TEIDAI NOTE

Quantum Mechanics

Vol 2.

H. Yukawa

MADE BY O.S. OKAMOTO NOTE

§ ~~Can~~ Representation of Canonical Variables

任意の dynamical system に於て p と q とを互ひに conjugate な variable とすると、前節(9')により、その間には

$$qp - pq = i\hbar \qquad (13)$$

なる関係がある。

この関係から直ちに出てくることは p, q の eigenvalue は $(-\infty, +\infty)$ の間の任ての値をとることである。

証明.　$q^n p - p q^n = n q^{n-1} i\hbar$　　$n=1 \to (13)$

$$\because\ q^{n+1}p - pq^{n+1} = q(q^n p - pq^n) + (qp - pq)q^n$$
$$= q \cdot n q^{n-1} i\hbar + i\hbar q^n$$
$$= (n+1) q^n \cdot i\hbar$$

更に q の函数 $e^{\frac{cq}{i\hbar}}$ をとり c: real number とすれば ~~…~~ q が real なる限り意味をもってゐる。 eigen value q' にかゝるものとなる

そして q の任意の eigen state ~~…~~ $\psi(q')$ に対し

$$e^{\frac{cq}{i\hbar}}\psi(q') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{cq}{i\hbar}\right)^n \psi(q')$$
$$= e^{\frac{cq'}{i\hbar}}\psi(q')$$

従って　$e^{\frac{cq}{i\hbar}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{cq}{i\hbar}\right)^n$

従って $e^{\frac{cq}{i\hbar}} p - p e^{\frac{cq}{i\hbar}}$

$$= \sum_n \frac{1}{n!}\left(\frac{cq}{i\hbar}\right)^n p - p \sum_n \frac{1}{n!}\left(\frac{cq}{i\hbar}\right)^n$$

$$= \sum \frac{n}{n!}\left(\frac{c}{i\hbar}\right)^n q^{n-1} i\hbar$$

$$= c\, e^{\frac{cq}{i\hbar}}$$

or $e^{\frac{cq}{i\hbar}} p = (p+c)\, e^{\frac{cq}{i\hbar}}$

$e^{\frac{cq}{i\hbar}} = S$ とすると

$$Sp = (p+c)S$$

or $SpS^{-1} = p+c$.

従って p の eigenvalue と $p+c$ の eigenvalue とは一致する。即ち p の一つの eigenvalue を p' とすると $p'+c$ も亦 p の eigenvalue. c は任意の real number であるから p の eigenvalue は $-\infty, +\infty$ の間の凡ての値をとる。

同様に q の eigenvalue も $(-\infty, +\infty)$ の間の凡ての値をとる。

所が ~~実際に於ては~~ classical dynamics に於ける canonical variables として ~~eigenvalue が $(-\infty, +\infty)$ の間の凡ての値をとらないもの~~

のとる値は $(-\infty, +\infty)$ の全体でないものもあった。例へば polar coordinate (r, θ, φ) 及び之に conjugate な momentum $(p_r, p_\theta, p_\varphi)$ の如きものである。

~~かかるもの~~ の量子力学に於ても canonical variables の定義を拡張して、eigenvalue が凡ての real number ~~をとる~~ 値をとるもの以外の variables をふくむ様にすれば これを求めるには 次の如くにして、

(q') 即ち

$$q_r q_s - q_s q_r = 0 \qquad p_r p_s - p_s p_r = 0$$
$$q_r p_s - p_s q_r = i\hbar \delta_{rs} \qquad r, s = 1, 2, \cdots n$$

を満足する canonical variables の set は ~~$q_1 q_2$~~ q's を与へただけでは定まって来ない。

∵ 与へられた q's に対し p_r's $(r = 1, 2, \cdots n)$ が (q') を満足するならば、 $p_r + f_r(q_r)$ $r = 1, 2, \cdots n$ も又 (q') を満足する。

但し f_r は q_r の任意の函数。

$$\because \{p_r + f_r(q_r)\}\{p_s + f_s(q_s)\} - \{p_s + f_s(q_s)\} \times \{p_r + f_r(q_r)\} = 0$$

$$\because f_r(q_r) p_s - p_s f_r(q_r) = 0 \quad \text{for } r \neq s$$

$$q_r\{p_s + f_s(q_s)\} - \{p_s + f_s(q_s)\} q_r = i\hbar \delta_{rs}$$

~~ここで f~~

次に $f(q_r)$ を q_r の power series で define すれば [illegible]

$$f(q_r)p_r - p_r f(q_r) = i\hbar f'(q_r) \qquad (14)$$

∵ (14) が f_1, f_2 によって満足されるならば

$$(f_1+f_2)p_r - p_r(f_1+f_2) = i\hbar f_1' + i\hbar f_2'$$

$$f_1 f_2 p_r - p_r f_1 f_2 = f_1(f_2 p_r - p_r f_2) + (f_1 p_r - p_r f_1) f_2$$

$$= i\hbar(f_1 f_2' + f_1' f_2) = i\hbar(f_1 f_2)'(q_r)$$

なるから (14) は f_1+f_2, $f_1 f_2$ によっても満足される。しかるに $f = q_r$ の時は勿論満足されるから induction によって . . .

. . .

詳しく書けば $\psi(q_1' q_2' \dots q_n')$

そこで今 q's の simultaneous eigenstate $\psi(q')$ を fundamental state とした場合の p's の repres はどうなるかといふに、任意の state ψ を $\psi(q')$ によって expand し

$$\psi = \int \psi(q')\, dq' (q'|)$$

とする q's の eigenvalue は $(-\infty, +\infty)$ の総ての値をとるから integration は $q_1' q_2' \dots q_n'$ について夫々 $(-\infty, +\infty)$ の間にとられる。

この ψ を

$$\psi' = \int \psi(q')\, dq' \frac{\partial (q'|)}{\partial q_r'}$$

にかへる如き operator は linear operator である。之を π_r とかくと

$$\pi_r \psi = \int \psi(q')\, dq' \frac{\partial (q'|)}{\partial q_r'} \qquad (15)$$

~~任意の二つの state ψ_i, ψ_k に対し~~

~~$\bar{\psi}_i \pi_r \psi_k$~~

従って

$$\pi_s \pi_r \psi = \int \psi(q')\, dq' \frac{\partial (q'|)}{\partial q_r' \partial q_s'}$$

$$\pi_r \pi_s \psi = \quad \dots$$

$$\therefore \pi_r \pi_s - \pi_s \pi_r = 0 \qquad (16)$$

又

$$\pi_s(q_r \psi) = \int \psi(q')\, dq' \frac{\partial q_r'(q'|)}{\partial q_s'}$$

$$= \int q_r' \psi(q')\, dq' \frac{\partial (q'|)}{\partial q_s'} + \delta_{rs} \int \psi(q')\, dq' (q'|)$$

一方 ~~[illegible]~~

$$q_r \pi_s \psi = \int q_r' \psi(q')\, dq' \frac{\partial (q'|)}{\partial q_s'}$$

$$\therefore \pi_s q_r - q_r \pi_s = \delta_{rs} \qquad (17)$$

f を q's の任意の differentiable 函数とすると

$$\pi_s f \psi = f \pi_s \psi + \frac{\partial f}{\partial q_s}\psi$$

$$\because \quad \pi_s f \psi = \int \psi(q') \frac{\partial}{\partial q'_s}\left(f(q')(q'|)\right) dq'$$

$$= \int \psi(q') \frac{\partial f}{\partial q'_s}(q'|)\, dq' + \int f(q')\, \psi(q') \frac{\partial (q'|)}{\partial q'_s}\, dq'$$

$$= \cdots$$

$$\text{or} \quad \pi_s f - f \pi_s = \frac{\partial f}{\partial q_s} \qquad (18)$$

(17) から見ると $-i\hbar\pi_s$ は p_s と同じ V.R. を満足してゐる。
従って $p_s + i\hbar\pi_s \quad s=1,2,\cdots n$
は q's と commute する。従って q's のみの函数である。

$$p_s + i\hbar\pi_s = f_s(q)$$

とおくと

$$p_r p_s - p_s p_r = (-i\hbar\pi_r + f_r)(\quad) - (\quad)(\quad)$$

$$\text{or} \quad \pi_s f_r - f_r \pi_s = \pi_r f_s - f_s \pi_r$$

(18) により $\dfrac{\partial f_r}{\partial q_s} = \dfrac{\partial f_s}{\partial q_r}$

$\therefore \; f_r = \dfrac{\partial G}{\partial q_r}$ なる G がある。

$$\therefore \; p_s + i\hbar\pi_s = \frac{\partial G}{\partial q_s}. \qquad \cdots \quad (19)$$

そこで新しい q's の S.E.S. $\psi(q')$ のかはりに
$e^{iF(q')}\psi(q')$ をとると、$(q'|)$ は $e^{-iF(q')}(q'|)$

従って $\displaystyle\int \psi(q')dq' \frac{\partial (q'|)}{\partial q'_s}$ は $\displaystyle\int \psi(q')\, dq' \left\{\frac{\partial (q'|)}{\partial q'_s} - i\frac{\partial F}{\partial q'_s}(q'|)\right\}$

即ち $\pi_s\psi$ は $\left(\pi_s - i\dfrac{\partial F}{\partial q_s}\right)\psi$

となる。

~~即ち~~ π_r と $\pi_r - i\dfrac{\partial F}{\partial q_r}$ とは S.E.S. の
~~とり方 equivalent である。~~

~~従って (19) に於て~~ $\pi_s - \dfrac{1}{i\hbar}\dfrac{\partial G}{\partial q_s}$ のかはりに π_s

従って $F = \dfrac{G}{\hbar}$ ととっておけば

(19) 式は

$$p_s = -i\hbar\pi_s \qquad (20)$$

となる。
之は (19) から出てくる一つの結果で Schrödinger によって与へられた。

そこで $f(q_s, p_r)$ を q's, p's の power series としてあらはされる任意函数とすると、(20) により、之は $f(q_s, -i\hbar\pi_r)$ に equivalent である。
所で

$$f(q_s, -i\hbar\pi_r)\psi$$

$$= f(q_s, -i\hbar\pi_r)\int \psi(q')\,dq'(q'/)$$

$$= \int \psi(q')\,dq'\, f(q'_s, -i\hbar\tfrac{\partial}{\partial q'_r})(q'/)$$

所で $f(q_s, -i\hbar\pi_r)$ の eigenvalue f' に属する eigenstate $\psi_{f'}$ に対しては

$$f(q_s, -i\hbar\pi_r)\,\psi_{f'} = f'\,\psi_{f'}$$

or

$$\int \psi(q')\,dq'\, f(q_s, -i\hbar\tfrac{\partial}{\partial q'_r})(q'/f') = \int \psi(q')\,dq'\, f'(q'/f')$$

従って

$$f(q'_s, -i\hbar\tfrac{\partial}{\partial q'_r})(q'/f') = f'(q'/f') \qquad (21)$$

之は p, q の任意函数 $f(q_s, p_r)$ の eigenvalue を定める differential equation である。
この場合 ~~f(21)~~ q' の函数 (q'/f') は この dif. eq の eigenvalue f' に対する eigenfunction (Eigenfunktion) に他ならぬ。
~~特に f を Hamiltonian H に~~ とれば、
~~とり、その eigenvalue は~~
特に f を Hamiltonian $H(q_s, p_r)$ にとり、且 H が time を explicit に含んでゐない場合を考へると その eigenvalue は system のとりうる energy value に他ならぬ。これを E とすると、(21) は

$$H(q'_s, -i\hbar\tfrac{\partial}{\partial q'_r})(q'/E) = E(q'/E) \qquad (22)$$

となる。
之が Schrödinger の differential equation である。~~適当な條件の下に於て、この eq を満足する函数 (q'/E) 及び、それを求むれば、同時に system のとりうる energy value が定まる。~~ 之を作るには $H(q_s, p_r)$ に於て p_r の代りに $-i\hbar\frac{\partial}{\partial q'_r}$ をとり、之を q' の函数 (q'/E) に operate したものが $E(q'/E)$ に等しとおけば(よい。)

(22)を満足する函数 (q'/E) は Energy が一定の値をもつてゐる様な ~~sys~~ state の q's eigenstate S.E.S を F.S. としての representation である。
system の energy が一定の値を有する様な state を その system の stationary state と称する。
従つて Schrödinger の diff. eq (22) をとくことによつて system の energy level 及び stationary state が決定される。~~を決定する事に他ならぬ。~~

(21) 式は之の形でかけば

$$H\psi(E) = E\psi(E)$$

であるが、任意の state ψ を H の eigenstate で expand し

$$\psi = \sum_E a(E)\psi(E) \qquad (23)$$

~~とおくと~~、と ~~し、之に 確定を~~ なつたとする。
一方、ψ 及び $\psi(E)$ を q's の S.E.S. で expand すると、

$$\psi = \int \psi(q')(q'/)dq'$$

$$\psi(E) = \int \psi(q')(q'/E)dq'$$

之を (23) に入れると.

$$\int \psi(q')(q'/)dq' = \sum_E \int \psi(q')(q'/E)a(E)dq'$$

従つて、 $$(q'/) = \sum_E (q'/E)\,a(E)$$

でなければならぬ。
これからして、任意の state の q's に関する repr $(q'/)$ は stationary state の repr. (q'/E) 即ち H の eigenfunction によつて expand 出来る。

一般に H に限らず p, q の任意函数 f から作つた Schrödinger の diff. eq. (21) の solution ~~(q'/f') によつて即ち~~ ~~$f(q_s, p_r)$ の~~ eigenfunction (q'/f') によつて、任意の state の repres を expand することが出来る。

簡単な例として、前の (12) の場合 ~~をとると~~

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(xyz) \qquad (12)$$

をとり、 p_x, p_y, p_z のかはりに $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, $-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$, $-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$. ~~とすれば~~ (22) 式は (q'/E) のかはりに $f_E(xyz)$ とかけば.

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(xyz)\right\}f_E(xyz)$$

$$= E\, f_E(xyz) \qquad (24)$$

又は 普通の記号を使へば ~~or~~ $\cancel{-\frac{\hbar}{2m}\Delta+V}$

$$\left\{\Delta + \cancel{\frac{\hbar^2}{8}}\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\right\}f_E = \cancel{E f_E}\; 0 \qquad (24')$$

となる。

最後に $q_1 q_2 \cdots q_n$ と $p_1 p_2 \cdots p_n$ との間の transformation function $(q_1' q_2' \cdots q_n'/p_1' p_2' \cdots p_n')$ を求めよう。 ~~その満足すべき式は之を求めれ~~

(q'/p') ~~ψ~~ とかけば、その満足すべき式は

$$\cancel{\int \psi(q')(q'/p')\,dq' = \psi(p')}$$

~~両辺に p_r を operate すると.~~

$$\psi(p') = \int \psi(q')(q'/p')\,dq'$$

両辺に $p_r = -i\hbar\pi_r$ を operate すると.

$$p_r'\,\psi(p') = -i\hbar\int \psi(q')\frac{\partial(q'/p')}{\partial q_r'}\,dq'$$

~~とする~~

~~ならば $\psi(q')$ の係数を等しとおけば~~

or

$$p_r'\int \psi(q')(q'/p') = -i\hbar\int \psi(q')\frac{\partial(q'/p')}{\partial q_r'}\,dq'$$

$\psi(q')$ の係数を等しとおけば

$$p_r'(q'/p') = -i\hbar\frac{\partial(q'/p')}{\partial q_r'} \qquad r=1,2\cdots n$$

そこで ~~(~~ $(q'/p') = (q_1'/p_1')\cdots(q_n'/p_n')$

とおくと

$(q'/p') = c(p_1' \cdots p_n')\, e^{i\sum_r q_r' p_r'/\hbar}$

$(p'/q') = \bar{c}(\cdots)\, e^{-i\sum_r q_r' p_r'/\hbar}$

$$p_r'(q_r'/p_r') = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r'}(q_r'/p_r')$$

$$\left.\begin{aligned}(q_r'/p_r') &= c\, e^{iq_r'p_r'/\hbar} \\ \text{従って}\quad (p_r'/q_r') &= \bar{c}\, e^{-iq_r'p_r'/\hbar}\end{aligned}\right\} \quad (25)$$

但し c及び $\bar{c}$ は p_r' のみの函数である。

所で ~~orthogonality と normalization の條件から~~

$$\cancel{\bar{c}c\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iq_r'(p_r'-p_r'')/\hbar}\, dq' = \delta(p_r'-p_r'')}$$

$\psi(q')$, $\psi(p')$ は共に normalized とすると

$$\left.\begin{aligned}\bar{\psi}(q')\psi(q'') &= \delta(q'-q'') \\ \bar{\psi}(p')\psi(p'') &= \delta(p'-p'')\end{aligned}\right\} \quad (26)$$

従って

$$\delta(p'-p'') = \cancel{\psi(q')(q'/p')} \int \psi(q'')(q''/p'')\, dq'$$

$$\int (p'/q')\bar{\psi}(q')\, dq'$$

$$= \iint (p'/q')\,\delta(q'-q'')\,(q''/p'')\, dq'\, dq''$$

$$= \int (p'/q')(q'/p'')\, dq' \quad (27)$$

$$\delta(p'-p'') = \delta(p_1'-p_1'')\cdots\delta(p_n'-p_n'').$$

~~故に~~ or $\int (p_r'/q_r')(q_r'/p_r'')\, dq_r' = \delta(p_r'-p_r'')$

or $\bar{c}(p_r')c(p_r'')\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iq_r'(p_r'-p_r'')/\hbar}\, dq_r' = \delta(p_r'-p_r'')$

$$\bar{c}(p_r')c(p_r'')\frac{\hbar}{-i(p_r'-p_r'')}\left[e^{-iq_r'(p_r'-p_r'')/\hbar}\right]_{q_r'=-\infty}^{q_r'=\infty} = \delta(p_r'-p_r'')$$

$$\bar{c}(p_r')c(p_r'')\frac{2\hbar}{p_r'-p_r''}\sin\{q_r'(p_r'-p_r'')/\hbar\}\Big|_{q_r'=\infty} = \delta(p_r'-p_r'')$$

左辺は或る $q_r'\to\infty$ の limit に於ては一種の δ-函数 ~~である~~ となる?

