}_n\hat{u}_m=\delta_{nm}\ \&\ S_n \text{ は実数} \tag{6}$$

と書くことが出来る。ここで $\hat{u}_n$ は $\boldsymbol{u}_n$ の単位ベクトルである。

この 3 次元のベクトル・テンソルのイメージを状態関数の場合にも援用する。

独立変数 x の変域 $0<x\leqq L$ の間で与えられた任意の関数 $f(x)$ を考えよう。どのように変化している関数であっても，もっとも素朴で直接的な与えかた（表示の仕方）は，x の変域を N 等分して

$$0<x_1<x_2<x_3<\cdots\cdot<x_n<\cdots\cdot<x_{N-2}<x_{N-1}<x_N(=L)$$

とし，区切りの各点に対してそれぞれの関数の値を与える，すなわち

$$\{\,\mathrm{f}(x_1), f(x_2), f(x_3), \cdots\cdot, f(x_{N-2}), f(x_{N-1}), f(x_N)\}$$

と N ヶの値の組で表現する表示法である。簡明にするためには，十分大きな $N(\gg 1)$ を取って

$$x_n=0+n(\Delta x) \quad \text{with} \quad \Delta x=L/N$$

と，等間隔で区切るのがよい。

この関数の表示法はつぎのように変形できる；すなわち

$$\begin{aligned}
&\{\ f(x_1),\ f(x_2),\ f(x_3),\cdots\cdot,\ f(x_n),\cdots\cdot,\ f(x_{N-2}),\ f(x_{N-1}),\ f(x_N)\}\\
=\ &\{\ f(x_1),\ 0,\ 0,\cdots\cdot,\ 0,\cdots\cdot,\ 0,\ 0,\ 0\}\\
&+\{\ 0,\ f(x_2),\ 0,\cdots\cdot,\ 0,\cdots\cdot,\ 0,\ 0,\ 0\}\\
&+\{\ 0,\ 0,\ f(x_3),\cdots\cdot,\ 0,\cdots\cdot,\ 0,\ 0,\ 0\}\\
&\cdots\cdots\\
&+\{\ 0,\ 0,\ 0,\cdots\cdot,\ f(\mathrm{x}_n),\cdots\cdot,\ 0,\ 0,\ 0\}\\
&\cdots\cdot\\
&+\{\ 0,\ 0,\ 0,\cdots\cdot,\ 0,\cdots\cdot,\ 0,\ f(x_{N-1}),\ 0\}\\
&+\{\ 0,\ 0,\ 0,\cdots\cdot,\ 0,\cdots\cdot,\ 0,\ 0),\ f(x_N)\}\\
=\ &\quad f(x_1)\ \ \{1,0,0,\cdots\cdot,0,\cdots\cdot,0,0,0\}\\
&+\ f(x_2)\ \ \{0,1,0,\cdots\cdot,0,\cdots\cdot,0,0,0\}\\
&\cdots\cdots\cdots\cdot\\
&+\ f(x_n)\ \ \{0,0,1,\cdots\cdot,0,\cdots\cdot,0,0,0\}
\end{aligned}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdot$$

$$+ \quad f(x_N) \quad \{0,0,0,\cdots\cdot,0,\cdots\cdot,0,0,1\}$$

である。これは3つの数値の1組を，$\hat{x},\hat{y},\hat{z}$ を用いてベクトル表示していた(4)式と丁度対応している。それ故3次元を N 次元に拡張して

$$\begin{aligned}
\hat{x}_1 &\equiv \{1,0,0,\cdots\cdot,0,\cdots\cdot,0,0,0\} \\
\hat{x}_2 &\equiv \{0,1,0,\cdots\cdot,0,\cdots\cdot,0,0,0\} \\
&\cdots\cdot \\
&\cdots\cdot \\
\hat{x}_N &\equiv \{0,0,0,\cdots\cdot,0,\cdots\cdot,0,0,1\}
\end{aligned} \tag{7}$$

と定義し，$f(x)$ for $0 < x < L$ を

$$\{ f(x_1), f(x_2), f(x_3),\cdots\cdot, f(x_n),\cdots\cdot, f(x_{N-2}), f(x_{N-1}), f(x_N)\}$$

と表示していたことを，

$$\begin{aligned}
&f(x_1)\hat{x}_1+f(x_2)\hat{x}_2+f(x_3)\hat{x}_3+\cdots\cdot+f(x_n)\hat{x}_n+\cdots\cdot \\
&\qquad +f(x_{N-2})x_{N-2}+f(x_{N-1})x_{N-1}+f(x_N)\hat{x}_N
\end{aligned}$$

