TEIDAI NOTE

Quantum Mechanics

Vol 3.

湯川秀樹

N51

Chapter V Perturbation Theory and Many Body Problem

P. T.

§ ~~Perturbation Theo~~ Change of ~~Energy eigenvalue and eigenstate by a perturbation~~

前章に於ては one body problem の中で特別に exact に解き得る様な問題のみを取扱つたが、一般の場合には Schrödinger の diff eq をとくことは出来ないから。この場合には eigenvalue 及び eigenfunction の approximate な値を求めることによつて満足せねばならぬ。

与へられた system の Hamiltonian を H とする。~~これに対して、H_0 といふ函数が~~ 之を二つの部分にわけて

$$H = H_0 + H'$$

とした時、H_0 ~~なる~~を Hamiltonian とする system に対する Schrödinger の eq は exact にとけ、しかもこの system は元の system と大差ない様な場合ならば、H' を perturbation と考へ、H_0 の solution から出発して、以下に述べる Perturbation theory の方法によつて H の solution に近づくことが出来る。

~~今問題は H_0 を Hamiltonian とする unperturbed system の~~ 一つの energy value W_0 及び ~~それに属する eigenfunction~~ stationary state ψ_0 から出発

~~H=H₀+H'を Ham.とする~~

~~して、perturbed system の energy value 中で W₀と少しく異なるもの~~ $W=W_0+W'$.

そこで H_0 を Hamiltonian とする unperturbed system の ~~stationary~~ state 中 互いに ~~orthogonal~~ linearly indep なもの ~~を~~ 選びて $\psi_1, \psi_2, \dots$ とすると、system の任意の state はそれらの superposition

(1) $$\Psi = \sum a_p \psi_p$$

としてあらはされる。

それらは wave equation

(2) $$i\hbar \frac{\partial \psi_p}{\partial t} = H_0 \psi_p \qquad p = 1, 2, \dots$$

を満足せねばならぬ。

所で ψ が $H = H_0 + H'$ を Hamiltonian とする perturbed system の state であるとすると、ψ は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

を満足せねばならぬ。

従って、(1)を入れると

$$i\hbar \sum_p \dot{a}_p \psi_p + i\hbar \sum_p a_p \frac{\partial \psi_p}{\partial t} = \sum_p a_p H_0 \psi_p + \sum_p a_p H' \psi_p$$

(2)により、

$$i\hbar \sum_p \dot{a}_p \psi_p = \sum_p a_p H' \psi_p$$

両辺に ψ_q の conjugate $\bar{\psi}_q$ をかけると

~~$i\hbar\, \dot{a}_q = \sum_p a_p H'_{qp}$~~

$$i\hbar \sum_p \dot{a}_p \cdot \bar{\psi}_q \psi_p = \sum_p a_p \cdot \bar{\psi}_q H' \psi_p$$

となる。

$\psi_1, \psi_2, \dots$ を互いに orthogonal, normalised state の complete set にとると、

$$\bar{\psi}_q \psi_p = \delta_{qp}, \text{これより}\ \bar{\psi}_q H' \psi_p = H'_{qp}$$

とかくと、上式は

(3) $$i\hbar\, \dot{a}_q = \sum_p a_p H'_{qp}$$

となる。即ち ψ が perturbed system の state であるためには 係数 a_p は(3)なる式に従って time と共にかはるものでなければならぬ。若し const でなく

所で (1)式の両辺に $\bar{\psi}_q$ をかけると ψ を normalised として

$$a_p = \bar{\psi}_q \psi \qquad \text{又} \qquad \sum_p |a_p|^2 = 1$$

∴ $|a_p|^2$ は ψ なる state と ψ_p なる state との probability of agreement をあらはす。これが time と共にかはるのであるから、perturbation のために

systemのstateは断続的に変ることになる。例へば
$t=t_0$に於て ~~system~~ $a_p = \delta_{pq}$ とすると、
この瞬間にはsystemは ψ_q なるstateにあるが、それから少しして後は、$p \neq q$ でも $a_p \neq 0$ となるものなる
p があるであらうから ψ_p なるstateにある
Probは0でない。之は q なるstateから p なる
stateへのtransitionのprobabilityであると考へ
られる。 ~~(3)の式から見れば このTrans. Prob~~
~~は 大体~~ $|H'_{qp}|^2$ ~~に比例してゐることが~~
~~わかる。~~

∵ ~~$t=t_0$ に於て $a_p(t_0) = \delta_{pq}$~~ 一般には
H'はtをふくんでゐるから H'_{qp} の t に於ける値を
$H'_{qp}(t)$ とする。 $t=t_0$ に於て、systemは ψ_q なる
stateにある $a_p(t_0) = \delta_{pq}$ とし、 $|H'_{qp}(t_0)|$ に比して
$(p=1, 2, \cdots)$
短い時間内には、 $a_p\ (p=1, 2, \cdots)$ の変化は
著しくないから

$$i\hbar\, \dot{a}_{qr}(t) = \sum a_p(t_0)\, H'_{qp}(t_0) = H'_{rq}(t_0)$$

としてよい。 但し $t - t_0 \ll \dfrac{\hbar}{|H'_{qp}(t_0)|}$

之から して $i\hbar\, a_{qr}(t) = \int_0 H'_{rq}(t_0)\, dt$

以上の考察はSchrödingerのrepresentationについて
であるが、Heisenbergのrepresentationに直せば、

$$a_p^* = e^{+\frac{i}{\hbar} W_p^0 t}\, a_p$$

$$H_{pq}^{*\prime} = H'_{pq}\, e^{+\frac{i}{\hbar}(H_p^0 - H_q^0)t}$$

となる。
従って (3)式は
$i\hbar\, a$

H'_{qp}は一般にtimeをparameterにふくむから
tに於ける値を $H'_{qp}(t)$ とかく。
$t=t_0$に於て $a_p(t_0) = \delta_{qp}$ 即ちsystemは
ψ_q なるstateにあったとすると、それ以後、a_pが
著しく変化しない様な短い時間内に於ては(3)は

$$i\hbar\, \dot{a}_p(t) = \sum_r a_r(t_0)\, H'_{pr}(t) = H'_{pq}(t)$$

とかくことが出来る。之からして

$$i\hbar\, a_p(t) = i\hbar\, \delta_{qp} + \int_{t_0}^{t} H'_{pq}(t)\, dt$$

但しこの関係が approximate に成立するためには
$a_p - \delta_{qp} \ll 1$, 即ち

$$\frac{1}{\hbar}\left|\int_{t_0}^{t} H'_{pq}(t)\, dt\right| \ll 1$$

H'_{pq} の平均値を $\overline{H}'_{pq}$ とすると

$$\frac{\overline{H}'_{pq}}{\hbar}(t-t_0) \ll 1$$

$$\text{or} \quad t-t_0 \ll \frac{\hbar}{\overline{H}'_{pq}}$$

でなければならぬ。この時間内では

$$|a_p(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{t_0}^{t} H'_{pq}(t)\,dt\right|^2 \quad \text{for } p \neq q.$$

(4)

$$= \frac{1}{\hbar^2}|\overline{H}'_{pq}|^2 (t-t_0)^2$$

即ち一定時間内に q なる state から p なる state への transition prob は $|\overline{H}'_{pq}|^2$ に比例する。

~~併~~ 併し之れ不合理に感ぜらるることは、trans. prob が time に比例せず、その二乗に比例することである。

この難点を~~除く~~吟味するために ~~H' が time を explicit に含まない場合を扱ってみる。~~ 次の様な場合を考へる

~~この場合には~~

$$\cancel{H'_{pq}(t) = (H'_{pq})_0} \; (H'_0)_{pq}\, e^{i/\hbar (W_p^0 - W_q^0)t}$$

~~なる事である。従~~ し $(H'_0)_{pq}$ は time を含まぬ!!。 ~~($H'_{pq}(t) = \overline{\psi}_p H' \psi_q =$~~

今 $\psi_1, \psi_2, \cdots$ が夫々 H_0 の eigenvalue $W_1^{(0)} W_2^{(0)} \cdots$ に対する stationary state とすると

H' が time を explicit にふくまなければ

$$i\hbar \frac{\partial H'}{\partial t} = 0.$$

$$\therefore \; i\hbar \frac{\partial H'_{pq}(t)}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\, \overline{\psi}_p H' \psi_q$$

しかるに

$$-i\hbar \frac{\partial \overline{\psi}_p}{\partial t} = W_p^{(0)} \overline{\psi}_p$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_q}{\partial t} = W_q^{(0)} \psi_q$$

$$\therefore \; i\hbar \frac{\partial H'_{pq}(t)}{\partial t} = (W_q^{(0)} - W_p^{(0)})\, H'_{pq}(t)$$

$$\therefore \; H'_{pq}(t) = H'_{pq}(t_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(W_q^{(0)} - W_p^{(0)})(t-t_0)}$$

従って

$$\cancel{a_p(t)} \int_{t_0}^{t} H'_{pq}(t)\,dt = H'_{pq}(t_0)\, \frac{e^{i(W_q^{(0)}-W_p^{(0)})(t-t_0)/\hbar} - 1}{-i/\hbar\,(W_q^{(0)} - W_p^{(0)})}$$

$$\therefore \; |a_p(t)|^2 = 2\,|H'_{qp}(t_0)|^2 \frac{\{1-\cos(W_q^{(0)} - W_p^{(0)})\frac{t-t_0}{\hbar}\}}{(W_q^{(0)} - W_p^{(0)})^2}$$

(5)

$$\text{for } W_q^{(0)} \neq W_p^{(0)}$$

$$= |H'_{qp}(t_0)|^2 \frac{(t-t_0)^2}{\hbar^2}$$

$$\text{for } W_q^{(0)} = W_p^{(0)}$$

であるから energy value の異なった state への transition prob は time が短いがはるかに小さいが、energy value の同一な state 間の transition prob は time の二乗に比例して増して行く。

かゝる結論が出てきたのは H_0 の eigenvalue を discrete と仮定したからである。

continuous な場合には定まった energy value をもった state への transition prob は 0 であって、energy ~~value~~ が或る範囲の finite な範囲の任意の値をとる様な任意の state への transition prob を総和したものが finite な値をとりうる。

今 $\psi(\alpha)$ を H_0 の eigenvalue $W_0(\alpha)$ に属する一つの ~~eigenfunction とする。かゝる~~ stationary state とする。かゝる stationary state の orth. norm. complete set をとり、任意の state ψ をそれらの superposition として

$$(6) \qquad \Psi = \int a(\alpha)\psi(\alpha)\,d\alpha$$

とする。今 $t=t_0$ において $\Psi=\psi(\alpha')$ なら $a(\alpha)=\delta(\alpha\alpha')$ とおくと前節の計算により、

$$i\hbar\, a(\alpha,t) = i\hbar\,\delta(\alpha\alpha') + \int_{t_0}^{t} (\alpha|H'(t)|\alpha')\,dt$$

$$= i\hbar\,\delta(\alpha\alpha') + (\alpha|H'(t_0)|\alpha')\,\frac{e^{i(W_0(\alpha')-W_0(\alpha))(t-t_0)/\hbar}-1}{-\frac{i}{\hbar}(W_0(\alpha')-W_0(\alpha))}$$

となる。

~~これ α というのはいくつかの parameter を一つにかいたものであるが、簡単のため parameter を一つとすると、α = α(W~~

従って time t において system が $\psi(\alpha)$ なる state にある prob は

$$(7) \qquad |a(\alpha,t)|^2 = \frac{2|(\alpha|H'(t_0)|\alpha')|^2}{(W_0(\alpha')-W_0(\alpha))^2} \times\left[1-\cos(W_0(\alpha')-W_0(\alpha))\frac{t-t_0}{\hbar}\right]$$

for $\alpha \neq \alpha'$,

この値は $W_0(\alpha)=W_0(\alpha')$ なる α の附近で非常に大きくなり

$$(W_0(\alpha')-W_0(\alpha))\frac{t-t_0}{\hbar} \gg 1$$

の点においては非常に小さい。time t において $(\alpha''-\delta, \alpha''+\delta)$ 内の α'' において $W_0(\alpha'')=W_0(\alpha')$ とし、system が $\psi(\alpha')$ なる ~~state~~ の附近の任意の state にある prob. は

$$\int_{\alpha''-\delta}^{\alpha''+\delta} |a(\alpha,t)|^2\, d\alpha = \int_{\alpha''-\delta}^{\alpha''+\delta} 2\,|(\alpha|H'(t_0)|\alpha')|^2 f(\alpha)\,d\alpha$$

である。 $\frac{t-t_0}{\hbar}\{W_0(\alpha)-W_0(\alpha')\} = x$ とおけば、

之は

$$2\frac{t-t_0}{\hbar}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \cancel{H'(x,x')}\, K(x,x')\,\frac{1-\cos x}{x^2}\,dx$$

となる。但し $K(x,x') = |(\alpha|H'(t_0)|\alpha')|^2\,\frac{dW_0(\alpha)}{d\alpha}$

$$\text{(8)}\quad\begin{cases} \cancel{x = \frac{t-t_0}{\hbar}\{W_0(\alpha'')-W_0(\alpha')\}} \\ -\varepsilon = \frac{t-t_0}{\hbar}\{W_0(\alpha''-\delta)-W_0(\alpha')\} = \frac{t-t_0}{\hbar}(-\delta)\left.\frac{dW_0}{d\alpha}\right|_{\alpha=\alpha''} \\ +\varepsilon = \frac{t-t_0}{\hbar}\{W_0(\alpha''+\delta)-W_0(\alpha')\} = \frac{t-t_0}{\hbar}(\delta)\left.\frac{dW_0}{d\alpha}\right|_{\alpha=\alpha''} \end{cases}$$

$t-t_0$ ~~$\gg \frac{\hbar}{W_0(\alpha)-W_0(\alpha')}$ に比し 充分大きく~~ が餘り小くなければ、 $K(x,x')$ があまり変化しない内に $\frac{1-\cos x}{x^2}$ は小さくなってしまふから 上式は大体、

$$2\frac{t-t_0}{\hbar}K(x''x')\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1-\cos x}{x^2}\,dx$$

としてよい。

or $2\pi\frac{t-t_0}{\hbar}K(x''x')$

$$= (t-t_0)\,\frac{2\pi}{\hbar}\,|(\alpha''|H'(t_0)|\alpha')|^2\left.\frac{dW_0(\alpha)}{d\alpha}\right|_{\alpha=\alpha''} \qquad (9)$$

前の結果には time t_0 に於て system が $\psi(\alpha')$ にあったならば ~~$|a(\alpha,t)|^2$~~ time t に於て $\psi(\alpha)$ にある prob は

$$(7)\quad |a(\alpha,t)|^2 = \frac{2|(\alpha|H'(t_0)|\alpha')|^2}{(W_0(\alpha')-W_0(\alpha))^2}\left[1-\cos(W_0(\alpha')-W_0(\alpha))\frac{t-t_0}{\hbar}\right]$$

for $\alpha \neq \alpha'$.