両辺を p_r' について積分すれば,

$$\cancel{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin\{q_r'(p_r'-p_r'')/\hbar\}}{p_r'-p_r''}} =$$

Dirichlet の ~~theorem~~ により。

$$\int_{-\infty}^{\infty} C(p_r')\frac{\sin q_r'(p_r'-p_r'')/\hbar}{p_r'-p_r''}\,dp_r'\Bigg|_{q_r'=\infty} = \pi C(p_r')$$

なるゆゑ、左辺は

$\bar{C}(p_r')2\hbar\pi$

右辺は 1 なるゆゑ、

$$\bar{C}(p_r')C(p_r') = \frac{1}{2\hbar\pi} = \frac{1}{h}$$

$$\therefore\ C = h^{-\frac{1}{2}}e^{iF(p_r')}$$

なる形となる。但し $F(p_r')$ は p_r' の real function.
然るに $\psi(p')$ を $e^{i\sum F(p_r)}\psi(p')$ でおきかへておけば (q'/p') は $(q'/p')e^{-i\sum F(p_r')}$ となり
従って (q_r'/p_r') の phase の factor はなくなり

$$C = h^{-\frac{1}{2}}$$

$$(q_r'/p_r') = h^{-\frac{1}{2}}e^{iq_r'p_r'/\hbar} \qquad (28)$$

となるから、

~~同様に~~ $(q'/p') = (q_1'/p_1')\cdots(q_n'/p_n')$

$$= h^{-n/2}e^{i(p_1'q_1'+\cdots p_n'q_n')/\hbar} \qquad (29)$$

で与へられる。
従って任意の state ψ の q-rep と p-rep との間には

$$(p'/) = h^{-\frac{n}{2}}\int e^{-i(p_1'q_1'+\cdots+p_n'q_n')}dq'(q'/)$$

$$(q'/) = h^{-\frac{n}{2}}\int e^{i(p_1'q_1'+\cdots+p_n'q_n')}dp'(p'/)$$

なる関係がある。

~~そこで~~ Jordan (Z.S. f. Phys. ~~44~~, 1, 1927) は canonical variables の定義を拡張して、transformation function が

$$(q_r'/p_r') = C e^{iq_r'p_r'/\hbar} \qquad (30)$$

なる形で与へられ、orth. 及び normal の関係

$$\left.\begin{aligned}\int(q_r'/p_r')dp_r'(p_r'/q_r'') &= \delta(q_r'-q_r'')\\ \int(p_r'/q_r')dq_r'(q_r'/p_r'') &= \delta(p_r'-p_r'')\end{aligned}\right\}(31)$$

を満足する p_r と q_r とは互に canonical conjugate であると解することにした。
但し p_r, q_r の eigenvalue が discrete ならば

integral は sum に、δ-function は δ-symbol ~~は~~ δ にかきかへられねばならぬ。

しかし実際問題としては canonical variable の概念なしに ~~済れ。~~ 幾つかの variable を introduce し、その物理的意味より、eigenvalue 及び variables の間の ~~Vertauschung~~ 交換の代数的又は函数的関係（特別の場合には Vertauschungsrel.）を仮定し、~~Hamiltonian を~~ System の Energy 即ち Hamiltonian をそれらの variable の函数としてあらはし、任意の variable に対する ~~$i\hbar\dot\xi$~~ eq of motion は

$$i\hbar\dot{\xi} = \xi H - H\xi$$

で与へられるとして计算すればよいのである。

$$\int (q'/p')(p'/q'')\, dp'\,dq'' = 1.$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}}$$

$$dp' \int \underline{(q'/p')}(p'/q'')\, dq'' \qquad \boxed{(q'/p')(p'/q')}\ dp'$$

q'

$q', q'+dq'$:

§ ~~Unbestimmtheitsrelation und Wellenpacket~~ (wave packet) (VS) 10

$$qp - pq = i\hbar$$

なる関係を満足する canonical variables の間の関係

一方例へば q が定まった値 (q'; $q'+dq'$ の間の値) をとる時 p が p' ($p'+dp'$ の間) の値をとる ~~prob は~~ ~~relat. prob~~ relative は

$$(q'/p')(p'/q')\ \cancel{dq'} = dp'dq'$$

$$= \cancel{\mathrm{const}}\ c\ dp'dq' \qquad c: \text{indep of } p', q'$$

で与へられる。従って q の値を定めておけば p の値は全くわからぬことになる。

更に任意の state Ψ に（但し $\bar\Psi\Psi = 1$）

$$\Psi = \int \psi(q')(q'/)\, dq'$$

に対して q を測定した時の平均値は

$$\bar\Psi q \Psi = \int (/q')\, q'\, (q'/)\, dq' = \bar{\bar{q}}$$

誤差の二乗の平均は

$$\bar\Psi (q - \bar{\bar{q}})^2 \Psi = \int (/q')(q' - \bar{\bar{q}})^2 (q'/)\, dq' = (\Delta q)^2$$

同じ state に対して
又 p を測定した時の平均値は

$$\bar\Psi p \Psi = -i\hbar \int (/q') \frac{\partial (q'/)}{\partial q'}\, dq' = \bar{\bar{p}}$$

従って p の測定の結果の二乗の平均は

$$平(p-\bar{\bar{p}})^2\psi = \int (/q')\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q'}-\bar{\bar{p}}\right)^2 (q'/)\,dq'$$
$$= (\Delta p)^2$$

$\psi(q')$ のかはりに $\psi(q')e^{i\bar{\bar{p}}q'/\hbar}$ とれば
$(q'/)$ は $e^{-i\bar{\bar{p}}q'/\hbar}(q'/)$
$(/q')$ は $e^{i\bar{\bar{p}}q'/\hbar}(/q')$
に transform される.

(32) $$(\Delta p)^2 = \int (/q')\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q'}\right)^2 (q'/)\,dq'$$

又 q' ~~かはり~~ の測定の結果の二乗の平均は $q-\bar{\bar{q}}$ の測定の結果の二乗の平均と同じであるから

(33) $$(\Delta q)^2 = \int (/q')\,q'^2\,(q'/)\,dq'$$

としてよい。

(32) は Integration by parts により,

(32') $$(\Delta p)^2 = \hbar^2\int \frac{\partial}{\partial q'}(/q')\frac{\partial}{\partial q'}(q'/)\,dq' - \hbar^2 (/q')\frac{\partial}{\partial q'}(q'/)\Big|_{-\infty}^{+\infty}$$

~~所で $(/q')$ が ±∞で 0 にならねば $(\Delta q)^2$ が ∞ になる!)~~
~~$\frac{\partial(q'/)}{\partial q'}$ が 0 にならねば ; 第二項は 0 になる~~

$(\Delta q)^2$ が finite ならば $(q'/)$ は ±∞ で 0 の筈,
(32') の第二項の値は 0.

~~∴ $(\Delta p)^2(\Delta q)^2 = \hbar^2\int$~~

所で $(q'/)$ と $(/q')$ とは互に complex conjugate なる故.

$$q'(q'/) = f \qquad \frac{\partial(q'/)}{\partial q'} = g$$

とおけば $$q'(/q') = \bar{f} \qquad \frac{\partial(/q')}{\partial q'} = \bar{g}.$$

$$(\Delta q)^2(\Delta p)^2 = \hbar^2\int \bar{f}f\,dq' \cdot \int \bar{g}g\,dq'$$
$$\geq \frac{1}{4}\hbar^2\left|\int (f\bar{g}+\bar{f}g)\,dq'\right|^2$$

∵ $$\int(\bar{f}\lambda+\bar{g})(f\lambda+g)\,dq' = 0$$

or $$\int \bar{f}f\,dq'\,\lambda^2 + \int(f\bar{g}+\bar{f}g)\,dq'\,\lambda + \int\bar{g}g\,dq' \geq 0$$

~~の根~~は q' の如何にかかはらず ~~$f\lambda+g$~~ $f\lambda+g=0$ でない限り, real な λ によっては満足されぬ。
従って判別式は neg.

即ち $$4\int\bar{f}f\int\bar{g}g\,dq' \geq \left|\int(f\bar{g}+\bar{f}g)\,dq'\right|^2$$

但し等號は $f\lambda + g = 0$ の時に成立する。

従って一般に

$$(\Delta q)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{1}{4}\hbar^2 \left| \int \left\{ q'(q'/) \frac{\partial (/q')}{\partial q'} + q'(/q') \frac{\partial (q'/)}{\partial q'} \right\} dq' \right|^2$$

$$= \frac{1}{4}\hbar^2 \left| \int q' \frac{\partial}{\partial q'} \left\{ (/q')(q'/) \right\} dq' \right|^2$$

$\bar\psi\psi = 1$

$$= \frac{1}{4}\hbar^2 \left| -\underbrace{\int (/q')(q'/) dq'}_{=1} + \underbrace{q'(/q')(q'/)\Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{=0} \right|^2$$

$q'^2(/q')(q'/)\Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0$ なるから

$$= \frac{1}{4}\hbar^2$$

(34) $\Delta q \, \Delta p \geq \dfrac{\hbar}{2} = \dfrac{h}{4\pi}$

之は (33) で定義された任意の canonical variables に対して成立するもので、講義の最初にのべた Heisenberg の Unbestimmtheitsrelation を量子力学の理論から正確に云ひあらはしたもの に他ならぬ。

等號の成立するのは

$$f\lambda + g = 0$$

or $$\lambda q'(q'/) + \frac{\partial (q'/)}{\partial q'} = 0$$

or $$(q'/) = C e^{-\lambda/2\, q'^2}$$

$$(/q')(q'/) = \bar{C} C e^{-\lambda' q'^2}$$

λ': real part of λ.

即ち q の色々な eigenvalue をとる prob が gauss の error function であらはされる様な場合に $\Delta p \Delta q$ の積は最小になる。この場合には

$$(p'/) = \int (p'/q')(q'/) dq'$$

$$= C' \int e^{-iq'p'/\hbar} e^{-\lambda q'^2} dq'$$

$q' + \dfrac{ip'}{2\lambda\hbar} = q''$ とおけば

$$(p'/) = C' e^{-\frac{p'^2}{4\lambda\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda q''^2} dq''$$

$\infty + \frac{ip'}{2\lambda\hbar}$, $-\infty + \frac{ip'}{2\lambda\hbar}$

即ち p の色々な eigenvalue をとる prob も又 gauss の error function であらはされる。

前の expansion に於て

$$\psi = \int \psi(q')(q'/)\, dq'$$

§ Schrödinger's wave equation and Heisenberg's matrix

前節に於て、stationary state の q-representation に対して Schrödinger の diff. eq. が存在することを知った。しからば一般の state の q-representation に対しては如何なる方程式が成立するかをしらべて見る。

~~前の場合~~ $\psi(q')$ 詳しくかけば $\psi(q_1' q_2' \cdots q_n')$ というのは、ある time t に於て $q_1 q_2 \cdots q_n$ を測定すれば必ず $q_1' q_2' \cdots q_n'$ なる値の得られる様な state を意味している。

~~之を詳しくかけば~~ 従って詳しくいえば ~~$\psi(q_1' q_2' \cdots q_n')$ time t に depend して~~

$\psi(q_1' q_2' \cdots q_n')$ は time t に depend している。従って $(q'/)$ も又 time に depend している。即ち詳しくかけば

$$\psi = \int \psi(q', t)(q', t/)\, dq'$$

である。ただし ~~それの関係は~~ 次にこの $(q', t/)$ が $q_1' q_2' \cdots q_n'$ 及び t に如何に depend しているかを定めれば。~~任意の time に於て~~ ある state に於て q's を測定した時

其の結果の得られる prob がわかり、従って又任意の time に任意の量を測定した時色々な結果の得られる prob がわかる筈である

今任意の dynamical variable ξ に於いて
$(q',t\,|\,\xi(t)\,|\,q'',t) = \cancel{q',t+|\xi}$
$= (q',t+dt\,|\,\xi(t+dt)\,|\,q'',t+dt)$

となる如くに $\psi(q',t)$ をとって有るとすると。
$(q',t\,|\,\xi(t+dt)-\xi(t)\,|\,q'',t)$
$= (q',t\,|\,\xi(t+dt)\,|\,q'',t)$
$-(q',t+dt\,|\,\xi(t+dt)\,|\,q'',t+dt)$ } (35)

$\xrightarrow{}$ eq of motion
$i\hbar\dot{\xi} = \xi H - H\xi$
or $i\hbar\dot{\xi}\psi = (\xi H - H\xi)\psi$ for any ψ
を q-rep. で書けば

$\lim_{\delta\to 0}\frac{i\hbar}{dt}\int(q',t\,|\,\xi(t+dt)-\xi(t)\,|\,q'',t)\,\cancel{(q''t)}\,dq''$ $(q''t)\,dq''$
$\int(q',t\,|\,\xi(t)\,|\,q'',t)\,dq''(q''',t\,|\,H(t)\,|\,q'',t)$
$-\int(q',t\,|\,H(t)\,|\,q'',t)\,dq''(q'',t\,|\,\xi(t)\,|\,q'',t)$ $(q''t)\,dq''$

そこで任意の ψ を
$$\psi' = i\hbar\int\psi(q',t)\frac{\partial(q',t|)}{\partial t}dq'$$

にかへる如き Operator を F とおくと、
$$F\psi = i\hbar\int\psi(q',t)\frac{\partial(q',t|)}{\partial t}dq'.$$

次に任意の ~~dynami~~ observable quantity を $\xi(t)$ とし ~~$\xi(t)\psi$ を $\psi(q',t)$ で expand すると~~
$\xi(t)\psi_{(q',t)} = \int\psi(q',t)\,(q',t|\xi)\,dq'$
$= \int\psi(q'',t)(q',t|\xi(t)|q',t)\,dq''$
~~となるとすると、~~
~~$\xi(t+dt)\psi = \int\psi(q',t+dt)(q',t+dt|\xi)\,dq$~~
~~$= \int\psi(q',t)$~~
~~又は $\xi(t+dt)$~~
とおくと
$\xi(t)\psi = \int\psi(q'',t)(q'',t\,|\,\xi(t)\,|\,q',t)\,dq''\,(q',t|)\,dq'$
$\xi(t+dt)\psi(q',t+dt) = \int\psi(q'',t+dt)(q',t+dt\,|\,\xi(t+dt)\,|\,q'',t+dt)\,dq''$
$= \int\psi(q'',t+dt)(q',t\,|\,\xi(t)\,|\,q'',t)\,dq''$

$$\xi(t+dt)\,\psi(q''', t+dt) = \int \psi(q', t_{dt})\, C(q'q'')\, dq''$$

$$\xi(t)\,\psi(q', t) = \int \psi(q'', t+dt)\, C(q'q'')\, dq''$$

$$\xi(t) =$$

§ Schrödinger's wave equation and Heisenberg's matrix

前節に於て stationary state の q-repres. に對して Schrödinger の diff. が成立することを知った。しからば一般の state の q-repr. に對しては如何なる関係が存在するかをしらべてみる。

前の expansion ~~に於て~~

$$\psi = \int \psi(q')(q'|)\,dq' \quad (35)$$

に於て $\psi(q')$ 詳しくかけば $\psi(q_1' q_2' \cdots q_n')$ なというのは或る time t に於て $q_1 q_2 \cdots q_n$ を測定すれば $q_1' q_2' \cdots q_n'$ なる値の得られる様な state を意味している。

