27. 連続固有値関数の規格化と **Fourier** 変換

連続固有関数の規格化と Fourier 変換

§0 疑問の発生

量子力学に登場する波動関数(や固有関数)を物理的に正しい形にするためには，関数の大きさの2乗の空間全体での総和(積分値)が1に等しくなるようにする規格化を行う必要がある。系が見出される確率の総和が1であるという原則を満たすための作業であるが，必ずしも1に規格化できない場合がある。たとえば，運動量 $\boldsymbol{p}$ をもつ平面波を表す関数

$$u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = A\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{1}$$

について考えてみよう[1]。この関数が運動量 $\boldsymbol{p}$ の運動を表していること(つまり，運動量演算子の(固有値 $\boldsymbol{p}$ をもつ)固有関数であること)は，$u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ に運動量演算子

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} \tag{2}$$

を作用させると，

$$\hat{\boldsymbol{p}}u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}A\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} = (-\mathrm{i}\hbar)\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}A\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{p}A\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{p}u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) \tag{3}$$

となることから明らかである。次に，式(1)の規格化定数 A を決めよう。関数 $u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ にその複素共役をかけて $\boldsymbol{r}$ で積分すると，

$$\int |u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})|^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int u^*_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int A^*\mathrm{e}^{(-\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\cdot A\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{4-1}$$

$$= \int A^*A\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int |A|^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = |A|^2\int \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \infty \tag{4-2}$$

という結果になり，規格化定数 A を決めることができないという(大)問題が生じる。ここで，$\mathrm{d}\boldsymbol{r} \equiv \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$ であるが，1次元だけ考えて，

$$u_{p_x}(x) = a\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)p_x x} \tag{5}$$

としても，当然，

$$|a|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x = +\infty - (-\infty) = +\infty \tag{6}$$

となり，固有関数の大きさの2乗の積分値が∞になってしまう。しかし，これは考えてみれば当然の結果である。平面波は空間に無限に広がる波であり，無限遠まで系が見出される確率があるから，確率の総和が無限大に発散し，1に規格化することができないという結果はむ

[1] いきなり，運動量 $\boldsymbol{p}$ をもつ平面波と言われても，この関数を思い付かないかもしれないが，読み進めれば理解できると思います。なお，本書では IUPAC の推奨にしたがって虚数を upright の「i」で表します。

しろ自然である。では，この(1に規格化できない)問題にどのように対処すればよいであろうか。本書は，連続固有値[1]をもつ固有関数の規格化を理解し，不確定性関係を Fourier 変換の関係として理解するために書かれた monograph である。

§1 離散固有値関数の規格化

連続固有値関数の規格化を考える前に離散固有値をもつ波動関数について考えよう[2]。ある演算子の n 番目の固有値に対応する固有関数を $u_n(\boldsymbol{r})$ とし，固有関数の組 $\{u_n(\boldsymbol{r})\}$ が正規直交系[3]であるとき[4]，次式が成り立つ。

$$\boxed{\int u_m^*(\boldsymbol{r})u_n(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta_{mn}} \tag{7}$$

ここで，δ_{mn} は Kronecker のデルタであるから，

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & (m = n) \\ 0 & (n \neq n) \end{cases} \tag{8}$$

となる。$\{u_n(\boldsymbol{r})\}$ を基底関数として利用すれば，系の任意の状態を表す状態関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ を $\{u_n(\boldsymbol{r})\}$ の線形結合で表すことができ[5]，基底関数 $u_n(\boldsymbol{r})$ の展開係数を a_n とすると，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_n a_n u_n(\boldsymbol{r}) \tag{9}$$

となる。式(9)の両辺に左から $u_m^*(\boldsymbol{r})$ をかけて積分すると，

$$\int u_m^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \sum_n a_n \int u_m^*(\boldsymbol{r})u_n(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \sum_n a_n \delta_{mn} = a_m \tag{10}$$

となるから，展開係数 a_n は

$$\boxed{a_n = \int u_n^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}} \tag{11}$$

で与えられる。状態関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ を

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_m a_m u_m(\boldsymbol{r}) \tag{12}$$