この値は $W_0(\alpha) \doteqdot W_0(\alpha')$ なる α に対してのみ大きな値をもってゐる。即ち energy の同じ他の state への transition prob 丈が大きな値をもってゐる。

今 $W_0(\alpha'') = W_0(\alpha') = W_0'$ とし、α'' 附近の state で energy が $W_0'-\varepsilon$, $W_0'+\varepsilon$ の間にある全ての state への transition prob の和は

$$\int_{W_0'-\varepsilon}^{W_0'+\varepsilon}|a(\alpha,t)|^2\,dW_0$$

である。但し α といふのは一般にはいくつかの variable これを計算するには $\alpha_1, \alpha_2 \ldots \alpha_n$ を代表したものであるから 例へば α_1 を energy にとり、 $\alpha_1 = W_0$ とすると、

$$(8)\quad \int_{W_0-\varepsilon}^{W_0+\varepsilon}|a(\alpha,t)|^2\,dW_0$$

$$= \int_{W_0'-\varepsilon}^{W_0'+\varepsilon}\frac{2|(W_0\alpha_2\cdots|H'(t_0)|W_0'\alpha_2'\cdots)|^2}{(W_0'-W_0)^2}\left[1-\cos\left\{(W_0'-W_0)\frac{t-t_0}{\hbar}\right\}\right]\times dW_0$$

$\frac{t-t_0}{\hbar}(W_0-W_0')=x$, とおけば
$\frac{t-t_0}{\hbar}\varepsilon=\delta$

之は

$$\int_{-\delta}^{+\delta}\frac{1-\cos x}{x^2}\,\frac{2|(W_0\alpha_2\cdots|H'|W_0'\alpha_i'\cdots)|^2}{\hbar}\cdot\frac{(t-t_0)}{\hbar}\,dx$$

しかるに $t-t_0 \gg \frac{\hbar}{\varepsilon}$ なる時刻 t に対しては ~~δは大きいから~~ energy W_0 の少しの変化に対して xは急に変はり、又 δ は大きくなれば、上の integral は

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1-\cos x}{x^2}\,dx\cdot\frac{2|(W_0\alpha_2\cdots|H'|W_0'\alpha_i'\cdots)|^2(t-t_0)}{\hbar}$$

(9) $$=\frac{2\pi}{\hbar}|(W_0'\alpha_2\cdots|H'|W_0'\alpha_i'\cdots)|^2(t-t_0)$$

従って $\psi(W_0'\alpha_i'\cdots)$ なる state から $\psi(W_0'\alpha_2\cdots)$ 附近の state への ~~pr~~ Transition Prob は $(W_0'-\varepsilon, W_0'+\varepsilon)$の範囲 $|(W_0\alpha_2\cdots|H'|W_0'\alpha_i'\cdots)|^2$ に比例し time $t-t_0$ に比例する。

但し時間の範囲は

$$\frac{\hbar}{\varepsilon} \ll t-t_0 \ll \frac{\hbar}{|(W_0'\alpha_2\cdots|H'|W_0'\alpha_i'\cdots)|}$$

に限られてゐる。

即ち $t-t_0$なる時間に $\psi(\alpha')$ なる state から $\psi(\alpha'')$ 及びその附近の state へ移るところの transition probability は $|(\alpha''|H'(t_0)|\alpha')|^2$ に比例し、又 $t-t_0$ に比例する。

但し(9)の式が成立するためには αを少しかへれば xは うんとかはる。即ち $t-t_0$が相当大きくなければならぬ。一方に於て (7)が成立するためには (4)に(5)に於けると同様に

$$t-t_0 \ll \frac{\hbar}{|(\alpha''|H'(t_0)|\alpha')|}$$

でなければならぬ。

かゝる条件を満足する様な時間の範囲に対してのみ、~~時間に比例する~~ Transition Prob をは ~~defineしうる~~。時間に比例してます。

以上の考察によつて一つの system に perturbation が加はれば、一つの stationary state から他の stationary へ transition を起すことが[起る]。その prob を計算する方法を知つた。

次に Perturbation が Time に indep であるとき Perturbed system の energy の定まった stationary state は ~~之の~~ unperturbed system の stationary state と如何なる関係にあるかをしらべて見る。

前と同様 unperturbed system の energy value $W_1^{(0)}, W_2^{(0)}, \cdots$ に属する stationary state を $\psi_1^{(0)}, \psi_2, \cdots$ とおく。任意の state は $H_0\psi_p = W_p^{(0)}\psi_p$

$$\psi = \sum_p a_p \psi_p$$

とかくことが出来る。之が perturbed system の stationary state であるためには

$$H\psi = W\psi \qquad W: \text{number}$$

or $$(H_0 + H')\sum_p a_p\psi_p = W\sum_p a_p\psi_p$$

or $$\sum_p a_p (W_p^{(0)} + H')\psi_p = \sum_p a_p W\psi_p$$

両辺に $\bar{\psi}_q$ をかけると、

$$\sum_p (W_{p}^{(0)}\delta_{qp} + H'_{qp}) a_p = W a_q \qquad (10)$$

従って perturbed system の energy value W は (10) なる linear 一次方程式の characteristic equation

$$\mathrm{Det}\,\{(W_q^{(0)} - W)\delta_{pq} - H'_{qp}\} = 0$$

の solution として得られる。

それらに属する eigenstate 夫々 $\psi_1'^{(0)}, \psi_2'^{(0)}, \cdots$ 及び $\psi_1^{(0)}, \psi_2^{(0)}, \cdots$

$$\psi = \sum_{p'} a_{p'}\psi_{p'} + \sum_p a_p\psi_p$$

H' 即ち $|H'_{qp}|$ が小さい場合には ~~W が~~ unperturbed system の energy value ~~の一つ~~ $W_r^{(0)}$ ~~に近いとすると~~ の中 ~~W に近いものを~~ $W_1^{(0)}, W_2^{(0)} \cdots$ W との差が $|H'_{qp}|$ よりずっと大きなものを $W_1'^{(0)}, W_2'^{(0)} \cdots$ ~~然~~しからざるものを $W_1^{(0)}, W_2^{(0)}, \cdots$ とすると、

(10) の式は次の如く分けて考へることが出来る。

(10)′ $$(W - W_q^{(0)})a_q = \sum_p H'_{qp}a_p + \sum_{p'} H'_{qp'}a_{p'}$$

(10)″ $$(W - W_{q'}^{(0)})a_{q'} = \sum_p H'_{q'p}a_p + \sum_{p'} H'_{q'p'}a_{p'}$$

~~然るに~~ 両式の右辺は常に小さいから左辺は常に小さくなければならぬが、(10)′ に於ては a_q の係数が小さい故 a_q 自身は相当な値をとり得る。之に反して $a_{q'}$ の係数は大きいから $a_{q'}$ 自身は a_q に比して小さくなければならぬ。~~詳しく言へば~~ $|W - W_q^{(0)}|$ が小さい程 a_q は大き〔く〕、之が大きい程 a_q は小さくなる。

従って (10)′ の式の右辺の第二項は他の項に比して小さい故之を neglect すると

(11) $$(W - W_q^{(0)})a_q = \sum_p H'_{qp}a_p$$

となる。もしも W に近い eigenvalue の数が

少なければ、この聯立一次方程式の変数の数は少なくなり演算はとても簡単になる。~~[illegible]~~
但し (11) の式が成立するためには、いいかへれば W が eigenvalue であるためには

$$(12)\ \mathrm{Det}\{(W - W_p^{(0)})\delta_{pq} - H'_{pq}\} = 0$$

でなければならぬ。

もし W なる値の附近に unperturbed system の eigenvalue が唯一つしかない時れば、この eigenvalue に属する eigenstate 丈を考へればよい。(Stapp とする) それらをそれぞれ $W_s^{(0)}$ 及び $\psi_s^{(1)} \psi_s^{(2)} \cdots \psi_s^{(l)}$ とする。
但し、l は $W_s^{(0)}$ なる eigenvalue に属する互いに linearly indep な state の数、即ち Entartung の degree をあらはす。従って W は

$$\mathrm{Det}\{(W - W_s^{(0)})\delta_{ij} - H'^{(ij)}_{ss}\} = 0$$

を満足せねばならぬ。
すると之れ $\psi_s^{(1)} \psi_s^{(2)} \cdots \psi_s^{(l)}$ の係数 $a_s^{(1)} a_s^{(2)} \cdots a_s^{(l)}$ は

$$(W - W_s^{(0)}) a_s^{(i)} = \sum_{j=1}^{l} H'^{(ij)}_{ss} a_s^{(j)}$$

を満足せねばならぬ。但し

$$H'^{(ij)}_{ss} = \bar{\psi}_s^{(i)} H' \psi_s^{(j)}.$$

Entartung のない場合には、$W_s^{(0)}$ に属する eigenstate が一つしかない時には、

$$(W - W_s^{(0)}) a_s = H'_{ss} a_s$$

$$\therefore\ W = W_s^{(0)} + H'_{ss} \qquad (13)$$

この場合には perturbation による energy の change は (Stapp として) 元の stationary state に対する perturbation energy の平均値に等しくなる。

§ Many Body Problem

多くの particle 1, 2, … n の間に、$V(r_{ij})$ なる potential であらはされる force が働き、~~更に~~ particle に external field $V(r_i)$ が働く場合、之等の particles を扱ふ時の Hamiltonian は

$$(14)\quad \begin{cases} H = \frac{1}{2m_1}p_1^2 + \frac{1}{2m_2}p_2^2 + \cdots + \frac{1}{2m_n}p_n^2 \\ \quad + \sum_{i<j=1}^{n} V(r_{ij}) + \sum_{i=1}^{n} V(r_i) \end{cases}$$

である。

atomic system に対して、nucleus を origin に fixed と考へれば、electron に external field は

$$V(r_i) = V(r_i) = -\frac{Ze^2}{r_i}$$

electron の間には Coulomb force

$$V(r_{ij}) = \frac{e^2}{r_{ij}}$$

が作用するから、Hamiltonian は

$$(15)\quad H = \frac{1}{2m}(p_1^2 + \cdots + p_n^2) + \sum_{i<j}\frac{e^2}{r_{ij}} - \sum_{i}\frac{Ze^2}{r_i}$$

である。electron の数 n が二つ以上になれば

この H から出てくる Schrödinger eq を exact にとくことは出来ない。故に ~~色々~~ 色々の approx 方法によって approximate solution を求めねばならぬ。

しかし Schröd. eq をとかなくても或る atomic system の有する性質を明かにする方法はある。

といふのは i 番目の particle の angular momentum

$$m_i = [r_i p_i]$$

を考へてみると、之は H の中の $\frac{e^2}{r_{ij}}$ 以外の項とは commute するが、$\frac{e^2}{r_{ij}}$ $j = 1, 2, \cdots n$ とは commute しない。∴ 各 particle の ang. mom. は 各々 const of motion ではない。併し、Total A.M.

$$(16)\quad m = \sum_{i=1}^{n} m_i = \sum_{i=1}^{n}[r_i p_i]$$

は Const of Motion である。

$$\because\quad \left(m_i \frac{e^2}{r_{ij}} - \frac{e^2}{r_{ij}} m_i\right) =$$

$$\left(m_j \frac{e^2}{r_{ij}} - \frac{e^2}{r_{ij}} m_j\right) =$$

$$(m_i + m_j)\frac{e^2}{r_{ij}} - \frac{e^2}{r_{ij}}(\cdots) = 0$$

$$m_k \frac{e^2}{r_{ij}} - \frac{e^2}{r_{ij}} m_k = 0 \quad \text{for } k \neq i,\ k \neq j$$

$$\because \sum_{i=1}^{n} m_{ix}(y_i-y_j)-(y_i-y_j)\sum_{i=1}^{n} m_{ix}$$
$$= i\hbar(z_i-z_j) \qquad \text{etc}$$
$$\sum_{i=1}^{n} m_{ix}\{(x_i-x_j)^2+(y_i-y_j)^2+(z_i-z_j)^2\}$$
$$-\{\ \ ,\ \ \}\sum_{i=1}^{n} m_{ix} = 0,$$

etc.

而して、

(167) $[m_x, m_y] = i\hbar m_z$

$$[\sum_i m_i, \sum_i m_i] = i\hbar\sum_i m_i$$

~~此の関係から見て Total~~ comp. ~~Ang. Mom. のとりうる eigenvalue~~ は 各 m_i のとりうる ~~eigenvalue の値~~ が整数であり、その互に commute する故、total ang. mom の comp のとりうる値は ~~整数~~ それらの和で である。
~~この system に elect~~
故に Atomic system の stationary state は其 total angular momentum の絶対値の二乗

$$M = m_x^2+m_y^2+m_z^2$$

~~と此と~~ 及び comp. m_z の値によって

characterise 出来る。

次に ― 或は 多くの同様な particle 例へば多くの electron よりなる system に於ては Hamilton 函数は之等に関して symmetric である。即ち particle の coordinate, momentum の交換に対して invariant である。この交換を一つの operator と考へると(これを P とすると). その逆(P^{-1})も存在する。之は一つの transformation である。之を unitary transformation として あらはすことが出来る。即ち $\bar{P}=P^{-1}$ ~~然して i番目の particle と j番目の particle の交換をあらはす unitary transf. を P_{ij}。或は i を j に j を i とすると。任意の transformation の permutation は それらの積としてあらはされる。~~

~~次に多くの permutation の和~~

n個の particle の間の permutation は n! 個あるわけだが、その中任意の ~~二つの P_μ, P_ν の commutat~~
二つの permutation P_μ, P_ν の和及び積を夫々

$$(P_\mu+P_\nu)\psi = P_\mu\psi+P_\nu\psi$$
$$(P_\mu P_\nu)\psi = P_\mu(P_\nu\psi)$$

として定義すれば、~~任意の~~ permutation は ~~二つの particle の交換 例へば i番目と j番目の particle の permutation P_{ij} なる type のものの積として、あらはされる。~~ の積は又一つの permutation である。∴ permutation の任意の algebraic 函数は linear 函数として あらはされる。

「さて permutation の性質をもっと詳しくしらべるため. n個の particle の coord の一組の値を q' とかき, それに P なる permutation を施した時の coord の一組の値を Pq' とすると.

$$\int (q'|P|q'')dq''(q''|)$$

q を diagonal にする repr における $P\psi$ の repr は

$$\int (q'|P|q'')dq''(q''|)$$

$$= (Pq'|)$$

$$\therefore (q'|P|q'') = \delta(Pq'-q'')$$

$$= \delta(q'-P^{-1}q'')$$

但し $\delta(Pq'-q'') = \delta(Pq'_1-q''_1)\delta(Pq'_2-q''_2)\cdots$

しかるに $(q'|\bar{P}|q'') = \overline{(q''|P|q')} = \delta(q''-P^{-1}q')$

$$=(q'|P^{-1}|q'')$$

$$\therefore \bar{P} = P^{-1}$$

∴ permutation は一般には real observable ではない. unitary transformation である.」

上述の如く similar particle よりなる system の Hamiltonian は particle の transform に対し invariant である. これを symbol で

書けば P を任意の perm とすると

$$PHP^{-1} = H$$

$$\text{or } PH = HP.$$

∴ permutation は const of motion である.

(証明は次の如し.

$$(q'|PH|q'') = \int \delta(Pq'-q''')dq'''(q'''|H|q'')$$

$$= (Pq'|H|q'')$$

$$(q'|HP|q'') = \int (q'|H|q''')dq'''\delta(q'''-P^{-1}q'')$$

$$= (q'|H|P^{-1}q'')$$

$$= (Pq'|H|q'')\quad))$$

これ $n!$ 個の constant of motion の中で互に commute する max. number をとれば, それによって system の state を完全に characterise 出来る.

然るに ~~A との~~ permutation の函数の中で凡ての permutation と ~~const~~ commute するものをさがしてみる. 今任意の permutation P_μ をとり

$$\sum_{\nu=1}^{n!} P_\nu P_\mu P_\nu^{-1}$$

を作ってみると, これは凡ての permutation と commute する. ∵ $\cancel{P_\lambda P_\nu P_\mu P_\nu^{-1} = P_\nu P_\mu P_\nu^{-1} P_\lambda}$ これは凡ての particle $\cancel{P_\lambda P_\nu P_\mu P_\nu^{-1} = P_\nu P_\mu P_\nu^{-1}}$ に関して sym. である.

なぜ $n!X' = \sum_\nu P_\nu X' P_\nu^{-1} = \sum_i a_i X_i$

($X' = \sum_\mu a_\mu P_\mu^{(i)}$)

∵ $P_\lambda \cdot \sum_\nu P_\nu P_\mu P_\nu^{-1} \cdot P_\lambda^{-1} = \sum_\nu (P_\lambda P_\nu) P_\mu (P_\lambda P_\nu)^{-1}$

$= \sum_\nu P_\nu P_\mu P_\nu^{-1}$

いいかへれば、$\sum_\nu P_\nu P_\mu P_\nu^{-1}$ は n個の particle に関して symmetric である。同じ type の permutation から出来るものは結果は同じである。同じ type の permutation に対して class と称する。∴ $\sum_\nu P_\nu P_\mu P_\nu^{-1}$ $\mu=1,\dots n!$ の中で異なるものは class の数丈ある。class の数を l と書し、$P^{(i)}$ を class i に属する任意の perm とし、

(18) $\frac{1}{n!}\sum_\nu P_\nu P^{(i)} P_\nu^{-1} = X_i$

とおく。$X_1, X_2 \dots X_l$ は互に commute し、~~又これ以外には~~ 全ての perm と commute して、且つ linearly indep なものは存在しない。しかも之等の X_i は real observable である。(∵ $\overline{\sum_\nu P_\nu P^{(i)} P_\nu^{-1}} = \sum_\nu \overline{P_\nu^{-1}}\,\overline{P^{(i)}}\,\overline{P_\nu}$

$= \sum_\nu P_\nu P^{(i)-1} P_\nu^{-1}$ しかるに $P^{(i)}$ と $P^{(i)-1}$ とは同 type だから $\overline{X_i} = X_i$)

∴ $X_1, X_2 \dots X_l$ なる observable のとりうる一組の値によって system の state を characterize しうる。しかるに X_i は constant of motion で、又 system に perturbation H'' が加っても之が particles に関して symmetric ならば、H'

$\therefore P_\mu P_\nu P_\mu$ $\quad P_\mu P_\mu P_\nu^{-1} = P_\mu^{-1}$

と commute するから、X_i は矢張り constant of motion である。~~ある time において~~ ∴ X's の値は一度決まれば決して変ることはない。

~~X's のとりうる色んな値の中で最もよくわかるのは、~~

~~$X_1' = X_2' = \dots = X_l' = 1$.~~

~~及び $X_i' = \pm 1$ according as $P^{(i)}$ is even or odd permutation.~~

~~である。~~

~~其の他の set of values を決めるには次のごとくする。先ず $X_i X_j$ $(i, j = 1, 2, \dots l)$ は perm であるから~~

~~$X_i X_j = \sum_\nu a_\nu P_\nu$~~

~~なる形に書ける。しかも之が~~ [illegible] の perm と ~~commute するから~~

~~$X_i X_j = \sum_k c_k^{ij} X_k$~~

eigenvalue の組は幾つあるかといふことは X's の any function を $\mathfrak{B}$ とすると

$\mathfrak{B} = \sum_i b_i X_i$

之から

$(\mathfrak{B})^p = \sum_i b_i^{(p)} X_i \quad p = 1, 2, \dots l$

之は $P_1^{(1)} = 1$ とすれば $X_1' = 1$.

