

# 量子力学とクライン・ゴールドン方程式

素粒子の満たす場  $\psi(x, t)$  の運動方程式 : クライン・ゴールドン方程式 :

$$\left( \sum_{\mu=0}^3 \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(x, t) = 0 \quad (1.1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left( \frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) = \left( \frac{\partial}{\partial x^0}, \nabla \right) = \left( \frac{\overbrace{\frac{\partial}{\partial x^0}}^{\mu=0}, \overbrace{\nabla_x}^{\mu=1}, \overbrace{\nabla_y}^{\mu=2}, \overbrace{\nabla_z}^{\mu=3}} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left( \frac{\partial}{\partial x_0}, \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right) = \left( \frac{\partial}{\partial x_0}, -\nabla \right) = \left( \frac{\overbrace{\frac{\partial}{\partial x_0}}^{\mu=0}, \overbrace{-\nabla_x}^{\mu=1}, \overbrace{-\nabla_y}^{\mu=2}, \overbrace{-\nabla_z}^{\mu=3}} \right) \end{array} \right\} \Leftarrow \left\{ \begin{array}{l} \nabla_x = \frac{\partial}{\partial x} \\ \nabla_y = \frac{\partial}{\partial y} \\ \nabla_z = \frac{\partial}{\partial z} \end{array} \right. \quad (1.2)$$

を導く。素粒子のエネルギー ( $E$ ) と運動量 ( $\mathbf{p}$ ) と質量 ( $m$ ) の間には

$$E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4 \Leftarrow \mathbf{p} = \left( \begin{array}{c} \overbrace{p_x}^{p_1}, \overbrace{p_y}^{p_2}, \overbrace{p_z}^{p_3} \\ \mathbf{p}_x, \mathbf{p}_y, \mathbf{p}_z \end{array} \right) \quad (1.3)$$

の**アインシュタインの関係式**がある。或いは、

$$E^2 - c^2 \mathbf{p}^2 = m^2 c^4 \quad (1.4)$$

である。これを、量子論での状態  $|\psi(t)\rangle$  に適用するには、

- $\mathbf{p}$  を演算子  $\hat{\mathbf{p}}$  の固有値と見なして  $\hat{\mathbf{p}}$  に置き換え :

$$\mathbf{p}|\psi(t)\rangle \Rightarrow \hat{\mathbf{p}}|\psi(t)\rangle \left\{ \begin{array}{l} p_x |\psi(t)\rangle \Rightarrow \hat{p}_x |\psi(t)\rangle \\ p_y |\psi(t)\rangle \Rightarrow \hat{p}_y |\psi(t)\rangle \\ p_z |\psi(t)\rangle \Rightarrow \hat{p}_z |\psi(t)\rangle \end{array} \right. \quad (1.5)$$

- $E$  をハミルトニアン  $\hat{H}$  の固有値と見なして  $\hat{H}$  に置き換え :

$$E|\psi(t)\rangle \Rightarrow \hat{H}|\psi(t)\rangle \quad (1.6)$$

て  $(E^2 - c^2 \mathbf{p}^2)|\psi(t)\rangle = m^2 c^4 |\psi(t)\rangle$  より

$$\boxed{(\hat{H}^2 - c^2 \hat{\mathbf{p}}^2)|\psi(t)\rangle = m^2 c^4 |\psi(t)\rangle} \quad (1.7)$$

と変更する。また、 $|\psi(t)\rangle$  は、量子力学の運動方程式 :

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (1.8)$$

に従う。ここで、

● (1.7)を時間  $t$  と位置  $\mathbf{x}$  の微分で表される方程式に変換することで**場の運動方程式**が得られる。

### 時間の微分

まず、時間の微分で表わすため、(1.8)を(1.7)に代入すると

$$(\hat{H}^2 - c^2 \hat{\mathbf{p}}^2)|\psi(t)\rangle = \hat{H}^2 |\psi(t)\rangle - c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 |\psi(t)\rangle = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 |\psi(t)\rangle - c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 |\psi(t)\rangle \quad (1.9)$$

なので、

$$(\hat{H}^2 - c^2 \hat{\mathbf{p}}^2)|\psi(t)\rangle = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 |\psi(t)\rangle - c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 |\psi(t)\rangle \quad (1.10)$$

を得る。

### 運動量 $\mathbf{p}$ と座標 $\mathbf{x}$

次に、(1.10)の第 2 項の

● 運動量演算子  $\hat{\mathbf{p}}$  を通常の数 (3 次元ベクトル)  $\mathbf{p}$  にする

ために、運動量演算子  $\hat{\mathbf{p}}$  の固有状態  $|\mathbf{p}\rangle$  を

$$\begin{aligned} \hat{p}_i |\mathbf{p}\rangle &= p_i |\mathbf{p}\rangle \quad (i=1,2,3) \leftarrow \mathbf{p} = \begin{pmatrix} \underline{p}_1 & \underline{p}_2 & \underline{p}_3 \\ p_x & p_y & p_z \end{pmatrix} \\ \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle &= \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \end{aligned} \quad (1.11)$$

で導入する。更に、完全性条件

$$\int |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} \langle \mathbf{p}| = I \quad (d\mathbf{p} = dp_x dp_y dp_z) \quad (1.12)$$

を満たす。また、同様に、位置演算子を導入し、

●  $\mathbf{x}$  を位置演算子  $\hat{\mathbf{x}}$  の固有状態  $|\mathbf{x}\rangle$  の固有値

として

$$\begin{aligned} \hat{x}_i |\mathbf{x}\rangle &= x_i |\mathbf{x}\rangle \quad (i=1,2,3) \leftarrow \mathbf{x} = \begin{pmatrix} \underline{x}_1 & \underline{x}_2 & \underline{x}_3 \\ x & y & z \end{pmatrix} \\ \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle &= \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \end{aligned} \quad (1.13)$$

