

小川修三「量子力学」講義ノート 2

編集： 矢野 忠^{*1}

2019年5月25日

^{*1} yanotad@earth.ocn.ne.jp

はじめに

小川修三氏（名古屋大学名誉教授）夫人の敏子様から小川さんの量子力学講義ノートのコピーを送って頂いた。これは広島大学と名古屋大学で小川さんがされた量子力学の講義のノートであり、もともと公表されることを前提としてはいない。

それで単なるメモに近い箇所もあるが、小川さんの量子力学の講義はその当時にその講義を聞いた学生に感銘を与えたことで知られており、学生に量子力学をできるだけ納得できるように理解させたいという気持ちにあふれている*1。

講義ノートを3部に分けて、これから1年くらいを目途にして pdf のファイルでこの『素粒子論研究』電子版に順次掲載をして行くことを考えているが、その前に講義ノートの目次をご参考のために挙げておきたい。かっこ内の数字は A4 のノートのページ数である。ただし、注の部分を省いている。

送って頂いたコピーの中に目次が抜書きされてあるが、どうも講義ノートを見ると、抜書きの目次とは節のタイトルが一致していないものもある。また、講義が数回されているためにいつかの版'(version)がある箇所もある。

それで、異なった version も含めてどういうノートが存在しているのかをここで述べたい。

目次はどうも Schiff の量子力学とほぼ同じようである。ただ、内容は小川さんの独自の見解が各所にみられる。

これは小川修三『量子力学講義ノート 2』である。第4章から第6章までをとりあげる。

（謝辞）パリティ演算子の箇所は米澤穰氏（広島大学名誉教授）と中西 襄氏（京都大学名誉教授）に解説していただいた。ここに感謝を申し上げます。また川崎守氏（岐阜大学名誉教授）にはたくさんの改善点やミスをご指摘いただきました。御礼を申し上げます。

内容目次

第1章 量子の発見

1. 空洞輻射 (1)
2. 光量子 (2-3)
光電効果、輻射圧、コンプトン効果
3. 原子模型と Bohr の理論 (4-5)
4. 電子の波動性と de Broglie 波 (6-7)
5. 補遺 1 位相速度と群速度

第2章 Schrödinger 方程式

6. Schrödinger 方程式 (8-12)
電子密度の保存、Ehrenfest の定理
7. ψ の物理的意味 (12-14)
確率波、Schrödinger 方程式と観測における波束の収縮

*1 編者は小川さんが量子力学の講義をされる以前の学生であり、彼の原子核物理の講義を聞いた。

第3章 固有状態と固有値

8. 物理量と演算子 (15-24)
運動量と固有状態、位置の固有関数、 δ -関数
9. 交換関係 (25-26)
 $[q, p] = i\hbar$, 交換可能性と同時固有状態
10. 不確定性関係 (27-29)
位置と運動量、minimal wave packet, $\Delta E \Delta t$ の例
11. 重ね合わせの原理 (29-32)
スリット実験の例

第4章 離散固有値問題

12. 井戸型ポテンシャル (2 ページの数式が残っているが再現できていない: 編者)
13. 調和振動子 (25-32)
三次元、パリティ
14. 水素原子 (33-39)
15. 角運動量 (39-45)、磁気量子数

第5章 連続固有値の問題

16. 1次元の壁による散乱-トンネル効果 (48-50)
17. 散乱の運動学 (52-59)
古典像、量子力学的像 (beam の送り出し、漸近的振舞い)
18. 中心力による散乱 (59-66)
Coulomb 力、短距離力

第6章 行列力学

19. Matrix 力学の導入 (n1-n6)(na-nd) (Matrix 力学の応用として) 角運動量 (h10-h11)
20. 変換論 (n6-n15)
unitary 変換、状態関数、Heisenberg 描像と Schrödinger 描像、固有値問題の例

第7章 摂動論

21. 定常状態における摂動論 (n1-n3, h4-h7, ni-nii, ナンバーなし 1)
固有値問題 - Stark 効果など、Born 近似
22. 時間的发展での摂動論 (h7.1-h7.3, n7.4-n7.5)

第8章 多粒子系

23. スピンと角運動量の合成 (n1-n10)
回転群の表現
24. 同種粒子系の波動関数 (n11-n19, ナンバーなし 3)
Pauli の原理、統計、密度行列
25. 原子構造論

第9章 相対論的量子力学

26. Dirac 方程式
27. 場の量子化

第 4 章

離散固有値問題

古典論では存在しなかった物理量が量子化（とびとびの値をとること）されていることを、具体的例によって示して行こう。歴史的には、Planck によって電磁場に伴うエネルギーが、 $h\nu$ の整数倍であることの発見、つぎに Bohr による原子のエネルギー準位について

$$W_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

の仮定がなされた。そのとき、これらの値そのものは理論的に導出されたのではなく、経験的に仮定されている。

量子力学はその枠の中にこの値を決定する能力をもっているのである。すでに述べた量子力学の一般的手続きによってエネルギー準位を具体的に求めてみよう。

4.1 調和振動子 (harmonic oscillator)

まず古典像から考えて行こう。



図 4.1

図 4.1 に示したように、質量 m の粒子がバネ（弾性係数 k ）の力で運動している。このとき粒子に働く力 F は $F = -kx$, ($x = 0$ が平衡の位置) の力が働く。そのとき運動方程式は

$$m\ddot{x} = -kx$$

である。そのときの系の全エネルギー (Hamiltonian) H は

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2, \quad p: \text{質量 } m \text{ の粒子のもつ運動量} \quad (4.1.1)$$

で与えられる。電磁波の運動は調和振動子のあつまりと考えるとよい*1。

*1

$$-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} + \Delta \mathbf{A} = 0, \quad \text{真空中の Maxwell 方程式}$$

$$\text{Fourier 展開は } \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \sum \mathbf{A}_k \exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$

Hamiltonian が決定されると、それを状態関数に対する演算子とみなし、固有値方程式をつくる。

$$Hu(x) = Eu(x)$$

すなわち

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{k}{2} x^2 \right] u = Eu \quad (4.1.2)$$

これは u 状態にある電子についてのエネルギーを測定すれば、そのエネルギーはばらつくことなく常に一定の E のエネルギー値が得られるということであった*2。

(4.1.2) を解くために変数変換

$$\begin{aligned} \xi &= \alpha x, & \alpha^4 &= \frac{mk}{\hbar^2} \\ & & & \text{および} \\ \lambda &= \frac{2E}{\hbar} \left(\frac{m}{k} \right)^{1/2} = \frac{2E}{\hbar\omega}, & \omega &= \sqrt{\frac{k}{m}} \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

を用いて書きなおすと

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)u = 0 \quad (4.1.4)$$

(4.1.4) を解くのに

$$u(\xi) = H(\xi)e^{-\xi^2/2} \quad (4.1.5)$$

とおくと

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0 \quad (4.1.6)$$

が得られる。

$$H = \xi^s (a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + \dots), \quad a_0 \neq 0, s \geq 0 \quad (4.1.7)$$

とおいて、(4.1.6) に代入すれば、すべての ξ の値に対して (4.1.6) が成り立つためには

$$\begin{aligned} s(s-1)a_0 &= 0 \\ s(s+1)a_1 &= 0 \\ (s+2)(s+1)a_2 - (2s+1-\lambda)a_0 &= 0 \\ (s+3)(s+2)a_3 - (2s+3-\lambda)a_1 &= 0 \\ &\dots \\ (s+\nu+2)(s+\nu+1)a_{\nu+2} - (2s+2\nu+1-\lambda)a_\nu &= 0 \end{aligned} \quad (4.1.8)$$

が得られる。いま十分大きい ν の値に対しては

$$\frac{a_{\nu+2}}{a_\nu} \rightarrow \frac{2}{\nu} = \frac{1}{n}, \quad (\nu = 2n) \quad (4.1.9)$$

となる。これから、もし (4.1.7) の級数が有限項で止まらないならば、 ξ の大きいところで、(4.1.7) は

$$H \sim \xi^n e^{\xi^2}$$

この Fourier 展開を Maxwell 方程式に代入すると

$$\frac{1}{\sqrt{L^3}} \sum \left[-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A}_k - k^2 \mathbf{A}_k \right] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = 0$$

*2 編者注：講義ノートには $u(x)$ がエネルギーの固有関数であることを明示するように、 $u_E(x)$ と添字つきで表しているが、ここでは見やすいように添字 E を省略した。また変数 x もしばしば省略する。

という形をとる*3。

しかし、これは物理的に許されない。すなわち

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} u(\xi) = 0$$

でなければならないから、級数は有限項で止まる必要がある。したがって

$$\lambda = 2s + 2\nu + 1$$

が整数 (integer) でなければならない。

$a_0 \neq 0$ の条件で級数の偶数べきの項の和が得られた。奇数べきの項は $\lambda = 2s + 2\nu + 1$ の条件では有限項で終わらない。したがって $a_1 = 0$ としなければならない。

ところで (4.1.8) の第一行の式によって $s = 0$ または $s = 1$ である。したがって、 $\lambda = 2\nu + 1$ 、または、 $\lambda = 2\nu + 3$ が成り立つ。いずれにしろ

$$\lambda = 2n + 1, \text{ すなわち } E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (4.1.10)$$

が得られる。

(4.1.10) で $E = \frac{1}{2} \hbar\omega$ を零点エネルギー (zero-point energy) という。これは不確定性関係による最小のエネルギー (minimum energy) である。

ここで **Hermite** の多項式についてまとめておこう。

Hermite の多項式

$$\lambda = 2n + 1, \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (4.1.10)$$

に対する (4.1.6)

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0 \quad (4.1.6)$$

をみたく多項式 H_n を n 次のエルミート多項式 (**Hermite polynomial**) という。これはつぎの母関数 $S(\xi, s)$ から定義される。

$$\begin{aligned} S(\xi, s) &= e^{\xi^2 - (s-\xi)^2} \\ &= e^{-s^2 + 2s\xi} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n \end{aligned} \quad (4.1.11)$$

これが (4.1.6) をみたくすることを示すのは簡単である*4。低次の Hermite 多項式をいくつか挙げておくと

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad \dots \quad (4.1.12)$$

等で与えられる。こうして固有状態 (固有関数系) 列

$$u_n = N_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2} \quad (4.1.13)$$

*3 付録 4.1 を参照せよ

*4 付録 4.2 を参照。

が得られる。 $\alpha x = \xi$ において正規化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u_n|^2 dx = \frac{|N_n|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 1$$

の積分を行うと正規化定数 N が求められる。

そのために、つぎの積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{(-s^2+2s\xi)} e^{(-t^2+2t\xi)} e^{-\xi^2} d\xi = \sum_n \sum_m \frac{s^n t^m}{n! m!} \int H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi$$

を使う。ここで上式の左辺は

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(s+t-\xi)^2} e^{2st} d\xi = \sqrt{\pi} \sum_n \frac{(2st)^n}{n!}$$

であるから、

$$\sqrt{\pi} \sum_n \frac{(2st)^n}{n!} = \sum_n \sum_m \frac{s^n t^m}{n! m!} \int H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi$$

が得られる。この両辺を見比べると左辺に n と m との値がちがう $s^n t^m$ の項はないことと $n = m$ の項を比べて

$$\begin{aligned} \int H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi &= 0, \quad (m \neq n) \\ \int H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi &= \sqrt{\pi} 2^n n!, \quad (m = n) \end{aligned} \quad (4.1.14)$$

が得られる。

また、正規化定数 N_n は

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2} \quad (4.1.15)$$

と求められる。

付録 4.1 Hermite の微分方程式の解

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0 \quad (4.1.6)$$

$$\begin{aligned} H &= \xi^s (a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + \cdots + a_\nu \xi^\nu + a_{\nu+1} \xi^{\nu+1} + a_{\nu+2} \xi^{\nu+2} + \cdots), \quad (a_0 \neq 0, a_1 = 0) \\ (s + \nu + 2)(s + \nu + 1) a_{\nu+2} - (2s + 2\nu + 1 - \lambda) a_\nu &= 0 \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

この H のべき級数で奇数幕の項が現れないようにするために $a_1 = 0$ とっている。ここで、 $\nu \rightarrow \infty$ のとき

$$\frac{a_{\nu+2}}{a_\nu} \rightarrow \frac{2}{\nu} = \frac{1}{n}, \quad (\nu = 2n) \quad (4.1.9)$$

つぎの級数

$$\begin{aligned} K(\xi) &= a_0 \xi^s \left[1 + \xi^2 + \frac{1}{2!} \xi^4 + \cdots + \frac{1}{n!} (\xi^2)^n + \frac{1}{(n+1)!} (\xi^2)^{n+1} + \cdots \right] \\ &= a_0 \xi^s e^{\xi^2} \end{aligned}$$

ν が十分大きいところで適当な値 α をかけて

$$a_\nu = \alpha a_0 \frac{1}{n!}$$

とおくと、 $H(\xi) - \alpha K(\xi)$ は十分大きな ν のところでは各項が等しくなるから有限な項の多項式と見なせる。つまり

$$H(\xi) = \alpha K(\xi) + P(\xi)$$

とすると、 ξ の十分大きいところでは

$$u(\xi) = e^{-\xi^2/2} H(\xi) \sim \xi^s [\alpha a_0 e^{\xi^2/2} + e^{-\xi^2/2} P(\xi)]$$

しかし、上の式の右辺の第 1 項は境界条件に合わないので解とはならない。

付録 4.2 Hermite の微分方程式の導出

(4.1.11) の母関数 S から

$$\begin{aligned} \frac{dS}{d\xi} &= 2s e^{-s^2+2s\xi} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} \cdot 2s^{n+1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n}{n!} s^n \end{aligned}$$

から

$$H'_n(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi)$$

また

$$\begin{aligned} \frac{dS}{ds} &= (-2s + 2\xi) e^{-s^2+2s\xi} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2s + 2\xi)}{n!} s^n H_n(\xi) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{s^{s-1}}{(n-1)!} H_n(\xi) \end{aligned}$$

から

$$H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2n H_{n-1}(\xi) = 0 \quad (\text{A})$$

ここで $n \rightarrow n-1$ とおきかえると

$$H_n(\xi) - 2\xi H_{n-1}(\xi) + 2(n-1) H_{n-2}(\xi) = 0 \quad (\text{B})$$

となり、この式で

$$\begin{aligned} H_{n-1}(\xi) &= \frac{1}{2n} H'_n(\xi) \\ H_{n-2}(\xi) &= \frac{1}{4n(n-1)} H''_n(\xi) \end{aligned}$$

を上式 (B) に代入すると (4.1.6) の Hermite の微分方程式が求まる。

パリティ (Parity)

調和振動子 (harmonic oscillator)、その他の原子の問題などを取り扱うときに出会う、多くの場合ポテンシャル・エネルギー (potential energy) $V(x)$ は一般にその変数 (argument) の変換

$$\begin{aligned} x &\rightarrow -x \\ \mathbf{r} &\rightarrow -\mathbf{r} \end{aligned} \quad (4.1.16)$$

に対して不変である。つまり原点に関して対称である。すなわち

$$V(-x) = V(x) \text{ または } V(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$$

が成り立つ。この場合、エネルギーの固有状態に縮退がなければ

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right)u(\mathbf{r}) = Eu(\mathbf{r})$$

に対して、必ず

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right)u(-\mathbf{r}) = Eu(-\mathbf{r})$$