これ等の関係から b's を eliminate すると、結局

$$\cancel{B}\,B^{\alpha} + c_1 B^{\alpha-1} + \cdots + c_{\alpha-1} B + c_\alpha = 0$$

なる関係が得られる。B の eigenvalue はこの式の根である ~~α~~ 個から、α個以上の異なる値をとり得ない。~~しかし~~ B は X's の any 函数であるから X's のとりうる set of value は α組以上ではあり得ない。しかし α組より少なければ

$$\sum_i a_i X'_i = 0$$

となる様な a_i を求めうるから X_i が linearly indep でなくなる。之は間違である。∴ X's の eigenvalue の組は丁度 α 組である。

之等の中で α組の値の中ですぐわかるのは

$$X'_1 = X'_2 = \cdots = X'_l = 1.$$

及び $X'_i = \pm 1$ according as $P^{(i)}$ even or odd.

前者の中には凡ての particle に関して symmetric な state があり、後者の中には凡ての particle に関して anti-symmetric な state が存する。

もしも system がある time において symm. or antisym. state ならば、その後いつまでも symm or anti state にある。

§ Spinning Electron

前節に述べた様に同種な particle よりなる system においては各 particle に関する symmetry の性質が如何という事が問題となる。electron の場合を考へてみるに、この場合には各 electron に対する ~~var~~ dyn. variable として $x\,y\,z$ $p_x\,p_y\,p_z$ の他に更に spin を考へねばならぬ。spin とは classical にいへば electron の自転であり、自転の angular momentum の任意方向に対する comp. は $\pm\frac{\hbar}{2}$ の二つの値の中の一をしかとり得ない。この外に spin は angular momentum と同性質のものであるから ~~その~~ 三次元の vector S $(S_x S_y S_z)$ は矢張り

$$[S\,S] = i\hbar S \qquad (29)$$

なる V.R. に従ふとする。更に S_x etc の eigenvalue は $\pm\frac{\hbar}{2}$ であるから S_x^2, S_y^2, S_z^2 の eigenvalue は $\frac{\hbar^2}{4}$ のみである。∴ 之等は c なる number である。即ち

$$\left\{\begin{array}{l} S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \\ S_xS_y - S_yS_x = i\hbar S_z \text{ etc} \end{array}\right. \qquad (30)$$

~~これ~~、で $S = \frac{\hbar}{2}\sigma$ とおけば、

(31) $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \qquad \sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2i\sigma_z$ etc

$$2i(\sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x) = (\sigma_y\sigma_z-\sigma_z\sigma_y)\sigma_y+\sigma_y(\;\;)$$
$$= -\sigma_z+\sigma_z=0.$$

$$\therefore \sigma_x\sigma_y = i\sigma_z = -\sigma_y\sigma_x \quad \text{etc} \qquad (32)$$

coordinate axis の rotation をやると.

$$\sigma_x' = a_{xx}\sigma_x + a_{xy}\sigma_y + a_{xz}\sigma_z \quad \text{etc}$$
$$\sigma_x'^2 = 1$$
$$\sigma_x'\sigma_y' = (a_{xx}\sigma_x + a_{xy}\sigma_y + a_{xz}\sigma_z)\times(a_{yx}\sigma_x + a_{yy}\sigma_y + a_{yz}\sigma_z)$$
$$= a_{xx}a_{yx}+a_{xy}a_{yy}+a_{xz}a_{yz} + (a_{xy}a_{yz}-a_{xz}a_{yy})\,i\sigma_x+\cdots$$
$$= i\,(a_{zx}\sigma_x + a_{zy}\sigma_y + a_{zz}\sigma_z)$$
$$= i\sigma_z'$$

故に ~~2式~~ (31), (32) の関係は coord. Transf に対して invariant.

σの matrix repr. を考へてみると. σ_z を diagonal にすると $\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$ なる形である. $\sigma_x = \begin{pmatrix}a_1&a_2\\a_3&a_4\end{pmatrix}$ とすると.

$\sigma_z\sigma_x=-\sigma_x\sigma_z$ から $\begin{pmatrix}a_1&a_2\\-a_3&-a_4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_1&-a_2\\a_3&-a_4\end{pmatrix}$

$\therefore a_1=a_4=0$

又 $\sigma_x^2=1$ $\therefore a_2a_3=1$ $\quad a_2=\tilde{a}_3$

$$\therefore \sigma_x = \begin{pmatrix}0&e^{i\alpha}\\e^{-i\alpha}&0\end{pmatrix}$$

なる形になる. 故に $e^{i\alpha}=1=e^{-i\alpha}$ ととれば.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix} \qquad \sigma_y = i\sigma_x\sigma_z = \begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$$

σの (l, m, n) なる方向に対する spin comp. は

$$\begin{pmatrix}n & l-im\\ l+im & -n\end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \quad (33)$$

なる matrix で与へられる。

~~electron に対する互に commute する observables の complete set として x y z σ_z をとると, 任意の state は x'y'z', σ_z' の函数. $(x'y'z'\sigma_z'|)$ であらはされる. 但し x'y'z' は凡ての real value をとり,, σ_z' は ±1 の値をとる. σ_z' の 任意函数 $f(\sigma_z')$ は~~ σ_z を diagonal にする rep. においては σ_z が +1 なる値をもつ state は ~~$(x'y'z'|)$~~ $\delta_{\sigma_z',1}$

−1 〃 ~~$(x'y'z'|)$~~ $\delta_{\sigma_z',-1}$ であらはされ. 従って任意の state は其等の superposition

$$f(\sigma_z') = \cancel{\delta_{\sigma_z'}}\; a_1\delta_{\sigma_z',1} + a_{-1}\delta_{\sigma_z',-1}$$

で与へられる。

例へば. spin の方向が (l, m, n) である場合

或は $\quad n a_+ + (l-im)a_- = a_+$

$$(l+im)a_+ - n a_- = a_-$$

$$\therefore \quad \frac{a_+}{a_-} = \frac{l-im}{1-n} = \frac{1+n}{l+im}$$

$$\therefore \quad |a_+|^2 : |a_-|^2 = 1+n : 1-n$$

electronに於ける互にcommuteするobservableのcomplete setは例へば $xyz\sigma_z$ で、その場合には任意のstateは $x'y'z'\sigma_z'(\pm1)$ の函数 $(x'y'z'\sigma_z'|)$ で表へられる。之は $(x'y'z'+1|)$, $(x'y'z'-1|)$ の二部分より成る。~~これ~~ spinを考へる場合は wave function が二つの component より成ると考へてもよい。

「そこで任意のelectromagnetic fieldに於けるelectronの運動を考へてみる。先づspinを考へないならば、classical Hamiltonianは

$$H = \frac{1}{2m}\left(p + \frac{e}{c}A\right)^2 \pm eV. \qquad (34)$$

である。但し、Vはscalar potential、Aはvector potentialである。

~~例へば Hydrogen atom~~

$$(\because \quad \frac{dx}{dt} = \frac{1}{m}\left(p_x + \frac{e}{c}A_x\right) \quad \text{etc}$$

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{1}{m}\left(p + \frac{e}{c}A\right)\frac{e}{c}\frac{\partial A}{\partial x} + e\frac{\partial V}{\partial x} \quad \text{etc.}$$

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{dp_x}{dt} + \frac{e}{c}\frac{dA_x}{dt}$$

$$= -\frac{e}{c}\frac{dr}{dt}\frac{\partial A}{\partial x} + e\frac{\partial V}{\partial x} + \frac{e}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}$$

$$+ \frac{e}{c}\frac{dr}{dt}\,\mathrm{grad}\,A_x$$

$$= e\left(\frac{\partial V}{\partial x} + \frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}\right)$$

$$- \frac{e}{c}\left\{\frac{dy}{dt}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) - \frac{dz}{dt}\left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\right\}$$

しかるに $\quad E = -\mathrm{grad}\,V - \frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t}$

$$H = \mathrm{rot}\,A$$

$$\therefore\ m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -e\mathbf{E} - \frac{e}{c}\left[\frac{d\mathbf{r}}{dt}, \mathbf{H}\right]$$

之は ~~普通の~~ electron に於ける運動方程式に他ならぬ。)

electron が $\frac{\hbar}{2}\sigma$ の spin を持つてゐるならば ~~..~~
従つて $-\frac{e}{mc}s = \frac{e\hbar}{2mc}\sigma$ なる magnetic moment をもつてゐることになる。(之に就ける意味の的な把握は後の Dirac の relativistic electron theory の所でわかる。) ~~..~~ $\therefore$ H なる magnetic field に対しては

$$\frac{e\hbar}{2mc}\sigma\mathbf{H}$$

なる energy がつけ加はることになる。

$$\therefore\ H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - eV + \frac{e\hbar}{2mc}\sigma\mathbf{H} \qquad (35)$$

之は 簡単に

$$H = \frac{1}{2m}\left\{s\cdot\left(\mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right\}^2 - eV \qquad (35)'$$

とかける。

$$\left(\because\ \frac{1}{2m}\left\{\sigma\left(\mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right\}^2 = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + \frac{1}{2m}\sum\left\{\sigma_x\sigma_y\left(p_x+\frac{e}{c}A_x\right)\left(p_y+\frac{e}{c}A_y\right)+\sigma_y\sigma_x\left(p_y+\frac{e}{c}A_y\right)\left(p_x+\frac{e}{c}A_x\right)\right\}\right.$$

$$= \cdots + \frac{e}{2mc}\sum i\sigma_z\cdot -i\hbar H_z$$

$$\left.= \frac{e\hbar}{2mc}\sigma\mathbf{H}.\ \right)$$

今 Hydrogen atom が z 方向に向いた uniform Field H_z の中にある場合を考へる。

$$V = \frac{e}{r},\quad A_x = -\frac{1}{2}H_y\, y \quad A_y = \frac{1}{2}H_y\, x$$

従って Hamiltonian は

$$H = \frac{1}{2m}\left\{\left(p_x - \frac{1}{2}\frac{e}{c}H_y\, y\right)^2 + \left(p_y + \frac{1}{2}\frac{e}{c}H_y\, x\right)^2 + p_z^2\right\} - \frac{e^2}{r} + \frac{e\hbar}{2mc}H_y\,\sigma_z$$

となる。Field が余り強くなく、H^2 を neglect し得る場合には

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right) - \frac{e^2}{r} + \frac{eH_y}{2mc}\left(m_z + \hbar\sigma_z\right) \qquad (36)$$

となる。

~~..~~ magnetic field のない場合に比して、energy は ~~hydrogen atom が~~

$$\frac{eH_y}{2mc}\left(m_z + \hbar\sigma_z\right)$$

丈 変化することになる。所で m_z の eigenvalue は $\hbar$ の integral multiple であり、σ_z の eigenvalue は ± 1 である。

$\therefore$ energy level の change は $\frac{e\hbar H_y}{2mc}$ の integral multiple である。

1から1'へ emit or absorb される radiation の frequency の change は如何といふに、m_z に対する selection rule は、$m_z'' - m_z' = 0$ or $\pm\hbar$ である。σ_z の方は ~~constant of motion である~~ ~~から~~ electric displacement と commute ~~する~~ するから $\sigma_z'' = \sigma_z'$.

∴ energy change は $\frac{e\hbar}{2mc}(m_z'' - m_z') = 0$ or $\pm\frac{e\hbar}{2mc}$ ~~(0 or ±1)~~

∴ frequency change は

$$0 \text{ or } \pm\frac{eh}{4\pi mc}$$

となる。即ち magnetic field のない時の一本の線が三つにわかれ、~~その~~ displace した線は xy-plane に circularly に polarize しており、displace しない line は z-方向に polarize しているとになる。これは classical theory に於ける Zeemann effect の結果と一致してゐる。

さてこゝに Pauli の exclusion principle によれば二つの electron が同一の state にあり得ない。∴ electron の wave 函数は coord. 及び spin に関して antisym. でなければならぬ。

さてこゝに於いて spinning electron の ~~wave 函数~~ state は $x'y'z'$ 及び ~~$x'y'$~~ σ_z' の函数として表はすことが出来る。それ故 n 個の electron よりなる system の state はそれぞれの coord. 及び spin の comp

$x_1' y_1' z_1' \sigma_{z1}'$, $x_2' y_2' z_2' \sigma_{z2}'$ ――― $x_n' y_n' z_n' \sigma_{zn}'$

の函数として表はされる。~~しかも或る順序に~~ この中の ~~任意~~ どれかの二つの electron の coord. 及び spin comps を交換するならば函数の値は一般にかはるであらう。今任意の二つの electron の coord. 及び spin comp を交換すると wave 函数の符号がかはると仮定する。いひかへれば wave 函数は electron に関して antisymmetric であると仮定する。即ち前節に於いて述べた ~~of permut~~ observable $X_1' X_2' \cdots X_l'$ は +1 or −1 according as class i is even or odd.

Pauli の exclusion principle によれば二つの electron が同一の state にあり得ない。

~~何故なれば~~ 何故ならば、もしも二つの electron が同一の state にあるとすると、~~eigen 函数は~~ wave 函数は二つの electron ~~に関して~~ を交換しても変化がない筈。しかるに上の仮定によれば wave 函数の符号がかはらねばならぬ。∴ wave 函数は identically に 0 である外ない。

即ち Pauli の exclusion principle は自ら満足されてゐる。

「electron の wave 函数が antisymmetric である」といふ~~性質~~(仮定)から follow する一般的な結果をのべる。

electron の coordinate 丈の(任意の) permutation を P とかき、之に対応する spin coord の permutation を P^σ とかくと、~~任意の wave 函数~~ PP^σ は ~~coord~~ electron の coord と spin の両方の permutation を意味するから、antisymmetric な state は PP^σ の ~~$PP^\sigma = \pm 1$~~ eigenstate で、

$$PP^\sigma = \pm 1 \qquad (27)$$

according as P is even or odd

即ち、electron の coord の perm と spin の perm の間には simple な関係がある。

例へば二つの electron i, j の coord の交換 P_{ij} を考へ~~ると~~すると

$$P_{ij} P_{ij}^\sigma = -1$$

$$\text{or} \quad P_{ij}^\sigma = -P_{ij} \qquad (28)$$

~~所で P_{ij}^σ の definition により、~~

~~$P_{ij}^\sigma \sigma_i P_{ij}^{\sigma-1} = \sigma_j$~~

~~である~~。所で

$$O_{ij} = \frac{1}{2}\{1 + (\sigma_i \sigma_j)\}$$

なる量を考へると、

$$O_{ij}^2 = \frac{1}{4}\{1 + 2(\sigma_i, \sigma_j) + (\sigma_i, \sigma_j)^2\}$$

$$= \frac{1}{4}\{1 + 2(\sigma_i, \sigma_j) + 3 - 2(\sigma_i, \sigma_j)\}$$

$$= 1.$$

$$O_{ij}\sigma_{ix} = \frac{1}{2}\{\sigma_{ix} + \sigma_{jx} - i\sigma_{iz}\sigma_{jy} + i\sigma_{iy}\sigma_{jz}\}$$

$$\sigma_{jx} O_{ij} = \frac{1}{2}\{\sigma_{jx} + \sigma_{ix} + i\sigma_{iy}\sigma_{jz} - i\sigma_{iz}\sigma_{jy}\}$$

$$\therefore O_{ij}\sigma_i = \sigma_j O_{ij}$$

~~or $O_{ij}\sigma_i O_{ij}^{-1} = \sigma_j$~~.

しかるに P_{ij}^σ の definition により、

$$P_{ij}^\sigma \sigma_i P_{ij}^{\sigma-1} = \sigma_j$$

~~$\therefore P_{ij}^\sigma O_{ij} \sigma_i O_{ij}^{-1} P_{ij}^{\sigma-1} = \sigma_i$~~

∴ ~~or $P_{ij}^\sigma O_{ij}$ は σ_i~~

$$(P_{ij}^{\sigma})^{-1} O_{ij}\sigma_i = \sigma_i (P_{ij}^{\sigma})^{-1} O_{ij}$$

∴ $(P_{ij}^\sigma)^{-1} O_{ij}$ は σ_i 並びに σ_j と commute する。

又は勿論 σ_i, σ_j 以外の σ's と commute する。

凡ての variable と commute する. ∴ ~~const.~~ 了は number

$$\therefore \quad O_{ij} = c P_{ij}^{\sigma} \qquad c: \text{number}.$$

~~[illegible]~~ 両辺を二乗すると

$$1 = c^2$$

所で. σ_{iz}, σ_{jz} の任意函数は

$$\delta(\sigma_{iz}', 1)\,\delta(\sigma_{jz}', 1)$$
$$\delta(\sigma_{iz}', -1)\,\delta(\sigma_{jz}', -1)$$
$$\delta(\sigma_{iz}', 1)\,\delta(\sigma_{jz}', -1) + \delta(\sigma_{iz}', -1)\,\delta(\sigma_{jz}', 1)$$
$$\delta(\sigma_{iz}', 1)\,\delta(\sigma_{jz}', -1) - \delta(\sigma_{iz}', -1)\,\delta(\sigma_{jz}', 1)$$

なる四つの linearly indep の linear comb として あらはされるが、之等は ~~A~~ 夫々. P_{ij}^{σ} の eigenvalue 1, 1, 1, -1 に属する eigenstate である。
~~一方. O_{iz} の~~ ∴ P_{ij}^{σ} の eigenvalue の sum は 2 である. 一方 O_{ij} の eigenvalue の sum は 2.
(∵ $(\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j)$ の eigenvalue の sum は 0 であるから)

$$\therefore \quad O_{ij} = P_{ij}^{\sigma}.$$

$$\therefore \quad P_{ij}^{\sigma} = \frac{1}{2}\{1 + (\boldsymbol{\sigma}_i \boldsymbol{\sigma}_j)\} \qquad (29)$$

(28) によって,

$$P_{ij} = -\frac{1}{2}\{1 + (\boldsymbol{\sigma}_i \boldsymbol{\sigma}_j)\} \qquad (30)$$

そこで二つの electron の座標 (coord) の交換 (P_{ij}) の属する class の χ を χ_{ij} とすると,

$$\chi_{ij} = \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i<j} P_{ij}$$

$$= -\frac{1}{2}\left\{1 + \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i<j} (\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j)\right\}$$

total ~~an~~ spin angular momentum を

$$\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i = \frac{\hbar}{2} \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i$$

とすると, ~~orbital angular~~ (19) (20) によって,

$$[\mathbf{S}, \mathbf{S}] = i\hbar\, \mathbf{S}. \qquad (31)$$

が成立する. ~~故に $\mathbf{S}^2$ は constant of motion で $\mathbf{S}^2$ は各 component と variable と commute~~

$$\mathbf{S}^2 = \cancel{k(k+1)\hbar} \; S(S+1)\hbar^2.$$

~~故に之を diagonal matrix にとれば~~ S: integer or half integer.