で導入する。更に、完全性条件

$$\int |\mathbf{x}\rangle d\mathbf{x} \langle \mathbf{x}| = I \quad (d\mathbf{x} = dx dy dz) \quad (1.14)$$

を満たす。ちなみに、(1.13)と(1.14)を成分で表示すると

$$|\mathbf{x}\rangle = |xyz\rangle \tag{1.15}$$

であり、

$$\hat{x}_i |\mathbf{x}\rangle = x_i |\mathbf{x}\rangle \Rightarrow \begin{cases} \hat{x}_1 |xyz\rangle = x |xyz\rangle \\ \hat{x}_2 |xyz\rangle = y |xyz\rangle \\ \hat{x}_3 |xyz\rangle = z |xyz\rangle \end{cases} \tag{1.16}$$

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \Rightarrow \langle x'y'z' | xyz \rangle = \delta(x' - x) \delta(y' - y) \delta(z' - z)$$

と

$$\int |\mathbf{x}\rangle d\mathbf{x} \langle \mathbf{x}| = I \Rightarrow \int |xyz\rangle dx dy dz \langle xyz| = I \tag{1.17}$$

である。運動量演算子  $\hat{\mathbf{p}}$  は位置演算子  $\hat{\mathbf{x}}$  と量子力学の基本的な交換関係：

$$\left\{ \begin{array}{l} [\hat{x}_i, \hat{p}_j] (= \hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{x}_i) = i\hbar \delta_{ij} \\ [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \end{array} \right. \Leftarrow \left\{ \begin{array}{l} i, j = 1, 2, 3 \\ \hat{\mathbf{x}} = \left( \begin{array}{c} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \\ \hat{x}_3 \end{array} \right), \hat{\mathbf{p}} = \left( \begin{array}{c} \hat{p}_x \\ \hat{p}_y \\ \hat{p}_z \end{array} \right) \end{array} \right. \tag{1.18}$$

を満たす。逆に

- $[\hat{x}_i, \square_j] = i\hbar \delta_{ij}$  を満たす演算子  $\square$  を運動量と見なす

のが、量子力学での運動量の定義である (【付録】 I.座標に依存する運動量参照)。

### 運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ を通常の数 (3次元ベクトル) $\mathbf{p}$ にする

(1.11)を用いると、(1.10)の第2項は

$$\begin{aligned} c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 |\psi(t)\rangle &= c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 I |\psi(t)\rangle = c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 \left( \int |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} \langle \mathbf{p}| \right) |\psi(t)\rangle = c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 \int |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| \psi(t)\rangle d\mathbf{p} \\ &= c^2 \int \mathbf{p}^2 |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| \psi(t)\rangle d\mathbf{p} \end{aligned} \tag{1.19}$$

と計算できる。ここに、 $\langle \mathbf{p}| \psi(t)\rangle$  は数学の表記では  $\mathbf{p}$  の関数なので

$$\psi(\mathbf{p}, t) = \langle \mathbf{p}| \psi(t)\rangle \tag{1.20}$$

と表して、

$$c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 |\psi(t)\rangle = c^2 \int \mathbf{p}^2 |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| \psi(t)\rangle d\mathbf{p} = c^2 \int \mathbf{p}^2 |\mathbf{p}\rangle \psi(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} \tag{1.21}$$

である。従って、

$$(\hat{H}^2 - c^2 \hat{\mathbf{p}}^2) |\psi(t)\rangle = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 |\psi(t)\rangle - c^2 \int \mathbf{p}^2 |\mathbf{p}\rangle \psi(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} \tag{1.22}$$

を得る。

**x の微分で表す**

次に、

$$\bullet (1.22) : (\hat{H}^2 - c^2 \hat{p}^2) |\psi(t)\rangle = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 |\psi(t)\rangle - c^2 \int p^2 |p\rangle \psi(p,t) dp \text{ の } \int p^2 |p\rangle \psi(p,t) dp \text{ を } x$$

の微分で表す

ために、(1.14)用いて、

$$|\psi(t)\rangle = I |\psi(t)\rangle = \left( \int |x\rangle dx \langle x| \right) |\psi(t)\rangle = \int |x\rangle dx \langle x | \psi(t)\rangle \quad (1.23)$$

ここで、(1.20)のように、関数表記を

$$\psi(x,t) = \langle x | \psi(t)\rangle \quad (1.24)$$

とすれば、

$$|\psi(t)\rangle = \int |x\rangle dx \langle x | \psi(t)\rangle = \int |x\rangle \psi(x,t) dx \quad (1.25)$$

なので

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \int |x\rangle \psi(x,t) dx} \quad (1.26)$$

になる。これより

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 |\psi(t)\rangle = \int |x\rangle \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \psi(x,t) dx \quad (1.27)$$

なので

$$\boxed{\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 |\psi(t)\rangle = \int |x\rangle \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \psi(x,t) dx} \quad (1.28)$$

を得る。また、(1.22)の第 2 項は

$$\begin{aligned} c^2 \int |p\rangle p^2 \psi(p,t) dp &= c^2 \int I |p\rangle p^2 \psi(p,t) dp = c^2 \int \left( \int |x\rangle dx \langle x| \right) |p\rangle p^2 \psi(p,t) dp \\ &= c^2 \int \int |x\rangle dx \langle x | p\rangle p^2 \psi(p,t) dp = c^2 \int \int |x\rangle \langle x | p\rangle p^2 \psi(p,t) dx dp \end{aligned} \quad (1.29)$$

