

## 目次

<b>1</b>	<b>量子力学の初等的まとめ</b>	<b>1</b>
1.1	基本的仮定	1
1.2	エーレンフェストの定理	5
1.3	ディラックの表記法	7
1.4	エルミート演算子	8
1.5	演算子の関数	12
1.6	不確定性関係	13
1.7	定常状態	15
1.8	運動量の固有状態	17
1.9	平面波と波束の運動	18
1.10	時間とエネルギーの不確定性関係	22
1.11	回折と干渉	23
<b>2</b>	<b>1次元の束縛状態</b>	<b>26</b>
2.1	1次元シュレーディンガー方程式の一般的性質	26
2.2	井戸型ポテンシャル	28
2.3	無限に深い井戸	31
2.4	デルタ関数型ポテンシャル	33
2.5	周期的ポテンシャル	36
2.6	一様重力での束縛状態	39
2.7	指数関数を含むポテンシャル	41
2.8	パリティ	44
2.9	無限遠における波動関数	45
2.10	離散的エネルギーと節の個数	46
2.11	シュレーディンガー方程式の数値解法	50
<b>3</b>	<b>1次元の散乱</b>	<b>56</b>
3.1	境界条件	56
3.2	デルタ関数型ポテンシャル	58
3.3	階段型ポテンシャル	59
3.4	箱型または井戸型ポテンシャル	59
3.5	解析的に解ける例	63
3.6	近似的解法	68
3.7	波束の散乱	71
3.8	時間に依存するシュレーディンガー方程式の数値解法	74

<b>4</b>	<b>調和振動子</b>	<b>79</b>
4.1	固有値と固有関数	79
4.2	零点エネルギーと不確定性	85
4.3	古典力学との関係	86
4.4	コヒーレント状態	89
4.5	2次元等方調和振動子	95
<b>5</b>	<b>角運動量</b>	<b>98</b>
5.1	角運動量の定義	98
5.2	可換な演算子と同時固有関数	99
5.3	角運動量の固有値と固有関数	100
5.4	軌道角運動量と球面調和関数	103
5.5	角度と不確定性関係	108
5.6	角運動量の行列表現	110
5.7	スピン	113
5.8	スピンの行列表現	115
5.9	射影演算子と密度行列演算子	120
5.10	スピンの歳差運動と磁気共鳴	123
5.11	角運動量の合成	127
5.12	ベルの不等式	134
5.13	回転と角運動量	136
5.14	ベクトル場とスピン1	139
5.15	ウィグナー・エッカルトの定理と射影定理	141
<b>6</b>	<b>中心力での束縛状態</b>	<b>145</b>
6.1	古典力学	145
6.2	量子力学での重心運動の分離	145
6.3	動径方向の波動関数	146
6.4	3次元井戸型ポテンシャル	151
6.5	クーロンポテンシャル	153
6.6	放物線座標	156
6.7	ルンゲ・レンツ ベクトル	159
6.8	3次元等方調和振動子	163
6.9	スピン・軌道相互作用	167
6.10	2次元の中心力	168
6.11	中心力ポテンシャルでの数値解法	170
<b>7</b>	<b>磁場中の荷電粒子</b>	<b>171</b>
7.1	古典力学	171
7.2	量子力学	172
7.3	ゲージ不変性	174
7.4	連続の方程式	175
7.5	一様磁場	176

7.6	アハラノフ・ボーム効果	181
7.7	モノポール	185
7.8	ゼーマン効果	187
<b>8</b>	<b>定常状態の近似法</b>	<b>190</b>
8.1	摂動展開	190
8.2	縮退していない場合 (1 次の摂動)	191
8.3	縮退していない場合 (2 次の摂動)	194
8.4	摂動展開の収束性とパデ近似	201
8.5	縮退している場合 (1 次の摂動)	203
8.6	シュタルク効果	213
8.7	縮退している場合 (2 次の摂動)	218
8.8	変分法	221
<b>9</b>	<b>WKB 近似 (準古典近似)</b>	<b>227</b>
9.1	WKB 近似	227
9.2	回帰点近傍の解と接続条件	229
9.3	ボーア・ゾンマーフェルトの量子化条件	232
9.4	トンネル効果	235
<b>10</b>	<b>時間に依存する場合の近似法</b>	<b>239</b>
10.1	摂動展開	239
10.2	時間依存の表し方	241
10.3	ハイゼンベルグ方程式	245
10.4	時間に依存しない摂動	247
10.5	周期的摂動	251
10.6	強制振動	254
10.7	状態密度	259
10.8	断熱近似	261
10.9	ベリー位相	262
<b>11</b>	<b>散乱問題</b>	<b>266</b>
11.1	自由粒子	266
11.2	散乱断面積と境界条件	267
11.3	ボルン近似	271
11.4	中心力ポテンシャルと部分波展開	273
11.5	位相のずれの積分公式	276
11.6	井戸型ポテンシャルによる散乱	278
11.7	剛体球による散乱	283
11.8	ヨスト関数と S 行列の解析性	288
11.9	分散式とレビンソンの定理	300
11.10	クーロン散乱	303
11.11	位相のずれと数値計算	311

<b>12 同種粒子系</b>	<b>313</b>
12.1 状態の対称化	313
12.2 2粒子系	315
12.3 ヘリウム原子	320
12.4 置換演算子と状態の対称化	326
12.5 相互作用しない同種粒子系	331
12.6 ハートリー・フォック近似	333
12.7 和則	342
12.8 第二量子化 (フェルミオン)	344
12.9 第二量子化 (ボソン)	352
<b>13 場の量子化</b>	<b>355</b>
13.1 正準量子化	355
13.2 シュレーディンガー方程式の量子化	356
13.3 真空中の古典電磁場	358
13.4 自由な電磁場の量子化	361
13.5 荷電粒子と電磁場の相互作用	365
<b>14 ブラ・ケットによる量子力学の定式化</b>	<b>374</b>
14.1 ブラベクトルとケットベクトル	374
14.2 演算子	375
14.3 固有値と固有ベクトル	376
14.4 行列表現	379
14.5 可換な観測量	380
14.6 連続的固有値	381
14.7 位置と運動量, 波動関数	383
<b>15 時間反転</b>	<b>389</b>
15.1 反線形演算子	389
15.2 反線形演算子の表現	390
15.3 時間反転: スピン 0 の場合	391
15.4 時間反転: スピンが 0 でない場合	394
<b>16 数学的補足</b>	<b>397</b>
16.1 レビ・チビタの記号	397
16.2 合成関数の高階微分	398
16.3 ディラックのデルタ関数	398
16.4 フーリエ変換	401
16.5 複素積分	404
16.6 鞍点法	409
16.7 極座標, 円柱座標, 放物線座標	410
16.8 曲線座標でのラプラシアン	413
16.9 ラグランジュの未定乗数法	415

16.10 汎関数微分 . . . . .	417
<b>17 特殊関数</b>	<b>419</b>
17.1 エルミート多項式 . . . . .	419
17.2 ルジャンドル多項式 . . . . .	421
17.3 球面調和関数 . . . . .	426
17.4 ガンマ関数とベータ関数 . . . . .	430
17.5 球ベッセル関数 . . . . .	434
17.6 ベッセル関数 . . . . .	441
17.7 合流型超幾何関数 . . . . .	444
17.8 超幾何関数 . . . . .	448
17.9 ラゲール多項式 . . . . .	450
<b>18 漸近形</b>	<b>453</b>
18.1 合流型超幾何関数の漸近形 . . . . .	453
18.2 エアリー関数 . . . . .	459
18.3 エルミート多項式の漸近形 . . . . .	466
<b>索引</b>	<b>470</b>

## 参考文献

ディラック	量子力学 (岩波書店)
J. J. サクライ	現代の量子力学 上, 下 (吉岡書店) Modern Quantum Mechanics ( Addison-Wesley Pub., 1995 )
シッフ	量子力学 上, 下 (吉岡書店)
メシア	量子力学 1, 2, 3 (東京図書) A. Messiah, Quantum Mechanics ( Dover Pub., 1999 )
ランダウ, リフシッツ	量子力学 1, 2 (東京図書), 量子力学 (ちくま学芸文庫)
マンドル	量子力学 (丸善) F. Mandl, Quantum Mechanics ( Wiley, 1992 )
猪木, 川合	量子力学 I, II (講談社)
湯川, 豊田	岩波講座 現代物理学の基礎 [第 2 版] 3, 4 量子力学 I, II (岩波書店)
河原林	岩波講座 現代の物理学 3, 量子力学 (岩波書店)
山内恭彦, 武田暁	復刊 大学演習 量子物理学 (裳華房)
朝永振一郎	量子力学 I, II (みすず書房)
A. Galindo, P. Pascual	Quantum Mechanics I, II ( Springer-Verlag, 1990 )

## 1 量子力学の初等的まとめ

### 1.1 基本的仮定

古典力学ではニュートンの運動方程式  $m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$  を運動の第2法則という公理ないし仮定として認めたように, 量子力学にある程度慣れるまで, 次のことを仮定として認めなさい。古典力学との対応関係などによる理由付けを行うことができるが, 結局のところ仮定である。以下の形式は実用上最もよく使われる形式であるが, 実は, 量子力学の1つの表現形式にすぎない。

古典力学では粒子の位置  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  は時間の関数であるが, 量子力学では  $\mathbf{r}$  は時間とは独立な空間の位置を表す変数である。また, 3つの変数  $x, y, z$  の関数  $f(x, y, z)$  を単に  $f(\mathbf{r})$  と書く。

#### 仮定 1

$\hbar = h/2\pi$  ( $h$  はプランク定数) とする。古典力学における運動量  $\mathbf{p}$  は, 量子力学では微分演算子  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$  になる。成分で書けば

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

である。演算子であることを示すため, 記号の上の  $\wedge$  を付けて表す。ただし, 演算子であることが自明な場合には省略することもある。

次の2式

$$\hat{p}_x x f(\mathbf{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x f(\mathbf{r}) = -i\hbar \left( f(\mathbf{r}) + x \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial x} \right), \quad x \hat{p}_x f(\mathbf{r}) = -i\hbar x \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial x}$$

の差をとれば

$$(x \hat{p}_x - \hat{p}_x x) f(\mathbf{r}) = i\hbar f(\mathbf{r})$$

である。 $f(\mathbf{r})$  は任意の関数であるから,  $f(\mathbf{r})$  を省略して, この関係式を単に

$$x \hat{p}_x - \hat{p}_x x = i\hbar$$

と書く。一般に, 演算子を含む関係式は任意関数に作用したときに成り立つ関係を表す。2つの演算子  $\hat{A}, \hat{B}$  に対して  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$  で定義される  $[\hat{A}, \hat{B}]$  を交換子という。上の関係式は  $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$  である。 $x, y, z$  成分を添字 1, 2, 3 で表すと

$$\begin{aligned} [x_i, \hat{p}_j] f(\mathbf{r}) &= (x_i \hat{p}_j - \hat{p}_j x_i) f(\mathbf{r}) = -i\hbar \left( x_i \frac{\partial f}{\partial x_j} - \frac{\partial x_i f}{\partial x_j} \right) \\ &= -i\hbar \left( x_i \frac{\partial f}{\partial x_j} - \frac{\partial x_i}{\partial x_j} f - x_i \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \end{aligned}$$

$i = j$  のとき  $\partial x_i / \partial x_j = 1$ ,  $i \neq j$  のとき  $\partial x_i / \partial x_j = 0$  であるから, 交換関係

$$[x_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad [x_i, x_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (1.1)$$

が成り立つ。ただし

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

はクロネッカーのデルタ記号である。 $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$  は微分する順番を変えても同じであることを意味する。量子力学では, 交換関係が重要な働きをする。

### 仮定 2

ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  中の質量  $m$  の粒子の運動に対して、次の微分方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t), \quad \hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

を満たす関数  $\psi(\mathbf{r}, t)$  を考える。ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  中を運動している粒子の位置を時刻  $t$  に測定すると、点  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  近傍の微小体積  $d^3r = dx dy dz$  に粒子を見出す相対的確率は

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$$

である。(1.2) を **時間に依存するシュレーディンガー方程式** という。 $H$  は古典力学でのハミルトニアン、つまりエネルギーに対応する。

古典力学では、粒子の位置は、運動方程式から時間の関数として一意に決まる。一方、量子力学では、粒子の位置を観測すると、古典力学と同様に粒子は必ずある一点  $\mathbf{r}$  に見出されるが ( 粒子の一部分を見出すことはない )、どの点に見出すかは観測するまで分からない。決定できるのは見出す確率  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$  だけである。古典力学に比べれば非常に不確定であるが、古典力学が適用できない微視的世界の性質である。

$\psi(\mathbf{r}, t)$  が実数ならば (1.2) の左辺は純虚数になり、一方、右辺  $\hat{H}\psi(\mathbf{r}, t)$  は実数であるから、(1.2) の解としては  $\psi(\mathbf{r}, t) = 0$  という無意味な解しかない。したがって、 $\psi(\mathbf{r}, t)$  は複素数でなければならない。古典力学でも物理量を複素数で扱うことがあるが、これは実数で扱うよりも解法が簡単で見通しがよくなるためであって、本質的には複素数を必要としない。

$\psi(\mathbf{r}, t)$  を **波動関数** という。また、粒子は **状態**  $\psi(\mathbf{r}, t)$  にあるという。状態という概念は量子力学における最も基本的概念である。量子力学では、この波動関数からすべての物理的情報が得られる。(1.2) は  $\psi$  について 1 次 (線形) であるから、 $C$  を定数とすると、 $\psi(\mathbf{r}, t)$  が (1.2) を満たすならば、 $C\psi(\mathbf{r}, t)$  も (1.2) を満たす。また、相対的確率は  $\psi(\mathbf{r}, t)$  から求めても  $C\psi(\mathbf{r}, t)$  から求めても同じである。したがって、 $\psi(\mathbf{r}, t)$  も  $C\psi(\mathbf{r}, t)$  も同じ状態を表す。この定数倍の不定性は、波動関数を **規格化** すればなくなる。一般的には、 $\psi_1(\mathbf{r}, t), \psi_2(\mathbf{r}, t), \dots$  が (1.2) を満たすとき、これらの線形結合

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_i C_i \psi_i(\mathbf{r}, t), \quad C_i = \text{複素数の定数}$$

もまた (1.2) の解である。これを **重ね合わせの原理** といい非常に重要な性質である。例えば

$$\psi(\mathbf{r}, t) = C_1 \psi_1(\mathbf{r}, t) + C_2 \psi_2(\mathbf{r}, t) \quad \text{のとき} \quad |\psi|^2 = |C_1 \psi_1|^2 + |C_2 \psi_2|^2 + 2\text{Re}(C_1^* C_2 \psi_1^* \psi_2)$$

である。確率密度は単純な和  $|C_1 \psi_1|^2 + |C_2 \psi_2|^2$  ではなく  $C_1 \psi_1$  と  $C_2 \psi_2$  の干渉項が現れる。このため、量子力学では粒子は波動的性質を示す (24 ページ参照)。これは古典力学的粒子にはない性質である。

### 確率保存

$$P(t) = \int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (1.3)$$

とする。粒子はどこかに必ず見出すから  $P(t) = 1$  とできる。 $\psi(\mathbf{r}, t)$  がこれを満たさない場合、 $\phi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t)/\sqrt{P(t)}$  を波動関数として採用すればよいが、 $\phi(\mathbf{r}, t)$  も (1.2) を満たす必要があるから  $P(t) = \text{一定}$  でなければならない。 $P(t) = \text{一定}$  になることを示す。

確率密度  $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi^* \psi$  の時間微分は

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^* + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = 2\text{Re} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)$$

ただし  $\operatorname{Re} z$  は複素数  $z$  の実部を表す。(1.2) より

$$\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi - \frac{i}{\hbar} V(\mathbf{r}) |\psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi) - \frac{i\hbar}{2m} (\nabla \psi^*) \cdot \nabla \psi - \frac{i}{\hbar} V(\mathbf{r}) |\psi|^2 \quad (1.4)$$

になる。ただし、ベクトル解析の公式

$$\nabla \cdot (f \nabla g) = (\nabla f) \cdot \nabla g + f \nabla^2 g \quad (1.5)$$

を使った。 $(\nabla \psi^*) \cdot \nabla \psi$  は実数であるから、(1.4) の右辺第 2 項は純虚数である。また、 $V(\mathbf{r})$  は実数であるから第 3 項も純虚数になり

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \operatorname{Re} \left( \frac{i\hbar}{m} \psi^* \nabla \psi \right) = - \nabla \cdot \operatorname{Re} \left( \frac{1}{m} \psi^* \hat{\mathbf{p}} \psi \right)$$

である。

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{m} \operatorname{Re} \left( \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{r}, t) \right) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) \right) \quad (1.6)$$

とすると

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (1.7)$$

これを領域  $V$  で積分しガウスの定理を用いると

$$\frac{d}{dt} \int_V d^3r \rho(\mathbf{r}, t) = - \int_V d^3r \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = - \int_S dS \mathbf{n} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (1.8)$$

$S$  は領域  $V$  の境界面、 $\mathbf{n}$  は  $S$  での外向きの単位法線ベクトルである。 $V$  を全領域にすると  $S$  は無限遠になる。このとき  $S$  上での  $\psi(\mathbf{r}, t)$  は十分早く 0 に収束するから、表面積分は 0 になる。したがって、全領域での積分は

$$\frac{d}{dt} \int d^3r \rho(\mathbf{r}, t) = \frac{dP}{dt} = 0$$

であり  $P$  は時間に依存しない。

$P$  は時間に依らないから  $\psi(\mathbf{r}, t)/\sqrt{P}$  も (1.2) の解である。これを改めて  $\psi(\mathbf{r}, t)$  とおくと

$$\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1 \quad (1.9)$$

になり  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$  は絶対確率を表す。波動関数が (1.9) を満たすとき**規格化**されているという。

(1.7) は電磁気学や流体力学でも現れる**連続の方程式** ( 流れの保存則 ) である。例えば、 $\rho$  を電荷密度、 $\mathbf{j}$  を電流密度とすると (1.7) は電荷保存を表す。これとの対応から、 $\rho = |\psi|^2$  が確率密度のとき、(1.6) で定義される  $\mathbf{j}$  は**確率の流れの密度 (確率流)** と解釈できる。

**問題 1.1**  $\alpha, C$  を適当な正の定数として

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |\psi(\mathbf{r}, t)| < \frac{C}{r^{3/2+\alpha}}, \quad r = |\mathbf{r}| \quad (1.10)$$

ならば  $P$  は有限になることを示せ。

**問題 1.2**  $V(\mathbf{r})$  が複素数の場合

$$\frac{dP}{dt} = \frac{2}{\hbar} \int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \operatorname{Im} V(\mathbf{r})$$

になることを示せ。 $V$  が実数でない場合、確率は保存しない。



### 仮定 3

古典力学の物理量  $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  に対応した演算子  $\hat{A} = A(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}})$  を考える。状態  $\psi(\mathbf{r}, t)$  において、この物理量を繰り返し測定を行ったとき、その期待値  $\langle \hat{A} \rangle$  は

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) A(\mathbf{r}, -i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{r}, t)$$

で与えられる。ただし、 $\psi(\mathbf{r}, t)$  が規格化されているとする。量子力学では、特別な場合を除き、測定値は確定した値にはならない。

$\hat{A}$  が微分演算子を含む場合、この微分演算子は  $\hat{A}$  の右側にある  $\psi(\mathbf{r}, t)$  にのみ作用する。したがって、一般には

$$\langle \hat{A} \rangle \neq \int d^3r A(\mathbf{r}, -i\hbar \nabla) (\psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t))$$

である。 $\hat{A}$  が微分演算子を含まない  $\hat{A} = A(\mathbf{r})$  の場合には

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3r A(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r A(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

であり、これは仮定 2 の  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$  に対する確率解釈とも一致する。

### 運動量の期待値

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = -i\hbar \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t)$$

は実数でなければならないが、この式からはそれ程自明なことではない。上式の複素共役をとると

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle^* = i\hbar \int d^3r \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)$$

である。 $\psi \xrightarrow{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} 0$  ならば、部分積分を行うと、例えば

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial x} &= \left[ \psi(\mathbf{r}, t) \psi^*(\mathbf{r}, t) \right]_{x=-\infty}^{x=+\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \end{aligned}$$

であるから

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle^* = -i\hbar \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) = \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$$

したがって、運動量の期待値は実数である。

波動関数が実数ならば

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = -i\hbar \int d^3r \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2} \int d^3r \nabla \psi^2(\mathbf{r}, t) = i \times \text{実数}$$

$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$  は実数であるからこれは 0 である。あるいは

$$\langle \hat{p}_x \rangle = -\frac{i\hbar}{2} \int d^3r \frac{\partial}{\partial x} \psi^2(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2} \int dy dz [\psi^2(\mathbf{r}, t)]_{x=-\infty}^{x=\infty} = 0$$

したがって、実数の波動関数だけでは  $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle \neq 0$  の状態を表せない。

確率の流れの密度  $\mathbf{j}$  の表現 (1.6) から

$$\int d^3r \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle + \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle^*}{2m} = \frac{\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{m}$$

になり速度の期待値である。流体力学では  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  は、流体の速度を  $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$  とすると  $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$  であるから、 $\mathbf{j}$  の積分は  $\mathbf{v}$  の期待値である。これからも (1.6) の  $\mathbf{j}$  を確率の流れの密度と見なせる。

## 1.2 エーレンフェストの定理

以上の仮定の正しさは実験結果を再現するかで検証されるものだが、ある条件下で古典力学が導出できれば、仮定の妥当性の1つの証拠になろう。これはエーレンフェスト (Ehrenfest) の定理を使うと示せる。

$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$ , つまり, 任意関数  $\psi(\mathbf{r}, t)$  に対して  $\hat{A}\hat{B}\psi(\mathbf{r}, t) = \hat{B}\hat{A}\psi(\mathbf{r}, t)$  である2つの演算子を, 交換可能あるいは可換な演算子という。また, 一般に演算子  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$  に対して

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} + \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) \\ &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \end{aligned} \quad (1.11)$$

が成り立つ。 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$  は可換とは限らないから, (1.11) の演算子の順番を勝手に入れ換えてはならない。ただし,  $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$  ではある。

### 問題 1.3 ヤコビの恒等式

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$$

を示せ。

### 量子力学における保存則と交換関係

$\hat{H}$  がエルミート演算子であることを用いれば, 以下のことは簡単に示せるが ( (1.29) 参照 ) ここでは用いない。期待値  $\langle \hat{A} \rangle$  の時間変化は

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \left( i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi + \psi^* \hat{A} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi \right)$$

ここで  $\hat{A}$  は時間に依存してもよい。(1.2) 及びその複素共役を代入すると

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \left( -(\hat{H}\psi^*)\hat{A}\psi + \psi^*\hat{A}\hat{H}\psi + i\hbar \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi \right) \quad (1.12)$$

である。右辺第1項の  $\hat{H}$  は  $\psi^*$  だけに作用する。また,  $\hat{A}$  と  $\hat{H}$  は可換とは限らない。

$$\int d^3r (\hat{H}\psi^*)\hat{A}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r (\nabla^2 \psi^*)\hat{A}\psi + \int d^3r V(\mathbf{r})\psi^*\hat{A}\psi$$

(1.5) より

$$\begin{aligned} \int_V d^3r ((\nabla^2 \psi^*)\hat{A}\psi - \psi^* \nabla^2 \hat{A}\psi) &= \int_V d^3r \nabla \cdot ((\nabla \psi^*)\hat{A}\psi - \psi^* \nabla \hat{A}\psi) \\ &= \int_S dS \mathbf{n} \cdot ((\nabla \psi^*)\hat{A}\psi - \psi^* \nabla \hat{A}\psi) \end{aligned}$$

積分領域  $V$  を全領域にすると  $V$  の表面  $S$  は無限遠になり  $S$  での面積分は0になる。したがって

$$\int d^3r (\nabla^2 \psi^*)\hat{A}\psi = \int d^3r \psi^* \nabla^2 \hat{A}\psi$$

になるから

$$\int d^3r (\hat{H}\psi^*)\hat{A}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \psi^* \nabla^2 \hat{A}\psi + \int d^3r V(\mathbf{r})\psi^*\hat{A}\psi = \int d^3r \psi^* \hat{H} \hat{A} \psi$$

これから

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \int d^3r \left( -\psi^* \hat{H} \hat{A} \psi + \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi + i\hbar \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi \right) \\ &= \int d^3r \psi^* [\hat{A}, \hat{H}] \psi + i\hbar \int d^3r \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi \end{aligned} \quad (1.13)$$

である。 $\hat{A}$  が時間に依存しない場合

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \psi^* [\hat{A}, \hat{H}] \psi \quad (1.14)$$

になるから、 $\hat{A}$  と  $\hat{H}$  が可換 ( $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ ) ならば  $\langle \hat{A} \rangle$  は時間的に一定になる。これが量子力学における保存則である。 $\hat{H}$  は自分自身と可換であるから、エネルギー期待値  $\langle \hat{H} \rangle$  は保存する。また、 $\hat{A} = 1$  とすれば

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = P$$

であるから、全確率  $P$  は時間的に一定である。

### エーレンフェスト (Ehrenfest) の定理

(1.14) において  $\hat{A} = \mathbf{r}$ ,  $\hat{A} = \hat{\mathbf{p}}$  とすれば

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int d^3r \psi^* [\mathbf{r}, \hat{H}] \psi, \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int d^3r \psi^* [\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] \psi$$

である。 $[x, \hat{H}]$  を考えると、 $\hat{H}$  で  $x$  と可換でない部分は  $\hat{p}_x$  の部分だけであるから (1.11) より

$$[x, \hat{H}] = \frac{1}{2m} [x, \hat{p}_x^2] = \frac{1}{2m} ([x, \hat{p}_x] \hat{p}_x + \hat{p}_x [x, \hat{p}_x]) = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x$$

になる。 $y, z$  についても同様であるから

$$[\mathbf{r}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{\mathbf{p}}, \quad \therefore \quad \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{m} \int d^3r \psi^* \hat{\mathbf{p}} \psi = \frac{1}{m} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$$

一方

$$[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] = [\hat{\mathbf{p}}, V(\mathbf{r})] = -i\hbar (\nabla V(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r}) \nabla)$$

演算子を含む関係式は、作用する任意の関数  $\psi$  を省略してある。これを明記すれば、上式は

$$[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] \psi = -i\hbar (\nabla V(\mathbf{r}) \psi - V(\mathbf{r}) \nabla \psi)$$

右辺第1項の  $\nabla$  は積  $V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t)$  に作用し

$$\nabla V(\mathbf{r}) \psi = (\nabla V(\mathbf{r})) \psi + V(\mathbf{r}) \nabla \psi = -\mathbf{F}(\mathbf{r}) \psi + V(\mathbf{r}) \nabla \psi, \quad \mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$$

になるから

$$[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] \psi = i\hbar \mathbf{F}(\mathbf{r}) \psi, \quad \therefore \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \int d^3r \mathbf{F}(\mathbf{r}) |\psi|^2 = \langle \mathbf{F}(\mathbf{r}) \rangle$$

$\mathbf{F}$  は古典力学の力である。まとめると、位置と運動量の期待値は古典力学と類似の関係

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \langle \mathbf{F}(\mathbf{r}) \rangle \quad (1.15)$$

を満たす。これをエーレンフェストの定理という。

$\langle \mathbf{F}(\mathbf{r}) \rangle = \mathbf{F}(\langle \mathbf{r} \rangle)$  ならば、古典力学の運動方程式は、量子力学の期待値として成り立つが、一般には  $\langle \mathbf{F}(\mathbf{r}) \rangle \neq \mathbf{F}(\langle \mathbf{r} \rangle)$  である。簡単のため 1 次元の場合を考える。  $X = \langle x \rangle$  とすると

$$F(x) = F(X + x - X) = F(X) + F'(X)(x - X) + \frac{F''(X)}{2}(x - X)^2 + \dots$$

であるから

$$\begin{aligned} \langle F(x) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx F(x) |\psi(x, t)|^2 \\ &= F(X) \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi|^2 + F'(X) \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - X) |\psi|^2 + \frac{F''(X)}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - X)^2 |\psi|^2 + \dots \end{aligned}$$

になる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi|^2 = 1, \quad X = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi|^2$$

であるから

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = F(\langle x \rangle) + \frac{F''(\langle x \rangle)}{2} (\Delta x)^2 + \dots, \quad \Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (1.16)$$

右辺第 2 項が無視できれば、古典力学は量子力学のよい近似として成り立つ。**仮定 1, 仮定 2, 仮定 3** を認めると、古典力学を導出できる。

$$V(x) \propto x^n, \quad n = 0, 1, 2 \quad (1.17)$$

の場合  $F(x) = -V'(x)$  の 2 階以上の導関数は 0 になるから、期待値  $\langle x \rangle$  は厳密に古典力学の運動方程式に従う。具体例としては、自由粒子 ( $n = 0$ )、一様重力あるいは一様電場 ( $n = 1$ )、調和振動子ポテンシャル ( $n = 2$ ) である。ただし、 $\langle x \rangle$  を古典力学的な粒子の位置と解釈するには、 $|\psi(x, t)|^2$  がある領域に局在する必要がある。 $|\psi(x, t)|^2$  が空間的に広がっている場合、 $\langle x \rangle$  は単なる平均値であって古典力学的な粒子の位置という物理的意味はない。また、 $\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2}$  とすると、13 ページで示すように、不確定性関係  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$  が成り立つ。古典力学では粒子の位置と運動量は同時に確定した値をとる。しかし、量子力学ではこのようなことは原理的に不可能である。位置  $x$  を極端に局在化させると、運動量は全く不定になり古典力学は成り立たない。

### 1.3 ディラックの表記法

以下では異なる波動関数を扱うため、波動関数にラベル  $\alpha$  を付けて  $\psi_\alpha(\mathbf{r}, t)$  などとし  $\alpha$  により異なる状態を区別する。また、表現を簡潔にするためディラックの表記法を導入する。 $\psi_\alpha(\mathbf{r}, t)$  の代わりに  $|\psi_\alpha\rangle$  あるいは単に  $|\alpha\rangle$  と書く。記号  $|\rangle$  を**ケット**という。ディラックの表記法は量子力学を最も一般的に定式化できる非常に深い意味を持つ表記法であるが、当面は波動関数の簡便な表記法と考えてよい。詳しくは **14 ブラ・ケットによる量子力学の定式化** 参照。

ケット  $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$  の内積  $\langle \alpha | \beta \rangle$  を

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \int d^3r \psi_\alpha^*(\mathbf{r}, t) \psi_\beta(\mathbf{r}, t)$$

で定義する。この定義から  $\langle \alpha | \beta \rangle^* = \langle \beta | \alpha \rangle$  である。特に、 $\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$  であり  $\langle \alpha | \alpha \rangle = 0$  は  $\psi_\alpha(\mathbf{r}, t)$  が恒等的に 0 の場合だけである。ある演算子  $\hat{A}$  が波動関数  $\psi_\alpha(\mathbf{r}, t)$  に作用した状態  $\hat{A}\psi_\alpha(\mathbf{r}, t)$  を  $\hat{A}|\alpha\rangle$  と書く。これと  $|\beta\rangle$  の内積は

$$\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \int d^3r \psi_\beta^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi_\alpha(\mathbf{r}, t)$$

である。

## 1.4 エルミート演算子

任意の状態  $\psi_\alpha(\mathbf{r}, t)$ ,  $\psi_\beta(\mathbf{r}, t)$  に対して

$$\left( \int d^3r \psi_\alpha^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi_\beta(\mathbf{r}, t) \right)^* = \int d^3r \psi_\beta^*(\mathbf{r}, t) \hat{B} \psi_\alpha(\mathbf{r}, t), \quad \text{つまり} \quad \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle^* = \langle \beta | \hat{B} | \alpha \rangle$$

を満たす演算子  $\hat{B}$  を  $\hat{A}$  のエルミート共役といい  $\hat{B} = \hat{A}^\dagger$  で表す。

$$\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle^* = \langle \beta | \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle \quad (1.18)$$

である。行列  $A_{ij}$  のエルミート共役  $A^\dagger$  は  $(A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*$  であるが、(1.18) は行列のエルミート共役と同様の定義である。 $\hat{A}$  が単なる数の場合、エルミート共役は複素共役である。定義より

$$\langle \beta | (\hat{A}^\dagger)^\dagger | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{A}^\dagger | \beta \rangle^* = \langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle, \quad \therefore \quad (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$$

である。 $|\gamma\rangle = \hat{A}|\beta\rangle$  とおくと任意の状態  $|\mu\rangle$  に対して

$$\langle \gamma | \mu \rangle = \langle \mu | \gamma \rangle^* = \langle \mu | \hat{A} | \beta \rangle^* = \langle \beta | \hat{A}^\dagger | \mu \rangle \quad (1.19)$$

$|\gamma\rangle = \hat{A}|\beta\rangle$  のとき、積分に現れる  $\langle \gamma |$  は  $\langle \gamma | = \langle \beta | \hat{A}^\dagger$  で置き換えればよい。

$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$  であるとき、 $\hat{A}$  をエルミート演算子という。エルミート演算子の期待値  $\langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle$  は実数である。 $|\alpha'\rangle = \hat{A}^\dagger |\alpha\rangle$ ,  $|\beta'\rangle = \hat{B} |\beta\rangle$  とすると (1.19) より

$$\langle \alpha' | \beta' \rangle = \langle \alpha | \hat{A} | \beta' \rangle = \langle \alpha | \hat{A} \hat{B} | \beta \rangle, \quad \therefore \quad \langle \alpha' | \beta' \rangle^* = \langle \beta | (\hat{A} \hat{B})^\dagger | \alpha \rangle$$

一方、 $\langle \alpha' | \beta' \rangle^* = \langle \beta' | \alpha' \rangle = \langle \beta | \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle$  になるから  $(\hat{A} \hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$  である。一般に  $n$  個の演算子の積  $\hat{A}_1 \hat{A}_2 \cdots \hat{A}_n$  のエルミート共役は

$$(\hat{A}_1 \hat{A}_2 \cdots \hat{A}_n)^\dagger = \hat{A}_n^\dagger \cdots \hat{A}_2^\dagger \hat{A}_1^\dagger \quad (1.20)$$

である。演算子は可換とは限らないから、積の順番には注意しなければならない。 $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  がエルミート演算子のとき  $(\hat{A} \hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger = \hat{B} \hat{A}$  であるから、エルミート演算子の積は必ずしもエルミート演算子ではない。 $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  が可換ならば、積  $\hat{A} \hat{B}$  はエルミート演算子である。

**問題 1.4**  $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  がエルミート演算子のとき  $i[\hat{A}, \hat{B}]$  がエルミート演算子になることを示せ。

### エルミート演算子の基本的性質

演算子  $\hat{A}$  がある関数  $\varphi(\mathbf{r})$  に作用したものを  $\hat{A}\varphi(\mathbf{r})$  は、元の関数  $\varphi(\mathbf{r})$  とは一般には全く異なったものになる。しかし、ある特別な関数  $\varphi_a(\mathbf{r})$  について

$$\hat{A}\varphi_a(\mathbf{r}) = a\varphi_a(\mathbf{r})$$

になることがある。ここで  $a$  は定数である。このとき、 $\varphi_a(\mathbf{r})$  を演算子  $\hat{A}$  の固有関数あるいは固有状態、 $a$  を固有値という。 $a$  のとりうる値は離散的な場合もあるし連続的な値の場合もある。

一般に複数の関数  $\psi_i(\mathbf{r})$  が

$$c_1\psi_1(\mathbf{r}) + c_2\psi_2(\mathbf{r}) + \cdots + c_n\psi_n(\mathbf{r}) = 0 \implies c_1 = c_2 = \cdots = c_n = 0$$

つまり、 $\psi_i$  は他の関数の線形結合で表せないとき、 $\psi_i(\mathbf{r})$  は互いに 1 次独立であるという。ある固有値  $a$  の 1 次独立な固有関数が  $n$  個 ( $n \geq 2$ ) あるとき、固有値  $a$  は  $n$  重に縮退しているという。また、 $n$  を縮退度という。

$\hat{A}$  をエルミート演算子とする。話を簡単にするため、 $\hat{A}$  は離散的な固有値をとるとし、固有値に  $a_1, a_2, \dots$  のように番号を付ける。 $a_i$  に対する固有関数を  $\varphi_i(\mathbf{r})$  で表す：

$$\hat{A}\varphi_i(\mathbf{r}) = a_i\varphi_i(\mathbf{r}), \quad \text{あるいは} \quad \hat{A}|i\rangle = a_i|i\rangle \quad (1.21)$$

また、 $\langle i|i\rangle = 1$  であり  $\varphi_i(\mathbf{r})$  は規格化されているとする。

(1.21) の両辺に  $\varphi_i^*$  をかけ積分すると  $\langle i|\hat{A}|i\rangle = a_i\langle i|i\rangle = a_i$  である。エルミート演算子の期待値  $\langle i|\hat{A}|i\rangle$  は実数であるから固有値  $a_i$  は実数である。

(1.21) に  $\varphi_j^*$  をかけ積分すると  $\langle j|\hat{A}|i\rangle = a_i\langle j|i\rangle$  になる。複素共役をとれば  $\langle i|\hat{A}|j\rangle = a_i\langle i|j\rangle$  である。 $\hat{A}|j\rangle = a_j|j\rangle$  と  $|i\rangle$  の内積から  $\langle i|\hat{A}|j\rangle = a_j\langle i|j\rangle$  である。したがって

$$(a_i - a_j)\langle i|j\rangle = 0 \quad (1.22)$$

になる。固有値に縮退がなければ、 $i \neq j$  のとき  $a_i \neq a_j$  であるから  $\langle i|j\rangle = 0$  になる。このとき、 $\varphi_i(\mathbf{r})$  と  $\varphi_j(\mathbf{r})$  は直交するという。 $\varphi_i$  の規格化を合わせれば

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \quad (1.23)$$

である。これを規格直交性という。

固有値に縮退がある場合でも (1.23) は成り立つ。 $a$  が  $n$  重に縮退しているとし、 $n$  個の独立な固有関数を  $\varphi_i$  とする。

$$\hat{A}|i\rangle = a|i\rangle, \quad \langle i|i\rangle = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

である。 $a_i = a_j = a$  であるから (1.22) より  $\langle i|j\rangle = 0$  とは限らない。ところで

$$|2'\rangle = c_{21}|1\rangle + c_{22}|2\rangle, \quad |3'\rangle = c_{31}|1\rangle + c_{32}|2'\rangle + c_{33}|3\rangle, \quad \dots$$

として

$$\langle 1|2'\rangle = 0, \quad \langle 2'|2'\rangle = 1, \quad \langle 1|3'\rangle = 0, \quad \langle 2'|3'\rangle = 0, \quad \langle 3'|3'\rangle = 1, \quad \dots$$

を満たすように係数  $c_{ij}$  を決める (シュミットの方法)。最初の 2 つの式より

$$c_{21} = -\langle 1|2\rangle c_{22}, \quad c_{22} = (1 - |\langle 1|2\rangle|^2)^{-1/2}$$

残りの 3 条件から、3 つの係数  $c_{31}, c_{32}, c_{33}$  も決まる。 $|i'\rangle$  を  $|i\rangle$  と表せば  $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$  であり、縮退があっても規格直交系を作れる。

エルミート演算子の固有関数の組は完全系をなす。つまり、任意の関数  $\psi(\mathbf{r})$  は  $\varphi_i(\mathbf{r})$  を用いて

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \varphi_i(\mathbf{r}), \quad \text{あるいは} \quad |\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle \quad (1.24)$$

と展開できる。この展開を認めれば係数  $c_i$  は次のように決まる。上式に  $\varphi_j^*(\mathbf{r})$  をかけ積分すると

$$\langle j|\psi\rangle = \sum_i c_i \langle j|i\rangle = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j \quad (1.25)$$

これを  $\psi(\mathbf{r})$  の展開式に代入すると

$$|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\psi\rangle \quad (1.26)$$

つまり

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \int d^3r' \varphi_i^*(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') = \int d^3r' \psi(\mathbf{r}') \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_i^*(\mathbf{r}')$$

したがって、ディラックのデルタ関数を用いて (398 ページ)

$$\sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (1.27)$$

である。固有関数の組が完全系をなすとは (1.27) が成り立つことである。エルミート演算子の基本的性質は、固有値が実数であること及び (1.23), (1.27) である。

物理量の期待値は実数でなければならない。期待値が実数である条件は (1.18) から

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle$$

である。したがって、物理量はエルミート演算子  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$  である。前節の仮定 3 は、本来、次の仮定に置き換えるべきものである。

#### 仮定 3'

物理量  $\hat{A}$  を観測すると、1 回の観測毎に状態は  $\hat{A}$  の固有状態  $\varphi_i(\mathbf{r})$  のどれか 1 つになり、観測値は固有値  $a_i$  である。どの固有状態になるかはあらかじめ分らないが、ある固有状態  $\varphi_i$  になる確率は

$$|c_i(t)|^2, \quad \text{ただし } c_i(t) = \int d^3r \varphi_i^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) = \langle i | \psi \rangle \quad (1.28)$$

である。ここで、 $\psi(\mathbf{r}, t)$  は観測前の系の規格化された波動関数であり、 $c_i$  は  $\psi(\mathbf{r}, t)$  の展開式 (1.24) の係数である。

$\psi$  は規格化されているから

$$1 = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{ij} c_i^* c_j \int d^3r \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}) = \sum_{ij} c_i^* c_j \delta_{ij} = \sum_i |c_i|^2$$

になる。波動関数が規格化されているとき、確率の和は確かに 1 になる。逆に、波動関数が規格化されていないとき、 $\sum_i |c_i|^2 = 1$  が波動関数の規格化条件である。この仮定から  $\hat{A}$  の期待値は

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i a_i |c_i|^2$$

ところで

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i c_i \hat{A}|i\rangle = \sum_i c_i a_i |i\rangle, \quad \therefore \quad \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{ij} c_j^* c_i a_i \langle j | i \rangle = \sum_i a_i |c_i|^2$$

仮定 3' から仮定 3 が導ける。

状態が  $\hat{A}$  の固有状態  $\varphi_k(\mathbf{r})$  の場合

$$c_i = \int d^3r \varphi_i^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_k(\mathbf{r}) = \delta_{ik}$$

である。したがって、 $\hat{A}$  を測定したとき、 $i \neq k$  である  $a_i$  になる確率は 0 であり、測定値は常に固有値  $a_k$  になる。

$\psi(\mathbf{r}, 0)$  が時間に依存しない演算子  $\hat{A}$  の固有状態  $\hat{A}\psi(\mathbf{r}, 0) = a\psi(\mathbf{r}, 0)$  とする。  $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$  ならば

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}\psi(\mathbf{r}, t) = \hat{A}\hat{H}\psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}\hat{A}\psi(\mathbf{r}, t)$$

である。したがって、 $\hat{A}\psi(\mathbf{r}, t)$  と  $\psi(\mathbf{r}, t)$  を定数倍した  $a\psi(\mathbf{r}, t)$  は、時間については1階の同じ微分方程式を満たし、 $t=0$  では  $\hat{A}\psi(\mathbf{r}, t)$  と  $a\psi(\mathbf{r}, t)$  は一致する。1階の微分方程式の解は初期条件を与えると一意に決まるから、任意の時刻で  $\hat{A}\psi(\mathbf{r}, t) = a\psi(\mathbf{r}, t)$ 、つまり、状態は  $\hat{A}$  の固有状態である。 $[\hat{A}, \hat{H}] \neq 0$  の場合、 $t \neq 0$  では状態は一般には  $\hat{A}$  の固有状態ではない。なお、6 ページで示したように  $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$  ならば  $\hat{A}$  の期待値は保存する。

5 ページでは部分積分を用いて (1.14) を示したが、簡潔な方法で示す。 $|\varphi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$  とすると (1.12) は

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \langle \psi | \hat{A}\hat{H} | \psi \rangle - \int d^3r (\hat{H}\psi^*)\varphi = \langle \psi | \hat{A}\hat{H} | \psi \rangle - \left( \int d^3r \varphi^* \hat{H}\psi \right)^* \\ &= \langle \psi | \hat{A}\hat{H} | \psi \rangle - \langle \varphi | \hat{H} | \psi \rangle^* \end{aligned}$$

$\hat{H}$  はエルミート演算子であるから

$$\langle \varphi | \hat{H} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{H} | \varphi \rangle = \langle \psi | \hat{H}\hat{A} | \psi \rangle, \quad \therefore i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | (\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}) | \psi \rangle \quad (1.29)$$

になる。

**問題 1.5** 運動量  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$  がエルミート演算子であること、つまり  $\langle \alpha | \hat{\mathbf{p}} | \beta \rangle^* = \langle \beta | \hat{\mathbf{p}} | \alpha \rangle$  が成り立つことを示せ。

$$\hat{\mathbf{p}}^\dagger = (-i\hbar\nabla)^\dagger = (-i\hbar)^* \nabla^\dagger = i\hbar \nabla^\dagger$$

であるから  $\nabla^\dagger = -\nabla$  になる。 $\nabla$  はエルミート演算子ではない。

### ユニタリ演算子

任意の状態  $|\psi\rangle$  に対して  $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ 、つまり  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} = 1$  であるとき、これらの演算子は互いに逆であるという。 $\hat{A}$  の逆を  $\hat{A}^{-1}$  あるいは  $1/\hat{A}$  で表す。

$$\hat{C}\hat{D}\hat{D}^{-1}\hat{C}^{-1} = \hat{C}\hat{C}^{-1} = 1, \quad \therefore (\hat{C}\hat{D})^{-1} = \hat{D}^{-1}\hat{C}^{-1}$$

である。エルミート共役と同様に、積の順番が入れ替わる。

$$\hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{A} \hat{A}^\dagger = 1, \quad \text{つまり} \quad \hat{A}^\dagger = \hat{A}^{-1}$$

であるとき  $\hat{A}$  をユニタリ演算子という。 $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  がユニタリ演算子のとき

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1} = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger = (\hat{A}\hat{B})^\dagger$$

であるから積  $\hat{A}\hat{B}$  もユニタリ演算子である。エルミート演算子の場合と異なり  $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  が可換である必要はない。 $|\alpha'\rangle = \hat{U}|\alpha\rangle$ 、 $|\beta'\rangle = \hat{U}|\beta\rangle$  とすると (1.19) より

$$\langle \alpha' | \beta' \rangle = \langle \alpha | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \beta \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle \quad (1.30)$$

になり内積は保存する。



ユニタリ演算子  $\hat{U}$  の固有値を  $u$ , 固有関数を  $|u\rangle$  とすると  $\hat{U}|u\rangle = u|u\rangle$  である。 $\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$  より

$$\langle u|u\rangle = \langle u|\hat{U}^\dagger \hat{U}|u\rangle = u \langle u|\hat{U}^\dagger|u\rangle = u \langle u|\hat{U}|u\rangle^* = uu^* \langle u|u\rangle, \quad \therefore |u| = 1 \quad (1.31)$$

ユニタリ演算子の固有値は絶対値 1 の複素数である。 $|u\rangle = u\hat{U}^\dagger|u\rangle$  より

$$\langle u'|\hat{U}^\dagger|u\rangle = u^{-1}\langle u'|u\rangle = u^* \langle u'|u\rangle, \quad \text{複素共役をとれば} \quad \langle u|\hat{U}|u'\rangle = u \langle u|u'\rangle$$

ところで,  $\langle u|\hat{U}|u'\rangle = u' \langle u|u'\rangle$  であるから,  $u \neq u'$  のとき  $\langle u|u'\rangle = 0$  である。

## 1.5 演算子の関数

演算子  $\hat{A}$  の関数  $F(\hat{A})$

$$F(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{A}^n$$

を考える。 $\hat{A}$  はエルミート演算子である必要はない。 $\hat{A}|i\rangle = a_i|i\rangle$  である  $\hat{A}$  の固有状態に対しては

$$F(\hat{A})|i\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{A}^n|i\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n a_i^n|i\rangle = F(a_i)|i\rangle \quad (1.32)$$

である。ここで  $F(a_i)$  は演算子ではなく数値である。任意の状態  $|\psi\rangle$  は

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle, \quad c_i = \text{係数}$$

と展開できるから

$$F(\hat{A})|\psi\rangle = \sum_i c_i F(\hat{A})|i\rangle = \sum_i c_i F(a_i)|i\rangle \quad (1.33)$$

になり, 任意の状態に対する作用は定まる。例えば, 微分演算子が分母にある  $\frac{1}{z + \nabla^2}$  の場合

$$\nabla^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = -\mathbf{k}^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \therefore \frac{1}{z + \nabla^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{z - \mathbf{k}^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (1.34)$$

である。一般の波動関数  $\psi(\mathbf{r}, t)$  をフーリエ変換して

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3k a(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

とすれば

$$\frac{1}{z + \nabla^2} \psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3k a(\mathbf{k}, t) \frac{1}{z + \nabla^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \int d^3k \frac{a(\mathbf{k}, t)}{z - \mathbf{k}^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

になる。 $a(\mathbf{k}, t)$  が与えられれば最後の積分は実行でき,  $\psi(\mathbf{r}, t)$  に対する作用は具体的に求まる (問題 11.1 参照)

量子力学では

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} \quad (1.35)$$

がよく現れる。 $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  が可換ならば, 通常の数と同様に  $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$  である。特に

$$e^{\hat{A}}e^{-\hat{A}} = e^{-\hat{A}}e^{\hat{A}} = 1, \quad \therefore (e^{\hat{A}})^{-1} = e^{-\hat{A}}$$

である。 $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  が可換でない場合  $e^{\hat{A}+\hat{B}} \neq e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$  である。これについては (4.52) を参照。

$$(e^{\hat{A}})^{\dagger} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\hat{A}^n)^{\dagger}}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\hat{A}^{\dagger})^n}{n!} = \exp(\hat{A}^{\dagger})$$

$\hat{A}$  がエルミート演算子のとき  $(i\hat{A})^{\dagger} = -i\hat{A}$  であるから

$$(e^{\hat{A}})^{\dagger} = e^{\hat{A}}, \quad (e^{i\hat{A}})^{\dagger} = e^{-i\hat{A}} = (e^{i\hat{A}})^{-1} \quad (1.36)$$

$e^{\hat{A}}$  はエルミート演算子,  $e^{i\hat{A}}$  はユニタリ演算子である。

作用が明確な演算子の関数の 1 例を示そう。 $\psi(x)$  を  $c$  だけ  $x$  方向に移動させると  $\psi(x-c)$  になる。 $\psi(x-c)$  をテイラー展開すると

$$\psi(x-c) = \psi(x) + (-c)\frac{d\psi}{dx} + \frac{(-c)^2}{2!}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \cdots + \frac{(-c)^n}{n!}\frac{d^n\psi}{dx^n} + \cdots$$

ここで  $\hat{A} = -c\frac{d}{dx}$  とおくと

$$\psi(x-c) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n \psi(x) = \exp(\hat{A}) \psi(x) = \exp\left(-c\frac{d}{dx}\right) \psi(x) \quad (1.37)$$

である。運動量演算子  $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$  で表せば

$$e^{-ic\hat{p}/\hbar}\psi(x) = \psi(x-c) \quad (1.38)$$

になる。ユニタリ演算子  $e^{-ic\hat{p}/\hbar}$  は波動関数を  $c$  だけ  $x$  方向に移動させる演算子である。

## 1.6 不確定性関係

状態  $|\psi\rangle$  が  $\hat{A}$  の固有状態でなければ, 物理量  $\hat{A}$  の観測値は確定した値 ( 何回観測しても常に同じ値 ) にはならず不確定性がある。その不確定性の目安は分散

$$\Delta a = \sqrt{\langle \psi | (\hat{A} - a)^2 | \psi \rangle}, \quad \text{ただし } a = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

で与えられる。 $a$  は演算子ではなく値であるから

$$\Delta a = \sqrt{\langle \psi | (\hat{A}^2 - 2a\hat{A} + a^2) | \psi \rangle} = \sqrt{\langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - a^2} = \sqrt{\langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2}$$

とも書ける。 $|\psi_a\rangle = (\hat{A} - a)|\psi\rangle$  とおく。(1.30) で  $\hat{U} = \hat{U}^{\dagger} = \hat{A} - a$  とすれば  $\langle \psi_a | \psi_a \rangle = (\Delta a)^2$  になるから  $\Delta a = 0 \iff |\psi_a\rangle = (\hat{A} - a)|\psi\rangle = 0$  である。したがって,  $|\psi\rangle$  が  $\hat{A}$  の固有状態の場合だけ  $\Delta a = 0$  になる。

2つの物理量  $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  の分散について不等式

$$\Delta a \Delta b \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right| \quad (1.39)$$

が成り立つ。これを**不確定性関係**という。 $\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \neq 0$  ならば不確定性の積には下限があり, 一方の分散が小さくなれば他方の分散は大きくなる。例えば,  $\hat{A} = x$ ,  $\hat{B} = \hat{p}_x$  とすると  $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$  であるから

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2 \quad (1.40)$$

になり, 位置と運動量が同時に確定した値になることは不可能である。これは古典力学にはない量子力学特有の現象である。

(1.39) を証明する。  $c$  を任意の複素定数とすると  $\psi(\mathbf{r}) = \psi_\alpha(\mathbf{r}) + c\psi_\beta(\mathbf{r})$  を考える。

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle + |c|^2 \langle \beta | \beta \rangle + c \langle \alpha | \beta \rangle + c^* \langle \beta | \alpha \rangle \geq 0 \quad (1.41)$$

である。  $c = -\langle \beta | \alpha \rangle / \langle \beta | \beta \rangle$  とすると,  $\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle^*$  であるから

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{|\langle \alpha | \beta \rangle|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} \geq 0, \quad \therefore \quad \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \quad (1.42)$$

になる (シュワルツの不等式)。等号は  $\psi = 0$ , すなわち  $\psi_\alpha \propto \psi_\beta$  のとき成り立つ。実ベクトルの不等式  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} \mathbf{b} \cdot \mathbf{b} \geq (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2$  の拡張である。

$$|\psi_a\rangle = \hat{A}'|\psi\rangle = (\hat{A} - a)|\psi\rangle, \quad |\psi_b\rangle = \hat{B}'|\psi\rangle = (\hat{B} - b)|\psi\rangle$$

とする。ただし  $b = \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle$  である。  $(\Delta a)^2 = \langle \psi_a | \psi_a \rangle$ ,  $(\Delta b)^2 = \langle \psi_b | \psi_b \rangle$  であるからシュワルツの不等式を使うと

$$(\Delta a)^2 (\Delta b)^2 = \langle \psi_a | \psi_a \rangle \langle \psi_b | \psi_b \rangle \geq |\langle \psi_a | \psi_b \rangle|^2 = \left| \langle \psi | \hat{A}' \hat{B}' | \psi \rangle \right|^2 \quad (1.43)$$

になる。等号は  $\lambda$  を定数として  $\psi_b(\mathbf{r}) = \lambda \psi_a(\mathbf{r})$  のとき成り立つ。  $\hat{A}' \hat{B}'$  を 2 つの部分に分けて

$$\hat{A}' \hat{B}' = i \hat{C} + \hat{D}, \quad \hat{C} = \frac{1}{2i} (\hat{A}' \hat{B}' - \hat{B}' \hat{A}') = \frac{1}{2i} [\hat{A}, \hat{B}], \quad \hat{D} = \frac{\hat{A}' \hat{B}' + \hat{B}' \hat{A}'}{2}$$

とする。  $\hat{A}'$  と  $\hat{B}'$  はエルミート演算子であるから  $\hat{C}$  と  $\hat{D}$  もエルミート演算子になり (問題 1.4 参照), これらの期待値は実数である。したがって

$$\left| \langle \psi | \hat{A}' \hat{B}' | \psi \rangle \right|^2 = \left| i \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{D} | \psi \rangle \right|^2 = \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle^2 + \langle \psi | \hat{D} | \psi \rangle^2$$

になるから

$$(\Delta a)^2 (\Delta b)^2 \geq \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle^2 + \langle \psi | \hat{D} | \psi \rangle^2 \geq \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle^2 = \frac{1}{4} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2$$

であり (1.39) が成り立つ。

(1.39) で最小の不確定性が成り立つ条件は  $\psi_b(\mathbf{r}) = \lambda \psi_a(\mathbf{r})$  かつ

$$\langle \psi | \hat{D} | \psi \rangle = \frac{1}{2} (\langle \psi_a | \psi_b \rangle + \langle \psi_a | \psi_b \rangle^*) = \frac{\lambda + \lambda^*}{2} \langle \psi_a | \psi_a \rangle = 0 \quad (1.44)$$

である。  $(\Delta a)^2 = \langle \psi_a | \psi_a \rangle \neq 0$  の場合,  $\lambda + \lambda^* = 0$  より  $\nu$  を任意実数として  $\lambda = i\nu$  になるから

$$\psi_b(\mathbf{r}) = i\nu \psi_a(\mathbf{r}), \quad i.e. \quad (\hat{B} - b)\psi(\mathbf{r}) = i\nu(\hat{A} - a)\psi(\mathbf{r}) \quad (1.45)$$

が不確定性最小の条件である。  $\nu$  は  $\Delta a$  または  $\Delta b$  を与えれば決まる。  $\langle \psi_a | \psi_b \rangle = i\nu \langle \psi_a | \psi_a \rangle$  は純虚数になるから

$$\langle \psi_a | \psi_b \rangle = \frac{1}{2} (\langle \psi_a | \psi_b \rangle - \langle \psi_b | \psi_a \rangle) = \frac{1}{2} \langle \psi | (\hat{A}' \hat{B}' - \hat{B}' \hat{A}') | \psi \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle$$

したがって

$$\nu = -\frac{i \langle \psi_a | \psi_b \rangle}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle} = -\frac{\langle \psi | i[\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle}{2(\Delta a)^2} \quad (1.46)$$

になる。  $i[\hat{A}, \hat{B}]$  はエルミート演算子であるから  $\nu$  は実数である。

**問題 1.6** (1.41)において  $c = u + iv$  とする。任意の実数  $u, v$  に対して (1.41) の不等式が成り立つことから (1.42) を導け。

**問題 1.7** 1次元を考える。位置  $x$  と運動量  $\hat{p}$  に関して最小の不確定性  $\Delta x \Delta p = \hbar/2$  を満たす規格化した状態  $\psi(x)$  は (1.45), (1.46) より

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi(\Delta x)^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0x\right) \quad (1.47)$$

になることを示せ。ただし,  $x_0 = \langle \psi | x | \psi \rangle$ ,  $\hbar k_0 = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle$  である。

## 1.7 定常状態

時間に依存するシュレーディンガー方程式の特別な解として, 変数分離した  $\psi(\mathbf{r}, t) = f(t)\varphi(\mathbf{r})$  を考える。これを (1.2) に代入すると

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \frac{df}{dt} \varphi(\mathbf{r}) = \hat{H}\psi = f(t)\hat{H}\varphi(\mathbf{r}), \quad \therefore \quad \frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{\varphi(\mathbf{r})} \hat{H}\varphi(\mathbf{r})$$

最後の式の左辺は  $t$  だけの関数, 右辺は  $\mathbf{r}$  だけの関数であるから, 両者が任意の  $\mathbf{r}, t$  で等しいためには定数でなければならない。この定数を  $E$  とすると

$$\frac{df(t)}{dt} = \frac{E}{i\hbar} f(t), \quad \therefore \quad f(t) = f_0 e^{-iEt/\hbar}$$

である。定数  $f_0$  を  $\varphi(\mathbf{r})$  に含めることにすると

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \varphi(\mathbf{r}), \quad \text{ただし} \quad \hat{H}\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (1.48)$$

になる。 $\hat{H}\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r})$  を時間に依存しないシュレーディンガー方程式, あるいは, 単にシュレーディンガー方程式という。ハミルトニアン  $\hat{H}$  の固有関数  $\varphi(\mathbf{r})$  と固有値  $E$  を求める方程式である。 $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \varphi(\mathbf{r})$  の場合, 確率密度は  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\varphi(\mathbf{r})|^2$  になり時間に依存しない。また, 演算子  $\hat{A}$  が時間に依存しないとき期待値  $\langle \hat{A} \rangle$  も

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \left( e^{-iEt/\hbar} \varphi(\mathbf{r}) \right)^* \hat{A} e^{-iEt/\hbar} \varphi(\mathbf{r}) = \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r}) \hat{A} \varphi(\mathbf{r})$$

になり一定である。このため,  $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \varphi(\mathbf{r})$  を定常状態という。

$\hat{H}$  の固有値と固有関数は一般に複数存在する。ここでは, 固有値は離散的であるとし, 番号付けて

$$\hat{H}\varphi_n(\mathbf{r}) = E_n\varphi_n(\mathbf{r}), \quad \text{つまり} \quad \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

とする。これらは規格直交性 (1.23) を満たす。時間に依存するシュレーディンガー方程式 (1.2) の解である定常状態  $e^{-iE_nt/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r})$  の任意の線形結合 ( $c_n$  は時間に依らない定数)

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r}), \quad \text{あるいは} \quad |\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar} |n\rangle \quad (1.49)$$

を考える。

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) e^{-iE_nt/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r}) = 0$$

になるから (1.49) が (1.2) の一般解である。係数  $c_n$  は

$$\langle n | \psi(0) \rangle = \sum_{n'} c_{n'} \langle n | n' \rangle = \sum_{n'} c_{n'} \delta_{nn'} = c_n \quad (1.50)$$

より、時刻  $t = 0$  での状態  $\psi(\mathbf{r}, 0)$  が与えられれば  $c_n$  が決まり、任意の時刻での状態  $\psi(\mathbf{r}, t)$  は一意に決定する。特に、 $\psi(\mathbf{r}, 0)$  が  $\hat{H}$  の固有関数  $\varphi_k$  ならば  $c_n = \langle n | k \rangle = \delta_{nk}$  であるから定常状態  $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iE_k t/\hbar} \varphi_k(\mathbf{r})$  になる。

演算子  $\hat{A}$  の期待値は

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \sum_{nn'} c_n^* c_{n'} e^{i(E_n - E_{n'})t/\hbar} \langle n | \hat{A} | n' \rangle \quad (1.51)$$

であり一般に時間に依存する。ただし、定常状態の場合  $c_n = \delta_{nk}$  であるから

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle k | \hat{A} | k \rangle = \langle \psi(0) | \hat{A} | \psi(0) \rangle$$

になり、前に述べたように一定である。 $\langle n | \hat{H} | n' \rangle = E_n \langle n | n' \rangle = E_n \delta_{nn'}$  であるから、 $\hat{H}$  の期待値は

$$\langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \quad (1.52)$$

になり、定常状態でなくても一定である (エネルギー保存則)。時刻  $t$  でエネルギーを測定して  $E_n$  になる確率は

$$|\langle n | \psi(t) \rangle|^2 = |c_n e^{-iE_n t/\hbar}|^2 = |c_n|^2$$

であり時間に依存しないから期待値も一定になる。

演算子の指数関数  $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$  を考える。 $e^{-i\hat{H}t/\hbar} |n\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$  であるから (1.49) は

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-i\hat{H}t/\hbar} |n\rangle$$

$e^{-i\hat{H}t/\hbar}$  は  $n$  に依存しないから和の前に出して

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \sum_n c_n |n\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (1.53)$$

と表せる。(1.38) で示したように、運動量演算子は波動関数を空間的に変位させるが、ハミルトニアンは時間的な変位をもたらす。(1.53) は時間に依存するシュレーディンガー方程式 (1.2) を書き換えたにすぎないが、理論展開が見通しやすくなることもある。(1.19) を使えば (1.51) は

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{A}_H(t) | \psi(0) \rangle, \quad \hat{A}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (1.54)$$

というコンパクトな表現になる。左辺では時間依存は状態  $|\psi(t)\rangle$  が担うが、右辺では演算子  $\hat{A}_H(t)$  が担う。前者をシュレーディンガー描像、後者をハイゼンベルグ描像というが、これについては 244 ページで扱う。

**問題 1.8**  $\psi(\mathbf{r}, t)$  を  $\hat{H}$  の固有関数  $\varphi_n(\mathbf{r})$  で展開して

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n f_n(t) \varphi_n(\mathbf{r})$$

とする。(1.2) より  $f_n(t)$  が  $i\hbar df_n/dt = E_n f_n$  を満たすことを示せ。これから (1.49) を示せ。

問題 1.9  $\hat{H}$  の固有関数の場合

$$\langle n | [\hat{A}, \hat{H}] | n' \rangle = (E_{n'} - E_n) \langle n | \hat{A} | n' \rangle$$

を示せ。これと (1.51) より (1.14) を求めよ。また, (1.54) の両辺を時間で微分し (1.14) を求めよ。

問題 1.10 前問より  $\langle n | [\hat{A}, \hat{H}] | n \rangle = 0$  である。 $\hat{A} = \mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{p}}$  として

$$\frac{1}{2m} \langle n | \hat{\mathbf{p}}^2 | n \rangle = \frac{1}{2} \langle n | \mathbf{r} \cdot (\nabla V) | n \rangle, \quad \text{ただし} \quad \hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (1.55)$$

を示せ。これは量子力学での**ビリアル定理**である。

## 1.8 運動量の固有状態

運動量演算子  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$  に対して  $\hat{\mathbf{p}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = \hbar\mathbf{k} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  であるから

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = N_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad N_{\mathbf{k}} = \text{規格化定数}$$

は  $\hat{\mathbf{p}}$  の固有関数で固有値は  $\hbar\mathbf{k}$  である。 $\mathbf{k}$  が複素ベクトルでも  $\hat{\mathbf{p}}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hbar\mathbf{k}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  を満たすが、例えば  $\text{Im } k_x \geq 0$  のとき  $x \rightarrow \mp\infty$  で  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は発散し物理的に無意味である。そもそも、 $\hat{\mathbf{p}}$  がエルミート演算子であるためには、固有値  $\hbar\mathbf{k}$  は実ベクトルである。自由粒子  $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m)$  の場合

$$\hat{H}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad k = |\mathbf{k}|$$

$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は  $\hat{H}$  の固有関数でもあり固有値は  $E_{\mathbf{k}}$  である。 $|\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|$  は  $\mathbf{r}$  に依存しないから

$$\int d^3r |\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = |N_{\mathbf{k}}|^2 \int d^3r = \text{発散}$$

になり厳密には規格化はできない。これを回避するには、 $\mathbf{r}$  の積分領域を有限な体積  $V$  の領域とし  $V \rightarrow \infty$  の極限を考えればよい (259 ページ参照)。別の方法として、ディラックのデルタ関数を用いる。 $N_{\mathbf{k}} = (2\pi)^{-3/2}$  とすると

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = N_{\mathbf{k}}^* N_{\mathbf{k}'} \int d^3r \exp(i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}) = (2\pi)^3 |N_{\mathbf{k}}|^2 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$

固有値が連続になる場合、固有関数の規格直交性はクロネッカーのデルタ記号の代わりにディラックのデルタ関数を使う。

自由粒子の場合、時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t)$$

の解は, (1.49), (1.50) の  $\varphi_i(\mathbf{r})$  として  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  を用いると,  $\mathbf{k}$  は連続に変化するから和  $i$  を積分に置き換えて

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3k c(\mathbf{k}) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k c(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}} t), \quad \omega_{\mathbf{k}} = \frac{E_{\mathbf{k}}}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

になる。これはフーリエ変換であるが、フーリエ変換を量子力学的に言えば、波動関数を運動量の固有関数で展開することである。(1.50) は  $|i\rangle$  を  $|\mathbf{k}\rangle$  で置き換えればよい。実際

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | \psi(0) \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, 0) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3r \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \int d^3k' c(\mathbf{k}') \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) = \int d^3k' c(\mathbf{k}') \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = c(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

である。

問題 1.11 状態  $\psi(\mathbf{r}, t)$  を  $\psi(\mathbf{r}, t) = N \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - iEt/\hbar)$  とする。

1. 確率密度  $\rho$  と確率の流れの密度  $\mathbf{j}$  を求め  $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$  を満たすことを示せ。ただし  $\mathbf{v}$  は運動量  $\hbar \mathbf{k}$  である粒子の速度  $\hbar \mathbf{k}/m$  である。確率密度  $\rho$  の粒子が速度  $\mathbf{v}$  で運動するから確率流は  $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$  になる。
2.  $\Delta x$  と  $\Delta p_x$  を求めよ。

問題 1.12 自由粒子に限らず一般に波動関数をフーリエ変換して

$$\varphi(\mathbf{k}, t) = \int \frac{d^3 r}{(2\pi)^{3/2}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t)$$

とする。

1.  $\psi(\mathbf{r}, t)$  が規格化されているとき  $\int d^3 k |\varphi(\mathbf{k}, t)|^2 = 1$  を示せ。
2. 運動量の期待値が

$$\int d^3 r \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3 k \hbar \mathbf{k} |\varphi(\mathbf{k}, t)|^2$$

になることを示せ。これから運動量の観測値が  $\hbar \mathbf{k}$  になる確率は  $|\varphi(\mathbf{k}, t)|^2$  である。これは **仮定 3'** である。

3.  $\int \frac{d^3 r}{(2\pi)^{3/2}} x^n \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) = \left( i \frac{\partial}{\partial k_x} \right)^n \varphi(\mathbf{k}, t)$  を示せ。これから一般に

$$\int \frac{d^3 r}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) = V(i\nabla_{\mathbf{k}}) \varphi(\mathbf{k}, t)$$

である。ただし  $\nabla_{\mathbf{k}}$  は  $\mathbf{k}$  についてのグラジエントである。

4. 時間に依存するシュレーディンガー方程式は  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$  とすると

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(\mathbf{p}, t)}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \varphi(\mathbf{p}, t) + V(\hat{\mathbf{r}}) \varphi(\mathbf{p}, t), \quad \hat{\mathbf{r}} = i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} \quad (1.56)$$

になることを示せ。運動量ではなく位置  $\mathbf{r}$  が微分演算子に置き換わるが、位置と運動量の交換関係は (1.1) と同じであることを示せ。

## 1.9 平面波と波束の運動

一般に  $\mathbf{r}$  と  $t$  の関数である  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$  を考える。ここで  $\omega > 0$  は  $k$  の関数で  $\omega = \hbar k^2/(2m)$  である必要はない。ある時刻  $t$  において、位相  $\theta = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t$  が同じ 2 点を  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  とすると

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1 - \omega t = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2 - \omega t, \quad \therefore \quad \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = 0$$

より  $\mathbf{k}$  と  $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  は直交する。したがって、 $t$  を固定したとき、位相が一定の点  $\mathbf{r}$  は  $\mathbf{k}$  に垂直な平面になる。このため、 $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$  を**平面波**という。位相一定の平面は時間が変化すると移動するが、この平面は  $\mathbf{k}$  に垂直であるから移動方向は  $\mathbf{k}$  の方向である。 $t$  が  $\Delta t$  だけ変化したとき、 $\mathbf{k}$  方向への移動距離を  $\Delta r$  とすると、位相一定より

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t = \mathbf{k} \cdot \left( \mathbf{r} + \frac{\mathbf{k}}{k} \Delta r \right) - \omega(t + \Delta t), \quad \therefore \quad v_p = \frac{\Delta r}{\Delta t} = \frac{\omega}{k}$$

である。位相一定の平面は速度  $v_p = \omega/k$  で移動する。 $v_p$  を**位相速度**という。シュレーディンガー方程式の場合  $v_p = \hbar k/(2m)$  になるから、粒子の速さ  $\hbar k/m$  とは異なる。

典型的な2つの波動方程式

$$(S) \quad i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t), \quad (M) \quad \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (1.57)$$

を扱おう。(S) は自由粒子のシュレーディンガー方程式, (M) は電磁気のマクスウェル方程式である。平面波  $\psi(\mathbf{r}, t) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$  を代入すると

$$(S) \text{ のとき } \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}, \quad (M) \text{ のとき } \omega = ck \quad (1.58)$$

ならば  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$  は波動方程式を満たす。(S) の場合, 位相速度は  $\hbar k/(2m)$  であり  $k$  に依存するから, 個々の平面波の速さは異なる。一方, (M) の場合, 位相速度は  $c$  であり全ての平面波は同じ速さで進む。(1.58) の  $\omega$  は  $k$  の関数であるから  $\omega_k$  と表すことにする。

(1.57) の方程式は  $\psi$  について1次であるから,  $a(\mathbf{k})$  を任意関数として

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3k a(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega_k t)$$

も (1.57) の解である。以下では簡単のため1次元を考え  $k_x = k$  とすると

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk a(k) \exp(ikx - i\omega_k t) \quad (1.59)$$

具体的に計算するため

$$a(k) = a_0 e^{-b^2(k-k_0)^2/2}, \quad a_0 > 0, \quad b > 0 \quad (1.60)$$

とする。 $|k - k_0| = 1/b$  のとき  $|a|^2 \propto e^{-b^2(k-k_0)^2} = e^{-1}$  になるから, (1.59) は主に  $|k - k_0| \lesssim 1/b$  を満たす平面波の重ね合わせである。 $b \rightarrow \infty$  では  $k \neq k_0$  のとき  $a(k) = 0$  になり, (1.59) は  $k = k_0$  の平面波だけからなる。逆に  $b \rightarrow 0$  では  $a(k) = a_0$  であり, (1.59) は全ての平面波を同じ割合で含む。(1.57) の場合, 位相  $\theta = kx - \omega_k t$  は  $k$  の関数としては高々2次であるから ( $\omega_k$  が  $k$  の3次以上に依存する場合  $(k - k_0)^3$  以上を無視する近似では)

$$\begin{aligned} \theta(k) &= \theta(k_0) + \left. \frac{d\theta}{dk} \right|_{k=k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\theta}{dk^2} \right|_{k=k_0} (k - k_0)^2 \\ &= k_0 x - \omega_0 t + (x - v_g t) (k - k_0) - \frac{\gamma t}{2} (k - k_0)^2 \end{aligned}$$

ただし

$$\omega_0 = \omega_{k_0}, \quad v_g = \left. \frac{d\omega_k}{dk} \right|_{k=k_0}, \quad \gamma = \left. \frac{d^2\omega_k}{dk^2} \right|_{k=k_0}$$

これから (1.59) は  $k - k_0$  を改めて  $k$  とすると

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= a_0 e^{ik_0 x - i\omega_0 t} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\left(-\frac{Z}{2} k^2 + i(x - v_g t) k\right), \quad Z = b^2 + i\gamma t \\ &= a_0 \exp\left(ik_0 x - i\omega_0 t - \frac{(x - v_g t)^2}{2Z}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\left(-\frac{Z}{2} \left(k - \frac{i(x - v_g t)}{Z}\right)^2\right) \end{aligned}$$

(16.36) より  $\text{Re } Z > 0$  であるからガウス積分が成り立ち

$$\psi(x, t) = a_0 \sqrt{\frac{2\pi}{b^2 + i\gamma t}} \exp\left(ik_0 x - i\omega_0 t - \frac{(x - v_g t)^2}{2(b^2 + i\gamma t)}\right) \quad (1.61)$$

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{2\pi a_0^2}{b\sqrt{D(t)}} \exp\left(-\frac{(x - v_g t)^2}{D(t)}\right), \quad D(t) = b^2 + \frac{(\gamma t)^2}{b^2} \quad (1.62)$$



になる。この波動は速さ  $v_g$  で進む。 $\psi(x, t)$  は  $k = k_0$  を中心とした平面波の重ね合わせであるが、これが全体として  $v_g$  で移動する。このため  $v_g$  を**群速度**という。

$$(S) \quad \frac{d\omega_k}{dk} = \frac{\hbar k}{m} \neq \frac{\omega_k}{k} = \frac{\hbar k}{2m}, \quad (M) \quad \frac{d\omega_k}{dk} = c = \frac{\omega_k}{k}$$

であるから、(S) の場合、位相速度と群速度は異なる。

$|\psi(x, t)|^2$  は  $x = v_g t$  を中心に  $\sqrt{D}$  程度の有限の広がりをもつ。このように、ある場所に局在した波動を**波束**という。(M) の場合  $\gamma = 0$  であるから  $D(t) = b^2$  になり時間に依存しない。したがって、波束は形を変えずに位相速度 (= 群速度) で移動する。一方、(S) の場合は  $\gamma = \hbar/m \neq 0$  であるから、時間の経過とともに  $D(t)$  は増加し波束は分散する。一般に、 $\omega_k \propto k$  でない場合、平面波の位相速度  $\omega_k/k$  は  $k$  に依存し平面波ごとに異なるから、平面波の重ね合わせである波束の形は時間とともに変化する。この現象を波の**分散**という。また、 $\omega_k$  と  $k$  の関係を**分散関係**という。波束全体は形を変えながら群速度  $v_g = d\omega_k/dk$  で移動する。

以下では、シュレーディンガー方程式を扱う。自由粒子の場合

$$\hat{H}\varphi_k(x) = E_k\varphi_k(x), \quad \text{ただし} \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega_k, \quad \varphi_k(x) = e^{ikx}$$

である。 $k$  は連続であるから (1.49) における  $n$  の和を  $k$  の積分で置き換えると (1.59) になる。

(1.62) より  $\psi(x, t)$  を規格化すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 = \frac{2\pi a_0^2}{b\sqrt{D}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{(x - v_g t)^2}{D}\right) = \frac{2\pi^{3/2} a_0^2}{b} = 1, \quad \therefore a_0 = \sqrt{\frac{b}{2\pi^{3/2}}}$$

(1.61), (1.62) は

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{1}{\pi^{1/2} b^2 + i\hbar t/m}} \exp\left(ik_0 x - i\omega_0 t - \frac{(x - v_g t)^2}{2(b^2 + i\hbar t/m)}\right), \quad v_g = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (1.63)$$

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi D(t)}} \exp\left(-\frac{(x - v_g t)^2}{D(t)}\right), \quad D(t) = b^2 + \left(\frac{\hbar t}{mb}\right)^2 \quad (1.64)$$

になる。初期波動関数

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} b}} \exp\left(ik_0 x - \frac{x^2}{2b^2}\right) \quad (1.65)$$

は不確定性最小の状態 (1.47) で  $x_0 = 0$ ,  $\Delta x = b/\sqrt{2}$

とした状態である。古典力学では自由粒子は等速運動をするが、これに対応して、確率密度の中心も一定

速度  $v_g = \hbar k_0/m$  で運動する。ただし、古典力学と異なり、位置と運動量は確定した値にはならない。上図に  $|\psi(x, t)|^2$  を適当な時間間隔  $t_0$  で図示した。波束は時間の経過とともに拡散する。

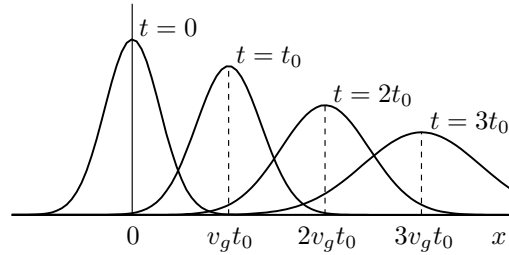
時刻  $t$  での期待値を  $\langle \cdots \rangle$  で表す。 $y = x - v_g t$  とすると

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi D}} \int_{-\infty}^{\infty} dy (y + v_g t) e^{-y^2/D} = \frac{v_g t}{\sqrt{\pi D}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2/D} = v_g t$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi D}} \int_{-\infty}^{\infty} dy (y + v_g t)^2 e^{-y^2/D} = \frac{D}{2} + (v_g t)^2$$

$x$  の分散は

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{D}{2} = \frac{b^2}{2} \left(1 + \left(\frac{\hbar t}{mb^2}\right)^2\right)$$



になり、波束の広がり時間の経過とともに拡大する。

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x, t) = \left( ik_0 - \frac{x - v_g t}{b^2 + i\hbar t/m} \right) \psi(x, t)$$

であるから

$$\langle \hat{p} \rangle = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( k_0 + i \frac{x - v_g t}{b^2 + i\hbar t/m} \right) |\psi(x, t)|^2 = \hbar k_0 = mv_g$$

$\langle \hat{p} \rangle = m d\langle x \rangle / dt$  になるが、これはエーレンフェストの定理の具体例である。部分積分を行うと

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x, t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) = \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \left| \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|^2$$

したがって

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi D}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( k_0^2 + \frac{x^2}{b^2 D} \right) e^{-x^2/D} = \hbar^2 k_0^2 + \frac{\hbar^2}{2b^2}$$

になり  $(\Delta p)^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \hbar^2 / (2b^2)$  は時間に依存しない。自由粒子の場合、運動量演算子  $\hat{p}$  はハミルトニアン  $H = \hat{p}^2 / 2m$  と可換であり  $\hat{p}$ ,  $\hat{p}^2$  の期待値は時間に依存しない。不確定性の積は

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \left( \frac{\hbar t}{mb^2} \right)^2}$$

である。 $t \neq 0$  では最小の不確定性状態ではない。 $(\Delta x)^2 = b^2/2 + (\Delta p t/m)^2$  と表せる。 $\Delta x$  は、運動量の不確定性に対応する速度  $\Delta p/m$  で広がる。 $t = 0$  で不確定性最小の状態 (1.65) であり  $\Delta p$  は一定であるから、 $\Delta x$  は  $t = 0$  で最小になる ((1.69) 参照)。

平面波は運動量演算子の固有関数であるから  $\Delta p = 0$  である。また、 $|\psi| = \text{一定}$  より  $\Delta x = \infty$  になり  $\Delta x \Delta p$  は不定である。平面波を波束の極限として扱えば、この不定性は回避できる。波動関数 (1.63) の場合、 $b \rightarrow \infty$  とすると運動量  $\hbar k_0$  の純粋な平面波になり

$$\Delta x \xrightarrow{b \rightarrow \infty} b/\sqrt{2} \rightarrow \infty, \quad \Delta p = \hbar/(\sqrt{2}b) \rightarrow 0, \quad \Delta x \Delta p \rightarrow \hbar/2$$

である。

**問題 1.13** (1.59) より

$$a(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} \psi(x, 0)$$

である。これを (1.59) に代入すると

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-x') - i\omega_k t} \psi(x', 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' G(x-x', t) \psi(x', 0) \quad (1.66)$$

になる。ただし

$$G(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx - i\omega_k t} \quad (1.67)$$

である。 $G(x, t)$  は 1 次元での自由粒子のグリーン関数である。(16.34) を用いて積分を実行し

$$G(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp\left(i \frac{mx^2}{2\hbar t}\right) \quad (1.68)$$

を示せ (問題 3.9 参照)。  $t = 0$  のとき規格化された波動関数を

$$\psi(x, 0) = \left( \frac{\alpha}{\pi z^2} \right)^{1/4} \exp\left( ik_0 x - \frac{x^2}{2z} \right), \quad z = \alpha + i\beta, \quad \alpha, \beta \text{ は実数で } \alpha > 0$$

とする。(1.66) より

$$\psi(x, t) = \frac{(\alpha/\pi)^{1/4}}{\sqrt{z + i\hbar t/m}} \exp\left(ik_0x - i\omega_0t - \frac{(x - v_g t)^2}{2(z + i\hbar t/m)}\right), \quad \omega_0 = \frac{\hbar k_0^2}{2m}, \quad v_g = \frac{\hbar k_0}{m}$$

及び

$$(\Delta x)^2 = \frac{\alpha^2 + (\hbar t/m + \beta)^2}{2\alpha}, \quad (\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{2\alpha} \quad (1.69)$$

を示せ。時刻  $t = -m\beta/\hbar$  で最小の不確定性関係を満たす。 $\beta = 0$  あるいは  $t + m\beta/\hbar$  を  $t$  と置きなおせば,  $\psi(x, t)$  は (1.63) になる。

## 1.10 時間とエネルギーの不確定性関係

状態  $\psi(\mathbf{r}, t)$  での期待値を  $\langle \dots \rangle$  で表す。 $\hat{A}$  を時間に依存しない演算子とし

$$\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}, \quad \Delta E = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2}$$

とすると, (1.14), (1.39) より

$$\Delta A \Delta E \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle| = \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} \right|, \quad \text{つまり} \quad \Delta T_A \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta T_A \equiv \frac{\Delta A}{|d\langle \hat{A} \rangle/dt|} \quad (1.70)$$

になる (マンデルスタム・タムの不等式)。 $\Delta T_A$  の次元は時間である。時刻  $t$  で  $\hat{A}$  を観測すると, 観測値は期待値  $\langle \hat{A} \rangle$  を中心として  $\Delta A$  程度で分散する。時刻  $t$  と  $t + \delta t$  における期待値の差

$$\left| \langle \psi(t + \delta t) | \hat{A} | \psi(t + \delta t) \rangle - \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \right| \approx \delta t \left| \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} \right| = \frac{\delta t}{\Delta T_A} \Delta A$$

が  $\Delta A$  より小さければ ( $\delta t < \Delta T_A$ ),  $\hat{A}$  の測定では系は実質的に同じである。したがって,  $\Delta T_A$  は  $\hat{A}$  の測定により系が変化したと見なせるのに必要な時間の目安になる。この時間  $\Delta T_A$  とエネルギーの分散は不確定性関係 (1.70) を満たす。 $\Delta E$  が小さい程, 系の変化を見出すには長い時間経過が必要になる。特に,  $\Delta E \rightarrow 0$  のとき  $\Delta T_A \rightarrow \infty$  になり系は時間変化しない。 $\Delta E = 0$  の状態は定常状態であり  $\langle \hat{A} \rangle$  は時間に依存しないから  $\Delta T_A \rightarrow \infty$  である。

具体例として, 1次元で  $x$  軸正方向に運動する自由粒子の波束を考える。波束は空間的に  $\Delta x$  程度広がっているため, 粒子がある1点を通過する時刻は観測では厳密には決定できない。波束の速度 (群速度) を  $v$  とすると, 波束がある1点  $x$  を時刻  $t$  に通過したか,  $t + \delta t$  に通過したか, が区別できるのは  $v\delta t \gtrsim \Delta x$  の場合であろう。このとき  $\Delta T = \Delta x/v$  程度の不確定性をもつ。 $q = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle$  とすると

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | \frac{\hat{p}^2}{2M} | \psi \rangle = \frac{q^2 + (\Delta p)^2}{2M}, \quad \frac{d}{dt} \langle \psi | x | \psi \rangle = \frac{q}{M} = v$$

である。 $\Delta T = \Delta x/v$  は (1.70) で  $\hat{A} = x$  としたものである。波束では運動量も分散するから, エネルギーにも分散が生じる。 $\langle \psi | \hat{H}^2 | \psi \rangle$  を求めるのは煩雑であるから  $\Delta E \approx (dE/dq)\Delta p = v\Delta p$  で評価すると  $\Delta T \Delta E \approx \Delta x \Delta p \geq \hbar/2$  になる。

(1.70) は (1.39) と類似の関係式ではあるが, 大きな違いがある。(1.39) では  $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  は演算子 (物理量) であり,  $\Delta a$  と  $\Delta b$  は状態  $\psi$  における分散である。時間  $t$  は演算子ではなく変数であり,  $\Delta T_A$  は  $t$  の分散ではない。位置  $\mathbf{r}$  も変数ではあるが, 位置演算子  $\hat{\mathbf{r}}$  が存在しその固有値が  $\mathbf{r}$  である (383 ページ)。時間にも対応する演算子  $\hat{T}$  が存在し, その固有値を  $t$  とする。 $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$ ,  $\hat{p}_x = -i\hbar \partial/\partial x$

との類似から,  $\hat{H} = i\hbar \partial/\partial t$  であれば  $[\hat{H}, t] = i\hbar$  であり  $\Delta t \Delta E \geq \hbar/2$  になりそうである。この場合  $\hat{H}$  の固有状態は  $e^{-iEt/\hbar}$  に比例し, 固有値  $E$  は任意の実数になる。一方, 物理的に意味のある  $\hat{H}$  では, 基底状態が存在するから固有値  $E$  には下限がある。したがって,  $\hat{T}$  は存在せず  $\hat{H} = i\hbar \partial/\partial t$  とはできない。シュレーディンガー方程式  $i\hbar \partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi$  は任意の  $\psi$  について成立しないから  $\hat{H} = i\hbar \partial/\partial t$  を意味しない。一方,  $\hat{p}_x\psi = -i\hbar \partial\psi/\partial x$  は  $\hat{p}_x$  の定義であり, 任意の  $\psi$  について成り立つ。

### 1.11 回折と干渉

波動に特有な現象として回折と干渉がある。(1.63) の波束の波動関数を用いて, 量子力学的粒子の回折と干渉を調べる。

#### 回折

粒子が  $xy$  平面上を運動する場合を考える。 $x$  軸正方向に運動する粒子が  $x = 0$  の単スリットを通過した後,  $x = L$  で粒子を見出す

確率  $P(y) = |\psi(L, y, t)|^2$  を求める。 $\psi(x, y, t)$  は 2 次元のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, t) = (H_x + H_y) \psi(x, y, t), \quad H_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad H_y = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (1.71)$$

に従う。ハミルトニアンは  $x$  だけの部分  $H_x$  と  $y$  だけの部分  $H_y$  に分離する。そこで, 1 次元のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi_x}{\partial t} = H_x \psi_x, \quad i\hbar \frac{\partial \psi_y}{\partial t} = H_y \psi_y \quad (1.72)$$

の解を用いて  $\psi(x, y, t) = \psi_x(x, t) \psi_y(y, t)$  とする。 $H_x \psi = \psi_y H_x \psi_x$ ,  $H_y \psi = \psi_x H_y \psi_y$  であるから

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial \psi_x}{\partial t} \psi_y + \psi_x i\hbar \frac{\partial \psi_y}{\partial t} = (H_x \psi_x) \psi_y + \psi_x (H_y \psi_y) = (H_x + H_y) \psi(x, y, t)$$

になり  $\psi = \psi_x \psi_y$  は (1.71) を満たす。 $t = 0$  での波動関数を (1.65)

$$\psi_x(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} b}} \exp\left(ik_0 x - \frac{x^2}{2b^2}\right), \quad \psi_y(y, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} b}} \exp\left(-\frac{y^2}{2b^2}\right)$$

とする。ただし  $\psi_y$  では  $k_0 = 0$  である。波束  $\psi(x, y, 0) = \psi_x(x, 0) \psi_y(y, 0)$  は  $x$  軸正方向の速度  $\hbar k_0/m$  をもち, 原点を中心に半径  $b$  程度で広がるから, スリットを通過する粒子の状態と見なせる。

(1.72) の解は前節で求めた。 $\psi_x(x, t)$  は (1.63) で与えられる。また,  $\psi_y(y, t)$  は  $k_0 = 0$  とすると

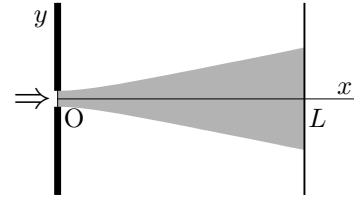
$$\psi_y(y, t) = \sqrt{\frac{1}{\pi^{1/2} b^2 + i\hbar t/m}} \exp\left(-\frac{y^2}{2(b^2 + i\hbar t/m)}\right) \quad (1.73)$$

である。(1.64) より

$$|\psi_x(x, t)|^2 = \frac{e^{-(x-v_g t)^2/D}}{\sqrt{\pi D}}, \quad |\psi_y(y, t)|^2 = \frac{e^{-y^2/d^2}}{\sqrt{\pi d^2}}, \quad D(t) = b^2 + \left(\frac{\hbar t}{mb}\right)^2 \quad (1.74)$$

になる。波束の中心が  $x = L$  に到達する時刻は  $t = L/v_g$  である。このとき  $x = L$  での確率分布は

$$P(y) = |\psi(L, y, L/v_g)|^2 = \frac{e^{-y^2/d^2}}{\pi d^2}, \quad d = \sqrt{D(L/v_g)} = b \sqrt{1 + \left(\frac{L}{b^2 k_0}\right)^2} \quad (1.75)$$



粒子を見出す  $y$  方向の領域は、ほぼ  $|y| \lesssim d$  である。回折の実験では  $L \gg b$  であり  $L/(b^2 k_0) \gg 1$  ならば  $d \approx L/(b k_0) \gg b$  になるから、スリットの影の部分にも粒子を見出す。波長  $\lambda = 2\pi/k_0$  で表せば  $d \sim \lambda L/b$  になるが、これは波動の回折と同じであり、量子力学的粒子は波動性を示す。

波動性を示すといっても、粒子は波動のように広がらない。粒子である以上、観測すると粒子はある 1 点  $y$  に存在し、粒子の一部分を見出すわけではない。古典力学では粒子の位置は時間の関数として一意に決まるが、量子力学では、観測ごとに見出す位置は異なる。どの位置に見出すかが確率的に決まり、多数回の観測を行うと  $y$  に見出す割合は  $P(y)$  になり回折を起こす。

一方、 $b k_0$  が非常に大きいなら  $L/(b^2 k_0) \ll 1$  になる。この場合  $d \approx b$  である。これは古典力学的粒子から予想される結果であり波動性は現れない。 $y$  方向の平均速度は 0 であるが、 $\Delta p_y = \hbar^2/(2b^2)$  の分散があるため  $D(t)$  は時間の経過とともに拡大する。 $x$  方向の速度  $\hbar k_0/m$  が大きく、波束が  $x = L$  に短時間で到達する場合、 $D(t) \approx D(0)$  になり回折は起こらない。

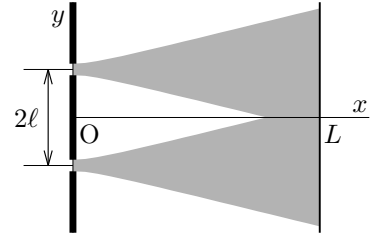
### 干渉

$x = 0, y = \pm \ell$  にスリットがある場合に対応して、(1.73) において  $y$  を  $y \pm \ell$  に置き換え

$$\psi(x, y, t) = \frac{\psi_x(x, t)}{\sqrt{2}} \left( \psi_y(y + \ell, t) + \psi_y(y - \ell, t) \right) \quad (1.76)$$

とする。この  $\psi$  はシュレーディンガー方程式 (1.71) を満たす。

$1/\sqrt{2}$  は規格化定数である。



$$\begin{aligned} |\psi(x, y, t)|^2 &= \frac{|\psi_x(x, t)|^2}{2} \left( \psi_y(y + \ell, t) + \psi_y(y - \ell, t) \right) \left( \psi_y^*(y + \ell, t) + \psi_y^*(y - \ell, t) \right) \\ &= \frac{|\psi_x(x, t)|^2}{2} \left[ |\psi_y(y + \ell, t)|^2 + |\psi_y(y - \ell, t)|^2 + 2 \operatorname{Re} \left( \psi_y^*(y + \ell, t) \psi_y(y - \ell, t) \right) \right] \end{aligned}$$

第 3 項が存在するため干渉が起こる。

$$\begin{aligned} \psi_y^*(y + \ell, t) \psi_y(y - \ell, t) &= \frac{1}{\sqrt{\pi D}} \exp \left( -\frac{(y + \ell)^2}{2(b^2 - i\hbar t/m)} - \frac{(y - \ell)^2}{2(b^2 + i\hbar t/m)} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi D}} \exp \left( -\frac{y^2 + \ell^2}{D} - iKy \right), \quad K(t) = \frac{2\hbar t}{mb^2 D(t)} \end{aligned}$$

これと (1.74) より

$$|\psi(x, y, t)|^2 = \frac{e^{-(x-v_g t)^2/D}}{2\pi D} \left( e^{-(y+\ell)^2/D} + e^{-(y-\ell)^2/D} + 2e^{-(y^2+\ell^2)/D} \cos Ky \right)$$

になる。 $t = 0$  のとき  $D = b^2, K = 0$  である。 $L \gg \ell \gg b$  であるから  $e^{-\ell^2/b^2} \approx 0$  になり

$$|\psi(x, y, 0)|^2 \approx \frac{e^{-x^2/b^2}}{2\pi b^2} \left( e^{-(y+\ell)^2/b^2} + e^{-(y-\ell)^2/b^2} \right), \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx dy |\psi(x, y, 0)|^2 \approx 1$$

$t = 0$  では干渉項は無視でき、 $|\psi(x, y, 0)|^2$  は  $x = 0, y = \pm \ell$  を中心とした 2 つの波束の和になる。したがって、 $\psi(x, y, 0)$  は  $x = 0, y = \pm \ell$  にある 2 つのスリットを通過する状態と見なせる。波束の中心が  $x = L$  に到達する時刻  $t = L/v_g$  では

$$\begin{aligned} |\psi(x, y, L/v_g)|^2 &= \frac{e^{-(x-L)^2/d^2}}{2\pi d^2} \left( e^{-(y+\ell)^2/d^2} + e^{-(y-\ell)^2/d^2} + 2e^{-(y^2+\ell^2)/d^2} \cos 2\kappa y \right) \\ &= \frac{1}{2\pi d^2} \exp \left( -\frac{(x-L)^2 + y^2 + \ell^2}{d^2} \right) \left( e^{-2\ell y/d^2} + e^{2\ell y/d^2} + 2 \cos 2\kappa y \right) \quad (1.77) \end{aligned}$$

ただし

$$d = \sqrt{D(L/v_g)} = b \sqrt{1 + \left(\frac{L}{b^2 k_0}\right)^2}, \quad \kappa = \frac{K(L/v_g)}{2} = \frac{\ell}{d^2} \frac{L}{b^2 k_0}$$

である。 $L/(b^2 k_0) \gg 1$  の場合、 $d \approx L/(b k_0)$ 、 $\kappa \approx \ell k_0/L$  になる。 $\kappa \gg \ell/d^2$  より  $e^{\pm 2\ell y/d^2}$  は  $\cos 2\kappa y$  に比べて非常にゆっくり変化する。 $|\ell y/d^2| \ll 1$  ならば  $e^{\pm 2\ell y/d^2} \approx 1$  になるから

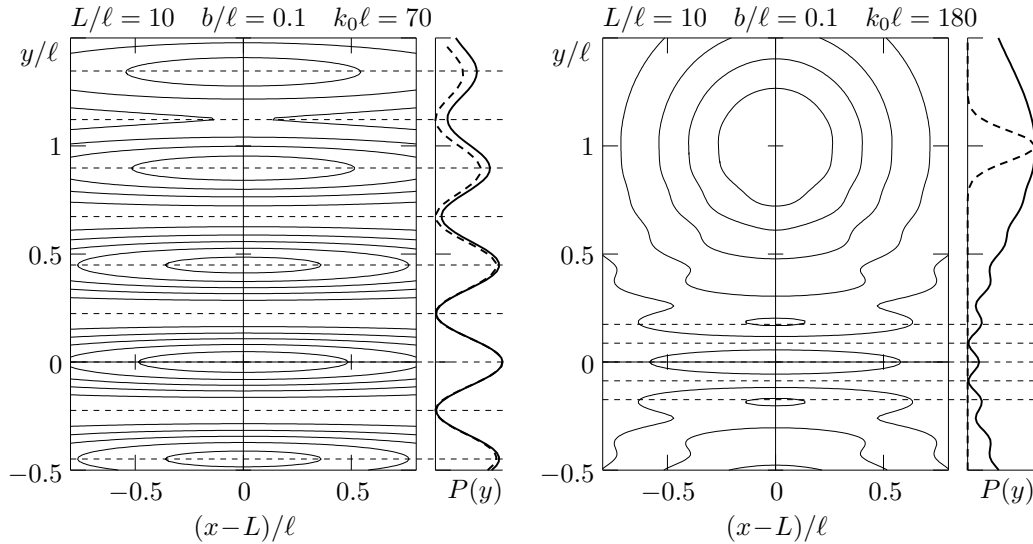
$$|\psi(x, y, L/v_g)|^2 \approx \frac{2}{\pi d^2} \exp\left(-\frac{(x-L)^2 + y^2 + \ell^2}{d^2}\right) \cos^2 \kappa y \quad (1.78)$$

と近似できる。 $b/\ell \ll 1$  であるから

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial y} = -2\kappa |\psi|^2 \left( \tan \kappa y + \frac{b^2}{\ell^2} \kappa y \right) \approx -2\kappa |\psi|^2 \tan \kappa y \propto \cos \kappa y \sin \kappa y$$

したがって、 $y \approx y_n = n\pi/(2\kappa)$  で  $|\psi(x, y, L/v_g)|^2$  は極小 ( $n = \text{奇数}$ ) または極大 ( $n = \text{偶数}$ ) になる。波長  $\lambda = 2\pi/k_0$  で表せば  $y_n = \lambda L n / (4\ell)$  になり、波動の干渉と同じである。回折と同様に、粒子自体が波動のように広がるわけではなく、観測すると粒子は1点に存在する。どの点に存在するかが確率的に決まり、多数回観測すると粒子の分布は干渉パターンを示す。 $L/(b^2 k_0) \ll 1$  の場合、 $d \approx b$  より  $|\psi(x, y, L/v_g)|^2 \approx |\psi(x, y, 0)|^2$  になり干渉は現れない。

下図に (1.77) の等高線と  $P(y) = |\psi(L, y, L/v_g)|^2$  の数値結果を示す。 $x$  軸に平行な破線は  $y = y_n$  である。左図では干渉縞が見える。破線の曲線は  $x = L$  での近似式 (1.78) を示す。右図の場合、ほとんど干渉しないが回折は起こる。破線の曲線は  $(b/d)^2 \approx 0.03$  倍した初期波動関数  $|\psi(0, y, 0)|^2$  である。



## 2 1次元の束縛状態

### 2.1 1次元シュレーディンガー方程式の一般的性質

1次元のシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)\psi(x) \quad (2.1)$$

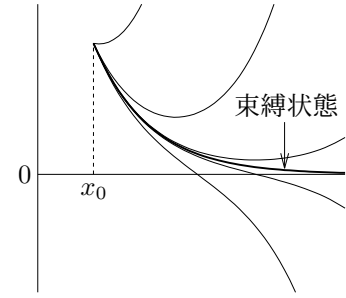
を考える。系の広がりを表す適当な長さを  $\lambda$  として  $q = x/\lambda$  とすると

$$\frac{d^2\psi(q)}{dq^2} = (U(q) - \varepsilon)\psi(q), \quad \varepsilon = \frac{2m\lambda^2 E}{\hbar^2}, \quad U(q) = \frac{2m\lambda^2}{\hbar^2} V(x) \quad (2.2)$$

とも表せる。 $q, \varepsilon, U(q)$  は無次元である。

定常状態  $\psi(x)$  には**束縛状態**と**散乱状態**がある。古典力学的粒子との対応で言えば、空間の有限な範囲内での運動が束縛状態、無限遠から入射して無限遠に飛び去る運動が散乱状態に対応する。束縛状態の場合、粒子は無限遠に存在しないから、境界条件  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$  を満たす必要がある。散乱状態では無限遠で  $\psi(x)$  は有限であればよい。1次元の束縛状態の一般的性質について考える。(2.1) はスツルム・リウビル型微分方程式の特別な場合である。

詳しくは45ページで扱うが、ここでは  $x \rightarrow \infty$  での  $\psi(x)$  の振る舞いを定性的に調べる。 $x \rightarrow -\infty$  でも同様である。 $V(x)$  と  $E$  は実数であるから、 $\psi(x)$  の実部または虚部  $f(x)$  は (2.1) を満たす。適当な  $x_0$  に対して  $x \geq x_0$  のとき  $V(x) - E$  が定符号になるとする。 $V(x) - E > 0$  の場合、 $f(x) > 0$  のとき  $f''(x) > 0$  より  $f'(x)$  は増加関数、 $f(x) < 0$  のとき  $f'(x)$  は減少関数であるから、 $f(x_0)$  を固定し  $f'(x_0)$  を変化させると、 $f(x)$  は図のようになる。 $x \rightarrow \infty$  で単調



に0に収束する  $\psi(x)$  が存在する。このとき、 $\psi'(x)$  も0に収束する。これが束縛状態の波動関数である。 $V(x) - E < 0$  の場合、 $f'(x)$  は  $f(x) > 0$  のとき減少関数、 $f(x) < 0$  のとき増加関数になるから、 $\psi(x)$  は0を中心に振動し束縛状態ではない。

$E = E_1, E = E_2$  の解をそれぞれ  $\psi_1(x), \psi_2(x)$  とすると

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E_1)\psi_1(x), \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E_2)\psi_2(x)$$

であるから

$$\frac{dW}{dx} = \psi_1 \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \psi_2 \frac{d^2\psi_1}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - E_2)\psi_1(x)\psi_2(x), \quad W(x) = \psi_1 \frac{d\psi_2}{dx} - \psi_2 \frac{d\psi_1}{dx} \quad (2.3)$$

になる。 $W(x)$  を**ロンスキャン**という。2階の常微分方程式 (2.1) には1つの  $E$  に対して1次独立な解は2つあり、2重に**縮退** (8ページ) する可能性がある。1次独立な解を  $\psi_1(x), \psi_2(x)$  とすると、 $E_1 = E_2 = E$  であるから  $dW/dx = 0$  になり  $W(x) = \text{一定} = w$  である。 $w = 0$  の場合

$$\frac{d}{dx} \frac{\psi_2}{\psi_1} = \frac{\psi_1 \psi_2' - \psi_2 \psi_1'}{\psi_1^2} = 0 \quad \therefore \quad \psi_2(x) = C\psi_1(x)$$

したがって、1次独立ならば  $w \neq 0$  であるから、 $\psi_1(x), \psi_1'(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$  のとき  $|\psi_2(x)| \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} \infty$  になる。 $\psi_2(x)$  は束縛状態ではないから、1次元の束縛状態に縮退はない。

束縛状態の波動関数  $\psi(x)$  の実部を  $f(x)$ 、虚部を  $g(x)$  とすると、 $f(x)$  と  $g(x)$  は独立に (2.1) を満たし  $f(x), g(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$  であるから、 $f(x)$  または  $g(x)$  自体も束縛状態の波動関数である。束縛状

態に縮退はないから,  $C$  を実数として  $g(x) = Cf(x)$  とおける。極形式で表して  $1 + iC = re^{i\theta}$  とすれば  $\psi(x) = e^{i\theta}rf(x)$  になる。物理的に意味のない位相定数  $e^{i\theta}$  を除けば, 束縛状態の波動関数  $\psi(x)$  は必ず実数にできる。

$x \rightarrow \pm\infty$  で 0 に収束しない散乱状態は 2 重に縮退してもよい。例えば, 自由粒子の場合 ( $V = 0$ ),  $e^{\pm ikx}$  は (2.1) を満たし  $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$  は同じになるが,  $e^{ikx}$  と  $e^{-ikx}$  は 1 次独立であり縮退する。 $\psi(x)$  と  $\psi^*(x)$  は同じ散乱の境界条件 (3.2) を満たさないから, 散乱状態は実数化できない。

(2.3) を積分すると, 束縛状態の場合  $W(\infty) = W(-\infty) = 0$  になるから

$$W(\infty) - W(-\infty) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - E_2) \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1(x) \psi_2(x) = 0$$

である。 $E_2 \neq E_1$  のとき  $\psi_1(x)$  と  $\psi_2(x)$  は直交する。

### $V(x) = V(-x)$ の場合

(2.1) で  $x$  を  $-x$  に置き換えると

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(-x) + V(-x) \psi(-x) = E \psi(-x)$$

である。 $V(x) = V(-x)$  の場合,  $\psi(-x)$  と  $\psi(x)$  は同じハミルトニアンと同じ  $E$  の状態である。束縛状態ならば, 縮退はないから  $\psi(-x) = C\psi(x)$  とおける。 $\psi(x) = C\psi(-x) = C^2\psi(x)$  より  $C^2 = 1$  であり  $\psi(-x) = \pm\psi(x)$  になる。 $V(x) = V(-x)$  の場合, 束縛状態の  $\psi(x)$  は偶関数か奇関数である。

### ポテンシャルに有限のとびがある場合の接続条件

$x = a$  で  $V(x)$  が不連続であるとき,  $x = a$  で  $\psi(x)$  は連続であるが 2 階微分  $\psi''(x)$  は不連続になる。シュレーディンガー方程式 (2.1) を  $a - \varepsilon \leq x \leq a + \varepsilon$  で積分すると

$$\psi'(a + \varepsilon) - \psi'(a - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx (V(x) - E) \psi(x) \quad (2.4)$$

$V(x)$  が  $x = a$  で不連続でも右辺の被積分関数は有限であるから,  $\varepsilon \rightarrow +0$  とすると  $\psi'(a + 0) - \psi'(a - 0) = 0$  になる。したがって, ポテンシャルに有限のとびがある場合でも  $\psi(x)$  と  $d\psi/dx$  は連続である。なお, 無限大のとびがある場合は, (2.19) 前後の議論参照。

### ポテンシャルにデルタ関数を含む場合の接続条件

$V_1(x)$  を有限関数として  $V(x) = V_0\delta(x - a) + V_1(x)$  とする。(2.4) より

$$\psi'(a + \varepsilon) - \psi'(a - \varepsilon) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \delta(x - a) \psi(x) + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx (V_1(x) - E) \psi(x)$$

第 2 項は  $\varepsilon \rightarrow +0$  のとき 0 になるから

$$\psi'(a + 0) - \psi'(a - 0) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(a) \quad (2.5)$$

$\psi(a) \neq 0$  ならば  $\psi'(x)$  は  $x = a$  で不連続になる。 $x \neq a$  では  $V(x) = V_1(x)$  になるから, ポテンシャル  $V_1(x)$  での解  $\psi(x)$  を求め,  $x < a$  での  $\psi(x)$  と  $x > a$  での  $\psi(x)$  が  $x = a$  で連続で, かつ (2.5) を満たすようにする。デルタ関数型ポテンシャルの影響は  $x = a$  での接続条件だけに現れる。

### ポテンシャルに下限がある場合の固有値の範囲

$\psi(x)$  は規格化されているとする。(2.1) に  $\psi^*(x)$  をかけ積分すると

$$E = T + \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) |\psi(x)|^2, \quad T = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$$



運動エネルギー  $T$  で部分積分すると、束縛状態の場合  $\psi(\pm\infty) = 0$  であるから

$$T = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d\psi^*(x)}{dx} \frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 > 0$$

である。したがって  $V(x) \geq V_{\min}$  ならば

$$E > \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) |\psi(x)|^2 \geq V_{\min} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = V_{\min} \quad (2.6)$$

になる。 $V(x_0) = V_{\min}$  とすると、古典力学では、最低エネルギー  $E_0$  は粒子が  $x = x_0$  に静止している場合であり  $E_0 = V_{\min}$  になる。一方、量子力学では位置  $x_0$  と運動量  $= 0$  が確定した状態は、不確定性関係のため許されないから、最低エネルギー  $E_0$  の状態 (基底状態) でも  $E_0 > V_{\min}$  である。 $E_0 - V_{\min}$  を零点エネルギーという。零点エネルギーは不確定性関係を用いると大雑把に評価できる。例えば、問題 2.3 あるいは 85 ページ。

### ポテンシャルが無限遠で一定になる場合

$V(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} V_{\pm}$  で  $V_+ > V_-$  の場合を考える。 $x \rightarrow \pm\infty$  ではシュレーディンガー方程式は

$$x \rightarrow \infty : \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V_+ - E)\psi, \quad x \rightarrow -\infty : \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V_- - E)\psi \quad (2.7)$$

になる。 $k_{\pm} = \sqrt{2m|E - V_{\pm}|/\hbar^2}$  とする。 $E > V_-$  の場合  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} A \cos k_- x + B \sin k_- x$ ,  $E = V_-$  の場合  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} A + Bx$  になるから、束縛状態は存在しない。 $E < V_-$  の場合

$$\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} Ae^{-k_+ x} + Be^{k_+ x}, \quad \psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} Ce^{-k_- x} + De^{k_- x}$$

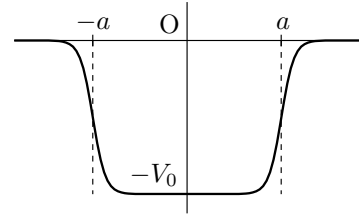
であるから  $A, D \neq 0, B = C = 0$  ならば  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$  になる。したがって、束縛状態が存在するためには  $E < \min(V_+, V_-)$  である。26 ページの定性的議論から、束縛状態が存在するには、適当な  $x_0 > 0$  に対して  $|x| > x_0$  のとき  $V(x) - E > 0$  になる必要があり  $E < \min(V_+, V_-)$  になる。

**問題 2.1**  $V(x) = v_0 \delta(x - a) + V_1(x)$  の場合、 $d^2\psi/dx^2$  は  $x = a$  で発散するから、 $\psi(x)$  は全領域で 1 つの滑らかな関数では表せない。そこで  $\psi(x) = \theta(a - x)\psi_-(x) + \theta(x - a)\psi_+(x)$  とする。ただし  $\theta(x)$  は (16.8) の階段関数である。(16.19) より接続条件 (2.5) を求めよ。

## 2.2 井戸型ポテンシャル

$a, V_0$  が正の定数である井戸型ポテンシャル  $V(x)$

$$V(x) = -V_0 \theta(a - |x|) = \begin{cases} 0, & |x| > a \\ -V_0, & |x| < a \end{cases} \quad (2.8)$$



を考える。右図のような滑らかで  $|x| = a$  で急激に立ち上がるポテンシャルの極限と見なすと、粒子に働く力  $F(x) = -dV/dx$  は  $x = -a$  近傍では  $F > 0$ ,  $x = a$  近傍では  $F < 0$  になり、それ以外では 0 である。 $F$  は常に井戸の中心を向く引力である。一般に、束縛状態のエネルギーは離散的になり (46 ページ参照), また、粒子は古典力学で存在できない領域にも存在できる。井戸型ポテンシャルはこれらの性質を考察するのに適した例題である。

$V_{\min} = -V_0, V_{\pm} = 0$  より、束縛状態は  $-V_0 < E < 0$  の場合に存在する。

$$\alpha = \sqrt{-2ma^2 E/\hbar^2}, \quad \beta = \sqrt{2ma^2 (E + V_0)/\hbar^2}, \quad v_0 = \sqrt{2ma^2 V_0/\hbar^2} \quad (2.9)$$

とおく。これらは無次元の正の実数である。シュレーディンガー方程式 (2.1) は

$$|x| < a \text{ のとき } \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{\beta^2}{a^2} \psi(x), \quad |x| > a \text{ のとき } \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{\alpha^2}{a^2} \psi(x) \quad (2.10)$$

になる。\$V(x) = V(-x)\$ であるから束縛状態の波動関数は偶関数か奇関数になり、(2.10) を \$x \ge 0\$ の範囲で解けばよい。これは全空間で解く場合に比べて扱いが簡単になる。\$|x| < a\$ では \$\cos(\beta x/a)\$ と \$\sin(\beta x/a)\$, \$x > a\$ では \$e^{-\alpha x/a}\$ と \$e^{\alpha x/a}\$ の線型結合になるが、\$\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0\$ より

$$\text{偶関数 : } \psi(x) = \begin{cases} A \cos(\beta x/a) \\ B e^{-\alpha x/a} \end{cases} \quad \text{奇関数 : } \psi(x) = \begin{cases} C \sin(\beta x/a), & -a < x < a \\ D e^{-\alpha x/a}, & x > a \end{cases}$$

とおける。\$x = a\$ で \$\psi(x)\$, \$\psi'(x)\$ は連続であるから

$$A \cos \beta = B e^{-\alpha}, \quad \beta A \sin \beta = \alpha B e^{-\alpha}, \quad \therefore \alpha = \beta \tan \beta \quad (2.11)$$

$$C \sin \beta = D e^{-\alpha}, \quad \beta C \cos \beta = -\alpha D e^{-\alpha}, \quad \therefore \alpha = -\beta \cot \beta \quad (2.12)$$

になる。(2.11) は \$\alpha^2 = \beta^2 \tan^2 \beta\$ かつ \$\tan \beta > 0\$ と同値である。更に、\$\alpha^2 = v\_0^2 - \beta^2\$ より

$$|\cos \beta| = \beta/v_0, \quad \tan \beta > 0 \quad (2.13)$$

と簡単になる。\$B = A e^\alpha \cos \beta\$ より波動関数は

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos(\beta x/a), & -a < x < a \\ A \cos \beta e^{-\alpha(x-a)/a}, & x > a \end{cases}, \quad A = \sqrt{\frac{1}{a} \frac{\alpha}{1+\alpha}} \quad (2.14)$$

になる。\$A\$ は \$\psi(x)\$ を規格化することで決まる。

$$\int_0^a dx \cos^2 \frac{\beta x}{a} = \frac{a}{2} \left(1 + \frac{\alpha}{v_0^2}\right), \quad \cos^2 \beta \int_a^\infty dx e^{-2\alpha(x-a)/a} = \frac{a}{2\alpha} \cos^2 \beta = \frac{a}{2} \frac{\beta^2}{\alpha v_0^2} \quad (2.15)$$

であるから

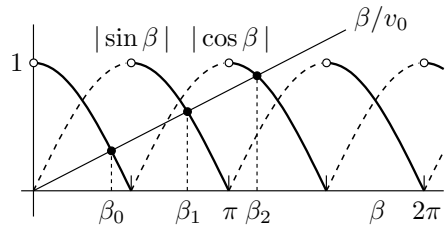
$$\int_{-\infty}^\infty dx |\psi(x)|^2 = a|A|^2 \left(1 + \frac{\alpha^2 + \beta^2}{\alpha v_0^2}\right) = a|A|^2 \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right) = 1, \quad \therefore A = \sqrt{\frac{1}{a} \frac{\alpha}{1+\alpha}}$$

とすればよい。(2.13) と同様にすると、奇関数の (2.12) と波動関数は

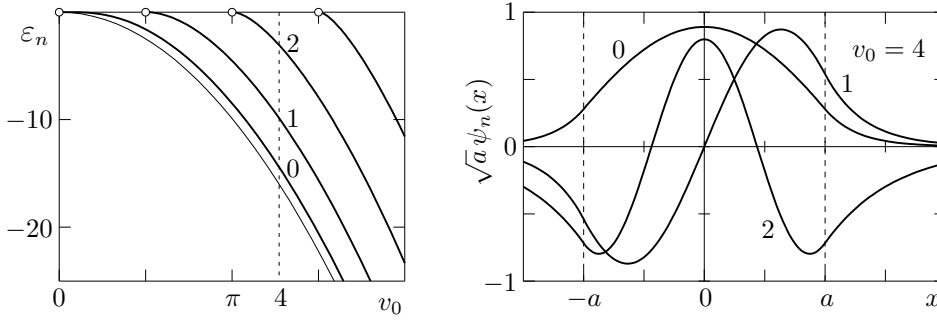
$$|\sin \beta| = \beta/v_0 \text{ ただし } \tan \beta < 0, \quad \psi(x) = \begin{cases} A \sin(\beta x/a), & 0 \leq x < a \\ A \sin \beta e^{-\alpha(x-a)/a}, & x > a \end{cases} \quad (2.16)$$

になる。(2.13), (2.16) は特定の \$\beta\$ で成り立つから、束縛状態のエネルギー \$E\$ は離散的になる。これらの方程式は解析的に解けないが、図を用いて解の性質を調べることはできる。

(2.13), (2.16) の解は \$|\cos \beta|\$ または \$|\sin \beta|\$ と直線 \$\beta/v\_0\$ の交点から求まる。これを図示すると右図になる (\$v\_0 = 4\$ の場合)。曲線の実線部分と直線との交点が解 \$\beta\_n\$ を与える (\$n = 0, 1, \dots\$)。破線との交点は解ではない。交点が \$\circ\$ のとき、\$\beta\_n/v\_0 = 1\$ より \$2ma^2 E\_n/\hbar^2 = \beta\_n^2 - v\_0^2 = 0\$ になり束縛状態ではない。図から \$(k-1)\pi/2 < v\_0 \leq k\pi/2\$ の場合、\$k\$ 個の束縛状態が存在する。\$\beta = \beta\_n\$ の波動関数を \$\psi\_n(x)\$ とすると、\$n\$ が偶数のとき \$\psi\_n\$ は偶関数 (2.14)、奇数のとき奇関数 (2.16) であり、偶関数の解と奇関数の解が交互に現れる。



下の左図に  $\varepsilon_n = 2ma^2 E_n / \hbar^2 = \beta_n^2 - v_0^2$  を示す。曲線に付けた値は  $n$  である。  $E_0 < E_1 < \dots < 0$  であるが、最も低い  $E_0$  の状態が**基底状態**であり、 $E_1, E_2, \dots$  の状態をそれぞれ第1**励起状態**、第2**励起状態**、 $\dots$  という。細い曲線は古典力学での最低エネルギー  $E = -V_0$ 、つまり  $\varepsilon = -v_0^2$  である。これと  $E_0$  との差  $\hbar^2 \beta_0^2 / (2ma^2)$  が零点エネルギーである ( (2.6) 参照 )。  $E = E_n$  の波動関数  $\psi_n(x)$  を右図に示す。26 ページの図での議論から、 $|x| < a$  のとき  $V(x) - E < 0$  であるから  $\psi_n(x)$  は振動し、 $|x| > a$  では指数関数的に減少する。また、 $\psi_n(x)$  には  $n$  個の零点 (節) が存在する。節の個数については46 ページ参照。



**問題 2.2** 具体形 (2.14), (2.16) を用いて  $k \neq \ell$  のとき直交性  $\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_k(x) \psi_\ell(x) = 0$  を示せ。

$v_0$  が  $k\pi/2$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$  を超えると、 $k$  が偶数のとき (2.11)、奇数のとき (2.12) に新たな束縛状態の解  $2ma^2 E / \hbar^2 = -\alpha^2 \approx 0$  が現れる。 $v_0 = k\pi/2 + \delta$ ,  $0 < \delta \ll 1$  とする。 $\beta = \sqrt{v_0^2 - \alpha^2} \approx v_0$  であるから  $\alpha = -\beta \cot \beta \approx v_0 \tan \delta \approx v_0 \delta > 0$  または  $\alpha = \beta \tan \beta \approx v_0 \delta$  になる。これから  $E \approx 0$  の解は

$$\frac{2ma^2}{\hbar^2} E \xrightarrow{v_0 \rightarrow 0} -v_0^4, \quad \frac{2ma^2}{\hbar^2} E \xrightarrow{v_0 \rightarrow k\pi/2 \neq 0} -\left(\frac{k\pi}{2}\right)^2 \left(v_0 - \frac{k\pi}{2}\right)^2 \quad (2.17)$$

である。

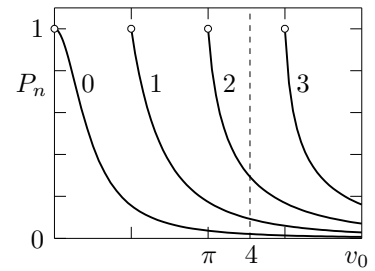
古典力学では  $mv^2/2 = E - V(x) \geq 0$  を満たす領域が運動可能領域である。井戸型ポテンシャル (2.8) で  $-V_0 < E < 0$  の場合、この領域は  $|x| < a$  になり古典力学的粒子は井戸の外部に侵入できない。一方、量子力学では  $|x| > a$  でも  $\psi(x) \neq 0$  であり、井戸の外部にも粒子は存在する。 $|x| > a$  の存在確率は (2.15), (2.16) より

$$P_n = 2 \int_a^\infty dx |\psi_n(x)|^2 = \frac{1}{1 + \alpha_n} \frac{\beta_n^2}{v_0^2}$$

になる。 $P_n$  の  $v_0$  依存性を右図に示す。 $E_n \approx 0$  ( $\alpha_n \approx 0$ ) のとき、 $|x| > a$  での  $\psi_n(x) \propto e^{-\alpha_n |x|/a}$  は大きく広がり、粒子はほとんど  $|x| > a$  に存在する。 $v_0$  が大きくなると  $\alpha_n$  は増加し  $P_n$  は減少する。 $v_0 \rightarrow \infty$  では  $P_n \rightarrow 0$  になり、量子力学でも粒子は井戸に閉じ込められる。 $E_n \xrightarrow{v_0 \rightarrow \infty} -\infty$  になるが  $E_n + V_0 = \hbar^2 \beta_n^2 / (2ma^2)$  は有限である。これはポテンシャルの底  $-V_0$  を基準にしたエネルギーである。そこで、 $E + V_0$ ,  $V(x) + V_0$  を  $E$ ,  $V(x)$  と置き直すと

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta^2, \quad V(x) = \begin{cases} V_0 = \infty, & |x| > a \\ 0, & |x| < a \end{cases} \quad (2.18)$$

である。29 ページの図で、直線  $\beta/v_0$  は  $\beta$  軸に一致するから、(2.13), (2.16) の解は  $\beta_n \rightarrow (n+1)\pi/2$



になる。また、 $\alpha = \sqrt{v_0^2 - \beta^2} \rightarrow \infty$  であるから、(2.14), (2.16) より  $n+1$  を  $n$  と置き換えると

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{2a} \right)^2, \quad \psi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi(x+a)}{2a}, & |x| \leq a \\ 0, & |x| > a \end{cases}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.19)$$

になる。 $d\psi/dx$  は  $x = \pm a$  で不連続である。固有値と固有関数は簡単になり、第1章の固有関数の完全性などを具体的に確かめることができる。以下の無限に深い井戸参照。

一般に、 $a < x < b$  で  $V(x)$  は有限で外側では  $V(x) = \infty$  のとき、 $\psi(a) = \psi(b) = 0$  の境界条件を設定し  $a \leq x \leq b$  の領域だけを考える。量子力学的にも  $V(x) = \infty$  の領域に粒子は侵入できない。 $d\psi/dx$  の連続性は  $x = a, b$  では要求しない。

**問題 2.3** ポテンシャル (2.18) の場合、不確定性関係から  $E > \frac{\hbar^2}{2m(2a)^2}$  を示せ。

### 2つの境界条件と離散的エネルギー固有値

束縛状態の  $E$  が離散的になる原因は、2つの境界条件  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0$  及び  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} 0$  を要請することにある。 $\psi(x)$  が偶関数か奇関数の場合、一方の境界条件を満たせば、他の境界条件は自動的に満たす。ここで、 $\psi(x)$  が偶関数か奇関数になることを使わず、また、境界条件  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0$  だけを考慮してみる。この場合、(2.10) の解は  $A, B, C, D, F$  を任意定数として ( $F \neq 0$ )

$$\psi(x) = \begin{cases} Fe^{\alpha x/a}, & x < -a \\ A \sin(\beta x/a) + B \cos(\beta x/a), & x < |a| \\ Ce^{-\alpha x/a} + De^{\alpha x/a}, & x > a \end{cases} \quad (2.20)$$

である。 $x = \pm a$  で  $\psi, d\psi/dx$  は連続であるから

$$Fe^{-\alpha} = -A \sin \beta + B \cos \beta, \quad \alpha Fe^{-\alpha} = \beta (A \cos \beta + B \sin \beta) \quad (2.21)$$

$$A \sin \beta + B \cos \beta = Ce^{-\alpha} + De^{\alpha}, \quad \beta (A \cos \beta - B \sin \beta) = \alpha (De^{\alpha} - Ce^{-\alpha}) \quad (2.22)$$

(2.21) から

$$\frac{A}{F} = e^{-\alpha} \left( \frac{\alpha}{\beta} \cos \beta - \sin \beta \right), \quad \frac{B}{F} = e^{-\alpha} \left( \frac{\alpha}{\beta} \sin \beta + \cos \beta \right) \quad (2.23)$$

(2.22) より  $C, D$  を  $A, B$  で表し、これに上式を代入すると

$$\frac{C}{F} = \frac{\alpha^2 + \beta^2}{\alpha\beta} \cos \beta \sin \beta, \quad \frac{D}{F} = e^{-2\alpha} \left( \sin \beta + \frac{\beta}{\alpha} \cos \beta \right) \left( \frac{\alpha}{\beta} \cos \beta - \sin \beta \right) \quad (2.24)$$

になる。 $-V_0 < E < 0$  である任意の  $E$  に対して  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0$  を満たす解は存在し、この境界条件だけでは  $E$  は連続的である。ところで、 $D \neq 0$  ならば  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \infty$  になり物理的に無意味である。そこで  $D = 0$  を要請すると、(2.24) より (2.11), (2.12) になり、束縛状態の  $E$  は離散的になる。(2.11) が成り立つとき、 $\alpha = \beta \tan \beta$  を (2.23), (2.24) に代入すると  $A = 0, C = F = B e^{\alpha} \cos \beta$  になるから、(2.20) は偶関数 (2.14) を再現する。(2.12) の場合、(2.20) は奇関数 (2.16) になる。

### 2.3 無限に深い井戸

ポテンシャルが無限に深い井戸 (2.18) の場合、固有値と固有関数 (2.19) は

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{b} \right)^2, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{n\pi x}{b}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.25)$$

である。ただし,  $x+a$  を改めて  $x$  とし  $0 \leq x \leq b = 2a$  の領域を考える。上の結果は井戸型ポテンシャルの極限として求めたが, ここでシュレーディンガー方程式

$$H\psi(x) = E\psi(x), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(b, x), \quad V(b, x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < b \\ \infty, & \text{上記以外} \end{cases}$$

を直接解く。境界条件  $\psi(0) = \psi(b) = 0$  と  $0 < x < b$  において

$$d^2\psi/dx^2 = -\kappa^2\psi(x), \quad \kappa = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

を満たす解を求める。 $E$  は  $V$  の最小値より大きいから  $E > 0$  になり,  $\kappa$  は正の実数である。 $\psi(x)$  は  $\sin \kappa x$  と  $\cos \kappa x$  の線形結合で表せるが,  $\psi(0) = 0$  より  $\psi(x) = A \sin \kappa x$  である。 $\psi(b) = A \sin \kappa b = 0$ ,  $A \neq 0$  より  $n$  を正の整数として  $\kappa = n\pi/b$  になり (2.25) を得る。 $n \leq 0$  も解になるが,  $\psi_0(x)$  は恒等的に 0 になり無意味である。また,  $\psi_{-n}(x) = -\psi_n(x)$  より  $\psi_{-n}(x)$  と  $\psi_n(x)$  は 1 次独立ではない。

$0 \leq x \leq b$  では  $\psi_n(x) = \sqrt{2/b} (e^{in\pi x/b} - e^{-in\pi x/b})/2i$  であるが,  $0 \leq x \leq b$  の外側で  $\psi_n(x) = 0$  になるから

$$\psi_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{\sqrt{2\pi}} e^{iqx} \varphi_n(q)$$

としたとき,  $q = \pm n\pi/b$  以外の平面波も混ざる。フーリエ逆変換より

$$\varphi_n(q) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-iqx} \psi_n(x) = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{b}{4\pi}} e^{-ibq/2 + in\pi/2} (g(bq - n\pi) - (-1)^n g(bq + n\pi))$$

ただし  $g(x) = \frac{\sin(x/2)}{x/2}$  になる。**問題 1.12** の 2. より, 状態  $\psi_n(x)$  において運動量が  $\hbar q$  である確率密度  $P_n(q)$  は

$$P_n(q) = |\varphi_n(q)|^2 = \frac{b}{4\pi} (g(bq - n\pi) - (-1)^n g(bq + n\pi))^2$$

である。 $g^2(x)$  は  $x = 0$  を中心に幅  $|x| \lesssim 2\pi$  のピークをなすから (248 ページの図),  $n \gg 1$  の場合

$$g(bq - n\pi)g(bq + n\pi) \approx 0, \quad \therefore P_n(q) \approx \frac{b}{4\pi} (g^2(bq - n\pi) + g^2(bq + n\pi))$$

になり,  $\psi_n$  は  $|q \pm n\pi/b| \lesssim 2\pi/b$  である平面波  $e^{iqx}$  の重ね合わせである。

$\psi_k(x)$  が規格直交系であることは簡単に示せる。完全性 (1.27)

$$F_n(x, x') = \sum_{k=1}^n \psi_k(x) \psi_k(x') = \frac{2}{b} \sum_{k=1}^n \sin \frac{k\pi x}{b} \sin \frac{k\pi x'}{b} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \delta(x - x') \quad (2.26)$$

を示す。 $q = \pi x/(2b)$ ,  $q' = \pi x'/(2b)$  とする。 $0 \leq q, q' \leq \pi/2$  である。 $\sin$  の積を  $\cos$  の和に直せば

$$F_n(x, x') = \frac{1}{2b} (D_n(q - q') - D_n(q + q'))$$

ただし ( $z = e^{iq}$ )

$$D_n(q) = 1 + 2 \sum_{k=1}^n \cos 2kq = \sum_{k=-n}^n z^{2k} = \frac{z^{2n+1} - z^{-2n-1}}{z - z^{-1}} = \frac{\pi q}{\sin q} \frac{\sin(2n+1)q}{\pi q}$$

になる。 $z^2 = 1$  は  $z^2 \rightarrow 1$  の極限を考える。(16.18) より

$$D_n(q) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{\pi q}{\sin q} \delta(q) = \pi \delta(q) = 2b \delta(x), \quad \therefore F_n(x, x') \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \delta(x - x') - \delta(x + x')$$

$x, x' \geq 0$  より第2項は  $x = x' = 0$  の場合だけ寄与し,  $x = 0$  で0になる関数に対しては無視できるから, (2.26) が成り立つ。  
 $bF_n(x, x')$  を  $x$  の関数として図に示す。  $n \gg 1$  のとき  $bF_n(x, x) \approx D_n(0)/2 = n + 1/2$  である。

$\psi(0) = \psi(b) = 0$  である任意関数  $\psi(x)$  は

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} d_n \psi_n(x), \quad d_n = \int_0^b dx \psi_n(x) \psi(x)$$

と展開できる。

$$\psi(x) = \theta(c-x) \sqrt{2/c} \sin(\pi x/c), \quad 0 < c \leq b \quad (2.27)$$

を考える。 $\psi(x)$  はポテンシャルが  $V(c, x)$  における基底状態ではあるが,  $c \neq b$  のとき  $V(b, x)$  での固有状態  $\psi_n(x)$  ではない。 $d_n$  の積分を行うと

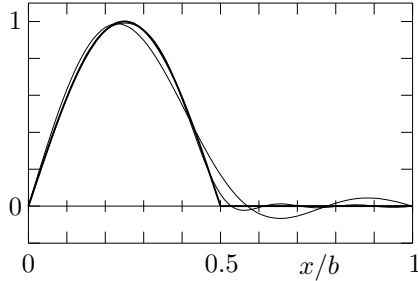
$$d_n = \sqrt{c/b} f(nc/b), \quad f(x) = \frac{2 \sin \pi x}{\pi 1 - x^2}, \quad f(1) = f(x \rightarrow 1) = 1$$

である。 $c = b$  のとき  $\psi(x) = \psi_1(x)$  より  $d_n = f(n) = \delta_{n1}$  になる。 $c = b/2$  の場合

$$s_k = \sum_{n=1}^k d_n^2 \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 1, \quad \Phi_k(x) = \sum_{n=1}^k d_n \psi_n(x) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \psi(x, 0)$$

を数値的に確かめる。 $n = 2$  以外の偶数では  $d_n = 0$  である。下図に  $\sqrt{c/2} \psi(x, 0)$  を太い曲線で,  $k = 3, 9$  の  $\sqrt{c/2} \Phi_k(x)$  を細い曲線で示す。 $\psi(x, 0)$  との一致がよい方が  $k = 9$  である。

$n$	$d_n$	$d_n^2$	$s_n$
1	0.6002	0.3603	0.3603
2	0.7071	0.5000	0.8603
3	0.3601	0.1297	0.9899
5	-0.0857	0.0074	0.9973
7	0.0400	0.0016	0.9989
9	-0.0234	0.0005	0.9994



(2.27) の場合,  $H$  の期待値は

$$\langle H \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^b dx \psi(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \varepsilon_c \int_0^b dx \psi^2(x) = \varepsilon_c, \quad \varepsilon_c = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{c} \right)^2$$

になる (問題 2.4)。  $k$  を整数として  $c = b/k$  のとき,  $\langle H \rangle = E_k$  であり固有値に一致するが,  $k \neq 1$  ならば  $\psi(x, t)$  は  $H$  の固有関数ではない。エネルギーを観測すると観測値は固有値  $E_n$  のいずれかであり,  $E_n$  を得る確率は  $d_n^2 = (f(n/k))^2/k$  である。 $f(1) = 1$  より  $E_k$  の確率は  $1/k$  であるが, 期待値も  $E_k$  になる。 $k = 2$  での  $d_n^2$  は上の表に与えてある。 $k = 1$  の場合, 観測値は常に  $E_1$  である。

**問題 2.4**  $c \neq b$  のとき  $H\psi(x) \neq \varepsilon_c \psi(x)$ ,  $\psi(x)H\psi(x) = \varepsilon_c \psi^2(x)$  を示せ。

## 2.4 デルタ関数型ポテンシャル

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x), \quad V(x) = -\frac{\hbar^2 v_1}{m} \delta(x) \quad (2.28)$$

の束縛状態を求める ( $E < 0$ )。定数  $v_1$  の次元は長さの逆である。例えば, デルタ関数の具体的表現 (16.16) を用いると, 粒子に働く力  $F(x)$  は

$$F(x) = -\frac{dV}{dx} = -\frac{\hbar^2 v_1}{m} \frac{1}{\pi} \frac{2\varepsilon x}{(x^2 + \varepsilon^2)^2}, \quad \varepsilon \rightarrow +0$$

になる。 $-v_1 < 0$  のとき,  $x \geq 0$  では  $F(x) \leq 0$  になり常に原点方向に作用するから引力である。 $-v_1 > 0$  の場合斥力になる。

$\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2} > 0$  とすると,  $x \neq 0$  のとき  $\psi'' = \kappa^2 \psi$  になるから  $\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$  とおける。 $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$  より  $A = 0$ , 更に  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0$  より  $B = 0$  になり束縛状態は存在しない, などとしないように。(2.5) より  $d\psi/dx$  は  $x = 0$  で不連続になるから,  $\psi(x)$  は滑らかな 1 つの関数では表せない。

$$x > 0 \text{ のとき } \psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}, \quad x < 0 \text{ のとき } \psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$$

とする。 $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$  より  $A = D = 0$ , 更に  $x = 0$  で  $\psi(x)$  は連続であるから  $B = C$  になり,  $\psi(x) = Be^{-\kappa|x|}$  である ( $B \neq 0$ )。 (2.5) は

$$\psi'(0+0) - \psi'(0-0) = -2\kappa B = -2v_1 \psi(0), \quad \therefore \kappa = v_1$$

$\kappa > 0$  より引力  $v_1 > 0$  のとき束縛状態が 1 つ存在する。固有値と規格化した波動関数は

$$E = -\frac{\hbar^2 v_1^2}{2m}, \quad \psi(x) = \sqrt{v_1} e^{-v_1|x|} \quad (2.29)$$

である。 $V(x)$  は偶関数であるから, 束縛状態の  $\psi(x)$  は偶関数あるいは奇関数になる。奇関数の場合,  $\psi(0) = 0$  より  $\delta(x)\psi(x) = 0$  になり  $V(x) = 0$  と同等であるから束縛状態は存在しない。

ポテンシャル  $V(x)$  と運動エネルギー  $T = H - V(x)$  の期待値は

$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) \psi^2(x) = -\frac{\hbar^2 v_1}{m} \psi^2(0) = -\frac{\hbar^2 v_1^2}{m} = 2E, \quad \langle T \rangle = E - \langle V \rangle = -E > 0$$

になる。ビリアル定理 (1.55) と  $x\delta'(x) = -\delta(x)$  より  $\langle T \rangle = \langle xV'(x) \rangle / 2 = -\langle V \rangle / 2$  である。

**問題 2.5**  $\psi(x) = \sqrt{v_1} e^{-v_1|x|}$  は偶関数であるから, 積分領域を  $x > 0$  に制限し

$$\langle T \rangle = -2 \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{\infty} dx \psi(x) \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -\frac{\hbar^2 v_1^3}{m} \int_0^{\infty} dx e^{-2v_1 x} = -\frac{\hbar^2 v_1^2}{2m}$$

とすると誤った結果になるが, 部分積分し

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2 = 2 \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{\infty} dx \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2 = \frac{\hbar^2 v_1^2}{2m}$$

は正しい結果になる。この原因を考えよ。

(2.8) で  $V_0 = \hbar^2 v_1 / (2ma) > 0$  とすると  $V(x) \xrightarrow{a \rightarrow 0} -\hbar^2 v_1 \delta(x) / m$  になるから, 井戸型ポテンシャルの結果から (2.29) を導ける。 $V_0 \xrightarrow{a \rightarrow 0} \infty$  であるが, (2.9) より  $v_0 = \sqrt{2ma^2 V_0 / \hbar^2} = \sqrt{av_1} \rightarrow 0$  になる。 $v_0 \rightarrow 0$  のとき (2.17) より ( $\alpha \approx v_0^2$ )

$$E \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2ma^2} v_0^4 = -\frac{\hbar^2 v_1^2}{2m}, \quad \psi(x) = \sqrt{\frac{1}{a} \frac{\alpha}{1+\alpha}} \cos \beta e^{-\alpha|x-a|/a} \xrightarrow{a \rightarrow 0} \sqrt{v_1} e^{-v_1|x|}$$

になり (2.29) を得る。

$\psi(x)$  をフーリエ変換して

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{iqx} \varphi(q) \quad (2.30)$$

とする。これと  $E = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m$ ,  $\kappa > 0$  を (2.28) に代入すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq e^{iqx} \left( \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \right) \varphi(q) = \frac{\hbar^2 v_1}{m} \psi(x) \delta(x) = \frac{\hbar^2 v_1}{2\pi m} \psi(0) \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{iqx}$$

フーリエ逆変換すれば  $(q^2 + \kappa^2)\varphi(q) = v_1 \psi(0)/\pi$  になるから

$$\psi(x) = \frac{v_1 \psi(0)}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{e^{iqx}}{q^2 + \kappa^2} = \frac{v_1}{\kappa} \psi(0) e^{-\kappa|x|}$$

である。 $x = 0$  とすると  $\kappa = v_1$  であり (2.29) が求まる。 $e^{-\kappa|x|}$  をフーリエ変換して上式を確かめよ。

**問題 2.6** 領域  $|x| < a$  に閉じ込めた粒子のシュレーディンガー方程式

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x), \quad V(x) = \frac{\hbar^2 v}{m} \delta(x), \quad \text{境界条件 } \psi(\pm a) = 0$$

を考える。 $E > 0$  とは限らないが  $q = \sqrt{2mE/\hbar^2}$  とする。 $v$  は  $v_1$  と符号が逆である。

1.  $\sin aq = 0$  または  $q \cot aq + v = 0$  になることを示せ。 $\sin aq = 0$  は  $V(x)$  の影響を受けない。以下では  $q \cot aq + v = 0$  の解を考える。

2.  $E < 0$  の解は,  $av < -1$  のとき 1 つだけ存在することを示せ。

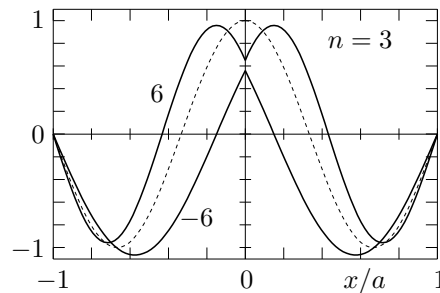
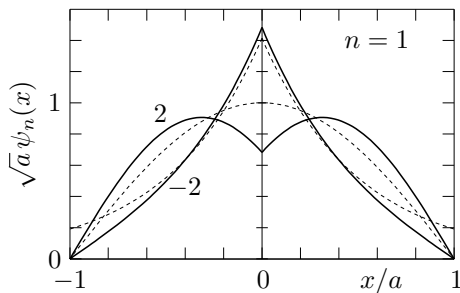
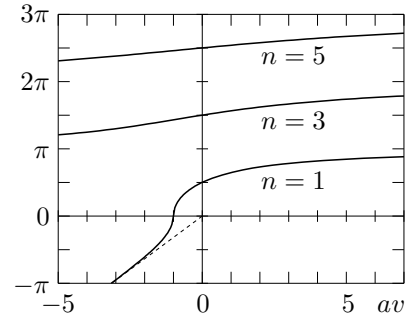
3.  $v = 0$  での固有値と固有関数 (2.19) を  $\varepsilon_n, \varphi_n(x)$  とする。 $E$  と規格化した  $\psi(x)$  は,  $|av| \ll 1$  のとき,  $n = 1, 3, 5, \dots$  として

$$E_n \approx \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 v}{ma} - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2v}{n\pi} \right)^2 \quad (2.31)$$

$$\psi_n(x) \approx \left( 1 - \frac{2av}{(n\pi)^2} \right) \varphi_n(x) + \frac{4av}{(n\pi)^2} (x \mp a) \varphi'_n(x), \quad \begin{cases} -, & x > 0 \\ +, & x < 0 \end{cases} \quad (2.32)$$

を示せ (197 ページの **例題 2** 参照)。また,  $E_n > 0$  のとき  $E_n \xrightarrow{av \rightarrow \pm\infty} \varepsilon_{n\pm 1}$  を示せ。

$E \geq 0$  のとき  $\pm \sqrt{2ma^2|E|/\hbar^2}$  を  $av$  の関数として右図に示す。破線の直線  $av$  は (2.29) である。下図は  $\psi_n(x)$  である。曲線に付けた値は  $av$  を表す。破線は  $\varphi_n$  または (2.29) である。 $v > 0$  の場合, 斥力のため  $\psi_n$  は  $x = \pm a$  の側へ押しやられ,  $v < 0$  では原点側に引きこまれる。 $av = -1$  のとき  $E = 0$  の解が存在し  $\psi(x) = \sqrt{3/2a} (1 - |x|/a)$  になる。 $n = 1$ ,  $av \ll -1$  以外では  $|av| \gg 1$  のとき  $\psi_n(0) \approx 0$  になる。これは  $-a \leq x \leq 0$  と  $0 \leq x \leq a$  の 2 つに分離したことに同等で  $E_n \approx \varepsilon_{n\pm 1}$  になる。





問題 2.7 2つのデルタ関数型ポテンシャル

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x) = E\psi(x), \quad V(x) = -\frac{\hbar^2 v_2}{m} (\delta(x-a) + \delta(x+a)) \quad (2.33)$$

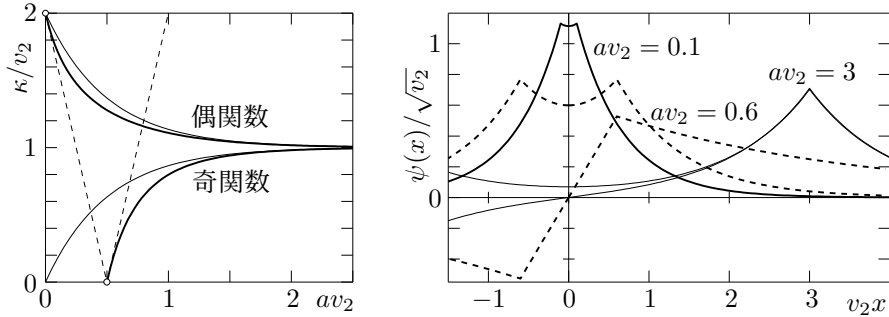
を考える ( $a, v_2 > 0$ )。  $\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2} > 0$  とする。

1.  $x \neq \pm a$  のとき自由粒子と同じになるから,  $\psi(x)$  は  $e^{\pm\kappa x}$  の重ね合わせで表せる。

$$2a\kappa = -\log |\kappa/v_2 - 1| \quad (2.34)$$

を示せ。

2. (2.30) と同様に, 波動関数  $\psi(x)$  をフーリエ変換して (2.34) を求めよ。
3. (2.34) の両辺を  $\kappa/v_2$  の関数として描き, 束縛状態は  $0 < 2av_2 \leq 1$  のとき1つ,  $2av_2 > 1$  のとき2つあることを示せ。また, 解  $\kappa/v_2$  を  $av_2$  の関数として概略を描け。数値結果を下の左図に示す。破線は  $2|1 - 2av_2|$ , 細い曲線は  $1 \pm e^{-2av_2}$  である。下の右図に規格化した  $\psi(x)$  を示す。  $av_2 = 0.1$  のとき奇関数の状態は存在しない。
4.  $a \rightarrow 0, a \rightarrow \infty$  での  $E, \psi(x)$  を (2.29) と比較せよ。



問題 2.8  $N$  個のデルタ関数からなるポテンシャル

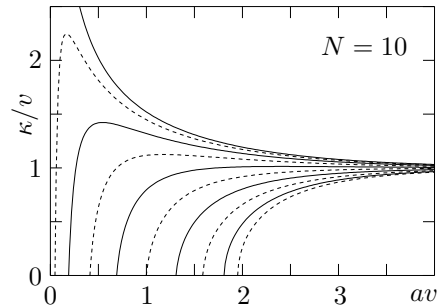
$$V(x) = -\frac{\hbar^2 v}{m} \sum_{n=1}^N \delta(x - na), \quad v > 0$$

での束縛状態の固有値  $E$  は,  $\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$  とすると

$$e^{iN\theta} = \pm \frac{\kappa}{v} \left( e^{i\theta} - \left(1 - \frac{v}{\kappa}\right) e^{\kappa a} \right), \quad \cos \theta \equiv \cosh \kappa a - \frac{v}{\kappa} \sinh \kappa a, \quad 0 < \theta < \pi$$

で決まることを示せ。右図に数値計算例を示す。実線は+, 破線は-の解を表す。+のとき  $\psi(x)$  は  $x - (N+1)a/2$  の偶関数, -のとき奇関数になる。以下のことを示せ。

1.  $av \rightarrow 0$  のとき, 束縛状態は1つだけ存在し  $\kappa/v \rightarrow N$
2.  $av > 1 + \cos(\pi/N)$  では  $N$  個の束縛状態が存在する。
3. 周期的境界条件  $\psi(x) = \psi(x + Na)$  の場合, 純虚数解  $\kappa = iq$  は (2.37) を満たす。



## 2.5 周期的ポテンシャル

周期  $a$  の周期的ポテンシャル  $V(x+a) = V(x)$  を考える。(1.38) より

$$U(a)\psi(x) = \psi(x+a), \quad U(a) = e^{ia\hat{p}/\hbar}, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

である。 $\psi(x)$  を  $V(x)\psi(x)$  で置き換えれば

$$U(a)V(x)\psi(x) = V(x+a)\psi(x+a) = V(x)\psi(x+a) = V(x)U(a)\psi(x)$$

これは任意の  $\psi(x)$  について成り立つから  $U(a)$  と  $V(x)$  は可換  $[U(a), V(x)] = 0$  である。演算子  $\hat{p}$  の関数  $U(a)$  も  $\hat{p}$  と可換であるから,  $H = \hat{p}^2/2m + V(x)$  と  $U(a)$  は可換になる。99 ページで示すように, 可換な演算子には同時固有関数が存在する。(1.31) よりユニタリ演算子  $U(a)$  の固有値は絶対値 1 の複素数であるから,  $k$  を任意実数として

$$H\psi(x) = E\psi(x), \quad U(a)\psi(x) = e^{ika}\psi(x)$$

を満たす  $\psi(x)$  が存在する。 $U(a)\psi(x) = \psi(x+a)$  より

$$\psi(x+a) = e^{ika}\psi(x), \quad \text{つまり} \quad \psi(x) = e^{ikx}\varphi(x), \quad \varphi(x+a) = \varphi(x) \quad (2.35)$$

である。周期的ポテンシャルの固有関数は, 同じ周期性をもつ周期関数と平面波の積で表せる。これを**ブロッホ (Bloch) の定理**という。 $U(a)$  の固有値を与えても  $k$  は一意には決まらないから,  $ka$  を幅  $2\pi$  の領域に制限してもよい。

$$H\psi^*(x) = E\psi^*(x), \quad U(a)\psi^*(x) = \psi^*(x+a) = \left(e^{ika}\psi(x)\right)^* = e^{-ika}\psi^*(x)$$

であるから,  $\psi^*(x)$  も  $H$  と  $U(a)$  の同時固有関数である。 $e^{ika} \neq \pm 1$  のとき,  $U(a)$  の固有値は  $\psi(x)$  と  $\psi^*(x)$  では異なるから,  $\psi(x)$  と  $\psi^*(x)$  は 1 次独立であり  $E$  は 2 重に縮退する。 $H$  の固有関数としては, 例えば  $\psi(x) \pm \psi^*(x)$  でもよいが, これはブロッホの定理を満たさない。

### 簡略化したクロニヒ・ペニー (Kronig-Penney) の模型

周期的ポテンシャルがデルタ関数で与えられる

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad V(x) = \frac{\hbar^2 v}{ma} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-na), \quad v = \text{無次元の定数}$$

を解く。 $x \neq na$  のとき, 自由粒子と同じなるから,  $na < x < (n+1)a$  では

$$\psi_n(x) = A_n \cos q(x/a - n) + B_n \sin q(x/a - n), \quad q = \sqrt{2ma^2 E/\hbar^2}$$

とおける。 $x = na$  での連続性と (2.5) より

$$\psi_n(na) = \psi_{n-1}(na), \quad \psi'_n(na) - \psi'_{n-1}(na) = \frac{2v}{a}\psi_{n-1}(na)$$

であるから  $n$  を任意整数として

$$\mathbf{u}_n = A \mathbf{u}_{n-1} = A^n \mathbf{u}_0, \quad \text{ただし} \quad \mathbf{u}_n = \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} \cos q & \sin q \\ \frac{2v}{q} \cos q - \sin q & \frac{2v}{q} \sin q + \cos q \end{pmatrix}$$

である。ブロッホの定理 (2.35) より  $\psi_n(x+a) = e^{ika}\psi_{n-1}(x)$  であるから  $\mathbf{u}_n = e^{ika}\mathbf{u}_{n-1}$  になる。したがって,  $A\mathbf{u}_n = e^{ika}\mathbf{u}_n$ ,  $\mathbf{u}_n$  は行列  $A$  の固有値  $e^{ika}$  の固有ベクトルである。一般に

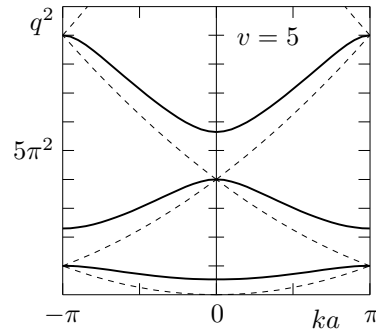
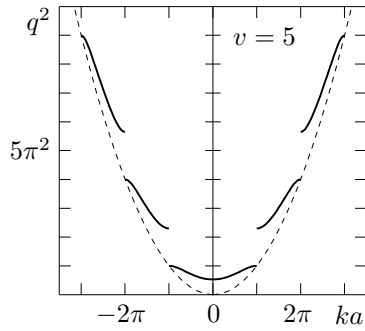
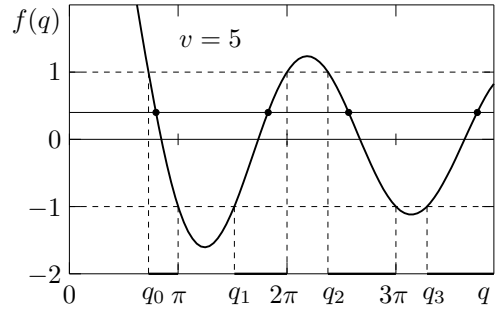
$$\det(A - \lambda) = \lambda^2 - 2f(q)\lambda + 1, \quad f(q) = \cos q + v \frac{\sin q}{q} \quad (2.36)$$

$\mathbf{u}_n \neq \mathbf{0}$  より  $\det(A - e^{ika}) = 0$  であるから

$$f(q) = \cos ka \quad (2.37)$$

になる。 $k$  を与えると  $E = \hbar^2 q^2/2ma^2$  が決まる。 $\pm k$  では  $E$  は同じになり,  $e^{ika} \neq \pm 1$  のとき 2 重に縮退する。 $v < 0$  の場合,  $E > 0$  とは限らない。

偶関数  $f(q)$  を右図に示す。 $f(0) = 1 + v$ ,  $n \neq 0$  のとき  $f(n\pi) = (-1)^n$  である。 $f(q) = \cos ka$  の解  $q$  は  $|f(q)| \leq 1$  である。これを満たす  $q$  の範囲を太い線分で示す。 $v > 0$  のとき,  $\ell$  を正の整数として  $q_{\ell-1} \leq q \leq \ell\pi$  である。 $E = \hbar^2 q^2 / (2ma^2)$  には許される領域と禁止される領域が帯状に現れる。これを**エネルギーバンド**という。 $\cos ka$  を与えると無限個の解  $q$  が存在する (図の  $\bullet$ )。  $k = 0$  のとき  $q = q_0$  とし,  $k$  を連続的に変化させたとき,  $q$  も連続的にとれば  $q$  は一意に定まる。このとき  $q^2 = 2ma^2 E / \hbar^2$  は下の左図になる。破線  $(ka)^2$  は自由粒子のエネルギーである (**問題 2.10**)。  $\cos ka$  は周期  $2\pi/a$  であるから  $ka$  を  $2\pi$  の幅, 例えば,  $|ka| \leq \pi$  に制限してもよい (ブリルアン帯)。この場合,  $q^2$  は右図になる。



ブロッホの定理 (2.35) を用いないで (2.37) を求める。(2.36) より  $\Lambda$  の固有値と固有ベクトルは

$$\Lambda \mathbf{e}_{\pm} = \lambda_{\pm} \mathbf{e}_{\pm}, \quad \lambda_{\pm} = f(q) \pm \sqrt{f^2(q) - 1}$$

になる。 $f^2(q) \neq 1$  のとき  $\lambda_+ \neq \lambda_-$  より  $\mathbf{e}_{\pm}$  は 1 次独立であるから

$$\mathbf{u}_0 = c_+ \mathbf{e}_+ + c_- \mathbf{e}_-, \quad \mathbf{u}_n = \Lambda^n \mathbf{u}_0 = c_+ \lambda_+^n \mathbf{e}_+ + c_- \lambda_-^n \mathbf{e}_- \quad (2.38)$$

と表せる。 $\lambda_+ \lambda_- = 1$  より  $\mathbf{u}_{\pm\infty} \neq \mathbf{0}$  が有限であるためには  $|\lambda_{\pm}| = 1$  でなければならない。したがって,  $-1 < f(q) < 1$  であり (2.37) を満たす必要がある。 $\lambda_{\pm} = \cos ka \pm i \sin ka = e^{\pm ika}$  になる。1 次独立な  $\mathbf{u}_n$  は 2 つあるが, 特に,  $\mathbf{u}_n$  を  $\Lambda$  の固有ベクトル  $\mathbf{u}_n = c_{\pm} \lambda_{\pm}^n \mathbf{e}_{\pm} = e^{\pm ikan} \mathbf{u}_0$  にとれば

$$\psi_n(x) = e^{\pm ikan} \psi_0(x - an) = e^{\pm ika} \psi_{n-1}(x - a)$$

になり (2.35) が成り立つ。 $f^2(q) = 1$  の場合,  $\lambda = f(q)$  の 1 つだけであり (2.38) は成り立たない。しかし,  $\mathbf{u}_0$  を  $\Lambda$  の固有ベクトルにとれば  $\mathbf{u}_n = \lambda^n \mathbf{u}_0$  になるから  $f^2(q) = 1$  の解でもよい。

**問題 2.9**  $f^2(q) = 1$  で  $\sin q \neq 0$  のとき

$$P^{-1} \Lambda P = \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad \text{ただし} \quad P = \begin{pmatrix} \sin q & 0 \\ \lambda - \cos q & 1 \end{pmatrix}$$

を示せ (ジョルダンの標準形)。任意の  $n$  に対して  $A_n, B_n$  が有限になる条件を求めよ。

**問題 2.10**  $ka = \ell\pi \neq 0$  の場合,  $q = \ell\pi$ ,  $q \approx \ell\pi(1 + 2v/(\ell\pi)^2)$  が (2.37) を満たすことを示せ。 $q = \ell\pi$  のとき,  $\mathbf{u}_0$  を  $\Lambda$  の固有ベクトルにとる。 $\psi(x) = B_0 \sin(\ell\pi x/a)$  を示せ。 $\psi(an) = 0$  より  $V(x)\psi(x) = 0$  になるから,  $E$  は自由粒子のエネルギーに一致する。

## 2.6 一様重力での束縛状態

古典力学で扱う最も基本的な問題、質量  $m$  の質点が一定の力  $-mg$  を受け鉛直線 ( $x$  軸) 上を運動する場合、 $V(x) = mgx$  とすると (2.2) は

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} = (q - \varepsilon)\psi(q), \quad \text{ただし} \quad \lambda = \left(\frac{\hbar^2}{2m^2g}\right)^{1/3}, \quad \varepsilon = \frac{2m\lambda^2 E}{\hbar^2} = \frac{E}{mg\lambda} \quad (2.39)$$

になる。これは (18.24) であるから、 $\psi(q)$  はエアリー関数  $\text{Ai}(q - \varepsilon)$  と  $\text{Bi}(q - \varepsilon)$  で表せる。(18.36), (18.37) より  $q \rightarrow \infty$  のとき  $\text{Ai}(q) \rightarrow 0$ ,  $\text{Bi}(q) \rightarrow \infty$  であるから  $\psi(q) = C\text{Ai}(q - \varepsilon)$  とおけ

$$\psi(q) \xrightarrow{q \rightarrow -\infty} \frac{C}{\sqrt{\pi}(\varepsilon - q)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}(\varepsilon - q)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (2.40)$$

になる。任意の  $\varepsilon$  に対して  $\psi(q) \xrightarrow{q \rightarrow \pm\infty} 0$  であるが、 $\psi'(q)$  の振幅は  $q \rightarrow -\infty$  では  $|q|^{1/4}$  で発散するから束縛状態ではない。古典的粒子が自由落下し続けることに対応する。一般に

$$\varphi(q) = \frac{1}{(\varepsilon - U(q))^{1/4}} \left( A \sin k(q) + B \cos k(q) \right), \quad k(q) = \int dq \sqrt{\varepsilon - U(q)} \quad (2.41)$$

とすると ((9.6) 参照)

$$\varphi''(q) = (U(q) - \varepsilon)(1 - \kappa(q))\varphi(q), \quad \kappa(q) = \frac{5U'^2 + 4(\varepsilon - U)U''}{16(\varepsilon - U)^3}$$

である。 $U(q) \xrightarrow{q \rightarrow -\infty} -\infty$  のとき  $\kappa(q) \xrightarrow{q \rightarrow -\infty} 0$  ならば (例えば  $U \propto q^n$  の場合  $\kappa \propto q^{-n-2}$ )、 $\psi(q) \rightarrow \varphi(q)$  になる。任意の  $\varepsilon$  に対して  $\varepsilon - U(q) > 0$  であるから、 $\psi(q)$  は  $|U(q)|^{-1/4}$  で 0 に収束するが、 $\psi'(q)$  は振動しながら  $|U(q)|^{1/4}$  で発散する。 $U(q) = q$  とすれば (2.41) は (2.40) になる。

以下では、古典的粒子が  $x = 0$  で壁と弾性衝突し  $0 \leq x \leq E/mg$  を周期運動する場合を考える。

$$U(q) = \begin{cases} \infty, & q < 0 \\ q, & q > 0 \end{cases} \quad (2.42)$$

である。境界条件  $\psi(0) = C\text{Ai}(-\varepsilon) = 0$  より  $\varepsilon = -a_n$  でなければならない。ただし  $a_n$  は  $\text{Ai}(x)$  の零点である (460 ページの図参照)。エネルギー固有値  $E$  は離散的になり

$$E_n = -mg\lambda a_n \approx mg\lambda \left[ \frac{3\pi}{2} \left( n - \frac{1}{4} \right) \right]^{2/3} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.43)$$

ここで  $a_n$  の近似式 (18.27) を用いた (234 ページ 問題 9.2 参照)。古典力学での最低エネルギーは  $E = 0$  ( $x = 0$  に静止) であるが、量子力学では不確定性のため  $x = 0$  に静止できないから、最低エネルギーは  $E_1 > 0$  になる ((2.6) 参照)。

$\psi_n(q) = C\text{Ai}(q + a_n)$  は  $\text{Ai}(q)$  を  $-a_n > 0$  だけ平行移動すればよい。規格化条件

$$\int_0^\infty dx \psi_n(x)^2 = \lambda C^2 I_n = 1, \quad I_n = \int_{a_n}^\infty dq \text{Ai}^2(q) = - \int_{a_n}^\infty dq q \frac{d\text{Ai}^2}{dq} = -2 \int_{a_n}^\infty dq q \text{Ai} \frac{d\text{Ai}}{dq}$$

から  $C$  を決める。 $q\text{Ai}(q) = \text{Ai}''(q)$  より

$$I_n = - \int_{a_n}^\infty dq \frac{d\text{Ai}'^2}{dq} = (\text{Ai}'(a_n))^2, \quad \therefore \quad \psi_n(x) = \frac{\text{Ai}(q + a_n)}{\sqrt{\lambda} \text{Ai}'(a_n)} \quad (2.44)$$

である。

460 ページの図より  $z > \ell$ , ( $\ell \sim 3$ ) では  $\text{Ai}^2(z) \approx 0$  になるから, 量子力学的粒子は  $q \geq 0$ ,  $q + a_n \lesssim \ell$  に存在するとしてよい。これを  $x = \lambda q$  で表すと

$$0 \leq x \lesssim \lambda(\ell - a_n) = \frac{E_n}{mg} \left(1 - \frac{\ell}{a_n}\right) \quad (2.45)$$

$\lambda$  は系の広がりを表す。  $\hbar c \approx 200 \text{ MeV fm}$ ,  $c^2/2g \approx 4.6 \times 10^{30} \text{ fm}$ , ( $\text{fm} = 10^{-15} \text{ m}$ ) であるから

$$\lambda = \left[ \left( \frac{\hbar c}{mc^2} \right)^2 \frac{c^2}{2g} \right]^{1/3} \approx \begin{cases} 6 \mu\text{m}, & \text{陽子, 中性子 } mc^2 \approx 940 \text{ MeV} \\ 0.9 \text{ mm}, & \text{電子 } mc^2 \approx 0.51 \text{ MeV} \end{cases}$$

になる。電磁気力などに比べて, 重力は非常に弱い力であるため, 波動関数の広がりは巨視的スケールである。重力だけが作用する量子系は例外的であり, 通常, 量子力学では重力は考えない。中性子は電荷 0 であるから, 重力だけが作用する系を作れる。最近, 離散的固有値 (2.43) が実験的に測定されている (Nature **415** (2002) 297, Physical Review **D67** (2003) 102002)。

**問題 2.11**  $V(x) = mg|x|$  の場合, 固有値  $E$  を求め  $E \approx mg\lambda \left(3\pi(2k+1)/8\right)^{2/3}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$  になることを示せ。  $k = 2n - 1$  の場合 (2.43) である。

### 古典力学との関係

(2.45) を古典力学の存在領域 (運動可能領域)  $0 \leq x \leq E_n/mg$  と比較すると, 量子力学では, 古典力学で禁止された領域に染み出す (下図で縦線  $q = -a_n$  より右側の部分)。  $n$  が小さい場合  $-\ell/a_n \sim 1$  であるが,  $n$  が大きくなると  $-\ell/a_n \ll 1$  になり量子力学的染み出しは無視できる。

区間  $[x, x+dx]$  に粒子を見出す古典力学的確率  $P_{\text{cl}}(E, x) dx$  は, この区間を通過するのに要する時間  $dt = dx/v$ , ( $v = \text{速さ} \propto \sqrt{E - mgx}$ ) に比例するから

$$P_{\text{cl}}(E, x) = \frac{mg}{2E} \frac{1}{\sqrt{1 - mgx/E}}, \quad 0 \leq x \leq \frac{E}{mg} \quad (2.46)$$

である。ただし,  $0 \leq x \leq E/mg$  で規格化した。

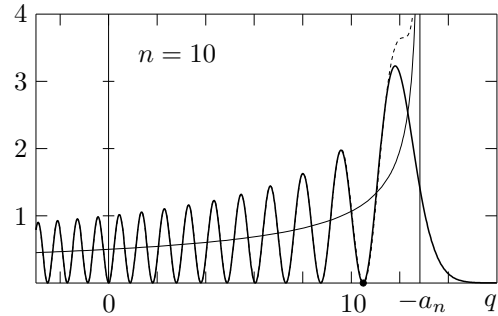
$z = q + a_n$  とおくと, 460 ページの図から  $z \lesssim -1$  では漸近形 (18.36) がよい近似で成り立ち

$$\text{Ai}(z) \approx \frac{\sin \theta}{\sqrt{\pi} |z|^{1/4}}, \quad \text{Ai}'(z) \approx -\frac{\text{Ai}(z)}{4z} - \frac{|z|^{1/4}}{\sqrt{\pi}} \cos \theta, \quad \theta = \frac{2}{3} |z|^{3/2} + \frac{\pi}{4}$$

になる。(18.27) より  $z = a_n$  のとき  $\theta \approx n\pi$  になるから  $\text{Ai}'(a_n) \approx (-1)^{n+1}(-a_n)^{1/4}/\sqrt{\pi}$  である。したがって, (2.44) より

$$\psi_n(x)^2 \approx \frac{mg}{E_n} \sqrt{\frac{-a_n}{|q + a_n|}} \sin^2 \theta = \frac{mg}{E_n} \frac{\sin^2 \theta}{\sqrt{1 - mgx/E_n}} = 2P_{\text{cl}}(E_n, x) \sin^2 \theta \quad (2.47)$$

である。 $\sin^2 \theta$  を  $1/2$  で置き換えた平均的な  $\psi_n^2(x)$  は, 近似的に  $P_{\text{cl}}$  を再現する。右図に  $\psi_n^2(x)$  を太い曲線で,  $P_{\text{cl}}(E_n, x)$  を細い曲線で示す。縦軸の単位は  $mg/E_n$  である。破線は (2.47) であり,  $q \lesssim -a_n - 1$  では (2.47) はよい近似である。 $q < 0$  の部分は  $q = 0$  に壁がない場合の存在確率を表す。 $q \rightarrow -\infty$  では  $\psi_n^2$  と  $P_{\text{cl}}$  は  $1/\sqrt{-q}$  に比例して 0 になる。なお, 原点を他の零点, 例えば図の  $\bullet$  に移動させれば  $n = 1$  の場合になる。ただし, 縦軸と細い曲線の交点が  $1/2$  になるように, 縦軸のスケールは変化する。



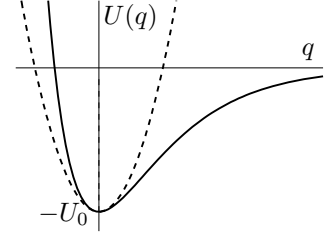
量子力学と古典力学の対応関係は, 時間に依存するシュレーディンガー方程式を解いて, 波束の運動を考察してもよい。 $U(q)$  が (2.42) のときの数値解は **問題 3.11** で求める。

## 2.7 指数関数を含むポテンシャル

### モースポテンシャル

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} + (\varepsilon - U(q))\psi = 0, \quad U(q) = U_0 (e^{-2q} - 2e^{-q}) \quad (2.48)$$

を解析的に解く。 $U_0$  は正の定数である。右図に  $U(q)$  を実線で示す。破線は調和振動子ポテンシャル近似 (2.61) である。



$$\rho = 2ue^{-q} \rightarrow \begin{cases} 0, & q \rightarrow \infty \\ \infty, & q \rightarrow -\infty \end{cases}, \quad u = \sqrt{U_0}$$

とすると (2.48) は

$$\left( \rho \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} - \kappa^2 - \frac{\rho^2}{4} + u\rho \right) \psi = 0, \quad \kappa = \sqrt{-\varepsilon} > 0 \quad (2.49)$$

になる。 $\rho \rightarrow 0, \infty$  のとき  $\psi \rightarrow 0$  であるが、漸近形は

$$\rho \rightarrow \infty, (q \rightarrow -\infty) \text{ のとき } \left( \rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\rho^2}{4} \right) \psi = 0, \quad \therefore \psi = e^{-\rho/2} = \exp(-ue^{-q}) \quad (2.50)$$

$$\rho \rightarrow 0, (q \rightarrow \infty) \text{ のとき } \left( \rho \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} - \kappa^2 \right) \psi = 0, \quad \therefore \psi = \rho^\kappa = (2u)^\kappa e^{-\kappa q}$$

になるから  $\psi = \rho^\kappa e^{-\rho/2} \varphi(\rho)$  とする。(2.49) は

$$\rho \frac{d^2\varphi}{d\rho^2} + (2\kappa + 1 - \rho) \frac{d\varphi}{d\rho} - a\varphi = 0, \quad a = \kappa + 1/2 - u$$

になる。これは合流型超幾何微分方程式 (17.102) であり一般解は (17.107) になる。 $\rho = 0, (q \rightarrow \infty)$  のとき  $\psi = 0$  を考慮すると

$$\psi = C\rho^\kappa e^{-\rho/2} M(a, 2\kappa + 1, \rho), \quad \rho = 2ue^{-q} \quad (2.51)$$

である。更に、(17.111) より  $\psi \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} 0$  であるためには  $a = -n, (n = 0, 1, 2, \dots)$  になるから

$$\kappa = \kappa_n = u - n - 1/2 > 0, \quad \varepsilon_n = -\kappa_n^2 = -(u - n - 1/2)^2 \quad (2.52)$$

である。 $n < u - 1/2$  より  $U_0 > 1/4$  のとき束縛状態が存在する。規格化定数  $C$  は (17.116) より

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq |\psi(q)|^2 = |C|^2 \int_0^\infty d\rho \rho^{2\kappa-1} e^{-\rho} M^2(-n, 2\kappa + 1, \rho) = |C|^2 \frac{n! \Gamma(2\kappa) \Gamma(2\kappa + 1)}{\Gamma(2\kappa + 1 + n)} = 1$$

で決まる。 $n$  次の多項式  $M(-n, 2\kappa + 1, \rho)$  は (17.124) のラゲール陪多項式  $L_n^{2\kappa}(\rho)$  で表せる。

2原子分子間のポテンシャルとしてモースポテンシャル

$$V(r) = V_0 \left( 1 - e^{-b(r-R)/R} \right)^2 - V_0 = V_0 \left( e^{-2b(r-R)/R} - 2e^{-b(r-R)/R} \right)$$

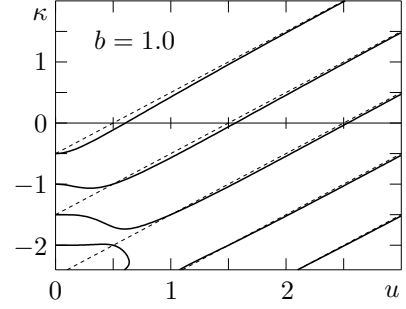
がよく使われる。 $r$  は2原子間の距離である。 $r = R$  で  $V(r)$  は最小値  $-V_0$  になる。 $V(0)$  は発散すべきだが、 $V(0) = V_0(e^{2b} - 2e^b)$  は有限である。しかし、 $b$  は2程度であり  $V(0) \approx 40V_0$  になるから  $V(0) = \infty$  と見なしてよい。 $\lambda = R/b, q = (r - R)/\lambda$  とすると

$$U(q) = \frac{2m\lambda^2}{\hbar^2} V(r) = U_0 (e^{-2q} - 2e^{-q}), \quad U_0 = \frac{2mR^2}{\hbar^2 b^2} V_0$$

である。(6.8)より軌道角運動量が0のとき動径方向のシュレーディンガー方程式は1次元と同じになる。 $r=0$ での境界条件は $\psi(r=0)=\psi(q=-b)=0$ であるから(2.51)より

$$M(\kappa+1/2-u, 2\kappa+1, 2ue^b)=0 \quad (2.53)$$

になり、これから $\kappa=\sqrt{-\varepsilon}$ が決まる。 $\kappa$ を $u$ の関数として右図に示す。破線の直線は(2.52)を表す。 $\kappa \leq 0$ の解も存在するが、束縛状態ではない。 $b \gtrsim 1$ の場合、 $\kappa > 0$ では曲線と直線はほとんど一致する。(18.13)より $x \gg 1$ のとき $M(a, b, x) \approx \Gamma(b)e^x x^{a-b}/\Gamma(a)$ になるから、 $b \gtrsim 1$ の場合、(2.53)の解は $\Gamma(\kappa+1/2-u)$ の発散点(2.52)で近似できる。



$$U(q) = -U_0/(\cosh q)^2$$

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} + \left( \varepsilon + \frac{U_0}{(\cosh q)^2} \right) \psi = 0 \quad (2.54)$$

の場合、 $\rho = 1/(e^{2q} + 1)$ とすると( $0 < \rho < 1$ )

$$\frac{d^2}{dq^2} = \left( \frac{d\rho}{dq} \frac{d}{d\rho} \right)^2 = 4f \frac{d}{d\rho} f \frac{d}{d\rho}, \quad f = \frac{1}{(2 \cosh q)^2} = \rho - \rho^2$$

であるから

$$\left( f \frac{d}{d\rho} f \frac{d}{d\rho} - \frac{\kappa^2}{4} + U_0 f \right) \psi = 0, \quad \kappa = \sqrt{-\varepsilon} > 0 \quad (2.55)$$

になる。 $\rho \rightarrow 0$ , ( $q \rightarrow \infty$ ) または  $\rho \rightarrow 1$ , ( $q \rightarrow -\infty$ ) のとき  $\psi \rightarrow 0$  である。 $\rho \approx 0$  の場合  $f \approx \rho$  より

$$\left( f \frac{d}{d\rho} f \frac{d}{d\rho} - \frac{\kappa^2}{4} + U_0 f \right) \psi \approx \left( \rho \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} - \frac{\kappa^2}{4} \right) \psi = 0, \quad \therefore \psi \approx \rho^{\kappa/2}$$

$\rho \approx 1$  のとき  $x = 1 - \rho$  とすると  $f \approx x$  であるから、上と同様にして  $\psi \approx x^{\kappa/2} = (1 - \rho)^{\kappa/2}$  になる。 $\psi = \rho^{\kappa/2} (1 - \rho)^{\kappa/2} \varphi = f^{\kappa/2} \varphi$  とし、正直に計算すれば、(2.55)は

$$\left( \rho(1 - \rho) \frac{d^2}{d\rho^2} + (\kappa + 1)(1 - 2\rho) \frac{d}{d\rho} - \kappa(\kappa + 1) + U_0 \right) \varphi = 0$$

になる。これは  $c = \kappa + 1$ ,  $1 + a + b = 2(\kappa + 1)$ ,  $ab = \kappa(\kappa + 1) - U_0$  とした超幾何微分方程式(17.118)である。 $a, b$ について対称であるから

$$a = \kappa + 1/2 - \sqrt{U_0 + 1/4}, \quad b = \kappa + 1/2 + \sqrt{U_0 + 1/4} = 2\kappa + 1 - a > 0$$

とする。(17.122)より一般解は超幾何関数  $F(a, b, c, x)$  を用いて

$$\psi = (1 - \rho)^{\kappa/2} \left( A \rho^{\kappa/2} F(a, b, 1 + \kappa, \rho) + B \rho^{-\kappa/2} F(a - \kappa, b - \kappa, 1 - \kappa, \rho) \right) \quad (2.56)$$

と表せる。 $\psi \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} 0$  より  $B = 0$  であり

$$\psi = A (1 - \rho)^{\kappa/2} \rho^{\kappa/2} F(a, b, 1 + \kappa, \rho), \quad A \neq 0 \quad (2.57)$$

になる。次に、 $\psi \xrightarrow{\rho \rightarrow 1} 0$  になる条件を求める。(17.59), (17.123)より

$$\begin{aligned} F(a, b, 1 + \kappa, \rho) &= \frac{\sin(\pi\kappa - \pi a)}{\sin(\pi\kappa)} F(a, b, 1 + \kappa, 1 - \rho) \\ &+ C (1 - \rho)^{-\kappa} F(1 + \kappa - a, a - \kappa, 1 - \kappa, 1 - \rho), \quad C = \frac{\Gamma(1 + \kappa)\Gamma(\kappa)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \end{aligned} \quad (2.58)$$

$F(a, b, c, 0) = 1$  より  $\psi \xrightarrow{\rho \rightarrow 1} AC(1-\rho)^{-\kappa/2}$  になるから  $C = 0$  でなければならない。  $\Gamma(x)$  は零点を持たず  $x = -n, n = 0, 1, 2, \dots$  で発散する。  $b > 0$  より  $a = -n$  が求める条件であり

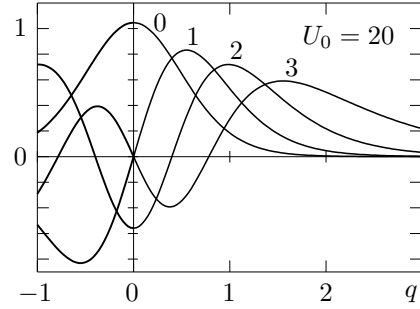
$$\kappa = \kappa_n = \sqrt{U_0 + 1/4} - n - 1/2 > 0, \quad \varepsilon_n = -\kappa_n^2 = -\left(\sqrt{U_0 + 1/4} - n - 1/2\right)^2 \quad (2.59)$$

$$\psi_n(q) = \frac{A}{(2 \cosh q)^{\kappa_n}} F(-n, 2\kappa_n + n + 1, 1 + \kappa_n, \rho), \quad \rho = \frac{1}{e^{2q} + 1} \quad (2.60)$$

になる。規格化した波動関数を図に示す。曲線に付けた値は  $n$  である。  $U_0 = 20$  のとき  $\kappa_n = 4 - n > 0$  になる。(2.58) より  $b = 2\kappa + 1 + n$  のとき

$$F(-n, b, 1 + \kappa, \rho) = (-1)^n F(-n, b, 1 + \kappa, 1 - \rho)$$

これと  $\rho(-q) = 1 - \rho(q)$  より  $\psi_n(-q) = (-1)^n \psi_n(q)$  である。 $\psi_n(x)$  は  $n$  個の節をもつ。  $F(a, b, c, 0) = 1$  より  $q \rightarrow \pm\infty$  のとき  $\psi_n(q) \propto e^{-\kappa_n|q|}$  になる。



### 調和振動子近似

一般に、  $U(q)$  が  $q = q_0$  で最小になる場合、  $\psi(q)$  が  $q = q_0$  付近に局在するなら、テイラー展開し

$$U(q) \approx u_0 + u_2(q - q_0)^2, \quad u_0 = U(q_0), \quad u_2 = U''(q_0)/2 \quad (2.61)$$

でもよい近似である。このとき (2.2) は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{\varepsilon - u_0}{\sqrt{u_2}} - x^2\right)\psi \approx 0, \quad \text{ただし} \quad x = u_2^{1/4}(q - q_0)$$

これは (4.2) であるから (4.6) より  $(\varepsilon - u_0)/\sqrt{u_2} \approx 2n + 1$  になる。(2.48), (2.54) の  $U(q)$  の場合、  $q = 0$  で最小になる。  $u_0 = -U_0, u_2 = U_0$  より  $\varepsilon \approx -U_0 + \sqrt{U_0}(2n + 1)$  である。これは  $\sqrt{U_0} \gg n$  での (2.52), (2.59) の近似式に一致する。

$$U(q) = -U_0 e^{-|q|}$$

$U(q)$  は偶関数であるから  $\psi(q)$  を偶関数または奇関数として  $q \geq 0$  を考えればよい。  $\rho = ue^{-q/2}$ ,  $u = 2\sqrt{U_0}$  とすると, (2.2) はベッセルの微分方程式 (17.90)

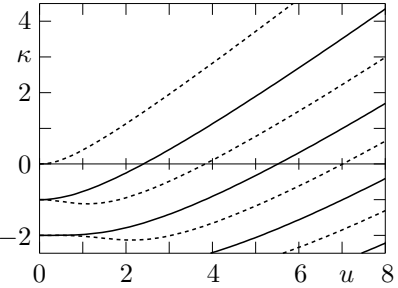
$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 - \frac{\kappa^2}{\rho^2}\right)\psi = 0, \quad \kappa = 2\sqrt{-\varepsilon} > 0 \quad (2.62)$$

になり、  $\psi$  はベッセル関数  $J_\kappa(\rho), N_\kappa(\rho)$  で表せる。  $\rho \xrightarrow{q \rightarrow \infty} 0$  より  $\psi(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} 0$  である。  $\rho \rightarrow 0$  のとき  $N_\kappa(\rho)$  は  $\rho^{-\kappa}$  で発散するから  $\psi(q) = AJ_\kappa(ue^{-q/2})$  になる。

$$\text{奇関数の場合} \quad \psi(0) = AJ_\kappa(u) = 0$$

$$\text{偶関数の場合} \quad \psi'(0) = -\frac{Au}{2} J'_\kappa(u) = 0$$

これから  $\kappa = \kappa(u)$  が決まる。右図で実線が奇関数、破線が偶関数の  $\kappa(u)$  である。  $\kappa > 0$  が束縛状態の固有値  $\varepsilon = -\kappa^2/4$  になる。偶関数の束縛状態は  $u > 0$  であれば存在するが、奇関数の束縛状態は  $u > J_0$  の最初の零点  $\approx 2.4$  の場合に存在する。



次に

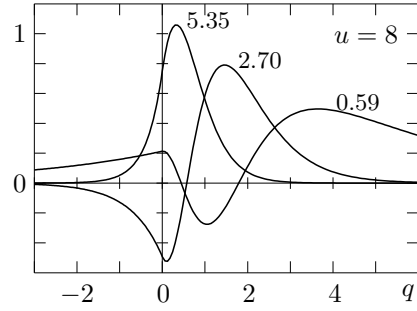
$$U(q) = \begin{cases} 0, & q < 0 \\ -U_0 e^{-q}, & q > 0 \end{cases} \quad \text{の場合} \quad \psi(q) = \begin{cases} Ae^{\kappa q/2}, & q < 0 \\ BJ_\kappa(ue^{-q/2}), & q > 0 \end{cases} \quad (2.63)$$



である。  $q = 0$  で  $\psi$  と  $d\psi/dq$  は連続であるから  $A = J_\kappa(u)B$ ,  $\kappa A = -uJ'_\kappa(u)B$  でなければならない。(17.97) より

$$\kappa J_\kappa(u) + uJ'_\kappa(u) = uJ_{\kappa-1}(u) = 0 \quad (2.64)$$

になる。前図の実線の  $\kappa$  を  $\kappa_{\text{odd}}$  とすると,  $\kappa = \kappa_{\text{odd}} + 1 > 0$  が束縛状態の固有値を与える。  $u > 0$  であれば束縛状態は存在する。右図に規格化した  $\psi(q)$  を示す。前図より  $u = 8$  の場合  $\kappa \approx 5.35, 2.70, 0.59$  である。



