

量子力学の軌跡解釈（ボーム力学）による力学の基本概念 1

川口 正倫

1. はじめに

量子力学の軌跡解釈は、「ボーム力学」「存在論的解釈」「因果的解釈」「ドプロイ・ボーム解釈」等と呼ばれているが、日本語の文献が非常に少なく、「隠れた変数の理論」としてあまり重要視されていないのが現状である。中には、既に否定された解釈と思い込んでいる人もいる少なくない。

しかし、軌跡解釈のような「隠れた変数の理論」は必ずしも否定されているとはいえない。一定の条件を課すことで、コッヘン・スペッカーの定理やベルの定理とも整合することができる。また、D.Born も *THE UNDIVIDED UNIVERSE* で述べているように、理解しやすさという点で標準解釈より優れた解釈になる可能性もある。なお、このような理解しやすさという利点から、分子動力学の分野では量子軌跡法という計算ツールとして軌跡解釈は用いられている。

本著は、この軌跡解釈の概要を運動学(電磁場を用いない)に限定し、私なりにまとめたものである。

2. 軌跡解釈の基本概念

2. 1 基本公理

まず、準備として次のような言葉を定義する。

所有値・・・ある物理量を観測していなくとも系が所有していると考えらえる値

観測可能量(オブザーバブル)・・・ある物理量を観測すると測定され得る値

所有値という概念は、標準解釈(何を「標準解釈」とするかは意見が分かれるであろうが、ここでは一般的なテキストで解説されている解釈とする。)では、用いられることはない。一方、観測可能量は標準解釈というオブザーバブルと同じ概念で、観測すると測定され得る値は、固有状態以外では、通常多数ある。次に基本となる公理を与える。

【公理 1.1】 物理系は個別系として、位置を所有値として有する粒子とそれに随伴する波動 ψ によって表される。

【公理 1.2】 波動 ψ はシュレディンガー方程式に従って時間発展する。

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (1.1)$$

【公理 1.3】 波動 ψ は、次のような関係により随伴する粒子の運動に影響を与える。

$$\psi(\mathbf{x}, t) \equiv R(\mathbf{x}, t) e^{-iS(\mathbf{x}, t)/\hbar} \quad (1.2)$$

と定義したとき、質量 m の粒子の運動は、

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{m} \nabla S(\mathbf{x}, t) \quad (1.3)$$

という速度場に従って運動する。

2. 2 運動方程式とエネルギー

【補題 1】 式(1.2)をシュレディンガー方程式(式(1.1))に代入し、実数部と虚数部を整理すると、次のような 2 つの方程式が得られる。

$$\frac{\partial R(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \left\{ R(\mathbf{x}, t) \nabla^2 S(\mathbf{x}, t) + 2 \nabla R(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla S(\mathbf{x}, t) \right\} \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial S(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\left\{ \frac{(\nabla S(\mathbf{x}, t))^2}{2m} + V(\mathbf{x}, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R(\mathbf{x}, t)}{R(\mathbf{x}, t)} \right\} \quad (1.5)$$

(証明) 省略

【命題 1】 粒子の運動方程式は、次のようになる。

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}(t)}{dt^2} = -\nabla (Q(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}, t))_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)} \quad (1.6)$$

ここで、 $Q(\mathbf{x}, t)$ は、

$$Q(\mathbf{x}, t) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R(\mathbf{x}, t)}{R(\mathbf{x}, t)} \quad (1.7)$$

と定義され、量子ポテンシャルといわれる。

(証明)

【公理 1.3】 より粒子の運動は、式(1.3)の速度場に従うから、粒子の位置ベクトルを $\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)$ とすれば、

$$m \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \nabla S(\mathbf{x}(t), t)$$

である。ここで、 $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla$ という関係式を用いて両辺を微分すると、

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}(t)}{dt^2} = \frac{\nabla \partial S(\mathbf{x}(t), t)}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{x}(t), t) \nabla^2 S(\mathbf{x}(t), t)$$