になる。従って、

$$\boxed{c^2 \int |p\rangle p^2 \psi(p,t) dp = c^2 \int \int |x\rangle \langle x | p\rangle p^2 \psi(p,t) dx dp} \quad (1.30)$$

ここで、 $\langle x | p\rangle$ を計算する必要がある。**交換関係  $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$  と  $\langle x | \hat{p}_j | \psi(t)\rangle$** 

量子力学の基本的な交換関係(1.18)

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

より

$$\begin{aligned} i\hbar\delta_{ij}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle &= \langle\mathbf{x}|\left[\hat{\mathbf{x}}_i, \hat{\mathbf{p}}_j\right]|\psi(t)\rangle = \langle\mathbf{x}|(\hat{\mathbf{x}}_i\hat{\mathbf{p}}_j - \hat{\mathbf{p}}_j\hat{\mathbf{x}}_i)|\psi(t)\rangle \\ &\stackrel{\langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{x}}=\langle\mathbf{x}|x}{=} \langle\mathbf{x}|(\mathbf{x}_i\hat{\mathbf{p}}_j - \hat{\mathbf{p}}_j\hat{\mathbf{x}}_i)|\psi(t)\rangle = \mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j|\psi(t)\rangle - \langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j\hat{\mathbf{x}}_i|\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (1.31)$$

より、

$$i\hbar\delta_{ij}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle = \mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j|\psi(t)\rangle - \langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j\hat{\mathbf{x}}_i|\psi(t)\rangle \quad (1.32)$$

つまり、

$$\langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j\hat{\mathbf{x}}_i|\psi(t)\rangle = \mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j|\psi(t)\rangle - i\hbar\delta_{ij}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle \quad (1.33)$$

である。ここで、

$$\boxed{\frac{\partial\mathbf{x}_i}{\partial\mathbf{x}_j} = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3)} \quad (1.34)$$

に注意して

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j\hat{\mathbf{x}}_i|\psi(t)\rangle &= \mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j|\psi(t)\rangle - i\hbar\delta_{ij}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle \\ &= \mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j|\psi(t)\rangle - i\hbar\frac{\partial\mathbf{x}_i}{\partial\mathbf{x}_j}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle \quad (i, j = 1, 2, 3) \end{aligned} \quad (1.35)$$

と書き直し、微分の公式：

$$\frac{\partial(fg)}{\partial\mathbf{x}_j} = \frac{\partial f}{\partial\mathbf{x}_j}g + f\frac{\partial g}{\partial\mathbf{x}_j} \quad (1.36)$$

を用いて得られる

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial\mathbf{x}_j}\left[\mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle\right] &\stackrel{f=\mathbf{x}_i}{=} \stackrel{g=\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle}{\underbrace{\frac{\partial f}{\partial\mathbf{x}_j}}_{\frac{\partial\mathbf{x}_i}{\partial\mathbf{x}_j}}}\underbrace{\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle}_g + \underbrace{\mathbf{x}_i}_{f}\underbrace{\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}_j}}_{\frac{\partial g}{\partial\mathbf{x}_j}}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle \\ \Rightarrow \frac{\partial\mathbf{x}_i}{\partial\mathbf{x}_j}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle &= \frac{\partial}{\partial\mathbf{x}_j}\left[\mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle\right] - \mathbf{x}_i\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}_j}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (1.37)$$

を代入し

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j\hat{\mathbf{x}}_i|\psi(t)\rangle &= \mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j|\psi(t)\rangle - i\hbar\frac{\partial\mathbf{x}_i}{\partial\mathbf{x}_j}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle \\ &= \mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j|\psi(t)\rangle - i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}_j}\left[\mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle\right] - \mathbf{x}_i\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}_j}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle\right) \\ &= \mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j|\psi(t)\rangle - i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}_j}\left[\mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle\right] + i\hbar\mathbf{x}_i\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}_j}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle \\ &= \mathbf{x}_i\left[\langle\mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}_j|\psi(t)\rangle + i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}_j}\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle\right] - i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}_j}\left[\mathbf{x}_i\langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle\right] \end{aligned} \quad (1.38)$$

より

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j \hat{\mathbf{x}}_i | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} [x_i \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle] + x_i \left[ \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j | \psi(t) \rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle \right] \quad (1.39)$$

である。この関係式が、自動的に成り立つ場合があり

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j \hat{\mathbf{x}}_i | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} [x_i \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle] + x_i \overbrace{\left[ \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j | \psi(t) \rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle \right]}{=0} \quad (1.40)$$

とすればよい。つまり、

$$\boxed{\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle} \quad (1.41)$$

であり、

$$\begin{cases} \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle \\ \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j \hat{\mathbf{x}}_i | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} [x_i \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle] \end{cases} \quad (1.42)$$

を得る。従って、演算ルールとして

$$\boxed{\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j f(\hat{\mathbf{x}}) | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} [f(\mathbf{x}) \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle]} \quad (j=1,2,3) \quad (1.43)$$

がわかる。それぞれ

$$\begin{cases} f(\hat{\mathbf{x}}) = 1 (\Rightarrow f(\mathbf{x}) = 1): \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle \\ f(\hat{\mathbf{x}}) = \hat{\mathbf{x}}_i (\Rightarrow f(\mathbf{x}) = x_i): \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j \hat{\mathbf{x}}_i | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} [x_i \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle] \end{cases} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (1.44)$$