なる $u_E(-\mathbf{r})$ が同じ固有値に属する。したがって

$$u(-\mathbf{r}) = \epsilon u(\mathbf{r}) \tag{4.1.17}$$

\mathbf{r} の符号をもう一度変えることによって

$$u(\mathbf{r}) = \epsilon u(-\mathbf{r}) = \epsilon^2 u(\mathbf{r})$$

であるから

$$\epsilon^2 = 1 \text{ すなわち } \epsilon = \pm 1 \tag{4.1.18}$$

が得られる。

すなわち、固有関数は座標変換 (4.1.16) に対する固有状態にあり、その固有値は ± 1 である。このための条件はハミルトニアン $H(\mathbf{r})$ が

$$H(-\mathbf{r}) = H(\mathbf{r}) \tag{4.1.19}$$

であることが必要であった。状態関数に対する演算子

$$Pu(\mathbf{r}) = u(-\mathbf{r}) \tag{4.1.20}$$

で定義される演算子 P をパリティ Parity とよぶ。パリティは古典論にはなかったものであり、量子力学において演算子ということで導入できた新しい物理量である。(4.1.20) のパリティ演算子 P を位置の演算子 (x, y, z) と運動量演算子 $-i\hbar\nabla$ で表すと

$$P = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-2x)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n} \right] \left[\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} (-2y)^m \frac{\partial^m}{\partial y^m} \right] \left[\sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} (-2z)^l \frac{\partial^l}{\partial z^l} \right] \tag{4.1.21}$$

となる*5。

調和振動子では

$$Pu_n(x) = (-1)^n u_n(x) \tag{4.1.22}$$

つまり、 n が偶数 even か奇数 odd によって $+1$ または -1 の固有値をもつ状態になる。

*5 このパリティ演算子の表現の導出は「数学・物理通信」7巻1号の米澤穰氏と中西襄氏の論考を参照せよ。「数学・物理通信」のバックナンバーは名古屋大学の谷村氏のサイトにある。

4.2 水素原子

水素の原子核（陽子）のまわりをただ一つの電子がまわっている、水素原子の電子のエネルギーを求める問題を扱ってみよう。ハミルトニアンは

$$H = \frac{p_N^2}{2m_N} + \frac{p_e^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} \quad (4.2.1)$$

つぎの時間的な Schrödinger 方程式から出発しよう。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{r}_n, \mathbf{r}_e) = H\psi(t, \mathbf{r}_n, \mathbf{r}_e) \quad (4.2.2)$$

で、 ψ はつぎのような解が

$$\psi = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \epsilon t\right) \phi(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_e) \quad (4.2.3)$$

が存在する。そのとき

$$\epsilon \phi = H\phi$$

が固有値方程式である。つぎのような変数変換が 2 体問題のときの一般的手法である。

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_N \\ (m_n + m_e)\mathbf{R} &= m_e \mathbf{r}_e + m_N \mathbf{r}_N \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

すなわち

$$\mathbf{R} = \frac{m_e}{M} \mathbf{r}_e + \frac{m_N}{M} \mathbf{r}_N, \quad M = m_e + m_N$$

である。これによって

$$\begin{aligned} \nabla_e &= \frac{m_e}{M} \nabla_{\mathbf{R}} + \nabla_{\mathbf{r}} \\ \nabla_N &= \frac{m_N}{M} \nabla_{\mathbf{R}} - \nabla_{\mathbf{r}} \end{aligned}$$

を用いれば*6、

$$\epsilon \phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad M = m_e + m_N, \quad \mu = \frac{m_e m_N}{M}$$

*6 編者注：この式を成分で式を書いてみたらいい。相対座標 \mathbf{r} は

$$\begin{aligned} x &= x_e - x_N, \\ y &= y_e - y_N, \\ z &= z_e - z_N \end{aligned}$$

また重心座標 \mathbf{R} は

$$\begin{aligned} X &= \frac{m_e}{M} x_e + \frac{m_N}{M} x_N, \\ Y &= \frac{m_e}{M} y_e + \frac{m_N}{M} y_N, \\ Z &= \frac{m_e}{M} z_e + \frac{m_N}{M} z_N, \quad (M = m_e + m_N) \end{aligned}$$

と表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_e} &= \frac{m_e}{M} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x} \\ &\dots \\ \frac{\partial}{\partial x_N} &= \frac{m_n}{M} \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x} \\ &\dots \end{aligned}$$

これらの式をベクトルで表すと (4.2.5) となる。

μ は換算質量 (reduced mass) と呼ばれる。ここで変数分離を行う。

$$\begin{aligned}\phi &= U(\mathbf{R})u(\mathbf{r}) \\ \epsilon Uu &= \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}}U\right)u + U\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r})\right)u\end{aligned}$$

ここで両辺を Uu でわって

$$\epsilon - \frac{-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}}U}{U} = \frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r})\right)u}{u} = E$$

左辺は \mathbf{R} の関数で、右辺は \mathbf{r} の関数である。したがって、 E は定数 (constant) でなければならない。すなわち、

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}}U(\mathbf{R}) = (\epsilon - E)U(\mathbf{R}), \quad (4.2.5a)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r})\right)u(\mathbf{r}) = Eu(\mathbf{r}) \quad (4.2.5b)$$

(4.2.5a) は重心運動の方程式であり、(4.2.5b) はこれから解こうとする相対運動の波動方程式である*7。

(4.2.5b) の $V(\mathbf{r})$ が中心力のポテンシャルであり、 $V(\mathbf{r}) = k/r$ の形であるために 3 次元の極座標系で取り扱うと便利である。

(4.2.5b) の相対座標 \mathbf{r} のラプラス演算子 Δ を直交座標から極座標 (r, θ, ϕ) に変換しよう。

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Lambda(\theta, \phi), \\ \Lambda(\theta, \phi) &= \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\end{aligned}$$

(4.2.5b) は

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right] u + \frac{1}{r^2} \Lambda u = 0$$

となる。いま

$$u = R(r)\Theta(\theta)\Omega(\phi) \quad (4.2.6)$$

とおくと

$$\frac{\left[\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] R(r)}{R(r)} + \frac{\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \Theta}{\Theta} + \frac{\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Omega}{\Omega} = 0$$

これから、この式の第 1 項および第 2 項と第 3 項はそれぞれ独立な変数の関数であり、それらがたしあって 0 と

*7 (4.2.5a) の重心運動の方程式の解は

$$U(\mathbf{R}) = N e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}, \quad |\mathbf{K}| = \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2}(\epsilon - E)}, \quad N = \sqrt{\frac{1}{L^3}}$$

$\epsilon - E \geq 0$ でなければならない。すべての実数が固有値となる。この解は同時に運動量の固有状態である。したがって

$$-i\nabla U = \hbar\mathbf{K}U$$

である。

なるためには

$$\frac{\left[\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] R(r)}{R(r)} = C,$$

$$\frac{\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \Theta}{\Theta} + \frac{\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Omega}{\Omega} = -C$$

とならなければならない。さらに、上式の第2式は

$$\frac{\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + C \sin^2 \theta \Theta}{\Theta} + \frac{\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \phi^2}}{\Omega} = 0$$

となる。このことから、さらにこの式の各項がそれぞれ一定 (constant) でなければならない。この定数を m^2 とおくと

$$\frac{\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + C \sin^2 \theta}{\Theta} = m^2,$$

$$\frac{\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \phi^2}}{\Omega} = -m^2$$

となる。これらから、次の方程式

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{C}{r^2} \right] R = 0, \quad (4.2.7a)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \left(C - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0, \quad (4.2.7b)$$

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \phi^2} + m^2 \Omega = 0 \quad (4.2.7c)$$

が得られる*8。これからこれらの方程式を解いていこう。

まず、(4.2.7c) は

$$\Omega^m(\phi) = \frac{\exp(im\phi)}{\sqrt{2\pi}} \quad (4.2.8)$$

の解をもつ*9。ところで、 ϕ は極座標の方位角で、 2π 回転すると状態は元に戻るから

$$\Omega(0) = \Omega(2\pi), \quad \Omega'(0) = \Omega'(2\pi)$$

が成り立つ必要がある。このために

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.2.9)$$

となる。

つぎに、(4.2.7b) は $x = \cos \theta$ とすると、 $\frac{d}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta} \frac{d}{dx} = -\sqrt{1-x^2} \frac{d}{dx}$ であるから

$$(1-x^2) \frac{d^2 \Theta}{dx^2} - 2x \frac{d\Theta}{dx} + \left(C - \frac{m^2}{1-x^2} \right) \Theta = 0 \quad (4.2.10)$$

となる。これを **Legendre** の方程式という*10。

*8 編者注：この変数分離した微分方程式を導く過程はちょっと複雑に感じられる。まず $u = R(r)Y(\theta, \phi)$ において、 $R(r)$ と $Y(\theta, \phi)$ の方程式を導く。さらに Y の方程式を $Y = \Theta(\theta)\Omega(\phi)$ と $\Theta(\theta)$ と $\Omega(\phi)$ の2つの角度に関係した関数の微分方程式に変数分離するという二段階をとるほうが考えやすい。

*9

$$\int_0^{2\pi} |\Omega^m(\phi)|^2 d\phi = 1$$

すなわち

$$\int_0^{2\pi} (\Omega^m(\phi))^* \Omega^m(\phi) d\phi = \delta_{mn}$$

*10 編者注：講義ノートが1頁だけ欠けている。それで編者がその箇所を適当に埋めることを試みた。

(編者補足はじめ) (4.2.10) はこのままの形ではべき級数法では解くことができないが、いま

$$\Theta = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} G(x) \quad (4.2.11)$$

とにおいて、 $G(x)$ についての微分方程式

$$(1-x^2) \frac{d^2 G(x)}{dx^2} - 2(|m|+1)x \frac{dG}{dx} + [C - |m|(|m|+1)] G = 0 \quad (4.2.12)$$

を求めれば、この微分方程式はべき級数法で解くことができる*11。

$x = \cos \theta$ が $-1 \leq x \leq 1$ のときには、(4.2.10) の $\Theta(x)$ が有限となるためには、定数 C は

$$C = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

となるときに限られる。

すでに、(4.2.7c) の解として (4.2.8) の解は (4.2.9) によって、整数 m によって限定されている。したがって、(4.2.10) は整数 l と m とによって特徴づけられる。すなわち、(4.2.10) は

$$(1-x^2) \frac{d^2 \Theta}{dx^2} - 2x \frac{d\Theta}{dx} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] \Theta = 0$$

となる。この解 Θ は整数 l, m をつけて、 Θ_l^m と表す (編者補足おわり)。

それを

$$\Theta_l^m := P_l^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x) \quad (4.2.13)$$

ただし、 $P_l(x)$ は母関数 (generating function) $T(x, s)$

$$\begin{aligned} T(x, s) &= (1-2sx+s^2)^{-1/2} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) s^l, \quad |s| < 1 \end{aligned} \quad (4.2.14)$$

からつくられる (付録 4.3 「ルジャンドルの方程式」を参照せよ)。

球面調和関数 (Spherical Harmonics)

(4.2.7b) の解 $P_l^m(\cos \theta)$ と (4.2.7c) の解 $\Omega^m(\phi)$ の積を球面調和関数 (Spherical Harmonic) という*12。ただし、 $C = l(l+1)$, ($l = 0, 1, 2, \dots$) である。これは角度 (θ, ϕ) に関する完全直交関数系をつくる。

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = N_{lm} P_l^m(\cos \theta) \Omega^m(\phi) \quad (4.2.15)$$

(4.2.14) から

$$\begin{aligned} T_m(x, s) &= \frac{(2|m|)!(1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} s^{|m|}}{2^{|m|}(|m|)!(1-2sx+s^2)^{|m|+1/2}}, \\ &= \sum_{l=|m|}^{\infty} P_l^m(x) s^l \end{aligned} \quad (4.2.16)$$

を用いて

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^m(x) dx = \delta_{ll'} \left[\frac{2}{2l+1} \right] \left[\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \right] \quad (4.2.17)$$

*11 編者注：この辺の議論はポーリングとウィルソンの『量子力学序論』(白水社) 139-145 を参照せよ。

*12 編者注：著者 (小川) は (4.2.7b) と (4.2.7c) の二つの微分方程式をみたす解を球面調和関数と定義している。同じことだが、編者がわかりやすいように変更した。

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \epsilon \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right] P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (4.2.18)$$

ここで

$$\epsilon = \begin{cases} (-1)^m, & m > 0 \text{ のとき} \\ 1, & m \leq 0 \text{ のとき} \end{cases}$$

いくつかの調和球面関数をあげておこう。

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\ Y_{1,1} &= -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{i\phi} \\ Y_{1,0} &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \\ Y_{1,-1} &= \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{-i\phi} \end{aligned}$$

パリティ変換 (Parity Transformation)

空間反転 $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ は極座標では

$$\begin{aligned} r &\rightarrow r \\ \theta &\rightarrow \pi - \theta \\ \phi &\rightarrow \pi + \phi \end{aligned} \quad (4.2.19)$$

となる。この演算子を P で表せば

$$\begin{aligned} PY_{lm}(\theta, \phi) &= Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \phi) \\ &= (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

である。 l が偶数 (even) か奇数 (odd) によってパリティの値は ± 1 をとる。

(4.2.18) で定義された球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \phi)$ は軌道角運動量演算子の固有関数であるから、4章3節に軌道角運動量について述べることにしよう。

動径部分の状態関数

相対座標の状態関数の角部分の状態関数 $Y(\theta, \phi)$ がわかってきたので、動径部分状態関数の方程式を解くことができる段階に来た。

(4.2.7a) にもどって、これを少し書き直しておく。

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{Ze^2}{r} R + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} R = ER \quad (4.2.20)$$

ここで、右辺の最後の項は古典力学的に表せば

$$\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \rightarrow \frac{M^2}{2\mu r^2} = \frac{\mu r^2 \omega^2}{2} : \text{遠心力によるエネルギー、ここで } \omega \text{ は角速度}$$

となる*13。

さらに書き換えて

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{dR}{d\rho} \right) + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R = 0 \quad (4.2.21)$$

*13 編者注：量子力学では力はハミルトンには現れず、力のポテンシャルが現れる。遠心力を導く、遠心力のポテンシャルは力を距離で積

$$\rho = \alpha r, \quad \alpha^2 = \frac{8\mu|E|}{\hbar^2}, \quad \lambda = \frac{Ze^2}{\hbar} \left(\frac{\mu}{2|E|} \right)^{1/2} \quad (4.2.22)$$

この式で

$$R = F(\rho)e^{-\frac{\rho}{2}} \quad (4.2.23)$$

とすると

$$F'' + \left(\frac{2}{\rho} - 1 \right) F' + \left[\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] F = 0 \quad (4.2.24)$$

これをべき級数の方法で解こう。

$$F = \rho^s (a_0 + a_1 \rho + a_2 \rho^2 + \dots), \quad a_0 \neq 0, \quad s \geq 0 \\ = \rho^s L(s)$$

これを (4.2.24) に代入すると、最低次のべきの項から $s(s+1) - l(l+1) = 0$, したがって $s = l$, または $s = -(l+1)$ となる。 $s \geq 0$ から $s = l$ となる。これを用いて

$$\rho L'' + [2(l+1) - \rho] L' + (\lambda - l - 1) L = 0 \quad (4.2.25)$$

を解くと

$$a_{\nu+1} = \frac{\nu + l + 1 - \lambda}{(\nu + 1)(\nu + 2l + 2)} a_{\nu}$$

ν が大きければ

$$\frac{a_{\nu+1}}{a_{\nu}} \rightarrow \frac{1}{\nu}$$

ν がどこかで止まらなければ $\rho^s L(s) \sim \rho^s e^{\rho}$ となるが、これは $\rho \rightarrow \infty$ のときに発散するので、これは困る。したがって

$$\lambda = n' + l + 1 := n \quad (4.2.26)$$

なる整数値をとる。(4.2.22) の λ で、 $Z = 1$ とおいて、 E を求めれば

$$E_n = -\frac{\mu e^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots > l) \quad (4.2.27)$$

Laguerre の多項式

母関数 (generating function)

$$U(\rho, s) = \frac{e^{-\frac{\rho s}{1-s}}}{1-s} \\ = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{L_q(\rho)}{q!} \cdot s^q, \quad (s < 1) \quad (4.2.28)$$