さらに式(1.3)を用いて $\mathbf{v}$ を消去すると、

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = \frac{\nabla \partial S}{\partial t} + \frac{\nabla S \nabla^2 S}{m} = \frac{\nabla \partial S}{\partial t} + \frac{\nabla \nabla^2 S^2}{2m}$$

そして【補題 1】 の式(1.5)から $\partial S/\partial t$ を消去すると、

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = \frac{\nabla \partial S}{\partial t} + \frac{\nabla \nabla^2 S^2}{m} = -\nabla \left(V(\mathbf{x}, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R(\mathbf{x}, t)}{R(\mathbf{x}, t)} \right)$$

□

【命題 2】 $2m \gg \hbar$ を古典力学の適用範囲とみなせば、粒子の運動方程式は(式(1.6))は、量子力学と古典力学のいずれにも適用できる。(証明) 式(1.6)より自明 □

【命題 3】 粒子の軌跡は、任意のある時間の位置を定めれば、一意に定まる。

(証明)

粒子の運動方程式(式(1.6))が2階微分であることから、2つの初期条件が必要とさるが、【公理 1.3】により、任意のある時間の位置 $\mathbf{x}(t_0)$ を定めるとその位置における速度 $\mathbf{v}(\mathbf{x}(t_0), t_0)$ も定まるため、任意のある時間の位置 $\mathbf{x}(t_0)$ を定めれば粒子の軌跡 $\mathbf{x}(t_0)$ は一意に定まる。 □

【命題 4】 粒子のエネルギー E は

$$E = - \frac{\partial S(\mathbf{x}(t), t)}{\partial t} \quad (1.8)$$

となる。

(証明)

古典力学で行うのと同様に、粒子の運動方程式(1.6)の両辺に $(d\mathbf{x}/dt)$ を掛けて積分すると、

$$\frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 + V + Q = C \quad (C : \text{積分定数})$$

となり、これがエネルギーを表すと考えられる。そして、式(1.3)により $\mathbf{v}$ を消去すると、

$$\frac{(\nabla S)^2}{2m} + V + Q = C$$

となる。式(1.5)により左辺を消去すれば、

$$- \frac{\partial S(\mathbf{x}(t), t)}{\partial t} = C = E \quad \square$$

2. 3 存在確率の定理

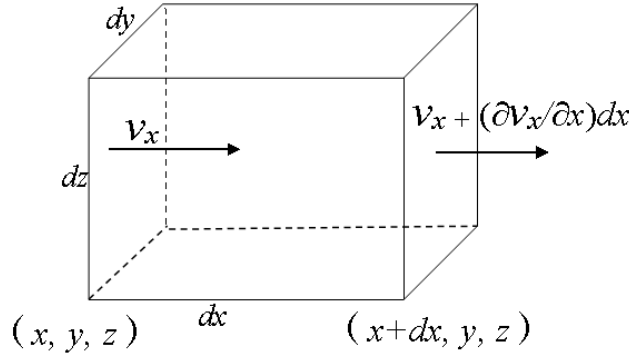
初期状態 $\mathbf{x}(t_0)$ を定めると運動方程式を解くことにより、その後の軌跡 $\mathbf{x}(t_0)$ が定まる。ここで考えているのは1粒子系であるため、1つの波動 ϕ に対して見出されるのは1つの軌跡であるが、全く同じ波動 ϕ を多数用意し、それぞれに随伴する粒子に初期状態 $\mathbf{x}_1(t_0), \mathbf{x}_2(t_0), \mathbf{x}_3(t_0), \mathbf{x}_4(t_0), \mathbf{x}_5(t_0), \mathbf{x}_6(t_0) \dots$ を定めると、それぞれの軌跡 $\mathbf{x}_1(t), \mathbf{x}_2(t), \mathbf{x}_3(t), \mathbf{x}_4(t), \mathbf{x}_5(t), \mathbf{x}_6(t) \dots$ が定まることになる。そして、こういう軌跡をあらゆる初期状態について求めて、重ね合わせることを考えてみると、粒子の存在確率(密度)という概念が浮かび上がる。ただし、ここでいう存在確率はあくまで個別系についての存在確率ではなく、全く同じ波動 ϕ をサンプルとして多数用意した場合に、ある単位体積に粒子が存在する個別系の数がどの程度であることを示すものである。例えば、基底状態の水素原子を無限個用意し、それぞれについて電子の原子核からの距離(r)を測定して、 r を横軸、存在したサンプルの数を縦軸にプロットするようなものである。従って、このようにして求められる存在確率は、波動 ϕ の全体的な統計を示すものであり、個別系の性質を表すものではない。

