

量子力学

石川健三

平成 27 年 1 月 21 日

序

物質のミクロな世界における理解は、19世紀末より急速に進展した。新たな実験によってわかった原子や分子の振る舞いの記述や理解には、マクロな世界で使われる古典力学や電磁気学とは質的に異なる新たな物理学の体系が必要であることが明らかになった。その後、様々な実験、理論的発展、さらに多くの応用がなされ、量子力学の体系が形成された。量子力学は、ミクロな世界の物質や物体の運動、変化、構造等にかかわる体系であり、現代物理学の重要な柱の一つとなっている。ミクロな世界のすべての現象は、量子力学に基礎を置いて理解される。量子力学は、基礎科学として重要な位置を占めるだけでなく、様々な科学の応用や技術の展開に必須な分野である。さらに近年、量子論はマクロな世界でも、重要な働きをしていることが分かってきた。

量子力学の基本は、20世紀前半、プランク、アインシュタイン、ボーア、ディラック、シュレーディンガー、ハイゼンベルグ、ドブroy、等の先人たちによって発展した。量子論完成への道は、単純ではなく、右余曲折を経て現在の形に至った。その結果量子力学は、古典力学以上にすっきりした論理体系となり数学的にもきっちりと構成されて現在に至っている。しかしながら、基本的な運動法則と観測・測定、並びに物理量との関係は、直接的ではなく、確率を含む複雑な様相を呈する。これらに関しては、今まで曖昧にしてきた問題点が、科学・技術や測定方法の大幅な進歩によってきっちりと詰めれる状況になりつつある。このため、量子力学に特徴的な複素数を生かした応用や原子・分子等についての新たな理解や応用等の質的に新しい発展が現在期待されている。

量子力学の体系は、複素ベクトル空間で記述される。物体の位置が、基本の方程式に現れる古典力学とは異なり、物理状態を表す複素ベクトルが、複素数を含む基本方程式を満たす。方程式は、波動方程式であり解は重ね合わせの原理を満たす。本書では、量子力学の説明を、簡単な問題から始め徐々に複雑な系に進む。座標1次元の物理系の波動方程式を手始めに、徐々に高次元座標系や複雑な物理系を取り上げる。代表的な物理系に、調和振動子と水素原子がある。いずれも、解析的な方法を適用して方程式の解を求めることができ、関連する物理現象は数多い。このため、調和振動子と水素原子の諸問題を十分掘り下げ、調べておくことは、大変有益である。これらの方法は、また他の問題の解法や、量子力学の特徴を理解するのに役立つ。

ミクロな世界の物理系の測定は、電磁場による実験でなされることが多い。これは、電荷や電流と電磁場が、同じ形の普遍的な相互作用をする事実に基づいている。この性質があるので、電子は、いかなる状態にあっても電磁場とは同じ形で相互作用する。だから、電

子を使い電場や磁場の情報を得ることや、逆に電磁波を使い電子の情報を得ることができる。このためには、” 磁場中にある荷電粒子 ”の量子力学、また様々な近似法、特に摂動論を理解しなければならない。摂動論の説明は、本書では詳しくなされる。また、他の近似法である準古典近似 (WKB 法) や、変分法についても調べる。これらの考察から、量子力学と古典力学との相違点も明らかになるであろう。

また、散乱問題や、多体問題は、量子力学を使い展開する諸問題の例である。これらを、学部中に十分使いこなせるようになれば、大変結構であるが、現状ではなかなか時間的に難しいかもしれない。大学院になってからでもよいから、これらの基本的な事柄については、十分把握しておくことが必要であろう。最後の章では、量子力学の新しい観点から発展しつつある問題である ”観測と量子情報 ”を取り上げる。もしも物理状態を表わす複素数の波が、直接観測にかかることになれば、計算や情報に使えるかもしれない。その場合、量子力学の新たな応用の道が開けることになる。これは、困難なことであるが、将来可能になるかもしれない。

本書の第 2 章で、量子力学の論理構造を明確に整理した。量子力学は、重ね合わせの原理、確率原理、正準交換関係、シュレーディンガー方程式を柱として、定式化されている。この点を、この第 2 章で、詳しくのべた。数学的な記述が多く具体的でないので、少し戸惑うかもしれない。第 3 章以下では、量子力学を具体的な物理系に適用して、それらの物理系の性質を明らかにしている。そのため、第 3 章以下を学んだ後で、第 2 章を復習するのも、有益であろう。

本書では、波動関数の波としての性質が強調されている。これは、波動としての量子物理に今まで無視されてきた効果があり、新たな展開が予想されることによる。有限な大きさをもつ波束は、波動状態でありながら粒子状態を表現するため、不確定性関係の分かり易い説明に使われてきた。波束について今まで以上の丁寧な議論を加え、さらに、波の特徴をホイゲンズの原理で示した。これらの議論については、いままでの教科書よりも丁寧に説明した。

目次

序	i
第1章 量子力学への道	1
1.1 古典力学との矛盾	1
1.2 光	1
1.2.1 黒体輻射	1
1.2.2 光電効果	3
1.3 電子	4
1.3.1 干渉	4
1.3.2 2重スリットの実験	5
1.3.3 定在波：原子から放射される光の線スペクトル	7
1.3.4 ドブロイ波	8
1.4 量子力学	9
1.5 自然の成り立ち	10
1.5.1 原子	10
1.5.2 金属と絶縁体	11
1.5.3 半導体	12
1.5.4 原子核	12
1.5.5 素粒子	13
1.5.6 宇宙	14
1.6 問題	15
第2章 量子力学の体系	17
2.1 重ね合せの原理	18
2.1.1 複素ベクトル空間	18
2.1.2 ブラ・ケット	21
2.1.3 演算子	23
2.1.4 線形演算子	23
2.2 観測量と確率	28
2.2.1 量子力学の第一原理	28

2.2.2	確率密度と確率の流れ、演算子の期待値	29
2.2.3	散乱振幅	30
2.2.4	密度行列	30
2.3	正準交換関係	31
2.3.1	量子力学の第2原理	31
2.3.2	交換関係	32
2.3.3	ディラックのデルタ関数	34
2.3.4	座標表示における運動量演算子	35
2.3.5	有限領域	36
2.3.6	多変数	37
2.4	シュレーディンガー方程式	37
2.4.1	量子力学の第3原理	37
2.4.2	運動方程式	39
2.4.3	シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示	40
2.4.4	定常状態	40
2.4.5	保存量	41
2.4.6	ネーターの定理と保存量	44
2.5	問題	45
第3章	一次元運動	53
3.1	平面波	54
3.1.1	進行波	55
3.1.2	定在波	56
3.2	波束	61
3.2.1	最小波束	61
3.2.2	不確定性関係	63
3.2.3	一般の波束	65
3.3	箱型ポテンシャルによる束縛状態	65
3.3.1	束縛状態	67
3.3.2	束縛状態のエネルギー	69
3.4	箱型ポテンシャルによる散乱状態	69
3.4.1	散乱状態	70
3.4.2	散乱確率：透過率と反射率	72
3.5	ポテンシャル中の運動	73
3.5.1	ポテンシャル1	73
3.5.2	ポテンシャル2	75
3.6	波束の散乱	76

3.6.1	箱形ポテンシャル	76
3.6.2	一定のポテンシャル	77
3.6.3	ポテンシャルの山	78
3.6.4	一様な加速	79
3.7	束縛状態のまとめ	80
3.8	問題	81
第4章	調和振動子	85
4.1	定常状態	85
4.2	微分方程式の解法：エルミート多項式	87
4.2.1	漸近形	87
4.2.2	エルミート多項式	88
4.3	生成・消滅演算子	90
4.3.1	生成・消滅演算子	90
4.3.2	零点エネルギー	92
4.4	行列要素	92
4.5	コヒーレント状態	93
4.5.1	消滅演算子 a の固有状態	93
4.5.2	ハウスドルフ公式	94
4.5.3	規格化定数：ハウスドルフ公式の応用	95
4.6	多次元調和振動子	97
4.6.1	変数分離	97
4.6.2	エネルギーの縮退	97
4.7	一定の力	98
4.7.1	線形ポテンシャル	98
4.7.2	なめらかに変化する力	100
4.8	問題	100
第5章	三次元運動	105
5.1	自由粒子	107
5.1.1	平面波	108
5.1.2	ホイゲンスの原理	109
5.1.3	重ねあわせの原理と干渉	112
5.1.4	重ねあわせの原理と粒子の軌道（軌跡）の観測	113
5.2	球座標	114
5.2.1	球座標での変数分離	114
5.2.2	波動関数の規格化	115
5.3	動径波動関数	115

5.3.1	原点近傍	116
5.3.2	漸近形	117
5.3.3	自由球面波	119
5.3.4	固有値方程式	120
5.4	球形ポテンシャル中の束縛状態	120
5.5	動径座標についての方程式	123
5.5.1	球対称調和振動子の基底状態	123
5.5.2	水素原子の基底状態	124
5.6	角運動量	126
5.6.1	角運動量	126
5.6.2	角運動量の行列表現	127
5.6.3	球座標による角運動量状態	132
5.6.4	Legendre 微分方程式	135
5.6.5	角運動量ハミルトニアン	135
5.7	スピン角運動量	136
5.8	角運動量の合成	137
5.8.1	角運動量状態の直積	137
5.8.2	全角運動量 $l_1 + l_2$ の状態	138
5.8.3	全角運動量が $l_1 + l_2$ より小さい状態	140
5.8.4	縮退度	141
5.8.5	スピンと軌道角運動量の合成	141
5.9	座標軸の回転と角運動量	143
5.9.1	3軸回りの有限回転	143
5.9.2	オイラー角	144
5.10	問題	144
第6章	水素原子	149
6.1	2体問題	149
6.2	水素原子のレンツベクトル	151
6.2.1	レンツベクトル	151
6.2.2	スペクトルの代数的決定	153
6.3	水素原子の定常状態：エネルギー固有値と固有状態	153
6.3.1	固有値と固有関数	156
6.4	保存則と固有状態の量子数	160
6.4.1	回転と空間反転	161
6.4.2	レンツベクトル	161
6.4.3	$n \rightarrow \infty$ での固有状態	161

6.4.4	分配和	161
6.5	正エネルギー解	162
6.6	放物線座標での固有状態	162
6.7	まとめ	167
6.7.1	古典力学	167
6.7.2	量子力学	168
6.8	問題	169
6.8.1	解	171
第7章	電磁場中の荷電粒子の運動	179
7.1	荷電粒子のラグランジアン	179
7.1.1	荷電粒子のシュレーディンガー方程式	180
7.1.2	確率の密度と流れ	181
7.2	一様磁場中の2次元電子：ランダウ準位	181
7.3	ランダウ準位	183
7.4	一様磁場中の三次元電子	184
7.5	ゲージ不変性	185
7.6	電磁波と電子の相互作用	186
7.7	問題	187
第8章	摂動論	191
8.1	近似法	191
8.2	摂動論	191
8.3	2 × 2 行列の対角化	192
8.3.1	厳密な対角化	192
8.3.2	弱結合展開	195
8.3.3	強結合展開	195
8.4	無限次元ハミルトニアンの対角化：不連続スペクトル	197
8.5	展開の各次数の方程式	198
8.5.1	ϵ^0	198
8.5.2	ϵ^1 のオーダー	198
8.5.3	ϵ^2 のオーダー	200
8.6	非調和振動子	201
8.7	無限次元ハミルトニアンの対角化：連続スペクトル	201
8.7.1	グリーン関数	203
8.8	縮退のある場合の摂動論	204
8.9	一様電場中の束縛状態	206
8.9.1	空間反転対称性：縮退なし	206

8.9.2	攝動エネルギー	207
8.9.3	水素原子：縮退あり	208
8.10	時間に依存する攝動論	209
8.10.1	周期的変化	212
8.10.2	ゆっくりした変化（断熱変化）	213
8.10.3	短時間近似	216
8.11	遷移確率	217
8.12	問題	219
第9章	準古典近似（WKB法）	223
9.1	プランク定数での展開	224
9.2	古典極限	225
9.3	古典極限と初期条件や境界条件	226
9.3.1	存在確率と滞在時間	226
9.3.2	古典軌道	226
9.3.3	干渉	227
9.4	トンネル効果と境界条件	228
9.5	束縛状態とボーア・ゾンマーフェルト量子化条件	229
9.5.1	大きな質量	230
9.6	三次元球対称な場合	230
9.7	問題	231
第10章	変分法	233
10.1	変分	233
10.2	変分	235
10.3	問題	235
第11章	散乱問題	237
11.1	正エネルギーの連続固有値	237
11.2	散乱状態の波動関数：部分波展開	239
11.2.1	散乱状態の波動関数の計算例	239
11.3	散乱振幅と断面積	240
11.3.1	確率の流れ	240
11.3.2	断面積	241
11.4	リップマン・シュウインガー積分方程式	242
11.4.1	逐次近似法	243
11.4.2	グリーン関数のフーリエ表示	244
11.4.3	様々なグリーン関数	245

11.5	散乱振幅の近似計算	250
11.5.1	WKB 近似	250
11.5.2	Born 近似	251
11.6	球形ポテンシャルによる散乱	252
11.7	クーロンポテンシャルによる散乱	254
11.7.1	球座標による正エネルギー解	254
11.7.2	放物線座標におけるシュレーディンガー方程式	255
11.8	散乱振幅と束縛状態	259
11.9	散乱振幅の解析性	261
第 12 章	非定常状態と波束	263
12.1	自由な波束	263
12.1.1	波束の形、運動と散乱	264
12.1.2	波束の形	264
12.1.3	波束の運動	265
12.2	波束の大きさ	266
12.2.1	光	266
12.2.2	電子	270
12.2.3	他の素粒子	270
12.3	mass singularity:infrared divergence	271
12.3.1	波束の効果が有意か	273
12.3.2	波束と有限温度	273
12.4	波束の散乱	273
12.5	波束とエネルギー・運動量保存則	274
12.5.1	位置、運動量、位相	275
12.5.2	波束粒子の光の放出	277
12.5.3	波束による入射波と散乱波	279
12.5.4	波束による散乱振幅と運動エネルギー保存	279
12.6	有限距離における散乱振幅と黄金律の補正	279
12.6.1	有限サイズ効果と EPR 長距離相関	280
12.7	問題	280
第 13 章	同種粒子の多体問題	283
13.0.1	電子のスピン	284
13.1	フェルミ統計に従う電子と多電子原子の波動関数	285
13.2	ヘリウム	286
13.3	多電子原子	287
13.3.1	多電子原子のハミルトニアン	287

13.3.2	電子間相互作用 = 0	288
13.4	相互作用と近似法	289
13.5	ハートリー・フォック近似	289
13.6	トーマス・フェルミ近似	290
13.7	スピンの効果	291
13.8	メンデレーエフの周期律表	292
13.9	フンド則	293
13.10	電子ガスと凝集力	294
13.11	ボース統計に従う光子と黒体輻射	296
13.12	場の量子化	297
13.13	問題	297
13.14	問題	300
第 14 章 付録		303
14.1	B : 一般曲線直交座標におけるベクトル解析	303
14.1.1	ベクトルの微分	303
14.1.2	デカルト座標	303
14.1.3	場についての積分定理	305
14.1.4	球座標	309
14.1.5	円柱座標	313
14.1.6	放物線座標	314
14.1.7	一般の直交曲線座標	316
14.1.8	スケール因子	317
14.2	付録 C : エルミート行列の対角化と 2 次形式の標準形	317
14.2.1	行列の固有値問題	317
14.2.2	2 次形式の標準形	319
14.2.3	二つの行列の同時固有値問題	319
14.3	D 特殊関数	320
14.3.1	ガンマ関数	320
14.3.2	Legendre の微分方程式と Legendre 多項式	321
14.3.3	Hermite の微分方程式と Hermite 多項式	322
14.3.4	ベッセル関数	326
14.3.5	Airy 関数	327
14.3.6	超幾何関数	327
14.3.7	合流型超幾何関数	328
14.3.8	Laguerre 多項式	328
14.4	E フーリエ級数とフーリエ展開	328

14.5	F グリーン関数	329
14.6	G 複素関数論	329
14.7	クラスター展開	330
14.8	参考文献	331
14.9	テスト	331
14.9.1	中間テスト 1 : 3次元運動	332
14.9.2	量子力学期末テスト	333
14.9.3	量子力学期末テスト(再追)	335

第1章 量子力学への道

1.1 古典力学との矛盾

質点や有限な大きさを持つ物体の運動を明らかにする古典力学は、マクロな世界で成立しているが、分子、原子、原子核、電子、素粒子の世界であるミクロな世界の記述には適さない。ミクロな世界では、原子間隔のような微小なスケールの位置を測定する物差しは存在しないので、位置の時間的な発展を追うことはできない。一方で、ミクロな世界では、古典物理学では考えられない新しい様々な現象が起きている事がわかった。その説明には、古典力学にはない新しい概念と数学が必要となった。

歴史的に、ミクロな世界の特異な現象として、黒体輻射の光の分布関数、光電効果、原子の安定性と線スペクトルの存在、等がまず見つかった。これらの説明には、黒体輻射でプランクが導入した量子仮説、光電効果について量子の考えを拡張したアインシュタインの光量子、原子の安定性や線スペクトルで量子の考えを電子に使ったボーアの量子条件、等の新たな量子概念が使われた。量子の考えを、初めプランクが光に適用し、次にアインシュタインが光と電子の相互作用に適用し、最後にボーアが原子の内部における電子に適用し、一見不可解に見える現象の説明がなされた。その後、ハイゼンベルグ、ディラック、シュレーディンガー等により量子力学が閉じた論理体型として定式化されると共に、量子力学によりミクロの世界の諸現象や、様々な物質の構成や性質が解明され、また新たな科学技術の世界が開かれた。プランクによる量子概念の導入から、量子力学の定式化まで、20世紀の初めのほぼ30年間になされた。量子力学が、古典力学に代りミクロな世界を記述する力学である。

1.2 光

1.2.1 黒体輻射

有限な温度で熱平衡にある物理系は、その系に含まれる各物理状態の全体で決る性質をもつ。例えば、ある温度 T で熱平衡にある輻射（電磁波）のスペクトルは、温度で決まる分布をもつ。この分布を知ることは重要である。黒く塗った壁で囲まれた箱の内部を温度 T に保つと、箱の内部に固有な分布の光が充満する。箱から放射されるこの光を観測すると、黒体の壁と熱平衡にある内部の光の分布が分かる。光の分布は、光のミクロな性質を反映している。

黒体輻射の測定から、低温での高振動数領域における光の分布関数は、Wien の放射式

$$P(T, \nu) = \left(\frac{8\pi\alpha\nu^3}{c^3}\right)e^{-\frac{\beta\nu}{T}} \quad (1.1)$$

に従い、高温では低振動数領域における分布関数は Rayleigh-Jeans の放射式

$$P(T, \nu) = \left(\frac{8\pi\nu^2}{c^3}\right)kT \quad (1.2)$$

に従うことが分かった。低温で高振動数における分布は、有限温度 T においてエネルギー E を持つ状態の存在確率を表すボルツマン分布

$$P(T, E) = e^{-\frac{E}{kT}} \quad (1.3)$$

を思い出させる。

プランクは、Wien の放射式と Rayleigh-Jeans の放射式を統一的に表す低振動数領域から高振動数領域まで成立する公式として、プランクの放射式、

$$P(T, \nu) = \left(\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\right)\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (1.4)$$

を得た。式 (1.4) は、単純なボルツマン分布とは異なる形であり、また、作用の次元を持つ新たな物理定数 h が含まれている。この物理定数 h は、プランクが導入したのでプランク定数と呼ばれている。実際、式 (1.4) で、 T を小さく ν を大きくすると、近似的に

$$e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \approx e^{\frac{h\nu}{kT}} \quad (1.5)$$

が成立する。これを代入して、式 (1.4) は

$$P(T, \nu) = \left(\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\right)e^{-\frac{h\nu}{kT}} \quad (1.6)$$

と Wien の放射式に一致する。また式 (1.4) で T を大きく ν を小さくすると、近似的に

$$e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \approx \frac{h\nu}{kT} \quad (1.7)$$

が成立する。これを代入して、式 (1.4) は

$$P(T, \nu) = \left(\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\right)\frac{kT}{h\nu} \quad (1.8)$$

と Rayleigh-Jeans の放射式に一致する

このようにして、プランクの放射式は、Wien の放射式と Rayleigh-Jeans の放射式を統一的に表している。

ところで、式 (1.4) は、一見、ボルツマン分布とは無関係である。しかし、等比級数の公式

$$x \sum_{n=0}^{n=\infty} x^n = \frac{x}{1-x} \quad (1.9)$$

で公比を

$$x = e^{-\frac{h\nu}{kT}} \quad (1.10)$$

とすると

$$\frac{x}{1-x} = \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (1.11)$$

となることが分かる。これより、プランクの放射式は有限温度におけるボルツマン分布

$$P = e^{-\frac{E_n}{kT}} \quad (1.12)$$

で、エネルギーがとびとびの値

$$E_n = h\nu n, n = \text{整数} \quad (1.13)$$

となる時に得られる式である。n は整数であり、光の個数を表している。古典電磁気学では、光は波であるため、光のエネルギーは波の振幅の自乗に比例し、振動数にはよらないはずである。しかし、上の結果は、古典電磁気学が示す光の性質とは大きく異なるものであり、ミクロな世界における光は、古典電磁気のものとは異なる事を示唆している。

1.2.2 光電効果

アインシュタインは、振動数 ν の一つの光は振動数に比例するエネルギー $h\nu$ を持つとして量子の考えを使い光電効果を初めて説明した。

光電効果とは、光が金属に照射されたとき、金属から電子が放射される現象であり、古典物理学では理解できない性質を示す。光の強度や、振動数を変化させたとき、放射される電子のエネルギーや総量がどのように変化するのが調べられた。その結果、電子のエネルギーは、光の強度によらず光の振動数で決まること、並びに、電子の総量は光の強度で決まることになった。電子のエネルギーと振動数の関係は、図のようである。

古典電磁気学では、光のエネルギーは光の振幅すなわち強度に比例して、振動数には無関係である。そのため、光電効果は、古典電磁気学が示す光のエネルギーが電子のエネルギーに変換されるものとは全く異なる事を示している。

これは以下のように考えるとつじつまがあう。

(1) ミクロなプロセスでは、光は振動数に比例するエネルギーを持つこと。

$$E_{\text{光}} = h\nu \quad (1.14)$$

(2) 放出電子のエネルギーと入射光のエネルギーの間には関係式

$$E_{\text{光}} = E_{\text{電子}} + E_0 \quad (1.15)$$

が成り立つこと。 E_0 は電子を金属内から外へ出すための光のエネルギーの最小の値であり、金属の種類によって異なる。 E_0 は、電子が金属内にあるときのエネルギーであり、金属内に閉じ込められてエネルギーが低くなっている。電子を、外に取出すためには、少なくともこのエネルギーを必要とする。

光のエネルギーが、振動数で決まるとする考えは、 N 個の光がエネルギー $h\nu N$ を持つとした、プランクの量子仮設の考えを光と電子の衝突に拡張したものである。光電効果では、一個の光のエネルギーが電子のエネルギーに変換される。この際、エネルギー保存則が成立している。このようにして、古典電磁気学で波である光が、ミクロな世界では、一個、二個、と個数を考えられる粒子的な性質を持つことが分かった。この粒子的な光を光子と呼ぶ。

黒体輻射や光電効果から、古典物理学では波である光は、ミクロな世界で粒子的な性質を持つことが分かった。この粒子性の定量的な値をきめるのは、新たな物理定数であるプランク定数 h である。

1.3 電子


1.3.1 干渉

マクロな世界で粒子として振る舞う電子は、ミクロな世界で古典力学では理解できない波の性質を示す。上に述べたように、電子のミクロな軌道を直接確かめる物差しは存在しない。しかし、電子の運動を間接的に確かめることは可能である。運動の結果引き起こされる現象を確かめればよい。その一つの方法は、電子の位置の時間変化を追う代わりに、電子がマクロな距離を運動した後で、おおきなスクリーンにあたる現象を調べることである。この際、電子がスクリーンに衝突するおおよその位置は、測定出来るようにしておく。

以下、小さな穴を通過するミクロな粒子の運動を考察し、次にこれを実際の実験と比較する。実験は、古典力学が示すものとは大きく異なることがわかる。


粒子の位置を $x(t)$ とすると、小さな穴を通過する初期条件を満たす電子の運動は、古典力学では一意的である。穴と、スリット、並びにスクリーン以外の場所では、粒子に力は働かないとみなせる。この場合の運動は、自由粒子のものであり、解は

$$x(t) = v_0 t + x_0 \quad (1.16)$$

で表される等速度運動である。時刻 $t = 0$ で x_0 にあった粒子は、必ずその延長線上にある。そのため、スクリーン上では、-2

のような粒子のスポットが、観測される。

1.3.2 2重スリットの実験

次に一つの穴の代りに、二つのスリットを通過する粒子の運動を考察する。のような2重スリットを通過するミクロな粒子の運動に対して、ニュートンの運動方程式を適用して、考察しよう。粒子が、2重スリットのどちらを通過したかがわかっている時は、対応する初

期条件を選んだ結果、単スリットの問題と同じになる。そのため、単スリットの結果を使えば良い。この場合には、スクリーン上で、のように二つの粒子スポットが観測されるは

ずである。

では、粒子が2重スリットのどちらを通過したか調べない時は、スクリーン上でどのように観測されるだろうか？古典力学に基づく場合では、上の場合と同じ結果となり、図4

で示されているように粒子が観測されることが期待される。しかしながら、パラメーターが適当である値の場合の実験では、図5のようなパターンが測定される。これは、上

の場合と全く異なる。この場合は、ニュートンの運動方程式による解析が使えない。スクリーン上には、良く知られた波の干渉と同じパターンが生ずる。例えば、単色光を2重スリットを通してスクリーンに映す場合のヤングの実験の結果とほぼ等しい。ヤングの実験では、行路差が波長の整数倍の場合には、光は強めあうが、行路差が、波長の半整数倍の場合には、光は弱めあい、殆んど見えなくなる。だから、粒子が2重スリットのどちらを通過したか調べない場合は、粒子は干渉を示し波のように振る舞う。干渉は、波の示す特性のひとつであるが、干渉の大きさは、波の波長によって大きく異なる。運動量 p をもつ粒子が示す波としての波長は、プランク定数から、

$$p = \hbar k, k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.17)$$

となることが、ド・ブロイにより見つかった。

この際、運動量と波数ベクトルが比例し、プランク定数が比例定数となっている。丁度、エネルギーと振動数がプランク定数を比例定数として、比例関係にあるのと同じ形となっている。波の干渉は、波の波長と2重スリットの間隔との相対的な大きさの比の値によりおきたり起きなかつたりする。波の波長がスリット間隔より遥かに小さい場合は、干渉は起きな

い。両者がほぼ等しい場合に、干渉が起きる。プランク定数は重要な物理定数の一つで現在、

$$h = 6.62660693(11) \times 10^{-34} JS \quad (1.18)$$

であることがわかっている。このようにして、古典物理学では粒子として扱われる電子が、波の特徴である干渉を示すことが分かった。この性質を特徴づけるのは、やはりプランク定数である。

1.3.3 定在波：原子から放射される光の線スペクトル

古典力学で、引力ポテンシャル中にある質点の運動は、正エネルギー解と負エネルギー解の2種類に分類される。正エネルギー解の運動では、粒子は無遠方まで到達するが、負エネルギー解の運動では、粒子は有限領域に束縛されている。ミクロな世界でも、二つの違いが存在する。前章のスリットを通過する粒子の問題は、正エネルギー解についてであった。次に負エネルギー解について考えよう。負エネルギー解は束縛状態に対応する。ミクロな世界の束縛状態は、マクロな物差しより小さい場合、粒子の位置を各時刻で直接測定することは出来ない。しかし、このような束縛状態である原子から、光が放射され、観測される。この光を測定することにより、ミクロな束縛状態についての有益な情報が得られた。アインシュタインの光電効果の理論は、振動数 ν の光が、ミクロな振動子とみなせエネルギー、

$$E = h\nu \quad (1.19)$$

をもつことを示す。粒子がエネルギー δE 失う際、このエネルギーが光に変換されれば、エネルギー保存法則から、出てくる光の振動数 ν は、

$$\delta E = h\nu \quad (1.20)$$

となるはずである。束縛状態から放射される光の振動数を測定することにより、粒子状態のエネルギーがわかる。ところで、実験は、図6のような線スペクトルが存在することを示し

た。さらに、線スペクトルは水素原子の場合では、

$$\delta E = c \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), n, m \text{ 整数} \quad (1.21)$$

のような簡単な関係式を満たしていた。これは、エネルギーが不連続になっていて、特別な値が実現していることを示唆している。束縛された波が、とびとびの振動数をもつことは、マクロな弦の振動等で頻繁に観測されることである。例えば、端が固定された長さ l の弦の振動では、端で変位が零になるように境界条件を満たすのは、波長 λ が

$$\lambda \times l = 2\pi N \quad (1.22)$$

を満たす場合だけである。境界条件を満たすとき、弦の振動を解く問題は、微分演算子の固有値を求める固有値問題と等価となる。原子内に束縛された電子の問題も、何らかの固有値問題となりそうである。エネルギーがとびとびの値をとることから、原子から放射される光に線スペクトルがでることが理解出来る。ミクロな世界における電子束縛状態でも、同じことが実現している。つまりマクロな世界の束縛状態では、電子が波のように振る舞う。

ボーアは、半古典的な方法で、断熱不変量が量子条件を満たすことを要請して、この事情を明らかにした。

1.3.4 ドブロイ波

ミクロな世界における波は、マクロの世界の波である電磁波や、水面波とは大きく異なる。

電磁波では電場や磁場が時間的に振動し、水面波では水面の高さが時間的に振動する。電場や磁場は、電荷や電流に働く力から直接決まる実数である。勿論、水面の変位は実数で表され、水面波は実数の変位が振動する波である。電磁波では、電場や磁場が時間や空間と共に振動しながら伝播する。

ところが、ミクロな世界では、位置の測定は出来ないの、力の測定も出来ない。古典的な意味での粒子の位置 $x(t)$ を使うことは不可能である。そのかわり、粒子の平均的な位置や、位置の分布は使える。ミクロな世界の波は、驚くことに複素数の波であり実数の波ではない。複素数の波の絶対値の二乗が、粒子の分布を与える。ミクロの世界では、複素数が登場する。位相空間における性質

$$\delta p \times \delta q = \hbar \quad (1.23)$$

はこれらの力学変数が、単純な実数ではなく、ある種の空間における演算子であると共に、関係式

$$[q, p] = i\hbar \quad (1.24)$$

を満たしている事を示唆している。ここで i は純虚数である。また、波の特徴は、その空間に二つの要素 u_1, u_2 があれば、必ずそれらの線形結合した別の要素 v もある事を示す重ねあわせの原理

$$v = z_1 u_1 + z_2 u_2 \quad (1.25)$$

が成り立つ事である。係数 z_1, z_2 が複素数であるとき、この空間を複素ベクトル空間と呼ぶ。ミクロな世界は、複素ベクトル空間で表現され、ミクロな物理状態は、複素ベクトルで表現される。

1.4 量子力学

ミクロな物理状態を表す複素ベクトルは、時間や空間座標の関数として表すとき、通常、複素波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ で表す。質量 m の粒子が、ポテンシャル $U(\mathbf{x})$ 中を運動する際に複素波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ が従う波動方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = H\psi(\mathbf{x}, t) \quad (1.26)$$

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{x}) \quad (1.27)$$

である。 H は古典力学で現れるハミルトニアンであるが、 \mathbf{p} と \mathbf{x} は単なる実数ではなく、交換関係を満たす演算子である。この式は、

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{i\omega t} \psi(\mathbf{x}) \quad (1.28)$$

と時間について振動形の波動関数では、

$$E = h\nu, \nu = \frac{\omega}{2\pi} \quad (1.29)$$

となり、アインシュタインの関係式と一致する。

交換関係を満たす一つの方法は、 \mathbf{x} を単なる実数として、 \mathbf{p} を

$$\mathbf{p} = -i\hbar \nabla \quad (1.30)$$

とおくことである。この時、交換関係 (2.109) を満たすことが分かる。さらに、波動関数を

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \psi(t) \quad (1.31)$$

と波数 \mathbf{k} をもつ平面波として、運動量演算子 \mathbf{p} をかけると

$$\mathbf{p}\psi(\mathbf{x}, t) = \hbar\mathbf{k}\psi(\mathbf{x}, t) \quad (1.32)$$

となり、運動量演算子 \mathbf{p} の固有値はドブロイの関係式に一致する。

次に、調和振動子では、

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \quad (1.33)$$

であり、波動方程式をとして

$$\psi(x, t) = e^{i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x), E = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}) \quad (1.34)$$

が得られ、プランクの公式に一致するとびとびのエネルギーが得られる事がわかる。

また、2重スリットでは、波動関数はそれぞれの波を重ねあわせた波

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_1(\mathbf{x}, t) + \psi_2(\mathbf{x}, t) \quad (1.35)$$

$$|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = |\psi_1(\mathbf{x}, t)|^2 + |\psi_2(\mathbf{x}, t)|^2 + 2\text{Re}(\psi_1(\mathbf{x}, t)^* \times \psi_2(\mathbf{x}, t)) \quad (1.36)$$

$$(1.37)$$

であり、波動関数の絶対値の2乗に比例する分布は干渉項をもつ事になる。これは、実験で見えている干渉を示す。

最後に、この方程式を水素原子の束縛状態に適用して、波動方程式の解を求め、エネルギーが

$$E = c\frac{1}{n^2}, n \text{ 整数} \quad (1.38)$$

と得られる。これは、水素原子から放射された光の線スペクトル (1.21) の結果と一致する。

このようにして、ミクロの世界の異常に見えたすべての結果が再現される。ミクロの世界は、ニュートンの運動方程式ではなく、この波動方程式 (Schroedinger 方程式) で記述されている。

1.5 自然の成り立ち

これまでいくつかのミクロな現象に古典力学を適用すると、これらの現象が説明出来ないことから、新たな力学として量子力学形成されてきた歴史を簡単に見てきた。

量子力学が形成された後、量子力学を適用することで沢山の新たな事柄が、わかった。その多くは、本教科書の範囲外であるため、詳しく説明する余地は本書にはない。しかしこれらについて簡単に触れておく事は、有益である。

1.5.1 原子

原子はもともと、物質の基本的構成単位と考えられていたので、構造のない単純なものであるとみなされていた。ところが、19世紀の終りから20世紀のはじめにかけて、原子が構造を持つとする考えや、実験結果がでてきた。原子が構造を持つならば、何らかの内部の変化や運動が考えられる。当時古典力学や古典電磁気学等の古典物理学しかなかったので、長岡やラザフォードは、古典物理学にもとずいて原子模型を考えた。古典力学や古典電磁気

学を使うと、原子の内部の電子が徐々にエネルギーを失い最後に点になってしまうという原子の不安定性という困難がでてくる。だから、原子模型はすぐには受け入れられなかった。その後、ミクロな世界では古典物理学は適用出来ずに、新たに発展した量子力学が適用されることが判明した。量子力学を使うと、原子は安定であり、困難は消えた。

ラザフォードは、 α 粒子をビームにして、物質を標的にした散乱実験を行ない、物質を構成する原子についての情報を得た。ビームの α 粒子が、原子に衝突した後大きな角度で反射する現象を見つけ、中心に重い芯をもつ原子構造に到達した。この原子模型では、原子は、中心に正電荷を帯びた原子核があり外を原子核の電荷と同じ個数の負電荷を帯びた電子が回っている。電子の数は、元素の種類により、異なる。水素では一個、ヘリウムでは2個、リチウムでは、3個と続く。正電荷と負電荷の間に働く力は、電気的なクーロン力である。マクロな世界で、電荷間にクーロン力が働くことは、古典電磁気学でわかった。ミクロな世界でも、電荷間にクーロン力が働く点では、マクロな世界と同じである。クーロン力が働いた時の運動が、マクロな世界とミクロな世界で大きく異なる。ミクロな世界では、電子は波動として振る舞う。波動方程式の定常解として原子内の電子の状態が記述され、このとき、原子は、上で述べた不安定性をもたない。長岡やラザフォードの原子模型は、古典力学で扱うと矛盾を引き起こし、間違った模型であることになるが、量子力学で扱うと実験結果や、自然現象を説明した正しい模型であることが明らかとなった。

1.5.2 金属と絶縁体

沢山の原子が結合して出来ている固体は、通常金属か絶縁体である。金属内では定常的な直流電流が流れるが、絶縁体内では定常的な直流電流はあり得ない。また、金属は、熱を伝導しやすいと共に表面が光沢をもち光を反射する。一方、絶縁体は、光沢をもたず光を反射しないで熱の伝導も良くない。同じ原子が沢山集まって構成されているにも拘らず、このような違いが生ずるのは何故だろうか？この違いの起源は何だろうか？

原子が沢山集まって金属や絶縁体が形成される機構や、上の性質は、ミクロな世界の力学である量子力学で初めて理解されるものである。この際、特に電子が重要な役割をになって

いる。すべての原子に含まれる電子は、すべて同じ粒子であり区別することは出来ない。沢山の同種粒子が関与する量子効果から、沢山の原子が集まり金属や絶縁体が形成され、同時にこれらの多様な性質が発現する。

1.5.3 半導体

半導体は、金属と絶縁体の間隔的な性質をもつ固体であり、量子力学を適用して初めて性質が理解でき、また現代の様々な電子機器に応用されている。電子の運動が直接影響を及ぼしている

1.5.4 原子核

原子核は、原子の中心にあって原子の質量の大部分をになう小さな物体であり、陽子と中性子の結合体で大きさは約 $10^{-15}cm$ である。各元素ごとに、原子核を構成する陽子と中性子の数は決まっている。例えば、水素の原子核は陽子、ヘリウムの原子核は2つの陽子と2つの中性子、リチウムの原子核は3個の陽子と3個の中性子等から構成されたものが主な原子

核である。しかし、一つの陽子と一つの中性子が結合した重水素、陽子 2 個と中性子 1 個からなるヘリウム 3、等異なる数の中性子が結合した同位体の原子核が沢山ある。これらの物理系の理解は、量子力学で可能である。

ただし、陽子と中性子の間には、短距離力である核力が働いている。核力は、引力の場合も斥力の場合もあるが、極めて強い力である。そのため、近似的にポテンシャルで表せるが、厳密にはポテンシャルで表しきれない多体効果を含む。多体効果から、相互作用により、粒子が生成されたり消滅したりして、粒子数が変化する。このようなプロセスは、異なる粒子数の状態を統一的に扱う量子力学的方法で、調べられる。

1.5.5 素粒子

素粒子は、最も基本的な物質の構成要素である。特殊相対性理論は、光速に近い速度で運動する物体の運動は、古典的な運動とは異なることを教える。物体の静止エネルギーと同じ程度の大きさのエネルギーが関与するミクロな物理では、相対論的な量子力学が必要である。素粒子の物理を扱うには、相対論と量子論との両方を取り入れ、さらに粒子数が変化する多体効果を含む方法が必須である。現在の素粒子には、レプトンとクォーク、並びに 3 種

類の相互作用（力）を媒介する粒子である光子、弱ボソン、グルーオン、が知られている。レプトンには、電子、電子ニュートリノ、ミューオン、ミューオンニュートリノ、タウ、タウニュートリノの6個があり、クォークには、u-クォーク、d-クォーク、c-クォーク、s-クォーク、t-クォーク、b-クォークの6個がある。

現在、基本的な相互作用として、電磁気相互作用、弱い相互作用、強い相互作用、重力、の4種類が知られている。重力以外の相互作用を媒介する素粒子はスピン1をもつゲージ粒子とよばれる粒子であり、それらの存在も確認されている。

素粒子の多くは、有限の質量をもつ。例えば、電荷をもつ3個のレプトンで、電子は質量 $0.5\text{MeV}/c^2$ をもち、ミューオンは $100\text{MeV}/c^2$ 、タウは $1.3\text{GeV}/c^2$ をもつ。他の素粒子も、それぞれ異なる質量をもっている。質量の起源も、ヒッグス粒子とよばれる一つの素粒子がになっている。ただし、ヒッグス粒子は実験的には、まだ検証されていない素粒子である。

1.5.6 宇宙

宇宙は、自然界における最も大きな構造であり、大きな質量をもつマクロな世界に属する。大きな質量をもつマクロな物体の間に働く力としては、重力相互作用が最も大事である。例えば、太陽系における惑星の運動は、万有引力の法則に従い古典力学で決定される。しかしながら、宇宙における諸現象の素過程は、原子、分子、原子核、素粒子等の中の反応であり、これらの理解には、量子力学が不可欠である。特に、宇宙の初期は、高温高密度であったと思われるので、この領域では、量子力学が重要な働きをしている。例えば、宇宙初期に生成された光は、ほぼ正確なプランク分布を示している。

1.6 問題

問題 1

ミクロな世界が。古典力学では記述できないことを示す現象をあげて、古典力学に基づく予想と量子力学の結果を比較すると共に、実際の現象を説明せよ。

問題 2

ボーアが適用した方法は、古典力学の枠組みに新たな量子化条件を付加した事である。この結果、古典力学では説明できない原子の不連続スペクトルを導く事に成功した。得られたエネルギー準位から計算された光のスペクトルは、さらに実験で観測されたものに一致することを明らかにした。

1。物理系のパラメーターをゆっくり変えた時、不変に保たれる物理量を断熱不変量という。例えば、質量 m で、ばね定数 k の振動子の運動は、ラグランジアン L

$$L = \frac{m}{2}(\dot{x}(t))^2 - \frac{k}{2}x(t)^2 \quad (1.39)$$

で記述される。ここで、ばね定数 k を、定数ではなく時間とともにゆっくり変動させる。この時、エネルギー $E = \frac{m}{2}\dot{x}^2 + \frac{k}{2}x^2$ は不変ではないが、一周期で積分した作用積分

$$I = \oint dxp, p = \sqrt{E - \frac{k}{2}x^2} \quad (1.40)$$

は、断熱不変量である。これを、示せ。

2。上の I が、ある定数の整数倍であるとする、エネルギーが飛びとびの値になることを示せ。

問題 3 水素原子の断熱不変量

水素原子は、ラグランジアン

$$L = \frac{m}{2}\left(\frac{d}{dt}\vec{x}(t)\right)^2 - \alpha\frac{1}{r} \quad (1.41)$$

で表される。球座標では、

$$L = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\phi}^2) - \alpha\frac{1}{r} \quad (1.42)$$

である。力学変数 r 、 θ 、と ϕ に共役な正準運動量は、

$$p_r = \frac{\partial}{\partial \dot{r}} L = m\dot{r}, \quad (1.43)$$

$$p_\theta = \frac{\partial}{\partial \dot{\theta}} L = mr^2\dot{\theta}, \quad (1.44)$$

$$p_\phi = \frac{\partial}{\partial \dot{\phi}} L = mr^2\theta^2\dot{\phi} \quad (1.45)$$

負エネルギー解で表される束縛状態に対して、断熱不変量を計算せよ。

問題 4 コンプトン散乱

振動数 ν の光は、運動量 $h\nu/c$ とエネルギー $h\nu$ を持つ粒子とみなせる事を使い、振動数 ν の光と、運動量 $m\frac{\vec{v}}{(1-v^2/c^2)^{1/2}}$ 、エネルギー $\frac{mc^2}{(1-v^2/c^2)^{1/2}}$ の電子との衝突をコ古典力学で調べる。

- (1) 散乱される光の波長のずれを求めよ。
- (2) 光と反跳電子の散乱角を求めよ。
- (3) 反跳電子の運動エネルギーを求めよ。

問題 5 光電効果

振動数 ν の光は、エネルギー $h\nu$ を持つ粒子とみなせる事を使い、振動数 ν の光が金属の表面に衝突して出てくる電子の運動エネルギーと速さを計算せよ。ただし、光のエネルギーはすべて電子の運動エネルギーに転換されるとし、光の波長は 2000 オングストロームとする。電子のエネルギーは $\frac{mc^2}{(1-v^2/c^2)^{1/2}}$ である。

問題 6 ドブロイ波

運動量 p の粒子は、ドブロイ波長 $\lambda = h/p$ の波でもある。次の粒子のドブロイ波長を計算せよ。

- (1) エネルギーが 15 KeV の電子
- (2) 速さが 2×10^8 M/S の陽子
- (3) 温度 300K で熱平衡にある陽子。ただし、陽子のエネルギーは $3/2kT$ とする。

第2章 量子力学の体系

ミクロな世界を記述する量子力学は、古典力学とは全く異なる形の極めて首尾一貫した論理体系として構成されている。本書は、量子力学の体系を、第一原理、第二原理、第三原理、並びにそれらと関連して重要な役割を演ずる重ね合わせの原理を柱とする標準的な方法をとる。重ね合わせの原理はミクロな世界が複素ベクトル空間で表現されることを示し、第一原理は二つの状態ベクトルの内積はそれらの状態間の確率振幅を与えることを示す。そして、第二原理は、正準座標と正準運動量が複素ベクトル空間における特殊な演算子であり、いかなる場合も、これらの間の交換関係が純虚数になり、大きさが量子論に固有の基本物理定数であるプランク定数で決まる、いわゆる正準交換関係が成立することを示す。最後の第三原理は、状態ベクトルの時間発展が、*Schroedinger* 方程式で決まる事を示す。

量子力学の体系と古典力学の体系との大きな違いは、物理状態の表現方法にある。古典力学で質点の物理状態は、位置座標や運動量で表され、質点の運動は時間に依存して変化する位置座標や運動量で記述されている。これらの変数の時間に対する変化率が、運動法則の基本をなす運動方程式で決まる。質点の場合、運動方程式は、質量、位置や速度の変化率、と力の間の普遍的な関係式であり、一つの物理系は、一つの力とその力をもつ運動方程式で記述され、その物理系が示す様々な運動は、同じ運動方程式のことなる解として求まる。ところが、量子力学では、質点の物理状態は複素ベクトル空間の要素である複素ベクトルで表現される。物理状態に複素ベクトル空間の複素ベクトルが対応し、物理状態の情報は、複素ベクトルで表される。複素ベクトルの時間変化が、運動法則の基本をなす方程式、*Schroedinger* 方程式、で決る。一つの物理系は、一つの複素ベクトル空間で表され、その物理系が示す様々な運動状態は、同じ *Schroedinger* 方程式のことなる解として求まる。このように、古典力学では、時間の関数である位置座標や運動量が物理情報を担う。これらは、観測して簡単に決まり、運動の法則は、これら物体の位置や運動量が満たす方程式であるニュートンの運動方程式で表されている。一方、量子力学では、質点の物理状態を表すのは、複素ベクトルであり、複素ベクトルの時間変化は、*Schroedinger* 方程式、で表される。*Schroedinger* 方程式から物理状態の時間発展の様子が決るが、複素ベクトルは直接観測されるわけではない。観測される物理量である観測量は、後で詳しく説明されるように、複素ベクトルとその複素共役の積で表される。さらに、この関係には確率が伴う。これらの関係は、理解しにくいものである。観測量、物理量、並びに運動法則の間関係が、量子力学と古典力学とで大きく異なっている。

2.1 重ね合せの原理

ミクロな世界を記述する複素ベクトル空間では、複数のベクトルの線形結合が、必ず同じ複素ベクトル空間に属する。つまり、物理状態は重ね合わせの原理を満たす。重ねあわせの原理は、波動現象に特徴的な性質であり、ミクロな世界の諸現象は、波動現象として理解される。量子力学の波動では、複数の物理状態を複素数を係数として重ねあわせた状態が必ず存在する。このように、係数として複素数を使う線形結合が同じ空間に属する空間を複素ベクトル空間とよび、量子力学は複素ベクトル空間で表現される。ミクロな世界が、波動現象を示すため、複素ベクトルの代りに、波動関数なる名称が頻繁に使われる。

2章の2重スリットを波が通過する現象を考えよう。水面波、電磁波、光、等の波や、また2章で考察した電子が、二つのスリットを通過してスクリーンに達するとき、それぞれのスリットを通る波の重ねあわされた波が実現する。これら二つのスリットを通過して重ねあわされた波は、スクリーン上で複雑な干渉縞の模様を示す。水面波の場合は、波となるのは、水面の変位であり、実数である。同様に、電磁波の場合も、実数である電場や磁場が波として振る舞う。しかし、量子力学の波は、実数ではなく複素数である。測定器により観測される値は、複素数ではなく実数である。このため、後で述べるように、量子力学における観測値と、複素数である波動関数の関係は、量子力学に固有な形をとる。

少し数学的になるが、次章に複素ベクトル空間の性質をまとめておこう。これらは、波動関数が従う性質、方程式や、波動関数を含む空間の性質をしめしている。

2.1.1 複素ベクトル空間

複素ベクトル空間の要素である波動関数は、複素数の関数である。この点、量子力学の世界は、実数だけで物理法則が表される古典理論とは、大きく異なる。いま一つの物理系 P を、一つのベクトル空間 V で表すことにし、空間 V の要素を v とする。この空間で、任意の二つの要素 v_1, v_2 と任意の二つの複素数 c_1, c_2 が与えられた時、それらの線形結合が同じ空間に属する、すなわち

$$v_1 \in V, v_2 \in V \rightarrow c_1 v_1 + c_2 v_2 \in V \quad (2.1)$$

が満たされるとき、この空間を複素ベクトル空間とよぶ。

ベクトル空間の簡単な例として、質点の位置ベクトルの集合がある。これは、実数のベクトルの集まりである実ベクトル空間であり、実数を係数とする任意の二つのベクトルの線形結合が同じ空間に属している。実ベクトル空間は、実数ベクトルの集合であり、複素ベクトルの集合である複素ベクトル空間とは異なる性質を持つ。一つの平面上のすべての位置ベクトルの全体が作る空間では、二つのベクトル \vec{r}_1, \vec{r}_2 と二つの実数により構成された線形結合

$$x_1 \vec{r}_1 + x_2 \vec{r}_2 = \vec{r} \quad (2.2)$$

は明らかに同じ空間に入っている。

線形独立

複数のベクトル $v_1, v_2, v_3, v_4, \dots, v_n$ が、線形独立であるとは、これらのどのベクトルも、他のベクトルの線形結合として表せない、事である。

別の表現として、既知のベクトル v_1, v_2, \dots から、係数 c_1, c_2, \dots を決める線形方程式

$$c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n = 0 \quad (2.3)$$

の $c_i (i = 1, n)$ のすべての解が

$$c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0 \quad (2.4)$$

と零になる場合だけであるとき、これらのベクトル $v_1, v_2, v_3, v_4, \dots, v_n$ は、線形独立であるという。

二つの表現は同等である。これを示すため、逆に、上の方程式を満たす零でない係数解が少なくとも2個あるとして、それらを c_1, c_2 としよう。この時、

$$c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n = 0 \quad (2.5)$$

$$c_1 \neq 0, c_2 \neq 0 \quad (2.6)$$

から、

$$v_1 = -\frac{1}{c_1}(c_2 v_2 + \dots + c_n v_n) \quad (2.7)$$

となり、ベクトル v_1 は他のベクトルの線形結合となっている。よって上の二つの記述が、同等であることがわかる。

ベクトル空間の次元

線形独立なベクトルの個数の最大値を、そのベクトル空間の次元とよぶ。次元 n の一つのベクトル空間では、適当に選んだ n 個のベクトルを含む線形方程式

$$c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n = 0 \quad (2.8)$$

の解が、

$$c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0 \quad (2.9)$$

となるが、

$$c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_{n+1} v_{n+1} = 0 \quad (2.10)$$

の解が、

$$c_1 = c_2 = \dots = c_n = c_{n+1} = 0 \quad (2.11)$$

となるわけではない。いま

$$c_{n+1} \neq 0 \quad (2.12)$$

とする。すると、両辺を c_{n+1} で割り、

$$v_{n+1} = -\frac{1}{c_{n+1}}(c_1 v_1 + c_2 v_2 + \cdots + c_n v_n) \quad (2.13)$$

が得られる。このように、一つのベクトル v_{n+1} が他のベクトルの線形結合で表されている。例えば、平面上の位置ベクトルのなす空間では、平行でない2個のベクトルは、線形独立であり、また他の3個目のベクトルは、これらの線形結合で表される。よって、この空間は二次元ベクトル空間である。

内積

ベクトルは単なる数ではない。だから、ベクトルは直接そのまま観測量と結び付くわけではない。ベクトルから構成される実数が、観測量に結び付く。2個のベクトルから、内積で一つの複素数を定義することが出来る。複素ベクトル空間の場合、2個のベクトル u と v の内積は、ベクトル u の成分の複素共役とベクトル v の成分の複素共役を使い

$$(u, v) = \sum_i \bar{u}_i v_i \quad (2.14)$$

と定義され、特殊の場合を除いて一般に複素数である。内積は、分配法則

$$(u, c_1 v_1 + c_2 v_2) = \sum_i c_i (u, v_i) \quad (2.15)$$

$$(c_1 u_1 + c_2 u_2, v) = \sum_i \bar{c}_1 (u_i, v) \quad (2.16)$$

を満たしている。

内積が零となるとき、

$$(u, v) = 0 \quad (2.17)$$

二つのベクトル u, v は直交している。

一つのベクトル同士の内積は、実数となり、また正か零であり、

$$(u, u) \geq 0 \quad (2.18)$$

となっている。ここで等号が満たされ

$$(u, u) = 0 \quad (2.19)$$

となるのは、

$$u = 0 \quad (2.20)$$

の場合に限られる。

単位ベクトル

n 次元空間で、大きさが1で、互いに直交する n 個のベクトル $e_i, i = 1, n$ は、

$$(e_i, e_j) = 0, i \neq j \quad (2.21)$$

を満たすと共に、規格化の条件

$$(e_i, e_i) = 1, i = j \quad (2.22)$$

を満たす。二つの条件を、クロネッカーの記号でまとめて、

$$(e_i, e_j) = \delta_{i,j} \quad (2.23)$$

とあらわせる。このようなベクトルを、規格化直交ベクトルとよぶ。この空間の任意のベクトル u は、

$$u = \sum_{i=1}^n c_i e_i \quad (2.24)$$

と規格化直交ベクトルの線形結合で表され、係数が

$$(e_j, u) = \sum_{i=1}^n c_i (e_j, e_i) \quad (2.25)$$

$$= \sum_{i=1}^n c_i \delta_{i,j} = c_j \quad (2.26)$$

とベクトルの内積となる。この係数をベクトルの成分という。

2.1.2 ブラ・ケット

複素ベクトル空間のベクトルを表すのに、ディラックのブラ・ケット記号が便利である。

通常、波動関数は、複素数 ψ で表わす。複素数 ψ は、座標や時間の関数である。この表記法では、波動関数 ψ_1 と波動関数 ψ_2 の内積は

$$\int dx \psi_1^*(\mathbf{x}) \psi_2(\mathbf{x}) \quad (2.27)$$

と積分で計算される。内積の定義にいつも、積分記号、体積要素、波動関数の複素共役と波動関数の積等の複数の操作や、演算が必要であり、結構面倒である。もっと、簡便に内積や、ベクトルを表わす方法はないだろうか？それが、ディラックのブラ・ケット記号である。

ディラックのブラ・ケット記号では、複素数の波動関数の代りに、先ずベクトルの集まりからなる抽象的な空間を考える。この空間の要素は、単純な数であるとは限らない。そのため、要素を、一般的な表記

$$|\psi\rangle \quad (2.28)$$

で表わしケットベクトルとよぶ。ケットベクトルの複素共役ベクトルは、やはり抽象的なものであるが、反対の括弧の形、

$$\langle\psi| \quad (2.29)$$

で表しブラベクトルとよぶ。そして、二つのケットベクトル $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ との内積は複素数であるが、二つの内積をブラケット (括弧)

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle \quad (2.30)$$

と表現する。つまり、ケットベクトル $|\psi_1\rangle$ 、 $|\psi_2\rangle$ は一つの抽象的な空間の要素であり、またブラベクトル $\langle\psi_1|$ 、 $\langle\psi_2|$ は、ケットベクトル $|\psi_1\rangle$ 、 $|\psi_2\rangle$ と複素共役な抽象的空間の要素であり、もとの空間の要素と複素共役な空間の要素の一对から、内積を定義する。内積は複素数であり、必ず一对の組から定義される。このようにブラベクトルとケットベクトルをこの順に並べるだけで、内積になると決めておくと、内積には、積分記号も、複素共役の記号もいらない。そのため、簡単に表記できる。以上がディラックのブラ・ケットの決まりである。

ディラックのブラ・ケットの表記では、ケットベクトルの集合が、物理状態の集合と対応している。いま無限次元空間で、一つの規格化直交ベクトルの集合を

$$\{|u_n\rangle\}, n = 1, 2, 3, \dots, \infty \quad (2.31)$$

とし、それらの内積は

$$\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm} \quad (2.32)$$

と規格化されているとする。一つのケットベクトル $|\psi\rangle$ をこの規格化直交ケットベクトルの線形結合で

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle \quad (2.33)$$

と展開しよう。ケットベクトルの展開には、ケットベクトルしか表れない事に注意が必要である。すると展開係数は、両辺に左からブラベクトル $\langle u_m |$ をかけブラケットとして、上の規格直交性を使い

$$\langle u_m | \psi \rangle = \sum_n c_n \langle u_m | u_n \rangle = c_m \quad (2.34)$$

となることがわかる。また、この結果を上式の式に代入して

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n | \psi \rangle \quad (2.35)$$

が得られる。さらに、状態ベクトル $|\psi\rangle$ が任意であることより、ケットベクトルとブラベクトルをこの順に並べた演算子が、

$$\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = 1 \quad (2.36)$$

となる。このように規格化直交ベクトル全体で任意のベクトルを展開できる時、全体で完備系をなすという。これ以降、ディラックのブラ・ケットの表記法を使う。ケットベクトル $|u\rangle$ とブラベクトル $\langle v|$ を、この順にならべた

$$O = |u\rangle \langle v| \quad (2.37)$$

は演算子であり、ケットベクトル $|\psi\rangle$ にかけた時、結果はケットベクトル

$$O|\psi\rangle = |u\rangle c \quad (2.38)$$

$$c = \langle v | \psi \rangle \quad (2.39)$$

になり、ブラベクトル $\langle \psi|$ にかけた時、結果はブラベクトル

$$\langle \psi | O = d \langle v| \quad (2.40)$$

$$d = \langle \psi | u \rangle \quad (2.41)$$

になる。

2.1.3 演算子

物理状態が、複素ベクトルで表される量子力学では、物理量は複素ベクトル空間における Hermite 演算子で表される。質点の場合、物理量としては、位置、運動量をはじめとして、エネルギー、角運動量等であり、これらは位置座標と運動量の適当な積から構成される。

2.1.4 線形演算子

複素ベクトル空間における演算子は一つのベクトルを一つのベクトルに変換する。変換 H が線形であるとき、すなわち任意のベクトル $|u_i\rangle, i = 1, 2$ に対して

$$H|u_i\rangle = |v_i\rangle (i = 1, 2) \quad (2.42)$$

$$H(c_1|u_1\rangle + c_2|u_2\rangle) = c_1|v_1\rangle + c_2|v_2\rangle \quad (2.43)$$

が満たされるとき、この演算子 H を線形演算子という。線形演算子は、一つのベクトルを一つのベクトルに変換するので、内積

$$\langle u_\beta H u_\alpha \rangle = (H_{\beta,\alpha}) \quad (2.44)$$

で特徴付けられる。これは、行列の β, α 成分とみなせる。

演算子の和と積

二つの線形演算子、 H_1 と H_2 があるとき、それらの和や積

$$H_1 + H_2 \quad (2.45)$$

$$H_1 H_2 \quad (2.46)$$

は、任意のベクトル $|u\rangle$ に対して

$$(H_1 + H_2)|u\rangle = H_1|u\rangle + H_2|u\rangle \quad (2.47)$$

$$H_1 H_2|u\rangle = H_1(H_2|u\rangle) \quad (2.48)$$

で定義される。一般の線形演算子の和と差では、

$$(H_1 + H_2)|u\rangle = (H_2 + H_1)|u\rangle \quad (2.49)$$

$$H_1(H_2|u\rangle) \neq H_2(H_1|u\rangle) \quad (2.50)$$

となるので、

$$H_1 + H_2 = H_2 + H_1 \quad (2.51)$$

$$H_1 H_2 \neq H_2 H_1 \quad (2.52)$$

となる。これを、演算子の和は可換であるが、積は非可換であるという。ただし、例外的に、二つの演算子の積が、可換になることはある。また、後で詳しく述べるように、非可換な性質は交換関係

$$[H_1, H_2] = H_1 H_2 - H_2 H_1 \quad (2.53)$$

で特徴付けられる。

Hermite 演算子

行列 H の Hermite 共役 H^\dagger は、

$$H_{\beta,\alpha}^\dagger = \bar{H}_{\alpha,\beta} \quad (2.54)$$

と各成分の転置の複素共役をとった行列の事であり、各成分が元の成分と等しくなる時、すなわち関係式

$$\bar{H}_{\alpha,\beta} = H_{\beta,\alpha} \quad (2.55)$$

を満たすとき、行列を Hermite 行列とよぶ。Hermite 演算子は、量子力学で特に重要である。Hermite 行列の例は、 H_{11} 、 H_{22} 、 H_{33} を実数とした 3×3 行列

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} \\ H_{12}^* & H_{22} & H_{23} \\ H_{13}^* & H_{23}^* & H_{33} \end{pmatrix}$$

である。

和と積

H_1, H_2 が Hermite 行列であるとき、和は

$$(H_2 + H_1)^\dagger = H_2 + H_1 \quad (2.56)$$

となり Hermite 行列であるが、積は

$$(H_2 H_1)^\dagger = H_1 H_2 \neq H_2 H_1 \quad (2.57)$$

となり、一般に Hermite 行列ではない。

固有値と固有ベクトル

Hermite 行列は、固有値が実数になり、異なる固有値に対応する固有ベクトルが直交する。すなわち、固有値方程式

$$H u_\alpha = \alpha u_\alpha \quad (2.58)$$

で固有値 α 固有ベクトル u_α は、関係式

$$\bar{\alpha} = \alpha \quad (2.59)$$

$$\langle u_\alpha, u_\beta \rangle = 0, \alpha \neq \beta \quad (2.60)$$

を満たしている。証明は、付録で与えられている。

一方で、物理量は必ず実数の値を観測値としてもつので、複素ベクトル空間では Hermite 演算子で表される。

位置座標と運動量は代表的な物理量であり、Hermite 演算子で表される。演算子としての位置座標を、単なる数と区別して \tilde{x} と表記することにしよう。 \tilde{x} は Hermite な演算子であるので、 \tilde{x} の固有状態は、

$$\tilde{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (2.61)$$

を満たし、固有値 x は実数である。

運動量も演算子であるので、単なる数と区別して \tilde{p} と表記することにする。 \tilde{p} も Hermite な演算子であるので、 \tilde{p} の固有状態は、

$$\tilde{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad (2.62)$$

を満たし、固有値 p は実数である。固有状態 $|x\rangle$ と $|p\rangle$ は、特殊な関係を満たしている。これは、後で述べる位置座標と運動量の間で成立する交換関係から導かれる。

位置座標 \tilde{x} と運動量 \tilde{p} の成分の積

$$\tilde{x}_i \tilde{p}_j \quad (2.63)$$

では、

$$(\tilde{x}_i \tilde{p}_j)^\dagger = \tilde{p}_j \tilde{x}_i \quad (2.64)$$

となり、 \tilde{p}_j と \tilde{x}_i が可換であれば、Hermitian な演算子となる。角運動量

$$(\epsilon_{ijk} \tilde{x}_j \tilde{p}_k)^\dagger = \epsilon_{ijk} \tilde{p}_k \tilde{x}_j \quad (2.65)$$

では、 $j \neq k$ であるので、後でわかるが、 \tilde{p}_k と \tilde{x}_j が可換となり、Hermitian な演算子となる。

この節では、位置座標や運動量に演算子であることを強調するために、物理量 O を \tilde{O} とした。しかし、いつも \tilde{O} とするのは煩わしいので、これからは、演算子である場合でも、誤解がない限り単に x_i や p_j と、一般的に O と表わす事にして、 \tilde{O} とはしない。

非 Hermitian 演算子

Hermitian でない演算子は、二つの Hermitian 演算子の和で表すことが出来る。いま、演算子 O が

$$O \neq O^\dagger \quad (2.66)$$

と Hermitian でない演算子とする。この時、二つの Hermitian 演算子、 H と K を使い、 O を

$$O = H + iK \quad (2.67)$$

$$H^\dagger = H, K^\dagger = K \quad (2.68)$$

と分解することが出来る。それぞれは、 O とその Hermitian 共役の和と差、

$$H = \frac{O + O^\dagger}{2} \quad (2.69)$$

$$K = \frac{O - O^\dagger}{2i} \quad (2.70)$$

である。また、 O とその Hermitian 共役の積、

$$OO^\dagger \quad (2.71)$$

$$O^\dagger O \quad (2.72)$$

は、

$$(OO^\dagger)^\dagger = (O^\dagger)^\dagger O^\dagger = OO^\dagger \quad (2.73)$$

$$(O^\dagger O)^\dagger = O^\dagger (O^\dagger)^\dagger = O^\dagger O \quad (2.74)$$

と明らかに Hermite 演算子である。

ユニタリー演算子
演算子が、

$$U^\dagger U = 1 \quad (2.75)$$

となるとき、ユニタリー演算子とよぶ。二つのベクトル v_1 、 v_2 の内積とそれらを変換したベクトルの内積は、

$$(Uv_1, Uv_2) = \sum_l \bar{U}v_{1l}(Uv_2)_l \quad (2.76)$$

$$\begin{aligned} &= \bar{U}_{lm_1}v_{1m_1}U_{lm_2}v_{2l} \\ &= \bar{v}_{1m_1}(U^\dagger U)_{m_1m_2}v_{2m_2} \\ &= (v_1, v_2) \end{aligned} \quad (2.77)$$

と等しい。つまり、ユニタリー演算子は、ベクトル間の内積を変えない演算子である。ベクトルの内積は、後で示すように観測量を与える。そのため、ユニタリー演算子は、量子力学では特に重要である。

二つのユニタリー演算子の和は、

$$(U_1 + U_2)^\dagger = U_1^\dagger + U_2^\dagger = U_1^{-1} + U_2^{-1} \quad (2.78)$$

$$\begin{aligned} (U_1 + U_2)(U_1^{-1} + U_2^{-1}) &= U_1U_1^{-1} + U_1U_2^{-1} + U_2U_1^{-1} + U_2U_2^{-1} \\ &= 1 + U_1U_2^{-1} + U_2U_1^{-1} + 1 \neq 1 \end{aligned} \quad (2.79)$$

とユニタリー演算子でない。一方、二つのユニタリー演算子の積は、一般に

$$\begin{aligned} (U_1U_2)^\dagger &= U_2^\dagger U_1^\dagger = U_2^{-1}U_1^{-1} \\ U_2^{-1}U_1^{-1}U_1U_2 &= 1 \end{aligned} \quad (2.80)$$

であり、ユニタリーである。

Hermite 演算子に純虚数 i と実数 t をつけた指数関数、

$$U = e^{itH}, H^\dagger = H \quad (2.81)$$

の Hermite 共役は

$$U^\dagger = e^{-itH} \quad (2.82)$$

$$U^\dagger U = e^{-itH} e^{itH} = 1 \quad (2.83)$$

となりユニタリー演算子である。実数 t は、連続的に値を変えることができる。だから、このユニタリー演算子 $U(t)$ は、変数 t の連続関数の演算子である。

2.2 観測量と確率

2.2.1 量子力学の第一原理

物理状態がベクトルで表される量子力学では、二つの物理状態 α, β に対応する二つのベクトル $|u_\alpha\rangle, |u_\beta\rangle$ の内積

$$f = \langle u_\alpha, u_\beta \rangle \quad (2.84)$$

は、物理状態 α で他の物理状態 β を観測する振幅である。振幅は一般に複素数であり、直接観測されるわけではないが、振幅の絶対値の2乗

$$P = |f|^2 \quad (2.85)$$

がこの観測がなされる確率となる。これを、量子力学の確率原理という。

何故、確率が観測値となるのか不思議であり、他の点では完全に論理的に体型たっている量子力学で最も不可思議な事柄であり、もっともわかりにくい点でもある。しかし、今まで多くの物理学者が長年にわたり様々な実験を通して、経験的に確かめた確率解釈は、正しいと思わざるを得ない。このように考えて、今までのところすべてつじつまがっている。

状態 α で状態 β を観測する確率を $P_{\alpha,\beta}$ とすると、確率として満たすべき条件は、確率は正定値であり全確率が1であること、即ち、

$$(1) P_{\alpha,\beta} \geq 0 \quad (2.86)$$

$$(2) \sum_{\beta} P_{\alpha,\beta} = 1 \quad (2.87)$$

が満たされ、さらに二つの独立事象が起きる確率はそれらの和となること、即ち状態 α で状態 β_1 か状態 β_2 を観測する確率が

$$P_{\alpha,\beta_1} + P_{\alpha,\beta_2} \quad (2.88)$$

となることである。このように、確率は必ず正であり、またすべてがおきる確率、即ち全確率は1である。

いま、自然崩壊する放射性同位元素を沢山集めて、観測するとする。これら放射性同位元素がすべて同じ状況にある場合、ある時刻に、どの原子が崩壊するのか、わかる方法や原理があるだろうか？同じ原子は、すべて平等であるため、一つのを他と区別することや、その手段は存在しない。だから、どの原子が崩壊するか、誰にもわからない。しかし、各原子が崩壊する確率は、予測出来る。

同様に、一つの原子 A が、いろいろなモード

$$A \rightarrow x_1 + x_2 + x_3 \quad (2.89)$$

$$\rightarrow x_4 + x_4 + x_6 \quad (2.90)$$

$$\rightarrow x_7 + x_8 + x_9 \quad (2.91)$$

$$\rightarrow \dots \quad (2.92)$$

に崩壊する可能性を持つとする。 x_1, x_2, \dots は、それぞれ異なる物理状態である。では、ある時刻に、どのモードの崩壊が起きるか、予め知る術や、後でそれを確認する術があるであろうか？これも、存在しない。わかるのは、原子の崩壊を沢山観測した時の、それぞれのモードへの崩壊が起きる確率である。この原子が崩壊しない確率は、1から崩壊する全確率を差し引いて得られる。

2.2.2 確率密度と確率の流れ、演算子の期待値

複素ベクトル ψ と座標ベクトル $\langle \mathbf{x} |$ の内積、

$$\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \quad (2.93)$$

は、このベクトルで座標 \vec{x} を観測する振幅であり、座標表示の波動関数である。この絶対値の二乗は、この状態で粒子を位置 \mathbf{x} で観測する確率を示す。 ψ が一つの粒子の波動関数である場合、

$$\int d\mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 = 1 \quad (2.94)$$

と全空間で1に規格化される。後で述べるように、確率密度 $\rho(\mathbf{x})$ と確率の流れ $\mathbf{j}(\mathbf{x})$ が、波動関数とその複素共役、並びにある速度演算子 \mathbf{v} を使い

$$\rho(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|^2 \quad (2.95)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x})^* \mathbf{v} \psi(\mathbf{x}) \quad (2.96)$$

と表わせ、連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}) = 0 \quad (2.97)$$

を満たしている。また、この時、

$$\int d\mathbf{x} \mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 = \langle \mathbf{x} \rangle \quad (2.98)$$

は、この粒子の位置 \mathbf{x} の平均値を表す。同様に、任意な Hermite 演算子 H に対する

$$\langle \psi | H | \psi \rangle \quad (2.99)$$

は、この状態で演算子 H を観測した時の平均の値（期待値）である。 H の固有状態

$$H|h\rangle = h|h\rangle \quad (2.100)$$

を使い、期待値は

$$\langle \psi | H | \psi \rangle \quad (2.101)$$

$$\begin{aligned} &= \langle \psi | h \rangle \langle h | H | h' \rangle \langle h' | \psi \rangle \\ &= \sum |\langle \psi | h \rangle|^2 h \end{aligned} \quad (2.102)$$

と表せ、 h についての分布関数が、

$$P(h) = |\langle \psi | h \rangle|^2 \quad (2.103)$$

である。上の式 (2.102) で、Hermite 演算子の固有値は実数であり、相異なる固有値に対する固有状態が直交すること、

$$\langle h | H | h' \rangle = h' \langle h | h' \rangle = h' \delta(h - h'), \quad h = \text{実数} \quad (2.104)$$

を使った。 $\delta(h - h')$ は、次節で説明されるデルタ関数である。

2.2.3 散乱振幅

時刻が $t = -\infty$ における状態 $|u_\beta^- \rangle$ と $t = +\infty$ における状態 $|u_\alpha^+ \rangle$ との内積

$$S_{\alpha, \beta} = \langle u_\alpha^+ | | u_\beta^- \rangle \quad (2.105)$$

は、 $t = -\infty$ における状態 β が $t = +\infty$ における状態 α に遷移する散乱振幅である。 $t = \pm\infty$ で用意された二つの状態ベクトルの間の遷移振幅を表わすため、この散乱振幅は、ミクロな物理情報をマクロな方法で取り出す実験に対応する。ミクロな状態は、 t が有限な値を持つ領域に値を持つ。この領域が、極めて微小な領域である時、微小領域における影響を受けた波は、 $t = \pm\infty$ にまで到達する。この領域が、マクロな空間領域であれば、マクロな実験における観測にかかる。

2.2.4 密度行列

一つの状態ベクトル $|\psi\rangle$ から密度演算子を

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi| \quad (2.106)$$

と定義する。すると、ある演算子 O のこの状態での期待値は

$$\text{Tr}(\rho O) = \langle \psi | O | \psi \rangle \quad (2.107)$$

となる。

2.3 正準交換関係

古典力学で、最も基本的な物理量は、位置座標 q と運動量 p であり、他の物理量は、これらの関数で記述されていた。運動量は、正準形式でラグランジアン L の速度についての微分、

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \quad (2.108)$$

で決る q に共役な量である。

量子力学でも q と運動量 p が最も基本的な物理量であり、他の物理量はこれらの関数である。当然ながら、これらは Hermite 演算子である。

2.3.1 量子力学の第 2 原理

位置座標と運動量は演算子であり、いつも交換関係

$$[q, p] = i\hbar, \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (2.109)$$

を満たす。右辺は、演算子 1 に比例し、大きさはプランク定数 h を 2π でわった \hbar であり、純虚数である。だから、任意の状態 $|u\rangle$ にかけた時、状態を変化させずに、大きさと位相だけを変えた状態

$$\begin{aligned} q|u\rangle &\neq c|u\rangle \\ p|u\rangle &\neq c'|u\rangle \\ [q, p]|u\rangle &= i\hbar|u\rangle \end{aligned} \quad (2.110)$$

になる。 \hbar は、これから頻繁に現れる。プランク定数は、式 (1.18) の大きさをもっている。

無限領域

q が古典変数として、 $-\infty$ から $+\infty$ までの値をとる変数であるとしよう。この時、 q の固有状態、

$$q|q_1\rangle = q_1|q_1\rangle \quad (2.111)$$

の行列要素は、

$$\langle q_2|q|q_1\rangle = q_1\langle q_2|q_1\rangle \quad (2.112)$$

である。ここで、交換関係 (2.109) を q の固有状態ではさみ、

$$\langle q_2|[q, p]|q_1\rangle = i\hbar\langle q_2|q_1\rangle \quad (2.113)$$

を得る。

もしも、空間が有限次元で、固有値 q_i が不連続であるとする、 $q_2 = q_1$ とおいて、 $\langle q_l | q_l \rangle$ は1に規格できる。さらにすべての l の和をとって、左辺が

$$\sum_{q_l} \langle q_l | [q, p] | q_l \rangle = \sum_l \langle q_l | (qp - pq) | q_l \rangle \quad (2.114)$$

$$= \sum_{l,m} \langle q_l | q | q_m \rangle \langle q_m | p | q_l \rangle - \sum_{l,m} \langle q_l | p | q_m \rangle \langle q_m | q | q_l \rangle = 0 \quad (2.115)$$

と恒等的に零になる。一方、右辺は

$$\sum_{q_l} i\hbar \langle q_l | q_l \rangle = i\hbar \sum_l 1 = i\hbar L \neq 0 \quad (2.116)$$

と、空間の次元 L に比例する定数となる。よって、右辺と左辺が異なる結果が得られ、矛盾が生じている。この矛盾を解消するためには、前提条件を否定するしかない。だから、空間が有限次元ではなく無限次元であり、また固有値 q_i が連続であり、状態は規格化出来ない。

無限次元でこれらの行列要素は如何なるものであるだろうか？これをみるため、この左辺を書換えて、

$$\langle q_2 | (qp - pq) | q_1 \rangle = (q_2 - q_1) \langle q_2 | p | q_1 \rangle \quad (2.117)$$

を得るので、 p の行列要素が満たす関係式、

$$(q_2 - q_1) \langle q_2 | p | q_1 \rangle = i\hbar \langle q_2 | q_1 \rangle \quad (2.118)$$

が得られる。次の次の節で、さらにこの関数について考察する。

2.3.2 交換関係

二つの演算子 A, B の交換関係は、

$$[A, B] = AB - BA \quad (2.119)$$

で定義され、 A, B の間の関係を示す量子力学で極めて重要な量である。単なる数の交換関係は零になる。だから、古典力学ではすべての変数は互いに可換である。交換関係は、古典力学とは異なる量子力学の特徴を表している。

三つの演算子、 A, B, C に対して、交換関係は

$$[A, B] = -[B, A] \quad (2.120)$$

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C] \quad (2.121)$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad (2.122)$$

を満たしている。上の式で、はじめの二つの式は自明であるが、3番目は自明でない。これが正しい事を示そう。左辺は、

$$[A, BC] = ABC - BCA \quad (2.123)$$

右辺は

$$[A, B]C + B[A, C] = ABC - BAC + BAC - BCA \quad (2.124)$$

$$= ABC - BCA \quad (2.125)$$

となり、両辺が等しい事がわかる。

ジャコビの恒等式

三つの演算子、 A, B, C に対する交換関係の交換関係は、ジャコビの恒等式

$$[[A, B]C] + [[B, C]A] + [[C, A]B] = 0 \quad (2.126)$$

を満たしている。左辺の各項は、交換関係の定義から

$$[[A, B]C] = (AB - BA)C - C(AB - BA) \quad (2.127)$$

$$[[B, C]A] = (BC - CB)A - A(BC - CB) \quad (2.128)$$

$$[[C, A]B] = (CA - AC)B - B(CA - AC) \quad (2.129)$$

となり、3個の演算子の積を先頭のもので分類して

$$[[A, B]C] = A(BC) + B(-AC) + C(-AB + BA) \quad (2.130)$$

$$[[B, C]A] = A(-BC + CB) + B(CA) + C(-BA) \quad (2.131)$$

$$[[C, A]B] = A(-CB) + B(-CA + AC) + C(AB) \quad (2.132)$$

と表す。すると、和については、

$$\begin{aligned} & [[A, B]C] + [[B, C]A] + [[C, A]B] \\ &= A(BC - BC + CB - CB) + B(-AC + CA - CA + AC) \\ &+ C(-AB + BA - BA + AB) = 0 \end{aligned} \quad (2.133)$$

となり零になることがわかる。このように、ジャコビの恒等式は任意の演算子の交換関係で成立する。

例

q や p の関数の交換関係は

$$[q, p^2] = 2i\hbar p, \dots [q, p^l] = i\hbar l p^{l-1} \quad (2.134)$$

となるので、一般の p の関数では、

$$[q, F(p)] = i\hbar F'(p) \quad (2.135)$$

また、

$$[q^2, p] = 2i\hbar q, \dots [q^l, p] = i\hbar l q^{l-1} \quad (2.136)$$

となるので、一般の q の関数では

$$[G(q), p] = i\hbar G'(q) \quad (2.137)$$

となる。

ポアッソン括弧と交換関係

古典力学におけるポアッソン括弧は、

$$\{q, p\}_{PB} = 1, \{q, q\}_{PB} = 0, \{p, p\}_{PB} = 0 \quad (2.138)$$

を満たし、さらに

$$\{q, F(p)\}_{PB} = F'(p), \{G(q), p\}_{PB} = G'(q) \quad (2.139)$$

となっている。このため、量子力学の交換関係 (2.135), (2.137) と古典力学におけるポアッソン括弧 (2.139) が、

$$\frac{1}{i\hbar}[q, F(p)] \Leftrightarrow \{q, F(p)\}_{PB} \quad (2.140)$$

$$\frac{1}{i\hbar}[G(q), p] \Leftrightarrow \{G(q), p\}_{PB} \quad (2.141)$$

と関係している。この結果、古典力学における正準運動方程式と、量子力学の運動方程式が一致することが分かる。

2.3.3 デイラックのデルタ関数

エルミート演算子の相異なる固有値に対応する状態は直交する事より $q_1 \neq q_2$ で式 (2.118) の右辺は、零となり、

$$(q_2 - q_1)\langle q_2 | p | q_1 \rangle = i\hbar \langle q_2 | q_1 \rangle = 0, q_1 \neq q_2 \quad (2.142)$$