分すれば、求められる。すなわち

$$F = -\frac{dU}{dr}$$

であるから、遠心力のポテンシャルは

$$U(r) = \frac{M^2}{2\mu r^2}$$

と表される。量子力学では $M^2 = l(l+1)\hbar^2$ である。

ρ と s について微分するとそれぞれ

$$\begin{aligned} L'_q - qL'_{q-1} &= -qL_{q-1}, \\ L_{q+1} &= (2q+1-\rho)L_q - q^2L_{q-1} \end{aligned}$$

を得る。それを用いて

$$\rho L''_q + (1-\rho)L'_q + qL_q = 0$$

となる。これを p 回微分すれば

$$\rho L_q^{p+2} + (p+1-\rho)L_q^{p+1} + (q-p)L_q^p = 0 \quad (4.2.29)$$

となる。ここで

$$p = 2l + 1, \quad q = \lambda + l = n + l$$

とおけば、これは (4.2.25) に一致する。

$$\frac{d^p}{d\rho^p} L_q = L_q^p = L_{n+l}^{2l+1} \quad (4.2.30)$$

を Laguerre の陪関数 (associated Laguerre function of order p) という。

動径関数の正規化

$$\int_0^\infty |R(\rho)|^2 \rho^2 d\rho = \int \rho^{2l} e^{-\rho} [L_q^p]^2 \rho^2 d\rho = \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \quad (4.2.31)$$

水素原子の固有関数列

$$\begin{aligned} u_{n,l,m}(r, \theta, \phi) &= R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \\ R_{n,l} &= - \left[\left(\frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(l+n)!]^3} \right]^{1/2} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \\ a_0 &= \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \quad \rho = \frac{2Z}{na_0} r \\ E_n &= -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{n^2} \end{aligned} \quad (4.2.32)$$

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} 2e^{-\frac{Zr}{a_0}} \\ R_{20}(r) &= \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \\ R_{21}(r) &= \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{\sqrt{3}a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \end{aligned} \quad (4.2.33)$$

状態の縮退 (degeneracy)

水素原子の場合、energy の固有値は n にだけ依存していて、 l, m にはよらない。したがって、同一の n に属する異なった l, m をもつ状態はすべて同じ energy をもつ。このように同一の energy 準位にいくつかの状態が属していることをエネルギー状態の縮退という。

さて、(4.2.27) から n が与えられたとして

$$l = n - 1, n - 2, \dots, 0 \quad (4.2.34)$$

である n 個の状態、また l が与えられたとして

$$m = l, l - 1, \dots, -l + 1, -l \quad (4.2.35)$$

である $2l + 1$ 個の状態がある。

そこで、ある n が与えられたときに

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2 \quad (4.2.36)$$

個の状態が縮退することになる。(4.2.35) の縮退は中心力場では一般的であるが、(4.2.34) は Coulomb 力という中心力の特別な事情によっている。Alkali 原子では、内部の (すなわち l の小さな) 電子のために外側の (l の大きな) 電子により小さい Coulomb 力を受け、 l の degeneracy がとれる。また磁場を与えると、 m の degeneracy がとれる。

付録 4.3 ルジャンドルの方程式

ルジャンドル関数の母関数 $T(x, s)$

$$\begin{aligned} T(x, s) &= (1 - 2sx + s^2)^{-1/2} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) s^l, \quad |s| < 1 \end{aligned} \quad (4.2.14)$$

から出発しよう。母関数 (4.2.14) の対数をとれば

$$\log(1 - 2sx + s^2)^{-1/2} = \log\left(\sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) s^l\right)$$

これを s で微分すれば、

$$\frac{x - s}{1 - 2sx + s^2} = \frac{\sum_{l=0}^{\infty} l P_l(x) s^{l-1}}{\sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) s^l}$$

となる。分母をはらうと

$$\sum_{l=0}^{\infty} (x - s) P_l(x) s^l = (1 - 2sx + s^2) \left(\sum_{l=0}^{\infty} l P_l(x) s^{l-1} \right)$$

両辺の s^l の係数を比較すると (以後変数 x を省く)

$$(l + 1) P_{l+1} - (2l + 1) x P_l + l P_{l-1} = 0 \quad (A1)$$

が得られる。同様に (4.2.14) の対数をとって x で微分すれば

$$\frac{s}{1 - 2sx + s^2} = \frac{\sum_l P'_l s^l}{\sum_l P_l s^l}, \quad P'_l = \frac{d}{dx} P_l$$

が得られる。分母をはらって

$$\sum_{l=0}^{\infty} P_l s^{l+1} = \sum_{l=0}^{\infty} (s^l - 2xs^{l+1} + s^{l+2}) P'_l$$

この両辺の s^{l+1} の係数を比較すれば

$$P_l - P'_{l-1} + 2xP'_l - P'_{l+1} = 0 \quad (\text{A2})$$

(A1) を x で微分して、2 をかければ、

$$2(l+1)P'_{l+1} - 2(2l+1)P_l - 2(2l+1)xP'_l + 2lP'_{l-1} = 0 \quad (\text{B1})$$

となる。(A2)×(2l+1) をつくれば

$$(2l+1)P_l + 2(2l+1)xP'_l - (2l+1)(P'_{l-1} + P'_{l+1}) = 0 \quad (\text{B2})$$

となる。

(B1) と (B2) をたせば、

$$(2l+1)P_l = \frac{d}{dx}(P_{l+1} - P_{l-1}) \quad (\text{A3})$$

が得られる。この式をうまく使えばルジャンドル関数の次数 l をそろえることができる。すなわち、ルジャンドル関数の方程式を導くことができる。

(A1) を x で微分すると

$$0 = (l+1)P'_{l+1} - (2l+1)xP'_l + lP'_{l-1} - (2l+1)P_l$$

上式から (A3) を用いて、 P'_{l-1} を消去すると

$$\begin{aligned} 0 &= (l+1)P'_{l+1} - (2l+1)xP'_l + lP'_{l-1} - (2l+1)P_l \\ &= (l+1)P'_{l+1} - (2l+1)xP'_l + lP'_{l+1} - (2l+1)lP_l - (2l+1)P_l \end{aligned}$$

したがって

$$(2l+1)P'_{l+1} - (2l+1)xP'_l - (2l+1)(l+1)P_l = 0$$

であるから、これを $(2l+1)$ でわれば、

$$P'_{l+1} = xP'_l + (l+1)P_l \quad (\text{A4})$$

が得られる。この式に $P'_{l+1} = P'_{l-1} + (2l+1)P_l$ を代入すれば

$$P'_{l-1} = -lP_l + xP'_l, \quad (\text{A5})$$

ここで (A4) で $l \rightarrow l-1$ と置き換えた式を (A5) に代入すれば

$$P'_l = lP_{l-1} + x(-lP_l + xP'_l)$$

となる。これをまとめると

$$(1-x^2)P'_l = l(P_{l-1} - xP_l)$$

となる。さらにこれを x で微分して、(A5) を用いれば

$$\frac{d}{dx} [(1-x^2)P'_l] + l(l+1)P_l = 0, \quad (\text{A6})$$

のルジャンドルの方程式が得られる。すなわち、これは (4.2.10) で $C = l(l+1)$, $m = 0$ とおいた式である。

4.3 角運動量 (angular momentum)

古典論での軌道角運動量は $\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{P}$ である*¹⁴。このとき量子力学では

$$\begin{aligned} M_x &= yp_z - zp_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ M_y &= zp_x - xp_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ M_z &= xp_y - yp_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (4.3.1)$$

この角運動量の成分の間に

$$[M_x, M_y] = i\hbar M_z, \quad (x, y, z \text{ を cyclic}) \quad (4.3.2)$$

が成立する。しかし、

$$\mathbf{M}^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 \quad (4.3.3)$$

とおき、ハミルトニアン H を思い出すと

$$[\mathbf{M}^2, M_i] = 0, \quad (i = x, y, z) \quad (4.3.4)$$

$$[H, M_i] = 0 \quad (4.3.5)$$

が成り立つ。したがって \mathbf{M}^2 と M_i のいずれかひとつとは同時に同じ固有関数もてる。また、ハミルトニアン H と M_i とは交換可能であって同時に同じ固有関数もてる。

軌道角運動量 M_i を極座標で表すと

$$\begin{aligned} M_x &= i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ M_y &= i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ M_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

となる。そこで

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^2 &= M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \end{aligned} \quad (4.3.7)$$

これを (4.2.11),(4.2.12) と比較すると*¹⁵

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^2 Y_{l,m} &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] Y_{l,m} \\ &= \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m} \end{aligned} \quad (4.3.8)$$

すなわち、(4.3.8) の解 $Y_{l,m}$ は、全角運動量の固有状態である。その固有値は $\hbar^2 l(l+1)$ である。

*¹⁴ 編者注：軌道角運動量の軌道という語を付加するのは量子力学ではほかにスピン角運動量があるからである。しかし、以下、区別する必要があるところまで、「軌道」の語をつけない。

*¹⁵ 編者注：しかし、このままではちょっと比較しにくい。(4.2.11),(4.2.12) にわかる前に脚注6で導入した $Y(\theta, \phi)$ についての角部分の状態関数の方程式を (4.2.32) と比較する。

また

$$M_z \Omega^m = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \Omega^m = m\hbar \Omega^m \quad (4.3.9)$$

これから Ω^m は角運動量の z 成分の固有状態である。また $|m| \leq l$ の条件は当然期待できることであった。

$$[M^2, M_z] = 0$$

であるから、同時固有状態をもつことができる*16。まさに Y_{lm} はそれであった。一つの l に対して m は

$$m = l, l-1, l-2, \dots, 1, 0, -1, \dots, -(l-1), -l \quad (4.3.10)$$

の $2l+1$ 個の値をとることができる。これは角運動量がベクトルであり、かつその方向が量子化されることによる (図 4.2 参照)。

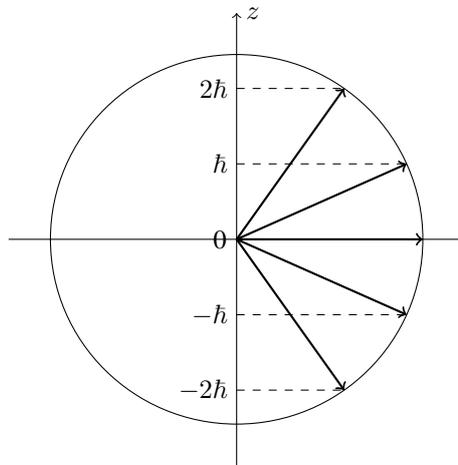


図 4.2 角運動量の方法量子化 ($l=2$ のとき)

ところで

$$[M_x, M_y] = i\hbar M_z, [M_y, M_z] = i\hbar M_x, [M_z, M_x] = i\hbar M_y \quad (4.3.11)$$

このことから、 M_z が確定した値をとるとき、 M_x, M_y の値はばらつく、すなわち、同時固有状態がとれない。

*16 編者注：「同時固有状態」とはおかしな用語である。英語では simultaneous eigenstates という。二つ以上の演算子に対して同じ固有状態が属することである。編者は「共通の固有状態」と言い換えている。著者（小川）は (4.3.5) の下に同時に同じ固有関数をもてると説明している。同時固有関数という語は定着した用語である。川崎氏によれば、著者は注意深く、「同時に同じ固有関数をもつ」と表現していると編者に注意を喚起してくれた。

第 5 章

連続固有値の問題

5.1 連続固有値の例

粒子の位置座標および運動量はすべての実数値を固有値とすることができ、固有関数を見出すことができる。ここで、2, 3 の注意を与えておこう。

1. x または p がすべての実数をとるということは、どんな実数値に属する固有状態も原理的にはつくりだせる（実現できる）ということである。この状況は古典論とまったく同じである。しかし、 x と p との同時固有状態をつくることは、量子力学では原理的に禁止されていて、

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$$

となる不確定性関係で制約されている。

2. 運動量 p_x の固有値方程式

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi = p\psi$$

をみると、 p として虚数をとることも可能に見える。しかし、その解は

$$\psi(x) = e^{\pm \frac{|p|}{\hbar} x} \tag{5.1.1}$$

となって、 $x = \infty$ or $x = -\infty$ で $\psi(x) \rightarrow \infty$ という unphysical のことになってしまう。つまり、関数的にいうと $x = \pm\infty$ が singularity である*1。

*1 編者注：この箇所はちょっと意味がとりづらい。

$$-i\hbar \frac{d\psi}{dx} = p\psi$$

を解くと、解として

$$\psi(x) = C e^{\frac{ip}{\hbar} x}$$

が求められる。運動量演算子

$$-i\hbar \frac{d}{dx}$$

は Hermite 演算子であるから、運動量演算子をとる固有値はすべて実数であることが証明される。

しかし、ここではそういう知識をまだもっていないとして、運動量演算子の $-i\hbar \frac{d}{dx}$ の固有値 p が純虚数であるとして $p = \pm ik$, $k =$ 実数 とすれば、

$$\psi(x) = C e^{\pm \frac{|k|}{\hbar} x} \tag{5.1.2}$$

となる。これは $x \rightarrow \pm\infty$ で、 $\psi(x) \rightarrow 0$ となり、物理的な境界条件に反するから、運動量演算子の固有値が純虚数をとることはないという意味であろう。

水素原子の場合

前章の相対座標での Hamiltonian を使えば、方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \Lambda(\theta, \phi) \right] + V(r) \right) \psi = E\psi \quad (5.1.3)$$

である。ここで

$$\Lambda(\theta, \phi) = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

状態関数

$$\psi = R(r)\Theta(\theta)\Omega(\phi)$$

において

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}, \quad \rho = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}} r \quad (5.1.4)$$

とおくと

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + k^2 + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u = 0, \quad \left(k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} > 0 \right) \quad (5.1.5)$$

(5.1.5) は $\rho \rightarrow \infty$ で、解は

$$u(\rho) \sim Ae^{ik\rho} + Be^{-ik\rho}$$

となり、正規化は k のすべての実数に対して可能である。なぜなら $|u| < \infty$ であるから。 E は $E \geq 0$ なるすべての値が可能である。実際に解いてみよう。

$$u(\rho) = e^{\pm ik\rho} \rho^{l+1} \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \rho^{\nu} \quad (5.1.6)$$

において、 ρ のべきの同じところを比較して

$$a_{\nu+1} = \frac{2[\mp i(\nu+l+1)k - z]}{(\nu+l+2)(\nu+l+1) - l(l+1)} a_{\nu}$$

$\nu \rightarrow \infty$ とすると

$$a_{\nu+1} \approx \frac{\mp 2ik}{\nu+l+2} a_{\nu} \approx \frac{(\mp 2ik)^{\nu+1}}{(\nu+l+2)!} a_0 \quad (5.1.7)$$

つまり (5.1.6) の級数は収束する。

方程式 (5.1.5) は合流型超幾何関数として解が表されることが知られており、詳しいことは微分方程式論に任すが、

$$u_{n,l}(\rho) = e^{\pm ik\rho} \rho^{l+1} F \left(l+1 \pm \frac{Z}{ik}, 2l+2, \mp 2ik\rho \right) \quad (5.1.8)$$

として表されている*2。

=====
 編者注： 上の部分は名古屋大学時代の講義ノートにしたがったものであるが、広島大学時代の講義ノートはつぎのようである。古いノートを上のノートで新しく置き換えたものかと思われるが、廃棄はされていないので、つぎに掲載をしておく。

*2 編者注： $u_{nl}(\rho) = e^{\pm ik\rho} \rho^{l+1} F(\rho)$ において、これを (5.1.5) に代入し、 $F(\rho)$ についての微分方程式を導いて、それが合流型超幾何関数の満たす微分方程式になることをみてもよい。

水素原子の場合には

$$\left(-\frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}\right)\psi = E\psi$$