## 2.8 パリティ

$V(x) = V(-x)$  のとき, 束縛状態の固有関数は偶関数か奇関数になる。これは  $x$  を  $-x$  に変える空間反転 (パリティ) に関する対称性である。パリティは位置を反転させるだけだが, 重要な物理量である。任意の状態  $\psi(x)$  に対して

$$P\psi(x) = \psi(-x) \quad (2.65)$$

によりパリティ演算子  $P$  を定義する。  $P^2\psi(x) = P\psi(-x) = \psi(x)$  より  $P^2 = 1$  である。

$$\langle \alpha | P | \beta \rangle^* = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\alpha(x) \psi_\beta^*(-x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\beta^*(x) \psi_\alpha(-x) = \langle \beta | P | \alpha \rangle$$

であるから  $P$  はエルミート演算子である。

$$Px\psi(x) = -x\psi(-x), \quad xP\psi(x) = x\psi(-x)$$

$$P\hat{p}\psi(x) = -i\hbar P\psi'(x) = -i\hbar\psi'(-x), \quad \hat{p}P\psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}\psi(-x) = +i\hbar\psi'(-x)$$

したがって

$$Px + xP = 0, \quad P\hat{p} + \hat{p}P = 0 \quad \text{あるいは} \quad PxP = -x, \quad P\hat{p}P = -\hat{p} \quad (2.66)$$

になり, パリティ演算子  $P$  は  $x, \hat{p}$  とは反可換である。

$P$  の固有値を  $\eta$ , 固有関数を  $\psi_\eta(x)$  とする。  $P\psi_\eta(x) = \eta\psi_\eta(x)$  である。  $P^2 = 1$  より

$$\psi_\eta(x) = P^2\psi_\eta(x) = \eta^2\psi_\eta(x), \quad \therefore \quad \eta = \pm 1$$

$P\psi_\eta(x) = \psi_\eta(-x) = \eta\psi_\eta(x)$  であるから, パリティの固有関数は偶関数 ( $\eta = 1$ ) または奇関数 ( $\eta = -1$ ) である。

(2.66) より  $H = \hat{p}^2/(2m) + V(x)$  は  $PHP = \hat{p}^2/(2m) + V(-x)$  になる。  $V(x) = V(-x)$  のとき  $PHP = H$ , つまり  $HP - PH = 0$  である。  $H$  の固有関数を  $\varphi_\alpha(x)$ , 固有値を  $E_\alpha$  とする。

$$HP\varphi_\alpha(x) = PH\varphi_\alpha(x) = E_\alpha P\varphi_\alpha(x)$$

より  $P\varphi_\alpha(x)$  も固有値  $E_\alpha$  の固有関数である。束縛状態のように縮退がなければ,  $P\varphi_\alpha(x) \propto \varphi_\alpha(x)$  であるから  $\varphi_\alpha(x)$  は  $P$  の固有関数でもあり, 偶関数か奇関数になる。一方,  $\varphi_\alpha(x)$  と  $P\varphi_\alpha(x)$  が 1 次独立で縮退するならば  $\varphi_\alpha(x)$  は  $P$  の固有関数ではないが,  $(1 \pm P)\varphi_\alpha(x)$  は  $H$  と  $P$  の同時固有

関数である。 $H$  の固有関数を偶関数と奇関数にでき、パリティ  $\pm 1$  の状態は縮退する。一般に、エルミート演算子  $A$  と  $B$  が可換ならば、 $A$  と  $B$  の同時固有関数が存在する (99 ページ参照)。

3 次元では

$$P\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}), \quad P^\dagger = P, \quad P^2 = 1, \quad P\mathbf{r} + \mathbf{r}P = 0, \quad P\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}P = 0 \quad (2.67)$$

である。パリティの固有状態  $P\psi_\eta(\mathbf{r}) = \eta\psi_\eta(\mathbf{r})$  を正パリティ状態 ( $\eta = 1$ ) あるいは負パリティ状態 ( $\eta = -1$ ) という。1 次元の場合と同様に、 $H$  が空間反転に対して不変、つまり  $[H, P] = 0$  ならば  $H$  と  $P$  の同時固有状態が存在する。 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$  と  $\psi_\beta(\mathbf{r})$  がパリティの固有状態で固有値を  $\eta_\alpha, \eta_\beta$  とする。演算子  $A$  が  $PAP = \eta_a A$ , ( $\eta_a = \pm 1$ ) を満たすとき

$$\langle \alpha | A | \beta \rangle = \langle \alpha | P^2 A P^2 | \beta \rangle = \eta_\alpha \eta_\beta \langle \alpha | PAP | \beta \rangle = \eta_\alpha \eta_\beta \eta_a \langle \alpha | A | \beta \rangle, \quad \eta_\alpha \eta_\beta \eta_a = \pm 1 \quad (2.68)$$

になる。 $\eta_\alpha \eta_\beta \eta_a = -1$  ならば  $\langle \alpha | A | \beta \rangle = 0$  である (パリティ選択則)。

## 2.9 無限遠における波動関数

26 ページの定性的議論を再考する。(2.2) において  $q > q_0$  のとき  $U(q) - \varepsilon$  は定符号とする。

$U(q) - \varepsilon < 0$  になるのは、 $q \rightarrow \infty$  で  $U(q)$  が有限な値になるか、または、 $U(q) \xrightarrow{q \rightarrow \infty} -\infty$  の場合である。前者の場合、(2.7) と同様に、束縛状態は存在しない。後者の場合、(2.41) と同様に  $\psi(q) \xrightarrow{q \rightarrow \infty} 0$  であるが  $\psi'(q)$  は振動しながら発散するから、束縛状態ではない。

次に、 $q > q_0$  のとき  $\kappa > 0$  を定数として  $U(q) - \varepsilon \geq \kappa^2 > 0$  とする。 $U(q) \xrightarrow{q \rightarrow \infty} \infty$  でもよい。

$$\psi_1(q_0) = 1, \quad \psi'_1(q_0) = 0, \quad \psi_2(q_0) = 0, \quad \psi'_2(q_0) = 1$$

により (2.2) の特解  $\psi_i(q)$  を決める。 $\psi''_i = (U(q) - \varepsilon)\psi_i$  を積分で表すと

$$\begin{aligned} \psi_i(q) &= f_i(q) + \int_{q_0}^q dq_1 (q - q_1) (U(q_1) - \varepsilon) \psi_i(q_1), \quad f_i(q) = \psi_i(q_0) + \psi'_i(q_0)(q - q_0) \\ &= f_i(q) + \int_{q_0}^q dq_1 (q - q_1) (U(q_1) - \varepsilon) \left( f_i(q_1) + \int_{q_0}^{q_1} dq_2 (q_1 - q_2) (U(q_2) - \varepsilon) \psi_i(q_2) \right) \end{aligned}$$

これを繰り返せば  $q > q_0$  では正項級数になるから  $\psi_i(q) > 0$  である。ロンスキヤンは

$$\psi_1(q)\psi'_2(q) - \psi'_1(q)\psi_2(q) = \text{一定} = \psi_1(q_0)\psi'_2(q_0) - \psi'_1(q_0)\psi_2(q_0) = 1 \neq 0 \quad (2.69)$$

になり  $\psi_1(q)$  と  $\psi_2(q)$  は独立である。

$$\phi_1(q) = \cosh \kappa(q - q_0), \quad \phi_2(q) = \sinh \kappa(q - q_0)$$

とすると

$$\frac{dW_i}{dq} = (U(q) - \varepsilon - \kappa^2) \psi_i(q) \phi_i(q) \geq 0, \quad W_i(q) = \phi_i(q) \psi'_i(q) - \phi'_i(q) \psi_i(q)$$

であるから  $W_i(q) \geq W_i(q_0) = 0$ , つまり  $\psi'_i/\psi_i \geq \phi'_i/\phi_i$  である。積分すると

$$\int_{q_0}^q dx \frac{\psi'_i(x)}{\psi_i(x)} \geq \int_{q_0}^q dx \frac{\phi'_i(x)}{\phi_i(x)}, \quad \therefore \quad \log \frac{\psi_i(q)}{\psi_i(q_0)} \geq \log \frac{\phi_i(q)}{\phi_i(q_0)}$$

になるから

$$\psi_i(q) \geq \frac{\psi_i(q_0)}{\phi_i(q_0)} \phi_i(q), \quad \psi'_i(q) \geq \frac{\phi'_i(q)}{\phi_i(q)} \psi_i(q) \geq \frac{\psi_i(q_0)}{\phi_i(q_0)} \phi'_i(q)$$

$\psi_1(q_0)/\phi_1(q_0) = 1$  である。一方,  $\psi_2(q_0)/\phi_2(q_0)$  は  $0/0$  になるが

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\psi_2(q_0 + \varepsilon)}{\phi_2(q_0 + \varepsilon)} = \frac{\psi'_2(q_0)}{\phi'_2(q_0)} = \frac{1}{\kappa}$$

であるから

$$\psi_1(q) \geq \cosh \kappa(q - q_0), \quad \psi'_1(q) \geq \kappa \sinh \kappa(q - q_0), \quad \psi_2(q) \geq \frac{\sinh \kappa(q - q_0)}{\kappa}, \quad \psi'_2(q) \geq \cosh \kappa(q - q_0)$$

になる。 $u(q) = \psi_1(q)/\psi_2(q)$ ,  $v(q) = \psi'_1(q)/\psi'_2(q)$  とすると (2.69) より

$$u - v = \frac{1}{\psi_2 \psi'_2} > 0, \quad u' = -\frac{1}{\psi_2^2} < 0, \quad v' = \frac{U(q) - \varepsilon}{\psi_2'^2} > 0$$

$u(q)$  は単調減少,  $v(q)$  は単調増加であり  $u - v \xrightarrow{q \rightarrow \infty} 0$  になるから,  $u(q)$  と  $v(q)$  は  $q \rightarrow \infty$  で同じ極限值  $\alpha$  に収束し  $v(q) < \alpha < u(q)$  である。 $\psi_\alpha = \psi_1 - \alpha \psi_2$  とする。 $\psi_1$  と  $\psi_2$  は独立であるから, (2.2) の一般解  $\psi(q)$  は

$$\psi(q) = A_1 \psi_1(q) + A_2 \psi_2(q) = A_1 \psi_\alpha(q) + (A_1 \alpha + A_2) \psi_2(q)$$

と表せる。

$$\psi_1 = u \psi_2 = \left( v + \frac{1}{\psi_2 \psi'_2} \right) \psi_2, \quad \psi'_1 = v \psi'_2 = \left( u - \frac{1}{\psi_2 \psi'_2} \right) \psi'_2$$

より

$$\begin{aligned} \psi_\alpha &= (u - \alpha) \psi_2 > 0, & \psi_\alpha &= \left( v - \alpha + \frac{1}{\psi_2 \psi'_2} \right) \psi_2 < \frac{1}{\psi'_2} < 2e^{-\kappa(q - q_0)} \\ \psi'_\alpha &= (v - \alpha) \psi'_2 < 0, & \psi'_\alpha &= \left( u - \alpha - \frac{1}{\psi_2 \psi'_2} \right) \psi'_2 > -\frac{1}{\psi_2} > -2\kappa e^{-\kappa(q - q_0)} \end{aligned}$$

になるから,  $q \rightarrow \infty$  のとき  $\psi_\alpha(q)$  と  $\psi'_\alpha(q)$  は  $e^{-\kappa q}$  以上の速さで 0 に収束する。 $A_1 \alpha + A_2 = 0$  のとき  $\psi(q) = A_1 \psi_\alpha(q)$  は束縛状態の境界条件を満たす。 $A_1 \alpha + A_2 \neq 0$  の場合,  $\psi(q)$  は  $e^{\kappa q}$  以上で発散する。 $q \rightarrow \infty$  での束縛状態の境界条件を満たす  $\psi(q)$  は, 定数  $A_1$  を除けば, 一意に決まる。この  $\psi(q)$  は  $U(q) - \varepsilon \geq \kappa^2$  である任意の  $\varepsilon$  について存在するが,  $\psi(q) \xrightarrow{q \rightarrow -\infty} 0$  とは限らない。

## 2.10 離散的エネルギーと節の個数

$\psi(x) = 0$  になる点  $x$  を節またはノードという。無限に深いポテンシャルの場合, 端点で  $\psi(x) = 0$  になるが, 端点は節に含めない。これまでの具体例から分かるように

2つの端点 ( $\pm\infty$  を含む) で  $\psi(x) = 0$  である境界条件のため, 束縛状態のエネルギー  $E$  は離散的になる。 $E$  は縮退しない。 $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$  と並べたとき,  $E = E_n$  の波動関数  $\psi_n(x)$  には  $n$  個の節が存在する。基底状態  $\psi_0(x)$  は節を持たない。更に,  $\psi_{n+1}(x)$  の隣り合う節の間に  $\psi_n(x)$  の節が 1 つ存在する。 (2.70)

である。 $\psi(x)$  は実数としてよい。

節の個数と  $E$  の関係は簡単な議論から予想できる。 $\psi(x_0) = 0$  のとき  $\psi'(x_0) \neq 0$ ,  $\psi''(x_0) = 0$  より

$$\psi'(x)^2 = \psi'(x_0)^2 \left( 1 + \frac{2m}{\hbar^2} (V(x_0) - E) (x - x_0)^2 \right) + \dots$$

であるから,  $E > V(x_0)$  ならば  $\psi'(x)^2$  は  $x = x_0$  で極大である。このため,  $\psi'(x)^2$  の積分である運動エネルギーは, 節の個数  $n$  が多いほど大きくなり  $E_0 < E_1 < \dots$  になるだろう。

(2.70) を  $V(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$  の場合に示す。束縛状態であるから (2.2) において  $\varepsilon < 0$  である。

$$\psi(q) = \rho(q, \varepsilon) \sin \theta(q, \varepsilon), \quad \frac{d\psi}{dq} = \rho(q, \varepsilon) \cos \theta(q, \varepsilon), \quad \rho(q, \varepsilon) = \sqrt{\psi(q)^2 + (d\psi/dq)^2} \quad (2.71)$$

とする。  $\psi(q)$  は恒等的には 0 でないから,  $\psi(q)$  と  $d\psi/dq$  は同時に 0 にはならず  $\rho > 0$  である。

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} = \frac{d\rho}{dq} \cos \theta - \rho \frac{d\theta}{dq} \sin \theta = (U(q) - \varepsilon) \rho \sin \theta, \quad \frac{d\psi}{dq} = \frac{d\rho}{dq} \sin \theta + \rho \frac{d\theta}{dq} \cos \theta = \rho \cos \theta$$

であるから

$$\frac{d\theta}{dq} = 1 + (\varepsilon - U(q) - 1) \sin^2 \theta \quad (2.72)$$

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dq} = (1 + U(q) - \varepsilon) \sin \theta \cos \theta \quad (2.73)$$

になる。(2.72) を解くと  $\theta(q)$  が決まり, これを (2.73) に代入すると  $\rho(q)$  も求まる。 $q \rightarrow \pm\infty$  のとき  $U(q) \rightarrow 0$  より束縛状態は  $\psi(q) \propto e^{\mp\sqrt{-\varepsilon}q}$  になり

$$\cot \theta(\pm\infty, \varepsilon) = \lim_{q \rightarrow \pm\infty} \frac{\psi'}{\psi} = \mp\sqrt{-\varepsilon} \quad (2.74)$$

$\cot^2 \theta(q, \varepsilon) = -\varepsilon$  は  $U = 0$  での (2.72) の定数解である。(2.74) を満たすとき (2.73) は

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dq} = (1 + U(q) - \varepsilon) \frac{\tan \theta}{1 + \tan^2 \theta} \xrightarrow{q \rightarrow \pm\infty} \mp\sqrt{-\varepsilon}, \quad \therefore \quad \rho(q) \xrightarrow{q \rightarrow \pm\infty} \rho_{\pm} e^{\mp\sqrt{-\varepsilon}q}$$

になるから, (2.74) が束縛状態の条件である。

$$\alpha_- = \cot^{-1} \sqrt{-\varepsilon}, \quad \alpha_+ = \pi - \alpha_-, \quad 0 < \alpha_- < \pi/2 \quad (2.75)$$

とする。 $\cot \theta(\pm\infty, \varepsilon) = \cot \alpha_{\pm}$  である。 $k$  を整数として  $\theta(q, \varepsilon) + k\pi$  も (2.72) の解であり  $\theta(q, \varepsilon)$  には  $k\pi$  の不定性があるから,  $\theta(-\infty, \varepsilon) = \alpha_-$  としてよい。これを初期条件として (2.72) を解けば  $\theta(q, \varepsilon)$  が決まる。このとき  $\cot \theta(\infty, \varepsilon) = \cot \alpha_+$ , つまり

$$\theta(-\infty, \varepsilon) = \alpha_-, \quad \theta(\infty, \varepsilon) = n\pi + \alpha_+ = (n+1)\pi - \alpha_-, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.76)$$

である  $\varepsilon$  が存在するならば, 束縛状態のエネルギーになり離散的である。 $\theta(-\infty, \varepsilon) > 0$  から解き始めて  $\theta(q_0, \varepsilon) = 0$  になったとすると  $\theta'(q_0, \varepsilon) \leq 0$  になるが, (2.72) より  $\theta'(q_0, \varepsilon) = 1$  であるから  $\theta(q, \varepsilon) = 0$  にはならず  $\theta(q, \varepsilon) > 0$  である。 $\theta(\infty, \varepsilon) > 0$ ,  $\pi/2 < \alpha_+ < \pi$  より  $n \geq 0$  である。

$\varepsilon_a > \varepsilon_b$  のとき  $\theta_a(q) = \theta(q, \varepsilon_a)$ ,  $\theta_b(q) = \theta(q, \varepsilon_b)$  とおく。

$$\theta_a(-\infty) = \cot^{-1} \sqrt{-\varepsilon_a}, \quad \theta_b(-\infty) = \cot^{-1} \sqrt{-\varepsilon_b}, \quad \theta_a(-\infty) - \theta_b(-\infty) > 0$$

である。ただし,  $\theta(\infty, \varepsilon) = n\pi + \alpha_+$  を満たす必要はない。

$$\frac{dF}{dq} = (\varepsilon_b - U(q) - 1) \frac{\sin^2 \theta_a - \sin^2 \theta_b}{\theta_a - \theta_b}, \quad \text{ただし} \quad \theta_a = \theta_b \quad \text{のとき} \quad \frac{\sin \theta_a - \sin \theta_b}{\theta_a - \theta_b} = \cos \theta_a$$

とする。 $dF/dq$  は任意の点で連続である。(2.72) より

$$\frac{d}{dq} \left( (\theta_a - \theta_b) e^{-F} \right) = (\varepsilon_a - \varepsilon_b) e^{-F} \sin^2 \theta_a \geq 0$$

になるから

$$(\theta_a(q) - \theta_b(q))e^{-F(q)} \geq \lim_{q \rightarrow -\infty} (\theta_a(q) - \theta_b(q))e^{-F(q)} > 0$$

$\theta(-\infty, \varepsilon) = \cot^{-1} \sqrt{-\varepsilon}$  のとき  $\theta(q, \varepsilon)$  は  $\varepsilon$  の単調増加関数である。したがって, (2.76) を満たす  $\varepsilon$  を  $\varepsilon_n$  とすると,  $\varepsilon_n$  は縮退せず  $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \dots$  になる。

(2.71) の場合,  $\theta(q_k, \varepsilon) = k\pi$  である  $q_k$  が節になる。(2.72) より  $\theta'(q_k, \varepsilon) = 1$  であるから  $q_k$  は 1 点だけである。

$$0 < \theta(-\infty, \varepsilon_n) < \pi/2, \quad n\pi + \pi/2 < \theta(\infty, \varepsilon_n) < (n+1)\pi \quad (2.77)$$

であり,  $\theta(q, \varepsilon)$  は  $q$  の単調関数とは限らないが,  $\theta(q, \varepsilon_n) = (n+1)\pi$  にはならないから,  $\psi(q, \varepsilon_n)$  には  $k = 1, \dots, n$  である  $n$  個の節が存在する。

$\psi_n(q) = \psi(q, \varepsilon_n)$  の節を  $q_1 < q_2 < \dots < q_n$  とする。(2.3) と同様に

$$\frac{d}{dq} (\psi'_n \psi_{n+1} - \psi'_{n+1} \psi_n) = (\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n) \psi_{n+1} \psi_n$$

これを  $q_k \leq q \leq q_{k+1}$  で積分すると

$$\psi'_n(q_{k+1})\psi_{n+1}(q_{k+1}) - \psi'_n(q_k)\psi_{n+1}(q_k) = (\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n) \int_{q_k}^{q_{k+1}} dq \psi_{n+1}(q)\psi_n(q) \quad (2.78)$$

$q_k < q < q_{k+1}$  で  $\psi_n(q)$  は定符号である。 $\psi_n(q) \geq 0$  のとき  $\psi'_n(q_{k+1}) \leq 0$ ,  $\psi'_n(q_k) \geq 0$  であるから,  $\psi_{n+1}(q)$  が  $q_k \leq q \leq q_{k+1}$  で定符号ならば, 左辺と右辺の符号は逆になる。したがって,  $\psi_{n+1}(q)$  は  $q_k < q < q_{k+1}$  で符号が変わり 1 つ以上の節が存在する。 $\pm\infty$  は節ではないが,  $q_0 = -\infty$ ,  $q_{n+1} = \infty$  としても以上の議論は成り立つ。 $\psi_{n+1}(q)$  の節の個数は  $n+1$  であるから,  $n+1$  個の区間

$$-\infty < q < q_1, \quad q_1 < q < q_2, \quad \dots, \quad q_n < q < \infty$$

に  $\psi_{n+1}(q)$  の節が 1 つ存在する。つまり,  $\psi_{n+1}(q)$  の隣り合う節の間に  $\psi_n(q)$  の節が 1 つ存在する。なお, ある節  $q_k$  で  $\psi_{n+1}(q_k) = 0$  とする。この場合も (2.78) より  $\psi_{n+1}(q)$  は  $q_k < q < q_{k+1}$  で符号が変わり,  $\psi_{n+1}(q)$  の節の個数は  $n+2$  になる。したがって,  $\psi_{n+1}(q)$  と  $\psi_n(q)$  の節が一致することはない。ただし,  $\psi_{n+1}(q)$  と  $\psi_{n-1}(q)$  の節が一致することはある。

以上で (2.70) が示せた。 $U(q) \xrightarrow{q \rightarrow \pm\infty} 0$  でない場合, (2.75) の  $\alpha_{\pm}$  を適当に変更すれば, (2.70) を示せるだろう (149 ページ参照)。

- $\varepsilon \neq \varepsilon_n$  のとき  $\psi(q) \xrightarrow{q \rightarrow \infty} Ae^{\sqrt{-\varepsilon}q} + Be^{-\sqrt{-\varepsilon}q}$ ,  $A \neq 0$  より  $\cot \theta(\infty, \varepsilon) = \sqrt{-\varepsilon} = \cot \alpha_-$  になり  $\theta(\infty, \varepsilon)$  は  $\varepsilon = \varepsilon_n$  で不連続である。 $\theta(\infty, \varepsilon)$  は  $\varepsilon$  の増加関数であるから

$$\theta(\infty, \varepsilon_n - 0) = n\pi + \alpha_- < \theta(\infty, \varepsilon_n) = (n+1)\pi - \alpha_- < \theta(\infty, \varepsilon_n + 0) = (n+1)\pi + \alpha_- \quad (2.79)$$

$\theta(\infty, \varepsilon_n + 0) - \theta(\infty, \varepsilon_n - 0) = \pi$  である。

- $U(q) = U(-q)$  の場合  $\theta_k(q, \varepsilon) = k\pi - \theta(-q, \varepsilon)$  とすると

$$\frac{d\theta_k}{dq} = \frac{d\theta(-q)}{d(-q)} = 1 + (\varepsilon - U(-q) - 1) \sin^2 \theta(-q, \varepsilon) = 1 + (\varepsilon - U(q) - 1) \sin^2 \theta_k(q, \varepsilon)$$

になり  $\theta_k(q, \varepsilon)$  も (2.72) の解である。一般に  $\theta_k(-\infty, \varepsilon) \neq \theta(-\infty, \varepsilon)$  であるが, (2.76) より

$$\theta_{n+1}(-\infty, \varepsilon_n) = (n+1)\pi - \theta(\infty, \varepsilon_n) = \theta(-\infty, \varepsilon_n)$$

$\theta(-\infty, \varepsilon)$  を与えると (2.72) の解は一意に決まるから, 任意の  $q$  に対して

$$\theta(q, \varepsilon_n) = \theta_{n+1}(q, \varepsilon_n) = (n+1)\pi - \theta(-q, \varepsilon_n) \quad (2.80)$$

$\theta(0, \varepsilon_n) = (n+1)\pi/2$  であり  $\theta(q, \varepsilon_n) - \theta(0, \varepsilon_n)$  は  $q$  の奇関数になる。 $\varepsilon = \varepsilon_n$  のとき (2.73) の右辺は  $q$  の奇関数になるから  $\rho(q, \varepsilon_n)$  は偶関数であり  $\psi(-q, \varepsilon_n) = (-1)^n \psi(q, \varepsilon_n)$  が成り立つ。基底状態  $\psi_0(x)$  は偶関数であり、 $\varepsilon_n$  の増加とともに偶関数と奇関数が交互に現れる。

### 具体例

井戸型ポテンシャル (2.8)

$$U(q) = \begin{cases} 0, & |q| > 1 \\ -v_0^2, & |q| < 1 \end{cases}, \quad v_0 = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0}, \quad \varepsilon = \frac{2ma^2}{\hbar^2} E \quad (2.81)$$

の場合 ( $\lambda = a$ ), (2.72) は

$$\frac{d\theta}{dq} = \begin{cases} 1 - (1 + \kappa^2) \sin^2 \theta, & |q| > 1 \\ 1 - (1 - K^2) \sin^2 \theta, & |q| < 1 \end{cases}, \quad \kappa = \sqrt{-\varepsilon}, \quad K = \sqrt{\varepsilon + v_0^2} \quad (2.82)$$

になり

$$\theta(q) = \begin{cases} \theta(-\infty) = \alpha_-, & q < -1 \\ \theta(\infty) = (n+1)\pi - \alpha_-, & q > 1 \end{cases}, \quad \alpha_- = \tan^{-1} \frac{1}{\kappa} \quad (2.83)$$

である。 $|q| < 1$  では  $d\theta/dq \geq \min(K^2, 1) > 0$  であり定数解は存在しない。

$$\int \frac{dq}{1 - (1 - K^2) \sin^2 q} = \frac{1}{K} \tan^{-1}(K \tan q)$$

であるから

$$\tan \theta = F(q), \quad F(q) = \frac{\tan(Kq + \theta_0)}{K}, \quad \theta_0 = \text{任意定数} \quad (2.84)$$

になる。 $|\tan^{-1} F| < \pi/2$  であるが  $|\theta| < \pi/2$  とは限らないから  $\ell(q)$  を整数として

$$\theta(q) = \ell(q)\pi + \tan^{-1} F(q)$$

ただし  $\ell(-1) = 0$  とする。 $\theta(q)$  は増加関数であるから、 $\tan \theta(q)$  が発散するとき

$$\tan^{-1}(\tan \theta(q \pm 0)) = \tan^{-1}(\mp \infty) = \mp \pi/2$$

$\theta(q)$  の連続性より  $\ell(q+0) = \ell(q-0) + 1$  になる。 $|q| < 1$  のとき (2.77) より  $\theta(q) = \pi/2, \dots, n\pi + \pi/2$  の  $n+1$  箇所で発散するから  $\ell(1) = n+1$  になり  $\theta(1) = (n+1)\pi + \tan^{-1} F(1)$  である。 $\theta(q)$  が  $q = \pm 1$  で連続であるためには (2.83) より

$$F(-1) = \frac{\tan(\theta_0 - K)}{K} = \frac{1}{\kappa}, \quad F(1) = \frac{\tan(\theta_0 + K)}{K} = -\frac{1}{\kappa}$$

$\tan(K + \theta_0) = \tan(2K + \theta_0 - K)$  に第1式を代入すると

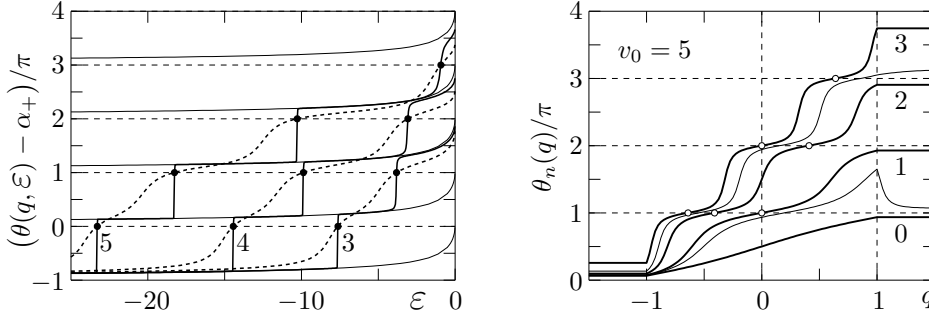
$$\tan 2K = \frac{2\kappa/K}{1 - (\kappa/K)^2}, \quad \therefore \quad \tan K = \kappa/K \quad \text{または} \quad \tan K = -K/\kappa$$

になり (2.11), (2.12) を再現する。

$$\tan \theta_0 = \frac{\tan(\theta_0 - K) + \tan K}{1 - \tan(\theta_0 - K) \tan K} = \frac{K/\kappa + \tan K}{1 - (K/\kappa) \tan K} = \begin{cases} \infty, & \tan K = \kappa/K \text{ のとき} \\ 0, & \tan K = -K/\kappa \text{ のとき} \end{cases}$$

である。

下の左図に  $q$  を与えたとき  $\theta(q, \varepsilon) - \alpha_+$  を  $\varepsilon$  の関数として示す。太い実線は  $q = 2$ , 破線は  $q = 1$  の場合であり, 曲線に付けた値は  $v_0$  である。● は  $\theta(q, \varepsilon) - \alpha_+ = n\pi$  で決まる  $\varepsilon_n$  を表す。(2.79) より  $\theta(2, \varepsilon) \approx \theta(\infty, \varepsilon)$  は  $\varepsilon_n$  近傍で急激な変化をする。細い実線は  $\cot \theta = \sqrt{-\varepsilon}$ , つまり  $\theta - \alpha_+ = k\pi + 2\cot^{-1} \sqrt{-\varepsilon}$  を示す。右図は  $\theta_n(q) = \theta(q, \varepsilon_n)$  である。曲線に付けた値は  $n$  を表す。 $\sin \theta_n(q) = 0$  である節 (○) は  $n$  個存在し, (2.80) の対称性が成り立つ。細い曲線は  $\varepsilon = -5, -20$  の場合である。例外はあるが,  $\varepsilon \neq \varepsilon_n$  のとき  $\theta(q, \varepsilon)$  は  $q > 1$  で一定ではない。

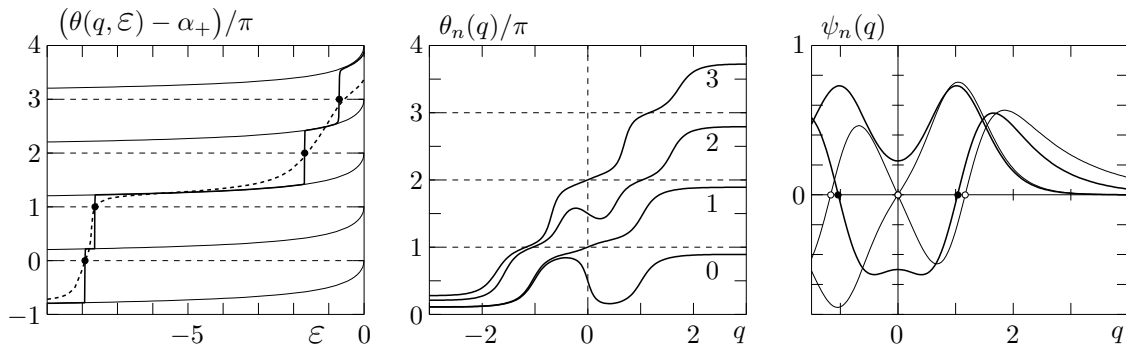


### 問題 2.12

1.  $\tan K = \kappa/K$  のとき  $n$  は偶数,  $\tan K = -\kappa/K$  のとき  $n$  は奇数になることを示せ。
2. (2.73) より  $|q| < 1$  のとき  $\psi \propto \sin(Kq + \theta_0)$  を示せ。
3.  $\cot \theta(1, \varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} -v_0 \tan 2v_0$  を示せ。 $\kappa$  の 1 次まで考慮し  $\cot \theta(1, \varepsilon) = -\kappa$  を解くと,  $\varepsilon \approx 0$  の解は (2.17) になることを示せ。

**問題 2.13** デルタ関数型ポテンシャル (2.28)  $U(q) = -2\lambda v_1 \delta(q)$  の場合, (2.72) より (2.29) を求めよ。 $q \neq 0$  のとき  $\sin^2 \theta(q) = 1/(1 - \varepsilon)$ , (2.80) より  $\sin^2 \theta(0) = 1$  であり  $\sin^2 \theta(q)$  は  $q = 0$  で不連続になるから ( $\theta_n$  の図で  $\pm 1$  を 0 に近づけた極限), (2.72) を直接積分しても無意味である。

$q = \pm 1$  で最小値  $-U_0$  になる  $U(q) = -U_0 q^2 e^{-q^2+1}$  の場合, (2.73), (2.72) の数値解を下に示す。 $U_0 = 12$  とした。左図で実線は  $\theta(5, \varepsilon) \approx \theta(\infty, \varepsilon)$ , 破線は  $\theta(2, \varepsilon)$  である。(2.72), (2.80) より  $n$  が偶数のとき  $\theta'_n(0) = \varepsilon_n - U(0) = \varepsilon_n < 0$  であり  $q = 0$  の近くでは  $\theta_n(q)$  は減少関数になる (中央の図)。右図に規格化した  $\psi_n(q) = \psi(q, \varepsilon_n)$  を示す。太い曲線は  $n$  が偶数, 細い曲線は奇数の場合であり  $\psi_n(-q) = (-1)^n \psi_n(q)$  になる。 $\psi_n$  の節は  $\psi_{n+1}$  の節の間にある。



### 2.11 シュレーディンガー方程式の数値解法

シュレーディンガー方程式が解析的に解ける問題は限られる。以下では, 無次元化した (2.2) を数値的に解き, 束縛状態の  $\varepsilon$  と  $\psi(q)$  を求める。2次元や3次元の問題でも中心力の場合, 解くべき方程式は (2.2) の型になる (170 ページ参照)。26 ページで示したように  $\psi(q)$  は実数としてよい。

区間  $q_{\min} \leq q \leq q_{\max}$  の両端で  $\psi(q)$  の境界条件が与えられているとする。ただし、境界が無遠の場合、 $\psi(q)$  がほぼ 0 となる適当な有限区間で置き換える。 $\varepsilon$  を与えたとき、片側の境界条件から出発して求めた解  $\psi(q)$  は、一般には、もう 1 つの境界条件を満たさない。 $\varepsilon$  が離散的固有値のときだけ両方の境界条件を満たす。シュレーディンガー方程式の束縛状態を数値的に求める問題は、微分方程式を解くと同時に、固有値も求めなければならない。

離散的固有値を求める 1 つの方法を示す ( 櫻井捷海, コンピュータで学ぶ量子力学 [基礎編] (裳華房) 1992 )。  $\varepsilon$  を与えたとき

$\psi_-(q, \varepsilon) = q_{\min}$  での境界条件から  $q$  を増加させて得られる解

$\psi_+(q, \varepsilon) = q_{\max}$  での境界条件から  $q$  を減少させて得られる解

とする。一方の境界条件を満たす解を数値的に求めることは容易である。 $\psi_-(q, \varepsilon)$  と  $\psi_+(q, \varepsilon)$  を適当な中間点  $q = q_c$  で接続する。一般に  $\psi_-(q_c, \varepsilon) \neq \psi_+(q_c, \varepsilon)$  であり  $q = q_c$  で連続ではない。ところで、定数倍した関数も微分方程式を満たすから  $\phi_{\pm}(q, \varepsilon) = \psi_{\pm}(q, \varepsilon)/\psi_{\pm}(q_c, \varepsilon)$  とすれば、 $\phi_{\pm}(q_c, \varepsilon) = 1$  になり  $q = q_c$  で連続である。しかし、 $\varepsilon$  が固有値に等しい場合を除けば  $\phi'(q) = d\phi/dq$  は  $q = q_c$  で連続にならない。

$$\phi'_-(q_c, \varepsilon) - \phi'_+(q_c, \varepsilon) = \frac{W(\varepsilon)}{\psi_-(q_c, \varepsilon)\psi_+(q_c, \varepsilon)}, \quad W(\varepsilon) = \psi'_-(q_c, \varepsilon)\psi_+(q_c, \varepsilon) - \psi_-(q_c, \varepsilon)\psi'_+(q_c, \varepsilon)$$

であるから、ロンスキャン  $W(\varepsilon) = 0$  の解が固有値を与える。(2.3) より  $W(\varepsilon)$  は  $q_c$  に依存しない。

### ヌメロフ法

(2.2) を  $\psi(q)$  と  $\psi'(q)$  の 1 階 2 元連立微分方程式にしてルンゲ・クッタ ( Runge-Kutta ) 法を用いてもよいが、ここではヌメロフ ( Numerov ) 法を用いる。 $q_{\min} \leq q \leq q_{\max}$  を  $N_q$  等分して

$$q_k = q_{\min} + \Delta q k, \quad k = 0, 1, \dots, N_q, \quad \Delta q = \frac{q_{\max} - q_{\min}}{N_q}$$

とする。 $q = q_k$  での  $f(q)$  を  $f_k = f(q_k)$  とおく。テイラー展開を使うと

$$f_{k\pm 1} = f(q_k \pm \Delta q) = f_k \pm \Delta q f'_k + \frac{(\Delta q)^2}{2} f''_k \pm \frac{(\Delta q)^3}{3!} f_k^{(3)} + \frac{(\Delta q)^4}{4!} f_k^{(4)} + \dots$$

であるから

$$f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1} = (\Delta q)^2 f''_k + \frac{(\Delta q)^4}{12} f_k^{(4)} + O((\Delta q)^6) \quad (2.85)$$

これから  $q = q_k$  における 2 階微分は

$$f''_k = \frac{f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}}{(\Delta q)^2} + O((\Delta q)^2) \quad (2.86)$$

になる。(2.2) より

$$\psi_k^{(4)} = \left. \frac{d^2 F(q) \psi(q)}{dq^2} \right|_{q=q_k}, \quad \text{ただし } F(q) = U(q) - \varepsilon$$

であるが、右辺の 2 階微分に  $f(q) = F(q)\psi(q)$  として (2.86) を使うと

$$\psi_k^{(4)} = \frac{F_{k+1}\psi_{k+1} - 2F_k\psi_k + F_{k-1}\psi_{k-1}}{(\Delta q)^2} + O((\Delta q)^2)$$

になる。これと  $\psi''_k = F_k\psi_k$  を (2.85) の右辺に代入すると

$$\psi_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1} = (\Delta q)^2 F_k \psi_k + \frac{(\Delta q)^2}{12} (F_{k+1}\psi_{k+1} - 2F_k\psi_k + F_{k-1}\psi_{k-1}) + O((\Delta q)^6)$$



したがって  $D_q = (\Delta q)^2/12$  とすると

$$(1 - D_q F_{k+1})\psi_{k+1} - 2(1 + 5D_q F_k)\psi_k + (1 - D_q F_{k-1})\psi_{k-1} = O((\Delta q)^6) \quad (2.87)$$

になる。 $k$  を  $k-1$  で置き換えると,  $k = 2, 3, \dots$  に対して

$$\psi_k \approx \frac{2(1 + 5D_q F_{k-1})\psi_{k-1} - (1 - D_q F_{k-2})\psi_{k-2}}{1 - D_q F_k}, \quad F_k = U(q_k) - \varepsilon, \quad D_q = \frac{(\Delta q)^2}{12} \quad (2.88)$$

である。 $\psi_0$  と  $\psi_1$  を与えてこの式を  $k = 2, 3, \dots$  に適用すると  $\psi_2, \psi_3, \dots$  が順に求まり  $\psi_-$  が決まる。一方,  $\psi_{N_q}, \psi_{N_q-1}$  を与えて

$$\psi_k \approx \frac{2(1 + 5D_q F_{k+1})\psi_{k+1} - (1 - D_q F_{k+2})\psi_{k+2}}{1 - D_q F_k}, \quad k = N_q - 2, N_q - 3, \dots \quad (2.89)$$

として  $k$  を減少させると  $\psi_{N_q-2}, \psi_{N_q-3}, \dots$  が順に求まり  $\psi_+$  が決まる。なお,  $W(\varepsilon)$  を求めるには  $\psi'(q)$  が必要であるが, (2.86) と同様にすれば

$$\psi'_k = \frac{1}{12\Delta q} (8(\psi_{k+1} - \psi_{k-1}) - \psi_{k+2} + \psi_{k-2}) + O((\Delta q)^4) \quad (2.90)$$

$$\psi'_k = \frac{1}{60\Delta q} (45(\psi_{k+1} - \psi_{k-1}) - 9(\psi_{k+2} - \psi_{k-2}) + \psi_{k+3} - \psi_{k-3}) + O((\Delta q)^6)$$

である。

### 波動関数の初期値と接続点

ヌメロフ法で  $\psi_{\pm}(q)$  を求める場合, 境界条件を満たす初期値

$$\psi_0 = \psi_-(q_{\min}), \quad \psi_1 = \psi_-(q_{\min} + \Delta q), \quad \psi_{N_q-1} = \psi_+(q_{\max} - \Delta q), \quad \psi_{N_q} = \psi_+(q_{\max})$$

を与える必要がある。例えば

- $-\infty < q < \infty$  で  $\psi(q) \xrightarrow{q \rightarrow \pm\infty} 0$  の場合  
 $q_{\min}, q_{\max}$  を  $\psi(q_{\min}) \approx 0, \psi(q_{\max}) \approx 0$  になる十分遠方とする (ただし, 遠方過ぎても無駄な計算をするだけである)。このとき

$$\psi_0 = \psi_{N_q} = 0, \quad \psi_1 = \psi_{N_q-1} = \text{微小値} \neq 0 \quad (2.91)$$

とする。最終的に波動関数を規格化するから微小値は適当でよい。漸近形が解析的に求まる場合, 漸近形を用いてもよい。 $U(q) \xrightarrow{q \rightarrow \pm\infty} 0$  ならば  $\psi(q) \rightarrow e^{\pm\kappa q}$  になるから ( $\kappa = \sqrt{-\varepsilon}$ )

$$\psi_0 = e^{\kappa q_{\min}}, \quad \psi_1 = e^{\kappa(q_{\min} + \Delta q)}, \quad \psi_{N_q} = e^{-\kappa q_{\max}}, \quad \psi_{N_q-1} = e^{-\kappa(q_{\max} - \Delta q)} \quad (2.92)$$

である。接続点  $q_c$  は  $q_c = 0$  でよからう。

- $0 \leq q < \infty$  で  $\psi(0) = 0, \psi(q) \xrightarrow{q \rightarrow \infty} 0$  の場合  
 $q_{\min} = 0$  とし (2.91) を用いる。 $q = q_{\max}$  では (2.92) でもよい。接続点は  $x \approx \lambda$ , つまり  $q_c \approx 1$  程度である。 $U(q)$  が  $q$  の偶関数の場合, 束縛状態の波動関数は奇関数あるいは偶関数になるから  $q_{\min} = 0$  として解いた方が無駄がない。ただし, 偶関数の場合  $\psi'(0) = 0$  である。

### 固有値の求め方

$W(\varepsilon)$  が数値的にしか求まらない場合,  $W(\varepsilon) = 0$  の解を求める方法としてセカント法や二分法が

ある。これらの方法では  $\varepsilon$  の初期値が2つ必要になる。ここでは以下のようにする。 $\varepsilon_{\min} < \varepsilon < \varepsilon_{\max}$  の固有値を求めるとして、この区間を  $N_e$  等分して

$$\varepsilon_i = \varepsilon_{\min} + i \Delta\varepsilon, \quad i = 0, 1, \dots, N_e, \quad \Delta\varepsilon = (\varepsilon_{\max} - \varepsilon_{\min})/N_e$$

とする。 $W(\varepsilon)$  は発散しないから、 $W(\varepsilon_i)W(\varepsilon_{i+1}) < 0$  ならば  $\varepsilon_i < \varepsilon < \varepsilon_{i+1}$  に  $W(\varepsilon) = 0$  を満たす  $\varepsilon$  が存在する。そこで  $\varepsilon_i$  と  $\varepsilon_{i+1}$  を初期値として二分法またはセカント法を適用する。 $N_e$  をある程度大きくとれば、 $\varepsilon_{\min} < \varepsilon < \varepsilon_{\max}$  にある全ての固有値を安定して求めることができる。

### C プログラムの例

$$\begin{aligned} q_{\min} &= q_{\min}, & q_{\max} &= q_{\max}, & dq &= \Delta q, & nq &= N_q, & nc &= (q_c - q_{\min})/\Delta q \\ wf[k] &= \psi_k, & pot[k] &= U(q_k) \end{aligned}$$

とする。これらを main 関数の前で定義した外部変数とすると、 $W(\varepsilon)$  を求める関数で引数とする必要がない。 $wf[k]$  と  $pot[k]$  は次元が  $N_q + 1$  以上の配列である。ヌメロフ法を実行する度に  $U(q_k)$  を計算するのは無駄であり、一度計算して配列に保存しておく。整数  $nc$  は  $k = nc$  のときの  $q_k$  が接続点  $q_c$  に対応する。

`double wronski( double ee )`  $\varepsilon$  を与えたとき  $W(\varepsilon)$  を求める関数

ここでは境界条件を (2.91) とした。問題に応じて適切に変更する。最初の for ループで (2.88) を用いて  $wf[k] = \psi_{-k}$  を求める。接続点での  $\psi'_-$  を (2.90) で計算するため  $k = nc+2$  までループを回す。次の for ループで (2.89) により  $wf[k] = \psi_{+k}$  を求める。最後の for ループでは  $\psi_-$  と  $\psi_+$  を連続にする。この時点では  $k \leq nc-1$  のとき  $wf[k] = \psi_{-k}$ ,  $k \geq nc$  のとき  $wf[k] = \psi_{+k}$  であるから、 $k \leq nc-1$  に対して定数倍  $\psi_{+nc}/\psi_{-nc} = wf[nc]/wf1$  すればよい。

`double get_eigen( double e1, double e2 )`

2つの初期値  $\varepsilon = e1, e2$  を与えたとき、二分法を用いて  $W(\varepsilon) = 0$  の解を求める関数。相対誤差  $|1 - e1/e2| < \text{微小値}$  になったら収束した見なす。ここでは 微小値 =  $10^{-6}$  としてある。

---

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
double potential( double q );
double wronski( double ee );
double get_eigen( double e1, double e2 );
double wf[ ... ], pot[ ... ], qmin, qmax, dq;
int nc, nq;
int main()
{
    double emin, emax, de, ee, w1, w2, qc;
    int i, ne;
    qmin = ... ; qmax = ... ; qc = ... ; dq = ... ;
    nq=(qmax-qmin)/dq; nc=(qc-qmin)/dq;
    qmax=qmin+nq*dq; qc=qmin+nc*dq;
    for(i=0; i<=nq; i++ )
        pot[i]= potential(qmin+dq*i);
    emin = ... ; emax = ... ; ne = ... ;
    de=(emax-emin)/ne;
```

```

    w1= wronski( emin );
    for(i=1; i<=ne; i++){
        ee=emin+de*i;
        w2=wronski( ee );
        if( w1*w2<0 ){
            printf("%9.4f\n", get_eigen( ee, ee-de ) );
        }
        w1=w2;
    }
    return 0;
}

double potential( double q )
{
    .....
}

double wronski( double ee )
{
    double dq2, c1, c2, c3, wf1, wf2, wf3, dwf1, dwf2;
    int k;
    dq2=dq*dq/12;
    wf[0]=0; wf[1]=1.e-6;
    for(k=2; k<=nc+2; k++){
        c1=1-dq2*(pot[k]-ee );
        c2=1+5*dq2*( pot[k-1]-ee );
        c3=1-dq2*( pot[k-2]-ee );
        wf[k] = ( 2*c2*wf[k-1] - c3*wf[k-2] )/c1;
    }
    wf1=wf[nc]; wf2=wf[nc-1]; wf3=wf[nc-2];
    dwf1=( 8*(wf[nc+1]-wf[nc-1])-(wf[nc+2]-wf[nc-2]) )/(12*dq);
    wf[nq]=0; wf[nq-1]=1.e-6;
    for(k=nq-2; k>=nc-2; k-- ){
        c1=1-dq2*( pot[k]-ee );
        c2=1+5*dq2*( pot[k+1]-ee );
        c3=1-dq2*( pot[k+2]-ee );
        wf[k] = ( 2*c2*wf[k+1] - c3*wf[k+2] )/c1;
    }
    dwf2=( 8*(wf[nc+1]-wf[nc-1])-(wf[nc+2]-wf[nc-2]) )/(12*dq);
    wf[nc-1]=wf2; wf[nc-2]=wf3;
    for(k=0; k<=nc-1; k++ )
        wf[k]=wf[k]*wf[nc]/wf1;
    return dwf1*wf[nc]-dwf2*wf1;
}

double get_eigen( double e1, double e2 )
{
    double w1, w2, w3, e3;
    w1=wronski( e1 );

```

```

w2=wronski( e2 );
while( fabs(e1-e2)>fabs(e2)*1.e-6 + 1.e-80 ){
    e3=( e1+e2 )/2;
    w3=wronski( e3 );
    if( w1*w3 > 0 ){
        w1=w3; e1=e3;
    } else {
        w2=w3; e2=e3;
    }
}
return e1;
}

```

**問題 2.14** ポテンシャルが $U_0$ は正の定数)

$$1. U(q) = q^2 \quad 2. U(q) = U_0 (e^{-2q} - 2e^{-q}) \quad 3. U(q) = -U_0/(\cosh q)^2 \quad (2.93)$$

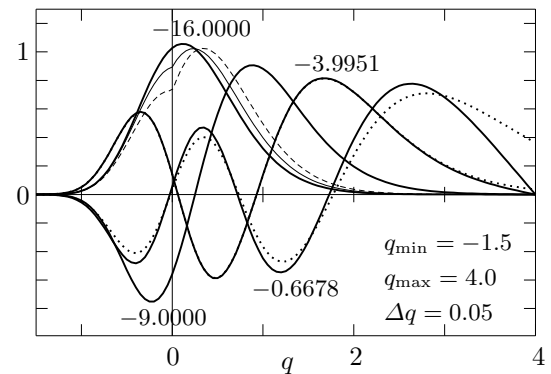
の場合, 束縛状態の固有値  $\varepsilon$  を求めよ。また, 波動関数を規格化し図示せよ。 $q_{\min}, q_{\max}$  の設定は古典力学的回帰点  $q_{cl}$ , ( $U(q_{cl}) - \varepsilon = 0$ ) の2倍程度が目安になるが,  $U_0 \approx 20$ ,  $q_{\max} \approx 4$ ,  $q_{\min} \approx -4$ ,  $\Delta q \approx 0.1$  でまずは試してみよ。波動関数の規格化は台形則を用いればよい。

$$S = \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \psi^2(q) dq \approx \Delta q \left( \frac{\psi_0^2 + \psi_{N_q}^2}{2} + \sum_{k=1}^{N_q-1} \psi_k^2 \right)$$

を求めば  $\psi_k/\sqrt{S}$  が規格化した波動関数になる。漸近形 (2.92) を用いる場合,  $q < q_{\min}$  と  $q > q_{\max}$  での漸近形の寄与を  $S$  に加える。(2.93) の場合, (2.2) は解析的に解ける。2. と 3. の解析解  $\varepsilon$  は (2.52), (2.59) である。1. の場合 (4.6) より  $\varepsilon = 2n + 1$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  になる。

#### モースポテンシャルの数値計算例

$U_0 = (9/2)^2$  での規格化した  $\psi(q)$  を右図に示す。曲線に付けた数値は数値計算で求めた  $\varepsilon_n$  である。解析解 (2.52) は  $\varepsilon_n = -(4-n)^2$  になる。図より  $n = 2, 3$ , 特に  $n = 3$  の場合  $q_{\max}$  を大きく取る必要がある。 $q_{\max}$  での初期値を (2.92) に変更すると,  $\varepsilon_0$  と  $\varepsilon_1$  は殆ど変わらないが  $\varepsilon_2 = -3.9998$ ,  $\varepsilon_3 = -0.9584$  に改善する。このときの  $\psi(q)$  を点線で示す。なお, 細い曲線は  $\varepsilon = -15$ , 破線は  $\varepsilon = -14$  での  $\psi(q)$  である。接続点  $q_c = 0$  で  $d\psi/dx$  は不連続であるが,  $\varepsilon$  が  $\varepsilon_0$  に近づくとき次第に滑らかに接続する様子が分かる。(2.50) より  $q_{\min}$  から  $q$  を増加させて解くとき  $\psi(q)$  は二重指数関数的に増加するから桁あふれする可能性がある。



### 3 1次元の散乱

#### 3.1 境界条件

前節では1次元のポテンシャル  $V(x)$  による束縛状態を扱った。同じポテンシャルでも、束縛状態とは物理的に異なった状況として散乱がある。これは無限遠方から粒子が入射し、ポテンシャルの影響を受けながら、再び無限遠方に飛び去る問題である。これを量子力学的に扱う場合、解くべき方程式は束縛状態と同様にシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

であるが、束縛状態の境界条件  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$  では無限遠方に粒子は存在しないから、境界条件の設定を変更しなければならない。

境界条件を考察する前に、(1.6) で定義した確率の流れの密度 (確率流) について触れておく。確率保存を表す (1.7) は1次元の場合

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x,t)}{\partial x} = 0, \quad \rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2, \quad j(x,t) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \psi^*(x,t) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} \right) \quad (3.1)$$

である。領域  $D = [x_1, x_2]$  で積分すると

$$\frac{d}{dt} P_{12}(t) = j(x_1, t) - j(x_2, t), \quad P_{12}(t) = \int_{x_1}^{x_2} dx \rho(x, t)$$

$D$  での確率  $P_{12}$  の単位時間当たりの変化は、 $D$  の下端  $x = x_1$  で  $D$  に流入する確率流  $j(x_1, t)$  と上端  $x = x_2$  で  $D$  から流出する確率流  $j(x_2, t)$  の差であるから、 $j(x, t)$  は位時間当たり  $x$  を通過する確率と解釈できる。定常状態  $\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x)$  の場合、 $\rho(x, t)$ ,  $j(x, t)$  は時間に依存しない。

散乱の境界条件を考えよう。 $x \rightarrow -\infty$  から粒子が  $x$  軸正方向に入射する場合を扱う。

$\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty}$  入射波 + ポテンシャルで反射されて戻って来る反射波

$\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty}$  ポテンシャルを透過して  $x$  軸正方向に向かう透過波

になるべきである。これを式で表そう。 $x \rightarrow \pm\infty$  で  $V(x)$  がある値に収束する場合を考える。エネルギーの基準を適当に取れば

$$V(-\infty) = 0, \quad V(\infty) = V_+$$

にできる。 $x \rightarrow -\infty$  では、シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

である。 $E < 0$  の場合  $\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$  とすると  $\psi'' = \kappa^2\psi$  であるから  $A, B$  を任意定数として

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$$

$x \rightarrow -\infty$  で  $\psi$  が有界であるためには  $B = 0$  である。このとき  $\psi(x) = Ae^{\kappa x} \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0$  になり、散乱の状況を表せない。一方、 $E > 0$  ならば

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \text{ただし} \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

である。この  $\psi(x)$  を  $\psi_I(x)$  と  $\psi_R(x)$

$$\psi_I(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} Ae^{ikx}, \quad \psi_R(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} Be^{-ikx}$$

に分割すると、それぞれの  $x \rightarrow -\infty$  での確率流は

$$J_I = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \psi_I^*(x) \frac{d\psi_I(x)}{dx} \right) \Big|_{x=-\infty} = \frac{\hbar k}{m} |A|^2, \quad J_R = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \psi_R^*(x) \frac{d\psi_R(x)}{dx} \right) \Big|_{x=-\infty} = -\frac{\hbar k}{m} |B|^2$$

になる。また、 $\psi_I$  の確率密度は  $|\psi_I(x)|^2 \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} |A|^2$  である。したがって、 $\psi_I(x)$  は単位長さあたり  $|A|^2$  のような密度で、速さ  $\hbar k/m$  で  $x$  軸正方向に運動する粒子を表すと解釈できる。同様に、 $\psi_R(x \rightarrow -\infty)$  は速さ  $\hbar k/m$  で  $x$  軸負方向に運動する粒子を表す。これから  $\psi_I(x)$  は入射波を、 $\psi_R(x)$  は反射波を表す。以下では  $E > 0$  とする。

$x \rightarrow \infty$  では

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V_+) \psi$$

であるから、 $0 < E < V_+$  のとき有界な解は

$$\psi(x) = C e^{-\kappa' x}, \quad \kappa' = \sqrt{2m(V_+ - E)/\hbar^2}$$

$\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$  になるから粒子は  $x \rightarrow \infty$  に到達できず透過は起こらない。一方、 $E > V_+$  のとき

$$\psi(x) = C e^{ik'x} + D e^{-ik'x}, \quad k' = \sqrt{2m(E - V_+)/\hbar^2}$$

になり、透過が起こる。 $x \rightarrow \infty$  では  $x$  軸正方向に向かう波だけになるべきであるから  $D = 0$  である。 $x \rightarrow -\infty$  から粒子が入射するとき、散乱の境界条件は

$$\psi(x) \rightarrow \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ C e^{-\kappa' x}, & x \rightarrow \infty, \quad E < V_+, \quad (V_+ > 0) \\ C e^{ik'x}, & x \rightarrow \infty, \quad E > V_+, \quad (V_+ \text{ は正でも負でもよい}) \end{cases} \quad (3.2)$$

になる。束縛状態ではエネルギー固有値  $E$  はある特定の値のみが許され離散的になるが、散乱問題では  $E > V(-\infty)$  であれば上の境界条件を満たす解は常に存在し  $E$  は連続的になる。

境界条件 (3.2) を満たす  $|\psi(x)|$  は  $x \rightarrow -\infty$  で 0 にならないから、 $|\psi(x)|^2$  の積分は発散し規格化できない。しかし、散乱では反射あるいは透過する割合が問題であり、規格化の必要はない。 $x \rightarrow \infty$  での確率流は

$$J_T = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right) \Big|_{x=\infty} = \begin{cases} 0, & E < V_+, \quad (V_+ > 0) \\ \frac{\hbar k'}{m} |C|^2, & E > V_+ \end{cases}$$

である。**反射率**  $R$  と **透過率**  $T$  を確率流の大きさの比  $R = |J_R/J_I|$ ,  $T = |J_T/J_I|$  で定義する。単位時間当たり 1 個の粒子が入射したとき、単位時間当たり何個反射あるいは透過するか、である。 $J$  の具体形を代入すると

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2, \quad T = \begin{cases} 0, & E < V_+ \\ \frac{k'}{k} \left| \frac{C}{A} \right|^2, & E > V_+ \end{cases} \quad (3.3)$$

になる。係数  $A, B, C$  の関係は、具体的にシュレーディンガー方程式を解くことで決まる。

定常状態  $\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x)$  の場合、 $\rho(x, t)$  と  $j(x, t)$  は時間に依存しないから、(3.1) は  $dj(x)/dx = 0$  になり  $j(x)$  は一定である。 $x \rightarrow -\infty$  では

$$j(x) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[ (A e^{ikx} + B e^{-ikx})^* \frac{d}{dx} (A e^{ikx} + B e^{-ikx}) \right] = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) \quad (3.4)$$

入射波と反射波の干渉項は寄与しない。一方,  $x \rightarrow \infty$  では  $j(x) = J_T$  である。したがって,  $j(x) =$  一定, つまり  $j(-\infty) = j(\infty)$  より

$$0 < E < V_+ \text{ のとき } |A|^2 - |B|^2 = 0, \quad \therefore R = 1, T = 0$$

$$V_+ < E \text{ のとき } k(|A|^2 - |B|^2) = k'|C|^2, \quad \therefore R + T = 1$$

$R + T = 1$  は散乱での確率保存を表す。入射粒子は必ず反射または透過し消滅することはない。

### 3.2 デルタ関数型ポテンシャル

扱いが簡単な  $V(x) = \frac{\hbar^2 v_1}{m} \delta(x)$  の場合を考える。(2.28) の  $v_1$  とは符号が逆である。 $E > 0$  として  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$  とする。シュレーディンガー方程式は,  $x \neq 0$  のとき  $\psi'' = -k^2\psi$  になるから

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ikx}, & x > 0 \end{cases} \quad (3.5)$$

である。 $x = 0$  での  $\psi(x)$  の連続性と (2.5) より

$$A + B = C, \quad ikC - ik(A - B) = 2v_1C, \quad \therefore \frac{B}{A} = -\frac{iv_1}{k + iv_1}, \quad \frac{C}{A} = \frac{k}{k + iv_1} \quad (3.6)$$

(3.3) において  $E > V_+ = 0$ ,  $k' = k$  であるから, 反射率  $R$  と透過率  $T$  は

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{v_1^2}{k^2 + v_1^2}, \quad T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{k^2}{k^2 + v_1^2} = 1 - R \quad (3.7)$$

になる。ポテンシャルが強くて  $k^2 \ll v_1^2$  のとき  $R \approx 1, T \approx 0$  であり主に反射するが,  $k^2 \gg v_1^2$  の場合は  $R \approx 0, T \approx 1$  でありほとんど透過する。

$R$  と  $T$  は  $v_1^2$  に依存するから, 引力 ( $v_1 < 0$ ) と斥力 ( $v_1 > 0$ ) の違いはないが, 波動関数には違いが現れる。 $\theta = \tan^{-1}(v_1/k)$  とすると, 透過波は  $\psi(x) = Ce^{ikx}/A = \sqrt{T}e^{i(kx-\theta)}$  と表せる。斥力  $v_1 > 0$  の場合  $0 < \theta < \pi/2$  であるから, 振幅は別にして,  $\psi(x)$  は自由粒子の波動関数  $e^{ikx}$  を  $\Delta x = \theta/k$  だけ  $x$  軸正方向に平行移動したものである。原点での斥力のため  $e^{ikx}$  は原点から押し出され  $\psi(x)$  になる。引力  $v_1 < 0$  の場合,  $\theta < 0$  であり  $e^{ikx}$  は原点に引き込まれる。このような位相の振る舞いは, 3次元の中心力ポテンシャルでも起こる (277 ページ参照)。

$E < 0$  のとき  $k$  は純虚数になるが, この場合でも (3.5) はシュレーディンガー方程式の解である。これから束縛状態の  $E$  を求める。複素関数  $\sqrt{z}$  の多価性のため  $k = \pm i\sqrt{-2mE/\hbar^2}$  であるが, (3.5) が  $\psi \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$  を満たすには  $ik$  は負の実数でなければならない。このとき  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0$  より  $A = 0$  である。

$$ik < 0, \quad A/B = 0 \quad (3.8)$$

である  $k$  が存在すれば, 束縛状態のエネルギー  $E = \hbar^2 k^2 / 2m < 0$  を与える。(3.6) の場合  $k + iv_1 = 0$  である。 $ik < 0$  より 引力  $v_1 < 0$  のとき束縛状態が 1 つ存在し  $E = -\hbar^2 v_1^2 / 2m$ ,  $\psi(x) = \sqrt{|v_1|} e^{v_1|x|}$  になる。これは (2.29) である。一般に, 複素  $k$  平面上における散乱波動関数の解析的性質により, 束縛状態と散乱状態を統一的に扱える (62 ページ, 288 ページ参照)。

**問題 3.1** ポテンシャルが (2.33) の場合

$$T^{-1} = 1 + \frac{4v_2^2}{k^2} \left( \cos 2ka - \frac{v_2}{k} \sin 2ka \right)^2, \quad R = 1 - T$$

を示せ。また, 束縛状態のエネルギー (2.34) で  $T^{-1} = 0$  を示せ。

### 3.3 階段型ポテンシャル

$V_0$  を定数として

$$V(x) = V_0 \theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

の場合,  $x < 0$  ではシュレーディンガー方程式の解は

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0 \quad (3.10)$$

$x > 0$  では

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V_0) \psi \quad (3.11)$$

になるから, 境界条件 (3.2) を満たすものは

$$\psi(x) = Ce^{ik'x}, \quad k' = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2} \quad (3.12)$$

である。ただし  $E < V_0$  のとき  $k'$  は純虚数になり  $ik' < 0$  にとる。 $x = 0$  で  $\psi(x)$  と  $\psi'(x)$  が連続になるように (3.10), (3.12) を接続すると

$$A + B = C, \quad k(A - B) = k'C, \quad \therefore \frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'} \quad (3.13)$$

である。

$E > V_0$  のとき  $k' > 0$  であるから, 反射率  $R$  と透過率  $T$  は

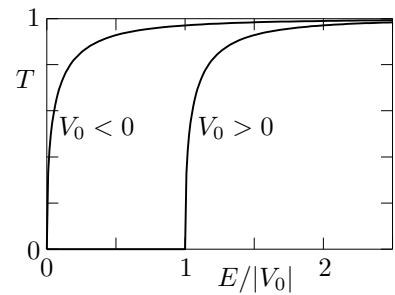
$$T = \frac{k'}{k} \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{4kk'}{(k + k')^2} = \frac{4\sqrt{E(E - V_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^2}, \quad R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left( \frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 = 1 - T \quad (3.14)$$

になる。古典力学では  $R = 0$ ,  $T = 1$  であるが, 量子力学では  $V_0$  の符号に依らず  $R \neq 0$  であり反射が起こる。 $\varepsilon = E/|V_0|$  とすると  $\varepsilon \gg 1$  のとき  $T \approx 1 - 1/(4\varepsilon)^2$  であり古典力学に近づく。一方,  $V_0 > 0$  の場合  $T \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 1} 4\sqrt{\varepsilon - 1}$ ,  $V_0 < 0$  では  $T \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 4\sqrt{\varepsilon}$  になる。

$E < V_0$  の場合,  $k'$  は純虚数になるから  $R = |B/A|^2 = 1$  である。また, 全確率流  $j(x) = 0$  より  $T = 0$  になる。古典力学と同様に, 粒子は完全に反射され透過することはない。ただし, 次の点で異なる。古典力学では, 粒子が存在する領域は  $E - V(x) \geq 0$  を満たす  $x$  であるから,  $E < V_0$  の場合  $x > 0$  に粒子は存在しない。一方, 量子力学では,  $x > 0$  のとき

$$\psi(x) = Ce^{-\kappa x}, \quad \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2} \quad (3.15)$$

であり粒子は  $x > 0$  に存在する。



### 3.4 箱型または井戸型ポテンシャル

$a$  を正の定数として

$$V(x) = V_0 \theta(a - |x|) = \begin{cases} 0, & |x| > a \\ V_0, & |x| < a \end{cases} \quad (3.16)$$



とする。境界条件 (3.2) を満たす解は

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < -a \\ Fe^{ik'x} + Ge^{-ik'x}, & |x| < a \\ Ce^{ikx}, & x > a \end{cases} \quad (3.17)$$

ただし

$$k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0, \quad k' = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$$

になる。  $E - V_0 < 0$  のとき  $k'$  は純虚数である。  $x = -a$  及び  $x = a$  での波動関数の接続条件から

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Fe^{-ik'a} + Ge^{ik'a}, \quad k(Ae^{-ika} - Be^{ika}) = k'(Fe^{-ik'a} - Ge^{ik'a}) \quad (3.18)$$

$$Fe^{ik'a} + Ge^{-ik'a} = Ce^{ika}, \quad k'(Fe^{ik'a} - Ge^{-ik'a}) = kCe^{ika} \quad (3.19)$$

(3.19) より

$$\frac{F}{A} = \frac{k' + k}{2k'} e^{i(k-k')a} \frac{C}{A}, \quad \frac{G}{A} = \frac{k' - k}{2k'} e^{i(k+k')a} \frac{C}{A} \quad (3.20)$$

である。これを (3.18) に代入すれば

$$\frac{B}{A} = \frac{i(k'^2 - k^2) \sin(2ak') e^{-2iak}}{\mathcal{J}(k)}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2kk' e^{-2iak}}{\mathcal{J}(k)} \quad (3.21)$$

$$\frac{F}{A} = \frac{k(k' + k) e^{-ia(k+k')}}{\mathcal{J}(k)}, \quad \frac{G}{A} = \frac{k(k' - k) e^{-ia(k-k')}}{\mathcal{J}(k)} \quad (3.22)$$

ただし

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(k) &= 2kk' \cos(2ak') - i(k'^2 + k^2) \sin(2ak') \\ &= -2i(k \cos ak' - ik' \sin ak')(k \sin ak' + ik' \cos ak') \end{aligned} \quad (3.23)$$

になる。

**$0 < E < V_0$  の場合**  $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2} > 0$  とすると  $k' = \pm i\kappa$  になるから

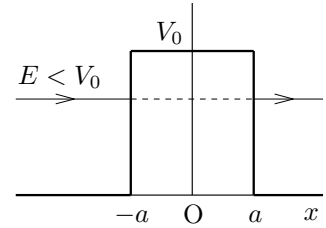
$$\mathcal{J}(k) = \pm (2i\kappa \cosh(2a\kappa) + (k^2 - \kappa^2) \sinh(2a\kappa))$$

である。

$$\varepsilon = (2a)^2 2mE/\hbar^2, \quad v = (2a)^2 2mV_0/\hbar^2 \quad (3.24)$$

とすると

$$\begin{aligned} T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 &= \frac{4k^2 \kappa^2}{4k^2 \kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(2a\kappa)} \\ &= \frac{4\varepsilon(v - \varepsilon)}{4\varepsilon(v - \varepsilon) + v^2 \sinh^2(\sqrt{v - \varepsilon})} \end{aligned} \quad (3.25)$$



になり  $R = |B/A|^2 = 1 - T$  を満たす。古典力学では  $x < -a$  に存在

する粒子は  $|x| < a$  のポテンシャル障壁を通り抜けて  $x > a$  に侵入できないが、量子力学では  $x > a$  に到達し  $T \neq 0$  である。これを**トンネル効果**という (235 ページ参照)。  $\varepsilon \approx v$  の場合

$$T \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow v} \frac{4\varepsilon}{4\varepsilon + v^2} = \frac{1}{1 + v/4} \quad (3.26)$$

になるから、  $v = (2a)^2 2mV_0/\hbar^2$  が小さいほどトンネル効果は大きい。一方、  $\varepsilon \ll v$  では

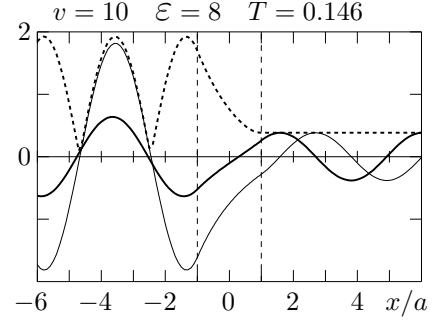
$$T \approx \frac{16\varepsilon(v - \varepsilon)}{v^2} \exp(-2\sqrt{v - \varepsilon})$$

になり、  $v - \varepsilon$  の増加とともに急激に 0 に近づく。

(3.17) より  $|x| < a$  のとき

$$\left| \frac{\psi(x)}{A} \right|^2 = T \left( \cosh^2(\kappa(x-a)) + \frac{k^2}{\kappa^2} \sinh^2(\kappa(x-a)) \right)$$

であるから  $|\psi(x)|$  は指数関数的に減少する。右図に (3.17) の具体例を示す。太い曲線は  $\psi(x)/A$  の実部, 細い曲線は虚部を表す。点線は  $|\psi(x)/A|$  である。  $x > a$  のとき  $|\psi(x)/A| = \sqrt{T}$  になる。



$E > V_0$  の場合  $k' > 0$  であるから

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{4k^2 k'^2}{4k^2 k'^2 + (k'^2 - k^2)^2 \sin^2(2ak')} = \frac{4\varepsilon(\varepsilon - v)}{4\varepsilon(\varepsilon - v) + v^2 \sin^2(\sqrt{\varepsilon - v})} \quad (3.27)$$

であり  $R + T = 1$  を満たす。階段ポテンシャルと同様に,  $E > V_0$  でも反射が起こるが,  $E \gg |V_0|$  では  $R \approx 0$  である。  $0 \leq \sin^2(\sqrt{\varepsilon - v}) \leq 1$  より

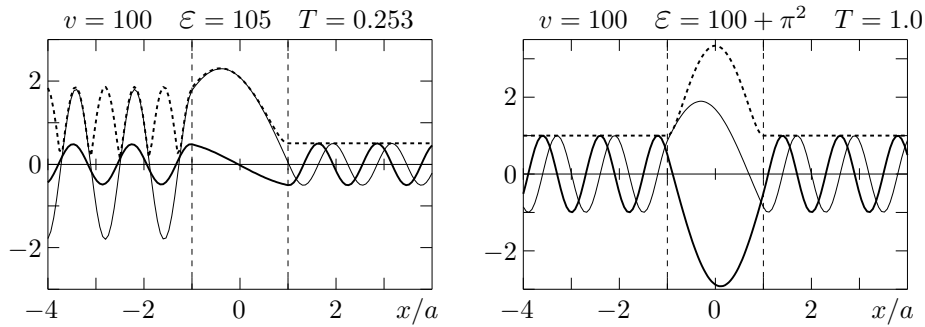
$$T_{\min} \leq T \leq 1, \quad T_{\min} = \frac{4\varepsilon(\varepsilon - v)}{4\varepsilon(\varepsilon - v) + v^2} = 1 - \frac{1}{(1 - 2\varepsilon/v)^2}$$

になる。

$V_0 > 0$  のとき  $\varepsilon \rightarrow v$ , ( $E \rightarrow V_0$ ) では (3.26) と同様に  $T \rightarrow 1/(1 + v/4)$  である。  $E$  が  $V_0$  から増加すると  $T$  も増加し

$$\sin(\sqrt{\varepsilon - v}) = 0, \quad \text{つまり} \quad \sqrt{\varepsilon - v} = 2ak' = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.28)$$

を満たす特定のエネルギー  $E$  では  $T = 1$ ,  $R = 0$  になり完全に透過する。このとき  $C = (-1)^n A$ ,  $B = 0$  より  $\psi(a) = (-1)^n \psi(-a)$  になる。  $x = -a$  と  $x = a$  の波動関数の違いは単に符号  $(-1)^n$  だけであり, 入射波はそのまま透過する。まるでポテンシャルがないかのように振舞い  $T = 1$  になる。下図に波動関数 (3.17) の具体例を示す。右図は  $\sqrt{\varepsilon - v} = \pi$  の場合で,  $x > a$  の波動関数の符号を変えれば,  $x < -a$  の波動関数に滑らかに接続する。



$T = 1$  である  $\sqrt{\varepsilon - v} = n\pi$  近傍では  $\varepsilon - v = (n\pi)^2 + x$  とすると

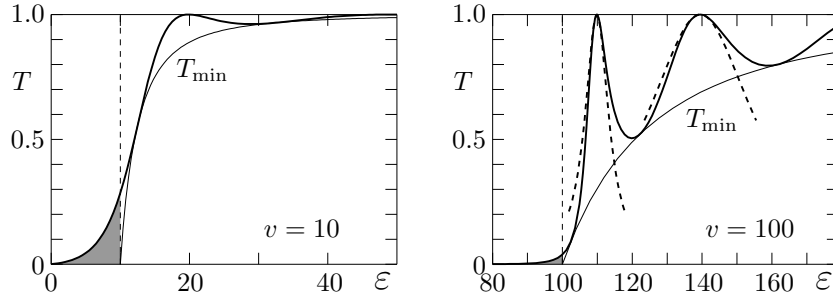
$$\sin^2(\sqrt{\varepsilon - v}) = \left( \frac{x}{2n\pi} \right)^2 + \dots, \quad \therefore \quad T^{-1} \approx 1 + \frac{x^2}{\Gamma^2}, \quad \Gamma = \frac{(2n\pi)^2}{v} \sqrt{v + (n\pi)^2} \quad (3.29)$$

になるから,  $v \gg (n\pi)^2$  ならば,  $T$  は  $\varepsilon = v + (n\pi)^2$  でピーク幅が  $\Gamma$  程度のピークになり共鳴が起こる。ポテンシャル中心での存在確率は

$$\left| \frac{\psi(0)}{A} \right|^2 = \left| \frac{F + G}{A} \right|^2 = \frac{k^2}{k^2 \cos^2(ak') + k'^2 \sin^2(ak')} = \frac{2\varepsilon}{2\varepsilon - v + v \cos \sqrt{\varepsilon - v}}$$

になるから,  $\varepsilon = v + \pi^2$  のとき  $|\psi(0)/A|^2 = 1 + v/\pi^2$  である。これはポテンシャル外部での確率  $|\psi(|x| > a)/A|^2 = 1$  に比べて非常に大きい。右図の場合  $1 + v/\pi^2 \approx 11$  である。斥力ポテンシャルではあるが, ポテンシャル内に閉じ込められた束縛状態のようである。

$v = 10, 100$  のとき (3.27), (3.25) の透過率  $T$  をエネルギー  $\varepsilon$  の関数として図示すると下図のようになる。影を付けた  $0 < \varepsilon < v$  の部分はトンネル効果を表し, 古典力学的には  $T = 0$  である。 $v = 100$  の図で破線は (3.29) である。 $\varepsilon = v + (n\pi)^2$  近傍では,  $n$  が小さいほど鋭いピークになる。

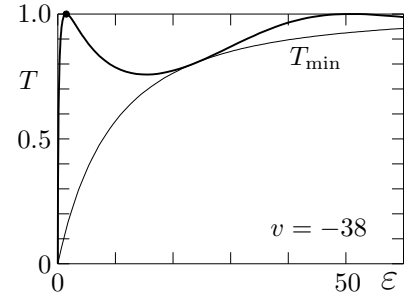


井戸型ポテンシャル  $V_0 < 0$  でも  $\sqrt{\varepsilon - v} = n\pi$  のとき  $T = 1$  である。 $v = -38 \approx -(2\pi)^2 = -39.47\cdots$  での  $T(\varepsilon)$  を右図に示す。(3.27) より

$$T \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{4\varepsilon}{4\varepsilon - v \sin \sqrt{-v}} = \begin{cases} 1, & v = -(n\pi)^2 \\ 0, & v \neq -(n\pi)^2 \end{cases}$$

である。 $v = -(n\pi)^2$  のとき (2.9) の  $v_0$  は  $v_0 = \sqrt{-v}/2 = n\pi/2$  であり, 30 ページの図から,  $v_0 = n\pi/2$  を越えると束縛状態が新たに現れる。●で示した  $T = 1$  の  $\varepsilon$  は  $v = -(2\pi)^2$  のとき  $\varepsilon = 0$  になる。引力を強くして

$v < -(2\pi)^2$  とすると,  $T(0) = 0$  になるとともに束縛状態が現れる。

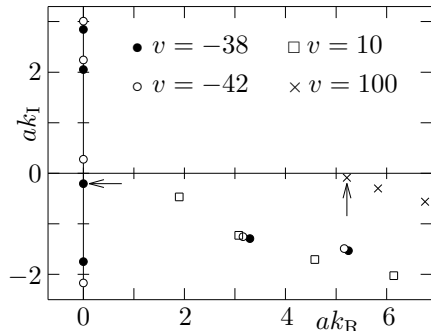


**問題 3.2** 波動関数が (3.17) の場合, 確率流  $j(x)$  を求め  $j(x) = \text{一定}$  を示せ。

**問題 3.3** (3.16) において  $V_0 = \frac{1}{2a} \frac{\hbar^2 v_1}{m}$  とする。 $V(x) \xrightarrow{a \rightarrow 0} \frac{\hbar^2 v_1}{m} \delta(x)$  である。透過率  $T$  は  $v_1 > 0$  のとき (3.25),  $v_1 < 0$  のとき (3.27) である。 $a \rightarrow 0$  のとき  $T$  は (3.7) になることを示せ。

(3.8) と同様に, 散乱の波動関数 (3.17) は,  $ik < 0$  で  $A/B = 0$  の場合, 束縛状態を表す。(3.21) より  $A/B = 0$  は  $\mathcal{J}(k) = 0$  である。 $k = i\kappa, \kappa > 0$  とおける。(2.9) で定義した  $\alpha, \beta$  は  $\alpha = a\kappa, \beta = ak'$  になるから (3.23) より (2.11), (2.12) を再現する。

右図に  $\mathcal{J}(k) = 0$  の複素解  $k$  を示す。 $k_R, k_I$  は  $k$  の実部, 虚部である。 $\mathcal{J}(k)^* = \mathcal{J}(-k^*)$  より  $-k^*$  も解になる。解は虚軸上と下半面に存在する。 $v = -38$  のとき  $k_I > 0$  の純虚数解が 2 つ存在し  $E = \hbar^2 k^2/2m < 0$  は束縛状態のエネルギーである (30 ページの図で  $v_0 = \sqrt{-v}/2 \approx \pi/1.02$ )。  $k_I < 0$  の純虚数解は束縛状態ではない。←で示した原点近傍の解  $ak \approx -0.2i$  が存在するため,  $v = -38$  の  $T$  は  $\varepsilon \approx 0$  で急激に増加する。 $v = -42 < -(2\pi)^2$  にすると  $ak \approx -0.2i$  は束縛状態  $ak \approx 0.28i$  に移行する。 $v = -(n\pi)^2 + \delta, |\delta| \ll 1$  のとき  $|ak| = O(\delta)$  とすると



$$4a^2 \mathcal{J}(k) = (-1)^n n\pi (4ak + i\delta/2) + O(\delta^2)$$

になるから、 $v \approx -(n\pi)^2$  のとき、原点近傍に純虚数解  $ak \approx -i\delta/8 = -i((n\pi)^2 + v)/8$  が存在する。

$v > 0$  の場合、束縛状態が存在しないことに対応して  $\mathcal{J}(k) = 0$  の解は虚軸上には存在しない。 $v$  が大きいとき、図の  $\uparrow$  で示したように、実軸に近い解が存在する。この解は (3.23) より  $2ak' = \sqrt{(2ak)^2 - v} \approx n\pi$  のとき存在する。そこで  $2ak = \sqrt{(n\pi)^2 + v} + ix$  とすると

$$\tilde{\mathcal{J}}(k) \equiv \frac{\mathcal{J}(k)}{2kk'} = (-1)^n \left( 1 + \frac{2(n\pi)^2 + v}{2(n\pi)^2} x + O(x^2) \right) = 0, \quad \therefore x = -\frac{2(n\pi)^2}{2(n\pi)^2 + v}$$

になるから、 $v \gg (n\pi)^2$  のとき実軸に近い解が下半面に存在する。 $v = 100, n = 1$  のとき、図の  $\uparrow$  で示した解  $ak \approx 5.2 - 0.08i$  になる。 $z_I = \text{Im } z \approx 0$  である複素解  $\mathcal{J}(z) = 0$

$$2az_R = 2a\text{Re } z = \sqrt{(n\pi)^2 + v}, \quad 2az_I = 2a\text{Im } z = -\frac{2(n\pi)^2}{2(n\pi)^2 + v}$$

が存在するとき、実数  $k$  が  $z_R$  近傍では

$$\tilde{\mathcal{J}}(k) = \tilde{\mathcal{J}}(z + k - z) = \tilde{\mathcal{J}}(z) + \tilde{\mathcal{J}}'(z)(k - z) + \cdots = \tilde{\mathcal{J}}'(z)(k - z) + \cdots$$

$$2z_R(k - z) = 2z_R(k - z_R) - 2iz_R z_I \approx (k + z_R)(k - z_R) - 2iz_R z_I = \frac{\varepsilon - \varepsilon_R + i\varepsilon_I}{4a^2}$$

ただし

$$\varepsilon_R = (2az_R)^2 = (n\pi)^2 + v, \quad \varepsilon_I = -8a^2 z_R z_I = \frac{(2n\pi)^2}{2(n\pi)^2 + v} \sqrt{(n\pi)^2 + v}$$

になる。 $|\mathcal{J}'(z)|^2 \approx 16a^2 \varepsilon_R / \varepsilon_I^2$  より

$$T^{-1} = |\tilde{\mathcal{J}}(k)|^2 \approx 1 + (\varepsilon - \varepsilon_R)^2 / \varepsilon_I^2$$

これは (3.29) である。近似の違いのため  $\Gamma \neq \varepsilon_I$  であるが、 $v \gg (n\pi)^2$  では  $\Gamma \approx \varepsilon_I$  になる。62 ページの  $T(v = 100)$  の図で  $\varepsilon = 100 + \pi^2$  の鋭いピークは複素解  $az \approx 5.2 - 0.08i$  の影響である。

### 3.5 解析的に解ける例

これまでの実質的に  $V(x) = \text{一定}$  であるが、ここでは  $V(x)$  が  $x$  に依存する場合を扱う。

#### 例題 1

$$V(x) = \frac{V_0}{(\cosh \alpha x)^2}, \quad \alpha > 0 \quad (3.30)$$

での散乱を考える。 $V_0$  は正でも負でもよい。 $q = \alpha x$  とするとシュレーディンガー方程式は

$$\left( \frac{d^2}{dq^2} + k^2 - \frac{U_0}{(\cosh q)^2} \right) \psi(q) = 0, \quad \text{ただし } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2 \alpha^2}}, \quad U_0 = \frac{2mV_0}{\hbar^2 \alpha^2} \quad (3.31)$$

である。散乱を扱うから  $E > \lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) = 0$  である。(2.54) と同様に  $\rho = 1/(e^{2q} + 1)$  とすると

$$\left( f \frac{d}{d\rho} f \frac{d}{d\rho} + \frac{k^2}{4} - U_0 f \right) \psi = 0, \quad f(\rho) = \rho - \rho^2 = \frac{1}{(2 \cosh q)^2}$$

になる。これは (2.55) で  $\kappa \rightarrow -ik, U_0 \rightarrow -U_0$  とすればよい ( $\kappa \rightarrow ik$  でも結果は同じ)。(2.56) より、一般解は  $C, D$  を任意定数として

$$\begin{aligned} \psi &= (1 - \rho)^{-ik/2} \left( C \rho^{-ik/2} F(v - ik, 1 - v - ik, 1 - ik, \rho) + D \rho^{ik/2} F(v, 1 - v, 1 + ik, \rho) \right) \\ &= C(e^q + e^{-q})^{ik} F(v - ik, 1 - v - ik, 1 - ik, \rho) + D e^{-ikq} F(v, 1 - v, 1 + ik, \rho) \end{aligned}$$

ただし

$$v = 1/2 - \sqrt{1/4 - U_0} = \begin{cases} 1/2 - u, & U_0 < 1/4 \\ 1/2 - iu, & U_0 > 1/4 \end{cases}, \quad u = \sqrt{|U_0 - 1/4|}$$

になる。 $q \rightarrow \infty$ , ( $\rho \rightarrow 0$ ) の場合,  $F(a, b, c, 0) = 1$  より  $\psi(q) \rightarrow Ce^{ikq} + De^{-ikq}$  になるが,  $x$  軸正方向に進む波  $e^{ikq}$  という境界条件のため  $D = 0$  である。(17.123) より  $D = 0$  のとき  $\psi$  は

$$\begin{aligned} \psi(q) &= C(e^q + e^{-q})^{ik} F(v - ik, 1 - v - ik, 1 - ik, \rho) \\ &= Ae^{ikq} F(1 - v, v, 1 + ik, 1 - \rho) \\ &\quad + B(e^q + e^{-q})^{ik} F(v - ik, 1 - v - ik, 1 - ik, 1 - \rho) \end{aligned} \quad (3.32)$$

ただし

$$\frac{A}{C} = \frac{\Gamma(1 - ik)\Gamma(-ik)}{\Gamma(1 - v - ik)\Gamma(v - ik)}, \quad \frac{B}{C} = \frac{\Gamma(1 - ik)\Gamma(ik)}{\Gamma(1 - v)\Gamma(v)} \quad (3.33)$$

と表せる。 $1 - \rho \xrightarrow{q \rightarrow -\infty} 0$  であるから

$$\psi(q) \rightarrow \begin{cases} Ae^{ikq} + Be^{-ikq}, & q \rightarrow -\infty \\ Ce^{ikq}, & q \rightarrow \infty \end{cases} \quad (3.34)$$

になる。したがって, 透過率  $T$  と反射率  $R$  は

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \left| \frac{\Gamma(1 - v - ik)\Gamma(v - ik)}{\Gamma(1 - ik)\Gamma(ik)} \right|^2, \quad R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left| \frac{\Gamma(1 - v - ik)\Gamma(v - ik)}{\Gamma(1 - v)\Gamma(v)} \right|^2 \quad (3.35)$$

で与えられる。なお,  $\Gamma(z)^* = \Gamma(z^*)$  より  $|\Gamma(z)| = |\Gamma(z^*)|$  である。

$U_0 < 1/4$  のとき  $v = 1/2 - u$  は実数である。(17.59) より

$$T = \left| \frac{\Gamma(1 - v - ik)\Gamma(v + ik)}{\Gamma(1 - ik)\Gamma(ik)} \right|^2 = \left| \frac{\sin(i\pi k)}{\sin(\pi v + i\pi k)} \right|^2 = \frac{\sinh^2(\pi k)}{\sinh^2(\pi k) + \cos^2(\pi u)} \quad (3.36)$$

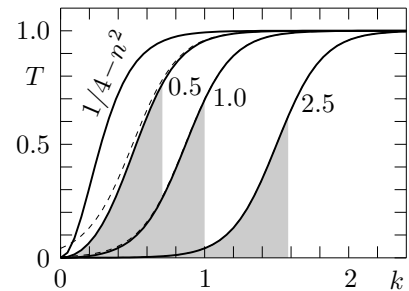
になる。 $k \gtrsim 1$  ならば  $\sinh^2(\pi k) \gtrsim 100$  になり  $T \approx 1$  である。 $T$  は  $u$  について周期 1 の周期関数である。 $n = 0, 1, 2, \dots$  として  $u = u_0 + n$ , つまり  $U_0 = 1/4 - (u_0 + n)^2$  のとき,  $T$  は  $n$  に依存しない。特に,  $u_0 = 1/2$ ,  $U_0 = -n(n+1)$  のとき,  $k$  に無関係に  $T = 1$  になり粒子は全て透過する。この場合  $\Gamma(v) = \Gamma(-n)$  は発散するから, (3.33) で  $B = 0$  になり反射波は存在しない。

$U_0 > 1/4$  のとき  $v = 1/2 - iu$  である。(17.60) より

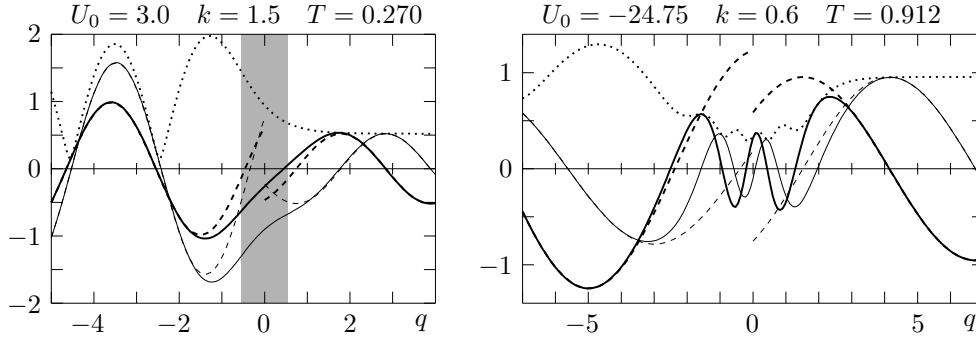
$$T = \left| \frac{\Gamma(1/2 + i(u - k))\Gamma(1/2 - i(u + k))}{\Gamma(1 - ik)\Gamma(ik)} \right|^2 = \frac{\sinh^2(\pi k)}{\sinh^2(\pi k) + \cosh^2(\pi u)} \approx \frac{1}{1 + e^{2\pi(u - k)}} \quad (3.37)$$

最後の近似式では  $\sinh x, \cosh x \approx e^x/2$  とした。 $k < \sqrt{U_0}$  の場合, 古典力学では透過できないが, 量子力学的にはトンネル効果のため  $T \neq 0$  である (問題 9.4 参照)。

右図に  $T(k)$  を示す。曲線に付けた値は  $U_0$  である。 $U_0 = 1/4 - n^2$ , ( $u = n$ ) の場合, (3.36) は  $T = \tanh^2(\pi k)$  になる。 $U_0 < 1/4$  では  $T \geq \tanh^2(\pi k)$  である。破線は (3.37) の近似式である。 $U_0 \gtrsim 1$  では実線と破線はほぼ一致する。影を付けた部分  $k < \sqrt{U_0}$  はトンネル効果を表す。(3.37) より  $U_0 \gg 1$  のとき  $T(\sqrt{U_0}) \approx 1/2$  になる。箱型ポテンシャルの場合, (3.26) がこれに対応する。



下図に波動関数 (3.32) の具体例を示す。 $\psi(q)/A$  の実部を太い実線で、虚部を細い実線で表す。点線は  $|\psi(q)/A|$  である。破線は  $q \rightarrow \pm\infty$  での漸近形を表す。 $q > 0$  のとき  $(C/A)e^{ikq}$ ,  $q < 0$  のとき  $e^{ikq} + (B/A)e^{-ikq}$  である。 $|\psi(q)/A| \xrightarrow{q \rightarrow \infty} \sqrt{T}$  になる。 $U_0 > k^2$  の場合、影を付けた  $V(x) > E$  の領域では、古典力学的運動は禁止される。



**問題 3.4** (3.35), (3.36), (3.37) より  $R + T = 1$  を示せ。

散乱状態を  $\psi \xrightarrow{q \rightarrow \pm\infty} 0$  である束縛状態に適用する。(3.8) と同様に

$$ik < 0, \quad \frac{A}{B} = \frac{\Gamma(1-v)\Gamma(v)}{\Gamma(1-v-ik)\Gamma(v-ik)} \frac{\Gamma(-ik)}{\Gamma(ik)} = 0$$

を満たす  $k$  が束縛状態の  $E$  を与える。ガンマ関数に零点はないから、 $A/B$  の分母のガンマ関数が発散するとき  $A/B = 0$  である。ただし  $\Gamma(ik) = \infty$  のとき  $B/C = \infty$  になるから除く。これから  $n = 0, 1, 2, \dots$  として

$$1 - v - ik = -n \quad \text{または} \quad v - ik = -n \quad \therefore \quad ik = n + 1/2 \pm \sqrt{1/4 - U_0}$$

であり、 $ik < 0$  より  $\kappa_n = -ik = \sqrt{1/4 - U_0} - n - 1/2 > 0$  になる。これを満たす  $n \geq 0$  が存在するには  $U_0 < 0$  である。(2.54) の  $\varepsilon$  は (3.31) の  $k^2$  であるから  $\varepsilon = k^2 = -\kappa_n^2$  になり (2.59) を得る ( $U_0$  の符号は逆)。また、 $v = -n - \kappa_n$  より (3.32) は束縛状態の波動関数 (2.60) になる。

$U_0 > 1/4$  のとき  $k = -i(n + 1/2) \pm \sqrt{U_0 - 1/4}$  で  $A/B = 0$  になる。 $n \geq 0$  であるから、箱型ポテンシャルと同様に、解は複素  $k$  平面の下半面に存在するが、実軸近傍 ( $\text{Im } k \approx 0$ ) には存在しない。このため、箱型ポテンシャルと異なり、 $T(k)$  は共鳴現象を起こさない。

**例題 2**

$$V(x) = \begin{cases} V_0 e^{-\alpha x}, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}, \quad \alpha > 0 \quad (3.38)$$

の場合、無次元化して

$$U_0 = \frac{2mV_0}{\hbar^2 \alpha^2}, \quad \varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2 \alpha^2} = \frac{k^2}{\alpha^2}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (3.39)$$

とし、更に

$$\rho = u e^{-\alpha x/2}, \quad u = -2i\sqrt{U_0}, \quad \lambda = -2i\sqrt{\varepsilon} = -2i\frac{k}{\alpha} \quad (3.40)$$

する。 $u$  は  $V_0 > 0$  のとき純虚数、 $V_0 < 0$  のとき実数であり、 $\lambda$  は純虚数である。 $x > 0$  でのシュレーディンガー方程式は、(2.62) と同様に、ベッセルの微分方程式

$$\left( \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 - \frac{\lambda^2}{\rho^2} \right) \psi = 0, \quad \therefore \quad \psi(x) = C_+ J_\lambda(\rho) + C_- J_{-\lambda}(\rho)$$

になる。  $x \rightarrow \infty$  のとき  $\rho \rightarrow 0$  である。

$$J_\lambda(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{(\rho/2)^\lambda}{\Gamma(\lambda+1)}, \quad \rho^\lambda = u^\lambda (e^{-\alpha x/2})^{-2ik/\alpha} = u^\lambda e^{ikx}$$

より

$$\psi \xrightarrow{x \rightarrow \infty} C e^{ikx} + \frac{C_-}{\Gamma(-\lambda+1)} \left(\frac{u}{2}\right)^{-\lambda} e^{-ikx}, \quad C = \frac{C_+}{\Gamma(\lambda+1)} \left(\frac{u}{2}\right)^\lambda$$

になるから

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx}, & x < 0 \\ C_+ J_\lambda(\rho), & x > 0 \end{cases} \quad (3.41)$$

である。  $x = 0$  での接続条件より

$$A + B = C_+ J_\lambda(u), \quad ik(A - B) = C_+ \frac{d}{dx} J_\lambda(\rho) \Big|_{x=0} = -\frac{\alpha u}{2} C_+ J'_\lambda(u) = ik \frac{u}{\lambda} C_+ J'_\lambda(u)$$

したがって

$$\frac{C}{A} = \frac{(u/2)^\lambda}{\Gamma(\lambda+1)} \frac{2}{J_\lambda(u) + u J'_\lambda(u)/\lambda} = \frac{(u/2)^{\lambda-1}}{\Gamma(\lambda) J_{\lambda-1}(u)} = \frac{1}{F_{\lambda-1}(u)} \quad (3.42)$$

$$\frac{B}{A} = \frac{2\lambda}{u} \frac{J_\lambda(u)}{J_{\lambda-1}(u)} - 1 = \frac{J_{\lambda+1}(u)}{J_{\lambda-1}(u)} = \frac{F_\lambda(u)}{F_{\lambda-1}(u)} - 1 \quad (3.43)$$

ただし、ベッセル関数の定義式 (17.92) より

$$F_\lambda(u) = \frac{\Gamma(\lambda+1) J_\lambda(u)}{(u/2)^\lambda} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{U_0^n}{n! (\lambda+1) \cdots (\lambda+n)} \quad (3.44)$$

$F_{\lambda-1}(u) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \infty$ ,  $F_{\lambda-1}(u) \xrightarrow{\lambda \rightarrow \infty} 1$  になるから  $T = |C/A|^2 \xrightarrow{E \rightarrow 0} 0$ ,  $T \xrightarrow{E \rightarrow \infty} 1$  である。

$V_0 < 0$  のとき  $u = \pm 2\sqrt{-U_0}$  であるが,  $(-z)^{-\lambda} J_\lambda(-z) = (-z)^{-\lambda} e^{i\pi\lambda} J_\lambda(z) = z^{-\lambda} J_\lambda(z)$  より  $C/A$ ,  $B/A$  及び  $\psi(x > 0) = C \Gamma(\lambda+1) (u/2)^{-\lambda} J_\lambda(\rho)$  は  $u$  の符号に依存しない。

**問題 3.5** (3.44) より  $C/A$ ,  $B/A$  の複素共役は  $\lambda$  を  $\lambda^* = -\lambda$  に置き換えればよい。(17.59), (17.97), (17.99) より  $R + T = 1$  を示せ。

$\sqrt{|\lambda^2 - u^2|} = 2\sqrt{|\varepsilon - U_0|} \gg 1$  での近似式を求める。  $q = u/\lambda = \sqrt{U_0/\varepsilon}$  とすると

$$J_\lambda(u) = J_\lambda(\lambda q) \approx \frac{f_1(q)^\lambda}{\sqrt{2\pi\lambda} (1 - q^2)^{1/4}}, \quad f_1(q) = \frac{q e^{\sqrt{1-q^2}}}{1 + \sqrt{1-q^2}} = \exp\left(\sqrt{1-q^2} - \cosh^{-1}(1/q)\right)$$

になる。ただし、 $q$  が実数で  $q > 1$  の場合

$$J_\lambda(u) \approx \frac{\cos(\lambda f_2(q) - \pi/4)}{\sqrt{\pi\lambda/2} (q^2 - 1)^{1/4}}, \quad f_2(q) = \sqrt{q^2 - 1} - \cos^{-1}(1/q)$$

である (数学公式 III 156 ページ)。  $f'_1(q) = f_1(q) \sqrt{1-q^2}/q$ ,  $f'_2(q) = \sqrt{q^2-1}/q$  より

$$\frac{dJ_\lambda}{du} = \frac{1}{\lambda} \frac{dJ_\lambda}{dq} \approx \frac{\lambda}{u} J_\lambda(u) \times \begin{cases} \left( \frac{1}{2\lambda} \frac{q^2}{1-q^2} + \sqrt{1-q^2} \right) \\ \left( \frac{1}{2\lambda} \frac{q^2}{1-q^2} - \sqrt{q^2-1} \tan \eta \right), \quad \eta = \lambda f_2(q) - \pi/4 \end{cases}$$

になるが,  $\sqrt{|\lambda^2 - u^2|} = |\lambda|\sqrt{|1 - q^2|} \gg 1$  のとき  $1/\lambda$  に比例する第1項は無視してよいから

$$J_{\lambda-1}(u) = \frac{\lambda}{u} J_{\lambda}(u) + \frac{dJ_{\lambda}}{du} \approx \sqrt{\frac{\lambda}{2\pi}} \frac{\bar{j}_{\lambda}(q)}{u}$$

ただし

$$\bar{j}_{\lambda}(q) = \begin{cases} \frac{1 + \sqrt{1 - q^2}}{(1 - q^2)^{1/4}} f_1(q)^{\lambda}, & q < 1 \text{ または } \operatorname{Im} q \neq 0 \\ \frac{(1 + i\sqrt{q^2 - 1})e^{i\eta} + (1 - i\sqrt{q^2 - 1})e^{-i\eta}}{(q^2 - 1)^{1/4}}, & q > 1 \end{cases}$$

である。これから

$$T^{-1} = |A/C|^2 = \Gamma(\lambda)\Gamma(-\lambda)|(2/u)^{\lambda-1}J_{\lambda-1}(u)|^2 \approx -\frac{1}{4\lambda \sin \pi \lambda} \left| \sqrt{\frac{\lambda}{2}} \left(\frac{2}{u}\right)^{\lambda} \bar{j}_{\lambda}(q) \right|^2$$

になる。  $\lambda = -2i\sqrt{\varepsilon}$  より  $-\lambda \sin \pi \lambda = \sqrt{\varepsilon}(e^{2\pi\sqrt{\varepsilon}} - e^{-2\pi\sqrt{\varepsilon}})$  であり

$$\left| \sqrt{\frac{\lambda}{2}} \left(\frac{2}{u}\right)^{\lambda} \right| = \left| q^{-\lambda} \left(\frac{\lambda}{2}\right)^{-\lambda+1/2} \right| = \left| q^{-\lambda} \exp\left((- \lambda + 1/2) \log(\lambda/2)\right) \right| = \varepsilon^{1/4} e^{\pi\sqrt{\varepsilon}} |q^{-\lambda}|$$

になるから

$$T \approx \frac{4(1 - e^{-4\pi\sqrt{\varepsilon}})}{|q^{-\lambda} \bar{j}_{\lambda}(q)|^2} \approx \frac{4}{|q^{-\lambda} \bar{j}_{\lambda}(q)|^2}$$

である。

$U_0 > \varepsilon > 0$  の場合  $q = \sqrt{U_0/\varepsilon} > 1$  である。  $\lambda$  は純虚数であるから  $|q^{-\lambda}| = 1$  になる。

$$P = i\lambda f_2(q) = \frac{2k}{\alpha} \left( \sqrt{q^2 - 1} - \cos^{-1}(1/q) \right) = 2 \left( \sqrt{U_0 - \varepsilon} - \sqrt{\varepsilon} \cos^{-1} \sqrt{\varepsilon/U_0} \right) > 0 \quad (3.45)$$

とすると  $i\eta = P - i\pi/4$  であるが,  $\sqrt{|\lambda^2 - u^2|} = 2\sqrt{U_0 - \varepsilon} \gg 1$  のとき  $P \gg 1$  より

$$\bar{j}_{\lambda}(q) \approx \frac{1 + i\sqrt{q^2 - 1}}{(q^2 - 1)^{1/4}} e^{P - i\pi/4}, \quad \therefore \quad T \approx \frac{4\sqrt{q^2 - 1}}{q^2} e^{-2P} = \frac{4\sqrt{\varepsilon(U_0 - \varepsilon)}}{U_0} e^{-2P} \quad (3.46)$$

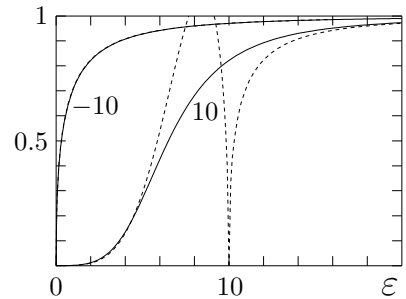
である。  $\varepsilon > U_0$  の場合  $q = \sqrt{U_0/\varepsilon}$  は  $0 < q < 1$  または純虚数 ( $U_0 < 0$  のとき) になり

$$T \approx \frac{4\sqrt{1 - q^2}}{(1 + \sqrt{1 - q^2})^2} \frac{1}{|(f_1(q)/q)^{\lambda}|^2}, \quad \frac{f_1(q)}{q} = \frac{e^{\sqrt{1 - q^2}}}{1 + \sqrt{1 - q^2}}$$

$q$  が純虚数でも  $1 - q^2 > 0$  のとき  $f_1(q)/q$  は実数であるから

$$T \approx \frac{4\sqrt{\varepsilon(\varepsilon - U_0)}}{(\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon - U_0})^2} \quad (3.47)$$

になる。右図に  $T = 1/|F_{\lambda-1}(u)|^2$  を実線で, (3.46), (3.47) を破線で示す。曲線に付けた値は  $U_0$  である。  $U_0 = -10$  では実線と破線は区別できない。  $2\sqrt{|U_0 - \varepsilon|} \gg 1$  のとき (3.46), (3.47) はよい近似になる。  $\varepsilon < U_0$  での  $T$  はトンネル効果を表す。



$\alpha \rightarrow 0$  のとき  $V(x)$  は階段ポテンシャル (3.9) になる。 (3.39) より  $E \neq V_0$  では  $|U_0 - \varepsilon| \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} \infty$  であるから (3.46), (3.47) は正確な結果になる。  $\varepsilon, P \rightarrow \infty, U_0/\varepsilon = V_0/E$  より

$$T(E < V_0) \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} 0, \quad T(E > V_0) \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} \frac{4\sqrt{E(E - V_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^2}$$



であり 59 ページの結果を再現する。 $\psi(x) = C_+ J_\lambda(\rho) \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} (3.12)$  である。

束縛状態のエネルギーは  $ik < 0$ ,  $A/B = 0$  で決まる。 $\lambda = -2ik/\alpha > 0$  のとき  $J_{\lambda-1}(u) = 0$  を満たす  $k$  である。これは (2.64) に他ならない。 $\mu > -1$  のとき  $J_\mu(x) = 0$  の解  $x$  は実数だけであるから,  $u = -2i\sqrt{U_0}$  が実数, つまり  $V_0 < 0$  のときに束縛状態が存在する。

**問題 3.6**  $V(x) = V_0 e^{-\alpha|x|}$ ,  $\alpha > 0$  の場合

$$\frac{C}{A} = \frac{\Gamma(1-\lambda)}{\Gamma(1+\lambda)} \left(\frac{u}{2}\right)^{2\lambda} \frac{1}{2} \left( \frac{J_{-\lambda}(u)}{J_\lambda(u)} - \frac{J'_{-\lambda}(u)}{J'_\lambda(u)} \right)$$

を示せ。 $u, \lambda$  は (3.40) である。また,  $2\sqrt{|U_0 - \varepsilon|} \gg 1$  のとき

$$T \approx \begin{cases} 1, & \varepsilon > U_0 \\ e^{-2P}, & U_0 > \varepsilon \end{cases}, \quad P = 4 \left( \sqrt{U_0 - \varepsilon} - \sqrt{\varepsilon} \cos^{-1} \sqrt{\varepsilon/U_0} \right) \quad (3.48)$$

を示せ (問題 9.4 参照)。(3.45) の  $P$  とは 2 倍違う。

### 3.6 近似的解法

$V(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$  の場合, 波動関数  $\psi(x)$  を  $V(x)$  についてベキ展開し近似的に求める。階段ポテンシャルに対しては, 直接的には適用できない。

入射波  $e^{ikx}$  の係数  $A$  は  $A = 1$  と取る。シュレーディンガー方程式

$$(E - H_0)\psi(x) = V(x)\psi(x), \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.49)$$

に対して, グリーン関数

$$(E - H_0)G(x) = \delta(x) \quad (3.50)$$

を考える。 $\psi_0(x)$  を  $(E - H_0)\psi_0(x) = 0$  の任意の解として

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \psi_{\text{sc}}(x), \quad \psi_{\text{sc}}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' G(x-x') V(x') \psi(x') \quad (3.51)$$

とすると

$$(E - H_0)\psi(x) = (E - H_0)\psi_{\text{sc}}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \underbrace{(E - H_0)G(x-x')}_{\delta(x-x')} V(x') \psi(x') = V(x)\psi(x)$$

であるから, (3.51) は (3.49) を満たす。 $\psi_0(x)$  を入射波  $\psi_0(x) = e^{ikx}$  にとれば,  $\psi_{\text{sc}}(x)$  は反射波と透過波を表すから  $\psi_{\text{sc}}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} C_\pm e^{\pm ikx}$  でなければならない。 $G(x)$  をフーリエ変換すれば求まるが, この境界条件を満たすには

$$G(x) = \frac{m}{i\hbar^2 k} e^{ik|x|}$$

とすればよい。 $d\theta(x)/dx = \delta(x)$  であるから

$$\frac{d^2 G}{dx^2} = \frac{m}{i\hbar^2 k} \frac{d^2}{dx^2} (\theta(x)e^{ikx} + \theta(-x)e^{-ikx}) = \frac{2m}{\hbar^2} \delta(x) - k^2 G(x)$$

になり (3.50) を満たす。したがって

$$\psi_{\text{sc}}(x) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{ik|x-x'|} V(x') \psi(x') = e^{ikx} \psi_+(x) + e^{-ikx} \psi_-(x)$$

ただし

$$\psi_+(x) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \int_{-\infty}^x dx' e^{-ikx'} V(x') \psi(x'), \quad \psi_-(x) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \int_x^{\infty} dx' e^{ikx'} V(x') \psi(x')$$

である。  $V(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$  の場合,  $\psi_{\pm}(\mp\infty) = 0$  より  $\psi_{\text{sc}}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} S_{\pm} e^{\pm ikx}$ , ただし

$$S_{\pm} = \psi_{\pm}(\pm\infty) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\mp ikx} V(x) \psi(x) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \langle \pm k | V | \psi \rangle \quad (3.52)$$

になり, 境界条件を満たす。  $|k\rangle$  は  $e^{ikx}$  を表す。

$$\frac{d\psi_{\text{sc}}}{dx} = ik \left( e^{ikx} \psi_+(x) - e^{-ikx} \psi_-(x) \right)$$

であるから, 確率流  $J(x)$  は

$$J(x) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left( (\psi_0^* + \psi_{\text{sc}}^*) \frac{d}{dx} (\psi_0 + \psi_{\text{sc}}) \right) = J_0 \left( |1 + \psi_+(x)|^2 - |\psi_-(x)|^2 \right), \quad J_0 = \frac{\hbar k}{m}$$

になる。  $\psi_{\pm}(\mp\infty) = 0$  より

$$J(\infty) = J_0 |1 + \psi_+(\infty)|^2 = J_0 |1 + S_+|^2, \quad J(-\infty) = J_0 (1 - |\psi_-(-\infty)|^2) = J_0 - J_0 |S_-|^2$$

$J(-\infty)$  の右辺第1項  $J_0$  は入射波の確率流である。したがって, 透過率  $T$  と反射率  $R$  は

$$T = \frac{|J(\infty)|}{J_0} = |1 + S_+|^2, \quad R = \frac{|J(-\infty) - J_0|}{J_0} = |S_-|^2 \quad (3.53)$$

で与えられる。  $J(x)$  は  $x$  に依存しないから  $J(\infty) = J(-\infty)$  であり  $R + T = 1$  を満たす。

$$(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad H_0|p\rangle = E_p|p\rangle, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad E_p = \frac{\hbar^2 p^2}{2m}$$

より  $H_0$  がエルミート演算子ならば

$$\langle p | V | \psi \rangle = \langle p | (E - H_0) | \psi \rangle = \langle p | (E - H_0) | \psi_{\text{sc}} \rangle = (E - E_p) \langle p | \psi_{\text{sc}} \rangle \quad (3.54)$$

である。  $p = \pm k$  とすると  $\langle \pm k | V | \psi \rangle = 0$ , つまり  $S_{\pm} = 0$  になり散乱は起こらない?  $\langle \pm k | \psi_{\text{sc}} \rangle$  が有限ならばそうなるが, 一般に  $p \rightarrow \pm k$  のとき  $\langle p | \psi_{\text{sc}} \rangle$  は  $1/(k \mp p)$  で発散し  $\langle \pm k | V | \psi \rangle \neq 0$  である (270 ページ参照)。なお  $\langle p | (E - H_0) | \psi_0 \rangle = 2\pi(E - E_p) \delta(p - k) = 0$  である。

(3.51) は (3.49) の書き換えであるが, 散乱の境界条件を満たす  $\psi(x)$  を  $V(x)$  でベキ展開するのに都合がよい。  $\psi_{\text{sc}}$  の定義式 (3.51) に  $\psi(x') = \psi_0(x') + \psi_{\text{sc}}(x')$  を代入すると

$$\psi_{\text{sc}}(x) = \psi_1(x) + \int_{-\infty}^{\infty} dx' G(x - x') V(x') \psi_{\text{sc}}(x'), \quad \psi_1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' G(x - x') V(x') \psi_0(x')$$

この操作を繰り返せば

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \psi_1(x) + \psi_2(x) + \cdots \quad (3.55)$$

ただし  $n = 1, 2, \dots$  のとき

$$\psi_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' G(x - x') V(x') \psi_{n-1}(x') = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots dx_n \prod_{k=1}^n G(x_{k-1} - x_k) V(x_k) \psi_0(x_n)$$

である ( $x_0 = x$ )。被積分関数は既知であり積分を行えば  $\psi_n(x)$  は求まる。

$$\psi_n(x) = e^{ikx} \psi_{n+}(x) + e^{-ikx} \psi_{n-}(x) \quad (3.56)$$

とすると

$$S_{\pm} = S_{1\pm} + S_{2\pm} + \cdots, \quad S_{n\pm} = \psi_{n\pm}(\pm\infty) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \langle \pm k | V | \psi_{n-1} \rangle$$

である。 $\psi_n$  は  $V$  の  $n$  次になるから、 $V$  の効果が小さい場合、例えば  $\psi_2$  以上を無視すると

$$R \approx |S_{1-}|^2, \quad S_{1-} = \frac{m}{i\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{2ikx} V(x)$$

になる。 $V(x)$  をフーリエ変換すると  $S_{1-}$  が求まる。これは 271 ページのボルン近似である。

**例題 1**  $V(x) = \frac{\hbar^2 v}{m} \delta(x)$  の場合、(3.51) から解析解は

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{v}{ik} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{ik|x-x'|} \delta(x') \psi(x') = e^{ikx} + \frac{v}{ik} \psi(0) e^{ik|x|}$$

$x=0$  とすると  $\psi(0) = 1 + v\psi(0)/ik$  になるから

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + B e^{-ikx}, & x < 0 \\ C e^{ikx}, & x > 0 \end{cases}, \quad B = \frac{v}{ik - v}, \quad C = 1 + B = \frac{ik}{ik - v}$$

であり (3.6) に一致する。 $R = |B|^2$ ,  $T = |C|^2$  である。(3.52) より

$$S_{\pm} = \frac{m}{i\hbar^2 k} \langle \pm k | V | \psi \rangle = \frac{v}{ik} \psi(0) = B$$

になるから (3.53) は同じ結果を与える。 $S_+ = S_-$  はデルタ型ポテンシャルの特殊性である。

$$\psi_n(x) = \frac{v}{ik} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{ik|x-x'|} \delta(x') \psi_{n-1}(x') = \frac{v}{ik} \psi_{n-1}(0) e^{ik|x|} = \left(\frac{v}{ik}\right)^n e^{ik|x|}$$

であるから、 $|v/k| < 1$  のとき (3.55) は

$$\psi(x) = e^{ikx} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{v}{ik}\right)^n e^{ik|x|} = e^{ikx} + \frac{v}{ik - v} e^{ik|x|}$$

になり解析解に収束する。(3.56) より  $\psi_{n\pm}(x) = (v/ik)^n = S_{n\pm}$  である。 $|v/k| \ll 1$  ならば  $R \approx |S_{1-}|^2 = (v/k)^2$  と近似でき、(3.55) で高次の  $\psi_n$  を無視する近似は有効である。一方、 $|v/k| \geq 1$  のとき (3.55) は収束せず無意味な展開である。

$e^{ik|x|-\varepsilon|x|}$ ,  $\varepsilon \rightarrow +0$  とすると、 $H_0$  は散乱状態に対してもエルミート演算子である。

$$\langle p | \psi_{sc} \rangle = B \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx+ik|x|-\varepsilon|x|} = B \frac{2ik}{k^2 - p^2 + i\varepsilon}$$

になり  $p \rightarrow \pm k$  で  $\langle p | \psi_{sc} \rangle$  は発散するが (3.54) は成り立つ。

**問題 3.7** 箱型ポテンシャル (3.16) の場合、解析解  $\psi(x)$  は (3.17), (3.20) ~ (3.23) で与えられる。ただし  $A = 1$  とする。(3.52) より  $S_+ = C - 1$ ,  $S_- = B$  を示せ。

**例題 2** (3.38) の場合

$$q = kx, \quad \beta = \frac{\alpha}{k}, \quad v = \frac{mV_0}{\hbar^2 k^2} = \frac{V_0}{2E}$$

とすると

$$\psi_n(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' G(x-x') V(x') \psi_{n-1}(x') = -iv \int_0^{\infty} dq' e^{i|q-q'|-\beta q'} \psi_{n-1}(q'), \quad \psi_0(q) = e^{iq}$$

より

$$\begin{aligned}\psi_1(q) &= -iv \int_0^\infty dq' e^{i|q-q'|-\beta q'+iq'} = e^{-iq}\psi_{1-}(q) + e^{iq}\psi_{1+}(q) \\ \psi_{1+}(q) &= \theta(q) \frac{v}{i\beta} \left(1 - \frac{2}{2+i\beta} e^{-\beta q}\right), \quad \psi_{1-}(q) = \theta(-q) \frac{v}{2+i\beta}\end{aligned}\tag{3.57}$$

である。2次は

$$\begin{aligned}\psi_2(x) &= -\frac{v^2}{\beta} \int_0^\infty dq' e^{i|q-q'|-\beta q'+iq'} \left(1 - \frac{2}{2+i\beta} e^{-\beta q'}\right) = e^{-iq}\psi_{2-}(q) + e^{iq}\psi_{2+}(q) \\ \psi_{2+}(q) &= -\frac{\theta(q)v^2}{\beta^2(2+i\beta)} \left(1 + i\beta - 2e^{-\beta q} + \frac{e^{-2\beta q}}{1+i\beta}\right), \quad \psi_{2-}(q) = \frac{\theta(-q)v^2}{(2+i\beta)(1+i\beta)}\end{aligned}\tag{3.58}$$

になる。したがって

$$S_{1-} = \psi_{1-}(-\infty) = \frac{v}{2+i\beta}, \quad S_{2-} = \psi_{2-}(-\infty) = \frac{v^2}{(2+i\beta)(1+i\beta)}$$

である。 $V_0$  の  $n$  次まで考慮した  $R$  を  $R_n$  とすると

$$R_2 = |S_{1-}|^2 = \frac{v^2}{4+\beta^2}, \quad R_3 = |S_{1-}|^2 + 2\operatorname{Re}(S_{1-}^* S_{2-}) = R_2 \left(1 + \frac{2v}{1+\beta^2}\right)\tag{3.59}$$

になる。(3.39) の  $U_0, \varepsilon$  で表すと  $\beta = 1/\sqrt{\varepsilon}$ ,  $v = U_0/2\varepsilon$  になるから

$$R_2 = \frac{U_0^2}{4\varepsilon(1+4\varepsilon)}, \quad R_3 = R_2 \left(1 + \frac{U_0}{1+\varepsilon}\right)$$

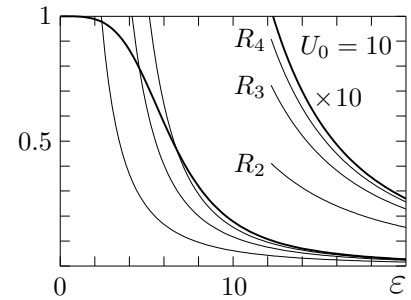
である。ベッセル関数の定義式 (17.92) より解析解 (3.43) は ( $\lambda = -2i\sqrt{\varepsilon}$ ,  $u = -2i\sqrt{U_0}$ )

$$B = \frac{J_{\lambda+1}(u)}{J_{\lambda-1}(u)} = -\frac{U_0}{\lambda(\lambda+1)} \left(1 - \frac{2U_0}{\lambda(\lambda+2)} + \cdots\right), \quad R = |B|^2 = \frac{U_0^2}{4\varepsilon(1+4\varepsilon)} \left(1 + \frac{U_0}{1+\varepsilon} + \cdots\right)$$

になるから、 $R_2, R_3$  は  $R$  の  $V_0$  に関するべき展開と一致する。

右図に  $R$  を太い曲線で、 $R_n$  を細い曲線で示す。 $|U_0/\varepsilon| \gg 1$  では  $R \approx 1$  になりほとんど反射するが、 $R_n$  は 1 より大きくなり物理的に無意味である。デルタ型ポテンシャルと同様に、 $R_4, R_5, \dots$  にしても状況は変わらない。一方、 $|U_0/\varepsilon| \ll 1$  では、高次の  $R_n$  になる程よい近似である。

$\alpha \rightarrow 0$  とすると  $V(x)$  は階段ポテンシャルになる。(3.59) より  $R_3 \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} v^2(1+2v)/4$  である。解析解 (3.14) に  $k' = k\sqrt{1-2v}$  を代入すると  $R = R_3 + O(v^4)$  である。



**問題 3.8**  $V(x)$  が (3.38) のとき、 $S_+ + 1, S_-$  がそれぞれ (3.42), (3.43) に一致することを確かめよ。解析的波動関数  $\psi(x)$  は (3.41) である。

### 3.7 波束の散乱

時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \psi(x,t)\tag{3.60}$$

を解き、波束の時間発展を追う。この方法は解析的扱いが困難になるが、古典力学との対応が分かりやすい。 $x < 0$  では  $V(x) = 0$  とする。初期波動関数  $\psi(x, 0)$  として波束 (1.47)

$$\psi(x, 0) = f(x)e^{ik_0x}, \quad f(x) = \frac{1}{(2\pi\alpha)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\alpha}\right), \quad \alpha > 0 \quad (3.61)$$

を考える。 $x_0 < 0$  は原点から十分離れており  $x > 0$  のとき  $\psi(x, 0) \approx 0$  とする。波束の中心は速度  $\hbar k_0/m > 0$  で移動し、ポテンシャルに触れると散乱が起こる。

平面波の重ね合わせ

$$A(e^{ikx} + b(k)e^{-ikx})e^{-i\omega(k)t}, \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (3.62)$$

は  $x < 0$  での (3.60) の解である。 $k$  は負でもよい。 $x > 0$  での解との連続性から  $b(k)$  は  $k$  の関数として与えられている。例えば、階段ポテンシャル (3.9) の場合 (3.13) より

$$b(k) = \frac{k-K}{k+K}, \quad K = \sqrt{k^2 - 2mV_0/\hbar^2} \quad (3.63)$$

である。 $K$  は実数とは限らない。(3.62) は任意の  $A$  に対して (3.60) の解であるから

$$\varphi_i(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k)e^{ikx-i\omega(k)t}, \quad \varphi_r(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k)b(k)e^{-ikx-i\omega(k)t} \quad (3.64)$$

とするとき  $\varphi(x, t) = \varphi_i(x, t) + \varphi_r(x, t)$  も  $x < 0$  では (3.60) の解になる。 $\varphi_i(x, t)$  が入射波束、 $\varphi_r(x, t)$  が反射波束を表す。

$$A(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x, 0)e^{-ikx} = \left(\frac{\alpha}{2\pi^3}\right)^{1/4} \exp\left(-\alpha(k-k_0)^2 - ix_0(k-k_0)\right)$$

とする。 $\varphi_i(x, 0) = \psi(x, 0)$  である。 $\varphi_r(x, 0)$  は

$$\varphi_r(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k)e^{-ik(x+x_0)}, \quad g(k) = \left(\frac{\alpha}{2\pi^3}\right)^{1/4} e^{-\alpha(k-k_0)^2 + ix_0k_0} b(k)$$

と表せる。この積分に寄与する  $k$  の領域は  $|k-k_0| < c/\sqrt{\alpha}$ ,  $c \sim 3$  である。この領域の幅  $2c/\sqrt{\alpha}$  に比べて  $e^{-ik(x+x_0)}$  の波長  $2\pi/|x+x_0|$  が非常に小さい、つまり  $|x+x_0| \gg \sqrt{\alpha}$  のとき、 $e^{-ik(x+x_0)}$  の振動に比べて  $g(k)$  は緩やかに変化するから  $\varphi_r(x, 0) \approx 0$  になる。 $x_0 < 0$  が原点から十分離れている場合、 $x < 0$  では  $|x+x_0| \gg \sqrt{\alpha}$  より  $\varphi_r(x, 0) \approx 0$  になり  $\varphi(x, 0) \approx \psi(x, 0)$  である。したがって、以下の数値計算例でも示すように、 $x < 0$  では任意の時刻  $t$  で  $\psi(x, t) = \varphi(x, t)$  としてよい。

$\varphi_i(x, t)$  は (1.63) になるが、 $A(k)$  が  $k = k_0$  で鋭いピークをもつ場合、 $\varphi_i(x, t)$  と  $\varphi_r(x, t)$  を近似的に求める。積分には  $k = k_0$  近傍のみが寄与するから、 $A(k)$  以外の量を  $k = k_0$  のまわりでテイラー展開し  $k - k_0$  の2次以上を無視すると

$$\omega(k) \approx \omega_0 + (k-k_0)v_0 = kv_0 - \omega_0, \quad \omega_0 = \omega(k_0), \quad v_0 = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$$

である。 $kx - \omega(k)t \approx k(x - v_0t) + \omega_0t$  より

$$\varphi_i(x, t) \approx e^{i\omega_0t} \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k)e^{ik(x-v_0t)} = e^{i\omega_0t} \psi_0(x - v_0t), \quad \psi_0(x) = \psi(x, 0) \quad (3.65)$$

になる。 $b(k)$  を極形式で表して  $b(k) = \sqrt{R(k)}e^{i\theta(k)}$  とおく。 $k > 0$  のとき  $R$  は反射率である。

$$\theta(k) \approx \theta_0 + (k-k_0)\ell, \quad \theta_0 = \theta(k_0), \quad \ell = \left.\frac{d\theta}{dk}\right|_{k=k_0}$$

とすると

$$\begin{aligned}\varphi_r(x, t) &\approx e^{i(\theta_0 - \ell k_0 + \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{\infty} dk \sqrt{R(k)} A(k) e^{ik(-x - v_0 t + \ell)} \\ &\approx e^{i(\theta_0 - \ell k_0 + \omega_0 t)} \sqrt{R_0} \psi_0(-x - v_0 t + \ell)\end{aligned}\quad (3.66)$$

である。 $\sqrt{R(k)}$  の  $k$  依存性は  $A(k)$  に比べて緩やかであるとし  $R(k) \approx R_0 = R(k_0)$  とした。 $x < 0$  のとき  $\psi_0(-x + \ell) \approx 0$  であるから  $\varphi_r(x, 0) \approx 0$  になる。

$\psi_0(x)$  は  $x = x_0 < 0$  を中心とした波束であるから、入射波束 (3.65) の中心は  $x = x_0 + v_0 t$  であり古典力学と同じ運動をする。一方、反射波束 (3.66) の中心  $x = -x_0 - v_0 t + \ell$  は、古典力学での反射粒子の位置  $x = -x_0 - v_0 t$  とは  $\ell$  だけ異なる。階段ポテンシャルで  $k^2 < 2mV_0/\hbar^2$  のとき、(3.63) より  $\kappa = \sqrt{2mV_0/\hbar^2 - k^2}$  とすると

$$\theta = -2 \tan^{-1} \frac{\kappa}{k}, \quad \therefore \quad \ell = \left. \frac{d\theta}{dk} \right|_{k=k_0} = \frac{2}{\kappa_0}, \quad \kappa_0 = \sqrt{2mV_0/\hbar^2 - k_0^2} \quad (3.67)$$

である。 $x > 0$  での波動関数 (3.15)  $\propto e^{-\kappa_0 x}$  は  $1/\kappa_0$  程度まで  $x > 0$  の領域に侵入するから、量子力学的には  $x \sim 1/\kappa_0$  で反射され  $\ell = 2/\kappa_0$  のズレが生じると解釈できる。ただし、 $\kappa_0 \approx 0$  の場合、上の近似は適用できない。

$x < 0$  での確率密度  $|\psi|^2 = |\varphi_i + \varphi_r|^2$  には入射波束と反射波束の干渉項

$$2\text{Re}(\varphi_i^* \varphi_r) \approx 2\sqrt{R_0} f(x - v_0 t) f(-x - v_0 t + \ell) \cos(2k_0 x - \theta_0)$$

が現れる。 $\cos(2k_0 x - \theta_0)$  の波長  $\pi/k_0$  が (3.61) の  $f(x)$  の広がり比べて十分小さければ、 $\varphi_i$  と  $\varphi_r$  が重なる領域では  $|\psi|^2$  は波長  $\pi/k_0$  で振動する。

(3.60) は次節の方法で数値的には正確に解ける。階段ポテンシャルの場合、数値計算で求めた  $|\psi(x, t)|^2$  を右図に太い実線で示す。細い実線は (3.64) を数値積分した  $|\varphi|^2 = |\varphi_i + \varphi_r|^2$ 、破線は  $|\varphi_i|^2$  または  $|\varphi_r|^2$  を表す。ただし  $b(k)$  は (3.63) である。 $x < 0$  のとき  $\psi$  と  $\varphi$  は図では区別できない。単位系 (3.70) と初期波動関数 (3.77) を用いると、●で示した古典力学的粒子の位置は

$$q_{\text{cl}}(\tau) = -|q_0 + 2p_0\tau|, \quad q_0 = -4, \quad p_0 = 5$$

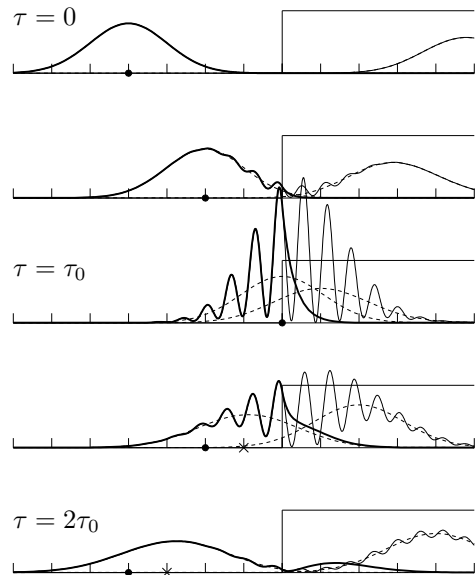
時刻  $\tau_0 = -q_0/(2p_0)$  で  $q_{\text{cl}} = 0$  になる。入射波束がポテンシャル障壁に触れる以前では、波束の中心は古典力学と同じ運動をする。一方、反射波束の中心は古典力学からずれる。× は近似的波束 (3.66) の中心

$$q(\tau) = q_{\text{cl}}(\tau) + \frac{2}{\sqrt{U_0 - p_0^2}}$$

を表す。入射波と反射波が重なるポテンシャルの壁付近では、入射側の  $|\psi(x, t)|^2$  に波長  $\approx \pi/p_0 \approx 0.6$  の干渉パターンが現れる。なお

$$\varphi_t(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \frac{2k}{k + K} e^{iKx - i\omega(k)t}, \quad K = \sqrt{k^2 - 2mV_0/\hbar^2}$$

とすると、 $x > 0$  では  $\psi = \varphi_t$  になる。



問題 3.9  $\psi(x, 0) = \varphi(x)$  である (3.60) の解  $\psi(x, t)$  は

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x) \right) G(x, x', t) = 0, \quad G(x, x', 0) = \delta(x - x') \quad (3.68)$$

とすると

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' G(x, x', t) \varphi(x') \quad (3.69)$$

で与えられる。 $V(x) = mgx$  の場合  $G(x, x', t)$  を求める。(2.39) の  $\lambda = \left( \frac{\hbar^2}{2m^2g} \right)^{1/3}$  を用いて (3.70) 及び  $q' = x'/\lambda$  の変換をする。(3.71) で  $U(q) = q$  になる。

1. フーリエ変換して

$$G(q, q', \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} dk dk' d\omega e^{ikq - ik'q' - i\omega\tau} g(k, k', \omega)$$

とする。(3.68) より

$$\frac{\partial g}{\partial k} = i(k^2 - \omega)g(k, k', \omega), \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\omega g(k, k', \omega) = \frac{1}{2\pi\lambda} \delta(k - k')$$

を示せ ((18.25) の第 2 式参照)。上式から

$$g(k, k', \omega) = \frac{1}{(2\pi)^2 \lambda} \exp\left(-i\omega(k - k') + i\frac{k^3 - k'^3}{3}\right)$$

$$G(q, q', \tau) = \frac{1}{\sqrt{4i\pi\lambda^2\tau}} \exp\left(\frac{i(q - q')^2}{4\tau} - \frac{i\tau(q + q')}{2} - \frac{i\tau^3}{12}\right)$$

を求めよ。 $g = 0$  のとき  $G(x, x', t)$  は自由粒子のグリーン関数 (1.68) になる。

2. 初期状態が

$$\varphi(x) = \frac{1}{(\pi b^2)^{1/4}} \exp\left(ik_0x - \frac{(x - x_0)^2}{2b^2}\right), \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi(x)|^2 = 1$$

のとき (3.69) より

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi D(t)}} \exp\left(-\frac{(x - x_{cl}(t))^2}{D(t)}\right), \quad x_{cl}(t) = x_0 + v_0 t - \frac{gt^2}{2}$$

を示せ。ただし、 $D(t)$  は自由粒子の波束の広がり (1.64) であり、 $x_{cl}(t)$  は初速  $v_0 = \hbar k_0/m$  の古典力学的粒子の位置である。

### 3.8 時間に依存するシュレーディンガー方程式の数値解法

時刻  $t = 0$  での波動関数  $\psi(x, 0)$  が与えられたとき、時間に依存するシュレーディンガー方程式を数値的に解き  $t = t_{\max}$  までの  $\psi(x, t)$  を求める (クーニン, 計算機物理学 (共立出版) 7.5 章)。  $x$  の領域は  $x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$  とし、計算の都合上  $\psi(x_{\min}, t) = \psi(x_{\max}, t) = 0$  の境界条件を課す。あるいは  $x_{\min}, x_{\max}$  を  $\psi(x, t)$  が実質的に 0 になる領域にとる。系の大きさを表す適当な長さを  $\lambda$  としたとき無次元の変数

$$q = \frac{x}{\lambda}, \quad \tau = \frac{\hbar}{2m\lambda^2} t \quad (3.70)$$

を用いると (3.60) は

$$i \frac{\partial}{\partial \tau} \psi(q, \tau) = H \psi(q, \tau), \quad H = -\frac{\partial^2}{\partial q^2} + U(q), \quad U(q) = \frac{2m\lambda^2}{\hbar^2} V(x) \quad (3.71)$$

になる。以下では、この方程式を扱う。  $\hbar = 1, 2m = 1$  という単位系を採用するといってもよい。

時間を等間隔  $\Delta\tau = \tau_{\max}/N_\tau$  に離散化し、時刻  $\tau = \tau_n = n\Delta\tau$ , ( $n = 0, 1, \dots, N_\tau$ ) での波動関数を  $\psi^{(n)}(q) = \psi(q, \tau_n)$  で表す。 $\psi^{(n-1)}$  が分かっているれば、(1.53) より  $\tau = \tau_n$  での波動関数は

$$\psi^{(n)}(q) = \exp(-iH\Delta\tau) \psi^{(n-1)}(q)$$

になる。 $\Delta\tau$  が小さいとき最も簡単な近似は  $\exp(-iH\Delta\tau) \approx 1 - iH\Delta\tau$  である。初期波動関数を  $H$  の固有関数  $\varphi_\alpha(q)$  で展開し

$$\psi^{(0)}(q) = \sum_{\alpha} c_{\alpha}(0) \varphi_{\alpha}(q), \quad H\varphi_{\alpha}(q) = E_{\alpha} \varphi_{\alpha}(q)$$

とする。 $(1 - iH\Delta\tau)^n \varphi_{\alpha}(q) = (1 - iE_{\alpha}\Delta\tau)^n \varphi_{\alpha}(q)$  であるから

$$\psi^{(n)}(q) \approx (1 - iH\Delta\tau) \psi^{(n-1)}(q) \approx \dots \approx (1 - iH\Delta\tau)^n \psi^{(0)}(q) = \sum_{\alpha} c_{\alpha}(0) (1 - iE_{\alpha}\Delta\tau)^n \varphi_{\alpha}(q)$$

になる。正確な係数  $c_{\alpha}(t) = c_{\alpha}(0) e^{-iE_{\alpha}t}$  の絶対値は時間的に一定であるが、上式では

$$|c_{\alpha}(0) (1 - iE_{\alpha}\Delta\tau)^n| = |c_{\alpha}(0)| \left(1 + (E_{\alpha}\Delta\tau)^2\right)^{n/2}, \quad 1 + (E_{\alpha}\Delta\tau)^2 > 1$$

になり、 $n$  とともに急激に増加する。時間的増幅を抑えるためには  $\Delta\tau$  を非常に小さくする必要があり、この近似は数値計算には向かない。時間的増幅を回避する1つの近似法は

$$\exp(-iH\Delta\tau) \approx \frac{1 - iH\Delta\tau/2}{1 + iH\Delta\tau/2} = \frac{2}{1 + iH\Delta\tau/2} - 1 \quad (3.72)$$

である。これは  $\Delta\tau$  の2次まで  $\exp(-iH\Delta\tau)$  と一致し、近似  $1 - iH\Delta\tau$  よりも精度がよい。更に

$$\psi^{(n)}(q) \approx \left(\frac{1 - iH\Delta\tau/2}{1 + iH\Delta\tau/2}\right)^n \psi^{(0)}(q) = \sum_{\alpha} c_{\alpha}(0) \left(\frac{1 - iE_{\alpha}\Delta\tau/2}{1 + iE_{\alpha}\Delta\tau/2}\right)^n \varphi_{\alpha}(q), \quad \left|\frac{1 - iE_{\alpha}\Delta\tau/2}{1 + iE_{\alpha}\Delta\tau/2}\right| = 1$$

であるから係数の絶対値は時間的に一定であり、正確な時間発展の係数と同じ性質を満たす。

(3.72) を数値計算用に書き直す。固有関数で展開することはしない。

$$\psi^{(n)}(q) \approx \left(\frac{2}{1 + iH\Delta\tau/2} - 1\right) \psi^{(n-1)}(q) = \phi(q) - \psi^{(n-1)}(q)$$

ただし

$$\phi(q) = \frac{2}{1 + iH\Delta\tau/2} \psi^{(n-1)}(q) \quad \text{つまり} \quad \left(1 + \frac{i\Delta\tau}{2} H\right) \phi(q) = 2\psi^{(n-1)}(q) \quad (3.73)$$

である。空間も  $\Delta q = (q_{\max} - q_{\min})/N_q$  の等間隔に分割し

$$q = q_k = q_{\min} + k\Delta q, \quad k = 0, 1, \dots, N_q$$

における関数を下付きの添字  $k$  で表す。2階微分を (2.86) で近似すると

$$H\phi_k = -\phi_k'' + U_k\phi_k \approx -\frac{\phi_{k+1} + \phi_{k-1} - 2\phi_k}{(\Delta q)^2} + U_k\phi_k$$



になる。これを (3.73) に代入すると  $k = 1, 2, \dots, N_q - 1$  のとき

$$\phi_{k+1} - (a_k - ib)\phi_k + \phi_{k-1} = 2ib\psi_k^{(n-1)}, \quad a_k = 2 + (\Delta q)^2 U_k, \quad b = \frac{2(\Delta q)^2}{\Delta \tau} \quad (3.74)$$

である。 $\phi_0, \phi_1$  を与えれば  $\phi_k$  が求まるが、境界条件  $\psi(q_{\min}, \tau) = \psi(q_{\max}, \tau) = 0$  を満たすために、 $\phi_0 = \phi_{N_x} = 0$  である  $\phi_k$  を求めたい。そこで

$$\phi_{k+1} = C_k \phi_k + D_k \quad (3.75)$$

として (3.74) に代入すると

$$\phi_k = \frac{1}{a_k - ib - C_k} \phi_{k-1} + \frac{D_k - 2ib\psi_k^{(n-1)}}{a_k - ib - C_k}$$

になる。これと  $\phi_k = C_{k-1} \phi_{k-1} + D_{k-1}$  から漸化式

$$C_{k-1} = \frac{1}{a_k - ib - C_k}, \quad D_{k-1} = \frac{D_k - 2ib\psi_k^{(n-1)}}{a_k - ib - C_k} = C_{k-1} (D_k - 2ib\psi_k^{(n-1)}) \quad (3.76)$$

を得る。

以上から、 $\tau = \tau_{n-1}$  での  $\psi^{(n-1)}$  から  $\tau = \tau_n$  での  $\psi^{(n)}$  を次のようにして決定できる。

1.  $\phi_{N_q} = C_{N_q-1} \phi_{N_q-1} + D_{N_q-1} = 0$  であるから  $C_{N_q-1} = D_{N_q-1} = 0$  とする。これを初期値として漸化式 (3.76) を  $k = N_q - 1$  から  $k = 1$  まで  $k$  が減少する方向に適用すると、 $\psi_k^{(n-1)}$  は分かっているから  $C_k, D_k$  が求まる。
2.  $C_k, D_k$  が分かれば、境界条件から  $\phi_0 = 0$  として (3.75) を  $k = 0$  から  $k = N_q - 1$  まで、今度は  $k$  が増加する向きに用いて  $\phi_k$  を求める。 $\psi^{(n)}$  は  $\psi_k^{(n)} = \phi_k - \psi_k^{(n-1)}$  で与えられる。

C 言語のプログラム例を示す。各種変数宣言などは省略。実数は double とする。

- 変数名を  $q_{\min} = q_{\min}, q_{\max} = q_{\max}, dq = \Delta q, dt = \Delta \tau, nq = N_q, nt = N_\tau$  とした。 $a_k$  など  $k$  に依存する変数は配列を用いる。
- 複素数は `#include <complex.h>` とすると扱える。`creal(z), cimag(z), cabs(z), conj(z)` は実部, 虚部, 絶対値, 複素共役である。複素関数として `cexp, csin, ccos, csqrt` などが使える。虚数単位は `I` であり、例えば、`cexp(I*z)` と `ccos(z)+I*csin(z)` は同じ結果になる。以下では `zpsi, zphi, zc, zd` は double complex の配列である。
- 最初に初期波動関数を計算する。 $C_k$  と  $a_k$  は時間に依存しないから、一度求めればよい。 $a_k$  を求めるとき  $U(q)$  の具体形を直接書かず、 $U(q)$  を求める関数 (ここでは `pot(q)`) を用意する。ポテンシャルの変更は関数 `pot` の部分を書き換えればよく `main` を変更する必要はない。
- 時間ステップごとに繰り返して  $\psi_k^{(n-1)}$  から次の波動関数  $\psi_k^{(n)}$  を求める。まず、 $C_k$  と同様に  $D_k$  を求める。 $D_k$  は  $\psi_k^{(n-1)}$  に依存するから時間ごとに求める必要がある。次に、 $\phi_0 = 0$  として (3.75) から  $\phi_k$  を決める。

---

```
int main()
{
    for( k=0; k<=nq; k++ ){
        qq[k] = qmin+k*dq;          /* q_k */
        aa[k] = 2 + dq*dq*pot( qq[k] ); /* a_k */
        zpsi[k] = psi(qk,0);        /* 初期波動関数 */
    }
}
```

```

        printf("%f %f\n", qq[k], zpsi[k]*conj(zpsi[k]));
    }
    b = 2*dq*dq/dt;
    zc[nq-1] = 0;          /* C_k */
    for( k=nq-1; k>=1; k-- ){
        zc[k-1] = 1/( aa[k]-I*b-zc[k] );
    }
    for( n=1; n<=nt; n++ ){
        zd[nq-1] = 0;      /* D_k */
        for( k=nq-1; k>=1; k-- ){
            zd[k-1] = zc[k-1]*( zd[k]-2*I*b*zpsi[k] );
        }
        zphi[0] = 0;        /* ϕ_k */
        for( k=0; k<=nq-1; k++ ){
            zphi[k+1] = zc[k]*zphi[k] + zd[k];
        }
        for( k=0; k<=nq; k++ ){          /* ψ(n-1) → ψ(n) */
            zpsi[k] = zphi[k] - zpsi[k];
            /* 適当な n のとき */
            printf("%f %f\n", qq[k], zpsi[k]*conj(zpsi[k]));
        }
    }
    return 0;
}