となる。

しかし、前章から

$$\langle q_1 | q_1 \rangle = \infty \quad (2.143)$$

$$\langle q_1 | p | q_1 \rangle = \infty \quad (2.144)$$

となり、また完備性の式

$$\sum_{q_2} |q_2\rangle \langle q_2| = 1 \quad (2.145)$$

の左から $\langle q_1 |$ 右から $|f\rangle$ をかけて、

$$\sum_{q_2} \langle q_1 | q_2 \rangle \langle q_2 | f \rangle = \langle q_1 | f \rangle \quad (2.146)$$

が得られる。ここで、 $f(q) = \langle q | f \rangle$ とおくと、

$$\sum_{q_2} \langle q_1 | q_2 \rangle f(q_2) = f(q) \quad (2.147)$$

となる。ここで、 $f = 1$ において、

$$\sum_{q_2} \langle q_1 | q_2 \rangle = 1 \quad (2.148)$$

$$\sum_{q_2} (q_2 - q_1) \langle q_2 | p | q_1 \rangle = i\hbar \quad (2.149)$$

を満たすことがわかる。このため、これらの関数は singular な関数であり、通常のなめらかな関数ではない。この性質を持つ関数、 $\delta(q_1 - q_2)$ やその微分を

$$\langle q_1 | q_2 \rangle = \delta(q_1 - q_2) \quad (2.150)$$

$$\langle q_2 | p | q_1 \rangle = i\hbar \frac{d}{dq_1} \delta(q_1 - q_2) \quad (2.151)$$

と表す。 $\delta(q_1 - q_2)$ をディラックのデルタ関数とよぶ。ディラックのデルタ関数は、通常の関数の極限として表す事が出来る。

2.3.4 座標表示における運動量演算子

座標を対角形にするとき、式 (2.151) より、運動量は微分演算子

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \quad (2.152)$$

で表わされる事が分かった。実際、任意の関数 $f(q)$ に対して具体的に計算して

$$[q, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}]f(q) = q(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q})f(q) - (-i\hbar \frac{\partial}{\partial q})qf(q) \quad (2.153)$$

$$= -i\hbar(qf'(q) - f(q) - qf'(q)) = i\hbar f(q) \quad (2.154)$$

となることが分かる。

2.3.5 有限領域

角度変数は、有限領域

$$0 \leq \theta \leq \pi \quad (2.155)$$

$$0 \leq \phi \leq 2\pi \quad (2.156)$$

で定義された変数である。領域が有限であるので、発散はなく singular な関数は存在しないで、状態は規格化出来る。交換関係

$$[\theta, p_\theta] = i\hbar \quad (2.157)$$

$$[\phi, p_\phi] = i\hbar \quad (2.158)$$

をそのまま固有状態

$$p_\phi |m\rangle = m|m\rangle \quad (2.159)$$

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (2.160)$$

にかけると

$$\hbar \langle m_1 | [\phi, p_\phi] | m_2 \rangle = i\hbar \langle m_1 | m_2 \rangle \quad (2.161)$$

$$\hbar(m_2 - m_1) \langle m_1 | \phi | m_2 \rangle = i\hbar \langle m_1 | m_2 \rangle \quad (2.162)$$

をえる。

$$\langle m | \phi | m \rangle \quad (2.163)$$

が有限ならば、 $m_2 = m_1$ で左辺は零になり、右辺は零ではない。このように、矛盾が導かれる。

何故このような矛盾が引き起こされるのだろうか？有限領域で定義されている角度変数が、物理系を記述する変数として直接現れる事はない。角度変数は、座標の一価関数ではなく、三角関数や指数関数が座標の一価関数である。そのため、角度変数の周期関数である三角関数や指数関数を通して物理系が表現される。これらの周期関数を使う場合は、以下に説明するように上の矛盾はない。

交換関係を角度変数の三角関数を使い、

$$[\sin \theta, p_\theta] = i\hbar \cos \theta \quad (2.164)$$

$$[\cos \theta, p_\theta] = -i\hbar \sin \theta \quad (2.165)$$

とするか、まとめた指数関数で

$$[e^{i\phi}, p_\phi] = i^2 \hbar e^{i\phi} \quad (2.166)$$

と表す場合、両辺に状態 $|m\rangle$ をかけても矛盾はないことを確認しよう。指数関数を使い、交換関係は

$$\begin{aligned}\langle m_1|[e^{i\phi}, p_\phi]|m_2\rangle &= i^2\hbar\langle m_1|e^{i\phi}|m_2\rangle \\ \hbar(m_2 - m_1)\langle m_1|e^{i\phi}|m_2\rangle &= i^2\hbar\langle m_1|e^{i\phi}|m_2\rangle\end{aligned}\quad (2.167)$$

となる。右辺を左辺に移項して、

$$(m_2 - m_1 + 1)\langle m_1|e^{i\phi}|m_2\rangle = 0 \quad (2.168)$$

となり、条件

$$\langle m_1|e^{i\phi}|m_2\rangle \neq 0 \rightarrow (m_2 - m_1 + 1) = 0 \quad (2.169)$$

が得られる。今度は両辺が等しくなり、矛盾はない。

2.3.6 多変数

多くの力学変数 $q_i, i = 1, N$ で記述される力学系では、運動量が

$$p_i = \frac{\partial L(q_i, \dot{q}_j)}{\partial \dot{q}_i} \quad (2.170)$$

と定義され、交換関係

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (2.171)$$

$$[q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0 \quad (2.172)$$

を満たしている。

2.4 シュレーディンガー方程式

質点の物理状態を表すベクトルを、座標表示を使い複素波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ で表そう。

2.4.1 量子力学の第3原理

質量 m の粒子が、ポテンシャル $U(\mathbf{x})$ 中を運動する際に複素波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ が従う波動方程式は、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) = H\psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.173)$$

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{x}), p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad (2.174)$$

である。 H は古典力学で現れるハミルトニアンであり、ラグランジアンが $L(x_i, \dot{x}_i)$ と与えられた系では、

$$H = p_i \dot{x}_i - L(x_i, \dot{x}_i) \quad (2.175)$$

である。ポテンシャル $U(\mathbf{x})$ 中でニュートンの運動方程式に従う質量 m の質点では、グランジアン、運動量、ハミルトニアンが、

$$\begin{aligned} L &= \frac{m\dot{\mathbf{x}}^2}{2} - U(\mathbf{x}) \\ p_i &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i \\ H &= p_i \dot{x}_i - L = \frac{p_i^2}{2m} + U(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2.176)$$

となる。また、一般座標を使い力学系を表現し、力学変数を q_i 運動量を p_j とし、 $H(q_i, p_j)$ をハミルトニアンとする。この力学系で、状態を表す波動関数 $\psi(q_i, p_j, t)$ の時間発展は、シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q_i, p_j, t) = H(q_i, p_j) \psi(q_i, p_j, t) \quad (2.177)$$

で決る。ここでユニタリ演算子 $U(t)$ を

$$U(t) = \exp\left(\frac{H}{i\hbar}t\right) \quad (2.178)$$

と定義しよう。このユニタリ演算子は、方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H(q_i, p_j) U(t) \quad (2.179)$$

を満たすので、シュレーディンガー方程式の時刻 t での解が

$$\psi(q_i, p_j, t) = U(t) \psi(q_i, p_j, 0) \quad (2.180)$$

と表せる。ここで、 $U^\dagger(t)$ は、

$$U^\dagger(t) = \exp\left(-\frac{H}{i\hbar}t\right) \quad (2.181)$$

となるので、明らかにユニタリテイの条件

$$U^\dagger(t)U(t) = U(t)U^\dagger(t) = 1 \quad (2.182)$$

を満たしている。また演算子 $U(t)$ やそのエルミート共役 $U^\dagger(t)$ は

$$[U(t), H] = [U^\dagger(t), H] = 0 \quad (2.183)$$

と、ハミルトニアンと交換する。

また、 $U(t)$ は、初期条件と積の関係式

$$U(0) = 1 \quad (2.184)$$

$$U(t_1)U(t_2) = U(t_1 + t_2) \quad (2.185)$$

を満たしている。

2.4.2 運動方程式

二つの状態 $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ ではさんだ一つの物理量 A の行列要素

$$\langle\psi_1(t)|A|\psi_2(t)\rangle \quad (2.186)$$

の時間依存性は、状態ベクトル $|\psi_1(t)\rangle$ と $|\psi_2(t)\rangle$ が従うシュレーディンガー方程式から決まる。解 (2.180) を方程式 (2.186) に代入して、

$$\langle\psi_1(t)|A|\psi_2(t)\rangle = \langle\psi_1(0)|U^\dagger(t)AU(t)|\psi_2(0)\rangle \quad (2.187)$$

となる。このように、時間に依存する行列要素で、時間に依存する部分を状態ベクトルに含ませる表示法をシュレーディンガー表示という。シュレーディンガー表示では、時間に依存する波動関数から様々な物理情報が引き出せる。

座標や運動量の期待値

$$q_i(t) = \langle\psi(0)|U^\dagger(t)q_iU(t)|\psi(0)\rangle \quad (2.188)$$

$$p_i(t) = \langle\psi(0)|U^\dagger(t)p_iU(t)|\psi(0)\rangle$$

の時間微分は、

$$\frac{d}{dt}\langle q_i(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(0)|U^\dagger(t)[q_i, H]U(t)|\psi(0)\rangle \quad (2.189)$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_i(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(0)|U^\dagger(t)[p_i, H]U(t)|\psi(0)\rangle$$

となる。ここで、交換関係

$$[q_i, H] = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}H = i\hbar\frac{p_i}{m} \quad (2.190)$$

$$[p_i, H] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}H = -i\hbar\frac{\partial U}{\partial q_i}$$

を代入して、期待値が満たす時間発展方程式

$$\frac{d}{dt}\langle q_i(t)\rangle = \langle\frac{p_i(t)}{m}\rangle \quad (2.191)$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_i(t)\rangle = -\langle\frac{\partial U}{\partial q_i}(t)\rangle$$

が得られる。この方程式は、古典力学の運動方程式に一致する。

2.4.3 シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示

上のように、時間に依存する行列要素で、時間に依存する部分を状態ベクトルに含ませる表示法をシュレーディンガー表示という。シュレーディンガー表示では、時間に依存する波動関数から様々な物理情報が引き出せる。

行列要素 (2.186) は、別の表記法

$$\langle \psi_1(0) | A_H(t) | \psi_2(0) \rangle \quad (2.192)$$

$$A_H(t) = U^\dagger(t) A U(t) \quad (2.193)$$

で計算することが出来る。この場合、行列要素は同じであるが、状態ベクトルは時間に依存しないで、演算子が時間に依存することになる。この表示法をハイゼンベルグ表示という。

ハイゼンベルグ表示では、演算子の時間発展は、微分方程式

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_H(t) & \quad (2.194) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^\dagger(t) A U(t) + U^\dagger(t) A i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) \\ &= U^\dagger(t) [A, H] U(t) = [A_H(t), H] \end{aligned}$$

と演算子とハミルトニアンとの交換関係で与えられる。この微分方程式を、ハイゼンベルグ方程式という。ハイゼンベルグ表示では、演算子に関する微分方程式の解から様々な物理情報が引き出せる。ハイゼンベルグ表示で、座標と運動量が従う運動方程式は、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q_{iH}(t) &= \frac{p_{iH}(t)}{m} \\ \frac{d}{dt} p_{iH}(t) &= -\frac{\partial U(q_{iH})}{\partial q_{iH}(t)} \end{aligned} \quad (2.195)$$

である。このように、正準交換関係は、演算子やその期待値に古典的な運動方程式を再現させている。

シュレーディンガー表示では、状態ベクトルが時間発展をにない演算子は時間によらない、逆にハイゼンベルグ表示では、状態ベクトルが時間発展によらず演算子が時間発展を担う。これらの中に位置する表示もある。例えば、相互作用表示では、演算子が自由場の時間発展を担い、状態ベクトルは相互作用によって時間発展する。

2.4.4 定常状態

ハミルトニアンの固有状態は、

$$H\psi_E(q_i, p_j) = E\psi_E(q_i, p_j) \quad (2.196)$$

を満たす。ここで、ハミルトニアンがエルミートな演算子であるので、エネルギー固有値 E は実数であり異なる固有値に対応する固有状態は

$$\langle \psi_{E_1} | \psi_{E_2} \rangle = 0, E_1 \neq E_2 \quad (2.197)$$

と直交する。この時、時間に依存するシュレーディンガー方程式 (2.174) は、簡単な形、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_E(\mathbf{x}, t) = E \psi_E(\mathbf{x}, t) \quad (2.198)$$

となり、指数関数で時間 t に依存する解

$$\psi_E(\mathbf{x}, t) = \exp\left(\frac{E}{i\hbar}t\right) \psi_E(\mathbf{x}, 0) \quad (2.199)$$

となる。 $\exp\left(\frac{E}{i\hbar}t\right)$ は力学変数によらないので定常状態は、時間が経過しても同じ状態である。定常状態は、様々な実験で直接測定にかかる状態であり、重要な働きをする。

固有値 E は、ハミルトニアン演算子の固有値であるエネルギーであり、波動関数の振動数 ν と

$$\nu = \frac{E}{\hbar 2\pi} = \frac{E}{h} \quad (2.200)$$

と関係している。

2.4.5 保存量

ジャコビの恒等式を応用して保存量を扱う。保存量は、時間と共に変化しない物理量であり、物理系の特徴的な性質を示すことが多い。そのため、保存量を知ることや、その性質を知ることによって、物理系の理解が進むことが多い。物理量が演算子となる量子力学では、保存量は時間に依存しない演算子となっている。あからさまには時間によらず、座標や運動量を通して時間に依存する性質をもつハイゼンベルグ表示の物理量 A_H の時間変化は

$$\dot{A}_H = \frac{1}{i\hbar} [H, A_H] \quad (2.201)$$

となることより、右辺が零であるとき即ち

$$[H, A_H] = 0 \quad (2.202)$$

のとき A_H は保存量である。また、これは、

$$[H, A] = 0 \quad (2.203)$$

のとき実現する。このように、量子力学では交換関係を通して物理量の性質が理解出来る。
いま、 A とは異なる B も保存量であるとし、交換関係

$$[H, B] = 0 \quad (2.204)$$

を満たすとしよう。 A と B と二つの保存量があるとき、さらにもう一つの保存量があることがある。この第三の保存量として交換関係 $[A, B]$ がある。これを示すのに、ジャコビの恒等式が応用される。 H と A と B についてのジャコビの恒等式から

$$[H, [A, B]] = -[A, [B, H]] - [B, [H, A]] = 0 \quad (2.205)$$

となるため、 A と B が H と交換するとき、 $[A, B]$ も H と交換してやはり保存量となる。ところで、 $[A, B]$ は、性質の違いから、次の二つの場合に分類される。

(1)

$$[A, B] = 0 \quad (2.206)$$

この場合、交換関係 $[A, B]$ は自明なもの、0、となるので新たな保存量は導かれない。

(2)

$$[A, B] \neq 0 \quad (2.207)$$

この場合、交換関係 $[A, B]$ は A とも B とも異なる非自明なものである。一般には、新たな演算子 C と二つの係数 d_1, d_2 を使い

$$[A, B] = C + d_1 A + d_2 B \quad (2.208)$$

となる。このようにして、二つの保存量がある力学系で新たな保存量を見つけるのに役立つ事になる。

交換関係の代数

いま、上の操作を繰り返し行ない、考えている物理系がもつ保存量がすべて分かったとし、これらを、 N 個の保存量 $Q_i, i = 1, N$ であるとしよう。つまり、 N 個の Q_i 以外には保存量はないとする。このとき、保存量の交換関係

$$[Q_i, Q_j] \quad (2.209)$$

は、 Q_i の線形結合で

$$[Q_i, Q_j] = \sum_k f_{ij}^k Q_k \quad (2.210)$$

と表わされる。ここで、 f_{ij}^k はある定数である。

証明

背理法で証明する。そのため、上を否定し、

$$[Q_i, Q_j] = \sum_k f_{ij}^k Q_k + Z \quad (2.211)$$

となる N 個の Q_i 以外の Z が存在するとする。すると、

$$[H, [Q_i, Q_j]] = [H, \sum_k C_{ij}^k Q_k + Z] = [H, \sum_k C_{ij}^k Q_k] + [H, Z] = [H, Z] \quad (2.212)$$

となり、 Z も保存量である。これは、 N 個の保存量 $Q_i, i = 1, N$ が系のすべての保存量である仮定と矛盾することを示している。だから、こういうことはあり得ず、

$$[Q_i, Q_j] = \sum_k f_{ij}^k Q_k \quad (2.213)$$

である。

交換関係の係数 f_{ij}^k は、 N 個の保存量が持つ性質を決める重要な量であり、後で述べる、角運動量では、 f_{ij}^k は反対称テンソル $\epsilon_{ijk}, i, j, k = 1, 3$ である。

例 1 運動量

自由粒子では、ハミルトニアンが

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 \quad (2.214)$$

$$(2.215)$$

であり、運動量との間で交換関係

$$[p_i, H] = 0$$

を満たす。また、運動量の成分の交換関係は

$$[p_i, p_j] = 0 \quad (2.216)$$

である。

運動量演算子の指数関数であるユニタリ演算子

$$U(\mathbf{a}) = e^{-i \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{p}}{\hbar}} \quad (2.217)$$

は、交換関係 $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$ より

$$\begin{aligned} & U(\mathbf{a})\psi(\mathbf{x})U(\mathbf{a})^{-1} \\ &= \psi(\mathbf{x}) + \frac{a_i}{-i\hbar} [p_i, \psi(\mathbf{x})] + \frac{a_i a_j}{2!} \left[\frac{p_i}{-i\hbar}, \frac{p_j}{-i\hbar}, \psi(\mathbf{x}) \right] + \dots \\ &= \left[1 + a_i \frac{\partial}{\partial x_i} + a_i a_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + \dots \right] \psi(\mathbf{x}) \\ &= \psi(\mathbf{x} + \mathbf{a}) \end{aligned} \quad (2.218)$$

と、座標 \mathbf{x} を \mathbf{a} 平行移動する働きをする。

2.4.6 ネーターの定理と保存量

解析力学で、力学変数の連続的な点変換に対して不変なラグランジアンで記述される力学系には、必ず保存量

$$Q^\alpha = \sum_{i,j} C_{ij}^\alpha p_j q_i \quad (2.219)$$

が存在する。

いまラグランジアン $L(q_i, \dot{q}_j)$ が、変数の連続変換

$$q_i(t) \rightarrow U_{ij} q_j(t) \quad (2.220)$$

に対して不変であるとする。

U_{ij} が δ_{ij} である場合は、変換は

$$q_i(t) \rightarrow \delta_{ij} q_j(t) = q_i(t) \quad (2.221)$$

となり、恒等変換 1 となる。次に、恒等変換 1 から無限小ずれた変換 U_{ij} を考える。この変換を、微少な A 個のパラメーター $\epsilon^\alpha, \alpha = 1, A$ と適当な係数 C_{ij} を使い、

$$U_{ij} = \delta_{ij} + \epsilon^\alpha C_{ij}^\alpha \quad (2.222)$$

と表わす。このとき力学変数は、

$$q_i(t) \rightarrow q_i(t) + \delta q_i(t), \quad (2.223)$$

$$\delta q_i(t) = \sum \epsilon^\alpha C_{ij}^\alpha q_j(t) \quad (2.224)$$

と変換され、ラグランジアンは、

$$L(q_i + \delta q_i(t), \frac{d}{dt}(q_i + \delta q_i(t))) = L(q_i(t), \dot{q}_i(t)) + \delta L \quad (2.225)$$

$$\delta L = \frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i$$

$$= \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i + p_i \delta \dot{q}_i$$

$$= \frac{d}{dt} (p_i C_{ij}^\alpha q_j) \epsilon^\alpha$$

と変換される。ラグランジアンが、変換に対して不変であるときは、任意のパラメーター ϵ^α に対して、

$$\delta L = 0 \quad (2.226)$$

となり、結果として

$$\frac{d}{dt}Q^\alpha = 0, \quad (2.227)$$

$$Q^\alpha = p_i C_{ij}^\alpha q_j \quad (2.228)$$

となり、 Q^α が時間に依存しない保存量であることを示している。

量子論では、演算子は正準交換関係に従うが、位置座標と運動量に従う運動方程式は古典的な運動方程式に一致する。そのため、保存量 Q^α は、量子論でも保存量である。

Q^α がすべての保存量を含むと仮定すると、交換関係 $[Q^\alpha, Q^\beta]$ もやはり保存量であることより、これはある定数で

$$[Q^\alpha, Q^\beta] = \sum_\gamma f^{\alpha\beta\gamma} Q^\gamma \quad (2.229)$$

と Q^α の線形結合になる。この関係式を、代数が閉じているという。また、保存量 Q^α は位置座標や運動量との間に、交換関係

$$\frac{1}{i\hbar}[Q^\alpha, q_i] = C_{ij}^\alpha q_j \quad (2.230)$$

$$\frac{1}{\hbar}[Q^\alpha, p_i] = C_{ij}^\alpha p_j \quad (2.231)$$

を満たしている。上式の右辺は、位置座標が受ける微少変換量の傾き (2.224) に一致している。

2.5 問題

1 3角不等式

ノルム

$$|u|^2 = (u, u) \quad (2.232)$$

が満たす三角不等式

$$|u| + |v| \geq |u + v| \quad (2.233)$$

を証明せよ。

ヒント：まず、シュワルツの不等式

$$((u, v) + (v, u))^2 - 4(u, u)(v, v) \leq 0 \quad (2.234)$$

を、次の実数パラメーター t の2次式が必ず正の値となる、正定置であることを使う。

$$|u + tv|^2 = |u|^2 + t^2|v|^2 + t((u, v) + (v, u)) \geq 0 \quad (2.235)$$

から証明する。

2 確率

二つの独立事象が、確率で記述されるために、必要なことは何か？またそれぞれの確率が、 P_1 、 P_2 であるときどちらかの事象がおきる確率は和である。

量子力学に対して確率解釈を適用して矛盾がないことを示せ。

解答：

二つの独立事象が、確率で記述されるためには、1. 必ずどちらかが起きること、2. 両者を区別することが可能であり、片方が起きれば他方が起きないこと、3. どちらかが起きる確率、すなわち全確率は1である。が必要である。

確率解釈の無矛盾性は、それぞれの事象の確率 P_i が次の関係式を満たすことである。

$$P_i \geq 0, P_{iorj} = P_i + P_j, \sum_i P_i = 1 \quad (2.236)$$

3 デイラックのデルタ関数

交換関係からデイラックのデルタ関数の性質を運動量の固有状態と、位置の固有状態の変換関数について示せ、また角運動量の固有状態についてはどのような変更がなされるか？

解答：

無限領域における位置と運動量

交換関係

$$[p, q] = i\hbar \quad (2.237)$$

の左辺に固有値 ξ をもつ q の固有状態を、右辺に固有値 ξ をもつ q の固有状態

$$\langle \xi | q = \xi \langle \xi |, q | \eta \rangle = \eta | \eta \rangle, \quad (2.238)$$

をかける。すると

$$\langle \xi | [p, q] | \eta \rangle = (\eta - \xi) \langle \xi | p | \eta \rangle \quad (2.239)$$

が得られる。ところで、左辺は交換関係から、

$$\langle \xi | [p, q] | \eta \rangle = i\hbar \langle \xi | \eta \rangle \quad (2.240)$$

となる。よって、

$$(\eta - \xi) \langle \xi | p | \eta \rangle = i\hbar \langle \xi | \eta \rangle \quad (2.241)$$

が得られる。これより、

$$\eta - \xi \neq 0, \langle \xi | p | \eta \rangle = 0, \quad (2.242)$$

$$\int d\xi (\eta - \xi) \langle \xi | p | \eta \rangle = i\hbar \quad (2.243)$$

となる。

角度変数における位置と運動量

角度 θ は $-\pi$ から π までの有限領域で値をとる。この点で、角度変数の関数は、すべて規格化でき

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta |f(\theta)|^2 = 1 \quad (2.244)$$

となる。角度 θ に共役な運動量を L_z とおく。これらは、交換関係

$$[L_z, \theta] = i\hbar \quad (2.245)$$

を満たすとする。はじめ θ の固有状態

$$\theta|\theta_i\rangle = \theta_i|\theta_i\rangle \quad (2.246)$$

を使い、上の無限領域の場合と同じ計算を試みる。

$$\langle\theta_1|[L_z, \theta]|\theta_2\rangle = i\hbar\langle\theta_1|L_z|\theta_2\rangle \quad (2.247)$$

$$\langle\theta_1|[L_z, \theta]|\theta_2\rangle = (\theta_2 - \theta_1)\langle\theta_1|L_z|\theta_2\rangle \quad (2.248)$$

4 定常状態

定常状態の性質

定常状態は、時間が経過しても変化しない状態であり、

$$|\psi(t, \vec{x})|^2 = |\psi(0, \vec{x})|^2, \quad (2.249)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d\vec{x} \psi^*(t, \vec{x}) O(x, \partial_x) \psi(t, \vec{x}) = 0 \quad (2.250)$$

を満たす。これらの等式を満たすのは、任意の時刻における波動関数が、

$$\psi(t, \vec{x}) = e^{i\alpha(t)} \psi(0, \vec{x}) \quad (2.251)$$

となるときに限られる。これを波動方程式に代入して得られる方程式

$$-\hbar\dot{\alpha}(t)\psi(0, \vec{x}) = H\psi(0, \vec{x}) \quad (2.252)$$

で、さらに両辺を $\psi(0, \vec{x})$ で割って等式

$$-\hbar\dot{\alpha}(t) = \frac{H\psi(0, \vec{x})}{\psi(0, \vec{x})} \quad (2.253)$$

が得られる。ここで、左辺は座標 \vec{x} によらない数であり右辺は t によらない数である。そのため、両辺がこれらの変数 t, \vec{x} に依存しない定数である。いま、この定数を E とする。するとこの結果、

$$-\hbar\dot{\alpha}(t) = E = \frac{H\psi(0, \vec{x})}{\psi(0, \vec{x})} \quad (2.254)$$

となり、一つの未定な定数 E をもつ二つの方程式

$$\alpha(t) = -\frac{E}{\hbar}t, \quad (2.255)$$

$$H\psi(0, \vec{x}) = E\psi(0, \vec{x}) \quad (2.256)$$

が定常状態を表す方程式である。

非定常状態の例

異なるエネルギー E を持つ波動を複数量重ね合わせた状態、

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_l a_l e^{-iE_l t} \psi_{E_l}(t, \vec{x}) \quad (2.257)$$

は定常状態ではない。例えば、二つの状態の和

$$\psi(t, \vec{x}) = a_1 \psi_{E_1}(t, \vec{x}) + a_2 \psi_{E_2}(t, \vec{x}) \quad (2.258)$$

は、

$$\begin{aligned} |\psi(t, \vec{x})|^2 &= |a_1|^2 |\psi_{E_1}(0, \vec{x})|^2 + |a_2|^2 |\psi_{E_2}(0, \vec{x})|^2 \\ &+ a_1^* a_2 e^{-i(E_1 - E_2)t} \psi_1(0, \vec{x})^* \psi_2(0, \vec{x}) + a_1 a_2^* e^{+i(E_1 - E_2)t} \psi_1(0, \vec{x}) \psi_2(0, \vec{x})^* \end{aligned} \quad (2.259)$$

となり時間に依存する確率をもち定常状態ではない。

5 ヤコビの恒等式

N 個の物理量 $Q_i (i = 1, N)$ が、

$$Q_i, i = 1, N \quad (2.260)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} Q_i = \frac{1}{i\hbar} [H, Q_i] = 0 \quad (2.261)$$

を満たすとする。

このとき、交換関係

$$[H, Q_i Q_j] = [H, Q_i] Q_j + Q_i [H, Q_j] = 0 \quad (2.262)$$

から、 $Q_i Q_j$ も保存量である (?)。

また、ヤコビの恒等式

$$[H, [Q_i, Q_j]] + [Q_i, [Q_j, H]] + [Q_j, [H, Q_i]] = 0 \quad (2.263)$$

より、交換関係 $[Q_i, Q_j]$ も保存量である。

6 エーレンフェストの定理

運動方程式、交換関係から、量子力学の方程式を古典力学の運動方程式と関連づけるハミルトニアンが

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2M} + V(\vec{x}) \quad (2.264)$$

であるポテンシャル V 中にある質量 M の質点の従う方程式を考えよう。
古典力学の運動方程式は、ポアッソン括弧を使い

$$\dot{p}_i = \{H, p_i\}_{PB} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{\partial V}{\partial q_i} \quad (2.265)$$

$$\dot{q}_i = \{H, q_i\}_{PB} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{2M} \quad (2.266)$$

である。ここで、ポアッソン括弧の関係式

$$\{q_i, q_j\}_{PB} = \{p_i, p_j\}_{PB} = 0, \{q_i, p_j\}_{PB} = \delta_{ij} \quad (2.267)$$

を使った。

一方量子力学の運動方程式は、交換関係を使い

$$\dot{p}_i = \frac{1}{i\hbar} [H, p_i] = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{\partial V}{\partial q_i} \quad (2.268)$$

$$\dot{q}_i = \frac{1}{i\hbar} [H, q_i] = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{2M} \quad (2.269)$$

となる。ここで、交換関係の関係式

$$[q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0, [q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (2.270)$$

を使った。

よって運動方程式は、古典力学と量子力学で同じものになる。

7 表示

表示の問題、表示の変換、シュレーディンガー表示、ハイゼンベルグ表示、中間表示（含む相互作用表示）

8 行列の対角化

行列の固有値問題、対角化

9 パウリ行列

パウリ行列

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

を対角化せよ。

10 交換関係

交換関係に関する分配則

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad (2.271)$$

$$\{A, BC\} = \{A, B\}C - B\{A, C\} \quad (2.272)$$

を証明せよ。ただし、

$$[A, B] = AB - BA \quad (2.273)$$

$$\{A, B\} = AB + BA \quad (2.274)$$

である。

また a_i と a_j^\dagger の間に次の交換関係、並びに b_i と b_j^\dagger の間に次の反交換関係

$$[a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (2.275)$$

$$\{b_i, b_j\} = \{b_i^\dagger, b_j^\dagger\} = 0, \{b_i, b_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (2.276)$$

が成立しているとする。この時、分配則を繰り返し使うことにより、以下の交換関係

$$[a_i^\dagger A_{ij} a_j, a_k^\dagger B_{kl} a_l] = a_i^\dagger [A, B]_{ij} a_j \quad (2.277)$$

$$[b_i^\dagger A_{ij} b_j, b_k^\dagger B_{kl} b_l] = b_i^\dagger [A, B]_{ij} b_j \quad (2.278)$$

を証明せよ。

問題 11 フーリエ級数とフーリエ変換

$-l \leq x \leq l$ で定義された関数 $f(x)$ がこの区間で連続でありまた $f(-l) = f(l)$ を満たし、かつ $f'(x)$ が不連続となる点が有限個しかない場合、

$$f(x) = a_0/2 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos \frac{n\pi}{l}x + b_n \sin \frac{n\pi}{l}x) \quad (2.279)$$

とフーリエ級数で表わせる。この時。次の関係を示せ。

(1)

$$a_m = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \cos \frac{m\pi}{l}x dx \quad (2.280)$$

$$b_m = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \sin \frac{m\pi}{l}x dx \quad (2.281)$$

(2)

$$\frac{1}{l} \int_{-l}^l dx |f(x)|^2 = a_0^2/2 + \sum_l (a_l^2 + b_l^2) \quad (2.282)$$

(3) $f(x) = x^2$ であるとき、係数 a_0, a_l, b_l を求めよ。

問題 12 フーリエ級数とフーリエ変換

$-l \leq x \leq l$ で定義された関数 $f(x)$ がこの区間で連続でありまた $f(-l) = f(l)$ を満たし、かつ $f'(x)$ が不連続となる点が有限個しかない場合、

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} (c_n e^{\frac{in\pi x}{l}}) \quad (2.283)$$

とフーリエ級数で表わせる。この時。次の関係を示せ。

(1)

$$c_m = \frac{1}{2l} \int_{-l}^l f(x) e^{\frac{im\pi x}{l}} dx \quad (2.284)$$

(2)

$$\frac{1}{2l} \int_{-l}^l dx |f(x)|^2 = \sum_l c_l^2 \quad (2.285)$$

(3) $l \rightarrow \infty$ の極限を考えて、

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} a(k) e^{ikx} dk \quad (2.286)$$

$$a(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

を示せ。

第3章 一次元運動

粒子の運動は、一次元空間で最も単純である。シュレーディンガー方程式は、難しい偏微分方程式であるが、一次元空間では比較的やさしくなり、しかも解析的に解ける場合がいくつかある。量子力学の特徴的な性質は、次元に無関係であり、一次元でもすべて現れる。そのため、量子力学の原理的な面やシュレーディンガー方程式の解法や解の性質を知るのに一次元の問題を調べるのは有益である。また、近年の目ざましい技術の進歩の結果、一次元物理系を作成できるようになって来た。そのため、一次元シュレーディンガー方程式で得られた結果を、直接実験的に検証することも可能である。

質量 m の粒子は、空間一次元では一つの空間座標 x と時間 t の波動関数 $\psi(x, t)$ で表わされる。波動関数はシュレーディンガー方程式、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t) \quad (3.1)$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(x), p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.2)$$

に従う。ここで、 H は、古典力学で重要な働きをするハミルトニアンである。量子力学では、運動エネルギー $\frac{p^2}{2m}$ 、ポテンシャル $U(x)$ 、ハミルトニアンはエルミートな演算子である。 H がエルミートであるので、固有値であるエネルギーは実数であり、また方程式 (3.1) の解は、時間によらない全確率

$$\int dx \rho(x, t) \quad (3.3)$$

をもつ。全確率が時間によらず一定の値となることは、この系で確率密度 $\rho(x, t)$ と確率の流れ $j(x, t)$ が、波動関数とその複素共役の積で

$$\rho(x, t) = \psi^*(x, t)\psi(x, t) \quad (3.4)$$

$$j(x, t) = \psi^*(x, t) \frac{-i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) - \frac{-i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x, t) \psi(x, t) \quad (3.5)$$

となっていて、連続の式を満たすことよりわかる。実際、上のシュレーディンガー方程式 (3.1) より、

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(x, t)\psi(x, t) + \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{-1}{i\hbar} \left(\left(\frac{-i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + U(x) \right) \psi^*(x, t) \psi(x, t) + \frac{1}{i\hbar} \psi^*(x, t) \left(\left(\frac{-i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + U(x) \right) \\
&= \frac{-1}{i\hbar} \left(\left(\frac{-i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi^*(x, t) \psi(x, t) + \psi^*(x, t) \left(\frac{-i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x, t) \right) \\
\frac{\partial}{\partial x} j &= \frac{1}{i\hbar} \left(\left(\frac{-i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi^*(x, t) \psi(x, t) + \psi^*(x, t) \left(\frac{-i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x, t) \right) \quad (3.7)
\end{aligned}$$

となり、ポテンシャルに無関係な関係式である連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0 \quad (3.8)$$

を満たす。連続の式は、まさに確率が保存することを示している。連続の式より、空間積分した全確率は、

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dx \rho(x, t) = - \int dx \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) = -[\rho(x)]_{x=-\infty}^{\infty} = 0 \quad (3.9)$$

となり時間によらない。ここで、十分遠方では $\psi = 0$ とする。

3.1 平面波

自由な粒子では、 $U(x) = 0$ であり、波動方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \frac{p^2}{2m} \psi(x, t) \quad (3.10)$$

である。 x を対角形とする座標表示で、波動方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x, t) \quad (3.11)$$

となる。この方程式は線形であるので、2つの方程式の解 ψ_1 と ψ_2 の線形結合、

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad (3.12)$$

は、やはり同じ方程式の解となる。

定常状態は、時間が経過しても変わらない状態を表わし、波動関数は時間について指数関数型

$$\psi(x, t) = \exp\left(\frac{Et}{i\hbar}\right) \psi(x, 0) \quad (3.13)$$

である。ここで、座標の関数 $\psi(x, 0)$ は、 E をエネルギー固有値とする常微分方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x, 0) = E \psi(x, 0) \quad (3.14)$$

を満たす。 E は、古典力学のエネルギーに対応する量子力学のエネルギーである。

3.1.1 進行波

ここで、方程式 (3.11) の特解として、平面波

$$\psi(x, t) = e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - kx)} \quad (3.15)$$

解を求めよう。式 (3.15) を波動方程式 (3.11) に代入して、エネルギーと運動量並びに波数ベクトルとの関係

$$E = \frac{p^2}{2m}, p = \hbar k \quad (3.16)$$

を得る。エネルギーが運動量の二乗に比例するのは、古典力学と等価である。この波で、位相の変化が一定であるのは、

$$\frac{E}{\hbar}t - kx = C \quad (3.17)$$

を満たす x と t である。これを解いて、 x が t に比例して変化し波が、+方向に進行することが分かる。さらに波の振動数 ν と波長 λ は、

$$\nu = \frac{E}{2\pi\hbar} = \frac{E}{h} \quad (3.18)$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \quad (3.19)$$

と、アインシュタインの関係式とドブロイの関係式に一致する振動数や波長を持つ。なお、プランク定数の値 (1.18) より、波長の値は、例えば、電子や陽子が摂氏 20 度 (293 K) のエネルギー $E = \frac{3}{2}kT$ を持つ場合には、

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (3.20)$$

$$p = \sqrt{2m \frac{3}{2}kT}$$
$$= \sqrt{3mkT}$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3mkT}} \quad (3.21)$$

$$= ; \text{電子} \quad (3.22)$$

$$= ; \text{陽子} \quad (3.23)$$

のようになる。この大きさは、非常に小さな値である。

平面波では、確率密度と流れは、 x や t に依存しない一定の値

$$\rho(x, t) = 1 \quad (3.24)$$

$$j(x, t) = v, v = \frac{p}{m} \quad (3.25)$$

であり、また流れは速度に比例している。平面波は、エネルギー H と運動量 p の固有状態であり、

$$He^{-i(\frac{E}{\hbar}t-kx)} = \frac{p^2}{2m}e^{-i(\frac{E}{\hbar}t-kx)} \quad (3.26)$$

$$pe^{-i(\frac{E}{\hbar}t-kx)} = \hbar ke^{-i(\frac{E}{\hbar}t-kx)} \quad (3.27)$$

を満たす。平面波のエネルギーや運動量の固有値は古典粒子の値に一致した、運動量と速度の関係も古典粒子のものと同じである。自由粒子は、平面波であらわされ、エネルギーや運動量の固有値は、古典力学と同じ値を持っている。

縮退

エネルギーの式 (3.16) から、運動量が $+p$ の状態と $-p$ の状態は、同じエネルギーを持つ異なる状態である。- 方向に進行する波、

$$\psi(x, t) = e^{-i(\frac{E}{\hbar}t+kx)} \quad (3.28)$$

は、式 (3.15) の波と同じエネルギー $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ を持つ。但し、確率密度と流れが、 x や t に依存しない点は同じであるが、値は

$$\rho(x, t) = 1 \quad (3.29)$$

$$j(x, t) = -\frac{p}{m} \quad (3.30)$$

となり、流れの向きは逆である。

このように、自由な波には同じエネルギーをもつ複数の異なる状態が存在する。これを、縮退した状態が存在すると表現し、同じエネルギーをもつことなる状態の数を縮退数（度）という。後で述べるように、縮退度は高次元空間ではより大きくなり、またエネルギーの値により変化する。

3.1.2 定在波

二つの縮退した状態は、同じエネルギーをもつので、それらの線形結合

$$\psi(x, t) = A_+e^{-i(\frac{E}{\hbar}t+kx)} + A_-e^{-i(\frac{E}{\hbar}t-kx)} \quad (3.31)$$

もやはり同じエネルギーを持っている。係数を変えると波の性質は、様々に変わる。2 係数が、 $A_+ = A_- = A$ 、と等しい時、関数は

$$A_+(e^{-i(\frac{E}{\hbar}t+kx)} + e^{-i(\frac{E}{\hbar}t-kx)}) = 2Ae^{-i\frac{E}{\hbar}t} \cos kx \quad (3.32)$$

となり、また 2 係数が $A_+ = -A_- = A$ のとき、関数は

$$A_+(e^{-i(\frac{E}{\hbar}t+kx)} - e^{-i(\frac{E}{\hbar}t-kx)}) = -2iAe^{-i\frac{E}{\hbar}t} \sin kx \quad (3.33)$$

となる。これらは、時間に無関係に波動関数の値が零になる節をもつ定在波である。節の位置は、式 (3.32) で

$$x = \frac{(n + \frac{1}{2})\pi}{k} \quad (3.34)$$

であり、式 (3.33) で

$$x = \frac{n\pi}{k} \quad (3.35)$$

となる。定在波の確率密度と確率の流れは、

$$\rho(x, t) = 4|A|^2 \frac{1}{2} (1 \pm \cos 2kx) \quad (3.36)$$

$$j(x, t) = 4|A|^2 \frac{1}{2} \sin 2kx \quad (3.37)$$

となり、これらを波長より充分長い領域で平均した値は

$$\rho(x, t) = 4|A|^2 \frac{1}{2} \quad (3.38)$$

$$j(x, t) = 0 \quad (3.39)$$

である。密度は一定であり、局所的に + や - に変化した流れであり、また全体としては流れがない事がわかる。

有限系

次に、一次元系の長さが有限である場合を考察しよう。有限の長さ a を持つ一次元系の場合、端がある。端で波動関数が満たす条件を境界条件という。境界条件は、波動方程式とは独立なものであり、物理系がどのように作成されたかに依って決まる。以下に、境界で密度

$\rho(x, t)|_{x=\text{境界}}$ が零となる固定端、流れ $j(x, t)|_{x=\text{境界}}$ が零となる自由端、両端が連結されていて端がない周期条件の三種類の境界条件を考察する。物理系で実現する波動は、同じ波動方程式でも境界条件を変えると異なる。境界条件に応じて固有関数が決まる。この事情は、弦や膜における古典的な振動や、各種の波動現象で共通である。

固定端

固定された端では、密度 $\rho(x, t)|_{x=\text{境界}}$ が零となる。そのため、波動関数が零となる。よって、境界条件は

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad (3.40)$$

となる。

これを式 (3.31) に代入して、

$$A_+ + A_- = 0 \quad (3.41)$$

$$A_+ e^{ika} + A_- e^{-ika} = A_+ (2i \sin ka) = 0 \quad (3.42)$$

となるので、これらを満たすのは、特別な k の値、

$$\sin ka = 0 \quad (3.43)$$

$$ka = n\pi, n = \text{整数} \quad (3.44)$$

に限られる。このとき、エネルギーは、

$$E = \frac{p_n^2}{2m}, p_n = \frac{\hbar\pi}{a} n \quad (3.45)$$

ととびとびの値をとり、規格化された関数は、

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin k_n x, k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (3.46)$$

となり、また内積が

$$(u_n, u_m) = \delta_{n,m} \quad (3.47)$$

となる。これらを、固定端の場合のエネルギーの固有値と固有関数という。

この状況は、有限の長さの古典的な弦の振動で、定常状態ではとびとびの振動数を持つ固有振動が実現するのと同じである。図のように、この場合、両端が固定されているので、波長の半整数倍が弦の長さとなる。

自由端

流れ $j(x, t)|_{x=\text{境界}}$ が零となる自由端の場合では、波動関数の微分が零となる。よって、境界条件は

$$\psi'(0) = \psi'(a) = 0 \quad (3.48)$$

である。

これを式 (3.31) に代入して、

$$A_+ - A_- = 0 \quad (3.49)$$

$$A_+ e^{ika} - A_- e^{-ika} = A_+ (2i) \sin ka = 0 \quad (3.50)$$

となるので、これらを満たすのは、特別な k の値、

$$\sin ka = 0 \quad (3.51)$$

$$ka = n\pi, n = \text{整数} \quad (3.52)$$

に限られる。このとき、エネルギーは、

$$E = \frac{p_n^2}{2m}, p_n = \frac{\hbar\pi}{a} n \quad (3.53)$$

ととびとびの値をとり、関数は、

$$u_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos k_n x, k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (3.54)$$

となり、内積は (3.47) に一致する。これらを、自由端の場合のエネルギーの固有値と固有関数という。

周期条件

$x = 0$ と $x = a$ がつながっている一次元系では、周期境界条件

$$\psi(x + a) = \psi(x) \quad (3.55)$$

が満たされる。

周期境界条件を式 (3.31) に代入して、

$$e^{ika} = 1 \quad (3.56)$$

となるので、これらを満たすのは、特別な k の値、

$$ka = 2n\pi, n = \text{整数} \quad (3.57)$$

に限られる。このとき、エネルギーは、

$$E = \frac{p_n^2}{2m}, p_n = \frac{\hbar\pi}{a} 2n \quad (3.58)$$

ととびとびの値をとり、関数は、

$$u_n = \sqrt{\frac{1}{a}} e^{\pm ik_n x}, k_n = \frac{n\pi}{2a} \quad (3.59)$$

となり、内積は (3.47) に一致する。これらを、周期境界条件の場合のエネルギーの固有値と固有関数という。この関数はさらに、運動量演算子の固有状態であり、

$$pu_n = p_n u_n, p_n = \hbar k \quad (3.60)$$

を満たしている。

それぞれの境界条件のもとで、固有関数が規格化直交系をなす。

3.2 波束

次に、平面波を重ね合わせた波を考察しよう。重ね合わせの原理より、波動方程式 (3.11) の一般解は任意関数 $a(k)$ を使い、

$$\psi(x, t) = \int dk a(k) e^{-i(\frac{E(k)}{\hbar}t - kx)}, E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.61)$$

と表せる。実際、この関数が波動方程式 (3.11) を満たす事は、

$$\begin{aligned} & (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}) \psi(x, t) \\ &= \int dk a(k) (E(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) e^{-i(\frac{E(k)}{\hbar}t - kx)} = 0 \end{aligned} \quad (3.62)$$

と確認できる。波 (3.61) は異なるエネルギーを重ねあわせた関数であるので、当然のことながら定常状態ではない。だから、波動関数、確率密度、確率の流れは時刻と共に変化する。 $a(k)$ の形に依存して、波動関数が時間と共にどのように変化するかが決まる。

3.2.1 最小波束

今、関数 $a(k)$ として中心が k_0 で広がりが $\frac{1}{\sqrt{\alpha}}$ のガウス関数

$$a(k) = N e^{-\alpha(k-k_0)^2} \quad (3.63)$$

$$N = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{-1/4} \quad (3.64)$$

の場合を考察する。ガウス関数は $k = k_0$ で最大になり、 $k \neq k_0$ でなめらかに変化して $k - k_0 \rightarrow \pm\infty$ で急速に零に近づく関数である。

x の関数 (3.61) は k の関数 (3.63) をフーリエ変換した関数であり形は、

$$\psi(x, t) = \int dk N e^{-\alpha(k-k_0)^2 - i(\frac{\hbar k^2}{2m}t - kx)} \quad (3.65)$$

$$\begin{aligned}
&= \tilde{N} \exp\left(-\frac{1}{4\left(\alpha - \frac{i\hbar t}{2m}\right)}(x - v_0 t)^2 - i\left(\frac{\hbar k_0^2}{2m}t - k_0 x\right)\right) \\
v_0 &= \frac{p_0}{m}, \tilde{N} = N\left(\frac{\pi}{\alpha - \frac{i\hbar t}{2m}}\right)^{1/2}
\end{aligned} \tag{3.66}$$

であり、 $t = 0$ では、

$$\psi(x, 0) = N\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{4\alpha}x^2 - ik_0 x\right) \tag{3.67}$$

となり、座標表示でもガウス型の関数となる。

次にこの関数の時間発展をおってみよう。

小さな時間 t

$$\alpha \gg \frac{\hbar t}{2m} \tag{3.68}$$

となる早い時刻では、波動関数は、

$$\psi(x, t) = \tilde{N} \exp\left(-\frac{1}{4\alpha}(x - v_0 t)^2 - i\left(\frac{\hbar k_0^2}{2m}t - k_0 x\right)\right) \tag{3.69}$$

$$v_0 = \frac{p_0}{m}, \tilde{N} = N\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} \tag{3.70}$$

となり、関数は、速度 v_0 で移動する中心の回りに幅 $\sqrt{\alpha}$ で広がった関数を表す。拡がり $\sqrt{\alpha}$ が小さい時、波は速度 v_0 の小さな粒子として振る舞う。通常の場合は、この時間領域を考察するので十分である。

大きな時間 t

$$\frac{\hbar t}{2m} \gg \alpha \quad (3.71)$$

となる極めて遅い時刻では、波動関数は、

$$\psi(x, t) = \tilde{N} \exp\left(-\frac{1}{4\frac{-i\hbar t}{2m}}(x - v_0 t)^2 - i\left(\frac{\hbar k_0^2}{2m}t - k_0 x\right)\right) \quad (3.72)$$

$$v_0 = \frac{p_0}{m}, \tilde{N} = N\left(\frac{\pi}{\frac{-i\hbar t}{2m}}\right)^{1/2} \quad (3.73)$$

と x についてゆっくりと振動する関数となる。振動の形から見積もる波束の大きさは、時間に比例して

$$\frac{2\hbar t}{m} \quad (3.74)$$

で与えられ、徐々に大きくなる。ガウス波束は、早い時刻では、波束の形を保ちながら時刻と共に平行移動を行ない、その後ゆっくりと波束が大きくなり、十分時間が経過した後では、十分拡がる。

3.2.2 不確定性関係

時刻 $t = 0$ における波動関数 (3.69) の座標の拡がり δx と運動量の拡がり δp は、

$$(\Delta x)^2 = \langle \psi | (x - \langle x \rangle)^2 | \psi \rangle \quad (3.75)$$

$$(\Delta p)^2 = \langle \psi | (p - \langle p \rangle)^2 | \psi \rangle \quad (3.76)$$

$$\langle O \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle \quad (3.77)$$

で計算される。両者の積は、

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad (3.78)$$

$$(3.79)$$

と幅 α に依存しない一定の値となる。だから、

$$\Delta x \rightarrow 0 \quad (3.80)$$

とすると、

$$\Delta p \rightarrow \infty \quad (3.81)$$

となり、逆に

$$\Delta p \rightarrow 0 \quad (3.82)$$

とすると

$$\Delta x \rightarrow \infty \quad (3.83)$$

になる。両者が同時に零に近づくことはあり得ない。この等式は、 x と p の交換関係に起源を持ち、一般の波動関数の場合は、必ずしも等号が成立するわけではなく、等号か不等号が成立する。

一般的な不確定性関係

座標の拡がり Δx と運動量の拡がり Δp の積は、任意の関数で普遍的な不等式を満たしている。いま、 x_0 と p_0 を x や p の平均値を示す定数として、

$$\langle \psi | x - x_0 | \psi \rangle = 0, \quad (3.84)$$

$$\langle \psi | p - p_0 | \psi \rangle = 0, \quad (3.85)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (3.86)$$

とする。ここで、状態 ψ に任意のパラメーター s を持つ演算子 $(x - x_0 + is(p - p_0))$ 状態 ψ にかけた状態 Ψ のノルムを $f(s)$ 、

$$f(s) = \langle \Psi | \Psi \rangle \quad (3.87)$$

$$|\Psi\rangle = \langle \psi | (x - x_0 + is(p - p_0)) | \Psi \rangle = (x - x_0 - is(p - p_0)) | \psi \rangle \quad (3.88)$$

とおく。状態のノルムはいつも正符号の値をとる正定値性から、パラメーター s の実二次式 $f(s)$ は正定値である。簡単のために、

$$\tilde{x} = x - x_0, \tilde{p} = p - p_0 \quad (3.89)$$

とおく。すると、

$$f(s) = \langle \psi | \tilde{x}^2 | \psi \rangle + s^2 \langle \psi | \tilde{p}^2 | \psi \rangle + s \langle \psi | -i[\tilde{x}, \tilde{p}] | \psi \rangle \quad (3.90)$$

$$= \langle \psi | \tilde{x}^2 | \psi \rangle + s^2 \langle \psi | \tilde{p}^2 | \psi \rangle + s\hbar$$

$$= \langle \psi | \tilde{p}^2 | \psi \rangle \left(s + \frac{\hbar}{2\langle \psi | \tilde{p}^2 | \psi \rangle} \right)^2 + \langle \psi | \tilde{x}^2 | \psi \rangle - \frac{\hbar^2}{4\langle \psi | \tilde{p}^2 | \psi \rangle} \quad (3.91)$$

となるので、 $f(s)$ の最小値は

$$\langle \psi | \tilde{x}^2 | \psi \rangle - \frac{\hbar^2}{4\langle \psi | \tilde{p}^2 | \psi \rangle} \geq 0 \quad (3.92)$$

となる。これより、拡がりの積についての不等式

$$\sqrt{\langle \psi | \tilde{p}^2 | \psi \rangle} \sqrt{\langle \psi | \tilde{x}^2 | \psi \rangle} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.93)$$

が成立することがわかる。この不等式をハイゼンベルの不確定性関係とよぶ。

ここで、ある s で状態 $|\Psi\rangle$ のノルムが零になるとき、等号が成立する。これはまた、ある s で、

$$|\Psi\rangle = (\tilde{x} - is\tilde{p})|\psi\rangle = 0 \quad (3.94)$$

$$(x - isp)|\psi\rangle = (x_0 - isp_0)|\psi\rangle \quad (3.95)$$

となる場合である。これは微分方程式で

$$(x + s\frac{\partial}{\partial x})\psi(x) = (x_0 - ip_0)\psi(x) \quad (3.96)$$

となり、さらにこの解は、

$$\psi(x) = Ne^{-ip_0x - \frac{1}{2s}(x-x_0)^2} \quad (3.97)$$

となる。ここに得られた関数は前節の関数 (3.69) に一致する。

3.2.3 一般の波束

では、上で見た座標の拡がりや運動量の拡がりの積が示す不確定性関係が、最小値より大きくなる波束は、如何なる形をしているのだろうか？ガウス波束に近いものでは、ガウス波束の $a(k)$ に適当な関数をかけた

$$a(k) = Ne^{-\alpha(k-k_0)^2} H_n(\sqrt{\alpha}(k-k_0)) \quad (3.98)$$

$$N = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{-1/4} \times C \quad (3.99)$$

を使えば良い。

3.3 箱型ポテンシャルによる束縛状態

この節からは、ポテンシャル中の質点の運動を考察する。最も簡単な場合は、一定な値を持つポテンシャルである。

ポテンシャルが、全空間で一定で

$$U(x) = V_0 \quad (3.100)$$

である場合は、

$$H - V_0 \quad (3.101)$$

を新たなハミルトニアンとみなせば、自由場と完全に同じになる。もともと、ポテンシャル U は、力 F が

$$F = -\frac{\partial}{\partial x}U(x) \quad (3.102)$$

となるように決定されている。一定のポテンシャルは、力を与えないので、波動関数が V_0 によらずに同等な関数となるこの結果は当然である。

次に、ポテンシャルが、部分的に一定で、

$$\begin{aligned} U(x) &= 0, x \leq 0 \\ &= -V_0, 0 \leq x \leq a \\ &= 0, a \leq x \end{aligned} \quad (3.103)$$

である箱型ポテンシャルを考察する。ポテンシャルは $x = 0$ と $x = a$ の2点で不連続である。ここで、 $V_0 > 0$ とする。この場合、力 F は

$$F = V_0(\delta(x) - \delta(x - a)) \quad (3.104)$$

となり、 $x = 0$ で正方向に $x = a$ で負方向に短距離の力が働く。このとき、古典力学では、

位置と速度は、時間の連続関数であり、 $x = 0$ と $x = a$ の間で、往復運動する解があり、量

量子力学では、波動関数とその微分は時間と座標の連続関数であり、 $x = 0$ と $x = a$ の間で値を持つ波動関数の解が存在すると予想される。この解は、この有限領域で値を持ち、 $x \rightarrow \infty$ や $x \rightarrow -\infty$ で大きさが零となる束縛状態である。

3.3.1 束縛状態

前節で、境界条件を満たす波動方程式のエネルギーは、とびとびの値をとる例を見てきた。この章で考察する束縛状態は、やはり境界条件

$$|\psi(x)| \rightarrow 0, |x| \rightarrow \infty \quad (3.105)$$

を満たし、 $\int dx |\psi(x)|^2$ が有限である。この場合も、エネルギーはとびとびの値をとる。

箱形ポテンシャルの問題でこの束縛状態を求める。それぞれの空間領域では、ポテンシャルが一定であるので、領域ごとに、シュレーディンガー方程式 (3.1) を解くのはやさしい。定常状態のシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d}{dx}\right)^2 + U\right)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.106)$$

を書換えて、

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^2\psi(x) = \left(\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}\right)\psi(x) \quad (3.107)$$

となるので、解はそれぞれの領域で

$$\psi(x) = e^{ik'x} \quad (3.108)$$

$$k' = \pm \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E-U)}, E-U > 0 \quad (3.109)$$

$$k' = \pm i \frac{1}{\hbar} \sqrt{(-)2m(E-U)}, E-U < 0 \quad (3.110)$$

と求まる。

いま、エネルギーが $-V_0 < E < 0$ の範囲にある場合を考える。各領域での波動関数は、

$$\psi(x) = B_- e^{\frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}x}, x < 0 \quad (3.111)$$

$$= A_+ e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}x} + A_- e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}x}, 0 < x < a \quad (3.112)$$

$$= B_+ e^{-\frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}x}, a < x \quad (3.113)$$

となる。ここで、 $0 < x$ と $a < x$ で、収束する関数を選択した。係数 B_- 、 A_+ 、 A_- 、 B_+ は未定の定数であり、関数が全領域で連続となる条件で決定される。 $x = 0$ における関数の左極限と右極限は、

$$\psi(0 - \epsilon) = B_- \quad (3.114)$$

$$\psi(0 + \epsilon) = A_+ + A_- \quad (3.115)$$

であり、関数の微分の左極限と右極限は

$$\psi'(0 - \epsilon) = B_- \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE} \quad (3.116)$$

$$\psi'(0 + \epsilon) = (A_+ - A_-) \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \quad (3.117)$$

となる。また $x = a$ で関数と関数の微分は、

$$\psi(a - \epsilon) = A_+ e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a} + A_- e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a} \quad (3.118)$$

$$\psi(a + \epsilon) = B_+ e^{-\frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}a}, \quad (3.119)$$

と

$$\psi'(a - \epsilon) = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} (A_+ e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a} - A_- e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a}) \quad (3.120)$$

$$\psi'(a + \epsilon) = -\frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE} B_+ e^{-\frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}a} \quad (3.121)$$

となる。よって、関数とその微分が連続である条件

$$\psi(0 - \epsilon) = \psi(0 + \epsilon) \quad (3.122)$$

$$\psi'(0 - \epsilon) = \psi'(0 + \epsilon) \quad (3.123)$$

$$\psi(a - \epsilon) = \psi(a + \epsilon) \quad (3.124)$$

$$\psi'(a - \epsilon) = \psi'(a + \epsilon) \quad (3.125)$$

に上の値を代入して、定数 B_+ 、 B_- 、 A_+ 、 A_- に関する斉次線形方程式

$$B_- = A_+ + A_- \quad (3.126)$$

$$B_- \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE} = (A_+ - A_-) \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \quad (3.127)$$

$$A_+ e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a} + A_- e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a} = B_+ e^{-\frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}a} \quad (3.128)$$

$$\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} (A_+ e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a} - A_- e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a}) = -\frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE} B_+ e^{-\frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}a} \quad (3.129)$$

が得られる。この式で、零でない定数が存在するためには、係数に関する行列式が零になる必要がある。これより、 E に対する関係式

$$\frac{\sqrt{(-E)(E + V_0)}}{2E + V_0} = \tan \sqrt{2m(E + V_0)a} \quad (3.130)$$

が満たされる必要がある。式 (3.130) を満たす E では、すべての定数が零になるわけではないが、他の値では、すべての定数が零になる。つまり、式 (3.130) を満たす E で方程式 (3.106) を満たす関数が存在し、他の E では $\psi = 0$ 以外の解は存在しない。方程式 (3.106) を満たすこの E が、エネルギー固有値である。

3.3.2 束縛状態のエネルギー

式 (3.130) を満たすエネルギー固有値 E は、ポテンシャルをきめるパラメーター V_0 と a で決まる。

3.4 箱型ポテンシャルによる散乱状態

この章で考察する散乱状態は、波動関数が $|x|$ が大きな領域でも有限な大きさを持つ境界条件

$$|\psi(x)| \neq 0, |x| \rightarrow \infty \quad (3.131)$$

を満たす。当然ながらこの波動関数では、 $\int dx |\psi(x)|^2$ は発散する。古典力学において、 $E > 0$ では質点が無限遠 $|x(t)| \rightarrow \pm\infty$ に到達する運動となる。逆に、質点が無限遠から飛来した後、無限遠に飛んで行く散乱現象を表わす。量子力学でも、 $E > 0$ では、散乱現象を表わす。

3.4.1 散乱状態

エネルギーが $0 < E$ の範囲にある場合、 $|\psi(x)_{x \rightarrow \pm\infty}| \neq 0$ となり、無限遠方に到達する粒子に対応する。この場合、各領域での波動関数は、数係数 $B_+, B_-, A_+, A_-, C_+, C_-$ をかけた

$$\psi(x) = B_+ e^{i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x} + B_- e^{-i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x}, x < 0 \quad (3.132)$$

$$= A_+ e^{i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}x} + A_- e^{-i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}x}, 0 < x < a \quad (3.133)$$

$$= C_+ e^{i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x} + C_- e^{-i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x}, a < x \quad (3.134)$$

となる。この波動関数で表わされる状態の確率密度は、

$$\rho = |B_+|^2 + |B_-|^2 + B_+ B_-^* e^{2i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x} + B_- B_+^* e^{-2i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x}, x < 0 \quad (3.135)$$

$$= |A_+|^2 + |A_-|^2 + A_+ A_-^* e^{2i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}x} + A_- A_+^* e^{-2i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}x}, 0 < x < a \quad (3.136)$$

$$= |C_+|^2 + |C_-|^2 + C_+ C_-^* e^{2i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x} + C_- C_+^* e^{-2i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x}, a < x \quad (3.137)$$

となる。ここで、この式の右辺の第3項、4項は x の振動関数であり、波長はミクロな大きさである。波長より充分長い適当な x の領域で平均すれば、零になる。だから、確率密度は、右辺の第1項と2項で決まる

$$\rho = |B_+|^2 + |B_-|^2, x < 0 \quad (3.138)$$

$$= |A_+|^2 + |A_-|^2, 0 < x < a \quad (3.139)$$

$$= |C_+|^2 + |C_-|^2, a < x \quad (3.140)$$

となる。確率の流れに対しても座標について振動する部分を取り除いて得られる、

$$j = |B_+|^2 \left(\frac{\sqrt{2E}}{m}\right) + |B_-|^2 \left(-\frac{\sqrt{2E}}{m}\right), x < 0 \quad (3.141)$$

$$= |A_+|^2 \left(\frac{\sqrt{2(E+V_0)}}{m}\right) + |A_-|^2 \left(-\frac{\sqrt{2(E+V_0)}}{m}\right), 0 < x < a \quad (3.142)$$

$$= |C_+|^2 \left(\frac{\sqrt{2E}}{m}\right) + |C_-|^2 \left(-\frac{\sqrt{2E}}{m}\right), a < x \quad (3.143)$$

となると考えて良い。右辺の第一項目は、正方向に進行する波を表わし、第二項目は、負方向に進行する波を表わすことが分かる。

次に、振幅を表わす係数 $B_+, B_-, A_+, A_-, C_+, C_-$ を求める。これらの係数は、前節と同じに波動関数とその微分の連続性から決まる。ここで特に、 $x < 0$ での正方向に進行する波の振幅を 1 に規格化し、 $x > 0$ での負方向に進行する波が存在しない条件、 $B_- = 1, +C_- = 0$ となる解

$$\psi(x) = e^{i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x} + B_- e^{-i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x}, x < 0 \quad (3.144)$$

$$= A_+ e^{i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}x} + A_- e^{-i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}x}, 0 < x < a \quad (3.145)$$

$$= C_+ e^{i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x}, a < x \quad (3.146)$$

を求めよう。

この解は、 $-\infty$ から $+$ 方向に進む波 $e^{i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x}$ が、ポテンシャルの影響で、反射して $-\infty$ にまで戻る成分 $B_- e^{-i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x}$ と透過して ∞ にまで達する成分 $C_+ e^{i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x}$ にわかれる波を表している。反射する成分の振幅は B_- であり、透過する成分の振幅は C_+ である。これらのそれぞれ大きさは、入射する波の振幅 1 より小さくなり、またその和が 1、

$$|B_-|^2 + |C_+|^2 = 1 \quad (3.147)$$

となることが、期待される。

$x = 0$ の両側での関数の値は、

$$\psi(0 - \epsilon) = 1 + B_- \quad (3.148)$$

$$\psi(0 + \epsilon) = A_+ + A_- \quad (3.149)$$

となり、関数の微分の値は

$$\psi'(0 - \epsilon) = (1 - B_-) i \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (3.150)$$

$$\psi'(0 + \epsilon) = (A_+ - A_-) \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \quad (3.151)$$

となる。

また $x = a$ の両側での関数の値は

$$\psi(a - \epsilon) = A_+ e^{i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}} + A_- e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}} \quad (3.152)$$

$$\psi(a + \epsilon) = C_+ e^{i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2mEa}} \quad (3.153)$$

となり関数の微分の値は、

$$\psi'(a - \epsilon) = \left(\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}\right) A_+ e^{i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}} - A_- e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}} \quad (3.154)$$

$$\psi'(a + \epsilon) = \left(i\frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}\right) C_+ e^{i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2mEa}} \quad (3.155)$$

となる。関数とその一階微分が連続であるとき、これらが一致することから、

$$1 + B_- = A_+ + A_- \quad (3.156)$$

$$(1 - B_-) i \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} = (A_+ - A_-) \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)} \quad (3.157)$$

$$A_+ e^{i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}} + A_- e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}} = C_+ e^{i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2mEa}} \quad (3.158)$$

$$\left(\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}\right) (A_+ e^{i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}} - A_- e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}}) = \left(i\frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}\right) C_+ e^{i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2mEa}} \quad (3.159)$$

と4つの等式が得られる。この方程式は、4つの未知数 B_- , A_+ , A_- , C_+ の線形項と零次項を含む非斉次方程式であり、斉次方程式 (3.129) とは異なり、任意の $E (> 0)$ の値で零でない解をもつ。つまり、 $E > 0$ では、どんな E の値でも解が存在する。ここで求めた解は、ポテンシャルの領域の外部から波を入射させた条件において、実現する全領域での波を示している。どんな E の値でも、対応する波がある。

3.4.2 散乱確率：透過率と反射率

等式 (3.156) – (3.159) から、係数 A_+ と A_- が満たす関係式、並びに A_+ , A_- と B_- や C_+ との関係

$$A_+ \left(1 + \sqrt{1 + \frac{V_0}{E}}\right) + A_- \left(1 - \sqrt{1 + \frac{V_0}{E}}\right) = 2 \quad (3.160)$$

$$\sqrt{1 + \frac{V_0}{E}} (A_+ e^{i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}} - A_- e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}}) = A_+ e^{i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}} + A_- e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}} \quad (3.161)$$

$$B_- = A_+ + A_- - 1 \quad (3.162)$$

$$C_+ = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2mEa}} (A_+ e^{i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}} + A_- e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)a}}) \quad (3.163)$$

が得られる。上の式 (3.161)(3.162) を解いて係数 A_+, A_- が

$$A_+ = 2 \frac{1 + \sqrt{1 + V_0/E}}{(1 + \sqrt{1 + V_0/E})^2 - (1 - \sqrt{1 + V_0/E})^2 e^{2\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a}} \quad (3.164)$$

$$A_- = 2 \frac{(-1 + \sqrt{1 + V_0/E}) e^{2\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a}}{(1 + \sqrt{1 + V_0/E})^2 - (1 - \sqrt{1 + V_0/E})^2 e^{2\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a}} \quad (3.165)$$

と得られ、さらに係数 B_-, C_+ が

$$B_- = \frac{-\frac{V_0}{E} + (-1 + \sqrt{1 + \frac{V_0}{E}}) e^{2\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a}}{(1 + \sqrt{1 + V_0/E})^2 - (1 - \sqrt{1 + V_0/E})^2 e^{2\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a}} \quad (3.166)$$

$$C_+ = 4 \frac{\sqrt{1 + V_0/E}}{(1 + \sqrt{1 + V_0/E})^2 - (1 - \sqrt{1 + V_0/E})^2 e^{2\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}a}} \quad (3.167)$$

と得られる。

反射率は、

$$|B_-|^2 = \quad (3.168)$$

透過率は、

$$|C_+|^2 = \quad (3.169)$$

である。

3.5 ポテンシャル中の運動

3.5.1 ポテンシャル1

ポテンシャル

$$U = -U_0 / \cosh^2 \alpha x \quad (3.170)$$

のもとでの、質点が従う方程式は、

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{U_0}{\cosh^2 \alpha x} \right) \psi = 0 \quad (3.171)$$

である。ここで、 U_0 はポテンシャルの深さ α はポテンシャルの拡がりを表すパラメーターである。

この方程式の $E < 0$ の束縛状態の解をここで求めよう。この解は、解析的に解くことができる。変数を

$$\xi = \tanh \alpha x \quad (3.172)$$

と変換すると、方程式は

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} \psi \right] + \left[s(s+1) - \frac{\epsilon^2}{1 - \xi^2} \right] \psi = 0 \quad (3.173)$$

となる。ここで、新たなパラメーター

$$\epsilon = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar\alpha}, \quad \frac{2mU_0}{\alpha^2\hbar^2} = s(s+1) \quad (3.174)$$

と

$$s = \frac{1}{2} \left(-1 + \sqrt{1 + \frac{8mU_0}{\alpha^2\hbar^2}} \right) \quad (3.175)$$

で方程式を表した。さらに、波動関数を

$$\psi = (1 - \xi^2)^{\frac{\epsilon}{2}} \omega(\xi) \quad (3.176)$$

と変換して合流型の超幾何微分方程式

$$u(1-u)\omega^{(4)} + (\epsilon+1)(1-2u)\omega^{(3)} - (\epsilon-s)(\epsilon+s+1)\omega = 0, \quad (3.177)$$

$$u = \frac{1+\xi}{2}$$

が得られ、解が合流型の超幾何級数で

$$\psi = (1 - \xi^2)^{\frac{\epsilon}{2}} F \left[\epsilon - s, \epsilon + s + 1, \epsilon + 1, \frac{1 - \xi}{2} \right] \quad (3.178)$$

$$E = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{8m} \left[-(1+2n) + \sqrt{1 + \frac{8mU_0}{\alpha^2\hbar^2}} \right]^2$$

と求まる。ここで、整数 n は

$$n \leq s \quad (3.179)$$

を満たす正の数である。

此の結果、束縛状態の数は $[s]$ であり、ポテンシャルの深さ U_0 と幅 $\frac{1}{\alpha}$ の積と共に増加する。大きい質量 m で、基底状態のエネルギー E_0 、とエネルギーギャップ ΔE は、

$$E_0 = -U_0 + \Delta E \quad (3.180)$$

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \quad (3.181)$$

となる。エネルギーギャップは、大きな質量では、質量の平方根に反比例して小さくなる。波動関数の広がりも、やはり質量の平方根に反比例する。

3.5.2 ポテンシャル 2

質点に近似的に一様な加速を与えるポテンシャルは、

$$V(x) = \frac{V_0}{1 + e^{-ax}} \quad (3.182)$$

である。これは、 $x \rightarrow \pm\infty$ で定数

$$V(x) \rightarrow 0, x = \infty \quad (3.183)$$

$$V(x) \rightarrow V_0, x = -\infty, \quad (3.184)$$

になり、有限な x の領域でなめらかに変化する関数である。もしも、パラメーター a が非常に小さいならば、有限な x でポテンシャルは座標の一次関数となり一定の力を与える。一定の力により加速される波束の変化を知るため、境界条件

$$\psi = \text{constant} \times e^{ik_1x}; x \rightarrow +\infty. \quad (3.185)$$

を満たす解を求める。新たな変数 χ

$$\chi = -e^{-\alpha x}, \quad (3.186)$$

を導入して、方程式を書き換えて超幾何微分方程式が得られる。固有解が超幾何級数を使いあわせ、漸近形が

$$\psi = \chi^{\frac{-ik_0}{\alpha}} (C_1(-\chi)^{\frac{i(k_0-k_1)}{\alpha}} + C_2(-\chi)^{i(k_0+k_1)}) \quad (3.187)$$

$$C_1 = \frac{\Gamma(\frac{-2ik_1}{\alpha})\Gamma(1 - 2\frac{ik_2}{\alpha})}{\Gamma(\frac{-i(k_1-k_2)}{\alpha})\Gamma(1 + \frac{-i(k_1-k_2)}{\alpha})} \quad (3.188)$$

$$C_2 = \frac{\Gamma(\frac{2ik_1}{\alpha})\Gamma(1 - 2\frac{ik_2}{\alpha})}{\Gamma(\frac{i(k_1-k_2)}{\alpha})\Gamma(1 + \frac{i(k_1-k_2)}{\alpha})} \quad (3.189)$$

$$\hbar k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)}, \hbar k_1 = \sqrt{2mE} \quad (3.190)$$

と求まる。

3.6 波束の散乱

平面波を重ねあわせて得られた波束は、前節で見たように、有限な大きさを持ち、近似的に粒子を表わしている。では、波束がポテンシャルを通過する時、変化するだろうか？もし波束がポテンシャルの影響を受けるならば、どのような影響を受けるか明らかにしておく事は大事である。具体的に方程式を解くことが出来る、箱形ポテンシャル、と前節で解を求めたいいくつかのポテンシャルで、波束の安定性を調べる。特に、加速した時の波束の変化を求めておくことは、応用の点からも重要である。

$\delta p \times \delta q$ を最小とする最小波束は、いつも最小波束に留まるのか、それとも、ポテンシャルの影響で非最小波束に変化するのか、も興味深い問題である。 $\delta p \times \delta q$ は、古典力学では断熱不変量であったが、波束では、どのように振る舞うのだろうか？

3.6.1 箱形ポテンシャル

幅 a で高さ又は深さ V_0 の箱形ポテンシャル (3.103) 中の波動関数から波束が $x > 0$ と $x < 0$ で

$$\psi_{wp} = \int dk N(k) (e^{ikx} + e^{-ikx} B_-(k)) e^{-iEt}, x \ll 0 \quad (3.191)$$

$$\psi_{wp} = \int dk N(k) (e^{ikx} C_+(k)) e^{-iEt}, x \gg 0, \quad (3.192)$$

$$N(k) = N_1 e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma}} \quad (3.193)$$

$$N_1 = . \quad (3.194)$$

となる。これらの関数形は、数値的に求めた波束が

3.6.2 一定のポテンシャル

次に、一定の高さのポテンシャルによる波束の加速を調べる。ポテンシャル V_0

$$\begin{aligned} U(x) &= V_0, x \leq 0 \\ &= 0, a \leq x. \end{aligned} \quad (3.195)$$

中での波動関数として

$$\psi(x) = e^{ikx} + B_- e^{-ikx}, x < 0 \quad (3.196)$$

$$= C_+ e^{ik'x}, a < x \quad (3.197)$$

,ここで $x < 0$ では、右に進行する波と左に進行する反射する振幅 B_- の波、 $x > 0$ では右に進行する振幅 C_+ の波である。波数ベクトル k, k' は、エネルギーやポテンシャルと

$$E = \frac{p^2}{2m} + V_0 = \frac{p'^2}{2m}, \quad (3.198)$$

$$p = \hbar k, p' = \hbar k' \quad (3.199)$$

と関係していて、振幅は

$$B_- = \frac{k - k'}{k + k'} \quad (3.200)$$

$$C_+ = \frac{2k}{k + k'} \quad (3.201)$$

となる。

これらの波から、波束が

$$\psi_{wp} = \int dk N(k) \left(e^{ikx} + \frac{k - k'}{k + k'} e^{-ikx} \right), x < 0 \quad (3.202)$$

$$= \int dk N(k) \frac{2k}{k + k'} e^{ik'x}, a < x$$

$$N(k) = N_1 e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma}} \quad (3.203)$$

$$N_1 = \quad (3.204)$$

となる。

3.6.3 ポテンシャルの山

次のポテンシャル

$$U = -\frac{U_0}{\cosh^2 \alpha x} \quad (3.205)$$

中の Schrodinger 方程式

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi = 0 \quad (3.206)$$

は解析的に解かれる. この解に基づいて、波束の散乱を調べる.

パラメーター ϵ と s を

$$\epsilon = \frac{(-2mE)^{1/2}}{\hbar\alpha} \quad (3.207)$$

$$s = \frac{1}{2}\left(-1 + \left(1 + \frac{8mU_0}{\alpha^2\hbar^2}\right)^{1/2}\right) \quad (3.208)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \chi = \tanh \alpha x \quad (3.209)$$

と導入しよう. すると解が

$$\psi = (1 - \chi^2)^{\frac{\epsilon}{2}} \omega(\chi) \quad (3.210)$$

$$\omega = F(\epsilon - s, \epsilon + s + 1, \epsilon + 1, \frac{1}{2}(1 - \chi)) \quad (3.211)$$

と、合流型超幾何関数 $F(a, b, c, x)$ を使い表わせる. 漸近形が、

$$\psi = N(e^{-ikx} A_1(k) + e^{ikx} A_2(k)), x \ll 0 \quad (3.212)$$

$$\psi = N e^{-ikx} B_1(k), x \gg 0 \quad (3.213)$$

であり、また、振幅が

$$A_1(k) = \frac{\Gamma(\frac{ik}{\alpha})\Gamma(1 - \frac{ik}{\alpha})}{\Gamma(-s)\Gamma(1 + s)} \quad (3.214)$$

$$A_2(k) = \frac{\Gamma(-\frac{ik}{\alpha})\Gamma(1 - \frac{ik}{\alpha})}{\Gamma(-\frac{ik}{\alpha} - s)\Gamma(-\frac{ik}{\alpha} + 1 + s)} \quad (3.215)$$

$$B_1(k) = 1. \quad (3.216)$$

である.