と書く。これは N 次元ベクトルと考えることが出来るから

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{f} = {} & \hat{x}_1 f(x_1)+\hat{x}_2 f(x_2)+\hat{x}_3 f(x_3)+\cdots\cdot+\hat{x}_n f(x_n)+\cdots\cdot \\
&+\hat{x}_{N-2} f(x_{N-2})+\hat{x}_{N-1} f(x_{N-1})+\hat{x}_N f(x_N)
\end{aligned} \tag{8}$$

と表記することになる。(7)式で与えた $\hat{x}_n$ に関しては規格直交関係が成立ち

$$\begin{aligned}
\hat{x}_m\cdot\hat{x}_n &= 1 \text{ for } m = n \\
&= 0 \text{ for } m \neq n
\end{aligned} \tag{9}$$

となることは自明であろう。また

$$\boldsymbol{f}\cdot\hat{x}_n = f(x_n) \tag{10}$$

である。具体例としてフーリエ関数の exp (inx) を考えることが出来る。関数ベクトルとして $\boldsymbol{e}_n$ と表し，変域の $L = 2\pi$ ととると

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{e}_n = {} & \hat{x}_1 exp(inx_1)+\hat{x}_2 exp(inx_2)+\cdots\cdot+ \\
&\hat{x}_n exp(inx_n)+\cdots\cdot+ \\
&\hat{x}_{N-2} exp(inx_{N-2})+ \\
&\hat{x}_{N-1} exp(inx_{N-1})+\hat{x}_N exp(inx_N)
\end{aligned} \tag{11}$$

と表わされる。

以上のように1つの関数ベクトルは具体的に1つの関数を示している。

そうすると，3次元の場合をお手本にして，関数ベクトルの変化はテンソルで表わされる筈である。実際に用いられているのは，3次元の対称テンソルを N 次元に拡張し複素数も取扱えるようにしたエルミート・テンソルであって，それを $\mathbf{H}$ と書くと，3次元の $\boldsymbol{S}$ と同じように，$\mathbf{H}$ の固有値，固有ベクトルが存在する。それを h_n, $\boldsymbol{u}_n$ と書くと，

$$\mathbf{H}\cdot\boldsymbol{u}_n = h_n\boldsymbol{u}_n$$

が成立つ。そして h_n は実数である。また固有値の異なる N ヶの固有ベクトル $(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots\cdot,\boldsymbol{u}_n,\cdots\cdot,\boldsymbol{u}_{N-2},\boldsymbol{u}_{N-1},\boldsymbol{u}_N)$ はお互いに直交する。

ここで確認すべきことは，これらの固有ベクトルはそれぞれが1つの関数を表している，ということである。さらに，それら N ヶの固有関数ベクトルがお互いに直交しているということは，$\hat{x}_1,\hat{x}_2,\cdots\cdot\hat{x}_n,\cdots\cdot,\hat{x}_{N-2},\hat{x}_{N-1},\hat{x}_N$ という座標軸の他に，これら固有ベクトルの $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots\cdot\boldsymbol{u}_n,\cdots\cdot,\boldsymbol{u}_{N-2},\boldsymbol{u}_{N-1},\boldsymbol{u}_N$ を別の座標軸系に採用することが出来る，ということである。(これは3次元のときに $[\hat{x},\hat{y},\hat{z}]$ 座標軸を用いる代りに極座標軸 $[\hat{r},\hat{\theta},\hat{\phi}]$ を用いて便利に使用したということと同じである。)　実例を示そう。$\boldsymbol{u}_n$ として(11)式の $\boldsymbol{e}_n$ をとることができる（容易に証明される）から，任意の関数は関数ベクトルとして

$$\begin{aligned}\boldsymbol{f} = {} & \hat{x}_1 f(x_1)+\hat{x}_2 f(x_2)+\hat{x}_3 f(x_3)+\\ & \cdots\cdot+\hat{x}_n f(x_n)+\cdots\cdot+\hat{x}_{N-2} f(x_{N-2})+\\ & \hat{x}_{N-1} f(x_{N-1})+\hat{x}_N f(x_N), \qquad (12)\\ = {} & \boldsymbol{e}_1 c^1+\boldsymbol{e}_2 c^2+\boldsymbol{e}_3 c^3+\cdots\cdot+\boldsymbol{e}_n c^n+\cdots\cdot+\\ & \boldsymbol{e}_{N-2} c^{N-2}+\boldsymbol{e}_{N-1} c^{N-1}+\boldsymbol{e}_N c_N, \qquad (13)\end{aligned}$$

