量子力学と古典力学の間

奥村 聡
北海道大学大学院理学院数学専攻 修士課程 2 年

概要

極微の世界を記述する物理学として，量子力学というものがある．量子力学を特徴付ける定数として Planck 定数 $\hbar$ というものがある．人間の素朴な感情として，Planck 定数 $\hbar$ が 0 とみなせる状況では，量子力学は古典力学によって十分精度良く近似されて欲しいという気持ちがある．ここでは古典力学を用いて量子力学を近似できる体系を紹介する．

1 序論

古典力学は力と運動の科学である．位置や運動量といった物理量の時間発展は Newton の運動方程式を解くことによって時間発展を予言することが可能である．このとき，位置の時間発展は Newton の運動方程式を解くことによって得られる：

$$m\frac{d^2}{dt^2}x(t) = F$$

ここで，m は考える物体の質量で，F は物体に作用する外力である．これと等価な古典力学の形式として Hamilton 形式の古典力学が知られている．Hamilton 形式では Newton の運動方程式と等価な方程式として Hamilton の正準方程式が知られており，Hamilton の正準方程式を通して，一般の物理量の時間発展を考えることができる．質点の位置と速度をひとたび与えると，物理量の時間発展は以後の各時刻では一意に決まってしまう．このとき古典状態を位置と運動量の組 (x, p) で表す．

一方，極微の世界を支配する物理法則を探ると，量子力学に行き着く．そこでは運動は点と位置の時間変化ではなかった．位置の時間微分として定立した速度は運動の基本量ではなくなり，その地位は運動量に取って代わられる．量子力学では，質点の各時刻 t における量子状態はある無限次元の空間の単位ベクトル ψ_t によって表現される．そして，質点の位置は量子状態を表すベクトルに作用する写像として表現される．これらは古典力学に現れるような数値として表現することは叶わない．

具体的にいえば，一つの質点を対象とする場合，Hilbert 空間としては $\mathbb{R}$ で定義した二乗可積分関数 $\psi(x), \quad (x \in \mathbb{R})$ の全体 $L^2(\mathbb{R})$ をとり，位置座標の演算子 $\hat{x}$ を

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \quad (x \in \mathbb{R})$$

によって定義することができる．運動量の演算子 $\hat{p}$ は位置座標の演算子 $\hat{x}$ とともに

$$\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = \hbar$$

をみたし，自己共役演算子と呼ばれる写像のクラスに属すというのが量子力学の公理の一つである．この関係式を正準交換関係という．例えば，

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)$$

がこれをみたす．

量子力学における時間発展は Schrödinger 方程式によって記述される：

$$\begin{cases} -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(t,x)+\hat{H}\psi(t,x)=0 \\ \psi(0,x)=\psi_0(x), \quad \psi_0\in L^2(\mathbb{R}). \end{cases}$$

$\hat{H}$ は古典力学でのエネルギーに相当する写像で，Schrödinger 方程式は各時刻における状態のみたす方程式である．ここでは, Schrödinger によって生成される時間発展が古典力学での時間発展によって近似できることを見る．

2　本論

前節でも述べたように量子力学において物理量は，ある無限次元空間から無限次元空間への写像となる．位置や運動量は正準交換関係をみたすような自己共役な演算子であるとして導入される．一般の古典物理量 f に対応する量子力学の物理量をどう処方するか問題があるが，これは以下の積分によって定義される：

$$f(\hat{x},\hat{p})=\mathfrak{Op}[f]=\frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^2}dY\mathscr{F}_\sigma[f](y,\eta)e^{i(y\cdot\hat{p}-\eta\cdot\hat{x})}.$$

このような古典物理量 f から量子物理量 $\mathfrak{Op}[f]$ への対応を f の Weyl 量子化という．古典力学におけるエネルギーを h で表すと，Schrödinger 方程式は以下のようになる：

$$\begin{cases} -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(t,x)+\mathfrak{Op}[h]\psi(t,x)=0 \\ \psi(0,x)=\psi_0(x), \quad \psi_0\in L^2(\mathbb{R}). \end{cases}$$

この方程式は写像 $U(t)=e^{-i\frac{t}{\hbar}\mathfrak{Op}[h]}$ を用いて

$$\psi(t,x)=\exp\left(-i\frac{t}{\hbar}\mathfrak{Op}^A[h]\right)\psi_0(x):=U_\hbar(t)\psi_0(x)$$

として解くことができる．

3　結論

時刻 t における古典的物理量を $f(x(t),p(t))=f(t)$ で表す．このとき，以下の記号を導入する：

$$\begin{aligned} F_{\mathrm{cl}}(t)&:=\mathfrak{Op}[f(t)] \\ F_{\mathrm{qm}}(t)&:=e^{i\frac{t}{\hbar}\mathfrak{Op}^A[h]}\mathfrak{Op}^A[f]e^{-i\frac{t}{\hbar}\mathfrak{Op}[h]} \end{aligned}$$

ここで $F_{\mathrm{cl}}(t)$ は古典的時間発展をしてから量子力学の写像に対応させ，$F_{\mathrm{qm}}(t)$ は量子力学の写像に対応させてから Schrödinger 方程式によって時間発展を生成していると解釈する． このとき，$C_T>0$ で,

$$\|F_{\mathrm{cl}}(t)-F_{\mathrm{qm}}(t)\|_{B(L^2(\mathbb{R}^d))}\le\hbar^2C_T, \quad (\text{for all } t\in[0,T]).$$

をみたすものが存在する．これは量子力学の時間発展と古典力学の時間発展の差が極めて小さな Planck 定数の差で抑えることができることを主張するもので，量子力学は古典力学によって近似できることを意味する．

参考文献

[1] 新井朝雄，" ヒルベルト空間と量子力学"，改訂増補版，共立出版,2014.

[2] 新井朝雄，"量子力学の数学的構造 I，II"，朝倉書店，1999.

[3] 新井朝雄，"量子現象の数理"，朝倉書店，2006.

[4] J. J. Kohn L. Nirenberg *An algebra of pseudo - differential operators* Communications on pure and applied mathematics , vol. XVIII, 269-305.

[5] 小出 昭一郎 "物理現象のフーリエ解析" 筑摩書房 2018.

[6] M. Zworski，"*Semiclassical Analysis*"， American Mathematical Society，2012.

[7] M.W.Wong，"*Weyl Transformations*"，Springer，1999.

[8] D. Robert,"*de l'Approximation Semi-Classique*|" Birkhäuser, 1987

[9] 首藤啓，"古典と量子の間"，岩波書店，1999.

[10] H. Weyl. "*Quantenmechanik und Gruppentheorie*". Zeitschrift für Physik 46, 1-46, 1927.