時間に依存する位相部をかけて $e^{-iEt}\psi$ となり、波束が

$$\psi_{wp} = \int dk N(k)(e^{-ikx} A_1(k) + e^{ikx} A_2(k))e^{-iEt}, x \ll 0 \quad (3.217)$$

$$\psi_{wp} = \int dk N(k)(e^{-ikx} B_1(k))e^{-iEt}, x \gg 0, \quad (3.218)$$

$$N(k) = N_1 e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma}} \quad (3.219)$$

$$N_1 = \quad (3.220)$$

となり、具体的に計算機で波束 ψ_{wp} が計算される。

3.6.4 一様な加速

一様な加速を近似的に示すポテンシャル (3.182)、での波束が

$$\psi_{wp} = \int dk N(k) \chi^{\frac{-ik_0}{\alpha}} (C_1 (-\chi)^{\frac{i(k_0-k_1)}{\alpha}} + C_2 (-\chi)^{i(k_0+k_1)}) \quad (3.221)$$

$$N(k) = N_1 e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma}} \quad (3.222)$$

$$N_1 = \quad (3.223)$$

となる。積分を数値的に求めて、

3.7 束縛状態のまとめ

様々な、ポテンシャル中における束縛状態のエネルギーや波動関数をまとめておく。

箱型ポテンシャル

$$U(x) = U_0, 0 \leq x, x \leq a \quad (3.224)$$

$$U(x) = 0, 0 < x < a$$

$$\psi = C \times e^{\pm\kappa x} \quad (3.225)$$

$$\kappa = \sqrt{\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)(U_0 - E)}$$

$$E = \quad (3.226)$$

なめらかな対称なポテンシャルの谷

$$U = -U_0 / \cosh^2 \alpha x \quad (3.227)$$

$$\xi = \tanh \alpha x \quad (3.228)$$

解が合流型の超幾何級数で

$$\psi = (1 - \xi^2)^{\frac{\epsilon}{2}} F[\epsilon - s, \epsilon + s + 1, \epsilon + 1, \frac{1 - \xi}{2}] \quad (3.229)$$

$$E = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{8m} \left[-(1 + 2n) + \sqrt{1 + \frac{8mU_0}{\alpha^2 \hbar^2}} \right]^2$$

と求まる。ここで、整数 n は

$$E_n \leq 0 \quad (3.230)$$

を満たす正の数である。

なめらかな非対称なポテンシャルの谷

$$U = A(e^{-2ax} - 2e^{-ax}) \quad (3.231)$$

$$\xi = \frac{2\sqrt{2mA}}{a\hbar} e^{-ax} \quad (3.232)$$

解が合流型の超幾何級数で

$$s = \frac{\sqrt{-2mE}}{a\hbar} \quad (3.233)$$

$$\psi = e^{-\xi/2} \xi^s F(-n, 2s + 1, \xi) \quad (3.234)$$

$$E = -A \left[1 - \frac{a\hbar}{\sqrt{2mA}} (n + 1/2) \right]^2$$

と求まる。ここで、整数 n は

$$E_n \leq 0 \quad (3.235)$$

を満たす正の数である。

3.8 問題

問題 1 箱型ポテンシャル

箱型ポテンシャル

$$\begin{aligned} V(x) &= V_1; x \leq 0, x_1 \leq x \\ &= 0; 0 \leq x \leq x_1 \end{aligned} \quad (3.236)$$

におけるエネルギー固有値と固有解を求めよ。次に、極限 $V_1 \rightarrow \infty$ での固有解と固有値を求めよ。

問題 2 周期箱型ポテンシャル

周期的な箱形ポテンシャル

$$\begin{aligned} V(x) &= V_0, Nb < x < Nb + a, N: \text{整数} \\ &= 0, Nb + a < x < (N + 1)b \end{aligned} \quad (3.237)$$

中での質量 M の質点の 1 次元運動をもとめよ。

周期的に並んだポテンシャルでは、一体エネルギーが連続的な値を持つエネルギー領域と、固有値がないエネルギー領域に分かれることを示せ。

問題 3 一様な電場

なめらかな加速ポテンシャルでのシュレーディンガー方程式を、超幾何級数を使い求めよ。また、階段ポテンシャル極限での関数や、傾きを零とする極限での関数形を求めよ。

問題 4 周期ポテンシャルと波束

問題 2 の周期的な箱形ポテンシャルでの波束の解を求めよ。

問題 5 波束

一般的な波束

問題 6 ドブロイ波長

ドブロイ波長は、

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar c}{pc} \quad (3.238)$$

である。ここで、

$$\hbar c = 200 \text{ MeV fm}, \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m} \quad (3.239)$$

と、電子質量 $m_e c^2 = 0.5 \text{ MeV}$ を代入して、速さ v が光速の半分の場合、光速の 10^{-5} 倍の場合について、ドブロイ波長を計算せよ。

解答

(I)

$$v = 0.5 c$$

$$\lambda = \frac{2\pi \times 200 \text{ MeV fm}}{m_e(0.5)cc} = \frac{2\pi \times 200 \text{ MeV fm}}{(0.5)0.5 \text{ MeV}} = \frac{6 \times 200}{0.25} \text{ fm} \quad (3.240)$$

$$= 4.8 \times 10^3 10^{-15} M = 4.8 \times 10^{-12} M$$

(II)

$$v = 10^{-5}c = 3 \times 10^3 M/sec$$

$$\lambda = \frac{2\pi \times 200 \text{ MeV fm}}{m_e(10^{-5})cc} = \frac{2\pi \times 200 \text{ MeV fm}}{(10^{-5})0.5 \text{ MeV}} = \frac{6 \times 200}{0.5 \times 10^{-5}} \text{ fm} \quad (3.241)$$

$$= 2.4 \times 10^8 10^{-15} M = 2.4 \times 10^{-7} M$$

問題 7 ポテンシャル

ポテンシャル

$$V(x) = -V_0/\cosh^2(\alpha x) \quad (3.242)$$

中での粒子のエネルギー固有値と固有関数を求めよ。

第4章 調和振動子

調和振動子は、簡単なポテンシャルでありながら様々な物理に関係している。ある物体にポテンシャル $V(x)$ による力が働いているとき、安定点は、力が消失する条件

$$V'(x)|_{x=x_0} = 0 \quad (4.1)$$

を満たす。安定点 x_0 の近傍では、ポテンシャルは近似的に

$$V(x) = V_0 + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 \quad (4.2)$$

と二次式で表わせる。この領域で物体は微少振動を行なう。微少振動の量子力学は、固有値や固有解を初め解析的にかつ厳密に解くことが出来る。また一般の微少振動に拡張するのも比較的やさしい。本章では、一次元調和振動子の量子論を考察する。

4.1 定常状態

調和振動子は、 k を定数とした2次式のポテンシャル

$$V = \frac{k}{2}x^2 \quad (4.3)$$

で表される。 k は正の値をとるバネ定数である。

古典力学では、運動エネルギーは正定値である。そのため、エネルギー、

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 \quad (4.4)$$

がある値 E であるとき、位置座標は有限な領域

$$|x| \leq x_0, x_0 = \left(\frac{2E}{k}\right)^{1/2} \quad (4.5)$$

に限られる。特に、質点が原点に静止している

$$x(t) = 0 \quad (4.6)$$

$$p(t) = 0 \quad (4.7)$$

解のエネルギーは

$$E = 0 \quad (4.8)$$

である。一般の解では、 E は任意な値となる。

ところが、量子力学における定常状態のエネルギーは、古典力学とは大きく異なる。波動関数は $e^{\frac{Et}{\hbar}} \psi(x)$ と時間の指数関数であり、 $\psi(x)$ はシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k}{2} x^2\right) \psi = E \psi \quad (4.9)$$

に従う。この方程式の解は、 $|x| \rightarrow \infty$ で必ず、

$$\left(E - \frac{k}{2} x^2\right) < 0 \quad (4.10)$$

となるので、

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} > 0 \quad (4.11)$$

となる必要がある。この波動関数は、有限な x の領域で値をもち、無限の x では零となる、束縛状態である。 $|x| \rightarrow \infty$ で、 e^{ipx} と振る舞う自由粒子となる解は存在しない点で、古典力学と同じ性質を満たしている。

量子力学が古典力学と異なる点は、 E の値が不連続な値に制限されることである。実際、波動関数が、規格化条件、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 < \infty \quad (4.12)$$

を満たすのは、 E が特別な値となる場合に限られる。これは次節で示される。

4.2 微分方程式の解法：エルミート多項式

4.2.1 漸近形

定常状態の固有値方程式を解く前に、いくつかの関数の2階微分を行なって見よう。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\alpha x} = -\frac{(\hbar\alpha)^2}{2m} e^{-\alpha x} \quad (4.13)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\sigma x^2} = \frac{\hbar^2 \sigma}{m} e^{-\sigma x^2} - \frac{(2\hbar\sigma)^2}{2m} x^2 e^{-\sigma x^2} \quad (4.14)$$

この結果から、関数 $e^{-\alpha x}$ は上の定常状態の固有値方程式 (4.9) の解にはなり得ない。しかし、式 (4.14) は、方程式 (4.9) におけるパラメーターを

$$k = \frac{(2\hbar\sigma)^2}{m} \quad (4.15)$$

$$E = \frac{\hbar^2 \sigma}{m} \quad (4.16)$$

とおくと方程式 (4.9) と同等な式となっている。つまり、関数

$$e^{-\sigma x^2}, \sigma = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \quad (4.17)$$

は定常状態の方程式 (4.9) の固有値

$$E = \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (4.18)$$

に対応する固有関数である。この関数 $e^{-\sigma x^2}$ は、非常になめらかで、無限遠点以外では、零とならない。後でわかるように、この状態は、最低のエネルギーをもつ基底状態である。また、励起状態は、有限な x で零となる節をもつ固有関数であることもわかる。

一つの特解がわかったので、次に一般解を求める。一般の解として、漸近形を変えない関数形をとる。その為、 $f(x)$ を未知の関数として

$$\psi = f(x)e^{-\sigma x^2} \quad (4.19)$$

とおく。これを微分方程式 (4.9) に代入して、

$$(f''(x) - 4\sigma x f'(x) - 2\sigma f(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} f(x))e^{-\sigma x^2} = 0 \quad (4.20)$$

が得られる。よって、 $f(x)$ が微分方程式

$$(f''(x) - 4\sigma x f'(x) + (\beta - 2\sigma)f(x)) = 0 \quad (4.21)$$

$$\beta = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (4.22)$$

を満たせばよい。

4.2.2 エルミート多項式

方程式 (4.21) の解として、多項式

$$f(x) = \sum_{n=0}^p a_n x^n \quad (4.23)$$

を仮定して見よう。係数 a_n は、今のところ未定であるが、この多項式が微分方程式 (4.21) を満たす条件で決まる。この関数 $f(x)e^{-\sigma x^2}$ の漸近形は、 $f(x)$ が有限次の多項式であれば $e^{-\sigma x^2}$ とほぼ同じである。

多項式の微分や 2 階微分、

$$f'(x) = \sum_{n=1}^p n a_n x^{n-1} \quad (4.24)$$

$$f''(x) = \sum_{n=2}^p n(n-1) a_n x^{n-2} \quad (4.25)$$

を微分方程式に代入して、 x に関する恒等式

$$\sum_n ((n+2)(n+1)a_{n+2} + (\beta - 2\sigma - 4\sigma n)a_n)x^n = 0 \quad (4.26)$$

をえる。この結果、係数に関する漸化式とその解

$$(n+2)(n+1)a_{n+2} + (\beta - 2\sigma - 4\sigma n)a_n = 0 \quad (4.27)$$

$$a_{n+2} = \frac{-\beta + 2\sigma + 4\sigma n}{(n+2)(n+1)} a_n \quad (4.28)$$

が得られる。この関係式から、(i) 解が多項式になる場合と、(ii) 多項式にならない場合に分類される。

(i) 多項式

ある整数 n_0 より大きい n での係数が零となる

$$-\beta + 2\sigma + 4\sigma n_0 = 0 \quad (4.29)$$

の場合であり、 $a_n \neq 0, n \leq n_0$ で $a_n = 0, n \geq n_0 + 2$ となるので、 $f(x)$ は多項式である。これは、 β が

$$\beta = 4\sigma(n_0 + 1/2) \quad (4.30)$$

となる場合であり、この時エネルギーが

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} 4\sigma(n_0 + 1/2) \quad (4.31)$$

となっている。このエネルギーでは、波動関数の規格化条件 (4.1) が満たされている。

(ii) 無限級数

すべての係数が零とならない場合

$$-\beta + 2\sigma + 4\sigma n \neq 0 \quad (4.32)$$

では、すべての係数 a_n が零でないので、 $f(x)$ は多項式ではなく無限級数となる。この無限級数の性質は、十分大きな n での a_n の振る舞いで決まる。 n が十分大きいとき、漸化式は

$$a_{n+2} = \frac{-\beta + 2\sigma + 4\sigma n}{(n+2)(n+1)} a_n \rightarrow \frac{4\sigma}{n} a_n \quad (4.33)$$

となり、さらに係数が

$$a_{2n+2} = \frac{2\sigma}{n} a_{2n} = \frac{(2\sigma)^n}{n!} a_0 \quad (4.34)$$

となる。この結果、 $f(x)$ は

$$f(x) = \sum_n \frac{(2\sigma)^n}{n!} a_0 x^{2n} = a_0 e^{2\sigma x^2} \quad (4.35)$$

と指数関数となり、さらに $\psi(x)$ が

$$\psi(x) = f(x)e^{-\sigma x^2} = a_0 e^{\sigma x^2} \quad (4.36)$$

とやはり指数関数となる。しかもこの指数関数は、 $x \rightarrow \pm\infty$ の領域で発散する。その為、規格化条件 (4.1) は満たされない。

規格化条件 (4.1) を満たすのは、エネルギー E が、(5.129) となる場合に限られる。この値が、エネルギー固有値である。

4.3 生成・消滅演算子

4.3.1 生成・消滅演算子

定常状態の方程式 (4.9) で、変数 x を y

$$y = \alpha x \quad (4.37)$$

$$\alpha = \frac{(mk)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} \quad (4.38)$$

に変換してあらわすと、簡単な形

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2\right]\psi = \beta\psi \quad (4.39)$$

$$\beta = 2\sqrt{\frac{m}{k}} \frac{E}{\hbar} \quad (4.40)$$

になる。この式の左辺を因数分解して

$$\left[\left(-\frac{\partial}{\partial y} + y\right)\left(\frac{\partial}{\partial y} + y\right)\right]\psi = (\beta - 1)\psi \quad (4.41)$$

と書き、さらに簡単な交換関係

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (4.42)$$

を満たす新たな互いに共役な演算子

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{\partial}{\partial y} + y\right) \quad (4.43)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial y} + y\right)$$

を使い、固有値方程式は

$$\beta\psi = [2a^\dagger a + 1]\psi \quad (4.44)$$

となる。

上の固有値は、 $a^\dagger a$ で決まる。 $a^\dagger a$ が満たす交換関係、

$$[a, a^\dagger a] = a, [a^\dagger, a^\dagger a] = -a^\dagger \quad (4.45)$$

と、交換関係 (4.42) を使い、調和振動子の固有値と固有関数が簡単にわかる。

β の固有状態

$$[2a^\dagger a + 1]\psi_{\beta_0} = \beta_0\psi_{\beta_0} \quad (4.46)$$

に a や a^\dagger をかけた状態は、やはり固有状態であり、

$$\begin{aligned} [2a^\dagger a + 1]a\psi_{\beta_0} &= (\beta_0 - 2)a\psi_{\beta_0} \\ [2a^\dagger a + 1]a^\dagger\psi_{\beta_0} &= (\beta_0 + 2)a^\dagger\psi_{\beta_0} \end{aligned} \quad (4.47)$$

となる。このように、 a や a^\dagger は、固有状態にかかって固有値を 2 あげたり下げたりする演算子である。そのため、 a は消滅演算子、 a^\dagger は生成演算子とよばれる。

規格化された状態 ψ_β では、 $\langle\psi_{\beta_0}|\psi_{\beta_0}\rangle = 1$ であり、

$$\begin{aligned} \beta &= \langle\psi_\beta|[2a^\dagger a + 1]\psi_\beta\rangle \\ &= 2|a|\psi\rangle|^2 + 1 > 0 \end{aligned} \quad (4.48)$$

であるので、 β は必ず正符号である。

以上の事柄から最低固有値 β_0 は、より低い固有値がない基底状態であり

$$a\psi_{\beta_0} = 0 \quad (4.49)$$

を満たす。この時、

$$[2a^\dagger a + 1]\psi_{\beta_0}\rangle = |\psi_{\beta_0}\rangle \quad (4.50)$$

と β の固有値が 1 である。

ここで、Hermite 演算子

$$n = a^\dagger a \quad (4.51)$$

の性質をまとめておく。 n の固有値は整数であり固有状態

$$n|n\rangle = n|n\rangle \quad (4.52)$$

は、基底状態

$$a|0\rangle = 0 \quad (4.53)$$

$$n|0\rangle = 0 \quad (4.54)$$

から構成される。 a^\dagger は n の値を 1 あげる生成演算子であるので、未定である定数 N で、

$$a^\dagger|n\rangle = N|n+1\rangle \quad (4.55)$$

と表せる。規格化定数 N は、状態の規格化

$$\langle n|aa^\dagger|n\rangle = |N|^2\langle n+1|n+1\rangle = |N|^2 \quad (4.56)$$

と交換関係 $[a, a^\dagger] = 1$ から決まる左辺の値

$$\langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|a^\dagger a + 1|n\rangle = n + 1 \quad (4.57)$$

から、

$$|N|^2 = (n + 1) \quad (4.58)$$

となる。

さらに上の結果を繰り返し使い、

$$\begin{aligned} |n\rangle &= N'(a^\dagger)^n|0\rangle \\ |N'| &= \sqrt{\frac{1}{n!}} \end{aligned} \quad (4.59)$$

となる。

座標表示の固有関数

固有値方程式 (4.49) を満たす基底状態の解を座標 y の関数として求めるのは、簡単である。

$$\left(\frac{\partial}{\partial y} + y\right) \psi_{\beta_0} = 0 \quad (4.60)$$

から、

$$\psi_{\beta_0} = N e^{-y^2/2} \quad (4.61)$$

であることがわかる。このように、方程式 (4.60) は一階方程式であるため、2階方程式 (4.9) よりも、簡単に解くことが出来た。

4.3.2 零点エネルギー

調和振動子のエネルギー固有値は、必ず正の値を持ちまた不連続になっている。古典力学と、量子力学との大きな差が、これらに見える。最小のエネルギーを零点エネルギーといい、様々な物理現象に顔をだす。様々な物理系の零点エネルギーを見積もろう。

ミクロな物理系

マクロな物理系

4.4 行列要素

演算子 a 、 a^\dagger 、と n が満たす交換関係を使い a 、 a^\dagger を、状態 $|n\rangle$ に作用させると、

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, a|0\rangle = 0 \quad (4.62)$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (4.63)$$

となる。これらから、 a と a^\dagger の行列要素が

$$\langle m|a|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{m-n+1} \quad (4.64)$$

$$\langle m|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m-n-1} \quad (4.65)$$

と求まり、その結果 a と a^\dagger の任意な関数の行列要素が計算できる。また、これらより座標 y の行列要素は、

$$\langle m|y|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle m|a + a^\dagger|n\rangle \quad (4.66)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\delta_{m-n+1} + \sqrt{n+1}\delta_{m-n-1})$$

と、微分 $\frac{\partial}{\partial y}$ の行列要素は、

$$\langle m|\frac{\partial}{\partial y}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle m|a - a^\dagger|n\rangle \quad (4.67)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\delta_{m-n+1} - \sqrt{n+1}\delta_{m-n-1})$$

と計算できる。これらは、以下の行列になる。

4.5 コヒーレント状態

4.5.1 消滅演算子 a の固有状態

コヒーレント状態は、消滅演算子 a の固有状態であり、固有値方程式

$$a|z\rangle = z|z\rangle \quad (4.68)$$

を満たす状態である。演算子 a は、 $a \neq a^\dagger$ とエルミートではないので、固有値 z は複素数であり、相異なる固有値に対応する固有状態が直交するわけではない。 a^\dagger の指数関数

$$|z\rangle = N e^{za^\dagger} |0\rangle \quad (4.69)$$

に、演算子 a をかけて

$$\begin{aligned} a|z\rangle &= N[a, e^{za^\dagger}]|0\rangle \\ &= N z e^{za^\dagger} |0\rangle \\ &= z|z\rangle \end{aligned} \quad (4.70)$$

が得られる。だから、この状態 (4.69) が演算子 a の固有状態である。さらに a を左から繰り返しにかけることにより、この状態が、演算子 a の冪乗の固有状態でもある、

$$a^l |z\rangle = z^l |z\rangle. \quad (4.71)$$

ことが分かる。

4.5.2 ハウスドルフ公式

演算子の指数関数の計算を行なう際、ハウスドルフ公式が頻繁に使われる。この公式は、演算子 A と B が、

$$[[A, B], A] = [[A, B], B] = 0 \quad (4.72)$$

を満たすとき、これらの演算子の指数関数が、等式

$$e^A e^B = e^{(A+B+\frac{1}{2}[A,B])} \quad (4.73)$$

を満たすことをいう。

この等式を証明するのに、新たな実数パラメーター t の関数

$$f(t) = e^{tA} e^{tB} \quad (4.74)$$

を使うのが便利である。ここで、 $f(t)$ が満足する微分方程式を求める。 $f(t)$ を t で微分して、

$$\frac{d}{dt} f(t) = A e^{tA} e^{tB} + e^{tA} B e^{tB} \quad (4.75)$$

$$\begin{aligned} &= A e^{tA} e^{tB} + e^{tA} B e^{-tA} e^{tA} e^{tB} \\ &= (A + e^{tA} B e^{-tA}) f(t) \end{aligned} \quad (4.76)$$

が得られる。演算子 A や B の位置に注意を払う必要がある。ここで、右辺の第 2 項を t でテイラー展開すると、

$$e^{tA} B e^{-tA} = B + t[A, B] + \frac{t^2}{2}[A, [A, B]] + \dots \quad (4.77)$$

である。さらに、関係式 (4.72) を使うと、右辺で第 2 項までが残り他は消えることが分かる。その結果

$$e^{tA} B e^{-tA} = B + t[A, B] \quad (4.78)$$

となる。これを上の $f(t)$ の微分方程式に代入して一階微分方程式

$$\frac{d}{dt} f(t) = (B + t[A, B]) f(t) \quad (4.79)$$

が得られる。簡単にこの微分方程式が解け、解が

$$f(t) = e^{(tB+t^2/2[A,B])} f(0) \quad (4.80)$$

と求まる。明らかに $f(0) = 1$ であるので、

$$f(t) = e^{(tB+t^2/2[A,B])} \quad (4.81)$$

となり最後に $t = 1$ を代入して、

$$e^A e^B = e^{(A+B+1/2[A,B])} \quad (4.82)$$

となる。また、 A と B を入れ替えて、同様に

$$e^B e^A = e^{(A+B-1/2[A,B])} \quad (4.83)$$

となる。さらに、両者をまとめて

$$e^A e^B = e^B e^A e^{+[A,B]} \quad (4.84)$$

が成立する。ハウスドルフ公式は、 A や B が生成消滅演算子であるときや、正準交換関係を満たす時、頻繁に使われる。

4.5.3 規格化定数：ハウスドルフ公式の応用

ハウスドルフ公式から、式 (4.69) の規格化定数が簡単に求まる。いま、

$$\langle z|z\rangle = |N|^2 \langle 0|e^{\bar{z}a} e^{za^\dagger}|0\rangle \quad (4.85)$$

の左辺は、状態の規格化条件と公式 (4.84) と $a|0\rangle = 0$ から

$$\langle z|z\rangle = 1 \quad (4.86)$$

となり、右辺はハウスドルフ公式から

$$|N|^2 e^{\bar{z}z[a, a^\dagger]} \langle 0|e^{za^\dagger} e^{\bar{z}a}|0\rangle = |N|^2 e^{\bar{z}z} \quad (4.87)$$

となる。だから、

$$|N|^2 e^{\bar{z}z} = 1 \quad (4.88)$$

$$|N| = e^{-\frac{1}{2}\bar{z}z} \quad (4.89)$$

となり、結果として規格化された状態

$$|z\rangle = e^{-\frac{1}{2}\bar{z}z} e^{za^\dagger} |0\rangle \quad (4.90)$$

となる。また、この状態はユニタリ演算子 $U(z)$ で

$$|z\rangle = U(z)|0\rangle \quad (4.91)$$

$$U(z) = e^{za^\dagger - \bar{z}a} \quad (4.92)$$

と表すことも出来る。

代数と行列要素

上で定義したユニタリ演算子 $U(z)$ の積は

$$U(z_1)U(z_2) = e^{z_1 a^\dagger - \bar{z}_1 a} e^{z_2 a^\dagger - \bar{z}_2 a} \quad (4.93)$$

$$= e^{z_1 a^\dagger - \bar{z}_1 a + z_2 a^\dagger - \bar{z}_2 a - \frac{1}{2}(z_2 \bar{z}_1 - z_1 \bar{z}_2)}$$

$$= U(z_1 + z_2) e^{-\frac{1}{2}(z_2 \bar{z}_1 - z_1 \bar{z}_2)}$$

$$= U(z_2)U(z_1) e^{-(z_2 \bar{z}_1 - z_1 \bar{z}_2)}$$

となる。だから $U(z)$ は非可換な演算子である。

また、異なる状態の内積は

$$\langle z_1|z_2\rangle = e^{\bar{z}_1 z_2 - \frac{1}{2}(\bar{z}_1 z_1 + \bar{z}_2 z_2)} \quad (4.94)$$

となる。

ここで、計算例として、

$$\langle 0|e^{ikx}|0\rangle \quad (4.95)$$

を求めよう。ハウスドルフの公式を使い、

$$\langle 0|e^{ikx}|0\rangle = \langle 0|e^{ik/\sqrt{2}(a+a^\dagger)}|0\rangle \quad (4.96)$$

$$= \langle 0|e^{ik/\sqrt{2}(a^\dagger)} e^{ik/\sqrt{2}(a)} e^{-k^2/4[a, a^\dagger]}|0\rangle$$

$$= e^{-k^2/4}$$

となる。

4.6 多次元調和振動子

4.6.1 変数分離

球対称な三次元調和振動子のポテンシャルは、

$$V(r) = \frac{1}{k}r^2 = \frac{1}{2}k(x^2 + y^2 + z^2) \quad (4.97)$$

である。このポテンシャルは、 x 座標、 y 座標、 z 座標の 2 乗の和であるので、変数分離型をしている。そのため、この物理系のハミルトニアンは、

$$H = \sum_i H^{(i)} \quad (4.98)$$
$$H^i = \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{k}{2}x_i^2 \right)$$

と各変数ごとの一次元調和振動子ハミルトニアンの和である。だから、デカルト座標で固有値方程式を解く場合は、固有関数を 3 変数の関数の積

$$\psi(\mathbf{x}) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (4.99)$$

とおく。その結果、それぞれが、一次元調和振動子の固有関数

$$H^i X(x_i) = E^i X(x_i) \quad (4.100)$$

となる時、各固有関数の積

$$H \prod_i X(x_i) = \left(\sum_i E^i \right) \prod_i X(x_i) \quad (4.101)$$

は三次元調和振動子ハミルトニアンの固有状態になり、固有値は和 $\sum_i E^i$ である。

4.6.2 エネルギーの縮退

n_1 、 n_2 、 n_3 を x 方向 y 方向 z 方向の状態を示す整数として、ブラケット記号で状態を、

$$|\psi\rangle = |n_1\rangle_1 |n_2\rangle_2 |n_3\rangle_3 \quad (4.102)$$

と表す。この状態は、エネルギー

$$E = \hbar\omega(N + 3/2) \quad (4.103)$$

$$N = n_1 + n_2 + n_3 \quad (4.104)$$

をもつ。そのため、同じ N をもつ異なる状態が存在する。例えば、ちいさな N では、
 $N = 1$

$$(n_1, n_2, n_3) = (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1) \quad (4.105)$$

の3状態が同じエネルギーをもち、
 $N = 2$

$$\begin{aligned} (n_1, n_2, n_3) &= (2, 0, 0), (0, 2, 0), (0, 0, 2) \\ &= (1, 1, 0), (1, 0, 1), (0, 1, 1) \end{aligned} \quad (4.106)$$

の6状態が同じエネルギーをもつ。この状態の数を縮退度といい、大きな N では縮退度は極めて大きくなる。

4.7 一定の力

4.7.1 線形ポテンシャル

一定の力が働く質点の運動は、古典力学では等加速度運動として簡単にとくことができるが、量子力学ではそれほど簡単ではない。この物理系のハミルトニアンは、

$$H = \frac{p^2}{2m} + Fx \quad (4.107)$$

であり、定常状態のシュレーディンガー方程式は、

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + Fx\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.108)$$

である。ここで変数を x から新たな変数 \tilde{x}

$$\tilde{x} = \frac{\sqrt{2mF}}{\hbar} \left(x - \frac{E}{F} \right) \quad (4.109)$$

と変換して、方程式を

$$\psi'' - \tilde{x}\psi = 0 \quad (4.110)$$

と見やすい形に書いておこう。この解は、Appendix D の解法により、ラプラス変換で

$$\psi = \text{constant} \int_C dt e^{\tilde{x}t - t^3/3} \quad (4.111)$$

と表わせる。Appendix D の関数 P や Q は、今の場合、

$$P = t^2, Q = -1, Z = -e^{-t^3/3}, V = e^{\tilde{x}t - t^3/3} \quad (4.112)$$

であり、積分経路は、積分の収束性からきまり、 t^3 の実数部が正になる t の複素数の領域である。

積分表示を使い、解の漸近形は条件

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\tilde{x}t - \frac{t^3}{3} \right) \Big|_{t=t_0} = 0 \quad (4.113)$$

を満たす停留点 t_0 、

$$\tilde{x} - t^2 = 0, t_0 = \pm\sqrt{\tilde{x}} \quad (4.114)$$

と、この点での最速下降線の方法で定まる。最速下降線の方法は、

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \frac{t^3}{3} \Big|_{t=t_0} = 2t_0 e^{2i\beta} \quad (4.115)$$

が最大の値をとる β で決まり、これらは、 $\tilde{x} > 0$ と $\tilde{x} < 0$ で異なり、

$$t_0 = -\sqrt{\tilde{x}}, \beta = \frac{\pi}{2}; \tilde{x} > 0 \quad (4.116)$$

$$t_0 = \pm i\sqrt{|\tilde{x}|}, \beta = \pm\frac{\pi}{4}; \tilde{x} < 0 \quad (4.117)$$

である。これらを使い、解の漸近形が

$$\psi = \frac{1}{2} \tilde{x}^{-1/4} e^{-2/3\tilde{x}^{3/2}}; \tilde{x} > 0 \quad (4.118)$$

$$\psi = |\tilde{x}|^{-1/4} \sin\left(\frac{2}{3}|\tilde{x}|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right); \tilde{x} < 0 \quad (4.119)$$

と求まる。 $\tilde{x} > 0$ では、解は急激に零に近づく関数であり、 $\tilde{x} < 0$ では解は無限領域で値をもち平面波に近い性質をもつ。しかしながら、 $\tilde{x} < 0$ における位相は平面波よりも $\tilde{x} \rightarrow -\infty$ で急激に振動する関数であり、また一定の値 $\frac{\pi}{4}$ が表れることに注意が必要である。この一定の値は、後で準古典近似を議論する際に重要である。

4.7.2 なめらかに変化する力

4.8 問題

問題 1 波動関数

質量 M 、ばね定数 k の調和振動子の固有状態の具体的な関数形を求めよう。ハミルトニアンは、

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{k}{2}x^2 \quad (4.120)$$

であり、シュレーディンガー方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \frac{k}{2}x^2\right)\psi = E\psi \quad (4.121)$$

である。固有状態を

$$\psi(x) = H(x)e^{-\left(\frac{x^2}{R_0^2}\right)} \quad (4.122)$$

と置くと、基底状態、 $H(x) = 1$

第1励起状態、 $H(x) = 2x$

1次高励起状態 $H(x) = 4x^2 - 2$; 1次多項式である。これを確認せよ。

問題 2 : エルミート関数の諸性質

エルミート多項式の母関数は、

$$e^{-t^2+2t\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} t^n \quad (4.123)$$

である。これを使い以下の関係を示せ。

(1)

$$H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi) = 0 \quad (4.124)$$

$$\frac{d}{d\xi} H_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi) \quad (4.125)$$

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - \frac{d}{d\xi} H_n(\xi) \quad (4.126)$$

(2)

$$H_0(\xi) = 1 \quad (4.127)$$

$$H_1(\xi) = 2\xi \quad (4.128)$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 \quad (4.129)$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \quad (4.130)$$

(3)

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (4.131)$$

(4)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} = 2^n n! (\pi)^{1/2} \delta_{nm} \quad (4.132)$$

(5) $H_n(\xi)$ が満たす 2 次微分方程式を導け。

問題 3 : 励起エネルギー

励起エネルギーの値、

問題 4 : 行列要素の計算

定常状態 $|n\rangle$ と $|m\rangle$ での座標 x と運動量 p の行列要素、

$$\langle n|x|m\rangle = \quad (4.133)$$

$$\langle n|p|m\rangle = \quad (4.134)$$

の計算は、生成演算子と消滅演算子を使うと比較的簡単である。

$$x = \frac{a + a^\dagger}{2} \quad (4.135)$$

$$p = \frac{a - a^\dagger}{2i} \quad (4.136)$$

問題 5 : 中心を平行移動

中心が $x = a$ である調和振動子のハミルトニアン

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{k}{2}(x - a)^2 \quad (4.137)$$

のシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \frac{k}{2}(x - a)^2\right)\psi = E\psi \quad (4.138)$$

の解は、座標を並行移動した

$$\psi(x - a) = H(x - a)e^{-\left(\frac{x-a}{R_0}\right)^2} \quad (4.139)$$

である。

問題 6 : 2次元振動子

2次元調和振動子のハミルトニアンは、

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{k}{2}(x^2 + y^2) \quad (4.140)$$

である。固有解を変数分離形

$$\psi = X(x)Y(y) \quad (4.141)$$

で求めよ。

問題 7 : 2次元振動子の極座標解

2次元調和振動子のハミルトニアンは、

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{k}{2}(x^2 + y^2) \quad (4.142)$$

である。固有解を極座標における変数分離形

$$\psi = R(r)\Theta(\theta) \quad (4.143)$$

で求めよ。

問題 8 ハウスドルフ公式

$i, j = 1, 2$ に対して

$$[a_i, a_j] = 0, [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad (4.144)$$

が成立している。

$$\langle 0 | e^{\vec{c}\vec{a}} e^{\vec{d}\vec{a}^\dagger} | 0 \rangle \quad (4.145)$$

を計算せよ。

第5章 三次元運動

質量 m を持つ質点の三次元空間での運動は、3変数のシュレーディンガー方程式で記述される。3次元シュレーディンガー方程式は、1次元シュレーディンガー方程式と本質的には同じである。しかし、数学的には、空間座標の3変数と時間の1変数との4変数の偏微分方程式は、空間1次元の2変数の偏微分方程式よりも、だいぶ複雑で、内容が豊富なものとなる。

この物理系のハミルトニアンは、 $V(\mathbf{x})$ をポテンシャルとして、

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \quad (5.1)$$

である。座標 x_i と運動量 p_j との交換関係

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (5.2)$$

は、座標を単なる実数で表す表示（座標表示）では

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla \quad (5.3)$$

と、運動量は座標についての微分で表現される。このとき、シュレーディンガー方程式は、時間について1階で空間について2階の偏微分方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) = H\psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.4)$$

となっている。

上の波動方程式で、 H がエルミート演算子であるため、波動関数の絶対値の二乗を積分した内積は一定に保たれ、また保存則を満たす確率の密度と流れが存在している。実際、内積の時間変化は、

$$\begin{aligned} & i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int d\vec{x}\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) \\ &= \int d\vec{x}\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) + \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t)\right) \\ &= \int d\vec{x}(\psi^\dagger(-H^\dagger)(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) + \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)H\psi(\mathbf{x}, t)) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (5.5)$$

と零になる。上の変形で、 H がエルミート演算子である条件式

$$H^\dagger = H \quad (5.6)$$

を使った。

さらに、波動関数とその複素共役から確率密度 $\rho(\mathbf{x}, t)$ と確率の流れベクトル $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ が

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.7)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\frac{\mathbf{p}}{2m}\psi(\mathbf{x}, t) - \left(\frac{\mathbf{p}}{2m}\psi^\dagger\right)\psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.8)$$

と定義される。波動関数が波動方程式を満たすことから、これらは、連続の式

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{x}, t) + \nabla\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \\ = & \frac{\partial}{\partial t}\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) + \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) \\ & + \nabla\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\frac{\mathbf{p}}{2m}\psi(\mathbf{x}, t) + \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\nabla\frac{\mathbf{p}}{2m}\psi(\mathbf{x}, t) - \nabla\frac{\mathbf{p}}{2m}\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) - \frac{\mathbf{p}}{2m}\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\nabla\psi(\mathbf{x}, t) \\ = & -\frac{\mathbf{p}^2}{i\hbar 2m}\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) + \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\frac{\mathbf{p}^2}{i\hbar 2m}\psi(\mathbf{x}, t)\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\nabla\frac{\mathbf{p}}{2m}\psi(\mathbf{x}, t) - \nabla\frac{\mathbf{p}}{2m}\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) \\ = & \nabla\cdot\frac{\mathbf{p}}{2m}\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) - \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\nabla\cdot\frac{\mathbf{p}}{2m}\psi(\mathbf{x}, t) + \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\nabla\frac{\mathbf{p}}{2m}\psi(\mathbf{x}, t) - \nabla\frac{\mathbf{p}}{2m}\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) \\ = & 0 \end{aligned} \quad (5.9)$$

を満たす。その結果、確率密度 $\rho(\mathbf{x}, t)$ を全空間で積分した確率

$$P = \int d\mathbf{x}\rho(\mathbf{x}, t) \quad (5.10)$$

の時間微分は、ガウスの定理を適用して、

$$\frac{\partial}{\partial t}P = \int d\vec{x}\dot{\rho}(\vec{x}, t) \quad (5.11)$$

$$= \int d\vec{x}\nabla\cdot\vec{j} = \int_{\text{表面}} d\vec{S}\cdot\vec{j} \quad (5.12)$$

と表面積分に変形される。波動関数がゼロになる充分大きな表面をえらぶと、右辺はゼロになる。その結果、全確率は

$$\frac{\partial}{\partial t}P = 0 \quad (5.13)$$

$$P = \int d\mathbf{x}\rho(\mathbf{x}, t) \quad (5.14)$$

と時間に依存しない定数である。

$\rho(\mathbf{x}, t)$ は状態 ψ を位置 \mathbf{x} に観測する確率を表している。確率は正定値でなければならないが、実際、 $\rho(\mathbf{x})$ は複素数と複素共役の積であるので正定値である。また P は全空間での全確率、即ち場所を指定せずに全空間の何処かで粒子を観測する確率を表す。全確率 P が時間によらず一定であるので、確率は保存する。

定常状態は、波動関数の時間についての依存性が指数関数、

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\mathbf{x}) \quad (5.15)$$

となる状態である。定常状態の波動関数は、時間が経過したとき時間に比例する位相項だけが変化して、本質的には同じ関数 $\psi(\mathbf{x}, t+a) = e^{\frac{iEa}{\hbar}} \psi(\mathbf{x}, t)$ にとどまっている。このため、定常状態では、確率密度 $\rho(\mathbf{x}, t)$ や流れ $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ は、

$$\rho(\mathbf{x}, t+a) = \rho(\mathbf{x}, t) \quad (5.16)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t+a) = \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \quad (5.17)$$

と時間に依存しない。

定常状態の波動関数は、空間座標について 2 階の偏微分方程式

$$H\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (5.18)$$

を満たしている。この方程式は、座標だけの微分方程式であるので、(5.4) 式よりもやさしい。実験で、定常状態の情報が得られる事が多いので、この形の方程式の解について調べる事も多い。

5.1 自由粒子

自由な粒子は、シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.19)$$

に従う。デカルト座標では、ラプラシアンは、

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (5.20)$$

となるので、それぞれの変数の微分の分離した和である変数分離形をしている。

5.1.1 平面波

ここで、この方程式の特解として、平面波

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad (5.21)$$

解を求めよう。方程式 (5.19) に代入して、

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (5.22)$$

が得られる。これは、一次元の平面波の積、

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_1(x, t)\psi_2(y, t)\psi_3(z, t) \quad (5.23)$$

$$\psi_1(x, t) = e^{-i(\frac{E(k_x)}{\hbar}t - k_x x)} \quad (5.24)$$

$$\psi_2(y, t) = e^{-i(\frac{E(k_y)}{\hbar}t - k_y y)} \quad (5.25)$$

$$\psi_3(z, t) = e^{-i(\frac{E(k_z)}{\hbar}t - k_z z)} \quad (5.26)$$

になっている。この際、全エネルギーは、各エネルギーの和、

$$E(\mathbf{k}) = E(k_x) + E(k_y) + E(k_z) \quad (5.27)$$

$$E(k_x) = \frac{\hbar k_x^2}{2m}, E(k_y) = \frac{\hbar k_y^2}{2m}, E(k_z) = \frac{\hbar k_z^2}{2m} \quad (5.28)$$

である。今の場合、ハミルトニアンは、各変数だけに依存する演算子の和であり、固有関数はそれぞれの関数の積であり、エネルギー固有値は各エネルギーの和である。全エネルギーが一定になるのは、運動量の3成分の二乗の和が一定である一つの球面上の点のような点である。

また、平面波 (5.21) は、ハミルトニアンの固有状態であると共に、運動量の固有状態でもあり、

$$H e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} = E(\mathbf{k}) e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad (5.29)$$

$$\mathbf{p} e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} = \hbar\mathbf{k} e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad (5.30)$$

を満たしている。これより、上の第一式の左辺に \mathbf{p} をかけ、また上の第二式の左辺に H をかけて得られる、

$$\mathbf{p}H e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} = \hbar \mathbf{k} E(\mathbf{k}) e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad (5.31)$$

$$H \mathbf{p} e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} = E(\mathbf{k}) \hbar \mathbf{k} e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad (5.32)$$

の両関係式の右辺が等しいことから、

$$[\mathbf{p}, H] e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad (5.33)$$

$$= (\hbar \mathbf{k} E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}) \hbar \mathbf{k}) e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \\ = 0 \quad (5.34)$$

となる。実際、ハミルトニアンと運動量の交換関係は、

$$[H, \mathbf{p}] = 0 \quad (5.35)$$

と零になり両演算子は互いに可換である。その為、両演算子の同時固有状態が存在している。

5.1.2 ホイゲンスの原理

次に、この方程式の一般解として、平面波を重ね合わせた

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d\mathbf{k} dE a(\mathbf{k}, E) e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad (5.36)$$

の形で解を求めよう。ここで、振幅 $a(\mathbf{k}, E)$ は波数ベクトル \mathbf{k} とエネルギー E の関数であり、 $\psi(\mathbf{x}, t)$ がシュレーディンガー方程式の解となるように定める。上の式 (5.36) を代入すると、方程式 (5.19) は、

$$\int dE d\mathbf{k} (E - \frac{\mathbf{p}^2}{2m}) a(\mathbf{k}, E) e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} = 0, \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (5.37)$$

となるので、エネルギーの関係式 (5.22) を満たす E を与える振幅、

$$a(\mathbf{k}, E) = \delta(E - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}) a(\mathbf{k}) \quad (5.38)$$

で、 $\psi(\mathbf{x}, t)$ はシュレーディンガー方程式の解となっている。この時、波動関数は

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d\mathbf{k} a(\mathbf{k}) e^{-i(\frac{E(\mathbf{k})}{\hbar}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad (5.39)$$

となる。 $a(\mathbf{k})$ は \mathbf{k} の任意の関数であるが、 $t = 0$ における波動関数と

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = \int d\mathbf{k} a(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (5.40)$$

と関係している。この式は、フーリエ変換の関係式であり、逆変換から

$$a(\mathbf{k}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d\mathbf{x} \psi(0, \mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (5.41)$$

となる。この $a(\mathbf{k})$ を再代入して、任意の t での波動関数 $\psi(t, \mathbf{x})$ が、 $t = 0$ での波動関数 $\psi(0, \mathbf{x})$ に重み $G(t, \mathbf{x})$ をかけて重ね合わせた形

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d\xi \psi(\xi, 0) G(t, \xi - \mathbf{x}) \quad (5.42)$$

$$G(t, \xi - \mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d\mathbf{k} e^{-i\left(\frac{E(\mathbf{k})}{\hbar}t - \mathbf{k}\cdot(\xi - \mathbf{x})\right)} \quad (5.43)$$

と表されることがわかる。ここで $G(t, \mathbf{x})$ は、波動方程式と初期条件

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2\right] G(t, \mathbf{x}) = 0 \quad (5.44)$$

$$G(0, \mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}) \quad (5.45)$$

を満たすことが式 (5.43) よりわかる。だから、 $G(t, \xi - \mathbf{x})$ は、 $t = 0$ で $\xi = \mathbf{x}$ を波源として伝播する波を表している。これより、式 (5.42) は、 $t = 0$ で空間の各点 ξ での波 $\psi(\xi, 0)$ に、この点を波源として伝播する波 $G(t, \xi - \mathbf{x})$ をかけて積分したものである。この関係式は、量子力学的なホイゲンスの原理を示している。

量子力学における波は、確率保存を示す波であるので、ホイゲンスの原理にも、この特徴が現れる。これは、重みの関数 $G(t, \xi - \mathbf{x})$ の時間発展が、もともとユニタリ演算子で記述されていることを示す関係式

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{x} G(t, \xi_1 - \mathbf{x}) G^*(t, \xi_2 - \mathbf{x}) \quad (5.46) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^6} \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{x} e^{-i\left(\frac{E(\mathbf{k}_1)}{\hbar}t - \mathbf{k}_1\cdot(\xi_1 - \mathbf{x})\right)} e^{i\left(\frac{E(\mathbf{k}_2)}{\hbar}t - \mathbf{k}_2\cdot(\xi_2 - \mathbf{x})\right)} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^6} \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) e^{-i\left(\frac{E(\mathbf{k}_1)}{\hbar}t - \mathbf{k}_1\cdot(\xi_1)\right)} e^{i\left(\frac{E(\mathbf{k}_2)}{\hbar}t - \mathbf{k}_2\cdot(\xi_2)\right)} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}_1 e^{i\mathbf{k}_1\cdot(\xi_1 - \xi_2)} \\ &= \delta(\xi_1 - \xi_2) \end{aligned}$$

から見て取れる。 $G(t, \mathbf{x})$ の具体的な形は、次の節で計算される式 (5.58) である。上の式 (5.46) は、 $G(t, \mathbf{x})$ が時間推進のユニタリ演算子の行列要素であることから簡単に導かれ、(章末の問題参照) 確率が保存することを意味している。実際、関係式 (5.46) から、波動関数の内積は

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{x} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \quad (5.47) \\ &= \int d\mathbf{x} d\xi_1 \psi^*(\xi_1, 0) G^*(t, \mathbf{x} - \xi_1) d\xi_2 G(t, \mathbf{x} - \xi_2) \psi(\xi_2, 0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int d\xi_1 d\xi_2 \psi^*(\xi_1, 0) \delta(\xi_1 - \xi_2) \psi(\xi_2, 0) \\
&= \int d\xi_1 |\psi(\xi_1, 0)|^2
\end{aligned}$$

と時間によらず一定であることがわかる。また、この関数に $\theta(t)$ をかけた関数

$$G_R(t, \mathbf{x}) = \theta(t)G(t, \mathbf{x}) \quad (5.48)$$

は

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] G_R(t, \mathbf{x}) = i\hbar \delta(t) \delta(\mathbf{x}) \quad (5.49)$$

を満たす。 $G_R(t, \mathbf{x})$ は、 $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2)$ のグリーン関数の一つである。グリーン関数は、後の章で述べる散乱問題で重要な役割を演ずる。

ガウス波束

次に4章の一次元ガウス波束を三次元ガウス波束に拡張しよう。

幅 $\sqrt{\alpha}$ の三次元球対称なガウス関数

$$\begin{aligned}
a(\mathbf{k}) &= N e^{-\alpha(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2} \\
N &= \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{-3/4}
\end{aligned} \quad (5.50)$$

の場合を考察する。関数 (5.39) の関数形は、

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d\mathbf{k} N e^{-\alpha(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2 - i(\frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})} \quad (5.51)$$

$$\begin{aligned}
&= \tilde{N} \exp\left(-\frac{1}{4(\alpha + \frac{i\hbar t}{2m})}(\mathbf{x} - \mathbf{v}_0 t)^2 - i\left(\frac{\hbar\mathbf{k}_0^2}{2m}t - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}\right)\right) \\
\mathbf{v}_0 &= \frac{\mathbf{p}_0}{m}, \tilde{N} = N \left(\frac{\pi}{\alpha + \frac{i\hbar t}{2m}}\right)^{3/2}
\end{aligned} \quad (5.52)$$

であり、 $t=0$ では、

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = N \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{1}{4\alpha}\mathbf{x}^2 - i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}\right) \quad (5.53)$$

となり、座標表示でもガウス型の関数となる。この関数の時間発展をおってみよう。

小さな時間 t

$$\alpha \gg \frac{\hbar t}{2m} \quad (5.54)$$

となる早い時刻では、波動関数は、

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}, t) &= \tilde{N} \exp\left(-\frac{1}{4\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{v}_0 t)^2 - i\left(\frac{\hbar \mathbf{k}_0^2}{2m} t - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}\right)\right) \\ \mathbf{v}_0 &= \frac{\mathbf{p}_0}{m}, \tilde{N} = N\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2}\end{aligned}\quad (5.55)$$

となり、関数は、速度 v_0 で移動する中心の回りに幅 $\sqrt{\alpha}$ で広がった関数を表す。広がり $\sqrt{\alpha}$ が小さい時、波は速度 v_0 の小さな粒子として振る舞う。通常の場合は、この時間領域を考察するので十分である。

大きな時間 t

$$\frac{\hbar t}{2m} \gg \alpha \quad (5.56)$$

となる極めて遅い時刻では、波動関数は、

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}, t) &= \tilde{N} \exp\left(-\frac{1}{4\frac{i\hbar t}{2m}}(\mathbf{x} - \mathbf{v}_0 t)^2 - i\left(\frac{\hbar \mathbf{k}_0^2}{2m} t - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}\right)\right) \\ \mathbf{v}_0 &= \frac{\mathbf{p}_0}{m}, \tilde{N} = N\left(\frac{\pi}{\frac{i\hbar t}{2m}}\right)^{3/2}\end{aligned}\quad (5.57)$$

と \mathbf{x} についてゆっくりと振動する関数となる。振動の形から見積もる波束の大きさは、時間に比例して

$$\frac{2\hbar t}{m} \quad (5.58)$$

で与えられ、徐々に大きくなる。ガウス波束は、早い時刻では、波束の形を保ちながら時刻と共に平行移動を行ない、その後ゆっくりと波束が大きくなり、十分時間が経過した後では、十分拡がる。

5.1.3 重ねあわせの原理と干渉

二つの波 ψ_1 と ψ_2 で、波 ψ_1 は $t = 0$ での座標が中心 \mathbf{x}_1 の近傍で値をもつ

$$\begin{aligned}\psi_1(\mathbf{x}, t) &= \int d\mathbf{k} N e^{-\alpha(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2 - i\left(\frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} t - \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)\right)} \\ &= \tilde{N} \exp\left(-\frac{1}{4\left(\alpha + \frac{i\hbar t}{2m}\right)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1 - \mathbf{v}_0 t)^2 - i\left(\frac{\hbar \mathbf{k}_0^2}{2m} t - \mathbf{k}_0 \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)\right)\right)\end{aligned}\quad (5.59)$$

とし、波 ψ_2 は $t = 0$ での座標が中心 \mathbf{x}_2 の近傍で値をもつ

$$\begin{aligned}\psi_2(\mathbf{x}, t) &= \int d\mathbf{k} N e^{-\alpha(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2 - i\left(\frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} t - \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)\right)} \\ &= \tilde{N} \exp\left(-\frac{1}{4\left(\alpha + \frac{i\hbar t}{2m}\right)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2 - \mathbf{v}_0 t)^2 - i\left(\frac{\hbar \mathbf{k}_0^2}{2m} t - \mathbf{k}_0 \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)\right)\right)\end{aligned}\quad (5.60)$$

のとする。これら二つの波 ψ_1 と ψ_2 の和

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 \quad (5.61)$$

の性質は、それぞれの波とは大きく異なる。特に、波の特徴である干渉を示す波が形成されている。波束で、この様子を具体的に観察してみよう。

5.1.4 重ねあわせの原理と粒子の軌道（軌跡）の観測

時間方向に連続的に行なう観測

粒子を観測する測定器は、粒子が形成する軌道を通して粒子の飛跡を測定する。もしも軌道がなかったり見えなかったら、粒子として同定することはできないだろう。では、何故粒子は一つの（古典）軌道に沿って観測されるのだろうか？もしも、粒子がいつも完全な平面波で記述されているならば、空間における場所が定まらず、観測が局所的な測定でなされるとしても、その軌跡が古典軌道になる保証はない。しかし、粒子が有限な波束で記述されるならば、粒子はいつもその波束の有限な内部で観測される。もしも、波束が粒子のように古典軌道にそって運動するならば、粒子の軌道が観測されることになる。

粒子が測定器で観測されるのは、実際粒子が形成する軌道による。波束は有限な大きさをもつので、波動関数が有限な振幅をもつその内部で測定器と反応し、その結果軌道が形成される。測定器との反応は、有限な幅で広がった位置の空間領域で行なわれ、また有限な運動量幅の運動量が測定された結果、この運動量が粒子から失われる。この結果初期状態として形成された粒子の状態は、位置と運動量が定まらない広がりをもつ波束である。だから、観測される粒子を表現するには、波束による記述が必要であり、波束の記述により粒子軌道を実現する振幅が構成される。

時間方向に広がった観測

測定器の反応が瞬間的ではなく、有限の時間幅で起きるとしよう。この場合の測定器を表す波束の波動関数には空間的な広がりと時間的な広がりを共に導入する必要がある。このような波の干渉は、時間的に局所的な波動関数を使う場合とは、異なる。

5.2 球座標

多くの場合、ポテンシャルは球対称であり、力が中心力となっている。中心力の場合の波動方程式は、球座標 r, θ, ϕ を使うと簡単になる。付録で与えられているように、球座標ではラプラシアンは、

$$\nabla^2 \Psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r \Psi(\mathbf{x})) + \frac{1}{r^2} d_{\theta, \phi}^2 \Psi(\mathbf{x}) \quad (5.62)$$

$$d_{\theta, \phi}^2 \Psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta \Psi(\mathbf{x})) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \Psi(\mathbf{x}) \quad (5.63)$$

と変数 r, θ, ϕ に関する一見複雑な 2 階微分で表せる。角度変数に関する微分項は、次に説明する角運動量演算子 L の自乗 L^2 に比例して

$$L^2 = -\hbar^2 d_{\theta, \phi}^2 \quad (5.64)$$

となっている。ラプラシアンで、動径座標 r と角度座標 θ, ϕ が分離していることがわかる。そのため、波動方程式の解は、 r の関数と角度座標 θ, ϕ の関数の積の形の変数分離形で求める事ができる。

5.2.1 球座標での変数分離

定常状態では、波動方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r \Psi(\mathbf{x})) + \frac{1}{r^2} d_{\theta, \phi}^2 \Psi(\mathbf{x}) \right) + V(r) \Psi(\mathbf{x}) = E \Psi(\mathbf{x}) \quad (5.65)$$

となるので、微分方程式を解くにあたり、関数 $\Psi(\mathbf{x})$ は変数 r と角度 θ, ϕ を分離した形

$$\Psi(\mathbf{x}) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (5.66)$$

を仮定するとより簡単になる。この形を上の方方程式に代入して、

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} Y(\theta, \phi) \left(\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R(r)) + \frac{1}{r^2} R(r) d_{\theta, \phi}^2 Y(\theta, \phi) \right) + V(r) R(r) Y(\theta, \phi) \\ & = E R(r) Y(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (5.67)$$

の両辺を $R(r)Y(\theta, \phi)$ で割って、等式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{R(r)} (\partial_r (r^2 \partial_r R(r)) + (V(r) - E)r^2) = -\frac{1}{Y(\theta, \phi)} d_{\theta, \phi}^2 Y(\theta, \phi) \quad (5.68)$$

を得る。この等式は、任意の r と θ, ϕ で成立する。一方で、左辺は r の関数であり、右辺は角度の関数である。そのため、両辺が r, θ, ϕ によらない定数になる。この時、 $R(r)$ は変数 r についての2階微分方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R(r)) \right) - \frac{1}{r^2} l(l+1) R(r) + V(r) R(r) = ER(r) \quad (5.69)$$

を満たし、 $Y(\theta, \phi)$ は角度についての2階微分方程式

$$d_{\theta, \phi}^2 Y(\theta, \phi) = -l(l+1) Y(\theta, \phi) \quad (5.70)$$

を満たす。角度に依存する関数 $Y(\theta, \phi)$ は、ポテンシャルに依存しない微分方程式を満たしている。 $l(l+1)$ は変数分離を行なう場合の未知の定数である。未知の定数は、変数分離に際しては任意の実数として扱われるが、今の場合式 (5.70) を満たすことから、特別の値 $l(l+1)$ に限定される。これは、次節で詳しく説明されるように、角運動量が満たす交換関係から決ることである。また後の節で、この微分方程式の解も求める。

5.2.2 波動関数の規格化

変数分離形の二つの関数

$$\Psi_1(\mathbf{x}) = R(r)_1 Y_1(\theta, \phi) \quad (5.71)$$

$$\Psi_2(\mathbf{x}) = R(r)_2 Y_2(\theta, \phi) \quad (5.72)$$

の内積は、

$$(\Psi_1(\mathbf{x}), \Psi_2(\mathbf{x})) = \int r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi (R(r)_1 Y_1(\theta, \phi), R(r)_2 Y_2(\theta, \phi)) \quad (5.73)$$

$$= \int_0^\infty r^2 dr R(r)_1^* R(r)_2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_1(\theta, \phi)^* Y_2(\theta, \phi) \quad (5.74)$$

と r 積分と θ, ϕ 積分の積となる。 r の積分要素に r^2 がかかり、 θ の積分要素に $\sin \theta$ がかかる事に注意する必要がある。

5.3 動径波動関数

次に、動径座標 r に関する方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R(r)) \right) + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1) + V(r) \right) R(r) = ER(r) \quad (5.75)$$

を考察する。これは、一次元空間におけるシュレーディンガー方程式とよく似ているが、いくつかの点で相違点

- (1) r の一階微分を含む事、
 (2) ポテンシャル $V(r)$ 以外に、角度変数の分離のパラメータ l に依存する大きさをもつ座標の関数、 $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1)$ を含む事、
 (3) 波動関数の規格化 (5.74) の際、積分要素に r^2 がかかること、があり、通常の一次元系とは異なる特徴をもつ。
 (1) については、 $R(r)$ を r でわった、関数 $u(r)$

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (5.76)$$

を使い方程式を書き換えると、微分が

$$\partial_r R(r) = \frac{u'(r)r - u(r)}{r^2} \quad (5.77)$$

$$\begin{aligned} \partial_r(r^2 \partial_r R(r)) &= \partial_r(u'(r)r - u(r)) \\ &= u''(r)r \end{aligned} \quad (5.78)$$

となることより、方程式は

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{u''(r)}{r} + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1) + V(r) \right) \frac{u(r)}{r} \right) &= E \frac{u(r)}{r} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1) + V(r) \right) u(r) &= E u(r) \end{aligned} \quad (5.79)$$

と一次元で一階微分項を含まない2階微分方程式になる。

(2) については、原点で発散する関数 $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1)$ は、角運動量の大きさに依存する斥力ポテンシャル、いわゆる遠心力ポテンシャルを表している。

(3) の関数の規格化については、 $u(r)$ を使うと、

$$\int_0^\infty r^2 dr R(r)_1^* R(r)_2 = \int_0^\infty dr u_1^*(r) u(r)_2 \quad (5.80)$$

と簡単になるが、一方で変数 r は、半無限領域

$$r \geq 0 \quad (5.81)$$

をとる。この点で、通常の一次元変数とは異なる。

5.3.1 原点近傍

さて、原点の近傍で、 $V(r)$ が発散しないなめらかな関数であるとしよう。この領域で、

$$R(r) = r^\gamma \quad (5.82)$$

とにおいて、冪 γ を求める。微分方程式から、 r が小さい領域では、

$$(\gamma(\gamma + 1) - l(l + 1))r^{\gamma-2} = 0 \quad (5.83)$$

となり、 γ は

$$\gamma = l, -l - 1 \quad (5.84)$$

となる。後者の $\gamma = -l - 1$ の解は、原点で発散する。だから、原点を含む領域における規格化された波動関数には向かない。しかし、原点を含まない領域での波動関数には、適している。一方、前者の $\gamma = l$ の関数は、原点の近傍で、なめらかであり

$$R(r) = r^l \quad (5.85)$$

と、有限であり $l \geq 1$ ならば原点で零となる。このため、原点を含む領域を表わす波動関数として適している。さらに、粒子の存在確率が、原点の近傍の領域において零となる事は、角運動量の積 $l(l + 1)$ に比例する強い斥力ポテンシャルのために、粒子が原点に近づく事を示している。この性質は、古典力学において遠心力ポテンシャルのために、質点が原点から遠ざけられる事に対応している。

5.3.2 漸近形

次に、 $V(r)$ が原点から遠く離れた領域で零となる関数であるとしよう。この領域で、 $u(r)$ が満たす方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_r^2 u(r) = Eu(r) \quad (5.86)$$

である。解の性質は、正エネルギーと負エネルギーで大きく異なる。

正エネルギー

$E \geq 0$ の場合、関数は進行波で

$$u(r) = Ne^{\pm ikr}, k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (5.87)$$

となり、定在波では、

$$u(r) = N \cos kr, N \sin kr \quad (5.88)$$

となる。 N は、規格化定数であり、適用する状況に応じた値をとる。

進行波では、 $R(r)$ の確率密度や流れは、

$$\rho(r) = |N|^2 \frac{1}{r^2} \quad (5.89)$$

$$\mathbf{j}(r) = \pm |N|^2 \mathbf{e}_r v \frac{1}{r^2} + O\left(\frac{1}{r^3}\right) \quad (5.90)$$

$$v = \frac{\hbar k}{m}$$

となり、大きな r の領域で、 r^2 に逆比例する値を持つ。流れの方向は、動径方向であり流れの大きさは、速さ v に比例する。確率 $\rho(r)$ を半径 R の球の内部で積分すると、半径 r の球の表面積が r^2 に比例するため、

$$\int_0^R dr r^2 \sin \theta d\theta d\phi \rho(r) = 4\pi |N|^2 R \quad (5.91)$$

と半径によらない値となり、半径 R の球面をきる確率の流れ、即ち \mathbf{j} を同じ球面で面積分したものは、

$$\int_{r=R} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = \pm 4\pi |N|^2 v \quad (5.92)$$

となる。つまり、球面を横切る確率は、早さ $v = \frac{\hbar k}{m}$ に比例して、外向きの場合と内向きの場合がある。

負エネルギー

$E \leq 0$ の場合 $r \rightarrow \infty$ で発散しない関数は、

$$R(r) = \frac{e^{-kr}}{r}, k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (5.93)$$

となる。関数は、遠方で急激に減少して零となる。この関数の確率密度や流れは、

$$\rho(r) = \frac{e^{-2kr}}{r^2} \quad (5.94)$$

$$\mathbf{j}(r) = 0 \quad (5.95)$$

となり、密度は r と共に急激に小さくなり、また流れは零である。確率 $\rho(r)$ を半径 $R = \infty$ の球の内部で積分すると、

$$\int_0^\infty dr r^2 4\pi \rho(r) = 4\pi |N|^2 \frac{1}{2p} \quad (5.96)$$

と一定の値になり、また半径 R の球面をきる確率の流れは、

$$\int_{r=R} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (5.97)$$

となる。つまり、有限な半径の球面を横切る確率は、零である。このように、 $E \leq 0$ の場合は、空間の内部に留まる状態、即ち束縛状態を表している。

5.3.3 自由球面波

ポテンシャルが零である場合、エネルギーは正定値となり方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R(r)) \right) + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1) \right) R(r) = ER(r) \quad (5.98)$$

である。これは、球ベッセル関数の微分方程式形

$$\partial_r^2 R(r) + \frac{2}{r} \partial_r R(r) - \frac{1}{r^2} l(l+1) R(r) + \frac{2mE}{\hbar^2} R(r) = 0 \quad (5.99)$$

をしている。 $r = cz$ とおいて変数変換して、

$$\partial_z^2 R(z) + \frac{2}{z} \partial_z R(z) - \frac{1}{z^2} l(l+1) R(z) + c^2 \frac{2mE}{\hbar^2} R(z) = 0 \quad (5.100)$$

となり、係数を

$$c^2 = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{-1}, c = \frac{\hbar}{p} = \frac{1}{k} \quad (5.101)$$

と選ぶと、方程式は球ベッセルの方程式

$$\partial_z^2 R(z) + \frac{2}{z} \partial_z R(z) + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2} \right) R(z) = 0 \quad (5.102)$$

に一致する。この方程式には、独立な関数が、定在波で

$$R(z) = j_l(z), n_l(z) \quad (5.103)$$

と二つある。前者 j_l は、原点近傍で r^l と振る舞い有限であり、後者 n_l は、原点近傍で r^{-l-1} と振る舞い発散する。

球ベッセル関数、 j_l 、は l が小さいとき、

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad (5.104)$$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}, \quad (5.105)$$

$$j_2(\rho) = \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho, \quad (5.106)$$

であり、原点で発散する球ベッセル関数、 n_l 、は l が小さいとき、

$$n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho}, \quad (5.107)$$

$$n_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad (5.108)$$

$$n_2(\rho) = -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho, \quad (5.109)$$

である。

進行波では、線形結合をとって、

$$R_+(r) = j_l(kr) + in_l(kr) \quad (5.110)$$

$$R_-(r) = j_l(kr) - in_l(kr) \quad (5.111)$$

となる。 $R_+(r)$ は原点から外向に進行する波であり、 $l = 0$ や $l = 1$ では、

$$l = 0; R_+(r) = -i \frac{e^{ikr}}{kr} \quad (5.112)$$

$$l = 1; R_+(r) = -e^{ikr} \frac{1}{kr} \left(1 + i \frac{1}{kr}\right) \quad (5.113)$$

となり、 $R_-(r)$ は外から原点に内向に進行する波であり、

$$l = 0; R_-(r) = i \frac{e^{-ikr}}{kr} \quad (5.114)$$

$$l = 1; R_-(r) = e^{-ikr} \frac{1}{kr} \left(1 + i \frac{1}{kr}\right) \quad (5.115)$$

となる関数である。有限な角運動量、 $l \neq 0$ 、の進行波は、有限な r では l 毎に異なる振る舞いをするが、 $r \rightarrow \infty$ では $l = 0$ の球面波と同じ r 依存性をもつ。むろん、角度依存性は $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ で決まり、 l や m に依存する。

後で述べる散乱問題では、有限な領域におけるポテンシャルの影響を受けた波が形成される。この波は、 j_l と n_l を (5.113) とは異なる重みをつけて重ねあわせた波動関数である。

5.3.4 固有値方程式

全領域で、方程式 (5.75) を満たす関数の振る舞いは、ポテンシャルにより異なる。一定の球型ポテンシャル、 $\frac{1}{r}$ の形のクーロンポテンシャルと r^2 の形の調和振動子の場合には、この関数を、解析的に求める事ができる。一定の球型ポテンシャルと r^2 の形の調和振動子は、次の節で扱われ、クーロンポテンシャルは、次の章で扱われる。他の場合は、数値的な、方法を必要とする。

5.4 球形ポテンシャル中の束縛状態

球形ポテンシャル

$$V = V_0, r \leq R \quad (5.116)$$

$$= 0, r \geq R \quad (5.117)$$

中の質点の従う動径方向の微分方程式は、 $r \leq R$ と $R < r$ を同じ表式で

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R(r)) \right) + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1) \right) R(r) = \frac{\tilde{p}^2}{2m} R(r) \quad (5.118)$$

となる。ただし、右辺の定数係数は、 $r = R$ の中では有限のポテンシャルの影響で外で異なり、

$$\frac{\tilde{p}^2}{2m} = (E - V_0), r \leq R, \quad (5.119)$$

$$= E, R < r \quad (5.120)$$

である。

いま $V_0 < 0$ として $V_0 < E < 0$ のエネルギーをもつ束縛状態を求めよう。内部と外部の運動量として

$$\tilde{p}_{in} = \pm \sqrt{2m(E - V_0)}, r \leq R, \quad (5.121)$$

$$\tilde{p}_{out} = \sqrt{-2mE}, R < r \quad (5.122)$$

とおき、さらに、

$$k_{in} = \frac{p_{in}}{\hbar} \quad (5.123)$$

$$k_{out} = \frac{p_{out}}{\hbar} \quad (5.124)$$

とにおいて、 $r < R$ で有界で $R < r$ で収束する波動関数が

$$N_l(k_{in}) j_l(k_{in} r), r \leq R, \quad (5.125)$$

$$M_l(k_{out}) (j_l(i\tilde{k}_{out} r) + i n_l(i\tilde{k}_{out} r)), R < r \quad (5.126)$$

となる。2階微分方程式の解は、関数値とその一階微分が連続になる。その為、 $r = R$ での

波動関数とその一階微分は連続性の条件

$$N_l(k_{in})j_l(k_{in}R) = M_l(k_{out})(j_l(i\tilde{k}_{out}R) + in_l(i\tilde{k}_{out}R)) \quad (5.127)$$

$$N_l(k_{in})\frac{\partial}{\partial r}j_l(k_{in}r)|_{r=R} = M_l(k_{out})\frac{\partial}{\partial r}(j_l(i\tilde{k}_{out}r) + in_l(i\tilde{k}_{out}r))|_{r=R} \quad (5.128)$$

を満たす。これらは、規格化定数 N_l, M_l によるが、両辺の比は規格化定数に依存しない。そのため、関係式

$$\frac{\frac{\partial}{\partial r}j_l(k_{in}r)|_{r=R}}{j_l(k_{in}R)} = \frac{\frac{\partial}{\partial r}(j_l(i\tilde{k}_{out}r) + in_l(i\tilde{k}_{out}r))|_{r=R}}{j_l(i\tilde{k}_{out}R) + in_l(i\tilde{k}_{out}R)} \quad (5.129)$$

が導かれる。この式で、エネルギーが決定される。

$l=0$ では、上の式は簡単になる。このとき、 $j_0(kr) = D\frac{\sin kr}{r}$ であり、 $j_0(ikr) + in_0(ikr) = C\frac{e^{-kr}}{r}$ であるので、固有値をきめる式 (5.129) は、

$$\frac{k_{in}R \cos k_{in}R - \sin k_{in}R}{R \sin k_{in}R} = \frac{k_{out}R + 1}{R} \quad (5.130)$$

となり、さらに変形して

$$\frac{k_{in}R \cos k_{in}R - \sin k_{in}R}{\sin k_{in}R} = k_{out}R + 1 \quad (5.131)$$

$$k_{in}R(\tan k_{in}R)^{-1} - 1 = k_{out}R + 1 \quad (5.132)$$

となり、さらに

$$\frac{\tan(k_{in}R)}{k_{in}R} = \frac{1}{k_{out}R + 2} \quad (5.133)$$

が得られる。この両辺は、変数 E の関数として図のようになり、両関数の交点から、固有値が決まる。

束縛状態である $E < 0$ の固有状態の数は、 V_0 が負で絶対値が大きければ大きいほど大きくなるのがわかる。特に、左辺が発散するのは、

$$\tan \sqrt{2m(E - V_0)}R = \infty \quad (5.134)$$

となるときであり、エネルギーはこの時、

$$E = V_0 + \frac{(2n+1)^2\pi^2}{8mR^2} \quad (5.135)$$

となっている。同様に左辺が零となるのは、

$$\tan \sqrt{2m(E - V_0)}R = 0 \quad (5.136)$$

となるときであり、エネルギーはこの時、

$$E = V_0 + \frac{(2n)^2\pi^2}{8mR^2} \quad (5.137)$$

となっている。だから、エネルギー固有値は、この値の間にあることになる。

5.5 動径座標についての方程式

5.5.1 球対称調和振動子の基底状態

球対称な三次元調和振動子のポテンシャルは、

$$V(r) = \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}k(x^2 + y^2 + z^2) \quad (5.138)$$

である。このポテンシャルは、 $r \rightarrow \infty$ で発散するので、一定のエネルギーの値 E より大きくなり、固有値方程式の解は、すべて

$$|\psi(\mathbf{x})| \rightarrow 0, |\mathbf{x}| \rightarrow \infty \quad (5.139)$$

となり、さらに積分が収束して

$$\int d\vec{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 = \text{finite} \quad (5.140)$$

となる束縛状態である。この事情は、古典力学において、三次元調和振動子の解がすべて閉じた閉軌道をなすのと、同じである。

動径座標 r に関する波動方程式 (5.75) にポテンシャルを代入して、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R(r)) \right) + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1) + \frac{k}{2} r^2 \right) R(r) = ER(r) \quad (5.141)$$

が得られる。

次に、角運動量が零である $l = 0$ 場合の方程式を考察する。このとき、方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R(r)) \right) + \frac{k}{2} r^2 R(r) = ER(r) \quad (5.142)$$

となり 1 次元調和振動子のシュレーディンガー方程式とほぼ同じ形になる。そのため、特殊解として、1 次元の場合と同じ形

$$R(r) = e^{-cr^2} \quad (5.143)$$

を仮定する。これを、方程式に代入するため、この関数の 1 階微分と 2 階微分を計算して

$$R'(r) = -2cre^{-cr^2} \quad (5.144)$$

$$R''(r) = (-2c + (-2cr)^2)e^{-cr^2} \quad (5.145)$$

が得られる。このため、シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(-2c + 4c^2r^2 - 4c)e^{-cr^2} + \frac{k}{2}r^2e^{-cr^2} = Ee^{-cr^2} \quad (5.146)$$

となり、係数が

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(4c^2) + \frac{k}{2} = 0 \quad (5.147)$$

$$c = \frac{\sqrt{mk}}{2\hbar} \quad (5.148)$$

を満たすとき、方程式 (5.146) は任意の r で成立する。つまり、 e^{-cr^2} は $c = \frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}$ のとき、方程式 (5.146) の解となっている。このとき、エネルギーは

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(6c) = 3 \times \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (5.149)$$

である。この解は、動径座標 r の関数として、 $r \rightarrow \infty$ で急激に小さくなり、また有限の r では零になることはない関数であり、基底状態である。このエネルギーは、最低固有状態のエネルギーであり、また必ず正定値である。3 次元調和振動子の零点エネルギーと呼ばれる。3 次元調和振動子のハミルトニアンは、3 方向の調和振動子の和であり、零点エネルギーも 1 次元振動子の零点エネルギーの丁度 3 倍となっている。

5.5.2 水素原子の基底状態

クーロンポテンシャルは、

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r}, \alpha > 0 \quad (5.150)$$

である。ここでは、異符号電荷の場合で、引力が働いている。このポテンシャルは、 $r \rightarrow \infty$ で零となるので、負エネルギー $E < 0$ の固有値方程式の解は、すべて

$$|\psi(\mathbf{x})| \rightarrow 0, |\mathbf{x}| \rightarrow \infty \quad (5.151)$$

となり、さらに積分が収束して

$$\int d\vec{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 = \text{finite} \quad (5.152)$$

となる束縛状態である。この事情は、古典力学における万有引力の下での運動で、負エネルギーの解が、閉じた楕円運動であるのと同じである。

動径座標 r に関する波動方程式 (5.75) にポテンシャルを代入して、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R(r)) \right) + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1) - \frac{\alpha}{r} \right) R(r) = ER(r) \quad (5.153)$$

が得られる。

次に、角運動量が零である $l = 0$ 場合の方程式を考察する。このとき、方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R(r)) \right) - \frac{\alpha}{r} R(r) = ER(r) \quad (5.154)$$

となり前問とは大きく異なる形になる。しかし、 $r \rightarrow \infty$ で急激に小さくなる固有関数があるはずである。そのため、特殊解として、前問を少し修正し形

$$R(r) = e^{-cr} \quad (5.155)$$

を仮定する。これを、方程式に代入するため、この関数の 1 階微分と 2 階微分を計算して得られる

$$R'(r) = -ce^{-cr} \quad (5.156)$$

$$R''(r) = (-c)^2 e^{-cr} \quad (5.157)$$

を代入して、シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(c^2 - 2c \frac{1}{r} \right) e^{-cr} - \frac{\alpha}{r} e^{-cr} = E e^{-cr} \quad (5.158)$$

となり、係数が

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (-2c) - \alpha = 0 \quad (5.159)$$

$$c = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \quad (5.160)$$

を満たすとき、方程式 (5.158) は任意の r で成立する。つまり、 e^{-cr} は $c = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$ のとき、方程式 (5.158) の解となっている。このとき、エネルギーは

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} c^2 = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad (5.161)$$

である。この解は、動径座標 r の関数として、 $r \rightarrow \infty$ で急激に小さくなり、また有限の r では零になることはない関数であり、基底状態である。このエネルギーは、水素原子の最低固有状態のエネルギーである。他の多くの励起状態の波動関数や、エネルギー固有値については、後の章で考察する。

5.6 角運動量

5.6.1 角運動量

球対称ポテンシャル、 $V(r)$ 、中で運動する質点の角運動量について調べよう。角運動量の次の三つの成分

$$L_x = yp_z - zp_y \quad (5.162)$$

$$L_y = zp_x - xp_z \quad (5.163)$$

$$L_z = xp_y - yp_x \quad (5.164)$$

は、ハミルトニアンとの間に交換関係

$$[H, L_i] = 0 \quad (5.165)$$

を満たす。このため角運動量の各成分は時間によらない保存量である。

次に、角運動量の二つの成分の間の交換関係を計算すると

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (5.166)$$

と、角運動量のもう一つの成分が求まることがわかる。角運動量の各成分は

$$L_i = \epsilon_{ijk} x_k p_j \quad (5.167)$$

と一般的に表され、位置や運動量の各成分との間で交換関係は、

$$[L_i, x_j] = \epsilon_{ikl} [x_k p_l, x_j] = i\hbar \epsilon_{ikl} x_k \delta_{jl} = i\hbar \epsilon_{ikj} x_k \quad (5.168)$$

$$[L_i, p_j] = \epsilon_{ikl} [x_k p_l, p_j] = i\hbar \epsilon_{ikl} p_l \delta_{jk} = i\hbar \epsilon_{ijl} p_l \quad (5.169)$$

となる。これらは、角運動量ベクトルと、交換関係

$$[L_i, A_j] = i\hbar \epsilon_{ikj} A_k \quad (5.170)$$

を満たす演算子の例である。このような演算子 A_i をベクトル演算子とよぶ。この交換関係は、角運動量が座標回転を引き起こす生成子であり、座標回転で演算子 A_i がベクトルとして変換を受ける事を表している。さらにこれらより、スカラー量である A^2 は

$$[L_i, A_j^2] = A_j [L_i, A_j] + [L_i, A_j] A_j = i\hbar \epsilon_{ijk} (A_j A_k + A_k A_j) = 0 \quad (5.171)$$

と角運動量と可換であることがわかる。 A^2 の任意な関数も

$$[L_i, F(A_j^2)] = 0 \quad (5.172)$$

となる。

角運動量間では、交換関係

$$\begin{aligned}
 [L_i, L_j] &= [L_i, \epsilon_{jkl} x_k p_l] \\
 &= \epsilon_{jkl} [L_i, x_k p_l] = \epsilon_{jkl} x_k [L_i, p_l] + \epsilon_{jkl} [L_i, x_k] p_l \\
 &= i\hbar (\epsilon_{jkl} \epsilon_{ilm} x_k p_m + \epsilon_{jkl} \epsilon_{ikm} x_m p_l) \\
 &= i\hbar \epsilon_{ijk} L_k
 \end{aligned} \tag{5.173}$$

が満たされている。角運動量は、上の演算子 A_i の一つであり、また、閉じた代数関係を満たしている。

5.6.2 角運動量の行列表現

角運動量ベクトルの3成分が満たす閉じた代数は、強い関係式であり、この代数を満たす有限次元の行列を、交換関係だけを使い求めることができる。いかに、それらの行列を求めよう。

まず、交換関係の両辺の行列の trace を計算して、

$$Tr[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} Tr L_k \tag{5.174}$$

を得る。ここで、左辺は任意の有限次元行列で成立する関係式、

$$Tr[A, B] = \sum_i [A, B]_{ii} = \sum_{i,l} (A_{il} B_{li} - B_{il} A_{li}) = 0 \tag{5.175}$$

から、

$$Tr L_k = 0 \tag{5.176}$$

となる。つまり、この3個の行列は、trace が零となる行列である。

以下、簡単のために $\frac{L_i}{\hbar}$ を L_i と表して計算する。これは $\hbar = 1$ なる単位系をとるのと同じである。さて、昇降演算子

$$L_+ = L_1 + iL_2, L_- = L_1 - iL_2 \tag{5.177}$$

を使うと、見通し良く計算できる。昇降演算子は交換関係

$$\begin{aligned}
 [L_3, L_+] &= L_+, [L_3, L_-] = -L_- \\
 [L_+, L_-] &= 2L_3
 \end{aligned} \tag{5.178}$$

を満たし、また角運動量ベクトルの大きさが、昇降演算子を使い

$$\mathbf{L}^2 = \sum_i L_i^2 \quad (5.179)$$

$$= L_+L_- + L_3(L_3 - 1) = L_-L_+ + L_3(L_3 + 1) \quad (5.180)$$

と書ける。

交換関係を満たす行列 $L_i (i = 1, 2, 3)$ を求めるにあたり、

- (1) 行列の一意性、
- (2) 直交基底ベクトル
- (3) 対角行列とその成分

に着目する。

(1) 一つの行列 L_i が、交換関係 (5.174) を満たすとき、一つのユニタリ行列 U で変換した行列

$$\tilde{L}_i = U^\dagger L_i U \quad (5.181)$$

$$U^\dagger U = 1 \quad (5.182)$$

は、同じ交換関係

$$[\tilde{L}_i, \tilde{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\tilde{L}_k \quad (5.183)$$