として、(1.42)を再現できる。そのとき、

- $\langle \mathbf{x} | [\hat{\mathbf{x}}_i, \hat{\mathbf{p}}_j] | \psi(t) \rangle = i\hbar \delta_{ij} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle$  が自動的に成り立つ
  - $[\hat{\mathbf{x}}_i, \hat{\mathbf{p}}_j] = i\hbar \delta_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, 3$ ) が成り立つ

である。

### 場の方程式

(1.30)は、

$$c^2 \int |\mathbf{p}\rangle \mathbf{p}^2 \psi(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} = c^2 \int \int |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}\rangle \mathbf{p}^2 \psi(\mathbf{p}, t) dx d\mathbf{p} \quad (1.45)$$

であるが、(1.42)を  $|\psi(t)\rangle$  の代わりに  $|\mathbf{p}\rangle$  に適用し

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x} | \hat{p}_j | \psi(t) \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle \Rightarrow \langle \mathbf{x} | \hat{p}_j | \mathbf{p} \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \\ &\stackrel{\hat{p}_j | \mathbf{p} \rangle = p_j | \mathbf{p} \rangle}{\Rightarrow} \langle \mathbf{x} | \hat{p}_j | \mathbf{p} \rangle = p_j \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle\end{aligned}\quad (1.46)$$

より、

$$\boxed{p_j \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \quad (j=1,2,3)} \quad (1.47)$$

を得る (【付録】Ⅱ.  $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$  を関数で表す、【付録】Ⅲ. フーリエ変換と  $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$  参照)。これにより

- $p_j$  ( $j=1,2,3$ ) を  $\frac{\partial}{\partial x_j}$  ( $j=1,2,3$ ) で表す

ことができる。従って、(1.45)の  $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle p^2$  は

$$\begin{aligned}p^2 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle &= (p_1 p_1 + p_2 p_2 + p_3 p_3) \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = p_1 p_1 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle + p_2 p_2 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle + p_3 p_3 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \\ &= p_1 \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_1} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle + p_2 \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_2} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle + p_3 \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_3} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_1} p_1 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_2} p_2 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_3} p_3 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_1} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_2} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_2} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_3} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_3} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \\ &= \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^2 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle + \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^2 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle + \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^2 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \\ &= \left[ \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^2 + \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^2 + \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^2 \right] \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \\ &= -\hbar^2 \left[ \left( \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^2 + \left( \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^2 + \left( \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^2 \right] \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \\ &= -\hbar^2 \left( i \frac{\partial}{\partial x} + j \frac{\partial}{\partial y} + k \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot \left( i \frac{\partial}{\partial x} + j \frac{\partial}{\partial y} + k \frac{\partial}{\partial z} \right) \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \\ &= -\hbar^2 \nabla \cdot \nabla \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = -\hbar^2 \nabla^2 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \Leftarrow \boxed{\nabla = i \frac{\partial}{\partial x} + j \frac{\partial}{\partial y} + k \frac{\partial}{\partial z}}\end{aligned}\quad (1.48)$$

より

$$\boxed{p^2 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = -\hbar^2 \nabla^2 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle} \Leftarrow \nabla = i \frac{\partial}{\partial x} + j \frac{\partial}{\partial y} + k \frac{\partial}{\partial z} \quad \left( \text{或いは、} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = i \frac{\partial}{\partial x} + j \frac{\partial}{\partial y} + k \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (1.49)$$

がわかる。従って、(1.45)は

$$\begin{aligned}
c^2 \int |\mathbf{p}\rangle \mathbf{p}^2 \psi(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} &= c^2 \int \int |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}\rangle \mathbf{p}^2 \psi(\mathbf{p}, t) dx d\mathbf{p} \\
&= c^2 \int \int |\mathbf{x}\rangle (-\hbar^2 \nabla^2 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}\rangle) \psi(\mathbf{p}, t) dx d\mathbf{p} \\
&= -\hbar^2 c^2 \int \int |\mathbf{x}\rangle (\nabla^2 \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}\rangle) \psi(\mathbf{p}, t) dx d\mathbf{p} \\
&= -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \nabla^2 \left( \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}\rangle \psi(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} \right) dx
\end{aligned} \tag{1.50}$$

より、今度は、 $\psi(\mathbf{p}, t) = \langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle$  より  $\psi(\mathbf{p}, t)$  を  $\langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle$  に戻すと

$$\begin{aligned}
c^2 \int |\mathbf{p}\rangle \mathbf{p}^2 \psi(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} &= -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \nabla^2 \left( \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}\rangle \psi(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} \right) dx \\
&\stackrel{\psi(\mathbf{p}, t) = \langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle}{=} -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \nabla^2 \left( \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle d\mathbf{p} \right) dx \\
&= -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \nabla^2 \left( \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} \langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle \right) dx = -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \nabla^2 \langle \mathbf{x} | \left( \int |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} \langle \mathbf{p} | \right) | \psi(t) \rangle dx \\
&\stackrel{\int |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} \langle \mathbf{p} | = I}{=} -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \nabla^2 \langle \mathbf{x} | I | \psi(t) \rangle dx = -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \nabla^2 \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle dx \\
&\stackrel{\psi(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle}{=} -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) dx
\end{aligned} \tag{1.51}$$

と計算できるので、

$$\boxed{c^2 \int |\mathbf{p}\rangle \mathbf{p}^2 \psi(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} = -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) dx} \tag{1.52}$$

