

複素数から量子力学へ

原田

2009年 5月-12月

1. 虚数と複素数

私たちが取り扱う数には様々な約束がある。例えば、その数を2回乗じる(2乗するという)と2になる数を2乗根2、即ち $\sqrt{2}$ と書く。勿論この場合、 $-\sqrt{2}$ も2乗すると2になることはすぐに分かるであろう。このようにして"無理数"が導入される。

このようなことを考えていると、さらに一つの奇妙な場合を思いつくであろう。即ち、2乗して-2になる数があっても良いではないか。そこで、前の約束どおり、 $\pm\sqrt{-2}$ と書こう。 $\sqrt{-2} = \sqrt{-1 \times 2} = \sqrt{-1}\sqrt{2}$ と書けるが、ここに現れる $\sqrt{-1}$ とはどのような数であろうか。私たちはこれまでこのような数に出くわしたことがない。ここで $\sqrt{-1} = i$ (オイラー(1709-1783)の記号)と定義しよう。このような i は虚数単位となり、 i がつく数を虚数と呼ぶ。一般に、実数と虚数からなる数 z

$$z = x + iy, (x, y \text{ は実数}) \quad (1)$$

を複素数と呼び、 $x = \text{Re}(z)$ を z の z 実数部、 $y = \text{Im}(z)$ を z の虚数部という。また、複素数 z の大きさ(絶対値) $|z|$ は次式で定義される： $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$ 。このようにして、私達の数の世界はこれまで扱ってきた実数とここに導入した虚数の2要素からなる世界へと、一気に広がったのである。このように2要素を持つ数を扱うには、2次元のベクトルと同様に2次元面を考えるのが妥当であろう。2次元面の x 軸を実数部の値に、 y 軸を虚数部の値に対応させ、 z を2次元面即ち複素平面に表示する。このような平面をガウス(1777-1855)平面と呼ぶ。ガウスは更に、 n 次元代数方程式、

$$P(z) = \sum_{j=0}^n c_j z^{n-j} = 0, \quad (2)$$

は、複素数の中に n 個(重根の重複度を入れて)の根を持つことを証明したのである。例えば、 $z^n - 1 = 0$ の根(1の n 乗根)は $z = \cos \theta + i \sin \theta$, ただし $\theta = 2\pi k/n (k = 1, 2, \dots, n)$ なる n 個の解を持つ。この根は次のド・モアベルの公式から用意に導かれる：

$$(\cos \theta + i \sin \theta)^n = \cos(n\theta) + i \sin(n\theta). \quad (3)$$

2. 共役複素数

z の共役複素数は次式で定義される：

$$\bar{z} = x - iy. (x, y \text{ は実数}) \quad (4)$$

\bar{z} は複素平面では、 z の x 軸に関して対称な点として与えられる。また、それらの積は z の大きさの 2 乗を与える：

$$\bar{z}z = (x + iy)(x - iy) = x^2 + y^2 = |z|^2. \quad (5)$$

3. 複素数の円座標表示

複素数は円座標を用いて

$$z = r \exp(i\theta) = r(\cos \theta + i \sin \theta) = x + iy, \quad (6)$$

と書ける。 r は複素平面での半径であり、 θ は偏角を表す。これらの定義より、重要な「オイラーの公式」が次のように書かれる事が分かる：

$$\exp(i\theta) = \cos \theta + i \sin \theta. \quad (7)$$

4. 複素数の 4 則演算

2 つの複素数を次のように定義する：

$$z_1 = x_1 + iy_1, \quad (8)$$

$$= r_1 \exp(i\theta_1), \quad (9)$$

$$z_2 = x_2 + iy_2, \quad (10)$$

$$= r_2 \exp(i\theta_2). \quad (11)$$

上記の 2 つの複素数の和、差は：

$$z_1 \pm z_2 = (x_1 + iy_1) \pm (x_2 + iy_2) = (x_1 \pm x_2) + i(y_1 \pm y_2), \quad (12)$$

$$= r_1 \cos \theta_1 \pm r_2 \cos \theta_2 + i(r_1 \sin \theta_1 \pm r_2 \sin \theta_2), \quad (13)$$