さて、全く同じ波動 ϕ に随伴する粒子の運動を調べることは、【公理 1.3】より、式(1.3)の速度場 $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ に従う粒子の運動を調べることである。そして、そのような速度場のある位置に粒子を置き軌跡を求めることを、あらゆる位置について実施し結果を重ね合わせるということは、速度場 $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ に相互作用の無い連続流体を置き、その流れを調べることと同じことである。従って、ここでは流体力学で連続方程式を導出する過程と同じ方法を用いて、存在確率の連続方程式を導く。

【補題 2】 粒子を相互作用の無い連続流体とみなしたとき、式(1.3)の速度場に従う連続方程式は次のようになる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{m}(\rho \nabla^2 S + \nabla \rho \cdot \nabla S) \quad (1.9)$$

(証明)



密度を $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$ とすると、速度場 $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ に従う流体が上図のような体積 $dx dy dz$ の立方体の $dy dz$ 平面を通り抜ける際の流量の変化 ΔN は、

$$\begin{aligned} \Delta N &= \left\{ \rho(x, y, z, t) v_x(x, y, z, t) dy dz - \rho(x+dx, y, z, t) v_x(x+dx, y, z, t) dy dz \right\} \\ &= \left\{ \rho v_x dy dz - \left(v_x + \frac{\partial v_x}{\partial x} dx \right) \left(\rho + \frac{\partial \rho}{\partial x} dx \right) dy dz \right\} \\ &= - \left(\rho \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_x \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) dx dy dz \end{aligned}$$

となる。これを $dx dz$ 平面及び $dx dy$ 平面についても求めると、立方体 $dx dy dz$ 全体の流量の変化は、

$$\Delta N = -(\rho \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho) dx dy dz$$

である。そして、これをこの立方体における密度の変化 $(\partial \rho / \partial t) dx dy dz$ と等しいとすると流体力学における連続の方程式、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\rho \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho)$$

が求まる。そして、式(1.3)により速度 $\mathbf{v}$ を消去すると、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{m}(\rho \nabla^2 S + \nabla \rho \cdot \nabla S)$$

となる。□

【命題 5】 式(1.2)における R の自乗(R^2)は、波動 ψ に随伴する粒子の存在確率である。ただし、この存在確率は個別系における存在確率ではなく、アンサンブル(統計集団)の意味を有する。
(確率の定理)

(証明)

式(1.4)の両辺に R を乗じて整理すると、

$$\frac{\partial R^2(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{m} \left\{ R^2(\mathbf{x}, t) \nabla^2 S(\mathbf{x}, t) + \nabla R^2(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla S(\mathbf{x}, t) \right\}$$

となる。ここで $R \rightarrow cR$ (c : 任意の実数) と置き換えを行っても方程式が形を変えない(式(1.5)でも同様)ため、規格化されているとみなすことができ、これを式(1.9)と比較すれば、

$$R^2 = \rho$$

である。そして、【補題 2】はアンサンブルについての存在確率の計算であることから、個別系における存在確率ではなく、アンサンブルの意味での存在確率である。 □

【命題 6】 シュレディンガー方程式の解である ψ について、 $\psi \psi^*$ を求めるとアンサンブルの意味での存在確率を求めることができるが、これは個別系の存在確率を記述するものではない。

(証明)

式(1.2)及び【命題 5】より、 $\rho = R^2 = \psi \psi^*$ である。また、【命題 5】よりこれはアンサンブルの意味での存在確率を示すものであり、個別系の存在確率を示すものではない。 □

【命題 7】 付随する粒子の存在を否定して、 ψ は個別系を記述するものではない。

(証明)