を得る。以上から、(1.22)は、(1.28)と(1.52)を用いて

$$\begin{aligned}
(\hat{H}^2 - c^2 \hat{\mathbf{p}}^2) | \psi(t) \rangle &= \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 | \psi(t) \rangle - \hbar^2 c^2 \int |\mathbf{p}\rangle \mathbf{p}^2 \psi(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} \\
&= -\hbar^2 \int |\mathbf{x}\rangle \left( \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \psi(\mathbf{x}, t) dx - \left( -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) dx \right) \\
&= -\hbar^2 c^2 \left( \int |\mathbf{x}\rangle \left( \frac{\partial}{\partial ct} \right)^2 \psi(\mathbf{x}, t) dx - \int |\mathbf{x}\rangle \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) dx \right) \\
&= -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \left[ \left( \frac{\partial}{\partial ct} \right)^2 - \nabla^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t) dx
\end{aligned} \tag{1.53}$$

より

$$\boxed{(\hat{H}^2 - c^2 \hat{\mathbf{p}}^2) | \psi(t) \rangle = -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \left[ \left( \frac{\partial}{\partial ct} \right)^2 - \nabla^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t) dx} \tag{1.54}$$

と計算できる。従って、(1.7) :

$$(\hat{H}^2 - c^2 \hat{\mathbf{p}}^2) | \psi(t) \rangle = m^2 c^4 | \psi(t) \rangle \tag{1.55}$$

は、(1.26)と(1.54)を用いて

$$\begin{cases} (\hat{H}^2 - c^2 \hat{p}^2) |\psi(t)\rangle = -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \left[ \left( \frac{\partial}{\partial ct} \right)^2 - \nabla^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t) dx \\ m^2 c^4 |\psi(t)\rangle = m^2 c^4 \int |\mathbf{x}\rangle \psi(\mathbf{x}, t) dx \end{cases} \quad (1.56)$$

より、

$$\begin{aligned} -\hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \left[ \left( \frac{\partial}{\partial ct} \right)^2 - \nabla^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t) dx &= m^2 c^4 \int |\mathbf{x}\rangle \psi(\mathbf{x}, t) dx \\ \Rightarrow \int |\mathbf{x}\rangle \left[ \hbar^2 c^2 \left( \left( \frac{\partial}{\partial ct} \right)^2 - \nabla^2 \right) + m^2 c^4 \right] \psi(\mathbf{x}, t) dx &= 0 \\ \Rightarrow \hbar^2 c^2 \int |\mathbf{x}\rangle \left[ \left( \frac{\partial}{\partial ct} \right)^2 - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi(\mathbf{x}, t) dx &= 0 \end{aligned} \quad (1.57)$$

すべての  $|\mathbf{x}\rangle$  に対して成立するので

$$\boxed{\left[ \left( \frac{\partial}{\partial ct} \right)^2 - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi(\mathbf{x}, t) = 0} \quad (1.58)$$

を得る。これを**クライン・ゴールドンの方程式**という。省略記号

$$\boxed{\square = \left( \frac{\partial}{\partial ct} \right)^2 - \nabla^2} \quad (1.59)$$

を用いて

$$\boxed{\left( \square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\mathbf{x}, t) = 0} \quad (1.60)$$

と表す事が多い。

#### 4次元ベクトル表記

(1.58)の時間微分と空間微分は、まとめることができ、

$$\boxed{x_0 = x^0 = ct} \quad (1.61)$$

とするとき、

- 4次元座標： $x^\mu \ (\mu = 0, 1, 2, 3) = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, \mathbf{x}) = (ct, x, y, z)$   
 $x_\mu \ (\mu = 0, 1, 2, 3) = (x_0, x_1, x_2, x_3) = (ct, -\mathbf{x}) = (ct, -x, -y, -z)$

を用いて、

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x^\mu} &= \left( \frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) = \left( \frac{\partial}{\partial x^0}, \nabla \right) = \left( \overbrace{\frac{\partial}{\partial x^0}}^{\mu=0}, \overbrace{\nabla_x}^{\mu=1}, \overbrace{\nabla_y}^{\mu=2}, \overbrace{\nabla_z}^{\mu=3} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x_\mu} &= \left( \frac{\partial}{\partial x_0}, \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right) = \left( \frac{\partial}{\partial x_0}, -\nabla \right) = \left( \overbrace{\frac{\partial}{\partial x_0}}^{\mu=0}, \overbrace{-\nabla_x}^{\mu=1}, \overbrace{-\nabla_y}^{\mu=2}, \overbrace{-\nabla_z}^{\mu=3} \right) \end{aligned} \right\} \Leftarrow \begin{cases} \nabla_x = \frac{\partial}{\partial x} \\ \nabla_y = \frac{\partial}{\partial y} \\ \nabla_z = \frac{\partial}{\partial z} \end{cases} \quad (1.62)$$

の 4 次元微分から

$$\begin{aligned} \sum_{\mu=0}^3 \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} &= \frac{\partial}{\partial x^0} \frac{\partial}{\partial x_0} + \frac{\partial}{\partial x^1} \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x^2} \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial x^3} \frac{\partial}{\partial x_3} \\ &= \frac{\partial}{\partial x^0} \frac{\partial}{\partial x_0} + \nabla_x (-\nabla_x) + \nabla_y (-\nabla_y) + \nabla_z (-\nabla_z) \\ &= \left( \frac{\partial}{\partial x^0} \right)^2 - (\nabla_x \nabla_x + \nabla_y \nabla_y + \nabla_z \nabla_z) = \left( \frac{\partial}{\partial x^0} \right)^2 - \nabla^2 \stackrel{x^0=ct}{=} \left( \frac{\partial}{\partial ct} \right)^2 - \nabla^2 \end{aligned} \quad (1.63)$$