---

[1] 固有値の値が離散的(とびとび)ではなく，連続的な値という意味である。

[2] 「考えよう」よりも「復習しておこう」と表現した方がよいかもしれない。

[3] 固有関数自身の大きさの2乗の積分値が1であり(正規化，規格化)，異なる固有値に対応する固有関数同士は直交する(内積が0)という固有関数の集合である。

[4] 固有関数の組は $n = 1, 2, 3, \cdots$ で指定される離散的な関数の集合である。厳密には，任意の関数を展開するには正規直交系ではなく完全系(完全正規直交系)である必要がある(ここでは $\{u_n(\boldsymbol{r})\}$ が完全系であるとする)。

[5] 系の状態関数とは，系の状態を表す波動関数であるが，必ずしも系の固有関数であるとは限らない。

と表し，式(12)の複素共役を式(9)にかけて $\boldsymbol{r}$ で積分すると，

$$\int \psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \sum_m a_m^* \sum_n a_n \int u_m^*(\boldsymbol{r})u_n(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{13-1}$$

$$= \sum_m a_m^* \sum_n a_n \delta_{mn} = \sum_m \sum_n a_m^* a_n \delta_{mn} \tag{13-2}$$

$$= \sum_n a_n^* a_n = \sum_n |a_n|^2 = 1 \tag{13-3}$$

となるから，展開係数 a_n も規格化され，$|a_n|^2$ は系($\psi(\boldsymbol{r})$)の中に固有状態 $u_n(\boldsymbol{r})$ が見出される確率であり， a_n が確率密度を表すことがわかる。言い換えると，状態 $\psi(\boldsymbol{r})$ の固有状態 $u_n(\boldsymbol{r})$ への射影成分の大きさが a_n である[1]。

§2 連続固有値関数の規格化

次に，連続固有値関数の規格化を考えよう。連続な固有値 f をとる固有関数を $u_f(\boldsymbol{r})$ とし，この固有関数が完全正規直交系をなすとする(しかし，正規，つまり規格化は現段階では未定義である)。任意の状態関数[2] $\psi(\boldsymbol{r})$ を $u_f(\boldsymbol{r})$ で展開すると，離散固有値関数で展開する際に式(9)で記した n に関する和が f に関する積分に変わるから，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \int a_f u_f(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}f \tag{14}$$

と表すことができる。展開係数を得るために，離散固有値関数の場合の式(11)と同様に，式(14)の両辺に左から $u_g^*(\boldsymbol{r})$ をかけて $\boldsymbol{r}$ で積分すると，

$$\int u_g^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int a_f \left(\int u_g^*(\boldsymbol{r})u_f(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \right) \mathrm{d}f \tag{15}$$

となる。基底関数群 $\{u_f(\boldsymbol{r})\}$ の直交条件は

$$\int u_g^*(\boldsymbol{r})u_f(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = 0 \quad (g \neq f) \tag{16}$$

であるが，式(4)のように，

$$\int u_f^*(\boldsymbol{r})u_f(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \infty \tag{17}$$

となると展開係数が得られない。式(15)の右辺が a_g に等しくなるためには，

$$\boxed{\int u_g^*(\boldsymbol{r})u_f(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta(g-f)} \tag{18}$$

---

[1] さらに別の表現をすれば，状態ベクトル $|\psi\rangle$ の固有ベクトル $|u_n\rangle$ への射影成分の大きさ $\langle u_n|\psi\rangle$ が a_n である，となる。

[2] 状態関数は系の複数の固有関数の重ね合わせで構成されている状態に対応する関数である。状態関数は演算子に対して期待値はもつが固有値をもつとは限らない。

であることが必要になる。式(18)の右辺は Dirac のデルタ関数であるから

$$\delta(g-f)=\begin{cases}\infty & (g=f)\\ 0 & (g\neq f)\end{cases}\tag{19}$$

となる。式(18)を式(15)に代入すると，確かに，

$$\int u_g^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int a_f\delta(g-f)\,\mathrm{d}f=a_g\tag{20}$$

となるから，展開係数 a_f が

$$a_f=\int u_f^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\tag{21}$$

で与えられることになる。ここで，展開係数の形に注意する必要がある。離散固有値関数での展開係数である式(11)では n が離散値であるから，n ごとに値が決まるが，式(21)の f は連続値であるから，a_f は連続な f を変数とする関数の形をしている。したがって，表示としては，a_f よりも f の関数という意味で $\varphi(f)$ と書く方が理解しやすい。その結果，式(21)は

$$\boxed{\varphi(f)=\int u_f^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}}\tag{22}$$