積は：

$$z_1 \times z_2 = (x_1 + iy_1)(x_2 + iy_2) = (x_1x_2 - y_1y_2) + i(x_1y_2 + x_2y_1), \quad (14)$$

$$= r_1r_2 \exp i(\theta_1 + \theta_2), \quad (15)$$

$$= r_1r_2 \{\cos(\theta_1 + \theta_2) + i \sin(\theta_1 + \theta_2)\}, \quad (16)$$

$$= r_1(\cos \theta_1 + i \sin \theta_1) \times r_2(\cos \theta_2 + i \sin \theta_2), \quad (17)$$

$$= r_1r_2 \{(\cos \theta_1 \cos \theta_2 - \sin \theta_1 \sin \theta_2) \quad (18)$$

$$+ i(\sin \theta_1 \cos \theta_2 + \cos \theta_1 \sin \theta_2)\}, \quad (19)$$

割り算は：

$$z_1/z_2 = (x_1 + iy_1)/(x_2 + iy_2), \quad (20)$$

$$= (x_1 + iy_1)(x_2 - iy_2)/(x_2^2 + y_2^2), \quad (21)$$

$$= \{(x_1x_2 + y_1y_2) + i(x_2y_1 - x_1y_2)\}/(x_2^2 + y_2^2), \quad (22)$$

$$= (r_1/r_2) \exp i(\theta_1 - \theta_2), \quad (23)$$

$$= (r_1/r_2) \{\cos(\theta_1 - \theta_2) + i \sin(\theta_1 - \theta_2)\}, \quad (24)$$

$$= (r_1/r_2)(\cos \theta_1 + i \sin \theta_1)/(\cos \theta_2 + i \sin \theta_2), \quad (25)$$

$$= (r_1/r_2) \{(\cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2) \quad (26)$$

$$+ i(\sin \theta_1 \cos \theta_2 - \cos \theta_1 \sin \theta_2)\}, \quad (27)$$

のように書ける。複素数の分数では、通常分母を実数にするのが通例で、それを有理化という。

問題

次の複素数を円座標で表示せよ。またそれらの、平方根を求めよ。

$$1)z = 1 + i, \quad (28)$$

$$2)z = 1 + \sqrt{3}i, \quad (29)$$

$$3)z = \sqrt{3} + i, \quad (30)$$

$$4)z = -1 - \sqrt{3}i, \quad (31)$$

$$5)z = \cos 2\theta + \sin 2\theta i. \quad (32)$$

ここで複素数の演算にとっても便利に使われる指数関数（オイラーの公式により指数関数表示に変換される）に関連した色々な性質をまとめておこう。

5. 指数関数の微分

$$\frac{d \exp(\alpha x)}{dx} = \alpha \exp(\alpha x), \quad (33)$$

$$\frac{d^n \exp(\alpha x)}{dx^n} = \alpha^n \exp(\alpha x). \quad (34)$$

6. 指数関数の積と商

$$\exp(\alpha x) \exp(\alpha y) = \exp(\alpha(x + y)), \quad (35)$$

$$\exp(\alpha x) / \exp(\alpha y) = \exp(\alpha(x - y)) \quad (36)$$

7. 指数関数の展開

$$\exp(\alpha x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha x)^n}{n!}. \quad (37)$$

$$\exp(ix) = \cos x + i \sin x \quad (38)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n}}{2n!} \quad (39)$$

$$+ i \left(\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} \right). \quad (40)$$

8. 古典物理学における複素数を用いた例 1 : 1次元の単振動
1次元の単振動の運動方程式は次のように書ける :

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x. \quad (41)$$

この式は、速度 v を導入すると、次の2つの式に書き換えられる :

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad (42)$$

$$\frac{dv}{dt} = -\omega^2 x. \quad (43)$$

今、次の複素数 z を次のように定義すると

$$z = \omega x + iv, \quad (44)$$

複素数 z は次の式を満たすことが容易に分かる。

$$\frac{dz}{dt} = -i\omega z. \quad (45)$$

この微分方程式は容易に解けて

$$z(t) = z_0 \exp(-i\omega t), \quad (46)$$

ただし、 $z_0 = z(0) = \omega(a + ib)$. 次のような単振動の解が容易に求まる。

$$x(t) = a \cos \omega t + b \sin \omega t, \quad (47)$$

$$v(t) = b\omega \cos \omega t - a\omega \sin \omega t. \quad (48)$$

9. 古典物理学における複素数を用いた例 2 : 電磁気学 ; 交流理論
交流電源 v 、インダクタンス L のコイル、電気容量 C のコンデンサー、電気抵抗 R の抵抗が直列につながれている回路を考える。今、回路には $j(t)$ の電流が流れているものとし、それぞれにおける電圧変化を考えると次のような式が成り立つ :

$$Rj + Q/C + L(dj/dt) = v. \quad (49)$$

ただし Q はコンデンサーに溜まった電荷である。この式を時間 t でもう一度微分し、 $(dQ/dt) = j$ に注意すると次式を得る :

