ブラウン運動論と量子力学（V）

佐賀大・理工・化学　　竹.山　尚　賢

（１月７日受理）

§1.　変分原理による基礎式の導出

衆知のように Schrödinger 方程式

$$i\hbar\,{}^{\partial\psi}\!/_{\partial t} = -({}^{\hbar^2}\!/_{2m})\,\triangle\psi + U\psi \tag{1}$$

はラグランジアン密度として

$$L = ({}^{i\hbar}\!/_{2})\,(\psi^{*}\,{}^{\partial\psi}\!/_{\partial t} - {}^{\partial\psi^{*}}\!/_{\partial t}\,\psi) - ({}^{\hbar^2}\!/_{2m})\,\nabla\psi^{*}\nabla\psi - U\psi^{*}\psi \tag{2}$$

をとり変分法によって導かれる。いま，Schrödinger 場として，次の形をとって変分原理により基礎式を導出しておきたい。

$$\left.\begin{aligned}\psi &= \exp({}^{R}\!/_{\hbar})\ \exp({}^{iS}\!/_{\hbar})\\ \psi^{*} &= \exp({}^{R}\!/_{\hbar})\ \exp(-{}^{iS}\!/_{\hbar})\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

従って、

$$\rho = \psi^{*}\psi = \exp({}^{2R}\!/_{\hbar}) \tag{3'}$$

（2）は，これらを用いて次式となる。

$$L = i\rho\,{}^{\partial R}\!/_{\partial t} - \rho\,{}^{\partial S}\!/_{\partial t} - \rho\,\{{}^{(\nabla S)^2}\!/_{2m} + U + {}^{(\nabla R)^2}\!/_{2m} + ({}^{i}\!/_{2m})(\nabla S\cdot\nabla R - \nabla R\cdot\nabla S)\} \tag{4}$$

これから，場を特性づける"座標"に対応する量 R，S に対する"共役運動量"は，それぞれ　$i\rho$，$-\rho$ であるから，ハミルトニアン密度は次のように書

ける。

$$H = i\rho\,{}^{\partial R}\!/_{\partial t} - \rho\,{}^{\partial S}\!/_{\partial t} - L$$

$$= \rho\left\{{}^{(\nabla S)^2}\!/_{2m} + U\right\}$$

$$-(i\rho)^2\rho^{-1}\,{}^{(\nabla R)^2}\!/_{2m}$$

$$+\left({}^{i\rho}\!/_{2m}\right)[\nabla S, \nabla R] \qquad (5)$$

ここで，

$$\vec{p} = \nabla S \ ;\ \vec{p}_d = \nabla R \qquad (5\cdot a)$$

を導入し，

$$[\nabla S, \nabla R] = [\vec{p}, \vec{p}_d]$$

$$= -i\hbar\ \mathrm{div}\ \vec{p}_d \qquad (5\cdot b)$$

ととると，次の“正準形式”の運動方程式が成立する。

$${}^{\partial S}\!/_{\partial t} = -\,{}^{\partial H}\!/_{\partial \rho}$$

$$= -\left({}^{p^2}\!/_{2m} + U\right)$$

$$+\,{}^{p_d^2}\!/_{2m} + \left({}^{\hbar}\!/_{2m}\right)\mathrm{div}\ \vec{p}_d, \qquad (6\cdot 1)$$

$$-\,{}^{\partial \rho}\!/_{\partial t} = {}^{\partial}\!/_{\partial \vec{q}}\left\{{}^{\partial H}\!/_{\partial(\nabla S)}\right\}$$

$$= \mathrm{div}\left({}^{\partial H}\!/_{\partial \vec{p}}\right)$$

$$= \mathrm{div}\left(\rho\,{}^{\vec{p}}\!/_{m}\right) \qquad (6\cdot 2)$$

(6・2) は連続の式であるが，

$$-\rho^{-1}\,{}^{\partial\rho}\!/_{\partial t} = -\,\partial\,{}^{\ell n\rho}\!/_{\partial t}$$

$$= \rho^{-1}\mathrm{div}\left(\rho\,{}^{\vec{p}}\!/_{m}\right) = \left({}^{\vec{p}}\!/_{m}\right)\nabla\,\ell n\,\rho + \mathrm{div}\,{}^{\vec{p}}\!/_{m} \qquad (6\cdot 2\cdot a)$$

と書き直し，これに（3′）からの

$$R=(\hbar/2)\,\ell n\,\rho \tag{6・2・b}$$

を用いて，次式がえられる。

$$\begin{aligned}\partial R/\partial t=&-(1/m)(\vec{p}\cdot\vec{p}_d)\\&-(\hbar/2m)\,\mathrm{div}\,\vec{p}\end{aligned} \tag{6・3}$$