~~といふことが出来る。~~ とおけば, angular momentum の場合と同様にして, S は integer or half integer を eigenvalue とする observable である。
之を使へば,

$$2\sum_{i<j} (\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j) = \left(\sum_i \boldsymbol{\sigma}_i, \sum_j \boldsymbol{\sigma}_j\right) - \sum_i (\boldsymbol{\sigma}_i \boldsymbol{\sigma}_i)$$
$$= 4 S(S+1) - 3n$$

$$(32) \quad \therefore \quad \chi_{ij} = -\frac{1}{2}\left\{1 + \frac{4S(S+1) - 3n}{n(n-1)}\right\}$$

かくのごとく electron の ~~wave~~ 函数は antisym. であるから Fermi の統計に従ふ。

今一辺の長さ ~~L なる cube 中に~~ V なる volume 中に閉ぢこめられた free electron の ~~集りに就て~~ (E, E+dE) の間の stationary ~~state~~ の数は spin を考へると (27) の値の二倍となる

$$4\pi\left(\frac{2mL^2}{h^2}\right)^{3/2}E^{1/2}dE$$

(E, E+dE) の間にある particle の数は

$$n(E)dE = \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3}\frac{E^{1/2}dE}{Ae^{E/kT}+1} \qquad (37)$$

である。~~詳しく計~~算してみると、electron の總數

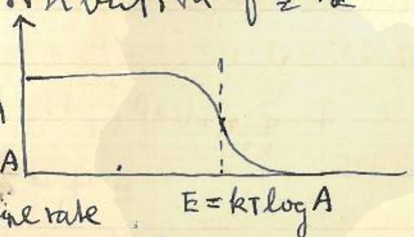
$$N = \int_0^\infty n(E)dE.$$

詳しく計算してみると、$\frac{Nh^3}{2V}(2\pi mkT)^{-3/2} \gg 1$ なる時には $A \ll 1$

で、この時には ~~(37)~~ の distribution 函数

$$\frac{1}{Ae^{E/kT}+1} \cong 1 \quad \text{for } E \ll -kT\log A$$

$$\cong 0 \quad \text{for } E \gg -kT\log A$$



この場合 electron gas は degenerate (entartet) しているといふ。普通の metal の如く、一個の atom につき1乃至2,3個の ~~elect~~ free electron が存在する場合には、數千度位迄 electron gas は完全に degenerate になると考へてよい。

十一月十三日。

前回述べた如く同様な particle からなる system が、ある時間に於て、それらの particles に関して symmetric 又は antisymmetric state にあったならば、その後永久に sym. or anti-sym. state にあることを知った。

今 system を形成する N個の同様な particles ~~間~~ の間の interaction を無視すれば、system の Hamiltonian は各 particle の Hamiltonian H_i $(i = 1, 2, \cdots N)$ の和

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_i$$

i番目の particle の wave function を $(q_i t|)$ とすれば

$$i\hbar\frac{\partial(q_i t|)}{\partial t} = H_i(q_i t|).$$

すると $(qt|) = (q_1 q_2 \cdots q_N t|) = (q_1 t|)\cdots(q_N t|)$ は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(qt|) = H(qt|)$$

を満足するから、system の wave 函数である。

所で H は N個の particles に関して sym. であるから、$(qt|)$ に任意の permutation P_ν を施したものを $P_\nu(qt|)$ とすると、之も又 system の一つの wave 函数で、従って一般に

$$\sum_{\nu=1}^{N!} a_\nu P_\nu(qt|)$$

$\frac{d}{M}L\frac{h^3}{2}(2\pi mkT)^{-3/2} = \frac{166}{712}\cdot 10^4$

$L = 6.06\cdot 10^{23}$, $d_{Ag} = 10.5$, $M_{Ag} = 107.9$, $m = 9.02\cdot 10^{-28}$ gr, $T = 300$

が又 system の wave 函数である.
故に system の state が particle に関して sym の時には wave函数は $\sum_{\nu=1}^{N!} P_\nu(q\,t)$ 　anti の時には $\sum_{\nu=1}^{N!}\varepsilon(P_\nu)\,P_\nu(q\,t)$
なる形でなければならぬ. 但し $\varepsilon(P_\nu)=\pm 1 \begin{cases} P_\nu : \text{even} \\ \quad : \text{odd} \end{cases}$,
~~q t~~ わかり易くする為に $(q_i\,t) = \psi_{\alpha_i}(q_i\,t)$
とすると

$$\sum_{\nu=1}^{N!} P_\nu(q\,t) = \psi_{\alpha_1}(q_1 t)\,\psi_{\alpha_2}(q_2 t)\cdots\psi_{\alpha_N}(q_N t) + \psi_{\alpha_2}(q_1 t)\,\psi_{\alpha_1}(q_2 t)\cdots\psi_{\alpha_N}(q_N t)+\cdots \tag{19}$$

$$\sum_{\nu=1}^{N!}\varepsilon(P_\nu)\,P_\nu(q\,t) = \begin{vmatrix} \psi_1(q_1 t) & \psi_1(q_2 t) & \cdots & \psi_1(q_N t) \\ \psi_2(q_1 t) & \psi_2(q_2 t) & \cdots & \psi_2(q_N t) \\ - & - & - & \\ \psi_N(q_1 t) & \psi_N(q_2 t) & \cdots & \psi_N(q_N t) \end{vmatrix} \tag{20}$$

∴ antisym. の時には もし ある i, j に対し
$\psi_i = \psi_j$ 　$(i, j = 1, 2, \cdots N)$
ならば det は 0 となる. 即ち 同じ state に二つの particle は存在し得ない.
之に反して symm の時には $\psi_1, \psi_2 \cdots \psi_N$ の中にいくら同じものがあっても system の wave 函数は 0 にならぬ. 即ち 一つの state に particle がいくつでも存在しうる。

二つの particle の場合 ψ_1, ψ_2 なる二つの ~~wave 函数~~ state 函数を考へると、
~~symm の場合に classical には~~ linearly ind. な symmetry の性質を考へねば. system の wave 函数として

$$\psi_1(q_1 t)\,\psi_1(q_2 t) \qquad \psi_1(q_1 t)\,\psi_2(q_2 t)$$
$$\psi_2(q_1 t)\,\psi_1(q_2 t) \qquad \psi_2(q_1 t)\,\psi_2(q_2 t)$$

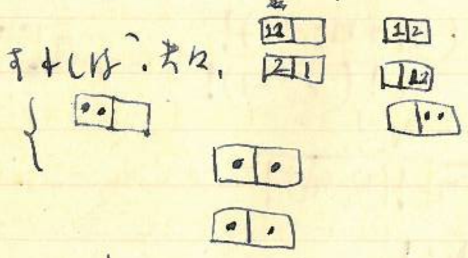
が四つ考へられるが.
symmetric ~~state~~ 函数に限れば

$$\psi_1(q_1 t)\,\psi_1(q_2 t) \qquad \psi_2(q_1 t)\,\psi_2(q_2 t)$$
$$\psi_1(q_1 t)\,\psi_2(q_2 t) + \psi_2(q_1 t)\,\psi_2(q_2 t)$$

の三つになる.
又 anti sym. 函数に限れば

$$\psi_1(q_1 t)\,\psi_2(q_2 t) - \psi_2(q_1 t)\,\psi_1(q_2 t)$$

丈になる。
之を図示すれば、次の如し.



一般に wave 函数を sym or anti sym なものに限れば、どの ~~state に~~ particle がどの state にあるかは知れぬ. どの state に或個の particle が存在するかによって wave 函数は定まって来. ~~anti~~ sym の時に同じ state の particle の数には制限はないが、anti の時に

又は二つ
二つ以上同一の state に存在し得ない。
今各 particle のとり得る ~~eigen~~ energy value を discrete として $E_1, E_2, \cdots E_l$ とし、各準位の energy value に属する ~~et~~ linearly independent な eigenfunction の数を夫々 $N_1\, N_2 \cdots N_l$ とし ~~~~ N 個の particle 中各準位の energy value を有するものが夫々
$n_1, n_2, \cdots n_l$
とすると、n_i 個が E_i なる energy value を有する様な組合せは幾通りあるかといふに！

$$\cancel{\frac{N_i!}{N_i^0!\,N_i^1!\cdots N_i^{n_i}!}}$$

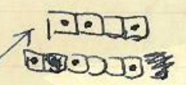
classical : $\rightarrow N_i^{n_i}$

sym :

anti sym :

$$\prod_i \frac{(N_i+n_i-1)!}{n_i!\,(N_i-1)!}$$

$$\prod_i \frac{N_i!}{n_i!\,(N_i-n_i)!}$$



~~classical~~ :
$$\frac{N_i!}{N_i^0!\,N_i^1!\cdots N_i^{n_i}!}$$

N_i^j は j 個の particle がある様な state の数。
N_i^j が ($j=1,\cdots n_i$) 定っておる場合には ←
但し、 $\sum_{j=0}^{n_i} N_i^j = N_i \qquad \sum_{j=0}^{n_i} j N_i^j = n_i$

従って、$n_1 n_2 \cdots n_l$ 個の particle が夫々 $E_1, E_2, \cdots E_l$ を有する様な組合せの数は
N_i^j ($i=1,\cdots l$, $j=0,2,\cdots n_i$) が定っておれば

$$P = \prod_{i=1}^{l} \frac{N_i!}{N_i^0!\,N_i^1!\cdots N_i^{n_i}!} \qquad (21)$$

個ある。
所で particle の総数

$$\left.\begin{aligned} N &= \sum_{i=1}^{l} n_i = \sum_{i=1}^{l}\sum_{j=0}^{n_i} j N_i^j \\ \text{及び}\quad N_i &= \sum_{j=0}^{n_i} N_i^j \end{aligned}\right\} (22)$$

は一定である。
又 system の total energy

$$E = \sum_{i=1}^{l} E_i n_i = \sum_{i=1}^{l}\sum_{j=0}^{n_i} j E_i N_i^j \qquad (23)$$

を不変とした時の ~~~~ P の maximum value は

$$\delta(\log P) = 0 \qquad \delta N_i = 0 \qquad \delta N = 0$$
$$\delta E = 0$$

or
$$\delta(\log P) + \sum_i \lambda_i \delta N_i + \alpha\, \delta N + \beta\, \delta E = 0 \quad (24)$$

を満足せねばならぬ。
所で ~~N~~ $\log P = \sum_{i=1}^{l}\left(\log N_i! - \sum_{j=0}^{n_i} \log N_i^j!\right)$

では、~~N_i^j が大きければ $\log N_i^j! = N_i^j \log N_i^j$~~
従って、

$$\sum_i \sum_j \delta N_i^j \left(-\frac{\partial}{\partial N_i^j} \log N_i^j! + \lambda_i + \alpha j + \beta j E_i\right) = 0$$

$$\therefore \quad \frac{\partial}{\partial N_i^j} \log N_i^j ! = \lambda_i + \alpha j + \beta j E_i$$

しかるに $\log (N_i^j)! - \log (N_i^j - 1)! = \log N_i^j$

$$\therefore \quad \log N_i^j = \lambda_i + \alpha j + \beta j E_i$$

但し $x_i = \alpha + \beta E_i$

$$\text{or} \quad N_i^j = C_i \, e^{\alpha j + \beta j E_i} = C_i e^{j x_i} \qquad (25)$$

∴ E_i なる energy value を有する particle の most probable value は

$$n_i = \sum_j j N_i^j = \frac{\sum_j j N_i^j}{\sum_j N_i^j} \cdot N_i$$

$$= N_i \frac{\sum_j j e^{j x_i}}{\sum_j e^{j x_i}} = N_i \frac{1}{S_i} \frac{dS_i}{dx_i}$$

但し $S_i = \sum_j e^{j x_i}$

sym の場合には各 state にある particle の数には制限はない。

∴ n_i が相当大きければ、

$$S_i = \sum_{j=0}^{n_i} e^{x_i j} \fallingdotseq \frac{1}{1 - e^{x_i}}$$

$$\therefore \quad n_i = N_i \frac{e^{x_i}}{1 - e^{x_i}} = \frac{N_i}{e^{-\alpha - \beta E_i} - 1}$$

antisym. の場合には、particle は 0 or 1.

$$\therefore \quad S_i = \sum_{j=0}^{1} e^{x_i j} = 1 + e^{x_i}$$

$$\therefore \quad n_i = N_i \frac{e^{x_i}}{1 + e^{x_i}} = \frac{N_i}{e^{-\alpha - \beta E_i} + 1}$$

しかるに classical theory に於ける Boltzmann's Principle に従えば system の一つの macroscopic state に於ける entropy を S と、その macroscopic state に相当する microscopic state の総数 P との間には

$$S = k \log P$$

なる関係がある。 k: Boltzmann's Const.

即ち most probable な macroscopic state に於いては entropy S は maximum である。

従って条件は ~~$\delta S = 0$~~

$$\frac{1}{k} \delta S + \sum_i \lambda_i \delta N_i + \alpha \delta N + \beta \delta E = 0$$

しかるに $\left.\frac{\partial S}{\partial E}\right|_{N_i, V} = \frac{1}{T}$, $\left.\frac{\partial S}{\partial N}\right|_{V, E, N_i} = \frac{u - Ts + pv}{T} = -\frac{\zeta}{T}$

$s = \frac{S}{N}$, $v = \frac{V}{N}$, $u = \frac{E}{N}$

$$(26) \begin{cases} \therefore \quad n_i = N_i \dfrac{1}{e^{-\frac{\zeta}{kT} + \frac{E_i}{kT}} \mp 1} \\[2ex] \quad = N_i \dfrac{1}{A e^{\frac{E_i}{kT}} \mp 1} \end{cases} \qquad A = e^{-\frac{\zeta}{kT}}$$

この二つの場合は夫々 Einstein-Bose 及び Fermi-Dirac の統計と稱せられる。

各辺の長さ L なる cube 中に閉ぢこめられた ~~N個の~~ free particle を考へれば.

$$H = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{N} p_i^2$$

i番目の particle の normalized eigenfunction は

$$\left(\frac{1}{L^3}\right)^{1/2} e^{\frac{2\pi i}{L}(l_i x_i + m_i y_i + n_i z_i)}$$

但し l_i, m_i, n_i : 0 or integer

energy value は

$$E_i \cancel{W_i} = \frac{h^2}{2mL^2}(l_i^2 + m_i^2 + n_i^2)$$

所で $r = \sqrt{l_i^2 + m_i^2 + n_i^2}$ とすると r と $r+dr$ の間にある ~~state の数は~~ l_i, m_i, n_i の組合せの数は $r \gg 1$ なら. $4\pi r^2 dr$.