で、 $E > 0$ のすべての実数値に対して空間のどこでも singular でない解—固有状態が存在する。この場合

$$\psi_{r \rightarrow \infty}(\mathbf{r}) \neq 0 \quad (5.1.9)$$

であって、古典論における双曲線軌道の運動状態に対応する。古典論の軌道を時間的にならした形で発見される確率が与えられるといってもよい。

一般に中心力ポテンシャルの場の中の運動では、 $E > 0$ での連続固有値が実現可能 (realizable) である。このとき状態は (5.1.9) の条件が妥当し、したがって確率の定義から

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{V} = 1$$

とするために、実際的には特定の大きさの閉じた空間を考えて、問題を処理する必要が起こる。たとえば、運動量のときには

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}$$

のように $1/\sqrt{L^3}$ の正規化が必要となる。この手法の具体的な適用については後に述べる。

(編者注：広島大学での講義の部分おわり)

=====

つぎに衝突の問題を考えることにしよう。

5.2 1次元の障壁による問題

古典像をまずつくる。障壁はポテンシャル (potential) で表せる。(古典力学ではそれ以外の機能は捨象される)

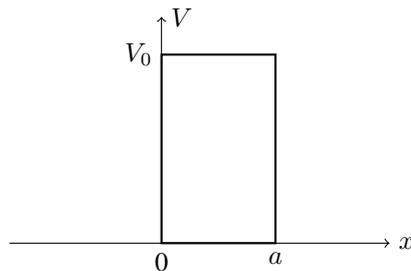


図 5.1 矩形型ポテンシャル

障壁の左の方から障壁に向かって飛来する粒子の運動を取り扱う。 $x < 0$ では右側に伝播する解と障壁からはねかえる解とが共存し、 $x > a$ では障壁から速がる解だけが存在することになる。これを条件とする。波動方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right] u(x) = Eu(x) \quad (5.2.1)$$

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & (0 \leq x \leq a) \\ 0 & (x \leq 0, x \geq a) \end{cases}$$

その解は

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} = p/\hbar, \quad x \leq 0 \quad (5.2.2)$$

$$u(x) = Ce^{ikx}, \quad x \geq a$$

解 (5.2.2) をもちいて確率の流れ^{*3}をつくると

$$j = \frac{-i\hbar}{2m} [u^* \nabla u - (\nabla u^*) u]$$

$$= \begin{cases} \frac{p}{m} (|A|^2 - |B|^2) = v(|A|^2 - |B|^2), & x \leq 0 \\ v|C|^2, & x \geq 0 \end{cases} \quad (5.2.3)$$

これから A, B, C は入射、反射、透過の各振幅になっている。

さて、 $0 \leq x \leq a$ の間の解は、 $E > V_0$ かまたは $E < V_0$ かの条件によって異なる。まず $E > V_0$ の場合を考えよう。

$$u(x) = De^{ik'x} + Fe^{-ik'x}, \quad k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar, \quad (5.2.4)$$

$x = 0$ と a とで関数およびその微分が連続という条件をおく。なぜなら、まず関数の連続性がないと、たとえば、その点では微分が ∞ となる。微分は運動量に対応するから、そこでは ∞ の速度、すなわち、無限大のエネルギーをもつことになるという unphysical なことが起こる^{*4}。

話の本筋に戻ると、 $x = 0$ での連続性から

$$A + B = D + F$$

$$k(A - B) = k'(D - F) \quad (i)$$

$x = a$ での連続性から

$$De^{ik'a} + Fe^{-ik'a} = Ce^{ika}$$

$$k'(De^{ik'a} - Fe^{-ik'a}) = kCe^{ika} \quad (ii)$$

この (ii) から、まず F を求めれば、

$$F = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k}{k'}\right) e^{i(k+k')a} C, \quad (iii a)$$

同様に、 D を求めれば

$$D = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k}{k'}\right) e^{i(k-k')a} C, \quad (iii b)$$

^{*3} $\psi(x, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{ikx} = \exp \frac{i}{\hbar} (-Et + kx)$ であるから、これは t の増大とともに x が増大する、進行波である。

^{*4} 微分が不連続だと、そこでは確率の流れが保存しなくなる。

ちょっとこのことを考えてみよう。いまは定常状態であるから

$$\rho \equiv u^* u, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

となる。連続の方程式は

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0$$

であるから、

$$\int \text{div } \mathbf{j} dV = 0$$

が得られるが、一方で

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int u^* u dV &= \frac{i\hbar}{2m} \int (u^* \Delta u - (\Delta u^*) u) dV \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int (u^* \Delta u - (\Delta u^*) u)_n dS \\ &\neq 0, \quad \text{なぜなら } (u^* \Delta u - (\Delta u^*) u)_n \neq 0 \text{ であるから。} \end{aligned}$$

となり、これで矛盾が起こる。

(iii) を (i) に代入して

$$\begin{aligned} A + B &= \left(\cos k'a - i \frac{k}{k'} \sin k'a \right) e^{ika} C, \\ A - B &= \frac{k'}{k} \left(-i \sin k'a + \frac{k}{k'} \cos k'a \right) e^{ika} C \\ &= \left(\cos k'a - i \frac{k'}{k} \sin k'a \right) e^{ika} C \end{aligned}$$

これらから

$$\begin{aligned} \frac{B}{A} &= \frac{i}{2} \left(\frac{k'}{k} - \frac{k}{k'} \right) \sin k'a e^{ika} \frac{C}{A} \\ 1 &= \frac{1}{2} \left[2 \cos k'a - i \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin k'a \right] e^{ika} \frac{C}{A} \\ &= \frac{1}{4kk'} \left[(k+k')^2 - (k-k')^2 e^{2ik'a} \right] e^{i(k-k')a} \frac{C}{A} \end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned} \frac{B}{A} &= \frac{(k^2 - k'^2)(1 - e^{2ik'a})}{(k+k')^2 - (k-k')^2 e^{2ik'a}} \\ \frac{C}{A} &= \frac{4kk' e^{-i(k-k')a}}{(k+k')^2 - (k-k')^2 e^{2ik'a}} \end{aligned} \quad (5.2.5)$$

こうして、反射係数 (reflection coefficient)

$$\begin{aligned} \left| \frac{B}{A} \right|^2 &= \left[1 + \frac{4k^2 k'^2}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a} \right]^{-1} \\ &= \left[1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 k'a} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (5.2.6)$$

と透過係数 (transmission coefficient)

$$\left| \frac{C}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2 k'a}{4E(E - V_0)} \right]^{-1} \quad (5.2.7)$$

が得られる。

つぎに $E < V_0$ とすると、 $k' = i\kappa$ とおけばよい。ここで $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ である。このとき反射係数と透過係数はそれぞれ

$$\left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left[1 - \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sinh^2 \kappa a} \right]^{-1} \quad (5.2.8)$$

$$\left| \frac{C}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 k'a}{4E(E - V_0)} \right]^{-1} \quad (5.2.9)$$

となる。ここで $E < V_0$ でも透過係数が 0 にはならないことに注意しよう。これは量子力学的運動 (すなわち、存在様式) の特徴である。

(例) α decay を例として説明する*5。

*5 編者注：こう書いてあるが、これに対応したノートは残っていない。

5.3 衝突の運動学

5.3.1 古典 (classical) 像

運動量とエネルギーの保存が成り立つ。

図のような衝突を考える。入射粒子の質量を m 、標的粒子の質量を M とする。



図 5.2a 実験室系 (LS)

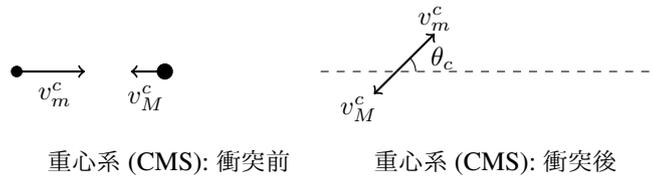


図 5.2b 重心系 (CMS)

重心^{*6}の速度を v_0 とすれば、

$$\begin{aligned} m(v - v_0) &= Mv_0 \\ v_0 &= \frac{m}{m + M}v \end{aligned} \quad (5.3.1)$$

(C.M. 系の) 弾性衝突では衝突前後で、それぞれの粒子の速度 (編者注: 厳密にいうと速さ、もちろん衝突によって進行方向は変わる) は変わらないから

$$v_m^c = \frac{M}{M + m}v, \quad v_M^c = \frac{m}{M + m}v$$

実験室系 (L.S.) と重心系 (C.M.S.) との関係

$$\begin{aligned} v_m^L \cos \theta_L &= v_m^c \cos \theta_c + v_M^c \\ v_m^L \sin \theta_L &= v_m^c \sin \theta_c \\ \tan \theta_L &= \frac{\sin \theta_c}{\cos \theta_c + \frac{v_M^c}{v_m^c}} = \frac{\sin \theta_c}{\cos \theta_c + \frac{m}{M}} \end{aligned} \quad (5.3.2)$$

これから

$$d(\cos \theta_L) = \frac{(1 + \gamma \cos \theta_c)}{(1 + 2\gamma \cos \theta_c + \gamma^2)^{3/2}} d(\cos \theta_c), \quad \gamma = (m/M) \quad (5.3.3)$$

^{*6} 重心系 (C.M.S.) とは、 $v_0 = \frac{m\dot{\mathbf{r}}_m + M\dot{\mathbf{r}}_M}{m + M}$ 、すなわち系の全運動量が 0 となる系のことである。

1. これから L-系での角度分布 $0 \sim \pi$ に対して C-M 系では $0 \sim \pi$ まで単調に変わる ($\gamma < 1$ のとき)。
2. $\gamma = 1$ のときは、 $\theta_L = \theta_c/2$ で 2 粒子の L-系での角度は常に 90° 、したがってまた後方 (backward) にでることはない。
3. $\gamma > 1$ のときは、L-系での散乱角はある角度の値以上はとれない。

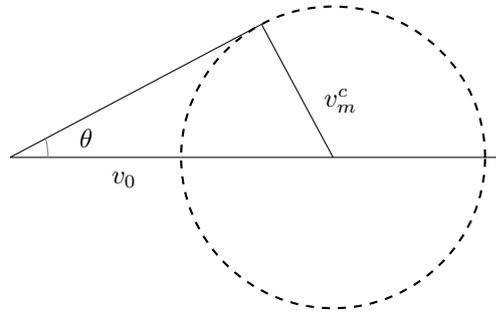


図 5.3 散乱角の上限

$$\theta_{max} = \sin^{-1} \left(\frac{v_m^c}{v_0} \right) = \sin^{-1} \left(\frac{M}{m} \right) = \sin^{-1} \left(\frac{1}{\gamma} \right)$$

入射粒子の energy 損失

$$\begin{aligned} \text{衝突後の運動エネルギー} &= \frac{m}{2} [(v_m^c \cos \theta_c + v_M^c)^2 + (v_m^c)^2 \sin^2 \theta_c] \\ -\Delta E &= E \frac{2mM}{(m+M)^2} (1 - \cos \theta_c) = E \frac{2\gamma}{(1+\gamma)^2} (1 - \cos \theta_c) \end{aligned}$$

これから平均エネルギー損失は、 $\gamma = 1$ のとき最大で

$$|\Delta E| = E/2 \quad (5.3.4)$$

(例) 原子炉の減速材 (moderator) で重水を使う理由のひとつである。

重心系におけるエネルギー

$$\frac{m}{2} \left(\frac{M}{m+M} \right)^2 v^2 + \frac{M}{2} \left(\frac{m}{m+M} \right)^2 v^2 = \frac{v^2}{2} \frac{1}{(m+M)^2} (m+M)mM = \frac{1}{2} \left(\frac{mM}{m+M} \right) v^2$$

重心系でみると、換算質量 (reduced mass) $\mu = \frac{mM}{m+M}$ の粒子が速さ (speed) v で定まった散乱中心で散乱されるといふことになる。

5.3.2 量子力学的像

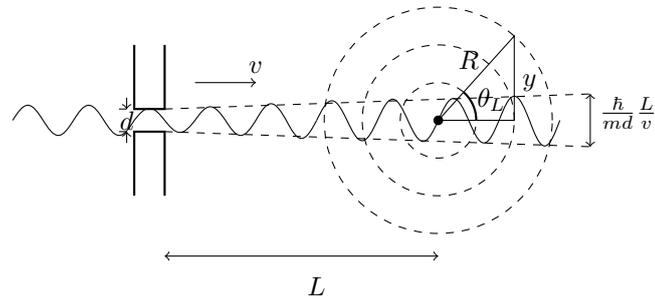


図 5.4 散乱が計測できるための条件

散乱が観測できる条件は

$$R \sin \theta_L = y \gg \frac{\hbar L}{m d v}$$

が成り立つことである。

(例) $d = 1\text{mm}$, $L = 1\text{m}$, 電圧 $V = 10^4\text{V}$ に加速した電子の散乱を考えてみよう*7。

$$\begin{aligned} \frac{mv^2}{2} &= eV \\ v &= \sqrt{2eV/m} \\ &= \sqrt{2 \cdot 1.60 \times 10^{-19}\text{C} \cdot 10^4\text{V} \cdot 10^7\text{erg} / 9.1 \times 10^{-28}\text{g}} \\ &= 0.6 \times 10^{10}\text{cm/s} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\hbar L}{m d v} &= \frac{10^{-27}\text{erg} \cdot \text{s}}{10^{-27}\text{g} \cdot 0.1\text{cm}} \frac{10^2\text{cm} \cdot \text{s}}{0.6 \times 10^{10}\text{cm}} \\ &= \frac{10^2}{0.1 \cdot 6 \times 10^{10}} \frac{\text{cm}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{cm} \cdot \text{s}}{\text{s}^2 \cdot \text{cm}^2} \\ &= 1.6 \times 10^{-8}\text{cm} \ll R \sin \theta_L \end{aligned}$$

だから実際問題としては d の値そのものがきく。

入射粒子 1 個 1 個については何もいえない。統計的な statement だけがができる。的の大きさをつぎのように定義する (図 5.5 参照)。

*7 $e = 1.60 \times 10^{-19}\text{C}$, $m = 9.108 \times 10^{-28}\text{g}$, $\hbar = 1.054 \times 10^{-27}\text{erg} \cdot \text{s}$

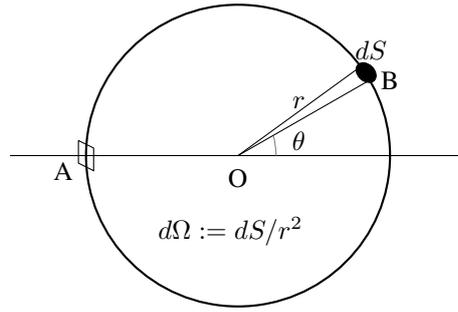


図 5.5 散乱断面積

A で 1cm^2 に毎秒入射する粒子数を N 、これを確率波 u で表すと

$$N = (u^* u)v$$

B で立体角 $d\Omega$ (面積 $R^2 d\Omega$) を出ていく毎秒の粒子数

$$dN := N\sigma(\theta, \phi)d\Omega \quad (5.3.5)$$

によって、散乱体の微分断面積 $\sigma(\theta, \phi)d\Omega$ という。

$$\sigma_T = \int \sigma(\theta, \phi)d\Omega \quad (5.3.6)$$

を全断面積 (total cross section) とよぶ。

重心系と実験室系とでの微分断面積の関係は、対応する粒子が散乱される interval で定義する。すなわち、

$$\sigma(\theta_L, \phi_L)d\Omega_L = \sigma(\theta_c, \phi_c)d\Omega_c$$

(5.3.3) を用いて

$$\sigma(\theta_L, \phi_L)d\Omega_L = \sigma(\theta_c, \phi_c) \frac{(1 + 2\gamma \cos \theta_c + \gamma^2)^{3/2}}{1 + \gamma \cos \theta_c} d\Omega_c \quad (5.3.7)$$