【命題 6】より自明。

2. 4 エネルギー一定常状態

まず、標準理論と同等に、エネルギー一定常状態を定義すると、

エネルギー一定常状態・・・ R が時間依存せずかつエネルギーが一定である状態。

となる。

【補題 3】 $t=t_0$ で $R=R(\mathbf{x}, t_0)$ とすると、 R の時間的发展は次のようになる。

$$R(\mathbf{x}, t) = R(\mathbf{x}, t_0) \exp \left(- \int_{t_0}^t \frac{\nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t')}{2} dt' \right) \quad (1.10)$$

(証明)

式(1.4)より、

$$\frac{\partial R(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\nabla R(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla S(\mathbf{x}, t)}{m} = -\frac{1}{2m} R(\mathbf{x}, t) \nabla^2 S(\mathbf{x}, t)$$

さらに、式(1.3)により左辺の ∇S を消去すると、

$$\frac{\partial R(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla R(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{2m} R(\mathbf{x}, t) \nabla^2 S(\mathbf{x}, t)$$

そして、両辺を $R(\mathbf{x}, t)$ で除し、 $\log(R(\mathbf{x}, t))$ の偏微分により、

$$\frac{\partial \log(R(\mathbf{x}, t))}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \log(R(\mathbf{x}, t)) = -\frac{1}{2m} \nabla^2 S(\mathbf{x}, t)$$

ここで、 $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla$ という関係式を用いると、

$$\frac{d \log(R(\mathbf{x}, t))}{dt} = -\frac{1}{2m} \nabla^2 S(\mathbf{x}, t)$$

従って、 t を t' に置き換え、 $t_0 \leq t' \leq t$ の範囲で dt' の定積分を行うと、

$$\log(R(\mathbf{x}, t)) - \log(R(\mathbf{x}, t_0)) = -\int_{t_0}^t \frac{1}{2m} \nabla^2 S(\mathbf{x}, t') dt'$$

この式から、式(1.3)により右辺の ∇S を消去すれば、(1.10)が成り立つ。□

【命題8】 エネルギー一定常状態では、次の関係が成り立つ。

$$\nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (1.11)$$

(証明)

エネルギー一定常状態の定義により、 R は時間依存しない。従って、【補題3】の(1.10)において、

$$\int_{t_0}^t \frac{\nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t')}{2} dt' = 0$$

が成り立つ。よって、 $\nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = 0$ である。□

【命題8】により、定常状態では速度場の生成が無いことがわかる。(電磁気学における定常磁場の関係式 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ を考えてみよ。さらに、定常磁場のポテンシャルと磁場を関係とのアナロジーから、式(1.3)は、速度場が $S(\mathbf{x}, t) = \text{一定}$ という曲線に対して垂直であり、 $S(\mathbf{x}, t)$ の勾配 $\times 1/m$ が速度場であることを意味し、 $S(\mathbf{x}, t)$ は速度場のポテンシャル(*)とすることができる。)

(※)「ポテンシャル」とは言っても、力学的な位置エネルギーとは異なることに注意。

【命題9】 エネルギー E のエネルギー一定常状態の $S(\mathbf{x}, t)$ は、次の形式であることが必要十分条件である。

$$S(\mathbf{x}, t) = -Et + \Phi(\mathbf{x}) + \text{定数} \quad (1.12)$$

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{x}) = 0 \quad (1.13)$$

(証明)

定義より、①エネルギー E は一定 かつ ② R が時間依存しなければ、エネルギー一定常状態である。

必要性：①については、【命題 4】の式(1.8)より、 $S(\mathbf{x}, t)$ は式(1.12)の形式となることが自明。②については、【命題 8】及び式(1.3)より、 $\nabla^2 S(\mathbf{x}, t) = 0$ であることから、式(1.12)の形式では直ちに式(1.13)が成り立つ。

十分性：式(1.8)より、式(1.12)の形式ではエネルギー E は一定となることが自明。

式(1.13)より、式(1.12)の形式では $\nabla^2 S(\mathbf{x}, t) = 0$ であることがわかる。このことから、式(1.3)と【命題 8】より、 R が時間依存しない。□