しかるに $E = \frac{h^2}{2mL^2} r^2$ なるゆゑ.

$$4\pi r^2 dr = 2\pi \cdot \left(\frac{\sqrt{2m}L}{h}\right)^{3} E^{\frac{1}{2}} dE \qquad (27)$$

∴ E と dE の間にある particle の数は

$$n(E)dE = 2\pi\left(\frac{\sqrt{2m}\,L}{h}\right)^3 E^{\frac{1}{2}} \frac{dE}{Ae^{\frac{E}{kT}} \mp 1}$$

$$= \frac{2\pi V(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \frac{E^{1/2}dE}{Ae^{\frac{E}{kT}} \mp 1} \qquad (28)$$

となる. ~~詳しく計算して見ると.~~

25

$$N = \frac{4\pi V(2mkT)^{3/2}}{h^3}\int_0^\infty \frac{u^{\frac{1}{2}}du}{Ae^u + 1}$$

$\sum_i a_i x_i = 0$

$\sum_i b_i x_i = 0$

$\sum_i c_i x_i = 0$

$a_i = a_i(\cdot b_i \cdot c_i)$

$\sum_i (\alpha h_i + \beta k_i) x_i = 0$

$\cancel{\frac{N h^3}{2V}}$

$$P = \prod_i \frac{(N_i + n_i - 1)!}{n_i!(N_i - 1)!}$$

$$\delta \log P + \alpha \delta N + \beta \delta E = 0$$

$$\cancel{\delta N_i} \text{ 等 } \sum_i \delta n_i \left(\frac{\partial \log P}{\partial n_i} + \alpha + \beta E_i\right) = 0$$

$$\log\frac{(N_i + n_i)!}{(n_i+1)!(N_i-1)!} - \log\frac{(N_i + n_i - 1)!}{n_i!(N_i-1)!}$$

$$= \log\frac{(N_i + n_i)}{(n_i + 1)}, \quad \log\frac{(N_i + n_i - 1)}{n_i}$$

$$\frac{N_i + n_i}{n_i + 1} = e^{-\alpha - \beta E_i}$$

$$n_i = N_i/(e^{-\alpha - \beta E_i} - 1) \quad \text{or} \quad \frac{N_i - 1}{e^{-\alpha-\beta E_i} - 1}$$

$$\sum_i \log\frac{(N_i + n_i)}{n_i + 1}\varepsilon_i = 0 \qquad \sum_i \varepsilon_i = 0 \qquad \sum_i E_i \varepsilon_i = 0.$$

$$\log\frac{N_i + n_i}{n_i + 1} + \alpha + \beta E_i = 0$$

$$P = \prod_i \frac{N_i!}{n_i!(N_i-n_i)!}$$

$$\log \frac{N_i!}{(n_i+1)!(N_i-n_i-1)!} - \log \frac{N_i!}{n_i!(N_i-n_i)!}$$

$$= \log \frac{(N_i-n_i)}{(n_i+1)} \quad , \quad \log \frac{(N_i-n_i-1)}{n_i}$$

$$\frac{N_i-n_i}{n_i+1} = e^{-\alpha-\beta E_i}$$

$$(1+e^{-\alpha-\beta E_i})\, n_i = N_i - e^{-\alpha-\beta E_i}$$

$$\text{or} = N_i - 1$$

$$n_i = \frac{N_i-1}{1+e^{-\alpha-\beta E_i}} \; \cancel{\text{or}}, \; \frac{N_i - e^{-\alpha-\beta E_i}}{1+e^{-\alpha-\beta E_i}}$$

Average value of n_i

$$\sum_{n_i=0}^{\infty} \frac{n_i \prod_i \frac{(N_i+n_i-1)!}{n_i!(N_i-1)!}}{\prod_i \frac{(N_i+n_i-1)!}{n_i!(N_i-1)!}} = \bar{n}_i \quad \text{但し} \quad \sum_i n_i = N, \quad \sum_i n_i E_i = E$$

§ Collision Problem (i) general case

以上迄に於て取扱つたのは、一つの particle が或 field 内で運動する場合に於ける energy 及び particle が一つの stationary state から他の stationary state 迄に移ることによつて emit され、又は absorb される radiation の intensity 等を計算する問題であつた。(これの逆に当る)を与へて居る。classical dynamics に於て之等と少しく異なつた問題として、一つの particle が或方向に進んで来た時、他の particle の作用によつて其の path を曲げられる場合といふ場合を、quantum mechanics で考へれば、或 velocity で進んで来る particle の場所はわからぬ故、~~deflect~~ 他の particle によつてどんな風に deflect されるかはわからぬ。只どの方向に deflect される prob が如何程であるかをいひ得る丈である。この prob を求めることが問題である。

今二つの particle の間に relative position のみに関係する力が働く場合には、Hamiltonian は

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

である。この場合には classical dynamics に於ると同様、重心の coord 及び relative coord を使ふことによつて、

$$m_1\mathfrak{r}_1 + m_2\mathfrak{r}_2 = (m_1+m_2)\mathbb{R} \qquad \mathfrak{r}_1 - \mathfrak{r}_2 = \mathfrak{r}$$

$$\mathfrak{p}_1 + \mathfrak{p}_2 = \mathbb{P} \qquad m_2\mathfrak{p}_1 - m_1\mathfrak{p}_2 = (m_1+m_2)\mathfrak{p}.$$

とおけば

$$XP_x - P_xX = i\hbar \text{ etc} \qquad xp_x - p_xx = i\hbar \text{ etc}$$

$$Xp_x - p_xX = 0 \text{ etc} \qquad xP_x - P_xx = 0 \text{ etc}$$

が成立するから、$\mathbb{P}$, $\mathfrak{p}$ は夫々 $\mathbb{R}$, $\mathfrak{r}$ の canonical conjugate である。すると

$$H = \frac{\mathbb{P}^2}{2(m_1+m_2)} + \frac{1}{2}\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}\mathfrak{p}^2 + V(r)$$

となる。

$P_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial X}$ etc $\quad p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ etc とおき Schrödinger wave eq をつくれば

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(XYZ, xyz, t/) = \left\{\frac{-\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\cdots\right) - \frac{\hbar^2}{2}\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}\Delta + V(r)\right\}(XYZ, xyzt/)$$

この式は

$$(XYZ, xyzt/) = f(XYZ)\psi(xyz)e^{-\frac{iW}{\hbar}t}$$
$$= \psi(xyz)e^{\frac{i(P_xX+P_yY+P_zZ-Wt)}{\hbar}} \quad (46)$$

なる形の solution を有する。但し、ψ は

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

を満足せねばならぬ。

ここに。P_x, P_y, P_z は number で 全体の translational motion の momentum の components をあらはす。

$$\mu = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}, \quad W' = W - \frac{1}{2(m_1+m_2)}(P_x^2+P_y^2+P_z^2)$$

~~かく~~ μ で W' は夫々 reduced mass 及び relative motion の energy をあらはす。

であるから問題は ~~(47) なる one body problem~~ ~~reduced mas~~ mass μ なる particle が V なる field において運動する場合の問題に帰着する。

若し potential ~~particles の間に働く~~ ~~V(xyz)の~~ force が relative distance のみに depend するならば (47) は

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}(W'-V(r))\psi = 0 \quad (48)$$

となる。之を polar coord で書けば、前の(29)と同様な式になる。我々 ~~が求める解は~~ は この式の解の中で次の様な條件を満すものを求める。

「先 ~~z-軸の~~ 第一の particle が z-方向に ある velocity で ~~p_z なる momentum をもつて~~ 運動して居たとする。しかしかゝる場合に相当する様な解は存在しない。何故なら第二の particle の影響によつて運動の方向はやがてかはつて了ふからである。であるから我々は ~~この~~ z方向の運動に相当する plane wave と、相當に遠方において

第二の particle を中心 ~~として~~ して外方へ拡がる spherical wave とを superpose したものになる様な解を求めてある。

今. $r>R$ においては $V=0$ とする。z-axis のまはりに axial symmetric ~~(axial~~ な solution は

$$\psi=\sum_{l=0}^{\infty}\chi_l(r)P_l(\cos\theta) \quad (49)$$

といふ形をしてゐる。

∵ 一般の solution は polar coord であれば

$$\psi(r\theta\varphi)=\sum_{l,m}\chi_l(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

なる形をしてゐるが、ψ が axial symmetric であるといふ条件から $m=0$ のもの丈を考へればよく、従って上の(49)なる形となる。

~~さて~~ ($m=0$ ととるかはりに $m\neq0$ なるある値をとっても $|\psi|^2$ は φ に depend しないことになる。しかし今の様な incident ~~wave が~~ particle が第二の particle に関して angular momentum をもってゐないなら、$m=0$ の値をとらねばならぬ。)

~~さて $\chi_l(r)$ は~~ (49)を(48)に入れ、両辺に $P_l(\cos\theta)\sin\theta d\theta$ をかけて θ について integrate すれば χ_l は

$r<R$ においては

$$(50)\quad \frac{d^2\chi_l(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\chi_l(r)}{dr}+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(W'-V)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l(r)=0$$

$r>R$ においては $V=0$ なるため

$$(51)\quad \frac{d^2\chi_l(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\chi_l(r)}{dr}+\left(\frac{2\mu W'}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi_l(r)=0$$

を満足せねばならぬ。(51.)式の solution は ~~$r>R$ の~~ よくしられてゐる様に Bessel-fn になる。即ち

$$(52)\quad \chi_l(r)=r^{-\frac{1}{2}}\left[A_lJ_{l+\frac{1}{2}}(kr)+B_lJ_{-l-\frac{1}{2}}(kr)\right]$$

但し ~~$J_{l+\frac{1}{2}}$~~ J_p は ~~$l+\frac{1}{2}$~~ p 次の Bessel fn をあらはす。

$k=\sqrt{2\mu W'}/\hbar$

今 $A_l=C_l\cos\delta_l$ 　 $B_l=(-1)^lC_l\sin\delta_l$

とおけば. x の大きな所では. asymptotic に

$$J_p(x)=\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\cos\left(x-\frac{2p+1}{4}\pi\right)+\cdots \quad x\gg p.$$

としてあらはされるため. $r>R$ において ψ は asymptotic に

$$(53)\quad \psi=\sqrt{\frac{2}{\pi k}}\frac{1}{r}\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta)C_l\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)$$

となる。

一方 z 方向に ~~$k\hbar$ なる momentum~~ 波長 $\frac{h}{2\pi}$ なる plane wave は よく知られてゐる如く

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\theta)(2l+1)\, i^l \sqrt{\frac{\pi}{2kr}}\, J_{l+\frac{1}{2}}(kr)$$

なる形に ~~あらはされ~~ expand される。asymptotic には

$$e^{ikr\cos\theta} = \frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\theta)(2l+1)\, i^l \times \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi\right) + \cdots$$

であるから ~~plane wave~~

$$\psi - e^{ikr\cos\theta} = \sqrt{\frac{2}{\pi k}}\,\frac{1}{r}\sum_l P_l(\cos\theta)\Big[C_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) - \sqrt{\frac{\pi}{2k}}(2l+1)\, i^l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\Big]$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi k}}\,\frac{1}{r}\sum_l P_l(\cos\theta)\Big[\Big(C_l \frac{e^{-\frac{il\pi}{2} + i\delta_l}}{2i} - \sqrt{\frac{\pi}{2k}}(2l+1)\, i^l \frac{e^{-\frac{il\pi}{2}}}{2i}\Big)e^{ikr} - \Big(C_l \frac{e^{\frac{il\pi}{2} - i\delta_l}}{2i} - \sqrt{\frac{\pi}{2k}}(2l+1)\, i^l \frac{e^{\frac{il\pi}{2}}}{2i}\Big)e^{-ikr}\Big]$$

~~の第二項が 0 なる~~ 右辺の第一項は outgoing spherical wave, 第二項は ingoing spherical wave をあらはしてゐる。で. ψ が asymptotic に plane wave と outgoing wave のみより成るためには

右辺の第二項は 0. 即ち

$$C_l = \sqrt{\frac{\pi}{2k}}(2l+1)\, i^l e^{i\delta_l}.$$

従って. asymptotic に

$$\psi = e^{ikr\cos\theta} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta),$$

$$(54)\quad f(\theta) = \frac{-i}{2k}\sum_l P_l(\cos\theta)(2l+1)\left(e^{2i\delta_l} - 1\right)$$

~~$f(\theta)$ そこで~~

~~$Q = \int |f(\theta)|^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$~~

ところで. $e^{ikr\cos\theta}$ ~~$r > R$ なる半径の sphere 上の~~ ~~incident~~ wave の ~~total intensity は.~~ z-方向に垂直な単位面積を通って単位時間に通る particle の数は.

$$\frac{1}{2m}\frac{\hbar}{i}\left(e^{-ikz}\frac{\partial}{\partial z}e^{ikz} - e^{ikz}\frac{\partial}{\partial z}e^{-ikz}\right) = \frac{k\hbar}{m}.$$

之に対して scatter される particle の total number は. $kr \gg 1$ なる処では

$$\iint \frac{-i\hbar}{2m}\left\{\frac{e^{-ikr}}{r}\overline{f(\theta)}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right)f(\theta) - \frac{e^{ikr}}{r}f(\theta)\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{e^{-ikr}}{r}\right)\overline{f(\theta)}\right\} \times r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \frac{k\hbar \cdot 2\pi}{m}\int |f(\theta)|^2 \sin\theta\, d\theta.$$

従つて 半径的内に 立方向に出て行く 半径面積を通つて 単位時間の particle がやつて来れば、~~半径的内に~~ scatter される ~~particle の数は~~ て、半径的内に 任意の ~~closed~~ surface を通過する particle の数は

$$(55)\quad Q = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \cancel{d\theta} \sin\theta \, d\theta$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

$$\because \int_0^\pi P_l^2(\cos\theta) \sin\theta \, d\theta = \frac{2}{2l+1}$$

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

$$(e^{2i\delta_l}-1)(e^{-2i\delta_l}-1) = 4 \sin^2 \delta_l .$$

この Q なる量は面積の次元を有するから effective cross section (Wirkungsquerschnitt) と称する。

(54), (55) から分かる様に scattering の模様を知るには δ_l $(l=0,1,2 \cdots)$ を求める必要がある。

それ ~~つまり~~ はつまり (52) に於ける A_l, B_l の比を求める問題である。

そのためには、~~$r=R$ に於て~~ $r<R$ に於ける eigenfunction

と $r>R$ に於ける eigenfunction が $r=R$ で continuous に続く、即ち ~~両者~~ 合ひ、その derivative の $r=R$ に於ける値が等しいといふ条件から定まつてくる。$r<R$ に於ける eigenfunction を元の通り $\chi_l(r)$ とすると、

$$(56)\quad \begin{cases} \chi_l(R) = R^{-\frac{1}{2}} \left\{ A_l J_{l+\frac{1}{2}}(kR) + B_l J_{-(l+\frac{1}{2})}(kR) \right\} \\ \left.\dfrac{d\chi_l}{dr}\right|_{r=R} = R^{-\frac{1}{2}} \left\{ A_l \left.\dfrac{dJ_{l+\frac{1}{2}}(kr)}{dr}\right|_{r=R} + B_l \left.\dfrac{dJ_{-(l+\frac{1}{2})}(kr)}{dr}\right|_{r=R} \right\} \\ \qquad - \dfrac{1}{2} R^{-\frac{3}{2}} \left\{ A_l J_{l+\frac{1}{2}}(kR) + B_l J_{-(l+\frac{1}{2})}(kR) \right\} \end{cases}$$

かくして、与へられた k に対する $A_l : B_l$ 従つて $\sin\delta_l$ が定まつてくる。

実際に於て $V(r)$ が r をいくら大きくしても 0 にならぬ場合には 上式に於て $R \to \infty$ の limiting case をとればよい。

しかし多くの場合 $\sin\delta_l$ の計算は面倒である。~~又 χ_l 解を決定するの難しい様な場合は~~

~~R の大きな所で~~ 上式は

$$\chi_l(R) = A_l \cdot K_+ + B_l K_-$$

$$\chi'_l(R) = A_l \bar{K}_+ + B_l \bar{K}_-$$

なる形である。これからして、

$$(57)\quad \frac{B_l}{A_l} = (-1)^l \, tg\,\delta_l = -\left\{ \frac{\overline{K}_+ - \overline{\overline{K}}_+ \frac{d}{dr}\log \chi_l}{\overline{K}_- - \overline{\overline{K}}_- \frac{d}{dr}\log \chi_l} \right\}_{r=R}$$

$$\sin^2\delta_l = \frac{tg^2\delta_l}{1+tg^2\delta_l}$$

$\therefore$ $\left.\frac{d}{dr}\log \chi_l\right|_{r=R}$ を与へれば phaseは定まる。

$$\frac{\overline{K}_+}{K_+} = \frac{d}{dr}\log\left.\left\{ r^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr)\right\}\right|_{r=R}$$

$$\frac{\overline{K}_-}{K_-} = \frac{d}{dr}\log\left.\left\{ r^{-\frac{1}{2}} J_{-l-\frac{1}{2}}(kr)\right\}\right|_{r=R}$$

(ii) Scattering in Coulomb Field

particlesの間に働く forceが与へられれば、上の様な方法で $\sin\delta_l$ を計算し、(54) or (55) の値を exact に決定しうるが、此の場合には寧ろ parabolic coordinate を使ふのが便利である。

$$\lambda_1 = r+z \qquad \lambda_2 = r-z \qquad \varphi = \tan^{-1}\frac{y}{x}$$
$$\infty > \lambda_1 \geq 0 \qquad \infty > \lambda_2 \geq 0 \qquad 2\pi > \varphi \geq 0$$

とおくと、

$$\Delta = \frac{4}{\lambda_1+\lambda_2}\left\{ \frac{\partial}{\partial\lambda_1}\left(\lambda_1\frac{\partial}{\partial\lambda_1}\right) + \frac{\partial}{\partial\lambda_2}\left(\lambda_2\frac{\partial}{\partial\lambda_2}\right) + \frac{1}{4}\frac{\lambda_1+\lambda_2}{\lambda_1\lambda_2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}$$

$$V(r) = \frac{-C}{r} = \frac{-2C}{\lambda_1+\lambda_2}$$

従って Schrödingerのeq.