で与えられる。

5.3.3 beam の送り出し

この小節ではビームの送り出しについて考えてみよう (図 5.6 参照)。

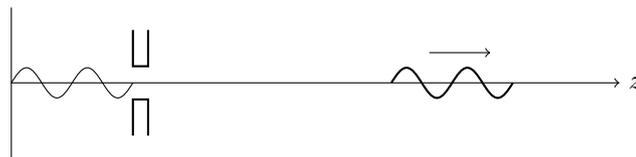


図 5.6 ビームの送り出し

ある時間間隔 Δt だけスリットを開いて出てくる波束の変化を考えてみる。問題は 1 次元で取り扱ったので十分である。

$$\psi(z, 0) = A \exp\left(-\frac{z^2}{2\Delta^2}\right) \exp(ikz) \quad (5.3.8)$$

ここで $k = p/\hbar$ は $t = 0$ で出発した速度 v と

$$v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$$

という関係になる。

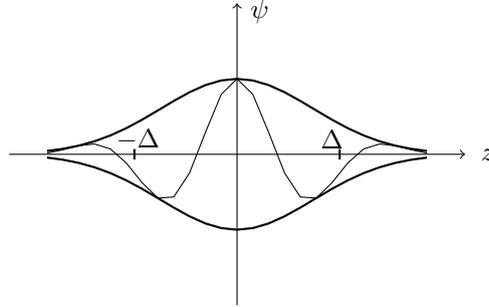


図 5.7 波束の時間的变化

$$\Delta = v\Delta t$$

$$\Delta p = \frac{\hbar}{\Delta}$$

$$\Delta E = \frac{(\Delta p)p}{m} = v\Delta p$$

$$(\Delta E)(\Delta t) \sim v\Delta p \cdot \frac{\Delta}{v} \sim \hbar$$

時間 Δt で用意された状態の Energy は $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$ だけ不確定である。

=====

この状態 (5.3.8) は散乱体がなければ、つぎの

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$$

にしたがって、時間的变化をする (図 5.7 参照)。

この方程式にしたがうと t だけ経ったときの解 $\psi(z, t)$ は

$$\psi(z, t) = \frac{A}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{m\Delta^2}}} \exp \left[-\frac{1}{2\Delta^2 D^2} \left(z - \frac{\hbar k}{m} t \right)^2 \right] \cdot \exp \left\{ \frac{i}{D^2} \left[\left(k + \frac{\hbar t z}{2m\Delta^4} \right) z - \frac{(\hbar k)^2}{2m\hbar} t \right] \right\} \quad (5.3.9)$$

ここで

$$D^2 = 1 + \left(\frac{\hbar t}{m\Delta^2} \right)^2$$

で与えられる*8。この解から波束の中心は

$$\langle z \rangle = \frac{\hbar k}{m} t$$

*8 編者注：この (5.3.9) の導出は講義ノートでは述べられていない。朝永『量子力学』II (みすず書房) 37-40 を参照せよ。記号の書き換えがあるが、ほぼこの通りの式が出ている。記号 D は編者が式が簡単になるように導入した。

で z 方向に移動していることがわかる。この波束の幅は

$$\Delta \rightarrow \Delta D$$

で増大する。 t が十分大きければ

$$\Delta D = \Delta \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{m\Delta^2}\right)^2} \sim \Delta \cdot \frac{\hbar}{m\Delta^2} \cdot t = \frac{\hbar}{m\Delta} t \sim \frac{\Delta p}{m} t$$

となり、最初の運動量の不確定による波束の広がりが続いている。それとともに振幅の絶対値

$$\left| A / \sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{m\Delta^2}} \right|$$

は時間の経過とともに小さくなる。確率波は広がり、そして、うすめられていく。

5.3.4 漸近的振舞い

まず beam の性質をはっきり定義 (well defined) するためには、用意する時間 Δt 、したがって Δ を十分大きくすることが必要である。 $\Delta \rightarrow \infty$ にすると (5.3.9) は

$$\psi(z, t) \sim \exp \left[i \left(kz - \frac{E}{\hbar} t \right) \right] = \exp(ipz/\hbar) \exp \left(-i \frac{E}{\hbar} t \right)$$

となって、これは定常波となる。

われわれは、このような条件で散乱実験を行っている (たとえば、原子による散乱では $\Delta \gg r_A$)。われわれの問題は時間的な変化部分を除いたものを求めることになる。

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta u + Vu = Eu \tag{5.3.10}$$

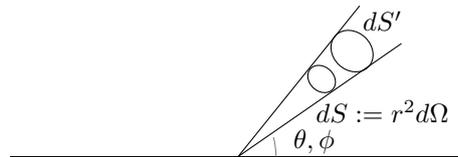
相対座標系では換算質量 μ の粒子の fixed center による散乱を考えればよい。なぜなら $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta$ は重心系で見た運動エネルギーであるから。

この解は十分に散乱中心 (scattering center) から離れたところでは

$$u(r, \theta, \phi) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A \left[e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \right]$$

となることが期待される。右方向への進行波と放射状 (radial) に放出される散乱波となる。散乱波が $\frac{e^{ikr}}{r}$ という r -依存性 (dependency) をもつことは物理的に明らかである。

なぜなら、 dS と dS' を通り抜ける粒子数が変わらないため (図 5.8 参照)。



$$d\Omega := dS/r^2$$

図 5.8 散乱の漸近的振る舞い

したがって、 θ, ϕ 方向の断面積は

$$\sigma(\theta, \phi) d\Omega \equiv \frac{|A \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}|^2 v r^2 d\Omega}{|A e^{ikz}|^2 v} = |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (5.3.11)$$

で与えられる。こうして散乱の断面積を求める問題は $f(\theta)$ を求める問題に帰着した。

5.4 中心力による散乱

多くの問題ではポテンシャル (potential) が、中心対称の場合、つまり r だけの関数である。この場合、散乱振幅 f や散乱断面積 σ は角度 ϕ にはよらない。したがって、解で ϕ の自由度は考えなくてよい。そこで解は

$$\begin{aligned} u(r, \theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos \theta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\chi_l(r)}{r} P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (5.4.1)$$

として (5.3.10) に代入すると

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \chi_l}{dr^2} + \left[k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l &= 0 \\ k &= \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2} \right)^{1/2}, U(r) = \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (5.4.2)$$

$r=0$ で $R_l(r)$ が有限 (finite) すなわち $\chi_l=0$ の条件が必要である*9。

(5.4.2) の解を

$$\chi_l(r) = v_l(r) e^{\pm ikr} \quad (5.4.3)$$

とおけば、

$$\frac{d^2 v_l}{dr^2} \pm 2ik \frac{d}{dr} v_l = \left[U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] v_l \quad (5.4.4)$$

さて $r \rightarrow \infty$ では (5.4.4) の右辺は $\rightarrow 0$ 、したがって $v_l(r)$ は $r \rightarrow \infty$ でゆるく変化する関数のはずである。そこで (5.4.4) で v'' を無視する (neglect) と

$$\pm 2ik \ln v_l = \int^r \left[U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] dr + \text{constant} \quad (5.4.5)$$

$r \rightarrow \infty$ では右辺は一定 (constant) である。(ただし $U(r)$ は $1/r$ よりもはやく収束するとしなければならない。) したがって、 v_l も一定となる。こうして

$$\chi_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A e^{i\delta_l} e^{\pm ikr}$$

という形をとることがわかる。

これをもうすこし physical にするために入射波の部分波 (partial wave) 展開

$$\begin{aligned} e^{ikr \cos \theta} &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \\ &\sim \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ikr} \left[e^{i(kr - \frac{1}{2}l\pi)} - e^{-i(kr - \frac{1}{2}l\pi)} \right] i^l P_l(\cos \theta), \text{ (as } r \rightarrow \infty) \end{aligned} \quad (5.4.6)$$

*9 この条件の導出は補遺 5.4.2 を参照のこと

をする*¹⁰。 l の固有状態ではない。

さて、実際の解 (solution) である、中心から広がって行く波は散乱体 (scatterer) によって影響され変化を受けるはずである。

$$\begin{aligned} u(r, \theta) &\sim \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ikr} \left[S_l e^{i(kr - \frac{1}{2}l\pi)} - e^{-i(kr - \frac{1}{2}l\pi)} \right] i^l P_l(\cos \theta) \\ &= e^{ikr \cos \theta} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \end{aligned} \quad (5.4.7)$$

とおけば、

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [e^{2i\delta_l} - 1] P_l(\cos \theta), \quad \text{ここで } S_l \equiv e^{2i\delta_l} \quad (5.4.8)$$

こうして散乱断面積 (scattering cross section) は

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \right|^2 \quad (5.4.9)$$

ここに導入した δ_l を位相のずれ (phase shift) とよび、断面積 (cross section) を求める問題は結局位相のずれを求める問題に帰着された。位相のずれ δ_l は波束が吸収されることがないから、実数 (real) である。すなわち、各部分波の粒子密度 (または放出される粒子数) はポテンシャル (potential) の存在によって変わらないからである。

全断面積は

$$\begin{aligned} \sigma_T &= \int \sigma(\theta) d\Omega \\ &= 2\pi \int \sigma(\theta) d(\cos \theta) \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \end{aligned} \quad (5.4.10)$$

これから l が決まった波 (wave) での散乱断面積には最大 (maximum) が存在することがわかる。

散乱の例を以下にいくつか挙げるが、その前に散乱の全断面積 σ_T と散乱振幅の虚部 $\text{Im} f(0)$ との関係を示す、光学定理について述べておこう。

(5.4.8) で散乱角 $\theta = 0$ の場合には、 $\cos \theta = 1$ である。Legendre の多項式 $P_l(1) = 1$ であることを用いれば、

$$\begin{aligned} f(0) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} (e^{i\delta_l} - e^{-i\delta_l}) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l \end{aligned}$$

となる。これと (5.4.10) とから

$$\text{Im} f(0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_T \quad (5.4.11)$$

の関係が得られる。これを光学定理という。

(例) 影のついた面積の幾何学的意味 (geometrical meaning of shaded area) (図 5.9 参照)

$$\pi r_{l+1}^2 - \pi r_l^2 = \frac{\pi}{k^2} [(l+1)^2 - l^2] = \frac{\pi}{k^2} (2l+1) \quad (5.4.12)$$

*¹⁰ $j_l(x)$ は l 次の球 Bessel 関数 (spherical Bessel function) である。

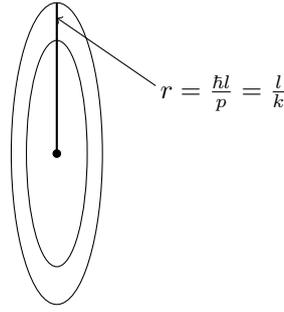


図 5.9 影のついた面積の幾何学的意味

(例) 井戸型ポテンシャル (square well potential) による散乱

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r \leq d \text{ のとき} \\ 0, & r > d \text{ のとき} \end{cases} \quad (5.4.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \chi_l}{dr^2} + \left[K^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l &= 0, \quad r \leq d \\ K^2 &= \frac{2\mu(E + V_0)}{\hbar^2} \\ \frac{d^2 \chi_l}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l &= 0, \quad r > d \\ k^2 &= \frac{2\mu E}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (5.4.14)$$

($r \leq d$ の解)

$\chi_l(0) = 0$ であるために

$$\frac{\chi_l}{Kr} = j_l(Kr)$$

$r = d$ での対数微分 (logarithmic derivative) は

$$\left. \frac{d}{dr} \log j_l(Kr) \right|_{r=d} = \frac{K j_l'(Kd)}{j_l(Kd)} = \gamma_l \quad (5.4.15)$$

($r > d$ の解)

$$\frac{\chi_l}{kr} = \frac{1}{kr} [\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l(kr)] \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{2ikr} \sin(kr + \delta_l - \frac{1}{2}\pi)$$

ここで、 $r \rightarrow \infty$ のとき

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{kr} \cos(kr - \frac{1}{2}(l+1)\pi) \\ n_l(kr) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{1}{2}(l+1)\pi) \end{aligned}$$

$r = d$ における対数微分 (logarithmic derivative) は

$$\frac{k[\cos \delta_l j_l'(kd) - \sin \delta_l n_l'(kd)]}{\cos \delta_l j_l(kd) - \sin \delta_l n_l(kd)} = \gamma_l \quad (5.4.16)$$

したがって

$$\tan \delta_l = \frac{k j_l'(kd) - \gamma_l j_l(kd)}{k n_l'(kd) - \gamma_l n_l(kd)}$$

いま、 l が十分大きければ、 δ_l が小さく、 γ_l は自由波 (free wave) の値と大きくはちがわないであろう。

$$\gamma_l = \frac{k j_l'(kd)}{j_l(kd)} + k\epsilon_l, \quad |\epsilon_l| \ll \frac{j_l'(kd)}{j_l(kd)}$$

とおくと

$$\tan \delta_l = \frac{\epsilon_l(kd)^2 j_l^2(kd)}{\epsilon_l(kd)^2 j_l(kd) n_l(kd) - 1}$$

これから

$$\delta_l \approx -\frac{\epsilon_l(kd)^{2l+2}}{[1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1)]^2} \quad (5.4.17)$$

となる。

($l = 0$ の場合)

$$\gamma := \frac{K \cos(Kd)}{\sin(Kd)} = \frac{k \cos(kd + \delta)}{\sin(kd + \delta)} \quad (A)$$

から、もし $kd \ll 1$ なら

$$k \cot \delta = \frac{\gamma}{1 - \gamma d} + \left[\frac{d - \frac{\gamma^2 d^3}{3}}{1 - \gamma d} \right] k^2 \quad (5.4.18)$$

これから

$$\delta \rightarrow 0, \quad (k \rightarrow 0 \text{ のとき})$$

これは δ の幾何学的説明 (geometrical explanation) である*¹¹。

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \approx \frac{4\pi}{k^2} \delta_0^2 = 4\pi a^2 \text{ as } k \rightarrow 0 \\ a &= \frac{1 - \gamma d}{\gamma} : \text{散乱半径 (scattering length)} \\ &\text{because higher } \delta_l \text{ diminishes much faster.} \end{aligned}$$

つまり、断面積 (cross section) はある一定値 (constant) に近づく。Energy が少し増すと、たとえば、 $l = 1$ までの部分波を考慮しなければならない。

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) d\Omega &= \frac{d\Omega}{k^2} |e^{i\delta_0} \sin \delta_0 + 3e^{i\delta_1} \sin \delta_1 \cos \theta|^2 \\ &= \frac{d\Omega}{k^2} [\sin^2 \delta_0 + 6 \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos(\delta_1 - \delta_0) \cos \theta + 9 \sin^2 \delta_1 \cos^2 \theta] \end{aligned} \quad (5.4.19)$$

5.4.1 球 Bessel 関数 (spherical Bessel function) $j_l(kr)$

(4.2.20) で Coulomb ポテンシャルがない場合

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_l}{dr} \right) + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} R = ER, \\ \rho = \alpha r, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}} \end{aligned} \quad (B0)$$

*¹¹ 編者注：(5.4.18) は (A) を $\cot \delta$ で解いて求める。もっとも k^2 までとるという近似ではその係数の分子は $d - \frac{\gamma^2 d^3}{3}$ ではなく、 $d + \frac{\gamma d^3}{3}$ となるように思われるが、その正否はわからない。また川崎氏によれば、 k^2 までの展開では

$$k \cot \delta = \frac{\gamma}{1 - \gamma d} + \left[\frac{3d - 3\gamma d^2 + \gamma^2 d^3}{3(1 - \gamma d)^2} \right] k^2 + O(k^3)$$

となるのではないかという。いずれにしてもなんらかの近似でそれが (5.4.18) になるのかもしれない。

として書き直すと

$$\frac{d^2 R_l}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_l}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R_l = 0 \quad (\text{B1})$$

この解は

$$\begin{aligned} \rho = 0 \text{ で regular : } j_l(\rho) \text{ speherical Bessel} \\ \rho = 0 \text{ で singular : } n_l(\rho) \text{ speherical Neuman} \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