を満たす。

- (2) 直交基底ベクトル

上のように、一つの行列がわかれば良いので、行列を計算しやすい直交基底ベクトルを選ぶ。

- (3) 対角行列とその成分

L_3 を対角行列にすると、固有値方程式

$$L_3|b\rangle = b|b\rangle \quad (5.184)$$

の解である固有値が、どのように分布するか知ることが、大切である。

さて、交換関係

$$[\mathbf{L}^2, L_i] = 0 \quad (5.185)$$

$$[L_i, L_i] = 0 \quad (5.186)$$

から、 L^2 と L_i の一つは互いに可換である。そのため、同時に対角形にする事ができる。いま、 L^2 と L_3 に着目して、これらに対角形とする表示を求める。このため、これらの固有値を (a, b) 、固有ベクトルを $|a, b\rangle$,

$$L^2|a, b\rangle = a|a, b\rangle \quad (5.187)$$

$$L_3|a, b\rangle = b|a, b\rangle \quad (5.188)$$

とにおいて、固有値や固有ベクトルの関係式や、この固有ベクトルによる角運動量の行列表示を求める。

この空間における演算子 L_i やそれらの任意な積はすべて L^2 と可換であるので、固有ベクトル $|a, b\rangle$ に演算子 L_i かその積をかけた状態は、

$$L^2 L_1^l L_2^m L_3^n |a, b\rangle = a L_1^l L_2^m L_3^n |a, b\rangle \quad (5.189)$$

となる。そのため、この空間では、 L^2 の固有値 a は一定の値に固定されている。しかし、 b はいくつかの値をとる。それらの値を大きさの順に b_1, b_2, \dots, b_N とすると、このベクトル空間は、

$$|a, b_1\rangle, |a, b_2\rangle, |a, b_2\rangle, \dots, |a, b_N\rangle \quad (5.190)$$

から成っている。昇降演算子と L_3 との交換関係から、

$$\begin{aligned} L_3(L_-)|a, b\rangle &= ([L_3, L_-] + L_-L_3)|a, b\rangle \\ &= (b-1)L_-|a, b\rangle \end{aligned} \quad (5.191)$$

となり、 L_- は L_3 の固有値を 1 下げ、

$$\begin{aligned} L_3(L_+)|a, b\rangle &= ([L_3, L_+] + L_+L_3)|a, b\rangle \\ &= (b+1)L_+|a, b\rangle \end{aligned} \quad (5.192)$$

と、 L_+ は L_3 の固有値を 1 上げる。このため、 $b_{i+1} = b_i + 1$ であることがわかり、まだ不定の規格化定数 N をのこして、

$$L_+|a, b\rangle = N|a, b+1\rangle \quad (5.193)$$

$$L_-|a, b\rangle = N'|a, b-1\rangle \quad (5.194)$$

と書ける。規格化定数は、状態の規格化から決り、後で具体形を求める。

ここで、 L_3 の上限値と下限値を持つベクトル $|a, b_N\rangle, |a, b_1\rangle$ に着目する。これらは

$$L_+|a, b_N\rangle = 0, \quad (5.195)$$

$$L_-|a, b_1\rangle = 0$$

を満たす。何故ならば、もし前者の等式が成立しないとすれば、

$$L_+|a, b_N\rangle \neq 0 \quad (5.196)$$

となり、 L_3 の固有値 $b_N + 1$ を持つ状態が存在することになる。これは、 b_N が L_3 の上限値であることに矛盾する。だから、上の等式が成立する。後者の等式についても、同様である。

ここでは、便宜上

$$b_{max} = b_N, b_{min} = b_1 \quad (5.197)$$

とおく。このとき、 L_+ や L_- を使う表示 (5.180) から、さらに

$$\begin{aligned} L^2|a, b_{max}\rangle &= (b_{max}^2 + b_{max})|a, b_{max}\rangle, \\ L^2|a, b_{min}\rangle &= (b_{min}^2 - b_{min})|a, b_{min}\rangle \end{aligned} \quad (5.198)$$

を満たす。よって最大固有値と最小固有値と a の間に、等式

$$a = (b_{max}^2 + b_{max}) = (b_{min}^2 - b_{min}) \quad (5.199)$$

が成立する。これを变形して、

$$b_{max}^2 + b_{max} - b_{min}^2 + b_{min} = 0 \quad (5.200)$$

$$(b_{max} + b_{min})(b_{max} - b_{min} + 1) = 0 \quad (5.201)$$

を得、二つの解

$$b_{max} = -b_{min}, b_{max} = b_{min} - 1 \quad (5.202)$$

が得られる。後者の解は、条件を満たさないので除外する。その結果、一般に

$$b_{max} = -b_{min} = l \quad (5.203)$$

とおいて、 a が

$$a = l(l + 1) \quad (5.204)$$

となる。この時、基底ベクトルの数は $2l + 1$ であり、ベクトル空間の次元は $2l + 1$ となる。だから、角運動量 L_i は $2l + 1 \times 2l + 1$ 行列となる。また、 l は整数か半整数である。

次に、状態の規格化から規格化定数 N, N' を求める。式の内積から、

$$|N|^2 \langle a, m + 1 | a, m + 1 \rangle = (a - m^2 - m) \langle a, m | a, m \rangle \quad (5.205)$$

$$|N'|^2 \langle a, m - 1 | a, m - 1 \rangle = (a - m^2 + m) \langle a, m | a, m \rangle \quad (5.206)$$

規格化されているベクトルを使い

$$|N|^2 = (a - m^2 - m) \quad (5.207)$$

$$|N'|^2 = (a - m^2 + m) \quad (5.208)$$

が得られ、

$$|N| = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \quad (5.209)$$

$$|N'| = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \quad (5.210)$$

となる。定数の位相は決らないが、実数になるようにベクトルの位相をきめる。すると、最終的に

$$N = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \quad (5.211)$$

$$N' = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \quad (5.212)$$

が得られる。よって、

$$L_+|a, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}|a, m+1\rangle \quad (5.213)$$

$$L_-|a, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}|a, m-1\rangle \quad (5.214)$$

となり、さらに元の角運動量の成分を使い

$$L_x|a, m\rangle = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)|a, m\rangle \quad (5.215)$$

$$= \frac{1}{2}(\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}|a, m+1\rangle + \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}|a, m-1\rangle)$$

$$L_y|a, m\rangle = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)|a, m\rangle \quad (5.216)$$

$$= \frac{1}{2i}(\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}|a, m+1\rangle - \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}|a, m-1\rangle)$$

となる。以上より、角運動量の行列要素が、

$$\langle a, m_1|L_x|a, m_2\rangle = \frac{1}{2}(\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\delta_{m_1, m_2+1} + \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\delta_{m_1, m_2-1}) \quad (5.217)$$

$$\langle a, m_1|L_y|a, m_2\rangle = \frac{1}{2i}(\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\delta_{m_1, m_2+1} - \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\delta_{m_1, m_2-1}) \quad (5.218)$$

$$\langle a, m_1|L_z|a, m_2\rangle = m_2\delta_{m_1, m_2} \quad (5.219)$$

とまとめられる。 L_x と L_y は、対角成分が零であるので $Tr L_i = 0, i = 1, 2$ である。また L_z は対角行列であるが、対角成分の和は明らかに零である。以上の結果に $l = 1/2\hbar$ と $l = 1\hbar$ を代入して具体的な行列をもとめよう。ここで、 \hbar をあからさまにいれておく。

例 1 : $l=1/2$

$$l_z = 1/2\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$l_x = 1/2\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$l_y = 1/2\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

例 1 : $l=1$

$$l_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$l_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$l_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

5.6.3 球座標による角運動量状態

球座標を使い角運動量の状態をもとめる。デカルト座標と球座標は

$$x = r \sin \theta \cos \phi, y = r \sin \theta \sin \phi, z = r \cos \theta \quad (5.220)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (5.221)$$

$$\tan \theta = \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}, \tan \phi = -\frac{y}{x} \quad (5.222)$$

で関係している。これらを使い、微分演算子を球座標に変換して、

$$p_x = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\right) \quad (5.223)$$

$$\begin{aligned} &= -i\hbar\left(\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ &= -i\hbar\left(\sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \end{aligned}$$

$$p_y = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial y}\right) \quad (5.224)$$

$$= -i\hbar\left(\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$p_z = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial z}\right) \quad (5.225)$$

$$= -i\hbar\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

が得られる。この結果、角運動量は

$$l_{\pm} = e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \quad (5.226)$$

$$l_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \quad (5.227)$$

$$l^2 = -\left\{\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right\} \quad (5.228)$$

となる。

l^2 と l_z の固有関数は、

$$Y_{lm} = \frac{1}{2\pi}e^{im\phi}\Theta_{lm}(\theta) \quad (5.229)$$

$$l^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm} \quad (5.230)$$

$$l_z Y_{lm} = mY_{lm} \quad (5.231)$$

とさらに角度変数を分離して表せる。この一連の方程式を解くのにあたり、前節の手法、即ち、先ず、 Y_{ll} や、 Y_{l-l} を求め、次にこれらの状態に昇降演算子をかけて逐次他のすべての状態を求めることにする。 Y_{ll} は最大の m の値を持つ状態であり、 Y_{l-l} は最小の m の値を持つ状態であり、1階微分方程式、

$$l_+ Y_{ll} = 0, l_- Y_{l-l} = 0 \quad (5.232)$$

を満たす。1階微分方程式を解くのは、二階微分方程式を解くよりはるかにやさしい。その為、簡単に解を求められる。 Θ_{ll} については、方程式

$$\frac{d\Theta_{ll}}{d\theta} - l\cot\theta\Theta_{ll} = 0 \quad (5.233)$$

を変形した後、積分して

$$\frac{1}{\Theta_u} \frac{d\Theta_u}{d\theta} = l \cot \theta \Theta_u \quad (5.234)$$

$$\begin{aligned} \log \Theta_u &= \log \sin^l \theta \\ \Theta_u &= N \sin^l \theta \end{aligned} \quad (5.235)$$

となりよって、

$$Y_u = \frac{1}{2\pi} e^{il\phi} \Theta_u(\theta) \quad (5.236)$$

と解が求まる。一般の解は、演算子 l_- を Y_{lm} にかけて、得られる関係式

$$l_- Y_{lm} = \sqrt{(l-m+1)(l+m)} Y_{l,m-1} \quad (5.237)$$

を使えば良い。この結果得られる関係式、

$$Y_{lm} = \left[\frac{1}{(2l)!} \right]^{-1/2} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} (l_-)^{l-m} Y_u \quad (5.238)$$

と、恒等式

$$(l_-) f(\theta) e^{im\phi} = e^{i(m-1)\phi} \sin \theta^{-m} \frac{d}{d \cos \theta} (f(\theta) \sin^m \theta) \quad (5.239)$$

を使い、

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{1}{2\pi} e^{im\phi} \Theta_{lm}(\theta) \quad (5.240)$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = N_{lm} \frac{1}{2^l l! \sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d \cos^{l-m} \theta} \sin^{2l} \theta \quad (5.241)$$

$$N_{lm} = (-i)^l \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{2(l-m)!}} \quad (5.242)$$

が得られる。ただし、規格化条件

$$\int \sin \theta d\theta |\Theta_{lm}(\theta)|^2 = 1 \quad (5.243)$$

を満たすように規格化定数をきめた。これは、規格化条件

$$\int \sin \theta d\theta d\phi |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = 1 \quad (5.244)$$

に対応する。

$Y_{l,-l}(\theta, \phi)$ を出発しても同じようにして、 $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ が得られる。

一価性と軌道角運動量

球座標でもとめた角運動量の固有状態 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ が、一価関数になるためには、

$$Y_{lm}(\theta, \phi + 2\pi) = Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (5.245)$$

$$e^{im(2\pi)} = 1, m = \text{整数} \quad (5.246)$$

と m は整数でなければならぬ。前節で求めた交換関係に基づく角運動量の一般論の際には、半整数も許されたが、今の場合には、半整数は許されない。今求めている軌道角運動量は、整数の値だけを取り、半整数の値をとるのは、後で述べるスピン角運動量である。

5.6.4 Legendre 微分方程式

2階微分方程式 (5.230) を直接解いて $\Theta(\theta)_{lm}$ を求めることもできる。方程式は、 $x = \cos \theta$ とおいて $m = 0$ では簡単な Legendre の微分方程式

$$(1 - x^2)P_l'' - 2xP_l' + l(l+1)P_l = 0 \quad (5.247)$$

になり解が付録で与えられたように、

$$P_{2n} = \sum_{r=0}^n (-1)^{n-r} \frac{(2n+2r-1)!!}{(2r)!(2n-2r)!!} x^{2r} \quad (5.248)$$

$$P_{2n+1} = \sum_{r=0}^n (-1)^{n-r} \frac{(2n+2r+1)!!}{(2r+1)!(2n-2r)!!} x^{2r+1} \quad (5.249)$$

と表せる。得られた結果は、式 (5.241) で $m = 0$ としたものに一致する。

5.6.5 角運動量ハミルトニアン

ハミルトニアンが

$$H = \frac{1}{2I} \sum_i L_i^2 \quad (5.250)$$

で与えられる物理系を考察する。たとえば、半径が R に固定された球面上の質量 m の質点の自由な運動の場合、

$$I = mR^2 \quad (5.251)$$

である。この系では、力学変数は L_i であり、座標 x_i は全く顔を出さない。 L_i の時間依存性がわかれば、運動がわかることになる。

角運動量の特徴は三つの成分が閉じた代数関係 $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ をなすことである。このため、運動方程式は、

$$\dot{L}_i = \frac{1}{i\hbar}[H, L_i] = 0 \quad (5.252)$$

であり、簡単に積分できて

$$L_i(t) = L_i(0) \quad (5.253)$$

となる。

ハミルトニアン H の固有状態は、角運動量の二乗 L^2 の固有状態 $|l, m\rangle$ であり、

$$H|l, m\rangle = \frac{1}{2I}\hbar^2l(l+1)|l, m\rangle \quad (5.254)$$

と、固有値は $\frac{1}{2I}\hbar^2l(l+1)$ である。

5.7 スピン角運動量

電子は、位置と運動量のベクトル積である軌道角運動量に加えてスピン角運動量 s をもつ。スピンは、電子の位置や運動量とは、独立な自由度であり、スピン演算子 s の成分は、角運動量の交換関係

$$[s_i, s_j] = i\epsilon_{ijk}s_k \quad (5.255)$$

を満たすが、位置、運動量と可換であり、軌道角運動量とも可換である。スピンの各成分は交換関係

$$[s_i, x_j] = [s_i, p_j] = 0 \quad (5.256)$$

$$[s_i, L_j] = 0 \quad (5.257)$$

を満たしている。

スピンは角運動量であるため、その大きさは、 \hbar の半整数倍か整数倍である。電子のスピンの大きさは、 $\frac{1}{2}\hbar$ であり、 s_3 の固有値も $\pm\frac{1}{2}\hbar$ をとる 2×2 の行列を構成する二次元ベクトル空間で表される。このため、 ξ の値を、 $\pm 1/2$ の 2 つの値をとるとして、電子は、 $\psi_{-1/2}(\mathbf{x}, t)$ と $\psi_{1/2}(\mathbf{x}, t)$ の 2 つの成分をもつ波動関数

$$\psi_\xi(\mathbf{x}, t) \quad (5.258)$$

で表される。陽子や中性子のスピンの大きさも $\frac{1}{2}\hbar$ であり、2 つの成分をもつ波動関数で表される。

$\frac{1}{2}\hbar$ の大きさを持つ電子のスピン角運動量は、 2×2 の行列、

$$(s_i)_{\xi,\eta}; \xi, \eta = -1/2, 1/2 \quad (5.259)$$

で表される。このとき、スピン角運動量のスピン自由度を表す変数 ξ に依存する波動関数への作用は、

$$((s_i)\psi(\mathbf{x}, t))_{\xi} = \sum_{\eta} (s_i)_{\xi,\eta} \psi_{\eta}(\mathbf{x}, t) \quad (5.260)$$

と定義される。

5.8 角運動量の合成

5.8.1 角運動量状態の直積

全角運動量 \mathbf{J} が二つの角運動量 \mathbf{L}_1 と \mathbf{L}_2 の和

$$\mathbf{J} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 \quad (5.261)$$

である系で、角運動量 \mathbf{L}_1 の基底ベクトル $|l_1, m_1\rangle_1$

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_1^2 |l_1, m_1\rangle_1 &= l_1(l_1 + 1) |l_1, m_1\rangle_1 \\ L_1^3 |l_1, m_1\rangle_1 &= m_1 |l_1, m_1\rangle_1 \end{aligned} \quad (5.262)$$

と角運動量 \mathbf{L}_2 の基底ベクトル $|l_2, m_2\rangle_2$

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_2^2 |l_2, m_2\rangle_2 &= l_2(l_2 + 1) |l_2, m_2\rangle_2 \\ L_2^3 |l_2, m_2\rangle_2 &= m_2 |l_2, m_2\rangle_2 \end{aligned} \quad (5.263)$$

がわかっている時、これらの固有状態から全角運動量の固有状態を構成出来る。その方法を、この節で考察する。二つの角運動量は独立なので、

$$[L_1^i, L_2^j] = 0 \quad (5.264)$$

が成立している。

全角運動量の z 成分と、大きさの二乗は、

$$\begin{aligned} J^{(3)} &= L_1^{(3)} + L_2^{(3)} \\ \mathbf{J}^2 &= (\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)^2 = \mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + 2\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2 \\ &= \mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + 2L_1^3 L_2^3 + L_1^{(+)} L_2^{(-)} + L_1^{-} L_2^{+} \end{aligned} \quad (5.265)$$

となる。つまり、全角運動量の z 成分では、変数が分離しているが、角運動量の大きさの二乗では、変数が分離しないで、両変数の積の項が含まれている。このため、角運動量の二つの状態の直積 $|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2$ は角運動量の z 成分の固有状態であり

$$\begin{aligned} J^{(3)}|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 &= (L_1^{(3)} + L_2^{(3)})|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 \\ &= (m_1 + m_2)|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 \end{aligned} \quad (5.266)$$

となるが、角運動量の大きさの二乗では

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 &= (\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)^2|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 \\ &= (\mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + 2\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2)|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 \\ &= (l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1) + 2m_1m_2)|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 \\ &\quad + (L_1^{(+)}L_2^{(-)} + L_1^{(-)}L_2^{(+)})|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 \end{aligned} \quad (5.267)$$

となり、右辺最後の項のため、例外を除いては固有状態ではない。つまり、二つの状態の直積 $|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2$ は、全角運動量演算子の様々な大きさ j を含んでいる。このとき、表現は既約表現ではないという。このベクトル空間を各 j 毎のベクトル空間の和の形で表せれば、各 j に属する空間内の任意のベクトルに全角運動量演算子にかけたとき同じ j の空間内にあり、既約表現をなしている。二つの角運動量の直積に含まれる既約表現の全体を求めるにはどうしたら良いだろうか？

5.8.2 全角運動量 $l_1 + l_2$ の状態

もしも、右辺最後の項が零になれば上の直積は、全角運動量の固有状態になる。この場合の結果にもとずいて、一般の既約表現を求めることができる。この項が零となるのは、

$$L_1^{(+)}|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 = 0 \quad (5.268)$$

$$L_2^{(+)}|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 = 0 \quad (5.269)$$

を実現する $m_1 = l_1, m_2 = l_2$ の場合か

$$L_1^{(-)}|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 = 0 \quad (5.270)$$

$$L_2^{(-)}|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 = 0 \quad (5.271)$$

を実現する $m_1 = -l_1, m_2 = -l_2$ の場合である。それぞれは、

$$\mathbf{J}^2|l_1, l_1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2\rangle_2 = (l_1 + l_2)(l_1 + l_2 + 1)|l_1, l_1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2\rangle_2 \quad (5.272)$$

$$J^3|l_1, l_1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2\rangle_2 = (l_1 + l_2)|l_1, l_1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2\rangle_2 \quad (5.273)$$

を満たす全角運動量ベクトルの固有状態

$$|l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle = |l_1, l_1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2\rangle_2 \quad (5.274)$$

となるか、また

$$\mathbf{J}^2 |l_1, -l_1\rangle_1 \otimes |l_2, -l_2\rangle_2 = (l_1 + l_2)(l_1 + l_2 + 1) |l_1, -l_1\rangle_1 \otimes |l_2, -l_2\rangle_2 \quad (5.275)$$

$$J^3 |l_1, -l_1\rangle_1 \otimes |l_2, -l_2\rangle_2 = (-l_1 - l_2) |l_1, -l_1\rangle_1 \otimes |l_2, -l_2\rangle_2 \quad (5.276)$$

を満たす全角運動量ベクトルの固有状態

$$|l_1 + l_2, -l_1 - l_2\rangle = |l_1, -l_1\rangle_1 \otimes |l_2, -l_2\rangle_2 \quad (5.277)$$

となる。これらは、全角運動量の大きさが $l_1 + l_2$ であり、全角運動量の z 成分が、最大値の $l_1 + l_2$ か最小値の $-l_1 - l_2$ である。このように、これらの状態は直積で簡単に構成できる。これは、直積ベクトルで、全角運動量の大きさが $l_1 + l_2$ であり、全角運動量の z 成分が、最大値の $l_1 + l_2$ となるのは、唯一 $|l_1, l_1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2\rangle_2$ だけであることからわかる。同様に、全角運動量の z 成分が、最小値の $-l_1 - l_2$ となるのは、唯一 $|l_1, -l_1\rangle_1 \otimes |l_2, -l_2\rangle_2$ だけである。

他の状態については、積 $|l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2$ は、全角運動量の z 成分 $m_1 + m_2$ をもつので、全角運動量の大きさについては、 $m_1 + m_2$ から $l_1 + l_2$ までの様々な組み合わせがありうる。そのため、これらの線形結合を取ることで、全角運動量の良い状態が構成できる。この状態は、適当な重みをかけて作った状態

$$|j, m_1 + m_2\rangle = \sum C_{m_1, m_2}^j |l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 \quad (5.278)$$

に、固有値方程式

$$\mathbf{J}^2 \sum C_{m_1, m_2}^j |l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 = j(j+1) \sum C_{m_1, m_2}^j |l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 \quad (5.279)$$

を要請して解けば良い。しかし、これは相等面倒である。むしろ、前の節で展開した昇降演算子を応用するのがやさしいので、この方法を以下で用いる。全角運動量の昇降演算子 $J^{(\pm)}$ は、それぞれの昇降演算子 $L_i^{(\pm)}$ の和であるので、状態へ作用させる計算が簡単に行なえる。全角運動量に関する関係式

$$J^{(+)} |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle \quad (5.280)$$

$$J^{(-)} |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle \quad (5.281)$$

から、

$$|j, m+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}} J^{(+)} |j, m\rangle \quad (5.282)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}} (L_1^{(+)} + L_2^{(+)}) \sum C_{m_1, m_2}^j |l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2 \\
|j, m-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} J^{(-)} |j, m\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} (L_1^{(-)} + L_2^{(-)}) \sum C_{m_1, m_2}^j |l_1, m_1\rangle_1 \otimes |l_2, m_2\rangle_2
\end{aligned} \tag{5.283}$$

が得られる。 $|j, j-1\rangle$ については、

$$\begin{aligned}
|j, j-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - j(j-1)}} J^{(-)} |j, j\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} (L_1^{(-)} + L_2^{(-)}) |l_1, l_1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2\rangle_2 \\
&= \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} \\
&\quad (\sqrt{l_1(l_1+1) - l_1(l_1-1)} |l_1, l_1-1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2\rangle_2 + (\sqrt{l_2(l_2+1) - l_2(l_2-1)} |l_1, l_1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2-1\rangle_2)
\end{aligned} \tag{5.284}$$

となり、さらに同じ方法を繰り返して使い、 $|j, m\rangle$ が得られる。

5.8.3 全角運動量が $l_1 + l_2$ より小さい状態

次に、上の $|j, j-1\rangle$ と直交する状態が、

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle & \\
&= (\sqrt{l_2(l_2+1) - l_2(l_2-1)} |l_1, l_1-1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2\rangle_2 - (\sqrt{l_1(l_1+1) - l_1(l_1-1)} |l_1, l_1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2-1\rangle_2)
\end{aligned} \tag{5.285}$$

と構成できる。この状態に $J^{(+)}$ をかけると

$$\begin{aligned}
&J^{(+)} |\psi\rangle \\
&= (\sqrt{l_2(l_2+1) - l_2(l_2-1)} \sqrt{l_1(l_1+1) - l_1(l_1-1)} |l_1, l_1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2\rangle_2 \\
&\quad - \sqrt{l_1(l_1+1) - l_1(l_1-1)} \sqrt{l_2(l_2+1) - l_2(l_2-1)} |l_1, l_1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2\rangle_2 \\
&= 0
\end{aligned} \tag{5.286}$$

と零になる。このため、

$$\begin{aligned}
&J^2 |\psi\rangle \\
&= (J^{(-)} J^{(+)} + L_3(L_3 + 1)) |\psi\rangle \\
&= (l_1 + l_2 - 1)(l_1 + l_2) |\psi\rangle
\end{aligned} \tag{5.287}$$

となり、この状態は J^2 の固有状態 $|l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1\rangle$ である。最後に、この状態を規格化して、

$$\begin{aligned} & |l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{l_2(l_2 + 1) - l_2(l_2 - 1) + l_1(l_1 + 1) - l_1(l_1 - 1)}} \\ & (\sqrt{l_2(l_2 + 1) - l_2(l_2 - 1)}|l_1, l_1 - 1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2\rangle_2 - \sqrt{l_1(l_1 + 1) - l_1(l_1 - 1)}|l_1, l_1\rangle_1 \otimes |l_2, l_2 - 1\rangle_2) \end{aligned} \quad (5.288)$$

が得られる。以下、この操作をくりかえして J^2 の固有状態 $|j, m\rangle, j = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2$ が得られる。

5.8.4 縮退度

異なる直積ベクトルの数は、 $(2l_1 + 1) \times (2l_2 + 1)$ である。これらから、全角運動量の既約表現として、 $j = l_1 + l_2$ から $j = |l_1 - l_2|$ までのベクトルが構成される。その独立ベクトルの数は

$$\sum_{j=|l_1-l_2}^{j=l_1+l_2} (2j+1) = (2l_1+1) \times (2l_2+1) \quad (5.289)$$

となり、両者は一致する。

5.8.5 スピンと軌道角運動量の合成

スピンと軌道角運動量の合成を行なう。いかで、スピンの大きさを $1/2$ とし、軌道角運動量の大きさを l とする。

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}, j_3 = l + 1/2$$

まず、 $l_3 = l$ と $s_3 = 1/2$ との直積

$$|l + 1/2, l + 1/2\rangle = |l, l\rangle \otimes |1/2, +1/2\rangle \quad (5.290)$$

は、全角運動量が $l + 1/2$ 、その第3成分が $l + 1/2$ となる。

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}, j_3 = l - 1/2$$

全角運動量が同じ $l + 1/2$ でその第3成分を一つ下げた状態は、降下演算子をかけることより、

$$\begin{aligned} |l + 1/2, l - 1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(l + 1/2)(l + 3/2) - (l + 1/2)(l - 1/2)}} L_- |l + 1/2, l + 1/2\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2l + 1)}} L_- |l + 1/2, l + 1/2\rangle \end{aligned} \quad (5.291)$$

と得られる。次に、降下演算子をそれぞれの演算子の和で表して、

$$\begin{aligned}
 L_-|l+1/2, l+1/2\rangle &= (l_- + l_-^{1/2})|l, l\rangle \otimes |1/2, +1/2\rangle \\
 &= \sqrt{l(l+1) - (l(l-1))}|l, l-1\rangle \otimes |1/2, +1/2\rangle + \sqrt{3/4 + 1/4}|l, l\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle \\
 &= \sqrt{2l}|l, l-1\rangle \otimes |1/2, +1/2\rangle + |l, l\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle
 \end{aligned} \tag{5.292}$$

となるので、状態 $|l+1/2, l-1/2\rangle$ は

$$\begin{aligned}
 |l+1/2, l-1/2\rangle &= N(\sqrt{2l}|l, l-1\rangle \otimes |1/2, +1/2\rangle + |l, l\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle) \\
 N &= \frac{1}{\sqrt{1+2l}}
 \end{aligned} \tag{5.293}$$

となる。

$$j = 1 - 1/2, j_3 = 1 - 1/2$$

上の状態 $|l+1/2, l-1/2\rangle$ と直交して第3成分が同じ $l-1/2$ である状態は、上とは異なる係数による線形結合で、

$$|l-1/2, l-1/2\rangle = N(|l, l-1\rangle \otimes |1/2, +1/2\rangle - \sqrt{2l}|l, l\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle)$$

となる。この状態は全角運動量の大きさが $l-1/2$ である。

$$j = 1 - 1/2, j_3 = 1 - 3/2$$

さらに、この状態に降下演算子をかけて、全角運動量の大きさが $l-1/2$ で第3成分を $l-3/2$ とする状態が得られる。

$$\begin{aligned}
 L_-|l-1/2, l-1/2\rangle &= NL_- (|l, l-1\rangle \otimes |1/2, +1/2\rangle - \sqrt{2l}|l, l\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle) \\
 &= NL_- (|l, l-1\rangle \otimes |1/2, +1/2\rangle - \sqrt{2l}|l, l\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle)
 \end{aligned} \tag{5.294}$$

以下このような、操作を繰り返して任意の状態 $|J, M\rangle$ が構成される。この時の式 (5.278) の係数は、よく表にされて示される。

5.9 座標軸の回転と角運動量

5.9.1 3軸回りの有限回転

角運動量演算子 L_i は

$$[L_i, x_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}x_k \quad (5.295)$$

を満たすので、角運動量演算子 L_3 を指数にもつユニタリ演算子 $U_3(\beta)$

$$U_3(\beta) = e^{-i\frac{\beta}{\hbar}L_3} \quad (5.296)$$

は、座標系に作用して座標の第3軸回りに有限の大きさの角 β 回転する。

無限小の角 $\delta\beta$ では、ユニタリ演算子により座標は

$$U_3(\delta\beta)x_1U_3(\delta\beta)^{-1} \quad (5.297)$$

$$(1 - i\frac{\delta\beta}{\hbar}L_3)x_1(1 + i\frac{\delta\beta}{\hbar}L_3) \quad (5.298)$$

$$= x_1 - i\frac{\delta\beta}{\hbar}[L_3, x_1]$$

$$= x_1 + (\delta\beta)x_2$$

となり、微小変化量 $\delta\beta$ に対する座標の微係数が、角運動量との交換関係で与えられる。

有限な β では、 $U_3(\beta)$ とその逆を x_1 の両辺にかけると

$$U_3(\beta)x_1U_3(\beta)^{-1} \quad (5.299)$$

$$= x_1 - i\frac{\beta}{\hbar}[L_3, x_1] + \frac{(-i\frac{\beta}{\hbar})^2}{2!}[L_3, [L_3, x_1]] + \frac{(-i\frac{\beta}{\hbar})^n}{n!}[L_3, [L_3, [\dots, x_1]] \dots]$$

$$= x_1 + (\beta)x_2 - \frac{(\beta)^2}{2!}x_1 +$$

$$= x_1 \cos \beta + x_2 \sin \beta \quad (5.300)$$

となり、 x_2 では

$$U_3(\beta)x_2U_3(\beta)^{-1} \quad (5.301)$$

$$= x_2 - i\frac{\beta}{\hbar}[L_3, x_2] + \frac{(-i\frac{\beta}{\hbar})^2}{2!}[L_3, [L_3, x_2]] + \frac{(-i\frac{\beta}{\hbar})^n}{n!}[L_3, [L_3, [\dots, x_2]] \dots]$$

$$= x_2 - (\beta)x_1 - \frac{(\beta)^2}{2!}x_2 +$$

$$= x_2 \cos \beta - x_1 \sin \beta \quad (5.302)$$

となる。これは、3軸回りの角度 β の回転である。つまり、ユニタリ演算子 $U_3(\beta)$ は、座標軸を z 軸回りに有限角 β 回転する演算子である。

5.9.2 オイラー角

一般の有限回転は、初めに3軸周りに α 、次に2軸周りに β 、最後に3軸周りの γ 回転で表わすことができる。この演算を表わすユニタリ演算子は、

$$U_3(\gamma)U_2(\beta)U_3(\alpha) \quad (5.303)$$

であり3つの角度 α, β, γ による第3軸、第2軸、第3軸回りの回転の積で表される。この角度を、オイラー角という。これらの変換により座標が

$$U_3(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$U_2(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix}$$

$$U_3(\gamma) = \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

をかけた座標に変換される。また角運動量の基底で波動関数は、

$$U_2(\beta)|l, m\rangle = \sum_{m'} d_{m, m'}^l(\beta)|l, m'\rangle \quad (5.304)$$

と同じ l をもつベクトルの空間内で変換される。ここで、 $d_{m, m'}^l(\beta)$ はd関数という。

5.10 問題

問 1 グリーン関数

ディラックのブラケットの記号を使い、式(5.43)の $G(t, \mathbf{x})$ は、

$$G(t, \mathbf{x}) = \langle 0 | e^{-i\frac{H}{\hbar}t} | \mathbf{x} \rangle \quad (5.305)$$
$$H = \frac{(-i\hbar)^2}{2m} \nabla^2$$

と表されること、並びにこれを使い $G(t, \mathbf{x})$ が満たす諸関係式を証明せよ。

問 2 波束

波束の効果を、

- (1) 相対論的な自由粒子で調べよ。ただしエネルギーは $E(\mathbf{p}) = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ と与えられる。
- (2) 零質量 $m = 0$ の場合についてはどのようなになるか？
調べよ。

問 3 2重スリット

波束の式を使い、2重スリットの問題を、スリットの幅、2重スリット間の間隔、波長等の依存性に注意を払い干渉を調べよ。

問 4 ベクトル演算子

角運動量 L_i と交換関係 (5.170) を満たすベクトル演算子 A_i の行列要素の関係式

$$\langle l, m | A_+ | l', m' \rangle = \quad (5.306)$$

$$\langle l, m | A_- | l', m' \rangle = \quad (5.307)$$

$$\langle l, m | A_z | l', m' \rangle = \quad (5.308)$$

を証明せよ。

問 5 パウリ行列

パウリ行列

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

は、関係式

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad (5.309)$$

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$$

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$$

を満たすことを証明せよ。

問題 6 角運動量

角運動量は、古典力学では

- (1) 任意の値を取ることができる、
 - (2) l_x, l_y, l_z の3成分を同時に決めることができる。
- しかしながら量子力学では、
- (3) 任意の値を取ることができない、
 - (4) l_x, l_y, l_z の3成分を同時に決めることができない。
- この違いを、交換関係を使って議論せよ。

また密度が 10g/cm^3 である固体の球が毎秒 10 回回転している時の角運動量の大きさを計算せよ。

問題7 ルジャンドル多項式

ルジャンドル多項式の母関数は

$$\frac{1}{(1-2xt+t^2)^{1/2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(z)t^l \quad (5.310)$$

である。これを使い、以下の関係式を導け。

(1)

$$(l+1)P_{l+1}(z) - (2l+1)zP_l(z) + lP_{l-1}(z) = 0 \quad (5.311)$$

$$P'_{l+1}(z) - 2zP'_l(z) + P'_{l-1}(z) - P_l(z) = 0 \quad (5.312)$$

(2)

$$P_0(z) = 1 \quad (5.313)$$

$$P_1(z) = z \quad (5.314)$$

$$P_2(z) = \frac{1}{2}(3z^2 - 1) \quad (5.315)$$

(3)

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2 - 1)^l \quad (5.316)$$

(4)

$$\int_{-1}^1 dz P_l(z) P_m(z) = 0, l \neq m \quad (5.317)$$

$$\int_{-1}^1 dz P_l(z)^2 = \frac{2}{2l+1} \quad (5.318)$$

問題 8 角運動量の合成

スピン $1/2$ のベクトル $u_\xi, \xi = -1/2, 1/2$ とスピン 1 のベクトル $v_m, m = -1, 0, 1$ を合成して、スピン $3/2$ とスピン $1/2$ のベクトルを構成せよ。

問題 9 球形のポテンシャル

ポテンシャル

$$V(r) = -V_0; r \leq R \quad (5.319)$$

$$= 0; 0 \leq r \quad (5.320)$$

における束縛状態を求めよ。半径 R を変えるとエネルギーや波動関数はどのように変化するか？

問題 10 箱型のポテンシャル

辺の長さが L である立方体形のポテンシャル

$$V(r) = -V_0; \text{内部} \quad (5.321)$$

$$= 0; \text{外部} \quad (5.322)$$

における束縛状態を求めよ。辺の長さ L を変えるとエネルギーや波動関数はどのように変化するか？

問題 11 原点で発散するポテンシャル

ポテンシャルが

$$V(r) = -V_0 r^{-p}; p > 2 \quad (5.323)$$

における束縛状態を議論せよ。

問題 12 球形のポテンシャル

ポテンシャル

$$V(r) = -V_0; R_1 \leq r \leq R_2 \quad (5.324)$$

$$= 0; r \leq R_1, R_2 \leq r, \quad (5.325)$$

における束縛状態を求めよ。半径 R を変えるとエネルギーや波動関数はどのように変化するか？

第6章 水素原子

水素原子は、正電荷 $+1|e|$ をもつ陽子に一つの電子が束縛された、最も単純な原子である。水素原子は、電子と陽子の座標を力学変数とし、これらの距離に反比例するクーロンポテンシャルを持つハミルトニアンで表わされる。電荷の積で決まるクーロン力は、異符号の電荷を持つ陽子と電子の間で引力となり、束縛状態を形成する。クーロン力は、スピンには依存しないので、ここでは、スピンは無視する。

量子論は、

(1) 原子に不連続スペクトルが存在すること、

(2) 原子核の回りの電子の運動に古典物理学を適用すると原子は電磁波を放射して徐々にエネルギーを失い不安定である、

等の古典力学で理解出来ない事柄を理解することを目指して展開した。ボーアは、量子論の考えを古典力学に巧妙に組み入れた半古典論を適用して、これらの矛盾がなくなることを示した。本章では、シュレーディンガー方程式を解くことにより、不連続なエネルギー準位を求める。結果は、不思議なことに、ボーアの結果と一致する。

6.1 2体問題

質量 M_1 位置ベクトル \mathbf{x}_1 の質点と、質量 M_2 位置ベクトル \mathbf{x}_2 の質点が、互いの距離 $r = |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$ で決まるポテンシャル $U(r)$ のもとで運動している系のラグランジアンは、

$$L = \frac{M_1}{2} \left(\frac{d}{dt} \mathbf{x}_1(t) \right)^2 + \frac{M_2}{2} \left(\frac{d}{dt} \mathbf{x}_2(t) \right)^2 - U(r) \quad (6.1)$$

でありハミルトニアンは、

$$H = \frac{1}{2M_1} (\mathbf{p}_1(t))^2 + \frac{1}{2M_2} (\mathbf{p}_2(t))^2 + U(r) \quad (6.2)$$

である。ここで、ポテンシャルの性質を考慮して、二つの重心の位置を表す重心座標と相対的位置を表す相対座標を導入しよう。重心座標 $\mathbf{X}(t)$ と相対座標 $\mathbf{r}(t)$ は、

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{X} + \frac{M_2}{M_1 + M_2} \mathbf{r} \quad (6.3)$$

$$\mathbf{x}_2 = \mathbf{X} - \frac{M_1}{M_1 + M_2} \mathbf{r} \quad (6.4)$$

であり、これらに共役な運動量は

$$\mathbf{p}_1 = \frac{M_1}{M_1 + M_2} \mathbf{P} + \mathbf{p} \quad (6.5)$$

$$\mathbf{p}_2 = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \mathbf{P} - \mathbf{p} \quad (6.6)$$

である。

ハミルトニアンは、重心座標と相対座標に共役な運動量で表して

$$H = \frac{1}{2M_t} (\mathbf{P}(t))^2 + \frac{1}{2\mu} (\mathbf{p}(t))^2 - U(r) \quad (6.7)$$

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}, M_t = M_1 + M_2 \quad (6.8)$$

と変数分離形になる。そのため、定常状態の波動関数は、

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2; t) &= e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \Psi_{E_1}(\vec{X}) \psi_{E_2}(\vec{r}) \\ E &= E_1 + E_2 \end{aligned} \quad (6.9)$$

と両変数の関数の積となり、それぞれが、波動方程式

$$\frac{1}{2M_t} (\mathbf{P}(t))^2 \Psi(\vec{X}) = E_1 \Psi(\vec{X}) \quad (6.10)$$

$$\left(\frac{1}{2\mu} (\mathbf{p}(t))^2 - U(r) \right) \psi(\vec{r}) = E_2 \psi(\vec{r}) \quad (6.11)$$

を満たす。

ここで、特に2つの質量に大きな差があつて、

$$M_1 \gg M_2 \quad (6.12)$$

の場合

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \approx M_2, M_t = M_1 + M_2 \approx M_1 \quad (6.13)$$

となる。陽子の質量は、電子の質量の約2,000倍であり、この状況に一致している。波動関数で、重心座標に依存する部分が一つの運動量をもつように凍結していたとしても、相対座標 \vec{r} に依存する部分は必ず広がった波動関数となっている。このため、電子は \vec{r} の広がりと同じ広がりをもつが、陽子は相対座標の広がりの $\frac{1}{2000}$ の広がりとなる。

6.2 水素原子のレンツベクトル

6.2.1 レンツベクトル

水素原子は、相対座標 \mathbf{x} に依存するクーロンポテンシャル、

$$U(\mathbf{x}) = -\frac{A}{r} \quad (6.14)$$

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} \quad (6.15)$$

が働いている陽子と電子からなる 2 体系である。A は電荷で決まる定数である。質量 m の質点の相対座標 \mathbf{x} の運動では、保存量は中心力であることに起源をもつ角運動量と、クーロンの相互作用に固有なベクトル (レンツベクトル) である。

相対座標に依存するハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 - \frac{A}{r} \quad (6.16)$$

であり、古典力学の運動方程式は

$$\dot{\mathbf{p}} = m\dot{\mathbf{v}} = -A \frac{\mathbf{x}}{r^3} \quad (6.17)$$

である。 m は厳密には、換算質量であるがほぼ電子の質量に一致するので、ここでは記号 m を使う。

動径方向の単位ベクトル \mathbf{e}_r の時間変化を調べよう。 r の定義から、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{e}_r &= \frac{d}{dt} \frac{\mathbf{r}}{r} \\ &= \frac{(\frac{d}{dt} \mathbf{r})r - (\frac{d}{dt} r)\mathbf{r}}{r^2} \\ &= \frac{(\frac{d}{dt} \mathbf{r})r - (\frac{d}{dt} \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}}{r})\mathbf{r}}{r^2} \\ &= \frac{(\frac{d}{dt} \mathbf{r})r^2 - (\frac{d}{dt} \mathbf{r} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}}{r^3} \\ &= \frac{1}{m} \frac{(\mathbf{p})r^2 - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}}{r^3} \end{aligned} \quad (6.18)$$

となる。次に恒等式

$$(\mathbf{x} \times \mathbf{p}) \times \mathbf{x} = \mathbf{x}^2 \mathbf{p} - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})\mathbf{x} \quad (6.19)$$

と角運動量の定義、

$$\mathbf{L} = (\mathbf{x} \times \mathbf{p}) \quad (6.20)$$

ならびに運動方程式から得られる

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathbf{L} \times \mathbf{p}) & \quad (6.21) \\ &= (\mathbf{L} \times \dot{\mathbf{p}}) \\ &= -\frac{1}{A}(\mathbf{L} \times \frac{\mathbf{r}}{r^3}) \end{aligned}$$

を使う。その結果新たな保存則

$$m \frac{d}{dt} \mathbf{e}_r = -\frac{1}{A} \frac{d}{dt} (\mathbf{L} \times \mathbf{p}) \quad (6.22)$$

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{e}_r + \frac{1}{mA} \mathbf{L} \times \mathbf{p}) = 0 \quad (6.23)$$

が得られる。このベクトルをあからさまにエルミートな形 \mathbf{E} 、

$$\mathbf{E} = \mathbf{e}_r + \frac{1}{2mA} (\mathbf{L} \times \mathbf{p} - \mathbf{p} \times \mathbf{L}) \quad (6.24)$$

で書きレンツベクトルと呼ぶ。レンツベクトルの成分は、ハミルトニアンと角運動量を含む交換関係

$$[E_i, E_j] = -\epsilon_{ijk} \frac{2}{mA^2} H L_k \quad (6.25)$$

$$[E_i, H] = 0 \quad (6.26)$$

を満たしているベクトルである。さらに交換関係

$$[L_i, E_j] = i\epsilon_{ijk} E_k \quad (6.27)$$

$$[L_i, H] = 0 \quad (6.28)$$

と直交関係、

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (6.29)$$

を満たしている。このように、水素原子では、角運動量 \mathbf{L} 、ハミルトニアン、レンツベクトル \mathbf{E} が保存し、また閉じた代数をなしている。角運動量とレンツベクトルとハミルトニアンの全体で、閉じた空間を構成するので、これらの大きさは、交換関係の代数から決まる。ところで、代数の相対的な大きさは、ハミルトニアンの固有値で決まる。そのため、逆にハミルトニアンの固有値が、代数的に決定される。

6.2.2 スペクトルの代数的決定

E を規格化した \tilde{E} を

$$\mathbf{E} = \sqrt{\frac{2|E|}{mA^2}} \tilde{\mathbf{E}} \quad (6.30)$$

と定義すると、交換関係が簡単になる。次のベクトル

$$\mathbf{J}^{(\pm)} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} \pm \tilde{\mathbf{E}}) \quad (6.31)$$

は、それぞれ角運動量の交換関係

$$[J_i^{(\pm)}, J_j^{(\pm)}] = i\epsilon_{ijk} J_k^{(\pm)} \quad (6.32)$$

を満たし、また直交関係 (6.29) から二つのベクトルの大きさは等しくなり、

$$\mathbf{J}^{(+)^2} = \mathbf{J}^{(-)^2} = j(j+1) \quad (6.33)$$

となる。これと、 $\tilde{\mathbf{E}}$ の定義から得られる

$$\tilde{\mathbf{E}}^2 = -(\mathbf{L}^2 + \hbar^2) - \frac{mA^2}{2E} \quad (6.34)$$

を使い、

$$-\frac{mA^2}{8\hbar^2 E} = \frac{1}{4}n^2 \quad (6.35)$$

$$n = 2j + 1 \quad (6.36)$$

が得られる。

6.3 水素原子の定常状態：エネルギー固有値と固有状態

水素原子の定常状態を考察しよう。クーロン引力の特徴は、ポテンシャルの強さを示す α が無次元であることである。だから、位置座標や時間座標以外で次元を持つパラメーターは、エネルギーに限られる。その結果、空間座標への依存性を規定するのは、エネルギーである。後で、その事情が具体的にわかるであろう。

クーロンポテンシャル中の質量 m の質点のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + U(r) \quad (6.37)$$

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon} \frac{1}{r} \quad (6.38)$$

である。このハミルトニアン固有値方程式は、

$$H\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x}) \quad (6.39)$$

であり座標を使う表示で、

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla \quad (6.40)$$

$$\mathbf{p}^2 = -(\hbar)^2\nabla^2 \quad (6.41)$$

となる。また、付録の結果から、球座標では、

$$\begin{aligned} \nabla^2\Psi(\mathbf{x}) &= \frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r\Psi(\mathbf{x})) \\ &+ \frac{1}{r^2\sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta\Psi(\mathbf{x})) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\partial_\varphi^2\Psi(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (6.42)$$

$$= \frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r\Psi(\mathbf{x})) + \frac{1}{r^2}\mathbf{L}^2\Psi(\mathbf{x}) \quad (6.43)$$

である。ここで、

$$\Psi(\mathbf{x}) = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (6.44)$$

とにおいて、固有値方程式の特解を求めてみよう。方程式は、

$$-\frac{1}{2m}\hbar^2\frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r R_l(r)) + \left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \alpha\frac{1}{r}\right)R(r) = ER(r) \quad (6.45)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r)R(r) + \left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \alpha\frac{1}{r}\right)R(r) = ER(r) \quad (6.46)$$

となる。次に、

$$r = \frac{\hbar^2}{m\alpha}\frac{n}{2}\rho \quad (6.47)$$

$$n = \frac{1}{\sqrt{-2\frac{\hbar^2 E}{m\alpha^2}}} \quad (6.48)$$

と無次元の変数 ρ に変換して、方程式は

$$R'' + \frac{2}{\rho}R' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R = 0 \quad (6.49)$$

となる。この方程式を満たす関数は、無次元の変数の関数である。しかしながら、変換式(6.47)(6.48)からわかるように、通常空間次元を持つ変数 r であらわした時、関数はエネルギーで決まる大きさをもつ。相互作用の強さ α が無次元であるため、エネルギーの大きさだけで、波動関数の空間的な大きさが決まっている。この点は、あとで詳しく検討する。

$\rho \rightarrow 0$ での方程式と解の漸近形は、

$$R'' + \frac{2}{\rho}R' + \left[-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R = 0 \quad (6.50)$$

$$R = \rho^l \quad (6.51)$$

また、 $\rho \rightarrow \infty$ での方程式と解の漸近形は、

$$R'' + \left[-\frac{1}{4}\right]R = 0 \quad (6.52)$$

$$R = e^{-\frac{1}{2}\rho} \quad (6.53)$$

である。このため、関数を

$$R = \rho^l e^{-\frac{1}{2}\rho} \omega(\rho) \quad (6.54)$$

と表して、 $\omega(\rho)$ が満たす方程式

$$\rho \omega''(\rho) + (2 + 2l - \rho)\omega'(\rho) + (n - l - 1)\omega(\rho) = 0 \quad (6.55)$$

が得られる。この方程式は級数解

$$\omega = \sum_p a_p \rho^p \quad (6.56)$$

の解を持つ、確定特異点を持つ微分方程式である。係数 a_p は、級数を方程式に代入して、漸化式

$$a_{p+1} = -\frac{n-l-1-p}{p+2+2l} \frac{1}{p+1} a_p \quad (6.57)$$

の解として得られる。この漸化式の解は、 n の値により、有限の幕で閉じる多項式の場合と有限で閉じない無限級数の場合の2種類に分類される。

1 多項式

$$n - l - 1 - p_0 = 0 \quad (6.58)$$

が満たされる n の場合、

$$a_{p_0+1} = 0 \quad (6.59)$$

となるため、級数は p_0 次の多項式となる。この式より、

$$n = l + p_0 + 1 = \text{整数} \quad (6.60)$$

から、エネルギーが

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (6.61)$$

と決まる。エネルギーがこのとびとびの値に一致する時、波動関数は、付録にある Laguerre 多項式、

$$\omega = L_{p_0}^{(2l+1)}(\rho) \quad (6.62)$$

である。 $\omega(\rho)$ が多項式であるので、(6.54) より R は $\rho \rightarrow \infty$ で漸近形 $e^{-\frac{1}{2}\rho}$ のように振る舞い、関数の絶対値の二乗の空間積分は収束する。この解は、電子が有限な空間領域にある束縛状態を表す。

2 無理級数

上の条件が満たされず、

$$n - l - 1 - p \neq 0 \quad (6.63)$$

の場合は、係数 a_p はすべて零ではないので、解は無理級数となる。この場合は、解の性質が、上の (1) の場合とは全く異なる。無理級数の性質は、一般的に大きな p での係数の振る舞いで決まる。今の級数では、大きな p で係数は漸化式より以下のようになり、関数 ω は収束性の良い無理級数で、

$$a_p = \frac{1}{p!} a_0 \quad (6.64)$$

$$\omega = \sum_p a_p \rho^p = a_0 e^\rho \quad (6.65)$$

となる。しかし、この級数は、 $\rho \rightarrow \infty$ で発散する。このため、 R の漸近形は

$$R = \rho^l e^{-\frac{1}{2}\rho} \omega = a_0 \rho^l e^{\frac{1}{2}\rho} \quad (6.66)$$

となることがわかる。この関数は、 $\rho = \infty$ で発散するので、 $\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr$ を 1 に規格化することはできない。そのため、 $n - l - 1 - p \neq 0$ のときは、束縛状態には対応しない。

このようにして、微分方程式の解の漸近形が、微分方程式の漸近形から得られる関数に一致するのは、 $n - l - 1 - p = 0$ のときに限られる。

6.3.1 固有値と固有関数

水素原子の束縛状態は、エネルギーや角運動量等の量子数の値で指定される。エネルギーは、式 (6.61) で与えられ、主量子数 n だけで決定される。主量子数 n が、一つの値に決まったとき、角運動量の大きさ l や最高次の冪 p_0 は複数の値をとる。各 l や p_0 ごとに波動関数は

異なるので、それぞれが一つの状態を表している。つまり、複数の状態が同じエネルギーをもつ。異なる角運動量の状態が同じエネルギーをもつ水素原子に固有のこの縮退は、クーロンポテンシャルの特異性を表している。これらが満たす関係式 (6.60) から、縮退の様子を詳しく解析しよう。

基底状態 : $n = 1$

主量子数が 1 である基底状態では、 l や p_0 の満たす

$$l + p_0 + 1 = 1 \quad (6.67)$$

の解は、 l や p_0 が正符号なので、ただひとつ

$$l = 0, p_0 = 0 \quad (6.68)$$

であり縮退がない。よって、基底状態のエネルギーと固有関数は

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad (6.69)$$

$$R = a_0 e^{-\rho/2}$$

であり、ただ一つの固有関数は、原点 (ポテンシャルの中心) で最大となり原点から遠ざかると一様に減少する。基底状態の波動関数は、原点と無限遠の途中で零になることはない図のような関数である。

第一励起状態 : $n = 2$

主量子数が 2 となる第一励起状態では、 l や p_0 が満たす方程式

$$l + p_0 = 1 \quad (6.70)$$

の解は

$$(1) l = 1, p_0 = 0, \quad (6.71)$$

$$(2) l = 0, p_0 = 1$$

の二つの組みである。これら第一励起状態は、エネルギー

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \frac{1}{2^2} \quad (6.72)$$

をもち、固有関数はそれぞれ

$$(1) l = 1, p_0 = 0; \quad (6.73)$$

$$R = a_1 L_0^3(\rho) \rho e^{-\rho/2} = a_1 \rho e^{-\rho/2}$$

$$(2) l = 0, p_0 = 1$$

$$R = a'_1 L_1^1(\rho) e^{-\rho/2} = a'_1 (2 - \rho) e^{-\rho/2} \quad (6.74)$$

である。このように、角運動量 1 の状態と、角運動量 0 の状態が同じエネルギーを持っている。

第二励起状態: $n = 3$

主量子数が 2 となる第二励起状態では、 l や p_0 は

$$l + p_0 = 2 \quad (6.75)$$

を満たす。この解は

$$(1) l = 2, p_0 = 0, \quad (6.76)$$

$$(2) l = 1, p_0 = 1,$$

$$(3) l = 0, p_0 = 2$$

の三つである。これら第二励起状態は、エネルギー

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \frac{1}{3^2} \quad (6.77)$$

をもち、固有関数は

$$(1) l = 2, p_0 = 0; , \quad (6.78)$$

$$R = a\rho^2 L_0^5(\rho)e^{-\rho/2}$$

$$(2)l = 1, p_0 = 1, \tag{6.79}$$

$$R = a\rho^1 L_1^3(\rho)e^{-\rho/2}$$

$$(3)l = 0, p_0 = 2 \tag{6.80}$$

$$R = aL_2^1(\rho)e^{-\rho/2}$$

である。この場合では、角運動量 2 の状態、角運動量 1 の状態、と角運動量 0 の状態が同じエネルギーを持っている。

より高い励起状態についても、同様に解を求めることができる。

第 N-1 励起状態: $n = N$

主量子数が N となる第 N-1 励起状態では、 l や p_0 は

$$l + p_0 = N - 1 \tag{6.81}$$

を満たす。この解は

$$(1)l = N - 1, p_0 = 0, \tag{6.82}$$

$$(2)l = N - 2, p_0 = 1,$$

$$(3)l = N - 3, p_0 = 2$$

...

$$(N)l = 0, p_0 = N - 1 \tag{6.83}$$

の N この l に対応する。これら第 N-1 励起状態は、エネルギー

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \frac{1}{N^2} \tag{6.84}$$

をもち、角運動量が最大値 $N - 1$ から最小値 0 にまでわたる。角運動量 l の状態は、 l_z が $-l$ から $+l$ まであり状態数は $2l + 1$ 個である。このエネルギーをもつ固有関数の総数は

$$(1)l = N - 1, p_0 = 0; m = -l, \dots, -l; 2N - 1 \text{ 個} \tag{6.85}$$

$$(2)l = N - 2, p_0 = 1, 2N - 3 \text{ こ}$$

$$(3) \dots$$

$$(N)l = 0, p_0 = N - 1, 1 \text{ こ}$$

をたして得られる、

$$(2N - 1) + (2N - 2) + \dots + (1) = N^2 \quad (6.86)$$

である。

動径波動関数は、基底状態では、節をもたない二乗可積分の関数であり、第一励起状態では、一つ節をもち、第二励起状態では二つ節をもつ。 $n \rightarrow \infty$ では、エネルギーは、限りなく零に近ずき波動関数は、限りなく広がる。

6.4 保存則と固有状態の量子数

動径座標 r の関数であるクーロンポテンシャルは、球対称であると共に空間座標の符号を変える変換である空間反転 $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$ に対して不変である。空間回転を生成する演算子は、角運動量であり、空間反転を生成する演算子は、パリティ演算子である。物理系が不変であることより、角運動量演算子、 L_i 、並びにパリティ演算子、 P 、がハミルトニアン H と交換する。また、可換な二つの演算子は、同時に対角化することが可能である。そのため、ハミルトニアンの固有状態は、角運動量の量子数と空間反転の量子数で指定される。この角運動量は、 \hbar の整数倍となる軌道角運動量 $\hbar l$ をもち、その z 成分 $\hbar m$ は、 $-\hbar l$ から $\hbar l$ までの値をとる。

空間反転は、座標を $x \rightarrow -x$ とする変換である。この変換に対して固有状態は不変である。これより、ハミルトニアンの固有関数は、角運動量の固有状態であるとともに、空間反転の固有状態になる。主量子数 n 、角運動量の大きさ l 、角運動量の z 成分の大きさ m の固有関数は、まとめて

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (6.87)$$

$$R_{n,l}(r) = \left[\left(\frac{2}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3} \right]^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m\alpha}, \rho = \frac{2}{na_0}r$$

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (6.88)$$

と表わされる。

6.4.1 回転と空間反転

空間反転 P は、デカルト座標 \mathbf{x} を

$$\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x} \quad (6.89)$$

と変換する。このとき、極座標は、

$$r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \phi \rightarrow \pi + \phi \quad (6.90)$$

と変換される。この座標変換で球関数は、

$$Y_{lm}(\theta, \phi) \rightarrow Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \phi) \quad (6.91)$$

$$= (-)^m (-)^{l+m} Y_{lm}(\theta, \phi) = (-)^l Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (6.92)$$

と変換され、 l が偶数では $+$ の固有値の状態になり、 l が奇数では $-$ の固有値の状態になる。

6.4.2 レンツベクトル

水素原子のハミルトニアン H は、レンツベクトルと交換する。だから、レンツベクトルは保存ベクトルである。また、レンツベクトルと角運動量ベクトルは、交換関係、(6.25), (6.26), (6.27) を満たしている。交換関係 (6.25) は、一定のエネルギーを持つ状態の空間が、角運動量と同等の交換関係を持つレンツベクトルにより張られる空間となることを示している。この空間が有限次元の空間であるとき、同じエネルギーを持ちこの次元の数に一致する状態が存在する。つまり、この次元が縮退度を表している。水素原子の特異な縮退は、保存する角運動量と保存するレンツベクトル、並びにハミルトニアンが満たす交換関係に起源をもつ。

6.4.3 $n \rightarrow \infty$ での固有状態

主量子数 n が式 (6.61) でエネルギーをきめるとともに、式 (6.60) でこのエネルギーを持つ縮退した関数の空間の次元を決める。また、 $n \rightarrow \infty$ では、エネルギーは無限小になり、波動関数は限りなく大きくなり、また状態の数も限りなく大きくなる。この領域における固有関数の様子を調べてみよう。

6.4.4 分配和

1 水素原子の束縛状態の状態和

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{nlm} e^{-\beta E_n} \quad (6.93)$$

$$= \sum_n e^{-\beta E_n} n^2 \quad (6.94)$$

は、

$$E_n = -R \frac{1}{n^2} \quad (6.95)$$

では、発散する。

6.5 正エネルギー解

正エネルギー $E > 0$ の解は、無限遠 $r \rightarrow \infty$ での波動関数の値が有限となり、規格化出来ない。この関数は、無限の遠方から波が入射し、ポテンシャルのために散乱され、最後に遠方に出てゆく散乱状態を表している。散乱問題では、同じ方程式の異なる境界条件を満たす解を調べる。

6.6 放物線座標での固有状態

放物線座標 (ξ, η, ϕ) は、デカルト座標と

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\xi\eta} \cos\phi, \\ y &= \sqrt{\xi\eta} \sin\phi, \end{aligned} \quad (6.96)$$

$$\begin{aligned} z &= \frac{1}{2}(\xi - \eta) \\ r &= \frac{1}{2}(\xi + \eta) \end{aligned} \quad (6.97)$$

と関連してい、付録にあるようにラプラシアンは、

$$\nabla^2 \Psi(\mathbf{x}) = \left(\frac{4}{\xi + \eta} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right) \right) + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Psi(\mathbf{x}) \quad (6.98)$$

である。これらの関係式を、シュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(r) \right) \Psi(\mathbf{x}) = E \Psi(\mathbf{x}) \quad (6.99)$$

に代入して、放物線座標におけるシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{4}{\xi + \eta} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right) \right) + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \alpha \frac{2}{\xi + \eta} \right) \Psi(\mathbf{x}) = E \Psi(\mathbf{x}) \quad (6.100)$$

を得る。方程式で3変数 ξ, η, ϕ が分離しているので、波動関数を変数分離型

$$\Psi = f_1(\xi)f_2(\eta)e^{im\phi} \quad (6.101)$$

に仮定する。この変数分離型の関数を代入して、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{4}{\xi+\eta}\left(f_2\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}f_1+f_1\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)f_2\right)\right)-\frac{1}{\xi\eta}m^2f_1f_2\right)-\alpha\frac{2}{\xi+\eta}\right)f_1f_2 = Ef_1f_2 \quad (6.102)$$

を得、さらにこの両辺を f_1f_2 でわって、方程式が

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{4}{\xi+\eta}\left(\frac{1}{f_1}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}f_1+\frac{1}{f_2}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)f_2\right)\right)-\frac{1}{\xi\eta}m^2\right)-\alpha\frac{2}{\xi+\eta}\right) = E \quad (6.103)$$

となる。これより、あらたな未定定数 β_1, β_2 を導入して、それぞれの変数についての方程式

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{d}{d\xi}f_1\right) + \left[\frac{1}{2}\tilde{E}\xi - \frac{m^2}{4\xi} + \beta_1\right]f_1 = 0 \quad (6.104)$$

$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{d}{d\eta}f_2\right) + \left[\frac{1}{2}\tilde{E}\eta - \frac{m^2}{4\eta} + \beta_2\right]f_2 = 0 \quad (6.105)$$

が得られる。ここで、新たなパラメーターは、基のパラメーターから

$$\tilde{E} = \frac{ME}{\hbar^2}, \beta_1 + \beta_2 = \frac{M\alpha}{\hbar^2} \quad (6.106)$$

与えられる。変数分離型

$$u(\xi, \eta, \phi) = f(\xi)g(\eta)\Phi(\phi) \quad (6.107)$$

と、軸対称形を代入して、

$$\Phi_m(\phi) = (2\pi)^{-1/2}e^{im\phi} \quad (6.108)$$

f と g の式

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df}{d\xi}\right) - \left(\frac{m^2}{4\xi} + \frac{\mu|E|\xi}{2\hbar^2} - \frac{\mu Ze^2}{\hbar^2}\right)f = 0, \quad (6.109)$$

$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{dg}{d\eta}\right) - \left(\frac{m^2}{4\eta} + \frac{\mu|E|\eta}{2\hbar^2} - \nu\right)g = 0,$$

が分離パラメーター ν を使い表せる。解は、

$$u_c = e^{ikz}f(\xi) = e^{ik(\eta-\xi)}f(\xi) = e^{ik\eta}e^{-ik\xi}f(\xi) \quad (6.110)$$

となる。ここで、 f は

$$\xi \frac{d^2 f}{d\xi^2} + (1 - ik\xi) \frac{df}{d\xi} - nkf = 0, \quad n = \mu e^2 / \hbar^2 k. \quad (6.111)$$

を満たす。合流型の超幾何級数

$$f(\xi) = CF(-in, 1, ik\xi), \quad (6.112)$$

ただし、

$$\begin{aligned} F(a, b, z) &= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+s)\Gamma(b)z^s}{\Gamma(a)\Gamma(b+s)\Gamma(1+s)} \\ &= 1 + \frac{az}{b1!} + \frac{a(a+1)z^2}{b(b+1)2!} + \dots \end{aligned} \quad (6.113)$$

$\xi = 0$ では、

$$f(0) = CF(-in, 1, 0) = C, \quad (6.114)$$

であり、 $f(\xi)$ は単調増加関数である。

$f(\xi)$ の漸近形は F から求められる。

$$F(a, b, z) = W_1(a, b, z) + W_2(a, b, z) \quad (6.115)$$

ここで、 $W_1(a, b, z)$ と $W_2(a, b, z)$ は、

$$\begin{aligned} W_1(a, b, z) &= \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-z)^{-a} g(a, a-b+1, -z) \\ W_2(a, b, z) &= \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z (z)^{a-b} g(1-a, b-a, z) \\ g(\alpha, \beta, z) &\rightarrow_{z \rightarrow \infty} 1 + \frac{\alpha\beta}{z} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{z^2 2!} + \dots \end{aligned} \quad (6.116)$$

と書かれる。だから

$$\begin{aligned} W_1(-in, 1, ik\xi) &= \frac{\Gamma(1)}{\Gamma(1+in)} (-ik\xi)^{in} g(-in, -in, -ik\xi) \\ W_2(-in, 1, ik\xi) &= \frac{\Gamma(1)}{\Gamma(-in)} e^{ik\xi} (ik\xi)^{-in-1} g(in, 1+in, ik\xi) \\ g(\alpha, \beta, z) &\rightarrow_{z \rightarrow \infty} 1 + \frac{\alpha\beta}{z} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{z^2 2!} + \dots \end{aligned} \quad (6.117)$$

漸近領域 $r \rightarrow \infty$ でのクーロン波動関数 ($\theta \neq 0$) は

$$u_c = e^{ikn} e^{-ik\xi} CF(-in, 1, ik\xi) \quad (6.118)$$

$$\rightarrow \frac{C e^{n\pi/2}}{\Gamma(1+in)} \left\{ e^{i(kz+lnk(r-z))} \left[1 - \frac{n^2}{ik(r-z)} \right] + r^{-1} f_c(\theta) e^{i(kr-nln2kr)} \right\},$$

$$f_c(\theta) = \frac{n}{2k \sin^2 \theta/2} e^{-in(\sin^2 \theta/2)} \quad (6.119)$$

だから、微分断面積

$$\sigma_c(\theta) = |f_c(\theta)|^2 = \left(\frac{n}{2k \sin^2 \theta/2} \right)^2, \quad (6.120)$$

が得られる。これは、 $\theta \neq 0$ で有限である。

$\theta \approx 0$ では、 ξ は有限である。また、式 (6.120) は $\theta = 0$ で発散する。だから、 $\theta = 0$ は "波動領域" であり "粒子領域" とは分けて扱われる必要がある。実際、波動関数 $f(\xi)$ は $\xi = 0$ で、式 Eqs.(6.110), (6.112), と (6.113) で発散しない。発散は、長距離力 $1/r$ と平面波の無限のサイズから導かれる。

平面波の中の無限の大きさの衝突パラメーターと角運動量が、無限の断面積を導く。そのため、初期状態や終状態が有限サイズの波束であるとき、衝突パラメーターも角運動量も有界となる。これらの上限値、 b_{max} と L_{max} , は

$$L_{max} = pb_{max} = p\sqrt{\sigma} \quad (6.121)$$

を満たす。この時、断面積は有限である。

球座標

球座標では、波動関数は主量子数と角運動量子数で書かれる。これらは、引力の場合、

$$n = -i/k, \rho = 2r/n = 2ikr \quad (6.122)$$

$$k = \sqrt{2 \frac{\mu e^4}{\hbar^2} E}$$

で

$$\psi = R_{kl} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (6.123)$$

$$R_{kl} = \frac{C_{kl}}{(2l+1)!} (2kr)^l e^{-ikr} F(i/k + l + 1, 2l + 2, 2ikr)$$

$$= C_{kl} \frac{e^{-\pi/2k}}{kr} \operatorname{Re} \left[\frac{e^{-i(kr - \pi(l+1)/2 + (1/k)\log 2kr)}}{\Gamma(l+1 - i/k)} g(l+1 + i/k, i/k - l, -2ikr) \right]$$

$$C_{kl} = 2k e^{\pi/2k} |\Gamma(l+1 - i/k)|.$$

$r \rightarrow \infty$ では,

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r} \sin(kr - \frac{1}{k} \log 2kr - 1/2l\pi + \delta_l), \delta_l = \arg \Gamma(l + 1 - i/k) \quad (6.124)$$

である。斥力の場合、

$$n = \frac{-i}{\sqrt{2\frac{\mu e^4}{\hbar^2} E}} = -i/k, \rho = 2r/n = 2ikr \quad (6.125)$$

で

$$\begin{aligned} R_{kl} &= \frac{C_{kl}}{(2l+1)!} (2kr)^l e^{ikr} F(i/k + l + 1, 2l + 2, -2ikr) \\ &= C_{kl} \frac{e^{-\pi/2k}}{kr} \operatorname{Re} \left[\frac{e^{-i(kr - \pi(l+1)/2 + (1/k)\log 2kr)}}{\Gamma(l + 1 - i/k)} g(l + 1 + i/k, i/k - l, -2ikr) \right] \\ C_{kl} &= 2ke^{-\pi/2k} |\Gamma(l + 1 + i/k)| \end{aligned} \quad (6.126)$$

である。 $r \rightarrow \infty$ では,

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r} \sin(kr - \frac{1}{k} \log 2kr - 1/2l\pi + \delta_l), \delta_l = \arg \Gamma(l + 1 + i/k). \quad (6.127)$$

大きな l や k で,

$$\Gamma(l + 1 + i/k) \approx \Gamma(l + 1) e^{i\frac{1}{k} \log(l+1)}, \quad (6.128)$$

であり、次のようになる、

$$\delta_l = \frac{1}{k} \log(l + 1). \quad (6.129)$$

部分波により散乱振幅,

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l + 1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta) \quad (6.130)$$

と部分断面積

$$\sigma_c = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) \sin^2 \delta_l, \quad (6.131)$$

は、となる。小さな δ_l では,

$$\sigma_c = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) \delta_l^2, \quad (6.132)$$

である。 Eq.(6.128) を代入して,

$$\begin{aligned} \sigma_c &= \frac{4\pi}{k^4} \sum_l (2l + 1) \log^2(l + 1) \\ &= \frac{4\pi}{k^4} L^2 \log^2(L + 1) |_{L=\infty} = \infty \end{aligned} \quad (6.133)$$

が得られる。断面積は Eq.(6.120) と一致して発散する。

6.7 まとめ

クーロンポテンシャルで相互作用する2体系の古典力学と、量子力学をまとめて比較しておくのは教育的である。

6.7.1 古典力学

古典力学の運動方程式は

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\alpha}{r} = E \quad (6.134)$$

である。

$$E < 0$$

負エネルギー領域で、 $r \rightarrow \infty$ とおくと、 $\frac{1}{r} \rightarrow 0$ なので、運動方程式は

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} = -|E| \quad (6.135)$$

となり、解には成りえない。よって、負エネルギーをもつ運動方程式の解は、 $r \rightarrow \infty$ には成りえない。つまり、軌道は有限な空間領域に限られている。実際、二次元面内の軌道は極座標 r, ϕ で

$$\frac{M}{r} = \frac{m\alpha}{M}(1 + \epsilon \cos \phi) \quad (6.136)$$

$$\epsilon = \sqrt{1 + \frac{2mE}{\frac{m^2\alpha^2}{M^2}}} \quad (6.137)$$

となり、離心率は1より小さくなり軌道は楕円である。レンツベクトルが保存することより、楕円の位置は不変に保たれている。

$$E > 0$$

正エネルギーで $r \rightarrow \infty$ とおくと、 $\frac{1}{r} \rightarrow 0$ なので、運動方程式は

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} = |E| \quad (6.138)$$

となり、解が

$$|\mathbf{p}| = \sqrt{2mE} \quad (6.139)$$

で与えられる。離心率は1より大きくなり軌道は開いた双曲線である。よって、 $r \rightarrow \infty$ となる。この解の振る舞いから、ラザーフォード散乱の断面積が、求まる。

6.7.2 量子力学

波動方程式は、

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\alpha}{r}\right)\psi = E\psi \quad (6.140)$$
$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$$

である。

$$E < 0$$

負エネルギーで $r \rightarrow \infty$ とおくと、 $\frac{1}{r} \rightarrow 0$ なので、波動方程式は

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi = -|E|\psi \quad (6.141)$$

となり、平面波

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (6.142)$$

のような遠方で有限な値を持つ解はない。実際、解は、(6.88) であり、

$$|\psi| \rightarrow 0, r \rightarrow \infty \quad (6.143)$$

となる。エネルギーや角運動量とはびとびの値をとる。

$$E > 0$$

正エネルギーで $r \rightarrow \infty$ とおくと、 $\frac{1}{r} \rightarrow 0$ なので、波動方程式は

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi = |E|\psi \quad (6.144)$$

となり、解は

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad (6.145)$$

$$|\mathbf{p}| = |\hbar\mathbf{k}|, E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (6.146)$$

となる。波動方程式の解は、無限遠方に値を持つ波動関数で、 $r \rightarrow \infty$ から伝播した波が、散乱された後 $r \rightarrow \infty$ に伝播される波を表わす。後で調べるように、詳細な計算から量子力学におけるラザーフォード散乱の断面積が、求まる。エネルギーは、連続的である。

このように、古典力学と量子力学では、一見方程式が全く異なるが、しかし、解の性質は、良く似ている。正エネルギーでは、古典力学で、粒子は無限遠からポテンシャルの中心に近づく後角度を変えた方向に飛んで行き、量子力学でも波が無限遠からポテンシャルの中心に近づく後角度を変えた方向の波となる散乱に対応している。また、負エネルギーでは、いずれも束縛状態になっている。

6.8 問題

6-1 修正クーロンポテンシャル

ポテンシャル $U(r) = -A\frac{1}{r} + B\frac{1}{r^2}$ の場合のエネルギー固有値と固有状態を求めよ。水素原子がもつ縮退が、この場合にどのようなになるか、詳しく考察せよ。

6-2 水素原子の波動関数

(1) 水素原子のエネルギーの値と波動関数は、次のようにまとめられることを確認せよ。

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (6.147)$$

$$R_{nl}(r) = -\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!^{1/2}}{2n(n+l)!^3} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad (6.148)$$

$$\rho = \frac{2Z}{na_0}r, a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \left(\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right)^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (6.149)$$

(2) 動径波動関数が

$$R_{10}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0} \quad (6.150)$$

$$R_{20}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} \quad (6.151)$$

$$R_{21}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0\sqrt{3}} e^{-Zr/2a_0} \quad (6.152)$$

となることを確認せよ。

(3) 基底状態、第1励起状態、等の波動関数の空間的な振る舞いを図示せよ。

6-3 ミュー原子

ミューオン原子のエネルギー準位を求めよ。ただし、ミューオン原子とは、質量は $100MeV/c^2$ で電子質量の200倍程度であるミューオンと陽子からなる束縛状態である。

6-4 リュードベリ原子

リュウドベルグ原子のエネルギー準位を求めよ。リュウドベルグ原子とは、電子の一つが非常に高い励起状態にある原子であり、高い励起状態の電子に対するシュレーディンガー方程式は、中心に $+1|e|$ の正電荷を帯びた原子の周りに一つの電子がある物理系とみなせ、ほぼ水素原子と同じに扱える。

6-5 アルカリ原子

アルカリ原子は、安定な閉核をなす電子雲を持つ原子のまわりに、電子が一つ加えられた、原子である。アルカリ原子のエネルギー準位を求めよ

6-6 ポジトロニウム

ポジトロニウムは、電子と陽電子の束縛状態である。ポジトロニウムのエネルギー準位を求めよ

6-7 スピン

スピン

6-8 水素原子 (放物線座標)

放物線座標 (付録参照) を使い水素原子の束縛状態を求めよ。

6-9 レンツベクトル

レンツベクトルが関係する交換関係 (6.25), (6.26), (6.27)、並びにレンツベクトルの二乗が満たす関係式 (6.34) を証明せよ。

問題 10 高励起状態

高励起状態 $n \rightarrow \infty$ の波動関数、エネルギー、縮退度、を使い分配関数

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) \quad (6.153)$$

を調べよ。

6.8.1 解

6-1

ポテンシャル $U(r) = -A\frac{1}{r} + B\frac{1}{r^2}$ の場合の動径座標 r の波動関数 R の満たす方程式は、

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{\hbar^2}{2m} l(l+1) \frac{1}{r^2} - \frac{A}{r^2} + \frac{B}{r} \right) R = 0 \quad (6.154)$$

である。新たなパラメータ ρ, s, n

$$\rho = \frac{2\sqrt{-2mEr}}{\hbar} \quad (6.155)$$

$$s(s+1) = 2mA/\hbar^2 + l(l+1) \quad (6.156)$$

$$n = \frac{B\sqrt{m/-2E}}{\hbar} \quad (6.157)$$

を使い上の波動方程式は、

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(-1/4 + \frac{n}{\rho} - \frac{s(s+1)}{\rho^2} \right) R = 0 \quad (6.158)$$

となる。原点近傍の振る舞い ρ^s と無限遠点での振る舞い $e^{-\rho/2}$ を取り出して、関数 R を合流型超幾何級数で

$$R = \rho^s e^{-\rho/2} F(-n+2s+1, 2s+2, \rho) \quad (6.159)$$

となる。ただし、関数 R が $\rho \rightarrow \infty$ で収束するためには、

$$p = n - s - 1 \quad (6.160)$$

となる p は零か正の整数でなければならない。よってエネルギー固有値が、

$$E_p = -\frac{2B^2 m}{\hbar^2} (2p+1 + \sqrt{(2l+1)^2 + 8mA/\hbar^2})^{-2} \quad (6.161)$$

となる。エネルギー固有値は、純粋なクーロンポテンシャルの場合とは異なり、角運動量 l に依存する。クーロンポテンシャルの場合 ($A=0$) に特徴的であった、エネルギー固有値が主量子数だけで書かれる縮退は、今のポテンシャルでは、ない。基底状態のエネルギーは、

$$E_0 = -\frac{2B^2 m}{\hbar^2} (1 + \sqrt{1 + 8mA/\hbar^2})^{-2} \quad (6.162)$$

第一励起状態のエネルギーは

$$E_1 = -\frac{2B^2 m}{\hbar^2} (3 + \sqrt{1 + 8mA/\hbar^2})^{-2} \quad (6.163)$$

となる。二つのエネルギーの間隔は、

$$\delta E = E_1 - E_0 \quad (6.164)$$

$$= -\frac{2B^2m}{\hbar^2} \left((1 + \sqrt{(1 + 8mA/\hbar^2)})^{-2} - (3 + \sqrt{1 + 8mA/\hbar^2})^{-2} \right) \quad (6.165)$$