従って詳しく ~~かけば~~ いへば $\psi(q_1' q_2' \cdots q_n')$ 及び $(q'|)$ は time と共にかはる。

故に (35) は詳しくかけば

$$\psi = \int \psi(q', t)(q't|)\,dq' \quad (36)$$

である。

そして $(q't|)$ が $q_1' q_2' \cdots q_n'$ 及び t に如何に depend しているかを定めれば、ある state に於て任意の time に q's を測定した

時、夫々の結果の得られる prob がわかり従って
又任意の time に於て任意の量を測定した時
夫々の結果の得られる prob がわかるのである
そこで任意の state

$$\psi = \int \psi(q't|)\,(q't|)\,dq'$$

を

$$\psi' = i\hbar \int \psi(q't|)\,\frac{\partial (q't|)}{\partial t}\,dq'$$

にかへる様な linear operator を F とすると

$$\mathsf{F}\psi = i\hbar \int \psi(q't|)\,\frac{\partial (q't|)}{\partial t}\,dq' \quad (37)$$

~~併~~て又任意の state ψ を

$$\psi'' = \cancel{i\hbar} \lim_{\Delta t \to 0} \int \{\psi(q',t+\Delta t) - \psi(q',t)\}(q't|)\,dq'$$

にかへる様な operator を ~~簡単に~~ d_t とすると

$$d_t\psi = \lim_{\Delta t \to 0} \int \{\psi(q',t+\Delta t) - \psi(q',t)\}(q',t|)\,dq' \quad (38)$$

~~然~~所で

$$\psi = \int \psi(q't|)(q't|)\,dq'$$
$$= \int \psi(q',t+\Delta t|)\,(q',t+\Delta t|)\,dq'$$

$$\therefore\ i\hbar \int \{\psi(q',t+\Delta t|) - \psi(q',t|)\}(q',t+\Delta t|)\,dq'$$
$$= -i\hbar \int \psi(q',t)\{(q',t+\Delta t|) - (q',t|)\}\,dq'$$

$\therefore$ $\Delta t \to 0$ の lim に於ては

$$i\hbar\, d_t \psi = -\mathsf{F}\psi \qquad 38)(39)$$

となる。

さて ~~ここで~~

$$\dot{\xi}(t)\psi = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t}\{\xi(t+\Delta t) - \xi(t)\}\psi$$
$$= \frac{1}{\Delta t}\int \psi(q',t+\Delta t)(q',t+\Delta t|\,\xi^{(t+\Delta t)}\,|q'',t+\Delta t)(q'',t+\Delta t|)\,dq'dq''$$
$$- \frac{1}{\Delta t}\int \psi(q',t)(q',t|\,\xi\,|q'',t)(q'',t|)\,dq'dq''$$
$$\cancel{= \frac{1}{\Delta t}\int \{\psi(q',t+\Delta t) - \psi(q',t)\}(q',t+\Delta t|\,\xi(t+\Delta t)|\,q'',t+\Delta t)}$$

~~もし ξ が time を explicit に含まず、従って~~
~~$(q',t+\Delta t|\,\xi(t+\Delta t)\,|q'',t+\Delta t)$~~
~~$= (q',t|\,\xi(t)\,|q'',t)$~~ …あらはされるに等しく
~~ならば~~ ~~所で~~ ~~ξ~~ $(q',t|\,\xi(t)\,|q'',t)$ は
~~q',q'' 及び~~ t に depend する故 之を ~~$c(q',q'',t)$~~

~~とおくと~~

$$\cancel{(q', t+\Delta t \,|\, \overset{(t+\Delta t)}{\xi} \,|\, q'', t+\Delta t) = \tau(q', q'', t+\Delta t)}$$

∴ ~~上式の両辺を~~ ... の ... は

$$\cancel{\frac{1}{\delta t}\int \psi(q', t+\Delta t)}$$

$$= \int d_t\, \psi(q',t)\cdot(q',t\,|\,\xi(t)\,|\,q'',t)(q'',t/)\,dq'dq''$$

$$+ \int \psi(q',t)\,\frac{\partial}{\partial t}(q',t\,|\,\xi(t)\,|\,q'',t)\,(q'',t/)\,dq'dq''$$

$$+ \int \psi(q',t)\,(q',t\,|\,\xi(t)\,|\,q'',t)\,\frac{\partial(q'',t/)}{\partial t}\,dq'dq''$$

$$\therefore\ i\hbar\dot{\xi}\psi = i\hbar d_t \xi\psi + i\hbar\frac{\partial\xi}{\partial t}\psi + \xi\bar{F}\xi\psi$$

$$\text{or}\quad i\hbar\dot{\xi}\psi = \left(i\hbar\frac{\partial\xi}{\partial t} + \xi\bar{F} - \bar{F}\xi\right)\psi \qquad (40)$$

for any ψ

$$\therefore\quad i\hbar\dot{\xi} = i\hbar\frac{\partial\xi}{\partial t} + \xi\bar{F} - \bar{F}\xi \qquad (41)$$

となる。

但し $\displaystyle \frac{\partial\xi}{\partial t}\psi(q',t) = \int \psi(q'',t)\frac{\partial}{\partial t}(q',t\,|\,\xi(t)\,|\,q'',t)\,dq''$ (42)

［従って］ξ が time を explicit に含まぬときは $(q',t\,|\,\xi(t)\,|\,q'',t)$ は time に independent でなければならぬ。 17

~~その場合には之を~~ $(q'|\xi|q'')$ とかく

を意味してゐる。

之を ξ の eq. of motion ~~と比較すると~~

$$i\hbar\dot{\xi} = i\hbar\frac{\partial\xi}{\partial t} + \xi H - H\xi$$

と比較すると、

$$\xi\overset{H-\bar{F}}{(\bar{F}-H)} = \overset{H-\bar{F}}{(\bar{F}-H)}\xi$$

之が任意の ξ に対して成立すれば

$$\cancel{\bar{F}-H} \ \ H-\bar{F} = C(t) \qquad \cancel{C:\text{const}} \quad (43)$$

C: ordinary fn of t only

即ち additive constant C を除けば $\bar{F}$ は Hamiltonian に他ならぬ。

元来 $\bar{F}$ は unique には定らぬ。$\psi(q',t)$ の代りに例へば $e^{\frac{iC(t)}{\hbar}}\psi(q',t)$ をとつておけば、$(q't/)$ は $e^{-\frac{iC(t)}{\hbar}}(q',t/)$ となり

従つて $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(q',t/)$ は $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{-iC(t)/\hbar}(q',t/)\right)$

$$= i\hbar e^{-iC(t)/\hbar}\frac{\partial}{\partial t}(q',t/) + C(t)\,e^{-iC(t)/\hbar}(q',t/)$$

となるから、$\bar{F}$ は $\bar{F} + C(t) = H$

になる。

~~であるから~~ 即ち $\psi(q',t)$ を適当にとれば、

$$i\hbar\int \psi(q',t)\frac{\partial(q',t/)}{\partial t}\,dq'$$

$$= H\psi \qquad (44)$$

となる。しかるに前節に述べた如く

$$H\psi = H\int \psi(q't)(q't/)dq'$$

$$=\int \psi(q't)\, H(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r'}, q_s')(q't/)\,dq'$$

なるゆゑ、従而 $(q't/)$ は

$$i\hbar \frac{\partial (q't/)}{\partial t} = H(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r'}, q_s')(q't/) \qquad (45)$$

or $-i\hbar d_t \psi = H\psi$ (45')

を満足せねばならぬ。之即ち Schrödinger の wave equation である。~~其~~の任意の solution で適

特に $(q't/)$ が time を ~~函数~~ 含む

$$(q't/) = (q'/E)\, e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \qquad (47)$$

なる形で含んでゐるときには (45) から E 及び $(q'/)$ は

$$E(q'/E) = H(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r'}, q_s')(q'/E) \qquad (48)$$

を満足せねばならぬ。

之は吾々の求めた Schrödinger の diff. eq に他ならぬ。

(48) ~~によって~~ を解いて H の eigenvalue E 及び それに属する eigenfunction ~~が互に independent なものを~~ 求めれば (q'/E) ~~linearly~~

~~(45)の general~~ wave eq の general solution —

は ~~wave~~ E が discrete, conti. に従って

$$(q't/) = \sum_E c_E (q'/E)\, e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

$$\text{or} \quad = \int_E c(E)(q'/E)\, e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\, dE$$

で与へられる。~~従~~

~~(45)を積分すれば Hamiltonian が classically に p, q の函数として表はされてゐないかな場合でも、その q~~

当な条件を満足するものは wave function と称せられる。故に物理的に意味ある state の q-repres は常に Schröd. の wave eq. を満足する wave function として与へられる。

~~このが~~ この様に任意の state ψ の representation として $q_1' q_2' \ldots q_n'$ 及び t の函数 $(q't/)$ を取った場合之を Schrödinger の representation と称する。

~~然れば~~ (47) (48) から明かな様に system の Hamiltonian の eigenstate 即ち stationary state の Schrödinger の repr. は

$$(q'/E)\, e^{-iEt/\hbar}$$

なる形で与へられる。~~station~~

故に stationary state に対して、time t に 任意の量 ξ を測定した ~~ξ' という結果の得られる prob. は~~ 平均値は

$$|(\xi'/E)|^2 = (t|\xi|t)(\xi'/E)\,e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$\int (E/q',t)(q't|\xi(t)|q''t)(q''t/E)\,dq'dq''$$

$$= \int (E/q')(q't|\xi(t)|q''t)(q''/E)\,dq'dq''$$

$$= \int (E/q')(q'|\xi|q'')(q''/E)\,dq'dq''$$

この平均値は time に indep. である故、
任意の量の平均値は ~~測定を行った時に~~ time に無関係である。之からして 任意の量を測定して或る結果の得られる prob は time に無関係であることがわかる。

(45) からして ~~を拡張すれば~~、Hamiltonian が classically に p, q の analytic 函数 で表わし得ない様な場合でも その Schrödinger の repres

$$(q',t|H|q'',t)$$

がわかっておれば、system の任意の state の Schrödinger の repr は ~~微分~~ eq

$$i\hbar\frac{\partial (q't/)}{\partial t} = \int (q',t|H|q'',t)(q''t/)\,dq'' \quad (46)$$

~~で与えられる~~を満足せねばならぬことがわかる

Schrödinger の repr. の特徴は ξ が time を explicit にふくまぬなら

$$(q',t|\xi(t)|q'',t)$$

が time に indep であること、いひかへれば 任意の dynamical variable をあらわす matrix element は凡ての time に亘って定まっていることである。

次に我々は ~~他の~~ もう一つの 重要な repr. について考へて見る。
(Hamiltonian は t を explicit にふくまぬ場合に)
即ち与へられた system の constant of motion で互に commute し、且互に independent なものの max. number をとり、之を $\alpha_1, \alpha_2 \cdots \alpha_l$ とし、その eigenvalue $\alpha_1' \alpha_2' \cdots \alpha_l'$ に属する sim. eigenstate を $\psi(\alpha_1'\alpha_2'\cdots\alpha_l')$ or $\psi(\alpha')$ と表す。今 任意の state ψ を expand し

$$\psi = \sum_{\alpha'} \psi(\alpha')(\alpha'/)$$

と~~なったと~~かく。但し 簡単の為め α's の eigenvalue は凡て discrete としておく。
すると任意の dyn. variable ξ(t) に対し

$$\xi(t)\psi = \sum_{\alpha'\alpha''} \psi(\alpha'')(\alpha''|\xi(t)|\alpha')(\alpha'/)$$

$$\cancel{\xi(t)\psi = \sum_{\alpha'\alpha''}\psi(\alpha'')(\alpha''|\xi(t)|\alpha')(\alpha'/) = \sum_{\alpha''}}$$

Schrödinger の repr に於ては特に $q_1 q_2 \cdots q_n$ の sim. eig. state を fund. state にとつたが、次に Hamilton 函数 H が time を explicit に含まぬ場合は、H と commute し、いひかへれば constant of motion で、互に commute し互に indep なもの の max. number をとり之を $\alpha_1, \alpha_2 \cdots \alpha_l$ と ~~おき~~ し、それらの eigenvalue $\alpha_1', \alpha_2' \cdots \alpha_l'$ に属する sim. eig. state $\psi(\alpha_1'\alpha_2'\cdots\alpha_l')$ or $\psi(\alpha')$ を ~~fund. state にとる~~ する fund. state とする repr. を考へて見る。

さて任意の state ψ は

$$\psi = \int\!\!\sum_{\alpha'} \psi(\alpha')(\alpha'/)$$

なる形に expand される。但し簡単の為 α's の eigenvalue を皆 discrete としておく。

又 $\psi(\alpha')$ の $\psi(q',t)$ に関する rep を考へると

$$\psi(\alpha') = \int \psi(q',t)(q',t/\alpha')dq'$$

となる ~~と、α'~~。所で $\alpha_1,\alpha_2\cdots\alpha_l$ は H と commute

するもので互に indep なものの最大数をとつたのであるから、その中に H 自身が含まれてゐるか然らずんば H は α's の函数である。

∴ $\psi(\alpha')$ は H の eigenvalue がいへば H' になる 一つの eigen. state である。

従つてその Schrödinger の rep は (47) によつて

$$(q',t/\alpha') = (q'/\alpha')\,e^{-\frac{iH't}{\hbar}} \qquad (49)$$

で与へられる。

~~従つて~~ 所で 任意の dyn. variable $\xi(t)$ に対し ~~の α-rep~~

$$(\alpha'|\xi(t)|\alpha'') = \int(\alpha'/q',t)(q',t|\xi(t)|q'',t)\times(q''t/\alpha'')\,dq'dq'' \qquad (50)$$

なる関係がある。之は (49) によつて

$$(\alpha'|\xi(t)|\alpha'') = \int(\alpha'/q')(q',t|\xi(t)|q'',t)(q''/\alpha'')\,dq'dq''\cdot e^{\frac{i(H'-H'')t}{\hbar}}$$

ξ が time を explicit に含まぬなら

$$= \int(\alpha'/q')(q'|\xi|q'')(q''/\alpha'')\,dq'dq'' \times e^{\frac{i(H'-H'')t}{\hbar}} \qquad (51)$$

とかくことが出来る。

初めの integral は全く time に indep である。

之を $(\alpha'|\xi|\alpha'')_0$ とかくと

$$(\alpha'|\xi(t)|\alpha'') = (\alpha'|\xi|\alpha'')_0 \, e^{\frac{i(H'-H'')t}{\hbar}} \qquad (52)$$

~~これ等が~~ Heisenberg の創始した matrix mechanics に於て classical な dyn. variable に対応させた matrix はこの意味のものであった。
之を Heisenberg の matrix とよぶことにする。
Heisenberg は、matrix の各 element を、~~dyn.~~ その 任意の dyn. variable に対応する
dyn. variable を classical に Fourier series に expand した時の各 comp に対応させることによって、その物理的な意味を定め様とした。
すると system の emit 又は absorb する所の radiation の frequency は

$$\nu = \frac{H'-H''}{2\pi\hbar}$$

$$\text{or} \quad h\nu = H'-H'' \qquad (53)$$

によって決定され、emit 又は absorb される prob は

$$|(\alpha'|\mathbf{D}|\alpha'')_0|^2 \qquad (54)$$

に比例すると考へられる。ここに $\mathbf{D}$ は system の electric moment をあらはす vector である。
言ひかへれば ~~かくして~~ 2つの状態に各々あらはすことになる。
結局 ~~[illegible]~~ 関係は radiation の強度に於て

~~Heisenberg~~ Schrödinger の wave eq をといて ~~wave~~ stationary state に於ける wave fn
~~$\alpha'/\xi' t$~~ $(\xi' t/\alpha')$ を求めれば (50) 又は (51) により Heisenberg の matrix を作ることが出来る。
従って radiation の emission, absorption の問題に於ける selection principle 及び ~~intensity rule~~ emission, absorption の intensity 等が決定されるわけである。

§ Examples

以上述べた所によつて non-relativistic ~~[illegible]~~ quantum-系に於ける ~~[illegible]~~ mechanics ~~の[illegible]~~ の一般的方法がわかつた。そこで之を実際の問題にapplyしてみる。

(i) Harmonic Oscillator

§ Relations to Classical ~~Dynamics. and Electrodynamics~~ Theory

~~前節では~~ 始めに Quantum Mechanics が $h \to 0$ の ~~limit~~ となる場合に於て classical theory と一致すべきであることは既に疑ひないが少し両者の関係を明かにする為 Schrödinger が初めて用ひ出した wave packet なるものを考へてみるとよい。