いくつかの球 Bessel(speherical Bessel) 関数と球 Neuman(speherical Neuman) 関数を以下に与える。

$$\begin{aligned} j_0 &= \frac{\sin \rho}{\rho} \\ j_1 &= \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho} \\ j_2 &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho \\ &\dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n_0 &= -\frac{\cos \rho}{\rho} \\ n_1 &= -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho} \\ n_2 &= -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho \\ &\dots \end{aligned}$$

また $\rho \rightarrow 0$ ときの、leading 項はそれぞれ

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &\xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{\rho^l}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1)} \\ n_l(\rho) &\xrightarrow{\rho \rightarrow 0} -\frac{1 \cdot 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l-1)}{\rho^{l+1}} \end{aligned} \quad (\text{B3})$$

であり、また $\rho \rightarrow \infty$ のときの、leading 項はそれぞれ

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &\xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} \cos\left[\rho - \frac{1}{2}(l+1)\pi\right] \\ n_l(\rho) &\xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} \sin\left[\rho - \frac{1}{2}(l+1)\pi\right] \end{aligned} \quad (\text{B4})$$

である。また、つぎのような性質もある。

$$\begin{aligned} n_{l-1} j_l - n_l j_{l-1} &= \frac{1}{\rho^2} \\ j_l \frac{d}{d\rho} n_l - n_l \frac{d}{d\rho} j_l &= \frac{1}{\rho^2} \end{aligned} \quad (\text{B5})$$

5.4.2 補遺 $r = 0$ での $R_l(r) = \text{finite}$ の条件の導出

この条件は確率の保存という一般的な条件から必要とされる。すなわち、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0$$

を全空間にわたって積分すると

$$\begin{aligned}
 0 &= \frac{\partial}{\partial t} \int \rho dr \\
 &= - \int \operatorname{div} \mathbf{j} dr \\
 &= - \oint \mathbf{j}_n dS_n \\
 &= - \frac{i\hbar}{2m} \oint \left[\psi^* \frac{\partial}{\partial r} \psi - \left(\frac{\partial}{\partial r} \psi^* \right) \psi \right] dS_n
 \end{aligned}$$

ここで $\psi = A \frac{\chi}{r}$ とすれば

$$\begin{aligned}
 0 &= - \frac{i\hbar}{2m} \oint |A|^2 \left(\frac{\chi^* \chi'}{r^2} - \frac{\chi'^* \chi}{r^2} \right) dS_n \\
 &:= - \frac{i\hbar}{2m} \left[\int_{\sigma_{r \rightarrow 0}} |A|^2 \left(\frac{\chi^* \chi'}{r^2} - \frac{\chi'^* \chi}{r^2} \right) dS_n + \int_{S_{r \rightarrow \infty}} |A|^2 \left(\frac{\chi^* \chi'}{r^2} - \frac{\chi'^* \chi}{r^2} \right) dS_n \right]
 \end{aligned}$$

これが 0 であるためには

$$\frac{d}{dr} |\chi|_{r \rightarrow 0}^2 = 0$$

であればよい。したがって

$$\begin{aligned}
 |\chi|^2 &\sim r^\alpha, \quad (\alpha > 1) \\
 |\chi| &\sim O(r^{\alpha/2}) \\
 |\chi|_{r \rightarrow 0} &\rightarrow 0
 \end{aligned}$$

5.5 クーロン場 (Coulomb field) による散乱

クーロン場ではポテンシャル $V(r)$ が $1/r$ というゆるい変化をもっているので、断面積 (cross section) への寄与もある部分波までにはおさまらない。放物線座標 $\xi = r - z, \eta = r + z, \phi$ を用いて、漸近解を求めてみると^{*12}

$$\begin{aligned}
 u_c &\rightarrow \frac{C e^{\frac{1}{2}n\pi}}{\Gamma(1+in)} \left(e^{i[kz - n \ln k(r-z)]} \left[1 - \frac{n^2}{ik(r-z)} \right] + \frac{1}{r} f_c(\theta) e^{i(kr - n \ln 2kr)} \right) \\
 f_c &= \frac{\Gamma(1+in) e^{-in \ln(\sin^2 \frac{1}{2}\theta)}}{i\Gamma(-in) 2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} \\
 &= \frac{n}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} e^{-in \ln(\sin^2 \frac{\theta}{2}) + i\pi + 2i\eta_0} \\
 n &= ZZ'e^2/\hbar v, \quad \eta_0 = \arg \Gamma(1+in), \quad v: \text{相対速度}
 \end{aligned} \tag{5.5.1}$$

入射波も散乱波もクーロン力によってゆがめられて (distort) いる。断面積は

$$\sigma_c(\theta) d\Omega = \left| \frac{n}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right|^2 d\Omega = \left(\frac{ZZ'e^2}{2\mu v^2} \right)^2 \csc^4 \frac{\theta}{2} d\Omega \tag{5.5.2}$$

^{*12} 編者注: r, z は円柱座標であるが、 ξ, η, ϕ は放物線座標 (parabolic coordinates) である。ここでは ξ, η はあらわには使われていない。しかし、Coulomb ポテンシャルの場合にはこの放物線座標がよく使われる。放物線座標については補遺 5.5.1 を参照せよ。

5.5.1 補遺 放物線座標

(編者注)：放物線座標についてはあまりなじみがないので、この補遺を編集者がつけた。

マグロヒル『数学公式・数表ハンドブック』（オーム社）によれば、放物線座標 (u, v, ϕ) と直交座標 (x, y, z) との間に

$$\begin{aligned}x &= uv \cos \phi \\y &= uv \sin \phi \\z &= \frac{1}{2}(u^2 - v^2)\end{aligned}$$

である。これから

$$x^2 + y^2 = u^2 v^2$$

が得られ、また

$$x^2 + y^2 + z^2 = \frac{1}{2}(u^2 + v^2)^2$$

が得られる。 $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$ であることを用いれば、

$$\begin{aligned}u^2 + v^2 &= 2r \\u^2 - v^2 &= 2z\end{aligned}$$

となる。これを u^2, v^2 について解けば、

$$\begin{aligned}u^2 &= r + z \\v^2 &= r - z\end{aligned}$$

と求められる。いま $v^2 = \xi, u^2 = \eta$ とおけば、

$$\begin{aligned}\xi &= r - z \\ \eta &= r + z\end{aligned}$$

が得られる。

第 6 章

行列力学

6.1 マトリックス (matrix) 力学の導入

Heisenberg の考え

原子からある振動数の光が出ることは、原子の中である種の振動が起きていることを示す。古典論によるとその光の強度は、電子の電気 2 重極 (electric dipole) $ex(t)$ の 2 乗に比例し、

$$ex(t) \sim \sum_{\tau} eX(n, \tau) \exp[2\pi i\nu(n, \tau)t] \quad (6.1.1)$$

と Fourier 展開できる。 n は原子の n 番目の状態を示し、 τ はそこでの高調波の τ 番目を示す*1。すなわち、

$$\nu(n, \tau) = \tau\nu(n, 1) \quad (6.1.2)$$

が古典論の結論である。

しかし、この関係からは Bohr の振動数条件、もしくはそれにもとづく Ritz の結合則

$$\nu(n, n - \tau) = \frac{1}{h}[W(n) - W(n - \tau)] \quad (6.1.3)$$

$$\nu(n, n - \tau) + \nu(n - \tau, n') = \nu(n, n') \quad (6.1.4)$$

は出てこない*2。

Ritz の結合則をみたとすように (6.1.1) をつぎのような対応関係としてとらえられる。

$$ex(t) \sim \sum_{\tau} eX(n, n - \tau) \exp[2\pi i\nu(n, n - \tau)t] \quad (6.1.1')$$

$\nu(n, n - \tau) = -\nu(n - \tau, n)$ であり、 $ex(t)$ が実数であるから

$$X^*(n, n - \tau) = X(n - \tau, n) \quad (6.1.5)$$

が成立しなければならない。

*1 編者注：高調波 (higher harmonics) とは一定の周波数 (振動数) ν をもつ (正弦波でない) 波をフーリエ分解したとき、周波数が ν より大きい成分をいう。周波数 $n\nu$ のものを n 次の高調波という。(岩波『理化学辞典』より引用)

*2 古典論では (6.1.2) を用いれば、 $\nu(n, n - \tau) = (n - \tau)\nu(n, 1)$ 、 $\nu(n, n') = n'\nu(n, 1)$ であるから、

$$\nu(n, n - \tau) + \nu(n, n') = [(n - \tau) + n']\nu(n, 1) = \nu(n, n - \tau + n')$$

となり、

$$\nu(n, n - \tau) + \nu(n, n') = \nu(n, n - \tau + n')$$

が成り立つ。すなわち、(6.1.4) は成り立たない。

古典的な粒子の位置に対して、(6.1.1)' の関係によって2つの添字でもって表示される量の集合が対応させられることになる。

$$ex(t) \leftrightarrow X(n, m) \quad (6.1.6)$$

それでは古典的な量の積、たとえば、4重極モーメント $(3x_i x_j - x^2 \delta_{ij})$ にはどのような量に対応させればよいか。

ここで、さらに、「最初に (6.1.1)' に考慮した以外の振動数は表れない」と仮定する。この仮定と

$$x_i \leftrightarrow \sum_{n,m} X_i(n, m) \exp[2\pi i \nu(n, m)t] \quad (6.1.6')$$

から

$$x_i x_j \leftrightarrow \sum_{n,m} X_i(m, n) X_j(k, l) \exp\{2\pi i [\nu(n, m) + \nu(k, l)]t\} \quad (6.1.7)$$

は2つの添字で表される振動数によってまとめ上げられる。すなわち

$$\nu(n, m) + \nu(k, l) = \nu(n, l) \quad (6.1.8)$$

とすると、 $m = k$ 、したがって (6.1.7) において

$$x_i x_j \leftrightarrow \sum_n \sum_m X_i(n, m) X_j(m, l) \exp[2\pi i \nu(n, l)t] \quad (6.1.7')$$

という対応をおくべきことになる。この規則は行列 (matrix) のかけ算の規則である。

つぎに微分演算の問題： Ritz の結合則 または Bohr の関係から

$$\nu(n, n - \tau) = \frac{1}{h} [W(n) - W(n - \tau)]$$

$n \rightarrow \infty$ のとき、これは

$$\frac{1}{h} [W(n) - W(n - \tau)] \Rightarrow \frac{1}{h} \tau \frac{\partial W}{\partial n} \quad (6.1.9)$$

に対応する。したがって、一般に

$$\tau \frac{\partial F(n)}{\partial n} \Rightarrow [F(n + \tau) - F(n)] \quad (6.1.10)$$

というおきかえをすることを約束する。

さて、量子条件

$$\oint p dq = \oint p \dot{q} dt = nh$$

を古典論でかくと

$$\begin{aligned} p &\leftrightarrow \sum p(m, \tau) \exp[2\pi i \nu(m, \tau)t] \\ q &\leftrightarrow \sum q(m, \tau') \exp[2\pi i \nu(n, \tau')t] \\ \int p \dot{q} dt &\leftrightarrow \sum \int p(m, \tau) q(n, \tau') 2\pi i \nu(n, \tau') \exp 2\pi i [\nu(m, \tau) + \nu(n, \tau')] t dt \end{aligned}$$

周期を $1/\nu(n, 1)$ にとって、かつ十分長い時間の平均をとると

$$\begin{aligned} \int p \dot{q} dt &\leftrightarrow \sum \int p(m, \tau) q(n, \tau') 2\pi i \nu(n, \tau') \exp 2\pi i [\nu(m, \tau) + \nu(n, \tau')] t dt \\ &= -2\pi i \sum p(n, \tau) q(n, -\tau) \tau \end{aligned}$$

これは $m = n, \tau' = -\tau$ のところが残るから。

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial n}(nh) &= \frac{h}{2\pi i} \\ \frac{h}{2\pi i} &= -\sum_{\tau} \frac{\partial}{\partial n} p(n, \tau) q(n, -\tau)\end{aligned}$$

したがって、

$$\frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial n}(nh) = -\sum_{\tau} \frac{\partial}{\partial n} [p(n, \tau) q(n, -\tau)]$$

この右辺は

$$\sum_{\tau} [p(n + \tau, n) q(n, n + \tau) - p(n, n - \tau) q(n - \tau, n)] = qp - pq$$

である。すなわち、

$$qp - pq := [q, p] = \frac{-h}{2\pi i} = i\hbar, \quad \hbar := \frac{h}{2\pi} \quad (6.1.11)$$

が得られた。

こうして

物理量 $A \leftrightarrow$ Hermite 行列 A_{ij}

という対応関係と (6.1.11) の交換関係とが得られることとなった。ここで、Hermite 行列とは

$$A_{ji}^* = A_{ij}$$

の性質をもつ、行列のことである。すなわち、Hermite 行列とは転置行列の複素共役をとった行列が元の行列に等しい行列のことである。Heisenberg 描像^{*3}：

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} e^{\frac{\hbar}{i}(E_1 - E_n)t} \\ \cdots & A_{ij} e^{\frac{\hbar}{i}(E_i - E_j)t} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{n1} e^{\frac{\hbar}{i}(E_n - E_1)t} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \quad (6.1.12)$$

(6.1.11) からつぎのことが証明できる。

$$[p, f(p, q)] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial q} \quad (6.1.13)$$

$$[q, f(p, q)] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial p} \quad (6.1.14)$$

(証明) $f(p, q) = \sum a_{n,m} p^n q^m$ と展開できるとして

$$\begin{aligned}[p, p^n q^m] &= p p^n q^m - p^n q^m p \\ &= p^{n+1} q^m - p^n q^{m-1} p q + p^n q^{m-1} [p, q] \\ &= p^{n+1} q^m - p^n q^{m-2} p q + p^n q^{m-2} [p, q] q - i\hbar p^n q^{n-1} \\ &= \cdots \\ &= p^{n+1} q^m - p^{n+1} q^m + p^n [p, q] q^{m-1} - i\hbar(m-1) p^n q^{m-1} \\ &= -i\hbar m p^n q^{m-1} \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} (p^n q^m)\end{aligned}$$

^{*3} 編者注：Heisenberg 描像 (picture) は以前は Heisenberg 表示 (representation) と言っていたので、元の講義ノートには「表示」とあったが、編者が「描像」と変更した。

これで (6.1.13)(6.1.14) が証明された (Q.E.D.)。

これを用いて古典的なハミルトン (Hamilton eq.) はハミルトニアン (Hamiltonian) H が t を陽に含まない場合には、量子的な表現

$$\begin{aligned}\dot{p} &= \frac{-i}{\hbar}[p, H] \\ \dot{q} &= \frac{-i}{\hbar}[q, H]\end{aligned}\tag{6.1.15}$$

を得る*4。

特に

$$\dot{H} = \frac{i}{\hbar}[H, H] = 0\tag{6.1.16}$$

はエネルギー保存の法則の表現とみることができるが、これを行列要素で表すと

$$\nu(n, n')H(n, n') = 0$$

となり、 $n \neq n'$ の場合 $H(n, n') = 0$ 、すなわち $H(n, n')$ は

$$H(n, n') = \delta_{n, n'} H_n\tag{6.1.17}$$

の対角行列であることがわかる。また、(6.1.15) を用いて

$$2\pi i \nu(n, n')q(n, n') = \frac{i}{\hbar}[H_n - H_{n'}]q(n, n')$$

および (6.1.3) から、 H_n は原子のエネルギー準位 W_n (n によらな定数を除いて) に等しいことがわかる。

6.2 変換論

6.2.1 定義

行列 $A(m, n)$ が

$$A(m, n) = A^*(m, n)\tag{6.2.1}$$

をみたすとき、エルミート行列 (**Hermitian matrix**) という。

行列 S があって、そのエルミート共役 (Hermite Conjugate) を S^\dagger と表すとき

$$S_{ij}^\dagger = S_{ji}^*\tag{6.2.2}$$

としたとき、

$$S^\dagger S = S S^\dagger = 1\tag{6.2.3}$$

をみたすとき、 S をユニタリ-行列 (**unitary matrix**) という。

$$S A S^{-1} = A'\tag{6.2.4}$$

*4 編者注：ハミルトニアンを H で表し、位置座標を q 、運動量を p で表すとき、

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q}\end{aligned}$$

をハミルトンの正準方程式 (canonical equation) という。この方程式と (6.1.15) とは古典論と量子論との方程式として密接な対応関係にある。

でつくられる A' を行列 A が S によって変換された行列という。当然

$$S^{-1}A'S = A \quad (6.2.5)$$

が成り立つ。これを逆変換という。

ここでいくつかのユニタリ行列の性質を示しておこう。

1. エルミート行列のエルミート性 (Hermitian property) はユニタリ (unitary) 変換によって変わらない。

$$A : A_{ij} = A_{ji}^* \\ SAS^{-1} : [S_{ik}A_{kl}S_{lj}^{-1}]^* = S_{ik}^*A_{kl}^*S_{lj}^{-1*} = S_{ki}^{-1}A_{lk}S_{jl} = S_{jl}A_{lk}S_{ki}^{-1} = A'_{ji}$$

q.e.d.