となる。特に質量 m が大きい時、基底状態のエネルギーは

$$E_0 = -\frac{B^2}{4A} \quad (6.166)$$

と質量 m によらない値となり、またエネルギー間隔は

$$\Delta E = \frac{B^2}{2A} \frac{\hbar}{\sqrt{(2mA)}} \quad (6.167)$$

となり、質量の平方根に逆比例する小さな値となる。波動関数の空間的な広がりも、式 (6.156) より、質量の平方根に逆比例する小さな値となる。

質量が大きい極限の振る舞いを、古典力学と比較しよう。古典力学では、質点の静止した運動は、ポテンシャルの最小値で実現する。ポテンシャル $U(r)$ の微分は、

$$U'(r) = -2A/r^3 + B/r^2 = (B/r^3)(r - 2A/B) \quad (6.168)$$

となるので、ポテンシャルは

$$r = 2A/B \quad (6.169)$$

で最少となる。ポテンシャルの最小値は

$$U_{\text{最小}} = -\frac{B^2}{4A} \quad (6.170)$$

となり、静止しているので、運動エネルギーは零である。よってこれが、全エネルギーであり、実際量子論の結果 (6.166) と一致する。

6-3 ミューオニウム

ミュウオンと電子の換算質量は、

$$m_{\text{換算}} = \frac{m_e m_\mu}{m_e + m_\mu} = m_e \times \frac{m_\mu}{m_e + m_\mu} \quad (6.171)$$

$$= m_e \times \frac{100}{100.5} = m_e (1 - 0.005) \quad (6.172)$$

交換関係が満たす関係式

$$\begin{aligned}
 AB &= BA + [A, B], & (6.173) \\
 [A, BC] &= [A, B]C + B[A, C], \\
 [AB, C] &= A[B, C] + [A, C]B, \\
 [p_i, f(x)] &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} f(x), \\
 [x_i, g(p)] &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} g(p),
 \end{aligned}$$

並びに、完全反対称 3 階テンソル ϵ_{ijk} が満たす恒等式

$$\begin{aligned}
 \sum_i \epsilon_{ij_1k_1} \epsilon_{ij_2k_2} &= \delta_{j_1j_2} \delta_{k_1k_2} - \delta_{j_1k_2} \delta_{j_2k_1} \\
 \sum_{ij} \epsilon_{ijk_1} \epsilon_{ijk_2} &= 2\delta_{k_1k_2}
 \end{aligned}$$

を繰り返し使う。

先ず角運動量ベクトルは、 \mathbf{x} と直交し内積

$$L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k \quad (6.174)$$

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{L} = \epsilon_{ijk} x_i x_j p_k = 0$$

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{x} = \epsilon_{ijk} x_j p_k x_i = \epsilon_{ijk} x_j x_i p_k + \epsilon_{ijk} x_j i\hbar \delta_{ik} = 0 \quad (6.175)$$

が零になる。同様に、角運動量ベクトルは運動量とも直交して内積が

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{p} = 0 \quad (6.176)$$

となる性質を満たしている。

レンツベクトルは、

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{x}}{r} + \frac{1}{2mA} (\mathbf{L} \times \mathbf{p} - \mathbf{p} \times \mathbf{L}) \quad (6.177)$$

$$E_i = \frac{x_i}{r} + \frac{1}{2mA} \epsilon_{ijk} (L_j p_k - p_j L_k) \quad (6.178)$$

と定義される。

(1) レンツベクトルの交換関係

レンツベクトルの交換関係

$$\begin{aligned}
 & [E_{i_1}, E_{i_2}] \tag{6.179} \\
 &= \left[\frac{x_{i_1}}{r} + \frac{1}{2mA} \epsilon_{i_1 j_1 k_1} (L_{j_1} p_{k_1} - p_{j_1} L_{k_1}), \frac{x_{i_2}}{r} + \frac{1}{2mA} \epsilon_{i_2 j_2 k_2} (L_{j_2} p_{k_2} - p_{j_2} L_{k_2}) \right] \\
 &= -\frac{1}{2mA} \epsilon_{i_2 j_2 k_2} [(L_{j_2} p_{k_2} - p_{j_2} L_{k_2}), \frac{x_{i_1}}{r}] + \frac{1}{2mA} \epsilon_{i_1 j_1 k_1} [(L_{j_1} p_{k_1} - p_{j_1} L_{k_1}), \frac{x_{i_2}}{r}] \\
 &+ \left(\frac{1}{2mA} \right)^2 \epsilon_{i_1 j_1 k_1} \epsilon_{i_2 j_2 k_2} [(L_{j_1} p_{k_1} - p_{j_1} L_{k_1}), (L_{j_2} p_{k_2} - p_{j_2} L_{k_2})]
 \end{aligned}$$

を計算するため、はじめに、角運動量ベクトルや運動量ベクトルと、単位ベクトルとの交換関係を求めておこう。これらは、

$$[L_i, \frac{x_j}{r}] = i\hbar \epsilon_{ijk} \frac{x_k}{r} \tag{6.180}$$

$$[p_i, \frac{x_j}{r}] = -i\hbar \frac{r^2 \delta_{ij} - x_i x_j}{r^3} \tag{6.181}$$

$$\sum_i [p_i, \frac{x_i}{r}] = -i\hbar \frac{2}{r} \tag{6.182}$$

となる。

これらを使い、交換関係

$$\begin{aligned}
 & [L_j p_k - p_j L_k, \frac{x_i}{r}] = L_j [p_k, \frac{x_i}{r}] + [L_j, \frac{x_i}{r}] p_k - p_j [L_k, \frac{x_i}{r}] - [p_j, \frac{x_i}{r}] L_k \tag{6.183} \\
 &= L_j (-) i\hbar \frac{r^2 \delta_{ki} - x_k x_i}{r^3} + i\hbar \epsilon_{jil} \frac{x_l}{r} p_k - p_j i\hbar \epsilon_{kil} \frac{x_l}{r} + i\hbar \frac{r^2 \delta_{ji} - x_j x_i}{r^3} L_k \\
 &= i\hbar (-L_j \frac{r^2 \delta_{ki} - x_k x_i}{r^3} + \epsilon_{jil} \frac{x_l}{r} p_k - \epsilon_{kil} p_j \frac{x_l}{r} + \frac{r^2 \delta_{ji} - x_j x_i}{r^3} L_k)
 \end{aligned}$$

が得られる。

次に交換関係 (6.179) で $(\frac{1}{2mA})^2$ に比例する項の交換関係を求める。

$$\begin{aligned}
 & [L_{j_1} p_{k_1} - p_{j_1} L_{k_1}, L_{j_2} p_{k_2} - p_{j_2} L_{k_2}] \tag{6.184} \\
 &= [L_{j_1} p_{k_1}, L_{j_2} p_{k_2}] - [L_{j_1} p_{k_1}, p_{j_2} L_{k_2}] - [p_{j_1} L_{k_1}, L_{j_2} p_{k_2}] + [p_{j_1} L_{k_1}, p_{j_2} L_{k_2}] \\
 &= [L_{j_1}, L_{j_2} p_{k_2}] p_{k_1} + L_{j_1} [p_{j_1}, L_{j_2} p_{k_2}] - L_{j_1} [p_{k_1}, L_{j_2} p_{k_2}] - [L_{j_1}, L_{j_2} p_{k_2}] p_{k_1} \\
 &\quad - [p_{j_1}, L_{j_2} p_{k_2}] L_{k_1} - p_{j_1} [L_{j_1}, L_{j_2} p_{k_2}] + p_{j_1} [L_{k_1}, L_{j_2} p_{k_2}] + [p_{j_1}, L_{j_2} p_{k_2}] L_{k_1} \\
 &= [L_{j_1}, L_{j_2}] p_{k_2} p_{k_1} + L_{j_2} [L_{j_1}, p_{k_2}] p_{k_1} + L_{j_1} [p_{k_1}, L_{j_2}] p_{k_2} + L_{j_1} L_{j_2} [p_{k_1}, p_{k_2}] \\
 &\quad - L_{j_1} [p_{k_1}, p_{j_2}] L_{k_2} - L_{j_1} p_{j_2} [p_{k_1}, L_{k_2}] - [L_{j_1}, p_{j_2}] L_{k_2} p_{k_1} - p_{j_2} [L_{j_1}, L_{k_2}] p_{k_1} \\
 &\quad - [p_{j_1}, L_{j_2}] p_{k_2} L_{k_1} + L_{j_2} [p_{j_1}, p_{k_2}] L_{k_1} - p_{j_1} [L_{k_1}, L_{j_2}] p_{k_2} + p_{j_1} L_{j_2} [L_{k_1}, p_{k_2}] \\
 &\quad + p_{j_1} [L_{k_1}, p_{j_2}] L_{k_2} + p_{j_1} p_{j_2} [L_{k_1}, L_{k_2}] + [p_{j_1}, p_{j_2}] L_{k_2} L_{k_1} + p_{j_2} [p_{j_1}, L_{k_2}] L_{k_1}
 \end{aligned}$$

ここで交換関係

$$[p_i, p_j] = 0, [L_i, p_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}p_k, [L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$$

を使うことにより上の交換関係は

$$\begin{aligned} & [L_{j_1}p_{k_1} - p_{j_1}L_{k_1}, L_{j_2}p_{k_2} - p_{j_2}L_{k_2}] \\ = & i\hbar(\epsilon_{j_1j_2l_2}L_{l_2}p_{k_2}p_{k_1} + \epsilon_{j_1k_2l_2}L_{j_2}p_{l_2}p_{k_1} - \epsilon_{j_2k_1l_2}L_{j_1}p_{l_2}p_{k_2} + \epsilon_{k_2k_1l_2}L_{j_1}p_{j_2}p_{l_2} \\ & \epsilon_{j_1j_2l_1}p_{l_1}L_{k_2}p_{k_1} - \epsilon_{j_1k_2l_1}p_{j_2}L_{l_1}p_{k_1} - \epsilon_{k_1k_2l_1}p_{j_1}L_{j_2}p_{l_1} - \epsilon_{k_1j_2l_1}p_{j_1}L_{l_1}p_{k_2} \\ & + \epsilon_{j_2j_1l_1}p_{l_1}p_{k_2}L_{k_1} + \epsilon_{k_1j_2l_1}p_{j_1}p_{l_1}L_{k_2} + \epsilon_{k_1k_2l_1}p_{j_1}p_{j_2}L_{l_1} - \epsilon_{k_2j_1l_1}p_{j_2}p_{l_1}L_{k_1}) \end{aligned} \quad (6.185)$$

となる。これを交換関係 (6.179) に代入し、さらに以下のような計算を何度もおこなう。

$$\begin{aligned} & \epsilon_{i_1j_1k_1}\epsilon_{i_2j_2k_2}\epsilon_{j_1j_2l_2}L_{l_2}p_{k_2}p_{k_1} \\ = & \epsilon_{i_1j_1k_1}(\delta_{i_2j_1}\delta_{k_2l_2} - \delta_{i_2l_2}\delta_{k_2j_1})L_{l_2}p_{k_2}p_{k_1} \\ = & \epsilon_{i_1i_2k_1}\mathbf{L} \cdot \mathbf{p}p_{k_1} - \epsilon_{i_1k_2k_1}L_{i_2}p_{k_2}p_{k_1} \\ = & 0 \end{aligned} \quad (6.186)$$

最後の等式で、 $\mathbf{L} \cdot \mathbf{p} = 0$ と k_1k_2 について反対称の $\epsilon_{i_1k_2k_1}$ と対称の $p_{k_2}p_{k_1}$ の積の和が零になる性質を使った。

$$\begin{aligned} & \epsilon_{i_1j_1k_1}\epsilon_{i_2j_2k_2}\epsilon_{j_1k_2l_2}L_{j_2}p_{l_2}p_{k_1} \\ = & \epsilon_{i_1j_1k_1}(-\delta_{i_2j_1}\delta_{j_2l_2} + \delta_{i_2l_2}\delta_{j_2j_1})L_{j_2}p_{l_2}p_{k_1} \\ = & -\epsilon_{i_1i_2k_1}\mathbf{L} \cdot \mathbf{p}p_{k_1} + \epsilon_{i_1j_2k_1}L_{j_2}p_{i_2}p_{k_1} \\ = & \epsilon_{i_1j_2k_1}L_{j_2}p_{i_2}p_{k_1} \end{aligned} \quad (6.187)$$

その結果、レンツベクトルの交換関係、

$$\begin{aligned} & [E_{i_1}, E_{i_2}] \\ = & -i\frac{2}{mA^2}i\hbar\epsilon_{i_1i_2j_2}L_{j_2}\left[\frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 - \frac{A}{r}\right] \end{aligned} \quad (6.188)$$

をうる。

(2) レンツベクトルの内積

次に、レンツベクトルの内積

$$\begin{aligned} & \mathbf{E}^2 \\ = & 1 + \frac{1}{2mA}\epsilon_{i_1j_1k_1}\frac{x_{i_1}}{r}(L_{j_1}p_{k_1} - p_{j_1}L_{k_1}) + \frac{1}{2mA}\epsilon_{i_1j_1k_1}(L_{j_1}p_{k_1} - p_{j_1}L_{k_1})\frac{x_{i_1}}{r} \\ & + \left(\frac{1}{2mA}\right)^2\epsilon_{ij_1k_1}\epsilon_{ij_2k_2}(L_{j_1}p_{k_1} - p_{j_1}L_{k_1})(L_{j_2}p_{k_2} - p_{j_2}L_{k_2}) \end{aligned} \quad (6.189)$$

を計算する。ここで、 $(\frac{1}{2mA})^2$ に比例する項は、

$$\begin{aligned}
& \epsilon_{ij_1k_1}\epsilon_{ij_2k_2}(L_{j_1}p_{k_1} - p_{j_1}L_{k_1})(L_{j_2}p_{k_2} - p_{j_2}L_{k_2}) \quad (6.190) \\
&= (\delta_{j_1j_2}\delta_{k_1k_2} - \delta_{j_1k_2}\delta_{j_2k_1})(L_{j_1}p_{k_1} - p_{j_1}L_{k_1})(L_{j_2}p_{k_2} - p_{j_2}L_{k_2}) \\
&= L_jp_kL_jp_k - L_jp_kp_jL_k - p_jL_kL_jp_k + p_jL_kp_jL_k \\
&\quad - L_jp_kL_kp_j + L_jp_kp_kL_j + p_jL_kL_kp_j - p_jL_kp_kL_j \\
&= L_jp_kp_kL_j + i\hbar\epsilon_{jkl}L_jp_kp_l - p_kL_jp_jL_k - i\hbar\epsilon_{jkl}p_lp_jL_k - p_jL_k(p_kL_j + i\hbar\epsilon_{jkl}p_l) \\
&\quad + p_jL_k(i\hbar\epsilon_{kjl}p_l + p_kL_j)L_j - L_j\mathbf{p} \cdot \mathbf{L}p_j + \mathbf{L}^2\mathbf{p}^2 + \mathbf{p}^2\mathbf{L}^2 - p_j\mathbf{L} \cdot \mathbf{p}L_j \\
&= 4\mathbf{L}^2\mathbf{p}^2 - 4(i\hbar)^2\mathbf{p}^2
\end{aligned}$$

となる。また、 $(\frac{1}{2mA})$ に比例する項で、 \mathbf{x} と \mathbf{p} の積を角運動量に一致するように順序を変えて、

$$\begin{aligned}
& \epsilon_{ijk}\frac{x_i}{r}L_jp_k \quad (6.191) \\
&= \epsilon_{ijk}\frac{x_i}{r}(p_kL_j + i\hbar\epsilon_{jkl}p_l) \\
&= \epsilon_{ijk}\frac{1}{r}x_i(p_kL_j) + i\hbar\frac{1}{r}x_i2\delta_{il}p_l \\
&= \frac{1}{r}(-)\mathbf{L}^2 + i\hbar2\frac{1}{r}\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}
\end{aligned}$$

と

$$\begin{aligned}
& \epsilon_{ijk}\frac{x_i}{r}p_jL_k \quad (6.192) \\
&= \epsilon_{ijk}\frac{1}{r}x_i p_jL_k \\
&= \frac{1}{r}\mathbf{L}^2
\end{aligned}$$

と

$$\begin{aligned}
& \epsilon_{ijk}L_jp_k\frac{x_i}{r} \quad (6.193) \\
&= \epsilon_{ijk}L_j([p_k, \frac{x_i}{r}] + \frac{x_i}{r}p_k) \\
&= -\frac{1}{r}\mathbf{L}^2
\end{aligned}$$

と

$$\begin{aligned}
& \epsilon_{ijk}p_jL_k\frac{x_i}{r} \quad (6.194) \\
&= \epsilon_{ijk}p_j(i\hbar\epsilon_{kil}\frac{x_l}{r} + \frac{x_i}{r}L_k) \\
&= 2i\hbar\mathbf{p} \cdot \frac{\mathbf{x}}{r} + \frac{1}{r}\mathbf{L}^2
\end{aligned}$$

となる。最後に、これらを代入して、

$$\begin{aligned}
 & \mathbf{E}^2 & (6.195) \\
 = & 1 + \frac{1}{2mA} \left[\frac{1}{r} (-) \mathbf{L}^2 + i\hbar 2 \frac{1}{r} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} - \frac{1}{r} \mathbf{L}^2 - \frac{1}{r} \mathbf{L}^2 - 2i\hbar \mathbf{p} \cdot \frac{\mathbf{x}}{r} - \frac{1}{r} \mathbf{L}^2 \right] \\
 & + \left(\frac{1}{2mA} \right)^2 (4\mathbf{L}^2 \mathbf{p}^2 - 4(i\hbar)^2 \mathbf{p}^2) \\
 = & 1 + \frac{1}{2mA} \left[-4 \frac{1}{r} \mathbf{L}^2 + 2i\hbar \left[\frac{1}{r} \mathbf{x}, \mathbf{p} \right] \right] + \left(\frac{1}{2mA} \right)^2 (4\mathbf{L}^2 \mathbf{p}^2 - 4(i\hbar)^2 \mathbf{p}^2) \\
 = & 1 + \frac{1}{2mA} \left[-4 \frac{1}{r} \mathbf{L}^2 + 2^2 (i\hbar)^2 \frac{1}{r} \right] + \left(\frac{1}{2mA} \right)^2 (4\mathbf{L}^2 \mathbf{p}^2 - 4(i\hbar)^2 \mathbf{p}^2)
 \end{aligned}$$

が得られる。

第7章 電磁場中の荷電粒子の運動

原子内の電子を目で直接観測することはできない。そこで、電子に関する情報を得るため、電場や磁場を原子に加える。すると、原子は固有の現象を示す。この現象は電子と電場や磁場との相互作用から引き起こされ、原子や原子内の電子に関する情報を担っている。電場や磁場は、電荷と普遍的な形で、物質やその状態には関係なく相互作用する。この相互作用は、電荷だけに依存しているので、自由な電子と原子内に束縛された電子で共通である。だから、原子による電場や磁場への影響は、正確に計算することができる。この計算法を確立するため、電荷を持つ粒子が電場や磁場、ならびに電磁波といかに相互作用するのかを明らかにしておく。本章では、電場や磁場中での荷電粒子の運動を考察する。

7.1 荷電粒子のラグランジアン

電場を表すスカラーポテンシャルを $A_0(\mathbf{x})$ 、磁場を表すベクトルポテンシャルを $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ とすると、質量 m 電荷 q の荷電粒子はラグランジアン、

$$L = \frac{m}{2} \mathbf{v}^2 - qA_0(\mathbf{x}) + q\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} \quad (7.1)$$

で記述される。これから得られるオイラーラグランジュの運動方程式は、

$$m \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{x} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (7.2)$$

である。ここで、変分の計算

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = -q \frac{\partial A_0}{\partial x_i} - q\mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{A} \quad (7.3)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i + qA_i(\mathbf{x}) \quad (7.4)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m \frac{d^2}{dt^2} x_i + q \frac{\partial}{\partial t} A_i(\mathbf{x}) + q \frac{\partial A_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} \dot{x}_j \quad (7.5)$$

と電場、磁場をポテンシャルから求める式

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (7.6)$$

$$\mathbf{E}_i = -\frac{\partial A_0}{\partial x_i} + \frac{\partial A_i}{\partial t} \quad (7.7)$$

を使った。運動方程式 (7.2) の右辺の第1項は、電荷が電場から受ける電場に比例する力であり、第2項は速度と磁場とのベクトル積に比例する磁場から受けるローレンツ力である。ローレンツ力は速度に依存する力であるので、一見、保存力とは異なる性質をもつ。しかしながら、ラグランジアンによる変分原理で運動方程式を表すことができるため、保存力と同じ正準形式の方法で力学を扱うことができる。

位置座標 x_i に共役な運動量は、ラグランジアンを \dot{x}_i で微分した、

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i + eA_i(x_i) \quad (7.8)$$

であり、運動量が速度の項とベクトルポテンシャルとの和となることが特徴である。通常の保存力のもとでは、運動量が速度の項だけであったのと、対照的である。

力学変数と共役な運動量の間には、正準交換関係が成立する。いま、速度を運動量で、

$$\dot{x}_i = \frac{1}{m}(p_i - qA_i) \quad (7.9)$$

と表せることから、磁場中の速度は、交換関係

$$[\dot{x}_i, \dot{x}_j] = i\frac{q\hbar}{m}([\nabla_i, A_j] - [\nabla_j, A_i]) \quad (7.10)$$

を満たし、可換ではなくなる。この式の右辺は、磁場に比例する。このため、磁場に垂直な方向の二つの速度は、可換ではなく、両変数を同時に対角形にすることはできない。一つを対角形にする表現か、又は両変数に有限なある広がりを持たせる表現が、良く使われる。2次元面に垂直な方向に一樣な磁場がかかっている時、面内の電子は、この性質を反映する。

7.1.1 荷電粒子のシュレーディンガー方程式

ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= \sum_i p_i \dot{x}_i - L \\ &= p_i \frac{(p_i - qA_i)}{m} - \frac{m}{2}(p_i - qA_i)^2 \frac{1}{m^2} - q\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} + qA_0 \\ &= \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + qA_0 \end{aligned} \quad (7.11)$$

となるので、シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + qA_0 \right] \psi \quad (7.12)$$

である。このように、電場や磁場中にある荷電粒子の従うシュレーディンガー方程式は、ベクトルポテンシャルとスカラーポテンシャルを使い表される。

この結果は、古典力学における運動方程式とは大きく異なる。古典力学の運動方程式は、ポテンシャルではなく、力でかけられる。質点に働く力に基づいて、もともと電場や磁場が定義されているので、古典力学の方程式は必然的に電場や磁場で書かれる。しかし量子力学のシュレーディンガー方程式は、力ではなくエネルギーであるハミルトニアンに基づくので、ポテンシャルで書かれる。だから、荷電粒子のシュレーディンガー方程式は電場や磁場ではなく、スカラーポテンシャルやベクトルポテンシャルで書かれることになる。ところで、力を積分したものがポテンシャルであるので、一つの力に対してポテンシャルは一意的に決まるわけではない。この事情は、後で述べるゲージ不変性と密接に関連している。ゲージ不変性の考えや、ゲージ変換の考えは、現代物理学で大きな役割を果たしている。

7.1.2 確率の密度と流れ

電磁場中にある荷電粒子の従うシュレーディンガー方程式から、確率密度と確率の流れが、

$$\begin{aligned}\rho(t, \mathbf{x}) &= \psi^\dagger(t, \mathbf{x})\psi(t, \mathbf{x}) \\ \mathbf{j}(t, \mathbf{x}) &= \psi^\dagger(t, \mathbf{x})\frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})\psi(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})\psi^\dagger(t, \mathbf{x})\psi(t, \mathbf{x})\end{aligned}\quad (7.13)$$

と波動関数とその複素共役の積からあらわせ、連続の式（保存則）

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t, \mathbf{x}) + \nabla \cdot \mathbf{j}(t, \mathbf{x}) = 0 \quad (7.14)$$

を満たす。

確率密度や確率の流れは、電磁場を含むものとなり、電磁場がない場合のものから

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A} \quad (7.15)$$

と置き換えたものになっている。

7.2 一様磁場中の2次元電子：ランダウ準位

電子が二次元面内を自由に運動する系で、面に垂直に磁場がかかっているとき、運動は興味深いものとなる。ベクトルポテンシャルの第3成分が、

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &= (A_x, A_y, A_z) \\ A_x &= 0, A_y = xB, A_z = 0\end{aligned}\quad (7.16)$$

であるとき、磁場（磁束密度）ベクトルは3軸方向を向き、

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = (0, 0, B) \quad (7.17)$$

となる。

このベクトルポテンシャルをもつ二次元内を運動する電子のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 = \frac{1}{2m}(p_x^2 + (p_y - eBx)^2) \quad (7.18)$$

となる。このハミルトニアンの固有値問題をいかに考察する。明らかに、ハミルトニアンは変数 y には微分を通してだけ依存する。その為、波動関数は、 y 方向の運動量演算子 p_y の固有状態と x のある関数の積

$$\psi(x, y) = u(x)e^{ip_y y} \quad (7.19)$$

と変数が分離された定常解をもつ。式 (7.19) で、 p_y は y 方向の運動量である。 $u(x)$ の満たす固有値方程式は、

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m}(p_x^2 + (p_y - eBx)^2)u(x) &= Eu(x) \\ \left(\frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2m}e^2B^2(x - x_0)^2\right)u(x) &= Eu(x) \\ x_0 &= \frac{p_y}{eB} \end{aligned} \quad (7.20)$$

となり、新たな変数 $\tilde{x} = x - x_0$ を使い方程式が

$$\left(\frac{1}{2m}p_{\tilde{x}}^2 + \frac{1}{2m}e^2B^2\tilde{x}^2\right)u(\tilde{x}) = Eu(\tilde{x}) \quad (7.21)$$

と表され、固有値 E が p_y に依存しない調和振動子と同等な式であることがわかる。

この方程式は、バネ定数が

$$k = \frac{e^2B^2}{m} \quad (7.22)$$

の調和振動子と等価であるので、振動数は

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{eB}{m} \quad (7.23)$$

であり、エネルギーは、とびとびの値

$$E = \hbar\omega(l + 1/2) \quad (7.24)$$

となる。この固有状態をランダウ準位という。

7.3 ランダウ準位

エネルギー固有値 (7.24) が p_y によらないので、一つのエネルギーで異なる p_y をもつ多くの状態、

$$u_l(x - x_0)e^{i\frac{p_y}{\hbar}y} \quad (7.25)$$

$$E_l = \hbar\omega(l + 1/2), x_0 = \frac{p_y}{eB} \quad (7.26)$$

が存在する。この波動関数は、 y 方向には、平面波であるので端から端まで占める広がった関数であるが、 x 方向には各 p_y ごとに異なる値 x_0 を中心として、有限なひろがりをもつ関数である。

各エネルギー毎に p_y で区別される異なる固有状態が存在する。その状態数である縮退度は、同じエネルギーで互いに直交する状態の数であり異なる p_y の数に一致する。これを、有限の面積をもつ二次元系で求めよう。

いま、二次元系の大きさを $L_x \times L_y$ とし、座標 x, y の領域が

$$0 \leq x \leq L_x, \quad (7.27)$$

$$0 \leq y \leq L_y$$

であるとする。この時、変数分離解 (7.19) の y 方向には周期境界条件を課すことより、運動量が

$$p_y = \frac{2\pi}{L_y}n, n = \text{整数} \quad (7.28)$$

と決まる。この時、異なる p_y を持つ状態は互いに直交し、同じ p_y の状態は有限な内積を持つ。また、 x 方向では関数の中心 x_0 に対する条件

$$0 \leq x_0 \leq L_x \quad (7.29)$$

が満たされる。この条件は、固有関数が $x_0 = \frac{p_y}{eB}$ を中心とするガウス型の関数であることより、この中心座標が二次元空間内にあることから導かれる

$$0 \leq \frac{2\pi}{eBL_y}n \leq L_x \quad (7.30)$$

となる。これより、整数 n に対する条件

$$0 \leq n \leq \frac{eB}{2\pi} L_x L_y \quad (7.31)$$

がえられ、 n の最大値の N が

$$N = \frac{eB}{2\pi} L_x L_y \quad (7.32)$$

と面積に比例した値となる。 N が、全縮退度である。全縮退度が面積に比例するので、面積 $S = L_x L_y$ あたりの縮退度つまり面密度 ρ は一定であり、値は

$$\rho = \frac{N}{S} = \frac{eB}{2\pi} \quad (7.33)$$

である。この結果は、一量子状態の占める面積 s_0 が、磁場に反比例する値

$$s_0 = \frac{2\pi}{eB} \quad (7.34)$$

であることを示す。だから、磁場が強くなると、各状態の空間的な大きさは、磁場に反比例して小さくなる。

面密度 ρ が磁場に比例して大きくなる一方で、エネルギー間隔が磁場に比例するので、有限のエネルギー間隔内にある状態数は、磁場によらずに一定である。この状態数は、零磁場の場合に一致する。

7.4 一様磁場中の三次元電子

三次元運動する電荷を持つ質点のハミルトニアンは (7.11) である。 z 軸方向の磁場がある系では、ベクトルポテンシャルが式 (7.17) で表されるので、定常状態のシュレーディンガー方程式は

$$\left[\frac{1}{2m} ((p_x - eA_x)^2 + p_y^2 + p_z^2) \right] \psi = E\psi \quad (7.35)$$

である。波動関数を p_y と p_z の固有状態の変数分離型で、

$$\psi = e^{i(k_y y + k_z z)} u(x) \quad (7.36)$$

とおくと、1変数の固有値方程式

$$(p_x^2 + (p_y - eBx)^2) u(x) = (2mE - p_z^2) u(x) \quad (7.37)$$

が得られる。これより、固有値と固有関数が、

$$2mE - p_z^2 = 2mE_l, E_l = \hbar\omega(l + 1/2) \quad (7.38)$$

$$u(x) = u_l(x - x_0), x_0 = \frac{p_y}{eB} \quad (7.39)$$

と得られ、さらにエネルギーが

$$E = E_l + \frac{p_z^2}{2m} \quad (7.40)$$

となる。つまり、磁場に垂直な二次元面内では、二次元ランダウ準位が実現し、磁場方向には自由な運動となり、全エネルギーはそれぞれのエネルギーの和となる。

7.5 ゲージ不変性

磁場 B はベクトルポテンシャルの回転であるので、ベクトルポテンシャルを

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\lambda(x) \quad (7.41)$$

と変えても、恒等式

$$\nabla \times \nabla\lambda(x) = 0 \quad (7.42)$$

が成立するので、磁場は

$$\nabla \times \mathbf{A} \rightarrow \nabla \times \mathbf{A} + \nabla \times \nabla\lambda(x) = \nabla \times \mathbf{A} \quad (7.43)$$

と不変のまま変化しない。この変換を、ゲージ変換という。上の結果、一つの磁場を与えるベクトルポテンシャルはゲージ変換の自由度の数だけ、無限個ある。

ところで、ハミルトニアンはベクトルポテンシャルを使い書かれるので、ゲージ変換で変わり、その結果、シュレーディンガー方程式も固有状態も変わる。では、量子力学は、ゲージ変換に対して不変ではないのだろうか？量子力学で、観測量と関連する確率振幅や種々の

確率は、ゲージ変換に対してどのように振る舞うのであろうか？これを調べておくことは、大変重要である。

このため、波動関数を位相変換して再定義した、

$$\psi = e^{\frac{e\lambda}{i\hbar}} \tilde{\psi} \quad (7.44)$$

が従う新たなシュレーディンガー方程式を求める。これは、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi} = \left[\frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A} - e\nabla\lambda)^2 + eA_0 \right] \tilde{\psi} \quad (7.45)$$

であり、丁度、ベクトルポテンシャルをゲージ変換した時の、シュレーディンガー方程式に一致する。このとき、波動関数の複素共役は

$$\psi^\dagger = e^{\frac{-e\lambda}{i\hbar}} \tilde{\psi}^\dagger \quad (7.46)$$

である。状態 α と状態 β との振幅は、波動関数とその複素共役の内積であり、ゲージ変換で

$$\int d\mathbf{x} \psi_\alpha^\dagger \psi_\beta = \int d\mathbf{x} \tilde{\psi}_\alpha^\dagger \tilde{\psi}_\beta \quad (7.47)$$

と不変である。振幅が不変であるので、振幅の絶対値の二乗で決まる確率はゲージ変換で不変である。だから、如何なるゲージで計算しても、物理量は不変である。

7.6 電磁波と電子の相互作用

シュレーディンガー方程式 (7.12) は、電子が、電磁場と相互作用している系の時間発展を表す。ここで、ベクトルポテンシャルやスカラーポテンシャルが、電磁波を表す場合でも、シュレーディンガー方程式は同じ、(7.12) である。電荷を持つ粒子の運動が、いつも普遍的な形のシュレーディンガー方程式で表されることが、重要である。しかしながら、この場合シュレーディンガー方程式を解析的に解くことは、困難であることが多い。多くの場合、次章で説明する近似法が適用され計算が行なわれる。

また、引力ポテンシャル $V(\mathbf{x})$ が働く系にさらに、電場、磁場、または電磁波が加わるときは、

$$A_0(\mathbf{x}, t) \rightarrow V(r) + A_0(\mathbf{x}, t) \quad (7.48)$$

とにおいて得られるシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{x}) + eA_0 \right] \psi \quad (7.49)$$

が系を記述している。ここで、ポテンシャル $A_0(\mathbf{x}, t)$, $A_i(\mathbf{x}, t)$ は電場、磁場、または電磁波を表している。この系のとり扱いにも、次章で説明する近似的な計算が行なわれる。

7.7 問題

問題 1

二次元系で、面に垂直の磁場と面に平行の電場が加わった時、電子が満たすシュレーディンガー方程式を書き下せ。次に、解きやすいゲージを選んで、そのシュレーディンガー方程式の解を求めよ。

問 2

ベクトルポテンシャルが、

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &= (A_x, A_y, A_z) \\ A_x &= -\frac{B}{2}y, A_y = \frac{B}{2}x, A_z = 0\end{aligned}\tag{7.50}$$

であるとき、磁場（磁束密度）ベクトルは 3 軸方向を向き、

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = (0, 0, B)\tag{7.51}$$

となる。

このベクトルポテンシャルをもつ二次元内を運動する電子のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 = \frac{1}{2m}((p_x + e\frac{B}{2}y)^2 + (p_y - e\frac{B}{2}x)^2)\tag{7.52}$$

である。このハミルトニアンの固有値問題をとけ。（ヒント：二次元極座標を使う）

問 3

ハミルトニアン

$$H = H_0 + \epsilon H_1\tag{7.53}$$

で、それぞれが次の 2×2 行列

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

であるとき、このハミルトニアン H の固有値問題、すなわち固有値方程式

$$H\mathbf{u} = E\mathbf{u} \quad (7.54)$$

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

を満たす固有値と固有ベクトルを求めよ。ただし、 ϵ は一つのパラメーターである。

問題 4 一様磁場中の 3 次元問題

z 軸方向に一様な磁場 B があるときの質量 m の質点のエネルギー一定常状態を求めよ。

問題 5 面に垂直な一様磁場と、面内方向の電場がある 2 次元問題

x y 面に垂直な一様な磁場 B と、磁場と平行な電場 E があるときの質量 m の質点の運動をしらべよ。

問題 6 z 軸上に磁束がある系の 3 次元問題

z 軸上に無限に細い磁束があるときの質量 m の質点のエネルギー一定常状態を求めよ。

問題 7 一様磁場中の 2 次元問題

ランダウ準位を、本文とは異なるゲージでのベクトルポテンシャルで求めよ。またゲージ変換との関連を明らかにせよ。

問題の解答

問 1

x 方向の電場と、面に垂直方向の磁場があるとき、ベクトルポテンシャルを、

$$A_x = 0, A_y = xB \quad (7.55)$$

と選ぶと、スカラーポテンシャル、

$$A_0 = xE_{\text{電}} \quad (7.56)$$

と同様に変数 x だけが含まれ、ハミルトニアンは解きやすい形

$$H = \frac{1}{2m}((p_x)^2 + (p_y - eBx)^2) + eE_{\text{電}}x \quad (7.57)$$

となる。その為、固有関数を変数分離形

$$\psi = e^{ip_y y} u(x) \quad (7.58)$$

で表わせ、固有値方程式

$$\left[\frac{1}{2m}((p_x)^2 + (p_y - eBx)^2) + eE_{\text{電}}x \right] u(x) = E u(x) \quad (7.59)$$

が得られる。

ここで、座標 x について平方完成して

$$\frac{1}{2m}(p_y - eBx)^2 + eE_{\text{電}}x = \frac{1}{2m}e^2 B^2 (x - x_0)^2 + E_0 \quad (7.60)$$

と表わしておく。ここで、定数 x_0 と E_0 は

$$x_0 = \frac{p_y}{eB} - \frac{eE_{\text{電}}}{2eB^2} \quad (7.61)$$

$$E_0 = \frac{E_{\text{電}}}{B} p_y - \frac{E_{\text{電}}^2}{4B^2} \quad (7.62)$$

である。 E_0 が p_y に依存するので、エネルギー固有値 E は、ランダウ準位のエネルギー E_l と E_0 の和

$$E = E_0(E_{\text{電}}, B) + E_l(B) \quad (7.63)$$

$$E_l(B) = \hbar\omega(l + 1/2) \quad (7.64)$$

$$\omega = \frac{eB}{m} \quad (7.65)$$

になり、 p_y に依存することになる。そのため、異なる p_y の状態は異なるエネルギーを持ち、ランダウ準位の縮退が解ける。また、

$$v_y = \frac{\partial E(p_y)}{\partial p_y} = \frac{E_{\text{電}}}{B} \quad (7.66)$$

は、 x 方向の電場があるときの電子の y 方向の速度を表わす。これは、古典力学のドリフト運動に対応し、ホール効果を引き起こすものである。

問 2

このハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \left((p_x + e\frac{B}{2}y)^2 + (p_y - e\frac{B}{2}x)^2 \right) \\ &= \frac{1}{2m} \left((p_x^2 + p_y^2 + (e\frac{B}{2})^2(x^2 + y^2) + eB(y p_x - x p_y)) \right) \\ &= \frac{1}{2m} \left((p_x^2 + p_y^2 + (e\frac{B}{2})^2(x^2 + y^2) - eBL_z) \right) \end{aligned} \quad (7.67)$$

と $r^2 = x^2 + y^2$ に比例する二次元球対称ポテンシャルと角運動量 L_z で表わされる。この表示で、方程式を解くのが簡単である。

固有解を、

$$\psi = v(r)e^{im\phi} \quad (7.68)$$

とおくと、 $v(r)$ は Laguerre 関数を使い書かれる。

問 3

最も簡単な線形代数の問題である。次章に答えが与えられている。

第8章 撮動論

8.1 近似法

クーロンポテンシャルや調和振動子では、エネルギー固有状態や固有値を厳密に求める事が出来た。しかしこれら以外の一般的なポテンシャルでは、通常、シュレーディンガー方程式を解析的に解くことは困難である。また、ハミルトニアン固有状態を解析的に求めることも困難である。本書で今まで調べた物理系は、例外的に方程式の厳密な解が具体的に求まった。しかし、多くの問題では、解が解析的に求まるわけではない。それにも拘らず、物理の諸問題を調べるには方程式の解を求めることや、解の様々な性質を知ることが、必須である。このような場合、様々な工夫がなされる。それらは、大きく

- (1) 近似的解法
- (2) 数値的解法

の2種類に分類される。(2)の数値的解法は、近年の高速計算機の発達に伴って、大きく進展している。微分方程式を、数値的に解くには、微分を差分に置換えて計算を実行する。数値的解法の詳細の説明には、多くのページを要し、また本書の目的とは合致しないので、省くことにする。(1)の近似的解法は、本書で取り扱われる。近似法のなかで主要な一つである撮動論を本章で説明し、準古典近似(WKB法)と変分法を、後の章で説明する。

8.2 撮動論

撮動論は、最も良く使われる近似法である。撮動論では、ハミルトニアンを解析的に固有解がわかる成分 H_0 と、それ以外の項 H_1 に分解する。 H_0 は、ポテンシャルを全く含まない自由粒子のものである場合や、またポテンシャルを含み解析解がわかっている場合がある。 H_1 は、状況や考察する問題に応じて様々な形が考えられる。

ところで、ミクロな状態を探るにはどうしたら良いだろうか？ 極微な状態を直接目で観察することはできないので、通常、外部から電場や磁場をくわえたり、電磁波を加え、極微な物理系が示す反応を調べる事が多い。電磁場は、ミクロな状態から影響を受け状態によって異なる信号をだす。この電磁場とミクロな状態との相互作用は、電荷と電磁場との相互作用できまり、十分弱い。そのため、この相互作用の効果を知るのに撮動論が有効である。また、

荷電粒子と電磁場との相互作用は、前章で示したように普遍的な形をとることが分っている。その為、ミクロな状態の情報が、電磁場を通して得られる。

時間に依存しない H_1 の場合は、定常状態のエネルギー固有値を摂動論で求める。これは、時間に依存しない摂動論である。この場合、不連続エネルギーの状態と、連続エネルギーの状態と、異なる扱いがなされる。不連続エネルギーを持つ状態では、エネルギー固有値も固有状態も H_1 で変わる。両方が変化するので、エネルギー固有値と固有状態を相互作用の大きさを表すパラメーターで冪展開して近似することが有効である。一方、連続エネルギーを持つ状態では、相互作用によってエネルギーが変化したと考える事もできるし、エネルギーが一定に保たれると考える事もできる。この場合は、エネルギーを一定の値に固定しておくほうが計算は簡単であり系統的に行なえる。この後者の計算は、後で散乱問題で応用される。

一方、 H_1 が時間に依存して変化する場合は、定常状態ではなく、状態が時間と共に変化する様子や遷移振幅や確率を解析して計算する。この場合は、時間に依存する摂動論を適用する。

ここでは、先ず、有限な行列の固有値や固有ベクトルを求め、対角化を行なう。最も簡単である 2×2 行列の対角化を例にとって、摂動論を考えてみる。この場合には、ハミルトニアンは 2×2 行列であり、エネルギーは必ず不連続になり、連続となる事はない。だから、無限次元の問題では、不連続エネルギー状態である束縛状態の扱いに対応する。

最も簡単でありながら自明ではない 2×2 エルミート行列をはじめ考察する。

8.3 2×2 行列の対角化

8.3.1 厳密な対角化

ハミルトニアン

$$H = H_0 + \epsilon H_1 \quad (8.1)$$

で、 H_0 と H_1 のそれぞれが次の 2×2 行列

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

であり、 ϵ を一つのパラメーターとする。このハミルトニアン H の固有値 E と固有ベクトル \mathbf{u}

は、固有値方程式 $H\mathbf{u} = E\mathbf{u}$ を満たす。固有ベクトル \mathbf{u} と固有値 E の厳密な解を先ず求める。次に、摂動論にもとずいて、対角行列 H_0 の固有値や固有ベクトルを使い非対角行列 H_1 を含む H の固有値や固有ベクトルを ϵ についての冪展開の形で求めることにする。

H_0 の一つの固有ベクトルは

$$u_1^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

であり、固有値 E_1 をもち固有値方程式

$$H_0 u_1^0 = E_1 u_1^0 \quad (8.2)$$

に従う。もう一つの固有ベクトルは、

$$u_2^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

であり、固有値 E_2 をもち固有値方程式

$$H_0 u_2^0 = E_2 u_2^0 \quad (8.3)$$

に従う。

二つのベクトルの線形結合

$$u_1 u_1^0 + u_2 u_2^0 = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

からなるベクトル空間を考える。

まずはじめに H の厳密な固有解を求めよう。固有値と固有ベクトルをきめる固有値方程式は、

$$H\mathbf{u} = E\mathbf{u} \quad (8.4)$$

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

となり、行列の成分を使い

$$(E_1 - E)u_1 + i\epsilon u_2 = 0 \quad (8.5)$$

$$-i\epsilon u_1 + (E_2 - E)u_2 = 0 \quad (8.6)$$

となる。 $u_1, u_2 \neq 0$ となるのは、係数からなる行列式が零となり、固有値 E が (永年) 方程式

$$\begin{vmatrix} E_1 - E & i\epsilon \\ -i\epsilon & E_2 - E \end{vmatrix} = 0 \quad (8.7)$$

を満たすときである。このとき、永年方程式は E についての二次方程式、

$$(E_1 - E)(E_2 - E) - \epsilon^2 = 0 \quad (8.8)$$

となる。この根から、固有値 E が

$$E = \frac{E_1 + E_2 \pm \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4\epsilon^2}}{2} \quad (8.9)$$

$$= \frac{E_1 + E_2 \pm |E_1 - E_2| \sqrt{1 + \lambda^2}}{2}$$

$$\lambda = 2 \frac{\epsilon}{|E_1 - E_2|} \quad (8.10)$$

と求まる。エネルギー固有値は、 E_1, E_2, ϵ の関数であり、式 (8.9) より、 2ϵ が $|E_1 - E_2|$ より小さい場合は、 ϵ でテイラー展開出来る。このため ϵ と $2|E_1 - E_2|$ との比である無次元量、 λ 、を導入して近似式を表わした。

また、固有ベクトルの成分は、

$$u_1 = \frac{-i\epsilon}{E_1 - E} u_2 \quad (8.11)$$

$$= \frac{-i2\epsilon}{E_1 - E_2 \mp \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4\epsilon^2}} u_2$$

$$= \frac{-i\lambda}{1 \mp \sqrt{1 + \lambda^2}} u_2$$

となり、さらに規格化の条件

$$|u_1|^2 + |u_2|^2 = 1 \quad (8.12)$$

から、

$$|u_2|^2 \left(1 + \left(\frac{\lambda}{1 \mp \sqrt{1 + \lambda^2}}\right)^2\right) = 1$$

$$|u_2| = \frac{1 \mp \sqrt{1 + \lambda^2}}{\sqrt{\lambda^2 + (1 \mp \sqrt{1 + \lambda^2})^2}} \quad (8.13)$$

となる。このように、 2×2 行列は、どんな場合でも対角化を行なうことができる。以上から、固有値と対応する固有ベクトルは、無次元のパラメーター、 λ 、の関数であることが分かる。

8.3.2 弱結合展開

固有値は、変数の組 λ 、式 (8.10) の関数であり、 λ が条件

$$\lambda < 1 \quad (8.14)$$

を満たすとき、エネルギーは

$$E = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \left(\frac{E_1 - E_2}{2}\right) \sqrt{1 + \lambda^2} \quad (8.15)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \left(\frac{E_1 - E_2}{2}\right) \left(1 + \frac{1}{2}(\lambda^2 + O(\lambda^4))\right) \\ &= E_1 + \left(\frac{E_1 - E_2}{4}\right)(\lambda^2 + O(\lambda^4)); +\text{符号} \\ &E_2 - \left(\frac{E_1 - E_2}{4}\right)(\lambda^2 + O(\lambda^4)); -\text{符号} \end{aligned} \quad (8.16)$$

と λ でべき展開できる。

また、固有ベクトルの成分は、

$$\begin{aligned} |u_2| &= \frac{1 \mp \sqrt{1 + \lambda^2}}{\sqrt{\lambda^2 + (1 \mp \sqrt{1 + \lambda^2})^2}} \\ &= 1 - \frac{1}{8}\lambda^2 + O(\lambda^4); +\text{符号} \\ &\quad -\frac{\lambda}{2} + O(\lambda^3); -\text{符号} \end{aligned} \quad (8.17)$$

$$\begin{aligned} |u_1| &= +\frac{\lambda}{2} + O(\lambda^3); +\text{符号} \\ &\quad 1 - \frac{\lambda^2}{8} + O(\lambda^4); -\text{符号} \end{aligned} \quad (8.18)$$

となりやはり λ でべき展開できる。このべき展開は、 H の固有ベクトルを H_0 の固有ベクトルの線形結合で表わす展開となっている。当然ながら、固有値も固有ベクトルも $\lambda \rightarrow 0$ では、 H_0 の固有値や固有ベクトルに一致する。

8.3.3 強結合展開

一方で、 λ が大きく、条件 (8.14) を満たさない時は、上のような展開はできない。この時、 H を $\frac{1}{\epsilon}$ について展開した形、

$$H = \epsilon \left[H_1 + \frac{1}{\epsilon} H_0 \right] \quad (8.19)$$

で表わし、さらに H_1 が対角行列 H_D の変換として

$$H_1 = U_0^{-1}[H_D]U_0; H_D = \text{対角形} \quad (8.20)$$

と表わされることから、計算すれば良い。ここで、

$$H_D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$U_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix}$$

である。この表示では、

$$U_0^{-1} H U_0 = \epsilon [H_D + \frac{1}{\epsilon} U_0^{-1} H_0 U_0] \quad (8.21)$$

$$U_0^{-1} H_0 U_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} E_1 + E_2 & i(E_1 - E_2) \\ -i(E_1 - E_2) & E_1 + E_2 \end{pmatrix}$$

となるので、 $\frac{1}{\epsilon}$ についての展開による計算が行なえる。

λ が大きくなる代表例は、

$$E_1 = E_2 \quad (8.22)$$

となり $\lambda = \infty$ となる場合である。この時、固有値は

$$\begin{aligned} E &= E \pm \sqrt{\epsilon^2} \\ &= \pm \epsilon \left(1 \pm \frac{E}{\epsilon} \right) \end{aligned} \quad (8.23)$$

となり、固有ベクトルの成分は

$$u_1 = \mp i u_2 \quad (8.24)$$

となる。これらは、エネルギー固有値やエネルギー固有ベクトルの厳密な解 (8.15) や (8.12) に $\lambda = \infty$ を代入して得られるが、エネルギー固有値やエネルギー固有ベクトルの冪展開による近似式 (8.17) と (8.18) に $\lambda = \infty$ を代入しても得られない。近似式が使えるのは、 λ が小さい時に限られる。

このように、行列の対角化では、たとえ非対角成分が小さくとも、対角成分 E_i と E_j が等しくなる場合は、非対角成分についての単純な展開はできない。だから、対角成分 E_i が等しくなる場合の近似法については、別扱いするのが良い。対角成分 E_i が異なる場合は、非対角成分が小さい領域では、単純な展開が可能である。

8.4 無限次元ハミルトニアンの対角化：不連続スペクトル

上の 2×2 行列の固有値や固有ベクトルを求める問題では、厳密解を求めることができた。その結果にもとずいて、パラメーター λ が小さい領域では、固有値や固有ベクトルがこのパラメータについての展開式で表されることを確かめた。固有値や固有ベクトルを、小さなパラメーターで展開する方法の利点は、固有値方程式の厳密な解がわからない場合でも適用できることである。パラメーター λ が零である場合の固有値方程式の解を使う事により、 λ が有限の値での解についての近似式を得る方法を、対角成分に縮退が無い一般の量子力学の場合で先ず考えよう。

時間に依存する波動方程式と、時間に依存しない固有値方程式

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \vec{x}) &= (H_0 + \epsilon H_1) \Psi(t, \vec{x}) \\ (H_0 + \epsilon H_1) \Psi(\vec{x}) &= E \Psi(\vec{x}) \end{aligned} \quad (8.25)$$

を考察する。

一般の量子系で、ハミルトニアンが H_0 と ϵH_1 の和

$$H = H_0 + \epsilon H_1 \quad (8.26)$$

で表され、さらに H_0 の固有値 E_i^0 と固有ベクトル u_i^0

$$H_0 |u_i^0\rangle = E_i^0 |u_i^0\rangle \quad (8.27)$$

$$\sum_i |u_i^0\rangle \langle u_i^0| = 1 \quad (8.28)$$

がすべて分かっているとする。ここで、すべてのエネルギー E_i^0 はとびとびで互いに異なり、

$$E_i^0 \neq E_j^0 \quad (8.29)$$

が満たされているとし、また ϵ は微少なパラメーターであるとする。上の二つ目の式 (8.28) は、固有ベクトルの集合が完全系をなすことを意味する。このため、任意の関数が、この関数系で展開できる。 H の固有値方程式、

$$H |u_l\rangle = E_l |u_l\rangle \quad (8.30)$$

を満たす固有値と固有ベクトルも、このパラメーター ϵ の冪で展開して、

$$|u_l\rangle = \sum_i \epsilon^i |\phi_l^{(i)}\rangle \quad (8.31)$$

$$E_l = \sum_i \epsilon^i E_l^{(i)} \quad (8.32)$$

と表す。さらに、これらの関数とエネルギーは、 ϵ の零次の未知の係数 c_i^j, a_i^j を使い

$$|\phi_l^{(i)}\rangle = \sum_j a_l^{(i,j)} |u_j^0\rangle \quad (8.33)$$

と展開する。これから、したつきの添字 l は便宜上、省いて表わす事にする。

(8.31) を、固有値方程式に代入して、

$$(H_0 + \epsilon H_1) \sum_i \epsilon^i |\phi_i\rangle = \sum_m \epsilon^m E^{(m)} \sum_i \epsilon^i |\phi_i\rangle \quad (8.34)$$

を得る。この等式で、 ϵ の各次数毎の係数の比較から、

$$\epsilon^0 : (E_0 - H_0)|\phi_0\rangle = 0 \quad (8.35)$$

$$\epsilon^1 : (E_0 - H_0)|\phi_1\rangle + E_1|\phi_0\rangle = H_1|\phi_0\rangle \quad (8.36)$$

$$\epsilon^2 : (E_0 - H_0)|\phi_2\rangle + E_1|\phi_1\rangle + E_2|\phi_0\rangle = H_1|\phi_1\rangle \quad (8.37)$$

...

が得られる。

8.5 展開の各次数の方程式

8.5.1 ϵ^0

式 (8.35) から、状態 $|\phi_0\rangle$ は、零次ハミルトニアン H_0 の固有状態の一つであることがわかる。いま、この固有状態が、

$$|\phi_0\rangle = |u_j^0\rangle \quad (8.38)$$

であるとしよう。この状態のエネルギーは

$$E_0 = E_j^0 \quad (8.39)$$

である。

8.5.2 ϵ^1 のオーダー

次に式 (8.36) に式 (8.33) と式 (8.32) を代入して、方程式は

$$\sum_j a_1^j (E_j^0 - E_j^0) |u_j^0\rangle + E_1 |u_j^0\rangle = H_1 |u_j^0\rangle \quad (8.40)$$

となる。この両辺に左から $\langle u_m^0 |$ をかけて、係数に対する連立 1 次方程式

$$\sum_j a_1^j (E_J^0 - E_j^0) \langle u_m^0 | u_j^0 \rangle + E_1 \langle u_m^0 | u_J^0 \rangle = \langle u_m^0 | H_1 | u_J^0 \rangle \quad (8.41)$$

$$\sum_j a_1^j (E_J^0 - E_j^0) \delta_{mj} + E_1 \delta_{mJ} = \langle u_m^0 | H_1 | u_J^0 \rangle \quad (8.42)$$

が得られる。次に、この式に $m = J$ を代入して 1 次のエネルギー、 E_1 、が

$$E_1 = \langle u_J^0 | H_1 | u_J^0 \rangle \quad (8.43)$$

となる。また、この式に $m \neq J$ を代入して、1 次の係数、 a_1^m 、が

$$a_1^m (E_J^0 - E_m^0) = \langle u_m^0 | H_1 | u_J^0 \rangle, m \neq J \quad (8.44)$$

$$a_1^m = -\frac{1}{E_m^0 - E_J^0} \langle u_m^0 | H_1 | u_J^0 \rangle \quad (8.45)$$

と得られる。以上の結果には $m = J$ における 1 次の係数 a_1^J は、含まれていない。つまり、まだ未定のままである。 a_1^J をきめるため、状態のノルムがどのようになるか、求めると、

$$\begin{aligned} \langle u_l | u_l \rangle &= \sum_{i,j} \epsilon^{i+j} \langle \phi_j | \phi_i \rangle \\ &= 1 + \epsilon (a_1^J + a_1^{J*}) + \epsilon^2 (a_2^J + a_2^{J*} + \sum |a_1^k|^2) + \dots \end{aligned} \quad (8.46)$$

状態のノルムが 1 になるように規格化を行なえば、

$$a_1^J + a_1^{J*} = 0 \quad (8.47)$$

$$a_2^J + a_2^{J*} + \sum |a_1^k|^2 = 0$$

となる。つまり、 a_1^J の実数部は零になる。 a_1^J の虚数部をきめる式はない、このため a_1^J の虚数部については、未定のままである。 a_1^J の虚数部をきめる一つの方法は、 H_1 が時間と共にゆっくり変化したときの波動関数の変化を時間に依存する方程式から求めることである。この方法によりきめる虚数部は、後で述べる時間に依存する摂動として議論される。

いま a_1^J を実数に選ぶと、

$$a_1^J = 0 \quad (8.48)$$

$$a_2^J = -\frac{1}{2} \sum |a_1^k|^2 \quad (8.49)$$

となる。

8.5.3 ϵ^2 のオーダー

次に式 (8.37) に式 (8.33) と式 (8.32) を代入して、係数 a_l^j とエネルギー E_1, E_2 を含む状態ベクトルとしての等式が

$$\sum_j a_2^j (E_J^0 - E_j^0) |u_j^0\rangle + E_1 \sum_j a_1^j |u_j^0\rangle + E_2 |u_J^0\rangle = H_1 \sum_j a_1^j |u_j^0\rangle \quad (8.50)$$

となる。状態ベクトルについての等式から、係数や固有値を求めるため、この両辺に左から $\langle u_m^0 |$ をかける。この結果、係数やエネルギーについての C-数の等式

$$\sum_j (a_2^j (E_J^0 - E_j^0) \langle u_m^0 | u_j^0 \rangle + E_1 a_1^j \langle u_m^0 | u_j^0 \rangle) + E_2 \delta_{Jm} = \sum_j a_1^j \langle u_m^0 | H_1 | u_j^0 \rangle \quad (8.51)$$

$$\sum_j (a_2^j (E_J^0 - E_j^0) \delta_{mj} + E_1 a_1^j \delta_{mj}) + E_2 \delta_{Jm} = \sum_j a_1^j \langle u_m^0 | H_1 | u_j^0 \rangle \quad (8.52)$$

が得られる。これより、この式に $m = J$ を代入して 2 次のエネルギーが

$$E_2 = \sum_j a_1^j \langle u_J^0 | H_1 | u_j^0 \rangle - E_1^0 a_1^J \quad (8.53)$$

となり、さらに、Eq.(8.45) を代入して、

$$E_2 = \frac{\sum_j |\langle u_J^0 | H_1 | u_j^0 \rangle|^2}{E_j^0 - E_J^0} \quad (8.54)$$

となる。

また、この式に (8.52) を代入して、2 次の係数が

$$a_2^m (E_J^0 - E_m^0) + E_1 a_1^m = \sum_j a_1^j \langle u_m^0 | H_1 | u_j^0 \rangle \quad (8.55)$$

$$a_2^m = \sum \frac{\langle u_m^0 | H_1 | u_j^0 \rangle \langle u_j^0 | H_1 | u_n^0 \rangle}{(E_n^0 - E_m^0)(E_n^0 - E_j^0)} - \frac{\langle u_m^0 | H_1 | u_n^0 \rangle \langle u_n^0 | H_1 | u_n^0 \rangle}{(E_n^0 - E_m^0)^2} + \sum_j \frac{a_1^j \langle u_m^0 | H_1 | u_j^0 \rangle}{E_j^0 - E_m^0} \quad (8.56)$$

と得られる。

以上の通り、エネルギー補正や波動関数の補正には、二つのエネルギーの差を分母に、 H_1 を状態ではさんだ行列要素を分子とする分数をすべての中間状態で和をとったものである。この形は、 2×2 行列の対角化と同じ形である。

では、分母が零になる場合は、エネルギー補正はどうなるだろうか？分母が零になる場合、二つのエネルギーが一致するので、縮退があることを意味する。この状態で、もしも分子の行列要素が有限ならば、級数は発散する。しかし、このとき分子が零になるならば、級数に発散は表れない。後で、縮退がある場合には、縮退した空間内で H_1 を対角形にするような基底をとる事で、このような発散のない摂動論が構成される事を見る。

8.6 非調和振動子

座標 x の二次式に加えて 4 次の項を持つ非調和振動子のハミルトニアンは

$$H = H_0 + H_1 \quad (8.57)$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2M} + \frac{k}{2}x^2 \quad (8.58)$$

$$H_1 = \lambda x^4 \quad (8.59)$$

で表される。4 次の非調和項のため、このハミルトニアンの固有値方程式

$$H\Psi = E\Psi \quad (8.60)$$

の厳密な解を求めることはできない。しかし、 $\lambda = 0$ の場合のすべてのエネルギー固有値や固有解は分かっているので、エネルギー固有値や固有解をパラメーター λ について展開して、

$$\Psi = \sum_n \lambda^n \psi_n \quad (8.61)$$

$$E = \sum_n \lambda^n e_n \quad (8.62)$$

の形で求めることができる。例えば、 n 番目の固有状態のエネルギーの λ の一次の補正項は、

$$\delta E_n = \lambda \sum_{n_1, n_2, n_3} \langle n|x|n_1\rangle \langle n_1|x|n_2\rangle \langle n_2|x|n_3\rangle \langle n_3|x|n\rangle \quad (8.63)$$

となる。

8.7 無限次元ハミルトニアンの対角化：連続スペクトル

H_0 の固有値が連続になる連続スペクトル領域での摂動計算は、今まで扱ってきた不連続スペクトル領域での摂動論とは異なる。次に、零次のハミルトニアンの固有エネルギーが、連続的となっている領域における、小さな摂動項による固有関数の変化を求めよう。この場合、エネルギー固有値が相互作用で変化しないとみなす事ができ、同じエネルギー E を持つ二つの固有値方程式

$$H = H_0 + \epsilon H_1 \quad (8.64)$$

$$H_0|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle \quad (8.65)$$

$$H|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle \quad (8.66)$$

を考察することになる。勿論、零次の方程式 (8.65) が解けているとする。これが、連続的な固有値からなり、完全系をなす固有解

$$\int dE |\psi_E\rangle \langle \psi_E| = 1 \quad (8.67)$$

がわかっているものとする。また、(8.66)の固有値も同じ領域をとって連続であるとする。
 H の固有値方程式を満たす固有ベクトルをパラメーター ϵ の冪で展開して、

$$|\Psi_E\rangle = \sum_i \epsilon^i |\phi_E^i\rangle \quad (8.68)$$

と表す。(8.68)を、固有値方程式に代入して、

$$(H_0 + \epsilon H_1) \sum_i \epsilon^i |\phi_E^i\rangle = E \sum_i \epsilon^i |\phi_E^i\rangle \quad (8.69)$$

を得る。この等式で、 ϵ の各次数毎の係数の比較から、

$$\epsilon^0 : (E - H_0)|\phi_E^0\rangle = 0 \quad (8.70)$$

$$\epsilon^1 : (E - H_0)|\phi_E^1\rangle = H_1|\phi_E^0\rangle \quad (8.71)$$

$$\epsilon^2 : (E - H_0)|\phi_E^2\rangle = H_1|\phi_E^1\rangle \quad (8.72)$$

...

が得られる。ここで、 H_0 の固有状態で未知関数 $|\phi_E^1\rangle$ や右辺を展開して、

$$|\phi_E^1\rangle = \int d\lambda a(\lambda)^{(1)} |\psi_\lambda\rangle \quad (8.73)$$

$$H_1|\phi_E^0\rangle = \int d\lambda |\psi_\lambda\rangle \langle \psi_\lambda | H_1 | \phi_E^0 \rangle \quad (8.74)$$

と表す。未定係数 $a(\lambda)^{(1)}$ は、方程式

$$(E - H_0)|\phi_E^1\rangle = \int d\lambda a(\lambda)^{(1)} (E - \lambda) |\psi_\lambda\rangle \quad (8.75)$$

に式(8.73)と式(8.74)を代入して

$$\int d\lambda a(\lambda)^{(1)} (E - \lambda) |\psi_\lambda\rangle = \int d\lambda |\psi_\lambda\rangle \langle \psi_\lambda | H_1 | \phi_E^0 \rangle \quad (8.76)$$

が得られ、さらに両辺の $|\psi_\lambda\rangle$ の係数を比較して、

$$a(\lambda)^{(1)} = \frac{\langle \psi_\lambda | H_1 | \phi_E^0 \rangle}{E - \lambda} \quad (8.77)$$

と決まる。よって、これをもとの式に代入して関数が

$$|\phi_E^1\rangle = \int d\lambda |\psi_\lambda\rangle \frac{1}{E - \lambda} \langle \psi_\lambda | H_1 | \phi_E^0 \rangle \quad (8.78)$$

となる。この解は、次に説明されるグリーン関数 G 、

$$G = \int d\lambda |\psi_\lambda\rangle \frac{1}{E - \lambda} \langle \psi_\lambda | \quad (8.79)$$

を使い、

$$\epsilon^0 : (E - H_0)|\phi_E^0\rangle = 0 \quad (8.80)$$

$$\epsilon^1 : |\phi_E^1\rangle = GH_1|\phi_E^0\rangle \quad (8.81)$$

$$\epsilon^2 : |\phi_E^2\rangle = GH_1|\phi_E^1\rangle = (GH_1)^2|\phi_E^0\rangle \quad (8.82)$$

...

と表せる。その結果、 H の固有関数が

$$|\Psi_E\rangle = \sum_i \epsilon^i (GH_1)^i |\phi_E^0\rangle \quad (8.83)$$

と表せる。だから、グリーン関数を使う無限級数で固有解があらわされる。

8.7.1 グリーン関数

さて、グリーン関数 G に演算子 $E - H_0$ をかけると、

$$(E - H_0)G = \int d\lambda |\psi_\lambda\rangle \langle \psi_\lambda| = 1 \quad (8.84)$$

となる。つまり、 G は微分作用素 $(E - H_0)$ の逆演算子であり、

$$G = (E - H_0)^{-1} \quad (8.85)$$

と書ける。グリーン関数 G の具体的な計算や、上の結果の応用は後で述べる散乱問題でなされる。

座標表示で、グリーン関数は、

$$\langle \mathbf{x} | G | \mathbf{y} \rangle = \int d\lambda \langle \mathbf{x} | \psi_\lambda \rangle \frac{1}{E - \lambda} \langle \psi_\lambda | \mathbf{y} \rangle \quad (8.86)$$

と、固有関数の座標表示、 $\langle \mathbf{x} | \psi_\lambda \rangle$ で表わされる。状態 $|f\rangle$ の座標表示、

$$f(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | f \rangle \quad (8.87)$$

で、グリーン関数の演算を計算すると、

$$(Gf)(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | G | f \rangle \quad (8.88)$$

$$= \langle \mathbf{x} | G | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | f \rangle$$

$$= \int d\mathbf{y} G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) f(\mathbf{y}) \quad (8.89)$$

とグリーン関数は、積分演算子である。 $E - H_0$ が微分演算子であったので、その逆は積分演算子になる。

例 自由粒子のグリーン関数

H_0 として、自由粒子のハミルトニアン

$$H_0 = \frac{(-i\hbar)^2}{2m} \nabla^2 \quad (8.90)$$

を考えると、グリーン関数は、

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\mathbf{y}} \frac{1}{E - \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}} \quad (8.91)$$

となる。このグリーン関数に演算子 $E - H_0$ をかけると、

$$\begin{aligned} (E - H_0)G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\mathbf{y}} \left(E - \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}\right) \frac{1}{E - \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}} \\ &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\mathbf{y}} \\ &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \end{aligned} \quad (8.92)$$

となり、実際これがグリーン関数である事が分かる。

ところで、式 (8.91) の被積分関数は、 $k = \pm\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ で分母が零になり、このままでは積分は発散してしまう。分母が零になる積分領域で、分母に小さな虚数部分 $i\epsilon$ を加えると、分母が零になる極は、複素平面で実軸上からずれるため、積分は収束する。ただし、加える小さな虚数部分 $i\epsilon$ の符号によって、得られる関数は異なる。この問題は、後の章で扱う散乱問題で、重要になる。

8.8 縮退のある場合の摂動論

上の摂動計算では、エネルギー分母 $E_i^0 - E_j^0$ が零ではないと仮定した。上の式のまま、エネルギー分母 $E_i^0 - E_j^0$ を零にさせると、 $\langle i|H_1|j\rangle$ が零でないならば、エネルギーや波動関数に、 $\frac{1}{0}$ の発散が生じてしまう。このような縮退がある場合でも、波動関数や、エネルギーが発散しない物理的な解があるはずであるが、これを求めるには、少し工夫が必要である。

発散の問題を引き起こすのは、エネルギーが等しい状態、つまり縮退した状態からの補正項である。一方、エネルギー的に縮退した状態の空間で各状態を線形結合した状態も、同じように零次のエネルギー固有状態である。だから、新たな状態 \tilde{i}, \tilde{j} では、 $\langle \tilde{i}|H_1|\tilde{j}\rangle$ が $\tilde{i} \neq \tilde{j}$ でいつも零となる都合の良い状態にしてしまえば、発散のない摂動計算を遂行できる。このため、縮退した空間内ではじめに相互作用を含むハミルトニアンを対角形にする。

二つの状態、 $|1\rangle, |2\rangle$ が縮退してエネルギー E^0 を持つとする。この空間内で、相互作用ハミルトニアン H_1 は行列要素

$$\langle i|H_1|j\rangle, i, j = 1, 2 \quad (8.93)$$

で記述される。相互作用ハミルトニアン H_1 はエルミートなので、

$$\langle 2|H_1|1\rangle = \langle 1|H_1|2\rangle^* \quad (8.94)$$

を満たす。いま

$$\langle 1|H_1|2\rangle = \lambda = |\lambda|e^{i\alpha} \quad (8.95)$$

$$\langle 2|H_1|1\rangle = \lambda^* = |\lambda|e^{-i\alpha} \quad (8.96)$$

とおく。

この空間内での全ハミルトニアン

$$H = \begin{pmatrix} E^0 & |\lambda|e^{i\alpha} \\ |\lambda|e^{-i\alpha} & E^0 \end{pmatrix}$$

の一つの固有値と固有状態は

$$H\mathbf{u}_+ = E_+\mathbf{u}_+, E_+ = (E^0 + |\lambda|) \quad (8.97)$$

$$\mathbf{u}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix}$$

であり、もう一つの固有値と固有状態は

$$H\mathbf{u}_- = E_-\mathbf{u}_-, E_- = (E^0 - |\lambda|) \quad (8.98)$$

$$\mathbf{u}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\alpha} \end{pmatrix}$$

である。固有値は、相互作用が弱くなる極限

$$\lambda \rightarrow 0 \quad (8.99)$$

で、 H_0 の固有値になるにもかかわらず、固有状態は

$$\mathbf{u}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\neq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix}$$

$$u_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\neq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\alpha} \end{pmatrix}$$

になることに注意が必要である。

より多くの状態が縮退している場合は、縮退した状態空間での全ハミルトニアンを対角形にする。この結果、縮退がなくなる場合と、まだ縮退が残る場合がある。前者では、縮退がないとして、近似を行なう。後者では、縮退があっても、これらの状態間には相互作用がないので、摂動計算に支障はない。

8.9 一様電場中の束縛状態

水素原子等の束縛状態に z 軸方向に一様な電場がかかった時、波動関数やエネルギーはどのように変化するだろうか？一様な電場は一定の力 F を与えるので、ハミルトニアンには

$$H = H_0 + H_1 \quad (8.100)$$

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + U(r) \quad (8.101)$$

$$H_1 = Fz, F = eE_{\text{電}} \quad (8.102)$$

と、 z に比例する項 H_1 が加わる。 H_1 を摂動項として、固有状態の波動関数やエネルギーを求める。

8.9.1 空間反転対称性：縮退なし

空間反転 P に対して、 H_0 は不変であるが H_1 は符号を変える。

$$PH_0P^{-1} = H_0 \quad (8.103)$$

$$PH_1P^{-1} = -H_1 \quad (8.104)$$

このため、 H_0 の固有状態は、空間反転の固有状態であり、

$$P|\psi_i\rangle = \eta_i|\psi_i\rangle, \quad (8.105)$$

空間反転が

$$P^2 = 1 \quad (8.106)$$

を満たすことより、状態に固有な η は

$$\eta^2 = 1, \eta = \pm 1 \quad (8.107)$$

をとる。行列要素、

$$\begin{aligned} \langle i|H_1|j\rangle \\ = \langle i|P^{-1}PH_1P^{-1}P|j\rangle = -\eta_i\eta_j\langle i|H_1|j\rangle \end{aligned} \quad (8.108)$$

となるので、まとめて

$$(1 + \eta_i\eta_j)\langle i|H_1|j\rangle = 0 \quad (8.109)$$

が得られる。このため、状態 i と状態 j のパリティが等しいとき、

$$\begin{aligned} \eta_i\eta_j &= 1 \\ \langle i|H_1|j\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (8.110)$$

行列要素は零になり、状態 i と状態 j のパリティが異なるとき、

$$\begin{aligned} \eta_i\eta_j &= -1 \\ \langle i|H_1|j\rangle &\neq 0 \end{aligned} \quad (8.111)$$

行列要素は零ではない。

8.9.2 摂動エネルギー

z 軸方向の一定の力のために、水素原子のエネルギー準位は

$$\Delta E = F\langle u_j^0|z|u_j^0\rangle + F^2\frac{\sum_j |\langle u_j^0|z|u_j^0\rangle|^2}{E_j^0 - E_j^0} + \dots \quad (8.112)$$

だけずれる。

一次の摂動エネルギー

ところで、上の行列要素の関係式 (8.111), (8.112) より上の式の右辺第 1 項は、零になる。このため、エネルギーで電場 $E_{\text{電}}$ に比例する項は零になり、エネルギーの補正は電場の二次式から始る。

また、全エネルギーを電場で微分した原点における微係数 (電気 2 重極モーメント) は、

$$\frac{\partial}{\partial E_{\text{電}}}\Delta E|_{E_{\text{電}}=0} = 0 \quad (8.113)$$

と零になる。この電気 2 重極モーメントは、後の節で扱う縮退があるときは、異なる結果を導くことになる。

二次の摂動エネルギー

$$\Delta E = F^2\frac{\sum_j |\langle u_j^0|z|u_j^0\rangle|^2}{E_j^0 - E_j^0} \quad (8.114)$$

8.9.3 水素原子：縮退あり

異なるパリティを持つ状態が同じエネルギーを持って縮退した場合、前節とは異なり力（電場）に比例するエネルギーが生ずるので、注意が必要である。水素原子が特異な縮退を持つことを、前の章でみた。この縮退は、主量子数 n が等しくて、角運動量が異なりパリティが異なる状態の間に存在する。そのため、一様な電場が加わった系で、縮退の効果が重要になる。

基底状態は、 $n = 1$ で縮退がない。第一励起状態は $n = 2$ であり、 $l = 0$ の 1 状態と $l = 1, m = 1, 0, -1$ の 3 状態で、4 つの状態が同じエネルギーをもつ 4 重縮退がある。 z 軸方向の電場により影響を受けるのは、2 状態

$$|n = 2, l = 0, m = 0\rangle, |n = 2, l = 1, m = 0\rangle \quad (8.115)$$

である。いま、行列要素を

$$\delta = \langle n = 2, l = 0, m = 0 | H_1 | n = 2, l = 1, m = 0 \rangle \quad (8.116)$$

$$= |\delta| e^{i\beta} \quad (8.117)$$

とにおいて、この空間内での（有効）ハミルトニアンは

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \delta \\ \delta^* & 0 \end{pmatrix}$$

となる。これの一つの固有値と固有状態は

$$H \mathbf{u}_+ = E_+ \mathbf{u}_+, E_+ = +|\delta| \quad (8.118)$$

$$\mathbf{u}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\beta} \end{pmatrix}$$

であり、もう一つの固有値と固有状態は

$$H \mathbf{u}_- = E_- \mathbf{u}_-, E_- = -|\delta| \quad (8.119)$$

$$\mathbf{u}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\beta} \end{pmatrix}$$

である。ここで、波動関数を使い行列要素を具体的に計算すると、

$$\begin{aligned} \delta &= \int d\mathbf{r} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0\sqrt{3}} e^{\frac{-r}{2a_0}} \cos\theta \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{\frac{-r}{2a_0}} \frac{1}{4\pi} F r \cos\theta \\ &= 3a_0 F \end{aligned} \quad (8.120)$$

となる。

8.10 時間に依存する摂動論

摂動項が、時間に依存して変化する場合には、時間依存のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = (H_0 + \epsilon H_1(t)) |\Psi(t)\rangle \quad (8.121)$$

を近似的に解く。シュレーディンガー方程式で、波動関数を小さなパラメーター ϵ で展開して

$$|\Psi(t)\rangle = \sum \epsilon^p |\psi^{(p)}(t)\rangle \quad (8.122)$$

と表わし、さらに各項を H_0 の固有状態で

$$|\psi^{(p)}(t)\rangle = \sum_l a_l(t)^{(p)} |\psi_l\rangle \quad (8.123)$$

と展開しておく。係数 $a_l(t)^{(p)}$ は、時間 t に依存することに注意しよう。

また上の展開式で、 p についての和を先に行ない

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_l A_l(t) |\psi_l\rangle \quad (8.124)$$

$$A_l(t) = \sum_p \epsilon^p a_l(t)^{(p)}$$

とも表わせる。これをシュレーディンガー方程式の左辺

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle \quad (8.125)$$

$$= \sum_l i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_l(t) |\psi_l\rangle \quad (8.126)$$

と右辺

$$(H_0 + \epsilon H_1(t)) |\Psi(t)\rangle \quad (8.127)$$

$$= \sum_l A_l(t) (H_0 + \epsilon H_1) |\psi_l\rangle$$

$$= \sum_l A_l(t) (E_l^0 + \epsilon H_1) |\psi_l\rangle$$

$$(8.128)$$

に代入して、両辺に左から $\langle \psi_l |$ をかけて、係数 $A_l(t)$ についての方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_l(t) = (E_l^0 + \epsilon \sum_m \langle \psi_l | H_1 | \psi_m \rangle) A_m(t) \quad (8.129)$$

を得る。

次に、時間依存性に着目する。零次のエネルギー E_l^0 で決まる指数関数を取り出して変換した係数 $\tilde{A}_l(t)$ を

$$A_l(t) = e^{\frac{E_l^0 t}{i\hbar}} \tilde{A}_l(t) \quad (8.130)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_l(t) = e^{\frac{E_l^0 t}{i\hbar}} (E_l^0 \tilde{A}_l(t) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{A}_l(t)) \quad (8.131)$$

と定義すると、係数は方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{A}_l(t) = \epsilon \sum_m \langle \psi_l(t) | H_1 | \psi_m(t) \rangle \tilde{A}_m(t) \quad (8.132)$$

に従う。これに、係数の展開式

$$\tilde{A}_l(t) = \sum_p \epsilon^p \tilde{a}_l^{(p)}(t) \quad (8.133)$$

を代入して、方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_p \epsilon^p \tilde{a}_l^{(p)}(t) \right) = \epsilon \sum_m \langle \psi_l(t) | H_1 | \psi_m(t) \rangle \left(\sum_p \epsilon^p \tilde{a}_l^{(p)}(t) \right) \quad (8.134)$$

が得られる。さらに、この方程式の ϵ の各幕の項から、方この空間内での全ハミルトニアン

$$H = \begin{pmatrix} E^0 & |\lambda| e^{\alpha} \\ |\lambda| e^{-i\alpha} & E^0 \end{pmatrix}$$

の一つの固有値と固有状態は 程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{a}_l^{(0)}(t) = 0 \quad (8.135)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{a}_l^{(1)}(t) = \langle \psi_l(t) | H_1 | \psi_m(t) \rangle \tilde{a}_m^{(0)}(t)$$

...