となる。

§3 運動量固有関数の規格化

§0で扱った運動量固有関数 $u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})=A\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}$ の規格化定数 A を決定しよう。

$$\int u_{\boldsymbol{p}'}^*(\boldsymbol{r})u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}=|A|^2\int \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\tag{23}$$

となるが，デルタ関数の積分表示

$$\delta(\alpha)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\beta}\mathrm{d}\beta\tag{24}$$

を利用し[1]，1次元の運動量 p_x と座標 x について，

$$\alpha=p_x-p_x'\tag{25}$$

$$\beta=x\tag{26}$$

とおくと，

$$\delta(p_x-p_x')=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_x-p_x')x}\mathrm{d}x\tag{27}$$

[1] 本書に記しているデルタ関数に関する表記や公式はすべて，篠崎寿夫，松森徳衛，松浦武信「現代工学のためのデルタ関数入門」(現代工学社，1983年)に書かれている。

となる。今，3次元を扱っているから，

$$\boldsymbol{r} = x\boldsymbol{e}_x + y\boldsymbol{e}_y + z\boldsymbol{e}_z \tag{28}$$

$$\boldsymbol{p} = p_x\boldsymbol{e}_x + p_y\boldsymbol{e}_y + p_z\boldsymbol{e}_z \tag{29}$$

$$\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \tag{30}$$

$$\mathrm{d}\boldsymbol{p} = \mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z \tag{31}$$

であり，x, y, z に関する式(27)型の式の積を作ると，

$$\delta(p_x - p'_x)\delta(p_y - p'_y)\delta(p_z - p'_z) \qquad (32)\text{-}1$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_x - p'_x)x}\mathrm{d}x\right)\left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_y - p'_y)y}\mathrm{d}y\right)\left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_z - p'_z)z}\mathrm{d}z\right) \qquad (32)\text{-}2$$

となる。式(32)-1は，デルタ関数の表記法に従って，

$$\delta(p_x - p'_x)\delta(p_y - p'_y)\delta(p_z - p'_z) \equiv \delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}') \tag{33}$$

と書くことができ，式(32)-2は

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}[(p_x - p'_x)x + (p_y - p'_y)y + (p_z - p'_z)z]}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{34}$$

と書き換えられる。したがって，

$$\delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{35}$$

が得られる。式(35)を式(23)に適用すると，

$$\int u^*_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = |A|^2\int \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r} = |A|^2\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}'}{\hbar}\right)\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r} = |A|^2\,(2\pi)^3\delta\left(\frac{\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}'}{\hbar}\right) \tag{36}$$

が得られる。式(18)から，

$$\int u^*_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}') \tag{37}$$

が成り立ち，式(36)と式(37)が等しいことより，

$$|A|^2\,(2\pi)^3\delta\left(\frac{\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}'}{\hbar}\right) = \delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}') \tag{38}$$

を得る。規格化定数 A を決めることが目的であるから， $\delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')$ と $\delta((\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')/\hbar)$ の関係が必要となる[1]。そこで，デルタ関数の性質

[1] 言い換えると， $\delta((\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')/\hbar)$ を $\delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')$ で表したい。

$$\boxed{\delta(b\alpha)=\frac{1}{|b|}\delta(\alpha)} \qquad (b \text{ は定数}) \tag{39}$$

を利用する。

式(39)のより一般的な式は,

$$\delta(h(\alpha))=\sum_i \frac{1}{|h'(\alpha_i)|}\delta(\alpha-\alpha_i) \tag{40}$$

であり, α_i は方程式 $h(\alpha)=0$ の i 番目の単解である。また,

$$h'(\alpha_i)\equiv\frac{\mathrm{d}h(\alpha_i)}{\mathrm{d}\alpha}\equiv\left.\frac{\mathrm{d}h(\alpha)}{\mathrm{d}\alpha}\right|_{\alpha=\alpha_i} \tag{41}$$

である。方程式 $h(\alpha)=0$ の解が $\alpha=\alpha_0$ の1つだけであれば,

$$\delta(h(\alpha))=\frac{1}{|h'(\alpha_0)|}\delta(\alpha-\alpha_0) \tag{42}$$

となり, $h(\alpha)$ が α の1次関数 $h(\alpha)=b\alpha+c$ (c は定数)であれば, $\alpha_0=-c/b$ および $|h'(\alpha_0)|=|b|$ となるから,

$$\delta(b\alpha+c)=\frac{1}{|b|}\delta\left(\alpha+\frac{c}{b}\right) \tag{43}$$