2. 交換関係はユニタリ変換によって不変である。

$$SAS^{-1} = A' \text{ としたとき } [A, B] = C \rightarrow [A', B'] = C'$$

3. 行列 A と B とが交換可能ならば、 A と B とを同時に対角化できる。

まず A をエルミート行列として、それがユニタリ行列で対角化できることを示す。

$$SAS^\dagger = A'$$

によって対角化できたとすると、上の式の両辺に右から S をかければ、

$$SA = A'S$$

となる。この行列の (i, k) 成分をとると

$$S_{ij}A_{jk} = A'_i S_{ik} \quad (6.2.6)$$

i を固定して $S_{ij} = x_j$ とおくと

$$\sum x_j A_{jk} = A'_i x_k \quad (k = 1, 2, \dots, n; n = \text{行列の次元})$$

の同次方程式となる。この解 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ が存在すれば、それがユニタリ行列 S の (ij) 成分を与える。ここで、 $j = 1, 2, \dots, n$ である。 A'_i を行列 A の固有値という。

つぎに $SAS^\dagger = A'$ ($A'_{jk} = A'_j \delta_{jk}$) としよう。 $AB = BA$ にユニタリ変換 S をほどこして

$$SAS^\dagger SBS^\dagger = SBS^\dagger SAS^\dagger$$

$$A'(SBS^\dagger) = (SBS^\dagger)A'$$

ここで $SBS^\dagger := B'$ として、この (ik) 成分をとると

$$A'_i \delta_{ij} B'_{jk} = B'_{ij} \delta_{jk} A'_k$$

すなわち

$$(A'_i - A'_k) B'_{ik} = 0$$

したがって、 $A'_i \neq A'_k$ であれば、 $B'_{ik} = 0$ である。 A に縮退がなければ、 B' は対角行列である。

4. エルミート行列の対角要素は、実数である。したがって固有値は実数である。

6.2.2 ユニタリー変換の拡張

いままでユニタリー行列 S に対して、 n 行 n 列という仮定を暗黙裡にしていた。しかし、これを n 行 m 列 ($n \neq m$) に拡張することができる。

集合 (たとえばエネルギー準位) n に属する添字を i, i', \dots

集合 (たとえばエネルギー準位) m に属する添字を k, k', \dots

としよう。

S のエルミート共役 (Hermite Conjugate)

$$(S^\dagger)_{ki} = S_{ik}^* \quad (6.2.7)$$

の定義は同じであるが、添字が $i = 1, 2, \dots, n; k = 1, 2, \dots, m; (n \neq m)$ であることに注意しよう。

$$\begin{aligned} (SS^\dagger)_{ii'} &= \sum_k S_{ik} S_{ki'}^\dagger = \sum_k S_{ik} S_{ki'}^* = \delta_{ii'} \\ (S^\dagger S)_{kk'} &= \sum_i S_{ki}^\dagger S_{ik'} = \sum_i S_{ki}^* S_{ik'} = \delta_{kk'} \end{aligned} \quad (6.2.8)$$

にしたがって、 S がユニタリーであることを定義する。行列 A (m 行 m 列) から、 A' (n 行 n 列) への変換は

$$SAS^\dagger = A', \quad A'_{kk'} = S_{ki} A_{ii'} S_{i'k'} \quad (6.2.9)$$

逆変換は

$$S^\dagger A' S = A, \quad A_{ii'} = S_{ik}^\dagger A'_{kk'} S_{k'i'} \quad (6.2.9)$$

で与えられる。

(問) 行と列の数が異なったユニタリー変換 S によっても、エルミート行列のエルミート性は変わらないことを示せ。

6.2.3 状態関数と変換理論

Schrödinger 方程式による固有値方程式

$$H\psi_k = E_k\psi_k \quad (6.2.10)$$

を考える。 ψ_k はハミルトニアン H の固有関数で、かつ、完全正規直交系をなすと考える。すなわち、

$$\int \psi_k^* \psi_m d\mathbf{x} = \delta_{km}$$

いま別の正規完全直交系を v_i とする*5。

$$v_i(\mathbf{x}) = \sum_k S_{ik} \psi_k(\mathbf{x}) \quad (6.2.11)$$

*5 たとえば、1 次元で

$$v_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ip_n x/\hbar}, \quad p_n = \frac{2\pi\hbar}{L} n$$

とすると

$$\int_{-L/2}^{L/2} v_m^*(x) v_n(x) dx = \delta_{mn} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{2\pi\hbar}{L} \delta(p_n - p_m)$$

逆に

$$\sum_n v_n^*(y) v_n(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_n e^{\frac{i}{\hbar}(x-y)p_n} = \delta(x-y)$$

ここで

$$S_{ik} = \int \psi_k^*(\mathbf{x}) v_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (6.2.12)$$

逆に (6.2.11) の両辺に S_{ik}^* をかけて i について和をとると

$$\begin{aligned} \sum_i S_{ik}^* v_i(\mathbf{x}) &= \sum_i \left(\int v_i^*(\mathbf{x}') \psi_k(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \right) \left(\sum_m \int \psi_m^*(\mathbf{x}'') v_i(\mathbf{x}'') d\mathbf{x}'' \right) \psi_m(\mathbf{x}) \\ &= \sum_m \int \int \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \psi_k(\mathbf{x}') \psi_m^*(\mathbf{x}'') d\mathbf{x}' d\mathbf{x}'' \psi_m(\mathbf{x}) \\ &= \sum_m \left(\int \psi_m^*(\mathbf{x}') \psi_k(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \right) \psi_m(\mathbf{x}) \\ &= \sum_m \delta_{km} \psi_m(\mathbf{x}) \\ &= \psi_k(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

あるいは

$$\psi_k(\mathbf{x}) = \sum_i S_{ki}^\dagger v_i(\mathbf{x}) \quad (6.2.13)$$

上の計算において、完備の関係

$$\sum_i v_i^*(\mathbf{x}') v_i(\mathbf{x}'') = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'')$$

と正規直交関係

$$\int \psi_m^*(\mathbf{x}') \psi_k(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' = \delta_{km}$$

を用いた。

上記の導出から

$$\begin{aligned} \sum_k S_{ik}^\dagger S_{km} &= \delta_{im} \\ \sum_i S_{ki} S_{im}^\dagger &= \delta_{km} \end{aligned} \quad (6.2.14)$$

は明かである。すなわち行列 S はユニタリーである。

(6.2.13) を (6.2.10) に代入すると

$$H \sum_i S_{ki}^\dagger v_i(\mathbf{x}) = E_k \sum_i S_{ki}^\dagger v_i(\mathbf{x})$$

両辺に $v_i^*(\mathbf{x})$ をかけて積分すると、

$$\sum_m H_{im} S_{mk}^\dagger = E_k S_{ik}^\dagger, \quad H_{im} = \int v_i^*(\mathbf{x}) H v_m(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (6.2.15)$$

この両辺に S_{ni} をかけて i について和をとると

$$\sum_i \sum_m S_{ni} H_{im} S_{mk}^\dagger = E_k \sum_i S_{ni} S_{ik}^\dagger = E_k \delta_{kn}$$

となる。(編者注: この一連の式の中では $p_n = \frac{2\pi\hbar}{L}n$ が使われている。それはまちがいでないのだが、むしろ波数 $k_n = \frac{2\pi n}{L}$ を使ったほうが式が見やすいと思う。)

3次元に拡張するのは容易である。

形式的に整えると

$$SHS^\dagger = E \quad (6.2.16)$$

によって表すことができる。

以上の手続きをふりかえってみると、任意の正規完全直交系 $v_i(\mathbf{x})$ によってつくられたハミルトニアン H の行列 (6.2.15) に対して、適当なユニタリー変換を見出して H を対角行列にできたとき、その対角線の値が H の固有値になっていることがわかる。

一般に行列力学では、物理量はエルミート行列で表され、その固有値を見出す問題—固有値問題は、その対角化を対角行列を見出す問題となる。

ところでユニタリー行列 S とはなんであるか。

(6.2.13) において $v_i(\mathbf{x})$ として、 $\delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x})$ をとろう。これは空間を碁目状に細分し、それに番号を付し、網の目を無限小にした極限として位置 x_i を定義することによってつくることができる。つまり \mathbf{x} は勝手に走るが、 x_i に来たとき 1 の値をとるようにする。

$$\begin{aligned} \psi_k(\mathbf{x}) &= \sum_i S_{ik}^\dagger \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}) \\ &= \int S_{k\mathbf{x}}^* \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d\mathbf{x}' \\ &= S_{k\mathbf{x}}^* \end{aligned} \quad (6.2.17)$$

こうして Schrödinger 方程式における波動関数は、Matrix 力学では、ハミルトニアンの固有関数系と位置の固有関数系をつなぐ unitary 変換行列の行列要素であることがわかった。

話を (6.2.12) にもどせば、Matrix 力学 (=量子力学) では一つの力学系の固有状態は対応する完全直交関数列によって表現されると考えており、いくつかの異なった関数列があった場合には、それらの間は (6.2.12) に対応するユニタリー変換によって相互に移ることができる—つまり同等な記述ができる。これはちょうど古典力学で、一つの力学系を記述するのに正準共役な座標 (p, q) の組がいくつかあり得て、その間の変換 $(p, q) \rightarrow (P, Q)$ によってすべて同等な記述ができることに対応している。

実用的な観点からいえば、便利な関数列—座標系を選んで記述するのがよい。

(問) 電子の位置座標 \mathbf{x} を、原子のエネルギーの固有関数列を基底とする行列で表せ。

(6.2.15) を空間座標を用いた Schrödinger 方程式として表すには、 H_{im} をどう表すべきか。

6.2.4 Heisenberg 描像と Schrödinger 描像

本章のはじめの (6.2.1') にもどる。Heisenberg は位置に対応する量として行列要素

$$(X^H)_{n,m} = X^S(n, m) e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t} \quad (6.2.18)$$

をもつ行列を導入した。この行列は、原子のエネルギー固有状態を基底とした表現であることは明かである。文字 X の肩についた添字 H と S はあとでその意味がわかる。

$$[X^H]_{n,m} = \left[e^{\frac{i}{\hbar}Ht} X^S e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \right]_{n,m}$$

であるから

$$\frac{dX^H}{dt} = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \frac{\partial X^S}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} + \frac{i}{\hbar} [H, X^H] \quad (6.2.19)$$

をみやすことがわかる*6。

*6 編者注：これは $X^H = e^{\frac{iHt}{\hbar}} X^S e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$ の 3 つの因子を微分のチェン・ルールを用いて微分し、その結果をまとめるときに $e^{\frac{iHt}{\hbar}} X^S e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = X^H$ と置き換えれば、導くことができる。

いま Schrödinger の波動方程式を

$$i\hbar \frac{\partial \psi^S}{\partial t} = H\psi^S \quad (6.2.20)$$

とすると

$$\begin{aligned} \psi^S(\Delta t) &= \psi(0) - \frac{i}{\hbar} \Delta t H \psi^S(0) \\ &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t H\right) \psi^S(0) \end{aligned}$$

$\Delta t = t/N$ として、 $N \rightarrow \infty$ にすると

$$\left(1 - \frac{1}{N} \frac{itH}{\hbar}\right)^N \psi^S(0) = e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \psi^S(0) := \psi(t) \quad (6.2.21)$$

が解として求まる。 $\psi^S(0) \equiv \psi^H$ とおくと

$$\dot{\psi}^H = 0$$

さて Schrödinger 方程式 (6.2.20) を書き下すときに表示した物理量 (行列) を F^S (たとえば (6.2.20) の中のポテンシャル) とし、その期待値を求めると、

$$\begin{aligned} \langle F^S \rangle &= \int (\psi^S)^* F^S \psi^S dV \\ &= \int (\psi^H)^* e^{\frac{i}{\hbar} Ht} F^S e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \psi^H dV \\ &= \int (\psi^H)^* F^H \psi^H dV \end{aligned}$$

とすれば、

$$F^H = e^{\frac{i}{\hbar} Ht} F^S e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \quad (6.2.22)$$

が得られる。これは明らかに X^H と同じ方程式をみたす。こうして Heisenberg の導入した、物理量に対応する演算子と Schrödinger 方程式に現れる演算子とは

$$S = e^{i\frac{H}{\hbar}t} \quad (6.2.23)$$

の変換によって移り得る描像 (表現) の違いにすぎないことがわかる。(6.2.23) のユニタリ演算子 S を用いてユニタリ変換できることは明らかであろう*7。

(問) S がユニタリ演算子であることを証明せよ。

ψ^H を基底とした描像 (表示) を Heisenberg 描像 (表示)、 ψ^S のそれを Schrödinger 描像 (表示) という。また物理量 F^H に対する

$$\frac{dF^H}{dt} = \frac{\partial F^H}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, F^H] \quad (6.2.24)$$

を Heisenberg の運動方程式という。

(例題) $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$ のときに、交換関係 $[p, q] = \frac{\hbar}{i}$ を用いて H の固有値を求めよ。

(解) $\eta = c(p - im\omega q), \eta^\dagger = c(p + im\omega q)$ とおくと

$$\begin{aligned} \eta\eta^\dagger &= c^2(p^2 + m^2\omega^2 q^2 + m\omega\hbar) \\ \eta^\dagger\eta &= c^2(p^2 + m^2\omega^2 q^2 - m\omega\hbar) \end{aligned}$$

*7 編者注：ユニタリ変換とユニタリ演算子とを区別せよ。ユニタリ演算子とは $SS^\dagger = 1$ を満たす演算子 S のことであり、ユニタリ変換は $SAS^\dagger = A'$ による A から A' への変換をさす。

となる。[η, η^\dagger] = $2c^2 m \omega \hbar = 1$ において、 $c = \sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}$ と決めておくと

$$H = \hbar\omega\eta\eta^\dagger - \hbar\omega/2 = \hbar\omega\eta^\dagger\eta + \hbar\omega/2$$

と書くことができる。 $Hu_n = W_n u_n$ としよう。

$$\begin{aligned} H\eta - \eta H &= -\hbar\omega\eta \\ H\eta u_n &= (W_n - \hbar\omega)\eta u_n \end{aligned}$$

したがって ηu_n も固有値 $W_n - \hbar\omega$ に属する固有関数である。

$$(\eta u_n, \eta u_n) = (u_n, [H - \hbar\omega/2]u_n) = (u_n, [W_n - \hbar\omega/2]u_n) \geq 0$$