double pot( double q )
{
    return 0;    /* 自由粒子の場合 */
}

```

数値計算で求めた  $|\psi(q, \tau)|^2$  を  $q$  の関数として図にする必要がある。最も簡単に行うには、適当な時間間隔で  $q$  と  $|\psi(q, \tau)|^2$  の数値をファイルに出力して、例えば、GNUPLOT に読み込む。

73 ページの図は、階段型ポテンシャル  $U(q) = U_0\theta(q)$  の場合、 $\psi(q, 0)$  として (3.61)

$$\psi(q, 0) = \frac{1}{(2\pi\beta)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(q-q_0)^2}{4\beta} + ip_0q\right), \quad p_0 = \lambda k_0, \quad \beta = \alpha/\lambda^2 \quad (3.77)$$

を用いた結果である。パラメータの値は

$$\begin{aligned} q_{\min} &= -10, & q_{\max} &= 10, & \tau_{\max} &= 0.8, & N_\tau &= 1000, & N_q &= 1500 \\ q_0 &= -4, & \beta &= 1, & p_0 &= 5, & U_0 &= 29 \end{aligned} \quad (3.78)$$

とした。

**問題 3.10** 上のプログラムを完成させよ。

1. プログラムの正当性、数値結果の収束性を調べるため、 $U(q) = 0$  のとき解析解 (1.63)

$$\psi(q, \tau) = \sqrt{\frac{\sqrt{\beta/2\pi}}{\beta + i\tau}} \exp\left(ip_0q - ip_0^2\tau - \frac{(q - q_0 - 2p_0\tau)^2}{4(\beta + i\tau)}\right)$$

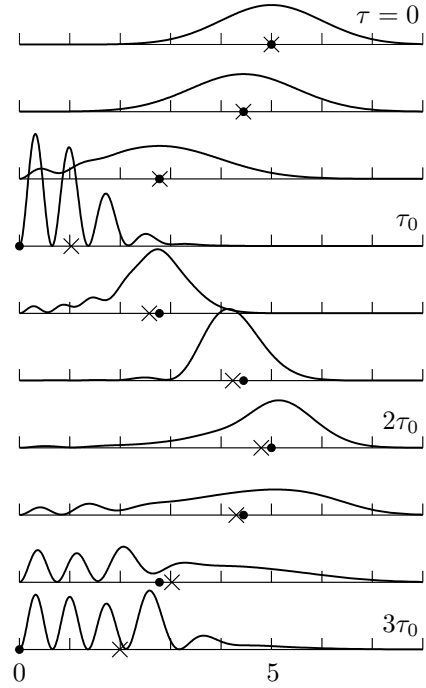
と比較せよ。

2. 階段型ポテンシャルのとき 73 ページの図と比較せよ。また, 箱 (井戸) 型ポテンシャルのとき, シッフ, 量子力学 (上) の 121~124 ページの図と比較せよ。

3. 89 ページの問題 4.7

**問題 3.11**  $q_{\min} = 0$  で  $U(q) = U_0 q$  のとき,  $\psi(q, \tau)$  を求め古典力学と比較せよ (問題 3.9 参照)。古典力学的には, 粒子は  $F = -U_0$  の力を受け自由落下し  $q = 0$  で壁と弾性衝突する運動である。古典力学での質点の位置を  $q_{\text{cl}}(\tau)$  とすると, 運動方程式は  $d^2 q_{\text{cl}}/d\tau^2 = -2U_0$  になる。 $q_{\text{cl}}(0) = q_0$ , 初速 0 の場合, 最初に  $q_{\text{cl}} = 0$  になる時刻は  $\tau = \tau_0 = \sqrt{q_0/U_0}$  である。

数値計算例を右図に示す。初期状態は (3.77) で  $p_0 = 0$ ,  $q_0 = 5$ ,  $\beta = 1$  とし  $U_0 = 5$  である。 $\bullet$  は  $q_{\text{cl}}(\tau)$ ,  $\times$  は量子力学での位置の期待値  $\langle q \rangle$  を表す。(1.16) より  $F = \text{定数}$  の場合  $\langle q \rangle = q_{\text{cl}}(\tau)$  である。数値計算の結果も, 波束が壁に触れるまではこれが成り立つ。壁に触れると壁から力が受けるため成り立たないが, 波束が壁から離れると, 図に示した時間内では  $\langle q \rangle \approx q_{\text{cl}}(\tau)$  になる。階段ポテンシャルの場合と同様に, 波束が壁に触れると, 落下する波束と壁で反射する波束の干渉パターンが現れる。 $q = 0$  での古典力学的粒子の運動量は  $\sqrt{q_0 U_0}$  になるから, 干渉パターンの波長は  $\pi/\sqrt{q_0 U_0} \approx 0.6$  程度である。



## 4 調和振動子

$x$  軸上で原点からの距離に比例する引力  $-kx$  を受け単振動する粒子を考える。ポテンシャルエネルギーは角振動数  $\omega = \sqrt{k/m}$  を用いると  $m\omega^2 x^2/2$  であるから、ハミルトニアン  $\hat{H}$  は

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

になる。調和振動子はシュレーディンガー方程式が厳密に解ける数少ない例である。また、原子・分子や原子核などのミクロな系には微小振動があり、これらは調和振動子がよい近似になる（例えば、(2.61)）。更に、電磁場などの場で記述される系は無限個の調和振動子の系と見なせる。調和振動子の量子力学的扱いは広範囲に適用でき極めて重要である。以下では、演算子を表す  $\hat{\phantom{x}}$  は簡単のため省略する。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{\hbar\omega}{2} \left( -\frac{d^2}{dq^2} + q^2 \right), \quad \text{ただし } q = \alpha x, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (4.1)$$

と表せる。 $q$  は無次元の変数である。シュレーディンガー方程式  $H\varphi(x) = E\varphi(x)$  は

$$\frac{d^2\varphi}{dq^2} + (\varepsilon - q^2)\varphi(q) = 0, \quad \text{ただし } \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (4.2)$$

になる。(2.6) より  $\varepsilon > 0$  である。

### 4.1 固有値と固有関数

微分方程式 (4.2) を直接解く解析的方法と演算子を用いた方法で固有値と固有関数を求める。

#### 解析的方法

$\varphi(q) = q^n e^{aq^2}$  とすると

$$\left( \frac{d^2}{dq^2} - q^2 + \varepsilon \right) \varphi(q) = \left( 4a^2 - 1 + \frac{2a + 4an + \varepsilon}{q^2} + \frac{n(n-1)}{q^4} \right) q^2 \varphi(q) \xrightarrow{q \rightarrow \pm\infty} (4a^2 - 1) q^2 \varphi(q)$$

$a = \pm 1/2$  とすれば  $q \rightarrow \pm\infty$  で近似的に微分方程式を満たす。そこで  $q^n$  をベキ級数に置き換えて

$$\varphi(q) = h(q) e^{-q^2/2}, \quad h(q) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k q^k$$

とし (4.2) に代入すると

$$\frac{d^2 h}{dq^2} - 2q \frac{dh}{dq} + (\varepsilon - 1) h = 0 \quad (4.3)$$

である。

$$q \frac{dh}{dq} = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k q^k, \quad \frac{d^2 h}{dq^2} = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k q^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2} q^k$$

より (4.3) は

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left( (k+2)(k+1) a_{k+2} + (\varepsilon - 2k - 1) a_k \right) q^k = 0$$

これが任意の  $q$  で成り立つためには

$$(k+2)(k+1) a_{k+2} + (\varepsilon - 2k - 1) a_k = 0, \quad \therefore a_{k+2} = \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+2)(k+1)} a_k \quad (4.4)$$

でなければならない。 $a_0$  を与えると  $k = \text{偶数}$  の  $a_k$  が決まり偶関数の解が求まる。また,  $a_1$  を与えれば奇関数の解を得る。一般解は偶関数と奇関数の和であり, 2つの任意定数  $a_0, a_1$  を含む。

$\varepsilon > 0$  が奇数でないならば, 任意の  $k$  に対して  $2k + 1 - \varepsilon \neq 0$  であり  $h(q)$  は無限級数である。 $k \gg 1$  のとき  $a_{k+2}/a_k \approx 2/k$  になる。これは

$$e^{q^2} = \sum_{k=0,2,\dots} c_k q^k, \quad c_k = \frac{1}{(k/2)!}, \quad \frac{c_{k+2}}{c_k} = \frac{1}{k/2+1} \approx \frac{2}{k}$$

の係数比と同じになるから,  $h(q) \xrightarrow{|q| \rightarrow \infty} e^{q^2}$  であり  $\varphi(q) = h(q)e^{-q^2/2} \xrightarrow{|q| \rightarrow \infty} e^{q^2/2}$  は発散する (詳しくは問題 4.1)。したがって, 束縛状態の境界条件を満たすには  $\varepsilon$  は奇数, つまり,  $n = 0, 1, 2, \dots$  として  $\varepsilon = 2n + 1$  でなければならない。このとき

$$h(q) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k q^k, \quad a_{k+2} = \frac{2(k-n)}{(k+2)(k+1)} a_k \quad (4.5)$$

になる。 $a_{n+2} = a_{n+4} = \dots = 0$  であるから,  $n$  が偶数 (奇数) のとき偶関数 (奇関数) の  $h(q)$  は  $n$  次の多項式, 奇関数 (偶関数) は無限級数になる。多項式の場合  $h(q)e^{-q^2/2} \xrightarrow{q \rightarrow \pm \infty} 0$  であり, 束縛状態の境界条件を満たす。したがって, 調和振動子ポテンシャルの束縛状態のエネルギー固有値は

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}\varepsilon = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.6)$$

であり離散的になる。 $E_n$  は  $n$  が 1 つ増すと  $\hbar\omega$  だけ増加する。また, 最低エネルギーは 0 ではなく  $\hbar\omega/2$  である。これを**零点エネルギー**という (85 ページ参照)。

$\varepsilon = 2n + 1$  のとき (4.3) は

$$\frac{d^2 h}{dq^2} - 2q \frac{dh}{dq} + 2nh = 0 \quad (4.7)$$

になり, この微分方程式の解  $h(q)$  は (4.5) で与えられる。多項式の  $h(q)$  を求める。 $n$  が偶数 (奇数) のとき偶関数 (奇関数) になるから

$$k = n - 2\ell, \quad \ell = 0, 1, \dots, [n/2], \quad \text{ただし } [n/2] = n/2 \text{ を超えない最大の整数}$$

とおける。 $b_\ell = a_{n-2\ell}$  とすると

$$h(q) = \sum_{\ell=0}^{[n/2]} b_\ell q^{n-2\ell}, \quad b_\ell = -\frac{1}{4} \frac{(n-2(\ell-1)-1)(n-2(\ell-1))}{\ell} b_{\ell-1}$$

である。 $b_{\ell-1}$  を  $b_{\ell-2}$  で表す。これを繰り返すと

$$b_\ell = \left(-\frac{1}{4}\right)^\ell \frac{(n-2\ell+1)(n-2\ell+2)\cdots(n-1)n}{\ell!} b_0 = \left(-\frac{1}{4}\right)^\ell \frac{n!}{\ell!(n-2\ell)!} b_0$$

になる。 $b_0$  は任意であるが  $b_0 = 2^n$  とすると

$$h(q) = H_n(q) = \sum_{k=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^k n!}{k!(n-2k)!} (2q)^{n-2k} = (-1)^n e^{q^2} \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2} \quad (4.8)$$

である。最後の表現は (16.5) を用いた。 $H_n(q)$  を  $n$  次の**エルミート多項式**という。 $H_n(q)$  の基本的性質については 419 ページ 17.1 を参照。固有値  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  の固有関数  $\varphi_n$  は

$$\varphi_n(x) = C_n H_n(q) e^{-q^2/2} = C_n H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2}, \quad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar} \quad (4.9)$$

になる。係数  $C_n$  は規格化条件から決まる。なお, 無限級数解  $h(q)$  を**第 2 種エルミート関数**という。

**問題 4.1** 無限級数  $h(q)$  が偶関数のとき  $s = 0$ , 奇関数のとき  $s = 1$  とする。  $k = 2n + s$  とし  $b_n = a_{2n+s}$  で漸化式 (4.4) を書き直すと

$$b_{n+1} = \frac{1 - c_n}{n+1} b_n, \quad \text{ただし} \quad c_n = \frac{\varepsilon + 1 + 2s}{2(2n+1+2s)}$$

になる。  $0 < \eta < 1/2$  に対して  $n \geq \ell$  のとき  $c_n < \eta$  になる  $\ell$  が存在する。  $n > \ell$  のとき

$$|b_n| > C_\ell \frac{(1-\eta)^n}{n!}, \quad C_\ell = |b_\ell| \frac{\ell!}{(1-\eta)^\ell} > 0$$

を示せ。  $n > \ell$  では  $b_n$  は同符号である。

$$|h(q)| > |q|^s \left( C_\ell e^{(1-\eta)q^2} - F(q) \right), \quad F(q) = \sum_{n=0}^{\ell} \left( |b_n| + C_\ell \frac{(1-\eta)^n}{n!} \right) q^{2n} = 2\ell \text{ 次の多項式}$$

を示せ。  $1/2 - \eta > 0$  であるから  $\varphi(q) = h(q)e^{-q^2/2}$  は  $q \rightarrow \pm\infty$  で発散する。

**問題 4.2**  $\rho = q^2$  とすると (4.3) は合流型超幾何微分方程式 (17.102) になる。  $\varphi(q) \xrightarrow{q^2 \rightarrow \infty} 0$  より

$$\varepsilon = 2n + 1, \quad h(q) \propto \begin{cases} M(-k, 1/2, q^2), & n = 2k \text{ のとき} \\ qM(-k, 3/2, q^2), & n = 2k + 1 \text{ のとき} \end{cases}$$

を示せ ((17.111) 参照)。 (4.8) と (17.113) より  $h(q) \propto H_n(q)$  を示せ。

#### 演算子を用いた方法

ディラックによる演算子を用いた方法で  $H$  の固有値と固有関数を求める。演算子  $a$  を

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x + \frac{i}{m\omega} p \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( q + \frac{d}{dq} \right), \quad q = \alpha x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (4.10)$$

で定義する。運動量演算子  $p = -i\hbar d/dx$  はエルミート演算子であるから

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x - \frac{i}{m\omega} p \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( q - \frac{d}{dq} \right) \quad (4.11)$$

になる。  $x, p$  を  $a, a^\dagger$  で表すと

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) = \frac{a^\dagger + a}{\sqrt{2}\alpha}, \quad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (a^\dagger - a) = \frac{i\hbar\alpha}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a) \quad (4.12)$$

になるから

$$[x, p] = \frac{i\hbar}{2} [a^\dagger + a, a^\dagger - a] = i\hbar [a, a^\dagger], \quad \therefore [a, a^\dagger] = 1 \quad (4.13)$$

である。  $H$  を  $a, a^\dagger$  で表すと

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 = \frac{\hbar\omega}{4} \left( -(a^\dagger - a)^2 + (a^\dagger + a)^2 \right) = \frac{\hbar\omega}{2} (a^\dagger a + a a^\dagger) = \hbar\omega (a^\dagger a + 1/2)$$

したがって、エルミート演算子  $N = a^\dagger a$  の固有値と固有関数を求めればよい。

以下では、交換関係  $[a, a^\dagger] = 1$  だけを用いる。  $a$  と  $a^\dagger$  の具体形には無関係であるから、調和振動子だけでなく、177 ページや場の量子化 (355 ページ)、多粒子系の量子力学 (352 ページ) にも適用できる。  $N = a^\dagger a$  の固有値を  $\nu$ , 固有関数をディラックの表記法を用いて  $|\nu\rangle$  とすると

$$N|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle, \quad \langle\nu|\nu\rangle = 1$$

である。 $|\phi\rangle = a|\nu\rangle$  とすると (1.30) より

$$\langle\phi|\phi\rangle = \langle\nu|a^\dagger a|\nu\rangle = \nu\langle\nu|\nu\rangle = \nu \quad (4.14)$$

になる。 $\langle\phi|\phi\rangle \geq 0$  であるから,  $N$  の固有値  $\nu$  は負にはならない。また,  $\nu = 0$  は  $|\phi\rangle = a|\nu\rangle = 0$  の場合だけである。

演算子  $A, B$  に対して  $[A, B]$  が  $B$  と可換な場合

$$[A, B^k] = [A, B]kB^{k-1}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.15)$$

を数学的帰納法で示す。 $k = 0, 1$  のときは自明である。 $k$  のとき成り立つとすると

$$[A, B^{k+1}] = B[A, B^k] + [A, B]B^k = B[A, B]kB^{k-1} + [A, B]B^k = [A, B](k+1)B^k$$

であるから  $k+1$  のときも成り立つ。一般に  $F(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k$  のとき

$$[A, F(B)] = [A, B] \frac{dF}{dB}, \quad \text{ただし} \quad [[A, B], B] = 0 \quad (4.16)$$

である。

(4.15) より

$$[a, (a^\dagger)^k] = k(a^\dagger)^{k-1}, \quad [a^\dagger, a^k] = -ka^{k-1} \quad (4.17)$$

になるから

$$[N, (a^\dagger)^k] = a^\dagger[a, (a^\dagger)^k] = k(a^\dagger)^k, \quad [N, a^k] = [a^\dagger, a^k]a = -ka^k \quad (4.18)$$

したがって

$$N(a^\dagger)^k|\nu\rangle = (k(a^\dagger)^k + (a^\dagger)^k N)|\nu\rangle = (\nu+k)(a^\dagger)^k|\nu\rangle, \quad Na^k|\nu\rangle = (\nu-k)a^k|\nu\rangle \quad (4.19)$$

$k = 0, 1, 2, \dots$  のとき  $(a^\dagger)^k|\nu\rangle, a^k|\nu\rangle$  も  $N$  の固有関数で固有値はそれぞれ  $\nu+k, \nu-k$  になる。 $\nu$  が整数でない場合  $\nu-k \neq 0$  であるから,  $k$  を十分大きくとれば  $\nu-k < 0$  になり, 負の固有値が存在する。これは  $N$  の固有値が非負であることと矛盾する。一方,  $\nu$  が整数  $\nu = n = 0, 1, 2, \dots$  の場合,  $a^n|n\rangle \neq 0$  の固有値は  $n-n=0$  になるから (4.14) より

$$a(a^n|n\rangle) = a^{n+1}|n\rangle = 0, \quad \therefore a^k|n\rangle = 0 \quad \text{ただし} \quad k = n+1, n+2, \dots$$

$N$  の固有値が負になる状態は存在しない。したがって,  $N = a^\dagger a$  の固有値は非負の整数  $n$  に限られ

$$a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle, \quad a|0\rangle = 0$$

である。これから  $H = \hbar\omega(N + 1/2)$  の固有値は  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  になり (4.6) と一致する。

(4.19) より  $(a^\dagger)^n|0\rangle$  は固有値  $n$  の固有状態である。次ページで示すように  $n$  は縮退しないから  $|n\rangle = c_n(a^\dagger)^n|0\rangle$  とおける。規格化定数  $c_n$  を求める。(1.30) で  $\hat{U} = c_{n'}(a^\dagger)^{n'}$  とすると  $\hat{U}^\dagger = c_{n'}^* a^{n'}$  であるから

$$\langle n'|n\rangle = c_{n'}^* c_n \langle 0|a^{n'}(a^\dagger)^n|0\rangle$$

(4.17) より  $n' \geq n$  のとき

$$a^{n'}(a^\dagger)^n|0\rangle = a^{n'-1}(n(a^\dagger)^{n-1} + (a^\dagger)^n a)|0\rangle = n a^{n'-1}(a^\dagger)^{n-1}|0\rangle = \dots = n! a^{n'-n}|0\rangle \quad (4.20)$$

になるから  $\langle n|n\rangle = |c_n|^2 n! \langle 0|0\rangle$  である。規格化した固有関数は

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle, \quad \langle 0|0\rangle = 1 \quad (4.21)$$

になる。 $n' - n > 0$  のとき  $\langle 0|a^{n'-n}|0\rangle = 0$  より  $\langle n'|n\rangle = \delta_{nn'}$  になり  $|n\rangle$  は規格直交系である。(4.17) より  $n \geq 1$  のとき

$$a|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a (a^\dagger)^n |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( (a^\dagger)^n a + n (a^\dagger)^{n-1} \right) |0\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

また

$$a^\dagger |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^{n+1} |0\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

であるから,  $|n\rangle$  は漸化式

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad a |n\rangle = \begin{cases} \sqrt{n} |n-1\rangle, & n \neq 0 \\ 0, & n = 0 \end{cases} \quad (4.22)$$

を満たす。 $a^\dagger$  は演算子  $N$  の固有値  $n$  を1つ増加させるので**生成演算子**,  $a$  は1つ減少させるので**消滅演算子**と呼ばれる。

1次元の束縛状態に縮退はないから, 調和振動子の場合  $N = a^\dagger a$  の固有値は縮退しない。これを一般的に示す。99 ページより  $[N, M] = 0$  である演算子  $M$  と  $N$  の同次固有関数  $|n, m\rangle$  が存在する。 $n$  を与えたとき  $M$  の固有値  $m$  が一意に決まらない場合  $n$  は縮退する。ここで考えている系では, 演算子は  $a^\dagger$  と  $a$  で表せるから  $C_{k\ell}$  を係数として  $M = \sum_{k,\ell=0}^{\infty} C_{k\ell} (a^\dagger)^k a^\ell$  とおける。

$$[N, M] = \sum_{k,\ell=0}^{\infty} C_{k\ell} \left( [N, (a^\dagger)^k] a^\ell + (a^\dagger)^k [N, a^\ell] \right) = \sum_{k,\ell=0}^{\infty} C_{k\ell} (k - \ell) (a^\dagger)^k a^\ell = 0$$

になるから  $C_{k\ell} = C_k \delta_{k\ell}$  である。これと**問題 4.3** より  $M$  は  $N$  の関数になる。 $n$  を与えると  $m$  は一意に決まるから  $n$  は縮退しない。

**問題 4.3**  $(a^\dagger)^{k+1} a^{k+1} = N(N-1) \cdots (N-k)$  を示せ。

(4.10), (4.11) の具体形を用いて (4.21) の波動関数  $\varphi_n$  を求める。基底状態  $\varphi_0$  は

$$a\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( q + \frac{d}{dq} \right) \varphi_0 = 0, \quad \therefore \quad \varphi_0 = C e^{-q^2/2}$$

規格化定数  $C$  は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi_0(q)|^2 = \frac{|C|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-q^2} = \frac{|C|^2}{\alpha} \sqrt{\pi} = 1, \quad \therefore \quad C = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}}$$

とすればよいから

$$\varphi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} e^{-q^2/2} = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} e^{-\alpha^2 x^2/2} \quad (4.23)$$

である。これを (4.21) に代入すると

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2} n!}} (a^\dagger)^n e^{-q^2/2} = C_n \left( q - \frac{d}{dq} \right)^n e^{-q^2/2}, \quad C_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2} n! 2^n}} \quad (4.24)$$



になる。任意の  $f(q)$  に対して

$$e^{q^2/2} \frac{d}{dq} e^{-q^2/2} f(q) = \left( \frac{d}{dq} - q \right) f(q), \quad \therefore \quad \frac{d}{dq} - q = e^{q^2/2} \frac{d}{dq} e^{-q^2/2}$$

であるから

$$\left( \frac{d}{dq} - q \right)^n = \underbrace{e^{q^2/2} \frac{d}{dq} e^{-q^2/2} e^{q^2/2} \frac{d}{dq} e^{-q^2/2} \dots e^{q^2/2} \frac{d}{dq} e^{-q^2/2}}_{n \text{ 個}} = e^{q^2/2} \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2/2}$$

になる。これから (4.24) は (4.8) の  $H_n(q)$  を用いて

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2} n! 2^n}} e^{-q^2/2} H_n(q), \quad q = \alpha x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (4.25)$$

と表せる。これは微分方程式を解いた結果 (4.9) と同じであり、規格化定数も自動的に決まる。

### パリティ

$V(x) = m\omega^2 x^2/2$  は  $V(x) = V(-x)$  であるから、27 ページで示したように、 $H$  の固有関数  $\varphi_n(x)$  は偶関数あるいは奇関数になる。別な言い方をすれば、 $\varphi_n(x)$  は (2.65) で定義したパリティ演算子  $P$  の固有関数でもある。実際、(4.8), (4.25) より  $\varphi_n(-x) = (-1)^n \varphi_n(x)$  であるから、 $n$  が偶数のとき偶関数、奇数のとき奇関数である。あるいは、(2.66) より  $Pa^\dagger = -a^\dagger P$  であるから

$$P\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} P (a^\dagger)^n \varphi_0(x) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n P\varphi_0(x) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \varphi_0(x) = (-1)^n \varphi_n(x)$$

ただし、 $\varphi_0(x) \propto e^{-\alpha^2 x^2/2}$  は偶関数であるから  $P\varphi_0(x) = \varphi_0(x)$  である。

### 完全規格直交系

$\varphi_n(x)$  が完全系であることを示す。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dk (2ik)^n e^{-(k+iq)^2} &= e^{q^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk (-1)^n \frac{d^n}{dq^n} e^{-2ikq-k^2} \\ &= (-1)^n e^{q^2} \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-(k+iq)^2} = \sqrt{\pi} H_n(q) \end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_n(x') &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-(q^2+q'^2)/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! 2^n} H_n(q) H_n(q') \\ &= \frac{\alpha}{\pi^{3/2}} e^{-(q^2+q'^2)/2} \int_{-\infty}^{\infty} dk dk' e^{-(k+iq)^2} e^{-(k'+iq')^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2kk')^n}{n!} \\ &= \frac{\alpha}{\pi^{3/2}} e^{(q^2-q'^2)/2} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{2i(q'-q)k} \int_{-\infty}^{\infty} dk' e^{-(k'+k+iq')^2} \\ &= \alpha \delta(q-q') = \delta(x-x') \end{aligned}$$

になる。これは (1.27) の具体例であり  $\varphi_n(x)$  が完全系であることを表す。

**問題 4.4** メラー (Mehler) の公式  $z$  を  $|z| \leq 1, z^2 \neq 1$  である複素数とすると

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z/2)^n}{n!} H_n(q) H_n(q') = \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} \exp\left(\frac{2qq'z - (q^2 + q'^2)z^2}{1-z^2}\right) \quad (4.26)$$

を示せ。 $z \rightarrow 1$  より  $\varphi_n(x)$  の完全性を示せ。 $z = t/q'$  として  $q' \rightarrow \infty$  とすると、 $H_n(q') \rightarrow (2q')^n$  であるから (17.8) を得る。 $q = q' = 0$  のとき、(17.3) より左辺は  $1/\sqrt{1-z^2}$  のベキ展開に一致する。

## 4.2 零点エネルギーと不確定性

古典力学的には最低のエネルギーは粒子が原点に静止している状態で  $E = 0$  である。一方、量子力学では、最低のエネルギー固有値は 0 ではなく  $\hbar\omega/2$  である。これを**零点エネルギー**という。量子力学では、不確定性関係のため位置  $x$  と運動量  $p$  が同時に確定した値になることはないから、原点に静止した状態 (位置と運動量が同時に 0 に確定した状態) はない。したがって、最低のエネルギーは 0 にはならない。不確定性関係を用いて最低のエネルギーを評価する。

$H$  の固有状態  $\varphi$  での期待値を  $\langle \dots \rangle$  で表す。

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}, \quad \Delta p = \sqrt{\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$$

$\varphi(x)$  は偶関数か奇関数であるから  $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$  である。したがって

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle + \frac{m\omega^2}{2} \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 + \frac{m\omega^2}{2} (\Delta x)^2 \geq \omega \Delta x \Delta p$$

最後の不等式では 相加平均  $\geq$  相乗平均 を使った。不確定性関係  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$  より  $\langle H \rangle \geq \hbar\omega/2$  である。最低エネルギーが  $\hbar\omega/2$  以下にならないことは、シュレーディンガー方程式を具体的に解かなくても、不確定性関係だけから導ける。 $\langle H \rangle = \hbar\omega/2$  になるのは

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}, \quad \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 = \frac{m\omega^2}{2} (\Delta x)^2, \quad \text{つまり} \quad \Delta x = \frac{\hbar}{2\Delta p} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}$$

のときである。

固有関数 (4.21) を用いて不確定性関係を求める。(4.12), (4.22) より

$$x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left( \sqrt{n+1}|n+1\rangle + \sqrt{n}|n-1\rangle \right) \quad (4.27)$$

規格直交性  $\langle n'|n\rangle = \delta_{nn'}$  より  $\langle n|x|n\rangle = 0$ , 同様にして  $\langle n|p|n\rangle = 0$  である。前に述べたように,  $\varphi_n(x)$  は偶関数あるいは奇関数であるから当然の結果である。次に, 交換関係 (4.13) より

$$(a^\dagger + a)^2 = (a^\dagger)^2 + a^2 + 2a^\dagger a + 1$$

であるから

$$x^2|n\rangle = \frac{1}{2\alpha^2} \left( \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle + \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle + (2n+1)|n\rangle \right) \quad (4.28)$$

これから

$$\langle n|x^2|n\rangle = \frac{1}{\alpha^2} \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{同様にして} \quad \langle n|p^2|n\rangle = (\hbar\alpha)^2 \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (4.29)$$

以上から, 状態  $|n\rangle$  での分散は

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{\alpha^2} \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (\Delta p)^2 = (\hbar\alpha)^2 \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad \therefore \Delta x \Delta p = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

基底状態では最小の不確定性が成り立つ。 $\alpha$  を基底状態での  $\Delta x$  で表すと  $\alpha^2 = 1/(2(\Delta x)^2)$  であるから, 基底状態の波動関数 (4.23) は  $x_0 = k_0 = 0$  とした不確定性最小の状態 (1.47) である。(4.29) はビリアル定理 (1.55) を用いても示せる。

### 4.3 古典力学との関係

254 ページの強制振動参照。

#### 定常状態

古典力学的粒子の速度  $v$  は

$$v^2 = \frac{2}{m} \left( E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) = \frac{\hbar\omega}{m} (\varepsilon - q^2), \quad \text{ただし } q = \alpha x, \quad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

であるから, (2.46) と同様にすると,  $x$  と  $x + dx$  の間に粒子を見出す古典力学的確率  $P_{cl}(x) dx$  は

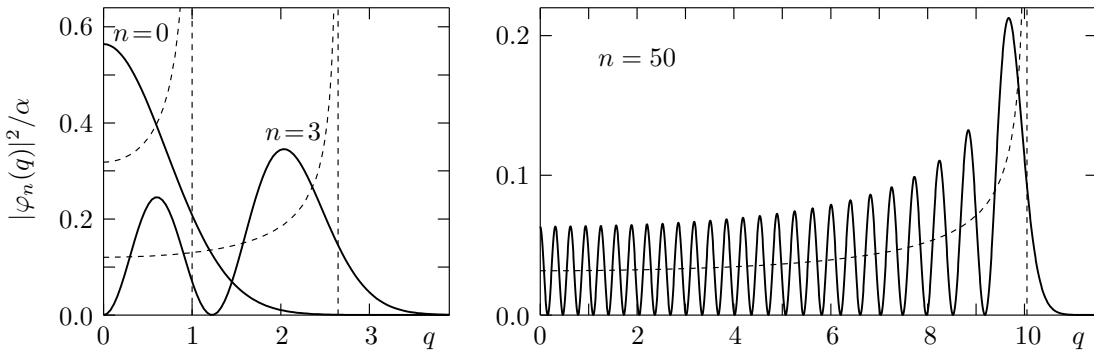
$$P_{cl} = \frac{C}{\sqrt{\varepsilon - q^2}} = \frac{\alpha}{\pi \sqrt{\varepsilon - q^2}} \quad (4.30)$$

ただし, 規格化より

$$\int_{-\sqrt{\varepsilon}/\alpha}^{\sqrt{\varepsilon}/\alpha} dx P_{cl} = \frac{2C}{\alpha} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} \frac{dq}{\sqrt{\varepsilon - q^2}} = \frac{2C}{\alpha} \left[ \sin^{-1} \frac{q}{\sqrt{\varepsilon}} \right]_0^{\sqrt{\varepsilon}} = \frac{C}{\alpha} \pi = 1$$

である。量子力学的エネルギー固有値に対応する  $E = \hbar\omega(n + 1/2)$  のときは  $\varepsilon = 2n + 1$  である。

$n = 0, 3$  の場合 (4.25) の波動関数  $|\varphi_n|^2$  を  $q$  の関数として図示すると下図になる。 $\varphi_n$  は  $n$  が偶数のとき偶関数, 奇数のとき奇関数になるから  $q \geq 0$  の範囲を示した。破線で示した古典力学の確率  $P_{cl}(q)/\alpha$  とは明らかに異なる  $q$  依存性を示す。また, 古典力学では粒子が存在できない領域  $|q| > \sqrt{2n+1}$  にも, 量子力学的には粒子は存在する。しかし,  $n$  が大きくなると  $|\varphi_n|^2$  の平均的振る舞いは  $P_{cl}(q)$  に近づく (下図の  $n = 50$ )。  $\varphi_n$  は  $q > 0$  に  $n/2$  個の零点を持つため,  $|\varphi_n|^2$  は非常に激しく振動するが, その平均は  $P_{cl}$  とよく一致する。これは  $n \rightarrow \infty$  での  $H_n(q)$  の漸近的形 (18.39) あるいは準古典近似である WKB 近似を使うと解析的に示せる (233 ページ)。  $E_n \sim \hbar\omega$  では量子力学的効果は顕著であるが,  $E_n \gg \hbar\omega$  になると量子力学は古典力学を再現する。このような結果は一様重力での束縛状態と同じである。



#### 波束の運動

時刻  $t = 0$  の状態  $\psi(x, 0)$  を与えると, 任意の時刻での状態  $\psi(x, t)$  は (1.49), (1.50) より

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(x), \quad c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_n(x) \psi(x, 0) \quad (4.31)$$

になる ( $\varphi_n^* = \varphi_n$ )。

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi d^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4d^2} + \frac{i p_0 x}{\hbar}\right) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\mu}} \exp\left(-\frac{(q-q_0)^2}{2\mu} + i k_0 q\right) \quad (4.32)$$

ただし

$$q = \alpha x, \quad q_0 = \alpha x_0, \quad k_0 = \frac{p_0}{\hbar \alpha} = \alpha \frac{p_0}{m\omega}, \quad \mu = 2\alpha^2 d^2$$

とする。(4.32) は  $\Delta x = d$  とした最小不確定の状態 (1.47) である。(17.9) より

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{\sqrt{n!}} s^n &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x, 0) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n(x)}{\sqrt{n!}} s^n \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\sqrt{\mu}}} \int_{-\infty}^{\infty} dq \exp\left(-\frac{(q-q_0)^2}{2\mu} + ik_0 q - \frac{q^2 + s^2}{2} + \sqrt{2} sq\right) \end{aligned}$$

指数部を  $q$  について完全平方すれば

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{\sqrt{n!}} s^n = \sqrt{\frac{2\sqrt{\mu}}{\mu+1}} \exp\left(\frac{-q_0^2 - \mu k_0^2 + 2iq_0 k_0 + 2\sqrt{2}(q_0 + i\mu k_0)s + (\mu-1)s^2}{2(\mu+1)}\right) \quad (4.33)$$

になる。右辺を  $s$  についてベキ展開すると  $c_n$  が求まるが、 $\mu \neq 1$  のとき指数部に  $s^2$  の項があり複雑になる。ここでは  $\mu = 1$ , つまり  $d = 1/(\sqrt{2}\alpha)$  とする。基底状態の波動関数  $\varphi_0(x)$  を平行移動した  $\psi(x, 0) = \varphi_0(x - x_0)e^{ip_0 x/\hbar}$  の場合である ( $\mu \neq 1$  の場合, **問題 4.5** 参照)。

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{\sqrt{n!}} s^n &= \exp\left(-\frac{q_0^2 + k_0^2 - 2iq_0 k_0}{4} + \frac{q_0 + ik_0}{\sqrt{2}} s\right) \\ &= \exp\left(-\frac{q_0^2 + k_0^2 - 2iq_0 k_0}{4}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{q_0 + ik_0}{\sqrt{2}}\right)^n s^n \end{aligned}$$

$s^n$  の係数を比較すると

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{q_0 + ik_0}{\sqrt{2}}\right)^n \exp\left(-\frac{q_0^2 + k_0^2 - 2iq_0 k_0}{4}\right) \quad (4.34)$$

である。これと (4.25) を (4.31) に代入し (17.8) を使うと

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} \exp\left(-\frac{q^2}{2} - \frac{q_0^2 + k_0^2 - 2iq_0 k_0}{4} - \frac{i\omega t}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda/2)^n}{n!} H_n(q) \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} \exp\left(-\frac{q^2}{2} - \frac{q_0^2 + k_0^2 - 2iq_0 k_0}{4} - \frac{i\omega t}{2} - \frac{\lambda^2}{4} + \lambda q\right) \end{aligned} \quad (4.35)$$

になる。ただし  $\lambda = (q_0 + ik_0)e^{-i\omega t}$  である。 $|e^z| = \exp(\operatorname{Re} z)$  であるから確率密度は

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-q^2 - \frac{q_0^2 + k_0^2}{2} - \frac{\lambda_R^2 - \lambda_I^2}{2} + 2\lambda_R q\right), \quad \lambda_R = \operatorname{Re} \lambda, \quad \lambda_I = \operatorname{Im} \lambda$$

$|\lambda|^2 = \lambda_R^2 + \lambda_I^2 = q_0^2 + k_0^2$  より

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-(q - \lambda_R)^2\right) = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\alpha^2 (x - X(t))^2\right) \\ X(t) &= \frac{\lambda_R}{\alpha} = x_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t \end{aligned} \quad (4.36)$$

$X(t)$  は  $t = 0$  で位置  $x_0$ , 運動量  $p_0$  である古典力学的粒子の位置である。 $|\psi(x, t)|^2$  は波形を保持したまま中心が古典力学と同じ振動をする波束である。

状態  $\psi(x, t)$  での期待値を  $\langle \dots \rangle$  で表す。  $x$  と  $x^2$  の期待値を求めると

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\alpha^2} \int_{-\infty}^{\infty} dq q |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dq (q + \lambda_R) e^{-q^2} = \frac{\lambda_R}{\alpha} = X(t) \quad (4.37)$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}\alpha^2} \int_{-\infty}^{\infty} dq (q + \lambda_R)^2 e^{-q^2} = \frac{1}{\alpha^2} \left( \frac{1}{2} + \lambda_R^2 \right) = \frac{1}{2\alpha^2} + (X(t))^2 \quad (4.38)$$

であるから  $\Delta x = 1/(\sqrt{2}\alpha)$  になり  $\Delta x$  は時間に依存しない。(4.35) より

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) = \alpha (\lambda - \alpha x) \psi(x, t)$$

になるから運動量の期待値は

$$\langle p \rangle = -i\hbar (\lambda - \alpha \langle x \rangle) = -i\hbar (\lambda - \lambda_R) = \hbar \alpha \lambda_I = p_0 \cos \omega t - m\omega x_0 \sin \omega t = m \frac{dX}{dt} \quad (4.39)$$

これも古典力学と一致する (246 ページのハイゼンベルグ方程式参照)。次に

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) = -\alpha^2 (1 - (\lambda - \alpha x)^2) \psi(x, t) = -\alpha^2 (1 - \lambda^2 + 2\lambda\alpha x - \alpha^2 x^2) \psi(x, t)$$

である。これと (4.37), (4.38) より

$$\langle p^2 \rangle = \hbar^2 \alpha^2 \left( 1 - \lambda^2 + 2\lambda\lambda_R - \frac{1}{2} - \lambda_R^2 \right) = \hbar^2 \alpha^2 \left( \lambda_I^2 + \frac{1}{2} \right) = \langle p \rangle^2 + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2}$$

になり  $\Delta p = \hbar\alpha/\sqrt{2}$  も時間に依存しない。 $\Delta x \Delta p = \hbar/2$  であるから, (4.35) の  $\psi(x, t)$  は常に不確定性最小の状態である。

運動エネルギー  $K = p^2/(2m)$  とポテンシャルエネルギー  $V(x) = m\omega^2 x^2/2$  の期待値は

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle = \frac{1}{2m} \langle p \rangle^2 + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{4m} = \frac{1}{2m} (p_0 \cos \omega t - m\omega x_0 \sin \omega t)^2 + \frac{\hbar\omega}{4} \\ \langle V \rangle &= \frac{m\omega^2}{2} \langle x^2 \rangle = \frac{m\omega^2}{2} \langle x \rangle^2 + \frac{m\omega^2}{4\alpha^2} = \frac{m\omega^2}{2} (x_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t)^2 + \frac{\hbar\omega}{4} \end{aligned}$$

$\langle K \rangle$  と  $\langle V \rangle$  は時間に依存するが, これらの和である  $H$  の期待値は

$$\langle H \rangle = \langle K \rangle + \langle V \rangle = E_{cl} + \frac{\hbar\omega}{2}, \quad E_{cl} = \frac{p_0^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x_0^2$$

で時間的に一定である。 $\langle H \rangle$  は古典力学的エネルギー  $E_{cl}$  と零点エネルギーの和である。この結果は次のようにすれば簡単に求まる。(4.34) より

$$|c_n|^2 = \frac{\rho^n}{n!} e^{-\rho}, \quad \rho = \frac{q_0^2 + k_0^2}{2} = \frac{E_{cl}}{\hbar\omega}$$

これはポアソン分布である。

$$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1, \quad \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 n = \rho, \quad \therefore \quad \langle H \rangle = \hbar\omega \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \left( n + \frac{1}{2} \right) = E_{cl} + \frac{\hbar\omega}{2}$$

になる。

#### 問題 4.5 時間に依存するシュレーディンガー方程式

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

を満たす任意の  $\psi(x, t)$  を考える。この状態での期待値を  $\langle \dots \rangle$  で表す。

$$D_x(t) = (\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \quad D_p(t) = \frac{(\Delta p)^2}{m^2 \omega^2} = \frac{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}{m^2 \omega^2}$$

$$D_{xp}(t) = \frac{\langle xp + px \rangle - 2\langle x \rangle \langle p \rangle}{m}$$

とする。

1. (1.14) より

$$dD_x/dt = D_{xp}, \quad dD_p/dt = -D_{xp}, \quad dD_{xp}/dt = -2\omega^2(D_x - D_p)$$

を示せ。

2. 1. の微分方程式の一般解を求めよ。  $D_x(t)$  と  $D_p(t)$  が定数になる条件は  $D_x(0) = D_p(0)$ ,  $D_{xp}(0) = 0$  であることを示せ。

3.  $\psi(x, 0)$  が (4.32) の場合

$$(\Delta x)^2 = d^2 + \frac{1 - \mu^2}{\mu^2} \sin^2 \omega t, \quad \mu = 2\alpha^2 d^2 \quad (4.40)$$

を示せ。  $d = 1/(\sqrt{2}\alpha)$  のときだけ  $\Delta x$  は一定になる。

**問題 4.6** (4.31) より

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \varphi_n(x') \psi(x', 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' G(x, x', t) \psi(x', 0)$$

ただし

$$G(x, x', t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(x) \varphi_n(x') \quad (4.41)$$

である。  $G(x, x', t)$  は 1 次元調和振動子のグリーン関数である。(4.26) より

$$G(x, x', t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t}} \exp\left(i \frac{m\omega}{2\hbar} \frac{(x^2 + x'^2) \cos \omega t - 2xx'}{\sin \omega t}\right) \quad (4.42)$$

を示せ。

$$G(x, x', t) \xrightarrow{\omega \rightarrow 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp\left(i \frac{m(x - x')^2}{2\hbar t}\right)$$

は自由粒子のグリーン関数 (1.68) である。

**問題 4.7** 問題 3.10 で作成したプログラムで  $\text{pot}(x)$  を調和振動子ポテンシャルに置き換え、初期波動関数を (4.32) とする。  $d = 1/(\sqrt{2}\alpha)$  のとき、数値解  $|\psi(x, t)|^2$  と解析解 (4.36) を比較せよ。また、任意の  $d$  に対して  $\Delta x$  を数値的に求め (4.40) と比較せよ。

#### 4.4 コヒーレント状態

消滅演算子  $a$  の固有状態  $|\lambda\rangle$

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \quad \langle \lambda | \lambda \rangle = 1 \quad (4.43)$$

をコヒーレント状態 (coherent state) という。\$a\$ はエルミート演算子ではないから、固有値 \$\lambda\$ は複素数である。また、基底状態 \$|n=0\rangle\$ は \$\lambda=0\$ のコヒーレント状態である。コヒーレント状態は調和振動子ポテンシャルに限らず、一般に \$[a, a^\dagger]=1\$ を満たす演算子 \$a\$ に対して考えることができる。なお、\$a^\dagger|\lambda\rangle=\lambda^\*|\lambda\rangle\$ ではない。これが成り立つならば

$$aa^\dagger|\lambda\rangle=\lambda^*a|\lambda\rangle=|\lambda|^2|\lambda\rangle, \quad a^\dagger a|\lambda\rangle=|\lambda|^2|\lambda\rangle$$

であるから \$aa^\dagger-a^\dagger a=0\$ になり \$aa^\dagger-a^\dagger a=1\$ と矛盾する。

\$a^\dagger|\lambda\rangle\$ がどうなるか不明であるが、期待値は簡単に求まる。\$|\lambda\rangle\$ の定義から

$$\langle\lambda|a|\lambda\rangle=\lambda, \quad \langle\lambda|a^2|\lambda\rangle=\lambda^2$$

これらの複素共役をとると、エルミート共役の定義から

$$\langle\lambda|a^\dagger|\lambda\rangle=\lambda^*, \quad \langle\lambda|(a^\dagger)^2|\lambda\rangle=(\lambda^*)^2$$

になる。\$a^\dagger a|\lambda\rangle=\lambda a^\dagger|\lambda\rangle\$ より

$$\langle\lambda|a^\dagger a|\lambda\rangle=\lambda\langle\lambda|a^\dagger|\lambda\rangle=\lambda\lambda^*=|\lambda|^2, \quad \langle\lambda|aa^\dagger|\lambda\rangle=\langle\lambda|a^\dagger a+1|\lambda\rangle=|\lambda|^2+1$$

したがって、(4.12) より位置と運動量の期待値は

$$\langle\lambda|x|\lambda\rangle=\frac{\lambda+\lambda^*}{\sqrt{2}\alpha}=\frac{\sqrt{2}}{\alpha}\operatorname{Re}\lambda, \quad \langle\lambda|p|\lambda\rangle=-i\hbar\alpha\frac{\lambda-\lambda^*}{\sqrt{2}}=m\omega\frac{\sqrt{2}}{\alpha}\operatorname{Im}\lambda \quad (4.44)$$

比例定数は別にして、\$\lambda\$ の実部と虚部はそれぞれ位置と運動量の期待値を表す。\$x^2\$ と \$p^2\$ は

$$\begin{aligned} \langle\lambda|x^2|\lambda\rangle &= \frac{1}{2\alpha^2}\langle\lambda|(a^2+(a^\dagger)^2+aa^\dagger+a^\dagger a)|\lambda\rangle = \frac{(\lambda+\lambda^*)^2+1}{2\alpha^2} \\ \langle\lambda|p^2|\lambda\rangle &= \frac{\hbar^2\alpha^2}{2}\left(1-(\lambda-\lambda^*)^2\right) \end{aligned}$$

したがって、分散は

$$(\Delta x)^2=\langle\lambda|x^2|\lambda\rangle-\langle\lambda|x|\lambda\rangle^2=\frac{1}{2\alpha^2}, \quad (\Delta p)^2=\langle\lambda|p^2|\lambda\rangle-\langle\lambda|p|\lambda\rangle^2=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2} \quad (4.45)$$

になり \$\lambda\$ に依存しない。基底状態と同様に、コヒーレント状態は最小の不確定性 \$\Delta x\Delta p=\hbar/2\$ を満たす。

コヒーレント状態はハミルトニアン \$H=\hbar\omega(a^\dagger a+1/2)\$ の固有状態ではない。

$$\langle E\rangle=\langle\lambda|H|\lambda\rangle=\hbar\omega\left(|\lambda|^2+\frac{1}{2}\right) \quad (4.46)$$

交換関係から \$(a^\dagger a)^2=a^\dagger a a^\dagger a=a^\dagger(a^\dagger a+1)a=(a^\dagger)^2 a^2+a^\dagger a\$ になるから

$$\langle\lambda|(a^\dagger a)^2|\lambda\rangle=\lambda^2\langle\lambda|(a^\dagger)^2|\lambda\rangle+|\lambda|^2=|\lambda|^4+|\lambda|^2$$

これから

$$\langle\lambda|H^2|\lambda\rangle=\hbar^2\omega^2\langle\lambda|\left((a^\dagger a)^2+a^\dagger a+\frac{1}{4}\right)|\lambda\rangle=\hbar^2\omega^2\left(\left(|\lambda|^2+\frac{1}{2}\right)^2+|\lambda|^2\right)$$

したがって

$$(\Delta E)^2=\langle\lambda|H^2|\lambda\rangle-\langle\lambda|H|\lambda\rangle^2=\hbar^2\omega^2|\lambda|^2 \quad (4.47)$$

期待値に対する相対的な分散は

$$\frac{\Delta E}{\langle E \rangle} = \frac{|\lambda|}{|\lambda|^2 + 1/2}$$

になるから、 $|\lambda| \gg 1$ , つまり  $\langle E \rangle / \hbar \omega \gg 1$  である古典力学的極限では分散は無視できる。

$|\lambda\rangle$  は  $H$  の固有状態  $|n\rangle$  により

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(\lambda) |n\rangle \quad (4.48)$$

と表せる。(4.22) を用いると

$$a|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n a|n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle = \lambda \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$$

である。 $\varphi_{n'}^*$  をかけ積分すると  $\langle n' | n \rangle = \delta_{nn'}$  であるから  $\sqrt{n+1} c_{n+1} = \lambda c_n$  になる。したがって

$$c_n = \frac{\lambda}{\sqrt{n}} c_{n-1} = \frac{\lambda^2}{\sqrt{n(n-1)}} c_{n-2} = \cdots = \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} c_0$$

$c_0$  は規格化条件

$$\langle \lambda | \lambda \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 e^{|\lambda|^2} = 1$$

より  $c_0 = e^{-|\lambda|^2/2}$  とすればよいから

$$c_n(\lambda) = \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\lambda|^2/2} \quad (4.49)$$

になる。これと (4.22) を (4.48) に代入すると

$$|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = \exp(\lambda a^\dagger - |\lambda|^2/2) |0\rangle \quad (4.50)$$

である。なお、 $|c_n(\lambda)|^2 = |\lambda|^{2n} e^{-|\lambda|^2} / n!$  はポアソン分布であるから  $n$ , つまり  $a^\dagger a$  の期待値は  $|\lambda|^2$  になる。

**問題 4.8** 生成演算子  $a^\dagger$  の固有状態  $|\lambda\rangle$  が存在するとする。(4.48) の展開式より  $|\lambda\rangle = 0$  になることを示せ。したがって、 $a^\dagger$  の固有状態は存在しない。

#### キャンベル・ハウスドルフ (Campbell-Hausdorff) の公式

演算子  $A, B$  が

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0 \quad (4.51)$$

を満たすとき

$$e^A e^B = e^{A+B+[A,B]/2} \quad (4.52)$$

が成り立つ。これはキャンベル・ハウスドルフの公式の特別な場合である。

**証明** (4.16) より

$$[B, e^{xA}] = [B, A] \frac{d}{dA} e^{xA} = x [B, A] e^{xA}$$

右側から  $e^{-xA}$  をかければ

$$e^{xA} B e^{-xA} = B + x [A, B] \quad (4.53)$$



である。これを別の方法で示す。 $f(x) = e^{xA} B e^{-xA}$  とすると

$$f'(x) = \frac{de^{xA}}{dx} B e^{-xA} + e^{xA} B \frac{de^{-xA}}{dx} = A e^{xA} B e^{-xA} - e^{xA} B e^{-xA} A = [A, f(x)]$$

これから  $f''(x) = [A, f'(x)] = [A, [A, f(x)]]$ , 一般に

$$f^{(n)}(x) = \underbrace{[A, [A, [\dots, [A, f(x)] \dots]]}_{n \text{ 個}}$$

である。 $f(0) = B$  より

$$e^{xA} B e^{-xA} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \underbrace{[A, [A, [\dots, [A, B] \dots]]}_{n \text{ 個}} \quad (4.54)$$

(4.51) が成り立つ場合,  $n \geq 2$  の項は 0 になるから (4.53) を得る。次に  $g(x) = e^{xA} e^{xB}$  とすると

$$\frac{dg}{dx} = A e^{xA} e^{xB} + e^{xA} B e^{xB} = (A + e^{xA} B e^{-xA}) e^{xA} e^{xB} = (A + B + x[A, B]) g(x)$$

$A + B$  と  $[A, B]$  は可換であるから, あたかも普通の数のように扱ってよい。上式を積分すると  $g(0) = 1$  であるから

$$g(x) = \exp\left((A + B)x + [A, B]x^2/2\right)$$

$x = 1$  とすると (4.52) が求まる。

#### コヒーレント状態の波動関数

$A = \lambda(a^\dagger - a)$ ,  $B = \lambda a$  とすると  $[A, B] = -\lambda^2$  であるから (4.52) より

$$e^{\lambda a^\dagger} = e^{A+B} = e^{\lambda^2/2} e^{\lambda(a^\dagger - a)} e^{\lambda a}$$

したがって, (4.50) は

$$|\lambda\rangle = \exp\left(\frac{\lambda^2 - |\lambda|^2}{2}\right) e^{\lambda(a^\dagger - a)} e^{\lambda a} |0\rangle$$

になる。 $a|0\rangle = 0$  であるから

$$e^{\lambda a} |0\rangle = \left(1 + \lambda a + \frac{\lambda^2}{2} a^2 + \dots\right) |0\rangle = |0\rangle$$

これと  $a^\dagger - a = -\sqrt{2} \frac{d}{dq}$  より  $|\lambda\rangle$  の波動関数  $\varphi_\lambda$  は

$$\varphi_\lambda(q) = \exp\left(\frac{\lambda^2 - |\lambda|^2}{2}\right) \exp\left(-\sqrt{2} \lambda \frac{d}{dq}\right) \varphi_0(q) = \exp\left(\frac{\lambda^2 - |\lambda|^2}{2}\right) \varphi_0(q - \sqrt{2} \lambda)$$

になる。ただし, (1.37) を使った。基底状態の波動関数 (4.23) を代入すると

$$\varphi_\lambda(q) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} \exp\left(\frac{\lambda^2 - |\lambda|^2}{2} - \frac{1}{2} (q - \sqrt{2} \lambda)^2\right) \quad (4.55)$$

になる。(4.44) より

$$q_0 = \alpha \langle \lambda | x | \lambda \rangle = \sqrt{2} \operatorname{Re} \lambda, \quad k_0 = \frac{1}{\hbar \alpha} \langle \lambda | p | \lambda \rangle = \sqrt{2} \operatorname{Im} \lambda$$

とおくと  $\lambda = (q_0 + ik_0)/\sqrt{2}$  であるから (4.55) は

$$\varphi_\lambda(q) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} \exp\left(-\frac{(q-q_0)^2}{2} + ik_0q - ik_0q_0/2\right) \quad (4.56)$$

これは、位相  $e^{-ik_0q_0/2}$  を除けば (4.32) である。

時刻  $t=0$  での状態を  $\lambda = \lambda_0$  であるコヒーレント状態とする。時刻  $t$  の状態  $|\psi(t)\rangle$  は (4.31) の係数  $c_n$  に (4.49) を代入すればよいから

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\lambda_0|^2/2} e^{-i\omega(n+1/2)t} |n\rangle \\ &= e^{-|\lambda_0|^2/2 - i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda_0 e^{-i\omega t} a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = e^{-i\omega t/2} |\lambda = \lambda_0 e^{-i\omega t}\rangle \end{aligned}$$

$|\psi(t)\rangle$  もコヒーレント状態である。 $|\psi(t)\rangle$  での  $x$  と  $p$  の期待値は (4.44) で  $\lambda$  を  $\lambda_0 e^{-i\omega t}$  に置き換えればよいから

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | x | \psi(t) \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{\alpha} \operatorname{Re}(\lambda_0 e^{-i\omega t}) = \langle \lambda_0 | x | \lambda_0 \rangle \cos \omega t + \frac{\langle \lambda_0 | p | \lambda_0 \rangle}{m\omega} \sin \omega t \\ \langle \psi(t) | p | \psi(t) \rangle &= m\omega \frac{\sqrt{2}}{\alpha} \operatorname{Im}(\lambda_0 e^{-i\omega t}) = \langle \lambda_0 | p | \lambda_0 \rangle \cos \omega t - m\omega \langle \lambda_0 | x | \lambda_0 \rangle \sin \omega t \end{aligned}$$

になり (4.37), (4.39) を再現する。 $\Delta x, \Delta p$  は (4.45) で与えられるから時間に依存しない。したがって、常に不確定性が最小の状態である。これも既に波束の運動のところで示した。

**問題 4.9** コヒーレント状態の定義式 (4.43) から

$$a \varphi_\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( q + \frac{d}{dq} \right) \varphi_\lambda = \lambda \varphi_\lambda$$

である。この微分方程式を解き (4.55) を求めよ。同様に、無限遠で有界な  $a^\dagger$  の固有状態は存在しないことを示せ。

**問題 4.10**  $a_H(t) = e^{iHt/\hbar} a e^{-iHt/\hbar}$  とする。ただし、 $H = \hbar\omega (a^\dagger a + 1/2)$  である。 $a_H$  は 246 ページのハイゼンベルグ描像での演算子である。

1.  $\frac{d}{dt} a_H = -i\omega a_H$  を示せ。この微分方程式を解けば  $a_H(t) = e^{-i\omega t} a$  である。
2. (4.54) より  $a_H(t) = e^{-i\omega t} a$  を示せ。
3.  $t=0$  のとき  $|\lambda_0\rangle$  の状態は、時刻  $t$  では  $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\lambda_0\rangle$  になる。これから

$$a |\psi(t)\rangle = \lambda_0 e^{-i\omega t} |\psi(t)\rangle$$

を示せ。

**コヒーレント状態の直交性と完全性**

(4.48), (4.49) から

$$\begin{aligned} \langle \lambda | \lambda' \rangle &= \sum_{nn'} c_n^*(\lambda) c_{n'}(\lambda') \langle n | n' \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^*(\lambda) c_n(\lambda') = \exp\left(-\frac{|\lambda|^2 + |\lambda'|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda^* \lambda')^n}{n!} \\ &= \exp\left(-\frac{|\lambda|^2 + |\lambda'|^2}{2} + \lambda^* \lambda'\right) \end{aligned}$$

$|e^z| = e^{\operatorname{Re} z} = e^{(z+z^*)/2}$  であるから

$$|\langle \lambda | \lambda' \rangle| = \exp\left(-\frac{|\lambda|^2 + |\lambda'|^2}{2} + \frac{\lambda^* \lambda' + \lambda \lambda'^*}{2}\right) = \exp\left(-\frac{|\lambda - \lambda'|^2}{2}\right)$$

になる。したがって、コヒーレント状態は直交系ではないが、 $\lambda$  と  $\lambda'$  が複素平面上で十分離れていれば近似的に直交する。

コヒーレント状態は直交系ではないが完全系である。

$$S(x, x') = \frac{1}{\pi} \int d^2 \lambda \varphi_\lambda(x) \varphi_\lambda^*(x')$$

を考える。ここで  $\lambda_R = \operatorname{Re} \lambda$ ,  $\lambda_I = \operatorname{Im} \lambda$  とするとき  $d^2 \lambda = d\lambda_R d\lambda_I$  である。(4.48), (4.49) から

$$S(x, x') = \frac{1}{\pi} \sum_{nn'} \frac{1}{\sqrt{n! n'!}} \varphi_n(x) \varphi_{n'}(x') \int d^2 \lambda e^{-|\lambda|^2} (\lambda^*)^n \lambda^{n'}$$

$\lambda$  を極形式で表して  $\lambda = r e^{i\theta}$  とすると

$$\begin{aligned} \int d^2 \lambda e^{-|\lambda|^2} (\lambda^*)^n \lambda^{n'} &= \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\theta r^{n+n'+1} e^{-r^2} e^{i(n'-n)\theta} \\ &= 2\pi \delta_{nn'} \int_0^\infty dr r^{2n+1} e^{-r^2} = \pi \delta_{nn'} \int_0^\infty dx x^n e^{-x} \end{aligned}$$

$(e^{-x})' = -e^{-x}$  を用いて部分積分を行うと

$$\int_0^\infty dx x^n e^{-x} = [-x^n e^{-x}]_0^\infty + n \int_0^\infty dx x^{n-1} e^{-x} = n \int_0^\infty dx x^{n-1} e^{-x} = \cdots = n! \int_0^\infty dx e^{-x} = n!$$

であるから

$$S(x, x') = \sum_{n=0}^\infty \varphi_n(x) \varphi_n(x') = \delta(x - x')$$

になる。したがって、コヒーレント状態は完全系である。任意の状態  $\psi(x)$  は

$$\psi(x) = \int dx' \psi(x') \delta(x - x') = \frac{1}{\pi} \int d^2 \lambda \varphi_\lambda(x) \int dx' \varphi_\lambda^*(x') \psi(x')$$

つまり

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2 \lambda |\lambda\rangle \langle \lambda | \psi \rangle, \quad \text{ただし} \quad \langle \lambda | \psi \rangle = \int_{-\infty}^\infty dx \varphi_\lambda^*(x) \psi(x)$$

と展開できる。 $|\lambda\rangle$  は直交系ではないので、 $|\lambda\rangle$  は他のコヒーレント状態の重ね合わせで書ける。

$$|\lambda\rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2 \lambda' |\lambda'\rangle \langle \lambda' | \lambda \rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2 \lambda' |\lambda'\rangle \exp\left(-\frac{|\lambda|^2 + |\lambda'|^2}{2} + \lambda \lambda'^*\right) \quad (4.57)$$

また、 $|n\rangle$  は

$$|n\rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2 \lambda |\lambda\rangle \langle \lambda | n \rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2 \lambda |\lambda\rangle c_n^*(\lambda) = \frac{1}{\pi} \int d^2 \lambda |\lambda\rangle \frac{(\lambda^*)^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\lambda|^2/2} \quad (4.58)$$

と表せる。

**問題 4.11** (4.50) は

$$|\lambda\rangle = D(\lambda)|0\rangle, \quad \text{ただし} \quad D(\lambda) = \exp(\lambda a^\dagger - \lambda^* a)$$

と表せることを示せ。また,  $D$  が次の性質を満たすことを示せ。

$$D^\dagger(\lambda) = D(-\lambda), \quad D^\dagger(\lambda)aD(\lambda) = a + \lambda$$

$D(-\lambda) = D^{-1}(\lambda)$  より  $D(\lambda)D^\dagger(\lambda) = D^\dagger(\lambda)D(\lambda) = 1$  になるから  $D(\lambda)$  はユニタリ演算子である。また, 2 番目の式より  $aD(\lambda) = D(\lambda)a + \lambda D(\lambda)$  であるから

$$a|\lambda\rangle = aD(\lambda)|0\rangle = (D(\lambda)a + \lambda D(\lambda))|0\rangle = \lambda D(\lambda)|0\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

である。

**問題 4.12** (4.57), (4.58) より (4.41) で定義した  $G(x, x', t)$  はコヒーレント状態を用いて

$$G(x, x', t) = \frac{e^{-i\omega t/2}}{\pi} \int d^2\lambda \varphi_{\lambda(t)}(x) \varphi_{\lambda}^*(x'), \quad \text{ただし} \quad \lambda(t) = \lambda e^{-i\omega t}$$

と表せることを示せ。積分を実行して (4.42) を求めよ。

## 4.5 2次元等方調和振動子

ハミルトニアン  $H$  が

$$H = H_1 + H_2, \quad H_k = \frac{p_k^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x_k^2$$

の場合を考える。 $\omega$  は  $k = 1, 2$  で同じとする (等方)。**問題 6.16** で動径方向の微分方程式を解き  $H$  の固有値と固有関数を求めるが, ここでは生成・消滅演算子を用いる。(4.10) と同様に

$$a_k = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x_k + \frac{i}{m\omega} p_k \right)$$

とすれば

$$[a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk}, \quad [a_j, a_k] = 0, \quad H = \hbar\omega(N + 1), \quad N = a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2$$

になる。1次元の結果から  $n$  を非負の整数として

$$a_k^\dagger a_k |n\rangle = n |n\rangle, \quad |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_k^\dagger)^n |0\rangle$$

である。 $a_1^\dagger a_1$  と  $a_2^\dagger a_2$  の固有状態を区別するため  $n$  をそれぞれ  $n_1, n_2$  で表す。系の状態は  $|n_1\rangle$  と  $|n_2\rangle$  の直積  $|n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle$  になる。(4.25) の  $\varphi_n(x)$  で表せば

$$\varphi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \varphi_{n_1}(x_1) \varphi_{n_2}(x_2)$$

である。 $x_1$  と  $x_2$  は独立変数であるから  $a_1^\dagger, a_1$  は  $|n_1\rangle$  だけに作用し,  $a_2^\dagger, a_2$  は  $|n_2\rangle$  だけに作用する。したがって

$$\begin{aligned} a_1^\dagger a_1 |n_1, n_2\rangle &= (a_1^\dagger a_1 |n_1\rangle) |n_2\rangle = n_1 |n_1, n_2\rangle \\ a_2^\dagger a_2 |n_1, n_2\rangle &= |n_1\rangle (a_2^\dagger a_2 |n_2\rangle) = n_2 |n_1, n_2\rangle \end{aligned} \quad \therefore \quad N |n_1, n_2\rangle = (n_1 + n_2) |n_1, n_2\rangle$$

$|n_1, n_2\rangle$  は  $H$  の固有関数で固有値は  $E_{n_1 n_2} = \hbar\omega(n_1 + n_2 + 1)$  になる。 $E_{n_1 n_2}$  は和  $n = n_1 + n_2$  だけで決まる。 $n + 1$  個の互いに直交する

$$|n_1, n_2 = n - n_1\rangle, \quad n_1 = 0, 1, \dots, n$$

は, 同じ固有値  $\hbar\omega(n+1)$  になるから  $n+1$  重に縮退する。  $C_n$  を任意定数として

$$\sum_{n_1=0}^n C_{n_1} |n_1, n_2 = n - n_1\rangle \quad (4.59)$$

も  $H$  の固有関数で固有値は  $\hbar\omega(n+1)$  である。  $C_n$  を適当に取れば,  $|n_1, n_2\rangle$  とは別の互いに直交する  $H$  の固有関数を作れる。

軌道角運動量  $\hbar L_3 = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_3$  を考える ( $H$  は  $z$  軸まわりの回転に対して不変)。

$$L_3 = \frac{1}{\hbar}(x_1 p_2 - x_2 p_1) = \frac{i}{2} \left( (a_1^\dagger + a_1)(a_2^\dagger - a_2) - (a_2^\dagger + a_2)(a_1^\dagger - a_1) \right) = i(a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2)$$

である。

$$a_\pm^\dagger = \frac{a_1^\dagger \pm ia_2^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad \text{つまり} \quad a_1^\dagger = \frac{a_+^\dagger + a_-^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad a_2^\dagger = \frac{a_+^\dagger - a_-^\dagger}{\sqrt{2}i} \quad (4.60)$$

とすると ( $\mu, \nu = \pm$ )

$$[a_\mu, a_\nu^\dagger] = \delta_{\mu\nu}, \quad [a_\mu, a_\nu] = 0$$

であり

$$H = \hbar\omega(N+1), \quad N = a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_-, \quad L_3 = a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_- \quad (4.61)$$

になる。  $a_\mu^\dagger a_\mu$  の固有値  $n_\mu$  も非負の整数になり

$$a_\mu^\dagger a_\mu |n_\mu\rangle = n_\mu |n_\mu\rangle, \quad |n_\mu\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_\mu!}} (a_\mu^\dagger)^{n_\mu} |0\rangle$$

である。したがって,  $|n_+, n_-\rangle = |n_+\rangle |n_-\rangle$  は  $N$  と  $L_3$  の同時固有関数

$$N|n_+, n_-\rangle = (n_+ + n_-)|n_+, n_-\rangle, \quad L_3|n_+, n_-\rangle = (n_+ - n_-)|n_+, n_-\rangle$$

である。  $N$  の固有値が  $n$ , つまり,  $H$  の固有値が  $\hbar\omega(n+1)$  のとき,  $L_3$  の固有値  $\ell$  は  $n+1$  個の値

$$\ell = n_+ - n_- = n - 2n_- = n, n-2, \dots, -n+2, -n$$

をとる。  $n \leq 3$  の場合, 右図に  $(\ell, n)$  を  $\bullet$  で示す。  $(\ell, n)$  を指定すると, 状態は一意に決まる。  $[a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger$  より

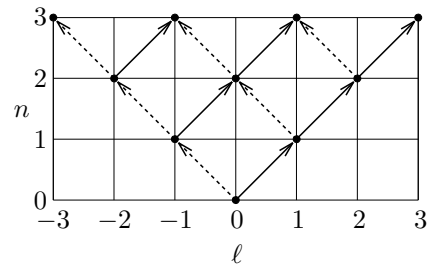
$$[N, a_\pm^\dagger] = a_\pm^\dagger, \quad [L_3, a_\pm^\dagger] = \pm a_\pm^\dagger$$

になるから,  $a_\pm^\dagger$  は両者ともに  $n$  を  $n+1$  にする。一方,  $L_3$  に対して  $a_\pm^\dagger$  は固有値  $\ell$  を  $\ell \pm 1$  にする。実線の矢印は  $a_+^\dagger$ , 破線の矢印は  $a_-^\dagger$  の作用を表す。

$|n_+, n_-\rangle$  は (4.59) のように  $|n_1, n_2\rangle$  の線形結合で表せる。例えば

$$\begin{aligned} |n_+ = n, n_- = 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_+^\dagger)^n |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} (a_1^\dagger + ia_2^\dagger)^n |0, 0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sum_{n_1=0}^n {}_n C_{n_1} (a_1^\dagger)^{n_1} (ia_2^\dagger)^{n-n_1} |0, 0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{n_1=0}^n i^{n-n_1} \sqrt{{}_n C_{n_1}} |n_1, n_2 = n - n_1\rangle \end{aligned}$$

である。基底状態  $|0, 0\rangle$  は縮退しないから  $|n_1, n_2\rangle$  でも  $|n_+, n_-\rangle$  でも同じである。



99 ページで示すように、可換な演算子には同時固有関数が存在する。

$$[a_k^\dagger a_k, a_i^\dagger a_j] = a_k^\dagger [a_k, a_i^\dagger] a_j + a_i^\dagger [a_k^\dagger, a_j] a_k = a_k^\dagger a_j \delta_{ki} - a_i^\dagger a_k \delta_{kj} = a_i^\dagger a_j (\delta_{ki} - \delta_{kj})$$

$k$  について和をとれば  $[H, a_i^\dagger a_j] = 0$  になるから  $[H, L_3] = 0$  である。したがって、 $H$  と  $L_3$  の同時固有関数が存在し  $|n_+, n_-\rangle$  で与えられる。一方  $[H_1, H_2] = 0$  であるから  $H_1$  と  $H_2$  の同時固有関数が存在する。これは  $|n_1, n_2\rangle$  である。基底状態を除くと、 $|n_+, n_-\rangle$  は  $H_1, H_2$  の固有関数ではなく、 $|n_1, n_2\rangle$  は  $L_3$  の固有関数ではない。

## 5 角運動量

角運動量の量子力学は量子力学における代数的扱いの代表例であり、これを理解することは量子力学自体の理解を深める。また、この代数は最も単純なリー代数 ( Lie algebra ) である。リー代数は素粒子の標準模型 ( 弱電相互作用を記述するワインバーグ・サラム模型と強い相互作用を扱う量子色力学 ) で重要な役割をする。原子や原子核のような有限系の状態は角運動量の量子数で指定されるので、この点でも角運動量は重要である。

角運動量の量子論では交換関係が重要になる。 $x, y, z$  成分を添字 1, 2, 3 で表す。 $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z, p_j = -i\hbar \partial/\partial x_j$  である。(1.1) より交換関係

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (5.1)$$

が成り立つ。また、一般に演算子  $A, B, C, D$  に対して (1.11) より

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C, \quad [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (5.2)$$

$$[A + B, C + D] = [A, C] + [A, D] + [B, C] + [B, D] \quad (5.3)$$

である。演算子を含む関係式は任意の関数に作用したとき成り立つ関係式を表す。

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B})_1 = A_2 B_3 - A_3 B_2, \quad \therefore (\mathbf{A} \times \mathbf{A})_1 = A_2 A_3 - A_3 A_2 = [A_2, A_3] \quad (5.4)$$

ベクトル  $\mathbf{A}$  が演算子で各成分が非可換のとき  $\mathbf{A} \times \mathbf{A} \neq 0$  である。

### 5.1 角運動量の定義

古典力学では軌道角運動量  $\mathbf{L}$  は  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  である。これに対応して量子力学では  $\mathbf{L}$  は演算子

$$\hbar \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla$$

になる。このテキストでは  $\hbar$  を取り出して  $\mathbf{L}$  を定義する。 $\mathbf{L}$  は無次元で、各種関係式に  $\hbar$  が現れる煩雑さがなくなる。軌道角運動量の交換関係を求める。非可換な部分を「 $\square$ 」で結ぶと

$$\begin{aligned} \hbar^2 [L_1, L_2] &= [x_2 \overbrace{p_3 - x_3 p_2, x_3 p_1 - x_1 p_3}] = x_2 [p_3, x_3] p_1 + x_1 [x_3, p_3] p_2 \\ &= i\hbar (x_1 p_2 - x_2 p_1) = i\hbar^2 L_3 \end{aligned}$$

同様に  $[L_2, L_3] = iL_1, [L_3, L_1] = iL_2$  である。まとめて

$$[L_i, L_j] = i \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k \quad \text{あるいは} \quad \mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\mathbf{L}$$

になる。 $\varepsilon_{ijk}$  は 397 ページのレビ・チビタの記号である。

一般に、各成分がエルミート演算子で交換関係

$$[J_x, J_y] = iJ_z, \quad [J_y, J_z] = iJ_x, \quad [J_z, J_x] = iJ_y \quad (5.5)$$

つまり

$$[J_i, J_j] = i \sum_k \varepsilon_{ijk} J_k \quad \text{あるいは} \quad \mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\mathbf{J} \quad (5.6)$$

を満たすとき  $\hbar \mathbf{J}$  を角運動量 ( angular momentum ) と定義する。 $\mathbf{J}$  は  $\mathbf{r}$  と  $\mathbf{p}$  で表される必要はなく、上の交換関係を満たせばよい。軌道角運動量は角運動量的一种である。角運動量の固有値と固有関数の性質は、この交換関係により非常に強い制限を受ける。

## 5.2 可換な演算子と同時固有関数

最初に, 2つの演算子  $A$  と  $B$  の同時固有関数  $|a, b\rangle$

$$A|a, b\rangle = a|a, b\rangle, \quad B|a, b\rangle = b|a, b\rangle$$

が存在し完全系をなす場合を考える。任意の状態  $|\psi\rangle$  は  $|\psi\rangle = \sum_{ab} C_{ab} |a, b\rangle$  と展開できる。

$$AB|\psi\rangle = A \sum_{ab} C_{ab} B|a, b\rangle = A \sum_{ab} C_{ab} b|a, b\rangle = \sum_{ab} C_{ab} bA|a, b\rangle = \sum_{ab} C_{ab} ab|a, b\rangle$$

同様にして

$$BA|\psi\rangle = \sum_{ab} C_{ab} ab|a, b\rangle, \quad \therefore [A, B]|\psi\rangle = 0$$

である。 $|\psi\rangle$  は任意であるから  $[A, B] = 0$  になり  $A$  と  $B$  は可換である。

逆に,  $[A, B] = 0$  ならば  $A$  と  $B$  の同時固有関数が存在することを示す。固有値が  $a$  である  $A$  の固有関数を  $|a\rangle$  とする, つまり  $A|a\rangle = a|a\rangle$  である。 $AB = BA$  より

$$AB|a\rangle = BA|a\rangle = aB|a\rangle$$

これから  $B|a\rangle$  も固有値  $a$  である  $A$  の固有関数である。 $a$  が縮退のない固有値ならば,  $B|a\rangle$  は  $|a\rangle$  に比例するから,  $b$  を定数として  $B|a\rangle = b|a\rangle$  になる。 $|a\rangle$  は  $B$  の固有関数でもある。

固有値  $a$  が  $n$  重に縮退しているとき, 固有値  $a$  に属する互いに直交する固有関数を  $|a, i\rangle$

$$A|a, i\rangle = a|a, i\rangle, \quad \langle a, i | a, j \rangle = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n$$

とする (直交化については9ページ)。 $B|a, i\rangle$  は, 固有値が  $a$  である  $A$  の固有関数であるから

$$B|a, i\rangle = \sum_{k=1}^n |a, k\rangle \mathcal{B}_{ki}, \quad \langle a, i | B | a, j \rangle = \sum_{k=1}^n \langle a, i | a, k \rangle \mathcal{B}_{kj} = \mathcal{B}_{ij}$$

と展開できる。 $|a, i\rangle$  は  $B$  の固有関数とは限らない。エルミート演算子  $B^\dagger = B$  ならば, (1.18) より

$$\mathcal{B}_{ji}^* = \langle a, i | B^\dagger | a, j \rangle = \langle a, i | B | a, j \rangle = \mathcal{B}_{ij}$$

になるから,  $n \times n$  行列  $\mathcal{B} = (\mathcal{B}_{ij})$  はエルミート行列である。また,  $B$  がユニタリ演算子ならば  $\mathcal{B}$  はユニタリ行列になる。 $\mathcal{B}\mathcal{B}^\dagger = \mathcal{B}^\dagger\mathcal{B}$  である正規行列は (エルミート行列とユニタリ行列はこれを満たす), 適当なユニタリ行列  $U$  で対角化できるから

$$(U^\dagger \mathcal{B} U)_{ij} = b_i \delta_{ij}, \quad \therefore (\mathcal{B} U)_{ij} = (U U^\dagger \mathcal{B} U)_{ij} = \sum_k U_{ik} (U^\dagger \mathcal{B} U)_{kj} = b_j U_{ij}$$

とおける。 $|a, i'\rangle = \sum_k |a, k\rangle U_{ki}$  とすると,  $|a, i'\rangle$  は  $A$  の固有関数であり

$$B|a, i'\rangle = \sum_k B|a, k\rangle U_{ki} = \sum_{k,j} |a, j\rangle \mathcal{B}_{jk} U_{ki} = \sum_j |a, j\rangle (\mathcal{B} U)_{ji} = b_i |a, i'\rangle$$

になるから,  $B$  の固有関数でもある。したがって,  $A$  の固有関数  $|a, i\rangle$  が  $B$  の固有関数でない場合でも, 適当な線形結合  $|a, i'\rangle$  を  $A$  と  $B$  の同時固有関数にできる。



可換な演算子  $A, B$  の同時固有関数が一意に定まらない場合,  $A, B$  の双方と可換な 3 番目の演算子  $C$  を加えて, 3 つの演算子の同時固有関数を考える。一般に, 互いに可換な演算子の組  $A, B, \dots, D$  の同時固有関数が一意に定まるとき, この組を同時観測可能量の完全な組という。

$[A, B] = 0, [A, C] = 0$  のとき ( $[B, C] = 0$  とは限らない),  $A$  の固有値が縮退していないならば  $A$  の固有関数  $|a\rangle$  は  $B, C$  の固有関数になる。固有値をそれぞれ  $b, c$  とすると, 全ての  $|a\rangle$  が縮退していなければ

$$[B, C]|\psi\rangle = \sum_a (BC - CB)|a\rangle\langle a|\psi\rangle = \sum_a (bc - cb)|a\rangle\langle a|\psi\rangle = 0$$

になり  $[B, C] = 0$  である。一方,  $A$  の固有値に縮退がある場合, 縮退した  $A$  の固有関数の線形結合により,  $A, B$  の同時固有関数  $|\psi_{ab}\rangle$  と  $A, C$  の同時固有関数  $|\psi_{ac}\rangle$  を作れる。一般に,  $|\psi_{ab}\rangle$  と  $|\psi_{ac}\rangle$  は異なる。この場合,  $|\psi_{ab}\rangle$  は  $C$  の固有関数とは限らないから  $[B, C] = 0$  とは言えない。以下で示すように,  $[\mathbf{J}^2, J_x] = 0, [\mathbf{J}^2, J_z] = 0$  であり  $\mathbf{J}^2$  の固有関数は縮退している。このとき  $[J_x, J_z] \neq 0$  である。

### 5.3 角運動量の固有値と固有関数

(5.2) を使うと, 例えば

$$\begin{aligned} [J_x, \mathbf{J}^2] &= [J_x, J_y^2 + J_z^2] = J_y[J_x, J_y] + [J_x, J_y]J_y + J_z[J_x, J_z] + [J_x, J_z]J_z \\ &= i(J_yJ_z + J_zJ_y - J_zJ_y - J_yJ_z) = 0 \end{aligned}$$

あるいは

$$[J_i, \sum_j J_j J_j] = \sum_j ([J_i, J_j] J_j + J_j [J_i, J_j]) = i \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} (J_k J_j + J_j J_k)$$

2 項目で  $j$  を  $k, k$  を  $j$  と書き直し  $\varepsilon_{ikj} = -\varepsilon_{ijk}$  に注意すると

$$[J_i, \sum_j J_j J_j] = i \sum_{jk} (\varepsilon_{ijk} + \varepsilon_{ikj}) J_k J_j = 0$$

である。したがって,  $\mathbf{J}$  の各成分は非可換であるが  $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$  と各成分は可換である。

2 つの互いにエルミート共役な演算子

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y, \quad J_{\pm}^{\dagger} = J_{\mp}$$

を導入する。(5.5) から

$$[J_z, J_{\pm}] = [J_z, J_x] \pm i[J_z, J_y] = iJ_y \pm J_x = \pm J_{\pm} \quad (5.7)$$

$$[J_+, J_-] = [iJ_y, J_x] + [J_x, -iJ_y] = -2i[J_x, J_y] = 2J_z \quad (5.8)$$

になる。 $J_x = (J_+ + J_-)/2, J_y = (J_+ - J_-)/2i$  であるから

$$\mathbf{J}^2 = \frac{(J_+ + J_-)^2}{4} - \frac{(J_+ - J_-)^2}{4} + J_z^2 = \frac{J_+ J_- + J_- J_+}{2} + J_z^2$$

これと (5.8) より

$$J_- J_+ = \mathbf{J}^2 - J_z^2 - J_z, \quad J_+ J_- = \mathbf{J}^2 - J_z^2 + J_z \quad (5.9)$$

である。

演算子  $A$  を  $|\psi\rangle$  に作用させて  $|a\rangle = A|\psi\rangle$  とすると,  $\langle a|a\rangle$  は非負の実数であるから

$$\langle a|a\rangle = \langle a|a\rangle^* = \langle a|A|\psi\rangle^* = \langle \psi|A^\dagger|a\rangle = \langle \psi|A^\dagger A|\psi\rangle \geq 0 \quad (5.10)$$

になる。 $A$  がエルミート演算子  $A^\dagger = A$  ならば  $\langle \psi|A^2|\psi\rangle \geq 0$  である。

可換な演算子には同時固有関数が存在する。 $\mathbf{J}$  の各成分は互いに非可換であるが,  $\mathbf{J}$  の各成分と  $\mathbf{J}^2$  は可換であるから,  $\mathbf{J}^2$  と  $\mathbf{J}$  の 1 つの成分との同時固有関数を考えることができる。慣例的に 1 つの成分として  $J_z$  を採用する。 $\mathbf{J}^2$  の固有値が  $\lambda$  であり,  $J_z$  の固有値が  $m$  である規格化された同時固有関数を  $\lambda, m$  でラベル付けして  $|\lambda m\rangle$  で表す:

$$\mathbf{J}^2|\lambda m\rangle = \lambda|\lambda m\rangle, \quad J_z|\lambda m\rangle = m|\lambda m\rangle, \quad \langle \lambda m|\lambda m\rangle = 1 \quad (5.11)$$

である。 $\lambda$  と  $m$  を指定しても, 独立な  $|\lambda m\rangle$  が複数存在する場合がある。例えば, エルミート演算子  $F$  が  $[\mathbf{J}, F] = 0$  ならば,  $\mathbf{J}^2, J_z, F$  の同時固有関数

$$\mathbf{J}^2|f, \lambda m\rangle = \lambda|f, \lambda m\rangle, \quad J_z|f, \lambda m\rangle = m|f, \lambda m\rangle, \quad F|f, \lambda m\rangle = f|f, \lambda m\rangle$$

が存在する。 $f$  は複数の値をとるから  $\lambda m$  の状態は 1 つではない。複数ある場合, ある特定の  $|\lambda m\rangle$  を考え (上の例では  $f$  を固定する), 以下では  $\lambda$  と  $m$  を指定したとき  $|\lambda m\rangle$  は 1 つとする。必要な条件は (5.11) だけである。

$\mathbf{J}^2, J_z$  はエルミート演算子であるから  $\lambda$  と  $m$  は実数であり, (5.10) より  $\langle \lambda m|\mathbf{J}^2|\lambda m\rangle = \lambda \geq 0$  である。また, (5.10) で  $A = J_+$  とすれば (5.9) より

$$\langle \lambda m|J_-J_+|\lambda m\rangle = \langle \lambda m|(\mathbf{J}^2 - J_z^2 - J_z)|\lambda m\rangle = \langle \lambda m|(\lambda - m^2 - m)|\lambda m\rangle \geq 0$$

$\lambda - m^2 - m$  は数であるから積分の前に出してもよい。したがって

$$\langle \lambda m|J_-J_+|\lambda m\rangle = \lambda - m^2 - m \geq 0 \quad (5.12)$$

同様にして

$$\langle \lambda m|J_+J_-|\lambda m\rangle = \langle \lambda m|(\mathbf{J}^2 - J_z^2 + J_z)|\lambda m\rangle = \lambda - m^2 + m \geq 0 \quad (5.13)$$

上の 2 つの不等式を  $m$  について解けば

$$-j \leq m \leq j, \quad \text{ただし} \quad j = \frac{\sqrt{1+4\lambda}-1}{2} \geq 0$$

になり,  $\lambda$  を与えたとき  $m$  には最大値  $m_{\max}$ , 最小値  $m_{\min}$  が存在する。 $j$  の定義式より  $\lambda = j(j+1)$  である。以下では  $\lambda$  の代わりに  $j$  を用いて状態を指定する:

$$\mathbf{J}^2|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle, \quad J_z|jm\rangle = m|jm\rangle, \quad j \geq 0$$

である。(5.7) より

$$J_zJ_\pm|jm\rangle = (J_\pm J_z \pm J_\pm)|jm\rangle = (m \pm 1)J_\pm|jm\rangle$$

$J_\pm$  と  $\mathbf{J}^2$  は可換であるから

$$\mathbf{J}^2J_\pm|jm\rangle = J_\pm\mathbf{J}^2|jm\rangle = j(j+1)J_\pm|jm\rangle$$

$J_\pm|jm\rangle$  も  $\mathbf{J}^2, J_z$  の同時固有関数で, 固有値はそれぞれ  $j(j+1), m \pm 1$  である。 $J_+|jm_{\max}\rangle \neq 0$  ならば  $J_+|jm_{\max}\rangle$  の  $J_z$  の固有値は  $m_{\max} + 1$  になり  $m_{\max}$  が最大の固有値であることと矛盾するか

ら  $J_+|jm_{\max}\rangle = 0$  である。同様にして  $J_-|jm_{\min}\rangle = 0$  でなければならない。(5.12) で  $m = m_{\max}$ , (5.13) で  $m = m_{\min}$  とすれば

$$\begin{aligned} j(j+1) - m_{\max}^2 - m_{\max} &= (j - m_{\max})(j + m_{\max} + 1) = 0 \\ j(j+1) - m_{\min}^2 + m_{\min} &= (j + m_{\min})(j - m_{\min} + 1) = 0 \end{aligned}$$

になるから  $m_{\max} = j$ ,  $m_{\min} = -j$  である。 $|jm_{\max}\rangle$  に  $J_-$ ,  $J_-^2, \dots, J_-^n$  を作用すると,  $J_z$  の固有値は  $m_{\max} - 1, m_{\max} - 2, \dots, m_{\max} - n$  になるから,  $m_{\max} - n = m_{\min}$  を満たす  $n$  が存在する。 $m_{\max} = j$ ,  $m_{\min} = -j$  より  $2j = n$  になり,  $2j$  は負でない整数である。結局, 角運動量の固有値と固有関数は

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2|jm\rangle &= j(j+1)|jm\rangle, & j &= 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots \\ J_z|jm\rangle &= m|jm\rangle, & m &= -j, -j+1, \dots, j-1, j \end{aligned} \quad (5.14)$$

になる。 $j$  を与えたとき  $m$  は  $2j+1$  個の値をとる。エルミート演算子の固有関数の規格直交性 (1.23) より

$$\langle jm|j'm'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \quad (5.15)$$

である。なお, 角運動量の大きさは  $\hbar\sqrt{j(j+1)}$  であるが, 簡略して大きさ  $j$  という。角運動量の大きさが  $j$  の状態とは  $\mathbf{J}^2$  の固有値が  $j(j+1)$  の状態を指す。

$J_+|jj\rangle = 0$  である。一方,  $m < j$  のとき  $|\psi\rangle \equiv J_+|jm\rangle$  は  $\mathbf{J}^2$ ,  $J_z$  の同時固有関数で, 固有値はそれぞれ  $j(j+1)$ ,  $m+1$  である。 $|jm+1\rangle$  の状態は 1 つだけであるから  $|\psi\rangle = c_{jm}|jm+1\rangle$  とおける。

$$\langle\psi|\psi\rangle = |c_{jm}|^2\langle jm+1|jm+1\rangle = |c_{jm}|^2, \quad (5.12) \text{ より } \langle\psi|\psi\rangle = (j-m)(j+m+1)$$

である。 $c_{jm}$  の位相は決まらないが, 最も便利のように決めればよい。 $c_{jm}$  を正の実数にとれば

$$J_+|jm\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|jm+1\rangle \quad (5.16)$$

である。 $J_+|jj\rangle = 0$  であるから, 上式は  $m = j$  のときも成り立つとしてよい。この両辺に  $J_-$  を作用させ (5.9) を用いれば

$$\sqrt{(j-m)(j+m+1)}J_-|jm+1\rangle = J_-J_+|jm\rangle = (j-m)(j+m+1)|jm\rangle$$

$m+1$  を  $m$  に置き換えると

$$J_-|jm\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|jm-1\rangle \quad (5.17)$$

$J_+$  は  $J_z$  の固有値を 1 増加させるので**上昇演算子**,  $J_-$  を**下降演算子**, あわせて**昇降演算子**という。

(5.16) あるいは (5.17) を繰り返し適用すれば, ある 1 つの固有関数  $|jm_0\rangle$  から他の固有関数  $|jm\rangle$  を作れる。例えば

$$|jj-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j}}J_-|jj\rangle, \quad |jj-2\rangle = \frac{1}{\sqrt{(2j-1)\cdot 2}}J_-|jj-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j(2j-1)\cdot 2}}(J_-)^2|jj\rangle$$

であるから, 一般に

$$|jj-k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j(2j-1)\cdots(2j-k+1)k!}}(J_-)^k|jj\rangle = \sqrt{\frac{(2j-k)!}{(2j)!k!}}(J_-)^k|jj\rangle$$

$m = j - k$  とすると

$$|jm\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} (J_-)^{j-m} |jj\rangle \quad (5.18)$$

である。同様にして

$$|jm\rangle = \sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}} (J_+)^{j+m} |j-j\rangle \quad (5.19)$$

になる。

運動量演算子  $-i\hbar\nabla$  の3つの成分は互いに可換であるから、これらは同時に確定した値をとれる、つまり、3つの成分の同時固有関数  $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$  が存在する。一方、 $\mathbf{J}$  の各成分は非可換であるから、 $J_x, J_y, J_z$  は同時に確定した値をとることはできない (ただし  $j=0$  の場合は例外的である)。これは運動量と角運動量の大きな違いである。 $J_x = (J_+ + J_-)/2$  であるから (5.16), (5.17) より

$$J_x|jm\rangle = \frac{1}{2}(c_+|jm+1\rangle + c_-|jm-1\rangle), \quad c_{\pm} = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)} \quad (5.20)$$

規格直交性  $\langle jm|jm'\rangle = \delta_{mm'}$  から

$$\langle jm|J_x|jm\rangle = \frac{1}{2}(c_+\langle jm|jm+1\rangle + c_-\langle jm|jm-1\rangle) = 0, \quad \text{同様に} \quad \langle jm|J_y|jm\rangle = 0$$

$|\psi\rangle = J_x|jm\rangle$  とおくと  $\langle jm|J_x^2|jm\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$  であるから (5.20) より

$$\begin{aligned} \langle jm|J_x^2|jm\rangle &= \frac{1}{4}(c_+^2\langle jm+1|jm+1\rangle + c_-^2\langle jm-1|jm-1\rangle) \\ &\quad + \frac{c_+c_-}{4}(\langle jm-1|jm+1\rangle + \langle jm+1|jm-1\rangle) \\ &= \frac{c_+^2 + c_-^2}{4} = \frac{j(j+1) - m^2}{2} \end{aligned}$$

あるいは、対称性より  $\langle jm|J_x^2|jm\rangle = \langle jm|J_y^2|jm\rangle$  であるから

$$\langle jm|J_x^2|jm\rangle = \langle jm|J_y^2|jm\rangle = \frac{1}{2}\langle jm|(\mathbf{J}^2 - J_z^2)|jm\rangle = \frac{j(j+1) - m^2}{2}$$

したがって

$$\Delta J_x = \Delta J_y = \sqrt{\frac{j(j+1) - m^2}{2}}, \quad \text{ただし} \quad \Delta J_k = \sqrt{\langle jm|J_k^2|jm\rangle - \langle jm|J_k|jm\rangle^2} \quad (5.21)$$

$j \neq 0$  の場合  $\Delta J_x = \Delta J_y \neq 0$  であり、 $J_z$  の固有状態では  $J_x, J_y$  の値は確定した値にならない。

$$\Delta J_x \Delta J_y = \frac{j(j+1) - m^2}{2} \geq \frac{|m|(|m|+1) - m^2}{2} = \frac{|m|}{2} = \frac{1}{2}|\langle jm|[J_x, J_y]|jm\rangle|$$

である。これは不確定性関係 (1.39) である。

古典力学的に考えれば、角運動量ベクトルが  $z$  軸方向を向けば  $J_z^2 = \mathbf{J}^2$  である。これを量子力学に訳せば  $m^2 = j(j+1)$  であるが、上の議論から分かるように、不確定性から  $m^2 = j(j+1)$  は許されない ( $j=0$  の場合は例外)。ただし、 $j \rightarrow \infty$  の極限では  $j(j+1) \approx j^2$  になるから、 $|j \pm j\rangle$  は角運動量ベクトルが  $z$  軸方向を向いた状態と言える。

#### 5.4 軌道角運動量と球面調和関数

軌道角運動量  $\mathbf{L} = -i\mathbf{r} \times \nabla$  を3次元極座標で表す。(16.39) 及び  $\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\theta = \mathbf{e}_\phi$ ,  $\mathbf{e}_\phi \times \mathbf{e}_r = \mathbf{e}_\theta$  より

$$\mathbf{L} = -i r \mathbf{e}_r \times \left( \mathbf{e}_r \partial_r + \frac{\mathbf{e}_\theta}{r} \partial_\theta + \frac{\mathbf{e}_\phi}{r \sin \theta} \partial_\phi \right) = -i \left( \mathbf{e}_\phi \partial_\theta - \frac{\mathbf{e}_\theta}{\sin \theta} \partial_\phi \right)$$

である。(16.37) を代入すると

$$\mathbf{L} = i\mathbf{e}_x \left( \sin \phi \partial_\theta + \cot \theta \cos \phi \partial_\phi \right) - i\mathbf{e}_y \left( \cos \phi \partial_\theta - \cot \theta \sin \phi \partial_\phi \right) - i\mathbf{e}_z \partial_\phi \quad (5.22)$$

したがって

$$L_\pm \equiv L_x \pm iL_y = e^{\pm i\phi} (\pm \partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi), \quad L_z = -i\partial_\phi \quad (5.23)$$

である。また, (16.38) より

$$\mathbf{L}^2 = - \left( \mathbf{e}_\phi \partial_\theta - \frac{\mathbf{e}_\theta}{\sin \theta} \partial_\phi \right) \cdot \left( \mathbf{e}_\phi \partial_\theta - \frac{\mathbf{e}_\theta}{\sin \theta} \partial_\phi \right) = -\partial_\theta^2 - \cot \theta \partial_\theta - \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \quad (5.24)$$

になる。軌道角運動量は角度及びその微分で表され, 動径  $r$  を含まない。

習慣として, 軌道角運動量の大きさを  $j$  ではなく  $\ell$  で表わす。 $\mathbf{L} = -i\mathbf{r} \times \nabla$  は角度  $\theta, \phi$  とこれらの微分で表せるから,  $\theta, \phi$  の関数である同時固有関数  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$

$$\mathbf{L}^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell+1) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad L_z Y_{\ell m}(\theta, \phi) = m Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

を求める。任意の  $R(r)$  に対して  $\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  は  $\mathbf{L}^2, L_z$  の同時固有関数である。 $R(r)$  は他の条件, 例えば,  $\psi(\mathbf{r})$  がハミルトニアン固有状態になるように決める。なお,  $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$  の状態を文字  $s, p, d, f, g, h, \dots$  で表す。例えば,  $s$  状態とは  $\ell = 0$  の状態である。

$L_z = -i\partial_\phi$  より

$$-i \frac{\partial Y_{\ell m}(\theta, \phi)}{\partial \phi} = m Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad \therefore Y_{\ell m}(\theta, \phi) = F_{\ell m}(\theta) e^{im\phi}$$

である。波動関数は座標  $\mathbf{r}$  の 1 価関数であるから  $Y_{\ell m}(\theta, \phi) = Y_{\ell m}(\theta, \phi + 2\pi)$ , つまり  $e^{2\pi im} = 1$  でなければならない。したがって,  $m$  は整数である。これから  $\ell$  も整数になる。角運動量の一般論からすると,  $\ell$  は整数あるいは半整数になるが, 波動関数が座標  $\mathbf{r}$  の 1 価であることを要求すると, 軌道角運動量の  $\ell$  は整数だけになる。 $F_{\ell m}(\theta)$  は

$$\mathbf{L}^2 F_{\ell m}(\theta) e^{im\phi} = \ell(\ell+1) F_{\ell m}(\theta) e^{im\phi}$$

を満たすように決める必要がある。(5.24) より

$$\left( -\frac{d^2}{d\theta^2} - \cot \theta \frac{d}{d\theta} + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) F_{\ell m}(\theta) = \ell(\ell+1) F_{\ell m}(\theta) \quad (5.25)$$

これはルジャンドルの倍微分方程式 (17.28) であり解析的に解けるが, ここでは

$$L_- Y_{\ell -\ell} = L_- F_{\ell -\ell}(\theta) e^{-i\ell\phi} = -e^{-i(\ell+1)\phi} \left( \frac{d}{d\theta} - \ell \cot \theta \right) F_{\ell -\ell}(\theta) = 0 \quad (5.26)$$

により  $F_{\ell -\ell}(\theta)$  を求め,  $L_+$  を  $Y_{\ell -\ell}(\theta, \phi)$  に作用させて  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  を求める ( $L_+ Y_{\ell \ell} = 0$  でもよい)。

$$\left. \begin{array}{l} L_\pm Y_{\ell \pm \ell} = 0 \\ L_z Y_{\ell \pm \ell} = \pm \ell Y_{\ell \pm \ell} \end{array} \right\} \Rightarrow \mathbf{L}^2 Y_{\ell \pm \ell} = (L_\mp L_\pm + L_z^2 \pm L_z) Y_{\ell \pm \ell} = \ell(\ell+1) Y_{\ell \pm \ell} \quad (5.27)$$

であり, 自動的に  $\mathbf{L}^2 Y_{\ell \pm \ell} = \ell(\ell+1) Y_{\ell \pm \ell}$  を満たす。したがって, (5.26) だけを考えればよい。微分方程式 (5.25) は簡単には解けないが, (5.26) は簡単である。

$F_{\ell -\ell}(\theta)$  を単に  $F(\theta)$  と書くことにすると (5.26) より

$$\int \frac{dF}{F} = \ell \int d\theta \cot \theta = \ell \int d\theta \frac{(\sin \theta)'}{\sin \theta} = \ell \log |\sin \theta|, \quad \therefore F(\theta) = C \sin^\ell \theta, \quad C = \text{定数}$$

である。  $d^3r = dr r^2 d\theta \sin \theta d\phi$  であるから

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 = 1$$

で規格化すると

$$|C|^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \sin^{2\ell} \theta = 2\pi |C|^2 I_\ell = 1, \quad I_\ell \equiv \int_0^\pi d\theta \sin^{2\ell+1} \theta = \int_{-1}^1 dt (1-t^2)^\ell$$

ただし  $t = \cos \theta$  とした。部分積分を行うと

$$I_\ell = [t(1-t^2)^\ell]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 dt t \frac{d}{dt} (1-t^2)^\ell = 2\ell \int_{-1}^1 dt t^2 (1-t^2)^{\ell-1} = 2\ell (-I_\ell + I_{\ell-1})$$

したがって

$$I_\ell = \frac{2\ell}{2\ell+1} I_{\ell-1} = \frac{2\ell \cdot 2(\ell-1)}{(2\ell+1)(2\ell-1)} I_{\ell-2} = \frac{2\ell \cdot 2(\ell-1) \cdot 2(\ell-2) \cdots 2}{(2\ell+1)(2\ell-1)(2\ell-3) \cdots 3} I_0 = 2 \frac{(2^\ell \ell!)^2}{(2\ell+1)!} \quad (5.28)$$

これから

$$Y_{\ell-\ell}(\theta, \phi) = F(\theta) e^{-i\ell\phi} = \frac{1}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} \sin^\ell \theta e^{-i\ell\phi} \quad (5.29)$$

になる。  $C$  の位相は決まらないが、通常  $C$  が正の定数になるようにとる。

$\ell = 0, 1, 2$  の具体形を求める。  $Y_{00}(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi}$  になり定数である。(5.17), (5.23) より

$$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}, \quad Y_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} L_+ Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \quad (5.30)$$

これは

$$Y_{1\mu} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x_\mu}{r} \quad \text{ただし} \quad x_{\pm 1} = \frac{\mp x - iy}{\sqrt{2}}, \quad x_0 = z \quad (5.31)$$

とも表せる。同様にして

$$Y_{2\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}, \quad Y_{2\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}, \quad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

になる。

一般には (5.19), (5.29) より

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} (L_+)^{\ell+m} \sin^\ell \theta e^{-i\ell\phi} \quad (5.32)$$

である。  $L_+$  の作用を求めると, (5.23) から任意の  $f(\theta)$  に対して

$$L_+ f(\theta) e^{in\phi} = e^{i\phi} \left( \partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi \right) f(\theta) e^{in\phi} = e^{i(n+1)\phi} \left( f'(\theta) - n f(\theta) \cot \theta \right)$$

である。ところで ( $t = \cos \theta$ )

$$\frac{d}{dt} f(\theta) \sin^{-n} \theta = \frac{d\theta}{d \cos \theta} \frac{d}{d\theta} f(\theta) \sin^{-n} \theta = -\sin^{-n-1} \theta \left( f'(\theta) - n f(\theta) \cot \theta \right)$$

であるから

$$L_+ f(\theta) e^{in\phi} = e^{i(n+1)\phi} g(\theta), \quad g(\theta) = -\sin^{n+1} \theta \frac{d}{dt} f(\theta) \sin^{-n} \theta \quad (5.33)$$

になる。再び  $L_+$  を作用すると、上式で  $f \rightarrow g$ ,  $n \rightarrow n+1$  の置き換えをすればよいから

$$\begin{aligned} (L_+)^2 f(\theta) e^{in\phi} &= L_+ g(\theta) e^{i(n+1)\phi} = -e^{i(n+2)\phi} \sin^{n+2} \theta \frac{d}{dt} \sin^{-n-1} \theta g(\theta) \\ &= (-1)^2 e^{i(n+2)\phi} \sin^{n+2} \theta \frac{d^2}{dt^2} f(\theta) \sin^{-n} \theta \end{aligned}$$

以上のことを繰り返し行えば

$$(L_+)^k f(\theta) e^{in\phi} = (-1)^k e^{i(n+k)\phi} \sin^{n+k} \theta \frac{d^k}{dt^k} f(\theta) \sin^{-n} \theta \quad (5.34)$$

である。 $f(\theta) = \sin^\ell \theta$ ,  $n = -\ell$ ,  $k = \ell + m$  とおけば、(5.32) より

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} e^{im\phi} P_\ell^m(\cos \theta) \quad (5.35)$$

を得る。ただし

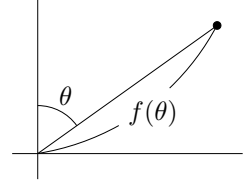
$$P_\ell^m(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^\ell, \quad -\ell \leq m \leq \ell, \quad |x| \leq 1 \quad (5.36)$$

である。 $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  を球面調和関数,  $P_\ell^m(x)$  をルジャンドル ( Legendre ) 陪関数という。特に,  $P_\ell^0(x)$  を単に  $P_\ell(x)$  と書く。 $P_\ell(x)$  は  $\ell$  次の多項式でルジャンドル多項式という。これらの関数の性質については 421 ページ 17.2 及び 426 ページ 17.3 を見よ。(17.15) より

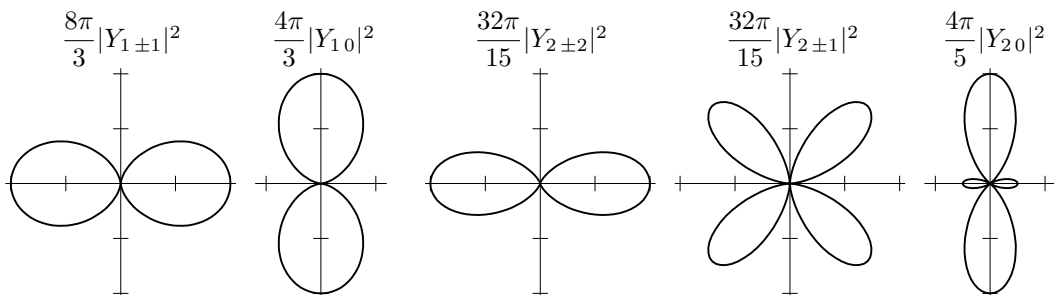
$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \epsilon_m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} P_\ell^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad \epsilon_m = \begin{cases} (-1)^m, & m \geq 0 \\ 1, & m < 0 \end{cases}$$

とも表せる。 $P_\ell^{|m|}(x)$  をジャンドル陪関数  $P_\ell^m(x)$  と定義することもある。

確率密度  $|Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2$  は  $\phi$  に依存せず  $z$  軸に関して軸対称になる。特に,  $\ell = 0$  の場合  $|Y_{00}|^2 = 1/4\pi$  は角度に依存せず等方的である。右図のように, 関数  $f(\theta)$  を原点からの距離として図示すると,  $\ell = 1, 2$  のとき  $|Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2$  は下図になる ( 座標軸の 1 目盛りは 0.5 )。この図はどの方向に確率密度が



大きいかを表す。例えば,  $|Y_{\ell \pm \ell}|^2$  は  $xy$  平面付近 ( $\theta \approx \pi/2$ ) に存在する確率密度が大きい。確率密度は古典力学とのある程度の対応がある。古典力学では粒子の位置を  $\mathbf{r}(t)$ , 運動量を  $\mathbf{p}(t)$  とすると, 軌道角運動量  $\mathbf{L}_{cl}$  は  $\mathbf{L}_{cl} = \mathbf{r}(t) \times \mathbf{p}(t)$  である。 $\mathbf{L}_{cl}$  が保存する場合,  $\mathbf{r}(t)$  は常に一定方向  $\mathbf{L}_{cl}$  に直交するから, 運動は  $\mathbf{L}_{cl}$  に直交し原点を含む平面内で起こる。 $m = \pm \ell$  の状態は, 古典力学的には  $\mathbf{L}_{cl}$  が  $z$  軸方向を向き  $xy$  平面上で運動する。これに対応して  $m = \pm \ell$  の確率密度は  $xy$  平面を中心に分布する。(5.29) より  $|Y_{\ell \pm \ell}|^2 \propto \sin^{2\ell} \theta$  であるから  $\ell \rightarrow \infty$  では  $\theta \neq \pi/2$  のとき  $|Y_{\ell \pm \ell}|^2 = 0$ , つまり, 粒子は  $xy$  平面上だけに存在し古典力学を再現する。 $m$  が 0 になるにつれて, 古典力学的には  $\mathbf{L}_{cl}$  は  $z$  軸から傾き, これに伴い  $|Y_{\ell m}|^2$  の分布も  $xy$  平面から離れる。 $m = 0$  の状態は  $\mathbf{L}_{cl}$  が  $z$  軸に直交することに対応し,  $|Y_{\ell 0}|^2$  は  $z$  軸を中心に分布する。



問題 5.1  $\psi_i(\mathbf{r}) = x_i f(r)$  とする。

1.  $L_i \psi_j(\mathbf{r}) = i \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \psi_k(\mathbf{r})$  を示せ。したがって,  $\psi_i(\mathbf{r})$  は  $L_i$  の固有関数で固有値は 0 である。
2.  $L^2 \psi_i = 2\psi_i$  を示せ。  $\psi_i$  は  $L^2$  の固有関数で  $\ell = 1$  である。
3. 以上の結果を  $\psi_i$  を  $Y_{1m}$  で表して求めよ。

問題 5.2  $\psi_{\pm}(\theta, \phi) = Y_{\ell=1/2, m=\pm 1/2}$  とおく。  $L_{\mp} \psi_{\pm} = 0$ ,  $L_z \psi_{\pm} = \pm \psi_{\pm}/2$  より  $\psi_{\pm}(\theta, \phi)$  を求めよ。これと  $L_{\mp} \psi_{\pm} = \psi_{\mp}$  は矛盾することを示せ。したがって  $\ell = 1/2$  の状態は存在しない。

$L^2, L_z$  の同時固有関数  $\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  の確率流 (1.6)

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{M} \text{Re}(\psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} \psi(\mathbf{r})) = \frac{\hbar}{M} \text{Im}(\psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}))$$

を求める ( $M$  は粒子の質量)。  $f(\theta)$  を実数として  $Y_{\ell m}(\theta, \phi) = f(\theta)e^{im\phi}$  であるから (16.39) より

$$\begin{aligned} \frac{M}{\hbar} \mathbf{j}(\mathbf{r}) &= \text{Im} \left( \mathbf{e}_r R^* \frac{dR}{dr} f^2 + \mathbf{e}_{\theta} \frac{|R|^2}{r} f \frac{df}{d\theta} + \mathbf{e}_{\phi} \frac{im}{r \sin \theta} |R|^2 f^2 \right) \\ &= |Y_{\ell m}|^2 \text{Im} \left( R^* \frac{dR}{dr} \right) \mathbf{e}_r + m \frac{|\psi(\mathbf{r})|^2}{r \sin \theta} \mathbf{e}_{\phi} \end{aligned} \quad (5.37)$$

束縛状態の場合  $R(r)$  は実数にできるから (148 ページ参照), 第 1 項は 0 になり

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 \mathbf{v}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{v}(\mathbf{r}) = \frac{m\hbar}{M\rho} \mathbf{e}_{\phi}, \quad \rho = r \sin \theta = z \text{ 軸からの距離}$$

である。  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$  は古典力学での速度に対応する。  $z$  軸まわりに角速度  $\omega$ , 半径  $\rho$  の円運動する古典的粒子の速度は  $\mathbf{v}_{\text{cl}} = \rho\omega \mathbf{e}_{\phi}$  であり,  $z$  軸方向の角運動量  $\ell_z$  は  $\ell_z = M\rho^2\omega$  になるから  $\mathbf{v}_{\text{cl}} = \ell_z \mathbf{e}_{\phi}/(M\rho)$  と表せる。  $\ell_z = m\hbar$  とすれば  $\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{v}_{\text{cl}}$  である。軌道角運動量の固有状態での量子力学的粒子は,  $z$  軸まわりに円運動していると見なせる。

問題 5.3  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$  の定義より

$$\langle \psi | \mathbf{L} | \psi \rangle = \frac{M}{\hbar} \int d^3r \mathbf{r} \times \mathbf{j}(\mathbf{r})$$

である。規格化した  $\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  の場合, (5.37) より  $\langle \psi | \mathbf{L} | \psi \rangle = m \mathbf{e}_z$  を示せ。  $R$  は複素数でもよい。  $L_x, L_y$  の期待値は 0,  $L_z$  の期待値は  $m$  という当然の結果である。

パリティ

(2.67) のパリティ演算子  $P$  を考える。  $P\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$  であるが,  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  の変換を極座標で表すと  $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \phi \rightarrow \pi + \phi$  であるから, (5.29) より

$$PY_{\ell-\ell}(\theta, \phi) = Y_{\ell-\ell}(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^{\ell} Y_{\ell-\ell}(\theta, \phi) \quad (5.38)$$

になる。(2.67) より  $P\hbar\mathbf{L}P = P\mathbf{r}P \times P\mathbf{p}P = \hbar\mathbf{L}$  になるから,  $P$  と軌道角運動量  $\mathbf{L}$  は可換である。したがって, (5.38) に  $(L_+)^{\ell+m}$  を作用させると

$$P(L_+)^{\ell+m}Y_{\ell-\ell}(\theta, \phi) = (-1)^{\ell}(L_+)^{\ell+m}Y_{\ell-\ell}(\theta, \phi), \quad \therefore PY_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^{\ell}Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (5.39)$$

になる。  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  はパリティの固有関数で固有値  $(-1)^{\ell}$  は  $m$  に依存しない。これはパリティ選択則 (2.68) と関連して重要な性質である。(5.39) は (17.36) である。



## 5.5 角度と不確定性関係

角度  $\phi$  と角運動量  $L_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi}$  の交換関係は  $[\phi, L_z] = i$  であるから (1.39) より

$$\Delta\phi \Delta L_z \geq 1/2 \quad (5.40)$$

になりそうであるが,  $L_z$  の固有状態  $\psi(\phi) = e^{im\phi}/\sqrt{2\pi}$  に対しては

$$\Delta L_z = 0, \quad (\Delta\phi)^2 = \int_0^{2\pi} d\phi \phi^2 |\psi|^2 - \left( \int_0^{2\pi} d\phi \phi |\psi|^2 \right)^2 = \frac{\pi^2}{3} \quad (5.41)$$

であるから (5.40) は成り立たない。したがって, (5.40) の不確定性関係は修正する必要がある。

シュワルツの不等式 (1.43) より

$$\Delta\phi \Delta L_z \geq |\langle \psi | \phi' L'_z | \psi \rangle|, \quad \text{ただし} \quad \phi' = \phi - \langle \phi \rangle, \quad L'_z = L_z - \langle L_z \rangle$$

ここで

$$\langle \phi \rangle = \langle \psi | \phi | \psi \rangle, \quad \langle L_z \rangle = \langle \psi | L_z | \psi \rangle$$

である。

$$A = \frac{\phi' L'_z - L'_z \phi'}{2} = \frac{1}{2} [\phi, L_z] = \frac{i}{2}, \quad B = \frac{\phi' L'_z + L'_z \phi'}{2}$$

とすると

$$\Delta\phi \Delta L_z \geq \left| \langle \psi | A | \psi \rangle + \langle \psi | B | \psi \rangle \right| = \left| \frac{i}{2} + \langle \psi | B | \psi \rangle \right| \quad (5.42)$$

になる。 $\phi'$  と  $L'_z$  はエルミート演算子であるから

$$\langle \psi | L'_z \phi' | \psi \rangle^* = \langle \psi | \phi'^{\dagger} L_z^{\dagger} | \psi \rangle = \langle \psi | \phi' L'_z | \psi \rangle \quad (5.43)$$

これが正しければ  $\langle \psi | B | \psi \rangle$  は実数になり (5.40) が成り立つ。ところで,  $\phi$  の実関数  $F(\phi)$  に対して

$$\langle \psi | L'_z F(\phi) | \psi \rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \psi^*(\phi) \left( -i \frac{d}{d\phi} - \langle L_z \rangle \right) F(\phi) \psi(\phi)$$

は部分積分すると

$$\begin{aligned} \langle \psi | L'_z F(\phi) | \psi \rangle &= -i \left[ F(\phi) |\psi(\phi)|^2 \right]_0^{2\pi} + \int_0^{2\pi} d\phi \psi(\phi) F(\phi) \left( i \frac{d}{d\phi} - \langle L_z \rangle \right) \psi^*(\phi) \\ &= -i \left( F(2\pi) - F(0) \right) |\psi(0)|^2 + \langle \psi | F(\phi) L'_z | \psi \rangle^* \end{aligned} \quad (5.44)$$

ただし, 波動関数の一価性より  $\psi(0) = \psi(2\pi)$  である。一般に, 右辺の第1項は0ではない。 $F(\phi) = \phi - \langle \phi \rangle$  の場合

$$\langle \psi | L'_z \phi' | \psi \rangle = -2\pi i |\psi(0)|^2 + \langle \psi | \phi' L'_z | \psi \rangle^*$$

になり (5.43) は成り立たない。これから

$$\langle \psi | B | \psi \rangle = -i\pi |\psi(0)|^2 + \text{Re} \left( \langle \psi | \phi' L'_z | \psi \rangle \right)$$

(5.42) に代入すると

$$\Delta\phi \Delta L_z \geq \left| \frac{i}{2} \left( 1 - 2\pi |\psi(0)|^2 \right) + \text{Re} \left( \langle \psi | \phi' L'_z | \psi \rangle \right) \right| \geq \frac{1}{2} \left| 1 - 2\pi |\psi(0)|^2 \right| \quad (5.45)$$

になる。これが角度と角運動量の不確定性を表す関係式である。 $\psi$  が  $L_z$  の固有状態の場合,  $|\psi| = 1/\sqrt{2\pi}$  より  $\Delta\phi\Delta L_z \geq 0$  になるから (5.41) と矛盾しない。

$x$  と  $p = -i d/dx$  の場合 (5.44) に対応する関係式は

$$\langle \psi | pF(x) | \psi \rangle = -i F(\infty) |\psi(\infty)|^2 + i F(-\infty) |\psi(-\infty)|^2 + \langle \psi | F(x)p | \psi \rangle^*$$

である。両端での境界条件  $\psi(\pm\infty) = 0$  のため  $\langle \psi | pF(x) | \psi \rangle = \langle \psi | F(x)p | \psi \rangle^*$  になり  $\Delta x \Delta p \geq 1/2$  が成り立つ。角度の場合も同様の境界条件  $\psi(0) = \psi(2\pi) = 0$  を課せば  $\Delta\phi\Delta L_z \geq 1/2$  になるが, このような境界条件は考えない。

周期的関数  $F(\phi) = \sin \phi, \cos \phi$  の場合, (5.44) より  $\langle \psi | L'_z F(\phi) | \psi \rangle = \langle \psi | F(\phi) L'_z | \psi \rangle^*$  であるから, 通常の不確定性関係が成り立ち

$$\Delta F(\phi) \Delta L_z \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [F(\phi), L_z] | \psi \rangle| = \frac{1}{2} |\langle \psi | \frac{dF}{d\phi} | \psi \rangle|, \quad \Delta F(\phi) = \sqrt{\langle \psi | F^2 | \psi \rangle - \langle \psi | F | \psi \rangle^2}$$

である。したがって

$$\Delta \sin \phi \Delta L_z \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | \cos \phi | \psi \rangle|, \quad \Delta \cos \phi \Delta L_z \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | \sin \phi | \psi \rangle|$$

になるから

$$(\Delta\Phi)^2 = (\Delta \sin \phi)^2 + (\Delta \cos \phi)^2 = 1 - \langle \psi | \sin \phi | \psi \rangle^2 - \langle \psi | \cos \phi | \psi \rangle^2 = 1 - |\langle \psi | e^{i\phi} | \psi \rangle|^2$$

とすれば

$$\Delta\Phi\Delta L_z \geq \frac{1}{2} \sqrt{1 - (\Delta\Phi)^2}$$

である。波動関数が  $\phi = \phi_0$  に局在している場合  $\phi = \phi_0 + \delta\phi$  とおくと

$$\langle \psi | e^{i\phi} | \psi \rangle = e^{i\phi_0} \langle \psi | (1 + i\delta\phi - (\delta\phi)^2/2 + \dots) | \psi \rangle$$

であるから

$$\begin{aligned} (\Delta\Phi)^2 &= 1 - \left(1 - \frac{1}{2} \langle \psi | (\delta\phi)^2 | \psi \rangle\right)^2 - \langle \psi | \delta\phi | \psi \rangle^2 + \dots \\ &\approx \langle \psi | (\delta\phi)^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \delta\phi | \psi \rangle^2 = \langle \psi | \phi^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \phi | \psi \rangle^2 = (\Delta\phi)^2 \end{aligned}$$

したがって  $\Delta\phi \approx 0$  のとき  $\Delta\phi\Delta L_z \gtrsim \sqrt{1 - (\Delta\Phi)^2}/2 \approx 1/2$  になる。

- P. Carruthers, Reviews of Modern Physics **40** (1968) 411

<http://prola.aps.org/abstract/RMP/v40/i2/p411.1>

**問題 5.4** 角度  $\phi$  の分散を考えることにして

$$V(a) = V_2(a) - V_1^2(a), \quad V_2(a) = \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \phi^2 |\psi(\phi+a)|^2, \quad V_1(a) = \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \phi |\psi(\phi+a)|^2$$

とする。積分領域は以下の式を簡単にするため  $-\pi \leq \phi \leq \pi$  に変更した。

1.  $\psi(\phi)$  は周期  $2\pi$  の関数で規格化されている。

$$\frac{dV_1}{da} = 2\pi |\psi(\pi+a)|^2 - 1, \quad \frac{dV_2}{da} = -2V_1(a), \quad \int_{\alpha-\pi}^{\alpha+\pi} da V_2(a) = \frac{2\pi^3}{3}$$

を示せ。ただし  $\alpha$  は任意定数である。これから  $dV/da = -4\pi V_1(a) |\psi(\pi+a)|^2$  になり  $V(a)$  は  $a$  に依存する。

2.  $L_z$  の分散

$$(\Delta L_z)^2 = \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \psi^*(\phi+a) L_z^2 \psi(\phi+a) - \left( \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \psi^*(\phi+a) L_z \psi(\phi+a) \right)^2$$

は  $a$  に依存しないことを示せ。

## 3. (5.45) を導いたのと同様にすると

$$\sqrt{V(a)} \Delta L_z \geq \frac{1}{2} \left| 1 - 2\pi |\psi(\pi+a)|^2 \right| = \frac{1}{2} |V_1'(a)|$$

になることを示せ。

4.  $(\Delta\phi)^2$  を  $V(a)$  の最小値で定義する。  $a = a_0$  で最小とし  $V_2(a)$  を  $a = a_0$  のまわりでテイラー展開し  $(a - a_0)^3$  以上を無視する。  $a_0 - \pi \leq a \leq a_0 + \pi$  で積分し

$$\Delta\phi \Delta L_z \gtrsim \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{3}{\pi^2} (\Delta\phi)^2 \right)$$

になることを示せ。

## 5.6 角運動量の行列表現

量子力学は行列力学とも言われる。これは量子力学の関係式が行列で表せるからである。例えば、シュレーディンガー方程式

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

を解くことを考える。完全規格直交系  $\{\varphi_n(\mathbf{r})\}$  が分かっているとする。  $\psi(\mathbf{r})$  は  $\varphi_n(\mathbf{r})$  で展開できるから

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{r}), \quad \text{あるいは} \quad |\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

と表せる。これをシュレーディンガー方程式に代入し、左から  $\varphi_k^*(\mathbf{r})$  をかけ積分すると

$$\sum_n \langle k|H|n\rangle c_n = E \sum_n \langle k|n\rangle c_n = E c_k \quad (5.46)$$

になる。ただし、直交性  $\langle k|n\rangle = \delta_{kn}$  を使った。  $h_{kn} = \langle k|H|n\rangle$  とする。  $h_{kn}$  は具体的に計算できる既知の量である。上の方程式は

$$\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \cdots \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

と書ける。これは行列  $(h_{kn})$  の固有値  $E$  と固有ベクトル  $(c_1 \ c_2 \ \cdots)$  を求める問題である。  $H$  はエルミート演算子であるから、行列  $(h_{kn})$  はエルミート行列である。

2つの状態  $\psi_\alpha, \psi_\beta$  間の演算子  $A$  の積分  $\langle \psi_\alpha | A | \psi_\beta \rangle$  について考えてみよう。

$$|\psi_\alpha\rangle = \sum_n \alpha_n |n\rangle, \quad |\psi_\beta\rangle = \sum_n \beta_n |n\rangle$$

のとき

$$\langle \psi_\alpha | A | \psi_\beta \rangle = \int d^3r \psi_\alpha^*(\mathbf{r}) A \psi_\beta(\mathbf{r}) = \sum_{kn} \alpha_k^* \beta_n \int d^3r \varphi_k^*(\mathbf{r}) A \varphi_n(\mathbf{r}) = \sum_{kn} \alpha_k^* \langle k | A | n \rangle \beta_n \quad (5.47)$$

$a_{kn} = \langle k | A | n \rangle$  とおくと

$$\langle \psi_\alpha | A | \psi_\beta \rangle = \sum_{kn} \alpha_k^* a_{kn} \beta_n = (\alpha_1^* \alpha_2^* \cdots) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (5.48)$$

になり, 行列で表現できる。

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad a_{kn} = \langle k | A | n \rangle \quad (5.49)$$

とすれば

$$\langle \psi_\alpha | A | \psi_\beta \rangle = \boldsymbol{\alpha}^\dagger \mathbf{A} \boldsymbol{\beta}, \quad \langle \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle = \boldsymbol{\alpha}^\dagger \boldsymbol{\beta} \quad (5.50)$$

である。以上の例から分かるように

$$\text{演算子} \rightarrow \text{行列}, \quad \text{波動関数} \rightarrow \text{列ベクトル}, \quad \text{波動関数の複素共役} \rightarrow \text{行ベクトル} \quad (5.51)$$

の置き換えをすれば, 量子力学の関係式は行列で表すことができる。ただし, どのような完全規格直交系  $\{\varphi_n\}$  を採用するかで, 行列要素とベクトルの成分は変わってくる。なお, 単位ベクトルは完全規格直交系の関数  $\varphi_n$  を表す:

$$\varphi_n \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad n \text{ 行目}$$

完全規格直交系  $\{\varphi_n\}$  を基底とするベクトル空間を扱っているわけである。

以下の議論には関係ないが, 次の点を注意しておく。(5.47) は

$$\alpha_k^* = \langle k | \psi_\alpha \rangle^* = \langle \psi_\alpha | k \rangle, \quad \beta_n = \langle n | \psi_\beta \rangle$$

であるから

$$\langle \psi_\alpha | A | \psi_\beta \rangle = \sum_{kn} \langle \psi_\alpha | k \rangle \langle k | A | n \rangle \langle n | \psi_\beta \rangle$$

になる。これは

$$\langle \psi_\alpha | A | \psi_\beta \rangle = \langle \psi_\alpha | \left( \sum_k |k\rangle \langle k| \right) A \left( \sum_n |n\rangle \langle n| \right) | \psi_\beta \rangle$$

と書ける。したがって, 形式的には

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1 \quad (5.52)$$

である。逆に, (5.52) を使えば, (5.47) を求めることは簡単である。また, (5.52) を  $|a\rangle$  に作用すると

$$|a\rangle = \left( \sum_n |n\rangle \langle n| \right) |a\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | a \rangle$$

であり直ちに (1.26) を得る。(5.52) は固有関数の組が完全系をなす (1.27)

$$\sum_n \varphi_n(\mathbf{r}) \varphi_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (5.53)$$

と同等であり, いろいろな関係式を完全規格直交系  $\{\varphi_n(\mathbf{r})\}$  で表現するとき, 非常に役に立つ等式である。ディラックの表記法は簡便で見通しがよい。これに比べて, 積分表示は煩雑である。

$$\begin{aligned}
 & \sum_{kn} \alpha_k^* \langle k | A | n \rangle \beta_n \\
 &= \sum_{kn} \underbrace{\int d^3 r_1 \psi_\alpha^*(\mathbf{r}_1) \varphi_k(\mathbf{r}_1)}_{\alpha_k^*} \underbrace{\int d^3 r_2 \varphi_k^*(\mathbf{r}_2) A(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \varphi_n(\mathbf{r}_2)}_{\langle k | A | n \rangle} \underbrace{\int d^3 r_3 \varphi_n^*(\mathbf{r}_3) \psi_\beta(\mathbf{r}_3)}_{\beta_n} \\
 &= \int d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 \psi_\alpha^*(\mathbf{r}_1) \left( \sum_k \varphi_k(\mathbf{r}_1) \varphi_k^*(\mathbf{r}_2) \right) A(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \left( \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}_2) \varphi_n^*(\mathbf{r}_3) \right) \psi_\beta(\mathbf{r}_3)
 \end{aligned}$$

ここで (5.53) を代入すると

$$\begin{aligned}
 \sum_{kn} \alpha_k^* \langle k | A | n \rangle \beta_n &= \int d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 \psi_\alpha^*(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) A(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \psi_\beta(\mathbf{r}_3) \\
 &= \int d^3 r_2 \int d^3 r_1 \psi_\alpha^*(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) A(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \int d^3 r_3 \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \psi_\beta(\mathbf{r}_3) \\
 &= \int d^3 r_2 \psi_\alpha^*(\mathbf{r}_2) A(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \psi_\beta(\mathbf{r}_2) = \langle \psi_\alpha | A | \psi_\beta \rangle
 \end{aligned}$$

である。

以上の一般論を角運動量に適用する。基底として  $\mathbf{J}^2$ ,  $J_z$  の同時固有関数  $|jm\rangle$  を考える。以下では

$$|n\rangle = |j, m=j+1-n\rangle, \quad n = 1, 2, \dots, 2j+1$$

で表す。系の角運動量の大きさ  $j$  は与えられているとする。具体的問題として  $J_x$  の固有値と固有関数を行列で求めてみよう。 $J_x = (J_+ + J_-)/2$  及び (5.16), (5.17) から  $J_x$  の行列要素は

$$\begin{aligned}
 \langle n | J_x | n' \rangle &= \frac{1}{2} \langle m=j+1-n | J_+ | m=j+1-n' \rangle + \frac{1}{2} \langle m=j+1-n | J_- | m=j+1-n' \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \sqrt{(n'-1)(2j+2-n')} \langle m=j+1-n | m=j+2-n' \rangle \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sqrt{n'(2j+1-n')} \langle m=j+1-n | m=j-n' \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \sqrt{(n'-1)(2j+2-n')} \delta_{nn'-1} + \frac{1}{2} \sqrt{n'(2j+1-n')} \delta_{nn'+1}
 \end{aligned}$$

である。具体例として,  $j=1$  の場合

$$\langle n | J_x | n' \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(n'-1)(4-n')} \delta_{nn'-1} + \frac{1}{2} \sqrt{n'(3-n')} \delta_{nn'+1}, \quad n, n' = 1, 2, 3$$

であるから  $J_x$  の行列は

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{同様にして} \quad J_y : \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z : \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.54)$$

になる。 $J_z$  の固有関数が基底であるから,  $J_z$  の行列は対角行列である。

$J_x$  の固有値を  $m_x$ , 固有関数を  $|m_x\rangle$  とすると

$$J_x |m_x\rangle = m_x |m_x\rangle, \quad |m_x\rangle = \sum_{n=1}^{2j+1} c_n |n\rangle \quad (5.55)$$

である。 $j = 1$  の場合, これは

$$\begin{pmatrix} -m_x & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & -m_x & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -m_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = 0 \quad (5.56)$$

になる。 $c_1 = 0, c_2 = 0, c_3 = 0$  以外の解が存在するためには

$$\begin{vmatrix} -m_x & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & -m_x & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -m_x \end{vmatrix} = m_x - m_x^3 = 0, \quad \therefore m_x = 0, \pm 1$$

固有値は  $J_z$  の固有値と同じになる。次に, 固有ベクトルを求める。 $m_x = 0$  の場合 (5.56) から  $c_2 = 0, c_1 + c_3 = 0$  になるから, 規格化された固有関数は  $c_1$  を正の実数にとれば

$$|m_x=0\rangle = \frac{|n=1\rangle - |n=3\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|m=1\rangle - |m=-1\rangle}{\sqrt{2}}$$

である。 $m_x = \pm 1$  の場合,  $c_2 = \pm\sqrt{2}c_1, c_3 = c_1$  より規格化は  $|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 4|c_1|^2 = 1$  である。 $c_1$  を正の実数にとれば

$$|m_x=\pm 1\rangle = \frac{1}{2} (|m=1\rangle \pm \sqrt{2}|m=0\rangle + |m=-1\rangle)$$

になる。10 ページの**仮定 3'** から,  $|m_x\rangle$  の状態で  $J_z$  を観測すると観測値は  $J_z$  の固有値  $m$  になるが, 観測毎に  $m$  の値は異なり, どの  $m$  が得られるかは確率的に決まるだけである。 $m$  を得る確率  $P_m$  は (1.28) より

$$P_m = |\langle m | m_x=0 \rangle|^2 = \begin{cases} 0, & m = 0 \\ 1/2, & |m| = 1 \end{cases}, \quad P_m = |\langle m | m_x=\pm 1 \rangle|^2 = \begin{cases} 1/2, & m = 0 \\ 1/4, & |m| = 1 \end{cases}$$

になる。 $J_z, J_z^2$  の期待値 (平均値) は

$$\langle m_x | J_z | m_x \rangle = \sum_m m P_m = 0, \quad \langle m_x | J_z^2 | m_x \rangle = \sum_m m^2 P_m = \begin{cases} 1, & m_x = 0 \\ 1/2, & |m_x| = 1 \end{cases}$$

であり, 分散は (5.21) で  $j = 1, m \rightarrow m_x$  としたものに一致する。

**問題 5.5** **問題 5.1** の  $\psi_i(\mathbf{r}) = x_i f(r)$  を用いて  $L_{ij} = \langle \psi_i | L_z | \psi_j \rangle$  とする。ただし,  $\psi_i(\mathbf{r})$  は規格化されている。 $3 \times 3$  行列  $(L_{ij})$  の固有値  $m$  は  $m = 0, \pm 1$  になることを示せ。また, 固有関数は  $Y_{1m}(\theta, \phi) r f(r)$  に比例することを示せ。

## 5.7 スピン

これまでは, 3次元軌道運動のみ考えたが, 軌道運動の自由度とは独立な内部自由度を持つ粒子が存在する。内部自由度の典型例は, 角運動量の交換関係を満たす自由度である。この場合, 角運動量は軌道角運動量と内部角運動量からなる。古典力学での剛体の角運動量は, 重心の軌道角運動量と重心まわりの自転の角運動量からなる。これとの対比から, 内部角運動量は自転に対応するため, **スピン**というが, スピンと軌道運動である自転は全く関係ない。スピンをもつ粒子の量子力学的状態は, 軌道運動の状態を表すこれまでの波動関数  $\psi(\mathbf{r}, t)$  とスピンの状態  $\varphi(t)$  からなる。 $\psi(\mathbf{r}, t)$  は  $\mathbf{r}$

の1価関数であるため、軌道角運動量の大きさ $\ell$ は整数である。一方、スピンは $\mathbf{r}$ とは独立であるから、スピンの状態 $\varphi$ は $\mathbf{r}$ の関数ではない。このため、スピンの大きさ $s$ は半整数でもよい。 $\ell$ は軌道運動に応じて任意の負でない整数をとるが、 $s$ は粒子に固有の決まった値である。電子、陽子、中性子は $s = 1/2$ 、光子は $s = 1$ である。

スピン演算子に対しては $\mathbf{J}$ ではなく $\mathbf{S}$ と書こう。 $\mathbf{S}$ は交換関係(5.5)

$$[S_x, S_y] = iS_z, \quad [S_y, S_z] = iS_x, \quad [S_z, S_x] = iS_y$$

を満たす。 $\mathbf{S}$ を規定する性質はこれだけである。軌道角運動量のように $\mathbf{r}$ と $\hat{\mathbf{p}}$ で表現できるものではない。 $\mathbf{S}$ の大きさを $s$ とすると

$$\mathbf{S}^2 |s m_s\rangle = s(s+1) |s m_s\rangle, \quad S_z |s m_s\rangle = m_s |s m_s\rangle, \quad m_s = -s, -s+1, \dots, s \quad (5.57)$$

を満たす $\mathbf{S}^2, S_z$ の同時固有関数 $|s m_s\rangle$ が存在する。 $|s m_s\rangle$ は粒子の内部自由度の状態であるから、 $|s m_s\rangle$ は $\mathbf{r}$ の関数としては表せない。スピン状態に関する情報は(5.57)だけである。スピンを持つ粒子の状態は、一般的には、軌道運動に関する部分とスピン部分からなる。形式的には

$$\sum_{m_s=-s}^s \psi_{m_s}(\mathbf{r}, t) |s m_s\rangle \quad (5.58)$$

である。軌道運動に関する状態は $\psi_{m_s}(\mathbf{r}, t)$ に含まれる。 $\psi_{m_s}(\mathbf{r}, t)$ が $\mathbf{r}$ に依存しない場合は、最も一般的なスピンだけの状態である。これまでは、粒子には内部自由度がない( $s = 0$ )として、状態を扱ってきたことになる。

### スピン 1/2

以下では一番重要な $s = 1/2$ の場合を扱う( $s = 1$ については137ページ)。 $m_s$ は $\pm 1/2$ の2つの値しかとらないから、簡単のため

$$|+\rangle = |s = \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}\rangle, \quad |-\rangle = |s = \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \quad (5.59)$$

と略記する。

$$\mathbf{S}^2 |\pm\rangle = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2}\right) |\pm\rangle = \frac{3}{4} |\pm\rangle, \quad S_z |\pm\rangle = \pm \frac{1}{2} |\pm\rangle$$

である。スピン部分の状態の基底は $|+\rangle, |-\rangle$ の2つのみであり、言わば2次元のベクトル空間である。任意の状態は

$$\psi_+(\mathbf{r}, t) |+\rangle + \psi_-(\mathbf{r}, t) |-\rangle \quad (5.60)$$

と書ける。 $\mathbf{S}$ が作用するのは $|\pm\rangle$ の部分で、 $\psi_{\pm}(\mathbf{r}, t)$ に対しては何の作用もしない。

$\mathbf{S}$ は角運動量の交換関係以外にも $j = 1/2$ に特有の関係式を満たす。これらは $\boldsymbol{\sigma} = 2\mathbf{S}$ で表した方が簡単になる。 $\mathbf{S}^2 |\pm\rangle = \frac{3}{4} |\pm\rangle$ であるから $\boldsymbol{\sigma}^2 |\pm\rangle = 3 |\pm\rangle$ になる。したがって、任意の状態 $|\psi\rangle = \psi_+ |+\rangle + \psi_- |-\rangle$ に対して

$$\boldsymbol{\sigma}^2 |\psi\rangle = \psi_+ \boldsymbol{\sigma}^2 |+\rangle + \psi_- \boldsymbol{\sigma}^2 |-\rangle = 3 |\psi\rangle$$

であるから $\boldsymbol{\sigma}^2 = 3$ である。同様に $\sigma_z^2 |\pm\rangle = |\pm\rangle$ より $\sigma_z^2 = 1$ になる。(5.16), (5.17)で $j = 1/2$ とすると( $\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$ )

$$\sigma_+ |+\rangle = 0, \quad \sigma_+ |-\rangle = 2 |+\rangle, \quad \sigma_- |+\rangle = 2 |-\rangle, \quad \sigma_- |-\rangle = 0 \quad (5.61)$$

である。 $\sigma_+^2|\pm\rangle = 0, \sigma_-^2|\pm\rangle = 0$  になるから

$$\sigma_{\pm}^2 = \sigma_x^2 - \sigma_y^2 \pm i(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) = 0, \quad \therefore \sigma_x^2 = \sigma_y^2, \quad \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0$$

$\sigma_x^2 + \sigma_y^2 = \sigma^2 - \sigma_z^2 = 2$  より  $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = 1$  である。 $\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0$  と角運動量の交換関係  $\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2i\sigma_z$  から

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z$$

になる。 $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$  の右側から  $\sigma_y$  をかければ  $\sigma_z\sigma_y = -i\sigma_x$  である。同様にして

$$\sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x, \quad \sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y$$

以上をまとめて表すと、有用な関係式

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (5.62)$$

を得る。あるいは

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}, \quad \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i = 2i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k$$

$i \neq j$  のとき  $\sigma_i$  と  $\sigma_j$  は反可換である。 $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$  に  $\sigma_z$  をかければ  $\sigma_x\sigma_y\sigma_z = i$  になる。

(5.62) の適用例として  $\sigma \cdot A \sigma \cdot B$  を求める。ベクトル  $A, B$  は  $\sigma$  と可換ならば演算子でもよい。

$$\begin{aligned} \sigma \cdot A \sigma \cdot B &= \sum_{ij} \sigma_i A_i \sigma_j B_j = \sum_{ij} \left( \delta_{ij} + i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k \right) A_i B_j \\ &= \sum_i A_i B_i + i \sum_k \sigma_k \sum_{ij} \varepsilon_{ijk} A_i B_j \\ &= A \cdot B + i \sigma \cdot (A \times B) \end{aligned} \quad (5.63)$$

になる。 $\mathbf{n}$  をある方向の単位ベクトルとして  $A = B = \mathbf{n}$  とすれば  $(\mathbf{n} \cdot \sigma)^2 = \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$  である。演算子あるいは行列  $A$  の指数関数  $e^A$  はテイラー展開を使って (1.35) で定義される。これから

$$\exp(i\theta \mathbf{n} \cdot \sigma) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\theta \mathbf{n} \cdot \sigma)^k}{k!} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\theta \mathbf{n} \cdot \sigma)^{2m}}{(2m)!} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\theta \mathbf{n} \cdot \sigma)^{2m+1}}{(2m+1)!}$$

$(\mathbf{n} \cdot \sigma)^2 = 1$  であるから

$$\exp(i\theta \mathbf{n} \cdot \sigma) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \theta^{2m}}{(2m)!} + i \mathbf{n} \cdot \sigma \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \theta^{2m+1}}{(2m+1)!} = \cos \theta + i \mathbf{n} \cdot \sigma \sin \theta \quad (5.64)$$

になる。(1.36) より  $\exp(i\theta \mathbf{n} \cdot \sigma)$  はユニタリ演算子である。

## 5.8 スピンの行列表現

スピン状態については前節の行列表現を用いると扱いが容易になる。スピンの場合について行列表現を改めて導く。例えば、 $F$  を演算子として  $F\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t)$  の関係式を行列で表す。

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_+(\mathbf{r}, t)|+\rangle + \psi_-(\mathbf{r}, t)|-\rangle, \quad \varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi_+(\mathbf{r}, t)|+\rangle + \varphi_-(\mathbf{r}, t)|-\rangle$$

と展開できる。 $F\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t)$  は

$$F|+\rangle\psi_+ + F|-\rangle\psi_- = \varphi_+|+\rangle + \varphi_-|-\rangle$$



になる。 $|\pm\rangle$  との内積をとれば

$$\langle \pm | F | + \rangle \psi_+ + \langle \pm | F | - \rangle \psi_- = \varphi_+ \langle \pm | + \rangle + \varphi_- \langle \pm | - \rangle$$

$\langle \pm | \pm \rangle = 1, \langle \pm | \mp \rangle = 0$  であるから

$$\langle + | F | + \rangle \psi_+ + \langle + | F | - \rangle \psi_- = \varphi_+, \quad \langle - | F | + \rangle \psi_+ + \langle - | F | - \rangle \psi_- = \varphi_-$$

これは行列を用いて

$$\begin{pmatrix} \langle + | F | + \rangle & \langle + | F | - \rangle \\ \langle - | F | + \rangle & \langle - | F | - \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_+ \\ \varphi_- \end{pmatrix}$$

したがって、演算子を  $2 \times 2$  行列、状態を 2 成分の列ベクトルで置き換えればよい:

$$F \Rightarrow \begin{pmatrix} \langle + | F | + \rangle & \langle + | F | - \rangle \\ \langle - | F | + \rangle & \langle - | F | - \rangle \end{pmatrix}, \quad \psi_+(\mathbf{r}, t) | + \rangle + \psi_-(\mathbf{r}, t) | - \rangle \Rightarrow \psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}, t) \\ \psi_-(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$$

$\psi(\mathbf{r}, t)$  を **2 成分スピノール** という。単位ベクトルは

$$| + \rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad | - \rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.65)$$

である。スピノール  $\psi(\mathbf{r}, t)$  の規格化は (5.50) より

$$\begin{aligned} \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) &= \int d^3r \begin{pmatrix} \psi_+^*(\mathbf{r}, t) & \psi_-^*(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}, t) \\ \psi_-(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \\ &= \int d^3r (|\psi_+(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_-(\mathbf{r}, t)|^2) = 1 \end{aligned}$$

である。 $|\psi_+(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$  はスピン上向き ( $m_s = 1/2$ ) の粒子が位置  $\mathbf{r}$  の微小体積  $d^3r$  に存在する確率を表す。 $|\psi_-(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$  はスピン下向きの粒子の存在確率である。軌道運動の状態がスピンの状態とは無関係に記述できる、つまり、 $\psi_\pm(\mathbf{r}, t)$  の  $\mathbf{r}$  依存性が共通の場合、状態は直積

$$\varphi(\mathbf{r}, t) \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix}$$

になる。 $c_\pm(t)$  は粒子の位置  $\mathbf{r}$  に依存しない。規格化は

$$(|c_+(t)|^2 + |c_-(t)|^2) \int d^3r |\varphi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1, \quad \therefore |c_+(t)|^2 + |c_-(t)|^2 = 1, \quad \int d^3r |\varphi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1$$

としておけばよい。なお、 $F$  がスピンに依存しない場合  $\langle \pm | F | \pm \rangle = F \langle \pm | \pm \rangle = F, \langle \pm | F | \mp \rangle = 0$  であるから  $F\psi_\pm = \varphi_\pm$  である。

演算子  $\sigma$  に対応する行列も  $\sigma$  で表すと (5.61) から

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} \langle + | \sigma_+ | + \rangle & \langle + | \sigma_+ | - \rangle \\ \langle - | \sigma_+ | + \rangle & \langle - | \sigma_+ | - \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2\langle + | + \rangle \\ 0 & 2\langle - | + \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

同様にして

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

である。 $\sigma_x = (\sigma_+ + \sigma_-)/2$ ,  $\sigma_y = -i(\sigma_+ - \sigma_-)/2$  より

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.66)$$

を得る。この行列をパウリ行列という。 $2 \times 2$  の単位行列を  $I$  とすると, 例えば,  $\sigma_x^2 = I$  と書くべきだが,  $I$  は数 1 として扱ってよいから, 特に, 明示しない。単に  $\sigma_x^2 = 1$  と表す。

パウリ行列は (5.62) を満たす  $2 \times 2$  エルミート行列の 1 つの具体例である。別の表現も存在する。 $U$  を  $2 \times 2$  のユニタリ行列 ( $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$ ) とする。パウリ行列  $\sigma$  に対して  $\Sigma = U\sigma U^\dagger$  とすると  $\Sigma^\dagger = U\sigma^\dagger U^\dagger = U\sigma U^\dagger = \Sigma$  であり

$$\Sigma_i \Sigma_j = U \sigma_i \sigma_j U^\dagger = U \left( \delta_{ij} + i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k \right) U^\dagger = \delta_{ij} + i \sum_k \varepsilon_{ijk} \Sigma_k$$

を満たす (問題 5.7 参照)。

行列の対角要素の和 (トレース) を  $\text{Tr}$  で表す。一般に  $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$  である。 $i \neq j$  のとき  $\sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i$ ,  $\sigma_j \sigma_i \sigma_j = -\sigma_i$  より

$$\text{Tr} \sigma_i = -\text{Tr}(\sigma_j \sigma_i \sigma_j) = -\text{Tr}(\sigma_i \sigma_j^2) = -\text{Tr} \sigma_i = 0, \quad \text{Tr}(\sigma_i \sigma_j) = -\text{Tr}(\sigma_j \sigma_i) = -\text{Tr}(\sigma_i \sigma_j) = 0$$

また,  $\text{Tr} I = 1 + 1 = 2$  より  $\text{Tr} \sigma_i^2 = 2$  になる。 $2 \times 2$  行列  $A$  は  $A^2 - A \text{Tr} A + \det A = 0$  を満たす (ケイリー・ハミルトンの定理)。 $A = \sigma_i$  とすれば  $\det \sigma_i = -1$  である。まとめると

$$\text{Tr} \sigma_i = 0, \quad \text{Tr}(\sigma_i \sigma_j) = 2\delta_{ij}, \quad \det \sigma_i = -1 \quad (5.67)$$

これは  $\sigma_i$  の具体的表現に依存しない。任意の  $A$  は

$$A = \frac{a_0 + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2}, \quad \text{ただし} \quad a_0 = \text{Tr} A, \quad \mathbf{a} = \text{Tr}(\boldsymbol{\sigma} A) \quad (5.68)$$

と表せる。

**問題 5.6** パウリ行列を用いて  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}$  を  $2 \times 2$  行列で表せ。 $2 \times 2$  行列の積  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$  を具体的に計算し (5.63) を示せ。

### スピン状態の具体例

例えば,  $\sigma_x$  の固有値を  $m$ , 固有状態を  $\chi_m$  とすると  $\sigma_x \chi_m = m \chi_m$  は

$$\begin{pmatrix} -m & 1 \\ 1 & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = 0, \quad \text{ただし} \quad \chi_m = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$$

になる。 $c_+ = c_- = 0$  でないためには, 左辺の  $2 \times 2$  行列の行列式  $= m^2 - 1 = 0$  より  $m = \pm 1$  である。 $c_- = m c_+$  であるから規格化条件  $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 2|c_+|^2 = 1$  より  $c_+ = 1/\sqrt{2}$  とすればよい。したがって  $\sigma_x$  の固有値は  $\pm 1$  であり, 固有状態は

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \quad \text{あるいは} \quad \frac{|+\rangle \pm |-\rangle}{\sqrt{2}} \quad (5.69)$$

になる。

一般に,  $\mathbf{n}$  を単位ベクトルとして  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の固有状態と固有値を求める。 $\mathbf{n}$  を極座標で表して

$$\mathbf{n} = \mathbf{e}_x \sin \theta \cos \phi + \mathbf{e}_y \sin \theta \sin \phi + \mathbf{e}_z \cos \theta$$

としパウリ行列を代入すると

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \sin \theta \cos \phi + \sigma_y \sin \theta \sin \phi + \sigma_z \cos \theta = \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (5.70)$$

になる。 $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の固有値を  $m$ , 固有状態を  $\chi_m$  とすると  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \chi_m = m \chi_m$  は

$$\begin{pmatrix} \cos \theta - m & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta - m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = 0, \quad \text{ただし} \quad \chi_m = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \quad (5.71)$$

であるから

$$\begin{vmatrix} \cos \theta - m & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta - m \end{vmatrix} = m^2 - 1 = 0, \quad \therefore m = \pm 1$$

行列  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  は  $(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = 1$  を満たすから, その固有値  $m$  が  $m^2 = 1$  で決まることは当然の結果である。次に, 固有状態を求める。(5.71) から

$$c_- = c_+ e^{i\phi} \frac{m - \cos \theta}{\sin \theta} = \begin{cases} c_+ e^{i\phi} \tan(\theta/2), & m = 1 \\ -c_+ e^{i\phi} \cot(\theta/2), & m = -1 \end{cases}$$

ただし,  $1 - \cos \theta = 2 \sin^2(\theta/2)$ ,  $1 + \cos \theta = 2 \cos^2(\theta/2)$  である。 $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$  より

$$m = 1 \text{ のとき } c_+ = e^{i\alpha} \cos(\theta/2), \quad m = -1 \text{ のとき } c_+ = e^{i\beta} \sin(\theta/2)$$

位相  $\alpha, \beta$  は任意である。以上から  $\alpha = \beta = 0$  とすれば,  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の固有値  $\pm 1$  の固有状態  $\chi_{\pm}(\mathbf{n})$  は

$$\chi_+(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad \chi_-(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) \\ -e^{i\phi} \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (5.72)$$

になる。まとめて

$$\chi_m = \frac{1}{\sqrt{2(1 - m \cos \theta)}} \begin{pmatrix} \sin \theta \\ e^{i\phi}(m - \cos \theta) \end{pmatrix}, \quad m = \pm 1 \quad (5.73)$$

と表すこともできる。

固有値は方向に依存しないが, 固有状態は方向に依存する。

$$\chi_+^\dagger \chi_- = (\cos(\theta/2) \ e^{-i\phi} \sin(\theta/2)) \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) \\ -e^{i\phi} \cos(\theta/2) \end{pmatrix} = 0, \quad \therefore \chi_m^\dagger(\mathbf{n}) \chi_{m'}(\mathbf{n}) = \delta_{mm'}$$

であるから,  $\chi_{\pm}(\mathbf{n})$  は規格直交系をなす。(5.72) で  $\mathbf{n} \rightarrow -\mathbf{n}$ , ( $\theta \rightarrow \pi - \theta$ ,  $\phi \rightarrow \pi + \phi$ ) とすると  $\chi_+(-\mathbf{n}) = \chi_-(\mathbf{n})$ , つまり,  $\chi_{\pm}(\mathbf{n})$  は逆方向  $-\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の  $\mp 1$  の固有状態である。なお, ここでの  $\theta, \phi$  は粒子の位置  $\mathbf{r}$  の極座標ではなく, スピンの方向  $\mathbf{n}$  を指定する角度である。

パウリ行列  $\sigma_i$  の固有状態は  $\chi_{\pm}(\mathbf{n})$  の特別な場合である。 $(\theta, \phi) = (\pi/2, 0), (\pi/2, \pi/2)$  とすれば  $\mathbf{n} = \mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$  になるから

$$\chi_{\pm}(\mathbf{e}_x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\pm}(\mathbf{e}_y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \quad (5.74)$$

は  $\sigma_i \chi_{\pm}(\mathbf{e}_i) = \pm \chi_{\pm}(\mathbf{e}_i)$  を満たす。

規格化した任意のスピン状態  $\chi$  は

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

である。 $\alpha, \phi, \theta$  を実数として  $a = e^{i\alpha} \cos(\theta/2)$ ,  $b = e^{i(\alpha+\phi)} \sin(\theta/2)$  とおけるから  $\chi = e^{i\alpha} \chi_+(\mathbf{n})$  になる。 $\mathbf{n}$  を適当にとれば、任意のスピン状態は  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の固有状態である。

$(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = 1$  より  $\exp(i\theta \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})$  は  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  について高々 1 次であるから

$$\exp(i\theta \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = f(\theta) + g(\theta) \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

とおける。 $\chi_{\pm}(\mathbf{n})$  に作用させると  $e^{\pm i\theta} = f \pm g$  になるから  $f = \cos \theta$ ,  $g = i \sin \theta$  である。

### 期待値と確率

$\chi_+(\mathbf{n})$  での  $\boldsymbol{\sigma}$  の期待値を  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$  で表すと、(5.48) より  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \chi_+^\dagger \boldsymbol{\sigma} \chi_+$  である。(5.72) を代入すると

$$\langle \sigma_x \rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & e^{-i\phi} \sin(\theta/2) \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} = \sin \theta \cos \phi$$

同様にして

$$\langle \sigma_y \rangle = \sin \theta \sin \phi, \quad \langle \sigma_z \rangle = \cos \theta, \quad \therefore \quad \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \mathbf{n} \quad (5.75)$$

である。具体的な行列表現を用いなくても導ける。 $\mathbf{a}$  を任意のベクトルとすると (5.63) より

$$\chi_+^\dagger(\mathbf{n}) (\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \chi_+(\mathbf{n}) = 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}$$

$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \chi_+(\mathbf{n}) = \chi_+(\mathbf{n})$  であるから  $\mathbf{a} \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \mathbf{a} \cdot \mathbf{n}$  になる。 $\mathbf{a}$  は任意であるから (5.75) を得る。 $\chi_-(\mathbf{n})$  での期待値は  $\mathbf{n}$  を  $-\mathbf{n}$  に置き換えればよい。

$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  は非可換であるから、3 つの成分が同時に確定した値をとることはない。状態  $\chi_+(\mathbf{n})$  における  $\mathbf{n}'$  方向の成分  $\sigma_{n'} = \mathbf{n}' \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の分散  $\Delta \sigma$  は

$$\langle \sigma_{n'}^2 \rangle = 1, \quad \langle \sigma_{n'} \rangle = \mathbf{n}' \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \mathbf{n}' \cdot \mathbf{n}, \quad \therefore \quad \Delta \sigma = \sqrt{\langle \sigma_{n'}^2 \rangle - \langle \sigma_{n'} \rangle^2} = \sqrt{1 - (\mathbf{n}' \cdot \mathbf{n})^2}$$

である。 $\Delta \sigma = 0$  は  $\mathbf{n}' \cdot \mathbf{n} = \pm 1$ , つまり,  $\mathbf{n}' = \pm \mathbf{n}$  の場合だけである。状態  $\chi_{\pm}(\mathbf{n})$  でスピンを測定したとき、確定した値になるスピンは  $\pm \mathbf{n}$  方向の成分だけである。

一般に、エルミート演算子  $A$  の固有値を  $a$ , 固有状態を  $|a\rangle$  とする。固有値は複数個存在する。規格化された任意の状態  $|\psi\rangle$  で  $A$  を観測すると、観測値は固有値  $a$  のどれかになるが、一般に観測ごとに観測値は異なる。多数回観測したとき、固有値  $a$  を得る確率  $P_a$  は  $P_a = |\langle a | \psi \rangle|^2$  である (10 ページの**仮定 3'**)。これをスピンだけに依存する演算子  $A$  に適用する。固有状態は 2 成分スピノール  $\chi_a$  であり (5.50) より  $P_a = |\chi_a^\dagger \psi|^2$  になる。 $\psi$  も 2 成分スピノールである。具体例として、状態  $\chi_+(\mathbf{n})$  で  $\sigma_y$  を観測する場合、観測ごとの観測値は  $\sigma_y$  の固有値  $\pm 1$  のどちらか一方である。 $\sigma_y$  の観測値が  $\pm 1$  になる確率  $P_{\pm}$  は、 $\chi_a$  を (5.74) の  $\chi_{\pm}(\mathbf{e}_y)$  にすればよいから

$$P_{\pm} = |\chi_{\pm}^\dagger(\mathbf{e}_y) \chi_+(\mathbf{n})|^2 = \frac{1}{2} \left| (1 \mp i) \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1 \pm \sin \theta \sin \phi}{2} \quad (5.76)$$

になる。当然のことであるが  $P_+ + P_- = 1$  である。状態  $\chi_+(\mathbf{n})$  での  $\sigma_y$  の期待値  $\langle \sigma_y \rangle$  は

$$\langle \sigma_y \rangle = (+1) \times P_+ + (-1) \times P_- = \sin \theta \sin \phi$$

であり、直接求めた  $\langle \sigma_y \rangle$  を再現する。

## 5.9 射影演算子と密度行列演算子

2×2 のエルミート行列

$$P_{\pm}(\mathbf{n}) = \chi_{\pm}(\mathbf{n})\chi_{\pm}^{\dagger}(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} (\chi_{\pm})_1 \\ (\chi_{\pm})_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\chi_{\pm})_1^* & (\chi_{\pm})_2^* \end{pmatrix}, \quad (P_{\pm})_{ij} = (\chi_{\pm})_i(\chi_{\pm})_j^* \quad (5.77)$$

を考える。

$$P_{\pm}(\mathbf{n})\chi_{\pm}(\mathbf{n}) = \chi_{\pm}(\mathbf{n}), \quad P_{\pm}(\mathbf{n})\chi_{\mp}(\mathbf{n}) = 0 \quad (5.78)$$

であるから、任意の 2 成分スピノール  $\psi = c_+\chi_+ + c_-\chi_-$  に対して  $P_{\mu}\psi = c_{\mu}\chi_{\mu}$  になる ( $\mu = \pm$ )。  $P_{\mu}$  は  $\psi$  を  $\chi_{\mu}$  に射影する射影演算子である。定義より

$$\det P_{\mu} = 0, \quad P_{\mu}^2 = \chi_{\mu} \underbrace{\chi_{\mu}^{\dagger}\chi_{\mu}}_1 \chi_{\mu}^{\dagger} = P_{\mu}, \quad P_{\pm}P_{\mp} = \chi_{\pm} \underbrace{\chi_{\pm}^{\dagger}\chi_{\mp}}_0 \chi_{\mp}^{\dagger} = 0, \quad P_+ + P_- = 1 \quad (5.79)$$

である。  $\Gamma$  を 2×2 行列とすると、任意の  $\chi_{\alpha}, \chi_{\beta}$  に対して

$$\chi_{\alpha}^{\dagger}\Gamma\chi_{\beta} = \sum_{ij}(\chi_{\alpha})_i^*\Gamma_{ij}(\chi_{\beta})_j = \sum_{ij}\Gamma_{ij}(\chi_{\beta}\chi_{\alpha}^{\dagger})_{ji} = \text{Tr}(\Gamma\chi_{\beta}\chi_{\alpha}^{\dagger}), \quad \chi_{\alpha}^{\dagger}\chi_{\beta} = \text{Tr}(\chi_{\beta}\chi_{\alpha}^{\dagger})$$

と表せる。これから

$$\chi_{\mu}^{\dagger}\Gamma\chi_{\mu} = \text{Tr}(\Gamma P_{\mu}), \quad \text{Tr} P_{\mu} = 1 \quad (5.80)$$

である。  $\chi_{\mu}$  には位相の不定性がある。  $\chi_{\mu}$  を  $e^{i\alpha}\chi_{\mu}$  にすると、  $\chi_{\mu}^{\dagger}$  は  $e^{-i\alpha}\chi_{\mu}^{\dagger}$  になるから、  $P_{\mu}$  に位相の不定性はない。

$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \chi_{\pm}(\mathbf{n}) = \pm \chi_{\pm}(\mathbf{n})$  より

$$P_{\pm}(\mathbf{n}) = \frac{1 \pm \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2} \quad (5.81)$$

は (5.78) を満たす。あるいは、具体形 (5.72) を  $P_{\pm}(\mathbf{n}) = \chi_{\pm}(\mathbf{n})\chi_{\pm}^{\dagger}(\mathbf{n})$  に代入すれば上式が求まる。  $(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = 1$  より (5.79) が成り立つ。

(5.80) で  $\Gamma = \sigma_i$  とすると、(5.67) より

$$\chi_{\pm}^{\dagger}\sigma_i\chi_{\pm} = \text{Tr}(\sigma_i P_{\pm}) = \frac{1}{2}\text{Tr}(\sigma_i(1 \pm \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})) = \pm n_i, \quad \text{つまり} \quad \chi_{\pm}^{\dagger}\boldsymbol{\sigma}\chi_{\pm} = \pm \mathbf{n}$$

これは (5.75) である。

$$|\chi_{\pm}^{\dagger}(\mathbf{n}')\chi_{+}(\mathbf{n})|^2 = \chi_{+}^{\dagger}(\mathbf{n}) \underbrace{\chi_{\pm}(\mathbf{n}')\chi_{\pm}^{\dagger}(\mathbf{n}')}_{P_{\pm}(\mathbf{n}')} \chi_{+}(\mathbf{n}) = \text{Tr}(P_{\pm}(\mathbf{n}')P_+(\mathbf{n})) = \frac{1 \pm \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}'}{2} \quad (5.82)$$

である。  $\mathbf{n}' = \mathbf{e}_y$  のとき (5.76) になる。

**問題 5.7** パウリ行列は  $\sigma_z$  の固有状態  $|\pm\rangle$  を基底にした演算子  $\boldsymbol{\sigma}$  の表現である。  $\sigma_x$  の固有状態が基底の場合、演算子  $\boldsymbol{\sigma}$  の行列表現を  $\boldsymbol{\Sigma}$  とする。  $\sigma_x$  の固有値  $+1$  の状態  $\chi_1 = \chi_+(\mathbf{e}_x)$ 、  $-1$  の状態を  $\chi_2 = \chi_-(\mathbf{e}_x)$  とすれば、パウリ行列  $\boldsymbol{\sigma}$  を用いて  $(\boldsymbol{\Sigma})_{ij} = \chi_i^{\dagger}\boldsymbol{\sigma}\chi_j$  である。

$$\boldsymbol{\Sigma} = U^{\dagger}\boldsymbol{\sigma}U, \quad U^{\dagger}U = UU^{\dagger} = 1$$

を示せ。  $U$  は列ベクトル  $\chi_1, \chi_2$  を横に並べた 2×2 行列  $U = (\chi_1 \ \chi_2)$ 、  $U_{ij} = (\chi_j)_i$  である。また、具体形を求め  $\Sigma_x = \sigma_z$ 、  $\Sigma_y = -\sigma_y$ 、  $\Sigma_z = \sigma_x$  を示せ。  $\Sigma_x$  が対角行列になる。

## 密度行列演算子

状態  $|\psi\rangle$  における物理量  $A$  の測定を繰り返し行くと、観測値の期待値は  $\langle\psi|A|\psi\rangle$  になる。これは系の状態  $|\psi\rangle$  が完全に指定できる場合である。状態  $|\psi\rangle$  を**純粋状態**ともいう。一方、系の状態が完全には指定できないこともある。例えば、スピン  $1/2$  粒子の散乱で、入射粒子のスピン状態がランダムな場合である。 $\sigma_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$  とすると、 $|+\rangle$  と  $|-\rangle$  の状態が同じ確率  $1/2$  で出現する。純粋状態  $|\pm\rangle$  が混合しているから、粒子の状態を**混合状態**という。混合状態での観測値の期待値は (純粋状態での期待値)  $\times$  (純粋状態の出現確率) の和になる。スピン状態がランダムな場合

$$\frac{1}{2}\langle+|A|+\rangle + \frac{1}{2}\langle-|A|-\rangle$$

である。 $\sigma_x$  の固有値  $1$  の固有状態  $|\psi_x\rangle = (|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$  でも  $|\pm\rangle$  を見出す確率は  $1/2$  であるが、 $|\psi_x\rangle$  は混合状態ではなく純粋状態である。期待値は

$$\langle\psi_x|A|\psi_x\rangle = \frac{1}{2}\langle+|A|+\rangle + \frac{1}{2}\langle-|A|-\rangle + \frac{1}{2}\langle-|A|+\rangle + \frac{1}{2}\langle+|A|-\rangle$$

になる。

一般に、スピン  $1/2$  状態  $\chi_\alpha$  が割合  $w_\alpha$  で混ざった混合状態を考える。

$$\sum_{\alpha} w_{\alpha} = 1, \quad 0 \leq w_{\alpha} \leq 1$$

である。 $\chi_\alpha$  は規格化されているが、互いの直交する必要はない。また、純粋状態の個数に制限はない。純粋状態  $\chi_\alpha$  での物理量  $A$  の期待値は

$$\chi_{\alpha}^{\dagger} A \chi_{\alpha} = \text{Tr}(A P_{\alpha}), \quad P_{\alpha} = \chi_{\alpha} \chi_{\alpha}^{\dagger}$$

であるから、混合状態での期待値は

$$\langle A \rangle_{\rho} = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \text{Tr}(A P_{\alpha}) = \text{Tr}(A \rho), \quad \rho = \sum_{\alpha} w_{\alpha} P_{\alpha} \quad (5.83)$$

になる。射影演算子  $P_{\alpha}$  の線型結合  $\rho$  を**密度演算子**あるいは**密度行列演算子**という。 $\rho$  を用いると  $\langle A \rangle_{\rho}$  は簡潔に表現できる。また、対角和 ( $\text{Tr}$ ) は基底に依存しないから、計算に都合のよい基底を採用できる。 $A = 1$  とすれば

$$\text{Tr} \rho = \sum_{\alpha} w_{\alpha} = 1$$

である。ある  $\alpha = \beta$  で  $w_{\beta} = 1$  のとき、 $\alpha \neq \beta$  では  $w_{\alpha} = 0$  になるから、混合状態は純粋状態になり  $\rho = P_{\beta}$  は  $\chi_{\beta}$  への射影演算子である。量子力学的状態が完全に指定できても (純粋状態)、指定できなくても (混合状態)、系の性質は密度演算子  $\rho$  により統一的に記述できる。

混合状態の場合、 $\rho$  が与えられたとき、射影演算子の線型結合 (5.83) は、互いに直交する必要はないから、一意には決まらない。例えば

$$\rho = w \chi_{\alpha} \chi_{\alpha}^{\dagger} + (1-w) \chi_{\beta} \chi_{\beta}^{\dagger}, \quad \text{ただし} \quad \chi_{\alpha}^{\dagger} \chi_{\beta} = 0$$

の場合

$$u = \sqrt{w} \chi_{\alpha} + \sqrt{1-w} \chi_{\beta}, \quad v = \sqrt{w} \chi_{\alpha} - \sqrt{1-w} \chi_{\beta}$$

とすると

$$\rho = \frac{uu^{\dagger} + vv^{\dagger}}{2}, \quad u^{\dagger}u = v^{\dagger}v = 1, \quad u^{\dagger}v = 2w - 1$$

になるから、純粋状態  $u, v$  が等確率で混ざった混合状態とも見なせる。なお、互いに直交する場合、 $P_\alpha \chi_\beta = \delta_{\alpha\beta} \chi_\beta$  になるから  $\rho \chi_\alpha = w_\alpha \chi_\alpha$  である。 $\chi_\alpha$  はエルミート演算子  $\rho$  の固有状態で  $w_\alpha$  は固有値になる。

$\text{Tr } \rho^2 \leq \text{Tr } \rho = 1$ , 純粋状態のときだけ  $\text{Tr } \rho^2 = 1$  になる。

$$\text{Tr } \rho^2 = \sum_{\alpha\beta} w_\alpha w_\beta \text{Tr}(\chi_\alpha \chi_\alpha^\dagger \chi_\beta \chi_\beta^\dagger) = \sum_{\alpha\beta} w_\alpha w_\beta \chi_\beta^\dagger \chi_\alpha \chi_\alpha^\dagger \chi_\beta = \sum_{\alpha\beta} w_\alpha w_\beta |\chi_\alpha^\dagger \chi_\beta|^2$$

シュワルツの不等式 (1.42) より  $|\chi_\alpha^\dagger \chi_\beta|^2 \leq \chi_\alpha^\dagger \chi_\alpha \chi_\beta^\dagger \chi_\beta = 1$  であるから

$$\text{Tr } \rho^2 \leq \sum_{\alpha\beta} w_\alpha w_\beta = \left( \sum_\alpha w_\alpha \right)^2 = 1$$

になる。全ての  $\alpha$  に対して  $\chi_\alpha = e^{i\theta_\alpha} \chi$  のとき  $\text{Tr } \rho^2 = 1$  である。この場合  $\rho = \sum_\alpha w_\alpha \chi \chi^\dagger = \chi \chi^\dagger$ , 純粋状態である。逆に、純粋状態ならば  $\rho^2 = \rho$  であり  $\text{Tr } \rho^2 = 1$  になる。以上の議論は  $\chi$  が 2 成分スピノールである必要はなく、スピン 1/2 状態に限らず一般に成り立つ。

$\chi_\alpha$  がスピノールの場合、適当な単位ベクトル  $\mathbf{n}_\alpha$  を用いて

$$\rho = \sum_\alpha w_\alpha \chi_+(\mathbf{n}_\alpha) \chi_+^\dagger(\mathbf{n}_\alpha) = \sum_\alpha w_\alpha \frac{1 + \mathbf{n}_\alpha \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2} = \frac{1 + \mathbf{w} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2}, \quad \mathbf{w} = \sum_\alpha w_\alpha \mathbf{n}_\alpha$$

になる。

$$\mathbf{w}^2 = \sum_{\alpha\beta} w_\alpha w_\beta \mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\beta \leq \sum_{\alpha\beta} w_\alpha w_\beta = 1$$

である。(5.67) より

$$\text{Tr } \rho = 1, \quad \text{Tr } \rho^2 = \frac{1 + \mathbf{w}^2}{2} \leq 1, \quad \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\rho = \text{Tr}(\rho \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{w}$$

$\mathbf{w}^2 = 1$  は任意の  $\alpha, \beta$  に対して  $\mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\beta = 1$ , つまり  $\mathbf{n}_\alpha = \mathbf{n}$ , したがって  $\mathbf{w} = \mathbf{n}$  の場合である。 $\rho = \chi_+(\mathbf{n}) \chi_+^\dagger(\mathbf{n})$  になるから純粋状態である。

$\rho$  は  $\mathbf{w}$  にだけ依存するから、 $\chi_\alpha$  が互いに直交しない混合状態は一意に決まらない。しかし、直交する混合状態は一意に決まる。ただし、 $\rho$  の固有値に縮退がある場合は除く。 $\rho$  の固有値を  $p$ , 固有状態を  $\chi_p$  とする。 $\mathbf{e}$  を単位ベクトルとして  $\mathbf{w} = w\mathbf{e}$  で表すと

$$\frac{1 + w\mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2} \chi_p = p \chi_p$$

$\mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の固有値は  $\pm 1$ , 固有状態は  $\chi_\pm(\mathbf{e})$  であるから、 $p = (1 \pm w)/2$ ,  $\chi_p = \chi_\pm(\mathbf{e})$  になり

$$\rho = \frac{1+w}{2} \chi_+(\mathbf{e}) \chi_+^\dagger(\mathbf{e}) + \frac{1-w}{2} \chi_-(\mathbf{e}) \chi_-^\dagger(\mathbf{e}), \quad \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\rho = \frac{1+w}{2} \mathbf{e} + \frac{1-w}{2} (-\mathbf{e}) = \mathbf{w}$$

である。 $\mathbf{w}$  方向のスピン状態  $\chi_+(\mathbf{e})$  を  $(1+w)/2$ , 逆方向のスピン状態  $\chi_-(\mathbf{e})$  を  $(1-w)/2$  の割合で含む混合状態である。 $\chi_\pm(\mathbf{e}) \chi_\pm^\dagger(\mathbf{e}) = (1 \pm \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\sigma})/2$  を代入すれば  $\rho = (1 + \mathbf{w} \cdot \boldsymbol{\sigma})/2$  になり元に戻る。 $w = 0$  の場合、 $p = 1/2$  であるが  $\mathbf{e}$  は任意の単位ベクトルでよい。 $\pm \mathbf{e}$  方向の状態  $\chi_\pm(\mathbf{e})$  を同じ割合で含む混合状態になるから、スピンの全くランダムな状態である。 $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\rho = 0$  は当然である。純粋状態では  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = 0$  にはならない。

### 5.10 スピンの歳差運動と磁気共鳴

古典力学では、ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  中での電子 (電荷  $= -e$ ) のハミルトニアン  $H$  は、自由粒子ハミルトニアン  $\mathbf{p}^2/2M$  において  $\mathbf{p}$  を  $\mathbf{P} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})$  で置き換えればよい。量子力学では  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  として

$$H = \frac{1}{2M}\mathbf{P}^2, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (5.84)$$

になるが、スピンと磁場の相互作用を導出するため細工をする。 $\mathbf{p}$  は微分演算子であるが、(5.63) より  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2$  である。したがって、自由粒子ハミルトニアンを  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2/2M$  として  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{P}$  の置き換えをすると

$$H = \frac{1}{2M}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})^2 = \frac{1}{2M}\mathbf{P}^2 + \frac{i}{2M}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{P} \times \mathbf{P}) \quad (5.85)$$

(5.4) より

$$\begin{aligned} (\mathbf{P} \times \mathbf{P})_1 &= [P_2, P_3] = e[p_2, A_3(\mathbf{r})] - e[p_3, A_2(\mathbf{r})] \\ &= -ie\hbar\left((\partial_2 A_3) - (\partial_3 A_2)\right) = -ie\hbar B_1(\mathbf{r}), \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}) = (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})) \end{aligned}$$

$\mathbf{B}$  は磁場である。他の成分も同様にすると  $\mathbf{P} \times \mathbf{P} = -ie\hbar\mathbf{B}(\mathbf{r})$  になるから

$$H = \frac{1}{2M}\mathbf{P}^2 + \mu\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}), \quad \text{ただし} \quad \mu = \frac{e\hbar}{2M} = \text{ボーア磁子} \quad (5.86)$$

である。磁場とスピンの相互作用が現れる (172 ページ参照)。

一様磁場  $\mathbf{B}$  の場合

$$H = H_r + H_s, \quad H_r = \frac{1}{2M}\left(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)^2, \quad H_s = \mu\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$$

である。 $H_r$  はスピンを含まず  $H_s$  は  $\mathbf{r}$  に依存しないから、 $H = H_r + H_s$  は軌道部分とスピン部分に完全に分離する。これに対応して、状態を軌道部分  $\varphi(\mathbf{r})$  と  $\mathbf{r}$  に依存しない 2 成分スピノール  $\chi$  に分離して  $\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r})\chi$  とする。 $H\psi = E\psi$  は

$$H_r\varphi(\mathbf{r})\chi + \varphi(\mathbf{r})H_s\chi = E\varphi(\mathbf{r})\chi, \quad \text{つまり} \quad \varphi^{-1}(\mathbf{r})H_r\varphi(\mathbf{r})\chi = (E - H_s)\chi$$

になる。右辺は  $\mathbf{r}$  に依存しないから  $\varphi^{-1}(\mathbf{r})H_r\varphi(\mathbf{r})$  は定数である。この定数を  $E_r$  とすると

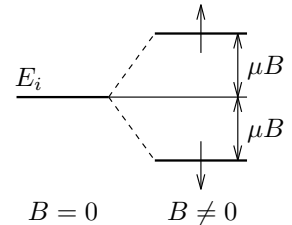
$$H_r\varphi(\mathbf{r}) = E_r\varphi(\mathbf{r}), \quad H_s\chi = E_s\chi, \quad E = E_r + E_s$$

になり、軌道部分とスピン部分を独立に扱える。以下では、スピン部分だけを考える (軌道部分は 176 ページ参照)。 $\mathbf{B}$  が  $\mathbf{r}$  に依存する場合、 $H_s$  も  $\mathbf{r}$  に依存するから、上記の扱いはできない。

$\mathbf{b}$  を  $\mathbf{B}$  方向の単位ベクトル、 $B = |\mathbf{B}|$  とすると  $H_s = \mu B \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  である。

(5.72) の  $\chi_{\pm}(\mathbf{n})$  で  $\mathbf{n}$  を  $\mathbf{b}$  で置き換えれば  $H_s\chi_{\pm}(\mathbf{b}) = \pm\mu B\chi_{\pm}(\mathbf{b})$  になる。 $\chi_{\pm}(\mathbf{b})$  は  $H_s$  の固有状態で固有値は  $\pm\mu B$  である。 $\chi_+$  を磁場方向に平行な状態、 $\chi_-$  を磁場方向に反平行な状態ともいう。 $H_r\varphi_i(\mathbf{r}) = E_i\varphi_i(\mathbf{r})$  とすると、 $H$  の固有値と固有状態は

$$E = E_i \pm \mu B, \quad \psi(\mathbf{r}) = \varphi_i(\mathbf{r})\chi_{\pm}(\mathbf{b})$$



になる。右図にエネルギーレベルを模式的に示す。 $E_i$  の磁場依存性は無視する。 $B = 0$  のとき  $\varphi_i\chi_+$  と  $\varphi_i\chi_-$  は縮退する。 $\mathbf{b}$  は任意であるからスピン状態は互いに直交する任意の 2 つの状態であり、スピンの向きは不定である。磁場が作用すると、縮退は解けスピン状態は磁場方向に平行 ( $\uparrow$ ) か反平行 ( $\downarrow$ ) に整列する (187 ページのゼーマン効果参照)。磁場によりスピンの方向を制御できる。



問題 5.8 時間に依存するシュレーディンガー方程式  $i\hbar \partial \psi / \partial t = (H_r + H_s) \psi(\mathbf{r}, t)$  も

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H_r \varphi(\mathbf{r}, t), \quad i\hbar \frac{d\chi}{dt} = H_s \chi(t), \quad \text{ただし} \quad \psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t) \chi(t)$$

に分離できることを示せ。

#### ラーモア歳差運動

$H_s = \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$  のとき時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi(t) = H_s \chi(t), \quad \chi(t) = \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix} \quad (5.87)$$

を 3 つの方法で解く。 $\mathbf{b}$  の方向を  $\theta_b, \phi_b$  とする。

1. 微分方程式を直接解く。(5.70) より (5.87) は

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} \cos \theta_b & e^{-i\phi_b} \sin \theta_b \\ e^{i\phi_b} \sin \theta_b & -\cos \theta_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix}, \quad \text{ただし} \quad \omega = \frac{\mu B}{\hbar}$$

つまり

$$i \dot{c}_+ = \omega (c_+ \cos \theta_b + c_- e^{-i\phi_b} \sin \theta_b), \quad i \dot{c}_- = \omega (c_+ e^{i\phi_b} \sin \theta_b - c_- \cos \theta_b) \quad (5.88)$$

である。第 1 式から

$$c_-(t) = \frac{e^{i\phi_b}}{\sin \theta_b} \left( \frac{i \dot{c}_+}{\omega} - c_+ \cos \theta_b \right) \quad (5.89)$$

これを第 2 式に代入すると  $\ddot{c}_+ = -\omega^2 c_+$  になる。あるいは  $H_s^2 = (\mu B)^2$  であるから

$$(i\hbar)^2 \frac{d^2}{dt^2} \chi(t) = i\hbar \frac{d}{dt} H_s \chi(t) = H_s^2 \chi(t) = (\mu B)^2 \chi(t), \quad \therefore \quad \ddot{c}_{\pm} = -\omega^2 c_{\pm}$$

$c_{\pm}$  は単振動の微分方程式を満たすが、独立な単振動ではない ( $(5.87) \Rightarrow \ddot{c}_{\pm} = -\omega^2 c_{\pm}$  であるが、この逆は成り立たない)。  $a, b$  を任意定数として  $c_+(t) = a \cos \omega t + b \sin \omega t$  とおける。これを (5.89) に代入すると

$$c_-(t) = \frac{e^{i\phi_b}}{\sin \theta_b} \left( (ib - a \cos \theta_b) \cos \omega t - (ia + b \cos \theta_b) \sin \omega t \right)$$

$a, b$  を  $c_{\pm}(0)$  で表すと  $a = c_+(0)$ ,  $ib = c_+(0) \cos \theta_b + c_-(0) \sin \theta_b e^{-i\phi_b}$  になるから

$$\begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \omega t - i \sin \omega t \cos \theta_b & -i \sin \omega t \sin \theta_b e^{-i\phi_b} \\ -i \sin \omega t \sin \theta_b e^{i\phi_b} & \cos \omega t + i \sin \omega t \cos \theta_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+(0) \\ c_-(0) \end{pmatrix} \quad (5.90)$$

である。右辺の  $2 \times 2$  行列を  $U$  とすると

$$U = \cos \omega t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} \cos \theta_b & \sin \theta_b e^{-i\phi_b} \\ \sin \theta_b e^{i\phi_b} & -\cos \theta_b \end{pmatrix} \sin \omega t = \cos \omega t - i \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin \omega t \quad (5.91)$$

になる (単位行列は明示しない)。

2. (1.49) のように定常状態で展開する。 $e^{\mp i\omega t} \chi_{\pm}(\mathbf{b})$  は (5.87) を満たすから、(5.87) の一般解は

$$\chi(t) = u_+ e^{-i\omega t} \chi_+(\mathbf{b}) + u_- e^{i\omega t} \chi_-(\mathbf{b}), \quad u_{\pm} = \text{定数} \quad (5.92)$$

とおける。 $\chi_{\pm}(\mathbf{b})$  の規格直交性を用いると  $\chi_{\pm}^{\dagger}(\mathbf{b}) \chi(0) = u_{\pm}$  であるから

$$\chi(t) = V \chi(0), \quad V = e^{-i\omega t} \chi_+(\mathbf{b}) \chi_+^{\dagger}(\mathbf{b}) + e^{i\omega t} \chi_-(\mathbf{b}) \chi_-^{\dagger}(\mathbf{b}) \quad (5.93)$$

(5.77) と同様に、 $\chi_{\pm} \chi_{\pm}^{\dagger}$  は  $2 \times 2$  行列である。 $V$  に (5.72) を代入すると  $V = U$  になる。

3. 一般に, 時間に依存するシュレーディンガー方程式  $i\hbar \frac{d}{dt}|t\rangle = H|t\rangle$  の解は,  $H$  が時間に依存しない場合, (1.53) から  $|t\rangle = e^{-iHt/\hbar}|t=0\rangle$  になる。あるいは, 演算子 (行列) の指数関数の定義 (1.35) から, この  $|t\rangle$  が時間に依存するシュレーディンガー方程式を満たすことは直接示せる。多くの場合,  $|t\rangle = e^{-iHt/\hbar}|t=0\rangle$  は形式的な解であり具体的な用途には向かないが, スピンの場合には有用である。 $H = \hbar\omega \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  とすると (5.64) から

$$|t\rangle = \exp(-i\omega t \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma})|t=0\rangle = (\cos \omega t - i\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin \omega t)|t=0\rangle = U|t=0\rangle$$

である。

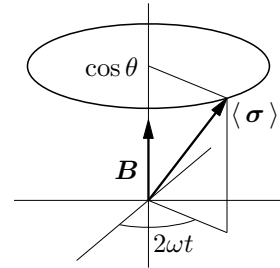
簡単のため, 磁場を  $z$  軸方向 ( $\theta_b = 0$ ) にとると (5.90) より  $c_{\pm}(t) = e^{\mp i\omega t} c_{\pm}(0)$  になる。この結果は (5.88) で  $\theta_b = 0$  とすれば  $dc_{\pm}/dt = \mp i\omega c_{\pm}$  になるから直ちに求まる。(5.72) で  $\phi = 0$  とした  $c_+(0) = \cos(\theta/2)$ ,  $c_-(0) = \sin(\theta/2)$  を初期状態とする。つまり,  $\boldsymbol{\sigma}$  の期待値が磁場の方向から  $\theta$  だけ傾いた状態を初期状態にする。(5.72) の  $\chi_+(\theta, \phi)$  を用いると

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \cos(\theta/2) \\ e^{i\omega t} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} = e^{-i\omega t} \chi_+(\theta, 2\omega t)$$

になる。 $\chi(t)$  は  $\mathbf{n}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の固有値 1 の固有状態である。ただし

$$\mathbf{n}(t) = \mathbf{e}_x \sin \theta \cos 2\omega t + \mathbf{e}_y \sin \theta \sin 2\omega t + \mathbf{e}_z \cos \theta$$

である。(5.75) より時刻  $t$  での  $\boldsymbol{\sigma}$  の期待値は  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \mathbf{n}(t)$  になる。これを図示すると右図になる。 $\boldsymbol{\sigma}$  の期待値は磁場方向 ( $z$  軸) を中心に角速度  $2\omega$  で歳差運動する。これを **ラーモア歳差運動** (Larmor precession) という。なお, 期待値が歳差運動するのであって,  $\sigma_i$  は互いに非可換であるから, 3 成分が同時に確定した値になることはない。



### 磁気共鳴

$z$  軸方向の一定磁場  $B_0 \mathbf{e}_z$  に  $xy$  平面内で回転する磁場  $\mathbf{e}_x B_1 \cos \omega t + \mathbf{e}_y B_1 \sin \omega t$  を加えた場合を考える ( $B_0, B_1 > 0$ )。ハミルトニアンは

$$H(t) = \mu \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mu B_1 (\sigma_x \cos \omega t + \sigma_y \sin \omega t) + \mu B_0 \sigma_z = \mu \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{-i\omega t} \\ B_1 e^{i\omega t} & -B_0 \end{pmatrix} \quad (5.94)$$

である。 $H$  は時間に依存するから 2., 3. の方法は使えない (問題 5.9 参照)。

$$H(t) = \mu B \begin{pmatrix} \cos \theta_b & \sin \theta_b e^{-i\omega t} \\ \sin \theta_b e^{i\omega t} & -\cos \theta_b \end{pmatrix}, \quad \cos \theta_b = \frac{B_0}{B}, \quad \sin \theta_b = \frac{B_1}{B}, \quad B = \sqrt{B_0^2 + B_1^2}$$

と表せる。これは (5.70) で  $\theta = \theta_b$ ,  $\phi = \omega t$  とすればよいから, (5.72) の  $\chi_{\pm}(\theta, \phi)$  を用いて

$$H(t)\chi_{\pm}(\theta_b, \omega t) = E_{\pm}\chi_{\pm}(\theta_b, \omega t), \quad E_{\pm} = \pm \mu B \quad (5.95)$$

である。固有値は時間に依存しない。しかし,  $\chi_{\pm}(\theta_b, \omega t)$  は時間に依存するから  $e^{-iE_{\pm}t/\hbar}\chi_{\pm}(\theta_b, \omega t)$  は時間に依存するシュレーディンガー方程式を満たさない (262 ページ参照)。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix} = H \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix}$$

を正直に解く。\$H\$ の行列表現 (5.94) を代入すると (\$\omega\_0 = \mu B\_0/\hbar\$, \$\omega\_1 = \mu B\_1/\hbar\$)

$$i\dot{c}_+ = \omega_0 c_+ + \omega_1 e^{-i\omega t} c_-, \quad i\dot{c}_- = \omega_1 e^{i\omega t} c_+ - \omega_0 c_-$$

になる。\$\omega\_1 \neq 0\$ の場合, 第2式 \$c\_+ = e^{-i\omega t} (i\dot{c}\_- + \omega\_0 c\_-)/\omega\_1\$ を第1式に代入すると

$$\ddot{c}_- - i\omega\dot{c}_- + (\omega_0^2 + \omega_1^2 - \omega\omega_0)c_- = 0$$

2次方程式 \$x^2 - i\omega x + \omega\_0^2 + \omega\_1^2 - \omega\omega\_0 = 0\$ の2根は

$$i\omega/2 \pm i\Omega, \quad \Omega = \sqrt{(\omega_0 - \omega/2)^2 + \omega_1^2}$$

になるから, \$a, b\$ を任意定数として

$$c_-(t) = e^{i\omega t/2} (a \cos \Omega t + b \sin \Omega t)$$

$$c_+(t) = e^{-i\omega t/2} \left( \frac{(\omega_0 - \omega/2)a + i\Omega b}{\omega_1} \cos \Omega t + \frac{(\omega_0 - \omega/2)b - i\Omega a}{\omega_1} \sin \Omega t \right)$$

\$a, b\$ を \$c\_{\pm}(0)\$ で表すと