Schrödinger の wave eq.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(q|\,) = H\left(q_s, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}\right)(q|\,) \qquad (55)$$

$$r, s = 1, 2, \dots n$$

に於て、

$$(q|\,) = e^{iS/\hbar} A \qquad (56)$$

とおいてみる。但し A, S は共に q 及び t の real function で ~~あつて~~ A は wave の amplitude S は phase をあらはしてる。

すると

$$-i\hbar\frac{\partial(q|\,)}{\partial q_r} = e^{iS/\hbar}\left(\frac{\partial S}{\partial q_r} - i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}\right)A$$

$$i\hbar\frac{\partial(q|\,)}{\partial t} = e^{iS/\hbar}\left(-\frac{\partial S}{\partial t} + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)A.$$

従つて q_r 及び $-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}$ $(r = 1, 2, \dots n)$ の power series としてあらはしうる任意の ~~[illegible]~~ 函数 f に対し、

$$f\left(q_s, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}\right)(q|\,) = e^{iS/\hbar} f\left(q_s, \frac{\partial S}{\partial q_r} - i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}\right)A$$

従って，(55)式は $e^{iS/\hbar}$ なる common factor で割れば，

$$(57) \quad \left(-\frac{\partial S}{\partial t}+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)A = H\left(q_s, \frac{\partial S}{\partial q_r}-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}\right)A$$

H は $\frac{\partial S}{\partial q_r}-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}$ の power series であらはされるが，右辺は ħ の power series としてあらはし得る。もしも その時 ħ の higher order を neglect しうるならば，両辺の real part, imaginary part を等しとおくことにより

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H\left(q_s, \frac{\partial S}{\partial q_r}\right) \quad (58)$$

$$-\frac{\partial A}{\partial t} = \sum_r \frac{\partial H(q_s, \partial S/\partial q_r)}{\partial(\partial S/\partial q_r)}\frac{\partial A}{\partial q} \quad (59)$$

(58)は classical dynamics における Hamilton-Jacobi の partial differential equation で ~~あって S は principal function と解~~ に他ならぬ。従って ħ が小さいと考へられる様な場合には Schrödinger の wave equation の phase S は Hamilton の principle principal function によって与へられる。

classical な particle の trajectory に沿うては

$$\frac{dq_r}{dt} = \frac{\partial H(q_s, \partial S/\partial q_r)}{\partial(\partial S/\partial q_r)} \quad (60)$$

が満たされるが その場合は，(59)から

$$\frac{dA}{dt} = 0.$$

即ち classical な particle の trajectory に沿うては Amplitude は constant である。

そこで，ある(相隣る) trajectory の group に対してのみ $A \neq 0$ である様な wave function を与へると 任意の時刻に対して $|\psi(q\,t)|^2$ はある q's のある小さい範囲以外では常に 0 となる。即ち所謂 "wave packet" (Wellenpaket) ~~が得られ之が classical な particle と同様な運動をするのが~~ 得られ，その運動は (60)式で与へられる。即ち "wave packet" は classical な particle と同様な運動をする。しかしこの wave packet の大いさは制限がある。即ち (57) の右辺の Taylor expansion の higher term を neglect しうるためには

$$(61) \quad \hbar\frac{\partial}{\partial q_r}A \ll \frac{\partial S}{\partial q_r}A, \quad r=1,2,\dots n$$

即ち A の gradient の A 自身に対する割合は phase $S/\hbar$ の gradient よりずっと小さくなければならぬ。

又(57)の rigorous な solution を求めると、~~考へれば~~ある
瞬間に於て ~~wave~~ ある点以外では殆ど 0 である様な
wave packet を作っても、packet は時と共に
段々拡がって了ふ。但 $\hbar$ が小さいと考へる
場合には packet の拡がり方は非常に遅い
故 packet の運動が近似的に classical な particle の
運動をあらはすと考へられる。

packet の拡がり方を一般的な場合について決定することは難しいが、uniform field の場合には比較的簡単である。Darwin がやった如く

一般に particle の system ~~の運動~~ に於ける
Hamiltonian は

$$(62)\quad H=\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2m_i}p_i^2+V(r_1, r_2\cdots r_n)$$

で与へられる。但し r_i は i 番目の particle の
position vector, p_i はそれに conjugate な
momentum vector をあらはす。

~~また~~ この場合には (57) は

$$\left(-\frac{\partial S}{\partial t}+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)A=\left\{\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2m_i}\overbrace{\left(\frac{\partial S}{\partial x_i}-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\right)^2}^{(\mathrm{grad}_i S-i\hbar\,\mathrm{grad}_i)^2}+V\right\}A$$

$$=\sum_i\frac{1}{2m_i}\left[\left\{\cancel{(\mathrm{grad}_i S)}\left(\frac{\partial S}{\partial x_i}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial y_i}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial z_i}\right)^2\right\}A\right.$$

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\sum_{xyz}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+\sum_{xyz}k_x x=0$$

$$S=c\,\frac{(x-x_0)^2+(\ )^2+(\ )^2}{t}+c't\sum_{xyz}k_x(x+x_0)+c''t^3\sum k_x^2$$

$$-\frac{c}{t^2}\sum(x-x_0)^2+\frac{1}{2m}\sum\left\{\frac{2c(x-x_0)}{t}+c't\,k_x\right\}^2+\sum k_x x$$

$$+c'\sum_{xyz}k_x(x+x_0)+3c''t^2\sum k_x^2$$

t^0; $\quad c'\sum_x k_x(x+x_0)+\frac{2cc'}{2m}\sum_x k_x(x-x_0)+\sum k_x x$

t^{-2}; $\quad -c\sum(x-x_0)^2+\frac{4c^2}{2m}\sum(x-x_0)^2=0$

t^2; $\quad 3c''\sum k_x^2+\frac{c'^2}{2m}\sum k_x^2=0$

$$c''=-\frac{c'^2}{6m}$$

$$c=\frac{m}{2}$$

$$c'+\frac{2cc'}{m}+1=0,\qquad c'-\frac{2cc'}{m}=0$$

$$2c'=-1\qquad c'=-\frac{1}{2}\qquad c''=-\frac{1}{24m}$$

$$- i\hbar \left(\frac{\partial S}{\partial x_i}\frac{\partial A}{\partial x_i} + \frac{\partial S}{\partial y_i}\frac{\partial A}{\partial y_i} + \frac{\partial S}{\partial z_i}\frac{\partial A}{\partial z_i} \right)$$

$$- i\hbar \, \Delta_i S \cdot A - \hbar^2 \Delta_i A \}] + VA$$

両辺の real part, imaginary 部を等しとおくと

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \sum_i \frac{1}{2m_i} \left\{ \left(\frac{\partial S}{\partial x_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z_i}\right)^2 \right\} + V - \hbar^2 \sum_i \frac{1}{2m_i} \frac{\Delta_i A}{A}$$

$$\cancel{\frac{\partial S}{\partial x_i}\frac{\partial A}{\partial}}$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\sum_i \frac{1}{2m_i} \left(\frac{\partial S}{\partial x_i}\frac{\partial A}{\partial x_i} + \cdots \right) - \sum_i \frac{1}{2m_i} \Delta_i S \cdot A$$

mass m の particle が $V = k_x x + k_y y + k_z z$ で与へられる uniform field を動く場合には

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \sum_{xyz} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + kx - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A} = 0$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{2m} \sum_{xyz} \frac{\partial S}{\partial x}\frac{\partial A}{\partial x} - \frac{1}{2m} \Delta S \cdot A = 0$$

A を t のみの function とおくと

$$(63) \quad \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \sum_{xyz} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + kx = 0$$

(64) $\dfrac{\partial A}{\partial t} = -\dfrac{1}{2m} A \Delta S$

(63) は任意の $(x_0 y_0 z_0)$ に対し

$$S = \frac{m}{2t}\sum_{xyz}(x-x_0)^2 - \frac{t}{2}\sum_{xyz} k_x(x+x_0) - \frac{1}{24m}t^3 \sum_{xyz} k_x^2$$

によって満足される。すると

$$\Delta S = \frac{3m}{t}$$

となるから $\cancel{A =}$ (64) は

$$A = C \cdot t^{-\frac{3}{2}}$$

によって満足される。

∴ wave function は

$$A\, e^{iS/\hbar} = C\, t^{-\frac{3}{2}} \exp \frac{i}{\hbar}\Big(\frac{m}{2t}\sum (x-x_0)^2 - \frac{t}{2}\sum k_x(x+x_0) - \frac{1}{24m} t^3 \sum k_x^2\Big)$$

wave eq の general solution は

$$\Psi(xyzt) = \iiint C\, t^{-\frac{3}{2}} \exp(\quad) f(x_0 y_0 z_0)\, dx_0 dy_0 dz_0$$

(65)

$x_0 = x + u\sqrt{t}$

で与へられる。(x_0, y_0, z_0) を

$\dfrac{x_0 - x}{\sqrt{t}} = u \quad \dfrac{y_0 - y}{\sqrt{t}} = v \quad \dfrac{z_0 - z}{\sqrt{t}} = w$

(u, v, w) にかへると、

$$\Psi(xyzt) = \iiint C \exp \frac{i}{\hbar}\Big\{\frac{m}{2}(u^2+v^2+w^2) - \frac{t}{2} k_x(2x + u\sqrt{t}) - \frac{t^3}{24m}\sum k_x^2\Big\}$$
$$f(x+u\sqrt{t}, \cdots)\, du\, dv\, dw$$

$t \to 0$ にすると、

$$\Psi(xyz0) = f(xyz)\Big(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{imu^2}{2\hbar}} du\Big)(\;)(\;) \qquad \frac{\pi^{1/2}}{\left(\frac{im}{2\hbar}\right)^{1/2}}$$

$$\left(\frac{im}{\hbar}\right)^{3/2} f(xyz) = \Psi(xyz0).$$

従って、(65) 式により $t=0$ における wave function を知れば任意時刻の wave fn が定まってくる。

特に $t=0$ に於て Ψ が gauss の error fn で与へられており

(66) $f(xyz) = e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{2\pi i m}{h}(v_x^0 x + v_y^0 y + v_z^0 z)}$

であるとすると、之は中心が0なる wave packet をあらはす。~~で initially に v^0 なる velocity~~

すると time t に於ては

$$\cancel{\Psi(xyzt) = \left(\frac{im}{ht}\right)^{3/2} \prod_{xyz} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x_0^2}{2\sigma^2} - \frac{2\pi i m}{h}(v_x^0 x}}$$

は

(67) $$\underbrace{C(t)\, e^{-\frac{1}{2} \sum_{xyz} \frac{(x - v_x^0 t + \frac{1}{2}\frac{k_x}{m} t^2)}{\sigma^2 + (\frac{ht}{m\sigma})^2}}}_{A(xyzt)}$$

となる。但し $|A(xyzt)|^2 = 1$、
即ち time t には wave packet の中心は

$$x = v_x^0 t - \frac{1}{2}\frac{k_x t^2}{m}$$

にうつって居る。即ち wave packet の中心は classical な particle と同様な運動をする。

但し wave packet の大いさは時と共に大きくなる、大きくなり方は $\frac{h}{m}$ が小さい程遅い。

大きさが二倍になる迄の時間 T は

$$T = \frac{m}{h}\sigma^2$$

で与へられる。

$m = 1\,gr.$ $\sigma = 10^{-4}\,c.m.$ 位ならば

$$T = \frac{1}{10^{-27}} 10^{-8} = 10^{19}\,sec$$

で、即ち visible な particle の運動は殆んど完全に wave packet の運動と一致する。

之に反し、electron の場合には

$m \doteqdot 10^{-27}\,gr$ なる故 $\sigma = 10^{-8}\,c.m$ とすれば

$$T \doteqdot 10^{-16}\,sec$$

となる。wave packet は直ぐに拡がって了ふ。

尚 任意の field に於て wave の中心が classical な particle と同様な motion をすることが次の如くにして証明される。

即ち ~~$\bar{q} = \int q' |(q' t /)|^2 dq'$~~

$V(xyz)$ なる field に於て mass m なる particle が動く場合、wave eq は

$$\left\{-\frac{h^2}{2m}\Delta + V\right\} \Psi(xyzt) = ih \frac{\partial \Psi(xyzt)}{\partial t} \quad (68)$$

~~で与へられ、及び~~ その conj complex eq.

$$\left\{-\frac{h^2}{2m}\Delta + V\right\} \bar{\Psi}(xyzt) = -ih \frac{\partial \bar{\Psi}(xyzt)}{\partial t} \quad (68')$$

で与へられる。
すると (68) (68')に夫々 $x\bar{\Psi}$, $-x\Psi$ を乗じて
辺々相加へ、両辺を x, y, z について
integrate すると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int x\,(\bar{\Psi}\Delta\Psi-\Psi\Delta\bar{\Psi})\,dv$$

$$=i\hbar\frac{d}{dt}\int\bar{\Psi}x\Psi\,dv$$

左辺は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int x\sum_{xyz}\frac{\partial}{\partial x}\left(\bar{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}\right)dv$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\Big[\frac{\partial}{\partial x}\Big\{x\Big(\bar{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}\Big)\Big\}-\Big(\bar{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}\Big)$$

$$+\frac{\partial}{\partial y}\Big\{x\Big(\bar{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial y}-\Psi\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial y}\Big)\Big\}+\cdots\Big]dv$$

∞に於て Ψ が充分小さくなるなら、

$$\frac{d}{dt}\int\bar{\Psi}x\Psi\,dv=\frac{-i\hbar}{2m}\int\left(\bar{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}\right)dv$$

$$\frac{d^2}{dt^2}\int\bar{\Psi}x\Psi\,dv=-\frac{i\hbar}{2m}\int\Big(\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial t}\frac{\partial\Psi}{\partial x}+\bar{\Psi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial t}-\frac{\partial\Psi}{\partial t}\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}-\Psi\frac{\partial^2\bar{\Psi}}{\partial x\partial t}\Big)dv$$

(68) (68')によつて計算すると容易に

$$=-\frac{1}{m}\int\bar{\Psi}\frac{\partial V}{\partial x}\Psi\,dv \qquad (69)$$

etc

となる。

この式の左辺は wave の中心の加速度をあらはし、右辺は force の平均値の $\frac{1}{m}$ に他ならぬ
従って $\bar{\Psi}\Psi$ が小なる wave packet をつくり、その拡がりの方が小さい部に限られ、~~~~く、其 packet の内部での $\frac{\partial V}{\partial x}$ の変化は~~~~小さいなら。この式は、近似的に

$$m\frac{d^2x}{dt^2}=-\frac{\partial V}{\partial x} \quad \text{etc} \qquad (70)$$

とかくことが出来る。但し (x y z) は wave packet の位置をあらはす。即ち wave packet は classical な particle と同様な運動をする。

以上の考察によつて classical dynamics との密接な関係が明かとなつたと思ふ。が次に classical な electrodynamics との関係を考察する

$$\frac{1}{2m}\Big[\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\Big)\bar{\Psi}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial x}\pm\bar{\Psi}\frac{\partial}{\partial x}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\Big)\Psi$$

$$+\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\Big)\Psi\cdot\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}-\Psi\frac{\partial}{\partial x}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\Big)\bar{\Psi}\Big]$$

$$=\frac{1}{2m}\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\Big\{\Delta\bar{\Psi}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial x}+\Delta\Psi\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}-\bar{\Psi}\frac{\partial}{\partial x}\Delta\Psi-\Psi\frac{\partial}{\partial x}\Delta\bar{\Psi}\Big\}+\cdots\Big]$$

$$\Big(+\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial x}\Delta\Psi+\frac{\partial\Psi}{\partial x}\Delta\bar{\Psi}\Big)$$

(68) $\bar\Psi$ を乗じ (68') に Ψ を乗じ之を相減ずると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\bar\Psi\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\mathrm{div}\{\bar\Psi\,\mathrm{grad}\,\Psi - \Psi\,\mathrm{grad}\,\bar\Psi\}$$

or
$$\frac{\partial}{\partial t}\bar\Psi\Psi - \frac{i\hbar}{2m}\mathrm{div}\{\bar\Psi\,\mathrm{grad}\,\Psi - \Psi\,\mathrm{grad}\,\bar\Psi\} = 0 \qquad (71)$$

$\bar\Psi\Psi(xyzt)$ は particle が time t に於て xyz に存在する prob. いひかへれば particle の統計的な分布をあらはす。もし particle が $-e$ なる charge をもつならば

(72) $\rho = -e\bar\Psi\Psi$

は electric density をあらはす。従って (71) 位 electric charge に対する continuity の式と考へ、

$$I = \frac{i\hbar e}{2m}(\bar\Psi\,\mathrm{grad}\,\Psi - \Psi\,\mathrm{grad}\,\bar\Psi) \qquad \frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\,I = 0$$
(72)'

を以って current density をあらはすとしても ~~考へることが出来る~~ よささうであるが 実際は次にのべる様に ~~radiation~~ I を current density と見なすためには $\Psi, \bar\Psi$ を quantige せねばならぬ。
~~そこで現在に於ては しかし之れは spontaneous emi しかしかかる点はあとに譲ることにして~~.