だから W_n の最小値は $\hbar\omega/2$ 、 $\eta^\dagger u_n$ は $W_n + \hbar\omega$ に属する固有解である。したがって、 H の固有値は

$$(1/2)\hbar\omega, 3/2\hbar\omega, \dots, (n+1/2)\hbar\omega$$

となる。

ここでもう一度重ね合わせの原理にふれておこう。

Schrödinger 方程式

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

にしたがう状態関数 $\psi_k(\mathbf{x}, t)$ で表される状態において粒子の位置を観測して、それが \mathbf{x} と $\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$ の間に見出される確率は、状態がエネルギー E_k の固有状態にあるとして

$$|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = |\psi_k(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

で与えられることを述べた。一方 $\psi_k(\mathbf{x})$ は (6.2.17) によれば、位置の固有状態系列とエネルギーの固有状態系列との間の変換行列であった。

この事情を一般化するとつぎのようになる。一つの力学系 (ハミルトニアン) を指定すると、その力学系のエネルギー固有状態は

$$H\psi_k(\mathbf{x}) = E_k \psi_k(\mathbf{x})$$

として与えられるが、これは別の物理量 (位置とか運動量とかの) A の固有値状態 $v_{a_i}(\mathbf{x})$ によって、つぎのように

$$\psi_k(\mathbf{x}) = \sum_i S_{ik}^\dagger v_{a_i}(\mathbf{x}) \quad (6.2.25)$$

と展開できる。

さらに状態が ψ_k にあるとき物理量 A を観測してそれが a_i の固有値に見出される確率は、その展開の係数 S_{ik}^\dagger を用いて

$$|S_{ik}^\dagger|^2 \quad (6.2.26)$$

で与えられる。

6.3 角運動量

Matrix 力学の応用として、角運動量の問題を取り扱う。

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (6.3.1)$$

$$\begin{aligned}
[L_x, L_y] &= (yp_z - zp_y)(zp_x - xp_z) - (zp_x - xp_z)(yp_z - zp_y) \\
&= yp_z zp_x + zp_y xp_z - zp_x yp_z - xp_z zp_y \\
&= yp_x(p_z z - zp_z) - xp_y(p_z x - zp_z) \\
&= i\hbar(xp_y - yp_x) \\
&= i\hbar L_z \\
[L_y, L_z] &= i\hbar L_x \\
[L_z, L_x] &= i\hbar L_y
\end{aligned} \tag{6.3.2}$$

L^2 と L_z と対角 (diagonal) な表示にとる。

$$[L^2, L_z] = 0, \quad L^2 := L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \tag{6.3.3}$$

であるから、演算子 L^2 と L_z との同時固有状態 (共通な固有状態) をつくることができる。対角化 (diagonalize) にしたとき、その対角要素がどうなるか—これが固有値問題である。そのために

$$L_+ := L_x + iL_y, \quad L_- := L_x - iL_y \tag{6.3.4}$$

という Matrix を考える*8。そうすると

$$\begin{aligned}
[L^2, L_+] &= 0 \\
[L_z, L_+] &= \hbar L_+ \\
[L_+, L_-] &= 2\hbar L_z
\end{aligned} \tag{6.3.5}$$

L^2 の固有値 λ を指定するパラメーターを l と表し、 L_z の固有値を $m\hbar$ と表し、(4.2.18) で定義した球面調和関数 Y_{lm} を $Y_{lm} = |lm\rangle$, $(Y_{lm})^* = \langle lm|$ で表せば、

$$0 = \langle l'm' | L^2 L_+ |lm\rangle - \langle l'm' | L_+ L^2 |lm\rangle = (\lambda' - \lambda) \langle l'm' | L_+ |lm\rangle$$

これから L^2 の固有値 l と l' とが異なっている状態間での L_+ の行列要素は 0 であることがわかる。すなわち、 $\langle l'm' | L_+ |lm\rangle = 0$, ($l' \neq l$) である。したがって、 $l' = l$ の場合だけを考えればよい*9。以下の計算では、ブラベクトルとケットベクトルの中の指標 l を省いて表すと

$$\begin{aligned}
\langle m' | L_z L_+ |m\rangle - \langle m' | L_+ L_z |m\rangle &= \hbar \langle m' | L_+ |m\rangle \\
\langle m' | L_+ |m\rangle (m' \hbar - m\hbar - \hbar) &= 0
\end{aligned} \tag{6.3.6}$$

これから $\langle m' | L_+ |m\rangle$ は $m' \hbar = (m+1)\hbar$ であるときを除いて 0 である。逆にいえば、 L_+ の意味をもつ固有値間の関係を与えるものとなっている。

*8 編者注: L_+, L_- を昇降演算子という。

*9 編者注: この説明は誤解を招くおそれがある。それで編者が補足の説明を行っておく。角運動量演算子 L の 2 乗 L^2 と z 成分 L_z が与えられたときに、それらの固有値と固有関数を求めることが問題となる。

ところが、ここではすでに L^2 と L_z の同時固有関数が球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ で与えられることを既知だとしている。この結果は正しいが、本当はまず固有値を求めて、その上で固有関数を求めることが必要である。その問題についての補足はここでしないが、たとえば『詳解量子力学演習』(共立出版) 96-98 の [2] を参照せよ。ここで

$$L^2 Y_{lm} = \lambda Y_{lm}, \quad L^2 Y_{l'm'} = \lambda' Y_{l'm'},$$

が成り立つとする。 L^2 の固有値は (6.4.10) で与えられる、 $\lambda = l(l+1)\hbar^2$ である。

さらに、ここでは、Dirac のブラ $\langle lm|$ とケットベクトル $|lm\rangle$ の記号を用いている。これは次の関係だと了解しておこう。

$$\begin{aligned}
|lm\rangle &:= Y_{lm}, \\
\langle lm| &:= (Y_{lm})^*, \quad (Y_{lm})^* = Y_{lm} \text{ の複素共役}
\end{aligned}$$

$m^2\hbar^2 \leq \lambda$ であるから m の値は有限である。その L_z の固有値 $m\hbar$ の m の最大値 \max を m_1 、最小値 \min を m_2 とすると $(m_1 - m_2)\hbar = \text{整数} \times \hbar$ であるから

$$L_+\psi_{m_1} = 0, L_-\psi_{m_2} = 0 \quad (6.3.7)$$

$$\begin{aligned} L_-L_+\psi_{m_1} &= (\mathbf{L}^2 - L_z^2 - L_z)\psi_{m_1} = (\lambda - m_1(m_1 + 1)\hbar^2)\psi_{m_1} = 0 \\ L_+L_-\psi_{m_2} &= (\mathbf{L}^2 - L_z^2 + L_z)\psi_{m_2} = (\lambda - m_2(m_2 - 1)\hbar^2)\psi_{m_2} = 0 \end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned} m_1(m_1 + 1) &= m_2(m_2 - 1) \\ m_1 &= -m_2 \end{aligned} \quad (6.3.8)$$

これから

$$(m_1 - m_2)\hbar = 2m_1\hbar = \text{整数} \times \hbar = 2j\hbar \quad (6.3.9)$$

この差が \hbar であるから $m_1 := j$ は $1/2, 1, 3/2, \dots$ となる*10。

上に求めた

$$L_-L_+\psi_{m_1} = (\mathbf{L}^2 - L_z^2 - L_z)\psi_{m_1} = (\lambda - m_1(m_1 + 1)\hbar^2)\psi_{m_1} = 0$$

から、 $\lambda - m_1(m_1 + 1) = 0$ が成り立つから、 $m_1 = l$ とおけば、

$$\lambda = l(l + 1)\hbar^2 \quad (6.3.10)$$

となる。ここで、 l を方位量子数とよぶ。また m は磁気量子数とよぶ。

こうして \mathbf{L}^2 と L_z の固有値が求まった。

(例題) 方位量子数が $l = 1$ のときの角運動量マトリックス

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

を導出し、このマトリックスを対角化する関数（固有関数）を求めよ。

(解) 角運動量演算子の x 成分は 3 次元の極座標では

$$l_x = i\hbar \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right)$$

である。これをマトリックスで表すには、この演算子を l_z を対角化したときに得られる固有関数、球面調和関数 $Y_{l,m}$ 、 $m = 1, 0, -1$ ではさんで積分して得られる期待値を求めれば、そのマトリックスが得られる。すなわち

$$\begin{pmatrix} \langle 1|l_x|1 \rangle & \langle 1|l_x|0 \rangle & \langle 1|l_x|-1 \rangle \\ \langle 0|l_x|1 \rangle & \langle 0|l_x|0 \rangle & \langle 0|l_x|-1 \rangle \\ \langle -1|l_x|1 \rangle & \langle -1|l_x|0 \rangle & \langle -1|l_x|-1 \rangle \end{pmatrix}$$

*10 j は半奇数と正の整数の値をとりうるということがわかった。しかし、軌道角運動量の 2 乗を規定する、この j の値が半奇数をとる可能性は実現しない。なぜなら、角部分の波動関数 $\Omega(\phi) = Ae^{im\phi}$ は空間の 1 価性を半奇数の場合には満たさないから。だが、スピン波動関数では半奇数の自由度を取ることができる。

で求められる。このマトリックスはエルミート行列であるから、対角線より上の行列要素を求めればよい。下三角の部分の行列要素は上の三角部分の対応する要素の複素数をとればよい。

$$\begin{aligned} Y_{1,1} &= -\alpha \sin \theta e^{i\phi} \\ Y_{1,0} &= \sqrt{2}\alpha \cos \theta \\ Y_{1,-1} &= \alpha \sin \theta e^{-i\phi} \\ \alpha &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \end{aligned}$$

である。以下の計算では $Y_{1,1} = Y_1, Y_{1,0} = Y_0, Y_{1,-1} = Y_{-1}$ の省略記号をつかう。

$$\begin{aligned} \langle 1|l_x|1 \rangle &= i\hbar \int Y_1^* \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_1 d\Omega = 0 \\ \langle 1|l_x|0 \rangle &= i\hbar \int Y_1^* \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_0 d\Omega = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ \langle 1|l_x|-1 \rangle &= 0 \\ \langle 0|l_x|-1 \rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ \langle -1|l_x|-1 \rangle &= 0 \end{aligned}$$

$l=1$ のときのマトリックス L_x が求まった。これを対角化すれば、

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

が求まる。またこの3つの固有値に対する固有関数 $Y_{m,x}$, ($m=1, 0, -1$) は $\lambda=1$ に対しては

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$\lambda=0$ に対しては

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$\lambda=-1$ に対しては

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned} Y_{1x} &= \alpha(-i \sin \theta \sin \phi + \cos \theta) \\ Y_{0x} &= -\sqrt{2}\alpha \sin \theta \cos \phi \\ Y_{-1x} &= \alpha(-i \sin \theta \sin \phi - \cos \theta) \\ \alpha &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \end{aligned}$$

となる*11。これらを用いて $Y_{1,1}$ を表せば、

$$Y_{1,1} = \frac{1}{2}(Y_{1x} + Y_{-1x}) + \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{0x} \quad (6.3.11)$$

*11 Y_{1x}, Y_{0x}, Y_{-1x} は軌道角運動量の x 成分 L_x を対角化したときの固有関数である。

の関係が得られる。

6.4 行列力学の導入：もう一つの版

(編者注：行列力学の導入としては別の講義ノートが部分的に残っているので、それを以下に記録しておく。著者にとっては置き換えるべきものであろうが、新しい版はその後ろの部分へのつながりがよくわからないので、ここにしておく)

Heisenberg は原子内の電子の軌道 $\mathbf{x}(t)$ をつぎのようにフーリエ展開した。

$$x_n(t) = \sum_n a_n(t) e^{2\pi i \nu t} \quad (6.4.1)$$

古典論で現れる振動数は基準振動の整数倍であって、Ritz の結合則

$$\nu(n, m) = \frac{1}{\hbar} [W(n) - W(m)] \quad (6.4.2)$$

を満たさない。そこで Heisenberg は電子の位置座標 $X_n(t)$ を行列 $X_{n,m}$ に対応させること、すなわち、

$$\{X_n(t)\} \longrightarrow \{X_{n,m} e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t}\} \quad (6.4.3)$$

を考えた。これに Bohr の量子条件

$$\oint pdq = nh$$

を適用して、有名な交換関係

$$xp - px := [x, p] = \frac{i\hbar}{2\pi} = i\hbar \quad (6.4.4)$$

を導いた。

この導出の論理的な詳細は朝永『量子力学』I (みすず書房) にゆずる。ここではいままでの話の続きとして、説明するにとどめる。

われわれは、演算子 x, p について、状態 ψ における平均値が

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int \psi^*(x) x \psi(x) dx \\ \langle p \rangle &= \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx \end{aligned} \quad (6.4.5)$$

で与えられる。

いま ψ について完全正規直交関数系を考える。例として運動量の固有状態は

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ip_n x/\hbar}, \quad p_n = \frac{2\pi\hbar}{L} n, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \\ \int_{-L/2}^{L/2} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx &= \delta_{nm} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{2\pi\hbar}{L} \delta(p - p') \end{aligned} \quad (6.4.6)$$

の正規直交性を満たす。

逆に、この運動量の固有状態には

$$\begin{aligned} \sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{i}{\hbar} p(x-x')} \\ &= \delta(x - x') \end{aligned} \quad (6.4.7)$$

完全正規直交関数系には一般的にこれらの性質がある。

すなわち

$$\begin{aligned}\sum_j \psi_n^*(j)\psi_m(j) &= \delta_{nm} \\ \sum \psi_n^*(j)\psi_n(k) &= \delta_{jk}\end{aligned}\tag{6.4.8}$$

である。

さて、一つの完全直交系 ψ_n をとって

$$\begin{aligned}x_{ab} &= \int \psi_a^* x \psi_b dx \\ p_{ab} &= \int \psi_a^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_b dx\end{aligned}\tag{6.4.9}$$

を定義する。左辺は2つの添字によって表されるから行列のように見える。しかし、これが行列であるためには、つぎの性質をさらに満たさねばならない。行列を A, B, C, \dots として

$$\begin{aligned}A + B &= B + A, \quad \text{交換則} \\ \alpha(A + B) &= \alpha A + \alpha B, \quad \text{分配則} \\ A + (B + C) &= (A + B) + C, \quad \text{結合則}\end{aligned}$$

この他に積が定義され、

$$\begin{aligned}(A + B)C &= AC + BC, \quad \text{分配則} \\ (AB)C &= A(BC), \quad \text{結合則} \\ (\alpha A)B &= A(\alpha B)\end{aligned}$$

積

$$(AB)_{ab} = \sum_c A_{ac} B_{cb}$$

の性質が証明されれば、上のすべての法則が成り立つことは明らかである。

$$\begin{aligned}(AB)_{ab} &= \int \psi_a^* AB \psi_b dx \\ &= \int \psi_a^*(x') A \delta(x' - x) B \psi_b(x) dx' dx \\ &= \sum_c \int \psi_a^*(x') A \psi_c(x') \psi_c^*(x) B \psi_b(x) dx' dx \\ &= \sum_c A_{ac} B_{cb}\end{aligned}$$

Q. E. D.

行列要素がすべて0であるものは0マトリックスといい、また単位マトリックスは

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ & & \ddots & \end{pmatrix}\tag{6.4.10}$$

で定義すると、交換関係

$$xp - px = i\hbar$$

は

$$x_{ac}p_{cb} - p_{ac}x_{cb} = i\hbar\delta_{ab} \quad (6.4.11)$$

という行列要素をもつ行列の表現となる。

また (18.9) から

$$\begin{aligned} x_{aa} &= \langle x \rangle_a \\ p_{aa} &= \langle p \rangle_a \end{aligned} \quad (6.4.12)$$

であるから、これらは実数である。さらに

$$\begin{aligned} x_{ab} &= x_{ba}^* \\ p_{ab} &= p_{ba}^* \end{aligned} \quad (6.4.13)$$

したがって、一般に

$$A_{ab} = A_{ba}^*$$

の性質を持つ行列はエルミート行列 (Hermitian matrix) とよばれ、その対角成分は実数である。つまり、物理量はエルミート行列で表現される。