である。さらに, $h(\alpha)=b\alpha$ (つまり, $c=0$)のとき,式(39)

$$\delta(b\alpha)=\frac{1}{|b|}\delta(\alpha) \tag{44}$$

が成り立つ。

式(38)を3成分に分けて表記すると,

$$|A|^2(2\pi)^3\delta\left(\frac{p_x-p'_x}{\hbar}\right)\delta\left(\frac{p_y-p'_y}{\hbar}\right)\delta\left(\frac{p_z-p'_z}{\hbar}\right)=\delta(p_x-p'_x)\delta(p_y-p'_y)\delta(p_z-p'_z) \tag{45}$$

となる。まず,x 成分について考え,式(39)において,

$$\alpha=p_x-p'_x \tag{46}$$

$$b=\frac{1}{\hbar} \tag{47}$$

とすると,

$$\delta\left(\frac{p_x-p'_x}{\hbar}\right)=\hbar\delta(p_x-p'_x) \tag{48}$$

が成り立つ。y および z 成分についても同様の関係が成り立つから，まとめると，

$$\delta\left(\frac{\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}}{\hbar}\right)=\hbar^3\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}) \tag{49}$$

が得られ，式(49)を式(38)に代入すると，

$$|A|^2\,(2\pi\hbar)^3\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')=\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \tag{50}$$

つまり，

$$|A|^2\,(2\pi\hbar)^3=1 \tag{51}$$

となり，規格化定数として

$$A=(2\pi\hbar)^{-3/2}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \tag{52}$$

が得られる[1]。したがって，運動量固有値 $\boldsymbol{p}$ をもつ規格化された運動量固有関数は

$$\boxed{u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}} \tag{53}$$

となる[2]。

多くのテキストで，式(53)を「規格化されている」と表現しているが，式(53)を「規格化された固有関数」と呼ぶことを疑問視する立場もある。それは，ポテンシャルの束縛を受けず運動量が規定された自由な粒子(平面波)は全空間に広がっており，振幅が有限である限り，結果的にエネルギーが無限大になるから，そのようなものは存在せず(あるいは，観測できない)，規格化することはできない，という論理である。この点について，R. L. White, *Basic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1996 (菅野卓雄，多田邦雄，神谷武志 訳「基礎量子力学」(丸善，1977年(第2刷))は式(53)を正規化と呼び，平面波の実在性について p. 122で次のように述べている。

- -

実在の電磁波がすべての方向に無限に振幅が0にならずに広がらないのと同じく，実現可能の状態関数が全空間にわたりある程度の振幅をもっていることはない。運動量固有関数と無限の平面波は理想化された概念の極限的な場合であって，多くの解析的な目的に対して非常に役立つが本当に実現可能な状態ではない。

- -

§4 運動量固有関数(基底関数)による展開

任意の状態関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ を前節で規格化した運動量固有関数 $u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ で展開してみよう。展開式である式(22)に式(53)を適用すると，

---

[1] 厳密には，$A=(2\pi\hbar)^{-3/2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$ (θ は位相)であるが，通常，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}=1$ (Condon−Shortley の位相条件)とする。

[2] 本書第2版第5刷以前に記していた式(37)～(41)は，一般性を欠いた正しくない記述でしたので削除しました。お詫びして訂正いたします。

$$\varphi(\boldsymbol{p})=\int u_{\boldsymbol{p}}^{*}(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\psi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{e}^{(-\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{54}$$

となる。これで，めでたく連続固有値関数で展開する際の係数を与える式が得られたので，本節を終了してもよいが(笑)，式(54)の第3式をよく眺めると Fourier 変換に似た部分があることに気付く。ある関数 $f(\alpha)$ の Fourier 変換は

$$F(\beta)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(\alpha)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\beta}\mathrm{d}\alpha \tag{55}$$

であり[1]，逆に $F(\beta)$ から $f(\alpha)$ を得る逆 Fourier 変換は，

$$f(\alpha)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}F(\beta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\beta}\mathrm{d}\beta \tag{56}$$