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{a}_l^{(i+1)}(t) = \langle \psi_l(t) | H_1 | \psi_m(t) \rangle \tilde{a}_m^{(i)}(t)$$

が得られる。ここで、便宜上

$$\tilde{V}_{lm}(t) = \langle \psi_l(t) | H_1 | \psi_m(t) \rangle \quad (8.136)$$

と表記することにする。上の漸化式を積分して

$$\tilde{a}_l^{(0)}(t) = \text{定数} \quad (8.137)$$

$$\tilde{a}_l^{(i+1)}(t) = \int_{t_0}^t \frac{dt'}{i\hbar} \tilde{V}_{lm}(t') \tilde{a}_m^{(i)}(t) \quad (8.138)$$

が得られる。この関係式を繰り返し代入して、 $\tilde{a}_l^{(i+1)}(t)$ を $\tilde{a}_l^{(0)}(t)$ で表わす公式は

$$\tilde{a}_l^{(i+1)}(t) = \int_{t_0}^t \frac{dt'}{i\hbar} \int_{t_0}^{t'} \frac{dt''}{i\hbar} \cdots \int_{t_0}^{t^{i-1}} \frac{dt^i}{i\hbar} \tilde{V}_{lm_1}(t') \tilde{V}_{m_1 m_2}(t'') \cdots \tilde{V}_{m_2 m_i}(t^i) \tilde{a}_{m_i}^{(0)}(0)$$

となる。また、この結果を展開式 (8.133) に代入して、

$$\begin{aligned} \tilde{A}_l(t) &= U(t, t_0) \tilde{a}_{m_i}^{(0)}(0) \\ U(t, t_0) &= [1 + \int_{t_0}^t \frac{dt'}{i\hbar} \epsilon \tilde{V}_{lm}(t') + \int_{t_0}^t \frac{dt'}{i\hbar} \int_{t_0}^{t'} \frac{dt''}{i\hbar} (\epsilon)^2 \tilde{V}_{lm_1}(t') \tilde{V}_{m_1 m_2}(t'') + \cdots] \end{aligned}$$

となる。この右辺の展開式は、 T 積の指数関数

$$U(t, t_0) = T \exp \int_{t_0}^t \frac{dt'}{i\hbar} \epsilon V(t') \quad (8.139)$$

と書き表すことが多い。 $U(t, t_0)$ は

$$\begin{aligned} U(t_0, t_0) &= 1 \\ U(t, t_1) U(t_1, t_2) &= U(t, t_2) \end{aligned} \quad (8.140)$$

を満たしている。

T 積

時間に依存する演算子 $A(t)$ と $B(t')$ の T 積は、

$$\begin{aligned} T(A(t)B(t')) &= A(t)B(t'); t \geq t' \\ &= B(t')A(t); t' \geq t \end{aligned} \quad (8.141)$$

と定義される。 T 積を使うと、上の積分は上限をそろえた表示

$$\begin{aligned} &\int_{t_0}^t \frac{dt'}{i\hbar} \int_{t_0}^{t'} \frac{dt''}{i\hbar} \cdots \int_{t_0}^{t^{i-1}} \frac{dt^i}{i\hbar} \tilde{V}_{lm_1}(t') \tilde{V}_{m_1 m_2}(t'') \cdots \tilde{V}_{m_2 m_i}(t^i) \\ &= \frac{1}{i!} \int_{t_0}^t \frac{dt'}{i\hbar} \int_{t_0}^t \frac{dt''}{i\hbar} \cdots \int_{t_0}^t \frac{dt^i}{i\hbar} T[\tilde{V}_{lm_1}(t') \tilde{V}_{m_1 m_2}(t'') \cdots \tilde{V}_{m_2 m_i}(t^i)] \end{aligned} \quad (8.142)$$

で表わせる。

時間間隔が無限大である場合の $U(+\infty, -\infty)$ は、

$$U(+\infty, -\infty) = T \exp \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt'}{i\hbar} \epsilon V(t') \quad (8.143)$$

であり、散乱で重要である。

8.10.1 周期的変化

相互作用項が、時間について

$$V(t) = Ve^{i(\omega-i\epsilon)t} + V^*e^{-i(\omega+i\epsilon)t} \quad (8.144)$$

と周期的に変化し、同時に漸近的に

$$V(t) \rightarrow 0, t \rightarrow -\infty \quad (8.145)$$

と零になる場合は、行列要素は

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{lk}(t) &= e^{\frac{E_k-E_l}{i\hbar}t} \int d\mathbf{x} \varphi_l^{(0)*}(\mathbf{x})(Ve^{i\omega t} + V^*e^{-i\omega t})\varphi_k^{(0)}(\mathbf{x}) \\ &= e^{\frac{E_k-E_l-\hbar\omega}{i\hbar}t} V_{l,k_0} + e^{\frac{E_k-E_l+\hbar\omega}{i\hbar}t} V_{l,k_0}^* \end{aligned} \quad (8.146)$$

$$V_{l,k_0} = \int d\mathbf{x} \varphi_l^{(0)*}(\mathbf{x})V\varphi_k^{(0)}(\mathbf{x}) \quad (8.147)$$

$$V_{l,k_0}^* = \int d\mathbf{x} \varphi_l^{(0)*}(\mathbf{x})V^*\varphi_k^{(0)}(\mathbf{x}) \quad (8.148)$$

となる。ここで、最低次の項として

$$\tilde{a}_k^{(0)}(t') = \delta_{k,k_0} \quad (8.149)$$

である場合、時刻 t での係数は

$$\begin{aligned} \tilde{a}_l^{(1)}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \tilde{V}_{lk}(t') \tilde{a}_k^{(0)}(t') \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \tilde{V}_{lk}(t') \delta_{k,k_0} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [e^{\frac{E_{k_0}-E_l-\hbar\omega}{i\hbar}t'} V_{l,k_0} + e^{\frac{E_{k_0}-E_l+\hbar\omega}{i\hbar}t'} V_{l,k_0}^*] \\ &= \frac{1}{E_{k_0} - E_l - \hbar\omega} e^{\frac{E_{k_0}-E_l-\hbar\omega}{\hbar}t} V_{l,k_0} + \frac{1}{E_{k_0} - E_l + \hbar\omega} e^{\frac{E_{k_0}-E_l+\hbar\omega}{\hbar}t} V_{l,k_0}^* \end{aligned} \quad (8.150)$$

となる。

ここで、大きな値 T における係数は、

$$\begin{aligned} \tilde{a}_l^{(1)}(T) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^T dt' \tilde{V}_{lk}(t') \tilde{a}_k^{(0)}(t') \\ &= \frac{1}{E_{k_0} - E_l - \hbar\omega} e^{\frac{E_{k_0}-E_l-\hbar\omega}{\hbar}T} V_{l,k_0} + \frac{1}{E_{k_0} - E_l + \hbar\omega} e^{\frac{E_{k_0}-E_l+\hbar\omega}{\hbar}T} V_{l,k_0}^* \end{aligned} \quad (8.151)$$

となり、さらに $T \rightarrow \infty$ では、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{\frac{E_{k_0}-E_l-\hbar\omega}{i\hbar}t'} = 2\pi\hbar\delta(E_{k_0} - E_l - \hbar\omega) \quad (8.152)$$

である。よって、無限時間経過した後では、係数は

$$\tilde{a}_l^{(1)}(\infty) = -i[2\pi\delta(E_{k_0} - E_l - \hbar\omega)V_{l,k_0} + 2\pi\delta(E_{k_0} - E_l + \hbar\omega)V_{*l,k_0}]$$

となる。デルタ関数は状態 l のエネルギーと状態 k_0 のエネルギーと振動数のエネルギー $\hbar\omega$ の和や差 $k_0 \pm \hbar\omega$ が等しい事を示すエネルギー保存を表わしている。前者は、状態 k_0 が振動数 ω の波を吸収して状態 l に遷移する事象に対応し、後者は状態 k_0 が振動数 ω の波を放出して状態 l に遷移する事象に対応し、デルタ関数にかかる係数 V_{l,k_0} と V_{*l,k_0} が遷移振幅である。

8.10.2 ゆっくりした変化（断熱変化）

ハミルトニアンが時間的にゆっくり変動するパラメーター $a(t)$ を含むとき、 $\frac{\dot{a}(t)}{a(t)}$ は小さな値である。この物理系でエネルギーは、小さな時間間隔では保存するが、大きな時間間隔では保存していない。だから、図のような長い時間スケールでは、保存系の性質と時間に依存

する摂動論の性質が絡み合った現象が生ずる。このような2重性をもつ物理系は、摂動論の方法で調べることができる。ハミルトニアンが $H(a(t))$ と書かれるとき、時間に依存するシュレーディンガー方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H(a(t))\psi(t) \quad (8.153)$$

である。ここで、 $a(t)$ がほぼ時間によらず定数であるので、各時刻における固有値方程式

$$H(a(t))u_n(\vec{x}, a(t)) = E_n(a(t))u_n(\vec{x}, a(t)) \quad (8.154)$$

を満たす固有状態 $u_n(\vec{x}, a(t))$ がある。この固有状態を使い、任意な時刻における波動関数を

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) u_n(\vec{x}, a(t)) e^{\int_{t_0}^t dt' \frac{E_n(a(t'))}{i\hbar}} \quad (8.155)$$

と展開する。波動関数の時間微分は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) &= \sum_n (\dot{c}_n(t) u_n(\vec{x}, a(t)) + c_n(t) \frac{E_n(a(t))}{i\hbar} u_n(\vec{x}, a(t))) e^{\int_{t_0}^t dt' \frac{E_n(a(t'))}{i\hbar}} \\ &+ \sum_n c_n(t) (\dot{a}(t) \frac{\partial}{\partial a} u_n(\vec{x}, a(t)) + \int_{t_0}^t dt' \dot{a}(t') \frac{\partial}{\partial a(t')} \frac{E_n(a(t'))}{i\hbar} u_n(\vec{x}, a(t))) e^{\int_{t_0}^t dt' \frac{E_n(a(t'))}{i\hbar}} \end{aligned} \quad (8.156)$$

となるので、シュレーディンガー方程式 (8.153) は

$$\begin{aligned} &\sum_n (i\hbar \dot{c}_n(t) u_n(\vec{x}, a(t)) + c_n(t) E_n(a(t)) u_n(\vec{x}, a(t))) e^{\int_{t_0}^t dt' \frac{E_n(a(t'))}{i\hbar}} \\ &+ \sum_n c_n(t) (i\hbar \dot{a}(t) \frac{\partial}{\partial a} u_n(\vec{x}, a(t)) + \int_{t_0}^t dt' \dot{a}(t') \frac{\partial}{\partial a(t')} E_n(a(t')) u_n(\vec{x}, a(t))) e^{\int_{t_0}^t dt' \frac{E_n(a(t'))}{i\hbar}} \\ &= \sum_m c_m(t) E_m u_m(\vec{x}, a(t)) e^{\int_{t_0}^t dt' \frac{E_m(a(t'))}{i\hbar}} \end{aligned} \quad (8.157)$$

となる。

次に、両辺に $u_p^*(\vec{x}, a(t))$ をかけて \vec{x} 積分を行い、係数 $a_p(t)$ についての方程式

$$\begin{aligned} &\sum_n (i\hbar \dot{c}_n(t) + c_n(t) E_n(a(t))) \delta_{np} e^{\int_{t_0}^t dt' \frac{E_n(a(t'))}{i\hbar}} \\ &+ \sum_n c_n(t) (i\hbar \dot{a}(t) \langle u_p | \frac{\partial}{\partial a} u_n(\vec{x}, a(t)) \rangle + \int_{t_0}^t dt' \dot{a}(t') \frac{\partial}{\partial a(t')} E_n(a(t')) \delta_{np} e^{\int_{t_0}^t dt' \frac{E_n(a(t'))}{i\hbar}} \\ &= \sum_m E_m c_m \delta_{mp} e^{\int_{t_0}^t dt' \frac{E_m(a(t'))}{i\hbar}} \end{aligned} \quad (8.158)$$

が得られる。ここで、固有関数 $u_n(\vec{x}, a(t))$ が規格直交系であることを使った。さらに、クロネッカーデルタを使って項の和を書き換えると、方程式は

$$\begin{aligned} &(i\hbar \dot{c}_p(t) + c_p(t) E_p(a(t))) + \sum_n c_n(t) (i\hbar \dot{a}(t) \langle u_p | \frac{\partial}{\partial a} u_n(\vec{x}, a(t)) \rangle e^{\int_{t_0}^t dt' \frac{E_n(a(t')) - E_p(a(t'))}{i\hbar}} \\ &+ c_p(t) \int_{t_0}^t dt' \dot{a}(t') \frac{\partial}{\partial a(t')} E_p(a(t')) = E_p c_p(a(t)) \end{aligned} \quad (8.159)$$

となり、左辺第2項と右辺がうち消して、最後に

$$\begin{aligned} &i\hbar \dot{c}_p(t) + \sum_n c_n(t) (i\hbar \dot{a}(t) \langle u_p | \frac{\partial}{\partial a} u_n(\vec{x}, a(t)) \rangle e^{\int_{t_0}^t dt' \frac{E_n(a(t')) - E_p(a(t'))}{i\hbar}} \\ &+ c_p(a(t)) \int_{t_0}^t dt' \dot{a}(t') \frac{\partial}{\partial a(t')} E_p(a(t')) = 0 \end{aligned} \quad (8.160)$$

となる。

$\dot{a}(t)$ が小さいことを使い、先ず $\dot{a}(t)$ の零次の近似で解を求める。方程式は、

$$i\hbar\dot{c}_p(t) = 0 \quad (8.161)$$

であり、解は、

$$c_p(t) = c_p(0) \quad (8.162)$$

である。

次に、 $\dot{a}(t)$ の 1 次のオーダーで解を求める。

このために、固有値方程式 (8.154) が与える関係式を導いておく。固有値方程式 (8.154) の両辺を $a(t)$ で微分して、

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial a}H(a(t))\right)u_n(\vec{x}, a(t)) + H(a(t))\left(\frac{\partial}{\partial a}\right)u_n(\vec{x}, a(t)) \\ &= \frac{\partial}{\partial a}u_n(\vec{x}, a(t))E_n(a(t)) + \left(\frac{\partial}{\partial a}E_n(a(t))\right)u_n(\vec{x}, a(t)) \end{aligned} \quad (8.163)$$

となる。この両辺に $u_p^*(\vec{x})$ をかけて \vec{x} 積分を行い、関係式

$$\begin{aligned} & \langle u_p | \left(\frac{\partial}{\partial a}H(a(t))\right) | u_n \rangle + E_p \langle u_p | \left(\frac{\partial}{\partial a}\right) | u_n \rangle \\ &= \langle u_p | \frac{\partial}{\partial a} | u_n \rangle E_n(a(t)) + \left(\frac{\partial}{\partial a}E_n(a(t))\right)\delta_{np} \end{aligned} \quad (8.164)$$

が得られる。よって、

$$\begin{aligned} \langle u_p | \frac{\partial}{\partial a}H | u_p \rangle &= \frac{\partial}{\partial a}E_p; p = n \\ \langle u_p | \frac{\partial}{\partial a}H | u_n \rangle &= (E_n - E_p)\langle u_p | \frac{\partial}{\partial a} | u_n \rangle; p \neq n \end{aligned} \quad (8.165)$$

が得られる。また、 $u_n(\vec{x}, a(t))$ の規格化条件

$$\langle u_p | u_n \rangle = \delta_{np} \quad (8.166)$$

の両辺を $a(t)$ で微分して

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial a}u_p | u_n \right\rangle + \langle u_p | \frac{\partial}{\partial a}u_n \rangle = 0 \quad (8.167)$$

となり、 $p = n$ では、

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial a}u_p | u_p \right\rangle + \langle u_p | \frac{\partial}{\partial a}u_p \rangle = \text{Re}\left(\left\langle \frac{\partial}{\partial a}u_p | u_p \right\rangle\right) = 0 \quad (8.168)$$

である。よって $\langle \frac{\partial}{\partial a} u_p | u_p \rangle$ は、純虚数であり、

$$\langle \frac{\partial}{\partial a} u_p | u_p \rangle = i\delta \quad (8.169)$$

とおく。位相 δ は、状態ベクトルの transport を表わす。

式 (8.160)、(8.164)、と (8.169) から、係数が初期条件

$$c_{n_0}(0) = 1 \quad (8.170)$$

$$c_n(0) = 0; n \neq n_0$$

を満たす時、微分方程式は

$$\dot{c}_{n_0} + i\dot{a}(t)\delta c_{n_0} = 0 \quad (8.171)$$

$$\dot{c}_p + c_{n_0} \frac{\dot{a}}{E_{n_0} - E_p} \langle u_p | \frac{\partial}{\partial a} H | u_{n_0} \rangle e^{\int_{t_0}^t dt' \frac{E_{n_0}(a(t')) - E_p(a(t'))}{i\hbar}} = 0$$

となる。さらに時間で積分して、係数が

$$c_{n_0}(t) = e^{-i \int_{t_0}^t dt' \dot{a}(t') \delta(t')} \quad (8.172)$$

$$c_p = -c_{n_0} \int_{t_0}^t dt' \frac{\dot{a}(t')}{E_{n_0} - E_p} \langle u_p | \frac{\partial}{\partial a} H | u_{n_0} \rangle e^{\int_{t_0}^{t'} dt'' \frac{E_{n_0}(a(t'')) - E_p(a(t''))}{i\hbar}}$$

となる。 $c_{n_0}(t)$ は、時刻の変化とともに位相だけが変化して、大きさは一定に保たれる。この位相は、ベリー位相と呼ばれることもある。

8.10.3 短時間近似

短時間の間にハミルトニアンが有限量変化する時、状態ベクトルの変化を調べよう。時刻が $0 < t < t_s$ の間に時間的に変動するパラメーター $a(t)$ の関数としてハミルトニアンが $H(a(t))$ と書かれ、 $a(t)$ が $a(0)$ から $a(t_s)$ へと、有限変化するとする。このとき、状態ベクトルの変化は、時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H(a(t)) \psi(t) \quad (8.173)$$

から求められる。この両辺を時間で積分して

$$i\hbar \psi(t) |_{t_0}^t = \int_{t_0}^t dt' H(a(t')) \psi(t') \quad (8.174)$$

となり、さらに右辺に平均値の定理を適用すると、 $0 < \bar{t} < t_s$ にある一つの \bar{t} で

$$i\hbar (\psi(t_s) - \psi(0)) | = t_s (H(a(\bar{t})) \psi(\bar{t})) \quad (8.175)$$

となる。間隔 t_s が十分短いとき、右辺は t_s に比例するので、

$$i\hbar(\psi(t_s) - \psi(0)) = 0 \quad (8.176)$$

となり、波動関数は

$$\psi(t) = \psi(0) \quad (8.177)$$

と変化しないことが分かる。つまりハミルトニアンが急激に変化したとき、時間についての一階微分方程式に従う、波動関数は変化しない。

8.11 遷移確率

ある時刻 $t = 0$ に H_0 の固有状態 $l = l_0$ にあった状態が、相互作用 $V(t)$ の影響で、他の時刻 $t = T$ に別の l の状態に遷移することがある。これが起きる確率を遷移確率とよぶ。遷移確率の計算を次に行なう。波動関数の展開式 (8.125) から、ある時刻 t に状態 l にいる確率は、係数の絶対値の二乗

$$|a_l(t)|^2 \quad (8.178)$$

で与えられる。

まず一次の摂動で、遷移確率を求めよう。周期ポテンシャル中における展開式から時刻 t での係数は

$$\begin{aligned} \tilde{a}_l^{(1)}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \tilde{V}_{lk}(t') \tilde{a}_k^{(0)}(t') \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \tilde{V}_{lk}(t') \delta_{k,k_0} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' [e^{\frac{E_{k_0} - E_l - \hbar\omega}{i\hbar} t'} V_{l,k_0} + e^{\frac{E_{k_0} - E_l + \hbar\omega}{i\hbar} t'} V_{l,k_0}^*] \\ &= \frac{1}{E_{k_0} - E_l - \hbar\omega} (e^{\frac{E_{k_0} - E_l - \hbar\omega}{\hbar} t} - 1) V_{l,k_0} + \frac{1}{E_{k_0} - E_l + \hbar\omega} (e^{\frac{E_{k_0} - E_l + \hbar\omega}{\hbar} t} - 1) V_{l,k_0}^* \end{aligned} \quad (8.179)$$

となる。エネルギーが保存して、 $E_{k_0} - E_l \pm \hbar\omega = 0$ ならば、積分は t に比例することが分かる。この条件を満たす時の積分の振る舞いを調べる為、関数

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\sin ax}{x} \quad (8.180)$$

の性質を明らかにする。まず、関数は $x \neq 0$ では、急激に振動する関数であり、一方で $x \rightarrow 0$ では

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin ax}{x} \quad (8.181)$$

$$= \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{ax}{x} = \lim_{a \rightarrow \infty} a \quad (8.182)$$

と発散する。また、この関数の積分は、積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin z}{z} = \pi \quad (8.183)$$

を使い、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin ax}{x} = \pi \quad (8.184)$$

である事が分かり、結局、この関数は、デルタ関数で

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\sin ax}{x} = \pi \delta(x) \quad (8.185)$$

と表わせる。次に、関数

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin^2 ax}{ax^2} \right) \quad (8.186)$$

の性質を明らかにする。この関数は $x \neq 0$ では、零になる関数であり、一方で $x \rightarrow 0$ では発散する。また、この関数の積分は、積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 z}{z^2} = \pi \quad (8.187)$$

を使い、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\sin^2 ax}{ax^2} \right) = \pi \quad (8.188)$$

であることが分かる。よって関数は、やはりデルタ関数で

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin^2 ax}{ax^2} \right) = \pi \delta(x) \quad (8.189)$$

と表わせる。積分公式 (8.183, 8.187) の証明は、付録 G で与えられている。

以上の関数の性質を使い、 t が大きいところでの係数 $a_l^{(1)}(t)$ の絶対値の二乗が、

$$\begin{aligned} |\tilde{a}_l^{(1)}(t)|^2 &= \left| \frac{1}{E_{k_0} - E_l - \hbar\omega} \left(e^{\frac{E_{k_0} - E_l - \hbar\omega}{\hbar} t} - 1 \right) V_{l,k_0} + \frac{1}{E_{k_0} - E_l + \hbar\omega} \left(e^{\frac{E_{k_0} - E_l + \hbar\omega}{\hbar} t} - 1 \right) V_{*l,k_0} \right|^2 \\ &= 4 \left(\left| \frac{\sin\left(\frac{E_{k_0} - E_l + \hbar\omega}{2\hbar} t\right)}{E_{k_0} - E_l + \hbar\omega} \right|^2 + \left| \frac{\sin\left(\frac{E_{k_0} - E_l - \hbar\omega}{2\hbar} t\right)}{E_{k_0} - E_l - \hbar\omega} \right|^2 \right) |V_{l,k_0}|^2 \\ &= \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) (\delta(E_{k_0} - E_l - \hbar\omega) + \delta(E_{k_0} - E_l + \hbar\omega)) |V_{l,k_0}|^2 t \end{aligned} \quad (8.190)$$

となることが分かる。結果は、時間 t に比例する、つまり時刻 t に状態 l にある確率、すなわち時刻 t までの間に状態 l に遷移した確率 P は、 t に比例し、

$$P = \omega t \quad . \quad (8.191)$$

ここで単位時間当りの遷移率 ω は、

$$\omega = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)(\delta(E_{k_0} - E_l - \hbar\omega) + \delta(E_{k_0} - E_l + \hbar\omega))|V_{l,k_0}|^2 \quad (8.192)$$

である。

ところで、 t についての一次関数は傾きと切片で決定され、定数項は例外を除けば零ではない。有限の間隔で計算する場合の遷移確率も定数項を持つ。傾きが有限であり時間間隔がきわめて大きい時、定数項は無視できると想像される。しかし、定数項が重要となる場合がないわけではない。この場合、確率は

$$P = \omega t + P^{(d)} \quad (8.193)$$

となる。定数項 $P^{(d)}$ は、 ω と大きく異なる起源と性質をもつ。量子力学の粒子と波との二重性は、遷移確率にも表れ、 ω は粒子性を $P^{(d)}$ は波動性を表すことが筆者たちの最近の研究で明らかになった。結果の一部を、後の章で説明する。

8.12 問題

問1 行列の摂動

ハミルトニアン

$$H = H_0 + \epsilon H_1 \quad (8.194)$$

で、 H_0 と H_1 のそれぞれが次の 3×3 行列

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \end{pmatrix}$$

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

であり、 ϵ を一つのパラメータとする。このハミルトニアン H の固有値 E と固有ベクトル \mathbf{u} は、固有値方程式 $H\mathbf{u} = E\mathbf{u}$ を満たす。固有ベクトル \mathbf{u} と固有値を求めよ。また、 ϵ の2次までの摂動展開の近似でも固有解と固有値を求めよ。

問2 調和振動子 1

調和振動子

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 \quad (8.195)$$

に、摂動項

$$H_1 = \lambda x^4 \quad (8.196)$$

が加わった時の、固有状態と固有エネルギーを λ の 2 次までの近似で求めよ。

問3 調和振動子 2

調和振動子

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 \quad (8.197)$$

に、摂動項

$$H_1 = \lambda x \quad (8.198)$$

が加わった時の、固有状態と固有エネルギーを λ の 2 次までの近似で求めよ。また、 x について完全平方の形に変形してから、変数変換をしてから、固有状態と固有値を求め、近似解と比較せよ。

問4 時間変動する調和振動子

調和振動子

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 \quad (8.199)$$

に、時間変動する摂動項

$$H_1 = \lambda z \cos \omega t \quad (8.200)$$

が加わったときの時間に依存する波動関数を、 λ の 1 次の近似で求めよ。

問5 断熱変化する調和振動子

問4の問題で、 ω が非常に小さいとする。この時、十分大きな T で

$$T\omega = \text{一定} \quad (8.201)$$

となる時刻 T での波動関数を求めよ。

問6 時間変化する行列

問7 ヘリウムの摂動

ヘリウムのハミルトニアンは、

$$H = \frac{\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (8.202)$$

である。ここで、1と2は電子の番号で $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ である。右辺の最後の項は、電子間の相互作用を表わす。電子間相互作用の項を摂動項とみなして、1次の摂動でヘリウム原子の基底状態のエネルギー固有値と固有関数を求めよ。

問8 時間に依存する摂動

問9 水素原子と摂動

水素原子に、摂動項

$$H_1 = \lambda z \quad (8.203)$$

が加わった系における、基底状態と第1励起状態のエネルギーと波動関数を摂動論の最低次の近似で、求めよ。

問10 周期的な摂動

問11 遷移確率

電磁波による、水素原子の定常状態の遷移を調べよ。

問題 12 形の変形

球形ポテンシャル

$$V(r) = V_0, r \leq R \quad (8.204) \\ = 0, R \leq r$$

に対してポテンシャルの形状が

$$V(r) = V_0, r \leq R + aY_2(\theta, \phi) \quad (8.205) \\ = 0, R + aY_2(\theta, \phi) \leq r$$

と変化したときの、定常状態を a の1次摂動で求めよ。

和則

dipole sum rule 等の応用。

第9章 準古典近似 (WKB法)

プランク定数は、作用の次元を持ち、大きさは約 6×10^{-27} エルグ秒 である。この値は、非常に小さい。そのため、物理系の運動は、その作用の大きさによって、量子効果が無視できる場合と、無視できない場合がある。前者で運動は古典力学で扱われるが、後者で運動は量子力学で扱われる。自由粒子では、運動量の大きさ p を持つ自由粒子の波長は $\lambda = \frac{h}{p}$ で与えられる。ミクロな粒子では、運動量 p は小さいが、マクロな物体では運動量は大きい。例えば、電子が速さ $1M/\text{秒}$ で運動している時、運動量は

$$p = 9.11 \times 10^{-31} \text{KgM/秒} \quad (9.1)$$

、波長は

$$\lambda = \frac{6.6 \times 10^{-34}}{9.11 \times 10^{-31}} = 0.7 \times 10^{-3} M \quad (9.2)$$

である。この値は、結晶中の原子間隔 $10^{-10} M$ よりもはるかに大きい。一方 1 Kg の物体が、同じ速さ $1M/\text{秒}$ で運動している時、運動量は

$$p = 1 \text{KgM/秒} \quad (9.3)$$

、波長は

$$\lambda = \frac{6.6 \times 10^{-34}}{1} = 6.6 \times 10^{-34} M \quad (9.4)$$

と極めて短くなる。この値は、結晶中の原子間隔 $10^{-10} M$ よりもはるかに小さいばかりか、素粒子の大きさ $10^{-15} M$ よりもはるかに小さい。

このように電子等のミクロな粒子では、波長が物理系の大きさと同じ程度になり波動効果としての量子効果は大きい。しかしマクロな物質では、波長が極めて小さくなり、波動効果である量子効果は無視できるくらい小さくなる。この違いを具体的に、シュレーディンガー方程式に基づいて、調べる事にしよう。

プランク定数を小さなパラメーターとみなして、シュレーディンガー方程式を近似的に解く方法である、準古典近似 (WKB法) を本章で考察する。この解析から量子力学と古典力学との関連が明らかになってくると共に、量子効果が無視できる状況が明きらかになる。この問題は、光学における波動光学と幾何光学の関係に極似している。波長が小さい時は、波動効果が無視できて、光の進行方向だけが重要である幾何光学が適用されることに対応している。

9.1 プランク定数での展開

エネルギー E を持つ定常状態の従うシュレーディンガー方程式

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + E - U\right]\psi = 0 \quad (9.5)$$

を、準古典近似を用いて解く。準古典近似では波動関数を

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} \quad (9.6)$$

とプランク定数 \hbar を指数関数の肩においた形で表わす。この関数の微分は

$$\begin{aligned} \nabla_i \psi &= \frac{i}{\hbar} \nabla_i \sigma e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} \\ \nabla_i^2 \psi &= \left[\frac{i}{\hbar} \nabla_i^2 \sigma + \left(\frac{i}{\hbar} \nabla_i \sigma \right)^2 \right] e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} \end{aligned} \quad (9.7)$$

であるので、シュレーディンガー方程式は

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{i}{\hbar} \nabla_i^2 \sigma + \left(\frac{i}{\hbar} \nabla_i \sigma \right)^2 \right] e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} + (E - U) e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} = 0 \quad (9.8)$$

となる。よって、 σ は、非線型方程式

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{i}{\hbar} \nabla_i^2 \sigma + \left(\frac{i}{\hbar} \nabla_i \sigma \right)^2 \right] + E - U = 0 \quad (9.9)$$

に従う。

σ の従う非線型方程式を、見やすい形

$$-\frac{1}{2m} (\nabla_i \sigma)^2 + E - U + i \frac{\hbar}{2m} \nabla_i^2 \sigma = 0 \quad (9.10)$$

で表わしておこう。左辺第1項、第2項、第3項はプランク定数 \hbar を含まない、プランク定数の零次の項であり、第4項はプランク定数 \hbar の1次である。だから、方程式は、プランク定数 \hbar について逐次展開を使い解かれる形をしている。 \hbar を小さな値をもつパラメーターとみなして、第4項を省略してプランク定数の零次をとった方程式は

$$-\frac{1}{2m} (\nabla_i \sigma)^2 + E - U = 0 \quad (9.11)$$

となる。これは、 σ を作用積分とする古典力学のハミルトン・ヤコビ方程式に一致する。また、未知の解 σ を \hbar で展開して、

$$\sigma = \sigma_0 + \hbar \sigma_1 + (\hbar)^2 \sigma_2 + \dots \quad (9.12)$$

と未知の量 $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \dots$ を使い表わす。これを方程式に代入して \hbar についての各冪乗の項から、各項 $\sigma_0, \sigma_1, \dots$ をきめる方程式が得られる。この結果、最初の2項は、

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2m}(\nabla_i\sigma_0)^2 + E - U &= 0 \\ -2(\nabla_i\sigma_1)(\nabla_i\sigma_0) + i\nabla_i^2\sigma_0 &= 0 \end{aligned} \quad (9.13)$$

である。上の第一式は、上の古典力学のハミルトン・ヤコビ方程式であり、第2式から σ_1 が決定される。

9.2 古典極限

空間が一次元であるとき、 σ_0 や σ_1 は、

$$\frac{\partial}{\partial x}\sigma_0 = \sqrt{2m(E - U(x))} \quad (9.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\sigma_1 = \frac{i}{2} \frac{\frac{\partial^2\sigma_0}{\partial x^2}}{\frac{\partial\sigma_0}{\partial x}} = \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial x} \log \sqrt{2m(E - U(x))} \quad (9.15)$$

を満たす。これより、 σ_0 や σ_1 を求めると、

$$\sigma_0(x) = \int dx' \sqrt{2m(E - U(x))} \quad (9.16)$$

$$\sigma_1(x) = \frac{i}{2} \log \sqrt{2m(E - U(x))} \quad (9.17)$$

となる。この結果、 \hbar の1次までとって近似した波動関数は、

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma_0} \frac{1}{(2m(E - U(x)))^{1/4}} \quad (9.18)$$

である。

この近似式で、 $\frac{\partial}{\partial x}\sigma_0 = 0$ となる x では、関数が発散する。しかしこの発散の仕方が弱いので、波動関数の積の積分から計算される物理量へのこの近傍からの寄与は無視できる。また、正負両符号の関数

$$\psi = e^{\pm \frac{i}{\hbar}\sigma_0} \frac{1}{(2m(E - U(x)))^{1/4}} \quad (9.19)$$

がいずれも解であり、これらの線形結合も方程式の解である。

9.3 古典極限と初期条件や境界条件

準古典近似法によって得られた波動関数 (9.19) に基づいて、古典極限での波動関数の振る舞いを考え、古典力学と量子力学との関連をみてみよう。

9.3.1 存在確率と滞在時間

古典力学では運動エネルギーは正定値であり、 $E \geq U(x)$ となっている。この古典運動が許される空間領域では、波動関数の指数部は純虚数になる。この指数関数の絶対値はいつも 1 であり、だから波動関数の大きさは、第 2 項で決まり、

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{(2m(E - U(x)))^{1/2}} \quad (9.20)$$

となる。よって、 x の微小領域 dx における粒子が存在する確率は、

$$P(x)dx = \frac{1}{(2m(E - U(x)))^{1/2}} dx \quad (9.21)$$

である、一方、古典力学では、エネルギーの式を書換えて座標 x と時間との関係

$$\frac{dt}{dx} = \frac{1}{(2m(E - U(x)))^{1/2}} \quad (9.22)$$

が成立し、 x の領域 dx における粒子が滞在する時間が

$$dT = \frac{1}{(2m(E - U(x)))^{1/2}} dx \quad (9.23)$$

である。量子力学の粒子の存在確率は波動関数できまり、古典力学の粒子の存在する比率は滞在時間で決まる。これらが互いに対応することが分かる。古典力学における時間で平均した物理量が、量子力学における確率で平均した物理量に対応する。

9.3.2 古典軌道

古典力学における質点の軌道は、時間 t や座標 x に依存する作用 S

$$S = Et - \sigma_0(E, x) \quad (9.24)$$

から、

$$\frac{\partial S}{\partial E} = t_0 \quad (9.25)$$

とにおいて得られる方程式、

$$t - \frac{\partial}{\partial E} \sigma_0(E, x) = t_0 \quad (9.26)$$

の解から得られる。自由粒子では、軌道は

$$\sigma_0(x) = (x - x_0) \sqrt{2mE} \quad (9.27)$$

$$t - (x - x_0) \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{E}} = t_0 \quad (9.28)$$

となる。 $E = \frac{m}{2} v^2$ とおくと、軌道は速度を v とする

$$x = x_0 + v(t - t_0) \quad (9.29)$$

である。

4章で調べた量子力学の自由粒子の波束の場合、方程式

$$\frac{\partial}{\partial p} \left(p(x - x_0) - \frac{p^2}{2m} (t - t_0) \right) \Big|_{p=p_0} = 0 \quad (9.30)$$

から波束の中心の運動が

$$x = x_0 + \frac{p_0}{m} (t - t_0) \quad (9.31)$$

と決まった。これは、自由粒子の古典軌道の式 (9.28) に対応する。

9.3.3 干渉

位相 $\frac{\sigma_0}{\hbar}$ の大きさは、波としての特徴的な現象である干渉や、回折が表れる条件を明らかにするのに役立つ。二つの異なる波を区別するパラメーターを λ とし、位相部の差

$$\frac{(\sigma(\lambda_1) - \sigma(\lambda_2))}{\hbar} \quad (9.32)$$

が 2π と比較して、1 のオーダーであれば、干渉が見え、1 よりはるかに大きいならば、干渉は見えない。この領域では、位相が速く変化することより、指数関数の位相が打ち消しあい、位相を平均化した振る舞いが観測される。位相が打ち消された領域は、古典領域である。古典領域における運動は、作用が

$$\delta \sigma_0 = 0 \quad (9.33)$$

を満たし停留的になっている。作用が最終的になる条件は、古典力学における運動方程式に一致する。

9.4 トンネル効果と境界条件

波動関数の指数部は $E < U(x)$ の領域、すなわち古典運動が許されない領域では、実数になる。だから、指数関数の絶対値は1より小さくなるか大きくなる。波動関数の大きさの自乗は、

$$|\psi(x)|^2 = e^{\pm \frac{2}{\hbar} \sigma_0} \frac{1}{(2m(E - U(x)))^{1/2}} \quad (9.34)$$

となる。よって、 x の領域 dx における粒子が存在する確率は、

$$P(x)dx = e^{\pm \frac{2}{\hbar} \sigma_0} \frac{1}{(2m(E - U(x)))^{1/2}} dx \quad (9.35)$$

である。

古典運動が許されない領域でも、波動関数が値をもち、粒子の存在する確率が有限になる事が多い。このため、図のようなポテンシャルの山のもとで、波（粒子）が左から入射する際、反射する波と、透過する波がある。透過した後では、右に進行する波は、自由な波としてそのまま進む。古典力学では、この状況における粒子はすべて反射する。しかし、量子力学では波動関数が零になるわけではない、よって一部の粒子は透過する。この効果は、ポテンシャルの山を通り抜けるので、トンネル効果と呼ばれている。図の領域 I での波動関数は、4章で求めた一定の力（ x に比例するポテンシャル） $V = Fx$ 、中での運動量

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (9.36)$$

を使う波動関数の漸近形のもつ位相因子 $\frac{\pi}{4}$ をかけた

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{v}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + \frac{i\pi}{4}\right] + \frac{1}{\sqrt{v}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{i\pi}{4}\right] \quad (9.37)$$

であり、領域 II では

$$\psi = \frac{C'}{\sqrt{|p|}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \left| \int_b^x p(x) dx \right|\right] \quad (9.38)$$

であり、領域 III では

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{v}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x) dx - \frac{i\pi}{4}\right] \quad (9.39)$$

である。領域 I と領域 II における波動関数の連続性から、

$$c' = \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^b p(x) dx \right|\right] \quad (9.40)$$

がえられ、領域 II と領域 III における波動関数の連続性から

$$C = -iC' \quad (9.41)$$

が得られる。これらをつなげて、領域 III における粒子数の流れは

$$D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \left| \int_a^b p(x) dx \right|\right] \quad (9.42)$$

となる。この値が、粒子がトンネルの山の障壁を越えて通過する確率である。

9.5 束縛状態とボーア・ゾンマーフェルト量子化条件

図のようなポテンシャルの谷における、波動関数を考える。

$x < a$ が古典的に許される領域である時、波動関数は $x = a$ を下限とする $p(x)$ の積分に $\frac{\pi}{4}$ を加えた位相をもつ

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + \frac{\pi}{4}\right) \quad (9.43)$$

となり、また $x > b$ が古典的に許される領域である時、波動関数は $x = b$ を下限とする $p(x)$ の積分から $\frac{\pi}{4}$ を減じた位相をもつ

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x) dx - \frac{\pi}{4}\right) \quad (9.44)$$

となる。

領域が有限で、 $b < x < a$ であるときは、この両条件が満たされる必要がある。これは、三角関数の周期性を考慮して

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx + \frac{\pi}{2} = (n+1)\pi \quad (9.45)$$

のとき実現する。つまり、この条件が満たされるとき、粒子が有限な領域 $b < x < a$ に束縛されている。

9.5.1 大きな質量

量子効果は、電子のような小さな質量の粒子では大きく、逆に大きな質量の物体では小さい。準古典近似で、質量効果を調べよう。

運動量 $p(x)$ に式 (9.36) を代入して、粒子の質量 m に対する依存性が分かる。量子化条件は、

$$\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_a^b \sqrt{E - V(x)} dx + \frac{\pi}{2} = (n+1)\pi \quad (9.46)$$

となり、質量とプランク定数の平方根の比 $r_P = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}$ で

$$\int_a^b \sqrt{E - V(x)} dx = r_P(n + 1/2)\pi, \quad (9.47)$$

$$r_P = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \quad (9.48)$$

と表わせる。右辺がプランク定数と質量の平方根の比 r_p に比例するので、この近似では物理量は、 r_p で決まる。この結果より、プランク定数 \hbar を一定にして質量 m を大きくする極限

$$m \rightarrow \infty \quad (9.49)$$

は、質量を一定にしてプランク定数を小さくする極限に一致する。また、エネルギー間隔は、

$$\Delta E \int_a^b \frac{1}{\sqrt{E - V(x)}} dx = r_P \pi, \quad (9.50)$$

$$(9.51)$$

を満たす。だから、 ΔE は、 \hbar に比例して \sqrt{m} に反比例する。 m が大きくなると、エネルギー間隔はせまくなりエネルギー準位は密になる。

9.6 三次元球対称な場合

三次元球対称ポテンシャル中の粒子の運動では、角度成分は、球関数で表わされ、動径座標の関数は一次元方程式に従う。この一次元方程式にたいして、準古典近似を使う事により、三次元球対称ポテンシャル中の問題が扱われる。

9.7 問題

問1 WKBとハミルトン・ヤコビ方程式

シュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + U(x)\right)\psi = E\psi \quad (9.52)$$

の解を

$$\begin{aligned} \psi &= e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} \\ \sigma &= \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2 + \dots \end{aligned} \quad (9.53)$$

とにおいて、 \hbar の冪で展開して次式を導け。

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_0'^2}{2\mu} &= E - U(x) \\ \sigma_1' &= -\frac{\sigma_0''}{2\sigma_0'} \end{aligned} \quad (9.54)$$

これらを解いて、 σ_0 と σ_1 を求めよ。

問2 古典軌道とWKB近似

上の問い1の結果から、粒子の古典軌道を決める σ_0 を選んだ時の、波動関数を議論せよ。

問3 ポテンシャルの山

遠方から十分余っくりとんできた粒子が、右図のポテンシャルの山を透過する確率が、

$$\exp\left(-2\int_a^b dx\sqrt{\frac{2mV(x)}{\hbar^2}}\right) \quad (9.55)$$

であることを示せ。

問4 ポテンシャルの谷

遠方から十分余っくりとんできた粒子が、右図のポテンシャルの谷山を透過する確率をどのようにになるか？

問5 ボーア・ゾンマーフェルト量子化条件

問6 3次元ポテンシャル

問7 縮退のある系のWKB

問8 時間に依存する摂動とWKB

第10章 変分法

10.1 変分

微分方程式 $H\psi = E\psi$ は、未知関数を含む積分量 $\int \psi^* H\psi$ についての変分が停留的になる条件

$$\delta \int \psi^* H\psi = 0 \quad (10.1)$$

から導かれる。ここで、変分は、波動関数が規格化されている条件

$$\int \int \psi^* \psi = 1 \quad (10.2)$$

を満たす関数のすべての微小変化にたいしておこなう。この条件付きで積分量が停留的になることは、ラグランジュの未定定数法で、

$$\delta \int \psi^* (H - E)\psi = 0 \quad (10.3)$$

の変分に置き換えられ、

$$\frac{\partial}{\partial \psi^*} \int \psi^* (H - E)\psi = (H - E)\psi = 0 \quad (10.4)$$

と微分方程式になる。

このような変分の考えで、シュレーディンガー方程式も導かれる。つまり、関数 ψ を様々に変えると、積分 $\int dx^3 \psi^* H\psi$ は様々な値をとる。この関数がシュレーディンガー方程式を満たす時、積分値が停留的になり逆も成立している。

逆に、シュレーディンガー方程式の解 $H\psi_n = E_n\psi_n$ がすべて分かっているとしよう。関数を

$$\psi = \sum_l a_l \psi_l \quad (10.5)$$

と展開すると、上の積分が

$$S = \int \psi^+ H\psi = \sum_l |a_l|^2 E_l \geq E_0 \quad (10.6)$$

となり、 S の値はいつも最低エネルギー E_0 より大きくなる事が分かる。

S は係数 $a_1, a_2, \dots, a_l, \dots$ の関数であり、 $S(a_1, a_2, \dots)$ と表そう。波動関数の規格化条件は、

$$\sum_l a_l^2 = 1 \quad (10.7)$$

である。 S が E_0 となるのは、 $a_0 = 1, a_l (l \neq 0) = 0$ の時である。

今までの計算では、関数を任意なものとし、関数の空間はすべての関数を含む完全系を考えた。変分法の考えは、近似的に関数の空間を有限なものに制限してしまうことである。この際、関数の空間として具体的な計算の易しいものを選ぶことが多い。

例 r^4 ポテンシャル

シュレーディンガー方程式

$$H = \frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2M} + kr^4 \quad (10.8)$$

は、解析的な解を求めるのは、困難である。変分関数として、指数関数

$$\psi(r) = Ne^{-ar}, N = \quad (10.9)$$

を仮定してみよう。ここで、 N は規格化定数であり、

$$N^2 \int d^3r e^{-2ar} = 1 \quad (10.10)$$

で決まる。

$$\int d^3r e^{-2ar} = 4\pi \int_0^\infty dr r^2 e^{-2ar} = \quad (10.11)$$

より、

$$N = \quad (10.12)$$

である。これらを代入して、

$$S(a) = N^2 \int d^3r e^{-ar} e^{-ar} = \quad (10.13)$$

となる。変分条件を

$$\frac{\partial}{\partial a} S(a) = 0 \quad (10.14)$$

として、 a を求める。

10.2 変分

具体的な計算で変分法を使うためには、変分関数は易しいほうが計算しやすい。また、近年は、計算機が進歩しているので、時間さえ厭わなければ、相当精度の高い値を求めることができる。

このため、変分の考えは、いろいろ応用され、特に、他に適当な方法がないような難しい問題で威力を発揮する。

10.3 問題

問 1

変分法に関する以下の問いに答えよ。

(1) H の最小固有値を E_{min} 、最大固有値を E_{max} とすると、任意の変分関数 $|\psi\rangle$ に対して

$$E_{min} \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \leq E_{max} \quad (10.15)$$

が成立することを示せ。

(2) 変分関数 $|\psi\rangle$ が H の固有状態 u_0 と、 u_1 を使い、 $|\psi\rangle = u_0 + \epsilon u_1$ と表わせるとき、エネルギー期待値は E_0 から ϵ^2 のオーダーだけずれていることを示せ。ここで、 E_0 は u_0 のエネルギーである。

問い 2

ヘリウム原子の問題を変分法で、

$$\psi = N e^{-\frac{Z(r_1+r_2)}{a_0}} \quad (10.16)$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (10.17)$$

とにおいて、 Z を変分パラメーターとしてエネルギーを求めよ。 N は、規格化の定数である。

第11章 散乱問題

古典力学において、短距離ポテンシャルやクーロンポテンシャル中での正エネルギーを持つ粒子の運動は、負エネルギー粒子の運動とは異なり、開いた軌道にそったものである。正エネルギー粒子は、ポテンシャルエネルギーが零となる無限領域で、運動できる。通常、無限の遠方から飛来した粒子が、ポテンシャル中心の近傍で角度をかえ、その後無限の遠方に飛んでゆく問題を調べる。この運動は、散乱現象で観測される。たとえ、ミクロな大きさをもつ散乱体の場合でも、その効果は、マクロな大きさの領域での影響を与える。だから、散乱は、マクロな実験でミクロな世界を探るのに使われる。

量子力学における散乱でも、やはり正エネルギーの解を扱う。ミクロなポテンシャルは、微少な空間領域で値をもち、ポテンシャルから十分離れた領域では、零になる。だから、*Schroedinger* 方程式の特殊解は、この領域では自由粒子の波動方程式に一致し、簡単に求められる。自由な波は簡単に求まるが、独立な異なる複数の解が存在する。解のなかのどのような組み合わせが妥当であるかは、ポテンシャルにより決まる。また、正エネルギー領域における *Schroedinger* 方程式の解は、ポテンシャルから十分離れた領域で、境界条件を与えて一意的に決まる。この境界条件を満たす解が、散乱状態の波動を表わす。この解は、また実験の状況により異なる。入射波がポテンシャルの影響で変化し、散乱される波を本章で求める。実験状況や、境界条件に注意を払う考察が必要である。

11.1 正エネルギーの連続固有値

短距離型ポテンシャル $U(\mathbf{x})$

$$U(\mathbf{x}) \neq 0, |\mathbf{x}| \leq R \quad (11.1)$$

をもつ *Schroedinger* 方程式

$$H\psi = E\psi, \quad (11.2)$$

$$H = H_0 + U(\mathbf{x})$$

$$H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

は、ポテンシャルが零になる空間領域

$$|\mathbf{x}| > R \quad (11.3)$$

では、自由粒子の方程式

$$H_0\psi = E\psi \quad (11.4)$$

となる。この解は、平面波、

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (11.5)$$

や球面波

$$\psi = \frac{e^{ikr}}{r} Y(\theta, \varphi) \quad (11.6)$$

であり、正のエネルギー

$$E = \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m} \geq 0 \quad (11.7)$$

をもつ。平面波は、一つの方向に進行する波を表わす。だから、この方向に伝播する物理状態を表わしている。一方、球面波は中心から発して球面方向に伝播する波を表わしている。球対称ポテンシャルや、小さな物体から生成される波は、多くの場合球面波である。

また、平面波は、球面波の重ね合わせで、

$$\begin{aligned} e^{ikz} &= e^{ikr \cos \theta} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (11.8)$$

と表わすことが出来る。この式で、左辺の運動量の固有状態が、右辺の $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ 等の角運動量の線形結合であらわせ、展開係数が球ベッセル関数となっている。いずれも、 z 軸回りの対称性をもつので、右辺には $m = 0$ の状態だけがある。

球ベッセル関数は、原点で収束する関数 j_l と

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad (11.9)$$

$$j_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho} (1 + O(\frac{1}{\rho})), \quad (11.10)$$

$$j_2(\rho) = -\frac{\sin \rho}{\rho} (1 + O(\frac{1}{\rho})) \quad (11.11)$$

原点で発散する関数 n_l

$$n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho} \quad (11.12)$$

$$n_1(\rho) = -\frac{\sin \rho}{\rho} (1 + O(\frac{1}{\rho})) \quad (11.13)$$

$$n_2(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho} (1 + O(\frac{1}{\rho})) \quad (11.14)$$

の2種類ある。これらは、方程式の互いに独立な解である。原点を含む空間領域で、有限な値をもつ関数は、 j_l であるので、原点を含む全領域で有限な一般解は、 j_l の線形結合で書かれる。また、原点を除く空間領域で有限な解は、 j_l と n_l の両関数の重ね合わせとなる。この場合は、原点で発散する関数 n_l も必要である。

11.2 散乱状態の波動関数：部分波展開

原点近傍で値をもつ球対称ポテンシャル中で、大きい r の領域での角運動量 l の動径波動関数は一般に

$$R_l(r) = A_l[\cos \delta_l j_l(kr) + \sin \delta_l n_l(kr)] \quad (11.15)$$

と上記の二つの関数の角度 δ_l による線形結合であらわせる。ここでは、 δ_l を未定のパラメータにして、波動関数を一般的に扱う事にする。ポテンシャルが与えられた時の δ_l を具体的な計算で求めることは、あとで考察する。

大きい r の領域では、 n_l も有限である。 j_l と n_l の漸近的な振る舞い

$$j_l(\rho) = \frac{\sin(\rho - \frac{l\pi}{2})}{\rho} \quad (11.16)$$

$$n_l(\rho) = \frac{\cos(\rho - \frac{l\pi}{2})}{\rho} \quad (11.17)$$

からこの関数の漸近的な振る舞いが

$$R_l(r) \rightarrow (kr)^{-1} A_l \sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l) \quad (11.18)$$

となり、さらに波動関数の漸近的な振る舞いが、

$$\psi = \sum A_l \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l) P_l(\cos \theta) \quad (11.19)$$

となる。 δ が二つの関数の相対的な大きさを決定するパラメーターである、位相シフトであり、後で詳しい性質が分かる。

11.2.1 散乱状態の波動関数の計算例

球形ポテンシャル

$$\begin{aligned} V &= V_0, r \leq R \\ &= 0, r \geq R \end{aligned} \quad (11.20)$$

中での質点の従う動径方向の微分方程式は、

11.3 散乱振幅と断面積

上の波動関数 (11.19) は、さらに z 軸方向に進む平面波と中心から外へ広がる球面波の和

$$\psi = e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \quad (11.21)$$

の形に表現出来る。ただし、各角運動量の波の和に対応する式 (11.19) から

$$A_l = (2l + 1) i^l e^{i\delta_l} \quad (11.22)$$

$$f(\theta) = (2ik)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta) \quad (11.23)$$

である。 δ_l が零であれば、球面波の成分は

$$f(\theta) = 0 \quad (11.24)$$

と存在しない事になり、波動関数は

$$\psi = e^{ikz} \quad (11.25)$$

と平面波のみである。また、 δ_l が小さければ、球面波の成分も小さいことになる。

$l = 0$ の成分は球対称の球面波、 $l = 1$ の成分は 2 重極の球面波、等を表わしている。大きな l ほど、急激に変化する角度依存性を持つ。

11.3.1 確率の流れ

入射平面波の確率の流れは、

$$[e^{-ikz}] \left(\frac{-i\hbar}{m} \nabla \right) [e^{ikz}] = \mathbf{e}_z v \quad (11.26)$$
$$v = \frac{\hbar k}{m}$$

となり、 z 軸方向をむいた一定の値である。この結果は、 z にだけ依存した平面波の流れとして、自然な結果である。また、球座標における ∇ が、

$$\nabla\Psi = \mathbf{e}_r\partial_r\Psi + \mathbf{e}_\theta\frac{1}{r}\partial_\theta\Psi + \mathbf{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\partial_\varphi\Psi \quad (11.27)$$

と表わされるので、上の球面波の波動関数が運ぶ確率の流れは、主に動径方向をむいた

$$\left[\frac{e^{-ikr}}{r}f^*(\theta)\right]\left(\frac{-i\hbar}{m}\nabla\right)\left[\frac{e^{ikr}}{r}f(\theta)\right] = \mathbf{e}_rv\frac{|f(\theta)|^2}{r^2} + (\mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi)O\left(\frac{1}{r^3}\right) \quad (11.28)$$

となる。充分大きな r では、上の第 2 項が無視できて、立体角 $d\Omega$ に進む方向の流れは、中心から外方向に進行する

$$r^2d\Omega\left[\frac{e^{-ikr}}{r}f^*(\theta)\right]\left(\frac{-i\hbar}{m}\nabla\right)\left[\frac{e^{ikr}}{r}f(\theta)\right] = \mathbf{e}_rd\Omega N \quad (11.29)$$

$$N = v|f(\theta)|^2$$

となる。入射波の流れで立体角 $d\Omega$ に進む方向の流れをわたったのが、微分散乱断面積

$$\frac{1}{v}N = |f(\theta)|^2 \quad (11.30)$$

である。

11.3.2 断面積

微分断面積は

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (11.31)$$

であり、角度で積分して、全断面積が位相シフト δ_l を使い

$$\begin{aligned} \sigma &= \int d\varphi d\cos\theta\sigma(\theta) \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2\delta_l \end{aligned} \quad (11.32)$$

と表わされる。ここで、ルジャンドル関数 $P_l(\cos\theta)$ が直交性を満たし、規格化された関数であることを使った。位相シフト δ_l が小さいならば、断面積も小さい値となる。

ところで、散乱振幅の前方 $\theta = 0$ での値が、

$$\begin{aligned} f(0) &= \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1) \\ &= \frac{1}{k} \sum_l (2l+1)(\cos\delta_l \sin\delta_l + i\sin^2\delta_l) \end{aligned} \quad (11.33)$$

となる。断面積 (11.33) と 振幅 (11.34) を比較して、全断面積と前方散乱振幅との間に一般的な関係式

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}f(0) \quad (11.34)$$

が成立することが分かる。この等式は、確率の保存則から導かれるものであり、“光学定理”と呼ばれている。

11.4 リップマン・シュウインガー積分方程式

この節では、定常状態の Schroedinger 方程式に基づいて散乱を調べる。Schroedinger 方程式

$$(H_0 + V)\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (11.35)$$

から散乱を調べるのに、微分方程式よりも積分方程式が都合よい。そのため、先ず Schroedinger 方程式を積分方程式に書換えよう。

Schroedinger 方程式を

$$(E - H_0)\psi(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) \quad (11.36)$$

と書き、両辺に 2.7 節の $(E - H_0)^{-1}$ をかけると、

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) + (E - H_0)^{-1}V(\mathbf{x})\psi \quad (11.37)$$

となる。ただしここで、 ψ_0 は自由粒子の方程式を満たし、

$$(E - H_0)\psi_0(\mathbf{x}) = 0 \quad (11.38)$$

とする。逆に、上の式の両辺に $(E - H_0)$ をかけると、明らかに Schroedinger 方程式が得られる事が分かる。

$(E - H_0)^{-1}$ は 9.7 節のグリーン関数であるので積分演算子であり、上式は具体的に積分形で

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{y}G(\mathbf{x} - \mathbf{y})V(\mathbf{y})\psi(\mathbf{y}) \quad (11.39)$$

と表わされる。左辺にある ψ と右辺にある ψ はいずれも未知関数であり、この方程式は積分方程式である。Schroedinger 方程式と積分方程式 (11.39) は、ほぼ等価であるが、厳密な意味では異なる点がある。グリーン関数 $G(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ は、微分方程式を満たすと共に、決まった境界条件を満たしている。境界条件を変えれば、グリーン関数 $G(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ は変わる。だから、積分方程式は、微分方程式に境界条件を付加したものと等価である。微分方程式の解も、境界条件をきめて始めて一意的に決まる。

11.4.1 逐次近似法

上の積分方程式 (11.39) の一つの解法は、未知関数 ψ を V の次数で展開して、

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) + \psi_1(\mathbf{x}) + \psi_2(\mathbf{x}) + \psi_3(\mathbf{x}) + \cdots \quad (11.40)$$

と表わして、各項を求める逐次近似法である。逐次近似法では、上の式を積分方程式 (11.39) に代入して

$$\begin{aligned} & \psi_0(\mathbf{x}) + \psi_1(\mathbf{x}) + \psi_2(\mathbf{x}) + \psi_3(\mathbf{x}) + \cdots \\ & = \psi_0(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{y} G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) V(\mathbf{y}) (\psi_0(\mathbf{y}) + \psi_1(\mathbf{y}) + \psi_2(\mathbf{y}) + \psi_3(\mathbf{y}) + \cdots) \end{aligned} \quad (11.41)$$

が得られ、さらに両辺の同じ V の次数の項を比較して、逐次

$$\psi_1(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{y} G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) V(\mathbf{y}) \psi_0(\mathbf{y}) \quad (11.42)$$

$$\psi_2(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{y} G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) V(\mathbf{y}) \psi_1(\mathbf{y}) \quad (11.43)$$

...

$$\psi_{(n+1)}(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{y} G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) V(\mathbf{y}) \psi_{(n)}(\mathbf{y}) \quad (11.44)$$

が得られる。この結果、 $n = 0$ からの任意の整数 n についての波動関数 ψ_{n+1} が ψ_n を含む積分から求まる。つまり、定積分の繰り返しにより積分方程式の解が、

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}) = & \psi_0(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{y} G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) V(\mathbf{y}) \psi_0(\mathbf{y}) + \\ & + \int d\mathbf{y}_2 G(\mathbf{x} - \mathbf{y}_2) V(\mathbf{y}_2) \int d\mathbf{y}_1 G(\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) V(\mathbf{y}_1) \psi_0(\mathbf{y}_1) + \cdots \end{aligned} \quad (11.45)$$

となる事が分かる。この表示は、グリーン関数を点線で表示してダイアグラムで表わす事ができる。

11.4.2 グリーン関数のフーリエ表示

ここで、

$$(\nabla^2 + k^2) \frac{e^{ikr}}{4\pi r} = \delta(\mathbf{r}) \quad (11.46)$$

が成立することを証明しよう。この等式の証明には、 $\delta(\mathbf{x})$ の性質に対応する二つの条件

$$(1) (\nabla^2 + k^2) \frac{e^{ikr}}{4\pi r} = 0; r \neq 0 \quad (11.47)$$

$$(2) \int d\mathbf{r} (\nabla^2 + k^2) \frac{e^{ikr}}{4\pi r} = 1 \quad (11.48)$$

が示される必要がある。

(1) 球座標を使うと、証明は比較的簡単である。極座標におけるラプラシアンは、 r に関する微分と角変数に関する微分 $D(\partial_\theta, \partial_\varphi)$ との和

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \right)^2 r + D(\partial_\theta, \partial_\varphi) \quad (11.49)$$

である。これより、原点以外の点で動径座標の関数 $\frac{e^{ikr}}{r}$ に作用したとき、ラプラシアンの一項目から

$$\nabla^2 \frac{e^{ikr}}{r} = -k^2 \frac{e^{ikr}}{r}; r \neq 0 \quad (11.50)$$

となる。だから (1) が成り立つ。ただし、原点では分母が零になるためこの等式は成立しない。

(2)

原点近傍での関数の振る舞いを見るため、原点の近傍の $r = \epsilon$ の球面内部での積分

$$\int_{r \leq \epsilon} d\mathbf{r} [\nabla^2 + k^2] \frac{e^{ikr}}{r} \quad (11.51)$$

を調べる。 ϵ は小さな値とする。この積分で、第2項は、

$$\begin{aligned} \left| \int_{r \leq \epsilon} d\mathbf{r} [k^2] \frac{e^{ikr}}{r} \right| &\leq k^2 \int_0^\epsilon 4\pi r^2 dr \frac{1}{r} \\ &= 2\pi k^2 \epsilon^2 = O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (11.52)$$

であり、 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限で零となる。しかし、第1項は微分 ∇^2 のため異なる振る舞いをする。この項の振る舞いをみるため、小さな半径 ϵ の球面の内部での積分に関するガウスの定理を適用しよう。ガウスの定理より、体積積分は表面積分

$$\int_{r \leq \epsilon} d\mathbf{r} \nabla^2 \frac{e^{ikr}}{r} = \int_{r=\epsilon} d\mathbf{S} \cdot \nabla \frac{e^{ikr}}{r} \quad (11.53)$$

でかけられる。さらに、 $d\mathbf{S} = \mathbf{e}_r dS$ を使い、表面積分は具体的な計算で

$$\begin{aligned} \int_{r=\epsilon} d\mathbf{S} \cdot \nabla \frac{e^{ikr}}{r} &= \int_{r=\epsilon} dS (-) \frac{ikr e^{ikr} - e^{ikr}}{r^2} \\ &= 4\pi \epsilon^2 \frac{1}{\epsilon^2} = 4\pi \end{aligned} \quad (11.54)$$

となり、 $\epsilon \rightarrow 0$ で有限な値となる。これは、被積分関数が丁度 $4\pi\delta(\mathbf{x})$ に比例する事を示している。 $\frac{e^{ikr}}{r}$ は中心から外へ広がる球面波を表わし、 $\frac{e^{-ikr}}{r}$ は外から内向に進行する球面波を表わす。この波も、同じ方程式を満たす。

11.4.3 様々なグリーン関数

グリーン関数のフーリエ変換による積分表示は

$$G(\mathbf{x}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{k_0^2 - k^2} \quad (11.55)$$

である。これを具体的に計算しよう。球座標を使い、上の積分は

$$\int k dk d\cos\theta d\varphi \frac{1}{(2\pi)^3} e^{ikr \cos\theta} \frac{1}{k_0^2 - k^2} \quad (11.56)$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\infty \frac{(e^{ikr} - e^{-ikr})}{2i} k dk \frac{1}{k_0^2 - k^2}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^\infty \frac{(e^{ikr} - e^{-ikr})}{2i} k dk \frac{1}{k_0^2 - k^2}$$

$$= I_1 + I_2$$

$$I_1 = \frac{1}{8i\pi^2 r} \int_{-\infty}^\infty e^{ikr} k dk \frac{1}{k_0^2 - k^2} \quad (11.57)$$

$$I_2 = -\frac{1}{8i\pi^2 r} \int_{-\infty}^\infty e^{-ikr} k dk \frac{1}{k_0^2 - k^2} \quad (11.58)$$

となる。角度について積分して1行目から2行目が得られる。

被積分関数の分母は、 $k = \pm k_0$ で零になり積分は発散してこのままでは、定義出来ない。しかしながら、分母が零になる近傍で、積分路を無限小だけ実軸から虚軸方向にずらすと積分は有限になり定義できる。しかも、積分結果は、どのように積分路をずらすかによって変わる。今の場合、被積分関数は、複素平面で一位の極をもつので、極の回りに周回積分を行なうと、周の半径がたとえ無限小であっても、積分値は留数で決まる有限な値である。極は、実軸上にあるので、この結果は、もともと実軸上にある積分路を極の近傍で無限小変えたとき、積分が有限量変化することを意味している。

積分路を極の近傍でずらすことは、積分路を実軸上のもとのままに固定して、極の位置を虚数方向に無限小ずらす事に対応している。分母に無限小の虚数部 $i\epsilon$ を加えることで、極の位置は虚数方向に無限小動く。だから、関数で

$$\frac{1}{k_0^2 - k^2} \rightarrow \frac{1}{k_0^2 - k^2 \pm i\epsilon} \quad (11.59)$$

と置換えると、極の位置は、実軸からずれる。 ϵ は無限小であるが、零とは異なる。そのため、 $i\epsilon$ が分母にあると、大きな効果が引き起こされる。

まず、積分 I_1 を考察しよう。積分 I_1

$$I_1 = \frac{1}{8i\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikr} k dk \frac{1}{k_0^2 - k^2} \quad (11.60)$$

は、 e^{ikr} が上半平面の $|k| \rightarrow \infty$ で急激に零になる関数であるので、 k を複素数にした上半平面での閉曲線 C_+ にそう複素積分

$$I_1 = \frac{1}{8i\pi^2 r} \int_{C_+} e^{ikr} k dk \frac{1}{k_0^2 - k^2} \quad (11.61)$$

に一致する事がわかる。閉曲線 C_+ にそう複素積分 I_1 は 留数定理から、閉曲線の内部にお

ける一位の極で決まる。一位の極が k_l にあるとき、積分 I_1 は

$$I_1 = 2\pi i \sum \frac{1}{8i\pi^2 r} e^{ik_l r} k_l \lim_{k \rightarrow k_l} (k - k_l) \frac{1}{k_0^2 - k^2} \quad (11.62)$$

となる。

積分領域内に $k = +k_0$ があれば、一位の極 $k = +k_0$ における留数から、積分 I_1 は、

$$\begin{aligned}
 I_1 &= 2\pi i \frac{1}{8i\pi^2 r} \\
 &\times (e^{ik_0 r} k_0 \lim_{k \rightarrow k_0} (k - k_0) \frac{1}{(k_0 - k)(k_0 + k)}) \\
 &= -\frac{1}{8\pi r} e^{ik_0 r}
 \end{aligned} \tag{11.63}$$

となる。

同様に、積分領域内に $k = -k_0$ があれば、一位の極 $k = -k_0$ における留数から、積分 I_1 は、

$$\begin{aligned}
 I_1 &= 2\pi i \frac{1}{8i\pi^2 r} \\
 &\times (e^{-ik_0 r} (-)k_0 \lim_{k \rightarrow -k_0} (k + k_0) \frac{1}{(k_0 - k)(k_0 + k)}) \\
 &= -\frac{1}{8\pi r} e^{-ik_0 r}
 \end{aligned} \tag{11.64}$$

となる。

最後に、積分領域内に一位の極がなければ、

$$I_1 = 0 \tag{11.65}$$

である。

次に、積分 I_2 を考察する。積分 I_2

$$I_2 = \frac{1}{8i\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikr} k dk \frac{1}{k_0^2 - k^2} \tag{11.66}$$

は、 e^{-ikr} が下半平面の $|k| \rightarrow \infty$ で急激に零になる関数であるので、 k を複素数にした下半平面での閉曲線 C_- にそう積分

$$I_2 = \frac{1}{8i\pi^2 r} \int_{C_-} e^{-ikr} k dk \frac{1}{k_0^2 - k^2} \tag{11.67}$$

に一致する事がわかる。閉曲線 C_- にそう複素積分 I_2 は 留数定理から、閉曲線の内部にお

ける一位の極 k_m から

$$I_2 = -2\pi i \sum \frac{1}{8i\pi^2 r} e^{-ik_m r} k_m \lim_{k \rightarrow k_m} (k - k_i) \frac{1}{k_0^2 - k^2} \quad (11.68)$$

となる。

積分領域内に $k = +k_0$ があれば、一位の極 $k = +k_0$ における留数から、関数は

$$\begin{aligned} I_2 &= -2\pi i \frac{1}{8i\pi^2 r} \\ &\times (e^{-ik_0 r} k_0 \lim_{k \rightarrow k_0} (k - k_0) \frac{1}{(k_0 - k)(k_0 + k)}) \\ &= -\frac{1}{8\pi r} e^{-ik_0 r} \end{aligned} \quad (11.69)$$

となる。

同様に、積分領域内に $k = -k_0$ があれば、一位の極 $k = -k_0$ における留数から、関数は

$$\begin{aligned} I_2 &= -2\pi i \frac{1}{8i\pi^2 r} \\ &\times (e^{ik_0 r} (-)k_0 \lim_{k \rightarrow -k_0} (k + k_0) \frac{1}{(k_0 - k)(k_0 + k)}) \\ &= -\frac{1}{8\pi r} e^{ik_0 r} \end{aligned} \quad (11.70)$$

となる。

最後に、積分領域内に一位の極がなければ、

$$I_2 = 0 \quad (11.71)$$

である。

極の位置の分類

二つの極が上半平面にあるか、下半平面にあるかで、以下の4つの場合があり、それぞれの場合のグリーン関数は、上で得られた結果をまとめて得られる。

(1) 極の位置が $k_0 + i\epsilon, -k_0 + i\epsilon$ である。

$$I_1 = \quad (11.72)$$

$$I_2 = \tag{11.73}$$

(2) 極の位置が $k_0 + i\epsilon, -k_0 - i\epsilon$ である。

$$I_1 = \tag{11.74}$$

$$I_2 = \tag{11.75}$$

(3) 極の位置が $k_0 - i\epsilon, -k_0 + i\epsilon$ である。

$$I_1 = \tag{11.76}$$

$$I_2 = \tag{11.77}$$

(4) 極の位置が $k_0 - i\epsilon, -k_0 - i\epsilon$ である。

$$I_1 = \quad (11.78)$$

$$I_2 = \quad (11.79)$$

以上のように、実変数の定積分で被積分関数の分母が零になり被積分関数が一位の極を持つとき、積分路を微少にずらして定義しなおした定積分は有限な値をとること、並びに、積分路を微少にずらすことにより、積分の結果が変わる事が分かる。複素関数論でよく知られたコーシーの積分定理では、複素解析関数の閉曲線に沿った積分は必ず零になり、極を持つ複素変数の有理型関数の閉曲線に沿った積分は、積分路の内部にある一位の極の留数で決まる。だから、今のグリーン関数が、積分路を微少に変えただけで値を変える事は、理解できるであろう。無限小なパラメーター $i\epsilon$ を分母に加えることで、積分路の微少な変形が実現できる。

11.5 散乱振幅の近似計算

11.5.1 WKB 近似

位相シフト δ_l の計算を、WKB 近似法に基づいて行なおう。

WKB 近似では、波動関数の位相が、定積分

$$\int_{r_0}^r dr p_r + \frac{\pi}{4} = \int_{r_0}^r \sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} - \frac{2mU(r)}{\hbar^2}} dr + \frac{\pi}{4} \quad (11.80)$$

で与えられる。上の積分で、下限 r_0 は被積分関数にある平方根を正符号とする最小の値である。位相の値は、ポテンシャルが $U(r)$ である場合と $U=0$ の場合でずれがあり、ずれの大きさは、

$$\delta_l = \int_{r_0}^r \sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} - \frac{2mU(r)}{\hbar^2}} dr - \int_{r_0}^r \sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}} dr \quad (11.81)$$

であり、 $U(r)$ が小さい時は、さらに

$$\delta_l = - \int_{r_0}^r \frac{mU(r)}{\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}}} dr \quad (11.82)$$

となる。

11.5.2 Born 近似

次に、積分方程式 (11.39) の第 1 近似を計算しよう。第一近似

$$\psi^{(1)}(\mathbf{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \psi^0(\mathbf{y})U(\mathbf{y})d\mathbf{y} \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \quad (11.83)$$

は、 \mathbf{y} を波源とする球面波が伝播して \mathbf{x} で形成するホイゲンスの原理を示す。ここで $r \rightarrow \infty$ とし、また \mathbf{k}' 方向に入射する平面波の波動関数

$$\psi^{(0)}(\mathbf{x}) = e^{-ik'\cdot\mathbf{y}} \quad (11.84)$$

と $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ での漸近形

$$|\mathbf{x}-\mathbf{y}| \rightarrow |\mathbf{x}| \left(1 - \frac{\mathbf{x}\cdot\mathbf{y}}{|\mathbf{x}|^2}\right) \quad (11.85)$$

を使うと、

$$\psi^{(1)}(\mathbf{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int U(\mathbf{y})d\mathbf{y} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{y}} \quad (11.86)$$

となる。これより、 $\psi^{(1)}$ は球面波の形

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(\mathbf{x}) &= \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \\ f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\mathbf{r})d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \end{aligned} \quad (11.87)$$

であることが分かる。ここで、 \mathbf{q} は入射運動量 \mathbf{k}' と散乱後の運動量 \mathbf{k} の差である交換される運動量である。

上のボルン近似の結果を、クーロンポテンシャルに適用する。

クーロンポテンシャル

クーロンポテンシャル

$$U(r) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}, Q = Ze \quad (11.88)$$

の場合には、積分が

$$\int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = \frac{Q}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2} \quad (11.89)$$

となり、振幅は

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{Q}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2} \quad (11.90)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{Q}{\epsilon_0} \frac{1}{4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \\ \mathbf{q}^2 &= (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta \\ &= 2k^2(1 - \cos \theta) = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{aligned} \quad (11.91)$$

である。これは、“Rutherford の公式” に一致する。

球形ポテンシャル

球形ポテンシャル

$$\begin{aligned} V &= V_0, r \leq R \\ &= 0, r \geq R \end{aligned} \quad (11.92)$$

を近似式 (11.88) に代入して、振幅が

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\mathbf{r}) d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^R V_0 r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\cos\theta d\phi e^{iqr \cos\theta} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^R V_0 r dr \int_0^\pi \frac{1}{iq} (e^{iqr} - e^{-iqr}) \end{aligned} \quad (11.93)$$

となることが分かる。

11.6 球形ポテンシャルによる散乱

球形ポテンシャル

$$\begin{aligned} V &= V_0, r \leq R \\ &= 0, r \geq R \end{aligned} \quad (11.94)$$

中の質点の従う動径方向の微分方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R(r)) + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1) \right) R(r) \right) = \frac{\tilde{p}^2}{2m} R(r) \quad (11.95)$$

である。ただし、右辺の定数係数は、 $r = R$ の中と外で異なり、

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{p}^2}{2m} &= (E - V_0), r \leq R, \\ &= E, R < r \end{aligned} \quad (11.96)$$

である。

いま $V_0 < 0$ として $0 < E$ のエネルギーをもつ散乱状態を求めよう。内部と外部の運動量として

$$\begin{aligned} \tilde{p}_{in} &= \pm \sqrt{2m(E - V_0)}, r \leq R, \\ \tilde{p}_{out} &= \sqrt{2mE}, R < r \end{aligned} \quad (11.97)$$

とおき、さらに、

$$k_{in} = \frac{p_{in}}{\hbar} \quad (11.98)$$

$$k_{out} = \frac{p_{out}}{\hbar} \quad (11.99)$$

とにおいて、 $r < R$ で有界で $R < r$ で自由な波となる波動関数は

$$N_l(k_{in})j_l(k_{in}r), r \leq R, \quad (11.100)$$

$$M_l(k_{out})(\cos \delta_l j_l(\tilde{k}_{out}r) + \sin \delta_l n_l(\tilde{k}_{out}r)), R < r \quad (11.101)$$

と表わせる。

2階微分方程式の解は、関数とその一階微分が連続である。その為、 $r = R$ での波動関数とその一階微分は連続性の条件

$$N_l(k_{in})j_l(k_{in}R) = M_l(k_{out})(\cos \delta_l j_l(i\tilde{k}_{out}R) + \sin \delta_l n_l(i\tilde{k}_{out}R)) \quad (11.102)$$

$$N_l(k_{in})\frac{\partial}{\partial r}j_l(k_{in}r)|_{r=R} = M_l(k_{out})\frac{\partial}{\partial r}(\cos \delta_l j_l(i\tilde{k}_{out}r) + \sin \delta_l n_l(i\tilde{k}_{out}r))|_{r=R} \quad (11.103)$$

を満たす。これらは、規格化定数 N_l, M_l によるが、両辺の比は規格化定数に依存しない。そのため、関係式

$$\frac{\frac{\partial}{\partial r}j_l(k_{in}r)|_{r=R}}{j_l(k_{in}R)} = \frac{\frac{\partial}{\partial r}(\cos \delta_l j_l(i\tilde{k}_{out}r) + \sin \delta_l n_l(i\tilde{k}_{out}r))|_{r=R}}{\cos \delta_l j_l(i\tilde{k}_{out}R) + \sin \delta_l n_l(i\tilde{k}_{out}R)} \quad (11.104)$$

が導かれる。この式で、位相シフトが決定される。

$l = 0$ では、上の式は比較的簡単になる。このとき、

$$j_0(kr) = D\frac{\sin kr}{r}, n_0(kr) = D\frac{\cos kr}{r} \quad (11.105)$$

$$\cos \delta_0 j_0(ikr) + \sin \delta_0 n_0(ikr) = D\frac{\sin(kr + \delta_0)}{r} \quad (11.106)$$

であるので、位相シフトをきめる式 (11.104) は、

$$\frac{k_{in}R \cos k_{in}R - \sin k_{in}R}{R \sin k_{in}R} = \frac{k_{out}R \cos(k_{out}R + \delta_0) - \sin(k_{out}R + \delta_0)}{R \sin(k_{out}R + \delta_0)} \quad (11.107)$$

となり、さらに変形して

$$\frac{k_{in}R \cos k_{in}R - \sin k_{in}R}{\sin k_{in}R} = \frac{k_{out}R \cos(k_{out}R + \delta_0) - \sin(k_{out}R + \delta_0)}{\sin(k_{out}R + \delta_0)} \quad (11.108)$$

となり、最終的に

$$k_{in}R \cot k_{in}R = k_{out}R \cot(k_{out}R + \delta_0) \quad (11.109)$$

が得られる。この両辺は、変数 δ_0 と E の関数として図のようになり、両関数の交点から、 δ_0 が E の関数として決まる。

$$V_0 \rightarrow \infty$$

11.7 クーロンポテンシャルによる散乱

クーロンポテンシャル中にある粒子の束縛状態や散乱振幅は、解析的に求める事ができる。そのため、厳密解が分かり近似によらずに様々な事柄を確認するのに役立ち、また近似法のテストに使える。クーロンポテンシャル問題は、さらに応用の上でも重要であり、また教育的でもある。6章では、球座標を使い水素原子の束縛状態を求めたが、本節では球座標による非束縛状態である正エネルギー解を求め、それらを散乱問題に応用する。また、放物線座標による正エネルギー解とその散乱問題への応用を調べる。

11.7.1 球座標による正エネルギー解

波動関数を、球座標で変数分離形

$$\Psi(\mathbf{x}) = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (11.110)$$

とにおいて、正エネルギーの固有解を求めよう。動径変数についての方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r)R(r) + (\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \alpha \frac{1}{r})R(r) = ER(r) \quad (11.111)$$

となる。次に、

$$r = \frac{\hbar^2}{m\alpha} i \frac{n}{2} \rho \quad (11.112)$$

$$n = \frac{1}{\sqrt{-2\frac{\hbar^2 E}{m\alpha^2}}} = \frac{-i}{k} \quad (11.113)$$

と無次元の変数 ρ に変換して、方程式は

$$R'' + \frac{2}{\rho}R' + [-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}]R = 0 \quad (11.114)$$

となる。解は、規格化定数を C_k として、超幾何級数で

$$R_{k,l} = C_k \frac{1}{(2l+1)!} (2kr)^l e^{-ikr} F(\frac{i}{k} + l + 1, 2l + 2, 2ikr) \quad (11.115)$$

と表わせる。漸近形は、

$$R_{kl} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sin(kr + \frac{1}{k} \log 2kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l) \quad (11.116)$$

$$e^{2i\delta_l} = \frac{\Gamma(l+1 - i/k)}{\Gamma(l+1 + i/k)} \quad (11.117)$$

となる。このように、クーロンポテンシャルでは、位相シフトが解析的に求まる。

11.7.2 放物線座標におけるシュレーディンガー方程式

放物線座標 (ξ, η, ϕ) は デカルト座標と

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\xi\eta} \cos\phi, \\ y &= \sqrt{\xi\eta} \sin\phi, \\ z &= \frac{1}{2}(\xi - \eta) \\ r &= \frac{1}{2}(\xi + \eta) \end{aligned} \quad (11.118)$$

と関連していて、付録にあるようにラプラシアンは、

$$\nabla^2 \Psi(\mathbf{x}) = \left(\frac{4}{\xi + \eta} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right) \right) + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Psi(\mathbf{x}) \quad (11.119)$$

である。これらの関係式を、クーロンポテンシャルをもつシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 - \alpha\frac{1}{r}\right)\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x}) \quad (11.120)$$

に代入して、放物線座標におけるシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{4}{\xi+\eta}\left(\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right)\right) + \frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) - \alpha\frac{2}{\xi+\eta}\right)\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x}) \quad (11.121)$$