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(2\frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial\bar\Psi}{\partial x} - \sum_{xyz}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial\bar\Psi}{\partial x}\right)$$
$$+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial\bar\Psi}{\partial y} + \frac{\partial\Psi}{\partial y}\frac{\partial\bar\Psi}{\partial x}\right)$$
$$+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial\bar\Psi}{\partial z} + \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{\partial\bar\Psi}{\partial x}\right)$$

何故かといへば、
Ψ を stationary state ~~…~~ の repr. の superposition として、

$$\Psi = \sum_n c_n u_n(xyz)\, e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}$$

とおくと

$$\rho = -e\sum_{m,n}\bar c_m c_n\, \bar u_m u_n\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t}$$

$$I = \frac{i\hbar e}{2m}\sum_{m,n}\bar c_m c_n(\bar u_m\,\mathrm{grad}\,u_n - u_n\,\mathrm{grad}\,\bar u_m)\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t}$$

~~所で $|c_n|^2$ は particle が n なる state にある prob をあらはす。~~ 従って $\frac{E_m-E_n}{\hbar}$ なる振動数の光が emit されるためには、$c_m c_n$ 共に $\neq 0$ でなければならぬ。即ち ある瞬間に於て particle が ~~E_n~~ なる state であれば $c_m = 0$ であるから ~~…~~ で ~~emission は trans~~ emission は起らぬことになる。即ち ~~spon~~ 高い energy ~~state~~ から低い energy state への übergang による spontaneous emission はおこらぬことになる。之は実験に反する。故に之を ~~一般論では $c_n, \bar c_m$ 等は~~ ρ, I を charge 及び current density と見なしうるためには $c_n, \bar c_m$ 等を

乃ち number ではない。従って Ψ, $\bar{\Psi}$ 等も単なる ~~number ではなく~~ function ではない。即ち quantized wave function でなければならぬと考へねばならぬ。

しかし実際に於て
~~現在ではかゝる点はあまり考へない~~し。

$$(73)\begin{cases} \rho_{nm} = e\,\bar{u}_m u_n\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t} \\[2mm] \mathbf{I}_{nm} = \dfrac{i\hbar e}{2m}\left(\bar{u}_m \operatorname{grad} u_n - u_n \operatorname{grad} \bar{u}_m\right) e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t} \end{cases}$$

をもって n なる state から m なる state への transition に伴ふ charge 及び current の distribution をあらはすとし、~~これから~~ classically に electromagnetic field を計算し、emit される光の intensity, polarization を出して来て差支ないことが後にわかる。

そこで

$$\left.\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi\rho \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \frac{4\pi}{c}\mathbf{I} \end{aligned}\right\} (74)$$

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\left(\operatorname{grad} V + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right) \\ \mathbf{H} &= \operatorname{rot} \mathbf{A} \end{aligned}\right\} (74')$$

(74'')の右辺に(73)を入れて、$\mathbf{E}$, $\mathbf{H}$ を計算すると、

$$V = \frac{1}{r} e^{2\pi i\nu\left(t-\frac{r}{c}\right)} \int \rho_0\, e^{\frac{2\pi i\nu}{c}(\mathfrak{n}r)}\, dv$$

ρ, $\mathbf{I}$ に (73) を入れし上

$$\rho = \rho_0 e^{2\pi i\nu t} \qquad \mathbf{I} = \mathbf{I}_0 e^{2\pi i\nu t}$$

と置き、~~(74) (74')~~ を上 charge 及び current の値が 0 でないのは狭い範囲に限られておるとし、そこから遠く離れた点の potential を求めると、

$$\begin{cases} V = \dfrac{1}{r} e^{2\pi i\nu\left(t-\frac{r}{c}\right)} \displaystyle\int \rho_0\, e^{\frac{2\pi i\nu}{c}(\mathfrak{n}r')}\, dv' \\[3mm] \mathbf{A} = \dfrac{1}{cr} e^{2\pi i\nu\left(t-\frac{r}{c}\right)} \displaystyle\int \mathbf{I}_0\, e^{\frac{2\pi i\nu}{c}(\mathfrak{n}r')}\, dv' \end{cases}$$

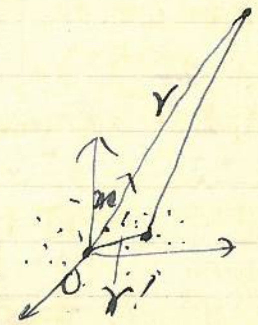
となり、

然るに unit time に emit される
~~radiation の energy は~~

freq. $\nu = \dfrac{E_n - E_m}{h}$

なる radiation の energy は

$$\frac{32\pi^4\nu^4}{3c^3}\,|\mathbf{D}|^2 \qquad (75)$$



$$\mathbf{D} = \frac{1}{2\pi i\nu}\int \mathbf{I}_0 e^{\frac{2\pi i\nu}{c}(\mathbf{n}\mathbf{r})} dv \qquad (76)$$

一秒間に emit される light quanta の数は その $\frac{\bar{S}}{h\nu}$ である。

但し、

$$\cancel{\mathbf{D} = \frac{e\hbar i}{2m}\int(\bar{u}_m \operatorname{grad} u_n - u_n \operatorname{grad}\bar{u}_m) \times e^{\frac{2\pi i\nu}{c}(\mathbf{n}\mathbf{r})} dv}$$

然るに u_n, u_m の値が ~~0 でない~~ 小さくない 範囲が radiation 光の波長 $\frac{c}{\nu}=\lambda$ に比して小さい時には、

$$\cancel{\mathbf{D} = \frac{e\hbar i}{2m}\int(\bar{u}_m \operatorname{grad} u_n - u_n \operatorname{grad}\bar{u}_m) dv}$$

$$\cancel{\int x \operatorname{div}\mathbf{I}_0 dv = -x\frac{\partial\rho}{\partial t}}$$

$$\mathbf{D} = -e\int \mathbf{r}\, u_n \bar{u}_m dv$$

に等しくなる。

$$\because \quad \operatorname{div}\mathbf{I} = -\frac{\partial\rho}{\partial t}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{I}_0 = -2\pi i\nu\rho_0$$

$$\int x \operatorname{div}\mathbf{I}_0 dv = -2\pi i\nu\int x\rho_0 dv$$

$$\text{or} \quad \int \mathbf{I}_{0x} dv = 2\pi i\nu\int x\rho_0 dv$$

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2\pi i\nu}\int \mathbf{I}_0 dv$$

$$= -e\int \mathbf{r}\, u_n \bar{u}_m dv \qquad (77)$$

故に atomic system から visible の光の emit 又は absorb される場合、その intensity は electric ~~displacement~~ moment をあらわす vector の 絶対値の 2乗に比例する。これは Heisenberg の matrix の element の matrix mechanics における結果と一致する。~~atomic system から~~ X-ray の如く波長が atom の dimension のものが emit 又は absorb される場合には (77) ではなしに (76) を使って intensity を計算せねばならぬ。

§ Central Field に於ける motion の前の最後へまわして呉れ

保存 ~~(iii) Reduction~~

二つの particle の間に相互の距離にのみ関係する力が働く場合には、classical dynamics に於けると同様、全体の free motion と particle の relative motion とに分けて考へることが出来る。

例へば、~~第一の~~ particle の mass をそれぞれ m_1, m_2 とすると、H は

$$H(p, \cancel{x}, r_{12}) = \frac{1}{2m_1}(p_{1x}^2+p_{1y}^2+p_{1z}^2) + \frac{1}{2m_2}(p_{2x}^2+p_{2y}^2+p_{2z}^2) + V(\cancel{r_1-r_2}\, r_{12})$$

但し $r_{12} = \{(x_1-x_2)^2+(\ )^2+(\ )^2\}^{\frac{1}{2}}$.

Schrödinger eq は

~~$$i\hbar\frac{\partial\psi(x_1,y_1,z_1,x_2y_2z_2t)}{\partial t} = H($$~~

Schrödinger eq は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(x_1y_1z_1, x_2y_2z_2t) = H\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_2}, r_{12}\right)$$

Coord. Transf を行って、

$$m_1x_1 + m_2x_2 = (m_1+m_2)X \quad \text{etc}$$

$$x_1 - x_2 = x$$

とすると、wave eq は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

第二子部　Chapter IV.　九月十一日.

One Body Problem

§ ~~One Body Problem~~

前章に於いて述べた様に、quantum mechanics の問題は要するに個々の場合に於ける Schrödinger の wave equation を解くことにある。以下に於いて一つの particle が与へられた field 内で運動する場合 ~~について~~ の中で、exact に解を得られる二三の例をあげる。

§(i) Free motion of a particle

先づ最も簡単な場合として ~~一つの particle が~~ external field の全く無い場合をとると Hamiltonian は

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2) \qquad (1)$$

である。

所で $i\hbar\dot{p}_x = p_xH - Hp_x = 0$ etc

である故 ~~p_x~~ 運動量 p_x, p_y, p_z は constant of motion である。

次に p_x, p_y, p_z は互に commute するから、それらの simultaneous eigenstate をとると、之は H の eigenstate である。この state に対する H の eigenvalue は p_x^2, p_y^2, p_z^2 の eigenvalue の和である。之等は夫々 positive or 0 等の任意の値をとり得る故、H の eigenvalue は 0 or positive の任意の

値をとり得る。又 p_x^2, p_y^2, p_z^2 の任意の state に於ける平均値は 0 or positive であるから、従ってその系の H の eigenvalue は 0 or positive に限られる。

次に velocity は

$$\dot{x} = \frac{1}{i\hbar}(xH - Hx)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2m}\{(xp_x - p_x x)p_x + p_x(xp_x - p_x x)\}$$

$$= \frac{p_x}{m} \quad \text{etc}$$

この場合の Schrödinger の wave Eq は 前章(45) 及び本章(1) より

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(x'y'z't|) = \frac{1}{2m}\left\{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2 + \cdots\right\}(x'y'z't|)$$

x'y'z' を改めて xyz と書き $(xyzt|) = \psi(xyzt)$ とかくと、wave eq. は

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = 0 \qquad (2)$$

となる。この式の periodic solution は

$$\psi = Ce^{i(p_x x + p_y y + p_z z - Wt)/\hbar} \qquad (3)$$

但し、$p_x\, p_y\, p_z$ は任意の real number で

$$W = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

If electron volt で表されば $\frac{1}{2}mv^2 = eV\cdot\frac{c}{300}$ $\therefore v = \sqrt{\frac{2e}{m}V}\cdot 10^8$

velocity を energy

$$\lambda = \sqrt{\frac{150}{V}}\cdot 10^{-8}\ \text{c.m.}$$

$\lambda = \sqrt{\frac{h^2}{2\frac{e}{m}V}}\cdot 10^{-4} = \sqrt{\frac{150}{V}}\cdot 10^{-4}$

∴ V ~ 100 volt の order にとれば丁度 x-ray order になる

而して $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = W\psi$, $-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = p_x\psi$ etc

であるから、この solution は momentum の値が $(p_x\, p_y\, p_z)$ で energy が W なる stationary state をあらはしてゐる。

即ち free particle の stationary state は Schrödinger の repr. では plane wave としてあらはされる。その wave length は（その propagation の方向は momentum の方向と一致）

$$\lambda = 2\pi\hbar/(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2} = h/p.$$

frequency は $\nu = W/2\pi\hbar = W/h$

propagation の velocity は $\lambda\nu = W/p = \frac{p}{2m}$

である。かゝる wave の存在を始めて考へたのは de Broglie で particle の motion には或る wave が associate しており、particle の motion はこの wave によって control せられると考へた。

後に行はれた Davisson, Germer その他の実験による電子線の回折の現象は、かゝる wave 所謂 de Broglie wave によって都合よく説明され、その波長は丁度

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

の関係を満足してゐる。

Proton に対しても同様な de Broglie wave の存在することが証明。

$\frac{h}{m} \sim 7$. $v \sim 10^8 \sim 10^9$ cm/sec の order の velocity の electron の波長は丁度 X-ray の波長の order である。結晶より回折される。

された。又 radiation を photon (or light quanta) よりなると考へるならば、之に associate してある wave の波長 h/p 及び振動数 W/h ~~等~~ が通常の light wave の波長及び振動数と一致することは Compton effect から明かである。又 de Broglie wave では wave 函数が complex で polarization が考慮されてゐないといふ点がある。

de Broglie の出発点になつたのは、relativistic な場合 ~~~~ であるが、

$$H = c\left(m^2c^2 + p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)^{1/2}$$

ととり変へすれば上を同様に取扱ひうる。

上に得た plane wave で表はされる state に於ては particle が $dx\,dy\,dz$ なる volume (xyz を頂点の) 内にある relative prob. は

$$|\psi(xyzt)|^2\,dx\,dy\,dz = |C|^2\,dx\,dy\,dz$$

で、位置に independent である。∴ particle がどこにあるかは全くわからぬ。~~之れは~~ Heisenberg の U.R. から考へて、~~~~ この場合 $p_x p_y p_z$ は確定一定の値をもつてゐるから位置のわからぬのは当然のことである。

free particle の任意の state は $\psi=(1)$ の形の凡ての periodic solution の superposition として与へられる。

$\left(4c\,y\frac{d^2}{dy^2}+2c\frac{d}{dy}+\frac{a^2y}{c^2}\right)$　$y=cx^2$　$\frac{d}{dx}=2cx\frac{d}{dy}$　$\frac{d^2}{dx^2}=4c^2x^2\frac{d^2}{dy^2}+2c\frac{d}{dy}$

0, 0, 2
2, 1, 0

§(III) Harmonic Oscillator ~~in one dimension~~

一つの particle が一点からの距離に比例する様な力の作用をうけつゝ運動する様な場合には classical theory には particle は harmonic oscillation をやる。Hamiltonian 函数は、力の中心を origin にとると、

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right) + a^2\left(x^2+y^2+z^2\right)$$

で与へられる。

$$= \sum_{xyz}\left(\frac{1}{2m}p_x^2 + a^2x^2\right)$$

x, y, z 方向の振動は互に independent であるから、簡単の為 one dimensional の場合をとり、

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + a^2 x^2 \qquad (4) \qquad \cancel{\ddot{x} = \frac{1}{m}\ldots}$$

とすると、

$$\dot{p}_x = -2a^2x \qquad \ddot{x} = -\frac{2}{m}a^2x$$

$$\dot{x} = \frac{p_x}{m} \qquad x = x_0\, e^{\pm i\sqrt{2a^2/m}\,t}$$

$$\ddot{x} = \frac{\dot{p}_x}{m} = -\frac{2a^2}{m}x$$

であるから振動数は $2\pi\nu = \sqrt{2a^2/m}$.

$$\therefore a^2 = \frac{4\pi^2\nu^2 m}{2} \qquad \underline{a^2 = 2\pi^2 m\nu^2}$$

$$\therefore H = \frac{1}{2m}\left\{p_x^2 + (2\pi\nu m)^2 x^2\right\}$$

$$p_x = \sqrt{2\pi\nu m\hbar}\,p = \sqrt{h\nu m}\,p, \quad x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi\nu m}}\,q \qquad (5)$$

とおけば、 $2\pi\nu m\hbar\, p^2 + 2\pi\nu m\hbar\, q^2$.

$$H=\frac{h\nu}{2}(p^2+q^2) \qquad \cancel{(8)}\ (6)$$

となる。又 ~~$px-xp$~~ $xp_x-p_xx=i\hbar$
より
$$qp-pq=i \qquad (7)$$

となる。(6)(7)の関係から H の eigenvalue を次の如くして定めることが出来る。
先、Hのeigenvalueは0 or positiveである。之を証する。

$\frac{1}{2}(q-ip)(q+ip)=A$ ~~とおくと~~ $=\frac{1}{2}(p^2+q^2)-\frac{1}{2}$ とおくと

$$A(q-ip)=(q-ip)\,\frac{1}{2}(q+ip)(q-ip)$$
$$=(q-ip)(A+1)$$

この式を A を diagonal にする様な representation で書けば、

$$A'(A'|q-ip|A'')=(A'|q-ip|A'')(A''+1)$$
$$\therefore\ (A'|q-ip|A'')=0 \quad \text{or} \quad A'=A''+1.$$