である(式(55), (56)はいずれも1次元の変数についての式であることに注意)。なお，変数 α と β の次元は互いに逆数の関係にあるから積 $\alpha\beta$ は無次元であるが，積 $\alpha\beta$ は単位として rad を有している[2]。上記の式(55), (56)の場合，α が単位 z をもつとすると，β が単位 $\mathrm{rad}\cdot\mathrm{z}^{-1}$ をもつ場合に対応する。逆に，α が単位 $\mathrm{rad}\cdot\mathrm{z}^{-1}$ をもち，β が単位 z をもつ場合は，式(55)の右辺に $1/2\pi$ が付き，式(56)には $1/2\pi$ が付かない。また，rad が α または β のいずれかに付かなければならないということはなく，rad を α と β で分け合って，α が単位 $\mathrm{rad}^{1/2}\cdot\mathrm{z}$，$\beta$ が単位 $\mathrm{rad}^{1/2}\cdot\mathrm{z}^{-1}$ としてもよい。この場合，式(55)と式(56)両方の右辺に $1/\sqrt{2\pi}$ が付く。なお，式(56)は1次元(1変数)の表記であるが，3次元の変数の場合には，

$$f(\alpha)=\frac{1}{(2\pi)^{3}}\int_{-\infty}^{+\infty}F(\beta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\beta}\mathrm{d}\beta \tag{57}$$

となる。

運動量固有関数で展開した式(54)は式(57)にかなり形が似ており，変数間に

$$f(\alpha)\longleftrightarrow\varphi(\boldsymbol{p}) \tag{58}$$

$$\beta\longleftrightarrow\boldsymbol{r} \tag{59}$$

$$\alpha\longleftrightarrow\frac{\boldsymbol{p}}{\hbar}=\boldsymbol{k} \tag{60}$$

という対応関係がある。式(60)に記した $\boldsymbol{k}$ は波数ベクトルと呼ばれる量であり，

$$\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k} \tag{61}$$

の関係から，式(54)は

[1] Fourier 変換は積分変換の一種であり，積分中の $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\beta}$ の部分を Kernel(積分核)と呼ぶ。Kernel によっていろいろな変換が存在し，Kernel が $\mathrm{e}^{-\alpha\beta}$ の場合は Laplace 変換，$\beta^{\alpha-1}$ の場合は Mellin 変換と呼ばれる。

[2] $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\beta}=\cos(\alpha\beta)+\mathrm{i}\sin(\alpha\beta)$ であるから $\alpha\beta$ は rad の単位を有する。

$$\varphi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\boldsymbol{r})\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{62}$$

となる。de Broglie 波長の式

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p} \tag{63}$$

より，

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{64}$$

となるから，rad の単位は $\boldsymbol{k}$ に含まれている(したがって，r は m, k は $\mathrm{rad}\cdot\mathrm{m}^{-1}$ である[1])。式(62)を式(57)と同じ形に変形すると，

$$\varphi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^{3/2} \psi(\boldsymbol{r})\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{65}$$

となるから，

$$F(\beta) \longleftrightarrow \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^{3/2} \psi(\boldsymbol{r}) \tag{66}$$

という対応が得られる。式(58)～(60)および式(66)の対応関係を式(55)に適用すると，

$$\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^{3/2} \psi(\boldsymbol{r}) = \int \varphi(\boldsymbol{p})\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{d}\boldsymbol{k} \tag{67}$$

となり，定数を右辺に移行して

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \int \left(\frac{\hbar}{2\pi}\right)^{3/2} \varphi(\boldsymbol{p})\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{d}\boldsymbol{k} \tag{68}$$

を得る。これまでの経緯からわかるように，式(65)と式(68)は互いに Fourier 変換の関係にある。式(65)は式(54)を変形して得られた式であるから，式(54)と式(68)も互いに Fourier 変換の関係にある。式(68)を $\boldsymbol{k}$ による積分から $\boldsymbol{p}$ による積分の形に変えるには，$\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{p}$ が3次元の変数であることに注意して，

$$\mathrm{d}\boldsymbol{k} = \mathrm{d}k_x \mathrm{d}k_y \mathrm{d}k_z = \frac{\mathrm{d}p_x}{\hbar}\frac{\mathrm{d}p_y}{\hbar}\frac{\mathrm{d}p_z}{\hbar} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\hbar^3} \tag{69}$$

を式(68)に適用すると，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi(\boldsymbol{p})\, \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{d}\boldsymbol{p} \tag{70}$$