を得る。方程式で3変数 ξ, η, ϕ が分離しているので、波動関数を変数分離型

$$\Psi = f_1(\xi)f_2(\eta)e^{im\phi} \quad (11.122)$$

に仮定する。この変数分離型の関数を代入して、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{4}{\xi+\eta}\left(f_2\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}f_1 + f_1\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)f_2\right)\right) - \frac{1}{\xi\eta}m^2f_1f_2\right) - \alpha\frac{2}{\xi+\eta}\right)f_1f_2 = Ef_1f_2 \quad (11.123)$$

を得、さらにこの両辺を f_1f_2 でわって、方程式が

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{4}{\xi+\eta}\left(\frac{1}{f_1}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}f_1 + \frac{1}{f_2}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)f_2\right)\right) - \frac{1}{\xi\eta}m^2\right) - \alpha\frac{2}{\xi+\eta}\right) = E \quad (11.124)$$

となる。これより、あらたな未定定数 β_1, β_2 を導入して、それぞれの変数についての方程式

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{d}{d\xi}f_1\right) + \left[\frac{1}{2}\tilde{E}\xi - \frac{m^2}{4\xi} + \beta_1\right]f_1 = 0 \quad (11.125)$$

$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{d}{d\eta}f_2\right) + \left[\frac{1}{2}\tilde{E}\eta - \frac{m^2}{4\eta} + \beta_2\right]f_2 = 0 \quad (11.126)$$

が得られる。ここで、新たなパラメーター β_1, β_2 は、もとのパラメーターを使い

$$\tilde{E} = \frac{ME}{\hbar^2}, \beta_1 + \beta_2 = \frac{M\alpha}{\hbar^2} \quad (11.127)$$

と表わせる。

z 軸方向に進行する z 軸回りに対称な平面波が、原点を中心とするクーロンポテンシャルにより散乱される問題では、 z 軸対称な解を調べれば良いので、

$$m = 0 \quad (11.128)$$

とおく。このとき、それぞれの変数についての方程式は、

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{d}{d\xi}f_1\right) + \left[\frac{1}{2}\tilde{E}\xi + \beta_1\right]f_1 = 0 \quad (11.129)$$

$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{d}{d\eta}f_2\right) + \left[\frac{1}{2}\tilde{E}\eta + \beta_2\right]f_2 = 0 \quad (11.130)$$

である。ここで、波動関数の境界条件を考慮する。散乱の入射波が z 軸方向の平面波として、

$$\psi = e^{ikz}; -\infty < z < 0, r \rightarrow \infty \quad (11.131)$$

とする。これは、放物線座標では、

$$\psi = e^{ik\frac{(\xi-\eta)}{2}}; \eta \rightarrow \infty \quad (11.132)$$

である。すべての ξ で上のようなになるためには、 $f_1(\xi)$ は ξ について平面波

$$f_1(\xi) = e^{\frac{ik\xi}{2}} \quad (11.133)$$

でなければならない。これを微分して、

$$\xi\frac{d^2}{d\xi^2}f_1(\xi) + \frac{d}{d\xi}f_1(\xi) = -\xi\frac{k^2}{4}f_1(\xi) + i\frac{k}{2}f_1(\xi) = -\left[\frac{1}{2}\tilde{E}\xi + \beta_1\right]f_1 \quad (11.134)$$

が得られる。これと式 (11.129) を比較して、定数 β_1 と \tilde{E} は

$$\tilde{E} = \frac{k^2}{2} \quad (11.135)$$

$$\beta_1 = -i\frac{k}{2} \quad (11.136)$$

であることがわかる。

次に $f_2(\eta)$ を求めよう。 $f_2(\eta)$ は、漸近形として

$$f_2(\eta) = e^{\frac{-ik\eta}{2}}; \eta \rightarrow \infty \quad (11.137)$$

となる必要がある。この漸近形をもつ $f_2(\eta)$ を求めるため、

$$f_2(\eta) = e^{\frac{-ik\eta}{2}}u(\eta) \quad (11.138)$$

とにおいて、 $u(\eta)$ を求める。微分を行ない、

$$\frac{d}{d\eta}f_1(\eta) = \left(\frac{-ik}{2}u(\eta) + u'(\eta)\right)e^{\frac{-ik\eta}{2}} \quad (11.139)$$

$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{d}{d\eta}f_1(\eta)\right) = \left[u'(\eta) - \frac{ik}{2}u(\eta) - \frac{k^2}{4}\eta u(\eta) - ik\eta u'(\eta) + \eta u''(\eta)\right]e^{\frac{-ik\eta}{2}} \quad (11.140)$$

が得られる。これらを $f_2(\eta)$ の微分方程式に代入して、 $u(\eta)$ の満たす方程式

$$\eta u''(\eta) + (1 - ik\eta)u'(\eta) + \frac{M\alpha}{\hbar^2}u(\eta) = 0 \quad (11.141)$$

が得られる。これは、変数変換

$$z = ik\eta \quad (11.142)$$

$$\eta = -ikz, \frac{d}{d\eta} = ik^{-1} \frac{d}{dz}, \left(\frac{d}{d\eta}\right)^2 = -k^{-2} \left(\frac{d}{dz}\right)^2 \quad (11.143)$$

で、合流型の超幾何微分方程式

$$zu''(z) + (1 - z)u'(z) - ik \frac{M\alpha}{\hbar^2}u(z) = 0 \quad (11.144)$$

が得られ、解は、

$$CF\left(-ik \frac{M\alpha}{\hbar^2}, 1, ik\eta\right) \quad (11.145)$$

$$n = k \frac{M\alpha}{\hbar^2} \quad (11.146)$$

となる。

漸近形

合流型超幾何関数の漸近形を代入して、関数が

$$\Psi = f_1(\xi)f_2(\eta) \quad (11.147)$$

$$= C \frac{e^{\frac{n\pi}{2}}}{\Gamma(1 + in)} \left\{ e^{i(kz + n \log k(r-z))} \left[1 - \frac{n^2}{ik(r-z)} \right] + \frac{1}{r} f_c(\theta) e^{i(kr - n \log 2kr)} \right\} \quad (11.148)$$

$$f_c(\theta) = \frac{\Gamma(1 + in)}{i\Gamma(-in)} \frac{e^{-in \log(\sin^2 \theta)}}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

と得られる。係数 C は、平面波の漸近形にあうようにきめて、

$$C = v^{-1/2} \Gamma(1 + in) e^{-\frac{1}{2}n\pi} \quad (11.149)$$

となる。

11.8 散乱振幅と束縛状態

定常状態の波動関数が満たす積分方程式

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{y} G(E, \mathbf{x} - \mathbf{y}) V(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \quad (11.150)$$

と束縛状態との関連を明確にしておこう。積分方程式の右辺第一項は、自由な方程式 $(H_0 - E)\psi_0$ を満たしている。ところで、束縛状態は負エネルギー $E < 0$ の値をもつので、対応する自由な方程式を満たす解は存在しない。だから、束縛状態は、積分方程式、

$$\psi_{\text{束縛}}(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{y} G(E, \mathbf{x} - \mathbf{y}) V(\mathbf{y}) \psi_{\text{束縛}}(\mathbf{y}) \quad (11.151)$$

を満たす。

球型ポテンシャルとクーロンポテンシャルの場合で、散乱振幅は

$$f(\theta) = \quad (11.152)$$

である。一方で、束縛状態は、

$$g = 0 \quad (11.153)$$

の解から決定される。もともと散乱状態と束縛状態は同じ方程式の異なる境界条件を満たす解である。だから、両者が密接な関係をもつ事は、自然なことである。しかしながら、散乱振幅と束縛状態が如何なる関係で結び付くのか、極めて非自明なことである。上の式は、この点について、示唆的である。

散乱振幅はもともと正エネルギーで定義され、正エネルギーが物理的な領域である。散乱振幅を、負エネルギーや複素エネルギーに拡張した変数の関数として考えるとき、散乱振幅の極が束縛状態に対応する事を見よう。

波動関数の $r \rightarrow \infty$ の領域での振る舞いは、正エネルギーと負エネルギーで共通に

$$\xi = rR(r) = A(E) \exp\left(\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} r\right) + B(E) \exp\left(-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} r\right) \quad (11.154)$$

である。この式より、 E が正、負、さらに複素数の領域で係数 $A(E), B(E)$ が満たす性質を明らかにできる。波動関数の上の表示と位相シフトを使う表示と比較して、 $l = 0$ で

$$-\frac{A(E)}{B(E)} = e^{2i\delta_0(E)} \quad (11.155)$$

$$f_0 = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_0} - 1) = \frac{\hbar}{2\sqrt{-2mE}} (A/B + 1) \quad (11.156)$$

となり、 $l \neq 0$ で

$$-\frac{A(E)}{B(E)} = e^{2i\delta_l(E)}(-1)^l \quad (11.157)$$

$$f_l = \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{\hbar}{2\sqrt{-2mE}}((-1)^l A/B + 1) \quad (11.158)$$

となる事が分かる。

負エネルギー $E < 0$ では、波動関数は実数になり、

$$\xi^* = \xi \quad (11.159)$$

$$A(E)^* = A(E) \quad (11.160)$$

$$B(E)^* = B(E) \quad (11.161)$$

となる。これを満たすのは、 E の複素数平面において係数が

$$A(E)^* = A(E^*), B(E)^* = B(E^*) \quad (11.162)$$

を満たしている場合である。また $E = E_0 < 0$ における束縛状態は、二乗可積分の関数で表わされるので、係数の一つが

$$B(E_0) = 0 \quad (11.163)$$

と零になる。いまこのエネルギーの領域で、 $B(E)$ が一位の零点となり

$$B(E) = C_0(E - E_0), A(E_0) = A_0 \quad (11.164)$$

とすると、これらに係数式 (11.156) に代入した散乱振幅は

$$f_0 = \frac{\hbar}{2\sqrt{-2mE}} \left(\frac{A_0}{C_0(E - E_0)} \right) \quad (11.165)$$

と $E = E_0$ で一位の極を持っている。つまり、束縛状態は、散乱振幅の極に対応している事が分かる。だから、散乱振幅を使う事により、散乱問題と束縛状態が統一的に解析する事ができる。

正エネルギー $E > 0$ で、波動関数、

$$\xi = A(E)e^{ikr} + B(E)e^{-ikr}, k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}} \quad (11.166)$$

が実数になる、

$$\xi^* = \xi \quad (11.167)$$

のは、

$$A(E)^* = B(E) \quad (11.168)$$

$$B(E)^* = A(E) \quad (11.169)$$

となるときである。また、 $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$ は E についてリーマン面で定義して、はじめて一価関数になる。散乱振幅の切断の位置は、グリーン関数の性質からも分かるように正エネルギー $E > 0$ にある。

11.9 散乱振幅の解析性

散乱振幅を、複素エネルギーの関数と考えたとき、如何なる性質をもつのが分かれば、有用な情報が得られる。エネルギーや、運動量、角運動量等を複素数に拡張して、物理量をもつ性質を解析することは、現代物理学で行なう常套手段である。誘電率が従うクラマーズクローニツヒの関係式が一つの代表例である。クラマー・クローニツヒの関係式は、誘電率 $\epsilon(\omega) = Re \epsilon(\omega) + iIm \epsilon(\omega)$ の虚部 $Im \epsilon(\omega)$ と実部 $Re \epsilon(\omega)$ の間に成り立つ関係式

$$Re \epsilon(\omega) = \int d\omega' \frac{Im \epsilon(\omega')}{\omega - \omega'} \quad (11.170)$$

のことである。

誘電率は、相関関数 $S(t)$ を使い、

$$\epsilon(\omega) = \int_0^\infty dt e^{i\omega t} S(t) \quad (11.171)$$

と書かれるので、 ω が実数部と虚数部をもつ複素数である時

$$\omega = Re \omega + iIm \omega \quad (11.172)$$

ω の上半平面

$$Im \omega > 0 \quad (11.173)$$

で、解析的である。

このため、新たな変数 ω^2 では、実軸を除く全平面で解析的である。このため、適当な閉

経路にそつ積分に対するコーシー・リーマンの関係式

$$\frac{1}{2\pi i} \oint \frac{d\omega' e(\omega')}{\omega^2 - \omega'^2} = e(\omega^2) \quad (11.174)$$

を満たしている。積分路を

第12章 非定常状態と波束

今までは、エネルギーの固有状態である定常状態による散乱現象を調べ、散乱振幅や散乱断面積を求めた。この場合の散乱状態は、エネルギー E が確定した定常状態であり、時間に依存しないシュレーディンガー方程式の適当な境界条件を満たす波動として求められた。境界条件は、 z 座標が $-\infty$ である領域では、 z 方向に進行する平面波に一致し、 r が大きい領域で $+$ の動径方向に進む球面波に一致するように取る。この境界条件は、実際の実験状況にほぼ一致する。しかしながら、 z 座標が $-\infty$ である領域で、波は、 z 方向に進行する平面波に厳密に一致しているだろうか？特に、運動量が一つの値をとる平面波は、空間的には無限に広がる波である。一つの波としての空間的な広がり、本当は有限な大きさである。この大きさをコヒーレンス長と呼ぶことにしよう。コヒーレンス長が、大きい波は、平面波でよく近似される。そのため、散乱を定常状態で解析する事が可能である。しかしながら、コヒーレンス長が短い波は、平面波による近似は良くない。またエネルギーが一つの決まった値をとるわけではなく、異なるエネルギー値を持つ波が重ね合わされている。この波は、定常状態から大きく異なる。だから、定常状態による定式化による解析では無理がある。この場合、時間に依存するシュレーディンガー方程式を、扱って散乱が理解される。4章や6章で調べた波束が、代表的な非定常状態である。小さな波束は、粒子的な性質をもつ波動状態であり、時間の発展とともに波束の位置が変化する非定常状態である。このような小さな波束を入射波とする波動解は、一方で、重なりあう時間が短い。そのため、遷移に際して運動エネルギーが、保存するわけではない。だから、エネルギーを一定に保つ定常解に基づいて解析できる保証はない。だから、散乱振幅は、定常状態とは異なる新たな興味深い性質を持つ。また、 $r \rightarrow \infty$ ではなく、 r が有限である領域における散乱が、重要な働きをしているらしいことが、明確になりつつある。有限な距離での散乱を調べるには、やはり有限な大きさを持つ非定常状態による定式化が必須である。散乱における有限サイズ効果も、本章で扱う。

12.1 自由な波束

波束は、 t, \vec{x} に依存し関数の絶対値が二乗可積分なシュレーディンガー方程式の解である。平面波の重ね合わせとして、

$$\int d\vec{k} e^{\frac{E(\vec{k})}{i\hbar}t - \vec{k}\vec{x}} \alpha(\vec{k}) \quad (12.1)$$

と表わされる。ここで、 $E(\vec{k})$ は、エネルギーであり、考察する物理系で決まった関数形をとる。相対論的に不変な系では、

$$E(\vec{k}) = \sqrt{\vec{k}^2 + m^2} \quad (12.2)$$

であり、非相対論的な系では、

$$E(\vec{k}) = \frac{\vec{k}^2}{2m} \quad (12.3)$$

である。

12.1.1 波束の形、運動と散乱

最も単純な波束は、運動量の重みとしてガウス型を使う”Gaussian 波束”である。“Gaussian 波束”は計算も簡単に行え、また運動量と位置の不確定性関係が最小になっている最小波束である。中心座標 \vec{X}_0 、中心運動量 \vec{P}_0 である波束状態 $|\vec{P}_0, \vec{X}_0, T_0\rangle$ は座標表示で、

$$\langle t, \vec{x} | \vec{P}_0, \vec{X}_0, T_0 \rangle = N_3 \left(\frac{\sigma}{2\pi}\right)^{3/2} \int d\vec{p} e^{-i(E(\vec{p})(t-T_0) - \vec{p}(\vec{x}-\vec{X}_0)) - \frac{\sigma}{2}(\vec{p}-\vec{P}_0)^2} \quad (12.4)$$

である。ここではエネルギーが質量 m を使い、 $E(\vec{p}) = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$ となる相対論的な粒子を考える。

時刻が $t = T_0$ では、

$$\langle T_0, \vec{x} | \vec{P}_0, \vec{X}_0, T_0 \rangle = N_3 \left(\frac{\sigma}{2\pi}\right)^{3/2} \int d\vec{p} e^{i(\vec{p}(\vec{x}-\vec{X}_0)) - \frac{\sigma}{2}(\vec{p}-\vec{P}_0)^2} \quad (12.5)$$

となり、運動量積分が簡単に計算でき、結果は

$$N_3 e^{-\frac{1}{2\sigma}(\vec{x}-\vec{X}_0)^2 + i\vec{P}_0(\vec{x}-\vec{X}_0)} \quad (12.6)$$

とやはりガウス型の関数になっている。座標の広がり、運動量の広がり、の逆数に比例している。

12.1.2 波束の形

時間反転や空間反転に対して不変な波束を考えることにする。これは、測定器における物理過程は、量子電気力学に起源をもつためこれらの不変性をもち、だからこれらの対称性を保持して平面波を重ね合わせた波束を使うことで、実験の状況を反映した波束となる。波束の効果で、人為的に対称性を破ることをしない波束である。ガウス波束は、この性質をもつ。また、より一般化した波束を考える場合でも、時間反転や空間反転に対して不変な波束とする。この性質は、

12.1.3 波束の運動

次に、波束の時間発展を調べる。まず、 $t - T_0$ が小さい時、運動量積分は $\vec{p} = \vec{P}_0$ の周りの計算から

$$N_3 e^{-\frac{1}{2\sigma}(\vec{x} - \vec{X}_0 - \vec{v}_0(t - T_0))^2 - i(E(\vec{P}_0)(t - T_0) - \vec{P}_0(\vec{x} - \vec{X}_0))} \quad (12.7)$$

$$\vec{v}_0 = \frac{\partial}{\partial p_i} E(\vec{p}) \Big|_{\vec{p} = \vec{P}_0} \quad (12.8)$$

と中心が一定の速度 \vec{v}_0 で平行移動する波束である。 $t = T_0$ が大きい時は、波束が広がる。運動量積分 (12.4) は、時間に依存する項を取り入れたガウス積分か、または大きな時間振動の効果を取り入れた停留位近似

$$\frac{\partial}{\partial p_i} \phi = 0 \quad (12.9)$$

$$\phi = (E(\vec{p})(t - T_0) - \vec{p}_0(\vec{x} - \vec{X}_0)) \quad (12.10)$$

の解、

$$\vec{v} = \frac{(\vec{x} - \vec{X})}{(t - T_0)} \quad (12.11)$$

から決まる。(12.11) は、時刻と位置座標から速度ベクトルを決める式であり、次に速度ベクトルから運動量ベクトルが決まる。この方法では、中心運動量 \vec{P}_0 に一致する座標を \vec{X}_0 とすると、この位置からずれた位置における波動関数が、ガウス関数で書かれる。その結果、いずれの方法でも、結果はほぼ同じであり、

$$\tilde{N}_3 e^{-\frac{1}{2\sigma} \left(\frac{E(\vec{P}_0)}{t - T_0}\right)^2 (\vec{x} - \vec{X}_0)_T^2 - \frac{1}{2\sigma} \left(\frac{E(\vec{P}_0)^6}{m^4(t - T_0)^2}\right) (\vec{x} - \vec{X}_0)_L^2 - i(E(\vec{P}_0)(t - T_0) - \vec{P}_0(\vec{x} - \vec{X}_0))} \quad (12.12)$$

となる。波束の広がり、波の進行方向（たて方向）と垂直方向（横方向）で異なり、縦方向では、

$$\sigma_L = \sqrt{2\sigma} \frac{m^2 |t - T_0|}{E(\vec{P}_0)^3} + \sqrt{2}\sigma \quad (12.13)$$

横方向では、

$$\sigma_T = \sqrt{2\sigma} \frac{|t - T_0|}{E(\vec{P}_0)} + \sqrt{2}\sigma \quad (12.14)$$

である。よって、広がる速さは、

$$v(\sigma)_L = \sqrt{2\sigma} \frac{m^2}{E(\vec{P}_0)^3} \quad (12.15)$$

$$v(\sigma)_T = \sqrt{2\sigma} \frac{1}{E(\vec{P}_0)} \quad (12.16)$$

となっている。質量が零であるときは縦方向の広がり是不変であり、小さな質量でもやはり、縦方向の広がりの変化は無視できることが多い。

$$v(\sigma)_L = 0 \quad (12.17)$$

しかしながら、横方向の広がり質量に無関係であり、速度の方向の広がりを反映している。

12.2 波束の大きさ

波束の大きさは、波の平均自由行程で見積もられる。また、in-coherent な散乱による平均自由行程は、散乱断面積 σ と散乱体の数密度 n で

$$l_{\text{平均自由行程}} = \frac{1}{\sigma n} \quad (12.18)$$

となる。

12.2.1 光

まず光のコヒーレンス長を見積もる。真空中に孤立した光は安定であり、他の物質に吸収されないし他の物質に変化もしない。だから、理想的な波となっていて、無限に大きな平面波とみなしてよい。ところが、光は物質と相互作用するため、物質がある状況での光は、物質との散乱のために、無限に大きな平面波ではない。たとえ、最初に大きな平面波であったとしても、散乱のためにコヒーレンスを失い、コヒーレンスを保つのは有限な長さに限られる。この長さは、平面波によって計算される断面積 σ と散乱体の数密度 n から計算される平均自由行程 (12.18) である。

光 γ と電子、原子、分子、等のミクロな物体や水滴等のミクロとマクロの中間的なセシミクロな物体との相互作用や散乱は、よく理解されている。

光と自由電子：

光と自由電子は電磁気結合定数 e の 2 次の過程で相互作用する。

自由電子で電磁気結合定数 e の 1 次の過程で、散乱が生じないのは、エネルギー・運動量保存則が成り立つためである。運動量 p_1 の電子が運動量 k の光を吸収して運動量 p_2 の電子に変換される過程

$$\text{電子 } (p_1) + \gamma(k) \rightarrow \text{電子 } (p_2) \quad (12.19)$$

で、エネルギー・運動量の保存より、

$$p_1 + k = p_2 \quad (12.20)$$

$$p_1^2 + k^2 + 2p_1 k = p_2^2 \quad (12.21)$$

となる。ここで、 $p_1^2 = p_2^2 = m^2$ 、 $k^2 = 0$ 、 $p_1 k = k_0 \sqrt{\vec{p}_1^2 + m^2} - \vec{p}_1 \vec{k}$ より、

$$m^2 + 2|\vec{k}|(\sqrt{\vec{p}_1^2 + m^2} - |\vec{p}_1| \cos \theta) = m^2 \quad (12.22)$$

となるが、この等式が成立するのは

$$|\vec{k}| = 0 \quad (12.23)$$

に限られる事が分かる。だから、無限に小さなエネルギーの光子を例外として、自由電子は1次の過程では光と散乱しない。

自由電子と光の散乱は、電磁気結合定数 e の2次で生ずる過程であるコンプトン散乱やその低エネルギー極限であるトムソン散乱で引き起こされる。これらの散乱断面積は

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{コンプトン}} &= \sigma_T, \hbar\nu \ll mc^2 \\ &= \sigma_T \frac{3}{8} \frac{mc^2}{\hbar\nu} \left(\log \frac{2\hbar\nu}{mc^2} + \frac{1}{2} \right), \hbar\nu \gg mc^2 \end{aligned} \quad (12.24)$$

$$\sigma_{\text{トムソン}} = \frac{8\pi}{3} r_e^2 \quad (12.25)$$

で与えられる。ここで、 r_0 は古典電子半径

$$r_0 = \frac{e^2}{4\pi m_e c^2} = 2.82 \times 10^{-13} \text{cm} \quad (12.26)$$

である。

光と束縛電子：

電子が束縛状態にある時は、事情が異なる。光と束縛電子をもつ原子は、電磁気結合定数 e の1次で相互作用して反応を起こす。光を吸収また放出することにより原子は、基底状態から励起状態に遷移するか、または励起状態から基底状態に遷移する。

一つの束縛状態 m から他の束縛状態 n に光を放出して遷移する確率を求めよう。ここでエネルギー E_m と E_n の大小の差で、光の吸収か放出が起きる。 e の最低次での行列要素は、

$$\langle n, \vec{k} | H_{int} | m \rangle = \frac{e}{mc} \sqrt{\frac{c\hbar}{2k_0 L^3}} \epsilon(\vec{k}) \int d\vec{x} \phi_m^* \vec{p} e^{-i(\vec{k}\vec{x})} \phi_m, \quad (12.27)$$

$$H_{int} = \int d\vec{x} \frac{e}{mc} \vec{p} \vec{A}(\vec{x}) \quad (12.28)$$

である。光の波数は、エネルギー保存則から束縛電子のエネルギー準位で

$$k = \frac{(E_m - E_n)}{c\hbar} \quad (12.29)$$

と決まる。水素原子の場合では、エネルギー差は、おおよそ

$$E_m - E_n = \alpha^2 \frac{mc^2}{2} \quad (12.30)$$

である。

この時の散乱断面積は

$$\sigma_{\text{原子励起}} = \quad (12.31)$$

$$\sigma_{\text{原子遷移}} = \quad (12.32)$$

となり、 e^2 のオーダーである。そのため、 e^4 のオーダーであるトムソン散乱やコンプトン散乱よりも、はるかに大きくなる。

物質中の光

原子と相互作用して、光は物質中でエネルギーを失う。エネルギーを失う割合を表わす "attenuation length" は、

$$\lambda [g/cm^2] \quad (12.33)$$

であり、物質の密度が

$$\mu [g/cm^3] \quad (12.34)$$

であるとき、平均自由行程は、

$$l_{\text{平均}} = \frac{\lambda [g/cm^2]}{\mu [g/cm^3]} = \frac{\lambda}{\mu} [cm] \quad (12.35)$$

である。

例:平均自由行程と波長

温度 $T=4000K$ で、 $k_B T$ 、attenuation length、平均自由行程等のパラメーターは

$$kT = 8.6 \times 10^{-5} eV K \times 4000 = 0.34 eV$$

$$\text{attenuation length } \lambda [g/cm^2] = 10^{-7} [g/cm^2]$$

$$\mu = 1 [g/cm^3] \text{ の場合: } l_{\text{平均}} = \frac{\lambda}{\mu} = 10^{-7} cm$$

$$\text{波長: } \lambda_{\text{波長}} = \frac{\hbar c}{0.34 eV} = \frac{200 \times 10^6 \times 10^{-13} eV cm}{0.34 eV} = 6 \times 10^{-5} cm$$

である。

太陽表面の値は：

平均密度： $1.41g/cm^3$

温度： $6000K$

物質から飛び出す光

物質中で平均自由行程 $l_{\text{平均}}$ をもつ光が、物質内から物質外の真空中に放射されたときどのようになるだろうか。この時、物質と真空の境界は平らであるとする。物質内と物質外（真空）での光の速度を、

$$v_{\text{物質}}, c \quad (12.36)$$

とする。コヒーレンスを保っている光が境界を通過する時間は、内部と外部で

$$\delta\tau_{(\text{内})} = \frac{l_{\text{平均}}}{v_{\text{物質}}} \quad (12.37)$$

$$\delta\tau_{(\text{外})} = \frac{l_{\text{波束}}}{cv} \quad (12.38)$$

である。これらは等しいので、物質外部での波束の大きさは、

$$l_{\text{波束}} = \frac{c}{v_{\text{物質}}} l_{\text{平均}} \quad (12.39)$$

である。

12.2.2 電子

電子は、電荷をもつ最も軽い粒子であり、電磁場や電荷との相互作用でコヒーレンスの性質が決まる。電子と荷電粒子との散乱は、光子交換によるラザフォード散乱である。ラザフォード散乱の微分断面積は e^4 のオーダーの

$$\sigma_{\text{Rutherford}} = \quad (12.40)$$

であり、角度について積分して全断面積が求められる。しかし、角度が零 $\theta = 0$ となる超前方散乱では、断面積は発散している。光子が零質量であるため、光子を交換する振幅

$$\bar{u}(\vec{p}_1)\gamma_\nu u(\vec{p}_2) \frac{e^2}{q^2} U(\vec{q}_1)\gamma_\nu U(\vec{q}_2) \quad (12.41)$$

で、交換する運動量の 2 乗が

$$\begin{aligned} q^2 &= (p_1 - p_2)^2 = 2m_e^2 - 2(p_1 p_2) \\ &= -2(\sqrt{p_1^2 + m^2} \sqrt{p_2^2 + m^2} - p_1 p_2 \cos \theta) + 2m^2 \\ &= 2(m^2 - m^2 - p_1^2 + p_1^2 \cos \theta) = -2p_1^2(1 - \cos \theta) \end{aligned} \quad (12.42)$$

となり、前方 $\theta = 0$ では、分母が零となることによる。また、クーロンポテンシャルが長距離力であることから、引き起こされている。この前方散乱の発散は、クーロンポテンシャルが、近距離力に遮蔽された状況では、生じない。遮蔽されたクーロンポテンシャルの遮蔽長は、ほぼ a で与えられる。

12.2.3 他の素粒子

パイ中間子や、K 中間子、ミュオンレプトンは、電子よりも 100 倍程度重い粒子であり、電子と陽子の中間の質量をもつ粒子である。質量の違いを反映して、これらの重い粒子が、エネルギーを失う確率は電子よりもはるかに小さい。これら重い粒子の平均自由行程は、

$$l_{\text{平均、ミュオン}} = \quad (12.43)$$

$$l_{\text{平均、パイ中間子}} =$$

$$l_{\text{平均、陽子}} =$$

となる。それぞれの、物質中での平均自由行程は、グラフ のようになる。

12.3 mass singularity:infrared divergence

Lee-Nauenberg, Phys. Rev. D133, B1549 ('64)

縮退がある時、摂動論を単純に適用すると

$$\frac{\langle i|V|j\rangle}{E_i - E_j} \quad (12.44)$$

のエネルギー分母 $E_i - E_j$ が零になる事がある。この時、級数は発散するので、近似解を求めることが出来ないように見える。分母が零になるのは、異なる状態が同じエネルギーをもつ縮退に起因している。発散を救う一つの方法は、分母が零になる時の分子の行列要素を零にすることである。このため、縮退した空間内で基底 $|i\rangle$ を組み直す変換

$$|i\rangle = U_{ij}|\tilde{j}\rangle \quad (12.45)$$

を行い、相互作用項を対角形

$$U_{ij}V_{jk}U_{kl}^\dagger = \delta_{il}\tilde{V}_i \quad (12.46)$$

にする。相互作用が対角形であるので、異なる状態への遷移は消える。だから、この基底を使う摂動論では、分母が零になることはない。

散乱

散乱で、おきる上の発散を抑える一つの方法は、終状態や初期状態で和を取った確率を使うことである。ユニタリ演算子 U_{pm} は、

$$U^\dagger(H_0 + H_1)U = E \quad (12.47)$$

$$U = U_+; t \rightarrow \infty, U_-; t \rightarrow -\infty \quad (12.48)$$

を満たし、散乱演算子 S が、 U_\pm で

$$S = U_-^\dagger U_+ \quad (12.49)$$

と表わせる。だから、状態 a から状態 b への遷移確率は、

$$|S_{ba}|^2 = \sum_{ij} [(U_-)_ib^* (U_-)_{jb}] [(U_+)_{ia} (U_+)_{ja}^*] \quad (12.50)$$

である。

U を g について摂動展開して、

$$(U_\pm)_{ij} = \delta_{ij} + g(E_i - E_j \pm i\alpha)^{(-1)}(1 - \delta_{ij})(H_1)_{ij} + O(g^2) \quad (12.51)$$

と書く。 E_i と E_j は状態 i と j のエネルギーであり、 α は正定値の無限小の数である。また、縮退した状態の空間を $D(E_a)$ と書き表わす。 U と U^\dagger の積を縮退した状態の空間 $D(E_a)$ でたした行列を

$$T_{ij}(E_a) = \sum_{D(E_a)} U_{ia} U_{ja}^* \quad (12.52)$$

とする。行列 T に摂動展開を代入して計算し、 g の一次で

$$\begin{aligned} T_{ij}(E_a) &= \sum_{D(E_a)} U_{ia} U_{ja}^* \quad (12.53) \\ &= \sum (\delta_{ia} + g(E_i - E_a \pm i\alpha)^{-1}(1 - \delta_{ia})(H_1)_{ia})(\delta_{ja} + g(E_j - E_a \mp i\alpha)^{-1}(1 - \delta_{ja})(H_1)_{ja}) \\ &= \sum 1 + \sum g(E_j - E_i \mp i\alpha)(1 - \delta_{ij})(H)_{ji}^* + \sum g(E_i - E_j \pm i\alpha)^{-1}(1 - \delta_{ij})(H)_{ij} + O(g^2) \\ &= \sum 1 \end{aligned}$$

とうち消す。よって、

$$\sum_{a,b} |S_{ab}|^2 \quad (12.54)$$

は発散しない。つまり、初期状態や終状態をたした確率は発散しない。

縮退した状態の空間で和を取った確率は、有限である。

colinear singularity

電子が光を放出してご再吸収するとして、エネルギー差は、

$$k + E(p - k) - E(p) = k + \sqrt{(p - k)^2 + m^2} - \sqrt{p^2 + m^2} \quad (12.55)$$

である。いま、 \vec{p} と \vec{k} が平行であり

$$\vec{p} // \vec{k} \quad (12.56)$$

とする。エネルギー差は、

$$k + E(p - k) - E(p) = k + p - k + \frac{m^2}{2(p - k)} - \left(p + \frac{m^2}{2p}\right) \quad (12.57)$$

$$= \frac{m^2}{2(p - k)} - \frac{m^2}{2p} \quad (12.58)$$

となり、高エネルギー $p \rightarrow \infty$ で、零になる。エネルギー $10^{11} GeV$ の陽子では、

$$m = 1 GeV, p = 10^{11} GeV/c \quad (12.59)$$

エネルギー差は、

$$\Delta E = 10^{-2} eV \quad (12.60)$$

の大きさである。

12.3.1 波束の効果が有意か

通常は、波束の効果は無視できる。特に、振幅 f が

$$f_{\text{波束}}(E, P; \Delta E, \delta\vec{P}) = f_{\text{平面波}}(E, P; \Delta E = 0, \delta\vec{P} = 0) \quad (12.61)$$

を満たす時、波束の振幅は平面波の振幅と近似的に等しい。しかし、逆に

$$f_{\text{波束}}(E, P; \Delta E, \delta\vec{P}) \neq f_{\text{平面波}}(E, P; \Delta E = 0, \delta\vec{P} = 0) \quad (12.62)$$

である場合、波束の振幅が重要になる。特に、保存則で禁じられる過程が、波束では保存則が近似的になる事がある。この時、波束の効果は大きくなり得る。熱平衡状態での期待値は、ある過程とその逆過程が等しい寄与をする。また、すべての状態が等しく関与する。このため、波束で計算しても平面波で計算しても、あまり変わらないと思われる。平衡からずれた現象では、事情は異なる。だから、波束の効果は、重要である。

12.3.2 波束と有限温度

有限温度 T 、有限密度 n_0 でクーロンポテンシャルは移動する電荷の影響で遮蔽される。遮蔽長は、デバイスクリーニング運動量

$$q_D^2 = \frac{4\pi n_0 e^2}{k_B T} \quad (12.63)$$

より、

$$\phi(x) = -e \frac{1}{x} e^{-q_D x} \quad (12.64)$$

と表わされる。長さ

$$\delta x = \frac{1}{q_0} = \left(\frac{k_B T}{4\pi n_0 e^2} \right) \quad (12.65)$$

を具体的に見積もろう。

12.4 波束の散乱

波束は、有限な大きさと速度をもつ波である。そのため、複数の波束が衝突した時、これらが重なっている空間や時間は有限の幅をもっている。波が、この幅の中にあるのは、有限の時間や空間である。だから、散乱振幅を形成する時間は有限幅をもつ。有限幅の時間では、

エネルギーの保存則や運動量の保存則は近似的に成立し、小さく破れる。図の2体散乱振幅では、エネルギーや運動量の保存則は、近似的に

$$e^{-\frac{\sigma_t}{2}(\sum_i E_i - \vec{v}_0(\sum_i \vec{p}_i))^2} \quad (12.66)$$

$$e^{-\frac{\sigma_s}{2}(\sum_i \vec{p}_i)^2}, \vec{v}_0 = \frac{1}{\sum_l \frac{1}{\sigma_l}} \sum_i \frac{1}{\sigma_i} \vec{v}_i \quad (12.67)$$

となる。ここで、 \vec{v}_0 は波束の速度と広がりから決まる、散乱系の速度である。このように、波束の時間方向の広がり σ_t と、運動する系での近似的なエネルギー保存則を満たしている。非相対論的な波束では、速度が小さいので、系の運動は無視できるが、相対論的な波束では、 \vec{v}_0 項は大事な働きをする。また、運動量保存則は、波束の空間方向の広がり σ_s で決まる近似的なものとなる。

波束の状態は、完全性を満たし、

$$\sum_{\vec{P}, \vec{X}} |\vec{P}, \vec{X}\rangle \langle \vec{P}, \vec{X}| = 1 = \int d\vec{p} |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| \quad (12.68)$$

ている。このため、

$$\sum_{out, \text{波束}} |\langle \psi_{out, \text{波束}} | \psi_{in} \rangle|^2 = \sum_{out, \vec{p}} |\langle \psi_{out, \vec{p}} | \psi_{in} \rangle|^2 = \quad (12.69)$$

と、すべての終状態の和を取ると全確率は等しくなる。

$$\sum_{in, \text{波束}} |\langle \psi_{out} | \psi_{in, \text{波束}} \rangle|^2 = \sum_{out} |\langle \psi_{out} | \psi_{in, \text{波束}} \rangle|^2 \quad (12.70)$$

となり、すべての in - 状態での平均や和は等しくなる。すべての状態ではなく、一部の状態の平均や和は、波束の場合と平面波の場合で異なる。

12.5 波束とエネルギー・運動量保存則

波束の特徴は、有限な大きさをもっていることである。このため、古典粒子に近い振る舞いをする。しかし一方で単純な粒子とは異なり、波の性質を保持している。古典的な振る舞いと、波動的な振る舞いを合わせ持つことは、興味深い。通常は、波束は古典力学と量子力学をつなぐ働きをして、大きな波束では波動的な性質が強くなり、小さな波束では、粒子的な性質が強くなると思われている。ところが、小さな波束は粒子的でありながら、同時に波としての位相を保つならば、波動的な性質を併せて持つことになる。もしそうであるならば、波束は、単純な古典力学による運動とは異なる現象を示すはずである。

光は、本来波動方程式で記述されるが、波の性質があからさまにあらわれる波動光学と、波の性質は隠れて進行方向だけが問題になる幾何光学に分かれる。両者の違いは、主に光の

波長と物体の大きさとの関連で区別できる。物体の大きさが、光の波長よりもはるかに大きいならば、光の波動的な性質は重要ではなく光の進行方向だけを問題にするので十分である。だから、光は幾何光学で扱われる。一方で、物体の大きさが波長と同程度かそれ以下であれば、波としての性質が重要であり、光は波動光学で扱われる。

可視光では、波長は数千オングストローム (数 $10^3 \times 10^{-10} =$ 数 10^{-7} M) である。マクロの物体は、はるかに大きい。だから、マクロな物体との間で引き起こされる物理をしらべるうえでは、幾何光学が良い。しかし、可視光とミクロに近い小さな物体との間の物理を調べる際には、波動光学が使われる。干渉や、回折がこれらの物理現象の代表的なものである。例えば、虹は光が小さな水滴で屈折し、屈折角が光の波長で異なることより生じたマクロなスケールで発現する干渉効果である。変調による効果とみなせるであろう。

電子、ミュオン、パイ中間子、K - 中間子、陽子は古典力学では粒子として扱われるが、量子論に起源をもつ小さな波束とした時、中心の位置、運動量、に加えて位相を持っている。位置と、運動量は古典力学の変数であるが、位相は粒子の古典力学にはない。位相は、作用 S をプランク定数 \hbar を単位として表した大きさを持つので、一般には非常に大きくなる。そのため、物理系の微小な変化に対してさえ、通常は急激に変化する。だから、位相を平均化した物理量が、マクロな世界の古典論を記述し、だから、古典論へ移行した物理では、位相は無視できる。この過程は、波動光学から幾何光学での移行と同じである。逆に、位相の振る舞いがまったく異なり、打ち消されず残り物理的な効果に影響する運動があれば、位相の特徴を保持する粒子的な運動が存在することになる。このような状況における粒子は、位相を持ちながら粒子的に振る舞うことになる。この状態における粒子は、古典粒子とは異なり新たな様相を呈することになる。次に、この状況を考察しよう。

12.5.1 位置、運動量、位相

位置、運動量と、位相の3変数を持つ波束は、位相のために単純な古典力学的な粒子とは異なる運動を行う。これを、明らかにしておこう。一つの特徴は、これらの散乱では位相が決まり、また運動量、エネルギーが近似的に保存することである。運動量や位置の広がりを

$$\begin{aligned} \delta \vec{p} \\ \delta \vec{X} \end{aligned} \tag{12.71}$$

とし、また子のエネルギーの広がりによって決まる位相の広がりを

$$\delta E \frac{\partial}{\partial E} \phi_{(particle)} = \delta \phi_{particle} \tag{12.72}$$

とする。これらの3変数の広がり、いずれも小さいとする。この時、この粒子は、波の特徴を持つ。だから、波の特徴である干渉や回折をはじめとする波動現象を示す。

波動現象

位相が微小に異なる複数の波束の和は、干渉した波となる。うなりや、変調波、回折波を、波束で構成する。質量が小さい相対論的な波の波束では、エネルギーと運動量との関係と、位置と時間との関係が成り立つため、波束の位相がきわめてゆっくり変化する。だから、波束の位相に起因する干渉が起きる。ニュートリノ波束の干渉が、解析されて、興味深い結果が得られている。(参考論文、石川-飛田)

このような、干渉や、うなりや、量子的な波の変調に関する新たな物理を探ることは、極めて興味深い。これからの緊急な問題である。新たな物理量の測定や、新たな測定法の道を開く可能性がある。

近似的なエネルギー・運動量保存則

波束の一つの特徴は、有限な大きさを持っていることであり、複数の波束の衝突にさいして互いが重なる時間は有限な範囲 δt である。だから、相互作用しあう時間が有限であるので、衝突後のエネルギーは、衝突前の値に厳密に一致するわけではなく、近似的に一致する。衝突前後のエネルギー差は、不確定性関係よりおおよそ

$$\delta E = \frac{\hbar}{\delta t} \quad (12.73)$$

である。

古典力学では、エネルギーは厳密に保存するし、量子力学の平面波の散乱でも境界条件が $t = \pm\infty$ で与えられるとき、エネルギーは厳密に保存する。その点、波束ではエネルギーが近似的に保存するため、いずれとも異なる。では波束の近似的なエネルギー保存則より、生ずる現象があるだろうか。

まず、波束の自由電子と光の相互作用、

$$\text{電子 (波束; } \vec{P}_1, \vec{X}_1, T_1) \rightarrow \text{電子 (波束; } \vec{P}_2, \vec{P}_2, T_2) + \text{光 } (\vec{k}) \quad (12.74)$$

を考えよう。平面波の通常の散乱では、エネルギー運動量の保存を使うと遷移確率は零になるが、波束では有限な値となる。波束での有限な遷移確率は、束縛電子と光との散乱に近い。

スピノールを波束の生成・消滅演算子で展開する。通常の場合の平面波展開(フーリエ展開)における生成・消滅演算子、

$$\psi(\vec{x}, t) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{\omega_p}} [\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle e^{-ip_0 x_0} u(\vec{p}, s) a(\vec{p}, s) + \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle v(\vec{p}, s') b^\dagger(\vec{p}, s')] \quad (12.75)$$

を重ね合わせて、波束の生成・消滅演算子が、

$$A_s(\vec{P}, \vec{X}, T, t) = \int d\vec{p} \langle \vec{P}, \vec{X}, T | \vec{p} \rangle a(\vec{p}, s) \quad (12.76)$$

$$B_s^\dagger(\vec{P}, \vec{X}, T, t) = \int d\vec{p} \langle \vec{P}, \vec{X}, T | \vec{p} \rangle b^\dagger(\vec{p}, s) \quad (12.77)$$

と表わせる。また逆の関係は

$$a(\vec{p}, s, t) = \int \frac{d\vec{P}d\vec{X}}{(2\pi)^3} \langle \vec{p} | \vec{P}, \vec{X}, T \rangle A_s(\vec{P}, \vec{X}, T) \quad (12.78)$$

$$b^\dagger(\vec{p}, s, t) = \int \frac{d\vec{P}d\vec{X}}{(2\pi)^3} B_s^\dagger(\vec{P}, \vec{X}, T) \langle \vec{P}, \vec{X}, T | \vec{p} \rangle \quad (12.79)$$

である。これらを場の演算子に代入して、 $\psi(\vec{x}, t)$ が波束の生成・消滅演算子を使い

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{\omega_p}} [\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle e^{-ip_0 x_0} u(\vec{p}, s) \int \frac{d\vec{P}'d\vec{X}'}{(2\pi)^3} A_s(\vec{P}', \vec{X}') \langle \vec{p} | \vec{P}', \vec{X}', T \rangle \\ &\quad + \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle e^{ip_0 x_0} v(\vec{p}, s') B_s^\dagger(\vec{P}, \vec{X}, T, t) \langle \vec{P}, \vec{X}, T | \vec{p} \rangle] \quad (12.80) \\ &= \int \frac{d\vec{P}'d\vec{X}'}{(2\pi)^3} [A_s(\vec{P}', \vec{X}', T) e^{-ip_0 x_0} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{\omega_p}} \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle u(\vec{p}, s) \langle \vec{p} | \vec{P}', \vec{X}', T \rangle \\ &\quad + B_s(\vec{P}, \vec{X}, T) \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{\omega_p}} \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle v(\vec{p}, s') \langle \vec{P}, \vec{X}, T | \vec{p} \rangle e^{ip_0 x_0}] \\ &= \int \frac{d\vec{P}'d\vec{X}'}{(2\pi)^3} [A_s(\vec{P}', \vec{X}', T) e^{-ip_0(x_0-T)} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{\omega_p}} \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle u(\vec{p}, s) \langle \vec{p} | \vec{P}', \vec{X}' \rangle \\ &\quad + B_s(\vec{P}, \vec{X}, T) \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{\omega_p}} \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle v(\vec{p}, s') \langle \vec{P}, \vec{X} | \vec{p} \rangle e^{ip_0(x_0-T)}] \end{aligned}$$

と表現される。

同様に、 $\bar{\psi}(\vec{x}, t)$ は

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(\vec{x}, t) &= \int \frac{d\vec{P}d\vec{X}}{(2\pi)^3} [A_s^\dagger(\vec{P}, \vec{X}, T) e^{ip_0(x_0-T)} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{\omega_p}} \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \bar{u}(\vec{p}, s) \langle \vec{P}, \vec{X} | \vec{p} \rangle \\ &\quad + B_s(\vec{P}, \vec{X}, T) \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{\omega_p}} \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \bar{v}(\vec{p}, s') \langle \vec{p} | \vec{P}, \vec{X} \rangle e^{-ip_0(x_0-T)}] \quad (12.81) \end{aligned}$$

となる。

12.5.2 波束粒子の光の放出

このように得られた場の表現を使い、次に遷移振幅を求める。波束 $|\vec{P}_1 \vec{X}_1, T_1, s_1\rangle$ で表わされる電子が、光 \vec{k} を放出して波束 $|\vec{P}_2 \vec{X}_2, T_2, s_2\rangle$ の電子に変換する振幅は

$$\begin{aligned} &\langle \vec{P}_2, \vec{X}_2, T_2, s_2; \vec{k} | \int_{T_1}^{T_2} dt H_{int} | \vec{P}_1, \vec{X}_1, T_1, s_1 \rangle \quad (12.82) \\ &= e \int_{T_1}^{T_2} dt d^3x e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \langle \vec{P}_2, \vec{X}_2, T_2, s_2 | \bar{\psi}(x) \gamma_\mu \psi(x) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} | \vec{P}_1, \vec{X}_1, T_1, s_1 \rangle \end{aligned}$$

である。\$t, \vec{x}\$ の積分を行うと振幅は

$$\begin{aligned} & \sum \int \frac{d\vec{P}_2 d\vec{X}_2}{(2\pi)^3} \frac{d\vec{P}_1 d\vec{X}_1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 \left(\frac{m^2}{E_{p_1} E_{p_2}} \right)^{1/2} e\bar{u}(\vec{p}_2, s_2) \gamma_\mu u(\vec{p}_1, s_1) \delta(\vec{p}_2 + \vec{k} - \vec{p}_1) \\ & (2\pi) \delta_\Lambda(E_{p_2} + k - E_{p_1}) e^{-i(E_2 T_2 - E_1 T_1)} \langle \vec{P}_2, \vec{X}_2, T_2 | \vec{p}_2 \rangle \langle \vec{p}_1 | \vec{P}_1, \vec{X}_1, T_1 \rangle \\ & = N_3^2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \sqrt{\frac{m}{E_{P_2}}} \sqrt{\frac{m}{E_{P_1}}} \bar{u}(P_2, s_2) \gamma_\mu u(P_1, s_1) e^\mu(k) e^{T_{tr} + R_{mom} + i\phi} \end{aligned} \quad (12.83)$$

となる。ただし、有限な時間間隔での \$t\$ 積分を

$$(2\pi) \delta_\Lambda(E_2 + k - E_1) = \int_{T_1}^{T_2} dt e^{i(E_2 + k - E_1)t} \quad (12.84)$$

と書き、多くの場合右辺をディラックのデルタ関数で近似して計算する。

波束の遷移では、運動量保存則やエネルギー保存則は、緩められた形で実現する。また波束の中心は、運動量の中心の値で決まる古典軌道の時間変化を表わしている。これらは、以下のようにになっているガウス関数のおもみで表現されている。

$$R_{tr} = -\frac{1}{4\sigma} [(\vec{X}_1 - \vec{X}_2 - \vec{v}_1 T_1 - \vec{v}_2 T_2)^2 - \frac{1}{(\vec{v}_1 - \vec{v}_2)^2} (\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \cdot (\vec{X}_1 - \vec{X}_2 - \vec{v}_1 T_1 + \vec{v}_2 T_2)^2] \quad (12.85)$$

$$R_{mom} = -\frac{\sigma}{4} (\vec{P}_1 - \vec{P}_2 - \vec{k})^2 - \frac{\sigma}{(\vec{v}_1 - \vec{v}_2)^2} (E(P_2) - E(P_1) - k^0 + \frac{\vec{v}_1 - \vec{v}_2}{2} \cdot (\vec{P}_1 - \vec{P}_2 - \vec{k}))^2 \quad (12.86)$$

波束の位置に対する条件は、\$R_{tr} \approx 0\$ で決定される。この式 (12.85) で、右辺第 1 項目は進行方向に無関係に空間での大きさが、ほぼ \$2\sigma\$ であることを示している。第 2 項目は、第 1 項目の成分から進行方向へ射影した成分、縦成分の長さを差し引く事を表わしている。つまり、進行方向の位置座標は消去されてしまい、波束であってもなんらの制約がされない。一方で、進行方向の長さは、時間に速度をかけたもので表わされる。だから、\$\vec{X}_l\$ での積分は、\$T\$ での積分に換算される。その結果、遷移確率が時間に比例することが、簡単にわかる。また、\$R_{mom} \approx 0\$ で緩められた運動量とエネルギーの中心値の関係があらわされる。運動量では、\$\frac{1}{\sigma}\$ 程度の広がりを持ち、エネルギーでは、\$\frac{\sigma}{|\vec{v}_1 - \vec{v}_2|}\$ 程度の広がりをもって、保存則が近似的に成立していることが式 (12.86) からわかる。運動量の広がり、空間の広がり、エネルギーの広がり、空間を二つの波束が互いに横切る時間の逆数となっている。これらの広がり、波束関数の性質から決まっているのであり、確率 1 で実現している。

また中心座標の時間・空間の位置と運動量・エネルギーで決まる位相部分は

$$\begin{aligned} \phi = & -E(P_2)T_2 + \vec{P}_2 \cdot \vec{X}_2 + E(P_1)T_1 - \vec{P}_1 \cdot \vec{X}_1 - \frac{1}{(\vec{v}_1 - \vec{v}_2)^2} (\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \cdot (\vec{X}_1 - \vec{X}_2 - \vec{v}_1 T_1 + \vec{v}_2 T_2) \\ & \times (E(P_2) - E(P_1) - k_0 + \frac{\vec{v}_1 - \vec{v}_2}{2} \cdot (\vec{P}_1 - \vec{P}_2 - \vec{k})) + \frac{1}{2} (\vec{X}_1 - \vec{X}_2 - \vec{v}_1 T_1 + \vec{v}_2 T_2) \cdot (\vec{P}_1 - \vec{P}_2 - \vec{k}) \end{aligned} \quad (12.87)$$

となっている。エネルギーと運動量の保存則からの破れが小さく $(\vec{P}_1 - \vec{P}_2 - \vec{k}) = 0$ とみなせるならば、この位相は

$$\phi = -E(P_2)T_2 + \vec{P}_2 \vec{X}_2 + E(P_1)T_1 - \vec{P}_1 \vec{X}_1 \quad (12.88)$$

と平面波の場合に一致する。

遷移振幅の絶対値の二乗から、遷移確率が

$$\begin{aligned} & |\langle \vec{P}_2, \vec{X}_2, T_2, s_2; \vec{k} | \int_{T_1}^{T_2} dt H_{int} | \vec{P}_1, \vec{X}_1, T_1, s_1 \rangle|^2 \\ &= [N_3^2 \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3]^2 e^{2R_{tr} + 2R_{mom}} \frac{m^2}{E_{P_2} E_{P_1}} [\bar{u}(P_2, s_2) \gamma_\mu u(P_1, s_1) \epsilon^\mu]^2 \end{aligned} \quad (12.89)$$

と求められる。ここで、スピナーの運動量に、中心値を代入する近似を使った。終状態の座標の積分を行う。縦方向と横方向の座標の積分が、

$$\begin{aligned} \int d\vec{X}_2 e^{2R_{tr}} &= \int d\vec{Y}_2 e^{2R_{tr}} = \int d\vec{Y}_2 e^{-2\sigma[\vec{Y}_2^2 - \frac{1}{(\vec{v}_1 - \vec{v}_2)^2} ((\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \cdot \vec{Y}_2)^2]}, \\ \vec{Y} &= \vec{X}_1 - \vec{v}_1 T_1 + \vec{v}_2 T_2 \\ &= \int d\vec{Y}_T e^{-2\sigma \vec{Y}_T^2} \int_0^L d\vec{Y}_L, \\ &= (2\sigma\pi) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \cdot T_{total}, \\ L &= |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \cdot T_{total} \end{aligned} \quad (12.90)$$

となる。結果は、時間間隔 T に比例する。

12.5.3 波束による入射波と散乱波

12.5.4 波束による散乱振幅と運動エネルギー保存

12.6 有限距離における散乱振幅と黄金律の補正

散乱では、半径 r が極めて大きくなる領域での波動関数が調べられる。通常は、 $r \rightarrow \infty$ の漸近形だけが、この領域での断面積等の確率を決定する。では、漸近形が使えるのは無限の領域に限られるのだろうか？有限の r でも、同じ形が使えるかもしれない。すると、散乱問題を適用できる領域が、広くなる可能性がある。また、有限の r での漸近値からの補正を求めておけば、さらに適用できる範囲が広がる。この問題を調べることにしよう。有限領域での問題を調べるには、有限な空間領域で値を持つ波束が必須である。終状態に波束を使うことで、距離に依存する散乱が分かる。

距離と角度に依存する確率

境界条件

黄金律の有限サイズ補正

12.6.1 有限サイズ効果と EPR 長距離相関

12.7 問題

1 古典力学

古典力学にのっとり、半径 a の剛体球による散乱を調べる。衝突パラメータ b で z 軸に沿って単位時間、単位面積当たり N 個の粒子が入射するものとする。この時、 A 方向 $\theta = \pi - 2\alpha$ 方向には、 $dN = bdbN$ 個が散乱される。この時の微分断面積 $\sigma(\theta, \phi)$ と全散乱断面積 σ_{total} とを求め、

$$\sigma(\theta, \phi) = \frac{a^2}{4} \quad (12.91)$$

$$\sigma_{total} = \pi a^2 \quad (12.92)$$

であることを確認せよ。

2 ポテンシャル散乱

ポテンシャル $V(r)$ のもとでの粒子の運動で、波動関数が

$$\psi(r, \theta) = A(e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr}) \quad (12.93)$$

と振る舞うとき、散乱振幅 $f(\theta)$ によって散乱断面積は以下のように示せ。

(1)

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (12.94)$$

(2)

$$f(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1 - e^{2i\delta_l})P_l(\cos\theta) \quad (12.95)$$

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{k^2} \left| \sum_l (2l+1)e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos\theta) \right|^2 \quad (12.96)$$

$$\sigma_{total} = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \sigma(\theta) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (12.97)$$

(3)

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f(0)) \quad (12.98)$$

問3 剛体球の散乱

問1の剛体球の散乱を量子論で調べよ。

問4 湯川ポテンシャルの散乱

ポテンシャル $V(r) = -Ze^2 \frac{e^{-\mu r}}{r}$ のもとでの粒子の散乱振幅と断面積をボルン近似の最低次のオーダーで求めよ。

第13章 同種粒子の多体問題

ここまでは一つの電子の量子的運動について調べた。座標を対角にする表現（座標表現）では、電子の波動関数を位置座標の関数として表わす。位置座標を単なる数（c-数）で表わすと、電子の量子力学を考察する際、直感的に把握することが比較的容易である。多数の電子から成る系の物理系の考察でも同様である。では、この座標表示で二つの電子の状態は、いかなる波動関数で記述されるだろうか？まずはじめに、原子核が+2の電荷をもち二つの電子が束縛されているヘリウム原子を例にとりて考える事にしよう。

いま、二つの電子の座標を x_1, x_2 として、波動関数を

$$\psi(x_1, x_2) \quad (13.1)$$

と表わすことにしよう。

ここで、 $+2|e|$ の電荷をもつヘリウム原子核のクーロンポテンシャルによる、一つの電子の基底状態、第一励起状態、第二励起状態等の束縛状態の波動関数を、

$$\psi_0(x), \psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots \quad (13.2)$$

とする。

はじめ、電子と電子の間には相互作用がないとみなしておく。いま、一つの電子 x_1 が基底状態 ψ_0 にあり、もう一つの電子 x_2 が第1励起状態 ψ_1 にある場合、この2電子状態の波動関数は、二つの直積

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_0(x_1)\psi_1(x_2) \quad (13.3)$$

である。

ところで、ミクロな世界の同種の2粒子を判別する方法はなく、二つの電子を区別することは出来ない。2電子の位置を入れ替えても、物理状態は不変である。同種粒子が、ミクロな世界で満たすこの性質を示す波動関数は、二つの座標を入れ替えても同じ物理状態を表わす必要がある。一つの物理状態を表す波動関数には、位相の不定性があることを考慮すると、座標の入れ替えに対して波動関数は、位相の定数を η として、

$$\psi(x_1, x_2) = \eta\psi(x_2, x_1) \quad (13.4)$$

とおける。座標の入れ替えを2回行なえば、座標は元に戻るので、

$$\psi(x_1, x_2) = \eta^2\psi(x_1, x_2) \quad (13.5)$$

が得られる。だから位相 η に対する条件が、

$$\eta^2 = 1 \quad (13.6)$$

$$\eta = \pm 1 \quad (13.7)$$

となる。この解は、二つ $\eta = \pm 1$ あり、 η が +1 の場合波動関数は座標の入れ替えに対して対称であり、 η が -1 の場合波動関数は反対称である。この η の値は、粒子に固有のものであり、各粒子毎に決まった値をもっている。このように、量子力学で同種粒子の多体波動関数は、座標の入れ替えに対して決まった対称性をもっている。

同種粒子の波動関数は、必ず座標の入れ替えに対して対称であるか、反対称であるかのどちらかである。

上の二つの直積で構成した波動関数 (13.3) は、座標の入れ替えにより、

$$\psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = \psi_0(\mathbf{x}_2)\psi_1(\mathbf{x}_1) \neq \psi_0(\mathbf{x}_1)\psi_1(\mathbf{x}_2) \quad (13.8)$$

と別のものになるので、同種粒子の 2 体波動関数としてはふさわしくない。しかしながら、ここで得られた二つの波動関数の和や差

$$\psi_s(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0(\mathbf{x}_2)\psi_1(\mathbf{x}_1) + \psi_0(\mathbf{x}_1)\psi_1(\mathbf{x}_2)) \quad (13.9)$$

$$\psi_a(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0(\mathbf{x}_2)\psi_1(\mathbf{x}_1) - \psi_0(\mathbf{x}_1)\psi_1(\mathbf{x}_2)) \quad (13.10)$$

は、

$$\psi_s(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = +\psi_s(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) \quad (13.11)$$

$$\psi_a(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = -\psi_a(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) \quad (13.12)$$

と、決まった対称性をもっている。だから、同種粒子の波動関数として適している。

電子やその仲間では、 $\eta = -1$ である反対称の波動関数で記述され、光やその仲間では、 $\eta = +1$ である対称の波動関数で記述される。反対称の波動関数に従う粒子をフェルミ粒子、対称の波動関数に従う粒子をボース粒子という。すべてのミクロな粒子は、フェルミ粒子かボース粒子かのどちらかである。実は、ミクロな粒子は決まったスピンを持つことが分かっている。スピンは、角運動量の 1 種であるので、必ず \hbar の単位で整数スピン $0, 1\hbar, 2\hbar, 3\hbar, \dots$ か、半整数スピン $\frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar, \frac{5}{2}\hbar, \dots$ を持つ。整数スピンを持つ粒子は、ボース粒子であり、半整数スピンを持つ粒子は、フェルミ粒子である。前者には、光子、中間子、弱ゲージ粒子、グルーオンが含まれ、後者には、電子、陽子、ニュートリノ、クォークが含まれる。

13.0.1 電子のスピン

電子は、 $\frac{1}{2}\hbar$ の大きさのスピンを持つ。スピンは角運動量の一成分であり 3 成分 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ を持ち角運動量の交換関係

$$[\sigma_i, \sigma_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad i, j, k = 1, 2, 3 \quad (13.13)$$

に従う。また、座標や運動量とは、無関係な内部自由度に対するものであり、当然ながらこれらと可換である。そのため、軌道角運動量とも可換であり、関係

$$[\sigma_i, x_j] = 0, \quad (13.14)$$

$$[\sigma_i, p_j] = 0, \quad (13.15)$$

$$[\sigma_i, L_j] = 0 \quad (13.16)$$

に従う。スピン角運動量の z 成分を対角形にする表現では

$$\sigma_z = \hbar \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}$$

となる。このベクトル空間は、固有値を $+\frac{1}{2}\hbar$ とするベクトルと $-\frac{1}{2}\hbar$ とするベクトルの 2 つの直交ベクトルで構成される。それぞれの波動関数を、座標とスピン変数の直積の関数で

$$\psi(+; t, \vec{x}), \psi(-; t, \vec{x}) \quad (13.17)$$

または、

$$\psi(\xi; t, \vec{x}), \xi = \pm \quad (13.18)$$

と表すことにする。 $\psi_+(t, \vec{x})$ は + スピンをもつ電子、 $\psi_-(t, \vec{x})$ は - スピンをもつ電子を表す。つまり、電子の状態は、スピンの状態と空間座標の状態の両方を決めて、一つが一意的に決まる。

電子の系で空間回転を引き起こす生成演算子は、軌道角運動量とスピン角運動量の和である全角運動量である。決まった全角運動量の表現を構成するには、軌道角運動量とスピン角運動量との合成を行えばよい。

13.1 フェルミ統計に従う電子と多電子原子の波動関数

電子は、スピン $\frac{1}{2}\hbar$ をもち、反対称な多体波動関数で記述されるフェルミ粒子である。統計の言葉では、電子は、フェルミ・ディラック統計に従う。スピンの変数 $\pm\frac{1}{2}$ と座標の変数 \mathbf{x} を組にして、 ξ, \mathbf{x} と表わすことにする。この時、2 電子波動関数

$$\Psi(\xi_1, \mathbf{x}_1; \xi_2, \mathbf{x}_2) \quad (13.19)$$

はスピンと座標の両変数の入れ替えに対して、

$$\Psi(\xi_2, \mathbf{x}_2; \xi_1, \mathbf{x}_1) = -\Psi(\xi_1, \mathbf{x}_1; \xi_2, \mathbf{x}_2) \quad (13.20)$$

と反対称である。反対称波動関数で、二つの電子のスピンと座標を一致させると、

$$\Psi(\xi_1, \mathbf{x}_1; \xi_1, \mathbf{x}_1) = -\Psi(\xi_1, \mathbf{x}_1; \xi_1, \mathbf{x}_1) \quad (13.21)$$

となり、左辺を移行して

$$2\Psi(\xi_1, \mathbf{x}_1; \xi_1, \mathbf{x}_1) = 0 \quad (13.22)$$

が得られる。つまり二つのスピンと座標が一致するとき、波動関数は零となる。だから、2電子が同じ座標と同じスピンを占めることはない。これを、パウリの排他原理という。

13.2 ヘリウム

ヘリウム原子は、原子核が $+2|e|$ の電荷をもち、回りを2個の電子が回っている2電子原子である。原子核とそれぞれの電子の間、並びに電子と電子の間には、電気的なクーロン力が働いている。電荷が、原子核と電子で逆であるので、原子核と電子の間の力は引力であり、電子と電子の間の力は斥力である。この物理系を表わすハミルトニアンは、電子の質量を m 、ヘリウム原子核の質量を M 、また電子と原子核の位置 \vec{x}_1 、 \vec{x}_2 、 \vec{X} 、と運動量 \vec{p}_1 、 \vec{p}_2 、 \vec{P} を使い、

$$H = \frac{(\vec{p}_1)^2}{2m} + \frac{(\vec{p}_2)^2}{2m} + \frac{(\vec{P})^2}{2M} - 2e^2 \frac{1}{|\vec{X} - \vec{x}_1|} - 2e^2 \frac{1}{|\vec{X} - \vec{x}_2|} + e^2 \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} \quad (13.23)$$

と表わせる。このハミルトニアンの固有状態を求めるのは、至難のわざである。もしも、電子間の相互作用を表わす $H_{\text{相互}} = +e^2 \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}$ がなければ固有値問題は、それほど難しいわけではない。また、2電子状態をあらわす波動関数は、2電子の座標について反対称な波動関数であることが必要である。

ヘリウム原子核の質量の値は、 $4\text{GeV}/c^2$ 近くあり電子の質量の値 $0.54\text{MeV}/c^2$ よりも 10^5 くらい大きい。このため、原子核が原点に静止している座標系で、ハミルトニアンを

$$H = \frac{(\vec{p}_1)^2}{2m} + \frac{(\vec{p}_2)^2}{2m} - 2e^2 \frac{1}{|\vec{x}_1|} - 2e^2 \frac{1}{|\vec{x}_2|} + H_{\text{相互}} \quad (13.24)$$

$$H_{\text{相互}} = e^2 \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} \quad (13.25)$$

として、良い近似となっている。

変分法

上のハミルトニアン (13.25) は、電子間相互作用 $H_{\text{相互}}$ がゼロである

$$H_{\text{相互}} = 0 \quad (13.26)$$

のとき、簡単に固有値や固有解を求められる形をしている。このとき、固有値方程式

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (13.27)$$

の解は、電荷 $2e$ の原子核に束縛された電子の状態 n と m の波動関数の直積

$$|\psi\rangle = \psi_{\text{水素}}^n(\vec{x}_1, 2e)\psi_{\text{水素}}^m(\vec{x}_2, 2e) \quad (13.28)$$

である。電子の同種粒子の性質を取り入れた時、上の波動関数を反対称化した、

$$|\psi\rangle_{\text{反対称}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{\text{水素}}^n(\vec{x}_1, 2e)\psi_{\text{水素}}^m(\vec{x}_2, 2e) - \psi_{\text{水素}}^m(\vec{x}_1, 2e)\psi_{\text{水素}}^n(\vec{x}_2, 2e) \right) \quad (13.29)$$

が、同種粒子効果を含む 2 電子の固有状態である。

ところで、実際のハミルトニアンで、電子間相互作用の強さは、原子核と電子の相互作用の強さとほぼ等しい大きさである。だから、上の直積波動関数は、あまり良くない。もっと良い波動関数の一つが、変分法で得られる。

13.3 多電子原子

N 個の電子を持つ原子で、原子核が原点に静止している座標系で、ハミルトニアンは、電子の運動エネルギー、電子と原子核との相互作用ポテンシャル、電子間の相互作用ポテンシャルからなり、

$$H = \sum_i^N \frac{(\vec{p}_i)^2}{2m} - Ze^2 \sum_i^N \frac{1}{|\vec{x}_i|} + e^2 \sum_{i<j}^N \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} \quad (13.30)$$

となる。多電子原子のハミルトニアンで、電子間相互作用の強さは、原子核と電子の相互作用の強さとほぼ等しい大きさである。だから、上の直積波動関数は、あまり良くない。もっと良い波動関数の一つが、変分法で得られる。

13.3.1 多電子原子のハミルトニアン

N 個の電子を持つ原子で、原子核が原点に静止している座標系で、ハミルトニアンは、電子の運動エネルギー、電子と原子核との相互作用ポテンシャル、電子間の相互作用ポテンシャルからなり、

$$H = \sum_i^N \frac{(\vec{p}_i)^2}{2m} - Ze^2 \sum_i^N \frac{1}{|\vec{x}_i|} + e^2 \sum_{i<j}^N \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} \quad (13.31)$$

となる。多電子原子のハミルトニアンは、水素原子の拡張であり、水素原子のように固有値方程式が解けると思われるかもしれない。しかし、解析的に解を求めるのは不可能であり、近似法が適用される。

13.3.2 電子間相互作用 = 0

電子間の相互作用がない N - 電子系は、ハミルトニアン

$$H = \sum_i^N \left(\frac{(\vec{p}_i)^2}{2m} - Ze^2 \sum_i^N \frac{1}{|\vec{x}_i|} \right) \quad (13.32)$$

で記述される。このハミルトニアンでは、 N 個の変数が分離しているため、1変数のハミルトニアン

$$H = \frac{(\vec{p})^2}{2m} - Ze^2 \frac{1}{|\vec{x}|} \quad (13.33)$$

の固有解がわかれば、 N - 体系の固有解がわかる。上のハミルトニアンは、水素原子のハミルトニアンで電荷の二乗 e^2 を Ze^2 で置き換えたものである。だから、固有値や固有解は、

$$\psi_{n,l,m}(\vec{x}) = R_n(r) Y_{lm}(\theta, \phi) e^{-\frac{r}{na_0}} \quad (13.34)$$

$$E(n, l, m) = R \quad (13.35)$$

$$a_0 =, R = \quad (13.36)$$

である。

N - 体電子系の波動関数は、上の一体波動関数の直積の線形結合で、フェルミ-ディラック統計を満たす多粒子波動関数になるように反対称性を持たせて構成される。状態を示す変数を α_i として、完全反対称テンソル $\epsilon_{i_1, i_2, i_3, \dots}$ 、

$$\epsilon_{i_1, i_2, i_3, \dots} = +1, (i_1, i_2, i_3, \dots) : \text{偶順列} \quad (13.37)$$

$$\epsilon_{i_1, i_2, i_3, \dots} = -1, (i_1, i_2, i_3, \dots) : \text{奇順列} \quad (13.38)$$

$$\epsilon_{i_1, i_2, i_3, \dots} = 0, (i_1, i_2, i_3, \dots) : \text{他の順列} \quad (13.39)$$

より、多電子波動関数は

$$\Psi = \sum \epsilon_{i_1, i_2, i_3, \dots} \prod \psi_{\alpha_{i_j}}(x_i) \quad (13.40)$$

である。この波動関数は、行列式（スレーター行列式）

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_{\alpha_{i_1}}(x_1) & \psi_{\alpha_{i_1}}(x_2) & \dots & \psi_{\alpha_{i_1}}(x_n) \\ \psi_{\alpha_{i_2}}(x_1) & \psi_{\alpha_{i_2}}(x_2) & \dots & \psi_{\alpha_{i_2}}(x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\alpha_{i_n}}(x_1) & \psi_{\alpha_{i_n}}(x_2) & \dots & \psi_{\alpha_{i_n}}(x_n) \end{vmatrix}$$

に一致する。

13.4 相互作用と近似法

電子間相互作用 $H_{\text{電子間}}$ を考慮した時の、多電子原子のハミルトニアン固有値問題を解析的に解くことには、今まで誰も成功していない。そのため、様々な近似法が考えられてきた。厳密な答えをだせなくても、近似の度合いを任意な程度まで上げる方法が分かれば、近似法は多様な応用に適用でき、物理の問題を解くのに使われる。

ところで、摂動項すなわち相互作用を表す項の大きさは、電磁気相互作用の場合、電価の大きさで決まる。電荷の大きさは、電子と陽子で同じ大きさであり、またすべての物体の電荷の大きさは、電子の電荷の丁度、整数倍である。電子の電荷と陽子の電荷が同じ大きさであることより、二つの電荷の和は、きっちり零になり、水素原子の電荷は零である。だから、二つの水素原子の間には、両者の距離の2乗に反比例するクーロン力は働かない。水素原子が沢山あるとき、それぞれはだから安定である。他の原子の原子核は陽子の電荷の整数倍になっているので、この数の電子と結合すると電荷をもたない中性の原子となり、やはり安定である。

安定な原子のエネルギー固有値は、水素原子のエネルギー固有値と同じに、最低エネルギーを持つ基底状態から、次のエネルギーの第一励起状態や、第2励起状態、等の沢山の負エネルギーの束縛状態からなるとともに、正エネルギーの散乱状態からなる。基底状態や、励起状態のエネルギーや波動関数を求めることより、多様な原子の性質が理解できる。

13.5 ハートリー・フォック近似

相互作用している多体系の固有関数を、未知の一体関数の直積を反対称化した多体波動関数で求めるのが、この近似法である。未知の一体関数は、全エネルギーの期待値を最適化することより、求められる。つまり、ハミルトニアン (13.31) のエネルギー期待値

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (13.41)$$

に対して変分条件

$$\delta E = 0 \quad (13.42)$$

を課す。この状態を、一体関数 $f_i(x)$ からなる直積の反対称化関数

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, i_3, \dots} \epsilon_{i_1, i_2, \dots, i_n} f_{i_1}(x_1) f_{i_2}(x_2) \cdots f_{i_n}(x_n) \quad (13.43)$$

として、エネルギー期待値並びに変分条件は、

$$E = \quad (13.44)$$

$$\delta E = \quad (13.45)$$

となる。関数系 $f_i(x)$ を決めるこの微積分方程式が解くことができれば、近似的な基底状態や、励起状態が求められる。

13.6 トーマス・フェルミ近似

量子力学の準古典近似 (WKB法) を多体問題に拡張したのが、トーマス・フェルミ近似である。多数の電子からなる原子、自由に動ける多くの電子からなる金属等の物理系を考察する。

各電子は、近似的に平面波の波として表せるとする。フェルミエネルギー E_F は一様な密度をもつ通常の物理系では、全系で一つの値が決められている。この時、多電子系には、フェルミエネルギーまでの一電子状態に電子が詰まっている。

では電子密度が一様ではなく空間依存性を持つ系では、どうしたら良いだろうか？空間座標に依存するフェルミエネルギー $E_F(x)$ を導入して、 x の近傍では $E_F(x)$ までの状態に電子が詰まっているとする計算法が、トーマスフェルミ近似である。古典力学では、座標 x と運動量は共に決められるが、量子力学では、座標と運動量を共に決めることは原理的に不可能である。しかし、近似的に座標と運動量を共に指定することはできる。準古典近似では、座標と運動量を共に、変数と使える。だから、空間座標 x の有限に広がった近傍で、運動量を使い状態に指定する事が可能である。だから、フェルミエネルギーを、座標の関数として扱える。

準古典近似は、一粒子波動関数がノードを沢山持つ関数であるとき、有効である。このような量子状態に多くの電子が詰まっているときの物理を調べる。フェルミエネルギーを使い密度は

$$\rho(x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int^{p_F(x)} d^3p = \quad (13.46)$$

と書かれる。

また、電荷密度 $\rho(\vec{x})$ からポテンシャル $\phi(\vec{x})$ は

$$\nabla^2 \phi(\vec{x}) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho(\vec{x}) \quad (13.47)$$

と決まり、ポテンシャル中でのハミルトニアンは、

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \phi(\vec{x}) \quad (13.48)$$

である。ポテンシャル $\phi(\vec{x})$ は無限遠で零になるように選ぶ、

$$\phi(\vec{x})|_{|x| \rightarrow \infty} = 0. \quad (13.49)$$

空間の各点におけるエネルギーの最大値（フェルミエネルギー）を $-E_0$ とすると、

$$-E_0 = \frac{1}{2m} p_F^2 - \phi(x) \quad (13.50)$$

原子では、電子間相互作用と原子核と電子との相互作用の結果外力の効果なしに安定な原子が形成されているため、 E_0 は定数である。これらは、

$$\phi(x) = E_0 + \frac{1}{2m} p_F^2 \quad (13.51)$$

を満たしている。ところで、中性の原子の半径を R とすると、原子の外部ではポテンシャルも電子密度も零であり、

$$\phi(x) = 0, p_F = 0; r > R \quad (13.52)$$

である。よってフェルミエネルギーは

$$E_0 = 0 \quad (13.53)$$

となっている。

これらの式 (13.46) (13.47) (13.48) を連立させて、トーマス・フェルミ方程式

$$\nabla^2 \phi(\vec{x}) = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \phi^{3/2}(\vec{x}) \quad (13.54)$$

が得られる。この方程式は、非線形でありまた任意パラメーターを含まない興味深い方程式である。

有限温度系では、フェルミ・ディラック統計の分布関数を使い密度は、

$$\rho(x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int^{p_F(x)} d^3 p n_F(p, T) \quad (13.55)$$

$$n_F(x) = \quad (13.56)$$

となる。

13.7 スピンの効果

電子はスピン $1/2 \hbar$ をもち式 (13.18) で分かる通り、異なる状態が $s_z = \pm 1/2 \hbar$ と二つある。二つの異なるスピン状態は、同じ軌道状態をとることができる。これを反映して、スピンの効果として、一電子の物理に關与する直接的な効果と、多電子の物理に關与する間接的な効果がある。

前者に属するものとして、磁場中での電子のエネルギーがスピンの違いに起因する二つの異なる値を持つことである。電子は、スピンの比例する磁気モーメントをもつため、磁場中の電子は磁場に比例するエネルギー

$$\Delta E = \vec{\mu} \cdot \vec{B}, \vec{\mu} = 2\mu\vec{s} \quad (13.57)$$

を持つ。電子の一体運動は、この項（ゼーマンエネルギー）のためスピンの磁場と平行か反平行かで差が生ずる。これが、シュテラン・ゲルラッハの実験で最初に見つかったスピンの効果である。

スピンの間接的な効果には、電子状態が軌道だけではなく、軌道とは独立なスピン変数で指定されることである。この効果は、磁場の有無に無関係に多電子系で重要である。電子の波動関数は、スピンの $s_z = 1/2$ の関数 $\psi_+(\vec{x}, t)$ と $s_z = -1/2$ の関数 $\psi_-(\vec{x}, t)$

$$\psi_{s_z}(\vec{x}, t), s_z = \pm 1/2 \quad (13.58)$$

で決まる。例えば、軌道の波動関数の最低エネルギー準位には、スピンの \pm の二つの状態がある。

13.8 メンデレーエフの周期律表

原子は、中心に原子核をもち周りに電子が束縛されている。原子核の電荷が $Z|e|$ であれば、 Z 個の電子が束縛されて原子は電氣的に中性になる。これらの電子が原子核からのクーロン力

$$U(r) = -\frac{Z|e|}{\epsilon_0} \frac{1}{r^2} \quad (13.59)$$

で束縛され、さらに i 番目の電子と j 番目の電子間には、クーロン斥力

$$V_{int} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{ij}^2}, r_{ij} = |\vec{x}_i - \vec{x}_j| \quad (13.60)$$

が働く。だから、全ハミルトニアンは、(13.31)

になる。このハミルトニアンの固有状態は、クーロン斥力を無視する近似で、(13.34) の積を反対称化した

$$\Psi = \sum_P \epsilon(P) \prod \psi_{l_i}(x_{i_n}) \quad (13.61)$$

で与えられる。

固有関数は、水素原子の波動関数で e^2 を Ze^2 に置き換えたものであり、主量子数 n 、角運動量 l 、角運動量の z 成分 l_z 、スピンの z 成分 s_z で状態は指定される。固有関数は、エネルギーの最低状態から

$$\begin{aligned} n = 1; l = 0, s = 1/2, s_z = \pm 1/2, E_1 = -R(z) \frac{1}{1} & \quad (13.62) \\ n = 2; l = 1, l_z = 1, 0, -1, s = 1/2, E_1 = -R(z) \frac{1}{4} \\ n = 3; l = 2, s = 1/2, E_1 = -R(z) \frac{1}{9} \\ n = 4; l = 0, s = 1/2, E_1 = -R(z) \frac{1}{16} \\ n = 5; l = 0, s = 1/2, E_1 = -R(z) \frac{1}{25} \\ \dots \end{aligned}$$