$$L(d^2j/dt^2) + R(dj/dt) + j/C = (dv/dt). \quad (50)$$

今、電流 j 、電圧 v を次のように書く：

$$j(t) = I_m \cos(\omega t + \theta), \quad (51)$$

$$= \operatorname{Re}(I_m e^{i(\omega t + \theta)}), \quad (52)$$

$$= \operatorname{Re}(I_m e^{i\theta} e^{i\omega t}), \quad (53)$$

$$= \operatorname{Re}(\bar{I} e^{i\omega t}), \quad (54)$$

$$v(t) = V_m \cos(\omega t + \delta), \quad (55)$$

$$= \operatorname{Re}(V_m e^{i(\omega t + \delta)}), \quad (56)$$

$$= \operatorname{Re}(V_m e^{i\delta} e^{i\omega t}), \quad (57)$$

$$= \operatorname{Re}(\bar{V} e^{i\omega t}). \quad (58)$$

ただし $\bar{I} = I_m e^{i\theta}$, $\bar{V} = V_m e^{i\delta}$ である。これらを上式に代入し、 t の微分を実行すると

$$-\omega^2 L \bar{I} + i\omega R \bar{I} + \bar{I}/C = i\omega \bar{V}. \quad (59)$$

を得る。従って、回路のインピーダンス \bar{Z} は次式のように求められる：

$$\bar{Z} = \bar{V}/\bar{I} = R + i(\omega L - 1/(\omega C)). \quad (60)$$

これより複素電流 \bar{I} は

$$\bar{I} = \bar{V}/\bar{Z}, \quad (61)$$

$$= \frac{R - i(\omega L - 1/(\omega C))}{R^2 + (\omega L - 1/(\omega C))^2} \bar{V}, \quad (62)$$

$$= \frac{V_m}{\sqrt{R^2 + (\omega L - 1/(\omega C))^2}} e^{i(\delta - \phi)}. \quad (63)$$

と求まる。ここで、角度 ϕ は次式で決まる：

$$\cos \phi = \frac{R}{\sqrt{R^2 + (\omega L - 1/(\omega C))^2}}, \quad (64)$$

$$\sin \phi = \frac{(\omega L - 1/(\omega C))}{\sqrt{R^2 + (\omega L - 1/(\omega C))^2}}. \quad (65)$$

このようにして回路に流れる電流 $j(t)$ は次のように与えられる：

$$j(t) = \operatorname{Re}(\bar{I} e^{i\omega t}), \quad (66)$$

$$= I_m \cos(\omega t + \delta - \phi), \quad (67)$$

$$I_m = \frac{V_m}{\sqrt{R^2 + (\omega L - 1/(\omega C))^2}}. \quad (68)$$

上式から分かるように、回路を流れる電流の位相は加えた電圧の位相に対し、 ϕ だけ遅れる。

また、 ω を変化させたとき、 $\omega = \omega_0 = 1/\sqrt{LC}$ で I_m は最大となる。この様に I_m が急に増加する現象を共振という。

10. 複素数と量子力学

量子力学では、粒子の2重性、即ち波動的性質と粒子的性質を併せ持つ事実を如何に定式化するかが大きな難問でした。

ド・ブロイは、アインシュタインの光量子仮説 "光は光子と呼ばれる粒子としての性質を持つ" を参考にして、"動いている粒子は全て波としての性質を持つ" と主張しました。光量子仮説によれば、光子の運動量は振動数を ν 、波長 λ 、光速 c 、プランク定数 h 、及び $\hbar = h/2\pi$ を用いて

$$p = h\nu/c = h/\lambda = \hbar k \Rightarrow mv, \quad (69)$$

と書かれ、一方エネルギー E は次の関係で結ばれることとなります：

$$E = h\nu = \hbar\omega \Rightarrow mv^2/2. \quad (70)$$

量子力学では、運動量やエネルギーのような物理量は全て演算子で書かれ、状態を表すのは波動関数と呼ばれる関数です。この波動関数を記述するために複素数は本質的な役目を果たすのです。

量子力学は、上に述べたド・ブロイの考え方を包括した理論でなければなりません。自由な波の場合には、波動関数は次のような平面波で書かれることが知られています。

$$\psi = A \exp i(kx - \omega t). \quad (71)$$

この波動関数から、それぞれ運動量 $p = \hbar k$ 、エネルギー $E = \hbar\omega$ を導く演算子は次の式で与えられることは容易に理解できる。