所で
$$A=\frac{1}{2}(q-ip)(q+ip)$$
を行列でかき直すと
$$A'=\frac{1}{2}\sum_{A''}(A'|q-ip|A'')(A''|q+ip|A')$$

となる。但し $\sum_{A''}$ は A の総ての eigenvalue に対する sum (or integral) をあらはす。
~~今 A' を一つの eigenvalue とすれば. $A''=A'-1$ が~~
夫々に対して 0 でない項は $A'=A''+1$ or $A''=A'-1$

丈である。即ち A' を任意の eigenvalue とすれば、もし $A'-1$ が eigenvalue でないなら上式の右辺は0になる。従って $A'=0$ でなければならぬ。
つまり、A' を一つの eigenvalue とすると
$A'-1,\ A'-2,\ \cdots\cdots$ が又 eigenvalue である。~~従、この series は~~ この series はどこまでも続くことはない。∵ $A+1$ の eigenvalue 0 or positive であるから A の eigenvalue は $-\frac{1}{2}$ より小さいことはない。所で この series が終る所は 0 でなければならぬ。即ち A の eigenvalue は 0 or positive integer でなければならぬ。~~逆に. A'~~
~~又 $(A''|q+ip|A''')=0$ or $A'''=A''+1$. であるから、A' が eigenvalue なら~~

又
$$A'+1=\frac{1}{2}\sum_{A''}(A'|q+ip|A'')(A''|q-ip|A')$$

であるから. A' が eigenvalue なら. $A''=A'+1$ も又 eigenvalue であるか ~~又~~ 然らずば $A'=-1$ でなければならぬ。しかるに $A'=-1$ は eigenvalue でないから $A'+1,\ A'+2,\ \cdots$ が eigenvalue になる。
∴ A' の eigenvalue が一つでもあれば、0 or positive int が総て A の eigenvalue になる。
∴ H の eigenvalue は $\quad h\nu(n+\frac{1}{2})$
$\quad = h\nu(A+\frac{1}{2})$

$n=0,1,2,\dots$ なるの各値をとる。
故に H.O. の energy value は $h\nu$ の half odd multiple なる。

この場合の Schrödinger の wave eq は (4) から

(8) $$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left\{-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+4\pi^2\nu^2m^2x^2\right\}\psi(x,t)$$

~~or~~ 又は (5)(6) から

(9) $$i\hbar\frac{\partial\psi(q,t)}{\partial t}=\frac{h\nu}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial q^2}+q^2\right)\psi(q,t)$$

(9) の time に関して periodic な solution

$$\psi(q,t)=f(q)e^{-iWt/\hbar}$$

を求めると、f は

$$\frac{d^2f}{dq^2}+\left(\frac{2W}{h\nu}-q^2\right)f=0. \qquad (10)$$

を満足せねばならぬ。

$$f(q)=e^{-\frac{q^2}{2}}\chi(q)$$

とおけば

$$\frac{d^2\chi}{dq^2}-2q\frac{d\chi}{dq}+\left(\frac{2W}{h\nu}-1\right)\chi=0 \qquad (11)$$

$$\chi=\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu q^{\rho+\nu}\quad\sum_{\nu=\nu_0}^{\infty}a_\nu q^\nu$$

とおき ~~$q^{\rho+\nu-2}$ 乗の係数を0とおけば~~

$$\cancel{(\rho+\nu)(\rho+\nu-1)a_\nu-2(\rho+\nu-2)a_{\nu-2}+\left(\tfrac{2W}{h\nu}-1\right)a_{\nu-2}=0}$$

q^{ν_0-2} 乗の ……　$\nu_0(\nu_0-1)a_\nu-2(\nu-2)a_{\nu-2}+\left(\frac{2W}{h\nu}-1\right)a_{\nu-2}=0$

~~$\therefore\ \rho(\rho-1)=0\quad\therefore\ \rho=0$ or 1.~~

~~$\rho=0:\ a_{2\nu}=\frac{2(2\nu-2)}{2\nu(2\nu-1)}a_{2(\nu-1)}$~~　$\nu=1,2,\dots$

$\therefore\ \nu_0=0$ or 1.

$$a_\nu=\frac{2\nu-3-\frac{2W}{h\nu}}{\nu(\nu-1)}a_{\nu-2}\qquad \nu=0,1,2,\dots$$

~~ν: odd (1, 3, 5, …) for $\nu_0=0$~~　$a_\nu=0$ for $\nu=1,3,\dots$
~~ν: 2, 4, … for $\nu_0=1$.~~　$=0$ for $\nu=2,4,\dots$

さらに χ の series が無限につづくとすると、$\frac{a_\nu}{a_{\nu-2}}\to\frac{2}{\nu}$ に converge する。所で

$$e^{q^2}=\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{q^{2\nu}}{\nu!}=\sum_{\nu=0}^{\infty}b_{2\nu}q^{2\nu}$$

$$b_\nu=\frac{1}{\left(\frac{\nu}{2}\right)!}\qquad b_\nu/b_{\nu-2}=\frac{2}{\nu}$$

$\therefore$ χ の $q=\pm\infty$ における order は e^{q^2} と大体同じ
$\therefore$ $f(q)$ は $\pm\infty$ で ∞ になる。かかる函数であらわされる如き state は物理的な意味をもたぬ。所で series がどこかで terminate するためには

$$\frac{2W}{h\nu}=2n+1\qquad n=0,1,2,\dots$$

なる事でなければならぬ。~~この時には χ は n: even, odd に従って even or odd polynomial~~

となる。
この場合　$W = h\nu\left(n+\frac{1}{2}\right)$　　$n=0,1,2,\cdots$
となり、前の matrix から出した eigenvalue と一致する。
χ は n: even or odd に従って even or odd polynomial となる。之を Hermite の polynomial と稱する。
之即ち
$$H_n = e^{q^2}\frac{d^n e^{-q^2}}{dq^n} \tag{12}$$
なる事がいへる事は直接 (11) に入れるか、又は χ ~~と...~~ と比較すれば容易にわかる。
従って、$W_n = h\nu\left(n+\frac{1}{2}\right)$ なる energy value に對する stationary state の eigenfunction は
$$f_n = C_n e^{\frac{q^2}{2}}\frac{d^n e^{-q^2}}{dq^n} \tag{13}$$

異なる eigenvalue (W_m, W_n) に對する eigenstate (ψ_m, ψ_n) は orthogonal 即ち $\psi_m \psi_n = 0$ である。従って之の Schrödinger の rep. で orthogonality の関係がある。(即ち eigenfunction の間に於て)
即ち
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_m(q) f_n(q)\, dq = 0 \quad \text{for } m \neq n.$$

之は実際 (13) を入れて計算して見てもわかる。
次に
$$\int \bar{f}_n f_n\, dq = |C_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty}\left(e^{\frac{q^2}{2}}\frac{d^n e^{-q^2}}{dq^n}\right)^2 dq$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots = e^{q^2}\frac{d^n e^{-q^2}}{dq^n}\cdot\frac{d^{n-1}e^{-q^2}}{dx^{n-1}}\Bigg|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d}{dq}\left(e^{q^2}\frac{d^n e^{-q^2}}{dq^n}\right)\frac{d^{n-1}e^{-q^2}}{dq^{n-1}}dq$$
第一項は Poly $\times e^{-q^2}$ なる形故、$\pm\infty$ で 0。
第二項を引續き partial $\int$ をして行くと、結局、
$$= (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d^n}{dq^n}\left(e^{q^2}\frac{d^n e^{-q^2}}{dq^n}\right)\cdot e^{-q^2}dq$$
$$= (-1)^n (-2)^n n! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-q^2} dx$$
$$= 2^n \cdot n! \sqrt{\pi}.$$
$$\therefore C_n = \left(2^n \cdot n! \sqrt{\pi}\right)^{-\frac{1}{2}}.$$
ととれば
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_m f_n\, dq = \delta_{mn}$$
となる。eigenfunction は normalize されているといふ。
この場合

以上 one dimensional の場合を考へたが、two dimension の場合には

$$H=\left(\frac{1}{2m}p_x^2+a^2x^2\right)+\left(\frac{1}{2m}p_y^2+a^2y^2\right)$$

であるから従って、第一の部分と第二の部分とは commute するから、H の eigenvalue は各々の eigenvalue の和で 従って ~~two dim. H.O. の~~

$$W=h\nu\left(n_x+\tfrac{1}{2}\right)+h\nu\left(n_y+\tfrac{1}{2}\right)$$
$$=h\nu(n_x+n_y+1)$$

2 dim. H.O. の energy value は $n_x, n_y=0,1,2,\dots$ となり、$h\nu$ の integer multiple となる †

\# 次に ~~この場合の eigenfunction は~~ ~~Schr. の eq を~~

$$p_x=\sqrt{h\nu m}\,p_1,\quad x=\sqrt{\frac{h}{2\pi\nu m}}\,q_1$$
$$p_y=\sqrt{}\,p_2,\quad y=\sqrt{}\,q_2$$

とおけば Schrödinger eq は

$$\left\{\left(\frac{\partial^2}{\partial q_1^2}-q_1^2\right)+\left(\frac{\partial^2}{\partial q_2^2}-q_2^2\right)\right\}f(q_1 q_2)=-\frac{2W}{h\nu}f(q_1 q_2)$$

であるから、$q_1 q_2$ に関して separable で eigenfunction

$$f(q_1,q_2)=f^{(1)}(q_1)\,f^{(2)}(q_2)$$

なる形におかれ、

~~とおけば~~ $f^{(1)}, f^{(2)}$ は夫々

$$\left(\frac{d^2}{dq_1^2}-q_1^2+\frac{2W_1}{h\nu}\right)f^{(1)}=0$$
$$\left(\frac{d^2}{dq_2^2}-q_2^2+\frac{2W_2}{h\nu}\right)f^{(2)}=0$$

但し $W_1+W_2=W$

を満足せねばならぬ。#

†
$$W=h\nu(n+1)$$
$$n=n_x+n_y\quad n_x, n_y=0,1,2,\dots$$

故に two dimensional h.O. の stationary state は二つの数 $n_x n_y$ の pair によって characterize されるが、最も小なる energy value

$W=h\nu$

に対する n_x, n_y の組は $n_x=n_y=0$ ~~の場合~~ のみであるが、それより大きな energy value に対する n_x, n_y の組は一つまでではない。例へば

$W=2h\nu$ に対する組は $n_x=0,\ n_y=1$

或は $n_x=1,\ n_y=0$ の二組ある。

即ち一つの eigenvalue に属する stationary state が二つ以上あることになる。かゝる場合、eigenvalue は degenerate して (entartet) してゐると称する。#

\# 之等の式は one dimensional H.O. に対する式に他ならぬ。之等の式の夫々の eigenvalue は

$W_1=h\nu\left(n_1+\tfrac{1}{2}\right)$、

或は $W_2=h\nu\left(m+\tfrac{1}{2}\right)$

相当する eigenfunc は夫々

$$f_{n_1}(q_1) = C_{n_1} e^{\frac{q_1^2}{2}} \frac{d^{n_1} e^{-q_1^2}}{dq_1^{n_1}}$$

及び

$$f_{n_2}(q_2) = C_{n_2} e^{\frac{q_2^2}{2}} \frac{d^{n_2} e^{-q_2^2}}{dq_2^{n_2}}$$

である。

$n = n_1 + n_2 = 0$ に相当する eigenfunc は　（として見れば場合には 一つの eigenvalue に相当する）

$$f_0 = C_0 e^{-\frac{q_1^2}{2} - \frac{q_2^2}{2}}$$

（同じ eigenvalue に相当する）

丈である。　$n \geq 1$ になると場合には linearly independent な eigenfunc が いくつも存在する。

例へば、$n=1$ の場合には

$$f_{01} = C_{01} e^{-\frac{q_1^2}{2} - \frac{q_2^2}{2}} \cdot q_2$$

$$f_{10} = C_{10} e^{-\frac{q_1^2}{2} - \frac{q_2^2}{2}} \cdot q_1$$

なる（それぞれ orthog）eigenfunc が二つ存在し、その任意の linear comb.

$$\cancel{f_{01} + f_{10}} \quad a_{01} f_{01} + a_{10} f_{10}$$

がまた $n=1$ なる他の相当する eigenfunc である。

(iii) § motion in a central field

(i) properties of angular momentum

central field の Potential を $V(r)$ とすれば Hamiltonian は

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(r) \qquad (14)$$

である。

angular momentum を classical dynamics に於ると同様

$$\mathfrak{M} = [r\, p] \qquad (15)$$

or

$$\left.\begin{aligned} m_x &= y p_z - z p_y \\ m_y &= z p_x - x p_z \\ m_z &= x p_y - y p_x \end{aligned}\right\} \quad (15)'$$

として定義すると、之は (real) observables で

$$(16)\left\{\begin{aligned} m_x x - x m_x &= (y p_z - z p_y)x - x(y p_z - z p_y) = 0 \\ m_x y - y m_x &= (y p_z - z p_y)y - y(y p_z - z p_y) = i\hbar z \\ m_x z - z m_x &= -i\hbar y \quad \text{etc} \end{aligned}\right.$$

同様にして

$$\left.\begin{aligned} m_x p_x - p_x m_x &= \cancel{i\hbar y}\ 0 \\ m_x p_y - p_y m_x &= i\hbar p_z \\ m_x p_z - p_z m_x &= -i\hbar p_y \end{aligned}\right\} \text{etc} \qquad (17)$$

なる V.R. が成立する。

又は $m_x m_y - m_y m_x = \{m_x(z p_x - x p_z) - (z p_x - x p_z) m_x\}$

(18) $= i\hbar(x p_y - y p_x) = i\hbar m_z$ etc

or $[\mathfrak{m}\,\mathfrak{m}] = i\hbar\mathfrak{m}$

次に $M = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2$ とおくと、

~~は~~ $(m_x^2+m_y^2+m_z^2)m_x - m_x(\;\;\;)$

$= m_y(m_y m_x - m_x m_y) + (m_y m_x - m_x m_y) m_y$
$+ m_z(m_z m_x - m_x m_z) + (m_z m_x - m_x m_z) m_z$

$= -m_y \cdot i\hbar m_z - i\hbar m_z m_y$
$+ m_z i\hbar m_y + i\hbar m_y m_z = 0$

or $M m_x - m_x M = 0$ etc ~~(19)~~

即ち M は $\mathfrak{m}$ と commute する。

~~そこで~~ (18) の V.R.から $m_x m_y m_z$ 並びに M の eigenvalue を次の如くして定めることが出来る。

$m_x m_y m_z$ の任意函数 α は M と commute するから

$\alpha M - M\alpha = 0$

~~$(M'..|\alpha|M''..)M''$~~ 之を M を diagonal にする様な repr. で書けば、

$(M'..|\alpha|M''..)M'' - M'(M'..|\alpha|M''..) = 0$

$M' \neq M''$ ならば $(M'..|\alpha|M''..) = 0$

∴ $(M'..|\alpha|M'..)$ なる type の matrix element 丈が 0 でない。

∴ m_x, m_y, m_z の内の任意の函数 ~~α~~ の matrix repr. には夫に ~~M' の一つの値丈が出てくる~~ 含まれてゐる。 M の eigenvalue の一つ 例へば M'

従って この M' を定数 parameter と考へてよい。

即ち ~~$(..|\alpha(M')|..)$ と書いてよい。~~ m_x, m_y, m_z は M' を parameter に含んでゐると見てよい。

そこで、 $(m_x+im_y)m_z - m_z(m_x+im_y)$

$= -i\hbar m_y + i(i\hbar m_x)$

$= -\hbar(m_x+im_y)$

or $(m_x+im_y)m_z = (m_z-\hbar)(m_x+im_y)$

之を M 及び m_z を diagonal にする repr. で書けば:

$(M'm_z'|m_x+im_y|M'm_z'')m_z''$

$= (m_z'-\hbar)(\;\;|\;\;|\;\;)$

$m_z'' = m_z' - \hbar$ or $(M'm_z'|m_x+im_y|M'm_z'') = 0$

これは M' の値が同じものの間丈で成立するから

M' を略してしまへば?