が得られる。したがって，式(54)と式(70)が互いに Fourier 変換の関係にあることになる。

---

[1] ここの r および k は1次元分を考えている。

ここまで，通常の Fourier 変換の表記にならって[1]，$\boldsymbol{r}$ で表す(座標空間での)状態関数は $\psi(\boldsymbol{r})$，$\boldsymbol{p}$ で表す(運動量空間での)状態関数は $\varphi(\boldsymbol{p})$ で表してきたが，$\psi(\boldsymbol{r})$ も $\varphi(\boldsymbol{p})$ も対象としている状態は同じものであり，表現する変数(座標)が異なるだけである。別の表現をすれば，状態ベクトル $|\psi\rangle$ を記述するのに位置演算子[2] $\hat{\boldsymbol{r}}$ の固有ベクトル(位置固有ベクトル) $|\boldsymbol{r}\rangle$ との内積をとったものを $\psi(\boldsymbol{r})$，つまり，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r} | \psi \rangle \tag{71}$$

と表し，同じ状態ベクトル $|\psi\rangle$ を記述するのに運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ の固有ベクトル(運動量固有ベクトル) $|\boldsymbol{p}\rangle$ との内積をとったものを $\varphi(\boldsymbol{p})$

$$\varphi(\boldsymbol{p}) = \langle \boldsymbol{p} | \psi \rangle \tag{72}$$

で表しているが[3]，(ψ と φ という風に)異なる文字を用いるとかえって意味が伝わりづらい(のではないだろうか)。したがって，ここでは(状態ベクトルが同じ $|\psi\rangle$ であることを忘れないために) $\varphi(\boldsymbol{p})$ ではなく $\psi(\boldsymbol{p})$ と書くことにする(ただし，$\psi(\boldsymbol{r})$ の中の文字 $\boldsymbol{r}$ を単に $\boldsymbol{p}$ に置き換えたものが $\psi(\boldsymbol{p})$ ではないという点に注意する必要がある)。以上の結果から，ある状態 $|\psi\rangle$ を $\boldsymbol{r}$ を変数として表した $\psi(\boldsymbol{r})$ と $\boldsymbol{p}$ を変数として表した $\psi(\boldsymbol{p})$ は，お互いに，次式で表される Fourier 変換の関係にあることがわかった。

$$\begin{cases} \psi(\boldsymbol{r}) = \dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \displaystyle\int \psi(\boldsymbol{p})\, \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{d}\boldsymbol{p} & \text{(座標表示[4](} \boldsymbol{r} \text{ -表示))} \quad (73) \\[2ex] \psi(\boldsymbol{p}) = \dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \displaystyle\int \psi(\boldsymbol{r})\, \mathrm{e}^{(-\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{d}\boldsymbol{r} & \text{(運動量表示(} \boldsymbol{p} \text{ -表示))} \quad (74) \end{cases}$$

式(73)と式(74)をブラ・ケットを用いた表記に対応させると，

$$\begin{cases} \psi(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r} | \psi \rangle = \displaystyle\int \langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{p} \rangle \langle \boldsymbol{p} | \psi \rangle \, \mathrm{d}\boldsymbol{p} = \int \langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{p} \rangle \psi(\boldsymbol{p}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{p} & (75) \\[2ex] \psi(\boldsymbol{p}) = \langle \boldsymbol{p} | \psi \rangle = \displaystyle\int \langle \boldsymbol{p} | \boldsymbol{r} \rangle \langle \boldsymbol{r} | \psi \rangle \, \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int \langle \boldsymbol{p} | \boldsymbol{r} \rangle \psi(\boldsymbol{r}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{r} & (76) \end{cases}$$

となり，式(53)で示した運動量固有関数 $u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ は $\boldsymbol{r}$-表示の運動量固有関数 $\langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{p} \rangle$ であり，

$$\langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{p} \rangle = u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{77}$$

であることがわかる。当然ながら，式(77)は $\boldsymbol{r}$-表示の運動量演算子 $-\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{r})$ の固有値 $\boldsymbol{p}$ をも

---

[1] 変数ごとに関数を表す文字を変えるという意味。たとえば，多くのテキストで $f(t)$ と $F(\omega)$ のような表記が多い。

[2] 座標演算子とも呼ばれる。

[3] 別の表現をすれば，$\psi(\boldsymbol{r})$ は状態ベクトル $|\psi\rangle$ を位置固有ベクトル $|\boldsymbol{r}\rangle$ で展開した場合の展開係数であり，$\psi(\boldsymbol{p})$ は状態ベクトル $|\psi\rangle$ を運動量固有ベクトル $|\boldsymbol{p}\rangle$ での展開した場合の展開係数である。したがって，$|\psi\rangle = \int \psi(\boldsymbol{r}) |\boldsymbol{r}\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int \psi(\boldsymbol{p}) |\boldsymbol{p}\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{p}$ である。