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, \quad (72)$$

$$E = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt}. \quad (73)$$

[問題] 上式を確かめよ。

一方、エネルギーは自由粒子の場合 $E = p^2/(2m)$ とかけるので、自由粒子に関する波動方程式は次式で書けることが分かる：

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi. \quad (74)$$

これを自由粒子に対するシュレディンガー方程式と呼びます。

11. 量子力学における複素数

量子力学においては複素数が必須なのです。特に波動関数の記述には欠かせません。例えば今、波動関数を次のような複素数で書きます：

$$\psi = u + iv, \quad (75)$$

ただし、 u 、 v は実関数とする。このような場合、シュレディンガー方程式は次の2式に分解されます：

$$\hbar \frac{d}{dt} u = Hv, \quad (76)$$

$$-\hbar \frac{d}{dt} v = Hu. \quad (77)$$

ただし、 $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ で、 H は自由粒子のハミルトニアンと呼ばれます。今、もし波動関数が実関数、即ち $v = 0$ 、であったとすると、上式から直ちに $\frac{d}{dt} u = 0$ 、即ち波動関数が時間変化しないという物理的に意味の無い答えが返ってきます。即ち、 $v = 0$ の過程が不合理であり、波動関数は複素数で無ければならないと言う結論に達します。通常、 $\psi = \varphi \exp(i\alpha)$ と置き、 $\exp(i\alpha)$ のことを位相因子と呼びます。粒子を見出す確率は $|\psi|^2$ ですから、位相因子は粒子を見出す確率には関与しないこととなります。

12. ゲージ変換と波動関数の位相因子

電場 \vec{E} 、磁場 \vec{B} の中を速度 \vec{v} で運動する電荷 q 、質量 m の荷電粒子に働く力をローレンツ力と呼び、次のように書く：

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}). \quad (78)$$

量子力学では \vec{E} 、 \vec{B} の代わりに、ベクトルポテンシャル \vec{A} 、スカラーポテンシャル ϕ を用いる。 \vec{E} 、 \vec{B} は、これらを用いて次のように書ける：

$$\vec{E} = -\text{grad}\phi - \partial\vec{A}/\partial t, \quad (79)$$

$$\vec{B} = \text{rot}\vec{A}. \quad (80)$$

問：ゲージ変換

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \text{grad}\theta, \quad (81)$$

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial\theta}{\partial t}. \quad (82)$$

は電場 \vec{E} 、磁場 \vec{B} を変化させないことを示せ。

問：波動関数の位相因子を

$$\psi \rightarrow \psi' = \psi \exp[i\frac{q}{\hbar}\theta(\vec{r}, t)], \quad (83)$$

のように変換する時、次のシュレディンガー方程式がゲージ不変となることを示せ：

$$\left\{ \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi \right\} \psi = E\psi. \quad (84)$$

13. アハラノフ・ボーム効果

位相因子が大切な役割を果たす例を、アハラノフ・ボーム効果で見てみよう。これらの問題では3次元系を扱わねばなりません。今、自由な電子(以後電荷を $-e$ とする)が磁場中にあるとき、系のハミルトニアンは次式で与えられます(導出については Ref.1 を参照)：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{\vec{\Pi}^2}{2m} \psi. \quad (85)$$

ただし

$$\vec{\Pi} = (-i\hbar \vec{\nabla} + e\vec{A}), \quad (86)$$

$$\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (87)$$

即ち、新たに定義された運動量 Π の右辺第1項が自由粒子の運動量に対応する項ですから、それに余計な第2項が付け加わったことになるのです。今、波動関数を次のようにおいて、シュレディンガー方程式を解く事を考えましょう：

$$\psi(x, y, z; t) = \psi_0(x, y, z; t) e^{iS(x, y, z)/\hbar}. \quad (88)$$

これをシュレディンガー方程式に代入すると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla} + \frac{i}{\hbar} (e\vec{A} + \vec{\nabla}S)) \psi_0. \quad (89)$$

となります。今、 S は任意なので $e\vec{A} + \vec{\nabla}S = 0$ を満たすように選ぶと、 ψ_0 は通常自由粒子の波動関数に選ぶことができます。ただし、 S は次のような積分で与えられます：

$$S(x, y, z) = -e \int_{P_0}^P \vec{A} \cdot d\vec{s}. \quad (90)$$

結局、この系の波動関数は

$$\psi(x, y, z; t) = \psi_0(x, y, z; t) \exp\left(-\frac{ie}{\hbar} \int_{P_0}^P \vec{A} \cdot d\vec{s}\right), \quad (91)$$

となり、磁場の効果は波動関数の位相因子として現れるのです。さて準備が整ったので、アハラノフ・ボーム効果を考えましょう。今、電子の波がコイルを挟んだ二つの分岐に分かれ、それらがコイルを通過した後に