を得るので

$$\boxed{\sum_{\mu=0}^3 \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left( \frac{\partial}{\partial ct} \right)^2 - \nabla^2} \quad (1.64)$$

である。従って、(1.58)は

$$\left[ \left( \frac{\partial}{\partial ct} \right)^2 - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi(\mathbf{x}, t) = 0 \Rightarrow \left( \sum_{\mu=0}^3 \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (1.65)$$

と 4 次元座標  $x^\mu$  ( $\mu = 0, 1, 2, 3$ ) の微分で表す事ができる。従って、

$$\boxed{\left( \sum_{\mu=0}^3 \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\mathbf{x}, t) = 0} \quad (1.66)$$

あるいは、

- 和記号を省略

して

$$\boxed{\left( \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\mathbf{x}, t) = 0} \quad (1.67)$$

更に

- 微分記号の省略表記：
$$\boxed{\begin{aligned} \partial^\mu &= \frac{\partial}{\partial x_\mu} \\ \partial_\mu &= \frac{\partial}{\partial x^\mu} \end{aligned}}$$

を用いて

$$\boxed{\left(\partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi(\mathbf{x}, t) = 0} \quad (1.68)$$

と表される。

同様に、アインシュタインの関係式(1.4) :  $E^2 - c^2 \mathbf{p}^2 = m^2 c^4$  は、

$$\boxed{p_0 = p^0 = \frac{E}{c}} \quad (1.69)$$

とするとき、

$$\bullet \quad 4 \text{次元運動量} \begin{cases} p^\mu \ (\mu = 0, 1, 2, 3) = (p^0, p^1, p^2, p^3) = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p}\right) = \left(\frac{E}{c}, p_x, p_y, p_z\right) \\ p_\mu \ (\mu = 0, 1, 2, 3) = (p_0, p_1, p_2, p_3) = \left(\frac{E}{c}, -\mathbf{p}\right) = \left(\frac{E}{c}, -p_x, -p_y, -p_z\right) \end{cases}$$

を用いて、

$$\begin{aligned} \sum_{\mu=0}^3 p^\mu p_\mu &= p^0 p_0 + p^1 p_1 + p^2 p_2 + p^3 p_3 = \frac{E}{c} \frac{E}{c} + p_x (-p_x) + p_y (-p_y) + p_z (-p_z) \\ &= \left(\frac{E}{c}\right)^2 - (p_x p_x + p_y p_y + p_z p_z) = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = \frac{E^2 - c^2 \mathbf{p}^2}{c^2} \end{aligned} \quad (1.70)$$

なので、

$$\boxed{E^2 - c^2 \mathbf{p}^2 = c^2 \sum_{\mu=0}^3 p^\mu p_\mu} \quad (1.71)$$

がわかる。従って、アインシュタインの関係式 :  $E^2 - c^2 \mathbf{p}^2 = m^2 c^4$  より

$$c^2 \sum_{\mu=0}^3 p^\mu p_\mu = m^2 c^4$$

より

$$\boxed{\sum_{\mu=0}^3 p^\mu p_\mu = m^2 c^2} \quad (1.72)$$

を得る。あるいは、「和記号を省略」した

$$\boxed{p^\mu p_\mu = m^2 c^2} \quad (1.73)$$

になる。

## 付録

### I.座標に依存する運動量

正確には、 $\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j | \psi(t) \rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle$  は、(1.41) のように 0 である必要は無く、

$$\begin{cases} \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j | \psi(t) \rangle: \text{変数は } \mathbf{x} \text{ と } t (\hat{\mathbf{p}}_j \text{ は演算子) なので、} \mathbf{x} \text{ と } t \text{ の関数} \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle: \mathbf{x} \text{ と } t \text{ なので、} \mathbf{x} \text{ と } t \text{ の関数} \end{cases}$$

に気がつくのと、ある  $\mathbf{x}$  の関数 ( $\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)$  とする) であればよい。そのとき、 $j=1, 2, 3$  に注意し

$$\begin{cases} \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_1 | \psi(t) \rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle = \mathbf{K}_1(\mathbf{x}, t) \\ \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_2 | \psi(t) \rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle = \mathbf{K}_2(\mathbf{x}, t) \\ \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_3 | \psi(t) \rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial x_3} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle = \mathbf{K}_3(\mathbf{x}, t) \end{cases} \quad (1.1)$$

と表せる。従って、(1.42) の代わりに

$$\begin{cases} \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle + \mathbf{K}_j(\mathbf{x}, t) \\ \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j \hat{x}_i | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} [\mathbf{x}_i \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle] + \mathbf{x}_i \mathbf{K}_j(\mathbf{x}, t) \end{cases} \quad (1.2)$$

が得られる。これは、

- 演算子  $\hat{x}$  の関数:  $\mathbf{B}_j(\hat{x}, t)$  ( $j=1, 2, 3$ )

$$\triangleright \langle \mathbf{x} | \mathbf{B}_j(\hat{x}, t) | \psi(t) \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{B}_j(\mathbf{x}, t) | \psi(t) \rangle = \mathbf{B}_j(\mathbf{x}, t) \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle \quad (1.3)$$

の性質を用いると、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | [\hat{\mathbf{p}}_j + \mathbf{B}_j(\hat{x}, t)] | \psi(t) \rangle &= \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j | \psi(t) \rangle + \langle \mathbf{x} | \mathbf{B}_j(\hat{x}, t) | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j | \psi(t) \rangle + \mathbf{B}_j(\mathbf{x}, t) \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle = \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j | \psi(t) \rangle + \mathbf{K}_j(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (1.4)$$