[4] 演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ は位置演算子と呼ばれることが多いが，$\boldsymbol{r}$-表示(あるいは x-表示)は位置表示よりも座標表示と呼ばれることの方が多い(ようである)。

つ固有関数である。一方，$\langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{r}\rangle$ は $\boldsymbol{p}$-表示の位置固有関数であり，

$$\langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{r}\rangle = \langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle^* = u_{\boldsymbol{r}}(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{(-\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{78}$$

となる。$u_{\boldsymbol{r}}(\boldsymbol{p})$ は $\boldsymbol{p}$-表示の位置演算子 $\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p})$ の固有値 $\boldsymbol{r}$ をもつ固有関数である。

§5 運動量固有関数の広がり

状態関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ が固有関数自身，つまり，特定の固有状態である場合を考えよう。運動量固有関数は式(53)で与えられるから，特定の固有状態として，運動量 $\boldsymbol{p}$ が確定値 $\boldsymbol{p}_0$ である場合を考える。したがって，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = u_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r}} \tag{79}$$

となる。この状態関数の(座標空間での)確率密度は

$$\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{(-\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \tag{80}$$

であるから，座標 $\boldsymbol{r}$ に関係なく一定値となる(系が見出される確率が一定値で無限に広がっている)。言い換えると，座標空間での不確定さは $\Delta\boldsymbol{r} = \infty$ である。次に，運動量空間での状態関数 $\psi(\boldsymbol{p})$ を得るために，式(79)を式(74)に代入すると，

$$\psi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)(\boldsymbol{p}_0-\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{81}$$

となるが，式(35)を適用すると，

$$\psi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi)^3 \delta\left(\frac{\boldsymbol{p}_0-\boldsymbol{p}}{\hbar}\right) = \frac{1}{\hbar^3} \delta\left(\frac{\boldsymbol{p}_0-\boldsymbol{p}}{\hbar}\right) \tag{82}$$

が得られる。さらに，式(49)を適用すると，

$$\psi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{\hbar^3} \delta\left(\frac{\boldsymbol{p}_0-\boldsymbol{p}}{\hbar}\right) = \frac{1}{\hbar^3} \hbar^3 \delta(\boldsymbol{p}_0-\boldsymbol{p}) = \delta(\boldsymbol{p}_0-\boldsymbol{p}) \tag{83}$$

となる。これは，運動量空間において系が見出される確率が $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}_0$ の1点のみにあることを意味し，運動量空間での不確定さはなく $\Delta\boldsymbol{p} = 0$ である。$\psi(\boldsymbol{r})$ と $\psi(\boldsymbol{p})$ の不確定さの関係は量子力学の不確定性原理

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \tag{84}$$

に対応している。上記の場合とは逆に，座標空間の $\boldsymbol{r}_0$ でのみ見出される($\boldsymbol{r}$ が確定値 $\boldsymbol{r}_0$ をもつ($\Delta\boldsymbol{r} = 0$))状態関数 $\psi(\boldsymbol{r}) = \delta(\boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{r})$ を考え，これを式(74)に代入すると，

$$\psi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \mathrm{e}^{(-\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \delta(\boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{(-\mathrm{i}/\hbar)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}_0} \tag{85}$$

が得られ，運動量空間での確率密度が

$$\psi^*(\boldsymbol{p})\psi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \tag{86}$$

となり，運動量 $\boldsymbol{p}$ に無関係に一定値，つまり，完全一様分布($\Delta \boldsymbol{p} = \infty$)となる。

謝辞

原稿を慎重にお読みいただき貴重な意見をいただいた，西村綾華 氏と梅本宏信 氏に深く感謝いたします。

連続固有値関数の規格化と
Fourier 変換

1991年 6月 9日 初版第1刷
2017年10月 6日 第2版第5刷
2019年 1月 2日 第3版第1刷

著者 山﨑 勝義
発行 漁火書店

検印 山﨑

印刷 ブルーコピー
製本 ホッチキス