$$c_-(t) = e^{i\omega t/2} \left( c_-(0) \cos \Omega t + \frac{\omega_1 c_+(0) - (\omega_0 - \omega/2)c_-(0)}{i\Omega} \sin \Omega t \right)$$

$$c_+(t) = e^{-i\omega t/2} \left( c_+(0) \cos \Omega t + \frac{\omega_1 c_-(0) + (\omega_0 - \omega/2)c_+(0)}{i\Omega} \sin \Omega t \right)$$
(5.96)

である。

\$t = 0\$ で系は \$z\$ 軸方向のスピン上向きの状態 \$|+\rangle\$ にあったとして \$c\_+(0) = 1\$, \$c\_-(0) = 0\$ とすると

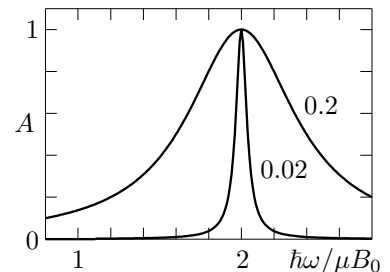
$$c_-(t) = e^{i\omega t/2} \frac{\omega_1}{i\Omega} \sin \Omega t, \quad c_+(t) = e^{-i\omega t/2} \left( \cos \Omega t + \frac{\omega_0 - \omega/2}{i\Omega} \sin \Omega t \right)$$

になる。時刻 \$t\$ でスピン下向きの状態 \$|-\rangle\$ になる確率 \$P\_-(t)\$ は

$$P_-(t) = \left| \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \right|^2 = |c_-|^2 = A \sin^2 \Omega t, \quad A = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} = \frac{(2\mu B_1)^2}{(\hbar\omega - 2\mu B_0)^2 + (2\mu B_1)^2}$$
(5.97)

である。\$B\_1 = 0\$ の場合, \$c\_-(t) = 0\$ でありスピンの逆転は起こらない。回転磁場 \$B\_1\$ が加わると, スピンの向きは逆転する。特に, \$\hbar\omega = 2\mu B\_0\$ のとき \$A = 1\$ になり完全に逆転する時刻がある。これは \$B\_1 \neq 0\$ であれば常に起こる。

\$B\_1/B\_0 = 0.02, 0.2\$ の場合, 振幅 \$A\$ を \$\hbar\omega/\mu B\_0\$ の関数として右図に示す。\$|\hbar\omega - 2\mu B\_0| \leq 2\mu B\_1\$ とき \$A \geq 1/2\$ であるから, 微弱な回転磁場 \$B\_1 \ll B\_0\$ の場合, \$\hbar\omega\$ が \$2\mu B\_0\$ の近傍だけ \$A \approx 1\$ になり共鳴が起こる。\$B\_1 = 0\$ のとき \$H\$ の固有状態は \$|\pm\rangle\$ であり固有エネルギーは \$E\_{\pm} = \pm\mu B\_0\$ である。これに角振動数 \$\omega\$ の微弱な回転磁場を加えると, \$\hbar\omega\$ がエネルギー差 \$E\_+ - E\_- = 2\mu B\_0\$ に等しいときだけ, \$|+\rangle \rightarrow |-\rangle\$ の遷移は大きくなる。時間に周期的に依存する外場が作用すると, この様な共鳴現象が起こる (251 ページ参照)。



**問題 5.9** (5.94) の \$H(t)\$ を

$$H(t) = H_0 + H_{xy}(t), \quad H_0 = \mu B_0 \sigma_z, \quad H_{xy}(t) = \mu B_1 (\sigma_x \cos \omega t + \sigma_y \sin \omega t)$$

に分割する。 $i\hbar d\chi/dt = H_0\chi(t)$  の解は  $u_{\pm}$  を定数として  $u_+e^{-i\omega_0 t}|+\rangle + u_-e^{i\omega_0 t}|-\rangle$  である。これを拡張して  $i\hbar d\chi/dt = H\chi(t)$  の解を

$$u_+(t)e^{-i\omega_0 t}|+\rangle + u_-(t)e^{i\omega_0 t}|-\rangle, \quad \text{つまり} \quad \chi(t) = \begin{pmatrix} u_+(t)e^{-i\omega_0 t} \\ u_-(t)e^{i\omega_0 t} \end{pmatrix} = e^{-iH_0 t/\hbar} \begin{pmatrix} u_+(t) \\ u_-(t) \end{pmatrix}$$

とすると

$$\frac{du_{\pm}}{dt} = -i\omega_1 e^{\mp i(\omega - 2\omega_0)t} u_{\mp}$$

になることを示せ。この微分方程式を解き (5.96) を求めよ。244 ページの相互作用描像 (ディラック描像) による解法である。

**問題 5.10**  $H$  が (5.94) の場合,  $z$  軸まわりに角速度  $\omega$  で回転する座標系から見れば, 磁場は時間に依存しない。これを利用して  $i\hbar d\chi/dt = H\chi(t)$  を解く。 $D(\theta) = e^{-i\theta\sigma_z/2}$  とする ((5.130) 参照)。

- (5.64) より  $D^\dagger(\omega t)H(t)D(\omega t) = H(0)$  を示せ。
- $\chi(t) = D(\omega t)\varphi(t)$  とすると  $i\hbar d\chi/dt = H\chi(t)$  は

$$\frac{d\varphi}{dt} = -i\Omega \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \varphi, \quad \text{ただし} \quad \mathbf{n} = \frac{\omega_1}{\Omega} \mathbf{e}_x + \frac{\omega_0 - \omega/2}{\Omega} \mathbf{e}_z, \quad \Omega = \sqrt{(\omega_0 - \omega/2)^2 + \omega_1^2}$$

になることを示せ。 $\mathbf{n}$  は単位ベクトルである。 $\Omega \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  は時間に依存しないから積分できる。

$$\chi(t) = e^{-i\omega t\sigma_z/2} \left( \cos \Omega t - i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin \Omega t \right) \chi(0)$$

を示し (5.96) を求めよ。

**問題 5.11**  $H(t)$  の固有状態  $\chi_{\pm}(\theta_b, \omega t)$  により  $\chi(t) = d_+(t)\chi_+(\theta_b, \omega t) + d_-(t)\chi_-(\theta_b, \omega t)$  と表せる。

$$d_{\pm}(t) = e^{-i\omega t/2} \left( d_{\pm}(0) \cos \Omega t + \frac{\pm d_{\pm}(0)(\omega_2^2 - \omega_0\omega/2) - d_{\mp}(0)\omega_1\omega/2}{i\omega_2\Omega} \sin \Omega t \right) \quad (5.98)$$

を示せ。ただし  $\omega_2 = \mu B/\hbar = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}$  である。また,  $\chi^\dagger(t)\chi(t) = |d_+(t)|^2 + |d_-(t)|^2$  が時間に依存しないことを確かめよ。

## 5.11 角運動量の合成

2つの部分系 1, 2 からなる合成系の角運動量を考える。部分系の角運動量演算子  $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$  は交換関係 (5.5)

$$[J_{1i}, J_{1j}] = i \sum_k \varepsilon_{ijk} J_{1k}, \quad [J_{2i}, J_{2j}] = i \sum_k \varepsilon_{ijk} J_{2k}$$

を満たす。2つの部分系は完全に独立な系, つまり  $[J_{1i}, J_{2j}] = 0$  である。例えば, 2つの粒子の軌道角運動量  $\mathbf{L}_1$  と  $\mathbf{L}_2$  は以上の性質を満たす。また, スピン  $\mathbf{S}$  をもつ粒子の場合, 軌道角運動量  $\mathbf{L}$  と  $\mathbf{S}$  は同一粒子の演算子であるが, 異なる自由度に伴う角運動量であるから  $[L_i, S_j] = 0$  である。

部分系の角運動量については固有関数が分かっているとき, 合成系の角運動量の固有関数をどのようにして作るかが問題になる。これが角運動量の合成である。古典力学的には単なるベクトルの和  $\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$  であるが, 量子力学では多少込み入った話になる。合成系の状態は, それぞれの部分系の状態を指定して表せるから, 部分系の直積

$$|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

で書ける。ただし,  $|j_k m_k\rangle$  は ( $k = 1, 2$ )

$$\mathbf{J}_k^2 |j_k m_k\rangle = j_k(j_k + 1) |j_k m_k\rangle, \quad J_{kz} |j_k m_k\rangle = m_k |j_k m_k\rangle$$

である。以下では, 表記を簡単にするため

$$|j_1 m_1\rangle = |m_1\rangle, \quad |j_2 m_2\rangle = |m_2\rangle, \quad |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = |m_1, m_2\rangle = |m_1\rangle |m_2\rangle$$

と略記する。合成系の角運動量  $\mathbf{J}$  は  $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 \otimes \mathbb{I}_2 + \mathbb{I}_1 \otimes \mathbf{J}_2$  で定義される。 $\mathbb{I}_k$  は部分系  $k$  の状態に作用する恒等演算子 (状態を全く変えない演算子) である。簡単のため  $\mathbb{I}_k$  は省略して  $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$  で表す。 $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$  はそれぞれ部分系 2, 部分系 1 に対しては恒等演算子として作用する。例えば

$$\begin{aligned} J_{1x} J_{2x} |m_1, m_2\rangle &= (J_{1x} |m_1\rangle) (J_{2x} |m_2\rangle) \\ (J_{1x} + J_{2x}) |m_1, m_2\rangle &= (J_{1x} |m_1\rangle) |m_2\rangle + |m_1\rangle (J_{2x} |m_2\rangle) \end{aligned}$$

である。括弧はどこまで作用するか明確にするため付けた。

合成系の角運動量  $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$  も (5.5) を満たす。

$$[J_i, J_j] = [J_{1i} + J_{2i}, J_{1j} + J_{2j}] = [J_{1i}, J_{1j}] + [J_{2i}, J_{2j}] = i \sum_k \varepsilon_{ijk} (J_{1k} + J_{2k}) = i \sum_k \varepsilon_{ijk} J_k$$

したがって, 5.1 節の固有値と固有関数の結果は  $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$  についてもそのまま使え,  $\mathbf{J}^2$  と  $J_z$  の同時固有関数  $|jm\rangle$

$$\mathbf{J}^2 |jm\rangle = j(j+1) |jm\rangle, \quad J_z |jm\rangle = m |jm\rangle$$

が存在する。合成系の状態  $|jm\rangle$  を直積 (これも合成系の状態) で表そう。

$J_z$  は部分系の和  $J_z = J_{1z} + J_{2z}$  であるから

$$J_z |m_1, m_2\rangle = (J_{1z} |m_1\rangle) |m_2\rangle + |m_1\rangle (J_{2z} |m_2\rangle) = (m_1 + m_2) |m_1, m_2\rangle$$

したがって, 直積は  $J_z$  の固有関数である。一方

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2, \quad 2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 = 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}$$

に対しては  $c_{\pm}(j, m) = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}$  とすると

$$\begin{aligned} (\mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2) |m_1, m_2\rangle &= (j_1(j_1 + 1) + j_2(j_2 + 1)) |m_1, m_2\rangle \\ 2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 |m_1, m_2\rangle &= 2m_1m_2 |m_1, m_2\rangle + c_+(j_1, m_1)c_-(j_2, m_2) |m_1 + 1, m_2 - 1\rangle \\ &\quad + c_-(j_1, m_1)c_+(j_2, m_2) |m_1 - 1, m_2 + 1\rangle \end{aligned} \quad (5.99)$$

であるから, 一般に, 直積  $|m_1, m_2\rangle$  は  $\mathbf{J}^2$  の固有関数ではない。ただし

$$c_+(j_1, m_1) = c_+(j_2, m_2) = 0 \quad \text{または} \quad c_-(j_1, m_1) = c_-(j_2, m_2) = 0$$

つまり  $m_1 = j_1, m_2 = j_2$  または  $m_1 = -j_1, m_2 = -j_2$  の場合は例外的であり

$$\mathbf{J}^2 |m_1, m_2\rangle = (j_1(j_1 + 1) + j_2(j_2 + 1) + 2j_1j_2) |m_1, m_2\rangle = j(j+1) |m_1, m_2\rangle, \quad j = j_1 + j_2$$

になる。直積は  $\mathbf{J}^2$  の固有関数である。問題は  $j = j_1 + j_2$ ,  $m = \pm j$  以外の  $|jm\rangle$  を直積で表すことである。 $|m_1, m_2\rangle$  は  $J_z$  の固有値  $m_1 + m_2$  の固有関数であるから,  $m_1 + m_2 = m$  を満たす  $|m_1, m_2\rangle$  の任意の線形結合

$$\sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2} |m_1, m_2\rangle, \quad \text{ただし } m_1 + m_2 \neq m \text{ のとき } C_{m_1 m_2} = 0$$

は  $J_z$  の固有値  $m$  の固有関数である。 $\mathbf{J}^2$  の固有関数になるように係数  $C_{m_1 m_2}$  を決める。

$|m_1| \leq j_1, |m_2| \leq j_2$  であるから,  $J_z$  の固有値  $m = m_1 + m_2$  は  $|m| \leq j_1 + j_2$  である。 $m$  の最大値が  $j_1 + j_2$  ということは  $j$  の最大値も  $j_1 + j_2$  である。 $m = j_1 + j_2$  になる  $m_1, m_2$  の組み合わせは  $m_1 = j_1, m_2 = j_2$  だけであるから

$$|j=j_{12}, m=j_{12}\rangle = |m_1=j_1, m_2=j_2\rangle, \quad \text{ただし } j_{12} = j_1 + j_2 \quad (5.100)$$

になる。これは上で確かめたことである。(5.100) に  $J_- = J_{1-} + J_{2-}$  を作用させると

$$J_- |j=j_{12}, m=j_{12}\rangle = (J_{1-} + J_{2-}) |m_1=j_1, m_2=j_2\rangle$$

である。左辺は (5.17) で  $j = m = j_{12}$  とすると

$$J_- |j=j_{12}, m=j_{12}\rangle = \sqrt{2j_{12}} |j=j_{12}, m=j_{12}-1\rangle$$

一方, 右辺は

$$\begin{aligned} (J_{1-} + J_{2-}) |m_1=j_1, m_2=j_2\rangle &= (J_{1-} |m_1=j_1\rangle) |m_2=j_2\rangle + |m_1=j_1\rangle (J_{2-} |m_2=j_2\rangle) \\ &= \sqrt{2j_1} |m_1=j_1-1, m_2=j_2\rangle + \sqrt{2j_2} |m_1=j_1, m_2=j_2-1\rangle \end{aligned}$$

であるから

$$|j=j_{12}, m=j_{12}-1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_{12}}} |m_1=j_1-1, m_2=j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_{12}}} |m_1=j_1, m_2=j_2-1\rangle \quad (5.101)$$

になる。この状態に再び  $J_- = J_{1-} + J_{2-}$  を作用させると

$$|j=j_{12}, m=j_{12}-1\rangle \rightarrow |j=j_{12}, m=j_{12}-2\rangle$$

$$|m_1=j_1-1, m_2=j_2\rangle \rightarrow |m_1=j_1-2, m_2=j_2\rangle \text{ と } |m_1=j_1-1, m_2=j_2-1\rangle \text{ の線形結合}$$

$$|m_1=j_1, m_2=j_2-1\rangle \rightarrow |m_1=j_1-1, m_2=j_2-1\rangle \text{ と } |m_1=j_1, m_2=j_2-2\rangle \text{ の線形結合}$$

になるから  $|j=j_{12}, m=j_{12}-2\rangle$  を

$$|m_1=j_1-1, m_2=j_2-1\rangle, \quad |m_1=j_1-2, m_2=j_2\rangle, \quad |m_1=j_1, m_2=j_2-2\rangle$$

で表せる。 $m_1 + m_2 = j_{12} - 2 = j_1 + j_2 - 2$  を満たす  $|m_1, m_2\rangle$  はこの3つである。この操作を繰り返せば  $|j=j_{12}, m\rangle$ ,  $m = j_{12}, \dots, -j_{12}$  を直積  $|m_1, m_2\rangle$  で表すことができる。

次に  $j$  が1つ小さい  $|j=j_{12}-1, m\rangle$  を求める。この場合  $m$  の最大値は  $m = j_{12}-1$  である。 $J_z$  の固有値が  $j_{12}-1$  になる  $|m_1, m_2\rangle$  は  $|m_1=j_1, m_2=j_2-1\rangle$  と  $|m_1=j_1-1, m_2=j_2\rangle$  の2つだけであるから

$$|j=j_{12}-1, m=j_{12}-1\rangle = c_1 |m_1=j_1-1, m_2=j_2\rangle + c_2 |m_1=j_1, m_2=j_2-1\rangle$$

と表せる。この状態と  $|j=j_{12}, m=j_{12}-1\rangle$  は  $\mathbf{J}^2$  の固有値が異なるから直交する。(5.101) より直交条件は  $\sqrt{j_1}c_1 + \sqrt{j_2}c_2 = 0$  である。これと規格化条件  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$  から

$$|j=j_{12}-1, m=j_{12}-1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_{12}}} |m_1=j_1, m_2=j_2-1\rangle - \sqrt{\frac{j_2}{j_{12}}} |m_1=j_1-1, m_2=j_2\rangle \quad (5.102)$$

とすればよい。これに  $J_-$  を繰り返し作用させれば  $|j=j_{12}-1, m\rangle$  を  $|m_1, m_2\rangle$  で表せる。**問題 5.12** より (5.102) が  $\mathbf{J}^2$  の固有関数になることは示せる。

同様に  $j = j_{12} - n, n = 1, 2, \dots$  の状態を求めることができる。 $j = m = j_{12} - n$  の状態は  $m_1 + m_2 = j_{12} - n$  を満たす  $n+1$  個の直積

$$|j=j_{12}-n, m=j_{12}-n\rangle = \sum_{k=0}^n C_k |m_1=j_1-k, m_2=j_2-n+k\rangle, \quad C_k = C_{j_1-k, j_2-n+k}$$

で表せる。規格化と既に求まっている  $j_{12}-n < j \leq j_{12}$  である  $n$  個の  $|j, m=j_{12}-n\rangle$  との直交条件から  $C_k$  は決まる。更に、 $j = m = j_{12} - n$  に  $J_-$  を作用させると

$$|jm\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle \quad (5.103)$$

が求まる。展開係数  $C_{m_1 m_2}$  を  $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle$  で表し **クレブシュ・ゴルドン (Clebsch-Gordan) 係数**, 略して CG 係数という。 $m_1 + m_2 \neq$

$m$  のとき, CG 係数は 0 である。以上の手順を図で表すと右図になる。●が  $|jm\rangle$  を表し, 矢印は  $J_-$  の作用を表す。また, 破線で結んだ 2 つの状態は直交させる。出発点は  $j = m = j_{12} = j_1 + j_2$  の状態で, これは直積 (5.100) である。

$j$  には下限がある。 $j$  の最小値を  $j_m$  とする。 $j$  が与えられたとき  $|jm\rangle$  は  $2j+1$  個存在する。 $j = j_m + k, k = 0, 1, \dots, j_1 + j_2 - j_m$  の場合, 状態の総数は

$$\sum_{k=0}^{j_1+j_2-j_m} (2(j_m+k)+1) = (j_1+j_2+1)^2 - j_m^2$$

になる。ところで,  $|jm\rangle$  は  $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$  の線形結合で表せるが, 互いに直交する線形結合の状態数は基底となる  $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$  の総数  $(2j_1+1)(2j_2+1)$  に等しいから

$$(j_1+j_2+1)^2 - j_m^2 = (2j_1+1)(2j_2+1), \quad \therefore j_m = |j_1 - j_2|$$

合成角運動量の  $j$  は

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 \quad (5.104)$$

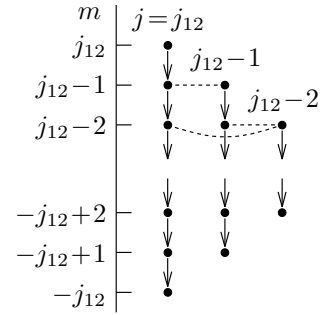
になる。これは普通のベクトルの大きさの関係式  $||\mathbf{J}_1| - |\mathbf{J}_2|| \leq |\mathbf{J}| \leq |\mathbf{J}_1| + |\mathbf{J}_2|$  に対応する。

$\mathbf{J}^2, J_z$  の固有関数 (5.103) は  $j_1, j_2$  については和を取らないから  $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2$  の固有関数でもあり

$$\mathbf{J}_1^2 |jm\rangle = j_1(j_1+1) |jm\rangle, \quad \mathbf{J}_2^2 |jm\rangle = j_2(j_2+1) |jm\rangle$$

を満たす。 $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2$  の同時固有関数の組が存在するということは, これらが互いに可換であることを意味する。 $\mathbf{J}_1^2$  と  $\mathbf{J}_1$  の各成分は可換であるから

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2] = [\mathbf{J}_1^2 + 2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 + \mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}_1^2] = 0, \quad \text{同様に} \quad [\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_2^2] = 0$$



である。一方,  $\mathbf{J}^2$  と  $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$  の各成分は非可換である。例えば

$$[\mathbf{J}^2, J_{1z}] = 2[\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2, J_{1z}] = 2[J_{1x}, J_{1z}]J_{2x} + 2[J_{1y}, J_{1z}]J_{2y} = i(J_{1x}J_{2y} - J_{1y}J_{2x}) \neq 0$$

1 と 2 を入れ替えれば

$$[\mathbf{J}^2, J_{2z}] = -i(J_{1x}J_{2y} - J_{1y}J_{2x}) \neq 0, \quad [\mathbf{J}^2, J_z] = [\mathbf{J}^2, J_{1z}] + [\mathbf{J}^2, J_{2z}] = 0$$

したがって,  $\mathbf{J}^2$  と  $J_{1z}, J_{2z}$  の同時固有関数の組は存在しない。直積  $|m_1, m_2\rangle$  は  $J_{1z}, J_{2z}$  の固有関数であるが  $\mathbf{J}^2$  の固有関数ではない ( $m_1 = \pm j_1, m_2 = \pm j_2$  は例外である)。

$|m_1, m_2\rangle$  の組も  $|jm\rangle$  の組も完全系という点では同等である。合成系の状態として, どちらの組を採用するかは, 扱う問題に依存する。例えば, ハミルトニアンに  $\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2$  が現れる場合, (5.99) に示したように,  $\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2$  が  $|m_1, m_2\rangle$  に作用した結果は複雑であるが

$$2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 |jm\rangle = (\mathbf{J}^2 - \mathbf{J}_1^2 - \mathbf{J}_2^2) |jm\rangle = (j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)) |jm\rangle \quad (5.105)$$

になるから, 合成系の状態として  $|jm\rangle$  を用いた方が簡単になる。

**問題 5.12** (5.102) の右辺に  $J_+ = J_{1+} + J_{2+}$  を作用させると 0 になることを確かめよ。(5.27) と同様にして, (5.102) は  $\mathbf{J}^2$  の固有関数である。

### CG 係数の基本的性質

$m = m_1 + m_2$  かつ  $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$  でなければ  $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle = 0$  である。CG 係数はすべて実数にできる。これと  $|jm\rangle$  及び  $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$  の直交性から

$$\begin{aligned} \langle jm | j'm' \rangle &= \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m'_1, m'_2}} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle \langle j_1 m'_1 j_2 m'_2 | j'm' \rangle \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j_1 m'_1, j_2 m'_2 \rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j'm' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (5.106)$$

である。直積の規格直交性  $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 m'_1 j_2 m'_2 \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}$  は  $|jm\rangle$  の完備性から

$$\sum_{j, m} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle \langle j_1 m'_1 j_2 m'_2 | jm \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (5.107)$$

である。

$$\begin{aligned} J_{\pm} |jm\rangle &= (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle \\ &= \sum \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle \left[ (J_{1\pm} |j_1 m_1\rangle) |j_2 m_2\rangle + |j_1 m_1\rangle (J_{2\pm} |j_2 m_2\rangle) \right] \end{aligned}$$

に (5.16), (5.17) を適用すると漸化式

$$\begin{aligned} &\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j, m \pm 1 \rangle \\ &= \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle j_1, m_1 \mp 1, j_2 m_2 | jm \rangle \\ &\quad + \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle j_1 m_1, j_2, m_2 \mp 1 | jm \rangle \end{aligned} \quad (5.108)$$



を得る。この漸化式を使うと、例えば  $\langle j_1 j_1 j_2 j_2 | j_1 + j_2 j_1 + j_2 \rangle = 1$  から他の全ての CG 係数を求めることができる。実際、CG 係数の具体的表現が求まっており  $m = m_1 + m_2$  のとき

$$\begin{aligned} & \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle \\ &= \sqrt{\frac{(2j_1 + 1)(j_1 + j_2 - j)!(j_1 - j_2 + j)!(-j_1 + j_2 + j)!}{(j_1 + j_2 + j + 1)!}} \\ & \times \sqrt{(j_1 + m_1)!(j_1 - m_1)!(j_2 + m_2)!(j_2 - m_2)!(j + m)!(j - m)!} \\ & \times \sum_k \frac{(-1)^k}{k! (j_1 + j_2 - j - k)!(j_1 - m_1 - k)!(j_2 + m_2 - k)!(j - j_2 + m_1 + k)!(j - j_1 - m_2 + k)!} \end{aligned}$$

である。ただし、整数  $k$  は分母の各整数が非負の範囲で和をとる。

**スピン 1/2 の合成**  $j_1 = j_2 = 1/2$

簡単のため  $|j_k = \frac{1}{2} m_k = \pm \frac{1}{2}\rangle = |\pm\rangle_k$  と略記する。(5.104) より  $j = 1, j = 0$  になる。

$|j = 1 m = 1\rangle = |+\rangle_1 |+\rangle_2$  である。(5.17) より

$$J_- |j = 1 m = 1\rangle = \sqrt{2} |j = 1 m = 0\rangle, \quad (J_{1-} + J_{2-}) |+\rangle_1 |+\rangle_2 = |-\rangle_1 |+\rangle_2 + |+\rangle_1 |-\rangle_2$$

であるから

$$|j = 1 m = 0\rangle = \frac{|+\rangle_1 |-\rangle_2 + |-\rangle_1 |+\rangle_2}{\sqrt{2}} \quad (5.109)$$

になる。更に  $J_-$  を作用させると  $|j = 1 m = -1\rangle = |-\rangle_1 |-\rangle_2$  である。 $m = 0$  の状態には  $j = 0$  もある。これは (5.109) に直交するから  $|j = 0 m = 0\rangle = (|+\rangle_1 |-\rangle_2 - |-\rangle_1 |+\rangle_2)/\sqrt{2}$  とすればよい。 $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$  は  $2 \times 2 = 4$  個であるから  $|j m\rangle$  も 4 個あり

$$\begin{aligned} |j = 1 m\rangle &= \begin{cases} |\pm\rangle_1 |\pm\rangle_2, & m = \pm 1 \\ \frac{|+\rangle_1 |-\rangle_2 + |-\rangle_1 |+\rangle_2}{\sqrt{2}}, & m = 0 \end{cases} \\ |j = 0 m = 0\rangle &= \frac{|+\rangle_1 |-\rangle_2 - |-\rangle_1 |+\rangle_2}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (5.110)$$

になる。 $j = 0$  の状態は 1 つしかないので**スピン 1 重項**、 $j = 1$  は 3 つあるので**スピン 3 重項**という。

$J_1$  の状態と  $J_2$  の状態を交換すると  $|j = 0 m = 0\rangle$  は符号が変わるが (反対称)、 $|j = 1 m\rangle$  は交換に対して不変である (対称)。この性質は、例えば、2 電子系を扱うとき重要になる。 $J_1 = \sigma_1/2$ ,  $J_2 = \sigma_2/2$  とする。

$$P_\sigma = \frac{1 + \sigma_1 \cdot \sigma_2}{2} \quad (5.111)$$

を考える。 $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 3$  より  $J^2 = (\sigma_1 + \sigma_2)^2/4 = P_\sigma + 1$  になるから

$$P_\sigma |j = 1 m\rangle = |j = 1 m\rangle, \quad P_\sigma |j = 0 m = 0\rangle = -|j = 0 m = 0\rangle$$

$P_\sigma$  は  $J_1$  の状態と  $J_2$  の状態を交換する演算子である。

### 問題 5.13

1.  $P_\sigma |\pm\rangle_1 |\pm\rangle_2 = |\pm\rangle_1 |\pm\rangle_2$ ,  $P_\sigma |\pm\rangle_1 |\mp\rangle_2 = |\mp\rangle_1 |\pm\rangle_2$  を確かめよ。
2. 2 回交換すれば元に戻るから  $P_\sigma^2 = 1$  である。これから  $(\sigma_1 \cdot \sigma_2)^2 = 3 - 2\sigma_1 \cdot \sigma_2$  になるが、これを (5.62) を用いて導け。

3.  $P_1 = (1 - \sigma_1 \cdot \sigma_2)/4$ ,  $P_3 = 1 - P_1$  は, それぞれスピン 1 重項, スピン 3 重項への射影演算子であることを示せ。  $P_1^2 = P_1$ ,  $P_3^2 = P_3$ ,  $P_1 P_3 = 0$  である。

### 軌道角運動量とスピン 1/2 の合成

$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  とする。  $\mathbf{J}^2$  と  $J_z$  の同時固有関数  $|jm\rangle$  を  $\mathbf{L}^2$ ,  $L_z$  の固有関数  $|\ell m_\ell\rangle$  とスピンの固有関数  $|\pm\rangle$  で表す。  $|\ell m_\ell\rangle$  は球面調和関数  $Y_{\ell m_\ell}(\theta, \phi)$  である。 5.11 の手順により  $J_-$  を作用させて求めることもできるが, ここではスピンの状態が  $|\pm\rangle$  の 2 つだけであることを利用する。  $\ell = 0$  の場合  $j = 1/2$  であり,  $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$  より  $|jm\rangle = |\pm\rangle/\sqrt{4\pi}$  になる。 以下では  $\ell \neq 0$  とする。 なお,  $L_z$  の固有値  $m_\ell$  は整数であるが  $m$  は半整数である。

$|j = \ell + \frac{1}{2}, m = \pm j\rangle = |\ell \pm \ell\rangle|\pm\rangle$  である。  $|m| < \ell + 1/2$  の場合,  $J_z = L_z + S_z$  の固有値が  $m$  になる直積は  $|\varphi_\pm\rangle \equiv |\ell m \mp \frac{1}{2}\rangle|\pm\rangle$  の 2 つだけであるから

$$|jm\rangle = c_1|\varphi_+\rangle + c_2|\varphi_-\rangle$$

とおける。これは任意の係数  $c_1, c_2$  に対して  $J_z$  の固有関数であるから,  $\mathbf{J}^2$  の固有関数

$$\mathbf{J}^2(c_1|\varphi_+\rangle + c_2|\varphi_-\rangle) = j(j+1)(c_1|\varphi_+\rangle + c_2|\varphi_-\rangle) \quad (5.112)$$

になるように  $c_1, c_2$  を決める。(5.99) より

$$2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}|\varphi_\pm\rangle = (\pm m - 1/2)|\varphi_\pm\rangle + \sqrt{j_0^2 - m^2}|\varphi_\mp\rangle, \quad j_0 \equiv \ell + 1/2 \quad (5.113)$$

になるから

$$\mathbf{J}^2|\varphi_\pm\rangle = (\mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S})|\varphi_\pm\rangle = (j_0^2 \pm m)|\varphi_\pm\rangle + \sqrt{j_0^2 - m^2}|\varphi_\mp\rangle$$

したがって, (5.112) は

$$\begin{pmatrix} j_0^2 + m - j(j+1) & \sqrt{j_0^2 - m^2} \\ \sqrt{j_0^2 - m^2} & j_0^2 - m - j(j+1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (5.114)$$

になる。左辺の行列式 = 0 より  $j = j_0 = \ell + 1/2$ ,  $j = j_0 - 1 = \ell - 1/2$  になる。これは (5.104) である。(5.114) と規格化条件  $c_1^2 + c_2^2 = 1$  より  $c_2 > 0$  とすると

$$|j = \ell \pm \frac{1}{2}, m\rangle = \pm \sqrt{\frac{\ell + 1/2 \pm m}{2\ell + 1}}|\ell m - \frac{1}{2}\rangle|+\rangle + \sqrt{\frac{\ell + 1/2 \mp m}{2\ell + 1}}|\ell m + \frac{1}{2}\rangle|-\rangle$$

これは  $|j = \ell + \frac{1}{2}, m = \pm j\rangle$  も含む。球面調和関数を用いて 2 成分スピノールで表した波動関数を  $\mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta, \phi)$  とすると

$$\mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\ell + 1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{\ell + 1/2 \pm m} Y_{\ell m - 1/2}(\theta, \phi) \\ \sqrt{\ell + 1/2 \mp m} Y_{\ell m + 1/2}(\theta, \phi) \end{pmatrix}, \quad j = \ell \pm 1/2 \quad (5.115)$$

である。  $\mathcal{Y}_{\ell jm}$  の具体形はともかくとして

$$\mathbf{J}^2 \mathcal{Y}_{\ell jm} = j(j+1) \mathcal{Y}_{\ell jm}, \quad \mathbf{L}^2 \mathcal{Y}_{\ell jm} = \ell(\ell+1) \mathcal{Y}_{\ell jm}$$

$2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2$  であるから

$$2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \mathcal{Y}_{\ell jm} = \kappa_{\ell j} \mathcal{Y}_{\ell jm}, \quad \kappa_{\ell j} = j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} = \begin{cases} \ell, & j = \ell + 1/2 \\ -\ell - 1, & j = \ell - 1/2 \end{cases} \quad (5.116)$$

$\mathcal{Y}_{\ell jm}$  は  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  の固有関数でもある。一方, (5.113) より直積  $Y_{\ell m \mp 1/2}|\pm\rangle$  は  $m^2 \neq j_0^2$  のとき  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  の固有関数ではない。(5.116) は 167, 211 ページで使う。

**問題 5.14**  $j_1 = 1, j_2 = 1$  のとき全角運動量の固有関数  $|jm\rangle$  を直積  $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$  で表せ。 $|j=0, m=0\rangle$  は  $|j=2, m=0\rangle, |j=1, m=0\rangle$  と直交する。位相の不定性はあるが

$$|j=0, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|m_1=0\rangle|m_2=0\rangle - |m_1=-1\rangle|m_2=1\rangle - |m_1=1\rangle|m_2=-1\rangle) \quad (5.117)$$

になる。

**問題 5.15** 前問で合成系の任意の状態は  $m_1, m_2 = 0, \pm 1$  である 9 個の  $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$  の線形結合で表せる。 $m = 0$  の状態に制限すれば  $(m_1, m_2) = (1, -1), (-1, 1), (0, 0)$  の 3 個で表せる。

$$|1\rangle = |m_1=1\rangle|m_2=-1\rangle, \quad |2\rangle = |m_1=-1\rangle|m_2=1\rangle, \quad |3\rangle = |m_1=0\rangle|m_2=0\rangle$$

とおく。

1. (5.99) を用いて  $\mathbf{J}^2|k\rangle, k = 1, 2, 3$  を求めよ。
2.  $m = 0$  の状態は  $c_k$  を定数として  $c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + c_3|3\rangle$  とおける。これから  $\mathbf{J}^2$  の固有値及び固有関数を求めよ。固有関数は問題 5.14 で求めた  $m = 0$  の結果に一致することを確かめよ。ただし、全体の位相の違いは無視する。

**例題** ハミルトニアン  $H$  が  $A, B$  を定数として

$$H = 4A \mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 + B(J_{1z} + J_{2z}) \quad (5.118)$$

のとき、 $H$  の固有値と固有関数を求める。直積  $|m_1, m_2\rangle$  で扱うよりも  $|jm\rangle$  で扱った方が簡単になる。(5.105) より

$$H|jm\rangle = E_{jm}|jm\rangle, \quad \text{ただし} \quad E_{jm} = 2A(j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)) + Bm$$

であり、 $|jm\rangle$  は  $H$  の固有関数である。 $j_1 = j_2 = 1/2$  の場合

$$E_{jm} = 2A\left(j(j+1) - \frac{3}{2}\right) + Bm = \begin{cases} A + Bm, & j = 1 \text{ のとき} \\ -3A, & j = 0 \text{ のとき} \end{cases} \quad (5.119)$$

になる。 $B = 0$  ではスピン 1 重項と 3 重項は分離し、3 重項の 3 つの状態は縮退している。 $B \neq 0$  とすると 3 重項の縮退も解ける。

**問題 5.16**  $j_1 = j_2 = 1/2$  の場合、直積は 4 個だけであるから、合成系の角運動量の固有関数を用いなくても  $H$  の固有関数を求めることは簡単である。 $|1\rangle = |+\rangle_1|+\rangle_2, |2\rangle = |-\rangle_1|-\rangle_2, |3\rangle = |+\rangle_1|-\rangle_2, |4\rangle = |-\rangle_1|+\rangle_2$  とおく。 $h_{ij} = \langle i|H|j\rangle$  を行列要素とする  $4 \times 4$  行列を求め、この行列の固有値と固有ベクトルを求めよ。

## 5.12 ベルの不等式

量子力学の確率的性質は、非常に奇妙な結果を導く。具体例として、スピン 1/2 の 2 粒子系が全スピン  $S = 0$  のスピン 1 重項状態  $|S = 0\rangle$  にある場合を考える。 $\mathbf{n}$  を単位ベクトルとして  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の固有値  $\pm 1$  の固有状態 (5.72) を  $|\mathbf{n}, \pm\rangle$  で表す。粒子 1, 2 の状態をそれぞれ  $|\mathbf{n}_1\rangle, |\mathbf{n}_2\rangle$  とすると、(5.110) より 2 粒子系の状態は

$$|S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\mathbf{n}, +\rangle_1 |\mathbf{n}, -\rangle_2 - |\mathbf{n}, -\rangle_1 |\mathbf{n}, +\rangle_2) \quad (5.120)$$

と表せる。(5.72) より  $\sigma_z$  の固有状態  $|\pm\rangle = |e_z, \pm\rangle$  で表すと

$$|n, +\rangle = \cos(\theta/2)|+\rangle + e^{i\phi} \sin(\theta/2)|-\rangle, \quad |n, -\rangle = \sin(\theta/2)|+\rangle - e^{i\phi} \cos(\theta/2)|-\rangle$$

になるから

$$|S=0\rangle = -\frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}}(|+\rangle_1|-\rangle_2 - |-\rangle_1|+\rangle_2)$$

位相  $-e^{i\phi}$  は物理的に無意味であるから, (5.120) は任意の  $n$  に対して同じ状態である。

粒子 1 の  $\sigma_z$  を観測し  $+1$  を得たとする。10 ページの**仮定 3'** より, 観測後の状態は  $|S=0\rangle$  から  $|e_z, +\rangle_1|e_z, -\rangle_2/\sqrt{2}$  になる。引き続いて, 粒子 2 の  $\sigma_z$  を観測すれば, 観測値は確実に  $-1$  である。一方, 粒子 1 の  $\sigma_x$  を観測し  $+1$  を得たとすると, 状態は  $|e_x, +\rangle_1|e_x, -\rangle_2/\sqrt{2}$  になる。(5.74) より  $|\langle e_z, \pm | e_x, - \rangle|^2 = 1/2$  であるから, 粒子 2 の  $\sigma_z$  を観測すれば, 観測値が  $\pm 1$  になる確率は等しく, 観測値は全くランダムである。これは 2 つの粒子が空間的に離れ, かつ, 粒子 1 の観測直後に粒子 2 の観測を行う場合でも成り立つ。この場合, “常識的” には, 粒子 2 の観測結果は粒子 1 の観測とは独立に決まるはずであるが, 量子力学では独立ではない。量子力学では, 粒子 1 の観測情報が超光速で瞬時に粒子 2 に伝わるようで不合理に思える。そこで, Einstein-Podolsky-Rosen に従い

**実在性** 物理系は観測とは独立に存在する。観測は物理系を全く乱さずに行われ, 物理量の観測値は確実に決まる。

**局所性** 空間的に離れた 2 つの観測は, 観測情報が光速でも到達できない場合, 互いに独立である。

とする。量子力学では指定不可能な**隠れた変数**が存在するため, この変数を指定すれば確実に決まる観測値を, 量子力学は確率的にしか予言できないと考える。実在的局所性と量子力学が矛盾しないか調べる。

単位ベクトル  $a$  と  $b$  の方向のスピンを観測を行う。実在性から, 任意の  $n$  に対して  $n \cdot \sigma$  の観測値は確定値で  $+1$  または  $-1$  である。 $a \cdot \sigma$ ,  $b \cdot \sigma$  を観測したら, 例えば, 常に  $+1$ ,  $-1$  になる状態を  $(+-)$  で表す。ただし,  $a \cdot \sigma$  と  $b \cdot \sigma$  が同時に観測可能である必要はない。量子力学では  $a \neq \pm b$  のとき  $a \cdot \sigma$  と  $b \cdot \sigma$  は非可換であるから, 両者が確定値になる状態 (同時固有状態) は存在しない。 $a_i$ ,  $b_i$  を  $\pm$  として, 粒子 1 の観測値を  $(a_1 b_1)$ , 粒子 2 の観測値を  $(a_2 b_2)$  で表す。粒子 1 と粒子 2 は十分離れていて局所性が成り立つとすると, 2 粒子系は  $(a_1 b_1, a_2 b_2)$  で指定できる。隠れた変数に伴う確率分布として,  $(a_1 b_1, a_2 b_2)$  の確率を  $\rho(a_1 b_1, a_2 b_2)$  とする。全スピンが 0 の場合, 同じ方向のスピンを観測値は粒子 1 と粒子 2 で逆符号になるから,  $a_1 = a_2$  または  $b_1 = b_2$  のとき  $\rho(a_1 b_1, a_2 b_2) = 0$  である。粒子 1 の  $a \cdot \sigma$  が  $+1$  の場合, 粒子 2 の  $n \cdot \sigma$  が  $\pm 1$  になる確率を  $P_{\pm}(n)$  で表すと

$$\begin{aligned} P_-(a) &= \sum_{b_1 b_2} \rho(+b_1, -b_2) = \rho(++ , --) + \rho(+-, -+), & P_+(a) &= 0 \\ P_{\pm}(b) &= \sum_{b_1 a_2} \rho(+b_1, a_2 \pm) = \rho(+\mp, -\pm) \end{aligned} \quad (5.121)$$

になる。量子力学で  $P_{\pm}(n)$  を求めると

$$\begin{aligned} P_{\pm}(n) &= \left| {}_1\langle a, + | {}_2\langle n, \pm | S=0 \rangle \right|^2 = \frac{1}{2} \left| \langle a, + | n, + \rangle \langle n, \pm | n, - \rangle - \langle a, + | n, - \rangle \langle n, \pm | n, + \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} \left| \langle a, + | n, \mp \rangle \right|^2 \end{aligned}$$

(5.82) より

$$P_{\pm}(n) = \frac{1 \mp a \cdot n}{4}, \quad \therefore \quad P_+(a) = 0, \quad P_-(a) = \frac{1}{2}, \quad P_{\pm}(b) = \frac{1 \mp a \cdot b}{4}$$

$\rho(+\mp, -\pm) = (1 \mp \mathbf{a} \cdot \mathbf{b})/4$  とすれば (5.121) は量子力学を再現する。

次に, 3 方向  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$  のスピンの観測を考える。実在的局所理論では, 2 粒子系は  $(a_1 b_1 c_1, a_2 b_2 c_2)$  で指定できる。 $(a_1 b_1 c_1, a_2 b_2 c_2)$  の確率を  $\rho(a_1 b_1 c_1, a_2 b_2 c_2)$  とする。2 方向と同様に,  $a_1 = a_2, b_1 = b_2, c_1 = c_2$  の 1 つでも満たすとき  $\rho = 0$  である。粒子 1 の  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  と粒子 2 の  $\mathbf{n}' \cdot \boldsymbol{\sigma}$  が共に  $+1$  になる確率を  $P(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$  とすると

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{b_1 c_1} \sum_{a_2 c_2} \rho(+b_1 c_1, a_2 + c_2) = \rho(+-- , -++) + \rho(++- , -+-)$$

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{c}) = \rho(+-- , -++) + \rho(++- , --+), \quad P(\mathbf{c}, \mathbf{b}) = \rho(++- , -+-) + \rho(--+ , +-+)$$

$\rho \geq 0$  であるから

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{c}) + P(\mathbf{c}, \mathbf{b}) \geq P(\mathbf{a}, \mathbf{b})$$

になる。これをベルの不等式という。量子力学では

$$P(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = |\langle \mathbf{n}, + | \langle \mathbf{n}', + | S = 0 \rangle|^2 = \frac{1}{2} |\langle \mathbf{n}', + | \mathbf{n}, - \rangle|^2 = \frac{1 - \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}'}{4}$$

になるから, ベルの不等式が成り立つためには

$$1 - \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} + 1 - \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} \geq 1 - \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}, \quad \text{つまり} \quad \mathbf{d} \cdot (\mathbf{d} - 2\mathbf{c}) \geq 0, \quad \mathbf{d} \equiv \mathbf{a} + \mathbf{b}$$

である。単位ベクトル  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$  は任意であるが,  $\mathbf{a} \neq \pm \mathbf{b}$  のとき  $\mathbf{c} = \mathbf{d}/|\mathbf{d}|$  とすると

$$0 < |\mathbf{d}| < 2, \quad \therefore \quad \mathbf{d} \cdot (\mathbf{d} - 2\mathbf{c}) = |\mathbf{d}|(|\mathbf{d}| - 2) < 0$$

になり, 量子力学はベルの不等式を破る場合がある。ベルの不等式は実験的に検証できる。実験結果は量子力学と一致し, ベルの不等式は成り立たない。

### 5.13 回転と角運動量

回転を考えるとき

1. 座標系を固定し物理系を回転する
2. 座標系を回転し物理系を固定する

の 2 つの方法があるが, 以下では, 物理系を回転する。単位ベクトル  $\mathbf{n}$  を回転軸とした角  $\theta$  の回転を  $\mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta)$  とする。 $\theta > 0$  の回転とは, 回転により右ネジが  $\mathbf{n}$  の方向に進む場合を指す。物理量  $A$  が回転  $\mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta)$  で  $A'$  に変換されるとき  $A \xrightarrow{\mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta)} A'$  で表す。

ベクトルの回転

$A \xrightarrow{\mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta)} A'$  を求める。

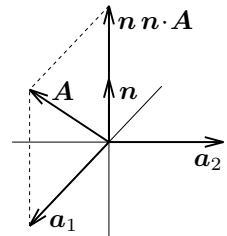
$$\mathbf{a}_2 = \mathbf{n} \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2 \times \mathbf{n} = \mathbf{A} - \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} \quad (5.122)$$

とすると,  $\mathbf{a}_2 \neq \mathbf{0}$  のとき  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{n}$  は右手直交系をなす。 $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$  であるから  $\mathbf{A} = \mathbf{a}_1 + \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A}$  を  $\mathbf{n}$  軸まわりに角  $\theta$  回すと

$$\mathbf{A}' = \mathbf{a}_1 \cos \theta + \mathbf{a}_2 \sin \theta + \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cos \theta + \mathbf{n} \times \mathbf{A} \sin \theta + \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} (1 - \cos \theta) \quad (5.123)$$

になる。これは  $\mathbf{n} \times \mathbf{A} = \mathbf{0}$  の場合も含む。単位ベクトル  $\mathbf{e}_i \xrightarrow{\mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta)} \mathbf{e}'_i$  は

$$\mathbf{e}'_i = \mathbf{e}_i \cos \theta + \mathbf{n} \times \mathbf{e}_i \sin \theta + \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i (1 - \cos \theta) \quad (5.124)$$



である。  $A_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A}$  とすると

$$\mathbf{A}' = \sum_i A_i \mathbf{e}'_i = \sum_i A'_i \mathbf{e}_i, \quad A'_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A}' = \sum_j U_{ij} A_j, \quad U_{ij} \equiv \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}'_j \quad (5.125)$$

である。

$$\mathbf{e}'_i = \sum_j U_{ji} \mathbf{e}_j = \sum_j U_{ij}^\dagger \mathbf{e}_j, \quad \therefore \quad \mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}'_j = \sum_{mn} U_{im}^\dagger U_{nj} \mathbf{e}_m \cdot \mathbf{e}_n = (U^\dagger U)_{ij} = \delta_{ij}$$

$3 \times 3$  行列  $U$  は実ユニタリ行列 (直交行列) である。

$3 \times 3$  エルミート行列  $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3$  を

$$(\Sigma_k)_{ij} = -i \varepsilon_{kij} = -i (\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j)_k \quad (5.126)$$

で定義する。

$$\sum_j (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Sigma})_{ij} A_j = -i \mathbf{v} \cdot (\mathbf{e}_i \times \mathbf{A}) = i (\mathbf{v} \times \mathbf{A})_i$$

$\mathbf{A}$  を  $A_i$  を成分とする列ベクトルで表せば

$$\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{A} = i \mathbf{v} \times \mathbf{A} \quad (5.127)$$

になる。 $\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Sigma}$  は  $3 \times 3$  行列である。 $\mathbf{v}$  は微分演算子でもよい。 $\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = -i \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{A}(\mathbf{r})$  である。

$\Sigma_{\mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma}$  とすると, (5.122) の  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  は

$$\Sigma_{\mathbf{n}} \mathbf{A} = i \mathbf{a}_2, \quad \Sigma_{\mathbf{n}}^2 \mathbf{A} = i \Sigma_{\mathbf{n}} \mathbf{a}_2 = -\mathbf{n} \times \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_1$$

になるから

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \mathbf{a}_2 \sin \theta + \mathbf{a}_1 (\cos \theta - 1) = U \mathbf{A}, \quad U = 1 - i \Sigma_{\mathbf{n}} \sin \theta + \Sigma_{\mathbf{n}}^2 (\cos \theta - 1)$$

である。(5.124) より  $U_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}'_j$  と上式は一致する。 $\Sigma_{\mathbf{n}}^3 \mathbf{A} = i \mathbf{n} \times \mathbf{a}_1 = i \mathbf{a}_2 = \Sigma_{\mathbf{n}} \mathbf{A}$ ,  $\mathbf{A}$  は任意であるから  $\Sigma_{\mathbf{n}}^3 = \Sigma_{\mathbf{n}}$ , ただし  $\Sigma_{\mathbf{n}}^2 \neq 1$  になる。 $k \geq 1$  のとき  $\Sigma_{\mathbf{n}}^{2k} = \Sigma_{\mathbf{n}}^2$ ,  $k \geq 0$  のとき  $\Sigma_{\mathbf{n}}^{2k+1} = \Sigma_{\mathbf{n}}$  より

$$\mathbf{A}' = U \mathbf{A}, \quad U = \exp(-i \theta \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma}) = 1 - i \Sigma_{\mathbf{n}} \sin \theta + \Sigma_{\mathbf{n}}^2 (\cos \theta - 1) \quad (5.128)$$

である。

### 状態の回転

$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{\mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta)} \psi'(\mathbf{r})$  を考える。回転すると  $\mathbf{r}$  になる点 ( $\mathbf{r}$  を逆回転した点) を  $\mathbf{r}_1$  とすると  $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}_1)$  である。(5.123) より無限小回転のとき  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r} - \theta \mathbf{n} \times \mathbf{r}$  であるから

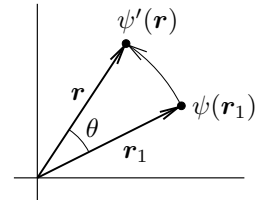
$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \theta \mathbf{n} \times \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) - \theta (\mathbf{n} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}) = (1 - i \theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}) \psi(\mathbf{r})$$

$\mathbf{L} = -i \mathbf{r} \times \nabla$  は軌道角運動量である。 $\theta$  の有限回転と  $d\theta$  の微小回転を続けて行えば  $\theta + d\theta$  の回転になるから

$$R(\mathbf{n}, \theta + d\theta) = R(\mathbf{n}, d\theta) R(\mathbf{n}, \theta) = (1 - i d\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}) R(\mathbf{n}, \theta), \quad \therefore \quad \frac{dR(\mathbf{n}, \theta)}{d\theta} = -i \mathbf{n} \cdot \mathbf{L} R(\mathbf{n}, \theta)$$

$R(\mathbf{n}, 0) = 1$  より

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}_1) = R(\mathbf{n}, \theta) \psi(\mathbf{r}), \quad R(\mathbf{n}, \theta) = \exp(-i \theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}) \quad (5.129)$$



になる。一般に系の全角運動量を  $\mathbf{J}$  とすると  $|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{R}(\mathbf{n},\theta)} |\psi'\rangle$  は

$$|\psi'\rangle = R(\mathbf{n},\theta)|\psi\rangle, \quad R(\mathbf{n},\theta) = \exp(-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}) \quad (5.130)$$

である。これを全角運動量の定義と見なしてよい。これから角運動量の交換関係が導ける ( (5.134) 参照)。  $\mathbf{J}$  はエルミート演算子であるから  $R$  はユニタリ演算子である。並進の演算子 (1.38) において、運動量を角運動量に置き換えると  $R$  になる。

$\exp(-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J})$  をスピン状態に適用してみる。  $\mathbf{J} = \sigma/2$  である。  $\mathbf{e}_z$  を  $y$  軸まわりに  $\theta$  回転 ( $\mathcal{R}_y$ ) し、次に  $z$  軸まわりに  $\phi$  回転 ( $\mathcal{R}_z$ ) すると、  $\mathbf{e}_z$  は  $(\theta, \phi)$  方向の単位ベクトル  $\mathbf{n}$  になる。したがって、  $\sigma_z$  の固有状態  $|\pm\rangle$  にこの2つの回転を行えば、  $\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$  の固有状態 (5.72) になるはずである。

$$|\pm\rangle \xrightarrow{\mathcal{R}_y} e^{-i\theta\sigma_y/2} |\pm\rangle \xrightarrow{\mathcal{R}_z} R|\pm\rangle, \quad R = e^{-i\phi\sigma_z/2} e^{-i\theta\sigma_y/2}$$

である。(5.64) よりパウリ行列を代入すると

$$R = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}$$

になるから

$$R \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = e^{-i\phi/2} \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad R \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -e^{-i\phi/2} \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) \\ -e^{i\phi} \cos(\theta/2) \end{pmatrix}$$

である。全体の位相  $\pm e^{-i\phi/2}$  を除けば (5.72) に一致する。回転する順番を逆にすると

$$e^{-i\theta\sigma_y/2} e^{-i\phi\sigma_z/2} |\pm\rangle = e^{\mp i\phi/2} e^{-i\theta\sigma_y/2} |\pm\rangle$$

になる。  $|\pm\rangle$  を  $z$  軸まわりに回転しても位相が変わるだけで、実質的に  $y$  軸まわりの回転である。

**問題 5.17**  $R\sigma_z R^\dagger = \mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$  を示せ。これから  $R|\pm\rangle$  が  $\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$  の固有状態であることを示せ。

### 演算子と回転

状態  $|\psi\rangle$  と演算子  $A$  の両者を回転すると、回転前と回転後で期待値は変化しない。回転後の  $A$  を  $A'$  とすると

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|R^\dagger A' R|\psi\rangle, \quad \therefore \quad A = R^\dagger A' R \quad \text{つまり} \quad A' = R A R^\dagger \quad (5.131)$$

である。演算子も  $|\psi\rangle$  と同じユニタリ演算子で変換される。

期待値の変換性で演算子を分類する。状態を回転させたとき、期待値が不変な演算子をスカラー演算子、ベクトルの変換 (5.125) に従う演算子をベクトル演算子と定義する。スカラー演算子  $S$  は  $\langle\psi|R^\dagger S R|\psi\rangle = \langle\psi|S|\psi\rangle$  である。無限小回転の場合

$$\langle\psi|(1+i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J})S(1-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J})|\psi\rangle = \langle\psi|[S+i\theta[\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}, S]]|\psi\rangle = \langle\psi|S|\psi\rangle, \quad \therefore \quad [S, \mathbf{J}] = 0$$

スカラー演算子は角運動量  $\mathbf{J}$  と可換な演算子であり  $S' = R S R^\dagger = S$  になるから回転不変である。ハミルトニアン  $H$  と  $\mathbf{J}$  が可換な場合、  $H, \mathbf{J}^2, J_z$  の同時固有関数が存在する。これを  $|n j m\rangle$  で表わし、そのエネルギー固有値を  $E_{n j m}$  とする ( $n$  は状態を指定するのに必要な  $j, m$  以外の量子数の組)。  $[H, J_\pm] = 0$  及び  $J_\pm|n j m\rangle \propto |n j m \pm 1\rangle$  より

$$H J_\pm|n j m\rangle = J_\pm H|n j m\rangle = E_{n j m} J_\pm|n j m\rangle, \quad \therefore \quad H|n j m \pm 1\rangle = E_{n j m}|n j m \pm 1\rangle \quad (5.132)$$

である。 $E_{njm\pm 1} = E_{njm}$  になるから、回転不変な  $H$  のエネルギー固有値は  $m$  に依存せず、少なくとも  $2j+1$  重に縮退する。

ベクトル演算子  $V$  の定義は、期待値が (5.125)

$$\langle \psi | R^\dagger V R | \psi \rangle = \sum_i \langle \psi | V_i | \psi \rangle e'_i, \quad \therefore \quad R^\dagger V R = \sum_i V_i e'_i \quad (5.133)$$

を満たすことである。無限小回転では  $e'_i = e_i + \theta \mathbf{n} \times e_i$  より

$$(1 + i\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}) V (1 - i\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}) = V + \theta \mathbf{n} \times V, \quad \therefore \quad [V, \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}] = i \mathbf{n} \times V$$

$\mathbf{n} = e_j$  としデカルト成分で表わせば

$$[V_i, J_j] = i(e_j \times V)_i = i \sum_k \varepsilon_{ijk} V_k, \quad [J_i, V_j] = i \sum_k \varepsilon_{ijk} V_k \quad (5.134)$$

である。 $V = J$  とすると角運動量の交換関係を得る。

$V'_i = R V_i R^\dagger$  とすると (5.133) より

$$V = \sum_i V'_i e'_i, \quad \therefore \quad V'_i = R V_i R^\dagger = V \cdot e'_i, \quad \text{つまり} \quad V' = \sum_i (V \cdot e'_i) e_i \quad (5.135)$$

期待値が  $V_i = V \cdot e_i$  と回転後同じになる  $V'_i$  は  $e_i$  を  $e'_i$  で置き換えた  $V \cdot e'_i$  である。上式は

$$V'_i = \sum_j V_j e_j \cdot e'_i = \sum_j V_j U_{ji} = \sum_j U^\dagger_{ij} V_j$$

と表せる。(5.125) では  $U$  であるが  $V'_i$  では  $U^\dagger = U^{-1}$  になる。(5.135) の  $V'$  と  $A' = \sum_i (A \cdot e_i) e'_i$  と比較すると  $e_i$  と  $e'_i$  の位置が逆である。問題 5.17 の場合  $e'_z = \mathbf{n}$  より  $R \sigma_z R^\dagger = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  になる。

**問題 5.18** (5.134) より、ベクトル演算子の内積はスカラー演算子であること、及び、 $R = e^{-i\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}}$  のとき  $R V \cdot e_i R^\dagger = V \cdot e'_i$  を示せ。 $e'_i$  は (5.124) で与えられる。

ベクトル  $V$  と角運動量の関係を扱う場合、デカルト成分  $V_i$  ではなく

$$V_\mu = e_\mu \cdot V = \begin{cases} \frac{\mp V_x - i V_y}{\sqrt{2}} \\ V_z \end{cases}, \quad e_\mu = \begin{cases} \frac{\mp e_x - i e_y}{\sqrt{2}} \\ e_z \end{cases}, \quad \begin{matrix} \mu = \pm 1 \\ \mu = 0 \end{matrix} \quad (5.136)$$

の方が便利になることがある。 $V = \mathbf{r}$  とすれば (5.31) である。

$$e_\mu^* \cdot e_\nu = \delta_{\mu\nu}, \quad e_\mu^* = (-1)^\mu e_{-\mu}, \quad V = \sum_\mu V_\mu e_\mu^* = \sum_\mu (-1)^\mu V_\mu e_{-\mu} \quad (5.137)$$

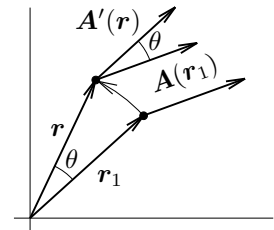
$$e_0 \times e_\mu^* = i\mu e_\mu^*, \quad e_{\pm 1} \times e_{\pm 1}^* = \mp i e_0, \quad e_{\pm 1} \times e_{\mp 1}^* = 0 \quad (5.138)$$

が成り立つ。

## 5.14 ベクトル場とスピン 1

ベクトル場の回転  $A(\mathbf{r}) \xrightarrow{\mathcal{R}(\mathbf{n}, \theta)} A'(\mathbf{r})$  の場合、 $A'(\mathbf{r})$  は  $A(\mathbf{r}_1)$  を回転させたベクトルである。(5.128), (5.129) より

$$\begin{aligned} A'(\mathbf{r}) &= \exp(-i\theta \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma}) A(\mathbf{r}_1) = \exp(-i\theta \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma}) \exp(-i\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}) A(\mathbf{r}) \\ &= \exp(-i\theta \mathbf{n} \cdot (\mathbf{L} + \boldsymbol{\Sigma})) A(\mathbf{r}) \end{aligned}$$





になる。 $\mathbf{L} + \mathbf{\Sigma}$  が全角運動量である。 $\mathbf{\Sigma}$  の定義 (5.126) と (16.2) より

$$(\Sigma_i \Sigma_j)_{mn} = \delta_{ij} \delta_{mn} - \delta_{in} \delta_{jm}, \quad \therefore [\Sigma_i, \Sigma_j] = i \sum_k \varepsilon_{ijk} \Sigma_k, \quad \Sigma^2 = 2$$

$\mathbf{\Sigma}$  は大きさ 1 の角運動量を表す行列である。 $\mathbf{\Sigma}$  は  $\mathbf{r}$  に依存しないから  $\mathbf{L}$  とは独立であり, スピン 1 と見なせる。

$$L_i \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_k \mathbf{e}_k L_i A_k(\mathbf{r}), \quad \Sigma_i \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_k A_k(\mathbf{r}) \Sigma_i \mathbf{e}_k$$

である。 $\mathbf{L}$  は  $A_k(\mathbf{r})$  に,  $\mathbf{\Sigma}$  は  $\mathbf{e}_k$  に作用する。3 成分であるスピン 1 粒子の波動関数は, ベクトル場  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  で表せる。このとき, 3 個の  $\mathbf{e}_k$  がスピン状態の基底である。(5.127) より

$$\Sigma_i \mathbf{e}_k = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{\Sigma} \mathbf{e}_k = i \mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_k = i \sum_k \varepsilon_{ikj} \mathbf{e}_j \quad (5.139)$$

である。 $\Sigma_k \mathbf{e}_k = 0$  になるから,  $\mathbf{e}_k$  は  $\Sigma_k$  の固有ベクトルで固有値は 0 である。スピン 1 演算子  $S_x, S_y, S_z$  の固有値 0 の固有状態  $|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$  をスピン状態の基底とすると, スピン 1 粒子の波動関数はデカルト成分のベクトルで表せる。

**問題 5.19**  $i\mathbf{n} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{\Sigma})\mathbf{r} = (\mathbf{n} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla \mathbf{r} - \mathbf{n} \times \mathbf{r} = \mathbf{0}$  であるから  $\mathbf{r}f(r)$  は全角運動量 0 の状態であり回転不変になる。(5.30), (5.117), (5.142) より, 軌道角運動量 1 とスピン 1 を合成した全角運動量 0 の状態が  $\mathbf{r}f(r)$  になることを示せ。

通常, スピン状態の基底は  $S_z$  の固有状態  $|\mu\rangle = |s=1, \mu\rangle, \mu = 1, 0, -1$  であり, 状態  $\psi(\mathbf{r})$  は

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mu=0,\pm 1} A_\mu(\mathbf{r}) |\mu\rangle, \quad A_\mu = \langle \mu | \psi \rangle \quad (5.140)$$

と表せる。 $\langle \mu | S_k | \nu \rangle$  は (5.54) で与えられる。

$$A_{\pm 1} = (\mp A_x + i A_y) / \sqrt{2}, \quad A_0 = A_z \quad (5.141)$$

とすると ( $A_{\pm 1}$  は (5.136) とは異なる。(5.144) 参照),  $\psi(\mathbf{r})$  は

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_k A_k(\mathbf{r}) |k\rangle \quad (5.142)$$

ただし

$$|x\rangle = \frac{|-1\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |y\rangle = i \frac{|1\rangle + |-1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |z\rangle = |0\rangle$$

になる。 $\langle k | k' \rangle = \delta_{kk'}$  であり,  $S_\pm |\mu\rangle = \sqrt{(1 \mp \mu)(2 \pm \mu)} |\mu \pm 1\rangle$  より

$$S_x |y\rangle = \frac{i}{2\sqrt{2}} (S_+ + S_-) (|1\rangle + |-1\rangle) = i |z\rangle$$

他の成分も同様にすれば, (5.139) に対応する関係式

$$S_i |j\rangle = i \sum_k \varepsilon_{ijk} |k\rangle, \quad \langle i | S_k | j \rangle = i \varepsilon_{kji} = (\Sigma_k)_{ij} \quad (5.143)$$

が成り立つ。 $S_k |k\rangle = 0$  より  $|k\rangle$  は  $S_k$  の固有状態で固有値は 0 である。 $|k\rangle$  を単位列ベクトル  $\mathbf{e}_k$  で表すと, 波動関数 (5.142) はベクトル  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_k A_k(\mathbf{r}) \mathbf{e}_k$  になる。 $|k\rangle$  と  $|\mu\rangle$  の関係は (5.136) の  $\mathbf{e}_k$  と  $\mathbf{e}_\mu$  の関係と同じであるから  $|\mu\rangle$  は  $\mathbf{e}_\mu$  になる。波動関数 (5.140) は

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_\mu A_\mu(\mathbf{r}) \mathbf{e}_\mu, \quad A_\mu(\mathbf{r}) = \langle \mu | \psi \rangle = \mathbf{e}_\mu^* \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = (5.141) \quad (5.144)$$

である。 $A_\mu = \mathbf{e}_\mu \cdot \mathbf{A}$  ではない。なお、 $\langle \mu | k \rangle = \mathbf{e}_\mu^* \cdot \mathbf{e}_k$  であるから、(5.136) は

$$V_k \equiv \mathbf{e}_k \cdot \mathbf{V} = \sum_\mu \mathbf{e}_\mu^* \cdot \mathbf{e}_k V_\mu = \sum_\mu V_\mu \langle \mu | k \rangle, \quad V_\mu \equiv \mathbf{e}_\mu \cdot \mathbf{V} = \sum_k V_k \langle k | \mu \rangle \quad (5.145)$$

と表せる。

**問題 5.20**  $S_n = \mathbf{n} \cdot \mathbf{S}$  とする。 $S_n$  の固有値は  $0, \pm 1$  であるから  $(S_n - 1)(S_n + 1)S_n = S_n^3 - S_n = 0$  が成り立つ。これを (5.143) から導け。 $\exp(i\theta S_n)$  は  $S_n$  について高々 2 次になるから

$$\exp(i\theta S_n) = f(\theta) + g(\theta)S_n + h(\theta)S_n^2$$

とおける。これを  $S_n$  の固有状態に作用させ  $f, g, h$  を求めよ。同じ結果を  $\exp(i\theta S_n)$  をマクローリン展開して求めよ。(5.128) 参照。

$$\exp(\pm i\pi S_y/2)|0\rangle = \mp |x\rangle, \quad \exp(\pm i\pi S_x/2)|0\rangle = \pm |y\rangle$$

を示せ。

**問題 5.21**  $\langle i | \mathbf{S} | j \rangle = -i \mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j$ ,  $\langle \mu | \mathbf{S} | \nu \rangle = -i \mathbf{e}_\mu^* \times \mathbf{e}_\nu$  を示せ。

### 5.15 ウィグナー・エッカルトの定理と射影定理

$2\lambda + 1$  個の演算子  $T_{\lambda\mu}$ , ( $\mu = -\lambda, -\lambda + 1, \dots, \lambda$ ) が系の全角運動量  $\mathbf{J}$  と交換関係

$$[J_\pm, T_{\lambda\mu}] = \sqrt{(\lambda \mp \mu)(\lambda \pm \mu + 1)} T_{\lambda, \mu \pm 1}, \quad [J_z, T_{\lambda\mu}] = \mu T_{\lambda\mu} \quad (5.146)$$

を満たすとき、 $T_{\lambda\mu}$  を  $\lambda$  階球面テンソル演算子 (spherical tensor operator of rank  $\lambda$ ) という。

$$[\mathbf{J}, T_{\lambda\mu}] = \sum_\nu T_{\lambda\nu} \langle \lambda\nu | \mathbf{J} | \lambda\mu \rangle \quad (5.147)$$

を満たす演算子として定義してもよい。ただし  $|\lambda\mu\rangle$  は  $\mathbf{J}^2, J_z$  の同時固有状態

$$\mathbf{J}^2 |\lambda\mu\rangle = \lambda(\lambda + 1) |\lambda\mu\rangle, \quad J_z |\lambda\mu\rangle = \mu |\lambda\mu\rangle$$

である。

- (5.146) より  $S_{\lambda\mu} = (-1)^\mu T_{\lambda, -\mu}^\dagger$  も  $\lambda$  階の球面テンソル演算子である。
- スカラー演算子は  $\mathbf{J}$  と可換であるから 0 階の球面テンソル演算子である。
- ベクトル演算子の交換関係 (5.134) を (5.136) の  $V_\mu$  で表す。(5.145) より

$$[J_i, V_\mu] = \sum_j [J_i, V_j] \langle j | \mu \rangle = \sum_{kj} i\varepsilon_{ijk} V_k \langle j | \mu \rangle = \sum_\nu V_\nu \sum_{kj} \langle \nu | k \rangle i\varepsilon_{ijk} \langle j | \mu \rangle$$

$i\varepsilon_{ijk}$  をスピン 1 演算子  $\mathbf{S}$  の行列要素 (5.143) で表すと

$$[J_i, V_\mu] = \sum_\nu V_\nu \sum_{kj} \langle \nu | k \rangle \langle k | S_i | j \rangle \langle j | \mu \rangle = \sum_\nu V_\nu \langle \nu | S_i | \mu \rangle$$

$\langle \nu | S_i | \mu \rangle = \langle j=1 \nu | J_i | j=1 \mu \rangle$  であるから、(5.147) で  $T_{1\mu} = V_\mu$  とすると上式になる。ベクトル演算子は 1 階の球面テンソル演算子である。

- 球面調和関数  $Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$  を演算子と見なす。  $L$  は角度の 1 階微分であるから

$$[L, Y_{\lambda\mu}] = (LY_{\lambda\mu}), \quad \therefore [L_{\pm}, Y_{\lambda\mu}] = \sqrt{(\lambda \mp \mu)(\lambda \pm \mu + 1)} Y_{\lambda, \mu \pm 1}, \quad [L_z, Y_{\lambda\mu}] = \mu Y_{\lambda\mu}$$

$Y_{\lambda\mu}$  は  $\lambda$  階の球面テンソル演算子である。

### ウィグナー・エッカルトの定理

$J^2, J_z$  の同時固有関数を  $|\alpha jm\rangle$  とする。  $\alpha$  は状態を指定するために必要な  $j, m$  以外の量子数の集合を表わす。

$$\langle \alpha' j' m' | T_{\lambda\mu} | \alpha jm \rangle = \langle j m \lambda \mu | j' m' \rangle \langle \alpha' j' || T_{\lambda} || \alpha j \rangle \quad (5.148)$$

が成り立つ。これをウィグナー・エッカルトの定理という。行列要素の  $m, m', \mu$  依存性は CG 係数だけに現れる。  $\langle \alpha' j' || T_{\lambda} || \alpha j \rangle$  を縮小行列要素 ( reduced matrix element ) という。

証明

$$|(j\lambda)j'm'\rangle \equiv \sum_{m\mu} T_{\lambda\mu} |jm\rangle \langle j m \lambda \mu | j' m' \rangle$$

とする。(5.146) より

$$\begin{aligned} J_+ T_{\lambda\mu} |jm\rangle &= [J_+, T_{\lambda\mu}] |jm\rangle + T_{\lambda\mu} J_+ |jm\rangle \\ &= \sqrt{(\lambda - \mu)(\lambda + \mu + 1)} T_{\lambda, \mu+1} |jm\rangle + \sqrt{(\lambda - \mu)(\lambda + \mu + 1)} T_{\lambda\mu} |j, m+1\rangle \end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned} J_+ |(j\lambda)j'm'\rangle &= \sum_{m\mu} \langle j m \lambda \mu | j' m' \rangle \left( \sqrt{(\lambda - \mu)(\lambda + \mu + 1)} T_{\lambda, \mu+1} |jm\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(j - m)(j + m + 1)} T_{\lambda\mu} |j, m+1\rangle \right) \\ &= \sum_{m\mu} T_{\lambda\mu} |jm\rangle \left( \langle j m \lambda \mu - 1 | j' m' \rangle \sqrt{(\lambda - \mu + 1)(\lambda + \mu)} \right. \\ &\quad \left. + \langle j m - 1 \lambda \mu | j' m' \rangle \sqrt{(j - m + 1)(j + m)} \right) \end{aligned}$$

CG 係数の漸化式 (5.108) を使うと

$$\begin{aligned} J_+ |(j\lambda)j'm'\rangle &= \sqrt{(j' - m')(j' + m' + 1)} \sum_{m\mu} T_{\lambda\mu} |jm\rangle \langle j m \lambda \mu | j' m' + 1 \rangle \\ &= \sqrt{(j' - m')(j' + m' + 1)} |(j\lambda)j' m' + 1 \rangle \end{aligned}$$

を得る。同様にして

$$J_{\pm} |(j\lambda)j'm'\rangle = \sqrt{(j' \mp m')(j' \pm m' + 1)} |(j\lambda)j' m' \pm 1 \rangle \quad (5.149)$$

$$J_z |(j\lambda)j'm'\rangle = m' |(j\lambda)j'm'\rangle \quad (5.150)$$

である。これは角運動量の固有関数が満たす関係式 (5.16), (5.17) と同じであるから

$$\langle j' m' | (j\lambda)j'' m'' \rangle = \delta_{j' j''} \delta_{m' m''} \langle j' m' | (j\lambda)j' m' \rangle$$

である。CG 係数の直交性 (5.107) より

$$\begin{aligned} \sum_{j' m'} |(j\lambda)j'm'\rangle \langle j m \lambda \mu | j' m' \rangle &= \sum_{j' m'} \sum_{m'' \mu''} T_{\lambda\mu''} |jm''\rangle \langle j m'' \lambda \mu'' | j' m' \rangle \langle j m \lambda \mu | j' m' \rangle \\ &= \sum_{m'' \mu''} T_{\lambda\mu''} |jm''\rangle \delta_{m m''} \delta_{\mu \mu''} = T_{\lambda\mu} |jm\rangle \end{aligned}$$

になるから  $C_{m'} = \langle j'm' | (j\lambda)j'm' \rangle$  とすると

$$\langle j'm' | T_{\lambda\mu} | jm \rangle = \sum_{j''m''} \langle j'm' | (j\lambda)j''m'' \rangle \langle jm\lambda\mu | j''m'' \rangle = \langle jm\lambda\mu | j'm' \rangle C_{m'} \quad (5.151)$$

である。後は  $C_{m'}$  が  $m'$  によらないことを示せばよい。

$$\langle j'm' | J_- J_+ | (j\lambda)j'm' \rangle = \langle j'm' | (\mathbf{J}^2 - J_z(J_z + 1)) | (j\lambda)j'm' \rangle = (j'(j' + 1) - m'(m' + 1)) C_{m'}$$

であるが, (5.16), (5.149) を使えば

$$\begin{aligned} \langle j'm' | J_- J_+ | (j\lambda)j'm' \rangle &= (j' - m')(j' + m' + 1) \langle j'm'+1 | (j\lambda)j'm'+1 \rangle \\ &= (j' - m')(j' + m' + 1) C_{m'+1} \end{aligned}$$

になる。したがって,  $C_{m'+1} = C_{m'}$  であり,  $C_{m'}$  は  $m'$  に依らない。そこで  $C_{m'} = \langle j' \| T_\lambda \| j \rangle$  とおけば (5.151) は (5.148) になる。

ウィグナー・エッカルトの定理には CG 係数  $\langle jm\lambda\mu | j'm' \rangle$  が含まれている。この CG 係数の性質から, 行列要素  $\langle \alpha'j'm' | T_{\lambda\mu} | \alpha jm \rangle$  が 0 でないためには

$$m + \mu = m', \quad |j - \lambda| \leq j' \leq j + \lambda$$

を同時に満たすことが必要である。例えば, スカラー演算子  $T_{00} = S$  の行列要素は

$$\langle \alpha'j'm' | S | \alpha jm \rangle = \langle jm00 | j'm' \rangle \langle \alpha'j' \| S \| \alpha j \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \langle \alpha'j \| S \| \alpha j \rangle$$

である。スカラー演算子は  $j$  や  $m$  の値を変えることはできない。また, 行列要素は  $m$  に依らない。

### 射影定理

ベクトル演算子  $\mathbf{V}$  の場合

$$\langle \alpha'j'm' | \mathbf{V} | \alpha jm \rangle = \frac{\langle \alpha'jm | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha jm \rangle}{j(j+1)} \langle jm' | \mathbf{J} | jm \rangle \quad (5.152)$$

が成り立つ。 $\mathbf{V}$  の  $\mathbf{a}$  方向部分は  $(\mathbf{a} \cdot \mathbf{V})\mathbf{a}/|\mathbf{a}|^2$  であるから, (5.152) では, 形式的に  $\mathbf{V}$  の  $\mathbf{J}$  方向に射影した成分だけが寄与をする。このため (5.152) を射影定理 (projection theorem) という。

**証明** 内積  $\mathbf{V} \cdot \mathbf{J}$  はベクトルの球面テンソル表現 (5.136) を使うと

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{V} = \sum_{\mu=0,\pm 1} (-1)^\mu J_\mu V_{-\mu}, \quad J_{+1} = -J_+/\sqrt{2}, \quad J_{-1} = J_-/\sqrt{2}$$

と表せるから

$$\begin{aligned} \langle \alpha'jm | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha jm \rangle &= m \langle \alpha'jm | V_0 | \alpha jm \rangle + \sqrt{(j+m)(j-m+1)/2} \langle \alpha'jm-1 | V_{-1} | \alpha jm \rangle \\ &\quad - \sqrt{(j-m)(j+m+1)/2} \langle \alpha'jm+1 | V_1 | \alpha jm \rangle \end{aligned}$$

ウィグナー・エッカルトの定理より

$$\langle \alpha'jm' | V_\mu | \alpha jm \rangle = \langle jm1\mu | jm' \rangle \langle \alpha'j \| V \| \alpha j \rangle, \quad \therefore \quad \langle \alpha'jm | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha jm \rangle = C_j \langle \alpha'j \| V \| \alpha j \rangle$$

ただし

$$\begin{aligned} C_j &= m \langle jm10 | jm \rangle + \sqrt{(j+m)(j-m+1)/2} \langle jm1-1 | jm-1 \rangle \\ &\quad - \sqrt{(j-m)(j+m+1)/2} \langle jm11 | jm+1 \rangle \end{aligned}$$

である。スカラー演算子  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}$  の行列要素は  $m$  に依存しないから  $C_j$  は  $m$  に依存しない。これから

$$\langle \alpha' j m' | V_\mu | \alpha j m \rangle = \frac{\langle j m 1 \mu | j' m' \rangle}{C_j} \langle \alpha' j m | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha j m \rangle$$

である。  $V_\mu = J_\mu$  とすると

$$\langle j m' | J_\mu | j m \rangle = \frac{\langle j m 1 \mu | j' m' \rangle}{C_j} \langle j m | \mathbf{J}^2 | j m \rangle = \frac{\langle j m 1 \mu | j' m' \rangle}{C_j} j(j+1)$$

になるから

$$\langle \alpha' j m' | V_\mu | \alpha j m \rangle = \frac{\langle \alpha' j m | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha j m \rangle}{j(j+1)} \langle j m' | J_\mu | j m \rangle$$

であり (5.152) が成り立つ。なお、  $C_j = \sqrt{j(j+1)}$  である。

射影定理の適用例として、質量  $M$ 、スピン  $s$  の粒子の磁気モーメント  $\boldsymbol{\mu}$

$$\boldsymbol{\mu} = \mu_0 (g_\ell \mathbf{L} + g_s \mathbf{S}), \quad \mu_0 = \frac{e\hbar}{2M} = \text{ボーア磁子} \quad (5.153)$$

の期待値を求める。電子の場合  $e > 0$  を  $-e$  に置き換える。  $g_\ell, g_s$  は **g因子** あるいは磁気回転比と呼ばれ

$$g_\ell = \begin{cases} 1 \\ 1 \\ 0 \end{cases}, \quad g_s = \begin{cases} 2.002, & \text{電子} \\ 5.586, & \text{陽子} \\ -3.826, & \text{中性子} \end{cases}$$

である。全角運動量  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  の固有状態  $|j m\rangle$  における期待値  $\langle j m | \boldsymbol{\mu} | j m \rangle$  を求める。

$$\mathbf{J}^2 |j m\rangle = j(j+1) |j m\rangle, \quad J_z |j m\rangle = m |j m\rangle, \quad \mathbf{L}^2 |j m\rangle = \ell(\ell+1) |j m\rangle$$

を満たす。射影定理を適用すると  $\boldsymbol{\mu}$  の期待値は

$$\langle j m | \boldsymbol{\mu} | j m \rangle = \frac{\langle j m | \mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\mu} | j m \rangle}{j(j+1)} \langle j m | \mathbf{J} | j m \rangle$$

になるから

$$\langle j m | \mu_z | j m \rangle = \langle j m | \mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\mu} | j m \rangle \frac{m}{j(j+1)}, \quad \langle j m | \mu_x | j m \rangle = \langle j m | \mu_y | j m \rangle = 0$$

である。  $2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2$  より

$$\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\mu} = \mu_0 (\mathbf{L} + \mathbf{S}) \cdot (g_\ell \mathbf{L} + g_s \mathbf{S}) = \frac{\mu_0}{2} \left( (g_\ell + g_s) \mathbf{J}^2 + (g_\ell - g_s) (\mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \right)$$

したがって

$$\langle j m | \mu_z | j m \rangle = \mu_0 g m, \quad g = \frac{g_\ell + g_s}{2} + \frac{g_\ell - g_s}{2} \frac{\ell(\ell+1) - s(s+1)}{j(j+1)}$$

になる。  $g$  を **ランデ (Landé) の g 因子** という。  $s = 1/2$  の場合

$$g = g_\ell \pm \frac{g_s - g_\ell}{2\ell + 1}, \quad \text{ただし } j = \ell \pm \frac{1}{2} \quad (5.154)$$

である。

**問題 5.22** 2つの球面テンソル演算子  $T_{\lambda_1 \mu_1}, T_{\lambda_2 \mu_2}$  から

$$(T_{\lambda_1} T_{\lambda_2})_{\lambda \mu} = \sum_{\mu_1 \mu_2} \langle \lambda_1 \mu_1 \lambda_2 \mu_2 | \lambda \mu \rangle T_{\lambda_1 \mu_1} T_{\lambda_2 \mu_2}$$

を定義する。  $(T_{\lambda_1} T_{\lambda_2})_{\lambda \mu}$  は  $\lambda$  階の球面テンソル演算子であることを示せ。

## 6 中心力での束縛状態

### 6.1 古典力学

ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  が原点からの距離  $r$  にだけ依存する中心力ポテンシャル  $V(r)$  を考える。時刻  $t$  での質点の位置を  $\mathbf{r}(t)$  とすると、ニュートン方程式は

$$M \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\nabla V(r) = -\frac{\mathbf{r}}{r} \frac{dV}{dr} \quad (6.1)$$

である。 $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$  とすると力学的エネルギー  $E = M\mathbf{v}^2/2 + V(r)$  は

$$\frac{dE}{dt} = M\mathbf{v} \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \nabla V = \mathbf{v} \cdot \left( M \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla V \right) = 0$$

になり保存する。これは中心力でなくても成り立つ。軌道角運動量  $\mathbf{L} = M\mathbf{r} \times \mathbf{v}$  は

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = M\mathbf{v} \times \mathbf{v} + M\mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\mathbf{r} \times \mathbf{r} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = 0$$

になり、これも保存する。ただし、中心力の場合だけである。 $\mathbf{L} = M\mathbf{r} \times \mathbf{v} =$  一定 より、運動は定ベクトル  $\mathbf{L}$  に直交し原点を含む平面上に限られる。この平面を  $xy$  平面とすれば  $z = 0$  である。 $x, y$  を2次元極座標で表すと  $x = r \cos \theta, y = r \sin \theta$  であるから

$$E = \frac{M}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + V(r) = \frac{M}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) + V(r), \quad \mathbf{L} = M(0, 0, x\dot{y} - \dot{x}y) = (0, 0, Mr^2 \dot{\theta})$$

$$L^2 = (Mr^2)^2 \dot{\theta}^2 = \text{一定 より}$$

$$E = \frac{M}{2} \dot{r}^2 + U(r), \quad \text{ただし} \quad U(r) = V(r) + \frac{L^2}{2Mr^2}$$

になる。これから運動は

$$\frac{dr}{dt} = \pm \sqrt{\frac{2}{M} (E - U(r))}, \quad \therefore \int \frac{dr}{\sqrt{E - U(r)}} = \pm \sqrt{\frac{2}{M}} \int dt$$

で決まる。遠心力ポテンシャル  $L^2/(2Mr^2)$  が加わった  $U(r)$  での1次元問題である。

質量  $M_1, M_2$  の2粒子系を考える。粒子2が粒子1に及ぼす力を  $\mathbf{F}$  とすると、粒子1が粒子2に及ぼす力は  $-\mathbf{F}$  であるから、運動方程式は  $M_1 \ddot{\mathbf{r}}_1 = \mathbf{F}, M_2 \ddot{\mathbf{r}}_2 = -\mathbf{F}$  になる。1と2の運動方程式の和から  $\ddot{\mathbf{R}} = 0$ 、質量で割った式の差から  $\mu \ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$  を得る。ただし

$$\mathbf{R} = \frac{M_1 \mathbf{r}_1 + M_2 \mathbf{r}_2}{M_1 + M_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \quad (6.2)$$

重心  $\mathbf{R}$  の運動は等速直線運動である。相対運動は換算質量  $\mu$  の1粒子の運動と等価である。 $\mathbf{F}$  が中心力の場合、(6.1)で  $M$  を  $\mu$  で置き換えた式になる。

### 6.2 量子力学での重心運動の分離

例えば、水素原子は陽子と電子の2粒子系で、陽子・電子間にはクーロン力が作用する。中心力が作用する2粒子系を量子力学で扱う場合、古典力学と同様に、重心運動と相対運動に分離できる。

2粒子系の波動関数  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$  はシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = H \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2M_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2M_2} \nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

に従う。ただし、2粒子間の相互作用  $V$  は相対位置だけに依存するとする。古典力学と異なり  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  は単に空間の場所を表し、時間  $t$  とは独立な変数である。また  $\nabla_1, \nabla_2$  はそれぞれ  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  のグラディエントである。(6.2) の  $\mathbf{r}$  と  $\mathbf{R}$  を成分で表して  $\mathbf{r} = (x, y, z), \mathbf{R} = (X, Y, Z)$  とすると

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{M_1}{M_1 + M_2} \frac{\partial}{\partial X}, \quad \frac{\partial}{\partial x_2} = -\frac{\partial}{\partial x} + \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{\partial}{\partial X}$$

$y, z$  についても同様にすると

$$\nabla_1 = \nabla + \frac{M_1}{M_1 + M_2} \nabla_R, \quad \nabla_2 = -\nabla + \frac{M_2}{M_1 + M_2} \nabla_R \quad (6.3)$$

ただし、 $\nabla, \nabla_R$  はそれぞれ  $\mathbf{r}, \mathbf{R}$  のグラディエントである。したがって

$$\frac{1}{M_1} \nabla_1^2 + \frac{1}{M_2} \nabla_2^2 = \frac{1}{\mu} \nabla^2 + \frac{1}{M_1 + M_2} \nabla_R^2, \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}$$

これから

$$H = H_R + H_{\text{rel}}, \quad H_R = -\frac{\hbar^2}{2(M_1 + M_2)} \nabla_R^2, \quad H_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

になり、重心  $\mathbf{R}$  だけに依存する部分  $H_R$  と相対座標  $\mathbf{r}$  だけに依存する部分  $H_{\text{rel}}$  に完全に分離する。そこで、波動関数を変数分離して  $\Psi = \bar{\varphi}(\mathbf{R}, t) \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)$  とすると、シュレーディンガー方程式は

$$\frac{1}{\bar{\varphi}(\mathbf{R}, t)} \left( i\hbar \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial t} - H_R \bar{\varphi}(\mathbf{R}, t) \right) = -\frac{1}{\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)} \left( i\hbar \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} - H_{\text{rel}} \bar{\psi}(\mathbf{r}, t) \right)$$

になる。左辺は  $\mathbf{r}$  に依存せず、右辺は  $\mathbf{R}$  に依存しないから、任意の  $\mathbf{R}, \mathbf{r}$  で両者が一致するためには、上式は  $t$  だけの関数である。これを便宜上  $df(t)/dt$  とおくと

$$i\hbar \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial t} - \frac{df}{dt} \bar{\varphi}(\mathbf{R}, t) = H_R \bar{\varphi}(\mathbf{R}, t), \quad i\hbar \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} + \frac{df}{dt} \bar{\psi}(\mathbf{r}, t) = H_{\text{rel}} \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)$$

$\varphi(\mathbf{R}, t) = e^{if(t)} \bar{\varphi}(\mathbf{R}, t), \psi(\mathbf{r}, t) = e^{-if(t)} \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)$  とすると  $\Psi = \bar{\varphi} \bar{\psi} = \varphi \psi$  であり

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = e^{if(t)/\hbar} \left( i\hbar \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial t} - \frac{df}{dt} \bar{\varphi}(\mathbf{R}, t) \right) = H_R \varphi(\mathbf{R}, t), \quad \text{同様にして} \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_{\text{rel}} \psi(\mathbf{r}, t)$$

になる。第1式は質量  $M_1 + M_2$  の自由粒子のシュレーディンガー方程式であり、古典力学の  $\ddot{\mathbf{R}} = 0$  に対応する。相対運動に関する第2式は  $V(\mathbf{r})$  の中を運動する質量  $\mu$  の1粒子のシュレーディンガー方程式であり、古典力学では  $\mu \ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$  になる。

以下では、相対運動について中心力ポテンシャルでの定常状態を扱う。換算質量  $\mu$  を  $M$  で表わし  $H_{\text{rel}}$  を  $H$  と記す。

### 6.3 動径方向の波動関数

中心力ポテンシャル  $V(r)$  のシュレーディンガー方程式は

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad H = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(r), \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla \quad (6.4)$$

である。ポテンシャルは  $r$  にだけ依存するから、この方程式を解くにはデカルト座標  $x, y, z$  の代わりに極座標  $r, \theta, \phi$  を用いた方が便利である。(5.24) と (16.40) より (6.6) は直ちに求まるが、ここでは別の方法で求める。恒等式

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{C} \mathbf{B} \cdot \mathbf{D} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{D} \mathbf{B} \cdot \mathbf{C} = \sum_{i,j=1}^3 \left( A_i B_j C_i D_j - A_i B_j C_j D_i \right)$$

は、演算子で各成分が非可換の場合でも、左から  $A, B, C, D$  として順序を保てば成り立つ。最後の式はこの順に並べた。 $\mathbf{A} = \mathbf{C} = \mathbf{r}, \mathbf{B} = \mathbf{D} = \nabla$  とすれば  $\mathbf{L} = -i\mathbf{r} \times \nabla$  は  $(\partial_i = \partial/\partial x_i)$

$$\begin{aligned} L^2 &= - \sum_{ij} x_i \underbrace{\partial_j x_i}_{\delta_{ij} + x_i \partial_j} \partial_j + \sum_{ij} x_i \underbrace{\partial_j x_j}_{1 + x_j \partial_j} \partial_i = - \sum_{ij} x_i^2 \partial_j^2 + 2 \sum_i x_i \partial_i + \sum_{ij} x_j \underbrace{x_i \partial_j}_{\partial_j x_i - \delta_{ij}} \partial_i \\ &= -r^2 \nabla^2 + \mathbf{r} \cdot \nabla + (\mathbf{r} \cdot \nabla)^2 \end{aligned}$$

になる。 $\mathbf{r} \cdot \nabla = r \frac{\partial}{\partial r}$  より

$$L^2 = -r^2 \nabla^2 + r \frac{\partial}{\partial r} + r \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} = -r^2 \nabla^2 + 2r \frac{\partial}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2}$$

$r \neq 0$  のとき

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} L^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} L^2 \quad (6.5)$$

になるから

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(r) = H_r + \frac{\hbar^2 L^2}{2Mr^2}, \quad H_r = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + V(r) \quad (6.6)$$

である。 $L^2$  を具体的に角度で表すと (5.24) になるが、以下では  $L^2$  の具体形は必要としない。重要な点は、角度に依存する部分が  $L^2$  だけになることである。一般に (6.5) は  $r = 0$  では成り立たない。例えば  $\nabla^2 r^{-1} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$  である。しかし、原点で有界な関数に対しては、(6.5) は  $r = 0$  を含む全空間で成り立つ。

$\mathbf{L}$  は  $r$  の微分を含まないから  $H_r$  とは可換である。また、 $[L^2, \mathbf{L}] = 0$  であるから  $[H, \mathbf{L}] = 0$  になる。 $\mathbf{L}$  の各成分は互いに非可換である。したがって、 $H, L^2, L_z$  は互いに可換になり、これらの同時固有関数が存在する。 $L^2, L_z$  の同時固有関数は球面調和関数  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  であるから、 $H, L^2, L_z$  の同時固有関数  $\psi(\mathbf{r})$  は

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$$

とおける。任意の  $R(r)$  に対して  $\psi(\mathbf{r})$  は  $L^2, L_z$  の固有関数である。 $\psi(\mathbf{r})$  が  $H$  の固有関数になるように  $R(r)$  を決める。 $L^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell+1) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  より  $H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$  は

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Mr^2} + V(r) \right) R_\ell(r) = E R_\ell(r) \quad (6.7)$$

になる。これから  $E$  と  $R(r)$  が決まる。これらは  $\ell$  に依存するが  $m$  には依存しない。上式に  $r$  をかければ

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Mr^2} + V(r) \right) \chi_\ell(r) = E \chi_\ell(r), \quad \text{ただし} \quad \chi_\ell(r) = r R_\ell(r) \quad (6.8)$$

とも表せる。これは

$$U_\ell(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Mr^2} \quad (6.9)$$

をポテンシャルとする 1 次元シュレーディンガー方程式である。古典力学と同様に  $U_\ell$  には遠心力による斥力のポテンシャルが加わる。

$r \geq 0$  より  $r = 0$  での境界条件が必要である。 $\psi(\mathbf{r})$  が全空間で有限であることを要請すると

$$\lim_{r \rightarrow 0} r R_\ell(r) = \chi_\ell(0) = 0 \quad (6.10)$$



である。点  $\mathbf{r}$  近傍の微小領域  $d^3r$  に粒子を見出す確率は

$$|\psi(\mathbf{r})|^2 d^3r = |R_\ell(r)|^2 r^2 dr |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 d\Omega = |\chi_\ell(r)|^2 dr |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 d\Omega, \quad d\Omega = d\theta \sin\theta d\phi$$

$|Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2$  を角度積分すると 1 である。したがって、 $r$  と  $r + dr$  に粒子を見出す確率は  $|\chi_\ell(r)|^2 dr$  であり、 $\psi(\mathbf{r})$  の規格化条件は

$$\int_0^\infty dr |\chi_\ell(r)|^2 = 1$$

になる。これも 1 次元と同じである。ただし、境界条件が  $\chi_\ell(0) = 0$  である半無限領域 ( $r \geq 0$ ) を考える。 $-\infty < x < \infty$  での偶関数ポテンシャルにおいて、奇関数の固有関数だけを扱うことに対応する。

**問題 6.1** 状態  $\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  における確率の流れ  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$  は (5.37) で与えられる。 $R(r)$  が (6.7) を満たすとき  $\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$  を示せ。

### 縮退度

1 次元の束縛状態に縮退はないから、束縛状態の境界条件を満たす (6.8) の独立な解  $\chi_\ell(r)$  は 1 つだけであり  $\chi_\ell(r)$  は実数にとれる。また、(6.8) の左辺は  $\ell$  に依存するが  $m$  には依存しないから、 $E$  も  $m$  に依存しない。したがって、中心力の場合、 $2\ell + 1$  個の独立な固有関数  $R_\ell(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  は、同じエネルギー固有値になり  $2\ell + 1$  重に縮退する ((5.132) 参照)。粒子がスピンをもつ場合、スピンの大きさを  $s$  とすると、状態は  $R(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)|s m_s\rangle$  と表される。 $E$  は  $m_s$  にも依らないから、 $H$  の固有状態は  $(2s + 1)(2\ell + 1)$  重に縮退する。特に必要がない限りスピン状態は考えない。

### 原点近傍の漸近形

$r^2 V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0$  の場合を考える。通常、この条件を満たすポテンシャルを扱う。 $\ell \neq 0$  のとき、原点近傍では遠心力ポテンシャルが支配的になり (6.8) は

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) \chi_\ell \approx 0, \quad \therefore \chi_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Cr^{\ell+1} + Dr^{-\ell} \quad (6.11)$$

になる。 $\chi_\ell(0) = 0$  より  $D = 0$  でなければならないから

$$\chi_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Cr^{\ell+1} \quad (6.12)$$

である。 $\ell$  が大きいほど斥力の遠心力が強くなるため、粒子は原点に近づき難くなり、存在確率  $\propto r^{2(\ell+1)}$  は急激に小さくなる。(6.12) は  $\ell = 0$  の場合も成り立つ (**問題 6.2**)。あるいは、 $\chi_\ell(0) = 0$  であるから  $\alpha > 0$  とし  $\chi_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Cr^\alpha$  とおく。これを (6.8) に代入すると

$$-\alpha(\alpha-1) + \ell(\ell+1) = \frac{2M}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad \therefore \alpha = \ell + 1 > 0$$

である。

(6.8) は 2 階の微分方程式であるから、独立な解は 2 つ存在する。上の結果から、2 つの解は原点近傍で  $r^{\ell+1}$  または  $r^{-\ell}$  に比例し、(6.8) の一般解は 2 つの解の線形結合である。しかし、原点での物理的境界条件 (6.10) のため  $r^{-\ell}$  に比例する解は棄却する。ラプラス方程式  $\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = 0$  の場合、(6.8) で  $V(r) = 0$ 、 $E = 0$  とすればよいから  $r^\ell Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  と  $r^{-\ell-1} Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  はラプラス方程式の厳密解である。

**問題 6.2**  $\nu > 0$  として  $V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} v_0 r^{1/\nu}/r^2$  とする。 $r^2 V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0$  である。 $\ell = 0$  の場合

$$\chi_0(r) = \sqrt{r} u(x), \quad x = 2\nu \sqrt{-2Mv_0/\hbar^2} r^{1/(2\nu)}$$

とすると,  $u(x)$  はベッセルの微分方程式 (17.90) を満たすことを示せ。これから  $\chi_0(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Cr$  になり, 漸近形は  $v_0, \nu$  に依存しないことを示せ。

### 直交性

$\ell$  を与えたとき, (6.8) の固有値  $E$  は一般に複数存在する。 $E$  を  $E_{n\ell}$  で表し,  $n$  により複数個の固有値を区別する。

$$\chi_{n\ell} \frac{d^2 \chi_{n'\ell}}{dr^2} = \frac{2M}{\hbar^2} (U_\ell(r) - E_{n'\ell}) \chi_{n\ell} \chi_{n'\ell}, \quad \chi_{n'\ell} \frac{d^2 \chi_{n\ell}}{dr^2} = \frac{2M}{\hbar^2} (U_\ell(r) - E_{n\ell}) \chi_{n\ell} \chi_{n'\ell}$$

の差をとると, ロンスキヤンは

$$\frac{dW}{dr} = \frac{2M}{\hbar^2} (E_{n\ell} - E_{n'\ell}) \chi_{n\ell}(r) \chi_{n'\ell}(r), \quad W(r) = \chi_{n\ell} \frac{d\chi_{n'\ell}}{dr} - \chi_{n'\ell} \frac{d\chi_{n\ell}}{dr} \quad (6.13)$$

になる。境界条件より  $W(0) = W(\infty) = 0$  であるから, 積分すれば

$$(E_{n\ell} - E_{n'\ell}) I_{n\ell, n'\ell} = 0, \quad I_{n\ell, n'\ell} = \int_0^\infty dr \chi_{n\ell}(r) \chi_{n'\ell}(r)$$

縮退はないから  $n \neq n'$  のとき  $E_{n\ell} \neq E_{n'\ell}$  であり  $I_{n\ell, n'\ell} = \delta_{nn'}$  になる。一方,  $\ell' \neq \ell$  のとき  $U_{\ell'}(r) \neq U_\ell(r)$  であるから,  $\chi_{n\ell}(r)$  と  $\chi_{n'\ell'}(r)$  は直交するとは限らない。しかし, 球面調和関数の直交性を使うと

$$\int d^3r \psi_{n\ell m}^*(\mathbf{r}) \psi_{n'\ell' m'}(\mathbf{r}) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} I_{n\ell, n'\ell'} = \delta_{nn'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

である。

### パリティ

(2.67) より  $\mathbf{p}^2$  はパリティ演算子  $P$  と可換である。また, 原点からの距離  $r$  も空間反転に対して不変であるから,  $P$  と中心力の  $H$  は可換になりこれらの同時固有関数が存在する。実際, (5.39) より

$$P R_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^\ell R_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad \text{つまり} \quad \psi(-\mathbf{r}) = (-1)^\ell \psi(\mathbf{r}) \quad (6.14)$$

であるから,  $R_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  はパリティの固有関数で固有値は  $(-1)^\ell$  である。

### 束縛状態の節 (ノード) の個数

$\chi_\ell(r)$  の節には, 1 次元の束縛状態 (46 ページ) と同様の性質がある。 $\lambda$  を適当な長さとして  $q = r/\lambda$  とすると (6.8) は

$$\left( \frac{d^2}{dq^2} - U(q) + \varepsilon \right) \chi(q) = 0, \quad U(q) = \frac{\ell(\ell+1)}{q^2} + \frac{2M\lambda^2}{\hbar^2} V(r), \quad \varepsilon = \frac{2M\lambda^2}{\hbar^2} E \quad (6.15)$$

になる。(2.71) と同様に

$$\chi(q) = \rho(q, \varepsilon) \sin \theta(q, \varepsilon), \quad \frac{d\chi}{dq} = \rho(q, \varepsilon) \cos \theta(q, \varepsilon), \quad \rho(q, \varepsilon) = \sqrt{\chi(q)^2 + (d\chi/dq)^2}$$

とすると (2.73), (2.72)

$$\frac{d\rho}{dq} = (1 + U(q) - \varepsilon) \rho \sin \theta \cos \theta, \quad \frac{d\theta}{dq} = 1 + (\varepsilon - U(q) - 1) \sin^2 \theta \quad (6.16)$$

が成り立つ。 $q \rightarrow 0$  のとき  $\chi \propto q^{\ell+1}$ ,  $q \rightarrow \infty$  のとき  $\chi \propto e^{-\sqrt{-\varepsilon}q}$  であるから

$$\tan \theta \xrightarrow{q \rightarrow 0} \frac{q}{\ell+1}, \quad \tan \theta \xrightarrow{q \rightarrow \infty} -\frac{1}{\sqrt{-\varepsilon}}$$

が束縛状態の境界条件である。(2.75) に対応して

$$\alpha_0(q) = \frac{q}{\ell+1}, \quad \alpha_+ = \pi - \cot^{-1} \sqrt{-\varepsilon}, \quad \pi/2 < \alpha_+ < \pi$$

とする。 $q \rightarrow 0$  のとき  $\theta(q) = \alpha_0(q)$  を初期条件として (6.16) の第 2 式を解くと  $\theta = \theta(q)$  が決まる。 $q_0 > 0$  で  $\theta(q_0) = 0$  になったとすると  $\theta'(q_0) \leq 0$  になるが, (6.16) より  $\theta'(q_0) = 1$  であるから  $q > 0$  では  $\theta(q) > 0$  になる。 $\cot \theta(\infty) = \cot \alpha_+$  を満たす  $\theta(\infty) > 0$  は

$$\theta(\infty) = \alpha_+ + n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

であればよい。これから束縛状態の  $\varepsilon$  が決まる。1 次元と同様に,  $q > 0$  のとき  $\theta(q, \varepsilon)$  は  $\varepsilon$  の単調増加関数になるから, 上式を満たす  $\varepsilon = \varepsilon_n$  は一意に決まり  $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \dots$  である。

$\chi(0) = 0$  であるが, 端点  $q = 0$  は節に含めない。 $k = 1, 2, \dots$  として  $\theta(q_k, \varepsilon_n) = k\pi$  である  $q_k$  が節になる。 $\theta'(q_k, \varepsilon_n) = 1$  より  $q_k$  は 1 点である。 $0 < \theta(q, \varepsilon_n) < (n+1)\pi$  であるから  $\chi(q, \varepsilon_n)$  は  $n$  個の節を持つ。(2.78) の議論はそのまま適用でき,  $\chi_{n+1}(q)$  の隣り合う節の間に  $\chi_n(q)$  の節が 1 つ存在する。

**問題 6.3**  $q > 0$  のとき  $\theta(q, \varepsilon)$  が  $\varepsilon$  の単調増加関数になることを示せ。

**問題 6.4** (6.11) より任意の  $\varepsilon$  に対して (6.15) の解で境界条件

$$Z(q, \varepsilon) \xrightarrow{q \rightarrow 0} \frac{q^{-\ell} + iq^{\ell+1}}{\sqrt{2\ell+1}} \quad (6.17)$$

を満たす複素数解  $Z(q, \varepsilon)$  が存在する。(6.15) の一般解は  $Z$  と  $Z^*$  の線型結合で表せる。特に, 束縛状態の波動関数  $\chi$  は  $\chi \propto Z - Z^*$  になる。極形式で表して  $Z(q, \varepsilon) = R(q, \varepsilon)e^{i\theta(q, \varepsilon)}$  とする。束縛状態の  $\varepsilon$  は

$$\int_0^\infty \frac{dq}{R^2(q, \varepsilon)} = \pi(n+1), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

で決まることを示せ。 $Z$  と  $Z^*$  のロンスキャンを考える。

### クラマースの関係式

$r$  のべき乗  $r^\nu$  の期待値

$$\langle r^\nu \rangle = \int d^3r r^\nu |\psi(\mathbf{r})|^2 = \int_0^\infty dr r^\nu \chi_\ell(r)^2$$

に関する漸化式を求める。

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0, \quad \chi_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^{\ell+1}, \quad \chi_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \text{指数関数的に } 0$$

とする。 $\nu + 2\ell + 1 > 0$  の場合を考える。(6.8) は

$$\chi_\ell''(r) - F(r)\chi_\ell(r) = 0, \quad F(r) = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2M}{\hbar^2}(V(r) - E) \quad (6.18)$$

と表せる。これに  $r^{\nu+1}\chi_\ell'$  をかけ積分する。 $\chi_\ell' \chi_\ell'' = (\chi_\ell'^2)'/2$  より

$$\int_0^\infty dr r^{\nu+1} \chi_\ell' \chi_\ell'' = \frac{1}{2} \int_0^\infty dr r^{\nu+1} (\chi_\ell'^2)' = \frac{1}{2} [r^{\nu+1} \chi_\ell'^2]_0^\infty - \frac{\nu+1}{2} \int_0^\infty dr r^\nu \chi_\ell'^2$$

$\nu + 2\ell + 1 > 0$  及び  $r \rightarrow 0$  のとき  $\chi_\ell \propto r^{\ell+1}$  より  $r^{\nu+1}\chi_\ell'^2 \propto r^{\nu+2\ell+1} \rightarrow 0$  になるから

$$\int_0^\infty dr r^{\nu+1} \chi_\ell' \chi_\ell'' = -\frac{\nu+1}{2} \int_0^\infty dr r^\nu \chi_\ell'^2$$

同様に  $\chi_\ell' \chi_\ell = (\chi_\ell^2)'/2$  を使うと

$$\int_0^\infty dr r^{\nu+1} F(r) \chi_\ell' \chi_\ell = -\frac{1}{2} \int_0^\infty dr \chi_\ell^2 (r^{\nu+1} F)'$$

より

$$2 \int_0^\infty dr r^{\nu+1} \chi_\ell' (\chi_\ell'' - F \chi_\ell) = \int_0^\infty dr \chi_\ell^2 (r^{\nu+1} F)' - (\nu+1) \int_0^\infty dr r^\nu \chi_\ell'^2 = 0 \quad (6.19)$$

次に, (6.18) に  $r^\nu \chi_\ell$  をかけ積分する。

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr r^\nu \chi_\ell \chi_\ell'' &= - \int_0^\infty dr \chi_\ell' (r^\nu \chi_\ell)' = -\nu \int_0^\infty dr r^{\nu-1} \chi_\ell' \chi_\ell - \int_0^\infty dr r^\nu \chi_\ell'^2 \\ &= \frac{\nu(\nu-1)}{2} \int_0^\infty dr r^{\nu-2} \chi_\ell^2 - \int_0^\infty dr r^\nu \chi_\ell'^2 \end{aligned}$$

になるから

$$\int_0^\infty dr r^\nu \chi_\ell (\chi_\ell'' - F \chi_\ell) = \frac{\nu(\nu-1)}{2} \int_0^\infty dr r^{\nu-2} \chi_\ell^2 - \int_0^\infty dr r^\nu \chi_\ell'^2 - \int_0^\infty dr r^\nu F \chi_\ell^2 = 0$$

$r^\nu \chi_\ell'^2$  の積分を  $r^{\nu-2} \chi_\ell^2$  と  $r^\nu F \chi_\ell^2$  の積分で表して (6.19) に代入すると

$$\frac{\nu(\nu^2-1)}{2} \langle r^{\nu-2} \rangle - 2(\nu+1) \langle r^\nu F \rangle - \langle r^{\nu+1} F' \rangle = 0$$

になる。

$V(r) = V_0 r^\kappa$  の場合 ( $\kappa > -2$ ),  $F(r)$  の具体形を代入して整理すると,  $\nu + 2\ell + 1 > 0$  のとき

$$\frac{\nu}{2} (\nu^2 - (2\ell+1)^2) \langle r^{\nu-2} \rangle - \frac{2MV_0}{\hbar^2} (2\nu+2+\kappa) \langle r^{\nu+\kappa} \rangle + \frac{4ME}{\hbar^2} (\nu+1) \langle r^\nu \rangle = 0 \quad (6.20)$$

になる。これを**クラマースの関係式**という。 $\mathbf{r} \cdot \nabla V = r dV/dr = \kappa V$  よりビリアル定理 (1.55) は

$$\frac{1}{2M} \langle \mathbf{p}^2 \rangle = \frac{\kappa}{2} \langle V(r) \rangle, \quad \therefore E = \frac{\langle \mathbf{p}^2 \rangle}{2M} + \langle V(r) \rangle = \frac{2+\kappa}{2} \langle V(r) \rangle \quad (6.21)$$

になる。これは (6.20) で  $\nu = 0$  とすれば求まる (規格化条件より  $\langle r^0 \rangle = 1$ )。

### 6.4 3次元井戸型ポテンシャル

井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}, \quad \text{ただし } V_0 > 0$$

の場合を考える。(6.7) は

$$r < a \text{ のとき } \left( \frac{1}{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \rho + 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) R_\ell(r) = 0, \quad \rho = kr, \quad k = \sqrt{\frac{2M(E+V_0)}{\hbar^2}} \quad (6.22)$$

$$r > a \text{ のとき } \left( \frac{1}{z} \frac{d^2}{dz^2} z + 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2} \right) R_\ell(r) = 0, \quad z = iKr, \quad K = \sqrt{\frac{-2ME}{\hbar^2}}$$

になる。束縛状態では  $-V_0 < E < 0$  より  $k, K$  は実数である。この微分方程式は (17.64) であるから

$$r < a \text{ のとき } R_\ell = A j_\ell(\rho) + B n_\ell(\rho), \quad r > a \text{ のとき } R_\ell = C h_\ell^{(1)}(z) + D h_\ell^{(2)}(z)$$

とおける。(17.78) より境界条件 (6.10) を満たすためには  $B = 0$  である。また, (17.80) より  $r \rightarrow \infty$  のとき  $K r h_\ell^{(1)}(iKr) \rightarrow -i^{-\ell} e^{-Kr}$ ,  $K r h_\ell^{(2)}(iKr) \rightarrow i^\ell e^{Kr}$  になるから,  $R_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$  であるためには  $D = 0$  である。動径方向のシュレーディンガー方程式の解は

$$r < a \text{ のとき } R_\ell(r) = A j_\ell(kr), \quad r > a \text{ のとき } R_\ell(r) = C h_\ell^{(1)}(iKr)$$

になる。 $r = a$  で  $R_\ell(r)$  が滑らかに接続するためには

$$A j_\ell(ka) = C h_\ell^{(1)}(iKa), \quad A \left. \frac{dj_\ell(kr)}{dr} \right|_{r=a} = C \left. \frac{dh_\ell^{(1)}(iKr)}{dr} \right|_{r=a} \quad (6.23)$$

である。2 番目の式で (17.71) を使うと

$$A \left( \ell j_\ell(ka) - ka j_{\ell+1}(ka) \right) = C \left( \ell h_\ell^{(1)}(iKa) - iKa h_{\ell+1}^{(1)}(iKa) \right)$$

これと (6.23) の最初の式から

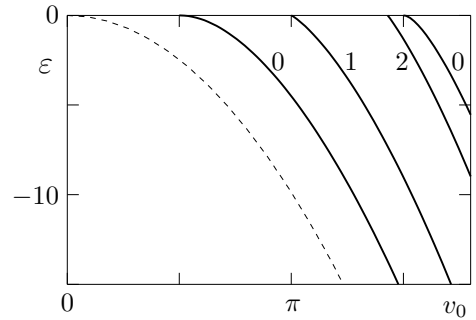
$$ka \frac{j_{\ell+1}(ka)}{j_\ell(ka)} = iKa \frac{h_{\ell+1}^{(1)}(iKa)}{h_\ell^{(1)}(iKa)}, \quad k^2 + K^2 = \frac{2MV_0}{\hbar^2} \quad (6.24)$$

になる。これから  $V_0$  を与えると  $K$  が求まり, エネルギー固有値  $E = -\hbar^2 K^2/(2M)$  が決まる。

図に (6.24) の数値結果を示す。横軸, 縦軸を無次元量

$$v_0 = \sqrt{2Ma^2V_0/\hbar^2}, \quad \varepsilon = 2Ma^2E/\hbar^2$$

で表した。曲線に付けた値は  $\ell$  である。 $v_0 \leq \pi/2$  では束縛状態は存在しない。 $v_0 > \pi/2$  になると  $\ell = 0$  の解が現れる。更に, ポテンシャルを深くし  $v_0 > \pi$  になると  $\ell = 1$  でも束縛状態が出現する。遠心力ポテンシャル  $\hbar^2 \ell(\ell+1)/(2Mr^2)$  のため,  $\ell$  が大きい束縛状態を得るには  $v_0$  を大きくする必要がある。 $v_0 > 3\pi/2$  になると 2 番目の  $\ell = 0$  の状態が現れる。破線は古典力学での最低エネルギー  $E = -V_0$ ,  $\varepsilon = -v_0^2$  である。具体形 (17.70) を使うと  $\ell = 0$  の場合 (6.24) は  $Ka = -ka \cot(ka)$  になる。これは 1 次元井戸型ポテンシャルで奇関数の固有値を与える (2.12) と同じである。



**問題 6.5** 角運動量  $\ell$  の新たな束縛状態が現れる条件は  $E \rightarrow 0$  の解が存在する条件である。(6.24) よりこの条件が,  $\ell = 0$  のとき  $\cos v_0 = 0$ ,  $\ell > 0$  のとき  $j_{\ell-1}(v_0) = 0$  になることを示せ。(17.71), (17.77), (17.78) の性質を使う。

**問題 6.6**  $V_0 \rightarrow +\infty$  を考える。この場合, 粒子は半径  $a$  の球に閉じ込められる。 $K \rightarrow \infty$  ( $E \rightarrow -\infty$ ) になるが, ポテンシャルの底  $-V_0$  を基準にしたエネルギー  $E + V_0 = \hbar^2 k^2/2M$  は有限である。(6.24) より  $k$  は  $j_\ell(ka) = 0$  で決まることを示せ。また,  $V_0 \rightarrow +\infty$  での動径方向のシュレーディンガー方程式を直接解き, この条件を求めよ。

### 6.5 クーロンポテンシャル

水素型原子のエネルギー準位を求める。原子核を電荷  $Ze$  の点電荷として扱う (210 ページ参照)。電荷  $-e$  の電子が受けるポテンシャル  $V(r)$  は

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} = -\frac{Z\alpha\hbar c}{r}, \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137.036} \quad (6.25)$$

ただし、無次元の  $\alpha$  を微細構造定数という。動径方向のシュレーディンガー方程式 (6.8) は

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Mr^2} - \frac{Z\alpha\hbar c}{r} - E \right) \chi_\ell(r) = 0$$

である。束縛状態は  $E < \lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0$  のとき存在する。 $E \geq 0$  は散乱状態であり、ここでは考えない (303 ページ)。 $r \rightarrow \infty$  では  $d^2\chi_\ell/dr^2 + (2ME/\hbar^2)\chi_\ell = 0$  になるから

$$\rho = kr, \quad \text{ただし} \quad k = 2\sqrt{-2ME/\hbar^2} \quad (6.26)$$

とすると

$$\left( \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right) \chi_\ell = 0, \quad \text{ただし} \quad \lambda = \frac{2McZ\alpha}{\hbar k} = Z\alpha\sqrt{\frac{Mc^2}{-2E}} \quad (6.27)$$

になる。 $\rho \rightarrow \infty$  では  $d^2\chi_\ell/d\rho^2 - \chi_\ell/4 = 0$  より  $\chi_\ell \rightarrow e^{\pm\rho/2}$  であるが、無限遠でも波動関数は有限であるから  $\chi_\ell \rightarrow e^{-\rho/2}$  である。一方、原点近傍では  $\chi_\ell \rightarrow \rho^{\ell+1}$  である。2つの漸近形をくくり出して  $\chi_\ell(\rho) = A(\rho)v_\ell(\rho)$ ,  $A(\rho) = \rho^{\ell+1}e^{-\rho/2}$  とおくと (6.27) は

$$\frac{d^2v_\ell}{d\rho^2} + \frac{2}{A} \frac{dA}{d\rho} \frac{dv_\ell}{d\rho} + \left( \frac{1}{A} \frac{d^2A}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right) v_\ell = 0$$

になる。

$$\frac{dA}{d\rho} = A \left( \frac{\ell+1}{\rho} - \frac{1}{2} \right), \quad \frac{d^2A}{d\rho^2} = \frac{dA}{d\rho} \left( \frac{\ell+1}{\rho} - \frac{1}{2} \right) - A \frac{\ell+1}{\rho^2} = A \left( \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{\ell+1}{\rho} + \frac{1}{4} \right)$$

より

$$\rho \frac{d^2v_\ell}{d\rho^2} + (2\ell+2-\rho) \frac{dv_\ell}{d\rho} - (\ell+1-\lambda)v_\ell = 0 \quad (6.28)$$

である。(17.102) で  $a = \ell+1-\lambda$ ,  $b = 2\ell+2$  とすると (6.28) になるから、原点で有限な解は、(17.106) の合流型超幾何関数  $M(a, b, x)$  を用いて

$$v_\ell(\rho) = CM(\ell+1-\lambda, 2\ell+2, \rho) \quad (6.29)$$

である。(17.111) より  $\chi_\ell(\rho) = \rho^{\ell+1}e^{-\rho/2}v_\ell(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} 0$  になる条件は  $\ell+1-\lambda = -n_r$ , ただし  $n_r = 0, 1, 2, \dots$  である。 $\lambda = n_r + \ell + 1$  は正の整数になるから  $n$  とおく。(6.27) より  $Z > 0$ , つまり、引力の場合に束縛状態が存在し

$$E_n = -\frac{(Z\alpha)^2 Mc^2}{2n^2}, \quad n = n_r + \ell + 1 = 1, 2, \dots \quad (6.30)$$

になる。 $n$  を主量子数という。

$n$  を与えたとき  $n_r + \ell = n - 1$  が同じ  $(n_r, \ell)$  は縮退する。許される  $\ell$  は  $n_r = n - \ell - 1 \geq 0$  より

$$\ell = 0, 1, \dots, n-1 \quad (6.31)$$

である。角運動量  $\ell$  の状態は  $2\ell + 1$  個あるから、縮退度は

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n(n-1) + n = n^2 \quad (6.32)$$

になる。有効ポテンシャル (6.9) は  $\ell$  に依存するから、一般に、 $\ell$  が異なれば  $E$  も異なる。異なる  $\ell$  の縮退はクーロンと 3 次元等方調和振動子に特有の現象である (159 ページ参照)。

(6.44) より  $E_n(Z=1) = -13.6/n^2 \text{ eV}$  になる。これを右図に示す ( $n \leq 5, \ell \leq 3$ )。図では 1 つの線分であるが、 $\ell$  の状態は  $2\ell + 1$  重に縮退している。基底状態は  $(n, \ell) = (1, 0)$ 、最初の励起状態は  $(n, \ell) = (2, 0), (2, 1)$  であり 4 重に縮退する。分光学での記法では、 $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$  に対して 1 つのアルファベット  $s, p, d, f, g, \dots$  を対応させ、状態を  $n$  とこのアルファベットで表す。基底状態は  $1s$ 、最初の励起状態は  $2s, 2p$  等である。

動径方向の波動関数は

$$\chi_{n\ell}(r) = C \rho^{\ell+1} e^{-\rho/2} M(-n_r, 2\ell+2, \rho), \quad n_r = n - \ell - 1 \geq 0 \quad (6.33)$$

である。一般に  $M(-n, b, x)$  は  $x > 0$  に  $n$  個の零点が存在するから、 $n_r$  は  $\chi_{n\ell}(r)$  の節 (ノード) の個数を表す (端点  $r = 0$  は節に含めない)。 (6.26), (6.30) より

$$\rho = 2\sqrt{-\frac{2ME_n}{\hbar^2}} r = \frac{2}{n} \frac{Z\alpha Mc}{\hbar} r = \frac{2}{n} \frac{r}{a_z}, \quad a_z = \frac{a_B}{Z}, \quad a_B = \frac{\hbar}{\alpha Mc} = \text{ボーア半径} \quad (6.34)$$

である。 $\chi_{n\ell}$  を規格化すると

$$\int_0^\infty dr \chi_{n\ell}^2 = C^2 \frac{na_z}{2} \int_0^\infty d\rho \rho^{2\ell+2} e^{-\rho} \left( M(-n_r, 2\ell+2, \rho) \right)^2$$

(17.116) で  $b = 2\ell + 2, \nu = 1$  とすると

$$\int_0^\infty dr \chi_{n\ell}^2 = C^2 \frac{na_z}{2} \frac{n_r!}{(2\ell+2)_{n_r}} \left( 1 + \frac{n_r}{\ell+1} \right) = C^2 n^2 a_z \frac{[(2\ell+1)!]^2 (n-\ell-1)!}{(n+\ell)!} = 1 \quad (6.35)$$

したがって、規格した波動関数は

$$\chi_{n\ell}(\rho) = \frac{1}{n(2\ell+1)!} \sqrt{\frac{1}{a_z} \frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}} \rho^{\ell+1} e^{-\rho/2} M(\ell+1-n, 2\ell+2, \rho) \quad (6.36)$$

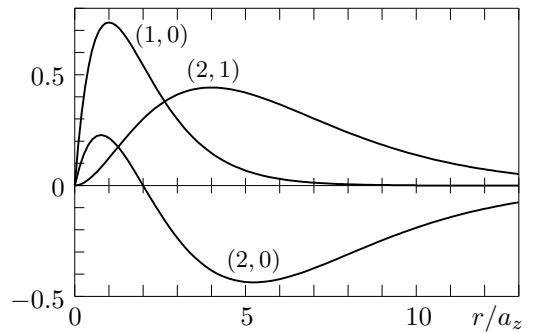
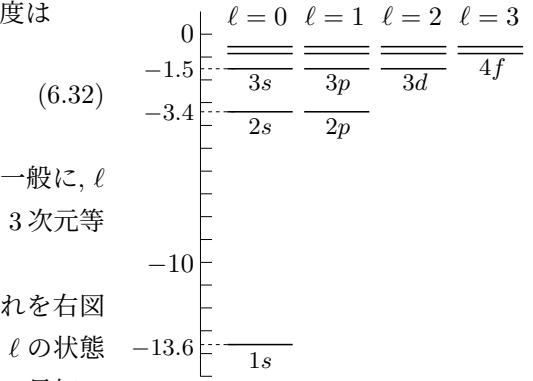
になる。基底状態と第 1 励起状態の波動関数  $\chi_{n\ell}$  を具体的に求める。 $\rho$  は  $n$  に依存するから  $q = r/a_z$  で表す。 $n = 1$  のとき  $\ell = 0, \rho = 2q, n = 2$  の場合  $\ell = 0, 1, \rho = q$  である。 (17.110) より

$$\sqrt{a_z} \chi_{10} = 2qe^{-q} \quad (6.37)$$

$$\sqrt{a_z} \chi_{20} = \frac{q}{\sqrt{2}} \left( 1 - \frac{q}{2} \right) e^{-q/2} \quad (6.38)$$

$$\sqrt{a_z} \chi_{21} = \frac{q^2}{2\sqrt{6}} e^{-q/2} \quad (6.39)$$

になる。右図に無次元の  $\sqrt{a_z} \chi_{n\ell}(r)$  を示す。曲線には  $(n, \ell)$  を付けた。  $e^{-\rho/2} = e^{-q/n}$  であるから、 $n$  が大きい波動関数は外側に大きく広がる。



クラマースの関係式 (6.20) をクーロンポテンシャルに適用する。

$$\frac{2M}{\hbar^2} V_0 = -\frac{2M}{\hbar^2} Z\alpha\hbar c = -\frac{2}{a_z}, \quad \frac{4ME_n}{\hbar^2} = -\frac{4M}{\hbar^2} \frac{(Z\alpha)^2 Mc^2}{2n^2} = -\frac{2}{n^2 a_z^2}$$

より (6.20) で  $\kappa = -1$  とすると,  $\nu + 2\ell + 1 > 0$  のとき

$$\frac{\nu}{4} (\nu^2 - 1 - 4\ell(\ell+1)) a_z^2 \langle r^{\nu-2} \rangle + (2\nu+1) a_z \langle r^{\nu-1} \rangle - \frac{\nu+1}{n^2} \langle r^\nu \rangle = 0 \quad (6.40)$$

になる。ただし

$$\langle r^\nu \rangle = \int_0^\infty dr r^\nu \chi_{n\ell}^2$$

規格化より  $\langle r^0 \rangle = 1$  であるから  $\nu = 0, 1, 2, \dots$  とすると

$$\langle r^{-1} \rangle = \frac{1}{n^2 a_z}, \quad \langle r \rangle = \frac{3n^2 - \ell(\ell+1)}{2} a_z, \quad \langle r^2 \rangle = n^2 \frac{5n^2 + 1 - 3\ell(\ell+1)}{2} a_z^2, \quad \dots \quad (6.41)$$

$r^{-1}, r, r^2, \dots$  の期待値は  $\chi_{n\ell}$  の具体形を知らなくても求まるが,  $\langle r^{-2} \rangle$  は求まらない。

**問題 6.7** (17.116) を用いて  $\langle r^{-1} \rangle$  を求め (6.41) と一致すること, 及び

$$\langle r^{-2} \rangle = \frac{2}{(2\ell+1)n^3 a_z^2} \quad (6.42)$$

になることを示せ。また, ビリアル定理 (1.55) を用いて  $\langle r^{-1} \rangle$  を求めよ。

$V(r) = -Z\alpha\hbar c/r$  の場合  $\mathbf{r} \cdot \nabla V(r) = r dV/dr = -V(r)$  である。 $K = \mathbf{p}^2/(2M)$  とするとビリアル定理から  $\langle K \rangle = -\langle V \rangle/2$  である。ここで  $\langle \dots \rangle$  は状態  $\psi_{n\ell m}$  での期待値を表す。 $\langle K \rangle + \langle V \rangle = E_n$  より  $\langle K \rangle = -E_n$  になる。粒子の平均的速さ  $v$  は  $v^2 = 2\langle K \rangle/M$  で評価できるから

$$\frac{v}{c} = \sqrt{-\frac{2E_n}{Mc^2}} = \frac{Z\alpha}{n} \approx \frac{Z}{137n}$$

$Z$  が大きい原子中では相対論的效果は無視できない。

### 実験との定量的比較

次の物理量の次元と概数は覚えておくべきである ( $\text{MeV} = 10^6 \text{eV}$ ,  $\text{fm} = 10^{-15} \text{m}$ )。

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137.035999} \approx \frac{1}{137}, \quad \alpha^2 \approx 0.53 \times 10^{-4} \quad (6.43)$$

$$\hbar c = 197.326972 \text{ MeV fm} \approx 200 \text{ MeV fm}, \quad Mc^2 = 0.51099893 \text{ MeV} \approx 0.5 \text{ MeV}$$

$M$  は電子の質量である。 $\hbar, e^2, M$  を上の組み合わせにすると, 物理量の次元及び数値を簡単に評価できる。例えば, 電子のボーア半径は

$$a_B = \frac{\hbar c}{\alpha Mc^2} \approx \frac{200 \times 137}{0.5} \text{ fm} = 0.55 \times 10^{-10} \text{ m}$$

である。正確な値は  $a_B = 0.529177 \times 10^{-10} \text{ m}$  になる。

水素原子 ( $Z = 1$ ) の場合, 基底状態エネルギーの実験値は  $E_{\text{exp}} = -13.598433 \text{ eV}$  である。一方, シュレーディンガー方程式の結果に上の値を代入すると

$$E(M) = -\alpha^2 Mc^2/2 = -13.605693 \text{ eV} = (1 + 5.339 \times 10^{-4}) E_{\text{exp}} \quad (6.44)$$



になり、実験値をよく再現するが僅かに異なる。 $E(M)$  に 2 つの補正をする。1 つは、水素原子は電子と陽子の 2 粒子系であるから、相対運動の質量として電子の質量  $M$  ではなく換算質量

$$\mu = \frac{MM_p}{M + M_p} = \frac{M}{1 + M/M_p}, \quad M_p = \text{陽子の質量} = 938.27205 \text{ MeV}/c^2 = 1836.1527M$$

を用いる。もう 1 つは相対論的補正である ((8.83) で  $j = 1/2$ ,  $n = 1$ )。理論値  $E_{\text{th}}$  は

$$\begin{aligned} E_{\text{th}} &= \left(1 + \frac{\alpha^2}{4}\right) \frac{\mu}{M} E(M) = (1 + 1.33 \times 10^{-5}) \underbrace{(1 - 5.443 \times 10^{-4})(1 + 5.339 \times 10^{-4})}_{1 - 1.07 \times 10^{-5}} E_{\text{exp}} \\ &= (1 + 2.6 \times 10^{-6}) E_{\text{exp}} \end{aligned}$$

になり、実験値をほぼ完全に再現する。

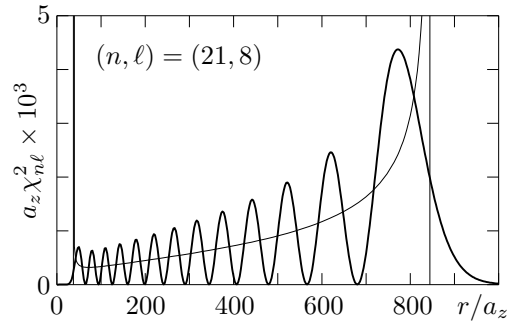
**問題 6.8** 古典力学の場合、軌道角運動量の大きさを  $L$ 、力学的エネルギーを  $E$  とすると

$$\frac{M}{2} \dot{r}^2 = E - \frac{L^2}{2Mr^2} + \frac{Z\alpha\hbar c}{r} \geq 0$$

を満たす  $r$  が運動可能領域である。 $L^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1)$  及び  $E$  が (6.30) のとき、(2.46), (4.30) と同様して、古典力学的確率密度  $P_{\text{cl}}(r)$  が

$$\begin{aligned} P_{\text{cl}}(r) &= \frac{1}{\pi a_z n^2} \frac{r}{\sqrt{(r_+ - r)(r - r_-)}} \\ r_{\pm} &= a_z \left( n^2 \pm n \sqrt{n^2 - \ell(\ell + 1)} \right) \end{aligned}$$

になることを示せ。 $n_r$  が大きいと  $\chi_{n\ell}^2$  は激しく振動し、平均的には細い曲線の  $P_{\text{cl}}$  に近づく。



## 6.6 放物線座標

$V(r) = -Z\alpha\hbar c/r$  のシュレーディンガー方程式 (6.4) を (16.49) で定義した放物線座標  $u, v, \phi$

$$u = r + z \geq 0, \quad v = r - z \geq 0, \quad \phi = \tan^{-1} \frac{y}{x} \quad (6.45)$$

を用いて解く。

$$\rho_1 = \sqrt{-\frac{2ME}{\hbar^2}} u, \quad \rho_2 = \sqrt{-\frac{2ME}{\hbar^2}} v, \quad \lambda = Z\alpha \sqrt{\frac{Mc^2}{-2E}} = (6.27)$$

とすると、(16.50) 及び  $r = (u + v)/2$  より (6.4) は

$$\left( \partial_1 \rho_1 \partial_1 + \partial_2 \rho_2 \partial_2 + \frac{\rho_1 + \rho_2}{4\rho_1 \rho_2} \partial_\phi^2 + \lambda - \frac{\rho_1 + \rho_2}{4} \right) \psi = 0, \quad \partial_k = \frac{\partial}{\partial \rho_k}$$

になる。 $H$  と  $L_z = -i\partial_\phi$  は可換であるから、 $\psi(\mathbf{r})$  として  $L_z$  の固有関数を採用し

$$\psi(\mathbf{r}) = f_1(\rho_1) f_2(\rho_2) e^{im\phi}, \quad m = \text{整数}$$

とすれば

$$\frac{1}{f_1} \left( \partial_1 \rho_1 \partial_1 - \frac{m^2}{4\rho_1} + \lambda - \frac{\rho_1}{4} \right) f_1 = -\frac{1}{f_2} \left( \partial_2 \rho_2 \partial_2 - \frac{m^2}{4\rho_2} - \frac{\rho_2}{4} \right) f_2$$

左辺は  $\rho_1$  だけの関数, 右辺は  $\rho_2$  だけの関数であるから, 上式は定数である。この定数を後での便宜上  $(1 + |m|)/2 + n_2$  とすると ( $n_2$  は整数とは限らない)

$$\left( \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{4\rho} - \frac{\rho}{4} + \frac{1 + |m|}{2} + n_k \right) f_k(\rho) = 0, \quad \text{ただし} \quad n_1 = \lambda - n_2 - |m| - 1 \quad (6.46)$$

である。

$$\rho \rightarrow 0 \text{ のとき} \quad \left( \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{4\rho} \right) f_k(\rho) = 0, \quad \therefore \quad f_k(\rho) \rightarrow \rho^{\pm m/2}$$

$$\rho \rightarrow \infty \text{ のとき} \quad \left( \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} - \frac{\rho}{4} \right) f_k(\rho) \approx \left( \rho \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\rho}{4} \right) f_k(\rho) = 0, \quad \therefore \quad f_k(\rho) \rightarrow e^{\pm \rho/2}$$

したがって  $f_k(\rho) = A(q)g_k(\rho)$ ,  $A(\rho) = \rho^{|m|/2}e^{-\rho/2}$  とすると (6.46) は

$$\rho g_k'' + \left( 1 + \frac{2\rho A'}{A} \right) g_k' + \left( \frac{(\rho A')'}{A} - \frac{m^2}{4\rho} - \frac{\rho}{4} + \frac{1 + |m|}{2} + n_k \right) g_k = 0$$

になる。

$$\rho A' = \frac{|m| - \rho}{2} A, \quad (\rho A')' = \left( \frac{m^2}{4\rho} + \frac{\rho}{4} - \frac{1 + |m|}{2} \right) A$$

であるから

$$\left( \rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (|m| + 1 - \rho) \frac{d}{d\rho} + n_k \right) g_k(\rho) = 0$$

これは (17.102) で  $a = -n_k$ ,  $b = |m| + 1$  としたものであるから, 原点で有限な解は

$$g_k(\rho) = C_k M(-n_k, |m| + 1, \rho), \quad \therefore \quad f_k(\rho) = C_k \rho^{|m|/2} e^{-\rho/2} M(-n_k, |m| + 1, \rho) \quad (6.47)$$

(17.111) より  $f_k(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} 0$  になるためには  $n_k = 0, 1, 2, \dots$  である。 $\lambda$  は整数になるから  $n$  と置き換えると (6.30)

$$E_n = -\frac{(Z\alpha)^2 M c^2}{2n^2}, \quad n = 1 + |m| + n_1 + n_2 \quad (6.48)$$

を得る。ただし, 主量子数  $n$  は3つの非負の整数の和になる。 $n$  と  $m$  を与えると,  $(n_1, n_2)$  は  $(0, n - |m| - 1)$  から  $(n - |m| - 1, 0)$  までの  $n - |m|$  個の値をとる。したがって,  $E_n$  の縮退度は

$$\sum_{|m| \leq n-1} (n - |m|) = n(2n - 1) - (n - 1)n = n^2 \quad (6.49)$$

になり, 極座標の結果 (6.32) に一致する。

### 波動関数

波動関数は  $N$  を規格化定数として

$$\psi_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r}) = N F_{n_1 m}(au) F_{n_2 m}(av) \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad a = \sqrt{-\frac{2ME_n}{\hbar^2}} = \frac{Z\alpha M c}{\hbar} \frac{1}{n} = \frac{1}{a_z n}$$

ただし

$$F_{nm}(\rho) = N_{n,m} \rho^{|m|/2} e^{-\rho/2} M(-n, |m| + 1, \rho), \quad N_{n,m} = \frac{1}{|m|!} \sqrt{\frac{(n + |m|)!}{n!}} \quad (6.50)$$

である。 $a_z$  は (6.34) で定義した量である。(17.116) で  $b = |m| + 1$ ,  $\nu = 0, 1$  とすると

$$\int_0^\infty dx F_{nm}^2(x) = 1, \quad \int_0^\infty dx x F_{nm}^2(x) = 2n + |m| + 1$$

を得る。

$$\frac{\partial(x, y, z)}{\partial(u, v, \phi)} = \frac{u+v}{4}, \quad \therefore \int d^3r \cdots = \int_0^\infty du dv \frac{u+v}{4} \int_0^{2\pi} d\phi \cdots$$

であるから

$$\begin{aligned} \int d^3r |\psi_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r})|^2 &= \frac{|N|^2}{a^3} \int_0^\infty dx dy \frac{x+y}{4} F_{n_1 m}^2(x) F_{n_2 m}^2(y) \\ &= \frac{|N|^2}{4a^3} (2n_1 + 2n_2 + 2|m| + 2) = \frac{|N|^2}{2a^3} n = 1 \end{aligned}$$

したがって、規格化した波動関数は

$$\psi_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r}) = N F_{n_1 m}(au) F_{n_2 m}(av) \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad N = \sqrt{\frac{2a^3}{n}}, \quad a = \frac{1}{a_z n} \quad (6.51)$$

になる。

(6.46) より

$$F_{n'm}(x) \left( \frac{d}{dx} x \frac{d}{dx} - \frac{m^2}{4x} - \frac{x}{4} + \frac{1+|m|}{2} + n \right) F_{nm}(x) = 0$$

である。これと  $n, n'$  を入れ替えた式との差をとると

$$\int_0^\infty dx \left( F_{n'm} \frac{d}{dx} \left( x \frac{dF_{nm}}{dx} \right) - F_{nm} \frac{d}{dx} \left( x \frac{dF_{n'm}}{dx} \right) \right) + (n - n') \int_0^\infty dx F_{nm} F_{n'm} = 0$$

左辺第1項は

$$\int_0^\infty dx \frac{d}{dx} \left( F_{n'm} x \frac{dF_{nm}}{dx} - F_{nm} x \frac{dF_{n'm}}{dx} \right) = \left[ F_{n'm} x \frac{dF_{nm}}{dx} - F_{nm} x \frac{dF_{n'm}}{dx} \right]_0^\infty = 0$$

になるから

$$\int_0^\infty dx F_{nm}(x) F_{n'm}(x) = \delta_{nn'} \quad (6.52)$$

である。一般にエルミート演算子の異なる固有値の固有関数は直交するから

$$\langle n_1 n_2 m | n'_1 n'_2 m' \rangle = \delta_{mm'} \delta_{n_1+n_2, n'_1+n'_2} \langle n_1 n_2 m | n'_1 n'_2 m \rangle$$

(6.52) より

$$\begin{aligned} \langle n_1 n_2 m | n'_1 n'_2 m \rangle &= \frac{2}{n} \int_0^\infty dx dy \frac{x+y}{4} F_{n_1 m}(x) F_{n'_1 m}(x) F_{n_2 m}(y) F_{n'_2 m}(y) \\ &= \frac{\delta_{n_2 n'_2}}{2n} \int_0^\infty dx x F_{n_1 m}(x) F_{n'_1 m}(x) + \frac{\delta_{n_1 n'_1}}{2n} \int_0^\infty dx x F_{n_2 m}(x) F_{n'_2 m}(x) \end{aligned}$$

$n_1 + n_2 = n'_1 + n'_2 = n - |m| - 1$  のとき

$$\langle n_1 n_2 m | n'_1 n'_2 m \rangle = \frac{\delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2}}{2n} \left( \int_0^\infty dx x F_{n_1 m}^2(x) + \int_0^\infty dx x F_{n_2 m}^2(x) \right) = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2}$$

したがって  $\langle n_1 n_2 m | n'_1 n'_2 m' \rangle = \delta_{mm'} \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2}$  になり  $\psi_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r})$  は規格直交系である。

**極座標と放物線座標の波動関数の関係**

$n, m$  を与えると  $n - |m|$  個の状態  $\psi_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r})$  が存在するが、これらの線形結合

$$\varphi_{nm}(\mathbf{r}) = \sum_{n_1, n_2} C_{n_1 n_2} \psi_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r}), \quad \text{ただし} \quad n_1 + n_2 = n - 1 - |m|$$

もエネルギー  $E_n$  で  $L_z$  の固有値は  $m$  である。係数  $C_{n_1 n_2}$  を適当にとれば  $\varphi_{nm}(\mathbf{r})$  を  $L^2$  の固有関数にでき、極座標での固有関数  $\psi_{n\ell m}(\mathbf{r})$  を  $\psi_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r})$  で表せる。 $n - |m|$  個の状態  $\psi_{n_1 n_2 m}$  の線形結合で作れる独立な状態は  $n - |m|$  個である。したがって、 $n, m$  を与えたとき  $\psi_{n\ell m}$  は  $n - |m|$  個存在する。実際、 $n, m$  を与えると、可能な  $\ell$  は  $n_r = n - \ell - 1 \geq 0, \ell \geq |m|$  より  $n - |m|$  通りである。逆に、 $\psi_{n_1 n_2 m}$  を  $\psi_{n\ell m}$  で表すこともできる。

$\psi_{n_1 n_2 m}$  と  $\psi_{n\ell m}$  を区別するため、 $\psi_{n\ell m}$  を  $\varphi_{n\ell m}$  で表す。 $F_{nm}$  の定義式 (6.50) と (17.110) から

$$F_{00}(x) = e^{-x/2}, \quad F_{10}(x) = e^{-x/2}(1-x), \quad F_{0,\pm 1}(x) = e^{-x/2}\sqrt{x}$$

である。基底状態  $n = 1$  は  $n_1 = n_2 = m = 0$  だけで縮退はない ( $a = 1/a_z$ )。

$$\psi_{000}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{a^3}{\pi}} F_{00}(au) F_{00}(av) = \frac{2a_z^{-3/2}}{\sqrt{4\pi}} e^{-r/a_z} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi_{10}(r)}{r} = \varphi_{100}$$

ただし、(6.37) 及び  $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$  を用いた。 $n = 2$  の場合 ( $a = 1/(2a_z)$ )、 $(n_1, n_2, m)$  の組み合わせは  $(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, \pm 1)$  であり 4 重に縮退する。(6.39), (6.38) より

$$\psi_{100} = \sqrt{\frac{a^3}{2\pi}} F_{10}(au) F_{00}(av) = \frac{\varphi_{200} - \varphi_{210}}{\sqrt{2}}, \quad \psi_{010} = \frac{\varphi_{200} + \varphi_{210}}{\sqrt{2}}, \quad \psi_{00,\pm 1} = \mp \varphi_{21,\pm 1} \quad (6.53)$$

である。

## 6.7 ルンゲ・レンツ ベクトル

中心力ポテンシャルの場合、エネルギー固有値は  $L_z$  の固有値  $m$  に依存しないため、軌道角運動量の大きさが  $\ell$  の状態は  $2\ell + 1$  重に縮退する。クーロンポテンシャルの場合は、更に、異なる  $\ell$  の状態も縮退する。これはクーロンポテンシャル及び 3 次元等方調和振動子 (166 ページ参照) に特有の現象である。この縮退は  $L$  以外に  $H$  と可換な演算子  $G$  が存在することを示唆する。 $H, L^2, L_z$  の同時固有関数を  $|\alpha, \ell, m\rangle$  とする。 $\alpha$  は状態を指定するのに必要な量子数の組を表す。 $HG = GH$  であるから

$$HG|\alpha, \ell, m\rangle = GH|\alpha, \ell, m\rangle = E_{\alpha\ell} G|\alpha, \ell, m\rangle$$

になり  $G|\alpha, \ell, m\rangle$  も  $H$  の固有関数で固有値は  $E_{\alpha\ell}$  である。更に、 $\lambda$  を整数として

$$[L_3, G] = \lambda G, \quad [L_+, G] = 0 \quad (6.54)$$

を満たすとする。(1.11), (5.9) より

$$\begin{aligned} [L^2, G] &= [L_- L_+ + L_3^2 + L_3, G] = [L_-, G]L_+ + L_3[L_3, G] + [L_3, G]L_3 + [L_3, G] \\ &= [L_-, G]L_+ + 2\lambda GL_3 + \lambda(\lambda + 1)G \end{aligned}$$

である。 $L_+|\alpha, \ell, \ell\rangle = 0$  であるから

$$L^2 G|\alpha, \ell, \ell\rangle = (\ell + \lambda)(\ell + \lambda + 1) G|\alpha, \ell, \ell\rangle, \quad L_3 G|\alpha, \ell, \ell\rangle = (\ell + \lambda) G|\alpha, \ell, \ell\rangle \quad (6.55)$$

になる。 $G|\alpha, \ell, \ell\rangle$  は  $H, L^2, L_3$  の同時固有関数で角運動量の大きさは  $\ell + \lambda$  である。一般に  $k = 1, 2, \dots$  として  $G^k|\alpha, \ell, \ell\rangle \neq 0$  ならば、 $G^k|\alpha, \ell, \ell\rangle$  も  $H, L^2, L_z$  の同時固有関数になるから、角運動量の大きさが  $\ell, \ell + \lambda, \ell + 2\lambda, \dots$  の状態は縮退する。

## 古典力学

古典力学では  $\mathbf{r}$  と  $\mathbf{p}$  は時刻  $t$  での粒子の位置と運動量を表す  $t$  の関数である。  $V_0$  を定数として  $V(r) = V_0/r$  の場合、力学的エネルギー、軌道角運動量  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  だけでなく

$$\mathbf{R} = \frac{1}{M} \mathbf{p} \times \mathbf{L} + \frac{V_0}{r} \mathbf{r} \quad (6.56)$$

も保存する。  $\mathbf{R}$  をルンゲ・ベクトルという。  $\dot{\mathbf{L}} = 0$ 、運動方程式  $\dot{\mathbf{p}} = -V'(r)\mathbf{r}/r$  より

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{R}} &= \frac{1}{M} \dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L} + V_0 \left( \frac{\dot{r}}{r} - \frac{\dot{r}}{r^2} \mathbf{r} \right) = \frac{V_0}{Mr^3} \mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) + V_0 \left( \frac{1}{Mr} \mathbf{p} - \frac{\dot{r}}{r^2} \mathbf{r} \right) \\ &= \frac{V_0}{Mr^3} (Mr\dot{r}\mathbf{r} - \mathbf{p}r^2) + V_0 \left( \frac{1}{Mr} \mathbf{p} - \frac{\dot{r}}{r^2} \mathbf{r} \right) = 0 \end{aligned}$$

である。なお、定ベクトル  $\mathbf{R}$  と  $\mathbf{r}$  のなす角を  $\theta = \theta(t)$  とすると

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{R} = rR \cos \theta = \frac{1}{M} \mathbf{r} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) + V_0 r = \frac{\mathbf{L}^2}{M} + V_0 r, \quad \therefore r = -\frac{\mathbf{L}^2}{MV_0} \frac{1}{1 + \varepsilon \cos \theta}, \quad \varepsilon = -\frac{R}{V_0}$$

になる。  $(\mathbf{p} \times \mathbf{L})^2 = \mathbf{p}^2 \mathbf{L}^2$ ,  $\mathbf{r} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) = \mathbf{L}^2$  より

$$\mathbf{R}^2 = \frac{1}{M^2} (\mathbf{p} \times \mathbf{L})^2 + \frac{2V_0}{Mr} \mathbf{r} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) + V_0^2 = \frac{2\mathbf{L}^2}{M} E + V_0^2, \quad E = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + \frac{V_0}{r} \quad (6.57)$$

である。  $E$  は力学的エネルギーで保存する。引力 ( $V_0 < 0$ ) で束縛運動 ( $E < 0$ ) の場合  $0 \leq \varepsilon < 1$  になり、軌道は  $\varepsilon$  を離心率とする楕円軌道である。  $\mathbf{r}$  が  $\mathbf{R}$  の方向 ( $\theta = 0$ ) のとき  $r$  は最小になるから、  $\mathbf{R}$  は原点 (楕円の焦点) から近日点に向かうベクトルである。

## 量子力学

(6.56) に対応する量子力学の演算子は  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  で置き換えればよいが、  $\mathbf{p}$  と  $\mathbf{L}$  は非可換であるから  $\mathbf{R}$  はエルミート演算子ではない。そこで

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2M} (\mathbf{p} \times \mathbf{L} + (\mathbf{p} \times \mathbf{L})^\dagger) + \frac{V_0}{\hbar r} \mathbf{r}, \quad \mathbf{L} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{r} \times \mathbf{p} = -i\mathbf{r} \times \nabla$$

とする。以前の  $\mathbf{L}$  の定義に合わせて  $\hbar$  で割った。演算子  $\mathbf{R}$  をルンゲ・レンツ ベクトルという。一般に、  $\mathbf{A}$  がエルミート演算子のとき (以下では、2度現れる添字については1から3まで和をとる)

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{L})_i^\dagger = \varepsilon_{ijk} (A_j L_k)^\dagger = \varepsilon_{ijk} L_k A_j = -\varepsilon_{ikj} L_k A_j = -(\mathbf{L} \times \mathbf{A})_i$$

また、ベクトル演算子と角運動量の交換関係 (5.134) 及び (16.2) より

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{L} + \mathbf{L} \times \mathbf{A})_i = \varepsilon_{ijk} (A_j L_k - L_k A_j) = i\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{jkm} A_m = i(\delta_{im} \delta_{jj} - \delta_{ij} \delta_{jm}) A_m = 2iA_i \quad (6.58)$$

であるから

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2M} (\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) + \frac{V_0}{\hbar r} \mathbf{r} = \frac{1}{M} (\mathbf{p} \times \mathbf{L} - i\mathbf{p}) + \frac{V_0}{\hbar r} \mathbf{r} \quad (6.59)$$

とも表せる。

演算子の場合でも  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{r} = 0$  である。(6.58) で  $\mathbf{A} = \mathbf{p}$  とし  $\mathbf{L}$  との内積をとれば

$$\mathbf{L} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) = -\mathbf{L} \cdot (\mathbf{L} \times \mathbf{p}) = -(\mathbf{L} \times \mathbf{L}) \cdot \mathbf{p} = -i\mathbf{L} \cdot \mathbf{p} = 0$$

ただし、(5.6) より  $\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\mathbf{L}$  である。したがって、量子力学でも  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{R} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{L} = 0$  が成り立つ。  $\mathbf{L}$  と  $H$  は可換であるから

$$[(\mathbf{p} \times \mathbf{L})_i, H] = \varepsilon_{ijk} [p_j, H] L_k = \varepsilon_{ijk} i\hbar V_0 \frac{x_i}{r^3} L_k = \frac{i\hbar V_0}{r^3} (\mathbf{r} \times \mathbf{L})_i$$

これとエルミート共役より

$$[\mathbf{R}, H] = \frac{i\hbar V_0}{2Mr^3} (\mathbf{r} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{r}) + \frac{V_0}{\hbar} \left[ \frac{\mathbf{r}}{r}, H \right] \quad (6.60)$$

$\mathbf{r}/r$  は角度だけに依存するから (6.6) の  $H$  で非可換な項は  $\mathbf{L}^2$  の部分だけであり

$$\left[ \frac{x_i}{r}, H \right] = \frac{\hbar^2}{2Mr^3} [x_i, \mathbf{L}^2] = \frac{\hbar^2}{2Mr^3} [x_i, L_j L_j] = \frac{\hbar^2}{2Mr^3} (L_j [x_i, L_j] + [x_i, L_j] L_j)$$

(5.134), あるいは, 直接, 確かめられるが  $[x_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk} x_k$  より

$$\left[ \frac{x_i}{r}, H \right] = \frac{i\hbar^2}{2Mr^3} \varepsilon_{ijk} (L_j x_k + x_k L_j) = \frac{i\hbar^2}{2Mr^3} (\mathbf{L} \times \mathbf{r} - \mathbf{r} \times \mathbf{L})_i$$

これを (6.60) に代入すれば  $[\mathbf{R}, H] = 0$  になり  $\mathbf{R}$  と  $H$  は可換である。

$[L_i, R_j] = i\varepsilon_{ijk} R_k$  より

$$[L_3, R_+] = R_+, \quad [L_+, R_+] = 0, \quad \text{ただし} \quad R_+ = R_1 + iR_2$$

になる。(6.54) で  $\lambda = 1, G = R_+$  とすれば上式になるから,  $R_+|n, \ell, \ell\rangle$  は  $\mathbf{L}^2, L_3$  の同時固有関数で, 固有値はそれぞれ  $(\ell+1)(\ell+2), \ell+1$  になる。 $H$  と  $R_+$  は可換であるから,  $R_+|n, \ell, \ell\rangle$  は  $H$  の固有関数で固有値は  $|n, \ell, \ell\rangle$  と同じになり,  $\ell$  と  $\ell+1$  の状態は縮退する。 $R_+$  を繰り返し作用すれば,  $\ell = 0$  から  $\ell = 1, 2, \dots$  の状態を作ることができ, これらは全て縮退する。ただし, 任意の  $\ell$  の状態が存在するわけではない。

$\mathbf{R}$  の成分間の交換関係を求める。簡単のため  $\mathbf{N} = \mathbf{p} \times \mathbf{L}$  とする。

$$\begin{aligned} [N_i, N_j] &= \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} (p_k p_m [L_\ell, L_n] + p_k [L_\ell, p_m] L_n + p_m [p_k, L_n] L_\ell) \\ &= i\varepsilon_{ikl} (\varepsilon_{jmn} \varepsilon_{qln} p_k p_m L_q + \varepsilon_{jnm} \varepsilon_{lqm} p_k p_q L_n + \varepsilon_{jmn} \varepsilon_{qkn} p_m p_q L_\ell) \\ &= -i\mathbf{p}^2 \varepsilon_{ijk} L_k \end{aligned}$$

$$[N_i, p_j] = i\delta_{ij} \mathbf{p}^2 - ip_i p_j, \quad \left[ N_i, \frac{x_j}{r} \right] = iF_{ij} - \frac{i\hbar}{r} \varepsilon_{ijk} L_k$$

ただし

$$F_{ij} = \delta_{ij} \mathbf{p} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} - p_j \frac{x_i}{r} + \hbar \frac{x_j}{r^3} (\mathbf{r} \times \mathbf{L})_i = \delta_{ij} \mathbf{p} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} - p_j \frac{x_i}{r} - \frac{x_j}{r} p_i + \frac{x_i x_j}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \mathbf{p}$$

である。 $F_{ij} - F_{ji} = [p_i, x_j/r] - [p_j, x_i/r] = 0$  より  $F_{ij}$  は  $i, j$  について対称になるから

$$\left[ N_i, \frac{x_j}{r} \right] - \left[ N_j, \frac{x_i}{r} \right] = -\frac{2i\hbar}{r} \varepsilon_{ijk} L_k$$

である。 $[N_i, p_j]$  も対称であるから  $\mathbf{R} = (\mathbf{N} - i\mathbf{p})/M + V_0 \mathbf{r}/\hbar r$  の交換関係は

$$[R_i, R_j] = \frac{1}{M^2} [N_i, N_j] + \frac{V_0}{\hbar M} \left( \left[ N_i, \frac{x_j}{r} \right] - \left[ N_j, \frac{x_i}{r} \right] \right) = -\frac{2i}{M} H \varepsilon_{ijk} L_k \quad (6.61)$$

になる。

$$\mathbf{N}^2 = \mathbf{p}^2 \mathbf{L}^2, \quad \mathbf{p} \cdot \mathbf{N} = 0, \quad \mathbf{N} \cdot \mathbf{p} = 2i\mathbf{p}^2, \quad \therefore (\mathbf{N} - i\mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2 (\mathbf{L}^2 + 1)$$

$$\frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \mathbf{N} = \frac{\hbar}{r} \mathbf{L}^2, \quad \mathbf{N} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{\hbar}{r} \mathbf{L}^2 + 2i\mathbf{p} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad \therefore \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot (\mathbf{N} - i\mathbf{p}) + (\mathbf{N} - i\mathbf{p}) \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{2\hbar}{r} (\mathbf{L}^2 + 1)$$

であるから、古典力学の (6.57) に対応する関係式は

$$\mathbf{R}^2 = \left( \frac{\mathbf{p}^2}{M^2} + \frac{2V_0}{Mr} \right) (\mathbf{L}^2 + 1) + \frac{V_0^2}{\hbar^2} = \frac{2}{M} H (\mathbf{L}^2 + 1) + \frac{V_0^2}{\hbar^2} \quad (6.62)$$

になる。

$|\psi\rangle = R_+ |n, \ell, \ell\rangle$  とすると, (6.61), (6.62) より

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \langle n, \ell, \ell | R_- R_+ | n, \ell, \ell \rangle = \langle n, \ell, \ell | \left( \mathbf{R}^2 - R_3^2 + i[R_1, R_2] \right) | n, \ell, \ell \rangle \\ &= \langle n, \ell, \ell | \left( \frac{2}{M} H (\mathbf{L}^2 + 1 + L_3) + \frac{V_0^2}{\hbar^2} - R_3^2 \right) | n, \ell, \ell \rangle \\ &= \frac{2}{M} E_n (\ell + 1)^2 + \frac{V_0^2}{\hbar^2} - \langle n, \ell, \ell | R_3^2 | n, \ell, \ell \rangle \end{aligned}$$

(6.30) の  $E_n$  を  $V_0 = -Z\alpha\hbar c$  で表わせば  $E_n = -MV_0^2/(2\hbar^2 n^2)$  になるから

$$\langle \psi | \psi \rangle + \langle n, \ell, \ell | R_3^2 | n, \ell, \ell \rangle = \frac{V_0^2}{\hbar^2} \left( 1 - \frac{(\ell + 1)^2}{n^2} \right)$$

左辺の 2 項は非負であるから  $\ell = n - 1$  のとき  $|\psi\rangle = R_+ |n, \ell, \ell\rangle = 0$  になり,  $\ell \geq n$  の状態は存在しない。与えられた  $n$  に対して縮退する状態は  $\ell = 0, 1, \dots, n - 1$  であり (6.31) を再現する。

**問題 6.9**  $\mathbf{R} \cdot \mathbf{L} = 0$  である。 $\langle n, \ell, \ell | R_3^2 | n, \ell, \ell \rangle = \langle \psi | \psi \rangle / (2\ell + 2)$  を示せ。

$H$  の固有値が負である束縛状態の場合

$$\mathbf{I} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{L} + \sqrt{-\frac{M}{2H}} \mathbf{R} \right), \quad \mathbf{K} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{L} - \sqrt{-\frac{M}{2H}} \mathbf{R} \right)$$

はエルミート演算子である。 $[R_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk} R_k$  と (6.61) より交換関係

$$[I_i, I_j] = i\varepsilon_{ijk} I_k, \quad [K_i, K_j] = i\varepsilon_{ijk} K_k, \quad [I_i, K_j] = 0$$

を満たすから,  $\mathbf{I}$  と  $\mathbf{K}$  は独立な角運動量と見なせる。 $H, \mathbf{I}^2, I_3, \mathbf{K}^2, K_3$  は互いに可換であり, これらの同時固有状態が存在する。ところで  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{R} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{L} = 0$  であるから

$$4\mathbf{I}^2 = 4\mathbf{K}^2 = \mathbf{L}^2 - \frac{M}{2H} \mathbf{R}^2 = -1 - \frac{MV_0^2}{2\hbar^2} \frac{1}{H}, \quad H = -\frac{MV_0^2}{2\hbar^2} \frac{1}{4\mathbf{I}^2 + 1} \quad (6.63)$$

になり  $\mathbf{I}^2$  と  $\mathbf{K}^2$  の固有値は等しい。したがって, 同時固有状態  $|\kappa, m_i, m_k\rangle$  は

$$\mathbf{I}^2 |\kappa, m_i, m_k\rangle = \kappa(\kappa + 1) |\kappa, m_i, m_k\rangle, \quad \mathbf{K}^2 |\kappa, m_i, m_k\rangle = \kappa(\kappa + 1) |\kappa, m_i, m_k\rangle$$

$$I_3 |\kappa, m_i, m_k\rangle = m_i |\kappa, m_i, m_k\rangle, \quad K_3 |\kappa, m_i, m_k\rangle = m_k |\kappa, m_i, m_k\rangle$$

を満たす。ただし,  $\kappa$  は整数あるいは半整数  $\kappa = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$  であり,  $m_i$  と  $m_k$  は独立でそれぞれ  $\kappa, \kappa - 1, \dots, -\kappa$  の  $2\kappa + 1$  個の異なる値をとる。(6.63) より

$$H |\kappa, m_i, m_k\rangle = E_\kappa |\kappa, m_i, m_k\rangle, \quad E_\kappa = -\frac{MV_0^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n \equiv 2\kappa + 1 = 1, 2, 3, \dots$$

これは (6.30) である。 $E_\kappa$  は  $m_i, m_k$  に依存しないから  $(2\kappa + 1)^2 = n^2$  重に縮退し (6.32) を再現する。 $\mathbf{L} = \mathbf{I} + \mathbf{K}$  であるから, (5.104) で  $j_1 = j_2 = \kappa$  とすれば  $\ell = 0, 1, \dots, 2\kappa = n - 1$  になる。

### 6.8 3次元等方調和振動子

ポテンシャルが  $V(r) = M\omega^2 r^2/2$  の場合, (6.8) は

$$\left( \frac{d^2}{dq^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{q^2} - q^2 + \frac{2E}{\hbar\omega} \right) \chi_\ell(q) = 0, \quad \text{ただし } q = ar, \quad a = \sqrt{M\omega/\hbar}$$

になる。1次元 (79 ページ) と同様に  $\chi_\ell \xrightarrow{q \rightarrow \infty} e^{-q^2/2}$  より,  $\chi_\ell(q) = f(q)v_\ell(q)$ ,  $f(q) = q^{\ell+1}e^{-q^2/2}$  とおくと

$$\frac{d^2 v_\ell}{dq^2} + \frac{2}{f} \frac{df}{dq} \frac{dv_\ell}{dq} + \left( \frac{1}{f} \frac{d^2 f}{dq^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{q^2} - q^2 + \frac{2E}{\hbar\omega} \right) v_\ell = 0$$

である。

$$\frac{df}{dq} = \left( \frac{\ell+1}{q} - q \right) f, \quad \frac{d^2 f}{dq^2} = \left( \frac{\ell+1}{q} - q \right) \frac{df}{dq} - \left( \frac{\ell+1}{q^2} + 1 \right) f = \left( \frac{\ell(\ell+1)}{q^2} + q^2 - 2\ell - 3 \right) f$$

より

$$\frac{d^2 v_\ell}{dq^2} + 2 \left( \frac{\ell+1}{q} - q \right) \frac{dv_\ell}{dq} - \left( 2\ell + 3 - \frac{2E}{\hbar\omega} \right) v_\ell = 0 \quad (6.64)$$

ここで  $\rho = q^2$  とすると

$$\frac{d}{dq} = \frac{d\rho}{dq} \frac{d}{d\rho} = 2\sqrt{\rho} \frac{d}{d\rho}, \quad \frac{d^2}{dq^2} = 4\sqrt{\rho} \frac{d}{d\rho} \sqrt{\rho} \frac{d}{d\rho} = 4 \left( \rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{d\rho} \right)$$

であるから

$$\rho \frac{d^2 v_\ell}{d\rho^2} + \left( \ell + \frac{3}{2} - \rho \right) \frac{dv_\ell}{d\rho} - \alpha v_\ell = 0, \quad \alpha \equiv \frac{1}{2} \left( \ell + \frac{3}{2} - \frac{E}{\hbar\omega} \right) \quad (6.65)$$

これは (17.102) で  $a = \alpha$ ,  $b = \ell + 3/2$  とすればよい。(17.107) より  $\chi_\ell(0) = 0$  を満たす解は

$$\chi_\ell(q) = C q^{\ell+1} e^{-q^2/2} M(\alpha, \ell + 3/2, q^2) \quad (6.66)$$

になる。(17.111) より  $\alpha = -n$ , ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ) の

とき  $\chi_\ell(q) \xrightarrow{q \rightarrow \infty} 0$  になるから, エネルギー固有値は

$$E_{n\ell} = \hbar\omega \left( N + \frac{3}{2} \right), \quad N = 2n + \ell \quad (6.67)$$

である。 $N = 2n + \ell$  が同じ  $(n, \ell)$  のエネルギー固有値は同じになり, クーロンポテンシャルと同様に, 異なる  $\ell$  の状態が縮退する。右図に  $E_{n\ell}/\hbar\omega$  を示す。

縮退度を求める。 $N$  を与えたとき, 許される  $\ell$  は

$$\ell = N - 2n, \quad n = 0, 1, \dots, [N/2] \quad (6.68)$$

である。 $n, \ell$  を固定したとき固有関数 (6.70) は  $2\ell + 1$  個あるから,  $\hbar\omega(N + 3/2)$  の縮退度  $D_N$  は

$$D_N = \sum_{n=0}^{[N/2]} \left( 2(N - 2n) + 1 \right) = \frac{(N+1)(N+2)}{2} \quad (6.69)$$

である。縮退する状態のパリティ  $(-1)^\ell = (-1)^N$  は同じである。一方, クーロンポテンシャルの場合, パリティの異なる状態が縮退する。

波動関数は

$$\psi_{n\ell m}(\mathbf{r}) = \frac{\chi_{n\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad \chi_{n\ell}(r) = A_{n\ell} q^{\ell+1} e^{-q^2/2} M(-n, \ell + 3/2, q^2) \quad (6.70)$$

になる。ただし  $q = ar = \sqrt{M\omega/\hbar} r$  である。規格化条件は  $\rho = q^2$  とすると



$$\frac{A_{n\ell}^2}{2a} \int_0^\infty d\rho \rho^{\ell+1/2} e^{-\rho} \left( M(-n, \ell+3/2, \rho) \right)^2 = 1$$

(17.116) で  $b = \ell + 3/2$ ,  $\nu = 0$  とすれば

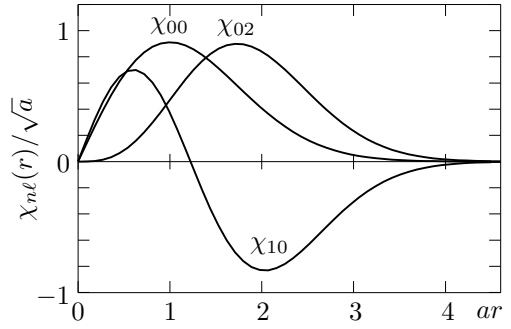
$$A_{n\ell} = \sqrt{2a \frac{\Gamma(\ell+n+3/2)}{n! \Gamma^2(\ell+3/2)}} \quad (6.71)$$

になる。 $n$  は  $\chi_{n\ell}(r)$  の節 (ノード) の個数である。クーロンポテンシャルでは  $n_r$  で表した量であり, 主量子数  $n$  ではない。 $N = 0, 2$  の場合  $\chi_{n\ell}(r)$  を右図に示す。

具体形は

$$\chi_{00} = \sqrt{\frac{4a}{\pi^{1/2}}} q e^{-q^2/2}, \quad \chi_{10} = \sqrt{\frac{6a}{\pi^{1/2}}} q \left( 1 - \frac{2}{3} q^2 \right) e^{-q^2/2}, \quad \chi_{02} = \sqrt{\frac{16a}{15\pi^{1/2}}} q^3 e^{-q^2/2}$$

である。 $e^{-q^2/2} = e^{-a^2 r^2/2}$  は状態に依存しないから, クーロンポテンシャルと比べて, 励起状態の波動関数は外側に広がらない。



**問題 6.10** (6.64) において  $v_\ell(q) = \sum_{k=0}^\infty a_k q^k$  とする。 $a_k$  の漸化式を求め,  $k$  が奇数のとき  $a_k = 0$  を示せ。 $\chi_\ell(q) \xrightarrow{q \rightarrow \infty} 0$  であるためには  $v_\ell(q)$  は多項式でなければならない。(6.67) を求めよ。

**問題 6.11**  $\ell = 0$  のとき, 動径方向のシュレーディンガー方程式の解は, 1次元で境界条件  $\chi(0) = 0$  を満たす解である。調和振動子の場合, 1次元の固有関数  $\varphi_n(r)$  が奇関数になる解である。実際,  $\ell = 0$  のとき, 固有値 (6.67) は1次元の固有値  $\hbar\omega(n+1/2)$  で  $n$  を  $2n+1$  に置き換えたものである。(6.70) の  $\chi_{n0}$  が  $\chi_{n0}(r) = (-1)^n \sqrt{2} \varphi_{2n+1}(r)$  になることを示せ (問題 4.2 参照)。 $\chi_{n\ell}(r)$  は  $0 \leq r \leq \infty$  で,  $\varphi_n(r)$  は  $-\infty \leq r \leq \infty$  で規格化したため  $\sqrt{2}$  の違いがある。

**問題 6.12**  $\psi_{n\ell m}$  における  $r^2$  の期待値  $\langle r^2 \rangle$  は

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^\infty dr r^2 \chi_{n\ell}^2 = \frac{A_{n\ell}^2}{a^3} \int_0^\infty dq q^{2\ell+4} e^{-q^2} \left( M(-n, \ell+3/2, q^2) \right)^2$$

である。(17.116) を用いて  $\langle r^2 \rangle$  を求め  $\langle V(r) \rangle = E_{n\ell}/2$  を示せ。1次元調和振動子の場合と同様に, これはビリアル定理 (1.55) である。(6.21) で  $\kappa = 2$  とすれば上式は直ちに求まる。

**問題 6.13** 問題 6.8 と同様して, 古典力学的確率密度  $P_{cl}(r)$  が

$$P_{cl}(r) = \frac{2}{\pi} \frac{r}{\sqrt{(r_+^2 - r^2)(r^2 - r_-^2)}}, \quad (ar_\pm)^2 = N + \frac{3}{2} \pm \sqrt{(N + 3/2)^2 - \ell(\ell+1)} \quad (6.72)$$

になることを示せ。

### デカルト座標での解

3次元等方調和振動子のハミルトニアンは, 3つの独立な1次元調和振動子 ( $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$ )

$$H = H_1 + H_2 + H_3, \quad H_k = \frac{p_k^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 x_k^2 \quad (6.73)$$

に分解できるから, 固有関数  $\varphi$  を変数分離して  $\varphi(\mathbf{r}) = X(x)Y(y)Z(z)$  とおくと,  $H\varphi = E\varphi$ , つまり,  $\varphi^{-1}H\varphi = E$  は

$$\frac{1}{X} H_1 X + \frac{1}{Y} H_2 Y + \frac{1}{Z} H_3 Z = E$$

左辺第1項, 第2項, 第3項はそれぞれ  $x, y, z$  だけの関数であるから, これらの和が常に定数であるためには, 各々が定数でなければならない。したがって, それぞれの定数を  $E_1, E_2, E_3$  とすると

$$H_1 X = E_1 X, \quad H_2 Y = E_2 Y, \quad H_3 Z = E_3 Z, \quad E = E_1 + E_2 + E_3$$

である。これらは1次元調和振動子の固有値問題であるから,  $H$  の固有値と固有関数は

$$H \varphi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r}) = \hbar\omega \left( n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \varphi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r}), \quad \varphi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r}) = \varphi_{n_1}(x) \varphi_{n_2}(y) \varphi_{n_3}(z) \quad (6.74)$$

ここで  $n_1, n_2, n_3$  は負でない整数,  $\varphi_n(x)$  は1次元調和振動子の固有関数(4.25)である。 $H$  の固有値は和  $N = n_1 + n_2 + n_3$  だけで決まる。 $N = 0, 1, 2, \dots$  を与えたとき,  $n_1 + n_2 + n_3 = N$  を満たす固有関数  $\varphi_{n_1 n_2 n_3}$  は  $N \neq 0$  ならば複数個あり縮退する。縮退度  $D_N$  は  $N$  個の  $\circ$  と2個の  $\bullet$  を

$$\underbrace{\circ \circ \cdots \circ \circ}_{n_1} \bullet \underbrace{\circ \circ \cdots \circ \circ}_{n_2} \bullet \underbrace{\circ \circ \cdots \circ \circ}_{n_3}$$

のように1列に並べる方法の数に等しいから

$$D_N = {}_{N+2}C_2 = \frac{(N+1)(N+2)}{2} = (6.69) \quad (6.75)$$

である。 $\varphi_n(x)$  は  $n$  が偶数(奇数)のとき偶関数(奇関数)であるから  $\varphi_n(-x) = (-1)^n \varphi_n(x)$  である。したがって  $\varphi_{n_1 n_2 n_3}(-\mathbf{r}) = (-1)^{n_1+n_2+n_3} \varphi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r})$  になるから, 縮退する固有関数のパリティは同じ  $(-1)^N$  である。

#### デカルト座標と極座標での固有関数の関係

$$\varphi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r}) = C_{n_1} C_{n_2} C_{n_3} e^{-a^2 r^2/2} H_{n_1}(ax) H_{n_2}(ay) H_{n_3}(az), \quad C_n = \sqrt{\frac{a}{\pi^{1/2} n! 2^n}} \quad (6.76)$$

と(6.70)の  $\psi_{n\ell m}(\mathbf{r})$  は  $H$  の固有関数である点では同等である。違いは  $\psi_{n\ell m}(\mathbf{r})$  が  $L^2, L_z$  の固有関数,  $\varphi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r})$  は  $H_1, H_2, H_3$  の固有関数になることである。一般には,  $\psi_{n\ell m}$  は  $H_1, H_2, H_3$  の固有関数ではなく,  $\varphi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r})$  は  $L^2, L_z$  の固有関数ではない。エネルギー固有値が  $\hbar\omega(N+3/2)$  である状態は  $\psi_{n\ell m}(\mathbf{r})$  でも  $\varphi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r})$  でも  $D_N$  個存在する。これらの線形結合

$$\sum_{\substack{n_1 n_2 n_3 \\ n_1+n_2+n_3=N}} C_{n_1 n_2 n_3} \varphi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r}), \quad \text{あるいは} \quad \sum_{\substack{n \ell m \\ 2n+\ell=N}} D_{n\ell m} \psi_{n\ell m}(\mathbf{r})$$

も  $H$  の固有関数で固有値は  $\hbar\omega(N+3/2)$  である。したがって, 例えば,  $\psi_{n\ell m}(\mathbf{r})$  を  $\varphi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r})$  の線形結合で表せる。これを  $N=0, 1$  の場合に具体的に挙げる。

$N=0$  の場合,  $n_1 = n_2 = n_3 = 0, n = \ell = m = 0$  だけで縮退はないから  $\psi_{000}(\mathbf{r}) = \varphi_{000}(\mathbf{r})$  になるはずである。実際,  $M(0, b, x) = 1, Y_{00}(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi}, H_0(x) = 1$  より

$$\psi_{000}(\mathbf{r}) = A e^{-a^2 r^2/2}, \quad \varphi_{000}(\mathbf{r}) = C_0^3 e^{-a^2 r^2/2}, \quad A = \frac{a A_{00}}{\sqrt{4\pi}} = \sqrt{\frac{a^3}{\pi^{3/2}}} = C_0^3$$

である。 $N=1$  の場合は3重に縮退する。

$$(n_1, n_2, n_3) = (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1) \quad \text{または} \quad n = 0, \ell = 1, m = 0, \pm 1$$

である。(5.30)より  $\sqrt{4\pi/3} r Y_{10} = z, \sqrt{4\pi/3} r Y_{1\pm 1} = (\mp x - iy)/\sqrt{2}$  になるから(6.70)は

$$\psi_{01m} = A e^{-a^2 r^2/2} r Y_{1m} = A e^{-a^2 r^2/2} \times \begin{cases} z, & m = 0 \\ \frac{\mp x - iy}{\sqrt{2}}, & m = \pm 1 \end{cases}, \quad \text{ただし} \quad A = \sqrt{\frac{2a^5}{\pi\sqrt{\pi}}}$$

である。一方、デカルト座標では、 $H_0(x) = 1$ ,  $H_1(x) = 2x$  より

$$\varphi_{100} = C x e^{-a^2 r^2/2}, \quad \varphi_{010} = C y e^{-a^2 r^2/2}, \quad \varphi_{001} = C z e^{-a^2 r^2/2}, \quad C = 2aC_0^2 C_1 = A$$

したがって  $\psi_{010} = \varphi_{001}$ ,  $\psi_{01\pm 1} = (\mp \varphi_{100} - i\varphi_{010})/\sqrt{2}$  になる。

### 異なる $\ell$ の状態の縮退

クーロンポテンシャルの場合、軌道角運動量  $\mathbf{L}$  以外に  $H$  と可換な演算子であるルンゲ・ベクトル (6.59) が存在するため、異なる  $\ell$  の状態が縮退する。3次元等方調和振動子でも同じ現象が起こる。(6.73) の  $H$  と可換な演算子を生成・消滅演算子を用いて求める。(4.10) より

$$a_i = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left( x_i + \frac{i}{M\omega} p_i \right), \quad i = 1, 2, 3$$

とすると

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, \quad H = \hbar\omega \sum_k a_k^\dagger a_k + \frac{3}{2}\hbar\omega$$

である。(1.11) より

$$[a_k^\dagger a_k, a_i^\dagger a_j] = a_i^\dagger [a_k^\dagger, a_j] a_k + a_k^\dagger [a_k, a_i^\dagger] a_j = (\delta_{ki} - \delta_{kj}) a_i^\dagger a_j, \quad \therefore [H, a_i^\dagger a_j] = 0$$

になり、9個の演算子  $a_i^\dagger a_j$  は  $H$  と可換である。 $\mathbf{a}^\dagger$  と  $\mathbf{a}$  はベクトル演算子であるから、9個の演算子をスカラー (1個)  $\mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a}$ , ベクトル (3個)  $\mathbf{a}^\dagger \times \mathbf{a}$ , 2階テンソル演算子 (5個) に組み直せる。スカラーはハミルトニアンである。

$$\mathbf{r} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} (\mathbf{a}^\dagger + \mathbf{a}), \quad \mathbf{p} = i\sqrt{\frac{M\hbar\omega}{2}} (\mathbf{a}^\dagger - \mathbf{a}), \quad \therefore \mathbf{L} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{r} \times \mathbf{p} = -i \mathbf{a}^\dagger \times \mathbf{a}$$

であり、ベクトル積は軌道角運動量になる。以下の議論では  $a_i^\dagger$  よりも  $b_\mu^\dagger$ , ( $\mu = 0, \pm 1$ )

$$b_{\pm 1}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1^\dagger \pm i a_2^\dagger), \quad b_0^\dagger = a_3^\dagger, \quad [b_\mu, b_\nu^\dagger] = \delta_{\mu\nu}, \quad [b_\mu, b_\nu] = [b_\mu^\dagger, b_\nu^\dagger] = 0 \quad (6.77)$$

を用いた方が便利である。

$$H = \hbar\omega \left( \sum_\mu b_\mu^\dagger b_\mu + \frac{3}{2} \right), \quad L_3 = \sum_\mu \mu b_\mu^\dagger b_\mu, \quad L_\pm = \pm \sqrt{2} (b_0^\dagger b_{\mp 1} - b_{\pm 1}^\dagger b_0) \quad (6.78)$$

になる。 $[L_3, b_\mu^\dagger b_\nu] = (\mu - \nu) b_\mu^\dagger b_\nu$  であるから、 $b_\mu^\dagger b_\nu$  は  $\mu = 1, \nu = -1$  のとき  $L_3$  の固有値を最大  $+2$  変化させる。そこで、テンソル演算子の定義 (5.146) で  $T_{k=2, q=2} = Q_2 = b_1^\dagger b_{-1}$  として

$$[L_-, Q_\mu] = \sqrt{(2+\mu)(3-\mu)} Q_{\mu-1}, \quad \mu = 0, \pm 1, \pm 2 \quad (6.79)$$

により  $\mu = 2$  以外の  $Q_\mu$  を決める。 $H$  と可換な演算子として  $\mathbf{L}$  と 2階テンソル演算子  $Q_\mu$  が存在することになる。

$H, \mathbf{L}^2, L_3$  の同時固有関数 (6.70) を  $|N, \ell, m\rangle$  で表す。ただし  $N = 2n + \ell$  である。

$$[L_3, Q_2] = 2Q_2, \quad [L_+, Q_2] = 0$$

であるが、これは (6.54) で  $\lambda = 2, G = Q_2$  としたものである。(6.55) より  $Q_2|N, \ell, \ell\rangle$  も  $H, \mathbf{L}^2, L_3$  の同時固有関数で角運動量の大きさは  $\ell + 2$  になる。これを繰り返せば、パリティが同じ  $(-1)^\ell$  である  $\ell, \ell + 2, \ell + 4, \dots$  の状態が縮退する。クーロンポテンシャルの場合、 $H$  と可換な演算子は (6.59) のルンゲ・ベクトル  $\mathbf{R}$  であり、この演算子はパリティを変える。一方、 $Q_\mu$  はベクトル演算子  $\mathbf{a}^\dagger$  と  $\mathbf{a}$  の積でありパリティを変えない。

問題 6.14 (6.79) より

$$Q_{\pm 2} = b_{\pm 1}^\dagger b_{\mp 1}, \quad Q_{\pm 1} = \mp \frac{b_0^\dagger b_{\mp 1} + b_{\pm 1}^\dagger b_0}{\sqrt{2}}, \quad Q_0 = \frac{2b_0^\dagger b_0 - b_1^\dagger b_1 - b_{-1}^\dagger b_{-1}}{\sqrt{6}}$$

を示せ。\$T\_{\lambda=2,\mu} = Q\_\mu\$ は (5.146) を満たす。

\$b\_\mu^\dagger b\_\mu\$ の固有関数 \$|n\_\mu\rangle\$ の直積を \$|n\_1, n\_0, n\_{-1}\rangle = |n\_1\rangle |n\_0\rangle |n\_{-1}\rangle\$ とする。(6.78) より \$|n\_1, n\_0, n\_{-1}\rangle\$ は \$H\$ と \$L\_3\$ の固有関数

$$H|n_1, n_0, n_{-1}\rangle = \hbar\omega(N + 3/2)|n_1, n_0, n_{-1}\rangle, \quad N = n_1 + n_0 + n_{-1}$$

$$L_3|n_1, n_0, n_{-1}\rangle = m|n_1, n_0, n_{-1}\rangle, \quad m = n_1 - n_{-1}$$

ではあるが、一般には \$\mathbf{L}^2\$ の固有関数ではない。\$n\_1 + n\_0 + n\_{-1} = N\$, \$n\_1 - n\_{-1} = m\$ を満たす \$|n\_1, n\_0, n\_{-1}\rangle\$ の線型結合により

$$|N, \ell, m\rangle = \sum_{n_1} C_{n_1} |n_1, n_0 = N + m - 2n_1, n_{-1} = n_1 - m\rangle, \quad \max(0, m) \leq n_1 \leq \frac{N+m}{2}$$

と表せる。\$|m| \le N\$ より \$\ell \le N\$ である。\$|n\_1, n\_0, n\_{-1}\rangle\$ のパリティは \$(-1)^{n\_1+n\_0+n\_{-1}}\$ であるから、上の \$|N, \ell, m\rangle\$ のパリティは \$(-1)^N\$ になる。一方、軌道角運動量の固有関数のパリティは \$(-1)^\ell\$ であるから \$(-1)^N = (-1)^\ell\$ になり、許される \$\ell\$ は (6.68) で与えられる。

\$|n\_1, n\_0, n\_{-1}\rangle\$ を \$m\$ で分類すると右表になる。\$m = N\$ は \$|N, 0, 0\rangle\$ だけである。\$b\_{-1}|N, 0, 0\rangle = b\_0|N, 0, 0\rangle = 0\$ と (6.78) より \$L\_+|N, 0, 0\rangle = 0\$ になるから、\$|N, 0, 0\rangle\$ は \$\mathbf{L}^2\$ の固有関数でもあり \$|N, \ell = N, m = N\rangle = |N, 0, 0\rangle\$ である (位相の差は除く)。\$m = N - 1\$ も \$|N - 1, 1, 0\rangle\$ だけである。

$$L_-|N, 0, 0\rangle = -\sqrt{2}b_0^\dagger b_1|N, 0, 0\rangle = -\sqrt{2N}|N - 1, 1, 0\rangle$$

\$m\$	\$ n_1, n_0, n_{-1}\rangle\$
\$N\$	\$ N, 0, 0\rangle\$
\$N - 1\$	\$ N - 1, 1, 0\rangle\$
\$N - 2\$	\$ N - 1, 0, 1\rangle,  N - 2, 2, 0\rangle\$
\$\vdots\$	
\$-N\$	\$ 0, 0, N\rangle\$

になるから \$|N, \ell = N, m = N - 1\rangle = -|N - 1, 1, 0\rangle\$ である。\$m = N - 1\$ の状態としては \$\ell = N - 1\$ も可能であるが、\$m = N - 1\$ になる \$|n\_1, n\_0, n\_{-1}\rangle\$ は 1 つしかないから \$\ell = N - 1\$ は存在しない。

問題 6.15 \$m = N - 2\$ の場合、具体的に \$|N, \ell, m\rangle\$ を \$|n\_1, n\_0, n\_{-1}\rangle\$ の線型結合で表せ。

## 6.9 スピン・軌道相互作用

原子や原子核を扱う場合、ハミルトニアンとして

$$H = H_0 + V_{\text{LS}}(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, \quad H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(r) \quad (6.80)$$

を考えることがある。\$\mathbf{S}\$ は \$s = 1/2\$ のスピン演算子である。\$V\_{\text{LS}}(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\$ をスピン・軌道 (LS) 相互作用あるいはスピン・軌道 (LS) 力という。

スピン状態も明記すると \$H\_0\$ の固有関数 \$\psi^{(0)}(\mathbf{r})\$ は

$$\psi^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{\chi_{n\ell}^{(0)}(r)}{r} Y_{\ell m_\ell}(\theta, \phi) |m_\sigma\rangle, \quad m_\ell = \ell, \ell - 1, \dots, -\ell, \quad m_\sigma = \pm 1 \quad (6.81)$$

と表せる。ここで \$|m\_\sigma\rangle\$ は (5.59) である。\$H\_0\$ の固有値は \$m\_\ell\$ 及び \$m\_\sigma\$ に依存しないから \$2(2\ell + 1)\$ 重に縮退する。

スピン・軌道相互作用がある場合, (5.113) から  $H$  の固有関数は (6.81) のようには表せない。これを交換関係から見直すと,  $\mathbf{L}$  の各成分は互いに非可換であるが, 各成分と  $L^2$  は可換である。 $\mathbf{S}$  も同様であるから,  $H$  は  $L^2$ ,  $S^2 = 3/4$  と可換であるが,  $[\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \mathbf{L}] \neq 0$ ,  $[\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \mathbf{S}] \neq 0$  であり  $H$  と  $\mathbf{L}$  及び  $\mathbf{S}$  とは非可換である。このため  $H$  の固有関数  $\psi(\mathbf{r})$  は  $L_z, S_z$  の固有関数である  $\psi^{(0)}(\mathbf{r})$  のようには表せない。全角運動量  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  で  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  を表すと  $2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - 3/4$  になるから  $H$  と  $\mathbf{J}$  は可換である。したがって,  $H, L^2, S^2, J^2, J_z$  の同時固有関数が存在する。 $L^2, S^2, J^2, J_z$  の同時固有関数は (5.115) の  $\mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta, \phi)$  であるから  $\psi(\mathbf{r})$  は

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\chi(r)}{r} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta, \phi), \quad j = \ell \pm 1/2, \quad m = -j, -j+1, \dots, j \quad (6.82)$$

とおける。このとき (5.116) より  $H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$  は

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Mr^2} + V_{\ell j}(r) \right) \chi(r) = E \chi(r) \quad (6.83)$$

ただし

$$V_{\ell j}(r) = V(r) + \frac{\kappa_{\ell j}}{2} V_{\text{LS}}(r), \quad \kappa_{\ell j} = \begin{cases} \ell, & j = \ell + 1/2 \\ -\ell - 1, & j = \ell - 1/2 \end{cases}$$

になる。 $V(r)$  が  $V_{\ell j}(r)$  に置き換わるだけで  $H_0$  の場合と全く同じ扱いができるが,  $V_{\ell j}(r)$  は  $\ell, j$  に依存する。このため,  $E$  は  $m$  には依存しないが,  $\ell$  だけでなく  $j$  にも依存する。 $m$  は  $2j+1$  個の値をとるから, 縮退度は  $2j+1 = 2(\ell \pm 1/2) + 1$  であり, 両者の和  $2(2\ell+1)$  は  $H_0$  の縮退度に等しい。 $2(2\ell+1)$  重に縮退した  $H_0$  の固有状態は,  $\ell \neq 0$  の場合, スピン・軌道相互作用により  $j = \ell + 1/2$  と  $j = \ell - 1/2$  の 2 つに分離する。

$V_{\text{LS}}(r) = \text{一定} = V_{\text{LS}}$  の場合, (6.83) は

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Mr^2} + V(r) \right) \chi(r) = \left( E - \frac{\kappa_{\ell j}}{2} V_{\text{LS}} \right) \chi(r)$$

これは  $H_0$  の動径方向の方程式であるから,  $H_0$  の固有値を  $E_{n\ell}^{(0)}$  とすると

$$\chi(r) = \chi_{n\ell}^{(0)}(r), \quad E = E_{n\ell}^{(0)} + \frac{\kappa_{\ell j}}{2} V_{\text{LS}} = \begin{cases} E_{n\ell}^{(0)} + \frac{\ell}{2} V_{\text{LS}}, & j = \ell + 1/2 \\ E_{n\ell}^{(0)} - \frac{\ell+1}{2} V_{\text{LS}}, & j = \ell - 1/2 \end{cases} \quad (6.84)$$

になる。 $\chi(r)$  は  $j$  に依存しないが,  $\ell \neq 0$  のとき固有値は  $j$  に依存し 2 つに分離する。

相対論的なディラック方程式を非相対論的近似すると

$$V_{\text{LS}}(r) = f_0 \left( \frac{\hbar}{Mc} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}, \quad f_0 = \frac{1}{2} \quad (6.85)$$

になる。 $V_{\text{LS}}(r)$  とその他の相対論的補正を考慮すると, 原子のエネルギー準位の微細構造を説明できる (211 ページ)。また, 原子核では  $f_0 < 0$  にとると, 原子核の魔法数を再現できる。

## 6.10 2次元の中心力

ハミルトニアン  $H$  が

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(r), \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

である場合を扱う。(16.46)で  $z = \text{一定}$  にすれば2次元極座標になるから

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} = \frac{1}{\sqrt{r}} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \sqrt{r} + \frac{1}{4r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$$

したがって

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{1}{\sqrt{r}} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \sqrt{r} + \frac{1}{4r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + V(r) \quad (6.86)$$

である。 $H$  は

$$L_z = -i \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i \frac{\partial}{\partial \theta}$$

と可換であるから、 $H$  と  $L_z$  の同時固有関数が存在する。 $L_z$  の固有関数は  $m$  を整数として  $e^{im\theta}$  であるから、 $H$  と  $L_z$  の同時固有関数  $\psi(\mathbf{r})$  は

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\chi(r)}{\sqrt{r}} \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2\pi}}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

とおける。(6.86)より  $H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$  は

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{m^2 - 1/4}{r^2} + V(r) \right) \chi(r) = E \chi(r) \quad (6.87)$$

になる。規格化条件は

$$\int_0^\infty dr r \int_0^{2\pi} d\theta |\psi(\mathbf{r})|^2 = \int_0^\infty dr |\chi(r)|^2 = 1$$

である。 $r \rightarrow 0$  のとき  $r^2 V(r) \rightarrow 0$  ならば (6.87) は

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} - \frac{m^2 - 1/4}{r^2} \chi = 0, \quad \therefore \chi(r) = A r^{|m|+1/2}$$

ただし  $\chi(0) = 0$  である。2次元中心力ポテンシャルでも、結局、1次元のシュレーディンガー方程式 (6.87) を解く問題になる。 $\ell(\ell+1) = (\ell+1/2)^2 - 1/4$  であるから  $\ell = |m| - 1/2$  とすると、(6.87) は (6.8) に一致する。また、 $r \rightarrow 0$  の漸近形も  $r^{|m|+1/2} = r^{\ell+1}$  であるから、3次元中心力と同じである。したがって、3次元中心力ポテンシャルで  $\ell = |m| - 1/2$  と置き換えれば、2次元中心力ポテンシャルの解が求まる。ただし、 $\ell$  は半整数である。

2次元で  $V(r) = -Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r)$  の場合、原点で有限な解は (6.29) で  $\ell = |m| - 1/2$  とおくと

$$v = CM(|m| + 1/2 - \lambda, 2|m| + 1, \rho), \quad \therefore |m| + 1/2 - \lambda = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$

でなければならないから

$$E = -\frac{(Z\alpha)^2 Mc^2}{2\lambda^2} = -\frac{(Z\alpha)^2 Mc^2}{2(n-1/2)^2}, \quad n = |m| + n_r + 1 = 1, 2, 3, \dots$$

であり、3次元とは異なる結果になる。波動関数は (6.33) より

$$\chi(r) = C_1 \rho^{|m|+1/2} e^{-\rho/2} M(-n_r, 2|m| + 1, \rho)$$

である。なお、(16.30)より2次元ポアソン方程式  $(\partial_x^2 + \partial_y^2)V = \delta(\mathbf{r})$  の解は  $V = \log r/(2\pi)$  であり  $V \propto 1/r$  ではない。

**問題 6.16** 2次元等方調和振動子  $V(r) = M\omega^2 r^2/2$  の固有値と固有関数が

$$E = \hbar\omega(2n + |m| + 1), \quad \psi(\mathbf{r}) = C r^{|m|} e^{-a^2 r^2/2} M(-n, |m| + 1, a^2 r^2) e^{im\theta}$$

になることを示せ。 $E = \hbar\omega(N+1)$  の縮退度を求めよ (95 ページ参照)。

### 6.11 中心力ポテンシャルでの数値解法

系の広がりを表す適当な長さを  $\lambda$  として

$$q = \frac{r}{\lambda}, \quad \varepsilon = \frac{2M\lambda^2 E}{\hbar^2}, \quad U_\ell(q) = \frac{2M\lambda^2}{\hbar^2} V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{q^2} \quad (6.88)$$

とすると (6.8) は

$$\frac{d^2 \chi_\ell}{dq^2} + (\varepsilon - U_\ell(q)) \chi_\ell = 0 \quad (6.89)$$

になる。これは (2.2) と同じ型であるから、2.11 章の数値計算法が使える。1 次元での束縛状態と異なる点は、領域が  $q \geq 0$  になること及びポテンシャルに  $\ell(\ell+1)/q^2$  が加わることである。

$q_{\min} \leq q \leq q_{\max}$  で微分方程式を解くとして、 $q_{\max}$  の設定と  $q = q_{\max}$  での波動関数の初期値は 1 次元と同様にすればよい。一方、 $q_{\min} = 0$  であるが  $\ell \neq 0$  のとき  $U(0)$  は発散するから、 $q_{\min}$  は適当な微小値、例えば  $q_{\min} = 10^{-6}$  にする。 $r \rightarrow 0$  のとき  $r^2 V(r) \rightarrow 0$  ならば (6.12) より  $\chi_\ell \rightarrow r^{\ell+1}$  に比例するから、波動関数の初期値として

$$\chi_\ell(q_{\min}) = q_{\min}^{\ell+1}, \quad \chi_\ell(q_{\min} + \Delta q) = (q_{\min} + \Delta q)^{\ell+1} \quad (6.90)$$

とする。ポテンシャル  $U_\ell(q)$  と波動関数の初期値は  $\ell$  に依存するから、53 ページのプログラムを出来るだけ修正せずに済ますには、 $\ell$  を main の前で定義し外部変数とすればよい。53 ページのプログラムで potential と wronski を修正し、main 部分を下記のようにすれば  $\ell = 0, 1, 2$  の数値解が求まる。接続点  $q_c$  は  $q_c \approx 1$  程度にとる。

---