なので、

$$\boxed{\langle \mathbf{x} | \mathbf{B}_j(\hat{x}, t) | \psi(t) \rangle = \mathbf{B}_j(\mathbf{x}, t) \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle = \mathbf{K}_j(\mathbf{x}, t)} \quad (1.5)$$

と見なすことができる。つまり、新たな、運動量演算子として

$$\boxed{\hat{\mathbf{p}}'_j = \hat{\mathbf{p}}_j + \mathbf{B}_j(\hat{x}, t) \quad (j=1, 2, 3)} \quad (1.6)$$

を選ぶことができる。このときの演算ルールは、

$$\boxed{\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}'_j f(\hat{x}) | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} [f(\mathbf{x}) \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle] + f(\mathbf{x}) \mathbf{B}_j(\mathbf{x}, t) \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle \quad (j=1, 2, 3)} \quad (1.7)$$

になり、(1.43) とともに用いる。それぞれ

$$\left\{ \begin{array}{l} f(\hat{x})=1(\Rightarrow f(\mathbf{x})=1): \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle + \overbrace{\mathbf{B}_j(\mathbf{x}, t) \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle}^{K_j(\mathbf{x}, t)} \\ f(\hat{x})=\hat{x}_i(\Rightarrow f(\mathbf{x})=x_i): \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}_j \hat{x}_i | \psi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} [x_i \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle] + \overbrace{x_i \mathbf{B}_j(\mathbf{x}, t) \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle}^{x_i K_j(\mathbf{x}, t)} \end{array} \right. \quad (1.8)$$

として、(1.2)を再現できる。また、基本的な交換関係：(1.18)は

$$[\hat{x}_i, \hat{p}'_j] = [\hat{x}_i, \hat{p}_j + \mathbf{B}_j(\hat{x}, t)] = [\hat{x}_i, \hat{p}_j] + \overbrace{[\hat{x}_i, \mathbf{B}_j(\hat{x}, t)]}^{=0} = [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

より、

$$\boxed{[\hat{x}_i, \hat{p}'_j] = i\hbar \delta_{ij} (j=1,2,3)} \Leftarrow \hat{p}'_j = \hat{p}_j + \mathbf{B}_j(\hat{x}, t) \quad (1.9)$$

と変更されない。 $[\hat{x}_i, \square_j] = i\hbar \delta_{ij}$ を満たす演算子  $\square$  が運動量なので、

- $\hat{p}'_j (= \hat{p}_j + \mathbf{B}_j(\hat{x}, t))$  は運動量

であるのがわかる。

よく知られている例は、「電磁場のある場合の素粒子の運動」であり、

- 電荷を  $eQ$  ( $Q=-1$ :電子、 $Q=1$ :陽子など)
- 電磁場を  $A(\mathbf{x}, t) \Rightarrow B(\mathbf{x}, t) = eQA(\mathbf{x}, t)$

とすると

$$\boxed{\hat{p}'_j = \hat{p}_j + eQA_j(\hat{x}, t) (j=1,2,3)} \quad (1.10)$$

になり、電子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}'^2}{2m_e} + \dots = \frac{[\hat{p} + eQA(\hat{x}, t)]^2}{2m_e} + \dots \quad (1.11)$$

で与えられる。

## II. $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$ を関数で表す

(1.47)の関係式：

$$p_j \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle (j=1,2,3) \quad (1.12)$$

より

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{ip_j}{\hbar} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle (j=1,2,3) \quad (1.13)$$

であり、成分表記すると

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{i p_1}{\hbar} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{i p_2}{\hbar} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \quad (1.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_3} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{i p_3}{\hbar} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \quad (1.16)$$

である。公式

$$\frac{\partial e^{ax}}{\partial x} = a e^x \quad (1.17)$$

を用いると、(1.14)は

$$\begin{cases} x = x_1 \\ a = \frac{i p_1}{\hbar} \end{cases} \quad (1.18)$$

とすれば、

$$\frac{\partial e^{\frac{i p_1}{\hbar} x_1}}{\partial x_1} = \frac{i p_1}{\hbar} e^{\frac{i p_1}{\hbar} x_1} = \frac{i p_1}{\hbar} e^{\frac{i x_1 p_1}{\hbar}} \quad (1.19)$$

がわかる従って、比例係数を  $A$  として

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = A e^{\frac{i x_1 p_1}{\hbar}} \quad (1.20)$$

更に、(1.15)も同時に成り立つので、同様にして、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_2} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle &\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x_2} \left( A e^{\frac{i x_1 p_1}{\hbar}} \right) = e^{\frac{i x_1 p_1}{\hbar}} \frac{\partial A}{\partial x_2} = A e^{\frac{i x_1 p_1}{\hbar}} \\ &\Rightarrow \frac{\partial A}{\partial x_2} = A \end{aligned} \quad (1.21)$$

より、新たな比例係数を  $B$  として

$$A = B e^{\frac{i x_2 p_2}{\hbar}} \quad (1.22)$$

となり、(1.20)より

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = A e^{\frac{i x_1 p_1}{\hbar}} = B e^{\frac{i x_2 p_2}{\hbar}} e^{\frac{i x_1 p_1}{\hbar}} = B e^{\frac{i(x_1 p_1 + x_2 p_2)}{\hbar}}$$

を得る。更に、(1.16)より、新たな比例係数を  $C$  として、

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = C e^{\frac{i(x_1 p_1 + x_2 p_2 + x_3 p_3)}{\hbar}} \quad (C: \text{比例係数}) \quad (1.23)$$