（6・1），（6・3）が，我々の基礎式である。

また，（5）における R～$i\rho$ の関係から，

$$\begin{aligned}\partial R/\partial t&=\partial H/\partial(i\rho)\\&=-i(p_d^2/m)+(1/2m)\,[\vec{p},\vec{p}_d]\\&=-i(p_d^2/m)-i(\hbar/2m)\,\mathrm{div}\,\vec{p}_d,\end{aligned} \tag{7・1}$$

$$\begin{aligned}i\,\partial\rho/\partial t&=-\mathrm{div}\,(\partial H/\partial\vec{p}_d)\\&=-\mathrm{div}\,(\rho\vec{p}_d/m),\end{aligned} \tag{7・2}$$

の二式がえられるが，これからは，

$$\left.\begin{aligned}&\partial R/\partial t=0,\\&(p_d^2/m)+(\hbar/2m)\,\mathrm{div}\,\vec{p}_d=0\end{aligned}\right\} \tag{8・1}$$

$$\left.\begin{aligned}&\partial\rho/\partial t=0,\\&\mathrm{div}\,(\rho\vec{p}_d/m)=0\end{aligned}\right\} \tag{8・2}$$

の関係が成立する特殊な状態がえられるにすぎず（6・3）は導出されない。（7・1 & 2）がリアルならざることは，$R=(\hbar/2)\,\ell n\rho$ の運動が，本来，非力学的な性格のものであることを意味するのであろう。（8・1 & 2）は同じ式であり，この状態は（6・3）における $\vec{p}=\vec{p}_q$，or $\nabla S=\nabla R$； R＝時間によらず一定の状態，従って，（6・1）から $\partial S/\partial t=-U$，or $d\vec{p}/dt=-\nabla U$

の正に非流水系古典力学の状態であることを知る。このことから $\nabla S \neq \nabla R$ が“量子力学”固有の効果（簡単に量子効果とよぶことにしよう）と何等かのかかわり合いがあるものとみられよう。（5・b）に集約されている事柄，$\vec{p}$ ー空間と $\vec{p}_d$ ー空間との相互移行性としての（5・b）の物理的意義が問われるであろう。

§ 2. 演算子関係

量子力学において $\hat{p}$ 空間と $\hat{q}$ 空間との力学的相互移行性（変換性）は

$$[\hat{p}, \hat{q}] = -i\hbar \tag{9}$$

によって規定されており，これによって演算子関係 $\hat{p} = -i\hbar\, {}^{\partial}/_{\partial \hat{q}}$ が具体化される。勿論，不確定性関係もまたこれによる。ところで，古典極限 $\hbar \to 0$ においては，正しく

$$\hat{p}\psi = -i\hbar\nabla\psi = \nabla S \cdot \psi \tag{10}$$

$$\text{ただし}\quad \psi = A\ \exp\left({}^{iS}/_{\hbar}\right),$$

が成立し，$\vec{p} = \nabla S$ と $\vec{q}$ とは無分散に定まり“位相空間”（$\vec{p}$, $\vec{q}$）においてトラジェクトリ束は

$$\rho = A^2 \cdot \delta(\vec{p} - \nabla S) \tag{11}$$

の分布をとるものとみなされよう。$\hbar \to 0$ の条件をはずすと“量子ポテンシャル”$-({}^{\hbar^2}/_{2m})\,{}^{\Delta A}/_{A}$ が存在し，これを考慮に入れて（11）の A を出さねばならない。本来，古典力学の中には，固有の確率概念はないのであるから，（11）の分布は量子ポテンシャルの存在に起因すると考えるべきであろう。量子力学の論理によると，c ー数 $\vec{p}$, $\vec{q}$ が波群の重心 $\langle\hat{p}\rangle$，$\langle\hat{q}\rangle$ を与えるものと考えるとき，それからの偏差の間に最低限

$$\left\{-i\hbar\,{}^{\partial}/_{\partial \hat{q}} - \langle\hat{p}\rangle\right\}\psi(\hat{q})$$

$$= i\alpha\left\{\hat{q} - \langle\hat{q}\rangle\right\}\psi(\hat{q}) \tag{12}$$

の関係が成立し，αは実数で正でなければならない。これから

$$\psi(\hat{q}) = (\alpha/\pi\hbar)^{1/4} \exp\{-\alpha(\hat{q}-\langle\hat{q}\rangle)^2/2\hbar\} \times \exp(i\langle\hat{p}\rangle\hat{q}/\hbar) \tag{13}$$

の形に波動関数が求まる。すなわち，運動量を定めたことの必然的結果として位置座標の方は

$$\langle(\hat{q}-\langle\hat{q}\rangle)^2\rangle = \hbar/2\alpha \tag{14}$$

だけの分散が生じ，ガウス分布をなすこととなる。量子力学の中にはαを決める手だてはなく，$\alpha\to+\infty$ あるいは α＝有限，$\hbar\to 0$ で正しく（13）は $\hat{q}$ についても δ関数 $\delta(\hat{q}-\langle\hat{q}\rangle)$ となり，位相点（$\langle\hat{p}\rangle$，$\langle\hat{q}\rangle$）が系の古典力学的状態を無分散に定めることとなる。