~~$(m_z'|m_x+im_y|m_z'')m_z''$~~

$m_z'' = m_z' - \hbar$ or $(m_z'|m_x+im_y|m_z'') = 0$

次に $(m_x+im_y)(m_x-im_y)$

$= m_x^2+m_y^2 - i(m_x m_y - m_y m_x)$

$= M - m_z^2 + \hbar m_z$

の repr. に於て diagonal terms は (diagonal 以外の terms は 0)

$\sum_{m_z''}(m_z'|m_x+im_y|m_z'')(m_z''|m_x-im_y|m_z')$

$= M' - m_z'^2 + \hbar m_z'$

但し左辺の $\sum_{m_z''}$ は m_z の凡ての eigenvalue についての sum or integral をあらはす。~~左辺の~~ この sum の中で 0 でないのは $m_z''=m_z'-\hbar$ の所丈である。
∴ m_z' が左辺一つの eigenvalue とすれば、$m_z'-\hbar$ が eigenvalue でないなら 左辺は 0.

$$\therefore \quad M'-m_z'^2+\hbar m_z'=0$$

$$\text{or} \quad M'+\frac{1}{4}\hbar^2=\left(m_z'-\frac{1}{2}\hbar\right)^2$$

$$\therefore \quad m_z'=\frac{1}{2}\hbar\pm\sqrt{M'+\frac{1}{4}\hbar^2}$$

さて、$M=m_x^2+m_y^2+m_z^2$ の eigenvalue M' ~~の絶対値~~ は $m_z'^2$ よりは大きい筈。∴ $|m_z'|<\sqrt{M'}$
∴ m_z', $m_z'-\hbar$, ・・・ なる series はどこかで終はり、終る所は $\frac{1}{2}\hbar\pm\sqrt{M'+\frac{1}{4}\hbar^2}$ の中の
$\frac{1}{2}\hbar-\sqrt{M'+\frac{1}{4}\hbar^2}$ $\left(\frac{1}{2}\hbar+\sqrt{M'+\frac{1}{4}\hbar^2}>\sqrt{M'}\right)$ である。
∴ 逆にいへば series は

$$\frac{1}{2}\hbar-\sqrt{M'+\frac{1}{4}\hbar^2},\quad \frac{3}{2}\hbar-\sqrt{M'+\frac{1}{4}\hbar^2},\ \cdots$$
$$\cdots\cdots \frac{1}{2}\hbar+k\hbar-\sqrt{M'+\frac{1}{4}\hbar^2},$$

なる形になる。
同様に

$$(m_x-im_y)(m_x+im_y)=M-m_z^2-\hbar m_z$$

なる式を使ふと、
m_z' が m_z の eigenvalue で ~~あっても~~ $m_z'+\hbar$ が

eigenvalue でないなら

$$M'-m_z'^2-\hbar m_z'=0$$

$$\text{or} \quad m_z'=-\frac{1}{2}\hbar\pm\sqrt{M'+\frac{\hbar^2}{4}}$$

この中とり得るのは + の方丈である。これが前の series の最後の項である筈.

$$\therefore \quad \frac{1}{2}\hbar+k\hbar-\sqrt{M'+\frac{\hbar^2}{4}}=-\frac{1}{2}\hbar+\sqrt{M'+\frac{\hbar^2}{4}}$$

$$\therefore \quad (k+1)\hbar=2\sqrt{M'+\frac{\hbar^2}{4}}$$

$$\therefore \quad M'+\frac{\hbar^2}{4}=\frac{1}{4}(k+1)^2\hbar^2$$

(19) $\quad \text{or} \quad M'=\cancel{\frac{\hbar^2}{4}k}\ \hbar^2\frac{k}{2}\left(\frac{k}{2}+1\right)$

k: 0 or positive integer.

∴ m_z の eigenvalue は

$$\frac{1}{2}\hbar-\frac{1}{2}(k+1)\hbar,\quad \frac{3}{2}\hbar-\frac{1}{2}(k+1)\hbar,\ \cdots$$
$$\cdots\ -\frac{1}{2}\hbar+\frac{k+1}{2}\hbar.$$

(20) $\quad \text{or} \quad -\frac{k}{2}\hbar,\ \left(-\frac{k}{2}+1\right)\hbar,\ \cdots\ \left(\frac{k}{2}-1\right)\hbar,\ \frac{k}{2}\hbar.$

であるから、m_z 従ってまた m_x, m_y の eigenvalue は $\hbar$ の ~~integer~~ multiple or $\hbar$ の half ~~integer~~ odd multiple である。

(15)で定義されたものに限るが

この関係は(18)なる V.R. 丈から follow する結果である。従って(18)なるV.R.を満足するあらゆる系の observable に対して成立つ。

さてこれに従って、

$$m_x r^2 - r^2 m_x = m_x(x^2+y^2+z^2) - (x^2+y^2+z^2)m_x$$
$$= (m_x x - x m_x)x + x(m_x x - x m_x) + \cdots$$
$$= 0 + 0 + i\hbar zy + i\hbar yz - i\hbar yz - i\hbar zy$$
$$= 0 \qquad \text{etc}$$

同様にして. $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ とすると.

$$m_x p^2 - p^2 m_x = 0 \qquad \text{etc}$$

∴ angular momentum は r 及び p^2 と commute する。(蓋し $(m_x r - r m_x)r + r(m_x r - r m_x) = 0$

之を ~~x, y, z~~ Schrödinger の repr. で書けば.

~~$(\ \ |\ \ )r'(x'y'z'|\ \ )+$~~

$$(x'y'z'|\ \ |x''y''z'')r'' + r'(x'y'z'|\ \ |x''y''z'') = 0$$

∴ $r' + r'' = 0$ でなければ $(x'y'z'|m_x r - r m_x|x''y''z'') = 0$ ∴ $r' = 0,\ r'' = 0$ 即ち ~~$x'y'z'$~~

$(0,0,0|m_x r - r m_x|0,0,0)$ なる matrix element 丈は別として 他の matrix element は ~~全て~~ 凡て 0.

∴ $m_x r - r m_x = 0$

と見て差支ない。蓋し r を r^2 の one valued function

$$x^2 p_x^2 = x p_x x p_x + i\hbar x p_x$$
$$= x p_x p_x x + 2i\hbar x p_x$$

と見れば. ~~…~~ r^2 と commute する m_x は r とも commute せねばならぬ。)

∴ Hamiltonian (14) と commute する。

$m_x m_y m_z$ は 即ち classical dynamics に於けると同様. central field に於ては A.M. は constant of motion である。

そこで Hamiltonian を r, その conjugate 及び angular momentum 等で表はす。

先づ $M^2 = \sum_{xyz}(yp_z - zp_y)^2 = r^2p^2 - (rp_r + i\hbar)rp_r \pm r^2p_r^2$

$$= \sum(y^2p_z^2 + z^2p_y^2 - yp_z zp_y - zp_y yp_z)$$
$$= \sum(y^2p_z^2 + z^2p_y^2 + x^2p_x^2) - \sum(yp_y p_z z + zp_z p_y y + xp_x p_x x + 2i\hbar x p_x)$$
$$= (x^2+y^2+z^2)(p_x^2+p_y^2+p_z^2) - (xp_x + yp_y + zp_z) \times (p_x x + p_y y + p_z z + 2i\hbar) \qquad (21)$$

そこで. $r^{-1}(xp_x + yp_y + zp_z - i\hbar) = p_r$ (22)

とおくと.

$$xp_r - p_r x = r^{-1}(x^2p_x - xp_x x)$$
$$= r^{-1}x\,i\hbar = i\hbar\frac{x}{r}$$

etc.

∴ $r^2p_r - p_r r^2 = 2i\hbar\left\{\frac{x}{r}\cdot x + \frac{y}{r}y + \frac{z}{r}\cdot z\right\}$
$= 2i\hbar r$

or $(r^2p_r - p_r r^2)\psi(x'y'z') = 2i\hbar r'\psi(x'y'z')$

$(r+r')(r-r')p_r\psi = 2i\hbar r'\psi$

∴ $(r-r')p_r\psi = (r+r')^{-1}\cdot 2i\hbar r'\psi$ ~~for r~~

∴ $(rp_r - p_r r)\psi = i\hbar\psi$　　for $r' \neq 0$.

∴ $\psi(0,0,0)$ を除く任意の state $\psi(x'y'z')$ ~~を~~ 従って其の superposition に対し

$$(rp_r - p_r r)\psi = i\hbar\psi$$

(いいかへれば (0,0,0) ~~附近~~ までは $\frac{\partial}{\partial r}$ なる operator は意味をもたぬが。)

が成立する。

∴　$rp_r - p_r r = i\hbar$

が ~~強大で~~ 通常の場合には常に成立する。

∴ p_r を r の conjugate と考へて、その conjugate complex canonical

$$\bar{p}_r = (p_x x + p_y y + p_z z + i\hbar)r^{-1}$$
$$= (xp_x + yp_y + zp_z - 2i\hbar)r^{-1}$$
$$= r^{-1}(\quad\quad〃\quad〃\quad\quad)$$
$$+ x\frac{x}{r^3}i\hbar + \cdots$$
$$= r^{-1}(xp_x + yp_y + zp_z - i\hbar)$$
$$= p_r$$

∴ p_r は real observable である。

p_r を使って

$$M = r^2p^2 - (rp_r + i\hbar)rp_r$$
$$= r^2p^2 \pm r^2p_r^2 \quad (23)$$

$$\therefore\ H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{M}{r^2}\right) + V(r) \quad (24)$$

こゝに M は H 及び r と commute するから p_r^2 とも commute する。∴ M を diagonal にした場合の operator の r, p_r の ~~repr~~ matrix に於ては、M' に関して diagonal な term のみが 0 にならぬから、あとは単に M を単に parameter と見てよい。

(~~24~~ 19) に対して　$\frac{k}{2} = l$ とおくと

$$M' = \hbar^2 l(l+1) \qquad l:\text{integer or half integer}$$

従って

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2}\right) + V(r) \quad (25)$$

この H の eigenvalue を ~~求め~~ 直接求めることもできるが 計算が複雑であり、この場合 Schrödinger の ~~wave~~ diff eq は $p_r = -i\hbar\frac{\partial}{\partial r}$ とおけば

$$\cancel{i\hbar\frac{\partial(r\psi)}{\partial t} = -\hbar^2} = \cancel{\frac{\hbar}{2m}\left(\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right)} +$$

$$W(r\psi) = \left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right) + V(r)\right\}(r\psi) \quad (26)$$

となる。この eq を与へられた field V(r) に対して解けばよいが、この式に到達するには初めから (14) の H に対する Schrö. eq をかき、之を polar coord. に

$$ds^2 = dr^2 + r^2\sin^2\theta\, d\varphi^2 + r^2 d\theta^2$$

~~繰しは上の~~計算は直した方が~~…~~わかり易い。

先(14)から S.W.E は

(27) $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(xyzt|) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)(xyzt|)$

之を polar coord に直し $(xyzt) = f(r\theta\varphi t)$ とすると。

$$i\hbar\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}f + V(r)f \qquad (28)$$

$$f = \psi(r\theta\varphi)e^{-\frac{iWt}{\hbar}}$$

とおけば。

$$\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(W-V(r))\right\}\psi = 0. \qquad (29)$$

この式は

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \chi(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

なる形の solution を有し得る。但 χ, Θ, Φ は夫々

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -\mu\Phi$$

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d}{d\theta} - \frac{\mu}{\sin^2\theta}\right)\Theta = -\lambda\Theta \qquad (30)$$

$\Theta = (1-x^2)^{\frac{m}{2}}v$

$(1-x^2)\frac{d^2v}{dx^2} - 2(m+1)x\frac{dv}{dx} + (\lambda - m(m+1))v = 0$

hypergeometric

(30) $$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\chi}{dr} - \frac{\lambda}{r^2}\chi + \frac{2m}{\hbar^2}(W-V(r))\chi = 0$$

となる。この θ, φ に関する式は classical theory でも現われてくる spherical harmonics に関する式である。先づ Φ が $0 \leq \varphi < 2\pi$ の one valued ~~fn~~ conti fn であるためには、

$$\Phi = e^{\pm im\varphi} \qquad (31)$$

で m: integer or 0 でなければならぬ

$\therefore\ \mu = m^2.$

~~次に Θ に関しては~~ これを Θ の式に入れると

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta = -\lambda\,\Theta.$$

$\cos\theta = x$ とおけば、$\frac{d}{d\theta} = \sin\theta\frac{d}{dx}$

$$\frac{d}{dx}\left\{(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx}\right\} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0 \qquad (32)$$

この式の solution はよく知られておるおり

$$\Theta = P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x) \qquad (33)$$

で与へられ、

$$\lambda = l(l+1)$$

となる。但し l: 0 or positive integer $\geq m$

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}[(x^2-1)^l] \qquad (34)$$

で Legendre の Polynomial である。

$$\int_{-1}^{+1} (P_l^m(x))^2 \cancel{P_{l'}^{m'}(x)}\, dx$$

$$= \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!} \qquad (35)$$

所で ~~…~~ angular momentum

m_z ~~$M = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2$~~ $= x p_y - y p_x$

の Schrödinger repr. は

$$-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \varphi} \quad 参$$

である。

$$\therefore\ m_z \psi(r\theta\varphi) = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}$$

$$= m\hbar\psi \quad 参$$

となる。∴ ψ なる state に於ては ~~m_z の eigenvalue~~ は angular momentum の z-comp が m なる値をとってる。

次に M の repr は

$$-\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} \quad 参$$

angular ~~momentum~~ の絶対値の二乗

関係 $\cdot\ l(l+1)\hbar^2$ なる値をとってる。

であるから m が ~~…~~ の関係を満足する ~~…~~ 引象行の Fn は

~~写の matrix の計算から~~ は l, m は half integer であ

るかったが ~~写の diff. operator~~ (15) によって表示されてる場合には、l, m は integer でなければならぬ。

さて $\lambda = l(l+1)$ を (30) の右辺の式に入れると、

$$(36)\quad \frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\chi}{dr} + \left\{\frac{2m}{\hbar^2}(W - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\chi = 0$$

~~これ~~ $\chi = \frac{U(r)}{r}$ とおけば、(26) の式が出てくる。

χ 及 $U(r)$ の物理的な意味の相違からくる、即ち

この相違は、particle が ~~r と…の~~ $(r, r+dr)$ に

ある prob. が、一方 $|U(r)|^2 dr$ であり、他方、

$|\chi(r)|^2 r^2 dr$ で与へられるからである。

(~~…~~) motion in the Coulomb field

さて、~~the~~ energy value W を求めるには (36) の式をとかねばならぬ。一般の field では この式はとけぬが、特に Coulomb field をとると

$$V(r) = \frac{-C}{r} \qquad C : \text{const} \begin{cases} >0 : \text{attraction} \\ <0 : \text{repulsion} \end{cases}$$

なる場合である。そこで、

$$\frac{2m}{\hbar^2}W = A, \qquad \frac{m}{\hbar^2}C = B \quad とおくと、$$

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\chi}{dr} + \left\{A + \frac{2B}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\chi = 0.$$

先 $W<0$ の場合を考へる。$r_0 = \frac{1}{2\sqrt{-A}}$ とおき

$\rho = \frac{r}{2r_0}$ を indep. variable として用ひると、

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d\chi}{d\rho} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{2Br_0}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\chi = 0$$

$a_\mu = \cancel{\frac{\mu+1-2B r_0}{(2l+2+\mu)}} a_{\mu-1}$ $\nu = 0$ $a_\nu \sim \infty$ $l = 0$ … discussion … 故に $\nu_0 = -1$ の場合を入れて … eigenvalue のとりうる値には制限がなくなる

$$a_\nu = \frac{\nu - 2B r_0}{\nu(\nu+1)} a_{\nu-1}$$

$\chi = e^{-\frac{x}{2}} u$ とおくと

$$\frac{d^2u}{dx^2} - \left(1 - \frac{2}{x}\right)\frac{du}{dx} + \left\{\frac{2Br_0 - 1}{x} - \underbrace{\frac{l(l+1)}{x^2}}_{=0}\right\} u \tag{37}$$

or

$$x^2 \frac{d^2u}{dx^2} + (2x - x^2)\frac{du}{dx} - \{l(l+1) - \underbrace{(2Br_0 - 1)x}_{=0}\} u$$

$u = \sum_{\nu=\nu_0}^{\infty} a_\nu x^\nu$ とおくと.

$$\nu(\nu-1) a_\nu + 2\nu a_\nu \underbrace{- l(l+1) a_\nu}\ - (\nu-1) a_{\nu-1} + \underbrace{(2Br_0 - 1) a_{\nu-1}}_{=0}$$

$$\text{or } \{\nu(\nu+1) - l(l+1)\} a_\nu = (\nu - 2Br_0) a_{\nu-1}$$

$$\nu_0(\nu_0+1) - l(l+1) = 0$$

$\therefore \nu_0 = l$ or $-(l+1)$

後の方の場合には eigenfunction が有限でないから考える必要はない。~~後の方をとると eigenfunction が $x = 0$ 即ち $r = 0$ で $\frac{1}{r^{l+1}}$ の order の ∞ となる。~~ かかる場合は除く.