とわかる。ベクトルの内積

$$\mathbf{x}_1 p_1 + \mathbf{x}_2 p_2 + \mathbf{x}_3 p_3 = \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} \quad (1.24)$$

を用いて、(1.23)から、

$$\boxed{\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = C e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} \quad (C: \text{比例係数})} \quad (1.25)$$

を得る。これより

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle = (\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle)^\dagger \quad (1.26)$$

も、求められ

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle = (\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle)^\dagger = \left( C e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} \right)^\dagger = \left( C e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} \right)^* = C^* e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} \quad (1.27)$$

なので

$$\boxed{\langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle = C^* e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} \quad (C: \text{比例係数})} \quad (1.28)$$

を得る。

### Ⅲ. フーリエ変換と $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$

フーリエ変換が自動的に現れることを見る。まず、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle &= C e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} \\ \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle &= C^* e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} \end{aligned} \quad (1.29)$$

および

$$\begin{aligned} \int |\mathbf{x}\rangle d\mathbf{x} \langle \mathbf{x}| &= I \\ \int |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} \langle \mathbf{p}| &= I \end{aligned} \quad (1.30)$$

を用いる。関数  $f(\mathbf{x}) = f(x, y, z)$  は、 $f$  を量子状態  $|f\rangle$  とみなせば、

$$\boxed{f(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | f \rangle} \quad (1.31)$$

で表されるので、(1.30)を用いて

$$f(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | f \rangle = \langle \mathbf{x} | I | f \rangle = \langle \mathbf{x} | \left( \int |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} \langle \mathbf{p}| \right) | f \rangle = \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle d\mathbf{p} \langle \mathbf{p} | f \rangle = \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | f \rangle d\mathbf{p} \quad (1.32)$$

関数として

$$\boxed{\tilde{f}(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | f \rangle} \quad (1.33)$$

なので、

$$f(\mathbf{x}) = \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | f \rangle d\mathbf{p} = \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \tilde{f}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (1.34)$$

従って、(1.29)を用いれば

$$f(\mathbf{x}) = \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \tilde{f}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = \int C e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} \tilde{f}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = C \int \tilde{f}(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} d\mathbf{p} \quad (1.35)$$

より

$$\boxed{f(\mathbf{x}) = C \int \tilde{f}(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} d\mathbf{p}} \quad (1.36)$$

なので、

- $\tilde{f}(\mathbf{p})$  のフーリエ変換を表す

ことになる。同様にして、

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\mathbf{p}) &= \langle \mathbf{p} | f \rangle = \langle \mathbf{p} | I | f \rangle = \langle \mathbf{p} | \left( \int |\mathbf{x}\rangle d\mathbf{x} \langle \mathbf{x}| \right) | f \rangle = \int \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle d\mathbf{x} \langle \mathbf{x} | f \rangle \\ &= \int \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | f \rangle d\mathbf{x} = \int C^* e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = C^* \int f(\mathbf{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (1.37)$$

より

$$\boxed{\tilde{f}(\mathbf{p}) = C^* \int f(\mathbf{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} d\mathbf{x}} \quad (1.38)$$

がわかる。これを

- (1.36) のフーリエ逆変換を表す

ことになる。

フーリエ変換とフーリエ逆変換を同時に行うと元に戻る。この性質より

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= C \int \tilde{f}(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} d\mathbf{p} = C \int C^* \int f(\mathbf{x}') e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} d\mathbf{x}' e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} d\mathbf{p} = |C|^2 \int \int f(\mathbf{x}') e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} d\mathbf{x}' d\mathbf{p} \\ &= |C|^2 \int \int f(\mathbf{x}') e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{p}} d\mathbf{x}' d\mathbf{p} \quad (1.39) \\ &= |C|^2 \int f(\mathbf{x}') \left( \int e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{p}} d\mathbf{p} \right) d\mathbf{x}' \end{aligned}$$

つまり

$$f(\mathbf{x}) = |C|^2 \int f(\mathbf{x}') \left( \int e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{p}} d\mathbf{p} \right) d\mathbf{x}' \quad (1.40)$$

を得る。ここで、

$$\text{デルタ関数 : } \begin{cases} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{p}} d\mathbf{p} \\ f(\mathbf{x}) = \int f(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \end{cases} \quad (1.41)$$

$$\begin{cases} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{\frac{i}{\hbar} [(x-x')p_x + (y-y')p_y + (z-z')p_z]} dp_x dp_y dp_z \\ f(\mathbf{x}) = f(x, y, z) = \int f(x', y', z') \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z') dx' dy' dz' \end{cases} \quad (1.42)$$

を思い起こせば、

$$\begin{aligned} f(x) &= |C|^2 \int f(x') \left( \int e^{\frac{i}{\hbar}(x-x')p} dp \right) dx' \\ &= |C|^2 \int f(x') (2\pi)^3 \delta(x-x') dx' = |C|^2 (2\pi)^3 \int f(x') \delta(x-x') dx' \\ &= |C|^2 (2\pi)^3 f(x) \end{aligned} \quad (1.43)$$

なので、

$$|C|^2 = \frac{1}{(2\pi)^3} \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} (= \text{実数とする}) \quad (1.44)$$

を得る。以上から、

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \int \tilde{f}(p) e^{\frac{i}{\hbar}x \cdot p} dp \\ \tilde{f}(p) &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \int f(x) e^{-\frac{i}{\hbar}x \cdot p} dx \\ \langle p | x \rangle &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{-\frac{i}{\hbar}x \cdot p} \end{aligned} \quad (1.45)$$

を導けた。