となり、これらは、角運動量の大きさが l であるとき、 z 成分は $l_z = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-1, l$ の $2l+1$ この状態をとり、スピンの 2 つの異なる状態と合わせて、縮退度

$$\begin{aligned} n = 1; l = 0, 1 \times 2 = 2 & \quad (13.63) \\ n = 2; l = 1, ; ((2+1)+1) \times 2 = 8 \\ n = 3; l = 2, 1, 0; ((2 \times 2 + 1) + (2 \times 1 + 1) + (1)) \times 2 = 18 \\ n = 4; l = 3, 2, 1, 0; ((2 \times 3 + 1) + (2 \times 2 + 1) + (2 \times 1 + 1) + (1)) \times 2 = 32 \\ n = 5; l = 4, 3, 2, 1, 0; (25) \times 2 = 50 \\ \dots \end{aligned}$$

をもつ。

これらの直積から構成した原子波動関数は、低いレベルから、水素 (H)、ヘリウム (He)、リチウム (Li)、ベリリウム (Be)、ホウ素 (B)、炭素 (C)、酸素 (O)、(N)、等に対応している。周期律表

13.9 フンド則

電子はフェルミ・ディラック統計に従い、一つの状態には一つの電子だけが占める。そのため 2 電子系で、二つのスピンが同じ状態

$$\psi_s^\alpha(\vec{x}_1)\psi_s^\beta(\vec{x}_2) - \psi_s^\alpha(\vec{x}_2)\psi_s^\beta(\vec{x}_1) \quad (13.64)$$

は、軌道状態が $\alpha = \beta$ と同じとき、零になってしまう。しかし、軌道状態が異なるとき、

$$\psi_s^\alpha(\vec{x}_1)\psi_{s'}^\beta(\vec{x}_2) - \psi_s^\alpha(\vec{x}_2)\psi_{s'}^\beta(\vec{x}_1) \quad (13.65)$$

は、零ではない。だから、スピンの異なる場合の方が、同じ軌道を使えてより低い一体エネルギー状態をとれる。一体軌道エネルギーの効果が大い場合は、だから異なるスピン状態に複数の電子が占める。

ところが、電子間の相互作用が原子核と電子間と同じクーロン相互作用であるので、一体軌道のエネルギーの効果は相互作用の効果より大きい保証はない。相互作用の効果は、一体軌道の状態に大きな補正を与えるほど大きい時、一体軌道に基づく近似は、良くないであろう。だから上のような結果になる保証はない。この場合でも成立することは、2体電子波動関数が、反対称性のため同じスピンと同じ座標で必然的に零になることである。波動関数は、座標とスピンを同時に入れ替えると、反対称になり

$$\psi_{s_1, s_2}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = -\psi_{s_2, s_1}(\vec{x}_2, \vec{x}_1) \quad (13.66)$$

となっている。だから、スピンの同じで座標が同じ時、波動関数は

$$\psi_{s_1, s_2}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = -\psi_{s_2, s_1}(\vec{x}_2, \vec{x}_1) = 0, s_1 = s_2, \vec{x}_1 = \vec{x}_2 \quad (13.67)$$

と零になる。しかし、座標が同じでもスピンの異なれば、

$$\psi_{s_1, s_2}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = -\psi_{s_2, s_1}(\vec{x}_2, \vec{x}_1) \neq 0, s_1 \neq s_2, \vec{x}_1 = \vec{x}_2 \quad (13.68)$$

と零になる必要はない。近距離における電子間のクーロン斥力の大きさは、だからスピンがそろった時の方が小さくなると考えられる。この効果が大きく効いている系では、スピンのそろはずである。

13.10 電子ガスと凝集力

金属中には、自由に動ける電子が沢山ある。これらの電子は、ほぼ自由に動き回るが、一方で電子の負の電荷のために、電子間には電気的なクーロン斥力が働いている。電子間に働く力が斥力であるため、多電子系のエネルギーは、自由電子のエネルギーよりも大きくなるのが予想される。しかし、電子はフェルミ・ディラック統計に従うので、多電子波動関数は粒子の交換に対して反対称である。この同種粒子の性質は、エネルギーや様々な物理量に影響を及ぼす。クーロン力で相互作用しあう電子ガスの性質を解明する研究は、身近な多体問題として長い歴史を持つ題材である。電子ガスにおけるクーロン相互作用の効果調べる。

電子は、負の電荷を帯びているが、金属全体は電気的に中性である。電子の負電荷と、金属中のイオンの正電荷とが同じ大きさで符号が逆である。もともと原子は、電気的に中性であるが、多原子が集まって金属を構成する。この際、原子内の一部の電子が原子から分離し金属全体に広がる。残された金属の原子は、正電荷を帯びたイオンになっている。これらのイオンは、電子よりもはるかに重く、ほぼ格子上に並んでいる。だから電子の運動を調べる

際には、良い近似でイオンの運動を無視できる。また、ほぼ周期的に並んでいる正電荷の密度を、一様な密度で近似する。電子ガスのハミルトニアンは、

$$H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{ij} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{ij}}, \quad (13.69)$$

$$r_{ij} = |\vec{x}_i - \vec{x}_j| \quad (13.70)$$

一様な密度では、平行移動に対する不変な一粒子波動関数は、平面波、

$$\psi_\alpha(x) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} \quad (13.71)$$

である。これらによる多電子の反対称波動関数は、

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_{\alpha_{i_1}}(x_1) & \psi_{\alpha_{i_1}}(x_2) & \cdots & \psi_{\alpha_{i_1}}(x_n) \\ \psi_{\alpha_{i_2}}(x_1) & \psi_{\alpha_{i_2}}(x_2) & \cdots & \psi_{\alpha_{i_2}}(x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\alpha_{i_n}}(x_1) & \psi_{\alpha_{i_n}}(x_2) & \cdots & \psi_{\alpha_{i_n}}(x_n) \end{vmatrix}$$

である。この状態のエネルギーを近似的に求めよう。

エネルギー期待値

$$E = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (13.72)$$

の計算のためには、分母の内積と分子のハミルトニアンの行列要素の計算が必要である。

まず、分母の内積は

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \sum_{P, P'} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \psi_{\alpha_{i_1}}^*(x_1) \psi_{\alpha_{i_2}}^*(x_2) \psi_{\alpha_{i_3}}^*(x_3) \cdots \psi_{\alpha_{i_N}}^*(x_N) \\ &\quad \times \psi_{\alpha_{j_1}}(x_1) \psi_{\alpha_{j_2}}(x_2) \psi_{\alpha_{j_3}}(x_3) \cdots \psi_{\alpha_{j_N}}(x_N) \\ &= \sum_{P, P'} \delta_{i_1, j_1} \delta_{i_2, j_2} \cdots \delta_{i_N, j_N} \\ &= \sum_{P=P'} = N! \end{aligned} \quad (13.73)$$

となる。次に分子は、

$$\begin{aligned} \langle \Psi | H | \Psi \rangle &= \sum_{P, P'} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \psi_{\alpha_{i_1}}^*(x_1) \psi_{\alpha_{i_2}}^*(x_2) \psi_{\alpha_{i_3}}^*(x_3) \cdots \psi_{\alpha_{i_N}}^*(x_N) \\ &\quad \times \left(\sum_l \frac{\vec{p}_l^2}{2m} + \sum_{lm} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{lm}} \right) \psi_{\alpha_{j_1}}(x_1) \psi_{\alpha_{j_2}}(x_2) \psi_{\alpha_{j_3}}(x_3) \cdots \psi_{\alpha_{j_N}}(x_N) \\ &= \sum_{P, P'} \int dx_1 dx_2 \psi_{\alpha_{i_1}}^*(x_1) \psi_{\alpha_{i_2}}^*(x_2) \left(\sum_{l=1,2} \frac{\vec{p}_l^2}{2m} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{12}} \right) \psi_{\alpha_{j_1}}(x_1) \psi_{\alpha_{j_2}}(x_2) \delta_{i_3, j_3} \delta_{i_4, j_4} \cdots \delta_{i_N, j_N} \\ &= \sum_{P=P'} () = \end{aligned} \quad (13.74)$$

13.11 ボース統計に従う光子と黒体輻射

光は、古典論ではマックスウェル方程式に従う波であるが、量子論では光子として波と粒子の両方の振る舞いをする。また、同種粒子として光子多体はボース・アインシュタイン統計に従い、光子の多体波動関数は座標の交換に対して対称関数で表される。一つの波数ベクトルに関する分配関数は、調和振動子の分配関数

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}), H = \hbar\omega(n + 1/2) \quad (13.75)$$

に一致する。 Z は、 $e^{-\beta\hbar\omega}$ を公比とする等比級数であり、簡単に計算できて、

$$Z = e^{-\beta\hbar\omega/2} \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \quad (13.76)$$

となる。また平均数 $\langle n \rangle$ は

$$\langle n(\omega, \beta) \rangle = \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad (13.77)$$

である。光の各波数のモードが異なる振動数の調和振動子で記述されるため、波数 \vec{k} の光子の平均数は、

$$\langle n(\omega(k), \beta) \rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad (13.78)$$

であり、3次元体積要素も含めた形では、光子の分布関数は、

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n(\omega(k), \beta) = \int \frac{1}{2\pi^2} k^2 dk \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega(k)} - 1} \quad (13.79)$$

である。この分布は図のようなグラフであり、プランクが黒体輻射で求めた分布関数である。プランク定数が歴史的に、初めて登場した式である。黒体輻射の分布関数は、光が、古典的な電磁波とは異なる性質をもつことを初めて示し、量子力学の端緒となった式である。

13.12 場の量子化

多体問題を最も系統的に扱う方法は、電子場や光子場を古典的な変数である c - 数ではなく、交換関係や反交換関係を満たす演算子とする場の量子化法である。今までは、電子場 $\psi(t, \vec{x})$ は、一つの電子の状態を表わすベクトル（波動関数）であった。二つの電子がある物理系では、二つの座標の関数として、ベクトルを表わす。このように、電子数を決めた物理状態は、電子数の位置変数を持つ波動関数で表わされる。

ところで、一つの粒子だけが存在する物理系で、その位置や状態が変化する物理を扱うには、一つの粒子の位置を変数とする波動関数でよい。しかし、粒子数が変化する物理現象を扱うには、この形の波動関数では不十分であり、異なる粒子数を表わすベクトルが付け加わる必要がある。粒子数が、零、1, 2, 等のすべての粒子数を含むベクトル空間を一括して構成できれば、このような物理を調べることが可能である。つまり、量子力学では扱う力学変数として、粒子の位置や、運動量を正準交換関係に従う演算子としたが、これを拡張して粒子数の異なるベクトル空間を構成する。このために、異なる粒子数の状態ベクトルを関連させる演算子が必要である。この演算子は、場の性質をもつ演算子であり、また場の方程式を満たす。このような場の方程式や演算子の性質を導くには、ラグランジアンを出発点として、場を交換関係を満たす力学変数とみなせば良い。このプロセスを、位置変数を量子化した次のステップであるので、第2量子化という。

13.13 問題

4 題選択せよ。

問 1

調和振動子のハミルトニアン、

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 \quad (13.80)$$

の固有値方程式

$$H\psi_E = E\psi_E \quad (13.81)$$

を解いて、固有値 E と固有ベクトル ψ_E を求めよ。如何なる方法を使っても良い。ここで m は質量、 k はバネ定数であり、 x と p は正準交換関係に従う。

問 2

水素原子のハミルトニアンは、

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\alpha}{r} \quad (13.82)$$

である。ここで m は電子の質量、 α は結合定数、 r は動径座標である。水素原子の束縛状態の固有エネルギーと基底状態の固有関数を求めよ。ただし、水素原子の動径座標 r についての方程式が、

$$-\frac{1}{2m}\hbar^2\frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r R_l(r)) + \left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \alpha\frac{1}{r}\right)R(r) = ER(r) \quad (13.83)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r)R(r) + \left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \alpha\frac{1}{r}\right)R(r) = ER(r)$$

となることを使って良い。ここで、 \hbar が角運動量の大きさ、 E は固有エネルギーである。

問 3

パウリ行列

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

は、関係式

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad (13.84)$$

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$$

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$$

を満たすことを証明せよ。

問 4

角運動量ベクトルは、位置 x_i と運動量 p_j から

$$l_i = \epsilon_{ijk}x_jp_k \quad (13.85)$$

と定義される。交換関係

$$[x_i, p_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} \quad (13.86)$$

$$[x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0 \quad (13.87)$$

を使い。角運動量の交換関係

$$[l_i, x_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}x_k \quad (13.88)$$

$$[l_i, p_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}p_k \quad (13.89)$$

$$[l_i, l_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}l_k \quad (13.90)$$

を証明せよ。

問 5

ハミルトニアンが H_0 と ϵH_1 の和

$$H = H_0 + \epsilon H_1 \quad (13.91)$$

で表され、さらに H_0 の固有値 E_i^0 と固有ベクトル $|u_i^0\rangle$

$$H_0|u_i^0\rangle = E_i^0|u_i^0\rangle \quad (13.92)$$

$$\sum_i |u_i^0\rangle\langle u_i^0| = 1 \quad (13.93)$$

がすべて分かっているとす。ここで、すべてのエネルギー E_i^0 はとびとびで互いに異なり、

$$E_i^0 \neq E_j^0 \quad (13.94)$$

が満たされているとし、また ϵ は微少なパラメーターであるとする。

(1)

H の固有値方程式、

$$H|u_i\rangle = E_i|u_i\rangle \quad (13.95)$$

を満たす固有値と固有ベクトルを ϵ の 1 次までの近似で求めよ。

(2)

$E_1 = E_2$ であるとき、 $|u_i^0\rangle; i = 1, 2$ の空間内で H の固有値と固有ベクトルを求めよ。ただし、 $\langle u_1^0|H_1|u_2^0\rangle = \delta$ とせよ。

問 6

二次元系で、面に垂直の磁場と面に平行の電場が加わった時、電子が満たすシュレーディンガー方程式を書き下せ。次に、解きやすいゲージを選んで、そのシュレーディンガー方程式の解を求めよ。

13.14 問題

4 題選択せよ。

問 1

調和振動子のハミルトニアン、

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 \quad (13.96)$$

の固有値方程式

$$H\psi_E = E\psi_E \quad (13.97)$$

の基底状態の固有値 E と固有ベクトル ψ_E を求めよ。ここで m は質量、 k はバネ定数であり、 x と p は正準交換関係に従う。

問 2

水素原子のハミルトニアンは、

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\alpha}{r} \quad (13.98)$$

である。ここで m は電子の質量、 α は結合定数、 r は動径座標である。水素原子の基底状態は角運動量が零の状態であることが分かっている。基底状態のエネルギーと固有関数を求めよ。ただし、水素原子の動径座標 r についての一般の状態の方程式は、

$$-\frac{1}{2m}\hbar^2\frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r R_l(r)) + \left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \alpha\frac{1}{r}\right)R(r) = ER(r) \quad (13.99)$$

となることを使って良い。ここで、 $l\hbar$ が角運動量の大きさ、 E は固有エネルギーである。

問 3

微分演算子

$$p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad (13.100)$$

は、交換関係

$$[x, p] = i\hbar \quad (13.101)$$

を満たすことを示せ。

問 4

角運動量ベクトルは、位置 x_i と運動量 p_j から

$$l_i = \epsilon_{ijk}x_jp_k \quad (13.102)$$

と定義される。交換関係

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (13.103)$$

$$[x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0 \quad (13.104)$$

を使い。角運動量の交換関係

$$[l_i, x_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}x_k \quad (13.105)$$

$$[l_i, p_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}p_k \quad (13.106)$$

$$[l_i, l_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}l_k \quad (13.107)$$

と

$$[l_i, \mathbf{x}^2] = 0 \quad (13.108)$$

$$[l_i, \mathbf{p}^2] = 0 \quad (13.109)$$

を証明せよ。

問 5

ハミルトニアンが H_0 と ϵH_1 の和

$$H = H_0 + \epsilon H_1 \quad (13.110)$$

で表され、さらに H_0 の固有値 E_i^0 と固有ベクトル $|u_i^0\rangle$

$$H_0|u_i^0\rangle = E_i^0|u_i^0\rangle \quad (13.111)$$

$$\sum_i |u_i^0\rangle\langle u_i^0| = 1 \quad (13.112)$$

がすべて分かっているとする。ここで、すべてのエネルギー E_i^0 はとびとびで互いに異なり、

$$E_i^0 \neq E_j^0 \quad (13.113)$$

が満たされているとし、また ϵ は微小なパラメーターであるとする。

(1)

H の固有値方程式、

$$H|u_l\rangle = E_l|u_l\rangle \quad (13.114)$$

を満たす固有値と固有ベクトルを ϵ の 1 次までの近似で求めよ。

(2)

$E_1 = E_2$ であるとき、 $|u_i^0\rangle; i = 1, 2$ の空間内で H の固有値と固有ベクトルを求めよ。ただし、 $\langle u_1^0|H_1|u_2^0\rangle = \delta$ とせよ。

問 6

二次元系で、面に垂直の磁場が加わった時、電子が満たすシュレーディンガー方程式を書き下し、その固有値問題をとけ。

第14章 付録

14.1 B：一般曲線直交座標におけるベクトル解析

運動の法則を表す常微分方程式や偏微分方程式を解く際、デカルト座標以外の直交曲線座標系が使われることが多い。たとえば、球対称ポテンシャル中の力学や、量子力学は、球座標を使うほうが便利である。球座標や他の直交座標におけるベクトル解析を本章でまとめておく。

14.1.1 ベクトルの微分

ベクトル場の微分や積分を様々な直交座標系で行う場合、単位ベクトルに注意を払うことが必要である。それぞれの座標系で直交単位ベクトルは、位置ベクトルを各変数に関して微分して得られる。

14.1.2 デカルト座標

単位ベクトルを $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ としてベクトル \mathbf{V} の成分を V_x, V_y, V_z とする。即ち、

$$\mathbf{V} = \mathbf{e}_x V_x + \mathbf{e}_y V_y + \mathbf{e}_z V_z \quad (14.1)$$

とする。単位ベクトルは、デカルト座標による表示で

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_x &= (1, 0, 0) \\ \mathbf{e}_y &= (0, 1, 0) \\ \mathbf{e}_z &= (0, 0, 1) \end{aligned} \quad (14.2)$$

を成分とする。これらは、規格直交系の条件、

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{i,j} \quad (14.3)$$

を満たす定ベクトルである。

微小線要素

各成分の微小量を使い、微小な線要素ベクトル $d\mathbf{l}$ とその長さは

$$\begin{aligned}d\mathbf{l} &= \mathbf{e}_x dx + \mathbf{e}_y dy + \mathbf{e}_z dz \\ dl^2 &= dx^2 + dy^2 + dz^2\end{aligned}\tag{14.4}$$

である。これらから、デカルト座標におけるベクトル解析の基本演算は以下のようになることがわかる。

座標の変化に対する関数 Ψ の変化 $\delta\Psi$ から、
勾配 (Gradient) は、

$$\delta\Psi = d\mathbf{l} \cdot \nabla\Psi(\mathbf{x})\tag{14.5}$$

と定義される。これより、勾配を成分に分解して

$$\nabla\Psi(\mathbf{x}) = \mathbf{e}_x(\nabla\Psi(\mathbf{x}))_x + \mathbf{e}_y(\nabla\Psi(\mathbf{x}))_y + \mathbf{e}_z(\nabla\Psi(\mathbf{x}))_z\tag{14.6}$$

とする、各成分は

$$(\nabla\Psi(\mathbf{x}))_x = \partial_x\Psi(\mathbf{x}), (\nabla\Psi(\mathbf{x}))_y = \partial_y\Psi(\mathbf{x}), (\nabla\Psi(\mathbf{x}))_z = \partial_z\Psi(\mathbf{x})\tag{14.7}$$

である。

発散 (Divergence)
ベクトル場 \mathbf{V} は、デカルト座標系で

$$\mathbf{V} = \mathbf{e}_x V_x + \mathbf{e}_y V_y + \mathbf{e}_z V_z\tag{14.8}$$

と表せる。このベクトルの発散は、

$$\nabla \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x}) = \partial_x V_x(\mathbf{x}) + \partial_y V_y(\mathbf{x}) + \partial_z V_z(\mathbf{x})\tag{14.9}$$

である。

回転 (Rotation)
同じベクトルの回転 (Rotation) は

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{V}(\mathbf{x}) &= \mathbf{e}_x(\partial_y V_z(\mathbf{x}) - \partial_z V_y(\mathbf{x})) \\ &\quad + \mathbf{e}_y(\partial_z V_x(\mathbf{x}) - \partial_x V_z(\mathbf{x})) \\ &\quad + \mathbf{e}_z(\partial_x V_y(\mathbf{x}) - \partial_y V_x(\mathbf{x}))\end{aligned}\tag{14.10}$$

である。

ラプラシアン (Laplacian)
スカラー場の勾配ベクトルの発散がラプラシアンであり、

$$\nabla^2\Psi(\mathbf{x}) = (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)\Psi(\mathbf{x})\tag{14.11}$$

となる。

14.1.3 場についての積分定理

1 変数 x の関数 $f(x)$ について、微分と積分は逆の操作であるので、微分 $f'(x)$ の積分や $f(x)$ の積分は、恒等式

$$\int_a^b dx f'(x) = f(b) - f(a) \quad (14.12)$$
$$\frac{\partial}{\partial b} \int_a^b dx f(x) = f(b)$$

を満たす。

同様な関係式が、場の微分と積分の間に成立する。

1 スカラー場の勾配についての積分定理

スカラー場の勾配の線積分については、

$$\int_{P_1}^{P_2} d\vec{l} \cdot \nabla \Psi = \Psi(P_2) - \Psi(P_1) \quad (14.13)$$

となる。この関係式は、線の上で一つのパラメーター t を使う一次元積分で考えると、

$$\vec{x}(t) = \vec{e}_x x(t) + \vec{e}_y y(t) + \vec{e}_z z(t) \quad (14.14)$$

から、線要素と勾配を t で計算して、

$$d\vec{l} \cdot \nabla \Psi = dt \left(\frac{dx}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{dy}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \frac{dz}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) = dt \frac{d\Psi}{dt} \quad (14.15)$$
$$\int_{t_1}^{t_2} d\vec{l} \cdot \nabla \Psi = \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt} \Psi(t) = \Psi(t_2) - \Psi(t_1)$$

となり、上の一変数関数の微分の積分に関する項等式に一致する。また、この結果を使うと、一般曲線座標系における勾配が簡単に計算できる。

2 ベクトル場の発散についてのガウスの発散定理

同様な関係式が、ベクトル場の微分の積分にたいして成立する。ベクトル場の微分には、発散と回転の2種類ある。前者に対して成立する関係式がガウスの発散定理であり、後者に対して成立する関係式がストークスの定理である。

まず、デカルト座標を使い、ガウスの発散定理を数学的帰納法で証明しよう。任意な立体に対してベクトル場の発散の体積積分が、ベクトル場の表面での面積分に同等であることを示すのがガウスの定理

$$\int_{\text{内部}} dv \nabla \cdot \mathbf{V} = \int_{\text{表面}} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V} \quad (14.16)$$

である。この定理を証明するにあたり、小さな立体による同等性の成立を第1段階、 $n = 1$ 、とし、これを先ず示し、次に大きな立体によるもの、 $n = N$ 、で成立するとき、さらに次の段階 $n = N + 1$ に拡張できることを示す。よって、任意の N 、すなわち任意の立体に対して定理が成立することを示す。

(証明)

1. 小さな立方体での積分の両辺が等しいことを証明する。図の極めて小さな立方体では、

積分は被積分関数の値に積分体積をかけたものである。そのため、左辺は

$$\int dv \nabla \cdot \vec{V} = dx dy dz (\partial_x V_x + \partial_y V_y + \partial_z V_z) \quad (14.17)$$

となる。また、右辺の面積分は、2枚の xy 面、2枚の yz 面、と2枚の zx 面の計6枚の面での被積分関数の値に面積をかけた

$$\begin{aligned} \int d\vec{S} \cdot \vec{V} & \quad (14.18) \\ &= (V_x(x + dx) - V_x(x)) dy dz + (V_y(y + dy) - V_y(y)) dx dz + (V_z(z + dz) - V_z(z)) dx dy \\ &= (\partial_x V_x + \partial_y V_y + \partial_z V_z) dx dy dz \end{aligned}$$

となる。よって、ベクトル場の発散の体積積分が、ベクトル場の表面での面積分に等しい。

$$\int_{\text{小立方体の内部}} dv \nabla \cdot \mathbf{V} = \int_{\text{小立方体の表面}} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V} \quad (14.19)$$

2. 等号が、一つの有限の大きさの立体で成立するとき、これに小さな立方体を接触させて構成した立体でも、成立することを示す。ある有限の大きさの立体で両積分が等しいとし、

この立体に小さな立方体を接触させて構成した新たな立体での積分を考察する。

$$\begin{aligned} & \int_{\text{内部}} dv \nabla \cdot \mathbf{V} + \int_{\text{小立方体の内部}} dv \nabla \cdot \mathbf{V} \\ &= \int_{\text{表面}} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V} + \int_{\text{小立方体の表面}} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V} \end{aligned} \quad (14.20)$$

上の等式の左辺は、積分の和則から全体の積分となり、一方で右辺は接触部分で積分が打ち消されると共に、接触部が表面ではなくなるため、結局

$$\int_{\text{内部+小立方体}} dv \nabla \cdot \mathbf{V} = \int_{\text{全体の表面}} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V} \quad (14.21)$$

が成立する。よって、任意の曲面で囲まれた立体の内部におけるベクトル場の発散の体積積分は、表面における面積分に一致する。

3 ベクトル場の回転についてのストークスの定理

ベクトル場の回転に関するストークスの定理は、ベクトル場の回転の面積分が、ベクトル場の境界に沿った線積分

$$\int_{\text{有限な曲面}} d\mathbf{S} \cdot \nabla \times \mathbf{V} = \int_{\text{曲面の境界}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{V} \quad (14.22)$$

に一致することを示す。

デカルト座標を使い、ストークスの定理を数学的帰納法で証明しよう。任意な面に対してベクトル場の回転の面積分が、ベクトル場の境界線に沿う線積分に同等であることを示すのがストークスの定理である。この定理を証明するにあたり、小さな平面による第1段階、 $n = 1$ 、で同等性が成立することを先ず示し、次に $n = N$ で同等性が成立するとき、 $n = N + 1$ に拡張できることを示す。よって、任意の N 、すなわち任意の立体に対する定理が成立することを示す。

(証明)

1. 小さな正方形で両辺の積分が等しいこと。極めて小さな xy 面内の正方形では、左辺は

$$\int dx dy \nabla \times \vec{V} = dx dy (\partial_x V_y - \partial_y V_x) \quad (14.23)$$

となる。また、右辺の線積分は

$$\begin{aligned} & (dx V_x(x, y) + dy V_y(x + dx, y) - dx V_x(x + dx, y + dy) - dy V_y(x, y + dy)) \\ & = dx dy (\partial_x V_y(x) - \partial_y V_x(x)) \end{aligned} \quad (14.24)$$

となる。よって、ベクトル場の回転の面積分が、ベクトル場の境界線での線積分に等しい。

$$\int_{\text{小正方形の内部}} d\mathbf{S} \cdot \nabla \times \mathbf{V} = \int_{\text{小正方形の境界線}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{V} \quad (14.25)$$

が成立する。

小さな閉局面で定理は、

$$\int_{\text{小さな閉局面}} d\mathbf{S} \cdot \nabla \times \mathbf{V} = \int_{\text{小正方形の境界線}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{V} = 0. \quad (14.26)$$

となり面積分が零になる。上の右辺で、閉局面では境界が存在しないので最後の等式が成立する。

2。一つの有限の大きさの曲面で成立するとき、小さな曲面を接触させて曲面を変形した曲面でも、成立する。

次に、ある曲面で両積分が等しいとし、この曲面に小さな曲面を接触させて境界線を変更して構成した新たな曲面での積分を考察する。

$$\begin{aligned} & \int_{\text{曲面}} d\mathbf{S} \cdot \nabla \times \mathbf{V} + \int_{\text{小曲面の内部}} d\mathbf{S} \cdot \nabla \times \mathbf{V} \\ & = \int_{\text{境界線}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{V} + \int_{\text{小境界線}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{V} \end{aligned} \quad (14.27)$$

上の等式の左辺は、積分の和則から全体の積分となり、一方で右辺は接触部分で積分が打ち消されると共に、接触部が境界線ではなくなるため、結局

$$\int_{\text{曲面}} d\mathbf{S} \cdot \nabla \times \mathbf{V} = \int_{\text{曲面の境界線}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{V} \quad (14.28)$$

が成立する。また、元の曲面に接した小さな曲面が、境界線を変えないときは、閉局面を足したものであるので、積分は変更を受けず、定理が成立する。

よって、任意の曲面で囲まれた立体の内部におけるベクトル場の回転の面積分は、境界における線積分に一致する。

以上のように、ベクトル場の微分である発散や回転の積分は、ベクトル場の面積分や線積分に一致する。積分は使う座標系には無関係であるので、この両定理は、座標系とは関係なく成立するため、以下に述べるいくつかの直交曲線座標系での、ベクトル場の発散や回転を計算するのに、使われる。

14.1.4 球座標

原点からの距離 r 、と z 軸からの角度 θ 、 xy 面からの角度 φ を使う球座標 (r, θ, φ) は デカルト座標と

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi, \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi, \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (14.29)$$

と関連している。

球座標における、単位ベクトルを $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi$ として任意のベクトル \mathbf{V} の成分を V_r, V_θ, V_φ とする。すなわち、

$$\mathbf{V} = \mathbf{e}_r V_r + \mathbf{e}_\theta V_\theta + \mathbf{e}_\varphi V_\varphi \quad (14.30)$$

とする。単位ベクトルはそれぞれの変数を微少に変化させた時の位置ベクトルの変化 $\partial_r \mathbf{x}, \partial_\theta \mathbf{x}, \partial_\varphi \mathbf{x}$ に比例した規格化されたベクトル

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_r &= (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta) \\ \mathbf{e}_\theta &= (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta) \\ \mathbf{e}_\varphi &= (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0) \end{aligned} \quad (14.31)$$

であり規格直交系の条件、

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{i,j} \quad (14.32)$$

$$\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j = \epsilon_{ijk} \mathbf{e}_k; (i = 1, 2, 3 \rightarrow r, \theta, \phi) \quad (14.33)$$

を満たす。しかし極座標ではこの単位ベクトルは定ベクトルではなく、角度と共に変わり、

$$\partial_r \mathbf{e}_r = 0, \partial_r \mathbf{e}_\theta = 0, \partial_r \mathbf{e}_\phi = 0 \quad (14.34)$$

$$\partial_\theta \mathbf{e}_r = \mathbf{e}_\theta, \partial_\theta \mathbf{e}_\theta = -\mathbf{e}_r, \partial_\theta \mathbf{e}_\phi = 0$$

$$\partial_\phi \mathbf{e}_r = \sin \theta \mathbf{e}_\phi, \partial_\phi \mathbf{e}_\theta = \cos \theta \mathbf{e}_\phi, \partial_\phi \mathbf{e}_\phi = -\sin \theta \mathbf{e}_r - \cos \theta \mathbf{e}_\theta$$

となる。そのため、次に示すいくつかの計算で、注意が必要である。

微小線要素

微小な線要素ベクトル $d\mathbf{l}$ とその長さの2乗は

$$\begin{aligned} d\mathbf{l} &= \mathbf{e}_r dr + \mathbf{e}_\theta r d\theta + \mathbf{e}_\phi r \sin \theta d\phi \\ dl^2 &= dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2 \end{aligned} \quad (14.35)$$

となる。角度変数は無次元であるので、 r^2 の項のために三項が同じ次元になっている。

場の微分に関するベクトル解析の基本演算は以下のとおりである。

微小量に対する式 (14.5) や 線積分公式 (14.13) より、

勾配 (Gradient) ベクトルは

$$\nabla \Psi(\mathbf{x}) = \mathbf{e}_r \partial_r \Psi(\mathbf{x}) + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta \Psi(\mathbf{x}) + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi \Psi(\mathbf{x}) \quad (14.36)$$

であり、各成分が

$$(\nabla \Psi(\mathbf{x}))_r = \partial_r \Psi(\mathbf{x}) \quad (14.37)$$

$$(\nabla \Psi(\mathbf{x}))_\theta = \frac{1}{r} \partial_\theta \Psi(\mathbf{x}) \quad (14.38)$$

$$(\nabla \Psi(\mathbf{x}))_\phi = \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi \Psi(\mathbf{x}) \quad (14.39)$$

となる。

つまり、 ∇ は、

$$\nabla = \mathbf{e}_r \partial_r + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi \quad (14.40)$$

となるベクトル演算子である。この表式を使い、ベクトル解析の様々な計算や、量子力学における様々な演算子、たとえば角運動量等、の球座標における表示が得られる。

発散 (Divergence)

発散に関するガウスの定理

$$\int dv \nabla \cdot \mathbf{V} = \int d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V} \quad (14.41)$$

で、体積要素と面要素が、各方向の辺の長さを使い

$$dv = (dr)(rd\theta)(r \sin \theta d\phi) \quad (14.42)$$

$$d\mathbf{S} = \mathbf{e}_r r^2 \sin \theta d\theta d\phi + \mathbf{e}_\theta r \sin \theta dr d\phi + \mathbf{e}_\phi r d\theta dr \quad (14.43)$$

と表わせることより、

$$\nabla \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x}) = \frac{1}{r^2 \sin \theta} (\partial_r (r^2 \sin \theta V_r(\mathbf{x})) + \partial_\theta (r \sin \theta V_\theta(\mathbf{x})) + \partial_\phi (r V_\phi(\mathbf{x}))) \quad (14.44)$$

となる。このように発散は、ベクトル場の発散に関するガウスの定理を使うと比較的に導ける。

また発散の結果は、単位ベクトルの微分 (14.34) を使い、具体的な計算

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x}) & \\ &= (\mathbf{e}_r \partial_r + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi) \cdot (\mathbf{e}_r V_r + \mathbf{e}_\theta V_\theta + \mathbf{e}_\phi V_\phi) \end{aligned} \quad (14.45)$$

より求めることもできる。

回転に関するストークスの定理

$$\int d\mathbf{S} \cdot \nabla \times \mathbf{V} = \int d\mathbf{l} \cdot \mathbf{V} \quad (14.46)$$

で、上の面要素と線要素から、

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{V}(\mathbf{x}) &= \left(\frac{1}{r^2 \sin \theta} \right) (\mathbf{e}_r (\partial_\theta (r \sin \theta V_\phi(\mathbf{x})) - \partial_\phi r V_\theta(\mathbf{x})) \\ &\quad + r \mathbf{e}_\theta (\partial_\phi V_r(\mathbf{x}) - \partial_r r \sin \theta V_\phi(\mathbf{x})) \\ &\quad + r \sin \theta \mathbf{e}_\phi (\partial_r r V_\theta(\mathbf{x}) - \partial_\theta V_r(\mathbf{x}))) \end{aligned} \quad (14.47)$$

となり、回転は、回転に関するストークスの定理を使うと比較的に導ける。
 た回転の結果は、単位ベクトルの微分 (14.34) を使い具体的な計算

$$\nabla \times \mathbf{V}(\mathbf{x}) = (\mathbf{e}_r \partial_r + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin\theta} \partial_\varphi) \times (\mathbf{e}_r V_r + \mathbf{e}_\theta V_\theta + \mathbf{e}_\varphi V_\varphi) \quad (14.48)$$

より、求めることもできる。

勾配と発散からラプラシアン (Laplacian) が

$$\begin{aligned} \nabla^2 \Psi(\mathbf{x}) &= \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r \Psi(\mathbf{x})) \\ &+ \frac{1}{r^2 \sin\theta} \partial_\theta (\sin\theta \partial_\theta \Psi(\mathbf{x})) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \partial_\varphi^2 \Psi(\mathbf{x}), \\ &= \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r \Psi(\mathbf{x})) + \frac{1}{r^2} d_{\theta,\phi}^2 \Psi(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (14.49)$$

と求まる。ここで、 $d_{\theta,\phi}^2$ は角度変数に関する微分演算子であり、

$$d_{\theta,\phi}^2 = \partial_\theta^2 + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta} \partial_\varphi^2 \quad (14.50)$$

と与えられ、次に述べる角運動量の自乗に比例する。スカラー関数 $\Psi(\mathbf{x})$ にラプラシアンが作用したとき、上記の演算に帰着する。もしもベクトル場にラプラシアンが作用したときは、これと異なりさらに複雑なものになる。

角運動量演算子

角運動量は、位置ベクトルと運動量ベクトルのベクトル積であり、演算子

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{P} \quad (14.51)$$

$$\begin{aligned} &= r \vec{e}_r \times (-i\hbar) (\vec{e}_r \partial_r + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin\theta} \partial_\varphi) \\ &= (-i\hbar) \vec{e}_r \times \vec{e}_\theta \partial_\theta + \vec{e}_r \times \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{\sin\theta} \partial_\varphi \\ &= (-i\hbar) (\vec{e}_\varphi \partial_\theta - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta} \partial_\varphi) \end{aligned} \quad (14.52)$$

である。これより、z成分は

$$L_z = (-i\hbar) (\vec{e}_\varphi^z \partial_\theta - \vec{e}_\theta^z \frac{1}{\sin\theta} \partial_\varphi) \quad (14.53)$$

$$\begin{aligned} &= (-i\hbar) (\vec{e}_\varphi^z \partial_\theta - \vec{e}_\theta^z \frac{1}{\sin\theta} \partial_\varphi) \\ &= (-i\hbar) \partial_\varphi \end{aligned} \quad (14.54)$$

となり、角運動量の昇降演算子や下降演算子が

$$L_x \pm iL_y = \hbar e^{\pm i\varphi} (\pm \partial_\theta + i \cot\theta \partial_\varphi) \quad (14.55)$$

となり、角運動量の大きさの二乗は、

$$\vec{L}^2 = (-i\hbar)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \quad (14.56)$$

となる。

これよりラプラス方程式の球対称の解は以下で与えられる。

$$R(r) = \frac{1}{r} \quad (14.57)$$

また、 L^2 の固有関数は球面調和関数

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (14.58)$$

で与えられる。

14.1.5 円柱座標

円柱座標 (ρ, φ, z) は デカルト座標と

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \varphi, \\ y &= \rho \sin \varphi, \\ z &= z \end{aligned} \quad (14.59)$$

と関連している。円柱座標における、単位ベクトルを $\mathbf{e}_\rho, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_z$ としベクトル \mathbf{V} の成分を V_ρ, V_φ, V_z とする。すなわち、

$$\mathbf{V} = \mathbf{e}_\rho V_\rho + \mathbf{e}_\varphi V_\varphi + \mathbf{e}_z V_z \quad (14.60)$$

とする。単位ベクトルは $\partial_\rho \mathbf{x}, \partial_\varphi \mathbf{x}, \partial_z \mathbf{x}$ に比例し

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_\rho &= (\cos \varphi, \sin \varphi, 0) \\ \mathbf{e}_z &= (0, 0, 1) \\ \mathbf{e}_\varphi &= (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0) \end{aligned} \quad (14.61)$$

であり規格直交系の条件、

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{i,j} \quad (14.62)$$

を満たす。 $\mathbf{e}_\rho, \mathbf{e}_\varphi$ は定ベクトルではないが \mathbf{e}_z は定ベクトルである。

円柱座標における基本演算は以下のとおりである。

勾配 (Gradient)

$$\nabla \Psi(\mathbf{x}) = \mathbf{e}_\rho \partial_\rho \Psi(\mathbf{x}) + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r} \partial_\varphi \Psi(\mathbf{x}) + \mathbf{e}_z \partial_z \Psi(\mathbf{x}) \quad (14.63)$$

発散 (Divergence)

$$\nabla \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\rho} \partial_\rho (\rho V_\rho(\mathbf{x})) + \frac{1}{\rho} \partial_\varphi V_\varphi(\mathbf{x}) + \partial_z V_z(\mathbf{x}) \quad (14.64)$$

回転 (Rotation)

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{V}(\mathbf{x}) = & \frac{1}{\rho} (\mathbf{e}_\rho (\partial_\varphi V_z(\mathbf{x}) - \partial_z \rho V_\varphi(\mathbf{x})) \\ & + \rho \mathbf{e}_\varphi (\partial_z V_\rho(\mathbf{x}) - \partial_\rho V_z(\mathbf{x})) \\ & + \mathbf{e}_z (\partial_\rho \rho V_\varphi(\mathbf{x}) - \partial_\varphi V_\rho(\mathbf{x}))) \end{aligned} \quad (14.65)$$

ラプラシアン (Laplacian)

$$\begin{aligned} \nabla^2 \Psi(\mathbf{x}) = & \frac{1}{\rho} \partial_\rho (\rho \partial_\rho \Psi(\mathbf{x})) \\ & + \frac{1}{\rho^2} \partial_\varphi^2 \Psi(\mathbf{x}) + \partial_z^2 \Psi(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (14.66)$$

スカラー関数 $\Psi(\mathbf{x})$ にラプラシアンが作用したとき、上記の演算に帰着する。もしもベクトル場にラプラシアンが作用した時は、これと異なりさらに複雑なものになる。

これよりラプラス方程式の軸対称の解は以下で与えられる。

$$R(\rho) = \log \rho \quad (14.67)$$

14.1.6 放物線座標

放物線座標 (ξ, η, ϕ) は デカルト座標と

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\xi \eta} \cos \phi, \\ y &= \sqrt{\xi \eta} \sin \phi, \end{aligned} \quad (14.68)$$

$$\begin{aligned} z &= \frac{1}{2}(\xi - \eta) \\ r &= \frac{1}{2}(\xi + \eta) \end{aligned} \quad (14.69)$$

と関連している。円柱座標における、単位ベクトルを $\mathbf{e}_\xi, \mathbf{e}_\eta, \mathbf{e}_\phi$ としベクトル \mathbf{V} の成分を V_ξ, V_η, V_ϕ とする。すなわち、

$$\mathbf{V} = \mathbf{e}_\xi V_\xi + \mathbf{e}_\eta V_\eta + \mathbf{e}_\phi V_\phi \quad (14.70)$$

とする。単位ベクトルは $\partial_\xi \mathbf{x}, \partial_\eta \mathbf{x}, \partial_\phi \mathbf{x}$ に比例し

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_\xi &= \sqrt{\frac{\xi}{\xi+\eta}} \left(\sqrt{\frac{\eta}{\xi}} \cos\phi, \sqrt{\frac{\eta}{\xi}} \sin\phi, 1 \right) \\ \mathbf{e}_\eta &= \sqrt{\frac{\eta}{\xi+\eta}} \left(\sqrt{\frac{\xi}{\eta}} \cos\phi, \sqrt{\frac{\xi}{\eta}} \sin\phi, -1 \right) \\ \mathbf{e}_\phi &= (-\sin\phi, \cos\phi, 0) \end{aligned} \quad (14.71)$$

であり規格直交系の条件、

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{i,j}; i, j = \xi, \eta, \phi \quad (14.72)$$

を満たす。 $\mathbf{e}_\xi, \mathbf{e}_\eta, \mathbf{e}_\phi$ は定ベクトルではなく、変数 ξ, η, ϕ に依存していることに、注意が必要である。

線要素は、

$$\begin{aligned} dl &= l_\xi \mathbf{e}_\xi d\xi + l_\eta \mathbf{e}_\eta d\eta + l_\phi \mathbf{e}_\phi d\phi \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\xi+\eta}{\xi}} \mathbf{e}_\xi d\xi + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\xi+\eta}{\eta}} \mathbf{e}_\eta d\eta + \sqrt{\xi\eta} \mathbf{e}_\phi d\phi \end{aligned} \quad (14.73)$$

であり、

体積要素と面要素は、

$$dv = \frac{1}{2} (\xi + \eta) d\xi d\eta d\phi \quad (14.74)$$

$$d\mathbf{S} = \mathbf{e}_\xi \sqrt{\frac{1}{4} \xi (\xi + \eta)} d\eta d\phi + \mathbf{e}_\eta \sqrt{\frac{1}{4} \eta (\xi + \eta)} d\xi d\phi + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{4\sqrt{\xi\eta}} (\xi + \eta) d\xi d\eta \quad (14.75)$$

となるので、放物線座標における基本演算は以下のとおりである。

勾配 (Gradient)

$$\nabla \Psi(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{4\xi}{\xi+\eta}} \mathbf{e}_\xi \partial_\xi \Psi(\mathbf{x}) + \sqrt{\frac{4\eta}{\xi+\eta}} \mathbf{e}_\eta \partial_\eta \Psi(\mathbf{x}) + \sqrt{\frac{1}{\xi\eta}} \mathbf{e}_\phi \partial_\phi \Psi(\mathbf{x}) \quad (14.76)$$

発散 (Divergence)

$$\nabla \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x}) = \frac{2}{\xi+\eta} \left(\partial_\xi \left(\sqrt{\frac{1}{4} \xi (\xi + \eta)} V_\xi(\mathbf{x}) \right) + \partial_\eta \left(\sqrt{\frac{1}{4} \eta (\xi + \eta)} V_\eta(\mathbf{x}) \right) + \partial_\phi \left(\sqrt{\frac{1}{\xi\eta}} V_\phi(\mathbf{x}) \right) \right) \quad (14.77)$$

ラプラシアン (Laplacian)

$$\nabla^2 \Psi(\mathbf{x}) = \left(\frac{4}{\xi+\eta} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right) \right) + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Psi(\mathbf{x}) \quad (14.78)$$

スカラー関数 $\Psi(\mathbf{x})$ にラプラシアンが作用したとき、上記の演算に帰着する。もしもベクトル場にラプラシアンが作用した時は、これと異なりさらに複雑なものになる。

14.1.7 一般の直交曲線座標

一般の直交曲線座標で単位ベクトルが、

$$(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \delta_{ij} \quad (14.79)$$

を満たすとする。

微小線要素

微小な線要素ベクトル $d\mathbf{l}$ とその長さの 2 乗がスケール因子 (l_1, l_2, l_3) で

$$\begin{aligned} d\mathbf{l} &= \mathbf{e}_1 l_1 dx_1 + \mathbf{e}_2 l_2 dx_2 + \mathbf{e}_3 l_3 dx_3 \\ dl^2 &= l_1^2 dx_1^2 + l_2^2 dx_2^2 + l_3^2 dx_3^2 \end{aligned} \quad (14.80)$$

と与えられている場合、場の微分に関するベクトル解析の基本演算は以下のとおりである。

ここで、スケール因子 l_1, l_2, l_3 は、定数である必要はない。

式 (14.5) より勾配が決まる。

勾配 (Gradient)

$$\nabla \Psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{l_1} \mathbf{e}_1 \partial_1 \Psi(\mathbf{x}) + \mathbf{e}_2 \frac{1}{l_2} \partial_2 \Psi(\mathbf{x}) + \mathbf{e}_3 \frac{1}{l_3} \partial_3 \Psi(\mathbf{x}) \quad (14.81)$$

発散 (Divergence)

発散に関するガウスの定理

$$\int dv \nabla \cdot \mathbf{V} = \int d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V} \quad (14.82)$$

で、体積要素と面要素が

$$dv = l_1 l_2 l_3 dx_1 dx_2 dx_3 \quad (14.83)$$

$$d\mathbf{S} = \mathbf{e}_1 l_1 l_2 dx_2 dx_3 + \mathbf{e}_2 l_3 l_1 dx_3 dx_1 + \mathbf{e}_3 l_1 l_2 dx_1 dx_2 \quad (14.84)$$

となることより、

$$\nabla \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x}) = \frac{1}{l_1 l_2 l_3} (\partial_1 (l_2 l_3 V_1(\mathbf{x})) + \partial_2 (l_3 l_1 V_2(\mathbf{x})) + \partial_3 (l_1 l_2 V_3(\mathbf{x}))) \quad (14.85)$$

このように発散の結果は、発散に関するガウスの定理を使うと比較的に簡単に導ける。

回転に関するストークスの定理

$$\int d\mathbf{S} \cdot \nabla \times \mathbf{V} = \int d\mathbf{l} \cdot \mathbf{V} \quad (14.86)$$

で、上の面要素と線要素から、

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{V}(\mathbf{x}) = & \mathbf{e}_1 \frac{1}{l_2 l_3} (\partial_2(l_3 V_3) - \partial_3(l_2 V_2)) \\ & + \mathbf{e}_2 \frac{1}{l_3 l_1} (\partial_3(l_1 V_1) - \partial_1(l_3 V_3)) \\ & + \mathbf{e}_3 \frac{1}{l_1 l_2} (\partial_1(l_2 V_2) - \partial_2(l_1 V_1))\end{aligned}\quad (14.87)$$

となり、回転は、回転に関するストークスの定理を使うと比較的に簡単に導ける。

勾配と発散からラプラシアン (Laplacian) が

$$\nabla^2 \Psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{l_1 l_2 l_3} (\partial_1 \left(\frac{l_2 l_3}{l_1} \partial_1 \Psi(\mathbf{x}) \right) + \partial_2 \left(\frac{l_3 l_1}{l_2} \partial_2 \Psi(\mathbf{x}) \right) + \partial_3 \left(\frac{l_1 l_2}{l_3} \partial_3 \Psi(\mathbf{x}) \right)) \quad (14.88)$$

と求まる。

14.1.8 スケール因子

座標..... 変数	(q_1, q_2, q_3)	スケール因子	(l_1, l_2, l_3)
デカルト座標....	(x, y, z)		$(1, 1, 1)$
球座標.....	(r, θ, ϕ)		$(1, r, r \sin \theta)$
円柱座標.....	(ρ, ϕ, z)		$(1, \rho, 1)$
放物線座標.....	(ξ, η, ϕ)		$(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\xi+\eta}{\xi}}, \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\xi+\eta}{\eta}}, \sqrt{\xi\eta})$

14.2 付録 C : エルミート行列の対角化と 2 次形式の標準形

14.2.1 行列の固有値問題

エルミート行列 H (成分 : $H_{ij} = H_{ji}^*$) が与えられた時、固有値方程式、

$$H_{ij} u_j^{(\lambda_1)} = \lambda u_i^{(\lambda_1)} \quad (14.89)$$

の解が必ず満たす性質として、

(1) 固有値 λ は必ず実数である。

(2) 相異なる固有値に対応する固有ベクトルは直交する。

がある。ここで、二つのベクトルが直交するとは、ベクトルの内積

$$\langle u^{\lambda_1}, u^{\lambda_2} \rangle = \sum_i u_i^{*\lambda_1} u_i^{\lambda_2} \quad (14.90)$$

が零になることである。ベクトルの大きさは自由に換えられるので、規格化をしておくと便利である。この時、ベクトルは

$$\langle u^{\lambda_1}, u^{\lambda_2} \rangle = \delta_{(\lambda_1, \lambda_2)} \quad (14.91)$$

を満たす事になる。

(証明)

証明は簡単である。式 (14.89) の両辺に $u_j^{*\lambda_2}$ をかけて和をとる事により、

$$\sum_{ij} u_i^{*\lambda_2} H_{ij} u_j^{\lambda_1} = \lambda_1 \sum u_j^{*\lambda_2} u_j^{\lambda_1} \quad (14.92)$$

が得られる。次に、 λ_1 と λ_2 の順番を替えて、

$$\sum_{ij} u_i^{*\lambda_1} H_{ij} u_j^{\lambda_2} = \lambda_2 \sum u_j^{*\lambda_1} u_j^{\lambda_2} \quad (14.93)$$

が得られる。ここで式 (14.92) の左辺の複素共役と、(14.93) の左辺は H の性質を使うと等しい事がわかる。よって、

$$(\lambda_1^* - \lambda_2) \sum u_j^{*\lambda_1} u_j^{\lambda_2} = 0 \quad (14.94)$$

となる。これより、

$$\lambda^* = \lambda \quad (14.95)$$

$$\lambda_1 \neq \lambda_2 \rightarrow \langle u^{(\lambda_1)}, u^{(\lambda_2)} \rangle = 0 \quad (14.96)$$

となり、固有値は実数であり、相異なる固有値に対応する固有ベクトルは直交する。これで証明が終りである。

今この固有ベクトルが、規格直交系の条件

$$\langle u^{(\lambda_1)}, u^{(\lambda_2)} \rangle = \delta_{\lambda_1, \lambda_2} \quad (14.97)$$

を満たすように規格化されているとする。これらのベクトルを縦に並べてユニタリ行列 U を構成しよう。

$$U = (u^{(\lambda_1)}, u^{(\lambda_2)}, \dots, u^{(\lambda_N)}) \quad (14.98)$$

明らかにこの行列は

$$U^\dagger U = I \quad (14.99)$$

を満たすユニタリ行列であり、行列 H の両辺にかけると

$$U^\dagger H U = E_D \quad (14.100)$$

は対角行列である。上の固有値が、対角成分に一致している。

14.2.2 2次形式の標準形

N 個の複素数 $z_i, i = 1, N$ の二次形式

$$I = \sum_{ij} z_i^* H_{ij} z_j \quad (14.101)$$

は変数を一次変換

$$z_i = \sum_j U_{ij} \tilde{z}_j \quad (14.102)$$

すると、

$$I = \sum_{ij} \tilde{z}_i^* \tilde{H}_{ij} \tilde{z}_j \quad (14.103)$$

$$\tilde{H} = U^\dagger H U \quad (14.104)$$

と変換される。うまい行列 U を選ぶと、 \tilde{H} は対角行列となり右辺には同じ z_i の2乗だけが現れ、

$$I = \sum_i \lambda_i |z_i|^2 \quad (14.105)$$

となる。この形を標準形という。 (z_1, z_2, z_3) がある座標系における空間の座標である場合、座標系を回転して別の座標系に移る際の変換は、直交変換である。

14.2.3 二つの行列の同時固有値問題

二つの可換なエルミート行列 A (成分: $A_{ij} = A_{ji}^*$) と B (成分: $B_{ij} = B_{ji}^*$)、

$$[A, B] = 0 \quad (14.106)$$

が与えられた時、固有値方程式、

$$A_{ij} u_j^{(\lambda_1)} = \lambda_a u_j^{(\lambda_1)} \quad (14.107)$$

$$B_{ij} u_j^{(\lambda_1)} = \lambda_b u_j^{(\lambda_1)} \quad (14.108)$$

を満たすベクトル $u^{(\lambda_1)}$ が存在する。

今この固有ベクトルが、規格直交系の条件

$$\langle u^{(\lambda_1)}, u^{(\lambda_2)} \rangle = \delta_{\lambda_1, \lambda_2} \quad (14.109)$$

を満たすように規格化されているとする。これらのベクトルを縦に並べてユニタリ行列 U を構成しよう。

$$U = (u^{(\lambda_1)}, u^{(\lambda_2)}, \dots, u^{(\lambda_N)}) \quad (14.110)$$

明らかにこの行列は

$$U^\dagger U = I \quad (14.111)$$

を満たすユニタリ行列であり、行列 A と B の両辺にかけると

$$U^\dagger A U = A_D, U^\dagger B U = B_D \quad (14.112)$$

A_D 、 B_D いずれも対角行列である。つまり、一つのユニタリ行列で二つの行列が、同時に対角形に変換される。

14.3 D 特殊関数

14.3.1 ガンマ関数

ガンマ関数は、積分

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt \quad (14.113)$$

$[\Re z > 0]$

で定義され、 $z = -n [n = 0, 1, 2, \dots]$ で留数が $(-)^n/n!$ である 1 位の極をもち、それ以外では正則で、また $\frac{1}{\Gamma(z)}$ は $|z| < \infty$ で正則である。 $z = 1$ では積分が簡単に計算でき、 $\Gamma(1) = 1$ である。また部分積分から、漸化式

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad (14.114)$$

が導かれ、整数 n に対する値が、

$$\Gamma(1) = 1, \Gamma(n+1) = n! \quad (14.115)$$

となることがわかる。 $z = n + 1/2$ では、ガンマ関数は

$$\Gamma(n+1/2) = \frac{(2n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi} \quad (14.116)$$

となり、また関係式

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z} \quad (14.117)$$

を満たしている。

14.3.2 Legendre の微分方程式と Legendre 多項式

Legendre の微分方程式

$$(1-x^2)y'' - 2xy' + n(n+1)y = 0 \quad (14.118)$$

の解として、Legendre 多項式 は

$$P_{2n} = \sum_{r=0}^n (-1)^{n-r} \frac{(2n+2r-1)!!}{(2r)!(2n-2r)!!} x^{2r} \quad (14.119)$$

$$P_{2n+1} = \sum_{r=0}^n (-1)^{n-r} \frac{(2n+2r+1)!!}{(2r+1)!(2n-2r)!!} x^{2r+1} \quad (14.120)$$

と表せる。また、この多項式は Rodorigue の公式

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (14.121)$$

とも表される。

$$P_{2l}(x) = \frac{1}{2^{(2l)}(2l)!} \frac{d^{(2l)}}{dx^{(2l)}} (x^2 - 1)^{2l} \quad (14.122)$$

$$= \frac{1}{2^{(2l)}(2l)!} \frac{d^{(2l)}}{dx^{(2l)}} \frac{(2l!)r!}{(2l-r)!} x^{2r} (-1)^{2l-r} \quad (14.123)$$

$$= \quad (14.124)$$

Legendre 多項式の母関数は

$$\frac{1}{\sqrt{1-2tz+t^2}} = \sum_l t^l P_l(z) \quad (14.125)$$

である。Rodorigue の公式を応用して、直交関係

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx &= 0; n \neq m \\ &= \frac{2}{2n+1}; n = m \end{aligned} \quad (14.126)$$

や、母関数より漸化式

$$nP_n(x) - (2n-1)xP_{n-1}(x) + (n-1)P_{n-2}(x) = 0 \quad (14.127)$$

$$(x^2-1)P_n'(x) = n[xP_n(x) - P_{n-1}(x)] \quad (14.128)$$

が導ける。Legendre 多項式は小さな n では、

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, P_1(x) = x, \\ P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1) = (1/4)(3 \cos 2\theta + 1) \\ P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) = (1/8)(5 \cos 3\theta + 3 \cos \theta) \end{aligned} \quad (14.129)$$

となる。

陪関数

Legendre の 陪微分方程式

$$(1 - x^2)y'' - 2xy' + [n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2}]y = 0 \quad (14.130)$$

の解として、Legendre 陪多項式

$$P_n^m(x) = (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \quad (14.131)$$

がある。

14.3.3 Hermite の微分方程式と Hermite 多項式

2 階微分方程式

$$y''(x) - 2xy'(x) + 2ny(x) = 0 \quad (14.132)$$

は、次の型の n 階微分方程式

$$\sum_{m=0}^{m=n} (a_m + b_m x) y^{(m)}(x) = 0 \quad (14.133)$$

の特殊な場合である。ここで、係数 a_n, b_n から作られる多項式 $P(t), Q(t)$ を

$$P(t) = \sum_{m=0}^{m=n} a_m t^m \quad (14.134)$$

$$Q(t) = \sum_{m=0}^{m=n} b_m t^m \quad (14.135)$$

と定義する。今の場合、

$$P(t) = 2n + t^2; a_0 = 2n, a_1 = 0, a_2 = 1 \quad (14.136)$$

$$Q(t) = -2t; b_0 = 0, b_1 = -2, b_2 = 0 \quad (14.137)$$

である。これらを使い

$$Z(t) = \frac{1}{Q(t)} e^{\int^t dt' \frac{P(t')}{Q(t')}} \quad (14.138)$$

となる $Z(t)$ のラプラス変換

$$y(x) = \int_C dt Z(t) e^{xt} \quad (14.139)$$

は、微分方程式の解となっている。ただし、積分路 C は、関数 $y(x)$ が収束するように選ぶ。関数 $y(x)$ の n 階微分は

$$y^{(m)}(x) = \int_C dt t^m Z(t) e^{xt} \quad (14.140)$$

となる。これを、微分方程式に代入して

$$\begin{aligned} & \sum_{m=0}^{m=n} (a_m + b_m x) y^{(m)} \quad (14.141) \\ &= \sum_{m=0}^{m=n} (a_m + b_m x) \int_C dt t^m Z(t) e^{xt} \\ &= \int_C dt Z(t) \sum_{m=0}^{m=n} t^m (a_m + b_m x) e^{xt} \\ &= \int_C dt Z(t) \sum_{m=0}^{m=n} (a_m t^m + b_m t^m \frac{\partial}{\partial t}) e^{xt} \\ &= \int_C dt [P(t)Z(t) + Q(t)Z(t) \frac{\partial}{\partial t}] e^{xt} \\ &= \int_C dt [P(t)Z(t) - \frac{\partial}{\partial t} (Q(t)Z(t))] e^{xt} \\ &= \int_C dt [P(t)Z(t) - \frac{P(t)}{Q(t)} (Q(t)Z(t))] e^{xt} \\ &= 0 \end{aligned}$$

となる。これより、関数 $y(x)$ が微分方程式の解であることがわかる。上で部分積分と定義式 (14.138) から得られる

$$\frac{\partial}{\partial t} (Q(t)Z(t)) = \frac{P(t)}{Q(t)} (Q(t)Z(t)) \quad (14.142)$$

を使った。

今の場合、

$$Z(t) = \frac{1}{Q(t)} \exp\left(\int^t dt' \frac{P(t')}{Q(t')}\right) \quad (14.143)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{-2t} \exp\left(\int^t dt' \frac{2n + t'^2}{-2t'}\right) \\
&= \frac{1}{-2t} \exp\left(\int^t dt' (-n/t' - t'/2)\right) \\
&= \frac{1}{-2t} \exp((-n \log t - t^2/4)) \\
&= -\frac{1}{2t^{n+1}} \exp(-t^2/4)
\end{aligned}$$

である。この $Z(t)$ をラプラス変換に代入して

$$\begin{aligned}
y &= \int_C \left(-\frac{1}{2t^{n+1}} e^{-t^2/4} e^{xt}\right) dt \\
&= -\frac{1}{2} \int_C \frac{e^{-t^2/4+xt}}{t^{n+1}} dt
\end{aligned} \tag{14.144}$$

となる。積分経路 C は、図のように、無限遠点から実軸にそい原点を回る。さらに、積分を実行するため、積分変数を t から

$$t = 2(x - u) \tag{14.145}$$

となる u に変換して、関数 y を

$$\begin{aligned}
y &= N \int_C \left(\frac{1}{2^{n+1}(x-u)^{n+1}} e^{-(x-u)^2+2x(x-u)}\right) du \\
&= N e^{x^2} \int_C \frac{e^{-u^2}}{2^{n+1}(x-u)^{n+1}} du
\end{aligned} \tag{14.146}$$

と表す。ここで、規格化定数を

$$N = \frac{1}{2\pi i} n! \tag{14.147}$$

と選んだ時の関数を $H_n(x)$ とすると、

$$\begin{aligned}
H_n &= \frac{1}{2\pi i} e^{x^2} \int_C \frac{e^{-u^2} n!}{2^{n+1}(x-u)^{n+1}} du \\
&= (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}
\end{aligned} \tag{14.148}$$

となる。これは、

$$\int dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{n,m} \tag{14.149}$$

となる直交関数基底となっている。

母関数

$H_n(x)$ の定義より、 t と x の関数 $G(t, x)$

$$G(t, x) = \sum_n t^n H_n(x) \frac{1}{n!} \quad (14.150)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)^n G(t, x)|_{t=0} = H_n(x) \quad (14.151)$$

を定義しておくると便利である。具体的に $G(t, x)$ が

$$\begin{aligned} G(t, x) &= \frac{e^{x^2}}{2\pi i} \int du e^{-u^2} \sum_n \frac{t^n}{(u-x)^{n+1}} (-)^n \\ &= \frac{e^{x^2}}{2\pi i} \int du e^{-u^2} \sum_n \frac{-t}{(u-x)} \frac{1}{u-x} \\ &= \frac{e^{x^2}}{2\pi i} \int du e^{-u^2} \frac{1}{1 + \frac{t}{u-x}} \frac{1}{u-x} \\ &= \frac{e^{x^2}}{2\pi i} \int du e^{-u^2} \frac{1}{t + u - x} \\ &= e^{x^2} e^{-(x-t)^2} \\ &= e^{-t^2 + 2xt} \end{aligned} \quad (14.152)$$

とわかり、母関数 (14.151) が、簡単な関数であることがわかる。これより母関数の t 微分

$$\frac{d}{dt} G(t, x) = (-2t + 2x) G(t, x) \quad (14.153)$$

$$\frac{d}{dt} G(t, x) = \sum_n n t^{n-1} H_n(x) \frac{1}{n!} \quad (14.154)$$

の比較から、漸化式

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \quad (14.155)$$

が得られ、 x 微分

$$\frac{d}{dx} G(t, x) = 2tG(t, x) \quad (14.156)$$

$$\frac{d}{dx} G(t, x) = \sum_n t^n H'_n(x) \quad (14.157)$$

の比較から、微分の漸化式

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x) \quad (14.158)$$

が得られる。

また、母関数の積の積分

$$\begin{aligned} \int dx e^{-x^2} G(t, x) G(t', x) &= \int dx e^{-x^2 + 2x(t+t') - t^2 - t'^2} \\ &= \int dx e^{-(x-t-t')^2 + 2tt'} = \sqrt{\pi} e^{2tt'} \end{aligned} \quad (14.159)$$

は、 tt' の関数であり、また展開式を使うと

$$\int dx e^{-x^2} G(t, x) G(t', x) = \sum_{n,m} t^n t'^m \frac{1}{n!m!} \int dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) \quad (14.160)$$

となる。任意の t や t' で上の二つの結果が一致するため、積分は

$$\int dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{n,m} \quad (14.161)$$

となっている。

14.3.4 ベッセル関数

ベッセルの微分方程式

$$\frac{d^2}{dz^2} u(z) + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} u(z) + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) u(z) = 0 \quad (14.162)$$

の二つの独立な解は、 $\nu \neq$ 整数 のとき、

$$J_\nu(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-)^l (z/2)^{2l}}{l! \Gamma(\nu + l + 1)} \quad (14.163)$$

$$N_\nu(z) = \frac{1}{\sin \nu\pi} [\cos \nu\pi J_\nu(z) - J_{-\nu}(z)] \quad (14.164)$$

である。 $J_\nu(z)$ は原点で有限であるが $N_\nu(z)$ は原点で発散する。

三次元球座標で変数分離した際、動径座標についての自由場の方程式は、

$$\frac{d^2}{dz^2} w(z) + \frac{2}{z} \frac{d}{dz} w(z) + \left(1 - \frac{n(n+1)}{z^2}\right) w(z) = 0 \quad (14.165)$$

となり、解がベッセル関数で、

$$j_n(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n+1/2}(z) \quad (14.166)$$

$$n_n(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} N_{n+1/2}(z) \quad (14.167)$$

$$J_{n+1/2}(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^{n+1/2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-)^l (z/2)^{2l}}{l! \Gamma(n+1/2+l+1)} \quad (14.168)$$

$$N_{n+1/2}(z) = \frac{1}{\sin(n+1/2)\pi} [\cos(n+1/2)\pi J_{n+1/2}(z) - J_{-n-1/2}(z)] \quad (14.169)$$

と表される。これらは、三角関数で

$$j_n(z) = (-)^n z^n \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^n \frac{\sin z}{z} \quad (14.170)$$

$$n_n(z) = (-)^{n+1} z^n \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^n \frac{\cos z}{z} \quad (14.171)$$

とも表せ、 n が小さな整数では、関数形は

$$j_0(z) = z^{-1} \sin z, j_1(z) = z^{-2}(\sin z - z \cos z) \quad (14.172)$$

$$j_2(z) = z^{-3}(3 - z^2) \sin z - 3z \cos z \quad (14.173)$$

$$n_0(z) = -z^{-1} \cos z, n_1(z) = -z^{-2}(\cos z + z \sin z) \quad (14.174)$$

$$n_2(z) = -z^{-3}(3 - z^2) \cos z + 3z \sin z \quad (14.175)$$

である。

14.3.5 Airy 関数

微分方程式

$$f'' - xf = 0 \quad (14.176)$$

は、変数変換

$$t = \frac{2}{3}x^{3/2} \quad (14.177)$$

でベッセル微分方程式になる。

14.3.6 超幾何関数

超幾何関数は、確定特異点を $z = 0, 1, \infty$ にもつ超幾何微分方程式

$$z(1-z) \frac{d^2}{dz^2} u + [\gamma - (\alpha + \beta + 1) \frac{d}{dz} u] - \alpha\beta u = 0 \quad (14.178)$$

の解として求まり、無限級数

$$F(\alpha, \beta, \gamma; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{(\gamma)_n n!} z^n \quad (14.179)$$

である。ここで係数の分母や分子の関数は

$$(\alpha)_n = \frac{\Gamma(\alpha + n)}{\Gamma(\alpha)} = \alpha(\alpha + 1) \cdots (\alpha + n - 1) \quad (14.180)$$

である。

14.3.7 合流型超幾何関数

14.3.8 Laguerre 多項式

Laguerre 微分方程式

$$x \frac{d^2}{dx^2} y + (\alpha + 1 - x) \frac{d}{dx} y + ny = 0 \quad (14.181)$$

の解

$$L_n^\alpha(x) = \frac{e^x x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha}) = \sum_{r=0}^n (-1)^r (n + \alpha | n - r) \frac{x^r}{r!} \quad (14.182)$$

を Laguerre 多項式という。Laguerre 多項式は、直交関係、

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha L_n^\alpha(x) L_m^\alpha(x) dx = 0; n \neq m \quad (14.183)$$

$$= \frac{\Gamma(\alpha + n + 1)}{n!}; n = m \quad (14.184)$$

を満たす。低次の Laguerre 多項式は

$$L_0^\alpha(x) = 1, L_1^\alpha(x) = 1 + \alpha - x, L_2^\alpha(x) = 1 + \alpha - x, \quad (14.185)$$

である。

14.4 E フーリエ級数とフーリエ展開

任意の周期関数 $f(x + L) = f(x)$ は、三角関数により

$$f(x) = \sum_n (a_n \sin k_n x + b_n \cos k_n x) \quad (14.186)$$

$$k_n = \frac{2\pi}{L} \quad (14.187)$$

と展開出来る。両辺に $\sin k_n x$ や $\cos k_n x$ をかけて積分して

$$a_n = \frac{1}{L} \int_0^L dx f(x) \sin k_n x, \quad (14.188)$$

$$b_n = \frac{1}{L} \int_0^L dx f(x) \cos k_n x, \quad (14.189)$$

ここで、三角関数が直交関数系である関係式

$$\int_0^L dx \sin k_n x \sin k_m x = \frac{L}{2} \delta_{nm} \quad (14.190)$$

$$\int_0^L dx \cos k_n x \cos k_m x = \frac{L}{2} \delta_{nm} \quad (14.191)$$

$$\int_0^L dx \sin k_n x \cos k_m x = 0 \quad (14.192)$$

を使った。

L が大きな極限では、

14.5 F グリーン関数

14.6 G 複素関数論

解析性、有理型関数と極、多価関数とリーマン面、Cauchy-Rieman の関係式、積分の漸近形と停留位相法

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin x}{x} = \pi \quad (14.193)$$

$$\int_c dz \frac{e^i z}{z} = 0 \quad (14.194)$$

14.7 クラスタ展開

古典統計力学における分配関数を考察する。ハミルトニアンは、1粒子の運動量 \vec{p}_i と2粒子間の相互作用ポテンシャル v_{ij} からなり

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i<j} v_{ij} \quad (14.195)$$

とする。N粒子の分配関数は、温度 T とボルツマン定数 k の積の逆数、 $\beta = \frac{1}{kT}$ とハミルトニアンの関数 $e^{-\beta H}$ を各粒子の状態を表わす力学変数である位置ベクトル \vec{r}_i と運動量ベクトル \vec{p}_i について積分した

$$Z_N(V, T) = \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^{3N} p d^{3N} r e^{-\beta H} \quad (14.196)$$

である。ここで、運動量積分は、ガウス積分

$$\int d\vec{p} e^{-\beta \frac{\vec{p}^2}{2m}} = \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^{3/2} \quad (14.197)$$

を使い簡単に実行でき、

$$Z_N(V, T) = \frac{1}{N! \lambda^{3N}} \int d^{3N} r e^{-\beta H_i}, \quad (14.198)$$

$$H_i = \sum_{i<j} v_{ij}, \lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}} \quad (14.199)$$

となる。

残された \vec{r} の積分は、簡単ではない。一つの方法は、

$$e^{\beta v_{ij}} = 1 + f_{ij} \quad (14.200)$$

とにおいて、分配関数を f_{ij} について展開することである。 β が零であれば、 f_{ij} は零であるので、この展開は β が小さい時有効である β についての冪展開である。 $\beta = \frac{1}{kT}$ であるので、 β が小さいのは大きな T 、すなわち高温になる。そのため、この展開は高温展開といわれる。この展開で、

$$Z_N(V, T) = \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N \prod_{i<j} (1 + f_{ij}) \quad (14.201)$$

$$= \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N [1 + (f_{12} + f_{13} + f_{14} + \cdots) + (f_{12}f_{13} + f_{12}f_{14} + \cdots) + \cdots] \quad (14.202)$$

となり、たくさんの項の和の積分になる。これらの各積分は難しくはないが、多くの項があるのでこれらの各積分を系統的に分類すると良い。その際、積分に絵(ダイアグラム)を対応させると、見通しが良く便利である。

各積分は、 α や β を二つの座標の対、例えば (ij) として

$$\int d^3r_1 \cdots d^3r_N f_\alpha f_\beta \cdots f_\gamma \quad (14.203)$$

の形である。この α, β, \dots のあり得るすべての組み合わせを数え上げるため、それぞれの f_{ij} に対して、座標の数だけの 0 を書く。次に、0 の中に座標を指定する数字、例えば i を入れ二つの座標が一つの f_{ij} にある時、これを示すように i を入れた 0 と j を入れた 0 を線で連結する。このルールで、各積分にダイアグラムを対応させることができる。例えば、

$$f_{12}, f_{13}, f_{24}, \cdots \quad (14.204)$$

や

$$f_{12}f_{23}, f_{12}f_{34}, f_{12}f_{13}, f_{12}f_{13}f_{23}, \cdots \quad (14.205)$$

である。これらは、

に対応する。

次に N を固定して、考えてみよう。 $N = 3$ では、

14.8 参考文献

1.

W. パウリ "量子力学の一般原理" 川口教男・堀節子訳、講談社 (1975)

W. Pauli, "Handbuch der Physik", (1933)

14.9 テスト

ポテンシャルが $U(r) = -\alpha \frac{1}{r} + c \frac{1}{r^2}$ である場合のエネルギー固有値と固有状態を求めよ。水素原子がもつ縮退が、この場合にどのようなになるか、詳しく考察せよ。

14.9.1 中間テスト 1 : 3次元運動

質量 m の質点が、三次元空間で球対称ポテンシャル $V(r)$ の中で運動している。この質点の量子力学に関する以下の問いに答えよ。

(1-1) この力学系のハミルトニアンは、古典力学で

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

である。このハミルトニアンの量子力学における表現を求めよ。(デカルト座標で良い)

(1-2) この質点の運動は、時間 t 、空間座標 \vec{x} に依存している波動関数 $\psi(t, \vec{x})$ で表される。この波動関数が従うシュレーディンガー方程式を書き下せ。

(1-3) 波動関数が、このシュレーディンガー方程式に従う時、下の確率密度 $\rho(t, \vec{x})$ を全空間で積分した確率 P

$$\rho(t, \vec{x}) = \psi(t, \vec{x})^\dagger \psi(t, \vec{x})$$
$$P = \int d\vec{x} \rho(t, \vec{x})$$

は、時間に依存しない保存量であることを示せ。

(1-4)

定常状態は、時間についての指数関数と座標についての関数の積で表現される。定常状態が従う方程式を書き下せ。

(2) 水素原子の場合、ポテンシャルは

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r}, \alpha > 0$$

である。水素原子の定常状態の一つを求めよ。球座標における次の関係式

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} d_{\theta, \phi}^2,$$
$$d_{\theta, \phi}^2 = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

を使ってもよい。

(3) 角運動量は、交換関係

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$$

を満たしている。この交換関係を満たす自明でない行列 ($L_i \neq 0$) の一般形か、または特殊な例を求めよ。

14.9.2 量子力学期末テスト

問 1 . 質量 m の質点が、三次元空間で球対称ポテンシャル $V(r)$ の中で運動している力学系のハミルトニアンは、

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)$$

である。

(1-1) 角運動量は、 i -成分を

$$L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k \quad (14.206)$$

とするベクトル演算子である。このように、2度同じ文字 j や k が現れるとき、 $\sum_{j,k}$ 記号を省略して、これらについて和をとるものとする。角運動量が交換関係

$$\begin{aligned} [L_i, x_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} x_k, [L_i, p_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} p_k \\ [L_i, L_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} L_k \end{aligned} \quad (14.207)$$

を満たしている事を示せ。また角運動量は、上のハミルトニアンと可換で

$$[L_i, H] = 0 \quad (14.208)$$

を満たすことを示せ。この関係式は、何を意味するか？

(1-2) 水素原子の場合、ポテンシャルは

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r}, \alpha > 0$$

である。水素原子の基底状態と第一励起状態の一つ、並びにそれらのエネルギーを求めよ。球座標における次の関係式

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} d_{\theta,\phi}^2, \\ d_{\theta,\phi}^2 &= \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \end{aligned}$$

を使ってもよい。

問 2

二次元系で、面に垂直の磁場と面に平行の電場が加わった時、電子が満たすシュレーディンガー方程式を書き下せ。次に、解きやすいゲージを選んで、そのシュレーディンガー方程式の解を求めよ。

問 3

3-1

1次元調和振動子に、 x^3 に比例する小さな摂動が加わった系

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 + \epsilon x^3 \quad (14.209)$$

における基底状態のエネルギーを ϵ の 1 次の近似で求めよ。

3-2

ハミルトニアン

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & |\lambda|e^{i\alpha} \\ |\lambda|e^{-i\alpha} & E_2 \end{pmatrix}$$

の固有値と固有状態を求めよ。また、 $E_1 \neq E_2$ の場合と $E_1 = E_2$ の場合で生じる違いについて説明せよ。

14.9.3 量子力学期末テスト(再追)

問 1 . 質量 m の質点が、三次元空間で球対称ポテンシャル $V(r)$ の中で運動している力学系のハミルトニアンは、

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

である。

(1-1) 角運動量は、 i -成分を

$$L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k \quad (14.210)$$

とするベクトル演算子である。このように、2度同じ文字 j や k が現れるとき、 $\sum_{j,k}$ 記号を省略して、これらについて和をとるものとする。角運動量が交換関係

$$[L_i, x_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}x_k, [L_i, p_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}p_k \quad (14.211)$$

を満たしている事を示し、さらに角運動量が、上のハミルトニアンと

$$[L_i, H] = 0 \quad (14.212)$$

となることを示せ。

次に、 $L_{\pm} = L_1 \pm iL_2$ として、交換関係

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \quad (14.213)$$

$$[\vec{L}^2, L_i] = 0, [L_+, L_-] = 2\hbar L_3, [L_3, L_{\pm}] = \pm\hbar L_{\pm} \quad (14.214)$$

が成立することを示せ。

(1-2) 水素原子の場合、ポテンシャルは

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r}, \alpha > 0$$

である。水素原子の基底状態と第一励起状態の一つ、並びにそれらのエネルギーを求めよ。球座標における次の関係式

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} d_{\theta, \phi}^2,$$
$$d_{\theta, \phi}^2 = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

を使ってもよい。

問 2

面に垂直の磁場と面に平行の電場が加わった 2 次元系を考察する。この磁場と電場をあらわすベクトルポテンシャルとスカラーポテンシャルは何か？

次に、解きやすいゲージを選んで、このシュレーディンガー方程式の解を求めよ。

問 3

3-1

1 次元調和振動子に、 x に比例する小さな摂動が加わった系

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 + \epsilon x \quad (14.215)$$

における基底状態のエネルギーの ϵ^2 のオーダーでの値を求めよ。

3-2

ハミルトニアン

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & |\lambda| \\ |\lambda| & E_2 \end{pmatrix}$$

の固有値と固有状態を求めよ。また、 $E_1 \neq E_2$ の場合と $E_1 = E_2$ の場合で生じる違いについて説明せよ。