と表される。右辺の2式は2つの表し方があるということを示しているのであって，右辺同志がお互い等しいことは云うまでもない。この c^n は $L=2\pi$ & $\Delta x = L/N$ ととって

$$\begin{aligned}c_n &= \mathbf{e}_n\cdot\boldsymbol{f} \equiv \{(1/N)\boldsymbol{e}_n\}^*\cdot\boldsymbol{f} \qquad (14)\\ &= (1/L)\{\hat{x}_1 exp(-inx_1)\Delta x+\hat{x}_2 exp(-inx_2)\Delta x+\cdots\cdot\\ &\qquad +\hat{x}_{N-1} exp(-inx_{N-1})\Delta x+\hat{x}_N exp(-inx_N)\Delta x\}\cdot\boldsymbol{f}\\ &= (1/L)\{\hat{x}_1\cdot\boldsymbol{f} exp(-inx_1)\Delta x+\hat{x}_2\cdot\boldsymbol{f} exp(-inx_2)\Delta x+\cdots\cdot\\ &\qquad +\hat{x}_{N-1}\cdot\boldsymbol{f} exp(-inx_{N-1})\Delta x+\hat{x}_N\cdot\boldsymbol{f} exp(-inx_N)\Delta x\}\end{aligned}$$

そして $\hat{x}_n \cdot \boldsymbol{f} = f(x_n)$であるから

$$= (1/L)\{f(x_1)exp(-inx_1)\Delta x + f(x_2)exp(-inx_2)\Delta x + \cdots\cdot$$
$$+ f(x_{N-1})exp(-inx_{N-1})\Delta x + f(x_N)exp(-inx_N)\Delta x\}$$
$$\fallingdotseq \frac{1}{L}\int_0^L f(x)exp(-inx)dx$$

となり，これはフーリエ係数に等しい。これはそれ故，フーリエ直交関数系による関数展開そのものを表している。なお，ここで $\boldsymbol{e}^n \cdot \boldsymbol{f}$ という関数ベクトルのスカラ積は積分になることを指摘しておこう。

強調されるべきことは，$\hat{x}_1, \hat{x}_2, \cdots\cdot, \hat{x}_n, \cdots\cdot, \hat{x}_{N-2}, \hat{x}_{N-1}, \hat{x}_N$ という座標軸で表示される普通の関数表現の他に，別の $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots\cdot, \boldsymbol{u}_n, \cdots\cdot, \boldsymbol{u}_{N-2}, \boldsymbol{u}_{N-1}, \boldsymbol{u}_N$ を座標軸系として表現した時も，関数ベクトルとしては全く同一の関数を表している，ということである。ゆえに前節で記したように，波動方程式と $\omega^2 - c^2k^2 = 0$ は実質的に同じであると書いたことは，(12)式の形式で表記したのか，(13)の形で書いたのか，という違いだけであって，同一の内容を関数ベクトル座標系を変えて表記しているだけのことである。さらにこの認識によって前節では，シュレーディンガー方程式をまづ(13)の形式で表し，それを(12)式に書換えて導いたことになっている。

さらに関数の形の変化は関数ベクトルを用いたエルミート・テンソルで表現される。

さて状態関数 $\psi(x)$ を関数ベクトル $\boldsymbol{\psi}$ で表示する場合を考えてみよう。状態関数の全体に掛かる係数は実質的な意味を持たないという重要な特性は，状態関数ベクトルの長さが意味を持たないと云うことであるから，

$$(\text{長さ})^2 = \boldsymbol{\psi}^* \cdot \boldsymbol{\psi} = 1 \tag{15}$$

と規格化して用いる。（ψ を存在確率と関連させて意味づけるために利用された。） 任意の状態ベクトル $\boldsymbol{\psi}$ を $\boldsymbol{u}_n$ 座標系で表示すると

$$\boldsymbol{\psi} = \Sigma(b_n)\boldsymbol{u}_n$$

と表されるが，これを定常状態の重ね合せと呼んでいる。この係数は当然

$$b_n = (\boldsymbol{u}_n)^* \cdot \boldsymbol{\psi}$$

と得られる。$\boldsymbol{u}_n$ についても(15)式を適用しておく。

状態関数 $\psi(x)$ の変化は，３次元の場合と同様に，エルミート・テンソル $\mathbf{H}$ で表される。時間 dt の間に微小変化 $d\boldsymbol{\psi}$ が生ずるとして，それを

$$d\boldsymbol{\psi} = (1/\alpha)dt\mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\psi} \quad \alpha\text{は比例定数}$$

と表すと，

$$\alpha(\partial\boldsymbol{\psi}/\partial t)=\mathbf{H}\cdot\boldsymbol{\psi} \tag{16}$$

である。$\mathbf{H}$ は実数固有値，規格化固有ベクトルを持ち，それらを $h_n,\boldsymbol{u}_n$ とするから

$$\mathbf{H}\cdot\boldsymbol{u}_n=h_n\boldsymbol{u}_n \tag{17}$$

である。固有ベクトルは h_n 倍になるが，長さの変化は物理的意味を持たないで変化しないと同じことであることは上に記した通りであるから，この固有ベクトルが定常状態を表している。その上で，この表示方法によると(16)式によって

$$\alpha(\partial\boldsymbol{u}_n/\partial t)=\mathbf{H}\cdot\boldsymbol{u}_n=h_n\boldsymbol{u}_n \tag{18}$$