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(W' + \frac{C}{r}\right)\psi = 0$$

or $A = \frac{2\mu}{\hbar^2}W'$, $B = \frac{\mu C}{\hbar^2}$ とおけば

$$\Delta\psi + \left(A + \frac{2B}{r}\right)\psi = 0$$

は

$$(58)\quad \frac{\partial}{\partial\lambda_1}\left(\lambda_1\frac{\partial\psi}{\partial\lambda_1}\right) + \frac{\partial}{\partial\lambda_2}\left(\lambda_2\frac{\partial\psi}{\partial\lambda_2}\right) + \frac{(\lambda_1+\lambda_2)^2}{4\lambda_1\lambda_2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \left\{\frac{A}{4}(\lambda_1+\lambda_2) + B\right\}\psi = 0$$

となる。　z-axis に関して sym. な solution としては

$$\psi = \Lambda_1(\lambda_1)\Lambda_2(\lambda_2)$$

なる形の solution が存在する。但し Λ_1 Λ_2 は夫々

$$\left.\begin{aligned} &\frac{d}{d\lambda_1}\left(\lambda_1\frac{d\Lambda_1}{d\lambda_1}\right)+\left(\frac{A}{4}\lambda_1+B_1\right)\Lambda_1=0 \\ &\frac{d}{d\lambda_2}\left(\lambda_2\frac{d\Lambda_2}{d\lambda_2}\right)+\left(\frac{A}{4}\lambda_2+B_2\right)\Lambda_2=0 \end{aligned}\right\}(59)$$

$$B_1+B_2=B$$

を満足せねばならぬ。これらの式は ~~cos~~ r に関する式 (36) と全く同性質の式で、その solution は

$$(60)\left\{\begin{aligned} \Lambda_1(\lambda_1)&=e^{\frac{ik\lambda_1}{2}}F\left(-\frac{B_1i}{k}+\frac{1}{2},1,-ik\lambda_1\right) \\ \Lambda_2(\lambda_2)&=e^{\frac{ik\lambda_2}{2}}F\left(-\frac{B_2i}{k}+\frac{1}{2},1,-ik\lambda_2\right) \end{aligned}\right.$$

$$k=\sqrt{A}.$$

∴ λ_1,λ_2 の大きな所では（即ち r の大きな所、但し z-axis 上は除く）

$$\Lambda_1(\lambda_1)=C_1e^{\frac{ik\lambda_1}{2}}\lambda_1^{\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}}+C_1'e^{-\frac{ik\lambda_1}{2}}\lambda_1^{-\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}}$$

$$\Lambda_2(\lambda_2)=C_2e^{\frac{ik\lambda_2}{2}}\lambda_2^{\frac{B_2i}{k}-\frac{1}{2}}+C_2'e^{-\frac{ik\lambda_2}{2}}\lambda_2^{-\frac{B_2i}{k}-\frac{1}{2}}$$

$$\therefore\ \psi=\Lambda_1\Lambda_2=C_1C_2e^{ikr}\lambda_1^{\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}}\lambda_2^{\frac{B_2i}{k}-\frac{1}{2}}+C_1'C_2'e^{-ikr}\lambda_1^{-\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}}\lambda_2^{-\frac{B_2i}{k}-\frac{1}{2}}$$
$$+C_1C_2'e^{ikz}\lambda_1^{\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}}\lambda_2^{-\frac{B_2i}{k}-\frac{1}{2}}+C_1'C_2e^{-ikz}\lambda_1^{-\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}}\lambda_2^{\frac{B_2i}{k}-\frac{1}{2}}$$

∴ r の大きな所で z-方向に進む plane wave と outgoing spherical wave のみが存在する ためには第二項第四項が 0、即ち $C_1\neq 0$, ~~$C_2'=0$~~ $C_1'=0$ でなければならぬ。

しかるに

$$C_1=c_1\int_0^\infty e^{-z}z^{-\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}}dz$$

$$C_1'=c_1'\int_0^\infty e^{-z}z^{+\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}}dz$$

であるから、

$$C_1=0\quad\text{for } -\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}=0,1,2,\cdots \text{ or } \frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}=-1,-2,-3\cdots$$

$$C_1'=0\quad\text{for } \frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}=0,1,2,\cdots \ \cancel{\text{or } -\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}=-1,-2,-3,\cdots}$$

であるから、$C_1\neq 0$, $C_1'=0$ であるのは

$$\cancel{-\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}=1,2,\cdots\cdots}$$

$$\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}=0,1,2,\cdots$$

しかし、$\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}=1,2,\cdots$ であれば、ψ は $r\to\infty$ で ∞ となる。∴ $\frac{B_1i}{k}-\frac{1}{2}=0$ のみが許される。

∴ $\frac{B_2i}{k}=\frac{Bi}{k}-\frac{1}{2}$ となる 結局

$$\psi=Ce^{ikr}(r-z)^{\frac{Bi}{k}-1}+C'e^{ikz}(r-z)^{-\frac{Bi}{k}}$$

なる事となる。 詳しくかくと、（計算 略す）

$$\text{or}\quad \Psi = C_0\left\{ \frac{-e^{i\left(kr + \frac{B}{k}\log(2r\sin^2\frac{\theta}{2}) + \sigma\right)}}{2\frac{k^2}{B} r \sin^2\frac{\theta}{2}} + e^{i\left(kr\cos\theta \mp \frac{B}{k}\log(2r\sin^2\frac{\theta}{2}) + \sigma'\right)} \times \left(1 - \frac{B^2 i}{2k^3 r \sin^2\frac{\theta}{2}}\right)\right\} \qquad (61)$$

従って (θ, φ) なる方向の solid angle ~~sinθdθdφ~~ 内に scatter される particle が ~~particle~~ の probability は

$$dQ(\theta,\varphi) = |f(\theta)|^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$= \frac{B^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi}{4k^4 r^2 \sin^4\frac{\theta}{2}}$$

しかるに $B = \frac{\mu c}{\hbar^2} = \frac{-\mu e_1 e_2}{\hbar^2}$ 　 $k^2 = A = \frac{2\mu}{\hbar^2} W'$

$$\therefore dQ(\theta,\varphi) = \frac{e_1^2 e_2^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi}{16 W'^2 \sin^4\frac{\theta}{2}} \qquad (62)$$

これが Rutherford の Scattering formula に他ならぬ。 此の式から明かな様に θ の大きくなる程 scatter される数は急減している。

$\theta > \frac{\pi}{2}$ に scatter される総数は

$$Q_{\theta > \frac{\pi}{2}} = \int_{\theta=\frac{\pi}{2}}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi} dQ$$

$$= \frac{2\pi e_1^2 e_2^2}{4 W'^2}\int_{-1}^{0}\frac{dx}{(1-x)^2}$$

$$= \pi\cdot\left(\frac{e_1 e_2}{2W'}\right)^2.$$

α-particle. $e_1 = 2e.$ 　 $W' \cong 8\cdot 10^{-6}$ erg

とすると、 $e_2 = Ze.$

$$Q_{\theta > \frac{\pi}{2}} = Z^2\ 2.8\cdot 10^{-27}\,\mathrm{cm}^2$$

空気中では 1 cm³ 中に 大体 $N = 5{,}4\cdot 10^{19}$ 個の atom がある。

$$Z^2 Q_{\theta > \frac{\pi}{2}} = 10^{-25}\,\mathrm{cm}.$$

∴ 10^5 個の α-particle が ~~1 cm を進む間~~ 空気中を進む中 1 cm につき 一個位の割で 直角以上 deflect される。

~~之故~~ $m_1 \ll m_2$ の時には 上式の結果はそのまま 実験と比較し得るが、 しからざる時には、 relative coord. を ~~と~~ 之の 第一第二の particle の coord ~~であらわ~~ に直さねばならぬ。

§ many body problem
(i) General Case
(ii) Helium atom and Hydrogen Molecule
(iii) Assembly of Similar Particles
§ Interaction of Matter and Radiation

Chap VI R. Q. M.
§) One Electron Problem
(开)§

$$\therefore \quad p_x = \frac{m v_x}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)\psi = 0$$

Chapter VI. Relativistic Quantum mechanics

§ One Electron Problem

今迄は non-relativistic な理論のみを述べて来たが、particle が光の velocity に近い velocity で運動してゐる様な場合を論ずるには、special relativity の考へを introduce せねばならぬ。即ち ~~theory の形式が~~ 方程式が Lorentz transformation に対して invariant で~~ある様に~~なければならない。

先づ最も簡単な場合として一つの electron 丈をとって考へる。Schrödinger の representation に於ては electron の状態は $x\,y\,z\,t$ の函数である wave function $\psi(x\,y\,z\,t)$ によってあらはされる。

所で classical theory では electromagnetic field のない時の electron の Hamiltonian は

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

で与へられる。　m : electron の rest mass.

従って、wave equation は

$$\left\{\frac{W}{c} - \left(m^2c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)^{1/2}\right\}\psi = 0 \quad (1)$$

となる。

但し　$W = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$　$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$　etc.

これに $\frac{W}{c} + (m^2c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2}$ なる operator をかけると.

$$\left\{\frac{W^2}{c^2} + m^2c^2 - p_x^2 - p_y^2 + p_z^2\right\}\psi = 0 \quad (2)$$

となる.

この式は relativistic に invariant な形はもってゐるが. quantum mechanics の一般の形式とは一致しない. 即ち wave eq は $\frac{\partial}{\partial t}$ or W に関して linear でない. relat. から云へば W について linear なら $p_x\ p_y\ p_z$ についても linear でなければならぬ. ~~そこで (1) 又は (2) の~~ が 云々で (1) の方は W に関して ~~linear であるが~~.

そこで Dirac は ~~(1) 又は (2) のかはりに~~.

$$\left\{\frac{W}{c} + \alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z + \beta\right\}\psi = 0 \quad (3)$$

なる形の wave eq. を仮定した ~~[illegible]~~. ~~する~~ 仮定. α, β は W, p に indep で これらと commute する. 又 field のない場合だから空間の各点は equivalent で wave eq. には $x\ y\ z\ t$ は explicit に入らぬ. ∴ α, β は x, y, z, t にも indep で これらと commute する. 従って α, β は新しい dynamical variable をあらはし. electron の internal motion に関係してる. (3) に $W/c - \alpha_x p_x - \cdots - \beta$ を operator すると

$$\left\{\frac{W^2}{c^2} - \sum_{xyz}\left[\alpha_x^2 p_x^2 + (\alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x)p_xp_y + (\alpha_x\beta + \beta\alpha_x)p_x\right] - \beta^2\right\}\psi = 0$$

∴ これと α, β の間に

$$\left.\begin{array}{ll} \alpha_x^2 = 1 & \alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x = 0 \\ \beta^2 = m^2c^2 & \alpha_x\beta + \beta\alpha_x = 0 \end{array}\right\} (4)$$

なる関係が成立すれば、之は(2)と一致する。

$\beta = \alpha_m mc$ とおけば、上式は

$$\alpha_\mu\alpha_\nu + \alpha_\nu\alpha_\mu = 2\delta_{\mu\nu} \quad (5)$$
$$\mu, \nu = x, y, z, m$$

となる。$\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z, \alpha_m$ は前章に述べた spin variables と同様な V.R. を満足してゐる。∴ 之等は electron の spin に関係した量であると考へられる。但し non-relativistic な場合 ~~之を matrix であらはすれ~~ には $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ なる三つの variable 丈でよかったが、今は ~~実~~ 四個の variables が必要。それで別に $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ と commute し、同様な V.R. を満足する $\rho_1\ \rho_2\ \rho_3$ なる observable を introduce する。

すると例へば

$$(6)\left\{\begin{array}{lll} \alpha_x = \rho_1\sigma_x & \alpha_y = \rho_1\sigma_y & \alpha_z = \rho_1\sigma_z \\ & \alpha_m = \rho_3 & \end{array}\right.$$

は総べて(5)を満足してる。

ρ_3, σ_z を diagonal にする repr. にすれば、

$$(\sigma_z'\rho_3'|\sigma_x|\sigma_z''\rho_3'')\rho_3''$$
$$=\rho_3'(\quad|\sigma_x|\quad)$$
$$\therefore (\quad|\sigma_x|\quad)=0$$
$$\text{or } \rho_3'=\rho_3'$$

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

$$\rho_3=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}$$

$$\left.\begin{array}{ll}\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix} & \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i&0&0\\i&0&0&0\\0&0&0&-i\\0&0&i&0\end{pmatrix}\\ \rho_1=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&1&0&0\end{pmatrix} & \rho_3=\begin{pmatrix}0&0&-i&0\\0&0&0&-i\\i&0&0&0\\0&i&0&0\end{pmatrix}\end{array}\right\}(17)$$

従つて ~~wave function~~

$$\left.\begin{array}{ll}\alpha_x=\begin{pmatrix}&&&1\\&&1&\\&1&&\\1&&&\end{pmatrix} & \alpha_y=\begin{pmatrix}&&&-i\\&&i&\\&-i&&\\i&&&\end{pmatrix}\\ \alpha_z=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&-1\\1&0&0&0\\0&-1&0&0\end{pmatrix} & \alpha_m=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&-1&\\&&&-1\end{pmatrix}\end{array}\right\}(18)$$

之等の matrices は Hermit 的である。
従つて wave function は 4 component をもつ。
所で electron ~~等~~のspin を~~表す~~あらはすためには wave function は二つの comp をもつておれば充分である。で ~~余分~~ 余分の solution が出てくる。
これについては後にのべる。

* をとって matrix の行列をとりかへたものとすると、

$$\tilde{\rho}_1 = \rho_1^*,\quad \tilde{\rho}_3 = \rho_3^*,\quad \tilde{\sigma} = \sigma^*$$

† (11) は又

(11') $\bar{\Psi}\left\{\frac{W}{c}+\frac{e}{c}A_0+\rho_1\left(\sigma, p+\frac{e}{c}A\right)+\rho_3 mc\right\}=0$

とかける。但し左から W, p をかけることは

$-i\hbar\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t}$, $+i\hbar\,\mathrm{grad}\,\bar{\Psi}$ を意味するものとする

(6)を使へば、wave eq は

$$\left\{\frac{W}{c}+\rho_1(\sigma, p)+\rho_3 mc\right\}\psi=0 \qquad (9)$$

electromagnetic field の存在する場合には scalar 及び vector potential を夫々 A_0, A とする。 classical theory と同様に、p の代りに $p+\frac{e}{c}A$、W の代りに $W+eA_0$ とおけば、wave eq は

$$\left\{\frac{W}{c}+\frac{e}{c}A_0+\rho_1\left(\sigma, p+\frac{e}{c}A\right)+\rho_3 mc\right\}\psi=0 \qquad (10)$$

之の conjugate な equation は

$$\left\{-\frac{W}{c}+\frac{e}{c}A_0+\tilde{\rho}_1\left(\tilde{\sigma}, -p+\frac{e}{c}A\right)+\tilde{\rho}_3 mc\right\}\bar{\Psi}=0 \qquad (11)$$

但し $\tilde{\rho}_1$, $\tilde{\sigma}$, $\tilde{\rho}_3$ 等は夫々 ρ_1, σ, ρ_3 の matrix element の conjugate をとったもの*

(10), (11) が relativistic な electron theory の fund. eq で Dirac の equation と呼ばれる。†

(10) (11) が Lorentz invariant なことを示すには、$\frac{W}{c}=p_0$, suffix x, y, z の代りに 1, 2, 3 とかき suffix の二つあるものは 0, 1, 2, 3 について sum up することを約束する。又 ~~(10) は~~ $\alpha_0 = 1$ と置く。(10) (11') は夫々

$$\left\{\alpha_\mu\left(p_\mu+\frac{e}{c}A_\mu\right)+\alpha_4 mc\right\}\psi=0 \qquad (12)$$

$$a_{\mu\nu} a_{\mu\varkappa} = \delta_{\nu\varkappa}.$$

$$a_{\mu\varkappa} \alpha_\varkappa$$

$\cancel{\alpha_{\mu\varkappa}}$

(15) (16) は
~~(12) (13)~~ は。

$$\{\bar{\gamma}\alpha_\mu \gamma a_{\mu\nu}(\quad) + \bar{\gamma}\alpha_m \gamma mc\} \psi' = 0$$

$$\bar{\Psi}' \bar{\gamma} \{\bar{\gamma}\alpha_\mu \gamma a_{\mu\nu}(\quad) + \bar{\gamma}\alpha_m \gamma mc\} \psi = 0$$

$$\therefore \bar{\gamma}\alpha_\mu \gamma = \alpha_\nu a_{\nu\mu} \quad (19)$$

$$\bar{\gamma}\alpha_m \gamma = \alpha_m$$

が満足されるならば γ^{-1}, ($\bar{\gamma}^{-1}$) が存在するなら, wave eq は

$$\alpha'_\mu \alpha'_\nu + \alpha'_\nu \alpha'_\mu$$
$$= \gamma \alpha_\varkappa \alpha_\lambda \gamma^{-1} a_{\varkappa\mu} a_{\lambda\nu} = \gamma \alpha_\mu \alpha_\nu \gamma^{-1}$$
$$= \delta_{\mu\nu}. \qquad \text{etc}$$

$$\bar{\Psi}\{\alpha_\mu(p_\mu + \tfrac{e}{c}A_\mu) + \alpha_m mc\} = 0 \qquad (13)$$

Lorentz transf をやると.

$$p_\mu = a_{\mu\nu} p'_\nu \qquad A_\mu = a_{\mu\nu} A'_\nu \qquad (14)$$

従って, (12) (13) は

$$\{\alpha_\mu a_{\mu\nu}(p'_\nu + \tfrac{e}{c}A'_\nu) + \alpha_m mc\} \psi = 0 \quad (15)$$

$$\bar{\Psi}\{\quad \text{〃} \quad\} = 0 \quad (16)$$

今. 新しい axes に関する wave fn ψ' と元の wave fn ψ の間に linear な関係があると仮定し,

$$\psi' = \gamma\psi \qquad \psi = \gamma^{-1}\psi' \qquad (17)$$

とおく. 但し γ は α's と同じく, 4行4列の matrix として表はされる如き operator.