再び合流する場合を考えます。2つの分岐に対応する波動関数をそれぞれ次のように定義します：

$$\psi_1 = \psi_{01} e^{iS_1/\hbar}, \quad (92)$$

$$\psi_2 = \psi_{02} e^{iS_2/\hbar}. \quad (93)$$

従って、それらは互いに干渉し次式第3項のような干渉項を生じます：

$$|\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_{01}|^2 + |\psi_{02}|^2 + 2\text{Re}(\psi_{01}\psi_{02}^* \exp(i(S_1 - S_2)/\hbar)). \quad (94)$$

ここで位相 $(S_1 - S_2)/\hbar$ は

$$(S_1 - S_2)/\hbar = -\frac{e}{\hbar} \oint_c \vec{A} \cdot d\vec{s}, \quad (95)$$

$$= -\frac{e}{\hbar} \int_S \text{rot} \vec{A} \cdot d\vec{S}, \quad (96)$$

$$= -\frac{e}{\hbar} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S}. \quad (97)$$

ここでストークスの定理 (Ref.1 参照) を用いた。この現象をアハラノフ・ボーム効果と言ひ、日本人の殿村により見事に観測された。以上のことより、磁場が存在しない外部空間でもベクトルポテンシャルが存在し、それが波動関数の位相となって干渉効果を生じ、観測にかかることは特筆に価する。

14. テーラー展開

これ以降、複素数とともに量子力学で重要な微分について述べることにする。何回でも微分可能な関数 $f(x)$ に対して、次のテーラー展開が導かれる：

$$f(x + \Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2!}f''(x)(\Delta x)^2 + \frac{1}{3!}f^{(3)}(x)(\Delta x)^3 + \dots \quad (98)$$

$$+ \frac{1}{n!}f^{(n)}(x)(\Delta x)^n + \dots \quad (99)$$

15. 並進操作を表す演算子

$$\psi(x - a) = \psi(x) + \frac{d\psi(x)}{dx}(-a) + \frac{1}{2!} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}(-a)^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3\psi(x)}{dx^3}(-a)^3 + \dots \quad (100)$$

$$= \left(1 - a \frac{d}{dx} + \frac{1}{2!} a^2 \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{3!} \frac{d^3}{dx^3} + \dots\right) \psi(x), \quad (101)$$

$$= \exp\left(-a \frac{d}{dx}\right) \psi(x). \quad (102)$$

と書ける。量子力学の場合、運動量は $p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ とかけるので、次式を得る：

$$\psi(x - a) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} a p_x\right) \psi(x). \quad (103)$$

従って、 $\psi(x)$ を a だけ並進移動させ $\psi(x - a)$ とする演算子は次式となる：

$$O = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}ap_x\right). \quad (104)$$

16. 回転操作を表す演算子

今、 $x - y$ 平面の点、 (x, y) または (r, θ) を z 軸の周りに $\delta\theta$ だけ回転する。すると、 (x, y) なる座標は $(x - r\delta\theta \sin\theta, y + r\delta\theta \cos\theta) = (x - y\delta\theta, y + x\delta\theta)$ に変化する。一方、 $\psi(x, y, z)$ を $\delta\theta$ だけ回転し、 $\psi'(x, y, z)$ を生成する演算子は次のように書かれる：

$$O\psi(x, y, z) = \psi'(x) = \psi(x + y\delta\theta, y - x\delta\theta, z). \quad (105)$$

$\delta\theta$ は微小量なので展開し、 $\delta\theta$ の 1 次の項まで残すと

$$O\psi(x, y, z) = \psi(x + y\delta\theta, y - x\delta\theta, z), \quad (106)$$

$$= \left(1 + y\delta\theta\frac{\partial}{\partial x} - x\delta\theta\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi(x, y, z). \quad (107)$$

従って、回転を生成する演算子は次式のように書ける：

$$O = 1 - \delta\theta\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right), \quad (108)$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta L_z. \quad (109)$$

ここで、 L_z は角運動量 $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ の z 成分を表す。並進操作の時と同様な議論により、一般に角度 θ の回転を生成する演算子は次式で書かれる：

$$O = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta L_z\right). \quad (110)$$

Ex)

$O = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta S_y\right)$ の行列表示を求めよ。ただし、 S_y はスピン演算子の y 成分であり、パウリスピン $\vec{\sigma}$ を用いて $S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ と書ける。

参考文献：

1. 量子力学 I：原田 勲、杉山忠男 著、講談社