となるので，式の上では

$$\boldsymbol{u}_n\propto exp(h_nt/\alpha)$$

となる。$\boldsymbol{u}_n$ は定数状態の規格化状態関数，すなわち $(\boldsymbol{u}_n)^*\cdot\boldsymbol{u}_n=1$ でなければならないから，$\alpha=i\beta(\beta$ は実数) が得られる。

ここで先に考察してお手本としている，粒子平面波が1つの定常状態を与えているということを取入れなければならない。すなわち

$$\boldsymbol{u}_n\propto exp(i\boldsymbol{p}_n\cdot\boldsymbol{r}/\hbar-iE_nt/\hbar) \tag{19}$$

が，(16)式を満足しなければならないから

$$i\beta(-iE_n/\hbar)\boldsymbol{u}_n=h_n\boldsymbol{u}_n,$$

したがって

$$\beta E_n/\hbar=h_n$$

となる。E_n,h_n は現象によって変化する定数であるから，結局

$$\beta/\hbar=1\quad\&\quad E_n=h_n$$

となって，(16)，(17)式が

$$i\hbar(\partial\boldsymbol{\psi}/\partial t)=\mathbf{H}\cdot\boldsymbol{\psi} \tag{16'}$$

$$\mathbf{H}\cdot\boldsymbol{u}_n=E_n\boldsymbol{u}_n \tag{17'}$$

と決定される。$\mathbf{H}$ はエネルギー E_n を固有値に持つエルミート・テンソルである，ということとなった。

エネルギー E_n は可観測量の物理量であるから，それがエルミート・テンソルの実数固有値

で表されることとなった。これは，お手本にした粒子平面波の記述法を取込んで決ってきたことである。３次元で対称テンソルを(6)式と書いたことと対応して，

$$\mathbf{H} = \sum_n E_n \boldsymbol{u}_n(\boldsymbol{u}_n)^* \tag{20}$$

と表される。

4．さいごに

以上の考察の次の段階では，$\boldsymbol{p}_n$ を可観測量の物理量として表わしてゆく等，と展開してゆくわけであるが，関数ベクトルとそれを用いたエルミート・テンソルという言葉を用いて，３次元ベクトル・対称テンソルのイメージを基にしながら進めることは，量子力学の構造の直観的理解に大変有用である，また別の機会に補足したいと考えている。なお，紙数制限のために，特に３．節の展開に省略が多いことを断っておく。

参考文献

L. I. Schiff : Introduction to Quantum Mechanics (McGRAW-HILL, 1968)

L. D. Landau & E. M. Lifshitz : Quantum Mechanics, Vol.3 of Course of Theoretical Physics (Pergamon Press, 1977)

朝永振一郎：量子力学Ｉ（みすず書房，1980）

M. サージェント，他２名：レーザー物理（丸善，1978）

Yu. L. Kimontovich : Statistical Theory of Non-equilibium Process in Plama (Pergamon Press, 1967)

H. ゴールドスタイン：古典力学上，下（吉岡書店，1990）

アブラハム&ベッカー：理論電気学（コロナ社，1948）

J. A. Stratton : Electromaganetic Theory (McGRAW-HILL, 1942)

A. ゾンマーフェルト：光学，理論物理学講座４巻（講談社，1989）

森毅：線形代数・生態と意味（日本評論社，1985）

ALTERNATIVE INTRODUCTION TO QUANTUM MECHANICS

Kenji WATANABE
Department of Applied Physics, Faculty of Science
Okayama University of Science
Ridai-cho 1-1, Okayama 700, Japan
(Received September 30, 1991)

From the educational view point of physics it is an undoubted, traditional problem that the Shroedinger equation is not normally introduced from the classical physics with the conceptual continuation, which is inversely given through the classical limit, as is well known.

Here is presented an alternative introduction directly from the classical physics concepts on indicating strongly the replacement of the point mechanical description to the field description, which can be intuitively understood as those of an illuminated notice board of the social news. The field description is given by a state function $\psi(x)$, which is imaged as an extension (Hilbert function space) of the 3-dimensional vector. Stationary graphs of the illuminated board correspond to give the stationary state of the quantum state. Its typical example of free particles is plane waves. which play an important role as fundamental quantum description corresponding to the guiding example of the plane wave description of the light. The vector $\boldsymbol{k}$ and the scalar ω of the light just correspond to the vector $\boldsymbol{p}$ and the scalar E of the relativistic particle through the relations of $\omega = c\boldsymbol{k}$ and $E = \boldsymbol{p}c$. Non-relativistic relation of $E = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}/(2m)$ is just the Schroedinger equation described in the function vector space, which is easily transformed to the Schroedinger equation usually described in the cartesian coordinates.