【命題 9】の $\Phi(\mathbf{x})$ の形式は $a_1, a_2, a_3, b_1, b_2, b_3, c$ を定数とすると、

$$\Phi(\mathbf{x}) = a_1 x + a_2 y + a_3 z + b_1 xy + b_2 yz + b_3 xz + cxyz$$

となることがわかる。(単なる定数は、式(1.12)の定数に包含できるため除く)

$$S(\mathbf{x}, t) = -Et + a_1 x + a_2 y + a_3 z + b_1 xy + b_2 yz + b_3 xz + cxyz + cxyz + \text{定数}$$

2. 5 運動量定常状態

まず、運動量の定義と運動量定常状態の定義を与える。

運動量 $\mathbf{P}(\mathbf{x}, t)$ は、次のように定義される。

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}, t) \equiv \nabla S(\mathbf{x}, t) = m\mathbf{V}(\mathbf{x}, t) \quad (1.14)$$

運動量定常状態・・・運動量 $\mathbf{P}(\mathbf{x}, t)$ が一定である状態。

【命題 10】 運動量定常状態では、次の関係式が成り立つ。 $(\Phi(\mathbf{x}) = a_1 x + a_2 y + a_3 z)$

$$\nabla^2 S(\mathbf{x}, t) = m \nabla \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (1.15)$$

(証明) 運動量の定義(式(1.14))と運動量定常状態の定義より自明。□

【命題 11】 運動量定常状態では、 R は時間依存しない。 $(R = R(\mathbf{x}) \text{ が成り立つ。})$

(証明)

【命題 10】の式(1.15)より、運動量定常状態では、 $\nabla \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x}, t) = 0$ が成り立つ。

従って、【補題 3】の式(1.10)より、 $R(\mathbf{x}, t) = R(\mathbf{x}, t_0)$ 。これは、 R が時間依存しないことを表す。

【命題 12】 運動量定常状態かつエネルギー一定常状態は、次の 3 つのタイプに分類される。

$$\textcircled{1} \quad E = \frac{\mathbf{v}^2}{2m} \quad V(\mathbf{x}) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R(\mathbf{x})}{R(\mathbf{x})}$$

$$\textcircled{2} \quad E = \frac{\mathbf{v}^2}{2m} + V + Q \quad V(\mathbf{x}) + Q(\mathbf{x}) = \text{一定}$$

$$\textcircled{3} \quad E = \frac{\mathbf{v}^2}{2m} + V + Q \quad R(\mathbf{x}) = \nabla^2 R(\mathbf{x}) \quad (Q = \text{一定})$$

$$V(\mathbf{x}) = \text{一定}$$

(証明) 【補題 1】の式(1.5)と【命題 4】の式(1.8)より自明。□

なお、②は水素原子モデルの基底状態等($\mathbf{v}=0$)、③は自由粒子($R=\text{一定}$ 、 $R=\sin(kx)$)である。

【命題 13】 エネルギーが 0 で無くても、粒子が静止した状態($\mathbf{v}=0$)という状態が存在する。

(証明) 【命題 12】の②③においてあり得る。□

【命題 13】によれば、粒子が静止した状態があり得ることになる。具体的には、波動関数が実数である状態は粒子が静止した状態であることは【公理 1.3】からも明らかであろう。しかし、**粒子が所有値として静止していることと、これが実際に測定値として表れるかは別の問題である。**

詳細については、「観測過程」として、次回の論文で述べるつもりであるが、簡単にいうと観測の際には、ポテンシャルエネルギー Q が運動エネルギーとなって表れるため、静止した粒子が観測されることはない。(【命題 12】の②のタイプで、 $\mathbf{v}=0$ であっても観測の際には Q が運動エネルギーに変換されるため、静止した粒子が観測されないことになる。なお、③のタイプで $\sin(kx)$ のようなものは、 e^{ikx} と e^{-ikx} の重ね合わせの状態で静止しているが、運動量を観測すると正負のどちらかが観測されることは、標準的な解釈の観測過程でも導かれる。)

以 上