いま（3）で拡散ポテンシャルを

$$R = -(\alpha/2)(\delta\vec{q})^2, \quad \delta\vec{q} = \vec{q} - \langle\vec{q}\rangle \tag{15}$$

ととると，拡散の運動量は

$$\vec{p}_d = \nabla R = -\alpha\,\delta\vec{q} \tag{15・a}$$

であり，差分商の形になる。そこで

$$\alpha = m/\tau_d \tag{15・b}$$

により，拡散時間 τ_d を導入する。そうすると（14）は

$$\langle(\delta\vec{q})^2\rangle/\tau_d = \hbar/2m = D, \tag{16}$$

これは出発点における対応関係に他ならない。

（16）は $\langle(\delta\vec{q})^2\rangle^{1/2}\{\langle(\delta\vec{q})^2\rangle^{1/2}/\tau_d\} = D$ と書いて位置及び速度の2乗平均根間の不確定性関係と考えたのであるが，量子力学のそれは，（13）と

は共役に位置を定めて運動量が分散する場合を考えて

$$<(\hat{p}-<\hat{p}>)^2> = \hbar\,\alpha/2 \tag{17}$$

の関係を求め，（14）と（17）との積から

$$<(\hat{q}-<\hat{q}>)^2>^{1/2}<(\hat{p}-<\hat{p}>)^2>^{1/2} = \hbar/2 \tag{18}$$

が結論される。このとき波群のひろがりを与える不定のパラメータ α（real, positive）は消えることに注意したい。この意味で量子力学における不確定性関係（18）と,（16）からの

$$<(\delta\vec{q})^2>^{1/2}\,m<(\delta\vec{q})^2>^{1/2}/\tau_d = \hbar/2 \tag{19}$$

とは，類似ではあっても本質的な差異がある。

すなわち，〝かくれた変数〞としての α，その次元は〔質量／時間〕であるが，これを陽にすることに（19）の積極的意義がありうるし，その意味で(19)の型の不確定性が，従ってゆらぎの基本的関係が，輸送係数Dを定義づけているブラウン運動の描像は，広義にみると，時空の構造に関連した本質的な問題を提起しているように思われる。（14）と（15・b）とから知られるように,拡散子の寿命としての τ_d は，その運動範囲の面積に比例して長くなる。このような時定数は物理的に吟味してみる価値があるように思われる。

ところで（3）のもとで（10）は

$$\hat{p}\psi = -i\hbar\nabla\psi = (\vec{p}-i\vec{p}_d)\psi \tag{20}$$

となるから，交換関係（9）は

$$[\vec{p},\vec{q}]-i[\vec{p}_d,\vec{q}] = -i\hbar \tag{20·a}$$

となり，

$$[\vec{p}, \vec{q}] = 0 \;; \quad [\vec{p}_d, \vec{q}] = \hbar , \qquad (20\cdot b)$$

が成立する。$\vec{p} = \nabla S$ の演算子化はできないが，$\vec{p}_d = \nabla R$ は $\vec{q}$ と非可換で，この為に $\vec{q}$ に関して分散が生じ演算子としては（エルミット性を問わぬこととして）

$$\vec{p}_d = \hbar \nabla \qquad (20\cdot c)$$

のように具体化される。これは $A = \rho^{1/2} = \exp\left({}^{R}\!/_{\hbar}\right)$ に作用して

$$\vec{p}_d A = \hbar \nabla A$$

あるいは

$$\vec{p}_d = \hbar \nabla \ln A = \left({}^{\hbar}\!/_{2}\right) \nabla \ln \rho \qquad (20\cdot d)$$

の定義式が再生する。

しかしながら連続の式

$$\partial \rho /_{\partial t} + \mathrm{div}\left(\rho \nabla {}^{S}\!/_{m}\right) = 0$$

を考慮するとき，速度は ${}^{\vec{p}}\!/_{m}$ であるから，

$$\hat{p} = -\left({}^{i\hbar}\!/_{2\rho}\right)\left(\psi^{*}\nabla\psi - \nabla\psi^{*}\psi\right)$$
$$= \nabla S = \vec{p} \qquad (21)$$

を力学的運動量としてとるべきことがわかる。ここには $\vec{p}_d$ は現れず，（21）は $\vec{p}$ が量子力学的演算子としての復権を主張しており，前節（5・b）の関係は $\vec{p}$ が $\vec{p}_d$ を $\vec{q}$ の関数とみなして作用しているものと理解できる。（6・1 & 2）あるいは（6・1 & 3）の基礎式において量子効果は（21）の意味における（5・b）唯一点に集約されているといえよう。