```

.....
int nc, nq, l; // l(エル)を追加
int main()
{
    .....
    qmax=qmin+nq*dq;  qc=qmin+nc*dq;
    for( l=0; l<=2; l++ ){ // 追加
        for(i=0; i<=nq; i++ )
            pot[i]= potential(qmin+dq*i);
        .....
    }
    w1=w2;
}
}
.....

```

---

**問題 6.17** 3 次元等方調和振動子の場合  $\lambda = \sqrt{\hbar/(M\omega)}$  とすれば (6.67) より

$$U_\ell(q) = q^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{q^2}, \quad \varepsilon_{n\ell} = \frac{2E}{\hbar\omega} = 4n + 2\ell + 3$$

になる。数値計算の結果が  $\varepsilon_{n\ell}$  を再現することを確認めよ。

## 7 磁場中の荷電粒子

### 7.1 古典力学

電荷  $q$  の荷電粒子のラグランジアン  $L$  を

$$L = \frac{M}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 + q \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - q A_0(\mathbf{r}, t) \quad (7.1)$$

とする。 $A_0(\mathbf{r}, t)$  はスカラーポテンシャルである。

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = M \dot{x}_i + q A_i, \quad \frac{\partial L}{\partial x_i} = q \dot{\mathbf{r}} \cdot \partial_i \mathbf{A} - q \partial_i A_0 \quad (7.2)$$

より, オイラー・ラグランジュ方程式  $dp_i/dt = \partial L/\partial x_i$  は

$$M \ddot{x}_i = -q \partial_i A_0 + q \dot{\mathbf{r}} \cdot \partial_i \mathbf{A} - q \frac{dA_i}{dt}$$

になる。

$$\frac{dA_i}{dt} = \frac{d}{dt} A_i(\mathbf{r}(t), t) = \sum_j \frac{dx_j}{dt} \frac{\partial}{\partial x_j} A_i(\mathbf{r}, t) + \partial_t A_i(\mathbf{r}, t) = \dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla A_i + \partial_t A_i$$

であるから

$$M \ddot{x}_i = q \left( -\partial_i A_0 - \partial_t A_i \right) + q \dot{\mathbf{r}} \cdot \left( \partial_i \mathbf{A} - \nabla A_i \right) = q \left( -\partial_i A_0 - \partial_t A_i \right) + q \left( \dot{\mathbf{r}} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \right)_i$$

つまり

$$M \ddot{\mathbf{r}} = q \mathbf{E} + q \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}, \quad \text{ただし} \quad \mathbf{E} = -\nabla A_0 - \partial_t \mathbf{A}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (7.3)$$

になり, (7.1) は正しい運動方程式を与える。ハミルトニアン  $H$  は

$$H = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p} - L = \frac{M}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 + q A_0 = \frac{1}{2M} (\mathbf{p} - q \mathbf{A})^2 + q A_0 \quad (7.4)$$

である。(7.2) で定義した正準運動量  $\mathbf{p} = M \dot{\mathbf{r}} + q \mathbf{A}$  は力学的運動量  $M \dot{\mathbf{r}}$  とは異なる。

$z$  軸方向の一様磁場  $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$  の場合, (7.3) で  $\mathbf{E} = 0$ ,  $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$  とすると

$$\ddot{x} = \omega_c \dot{y}, \quad \ddot{y} = -\omega_c \dot{x}, \quad \ddot{z} = 0, \quad \text{ただし} \quad \omega_c = qB/M$$

である。 $x$  と  $y$  の方程式を  $v = \dot{x} + iy$  で表すと

$$\dot{v} = -i\omega_c v, \quad \therefore \quad v(t) = v_0 e^{-i\omega_c t}$$

速さ  $\sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2} = |v| = |v_0|$  は一定である。更に, 積分すると

$$x(t) + iy(t) = \frac{iv_0}{\omega_c} e^{-i\omega_c t} + x_c + iy_c = \frac{iv(t)}{\omega_c} + x_c + iy_c \quad (7.5)$$

$(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2 = |v_0/\omega_c|^2 = \text{一定}$  になるから,  $(x_c, y_c)$  を中心とした角速度  $|\omega_c|$  の等速円運動である。(7.5) の実部と虚部を比較すると

$$x(t) + \frac{M}{qB} \dot{y}(t) = x_c, \quad y(t) - \frac{M}{qB} \dot{x}(t) = y_c \quad (7.6)$$

$x$  と  $y$  は時間に依存するが, 上の組み合わせは一定になり円運動の中心座標を表す。



## 7.2 量子力学

(7.4) で正準運動量  $\mathbf{p}$  を  $-i\hbar\nabla$  で置き換えると (正準量子化), シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = H\psi(\mathbf{r},t), \quad H = \frac{1}{2M}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r},t))^2 + qA_0(\mathbf{r},t), \quad \mathbf{p} = -i\hbar\nabla \quad (7.7)$$

になる。自由粒子のシュレーディンガー方程式  $i\hbar\partial\psi/\partial t = H_0\psi$ ,  $H_0 = \mathbf{p}^2/(2M)$  で

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - qA_0, \quad \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A} \quad (7.8)$$

の置き換えをすれば (7.7) になる。(7.8) を電磁相互作用のミニマル結合という。ミニマル結合のため, 荷電粒子系はゲージ不変になる。

123 ページの繰り返しになるが, スピン 1/2 と磁場の相互作用を導出する。 $\nabla \times \nabla = 0$  であるから (5.63) より  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2$  である。したがって  $H_0 = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2/2M$  として (7.8) の置き換えを行うと

$$H = \frac{1}{2M}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})^2 + qA_0 = \frac{1}{2M}\mathbf{P}^2 + \frac{i}{2M}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{P} \times \mathbf{P}) + qA_0, \quad \mathbf{P} = -i\hbar\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$$

である。 $\mathbf{P} \times \mathbf{P} = i\hbar q(\nabla \times \mathbf{A}) = i\hbar q\mathbf{B}$  より

$$H = \frac{1}{2M}\mathbf{P}^2 + qA_0(\mathbf{r},t) - \mu\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r},t), \quad \mu = \frac{\hbar q}{2M} \quad (7.9)$$

になり, 磁場  $\mathbf{B}(\mathbf{r},t)$  とスピンの依存した  $-\mu\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$  が現れる。 $\mu\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\mathbf{S}$  はスピン  $\mathbf{S}$  による磁気モーメントである。以上は, 相対論的量子力学のディラック方程式に対して非相対論的近似を行った結果である。スピン 1/2 粒子を扱うが, スピン 0 の場合, スピノール  $\psi$  を 1 成分に置き換え  $\mu\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$  を無視する。

一様磁場の場合,  $\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}$  を満たす  $\mathbf{A}$  は一意に決まらないが,  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{B} \times \mathbf{r}/2$  とすれば  $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$  である。 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  より  $\mathbf{P}^2 = \mathbf{p}^2 + q^2\mathbf{A}^2 - 2q\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$  である。

$$2\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \hbar\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}, \quad \mathbf{L} = -i\mathbf{r} \times \nabla$$

になるから

$$H = \frac{1}{2M}(\mathbf{p}^2 + q^2\mathbf{A}^2) + qA_0(\mathbf{r},t) - \mu\mathbf{B} \cdot (g_s\mathbf{S} + g_\ell\mathbf{L}), \quad g_s = 2, \quad g_\ell = 1 \quad (7.10)$$

である。軌道角運動量  $\mathbf{L}$  の  $g_\ell = 1$  は古典力学と同じである。一方, スピン  $\mathbf{S}$  の磁気モーメントは, 古典力学から類推される  $g_s = 1$  ではなく  $g_s = 2$  になる。 $g_\ell, g_s$  を  $g$  因子という ((5.153) 参照)。

電子の場合, 実験値は  $g_s - 2 = 2.3193 \cdots \times 10^{-3}$  であり,  $g_s = 2$  は実験値をほぼ再現する。量子電磁力学によれば  $g_s - 2 = \alpha/\pi + O(\alpha^2) \approx 2.323 \times 10^{-3}$  になる。ただし,  $\alpha \approx 1/137$  は微細構造定数 (6.25) である。 $\alpha^2$  以上の補正も考慮した量子電磁力学の理論値は実験値と驚くほどよく一致する。

(5.4) より  $\mathbf{P} \times \mathbf{P} = i\hbar q\mathbf{B}(\mathbf{r},t)$  は

$$[P_x, P_y] = i\hbar qB_z, \quad [P_y, P_z] = i\hbar qB_x, \quad [P_z, P_x] = i\hbar qB_y \quad (7.11)$$

あるいは

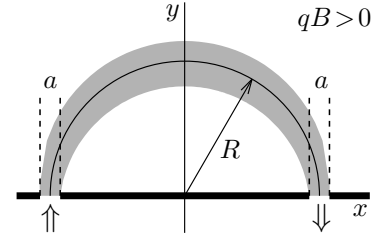
$$[P_i, P_j] = i\hbar q \sum_k \varepsilon_{ijk} B_k \quad (7.12)$$

と表せる。(7.2) より速度  $\dot{\mathbf{r}}$  に対応する量子力学の演算子は  $\mathbf{P}/M$  である。 $\mathbf{B} \neq 0$  のとき  $P_x, P_y, P_z$  の少なくとも一対は非可換になるから, 磁場中では速度が確定した状態は存在しない。

## 不確定性関係

$z$  軸方向の一定磁場の場合,  $[P_x, P_y] = i\hbar qB = \text{定数}$  であるから,  
(1.39) より

$$\Delta P_x \Delta P_y \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [P_x, P_y] | \psi \rangle| = \frac{\hbar |qB|}{2}$$



この不確定性は図のような装置で定性的理解はできる。古典力学

では, 円運動の半径を  $R$  とすると, 入射粒子の運動量は  $P_x = 0, P_y = qBR$  である。一方, 量子力学では  $\Delta x \sim a$  より  $\Delta P_x \sim \hbar/a$  である。 $R$  にも  $a$  程度の不確定性があるから  $P_y = qBR$  を使うと  $\Delta P_y \sim qB\Delta R \sim qBa$  になり  $\Delta P_x \Delta P_y \sim \hbar qB$  である。

## 古典力学との対応関係

(1.14) より

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | x_i | \psi \rangle = \langle \psi | [x_i, H] | \psi \rangle$$

である。(7.9) の  $H$  で  $x_i$  と非可換な部分は  $P_i$  だけで  $[x_i, P_i] = i\hbar$  であるから

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | x_i | \psi \rangle = \frac{1}{2M} \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | ([x_i, P_i] P_i + P_i [x_i, P_i]) | \psi \rangle = \frac{1}{M} \langle \psi | P_i | \psi \rangle$$

になる。これは古典力学での正準運動量  $\mathbf{p}$  の定義式 ((7.2) の第1式) に対応する。 $\mathbf{P} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  は一般に時間に依存するから (1.13) より

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | \mathbf{P} | \psi \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [\mathbf{P}, H] | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} | \psi \rangle, \quad \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = -q \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

になる。(7.12) より

$$\begin{aligned} [P_i, \mathbf{P}^2] &= \sum_j (P_j [P_i, P_j] + [P_i, P_j] P_j) = i\hbar q \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} (P_j B_k + B_k P_j) \\ &= i\hbar q (\mathbf{P} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{P})_i \end{aligned}$$

になるから

$$\frac{1}{i\hbar} [\mathbf{P}, H] + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = \frac{q}{2M} (\mathbf{P} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{P}) + q\mathbf{E} + \mu \nabla (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}), \quad \mathbf{E} = -\nabla A_0 - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

$(\mathbf{P} \times \mathbf{B})^\dagger = -\mathbf{B} \times \mathbf{P}$  より  $\mathbf{P} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{P}$  はエルミート演算子である。以上から

$$M \frac{d^2}{dt^2} \langle \psi | \mathbf{r} | \psi \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi | \mathbf{P} | \psi \rangle = \langle \psi | \left( \frac{q}{2M} (\mathbf{P} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{P}) + q\mathbf{E} + \mu \nabla (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) \right) | \psi \rangle$$

になる。演算子  $\mathbf{P}/M$  は粒子の速度を表すから, 上式は運動方程式 (7.3) に対応する。 $\mathbf{P}$  と  $\mathbf{B}$  が可換ならば, 右辺第1項は  $q\mathbf{P} \times \mathbf{B}/M$  になり, ローレンツ力と同じ表現である。

スピンの依存する第3項  $\mathbf{F}_\sigma = \mu \nabla (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B})$  は古典力学には存在しない。磁場が  $z$  軸方向のとき,  $\sigma_z$  の固有状態を  $|\pm\rangle$  とすると  $\mathbf{F}_\sigma |\pm\rangle = \pm \mu \nabla B_z |\pm\rangle$  である。スピン状態が  $|+\rangle$  と  $|-\rangle$  では逆向きの力が作用するから, スピン1/2粒子が不均一な磁場を通過すると, 粒子は2つのビームに分離する (シュテルン・ゲルラッハの実験)。ただし, 実験的には入射速度には分散があるから, 荷電粒子の場合, ローレンツ力によりビームは拡散し, 2つの分離を覆い隠す可能性がある。基底状態の角運動量が1/2の中性原子 (例えば銀原子) を用いれば, ローレンツ力の影響を受けない。

### 7.3 ゲージ不変性

$\lambda(\mathbf{r}, t)$  を任意の関数として

$$A'_0(\mathbf{r}, t) = A_0(\mathbf{r}, t) - \partial_t \lambda(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla \lambda(\mathbf{r}, t) \quad (7.13)$$

をゲージ変換という。 $\nabla \times \nabla = 0$  であるから

$$\mathbf{E}' = -\nabla A'_0 - \partial_t \mathbf{A}' = -\nabla A_0 - \partial_t \mathbf{A} = \mathbf{E}, \quad \mathbf{B}' = \nabla \times \mathbf{A}' = \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$$

であり, 古典力学の運動方程式 (7.3) はゲージ変換に依らない。また, Maxwell 方程式も  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  で記述できるから, ゲージ変換に対して不変である。古典的には,  $\mathbf{E}$  と  $\mathbf{B}$  が基本量であり, ポテンシャル  $A_\mu = (A_0, \mathbf{A})$  は一意に決まらない補助的な量と見なせる。一方, シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = H\psi(\mathbf{r}, t), \quad \text{ただし} \quad H = \frac{1}{2M} \mathbf{P}^2 - \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + qA_0, \quad \mathbf{P} = -i\hbar \nabla - q\mathbf{A} \quad (7.14)$$

は  $A_0$  と  $\mathbf{A}$  を含むから, 量子力学では  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  よりも  $A_\mu$  の方が基本的な量になる。 $H$  で  $A_\mu$  を (7.13) の  $A'_\mu$  で置き換えたものを  $H'$  とすると, シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\mathbf{r}, t) = H'\psi'(\mathbf{r}, t) \quad (7.15)$$

になる。 $H' \neq H$  であるが, 以下に示すように,  $\psi(\mathbf{r}, t)$  と  $\psi'(\mathbf{r}, t)$  は同じ状態を表す。これをシュレーディンガー方程式のゲージ不変性という。

$$U = e^{iq\lambda(\mathbf{r}, t)/\hbar}, \quad U^\dagger = e^{-iq\lambda(\mathbf{r}, t)/\hbar}$$

とする。任意の関数  $F(\mathbf{r}, t)$  に対して

$$\mathbf{P}(U^\dagger F) = U^\dagger \mathbf{P}F - i\hbar F \nabla U^\dagger = U^\dagger \mathbf{P}'F, \quad \text{ただし} \quad \mathbf{P}' = \mathbf{P} - q\nabla \lambda = -i\hbar \nabla - q\mathbf{A}'$$

である。 $F$  は任意であるから演算子の関係式として

$$UPU^\dagger = \mathbf{P}', \quad \text{一般に} \quad UP_i P_j \cdots P_k U^\dagger = UP_i U^\dagger UP_j U^\dagger \cdots UP_k U^\dagger = P'_i P'_j \cdots P'_k \quad (7.16)$$

が成り立つ。これから ( $\mathbf{B} = \mathbf{B}'$ ,  $A_0 = A'_0 + \partial_t \lambda$ )

$$UHU^\dagger = \frac{1}{2M} \mathbf{P}'^2 - \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + qA_0 = H' + q\partial_t \lambda \quad (7.17)$$

である。(7.14) に  $U$  をかけると

$$i\hbar U \frac{\partial}{\partial t} \psi = UHU^\dagger U\psi = H'U\psi + q\frac{\partial \lambda}{\partial t} U\psi = H'U\psi - i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} \psi, \quad \therefore \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (U\psi) = H'U\psi$$

になる。したがって,  $\psi$  が (7.14) の解ならば

$$\psi'(\mathbf{r}, t) = U\psi(\mathbf{r}, t) = e^{iq\lambda(\mathbf{r}, t)/\hbar} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (7.18)$$

は (7.15) の解になり, この逆も成り立つ。 $\psi$  と  $\psi'$  の違いは, 状態に無関係な  $U$  だけであるから,  $\psi$  と  $\psi'$  は同じ状態である。(7.13) と (7.18) が量子力学でのゲージ変換を表す。

ある演算子  $Q(A_\mu)$  に対して,  $A_\mu$  を (7.13) の  $A'_\mu$  で置き換え  $Q' = Q(A'_\mu)$  とする。物理量はエルミート演算子であるが, 電磁相互作用を考慮すると, 期待値がゲージ変換に対して不変

$$\langle \psi' | Q' | \psi' \rangle = \langle \psi | Q | \psi \rangle$$

でなければならない。 $|\psi\rangle = U^\dagger |\psi'\rangle$  であるから

$$UQ(A_\mu)U^\dagger = Q(A'_\mu) \quad (7.19)$$

が物理量の条件である。演算子  $Q$  の固有状態を  $|\psi\rangle$ , 固有値を  $q$  とする。 $Q|\psi\rangle = q|\psi\rangle$  の両辺に  $U$  をかければ

$$UQU^\dagger U|\psi\rangle = qU|\psi\rangle, \quad \therefore Q'|\psi'\rangle = q|\psi'\rangle$$

$Q$  と  $Q'$  は異なるが, 両者の固有値は一致し, 固有値はゲージに依存しない。また, 固有関数はゲージに依存するが位相  $U = e^{iq\lambda(\mathbf{r},t)/\hbar}$  が異なるだけである。

(7.2) より力学的運動量  $M\dot{\mathbf{r}}$  は量子力学では  $\mathbf{P}$  になる。これは (7.16) より物理量である。一方, 正準運動量  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  は  $A_\mu$  に依存しないから  $\mathbf{p}' = \mathbf{p}$  になるが,  $U\mathbf{p}U^\dagger = \mathbf{p} - q\nabla\lambda \neq \mathbf{p}'$  であるから物理量ではない。(7.17) より一般に  $UHU^\dagger \neq H'$  であるから,  $H$  は時間発展を記述する演算子ではあるが, それ自体は系のエネルギーという物理量ではない。しかし,  $\mathbf{E}, \mathbf{B}$  が時間に依存しないとき,  $A_0, \mathbf{A}$  も時間に依存しない範囲に制限すれば,  $\partial\lambda/\partial t = 0$  であるから  $UHU^\dagger = H'$  になり系のエネルギーという物理的意味をもつ。このとき,  $H$  の固有値はゲージに依存しない。

### 正準量子化

ゲージ  $\lambda$  の不定性は位相  $e^{iq\lambda/\hbar}$  に取り込めたが, 同様のことは正準運動量  $\mathbf{p}$  を  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  とするときにも起こる。 $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$  を満たす  $\mathbf{p}$  は  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  を任意関数として  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla + \mathbf{F}(\mathbf{r})$  でもよい。 $[p_i, p_j] = 0$  より  $\nabla \times \mathbf{F} = \mathbf{0}$  になるから  $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \hbar\nabla\theta(\mathbf{r})$  とおける。 $\mathbf{p}$  はエルミート演算子であるから  $\theta$  は実数である。 $e^{i\theta(\mathbf{r})}(-i\hbar\nabla + \mathbf{F}(\mathbf{r}))e^{-i\theta(\mathbf{r})} = -i\hbar\nabla$  であるから, ユニタリ変換  $e^{i\theta(\mathbf{r})}$  で  $\mathbf{F} = \mathbf{0}$  の表示になる。したがって  $\mathbf{F} = \mathbf{0}$  でも一般性は失わない ((14.20) 参照)。

## 7.4 連続の方程式

(7.14) より

$$\psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2M} \psi^\dagger D^2 \psi + \frac{1}{i\hbar} \left( qA_0 \psi^\dagger \psi - \mu \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \psi \right), \quad \text{ただし} \quad \mathbf{D} = -\frac{\mathbf{P}}{i\hbar} = \nabla + \frac{q}{i\hbar} \mathbf{A}$$

である。

$$\nabla \cdot (\psi^\dagger \mathbf{D} \psi) = (\nabla \psi^\dagger) \cdot \mathbf{D} \psi + \psi^\dagger \left( \mathbf{D} - \frac{q}{i\hbar} \mathbf{A} \right) \cdot \mathbf{D} \psi = \psi^\dagger D^2 \psi + (\mathbf{D} \psi)^\dagger \cdot \mathbf{D} \psi$$

になるから

$$\psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2M} \nabla \cdot (\psi^\dagger \mathbf{P} \psi) + \frac{F}{i\hbar}, \quad F = \frac{\hbar^2}{2M} (\mathbf{D} \psi)^\dagger \cdot \mathbf{D} \psi + qA_0 \psi^\dagger \psi - \mu \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \psi$$

$F$  は実数であるから, 確率密度  $\rho = \psi^\dagger \psi$  の時間微分は

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} + \left( \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^* = 2\text{Re} \left( \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = -\frac{1}{M} \nabla \cdot \text{Re}(\psi^\dagger \mathbf{P} \psi)$$

になる。したがって

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad \text{ただし} \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{M} \text{Re}(\psi^\dagger \mathbf{P} \psi) = \frac{1}{2M} \left( \psi^\dagger \mathbf{P} \psi + (\psi^\dagger \mathbf{P} \psi)^* \right) \quad (7.20)$$

であり連続の方程式が成り立つ。(7.20) は  $\mathbf{A} = \mathbf{0}$  での流れの密度 (1.6) に (7.8) の置き換えをすれば得られる。ゲージ変換に対しては

$$\psi'^\dagger \mathbf{P}' \psi' = \psi^\dagger U^\dagger U \mathbf{P} U^\dagger U \psi = \psi^\dagger \mathbf{P} \psi$$

になるから  $\mathbf{j}$  はゲージ不変である。

$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{f}) = 0$  であるから,  $\mathbf{j}$  に任意の  $\nabla \times \mathbf{f}$  を加えても連続の方程式を満たす。したがって, 連続の方程式だけでは  $\mathbf{j}$  を一意に決定できない。粒子がスピンをもつ場合, (7.20) にスピン依存項を加える必要がある。(7.9) のスピン依存項によるエネルギー期待値  $E_\sigma$  は

$$E_\sigma = - \int d^3r \, \boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \quad \boldsymbol{\mu} = \frac{\hbar q}{2M} \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\sigma} \psi(\mathbf{r}, t)$$

である。 $\nabla \cdot (\mathbf{A} \times \boldsymbol{\mu}) = \boldsymbol{\mu} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\mu})$  より

$$E_\sigma = - \int d^3r \, \mathbf{A} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\mu}) - \int d^3r \, \nabla \cdot (\mathbf{A} \times \boldsymbol{\mu}) = - \int d^3r \, \mathbf{A} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\mu})$$

$\nabla \cdot (\mathbf{A} \times \boldsymbol{\mu})$  の積分は, ガウスの定理より無限遠での表面積分になるから 0 とした。電磁気学によれば, 電流密度  $\mathbf{J}$  と電磁場の相互作用エネルギーは  $-\mathbf{A} \cdot \mathbf{J}$  の積分で与えられるから,  $\nabla \times \boldsymbol{\mu}$  はスピンによる電流密度と見なせる。これを電荷  $q$  で割れば確率の流れの密度になるから

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{M} \text{Re}(\psi^\dagger \mathbf{P} \psi) + \frac{\hbar}{2M} \nabla \times (\psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi) \quad (7.21)$$

である。スピン依存項は連続の方程式に寄与せず, また,  $\psi'^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi' = \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi$  よりゲージ不変である。

**問題 7.1**  $\text{Re}(\psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi) = \text{Re}(\psi^\dagger \mathbf{p} \psi)$  であるから, (7.9) の  $\boldsymbol{\mu} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$  を導出したのと同様の方法を適用し  $\mathbf{j} = \text{Re}(\psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P} \psi)/M$  とすると (7.21) に一致することを示せ。

## 7.5 一様磁場

一様磁場  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$  での荷電粒子の運動を考える (123 ページ参照)。(7.14) のハミルトニアンは  $A_0 = 0$  として

$$H = H_{xy} + H_z + H_\sigma, \quad H_{xy} = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2M}, \quad H_z = \frac{P_z^2}{2M}, \quad H_\sigma = -\mu B \sigma_z$$

である。(7.11) より  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$  のとき

$$[P_x, P_y] = -[P_y, P_x] = i\hbar qB, \quad \text{その他の } [P_i, P_j] = 0 \quad (7.22)$$

になるから,  $H_{xy}$ ,  $P_z$ ,  $\sigma_z$  は互いに可換で, これらの同時固有関数  $\Phi(\mathbf{r})$  が存在する。 $\sigma_z$  の固有スピノールを  $\sigma_z \chi_\sigma = \sigma \chi_\sigma$ ,  $\sigma = \pm 1$  とすれば,  $\Phi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}) \chi_\sigma$  とおけば  $H\Phi = E\Phi$  は

$$H_{xy}\Psi(\mathbf{r}) = E_{xy}\Psi(\mathbf{r}), \quad P_z\Psi(\mathbf{r}) = \hbar k_z\Psi(\mathbf{r}), \quad E = E_{xy} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2M} - \mu B \sigma \quad (7.23)$$

になる。 $\Pi = P_x$ ,  $X = -P_y/(qB)$  とすると

$$H_{xy} = \frac{1}{2M} \Pi^2 + \frac{M\omega^2}{2} X^2, \quad [X, \Pi] = i\hbar, \quad \text{ただし } \omega = \frac{|qB|}{M} \quad (7.24)$$

になるから,  $X$  を座標,  $\Pi$  を運動量とする 1 次元調和振動子である。したがって,  $H$  の固有値は

$$E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2M} - \mu B \sigma = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} - \frac{qB}{|qB|} \frac{\sigma}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2M}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

になる。磁場に垂直な  $xy$  平面内の運動は, 古典力学的には角速度  $\omega = |qB|/M$  の単振動を重ね合わせた等速円運動であるが, これに対応して, 量子力学でのエネルギーは離散的な値  $\hbar\omega(n + 1/2)$  に

なる。このエネルギー固有値の状態をランダウ準位という。磁場方向の状態は速度  $P_z/M$  の固有状態であるが、これは古典力学的粒子が等速運動することに対応する。 $qB \gtrless 0$  のとき  $n, \sigma = 1$  と  $n \mp 1, \sigma = -1$  は縮退する。自由度 2 の  $xy$  平面の運動を表す  $H_{xy}$  は、自由度 1 の 1 次元調和振動子と等価になるが、系の状態を指定するには  $H_{xy}$  には現れない自由度の状態も必要になる。以下で示すように、これを考慮するとランダウ準位は無限に縮退する。

$\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{B} = (0, 0, B)$  を満たす  $\mathbf{A}$  は無数にあり、例えば、 $g$  を任意の実数として

$$\mathbf{A} = (-By, 0, 0) + gB\nabla(xy) = ((g-1)By, gBx, 0) \quad (7.25)$$

よく使われるものは  $g = 0, 1, 1/2$  とした

$$\mathbf{A}_1 = (-By, 0, 0), \quad \mathbf{A}_2 = (0, Bx, 0), \quad \mathbf{A}_3 = \frac{1}{2}(-By, Bx, 0) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r} \quad (7.26)$$

である。以下では  $\nabla \times \mathbf{A} = B\mathbf{e}_z$  及び

$$A_x = A_x(x, y), \quad A_y = A_y(x, y), \quad A_z = 0$$

とする。 $P_z = -i\hbar\partial_z$  になるから、 $H_{xy}$  と  $P_z$  の同時固有関数  $\Psi(\mathbf{r})$  は  $\Psi(\mathbf{r}) = e^{ik_z z}\psi(x, y)$  とおける。 $A_x$  と  $A_y$  は  $z$  に依存しないから  $H_{xy}\Psi = E_{xy}\Psi$  は  $x, y$  についての方程式

$$H\psi(x, y) = E\psi(x, y), \quad H = \frac{1}{2M}(P_x^2 + P_y^2) = \frac{1}{2M}((p_x - qA_x)^2 + (p_y - qA_y)^2) \quad (7.27)$$

になる。簡単のため  $H_{xy}, E_{xy}$  を  $H, E$  で表す。また、 $qB > 0$  とする。 $\omega = qB/M$  である。

$z$  軸方向の一樣磁場の場合、古典力学での円運動の中心座標  $x_c, y_c$  は (7.6) である。これに対応する量子力学の演算子を  $X_c, Y_c$  とすると、力学的運動量  $M\dot{\mathbf{r}}$  は  $\mathbf{P}$  であるから

$$X_c = x + \frac{1}{qB}P_y, \quad Y_c = y - \frac{1}{qB}P_x \quad (7.28)$$

になる。(7.22) 及び  $[x_i, P_j] = [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$  より

$$[X_c, Y_c] = -\frac{i\hbar}{qB}, \quad [X_c, P_i] = [Y_c, P_i] = 0, \quad [X_c, H] = [Y_c, H] = 0 \quad (7.29)$$

$X_c$  と  $Y_c$  は非可換であるから、 $X_c$  と  $Y_c$  が同時に確定した値になることはない。 $X_c, Y_c$  のどちらか 1 つと  $H$  の同時固有関数は存在する。

系の力学変数は  $x, p_x, y, p_y$  であるが、この代わりに  $P_x, P_y, X_c, Y_c$  を用いる。(7.22), (7.29) は

$$[X, \Pi] = i\hbar, \quad \text{ただし} \quad (X, \Pi) = (-P_y/qB, P_x) \quad \text{または} \quad (X, \Pi) = (X_c, -qBY_c)$$

になるから、 $X$  を座標、 $\Pi$  を正準運動量と見なせる。生成演算子の定義 (4.11) と同様にして

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left( \frac{-P_y}{qB} - i\frac{P_x}{M\omega} \right) = -\frac{1}{\sqrt{2\hbar qB}} (iP_x + P_y) \quad (7.30)$$

$$b^\dagger = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left( X_c - i\frac{-qBY_c}{M\omega} \right) = \sqrt{\frac{qB}{2\hbar}} (X_c + iY_c) \quad (7.31)$$

とする。(7.22), (7.29) より

$$[a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = 1, \quad [a, b^\dagger] = [a, b] = 0$$

になるから、 $a^\dagger$  と  $b^\dagger$  は独立な調和振動子の生成演算子である。(4.21) より系の状態は

$$|n, k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n! k!}} (a^\dagger)^n (b^\dagger)^k |0\rangle, \quad \text{ただし } a|0\rangle = b|0\rangle = 0, \quad n, k = 0, 1, 2, \dots \quad (7.32)$$

になる。中心座標の距離演算子  $R_c$  を  $R_c^2 = X_c^2 + Y_c^2$  とする。 $a^\dagger, b^\dagger$  の定義より  $R_c^2$  と (7.27) のハミルトニアン  $H$  は

$$H = \hbar\omega \left( a^\dagger a + 1/2 \right), \quad R_c^2 = \frac{2\hbar}{qB} \left( b^\dagger b + 1/2 \right)$$

になるから、 $|n, k\rangle$  は  $H$  と  $R_c$  の同時固有関数である。 $H$  の固有値  $\hbar\omega(n+1/2)$  は  $k$  に依存しないから、ランダウ準位は無限に縮退する。 $|n, k\rangle$  は  $X_c \propto b^\dagger + b, Y_c \propto b^\dagger - b$  の固有関数ではないが、 $|n, k\rangle$  を  $k$  について適当に重ね合わせれば、 $H$  と  $X_c$  または  $Y_c$  の同時固有関数にできる。

ゲージを固定し  $H$  の固有関数  $\psi(x, y)$  の具体形を求める。無限に縮退するから、 $\psi(x, y)$  を決めるには  $H$  と可換な演算子との同時固有関数を求める必要がある。

#### $\mathbf{A} = \mathbf{A}_1$ の場合

$H$  を  $H_1$  で表すと

$$H_1 = \frac{1}{2M} (P_x^2 + P_y^2), \quad P_x = p_x + qBy, \quad P_y = p_y$$

である。 $H_1$  と  $p_x$  は可換であるから、この2つの同時固有関数  $\psi(x, y)$  が存在する。 $p_x$  の固有関数は  $e^{ik_x x}$  であるから  $\psi(x, y) = e^{ik_x x} Y(y)$  とおける

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{M\omega^2}{2} (y - y_0)^2 \right) Y(y) = EY(y), \quad y_0 = -\frac{\hbar k_x}{qB}, \quad \omega = \frac{qB}{M} \quad (7.33)$$

になる。これは  $y = y_0$  を中心とした調和振動子であるから、固有値と固有関数は

$$E = \hbar\omega \left( n + 1/2 \right), \quad \psi(x, y) = e^{ik_x x} \varphi_n(y - y_0), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.34)$$

ただし、 $\varphi_n(x)$  は (4.25) である。状態  $\psi$  は  $k_x, n$  を指定すると定まるが、 $E$  は  $k_x$  に依らないから、各エネルギー準位は無限に縮退する。

古典力学での中心座標に対応する (7.28) は  $\mathbf{A} = \mathbf{A}_1$  の場合

$$X_c = x + p_y/qB, \quad Y_c = -p_x/qB$$

になる。 $\mathbf{B} = 0$  の場合と異なり、 $e^{ik_x x}$  は力学的運動量  $P_x = p_x + qBy$  の固有関数ではなく  $Y_c$  の固有関数であり、 $Y_c$  の固有値  $-\hbar k_x/(qB)$  はポテンシャルの中心座標  $y_0$  である。エネルギー固有値  $E$  はポテンシャルの中心位置に依存しない。(1.39), (7.29) より不確定性関係は  $\Delta X_c \Delta Y_c \geq \hbar/(2qB)$  になる。(7.34) の場合  $\Delta Y_c = 0$  になるから、 $\Delta X_c = \infty$  であり  $X_c$  は全く不定になる。

固有関数  $\psi(x, y)$  の  $x$  依存性は平面波  $e^{ik_x x}$  ではあるが、確率密度の流れは  $x$  軸方向の一定速度  $\hbar k_x/M$  の流れにはならない。(7.21) よりスピン依存性を無視すると

$$j_x = \frac{1}{M} \text{Re}(\psi^* P_x \psi) = (y - y_0) \omega \varphi_n^2(y - y_0), \quad j_y = \frac{1}{M} \text{Re}(\psi^* P_y \psi) = 0$$

である。確率の流れは  $x$  軸方向を向き、速度  $(y - y_0)\omega$  の流れになる。これは  $y = y_0$  を中心とした角速度  $\omega$  の円運動の速度である。 $X_c$  は不定であるから、状態 (7.34) は直線  $y = y_0$  上に中心が一様に分布した円運動の集まりと見なせる。

#### 縮退度

$E = \hbar\omega(n+1/2)$  の縮退度は、粒子を有限の領域に閉じ込めれば有限になる。この縮退度を  $\mathbf{A} = \mathbf{A}_1$

の場合に求める。 $H$  の固有値はゲージに依らないから、その縮退度もゲージ不変である。粒子を一边  $L$  の正方形に閉じ込める。まず、自由粒子の場合を考える。259 ページと同様に、周期的境界条件を設定すると、平面波  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  の波数  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  は

$$k_x = 2\pi n_x/L, \quad k_y = 2\pi n_y/L, \quad n_x, n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

になる。エネルギー  $E = \hbar^2 k^2/2M$  が  $E$  と  $E + dE$  の間の状態数を  $\rho_{\text{free}}(E) dE$  とする。 $(k_x, k_y)$  平面上で面積  $(2\pi/L)^2$  に状態は 1 つあるから  $dk_x dk_y$  の状態数は

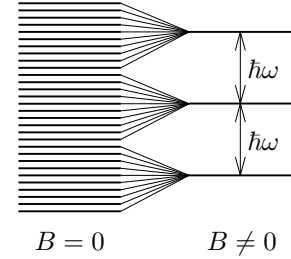
$$\frac{dk_x dk_y}{(2\pi/L)^2} = \frac{L^2}{4\pi^2} dk k d\theta = \frac{L^2 M}{4\pi^2 \hbar^2} dE d\theta, \quad \therefore \rho_{\text{free}}(E) = \frac{L^2 M}{4\pi^2 \hbar^2} \int_0^{2\pi} d\theta = \frac{L^2 M}{2\pi \hbar^2}$$

になる。磁場が作用する場合でも  $k_x = 2\pi n_x/L$  である。(7.33) を周期的境界条件で解く必要があるが、 $L$  が十分大きければ境界条件を無視してもよい近似である。(7.34) は近似的に成り立ち、ポテンシャルの中心  $y_0$  が  $0 < y_0 < L$  になる状態だけが許され

$$0 < y_0 = -\frac{\hbar k_x}{qB} < L, \quad \therefore \quad 0 < -\frac{n_x}{qB} < \frac{L^2}{2\pi \hbar}$$

である。 $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  の縮退度  $D_n$  は許される  $n_x$  の個数より

$$D_n = \frac{qBL^2}{2\pi \hbar} = \rho_{\text{free}} \frac{\hbar qB}{M} = \rho_{\text{free}} \hbar\omega$$



になる。 $D_n$  はエネルギー間隔  $\hbar\omega$  にある自由粒子の状態数に等しい。

したがって、 $|E - E_n| < \hbar\omega/2$  にあった自由粒子の状態が、磁場により 1 つのランダウ準位  $E = E_n$  に縮退すると見なせる (右図)。粒子を閉じ込めた領域の全磁束  $\Phi$  は  $\Phi = BL^2$  であるから

$$D_n = |\Phi/\Phi_0|, \quad \text{ただし} \quad \Phi_0 = 2\pi \hbar/q = h/q \quad (7.35)$$

と表せる。素電荷  $q = e$  のとき  $\Phi_0/2 = h/2e$  を磁束量子という。

### $\mathbf{A} = \mathbf{A}_3$ の場合

(7.27) の  $H$  を  $H_3$  で表す。この場合

$$P_x = p_x + \frac{qBy}{2}, \quad P_y = p_y - \frac{qBx}{2}, \quad X_c = \frac{x}{2} + \frac{p_y}{qB}, \quad Y_c = \frac{y}{2} - \frac{p_x}{qB} \quad (7.36)$$

であり

$$H_3 = \frac{1}{2M} (P_x^2 + P_y^2) = \frac{1}{2M} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{(qB)^2}{8M} (x^2 + y^2) - \frac{\hbar qB}{2M} L_z \quad (7.37)$$

になる ( $\hbar L_z = xp_y - yp_x$ )。  $\mathbf{A}_3 = \mathbf{A}_1 + \nabla\lambda$ ,  $\lambda = Bxy/2$  であるから、 $H_1$  と  $Y_c = -p_x/qB$  の同時固有関数 (7.34) をゲージ変換 (7.18) した

$$\psi(x, y) = \exp\left(i\frac{qB}{2\hbar}xy + ik_x x\right) \varphi_n(y - y_0) = \exp\left(\frac{iqB}{\hbar} \left(\frac{y}{2} - y_0\right)x\right) \varphi_n(y - y_0) \quad (7.38)$$

は  $H_3$  と (7.36) の  $Y_c$  の同時固有関数である。

**問題 7.2** (7.38) が  $H_3, Y_c$  の同時固有関数になることを実際に確かめよ。

$H_3$  と  $L_z$  は可換であるから、 $H_3$  と  $L_z$  の同次固有関数が存在する。ただし、 $Y_c$  と  $L_z$  は非可換である。(7.36) より

$$x = X_c - \frac{P_y}{qB}, \quad y = Y_c + \frac{P_x}{qB}, \quad p_x = \frac{P_x - qBY_c}{2}, \quad p_y = \frac{P_y + qBX_c}{2}$$



である。これを  $L_z$  に代入すると, (7.29) より  $[X_c, P_y] = [Y_c, P_x] = 0$  であるから

$$L_z = \frac{qB}{2\hbar} (X_c^2 + Y_c^2) - \frac{P_x^2 + P_y^2}{2\hbar qB} = b^\dagger b - a^\dagger a \quad (7.39)$$

になる。(7.32) の状態  $|n, k\rangle$  は  $L_z|n, k\rangle = (k-n)|n, k\rangle$  を満たす。 $\mathbf{A} = \mathbf{A}_3$  の場合,  $|n, k\rangle$  は  $H_3$  と  $L_z$  の同時固有状態である。

$L_z$  を除いた  $H_3$  は角振動数  $\omega' = qB/(2M) = \omega/2$  の 2 次元調和振動子である。(4.60) の  $a_\pm^\dagger$

$$a_\pm^\dagger = \frac{a_1^\dagger \pm ia_2^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad a_i^\dagger = \sqrt{\frac{M\omega'}{2\hbar}} \left( x_i - \frac{i}{M\omega'} p_i \right)$$

を用いると, (4.61) より

$$L_z = a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-, \quad H_3 = \frac{\hbar\omega}{2} (a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_- + 1) - \frac{\hbar qB}{2M} L_z = \hbar\omega (a_-^\dagger a_- + 1/2)$$

になる。 $H_3$  は  $a_-^\dagger a_-$  だけに依存し, 固有値は  $\hbar\omega(n+1/2)$  である。(7.30), (7.31) に (7.36) を代入すれば  $a^\dagger = a_-^\dagger$ ,  $b^\dagger = a_+^\dagger$  である。

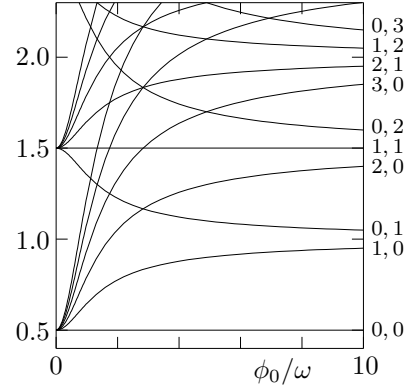
**問題 7.3**  $H = H_3 + M\phi_0^2(x^2 + y^2)/8$  とする。大きさが  $z$  軸からの距離に比例する電場を加えた場合である。 $H$  の固有値は  $m, n = 0, 1, 2, \dots$  として

$$E_{mn} = \frac{\hbar\Omega}{2} (m+n+1) + \frac{\hbar\omega}{2} (n-m), \quad \Omega = \sqrt{\omega^2 + \phi_0^2}$$

になることを示せ。右図に  $E_{mn}/\hbar\Omega$  を  $\phi_0/\omega$  の関数として示す。曲線には  $m, n$  を付けた。

$$\frac{E_{mn}}{\hbar\Omega} = \begin{cases} n + \frac{1}{2} - \frac{n-m}{4} \frac{\phi_0^2}{\omega^2} + \dots, & \phi_0 \ll \omega \\ \frac{m+n+1}{2} + \frac{n-m}{2} \frac{\omega}{\phi_0} + \dots, & \phi_0 \gg \omega \end{cases}$$

である。 $\phi_0 = 0$  のとき無限に縮退する。一方,  $\phi_0 \gg \omega$  では角振動数  $\phi_0/2$  の 2 次元調和振動子になる。



(7.32) で与えられる  $|n, k\rangle$  の波動関数  $\psi_{nk}(x, y)$  を求める。 $a_\pm^\dagger$  を 2 次元の極座標  $(r, \theta)$  で表すと

$$a_\pm^\dagger = \sqrt{\frac{M\omega}{8\hbar}} e^{\pm i\theta} \left( r - \frac{2\hbar}{M\omega} \left( \partial_r \pm \frac{i}{r} \partial_\theta \right) \right) = e^{\pm i\theta} \sqrt{\rho} \left( \frac{1}{2} - \partial_\rho \mp \frac{i}{2\rho} \partial_\theta \right), \quad \rho = \frac{M\omega}{2\hbar} r^2$$

であるから  $F_m(\rho) \equiv \rho^{m/2} e^{\rho/2}$  とすると

$$a_\pm^\dagger e^{im\theta} \varphi(\rho) = e^{i(m\pm 1)\theta} \sqrt{\rho} \left( \frac{1}{2} - \partial_\rho \pm \frac{m}{2\rho} \right) \varphi(\rho) = -e^{i(m\pm 1)\theta} F_{1\pm m}(\rho) \frac{d}{d\rho} \frac{\varphi(\rho)}{F_{\pm m}(\rho)}$$

一般に

$$(a_\pm^\dagger)^k e^{im\theta} \varphi(\rho) = (-1)^k e^{i(m\pm k)\theta} F_{k\pm m}(\rho) \frac{d^k}{d\rho^k} \frac{\varphi(\rho)}{F_{\pm m}(\rho)}$$

である。したがって

$$(a_-^\dagger)^n (a_+^\dagger)^k \varphi(\rho) = (-1)^{k+n} e^{i(k-n)\theta} \rho^{(n-k)/2} e^{\rho/2} \frac{d^n}{d\rho^n} \rho^k \frac{d^k}{d\rho^k} e^{-\rho/2} \varphi(\rho) \quad (7.40)$$

$$= (-1)^{k+n} e^{i(k-n)\theta} \rho^{(k-n)/2} e^{\rho/2} \frac{d^k}{d\rho^k} \rho^n \frac{d^n}{d\rho^n} e^{-\rho/2} \varphi(\rho) \quad (7.41)$$

になる。2 行目では  $a_-^\dagger$  を最初に作用させた (問題 7.4 参照)。規格化した  $\psi_{00}$  は

$$a_{\pm}\psi_{00} = e^{\mp i\theta} \sqrt{\rho} \left( \frac{1}{2} + \partial_{\rho} \mp \frac{i}{2\rho} \partial_{\theta} \right) \psi_{00} = 0, \quad \therefore \quad \psi_{00} = \frac{C_0}{\sqrt{2\pi}} e^{-\rho/2}, \quad C_0 = \sqrt{M\omega/\hbar}$$

であるから, (7.40), (7.41) で  $\varphi(\rho) = e^{-\rho/2}$  とすれば

$$\psi_{nk}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{n!k!}} (a_-^\dagger)^n (a_+^\dagger)^k \psi_{00} = (-1)^n C_0 \sqrt{\frac{n!}{k!}} \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\rho/2} \rho^{m/2} L_n^m(\rho) \quad (7.42)$$

$$= (-1)^k C_0 \sqrt{\frac{k!}{n!}} \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\rho/2} \rho^{-m/2} L_k^{-m}(\rho) \quad (7.43)$$

ただし,  $m = k - n$  は  $L_z$  の固有値,  $L_n^m$  は (17.124) のラゲール多項式である。  $m \geq 0$  のとき  $n_{\rho} = n$ ,  $m \leq 0$  のとき  $n_{\rho} = k$  とし, それぞれ (7.42), (7.43) を用いれば

$$\psi_{n_{\rho}m} = (-1)^{n_{\rho}} \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar} \frac{n_{\rho}!}{(n_{\rho} + |m|)!}} \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\rho/2} \rho^{|m|/2} L_{n_{\rho}}^{|m|}(\rho), \quad \rho = \frac{qB}{2\hbar} r^2 \quad (7.44)$$

$$E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( n_{\rho} + \frac{|m| - m + 1}{2} \right), \quad \omega = \frac{qB}{M} \quad (7.45)$$

になる。(17.135) より  $\psi_{n_{\rho}m}(x, y)$  は規格化されている。

微分方程式を解き (7.44), (7.45) を求める。円柱座標 (16.43), (16.44) を用いると  $\mathbf{A}_3(\mathbf{r}) = Br\mathbf{e}_{\theta}/2$  である。一般に  $\mathbf{A} = A(r)\mathbf{e}_{\theta}$  の場合, (16.45) より ( $z$  は考えない)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \nabla - \frac{iq}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r - \left( \frac{L_z}{r} - \frac{qA(r)}{\hbar} \right)^2 \right), \quad L_z = -i\partial_{\theta} \quad (7.46)$$

になり  $H$  と  $L_z$  の同時固有関数  $\psi = e^{im\theta} R(r)$  が存在する。  $A(r) = Br/2$  とすると  $H_3\psi = E\psi$  は

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2} \right) R + \frac{M\omega^2}{8} r^2 R = \left( E + \frac{\hbar\omega}{2} m \right) R, \quad \omega = \frac{qB}{M}$$

$\rho = (M\omega/2\hbar) r^2$  で表せば

$$\left( \rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{4\rho} - \frac{\rho}{4} + \frac{E}{\hbar\omega} + \frac{m}{2} \right) R = 0$$

である。  $\rho \rightarrow 0, \rho \rightarrow \infty$  での漸近形を取り出して  $R = \rho^{|m|/2} e^{-\rho/2} u(\rho)$  とすると

$$\left( \rho \frac{d}{d\rho^2} + (|m| + 1 - \rho) \frac{d}{d\rho} - a \right) u = 0, \quad a = \frac{|m| - m + 1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}$$

これは (17.102) であるから, 原点で有限な解は  $u(\rho) = CM(a, |m| + 1, \rho)$  になる。  $R \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} 0$  であるためには (17.111) より  $n_{\rho} = 0, 1, 2, \dots$  として  $a = -n_{\rho}$  であるから  $E$  は (7.45) になる。また,  $M(-n_{\rho}, |m| + 1, \rho) \propto L_{n_{\rho}}^{|m|}$  より, 規格化すれば  $\psi$  は (7.44) になる。

**問題 7.4**  $\rho^n \frac{d^n}{d\rho^n} \rho^k \frac{d^k}{d\rho^k} f(\rho) = \rho^k \frac{d^k}{d\rho^k} \rho^n \frac{d^n}{d\rho^n} f(\rho)$  を示せ。これから (7.40) と (7.41) は一致する。

## 7.6 アハラノフ・ボーム効果

空間的に限られた領域に磁場  $\mathbf{B}$  が存在するとき, 磁場が存在しない領域を運動する荷電粒子が, 磁場の影響を受けることがある。これをアハラノフ・ボーム効果 (略して AB 効果) という。これは

古典力学ではありえない純粋な量子力学的効果である。 $B$  を定数として

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \begin{cases} B\mathbf{e}_z, & r \leq a \\ 0, & r > a \end{cases}, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

の場合を考える。円柱座標を用いて  $\mathbf{A} = A(r)\mathbf{e}_\theta$  とする。(16.48) より  $\nabla \times \mathbf{A}$  は  $z$  軸方向のベクトルである。 $xy$  平面上で原点中心で半径  $r$  の円  $C$  に沿って  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  の線積分を行う。 $xy$  平面上における  $C$  の内部を  $S$  とすると、ストークスの定理から

$$2\pi r A(r) = \oint_C \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \int_S dx dy (\nabla \times \mathbf{A})_z = \int_S dx dy B_z = \begin{cases} \pi r^2 B, & r \leq a \\ \pi a^2 B = \Phi_a, & r > a \end{cases}$$

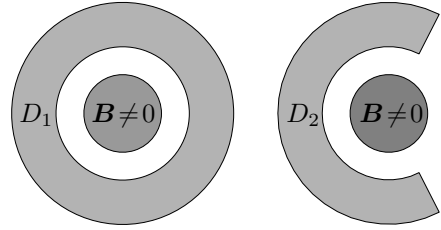
したがって

$$r \leq a \text{ のとき } \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{Br}{2} \mathbf{e}_\theta = (7.26) \text{ の } \mathbf{A}_3, \quad r > a \text{ のとき } \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\Phi_a}{2\pi r} \mathbf{e}_\theta = \nabla \lambda_0(\theta)$$

ただし, (16.45) より  $\lambda_0(\theta) = \Phi_a \theta / (2\pi)$  である。

**問題 7.5** 全空間で  $\mathbf{A} = \Phi_a \mathbf{e}_\theta / (2\pi r)$  の場合  $\nabla \times \mathbf{A} = \Phi_a \delta(x) \delta(y) \mathbf{e}_z$  を示せ。

ゲージ変換すると  $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \lambda$  になるから,  $r > a$  では  $\lambda = -\lambda_0$  とすれば  $\mathbf{A}' = 0$  にできそうである。原点周りに一周できる  $r > a$  の領域  $D_1$  (例えば右図の  $D_1$ ) では,  $\lambda_0(\theta) \neq \lambda_0(\theta + 2\pi)$  であるから,  $\lambda_0$  は  $\mathbf{r}$  の一価関数ではない。一方,  $\lambda(\mathbf{r})$  は  $\mathbf{r}$  の一価関数であるから  $\lambda = -\lambda_0$  とはおけない。あるいは,  $B \neq 0$  の領域を内部に含む閉曲



線に沿った  $\mathbf{A}'$  の線積分は, ストークスの定理より全磁束になるから  $\mathbf{A}' \neq 0$  である。原点周りに一周できない領域  $D_2$  の場合 (例えば図の  $D_2$ ),  $\theta$  は  $0 \leq \theta_1 \leq \theta \leq \theta_2 < 2\pi$  に制限されるため  $\theta + 2\pi$  は範囲外になる。したがって,  $\lambda_0(\theta) \neq \lambda_0(\theta + 2\pi)$  であっても  $\lambda_0$  は一価関数であり  $\lambda = -\lambda_0$  としてよい。 $D_2$  内の任意の閉曲線  $C$  は原点を一周できないから,  $C$  の内部は常に  $B = 0$  である。このため,  $C$  に沿った  $\mathbf{A}$  の線積分は 0 であり, ゲージ変換で  $\mathbf{A}' = 0$  にできる。 $D_2$  は単連結領域 (穴がない領域),  $D_1$  は多重連結領域である。

$B = 0$  の領域  $D$  に粒子を閉じ込めた場合, シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left( \nabla - \frac{iq}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 \psi(r, \theta) = E \psi(r, \theta), \quad \text{ただし } \mathbf{A} = \frac{\Phi_a}{2\pi r} \mathbf{e}_\theta$$

になる。 $z$  軸方向の運動は自由粒子と同じになるから考えない。(7.46) で  $A(r) = \frac{\Phi_a}{2\pi r}$  とすると

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left( \partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} (\partial_\theta - i\alpha)^2 \right) \psi = E \psi, \quad \alpha = \frac{\Phi_a}{\Phi_0}, \quad \Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{q} = (7.35)$$

である。 $e^{i\alpha\theta} \partial_\theta^2 e^{-i\alpha\theta} = (\partial_\theta - i\alpha)^2$  より

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left( \partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\theta^2 \right) \varphi(r, \theta) = E \varphi(r, \theta), \quad \psi(r, \theta) = e^{i\alpha\theta} \varphi(r, \theta) \quad (7.47)$$

になる。外部磁場は微分方程式には現れない。

$D$  として上図の  $D_2$  の場合, 境界条件は境界上で  $\psi = 0$ , つまり  $\varphi = 0$  であるから

$$\varphi(r_1, \theta) = \varphi(r_2, \theta) = 0, \quad \theta_1 \leq \theta \leq \theta_2, \quad \varphi(r, \theta_1) = \varphi(r, \theta_2) = 0, \quad r_1 \leq r \leq r_2$$

である。境界条件も外部磁場に依存しないから、固有値  $E$  は磁場の影響を受けない。領域  $D_2$  では  $\mathbf{A} = 0$  にできる。このときの波動関数が  $\varphi(r, \theta)$  である。 $\mathbf{A} = \nabla\lambda_0$  での波動関数  $\psi(r, \theta)$  はゲージ変換 (7.18) を行えば  $\psi = \exp(iq\lambda_0/\hbar)\varphi = e^{i\alpha\theta}\varphi$  になる。

$D$  が  $D_1 = \{(r, \theta) | r_1 \leq r \leq r_2\}$  の場合、 $\psi(r_1, \theta) = \psi(r_2, \theta) = 0$  であるが、 $\psi$  の一価性  $\psi(r, \theta) = \psi(r, \theta + 2\pi)$  を満たす必要がある ( $D_2$  の場合  $\theta$  に制限があるから、この条件は不要)。  $\varphi$  で表せば

$$\varphi(r_1, \theta) = \varphi(r_2, \theta) = 0, \quad \varphi(r, \theta) = e^{2\pi i\alpha}\varphi(r, \theta + 2\pi) \quad (7.48)$$

になる。 $\alpha = \Phi_a/\Phi_0$  は一般に整数ではないから、外部磁場の影響が現れる。条件 (7.48) を満たす (7.47) の解を求める。 $\varphi(r, \theta) = e^{i\mu\theta}R(r)$  とすると、(7.48) の 2 番目の条件から

$$e^{2\pi i(\mu+\alpha)} = 1, \quad \therefore \mu = m - \alpha, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

でなければならない。このとき  $\psi(r, \theta) = e^{i\alpha\theta}\varphi(r, \theta) = e^{im\theta}R(r)$  は  $L_z$  の固有関数で固有値は  $m$  である。 $z = kr$ ,  $k = \sqrt{2ME/\hbar^2}$  とすれば、(7.47) はベッセルの微分方程式 (17.90)

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + 1 - \frac{\nu^2}{z^2} \right) R = 0, \quad \nu(\Phi_a, m) = |\mu| = |m - \Phi_a/\Phi_0|$$

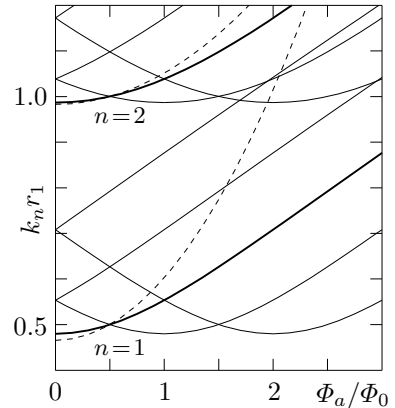
になる。 $R(r)$  は  $J_\nu(kr)$  と  $N_\nu(kr)$  の線形結合になるが  $R(r_1) = 0$  より

$$R(r) = A \left( J_\nu(kr_1)N_\nu(kr) - N_\nu(kr_1)J_\nu(kr) \right)$$

と表せる。もう一つの境界条件  $R(r_2) = 0$ ,  $A \neq 0$  より

$$D_\nu(k) = J_\nu(kr_1)N_\nu(kr_2) - N_\nu(kr_1)J_\nu(kr_2) = 0 \quad (7.49)$$

になる。 $\nu = |m - \Phi_a/\Phi_0|$  を与えると  $k = k_n$ , ( $n = 1, 2, \dots$ ) が決まる。磁場が存在しない領域でも  $E_n = \hbar^2 k_n^2 / (2M)$  は磁場に依存する。これがアハラノフ・ボーム効果 (AB 効果) である。AB 効果は、 $\mathbf{B} \neq 0$  の領域を取り囲む単連結でない領域の場合に生じる。 $\nu(\Phi_a + \Phi_0, m) = \nu(\Phi_a, m - 1)$  になるから、エネルギー固有値は  $\Phi_0$  を周期した  $\Phi_a$  の関数である。 $r_2 - r_1 = 2\pi r_1$  のとき  $k_n(\Phi_a)$  を右図に示す ( $|m| \leq 2$ )。太い曲線は  $m = 0$  である。 $m \neq 0$  の  $k_n$  は、これを横軸方向に  $m$  だけ平行移動する。 $m = 0$  の破線は近似式 (7.51) である。 $\nu = 1/2$  のとき (17.94), (17.70) より



$$\sin k(r_2 - r_1) = 0, \quad R(r) = \frac{2A}{\pi k \sqrt{r_1 r}} \sin k(r - r_1)$$

であるから  $k_n = n\pi/(r_2 - r_1)$  になる。図の場合  $k_n r_1 = n/2$  である。

$k$  の  $\Phi_a$  依存性を近似的に求める。 $kr_1, kr_2 \gg 1$  の場合、 $J_\nu(x)$ ,  $N_\nu(x)$  の漸近形 (17.96) より

$$D_\nu(k) \approx \frac{2}{\pi k \sqrt{r_1 r_2}} \left( \sin k(r_2 - r_1) - \eta \frac{r_2 - r_1}{kr_1 r_2} \cos k(r_2 - r_1) \right), \quad \eta = \frac{1}{2} \left( \nu^2 - \frac{1}{4} \right) \quad (7.50)$$

になるから  $k$  は

$$k(r_2 - r_1) \tan k(r_2 - r_1) \approx \delta, \quad \delta = \frac{(r_2 - r_1)^2}{r_1 r_2} \eta = \frac{(r_2 - r_1)^2}{2r_1 r_2} \left( \nu^2 - \frac{1}{4} \right)$$

で決まる。 $\delta$  が小さい場合  $k(r_2 - r_1) = n\pi + \Delta k$  とすると  $n\pi\Delta k + \dots \approx \delta$  より

$$k_n \approx \frac{n\pi}{r_2 - r_1} \left( 1 + \frac{\delta}{(n\pi)^2} \right) = \frac{n\pi}{r_2 - r_1} + \frac{1}{2n\pi} \frac{r_2 - r_1}{r_1 r_2} \left( \nu^2 - \frac{1}{4} \right) \quad (7.51)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2M} \approx \frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{n\pi}{r_2 - r_1} \right)^2 \left( 1 + \frac{2\delta}{(n\pi)^2} \right) = \frac{\hbar^2}{2M} \left[ \left( \frac{n\pi}{r_2 - r_1} \right)^2 + \frac{1}{r_1 r_2} \left( \nu^2 - \frac{1}{4} \right) \right]$$

である。波動関数  $R(r)$  は (7.50) で  $r_2$  を  $r$  に置き換えればよいから

$$R(r) \approx \frac{C}{\sqrt{r}} \left( \sin k_n(r - r_1) - \eta \frac{r - r_1}{k_n r_1 r} \cos k_n(r - r_1) \right)$$

$n$  が大きく  $r_2 - r_1$  が小さいほど、よい近似である。 $\nu = 1/2$  のときは正確な結果に一致する。

$r_1 = r_2 = R$  として粒子を半径  $R$  のリングに閉じ込めた場合  $E_n$  は発散するが、 $\theta$  の自由度だけ考えるから、 $\nu^2$  に比例する項以外は無視すべきであり

$$E = \frac{\hbar^2 \nu^2}{2MR^2} = E_R \left( m - \frac{\Phi_a}{\Phi_0} \right)^2, \quad E_R = \frac{\hbar^2}{2MR^2} \quad (7.52)$$

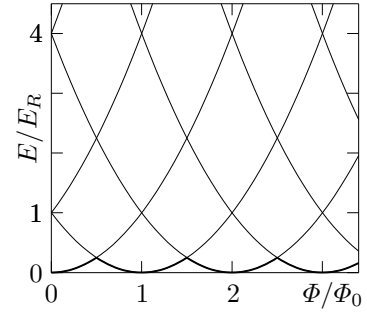
になる。最初から解き直してみると、 $\theta$  以外は定数であるから (16.45) より  $\nabla = e_\theta \partial_\theta / R$  になる。

$$\mathbf{A}(\theta) = \frac{\Phi}{2\pi R} \mathbf{e}_\theta, \quad \Phi = \begin{cases} \pi R^2 B, & R \leq a \\ \pi a^2 B, & R \geq a \end{cases} \quad (7.53)$$

である。 $\mathbf{e}_\theta \cdot (\partial_\theta \mathbf{e}_\theta) = 0$  より

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \nabla - \frac{iq}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 = E_R \left( -i\partial_\theta - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2$$

になる。 $L_z$  の固有関数  $\psi(\theta) = e^{im\theta}/\sqrt{2\pi}$  は  $H$  の固有関数でもある。エネルギー固有値  $E$  は  $E = E_R(m - \Phi/\Phi_0)^2$  になり (7.52) と一致する。図に  $E/E_R$  を  $\Phi/\Phi_0$  の関数として示す。 $E$  は  $\Phi_0$  を周期として  $\Phi$  に依存し、 $R > a$  でリングが磁場の外部にあっても  $E$  は磁場の影響を受ける。太い曲線



は最低エネルギー、つまり、基底状態のエネルギーである。

以下では、同時固有関数を使わずに求める。(7.47) と同様にして ( $\alpha = \Phi/\Phi_0$ )

$$H = -E_R e^{i\alpha\theta} \partial_\theta^2 e^{-i\alpha\theta}, \quad \therefore -E_R \frac{d^2}{d\theta^2} (e^{-i\alpha\theta} \psi(\theta)) = E e^{-i\alpha\theta} \psi(\theta),$$

である。 $E = 0$  の場合  $\psi(\theta) = e^{i\alpha\theta}(C + D\theta)$  であるが、 $\psi(\theta) = \psi(\theta + 2\pi)$  より  $e^{2\pi i\alpha} = 1$ ,  $D = 0$  である。 $\alpha = m$  のとき  $E = 0$ ,  $\psi(\theta) = e^{im\theta}/\sqrt{2\pi}$  という解が存在する。 $E \neq 0$  の場合

$$\psi(\theta) = e^{i\alpha\theta} (C e^{ik\theta} + D e^{-ik\theta}), \quad k = \sqrt{E/E_R} \quad (7.54)$$

である。 $\psi(\theta) = \psi(\theta + 2\pi)$  より

$$e^{2ik\theta} (1 - e^{2\pi i(\alpha+k)}) C + (1 - e^{2\pi i(\alpha-k)}) D = 0$$

が任意の  $\theta$  で成り立つ必要がある。 $k \neq 0$  より  $e^{2ik\theta}$  は定数ではないから、 $C = 0$  かつ  $D = 0$  以外の解が存在するには  $e^{2\pi i(\alpha+k)} = 1$  または  $e^{2\pi i(\alpha-k)} = 1$  である。 $k > 0$  より  $k = |m - \alpha|$  になり

$$\psi(\theta) = C e^{im\theta} + D e^{i(2\alpha-m)\theta}, \quad E = E_R k^2 = E_R (m - \alpha)^2$$

$2\alpha \neq \text{整数}$  のとき  $\psi(\theta) = \psi(\theta + 2\pi)$  より  $D = 0$  である。 $2\alpha$  が整数の場合、 $m' = 2\alpha - m$  とすれば  $m' \neq m$ ,  $(m - \alpha)^2 = (m' - \alpha)^2$  であり  $e^{im\theta}$  と  $e^{im'\theta}$  は縮退する。 $H$  の固有関数  $\psi(\theta)$  として2つの線形結合ではなく  $e^{im\theta}$ ,  $e^{im'\theta}$  を採用すれば、任意の  $\alpha$  に対して  $\psi(\theta) = e^{im\theta}/\sqrt{2\pi}$  である。

問題 7.6  $\theta = 0$  でリングを切断する。この場合  $\psi(0) = \psi(2\pi) = 0$  を境界条件とする。

$$E = \frac{\hbar^2}{2MR^2} \left(\frac{m}{2}\right)^2, \quad \psi(\theta) = \frac{e^{i\alpha\theta}}{\sqrt{\pi R}} \sin \frac{m\theta}{2}, \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

を示せ。 $E$  は磁場に依存しない。無限に深い井戸型ポテンシャルの固有値 (2.19) と比較せよ。

### 一般論

固有値と固有関数が  $\Phi$  の周期関数になることは領域  $D$  の形に依らず一般的に成り立つ。一般に、 $B \neq 0$  である領域を取り囲む  $B = 0$  の領域を  $D$  とする。 $D$  内では  $B = \nabla \times A = 0$  であるから  $A = \nabla \lambda$  と表せる。 $D$  内で  $P$  を始点とした  $B \neq 0$  の領域を囲む閉曲線  $C$  で線積分を行う。

$$\oint_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} = \oint_C d\mathbf{r} \cdot \nabla \lambda = \int d\lambda = \lambda(P') - \lambda(P)$$

ここで  $\lambda(P')$  は 1 周して再び  $P$  に戻ったときの  $\lambda$  の値である。ストークスの定理から

$$\oint_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} = \int_S d\mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \Phi, \quad \therefore \lambda(P') - \lambda(P) = \Phi$$

$\Phi \neq 0$  であるから  $\lambda(\mathbf{r})$  は  $\mathbf{r}$  の 1 価関数ではない。 $U(\mathbf{r}) = e^{iq\lambda(\mathbf{r})/\hbar}$  とすると

$$U^\dagger (\nabla - iq\mathbf{A}/\hbar) U = U^\dagger (\nabla U) + U^\dagger U \nabla - iq\mathbf{A}/\hbar = \nabla, \quad \therefore U^\dagger (\nabla - iq\mathbf{A}/\hbar)^2 U = \nabla^2$$

であるから、シュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left( \nabla - \frac{iq}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

は  $\psi(\mathbf{r}) = U\varphi(\mathbf{r}) = e^{iq\lambda(\mathbf{r})/\hbar}\varphi(\mathbf{r})$  とすると

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (7.55)$$

になる。具体例と同様に、シュレーディンガー方程式から  $\mathbf{A}$  を消去できる。ところで、 $\psi(\mathbf{r})$  は  $\mathbf{r}$  の 1 価関数  $\psi(P') = \psi(P)$  であるから

$$e^{iq\lambda(P')/\hbar}\varphi(P') = e^{iq\lambda(P)/\hbar}\varphi(P), \quad \therefore \varphi(P') = \exp\left(-2\pi i \Phi/\Phi_0\right)\varphi(P), \quad \Phi_0 = 2\pi\hbar/q \quad (7.56)$$

(7.55) は (7.56) を満たすように解かなければならない。したがって、 $E$  は  $\Phi$  の関数になる。これが一般的な AB 効果である。(7.56) の条件は  $\Phi$  について周期的でその周期は  $\Phi_0$  になるから、 $E$  も周期  $\Phi_0$  で  $\Phi$  に依存する。

## 7.7 モノポール

現在までのところ、磁荷あるいはモノポールの存在は確認されていない。しかし、存在するならば、Maxwell 方程式は電場と磁場について対称的な形式になる。例えば、電荷密度と磁荷密度をそれぞれ  $\rho_e(\mathbf{r}, t)$ ,  $\rho_m(\mathbf{r}, t)$  とすれば、 $\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_e(\mathbf{r}, t)$ ,  $\nabla \cdot \mathbf{B} = \rho_m(\mathbf{r}, t)$  である。

原点に磁荷  $q_m$  が静止しているとき  $\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) = q_m \delta(\mathbf{r})$  である。この場合  $q_m$  の次元は磁束と同じである。この方程式の解は、原点に点電荷が存在する電場と同様に

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{q_m}{4\pi} \frac{\mathbf{r}}{r^3}, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

である。この系を量子力学で扱うためには、 $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  を表すベクトル・ポテンシャル  $\mathbf{A}$

$$\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{q_m}{4\pi} \frac{\mathbf{r}}{r^3} \quad (7.57)$$

を求める必要がある。 $\mathbf{A}$  が任意の点で微分可能ならば恒等式  $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = 0$  が成り立つが、上式を満たす  $\mathbf{A}$  は  $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla \cdot \mathbf{B} = q_m \delta(\mathbf{r})$  になるから特異性をもつ。

3次元極座標を用いて  $\mathbf{A} = A(\theta)\mathbf{e}_\phi/r$  とすると (16.42) より ( $A_r = A_\theta = 0$ ,  $A_\phi = A/r$ )

$$\nabla \times \mathbf{A} = \frac{\mathbf{e}_r}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} (A \sin \theta) = \frac{q_m}{4\pi} \frac{\mathbf{e}_r}{r^2}, \quad \therefore \frac{d}{d\theta} (A \sin \theta) = \frac{q_m}{4\pi} \sin \theta$$

これから  $C$  を任意定数として

$$A(\theta) = \frac{q_m}{4\pi} \frac{C - \cos \theta}{\sin \theta}, \quad \text{つまり} \quad \mathbf{A} = \frac{q_m}{4\pi} \frac{C - \cos \theta}{r \sin \theta} \mathbf{e}_\phi = \frac{q_m}{4\pi} \frac{Cr - z}{r} \mathbf{G}, \quad \mathbf{G} = \frac{\mathbf{e}_\phi}{r \sin \theta}$$

$\mathbf{A}$  は  $z$  軸 ( $\sin \theta = 0$ ) 上で発散する。

$$\nabla \times \mathbf{A} = -\frac{q_m}{4\pi} \left( \nabla \frac{z}{r} \right) \times \mathbf{G} + \frac{q_m}{4\pi} \frac{Cr - z}{r} \nabla \times \mathbf{G} = \mathbf{B} + \frac{q_m}{4\pi} \frac{Cr - z}{r} \nabla \times \mathbf{G}$$

である。

$$\mathbf{G} = -\frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \mathbf{e}_x + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \mathbf{e}_y = -\frac{y}{x^2 + y^2} \mathbf{e}_x + \frac{x}{x^2 + y^2} \mathbf{e}_y = \frac{1}{2} \mathbf{e}_z \times \nabla \log(x^2 + y^2)$$

と (16.30) より

$$\nabla \times \mathbf{G} = \frac{1}{2} (\mathbf{e}_z \nabla^2 - \mathbf{e}_z \cdot \nabla \nabla) \log(x^2 + y^2) = \frac{1}{2} \mathbf{e}_z \nabla^2 \log(x^2 + y^2) = 2\pi \mathbf{e}_z \delta(x) \delta(y)$$

になるから (問題 7.5 参照)

$$\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B} + \mathbf{B}_D, \quad \mathbf{B}_D = \frac{q_m}{2} \left( C - \frac{z}{|z|} \right) \delta(x) \delta(y) \mathbf{e}_z$$

である。全領域では (7.57) を満たさない。 $C \neq \pm 1$  の場合、 $z$  軸上の任意の点で  $\mathbf{B}_D$  は発散するが、 $C = \pm 1$  では  $z$  軸上で  $z \gtrless 0$  のとき  $\mathbf{B}_D = 0$  になる。そこで、 $C = \pm 1$  とした  $\mathbf{A}$  を  $\mathbf{A}_\pm$  で表すと

$$\mathbf{A}_\pm(\mathbf{r}) = \frac{q_m}{4\pi} \frac{\pm 1 - \cos \theta}{r \sin \theta} \mathbf{e}_\phi, \quad \nabla \times \mathbf{A}_\pm = \mathbf{B} + \mathbf{B}_D^{(\pm)}, \quad \mathbf{B}_D^{(\pm)} = \pm q_m \theta(\mp z) \delta(x) \delta(y) \mathbf{e}_z \quad (7.58)$$

である。 $\mathbf{B}_D^{(\pm)} \neq 0$  の領域  $D_\pm$  は  $D_\pm = \{(0, 0, z) | z \gtrless 0\}$  になる。

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \mathbf{A}_+(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \notin D_+ \\ \mathbf{A}_-(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \notin D_- \end{cases}$$

とすれば、全領域で (7.57) が成り立つ。 $\mathbf{A} = \mathbf{A}_\pm$  であるシュレーディンガー方程式の解を  $\psi_\pm(\mathbf{r})$  とする。 $z$  軸を除いた共通領域では  $\mathbf{A}_+$  と  $\mathbf{A}_-$  は同一の磁場  $\mathbf{B}$  を与えるから、 $\psi_+$  と  $\psi_-$  はゲージ変換 (7.18) で結ばれる。

$$\mathbf{A}_+ - \mathbf{A}_- = \frac{q_m}{2\pi} \frac{\mathbf{e}_\phi}{r \sin \theta} = \nabla \lambda(\phi), \quad \lambda(\phi) = \frac{q_m}{2\pi} \phi$$

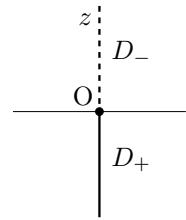
より

$$\psi_+(\mathbf{r}) = U(\phi) \psi_-(\mathbf{r}), \quad U(\phi) = \exp\left(\frac{iq}{\hbar} \lambda\right) = \exp\left(i \frac{qq_m}{2\pi\hbar} \phi\right)$$

である。 $\psi_\pm$  は一価関数であるから、 $U(\phi)$  も一価関数  $U(\phi) = U(\phi + 2\pi)$  である。したがって

$$\frac{qq_m}{2\pi\hbar} = n, \quad \text{あるいは} \quad q_m = n \Phi_0, \quad \text{ただし} \quad n = \text{任意整数}$$

でなければならない。これを磁荷に関するディラックの量子化条件という。モノポールが存在するならば、電荷と磁荷は任意の値をとることはできない。



## 7.8 ゼーマン効果

水素型原子に一樣磁場  $\mathbf{B}$  が作用する場合, (7.10) より電子 ( 電荷  $= -e$  ) のハミルトニアンは

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(r) + \mu \mathbf{B} \cdot (g_\ell \mathbf{L} + g_s \mathbf{S}) + \frac{e^2}{2M} \mathbf{A}^2$$

ただし,  $V(r)$  はクーロン・ポテンシャルであり

$$\mu = \frac{e\hbar}{2M} = \text{ボア磁子}, \quad \mathbf{A}^2 = \frac{(\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2}{4} = \frac{1}{4} (B^2 r^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})^2)$$

である。磁場は弱いとして  $\mathbf{A}^2$  の項を無視すると

$$H = H_0 + H_B, \quad H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(r) + V_{LS} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad H_B = \mu \mathbf{B} \cdot (g_\ell \mathbf{L} + g_s \mathbf{S}) \quad (7.59)$$

になる。ただし, (6.80) のスピン・軌道相互作用  $V_{LS} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  を加えた。簡単のため  $V_{LS}$  は定数とする。磁場方向を  $z$  軸にとると

$$H_B = \mu B (g_\ell L_z + g_s S_z) = \mu B (g_\ell J_z + (g_s - g_\ell) S_z), \quad \mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (7.60)$$

である。 $H_0$  の固有関数  $\psi_{n\ell jm}(\mathbf{r})$  と固有値  $E_{n\ell j}$  は (6.84) より

$$\psi_{n\ell jm}(\mathbf{r}) = \frac{\chi_{n\ell}(r)}{r} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta, \phi), \quad E_{n\ell j} = E_n^{(0)} + \begin{cases} \frac{\ell}{2} V_{LS}, & j = \ell + 1/2 \\ -\frac{\ell+1}{2} V_{LS}, & j = \ell - 1/2 \end{cases}$$

ここで,  $E_n^{(0)}$  と  $\chi_{n\ell}$  はクーロン・ポテンシャルのエネルギー固有値 (6.30) と動径方向波動関数 (6.36) であり,  $\mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta, \phi)$  は  $\mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}^2, J_z$  の同時固有関数 (5.115) である。

$H_B$  は  $\mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, J_z$  とは可換であるが,  $\mathbf{J}^2$  とは非可換である。したがって,  $H$  の固有関数  $\Psi$  は  $\mathbf{J}^2$  の固有関数ではないが,  $\mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, J_z$  との同時固有関数にでき

$$\Psi = a_+ \psi_+ + a_- \psi_-, \quad \text{ただし} \quad \psi_\pm = \psi_{n\ell, j=\ell \pm 1/2, m}, \quad E_\pm = E_{n\ell, j=\ell \pm 1/2}$$

とおける ( $V_{LS}$  が  $r$  に依存する場合,  $\Psi = \sum_{n,j} a_{nj} \psi_{n\ell jm}$  とする必要がある)。  $m = \pm(\ell + 1/2)$  のとき  $j = \ell - 1/2$  の状態は存在しないから  $a_- = 0$  である。

$$H_0 \psi_\pm = E_\pm \psi_\pm, \quad H_B \psi_\pm = b(m + S_z) \psi_\pm, \quad \text{ただし} \quad b = \mu B$$

より ( $g_\ell = 1, g_s = 2$ ),  $H\Psi = E\Psi$  は

$$a_+ (E_+ + bm + bS_z - E) \psi_+ + a_- (E_- + bm + bS_z - E) \psi_- = 0$$

になる。 $\psi_\pm^\dagger$  をかけ積分すると

$$\begin{pmatrix} E_+ + b\langle \psi_+ | S_z | \psi_+ \rangle + bm - E & b\langle \psi_+ | S_z | \psi_- \rangle \\ b\langle \psi_- | S_z | \psi_+ \rangle & E_- + b\langle \psi_- | S_z | \psi_- \rangle + bm - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} = 0 \quad (7.61)$$

である。(5.115) より

$$\langle \psi_\pm | S_z | \psi_\pm \rangle = \int d\Omega \mathcal{Y}_{\ell, j=\ell \pm 1/2, m}^\dagger \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \mathcal{Y}_{\ell, j=\ell \pm 1/2, m} = \pm \frac{m}{2\ell + 1} \quad (7.62)$$

$$\langle \psi_+ | S_z | \psi_- \rangle = \langle \psi_- | S_z | \psi_+ \rangle = -\frac{\sqrt{(\ell + 1/2)^2 - m^2}}{2\ell + 1} \quad (7.63)$$



である。

$|m| = \ell + 1/2$  のとき  $a_- = 0$  であるから  $E$  を  $E_m^{(+)}$  で表すと

$$E_m^{(+)} = E_+ + b \langle \psi_+ | S_z | \psi_+ \rangle + bm = E_n^{(0)} + \frac{\ell}{2} V_{LS} + b(m \pm 1/2) \quad (7.64)$$

$\mathcal{Y}_{\ell, j=\ell+1/2, m=\pm(\ell+1/2)}$  は球面調和関数  $Y_{\ell, m_\ell=\pm\ell}$  と  $\sigma_z$  の固有状態の直積であるから

$$H_B | \psi_+ \rangle = \mu B (\pm \ell \pm 1) | \psi_+ \rangle = \pm \mu B (\ell + 1) | \psi_+ \rangle$$

になる。この場合の  $|\psi_+ \rangle$  だけは  $H_B$  の固有関数である。

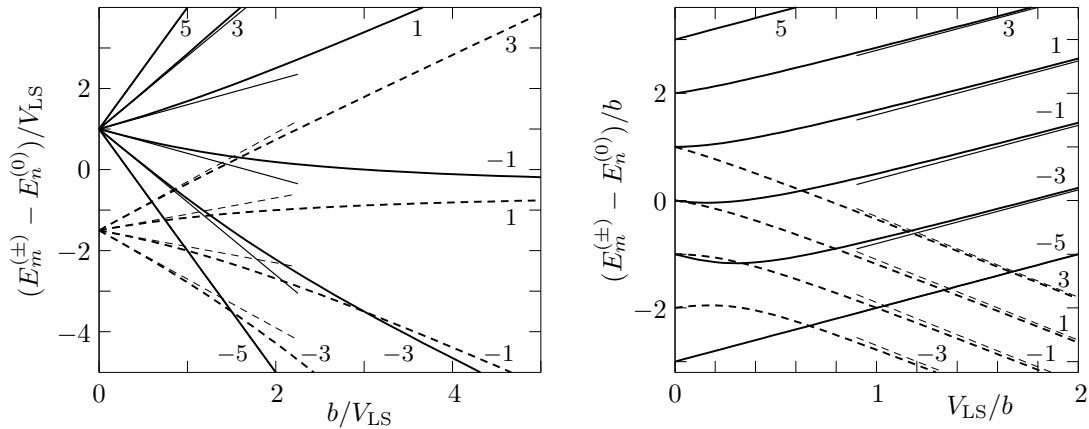
$|m| \neq \ell + 1/2$  の場合, (7.61) の  $2 \times 2$  行列の行列式  $= 0$  より

$$\begin{aligned} & \left( E_+ + \frac{bm}{2\ell+1} + bm - E \right) \left( E_- - \frac{bm}{2\ell+1} + bm - E \right) - b^2 \left( \frac{1}{4} - \frac{m^2}{(2\ell+1)^2} \right) \\ &= (E - bm)^2 - (E_+ + E_-)(E - bm) + E_+ E_- - \frac{bm}{2\ell+1}(E_+ - E_-) - \frac{b^2}{4} = 0 \end{aligned}$$

したがって

$$E_m^{(\pm)} = E_n^{(0)} - \frac{V_{LS}}{4} + bm \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\ell + 1/2)^2 V_{LS}^2 + 2V_{LS}bm + b^2}, \quad b = \mu B \quad (7.65)$$

$\ell = 2$  の場合,  $E_m^{(\pm)}$  の  $B$  依存性を図示する下図になる。左側は  $(E_m^{(\pm)} - E_n^{(0)})/V_{LS}$  を  $b/V_{LS}$  の関数として, 右側は  $(E_m^{(\pm)} - E_n^{(0)})/b$  を  $V_{LS}/b$  の関数として示した。太い実線は  $E_m^{(+)}$ , 破線は  $E_m^{(-)}$  であり, 曲線につけた値は  $2m$  である。 $n$  と  $\ell$  を与えると,  $E_n^{(0)}$  は  $2(2\ell+1)$  重に縮退しているが ( $2$  はスピン状態による縮退度), スピン・軌道相互作用により  $j = \ell + 1/2$  と  $j = \ell - 1/2$  に分離し, それぞれ  $2j+1$  重に縮退する。これに磁場が作用すると, 縮退は完全になくなり  $2(2\ell+1)$  個のエネルギー準位に分離する。



磁場が弱く  $|V_{LS}| \gg |b|$  のとき (7.65) は

$$\begin{aligned} E_m^{(\pm)} &= E_n^{(0)} - \frac{V_{LS}}{4} + bm \pm \frac{2\ell+1}{4} V_{LS} \left( 1 + \left( \frac{2}{2\ell+1} \right)^2 \frac{bm}{V_{LS}} + \dots \right) \\ &= E_n^{(0)} + \frac{\pm(2\ell+1) - 1}{4} V_{LS} + \left( 1 \pm \frac{1}{2\ell+1} \right) bm + \dots \end{aligned} \quad (7.66)$$

(7.65) は  $|m| \neq \ell + 1/2$  の場合であるが, 上式の  $E_m^{(+)}$  は  $|m| = \ell + 1/2$  のとき正確な (7.64) に一致する。また,  $b = 0$  のとき  $E_m^{(\pm)} = E_{n\ell, j=\ell \pm 1/2}$  になる。上図の細い直線は近似式 (7.66) である。隣り合う準位の間隔は

$$E_{m+1}^{(\pm)} - E_m^{(\pm)} \approx \left(1 \pm \frac{1}{2\ell+1}\right) \mu B$$

であり  $m$  に依存せず等間隔になる。この間隔の状態依存性は  $\ell$  だけで  $H_0$  の他の情報には無関係である。エネルギー準位が  $B$  に比例して分離することを**ゼーマン効果**という。

$|V_{LS}| \ll |b|$  の場合,  $|m| \neq \ell + 1/2$  のとき

$$\begin{aligned} E_m^{(\pm)} &= E_n^{(0)} + \left(m \pm \frac{1}{2}\right) \mu B \pm \left(m \mp \frac{1}{2}\right) \frac{V_{LS}}{2} + \cdots \\ &\approx E_n^{(0)} + \left(m \pm \frac{1}{2}\right) \mu B \end{aligned} \quad (7.67)$$

$m = \pm(\ell + 1/2)$  のとき (7.64) より

$$E_m^{(+)} \approx E_n^{(0)} + \left(m \pm \frac{1}{2}\right) \mu B$$

になる。 $m = \ell - 3/2, \dots, -\ell + 1/2$  のとき  $E_m^{(+)} \approx E_{m+1}^{(-)}$  であるから 2 重に縮退し, エネルギー準位は  $2\ell + 3$  個になる (前の右図で  $V_{LS}/b = 0$ )。これを**パッシェン・バック効果**という。エネルギー準位の間隔は  $\mu B$  である。

(7.62) より (7.60) の期待値は

$$\langle \psi_{n\ell jm} | H_B | \psi_{n\ell jm} \rangle = \left( g_\ell \pm \frac{g_s - g_\ell}{2\ell + 1} \right) \mu B m, \quad j = \ell \pm 1/2$$

で与えられる。括弧内はランダウの  $g$  因子 (5.154) である。 $|V_{LS}| \gg |\mu B|$  での近似式 (7.66) は

$$E_m^{(\pm)} \approx E_{n\ell j} + \langle \psi_{n\ell jm} | H_B | \psi_{n\ell jm} \rangle \quad (7.68)$$

と表せる。212 ページで示すように,  $H_B$  を 1 次の摂動とするとこれが求まる。一方, (7.67) はスピン・軌道相互作用  $V_{LS} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  を 1 次の摂動とした結果である。

## 8 定常状態の近似法

### 8.1 摂動展開

ハミルトニアン  $H$  の固有関数と固有値が解析的に求められない場合, 数値的に求めることになるが ( 50 ページ, 170 ページ参照 ), 数値的に正確な解が求まったとしても, 系の物理的性質が理解できたとは一概には言えない。数値計算が容易に行える現在でも, 近似の方法は重要である。

ハミルトニアン  $H$  は 2 つの部分  $H = H_0 + H'$  からなり,  $H_0$  の固有値  $E_n$  と固有関数  $|n\rangle$  は求まっているとする:

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad \langle m | n \rangle = \delta_{mn} \quad (8.1)$$

$E_n$  は連続的な値をとることもある。連続的固有値に対しては  $n$  の和を積分で置き換えればよいが, 表記を簡単にするため  $E_n$  は離散的とする。 $H'$  が  $H_0$  に比べて小さい場合,  $H_0$  を無摂動ハミルトニアン,  $H'$  を摂動ハミルトニアンという。 $H$  の固有関数を  $|\psi\rangle$ , 固有値を  $W$  とすると

$$H|\psi\rangle = W|\psi\rangle \quad (8.2)$$

である。110 ページの繰り返しになるが

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad (8.3)$$

と展開できる。これを (8.2) に代入し  $|m\rangle$  との内積をとれば

$$\sum_n \left( (E_m - W) \delta_{mn} + h_{mn} \right) c_n = 0, \quad \text{ただし} \quad h_{mn} = \langle m | H' | n \rangle$$

行列で表せば

$$\begin{pmatrix} E_1 - W + h_{11} & h_{12} & h_{13} & \cdots \\ h_{21} & E_2 - W + h_{22} & h_{23} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0 \quad (8.4)$$

自明な解 ( すべての  $c_n = 0$  ) 以外の解が存在するには, 左辺のエルミート行列の行列式が

$$\det \left( (E_m - W) \delta_{mn} + h_{mn} \right) = 0 \quad (8.5)$$

でなければならない。これから  $H$  の固有値  $W$  が求まり, (8.4) から固有状態が得られる。(8.5) を永年方程式という。以下では,  $W$  と展開係数  $c_n$  を  $H'$  のべき級数として求める。これをレイリー・シュレーディンガーの摂動論という。他の形式にブリルアン・ウィグナーの摂動論がある ( 199 ページ )。

$H'$  のべき展開を見やすくするため, パラメータ  $\lambda$  を導入して

$$H_\lambda |\psi\rangle = W |\psi\rangle, \quad H_\lambda = H_0 + \lambda H' \quad (8.6)$$

を考える。 $|\psi\rangle$  と  $W$  を  $\lambda$  について展開し

$$|\psi\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k |\psi_k\rangle, \quad W = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k W_k \quad (8.7)$$

とする。 $\lambda = 1$  の場合が求めたい結果である。(8.6) に代入すると

$$W |\psi\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^{i+j} W_i |\psi_j\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \lambda^k W_{k-j} |\psi_j\rangle$$

より

$$\sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k H_0 |\psi_k\rangle + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k H' |\psi_{k-1}\rangle - \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \sum_{j=0}^k W_{k-j} |\psi_j\rangle = 0$$

$\lambda^k$  の係数は 0 になるから

$$(H_0 - W_0) |\psi_0\rangle = 0 \quad (8.8)$$

$$(H_0 - W_0) |\psi_1\rangle = (W_1 - H') |\psi_0\rangle \quad (8.9)$$

$$(H_0 - W_0) |\psi_2\rangle = (W_1 - H') |\psi_1\rangle + W_2 |\psi_0\rangle \quad (8.10)$$

$$(H_0 - W_0) |\psi_k\rangle = (W_1 - H') |\psi_{k-1}\rangle + \sum_{j=0}^{k-2} W_{k-j} |\psi_j\rangle, \quad k \geq 2 \quad (8.11)$$

を得る。 $H_0$  の固有関数である  $|\psi_0\rangle$  は規格化条件  $\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$  を満たすとする。

(8.9)~(8.11) から求めた  $|\psi_k\rangle$  に対して、 $\alpha_k$  を任意定数として  $|\psi'_k\rangle = |\psi_k\rangle + \alpha_k |\psi_0\rangle$  とすると

$$(H_0 - W_0) |\psi'_k\rangle = (H_0 - W_0) |\psi_k\rangle + \alpha_k (H_0 - W_0) |\psi_0\rangle = (H_0 - W_0) |\psi_k\rangle$$

(8.9)~(8.11) の左辺は変わらないから、 $|\psi_k\rangle$  には  $\alpha_k |\psi_0\rangle$  だけの不定性がある。この不定性は摂動の各次数ごとに規格化を要請すれば除去できるが (198 ページ参照), ここでは別の方法を採用する。 $\alpha_k$  を  $\langle \psi_0 | \psi'_k \rangle = \langle \psi_0 | \psi_k \rangle + \alpha_k = 0$  で決める。 $|\psi'_k\rangle$  を改めて  $|\psi_k\rangle$  と書くことにすると

$$\langle \psi_0 | \psi_k \rangle = 0, \quad k \geq 1 \quad (8.12)$$

である。 $\langle \psi_0 | (H_0 - W_0) |\psi_k\rangle = \langle \psi_k | (H_0 - W_0) |\psi_0\rangle^* = 0$  及び (8.12) より, (8.9), (8.11) と  $|\psi_0\rangle$  の内積をとれば

$$0 = -\langle \psi_0 | H' | \psi_{k-1} \rangle + W_k \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle, \quad \therefore W_k = \langle \psi_0 | H' | \psi_{k-1} \rangle, \quad k \geq 1 \quad (8.13)$$

である。あるいは, (8.6) と  $|\psi_0\rangle$  の内積をとれば  $\langle \psi_0 | \psi \rangle = \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$  より

$$W = \langle \psi_0 | (H_0 + \lambda H') | \psi \rangle = W_0 + \lambda \langle \psi_0 | H' | \psi \rangle = W_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \langle \psi_0 | H' | \psi_{k-1} \rangle$$

であるから (8.13) を得る。 $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + |\phi\rangle$  とすると  $\langle \psi | \psi \rangle = 1 + \langle \phi | \phi \rangle > 1$  になるから  $|\psi\rangle$  は規格化されていない。規格化した状態  $|\psi\rangle_N$  は

$$|\psi\rangle_N = \sqrt{Z} |\psi\rangle, \quad Z^{-1} = \langle \psi | \psi \rangle \quad (8.14)$$

である。 $Z = |\langle \psi_0 | \psi \rangle|^2$  は摂動を考慮した状態  $|\psi\rangle_N$  での  $|\psi_0\rangle$  の割合を表す。

## 8.2 縮退していない場合 (1 次の摂動)

(8.8) から  $|\psi_0\rangle$  は  $H_0$  の固有関数のどれかである。そこで  $|\psi_0\rangle = |i\rangle$ ,  $W_0 = E_i$  とする。エネルギー固有値  $E_i$  が縮退している場合,  $|\psi_0\rangle$  は縮退した固有関数の線形結合になり  $|\psi_0\rangle = |i\rangle$  とは限らない。ここでは  $E_i$  は縮退していないとする。(8.13) で  $k=1$  とすると

$$W_1 = \langle \psi_0 | H' | \psi_0 \rangle = \langle i | H' | i \rangle \quad (8.15)$$

エネルギー固有値に対する 1 次の補正は, 摂動項  $H'$  の期待値で与えられる。

次に,  $|\psi_1\rangle$  を求める。 $|\psi_1\rangle$  を  $H_0$  の固有関数で展開して

$$|\psi_1\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

とする。展開式を (8.9) に代入し  $|m\rangle$  との内積をとると,  $\langle m|H_0|n\rangle = E_n\langle m|n\rangle = E_m\delta_{mn}$  より

$$c_m(E_m - E_i) = W_1\delta_{mi} - \langle m|H'|i\rangle \quad (8.16)$$

になる。 $m = i$  のとき (8.15) が求まるが  $c_i$  は決まらない。条件 (8.12) より  $\langle i|\psi_1\rangle = c_i = 0$  である。 $|i\rangle$  は縮退していないから  $m \neq i$  のとき  $E_m \neq E_i$  になり

$$c_m = \frac{\langle m|H'|i\rangle}{E_i - E_m}, \quad m \neq i \quad (8.17)$$

したがって

$$|\psi_1\rangle = \sum_{n \neq i} |n\rangle \frac{\langle n|H'|i\rangle}{E_i - E_n}, \quad |\psi\rangle = |i\rangle + |\psi_1\rangle = |i\rangle + \sum_{n \neq i} |n\rangle \frac{\langle n|H'|i\rangle}{E_i - E_n} \quad (8.18)$$

である。 $\langle i|\psi_1\rangle = \langle \psi_1|i\rangle^* = 0$  より  $\langle \psi|\psi\rangle = 1 + \langle \psi_1|\psi_1\rangle$  になる。 $\langle \psi_1|\psi_1\rangle$  は  $H'$  について 2 次であり 1 次近似では無視すべきであるから, (8.18) は 1 次近似では規格化されている。

1 次近似がよい近似である条件は  $|i\rangle$  に比べて  $|\psi_1\rangle$  が小さいことである。上の式から

$$j \neq i \text{ のとき } \left| \frac{\langle j|H'|i\rangle}{E_i - E_j} \right| \ll 1 \quad (8.19)$$

がその条件になる。したがって, 摂動  $H'$  が小さくても,  $E_i$  に非常に近い  $E_j$  が存在するならば, ここで扱った方法は適用できない。このような場合, 次ページのようにすればよい。

(8.18) をコンパクトな表現で表そう。 $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$  であるから  $n \neq i$  のとき

$$\frac{1}{E_i - E_n}|n\rangle = \frac{1}{E_i - H_0}|n\rangle$$

である (演算子の関数については 12 ページ)。 $1/(E_i - E_n)$  は数値であるから, これと  $|n\rangle$  の順番は気にする必要はない。しかし,  $1/(E_i - H_0)$  は演算子であるから,  $1/(E_i - H_0)$  は作用する  $|n\rangle$  の左側になければならない。(8.18) は

$$|\psi_1\rangle = \sum_{n \neq i} \frac{1}{E_i - H_0}|n\rangle \langle n|H'|i\rangle = \frac{1}{E_i - H_0} \sum_{n \neq i} |n\rangle \langle n|H'|i\rangle \quad (8.20)$$

になる。 $1/(E_i - E_n)$  は  $n$  に依存するが,  $1/(E_i - H_0)$  は  $n$  に依存しないから和の前に出せる。更に

$$Q_i|n\rangle = (1 - \delta_{ni})|n\rangle = \begin{cases} 0, & n = i \text{ のとき} \\ |n\rangle, & n \neq i \text{ のとき} \end{cases} \quad (8.21)$$

で定義される射影演算子  $Q_i$  を導入する ( $Q_i = 1 - |i\rangle\langle i|$  で定義してもよい)。 $Q_i$  は

$$Q_i^2 = Q_i, \quad Q_i^\dagger = Q_i, \quad [H_0, Q_i] = 0 \quad (8.22)$$

を満たす。例えば, 任意の  $|n\rangle$  に対して  $Q_i^2|n\rangle = Q_i|n\rangle$  より  $Q_i^2 = Q_i$  である。(8.20) は

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{E_i - H_0} Q_i \sum_n |n\rangle \langle n|H'|i\rangle = \frac{Q_i}{E_i - H_0} H'|i\rangle, \quad \frac{Q_i}{E_i - H_0} \equiv Q_i \frac{1}{E_i - H_0} Q_i \quad (8.23)$$

と表せる。 $Q_i|i\rangle = 0$  であるから  $n \neq i$  という制限は不要である。 $|n\rangle$  の完備性 (5.52) を用いた。

なお、実際問題において、(8.18) の展開が無限級数になる場合、 $|\psi_1\rangle$  を  $H_0$  の固有関数で展開せずに、(8.9) を微分方程式として解き  $|\psi_1\rangle$  を求める方法がある (197, 213, 217 ページ参照。Schiff §33)。

### 近似的に縮退する場合

$|i\rangle$  に縮退がない場合でも、 $E_i$  に接近した状態  $|j\rangle$  が存在すると、摂動が弱くても条件 (8.19) は成り立たず摂動展開ができない。以下では2つの状態が接近する場合を考えるが、3個以上の状態に拡張することは形式的には容易である。全ての状態を取り込めば (8.4) に戻る。

(8.21) で定義した演算子  $Q_i, Q_j$  を用いて

$$P_{ij} = 1 - Q_i + 1 - Q_j, \quad \text{つまり} \quad P_{ij}|n\rangle = \begin{cases} |n\rangle, & n = i, j \text{ のとき} \\ 0, & n \neq i, j \text{ のとき} \end{cases}$$

とする。 $H = H_0 + H'$  を再分割して

$$H = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}', \quad \mathcal{H}_0 = H_0 + P_{ij}H'P_{ij}, \quad \mathcal{H}' = H' - P_{ij}H'P_{ij}$$

とし  $\mathcal{H}'$  を摂動と見なす。 $P_{ij}H'P_{ij}$  もエルミート演算子である。 $m = i, j$  かつ  $n = i, j$  のとき  $\langle m|P_{ij}H'P_{ij}|n\rangle \neq 0$  であるから、 $H'$  を近似的に縮退する状態だけに作用する部分  $P_{ij}H'P_{ij}$  とそれ以外に分割したことになる。 $n \neq i, j$  のとき  $\mathcal{H}_0|n\rangle = H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$  より  $|n\rangle$  は  $\mathcal{H}_0$  の固有関数で固有値は  $E_n$  である。一方

$$\mathcal{H}_0|i\rangle = E_i|i\rangle + P_{ij}H'|i\rangle, \quad \mathcal{H}_0|j\rangle = E_j|j\rangle + P_{ij}H'|j\rangle$$

であるから、 $|i\rangle$  と  $|j\rangle$  は  $\mathcal{H}_0$  の固有関数ではない。 $|i\rangle, |j\rangle$  に代わる  $\mathcal{H}_0$  の固有関数  $|\psi\rangle$  を求める。 $a, b$  を任意定数として  $|\psi\rangle = a|i\rangle + b|j\rangle$  とおけるから

$$\mathcal{H}_0|\psi\rangle = aE_i|i\rangle + aP_{ij}H'|i\rangle + bE_j|j\rangle + bP_{ij}H'|j\rangle = E|\psi\rangle$$

$|i\rangle$  及び  $|j\rangle$  との内積をとれば

$$\begin{pmatrix} E_i + h_{ii} - E & h_{ij} \\ h_{ji} & E_j + h_{jj} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0, \quad h_{mn} = \langle m|H'|n\rangle \quad (8.24)$$

したがって、 $\mathcal{H}_0$  の固有値は 左辺の  $2 \times 2$  行列の行列式  $= 0$  より

$$E = E_{\pm} = \frac{1}{2}(E_i + h_{ii} + E_j + h_{jj} \pm D), \quad D = \sqrt{(E_i + h_{ii} - E_j - h_{jj})^2 + 4|h_{ij}|^2}$$

になる。 $E = E_{\pm}$  に対応して (8.24) と規格化条件  $|a|^2 + |b|^2 = 1$  より  $a, b$  が決まる。これを  $a_{\pm}, b_{\pm}$  とすると  $\mathcal{H}_0$  の固有関数

$$|\pm\rangle = a_{\pm}|i\rangle + b_{\pm}|j\rangle \quad (8.25)$$

が求まる。 $\mathcal{H}_0$  の固有関数は  $|\pm\rangle$  と  $n \neq i, j$  の  $|n\rangle$  であり、固有値はそれぞれ  $E_{\pm}, E_n$  になる。

$|\pm\rangle$  に対して  $\mathcal{H}'$  を1次の摂動として取り込む。 $W_1^{(\pm)}$  は (8.15) で  $|i\rangle$  を  $|\pm\rangle$  で置き換えれば

$$W_1^{(\pm)} = \langle \pm|\mathcal{H}'|\pm\rangle = \langle \pm|H'|\pm\rangle - \langle \pm|P_{ij}H'P_{ij}|\pm\rangle = 0$$

(8.18) の  $n \neq i$  の和は、自分以外の全ての状態についての和であるから

$$|\psi_1^{(\pm)}\rangle = \sum_{n \neq i, j} |n\rangle \frac{\langle n|\mathcal{H}'|\pm\rangle}{E_{\pm} - E_n} + |\mp\rangle \frac{\langle \mp|\mathcal{H}'|\pm\rangle}{E_{\pm} - E_{\mp}} = \sum_{n \neq i, j} |n\rangle \frac{\langle n|H'|\pm\rangle}{E_{\pm} - E_n} \quad (8.26)$$

になる。  $n \neq i, j$  のとき  $|\langle n | H' | \pm \rangle / (E_{\pm} - E_n)| \ll 1$  であれば、  $E_i \approx E_j$  であっても (8.26) は (8.19) を満たす。 (8.24) は着目する状態だけ (ここでは  $|i\rangle, |j\rangle$ ) に制限し (8.4) を解くことである。したがって、着目する状態間に作用する  $H'$  の効果は完全に取り込める。上の場合、  $|i\rangle, |j\rangle$  に作用する  $H'$  の効果は  $E_{\pm}, |\pm\rangle$  に含まれ  $W_1^{(\pm)}, |\psi_1^{(\pm)}\rangle$  には現れない。

$E_i \approx E_j$  の場合

$$E_{\pm} \approx E_i + W_{\pm}, \quad W_{\pm} = \frac{1}{2} \left( h_{ii} + h_{jj} \pm \sqrt{(h_{ii} - h_{jj})^2 + 4|h_{ij}|^2} \right) \quad (8.27)$$

$n \neq i, j$  のとき  $|E_i - E_n|$  が摂動項に比べて十分大きいならば、  $H'$  の 2 次以上を無視すると

$$|\psi_1^{(\pm)}\rangle \approx \sum_{n \neq i, j} |n\rangle \frac{\langle n | H' | \pm \rangle}{E_i - E_n}, \quad |\psi_2^{(\pm)}\rangle \approx |\mp\rangle \sum_{n \neq i, j} \frac{\langle \mp | H' | n \rangle \langle n | H' | \pm \rangle}{(W_{\pm} - W_{\mp})(E_i - E_n)} \quad (8.28)$$

$|\psi_2^{(\pm)}\rangle$  は 2 次の摂動 (8.32) の一部であるが、分子は  $H'$  の 2 次、分母の  $W_{\pm}$  は 1 次であるから、全体では 1 次である。 (8.27), (8.28) は、二重縮退する場合の (8.56), (8.62) である。

**問題 8.1**  $d = (E_i + h_{ii} - E_j - h_{jj})/D$  とする。 (8.25) の係数は

$$a_{\pm} = \sqrt{\frac{1 \pm d}{2}}, \quad b_{\pm} = \pm \frac{|h_{ij}|}{h_{ij}} \sqrt{\frac{1 \mp d}{2}}$$

になることを示せ。また、 (8.19) が成り立つ場合、 (8.26) が (8.18) になることを示せ。

### 8.3 縮退していない場合 (2 次の摂動)

(8.13) で  $k = 2$  とすると (8.18) あるいは (8.23) より

$$W_2 = \langle i | H' | \psi_1 \rangle = \langle i | H' \frac{Q_i}{E_i - H_0} H' | i \rangle = \sum_{n \neq i} \frac{\langle i | H' | n \rangle \langle n | H' | i \rangle}{E_i - E_n} = \sum_{n \neq i} \frac{|\langle n | H' | i \rangle|^2}{E_i - E_n} \quad (8.29)$$

になる。波動関数は

$$|\psi_2\rangle = \sum_n d_n |n\rangle, \quad d_i = 0$$

とおける。 (8.10) より

$$(E_m - E_i) d_m = W_1 c_m - \langle m | H' | \psi_1 \rangle + W_2 \langle m | i \rangle \quad (8.30)$$

$m = i$  のとき  $c_i = 0$  より (8.29) を得る。  $m \neq i$  の場合、1 次の結果を代入すると

$$d_m = \frac{1}{E_i - E_m} \left( \sum_{n \neq i} \frac{\langle m | H' | n \rangle \langle n | H' | i \rangle}{E_i - E_n} - \frac{\langle m | H' | i \rangle \langle i | H' | i \rangle}{E_i - E_m} \right) \quad (8.31)$$

になるから

$$|\psi_2\rangle = \sum_{n \neq i} d_n |n\rangle = \left( \frac{Q_i}{E_i - H_0} H' \right)^2 |i\rangle - \frac{Q_i}{(E_i - H_0)^2} H' |i\rangle \langle i | H' | i \rangle \quad (8.32)$$

である。

(8.14) の規格化した  $|\psi\rangle_N$  を求める。 $|\psi\rangle = |i\rangle + |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$  の場合,  $\langle i|\psi_1\rangle = \langle i|\psi_2\rangle = 0$  より

$$Z^{-1} = \langle \psi|\psi\rangle = \underbrace{\langle i|i\rangle}_{1\text{次}} + \underbrace{\langle \psi_1|\psi_1\rangle + \langle \psi_1|\psi_2\rangle + \langle \psi_2|\psi_1\rangle}_{2\text{次}} + \underbrace{\langle \psi_2|\psi_2\rangle}_{3\text{次}}$$

2 次の摂動であるから 3 次以上を無視すると

$$Z^{-1} = 1 + Z_2, \quad Z_2 = \langle \psi_1|\psi_1\rangle = \sum_{n \neq i} \frac{|\langle n|H'|i\rangle|^2}{(E_i - E_n)^2} = \langle i|H' \frac{Q_i}{(E_i - H_0)^2} H'|i\rangle \quad (8.33)$$

したがって

$$|\psi\rangle_N = \sqrt{Z}|\psi\rangle = (1 - Z_2/2)|i\rangle + |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle \quad (8.34)$$

である。 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$  に対しては 2 次の  $Z_2$  を 0 で置き換えた。 $Z \approx 1 - Z_2$  は  $|\psi\rangle_N$  での  $|i\rangle$  の割合を表すから,  $Z_2$  は  $|i\rangle$  以外の状態の割合である。

(8.32) を (8.13) に代入すると, 3 次の摂動は

$$W_3 = \langle i|H' \left( \frac{Q_i}{E_i - H_0} H' \right)^2 |i\rangle - \langle i|H'|i\rangle \langle i|H' \frac{Q_i}{(E_i - H_0)^2} H'|i\rangle \quad (8.35)$$

で与えられる。

**問題 8.2** 摂動の 2 次までで  ${}_N\langle \psi|H|\psi\rangle_N = E_i + W_1 + W_2$  を示せ。また,  $\langle \psi|H|\psi\rangle$  を求めよ。

**問題 8.3**

1.  $E_i$  に最も近い  $E_m$  との差を  $\Delta E_i = |E_m - E_i|$  とし,  $|i\rangle$  における  $H'$  の分散を  $\Delta H'_i$  とすると  $|W_2| \leq (\Delta H'_i)^2 / \Delta E_i$  になることを示せ。
2.  $|i\rangle$  が  $H_0$  の基底状態のとき, 常に  $W_2 < 0$  であることを示せ。したがって,  $\langle i|H'|i\rangle = 0$  ならば, 2 次の摂動まで考慮した基底状態のエネルギーは  $E_i$  よりも小さくなる。
3.  $Z = \partial W / \partial E_i$  を示せ。この関係式は任意の次数の摂動展開で成り立つ。

**例題 1**

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{M\omega^2}{2} x^2 = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right), \quad H' = \frac{\lambda\hbar\omega}{2} \left( (a^\dagger)^2 + a^2 \right)$$

ただし  $\lambda$  は無次元の定数であり,  $a, a^\dagger$  は (4.10), (4.11) である。 $H_0$  の固有値  $E_n$  は  $n = 0, 1, 2, \dots$  として  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  であり, 固有関数  $|n\rangle$  は漸化式 (4.22) を満たす。(4.22) より

$$H'|n\rangle = \frac{\lambda\hbar\omega}{2} \left( \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle + \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle \right)$$

になるから  $W_1 = \langle n|H'|n\rangle = 0$ , 2 次の補正は

$$W_2 = \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'|H'|n\rangle|^2}{E_n - E_{n'}} = \frac{|\langle n+2|H'|n\rangle|^2}{E_n - E_{n+2}} + \frac{|\langle n-2|H'|n\rangle|^2}{E_n - E_{n-2}} = -\frac{\lambda^2}{2} E_n$$

である。波動関数については 1 次まで考えると

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \sum_{n' \neq n} |n'\rangle \frac{\langle n'|H'|n\rangle}{E_n - E_{n'}} = |n+2\rangle \frac{\langle n+2|H'|n\rangle}{E_n - E_{n+2}} + |n-2\rangle \frac{\langle n-2|H'|n\rangle}{E_n - E_{n-2}} \\ &= \frac{\lambda}{4} \left( -\sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle + \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle \right) \\ &= \frac{\lambda}{4} \left( -(a^\dagger)^2 + a^2 \right) |n\rangle = \frac{\lambda}{4} \left( 1 + 2q \frac{d}{dq} \right) |n\rangle \end{aligned} \quad (8.36)$$



になる。

$H = H_0 + H'$  の固有値は正確に求まる。(4.10), (4.11) より

$$\hbar\omega\left((a^\dagger)^2 + a^2\right) = M\omega^2 x^2 - p^2/M$$

になるから

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{M\Omega^2}{2}x^2, \quad \text{ただし} \quad \frac{1}{M} = \frac{1-\lambda}{M}, \quad \Omega = \omega\sqrt{1-\lambda^2}$$

である。したがって  $H$  の固有値は

$$\hbar\Omega\left(n + \frac{1}{2}\right) = E_n\sqrt{1-\lambda^2} = E_n\left(1 - \frac{\lambda^2}{2} - \frac{\lambda^4}{8} - \dots\right)$$

になる。 $H_0$  の規格化した固有関数  $u_n$  は (4.25)

$$u_n(q) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} f_n(q), \quad f_n(q) = \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} e^{-q^2/2} H_n(q), \quad q = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} x$$

で与えられる。 $H$  の規格化された固有関数は

$$\varphi_n(q) = \sqrt{\alpha} u_n(\alpha q), \quad \alpha = \sqrt{\frac{M\Omega}{M\omega}} = \left(\frac{1+\lambda}{1-\lambda}\right)^{1/4} = 1 + \lambda/2 + \dots \quad (8.37)$$

になるから

$$\varphi_n(q) = \left(1 + \frac{\lambda}{4} + \dots\right) \left(u_n(q) + \frac{\lambda}{2} q \frac{du_n}{dq} + \dots\right) = u_n(q) + \frac{\lambda}{4} \left(1 + 2q \frac{d}{dq}\right) u_n(q) + \dots$$

$\lambda$  の 1 次の項は (8.36) に一致する。

交換関係  $[a, a^\dagger] = 1$  だけを用いて求める。 $u, v$  を実数として  $b = ua + va^\dagger$  とする。 $[b, b^\dagger] = u^2 - v^2 = 1$  を要請する。 $a = ub - vb^\dagger$  より

$$\frac{H}{\hbar\omega} = (u^2 + v^2 - 2\lambda uv) \left(b^\dagger b + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2} (\lambda(u^2 + v^2) - 2uv) (b^2 + (b^\dagger)^2)$$

になる。 $b^2 + (b^\dagger)^2$  の項が消えるように  $\lambda(u^2 + v^2) = 2uv$  とする。

$$\lambda^2(u^2 + v^2)^2 = 4u^2v^2 = (u^2 + v^2)^2 - (u^2 - v^2)^2 = (u^2 + v^2)^2 - 1, \quad \therefore \quad u^2 + v^2 = \frac{1}{\sqrt{1-\lambda^2}}$$

したがって

$$H = \hbar\omega(1-\lambda^2)(u^2 + v^2) \left(b^\dagger b + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\sqrt{1-\lambda^2} \left(b^\dagger b + \frac{1}{2}\right)$$

になり固有値は  $\sqrt{1-\lambda^2}E_n$  である。この方法は、一般に  $H$  が  $a, a^\dagger$  の 2 次形式の場合に適用できる。 $a \rightarrow b = ua + va^\dagger$  の変換を**ボゴリューボフ変換**という。(8.37) の  $\varphi_0(q)$  は  $b\varphi_0(x) = 0$  を満たす。

**問題 8.4**  $\lambda$  を無次元の定数として  $H' = \lambda\hbar\omega\sqrt{M\omega/\hbar}x$  の場合を考える。

$$W_1 = 0, \quad W_2 = -\frac{\lambda^2\hbar\omega}{2}, \quad \psi_1(q) = \lambda\frac{d}{dq}u_n(q), \quad \psi_2(q) = \frac{\lambda^2}{2}\frac{d^2}{dq^2}u_n(q), \quad Z = 1 - \lambda^2\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

を示せ。以上の結果と正確なエネルギー固有値及び固有関数を比較せよ。

## 例題 2

$$H = H_0 + V(x), \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad V(x) = \frac{\hbar^2 v}{m} \delta(x), \quad \text{境界条件 } \psi(\pm a) = 0$$

において  $V(x)$  を摂動として扱う (問題 2.6)。  $H_0$  の固有関数と固有値は (2.19) で与えられる。(2.19) の  $\psi_n(x)$  を  $\varphi_n(x)$  で表す。  $n$  が偶数のとき  $\varphi_n(0) = 0$  になるから  $V(x)$  の影響を受けない。以下では  $n$  は正の奇数とする。

$$\varphi_n(x) = \frac{\epsilon_n}{\sqrt{a}} \cos \frac{n\pi x}{2a}, \quad \epsilon_n = (-1)^{(n-1)/2}$$

である。

$\psi_0(x) = \varphi_n(x)$  の場合  $W_1 = \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle = \hbar^2 v / (ma)$  であり簡単に求まる。波動関数の 1 次の補正  $\psi_1(x)$  は  $k$  を正の奇数として

$$\psi_1(x) = \sum_{k \neq n} \varphi_k(x) \frac{\langle \varphi_k | V | \varphi_n \rangle}{E_n - E_k} = \frac{8av}{\pi^2} \sum_{k \neq n} \frac{\varphi_k(x)}{n^2 - k^2} \quad (8.38)$$

である。無限級数和は求められるが (問題 8.6), ここでは  $\varphi_k(x)$  で展開せずに (8.9)

$$x \neq 0 \text{ のとき } \left( \frac{d^2}{dx^2} + \left( \frac{n\pi}{2a} \right)^2 \right) \psi_1(x) = -\frac{2v}{a} \varphi_n(x), \quad \psi_1'(+0) - \psi_1'(-0) = 2v\varphi_n(0)$$

を解く。この微分方程式の特解を  $\psi_1(x) = f(x)\varphi_n'(x)$  とすると,  $\varphi_n'' = -(n\pi/2a)^2 \varphi_n$  であるから

$$\psi_1'' + \left( \frac{n\pi}{2a} \right)^2 \psi_1 = f''\varphi_n' - \frac{(n\pi)^2}{2a^2} f'\varphi_n = -\frac{2v}{a} \varphi_n, \quad \therefore f(x) = \frac{4av}{(n\pi)^2} x$$

であればよい。一般解 = 特解 + 同次方程式の一般解 である。同次方程式の一般解は  $\varphi_n$  と  $\varphi_n'$  の線型結合で表せる。 $\psi_1(x)$  は偶関数であるから

$$\psi_1(x) = \frac{4av}{(n\pi)^2} (x \pm C) \varphi_n'(x) + D\varphi_n(x), \quad \begin{cases} +, & x > 0 \\ -, & x < 0 \end{cases}$$

とおける。 $\psi_1(\pm a) = 0$  より  $C = -a$  である。 $\varphi_n'(0) = 0$  であるから,  $\psi_1(x)$  は  $x = 0$  で連続であり  $\psi_1'(+0) - \psi_1'(-0) = 2v\varphi_n(0)$  を満たす。 $\psi_1(x)$  と  $\psi_0(x) = \varphi_n(x)$  は直交するから

$$\langle \varphi_n | \psi_1 \rangle = D + 2 \frac{4av}{(n\pi)^2} \int_0^a dx (x-a) \varphi_n'(x) \varphi_n(x) = D + \frac{2av}{(n\pi)^2} = 0$$

したがって

$$\psi_1(x) = \frac{4av}{(n\pi)^2} (x \mp a) \varphi_n'(x) - \frac{2av}{(n\pi)^2} \varphi_n(x) \quad (8.39)$$

である。2 次の摂動エネルギーは

$$W_2 = \langle \varphi_n | V | \psi_1 \rangle = \frac{\hbar^2 v}{m} \varphi_n(0) \psi_1(0) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2v}{n\pi} \right)^2$$

になり,  $E_n + W_1 + W_2$ ,  $\varphi_n(x) + \psi_1(x)$  は近似式 (2.31), (2.32) に一致する。

**問題 8.5** (8.39) の  $\psi_1(x)$  は  $k$  を正の奇数として

$$\psi_1(x) = \sum_k \varphi_k(x) \langle \varphi_k | \psi_1 \rangle$$

と展開できる。積分  $\langle \varphi_k | \psi_1 \rangle$  を求め, (8.38) に一致することを確認せよ。

**問題 8.6**  $x \geq 0$  のとき  $q = (x \mp a)/a$  とすると, (8.38) は複素積分を用いて

The diagram shows a horizontal chain of nodes (black dots) connected by directed edges. The chain is labeled  $C$  on the left. It consists of several segments: a solid line with three nodes, a dashed line with two nodes labeled  $-n$  below it, a solid line with two nodes, and another dashed line with two nodes labeled  $n$  below it. Each segment is enclosed in a rounded rectangle with arrows indicating the direction of the edges.

と表せることを示せ。経路  $C$  は  $n$  と  $-n$  以外の任意の奇数  $(\bullet)$  を内部に含む。 $C$  は 2 位の極  $n$  と  $-n$  だけを含む経路  $C_n$  に変更できることを示し (8.39) を求めよ。 $q = x/a$  として

$$\psi_1(x) = \frac{\sqrt{a} v}{i\pi^2} \int_C dz \frac{e^{i\pi z q/2}}{z^2 - n^2} \tan(\pi z/2)$$

とも表せるが,  $x \neq 0$  のとき  $C_n$  に変更できない。

## 波動関数の不定性

(8.12) により波動関数の不定性を排除したが, この条件を設定しないで摂動を扱う。(8.13) は成り立たない。1 次の摂動は (8.16) で  $m = i$  とすると  $W_1 = \langle i | H' | i \rangle$ ,  $m \neq i$  のとき (8.17) が求まり

$$|\psi_1\rangle = c_i|i\rangle + |\bar{\psi}_1\rangle, \quad |\bar{\psi}_1\rangle = \sum_{n \neq i} |n\rangle \frac{\langle n|H'|i\rangle}{E_i - E_n} = (8.18) \text{ の } |\psi_1\rangle \quad (8.40)$$

(8.12) を使えば  $c_i = 0$  になるが, ここでは任意定数である。2 次の摂動 (8.30) は

$$(E_m - E_i) d_m = W_1 c_m - \langle m | H' | \bar{\psi}_1 \rangle - \langle m | H' | i \rangle c_i + W_2 \langle m | i \rangle$$

$m = i$  とすると  $W_2$  は (8.29) で与えられるが,  $d_i$  は不定である。 $m \neq i$  の場合

$$d_m = (8.31) \mathcal{O} \left( d_m + c_i \frac{\langle m | H' | i \rangle}{E_i - E_m} \right), \quad \therefore \quad |\psi_2\rangle = |\bar{\psi}_2\rangle + c_i |\bar{\psi}_1\rangle + d_i |i\rangle$$

ただし、 $|\bar{\psi}_2\rangle$  は (8.32) の  $|\psi_2\rangle$  である。波動関数を規格化する。 $\langle i|\bar{\psi}_k\rangle = 0$  より

$$\begin{aligned}\langle \psi | \psi \rangle &= \left( \langle i | + \langle \psi_1 | + \langle \psi_2 | + \cdots \right) \left( | i \rangle + | \psi_1 \rangle + | \psi_2 \rangle + \cdots \right) \\ &= 1 + \langle i | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 | i \rangle + \langle i | \psi_2 \rangle + \langle \psi_2 | i \rangle + \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle + \cdots \\ &= 1 + \underbrace{c_i + c_i^*}_{1 \text{ 次}} + \underbrace{d_i + d_i^* + |c_i|^2 + \langle \bar{\psi}_1 | \bar{\psi}_1 \rangle + \cdots}_{2 \text{ 次}} = 1\end{aligned}$$

摂動論では摂動の各次数で規格化を要請するから

$$c_i + c_i^* = 0 \implies c_i = i\theta_1, \quad d_i + d_i^* + |c_i|^2 + \langle \bar{\psi}_1 | \bar{\psi}_1 \rangle = 0 \implies d_i = i\theta_2 - \frac{\theta_1^2 + Z_2}{2}$$

$\theta_1, \theta_2$  は任意実数であり (8.33) より  $\langle \bar{\psi}_1 | \bar{\psi}_1 \rangle = Z_2$  である。規格化した波動関数は

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |i\rangle + |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle = \left(1 + i\theta_1 - \frac{\theta_1^2}{2} + i\theta_2 - \frac{Z_2}{2}\right) |i\rangle + (1 + i\theta_1) |\bar{\psi}_1\rangle + |\bar{\psi}_2\rangle \\ &= e^{i(\theta_1 + \theta_2)} \left( (1 - Z_2/2) |i\rangle + |\bar{\psi}_1\rangle + |\bar{\psi}_2\rangle \right) \end{aligned}$$

になる。 $\theta_1, \theta_2$  はそれぞれ 1 次, 2 次の摂動の係数であり, 摂動の 3 次以上は無視する。 $|\psi\rangle$  と (8.34) の  $|\psi\rangle_N$  は, 位相因子  $e^{i(\theta_1+\theta_2)}$  が異なるだけであるから, 両者は物理的に同じものである。

## ヘルマン・ファインマンの定理

$H$  がパラメーター  $\lambda$  に依存するとき,  $H(\lambda)$  の規格化された固有状態  $|i(\lambda)\rangle$

$$H(\lambda)|i(\lambda)\rangle = E_i(\lambda)|i(\lambda)\rangle, \quad \langle i(\lambda)|j(\lambda)\rangle = \delta_{ij}$$

を考える。上式を  $\lambda$  で微分すると

$$H^{(1)}|i(\lambda)\rangle + H|i'(\lambda)\rangle = E'_i|i(\lambda)\rangle + E_i|i'(\lambda)\rangle \quad (8.41)$$

ただし  $H^{(k)} = d^k H/d\lambda^k$ ,  $E'_i = dE_i/d\lambda$ ,  $|i'(\lambda)\rangle = d|i(\lambda)\rangle/d\lambda$  である。 $|i(\lambda)\rangle$  との内積をとれば

$$\frac{dE_i}{d\lambda} = \langle i(\lambda) | \frac{dH}{d\lambda} | i(\lambda) \rangle \quad (8.42)$$

を得る。これをヘルマン・ファインマンの定理という。(8.41) で  $|n(\lambda)\rangle \neq |i(\lambda)\rangle$  との内積をとれば

$$\langle n(\lambda) | i'(\lambda) \rangle = \frac{\langle n(\lambda) | H^{(1)} | i(\lambda) \rangle}{E_i(\lambda) - E_n(\lambda)}$$

になるから

$$|i'(\lambda)\rangle = \sum_n |n(\lambda)\rangle \langle n(\lambda) | i'(\lambda) \rangle = |i(\lambda)\rangle \langle i(\lambda) | i'(\lambda) \rangle + \sum_{n \neq i} |n(\lambda)\rangle \frac{\langle n(\lambda) | H^{(1)} | i(\lambda) \rangle}{E_i(\lambda) - E_n(\lambda)}$$

と表せる。(8.41) を  $\lambda$  で微分し  $|i(\lambda)\rangle$  との内積をとると、上式と (8.42) より

$$\begin{aligned} E''_i(\lambda) &= \langle i(\lambda) | H^{(2)} | i(\lambda) \rangle + 2\langle i(\lambda) | H^{(1)} | i'(\lambda) \rangle - 2E'_i \langle i(\lambda) | i'(\lambda) \rangle \\ &= \langle i(\lambda) | H^{(2)} | i(\lambda) \rangle + 2 \sum_{n \neq i} \frac{|\langle n(\lambda) | H^{(1)} | i(\lambda) \rangle|^2}{E_i(\lambda) - E_n(\lambda)} \end{aligned} \quad (8.43)$$

になる。 $E_i(\lambda) = \langle i(\lambda) | H(\lambda) | i(\lambda) \rangle$  を  $\lambda$  で微分して (8.42), (8.43) を求めてもよい。

(8.6) の場合  $H^{(1)} = dH_\lambda/d\lambda = H'$ ,  $H^{(2)} = 0$  であるから  $|n\rangle = |n(0)\rangle$ ,  $E_n = E_n(0)$  とすると

$$\begin{aligned} |i(\lambda)\rangle &= |i\rangle + \lambda |i'(\lambda=0)\rangle + \cdots \\ &= |i\rangle + \lambda c_i |i\rangle + \lambda \sum_{n \neq i} |n\rangle \frac{\langle n | H' | i \rangle}{E_i - E_n} + \cdots = |i\rangle + \lambda |\psi_1\rangle + \cdots, \quad c_i = \langle i(0) | i'(0) \rangle \\ E_i(\lambda) &= E_i + \lambda E'_i(\lambda=0) + \frac{\lambda^2}{2} E''_i(\lambda=0) + \cdots \\ &= E_i + \lambda \langle i | H' | i \rangle + \lambda^2 \sum_{n \neq i} \frac{|\langle n | H' | i \rangle|^2}{E_i - E_n} + \cdots = E_i + \lambda W_1 + \lambda^2 W_2 + \cdots \end{aligned}$$

したがって、摂動論の結果 (8.40), (8.15), (8.29) が求まる。

**問題 8.7**  $|\bar{n}(\lambda)\rangle = e^{i\theta(\lambda)}|n(\lambda)\rangle$  が  $\langle \bar{n}(\lambda) | \bar{n}'(\lambda) \rangle = 0$  を満たすように実関数  $\theta(\lambda)$  を決めよ。したがって,  $c_i = \langle i(0) | i'(0) \rangle = 0$  としても一般性は失わない。

**問題 8.8** ビリアル定理 (1.55) から導ける関係式を (8.42) を用いて導く。 $K$  を運動エネルギー,  $V$  をポテンシャルとする。1次元調和振動子ポテンシャル  $V(x) = M\omega^2 x^2/2$  の場合,  $\lambda = M$  として  $\langle n | K | n \rangle = \langle n | V | n \rangle$  を示せ。クーロンポテンシャル  $V(r) = -Z\alpha\hbar c/r$  の場合,  $\lambda = Z$ ,  $M$  として  $\langle n\ell m | V | n\ell m \rangle/2 = -\langle n\ell m | K | n\ell m \rangle$  を示せ。(6.21) 参照。

### ブリルアン・ウィグナーの摂動論

$(H_0 + H')|\psi\rangle = W|\psi\rangle$ ,  $\langle i | \psi \rangle = 1$  において,  $W$  と  $|\psi\rangle$  を  $H'$  のベキとして展開した。ここでは, 別の展開を行う。

$$E_n \langle n | \psi \rangle + \langle n | H' | \psi \rangle = W \langle n | \psi \rangle, \quad \therefore \quad \langle n | \psi \rangle = \frac{\langle n | H' | \psi \rangle}{W - E_n} = \langle n | \frac{1}{W - H_0} H' | \psi \rangle \quad (8.44)$$

であるから

$$|\psi\rangle = |i\rangle\langle i|\psi\rangle + \sum_{n \neq i} |n\rangle\langle n|\psi\rangle = |i\rangle + G_i(W)H'|\psi\rangle, \quad G_i(W) = \frac{Q_i}{W - H_0} \quad (8.45)$$

と表せる。ただし、 $Q_i$  は (8.21) の射影演算子である。この関係式を繰り返し用いると

$$|\psi\rangle = |i\rangle + G_iH'(|i\rangle + G_iH'|\psi\rangle) = |i\rangle + G_iH'|i\rangle + (G_iH')^2|i\rangle + \cdots$$

(8.45) は  $(1 - G_iH')|\psi\rangle = |i\rangle$  または  $(W - H_0 - Q_iH')|\psi\rangle = (W - H_0)|i\rangle$  と書けるから

$$|\psi\rangle = \frac{1}{1 - G_iH'}|i\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} (G_iH')^k |i\rangle, \quad |\psi\rangle = \frac{W - E_i}{W - H_0 - Q_iH'}|i\rangle$$

とも表せる。未知の固有値  $W$  を含むから  $|\psi\rangle$  が決定したわけではない。

(8.44) で  $n = i$  とすれば

$$W - E_i = \langle i|H'|\psi\rangle = \langle i|H'|i\rangle + \langle i|H'\frac{Q_i}{W - H_0}H'|i\rangle + \cdots \quad (8.46)$$

になる。1 次の摂動は (8.15) の  $W_1 = \langle i|H'|i\rangle$  に一致する。2 次の分母  $W - H_0$  は (8.29) の  $W_2$  の分母  $E_i - H_0$  とは異なる。 $H'$  の 3 次以上を無視しているから、 $W$  を 0 次の  $E_i$  で置き換えれば  $W_2$  を再現する。一方、摂動の次数を考慮せず、(8.46) を  $W$  について解くと、2 次の摂動よりもよい近似になることがある。 $W = E_i + W_1 + W_2 + x$  とし  $1/(W - H_0)$  を  $1/(E_i - H_0)$  で展開すると

$$\begin{aligned} x &= \langle i|H'\frac{Q_i}{E_i - H_0}\left(1 - \frac{W_1 + W_2 + x}{E_i - H_0} + \cdots\right)H'|i\rangle - W_2 \\ &= -(W_1 + W_2 + x)\langle i|H'\frac{Q_i}{(E_i - H_0)^2}H'|i\rangle + \cdots \approx -W_1\langle i|H'\frac{Q_i}{(E_i - H_0)^2}H'|i\rangle \end{aligned}$$

これは 3 次の摂動 (8.35) の右辺第 2 項である。

2 準位系

$$H_0|\pm\rangle = \pm E_0|\pm\rangle, \quad \langle \pm|H'|\pm\rangle = 0, \quad \langle \pm|H'|\mp\rangle = v$$

を考える。 $|\psi\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle$  とおけるから、 $(H_0 + H' - W)|\psi\rangle = 0$  は

$$\begin{pmatrix} E_0 - W & v \\ v & -E_0 - W \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = 0$$

になる。左辺の  $2 \times 2$  行列の行列式  $= (W - E_0)(W + E_0) - v^2 = 0$  より、正確な固有値は

$$W = \pm \sqrt{E_0^2 + v^2} = \pm \left(E_0 + \frac{v^2}{2E_0} - \frac{v^4}{(2E_0)^3} + \cdots\right)$$

である。

$$\langle \pm|H'\frac{Q_{\pm}}{W - H_0}H'|\pm\rangle = \frac{\langle \pm|H'|\mp\rangle\langle \mp|H'|\pm\rangle}{W \pm E_0} = \frac{v^2}{W \pm E_0}$$

$W = \pm E_0$  とすれば、2 次の補正  $\pm v^2/2E_0$  である。一方、(8.46) は  $W \mp E_0 = v^2/(W \pm E_0)$  であり、正確な固有値が求まる。 $\langle i|H'|i\rangle = 0$  である 2 準位系では  $(G_iH')^2|i\rangle = 0$  になるから、 $|\psi\rangle = |i\rangle + G_iH'|i\rangle$  であり (8.46) は正確な固有値を与える。

なお、 $k \geq 3$  のとき  $W_k = 0$  になるわけではない。(8.32) より  $|\psi_2\rangle = 0$  である。(8.11) で  $k = 3$  とすると  $(H_0 - E_i)|\psi_3\rangle = W_2|\psi_1\rangle + W_3|i\rangle$  になるから

$$|\psi_3\rangle = -W_2G_i(E_i)|\psi_1\rangle = -W_2G_i^2(E_i)H'|i\rangle$$

したがって  $W_3 = \langle i|H'|\psi_2\rangle = 0$ ,  $W_4 = \langle i|H'|\psi_3\rangle = \mp v^4/(2E_0)^3$  である。

### 8.4 摂動展開の収束性とパデ近似

摂動級数は収束するとは限らない。発散する場合でも、摂動級数は漸近級数として物理的意味をもつ場合がある。具体例として

$$H = H_0 + H', \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{M\omega^2}{2} x^2, \quad H' = v_0 x^4$$

を考える (225 ページの変分法参照)。 $v_0$  は正の定数である。 $q = \sqrt{M\omega/\hbar} x$  で表せば

$$H_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \left( -\frac{d^2}{dq^2} + q^2 \right), \quad H' = \frac{\hbar\omega}{2} u q^4, \quad \text{ただし } u = \frac{2v_0}{\hbar\omega} \left( \frac{\hbar}{M\omega} \right)^2 \quad (8.47)$$

になる。したがって、 $H\psi(x) = W\psi(x)$  は  $W = (\hbar\omega/2)\varepsilon$  とすると

$$(h_0 + h')\psi(q) = \varepsilon\psi(q), \quad h_0 = -\frac{d^2}{dq^2} + q^2 = 2a^\dagger a + 1, \quad h' = uq^4 = \frac{u}{4}(a^\dagger + a)^4 \quad (8.48)$$

である。(4.22) より

$$(a^\dagger + a)^2 |n\rangle = \sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2\rangle + (2n+1) |n\rangle + \sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle$$

これとこれの複素共役から

$$\begin{aligned} \langle n' | (a^\dagger + a)^4 | n \rangle &= \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} \delta_{n',n+4} + \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} \delta_{n',n-4} \\ &\quad + 2(2n+3)\sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{n',n+2} + 2(2n-1)\sqrt{n(n-1)} \delta_{n',n-2} \\ &\quad + 3(2n^2 + 2n + 1) \delta_{n',n} \end{aligned} \quad (8.49)$$

である。1 次及び 2 次の摂動は

$$\varepsilon_1 = \langle n | h' | n \rangle = \frac{3}{4} (2n^2 + 2n + 1) u \quad (8.50)$$

$$\varepsilon_2 = \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n' | h' | n \rangle|^2}{(2n+1) - (2n'+1)} = -\frac{(2n+1)(17n^2 + 17n + 21)}{16} u^2 \quad (8.51)$$

2 次の摂動では  $n' = n \pm 2, n \pm 4$  である ((8.49) より  $n' < 0$  は自動的に寄与しない)。

以下では、基底状態  $n = 0$  を考える。 $k$  次の摂動まで取り入れた  $\varepsilon$  を  $\varepsilon^{(k)}$  とすると

$$\varepsilon^{(k)}(u) = 1 + \sum_{m=1}^k B_m u^m, \quad B_1 = \frac{3}{4}, \quad B_2 = -\frac{21}{16}, \quad B_3 = \frac{333}{64}, \quad B_4 = -\frac{30885}{1024} \quad (8.52)$$

$B_1, B_2$  は (8.50), (8.51) で  $n = 0$  とすればよい。3 次以上の係数も (8.11), (8.13) から求められるが、75 次までの係数一覧が Physical Review **184** (1969) 1231 にある。

$$B_m \xrightarrow{m \gg 1} 2\sqrt{6} \pi^{-3/2} (-3/2)^m \Gamma(m+1/2) \quad (8.53)$$

になり、 $B_m$  は符号を変えながら急激に増加する。摂動級数の収束半径は

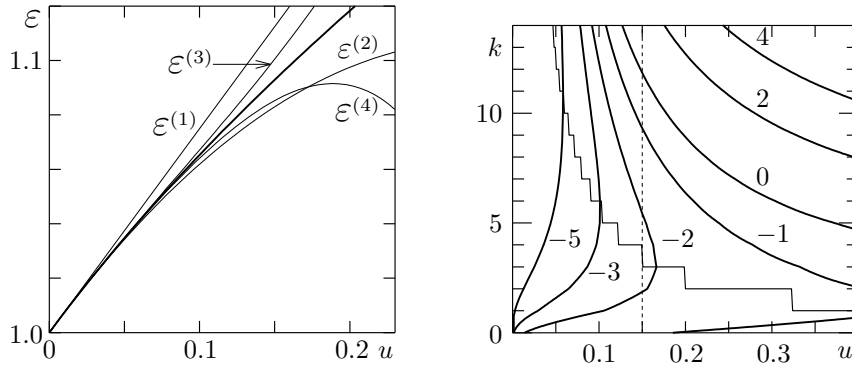
$$\left| \frac{B_k}{B_{k+1}} \right| = \frac{2}{3} \frac{\Gamma(k+1/2)}{\Gamma(k+1/2+1)} = \frac{2}{3(k+1/2)} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$$

であるから、 $\varepsilon^{(k)}(u)$  は  $u \neq 0$  がどんなに小さくても  $k \rightarrow \infty$  では発散するが、 $k$  が有限な部分  $\varepsilon^{(k)}(u)$  は  $\varepsilon(u)$  の近似になる漸近級数である ((18.14) 参照)。

$\varepsilon^{(k)}$  の  $u$  依存性を下の左図に示す。太い曲線は 53 ページのプログラムを用いて微分方程式 (8.48) を解いて得た  $\varepsilon$  である。これは数値的には正確である。図から  $u \lesssim 0.1$  ならば、4 次までの範囲では高次の摂動の方がよい近似になるが、 $u \gtrsim 0.18$  では  $\varepsilon^{(4)}$  は  $\varepsilon^{(2)}$  よりも近似が悪くなる。右図に

$$|1 - \varepsilon^{(k)}(u)/\varepsilon(u)| = \text{一定} = 10^n$$

を満たす  $(u, k)$  の曲線を示す。曲線に付けた値は  $n$  を表す。 $u \neq 0$  を与えたとき、 $\varepsilon^{(k)}$  は  $k$  がある値  $k_0$  (細い線) までは正確な  $\varepsilon$  に近づくが、 $k_0$  を超えると  $\varepsilon^{(k)}$  の精度は悪くなる。 $u$  が小さいほど  $k_0$  は大きくなり近似の精度は上がるが、 $k \rightarrow \infty$  では発散する。例えば  $u = 0.15$  のとき 3 次の摂動が最もよい近似になるが、0.001 の精度は得られない。



### パデ (Padé) 近似

漸近級数の近似精度を改善する方法としてパデ近似がある。漸近級数  $F(x)$  に対して

$$F(x) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} f_n x^n = \frac{P_M(x)}{Q_N(x)} + O(x^{N+M+1}), \quad P_M(x) = \sum_{n=0}^M p_n x^n, \quad Q_N(x) = \sum_{n=0}^N q_n x^n$$

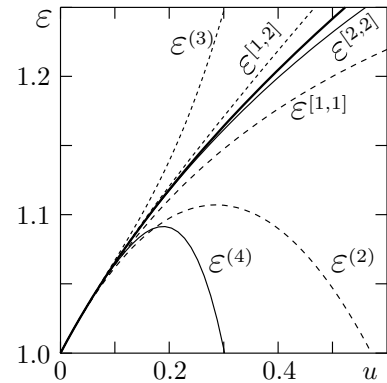
を満たすように多項式  $P_M(x)$ ,  $Q_N(x)$  を求め  $F(x) \approx P_M(x)/Q_N(x)$  で近似する。これを  $[N, M]$  パデ近似という。 $F(x)Q_N(x) = P_M(x)$  の両辺の係数を比較すると ( $p_0 = f_0, q_0 = 1$ )

$$\begin{aligned} [1, 1] : q_1 &= -f_2/f_1 & [1, 2] : q_1 &= -f_3/f_2, \quad p_2 = f_2 + f_1 q_1 \\ [2, 2] : q_1 &= \frac{f_1 f_4 - f_2 f_3}{f_2^2 - f_1 f_3}, \quad q_2 = \frac{f_3^2 - f_2 f_4}{f_2^2 - f_1 f_3}, \quad p_2 = f_2 + f_1 q_1 + f_0 q_2 \end{aligned}$$

いずれの場合も  $p_1 = f_1 + f_0 q_1$  になる。 $f_n$  に (8.52) の  $B_n$  を代入すると

$$\begin{aligned} \varepsilon^{[1,1]}(u) &= \frac{4 + 10u}{4 + 7u}, & \varepsilon^{[1,2]}(u) &= \frac{56 + 264u + 93u^2}{56 + 222u} \\ \varepsilon^{[2,2]}(u) &= \frac{3968 + 31724u + 39134u^2}{3968 + 28748u + 22781u^2} \end{aligned}$$

を得る。 $\varepsilon^{[1,1]}$ ,  $\varepsilon^{[1,2]}$ ,  $\varepsilon^{[2,2]}$  は、それぞれ  $\varepsilon^{(2)}$ ,  $\varepsilon^{(3)}$ ,  $\varepsilon^{(4)}$  に対するパデ近似である。図に示したように  $\varepsilon^{(n)}$  にパデ近似を適用すると、より広範囲の  $u$  に対してよい近似になる。



### 8.5 縮退している場合 (1 次の摂動)

$|\psi_0\rangle = |i\rangle$  は縮退していないと仮定したが, ここでは  $H_0$  の固有値が同一である  $g$  個の状態があるとする。この状態を  $|i, \alpha\rangle, (\alpha = 1, 2, \dots, g)$  で表す。

$$H_0|i, \alpha\rangle = E_i|i, \alpha\rangle, \quad \langle i, \alpha|i, \alpha'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}$$

である。 $|\psi_0\rangle = |i, \alpha\rangle$  とすると, (8.16) で  $|m\rangle = |i, \beta \neq \alpha\rangle$  のとき, 一般に  $\langle i, \beta|H'|i, \alpha\rangle \neq 0$  であるから  $c_{i, \beta}$  は発散し摂動展開ができない。ところで, 縮退する固有関数の任意の線形結合も  $H_0$  の固有関数で固有エネルギーは  $E_i$  であるから (8.8) を満たす。そこで

$$|\psi_0\rangle = \sum_{\alpha=1}^g a_{\alpha}|i, \alpha\rangle, \quad \langle \psi_0|\psi_0\rangle = \sum_{\alpha=1}^g |a_{\alpha}|^2 = 1 \quad (8.54)$$

とし, これを (8.9) に代入すると ( $W_0 = E_i$ )

$$(H_0 - E_i)|\psi_1\rangle = W_1 \sum_{\beta=1}^g a_{\beta}|i, \beta\rangle - \sum_{\beta=1}^g a_{\beta}H'|i, \beta\rangle$$

$|i, \alpha\rangle$  との内積をとると  $H_0|i, \alpha\rangle = E_i|i, \alpha\rangle$  であるから左辺は 0 になる。したがって

$$\sum_{\beta=1}^g (W_1\delta_{\alpha\beta} - h_{\alpha\beta})a_{\beta} = 0, \quad h_{\alpha\beta} \equiv \langle i, \alpha|H'|i, \beta\rangle \quad (8.55)$$

になり, 永年方程式

$$\det(W_1\delta_{\alpha\beta} - h_{\alpha\beta}) = 0 \quad (8.56)$$

を満たす必要がある。縮退も含め  $g$  個の  $W_1$  が求まり, 各々の  $W_1$  に対して (8.55) から  $a_{\alpha}$  が決まる。 $H'$  はエルミート演算子であるから,  $g$  個の  $|\psi_0\rangle$  は互いに直交する。二重縮退の場合,  $W_1$  は (8.27) の  $W_{\pm}$ ,  $|\psi_0\rangle$  は (8.25) の  $|\pm\rangle$  である。

$g$  個の  $|i, \alpha\rangle$  を基底とする関数空間  $V_i$  を考える。 $V_i$  の任意関数 (8.54) は  $H_0$  の固有関数であるが, (8.55) は  $V_i$  内で  $H'|\psi_0\rangle = W_1|\psi_0\rangle$  になることを要請する。これは, 正確な (8.4) を  $V_i$  の関数に制限して解く近似である。縮退した状態間に作用する  $H'$  の効果は  $W_1$  と  $|\psi_0\rangle$  に完全に取り込まれ, 縮退した状態とそれ以外の状態間の  $H'$  を摂動として扱う。 $|\psi_1\rangle$  が発散することはない。摂動とは無関係な  $|\psi_0\rangle$  を決めるのに 1 次の摂動 (8.9) を用いた。これは  $H_0 + \lambda H'$  の固有関数  $|\psi\rangle$  を  $\lambda$  の連続関数にするためである。 $|\psi\rangle$  が縮退しないならば,  $|\psi\rangle \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \text{特定の} |\psi_0\rangle$  になる。この特定の  $|\psi_0\rangle$  を決めるのが (8.55) である。

$g$  個の  $W_1, |\psi_0\rangle$  を区別して  $W_{1\beta}$  及び

$$|\psi_{0\beta}\rangle = \sum_{\alpha=1}^g a_{\alpha\beta}|i, \alpha\rangle, \quad a_{\alpha\beta} = \langle i, \alpha|\psi_{0\beta}\rangle \quad (8.57)$$

とすると, (8.55) は

$$a_{\alpha\beta}W_{1\beta} - \sum_{\alpha'} h_{\alpha\alpha'}a_{\alpha'\beta} = 0, \quad \text{つまり} \quad \mathbf{A}\mathbf{W}_1 - \mathbf{H}'\mathbf{A} = 0 \quad (8.58)$$

になる。ただし  $\mathbf{A}, \mathbf{H}', \mathbf{W}_1$  は  $g \times g$  行列

$$(\mathbf{A})_{\alpha\beta} = a_{\alpha\beta}, \quad (\mathbf{H}')_{\alpha\beta} = h_{\alpha\beta}, \quad (\mathbf{W}_1)_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}W_{1\alpha}$$



である。 $\langle \psi_{0\alpha} | \psi_{0\beta} \rangle = \delta_{\alpha\beta}$  より  $\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A} = 1$  である。(8.58) に  $\mathbf{A}^\dagger$  をかけると

$$\mathbf{A}^\dagger \mathbf{H}' \mathbf{A} = \mathbf{W}_1, \quad \sum_{\alpha' \beta'} a_{\alpha' \alpha}^* \langle i, \alpha' | H' | i, \beta' \rangle a_{\beta' \beta} = \langle \psi_{0\alpha} | H' | \psi_{0\beta} \rangle = W_{1\alpha} \delta_{\alpha\beta} \quad (8.59)$$

ユニタリ変換で行列  $\mathbf{H}'$  は対角行列  $\mathbf{W}_1$  になる。(8.57) の逆変換は

$$\sum_{\beta} a_{\alpha\beta}^* | \psi_{0\beta} \rangle = \sum_{\beta, \beta'} a_{\alpha\beta}^* a_{\beta' \beta} | i, \beta' \rangle = \sum_{\beta'} (\mathbf{A} \mathbf{A}^\dagger)_{\beta' \alpha} | i, \beta' \rangle = | i, \alpha \rangle$$

である。

波動関数の 1 次の補正  $|\psi_1\rangle$  を求める。

$$|\psi_1\rangle = \sum_{\alpha=1}^g b_\alpha | i, \alpha \rangle + |\phi\rangle = \sum_{\alpha=1}^g c_\alpha | \psi_{0\alpha} \rangle + |\phi\rangle, \quad |\phi\rangle = \sum_{n \notin i} c_n | n \rangle$$

と展開できる。 $n \notin i$  は  $g$  個の  $|i, \alpha\rangle$  を除くことを表す。(8.9) と  $|n \notin i\rangle$  との内積から

$$(E_n - E_i) c_n = -\langle n | H' | \psi_0 \rangle, \quad \therefore |\phi\rangle = \sum_{n \notin i} | n \rangle \frac{\langle n | H' | \psi_0 \rangle}{E_i - E_n} \quad (8.60)$$

である。(8.9) と  $|\psi_{0\alpha}\rangle$  との内積は (8.55) になり  $c_\alpha$  は決まらない。2 次の (8.10) と  $|\psi_{0\alpha}\rangle$  の内積は  $\langle \psi_{0\alpha} | (H_0 - E_i) | \psi_2 \rangle = 0$ ,  $\langle \psi_{0\alpha} | \psi_1 \rangle = c_\alpha$  であるから

$$W_1 c_\alpha - \langle \psi_{0\alpha} | H' | \psi_1 \rangle + W_2 \langle \psi_{0\alpha} | \psi_0 \rangle = 0$$

(8.59) より

$$\langle \psi_{0\alpha} | H' | \psi_1 \rangle = \sum_{\beta} c_\beta \langle \psi_{0\alpha} | H' | \psi_{0\beta} \rangle + \langle \psi_{0\alpha} | H' | \phi \rangle = W_{1\alpha} c_\alpha + \langle \psi_{0\alpha} | H' | \phi \rangle$$

したがって

$$(W_1 - W_{1\alpha}) c_\alpha - \langle \psi_{0\alpha} | H' | \phi \rangle + W_2 \langle \psi_{0\alpha} | \psi_0 \rangle = 0 \quad (8.61)$$

になる。 $W_{1\beta}$  に縮退がないとき  $|\psi_{0\beta}\rangle$  は確定している。上式で  $|\psi_0\rangle = |\psi_{0\beta}\rangle$ ,  $W_1 = W_{1\beta}$  とする。 $\alpha \neq \beta$  のとき  $W_{1\alpha} \neq W_{1\beta}$ ,  $\langle \psi_{0\alpha} | \psi_{0\beta} \rangle = 0$  であるから

$$c_\alpha = \frac{\langle \psi_{0\alpha} | H' | \phi \rangle}{W_{1\beta} - W_{1\alpha}}$$

(8.12) より  $\langle \psi_{0\beta} | \psi_1 \rangle = c_\beta = 0$  である。 $|\psi_{0\beta}\rangle$  に対する 1 次補正  $|\psi_{1\beta}\rangle$  は

$$|\psi_{1\beta}\rangle = \sum_{\alpha \neq \beta} |\psi_{0\alpha}\rangle \frac{\langle \psi_{0\alpha} | H' | \phi \rangle}{W_{1\beta} - W_{1\alpha}} + |\phi_\beta\rangle, \quad |\phi_\beta\rangle = \sum_{n \notin i} | n \rangle \frac{\langle n | H' | \psi_{0\beta} \rangle}{E_i - E_n} \quad (8.62)$$

になる。 $H' | \phi_\beta \rangle$  は  $H'$  の 2 次,  $W_1$  は 1 次であるから, 右辺第 1 項も  $H'$  の 1 次である。二重縮退する場合, (8.62) は (8.28) になる。(8.61) で  $\alpha = \beta$  とすると, 2 次の摂動エネルギーは

$$W_{2\beta} = \langle \psi_{0\beta} | H' | \phi_\beta \rangle = \sum_{n \notin i} \frac{|\langle n | H' | \psi_{0\beta} \rangle|^2}{E_i - E_n} \quad (8.63)$$

である。(8.13) を使ってもよい。(8.29) で  $|i\rangle$  を  $|\psi_{0\beta}\rangle$  で置き換えると上式になる。

$W_1$  が縮退する場合,  $|\psi_0\rangle$  は  $W_1$  が縮退する  $|\psi_{0\alpha}\rangle$  の任意の線型結合でよいが, (8.61) を満たす必要がある。これから  $|\psi_0\rangle$  が決まる。218 ページ参照。

## 射影演算子

縮退している場合の摂動を射影演算子を用いて再考する。

$$P_\alpha = |\psi_{0\alpha}\rangle\langle\psi_{0\alpha}|, \quad P = \sum_{\alpha=1}^g P_\alpha, \quad Q = \sum_{n \notin i} |n\rangle\langle n| \quad (8.64)$$

とする。定義及び  $|\psi_{0\alpha}\rangle, |n\rangle$  の規格直交性より

$$\begin{aligned} P_\alpha P_\beta &= \delta_{\alpha\beta} P_\alpha, & P_\alpha Q &= 0, & P^2 &= P, & Q^2 &= Q, & P + Q &= 1 \\ P_\alpha H_0 &= H_0 P_\alpha = E_i P_\alpha, & Q H_0 &= H_0 Q \end{aligned}$$

である。(8.57) より

$$P = \sum_{\alpha\beta\beta'} |i, \beta\rangle a_{\beta\alpha} \langle i, \beta' | a_{\beta'\alpha}^* = \sum_{\beta\beta'} (\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger)_{\beta\beta'} |i, \beta\rangle\langle i, \beta'| = \sum_{\alpha} |i, \alpha\rangle\langle i, \alpha|$$

$P$  は  $g$  個の  $|i, \alpha\rangle$  または  $|\psi_{0\alpha}\rangle$  を基底とする関数空間  $V_i$  への射影演算子である。

$|\psi_0\rangle = |\psi_{0\beta}\rangle$  のとき, (8.9) に  $P$  をかけると

$$P(H_0 - E_i) = (E_i - E_i)P = 0, \quad P|\psi_{0\beta}\rangle = |\psi_{0\beta}\rangle$$

であるから

$$0 = W_{1\beta}|\psi_{0\beta}\rangle - PH'|\psi_{0\beta}\rangle, \quad \text{つまり} \quad PH'P|\psi_{0\beta}\rangle = W_{1\beta}|\psi_{0\beta}\rangle$$

$|\psi_{0\beta}\rangle$  は  $PH'P$  の固有関数で固有値は  $W_{1\beta}$  である。言い換えれば,  $V_i$  内で  $H'|\psi_{0\beta}\rangle = W_{1\beta}|\psi_{0\beta}\rangle$  である。上式は  $\langle i, \alpha | H' | \psi_{0\beta} \rangle = W_{1\beta} \langle i, \alpha | \psi_{0\beta} \rangle$  とも表せる。(8.57) を代入すると (8.58) になる。(8.9) に  $P_\alpha$  及び  $Q$  をかけると

$$\begin{aligned} 0 &= W_{1\beta} P_\alpha |\psi_{0\beta}\rangle - P_\alpha H' |\psi_{0\beta}\rangle, \quad \therefore \quad \langle \psi_{0\alpha} | H' | \psi_{0\beta} \rangle = W_{1\beta} \delta_{\alpha\beta} \\ (H_0 - E_i) Q |\psi_{1\beta}\rangle &= -QH' |\psi_{0\beta}\rangle, \quad \therefore \quad |\phi_\beta\rangle \equiv Q |\psi_{1\beta}\rangle = \frac{Q}{E_i - H_0} H' |\psi_{0\beta}\rangle \end{aligned} \quad (8.65)$$

になるから (8.59), (8.60) を得る。

$$P_\alpha H' P_\beta = |\psi_{0\alpha}\rangle\langle\psi_{0\alpha}| H' |\psi_{0\beta}\rangle\langle\psi_{0\beta}| = \delta_{\alpha\beta} W_{1\alpha} P_\alpha$$

より

$$P_\alpha H' = P_\alpha H' (P + Q) = W_{1\alpha} P_\alpha + P_\alpha H' Q \quad (8.66)$$

であるから, (8.10) に  $P_\alpha$  を作用させると

$$0 = (W_{1\beta} - W_{1\alpha}) P_\alpha |\psi_{1\beta}\rangle - P_\alpha H' Q |\psi_{1\beta}\rangle + W_{2\beta} \delta_{\alpha\beta} |\psi_{0\beta}\rangle \quad (8.67)$$

$W_{1\beta}$  に縮退がないとき,  $\alpha \neq \beta$  ならば  $W_{1\alpha} \neq W_{1\beta}$  になるから

$$P_\alpha |\psi_{1\beta}\rangle = \frac{1}{W_{1\beta} - W_{1\alpha}} P_\alpha H' Q |\psi_{1\beta}\rangle = \frac{1}{W_{1\beta} - W_{1\alpha}} P_\alpha H'' |\psi_{0\beta}\rangle, \quad H'' \equiv H' \frac{Q}{E_i - H_0} H'$$

(8.12) より  $P_\beta |\psi_{1\beta}\rangle = 0$  とするから

$$|\psi_{1\beta}\rangle = (P + Q) |\psi_{1\beta}\rangle = \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{1}{W_{1\beta} - W_{1\alpha}} P_\alpha H'' |\psi_{0\beta}\rangle + \frac{Q}{E_i - H_0} H' |\psi_{0\beta}\rangle$$

は (8.62) になる。  $H_0$  に縮退がない場合  $P|\psi_1\rangle = 0$  であるから  $|\psi_1\rangle = Q|\psi_1\rangle$  になるが、  $H_0$  に縮退がある場合  $|\psi_1\rangle \neq Q|\psi_1\rangle$  である。

(8.67) で  $\alpha = \beta$  とすると

$$W_{2\beta}|\psi_{0\beta}\rangle = P_\beta H' Q|\psi_{1\beta}\rangle, \quad \therefore \quad W_{2\beta} = \langle \psi_{0\beta} | H' Q | \psi_{1\beta} \rangle = \langle \psi_{0\beta} | H'' | \psi_{0\beta} \rangle = (8.63)$$

一般に、  $k \geq 2$  のとき、  $\langle \psi_{0\beta} | \psi_{k-1} \rangle = 0$ , (8.66) より  $W_k = \langle \psi_{0\beta} | H' | \psi_{k-1} \rangle$  は

$$W_k = \langle \psi_{0\beta} | P_\beta H' | \psi_{k-1} \rangle = W_{1\beta} \langle \psi_{0\beta} | \psi_{k-1} \rangle + \langle \psi_{0\beta} | H' Q | \psi_{k-1} \rangle = \langle \psi_{0\beta} | H' Q | \psi_{k-1} \rangle \quad (8.68)$$

になる。  $H_0$  に縮退があっても  $P|\psi_{k-1}\rangle$  は  $W_k$  には寄与しない。(8.10) に  $Q$  を作用させると

$$Q|\psi_2\rangle = \frac{Q}{E_i - H_0} (H' - W_{1\beta}) (Q|\psi_{1\beta}\rangle + P|\psi_{1\beta}\rangle)$$

であるから、  $W_{1\beta}$  に縮退がないとき

$$W_{3\beta} = \langle \psi_{0\beta} | \left[ H' \left( \frac{Q}{E_i - H_0} H' \right)^2 - W_{1\beta} H' \frac{Q}{(E_i - H_0)^2} H' + \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{H'' P_\alpha H''}{W_{1\beta} - W_{1\alpha}} \right] | \psi_{0\beta} \rangle$$

になる。第1項と第2項は (8.35) に対応する。第3項は  $H_0$  が縮退する場合に現れる。

### 例題 1

2 次元等方調和振動子  $H_0$  に摂動  $H'$

$$H_0 = H_1 + H_2, \quad H_k = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{M\omega^2}{2} x_k^2, \quad H' = \kappa M\omega^2 x_1 x_2$$

が作用する場合を考える。  $\kappa$  は無次元の定数である。  $H_0$  の固有関数と固有値は (164 ページ参照)

$$H_0 |n_1, n_2\rangle = E_{n_1 n_2} |n_1, n_2\rangle, \quad E_{n_1 n_2} = \hbar\omega(n_1 + n_2 + 1), \quad n_k = 0, 1, 2, \dots$$

である。  $N_2 = n_1 + n_2$  が同じ固有関数  $|n_1, n_2\rangle$  は  $N_2 + 1$  個あり  $N_2 \neq 0$  のとき縮退する。  $|n_1, n_2\rangle$  は 1 次元調和振動子の固有関数 (4.25) の直積  $\varphi_{n_1}(x_1)\varphi_{n_2}(x_2)$  であるから

$$\langle n_1, n_2 | H' | n'_1, n'_2 \rangle = \kappa M\omega^2 \langle n_1 | x_1 | n'_1 \rangle \langle n_2 | x_2 | n'_2 \rangle$$

になる。縮退する固有関数を番号付けて

$$|n\rangle = |n_1 = n, n_2 = N_2 - n\rangle, \quad n = 0, 1, \dots, N_2$$

とすると、 (4.27) より

$$h_{mn} = \langle m | H' | n \rangle = \frac{\kappa \hbar \omega}{2} \left( \sqrt{(m+1)(N_2 - m)} \delta_{m,n-1} + \sqrt{(n+1)(N_2 - n)} \delta_{m-1,n} \right) \quad (8.69)$$

である。

$N_2 = 2$  の場合、  $h_{01} = h_{10} = h_{12} = h_{21} = \kappa \hbar \omega / \sqrt{2}$ , その他は 0 になるから、 (8.55) は

$$\begin{pmatrix} W_1 & -\kappa \hbar \omega / \sqrt{2} & 0 \\ -\kappa \hbar \omega / \sqrt{2} & W_1 & -\kappa \hbar \omega / \sqrt{2} \\ 0 & -\kappa \hbar \omega / \sqrt{2} & W_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (8.70)$$

になる。左辺の行列式  $= W_1(W_1^2 - (\kappa\hbar\omega)^2) = 0$  より  $W_1 = 0, \pm\kappa\hbar\omega$  であり, 3重縮退は完全に解ける。規格化した  $|\psi_0\rangle$  は

$$W_1 = 0 : |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n_1 = 2, n_2 = 0\rangle - |n_1 = 0, n_2 = 2\rangle) \quad (8.71)$$

$$W_1 = \pm\kappa\hbar\omega : |\psi_0\rangle = \frac{1}{2}(|n_1 = 0, n_2 = 2\rangle \pm \sqrt{2}|n_1 = 1, n_2 = 1\rangle + |n_1 = 2, n_2 = 0\rangle) \quad (8.72)$$

になる。これらは互いに直交する。

$H = H_1 + H_2 + H'$  の固有関数と固有値を解析的に求める。 $x_{\pm} = (x_1 \pm x_2)/\sqrt{2}$  とすれば

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial x_+}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_+} + \frac{\partial x_-}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\partial}{\partial x_+} + \frac{\partial}{\partial x_-} \right), \quad \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\partial}{\partial x_+} - \frac{\partial}{\partial x_-} \right)$$

より

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_+^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_-^2} \right) + \frac{M\omega_+^2}{2} x_+^2 + \frac{M\omega_-^2}{2} x_-^2, \quad \omega_{\pm}^2 = \omega^2(1 \pm \kappa)$$

$|\kappa| < 1$  の場合, 角振動数  $\omega_{\pm}$  の独立な2つの調和振動子になるから,  $H$  の固有値  $W$  は

$$W = \hbar\omega_+(n_+ + 1/2) + \hbar\omega_-(n_- + 1/2)$$

である。 $\omega_{\pm} = \omega\sqrt{1 \pm \kappa}$  をテイラー展開すれば

$$W = E_{n_+n_-} + W_1 + W_2 + \cdots, \quad W_1 = \frac{\kappa\hbar\omega}{2}(n_+ - n_-), \quad W_2 = -\frac{\kappa^2\hbar\omega}{8}(n_+ + n_- + 1)$$

になる。 $(n_+, n_-) = (2, 0), (0, 2), (1, 1)$  とすれば,  $W_1$  は摂動論の結果に一致する。

波動関数  $\varphi_{n_+n_-}(x_+, x_-) = \varphi_{n_+}(x_+)\varphi_{n_-}(x_-)$  は (4.25) より

$$\varphi_{n_+n_-}(x_+, x_-) = C_{n_+}^{(+)} C_{n_-}^{(-)} H_{n_+}(q_+) H_{n_-}(q_-) e^{-(q_+^2 + q_-^2)/2}$$

ただし

$$C_n^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} \left( \frac{M\omega_{\pm}}{\pi\hbar} \right)^{1/4}, \quad q_{\pm} = \sqrt{\frac{M\omega_{\pm}}{\hbar}} x_{\pm} = \sqrt{\frac{\omega_{\pm}}{\omega}} \frac{q_1 \pm q_2}{\sqrt{2}}$$

である。 $\kappa = 0$  の場合  $H_0 = H_1 + H_2$  の固有関数として

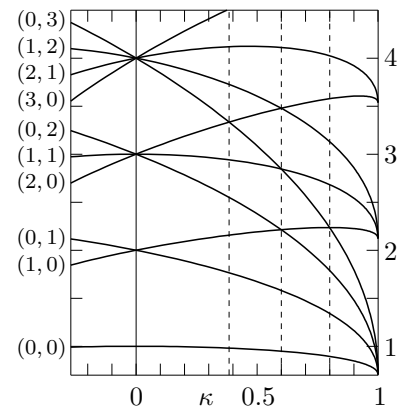
$$\varphi_{n_+n_-}(x_+, x_-) = C_{n_+} C_{n_-} H_{n_+}((q_1 + q_2)/\sqrt{2}) H_{n_-}((q_1 - q_2)/\sqrt{2}) e^{-(q_1^2 + q_2^2)/2}$$

を得る。 $H_n$  の具体形 (17.2) を用いると

$$\varphi_{11}(x_+, x_-) = 2C_1^2(q_1^2 - q_2^2) e^{-(q_1^2 + q_2^2)/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_2(x_1)\varphi_0(x_2) - \varphi_0(x_1)\varphi_2(x_2))$$

これは摂動論の (8.71) である。 $\varphi_{20}, \varphi_{02}$  も (8.72) に一致する。(8.55) で決めた  $H_0$  の固有関数  $|\psi_0\rangle$  は  $H = H_0 + H'$  の固有関数に連続的に変化する。

$n_+ + n_- \leq 3$  の場合,  $W/(\hbar\omega)$  の  $\kappa$  依存性を右図に示す。曲線には  $(n_+, n_-)$  を付けた。1次の摂動は  $\kappa = 0$  での接線である。 $\omega_+/\omega_-$  が有理数になる  $\kappa$  で縮退が起こる。破線は  $\omega_+/\omega_-$  が  $3/2, 2, 3$  になる  $\kappa$  を示す。 $\kappa \rightarrow \pm 1$  では  $\omega_{\mp} \rightarrow 0$  になり  $W$  は  $n_{\pm}$  だけに依存する。 $|\kappa| \geq 1$  の場合,  $\omega_{\pm}^2$  のどちらかは正ではなくなり, 束縛状態は存在しない。



問題 8.9  $\mathbf{J}$  を角運動量演算子 (5.5) とするとき

$$H = H_0 + H', \quad H_0 = \varepsilon_0 J_z^2, \quad H' = \mathbf{B} \cdot \mathbf{J}$$

を考える。 $\varepsilon_0$  は定数,  $\mathbf{B}$  は定数ベクトルであり  $|\varepsilon_0| \gg |\mathbf{B}|$  とする。 $\mathbf{J}^2, J_z$  の同時固有関数  $|jm\rangle$  は  $H_0$  の固有関数で固有値  $E_m$  は  $E_m = \varepsilon_0 m^2$  になるから,  $|jm\rangle$  と  $|j, -m\rangle$  は縮退する。

$$W = E_m + W_1 = \begin{cases} \varepsilon_0 m^2 \pm B_z m, & |m| \neq 1/2 \\ \frac{\varepsilon_0}{4} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(j+1/2)^2 (B_x^2 + B_y^2) + B_z^2}, & |m| = 1/2 \end{cases} \quad (8.73)$$

を示せ (8.24 参照)。 $H$  を

$$H = H_0 + H', \quad H_0 = \varepsilon_0 J_z^2 + B_z J_z, \quad H' = \frac{B_x - iB_y}{2} J_+ + \frac{B_x + iB_y}{2} J_-$$

と分割する。 $|jm\rangle$  は  $H_0$  の固有関数で  $E_m = \varepsilon_0 m^2 + B_z m$  になるから  $B_z \neq 0$  のとき縮退しない。縮退がない場合の 1 次の摂動では  $W_1 = \langle jm | H' | jm \rangle = 0$  である。 $|m| \neq 1/2$  の場合 (8.73) を再現するが,  $|m| = 1/2$  の場合は異なる結果になる。その理由を考えよ。

### 対称性

縮退がある場合, 次のような系の対称性を考慮した扱いは重要である。 $H_0$  と  $H'$  の両者と可換なエルミート演算子  $F$  が存在する場合,  $H_0$  と  $F$  の同時固有関数を作ることができ,  $|i, \alpha\rangle$  が  $F$  の固有関数にもなるように選べる。 $F$  の固有値を  $f_{i\alpha}$  とすると

$$F |i, \alpha\rangle = f_{i\alpha} |i, \alpha\rangle, \quad \alpha = 1, 2, \dots, g$$

である。 $H'F - FH' = 0$  より

$$0 = \langle i, \alpha | (H'F - FH') | i, \alpha' \rangle = (f_{i\alpha'} - f_{i\alpha}) h_{\alpha\alpha'}, \quad h_{\alpha\alpha'} = \langle i, \alpha | H' | i, \alpha' \rangle$$

である。 $g$  個の固有値  $f_{i\alpha}$  が全て異なっていれば  $h_{\alpha\alpha'} = \delta_{\alpha\alpha'} h_{\alpha\alpha}$  である。したがって, (8.55) は

$$(W_1 - h_{\alpha\alpha}) a_\alpha = 0, \quad \therefore W_1 = \langle i, \alpha | H' | i, \alpha \rangle, \quad |\psi_0\rangle = |i, \alpha\rangle \quad (8.74)$$

になり, 縮退がない場合と同じである。

$f_{i\alpha}$  が全て異なっていない場合でも, (8.55) の行列の次元を小さくできる。例えば, 異なる固有値が  $f_1$  と  $f_2$  の 2 つだけで, それぞれ  $g_1$  個と  $g_2 = g - g_1$  個に縮退している場合

$$1 \leq \alpha \leq g_1 \text{ のとき } F |i, \alpha\rangle = f_1 |i, \alpha\rangle, \quad g_1 + 1 \leq \alpha \leq g \text{ のとき } F |i, \alpha\rangle = f_2 |i, \alpha\rangle$$

とする。 $\alpha \leq g_1, \alpha' > g_1$  あるいは  $\alpha > g_1, \alpha' \leq g_1$  の場合,  $h_{\alpha\alpha'} = 0$  になる。(8.55) は

$$\alpha \leq g_1 : \sum_{\alpha'=1}^{g_1} (W_1 \delta_{\alpha\alpha'} - h_{\alpha\alpha'}) a_{\alpha'} = 0, \quad \alpha \geq g_1 + 1 : \sum_{\alpha'=g_1+1}^g (W_1 \delta_{\alpha\alpha'} - h_{\alpha\alpha'}) a_{\alpha'} = 0$$

の 2 つの部分に分解でき,  $g_1 \times g_1$  及び  $g_2 \times g_2$  の行列の問題になる。 $H_0$  と  $F$  の同時固有関数は

$$\sum_{\alpha=1}^{g_1} a_\alpha |i, \alpha\rangle, \quad \text{あるいは} \quad \sum_{\alpha=g_1+1}^g a_\alpha |i, \alpha\rangle \quad (8.75)$$

と書ける。 $H = H_0 + H'$  の固有関数も  $F$  との同時固有関数にとることができるから, 線形結合 (8.75) を  $|\psi_0\rangle$  として最初から使えばよい。一般に,  $F$  の固有値が同じ状態  $|i, \alpha\rangle$  だけを考えれば

十分で、異なる状態は独立に扱ってよい。特に、固有値が  $f_{i\alpha}$  である  $|i, \alpha\rangle$  が 1 つだけならば、縮退していない場合と同じ扱いができる。

対称性を考慮した扱いは、元々の方程式 (8.3)~(8.5) の場合にも適用される。 $H_0$  と  $F$  が可換なとき、 $|n\rangle$  として  $H_0$  と  $F$  の同時固有関数を採用する。 $H = H_0 + H'$  も  $F$  と可換ならば、 $H$  の固有状態  $|\psi\rangle$  は  $F$  の固有状態にもできるから、(8.3) の和は全ての状態  $|n\rangle$  について行う必要はなく、 $F$  の固有値が同じ  $|n\rangle$  についてだけ行えばよい。これにより (8.4) に現れた行列の次元を大幅に縮小できる可能性がある。数値計算で行列を対角化する場合、これは特に重要になる。

## 例題 2

206 ページの例題 1 を 3 次元等方調和振動子に拡張して

$$H = H_0 + H', \quad H_0 = H_1 + H_2 + H_3, \quad H' = \kappa M \omega^2 x_1 x_2$$

の場合を考える。 $H_0$  の固有値、固有関数は (6.74)

$$H_0 |n_1, n_2, n_3\rangle = E_{n_1 n_2 n_3} |n_1, n_2, n_3\rangle, \quad E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \omega \left( n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right)$$

であり、固有値  $\hbar \omega(N + 3/2)$  は  $(N + 1)(N + 2)/2$  重に縮退する。 $N = 2$  の場合

$$(n_1, n_2, n_3) = (0, 0, 2), (0, 1, 1), (0, 2, 0), (1, 0, 1), (1, 1, 0), (2, 0, 0) \quad (8.76)$$

が縮退する。これらの状態間の行列要素  $\langle n_1, n_2, n_3 | H' | n'_1, n'_2, n'_3 \rangle$  を求め、 $6 \times 6$  行列式の永年方程式 (8.56) を解いてもよいが煩雑である。ところで、 $H'$  は  $x_3$  を含まないから  $H_3$  と  $H'$  は可換である。また、 $H_3$  と  $H_0$  も可換であるから、 $H_3$  の固有値  $\hbar \omega(n_3 + 1/2)$  が同じ縮退した状態だけを考えればよい。(8.76) を  $n_3$  で分類すると

$$(n_1, n_2, n_3) = \underbrace{(0, 2, 0), (1, 1, 0), (2, 0, 0)}_{n_3=0}, \underbrace{(0, 1, 1), (1, 0, 1)}_{n_3=1}, \underbrace{(0, 0, 2)}_{n_3=2} \quad (8.77)$$

になる。 $\langle n_1, n_2, n_3 | H' | n'_1, n'_2, n'_3 \rangle = \langle n_1, n_2 | H' | n'_1, n'_2 \rangle \delta_{n_3 n'_3}$  である。 $v = \kappa \hbar \omega$  とすると

- $n_3 = 0$  の場合、 $N = n_1 + n_2 = 2$  であるから (8.70) より  $W_1 = 0, \pm v$
- $n_3 = 1$  の場合、 $|1\rangle = |n_1=0, n_2=1, n_3=1\rangle, |2\rangle = |n_1=1, n_2=0, n_3=1\rangle$  とすれば、(8.69) より  $h_{12} = h_{21} = v/2, h_{11} = h_{22} = 0$  である。(8.55) から  $W_1 = \pm v/2$  である。
- $n_3 = 2$  の状態は 1 つだけであるから  $W_1 = \langle 0, 0, 2 | H' | 0, 0, 2 \rangle = 0$

摂動の 1 次で、 $N = 2$  の 6 重縮退は  $W_1 = 0$  の 2 重縮退以外は解ける。

縮退した状態を (8.77) の順番で番号付け  $|i\rangle, i = 1, 2, \dots, 6$  とすると、(8.55) は

$$\left( \begin{array}{ccc|cc|c} W_1 & -v/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -v/\sqrt{2} & W_1 & -v/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -v/\sqrt{2} & W_1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & W_1 & -v/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -v/2 & W_1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & W_1 \end{array} \right) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \end{pmatrix} = 0$$

になる。 $6 \times 6$  行列は  $3 \times 3, 2 \times 2, 1 \times 1$  の部分行列に分割され、各部分行列の固有値と固有関数を

求めればよい。これが上で行ったことである。一方, (8.76) の順番で番号付けると

$$\begin{pmatrix} W_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W_1 & 0 & -v/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & W_1 & 0 & -v/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & -v/2 & 0 & W_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -v/\sqrt{2} & 0 & W_1 & -v/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -v/\sqrt{2} & W_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \end{pmatrix} = 0$$

になり, 見通しが非常に悪い。いずれの場合も, 行列式は  $W_1^2 (W_1^2 - v^2/4) (W_1^2 - v^2)$  である。

### 水素型原子と原子核の大きさ

原子核の大きさは  $10^{-14}$  m 程度であり, 原子の大きさ  $10^{-10}$  m に比べれば非常に小さい。このため, 原子のエネルギー準位を求めるとき, 原子核を電荷  $Ze$  の点電荷として扱う。そこで, 原子核の大きさは無視できることを摂動論で確かめよう。原子核は電荷  $Ze$  が一様に分布する半径  $R$  の球と見なせる。このとき, 電子が受けるポテンシャル  $V(r)$  は

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z\alpha\hbar c}{2R} \left(3 - \frac{r^2}{R^2}\right), & r < R \\ -\frac{Z\alpha\hbar c}{r}, & r > R \end{cases}, \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \text{微細構造定数} \approx \frac{1}{137} \quad (8.78)$$

になる。ハミルトニアンを

$$H = H_0 + H'(r), \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 - \frac{Z\alpha\hbar c}{r}, \quad H'(r) = \begin{cases} -\frac{Z\alpha\hbar c}{2R} \left(3 - \frac{r^2}{R^2} - \frac{2R}{r}\right), & r < R \\ 0, & r > R \end{cases}$$

に分割する。 $H'$  は角度に依存しないから, 球面調和関数の直交性 (17.40) より  $\ell = \ell'$  かつ  $m = m'$  のときだけ  $\langle n, \ell, m | H' | n, \ell', m' \rangle \neq 0$  である。したがって, (8.56) の  $h_{\alpha\alpha'}$  は既に対角化されており永年方程式を解く必要はない。1 次の摂動では

$$W_1 = \langle n, \ell, m | H' | n, \ell, m \rangle = \int_0^R dr H'(r) \chi_{n\ell}^2(r)$$

になる。対称性の観点から見ると  $[H', \mathbf{L}] = 0$  であるから,  $H_0$  の縮退している  $n^2$  個の状態で  $\mathbf{L}^2$  及び  $L_z$  の固有値が同じ状態だけを扱えばよい。状態は  $|n, \ell, m\rangle$  の1つだけで, 縮退がない場合と同じ扱いになる。 $W_1$  は  $\ell$  にも依存するから  $\ell$  が異なる状態の縮退は解ける。(6.36) より

$$W_1 = |E_n| \frac{C_{n\ell}}{\rho_{\max}} \int_0^{\rho_{\max}} d\rho \left( \frac{\rho^2}{\rho_{\max}^2} + \frac{2\rho_{\max}}{\rho} - 3 \right) \rho^{2\ell+2} F_{n\ell}(\rho) \quad (8.79)$$

ただし

$$E_n = -\frac{(Z\alpha)^2 Mc^2}{2n^2}, \quad \rho_{\max} = \frac{2R}{na_z} = \frac{2ZR}{na_B}, \quad a_B = \frac{\hbar}{Mc\alpha}$$

$$C_{n\ell} = \frac{(n+\ell)!}{[(2\ell+1)!]^2 (n-\ell-1)!}, \quad F_{n\ell}(\rho) = e^{-\rho} \left( M(\ell+1-n, 2\ell+2, \rho) \right)^2$$

$0 \leq \rho \leq \rho_{\max} \ll 1$  の場合  $F_{n\ell}(\rho) \approx 1$  であるから

$$W_1 \approx |E_n| \frac{3C_{n\ell}}{(\ell+1)(2\ell+3)(2\ell+5)} \rho_{\max}^{2\ell+2}, \quad W_1(\ell=0) \approx \frac{4}{5n} \left( \frac{ZR}{a_B} \right)^2 |E_n| \quad (8.80)$$

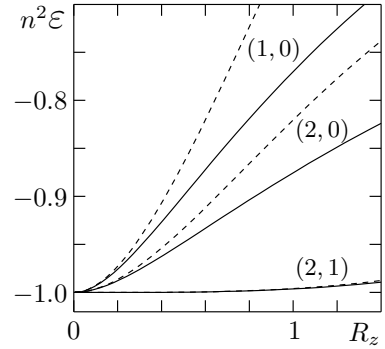
摂動は  $\ell = 0$  のとき最も効果がある。電子のボーア半径  $a_B$  は  $a_B = 0.53 \times 10^{-10} \text{ m}$  である。原子核の大きさは  $R \sim 10^{-14} \text{ m}$  であるから  $R/a_B \sim 10^{-4}$  になり  $W_1/|E_n| \approx 0$  である。結局、原子核を点電荷として扱ってよい。

**問題 8.10** ポテンシャルが (8.78) で与えられるとき、170 ページのプログラムを用いて固有値と固有関数を求めよ。系の大きさを表す  $\lambda$  として  $\lambda = a_z = a_B/Z$  とすると (6.88) は

$$\varepsilon = \frac{2E}{Mc^2(Z\alpha)^2}, \quad U(q) = \begin{cases} -\frac{1}{R_z} \left( 3 - \frac{q^2}{R_z^2} \right), & q < R_z \\ -\frac{2}{q}, & q > R_z \end{cases}$$

ただし  $R_z = ZR/a_B$  である。 $q_{\max}$  の取り方は 154 ページの図を参考にせよ。

右図に  $\varepsilon$  の数値結果を実線で示す。破線は (8.79) を数値積分した結果である。(8.80) から予想されるように、 $\ell = 0$  の状態は  $R_z$  依存性が強く、1 次の摂動は  $R_z \ll 1$  のときよい近似になる。 $\ell > 0$  の場合、 $R_z$  が大きくても 1 次の摂動はよく成り立つ。



ミューオンは質量が電子の 207 倍でそれ以外は電子とほとんど同じ性質を示す粒子である。ミューオンを軌道粒子とする  $\mu$  粒子原子を生成できる。ミューオンのボーア半径は、電子のボーア半径の  $1/207$  であり  $a_B = 2.6 \times 10^{-13} \text{ m}$  になる。 $Z$  が大きい場合  $a_B/Z$  は  $R$  と同程度になるから、原子核の大きさは無視できない。 $\mu$  粒子原子のエネルギー準位の実験値と理論的結果を比較することで、原子核の大きさを求めることができる。ただし、 $Z$  が大きい場合、非相対論的扱いでは不十分で、相対論的なディラック方程式を解く必要がある。

### スピン・軌道相互作用

(6.80) においてスピン・軌道相互作用  $H' = V_{LS}(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  を 1 次の摂動として扱う。 $H_0$  の固有関数は (6.81)  $|n\ell m_\ell m_\sigma\rangle$  で与えられる。 $H_0$  の固有値は  $m_\ell, m_\sigma$  に依存しないから  $2(2\ell+1)$  重に縮退する。 $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = (L_+S_- + L_-S_+)/2 + L_zS_z$  より  $m'_\ell = m_\ell \pm 1$  のとき  $\langle n\ell m'_\ell m'_\sigma | H' | n\ell m_\ell m_\sigma \rangle \neq 0$  であり (8.56) の  $h_{\alpha\alpha'}$  は対角行列ではない。このため、 $2(2\ell+1)$  次元の  $h_{\alpha\alpha'}$  を対角化が必要がある。ところで  $H_0$  と  $H'$  は  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  と可換であるから、 $H_0$  の固有関数として  $\mathbf{J}^2, J_z$  の同時固有関数を用いてもよい。これは (6.82)

$$\psi_{n\ell jm}(\mathbf{r}) = \frac{\chi_{n\ell}(r)}{r} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta, \phi) \quad (8.81)$$

で与えられる。ここで  $\mathcal{Y}_{\ell jm}$  は (5.115),  $m$  は  $J_z = L_z + S_z$  の固有値で半整数である。(5.116) より

$$\langle n\ell jm | H' | n\ell j' m' \rangle = W_1 \delta_{jj'} \delta_{mm'}, \quad W_1 = \langle V_{LS}(r) \rangle_{n\ell} \frac{\kappa_{\ell j}}{2}$$

ただし

$$\langle V_{LS}(r) \rangle_{n\ell} = \int_0^\infty dr V_{LS}(r) (\chi_{n\ell})^2, \quad \kappa_{\ell j} = \begin{cases} \ell, & j = \ell + 1/2 \\ -\ell - 1, & j = \ell - 1/2 \end{cases}$$

であり  $h_{\alpha\alpha'}$  は対角行列になる。したがって、1 次の摂動は  $W_1$  で与えられ、エネルギー準位は 2 つに分離する。 $\ell = 0$  の場合は  $j = 1/2$  だけで  $W_1 = 0$  である。

水素型原子を考える。 $V_{LS}(r)$  として (6.85)

$$V_{LS}(r) = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar}{Mc} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar}{Mc} \right)^2 \frac{Z\alpha\hbar c}{r^3}, \quad V(r) = -\frac{Z\alpha\hbar c}{r}$$



とすると

$$\langle V_{\text{LS}}(r) \rangle_{n\ell} = \frac{Z\alpha^4 M c^2 a_{\text{B}}^3}{2} \langle r^{-3} \rangle_{n\ell}, \quad a_{\text{B}} = \frac{\hbar}{M c \alpha} = \text{ボーア半径}$$

$\ell > 0$  の場合, クラマースの関係式 (6.40) で  $\nu = -1$  とし (6.42) を使うと  $\langle r^{-3} \rangle_{n\ell}$  が求まり

$$W_1 = -E_n \frac{(Z\alpha)^2}{(2\ell+1)\ell(\ell+1)n} \kappa_{\ell j} = -E_n \frac{(Z\alpha)^2}{(2\ell+1)n} \times \begin{cases} 1/(\ell+1), & j = \ell + 1/2 \\ -1/\ell, & j = \ell - 1/2 \end{cases} \quad (8.82)$$

になる。スピン・軌道相互作用は相対論的補正であるが, 相対論的補正として

$$H'' = -\frac{1}{2Mc^2} \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2M} \right)^2 = -\frac{1}{2Mc^2} (H_0 - V(r))^2, \quad H_{\text{D}} = \frac{\pi Z\alpha^4 M c^2 a_{\text{B}}^3}{2} \delta(\mathbf{r})$$

が存在する。 $H''$  は相対論的運動エネルギー  $\sqrt{(Mc^2)^2 + c^2 \mathbf{p}^2} - Mc^2$  の補正である。 $H''$  の非対角行列要素は 0 であり, 対角行列要素は (6.41), (6.42) より

$$\begin{aligned} W'_1 &= \langle n\ell jm | H'' | n\ell jm \rangle = -\frac{1}{2Mc^2} \langle n\ell jm | (E_n - V(r))^2 | n\ell jm \rangle \\ &= -\frac{1}{2Mc^2} \left( E_n^2 + 2Z\alpha\hbar c E_n \langle r^{-1} \rangle_{n\ell} + (Z\alpha\hbar c)^2 \langle r^{-2} \rangle_{n\ell} \right) \\ &= E_n \frac{(Z\alpha)^2}{n} \left( \frac{2}{2\ell+1} - \frac{3}{4n} \right) \end{aligned}$$

になる。(6.36) より  $\ell = 0$  のときだけ  $\psi_{n\ell jm}(0) \neq 0$  になるから

$$\langle n\ell jm | H_{\text{D}} | n\ell jm \rangle = \frac{\pi Z\alpha^4 M c^2 a_{\text{B}}^3}{2} \psi_{n\ell jm}^\dagger(0) \psi_{n\ell jm}(0) = -E_n \frac{(Z\alpha)^2}{n} \delta_{\ell,0}$$

(8.82) の  $W_1$  を  $\ell = 0$  にも適用すれば  $H_{\text{D}}$  の効果は取り込める。1 次の摂動までで  $H$  の固有値は

$$W_{n\ell j} = E_n + W_1 + W'_1 = E_n \left( 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left( \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right) \quad (8.83)$$

になる。 $\ell \neq 0$  のとき,  $j = \ell \pm 1/2$  の状態は  $E_n$  に比べて  $(Z\alpha)^2 \approx (Z/137)^2 \ll 1$  程度の差で 2 つに分かれる。これをエネルギー準位の微細構造という。

$n = 2$  のとき  $\ell = 0, 1$  であるから  $(\ell, j) = (0, 1/2), (1, 1/2), (1, 3/2)$  になる。クーロンポテンシャルだけなら, これらは縮退する。水素原子の場合 (数値は  $10^{-5}$  eV 単位)

$$\Delta E_1 = W(\ell = 0, j = 1/2) - W(\ell = 1, j = 1/2) = 0, \quad (0.438)$$

$$\Delta E_2 = W(\ell = 1, j = 3/2) - W(\ell = 0, j = 1/2) = -\frac{\alpha^2}{4} E_{n=2} = 4.528, \quad (4.099)$$

になる。括弧内は実験値である。(8.83) は  $10^{-6}$  eV 程度のズレはあるが実験値をよく再現する。

### ゼーマン効果

(7.59), (7.60) のハミルトニアン ( $g_\ell = 1, g_s = 2$ )