$\nu_0 = l$ とすれば, $\nu = l + \mu$ μ: ov integer

$$a_{l+\mu+1} = \frac{l + \mu + 1 - 2Br_0}{(2l + 2 + \mu)(\mu+1)} a_{l+\mu}$$

このseriesがどこまでも続くとすると μ の大きな所では. くすれば

$$a_{l+\mu+1} = \frac{l+\mu+1-2Br_0}{(2l+2+\mu)(\mu+1)} a_{l+\mu}$$

$$\frac{a_{l+\mu+1}}{a_{l+\mu}} \sim \frac{1}{\mu}$$

に converge する。 $\therefore$ x を ∞ にすれば大体 e^x の order で infinity になる。 $\therefore$ χ は $e^{\frac{x}{2}}$ の order で ∞ になる。 $\therefore$ かかる場合は物理的な意味をもたぬ。

故に series がどこかで断ち切れねばならない。

$$2Br_0 = l + n_r + 1 \qquad n_r: \text{integer or } 0.$$

でなければならぬ

この時には u は x の polynomial となり

χ は x or $r \to \infty$ に於て exponential に 0 となる。

$\therefore$ $W < 0$ の場合には eigenvalue は

$$2Br_0 = l + n_r + 1$$

$$\text{or } \frac{m}{\hbar^2} C \frac{1}{\sqrt{-A}} = l + n_r + 1$$

$n = l + n_r + 1$ とおけば $n = 1, 2, 3, \ldots$

$$\text{or } W = \frac{-mC^2}{2\hbar^2 n^2} \tag{38}$$

一つの electron が Ze なる charge をもった nucleus のまはりに運動する場合, nucleus の motion を neglect すれば, Coulomb field に於ける一つの particle の運動の問題となる

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \qquad C = Ze^2$$

之を(37)に入れると.

$$W = -\frac{Z^2 m e^4}{2\hbar^2 n^2} \tag{39}$$

Rydberg's Const $R = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3}$ を以てすれば

$$W = -\frac{Z^2 R h}{n^2} \tag{39'}$$

となる Balmer の formula である。

又 $r_0 = \dfrac{n\hbar^2}{2mZe^2}$ となる。 $a = \dfrac{\hbar^2}{2mZe^2}$ は

Bohr の理論における first orbit の半径で

H-atom の場合には $Z=1$, $a = 0{,}532\cdot 10^{-8}$ c.m.

$r_0 = na$,

$x^{-l}u$ は x の $n_r = n-l-1$ 次の polynomial で

$$\frac{d^{2l+1}}{dx^{2l+1}} L_{n+l}(x) = L^{2l+1}_{n+l}(x)$$

としてあらはされる。

但し $L_k = e^x \dfrac{d^k}{dx^k}(x^k e^{-x})$

は k th degree の Laguerre's Polynomial と称せられる ~~を表はす~~。

すると結局、radial eigenfunction は

$$\chi_n(r) = e^{-\frac{r}{2an}} \left(\frac{r}{an}\right)^l L^{2l+1}_{n+l}\left(\frac{r}{an}\right)$$

となる。

$W<0$ に於ける stationary state は n, l, m なる三つの integer によって characterise される。

$n = 1, 2, 3, \cdots$; total (principal) q.n.

$l\ (<n)$; positive or 0. ; azymuthal q.n.,

m : magnetic q.n. $m = l, l-1, \cdots -l$.

従って n, l, m の一組の値に属する eigenfunction は

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = C\cdot e^{-\frac{r}{2an}}\left(\frac{r}{n}\right)^l L^{2l+1}_{n+l}\left(\frac{r}{an}\right) \tag{40}$$
$$\times P^m_l(\cos\theta)\, e^{im\varphi}$$

但し $C = \left[\dfrac{2l+1}{4\pi}\cdot\dfrac{(l-m)!}{(l+m)!}\dfrac{(n-l-1)!}{2n^4a^3\{(n+l)!\}^3}\right]^{\frac{1}{2}}$

とすれば、

$$\iiint \bar{\psi}_{nlm}\psi_{n'l'm'}\, r^2 dr\, d\varphi \sin\theta\, d\theta = \delta_{nlm,\,n'l'm'}$$

なる orthogonal, normalized となる。

$W>0$ の場合は、r_0 が pure imaginary となり（従って x が p.i. となる）まで、上と全く同様に成りて。

μ の大きい所で $a_{l+\mu+1}/a_{l+\mu} \sim \frac{1}{\mu}$ になるが しかしこの場合には x: pure imaginary であるから ∞ で どうなるのかはっきりわからぬ。 $W<0$ の場合でも ∞ で どうなるかは ~~厳密~~ にははっきり云へなかったから 今こゝで、両方の場合について 厳密に論じておく。

$$F(\alpha, \rho; x) = 1 + \frac{\alpha}{1!\,\rho}x + \frac{1}{2!}\frac{\alpha(\alpha+1)}{\rho(\rho+1)}x^2 + \cdots$$

とすれば $u = x^l F(l - 2Br_0 + 1,\ 2l+2,\ x)$

であることは容易にわかる。

所で β: integer なる場合には

$$\frac{(\beta-1)!}{2\pi i\,\cancel{(\beta-1)}}\int^{(0,-x)} e^{-z}(z+x)^{-\alpha} z^{\alpha-\beta} dz$$

なる complex integral を考へるに、0 及 $-x$ を anti clockwise にまはる
其の他の
contour を考へれば
$|z|>|x|$ である様に
とれば、contour の各点に於て
$$(z+x)^{-\alpha}=z^{-\alpha}\cdot\sum_{\gamma=0}^{\infty}\binom{-\alpha}{\gamma}\left(\frac{x}{z}\right)^{\gamma}$$

となり、
$$\frac{1}{2\pi i}\int^{(0,-x)} e^{-z}\,\cancel{\alpha}\, z^{-\beta-\gamma} dz=\frac{1}{2\pi i}\int^{(0)} e^{-z}z^{-\beta-\gamma}dz=\frac{(-1)^{\beta+\gamma-1}}{(\beta+\gamma-1)!}$$
であるから
$$\frac{(\beta-1)!}{2\pi i}\int^{(0,-x)} e^{-z}(z+x)^{-\alpha}z^{\alpha-\beta}dz$$
$$=(\beta-1)!\,(+x)^{\gamma}\frac{\binom{-\alpha}{\gamma}(-1)^{\gamma}}{(\beta+\gamma-1)!}\,(-1)^{\beta-1}=(\beta-1)!\sum_{\gamma=0}^{\infty}\frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+\gamma-1)\cdot x^{\gamma}}{\beta(\beta+1)\cdots(\beta+\gamma-1)\cdot\gamma!}$$
$$=(\beta-1)!\,(-1)^{\beta-1}F(\alpha,\beta;x)$$

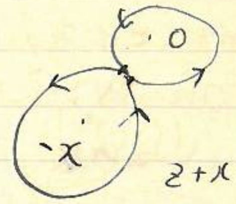
この級数は x^{γ} をかけたものが (37) を満足することを直接証明しうる。

(41) $\therefore\ F(\alpha,\beta;x)=(-1)^{\beta-1}\dfrac{(\beta-1)!}{2\pi i}\displaystyle\int^{(0,-x)} e^{-z}(z+x)^{-\alpha}z^{\alpha-\beta}dz$ 　β: integer.

この関係は β: integer でなくても成立する。

次に contour を二つにわける。一は $|z|<|x|$ の値をとりつゝ 0 のまはりをまはり、次に $|z+x|<|x|$ なる値をとりつゝ $-x$ のまはりをまはる

とすると、x の絶対値の大なる所では



$z+x=z'$

$$F(\alpha,\beta;x)=\frac{(\beta-1)!}{2\pi i}\,(-1)^{\beta-1}\,x^{-\alpha}\Big\{\sum_{\gamma}\int^{(0)}\left(\frac{+z}{x}\right)^{\gamma}\binom{-\alpha}{\gamma}e^{-z}z^{\alpha-\beta}dz+\int^{(0)} e^{-z+x}z^{-\alpha}(z-x)^{\alpha-\beta}dz\Big\}$$
$$=(\beta-1)!\,(-1)^{\beta-1}\Big\{(x)^{-\alpha}\sum C_{\gamma}x^{-\gamma}+e^{x}(-x)^{\alpha-\beta}\cdot\sum_{\gamma}C'_{\gamma}x^{-\gamma}\Big\}$$
$$C_{\gamma}=\frac{\binom{-\alpha}{\gamma}}{2\pi i}\int^{(0)} e^{-z}z^{\alpha-\beta+\gamma}dz$$

r: const $\int_{\theta=0}^{2\pi}$

$$C'_{\gamma}=\frac{(-1)^{\gamma}\binom{\alpha-\beta}{\gamma}}{2\pi i}\int^{(0)} e^{-z}z^{-\alpha+\gamma}dz$$

$\alpha-\beta=2\beta r_0-l-1$
$-\alpha=2\beta r_0-l-1$

~~$C_0=\frac{1}{2\pi i}\int^{(0)} e^{-z}z^{\alpha-\beta}dz\neq 0$ for $\alpha-\beta$ 2 pos. int. or 0.~~

$$C'_0=\frac{1}{2\pi i}\int^{(0)} e^{-z}z^{-\alpha}dz$$ ~~$\neq 0$ for $-\alpha$: pos. int. or 0.~~

$C'_0\neq 0$ であれば
~~$-\alpha$: pos. int. or 0~~ でなければ

$\therefore$ $W<0$ なら x: real pos. であれば、$x\to\infty$ に於て、u は e^{x} の order で、従って、χ は $e^{\frac{x}{2}}$ の order で infinity になる。

~~$-\alpha=0$ or pos. int. であるのは~~ $C'_0=0$ であるのは、
$-\alpha$: 0 or positive integer なら

$2\beta r_0=l+n_r+1$ 　　n_r: int. or 0

の場合である。　r_0: imag. ならば ∞ では x は pure imag. で ∞ になるから

次に $W>0$ の場合には $r \to \infty$ に於て $x \to$ ~~$+\infty$~~ $-ix$

$$e^{-\frac{x}{2}} u = x^{l} F(l-2Br_0+1, 2l+2, x)$$

$$\to e^{-\frac{x}{2}}(x)^{2Br_0-2} C_0\{1+Q(x)\} + e^{+\frac{x}{2}}(-x)^{-2Br_0-1} C_0\{1+O(x)\}$$

故に $r \to \infty$ に於て $\frac{1}{r}$ の order で 0 になる。

∴ $W>0$ の凡ての値が eigenvalue で、

eigenfunction は $2r_0 = i/kB$ とおけば

$$\chi_{klm}(r,\theta,\varphi) = C_{klm}\, e^{ikr} F\left(l+\frac{Bi}{k}+1, 2l+2; -2ikr\right)$$

(42)
$$\times P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}$$

k: pos. or 0 ~~any real number~~.

$r \to \infty$ に於て

$$\chi_{klm} \to C_+ \frac{e^{i(kr+\frac{B}{k}\log(kr))}}{r} + C_- \frac{e^{-i(kr+\frac{B}{k}\log(kr))}}{r}$$

W>0 の場合
故に stationary な蓋然は大体 spherical wave の和になってゐる。

この場合には Normalization の条件は

$$\iiint \tilde{\chi}_{klm} \chi_{k'l'm'}\, r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \delta(k k')\,\delta_{ll'}\,\delta_{mm'}$$

である様に とられねばならぬ。

~~W の他の state から~~

(iii) Selection Rules in central motion.

前章の結果によれば 一つの system が radiation の emission によって、一つの stationary state から、他の s. s へ transition をやる prob は、radiation の波長がその system 例へば atom の dimension に比して大きい場合は、~~主として、大体~~ el. displacement の matrix element の二乗に比例する。

~~それ故~~ 従って el. dis. の x, y, z comp. の l, m 及び l′ m′ に関する matrix element は (31) 及び (33) によって

~~$x_{nlm,n'l'm'} = \iiint x\, \tilde{\Psi}_{nlm} \Psi_{n'l'm'}\, dv$~~

~~$y_{nlm,n'l'm'} = \iiint y$~~

~~$z \ldots = \iiint z$~~

~~に比例する。第一の式は (40) により、$x_{nlm,n'l'm'}$~~

$$\int \sin\theta\, P_l^m(\cos\theta)\, P_{l'}^{m'}(\cos\theta)\sin\theta\, d\theta$$

及び
$$\int \cos\varphi \cdot e^{i(m'-m)\varphi}\, d\varphi$$
$$\int \sin\varphi \cdot e^{i(m'-m)\varphi}\, d\varphi$$

なる factor をふくむ。之等が 0 でないためには

(43)
$$m'-m = \pm 1 \quad \text{及び}$$
$$l-l' = \pm 1 \quad \text{でなければならぬ。}$$

従って、その comp の matrix element は ~~n l m, n' l' m'~~ は

$$\int \cos\theta \, P_l^m(\cos\theta) P_{l'}^{m'}(\cos\theta) \sin\theta \, d\theta$$

及び

$$\int e^{i(m'-m)\varphi} d\varphi$$

なる factor を含む。之等が 0 でないためには

$$m'-m=0 \qquad l'-l=\pm 1 \qquad (44)$$

でなければならぬ。

であるから、azymuthal q.n ~~は ±1~~ は ±1、一つの stationary state から他の st. state への trans. に際し、

mag. q. n は 0 or ±1 だけ変らねばならぬ。

---

† 以上述べた所は one body problem ばかりであったが、多体の場合には many body problem を ~~two~~ one body problem に reduce することが出来る。例えば

§ Collision of two Particles

(i) Reduction of two body problem†

二つの particle の間に relative position のみに関係する force が働く場合には、Hamiltonian は

$$H = \frac{1}{2m_1} p_1^2 + \frac{1}{2m_2} p_2^2 + V(r_1 - r_2) \qquad (45)$$

となる。この場合には、classical dynamics に於けると同様に、重心の coord. 及び relative coord. をとり、

$$m_1 r_1 + m_2 r_2 = (m_1+m_2) R \qquad r_1 - r_2 = r$$

$$p_1 + p_2 = P \qquad m_2 p_1 - m_1 p_2 = (m_1+m_2) p$$

とおけば、

$$X P_x - P_x X = i\hbar \text{ etc.} \qquad x p_x - p_x x = i\hbar \text{ etc}$$

$$X p_x - p_x X = 0 \text{ etc} \qquad x P_x - P_x x = 0 \text{ etc}$$

が成立するから、それぞれ P, p は夫々 R, r に conjugate である。すると

$$H = \frac{P^2}{2(m_1+m_2)} + \frac{1}{2}\frac{m_1+m_2}{m_1 m_2} p^2 + V(r)$$

となる。$P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial X}$ etc　$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ とおき、Schröd. wave. eq を作れば

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(XYZ, xyzt) = \left\{ \frac{-\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \cdots\right) - \frac{\hbar^2}{2}\frac{m_1+m_2}{m_1 m_2} \Delta + V(r) \right\} (XYZ, xyzt)$$

この式は $(XYZ, xyzt) = f(XYZ)\psi(xyz) e^{-\frac{iW}{\hbar}t}$

なる形の Solution を有する。但し f, ψ は夫々

$$(46)\quad \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)f+\frac{2M}{\hbar^2}\{W_1\}f=0$$

$$(47)\quad \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi+\frac{2\mu}{\hbar^2}\{W_2-V(xyz)\}\psi=0$$

を満足せねばならぬ。但し $M=m_1+m_2$, $\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$ は reduced mass をあらはし、$W_1+W_2=W$ で W_1, W_2, W は夫々 重心の kinetic energy, relative motion の energy 及び system の total energy をあらはす。

重心は自由 free に運動する。その運動量を (P_x, P_y, P_z) (の値 P) とすると f, eigenfunction は

$$f=e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{P}\mathbf{R}}\qquad W_1=\frac{\mathbf{P}^2}{2(m_1+m_2)}$$

従って問題は $V(xyz)$ なる field に於ける reduced mass μ なる particle の motion の問題となる。mutual interaction の外に uniform なる external field が存在する場合にも two body problem を reduce できる。この場合には H に $-(\mathbf{F}_1\mathbf{r}_1+\mathbf{F}_2\mathbf{r}_2)$ なる項が加はり、従って、(46) の W_1 のかはりに $W_1+(\mathbf{F}_1+\mathbf{F}_2)\mathbf{R}$ $=(\mathbf{F}_1+\mathbf{F}_2)\mathbf{R}\mp\frac{\mathbf{F}_1m_2-\mathbf{F}_2m_1}{m_1+m_2}\mathbf{r}$ (47) の W_2-V のかはりに $W_2-V+\frac{\mathbf{F}_1m_2-\mathbf{F}_2m_1}{m_1+m_2}\mathbf{r}$ とおけばよい。

Chapter II: One Body Problem

Eigenvalue, Eigen函数の決定 (Energy level)

Radiation の Intensity の決定。

Scattering の問題。