すると. $\bar{\Psi}' = \bar{\Psi}\bar{\gamma} \qquad \bar{\Psi} = \bar{\Psi}'\bar{\gamma}^{-1}$ (18)

~~すると $\bar{\gamma}$ (15) (16) は, に書いた, それから γ, $\bar{\gamma}$ をかける~~ ~~γ は unitary と仮定し, $\gamma^{-1} = \bar{\gamma}$~~ (19)

~~α_μ~~

~~そこで~~. $\gamma \alpha_\mu a_{\mu\nu} \bar{\gamma} = \alpha'_\nu \qquad \gamma\alpha_m\bar{\gamma} = \alpha'_m$

とおけば. (15) (16) に書いた, それから γ, $\bar{\gamma}$ をかけたものは.

$$\bar{\gamma}^{-1}\alpha_\mu a_{\mu\nu}\bar{\gamma} = \alpha''_\nu \qquad \bar{\gamma}^{-1}\alpha_m\bar{\gamma} = \alpha''_m$$

$$\Psi' \begin{cases} \alpha_\nu^*\left(p_\nu' + \frac{e}{c}A_\nu'\right) + \alpha_4^* i m c \} \Psi' = 0 & (\cancel{19})(20) \\ \} = 0 & (\cancel{20})(21) \end{cases}$$

となり、元の coord に於けると全く同じ形の wave eq が成立する。

∴ 問題は、(19)を満足する様な γ, γ* なる ~~unitary~~ operator の存在を証明すればよい。

~~任意の Lorentz transf は~~ xt-plane 内の θ なる hyperbolic angle の rotation.

$$\left.\begin{aligned} p_0 &= p_0' \cosh\theta + p_1' \sinh\theta \\ p_1 &= p_0' \sinh\theta + p_1' \cosh\theta \\ p_2 &= p_2' \qquad p_3 = p_3' \end{aligned}\right\} \quad (22)$$

の type のものと、ordinary space に於ける x-axis のまはりの rotation.

$$\left.\begin{aligned} p_0 &= p_0' \qquad p_1 = p_1' \\ p_2 &= p_2' \cos\theta + p_3' \sin\theta \\ p_3 &= -p_2' \sin\theta + p_3' \cos\theta \end{aligned}\right\} \quad (23)$$

の type のものをいくつか組合せると任意の Lorentz transformation が得られる。

所で(22)の変換に対しては $\gamma = e^{\frac{1}{2}\theta\alpha_1} = \bar{\gamma}$ とおけば (19)は満足される。又 (23) の場合には $\gamma^{-1} = e^{-\frac{1}{2}\theta\alpha_1}$

$$\gamma = e^{-\frac{1}{2}\theta\alpha_2\alpha_3} \qquad \bar{\gamma} = e^{\frac{1}{2}\theta\alpha_2\alpha_3} = \gamma^{-1}$$

とてればよい。
∴ 任意の Lorentz transformation に対して、wave eq の形は invariant である。

electron が time t に於て一点 xyz にある prob は

$$\sum_{i=1}^{4} \bar{\psi}_i(xyzt)\,\psi_i(xyzt)$$

で与へられると考へる。之を symbol で書けば、

$$\bar{\Psi}\alpha_0\Psi.$$

そこで、 $s_\mu = \bar{\Psi}\alpha_\mu\Psi \qquad \mu = 0,1,2,3.$

を考へると、

$$\begin{aligned} s_\mu' &= \bar{\Psi}'\alpha_\mu\Psi' \\ &= \bar{\Psi}\bar{\gamma}\alpha_\mu\gamma\Psi = \bar{\Psi}\cdot\bar{\gamma}\alpha_\mu\gamma\cdot\Psi \\ &= \Psi\alpha_\nu\Psi \cdot a_{\nu\mu} \\ \therefore\quad &= \cancel{s_\nu a_{\nu}}\; s_\nu a_{\nu\mu}. \end{aligned}$$

∴ s_μ は covariant vector.

$$s^0 = s_0 \qquad s^\mu = -s_\mu$$

は contravariant vector である。
(12) に $\bar{\Psi}$ をかけ、(13) に Ψ をかけて引くと、

$$\bar{\Psi}\cdot\alpha_\mu p_\mu\Psi - \bar{\Psi}\alpha_\mu p_\mu\Psi = 0$$

$$-i\hbar\left\{\bar{\Psi}\cdot\alpha_\mu\frac{\partial\Psi}{\partial x_\mu} + (\pm)\frac{\partial\Psi}{\partial x_\mu}\alpha_\mu\Psi\right\} = 0$$

$$\text{or}\quad \sum_\mu \frac{\partial s^\mu}{\partial x_\mu} = 0 \qquad (24)$$

であるから S^μ なる vector は electron の probability density 及び prob. current density をあらはすと考へられる。従って これに $-e$ をかけたものが ~~elec~~ charge 及び current density ~~をあらはす~~ の distribution をあらはすと考へられる。

前の時間の (19), (19') になる式は

$$\left.\begin{array}{l}\overline{\gamma\alpha_\nu\gamma} = \alpha_\mu a_{\mu\nu} \\ \overline{\gamma\alpha_m\gamma} = a_m\end{array}\right\} (19)$$

$$\mathrm{rot}\,\mathbb{H} - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbb{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}\mathbb{I}$$

$$\mathrm{div}\,\mathbb{E} = 4\pi\rho.$$

$$\frac{1}{8\pi}(\mathbb{E}^2 + \mathbb{H}^2) = \frac{1}{8\pi}\left\{\left(\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial t}\right)^2 + (\mathrm{rot}\,\mathbb{A})^2\right\} = \frac{1}{8\pi}\{$$

$$+\frac{4}{c}\mathbb{I}\mathbb{A}$$

$$\delta\mathbb{A}\left(\frac{1}{4\pi}\Box\mathbb{A} + \frac{\mathbb{I}}{c}\right)$$

§ Interaction of Matter and Radiation

前の時間には一つの electron が与へられた electro-magnetic field で運動する場合を考へたが、もっと一般にいくつかの particle が存在する場合 ~~には~~ を relativistic に取扱ふ。~~これには第一に particle の間の相互作用の retardation~~ charged particles の間に働く electro-magnetic force は有限の velocity をもって一方から他へ伝へられる ことを考慮せねばならぬ ~~である~~。即ち ~~通常の Coulomb~~ retarded Potential を扱はねばならぬ。~~更に~~ 第二には ~~又他方からいへば~~、charge particles の間の相互作用をあらはす electromagnetic field は同時に又 radiation 或は photon 等をあらはすものである。であるから我々は classical な electromagnetic theory を適当に modify し、~~radiation~~ photon の考へを矛盾せぬ様にせねばならぬ。

そこで先づ物質の存在しない場合を考へて、~~vacuum における~~ Maxwell の eq は

$$\left.\begin{array}{ll}\mathrm{div}\,\mathbb{H} = 0 & \mathrm{rot}\,\mathbb{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbb{H}}{\partial t} = 0 \\ \mathrm{div}\,\mathbb{E} = 0 & \mathrm{rot}\,\mathbb{H} - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbb{E}}{\partial t} = 0\end{array}\right\} (29)$$

第一の式から、$\mathbb{H} = \mathrm{rot}\,\mathbb{A}$　また第二式から

$$\mathrm{rot}\left(\mathbb{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial t}\right) = 0 \quad \text{or} \quad \mathbb{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial t} = -\mathrm{grad}\,A_0$$

しかるに

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}(-\mathrm{grad}\,A_0) = -\mathrm{rot}\cdot\mathrm{rot}\,\mathbb{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 A}{\partial t^2}$$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \overset{\text{grad}}{\cancel{\text{div}}}\,\mathbf{B}$$

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\,\overset{\text{grad}}{\cancel{\text{div}}}\,\mathbf{B} - \text{grad}\,A_0'$$

∴ $\mathbf{A}, A_0$ の代りに $\mathbf{A}', 0$ をとり、その代り

$$\frac{1}{c}\frac{\partial B}{\partial t} = A_0$$

とつても $\mathbf{E}, \mathbf{H}$ は變化しない。

$\text{div}\,\mathbf{A} =$

若し transverse wave 丈を考へるなら、

$$\frac{c}{4\pi}[\mathbf{E}\,\mathbf{H}]_n = S_n = 0$$

$$\left[\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \text{rot}\,\mathbf{A}\right]_n = 0$$

先づ第一の式から

$$\mathbf{H} = \text{rot}\,\mathbf{A}$$

第二の式から

$$\text{rot}\left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right) = 0$$

$$\therefore\ \mathbf{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\text{grad}\,A_0$$

第三の式から

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\text{div}\,\mathbf{A} = -\Delta A_0$$

第四の式から

$$\text{rot}\,\text{rot}\,\mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\text{grad}\,A_0$$

$$\text{grad}\,\text{div}\,\mathbf{A} - \Box\mathbf{A} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\text{grad}\,A_0$$

$$\therefore\ \mathbf{H} = \text{rot}\,\mathbf{A} \qquad \mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}.$$

又第三式から $\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\text{div}\,\mathbf{A} = 0$,
∴或る瞬間に於て $\text{div}\,\mathbf{A} = 0$ が満足されれば常に満足される。
故に $\text{div}\,\mathbf{A} = 0$ とおけば第四の式から

$$\text{div}\,\mathbf{A} = 0$$
$$\Box\mathbf{A} = 0$$

今我々は volume V で完全な反射壁をもつ容器の中の field ~~を~~ は、壁の所で $A_t = 0$ ~~が壁に垂直~~ といふ條件で與へられる。此の場合を我々は Hohlraum-strahlung と稱する。

$$\Delta A_i + \frac{4\pi^2\nu_i^2}{c^2} A_i = 0$$
$$\operatorname{div} A_i = 0$$

$$\left(\cancel{\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial}\right) \quad \operatorname{div}[A B] = \operatorname{rot} A \cdot B - A \operatorname{rot} B$$
$$\cancel{\operatorname{rot} A_i \cdot B =}$$

$$\int (\operatorname{rot} A_i \operatorname{rot} A_k)\, dv$$
$$= +\int A_i \cdot \operatorname{rot} \cdot \operatorname{rot} A_k\, dv$$
$$+ \int \cancel{\operatorname{div}} [A_i \cdot \underset{0}{\underset{\parallel}{\operatorname{rot}}} A_k]\, dv$$
$$= \frac{4\pi^2\nu_k^2}{c^2}\int A_i A_k\, dv$$
$$= 4\pi^2\nu_k^2 \cdot 4\pi\, \delta_{ik}$$

$$E = -\frac{1}{c}\sum_i p_i A_i$$

それで $\Delta A_i + \frac{4\pi^2\nu_i^2}{c^2} A_i = 0$, $\operatorname{div} A_i = 0$, A_i ~~…~~ 境で $= 0$

を満足する solution ~~の complete~~ な互に orthogonal なものの complete set を A_i とすると、
$$A = \sum_i q_i A_i$$

とおけば、q_i は
$$\ddot{q}_i + 4\pi^2\nu_i^2 q_i = 0$$
を満足せねばならぬ。

A_i は
$$\int_V (A_i A_k)\, dv = \delta_{ik}\, 4\pi c^2$$
なる様に normalize されてゐるとする。
$$E = -\frac{1}{c}\sum_i \dot{q}_i A_i \qquad H = \sum_i q_i \operatorname{rot} A_i$$

であるから Field の Energy は
$$\frac{1}{8\pi}\int_V (E^2 + H^2)\, dv = \frac{1}{2}\left\{\sum_i \dot{q}_i^2 + \frac{1}{4\pi}\sum_{ik} q_i q_k \int_V \operatorname{rot} A_i \operatorname{rot} A_k\, dv\right\}$$
$$= \frac{1}{2}\sum_i (\dot{q}_i^2 + q_i^2 \cdot 4\pi^2\nu_i^2)$$

$\dot{q}_i = p_i$
$$\text{を } H = \frac{1}{2}\sum_i (p_i^2 + 4\pi^2\nu_i^2 q_i^2) = \sum_i H_i$$

とおけば eq. of motion は
$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

~~そこで~~ 古典論に於て 即ち Hohlraumstrahlung は結局に多くの Harmonic Oscillator の集りと考へられる.

之を Q.M. 的に直せば、
$$q_i p_k - p_k q_i = i\hbar\delta_{ik}$$
で H_i の eigenvalue は $W_i = h\nu_i(n_i+\frac{1}{2})$
n_i: 0 or pos. int
$$\cancel{H = \Sigma} \quad W = \sum_i h\nu_i n_i + \frac{1}{2}\sum h\nu_i$$
右辺の後項は constant で、field の状態に関係のない項であるから省けば、
$$W = \sum_i h\nu_i n_i$$
之等の式の中に ~~よって~~ light quanta の概念は性質は ~~已に~~ 含まれてゐる.

field を describe する ~~量に commute する~~
$$N_i = \frac{1}{2h\nu_i}(p_i^2 + 4\pi^2\nu_i^2 q_i^2 - 1)$$
~~となる~~ なる observable の eigenvalue は $n_i =$ 0, 1, 2, … であり、$n_1, n_2, \dots$ を与へることによって field の状態は完全に定まる.
之は互に独立な particle の集りの 2種のもの ~~場合に考へた~~ Bose-Einstein の場合と全く同じである.
であるから light quanta は Bose-Einstein の統計に従ふ particle であるといへる.

$$H_{i_1} = \mathrm{rot}\, A_{i_1}$$

$$H_{i_1} = \frac{8\sqrt{4\pi}\cdot c}{L^3}\, a_i \cdot \frac{2\pi}{L}[l_i a_{i_1}] \sin\frac{2\pi l_i x}{L} \sin \cdots \sin \cdots$$

$$H_{i_2} = \;\;\text{〃}\;\; \text{〃}\;\; [l_i a_{i_2}] \;\;\text{〃}$$

$$\cancel{E_i}\, H_i = \sum_{\substack{i \\ \mu=1,2}} q_{i\mu}\, \mathrm{rot}\, A_{i\mu}$$

$$E_i = -\frac{1}{c} \sum_{i,\mu} p_{i\mu} A_{i\mu}$$

$$E_{ix} H_{ix} - H_{ix} E_{ix} = \frac{i\hbar}{c} \frac{2^3 4\pi c^2}{L^3} \frac{2\pi}{L} \sum_{i,\mu} a_{i\mu x}(l_{iy} a_{i\mu z} - l_{iz} a_{i\mu y})$$

$=$

thermal equilibrium において 従って. ν_i なる frequency の radiation の ~~intensity~~ light quanta の数は 前の (26) によって.

$$n_i = \frac{N_i}{e^{-\alpha + \frac{h\nu_i}{kT}} - 1}$$

所が light quanta の数に制限がないから $\delta N = 0$ という条件は不必要. 即ち (24) において $\alpha = 0$ とおかねば ならぬ. 従って.

$$n_i = \frac{N_i}{e^{\frac{h\nu_i}{kT}} - 1}$$

さて. ~~ν_i なる frequency の~~ $V = L^3$. とおいて.

$$A_{i_1} = \frac{2^{3/2}\sqrt{4\pi}\, c}{L^{3/2}}\, a_{i,1} \sin\frac{2\pi l_i x}{L} \sin\frac{2\pi m_i y}{L} \sin\frac{2\pi n_i z}{L}$$

$$A_{i_2} = \frac{2^{3/2}\sqrt{4\pi}\, c}{L^{3/2}}\, a_{i,2} \;\;\text{〃}$$

但し. $a_{ix} l_i + a_{iy} m_i + a_{iz} n_i = 0 \qquad a_i l_i = 0$

$b_{ix} l_i + \cdots = 0 \qquad b_{i2} l_i = 0$

$a_{i_1} a_{i_2} = 0$.