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(r) + V_{\text{LS}} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \mu B (J_z + S_z)$$

において, 第 3 項または第 4 項を 1 次の摂動として扱う。 $V_{\text{LS}}$  と磁場  $B$  は定数とする。

$$H = H_0 + H', \quad H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(r) + V_{\text{LS}} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad H' = \mu B (J_z + S_z)$$

とする場合,  $H_0$  の固有関数は (8.81) である。  $H_0$  の固有値 (6.84) は  $J_z$  の固有値  $m$  に依存しないから,  $2j+1$  重に縮退するが,  $H_0$  と  $H'$  は  $J_z$  と可換であるから, 1 次の摂動は縮退がない場合と同じになり  $W_1 = \langle n\ell jm | H' | n\ell jm \rangle$  である。これは (7.68) である。一方

$$H = H_0 + H', \quad H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(r) + \mu B(L_z + \sigma_z), \quad H' = V_{\text{LS}} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

に分けると,  $H_0$  の固有関数は (6.81) で与えられ, 固有値  $E$  は  $E = E_n + \mu B(m_\ell + m_\sigma)$  になる。  $n$  と  $\ell$  を与えたとき,  $m_\ell, m_\sigma = 1$  と  $m_\ell + 1, m_\sigma = -1$  は縮退する。この場合でも,  $H_0$  と  $H'$  は  $J_z$  と可換である。(6.81) は  $J_z$  の固有状態であり, 固有値  $m$  は  $m = m_\ell + m_\sigma/2$  である。縮退する 2 つの状態の  $m$  は異なるから, 1 次の摂動は縮退がない場合と同じでよい。したがって

$$W_1 = \langle n\ell m_\ell m_\sigma | H' | n\ell m_\ell m_\sigma \rangle = V_{\text{LS}} \langle n\ell m_\ell m_\sigma | L_z S_z | n\ell m_\ell m_\sigma \rangle = V_{\text{LS}} m_\ell \frac{m_\sigma}{2}$$

になるから, 1 次の摂動までで  $H$  の固有値  $W$  は

$$W = E + W_1 = E_n + \mu B \left( m + \frac{m_\sigma}{2} \right) + \frac{V_{\text{LS}}}{2} \left( m - \frac{m_\sigma}{2} \right) m_\sigma, \quad m_\sigma = \pm 1$$

これは (7.67) である。

## 8.6 シュタルク効果

水素型原子に  $z$  軸方向の一様電場  $\mathcal{E}$  を作用させると, 電子 (電荷  $-e$ ) のハミルトニアン  $H$  は

$$H = H_0 + H', \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 - \frac{Z\alpha\hbar c}{r}, \quad H' = e\mathcal{E}z = e\mathcal{E}r \cos \theta \quad (8.84)$$

になる。  $H_0$  のエネルギー固有値  $E_n$  は (6.30), 固有関数  $\psi_{n\ell m}$  の動径方向は (6.33) で与えられる。スピン状態は考えない。(2.67) のパリティ演算子  $P$  に対して (6.14) 及び  $PzP = -z$  より

$$\langle n', \ell, m | H' | n, \ell, m \rangle = -\langle n', \ell, m | H' | n, \ell, m \rangle = 0 \quad (8.85)$$

一般に, パリティ選択則 (2.68) とウィグナー・エッカルトの定理 (5.148) より,  $\ell \neq \ell' \pm 1$  または  $m \neq m'$  のとき  $\langle n', \ell', m' | H' | n, \ell, m \rangle = 0$  になる。

### 基底状態

縮退のない基底状態  $n=1, \ell=m=0$  の場合, (8.85) より  $W_1 = \langle 1, 0, 0 | H' | 1, 0, 0 \rangle = 0$  である。  $|\psi_1\rangle$  を求める。クーロンポテンシャルの場合,  $H_0$  の固有関数は束縛状態だけでも無限個あり,  $H_0$  の固有関数で展開した (8.18) の和を求めることは容易ではない。(8.9) を  $H_0$  の固有関数で展開せずに, 微分方程式として解く。(8.9) は

$$(H_0 - E_1)\psi_1(\mathbf{r}) = -e\mathcal{E}r \cos \theta \psi_0(r), \quad \psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_z^3}} e^{-r/a_z} \quad (8.86)$$

になる。  $E_1$  は  $H_0$  の基底状態エネルギー (6.30),  $a_z$  は (6.34) で定義される。  $\psi_0(r)$  は角度に依らないから

$$\psi_1(\mathbf{r}) = e\mathcal{E}\psi_0(r)\varphi(\mathbf{r}), \quad \varphi(\mathbf{r}) = g(r) \cos \theta$$

とおける。  $(H_0 - E_1)\psi_0 = 0$  より

$$(H_0 - E_1)\psi_0\varphi = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( 2\frac{d\psi_0}{dr} \frac{\partial\varphi}{\partial r} + \psi_0 \nabla^2 \varphi \right) = -\frac{\hbar^2}{2M} \psi_0 \left( \nabla^2 \varphi - \frac{2}{a_z} \frac{dg}{dr} \cos \theta \right)$$

になる。  $\cos \theta \propto Y_{10}$  より  $L^2 \varphi = 2\varphi$  であるから

$$\nabla^2 \varphi = \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} L^2 \right) \varphi = \cos \theta \frac{d}{dr} \left( \frac{dg}{dr} + \frac{2}{r} g \right)$$

$\rho = r/a_z$  とすると (8.86) は

$$\frac{d}{d\rho} \left( \frac{dg}{d\rho} + \frac{dP}{d\rho} g \right) = \frac{dQ}{d\rho}, \quad \frac{dP}{d\rho} = \frac{2}{\rho} - 2, \quad \frac{dQ}{d\rho} = \frac{2Ma_z^3}{\hbar^2} \rho$$

になるから

$$g(\rho) = e^{-P(\rho)} \int d\rho Q(\rho) e^{P(\rho)} = -\frac{Ma_z^3}{\hbar^2} \left( \rho + \frac{\rho^2}{2} \right) + C_1 \frac{2\rho^2 + 2\rho + 1}{4\rho^2} + C_2 \frac{e^{2\rho}}{\rho^2}$$

$\psi_1 \propto e^{-\rho} g(\rho) \cos \theta$  が原点と無限遠で発散しない条件より  $C_1 = C_2 = 0$  になり

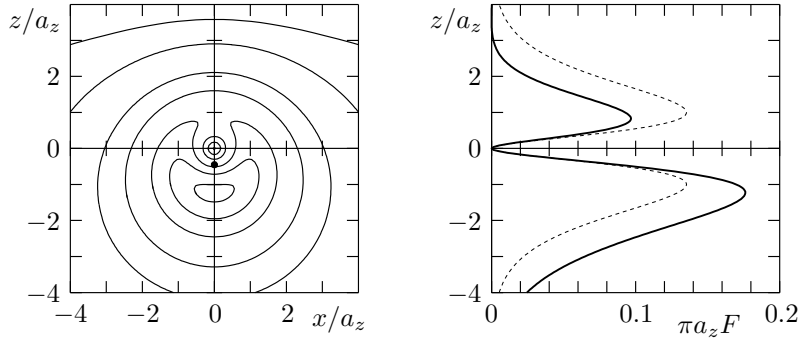
$$\psi_1(\mathbf{r}) = -\lambda \left( \frac{r}{a_z} + \frac{r^2}{2a_z^2} \right) \psi_0(r) \cos \theta, \quad \lambda = e\mathcal{E} \frac{Ma_z^3}{\hbar^2} = \frac{e\mathcal{E}}{Ze^2/(4\pi\epsilon_0 a_z^2)}$$

である。  $\lambda$  は外場  $\mathcal{E}$  による力と  $r = a_z$  でのクーロン力の比である。  $\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = 0$  であり

$$W_2 = \langle \psi_0 | H' | \psi_1 \rangle = -\frac{\hbar^2 \lambda^2}{Ma_z^3} \int d^3r r \left( \frac{r}{a_z} + \frac{r^2}{2a_z^2} \right) \psi_0^2(r) \cos^2 \theta = -\frac{9M(e\mathcal{E}a_z^2)^2}{4\hbar^2} \quad (8.87)$$

になる。

$F(\mathbf{r}) = r^2 |\psi_0 + \psi_1|^2$  を下図に示す ( $\lambda = 0.1$ )。左側は  $F(x, 0, z) = \text{一定}$  の点  $(x, z)$  からなる曲線 (等高線) を表す。右図で実線は  $F(0, 0, z)$ , 破線は  $\lambda = 0$  の場合である。  $\mathcal{E} > 0$  のとき電子には  $z$  軸負方向に力が働く。電子は  $z$  軸負の方向に押され  $\psi(\mathbf{r})$  は球対称から歪む。



歪みの度合いは双極子モーメント  $\boldsymbol{\mu} = -e\mathbf{r}$  の期待値で表される。  $\mathcal{E}$  の 1 次までの近似では

$$\langle \psi | \boldsymbol{\mu} | \psi \rangle = \langle \psi_0 | \boldsymbol{\mu} | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | \boldsymbol{\mu} | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 | \boldsymbol{\mu} | \psi_0 \rangle = 2\langle \psi_0 | \boldsymbol{\mu} | \psi_1 \rangle$$

$\psi_0, \psi_1$  は角度  $\phi$  に依存しないから  $\langle \psi | \mu_x | \psi \rangle = \langle \psi | \mu_y | \psi \rangle = 0$  である。  $z = H'/(e\mathcal{E})$  より

$$\langle \psi | \mu_z | \psi \rangle = -\frac{2}{\mathcal{E}} \langle \psi_0 | H' | \psi_1 \rangle = -\frac{2}{\mathcal{E}} W_2 = 4\pi\epsilon_0 \frac{9}{2} \frac{a_z^3}{Z} \mathcal{E} \quad (8.88)$$

になる。これは  $\langle \psi | z | \psi \rangle = -9\lambda a_z/2$  と表せる。左図の  $\bullet$  は  $\langle \psi | z | \psi \rangle$  である。  $E(\mathcal{E}), |\psi(\mathcal{E})\rangle$  を  $H$  の正確な固有値, 固有状態とすると, ヘルマン・ファインマンの定理 (8.42) より

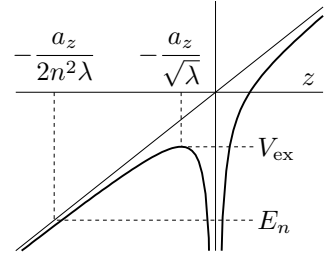
$$\langle \psi(\mathcal{E}) | \mu_z | \psi(\mathcal{E}) \rangle = -\langle \psi(\mathcal{E}) | \frac{dH}{d\mathcal{E}} | \psi(\mathcal{E}) \rangle = -\frac{dE(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} = -\frac{d}{d\mathcal{E}} \left( E_i + W_2 + O(\mathcal{E}^3) \right)$$

これから (8.88) が求まる。

電子に作用するポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  は

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{Z\alpha\hbar c}{r} + e\mathcal{E}z = \frac{Z\alpha\hbar c}{a_z} \left( -\frac{a_z}{r} + \lambda \frac{z}{a_z} \right)$$

である。 $V(0,0,z)$  は  $z = -a_z/\sqrt{\lambda}$  で極大値  $V_{\text{ex}} = 4E_1\sqrt{\lambda}$  になる (右図)。 $E_1 = -Z\alpha\hbar c/2a_z$  は基底状態エネルギーである。 $E_n > V_{\text{ex}}$  のとき、電子は原子核に束縛されず原子外に散逸する。 $E_n < V_{\text{ex}}$  の場合、古典力学的には電子は原子核に束縛されたままであるが、量子力学的にはトンネル効果のため電子は無限遠に逃げ出す。要するに、 $V(\mathbf{r}) \xrightarrow{z \rightarrow -\infty} -\infty$  になるから、任意の  $E$  に対して無限遠では  $E > V(\mathbf{r})$  であり、束縛状態は存在しない。しかし、 $|E_n| \gg |V_{\text{ex}}|$  の場合、電子が逃げ出す確率は非常に小さく、 $E = E_n$  の状態を離散的エネルギーの束縛状態であるかのように扱ってよい。



### 励起状態

$H_0$  の固有値  $E_n$  は  $n^2$  重に縮退しているが、摂動のため縮退は部分的に解ける。これを最初の励起状態 ( $n = 2$ ) について扱う。 $n = 2$  の固有関数は

$$(n, \ell, m) = (2, 0, 0), (2, 1, 0), (2, 1, 1), (2, 1, -1)$$

の4つある。 $H_0$  と  $H'$  は軌道角運動量の  $z$  成分  $L_z$  とは可換であるから、 $L_z$  の固有値  $m$  が同じ状態だけを考えればよい。

$m = 0$  の場合  $|\psi_0\rangle = a_1|2, 0, 0\rangle + a_2|2, 1, 0\rangle$  であり (8.55) は

$$\begin{pmatrix} W_1 - \langle 2, 0, 0 | H' | 2, 0, 0 \rangle & -\langle 2, 0, 0 | H' | 2, 1, 0 \rangle \\ -\langle 2, 0, 0 | H' | 2, 1, 0 \rangle & W_1 - \langle 2, 1, 0 | H' | 2, 1, 0 \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (8.89)$$

になる。(8.85) から  $\langle 2, 0, 0 | H' | 2, 0, 0 \rangle = \langle 2, 1, 0 | H' | 2, 1, 0 \rangle = 0$  である。 $|n\ell m\rangle$  の波動関数を  $\varphi_{n\ell m}(\mathbf{r})$  とすると、(5.30), (6.39), (6.38) より

$$\varphi_{200}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_z^3}} \left( 1 - \frac{r}{2a_z} \right) e^{-r/2a_z}, \quad \varphi_{210}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_z^3}} \frac{r}{2a_z} e^{-r/2a_z} \cos \theta$$

であるから ( $\rho = r/a_z$ )

$$\langle 2, 0, 0 | H' | 2, 1, 0 \rangle = \frac{e\mathcal{E}a_z}{16} \int_0^\infty d\rho \rho^4 (2 - \rho) e^{-\rho} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos^2 \theta = -3e\mathcal{E}a_z$$

になる。(8.89) より  $W_1$  と規格化された  $H_0$  の固有関数は

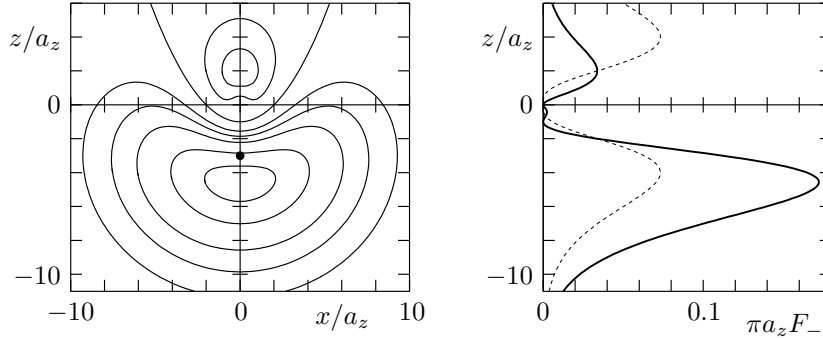
$$W_{1\pm} = \pm 3e\mathcal{E}a_z, \quad \psi_{0\pm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_{200}(\mathbf{r}) \mp \varphi_{210}(\mathbf{r})) = \frac{e^{-r/2a_z}}{\sqrt{16\pi a_z^3}} \left( 1 - \frac{r}{2a_z} \mp \frac{r \cos \theta}{2a_z} \right) \quad (8.90)$$

になり縮退は解ける。シュタルク効果が1次の摂動で現れるのは  $\ell$  の異なる状態が縮退するためであり、水素型原子に特有の現象である。 $|\psi_{0\pm}\rangle$  は  $\ell = 0, 1$  の重ね合わせであり  $\langle \psi_{0\pm} | H' | \psi_{0\pm} \rangle \neq 0$  になる。水素型原子でも、縮退がない基底状態では  $W_1 = 0$  でありシュタルク効果は2次から始まる。

$|\psi_{0\pm}\rangle$  は  $H_0$  の固有関数であり電場  $\mathcal{E}$  とは全く無関係である。ところで、 $\mathcal{E} \neq 0$  での固有関数  $|\psi\rangle$  は  $\mathcal{E}$  の連続関数であるから、 $\mathcal{E} \rightarrow 0$  のとき  $H_0$  の縮退する固有関数の特定の組み合わせになる。これが  $|\psi_{0\pm}\rangle$  である。基底状態と異なり、 $\mathcal{E} = 0$  でも双極子モーメント  $\langle \mu_z \rangle = \mp 3ea_z$  を持つ。

$$F_{\pm}(\mathbf{r}) = r^2 |\psi_{0\pm}(\mathbf{r})|^2 = \frac{r^2 e^{-r/a_z}}{16\pi a_z^3} \left( \frac{r}{2a_z} - 1 \pm \frac{r \cos \theta}{2a_z} \right)^2$$

とする。\$F\_+(\mathbf{r}) = F\_-(-\mathbf{r})\$ である。\$r/2a\_z > 1\$ では \$\cos\theta \geq 0\$ のとき \$F\_- \leq r^2|\varphi\_{200}(\mathbf{r})|^2/2\$ になる。214 ページの \$F(\mathbf{r})\$ の図と同様に \$F\_-\$ を下図に示す。破線は \$r^2|\varphi\_{200}(\mathbf{r})|^2/2\$ を示す。電子には電場とは逆向きの力が働くから、\$\varepsilon > 0\$ のとき \$z < 0\$ の領域に分布した方がエネルギーは下がる。下図より状態 \$\psi\_{0-}\$ での確率分布は \$z < 0\$ に多く分布し、エネルギー変化は \$W\_{1-} = -3e\varepsilon a\_z < 0\$ である。



\$m = \pm 1\$ の状態はそれぞれ 1 つだけであるから、これらは正しい \$H\_0\$ の状態である。(8.85) より \$W\_1 = \langle 2, 1, \pm 1 | H' | 2, 1, \pm 1 \rangle = 0\$ になり、\$m = 1\$ と \$m = -1\$ は縮退したままである。\$m \neq 0\$ と \$-m\$ の状態が縮退することは系の対称性から示せる。(8.84) の \$H\$ は \$\mathbf{L}^2\$ とは非可換であるが \$L\_z\$ とは可換であるから、\$H\$ と \$L\_z\$ の同時固有関数 \$\psi\_m = \varphi\_m(r, \theta) e^{im\phi}\$ が存在し、\$H\$ の固有値 \$E\$ は一般に \$L\_z\$ の固有値 \$m\$ に依存する。\$H\psi\_m = E\psi\_m\$ の複素共役をとれば、\$\psi\_m^\*\$ も \$H\$ の固有関数で、固有値 \$E\$ は変わらない。しかし、\$L\_z\$ の固有値は \$-m\$ になるから、\$\pm m\$ の状態は縮退する。

**問題 8.11** \$n = 2\$ の 4 つの状態を同時に扱い、(8.55) を \$4 \times 4\$ 行列の問題として解け。

#### 放物線座標によるシュタルク効果

一般に \$\ell = 0, 1, \dots, n-1\$ であるから、例えば、\$m = 0\$ の状態は \$n\$ 個存在し (8.89) は \$n \times n\$ 行列になる。これから \$W\_1\$ を求めるのは煩雑である。そこで、\$H\_0\$ の固有関数として放物線座標 (6.45) での固有関数 (6.51) を用いる。(6.52) より

$$\begin{aligned} & \langle n_1 n_2 m | H' | n'_1 n'_2 m' \rangle \\ &= e\varepsilon \frac{2a_z^3}{n} \int_0^\infty du dv \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \frac{u+v}{4} \frac{u-v}{2} F_{n_1 m}(au) F_{n_2 m}(av) F_{n'_1 m'}(au) F_{n'_2 m'}(av) e^{i(m'-m)\phi} \\ &= \delta_{mm'} \frac{e\varepsilon a_z}{4} \left( \delta_{n_2 n'_2} \int_0^\infty dx x^2 F_{n_1 m}(x) F_{n'_1 m}(x) - \delta_{n_1 n'_1} \int_0^\infty dx x^2 F_{n_2 m}(x) F_{n'_2 m}(x) \right) \end{aligned}$$

(6.48) より \$n = 1 + |m| + n\_1 + n\_2 = 1 + |m'| + n'\_1 + n'\_2\$ である。この場合 \$H'\$ は対角行列になるから

$$|\psi_0\rangle = |n_1 n_2 m\rangle, \quad W_1 = \langle n_1 n_2 m | H' | n_1 n_2 m \rangle = \frac{e\varepsilon a_z}{4} \int_0^\infty dx x^2 (F_{n_1 m}^2(x) - F_{n_2 m}^2(x))$$

である。\$H\_0\$ の固有状態は縮退するが、放物線座標を用いると、\$m\$ を指定すれば \$\psi\_0\$ は一意に決まり、縮退がない場合と同じ扱いができる。(17.116) で \$b = |m| + 1, \nu = 2\$ とすると

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx x^2 F_{n_1 m}^2(x) &= \frac{(n_1 + |m|)!}{(|m|!)^2 n_1!} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{|m|+2} M^2(-n_1, |m| + 1, x) \\ &= (|m| + 1)(|m| + 2) + 6n_1(|m| + n_1 + 1) \end{aligned}$$

\$1 + |m| + n\_1 + n\_2 = n\$ のとき

$$W_1(n, k) = \frac{3}{2} e\varepsilon a_z n k, \quad k = n_1 - n_2 = 0, \pm 1, \dots, \pm(n-1) \quad (8.91)$$

になる。放物線座標を用いると、任意の  $n$  に対して  $W_1$  が簡単に求まる。 $n^2$  重に縮退した状態は、1 次の摂動で  $2n-1$  個のエネルギー準位に分裂し、縮退は部分的に解ける。 $n, k, m$  を与えると状態は一意に決まる。 $0 \leq n_1 = n_2 + k \leq n-1, 0 \leq n_2 \leq n-1, n_1 + n_2 \leq n-1$  より

$$|m| = m_{\max} - 2n_2 = \begin{cases} 0, 2, \dots, m_{\max}, & m_{\max} \text{ が偶数のとき} \\ 1, 3, \dots, m_{\max}, & m_{\max} \text{ が奇数のとき} \end{cases} \quad m_{\max} = n-1-|k| \quad (8.92)$$

である  $m$  の状態が縮退する。 $m \neq 0$  のとき  $m$  の正負を考慮して 2 重に数えると、 $W_1(n, k)$  の縮退度は  $n-|k|$  になる。状態の総数は (6.49) と同様に  $n^2$  である。問題 8.12 より 2 次の摂動  $W_2$  は

$$W_2 = -\frac{(e\mathcal{E}a_z^2)^2 M}{16\hbar^2} n^4 (17n^2 - 3k^2 - 9m^2 + 19) \quad (8.93)$$

になる。 $W_2$  は  $m^2$  に依存するから、(8.92) の異なる  $|m|$  の状態の縮退は 2 次摂動で解ける。ただし  $\pm m \neq 0$  の 2 つの状態は縮退したままである (前ページの図の下の議論参照)。

(8.91) で  $n=2$  とすると、 $k=0$  のとき二重縮退で  $W_1=0$ 、 $k=\pm 1$  のとき  $W_1=\pm 3e\mathcal{E}a_z$  になり、極座標の結果と一致する。また、(8.93) は  $n=1, k=m=0$  のとき (8.87) になる。

**問題 8.12** 213 ページの基底状態の  $\psi_1$  と同様に、(8.9) を微分方程式として解き 2 次のシュタルク効果 (8.93) を求める。放物線座標では、 $m$  を指定すれば縮退がない場合と同じ扱いができる。

$$f(x) = x^{(b-1)/2} e^{-x/2}, \quad \mathcal{M}(k, x) = M(-k, b, x), \quad b = |m| + 1$$

とする。(6.50), (6.51) より 0 次の波動関数  $\psi_0$  は

$$\psi_0(u, v) = N F_{n_1}(x) F_{n_2}(y), \quad F_{n_i}(x) = N_{n_i} f(x) \mathcal{M}(n_i, x)$$

ただし  $x = u/(a_z n)$ ,  $y = v/(a_z n)$ ,  $n = n_1 + n_2 + b$  である。角度依存部分  $e^{im\phi}/\sqrt{2\pi}$  は省略する。

1.  $\psi_0 = N N_{n_1} N_{n_2} f(x) f(y) \mathcal{M}(n_1, x) \mathcal{M}(n_2, y)$  に対応して、1 次の補正  $\psi_1$  を

$$\psi_1(u, v) = N N_{n_1} N_{n_2} f(x) f(y) (X(x) \mathcal{M}(n_2, y) - \mathcal{M}(n_1, x) Y(y)) + C \psi_0(u, v)$$

とおく。(8.9) より ( $W_0 = (6.48), W_1 = (8.91)$ )

$$(D + n_1)X(x) = \lambda(A - 3kx + x^2)\mathcal{M}(n_1, x), \quad (D + n_2)Y(x) = \lambda(A + 3kx + x^2)\mathcal{M}(n_2, x)$$

$$D = x \frac{d^2}{dx^2} + (b-x) \frac{d}{dx}, \quad \lambda = \frac{Me\mathcal{E}a_z^3}{4\hbar^2} n^3, \quad A = \text{任意定数}$$

を示せ。定数  $C$  は  $\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = 0$  を満たすように決める。 $n_1 = (n-b+k)/2, n_2 = (n-b-k)/2$  であるから  $Y$  は  $X$  で  $k$  を  $-k$  に置き換えればよい。

2. (17.117) より  $X$  の方程式の右辺は  $\mathcal{M}(n_1 + i, x)$ ,  $i = 0, \pm 1, \pm 2$  で表せる。右辺が  $\mathcal{M}(n_1, x)$  を含まないように  $A$  をとる。 $(D + n_1)\mathcal{M}(n_1 + i, x) = -i\mathcal{M}(n_1 + i, x)$  より

$$\psi_1(u, v) = \lambda N \sum_{i=\pm 1, \pm 2} (c_i F_{n_1+i}(x) F_{n_2}(y) - d_i F_{n_1}(x) F_{n_2+i}(y)) + \lambda c_0 \psi_0(u, v)$$

になる。係数  $c_i$  を求めよ。 $d_i$  は  $c_i$  で  $k$  を  $-k$  で置き換える。

3.  $W_2 = \langle \psi_0 | H' | \psi_1 \rangle$  が (8.93) になることを示せ。 $x^2 F_n(x) F_{n'}(x)$  の積分は  $x^2 F_n(x)$  を  $F_{n+i}(x)$ ,  $i = 0, \pm 1, \pm 2$  で表し (6.52) を用いれば求まる。

### 8.7 縮退している場合 (2 次の摂動)

(8.55) で  $g_1$  重に縮退する  $W_1$  が存在する場合, (8.57) の  $|\psi_{0\alpha}\rangle$  を, 縮退する  $|\psi_{0\mu}\rangle$ ,  $1 \leq \mu \leq g_1$  と  $W_{1\alpha} \neq W_1$  である  $g_1 + 1 \leq \alpha \leq g$  に分ける。直交する別の組

$$|\bar{\psi}_{0\mu}\rangle = \sum_{\nu=1}^{g_1} b_{\nu\mu} |\psi_{0\nu}\rangle, \quad \langle \bar{\psi}_{0\mu} | \bar{\psi}_{0\nu} \rangle = \sum_{\mu'} b_{\mu'\mu}^* b_{\mu'\nu} = \delta_{\mu\nu} \quad (8.94)$$

も (8.55) を満たすから,  $|\psi_{0\mu}\rangle$  は一意には決まらない。 $|\psi_{0\mu}\rangle$  を適当に固定し  $b_{\nu\mu}$  を求める。(8.61) で  $|\psi_0\rangle = |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle$  のとき  $\alpha = \nu$  とすると ( $W_{1\nu} = W_1$ )

$$\langle \psi_{0\nu} | H' | \phi \rangle - W_{2\mu} \langle \psi_{0\nu} | \bar{\psi}_{0\mu} \rangle = \sum_{n \notin i} \frac{\langle \psi_{0\nu} | H' | n \rangle \langle n | H' | \bar{\psi}_{0\mu} \rangle}{E_i - E_n} - W_{2\mu} \langle \psi_{0\nu} | \bar{\psi}_{0\mu} \rangle = 0$$

である。(8.94) を代入すると

$$\sum_{\nu'=1}^{g_1} (h_{\nu\nu'}^{(2)} - W_{2\mu} \delta_{\nu\nu'}) b_{\nu'\mu} = 0, \quad \therefore \det(h_{\mu\nu}^{(2)} - W_{2\mu} \delta_{\mu\nu}) = 0 \quad (8.95)$$

ただし

$$h_{\mu\nu}^{(2)} = \sum_{n \notin i} \frac{\langle \psi_{0\mu} | H' | n \rangle \langle n | H' | \psi_{0\nu} \rangle}{E_i - E_n} \quad (8.96)$$

$W_{2\mu}$  は  $g_1 \times g_1$  行列  $h_{\mu\nu}^{(2)}$  の固有値である。 $W_{2\mu}$  に縮退がなければ  $|\bar{\psi}_{0\mu}\rangle$  も決まる。

#### 射影演算子

$|\psi_0\rangle = |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle$  のとき, (8.65), (8.67) と同様にして

$$Q|\psi_1\rangle = \frac{Q}{E_i - H_0} H' |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle, \quad (W_{1\mu} - W_{1\alpha}) P_\alpha |\psi_1\rangle - P_\alpha H' Q |\psi_1\rangle + W_{2\mu} P_\alpha |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle = 0 \quad (8.97)$$

である。第2式で  $\alpha = \nu$ ,  $1 \leq \nu \leq g_1$  とすると,  $W_{1\nu} = W_{1\mu}$  より

$$P_\nu H' Q |\psi_1\rangle = W_{2\mu} P_\nu |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle, \quad \text{つまり} \quad P_\nu H'' |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle = W_{2\mu} P_\nu |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle, \quad H'' = H' \frac{Q}{E_i - H_0} H'$$

これから  $\langle \psi_{0\nu} | H'' | \bar{\psi}_{0\mu} \rangle = W_{2\mu} \langle \psi_{0\nu} | \bar{\psi}_{0\mu} \rangle$  であり, (8.94) を代入すると (8.95) になる。

$$\bar{P} = \sum_{\nu=1}^{g_1} P_\nu = \sum_{\nu=1}^{g_1} \bar{P}_\nu, \quad \bar{P}_\nu = |\bar{\psi}_{0\nu}\rangle \langle \bar{\psi}_{0\nu}|$$

とすると

$$\bar{P} H'' \bar{P} |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle = W_{2\mu} |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle, \quad \text{あるいは} \quad \langle \bar{\psi}_{0\nu} | H'' | \bar{\psi}_{0\mu} \rangle = W_{2\mu} \langle \bar{\psi}_{0\nu} | \bar{\psi}_{0\mu} \rangle = W_{2\mu} \delta_{\mu\nu}$$

になる。 $PH'P$  の固有値  $W_{1\mu}$  の固有関数  $|\bar{\psi}_{0\mu}\rangle$  は, 同時に,  $\bar{P}H''\bar{P}$  の固有値  $W_{2\mu}$  の固有関数でもある。(8.68) と同様に  $\langle \bar{\psi}_{0\mu} | H' | \psi_1 \rangle = \langle \bar{\psi}_{0\mu} | H' Q | \psi_1 \rangle = W_{2\mu}$  である。以下で求める  $P|\psi_1\rangle$  は  $\langle \bar{\psi}_{0\mu} | H' | \psi_1 \rangle$  に寄与しない。

(8.97) で  $g_1 + 1 \leq \alpha \leq g$  の場合,  $W_{1\alpha} \neq W_{1\mu}$ ,  $P_\alpha |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle = 0$  より

$$P_\alpha |\psi_1\rangle = \frac{1}{W_{1\mu} - W_{1\alpha}} P_\alpha H' Q |\psi_1\rangle = \frac{1}{W_{1\mu} - W_{1\alpha}} P_\alpha H'' |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle$$

である。

$$|\psi_1\rangle = (P + Q) |\psi_1\rangle = \bar{P} |\psi_1\rangle + |\phi_1\rangle, \quad |\phi_1\rangle = (P - \bar{P} + Q) |\psi_1\rangle$$

に分解すると

$$|\phi_1\rangle = \sum_{\alpha=g_1+1}^g \frac{1}{W_{1\mu} - W_{1\alpha}} P_\alpha H'' |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle + \frac{Q}{E_i - H_0} H' |\bar{\psi}_{0\mu}\rangle$$

(8.12) より  $\bar{P}_\mu |\psi_1\rangle = 0$  である。 $W_{1\mu}$  に縮退がない場合  $\bar{P} = P_\mu$  であり  $|\psi_1\rangle$  は (8.62) になる。 $W_{1\mu}$  が縮退する場合、以上の議論では  $\bar{P} |\psi_1\rangle$  は不定であるが、 $W_{2\mu}$  が縮退しない場合

$$\bar{P} |\psi_1\rangle = \sum_{\nu \neq \mu} \bar{P}_\nu |\psi_1\rangle = \sum_{\nu \neq \mu} \frac{1}{W_{2\mu} - W_{2\nu}} \bar{P}_\nu H' \frac{Q}{E_i - H_0} (H' - W_{1\mu}) |\phi_1\rangle$$

になる。 $W_{2\mu} - W_{2\nu}$  は  $H'$  の 2 次であるが、全体は 1 次である。

**問題 8.13** 3 次の (8.11) より  $\bar{P}_\nu |\psi_1\rangle$  を求めよ。

**具体例**

$$H = H_0 + H', \quad H_0 = \varepsilon J_z^2, \quad H' = -\omega J_x$$

を考える。 $\varepsilon$  と  $\omega$  は実数の定数、 $J$  は角運動量演算子 (5.5) である。 $H_0$  の固有関数は  $J^2$ ,  $J_z$  の同時固有関数 (5.14) であり

$$H_0 |jm\rangle = \varepsilon m^2 |jm\rangle$$

になるから、 $m \neq 0$  のとき  $J_z$  の固有値が  $m$  と  $-m$  の 2 つの状態は縮退する。

$j = 1$  の場合、状態は

$$|1\rangle = |j=1, m=1\rangle, \quad |2\rangle = |j=1, m=-1\rangle, \quad |3\rangle = |j=1, m=0\rangle$$

の 3 個だけであり

$$H_0 |1\rangle = \varepsilon |1\rangle, \quad H_0 |2\rangle = \varepsilon |2\rangle, \quad H_0 |3\rangle = 0 \quad (8.98)$$

つまり、 $E_1 = E_2 = \varepsilon$ ,  $E_3 = 0$  である。 $J_x = (J_+ + J_-)/2$  及び (5.16), (5.17) から

$$H' |1\rangle = -\frac{\omega}{\sqrt{2}} |3\rangle, \quad H' |2\rangle = -\frac{\omega}{\sqrt{2}} |3\rangle, \quad H' |3\rangle = -\frac{\omega}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle) \quad (8.99)$$

になる。縮退していない  $|3\rangle$  の場合、1 次の摂動及び 2 次の摂動 (8.29) は

$$W_1 = \langle 3 | H' | 3 \rangle = 0, \quad W_2 = \sum_{n=1,2} \frac{|\langle n | H' | 3 \rangle|^2}{E_3 - E_n} = -\frac{\omega^2}{\varepsilon}$$

になるから、 $H$  の固有値  $W$  は 2 次の摂動まで取り入れると

$$W = E_3 + W_1 + W_2 = -\frac{\omega^2}{\varepsilon}$$

である。次に、縮退する  $|1\rangle, |2\rangle$  に対しては、(8.55) の  $h_{\alpha\alpha'}$  は

$$h_{11} = \langle 1 | H' | 1 \rangle = 0, \quad h_{12} = \langle 1 | H' | 2 \rangle = 0, \quad h_{22} = \langle 2 | H' | 2 \rangle = 0$$

であり  $W_1 = 0$  になるから、1 次の摂動では縮退は解けない。また  $a_1, a_2$  は全く不定であるから  $|\psi_{0\mu}\rangle = |1\rangle, |2\rangle$  でよい。(8.96) において、中間状態  $|n\rangle$  は  $|3\rangle$  だけであるから

$$h_{11}^{(2)} = \frac{\langle 1 | H' | 3 \rangle \langle 3 | H' | 1 \rangle}{E_1 - E_3} = \frac{\omega^2}{2\varepsilon}, \quad \text{同様に} \quad h_{12}^{(2)} = h_{21}^{(2)} = h_{22}^{(2)} = \frac{\omega^2}{2\varepsilon}$$



したがって, (8.95) は

$$\begin{pmatrix} W_2 - \omega^2/2\varepsilon & -\omega^2/2\varepsilon \\ -\omega^2/2\varepsilon & W_2 - \omega^2/2\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = 0, \quad \therefore \quad W_2 = 0, \quad \frac{\omega^2}{\varepsilon}$$

になる。 $H$  の固有値  $W$  は  $W = \varepsilon, \varepsilon + \omega^2/\varepsilon$  になり縮退は解ける。 $W_2 = 0$  の場合,  $b_1 + b_2 = 0$  より規格化した  $|\psi_0\rangle$  は  $|\psi_0\rangle = (|1\rangle - |2\rangle)/\sqrt{2}$  とすればよい。ところで, (8.98), (8.99) より

$$H_0|\psi_0\rangle = \varepsilon|\psi_0\rangle, \quad H'|\psi_0\rangle = 0, \quad \therefore \quad H|\psi_0\rangle = \varepsilon|\psi_0\rangle$$

になり,  $|\psi_0\rangle$  は固有値  $\varepsilon$  である  $H$  の正確な固有状態である。この状態に対して, 摂動  $H'$  は全く効かず  $W_1 = W_2 = \dots = 0$  になる。なお,  $H' = -\omega J_x$  であるから,  $|\psi_0\rangle$  は  $J_z^2$  と  $J_x$  の固有状態で,  $J_x$  の固有値は 0 である。ただし  $J_z$  の固有状態ではない。

$j = 1$  の場合, 正確な固有状態と固有値を求めることは簡単である。 $H$  の固有状態  $|\psi\rangle$  は

$$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + c_3|3\rangle$$

と展開できる。(8.98), (8.99) より

$$H|\psi\rangle = \left(\varepsilon c_1 - \frac{\omega}{\sqrt{2}}c_3\right)|1\rangle + \left(\varepsilon c_2 - \frac{\omega}{\sqrt{2}}c_3\right)|2\rangle - \frac{\omega}{\sqrt{2}}(c_1 + c_2)|3\rangle$$

になるから  $H|\psi\rangle = W|\psi\rangle$  は

$$\begin{pmatrix} \varepsilon - W & 0 & -\omega/\sqrt{2} \\ 0 & \varepsilon - W & -\omega/\sqrt{2} \\ -\omega/\sqrt{2} & -\omega/\sqrt{2} & -W \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = 0$$

と表せる。これは (8.4) の具体例である。左辺の  $3 \times 3$  行列の行列式  $= 0$  より

$$(W - \varepsilon)(W(\varepsilon - W) + \omega^2) = 0, \quad \therefore \quad W = \varepsilon, \quad W = \frac{\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 + 4\omega^2}}{2} \quad (8.100)$$

$\varepsilon^2 \gg 4\omega^2$  の場合

$$W = \frac{\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 + 4\omega^2}}{2} \approx \frac{1}{2} \left( \varepsilon \pm \varepsilon \left( 1 + \frac{2\omega^2}{\varepsilon^2} \right) \right) = \begin{cases} \varepsilon + \omega^2/\varepsilon, & + \text{ のとき} \\ -\omega^2/\varepsilon, & - \text{ のとき} \end{cases}$$

になり, 摂動論の結果を再現する。

**問題 8.14**  $m = \pm 1/2$  の縮退は 1 次の摂動で解けることを示せ。 $j = 1/2$  の場合, 1 次の摂動は正確な結果を与える。

**問題 8.15**  $\omega \gg \varepsilon$  の場合  $H_0 = -\omega J_x$ ,  $H' = \varepsilon J_z^2$  として  $\varepsilon J_z^2$  を摂動とする。 $H_0$  の固有関数は  $J^2$  と  $J_x$  の同時固有関数  $|j m_x\rangle$  であり,  $H_0$  の固有値は  $-\omega m_x$  になるから縮退はない。2 次の摂動まで考慮すると

$$W = -\omega m_x + \frac{\varepsilon}{2} (j(j+1) - m_x^2) - \frac{\varepsilon^2}{4\omega} m_x \left( j(j+1) - m_x^2 - \frac{1}{2} \right) + \dots$$

になることを示せ。 $j = 1$  のとき, これと (8.100) を比較せよ。なお,  $J_{\pm} = J_y \pm iJ_z$  とすると, (5.7), (5.8) と同様の交換関係  $[J_x, J_{\pm}] = \pm J_{\pm}$ ,  $[J_+, J_-] = 2J_x$  を満たす。

## 8.8 変分法

摂動論はハミルトニアン  $H$  が正確に解ける部分  $H_0$  とこれに比べて効果が小さい摂動  $H'$  に分離できるとき有効である。摂動論が適用できない場合、変分法が強力な近似法になることがある。物理の基本法則を表す微分方程式を積分型汎関数の停留値問題に書き直せる場合がある（汎関数については 417 ページ参照）。ハミルトニアン  $H$  の固有値問題  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  も変分形式に表せる。 $H$  について考えるが、以下の議論はエルミート演算子であればよい。

$\langle\psi|\psi\rangle = 1$  であっても、変分した状態  $|\psi'\rangle = |\psi\rangle + |\delta\psi\rangle$  は  $\langle\psi'|\psi'\rangle = 1$  とは限らないから、規格化条件は要請しない（問題 8.16 参照）。この場合、任意の  $|\psi\rangle$  における  $H$  の期待値  $E_\psi$  は

$$E_\psi = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \quad (8.101)$$

である。 $\psi$  が微小変化  $\delta\psi$  したとき

$$\delta E_\psi = E_{\psi+\delta\psi} - E_\psi = \frac{\langle\psi'|H|\psi'\rangle}{\langle\psi'|\psi'\rangle} - E_\psi = \frac{\langle\psi'|K|\psi'\rangle}{\langle\psi'|\psi'\rangle}, \quad K = H - E_\psi$$

を考える。 $\langle\psi|K|\psi\rangle = 0$  より

$$\begin{aligned} \langle\psi'|K|\psi'\rangle &= \langle\delta\psi|K|\psi\rangle + \langle\psi|K|\delta\psi\rangle + \langle\delta\psi|K|\delta\psi\rangle \\ \frac{1}{\langle\psi'|\psi'\rangle} &= \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle} \left( 1 - \frac{\langle\delta\psi|\psi\rangle + \langle\psi|\delta\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} + O(\delta\psi^2) \right) \end{aligned}$$

になるから

$$\langle\psi|\psi\rangle \delta E_\psi = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + O(\delta\psi^3)$$

ただし

$$\varepsilon_1 = \langle\delta\psi|K|\psi\rangle + \langle\psi|K|\delta\psi\rangle, \quad \varepsilon_2 = \langle\delta\psi|K|\delta\psi\rangle - \varepsilon_1 \frac{\langle\delta\psi|\psi\rangle + \langle\psi|\delta\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \quad (8.102)$$

$\varepsilon_1, \varepsilon_2$  はそれぞれ  $\delta\psi$  の 1 次, 2 次である。 $E_\psi$  が停留値になる条件は  $\delta\psi$  の 1 次  $\varepsilon_1 = 0$

$$\langle\delta\psi|K|\psi\rangle + \langle\psi|K|\delta\psi\rangle = 0 \quad (8.103)$$

積分で表せば

$$\int d^3r \delta\psi^*(\mathbf{r}) K \psi(\mathbf{r}) + \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) K \delta\psi(\mathbf{r}) = 0$$

である。 $u(\mathbf{r}), v(\mathbf{r})$  を実関数として  $\psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) + iv(\mathbf{r})$  とおけ、 $u(\mathbf{r})$  と  $v(\mathbf{r})$  は独立に変分できる。 $u(\mathbf{r})$  だけを微小変化  $\varepsilon(\mathbf{r})$  させると  $\delta\psi = \delta\psi^* = \varepsilon$  であり、 $v(\mathbf{r})$  だけを微小変化  $\varepsilon(\mathbf{r})$  させると  $\delta\psi = -\delta\psi^* = i\varepsilon$  になるから

$$\langle\varepsilon|K|\psi\rangle + \langle\psi|K|\varepsilon\rangle = 0, \quad -i\langle\varepsilon|K|\psi\rangle + i\langle\psi|K|\varepsilon\rangle = 0$$

つまり  $\langle\varepsilon|K|\psi\rangle = 0$  及び  $\langle\psi|K|\varepsilon\rangle = 0$  の両方を満たす必要がある。実関数  $\varepsilon(\mathbf{r})$  は微小ではあるが任意であるから、任意の変分  $\delta\psi = \delta u + i\delta v$  に対して

$$\langle\delta\psi|K|\psi\rangle = 0 \quad \text{かつ} \quad \langle\psi|K|\delta\psi\rangle = 0 \quad (8.104)$$

になる。(8.103)  $\implies$  (8.104) を示したが、この逆は自明である。 $\psi$  と  $\psi^*$  は独立でないが、 $\psi$  の実部と虚部の代わりに、 $\psi$  と  $\psi^*$  を独立と見なしてよい。(8.101) を  $\psi^*$  ( $\psi$ ) についてだけ変分すれば、

(8.104) の第 1 式 (第 2 式) が求まる。\$H\$ はエルミート演算子、\$E\_\psi\$ は実数であるから \$\langle \psi | K | \delta\psi \rangle^\* = \langle \delta\psi | K | \psi \rangle\$ になり、\$E\_\psi\$ が停留値になる条件は、どちらか一方だけでよい。

$$\text{任意の変分 } \delta\psi \text{ に対して } \langle \delta\psi | (H - E_\psi) | \psi \rangle = 0 \quad (8.105)$$

が停留値の条件になる。\$\delta\psi\$ は任意であるから \$\mathbf{r} = \mathbf{r}\_0\$ 近傍の微小領域 \$\Delta V\$ で \$\delta\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \neq 0\$、その他の領域で \$\delta\psi = 0\$ とすれば

$$\langle \delta\psi | (H - E_\psi) | \psi \rangle = \int d^3r \delta\psi^*(\mathbf{r}) (H - E_\psi) \psi(\mathbf{r}) = \Delta V \varepsilon^* (H - E_\psi) \psi(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_0} = 0$$

\$\mathbf{r}\_0\$ は任意であるから \$(H - E\_\psi)|\psi\rangle = 0\$ になる。任意の変分について (8.101) の \$E\_\psi\$ が停留値になる \$|\psi\rangle\$ は、すべて \$H\$ の固有関数であり \$E\_\psi\$ は固有値になる。次ページで示すように、基底状態を除くと、停留値 \$E\_\psi\$ は極大値でも極小値でもない。

完全規格直交系 \$\{|n\rangle\}\$ を用いれば、任意の \$|\psi\rangle\$ は

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad \langle \psi | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2, \quad \langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{mn} c_m^* \langle m | H | n \rangle c_n$$

と表せる。\$|n\rangle\$ は与えられたもので固定である。一方、\$c\_n\$ は任意係数である。\$E\_\psi\$ は \$c\_0, c\_1, c\_2, \dots\$ の多変数関数である。\$\psi\$ の変分と同様に \$c\_n\$ と \$c\_n^\*\$ を独立と見なす。

$$\frac{\partial}{\partial c_k^*} \langle \psi | \psi \rangle = c_k, \quad \frac{\partial}{\partial c_k^*} \langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_n \langle k | H | n \rangle c_n$$

であるから、ある 1 つの \$c\_k^\*\$ だけ微小変化させると、1 次のオーダーでは

$$\delta E_\psi = \delta c_k^* \frac{\partial}{\partial c_k^*} \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\delta c_k^*}{\langle \psi | \psi \rangle} \left( \sum_n \langle k | H | n \rangle c_n - E_\psi c_k \right)$$

任意の変分について \$\delta E\_\psi = 0\$ であるためには、すべての \$k\$ について \$\sum\_n \langle k | H | n \rangle c\_n = E\_\psi c\_k\$ である。これは \$H|\psi\rangle = E\_\psi|\psi\rangle\$ の行列表現 (5.46) である。\$|n\rangle\$ が \$H\$ の固有関数の場合 \$\langle k | H | n \rangle = E\_k \delta\_{kn}\$ になるから \$(E\_k - E\_\psi)c\_k = 0\$ である。\$E\_\psi\$ は \$H\$ の固有値のどれかである。\$E\_\psi = E\_n\$ とすると \$k \neq n\$ のとき \$c\_k = 0\$ であり \$|\psi\rangle \propto |n\rangle\$ になる。

\$H\$ の固有値を \$E\_n, E\_0 < E\_1 < E\_2 < \dots\$ とする。任意の \$|\psi\rangle\$ は

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

と展開できる。\$\langle n | H | k \rangle = \delta\_{nk} E\_n\$ であるから

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2 \geq E_0 \sum_n |c_n|^2 = E_0 \langle \psi | \psi \rangle, \quad \therefore E_\psi = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (8.106)$$

\$E\_\psi\$ は基底状態のエネルギー \$E\_0\$ の上限を与える。\$E\_\psi = E\_0\$ は \$n \neq 0\$ のとき \$c\_n = 0\$、つまり \$H|\psi\rangle = E\_0|\psi\rangle\$ の場合だけ成り立つ。

\$|\psi\rangle\$ が \$H\$ の固有関数 \$|k\rangle\$ のとき (8.102) の \$\varepsilon\_1 = 0\$ であり \$\varepsilon\_2 = \langle \delta\psi | (H - E\_k) | \delta\psi \rangle\$ になる。\$|\delta\psi\rangle\$ を \$H\$ の固有関数で展開すると

$$\varepsilon_2 = \sum_{n \neq k} |d_n|^2 (E_n - E_k), \quad \text{ただし} \quad |\delta\psi\rangle = \sum_{n \neq k} d_n |n\rangle$$

である。 $|k\rangle$  は  $|\psi\rangle$  に含め  $|\delta\psi\rangle$  から除く。基底状態の場合 ( $n \neq k = 0$ ),  $E_n - E_0 > 0$  より  $\varepsilon_2 > 0$  になり  $E_0$  は極小であるが, それ以外の場合

$$\sum_{n < k} |d_n|^2 (E_n - E_k) \leq 0, \quad \sum_{n > k} |d_n|^2 (E_n - E_k) \geq 0$$

であるから,  $d_n$  のとり方に依存して  $\varepsilon_2$  は正にも負にもなる。 $E_{k \neq 0}$  は停留値ではあるが, 極小値でも極大値でもない。

### 変分法による基底状態の近似解

$|\psi\rangle$  が任意ならば, 変分法  $\delta E_\psi = 0$  は  $H|\psi\rangle = E_\psi|\psi\rangle$  を正確に解くことと同等である。 $|\psi\rangle$  を制限すれば,  $\delta E_\psi = 0$  は一般に  $(H - E_\psi)|\psi\rangle = 0$  を意味しないが,  $H$  の固有関数と固有値の近似解が求まる。制限された  $|\psi\rangle$  として, 幾つかの連続なパラメータ  $a_1, a_2, \dots$  に依存する関数  $|\bar{\psi}_0\rangle$  を考える。これを**試行関数**という。 $E_{\bar{\psi}_0} \geq E_0$  であるから,  $E_{\bar{\psi}_0}$  が最小になるようにパラメータを決めれば, 試行関数  $|\bar{\psi}_0\rangle$  の範囲内では, この最小値が最もよい  $E_0$  の近似値になる。

$|\bar{\psi}_0\rangle$  は基底状態  $|0\rangle$  と  $|0\rangle$  に直交する成分  $|\phi_0\rangle$  に別けて

$$|\bar{\psi}_0\rangle = |0\rangle + \epsilon_0 |\phi_0\rangle, \quad \langle 0|0\rangle = \langle \phi_0|\phi_0\rangle = 1, \quad \langle \phi_0|0\rangle = 0 \quad (8.107)$$

とおける。複素定数  $\epsilon_0 = 0$  ならば  $|\bar{\psi}_0\rangle$  は正確な基底状態になる。 $\langle \bar{\psi}_0|\bar{\psi}_0\rangle = 1 + |\epsilon_0|^2$  である。 $\langle \phi_0|H|0\rangle = E_0\langle \phi_0|0\rangle = 0$  より

$$\langle \bar{\psi}_0|H|\bar{\psi}_0\rangle = \langle 0|H|0\rangle + |\epsilon_0|^2 \langle \phi_0|H|\phi_0\rangle = E_0 + |\epsilon_0|^2 \langle \phi_0|H|\phi_0\rangle$$

になるから

$$E_{\bar{\psi}_0} = \frac{\langle \bar{\psi}_0|H|\bar{\psi}_0\rangle}{\langle \bar{\psi}_0|\bar{\psi}_0\rangle} = E_0 + \frac{|\epsilon_0|^2}{1 + |\epsilon_0|^2} \Delta E_0, \quad \Delta E_0 = \langle \phi_0|H|\phi_0\rangle - E_0 \geq E_1 - E_0 \quad (8.108)$$

である。 $|\bar{\psi}_0\rangle$  と  $|0\rangle$  の違いが  $O(|\epsilon_0|)$  のとき  $E_{\bar{\psi}_0} - E_0$  は  $O(|\epsilon_0|^2)$  になるから, 試行関数による変分法は, 固有関数よりもエネルギー固有値を求めるのに適した近似方法である。

この近似法の場合, 摂動論のような近似の精度を評価する一般論はない。精度は試行関数の選択に依存する。厳密解  $\psi$  が解析的に求まらないとしても, 節(ノード)の個数(46 ページ参照), 原点あるいは無限遠での漸近形,  $H$  の対称性などの一般的性質から試行関数を制限できる。

### 励起状態

$|n\rangle$  が  $H$  の固有関数の場合, 基底状態と直交する任意の状態は  $|\psi\rangle = \sum_{n \neq 0} c_n |n\rangle$  と表せるから

$$\langle \psi|H|\psi\rangle = \sum_{n \neq 0} E_n |c_n|^2 \geq E_1 \sum_{n \neq 0} |c_n|^2 = E_1 \langle \psi|\psi\rangle, \quad \therefore E_\psi \geq E_1$$

である。 $\langle 0|\psi\rangle = 0$  のとき,  $E_\psi$  は第1励起状態のエネルギー  $E_1$  の上限を与える。したがって, 正確な基底状態  $|0\rangle$  が分かっている場合, 第1励起状態の試行関数  $|\bar{\psi}_1\rangle$  を  $|0\rangle$  に直交させ,  $E_{\bar{\psi}_1}$  の最小値を求めればよい。 $|0\rangle$  が分からなくても, 偶奇性などの対称性から  $\langle \bar{\psi}_1|0\rangle = 0$  とすることは可能であるが, 以下では  $\langle \bar{\psi}_1|\bar{\psi}_0\rangle = 0$  とする。この場合,  $E_{\bar{\psi}_1}$  の最小値が最適とは限らない。 $|\bar{\psi}_1\rangle$  を  $|0\rangle$  とこれに直交する成分  $|\phi_1\rangle$  に別けて

$$|\bar{\psi}_1\rangle = |\phi_1\rangle + \epsilon_1 |0\rangle, \quad \langle 0|0\rangle = \langle \phi_1|\phi_1\rangle = 1, \quad \langle \phi_1|0\rangle = 0$$

とする。  $\langle \phi_1 | H | \phi_1 \rangle \geq E_1$  であるが

$$E_{\bar{\psi}_1} - E_1 = \frac{\langle \bar{\psi}_1 | H | \bar{\psi}_1 \rangle}{\langle \bar{\psi}_1 | \bar{\psi}_1 \rangle} - E_1 = \frac{\langle \phi_1 | H | \phi_1 \rangle - E_1}{1 + |\epsilon_1|^2} - \frac{|\epsilon_1|^2}{1 + |\epsilon_1|^2} (E_1 - E_0)$$

であるから  $\epsilon_1 \neq 0$  のとき  $E_{\bar{\psi}_1} \geq E_1$  とはいえない。

$$\langle \bar{\psi}_1 | \bar{\psi}_0 \rangle = \epsilon_1^* + \epsilon_0 \langle \phi_1 | \phi_0 \rangle = 0, \quad \therefore |\epsilon_1|^2 = |\epsilon_0|^2 |\langle \phi_1 | \phi_0 \rangle|^2 \leq |\epsilon_0|^2$$

になるから (8.108) より

$$E_{\bar{\psi}} \geq E_1 - \frac{|\epsilon_0|^2}{1 + |\epsilon_0|^2} (E_1 - E_0) \geq E_1 - \frac{|\epsilon_0|^2}{1 + |\epsilon_0|^2} \Delta E_0 = E_1 - (E_{\bar{\psi}_0} - E_0)$$

である。したがって、 $E_{\bar{\psi}_0} \approx E_0$  ならば  $E_{\bar{\psi}_1}$  の最小値は  $E_1$  のよい近似になり得る。

**問題 8.16**  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$  の条件下で  $\langle \psi | H | \psi \rangle$  を停留値にせよ。未定乗数法 (415 ページ) を使う。

### 例題 1

321 ページでヘリウム原子の基底状態を変分法で扱う。ここでは、例題 2 と関連してハミルトニアン

$$H = -\frac{d^2}{dq^2} + \frac{v}{3}q^4, \quad v = \text{正の定数} \quad (8.109)$$

を考える。調和振動子の基底状態との類推から、基底状態の試行関数を  $\bar{\psi}_0(q) = e^{-\lambda q^2/2}$  とする。 $\lambda > 0$  が変分パラメータである。

$$\bar{\varepsilon}_0(\lambda) = \frac{\langle \bar{\psi}_0 | H | \bar{\psi}_0 \rangle}{\langle \bar{\psi}_0 | \bar{\psi}_0 \rangle} = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dq \left( \lambda - \lambda^2 q^2 + \frac{v}{3} q^4 \right) e^{-\lambda q^2} = \frac{\lambda}{2} + \frac{v}{4\lambda^2}$$

になるから、最小値は  $\bar{\varepsilon}_0(\lambda = v^{1/3}) = 3v^{1/3}/4$  である。 $H\psi_n(q) = \varepsilon_n\psi_n(q)$  を  $y = v^{1/6}q$  で表すと

$$\left( -\frac{d^2}{dy^2} + \frac{y^4}{3} \right) \psi_n(y) = e_n \psi_n(y), \quad e_n = v^{-1/3} \varepsilon_n$$

である。 $e_n$  は  $v$  に依存しないから、正確な固有値  $\varepsilon_n$  も  $v^{1/3}$  に比例する (一般に  $v|q|^k$  の場合  $\varepsilon \propto v^{2/(k+2)}$ )。  $v^{1/3}$  は  $v = 0$  でテイラー展開できないから、摂動論で近似解は求まらない。53 ページのプログラムを用いて数値的に解くと、 $e_n$  の値は右表になる。基底状態の  $e_0 \approx 0.735$  に対応する  $\bar{\varepsilon}_0$  の値は  $3/4 = 0.75$  であるから、試行関数  $e^{-\lambda q^2/2}$  による変分法は、よい近似である。

$n$	$e_n$	$c_n$	$P_{n,2}$	$P_{n,4}$
0	0.735	0.750	0.0180	0.0002
1	2.635	2.668	0.0000	0.0000
2	5.169	5.157	0.9751	0.0508
3	8.074	8.025	0.0000	0.0000
4	11.28	11.19	0.0037	0.9244
5	14.73	14.60	0.0000	0.0000
6	18.39	18.23	0.0031	0.0181

励起状態を考える。エルミート多項式  $H_n$  を用いて

$$\bar{\psi}_n(q) = H_n(z) e^{-z^2/2}, \quad z = \sqrt{\lambda} q$$

とする。

$$H = -\frac{\lambda}{2} (a - a^\dagger)^2 + \frac{v}{12\lambda^2} (a^\dagger + a)^4, \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( z + \frac{d}{dz} \right)$$

になるから (8.49) より

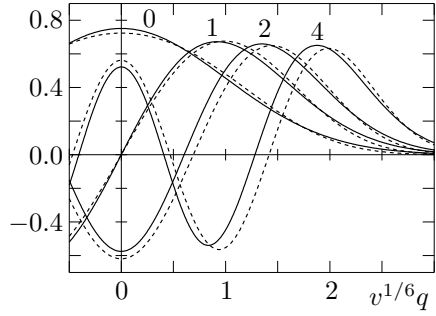
$$\bar{\varepsilon}_n = \frac{\langle \bar{\psi}_n | H | \bar{\psi}_n \rangle}{\langle \bar{\psi}_n | \bar{\psi}_n \rangle} = \frac{\lambda}{2} (2n+1) + \frac{v}{4\lambda^2} (2n^2 + 2n + 1)$$

である。最小値は  $\lambda^3 = v(2n^2 + 2n + 1)/(2n + 1)$  のとき

$$\bar{\varepsilon}_n = c_n v^{1/3}, \quad c_n = \frac{3}{4} \left( (2n + 1)^2 (2n^2 + 2n + 1) \right)^{1/3}$$

になる。表より  $c_n \approx e_n$  であり、変分法は励起状態に対しても有効である。規格化した波動関数を図に示す (縦軸の単位は  $v^{1/12}$ )。実線が  $\bar{\psi}_n$ 、破線が数値解  $\psi_n$  を表す。 $n \geq 2$  では  $m < n$  のとき  $P_{m,n} = |\langle \psi_m | \bar{\psi}_n \rangle|^2 = 0$  とは限らないから、不等式  $\bar{\varepsilon}_n = \sum_m \varepsilon_m P_{m,n} \geq \varepsilon_n$  は破れる。例えば、表より

$\bar{\psi}_2 = \sqrt{0.018} \psi_0 + \sqrt{0.975} \psi_2 + \dots$  である。また、 $\lambda$  は  $n$  に依存するから  $|\bar{\psi}_n\rangle$  の直交性は成り立たないが、 $\bar{\varepsilon}_n$  の最小値は  $\varepsilon_n$  のよい近似になる。



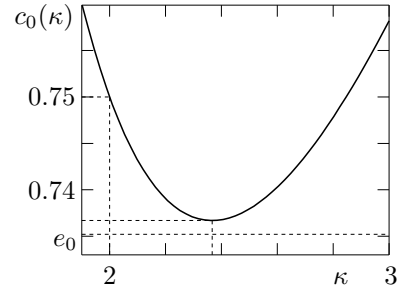
**問題 8.17** (8.109) の固有関数は  $e^{-\lambda q^2/2}$  よりも早く 0 に収束する。そこで、基底状態の試行関数を  $\bar{\psi}_0(q) = \exp(-\lambda|q|^\kappa/2)$  とする。 $\lambda > 0, \kappa > 0$  が変分パラメータである。(17.46) より

$$\bar{\varepsilon}_0(\lambda, \kappa) = \frac{\kappa^2 \Gamma(2 - 1/\kappa)}{4\Gamma(1/\kappa)} \left( \lambda^{2/\kappa} + v \frac{f(\kappa)}{\lambda^{4/\kappa}} \right), \quad f(\kappa) = \frac{4\Gamma(5/\kappa)}{3\kappa^2 \Gamma(2 - 1/\kappa)}$$

を示せ。 $\lambda = (2vf(\kappa))^{\kappa/6}$  のとき  $\partial \bar{\varepsilon}_0 / \partial \lambda = 0$  になり

$$c_0(\kappa) = \frac{\bar{\varepsilon}_0(\lambda, \kappa)}{v^{1/3}} = \frac{1}{4\Gamma(1/\kappa)} \left( 9\kappa^4 \Gamma^2(2 - 1/\kappa) \Gamma(5/\kappa) \right)^{1/3}$$

である。右図に  $c_0(\kappa)$  を示す。 $c_0(2) = 3/4$  は例題 1 である。 $\bar{\psi}_0(q) = e^{-\lambda|q|/2}$  の場合、 $c_0(1) = 3/2$  になり全く近似しない。 $c_0(\kappa)$  は  $\kappa \approx 2.37$  のとき最小値  $\approx 0.737$  になり、 $e_0 \approx 0.735$  を非常によく近似する。



### 例題 2

(8.47) の基底状態を考える。 $\hbar\omega/2$  をエネルギーの単位として

$$H = H_0 + H', \quad H_0 = -\frac{d^2}{dq^2} + q^2, \quad H' = \frac{v}{3}q^4, \quad v = 3u \geq 0$$

とする。 $v = 0$  のとき調和振動子になるから、試行関数として  $\bar{\psi}_0(q) = e^{-\lambda q^2/2}$ ,  $\lambda > 0$  を用いると

$$\bar{\varepsilon}_0(\lambda, v) = \frac{\langle \bar{\psi}_0 | H | \bar{\psi}_0 \rangle}{\langle \bar{\psi}_0 | \bar{\psi}_0 \rangle} = \frac{\lambda^2 + 1}{2\lambda} + \frac{v}{4\lambda^2}, \quad \frac{\partial \bar{\varepsilon}_0}{\partial \lambda} = \frac{\lambda^3 - \lambda - v}{2\lambda^3} \quad (8.110)$$

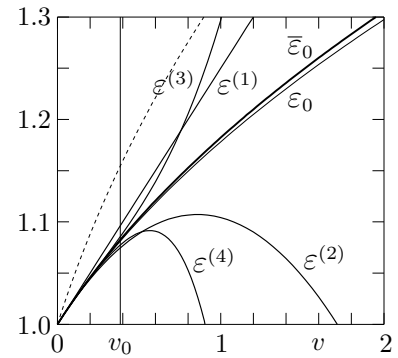
$\lambda^3 - \lambda - v = 0$  の解  $\lambda > 0$  で  $\bar{\varepsilon}_0$  は最小になる。カルダノの公式より  $v_0 = \sqrt{4/27}$  とすると

$$\begin{aligned} v \geq v_0 \text{ のとき } \lambda &= \alpha^{1/3} + \frac{1}{3\alpha^{1/3}} \xrightarrow{v \rightarrow \infty} v^{1/3} + \frac{1}{3v^{1/3}} + \dots, & \alpha &= \frac{v + \sqrt{v^2 - v_0^2}}{2} \\ v \leq v_0 \text{ のとき } \lambda &= \frac{2}{\sqrt{3}} \sin\left(\frac{\sin^{-1}(v/v_0) + \pi}{3}\right) \xrightarrow{v \rightarrow 0} 1 + \frac{v}{2} - \frac{3v^2}{8} + \frac{v^3}{2} + \dots \end{aligned}$$

である。右図に  $\lambda(v)$  を破線で、最小値  $\bar{\varepsilon}_0(v)$  を太い実線で示す。細い実線は  $H\psi_n = \varepsilon_n\psi_n$  を数値的に解いた正確な  $\varepsilon_0$  と  $k$  次の摂動  $\varepsilon^{(k)}$  である (201 ページ参照)。一般に変分法では  $\bar{\varepsilon}_0 \geq \varepsilon_0$  である。摂動論と異なり、試行関数  $e^{-\lambda q^2/2}$  による変分法は、広範囲の  $v$  に対してよい近似になる。

$$\bar{\varepsilon}_0(\lambda, v) = \frac{3\lambda^2 + 1}{4\lambda} \xrightarrow{v \rightarrow 0} 1 + \frac{v}{4} - \frac{v^2}{8} + \frac{v^3}{8} + \cdots$$

である。1 次の係数は (8.52) の  $B_1$  に一致するが ( $v = 3u$ ), 2 次以上は異なる。 $\bar{\varepsilon}_0(\lambda, v) \xrightarrow{v \rightarrow \infty} 3v^{1/3}/4$  は例題 1 の結果である。



**問題 8.18**  $\bar{\psi}_n(q) = H_n(\sqrt{\lambda}q) e^{-\lambda q^2/2}$  とする。

$$\bar{\varepsilon}_n(\lambda, v) = \frac{\langle \bar{\psi}_n | H | \bar{\psi}_n \rangle}{\langle \bar{\psi}_n | \bar{\psi}_n \rangle} = (2n+1) \bar{\varepsilon}_0(\lambda, v_n), \quad v_n = \frac{2n^2 + 2n + 1}{2n+1} v$$

を示せ。 $\bar{\varepsilon}_0(\lambda, v)$  は (8.110) である。1 次の摂動論と比較せよ。

## 9 WKB 近似 (準古典近似)

### 9.1 WKB 近似

前節の変分法と同様に、ここで考える近似法も非摂動論的近似法である。波動関数を  $\psi(\mathbf{r}, t) = \exp(iW(\mathbf{r}, t)/\hbar)$  とおく。  $W(\mathbf{r}, t)$  は複素数である。

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial W}{\partial t} \psi, \quad \nabla^2 \psi = -\frac{1}{\hbar^2} \left( (\nabla W)^2 - i\hbar \nabla^2 W \right) \psi$$

であるから時間に依存するシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left( (\nabla W)^2 - i\hbar \nabla^2 W \right) + V(\mathbf{r}) \quad (9.1)$$

になる。ここで  $\hbar$  を含む項を無視すると、古典力学でのハミルトン・ヤコビの方程式

$$-\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{2m} (\nabla W)^2 + V(\mathbf{r})$$

になる。これに対して  $\hbar$  の 1 次の補正を考慮する準古典近似を Wentzel-Kramers-Brillouin 近似, 略して **WKB 近似** という。

以下では 1 次元の定常状態  $\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x)$  を考える。

$$\psi(x) = \exp(iS(x)/\hbar), \quad W(x, t) = S(x) - Et$$

とおけるから (9.1) は

$$(S')^2 + 2m(V(x) - E) - i\hbar S'' = 0, \quad \text{ただし} \quad S' = \frac{dS}{dx}, \quad S'' = \frac{d^2S}{dx^2} \quad (9.2)$$

になる。  $S$  を  $\hbar$  についてベキ展開して  $S = S_0 + \hbar S_1 + \hbar^2 S_2 + \dots$  とする。  $S_2$  以上を無視する近似が WKB 近似である。

$$(S')^2 = \left( S'_0 + \hbar S'_1 + \hbar^2 S'_2 + \dots \right)^2 = (S'_0)^2 + 2\hbar S'_0 S'_1 + \hbar^2 \left( 2S'_0 S'_2 + (S'_1)^2 \right) + \dots$$

であるから、(9.2) が  $\hbar$  の各ベキで成り立つことを要請すると

$$0 \text{ 次}: (S'_0)^2 + 2m(V(x) - E) = 0, \quad 1 \text{ 次}: 2S'_0 S'_1 - iS''_0 = 0 \quad (9.3)$$

$$2 \text{ 次}: 2S'_0 S'_2 + (S'_1)^2 - iS''_1 = 0 \quad (9.4)$$

になる。

$$\hbar k(x) = \sqrt{2m|V(x) - E|}$$

とする。  $E > V(x)$  のとき  $2\pi/k(x)$  は局所的なド・ブロイ波長である。 0 次の方程式より

$$E > V(x) \text{ のとき } S_0(x) = \pm \hbar \int dx k(x), \quad E < V(x) \text{ のとき } S_0(x) = \pm i\hbar \int dx k(x)$$

1 次の方程式は

$$S'_1 = \frac{i}{2} \frac{S''_0}{S'_0} = \frac{i}{2} \frac{k'(x)}{k(x)}, \quad \therefore \quad S_1(x) = \frac{i}{2} \log S'_0 = \frac{i}{2} \log k(x) \quad (9.5)$$

ただし、積分定数は下式の係数  $C_{\pm}$ ,  $D_{\pm}$  に取り込めるから、ここでは無視する。したがって

$$\exp(iS/\hbar) \approx \exp(iS_0/\hbar + iS_1) = \exp\left(iS_0/\hbar - \frac{1}{2} \log k(x)\right) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp(iS_0/\hbar)$$



になるから,  $E > V(x)$  での一般解は  $C_{\pm}$  を任意定数として

$$\psi(x) = \psi_1(x) = \frac{C_+}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(i \int dx k(x)\right) + \frac{C_-}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(-i \int dx k(x)\right) \quad (9.6)$$

古典力学的運動が禁止される  $E < V(x)$  では  $D_{\pm}$  を任意定数として

$$\psi(x) = \psi_2(x) = \frac{D_+}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(\int dx k(x)\right) + \frac{D_-}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(-\int dx k(x)\right) \quad (9.7)$$

になる。

(9.2) は

$$2m(V(x) - E) + (S')^2(1 + \Delta S) = 0, \quad \Delta S = -i\hbar \frac{S''}{(S')^2} = i\hbar \frac{d}{dx} \frac{1}{S'}$$

と書ける。 $\Delta S$  を無視すれば 0 次の方程式になるから, WKB 近似がよい近似になる条件は

$$|\Delta S| = \left| \frac{d}{dx} \frac{\hbar}{S'} \right| \approx \left| \frac{d}{dx} \frac{\hbar}{S'_0} \right| = \left| \frac{d}{dx} \frac{1}{k(x)} \right| = \frac{m\hbar|V'(x)|}{|2m(V(x) - E)|^{3/2}} \ll 1 \quad (9.8)$$

である。あるいは, (9.5) より  $iS_1 = \log \kappa(x)$ ,  $\kappa = 1/\sqrt{S'_0}$  であるが, これを (9.4) に代入すると

$$S'_2 = \frac{iS''_1 + (iS'_1)^2}{2S'_0} = \frac{\kappa\kappa''}{2} = \frac{1}{2\sqrt{S'_0}} \frac{d^2}{dx^2} \frac{1}{\sqrt{S'_0}} \quad (9.9)$$

$\lambda(x) = \hbar/S'_0(x)$  とおくと

$$\hbar S'_2 = \frac{\sqrt{\lambda}}{2} \frac{d^2}{dx^2} \sqrt{\lambda} = \frac{\lambda''}{4} - \frac{(\lambda')^2}{8\lambda}, \quad \therefore \quad \hbar S_2 = \frac{\lambda'}{4} - \int dx \frac{(\lambda')^2}{8\lambda}$$

(9.8), つまり  $|\lambda'| \ll 1$  ならば  $|\hbar S_2| \ll 1$  になるから,  $S_2$  の波動関数への寄与は  $e^{i\hbar S_2} \approx 1$  になり WKB 近似が成り立つ。(9.8) より  $V(x)$  はゆっくり変化する必要があるが, その場合でも古典力学的運動の回帰点 ( $V(x) - E = 0$ ) 近傍では (9.8) は成り立たない。 $x = a$  で  $V(x) - E = 0$  とする。 $V(x)$  がゆっくり変化するならば,  $x \approx a$  では

$$V(x) \approx V(a) + V'(a)(x - a) = E + V'(a)(x - a) \quad (9.10)$$

と近似できる。このとき (9.8) は

$$|v_a^{1/3}(x - a)| \gg \frac{1}{2^{2/3}} \sim 1, \quad \text{ただし} \quad v_a = \frac{2m}{\hbar^2} V'(a) \quad (9.11)$$

になる。 $x$  がこの不等式を満たす領域では WKB 近似を適用できる。

古典力学的運動が許される領域  $E > V(x)$  では  $p(x) = \hbar k(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$  は古典力学的運動量の大きさである。(9.6) を 2 つに分けて

$$\psi_1 = \psi_+ + \psi_-, \quad \psi_{\pm}(x) = \frac{C_{\pm}}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(\pm i \int dx k(x)\right)$$

とすると確率密度は  $|\psi_{\pm}(x)|^2 = \hbar|C_{\pm}|^2/p(x)$  になり運動量  $p(x)$  に逆比例する。(2.46) と同様に, 古典力学的確率  $P_{cl}$  は運動量に逆比例するから, WKB 近似の確率密度は古典力学を再現する。 $\psi_{\pm}(x)$  の確率流 (1.6) は

$$J_{\pm}(x) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \psi_{\pm}^*(x) \frac{d\psi_{\pm}(x)}{dx} \right) = \pm \frac{\hbar}{m} |C_{\pm}|^2 = \text{定数}$$

になる。これは 確率流 = 速度 × 確率密度 から予想される結果である。

以上とは別の定式化で WKB 近似を導く。\$S(x)\$ を \$\hbar\$ の偶数ベキと奇数ベキに分割し

$$S(x) = S_e(x) + \hbar S_{\text{odd}}(x), \quad S_e = S_0 + \hbar^2 S_2 + \cdots, \quad S_{\text{odd}} = S_1 + \hbar^2 S_3 + \cdots$$

とする。更に \$S\_{\text{odd}}(x) = -i \log f(x)\$ とすれば

$$\psi(x) = \exp(iS(x)/\hbar) = \exp(iS_e/\hbar + \log f) = f \exp(iS_e/\hbar)$$

である。\$f\$ と \$S\_e\$ は \$\hbar\$ の偶関数に制限されているから、複素数 \$\psi\$ を表すのに 2 つの複素数 \$f, S\_e\$ が必要である。シュレーディンガー方程式 \$-\hbar^2 \psi'' + 2m(V(x) - E)\psi = 0\$ は

$$\underbrace{(S_e')^2 f + 2m(V - E)f - \hbar^2 f''}_{\hbar \text{ の偶関数}} - i\hbar \underbrace{(2f' S_e' + f S_e'')}_{\hbar \text{ の偶関数}} = 0$$

になる。\$\hbar\$ でベキ展開したとき、上式が各ベキで成り立つためには

$$(S_e')^2 f + 2m(V - E)f - \hbar^2 f'' = 0, \quad 2f' S_e' + f S_e'' = 0$$

である。第 2 式より

$$f(x) = C/\sqrt{S_e'(x)}, \quad S_{\text{odd}} = -i \log f = \frac{i}{2} \log S_e' + \text{定数}$$

である。\$f(x)\$ を第 1 式に代入すると

$$(S_e')^2 + 2m(V(x) - E) - \hbar^2 \sqrt{S_e'} \frac{d^2}{dx^2} \frac{1}{\sqrt{S_e'}} = 0$$

ここまでは近似をしていないから、この 3 階の微分方程式はシュレーディンガー方程式と同等である。\$S\_e(x) = S\_0(x) + \hbar^2 S\_2(x) + \cdots\$ と展開すると

$$(S_0')^2 + 2m(V(x) - E) + \hbar^2 \left( 2S_0' S_2' - \sqrt{S_0'} \frac{d^2}{dx^2} \frac{1}{\sqrt{S_0'}} \right) + \cdots = 0$$

\$\hbar\$ の 0 次の項より (9.3) の 0 次方程式を得る。また、\$S\_{\text{odd}} \approx (i/2) \log S\_0'\$ は (9.5) であり、\$\hbar^2\$ の項 = 0 は (9.9) である。\$e^{iS\_e/\hbar} = \exp(iS\_0/\hbar + i\hbar S\_2 + \cdots)\$ より \$|\hbar S\_2| \ll 1\$ のとき WKB はよい近似になる。

## 9.2 回帰点近傍の解と接続条件

\$E = V(a)\$ である回帰点 \$x = a\$ が存在する場合を考える。(9.6), (9.7) は

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left( C_+ e^{i\eta(a,x)} + C_- e^{-i\eta(a,x)} \right), & E > V(x) \\ \psi_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left( D_+ e^{\eta(a,x)} + D_- e^{-\eta(a,x)} \right), & E < V(x) \end{aligned} \tag{9.12}$$

ただし

$$\eta(a, x) = \int_a^x dx' k(x') = \frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' \sqrt{2m|V(x') - E|} \tag{9.13}$$

と表せる。WKB 近似により束縛状態のエネルギーや散乱の透過率を求める場合、\$\psi\_1(x)\$ と \$\psi\_2(x)\$ を接続する必要がある。\$x \approx a\$ では WKB 近似は成り立たないから、\$\psi\_1(x)\$ と \$\psi\_2(x)\$ を \$x = a\$ で直接

接続しても無意味である。したがって、 $\psi_1(x)$  と  $\psi_2(x)$  をどのように接続するかが問題になる。そこで、 $x = a$  近傍でのシュレーディンガー方程式を正確に解き、この解を媒介として  $\psi_1(x)$  と  $\psi_2(x)$  を接続する。

WKB 近似を適用する場合、ポテンシャル  $V(x)$  はゆっくり変化することが前提であるから、 $x = a$  近傍でのポテンシャルを (9.10) で近似する。シュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - z\psi = 0, \quad \text{ただし } z = v_a^{1/3}(x-a), \quad v_a = \frac{2m}{\hbar^2}V'(a)$$

になる。これは (18.24) であるから、一般解はエアリー関数を用いて  $\psi = F\text{Ai}(z) + G\text{Bi}(z)$  と表せる。ただし  $F$  と  $G$  は任意定数である。漸近形 (18.36), (18.37) を使うと

$$\psi(x) = F\text{Ai}(z) + G\text{Bi}(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{\pi} z^{1/4}} \left[ \frac{F}{2} \exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right) + G \exp\left(\frac{2}{3}z^{3/2}\right) \right] \quad (9.14)$$

$z \rightarrow -\infty$  のとき

$$\psi(x) \rightarrow \frac{1}{2\sqrt{\pi}|z|^{1/4}} \left[ (G - iF) \exp\left(\frac{2i}{3}|z|^{3/2} + \frac{i\pi}{4}\right) + (G + iF) \exp\left(-\frac{2i}{3}|z|^{3/2} - \frac{i\pi}{4}\right) \right] \quad (9.15)$$

である。これらの漸近形は、460 ページの図から、 $|z| \gtrsim 2$  ならば十分よい近似である。以下では、右図のように線形近似と WKB 近似の適用領域が重なるとし、重なる部分ではエアリー関数の漸近形が適用できるとする。なお、WKB 近似の適用領域 (9.11) を  $z$  で表すと  $|z| \gg 2^{-2/3} \sim 1$  である。

$$\frac{2}{3}|z|^{3/2} = \frac{2}{3}|v_a|^{1/2}|a-x|^{3/2} = \left| \int_a^x dx' |v_a(x'-a)|^{1/2} \right|$$

(9.10) より

$$v_a(x-a) = \frac{2m}{\hbar} V'(a)(x-a) \approx \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)$$

になるから

$$\frac{2}{3}|z|^{3/2} \approx |\eta(a, x)| = \begin{cases} -\eta(a, x), & x < a \\ \eta(a, x), & x > a \end{cases}, \quad k(x) = |v_a|^{1/3} \sqrt{|z|} \quad (9.16)$$

である。

### $V'(a) > 0$ の場合

$x > a$  のとき  $E < V(x)$ ,  $x < a$  のとき  $E > V(x)$  である。(9.12) に (9.16) を代入すると

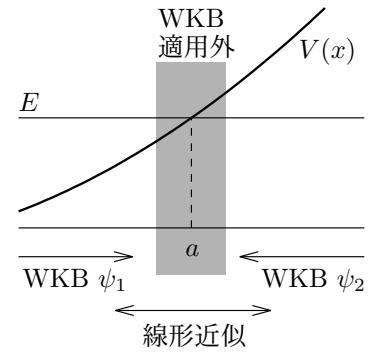
$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_2(x) = \frac{v_a^{-1/6}}{z^{1/4}} \left( D_+ \exp\left(\frac{2}{3}z^{3/2}\right) + D_- \exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right) \right), & x > a \\ \psi_1(x) = \frac{v_a^{-1/6}}{|z|^{1/4}} \left( C_+ \exp\left(-\frac{2i}{3}|z|^{3/2}\right) + C_- \exp\left(\frac{2i}{3}|z|^{3/2}\right) \right), & x < a \end{cases} \quad (9.17)$$

$x > a$  のとき (9.14),  $x < a$  のとき (9.15) の漸近形と比較すると

$$D_+ = \frac{v_a^{1/6}}{\sqrt{\pi}} G, \quad D_- = \frac{v_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi}} F, \quad C_+ = \frac{v_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi}} (G + iF) e^{-i\pi/4}, \quad C_- = \frac{v_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi}} (G - iF) e^{i\pi/4}$$

したがって

$$C_+ = \left( \frac{1}{2} D_+ + i D_- \right) e^{-i\pi/4}, \quad C_- = \left( \frac{1}{2} D_+ - i D_- \right) e^{i\pi/4} \quad (9.18)$$



これが求めるべき接続条件である。これから (9.12) は

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \times \begin{cases} (D_+ e^{\eta(a,x)} + D_- e^{-\eta(a,x)}), & x > a \\ \left[ D_+ \sin\left(\eta(a,x) + \frac{\pi}{4}\right) + 2D_- \cos\left(\eta(a,x) + \frac{\pi}{4}\right) \right], & x < a \end{cases} \quad (9.19)$$

$x < a$  の場合

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} (C_+ e^{i\eta(a,x)} + C_- e^{-i\eta(a,x)}), \quad C_{\pm} = \left(\frac{1}{2}D_+ \pm iD_-\right) e^{\mp i\pi/4} \quad (9.20)$$

とも表せる。

WKB 近似が成り立つ領域では  $\eta(a,x) \gg 1$  より  $e^{\eta(a,x)} \gg e^{-\eta(a,x)}$  になるから,  $|D_-| \gg |D_+|$  であっても  $D_+$  が厳密に 0 でない限り,  $x \gg a$  では  $\psi(x) = D_+ e^{\eta(a,x)} / \sqrt{k(x)}$  になる。  $D_+ = 0$  の場合は例外であり,  $x \gg a$  で  $\psi(x) = D_- e^{-\eta(a,x)} / \sqrt{k(x)}$  になり指数関数的に減少する。これを

$$x \ll a : \psi(x) = \frac{2D_-}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\eta(a,x) + \frac{\pi}{4}\right) \Leftarrow x \gg a : \psi(x) = \frac{D_-}{\sqrt{k(x)}} e^{-\eta(a,x)}$$

と表すこともある。  $|D_+| \ll |D_-|$  である  $D_+$  の項を加えても左辺は実質的に変わらないが, 右辺は  $D_+ e^{\eta(a,x)} / \sqrt{k(x)}$  になるから, 逆  $\Rightarrow$  は成り立たない。

**問題 9.1**  $\sin \theta \neq 0$  のとき

$$x \ll a : \psi(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\eta(a,x) + \frac{\pi}{4} - \theta\right) \Rightarrow x \gg a : \psi(x) = \frac{C \sin \theta}{\sqrt{k(x)}} e^{\eta(a,x)}$$

を示せ。この場合も, 逆は成り立たない。

**$V'(a) < 0$  の場合**

$x > a$  のとき  $E > V(x)$ ,  $x < a$  のとき  $E < V(x)$  より

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = \frac{v_a^{-1/6}}{|z|^{1/4}} \left( C_+ \exp\left(\frac{2i}{3}|z|^{3/2}\right) + C_- \exp\left(-\frac{2i}{3}|z|^{3/2}\right) \right), & x > a \\ \psi_2(x) = \frac{v_a^{-1/6}}{z^{1/4}} \left( D_+ \exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right) + D_- \exp\left(\frac{2}{3}z^{3/2}\right) \right), & x < a \end{cases}$$

になる。  $x - a$  と  $z$  は逆符号であるから,  $x > a$  のとき (9.15),  $x < a$  のとき (9.14) と比較すると

$$C_+ = \left(\frac{1}{2}D_- - iD_+\right) e^{i\pi/4}, \quad C_- = \left(\frac{1}{2}D_- + iD_+\right) e^{-i\pi/4} \quad (9.21)$$

である。したがって, (9.12) は

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \times \begin{cases} \left[ 2D_+ \cos\left(\eta(a,x) - \frac{\pi}{4}\right) - D_- \sin\left(\eta(a,x) - \frac{\pi}{4}\right) \right], & x > a \\ (D_+ e^{\eta(a,x)} + D_- e^{-\eta(a,x)}), & x < a \end{cases} \quad (9.22)$$

あるいは  $D_{\pm}$  を  $C_{\pm}$  で表せば

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \times \begin{cases} (C_+ e^{i\eta(a,x)} + C_- e^{-i\eta(a,x)}), & x > a \\ e^{-i\pi/4} \left[ (C_+ + iC_-) e^{-\eta(a,x)} + \frac{iC_+ + C_-}{2} e^{\eta(a,x)} \right], & x < a \end{cases} \quad (9.23)$$

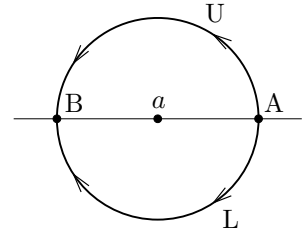
になる。 $\eta(a, x)$  の定義より  $x < a$  では  $\eta(a, x) < 0$  であるから,  $x$  の減少とともに  $e^{-\eta(a, x)}$  は指数関数的に増加する。 $D_- \neq 0$  ならば  $|D_-| \ll |D_+|$  であっても  $x \ll a$  では  $D_- e^{-\eta(a, x)}$  が支配的になる。 $x \ll a$  で  $\psi(x)$  が指数関数的に減少するためには  $D_- = 0$  でなければならない。

エアリー関数の漸近形を用いずに, 帰点  $x = a$  の両側の波動関数を接続する。そのために, WKB 近似が成り立たない  $x = a$  近傍を迂回する経路を複素  $x$  平面上で考え, この迂回路に沿って波動関数を接続する。迂回路上では WKB 近似と線形近似 (9.10) が成り立つとする。 $V'(a) > 0$  のとき,  $x > a$  で波動関数が指数関数的に減少する場合を考える。(9.17) より

$$x > a \text{ のとき } \psi(x) = \psi_2(x) = \frac{v_a^{-1/6} D}{z^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} z^{3/2}\right)$$

$$x < a \text{ のとき } \psi(x) = \psi_+(x) + \psi_-(x), \quad \psi_{\pm}(x) = \frac{v_a^{-1/6} C_{\pm}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\mp \frac{2i}{3} |z|^{3/2}\right) \quad (9.24)$$

である。 $z = v_a^{1/3}(x - a)$  を複素数に拡張し,  $\psi_2(x)$  を上半面の半円の経路 U, または下半面の半円の経路 L に沿って A から B に接続する。 $z = |z|e^{i\theta}$ ,  $|\theta| \leq \pi$  とおける。 $z^\nu = |z|^\nu e^{i\nu(\theta+2n\pi)}$  は  $\nu \neq \text{整数}$  のとき多価関数であるが,  $\theta = 0$  のとき正の実数になる  $n = 0$  をとれば



$$\psi_2(x) = \frac{v_a^{-1/6} D}{|z|^{1/4}} \exp\left(-\frac{i\theta}{4} - \frac{2}{3} |z|^{3/2} e^{i3\theta/2}\right)$$

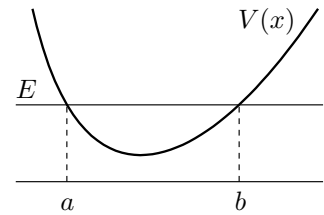
である。U に沿って B に到達すると  $\theta = \pi$  になるから,  $C_- = D e^{-i\pi/4}$  とすると  $\psi_2(x) = \psi_-(x)$  になる。 $C_+$  を決定するには下半面の L に沿って B に到達する必要がある。この場合  $\theta = -\pi$  になるから  $C_+ = D e^{i\pi/4}$  とすると  $\psi_2(x) = \psi_+(x)$  である。(9.24) で  $C_{\pm} = D e^{\pm i\pi/4}$  とすれば

$$\psi(x) = \frac{2v_a^{-1/6} D}{|z|^{1/4}} \cos\left(-\frac{2}{3} |z|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) = \frac{2D}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\eta(a, x) + \frac{\pi}{4}\right)$$

になり,  $D_+ = 0$  とした (9.19) が求まる。

### 9.3 ボーア・ゾンマーフェルトの量子化条件

1 次元ポテンシャル中での束縛状態を WKB 近似で求める。図のように  $x = a$  と  $x = b$  で  $V(x) = E$  とする。 $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$  になる条件を求める。 $V'(b) > 0$  であるから  $x = b$  での接続は (9.19) を用いる。 $x \rightarrow \infty$  のとき  $\psi(x) \rightarrow 0$  を満たすためには  $D_+ = 0$  である。 $D_-$  を  $D$  と書くことにすると



$$\psi(x) = \frac{D}{\sqrt{k(x)}} \times \begin{cases} e^{-\eta(b, x)}, & x > b \\ 2 \cos\left(\eta(b, x) + \frac{\pi}{4}\right), & x < b \end{cases} \quad (9.25)$$

になる。 $x < b$  での波動関数は  $x = a$  で接続するときの  $x > a$  での波動関数でもある。 $V'(a) < 0$  より  $x = a$  では (9.22) を使う。そのため (9.25) を (9.22) の形に書き直す。

$$\eta(b, x) = \int_b^x dx' k(x') = \eta(a, x) - \frac{\pi}{2} - \theta, \quad \text{ただし } \theta = \eta(a, b) - \frac{\pi}{2}$$

になるから,  $D_+ = D \cos \theta$ ,  $D_- = -2D \sin \theta$  とすると  $x < b$  の波動関数は

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left( 2D_+ \cos\left(\eta(a, x) - \frac{\pi}{4}\right) - D_- \sin\left(\eta(a, x) - \frac{\pi}{4}\right) \right)$$

になる。これと (9.22) を比較すると  $x < a$  では

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left( D_+ e^{\eta(a, x)} + D_- e^{-\eta(a, x)} \right)$$

である。  $x \rightarrow -\infty$  のとき  $\psi(x) \rightarrow 0$  より  $D_- = -2D \sin \theta = 0$  であるから,  $\theta = n\pi$ , つまり

$$\hbar \eta(a, b) = \int_a^b dx \sqrt{2m(E - V(x))} = \pi \hbar \left( n + 1/2 \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (9.26)$$

これが WKB 近似における束縛状態の条件である。運動量  $p(x) = \pm \sqrt{2m(E - V(x))}$  で表せば

$$2 \int_a^b dx p(x) = \oint_C dx p(x) = h \left( n + 1/2 \right), \quad h = \text{プランク定数}$$

線積分は  $(x, p)$  平面上の古典的軌道  $C$  に沿った 1 周積分である。  $n + 1/2$  を  $n$  で置き換えれば, **ボーア・ゾンマーフェルトの量子化条件**になる。

束縛状態の WKB 波動関数は

$$\psi(x) = \frac{D}{\sqrt{k(x)}} \times \begin{cases} (-1)^n e^{\eta(a, x)}, & x < a \\ 2 \cos\left(\eta(b, x) + \frac{\pi}{4}\right), & a < x < b \\ e^{-\eta(b, x)}, & x > b \end{cases} \quad (9.27)$$

になる。  $\psi(x)$  は  $a$  と  $b$  から十分離れた領域で有効である。  $d\eta(b, x)/dx = k(x) > 0$  であるから  $\eta(b, x)$  は  $\eta(b, a) = -(n + 1/2)$  から単調増加し  $\eta(b, b) = 0$  になる。したがって,  $a < x < b$  の間に波動関数が 0 になる点, つまり  $\cos(\eta(b, x) + \pi/4) = 0$  を満たす点  $x$  は  $n$  個存在する。  $n$  は波動関数の節 (ノード) の数である。 WKB 近似が成り立つ領域は  $\eta(a, b) \gg 1$  であるから, (9.26) は  $n \gg 1$  の場合によい近似になる。  $a < x < b$  では, 波動関数は激しく振動するから,  $|\psi|^2$  の平均的振る舞いは,  $\cos^2(\dots)$  を  $1/2$  で置き換え  $2\hbar|D|^2/p(x)$  になる。運動量の大きさ  $p(x) = \hbar k(x)$  に逆比例し古典力学的な確率密度を再現する。これは 1 次元の調和振動子と一様重力で具体的に示した。 WKB 近似は古典力学的極限で有効な準古典近似である。

$V(x)$  が偶関数  $V(x) = V(-x)$  の場合,  $k(x)$  は偶関数で  $a = -b$ ,  $b > 0$  であるから

$$\eta(a, x) = \int_{-b}^x dx' k(x') = - \int_b^{-x} dx' k(-x') = - \int_b^{-x} dx' k(x') = -\eta(b, -x)$$

$$\eta(b, -x) = -\eta(a, x) = -\eta(a, b) - \eta(b, x), \quad \therefore \quad \eta(b, -x) + \pi/4 = -\left(\eta(b, x) + \pi/4\right) - n\pi$$

したがって, (9.27) は  $\psi(-x) = (-1)^n \psi(x)$  を満たす (27 ページ参照)。

### 1 次元調和振動子

$V(x) = m\omega^2 x^2/2$  の場合,  $x = \pm x_0$ ,  $x_0 = \sqrt{2E/m\omega^2}$  のとき  $V(x) - E = 0$  になるから, (9.26) は

$$m\omega \int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{x_0^2 - x^2} = m\omega \frac{\pi x_0^2}{2} = \pi \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad \therefore \quad E = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

になり, エネルギー固有値はシュレーディンガー方程式の厳密解と一致する。

$V(x) = V(-x)$  であるから  $\psi(x)$  は偶関数または奇関数である。 $E = \hbar\omega(n+1/2)$  のとき  $x \geq 0$  での  $\psi(x)$  を求める。1次元調和振動子で定義した  $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ ,  $q = \alpha x$  を用いて

$$z = \frac{q}{\sqrt{2n+1}} = \frac{\alpha x}{\sqrt{2n+1}}$$

とする。 $x_0 = \sqrt{2n+1}/\alpha$  であるから  $x = x_0$  のとき  $z = 1$  になる。(9.27) は

$$\psi(q) = \frac{D}{\sqrt{k(z)}} \times \begin{cases} 2 \cos\left(\eta(z) + \frac{\pi}{4}\right), & |z| < 1 \\ e^{-\eta(z)}, & z > 1 \end{cases}$$

ただし

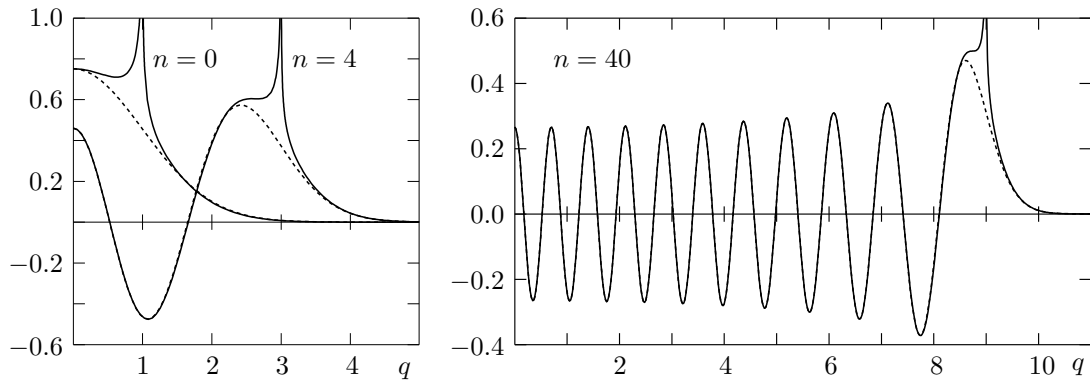
$$k(z) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |V(x) - E|} = \alpha \sqrt{(2n+1)|z^2 - 1|}, \quad \eta(z) = \int_{x_0}^x dx' k(x') = (2n+1) \int_1^z dz' \sqrt{|z'^2 - 1|}$$

になる。 $\eta(z)$  の積分を行えば

$$\psi(q) = \frac{D'}{|1 - z^2|^{1/4}} \times \begin{cases} 2 \cos\left(\frac{2n+1}{2} \left(z\sqrt{1-z^2} + \sin^{-1} z\right) - \frac{n\pi}{2}\right), & |z| < 1 \\ \left(z + \sqrt{z^2 - 1}\right)^{n+1/2} \exp\left(-\frac{2n+1}{2} z\sqrt{z^2 - 1}\right), & z > 1 \end{cases}$$

である。これは  $n \rightarrow \infty$  におけるエルミート多項式  $H_n(q)$  の漸近形 (18.39) を用いても求まる。

下図に  $\psi(q)/\sqrt{\alpha}$  を示す。破線は (4.25) の解析解  $\varphi_n(q)/\sqrt{\alpha}$  である。 $z = 1$  付近は WKB の適用外であるから、規格化の代わりに、 $q \approx 0$  のとき  $\psi(q) = \varphi_n(q)$  になるように  $D'$  を決めた。 $n \gg 1$  のとき、 $\psi(q)$  が発散する古典的回帰点  $q = \sqrt{2n+1}$  付近を除くと、 $\psi(q)$  は解析解を非常によく再現する。古典力学の運動可能領域  $|q| < \sqrt{2n+1}$  では  $|\psi(q)|^2$  は激しく振動するが、 $\cos^2(\dots)$  を  $1/2$  で置き換えた平均的振る舞いは、古典力学的確率密度になる。

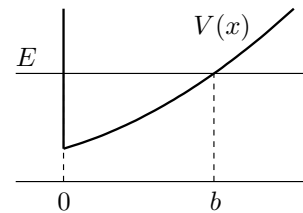


**問題 9.2**  $V(0) = \infty$  の場合  $\psi(0) = 0$  である。WKB 量子化条件は

$$\int_0^b dx \sqrt{2m(E - V(x))} = \pi\hbar \left(k + \frac{3}{4}\right), \quad k = 0, 1, \dots \quad (9.28)$$

になることを示せ。一様重力 (2.42) に適用し (2.43) の近似解を求めよ。

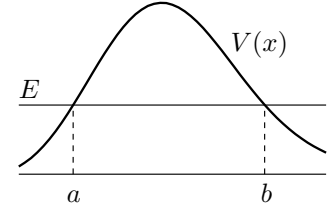
$V(x)$  が偶関数の場合、 $n$  が奇数の (9.26) は (9.28) になる。



**問題 9.3** WKB 近似が適用できる場合、 $V(x) > E$  の領域に粒子が存在する確率は非常に小さい。そこで、回帰点でも WKB 近似が成り立つとして、境界条件を  $\psi(a) = \psi(b) = 0$  とすると、ボーア・ゾンマーフェルトの量子化条件が求まることを示せ。

## 9.4 トンネル効果

図のように  $x < a$  の側から粒子が入射してポテンシャル障壁と衝突し,  $x > b$  の側に透過する場合を考える。古典力学では  $x < a$  での粒子がポテンシャルの障壁を通過して  $x > b$  の領域に到達することはできないが, 箱型ポテンシャルで見たように, 量子力学的には  $x > b$  に粒子は到達する (トンネル効果)。 $x > b$  では  $x$  軸正方向に進む波だけというのが境界条件である。この境界条件を満たす WKB 解は (9.23) において  $C_- = 0$  とすればよいから



$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}} \times \begin{cases} e^{i\eta(b,x)}, & x > b \\ e^{-i\pi/4} \left( e^{-\eta(b,x)} + \frac{i}{2} e^{\eta(b,x)} \right), & x < b \end{cases}$$

である。 $e^{\eta(b,x)}$  は無視できるが確率保存を示すため残しておく。

$$\eta(b,x) = \eta(a,x) - P, \quad P = \int_a^b dx k(x) = \frac{1}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m(V(x) - E)} \quad (9.29)$$

になるから,  $x < b$  の波動関数は (9.19) の形式

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left( D_+ e^{\eta(a,x)} + D_- e^{-\eta(a,x)} \right), \quad D_- = e^{-i\pi/4+P} C, \quad D_+ = \frac{i}{2} e^{-i\pi/4-P} C \quad (9.30)$$

に表せる。これが  $x = a$  で接続するときの  $x > a$  での波動関数になる。(9.20) から  $x < a$  では

$$\psi(x) = \psi_+(x) + \psi_-(x), \quad \psi_{\pm} = \frac{C_{\pm}}{\sqrt{k(x)}} e^{\pm i\eta(a,x)}$$

ただし

$$C_+ = \left( e^P + \frac{e^{-P}}{4} \right) C, \quad C_- = -i \left( e^P - \frac{e^{-P}}{4} \right) C$$

である。 $\psi_+$  が入射波,  $\psi_-$  が反射波を表す。(9.13) より入射波の確率流  $J_I$  は

$$J_I = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left( \psi_+^*(x) \frac{d\psi_+(x)}{dx} \right) = \frac{\hbar}{m} \frac{|C_+|^2}{k(x)} \frac{d\eta(a,x)}{dx} = \frac{\hbar}{m} |C_+|^2 = \frac{\hbar}{m} \left( e^P + \frac{e^{-P}}{4} \right)^2 |C|^2$$

反射波の確率流  $J_R$  は

$$J_R = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left( \psi_-^*(x) \frac{d\psi_-(x)}{dx} \right) = -\frac{\hbar}{m} |C_-|^2 = -\frac{\hbar}{m} \left( e^P - \frac{e^{-P}}{4} \right)^2 |C|^2$$

また,  $x > b$  での透過波の確率流  $J_T$  は

$$J_T = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left( \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right) = \frac{\hbar}{m} |C|^2$$

である。したがって, 透過率  $T$  と反射率  $R$  は

$$T = \frac{|J_T|}{|J_I|} = \frac{e^{-2P}}{(1 + e^{-2P}/4)^2}, \quad R = \frac{|J_R|}{|J_I|} = \left( \frac{1 - e^{-2P}/4}{1 + e^{-2P}/4} \right)^2$$

になる。確率保存  $R + T = 1$  は成り立つ。WKB 近似は  $P = \eta(a,b) \gg 1$  のとき成り立つから

$$T \approx e^{-2P} = \exp \left( -\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m(V(x) - E)} \right), \quad R \approx 1 \quad (9.31)$$

$e^{-2P}$  をガモフの透過因子という。



**問題 9.4** ポテンシャル (3.30) で  $V_0 > 0$  の場合を考える。(3.31) の  $U_0, k$  が  $\sqrt{U_0} \gg k \gg 1$  を満たすとき、透過率 (3.37) は  $T \approx \exp\left(-2\pi(\sqrt{U_0} - k)\right) = (9.31)$  になることを示せ。また、(3.48) の  $P$  は (9.31) で  $V(x) = V_0 e^{-\alpha|x|}$  とした結果に一致することを示せ。

### $\alpha$ 崩壊

ガモフの透過因子の適用例として、原子核の  $\alpha$  崩壊を考える。質量数  $A$  (陽子数  $Z$  と中性子数  $N$  の和) が  $A > 200$  の重い原子核は、多くの場合  $\alpha$  粒子 (陽子数 2, 中性子数 2 の He 原子核) を放出して崩壊する。 $\alpha$  粒子は原子核内では主に強い相互作用である核力の影響を受けるが、核力は作用範囲が  $1 \text{ fm} = 1 \times 10^{-15} \text{ m}$  程度と非常に短いため、原子核外ではクーロン力だけを感じる。これを簡略化して、 $\alpha$  粒子に作用するポテンシャル  $V(r)$  を

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < R \\ V_C(r) = \frac{g_c \hbar c}{r}, & r > R \end{cases}, \quad g_c = Z_\alpha Z_D \alpha$$

とする。 $-V_0 < 0$  は核力による引力ポテンシャルを表す定数、 $Z_\alpha = 2$  は  $\alpha$  粒子の陽子数、 $Z_D = Z - 2$  は  $\alpha$  粒子放出後の原子核の陽子数、 $\alpha$  は微細構造定数である。 $r$  は原子核の中心からの距離、 $R$  は原子核と  $\alpha$  粒子が接触し核力が作用する距離である。図のクーロン障壁  $V_R = V_C(R)$  の値を評価する。原子核の半径は  $r_0 A^{1/3}$ 、( $r_0 \approx 1.2 \text{ fm}$ ) であるが、これに  $\alpha$  粒子の大きさや核力の作用範囲などを考慮して

$$R = r_0 A^{1/3} + \Delta R, \quad \Delta R \approx 1.4 \text{ fm} \quad (9.32)$$

とする。ウラン原子核 (U) の場合  $A \approx 230$  とすると  $R \approx 9 \text{ fm}$  である。 $Z_D = 90$  及び (6.43) より

$$V_R = \frac{Z_\alpha Z_D \hbar c \alpha}{R} \approx \frac{2 \times 90 \times 200}{9 \times 137} \text{ MeV} \approx 29 \text{ MeV}$$

になる。ウラン原子核から放出される  $\alpha$  粒子のエネルギー  $E_\alpha$  は  $4 \sim 9 \text{ MeV}$  程度であり  $V_R$  に比べて小さい。古典力学的には、 $r < R$  に存在する  $\alpha$  粒子は  $r > b$  に到達できないから、原子核は  $\alpha$  崩壊しないが、量子力学的にはトンネル効果のため  $\alpha$  崩壊する。なお、 $V_C(b) = E_\alpha$  である  $b = g_c \hbar c / E_\alpha$  は  $b = R V_R / E_\alpha$  と表せる。

1 次元ポテンシャルの (9.29) を 3 次元の中心力ポテンシャルに適用するには、 $V(x)$  を (6.9) の  $U_\ell(r)$  で置き換える必要があるが、以下では、 $\alpha$  粒子の軌道角運動量は  $\ell = 0$  とする。更に、 $r = R$  ではポテンシャルが急激に変化するため WKB の接続は使えない。ところで、 $r < R$  でのシュレーディンガー方程式は、動径方向の波動関数を  $\psi(r)/r$  とすると

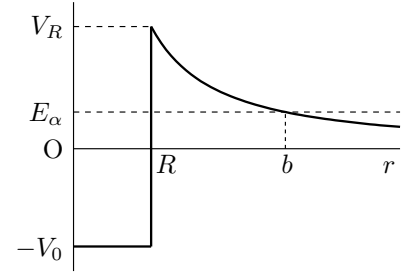
$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - V_0 \right) \psi = E_\alpha \psi$$

であるから  $C_\pm$  を任意定数として

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{k_0}} \left( C_+ e^{ik_0(r-R)} + C_- e^{-ik_0(r-R)} \right), \quad \text{ただし} \quad k_0 = \sqrt{\frac{2m(E_\alpha + V_0)}{\hbar^2}}$$

とおける。一方、 $r \ll b$  では (9.30) より、 $P \gg 1$  であるから  $D_+$  を無視すると

$$\psi(r) = \frac{D_-}{\sqrt{k(r)}} \exp\left(-\int_R^r dr' k(r')\right), \quad k(r) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_C(r) - E_\alpha)}$$



$r = R$  における  $\psi(r)$  と  $d\psi/dr$  の連続性より

$$\frac{C_+ + C_-}{\sqrt{k_0}} = \frac{D_-}{\sqrt{k(R)}}, \quad i\sqrt{k_0}(C_+ - C_-) = -D_- \sqrt{k(R)} \left(1 + \frac{k'(R)}{2k(R)^2}\right)$$

になる。(9.8) より WKB 近似では  $|k'/k^2| \ll 1$  であるから  $k'/k^2$  を無視すると

$$C_+ = \frac{k_0 + ik(R)}{2\sqrt{k_0 k(R)}} D_- = \frac{k_0 + ik(R)}{2\sqrt{k_0 k(R)}} e^{-i\pi/4 + P} C$$

確率流の比より透過率  $T$  は

$$T = \frac{|C|^2}{|C_+|^2} = K e^{-2P}, \quad \text{ただし} \quad K = \frac{4k_0 k(R)}{k_0^2 + k(R)^2} = 4 \frac{\sqrt{(V_R - E_\alpha)(E_\alpha + V_0)}}{V_R + V_0}$$

になる。(9.31) と異なり因子  $K$  が現れるが,  $V_0 \sim V_R \gg E_\alpha$  の場合  $K \approx 4\sqrt{V_R V_0}/(V_R + V_0) \sim 2$  になるから, (9.31) と同様に,  $T$  はガモフの透過因子  $e^{-2P}$  で決まる。

(9.29) の  $P$  を具体的に求めると,  $b = RV_R/E_\alpha$  より

$$P = \frac{1}{\hbar} \int_R^b dr \sqrt{2m(V_C(r) - E_\alpha)} = \frac{\sqrt{2mE_\alpha}}{\hbar} \int_R^{RV_R/E_\alpha} dr \sqrt{\frac{RV_R/E_\alpha}{r} - 1}$$

$1 \leq r/R \leq V_R/E_\alpha$  であるから  $r/R = \beta^{-2} \sin^2 \theta$ ,  $\beta = \sqrt{E_\alpha/V_R}$  とおける。 $\sin^{-1} \beta \leq \theta \leq \pi/2$  より

$$P = 2\sqrt{\frac{2mc^2}{E_\alpha}} g_c \int_{\sin^{-1} \beta}^{\pi/2} d\theta \cos^2 \theta = \sqrt{\frac{2mc^2}{E_\alpha}} g_c \left( \frac{\pi}{2} - \sin^{-1} \beta - \beta \sqrt{1 - \beta^2} \right)$$

である。 $\sin^{-1} x = x + x^3/6 + \dots$  であるから  $\beta = \sqrt{E_\alpha/V_R} = \sqrt{RE_\alpha/g_c} \ll 1$  の場合

$$P \approx \sqrt{\frac{2mc^2}{E_\alpha}} g_c \left( \frac{\pi}{2} - 2\beta + \frac{\beta^3}{3} \right) = \frac{1}{2} \left( \frac{C_1}{\sqrt{E_\alpha}} - C_2 + C_3 E_\alpha \right) \quad (9.33)$$

ただし

$$C_1 = \pi g_c \sqrt{2mc^2}, \quad C_2 = 4\sqrt{\frac{2mc^2 R g_c}{\hbar c}}, \quad C_3 = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2mc^2 R^3}{(\hbar c)^3 g_c}}, \quad g_c = Z_\alpha Z_D \alpha$$

になる。

$\alpha$  粒子は半径  $R$  の領域をポテンシャル障壁にぶつかりながら往復運動をしているとする。原子核内での  $\alpha$  粒子の速さは  $v_{\text{in}} = \hbar k_0/m$  であるから, 単位時間にポテンシャル障壁にぶつかる回数は  $v_{\text{in}}/(2R)$  になる。1 回につき  $K e^{-2P}$  の確率でポテンシャル障壁を通過するから, 単位時間に  $\alpha$  粒子がポテンシャル障壁を通過する確率  $\lambda$  は  $\lambda = v_{\text{in}} K e^{-2P}/(2R)$  になる。ある時刻  $t$  に  $N(t)$  個の原子核が存在するとき,  $dt$  の時間間隔に  $\alpha$  崩壊する原子核の個数は  $N(t)\lambda dt$  であるから

$$N(t+dt) = N(t) - N(t)\lambda dt, \quad \text{つまり} \quad \frac{dN}{dt} = -\lambda N, \quad \therefore N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$$

したがって,  $N(T_{1/2}) = N_0/2$  で定義される半減期  $T_{1/2}$  は

$$T_{1/2} = \frac{\log 2}{\lambda} = C_0 e^{2P}, \quad C_0 = \frac{2R \log 2}{v_{\text{in}} K} \quad (9.34)$$

になる。以上の導出は半定量的であり  $V_0$  には不確定な要素があるから,  $C_0$  をパラメータとして扱ってもよいが, ここでは  $V_0 \sim V_R \gg E_\alpha$  の場合に評価し

$$C_0 = \frac{R \log 2}{2} \sqrt{\frac{m}{2(V_R - E_\alpha)}} \frac{V_0 + V_R}{V_0 + E_\alpha} \approx \sqrt{\frac{m}{2V_R}} R \log 2$$

とする。  $P$  を (9.33) で近似すると

$$T_{1/2} \approx C_0 \exp\left(\frac{C_1}{\sqrt{E_\alpha}} - C_2 + C_3 E_\alpha\right) \quad (9.35)$$

になる。  $C_3 = 0$  とした (9.35) を **ガイガー・ヌッタール ( Geiger-Nuttall ) の法則** という。

ポロニウム ( Po,  $Z = 84$  ), ウラン ( U,  $Z = 92$  ), フェルミニウム ( Fm,  $Z = 100$  ) の同位体について, 上で求めた  $T_{1/2}$  と実験値を比較する。  $\alpha$  粒子の質量  $m$  は  $mc^2 = 3728 \text{ MeV}$  であるから, 各定数は表のようになる。  $C_1$  は同位体について共通であるが, 他の  $C_i$  は  $R$  に依存する。ここでは  $R$  を Po の場合  $A = 214$ , U の場合  $A = 230$ , Fm の場合  $A = 250$  の値に固定した。

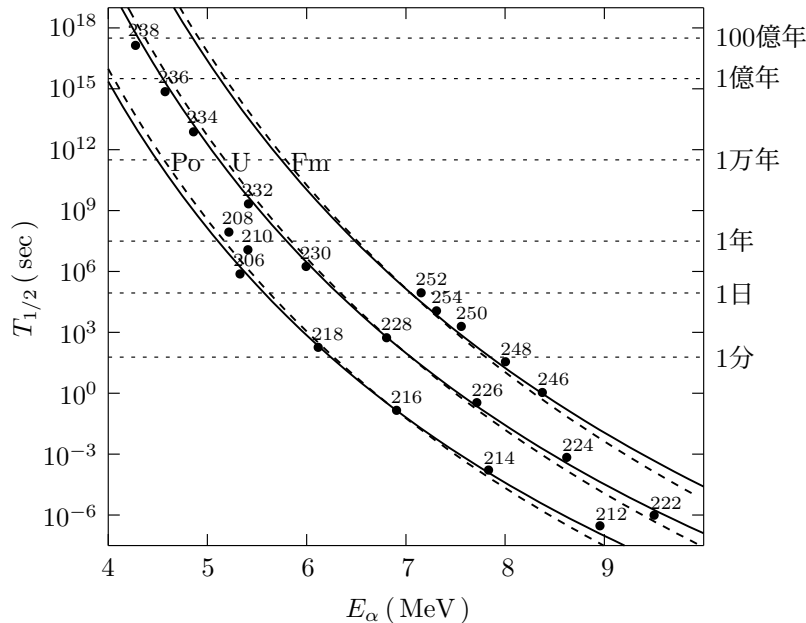
	$Z_D$	$R$ fm	$C_0$ $10^{-22} \text{ sec}$	$C_1$ $\text{MeV}^{1/2}$	$C_2$	$C_3$ $\text{MeV}^{-1}$
Po	82	8.58	1.63	325	78.8	0.476
U	90	8.75	1.60	356	83.4	0.469
Fm	98	8.96	1.59	388	88.0	0.466

下図に (9.34) を実線で示す。 (9.35) は (9.34) とほとんど一致する。 参考のため,  $C_3 = 0$  とした (9.35) を破線で示す。 ただし,  $C_0$  を  $30C_0 = e^{3.4}C_0$  で置き換えた。 ● は実験値を表し, ● に付けた数値は質量数  $A$  である。 実験値については

<http://www.nndc.bnl.gov/ensdf/>

S. B. Duarte et. al, At. Data Nucl. Data Tables **80** (2002) 235

を参照。 簡単な模型に基づく (9.34) は, 一桁程度の違いはあるが, 広範囲にわたる  $T_{1/2}$  の実験値をよく再現する。  $E_\alpha$  が 2 倍程度変化しただけでも  $T_{1/2}$  は 20 桁以上も変化するが, この極端な変化は  $T_{1/2}$  が  $e^{C_1/\sqrt{E_\alpha}}$ ,  $C_1/\sqrt{E_\alpha} \sim 100$  に依存するためである。



## 10 時間に依存する場合の近似法

### 10.1 摂動展開

この章では時間に依存するシュレーディンガー方程式を近似的に解き、摂動項  $H'$  が波動関数の時間発展に及ぼす影響を考える。 $H'$  は時間に依存してもよい。時刻  $t$  での状態を  $|t\rangle$  とすると

$$i\hbar \frac{d}{dt}|t\rangle = H(t)|t\rangle, \quad H(t) = H_0 + H'(t) \quad (10.1)$$

である。8章と同様に  $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$  は求まっているとする。 $|n\rangle$  は完全正規直交系をなす。

$H'(t)$  が時間に依存しない場合、 $t=0$  での状態が  $H$  の固有値  $W$  の固有状態  $|\varphi\rangle$  ならば、(10.1) を近似的に解くまでもなく  $|t\rangle = e^{-iWt/\hbar}|\varphi\rangle$  になる。 $|\varphi\rangle$  と  $|t\rangle$  は位相因子  $e^{-iWt/\hbar}$  が異なるだけで、状態は事実上は変化しない定常状態である。問題は  $W$  と  $|\varphi\rangle$  を求めることである(8章)。一方、初期状態が  $H_0$  の固有状態  $|i\rangle$  の場合、 $e^{-iE_it/\hbar}|i\rangle$  は(10.1)を満たさない。 $|t\rangle$  は

$$|t\rangle = \sum_n a_n(t)|n\rangle, \quad a_n(0) = \delta_{ni}$$

と展開できる。 $t > 0$  では  $n \neq i$  でも  $a_n(t) = 0$  とは限らず、状態は定常状態ではない。時刻  $t$  で状態が  $|n\rangle$  である確率  $|\langle n|t\rangle|^2 = |a_n(t)|^2 \neq 0$  ならば、 $|i\rangle$  から  $|n \neq i\rangle$  への遷移が可能である。 $a_n(t)$  は(10.1)から決まるが、一般には解析的に解くことは困難である。 $H'(t)$  が時間に依存する場合、そもそも定常状態は存在せず、状態は時間的に変化する。

$H'(t)$  が小さいとき、 $a_n(t)$  の時間依存は主に  $H_0$  による  $e^{-iE_nt/\hbar}$  であろう。そこで

$$|t\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_nt/\hbar} |n\rangle \quad (10.2)$$

とする。これを(10.1)に代入すると

$$i\hbar \frac{d}{dt}|t\rangle = \sum_n \left( i\hbar \frac{dc_n}{dt} + E_n c_n \right) e^{-iE_nt/\hbar} |n\rangle, \quad H|t\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar} (E_n + H'(t)) |n\rangle$$

であるから

$$\sum_n i\hbar \frac{dc_n}{dt} e^{-iE_nt/\hbar} |n\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar} H'(t) |n\rangle$$

$|m\rangle$  との内積をとると

$$\frac{dc_m}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n H'_{mn}(t) c_n(t), \quad H'_{mn}(t) = \langle m|H'(t)|n\rangle e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} \quad (10.3)$$

になる。 $H'_{mn}(t)$  は

$$H'_{mn}(t) = \langle m|H'_1(t)|n\rangle, \quad H'_1(t) = e^{iH_0t/\hbar} H'(t) e^{-iH_0t/\hbar} \quad (10.4)$$

とも表せる。(10.1) と同等である (10.3) は、摂動項だけを含むため摂動展開に適した形式になる。 $H'$  が時間に依存しない場合でも、(1.49) と異なり  $c_m(t)$  は時間に依存する。これは状態を  $H$  ではなく  $H_0$  の固有関数で展開しているためである。 $H_0, H'(t)$  はエルミート演算子であるから

$$H_1^{\dagger}(t) = \left( e^{-iH_0t/\hbar} \right)^{\dagger} H'(t) \left( e^{iH_0t/\hbar} \right)^{\dagger} = e^{iH_0t/\hbar} H'(t) e^{-iH_0t/\hbar} = H'_1(t)$$

になり  $H'_1(t)$  もエルミート演算子である。 $t \neq t'$  のとき  $H'_1(t)$  と  $H'_1(t')$  は一般に非可換である。

(10.3) を時間積分すると

$$c_m(t) = c_m(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \sum_{n_1} \int_{t_0}^t dt_1 H'_{mn_1}(t_1) c_{n_1}(t_1) \quad (10.5)$$

積分内の  $c_{n_1}(t_1)$  にこれが満たす式

$$c_{n_1}(t_1) = c_{n_1}(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \sum_{n_2} \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H'_{n_1 n_2}(t_2) c_{n_2}(t_2)$$

を代入すると

$$c_m(t) = c_m(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \sum_{n_1} \int_{t_0}^t dt_1 H'_{mn_1}(t_1) c_{n_1}(t_0) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_{n_1 n_2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H'_{mn_1}(t_1) H'_{n_1 n_2}(t_2) c_{n_2}(t_2)$$

この操作を繰り返し行くと

$$c_m(t) = c_m(t_0) + c_m^{(1)}(t) + c_m^{(2)}(t) + \cdots + c_m^{(k)}(t) + \cdots \quad (10.6)$$

ただし

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{n_1} \int_{t_0}^t dt_1 H'_{mn_1}(t_1) c_{n_1}(t_0) \quad (10.7)$$

$$c_m^{(2)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_{n_1 n_2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H'_{mn_1}(t_1) H'_{n_1 n_2}(t_2) c_{n_2}(t_0) \quad (10.8)$$

$$c_m^{(k)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^k} \sum_{n_1 \cdots n_k} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k H'_{mn_1}(t_1) H'_{n_1 n_2}(t_2) \cdots H'_{n_{k-1} n_k}(t_k) c_{n_k}(t_0) \quad (10.9)$$

になる。時刻  $t = t_0$  の状態、つまり、任意の  $n$  について  $c_n(t_0)$  を与えれば、時刻  $t$  での係数  $c_n(t)$  が決まる。

(10.6) は  $H'$  についてのベキ展開である。 $H'$  が小さい場合、例えば、 $H'$  の 3 次以上を無視してもよい近似になる。初期状態が  $H_0$  の固有状態  $|i\rangle$  の場合、時刻  $t$  で状態  $|m\rangle$  を見出す確率  $P_{im}(t) = |\langle m|t\rangle|^2 = |c_m(t)|^2$  は  $c_n(t_0) = \delta_{in}$  より

$$P_{im} = \left| \delta_{im} + c_m^{(1)}(t) + c_m^{(2)}(t) + \cdots \right|^2 = \begin{cases} |c_m^{(1)}(t)|^2 + \cdots, & m \neq i \\ 1 + 2\text{Re}(c_i^{(2)}(t)) + \cdots, & m = i \end{cases} \quad (10.10)$$

である。 $c_i^{(1)}(t)$  は純虚数になるから (10.10) には現れない。 $c_m^{(1)}$  は 1 次であるが  $|c_m^{(1)}|^2$  は 2 次の効果である。2 次まで考慮すると  $|i\rangle$  から  $|m \neq i\rangle$  への遷移が起こる。**遷移確率**は

$$P_{im} \approx |c_m^{(1)}(t)|^2, \quad c_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 e^{i(E_m - E_i)t_1/\hbar} \langle m|H'(t_1)|i\rangle \quad (10.11)$$

これがよい近似になる条件は  $|c_m^{(1)}(t)| \ll 1$  である。

**問題 10.1** (10.3) より  $P(t) = \langle t|t\rangle = \sum_n |c_n(t)|^2$  が定数になることを示せ。摂動展開すると  $P(t) = P(t_0) + P_1(t) + P_2(t) + \cdots$ 、ただし

$$P_1(t) = 2 \sum_n \text{Re}(c_n^*(t_0) c_n^{(1)}(t)), \quad P_2(t) = 2 \sum_n \text{Re}(c_n^*(t_0) c_n^{(2)}(t)) + \sum_n |c_n^{(1)}(t)|^2 \quad (10.12)$$

になる。 $P_1(t) = P_2(t) = 0$  を示せ。

## 10.2 時間依存の表し方

(10.2) より

$$c_n(t) = e^{iE_n t/\hbar} \langle n | t \rangle = \langle n | e^{iH_0 t/\hbar} | t \rangle \quad (10.13)$$

これと (10.4) から

$$\begin{aligned} & \sum_{n_1 \cdots n_k} H'_{mn_1}(t_1) H'_{n_1 n_2}(t_2) \cdots H'_{n_{k-1} n_k}(t_k) c_{n_k}(t_0) \\ &= \sum_{n_1 \cdots n_k} \langle m | H'_1(t_1) | n_1 \rangle \langle n_1 | H'_1(t_2) | n_2 \rangle \cdots \langle n_{k-1} | H'_1(t_k) | n_k \rangle \langle n_k | e^{iH_0 t_0/\hbar} | t_0 \rangle \\ &= \langle m | H'_1(t_1) H'_1(t_2) \cdots H'_1(t_k) e^{iH_0 t_0/\hbar} | t_0 \rangle \end{aligned}$$

になる。ここで  $|n\rangle$  の完全性を表す (5.52) を用いた。(10.6) に代入すると

$$c_m(t) = \langle m | U_I(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} | t_0 \rangle \quad (10.14)$$

ただし

$$U_I(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H'_1(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H'_1(t_1) H'_1(t_2) + \cdots \quad (10.15)$$

$$\begin{aligned} & + \frac{1}{(i\hbar)^k} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k H'_1(t_1) H'_1(t_2) \cdots H'_1(t_k) + \cdots \\ &= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H'_1(t_1) U_I(t_1, t_0) \end{aligned} \quad (10.16)$$

である。これから  $U_I(t, t_0)$  は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = H'_1(t) U_I(t, t_0), \quad U_I(t_0, t_0) = 1 \quad (10.17)$$

を満たす。 $H'_1(t)$  はエルミート演算子であるから, (10.17) のエルミート共役は

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I^\dagger(t, t_0) = U_I^\dagger(t, t_0) H'_1(t) \quad (10.18)$$

になる。(10.13) と (10.14) から

$$\langle n | e^{iH_0 t/\hbar} | t \rangle = \langle n | U_I(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} | t_0 \rangle, \quad \therefore | t \rangle = e^{-iH_0 t/\hbar} U_I(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} | t_0 \rangle \quad (10.19)$$

$|t\rangle$  がシュレーディンガー方程式 (10.1) を満たすことから (10.17) を導ける。

(10.16) を  $t_0$  で微分すると

$$V(t, t_0) = H'_1(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H'_1(t_1) V(t_1, t_0), \quad V(t, t_0) \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial t_0} U_I(t, t_0)$$

である。(10.16) に右から  $H'_1(t_0)$  をかければ,  $U_I(t, t_0) H'_1(t_0)$  は同じ積分方程式を満たすから

$$V(t_0, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t_0, t) = U_I(t_0, t) H'_1(t) \quad (10.20)$$

ただし,  $t$  と  $t_0$  を入れ換えた。(10.20) と (10.18) は同じ 1 階の微分方程式である。 $U_I^\dagger(t, t_0)$  と  $U_I(t_0, t)$  は  $t = t_0$  のとき一致するから, 任意の  $t_0, t$  に対して

$$U_I^\dagger(t, t_0) = U_I(t_0, t) \quad (10.21)$$

である。(10.17), (10.20) より  $\partial(U_I(t, \tau)U_I(\tau, t_0))/\partial\tau = 0$  になるから, 合成則

$$U_I(t, \tau)U_I(\tau, t_0) = U_I(t, t_0)U_I(t_0, t_0) = U_I(t, t_0) \quad (10.22)$$

が成り立つ。したがって,  $U_I(t, t_0)U_I(t_0, t) = U_I(t_0, t)U_I(t, t_0) = 1$ , つまり

$$U_I(t, t_0)U_I^\dagger(t, t_0) = U_I^\dagger(t, t_0)U_I(t, t_0) = 1, \quad U_I(t, t_0) = U_I^\dagger(t_0, t) = U_I^{-1}(t_0, t) \quad (10.23)$$

$U_I(t, t_0)$  はユニタリ演算子である。 $U_I^\dagger U_I = 1$  は  $\langle t|t \rangle = \text{一定} = \langle t_0|t_0 \rangle$  に他ならない。

**問題 10.2**  $V(t, t_0) = U_I(t, t_0)U_I^\dagger(t, t_0)$  とする。(10.17) と (10.18) より

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( U_I^\dagger(t, t_0)U_I(t, t_0) \right) = 0, \quad \frac{\partial V(t, t_0)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H_I'(t), V(t, t_0)]$$

を示せ。第1式から  $U_I^\dagger(t, t_0)U_I(t, t_0) = 1$  になるが, 第2式から直ちに  $\partial V(t, t_0)/\partial t = 0$  とは言えない。 $n = 1, 2, \dots$  のとき  $\partial^n V(t, t_0)/\partial t^n \Big|_{t=t_0} = 0$  を示せ。これから  $V(t, t_0) = V(t_0, t_0) = 1$  である。

### 時間順序積

時刻  $t_1, \dots, t_k$  を大きい順に並べるとき,  $k!$  通りの並べ方がある。これを  $1, \dots, k$  の置換  $p$  で表して, **時間順序積**あるいは**T積**を

$$\begin{aligned} & T[H_I'(t_1)H_I'(t_2)\cdots H_I'(t_k)] \\ &= \sum_p \theta(t_{p_1} - t_{p_2})\theta(t_{p_2} - t_{p_3})\cdots\theta(t_{p_{k-1}} - t_{p_k}) H_I'(t_{p_1})H_I'(t_{p_2})\cdots H_I'(t_{p_k}) \end{aligned}$$

で定義する(置換については327ページ参照)。未来の演算子( $t$ が大きい演算子)を左側から順に並べた積である。 $t \neq t'$  のとき  $H_I'(t)$  と  $H_I'(t')$  は一般に非可換であるから, 積の順序を指定する。和は  $k!$  個の置換  $p$  について行う。例えば,  $k = 2$  のとき  $(p_1, p_2) = (1, 2), (2, 1)$  であり

$$T[H_I'(t_1)H_I'(t_2)] = \theta(t_1 - t_2)H_I'(t_1)H_I'(t_2) + \theta(t_2 - t_1)H_I'(t_2)H_I'(t_1)$$

$k = 3$  の場合  $(p_1, p_2, p_3) = (1, 2, 3), (1, 3, 2), (2, 1, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2), (3, 2, 1)$  の  $3! = 6$  通りあり, 具体的に書き下すのは煩雑である。 $t > t_0$  のとき

$$\int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_k T[H_I'(t_1)\cdots H_I'(t_k)] = \sum_p \int_{t_0}^t dt_{p_1} \int_{t_0}^{t_{p_1}} dt_{p_2} \cdots \int_{t_0}^{t_{p_{k-1}}} dt_{p_k} H_I'(t_{p_1})\cdots H_I'(t_{p_k})$$

であるが, 積分変数  $t_{p_i}$  を  $t_i$  に置き換えれば, 積分は置換  $p$  に依存せず

$$\int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_k T[H_I'(t_1)\cdots H_I'(t_k)] = k! \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k H_I'(t_1)\cdots H_I'(t_k)$$

になる。

$$T\left(\int_{t_0}^t dt' H_I'(t')\right)^k \equiv \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_k T[H_I'(t_1)\cdots H_I'(t_k)] \quad (10.24)$$

と簡略化して表す。 $t > t_0$  のとき, (10.15) は

$$U_I(t, t_0) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{1}{(i\hbar)^k} \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_k T[H_I'(t_1)\cdots H_I'(t_k)] = T \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_I'(t')\right) \quad (10.25)$$

にまとまる。T exp(⋯) はテイラー展開後, (10.24) により  $H'_I$  を時間順 (未来が左側) に並べる。 $U_I(t, t_0) = U_I^\dagger(t_0, t)$  であるから,  $t < t_0$  の場合  $U_I(t_0, t)$  に (10.25) を適用する。 $(T[\cdots])^\dagger$  は  $T[\cdots]$  とは演算子の並びが逆になる (問題 10.3 参照)。

(10.25) は次のようにしても示せる。 $n \rightarrow \infty$  として

$$U_m = U_I(t_m, t_0), \quad \text{ただし} \quad t_m = t_0 + m\Delta t, \quad \Delta t = \frac{t - t_0}{n}, \quad m = 0, 1, \dots, n$$

とする。(10.17) は

$$\frac{U_{m+1} - U_m}{\Delta t} = \frac{1}{i\hbar} H'_I(t_m) U_m, \quad \therefore \quad U_{m+1} = (1 + h_m) U_m = e^{h_m} U_m, \quad h_m = \frac{\Delta t}{i\hbar} H'_I(t_m)$$

になるから

$$U_I(t, t_0) = U_n = e^{h_{n-1}} U_{n-1} = e^{h_{n-1}} e^{h_{n-2}} U_{n-2} = e^{h_{n-1}} e^{h_{n-2}} \dots e^{h_0} \quad (10.26)$$

これは  $t, t_0$  の大小に無関係である。 $t_2 > t_1$  のとき  $T(A(t_1) + A(t_2))^k$  を展開すると,  $A(t_1)$  と  $A(t_2)$  が非可換であっても,  $T$  は単に  $A(t_2)$  を  $A(t_1)$  の左側に移動させるから  $T e^{A(t_1)+A(t_2)} = e^{A(t_2)} e^{A(t_1)}$  になる。したがって,  $t > t_0$  の場合  $t_{n-1} > t_{n-2} > \dots > t_0$  より

$$U_I(t, t_0) = e^{h_{n-1}} e^{h_{n-2}} \dots e^{h_0} = T \exp \left( \sum_{m=0}^{n-1} h_m \right) = T \exp \left( \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' H'_I(t') \right)$$

$t < t_0$  の場合, 逆順  $t_{n-1} < \dots < t_0$  になるが,  $h_m^\dagger = -h_m$  より

$$U_I^\dagger(t, t_0) = e^{-h_0} e^{-h_1} \dots e^{-h_{n-1}} = T \exp \left( -\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' H'_I(t') \right) = U_I(t_0, t)$$

である。(10.26) から  $U_I$  がユニタリ演算子であり合成則 (10.22) を満たすことも示せる。

**問題 10.3**  $t < t_0$  のとき

$$\int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_k \left( T[H'_I(t_1) \cdots H'_I(t_k)] \right)^\dagger = k! \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k H'_I(t_1) \cdots H'_I(t_k)$$

を示せ。なお,  $t < t_1 < t_0, t_1 < t_2 < t_0, \dots$  である。

**シュレーディンガー描像**

(10.19) から

$$|t\rangle = U_S(t, t_0) |t_0\rangle, \quad U_S(t, t_0) = e^{-iH_0 t/\hbar} U_I(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} \quad (10.27)$$

である。(10.22), (10.23) と同様に

$$U_S(t, \tau) U_S(\tau, t_0) = U_S(t, t_0), \quad U_S(t_0, t) = U_S^\dagger(t, t_0) = U_S^{-1}(t, t_0)$$

を満たす。

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_S(t, t_0) &= i\hbar \frac{\partial e^{-iH_0 t/\hbar}}{\partial t} U_I(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} + e^{-iH_0 t/\hbar} i\hbar \frac{\partial U_I(t, t_0)}{\partial t} e^{iH_0 t_0/\hbar} \\ &= H_0 e^{-iH_0 t/\hbar} U_I(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} + e^{-iH_0 t/\hbar} i\hbar \frac{\partial U_I(t, t_0)}{\partial t} e^{iH_0 t_0/\hbar} \end{aligned}$$

(10.17) より

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_S(t, t_0) = H_0 U_S(t, t_0) + H'(t) U_S(t, t_0) = H(t) U_S(t, t_0) \quad (10.28)$$



したがって、当然のことであるが、 $|t\rangle = U_S(t, t_0)|t_0\rangle$  はシュレーディンガー方程式 (10.1) の解である。  $H$  が時間に依存しない場合、 $U_S(t_0, t_0) = 1$  より  $U_S(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)H/\hbar}$  になる。

2つの状態  $|\alpha(t)\rangle = U_S(t, t_0)|\alpha_0\rangle$ ,  $|\beta(t)\rangle = U_S(t, t_0)|\beta_0\rangle$  を考える。演算子  $F_S(t)$  の行列要素

$$f_{\alpha\beta}(t) = \langle \alpha(t) | F_S(t) | \beta(t) \rangle$$

は、 $F_S$  が時間に依存しなくても、時間に依存する。系の時間発展が状態により記述される形式をシュレーディンガー描像またはシュレーディンガー表示という。これまでの時間発展の表し方である。

#### 相互作用描像 (ディラック描像)

(10.19) から

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha(t)\rangle_I, \quad |\alpha(t)\rangle_I = U_I(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} |\alpha_0\rangle$$

とおける。これを使うと

$$f_{\alpha\beta}(t) = {}_I\langle \alpha(t) | F_I(t) | \beta(t) \rangle_I, \quad F_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} F_S(t) e^{-iH_0 t/\hbar}$$

と表せる。(10.17) より

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\alpha(t)\rangle_I = H'_I(t) U_I(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} |\alpha_0\rangle = H'_I(t) |\alpha(t)\rangle_I \quad (10.29)$$

である。演算子  $F_I(t)$  は

$$i\hbar \frac{dF_I}{dt} = [F_I(t), H_0] + i\hbar (\partial_t F)_I, \quad \text{ただし} \quad (\partial_t F)_I \equiv e^{iH_0 t/\hbar} \frac{\partial F_S}{\partial t} e^{-iH_0 t/\hbar}$$

を満たす。状態  $|\alpha(t)\rangle_I$  は全ハミルトニアン  $H$  の代わりに  $H'_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} H'(t) e^{-iH_0 t/\hbar}$  により時間変化するから、 $H'_I(t)$  が小さい摂動の場合に便利な方法になる。演算子も時間に依存し  $H_0$  で時間変化する。この形式を相互作用描像 (ディラック描像) あるいは相互作用表示という。

$|\alpha(t)\rangle_I$  を  $H_0$  の固有関数  $|n\rangle$  で展開して

$$|\alpha(t)\rangle_I = \sum_n c_n(t) |n\rangle$$

とし (10.29) に代入すると

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} = \sum_n H'_{mn}(t) c_n(t), \quad H'_{mn}(t) = \langle m | H'_I(t) | n \rangle$$

になる。これは (10.3) である。前節では相互作用描像で状態の時間依存を求めたことになる。

**問題 10.4** (10.29) を形式的に積分して (10.19) を求めよ。

#### ハイゼンベルグ描像

$$f_{\alpha\beta}(t) = \langle \alpha_0 | F_H(t) | \beta_0 \rangle, \quad F_H(t) = U_S^\dagger(t, t_0) F_S(t) U_S(t, t_0)$$

とも表せる。状態は時間に依存しない。 $f_{\alpha\beta}(t)$  の時間依存性は演算子  $F_H(t)$  がもたらす。これをハイゼンベルグ描像またはハイゼンベルグ表示という。(10.28) より

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dF_H}{dt} &= i\hbar \frac{\partial U_S^\dagger(t, t_0)}{\partial t} F_S U_S(t, t_0) + U_S^\dagger(t, t_0) F_S i\hbar \frac{\partial U_S(t, t_0)}{\partial t} + i\hbar U_S^\dagger(t, t_0) \frac{\partial F_S}{\partial t} U_S(t, t_0) \\ &= -U_S^\dagger(t, t_0) H F_S U_S(t, t_0) + U_S^\dagger(t, t_0) F_S H U_S(t, t_0) + i\hbar (\partial_t F)_H \\ &= [F_H(t), H_H(t)] + i\hbar (\partial_t F)_H \end{aligned} \quad (10.30)$$

ただし

$$H_H(t) \equiv U_S^\dagger(t, t_0) H U_S(t, t_0), \quad (\partial_t F)_H \equiv U_S^\dagger(t, t_0) \frac{\partial F_S}{\partial t} U_S(t, t_0)$$

になる。これを**ハイゼンベルグ方程式**という。ハイゼンベルグ描像では、シュレーディンガー方程式 (10.1) の代わりに (10.30) が時間発展を記述する。

$H$  が時間に依存しない場合  $\partial H_H / \partial t = 0$  より  $i\hbar dH_H/dt = [H_H(t), H_H(t)] = 0$  になり  $H_H(t) = \text{一定} = H$  である。あるいは、この場合  $U_S(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)H/\hbar}$  である。 $U_S(t, t_0)$  と  $H$  は可換になるから  $H_H(t) = H$  である。一般には  $H(t)$  と  $U_S(t, t_0)$  が非可換のため  $H_H(t) \neq H(t)$  である。

3つの描像の特徴をまとめると、演算子  $F_S$  が時間に依存しない場合

	シュレーディンガー描像	相互作用描像	ハイゼンベルグ描像
状態	$H$ による時間変化	$H_I'(t)$ による時間変化	時間変化しない
演算子	時間変化しない	$H_0$ による時間変化	$H_H$ による時間変化

になる。状態、演算子は表示法に依存するが、行列要素  $f_{\alpha\beta}(t)$  は表示法に依らない。

### 10.3 ハイゼンベルグ方程式

$U_S(t) = U_S(t, t_0 = 0)$  とする。シュレーディンガー描像の演算子  $A, B, \dots$  の積は

$$U_S^\dagger(t) A B \dots U_S(t) = U_S^\dagger A U_S U_S^\dagger B U_S U_S^\dagger \dots U_S(t, t_0) = A_H(t) B_H(t) \dots$$

になる。 $A_H(t) = U_S^\dagger(t) A U_S(t)$  はハイゼンベルグ描像での演算子である。演算子の関数  $F(A, B, \dots)$  は  $A, B, \dots$  についてベキ展開すれば

$$U_S^\dagger(t) F(A, B, \dots) U_S(t) = F(A_H(t), B_H(t), \dots)$$

になる。

ハミルトニアンが

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{r}), \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla$$

の場合を考える。簡単のため

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_H(t) = U_S^\dagger(t) \mathbf{r} U_S(t), \quad \mathbf{p}(t) = \mathbf{p}_H(t) = U_S^\dagger(t) \mathbf{p} U_S(t)$$

とする。 $H(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  は時間に依存しないから  $U_S(t) = \exp(-iH(\mathbf{r}, \mathbf{p})t/\hbar)$  になり

$$H(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)) = U_S^\dagger(t) H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) U_S(t) = H(\mathbf{r}, \mathbf{p})$$

である。ただし  $\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)$  は時間に依存する。同時刻での交換関係は

$$[x_i(t), p_j(t)] = U_S^\dagger [x_i, p_j] U_S = i\hbar \delta_{ij}, \quad [x_i(t), x_j(t)] = [p_i(t), p_j(t)] = 0 \quad (10.31)$$

になる。(1.11) より

$$\begin{aligned} [p_i(t), x_i^2(t)] &= x_i(t) [p_i(t), x_i(t)] + [p_i(t), x_i(t)] x_i(t) = -2i\hbar x_i(t) \\ [p_i(t), x_i^3(t)] &= x_i(t) [p_i(t), x_i^2(t)] + [p_i(t), x_i(t)] x_i^2(t) = -3i\hbar x_i^2(t) \\ &\vdots \\ [p_i(t), x_i^n(t)] &= -i\hbar n x_i^{n-1}(t) = -i\hbar \frac{d}{dx_i(t)} x_i^n(t) \end{aligned}$$

一般に, 任意の関数  $F(\mathbf{r})$  に対して

$$[p_i(t), F(\mathbf{r}(t))] = -i\hbar \frac{\partial F(\mathbf{r}(t))}{\partial x_i(t)}, \quad \text{同様に} \quad [x_i(t), F(\mathbf{p}(t))] = +i\hbar \frac{\partial F(\mathbf{p}(t))}{\partial p_i(t)}$$

である。交換関係 (10.31) を用いただけで  $p_i(t) = -i\hbar \partial / \partial x_i(t)$  である必要はない。

ハイゼンベルグの運動方程式 (10.30) は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} x_i(t) &= \frac{1}{i\hbar} [x_i(t), H(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))] = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2M} [x_i(t), p_i^2(t)] = \frac{p_i(t)}{M} \\ \frac{d}{dt} p_i(t) &= \frac{1}{i\hbar} [p_i(t), V(\mathbf{r}(t))] = F_i(\mathbf{r}(t)), \quad \mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (10.32)$$

$\mathbf{F}(\mathbf{r})$  は古典力学での力である。ニュートンの運動方程式と同じであるが,  $\mathbf{r}(t)$  と  $\mathbf{p}(t)$  は交換関係 (10.31) を満たす演算子である。ハイゼンベルグ描像では, 状態  $|\psi\rangle$  は時間に依存しないから

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | \mathbf{r}(t) | \psi \rangle = \langle \psi | \frac{d\mathbf{r}}{dt} | \psi \rangle = \frac{1}{M} \langle \psi | \mathbf{p}(t) | \psi \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \psi | \mathbf{p}(t) | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{F}(\mathbf{r}(t)) | \psi \rangle$$

これはエーレンフェストの定理 (1.15) である。 $H$  は時間に依存しないから  $H(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$  の代わりに  $t=0$  での  $H(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  を用いても (10.32) は成り立つ。しかし, 異なる時刻での交換関係は, この時点では分らない。

1次元調和振動子  $V(x) = M\omega^2 x^2/2$  の場合

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{p(t)}{M}, \quad \frac{dp(t)}{dt} = -M\omega^2 x(t) \quad (10.33)$$

$\ddot{x}(t) = -\omega^2 x(t)$  になるから  $A, B$  を任意の演算子として

$$x(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t, \quad p(t) = M\omega(-A \sin \omega t + B \cos \omega t)$$

$t=0$  でシュレーディンガー描像の演算子になるには  $A=x, B=p/M\omega$  である。したがって

$$x(t) = x \cos \omega t + \frac{p}{M\omega} \sin \omega t, \quad p(t) = -M\omega x \sin \omega t + p \cos \omega t, \quad p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

になり古典力学の位置, 運動量と同じ時間依存性を示す。期待値をとれば (4.37), (4.39) を再現する。異なる時刻での交換関係は

$$\begin{aligned} [x(t), p(t')] &= [x \cos \omega t + \frac{p}{M\omega} \sin \omega t, -M\omega x \sin \omega t' + p \cos \omega t'] = i\hbar \cos \omega(t-t') \\ [x(t), x(t')] &= -\frac{i\hbar}{M\omega} \sin \omega(t-t'), \quad [p(t), p(t')] = i\hbar M\omega \sin \omega(t-t') \end{aligned}$$

になる。 $t=t'$  とすれば (10.31) である。

(4.54) を用いて  $x(t) = e^{iHt/\hbar} x e^{-iHt/\hbar}$  を直接求める。

$$x(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it/\hbar)^n}{n!} X_n, \quad \text{ただし} \quad X_n \equiv \underbrace{[H, [H, \dots, [H, x] \dots]]}_{n \text{ 個}}$$

である。 $q = p/(iM\omega)$  とすると

$$[H, x] = \hbar\omega q, \quad [H, q] = \hbar\omega x, \quad [H, [H, x]] = (\hbar\omega)^2 x$$

これから  $n$  が偶数のとき  $X_n = (\hbar\omega)^n x$ , 奇数のとき  $X_n = (\hbar\omega)^n q$  になるから

$$x(t) = x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\omega t)^{2k}}{(2k)!} + q \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\omega t)^{2k+1}}{(2k+1)!} = x \cos \omega t + \frac{p}{M\omega} \sin \omega t$$

である。問題 4.10 参照。

**問題 10.5**  $t=0$  でのハミルトニアンとの交換関係  $[x(t), H(x, p)]$  を求め (10.33) を示せ。

## 10.4 時間に依存しない摂動

$H'(t)$  が時間に依存しない  $H'(t) = V$  の場合, シュレーディンガー描像では

$$|t\rangle = \exp(-iHt/\hbar)|t=0\rangle = \exp(-iH_0t/\hbar - iVt/\hbar)|t=0\rangle$$

である。一般に  $H_0$  と  $V$  は非可換のため

$$\exp(-iH_0t/\hbar - iVt/\hbar) \neq \exp(-iH_0t/\hbar) \exp(-iVt/\hbar)$$

であるから,  $\exp(-iHt/\hbar)$  を  $V$  についてだけ展開することは困難である。 $H'(t) = V$  の場合でも, 10.1 の方法 (相互作用描像) を用いる。時間に依存しない摂動論については 250 ページ参照。

$t = 0$  で系が  $H_0$  の固有状態  $|i\rangle$  にあるとき, 時刻  $t$  で別の固有状態  $|m\rangle \neq |i\rangle$  に遷移する確率  $P_{im}(t)$  を求める。(10.11) より  $V$  の 2 次までの摂動では

$$P_{im}(t) \approx |c_m^{(1)}(t)|^2, \quad c_m^{(1)}(t) = \frac{V_{mi}}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{mi}t'} = \frac{V_{mi}}{i\hbar} \frac{\sin(\omega_{mi}t/2)}{\omega_{mi}/2} e^{i\omega_{mi}t/2} \quad (10.34)$$

ただし  $V_{\alpha\beta} = \langle \alpha | V | \beta \rangle$ ,  $\omega_{\alpha\beta} = (E_\alpha - E_\beta)/\hbar$  である。遷移確率  $P_{im}(t)$  は

$$P_{im}(t) = \frac{|V_{mi}|^2}{\hbar^2} \left( \frac{\sin(\omega_{mi}t/2)}{\omega_{mi}/2} \right)^2 = \frac{t^2}{\hbar^2} |V_{mi}|^2 g^2(\omega_{mi}t), \quad g(x) = \frac{\sin(x/2)}{x/2} \quad (10.35)$$

になる。 $g(0) = 1$  である。

$\omega_{mi} \neq 0$  ならば  $0 \leq P_{im}(t) \leq 4|V_{mi}|^2/(E_m - E_i)^2$  である。一方,  $|m\rangle \neq |i\rangle$  ではあるが  $\omega_{mi} = 0$  のとき  $P_{im}(t) = t^2|V_{mi}|^2/\hbar^2$  になるから, 摂動が小さくても時間が経過すれば  $P_{im} > 1$  になる。この場合,  $P_{im}(t) \approx |c_m^{(1)}(t)|^2$  の近似は全く無意味である。2 次以上の  $c_m^{(k)}(t)$  も無視できず, これらを考慮すれば  $P_{im}(t) < 1$  になる。

$E_i \neq E_m$  の遷移はエネルギー保存を破りそうである。ところで,  $H_0$  の固有状態  $|i\rangle$  は系のハミルトニアン  $H = H_0 + V$  の固有状態ではないから, エネルギーの分散は  $(\Delta E)^2 = \langle i | H^2 | i \rangle - \langle i | H | i \rangle^2 \neq 0$  である。このため  $E_i \neq E_m$  の遷移はエネルギー保存を破るわけではない。エネルギー期待値は一定で  $\langle t | H | t \rangle = E_i + \langle i | V | i \rangle$  になる。次のように考えてもよい。時間に依存しない摂動  $V$  を時刻  $t = 0$  で作用させ  $t = t_1 > 0$  で切ったとする。

$$H'(t) = \begin{cases} V, & 0 < t < t_1 \\ 0, & \text{上記以外} \end{cases} \quad (10.36)$$

である。この場合,  $t < 0$  または  $t > t_1$  では  $H = H_0$  であるから, 系のエネルギーを測定すれば, 状態は  $H_0$  の固有状態になる。 $|t < 0\rangle = e^{-iE_it/\hbar}|i\rangle$  のとき  $t > t_1$  でエネルギーを測定して  $|m\rangle$  になる確率は (10.35) で  $t = t_1$  とすればよい。 $H = H_0 + H'(t)$  は時間に依存するからエネルギー保存は成り立たず,  $E_m \neq E_i$  である状態  $|m\rangle$  への遷移は禁止されない。ただし, 以下で示すように,  $t_1$  が十分大きければ  $E_m \approx E_i$  の遷移が主に効く。

**問題 10.6** (10.34) より

$$|t\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_nt/\hbar} |n\rangle \approx e^{-iE_it/\hbar} \left( 1 + \frac{t}{i\hbar} V_{ii} \right) |i\rangle + \sum_{n \neq i} \frac{e^{-iE_it/\hbar} - e^{-iE_nt/\hbar}}{E_i - E_n} V_{ni} |n\rangle$$

である。 $V$  の 1 次では, これが  $i\hbar d|t\rangle/dt = (H_0 + V)|t\rangle$  を満たすことを示せ。

## フェルミの黄金律

右図に  $g^2(x)$  を示す。これから (10.35) の遷移確率  $P_{im}(t)$  では

$$|\omega_{mi}| = |(E_m - E_i)/\hbar| \lesssim 2\pi/t \quad (10.37)$$

を満たす  $|m\rangle \neq |i\rangle$  への遷移が重要になる。 $t$  は十分大きく  $\omega_{mi} \approx 0$  の場合を扱うが,  $P_{im}(\omega_{im} \approx 0) = |V_{mi}|^2 t^2 / \hbar^2 \ll 1$  であり, 2 次までの摂動がよい近似で成り立つとする。

ここで, 終状態  $|m\rangle$  が連続状態を形成する場合を考える。この場合, 興味ある遷移確率は  $E_m \approx E_i$  である特定の  $|m\rangle$  ではなく

$$E_i - \delta E \leq E_m \leq E_i + \delta E$$

内にある一群の  $|m\rangle$  への遷移確率であり, このとき単位時間当たりの遷移確率を定めることができる。エネルギーが  $E$  と  $E + dE$  の間にある状態数を  $\rho(E) dE$  とする。 $\rho(E)$  を状態密度という (259 ページ)。求めたい遷移確率  $P$  は

$$P = \int_{E_i - \delta E}^{E_i + \delta E} dE_m \rho(E_m) P_{im}(t) = \frac{t^2}{\hbar^2} \int_{E_i - \delta E}^{E_i + \delta E} dE_m \rho(E_m) |V_{mi}|^2 g^2(\omega_{mi}t)$$

である。 $t$  が十分大きく  $\delta E/\hbar \gg 2\pi/t$  ならば, 積分の寄与は積分領域に比べて非常に狭い領域 (10.37) からくる。このとき,  $|V_{mi}|^2$  と  $\rho(E_m)$  を  $E_m = E_i$  で評価し積分領域内で一定と見なせば

$$P = \frac{t^2}{\hbar^2} \left( |V_{mi}|^2 \rho(E_m) \right)_{E_m=E_i} I, \quad I = \int_{E_i - \delta E}^{E_i + \delta E} dE_m g^2(\omega_{mi}t)$$

になる。 $x = \omega_{mi}t/2 = (E_m - E_i)t/2\hbar$  とすると

$$I = \frac{2\hbar}{t} \int_{-t\delta E/2\hbar}^{t\delta E/2\hbar} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} \approx \frac{2\hbar}{t} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2}$$

ここで,  $\delta E/\hbar \gg 2\pi/t$ , つまり  $t\delta E/2\hbar \gg \pi$  であるから, 積分範囲を  $\pm\infty$  に置き換えた。部分積分を行い (16.24) を用いると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = \left[ -\frac{\sin^2 x}{x} \right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin 2x}{x} = \pi, \quad \therefore I = \frac{2\pi\hbar}{t}$$

したがって, 単位時間当たりの遷移確率  $w = P/t$  は

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \left( |V_{mi}|^2 \rho(E_m) \right)_{E_m=E_i} \quad (10.38)$$

になる。これを**フェルミの黄金律**という。以下のようにすると簡潔に導ける。

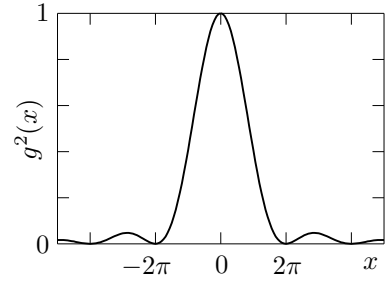
$$D(\omega, t) = \frac{t}{2\pi} g^2(\omega t) = \frac{t}{2\pi} \left( \frac{\sin(\omega t/2)}{\omega t/2} \right)^2$$

とする。

$$D(0, t) = \frac{t}{2\pi} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \infty, \quad D(\omega \neq 0, t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\omega D(\omega, t) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = 1$$

であるから

$$\frac{t}{2\pi} g^2(\omega t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \delta(\omega) \quad (10.39)$$



になる。(10.35) より, 1つの終状態  $|m\rangle$  への単位時間当たりの遷移確率  $w_{i \rightarrow m} = P_{im}(t)/t$  は

$$w_{i \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{mi}|^2 \frac{t}{2\pi} g^2(\omega_{mi}t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{mi}|^2 \delta(\omega_{mi}) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mi}|^2 \delta(E_m - E_i) \quad (10.40)$$

ここで  $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$  を使った。これから

$$w = \int dE_m \rho(E_m) w_{i \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \left( |V_{mi}|^2 \rho(E_m) \right)_{E_m=E_i}$$

になり (10.38) を得る。

(10.37) より遷移は, エネルギーが  $E_i$  を中心に幅  $\Delta E \lesssim 2\pi\hbar/t$  内の状態に対して起こる。この関係は時間・エネルギーの不確定性 (1.70) とは不等号の向きが逆であり別のものである。(1.70) での  $\Delta E$  はある時刻での状態におけるエネルギーの分散である。ここでの  $\Delta E$  は  $t$  だけ異なる2つの時刻での測定したエネルギー差であり, (10.36) のように摂動  $V$  が不連続的に作用したことに起因する (252 ページ参照)。不連続的变化は断熱因子を導入して回避できる。

### 断熱因子

$$H'(t) = V e^{-\varepsilon|t|}, \quad \varepsilon \rightarrow +0$$

とする。始状態 ( $t \rightarrow -\infty$ ) と終状態 ( $t \rightarrow +\infty$ ) では  $H' = 0$  であるが, 有限の時間では  $H'(t) = V$  になる。 $e^{-\varepsilon|t|}$  を断熱因子という。 $|t \rightarrow -\infty\rangle = |i\rangle$  のとき  $t \rightarrow +\infty$  では (16.16) より

$$c_m^{(1)}(\infty) = \frac{V_{mi}}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{mi}t - \varepsilon|t|} = \frac{2\pi}{i\hbar} V_{mi} \delta_\varepsilon(\omega_{mi}), \quad \delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow +0} \delta(x) \quad (10.41)$$

になる。これから  $\varepsilon \rightarrow +0$  のとき

$$|c_m^{(1)}(\infty)|^2 = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |V_{mi}|^2 (\delta(\omega_{mi}))^2$$

デルタ関数の2乗は無意味ではあるが  $t_0 \rightarrow -\infty, t_1 \rightarrow +\infty$  とすると

$$\delta(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{t_0}^{t_1} dt e^{i\omega t}, \quad \therefore \delta(0) = \frac{1}{2\pi} \int_{t_0}^{t_1} dt = \frac{t_1 - t_0}{2\pi}$$

であるから

$$(\delta(\omega))^2 = \delta(0) \delta(\omega) = \frac{t_1 - t_0}{2\pi} \delta(\omega) \quad (10.42)$$

単位時間当たりの遷移確率  $w_{i \rightarrow m}$  は

$$w_{i \rightarrow m} = \frac{|c_m^{(1)}(\infty)|^2}{t_1 - t_0} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{mi}|^2 \delta(\omega_{mi}) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mi}|^2 \delta(E_m - E_i)$$

これは (10.40) である。

### ボルン近似

ボルン近似については 271 ページで扱うが, ここではフェルミの黄金律 (10.38) を適用して求める。ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  による粒子の散乱を考える。ハミルトニアンは

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}), \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2$$

である。平面波  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} / (2\pi)^{3/2}$  を  $|\mathbf{k}\rangle$  で表すことにすると

$$H_0 |\mathbf{k}\rangle = E_k |\mathbf{k}\rangle, \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}, \quad \langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$

$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k} \rangle = \infty$  で 1 に規格化されていないが, 散乱を扱う場合, 入射流束に対する散乱流束の比を求めればよいので, 規格化は気にする必要はない。始状態を  $|\mathbf{k}_i\rangle$ , 終状態を  $|\mathbf{k}_f\rangle$  とすると, 単位時間当たりの遷移確率は  $\mathbf{k}_f \neq \mathbf{k}_i$  のとき

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}_f | V | \mathbf{k}_i \rangle|^2 \rho = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^6} |\mathcal{V}(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f)|^2 \rho, \quad \mathcal{V}(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r})$$

ただし  $E_m = E_i$  より  $|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f|$  である。 $\rho$  は単位エネルギー当たりの状態数であるが, (10.65) より単位エネルギー,  $\mathbf{k}$  の単位立体角当たりでは  $\rho = Mk/\hbar^2$  になる。 $\mathbf{k}_f$  の方向が立体角  $(\Omega, \Omega + d\Omega)$  に散乱される単位時間当たりの遷移確率を  $\tilde{w} d\Omega$  とすると

$$\tilde{w} d\Omega = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^6} |\mathcal{V}(\mathbf{q})|^2 \frac{Mk_f}{\hbar^2} d\Omega, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$$

になる。入射粒子の確率流  $\mathbf{J}$  は (1.6) から

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{M} \frac{1}{(2\pi)^3} \text{Im} \left( e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \nabla e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \right) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \mathbf{k}_i}{M}$$

であり, 単位時間, 単位面積あたり  $|\mathbf{J}|$  個の粒子が入射すると解釈できる。したがって, 単位時間に 1 個の粒子が入射したときの  $\tilde{w}$ , つまり, 微分断面積  $d\sigma/d\Omega$  は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^3 \frac{M}{\hbar k_i} \tilde{w} = \left( \frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \frac{k_f}{k_i} |\mathcal{V}(\mathbf{q})|^2 = \left( \frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |\mathcal{V}(\mathbf{q})|^2 \quad (10.43)$$

になる。微分断面積の定義は 267 ページを見よ。

### 時間に依存しない摂動論

時間に依存しない摂動論を用いて遷移確率を求める。 $H = H_0 + V$  の固有状態を  $|\tilde{n}\rangle$ , 固有値を  $W_n$  とすると,  $|t\rangle$  は (1.49) より

$$|t\rangle = \sum_n b_n e^{-iW_n t/\hbar} |\tilde{n}\rangle$$

と展開できる。この場合  $b_n$  は時間に依存しない定数である。縮退がない場合, 時間に依存しない摂動で 1 次まで考慮すると

$$|t\rangle = \sum_n b_n e^{-iW_n t/\hbar} (|n\rangle + |n^{(1)}\rangle)$$

ただし (8.18) より

$$W_n = E_n + V_{nn}, \quad |n^{(1)}\rangle = \sum_{n' \neq n} |n'\rangle \frac{V_{n'n}}{E_n - E_{n'}}, \quad V_{mn} = \langle m | V | n \rangle$$

である。 $b_n$  を  $V$  の次数で展開して  $b_n = b_n^{(0)} + b_n^{(1)} + \dots$  とすると

$$\begin{aligned} |t\rangle &= \sum_n e^{-iW_n t/\hbar} (b_n^{(0)} + b_n^{(1)} + \dots) (|n\rangle + |n^{(1)}\rangle) \\ &= \sum_n e^{-iW_n t/\hbar} (b_n^{(0)} |n\rangle + b_n^{(1)} |n\rangle + b_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle) + V \text{ の 2 次以上} \end{aligned}$$

したがって

$$\langle m | t \rangle = e^{-iW_m t/\hbar} (b_m^{(0)} + b_m^{(1)}) + \sum_n e^{-iW_n t/\hbar} b_n^{(0)} \langle m | n^{(1)} \rangle \quad (10.44)$$

$t = 0$  とすると

$$\delta_{mi} = b_m^{(0)} + b_m^{(1)} + \sum_n b_n^{(0)} \langle m | n^{(1)} \rangle$$

になるから、摂動の各次数で成り立つためには

$$b_m^{(0)} = \delta_{mi}, \quad b_m^{(1)} + \sum_n b_n^{(0)} \langle m | n^{(1)} \rangle = 0, \quad \therefore \quad b_m^{(1)} = -\langle m | i^{(1)} \rangle$$

(10.44) に代入すると

$$\begin{aligned} \langle m | t \rangle &= e^{-iW_i t/\hbar} \delta_{mi} + \left( e^{-iW_i t/\hbar} - e^{-iW_m t/\hbar} \right) \langle m | i^{(1)} \rangle \\ &= e^{-iE_i t/\hbar} \left( 1 - \frac{it}{\hbar} V_{ii} \right) \delta_{mi} + \left( e^{-iE_i t/\hbar} - e^{-iE_m t/\hbar} \right) \langle m | i^{(1)} \rangle + V \text{ の 2 次以上} \end{aligned}$$

これから  $m \neq i$  のとき

$$\langle m | t \rangle = \frac{e^{-iE_i t/\hbar} - e^{-iE_m t/\hbar}}{E_i - E_m} V_{mi} = -e^{-iE_m t/\hbar} \frac{e^{i\omega_{mi} t} - 1}{\hbar\omega_{mi}} V_{mi} = e^{-iE_m t/\hbar} c_m^{(1)}(t)$$

$m = i$  のとき  $\langle i | i^{(1)} \rangle = 0$  であるから

$$\langle m | t \rangle = e^{-iE_i t/\hbar} \left( 1 - \frac{it}{\hbar} V_{ii} \right) = e^{-iE_i t/\hbar} \left( 1 + c_i^{(1)}(t) \right)$$

になり (10.34) を再現する。

**問題 10.7** 時間に依存しない摂動で 2 次まで考慮すると

$$|t\rangle = \sum_n b_n e^{-iW_n t/\hbar} \left( |n\rangle + |n^{(1)}\rangle + |n^{(2)}\rangle - Z_n |n\rangle \right)$$

ただし, (8.32) より

$$\begin{aligned} W_n &= E_n + V_{nn} + \sum_{n' \neq n} \frac{|V_{nn'}|^2}{E_n - E_{n'}}, \quad Z_n = \frac{1}{2} \sum_{n' \neq n} \frac{|V_{nn'}|^2}{(E_n - E_{n'})^2} \\ |n^{(2)}\rangle &= \sum_{n' \neq n} \sum_{n'' \neq n} |n'\rangle \frac{V_{n'n''} V_{n''n}}{(E_n - E_{n'})(E_n - E_{n''})} - \sum_{n' \neq n} |n'\rangle \frac{V_{n'n} V_{nn}}{(E_n - E_{n'})^2} \end{aligned}$$

である。

$$\begin{aligned} \langle m | t \rangle &= e^{-iW_i t/\hbar} \delta_{mi} + \left( e^{-iW_i t/\hbar} - e^{-iW_m t/\hbar} \right) \left( \langle m | i^{(1)} \rangle + \langle m | i^{(2)} \rangle \right) \\ &\quad + \sum_n \left( e^{-iW_m t/\hbar} - e^{-iW_n t/\hbar} \right) \langle m | n^{(1)} \rangle \langle n | i^{(1)} \rangle \end{aligned}$$

を示せ。また, (10.8) から  $c_m^{(2)}(t)$  を求め  $\langle m | t \rangle = e^{-iE_m t/\hbar} \left( \delta_{mi} + c_m^{(1)}(t) + c_m^{(2)}(t) \right)$  が上式に一致することを確かめよ。ただし,  $V$  の 3 次以上は無視する。

## 10.5 周期的摂動

周期的な時間依存性をもつ摂動  $H'(t) = V e^{-i\omega_0 t} + V^\dagger e^{i\omega_0 t}$  を考える。演算子  $V$  は時間に依存しないとする。(10.34) と同様に,  $|t=0\rangle = |i\rangle$  のとき時刻  $t$  では

$$\begin{aligned} c_m^{(1)}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{mi} t'} \langle m | \left( V e^{-i\omega_0 t'} + V^\dagger e^{i\omega_0 t'} \right) | i \rangle \\ &= \frac{t}{i\hbar} \left( V_{mi} g((\omega_{mi} - \omega_0)t) e^{i(\omega_{mi} - \omega_0)t/2} + V_{im}^* g((\omega_{mi} + \omega_0)t) e^{i(\omega_{mi} + \omega_0)t/2} \right) \end{aligned} \quad (10.45)$$



になる。ただし  $g(x) = \sin(x/2)/(x/2)$  である。これから

$$|c_m^{(1)}(t)|^2 = \frac{t^2}{\hbar^2} \left[ |V_{mi}|^2 g^2((\omega_{mi} - \omega_0)t) + |V_{im}|^2 g^2((\omega_{mi} + \omega_0)t) + 2\text{Re}(V_{mi}V_{im}e^{-i\omega_0 t}) g((\omega_{mi} - \omega_0)t)g((\omega_{mi} + \omega_0)t) \right] \quad (10.46)$$

である。 $V$  がエルミート演算子の場合、 $|\hbar c_m^{(1)}(t)/V_{mi}|^2$  を  $\omega_{mi}$  の関数として右図に示す。 $\longleftrightarrow$  は幅  $2\pi/t$  を表し、細い曲線は (10.46) の右辺第 3 項を無視した場合である。 $t$  が十分大きいとき、 $c_m^{(1)}(t)$  に重要な寄与をするのは  $\omega_{mi} \approx \pm\omega_0$ 、つまり  $E_m \approx E_i \pm \hbar\omega_0$  の状態である。 $2\pi/t \ll \omega_0$  の場合、第 3 項は無視できるから、 $w_{i \rightarrow m} = |c_m^{(1)}(t)|^2/t$  は

$$w_{i \rightarrow m} \approx \frac{|V_{mi}|^2 t}{\hbar^2} g^2((\omega_{mi} - \omega_0)t) + \frac{|V_{im}|^2 t}{\hbar^2} g^2((\omega_{mi} + \omega_0)t)$$

になる。(10.39) より

$$w_{i \rightarrow m} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{\hbar} \left( |V_{mi}|^2 \delta(E_m - E_i - \hbar\omega_0) + |V_{im}|^2 \delta(E_m - E_i + \hbar\omega_0) \right) \quad (10.47)$$

単位時間当たりの遷移確率  $w$  は

$$w = \int dE_m \rho(E_m) w_{i \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \left( |V_{mi}|^2 \rho(E_m) \right)_{E_m = E_i \pm \hbar\omega_0} \quad (10.48)$$

$E_m = E_i + \hbar\omega_0$  は原子中の電子がエネルギー  $\hbar\omega_0$  の光子を吸収して状態  $|i\rangle$  から  $|m\rangle$  に遷移することに相当する。逆に、 $E_m = E_i - \hbar\omega_0$  は電子がエネルギー  $\hbar\omega_0$  の光子を放出する遷移である。

断熱因子を導入して

$$H'(t) = (V e^{-i\omega_0 t} + V^\dagger e^{i\omega_0 t}) e^{-\varepsilon|t|}, \quad \varepsilon \rightarrow +0$$

とする。 $|t \rightarrow -\infty\rangle = |i\rangle$  の場合  $t \rightarrow +\infty$  では、(10.41) と同様にして

$$\begin{aligned} c_m^{(1)}(\infty) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{mi}t - \varepsilon|t|} \langle m | (V e^{-i\omega_0 t} + V^\dagger e^{i\omega_0 t}) | i \rangle \\ &\xrightarrow{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{2\pi}{i\hbar} \left( V_{mi} \delta(\omega_{mi} - \omega_0) + V_{im}^* \delta(\omega_{mi} + \omega_0) \right) \end{aligned}$$

になるから

$$|c_m^{(1)}(\infty)|^2 = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \left( |V_{mi}|^2 \delta(\omega_{mi} - \omega_0)^2 + |V_{im}|^2 \delta(\omega_{mi} + \omega_0)^2 \right)$$

である。デルタ関数の 2 乗に対して (10.42) を用いれば  $w_{i \rightarrow m}$  として (10.47) が求まる。

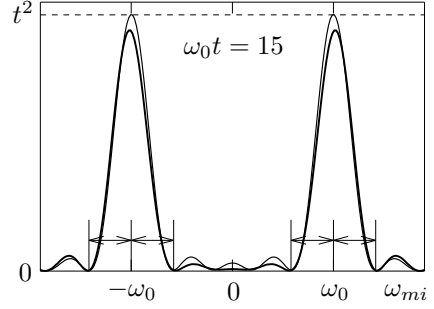
### エネルギーの不確定性

(10.36) と同様に ( $t - t_1/2$  を  $t$  と置き直すと)

$$H'(t) = \begin{cases} V e^{-i\omega_0 t} + V^\dagger e^{i\omega_0 t}, & |t| < t_1/2 \\ 0, & \text{上記以外} \end{cases}$$

の摂動が作用した場合、 $t > t_1/2$  で  $|m\rangle$  になる確率は (10.46) で  $t = t_1$  とすればよい。

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} H'(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-t_1/2}^{t_1/2} dt e^{i\omega t} (V e^{-i\omega_0 t} + V^\dagger e^{i\omega_0 t}) \\ &= \frac{t_1 V}{2\pi} g((\omega - \omega_0)t_1) + \frac{t_1 V^\dagger}{2\pi} g((\omega + \omega_0)t_1) \end{aligned} \quad (10.49)$$



であるから、フーリエ逆変換すれば任意の時刻で

$$H'(t) = \frac{t_1 V}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} g((\omega - \omega_0)t_1) + \frac{t_1 V^\dagger}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} g((\omega + \omega_0)t_1)$$

と表せる。 $H'(t)$  は純粋な  $\omega = \pm\omega_0$  の周期的摂動ではなく、主に  $|\omega \mp \omega_0| \lesssim 2\pi/t_1$  である角振動数  $\omega$  の周期的摂動の重ね合わせである。各々の  $\omega$  に対して  $E_m = E_i \pm \hbar\omega$  である  $|m\rangle$  に遷移するから、 $|\omega_{mi} \mp \omega_0| \lesssim 2\pi/t_1$  になる。したがって、 $\omega_{mi} \neq \pm\omega_0$  の遷移は粒子・光子系のエネルギー保存を破るわけではない。不連続的に  $\omega = \pm\omega_0$  の摂動を作用させた結果  $\omega = \pm\omega_0$  以外の成分が混入し、一見、エネルギー保存を破る  $\omega_{mi} \neq \pm\omega_0$  の遷移が起こる。遷移エネルギーの分散は、時間・エネルギーの不確定性 (1.70) ではない。

$t_1 \rightarrow \infty$  のとき (10.49) は  $\delta(\omega - \omega_0)V + \delta(\omega + \omega_0)V^\dagger$  になるから  $E_m = E_i \pm \hbar\omega_0$  の遷移だけ可能になる。なお、時間に依存しない摂動 (10.36) の場合  $\omega_0 = 0$  とすればよい。

**問題 10.8** (5.94) のハミルトニアン  $H$  は  $H_0 = \hbar\omega_0\sigma_z$  とすると

$$H = H_0 + H'(t), \quad H'(t) = V e^{i\omega t} + V^\dagger e^{-i\omega t}, \quad V = \frac{\hbar\omega_1}{2} (\sigma_x + i\sigma_y)$$

と表せる。 $H'(t)$  を摂動として扱う。(10.45) よりスピンの向きが逆転する確率  $P_-(t)$  を求め、正確な結果 (5.97) と比較せよ。

### 電離確率

水素型原子に電場  $\mathbf{E}(t) = \varepsilon_0 \mathbf{n} \cos \omega t$  を作用させる。 $\mathbf{n}$  は電場の方向を表す単位ベクトルである。電子のハミルトニアン  $H = H_0 + H'(t)$  は

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 - \frac{Z\alpha\hbar c}{r}, \quad H' = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} = V e^{-i\omega t} + V e^{i\omega t}, \quad V = e\varepsilon_0 \mathbf{n} \cdot \mathbf{r} / 2$$

である。基底状態の電子が、電場により正エネルギー状態に遷移し原子が電離する確率を求める。(10.48) で  $E_m = E_i + \hbar\omega$  の場合である。ただし

$$E_m = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}, \quad E_i = -\frac{(Z\alpha)^2 M c^2}{2}$$

である。303 ページで示すように、クーロン場中の正エネルギー状態はかなり複雑になる。ここでは、簡単のため、正エネルギー状態を平面波  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} / (2\pi)^{3/2}$  で近似する。始状態の波動関数  $\psi_i(\mathbf{r})$  は (6.37) より

$$\psi_i(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi_{10}(r)}{r} = \frac{1}{\sqrt{\pi} a^{3/2}} e^{-r/a}, \quad a = \frac{\hbar}{ZMc\alpha}$$

である。 $V_{mi} = \langle m | V | i \rangle$  に対応するものは

$$\langle \mathbf{k} | V | i \rangle = \frac{e\varepsilon_0}{4\sqrt{2}\pi^2 a^{3/2}} \int d^3r \mathbf{n} \cdot \mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - r/a} = \frac{e\varepsilon_0}{4\sqrt{2}\pi^2 a^{3/2}} i\mathbf{n} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \int d^3r e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - r/a}$$

になる。積分を行えば

$$\langle \mathbf{k} | V | i \rangle = \frac{e\varepsilon_0}{4\sqrt{2}\pi^2 a^{3/2}} i\mathbf{n} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \frac{8\pi a^3}{(1 + a^2 k^2)^2} = -i \frac{4\sqrt{2}}{\pi} e\varepsilon_0 \frac{a^{7/2}}{(1 + a^2 k^2)^3} \mathbf{n} \cdot \mathbf{k}$$

(10.43) と同様にして、 $\mathbf{k}$  が  $(\Omega, \Omega + d\Omega)$  方向の電子を単位時間あたりに放出する確率  $\tilde{w} d\Omega$  は

$$\tilde{w} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k} | V | i \rangle|^2 \frac{Mk}{\hbar^2} = \frac{64(e\varepsilon_0)^2}{\pi\hbar^3} \frac{Mk^3 a^7}{(1 + a^2 k^2)^6} \cos^2 \theta$$

になる。ただし  $\theta$  は  $\mathbf{k}$  と電場  $\mathbf{E}$  のなす角である。

## 10.6 強制振動

角振動数  $\omega_0$  の調和振動子に外力  $f(t)$  が作用する系を考える。 $f(t)$  は与えられた実関数である。

### 古典力学

運動方程式  $M\ddot{x} = -M\omega_0^2 x + f(t)$  は  $q(t) = Me^{i\omega_0 t}(\dot{x} - i\omega_0 x)$  とすると  $\dot{q} = e^{i\omega_0 t} f(t)$  になるから

$$q(t) = q(0) + \sqrt{2M\hbar\omega_0} F(t), \quad F(t) = \frac{1}{\sqrt{2M\hbar\omega_0}} \int_0^t d\tau e^{i\omega_0 \tau} f(\tau) \quad (10.50)$$

$\omega_0 x + i\dot{x} = iq(t)e^{-i\omega_0 t}/M$  より

$$\begin{aligned} x(t) &= \frac{1}{M\omega_0} \text{Re}(iq(t)e^{-i\omega_0 t}) = \text{Re}\left((x(0) + i\dot{x}(0)/\omega_0)e^{-i\omega_0 t}\right) + \sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega_0}} \text{Re}(iF(t)e^{-i\omega_0 t}) \\ &= x(0) \cos \omega_0 t + \frac{\dot{x}(0)}{\omega_0} \sin \omega_0 t + \frac{1}{M\omega_0} \int_0^t d\tau f(\tau) \sin \omega_0(t - \tau) \end{aligned} \quad (10.51)$$

である。 $\hbar\omega_0$  を単位とした調和振動子のエネルギー  $\varepsilon(t)$  は

$$\varepsilon(t) = \frac{1}{\hbar\omega_0} \frac{M}{2} (\dot{x}^2 + \omega_0^2 x^2) = \frac{|q|^2}{2M\hbar\omega_0} = \varepsilon_0 + |F(t)|^2 + 2\sqrt{\varepsilon_0} |F(t)| \cos \phi(t) \quad (10.52)$$

ただし,  $\varepsilon_0 = \varepsilon(0)$ ,  $q(0)^* F(t) = |q(0)F(t)|e^{i\phi(t)}$  とした。これから

$$\varepsilon_-(t) \leq \varepsilon(t) \leq \varepsilon_+(t), \quad \varepsilon_{\pm}(t) = (\sqrt{\varepsilon_0} \pm |F(t)|)^2$$

である。エネルギーを区間  $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$  に見出す確率を  $P_{\text{cl}}(\varepsilon) d\varepsilon$  とする。 $\phi(t)$  が  $0 \leq \phi \leq \pi$  で一様分布ならば

$$P_{\text{cl}}(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{|d\phi|}{\pi} = \frac{d\varepsilon}{\pi |d\varepsilon/d\phi|} = \frac{d\varepsilon}{2\pi\sqrt{\varepsilon_0} |F(t)| |\sin \phi|}$$

になるから

$$P_{\text{cl}}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \left( 4\varepsilon_0 |F(t)|^2 - (\varepsilon - \varepsilon_0 - |F(t)|^2)^2 \right)^{-1/2}, \quad \varepsilon_- \leq \varepsilon \leq \varepsilon_+ \quad (10.53)$$

である。

### 量子力学

ハミルトニアンは

$$H = H_0 + H'(t), \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{M\omega_0^2}{2} x^2, \quad H'(t) = -f(t)x$$

である。(4.10) で定義した生成・消滅演算子  $a^\dagger, a$  で表すと

$$H_0 = \hbar\omega_0 \left( a^\dagger a + 1/2 \right), \quad H'(t) = -\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}} f(t) (a^\dagger + a)$$

になる。 $U_0(t) = e^{-iH_0 t/\hbar}$  として  $A(t) = U_0^\dagger(t) a^\dagger U_0(t)$  とすると

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar} U_0^\dagger [H_0, a^\dagger] U_0 = i\omega_0 U_0^\dagger a^\dagger U_0 = i\omega_0 A, \quad \therefore A(t) = e^{i\omega_0 t} A(0)$$

$A(0) = a^\dagger$  より

$$U_0^\dagger(t) a^\dagger U_0(t) = e^{i\omega_0 t} a^\dagger, \quad U_0^\dagger(t) a U_0(t) = e^{-i\omega_0 t} a \quad (10.54)$$

である。これから  $H'_I(t) = U_0^\dagger(t)H'(t)U_0(t)$  は (10.50) の  $F(t)$  を用いて

$$H'_I(t) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2M\hbar\omega_0}}\left(e^{i\omega_0 t}f(t)a^\dagger + e^{-i\omega_0 t}f(t)a\right) = -\hbar\left(\frac{dF}{dt}a^\dagger + \frac{dF^*}{dt}a\right) \quad (10.55)$$

になる。相互作用描像での状態  $|t\rangle_I = U_0^\dagger(t)|t\rangle$  は (10.29)

$$\frac{d}{dt}|t\rangle_I = \frac{1}{i\hbar}H'_I(t)|t\rangle_I = i\left(\frac{dF}{dt}a^\dagger + \frac{dF^*}{dt}a\right)|t\rangle_I$$

で決まる。

$$\left[\frac{dF}{dt}a^\dagger + \frac{dF^*}{dt}a, Fa^\dagger + F^*a\right] = \frac{dF^*}{dt}F - F^*\frac{dF}{dt} \neq 0$$

より  $|t\rangle_I = e^{iFa^\dagger + iF^*a}|t=0\rangle_I$  ではない。  $|t\rangle_a = e^{-iF(t)a^\dagger}|t\rangle_I$  とおくと

$$\frac{d}{dt}|t\rangle_a = e^{-iFa^\dagger}\left(-i\frac{dF}{dt}a^\dagger + \frac{d}{dt}\right)|t\rangle_I = e^{-iFa^\dagger}i\frac{dF^*}{dt}a|t\rangle_I = i\frac{dF^*}{dt}e^{-iFa^\dagger}a e^{iFa^\dagger}|t\rangle_a$$

$A = -iFa^\dagger$ ,  $B = a$  とすると  $[A, B] = iF$ ,  $[A, [A, B]] = 0$  であるから (4.53) より

$$e^{-iFa^\dagger}a e^{iFa^\dagger} = a + iF, \quad \therefore \quad \frac{d}{dt}|t\rangle_a = i\frac{dF^*}{dt}(a + iF(t))|t\rangle_a$$

右辺の係数は演算子としては  $a$  だけ含むから積分できて

$$|t\rangle_a = \exp\left(i\int_0^t d\tau \frac{dF^*}{d\tau}(a + iF(\tau))\right)|t=0\rangle_a = e^{iF^*(t)a - G(t)}|t=0\rangle$$

ただし

$$G(t) = \int_0^t d\tau \frac{dF^*}{d\tau}F(\tau), \quad G(t) + G^*(t) = \int_0^t d\tau \frac{d}{d\tau}|F(\tau)|^2 = |F(t)|^2$$

したがって  $|t\rangle = U_0(t)|t\rangle_I = U_0(t)e^{iFa^\dagger}|t\rangle_a$  は

$$|t\rangle = e^{-G(t)}U_0(t)e^{iF(t)a^\dagger}e^{iF^*(t)a}|t=0\rangle \quad (10.56)$$

になる。 $e^{-G}$  は複素数であるが、これ以外は互いに非可換な演算子である。

$t=0$  で状態が  $H_0$  の固有状態  $|n\rangle$  のとき、時刻  $t$  で  $|m\rangle$  になる確率  $P_{nm}(t) = |\langle m|t\rangle|^2$  は

$$P_{nm}(t) = \left|e^{-G(t)}e^{-iE_m t/\hbar}\langle m|e^{iF(t)a^\dagger}e^{iF^*(t)a}|n\rangle\right|^2 = e^{-|F(t)|^2}\left|\langle m|e^{iF(t)a^\dagger}e^{iF^*(t)a}|n\rangle\right|^2$$

(4.22) より  $k \leq n$  のとき

$$a^k|n\rangle = \sqrt{n(n-1)\cdots(n-k+1)}|n-k\rangle = \sqrt{n!/(n-k)!}|n-k\rangle$$

$k > n$  のとき  $a^k|n\rangle = 0$  であるから

$$e^{iF^*a}|n\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(iF^*)^k}{k!}a^k|n\rangle = \sum_{k=0}^n \frac{(iF^*)^k}{k!}\sqrt{\frac{n!}{(n-k)!}}|n-k\rangle = \sum_{k=0}^n \frac{(iF^*)^{n-k}}{(n-k)!}\sqrt{\frac{n!}{k!}}|k\rangle \quad (10.57)$$

これから

$$\langle m|e^{iF(t)a^\dagger}e^{iF^*(t)a}|n\rangle = \sum_{k=0}^n \frac{(iF^*)^{n-k}}{(n-k)!}\sqrt{\frac{n!}{k!}}\langle m|e^{iFa^\dagger}|k\rangle$$

(10.57) で  $F^*$  を  $-F^*$  に置き換えれば

$$\langle m|e^{iFa^\dagger}|k\rangle = \langle k|e^{-iF^*a}|m\rangle^* = \sum_{\ell=0}^m \frac{((-iF^*)^{m-\ell})^*}{(m-\ell)!}\sqrt{\frac{m!}{\ell!}}\langle k|\ell\rangle = \sum_{\ell=0}^m \frac{(iF)^{m-\ell}}{(m-\ell)!}\sqrt{\frac{m!}{\ell!}}\delta_{k\ell}$$

になるから  $n, m$  の小さい方を  $(n, m)$  で表すと

$$\langle m | e^{iF(t)a^\dagger} e^{iF^*(t)a} | n \rangle = \sqrt{m!n!} (iF^*)^n (iF)^m \sum_{k=0}^{(n,m)} \frac{(-1)^k |F|^{-2k}}{(n-k)!(m-k)!k!}$$

したがって

$$P_{nm}(t) = m!n! e^{-|F(t)|^2} Q_{nm}^2(t), \quad Q_{nm}(t) \equiv \sum_{k=0}^{(n,m)} \frac{(-1)^k |F(t)|^{n+m-2k}}{(n-k)!(m-k)!k!}$$

である。  $P_{nm}(t) = P_{mn}(t)$  になる。  $n \geq m$  の場合、  $Q_{nm}$  の定義式で  $m-k$  を改めて  $k$  とすれば

$$Q_{nm}(t) = \frac{(-1)^m |F|^{n-m}}{m!(n-m)!} M(-m, n-m+1, |F|^2)$$

ここで (17.106), (17.109) を用いた。  $M(a, b, x)$  は合流型超幾何関数である。  $n \geq m$  のとき

$$P_{nm}(t) = P_{mn}(t) = \frac{n!}{m!} \frac{K^{n-m}}{((n-m)!)^2} e^{-K} M^2(-m, n-m+1, K) \quad (10.58)$$

ただし

$$K(t) = |F(t)|^2, \quad F(t) = \frac{1}{\sqrt{2M\hbar\omega_0}} \int_0^t d\tau e^{i\omega_0\tau} f(\tau)$$

になる。

解析解 (10.58) を摂動論と比較する。  $K^2$  以上を無視すると  $M(a, b, x) = 1 - ax/b + \dots$  より

$$P_{nm} = P_{mn} = \frac{n!}{m!} \frac{K^{n-m}}{((n-m)!)^2} (1-K) \left(1 - \frac{2m}{n-m+1} K\right) \approx \begin{cases} 1 - (2n+1)K, & n-m=0 \\ nK, & n-m=1 \\ 0, & n-m>1 \end{cases}$$

になる。摂動論では、(10.11), (10.55) より  $|t=0\rangle = |n\rangle$  のとき

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau \langle m | H_I'(\tau) | n \rangle = i \left( \delta_{m,n+1} \sqrt{m} F + \delta_{m,n-1} \sqrt{n} F^* \right)$$

であるから  $n > m$  の場合

$$P_{nm}(t) = P_{mn}(t) \approx |c_m^{(1)}(t)|^2 = \begin{cases} nK, & n-m=1 \\ 0, & n-m>1 \end{cases}$$

$n = m$  の場合 (10.8), (10.10) 及び  $c_n^{(1)} = 0$  より

$$P_{nn}(t) \approx 1 + c_n^{(2)} + (c_n^{(2)})^*, \quad c_n^{(2)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \theta(\tau - \tau') \langle n | H_I'(\tau) H_I'(\tau') | n \rangle$$

になる。  $\langle n | H_I'(\tau) H_I'(\tau') | n \rangle^* = \langle n | H_I'(\tau') H_I'(\tau) | n \rangle$  であるから、積分変数  $\tau$  と  $\tau'$  を入れ換えると

$$(c_n^{(2)})^* = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \theta(\tau' - \tau) \langle n | H_I'(\tau) H_I'(\tau') | n \rangle$$

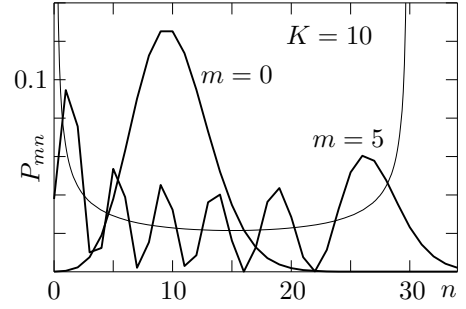
これから

$$P_{nn} = 1 - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \langle n | H_I'(\tau) H_I'(\tau') | n \rangle = 1 - \langle n | (Fa^\dagger + F^*a)^2 | n \rangle = 1 - (2n+1)K$$

$K$  の1次までの (10.58) と摂動論の結果は一致する。  $K \ll 1$  のとき摂動論はよい近似である。なお、外場  $f(t)$  が弱くても  $K \ll 1$  とは限らない。

$K$  が大きくなると摂動論とは全く異なる結果になる。 $m$  と  $K$  を与えたとき (10.58) の  $P_{mn}$  は右図の折れ線になる。細い曲線は (10.53) の古典力学での確率  $P_{cl}(\varepsilon)$  である。ただし,  $\varepsilon_0 = m + 1/2$ ,  $\varepsilon = n + 1/2$  とした。 $m, K$  が大きくなると  $P_{mn}$  は振動し平均的には  $P_{cl}$  に近づく。

基底状態からの遷移の場合 ( $m = 0$ ), 2 次の摂動では  $P_{0n} = K\delta_{n1}$  になり, 第 1 励起状態への遷移だけである。一方, (10.58) では  $M(0, b, x) = 1$  よりポアソン分布



$$P_{0n}(t) = \frac{K^n}{n!} e^{-K} \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} \exp\left(n - n \log n + n \log K - K\right) \quad (10.59)$$

になる。ただし, スターリングの公式  $n! \approx \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}$  を用いた。 $x = (n - K)/K$  とすると

$$\exp\left(n - n \log n + n \log K - K\right) = e^{Kf(x)}, \quad f(x) = x - (1+x) \log(1+x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} -x^2/2$$

になるから,  $n \approx K \gg 1$  の場合

$$P_{0n} \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi K}} e^{-(n-K)^2/2K} \quad (10.60)$$

である。 $P_{0n}$  は  $n \approx K$  で最大になり  $|n - K| \lesssim 2\sqrt{K}$  である広範囲の励起状態  $|n\rangle$  に遷移する。励起状態への全遷移確率  $P_{ex}$  は  $P_{ex} = 1 - P_{00} = 1 - e^{-K}$  になる。 $K \ll 1$  のとき  $P_{ex} \approx K$  であり第 1 励起状態にわずかに遷移するだけである。一方,  $K \gg 1$  では  $P_{ex} \approx 1$  になり基底状態に留まることはない。個々の  $P_{0n}$  は  $O(1/\sqrt{K})$  と小さいが, 関与する状態  $|n\rangle$  の数は  $O(\sqrt{K})$  である。

**問題 10.9** (10.55) より  $m \neq n \pm 1$  のとき  $\langle m | H'_1 | n \rangle = 0$  であるから, 遷移  $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$  の場合, (10.6) の摂動展開係数  $c_n^{(k)}$  は  $k \geq n$  のとき  $c_n^{(k)} \neq 0$  になる。最低次  $k = n$  は

$$c_n^{(n)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \langle n | H'_1(t_1) | n-1 \rangle \langle n-1 | H'_1(t_2) | n-2 \rangle \cdots \langle 2 | H'_1(t_{n-1}) | 1 \rangle \langle 1 | H'_1(t_n) | 0 \rangle$$

である。 $c_n^{(n)}(t) = (iF(t))^n / \sqrt{n!}$  を示せ。 $n+1$  次以上を無視すれば  $P_{0n} = K^n/n!$  である。

### コヒーレント状態

(10.54) より

$$U_0 e^{iFa^\dagger} U_0^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iF)^n}{n!} (U_0 a^\dagger U_0^\dagger)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iF)^n}{n!} (e^{-i\omega_0 t} a^\dagger)^n = \exp(iF e^{-i\omega_0 t} a^\dagger)$$

であるから (10.56) は

$$|t\rangle = e^{-G(t)} \exp(iF(t) e^{-i\omega_0 t} a^\dagger) U_0(t) e^{iF^*(t)a} |t=0\rangle$$

になる。 $|t=0\rangle$  が  $n=0$  の基底状態  $|0\rangle$  の場合  $e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iF^* a} |0\rangle = e^{-i\omega_0 t/2} |0\rangle$  であるから

$$i\theta(t) = -G(t) + |F(t)|^2/2 - i\omega_0 t/2, \quad \theta - \theta^* = i(G + G^* - |F|^2) = 0$$

とすると ( $\theta$  は実数)

$$|t\rangle = e^{i\theta} \exp(iF e^{-i\omega_0 t} a^\dagger - |F|^2/2) |0\rangle = e^{i\theta} |\lambda = iF(t) e^{-i\omega_0 t}\rangle$$

ここで  $|\lambda\rangle$  は (4.50) のコヒーレント状態である。(4.56) から  $|t\rangle$  の波動関数  $\psi(x, t)$  は

$$|\psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{M\omega_0}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{M\omega_0}{\hbar}\left(x - \langle t|x|t\rangle\right)^2\right), \quad \langle t|x|t\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega_0}} \operatorname{Re}(iF(t)e^{-i\omega_0 t})$$

になる。 $\langle t|x|t\rangle$  は (10.51) で  $x(0) = 0$ ,  $\dot{x}(0) = 0$  としたもの的一致する。初期状態は基底状態であるから、対応する古典力学の初期条件は「原点に静止」である。 $|\psi(x, t)|^2$  は波束の形を保持したまま中心が古典力学と同じ運動をする。 $H_0$  の期待値 (4.46) と分散 (4.47) は

$$\langle t|H_0|t\rangle = \hbar\omega_0(|F(t)|^2 + 1/2), \quad \sqrt{\langle t|H_0^2|t\rangle - \langle t|H_0|t\rangle^2} = \hbar\omega_0|F(t)|$$

これは (10.52) と類似の関係式である。

### 具体例

$f_0, \varepsilon$  を正の無次元の定数として

$$f(t) = f_0 \sqrt{2M\hbar\omega_0^3} e^{-\varepsilon\omega_0|t|} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

とする。(10.50) は

$$F(t) = if_0 \left( \frac{1 - e^{i(\omega_0 + \omega)t - \varepsilon\omega_0 t}}{1 + \omega/\omega_0 + i\varepsilon} + \frac{1 - e^{i(\omega_0 - \omega)t - \varepsilon\omega_0 t}}{1 - \omega/\omega_0 + i\varepsilon} \right) \xrightarrow{\varepsilon\omega_0 t \gg 1} \frac{2if_0(1 + i\varepsilon)}{(1 + \omega/\omega_0 + i\varepsilon)(1 - \omega/\omega_0 + i\varepsilon)}$$

になるから、時間が十分経過した場合  $K(\omega) = |F(t)|^2$  は

$$K(\omega) = \frac{4f_0^2(1 + \varepsilon^2)}{((\omega/\omega_0 + 1)^2 + \varepsilon^2)((\omega/\omega_0 - 1)^2 + \varepsilon^2)}$$

である。右図に  $K(\omega)$  を示す。 $\varepsilon \ll 1$  のとき  $\omega \approx \omega_0$  では

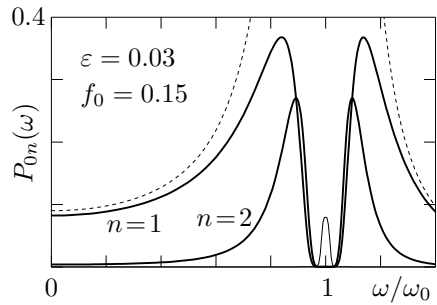
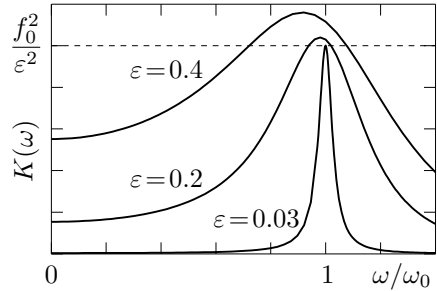
$$K(\omega) \approx \frac{f_0^2}{(\omega/\omega_0 - 1)^2 + \varepsilon^2} \quad (10.61)$$

であり、 $K(\omega)$  は幅  $\approx \varepsilon$ , 高さ  $\approx f_0^2/\varepsilon^2$  の鋭いピークになり共鳴が起こる。なお、 $K(0) = 4f_0^2/(1 + \varepsilon^2)$  である。

(10.59) より基底状態から励起状態への遷移確率は

$$P_{0n}(\omega) = K^n e^{-K}/n!$$

である。これを右図に示す。細い曲線は  $n = f_0^2/\varepsilon^2$  の場合である。2 次の摂動  $P_{0n}(\omega) \approx K(\omega)\delta_{n1}$  を破線で示す。 $K(\omega) \ll 1$  である  $\omega/\omega_0 \ll 1$  または  $\omega/\omega_0 \gg 1$  のときよい近似になる。 $K \leq K_{\max} \approx f_0^2/\varepsilon^2$  になるから、 $f_0 \ll 1$  であっても  $K(\omega) \ll 1$  とは限らない。



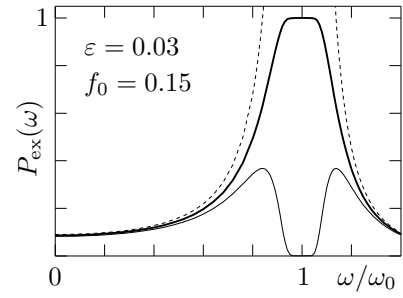
$$\frac{dP_{0n}}{d\omega} = \frac{dK}{d\omega} \frac{dP_{0n}}{dK} = \frac{dK}{d\omega} \frac{n - K}{n!} K^{n-1} e^{-K}$$

であるから、 $n < K_{\max}$  ならば  $K(\omega) = n$ , つまり  $\omega/\omega_0 \approx 1 \pm \varepsilon\sqrt{K_{\max}/(n-1)}$  の2点で  $P_{0n}(\omega)$  は極大になり、 $K(\omega)$  の極大点  $dK/d\omega = 0$  である  $\omega \approx \omega_0$  で極小になる (図の  $n = 1, 2$ )。一方、 $n \geq K_{\max}$  の場合  $\omega \approx \omega_0$  で極大になるだけである (図の細い曲線)。 $\varepsilon \ll 1$  のとき  $\omega = \omega_0$  の前後で  $P_{0n}(\omega)$  は急激な変化をするが、これは  $K(\omega)$  が  $\omega \approx \omega_0$  で鋭いピークになるためである。

右図に励起状態への全遷移確率  $P_{\text{ex}}(\omega) = 1 - e^{-K(\omega)}$  を太い曲線で示す。細い曲線は上図の  $P_{01}(\omega)$ , 破線は2次の摂動近似  $P_{\text{ex}}(\omega) \approx K(\omega)$  である。 $K \ll 1$  のとき, 主に  $n = 1$  への遷移だけ起こり  $P_{\text{ex}} \ll 1$  になる。一方, 共鳴領域  $\omega \approx \omega_0$  では  $K(\omega) \approx K_{\text{max}} \approx f_0^2/\varepsilon^2 \gg 1$  のため  $P_{\text{ex}}(\omega) \approx 1$  になる。この場合,  $n \ll K_{\text{max}}$  の遷移は  $P_{0n}(\omega) \approx 0$  になるが, (10.60) より

$$K_{\text{max}} - 2\sqrt{K_{\text{max}}} \lesssim n \lesssim K_{\text{max}} + 2\sqrt{K_{\text{max}}}$$

である  $|n\rangle$  の遷移が寄与する。(10.61) より  $|\omega/\omega_0 - 1| \lesssim \sqrt{f_0^2/4 - \varepsilon^2} \approx f_0/2$  では  $K(\omega) \gtrsim 4$  になり  $P_{\text{ex}} \gtrsim 1 - e^{-4} \approx 0.98$  であるから,  $P_{\text{ex}} \approx 1$  の領域は  $f_0$  に比例する。



## 10.7 状態密度

自由粒子のハミルトニアン  $H_0 = -\hbar^2 \nabla^2 / 2M$  の固有関数は, 平面波  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  であり無限に広がっているから, 通常の規格化はできない。このため

1. 有限の箱を考え, この中で 1 に規格化する。
2. デルタ関数を用いて規格化する。

のどちらかで規格化をおこなう。1 辺  $L$  の立方体で 1 に規格化すると

$$u_{\mathbf{k},L}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$

である。仮想的に  $x = 0$  と  $x = L$  をつなぎ, 両端で波動関数をなめらかに接続すれば, 人為的な箱の境界の影響を回避できるだろう。 $y, z$  についても同様にすると,  $u_{\mathbf{k},L}$  は**周期的境界条件**

$$u_{\mathbf{k},L}(x, y, z) = u_{\mathbf{k},L}(x + L, y, z) = u_{\mathbf{k},L}(x, y + L, z) = u_{\mathbf{k},L}(x, y, z + L)$$

を満たす必要がある。 $e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1$  になるから

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z), \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (10.62)$$

である。 $\mathbf{k}$  は離散的な値をとる。 $L \rightarrow \infty$  で  $\mathbf{k}$  は連続的になる。規格直交性は

$$\int_V d^3r u_{\mathbf{k},L}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}',L}(\mathbf{r}) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \quad (10.63)$$

になる。積分領域  $V$  は 1 辺  $L$  の立方体である。

(10.62) より  $\mathbf{k}$  空間での体積  $(2\pi/L)^3$  に状態が 1 つあるから,  $\mathbf{k}$  近傍の微小領域  $d^3k$  の状態数は

$$\frac{d^3k}{(2\pi/L)^3} = \frac{L^3}{(2\pi)^3} k^2 dk d\Omega \quad (10.64)$$

である。 $E = \hbar^2 k^2 / 2M$  の場合

$$\frac{L^3}{(2\pi)^3} d^3k = \rho_{\text{box}}(E) dE d\Omega, \quad \rho_{\text{box}}(E) = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{M}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}$$

$\rho_{\text{box}}(E)$  は単位エネルギー, 単位立体角あたりの状態数である。**状態密度** (単位エネルギーあたりの状態数) は  $4\pi\rho_{\text{box}}(E)$  になる。

ある物理量  $|\langle u_{\mathbf{k},L} | F | \psi \rangle|^2$  を終状態  $u_{\mathbf{k},L}$  について和を取る。 $\mathbf{k}$  近傍の微小領域  $d^3k$  の寄与は

$$|\langle u_{\mathbf{k},L} | F | \psi \rangle|^2 \frac{L^3}{(2\pi)^3} d^3k = |\langle u_{\mathbf{k}} | F | \psi \rangle|^2 d^3k, \quad \text{ただし} \quad u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$



になるから、人為的な箱の大きさ  $L$  に依存しない。 $L \rightarrow \infty$  とすれば  $\mathbf{k}$  は連続的になる。したがって、 $\mathbf{k}$  を連続変数として波動関数が  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  の場合、微小領域  $d^3k$  の状態数は単に  $d^3k$  とすればよい。 $E = \hbar^2 k^2 / 2M$  の場合、単位エネルギー、単位立体角あたりの状態数  $\rho(E)$  は

$$\rho(E) = \frac{M}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}} \quad (10.65)$$

になる。規格直交性は

$$\int d^3r u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3r \exp(i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (10.66)$$

であり、デルタ関数で規格化したことになる。 $u_{\mathbf{k},L}$  の次元は (長さ) $^{-3/2}$ 、状態数 (10.64) は無次元で  $\rho_{\text{box}}(E)$  は (エネルギー) $^{-1}$  になる。一方、 $u_{\mathbf{k}}$  は無次元で、状態数  $d^3k$  は (長さ) $^{-3}$  の次元になり  $\rho(E)$  は (長さ) $^{-3}$ (エネルギー) $^{-1}$  である。なお、 $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  とすれば

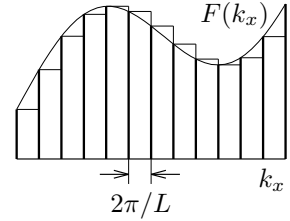
$$\int d^3r u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad d^3k \text{ の状態数} = \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

である。

(10.62) の  $\mathbf{k}$  についての和を考える。 $\sum_{k_x} F(k_x)$  は図の太い線分の和で

あるが、 $k_x = (2\pi/L)n_x$  は  $2\pi/L$  おきに等間隔に並んでいるから

$$\frac{2\pi}{L} \sum_{k_x} F(k_x) = \text{長方形の面積の和}$$



になる。これは  $L \rightarrow \infty$  のとき積分になり

$$\frac{2\pi}{L} \sum_{k_x} F(k_x) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x F(k_x)$$

である。3次元の場合

$$\frac{(2\pi)^3}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \int d^3k F(\mathbf{k}) \quad (10.67)$$

になる。積分領域は全空間である。また

$$F(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} F(\mathbf{k}') \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \frac{(2\pi)^3}{L^3} \sum_{\mathbf{k}'} F(\mathbf{k}') \frac{L^3}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \int d^3k' F(\mathbf{k}') \frac{L^3}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$$

であるから

$$\frac{L^3}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (10.68)$$

になる。 $\mathbf{k}$  が離散的な場合の規格直交性 (10.63) は

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int_V d^3r \exp(i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}) = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$$

と表せる。 $L \rightarrow \infty$  とすると、連続的な  $\mathbf{k}$  での規格直交性 (10.66) になる。

## 10.8 断熱近似

$H'(t)$  が時間的に非常にゆっくり変化する場合には,  $H'(t)$  についてベキ展開せずに近似解を求めることができる。

$t$  をパラメータとして, 全ハミルトニアン  $H(t)$  の固有関数  $|n(t)\rangle$  と固有値  $E_n(t)$  が求まったとする。

$$H(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle \quad (10.69)$$

である。時刻  $t$  での状態  $|t\rangle$  を  $|n(t)\rangle$  で展開して

$$|t\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-i\theta_n(t)} |n(t)\rangle, \quad \theta_n(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t') \quad (10.70)$$

とする。

$$|\dot{n}(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t} |n(t)\rangle, \quad \dot{H} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

と略記すると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |t\rangle = \sum_n \left( i\hbar \frac{dc_n}{dt} |n(t)\rangle + i\hbar c_n(t) |\dot{n}(t)\rangle + E_n(t) c_n(t) |n(t)\rangle \right) e^{-i\theta_n(t)}$$

であるから, 時間に依存するシュレーディンガー方程式  $i\hbar \partial |t\rangle / \partial t = H(t) |t\rangle$  は

$$\sum_n \left( \frac{dc_n}{dt} |n(t)\rangle + c_n(t) |\dot{n}(t)\rangle \right) e^{-i\theta_n(t)} = 0$$

になる。 $|m(t)\rangle$  との内積をとれば  $\langle m(t) | n(t) \rangle = \delta_{mn}$  より

$$\frac{dc_m}{dt} = - \sum_n c_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle e^{i\theta_m(t) - i\theta_n(t)} \quad (10.71)$$

である。(10.69) を  $t$  で微分すると

$$\dot{H} |n(t)\rangle + H |\dot{n}(t)\rangle = \dot{E}_n |n(t)\rangle + E_n |\dot{n}(t)\rangle$$

$|m(t)\rangle$  との内積をとれば

$$\langle m(t) | \dot{H} |n(t)\rangle + E_m(t) \langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle = \delta_{mn} \dot{E}_n + E_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle$$

したがって  $m \neq n$  のとき

$$\langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle = - \frac{\langle m(t) | \dot{H} |n(t)\rangle}{E_m(t) - E_n(t)} \quad (10.72)$$

$m = n$  の場合, 規格化条件  $\langle n(t) | n(t) \rangle = 1$  を  $t$  で微分すると

$$\langle \dot{n}(t) | n(t) \rangle + \langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle = \langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle^* + \langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle = 0$$

$\langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle$  は純虚数になるから, 実数関数  $\gamma_n(t)$  を

$$\langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle = -i \frac{d\gamma_n(t)}{dt} \quad (10.73)$$

で定義する。(10.72), (10.73) を (10.71) に代入すると

$$\frac{dc_m}{dt} = i \frac{d\gamma_m(t)}{dt} c_m(t) + \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\langle m(t) | \dot{H} |n(t)\rangle}{\hbar \omega_{mn}(t)} \exp \left( i \int_0^t dt' \omega_{mn}(t') \right) \quad (10.74)$$

ただし

$$\hbar\omega_{mn}(t) = E_m(t) - E_n(t)$$

になる。これは時間に依存するシュレーディンガー方程式を書き換えただけで正確な式である。

$|t=0\rangle = |i(0)\rangle$  とする。(10.74) の右辺では、時間的にゆっくり変化する  $\langle m(t)|\dot{H}|n(t)\rangle$ ,  $c_n(t)$ ,  $\omega_{mn}(t)$  の時間依存性を無視する。 $|c_n(t)| \approx |c_n(0)| = \delta_{ni}$  より

$$\frac{dc_m}{dt} = i \frac{d\gamma_m(t)}{dt} c_m \delta_{mi} + \frac{\langle m(t)|\dot{H}|i(t)\rangle}{\hbar\omega_{mi}(t)} e^{i\omega_{mi}(t)t} c_i (1 - \delta_{mi})$$

これから  $m \neq i$  の場合

$$c_m(t) \approx c_i(t) \frac{\langle m(t)|\dot{H}|i(t)\rangle}{\hbar\omega_{mi}(t)} \int_0^t dt' e^{i\omega_{mi}(t)t'} \approx c_i(t) \frac{\langle m(t)|\dot{H}|i(t)\rangle}{i\hbar\omega_{mi}(t)^2} (e^{i\omega_{mi}(t)t} - 1) \quad (10.75)$$

になる。ただし  $|c_i(t)| \approx 1$  である。

$H'(t)$  がゆっくり変化する場合でも、共鳴が起こる場合 (10.75) の近似は成り立たない。

$$H'(t) = V e^{-i\omega t} + V^\dagger e^{i\omega t}$$

が  $H_0$  に比べて小さいとし、その時間依存性は無視しないで扱う。 $|n(t)\rangle$  と  $E_n(t)$  を  $H_0$  の固有関数と固有値  $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$  で置き換えてもよい近似であるから (10.74) は  $m \neq i$  のとき

$$\frac{dc_m}{dt} \approx \frac{\langle m|\dot{H}|i\rangle}{\hbar\omega_{mi}} e^{i\omega_{mi}t} = \frac{-i\omega}{\hbar\omega_{mi}} \langle m|(V e^{-i\omega t} - V^\dagger e^{i\omega t})|i\rangle e^{i\omega_{mi}t}$$

になる。これから

$$c_m = -\frac{\omega}{\hbar\omega_{mi}} \left( \langle m|V|i\rangle \frac{e^{i(\omega_{mi}-\omega)t} - 1}{\omega_{mi} - \omega} - \langle m|V^\dagger|i\rangle \frac{e^{i(\omega_{mi}+\omega)t} - 1}{\omega_{mi} + \omega} \right)$$

$H'(t)$  がゆっくり変化するとしても、 $\omega_{mi} \approx \pm\omega$  (共鳴現象が起こる) 場合には (10.75) はよい近似ではない。

$\phi_n(t)$  を任意の実関数とすると  $|\bar{n}(t)\rangle = e^{i\phi_n(t)}|n(t)\rangle$  も (10.69) を満たす。

$$\langle \bar{n}(t)|\dot{\bar{n}}(t)\rangle = i\dot{\phi}_n + \langle n(t)|\dot{n}(t)\rangle = i\dot{\phi}_n - i\dot{\gamma}_n$$

になるから  $\phi_n(t) = \gamma_n(t)$  とすれば  $\langle \bar{n}(t)|\dot{\bar{n}}(t)\rangle = 0$  である。このとき

$$|t\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-i\theta_n(t)}|n(t)\rangle = \sum_n \bar{c}_n(t) e^{-i\theta_n(t)}|\bar{n}(t)\rangle, \quad \bar{c}_n(t) = e^{-i\gamma_n(t)}c_n(t)$$

と展開すると

$$\frac{d\bar{c}_m}{dt} = \sum_{n \neq m} \bar{c}_n(t) \frac{\langle \bar{m}(t)|\dot{H}|\bar{n}(t)\rangle}{\hbar\omega_{mn}(t)} \exp\left(i \int_0^t dt' \omega_{mn}(t')\right)$$

になり、(10.74) の右辺第 1 項は現れない。

## 10.9 ベリー一位相

(10.75) は初期状態とは別の状態への遷移確率であるが、断熱変化の場合、最初  $|m(0)\rangle$  にあった成分は、時間が経過してもほとんど  $|m(t)\rangle$  に留まり続け  $|c_m(t)| \approx |c_m(0)|$  であろう。 $H(t)$  がゆっくり変化する  $\dot{H} \approx 0$  の場合、(10.74) の右辺で第 2 項を無視すると

$$\frac{dc_m}{dt} = i \frac{d\gamma_m(t)}{dt} c_m(t), \quad \therefore c_m(t) = c_m(0) e^{i(\gamma_m(t) - \gamma_m(0))}$$

になり  $|c_m(t)| = |c_m(0)|$  である。(10.70) より

$$|t\rangle = \sum_m c_m(0) \exp(i\gamma_m(t) - i\gamma_m(0) - i\theta_m(t)) |m(t)\rangle$$

位相の時間依存は  $\theta_m$  と  $\gamma_m$  の2つある。(10.70) より  $e^{-i\theta_m(t)}$  は定常状態の  $e^{-iEt/\hbar}$  に対応する。 $\theta_m$  を動力的位相という。 $|\bar{m}(t)\rangle$  で表せば  $\dot{c}_m = 0$  より

$$|t\rangle = \sum_m \bar{c}_m(0) e^{-i\theta_m(t)} |\bar{m}(t)\rangle$$

になり  $\gamma_m$  は消える。このため  $e^{i\gamma_m(t)}$  は物理的に意味のない位相因子と見なしがちである。ところで、 $\langle \bar{m}(t) | \dot{\bar{m}}(t) \rangle = 0$ , つまり  $|\bar{m}(t)\rangle = e^{i\gamma_m(t)} |m(t)\rangle$  であるから、 $\gamma_m$  は  $|\bar{m}(t)\rangle$  に取り込まれているだけ、消えたわけではない。

(5.94) のハミルトニアン

$$H(t) = \mu \mathbf{B}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad B_x(t) = B_1 \cos \omega t, \quad B_y(t) = B_1 \sin \omega t, \quad B_z = B_0$$

を断熱近似で扱い  $\gamma_m$  の効果を調べる。(5.73), (5.95) より  $m = \pm 1$  として

$$H(t)\chi_m(t) = m\mu B\chi_m(t), \quad \chi_m(t) = \frac{1}{\sqrt{2(1-m\cos\theta_b)}} \begin{pmatrix} \sin\theta_b \\ e^{i\omega t}(m - \cos\theta_b) \end{pmatrix} \quad (10.76)$$

ただし

$$B = \sqrt{B_0^2 + B_1^2}, \quad \cos\theta_b = B_0/B, \quad \sin\theta_b = B_1/B$$

である。 $E_m(t) = m\mu B$  は時間に依存しないから  $\theta_m(t) = m\mu Bt/\hbar$  である。(10.73) の  $\gamma_m$  は

$$\frac{d\gamma_m}{dt} = i\chi_m^\dagger \frac{d\chi_m}{dt} = -\frac{\omega}{2} \frac{(m - \cos\theta_b)^2}{1 - m\cos\theta_b} = \frac{\omega}{2} (m\cos\theta_b - 1)$$

より

$$\gamma_m(t) - \gamma_m(0) = \frac{\omega t}{2} (m\cos\theta_b - 1) \quad (10.77)$$

である。

$$\gamma_m - \gamma_m(0) - \theta_m = m\varphi t - \frac{\omega t}{2}, \quad \varphi = -\frac{\mu B}{\hbar} + \frac{\cos\theta_b}{2}\omega$$

になるから、時刻  $t$  での状態  $\psi(t)$  は

$$\psi(t) = \sum_{m=\pm 1} c_m(0) e^{i(\gamma_m - \gamma_m(0) - \theta_m)} \chi_m(t) = e^{-i\omega t/2} \sum_{m=\pm 1} c_m(0) e^{im\varphi t} \chi_m(t) \quad (10.78)$$

時刻  $t = 0$  で系が  $\sigma_z$  の固有値  $+1$  の状態にあったとすると

$$\sum_m c_m(0) \chi_m(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \therefore c_m(0) = \chi_m^\dagger(0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\sin\theta_b}{\sqrt{2(1-m\cos\theta_b)}}$$

であるから

$$\psi(t) = \frac{e^{-i\omega t/2}}{2} \sum_m e^{im\varphi t} \frac{\sin\theta_b}{1 - m\cos\theta_b} \begin{pmatrix} \sin\theta_b \\ e^{i\omega t}(m - \cos\theta_b) \end{pmatrix} = e^{-i\omega t/2} \begin{pmatrix} \cos\varphi t + i\cos\theta_b \sin\varphi t \\ i e^{i\omega t} \sin\theta_b \sin\varphi t \end{pmatrix}$$

になる。したがって、時刻  $t$  で  $\sigma_z$  の固有値が  $-1$  になる確率  $P_-$  は

$$P_-(t) = |(0 \ 1) \psi(t)|^2 = (\sin\theta_b \sin\varphi t)^2 = \frac{B_1^2}{B^2} \sin^2 \left( \frac{\mu B}{\hbar} t - \frac{B_0}{2B} \omega t \right) \quad (10.79)$$

である。括弧内の2項目が  $\gamma_m$  の寄与である。

この系は正確に解ける。(5.98) より正確な解は

$$\psi(t) = e^{-i\omega t/2} \sum_m c_m(t) \chi_m(t), \quad c_m(t) = c_m(0) \cos \Omega t + C_m \sin \Omega t$$

ただし

$$C_m = \frac{mc_m(0)(\omega_2^2 - \omega\omega_0/2) - c_{-m}(0)\omega\omega_1/2}{i\omega_2\Omega}, \quad \omega_2 = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} = \mu B/\hbar$$

である。 $\omega$  の1次まで考慮すると

$$\Omega = \sqrt{(\omega_0 - \omega/2)^2 + \omega_1^2} \approx \omega_2 \left(1 - \frac{\omega_0\omega}{2\omega_2^2}\right) = -\varphi \quad (10.80)$$

になるから

$$C_m \approx \frac{1}{i\omega_2^2} \left(1 + \frac{\omega_0\omega}{2\omega_2^2}\right) \left(mc_m(0)\omega_2^2 \left(1 - \frac{\omega_0\omega}{2\omega_2^2}\right) - c_{-m}(0)\frac{\omega\omega_1}{2}\right) \approx -imc_m(0) + ic_{-m}(0)\frac{\omega_1\omega}{2\omega_2^2}$$

$c_{-m}(0)$  は (10.74) の右辺で第2項の寄与であるから無視すると

$$c_m(t) \approx c_m(0) \cos \Omega t - imc_m(0) \sin \Omega t = c_m(0)e^{-im\Omega t} \approx c_m(0)e^{im\varphi t}$$

したがって, (10.78) を得る。また, (5.97) より正確には  $P_- = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t$  である。 $\Omega$  を (10.80) で近似すると (10.79) を再現する。

一般に  $H$  が外部パラメータ  $\mathbf{b}(t)$  の関数で  $\mathbf{b}(t)$  を介して時間に依存する場合,  $|n(t)\rangle$  は  $\mathbf{b}$  の関数になるから  $|n(\mathbf{b})\rangle$  と書くことにする。

$$\frac{d}{dt}|n(\mathbf{b})\rangle = \left(\frac{db_x}{dt}\frac{\partial}{\partial b_x} + \frac{db_y}{dt}\frac{\partial}{\partial b_y} + \frac{db_z}{dt}\frac{\partial}{\partial b_z}\right)|n(\mathbf{b})\rangle = \frac{d\mathbf{b}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{b}}|n(\mathbf{b})\rangle$$

であるから (10.73) は

$$\frac{d\gamma_n}{dt} = \mathbf{A}_n(\mathbf{b}) \cdot \frac{d\mathbf{b}}{dt}, \quad \text{ただし} \quad \mathbf{A}_n(\mathbf{b}) = i\langle n(\mathbf{b})|\nabla_{\mathbf{b}}|n(\mathbf{b})\rangle$$

になる。これから  $\gamma_n$  は  $\mathbf{b}$  空間での線積分

$$\gamma_n(t) - \gamma_n(0) = \int_{\mathbf{b}(0)}^{\mathbf{b}(t)} \mathbf{A}_n(\mathbf{b}) \cdot d\mathbf{b}$$

で表せる。 $\mathbf{b}(t)$  が周期  $T$  の時間の関数ならば,  $\mathbf{b}(T) = \mathbf{b}(0)$  であり時刻  $t=0$  から  $t=T$  の間に  $\mathbf{b}$  は閉曲線を描く。この閉曲線を  $C$  とすると

$$\gamma_n(T) - \gamma_n(0) = \oint_C \mathbf{A}_n(\mathbf{b}) \cdot d\mathbf{b} \quad (10.81)$$

1周期したときの  $\gamma_n$  の変化は,  $\mathbf{b}(t)$  が  $C$  上を移動する速さには依存せず, 経路  $C$  だけに依存する。このため  $\gamma_n(T) - \gamma_n(0)$  を幾何学的位相, あるいはベリー一位相という。

$|n(\mathbf{b})\rangle$  の代わりに  $|\bar{n}(\mathbf{b})\rangle = e^{i\phi(\mathbf{b})}|n(\mathbf{b})\rangle$  を用いてもよい。

$$\nabla_{\mathbf{b}}|\bar{n}(\mathbf{b})\rangle = e^{i\phi(\mathbf{b})}(i\nabla_{\mathbf{b}}\phi(\mathbf{b}) + \nabla_{\mathbf{b}})|n(\mathbf{b})\rangle, \quad \therefore \quad \mathbf{A}_{\bar{n}}(\mathbf{b}) = \mathbf{A}_n(\mathbf{b}) - \nabla_{\mathbf{b}}\phi(\mathbf{b})$$

になるから,  $\mathbf{A}_n(\mathbf{b})$  は位相の取り方に依存する。 $\phi(\mathbf{b})$  に対してストークスの定理を用いると

$$\oint_C \mathbf{A}_{\bar{n}}(\mathbf{b}) \cdot d\mathbf{b} = \oint_C \mathbf{A}_n(\mathbf{b}) \cdot d\mathbf{b} - \int_S d\mathbf{S} \cdot (\nabla_{\mathbf{b}} \times \nabla_{\mathbf{b}}\phi(\mathbf{b}))$$

$\nabla_{\mathbf{b}} \times \nabla_{\mathbf{b}}\phi(\mathbf{b}) = 0$  より  $\gamma_n(T) - \gamma_n(0)$  は位相の取り方に依存しない。 $\mathbf{A}_n$  はゲージ変換 (7.13) と類似の変換をする。この点からすると  $\gamma_n(T) - \gamma_n(0)$  はゲージ不変量である。

問題 10.10 磁場  $B$  を極座標で表して

$$\mathbf{B} = B(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$$

とすると  $|m(\mathbf{B})\rangle$  は (5.72) で与えられる。また,  $\nabla_{\mathbf{B}}$  を極座標で表すと (16.39) より

$$\nabla_{\mathbf{B}} = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial B} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{B} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{B \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad d\mathbf{B} = dB \mathbf{e}_r + B d\theta \mathbf{e}_\theta + B \sin \theta d\phi \mathbf{e}_\phi$$

である。

$$\mathbf{A}_m(\mathbf{B}) = i \langle m(\mathbf{B}) | \nabla_{\mathbf{B}} | m(\mathbf{B}) \rangle = \frac{m \cos \theta - 1}{2B \sin \theta} \mathbf{e}_\phi$$

を示せ。(10.81) を用いて  $\gamma_m(T) - \gamma_m(0)$  を求めよ。ただし,  $B_z = B \cos \theta$  を一定にして 1 周する。この結果と (10.77) で  $t = 2\pi/\omega$  としたものが一致することを確かめよ。

なお, (16.48) で  $A_r = A_\theta = 0$ ,  $A_\phi \sin \theta = (m \cos \theta - 1)/2B$  とすれば

$$\nabla_{\mathbf{B}} \times \mathbf{A}_m(\mathbf{B}) = -\frac{m\mathbf{B}}{2B^3}$$

になりそうだが,  $\mathbf{A}_m$  は  $z$  軸上で発散する。(7.58) の  $\mathbf{A}_\pm(\mathbf{r})$  で  $q_m = \mp 2\pi$  とすると  $\mathbf{A}_{\pm 1}(\mathbf{B})$  になるから, (7.58) より

$$\nabla_{\mathbf{B}} \times \mathbf{A}_m(\mathbf{B}) = -\frac{m\mathbf{B}}{2B^3} - 2\pi\theta(-mz)\delta(x)\delta(y)\mathbf{e}_z$$

である。(10.81) にストークスの定理を適用するとき, 右辺第 2 項も考慮する必要がある。

## 11 散乱問題

### 11.1 自由粒子

散乱問題を扱う場合, 平面波  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  の  $r \rightarrow \infty$  での漸近形などが必要になる。ここでまとめておく。自由粒子のシュレーディンガー方程式は, エネルギー固有値  $E > 0$  のとき

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (11.1)$$

であり  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  はこの方程式の解である。 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  は軌道角運動量の固有状態ではないが, (11.1) の解として軌道角運動量の固有関数  $\psi(\mathbf{r}) = R_\ell(r)Y_{\ell m_\ell}(\Omega)$  も存在する。ただし,  $\mathbf{r}$  の方向を表す角度  $(\theta, \phi)$  を単に  $\Omega$  と書く。また,  $\mathbf{k}$  の方向を  $\Omega_{\mathbf{k}}$  で表す。(6.7) より (11.1) は

$$\left( \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + k^2 \right) R_\ell(r) = 0$$

になる。原点で有界な解は 17.5 (434 ページ) より球ベッセル関数  $j_\ell(kr)$  である。 $j_\ell(kr)Y_{\ell m_\ell}(\Omega)$  は (11.1) の解になる。これらの線形結合も原点で有界な (11.1) の解であるから

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L A_{LM} j_L(kr) Y_{LM}(\Omega)$$

と展開できる。 $A_{LM}$  は  $\mathbf{r}$  には依存しない。 $Y_{\ell m_\ell}^*$  をかけ角度積分をすれば, 直交性 (17.40) より

$$I \equiv \int d\Omega Y_{\ell m_\ell}^*(\theta, \phi) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = A_{\ell m_\ell} j_\ell(kr) \quad (11.2)$$

積分変数の角度  $\theta, \phi$  の基準を  $\mathbf{k}$  方向にとると,  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} = kr \cos \theta$  である。 $t = \cos \theta$  とし部分積分をすると

$$I = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 dt Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega) e^{ikrt} = \int_0^{2\pi} d\phi \left( \frac{1}{ikr} \left[ e^{ikrt} Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega) \right]_{t=-1}^{t=1} - \frac{1}{ikr} \int_{-1}^1 dt e^{ikrt} \frac{\partial Y_{\ell m_\ell}^*}{\partial t} \right)$$

$t = 1$ , つまり  $\theta = 0$  のとき  $\mathbf{r}$  の方向は  $\mathbf{k}$  の方向に一致し ( $\Omega = \Omega_{\mathbf{k}}$ ),  $t = -1$  のときは  $\mathbf{r}$  の方向は  $\mathbf{k}$  の逆方向になる ( $\Omega = -\Omega_{\mathbf{k}}$ )。  $Y_{\ell m_\ell}^*(\pm \Omega_{\mathbf{k}})$  は  $\phi$  に依存しないから

$$I = \frac{2\pi}{ikr} \left( e^{ikr} Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) - e^{-ikr} Y_{\ell m_\ell}^*(-\Omega_{\mathbf{k}}) \right) - \frac{1}{ikr} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 dt e^{ikrt} \frac{\partial Y_{\ell m_\ell}^*}{\partial t}$$

第 2 項で再び部分積分を行うと  $O((kr)^{-2})$  になるから,  $kr \rightarrow \infty$  では第 1 項に比べて無視できる。(17.36) より  $Y_{\ell m_\ell}^*(-\Omega_{\mathbf{k}}) = (-1)^\ell Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}})$  であるから

$$I \xrightarrow{kr \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{ikr} \left( e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr} \right) Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) = 4\pi i^\ell Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) \frac{\sin(kr - \ell\pi/2)}{kr}$$

$\sin(\dots)/kr$  は  $j_\ell(kr)$  の漸近形 (17.81) であるから, (11.2) より  $A_{\ell m_\ell} = 4\pi i^\ell Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}})$  になり

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} i^\ell j_\ell(kr) Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{\ell m_\ell}(\Omega) = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell+1) j_\ell(kr) P_\ell(\cos \alpha) \quad (11.3)$$

を得る ( (17.83) )。最後の等式では (17.43) を用いた。 $\alpha$  は  $\mathbf{k}$  と  $\mathbf{r}$  のなす角である。再び, (17.81) より

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xrightarrow{kr \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{ikr} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} \left( e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr} \right) Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{\ell m_\ell}(\Omega) \quad (11.4)$$

であり  $(-1)^\ell Y_{\ell m_\ell}(\Omega_{\mathbf{k}}) = Y_{\ell m_\ell}(-\Omega_{\mathbf{k}})$  と球面調和関数の完全性 (17.41) から

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xrightarrow{kr \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{ikr} \left( e^{ikr} \delta(\Omega - \Omega_{\mathbf{k}}) - e^{-ikr} \delta(\Omega + \Omega_{\mathbf{k}}) \right) \quad (11.5)$$

になる。 $\mathbf{k}$  が  $z$  軸方向の場合 (11.3) より

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell+1) j_\ell(kr) P_\ell(\cos \theta) \quad (11.6)$$

である。

## 11.2 散乱断面積と境界条件

粒子が無遠方から入射してポテンシャルで散乱される問題を扱う。単位面積を単位時間あたりに  $N_{\text{in}}$  個の粒子が入射したとき、単位時間に立体角  $d\Omega$  を通過する散乱粒子の個数  $dN$  は  $N_{\text{in}}$  と  $d\Omega$  に比例するから

$$dN = N_{\text{in}} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (11.7)$$

と表せる。これで定義される  $\sigma$  を断面積、 $d\sigma/d\Omega$  を微分断面積という。 $dN$  は単位時間あたりの個数であるから次元は [時間] $^{-1}$ 、 $N_{\text{in}}$  の次元は [時間] $^{-1}$ [面積] $^{-1}$  である。したがって、 $\sigma$  の次元は面積になるから断面積という。古典力学で、剛体球による散乱では  $\sigma$  は球の断面積に一致する。微分断面積は 1 次元の散乱における反射率と透過率に対応する。

シュレーディンガー方程式

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad \text{ただし} \quad V(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \quad (11.8)$$

を解き微分断面積を求めるが、散乱問題に適した境界条件を設定する必要がある。粒子は無遠方から入射する。 $V(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$  であるから、入射波を運動量  $\hbar\mathbf{k}$  の平面波  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  とする。入射粒子のエネルギーは  $\hbar^2 k^2 / (2m)$  であり、(11.8) の  $E$  は  $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$  になる。入射波は  $V(\mathbf{r})$  により散乱され、 $r$  が十分大きい領域では、 $\psi(\mathbf{r})$  は入射波と散乱波に分離できるだろう：

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A \left( e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\Omega) \frac{\chi(r)}{r} \right)$$

$A$  は適当な規格化定数であり  $A = 1$  でもよい。以下では  $A = 1$  とする。 $\psi(\mathbf{r})$  を (11.8) に代入すると  $r \rightarrow \infty$  では

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \left( f(\Omega) \frac{\chi(r)}{r} \right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f(\Omega) \frac{\chi(r)}{r} \quad (11.9)$$

になる。(6.5) より

$$\nabla^2 \left( f(\Omega) \frac{\chi(r)}{r} \right) = \frac{1}{r} \left( \frac{d^2 \chi}{dr^2} f(\Omega) - \frac{\chi}{r^2} \mathbf{L}^2 f(\Omega) \right) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r} \frac{d^2 \chi}{dr^2} f(\Omega)$$

であるから、(11.9) は  $d^2 \chi / dr^2 + k^2 \chi = 0$  になり  $\chi(r)$  は球面波  $e^{\pm ikr}$  の線形結合で表せる。ここで  $\varphi_\pm(\mathbf{r}) = f(\Omega) e^{\pm ikr} / r$  の確率流 (1.6) を求める。 $\nabla$  を極座標で表すと (16.39) より

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \boldsymbol{\partial}, \quad \boldsymbol{\partial} = \mathbf{e}_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\mathbf{e}_\phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

であるから

$$\nabla \varphi_\pm(\mathbf{r}) = \pm ik f \frac{e^{\pm ikr}}{r} \mathbf{e}_r + \frac{e^{\pm ikr}}{r^2} (\boldsymbol{\partial} - \mathbf{e}_r) f \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \pm ik f \frac{e^{\pm ikr}}{r} \mathbf{e}_r = \pm ik \varphi_\pm(\mathbf{r}) \mathbf{e}_r \quad (11.10)$$



したがって、確率流は

$$\frac{\hbar}{m} \text{Im} \left( \varphi_{\pm}^*(\mathbf{r}) \nabla \varphi_{\pm}(\mathbf{r}) \right) = \pm \frac{\hbar k}{m} |\varphi_{\pm}(\mathbf{r})|^2 \mathbf{e}_r$$

になり、 $\varphi_+$  ( $\varphi_-$ ) は動径方向外向き (内向き) に速さ  $\hbar k/m$  で進む粒子を表わす。散乱波は散乱されて外向きに出て行く波だけであり内向きに進む波は含まないから、散乱波として  $\varphi_+(\mathbf{r})$  を採用する。つまり

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (11.11)$$

が散乱問題の境界条件である。 $f(\Omega)$  を**散乱振幅**という。 $\mathbf{k}$  を与えたとき、境界条件 (11.11) を満たすシュレーディンガー方程式の解は必ず1つ存在する。一方、境界条件が  $\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$  である束縛状態は、任意の  $E$  に対して存在するわけではない。

入射波を  $\varphi_{\text{in}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ 、散乱波を  $\varphi_{\text{out}}(\mathbf{r}) = f(\Omega) e^{ikr}/r$  とする。 $\mathbf{e}_k$  を  $\mathbf{k}$  方向の単位ベクトルとすると、確率流は

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left( \psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) \right) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[ \left( \varphi_{\text{in}}^* + \varphi_{\text{out}}^* \right) ik \left( \varphi_{\text{in}} \mathbf{e}_k + \varphi_{\text{out}} \mathbf{e}_r \right) \right] \\ &= \frac{\hbar k}{m} \left( |\varphi_{\text{in}}|^2 \mathbf{e}_k + |\varphi_{\text{out}}|^2 \mathbf{e}_r + \text{Re}(\varphi_{\text{in}} \varphi_{\text{out}}^*) (\mathbf{e}_r + \mathbf{e}_k) \right) \end{aligned} \quad (11.12)$$

になる。第1項は速さ  $\hbar k/m$  で流れる入射波の確率流を表す。確率流は単位時間、単位面積を通過する確率を表すから、単位時間、単位面積あたりの入射粒子の個数  $N_{\text{in}}$  は

$$N_{\text{in}} = \frac{\hbar k}{m} |\varphi_{\text{in}}|^2 = \frac{\hbar k}{m}$$

としてよい。(11.12) の第2項目は速さ  $\hbar k/m$  で動径外向きに流れる散乱波の確率流である。半径  $r$  の球面上で立体角  $d\Omega$  が表す面積は  $r^2 d\Omega$  であるから、この部分を単位時間に通過する散乱波の確率は

$$\frac{\hbar k}{m} |\varphi_{\text{out}}|^2 r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{m} |f(\Omega)|^2 d\Omega$$

これは単位時間に立体角  $d\Omega$  を通過する散乱粒子の個数  $dN$  とみなせる。(11.7) と上の2式を比較すれば、微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\Omega)|^2 \quad (11.13)$$

になる。波動関数の  $r \rightarrow \infty$  での漸近形から散乱振幅  $f(\Omega)$  が求まれば、微分断面積が得られる。

(11.12) の右辺第3項

$$\mathbf{J}_{\text{inter}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar k}{m} \text{Re}(\varphi_{\text{in}} \varphi_{\text{out}}^*) (\mathbf{e}_r + \mathbf{e}_k) = \frac{\hbar k}{mr} \text{Re} \left( e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - ikr} f^*(\Omega) (\mathbf{e}_r + \mathbf{e}_k) \right)$$

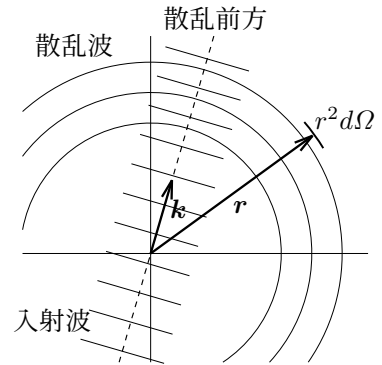
は入射波と散乱波の干渉項である。 $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  に (11.5) を代入すれば ( $\text{Re}(z/i) = \text{Im } z$ )

$$\mathbf{J}_{\text{inter}}(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar}{mr^2} \text{Im} \left[ f^*(\Omega) \left( \delta(\Omega - \Omega_{\mathbf{k}}) - e^{-2ikr} \delta(\Omega + \Omega_{\mathbf{k}}) \right) (\mathbf{e}_r + \mathbf{e}_k) \right]$$

$\Omega = \pm \Omega_{\mathbf{k}}$  のとき  $\mathbf{e}_r = \pm \mathbf{e}_k$  になるから

$$\delta(\Omega - \Omega_{\mathbf{k}}) (\mathbf{e}_r + \mathbf{e}_k) = \delta(\Omega - \Omega_{\mathbf{k}}) 2\mathbf{e}_k, \quad \delta(\Omega + \Omega_{\mathbf{k}}) (\mathbf{e}_r + \mathbf{e}_k) = 0$$

$$\therefore \mathbf{J}_{\text{inter}}(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi\hbar}{mr^2} \text{Im} f(\Omega_{\mathbf{k}}) \delta(\Omega - \Omega_{\mathbf{k}}) \mathbf{e}_k$$



である。定常状態の場合、確率保存  $\partial\rho/\partial t + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$  は  $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$  になるが、これを半径  $r$  の球で体積積分し、ガウスの定理を使うと

$$r^2 \int d\Omega \mathbf{J} \cdot \mathbf{e}_r = 0$$

になる。 $r \rightarrow \infty$  では  $\mathbf{J}$  は (11.12) で与えられる。各々の寄与は

$$\begin{aligned} \frac{\hbar k}{m} \int d\Omega |\varphi_{\text{in}}|^2 \mathbf{e}_k \cdot \mathbf{e}_r &= \frac{\hbar k}{m} \int d\Omega \mathbf{e}_k \cdot \mathbf{e}_r = 0 \\ \frac{\hbar k}{m} \int d\Omega |\varphi_{\text{out}}|^2 \mathbf{e}_r \cdot \mathbf{e}_r &= \frac{\hbar k}{m} \frac{\sigma_{\text{tot}}}{r^2}, \quad \sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega |f(\Omega)|^2 = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} \\ \int d\Omega \mathbf{J}_{\text{inter}}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{e}_r &= -\frac{4\pi\hbar}{mr^2} \text{Im} f(\Omega_{\mathbf{k}}) \int d\Omega \delta(\Omega - \Omega_{\mathbf{k}}) \mathbf{e}_r \cdot \mathbf{e}_k = -\frac{4\pi\hbar}{mr^2} \text{Im} f(\Omega_{\mathbf{k}}) \end{aligned}$$

ここで、 $\sigma_{\text{tot}}$  は全断面積である。したがって

$$r^2 \int d\Omega \mathbf{J} \cdot \mathbf{e}_r = \frac{\hbar k}{m} \left( \sigma_{\text{tot}} - \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\Omega_{\mathbf{k}}) \right) = 0, \quad \therefore \sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\Omega_{\mathbf{k}}) \quad (11.14)$$

になる。これを**光学定理**といい、前方散乱の散乱振幅  $f(\Omega_{\mathbf{k}})$  の虚部と全断面積の関係を与える。光学定理は確率保存を表す。散乱がなければ入射波は全て前方に通り抜けるが、散乱が起こると散乱部分は前方から取り除かれる。前方方向の流れ  $\mathbf{J}_{\text{inter}}$  は取り除かれた部分を表すわけである。

### グリーン関数

シュレーディンガー方程式 (11.8) は

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}), \quad U(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \quad (11.15)$$

と表せる。

$$(\nabla^2 + k^2) G(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \quad (11.16)$$

を満たすグリーン関数  $G(\mathbf{r})$  を用いると (11.15) は積分方程式

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \int d^3r' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'), \quad \text{ただし} \quad (\nabla^2 + k^2) \varphi(\mathbf{r}) = 0 \quad (11.17)$$

になる。実際

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = \int d^3r' (\nabla^2 + k^2) G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') = \int d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') = U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$$

であるから (11.17) は (11.15) を満たす。(11.17) は  $\varphi(\mathbf{r})$  と  $G(\mathbf{r})$  を適切に選べば、境界条件 (11.11) を自動的に満たす。このため、(11.15) を解くよりも (11.17) を用いた方が便利になることがある。

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\mathbf{r}), \quad \nabla \frac{1}{r} = -\frac{\mathbf{r}}{r^3}, \quad \nabla e^{\pm ikr} = \pm \frac{i\mathbf{k}\mathbf{r}}{r} e^{\pm ikr}, \quad \nabla^2 e^{\pm ikr} = \left( -k^2 \pm \frac{2i\mathbf{k}}{r} \right) e^{\pm ikr}$$

より

$$\nabla^2 \frac{e^{\pm ikr}}{r} = e^{\pm ikr} \nabla^2 \frac{1}{r} + 2 \left( \nabla \frac{1}{r} \right) \cdot \nabla e^{\pm ikr} + \frac{1}{r} \nabla^2 e^{\pm ikr} = -4\pi \delta(\mathbf{r}) - k^2 \frac{e^{\pm ikr}}{r}$$

になるから

$$G^{(\pm)}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \quad (11.18)$$

は (11.16) を満たす (問題 11.1 参照)。これを (11.17) に代入すると

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{\exp(\pm i\mathbf{k}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (11.19)$$

$\mathbf{r}$  と  $\mathbf{r}'$  のなす角を  $\alpha$  とすると ( (17.86) 参照 )

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = r \sqrt{1 + \frac{r'^2}{r^2} - 2 \frac{r'}{r} \cos \alpha} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} r \left( 1 - \frac{r'}{r} \cos \alpha + \dots \right) = r \left( 1 - \frac{\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{r}'}{r} + O((r'/r)^2) \right)$$

であるから

$$\frac{\exp(\pm i k |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{\exp(\pm i k r \mp i \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')}{r} (1 + O(r'/r)), \quad \text{ただし } \mathbf{k}' = k \mathbf{e}_r$$

多くの場合, 適当な  $R$  に対して  $r \gtrsim R$  で  $U(\mathbf{r}) \approx 0$  になる。(11.19) の積分に寄与するのは  $r' \lesssim R$  の領域であるから,  $r \gg R$  では  $r'/r \ll 1$  になり

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \varphi(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm i k r}}{r} \int d^3 r' e^{\mp i \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}')$$

これから  $G(\mathbf{r})$  として  $G^{(+)}(\mathbf{r})$ ,  $(\nabla^2 + k^2) \varphi(\mathbf{r}) = 0$  の解として  $\varphi(\mathbf{r}) = e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  を用いた

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \psi_{\text{sc}}(\mathbf{r}), \quad \psi_{\text{sc}}(\mathbf{r}) = \int d^3 r' G^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (11.20)$$

は境界条件 (11.11) を満たす。このとき, 散乱振幅は

$$f(\Omega) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 r e^{-i \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \langle \mathbf{k}' | U | \psi \rangle, \quad \mathbf{k}' = k \mathbf{e}_r \quad (11.21)$$

になる。 $\hbar \mathbf{k}'$  は  $\mathbf{r}$  方向の運動量, つまり, 散乱後に観測される粒子の運動量である。 $U(\mathbf{r})$  の作用範囲が有限な場合, (11.21) は散乱振幅を散乱の波動関数  $\psi(\mathbf{r})$  で表した厳密な結果である。なお,  $U(\mathbf{r})$  の作用範囲が無限でも (11.20) は成り立つが, 散乱振幅は (11.21) にはならない。

**問題 11.1**  $\varepsilon > 0$  として  $G_\varepsilon^{(\pm)}(\mathbf{r}) = (\nabla^2 + k^2 \pm i\varepsilon)^{-1} \delta(\mathbf{r})$  とする。

$$G_\varepsilon^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{-q^2 + k^2 \pm i\varepsilon} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm i k r - \varepsilon r}}{r} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow +0} G^{(\pm)}(\mathbf{r}) \quad (11.22)$$

を示せ。境界条件  $e^{\pm i k r}/r$  を満たすには  $\pm i\varepsilon$  が必要である。

$U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = (\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = (\nabla^2 + k^2) \psi_{\text{sc}}(\mathbf{r})$  であるから

$$I_1(\mathbf{p}) = \int d^3 r e^{-i \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = \int d^3 r e^{-i \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} (\nabla^2 + k^2) \psi_{\text{sc}}(\mathbf{r})$$

を考える。 $I_1(p = k) = -4\pi f(\Omega_p)$  である。(11.22) において  $\varepsilon$  を残しておくと  $r \rightarrow \infty$  のとき  $\psi_{\text{sc}}(\mathbf{r})$  は  $e^{-\varepsilon r}$  を含むから部分積分できて

$$I_1(\mathbf{p}) = I_2(\mathbf{p}), \quad I_2 = \int d^3 r \psi_{\text{sc}}(\mathbf{r}) (\nabla^2 + k^2) e^{-i \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} = (k^2 - p^2) \langle \mathbf{p} | \psi_{\text{sc}} \rangle$$

になる。 $p = k$  のとき  $I_2 = 0$  より  $f(\Omega_p) = 0$ , つまり, 散乱は起こらないという奇妙なことになりそうだが, 上式は  $\langle \mathbf{p} | \psi_{\text{sc}} \rangle$  が  $1/(k^2 - p^2)$  で発散することを表す。実際, (11.22) より

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \psi_{\text{sc}} \rangle &= \int d^3 r d^3 r' e^{-i \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} G_\varepsilon^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \\ &= \int d^3 r' e^{-i \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \int d^3 s e^{-i \mathbf{p} \cdot \mathbf{s}} G_\varepsilon^{(+)}(\mathbf{s}) = \frac{I_1(\mathbf{p})}{k^2 - p^2 + i\varepsilon} \end{aligned}$$

である。

## 11.3 ボルン近似

(11.19) より

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}) &= \varphi(\mathbf{r}) + \int d^3r' G^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \\
&= \varphi(\mathbf{r}) + \int d^3r' G^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \left( \varphi(\mathbf{r}') + \int d^3r'' G^{(+)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \psi(\mathbf{r}'') \right) \\
&= \varphi(\mathbf{r}) + \int d^3r' G^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}') + \cdots
\end{aligned} \tag{11.23}$$

になり摂動展開が得られる。これを (11.21) に代入すると  $\varphi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  より

$$f(\Omega) = f_b(\Omega) + f_2(\Omega) + \cdots \tag{11.24}$$

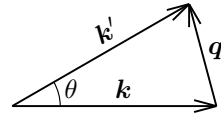
ただし

$$\begin{aligned}
f_b(\Omega) &= -\frac{1}{4\pi} \mathcal{U}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}), \quad \mathcal{U}(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \\
f_2(\Omega) &= -\frac{1}{4\pi} \int d^3r d^3r' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') G^{(+)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) U(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{4\pi} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\mathcal{U}(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \mathcal{U}(\mathbf{q} - \mathbf{k})}{q^2 - k^2 - i\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow +0
\end{aligned} \tag{11.25}$$

である。ここで (11.22) を用いた。  $V$  の 2 次以上を無視すると  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  として

$$f(\Omega) \approx f_b(\Omega) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \mathcal{V}(\mathbf{q}), \quad \mathcal{V}(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \tag{11.26}$$

になる。これを**ボルン近似**という。 $\hbar\mathbf{q}$  は散乱により粒子が  $V(\mathbf{r})$  から受け取る運動量である。ボルン近似では、散乱振幅は  $V(\mathbf{r})$  のフーリエ変換  $\mathcal{V}(\mathbf{q})$  に比例する。散乱角  $\theta$  は、図より  $q = 2k \sin(\theta/2)$  である。(11.26) はフェルミの黄金律による結果 (10.43) と一致する。



低エネルギー ( $k \approx 0$ ) の場合  $q \approx 0$  であるから  $\mathcal{V}(\mathbf{q}) \approx \mathcal{V}(0)$  になり  $f_b(\Omega)$  は方向に依存せず等方的になる。一方、高エネルギー ( $k \rightarrow \infty$ ) では  $\theta \neq 0$  ならば  $q$  は非常に大きくなるから  $e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$  は  $\mathbf{r}$  の関数として激しく振動し  $\mathcal{V}(\mathbf{q}) \approx 0$  になる。このため  $f_b(\Omega)$  は  $\theta \approx 0$ , ( $\Omega \approx \Omega_k$ ) の前方に集中する。なお、 $\mathcal{V}(0)$  は実数であるから  $f_b(\Omega_k)$  も実数になり、ボルン近似では光学定理 (11.14) は成り立たない。ただし、 $f_b(\Omega)$  は  $V$  について 1 次であるが、微分断面積  $|f_b(\Omega)|^2$  は  $V$  の 2 次になるから、 $V$  の 2 次まで考慮した  $\text{Im}f_2(\Omega_k)$  と比較すべきである (**問題 11.2** 参照)。

中心力の場合、角度積分を行えば

$$\mathcal{V}(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V(r) = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr r V(r) \sin(qr), \quad q = 2k \sin(\theta/2)$$

になり大きさ  $q$  だけで決まる。全断面積  $\sigma_{\text{tot}}$  は

$$\sigma_{\text{tot}} \approx \int d\Omega |f_b(\Omega)|^2 = 2\pi \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta |\mathcal{V}(q)|^2$$

積分変数を  $q = 2k \sin(\theta/2)$  にすると  $0 \leq q \leq 2k$ ,  $q dq = k^2 \sin\theta d\theta$  であるから

$$\sigma_{\text{tot}} \approx \frac{m^2}{2\pi\hbar^4 k^2} \int_0^{2k} dq q |\mathcal{V}(q)|^2 \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{m^2}{2\pi\hbar^4 k^2} \int_0^\infty dq q |\mathcal{V}(q)|^2 \tag{11.27}$$

になる。高エネルギー ( $k \rightarrow \infty$ ) では  $\sigma_{\text{tot}}$  はエネルギー  $E$  に逆比例する。

ボルン近似は (11.21) において  $\psi(\mathbf{r}) \approx \varphi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  で近似する。(11.23) より

$$|\varphi(\mathbf{r})| = 1 \gg \left| \int d^3 r' G^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}') \right|$$

ならば、ボルン近似はよい近似になる。代表的な点として原点  $\mathbf{r} = 0$  を考えると

$$|C_B| \ll 1, \quad \text{ただし} \quad C_B = \int d^3 r G^{(+)}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 r \frac{e^{ikr+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r} V(\mathbf{r}) \quad (11.28)$$

$k \rightarrow \infty$  のとき, (11.5) を用いると上の条件は

$$\frac{m}{\hbar^2 k} \left| \int_0^\infty dr \int d\Omega \left( \delta(\Omega + \Omega_k) - e^{2ikr} \delta(\Omega - \Omega_k) \right) V(\mathbf{r}) \right| \ll 1$$

したがって、高エネルギー散乱ではボルン近似は有効である。

### 井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} V_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (11.29)$$

の場合

$$\mathcal{V}(\mathbf{q}) = 4\pi V_0 a^3 f(aq), \quad f(x) = \frac{\sin x - x \cos x}{x^3} = \frac{1}{3} \left( 1 - \frac{x^2}{10} + \cdots \right) \quad (11.30)$$

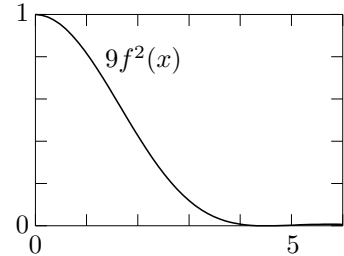
微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (av_0)^2 f^2(aq) \xrightarrow{aq \rightarrow 0} \frac{(av_0)^2}{9} \left( 1 - \frac{4}{5} a^2 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \cdots \right), \quad v_0 = \frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2} \quad (11.31)$$

になる。ボルン近似では前方 ( $\theta = 0$ ) での微分断面積はエネルギーに依らない。また,  $k \rightarrow 0$  では微分断面積は  $\theta$  に依存せず等方的になる。右図より  $x \gtrsim 4$  では  $f^2(x) \approx 0$  になるから、粒子は

$$aq = 2ak \sin \frac{\theta}{2} \lesssim 4, \quad \text{つまり} \quad \sin \frac{\theta}{2} \lesssim \frac{2}{ak}$$

に散乱され,  $k$  が大きいほど前方に集中する。(11.27) と (11.30) より全断面積は



$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{2\pi v_0^2}{k^2} S(2ak), \quad S(x) = \int_0^x dy y f^2(y) = \frac{1}{4} \left( 1 - \frac{(\sin x - x \cos x)^2}{x^4} - \frac{\sin^2 x}{x^2} \right) \quad (11.32)$$

になる。これから

$$\sigma_{\text{tot}} \xrightarrow{ak \rightarrow 0} \frac{4\pi}{9} (av_0)^2, \quad \sigma_{\text{tot}} \xrightarrow{ak \rightarrow \infty} \frac{\pi v_0^2}{2k^2} \quad (11.33)$$

である。(11.28) は

$$C_B = \frac{mV_0}{2\pi\hbar^2} \int_0^a d^3 r \frac{e^{ikr+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r} = \frac{mV_0}{2\hbar^2 k^2} (1 + 2iak - e^{2iak})$$

になる。 $k \rightarrow \infty$  では  $C_B \rightarrow 0$  になるから、ボルン近似は常によい近似である。一方、低エネルギーでは  $e^{2iak} = 1 + 2iak - 2a^2 k^2 + \cdots$  より  $C_B \approx ma^2 V_0 / \hbar^2$  になる。152 ページで示したように、引力の 3 次元井戸型ポテンシャルで束縛状態が存在する条件は  $ma^2 |V_0| / \hbar^2 > \pi^2 / 8 \sim 1$  であるから、束縛状態が存在する場合、低エネルギー散乱ではボルン近似は成り立たない。

## 湯川ポテンシャル

$\mu > 0$  として  $V(r) = v_0 e^{-\mu r}/r$  の場合

$$\mathcal{V}(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(r) = \frac{4\pi g}{q} \int_0^\infty dr e^{-\mu r} \sin(qr) = \frac{4\pi v_0}{q^2 + \mu^2} \quad (11.34)$$

になるから

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2mv_0/\hbar^2)^2}{(q^2 + \mu^2)^2}, \quad \sigma_{\text{tot}} = \frac{m^2}{2\pi\hbar^4 k^2} \int_0^{2k} dq q |\mathcal{V}(q)|^2 = \frac{4\pi(2mv_0/\hbar^2)^2}{\mu^2(4k^2 + \mu^2)} \quad (11.35)$$

である。 $\mathbf{k}$  と  $\mathbf{r}$  のなす角を  $\theta$  とし  $t = \cos\theta + 1$  とすると (11.28) は

$$C_B = \frac{mv_0}{\hbar^2} \int_0^2 dt \int_0^\infty dr e^{ikrt - \mu r} = \frac{mv_0}{\hbar^2} \int_0^2 \frac{dt}{\mu - ikt} = \frac{mv_0}{\hbar^2 k} \left( \tan^{-1} \frac{2k}{\mu} + i \log \sqrt{1 + (2k/\mu)^2} \right)$$

になる。

**問題 11.2** 湯川ポテンシャル  $U(r) = ge^{-\mu r}/r$ ,  $g = 2mv_0/\hbar^2$  の場合, 2 次の摂動 (11.25)

$$f_2(\theta) = \frac{g^2}{2\pi^2 k^3} \int d^3p \frac{1}{p^2 - 1 - i\varepsilon} \frac{1}{|\mathbf{p} - \mathbf{e}|^2 + \nu^2} \frac{1}{|\mathbf{p} - \mathbf{e}'|^2 + \nu^2}, \quad \mathcal{U}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi g}{q^2 + \mu^2}$$

を求める。ただし,  $\mathbf{p} = \mathbf{q}/k$ ,  $\nu = \mu/k$ ,  $\mathbf{e} = \mathbf{k}/k$ ,  $\mathbf{e}' = \mathbf{k}'/k$  とした。 $\theta$  は  $\mathbf{k}$  と  $\mathbf{k}'$  のなす角である。

1. ファインマンの公式

$$\frac{1}{AB} = \int_0^1 \frac{dx}{(Ax + B(1-x))^2}$$

より

$$f_2(\theta) = \frac{g^2}{2\pi k^3} \int_0^1 \frac{dx}{b} \int_{-\infty}^\infty dp \frac{p}{p^2 - 1 - i\varepsilon} \frac{1}{p^2 - 2bp + 1 + \nu^2}, \quad b = \sqrt{1 - 4x(1-x)\sin^2 \frac{\theta}{2}} \leq 1$$

を示せ。 $p$  の積分は 1 位の極  $1 + i\varepsilon$  と  $b + i\sqrt{1 + \nu^2 - b^2}$  の留数で表せる。

2.  $4\pi \text{Im} f_2(0)/k$  がボルン近似の全断面積 (11.35) に一致することを示せ (光学定理)。

3.  $\theta \neq 0$  の場合,  $x$  の積分は積分変数を  $b$  または  $y = x(1-x)$  にすれば解析的に求まる。

$$f_2(\theta) \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} \frac{ig^2}{4k^3 \sin^2(\theta/2)} \log \left| \frac{2k \sin(\theta/2)}{\mu} \right| \quad (11.36)$$

を示せ。 $U(r) \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} g/r$  の場合  $f_2(\theta)$  は発散するから (11.21), (11.24) は適用できない。

## 11.4 中心力ポテンシャルと部分波展開

ボルン近似は高エネルギーではよい近似になるが, 低エネルギーではポテンシャルが十分弱くないと適用できない。ここでは, 中心力ポテンシャルの場合, シュレーディンガー方程式を近似なしに解き, 散乱の境界条件 (11.11) を満たす解を求める。

中心力ポテンシャル  $V(r)$  の場合,  $H$ ,  $L^2$ ,  $L_z$  の同時固有関数  $\psi(\mathbf{r})$  が存在する。これは球面調和関数  $Y_{\ell m_\ell}(\Omega)$  を用いて

$$\psi(\mathbf{r}) = R_\ell(r) Y_{\ell m_\ell}(\Omega)$$

と表せる。シュレーディンガー方程式 (11.8) は (6.7)

$$\left( \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right) R_\ell(r) = 0, \quad U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \quad (11.37)$$

あるいは

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right) \chi_\ell(r) = 0, \quad R_\ell(r) = \frac{\chi_\ell(r)}{r} \quad (11.38)$$

になる。(6.12) より  $C_\ell$  を任意定数として  $R_\ell(r) = \chi_\ell(r)/r \xrightarrow{r \rightarrow 0} C_\ell r^\ell$  である。この境界条件から出発して  $r \rightarrow \infty$  の方向に (11.37) を解く。 $R_\ell(r)$  は  $C_\ell$  を除くと実数である。 $U(r)$  が  $1/r^2$  に比べて早く 0 になるとすれば (したがって,  $U \propto 1/r$  のときは以下の議論は適用できない),  $r$  が十分大きい領域では (11.37) は自由粒子と同じ方程式になるから  $R_\ell(r)$  は

$$R_\ell(r) = C_\ell \left( a_\ell j_\ell(kr) + b_\ell n_\ell(kr) \right) = A_\ell \left( \cos \delta_\ell j_\ell(kr) - \sin \delta_\ell n_\ell(kr) \right) \quad (11.39)$$

とおける。 $a_\ell, b_\ell$  は実数であるから  $\delta_\ell$  は実数である。この  $R_\ell$  は  $r$  が十分大きい領域での漸近形であるから, 原点で発散する  $n_\ell(kr)$  を含んでいても構わない。原点から解き始めてくれば,  $\delta_\ell$  は自動的に求まる量で  $k$  の関数  $\delta_\ell(k)$  である。球ベッセル関数の漸近形 (17.81) を用いると

$$R_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{A_\ell}{kr} \sin \left( kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell \right) = \frac{A_\ell}{2ikr} \left( i^{-\ell} e^{ikr+i\delta_\ell} - i^\ell e^{-ikr-i\delta_\ell} \right) \quad (11.40)$$

になる。自由粒子の場合, (11.39) は全ての領域で厳密な解であり, 原点で発散してはならないから  $\delta_\ell = 0$  である。したがって,  $r \rightarrow \infty$  での波動関数に対するポテンシャルの影響は位相  $\delta_\ell$  に現れる。 $\delta_\ell$  を  $\ell$  波の位相のずれ (phase shift) という。 $R_\ell(r)Y_{\ell m_\ell}(\theta, \phi)$  を  $\ell, m_\ell$  について和をとった波動関数は, 角運動量の固有状態ではないがシュレーディンガー方程式の解であるから, 境界条件 (11.11) を満たす  $\psi(\mathbf{r})$  は

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} a_{\ell m_\ell} R_\ell(r) Y_{\ell m_\ell}(\Omega) \quad (11.41)$$

と展開できる。角運動量の固有状態である  $R_\ell(r)Y_{\ell m_\ell}(\Omega)$  を部分波, (11.41) を部分波展開という。

(11.41) が境界条件 (11.11) を満たすようにする。(11.40) から

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{\ell, m_\ell} b_{\ell m_\ell} i^{-\ell} e^{i\delta_\ell} Y_{\ell m_\ell}(\Omega) - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{\ell, m_\ell} b_{\ell m_\ell} i^\ell e^{-i\delta_\ell} Y_{\ell m_\ell}(\Omega) \quad (11.42)$$

になる。ただし  $b_{\ell m_\ell} = A_\ell a_{\ell m_\ell}$  とした。一方, 境界条件 (11.11) は (11.4) より

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r} &= \frac{e^{ikr}}{2ikr} \left( 4\pi \sum_{\ell, m_\ell} Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{\ell m_\ell}(\Omega) + 2ikf(\Omega) \right) \\ &\quad - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{\ell, m_\ell} 4\pi (-1)^\ell Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{\ell m_\ell}(\Omega) \end{aligned} \quad (11.43)$$

(11.42) と (11.43) を比較すると, 両者の  $e^{ikr}$  及び  $e^{-ikr}$  の係数は一致しなければならないから

$$\begin{aligned} \sum_{\ell, m_\ell} b_{\ell m_\ell} i^{-\ell} e^{i\delta_\ell} Y_{\ell m_\ell}(\Omega) &= 4\pi \sum_{\ell, m_\ell} Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{\ell m_\ell}(\Omega) + 2ikf(\Omega) \\ \sum_{\ell, m_\ell} b_{\ell m_\ell} i^\ell e^{-i\delta_\ell} Y_{\ell m_\ell}(\Omega) &= 4\pi \sum_{\ell, m_\ell} (-1)^\ell Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{\ell m_\ell}(\Omega) \end{aligned}$$

第2式より

$$b_{\ell m_\ell} = 4\pi i^\ell e^{i\delta_\ell} Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) \quad (11.44)$$

これを第1式に代入すると, 加法定理 (17.43) より

$$f(\Omega) = \frac{4\pi}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} (e^{2i\delta_\ell} - 1) Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{\ell m_\ell}(\Omega) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) (e^{2i\delta_\ell} - 1) P_\ell(\cos \theta)$$

になる。ここで  $\theta$  は  $\mathbf{r}$  と  $\mathbf{k}$  のなす角である。 $\mathbf{k}$  方向を  $z$  軸にとれば (17.35) より同じ結果を得る。位相のずれ  $\delta_\ell$  が求まれば, 散乱振幅が決まる。中心力の場合, 散乱は入射運動量  $\hbar\mathbf{k}$  の方向に軸対称であるから,  $f(\Omega)$  は  $\theta$  だけに依存し  $\phi$  には無関係である。

$$S_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell(k)} = \frac{\cot \delta_\ell + i}{\cot \delta_\ell - i}, \quad f_\ell(k) = \frac{S_\ell(k) - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell}{k} = \frac{1}{k} \frac{1}{\cot \delta_\ell - i} \quad (11.45)$$

とすると

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) (S_\ell(k) - 1) P_\ell(\cos \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) f_\ell(k) P_\ell(\cos \theta) \quad (11.46)$$

になる。 $S_\ell(k)$  を  $\ell$  部分波の **S 行列 ( 散乱行列 )**,  $f_\ell(k)$  を **部分波振幅** という。微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \sum_{\ell, \ell'} (2\ell+1)(2\ell'+1) f_\ell(k) f_{\ell'}^*(k) P_\ell(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta)$$

になり, 異なる部分波の干渉が存在する。一方, 全断面積  $\sigma_{\text{tot}}$  は  $t = \cos \theta$  とすると (17.29) より

$$\sigma_{\text{tot}} = 2\pi \sum_{\ell, \ell'} (2\ell+1)(2\ell'+1) f_\ell f_{\ell'}^* \int_{-1}^1 dt P_\ell(t) P_{\ell'}(t) = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) |f_\ell|^2$$

になる。 $\ell$  波の部分波による寄与  $\sigma_\ell$  は

$$\sigma_\ell = 4\pi (2\ell+1) |f_\ell|^2 = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell \leq \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \quad (11.47)$$

である。前方散乱 ( $\theta = 0$ ) の散乱振幅は  $P_\ell(\cos 0) = P_\ell(1) = 1$  より

$$f(0) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell, \quad \therefore \quad \text{Im} f(0) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}$$

になり光学定理 (11.14) が成り立つ。

(11.44) を (11.41) に代入すると

$$\psi(\mathbf{r}) = 4\pi \sum_{\ell, m_\ell} i^\ell e^{i\delta_\ell} \frac{R_\ell(r)}{A_\ell} Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{\ell m_\ell}(\Omega) \quad (11.48)$$

(11.40) から

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{ikr} \sum_{\ell, m_\ell} \left( e^{2i\delta_\ell} e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr} \right) Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{\ell m_\ell}(\Omega)$$

である。これを平面波  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  の漸近形 (11.4) と比較すると, ポテンシャルは外向き球面波の位相をずらす。内向き球面波には何の影響も及ぼさないが, 内向き球面波は入射波以外にはないという境界条件を設定したから当然の結果である。 $e^{2i\delta_\ell} e^{ikr} = e^{ikr} + (e^{2i\delta_\ell} - 1) e^{ikr}$  と分解すると, 最初の  $e^{ikr}$  が入射波の外向き球面波を表し, 残りの部分が散乱波を与える。



(11.40) より  $\ell$  波は  $r \rightarrow \infty$  では

$$R_\ell(r) = -\frac{i^\ell A_\ell e^{-i\delta_\ell}}{2ikr} \left( e^{-ikr} - (-1)^\ell S_\ell(k) e^{ikr} \right) = \frac{(-i)^\ell e^{i\delta_\ell} A_\ell}{2ikr} \left( e^{ikr} - (-1)^\ell S_\ell^{-1}(k) e^{-ikr} \right) \quad (11.49)$$

である。  $E$  が負の場合  $\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2} > 0$  とする。  $k = i\kappa$  ならば

$$R_\ell(r) = \frac{(-i)^\ell e^{i\delta_\ell} A_\ell}{2ikr} \left( e^{-\kappa r} - (-1)^\ell S_\ell^{-1}(i\kappa) e^{\kappa r} \right)$$

になる。したがって、  $S_\ell^{-1}(i\kappa) = 0$  のとき  $R(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$  になり束縛状態の境界条件を満たす。これから角運動量  $\ell$  の束縛状態のエネルギーが求まる。1次元で透過率あるいは反射率が、束縛状態のエネルギーで発散するのと同じである。詳しくは 288 ページ以降で考察する。

### 11.5 位相のずれの積分公式

$R_\ell(r) = A_\ell \chi_\ell(r)/(kr)$  とすると (11.40) より

$$\chi_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right) \quad (11.50)$$

である。  $\chi_\ell(r)$  はこの漸近形と  $\chi_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} C_\ell r^{\ell+1}$  を満たす (11.38)

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right) \chi_\ell(r) = 0 \quad (11.51)$$

の解である。同じエネルギーで、別のポテンシャル  $\tilde{V}(r)$  の解を  $\tilde{\chi}_\ell(r)$  とする：

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \tilde{U}(r) + k^2 \right) \tilde{\chi}_\ell(r) = 0 \quad (11.52)$$

境界条件は

$$\tilde{\chi}_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \tilde{C}_\ell r^{\ell+1}, \quad \tilde{\chi}_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \tilde{\delta}_\ell\right)$$

である。  $\chi_\ell \times (11.52) - \tilde{\chi}_\ell \times (11.51)$  より、ロンスキアン  $W(r) = \chi_\ell \frac{d\tilde{\chi}_\ell}{dr} - \frac{d\chi_\ell}{dr} \tilde{\chi}_\ell$  は

$$\frac{dW}{dr} = \left( \tilde{U}(r) - U(r) \right) \tilde{\chi}_\ell \chi_\ell, \quad \therefore \quad W(\infty) - W(0) = \int_0^\infty dr \left( \tilde{U}(r) - U(r) \right) \tilde{\chi}_\ell \chi_\ell$$

境界条件より  $W(0) = 0$ ,  $W(\infty) = k \sin(\delta_\ell - \tilde{\delta}_\ell)$  になるから

$$\sin(\delta_\ell - \tilde{\delta}_\ell) = \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty dr \left( \tilde{V}(r) - V(r) \right) \tilde{\chi}_\ell \chi_\ell \quad (11.53)$$

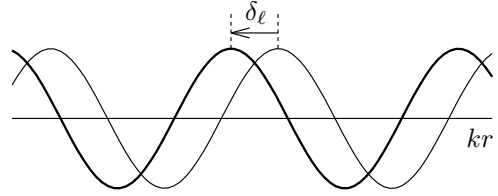
である。特に、  $\tilde{V}(r) = 0$  とすると  $\tilde{\delta}_\ell = 0$ ,  $\tilde{\chi}_\ell(r) = kr j_\ell(kr)$  であるから

$$\sin \delta_\ell = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r V(r) j_\ell(kr) \chi_\ell(r) \quad (11.54)$$

になる。(11.51) の解  $\chi_\ell(r)$  が分かれば、位相のずれ  $\delta_\ell$  が求まる。  $r \rightarrow 0$  では  $j_\ell(kr) \chi_\ell(r)$  は  $(kr)^{2\ell+2}$  に比例する。斥力の遠心力ポテンシャル  $\hbar^2 \ell(\ell+1)/(2mr^2)$  は  $\ell$  が大きいほど強くなるため、大きな  $\ell$  波ほど原点に近づけない。したがって、  $V(r)$  の作用範囲が有限で低エネルギーの場合、大きな  $\ell$  波は  $V(r)$  の影響を受けず  $\sin \delta_\ell \approx 0$  になるから、部分波展開は有効な方法になる。

$\Delta V(r) = V(r) - \tilde{V}(r)$  が微小の場合, (11.53) より

$$\delta_\ell - \tilde{\delta}_\ell \approx -\frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty dr \Delta V(r) (\tilde{\chi}_\ell(r))^2$$



になるから, 位相のずれの変化はポテンシャルの変化と逆符号である。したがって,  $V(r) = 0$  から出発し微小変化を繰り返して  $V(r)$  に到達すれば, 引力ポテンシャル  $V(r) < 0$  のとき  $\delta_\ell > 0$ , 斥力ポテンシャル  $V(r) > 0$  のとき  $\delta_\ell < 0$  になる。引力ポテンシャルの場合, 動径方向の波動関数は  $V(r) = 0$  に比べて原点側に引き込まれる。この様子を  $r \rightarrow \infty$  での  $\chi_\ell(r)$  の漸近形 (11.50) で図示すると上図のようになり  $\delta_\ell > 0$  である。太い曲線が  $\chi_\ell(r)$ , 細い曲線は  $\delta_\ell = 0$  の場合である。一方, 斥力の場合は押し出され  $\delta_\ell < 0$  になる。なお,  $\sin \delta_\ell$  を与えても  $\delta_\ell$  は一意には決まらない。ここでは,  $V(r) = 0$  のとき  $\delta_\ell = 0$  とし, これから  $\delta_\ell$  が連続的に変化するとして不定性を除いてある。

(11.54) を別の方法で導く。(11.21) に (11.48) を代入すると ( $R_\ell(r)/A_\ell = \chi_\ell(r)/(kr)$ )

$$f(\Omega) = - \sum_{\ell, m_\ell} i^\ell e^{i\delta_\ell} \int d^3 r' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} U(r') \frac{\chi_\ell(r')}{kr'} Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{\ell m_\ell}(\Omega') \quad (11.55)$$

$e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'}$  に (11.3) の複素共役を代入すると ( $\mathbf{k}' = k\mathbf{e}_r$ )

$$\begin{aligned} f(\Omega) &= -\frac{4\pi}{k} \sum_{\substack{\ell m_\ell \\ LM}} i^{\ell-L} e^{i\delta_\ell} Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{LM}(\Omega) \int_0^\infty dr' r' U(r') j_L(kr') \chi_\ell(r') \int d\Omega' Y_{\ell m_\ell}(\Omega') Y_{LM}^*(\Omega') \\ &= -\frac{4\pi}{k} \sum_{\ell, m_\ell} e^{i\delta_\ell} Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{\ell m_\ell}(\Omega) \int_0^\infty dr r U(r) j_\ell(kr) \chi_\ell(r) \end{aligned}$$

ただし, 球面調和関数の直交性 (17.40) を用いた。加法定理 (17.43) あるいは  $\mathbf{k}$  を  $z$  軸にとれば

$$f(\theta) = -\frac{1}{k} \sum_{\ell} e^{i\delta_\ell} (2\ell+1) P_\ell(\cos \theta) \int_0^\infty dr r U(r) j_\ell(kr) \chi_\ell(r) \quad (11.56)$$

になる。(11.46) と比較すると (11.54) を得る。

ボルン近似は  $f(\Omega)$  を  $V$  の 1 次近似で求める。これは, (11.55) で  $\delta_\ell$  と  $\chi_\ell(r)$  を自由粒子の結果  $\delta_\ell = 0, \chi_\ell(r) = kr j_\ell(kr)$  で置き換えることである。(11.3) より (11.55) は

$$f_b(\theta) = - \sum_{\ell, m_\ell} i^\ell \int d^3 r' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} U(r') j_\ell(kr') Y_{\ell m_\ell}^*(\Omega_{\mathbf{k}}) Y_{\ell m_\ell}(\Omega') = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 r' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' U(r')$$

になり, ボルン近似の散乱振幅 (11.26) を再現する。(11.56) で同じ置き換えをすれば

$$f_b(\theta) = - \sum_{\ell=0}^\infty (2\ell+1) P_\ell(\cos \theta) \int_0^\infty dr r^2 U(r) j_\ell^2(kr) \quad (11.57)$$

になる。(11.54) より, ボルン近似での位相のずれは

$$\sin \delta_\ell \approx -\frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 V(r) j_\ell^2(kr)$$

である。井戸型ポテンシャル (11.29) の場合

$$\sin \delta_\ell \approx -\frac{2mV_0 k}{\hbar^2} \int_0^a dr r^2 j_\ell^2(kr) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} \int_0^{ak} dx x^2 j_\ell^2(x) \quad (11.58)$$

低エネルギーで  $ak \ll 1$  のとき (17.77) を使うと

$$\sin \delta_\ell \approx -\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \frac{(ak)^{2\ell+1}}{[(2\ell+1)!!]^2(2\ell+3)}$$

$\ell \geq 1$  は  $\ell = 0$  に比べて  $O((ak)^2)$  になるから無視してよい。したがって

$$f_b(\theta) \approx -\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}, \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = a^2 \left( \frac{2mV_0a^2}{3\hbar^2} \right)^2$$

になる。 $ak \rightarrow 0$  での (11.31) は  $\ell = 0$  の寄与を表す。

**問題 11.3** (11.58) において  $(ak)^2$  まで考慮すると (11.31) になることを示せ。

## 11.6 井戸型ポテンシャルによる散乱

$V(r)$  が引力の井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}, \quad V_0 > 0 \quad (11.59)$$

の場合  $r < a$  では (11.37) は

$$\left( \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{\rho_1^2}{a^2} \right) R_\ell(r) = 0, \quad \rho_1 \equiv \sqrt{\rho^2 + v_0^2}, \quad \rho \equiv ak, \quad v_0 \equiv a\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad (11.60)$$

になるから、原点で有界な解は

$$R_\ell(r) = C_\ell j_\ell(\rho_1 r/a) \quad (11.61)$$

一方,  $r > a$  では自由粒子と同じであるから

$$R_\ell(r) = A_\ell \left( \cos \delta_\ell j_\ell(\rho r/a) - \sin \delta_\ell n_\ell(\rho r/a) \right) \quad (11.62)$$

$r = a$  で波動関数は滑らかに接続するから

$$C_\ell j_\ell(\rho_1) = A_\ell \left( \cos \delta_\ell j_\ell(\rho) - \sin \delta_\ell n_\ell(\rho) \right), \quad C_\ell \rho_1 j'_\ell(\rho_1) = A_\ell \rho \left( \cos \delta_\ell j'_\ell(\rho) - \sin \delta_\ell n'_\ell(\rho) \right)$$

両者の比をとれば

$$\tan \delta_\ell = \frac{(\gamma_\ell - \ell - 1) j_\ell(\rho) - \rho j'_\ell(\rho)}{(\gamma_\ell - \ell - 1) n_\ell(\rho) - \rho n'_\ell(\rho)}, \quad \text{ただし} \quad \gamma_\ell(\rho_1) = \frac{\rho_1 j'_\ell(\rho_1)}{j_\ell(\rho_1)} + \ell + 1 \quad (11.63)$$

である。 $j'_\ell(x)$ ,  $n'_\ell(x)$  に (17.71) を用いると

$$\tan \delta_\ell = \frac{(\gamma_\ell - 2\ell - 1) j_\ell(\rho) + \rho j_{\ell+1}(\rho)}{(\gamma_\ell - 2\ell - 1) n_\ell(\rho) + \rho n_{\ell+1}(\rho)}, \quad \gamma_\ell = 2\ell + 1 - \frac{\rho_1 j_{\ell+1}(\rho_1)}{j_\ell(\rho_1)} = \frac{\rho_1 j_{\ell-1}(\rho_1)}{j_\ell(\rho_1)} \quad (11.64)$$

になる。ここで  $j_{-1}(x) \equiv -n_0(x) = \cos x/x$  である。

### 低エネルギー極限

低エネルギー ( $\rho = ak \ll 1$ ) の場合 (17.77), (17.78) より

$$\frac{\rho j_{\ell+1}(\rho)}{j_\ell(\rho)} = \frac{\rho^2}{2\ell+3} \left( 1 + \frac{\rho^2}{(2\ell+3)(2\ell+5)} + \cdots \right), \quad \frac{\rho n_{\ell+1}(\rho)}{n_\ell(\rho)} = 2\ell+1 - \frac{\rho^2}{2\ell-1} + \cdots$$

$$\frac{j_\ell(\rho)}{n_\ell(\rho)} = -\frac{2\ell+1}{[(2\ell+1)!!]^2} \rho^{2\ell+1} \left( 1 - \frac{2\ell+1}{(2\ell+3)(2\ell-1)} \rho^2 + \cdots \right)$$

になる。これから

$$\tan \delta_\ell \approx \frac{2\ell+1-\gamma_\ell(\rho_1)-d_\ell\rho^2}{\gamma_\ell(\rho_1)-\rho^2/(2\ell-1)} \frac{2\ell+1}{[(2\ell+1)!!]^2} \rho^{2\ell+1} \quad (11.65)$$

ここで

$$d_\ell = \frac{1}{2\ell+3} \left( 1 + \frac{2\ell+1}{2\ell-1} (2\ell+1-\gamma_\ell(\rho_1)) \right)$$

更に

$$\rho_1 = \sqrt{v_0^2 + \rho^2} = v_0 + \frac{\rho^2}{2v_0} + \cdots, \quad \therefore \quad \gamma_\ell(\rho_1) = \gamma_\ell(v_0) + \frac{\gamma'_\ell(v_0)}{2v_0} \rho^2 + \cdots$$

であるから

$$\tan \delta_\ell \approx \frac{2\ell+1-\gamma_\ell(v_0)+O(\rho^2)}{\gamma_\ell(v_0)-c_\ell\rho^2} \frac{2\ell+1}{[(2\ell+1)!!]^2} \rho^{2\ell+1}, \quad \text{ただし} \quad c_\ell = \frac{1}{2\ell-1} - \frac{\gamma'_\ell(v_0)}{2v_0} \quad (11.66)$$

になる。ポテンシャルが  $\gamma_\ell(v_0) \approx 0$  または  $2\ell+1-\gamma_\ell(v_0) \approx 0$  という特別な場合を除いて

$$\tan \delta_\ell \approx \frac{2\ell+1-\gamma_\ell(v_0)}{\gamma_\ell(v_0)} \frac{2\ell+1}{[(2\ell+1)!!]^2} \rho^{2\ell+1} = \frac{2\ell+1}{[(2\ell+1)!!]^2} \frac{j_{\ell+1}(v_0)}{j_{\ell-1}(v_0)} (ka)^{2\ell+1} \xrightarrow{k \rightarrow 0} 0$$

であるから部分波振幅は

$$f_\ell = \frac{1}{k} \frac{1}{\cot \delta_\ell - i} \approx \frac{\tan \delta_\ell}{k} \approx \frac{2\ell+1}{[(2\ell+1)!!]^2} \frac{j_{\ell+1}(v_0)}{j_{\ell-1}(v_0)} (ka)^{2\ell} a \quad (11.67)$$

になる。 $\ell \neq 0$  のとき  $f_\ell \approx 0$  であり、散乱には  $\ell = 0$  である  $s$  波だけが寄与する。

$$f_0 \approx a \frac{j_1(v_0)}{j_{-1}(v_0)} = -a \left( 1 - \frac{\tan v_0}{v_0} \right)$$

であるから

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx |f_0|^2 = a^2 \left( 1 - \frac{\tan v_0}{v_0} \right)^2, \quad \sigma_{\text{tot}} \approx 4\pi a^2 \left( 1 - \frac{\tan v_0}{v_0} \right)^2 \quad (11.68)$$

になる。井戸型ポテンシャルに限らず、一般に作用範囲が有限なポテンシャルの場合、低エネルギー極限では  $\ell = 0$  の部分波だけが散乱に寄与し、散乱は等方的になる。例外的な

$$2\ell+1-\gamma_\ell(v_0) = \frac{v_0 j_{\ell+1}(v_0)}{j_\ell(v_0)} \approx 0$$

の場合、 $\ell = 0$  でも  $\tan \delta_0 \approx d_0(ka)^3$  であるから  $f_0 \approx d_0 a^3 k^2$  になり  $d\sigma/d\Omega \approx 0$  である。

**問題 11.4** (11.68) と  $k \rightarrow 0$  でのボルン近似の結果 (11.33) を比較せよ。

#### 部分波展開の収束性

近似式 (11.65) は  $\rho \rightarrow 0$  でなくても  $\rho \ll \ell$  ならば有効である。 $\ell$  が非常に大きい場合を考えると

$$\gamma_\ell(\rho_1) = \frac{\rho_1 j_{\ell-1}(\rho_1)}{j_\ell(\rho_1)} \approx 2\ell+1 - \frac{\rho_1^2}{2\ell+3}, \quad \therefore \quad 2\ell+1-\gamma_\ell(\rho_1)-d_\ell\rho^2 \approx \frac{\rho_1^2-\rho^2}{2\ell+3} = \frac{v_0^2}{2\ell+3}$$

したがって、十分大きな  $\ell$  に対しては

$$\tan \delta_\ell \approx \frac{v_0^2}{2\ell+3} \frac{\rho^{2\ell+1}}{[(2\ell+1)!!]^2} \sim \frac{v_0^2}{8e\ell^2} \left( \frac{e\rho}{2\ell} \right)^{2\ell+1}$$

ただし、スターリングの公式  $(2\ell+1)!! = \frac{(2\ell+1)!}{2^\ell \ell!} \sim \sqrt{2} e^{-\ell} (2\ell)^{\ell+1}$  を使った。 $\tan \delta_\ell$  は  $\ell$  の増加とともに急速に 0 に収束する。特に、低エネルギーでは、比較的小さな  $\ell$  だけを考慮すればよいから、

部分波展開は有効な方法である。一方、高エネルギーでは非常に大きな  $\ell$  まで考慮する必要があり、有効な方法ではない。この場合はボルン近似で扱った方がよい。

### 共鳴

低エネルギー極限に戻って、例外的な場合である  $\gamma_\ell(v_0) = v_0 j_{\ell-1}(v_0)/j_\ell(v_0) \approx 0$ , つまり  $j_{\ell-1}(v_0) \approx 0$  を考える。問題 6.5 で示したように  $j_{\ell-1}(v_0) = 0$  は角運動量  $\ell$  の新しい束縛状態がエネルギー 0 に出現する条件である。(11.66) より

$$\tan \delta_\ell \approx \frac{(2\ell+1)^2}{[(2\ell+1)!!]^2} \frac{\rho^{2\ell+1}}{\gamma_\ell(v_0) - c_\ell \rho^2}$$

ここで  $\gamma_\ell(v_0)$  と  $c_\ell \rho^2$  は共に微小量である。

$$\gamma'_\ell(v_0) = j_{\ell-1}(v_0) \left( \frac{v_0}{j_\ell(v_0)} \right)' + j'_{\ell-1}(v_0) \frac{v_0}{j_\ell(v_0)} = j_{\ell-1}(v_0) \left( \frac{v_0}{j_\ell(v_0)} \right)' + \frac{(\ell-1)j_{\ell-1}(v_0) - v_0 j_\ell(v_0)}{j_\ell(v_0)}$$

より  $j_{\ell-1}(v_0) \approx 0$  のとき  $\gamma'_\ell(v_0) \approx -v_0$  になるから

$$c_\ell = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\ell-1} = \frac{2\ell+1}{2(2\ell-1)}$$

である。 $\gamma_\ell(v_0)/c_\ell > 0$  ならば  $\rho = \rho_r \equiv \sqrt{\gamma_\ell(v_0)/c_\ell}$  で  $\tan \delta_\ell$  は発散するから、(11.47) より部分波の断面積  $\sigma_\ell$  は  $k$  が与えられたときの最大値  $(\sigma_\ell)_{\max} = 4\pi(2\ell+1)/k^2$  になる。 $\rho = \rho_r$  近傍では

$$\cot \delta_\ell \approx \frac{d \cot \delta_\ell(\rho_r)}{d\rho_r} (\rho - \rho_r) = -\frac{\rho - \rho_r}{\rho_i}, \quad \rho_i = \frac{(2\ell+1)^2}{[(2\ell+1)!!]^2} \frac{\rho_r^{2\ell}}{2c_\ell} \quad (11.69)$$

したがって

$$f_\ell = \frac{1}{k} \frac{1}{\cot \delta_\ell - i} \approx -\frac{a}{\rho_r} \frac{\rho_i}{\rho - \rho_r + i\rho_i}, \quad \sigma_\ell = 4\pi(2\ell+1)|f_\ell|^2 \approx \frac{4\pi a^2}{\rho_r^2} \frac{\rho_i^2}{(\rho - \rho_r)^2 + \rho_i^2}$$

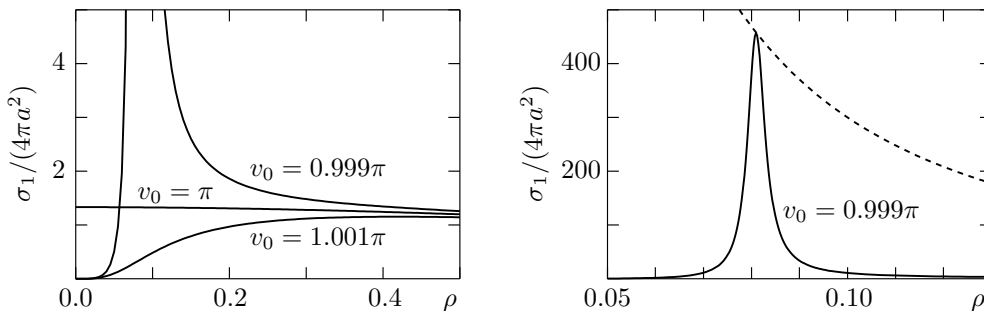
$\ell \neq 0$  のとき  $c_\ell > 0$  であり  $\rho_i \propto (\gamma_\ell(v_0))^\ell$  で  $\gamma_\ell(v_0) \approx 0$  であるから  $\rho_i$  は正の微小量である。これから、 $\sigma_\ell$  は  $\rho = \rho_r$  を中心とした幅が  $\rho_i$  程度の非常に鋭いピークになり共鳴が起こる。共鳴が起こる条件は  $c_\ell > 0$  より  $\gamma_\ell(v_0) > 0$  である。 $\gamma_\ell(v_0) = 0$ , つまり  $j_{\ell-1}(v_0) = 0$  とすると

$$\gamma_\ell(v_0) = \gamma'_\ell(v_0)(v_0 - v_{00}) + \cdots = -v_{00}(v_0 - v_{00}) + \cdots$$

$\gamma_\ell(v_0) > 0$  であるためには  $v_0 < v_{00}$  であり束縛状態が新たにできる直前である。なお、 $\sigma_\ell$  が極大になる  $\rho$  は  $\rho_r$  とは厳密には異なるが、 $\rho_i$  が微小ならば一致する。

$$\sigma_\ell = 4\pi a^2(2\ell+1) \frac{\sin^2 \delta_\ell}{\rho^2}, \quad \tan \delta_\ell \approx \frac{(2\ell+1)^2}{[(2\ell+1)!!]^2} \frac{\rho^{2\ell+1}}{\gamma_\ell(v_0) - c_\ell \rho^2}$$

を  $\ell = 1$  の場合に図示すると下図になる。 $j_{\ell-1}(x) = j_0(x) = \sin x/x$  であるから  $v_0 = \pi, 2\pi, \dots$  で新たな束縛状態が現れる (152 ページ参照)。図では  $v_0 = \pi$  前後での  $\sigma_1$  を示した。束縛状態が現れる直前では  $\sigma_1$  は非常に鋭いピークになる。破線は  $(\sigma_\ell)_{\max}$  である。



散乱の波動関数は (11.62) で  $A_\ell = k$  とすると  $r > a$  では

$$rR_\ell(r) = kr \left( \cos \delta_\ell j_\ell(\rho r/a) - \sin \delta_\ell n_\ell(\rho r/a) \right) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin \left( kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell \right)$$

$r < a$  では  $q = r/a$  とすると

$$rR_\ell(r) = rC_\ell j_\ell(\rho_1 q) = \rho \left( \cos \delta_\ell j_\ell(\rho) - \sin \delta_\ell n_\ell(\rho) \right) \frac{q j_\ell(\rho_1 q)}{j_\ell(\rho_1)}$$

になる。

$$\sin \delta_\ell = \frac{1}{\sqrt{\cot^2 \delta_\ell + 1}} \approx \frac{\rho_i}{\sqrt{(\rho - \rho_r)^2 + \rho_i^2}}, \quad \cos \delta_\ell = \sin \delta_\ell \cot \delta_\ell \approx -\frac{\rho - \rho_r}{\sqrt{(\rho - \rho_r)^2 + \rho_i^2}}$$

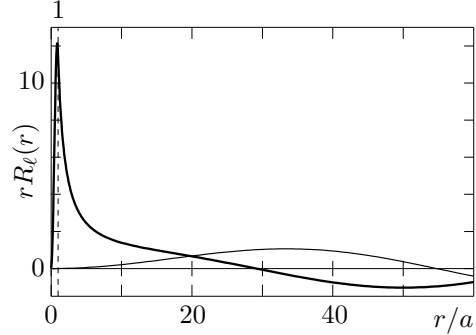
及び (17.77), (17.78) から

$$rR_\ell(r) \approx \frac{1}{\sqrt{(\rho - \rho_r)^2 + \rho_i^2}} \frac{\rho^\ell}{(2\ell + 1)!!} \left( \frac{[(2\ell + 1)!!]^2}{2\ell + 1} \frac{\rho_i}{\rho^{2\ell}} - \rho(\rho - \rho_r) \right) \frac{q j_\ell(\rho_1 q)}{j_\ell(\rho_1)}$$

$\sqrt{(\rho - \rho_r)^2 + \rho_i^2}$  以外の  $\rho$  を  $\rho_r$  で置き換え (11.69) を使うと

$$rR_\ell(r) \approx \frac{\rho_i^2}{\sqrt{(\rho - \rho_r)^2 + \rho_i^2}} \frac{1}{\sqrt{2c_\ell \rho_i}} \frac{q j_\ell(\rho_1 q)}{j_\ell(\rho_1)}$$

$r < a$  での波動関数は  $r \gg a$  に比べて非常に大きくなる。自由粒子と比較すると波動関数には大きなゆがみが生じ断面積は大きくなる。右図は前図で共鳴が起こる  $\ell = 1, v_0 = 0.999\pi, \rho = \rho_r$  の波動関数である。細い曲線は自由粒子の波動関数  $krj_1(kr)$  を表す。共鳴状態の波動関数は、 $r > a$  では最初はゆっくり減少しその後振動を始める。



$r \rightarrow \infty$  で振動することが束縛状態の波動関数と決定的に異なる点である。しかし、その振幅はポテンシャル内の波動関数に比べて非常に小さいから、この振動を無視すると、共鳴状態の波動関数は弱い束縛状態の波動関数と似た構造を示す。動径方向の有効ポテンシャルは  $V(r) + \hbar^2 \ell(\ell + 1)/(2mr^2)$  であり、 $\ell \neq 0$  のときは遠心力ポテンシャルが加わる。この遠心力ポテンシャルが障壁となり、 $E > 0$  でも粒子がポテンシャル  $V(r)$  内部に捕らわれ仮想的な束縛状態ができる。共鳴状態は  $E \approx 0$  でなくても  $E$  が  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)/(2ma^2)$  より十分小さければ存在しうる。

一般に  $k = k_r$  で  $\cot \delta_\ell(k) = 0$  とする。  $k_r \approx 0$  である必要はない。(11.69) と同様にすれば

$$\cot \delta_\ell \approx \frac{k - k_r}{k_i}, \quad \frac{1}{k_i} = \frac{d \cot \delta_\ell(k_r)}{dk_r} < 0$$

になるから

$$f_\ell = \frac{1}{k} \frac{1}{\cot \delta_\ell - i} \approx \frac{1}{k_r} \frac{k_i}{k - k_r - ik_i}, \quad \sigma_\ell = 4\pi(2\ell + 1)|f_\ell|^2 \approx \frac{4\pi(2\ell + 1)}{k_r^2} \frac{k_i^2}{(k - k_r)^2 + k_i^2}$$

である。  $k_i^2$  が小さければ  $\sigma_\ell$  は  $k = k_r$  を中心とした非常に鋭いピークになり共鳴が起こる。  $\sigma_\ell$  をエネルギー  $E = \hbar^2 k^2/2m$ ,  $E_r = \hbar^2 k_r^2/2m$  で表すと

$$k - k_r = \frac{k^2 - k_r^2}{k + k_r} \approx \frac{2m}{\hbar^2} \frac{E - E_r}{2k_r}$$

より

$$\sigma_\ell \approx \frac{4\pi(2\ell + 1)}{k_r^2} \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad \Gamma = -\frac{2\hbar^2}{m} k_r k_i > 0 \quad (11.70)$$

になる。これを**ブライト・ウィグナーの公式**という。 $E_r$  を共鳴エネルギー,  $\Gamma$  を共鳴幅という。

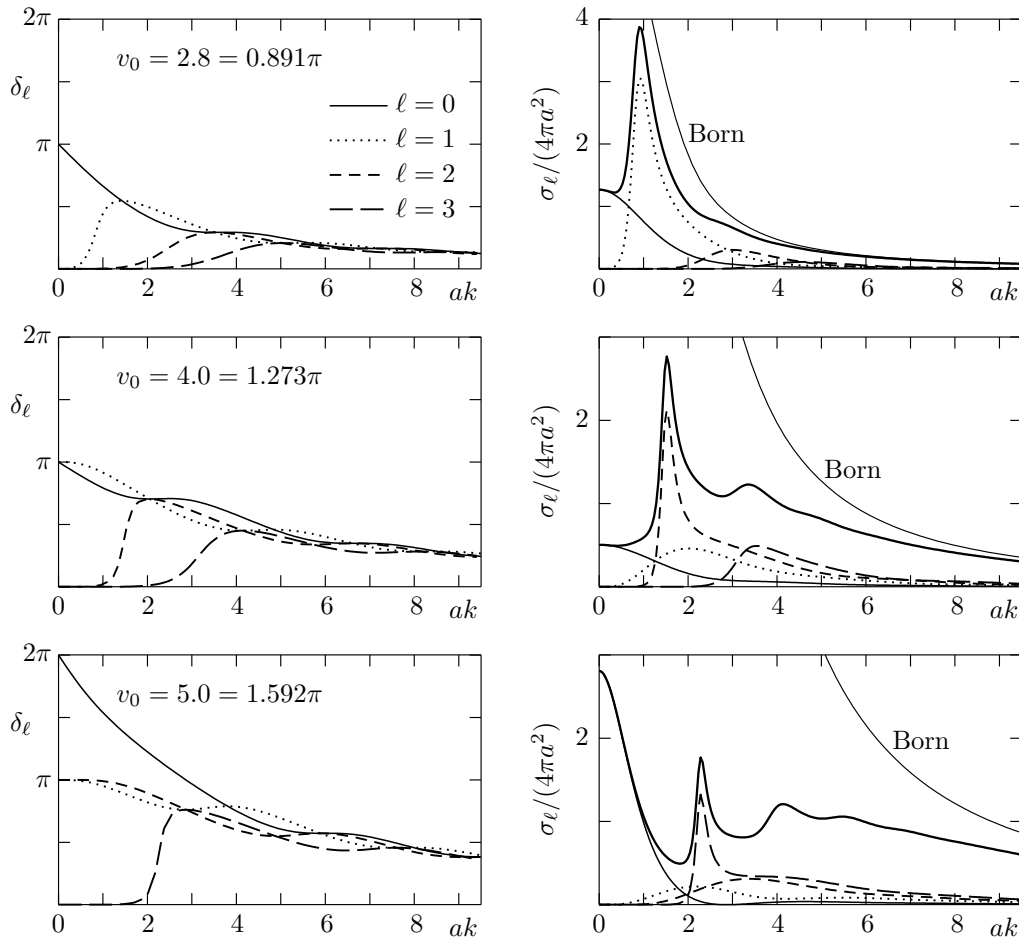
(11.45) で定義した  $S_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell}$  は

$$S_\ell(k) = \frac{\cot \delta_\ell + i}{\cot \delta_\ell - i} \approx \frac{k - k_r + ik_i}{k - k_r - ik_i} = \frac{k - k_{\text{res}}^*}{k - k_{\text{res}}}, \quad k_{\text{res}} = k_r + ik_i$$

になるから、複素  $k$  平面上で  $S_\ell(k)$  の極が  $k_r, k_i$  を与える。極のうち,  $\text{Re } k$  が正で  $\text{Im } k$  が負で小さい場合, 共鳴状態の位置と幅を与える。また, (11.49) 以下で見たように  $k$  が順虚数の場合,  $k^2/(2m)$  が束縛状態のエネルギーになる。 $S_\ell(k)$  の解析的性質については次節で考察する。

**問題 11.5** (11.64) より  $\cot \delta_\ell(k) - i = 0$  は束縛エネルギーを与える (6.24) になることを示せ。

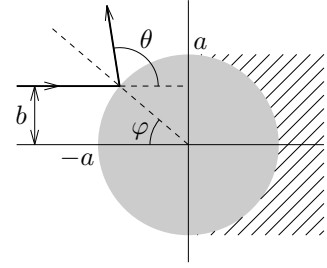
$v_0$  を与えたとき, (11.64) から  $\delta_\ell(k)$  を数値的に求めた結果を示す。(11.64) より  $\tan \delta_\ell(k) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$  になるから  $\delta_\ell(\infty) = 0$  とし  $\delta_\ell(k)$  を  $k$  の連続関数とした。 $\sigma_\ell$  の図で太い実線は全断面積  $\sigma_{\text{tot}}$  である。厳密には  $\ell = \infty$  まで  $\sigma_\ell$  の和をとる必要があるが, ここでは  $\ell \leq 8$  で十分である。Born はボルン近似での全断面積 (11.32) を表す。 $k$  が小さい領域では  $\sigma_{\ell=0}$  が主に寄与する。ボルン近似は  $v_0$  が小さく  $k$  が大きいほどよい近似である。共鳴に関しては,  $v_0 = 2.7$  で  $\ell = 1$  の共鳴が見える。前に示したように,  $v_0 \rightarrow \pi$  にすると, この共鳴状態は非常に鋭いピークに移行する。 $v_0 = 4, 5$  ではそれぞれ  $\ell = 2, 3$  の共鳴状態が存在する。(11.66) より  $\ell = 0$  かつ  $\gamma_0(v_0) = 0$  という場合を除くと  $\tan \delta_\ell(0) = 0$  であるから,  $N_\ell$  を整数として  $\delta_\ell(0) = \pi N_\ell$  になる。このとき,  $N_\ell$  は角運動量  $\ell$  の束縛状態の個数を表す (**レビンソンの定理** (11.127))。例えば,  $\ell = 0$  の場合  $v_0 = 2.7$  と  $v_0 = 4$  では束縛状態は 1 つ,  $v_0 = 5$  では 2 つ存在する (152 ページの図参照)。



## 11.7 剛体球による散乱

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

の場合を考える。右図に古典力学的粒子の散乱を示す。衝突径数  $b$  が  $b < a$  のとき散乱が起こる。運動量  $\hbar k$  と角運動量  $\hbar \ell_{cl} = \hbar k b$  で表せば  $\ell_{cl} < K = ka$  である。散乱角  $\theta = \pi - 2\varphi$ ,  $\sin \varphi = b/a$  より  $\cos(\theta/2) = b/a$  であるから、微分断面積  $\sigma(\theta)$  と全断面積  $\sigma_{tot}$  は



$$\sigma(\theta) = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{a^2}{4}, \quad \sigma_{tot} = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \sigma(\theta) = \pi a^2 \quad (11.71)$$

$\sigma_{tot}$  は球の幾何学的断面積になる。古典的粒子の散乱では、粒子が到達しない影領域 (図の斜線部分) が存在する。

以下では、量子力学の散乱として扱う。 $r > a$  では自由粒子と同じであるから

$$R_\ell(r) = A_\ell \left( \cos \delta_\ell j_\ell(kr) - \sin \delta_\ell n_\ell(kr) \right) = \frac{A_\ell}{2} \left( h_\ell(kr) e^{i\delta_\ell} + h_\ell^*(kr) e^{-i\delta_\ell} \right)$$

ただし  $h_\ell(x)$  は (17.67) の  $h_\ell^{(1)}(x) = j_\ell(x) + in_\ell(x)$  である。(18.18) より

$$h_\ell(x) = (-i)^{\ell+1} \frac{e^{ix}}{x} \bar{h}_\ell(x), \quad \bar{h}_\ell(x) = \sum_{n=0}^{\ell} \frac{(\ell+n)!}{(\ell-n)! n!} \left( \frac{i}{2x} \right)^n = 1 + i \frac{\ell(\ell+1)}{2x} + \dots$$

とおける。境界条件  $R_\ell(a) = 0$  より

$$\tan \delta_\ell = \frac{j_\ell(K)}{n_\ell(K)} \quad \text{あるいは} \quad e^{2i\delta_\ell} = -\frac{h_\ell^*(K)}{h_\ell(K)} = (-1)^\ell e^{-2iK} \frac{\bar{h}_\ell^*(K)}{\bar{h}_\ell(K)} \quad (11.72)$$

になる。 $\delta_0 = -K$ ,  $\delta_1 = -K + \tan^{-1} K$  である。 $\mathbf{k}$  を  $z$  軸方向にとると、波動関数 (11.48) は

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell+1) \frac{e^{2i\delta_\ell} h_\ell(kr) + h_\ell^*(kr)}{2} P_\ell(\cos \theta)$$

になる。(11.6) より  $\psi(\mathbf{r}, \delta_\ell = 0) = e^{ikz}$  である。散乱波  $\psi_{sc} = \psi - e^{ikz}$  は

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell+1) i k f_\ell(k) h_\ell(kr) P_\ell(\cos \theta), \quad i k f_\ell(k) = \frac{e^{2i\delta_\ell} - 1}{2} = -\frac{j_\ell(K)}{h_\ell(K)}$$

$f_\ell(k)$  は (11.45) である。 $r = a$  では  $\psi_{sc}(\mathbf{r}) = -e^{ikz}$  になり散乱波は入射波を打ち消す。

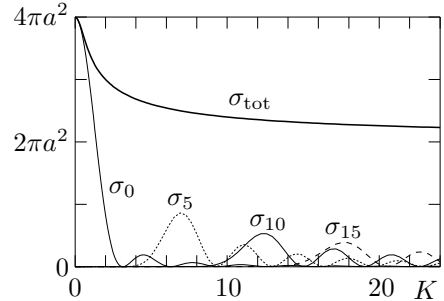
(11.47) の  $\sigma_\ell = 4\pi a^2 (2\ell+1) K^{-2} \sin^2 \delta_\ell$  と  $\sigma_{tot}$  を右図に示す。 $\sigma_0 = 4\pi a^2 K^{-2} \sin^2 K \xrightarrow{K \rightarrow 0} 4\pi a^2$  である。 $K \gg 1$  のとき数値結果は

$$\sigma_{tot} \approx 2\pi a^2 \left( 1 + 0.996 K^{-2/3} - 0.356 K^{-4/3} \right) \quad (11.73)$$

になる。 $\sigma_{tot} \xrightarrow{K \rightarrow 0} 4\pi a^2$ ,  $\sigma_{tot} \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 2\pi a^2$  である。

$K \rightarrow 0$  のとき (17.77), (17.78) より  $f_\ell \propto K^{2\ell}$  である。 $\ell = 0$  だけが寄与し散乱振幅  $f(\theta)$  は  $f(\theta) = f_0 \approx \delta_0/k = -a$  になり  $\sigma_{tot} = 4\pi a^2$  である。(11.115) の散乱半径  $a_0$  は剛体球の半径  $a$  に一致する。 $K = 0.3$  のとき確率流

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left( \psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) \right), \quad \mathbf{j}_{sc}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left( \psi_{sc}^*(\mathbf{r}) \nabla \psi_{sc}(\mathbf{r}) \right) \quad (11.74)$$





の流線を下に示す。左図より、回折のため粒子は剛体球を回りこみ影領域は存在しない。

$$\psi_{\text{sc}}(\mathbf{r}) = -\frac{a}{r} \left( 1 + iK\Theta(\mathbf{r}) + O(K^2) \right), \quad \Theta(\mathbf{r}) = \frac{r}{a} - 1 + \frac{a}{r} \cos \theta \quad (11.75)$$

になる。 $\psi(a, \theta) = O(K^2)$  である。これから  $K \rightarrow 0$  では ( $v = \hbar k/m$ )

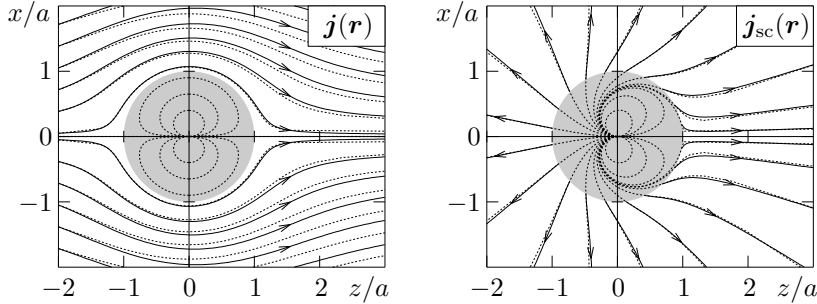
$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = v \left( 1 - \frac{a}{r} \right)^2 \left( \mathbf{e}_z \left( 1 - \frac{a^2}{r^2} \right) - \mathbf{e}_\theta \left( \frac{a}{r} + \frac{2a^2}{r^2} \right) \sin \theta \right) \quad (11.76)$$

$$\mathbf{j}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) = v \frac{a^2}{r^2} \left( \mathbf{e}_r - \frac{a^2}{r^2} (\mathbf{e}_r \cos \theta + \mathbf{e}_\theta \sin \theta) \right) \quad (11.77)$$

$r \approx a$  のとき  $\mathbf{j} \approx -3v(1 - a/r)^2 \mathbf{e}_\theta \sin \theta$  は球面に沿った流れである。一方、 $r \gg a$  のとき  $\mathbf{j} \approx v\mathbf{e}_z$  であり、 $\mathbf{j}_{\text{sc}} \approx v(a^2/r^2)\mathbf{e}_r$  より  $|f(\theta)|^2 = a^2$  になる。(11.76), (11.77) の流線は

$$\mathbf{j} : \sqrt{|1 - a^2/r^2|} \left( \frac{r}{a} - 1 \right) \sin \theta = C, \quad \mathbf{j}_{\text{sc}} : \frac{r}{a} = \frac{|\sin \theta|}{\sqrt{2(C - \cos \theta)}} \quad (11.78)$$

と表せる。定数  $C$  を与えると流線は決まり、点線で示した曲線になる。



**問題 11.6** (11.75), (11.76), (11.77) を示せ。 $xz$  平面上の流線は  $dx/dz = j_x(\mathbf{r})/j_z(\mathbf{r})$ , つまり  $dJ = j_z dx - j_x dz = 0$  で決まる。(11.76) の場合

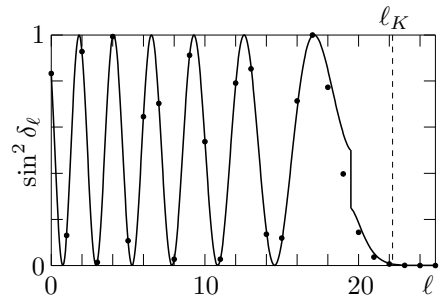
$$dJ = \frac{\hbar ka}{m} \left( 1 - \frac{a}{r} \right)^2 \left( \frac{\sin \theta}{r} dr - dF \right), \quad F(r, \theta) = \left( \frac{a}{r} - \frac{r}{a} \right) \sin \theta$$

を示せ。 $\mathbf{j}_{\text{sc}}(\mathbf{r})$  についても同様にして (11.78) を求めよ。

以下では  $K \gg 1$  の場合を考える。古典力学の角運動量  $\ell_{\text{cl}}$  に対応する量は  $\sqrt{\ell(\ell+1)}$  になるから

$$\sqrt{\ell(\ell+1)} = \sqrt{(\ell+1/2)^2 - 1/4} < K$$

とき散乱が起こるだろう。 $K \gg 1$  の場合  $\ell < \ell_m \approx K - 1/2$  である。右図に  $K = 20$  での  $\sin^2 \delta_\ell$  を  $\bullet$  で示す。曲線は (11.81),  $\ell_K$  は (11.84) である。古典力学から予想されるように、 $\ell > \ell_m$  では  $\sin^2 \delta_\ell \approx 0$  である。 $\ell < \ell_m$  のとき  $\sin^2 \delta_\ell$  は激しく振動する。 $\ell \leq \ell_m$  に制限し  $\sin^2 \delta_\ell$  を平均値  $1/2$  で置き換えると



$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi a^2}{K^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell \approx \frac{4\pi a^2}{K^2} \sum_{\ell=0}^{\ell_m} (2\ell+1) \frac{1}{2} = 2\pi a^2 \frac{(\ell_m+1)^2}{K^2} \approx 2\pi a^2$$

$K \gg 1$  の場合、散乱が起こる  $\ell$  は古典力学とほぼ同じであるが、 $\sigma_{\text{tot}}$  は古典力学の 2 倍である。

以上の議論をもう少し詳しく調べる。ベッセル関数  $J_\nu(x)$ ,  $N_\nu(x)$  は  $\sqrt{|\nu^2 - x^2|} \gg 1$  ならば

$$J_\nu(x) + iN_\nu(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi\sqrt{|\nu^2 - x^2|}}} \times \begin{cases} \exp(ixg_1(\nu/x) - i\pi/4), & x > \nu \\ \frac{\exp(-xg_2(\nu/x)) - 2i\exp(xg_2(\nu/x))}{2}, & x < \nu \end{cases} \quad (11.79)$$

ただし

$$g_1(x) = \sqrt{1 - x^2} - x \cos^{-1} x, \quad g_2(x) = x \cosh^{-1} x - \sqrt{x^2 - 1} \quad (11.80)$$

になる (数学公式 III 156 ページ)。(11.72) 及び  $h_\ell \propto J_{\ell+1/2} + iN_{\ell+1/2}$  より  $K\sqrt{|x_\ell^2 - 1|} \gg 1$  のとき

$$\delta_\ell \approx \begin{cases} -Kg_1(x_\ell) - \pi/4, & 0 < x_\ell < 1 \\ -\tan^{-1}(e^{-2Kg_2(x_\ell)}/2) \approx -e^{-2Kg_2(x_\ell)}/2, & x_\ell > 1 \end{cases}, \quad x_\ell = \frac{\ell + 1/2}{K} \quad (11.81)$$

あるいは

$$\sin^2 \delta_\ell \approx \begin{cases} \sin^2(Kg_1(x_\ell) + \pi/4), & 0 < x_\ell < 1 \\ e^{-4Kg_2(x_\ell)}/4, & x_\ell > 1 \end{cases} \quad (11.82)$$

である。 $g_1(x)$  は単調減少関数で  $g_1(0) = 1$ ,  $g_1(1) = 0$  であるから  $\sin^2(Kg_1(x) + \pi/4)$  は周期  $\pi/K$  程度で振動する。一方,  $e^{-4Kg_2(x)}$  は  $x$  の増加とともに急激に減少する。前図に示したように (11.82) は  $x_\ell = 1$  ( $\ell = K - 1/2$ ) 近傍以外では数値解  $\bullet$  とよく一致する。

$$g_1(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} 1 - \frac{\pi x}{2}, \quad g_1(x), g_2(x) \xrightarrow{x \rightarrow 1} \frac{c}{2}|1 - x|^{3/2}, \quad c = \frac{4\sqrt{2}}{3} \quad (11.83)$$

である。 $\ell \ll K$  の場合  $\delta_\ell \approx -K + \ell\pi/2$  になる。また,  $x_\ell > 1$  では  $\delta_\ell \approx -e^{-cK(x_\ell - 1)^{3/2}}/2$  より

$$K(x_\ell - 1)^{3/2} > 1 \quad \text{つまり} \quad \ell > \ell_K = K(1 + K^{-2/3}) - 1/2 \quad (11.84)$$

のとき  $\sin^2 \delta_\ell \approx \delta_\ell^2 < e^{-2c}/4 = 0.0058 \dots$  である。

**問題 11.7**  $g_1, g_2$  を (11.83) の第 2 式で近似し  $\ell$  の和を  $x_\ell$  の積分で置き換える。

$$\sigma_{\text{tot}} \approx 2\pi a^2 \left( 1 + \frac{2\sqrt{3} + 2^{1/3}}{3} \frac{\Gamma(2/3)}{(cK)^{2/3}} - \frac{2\sqrt{3} - 2^{-1/3}}{3} \frac{\Gamma(4/3)}{(cK)^{4/3}} \right), \quad c = \frac{4\sqrt{2}}{3}$$

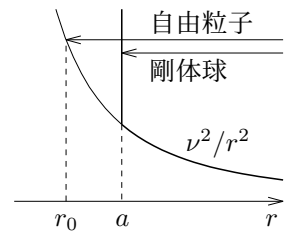
を示せ。 $\sigma_{\text{tot}} \approx 2\pi a^2(1 + 1.40K^{-2/3} - 0.34K^{-4/3})$  になり (11.73) をほぼ再現する。

**問題 11.8** WKB 近似 (227 ページ参照) での波動関数の位相  $\Theta(r)$  は

$$\Theta_\ell(r) = \int_{r_0}^r ds \sqrt{k^2 - U_\ell(s)} + \varphi, \quad U_\ell(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) + \frac{\nu^2}{r^2}, \quad \nu = \sqrt{\ell(\ell+1)} \approx \ell + 1/2$$

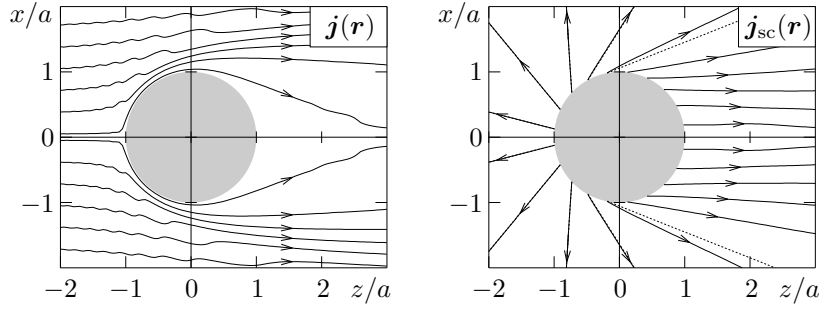
になる。 $\varphi$  は任意定数,  $r_0$  は  $k^2 - U_\ell(r_0) = 0$  の解である。自由粒子の  $\Theta_\ell(r)$  を  $\Theta_\ell^{\text{free}}(r)$  とすると, 位相のずれは  $\delta_\ell^{\text{wkb}} = \Theta_\ell(\infty) - \Theta_\ell^{\text{free}}(\infty)$  である。剛体球の場合

$$\delta_\ell^{\text{wkb}} = \begin{cases} -Kg_1(\nu/K), & \nu < K \\ 0, & \nu > K \end{cases}$$

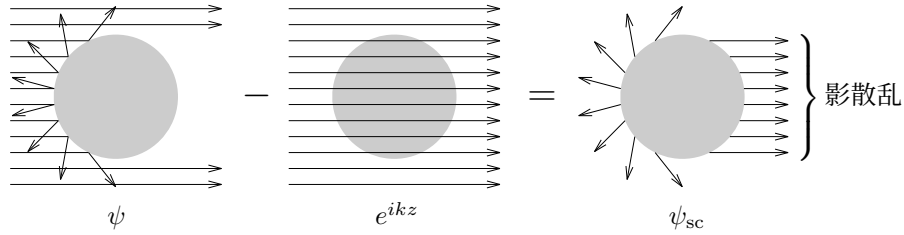


を示せ。 $K \gg 1$  のとき (11.81) と実質的には同じである。

$K = 20$  の確率流 (11.74) の流線を下に示す。左図より  $\theta \approx 0$  である前方 (入射側から見て剛体球の後方) には粒子が殆ど到達せず  $\psi \approx 0$  になる影領域が存在する。 $K$  が増加すると影領域は拡大する。影領域では  $\psi = e^{ikz} + \psi_{sc} \approx 0$  であるから  $\psi_{sc} \approx -e^{ikz}$  の散乱波 (影散乱波) が存在し  $\mathbf{j}_{sc} \approx (\hbar k/m)\mathbf{e}_z$  である。右図のほぼ  $z$  軸に平行な流線は、これを表す。 $K$  が非常に大きくても有限である限り、回折のため粒子は剛体球の後方に回りこみ、十分遠方では前方に到達する。影散乱も微分断面積に寄与するが、これは古典力学的粒子の散乱とは異なる現象である。一方、前方以外では、 $\mathbf{j}_{sc}$  の流線は点線で示した散乱後の古典的軌道とよく一致する (問題 11.9 参照)。



$K \gg 1$  のとき  $\psi - e^{ikz} = \psi_{sc}$  を古典的軌道により模式的に表すと下図のようになる。散乱は古典力学での散乱に対応する部分と影散乱からなる。以下で示すように、それぞれ断面積に  $\pi a^2$  の寄与をし  $\sigma_{tot} \approx 2\pi a^2$  である。



$\ell_m$  を十分大きくとれば、 $\ell > \ell_m$  のとき  $\delta_\ell = 0$  になるから

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}) = \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\ell_m} (2\ell+1)(e^{2i\delta_\ell} - 1)\bar{h}_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta) = \psi_1(\mathbf{r}) + \psi_2(\mathbf{r})$$

ただし

$$\psi_1(\mathbf{r}) = -\frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\ell_m} (2\ell+1)\bar{h}_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta), \quad \psi_2(\mathbf{r}) = \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\ell_m} (2\ell+1)e^{2i\delta_\ell}\bar{h}_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta)$$

である。 $j_\ell = (h_\ell + h_\ell^*)/2$  より平面波  $e^{ikz} = \phi_1 + \phi_2$  は

$$\phi_1(\mathbf{r}) = \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)\bar{h}_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta), \quad \phi_2(\mathbf{r}) = -\frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)(-1)^\ell \bar{h}_\ell^*(kr)P_\ell(\cos\theta)$$

に分割できる。 $e^{2i\delta_\ell}$ ,  $(-1)^\ell$  の振動のため、前方 ( $P_\ell(\cos\theta) \approx 1$ ) では  $\psi_1$ ,  $\phi_1$  が主要な項になる。 $\psi_1 \xrightarrow{K \rightarrow \infty} -\phi_1$  になるから、 $K \gg 1$  のとき  $\psi_1$  と  $\phi_1$  は大幅に打ち消し合い、前方に影の領域が発生する。影散乱は主に  $\psi_1$  がもたらす。

散乱振幅  $f(\theta)$  は  $f(\theta) = f_1(\theta) + f_2(\theta)$

$$f_1(\theta) = -\frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\ell_m} (2\ell+1)P_\ell(\cos\theta), \quad f_2(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\ell_m} (2\ell+1)e^{2i\delta_\ell}P_\ell(\cos\theta)$$

である。 $f_1, f_2$  はそれぞれ  $\psi_1, \psi_2$  の寄与である。右図に  $K = 20$  での  $|f(\theta)/a|^2$  を太い実線で示す。細い実線は  $|f_1(\theta)/a|^2$ , 破線は  $|f_2(\theta)/a|^2$  である。(11.84) より  $\ell_m = \ell_K$  とした。 $f_1(\theta), f_2(\theta)$  は  $\ell_m$  に依存するが,  $\ell > \ell_K$  では  $e^{2i\delta_\ell} \approx 1$  になるから,  $f = f_1 + f_2$  は  $\ell_m$  を  $\ell_K$  以上に大きくしても, ほとんど変化しない。

$$f_1(0) = -\frac{1}{2ik}(\ell_m + 1)^2 \approx i\frac{aK}{2} \quad (11.85)$$

より  $K \gg 1$  のとき影散乱による  $f_1$  のため  $|f(\theta)|^2$  は前方 ( $\theta \approx 0$ ) で特に大きい。 $\theta$  が増加すると  $f_2$  が支配的になり, 古典力学と同様に  $|f(\theta)|^2 \approx a^2/4$  である ((11.87))。  $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_{12}$

$$\sigma_i = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |f_i(\theta)|^2 = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\ell_m} (2\ell + 1) = \frac{\pi}{k^2} (\ell_m + 1)^2 \approx \pi a^2$$

$$\sigma_{12} = 4\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \operatorname{Re}(f_1^* f_2) = -\frac{2\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\ell_m} (2\ell + 1) \cos 2\delta_\ell \approx 0$$

である。 $\sigma_{\text{tot}}$  には古典力学に対応する  $\sigma_2 \approx \pi a^2$  だけでなく, 前方に集中する影散乱の寄与  $\sigma_1 \approx \pi a^2$  があり  $\sigma_{\text{tot}} \approx 2\pi a^2$  になる。 $|f_1(0)| \gg |f_2(0)|$  より

$$\frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0) \approx \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f_1(0) \approx \frac{4\pi}{k} \frac{aK}{2} \approx 2\pi a^2 \approx \sigma_{\text{tot}}$$

これは光学定理 (11.14) である。

$\ell \gg 1$ ,  $\theta \approx 0$  の場合  $P_\ell(\cos \theta) \approx J_0((2\ell + 1) \sin(\theta/2))$  と近似できる (数学公式 III 126 ページ)。 $\alpha = 2K \sin(\theta/2)$ ,  $x_m = (\ell_m + 1/2)/K \approx 1$  とすると

$$f_1(\theta) \approx -\frac{2K}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\ell_m} x_\ell J_0(\alpha x_\ell) \approx iaK \int_0^{x_m} dx x J_0(\alpha x) = ia x_m \frac{J_1(2K x_m \sin(\theta/2))}{2 \sin(\theta/2)} \quad (11.86)$$

この  $|f_1(\theta)|^2$  は, 古典的波動の回折に現れる関数である。 $J_1(x)/x \xrightarrow{x \rightarrow 0} 1/2$  より (11.85) を得る。 $f_1(\theta)$  の主な寄与は  $\theta = 0$  近傍であるから, (11.86) を  $0 \leq \theta \leq \pi$  に適用すると

$$\sigma_1 = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |f_1(\theta)|^2 \approx \pi a^2 x_m^2 \left(1 - J_0^2(2K x_m) - J_1^2(2K x_m)\right) \xrightarrow{K \rightarrow \infty} \pi a^2$$

になる。

(17.32) より  $\theta \neq 0$  のとき散乱振幅は

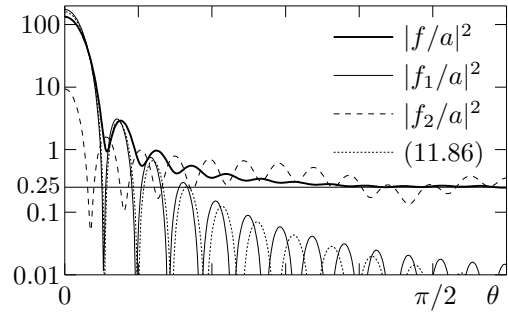
$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (e^{2i\delta_\ell} - 1) P_\ell(\cos \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) e^{2i\delta_\ell} P_\ell(\cos \theta)$$

になる。 $\theta = 0, \pi$  付近以外では  $\ell \gg 1$  のとき

$$P_\ell(\cos \theta) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi \ell \sin \theta}} \sin\left((\ell + 1/2)\theta + \pi/4\right)$$

であるから (数学公式 III 106 ページ)

$$\begin{aligned} f(\theta) &\approx \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\ell + 1/2}{2\pi \sin \theta}} \left( e^{i(2\delta_\ell - (\ell + 1/2)\theta - \pi/4)} - e^{i(2\delta_\ell + (\ell + 1/2)\theta + \pi/4)} \right) \\ &\approx \sqrt{\frac{a^2 K}{2\pi \sin \theta}} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \left( e^{i\phi_-(x)} - e^{i\phi_+(x)} \right), \quad \phi_\pm(x) = 2\delta(x) \pm K\theta x \pm \frac{\pi}{4} \end{aligned}$$



$\phi_{\pm}(x)$  が単調変化する領域では,  $K \gg 1$  のとき  $e^{i\phi_{\pm}(x)}$  は  $x$  の関数として激しく振動するから, 積分には殆ど寄与しない。例外は  $\phi_{\pm}(x)$  が極値になる場合である。 $x > 1$  のとき  $e^{2i\delta(x)} \approx 1$  より  $\phi_{\pm}(x) = \pm K\theta x \pm \pi/4$  になり  $x$  の単調関数である。 $x < 1$  の場合 (11.81) より

$$\phi_{\pm}(x) \approx K \left( -2g_1(x) \pm \theta x \right) \pm \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2}, \quad \frac{d\phi_{\pm}}{dx} \approx K \left( 2\cos^{-1} x \pm \theta \right)$$

になる。 $\phi_+(x)$  は単調増加関数であるが  $\phi_-(x)$  は  $x = \cos(\theta/2)$  で極大になる。 $x = \cos(\theta/2)$  近傍の  $\phi_-(x)$  だけ考慮すればよい。 $c = \cos(\theta/2)$  とおくと

$$\phi_-(x) = \phi_-(c) + \frac{\alpha}{2}(x-c)^2 + \cdots, \quad \alpha = \phi_-''(c) = -\frac{2K}{\sqrt{1-c^2}} = K \frac{d\theta}{dc}$$

である。 $K \gg 1$  のとき  $x = c$  近傍以外では  $e^{i\alpha(x-c)^2/2}$  は激しく振動するから  $-\infty < x < \infty$  の積分に置き換えると (16.34) より

$$f(\theta) \approx \sqrt{\frac{a^2 K c}{2\pi \sin \theta}} e^{i\phi_-(c)} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\alpha x^2/2} = \sqrt{\frac{a^2 K c}{2\pi \sin \theta} \frac{2\pi i}{\alpha}} e^{i\phi_-(c)} = \sqrt{\frac{ib}{\sin \theta} \frac{db}{d\theta}} e^{i\phi_-(c)} \quad (11.87)$$

ただし  $b = ac = a \cos(\theta/2)$  である。古典力学の (11.71) が近似的に成り立ち  $|f(\theta)|^2 \approx a^2/4$  である。

一般に  $\phi_{\pm}(\ell) = 2\delta_{\ell} \pm (\ell + 1/2)\theta \pm \pi/4$  とするとき,  $\phi_+(\ell)$  または  $\phi_-(\ell)$  が  $\ell = \ell_0(\theta)$  で極値になるとする。 $\ell_0(\theta) \gg 1$  であり  $\ell = \ell_0(\theta)$  近傍以外では  $\delta_{\ell}$  が大きく変化するならば

$$f(\theta) \approx \mp \frac{1}{k} \sqrt{\frac{\mp i \ell_0}{\sin \theta} \frac{d\ell_0}{d\theta}} e^{i\phi_{\pm}(\ell_0)}, \quad |f(\theta)|^2 \approx \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|, \quad b = \frac{\ell_0}{k}$$

である。

**問題 11.9** 283 ページの図より, 散乱後の粒子が  $(r, \theta)$  を通過するとき  $r \sin(\theta + 2\varphi) + a \sin \varphi = 0$  により  $\varphi$  が決まることを示せ。 $0 \leq \varphi < \pi/2 \leq \theta \leq \pi$  であるから  $2\varphi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \pi - \theta$  になる。粒子の速度  $\mathbf{v}_{cl} = \hbar k/m(\mathbf{e}_x \sin 2\varphi - \mathbf{e}_z \cos 2\varphi)$  は  $r \gg a$  のとき

$$\mathbf{v}_{cl} = \frac{\hbar k}{m} \left( \mathbf{e}_r - \mathbf{e}_{\theta} \frac{a}{r} \cos \frac{\theta}{2} + O(a^2/r^2) \right)$$

になることを示せ。 $\psi_{sc}(\mathbf{r}) \approx e^{ikr} f(\theta)/r$  及び (11.87) より  $\mathbf{j}_{sc}(\mathbf{r}) \approx \frac{a^2}{4r^2} \mathbf{v}_{cl}$  を示せ。

## 11.8 ヨスト関数と S 行列の解析性

一般的なシュレーディンガー方程式 (11.38)

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right) \chi_{\ell}(r) = 0 \quad (11.88)$$

を考える。物理的には  $k^2$  は実数であるが, ここでは複素数とする。 $r \rightarrow 0$  のとき  $r^2 U(r) \rightarrow 0$  ならば

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + k^2 \right) \chi_{\ell}(r) = 0 \quad (11.89)$$

になる。この方程式の解は  $kr j_{\ell}(kr)$ ,  $kr n_{\ell}(kr)$  である。(11.88) の解  $\Phi_{\ell}(k, r)$  として境界条件

$$\Phi_{\ell}(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} kr j_{\ell}(kr) = \frac{(kr)^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!} \left( 1 + O((kr)^2) \right) \quad (11.90)$$

を満たす解を考える。 $\Phi_\ell$  には  $r \rightarrow \infty$  での境界条件は設定しない。 $r \rightarrow \infty$  でも  $r^2 U(r) \rightarrow 0$  ならば (11.88) は (11.89) になるから, (11.88) の解  $F_\ell(k, r)$  として境界条件

$$F_\ell(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} kr h_\ell^{(1)}(kr) = (-i)^{\ell+1} e^{ikr} \left(1 + O((kr)^{-1})\right) \quad (11.91)$$

を満たす解が存在する。これに対しては  $r \rightarrow 0$  での境界条件は課さない。

(11.88) の解  $\varphi_1, \varphi_2$  のロンスキアン  $W(\varphi_1, \varphi_2) = \varphi_1 \frac{d\varphi_2}{dr} - \frac{d\varphi_1}{dr} \varphi_2$  は

$$\begin{aligned} \frac{dW}{dr} &= \varphi_1 \frac{d^2 \varphi_2}{dr^2} - \frac{d^2 \varphi_1}{dr^2} \varphi_2 \\ &= \varphi_1 \left( \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + U(r) - k^2 \right) \varphi_2 - \left( \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + U(r) - k^2 \right) \varphi_1 \varphi_2 = 0 \end{aligned}$$

であるから  $r$  に依存しない定数である。これから  $W(F_\ell(k, r), F_\ell(-k, r))$  を  $r \rightarrow \infty$  で求めれば

$$W(F_\ell(k, r), F_\ell(-k, r)) = (-1)^{\ell+1} W(e^{ikr}, e^{-ikr}) = 2ik(-1)^\ell \quad (11.92)$$

である。したがって,  $k \neq 0$  のとき  $F_\ell(k, r)$  と  $F_\ell(-k, r)$  は (11.88) の 1 次独立な解である。(11.88) で  $k$  を  $k^*$  で置き換えて複素共役をとると

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right) F_\ell^*(k^*, r) = 0, \quad \text{ただし} \quad F_\ell^*(k^*, r) = \left( F_\ell(k^*, r) \right)^*$$

になる。

$$F_\ell^*(k^*, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \left( k^* r h_\ell^{(1)}(k^* r) \right)^* = (-1)^{\ell+1} (-kr) h_\ell^{(1)}(-kr)$$

したがって

$$F_\ell^*(k^*, r) = (-1)^{\ell+1} F_\ell(-k, r) \quad (11.93)$$

である。一方, 境界条件 (11.90) と  $j_\ell(-\rho) = (-1)^\ell j_\ell(\rho)$  より  $\Phi_\ell(-k, r) = (-1)^{\ell+1} \Phi_\ell(k, r)$  であり  $\Phi_\ell(k, r)$  と  $\Phi_\ell(-k, r)$  は 1 次独立ではない。また  $(j_\ell(\rho^*))^* = j_\ell(\rho)$  より

$$\Phi_\ell(k, r) = \Phi_\ell^*(k^*, r) = (-1)^{\ell+1} \Phi_\ell(-k, r) \quad (11.94)$$

になる。

(11.88) の任意の解は  $F_\ell(k, r)$  と  $F_\ell(-k, r)$  の線形結合で表せるから

$$\Phi_\ell(k, r) = A F_\ell(k, r) + B F_\ell(-k, r)$$

とおける。 $W(\varphi, \varphi) = 0$  であるから

$$W(F_\ell(k, r), \Phi_\ell(k, r)) = B W(F_\ell(k, r), F_\ell(-k, r)) = 2ik(-1)^\ell B$$

$$W(F_\ell(-k, r), \Phi_\ell(k, r)) = A W(F_\ell(-k, r), F_\ell(k, r)) = 2ik(-1)^{\ell+1} A$$

ここで

$$\mathcal{J}_\ell(k) = \frac{i}{k} W(F_\ell(k, r), \Phi_\ell(k, r)) \quad (11.95)$$

と定義する。 $\mathcal{J}_\ell(k)$  を **ヨスト (Jost) 関数** という。(11.93), (11.94) より

$$\mathcal{J}_\ell^*(k^*) = -\frac{i}{k} W(F_\ell^*(k^*, r), \Phi_\ell^*(k^*, r)) = -\frac{i}{k} W(F_\ell(-k, r), \Phi_\ell(-k, r)) = \mathcal{J}_\ell(-k) \quad (11.96)$$

を満たす。  $B = (-1)^{\ell+1} \mathcal{J}_\ell(k)/2$ ,  $\Phi_\ell(k, r) = (-1)^{\ell+1} \Phi_\ell(-k, r)$  より  $A = \mathcal{J}_\ell(-k)/2$  になるから

$$\Phi_\ell(k, r) = \frac{1}{2} \left( \mathcal{J}_\ell(-k) F_\ell(k, r) - (-1)^\ell \mathcal{J}_\ell(k) F_\ell(-k, r) \right) \quad (11.97)$$

$$\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{(-i)^{\ell+1}}{2} \left( \mathcal{J}_\ell(-k) e^{ikr} - (-1)^\ell \mathcal{J}_\ell(k) e^{-ikr} \right) \quad (11.98)$$

である。  $r \rightarrow \infty$  での散乱波の漸近形 (11.49) と比較すると  $S_\ell$  は

$$S_\ell(k) = \frac{\mathcal{J}_\ell(-k)}{\mathcal{J}_\ell(k)} = \frac{\mathcal{J}_\ell^*(k^*)}{\mathcal{J}_\ell(k)} \quad (11.99)$$

と表せる。  $S_\ell(k^*) = \mathcal{J}_\ell^*(k)/\mathcal{J}_\ell(k^*)$  より

$$S_\ell^*(k^*) = \frac{\mathcal{J}_\ell(k)}{\mathcal{J}_\ell^*(k^*)} = S_\ell(-k) = \frac{1}{S_\ell(k)} \quad (11.100)$$

である。複素  $k$  平面上の、例えば、第 1 象限だけの  $S_\ell(k)$  が分かれば、全平面での  $S_\ell(k)$  が求まる。  $k$  が純虚数 ( $k = -k^*$ ) の場合、(11.96) より  $\mathcal{J}_\ell(k)$  は実数になるから、虚軸上では  $S_\ell(k)$  は実数である。  $k$  が実数の場合、  $S_\ell(k) = \mathcal{J}_\ell^*(k)/\mathcal{J}_\ell(k)$  より  $|S_\ell(k)| = 1$  になる。したがって、  $\delta_\ell(k)$  を実数として  $S_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell(k)}$  とおける。  $\delta_\ell(k)$  は位相のずれである。

### ヨスト関数の零点

$\mathcal{J}_\ell(k_n) = 0$  のとき  $k = k_n$  は  $S_\ell(k)$  の極である。(11.100) から

$$S_\ell^*(-k_n^*) = S_\ell(k_n) = \infty, \quad S_\ell(-k_n) = S_\ell^*(k_n^*) = 0 \quad (11.101)$$

$-k_n^*$  も  $S_\ell$  の極である。一方、  $-k$  と  $k^*$  は  $S_\ell$  の零点である。(11.97) から

$$\Phi_\ell(k_n, r) = a_n F_\ell(k_n, r), \quad a_n = \frac{\mathcal{J}_\ell(-k_n)}{2}$$

である。  $r \rightarrow \infty$  とすると

$$\Phi_\ell(k_n, r) \rightarrow (-i)^{\ell+1} a_n e^{ik_n r} = (-i)^{\ell+1} a_n e^{ik_R r} e^{-k_I r}, \quad k_R = \text{Re } k_n, \quad k_I = \text{Im } k_n \quad (11.102)$$

であるから、  $k_I > 0$  ならば  $\Phi_\ell(k_n, r) \rightarrow 0$  になる。また、  $\Phi_\ell(k_n, r)$  は原点で 0 であるから、  $\Phi_\ell(k_n, r)$  は束縛状態を表す。以下に示すように、  $\mathcal{J}_\ell(k_n) = 0$  で  $k_I > 0$  ならば  $k_R = 0$  になるから、エネルギー固有値  $E = -k_I^2/2m$  は負の実数である。

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right) \Phi_\ell(k, r) = 0, \quad \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) + k^{*2} \right) \Phi_\ell^*(k, r) = 0$$

であるから

$$\frac{d}{dr} W(\Phi_\ell(k, r), \Phi_\ell^*(k, r)) = \Phi_\ell \frac{d^2 \Phi_\ell^*}{dr^2} - \Phi_\ell^* \frac{d^2 \Phi_\ell}{dr^2} = 2i \text{Im}(k^2) |\Phi_\ell(k, r)|^2 \quad (11.103)$$

したがって

$$2i \text{Im}(k^2) \int_0^\infty dr |\Phi_\ell(k, r)|^2 = W(\Phi_\ell(k, r), \Phi_\ell^*(k, r)) \Big|_{r=\infty} - W(\Phi_\ell(k, r), \Phi_\ell^*(k, r)) \Big|_{r=0}$$

$r \rightarrow 0$  のとき  $\Phi_\ell \propto r^{\ell+1}$  になるから  $W(\dots)|_{r=0} = 0$  である。  $\mathcal{J}_\ell(k_n) = 0$  のとき (11.102) より

$$W(\Phi_\ell(k_n, r), \Phi_\ell^*(k_n, r)) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} |a_n|^2 \left( e^{ik_n r} \frac{d}{dr} e^{-ik_n^* r} - e^{-ik_n^* r} \frac{d}{dr} e^{ik_n r} \right) = -2i |a_n|^2 k_R e^{-2k_I r}$$

になるから

$$k_R \left( 2k_I \int_0^\infty dr |\Phi_\ell(k_n, r)|^2 + |a_n|^2 e^{-2k_I r} \Big|_{r=\infty} \right) = 0$$

$k_R = 0$  ならば上式は成り立つから  $\mathcal{J}_\ell(k_n) = 0$  である純虚数の解は存在できる。更に  $k_R = 0, k_I > 0$  のとき束縛状態のエネルギーを与える。 $k_R \neq 0$  の場合,  $k_I > 0$  ならば  $e^{-2k_I r} \Big|_{r=\infty} = 0$  より

$$\int_0^\infty dr |\Phi_\ell(k_n, r)|^2 = 0, \quad \therefore \quad \Phi_\ell(k_n, r) = 0 \quad (11.104)$$

これから  $\mathcal{J}_\ell(k_n) = 0$  の解は存在しない。一方,  $k_R \neq 0, k_I < 0$  ならば  $\Phi_\ell(k_n, r)$  は規格化できないが,  $\mathcal{J}_\ell(k_n) = 0$  の解は存在できる。したがって,  $S_\ell(k)$  の極は虚軸上と下半面に存在する。上半面の虚軸上の極が束縛状態になる。

### 束縛状態

(11.103) と同様にすれば  $\frac{d}{dr} W(F_\ell(k, r), F_\ell(k_n, r)) = (k^2 - k_n^2) F_\ell(k_n, r) F_\ell(k, r)$  になるから

$$W(F_\ell(k, r), F_\ell(k_n, r)) - W(F_\ell(k, r_0), F_\ell(k_n, r_0)) = (k^2 - k_n^2) \int_{r_0}^r dr' F_\ell(k_n, r') F_\ell(k, r')$$

$r_0 \rightarrow \infty$  のとき  $W(F_\ell(k, r_0), F_\ell(k_n, r_0)) = (-1)^{\ell+1} i (k_n - k) e^{i(k+k_n)r_0}$  より

$$W(F_\ell(k, r), F_\ell(k_n, r)) = (-1)^{\ell+1} i (k_n - k) e^{i(k+k_n)r_0} + (k^2 - k_n^2) \int_{r_0}^r dr' F_\ell(k_n, r') F_\ell(k, r')$$

したがって

$$\frac{d}{dk} W(F_\ell(k, r), F_\ell(k_n, r)) \Big|_{k=k_n} = (-1)^\ell i e^{2ik_n r_0} + 2k_n \int_{r_0}^r dr' F_\ell^2(k_n, r') = 2k_n \int_{r_0}^r dr' F_\ell^2(k_n, r')$$

$\text{Im } k_n > 0$  の場合  $e^{2ik_n r_0} \rightarrow 0, (r_0 \rightarrow \infty)$  である。同様に

$$W(\Phi_\ell(k_n, r), \Phi_\ell(k, r)) - W(\Phi_\ell(k_n, r_0), \Phi_\ell(k, r_0)) = (k_n^2 - k^2) \int_{r_0}^r dr' \Phi_\ell(k_n, r') \Phi_\ell(k, r')$$

$r_0 \rightarrow 0$  とすると

$$\frac{d}{dk} W(\Phi_\ell(k_n, r), \Phi_\ell(k, r)) \Big|_{k=k_n} = -2k_n \int_0^r dr' \Phi_\ell^2(k_n, r') = -2k_n a_n^2 \int_0^r dr' F_\ell^2(k_n, r')$$

になる。 $\mathcal{J}_\ell(k_n) = 0$  であるから定義 (11.95) より

$$\mathcal{J}'_\ell(k_n) = \frac{i}{k_n} \frac{d}{dk} W(F_\ell(k, r), \Phi_\ell(k, r)) \Big|_{k=k_n}$$

である。

$$\frac{d}{dk} (f(k)g(k)) \Big|_{k=k_n} = \left( \frac{df}{dk} g(k_n) + f(k_n) \frac{dg}{dk} \right) \Big|_{k=k_n} = \frac{d}{dk} (f(k)g(k_n) + f(k_n)g(k)) \Big|_{k=k_n}$$

になるから

$$\begin{aligned} \mathcal{J}'_\ell(k_n) &= \frac{i}{k_n} \frac{d}{dk} \left( W(F_\ell(k, r), \Phi_\ell(k_n, r)) + W(F_\ell(k_n, r), \Phi_\ell(k, r)) \right) \Big|_{k=k_n} \\ &= \frac{i}{k_n} \frac{d}{dk} \left( a_n W(F_\ell(k, r), F_\ell(k_n, r)) + \frac{1}{a_n} W(\Phi_\ell(k_n, r), \Phi_\ell(k, r)) \right) \Big|_{k=k_n} \\ &= -2ia_n \int_0^\infty dr' F_\ell^2(k_n, r') = i(-1)^\ell \mathcal{J}_\ell(-k_n) \int_0^\infty dr |F_\ell(k_n, r)|^2 \neq 0 \end{aligned} \quad (11.105)$$



ただし,  $k_n$  が純虚数のとき (11.93) より  $F_\ell^*(k_n, r) = F_\ell^*(-k_n^*, r) = (-1)^{\ell+1} F_\ell(k_n, r)$  である。したがって,  $\text{Im } k_n > 0$  の場合  $\mathcal{J}_\ell(k_n) = 0$  の解は重根にはならない。言い換えれば,  $k = k_n$  は  $S_\ell(k)$  の 1 位の極である。 $k = k_n$  近傍では

$$S_\ell(k) = \frac{\mathcal{J}_\ell(-k)}{\mathcal{J}_\ell(k)} = \frac{i\gamma_n}{k - k_n} + \cdots, \quad \gamma_n = \frac{\mathcal{J}_\ell(-k_n)}{i\mathcal{J}_\ell'(k_n)} = (-1)^{\ell+1} \left( \int_0^\infty dr |F_\ell(k_n, r)|^2 \right)^{-1} \quad (11.106)$$

になる。 $i\gamma_n$  は  $k = k_n$  における  $S_\ell(k)$  の留数である。規格化した束縛状態の波動関数  $\chi_\ell(r)$  は

$$\chi_\ell(r) \propto F_\ell(k_n, r), \quad \therefore \chi_\ell(r) = \sqrt{(-1)^{\ell+1}\gamma_n} F_\ell(k_n, r)$$

で与えられる。

### 共鳴状態

$S_\ell(k)$  の極  $k = k_n$  は下半面にも存在する ( $k_I = \text{Im } k_n < 0$ )。  $k_R = \text{Re } k_n > 0$  で  $|k_I|$  が非常に小さい場合,  $k \approx k_R$  での波動関数を考える。(11.93), (11.96) より,  $k$  が実数のとき

$$F_\ell(-k, r) = (-1)^{\ell+1} F_\ell^*(k, r), \quad \mathcal{J}_\ell(-k) = \mathcal{J}_\ell^*(k)$$

であるから, 波動関数 (11.97) は

$$\Phi_\ell(k, r) = \text{Re} \left( (-1)^{\ell+1} \mathcal{J}_\ell(k) F_\ell(-k, r) \right) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \text{Re} \left( i^{\ell+1} \mathcal{J}_\ell(k) e^{-ikr} \right)$$

になる。 $|k_I|$  が非常に小さいとき,  $k \approx k_R$  ならば  $k \approx k_n$  になるから  $\mathcal{J}_\ell(k) \approx \mathcal{J}_\ell(k_n) = 0$  である。したがって,  $k = k_R$  近傍の波動関数は  $r \rightarrow \infty$  で小さい振幅で振動する。一方,  $r \rightarrow 0$  では  $\Phi_\ell(k, r) \rightarrow r^{\ell+1}$  になるから,  $\Phi_\ell(k, r)$  は 281 ページで示した共鳴状態を表す。エネルギーは

$$E = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = E_R - \frac{i}{2} \Gamma, \quad E_R = \frac{\hbar^2}{2m} (k_R^2 - k_I^2) \approx \frac{\hbar^2 k_R^2}{2m}, \quad \Gamma = -\frac{2\hbar^2}{m} k_R k_I > 0$$

であるから, 確率密度の時間依存  $|e^{-iEt/\hbar}|^2 = e^{-\Gamma t/\hbar}$  は時間的に減衰するが,  $\Gamma$  が小さければ減衰は弱く, エネルギー  $\hbar^2 k_R^2/2m$  の準定常的な共鳴状態になる。なお, (11.102) より  $\Phi_\ell(k_n, r)$  は  $r \rightarrow \infty$  では  $e^{-k_I r}$  で発散する。

ブライト・ウィグナーの公式 (11.70) を導出する。 $k \approx k_R \approx k_n$  では  $\mathcal{J}_\ell(k) \approx \mathcal{J}_\ell'(k_n) (k - k_n)$  になるから ( $k$  は実数)

$$S_\ell(k) = \frac{\mathcal{J}_\ell^*(k)}{\mathcal{J}_\ell(k)} \approx e^{2i\theta_0} \frac{k - k_n^*}{k - k_n}, \quad \text{ただし} \quad e^{2i\theta_0} = \frac{(\mathcal{J}_\ell'(k_n))^*}{\mathcal{J}_\ell'(k_n)} \quad (11.107)$$

である。

$$k_R(k - k_n) = k_R(k - k_R) - ik_R k_I \approx \frac{k^2 - k_R^2}{2} - ik_R k_I = \frac{m}{\hbar^2} (E - E_R + i\Gamma/2)$$

より

$$S_\ell(k) \approx e^{2i\theta_0} \frac{E - E_R - i\Gamma/2}{E - E_R + i\Gamma/2} = e^{2i\theta_0} \left( 1 - \frac{i\Gamma}{E - E_R + i\Gamma/2} \right) \quad (11.108)$$

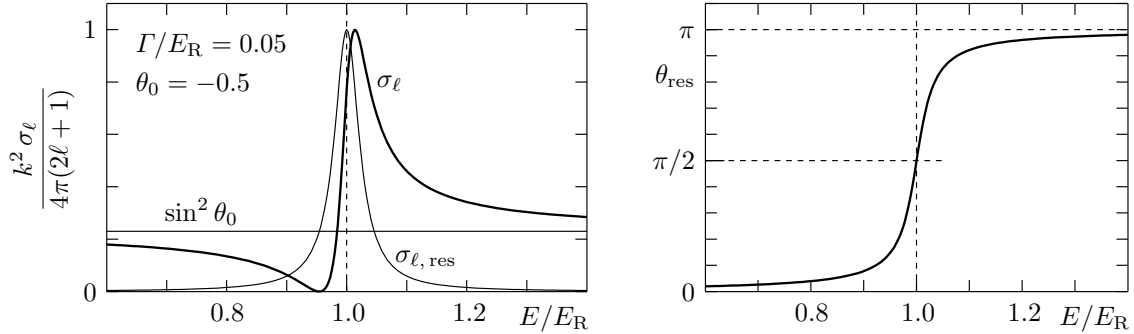
散乱の断面積  $\sigma_\ell$  は

$$\begin{aligned} \sigma_\ell &= \frac{\pi(2\ell+1)}{k^2} |1 - S_\ell|^2 \approx \frac{\pi(2\ell+1)}{k^2} \left| e^{-2i\theta_0} - 1 + \frac{i\Gamma}{E - E_R + i\Gamma/2} \right|^2 \\ &= \sigma_{\ell, \text{pot}} + \sigma_{\ell, \text{res}} - \frac{4\pi(2\ell+1)}{k^2} \text{Re} \left( \frac{\Gamma e^{i\theta_0} \sin \theta_0}{E - E_R + i\Gamma/2} \right) \end{aligned} \quad (11.109)$$

ただし

$$\sigma_{\ell, \text{pot}} = \frac{4\pi(2\ell+1)}{k^2} \sin^2 \theta_0, \quad \sigma_{\ell, \text{res}} = \frac{4\pi(2\ell+1)}{k^2} \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

である。 $\Gamma$  が小さいとき  $\sigma_{\ell}$  の  $E$  依存性を図示すると下の左図のようになる。 $\sigma_{\ell, \text{pot}}$  は通常のポテンシャル散乱の断面積である。 $\sigma_{\ell, \text{res}}$  は共鳴状態の寄与であり,  $\Gamma$  が小さい場合  $E = E_R$  で鋭いピークになる。(11.109) の第3項はポテンシャル散乱と共鳴散乱の干渉項である。 $E_R - \Gamma \lesssim E \lesssim E_R + \Gamma$  では共鳴散乱が支配的であるが,  $E = E_R$  から離れた領域では  $\sigma_{\ell} \approx \sigma_{\ell, \text{pot}}$  になる。



$E$  が実数の場合, (11.108) は

$$S_{\ell} = e^{2i\delta_{\ell}}, \quad \delta_{\ell} = \theta_0 + \theta_{\text{res}}, \quad \tan \theta_{\text{res}} = -\frac{\Gamma/2}{E - E_R}$$

と表せる。 $\theta_{\text{res}}$  を  $E$  の関数として図示すると上の右図になる。ただし,  $\theta_{\text{res}}$  には不定性があるが,  $E \ll E_R$  のとき  $\theta_{\text{res}} = 0$ ,  $E \gg E_R$  のとき  $\theta_{\text{res}} = \pi$  になるようにした。 $E \approx E_R$  では

$$\theta_{\text{res}} \approx \frac{\pi}{2} + \frac{E - E_R}{\Gamma/2}$$

になる。 $\Gamma$  が小さい場合,  $E = E_R$  付近で  $\theta_{\text{res}}$  は  $\theta_{\text{res}} \approx 0$  から  $\theta_{\text{res}} \approx \pi$  に急激に増加する。

**問題 11.10**  $\sigma_{\ell}$  の図で  $\sigma_{\ell} = 0$  になる  $E$  が存在する。この  $E$  は  $E_R + \frac{\Gamma}{2} \cot \theta_0$  になることを示せ。

### $|k| \rightarrow \infty$ におけるヨスト関数

簡単のため  $h_{\ell}(\rho) = \rho h_{\ell}^{(1)}(\rho)$  とする。 $h_{\ell}(kr)$  は (11.89) を満たす。これに  $\Phi_{\ell}(k, r)$  をかけた式と (11.88) に  $h_{\ell}(kr)$  をかけた式の差をとれば

$$\frac{d}{dr} \left( h_{\ell}(kr) \frac{d\Phi_{\ell}(k, r)}{dr} - \frac{dh_{\ell}(kr)}{dr} \Phi_{\ell}(k, r) \right) = h_{\ell}(kr) U(r) \Phi_{\ell}(k, r)$$

であるから

$$W(h_{\ell}(kr), \Phi_{\ell}(k, r)) \Big|_{r=\infty} - W(h_{\ell}(kr), \Phi_{\ell}(k, r)) \Big|_{r=0} = \int_0^{\infty} dr h_{\ell}(kr) U(r) \Phi_{\ell}(k, r)$$

になる。(11.91) より

$$W(h_{\ell}(kr), \Phi_{\ell}(k, r)) \Big|_{r=\infty} = W(F_{\ell}(k, r), \Phi_{\ell}(k, r)) \Big|_{r=\infty} = -ik \mathcal{J}_{\ell}(k)$$

である。

$$h_{\ell}(kr) = kr h_{\ell}^{(1)}(kr) \xrightarrow{r \rightarrow 0} -i \frac{(2\ell-1)!!}{(kr)^{\ell}}, \quad \Phi_{\ell}(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{(kr)^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!}$$

より  $W(h_\ell(kr), \Phi_\ell(k, r)) \Big|_{r=0} = -ik$  になるから

$$\mathcal{J}_\ell(k) = 1 + i \int_0^\infty dr r U(r) h_\ell^{(1)}(kr) \Phi_\ell(k, r) \quad (11.110)$$

である。(11.94) 及び  $(h_\ell^{(1)}(\rho^*))^* = (-1)^\ell h_\ell^{(1)}(-\rho)$  より

$$\mathcal{J}_\ell(k) - \mathcal{J}_\ell(-k) = i \int_0^\infty dr r U(r) \left( h_\ell^{(1)}(kr) + (h_\ell^{(1)}(k^*r))^* \right) \Phi_\ell(k, r)$$

ところで

$$h_\ell^{(1)}(\rho^*) = j_\ell(\rho^*) + in_\ell(\rho^*) = (j_\ell(\rho) - in_\ell(\rho))^*, \quad \therefore h_\ell^{(1)}(\rho) + (h_\ell^{(1)}(\rho^*))^* = 2j_\ell(\rho)$$

になるから

$$S_\ell(k) - 1 = \frac{\mathcal{J}_\ell(-k) - \mathcal{J}_\ell(k)}{\mathcal{J}_\ell(k)} = -\frac{2i}{\mathcal{J}_\ell(k)} \int_0^\infty dr r U(r) j_\ell(kr) \Phi_\ell(k, r)$$

である。

$|k| \rightarrow \infty$  では  $U$  を 1 次の摂動として扱える ( ボルン近似 )。  $\Phi_\ell(k, r)$  を自由粒子の波動関数  $kr j_\ell(kr)$  で置き換えると

$$\mathcal{J}_\ell(k) \approx 1 + ik \int_0^\infty dr r^2 U(r) h_\ell^{(1)}(kr) j_\ell(kr) \quad (11.111)$$

漸近形 (17.80), (17.81) より

$$\mathcal{J}_\ell(k) \xrightarrow{|k| \rightarrow \infty} 1 + \frac{i}{2k} \int_0^\infty dr U(r) \left( 1 - (-1)^\ell e^{2ikr} \right) \quad (11.112)$$

になる。  $\text{Im } k \geq 0$  ならば  $|e^{2ikr}| = \exp(-2r \text{Im } k) \leq 1$  になるから、  $\mathcal{J}_\ell(k)$  に対するポテンシャルの寄与は小さい。したがって、ポテンシャルの 1 次までで近似すると

$$S_\ell(k) - 1 \approx -2i \int_0^\infty dr r U(r) j_\ell(kr) \Phi_\ell(k, r) \approx -2ik \int_0^\infty dr r^2 U(r) j_\ell^2(kr)$$

散乱振幅 (11.46) は

$$f(\theta) \approx -\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) P_\ell(\cos \theta) \int_0^\infty dr r^2 U(r) j_\ell^2(kr), \quad \text{ただし } \text{Im } k \geq 0 \quad (11.113)$$

これはボルン近似の散乱振幅 (11.57) である。

$k \rightarrow 0$  におけるヨスト関数

$$\tilde{\Phi}_\ell(k, r) = \frac{\Phi_\ell(k, r)}{k^{\ell+1}}, \quad \tilde{\Phi}_\ell(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{r^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!}$$

とする。  $\tilde{\Phi}_\ell(k, r)$  の境界条件は  $k$  に依存せず、  $\tilde{\Phi}_\ell(k, r)$  は  $k \rightarrow 0$  としても発散しない。(11.94) より

$$\tilde{\Phi}_\ell(-k, r) = \tilde{\Phi}_\ell(k, r), \quad \therefore \tilde{\Phi}_\ell(k, r) = \tilde{\Phi}_\ell(0, r) + O(k^2)$$

である。(17.77), (17.78) より

$$\mathcal{J}_\ell(k) - \mathcal{J}_\ell(-k) = 2ik^{\ell+1} \int_0^\infty dr r U(r) j_\ell(kr) \tilde{\Phi}_\ell(k, r) = 2ik^{2\ell+1} (u_\ell + O(k^2))$$

$$\mathcal{J}_\ell(k) + \mathcal{J}_\ell(-k) = 2 - 2k^{\ell+1} \int_0^\infty dr r U(r) n_\ell(kr) \tilde{\Phi}_\ell(k, r) = 2\mathcal{J}_\ell(0) + O(k^2)$$

ただし

$$u_\ell = \frac{1}{(2\ell+1)!!} \int_0^\infty dr r^{\ell+1} U(r) \tilde{\Phi}_\ell(0, r), \quad \mathcal{J}_\ell(0) = 1 + (2\ell-1)!! \int_0^\infty dr \frac{U(r)}{r^\ell} \tilde{\Phi}_\ell(0, r)$$

になる。これから

$$\mathcal{J}_\ell(k) = \mathcal{J}_\ell(0) + ik^{2\ell+1}u_\ell + O(k^2) = \mathcal{J}_\ell(0) + c_\ell k^{\beta_\ell}, \quad \beta_\ell = \begin{cases} 1, & \ell = 0 \\ 2, & \ell > 0 \end{cases}, \quad c_0 = iu_0 \quad (11.114)$$

部分波振幅 (11.45) は

$$f_\ell(k) = \frac{S_\ell(k) - 1}{2ik} = \frac{1}{2ik} \frac{\mathcal{J}_\ell(-k) - \mathcal{J}_\ell(k)}{\mathcal{J}_\ell(k)} = -k^{2\ell} \frac{u_\ell + O(k^2)}{\mathcal{J}_\ell(0) + c_\ell k^{\beta_\ell}}$$

$\mathcal{J}_\ell(0) \neq 0$  の場合  $f_\ell(k) = -u_\ell k^{2\ell} / \mathcal{J}_\ell(0)$  より

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) f_\ell(k) P_\ell(\cos \theta) \xrightarrow{k \rightarrow 0} -a_0, \quad \text{ただし} \quad a_\ell = \frac{u_\ell}{\mathcal{J}_\ell(0)} \quad (11.115)$$

になる。全断面積は  $\sigma_{\text{tot}} = 4\pi a_0^2$  である。 $a_\ell$  を散乱半径あるいは散乱長という。ただし  $\ell > 0$  のとき  $a_\ell$  の次元は長さではない。 $\mathcal{J}_0(0) = 0$  ならば

$$f_0(k) = \frac{i}{k}, \quad \therefore f(\theta) = \frac{i}{k}, \quad \sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \quad (11.116)$$

になり、全断面積は発散する。ある  $\ell > 0$  で  $\mathcal{J}_\ell(0) = 0$  の場合

$$f_0(k) = -a_0, \quad f_\ell(k) = -\frac{u_\ell}{c_\ell} k^{2\ell-2}, \quad \therefore f(\theta) = \begin{cases} -a_0, & \ell \neq 1 \\ -a_0 - \frac{u_1}{c_1} \cos \theta, & \ell = 1 \end{cases} \quad (11.117)$$

である。 $k \rightarrow 0$  のとき、 $\mathcal{J}_1(0) = 0$  という特別な場合を除いて、 $\ell = 0$  だけが寄与する。

(11.45) より

$$\cot \delta_\ell = i \frac{S_\ell(k) + 1}{S_\ell(k) - 1} = i \frac{\mathcal{J}_\ell(-k) + \mathcal{J}_\ell(k)}{\mathcal{J}_\ell(-k) - \mathcal{J}_\ell(k)} = -\frac{1}{k^{2\ell+1}} \frac{\mathcal{J}_\ell(0) + O(k^2)}{u_\ell + O(k^2)}$$

であるから  $k \rightarrow 0$  のとき

$$k^{2\ell+1} \cot \delta_\ell = -\frac{1}{a_\ell} + \frac{r_\ell}{2} k^2 + \dots \quad (11.118)$$

と展開できる。 $r_\ell$  を有効距離という。 $\ell = 0$  のとき

$$S_0(k) = \frac{\cot \delta_0 + i}{\cot \delta_0 - i} = \frac{a_0 r_0 k^2 + i2a_0 k - 2}{a_0 r_0 k^2 - i2a_0 k - 2} = \frac{(k + ik_+)(k + ik_-)}{(k - ik_+)(k - ik_-)}, \quad k_\pm = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 2r_0/a_0}}{r_0}$$

になる。 $1 - 2r_0/a_0 > 0$  の場合、純虚数  $k = ik_\pm$  は  $S_0(k)$  の極になるが、上式は  $k \rightarrow 0$  での近似式であるから  $k_\pm \approx 0$  のとき  $ik_\pm$  は  $S_0(k)$  の極をよい近似で与える。 $k_\pm > 0$  ならば  $\ell = 0$  の束縛状態が存在し、そのエネルギーは  $E \approx \hbar^2 k_\pm^2 / 2m = -\hbar^2 k_\pm^2 / 2m$  になる。

陽子-中性子散乱の実験値は  $a_0 = 5.39 \text{ fm}$ ,  $r_0 = 1.70 \text{ fm}$  である ( $\text{fm} = 10^{-15} \text{ m}$ )。  $m$  として陽子-中性子の換算質量  $mc^2 = 940/2 \text{ MeV}$ , 及び  $\hbar c = 197.33 \text{ MeV fm}$  を使うと

$$k_- = 0.231 \text{ fm}^{-1}, \quad -\frac{\hbar^2 k_-^2}{2m} = -2.21 \text{ MeV}, \quad k_+ = 0.946 \text{ fm}^{-1}, \quad -\frac{\hbar^2 k_+^2}{2m} = -37.1 \text{ MeV}$$

になる。陽子-中性子系の束縛状態は重陽子の基底状態だけである。散乱実験のデータから求めた  $-(\hbar k_-)^2 / 2m$  は基底状態の実験値  $E = -2.226 \text{ MeV}$  とよく一致する。もう一組の実験データ  $a_0 = -23.7 \text{ fm}$ ,  $r_0 = 2.76 \text{ fm}$  があるが、 $k_- = -0.040 \text{ fm}^{-1} < 0$  になり束縛状態ではない。

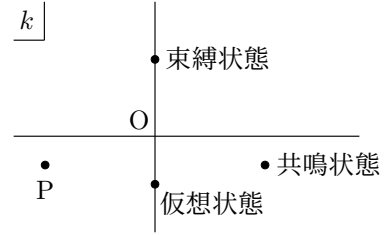
下半面の虚軸上にあり原点に近い  $S_\ell(k)$  の極を**仮想状態** ( virtual state ) という。  $k_+^2 \gg k^2, k_-^2$  の場合、全断面積は

$$\sigma_{\text{tot}} \approx 4\pi |f_0(k)|^2 = 4\pi \left| \frac{S_0(k) - 1}{2ik} \right|^2 = 4\pi a_0^2 \frac{k_+^2}{k^2 + k_+^2} \frac{k_-^2}{k^2 + k_-^2} \approx 4\pi a_0^2 \frac{k_-^2}{k^2 + k_-^2}$$

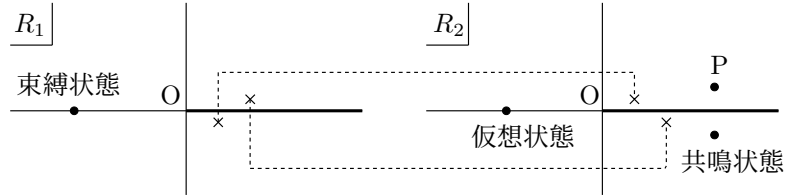
になる。  $\sigma_{\text{tot}}$  は  $k_-$  の符号に依らないから、  $k \approx 0$  の全断面積に対して、仮想状態は束縛状態と同じ効果をもたらす。波動関数は (11.98) より  $r \rightarrow \infty$  のとき  $\Phi_\ell(k_-, r) \propto e^{-k_- r}$  になるから、束縛状態 (  $k_- > 0$  ) では  $\Phi_\ell(k_-, r) \rightarrow 0$  になるが、仮想状態 (  $k_- < 0$  ) の場合  $\Phi_\ell(k_-, r) \rightarrow \infty$  である。

### S 行列の解析性

(11.104) 以下で述べたように、  $S_\ell(k)$  の極は虚軸上と下半面に存在する。複素  $k$  平面上で  $S_\ell(k)$  の極を右図に示す。一般に極は複数存在するが、ここでは代表的に 1 点のみ示す。  $k = k_R + ik_I$  が極ならば  $-k^* = -k_R + ik_I$  も極になる。したがって、共鳴状態に対応する極  $k_R > 0, k_I < 0$  の実部の符号を変えた極 P が存在するが、この極は物理的状態に対応しない。



$S_\ell(k)$  を  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  の関数  $S_\ell(E)$  として考える。異なる  $k$  と  $-k$  に対して  $E$  は同じになるが、一般に  $S_\ell(k) \neq S_\ell(-k)$  であるから  $S_\ell(E)$  は多価関数である。  $k = |k|e^{i\theta}$  とすると  $E = |E|e^{2i\theta}$  である。複素  $k$  平面の上半面 (  $0 \leq \theta \leq \pi$  ) は複素  $E$  平面の全平面  $R_1$  に対応し、下半面 (  $\pi \leq \theta \leq 2\pi$  ) も複素  $E$  平面の全平面  $R_2$  に対応するから、2枚の複素  $E$  平面  $R_1, R_2$  を用意する。  $R_1, R_2$  の正の実軸にカットを入れ、  $R_1$  のカットの下側 (上側) の部分と  $R_2$  のカットの上側 (下側) の部分を接続し、2枚の複素平面から成るリーマン面  $R$  を作る。  $k$  の全複素平面は  $R$  に対応する。  $E_1 = |E|e^{2i\theta}$  が  $R_1$  上の点で  $S_\ell(E_1) = S_\ell(k)$  のとき、  $E_2 = |E|e^{2i(\theta+\pi)}$  は  $R_2$  上の点で  $S_\ell(E_2) = S_\ell(-k)$  になる。  $E_1$  と  $E_2$  は異なる点であるから、  $R$  上では  $S_\ell(E)$  は一価関数である。複素  $k$  平面上での  $S_\ell(k)$  の極を複素  $E$  平面上で表すと下図になる。太い直線はカットを表す。破線は2つの平面の接続部分を結ぶ。  $R_1$  面上に存在する極 (  $k_I \geq 0$  である極 ) は束縛状態だけである。



$R_1$  上の点  $E_1 = E_0 e^{i\varepsilon}$ ,  $E_2 = E_0 e^{i(2\pi-\varepsilon)} = E_0 e^{-i\varepsilon}$  を考える。ただし  $E_0 \geq 0, 0 \leq \varepsilon < 2\pi$  である。  $k$  平面上では

$$k_1 = k_0 e^{i\varepsilon/2}, \quad k_2 = k_0 e^{i\pi-i\varepsilon/2} = -k_1^*, \quad \text{ただし} \quad k_0 = \sqrt{2mE_0/\hbar^2} \quad (11.119)$$

に対応するから

$$S_\ell(E_1) = S_\ell(k_1), \quad S_\ell(E_2) = S_\ell(-k_1^*) = S_\ell^*(k_1) = S_\ell^*(E_1)$$

$\varepsilon \rightarrow +0$  のとき  $E_1 = E_0 + i\varepsilon$ ,  $E_2 = E_0 - i\varepsilon$  になるから

$$S_\ell(E_0 - i\varepsilon) = S_\ell^*(E_0 + i\varepsilon) \quad (11.120)$$

である。 $S_\ell(E_0 + i\varepsilon) = S_\ell(k_0)$ ,  $S_\ell(E_0 - i\varepsilon) = S_\ell(-k_0)$  であるから, エネルギーの関数として考える場合, 正の実軸では  $\pm i\varepsilon$  を明記しておく必要がある。正エネルギー  $E_0$  の散乱に対応する S 行列  $S_\ell(k_0)$  を  $S_\ell(E_0)$  と書くことにすると

$$S_\ell(E_0 + i\varepsilon) = S_\ell(E_0), \quad S_\ell(E_0 - i\varepsilon) = S_\ell^*(E_0) \quad (11.121)$$

これから

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} (S_\ell(E_0 + i\varepsilon) - S_\ell(E_0 - i\varepsilon)) = 2i \operatorname{Im} S_\ell(E_0) = 2i \sin(2\delta_\ell(k_0))$$

正の実軸 (カット) の上下で  $S_\ell(E)$  は不連続である。負の実軸 ( $\varepsilon = \pi$ ) では  $k_1 = k_2 = ik_0$  になるから, 負の実軸の上下で  $S_\ell(E)$  は連続である。

### 井戸型ポテンシャル

引力の井戸型ポテンシャル (11.59) の場合, 原点で正則な (11.88) の解  $\Phi_\ell(k, r)$  は,  $r < a$  では

$$\Phi_\ell(k, r) = A \tilde{j}_\ell(Kr), \quad K = \rho_1/a = \sqrt{\rho^2 + v_0^2/a}, \quad \tilde{j}_\ell(x) = x j_\ell(x)$$

とおける。ただし, (11.60) の記号を用いた。 $\Phi_\ell(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} A(Kr)^{\ell+1}/(2\ell+1)!!$  であるから, 境界条件 (11.90) より  $A = k^{\ell+1}/K^{\ell+1}$  になる。 $r > a$  では  $\Phi_\ell(k, r)$  は  $\tilde{h}_\ell(\pm kr) \equiv \pm kr h_\ell^{(1)}(\pm kr)$  の線形結合で表せる。(11.97) より

$$\Phi_\ell(k, r) = \begin{cases} \frac{k^{\ell+1}}{K^{\ell+1}} \tilde{j}_\ell(Kr), & r < a \\ \frac{1}{2} (\mathcal{J}_\ell(-k) \tilde{h}_\ell(kr) - (-1)^\ell \mathcal{J}_\ell(k) \tilde{h}_\ell(-kr)), & r > a \end{cases}$$

になる。 $\Phi_\ell$  と  $d\Phi_\ell/dr$  が  $r = a$  で連続であるためには

$$\begin{aligned} 2 \frac{k^{\ell+1}}{K^{\ell+1}} \tilde{j}_\ell(Ka) &= \mathcal{J}_\ell(-k) \tilde{h}_\ell(ka) - (-1)^\ell \mathcal{J}_\ell(k) \tilde{h}_\ell(-ka) \\ 2 \frac{k^{\ell+1}}{K^{\ell+1}} \frac{d\tilde{j}_\ell(Ka)}{da} &= \mathcal{J}_\ell(-k) \frac{d\tilde{h}_\ell(ka)}{da} - (-1)^\ell \mathcal{J}_\ell(k) \frac{d\tilde{h}_\ell(-ka)}{da} \end{aligned}$$

第1式  $\times d\tilde{h}_\ell(ka)/da$  と 第2式  $\times \tilde{h}_\ell(ka)$  の差をとれば

$$(-1)^\ell \mathcal{J}_\ell(k) W(\tilde{h}_\ell(ka), \tilde{h}_\ell(-ka)) = 2 \frac{k^{\ell+1}}{K^{\ell+1}} W(\tilde{j}_\ell(Ka), \tilde{h}_\ell(ka))$$

になる。(11.92) より  $W(\tilde{h}_\ell(ka), \tilde{h}_\ell(-ka)) = 2ik(-1)^\ell$  であるから

$$\mathcal{J}_\ell(k) = \frac{ik^\ell}{K^{\ell+1}} W(\tilde{h}_\ell(ka), \tilde{j}_\ell(Ka)) = \frac{i\rho^{\ell+1}}{\rho_1^\ell} (\rho_1 h_\ell^{(1)}(\rho) j_\ell'(\rho_1) - \rho j_\ell(\rho_1) h_\ell^{(1)'}(\rho))$$

(17.71) より  $j_\ell, h_\ell^{(1)}$  は  $f_\ell'(x) = \ell f_\ell(x)/x - f_{\ell+1}(x)$  を満たすから

$$\mathcal{J}_\ell(k) = i \left( g_{\ell+1}(\rho) \frac{j_\ell(\rho_1)}{\rho_1^\ell} - g_\ell(\rho) \frac{j_{\ell+1}(\rho_1)}{\rho_1^{\ell-1}} \right), \quad \text{ただし} \quad g_\ell(x) = x^{\ell+1} h_\ell^{(1)}(x) \quad (11.122)$$

と表せる。なお, 井戸型ポテンシャルの場合, (11.110) は

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_\ell(k) &= 1 - i \frac{v_0^2 k^{\ell+1}}{a^2 K^\ell} \int_0^a dr r^2 h_\ell^{(1)}(kr) j_\ell(Kr) \\ &= 1 - i \frac{v_0^2 k^{\ell+1}}{a^2 K^\ell} \left[ \frac{r^2}{K^2 - k^2} \left( K h_\ell^{(1)}(kr) j_{\ell+1}(Kr) - k h_{\ell+1}^{(1)}(kr) j_\ell(Kr) \right) \right]_0^a \end{aligned}$$

になる ( [ ] 内を  $r$  で微分して確かめよ)。  $r \rightarrow 0$  のとき

$$r^2 h_\ell^{(1)}(kr) j_{\ell+1}(Kr) = O(r^2) \rightarrow 0, \quad r^2 h_{\ell+1}^{(1)}(kr) j_\ell(Kr) \rightarrow -i \frac{K^\ell}{k^{\ell+2}}$$

を用いれば (11.122) を得る。

$k$  が純虚数で  $\text{Im } k > 0$  のとき  $\mathcal{J}_\ell(k) = 0$  は、井戸型ポテンシャルの束縛状態の固有値を決める (6.24) である。  $\rho \rightarrow 0$  のとき  $g_\ell(\rho) \rightarrow -i(2\ell-1)!!$  になるから

$$\mathcal{J}_\ell(0) = \frac{(2\ell-1)!!}{v_0^{\ell-1}} \left( \frac{2\ell+1}{v_0} j_\ell(v_0) - j_{\ell+1}(v_0) \right) = \frac{(2\ell-1)!!}{v_0^{\ell-1}} j_{\ell-1}(v_0)$$

**問題 6.5** で示したように、  $\mathcal{J}_\ell(0) = 0$  は新たな束縛状態が現れる条件である。  $k$  で微分すると  $k = 0$  のとき  $df(\rho_1)/d\rho = \rho f'(\rho_1)/\rho_1 = 0$  である。 (17.79) より  $g'_\ell(0) = \delta_{\ell 0}$  になるから

$$-\frac{i}{a} \mathcal{J}'_\ell(0) = g'_{\ell+1}(0) \frac{j_\ell(v_0)}{v_0^\ell} - g'_\ell(0) \frac{j_{\ell+1}(v_0)}{v_0^{\ell-1}} = -v_0 j_1(v_0) \delta_{\ell 0}$$

したがって、 (11.114) が成り立つ。

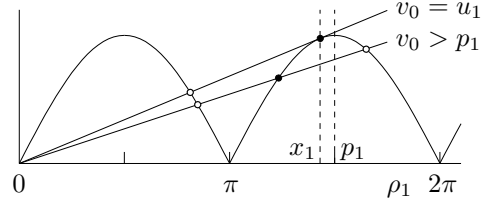
$S_0(k)$  の極、つまり  $\mathcal{J}_0(k) = 0$  の解を求める。 極は純虚数または虚部が負である。 (17.70) より  $\mathcal{J}_0(k) = 0$  は

$$\rho = -i\rho_1 \cot \rho_1, \quad \rho = ak, \quad \rho_1 = \sqrt{v_0^2 + \rho^2}$$

になる。ここでは純虚数解を求める。  $\kappa$  を実数として  $\rho = i\kappa$  とおく。  $v_0^2 - \kappa^2 > 0$  の場合、  $\rho_1 > 0$  であり  $\kappa = -\rho_1 \cot \rho_1$  になる。両辺を二乗すれば

$$|\sin \rho_1| = \frac{\rho_1}{v_0}, \quad \tan \rho_1 \geq 0 \text{ のとき } \kappa = \mp \sqrt{v_0^2 - \rho_1^2}$$

になる。  $\rho_1$  は直線  $\rho_1/v_0$  と  $|\sin \rho_1|$  の交点から求まる (29 ページ参照)。  $n\pi < \rho_1 < (n+1)\pi$  の場合、右図から  $v_0 = p_n = (n+1/2)\pi$  のとき  $\kappa = 0$ 、  $v_0 > p_n$  のとき  $\kappa > 0$  (図の  $\circ$ )、  $v_0 \geq u_n$  のとき  $\kappa < 0$  (図の  $\bullet$ ) の解が存在する。ただし

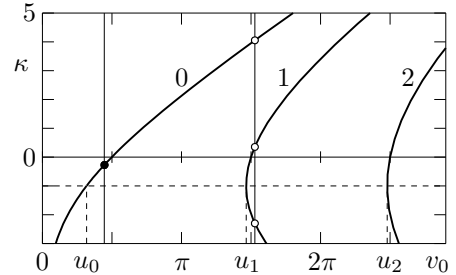


$$u_n = \frac{1}{|\cos x_n|} = \sqrt{1 + x_n^2}, \quad \sin x_n - x_n \cos x_n = x_n^2 j_1(x_n) = 0 \quad (11.123)$$

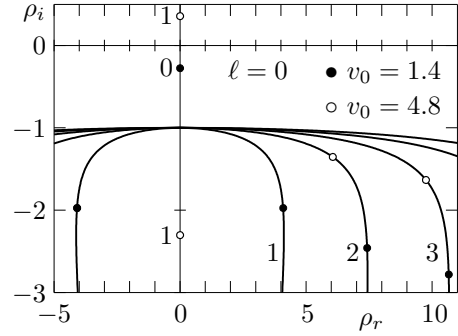
である。  $x = x_n$  のとき  $\sin x$  の接線は原点を通る。  $v_0 = u_n$  のとき  $\kappa = -\sqrt{u_n^2 - x_n^2} = -1$  になる。  $v_0^2 - \kappa^2 < 0$  の場合

$$\kappa = -\sqrt{\kappa^2 - v_0^2} \coth \sqrt{\kappa^2 - v_0^2} \leq -1$$

であるから、  $v_0 \leq 1$  のとき  $\kappa \leq -1$  の解が1つだけ存在する。  $n \neq 0$  のとき  $0 < v_0 < u_n$  では  $n\pi \leq \rho_1 < (n+1)\pi$  の領域に純虚数解は存在しない。  $\kappa$  と  $v_0$  の関係を右図に示す。 曲線に付けた値は  $n$  を表す。 また、  $\bullet$ 、  $\circ$  はそれぞれ  $v_0 = 1.4$ 、  $4.8$  での解である。  $v_0 = 1.4$  の場合、束縛状態は存在しないが、  $n = 0$  の解は  $k \approx 0$  の仮想状態であり  $v_0 > \pi/2 \approx 1.57$  では束縛状態になる。  $v_0 = 4.8$  のとき  $n = 0, 1$  の2つの束縛状態が存在する。



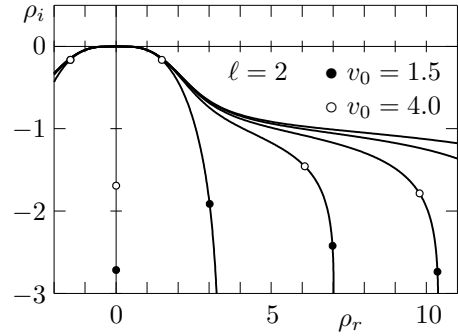
右図に  $\ell = 0$  での極  $ak = \rho = \rho_r + i\rho_i$  の位置を示す。曲線及び虚軸上の点に付けた添字は  $n$  の値を表す。(11.101) より  $\rho$  が極のとき  $-\rho^*$  も極である。 $n \neq 0$  の極は  $0 < v_0 < u_n$  では  $\rho_r \neq 0$  であるが、 $v_0 = u_n$  では  $\rho = -i$  になる。これは 2 位の極である。前図より  $v_0 > u_n$  になると、虚軸上を  $\pm i\infty$  の 2 方向に移動する。 $i\infty$  に移動する極は  $v_0 > (n + 1/2)\pi$  では上半面に現れ束縛状態になる (152 ページ参照)。 $n = 0$  の場合、常に虚軸上にある。前図と同様に、● は  $v_0 = 1.4$ 、○ は  $v_0 = 4.8$  での極を表す。



$\mathcal{J}_\ell(k) = 0$  の純虚数解  $\rho = i\kappa$  は  $\kappa > 0$  ならば 1 位の零点であるが、 $\kappa \leq 0$  の解が 2 位の零点になる場合がある。 $v_0 = v_\kappa$  で  $\rho = i\kappa$  が 2 位ならば、 $\rho \approx i\kappa$ 、 $v_0 \approx v_\kappa$  では  $\mathcal{J}_\ell(k) = 0$  は

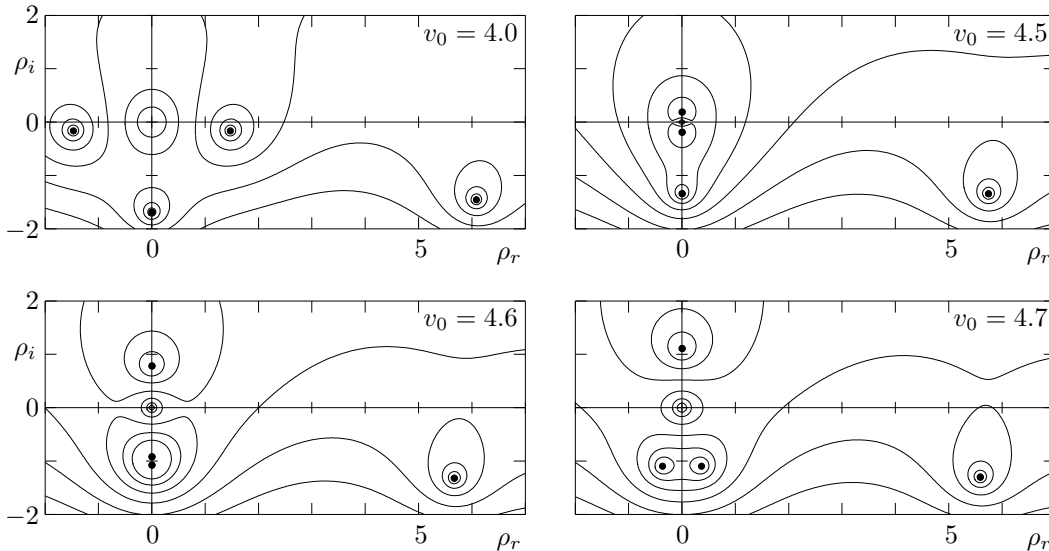
$$(\rho - i\kappa)^2 + c_\kappa(v_0 - v_\kappa) \approx 0, \quad \therefore \quad \rho = i\kappa \pm \sqrt{c_\kappa(v_\kappa - v_0)} \quad (11.124)$$

になる。 $c_\kappa > 0$  の場合、 $v_0 < v_\kappa$  では  $\rho_r \neq 0$  の  $\rho$  と  $-\rho^*$  の解が存在するが、この 2 つは  $v_0 = v_\kappa$  で重なり、 $v_0 > v_\kappa$  では 2 つの異なる純虚数解になる。 $c_\kappa < 0$  では逆になる。 $\ell = 0$  の場合、 $v_0 = u_{n \neq 0}$ 、 $\rho = -i$  で  $c_\kappa > 0$  である。



右図は  $\ell = 2$  の極である。 $v_0 = 4$  では実軸に近い極  $\approx 1.47 - 0.16i$  が存在する。この極は 282 ページの  $\sigma_\ell$  の図で  $v_0 = 4$ 、 $\ell = 2$  の鋭いピークに対応する。 $\ell = 0$  では極は虚軸に沿って原点に近づくが、 $\ell \neq 0$  の場合、実軸に沿って原点に近づく。原点では 2 位の極になる。(11.124) において  $\kappa = 0$ 、 $c_\kappa > 0$  である。 $v_\kappa$  は  $j_{\ell-1}(v_\kappa) = 0$  で決まる。 $v > v_\kappa$  では極は虚部が正と負の純虚数になり、正の極が束縛状態を表す。図の虚軸上の極は  $v_0$  を大きくしても原点に到達しない。

下図に  $\ell = 2$  での  $|\mathcal{J}_\ell(k)|$  の等高線を示す。● は  $\mathcal{J}_\ell$  の零点、 $S_\ell$  の極である。 $v_0 = 4.5, 4.6, 4.7$  での上半面の虚軸上の●は束縛状態である。束縛状態は  $j_1(v_0) = 0$  になると現れる。(11.123) の  $x_n$  を用いて  $v_0 = x_n$  になるから、 $\ell = 2$  の束縛状態は  $v_0 \geq x_1 \approx 4.493$  のとき存在する (152 ページ参照)。下図の場合、 $v_0 = x_1$  のとき  $c_\kappa > 0$  である 2 位の極  $\rho = 0$  が存在するが、これ以外に、 $v_0 \approx 4.603$  のとき  $c_\kappa < 0$  になる 2 位の極  $\rho = -i$  も存在する。





### 11.9 分散式とレビンソンの定理

散乱振幅 (11.46) は  $\theta$  と  $E$  に依存するから  $f(E, \theta)$  とする。前方散乱の場合

$$f(E, 0) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) (S_{\ell}(E) - 1)$$

になる。  $R_1$  面上では,  $f(E, 0)$  の極は束縛状態のエネルギー  $E_n < 0$  である。  $\text{Im} E \neq 0$  のとき, 複素積分

$$I(E) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \frac{f(z, 0)}{z - E}$$

を考える。ただし  $C$  は ( $R \rightarrow \infty, \varepsilon \rightarrow +0$ )

$C_{\infty}$  = 半径  $R$  の円周,  $C_0$  = 半径  $\varepsilon$  の円周,  $C_{\pm}$  = 正の実軸 ( $\text{Im} z = \pm \varepsilon$ )

から成る。  $C$  の内部にある  $f(z, 0)/(z - E)$  の極は  $z = E_n$  と  $z = E$  である。束縛状態  $E_n$  の角運動量が  $\ell$  のとき,  $z = E_n$  近傍では (11.106) より  $z = \hbar^2 k^2 / 2m$  とすると

$$S_{\ell}(z) = \frac{i\gamma_n}{k - k_n} + \dots = \frac{i\gamma_n(k + k_n)}{k^2 - k_n^2} + \dots = \frac{\hbar^2}{m} \frac{i\gamma_n k_n}{z - E_n} + \dots$$

になるから

$$f(z, 0) = \frac{\lambda_n}{z - E_n} + \dots, \quad \lambda_n = \frac{\hbar^2}{m} \frac{2\ell+1}{2} \gamma_n = \text{実数}$$

したがって, 留数定理より

$$I(E) = \lim_{z \rightarrow E} (z - E) \frac{f(z, 0)}{z - E} + \sum_n \lim_{z \rightarrow E_n} (z - E_n) \frac{f(z, 0)}{z - E} = f(E, 0) + \sum_n \frac{\lambda_n}{E_n - E} \quad (11.125)$$

になる。

$C$  を分割すれば

$$I(E) = I_{\infty} + I_0 + I_+ + I_-, \quad \text{ただし} \quad I_{\infty} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_{\infty}} dz \frac{f(z, 0)}{z - E} \quad \text{など}$$

$C_{\infty}$  では  $z = Re^{i\theta}$ ,  $0 \leq \theta \leq 2\pi$  であるから

$$I_{\infty} = \frac{iR}{2\pi i} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\theta} \frac{f(Re^{i\theta}, 0)}{Re^{i\theta} - E} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta f(Re^{i\theta}, 0)$$

$R_1$  面上では  $\text{Im} k \geq 0$  である。したがって, (11.113), (17.87) より

$$f(z, 0) \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} - \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \int_0^{\infty} dr r^2 U(r) j_{\ell}^2(kr) = - \int_0^{\infty} dr r^2 U(r) = f_b(0)$$

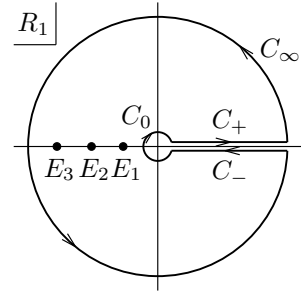
$f_b(\theta)$  はポルン近似の散乱振幅 (11.26) である。これから  $I_{\infty} \rightarrow f_b(0)$  になる。

$C_0$  では  $z = \varepsilon e^{i\theta}$ ,  $2\pi \geq \theta \geq 0$  であるから

$$I_0 = - \frac{\varepsilon}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\theta} \frac{f(\varepsilon e^{i\theta}, 0)}{\varepsilon e^{i\theta} - E} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{2\pi E} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\theta} f(\varepsilon e^{i\theta}, 0)$$

(11.115), (11.117) より  $\mathcal{J}_0(0) \neq 0$  ならば  $f(\varepsilon e^{i\theta}, 0) \rightarrow \text{定数}$  になるから  $I_0 \rightarrow 0$  である。  $\mathcal{J}_0(0) = 0$  でも (11.116) より  $f(\varepsilon e^{i\theta}, 0) = i/k \propto 1/(\sqrt{\varepsilon} e^{i\theta/2})$  になるから  $I_0 \rightarrow 0$  である。  $I_{\pm}$  は

$$I_+ = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{\infty} dz \frac{f(z + i\varepsilon, 0)}{z + i\varepsilon - E}, \quad I_- = \frac{1}{2\pi i} \int_{\infty}^0 dz \frac{f(z - i\varepsilon, 0)}{z - i\varepsilon - E}$$



ここで  $z$  は実数である。  $\text{Im } E \neq 0$  のとき  $z - E \neq 0$  より分母の  $i\varepsilon$  は無視してよいから

$$I_+ + I_- = \frac{1}{2\pi i} \int_0^\infty dz \frac{f(z + i\varepsilon, 0) - f(z - i\varepsilon, 0)}{z - E}$$