$\nu_i = c\sqrt{l_i^2 + m_i^2 + n_i^2}/L$, Eigenschwingung

∴ ν_ε と $\nu_\varepsilon + d\nu_\varepsilon$ の間にある ~~vibration~~ の数は.

$$4\pi V \frac{\nu_\varepsilon^2}{c^3} d\nu_\varepsilon \times 2$$

∴ ν_ε と $\nu_\varepsilon + d\nu_\varepsilon$ の間にある freq の light quanta の数は

$$n(\nu)\,d\nu = \frac{8\pi \nu_\varepsilon^2 V}{c^3} \frac{d\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

次に matter が存在し、charge 及び current が夫々 ρ, I なる density で distribute して居るならば、field eq は

$$\mathrm{rot}\,H - \frac{1}{c}\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} I$$

$$\mathrm{div}\,E = 4\pi\rho$$

となる。field の energy は

$$\frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + H^2 \mp \rho A_0 \mp I A\right) dv$$

$A_0 = 0$ ととってあるから

$$= \frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + H^2 - I A\right) dv.$$

~~$\int I A\, dv$ は matter の存在による perturbation energy~~. これに material system 自身の energy H_m を加へたものが total energy. この中 $\frac{1}{8\pi}\int (I A) dv$ は matter と radiation の interaction による perturbation energy ~~と考へられる~~ と考へねばならぬ.

unperturbed system の energy

$$H = \frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + H^2\right) dv +$$

従って $(\nu, \nu + d\nu)$ の間の frequency の radiation の intensity は

$$\frac{8\pi h\nu^3 d\nu}{c^3}\;\frac{d\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

これは Planck の式に他ならぬ。

この様に radiation を Fourier component に分けて考へれば、その amplitude p_i は p_i, q_i を含み、従って non-commutative なものでなければならぬ。~~云ひ換へれば. E, H は non-commutative なものでなければならぬ.~~ 例へば

$$E_x H_x - H_x E_x = 0$$

$$E_x H_y - H_y E_x =$$

即ち electromagnetic wave は quantize されておらねばならぬ.

このかはりに、~~であるから~~、始めから field quantity 同士を non-commutative な量と考へて、一般的な理論を立てることが出来る。その方法は詳しくいへば長くなるが、要するに、classical にいつて、degree of freedom が無限（又は continuum）の場合に quantum mechanics の general principle を apply すればよい。

electromagnetic field の Lagrangian は

$$\bar{L}_r = \frac{1}{8\pi}\int (\mathbf{E}^2 - \mathbf{H}^2)\, dv \qquad \int L\, dv$$

$$= \frac{1}{8\pi}\int \left\{ \left(\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right)^2 - (\mathrm{rot}\, \mathbf{A})^2 \right\} dv$$

Maxwell の field eq は $\mathbf{A}$ の variation に対し $\int \bar{L}\, dt$ が extremum といふ條件から出てくる。
それ故 $\mathbf{A}$ を dynamical variable とすると、その canonical conjugate は

$$\frac{\partial L_r}{\partial \frac{\partial A_x}{\partial t}} = -\frac{1}{4\pi c}\left(-\frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}\right) = -\frac{1}{4\pi c} E_x .$$

従つて Hamiltonian は

$$\bar{H}_r = \int \frac{-1}{4\pi c}\mathbf{E}\cdot\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\, dv - \bar{L}_r = \frac{1}{8\pi}\int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2)\, dv = \int H\, dv$$

$$= \frac{1}{8\pi}\int \left\{ \mathbf{E}^2 + (\mathrm{rot}\, \mathbf{H})^2 \right\} dv .$$

$$A = \sum q_i A_i$$

$$E = -\frac{1}{c}\sum p_i A_i$$

$$\frac{1}{4\pi c}\left(E(r)A(r') - A(r')E(r)\right)$$

$=$

$$\int A_{\lambda i}^{(r)} f_\kappa(r)\, dv = c_i \int A_{\kappa i}^{(r)} A_{\lambda i}^{(r)}\, dv$$

$$f_\kappa(r) = \sum_{\kappa i} c_{\kappa i} A_{\kappa i}(r) \quad ; \quad \sum_\kappa \int A_{\kappa i}^{(r)} f_\kappa(r)\, dv = c_{\kappa i}\, 4\pi c^2$$

$$+\frac{1}{4\pi c^2}\int A_{\kappa i}^{(r)} A_{\lambda i}^{(r')} f_\kappa(r')\, dv'$$

$$= f_\kappa(r)\, \delta_{\kappa\lambda}.$$

$$f_\lambda(r) = \sum_{i,\kappa} c_{i\kappa}^{(\lambda)} A_{i\kappa}(r)$$

$$\int A_{j\lambda}^{(r)} f_\lambda(r)\, dv = A_{j\lambda}$$

V. R. は

$$\frac{1}{4\pi c}\left(E_\kappa^{(r)} A_\lambda^{(r')} - A_\lambda^{(r')} E_\kappa^{(r)}\right) = i\hbar\,\delta(rr')\,\delta_{\kappa\lambda}$$

$$\frac{1}{4\pi c}\left(E_x(r)\, A_{y\lambda}(r') - A_{y\lambda}(r')\, E_x(r)\right) = 0,$$

etc $\qquad \kappa, \lambda = x, y, z$

この関係は次の $A = \sum_i q_i A_i \qquad E = -\frac{1}{c}\sum_i p_i A_i$

$$q_i p_j - p_j q_i = i\hbar\, \delta_{ij}$$

$$\int (A_i A_j)\, dv = 4\pi c^2$$

なる関係と equivalent である。†

$$\because \quad \frac{1}{4\pi c}\left(E_\kappa(r)\, A_\lambda(r') - A_\lambda(r')\, E_\kappa(r)\right)$$

$$= -\frac{1}{4\pi c^2}\sum_{i,j}(p_i q_j - q_j p_i)\, A_{\kappa i}^{(r)} A_{\lambda j}^{(r')}$$

$$= +\frac{i\hbar}{4\pi c^2}\, A_{\kappa i}(r)\, A_{\lambda i}(r') = i\hbar\, \delta(rr')\,\delta_{\kappa\lambda}.$$

† 但しこの場合には transverse wave の外に longitudinal wave が多く含まれてゐる。

次に electron の field $\psi, \bar{\psi}$ に対しても同様な考へを使ふ.

Lagrangian として

$$\bar{L}_e = \bar{\psi}\left\{ i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + eA_0 + c(\alpha, \overset{-i\hbar\,\mathrm{grad}}{p} + \frac{e}{c}A) + \alpha_m mc^2 \right\}\psi$$

$$L_e = \int \bar{L}_e \, dv$$

をとると Dirac の eq は $\psi, \bar{\psi}$ の variation に対して

$$\int L_e \, dt$$

が extremum といふ條件から出てくる.

ψ の canonical conjugate は

$$\frac{\partial L_e}{\partial \frac{\partial \psi_i}{\partial t}} = i\hbar\bar{\psi}_i \qquad i = 1, 2, 3, 4$$

從って vertauschungsrel は

$$\psi_i(x) \cdot i\hbar\bar{\psi}_j(x') - i\hbar\bar{\psi}_j(x')\psi_i(x) = i\hbar\,\delta(x, x')\delta_{ij}$$

or

$$\psi_i(x)\bar{\psi}_j(x') - \bar{\psi}_j(x')\psi_i(x) = \delta(x, x')$$

$$\psi_i(x)\psi_j(x') - \psi_j(x')\psi_i(x) = 0 \quad \text{etc}$$

となる筈であるが. この假定から出てくる結果は ~~particle~~ が electron は Bose-Einstein の統計に從ふことになる. これは實際とあはない.

従って Hamiltonian は

$$\bar{H}_e = \int \sum_i i\hbar \bar{\Psi}_i \frac{\partial \psi_i}{\partial t}\, dv - \bar{L}$$

$$= \int \bar{\Psi}\left\{-eA_0 - c\left(\alpha, -i\hbar\,\mathrm{grad} + \frac{e}{c}A\right) + \alpha_m mc^2\right\}\psi\, dv$$

$$= \int H_e\, dv$$

Lagrangian として $\bar{L} = L_e + L_r$

但し L_r の決定には vector potential A の他に scalar potential A_0 をも考慮するのが普通で、

$$\left.\begin{aligned} E &= -\mathrm{grad}\, A_0 - \frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t} \\ &\cancel{\mathrm{grad}}\ \frac{1}{c}\frac{\partial A_0}{\partial t} + \mathrm{div}\, A = 0 \end{aligned}\right\}$$

とおく。

すると A_0 の canonical conjugate は恒等的に 0 となる。この点は Quanten E.D. の一つの難点であるが之をさけるには始めから $A_0 = 0$ とおくか又は、Lagrange として

$$L_r = \frac{1}{8\pi}\left\{(E^2 - H^2) + \left(\frac{1}{c}\frac{\partial A_0}{\partial t} + \mathrm{div}\, A\right)^2\right\}$$

をとり、Hamiltonian を作り、終りになって $\frac{1}{c}\frac{\partial A_0}{\partial t} + \mathrm{div}\, A = 0$ なる Nebenbedingung を入れるかである。すると A_0 の Can. conj は $\frac{1}{4\pi c}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial A_0}{\partial t} + \mathrm{div}\, A\right) = E_0/4\pi c$ で、Hamiltonian は

$$H_r = \frac{1}{8\pi}(E^2 + H^2) + E_0$$

このかわりに

$$\psi_i(x)\bar{\Psi}_j(x') + \bar{\Psi}_j(x')\psi_i(x) = \delta(xx')\delta_{ij}$$

$$\psi_i(x)\psi_j(x') + \psi_j(x')\psi_i(x) = 0 \quad \text{etc}$$

とおけば、Fermi-Dirac の統計に従ふことになる。

electron と radiation の部分を一緒にした system に対しては Hamiltonian として

$$\bar{H} = \bar{H}_e + \bar{H}_r = \int (H_e + H_r)\, dv = \int H\, dv.$$

をとればよい。任意の field quantity $F(xyz)$ に対する equation of motion は

$$i\hbar \frac{\partial F(xyz)}{\partial t} = F(xyz)\bar{H} - \bar{H}F(xyz)$$

で与へられる。

故に F として $\psi_i(xyzt)$, $\bar{\Psi}_i(xyzt)$ をとれば合同 Dirac の eq が出て来、$E_x(xyzt)$ etc $H_x(xyz)$ etc をとれば、charge, current のある時の field equation

$$\mathrm{curl}\, E + \frac{1}{c}\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \qquad \mathrm{curl}\, H - \frac{1}{c}\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{4\pi i}{c}$$

$$\mathrm{div}\, E = 4\pi\rho \qquad \mathrm{div}\, H = 0$$

が得られる。但し

$$\rho = -e\sum_i \bar{\Psi}_i\psi_i \qquad i = -e\sum_{i,j} \bar{\Psi}_i \alpha_{ij}\psi_j$$

$$V_i = \cancel{\tfrac{1}{4\pi}} \int \mathfrak{I} A_i \, dv.$$

~~これを p_i, q_i を使~~
従って. system の total energy は

$$H = H_m + \frac{1}{8\pi}\int (\mathfrak{E}^2 + \mathfrak{H}^2)\, dv \; \cancel{-\tfrac{1}{4\pi}} \int \mathfrak{I} \mathbf{A}\, dv$$

$p_i q_i$ (or N_i) を使って書きかへると

$$H = H_m + \sum_i h\nu_i (N_i + \tfrac{1}{2}) + \cancel{\tfrac{1}{8\pi}} \sum_i q_i V_i$$

最後の項を matter と radiation の interaction による perturbation energy と考へれば unperturbed system の energy は

$$H_0 = H_m + \sum_i h\nu_i (N_i + \tfrac{1}{2})$$

perturbat. energy は $H' = \sum_i q_i V_i$

今 matterial system を discribe する canonical variables を $J_1 w_1, J_2 w_2, \cdots J_l, w_l$ とし、且 $J_1, J_2, \cdots J_l$: constant of motion とする. H_m は J's 丈の函数で. V_i は J's ω's ~~丈~~ の函数である. 従って

$$H_0 = H_m(J) + \sum_i h\nu_i (N_i + \tfrac{1}{2})$$

$$H' = \sum_i q_i V_i (J, \omega)$$

$$N_i p_i - p_i N_i = \frac{1}{2h\nu_i}\, 4\pi^2\nu_i^2 \cdot 2i\hbar\, q_i = 2\pi\nu_i\, i\, q_i$$

$$N_i = \frac{1}{2h\nu_i}\left(p_i^2 + 4\pi^2\nu_i^2 q_i^2 - 1\right)$$

$$N_i q_i - q_i N_i = \frac{-1}{2h\nu_i}\, p_i \cdot 2i\hbar = \frac{-ip_i}{2\pi\nu_i}$$

$$\cancel{(N_i q_i - q_i N_i) N_i - N_i (N_i q_i - q_0 N_i) = \frac{-i}{2\pi\nu_i}(-i\hbar)}$$

$$N_i''(N_i''|q_i|N_i') \cancel{N_i} (\quad) N_i' =$$

$$N_i(N_iq_i - q_iN_i) - (N_iq_i - q_iN_i)N_i$$
$$= (N_ip_i - p_iN_i)\frac{-i}{2\pi\nu_i}$$
$$= q_i$$

$$N_i''^2(N_i''|q_i|N_i') - 2N_i''(N_i''|q_i|N_i')N_i' + (N_i''|q_i|N_i')N_i'^2$$
$$= (N_i''|q_i|N_i')$$

$$(N_i'' - N_i' + 1)(N_i'' - N_i' - 1)(N_i''|q_i|N_i') = 0.$$

∴ $(N_i''|q_i|N_i') \neq 0$ なのは

unperturbed system の stationary state は J's の値及び N's の値によって characterize される。~~state を~~ ~~$J_1', J_2' \cdots N_1' N_2' \cdots$ とする。~~ time t_0 に於て system が $J_1 = J_1'$, $J_2 = J_2' \cdots$ $N_1 = N_1' \cdots$ なる state にあったとき、time t に於て、$J_1 = J_1'' \cdots$ $\cdots N_1 = N_1' \cdots$ なる state にある prob は 前章に述べた如く initial state と final state の energy が等しい時のみ大きな値をとる。~~ある~~

$H_m(J') = W'$ ~~, H.~~ とすると

$$W' + \sum_i h\nu_i N' = W'' + \sum_i h\nu_i N''$$

$$\text{or}\quad W' - W'' = \sum h\nu_i (N'' - N')$$

の時大きな値をとる。前章(9)により、

$$\frac{2\pi}{\hbar}\left|(J_1'' J_2'' N'' \cdots |H'| J_1' J_2' N' \cdots)\right|^2 (t - t_0)$$

である。~~但し J_0 = H_0 は unperturbed energy value.~~

H_0 をとる。

~~J_1 の on[?]~~

所で

$$(J''N''\cdots|H'|J'N'\cdots) = \sum_i (N_i''|q_i|N_i')\,\delta_{N_1''N_1'}\cdots\delta_{N_{i-1}''N_{i-1}'}$$
$$\times\ \delta_{N_{i+1}''N_{i+1}'}\cdots(J''|V_i|J')$$

で $(N_i''|q_i|N_i') \neq 0$ のは　$N_i'' = N_i' \pm 1$ の時丈で

$$(N_i'+1|q_i|N_i') = \sqrt{\frac{\hbar(N_i'+1)}{4\pi\nu_i}}\, e^{i\varphi_i}$$

$$(N_i'-1|q_i|N_i') = \sqrt{\frac{\hbar N_i'}{4\pi\nu_i}}\, e^{-i\varphi_i}$$

従つて. Transition Prob

$$\frac{2\pi}{\hbar}|(J''N''|H'|J'N')|^2(t-t_0)$$

が0でないのは. 例へば

$N_1''=N_1'$ . . . $N_{i-1}''=N_{i-1}'$ $N_i''=N_{i}'\pm1$ $N_{i+1}''=N_{i+1}'$ . . .

の如き場合まで. このときは. 夫々

$$\frac{2\pi}{\hbar}(t-t_0)|(J''|V_i|J')|^2\cdot\frac{\hbar(N_i'+1)}{4\pi\nu_i} = \frac{t-t_0}{2\nu_i}|(J''|V_i|J')|^2(N_i'+1)$$

或 $\frac{2\pi}{\hbar}(t-t_0)|(J''|V_i|J')|^2\cdot\frac{\hbar N_i'}{4\pi\nu_i}$

$$= \frac{t-t_0}{2\nu_i}|(J''|V_i|J')|^2 N_i'$$

となる.

但し. $W'-W''=\pm h\nu_i$

前者は material system が energy W' なる state から W'' なる state へ移り. 同時に ν_i なる frequency の light quanta が emit される Prob をあらはし. 後者は absorb される Prob をあらはす.

radiation の emit される方向や polarization の方向を論せず. 只 (ν と $\nu+d\nu$) の間の frequency の

$$\mathrm{I} = 2\pi$$

即ち振動数 ν に N(ν)dν の photon (~~light qu.~~) が存在する時

rad. が emit される prob といへば：

$$\frac{2\pi}{\hbar}(t-t_0)\left|(J''|V_i|J')\right|^2 \frac{hV}{4\pi\nu}\left(N(\nu)+\frac{8\pi\nu^2}{c^3}\right)d\nu$$

absorb される prob は

$$\frac{2\pi}{\hbar}(t-t_0)\left|(\quad '' \quad)\right|^2 \frac{hV}{4\pi\nu} N(\nu)\,d\nu .$$

$(\nu, \nu+d\nu)$ の間の freq の rad の energy density を $\rho(\nu)d\nu$ とすると

$$\rho(\nu) = h\nu N(\nu)$$

$$\frac{V}{2h\nu^2}(t-t_0)\left|(J''|V_i|J')\right|^2\left(\rho(\nu)+\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\right)d\nu$$

atom に比して radiation の波長が長い場合には、これは、~~また~~、前に出した correspondence principle から出した光の intensity の式と一致する。又今の場合には spontaneous emission prob が出てくることである。