(11.119) より  $E = z + i\varepsilon$  のとき  $k = \sqrt{2mz}/\hbar$ ,  $E = z - i\varepsilon$  のとき  $k = -\sqrt{2mz}/\hbar$  であるから

$$f(z - i\varepsilon, 0) = -\frac{\hbar}{2i\sqrt{2mz}} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) (S_\ell(z - i\varepsilon) - 1) = f^*(z + i\varepsilon, 0) = f^*(z, 0) \quad (11.126)$$

になる。ただし, (11.121) を使った。したがって

$$I_+ + I_- = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dz \frac{\text{Im} f(z, 0)}{z - E}, \quad \therefore \quad I = f_b(0) + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dz \frac{\text{Im} f(z, 0)}{z - E}$$

これと (11.125) より

$$f(E, 0) = f_b(0) + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dz \frac{\text{Im} f(z, 0)}{z - E} + \sum_n \frac{\lambda_n}{E - E_n}, \quad \text{ただし } \text{Im} E \neq 0$$

を得る。これを前方散乱振幅に対する**分散式**という。複素数  $E$  での  $f(E, 0)$  は実軸上の  $f(E, 0)$  で決まる。なお, 光学定理 (11.14) より  $\text{Im} f(z, 0)$  は全断面積で表せる。 $E$  が正の実数の場合 ( $\text{Im} E = 0$ ), 分散式で  $E$  を  $E + i\varepsilon$  で置き換えれば

$$f(E + i\varepsilon, 0) = f_b(0) + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dz \frac{\text{Im} f(z, 0)}{z - E - i\varepsilon} + \sum_n \frac{\lambda_n}{E - E_n + i\varepsilon}$$

$\varepsilon \rightarrow +0$  とすると  $E - E_n \neq 0$  より第3項目の  $i\varepsilon$  は無視してよい。

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \text{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)$$

であるから

$$f(E, 0) = f_b(0) + \frac{1}{\pi} \text{P} \int_0^\infty dz \frac{\text{Im} f(z, 0)}{z - E} + \sum_n \frac{\lambda_n}{E - E_n} + i \text{Im} f(E, 0), \quad \text{ただし } E > 0$$

$\text{P}$  は主値積分である。 $\lambda_n$ ,  $f_b(0)$  は実数であるから, 右辺の最初の3項の和は実数  $\text{Re} f(E, 0)$  である。 $\varepsilon \rightarrow -0$  でもよいが, (11.126) から  $f(E + i\varepsilon, 0)$  は  $E > 0$  での複素共役  $f^*(E, 0)$  になる。

### レビンソンの定理

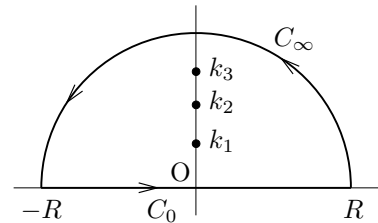
図のような複素  $k$  平面上の経路を  $C$  として

$$I = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dk G(k), \quad G(k) = \frac{\mathcal{J}'_\ell(k)}{\mathcal{J}_\ell(k)}$$

を考える ( $R \rightarrow \infty$ )。  $\mathcal{J}_\ell(k)$  は虚軸上と下半面に零点をもつから, 実数では  $k = 0$  だけが零点になり得る。ここでは  $\mathcal{J}_\ell(0) \neq 0$

とし  $G(k)$  は実軸上に極を持たないとする。経路  $C$  内の  $G(k)$  の極は, 上半面の虚軸上に存在する  $\mathcal{J}_\ell(k_n) = 0$  を満たす  $k = k_n$  である。これは束縛状態に対応し, 一般に複数個存在する。 $k \approx k_n$  では  $\mathcal{J}_\ell(k) = \mathcal{J}'_\ell(k_n)(k - k_n) + \dots$  になる。(11.105) より  $\mathcal{J}'_\ell(k_n) \neq 0$  であるから,  $k = k_n$  は  $G(k)$  の1位の極である。したがって, 留数定理より

$$I = \sum_n \lim_{k \rightarrow k_n} (k - k_n) G(k) = \sum_n 1 = N_\ell = \text{角運動量 } \ell \text{ の束縛状態の個数}$$



である。\$C\$ を実軸に沿った積分 \$I\_0\$ と上半面の半円の積分 \$I\_\infty\$ に分ければ

$$I = I_0 + I_\infty, \quad I_0 = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dk G(k), \quad I_\infty = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_\infty} dk G(k)$$

になる。\$\mathcal{J}\_\ell(k)\$ を極形式で表して \$\mathcal{J}\_\ell(k) = f(k)e^{-i\phi(k)}\$, \$f(k) > 0\$ とすると

$$I_0 = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left( \frac{f'(k)}{f(k)} - i\phi'_\ell(k) \right)$$

である。\$k\$ が実数のとき

$$S_\ell(k) = \frac{\mathcal{J}_\ell^*(k)}{\mathcal{J}_\ell(k)} = e^{2i\phi(k)} = e^{2i\delta_\ell(k)}, \quad \therefore \quad \phi'(k) = \delta'_\ell(k)$$

(11.96) より \$\mathcal{J}\_\ell^\*(k) = \mathcal{J}\_\ell(-k)\$ になるから

$$f(k)e^{i\phi(k)} = f(-k)e^{-i\phi(-k)}, \quad \therefore \quad f(k) = f(-k), \quad e^{-i\phi(k)} = e^{i\phi(-k)}$$

\$f'(k)/f(k)\$ は奇関数になるから、この積分は 0 である。また、\$\phi'(k) = \delta'\_\ell(k)\$ は偶関数であるから

$$I_0 = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \delta'_\ell(k) = \frac{1}{\pi} (\delta_\ell(0) - \delta_\ell(\infty))$$

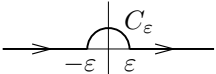
ただし、\$\delta\_\ell(k)\$ は連続関数で値の範囲に制限は設けない。上半面 (\$\text{Im } k > 0\$) では (11.112) より

$$\mathcal{J}_\ell(k) \xrightarrow{|k| \rightarrow \infty} 1 + \frac{i}{2k} \int_0^\infty dr U(r) (1 - (-1)^\ell e^{2ikr}) = 1 + \frac{iu}{2k}, \quad u = \int_0^\infty dr U(r)$$

\$G(k) \to u/(2ik^2)\$ になるから

$$I_\infty = \frac{1}{2\pi i} \frac{u}{2} \int_0^\pi d\theta R e^{i\theta} \frac{1}{(R e^{i\theta})^2} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0, \quad \therefore \quad \delta_\ell(0) - \delta_\ell(\infty) = \pi N_\ell$$

である。

\$\mathcal{J}\_\ell(0) = 0\$ の場合、\$\varepsilon \to +0\$ として実軸上の積分路を  に変更すると

$$I_0 = \frac{1}{2\pi i} \left( \int_{-\infty}^{-\varepsilon} + \int_{\varepsilon}^{\infty} \right) dk G(k) + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_\varepsilon} dk G(k) = \frac{1}{\pi} (\delta_\ell(0) - \delta_\ell(\infty)) + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_\varepsilon} dk G(k)$$

(11.114) より \$C\_\varepsilon\$ 上では \$G(k) = \beta\_\ell/k\$, \$k = \varepsilon e^{i\theta}\$, \$\pi \ge \theta \ge 0\$ になるから

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{C_\varepsilon} dk G(k) = \frac{1}{2\pi} \int_\pi^0 d\theta \varepsilon e^{i\theta} \frac{\beta_\ell}{\varepsilon e^{i\theta}} = -\frac{\beta_\ell}{2}, \quad \therefore \quad I_0 = \frac{1}{\pi} (\delta_\ell(0) - \delta_\ell(\infty)) - \frac{\beta_\ell}{2} = N_\ell$$

\$\mathcal{J}\_\ell(0) \neq 0\$ の結果と合わせれば

$$\delta_\ell(0) - \delta_\ell(\infty) = \pi \left( N_\ell + \frac{\alpha}{2} \right), \quad \alpha = \begin{cases} 0, & \mathcal{J}_\ell(0) \neq 0 \\ 1, & \mathcal{J}_\ell(0) = 0, \ell = 0 \\ 2, & \mathcal{J}_\ell(0) = 0, \ell > 0 \end{cases} \quad (11.127)$$

これを**レビンソンの定理**という。ここで \$N\_\ell\$ は負エネルギーの束縛状態の個数である。\$\ell \neq 0\$ のとき、零エネルギーの束縛状態も存在するが \$N\_\ell\$ には含めていない。

## 11.10 クーロン散乱

これまではポテンシャル  $V(r)$  は  $r \rightarrow \infty$  のとき  $1/r^2$  よりも早く 0 に収束すると仮定した。この仮定はクーロンポテンシャルに対しては成り立たない。質量  $m$ , 電荷  $Ze$  の粒子が質量  $m'$ , 電荷  $Z'e$  の粒子により散乱されるとする。 $m' \gg m$  の場合, あるいは, 重心運動を分離し  $m$  を換算質量に置き換えれば

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{ZZ'\alpha\hbar c}{r}\right)\psi_c(\mathbf{r}) = E\psi_c(\mathbf{r})$$

つまり

$$\left(\nabla^2 + k^2 - \frac{2k\eta}{r}\right)\psi_c(\mathbf{r}) = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0, \quad \eta = \frac{ZZ'\alpha mc}{\hbar k} \quad (11.128)$$

である。 $z$  軸を入射粒子の運動量方向にとる。 $\psi_c \xrightarrow{z \rightarrow -\infty} e^{ikz}$  である。

(16.49) の放物線座標  $u = r + z \geq 0$ ,  $v = r - z \geq 0$ ,  $\phi$  を用いて (11.128) を解く (156 ページ参照)。 $z$  軸方向に進む入射粒子が中心力ポテンシャルで散乱される場合,  $\psi_c$  は  $z$  軸まわりの角度  $\phi$  に依存しない。変数分離形  $\psi_c(\mathbf{r}) = f_1(u)f_2(v)$  を考えると, (16.50) より (11.128) は

$$\frac{1}{f_1(u)} \left(u \frac{d^2}{du^2} + \frac{d}{du} + \frac{k^2}{4}u\right) f_1(u) + \frac{1}{f_2(v)} \left(v \frac{d^2}{dv^2} + \frac{d}{dv} + \frac{k^2}{4}v\right) f_2(v) = k\eta \quad (11.129)$$

になる。 $z = (u - v)/2 \rightarrow -\infty$ , つまり, 任意の  $u$  に対して  $v \rightarrow \infty$  のとき

$$\psi_c = f_1(u)f_2(v) \xrightarrow{v \rightarrow \infty} e^{ikz} = e^{ik(u-v)/2}, \quad \therefore f_1(u) = e^{iku/2}, \quad f_2(v) \xrightarrow{v \rightarrow \infty} e^{-ikv/2}$$

である。(11.129) の  $f_1$  を含む部分は  $ik/2$  になる。 $f_2(v) = e^{-ikv/2}g(v)$  とすると (11.129) は

$$\left(\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (1 - \rho) \frac{d}{d\rho} + i\eta\right)g = 0, \quad \rho = ikv \quad (11.130)$$

これは合流型超幾何微分方程式 (17.102) で  $a = -i\eta$ ,  $b = 1$  とした方程式である。 $\rho = 0$  で正則な解は  $A_c$  を任意定数として  $g(v) = A_c M(-i\eta, 1, ikv)$  になるから

$$\psi_c(\mathbf{r}) = f_1(u)f_2(v) = e^{ikz}g(v) = A_c e^{ikz} M(-i\eta, 1, ikv), \quad v = r - z = 2r \sin^2(\theta/2) \quad (11.131)$$

である。以下で示すように, この解は  $r \rightarrow \infty$  で外向き球面波の境界条件を満たす。なお, 最初から  $\psi_c(\mathbf{r}) = e^{ikz}g(v)$  と仮定すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial x_i} &= \frac{\partial v}{\partial x_i} \frac{dg}{dv} = \left(\frac{x_i}{r} - \delta_{i,3}\right) \frac{dg}{dv}, \quad \frac{\partial^2 g}{\partial x_i^2} = \frac{r^2 - x_i^2}{r^3} \frac{dg}{dv} + \left(\frac{x_i}{r} - \delta_{i,3}\right)^2 \frac{d^2 g}{dv^2} \\ \therefore (\nabla^2 + k^2)\psi_c(\mathbf{r}) &= 2(\nabla e^{ikz}) \cdot (\nabla g) + e^{ikz} \nabla^2 g = \frac{2}{r} e^{ikz} \left((1 - ikv) \frac{dg}{dv} + v \frac{d^2 g}{dv^2}\right) \end{aligned} \quad (11.132)$$

であり, 直ちに (11.130) を得る。

(11.131) を入射波と散乱波に分離する。(18.13) より  $v = r - z \rightarrow \infty$  では  $v^{-2}$  以上を無視すると

$$\begin{aligned} \psi_c(\mathbf{r}) &= A_c e^{ikz} \left( \frac{(-ikv)^{i\eta}}{\Gamma(1+i\eta)} \left(1 + \frac{\eta^2}{ikv}\right) + \frac{e^{ikv}}{\Gamma(-i\eta)} \frac{(ikv)^{-i\eta}}{ikv} \right) \\ &= \frac{A_c}{i^{i\eta} \Gamma(1+i\eta)} \left[ e^{ikz} (kv)^{i\eta} \left(1 + \frac{\eta^2}{ikv}\right) - \frac{\eta \Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} e^{ikr} (kv)^{-i\eta-1} \right] \end{aligned}$$

になる ( $a^b = e^{a \log b}$  において  $\log b = \log |b| + i\theta$ ,  $|\theta| < \pi$  とする)。そこで

$$A_c = i^{i\eta} \Gamma(1+i\eta) = e^{i\eta \log i} \Gamma(1+i\eta) = e^{-\pi\eta/2} \Gamma(1+i\eta) \quad (11.133)$$

とすると

$$\psi_c(\mathbf{r}) \xrightarrow{v \rightarrow \infty} \psi_{\text{in}}(\mathbf{r}) + \psi_{\text{out}}(\mathbf{r})$$

ただし

$$\psi_{\text{in}}(\mathbf{r}) = e^{ikz} (kv)^{i\eta} \left(1 + \frac{\eta^2}{ikv}\right) = \exp(ikz + i\eta \log k(r-z)) \left(1 + \frac{\eta^2}{ik(r-z)}\right) \quad (11.134)$$

$$\psi_{\text{out}}(\mathbf{r}) = -\frac{\eta \Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} e^{ikr} (kv)^{-i\eta-1} = \frac{\exp(ikr - i\eta \log 2kr)}{r} f_c(\theta) \quad (11.135)$$

$$f_c(\theta) = -\frac{\eta}{2k} \frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} (\sin^2(\theta/2))^{-i\eta-1} = -\frac{\eta}{2k} \frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} \frac{\exp(-i\eta \log \sin^2(\theta/2))}{\sin^2(\theta/2)} \quad (11.136)$$

である。ここで  $v = r - z = 2r \sin^2(\theta/2)$  を用いた。  $\Gamma(1+i\eta) = |\Gamma(1+i\eta)| e^{i\sigma_0}$  とすれば  $\Gamma(1-i\eta) = \Gamma^*(1+i\eta)$  であるから

$$f_c(\theta) = -\frac{\eta}{2k \sin^2(\theta/2)} e^{i\delta} = -\frac{ZZ' \alpha \hbar c}{4E \sin^2(\theta/2)} e^{i\delta}, \quad \delta = 2\sigma_0 - \eta \log \sin^2(\theta/2) \quad (11.137)$$

になる。

クーロンポテンシャルは無限遠まで影響を及ぼす。このため、(11.134), (11.135) は (11.11) に似た構造をしているが ( $\mathbf{k}$  を  $z$  軸にとるから  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kz$ ),  $\psi_{\text{in}}$  は  $\exp(i\eta \log k(r-z))$  のため純粋な平面波ではない。ところで  $\psi_{\text{in}}$  の確率流  $\mathbf{J}$  を求めると

$$J_x = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left( \psi_{\text{in}}^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\text{in}} \right) = \frac{\hbar \eta}{m} \frac{x}{r(r-z)} \left( 1 + O((r-z)^{-1}) \right)$$

$$J_z = \frac{\hbar k}{m} \left( 1 - \frac{\eta}{kr} + O((r-z)^{-1}) \right)$$

である。したがって  $z \rightarrow -\infty$  では  $J_x, J_y \rightarrow 0$ ,  $J_z \rightarrow \hbar k/m$  になるから,  $\psi_{\text{in}}$  を入射波と考えてよい。 $\psi_{\text{out}}$  も散乱波特有の  $e^{ikr}/r$  にはならず, 因子  $\exp(-i\eta \log 2kr)$  がかかる。(11.10) と同様に  $\psi_{\text{out}}$  の確率流  $\mathbf{J}$  を求めると

$$\mathbf{J} = \mathbf{e}_r \frac{\hbar}{m} \frac{|f_c|^2}{r^2} \frac{d}{dr} (kr - \eta \log 2kr) + \frac{\hbar}{m} \frac{\text{Im}(f_c^* \nabla f_c)}{r^3} = \mathbf{e}_r \frac{\hbar k}{m} \frac{|f_c|^2}{r^2} + O(1/r^3)$$

になるから,  $f_c(\theta)$  は散乱振幅と見なせる。したがって, クーロン散乱の微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_c(\theta)|^2 = \left( \frac{ZZ' \alpha \hbar c}{4E \sin^2(\theta/2)} \right)^2 \quad (11.138)$$

になる。これはラザフォードが古典力学から求めた微分断面積と全く同じで (一致する理由は?), **ラザフォードの散乱公式**とよばれる。なお, 前方  $v = r - z = 0$  では (11.134), (11.135) の漸近形は成り立たないから  $\theta = 0$  は除く。(11.137) における  $e^{i\delta}$  は, ここで扱った 1 粒子の散乱では  $d\sigma/d\Omega$  に全く影響しない。しかし, 319 ページで見るように, 2 つの同種粒子が互いに及ぼすクーロン力で散乱する場合, 位相の  $\theta$  依存性は微分断面積に影響する。

ボルン近似 (11.26) で散乱振幅を求めてみる。湯川ポテンシャルの (11.34) で  $\mu \rightarrow 0$  とすると

$$\mathcal{V}(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) = \frac{4\pi ZZ' \alpha \hbar c}{q^2}, \quad \therefore \quad f_b(\theta) = -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \mathcal{V}(\mathbf{q}) = -\frac{ZZ' \alpha \hbar c}{4E \sin^2(\theta/2)}$$

である。 $f_b$  は正確な表現  $f_c$  とは位相が異なるだけであり  $|f_b|^2 = |f_c|^2$  になる。ところで, 散乱振幅の摂動展開 (11.24) の 2 次の寄与 (11.36) は  $\mu \rightarrow 0$  で発散する。クーロンポテンシャルの場合  $r \rightarrow \infty$  での漸近形は (11.11) にはないから, そもそも (11.21) 及びその摂動展開 (11.24) は適用できない。

問題 11.11 摂動展開 (11.23) はクーロンポテンシャルに対しても適用できる。1 次の摂動

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \int d^3r' G^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(r') \varphi(r'), \quad U(r) = \frac{2k\eta}{r}, \quad \varphi(\mathbf{r}) = e^{ikz}$$

を求める。(11.23)より  $(\nabla^2 + k^2)G^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  より  $(\nabla^2 + k^2)\psi_1(\mathbf{r}) = U(r)\varphi(\mathbf{r})$  である。積分を行うかわりに、この微分方程式を解く。

1.  $\psi_1(\mathbf{r}) = e^{ikz}\varphi_1(v)$  とし  $\varphi_1(v)$  をベキ展開する。(11.132) より原点で有界な解は

$$\varphi_1(v) = C - i\eta \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{(ikv)^n}{n}$$

になることを示せ。 $C$  は任意定数である。

2. ここで

$$f(a, z) = \int_{-z}^{\infty} dt e^{-t} t^{a-1} = \Gamma(a) - \int_0^{-z} dt e^{-t} t^{a-1}, \quad \operatorname{Re} a > 0$$

とする。最初の積分路は実軸に平行にとる。 $f(0, z) = \lim_{a \rightarrow 0} f(a, z)$  より

$$f(0, z) = \int_{-z}^{\infty} dt \frac{e^{-t}}{t} = -\gamma - \log(-z) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{z^n}{n}, \quad \gamma = \text{オイラー一定数}$$

を示せ。(17.63) 参照。

3. 部分積分すれば  $f(0, z) \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} -e^z/z$  である。 $C = i\eta(-\gamma + i\pi/2)$  とすると

$$\psi_1(\mathbf{r}) = i\eta e^{ikz} \left( \log(kv) + f(0, ikv) \right) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} i\eta e^{ikz} \log(kv) + f_b(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

になることを示せ。したがって、1 次の摂動では散乱振幅は  $f_b(\theta)$  になる。

原点での存在確率  $P_0$  に対するクーロン力の影響を調べる。(11.131), (11.133) より  $P_0$  は

$$P_0 = |\psi_c(0)|^2 = |A_c|^2 = e^{-\pi\eta} \Gamma(1 + i\eta) \Gamma(1 - i\eta) = e^{-\pi\eta} i\eta \Gamma(i\eta) \Gamma(1 - i\eta)$$

(17.59) より

$$P_0(\eta) = \frac{2\pi\eta}{e^{2\pi\eta} - 1} = 1 - \pi\eta + \cdots, \quad \eta = \frac{ZZ'\alpha mc}{\hbar k} = \frac{ZZ'\alpha}{v/c}, \quad v = \frac{\hbar k}{m} = \text{粒子の速さ}$$

になる。 $\psi_c$  は規格化できないから  $P_0$  は絶対確率ではないが、自由粒子の場合  $P_0(\eta = 0) = 1$  になるから、 $P_0(\eta)$  は原点での存在確率が自由粒子に比べて、どの程度変化するかを表す。引力のクーロン力の場合 ( $\eta < 0$ )、粒子は原点に引き込まれ  $P_0(\eta) > 1$  になるが、斥力の場合には逆に  $P_0(\eta) < 1$  である。また、 $|v/c|$  が小さい程  $|\eta|$  は大きくなり、クーロン力の効果が顕著になる。

### クーロン波の部分波展開

波動関数を (11.41) のように展開して

$$\psi_c(\mathbf{r}) = \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} \chi_{\ell}(r) P_{\ell}(\cos \theta) \quad (11.139)$$

とすると

$$\left( \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{2\eta}{\rho} + 1 \right) \chi_{\ell}(r) = 0, \quad \rho = kr \quad (11.140)$$

である。クーロンポテンシャルの束縛状態と同様に

$$\chi_\ell(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{i\rho} v_\ell(\rho)$$

とすると

$$\left( z \frac{d^2}{dz^2} + (2\ell + 2 - z) \frac{d}{dz} - (\ell + 1 + i\eta) \right) v_\ell = 0, \quad z = -2i\rho \quad (11.141)$$

これは合流型超幾何微分方程式 (17.102) で  $a = \ell + 1 + i\eta$ ,  $b = 2\ell + 2$  とした方程式であるから、原点で正則な解は  $B_\ell$  を定数として

$$v_\ell(\rho) = B_\ell M(\ell + 1 + i\eta, 2\ell + 2, -2i\rho)$$

になる。(18.10), (18.11) で定義した  $W_1, W_2$  で表せば

$$\begin{aligned} v_\ell(\rho) &= B_\ell \left( W_1(\ell + 1 + i\eta, 2\ell + 2, -2i\rho) + W_2(\ell + 1 + i\eta, 2\ell + 2, -2i\rho) \right) \\ &= B_\ell e^{-i\rho} \left( e^{i\rho} W_1(\ell + 1 + i\eta, 2\ell + 2, -2i\rho) + e^{-i\rho} W_1(\ell + 1 - i\eta, 2\ell + 2, 2i\rho) \right) \\ &= 2B_\ell e^{-i\rho} \operatorname{Re} \left( e^{i\rho} W_1(\ell + 1 + i\eta, 2\ell + 2, -2i\rho) \right) \end{aligned}$$

である。(18.10), (18.12) より

$$\begin{aligned} W_1(\ell + 1 + i\eta, 2\ell + 2, -2i\rho) &= \frac{\Gamma(2\ell + 2)}{\Gamma(\ell + 1 - i\eta)} (2i\rho)^{-\ell-1-i\eta} g_\ell(\eta, \rho) \\ &= \frac{(2\ell + 1)! e^{\pi\eta/2}}{|\Gamma(\ell + 1 + i\eta)|} \frac{e^{-i\eta \log(2\rho) - i(\ell+1)\pi/2 + i\sigma_\ell}}{(2\rho)^{\ell+1}} g_\ell(\eta, \rho) \end{aligned} \quad (11.142)$$

ただし

$$g_\ell(\eta, \rho) = g(\ell + 1 + i\eta, -\ell + i\eta, 2i\rho) = 1 + \frac{\eta + i(\ell(\ell + 1) + \eta^2)}{2\rho} + O(\rho^{-2})$$

また,  $\sigma_\ell$  は複素数  $\Gamma(\ell + 1 + i\eta)$  の偏角

$$\Gamma(\ell + 1 + i\eta) = |\Gamma(\ell + 1 + i\eta)| e^{i\sigma_\ell}, \quad \text{あるいは} \quad e^{2i\sigma_\ell} = \frac{\Gamma(\ell + 1 + i\eta)}{\Gamma(\ell + 1 - i\eta)} \quad (11.143)$$

である。したがって

$$B_\ell = \frac{2^\ell |\Gamma(\ell + 1 + i\eta)|}{(2\ell + 1)!} e^{-\pi\eta/2}$$

とすると

$$\begin{aligned} \chi_\ell(\rho) &= F_\ell(\eta, \rho) \equiv B_\ell \rho^{\ell+1} e^{i\rho} M(\ell + 1 + i\eta, 2\ell + 2, -2i\rho) \\ &= 2B_\ell \rho^{\ell+1} \operatorname{Re} \left( e^{i\rho} W_1(\ell + 1 + i\eta, 2\ell + 2, -2i\rho) \right) \\ &= \operatorname{Im} \left[ g_\ell(\eta, \rho) \exp \left( i \left( \rho - \eta \log(2\rho) - \pi\ell/2 + \sigma_\ell \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (11.144)$$

は  $\rho \rightarrow \infty$  のとき

$$F_\ell(\eta, \rho) \longrightarrow \sin \left( \rho - \eta \log(2\rho) - \frac{\pi\ell}{2} + \sigma_\ell \right), \quad \rho = kr$$

になる。これは (11.40) に対応し (11.143) で定義した  $\sigma_\ell$  がクーロンポテンシャルでの位相のずれを表す。 $F_\ell(\eta, \rho)$  を原点で正則な球面クーロン波動関数という。 $\rho \rightarrow 0$  のとき  $F_\ell(\eta, \rho) \rightarrow B_\ell \rho^{\ell+1}$  である。また、 $\eta = 0$  のとき (18.20) より

$$F_\ell(0, \rho) = \frac{2^\ell |\Gamma(\ell+1)|}{(2\ell+1)!} (2\ell+1)!! \rho j_\ell(\rho) = \rho j_\ell(\rho)$$

になる。

原点で正則な散乱の波動関数 (11.131) は (11.139)

$$A_c e^{ikz} M(-i\eta, 1, ik(r-z)) = \frac{1}{\rho} \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell F_\ell(\eta, \rho) P_\ell(\cos \theta), \quad A_c = \Gamma(1+i\eta) e^{-\pi\eta/2}$$

に展開できる。これを満たす係数  $C_\ell$  を求める。 $x = \cos \theta$  とすると (17.30) より

$$C_\ell \frac{F_\ell(\eta, \rho)}{\rho} = A \frac{2\ell+1}{2^{\ell+1}\ell!} \int_{-1}^1 dx (1-x^2)^\ell \frac{d^\ell}{dx^\ell} e^{i\rho x} M(-i\eta, 1, i\rho(1-x))$$

合流型超幾何関数の積分表示 (18.4) を用いると

$$\begin{aligned} e^{i\rho x} M(-i\eta, 1, i\rho(1-x)) &= v_0(-i\eta, 1) \int_{C_d} dt \exp(i\rho x + i\rho(1-x)t) t^{-i\eta-1} (1-t)^{i\eta} \\ &= v_0(-i\eta, 1) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\rho)^n}{n!} \int_{C_d} dt (t + (1-t)x)^n t^{-i\eta-1} (1-t)^{i\eta} \end{aligned}$$

であるから

$$C_\ell \frac{F_\ell(\eta, \rho)}{\rho} = A_c \frac{2\ell+1}{2^{\ell+1}\ell!} v_0(-i\eta, 1) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\rho)^n}{n!} \int_{C_d} dt t^{-i\eta-1} (1-t)^{i\eta} f_n(t)$$

ただし

$$f_n(t) = \int_{-1}^1 dx (1-x^2)^\ell \frac{d^\ell}{dx^\ell} (t + (1-t)x)^n$$

$\rho \rightarrow 0$  のとき  $F_\ell(\eta, \rho) \rightarrow B_\ell \rho^{\ell+1}$  であるから、 $n = \ell$  の項だけ考えればよい。(5.28) より

$$f_\ell(t) = (1-t)^\ell \ell! \int_{-1}^1 dx (1-x^2)^\ell = (1-t)^\ell \ell! \frac{2^{2\ell+1}(\ell!)^2}{(2\ell+1)!}$$

になるから

$$C_\ell = \frac{A_c}{B_\ell} \frac{(2i)^\ell \ell!}{(2\ell)!} v_0(-i\eta, 1) \int_{C_d} dt t^{-i\eta-1} (1-t)^{\ell+i\eta}$$

である。

$$M(-i\eta, \ell+1, 0) = v_0(-i\eta, \ell+1) \int_{C_d} dt t^{-i\eta-1} (1-t)^{\ell+i\eta} = 1$$

であるから

$$C_\ell = \frac{A_c}{B_\ell} \frac{(2i)^\ell \ell!}{(2\ell)!} \frac{v_0(-i\eta, 1)}{v_0(-i\eta, \ell+1)} = \frac{A_c}{B_\ell} \frac{(2i)^\ell}{(2\ell)!} \frac{\Gamma(\ell+1+i\eta)}{\Gamma(1+i\eta)} = (2\ell+1) i^\ell e^{i\sigma_\ell}$$

したがって

$$\psi_c(\mathbf{r}) = A_c e^{ikz} M(-i\eta, 1, ik(r-z)) = \frac{1}{\rho} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell e^{i\sigma_\ell} F_\ell(\eta, \rho) P_\ell(\cos \theta) \quad (11.145)$$



である。 $\eta = 0$  とすると (11.6) を再現する。

2 階の微分方程式 (11.140) の解で, 原点で正則な解  $F_\ell(\eta, \rho)$  とは独立な解  $G_\ell(\eta, \rho)$  が存在する。 $F_\ell$  は和  $W_1 + W_2$  であるから, 差  $W_1 - W_2$  を採用して

$$\begin{aligned} G_\ell(\eta, \rho) &= B_\ell \rho^{\ell+1} e^{i\rho} i \left( W_1(\ell+1+i\eta, 2\ell+2, -2i\rho) - W_2(\ell+1+i\eta, 2\ell+2, -2i\rho) \right) \\ &= -2B_\ell \rho^{\ell+1} \operatorname{Im} \left( e^{i\rho} W_1(\ell+1+i\eta, 2\ell+2, -2i\rho) \right) \\ &= \operatorname{Re} \left[ g_\ell(\eta, \rho) \exp \left( i \left( \rho - \eta \log(2\rho) - \pi\ell/2 + \sigma_\ell \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (11.146)$$

とすればよい。(11.142) より  $\rho \rightarrow \infty$  では

$$G_\ell(\eta, \rho) \rightarrow \cos \left( \rho - \eta \log(2\rho) - \pi\ell/2 + \sigma_\ell \right)$$

また, (18.21) より  $G_\ell(0, \rho) = -\rho n_\ell(\rho)$  である。

$F_\ell$  と  $G_\ell$  の線形結合から

$$\begin{aligned} u_\ell^{(+)}(\eta, \rho) &= e^{-i\sigma_\ell} \left( G_\ell(\eta, \rho) + i F_\ell(\eta, \rho) \right) = 2B_\ell \rho^{\ell+1} e^{i\rho - i\sigma_\ell + i\pi/2} W_1(\ell+1+i\eta, 2\ell+2, -2i\rho) \\ u_\ell^{(-)}(\eta, \rho) &= \left( u_\ell^{(+)}(\eta, \rho) \right)^* \end{aligned}$$

を作ると,  $\rho \rightarrow \infty$  のとき

$$u_\ell^{(\pm)}(\eta, \rho) \longrightarrow e^{\pm i(\rho - \eta \log(2\rho) - \pi\ell/2)}$$

$u^{(+)}(\eta, \rho)$  は外向きに出てゆく波,  $u^{(-)}(\eta, \rho)$  は内向きに入ってくる波である。

$$F_\ell(\eta, \rho) = \frac{e^{-i\sigma_\ell}}{2i} \left( e^{2i\sigma_\ell} u_\ell^{(+)}(\eta, \rho) - u_\ell^{(-)}(\eta, \rho) \right)$$

であるから, (11.145) は

$$\psi_c(\mathbf{r}) = \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell \left( e^{2i\sigma_\ell} u_\ell^{(+)}(\eta, kr) - u_\ell^{(-)}(\eta, kr) \right) P_\ell(\cos \theta) \quad (11.147)$$

になる。

**問題 11.12**  $x = \cos \theta$  とすると

$$f_c(\theta) = \frac{1}{2ik} \frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(-i\eta)} \left( \frac{1-x}{2} \right)^{-1-i\eta}$$

になる。(17.30) より

$$f_c(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) e^{2i\sigma_\ell} P_\ell(x) \quad (11.148)$$

を示せ。なお, (17.24) より

$$(1-x) \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) P_\ell(x) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \left( (2\ell+1) P_\ell - (\ell+1) P_{\ell+1} - \ell P_{\ell-1} \right) = 0$$

であるから

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) P_\ell(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 1 \\ \infty, & x = 1 \end{cases}$$

これは (17.31) で  $x' = 1$  としても求まる。したがって,  $x \neq 1, (\theta \neq 0)$  のとき

$$f_c(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) (e^{2i\sigma_\ell} - 1) P_\ell(\cos \theta)$$

とも表せる。これは (11.46) である。

**問題 11.13**  $\Gamma$  関数の性質 (17.47) より  $\sigma_\ell = \sigma_{\ell-1} + \tan^{-1}(\eta/\ell)$  を示せ。なお, (17.61) より

$$\sigma_0 = -\gamma\eta + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{\eta}{n} - \tan^{-1} \frac{\eta}{n} \right), \quad \gamma = \text{オイラー定数} = 0.57721 \dots \quad (11.149)$$

になる。

### 束縛状態

$S_\ell = e^{2i\sigma_\ell}$  が発散する  $E$  が束縛状態のエネルギーを与える。 $\Gamma(z)$  は  $n' = 0, 1, 2, \dots$  として  $z = -n'$  で発散するから, (11.143) より, 束縛状態のエネルギー  $E$  は

$$\ell + 1 + i\eta = -n', \quad \text{つまり} \quad ik = \frac{ZZ'\alpha mc^2}{\hbar c} \frac{1}{\ell + 1 + n'}$$

したがって

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{(ZZ'\alpha)^2 mc^2}{2n^2}, \quad n = \ell + 1 + n'$$

これは (6.30) と同等である。束縛状態の固有関数  $\chi_\ell(r)$  は  $C_\ell, D_\ell$  を定数として

$$\chi_\ell(r) = C_\ell F_\ell(\eta, kr) = D_\ell \left( u_\ell^{(+)}(\eta, kr) - S_\ell^{-1} u_\ell^{(-)}(\eta, kr) \right) = D_\ell u_\ell^{(+)}(\eta, kr)$$

とおける。 $r \rightarrow \infty$  のとき

$$\chi_\ell(r) \rightarrow D_\ell e^{i(kr - \eta \log(2kr) - \pi\ell/2)}$$

$r \rightarrow \infty$  で  $\chi_\ell(r) \rightarrow 0$  であるためには  $\text{Im } k = -ik > 0$  である。したがって  $ZZ' < 0$  であり, 束縛状態はクーロンポテンシャルが引力の場合に存在する。波動関数は (11.144) より

$$\chi_\ell(r) = C_\ell F_\ell(\eta, kr) = C'_\ell q^{\ell+1} e^{-q/2} M_\ell(-n', 2\ell+2, q), \quad q = -2ikr > 0$$

になり (6.33) を再現する。

### 修正クーロンポテンシャル

部分波展開はポテンシャルの作用範囲が有限で, 低エネルギーの場合に有効な方法である。ここで扱ったように, 作用範囲が無限大のクーロンポテンシャルでも部分波展開は可能であるが, 位相のずれは  $\sigma_\ell \neq 0$  であるから全ての  $\ell$  を扱う必要があり, 純粋なクーロンポテンシャルの場合, 微分断面積を部分波展開で求める意味はない。部分波展開は, ポテンシャルが

$$V(r) = V_0(r) + \frac{ZZ'\alpha\hbar c}{r}$$

で  $V_0(r)$  の作用範囲が短い場合に有効である。 $V(r)$  による位相のずれを  $\sigma_\ell + \delta_\ell$  とすると,  $\delta_\ell$  は  $\ell$  の増加とともに急速に 0 になると予想される。一方,  $\sigma_\ell$  は全ての  $\ell$  を考慮しなければならないが, この部分は  $f_c(\theta)$  であるから部分波展開を使う必要はない。

波動関数を

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} \chi_\ell(r) P_\ell(\cos \theta)$$

とすれば

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V_0(r) - \frac{2k\eta}{r} + k^2 \right) \chi_\ell(r) = 0 \quad (11.150)$$

である。\$r\$ が十分大きく \$V\_0(r)\$ が無視できる領域では (11.140) になるから

$$\chi_\ell(r) = a_\ell \left( F_\ell(\eta, kr) \cos \delta_\ell + G_\ell(\eta, kr) \sin \delta_\ell \right) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} a_\ell \sin \left( kr - \eta \log(2kr) - \frac{\pi\ell}{2} + \sigma_\ell + \delta_\ell \right)$$

とおける。\$\sigma\_\ell + \delta\_\ell\$ が \$V(r)\$ による位相のずれである。純粋なクーロンポテンシャルの場合、原点で正則になる条件のため \$G\_\ell\$ を含まないが、ここでは \$r\$ が十分大きい領域での漸近形を表すから \$G\_\ell\$ を含んでもよい。原点近傍では \$\chi\_\ell(r)\$ は \$V\_0(r)\$ のためこの漸近形からずれ、原点で正則である。

$$F_\ell = \frac{i}{2} \left( e^{-i\sigma_\ell} u^{(-)} - e^{i\sigma_\ell} u^{(+)} \right), \quad G_\ell = \frac{1}{2} \left( e^{-i\sigma_\ell} u^{(-)} + e^{i\sigma_\ell} u^{(+)} \right)$$

より

$$\chi_\ell(r) = c_\ell \left( e^{2i\delta_\ell + 2i\sigma_\ell} u_\ell^{(+)}(\eta, kr) - u_\ell^{(-)}(\eta, kr) \right), \quad c_\ell = \frac{e^{-i\delta_\ell - i\sigma_\ell}}{2i} a_\ell$$

である。

クーロンポテンシャルが存在しない場合、\$r \to \infty\$ での境界条件は (11.11) であるが、クーロンポテンシャルは \$r \to \infty\$ でも無視できないから、境界条件を修正する必要がある。(11.134), (11.135) より \$r \to \infty\$ のとき

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(ikz + i\eta \log k(r-z)) + f_c(\theta) \frac{\exp(ikr - i\eta \log 2kr)}{r} + f_0(\theta) \frac{\exp(ikr - i\eta \log 2kr)}{r}$$

を要請する。第1項の入射波は \$V\_0(r)\$ の影響を受けないからクーロンポテンシャルだけの場合と同じとする。散乱波は \$f\_c(\theta)\$ を \$f\_c(\theta) + f\_0(\theta)\$ で置き換えた。ポテンシャル \$V\_0(r)\$ の効果は \$f\_0(\theta)\$ に現れる。右辺第1項と第2項の和は \$\psi\_c(\mathbf{r})\$ の漸近形であるから

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \psi_c(\mathbf{r}) + f_0(\theta) \frac{e^{ikr - i\eta \log 2kr}}{r} \\ &= \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell \left( e^{2i\sigma_\ell} u_\ell^{(+)}(\eta, kr) - u_\ell^{(-)}(\eta, kr) \right) P_\ell(\cos \theta) \end{aligned} \quad (11.151)$$

$$+ f_0(\theta) \frac{e^{ikr - i\eta \log 2kr}}{r} \quad (11.152)$$

一方、\$\chi\_\ell\$ を用いた表現では \$r \to \infty\$ のとき

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell \left( e^{2i\delta_\ell + 2i\sigma_\ell} u_\ell^{(+)}(\eta, kr) - u_\ell^{(-)}(\eta, kr) \right) P_\ell(\cos \theta) \\ &= \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell \left( e^{2i\sigma_\ell} u_\ell^{(+)}(\eta, kr) - u_\ell^{(-)}(\eta, kr) \right) P_\ell(\cos \theta) \end{aligned} \quad (11.153)$$

$$+ \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell e^{2i\sigma_\ell} (e^{2i\delta_\ell} - 1) u_\ell^{(+)}(\eta, kr) P_\ell(\cos \theta) \quad (11.154)$$

である。(11.151) と (11.153) は一致すべきであるから \$c\_\ell = (2\ell+1)i^\ell/(2i)\$ になる。\$u\_\ell^{(+)}(\eta, kr)\$ の漸近形を (11.154) に代入し (11.152) と比較すると

$$f_0(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) e^{2i\sigma_\ell} (e^{2i\delta_\ell} - 1) P_\ell(\cos \theta) \quad (11.155)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_c(\theta) + f_0(\theta)|^2 = |f_c(\theta)|^2 + |f_0(\theta)|^2 + 2\text{Re}(f_c^* f_0)$$

になる。 $V_0(r)$  が短距離力の場合  $\delta_\ell$  は  $\ell$  の増加とともに急速に 0 に収束するであろうから, (11.155) の和は実質的には最初の数個で十分である。

### 11.11 位相のずれと数値計算

シュレーディンガー方程式 (11.150) を数値的に解き, 位相のずれ  $\delta_\ell$  を求める。(11.150) の数値解法は 6.11 章と同様に行う。ただし,  $r = 0$  から出発して  $r$  を増加させる方向に解くだけでよいので, 束縛状態を求める場合に比べてプログラムは簡単になる。

系の広がりを表す適当な長さを  $\lambda$  として

$$q = \frac{r}{\lambda}, \quad \varepsilon = \frac{2m\lambda^2 E}{\hbar^2}, \quad U_0(q) = \frac{2m\lambda^2}{\hbar^2} V_0(r)$$

とすると

$$\left( \frac{d^2}{dq^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{q^2} - U_0(q) - \frac{2\sqrt{\varepsilon}\eta}{q} + \varepsilon \right) \chi_\ell(q) = 0, \quad \eta = \frac{ZZ'\alpha mc\lambda}{\hbar\sqrt{\varepsilon}} = \frac{ZZ'\alpha mc}{\hbar k} \quad (11.156)$$

である。 $q \rightarrow 0$  のとき  $q^2 U_0(q) \rightarrow 0$  ならば  $\chi_\ell(q)$  の初期値を (6.90) として (11.156) を  $q$  が増加する方向に解く。簡単のため

$$\chi_{\max} = \chi_\ell(q_{\max}), \quad \chi_{\max-1} = \chi_\ell(q_{\max} - \Delta q)$$

とする。 $q = q_{\max}$  で  $U_0(q)$  が無視できるならば

$$\chi_{\max} = a_\ell \left( F_{\max} \cos \delta_\ell + G_{\max} \sin \delta_\ell \right), \quad \chi_{\max-1} = a_\ell \left( F_{\max-1} \cos \delta_\ell + G_{\max-1} \sin \delta_\ell \right)$$

とおける。ただし

$$\begin{aligned} F_{\max} &= F_\ell(\eta, \sqrt{\varepsilon} q_{\max}), & F_{\max-1} &= F_\ell(\eta, \sqrt{\varepsilon}(q_{\max} - \Delta q)) \\ G_{\max} &= G_\ell(\eta, \sqrt{\varepsilon} q_{\max}), & G_{\max-1} &= G_\ell(\eta, \sqrt{\varepsilon}(q_{\max} - \Delta q)) \end{aligned} \quad (11.157)$$

したがって

$$\tan \delta_\ell = - \frac{F_{\max} \chi_{\max-1} - F_{\max-1} \chi_{\max}}{G_{\max} \chi_{\max-1} - G_{\max-1} \chi_{\max}} \quad (11.158)$$

$\chi_{\max}$  と  $\chi_{\max-1}$  は数値的に求まっており,  $F_\ell$  と  $G_\ell$  は解析的に分かっているから,  $\delta_\ell$  を求めることができる。 $\delta_\ell$  には  $n\pi$  の不定性が残るが, この不定性は (11.155) には影響しない。

$\sigma_\ell$ ,  $F_\ell(\eta, \rho)$ ,  $G_\ell(\eta, \rho)$  を求めるプログラムを作成する必要がある。 $\sigma_\ell$  は問題 11.13 の漸化式と (11.149) を用いればよい。(11.144), (11.146) で定義した  $F_\ell(\eta, \rho)$  と  $G_\ell(\eta, \rho)$  は (18.12) より

$$g_\ell(\eta, \rho) = g(\ell+1+i\eta, -\ell+i\eta, 2i\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} D_k, \quad D_k = \frac{(\ell+1+i\eta)_k (-\ell+i\eta)_k}{k!} \frac{1}{(2i\rho)^k}$$

が求まればよい。 $(a)_k$  の定義より

$$D_{k+1} = \frac{(\ell+k+1+i\eta)(k-\ell+i\eta)}{(k+1)2i\rho} D_k$$

であるから  $D_0 = 1$  を初期値として漸化式を解けば  $g_\ell(\eta, \rho)$  が求まる。なお, 実部と虚部に分ければ

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} D_{k+1} &= \frac{(2k+1)\eta}{2(k+1)\rho} \operatorname{Re} D_k - \frac{\eta^2 + \ell(\ell+1) - k(k+1)}{2(k+1)\rho} \operatorname{Im} D_k \\ \operatorname{Im} D_{k+1} &= \frac{(2k+1)\eta}{2(k+1)\rho} \operatorname{Im} D_k + \frac{\eta^2 + \ell(\ell+1) - k(k+1)}{2(k+1)\rho} \operatorname{Re} D_k \end{aligned}$$

である。 $\eta = 0$  の場合  $D_k = 0$ , ( $k > \ell$ ) であるから  $g_\ell(\eta, \rho)$  は有限項の和である。一方,  $\eta \neq 0$  では無限級数は発散するが, この級数は  $g_\ell(\eta, \rho)$  に対する漸近級数であり, 部分和は  $\rho$  が大きい場合  $g_\ell(\eta, \rho)$  の近似式になる (457 ページ)。したがって,  $\rho$  をある程度大きく取り, 例えば,  $|D_k| < 10^{-6}$  になったら収束したと見なし  $k$  の和を打ち切る。 $\rho$  が小さいと収束条件に達せず, 和は発散する。

数値計算例として, 井戸型ポテンシャル

$$U_0(q) = \begin{cases} -u_0, & q < 1 \\ 0, & q > 1 \end{cases}$$

を扱う。 $\eta = 0$  の場合,  $\delta_\ell$  は解析的には (11.64) で与えられる。ここでの記号を用いると  $\rho = \sqrt{\varepsilon}$ ,  $\rho_1 = \sqrt{\varepsilon + u_0}$  である。 $u_0 = 50$ ,  $\varepsilon = 20$  の場合, (11.64) と (11.158) から求めた  $\delta_\ell$  を右表に示す。ただし  $q_{\min} = 10^{-3}$ ,  $q_{\max} = 3$ ,  $\Delta q = 0.01, 0.001$  とした。束縛状態の固有エネルギーは  $\Delta q \approx 0.1 \sim 0.01$  程度で十分よい精度の結果になる。この

場合, 遠方での波動関数の値はそれ程重要ではなく 0 に収束すればよい。一方, (11.158) の  $\delta_\ell$  は遠方での波動関数の値に敏感であるから,  $\Delta q$  は束縛状態に比べて小さく取る必要がある。

$\ell$	(11.158)		(11.64)
	0.01	0.001	
0	1.0295	1.0488	1.0514
1	0.3748	0.3797	0.3804
2	0.7494	0.7562	0.7571
3	-0.3499	-0.3219	-0.3178
4	-0.4628	-0.4626	-0.4626
5	-0.3969	-0.3885	-0.3873
6	0.0638	0.0694	0.0702
7	0.0027	0.0029	0.0029

## 12 同種粒子系

### 12.1 状態の対称化

2つの粒子が同種とは、物理的性質が全く同じでどのような観測でも区別できない粒子のことである。古典力学の場合、粒子の軌道が  $\mathbf{r}(t)$  と  $\mathbf{R}(t)$  で与えられる2粒子の同種粒子系を考える。 $\mathbf{r}(t)$  を粒子1の軌道とするか粒子2の軌道とするかにより2つの可能性がある。どちらも力学的にはまったく同等であり、ここに不定性がある。ところで、時刻  $t = t_0$  で  $\mathbf{r}(t_0)$  から出発した方を1とするか2とするかは単に便宜上のことである。 $\mathbf{r}(t_0)$  を粒子1とすれば、任意の時刻で  $\mathbf{r}(t)$  は粒子1の軌道を表し不定性はない。同種粒子が区別できない性質は、古典力学では問題にする必要はない。

量子力学では、同種粒子が区別できないことは困った問題を引き起こす。以下に、その例を示す。スピン0の粒子が相互作用せずに運動する場合を考える。時刻  $t = t_0$  で粒子が状態  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$  及び  $\psi_\beta(\mathbf{r})$  にある2粒子の同種粒子系を考える。ただし、 $\psi_\alpha$  と  $\psi_\beta$  は空間的に異なる領域に局在し、 $\psi_\alpha$  と  $\psi_\beta$  が重なる領域はないとする。つまり

$$\psi_\alpha(\mathbf{r})\psi_\beta(\mathbf{r}) = \psi_\alpha^*(\mathbf{r})\psi_\beta(\mathbf{r}) = 0, \quad \text{規格化条件より } \langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \beta | \beta \rangle = 1 \quad (12.1)$$

である。粒子1が状態  $\alpha$ 、粒子2が状態  $\beta$  にあるとすれば、2粒子系の状態は

$$\Psi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_2) \quad (12.2)$$

であり、粒子1が  $\beta$  にあり粒子2が  $\alpha$  にあるとすれば、2粒子系の状態は

$$\Psi_{\beta\alpha}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_\beta(\mathbf{r}_1)\psi_\alpha(\mathbf{r}_2)$$

になる。 $\Psi_{\alpha\beta}$  と  $\Psi_{\beta\alpha}$  は、どちらも、粒子が  $\alpha$  と  $\beta$  にある2粒子系の状態を表す。一般には、これらの線形結合

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = c_1\Psi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + c_2\Psi_{\beta\alpha}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (12.3)$$

も粒子が  $\alpha$  と  $\beta$  にある2粒子系の状態を表す。

$$\begin{aligned} \int d^3r_1 d^3r_2 |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 &= \int d^3r_1 d^3r_2 \left( |c_1|^2 |\psi_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_2)|^2 + |c_2|^2 |\psi_\beta(\mathbf{r}_1)\psi_\alpha(\mathbf{r}_2)|^2 \right. \\ &\quad \left. + 2\operatorname{Re}(c_1^*c_2 \psi_\alpha^*(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_1)\psi_\beta^*(\mathbf{r}_2)\psi_\alpha(\mathbf{r}_2)) \right) \end{aligned}$$

(12.1) より第3項目は0、第1項と第2項の積分は1になるから

$$\int d^3r_1 d^3r_2 |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 = |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

であり  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  は規格化されている。このとき粒子を  $\mathbf{x}$  と  $\mathbf{y}$  に見出す確率密度  $P(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  は、粒子1を  $\mathbf{x}$ 、粒子2を  $\mathbf{y}$  に見出す確率とその逆の和になるから

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= |\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 + |\Psi(\mathbf{y}, \mathbf{x})|^2 \\ &= |\psi_\alpha(\mathbf{x})|^2 |\psi_\beta(\mathbf{y})|^2 + |\psi_\beta(\mathbf{x})|^2 |\psi_\alpha(\mathbf{y})|^2 + 4\operatorname{Re}(c_1^*c_2) \operatorname{Re}(\psi_\alpha^*(\mathbf{x})\psi_\beta(\mathbf{x})\psi_\beta^*(\mathbf{y})\psi_\alpha(\mathbf{y})) \\ &= |\psi_\alpha(\mathbf{x})|^2 |\psi_\beta(\mathbf{y})|^2 + |\psi_\beta(\mathbf{x})|^2 |\psi_\alpha(\mathbf{y})|^2 \end{aligned}$$

である。 $t = t_0$  における確率密度の観測では係数  $c_1$  と  $c_2$  は決定できない。時刻  $t$  における波動関数  $\psi(\mathbf{r}, t)$  は

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp(-iH(t - t_0)/\hbar)\psi(\mathbf{r}), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

になるから確率密度  $P(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$  は

$$P(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = |\psi_\alpha(\mathbf{x}, t)|^2 |\psi_\beta(\mathbf{y}, t)|^2 + |\psi_\beta(\mathbf{x}, t)|^2 |\psi_\alpha(\mathbf{y}, t)|^2 \\ + 4\text{Re}(c_1^* c_2) \text{Re}(\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, t) \psi_\beta(\mathbf{x}, t) \psi_\beta^*(\mathbf{y}, t) \psi_\alpha(\mathbf{y}, t))$$

である。一般に  $\psi_\alpha^*(\mathbf{r}, t) \psi_\beta(\mathbf{r}, t) \neq 0$  であるから  $P(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$  は不定な  $c_1, c_2$  に依存する。このため、 $P(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$  を一意的に決定できないという困難に直面する。 $\mathbf{x} = \mathbf{y}$  のとき

$$P(\mathbf{x}, \mathbf{x}, t) = 2(1 + 2\text{Re}(c_1^* c_2)) |\psi_\alpha(\mathbf{x}, t)|^2 |\psi_\beta(\mathbf{x}, t)|^2$$

より、例えば

$$P(\mathbf{x}, \mathbf{x}, t) = \begin{cases} 4|\psi_\alpha(\mathbf{x}, t)|^2 |\psi_\beta(\mathbf{x}, t)|^2, & c_1 = c_2 = 1/\sqrt{2} \\ 0, & c_1 = -c_2 = 1/\sqrt{2} \end{cases}$$

になり、係数の取り方で全く異なる。

そこで、この困難さを回避するため次の対称化の要請をする。

**同種粒子の多粒子系の状態は、任意の 2 つの粒子の交換に関して対称 (不変) か、  
または反対称 (符号が変わる) でなければならない。** (12.4)

同種粒子を交換しても、多粒子系の状態は (位相を除いて) 変化しないことになる。2 つの可能性のうちどちらにすべきかは、粒子の種類により決まる。スピンの整数のボソン (ボーズ粒子) は対称な状態、スピンの半整数のフェルミオン (フェルミ粒子) は反対称な状態になる。以上の仮定が正しいことは、多くの実験事実から知られている。

(12.2) のように 2 粒子系の状態が 1 粒子状態の積で与えられる場合

$$\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_\alpha(\mathbf{r}_1) \psi_\beta(\mathbf{r}_2) + \psi_\beta(\mathbf{r}_1) \psi_\alpha(\mathbf{r}_2))$$

は、粒子の交換、つまり  $\mathbf{r}_1$  と  $\mathbf{r}_2$  を交換しても変わらない。これが対称な波動関数である。一方

$$\Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_\alpha(\mathbf{r}_1) \psi_\beta(\mathbf{r}_2) - \psi_\beta(\mathbf{r}_1) \psi_\alpha(\mathbf{r}_2))$$

は  $\mathbf{r}_1$  と  $\mathbf{r}_2$  の交換に関して符号が変わる反対称な波動関数である。 $\psi_\alpha$  と  $\psi_\beta$  の積で表される同種 2 粒子系の状態は  $\Psi_S$  または  $\Psi_A$  だけであり、この 2 つ以外は許されない。このため、(12.3) における  $c_1, c_2$  の不定性はなくなる。 $\psi_\alpha \propto \psi_\beta$  ならば、反対称な状態  $\Psi_A$  は  $\Psi_A = 0$  になる。したがって、2 つの同種フェルミ粒子が同じ 1 粒子状態を占めることはできない。これがパウリの排他原理である。

対称化の条件 (12.4) が系の時間発展と矛盾しないことを示しておく。2 粒子系の場合、系のハミルトニアンを  $H$ 、時刻  $t$  での状態を  $\Psi(1, 2; t)$  とすると

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(1, 2; t) = H(1, 2) \Psi(1, 2; t)$$

粒子 1 と 2 を交換すれば

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(2, 1; t) = H(2, 1) \Psi(2, 1; t)$$

になる。粒子 1 と 2 は同種粒子で区別できないから、1 と 2 を交換してもハミルトニアンは不変  $H(1, 2) = H(2, 1)$  である。したがって、 $\Psi(1, 2; t)$  と  $\Psi(2, 1; t)$  は同じ微分方程式を満たす。 $t = 0$  で  $\Psi$  は対称または反対称とする:

$$\Psi(2, 1; t = 0) = \kappa \Psi(1, 2; t = 0), \quad \kappa = \pm 1$$

このとき  $\Psi(2, 1 : t)$  と  $\kappa \Psi(1, 2 : t)$  は同じ 1 階の微分方程式を満たし初期条件も一致するから、任意の時刻で  $\Psi(2, 1 : t) = \kappa \Psi(1, 2 : t)$  である。ハミルトニアンが粒子の交換に関して不変であるため、ある時刻で状態が対称または反対称ならば、任意の時刻で状態は対称または反対称である。

### 複合粒子

原子や原子核のように複数の粒子からなる系が基底状態にあるとき、この系を励起するのに必要なエネルギーに比べて十分に小さいエネルギー領域では、基底状態の複合粒子系をあたかも 1 つの基本粒子として扱ってもよい。

素粒子  $a$  と  $b$  からなる複合粒子を考える。複合粒子 1 と複合粒子 2 からなる系の状態は

$$\Psi(\mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{1b}, \mathbf{r}_{2a}, \mathbf{r}_{2b})$$

と書ける。ここで  $\mathbf{r}_{1a}$  は複合粒子 1 内の粒子  $a$  の座標、その他も同様である。複合粒子 1 と複合粒子 2 を入れ換えると

$$\Psi(\mathbf{r}_{2a}, \mathbf{r}_{2b}, \mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{1b})$$

になる。これは構成粒子  $a$  の入れ換えと  $b$  の入れ換えである。したがって、 $a$  と  $b$  がフェルミオンならば、複合粒子の入れ換えで  $(-1) \times (-1) = +1$  になるから、複合粒子はボソンとして扱ってよい。フェルミオンとボソンならば  $(-1) \times (+1) = -1$  になるから複合粒子はフェルミオンである。一般に、偶数 (奇数) 個のフェルミオンを含む複合粒子はボソン (フェルミオン) である。

複合粒子	構成粒子	
水素原子	陽子 1 個, 電子 1 個	ボソン
$^3\text{He}$ 原子核	陽子 2 個, 中性子 1 個	フェルミオン
$^3\text{He}$ 原子	$^3\text{He}$ 原子核, 電子 2 個	フェルミオン
$^4\text{He}$ 原子核	陽子 2 個, 中性子 2 個	ボソン
$^4\text{He}$ 原子	$^4\text{He}$ 原子核, 電子 2 個	ボソン

## 12.2 2 粒子系

ハミルトニアン  $H$  が

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (12.5)$$

で与えられる質量  $M$ 、スピン  $s$  の同種 2 粒子系を考える。重心座標  $\mathbf{R}$  と相対座標  $\mathbf{r}$

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

で表すと、145 ページで示したように

$$H = H_R + H_{\text{rel}}, \quad H_R = -\frac{\hbar^2}{4M}\nabla_R^2, \quad H_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)$$

になり、重心  $\mathbf{R}$  だけに依存する部分  $H_R$  と相対座標  $\mathbf{r}$  だけに依存する部分  $H_{\text{rel}}$  に完全に分離する。 $\mu$  は換算質量  $\mu = M/2$  である。対称化の要請 (12.4) を考慮しない波動関数  $\Psi_0$  を重心運動と相対運動に変数分離して  $\Psi_0 = \varphi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})\chi_{12}$  とする。ここで  $\chi_{12}$  は 2 粒子系のスピン状態を表す。シュレーディンガー方程式  $H\Psi_0 = E\Psi_0$  は

$$H_R \varphi(\mathbf{R}) = E_R \varphi(\mathbf{R}), \quad H_{\text{rel}} \psi(\mathbf{r}) = E_{\text{rel}} \psi(\mathbf{r}), \quad \text{ただし} \quad E = E_R + E_{\text{rel}}$$



になる。粒子1と2を交換すると重心  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$  は不変だから  $\varphi(\mathbf{R})$  は変わらない。一方, 相対座標  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  は符号が変わる。2粒子系のハミルトニアンは粒子の入れ換えに対して不変であるから  $\psi(\mathbf{r})\chi_{12}$  と  $\psi(-\mathbf{r})\chi_{21}$  は縮退する (交換縮退)。したがって, (12.4) を満たす状態は, 規格化は別にして

$$\Psi = \varphi(\mathbf{R}) \left( \psi(\mathbf{r})\chi_{12} + \kappa \psi(-\mathbf{r})\chi_{21} \right), \quad \kappa = \begin{cases} 1, & \text{対称な状態} \\ -1, & \text{反対称な状態} \end{cases} \quad (12.6)$$

になる。以下, この節では  $\varphi(\mathbf{R})$  は無視する。

### 軌道角運動量とスピン

$H_{\text{rel}}\psi(\mathbf{r}) = E_{\text{rel}}\psi(\mathbf{r})$  は中心力ポテンシャル  $V(r)$  の1体問題であるから,  $\psi(\mathbf{r})$  として角運動量の固有状態  $\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  が存在する。この場合, (6.14) より  $\psi(-\mathbf{r}) = (-1)^\ell \psi(\mathbf{r})$  であるから (12.6) は

$$\psi(\mathbf{r}) (\chi_{12} + \kappa(-1)^\ell \chi_{21}), \quad \psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (12.7)$$

になる。粒子1, 2のスピン演算子をそれぞれ  $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2$  とするとき  $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$  の固有状態

$$\mathbf{S}^2|SM_S\rangle = S(S+1)|SM_S\rangle, \quad S_z|SM_S\rangle = M_S|SM_S\rangle, \quad \text{ただし } S = 0, 1, \dots, 2s-1, 2s$$

を考える。 $S$  が最大の  $S = 2s$  の状態は (5.100) から (5.101) を導出したのと同様にすると

$$|S = 2s, M_S = 2s-k\rangle = N_k (S_{1-} + S_{2-})^k |m_s=s\rangle_1 |m_s=s\rangle_2, \quad N_k = \text{規格化定数}$$

になり,  $S = 2s$  の状態は粒子1と2の入れ換えに対して対称な状態である。(5.102) より

$$|S = 2s-1, M_S = 2s-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |m_s=s\rangle_1 |m_s=s-1\rangle_2 - |m_s=s-1\rangle_1 |m_s=s\rangle_2 \right)$$

であり

$$|S = 2s-1, M_S = 2s-1-k\rangle = N_k (S_{1-} + S_{2-})^k |S = 2s-1, M_S = 2s-1\rangle$$

になる。粒子1と2の状態を交換すると  $|S = 2s-1, M_S = 2s-1\rangle$  は符号が変わるから,  $S = 2s-1$  の状態は反対称である。以下同様にすると  $S = 2s-2, 2s-3, \dots$  は対称, 反対称,  $\dots$  になる。したがって,  $\chi_{12} = |SM_S\rangle$  とすると

$$\chi_{21} = (-1)^{S-2s} \chi_{12} \quad (12.8)$$

になるから (12.7) は

$$\left( 1 + \kappa(-1)^{\ell+S-2s} \right) \psi(\mathbf{r})|SM_S\rangle = \left( 1 + (-1)^{\ell+S} \right) \psi(\mathbf{r})|SM_S\rangle, \quad \therefore (-1)^{\ell+S} = 1 \quad (12.9)$$

でなければならぬ。ここで,  $s$  が整数であるボソンの場合  $(-1)^{2s} = \kappa = 1$ ,  $s$  が半整数であるフェルミオンの場合  $(-1)^{2s} = \kappa = -1$  である。 $s = 0$  のボソンの場合,  $S = 0$  であるから  $\ell$  は偶数である。また,  $s = 1/2$  のフェルミオンの場合, 1重項  $S = 0$  のとき  $\ell$  は偶数,  $S = 1$  の3重項では  $\ell$  は奇数である。

### 同種粒子の散乱

相対運動, つまり, 重心系でのシュレーディンガー方程式  $H_{\text{rel}}\psi(\mathbf{r}) = E_{\text{rel}}\psi(\mathbf{r})$  を散乱問題に適用する。 $\chi_{12}$  として  $|SM_S\rangle$  を用いると (12.6) は

$$\psi(\mathbf{r})|SM_S\rangle + \kappa \psi(-\mathbf{r})(-1)^{S-2s}|SM_S\rangle = \left( \psi(\mathbf{r}) + (-1)^S \psi(-\mathbf{r}) \right) |SM_S\rangle$$

になる。観測する粒子は2個あるから  $1/\sqrt{2}$  で割る必要はない。入射粒子の運動量を  $z$  軸にとると  $r \rightarrow \infty$  では (11.11) より

$$\left( e^{ikz} + (-1)^S e^{-ikz} + \frac{f_S(\theta)}{r} e^{ikr} \right) |SM_S\rangle, \quad f_S(\theta) = f(\theta) + (-1)^S f(\pi - \theta)$$

である。重心系では、互いに反対方向に進む2つの入射波  $e^{ikz}$  と  $e^{-ikz}$  が存在する。一方、散乱波は両者の散乱が考慮されており、微分断面積は

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_S}{d\Omega} &= |f_S(\theta)|^2 = |f(\theta) + (-1)^S f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2(-1)^S \operatorname{Re}(f(\theta)f^*(\pi - \theta)) \end{aligned} \quad (12.10)$$

になる。古典力学のように粒子が識別できるなら、 $z$  軸正方向に運動する入射粒子が角度  $\theta$  だけ散乱される微分断面積と、それとは逆向きの  $z$  軸負方向に運動する入射粒子が角度  $\pi - \theta$  だけ散乱される ( $z$  軸正方向から見れば  $\theta$  の散乱) 微分断面積の和になるから

$$\frac{d\sigma_S}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2$$

である。(12.10) の右辺第3項は、粒子の非識別性に伴う量子力学的効果を表す。

部分波展開すると  $f(\theta)$  は (11.46) で与えられる。(17.13) より  $P_\ell(\cos(\pi - \theta)) = (-1)^\ell P_\ell(\cos \theta)$  になるから

$$f_S(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left( 1 + (-1)^{S+\ell} \right) (2\ell+1) \left( e^{2i\delta_\ell} - 1 \right) P_\ell(\cos \theta)$$

であり、条件 (12.9) を満たす部分波  $\ell$  だけが寄与する。

(12.10) の微分断面積  $d\sigma_S/d\Omega$  は2粒子系の全スピンの確定した値になる状態  $|SM_S\rangle$  の場合である。このような場合、スピンは偏極しているという。スピン偏極していない2粒子の微分断面積  $d\sigma/d\Omega$  を求める。2粒子系のスピン状態は  $(2s+1)^2$  個あるが、これらは同じ確率で起こると考える。全スピンの状態になる確率は  $(2S+1)/(2s+1)^2$  である。半整数  $s = n + 1/2$  のとき、 $S$  が偶数になる確率は  $S = 2k$ , ( $k = 0, 1, \dots, n$ ) より

$$\frac{1}{(2n+2)^2} \sum_{k=0}^n (2(2k)+1) = \frac{1}{(2n+2)^2} (2n(n+1) + n+1) = \frac{s}{2s+1}$$

したがって

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{s}{2s+1} |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \left( 1 - \frac{s}{2s+1} \right) |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + (-1)^{2s} \frac{2}{2s+1} \operatorname{Re}(f(\theta)f^*(\pi - \theta)) \end{aligned} \quad (12.11)$$

になる。これは  $s$  が整数のときも含む。

**問題 12.1** 規格化を別にして反対称スピン状態は

$$|m_s\rangle_1 |m'_s\rangle_2 - |m'_s\rangle_1 |m_s\rangle_2, \quad \text{ただし } m_s \neq m'_s$$

対称スピン状態は

$$|m_s\rangle_1 |m'_s\rangle_2 + |m'_s\rangle_1 |m_s\rangle_2, \quad m_s = m'_s \text{ も含む}$$

あるいは、これらの線形結合である。独立な反対称及び対称スピン状態の個数を求めよ。これから (12.11) を示せ。

2 粒子系のスピン状態を個々の粒子のスピン状態の直積で扱う。スピンの単位ベクトル  $\mathbf{n}$  方向を向いた状態を  $|\mathbf{n}\rangle$  で表す。つまり  $\mathbf{s} \cdot \mathbf{n} |\mathbf{n}\rangle = s |\mathbf{n}\rangle$  である。 $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  を単位ベクトルとして, 2 粒子のスピン状態が  $|\mathbf{a}\rangle, |\mathbf{b}\rangle$  のとき, 波動関数は

$$\psi(\mathbf{r})|\mathbf{a}, \mathbf{b}\rangle + \kappa \psi(-\mathbf{r})|\mathbf{b}, \mathbf{a}\rangle, \quad |\mathbf{a}, \mathbf{b}\rangle = |\mathbf{a}\rangle_1 |\mathbf{b}\rangle_2$$

である。 $r \rightarrow \infty$  では散乱波の部分は

$$\left( f(\theta)|\mathbf{a}, \mathbf{b}\rangle + \kappa f(\pi - \theta)|\mathbf{b}, \mathbf{a}\rangle \right) \frac{e^{ikr}}{r}$$

になるから微分断面積は

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega} &= \left( f^*(\theta)\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} | + \kappa f^*(\pi - \theta)\langle \mathbf{b}, \mathbf{a} | \right) \left( f(\theta)|\mathbf{a}, \mathbf{b}\rangle + \kappa f(\pi - \theta)|\mathbf{b}, \mathbf{a}\rangle \right) \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + \kappa \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} | \mathbf{b}, \mathbf{a} \rangle \left( f^*(\theta)f(\pi - \theta) + f(\theta)f^*(\pi - \theta) \right) \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\kappa |\langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle|^2 \operatorname{Re} \left( f(\theta)f^*(\pi - \theta) \right) \end{aligned} \quad (12.12)$$

で与えられる。スピンの同じ向き ( $\mathbf{b} = \mathbf{a}$ ) のとき  $\langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle = 1$  より

$$\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega} = |f(\theta) + \kappa f(\pi - \theta)|^2$$

逆向き ( $\mathbf{b} = -\mathbf{a}$ ) のとき  $\langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle = 0$  より

$$\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2$$

になる。

$|\mathbf{a}, \mathbf{b}\rangle$  は  $|SM_S\rangle$  を用いて

$$|\mathbf{a}, \mathbf{b}\rangle = \sum_{S=0}^{2s} \sum_{M_S=-S}^S |SM_S\rangle \langle SM_S | \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$$

と展開できる。

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} | \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \sum_{SM_S} |\langle SM_S | \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle|^2 = \sum_S P_S = 1, \quad \text{ただし} \quad P_S = \sum_{M_S} |\langle SM_S | \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle|^2$$

である。 $P_S$  は状態  $|\mathbf{a}, \mathbf{b}\rangle$  において全スピンの  $S$  になる確率を表す。粒子 1 と 2 を入れ換えれば (12.8) より

$$|\mathbf{b}, \mathbf{a}\rangle = \sum_{SM_S} |SM_S\rangle \langle SM_S | \mathbf{b}, \mathbf{a} \rangle = \sum_{SM_S} |SM_S\rangle (-1)^{S-2s} \langle SM_S | \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$$

になるから

$$\kappa \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} | \mathbf{b}, \mathbf{a} \rangle = \kappa (-1)^{2s} \sum_{SM_S} (-1)^S |\langle SM_S | \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle|^2 = \sum_S (-1)^S P_S$$

これを (12.12) に代入すると (12.10) より

$$\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega} = \sum_S P_S \left( |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2(-1)^S \operatorname{Re} \left( f(\theta)f^*(\pi - \theta) \right) \right) = \sum_S P_S \frac{d\sigma_S}{d\Omega} \quad (12.13)$$

になる。

問題 12.2  $s = 1/2$  の場合 ( $\kappa = -1$ ) を考える。

1.  $|n\rangle$  は (5.72) の  $\chi_+(n)$  で与えられる。

$$\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - (1 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \operatorname{Re}(f(\theta)f^*(\pi - \theta))$$

を示せ。スピンの偏極していないとき  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  の方向について平均をとれば  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0$  になるから, (12.11) が成り立つ。

2.  $|SM_S\rangle$  は (5.110) で与えられる。

$$P_0 = \frac{1 - \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{4}, \quad P_1 = \frac{3 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{4}$$

を示し (12.13) が成り立つことを確かめよ。

### 同種粒子のクーロン散乱

(11.137) を (12.11) に代入する。エネルギーを相対運動のエネルギー (重心系でのエネルギー)  $E_{\text{rel}}$ , 質量を換算質量  $\mu = M/2$  で置き換えるとモットの公式

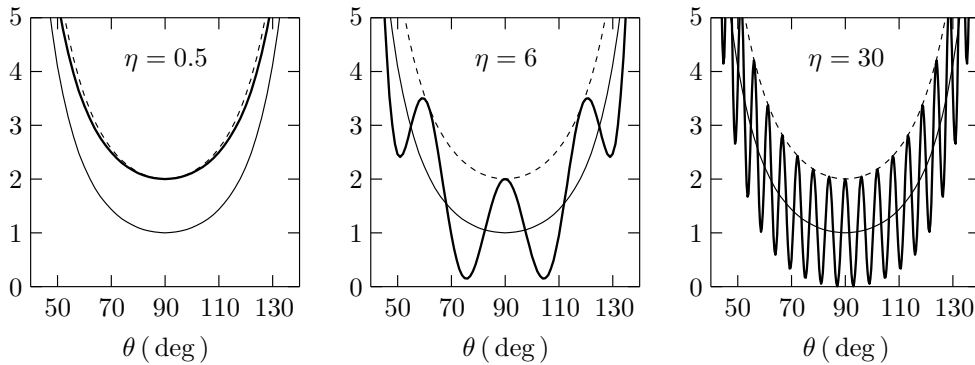
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} \left( \frac{Z^2 \alpha \hbar c}{E_{\text{rel}}} \right)^2 \left[ \frac{1 + \cos^2 \theta}{\sin^4 \theta} + \frac{(-1)^{2s}}{2s + 1} \frac{1}{\sin^2 \theta} \cos \left( \eta \log \tan^2 \frac{\theta}{2} \right) \right] \quad (12.14)$$

ただし

$$\eta = \frac{Z^2 \alpha \mu c}{\sqrt{2\mu E_{\text{rel}}}} = \frac{Z^2 \alpha}{2} \sqrt{\frac{Mc^2}{E_{\text{rel}}}}$$

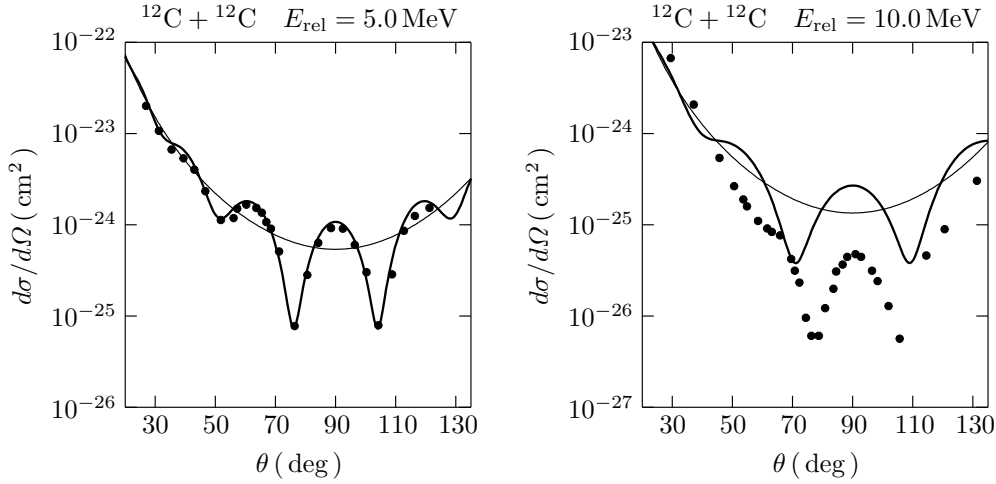
を得る。第 1 項は古典力学の微分断面積である。一方, 第 2 項は (11.137) の位相差  $\delta(\theta) - \delta(\pi - \theta)$  の寄与であり, 同種粒子の非識別性に伴う量子力学的効果である。1 体のクーロン散乱では位相は微分断面積には影響せず, 古典力学と量子力学の微分断面積はラザフォードの公式 (11.138) で与えられる。しかし, 同種粒子の 2 体散乱では位相が微分断面積に影響し, 古典力学と量子力学は異なる結果になる。

(12.14) の  $[\dots]$  の角度依存性を  $s = 0$  の場合に図示すると下図の太い実線になる。細い実線は第 2 項を無視した古典力学的微分断面積に対応する。  $E_{\text{rel}}$  が十分大きく  $\eta \ll 1$  のとき  $\theta = 0, \pi$  近傍以外では  $\cos(\eta \dots) = 1$  と近似できる。この近似を破線で示した。一方,  $E_{\text{rel}}$  が十分小さく  $\eta \gg 1$  のとき,  $\cos(\eta \dots)$  は  $-1$  と  $1$  の間で激しく振動する (図の  $\eta = 30$ )。したがって,  $\theta$  の微小範囲で平均をとれば  $\cos(\eta \dots)$  の寄与はゼロになり, 微分断面積は古典力学の結果に移行する。



(12.14) を炭素原子核 ( $^{12}\text{C}$ ) の散乱実験 (Bromley et al., Physical Review **123** (1961) 878) と比較する。 $^{12}\text{C}$  は  $Z = 6$  個の陽子と 6 個の中性子からなる複合粒子であり質量は  $Mc^2 = 11178 \text{ MeV}$

である。基底状態の角運動量は 0 であるから  $s = 0$  のボソンとする。下図で太い実線は (12.14), 細い実線は (12.14) の右辺第 2 項を無視した古典力学的微分断面積を表す。 $E_{\text{rel}} = 5 \text{ MeV}$  のとき ( $\eta = 6.2$ ), (12.14) は実験値と非常によく一致し, 波動関数の対称化に伴う干渉項の効果が実験的に見える。一方,  $E_{\text{rel}} = 10 \text{ MeV}$  ( $\eta = 4.4$ ) では (12.14) は実験を再現しない。このエネルギーでは, 散乱する 2 つの  $^{12}\text{C}$  が接触するため点電荷のクーロン散乱としては扱えない。



### 12.3 ヘリウム原子

ヘリウム原子, 一般には  $Z-2$  重にイオン化した原子を考える。この原子は電荷  $Ze$  の原子核と 2 個の電子からなる。原子核は電子に比べれば非常に重いため原点に静止しているとすると, 系のハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_1^2 - \frac{Z\alpha\hbar c}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_2^2 - \frac{Z\alpha\hbar c}{r_2} + \frac{\alpha\hbar c}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

になる。 $M$  は電子の質量,  $-Z\alpha\hbar c/r$  は電子が原子核から受ける引力のクーロン力, 最後の項は電子間の斥力のクーロン相互作用である。(12.5) と異なり重心運動と相対運動には分離できず,  $H$  の固有値と固有状態は解析的には求まらない。そこで  $H$  を

$$H = H_0(1) + H_0(2) + V, \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 - \frac{Z\alpha\hbar c}{r}, \quad V = \frac{\alpha\hbar c}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

と分割し  $V$  を摂動として扱う。(6.30) より  $H_0$  の固有関数と固有値は

$$\psi_{n\ell m}(\mathbf{r}) = \frac{\chi_{n\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad E_n = -\frac{(Z\alpha)^2 M c^2}{2n^2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad \ell \leq n-1$$

である。ただし  $\chi_{n\ell}(r)$  は (6.36) で与えられる。 $\psi_1 = \psi_{n_1 \ell_1 m_1}$ ,  $\psi_2 = \psi_{n_2 \ell_2 m_2}$  とする。 $H_0(1)$  は  $\mathbf{r}_1$  だけ,  $H_0(2)$  は  $\mathbf{r}_2$  だけに作用するから

$$\begin{aligned} (H_0(1) + H_0(2)) \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) &= (H_0(1) \psi_1(\mathbf{r}_1)) \psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_1(\mathbf{r}_1) (H_0(2) \psi_2(\mathbf{r}_2)) \\ &= (E_{n_1} + E_{n_2}) \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) \end{aligned}$$

したがって, スピン状態を含めて  $\psi_{n_1 \ell_1 m_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2 \ell_2 m_2}(\mathbf{r}_2) |SM_S\rangle$  は無摂動系  $H_0(1) + H_0(2)$  の固有状態である。ここで,  $|SM_S\rangle$  は 2 つのスピン  $1/2$  を合成した状態で (5.110) で与えられる。スピン状態としては単なる直積でもよい。しかし,  $S = 0$  は粒子の交換に対して反対称,  $S = 1$  は対称であるから, 波動関数の反対称化を行うためには, 最初から合成した状態を用いた方が便利である。

## 基底状態

基底状態は  $n_1 = n_2 = 1$  の場合であり, 波動関数  $\Psi_0$  及び無摂動系のエネルギー  $W_0$  は

$$\Psi_0 = \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)|SM_S\rangle, \quad W_0 = 2E_1 = -2Z^2E_H, \quad \text{ただし} \quad E_H = \frac{\alpha^2 Mc^2}{2} = 13.6 \text{ eV}$$

になる。 $\Psi_0$  は粒子 1 と 2 の交換に対して反対称でなければならない。 $\psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)$  は対称であり反対称化できないから,  $|SM_S\rangle$  は反対称, つまり,  $S = 0$  の 1 重項だけが許される。2 電子の空間部分の波動関数は同じであるが, スピン状態は上向き  $|+\rangle$  と下向き  $|-\rangle$  の重ね合わせあるから, パウリの排他原理を破ることはない。 $\Psi_0$  に縮退はないから, 1 次の摂動エネルギー  $W_1$  は  $\langle S=0|S=0\rangle = 1$  より

$$\begin{aligned} W_1 &= \langle \Psi_0 | V | \Psi_0 \rangle = \alpha \hbar c \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{|\psi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{100}(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \\ &= \frac{\alpha \hbar c}{(4\pi)^2} \int dr_1 d\Omega_1 dr_2 d\Omega_2 \frac{\chi_{10}^2(r_1) \chi_{10}^2(r_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \end{aligned}$$

ただし  $\Omega = (\theta, \phi)$  のとき  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$  である。(17.45) を用いると

$$W_1 = \frac{\alpha \hbar c}{(4\pi)^2} \sum_{\lambda\mu} \frac{4\pi}{2\lambda+1} \int dr_1 dr_2 \chi_{10}^2(r_1) \chi_{10}^2(r_2) \frac{r_1^\lambda}{r_1^{\lambda+1}} \int d\Omega_1 Y_{\lambda\mu}(\Omega_1) \int d\Omega_2 Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_2)$$

角度積分を実行すると  $Y_{\lambda\mu}$  の直交性から  $\lambda = \mu = 0$  以外は 0 になり

$$W_1 = \alpha \hbar c \int dr_1 dr_2 \chi_{10}^2(r_1) \chi_{10}^2(r_2) \frac{1}{r_{>}} = \alpha \hbar c \int_0^\infty dr_1 \chi_{10}^2(r_1) I(r_1)$$

ただし

$$I(r) = \frac{1}{r} \int_0^r dr' \chi_{10}^2(r') + \int_r^\infty dr' \frac{\chi_{10}^2(r')}{r'}$$

(6.37) より

$$I(r) = \frac{4}{a_z^3 r} \int_0^r dr_1 r_1'^2 e^{-2r_1'/a_z} + \frac{4}{a_z^3} \int_r^\infty dr' r' e^{-2r'/a_z} = \frac{1}{r} \left( 1 - \left( 1 + \frac{r}{a_z} \right) e^{-2r/a_z} \right) \quad (12.15)$$

になる。したがって

$$W_1 = \frac{4\alpha \hbar c}{a_z^3} \int_0^\infty dr_1 r_1 e^{-2r_1/a_z} \left( 1 - \left( 1 + \frac{r_1}{a_z} \right) e^{-2r_1/a_z} \right) = \frac{5\alpha \hbar c}{8a_z} = \frac{5}{4} Z E_H \quad (12.16)$$

1 次の摂動まで考慮すると基底状態のエネルギー  $W$  は

$$W = W_0 + W_1 = -2Z^2 E_H \left( 1 - \frac{5}{8Z} \right)$$

になる。 $Z$  が大きいほど  $|W_1/W_0|$  は小さく,

1 次の摂動はよい近似になる。右表に実験との比較を示す ( エネルギーは eV )。1 次の摂動を取り入れると  $W_0$  に比べて実験値をよく再現するようになる。

次のような簡単な変分法を用いると更により近似解が求まる。1 つの電子が感じる有効な電荷  $\tilde{Z}e$  は, 他の電子により原子核の電荷  $Ze$  が遮蔽されるため,  $\tilde{Z} < Z$  になるだろう。そこで,  $Z$  を  $\tilde{Z}$  で置き換えた波動関数

$$\tilde{\Psi}_0 = \tilde{\psi}_{100}(\mathbf{r}_1) \tilde{\psi}_{100}(\mathbf{r}_2) |S=0\rangle$$

	$Z$	$W_0$	$W_1$	$W$	実験値
He	2	-108.8	34	-74.8	-79.0
Li <sup>+</sup>	3	-244.8	51	-193.8	-197.6
Be <sup>++</sup>	4	-435.2	68	-367.2	-370.0

ただし

$$\tilde{\psi}_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tilde{\chi}_{10}(r), \quad \tilde{\chi}_{10}(r) = \frac{2}{\tilde{a}^{3/2}} e^{-r/\tilde{a}}, \quad \tilde{a} = \frac{1}{\tilde{Z}} \frac{\hbar}{M\alpha}$$

を考える。 $\tilde{\Psi}_0$  における  $H$  の期待値

$$\tilde{W} = \langle \tilde{\Psi}_0 | H | \tilde{\Psi}_0 \rangle = 2 \langle \tilde{\psi}_{100} | H_0 | \tilde{\psi}_{100} \rangle + \langle \tilde{\Psi}_0 | V | \tilde{\Psi}_0 \rangle$$

を求める。(6.21) で  $\kappa = -1$  とすると

$$\frac{1}{2M} \langle \psi_{100} | \mathbf{p}^2 | \psi_{100} \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi_{100} | \frac{Z\alpha\hbar c}{r} | \psi_{100} \rangle = -E_1 = Z^2 E_H$$

$Z$  を  $\tilde{Z}$  で置き換えれば

$$\frac{1}{2M} \langle \tilde{\psi}_{100} | \mathbf{p}^2 | \tilde{\psi}_{100} \rangle = \tilde{Z}^2 E_H, \quad \langle \tilde{\psi}_{100} | \frac{\alpha\hbar c}{r} | \tilde{\psi}_{100} \rangle = 2\tilde{Z} E_H$$

したがって

$$\langle \tilde{\psi}_{100} | H_0 | \tilde{\psi}_{100} \rangle = \frac{1}{2M} \langle \tilde{\psi}_{100} | \mathbf{p}^2 | \tilde{\psi}_{100} \rangle - Z \langle \tilde{\psi}_{100} | \frac{\alpha\hbar c}{r} | \tilde{\psi}_{100} \rangle = (\tilde{Z}^2 - 2Z\tilde{Z}) E_H$$

(12.16) より  $\langle \tilde{\Psi}_0 | V | \tilde{\Psi}_0 \rangle = (5/4)\tilde{Z} E_H$  になるから

$$\tilde{W} = 2 \left( \tilde{Z}^2 - 2Z\tilde{Z} + \frac{5}{8}\tilde{Z} \right) E_H = 2 \left( \left( \tilde{Z} - Z + \frac{5}{16} \right)^2 - \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2 \right) E_H$$

である。 $\tilde{W}$  を最小にするように  $\tilde{Z}$  を決めると  $\tilde{Z} = Z - 5/16$  になり

$$\tilde{W} = -2E_H \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2 = W_0 + W_1 - \frac{25}{128} E_H$$

である。1 次の摂動に比べて  $-25E_H/128 = -2.7 \text{ eV}$  だけ減少し、実験値との一致は更によくなる。

### 第1励起状態

次に、第1励起状態を考える。この場合  $n_1 = 1, n_2 = 2$  または  $n_1 = 2, n_2 = 1$  であり、無摂動系のエネルギー  $W_0$  は

$$W_0 = E_1 + E_2 = -\frac{5}{4} Z^2 E_H$$

波動関数は反対称化を無視すれば

$$\psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2) | SM_S \rangle, \quad \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2) | SM_S \rangle, \quad \ell = 0, 1$$

であり、それぞれ  $4 \times 4 = 16$ 、計 32 個の状態が縮退する。 $|S=1, M_S\rangle$  は 2 粒子の交換に対して対称、 $|S=0\rangle$  は反対称であるから、全体で反対称であるためには

$$\Psi_{\ell m}^{(S)} = \psi_{\ell m}^{(S)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | SM_S \rangle$$

ただし

$$\psi_{\ell m}^{(S)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2) + (-1)^S \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2) \right)$$

でなければならない。 $\psi_{\ell m}^{(1)}$  には  $4 \times 3 = 12$  個、 $\psi_{\ell m}^{(0)}$  には 4 個の状態がある。反対称化を考慮すると状態数は 16 個になる。16 個の状態が縮退するから 1 次の摂動エネルギーを求めるためには (8.56) の永年方程式を解く必要がある。ところで、 $V$  はスピンに依存しないから

$$\langle \Psi_{\ell m}^{(1)} | V | \psi_{\ell' m'}^{(0)} \rangle = (\text{空間部分の積分}) \times \langle S=1, M_S | S=0 \rangle = 0$$

各粒子の軌道角運動量を  $\mathbf{L}_i = -i \mathbf{r}_i \times \nabla_i$  とし全軌道角運動量  $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$  とする。 $\psi_{100}(\mathbf{r}_1)$  は軌道角運動量 0 の状態 ( $\mathbf{L}_1 \psi_{100}(\mathbf{r}_1) = 0$ ) であるから

$$\mathbf{L}^2 \psi_{100}(\mathbf{r}_1) \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2) = \ell(\ell+1) \psi_{100}(\mathbf{r}_1) \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2), \quad L_z \psi_{100}(\mathbf{r}_1) \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2) = m \psi_{100}(\mathbf{r}_1) \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2)$$

他の項も同様であるから

$$\mathbf{L}^2 \Psi_{\ell m}^{(S)} = \ell(\ell+1) \Psi_{\ell m}^{(S)}, \quad L_z \Psi_{\ell m}^{(S)} = m \Psi_{\ell m}^{(S)}$$

$\Psi_{\ell m}^{(S)}$  は全軌道角運動量  $\mathbf{L}^2$ ,  $L_z$  の同時固有状態で  $L = \ell$  になる。

$$\mathbf{L}_1 V = -i\alpha\hbar c \mathbf{r}_1 \times \nabla_1 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = -i\alpha\hbar c \frac{\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3}, \quad \mathbf{L}_2 V = -i\alpha\hbar c \frac{\mathbf{r}_2 \times \mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3}$$

より  $V$  は  $\mathbf{L}_1$ ,  $\mathbf{L}_2$  とは非可換であるが  $\mathbf{L}$  とは可換である。したがって, (8.74) と同様にして

$$\langle \Psi_{\ell m}^{(S)} | V | \Psi_{\ell' m'}^{(S')} \rangle = \langle \Psi_{\ell m}^{(S)} | V | \Psi_{\ell m}^{(S)} \rangle \delta_{SS'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

永年方程式 (8.56) の行列要素  $h_{\alpha\alpha'}$  は対角要素のみ持つから, 1 次の摂動エネルギーは

$$W_1^{(S)} = \langle \Psi_{\ell m}^{(S)} | V | \Psi_{\ell m}^{(S)} \rangle = \alpha\hbar c \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{|\psi_{\ell m}^{(S)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = J_\ell + (-1)^S K_\ell$$

ただし

$$J_\ell = \alpha\hbar c \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\psi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2)|^2 \quad (12.17)$$

$$K_\ell = \alpha\hbar c \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_{100}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1) \psi_{100}(\mathbf{r}_2) \psi_{2\ell m}^*(\mathbf{r}_2) \quad (12.18)$$

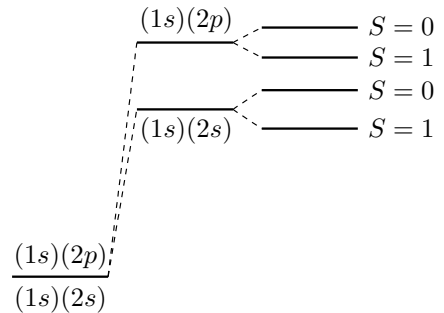
になる。 $J_\ell$  を直接積分 (クーロンエネルギー),  $K_\ell$  を交換積分 (交換エネルギー) という。

$J_\ell$  を考慮すると  $\ell = 0$  と  $\ell = 1$  の縮退は解ける。 $J_\ell$  は 2 つの電荷分布  $-e|\psi_{100}|^2$  と  $-e|\psi_{2\ell m}|^2$  の間の古典力学的なクーロンエネルギーである。154 ページの図より  $|\psi_{100}|^2$  と  $|\psi_{210}|^2$  の平均的間隔は  $|\psi_{100}|^2$  と  $|\psi_{200}|^2$  に比べて短いから  $J_1 > J_0 > 0$  になる。更に,  $K_\ell$  を取り入れるとスピン 1 重項  $S = 0$  とスピン 3 重項  $S = 1$  が分離する。 $S = 1$  の場合  $\psi_{\ell m}^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  は反対称であるから

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 \text{ のとき } \psi_{\ell m}^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0$$

になる。つまり, 2 つの電子は空間的には互いに遠ざかる傾向にある。このため, 2 電子間のクーロン斥力  $V$  の効果は  $S = 1$  の方が  $S = 0$  よりも弱くなり,  $S = 1$  は  $S = 0$  よりも強く束縛する。以下で示すように  $K_\ell > 0$  になり

$$W_1^{(1)} = J_\ell - K_\ell < W_1^{(0)} = J_\ell + K_\ell$$



である。右図にエネルギー準位を模式的に示す。スピン 1 重項状態のヘリウムをパラヘリウム, スピン 3 重項状態のヘリウムをオルソヘリウムという。 $V$  はスピンの依存しないが, 交換積分のため, エネルギー準位はスピンに依存する。交換積分は波動関数の反対称化に伴う量子力学的効果である。

以上の扱いでは, 2 粒子系のスピン状態として全スピンの固有状態を用いたが, 単なる直積を用いてもよい。208 ページの対称性の議論と同様に, 無摂動系のハミルトニアン  $H_0(1) + H_0(2)$  と  $V$  は



全軌道角運動量  $\mathbf{L}$  とは可換であるから,  $L^2$  と  $L_z$  の固有値が同じ状態だけを考えればよい。したがって, 空間部分の状態は

$$\psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2), \quad \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)$$

の2つである。 $\ell, m$  が異なる状態は独立に扱える。 $H_0(1) + H_0(2)$  と  $V$  は  $S_z$  と可換であるから, スピン状態は  $S_z$  の固有値  $M_S$  が同じ直積だけを考えればよい。

$M_S = 0$  の場合,  $|+\rangle_1|-\rangle_2$  と  $|-\rangle_1|+\rangle_2$  である。状態の反対称化を無視すれば

$$\psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2)|+\rangle_1|-\rangle_2, \quad \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2)|-\rangle_1|+\rangle_2$$

$$\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)|+\rangle_1|-\rangle_2, \quad \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)|-\rangle_1|+\rangle_2$$

の4つの状態が存在するが, 反対称化すれば独立な規格化された状態は

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2)|+\rangle_1|-\rangle_2 - \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)|-\rangle_1|+\rangle_2 \right)$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2)|-\rangle_1|+\rangle_2 - \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)|+\rangle_1|-\rangle_2 \right)$$

の2つになる。 $V$  はスピンの依存しないから

$$\langle \Psi_1 | V | \Psi_1 \rangle = \frac{\alpha \hbar c}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 \left( \frac{|\psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{|\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) = J_\ell$$

同様にして

$$\langle \Psi_1 | V | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | V | \Psi_1 \rangle = -K_\ell, \quad \langle \Psi_2 | V | \Psi_2 \rangle = J_\ell$$

である。無摂動系の状態を  $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$  とすると (8.55) は

$$\begin{pmatrix} W_1 - J_\ell & K_\ell \\ K_\ell & W_1 - J_\ell \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

になるから

$$\begin{vmatrix} W_1 - J_\ell & K_\ell \\ K_\ell & W_1 - J_\ell \end{vmatrix} = (W_1 - J_\ell)^2 - K_\ell^2 = 0, \quad \therefore \quad W_1 = J_\ell \pm K_\ell$$

$W_1 = J_\ell + K_\ell$  のとき

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0, \quad \therefore \quad c_1 = -c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

これから

$$\Psi = \frac{\Psi_1 - \Psi_2}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2) + \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2) \right) |S=0\rangle$$

$W_1 = J_\ell - K_\ell$  のとき  $c_1 = c_2 = 1/\sqrt{2}$  になり

$$\Psi = \frac{\Psi_1 + \Psi_2}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2) - \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2) \right) |S=1, M_S=0\rangle$$

である。全スピンの固有状態から出発しなくても同じ結果になるが, この系を扱う場合には全スピンの固有状態を最初から用いた方が簡単である。

$M_S = \pm 1$  の場合, 反対称化を無視すれば

$$\psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2)|\pm\rangle_1|\pm\rangle_2, \quad \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)|\pm\rangle_1|\pm\rangle_2$$

の 2 つあるが, 反対称化すれば

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_2) - \psi_{2\ell m}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2) \right) |S=1, M_S=\pm 1\rangle$$

だけになり  $W_1 = \langle \Psi | V | \Psi \rangle = J_\ell - K_\ell$  である。

$J_\ell$  と  $K_\ell$  を具体的に求めると, (17.45) から

$$J_\ell = \alpha \hbar c \int dr_1 d\Omega_1 dr_2 d\Omega_2 \chi_{10}^2(r_1) \chi_{2\ell}^2(r_2) \frac{1}{4\pi} |Y_{\ell m}(\Omega_2)|^2 \sum_{\lambda\mu} \frac{4\pi}{2\lambda+1} \frac{r_{<}^\lambda}{r_{>}^{\lambda+1}} Y_{\lambda\mu}(\Omega_1) Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_2)$$

$\Omega_1$  の積分を行うと  $\lambda = \mu = 0$  だけが残る

$$\begin{aligned} J_\ell &= \alpha \hbar c \int dr_1 dr_2 \chi_{10}^2(r_1) \chi_{2\ell}^2(r_2) \frac{1}{r_{>}} \int d\Omega_2 |Y_{\ell m}(\Omega_2)|^2 \\ &= \alpha \hbar c \int dr_1 dr_2 \chi_{10}^2(r_1) \chi_{2\ell}^2(r_2) \frac{1}{r_{>}} = \alpha \hbar c \int_0^\infty dr \chi_{2\ell}^2(r) I(r) \end{aligned}$$

ただし  $I(r)$  は (12.15) であり

$$\chi_{20}^2(r) = \frac{r^2}{2a_z^3} \left( 1 - \frac{r}{2a_z} \right)^2 e^{-r/a_z}, \quad \chi_{21}(r) = \frac{r^4}{24a_z^5} e^{-r/a_z}$$

同様に  $f_\ell(r) = \chi_{10}(r)\chi_{2\ell}(r)$  とすると

$$\begin{aligned} K_\ell &= \alpha \hbar c \sum_{\lambda\mu} \frac{1}{2\lambda+1} \int dr_1 dr_2 f_\ell(r_1) f_\ell(r_2) \frac{r_{<}^\lambda}{r_{>}^{\lambda+1}} \\ &\quad \times \int d\Omega_1 Y_{\ell m}(\Omega_1) Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_1) \int d\Omega_2 Y_{\ell m}^*(\Omega_2) Y_{\lambda\mu}(\Omega_2) \\ &= \frac{\alpha \hbar c}{2\ell+1} \int dr_1 dr_2 f_\ell(r_1) f_\ell(r_2) \frac{r_{<}^\ell}{r_{>}^{\ell+1}} \\ &= \frac{\alpha \hbar c}{2\ell+1} \int_0^\infty dr_1 f_\ell(r_1) \left( \frac{1}{r_1^{\ell+1}} \int_0^{r_1} dr_2 r_2^\ell f_\ell(r_2) + r_1^\ell \int_{r_1}^\infty dr_2 \frac{f_\ell(r_2)}{r_2^{\ell+1}} \right) \end{aligned}$$

$f_\ell(r)$  の具体形は

$$f_0(r) = \frac{\sqrt{2}r^2}{a_z^3} \left( 1 - \frac{r}{2a_z} \right) e^{-3r/(2a_z)}, \quad f_1(r) = \frac{r^3}{\sqrt{6}a_z^4} e^{-3r/(2a_z)}$$

になる。積分は  $(r$  の多項式)  $\times e^{-\alpha r}$  の積分になるから解析的に行える。手計算で行うには非常に煩雑であるが, 数式処理ソフト (例えば, フリーの Maxima) を使えば, それほどの手間はかからない。結果は

$$J_0 = \frac{\alpha \hbar c}{2a_z} \int_0^\infty dq q \left( 1 - \frac{q}{2} \right)^2 e^{-q} \left( 1 - (1+q) e^{-2q} \right) = \frac{34}{81} Z E_H = 0.42 Z E_H$$

$$J_1 = \frac{\alpha \hbar c}{24a_z} \int_0^\infty dq q^3 e^{-q} \left( 1 - (1+q) e^{-2q} \right) = \frac{118}{243} Z E_H = 0.486 Z E_H$$

$$K_0 = \frac{8}{27} \frac{\alpha \hbar c}{a_z} \int_0^\infty dq q^2 \left( 1 - \frac{q}{2} \right) \left( 1 + \frac{3}{2} q \right) e^{-3q} = \frac{32}{729} Z E_H = 0.044 Z E_H$$

$$K_1 = \frac{128}{729} \frac{\alpha \hbar c}{a_z} \int_0^\infty dq q e^{-3q/2} \left( 1 - \left( 1 + \frac{3}{2} q + \frac{9}{8} q^2 + \frac{27}{64} q^3 \right) e^{-3q/2} \right) = \frac{224}{6561} Z E_H = 0.034 Z E_H$$

になる。 $J_1 > J_0$  であり, 交換積分  $K_\ell > 0$  は直接積分  $J_\ell$  に比べて 1桁程度小さい。

## 12.4 置換演算子と状態の対称化

### 1 粒子状態

スピン 1/2 粒子を考える。 $|\alpha\rangle$  を完全規格直交系の 1 粒子状態とする。 $|\alpha\rangle$  の波動関数  $u_\alpha(\mathbf{r})$  は

$$u_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma=\pm 1} u_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r})\chi_\sigma, \quad \text{ただし} \quad \sigma_z\chi_\sigma = \sigma\chi_\sigma \quad (12.19)$$

と表せる。あるいは, 行列形式で表して

$$u_\alpha(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} u_{\alpha,+}(\mathbf{r}) \\ u_{\alpha,-}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad u_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} u_{\alpha,+}^*(\mathbf{r}) & u_{\alpha,-}^*(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (12.20)$$

でもよい。規格直交性は

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \sum_{\sigma} \int d^3r u_{\alpha,\sigma}^*(\mathbf{r}) u_{\alpha',\sigma}(\mathbf{r}) = \int d^3r u_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) u_{\alpha'}(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\alpha'} \quad (12.21)$$

である。任意の 1 粒子状態  $|\psi\rangle$  は

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} c_\alpha |\alpha\rangle, \quad c_\alpha = \langle \alpha | \psi \rangle \quad (12.22)$$

と展開できる。波動関数で表せば

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} c_\alpha u_\alpha(\mathbf{r})$$

あるいは

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \psi_\sigma(\mathbf{r}) \chi_\sigma, \quad \text{ただし} \quad \psi_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} c_\alpha u_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}) \quad (12.23)$$

係数  $c_\alpha$  は

$$c_\alpha = \langle \alpha | \psi \rangle = \sum_{\sigma} \int d^3r u_{\alpha,\sigma}^*(\mathbf{r}) \psi_\sigma(\mathbf{r}) = \int d^3r u_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$$

である。これを  $\psi_\sigma(\mathbf{r})$  の展開式に代入すると

$$\psi_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} u_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}) \sum_{\sigma'} \int d^3r' u_{\alpha,\sigma'}^*(\mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') = \sum_{\sigma'} \int d^3r' \left( \sum_{\alpha} u_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}) u_{\alpha,\sigma'}^*(\mathbf{r}') \right) \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')$$

したがって

$$\sum_{\alpha} u_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}) u_{\alpha,\sigma'}^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \text{あるいは} \quad \sum_{\alpha} u_{\alpha}(\mathbf{r}) u_{\alpha}^\dagger(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (12.24)$$

である。ただし, 第 2 式は  $2 \times 2$  行列で, 右辺では単位行列を省略した。粒子がスピンを持つ場合, 完全性 (1.27) は上式になる。

### 置換演算子

一般に  $i$  番目の粒子が 1 粒子状態  $|\psi\rangle$  にあるとき, 添字  $i$  を付けて  $|\psi\rangle_i$  で表すことにする。粒子 1 が状態  $|a\rangle$ , 粒子 2 が  $|b\rangle$  にある 2 粒子系の状態は  $|a\rangle_1 |b\rangle_2$  である。粒子 1 と粒子 2 を入れ換える演算子  $P_{12}$

$$P_{12} |a\rangle_1 |b\rangle_2 = |b\rangle_1 |a\rangle_2$$

を定義し

$$|\Psi\rangle_S = (1 + P_{12}) |a\rangle_1 |b\rangle_2, \quad |\Psi\rangle_A = (1 - P_{12}) |a\rangle_1 |b\rangle_2$$

とすると,  $|\Psi\rangle_S$  は対称,  $|\Psi\rangle_A$  は反対称な 2 粒子状態になる。

このような操作を  $N$  粒子系に一般化するためには,  $N$  個の粒子の入れ換え (置換) を考える必要がある。  $p_1, p_2, \dots, p_N$  は 1 から  $N$  までの整数で互いに異なるとする。  $1, 2, \dots, N$  をそれぞれ  $p_1, p_2, \dots, p_N$  に置換することを

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ p_1 & p_2 & \cdots & p_N \end{pmatrix} \quad (12.25)$$

で表す。特に, ある 2 つ  $i, j$  のみを入れ換える置換を互換といい  $(ij)$  で表す。任意の置換は互換を繰り返せば得られる。  $p_1 \neq 1$  ならば 1 と  $p_1$  を入れ換え (互換), この操作を  $i \neq p_i$  に対しても行えば置換  $p$  になる。ある置換を表す互換の表現は一意には決まらない。例えば, 同じ互換を 2 回繰り返せば元の戻るから, 異なる互換の表現が同じ置換を表す。ところで

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \prod_{i < j} (x_i - x_j)$$

は 2 つの変数の 1 回の互換で符号が変わる。置換 (12.25) に対して

$$f(x_{p_1}, x_{p_2}, \dots, x_{p_N}) = f(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad \text{または} \quad f(x_{p_1}, x_{p_2}, \dots, x_{p_N}) = -f(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

であるから, 前者ならば互換の回数は偶数, 後者ならば奇数でなければならない。したがって, ある置換を表現する互換の回数が偶数か奇数かは一意に決まる。偶数 (奇数) 回の互換で表せる置換を偶置換 (奇置換) という。  $N = 3$  のとき  $3! = 6$  個の置換があるが

$$\text{偶置換} \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad (12.26)$$

$$\text{奇置換} \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} = (12), \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} = (23), \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = (31) \quad (12.27)$$

である。

$N$  個の同種粒子系を考える。粒子 1 が状態  $|\alpha_1\rangle$ , 粒子 2 が状態  $|\alpha_2\rangle$ ,  $\dots$ , 粒子  $N$  が状態  $|\alpha_N\rangle$  にある  $N$  粒子系の状態を

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle = |\alpha_1\rangle_1 |\alpha_2\rangle_2 \cdots |\alpha_N\rangle_N \quad (12.28)$$

と表す。(12.25) の置換  $p$  に対応した置換演算子  $P$  を

$$P|\alpha_1\rangle_1 |\alpha_2\rangle_2 \cdots |\alpha_N\rangle_N = |\alpha_{p_1}\rangle_1 |\alpha_{p_2}\rangle_2 \cdots |\alpha_{p_N}\rangle_N$$

で定義する。

$$|\Psi\rangle = P|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle, \quad |\Psi'\rangle = P|\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_N\rangle$$

とすると

$$\langle\Psi'|\Psi\rangle = {}_1\langle\alpha'_{p_1}|\alpha_{p_1}\rangle {}_2\langle\alpha'_{p_2}|\alpha_{p_2}\rangle \cdots {}_N\langle\alpha'_{p_N}|\alpha_{p_N}\rangle$$

ところで

$${}_i\langle\alpha'|\alpha\rangle_i = \int d^3r_i u_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{r}_i) u_\alpha(\mathbf{r}_i) = \int d^3r u_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{r}) u_\alpha(\mathbf{r}) = \langle\alpha'|\alpha\rangle$$

であるから, 粒子を識別する添字  $i$  は落としてよい。  $p_1, p_2, \dots, p_N$  は互いの異なる 1 から  $N$  までの整数であるから

$$\langle\Psi'|\Psi\rangle = \langle\alpha'_1|\alpha_1\rangle \langle\alpha'_2|\alpha_2\rangle \cdots \langle\alpha'_N|\alpha_N\rangle = \langle\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_N|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle$$

一方

$$\langle \Psi' | \Psi \rangle = \langle \alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_N | P^\dagger P | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \rangle, \quad \therefore \quad P^\dagger P = 1$$

置換演算子  $P$  はユニタリ演算子である。 $P^\dagger = P^{-1}$  は  $P$  の逆置換である。

### 状態の対称化

対称化の要請 (12.4) を満たす  $N$  粒子系の状態を求めるために

$$S = \frac{1}{N!} \sum_P P, \quad A = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^p P \quad \text{ただし} \quad (-1)^p = \begin{cases} +1, & \text{置換 } p \text{ が偶置換} \\ -1, & \text{置換 } p \text{ が奇置換} \end{cases} \quad (12.29)$$

を導入する。 $P$  の和は  $N!$  個のすべての置換演算子についての和を表す。ある置換演算子  $P_1$  に対して

$$P_1 S = \frac{1}{N!} \sum_P P_1 P$$

2つの置換  $p_1, p$  を行った結果はある1つの置換  $p' = p_1 p$  を行ったことと同じであるから

$$P_1 S = \frac{1}{N!} \sum_{P'} P' = S$$

$(-1)^{p'} = (-1)^{p_1} (-1)^p$  より

$$P_1 A = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^p P_1 P = \frac{(-1)^{p_1}}{N!} \sum_{P'} (-1)^{p'} P' = (-1)^{p_1} A$$

$P_1$  を右側から作用させたときも同様であるから

$$P_1 S = S P_1 = S, \quad P_1 A = A P_1 = (-1)^{p_1} A \quad (12.30)$$

になる。 $P_1$  について和をとると

$$\begin{aligned} \frac{1}{N!} \sum_{P_1} P_1 S &= S^2 = \frac{1}{N!} \sum_{P_1} S = S \\ \frac{1}{N!} \sum_{P_1} (-1)^{p_1} P_1 A &= A^2 = \frac{1}{N!} \sum_{P_1} (-1)^{p_1} (-1)^{p_1} A = A \end{aligned}$$

したがって

$$S^2 = S, \quad A^2 = A \quad (12.31)$$

$P^\dagger = P^{-1}$  は  $P$  の逆置換であり偶奇性は  $P$  と同じである。すべての  $P$  についての和は、すべての  $P^{-1}$  についての和であるから

$$A^\dagger = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^p P^\dagger = \frac{1}{N!} \sum_{P^{-1}} (-1)^{p^{-1}} P^{-1} = A, \quad S^\dagger = S \quad (12.32)$$

$A$  と  $S$  はエルミート演算子である。

必ずしも条件 (12.4) を満たさない  $N$  粒子系の状態  $|\Psi\rangle$  に  $S$  または  $A$  を作用させ

$$|\Psi_S\rangle = S|\Psi\rangle, \quad |\Psi_A\rangle = A|\Psi\rangle \quad (12.33)$$

とする。互換  $P_{ij}$  の場合  $(-1)^p = -1$  であるから (12.30) より

$$P_{ij}|\Psi_S\rangle = P_{ij}S|\Psi\rangle = S|\Psi\rangle = |\Psi_S\rangle, \quad P_{ij}|\Psi_A\rangle = P_{ij}A|\Psi\rangle = -A|\Psi\rangle = -|\Psi_A\rangle$$

になるから、任意の2粒子の交換に対して  $|\Psi_S\rangle$  は完全対称な状態、 $|\Psi_A\rangle$  は完全反対称な状態であり、対称化の要請 (12.4) を満たす。したがって、求める状態は (12.33) である。ただし、 $|\Psi_S\rangle = 0$  あるいは  $|\Psi_A\rangle = 0$  になることもある。

$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle$  で粒子  $i$  と  $j$  が同じ1粒子状態を占めているとき、 $i$  と  $j$  を交換しても不変であるから

$$P_{ij}|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle = |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle$$

(12.30) より  $AP_{ij} = -A$  になるから、上式に  $A$  を作用させると

$$-A|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle = A|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle = 0$$

したがって、2個の同種フェルミオンが同じ1粒子状態を占めることはできない (パウリの排他原理)。一方、ボソンの場合にはこのような制限はない。粒子は1粒子状態に何個でも入る。

### スレーター (Slater) 行列式

$|\Psi\rangle$  が直積 (12.28) で与えられるとき、 $N$  個の同種フェルミオンの状態

$$|\Psi_A\rangle = C_N A|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle = \frac{C_N}{N!} \sum_p (-1)^p |\alpha_{p_1}\rangle_1 |\alpha_{p_2}\rangle_2 \cdots |\alpha_{p_N}\rangle_N$$

の規格化定数  $C_N$  を求める。ただし、 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$  はすべて異なる。(12.31), (12.32) より

$$\begin{aligned} \langle \Psi_A | \Psi_A \rangle &= |C_N|^2 \langle \Psi | A^\dagger A | \Psi \rangle = |C_N|^2 \langle \Psi | A | \Psi \rangle \\ &= \frac{|C_N|^2}{N!} \sum_p (-1)^p \langle \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N | \alpha_{p_1}, \alpha_{p_2}, \dots, \alpha_{p_N} \rangle \\ &= \frac{|C_N|^2}{N!} \sum_p (-1)^p \langle \alpha_1 | \alpha_{p_1} \rangle \langle \alpha_2 | \alpha_{p_2} \rangle \cdots \langle \alpha_N | \alpha_{p_N} \rangle \end{aligned}$$

規格直交性  $\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}$  より恒等置換  $p_1 = 1, p_2 = 2, \dots, p_N = N$  以外は寄与しないから

$$\langle \Psi_A | \Psi_A \rangle = \frac{|C_N|^2}{N!}$$

したがって  $C_N = \sqrt{N!}$  とすればよいから、規格化した状態は

$$|\Psi_A\rangle = \sqrt{N!} A|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p (-1)^p |\alpha_{p_1}\rangle_1 |\alpha_{p_2}\rangle_2 \cdots |\alpha_{p_N}\rangle_N$$

になる。ところで、 $N \times N$  行列  $(m_{ij})$  の行列式  $\det(m_{ij})$  の定義は

$$\det(m_{ij}) = \sum_p (-1)^p m_{p_1 1} m_{p_2 2} \cdots m_{p_N N}$$

であるから、形式的に  $m_{ij} = |\alpha_i\rangle_j$  とおけば

$$|\Psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(|\alpha_i\rangle_j) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |\alpha_1\rangle_1 & |\alpha_1\rangle_2 & \cdots & |\alpha_1\rangle_N \\ |\alpha_2\rangle_1 & |\alpha_2\rangle_2 & \cdots & |\alpha_2\rangle_N \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ |\alpha_N\rangle_1 & |\alpha_N\rangle_2 & \cdots & |\alpha_N\rangle_N \end{vmatrix} \quad (12.34)$$

である。これを**スレーター行列式**という。2つの粒子の入れ換えは2つの行の入れ換えに対応し符号が変わる。また、2つの行(列)が等しい行列式は0であるから、パウリの排他原理を満たす。最も簡単な  $N = 2$  のとき

$$\begin{aligned} |\Psi_A\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - P_{12})|\alpha_1\rangle_1|\alpha_2\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha_1\rangle_1|\alpha_2\rangle_2 - |\alpha_2\rangle_1|\alpha_1\rangle_2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} |\alpha_1\rangle_1 & |\alpha_1\rangle_2 \\ |\alpha_2\rangle_1 & |\alpha_2\rangle_2 \end{vmatrix} \end{aligned}$$

になり、確かに  $2 \times 2$  行列の行列式で表せる。

**問題 12.3**  $N = 3$  のとき (12.26), (12.27) より (12.34) を確かめよ。

1粒子だけに依存あるいは作用する1体演算子を  $f$  とする。 $i$  番目の粒子に作用する場合  $f_i$  で表すと、 $N$  粒子系全体では

$$F = \sum_{i=1}^N f_i \quad (12.35)$$

である。

$$\begin{aligned} PF|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle &= \sum_i |\alpha_{p_1}\rangle_1 |\alpha_{p_2}\rangle_2 \cdots f_{p_i} |\alpha_{p_i}\rangle_i \cdots |\alpha_{p_N}\rangle_N = \sum_i f_{p_i} P|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \\ &= FP|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \end{aligned}$$

になり  $F$  と置換演算子は可換である。したがって

$$\begin{aligned} \langle \Psi_A | F | \Psi_A \rangle &= N! \langle \Psi | A^\dagger F A | \Psi \rangle = N! \langle \Psi | F A | \Psi \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_p (-1)^p \langle \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N | f_i | \alpha_{p_1}, \alpha_{p_2}, \dots, \alpha_{p_N} \rangle \end{aligned}$$

$f_i$  は粒子  $i$  だけに作用するから

$$\begin{aligned} \langle \Psi_A | F | \Psi_A \rangle &= \sum_{i=1}^N \sum_p (-1)^p \langle \alpha_1 | \alpha_{p_1} \rangle \cdots \langle \alpha_{i-1} | \alpha_{p_{i-1}} \rangle \langle \alpha_i | f | \alpha_{p_i} \rangle \\ &\quad \times \langle \alpha_{i+1} | \alpha_{p_{i+1}} \rangle \cdots \langle \alpha_N | \alpha_{p_N} \rangle \end{aligned}$$

$k \neq i$  のとき  $p_k = k$  である置換だけが寄与する。このとき  $p_i = i$  になり恒等置換だけが残る

$$\langle \Psi_A | F | \Psi_A \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \alpha_i | f | \alpha_i \rangle = \langle \Psi | F | \Psi \rangle \quad (12.36)$$

になる。1体演算子の場合、恒等置換だけが寄与し反対称の効果はない。

2粒子に依存する2体演算子の期待値を求める。粒子  $i$  と  $j$  に作用するとき  $v_{ij}$  で表す。同種粒子であるから  $v_{ij} = v_{ji}$  である。系全体では

$$V = \sum_{\substack{i,j \\ i < j}} v_{ij} = \frac{1}{2} \sum'_{i,j} v_{ij} \quad (12.37)$$

である。' は  $i \neq j$  を意味する。 $V$  も置換演算子と可換であるから

$$\langle \Psi_A | V | \Psi_A \rangle = N! \langle \Psi | V A | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum'_{i,j} \sum_p (-1)^p \langle \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N | v_{ij} | \alpha_{p_1}, \alpha_{p_2}, \dots, \alpha_{p_N} \rangle$$

$v_{ij}$  は粒子  $i$  と  $j$  だけに作用するから

$$\langle \Psi_A | V | \Psi_A \rangle = \frac{1}{2} \sum'_{i,j} \sum_p (-1)^p \langle \alpha_i, \alpha_j | v_{ij} | \alpha_{p_i}, \alpha_{p_j} \rangle \prod_{k \neq i,j} \langle \alpha_k | \alpha_{p_k} \rangle$$

になる。ただし

$$\begin{aligned} \langle a, b | v_{ij} | c, d \rangle &= \int d^3 r_i d^3 r_j u_a^\dagger(\mathbf{r}_i) u_b^\dagger(\mathbf{r}_j) v_{ij} u_c(\mathbf{r}_i) u_d(\mathbf{r}_j) \\ &= \int d^3 r_1 d^3 r_2 u_a^\dagger(\mathbf{r}_1) u_b^\dagger(\mathbf{r}_2) v_{12} u_c(\mathbf{r}_1) u_d(\mathbf{r}_2) = \langle a, b | v_{12} | c, d \rangle \end{aligned}$$

である。 $k \neq i, j$  のとき  $p_k = k$  でなければならない。したがって、 $p_i = i, p_j = j$  あるいは  $p_i = j, p_j = i$  になる。置換  $p$  は恒等置換か互換 ( $ij$ ) だけになり

$$\langle \Psi_A | V | \Psi_A \rangle = \frac{1}{2} \sum'_{i,j} \left( \langle \alpha_i, \alpha_j | v_{12} | \alpha_i, \alpha_j \rangle - \langle \alpha_i, \alpha_j | v_{12} | \alpha_j, \alpha_i \rangle \right) \quad (12.38)$$

$$= \frac{1}{2} \sum'_{i,j} \langle \alpha_i, \alpha_j | v_{12} (1 - P_{12}) | \alpha_i, \alpha_j \rangle \quad (12.39)$$

$i = j$  のとき第 1 項と第 2 項は打ち消しあうから  $i \neq j$  の制限はなくてもよい。直積での期待値には右辺第 2 項はないから、2 体演算子では反対称の効果が見える。 $v_{12} = 1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  のとき

$$\begin{aligned} \langle \alpha_i, \alpha_j | v_{12} | \alpha_i, \alpha_j \rangle &= \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_1)|^2 |u_{\alpha_j}(\mathbf{r}_2)|^2 \\ \langle \alpha_i, \alpha_j | v_{12} | \alpha_j, \alpha_i \rangle &= \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} u_{\alpha_i}^\dagger(\mathbf{r}_1) u_{\alpha_j}(\mathbf{r}_1) u_{\alpha_j}^\dagger(\mathbf{r}_2) u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_2) \end{aligned}$$

になるが、これらは直接積分 (12.17) と交換積分 (12.18) である。

## 12.5 相互作用しない同種粒子系

$N$  個の同種粒子が互いに相互作用せず、共通のポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  内を運動する系を考える。系のハミルトニアン  $H$  は各粒子のハミルトニアン  $h$  の和

$$H = \sum_{i=1}^N h_i, \quad h_i = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_i)$$

である。この系は同種粒子の多粒子系を扱うときの基礎になる。

完全規格直交系である  $|\alpha\rangle$  としてハミルトニアン  $h$  の固有関数を考える。固有値を  $\varepsilon_\alpha$  とすると

$$h|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\alpha\rangle$$

$h_i$  は粒子  $i$  にだけ作用するから、直積  $|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle = |\alpha_1\rangle_1 |\alpha_2\rangle_2 \cdots |\alpha_N\rangle_N$  に対して

$$\begin{aligned} h_i |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle &= |\alpha_1\rangle_1 \cdots |\alpha_{i-1}\rangle_{i-1} (h_i |\alpha_i\rangle_i) |\alpha_{i+1}\rangle_{i+1} \cdots |\alpha_N\rangle_N \\ &= \varepsilon_{\alpha_i} |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \end{aligned}$$

これから

$$H |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle = E_{\alpha_1 \dots \alpha_N} |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle, \quad E_{\alpha_1 \dots \alpha_N} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_{\alpha_i}$$



$H$  は置換演算子と可換であるから

$$HS|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle = E_{\alpha_1 \dots \alpha_N} S|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle$$

$$HA|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle = E_{\alpha_1 \dots \alpha_N} A|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle$$

ボソン, フェルミオンに関係なく,  $N$  個の粒子が状態  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$  を占めるとき, 系のエネルギー固有値は個々の 1 粒子状態のエネルギー固有値の和になる。

ボソンの場合,  $N$  粒子系の基底状態は,  $\varepsilon_\alpha$  が最低の 1 粒子状態に  $N$  個の粒子すべてが占める状態である。これを**ボーズ・アインシュタイン凝縮**という。これは粒子間の相互作用が無視できる理想系での現象である。最近, 理想系に近い巨視的な系において, ボーズ・アインシュタイン凝縮が実際に観測されている。

Science **269** (1996) 198

<http://www.sciencemag.org/cgi/content/abstract/269/5221/198>

フェルミオンの場合,  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$  は全て異なる状態である。したがって,  $N$  粒子系の基底状態は,  $\varepsilon_\alpha$  が低い方から順に 1 個ずつ  $N$  個まで詰めた状態である。 $\varepsilon_\alpha$  が最も大きい  $N$  番目の 1 粒子エネルギーを**フェルミエネルギー**という。

### 原子の周期律

元素の化学的性質は原子番号に従い周期的に変化するが( **周期律** ), これを説明する上でパウリの排他原理が決定的な役割をする。原子番号  $Z$  の中性原子には  $Z$  個の電子が束縛されている。電子-電子間のクーロン斥力を無視し, 電荷  $Ze$  の原子核から受けるクーロン引力だけとすると, 1 粒子状態のエネルギーは (6.30) より

$$\varepsilon_n = -\frac{(Z\alpha)^2 Mc^2}{2n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

であり, 軌道角運動量  $\ell = 0, 1, \dots, n-1$  の状態が縮退する。電子-電子間のクーロン斥力を考慮すると, 電子の感じるポテンシャル  $V(r)$  は,  $r$  が十分遠方では, 他の  $Z-1$  個の電子により原子核の電荷  $Ze$  が遮蔽されるため, 電荷  $e$  によるポテンシャルになり引力は非常に弱くなる。外側での存在確率が大きい状態ほど, この遮蔽効果を受ける。(6.12) より, 軌道角運動量  $\ell$  の状態の存在確率は原点近傍では  $r^{2\ell+2}$  に比例し,  $\ell$  が大きいほど外側に押し出される。したがって,  $\ell$  が大きいほど弱い引力を感じるため  $\ell$  の大きな状態はエネルギーが高くなり, 純粋なクーロンポテンシャルでの  $\ell$  の縮退はとける。状態  $n\ell$  のエネルギー固有値を  $\varepsilon_{n\ell}$  とすると  $\varepsilon_{n0} < \varepsilon_{n1} < \dots$  である。 $\varepsilon_{n\ell}$  が近似的に縮退している組を低い方から順に表にすると下表になる。

パウリの排他原理により, 原子の基底状態は  $\varepsilon_{n\ell}$  の低い状態から順に  $Z$  個の電子を詰めた状態である。ところで, 軌道角運動量  $\ell$  の状態は  $2\ell+1$  個あり, 更に, スピン状態  $|\pm\rangle$  が 2 つあるから,  $\varepsilon_{n\ell}$  の縮退度は  $2(2\ell+1)$  である。したがって,  $\varepsilon_{n\ell}$  には最大  $2(2\ell+1)$  個の電子を詰められる。表の 2 列目は各組に収容可能な電子数である。表の累計まで電子を詰めると, 電子を励起するには 1 つ上の

$n\ell$	$2(2\ell+1)$ の和	累計
1s	2	2
2s 2p	2 + 6 = 8	10
3s 3p	2 + 6 = 8	18
3d 4s 4p	10 + 2 + 6 = 18	36
4d 5s 5p	10 + 2 + 6 = 18	54
4f 5d 6s 6p	14 + 10 + 2 + 6 = 32	86

組の状態に励起する必要がある, 比較的大きなエネルギーを要する。このため化学的に不活性になる。これが希ガス元素である。このようにして, パウリの排他原理により電子をエネルギーの低い状態から順に詰めることで, 原子の周期律を説明できる。

### フェルミガス

自由なフェルミオンの多粒子系を**フェルミガス**という。この系は簡単ではあるが、物理の様々な分野で重要な役割する。1粒子ハミルトニアン  $h = -\hbar^2 \nabla^2 / 2M$  の固有状態  $|\alpha\rangle$  は運動量  $\hbar \mathbf{k}$  と  $\sigma_z$  の固有値  $\sigma$  で指定できるから  $|\mathbf{k}\sigma\rangle$  で表すと

$$u_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \chi_\sigma, \quad \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (12.40)$$

ただし、259 ページと同様に、1 辺  $L$  の立方体で規格化した。また、周期的境界条件を設定すると

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z, \quad n_x, n_y, n_z \text{ は整数}$$

になる。

パウリの排他原理から  $N$  粒子系の基底状態は、 $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$  の小さい方から順に  $N$  個の  $u_{\mathbf{k}\sigma}$  に粒子を詰めた状態である。このとき、占有した状態のうち、最大の  $|\mathbf{k}|$  を  $k_F$  で表す。これを**フェルミ波数**という。占有した1粒子状態の数は粒子数に等しいから ( $s = 1/2$ )

$$N = \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \sum_{\sigma} 1 = (2s+1) \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} 1 \quad (12.41)$$

である。(10.67) より和を  $\mathbf{k}$  の積分で置き換えると

$$N = (2s+1) \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int_{k \leq k_F} d^3 k = (2s+1) \frac{L^3}{6\pi^2} k_F^3$$

したがって

$$\text{密度 } \rho = \frac{N}{L^3} = \frac{2s+1}{6\pi^2} k_F^3, \quad k_F = \left( \frac{6\pi^2}{2s+1} \rho \right)^{1/3} \quad (12.42)$$

になる。フェルミエネルギー  $\varepsilon_F$  は

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2M} = \frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{6\pi^2}{2s+1} \rho \right)^{2/3}$$

である。基底状態のエネルギー  $E_0$  は

$$E_0 = \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \sum_{\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2M} = (2s+1) \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d^3 k \frac{\hbar^2 k^2}{2M} = \frac{(2s+1)L^3}{10\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^5}{2M} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2M} N \quad (12.43)$$

になる。1粒子当たりのエネルギーは  $\frac{E_0}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F$  である。

## 12.6 ハートリー・フォック近似

互いに相互作用する  $N$  個のフェルミオンの多粒子系を考える。ハミルトニアンを

$$H = \sum_{i=1}^N h_i + \frac{1}{2} \sum'_{i,j} v_{ij} \quad (12.44)$$

とする ( $'$  は  $i \neq j$  を意味する)。  $h_i$  は粒子  $i$  に作用する1体のハミルトニアン、  $v_{ij}$  は2粒子  $i, j$  間の相互作用を表す。例えば、原点に静止した電荷  $Ze$  の原子核と  $N$  個の電子からなる原子では

$$h_i = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_i^2 - \frac{Z\alpha\hbar c}{|\mathbf{r}_i|}, \quad v_{ij} = \frac{\alpha\hbar c}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad \alpha = \text{微細構造定数} \quad (12.45)$$

である。以下の議論は  $h_i, v_{ij}$  の具体形には依存しない。

一般に  $H$  の固有値問題  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  を正確に解くことは困難であり、何らかの近似が必要になる。出発点になる近似が平均場近似である。粒子間の相互作用  $v_{ij}$  を一体のポテンシャル (平均場ポテンシャル)  $V(\mathbf{r})$  として取り込む。各粒子は 1 体ハミルトニアン  $h + V$  の固有状態  $|\alpha_i\rangle$  を占め、互いに独立に運動すると見なす。これは  $|\Psi\rangle$  を (12.34) のスレーター行列式  $|\Psi_A\rangle$  で近似することである。 $V$  あるいは 1 粒子状態をどのように決めるか、が問題である。基底状態の場合、221 ページの変分法より、 $H$  の期待値  $\langle\Psi_A|H|\Psi_A\rangle$  を最小にする 1 粒子状態  $|\alpha_i\rangle$  が最も最適である。 $|\alpha_i\rangle$  は規格直交系であるから、 $N^2$  個の条件  $\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij}$  のもとで  $\langle\Psi_A|H|\Psi_A\rangle$  を最小にする必要がある。したがって、ラグランジュの未定乗数法 (415 ページ) により  $\varepsilon_{ij}$  を未定乗数として

$$F = \langle\Psi_A|H|\Psi_A\rangle - \sum_{i,j=1}^N \varepsilon_{ij} \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle$$

を最小にする (条件  $\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij}$  を付加しない場合については問題 12.4)。 $\sum \varepsilon_{ij} \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle$  は実数であるから、 $N \times N$  行列  $(\varepsilon_{ij})$  はエルミート行列とする。ユニタリ行列  $U$  で

$$(U^\dagger \varepsilon U)_{ij} = \bar{\varepsilon}_i \delta_{ij}$$

と対角化できるから

$$\sum_{i,j} \varepsilon_{ij} \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \sum_{i,j} (U \bar{\varepsilon} U^\dagger)_{ij} \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \sum_i \bar{\varepsilon}_i \langle\bar{\alpha}_i|\bar{\alpha}_i\rangle, \quad |\bar{\alpha}_i\rangle = \sum_j (U^\dagger)_{ij} |\alpha_j\rangle$$

になる。粒子  $j$  の状態を  $B_{ij} = |\alpha_i\rangle_j$ ,  $\bar{B}_{ij} = |\bar{\alpha}_i\rangle_j$  で表すと、 $\bar{B} = U^\dagger B$ ,  $B = U \bar{B}$  であるから

$$|\Psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(B) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(U \bar{B}) = \det(U) |\bar{\Psi}_A\rangle, \quad |\bar{\Psi}_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(|\bar{\alpha}_i\rangle_j)$$

$|\det U| = 1$  より

$$F = \langle\bar{\Psi}_A|H|\bar{\Psi}_A\rangle - \sum_i \bar{\varepsilon}_i \langle\bar{\alpha}_i|\bar{\alpha}_i\rangle$$

である。以下ではこの表現を用い  $\bar{\quad}$  は省略する。(12.36), (12.39) より

$$\langle\Psi_A|H|\Psi_A\rangle = \sum_i \langle\alpha_i|h|\alpha_i\rangle + \frac{1}{2} \sum'_{i,j} \langle\alpha_i, \alpha_j|v_{12}(1 - P_{12})|\alpha_i, \alpha_j\rangle \quad (12.46)$$

積分で表すと

$$F = \sum_i \int d^3 r_1 u_{\alpha_i}^\dagger(\mathbf{r}_1) (h_1 - \varepsilon_i) u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_1) + \frac{1}{2} \sum'_{i,j} \int d^3 r_1 d^3 r_2 u_{\alpha_i}^\dagger(\mathbf{r}_1) u_{\alpha_j}^\dagger(\mathbf{r}_2) v_{12}(1 - P_{12}) u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_1) u_{\alpha_j}(\mathbf{r}_2)$$

になる。221 ページで示したが、変分を行うとき  $u_{\alpha_i}^\dagger$  と  $u_{\alpha_i}$  は独立と見なせる。1 つの状態  $u_{\alpha_k}^\dagger$  を微小変化  $\delta u_{\alpha_k}^\dagger$  させると、 $i = k, j = k$  以外は変化しないから

$$\begin{aligned} \delta F_k &= \int d^3 r_1 \delta u_{\alpha_k}^\dagger(\mathbf{r}_1) (h_1 - \varepsilon_k) u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_1) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \delta u_{\alpha_k}^\dagger(\mathbf{r}_1) u_{\alpha_j}^\dagger(\mathbf{r}_2) v_{12}(1 - P_{12}) u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_1) u_{\alpha_j}(\mathbf{r}_2) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \int d^3 r_1 d^3 r_2 u_{\alpha_i}^\dagger(\mathbf{r}_1) \delta u_{\alpha_k}^\dagger(\mathbf{r}_2) v_{12}(1 - P_{12}) u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_1) u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_2) \end{aligned}$$

3 行目で 1 と 2 を入れ替えれば  $v_{21} = v_{12}$  より 3 行目 = 2 行目 になり

$$\delta F_k = \int d^3 r_1 \delta u_{\alpha_k}^\dagger(\mathbf{r}_1) \left[ (h_1 - \varepsilon_k) u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_1) + \sum_{i \neq k} \int d^3 r_2 u_{\alpha_i}^\dagger(\mathbf{r}_2) v_{12} (u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_2) u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_1) - u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_2) u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_1)) \right]$$

になる。したがって、 $F$  が最小で  $\delta F_k = 0$  になるためには  $[\dots] = 0$  より

$$h_1 u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_1) + \sum_{i \neq k} \int d^3 r_2 u_{\alpha_i}^\dagger(\mathbf{r}_2) v_{12} (u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_2) u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_1) - u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_2) u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_1)) = \varepsilon_k u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_1) \quad (12.47)$$

である。 $N$  個の  $u_{\alpha_k}$  についての連立微積分方程式 (12.47) をハートリー・フォック方程式 (HF 方程式) という。

$$V_H^{(k)}(\mathbf{r}_1) = \sum_{i \neq k} \int d^3 r_2 u_{\alpha_i}^\dagger(\mathbf{r}_2) v_{12} u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_2), \quad V_F^{(k)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = - \sum_{i \neq k} u_{\alpha_i}^\dagger(\mathbf{r}_2) v_{12} u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_1)$$

とすれば, HF 方程式は

$$h_1 u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_1) + V_H^{(k)}(\mathbf{r}_1) u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_1) + \int d^3 r_2 V_F^{(k)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_2) = \varepsilon_k u_{\alpha_k}(\mathbf{r}_1)$$

と表せる。あるいは

$$h_{\text{HF}} |\alpha_k\rangle = \varepsilon_k |\alpha_k\rangle, \quad h_{\text{HF}} = h + V_{\text{HF}} \quad (12.48)$$

ただし

$$\langle \alpha | V_{\text{HF}} | \beta \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \alpha, \alpha_i | v_{12} (1 - P_{12}) | \beta, \alpha_i \rangle \quad (12.49)$$

である。(12.47) から分かるように,  $i = k$  の寄与は打ち消しあうから,  $V_H^{(k)}$  と  $V_F^{(k)}$  を同時に考慮する場合,  $i \neq k$  の条件は不要であり,  $V_{\text{HF}}$  は全ての 1 粒子状態について共通になる。 $N$  粒子系の状態をスレーター行列式で近似する場合, 1 粒子状態としては HF 方程式の解が最も最適である。

### HF 方程式の性質

- $V_{\text{HF}}$  は 2 つの部分  $V_H$  と  $V_F$  からなる。局所的ポテンシャル  $V_H^{(k)}(\mathbf{r})$  を直接項, 非局所的な  $V_F^{(k)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  を交換項という。交換項は粒子交換  $P_{12}$  に起因し反対称化の効果である。試行関数が直積  $\prod_i |\alpha_i\rangle$  の場合, (12.46) で  $P_{12}$  の項は現れないから  $V_F$  は存在しない。このため,  $V_H^{(k)}$  における和の制限  $i \neq k$  は省略できず, ポテンシャルは  $k$  に依存する。 $i \neq j$  のとき  $V_H^{(i)} \neq V_H^{(j)}$  であるから  $|\alpha_i\rangle$  と  $|\alpha_j\rangle$  は直交しない。一方,  $V_{\text{HF}}$  は 1 粒子状態に共通であるから, HF 方程式の解は  $\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}$  を満たす。
- 未定乗数  $\varepsilon_i$  はハミルトニアン  $h_{\text{HF}}$  のエネルギー固有値を表す。

$$\varepsilon_i = \langle \alpha_i | h_{\text{HF}} | \alpha_i \rangle = \langle \alpha_i | h | \alpha_i \rangle + \sum_k \langle \alpha_i, \alpha_k | v_{12} (1 - P_{12}) | \alpha_i, \alpha_k \rangle \quad (12.50)$$

であるから (12.46) は

$$\langle \Psi_A | H | \Psi_A \rangle = \sum_i \varepsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle \alpha_i, \alpha_j | v_{12} (1 - P_{12}) | \alpha_i, \alpha_j \rangle = \sum_i \left( \varepsilon_i - \frac{1}{2} \langle \alpha_i | V_{\text{HF}} | \alpha_i \rangle \right)$$

になる。系のエネルギー  $\langle \Psi_A | H | \Psi_A \rangle$  は  $|\Psi_A\rangle$  で占有している 1 粒子状態のエネルギー  $\varepsilon_i$  の和ではない。これは  $\sum_i \varepsilon_i$  では相互作用  $v_{ij}$  が二重に取り込まれるためである。

- $N$  粒子系から状態  $|\alpha_k\rangle$  の粒子を取り除いた  $N-1$  粒子系を考える。 $N$  粒子系と  $N-1$  粒子系では HF ポテンシャル (12.49) は異なるが、この違いは無視し 1 粒子状態は 2 つの系で同じとする。 $N$  粒子系のエネルギー  $E_N$  で  $\alpha_k$  を含む部分を取り出すと (12.46) より

$$E_N = \sum_{i \neq k} \langle \alpha_i | h | \alpha_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i, j \neq k} \langle \alpha_i, \alpha_j | v_{12} (1 - P_{12}) | \alpha_i, \alpha_j \rangle \\ + \langle \alpha_k | h | \alpha_k \rangle + \sum_i \langle \alpha_k, \alpha_i | v_{12} (1 - P_{12}) | \alpha_k, \alpha_i \rangle$$

である。右辺 1 行目は状態  $|\alpha_k\rangle$  の粒子を取り除いた  $N-1$  粒子系のエネルギー  $E_{N-1}$ 、2 行目は (12.50) より  $\varepsilon_k$  であるから  $E_{N-1} = E_N - \varepsilon_k$  になる。したがって、 $-\varepsilon_k$  は状態  $|\alpha_k\rangle$  の粒子を取り除くのに必要なエネルギーである。これを**クーブマンの定理**という。

- (12.49) の  $V_{\text{HF}}$  は 1 粒子状態の  $u_{\alpha_i}$  が分かっている必要があれば決まらない。一方、 $u_{\alpha_i}$  を求めるには  $V_{\text{HF}}$  が求まっている必要がある。(12.48) を数値計算で解く場合、次のような反復法を行い**自己無撞着** (self-consistent) に解く。適当な規格直交系  $u_{\alpha}^{(0)}$  により

$$\langle \alpha | V_{\text{HF}}^{(0)} | \beta \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \alpha, \alpha_i^{(0)} | v_{12} (1 - P_{12}) | \beta, \alpha_i^{(0)} \rangle$$

を求め、次に

$$(h + V_{\text{HF}}^{(0)}) u_{\alpha}^{(1)} = \varepsilon_{\alpha}^{(1)} u_{\alpha}^{(1)} \Rightarrow V_{\text{HF}}^{(1)} \text{ を求める} \Rightarrow (h + V_{\text{HF}}^{(1)}) u_{\alpha}^{(2)} = \varepsilon_{\alpha}^{(2)} u_{\alpha}^{(2)} \Rightarrow \dots \quad (12.51)$$

$u_{\alpha}^{(n+1)} \approx u_{\alpha}^{(n)}$  になるまで、この操作を繰り返す。

- 2 粒子系の場合、HF 方程式は (12.47) より

$$(h + U_{22}(\mathbf{r})) u_{\alpha_1}(\mathbf{r}) - U_{21}(\mathbf{r}) u_{\alpha_2}(\mathbf{r}) = \varepsilon_1 u_{\alpha_1}(\mathbf{r}) \\ (h + U_{11}(\mathbf{r})) u_{\alpha_2}(\mathbf{r}) - U_{12}(\mathbf{r}) u_{\alpha_1}(\mathbf{r}) = \varepsilon_2 u_{\alpha_2}(\mathbf{r}) \quad (12.52)$$

ただし

$$U_{ij}(\mathbf{r}_1) = \int d^3 r_2 u_{\alpha_i}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) v_{12} u_{\alpha_j}(\mathbf{r}_2)$$

になる。

- $h, v$  がスピンに依存しない場合、1 粒子状態  $u_{\alpha}(\mathbf{r})$  は軌道部分  $\varphi_{\mu}(\mathbf{r})$  とスピン部分  $\chi_{\sigma=\pm 1}$  の直積  $u_{\alpha}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mu}(\mathbf{r}) \chi_{\sigma}$  で表せる。(12.47) は

$$(h_1 - \varepsilon_{\mu}) \varphi_{\mu}(\mathbf{r}_1) \chi_{\sigma}(1) + \sum_{\mu_i, \sigma_i} \chi_{\sigma_i}^{\dagger}(2) \chi_{\sigma_i}(2) \chi_{\sigma}(1) \int d^3 r_2 v_{12} |\varphi_{\mu_i}^*(\mathbf{r}_2)|^2 \varphi_{\mu}(\mathbf{r}_1) \\ - \sum_{\mu_i, \sigma_i} \chi_{\sigma_i}^{\dagger}(2) \chi_{\sigma}(2) \chi_{\sigma_i}(1) \int d^3 r_2 v_{12} \varphi_{\mu_i}^*(\mathbf{r}_2) \varphi_{\mu_i}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\mu}(\mathbf{r}_2) = 0$$

になる。和の制限  $i \neq k$  は不要である。 $\chi_{\sigma}(1)$  は粒子 1、 $\chi_{\sigma}(2)$  は粒子 2 のスピン状態であるから  $\chi_{\sigma}^{\dagger}(2) \chi_{\sigma'}(1)$  は内積ではないが、 $\chi_{\sigma}^{\dagger}(2) \chi_{\sigma'}(2)$  は内積であり  $\chi_{\sigma}^{\dagger}(2) \chi_{\sigma'}(2) = \delta_{\sigma\sigma'}$  になる。これから  $\chi_{\sigma}(1)$  は省略でき、HF 方程式は軌道部分に関する方程式

$$h_1 \varphi_{\mu}(\mathbf{r}_1) + V_{\text{H}}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\mu}(\mathbf{r}_1) + \int d^3 r_2 V_{\text{F}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi_{\mu}(\mathbf{r}_2) = \varepsilon_{\mu} \varphi_{\mu}(\mathbf{r}_1) \quad (12.53)$$

ただし

$$V_H(\mathbf{r}_1) = \int d^3 r_2 v_{12} \sum_{\mu_i, \sigma_i} |\varphi_{\mu_i}^*(\mathbf{r}_2)|^2 = 2 \int d^3 r_2 v_{12} \sum_{\mu_i} |\varphi_{\mu_i}^*(\mathbf{r}_2)|^2 \quad (12.54)$$

$$V_F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -v_{12} \sum_{\mu_i, \sigma_i} \delta_{\sigma\sigma_i} \varphi_{\mu_i}^*(\mathbf{r}_2) \varphi_{\mu_i}(\mathbf{r}_1) = -v_{12} \sum_{\mu_i} \varphi_{\mu_i}^*(\mathbf{r}_2) \varphi_{\mu_i}(\mathbf{r}_1) \quad (12.55)$$

になる。

**問題 12.4** 2 粒子系を考える。  $H = h_1 + h_2 + v_{12}$  である。1 粒子状態を  $\psi_1, \psi_2$  とし

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_2(\mathbf{r}_1) \psi_1(\mathbf{r}_2))$$

とする。変分後に  $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$  を適用することにして  $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$  を極小にする。この場合 (8.105) より  $\langle \delta \Psi | (H - E) | \Psi \rangle = 0$  である。

$$\begin{pmatrix} h + V_{22}(\mathbf{r}) & -V_{21}(\mathbf{r}) \\ -V_{12}(\mathbf{r}) & h + V_{11}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E - h_{22} & h_{21} \\ h_{12} & E - h_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

を示せ。ただし

$$h_{ij} = \langle \psi_i | h | \psi_j \rangle, \quad V_{ij}(\mathbf{r}_1) = \int d^3 r_2 \psi_i^\dagger(\mathbf{r}_2) v_{12} \psi_j(\mathbf{r}_2)$$

である (ランダウ 量子力学 298 ページ)。右辺の  $2 \times 2$  行列を対角化し (12.52) を求めよ。

### 例題 1

$N$  個の自由なフェルミオンに相対位置だけに依存する相互作用が作用する場合を考える。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_i \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j}' v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = v(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)$$

である。(12.40) の平面波  $u_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \chi_\sigma = L^{-3/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \chi_\sigma$  が HF 方程式を満たすことを示す。フェルミ波数を  $k_F$  とすると、占有状態についての和は  $|\mathbf{k}| \leq k_F$  を満たす  $\mathbf{k}$  の和になる。(12.54) は

$$V_H(\mathbf{r}_1) = \int d^3 r_2 v(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \sum_{\sigma} \frac{1}{L^3} = \frac{N}{L^3} \int d^3 r_2 v(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$$

ここで (12.41) を用いた。(12.55) は

$$\begin{aligned} \int d^3 r_2 V_F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2) &= - \int d^3 r_2 v(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2}}{L^{3/2}} \sum_{|\mathbf{k}'| \leq k_F} \frac{e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}}{L^3} \\ &= - \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1) \sum_{|\mathbf{k}'| \leq k_F} \int d^3 r_2 v(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \frac{e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}}{L^3} \end{aligned}$$

積分領域は体積  $L^3$  の領域であるが  $L \rightarrow \infty$  の極限を考えるから、積分変数を  $\mathbf{r}_2$  から  $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$  に変更しても積分領域は変わらない。したがって

$$V_H(\mathbf{r}_1) = \frac{N}{L^3} \mathcal{V}(0) = \text{定数}, \quad \int d^3 r_2 V_F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2) = V_F(\mathbf{k}) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1)$$

ただし

$$\mathcal{V}(\mathbf{q}) = \int d^3 r e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} v(\mathbf{r}), \quad V_F(\mathbf{k}) = -\frac{1}{L^3} \sum_{|\mathbf{k}'| \leq k_F} \mathcal{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (12.56)$$

である。以上から HF 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_H + V_F(\mathbf{k})\right)\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\mathbf{k}}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + V_H + V_F(\mathbf{k})$$

になり、平面波  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は HF 方程式を満たす。

$$[\mathbf{P}, H] = -\frac{i\hbar}{2} \sum_{i \neq j} [\nabla_i + \nabla_j, v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] = 0, \quad \mathbf{P} = -i\hbar \sum_i \nabla_i$$

であるから、 $H$  と系の運動量  $\mathbf{P}$  の同時固有状態が存在する。したがって、運動量の固有状態である平面波を用いればよい。系の並進不変性のため、平面波は HF 方程式の解になる。

$\mu > 0$  として  $v(\mathbf{r}) = g e^{-\mu r}/r$  の場合、 $V_F(\mathbf{k})$  を求める。(11.34) より  $\mathcal{V}(\mathbf{q}) = 4\pi g/(q^2 + \mu^2)$  である。(10.67) を用いて  $\mathbf{k}'$  の和を積分で置き換えると

$$V_F(\mathbf{k}) = -\frac{4\pi g}{L^3} \sum_{|\mathbf{k}'| \leq k_F} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 + \mu^2} = -\frac{4\pi g}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3 k' \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 + \mu^2}$$

$\mathbf{k}$  と  $\mathbf{k}'$  のなす角を  $\theta$  とすれば

$$\begin{aligned} V_F(\mathbf{k}) &= -\frac{4\pi g_c}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^{k_F} dk' k'^2 \int_0^\pi d\theta \frac{\sin \theta}{k^2 + k'^2 + \mu^2 - 2kk' \cos \theta} \\ &= -\frac{g}{\pi} \left[ k_F + \frac{k_F^2 - k^2 + \mu^2}{4k} \log \frac{(k_F + k)^2 + \mu^2}{(k_F - k)^2 + \mu^2} - \mu \left( \tan^{-1} \frac{k_F + k}{\mu} + \tan^{-1} \frac{k_F - k}{\mu} \right) \right] \end{aligned}$$

になる。クーロン相互作用の場合 ( $g = \alpha\hbar c$ ,  $\mu \rightarrow 0$ )

$$V_F(k) = -\frac{\alpha\hbar c}{\pi} k_F F(k/k_F), \quad F(x) = 1 + \frac{1-x^2}{2x} \log \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \approx \begin{cases} 2 - 2x^2/3, & x \approx 0 \\ 2/(3x^2) & x \gg 1 \end{cases} \quad (12.57)$$

である ( $F(1) = 1$ )。一方、 $\mathcal{V}(0) = 4\pi g/\mu^2$  より  $V_H = N\mathcal{V}(0)/L^3 \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} \infty$  になる。ここで、全体では電氣的に中性な電離気体 (プラズマ) を考える。密度  $\rho_+(\mathbf{r}) = \text{一定} = N/L^3$  の正電荷の媒質中における  $N$  個の電子系である。電子の 1 体ハミルトニアン  $h_0$  は

$$h_0 = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_0(\mathbf{r}), \quad V_0(\mathbf{r}) = -g \int d^3 r' \frac{\rho_+(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (12.58)$$

$V_0$  は媒質による引力のクーロンポテンシャルである。 $\mathbf{r}'$  の代わりに  $\mathbf{r}' - \mathbf{r}$  を積分変数にすれば

$$V_0(\mathbf{r}) = -g \frac{N}{L^3} \int d^3 r' \frac{1}{|\mathbf{r}'|} = -\frac{N}{L^3} \mathcal{V}(0) = -V_H$$

発散する斥力の  $V_H$  は引力の  $V_0$  と打ち消しあい

$$h_{\text{HF}} = h_0 + V_{\text{HF}} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_F(\mathbf{k}), \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + V_F(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} - \frac{\alpha\hbar c}{\pi} k_F F(k/k_F)$$

になる。

原子の電子系の場合、ハミルトニアン (12.45) を HF 近似で扱うとき、交換項  $V_F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  の処理は非常に面倒になる。そこで、平均化した自由電子の交換項 (12.57)

$$\begin{aligned} \langle V_F \rangle &= \int_0^{k_F} d^3 k V_F(k) / \int_0^{k_F} d^3 k = -\frac{3\alpha\hbar c}{\pi} k_F \int_0^1 dx x^2 F(x) \\ &= -\frac{3\alpha\hbar c}{\pi} k_F \left[ \frac{x+x^3}{4} - \frac{(1-x^2)^2}{8} \log \frac{1+x}{1-x} \right]_0^1 = -\frac{3\alpha\hbar c}{2\pi} k_F \end{aligned}$$

を考える。(12.42) より  $k_F$  を密度  $\rho = N/L^3$  で表すと  $k_F = (3\pi^2\rho)^{1/3}$  である。自由電子系の場合  $\rho$  は一定であるが、原子中の電子系では  $\rho$  は  $\mathbf{r}$  の関数になる。 $\langle V_F \rangle$  の  $k_F$  を  $(3\pi^2\rho(\mathbf{r}))^{1/3}$  で置き換えて交換項  $V_F(\mathbf{r})$  を近似する。これを交換項に対する局所密度近似という。HF 方程式 (12.53) は

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 - \frac{Z\alpha\hbar c}{r} + \alpha\hbar c \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} + V_F(\mathbf{r}) - \varepsilon_\mu \right) \varphi_\mu(\mathbf{r}) = 0$$

ただし

$$V_F(\mathbf{r}) = -\frac{3}{2}\alpha\hbar c \left( \frac{3}{\pi}\rho(\mathbf{r}) \right)^{1/3}, \quad \rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mu_i, \sigma_i} |\varphi_{\mu_i}(\mathbf{r})|^2 \quad (12.59)$$

になる。これをハートリー・フォック・スレーター方程式という。

**問題 12.5**  $\langle \Psi_A | H | \Psi_A \rangle$  における交換項の寄与

$$E_{\text{ex}} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle \alpha_i, \alpha_j | v_{12} P_{12} | \alpha_i, \alpha_j \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \sum_{|\mathbf{k}'| \leq k_F} \sum_{\sigma\sigma'} \langle \mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma' | v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) | \mathbf{k}'\sigma', \mathbf{k}\sigma \rangle$$

を考える。

1.  $E_{\text{ex}} = \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} V_F(\mathbf{k})$  を示せ。ただし  $V_F(\mathbf{k})$  は (12.56) である。クーロン相互作用の場合

$$E_{\text{ex}} = -\frac{\alpha\hbar c}{4\pi^3} k_F^4 L^3 = -\frac{\alpha\hbar c}{4\pi^3} \int d^3r k_F^4$$

になることを示せ。

2. 局所密度近似により  $k_F$  を  $(3\pi^2\rho(\mathbf{r}))^{1/3}$  で置き換える。 $\varphi_{\mu_k}^*(\mathbf{r})$  の変分に対して

$$\delta E_{\text{ex}} = \int d^3r \delta\varphi_{\mu_k}^*(\mathbf{r}) V_F(\mathbf{r}) \varphi_{\mu_k}(\mathbf{r}), \quad V_F(\mathbf{r}) = -\alpha\hbar c \left( \frac{3}{\pi}\rho(\mathbf{r}) \right)^{1/3}$$

を示せ。この  $V_F(\mathbf{r})$  は (12.59) の  $V_F(\mathbf{r})$  とは因子 3/2 だけ異なる。変分した後で局所密度近似を行うか、局所密度近似をした後で変分を行うか、の違いである。

## 例題 2

調和振動子ポテンシャル中の 2 粒子系に  $v_{12} = g(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2$  が作用する場合を考える。定数  $g$  は結合定数である。 $\hbar = 2M = \omega/2 = 1$  の単位系を用いると、ハミルトニアンは

$$H = \sum_{i=1}^2 h_i + g(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2, \quad h_i = -\nabla_i^2 + r_i^2 \quad (12.60)$$

である。まず、正確に解く。 $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/\sqrt{2}$  と  $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\sqrt{2}$  で表すと ((6.3) 参照)

$$\nabla_1 = \frac{\nabla_R + \nabla_r}{\sqrt{2}}, \quad \nabla_2 = \frac{\nabla_R - \nabla_r}{\sqrt{2}}, \quad \therefore H = -\nabla_R^2 + R^2 - \nabla_r^2 + (2g+1)r^2$$

であり  $g > -1/2$  のとき  $\omega/2 = 1$ ,  $\sqrt{2g+1}$  の 2 つの独立な振動子になる。基底状態のエネルギーは

$$E_0 = 3\left(1 + \sqrt{2g+1}\right) \quad (12.61)$$

規格化した軌道部分の波動関数は (6.76) より

$$\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{(2g+1)^{3/8}}{\pi^{3/2}} \exp\left(-R^2/2 - \sqrt{2g+1}r^2/2\right) \quad (12.62)$$



である。 $\Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  は粒子の交換に対して対称であるが、スピン状態も考慮した全波動関数  $\Psi_0(1, 2)$  は反対称でなければならない。2つのスピン  $1/2$  を合成した状態 (5.110) を  $|SM_S\rangle$  とすると、 $S=0$  は粒子の交換に対して反対称であるから  $\Psi_0(1, 2) = \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|S=0\rangle$  とすればよい。なお、 $\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  には  $\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2$  の項が存在するから  $\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  は1粒子状態の直積ではない。

HF 方程式により基底状態を求める。スピン状態を  $S=0$  とすれば、軌道部分の波動関数は粒子の交換に対して対称である。2粒子が最もエネルギーの低い1粒子状態を占有するとき、2粒子系のエネルギーは最低になるから

$$\Psi_{\text{HF}}(1, 2) = \varphi(\mathbf{r}_1)\varphi(\mathbf{r}_2)|S=0\rangle = \frac{u_+(\mathbf{r}_1)u_-(\mathbf{r}_2) - u_-(\mathbf{r}_1)u_+(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}}, \quad u_{\pm}(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r})\chi_{\pm}$$

とする。(12.52)において  $u_{\alpha_1} = u_+$ ,  $u_{\alpha_2} = u_-$  とすれば

$$U_{ij}(\mathbf{r}) = \chi_i^\dagger \chi_j g \int d^3r' (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 |\varphi(\mathbf{r}')|^2 = \delta_{ij} g \int d^3r' (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 |\varphi(\mathbf{r}')|^2$$

であるから (12.52) は

$$\left( -\nabla^2 + r^2 + g \int d^3r' (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 |\varphi(\mathbf{r}')|^2 \right) \varphi(\mathbf{r}) = \varepsilon \varphi(\mathbf{r}) \quad (12.63)$$

になる。 $\varphi(\mathbf{r})$  がパリティの固有状態ならば

$$\int d^3r' (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 |\varphi(\mathbf{r}')|^2 = r^2 + \int d^3r' r'^2 |\varphi(\mathbf{r}')|^2$$

であるから (12.63) は

$$\left( -\nabla^2 + (g+1)r^2 \right) \varphi(\mathbf{r}) = \varepsilon' \varphi(\mathbf{r}), \quad \varepsilon' = \varepsilon - g \int d^3r r^2 |\varphi(\mathbf{r})|^2$$

したがって、この方程式の基底状態は

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{(g+1)^{3/8}}{\pi^{3/4}} \exp\left(-\sqrt{g+1} r^2/2\right), \quad \varepsilon' = 3\sqrt{g+1}, \quad \varepsilon = 3\sqrt{g+1} + \frac{3g}{2\sqrt{g+1}} \quad (12.64)$$

になり

$$\Psi_{\text{HF}}(1, 2) = \varphi(\mathbf{r}_1)\varphi(\mathbf{r}_2)|S=0\rangle = \frac{(g+1)^{3/4}}{\pi^{3/2}} \exp\left(-\sqrt{g+1} (r_1^2 + r_2^2)/2\right) |S=0\rangle$$

である。(12.60) の  $H$  は  $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2$  を展開すれば

$$H = H_0 + H', \quad H_0 = \sum_{i=1}^2 \left( -\nabla_i^2 + (g+1)r_i^2 \right), \quad H' = -2g \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2$$

と表せるから

$$E_{\text{HF}} = \langle \Psi_{\text{HF}} | H | \Psi_{\text{HF}} \rangle = \langle \Psi_{\text{HF}} | H_0 | \Psi_{\text{HF}} \rangle = 2\varepsilon' = 6\sqrt{g+1}$$

$E_{\text{HF}}$  は1粒子エネルギーの和  $2\varepsilon$  ではない。 $H_0|\Psi_{\text{HF}}\rangle = E_{\text{HF}}|\Psi_{\text{HF}}\rangle$  であり  $|\Psi_{\text{HF}}\rangle$  は  $H_0$  の固有状態になる。この問題の場合、HF 近似は  $H'$  を無視する近似である。

$\Psi_{\text{HF}}$ ,  $E_{\text{HF}}$  を正確な結果 (12.61), (12.62) と比較する。シュワルツの不等式 (1.42) 及び (8.106) より  $|\langle \Psi_{\text{HF}} | \Psi_0 \rangle|^2 \leq 1$ ,  $E_{\text{HF}}/E_0 \geq 1$  である。 $r_1^2 + r_2^2 = R^2 + r^2$ , ヤコビアン  $\partial(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)/\partial(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = -1$

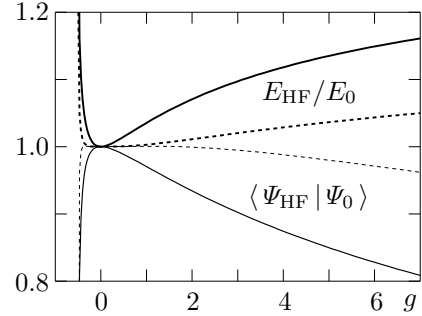
であるから

$$\begin{aligned}\langle \Psi_{\text{HF}} | \Psi_0 \rangle &= \frac{(g+1)^{3/4}(2g+1)^{3/8}}{\pi^3} \int d^3R d^3r \exp\left(-\frac{1+\sqrt{g+1}}{2}R^2 - \frac{\sqrt{2g+1}+\sqrt{g+1}}{2}r^2\right) \\ &= \frac{8(g+1)^{3/4}(2g+1)^{3/8}}{\left[\left(1+\sqrt{g+1}\right)\left(\sqrt{g+1}+\sqrt{2g+1}\right)\right]^{3/2}} = \begin{cases} 1-3g^2/32, & g \rightarrow 0 \\ \frac{8(\sqrt{2}-1)^{3/2}}{(g/2)^{3/8}}, & g \rightarrow \infty \end{cases}\end{aligned}$$

エネルギーの比は

$$\frac{E_{\text{HF}}}{E_0} = \frac{2\sqrt{g+1}}{1+\sqrt{2g+1}} = \begin{cases} 1+g^2/8, & g \rightarrow 0 \\ \sqrt{2}-1/\sqrt{g}, & g \rightarrow \infty \end{cases}$$

になる。右図に実線で  $\langle \Psi_{\text{HF}} | \Psi_0 \rangle$  と  $E_{\text{HF}}/E_0$  を示す。HF 近似は  $-1/4 \lesssim g \lesssim 1$  の場合よい近似である。 $E_{\text{HF}} \xrightarrow{g \rightarrow \infty} \sqrt{2}E_0$  であるが、 $\langle \Psi_{\text{HF}} | \Psi_0 \rangle \xrightarrow{g \rightarrow \infty} 0$  になり  $\Psi_{\text{HF}}$  は  $\Psi_0$  を全く近似しない。(8.108) より、通例、変分法は波動関数よりもエネルギーに対してよい近似になる。



HF 近似で無視した  $H' = -2g \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2$  を摂動として取り込む。1次元調和振動子の直積 (6.74) を  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$  として  $|\mathbf{n}\rangle$  で表すと、 $H_0$  の固有状態は

$$H_0 |\mathbf{n}, \mathbf{m}\rangle = E_{nm} |\mathbf{n}, \mathbf{m}\rangle, \quad E_{nm} = 2\sqrt{g+1} \sum_{i=1}^3 (n_i + m_i + 1)$$

である。 $|\Psi_{\text{HF}}\rangle = |\mathbf{0}, \mathbf{0}\rangle |S=0\rangle$  になる。 $H'$  はスピンに依存しないから、以下の議論では  $|S=0\rangle$  だけ考えればよく、 $H'$  と  $|\mathbf{0}, \mathbf{0}\rangle$  が対称であるため  $|\mathbf{n}, \mathbf{m}\rangle$  を対称化する必要はない。(8.29) より

$$W_1 = \langle \Psi_{\text{HF}} | H' | \Psi_{\text{HF}} \rangle = 0, \quad W_2 = 4g^2 \sum_{(\mathbf{n}, \mathbf{m}) \neq (\mathbf{0}, \mathbf{0})} \frac{|\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} | \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 | \mathbf{0}, \mathbf{0} \rangle|^2}{E_{00} - E_{nm}} < 0$$

$\mathbf{n} = \mathbf{m} = (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)$  のとき  $\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} | \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 | \mathbf{0}, \mathbf{0} \rangle \neq 0$  になるから  $E_{00} - E_{nm}$  を  $-4\sqrt{g+1}$  で置き換え任意の  $\mathbf{n}, \mathbf{m}$  の和にしてよい。 $|\mathbf{n}, \mathbf{m}\rangle$  の完全性を使うと

$$W_2 = -\frac{g^2}{\sqrt{g+1}} \langle \mathbf{0}, \mathbf{0} | (\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)^2 | \mathbf{0}, \mathbf{0} \rangle = -\frac{3g^2}{\sqrt{g+1}} \langle 0 | x^2 | 0 \rangle^2 = -\frac{1}{8} \left( \frac{g}{g+1} \right)^2 E_{\text{HF}} \quad (12.65)$$

になる。ただし、(4.29) より  $\langle 0 | x^2 | 0 \rangle = 1/(2\sqrt{g+1})$  である。前図に  $(E_{\text{HF}} + W_2)/E_0$  を太い破線で示す。 $E_{\text{HF}} + W_2$  は  $E_0$  を非常によく再現する。 $(E_{\text{HF}} + W_2)/E_0 \xrightarrow{g \rightarrow 0} 1 + 5g^4/128$  である。

**問題 12.6** (12.63) を反復法 (12.51) で解く。 $\varphi^{(n)}(\mathbf{r})$  から  $\varphi^{(n+1)}(\mathbf{r})$  を

$$\left(-\nabla^2 + r^2 + V^{(n)}(\mathbf{r})\right) \varphi^{(n+1)}(\mathbf{r}) = \varepsilon^{(n+1)} \varphi^{(n+1)}(\mathbf{r}), \quad V^{(n)}(\mathbf{r}) = g \int d^3r' (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 |\varphi^{(n)}(\mathbf{r}')|^2$$

で求める。 $\varphi^{(0)}(\mathbf{r})$  を  $h$  の基底状態  $e^{-r^2/2}/\pi^{3/4}$  とし  $\varphi^{(n+1)}(\mathbf{r}) = \varphi^{(n)}(\mathbf{r})$  になるまで繰り返し (12.64) を示せ。

**問題 12.7**  $\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} | \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 | \mathbf{0}, \mathbf{0} \rangle = \langle \mathbf{n} | \mathbf{r} | \mathbf{0} \rangle \cdot \langle \mathbf{m} | \mathbf{r} | \mathbf{0} \rangle$  を具体的に求めて (12.65) を導け。

問題 12.8 (8.18), (8.32), (8.34) より規格化した状態が

$$|\tilde{\Psi}_{\text{HF}}\rangle = \left(1 - \frac{H'}{4\sqrt{g+1}} + \frac{H'^2}{32(g+1)} - \frac{\langle\Psi_{\text{HF}}|H'^2|\Psi_{\text{HF}}\rangle}{16(g+1)}\right)|\Psi_{\text{HF}}\rangle \quad (12.66)$$

になることを示せ。前図に  $\langle\tilde{\Psi}_{\text{HF}}|\Psi_0\rangle$  を細い破線で示す。 $\langle\tilde{\Psi}_{\text{HF}}|\Psi_0\rangle \xrightarrow{g\rightarrow 0} 1 + O(g^4)$  になる。

## 12.7 和則

多粒子系のハミルトニアン (12.44) の固有状態を  $|n\rangle$ , 固有値を  $E_n$  とする。多粒子系の演算子  $F$  に対して

$$S \equiv \sum_n (E_n - E_0) |\langle n|F|0\rangle|^2 = \sum_n (E_n - E_0) \langle 0|F^\dagger|n\rangle \langle n|F|0\rangle$$

を考える。 $S$  を和則 (sum rule) という。 $|n\rangle$  と  $E_n$  を正確に求めることは困難であるが,  $S$  は正確に求まることがある。 $|n\rangle$  の完全性と

$$\langle n|[H, F]|0\rangle = (E_n - E_0)\langle n|F|0\rangle$$

より

$$S = \sum_n \langle 0|F^\dagger|n\rangle \langle n|[H, F]|0\rangle = \langle 0|F^\dagger[H, F]|0\rangle$$

同様にして

$$\langle 0|[F^\dagger, H]|n\rangle = (E_n - E_0)\langle 0|F^\dagger|n\rangle, \quad \therefore S = \langle 0|[F^\dagger, H]F|0\rangle$$

であるから

$$S = \frac{1}{2} \langle 0|(F^\dagger[H, F] - [H, F^\dagger]F)|0\rangle \quad (12.67)$$

$F$  がエルミート演算子ならば

$$S = \frac{1}{2} \langle 0|[F, [H, F]]|0\rangle \quad (12.68)$$

になり二重交換子の期待値で表せる。

粒子の位置だけに依存する 1 体演算子

$$F = \sum_{i=1}^N f(\mathbf{r}_i), \quad G = \sum_{i=1}^N g(\mathbf{r}_i)$$

の場合, (12.44) の  $H$  で  $F$  と非可換な部分は, 運動エネルギーだけとしてもよからう。このとき

$$[G, [H, F]] = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_i [g(\mathbf{r}_i), [\nabla_i^2, f(\mathbf{r}_i)]]$$

になる。 $[\nabla, f] = (\nabla f)$  であるが,  $[\nabla^2, f] = (\nabla^2 f)$  ではない。

$$[\nabla^2, f(\mathbf{r})] = \nabla \cdot [\nabla, f] + [\nabla, f] \cdot \nabla = \nabla \cdot (\nabla f) + (\nabla f) \cdot \nabla = (\nabla^2 f) + 2(\nabla f) \cdot \nabla$$

である。

$$[g, [\nabla^2, f]] = [g, (\nabla^2 f) + 2(\nabla f) \cdot \nabla] = -2(\nabla g) \cdot (\nabla f)$$

になるから

$$[G, [H, F]] = \frac{\hbar^2}{M} \sum_i (\nabla_i g(\mathbf{r}_i)) \cdot (\nabla_i f(\mathbf{r}_i))$$

である。したがって、 $F$  がエルミート演算子 ( $f(\mathbf{r})$  が実数) の場合

$$S = \frac{\hbar^2}{2M} \langle 0 | \sum_{i=1}^N (\nabla_i f(\mathbf{r}_i))^2 | 0 \rangle$$

になる。例えば  $f(\mathbf{r}) = z$  のとき  $(\nabla f)^2 = 1$  になるから

$$\sum_n (E_n - E_0) |\langle n | \sum_{i=1}^N z_i | 0 \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2M} \langle 0 | \sum_{i=1}^N 1 | 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2M} N \quad (12.69)$$

と正確に求まる。

$f(r)$  を実関数、 $Y_{\lambda\mu}$  を球面調和関数 (5.35) として

$$F_{\lambda\mu} = \sum_i f_{\lambda\mu}(\mathbf{r}_i), \quad f_{\lambda\mu}(\mathbf{r}) = f(r) Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$$

を考える。 $\mu \neq 0$  のとき  $Y_{\lambda\mu}$  は実数ではないから、 $S$  は二重交換子 (12.68) にはならない (時間反転不変性を仮定すれば二重交換子になる)。 $\mu$  について和をとった

$$S_\lambda = \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \sum_n (E_n - E_0) |\langle n | F_{\lambda\mu} | 0 \rangle|^2 = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \langle 0 | (F_{\lambda\mu}^\dagger [H, F_{\lambda\mu}] - [H, F_{\lambda\mu}^\dagger] F_{\lambda\mu}) | 0 \rangle$$

を求める。(17.37) より  $F_{\lambda\mu}^\dagger = (-1)^\mu F_{\lambda, -\mu}$  になるから

$$\begin{aligned} \sum_{\mu} \langle 0 | [H, F_{\lambda\mu}^\dagger] F_{\lambda\mu} | 0 \rangle &= \sum_{\mu} \langle 0 | [H, (-1)^\mu F_{\lambda, -\mu}] F_{\lambda\mu} | 0 \rangle \\ &= \sum_{\mu} \langle 0 | [H, F_{\lambda\mu}] (-1)^\mu F_{\lambda, -\mu} | 0 \rangle = \sum_{\mu} \langle 0 | [H, F_{\lambda\mu}] F_{\lambda\mu}^\dagger | 0 \rangle \end{aligned}$$

である。ただし、2 行目で  $-\mu$  を  $\mu$  と置き換えた。 $S_\lambda$  は二重交換子になり

$$\begin{aligned} S_\lambda &= \frac{1}{2} \sum_{\mu} \langle 0 | [F_{\lambda\mu}^\dagger, [H, F_{\lambda\mu}]] | 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{\mu} \langle 0 | \sum_{i=1}^N (\nabla_i f_{\lambda\mu}^*(\mathbf{r}_i)) \cdot (\nabla_i f_{\lambda\mu}(\mathbf{r}_i)) | 0 \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{\mu} \int d^3r (\nabla f_{\lambda\mu}^*(\mathbf{r})) \cdot (\nabla f_{\lambda\mu}(\mathbf{r})) \rho(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

ただし

$$\rho(\mathbf{r}) = \langle 0 | \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) | 0 \rangle$$

は  $|0\rangle$  での粒子数密度である。(6.5) より

$$\nabla^2 f_{\lambda\mu} = \left( \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r f(r) - \frac{\lambda(\lambda+1)}{r^2} f \right) Y_{\lambda\mu} = Y_{\lambda\mu} \left( \nabla^2 f - \frac{\lambda(\lambda+1)}{r^2} f \right)$$

になるから

$$\begin{aligned} 2(\nabla f_{\lambda\mu}^*) \cdot (\nabla f_{\lambda\mu}) &= \nabla^2 |f_{\lambda\mu}|^2 - f_{\lambda\mu} \nabla^2 f_{\lambda\mu}^* - f_{\lambda\mu}^* \nabla^2 f_{\lambda\mu} \\ &= \nabla^2 f^2 |Y_{\lambda\mu}|^2 - 2|Y_{\lambda\mu}|^2 \left( f \nabla^2 f - \frac{\lambda(\lambda+1)}{r^2} f^2 \right) \end{aligned}$$

(17.44) より  $\sum_{\mu} |Y_{\lambda\mu}|^2 = (2\lambda+1)/4\pi$  であり  $\nabla^2 f^2 - 2f \nabla^2 f = 2(\nabla f)^2 = 2(df/dr)^2$  であるから

$$S_\lambda = \frac{2\lambda+1}{4\pi} \frac{\hbar^2}{2M} \int d^3r \left( \left( \frac{df}{dr} \right)^2 + \frac{\lambda(\lambda+1)}{r^2} f^2 \right) \rho(\mathbf{r})$$

になる。 $\rho(\mathbf{r})$  が分かれば、和則  $S_\lambda$  は求まる。 $\lambda = 1$ ,  $f(r) = r$  のとき (12.69) を再現する。ただし、 $rY_{10} = \sqrt{3/4\pi} z$  であり  $S_1$  では  $\mu = 0, \pm 1$  の 3 成分について和をとるから  $9/4\pi$  の違いがある。

## 12.8 第二量子化 (フェルミオン)

2つの演算子  $A, B$  に対して交換関係は  $[A, B] = AB - BA$  であるが,  $\{A, B\} = AB + BA$  で反交換関係を定義する。 $\{A, B\} = 0$  のとき反可換という。

### 生成・消滅演算子

1 粒子状態  $|\alpha\rangle$  に対応して, 反交換関係

$$\{a_\alpha, a_{\alpha'}^\dagger\} = \delta_{\alpha\alpha'}, \quad \{a_\alpha, a_{\alpha'}\} = 0, \quad \{a_\alpha^\dagger, a_{\alpha'}^\dagger\} = 0 \quad (12.70)$$

を満たす演算子を考える。

$$a_\alpha|0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1$$

で定義される状態  $|0\rangle$  を粒子が 1 つも存在しない真空とし

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle_a = a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle = \prod_{i=1}^N a_{\alpha_i}^\dagger |0\rangle \quad (12.71)$$

を 1 粒子状態  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$  に粒子が存在する  $N$  粒子系の状態とする。

$\alpha_i$  と  $\alpha_{i+k}$  を占める粒子の入れ換えをする。(12.70) より  $a^\dagger$  を交換すると符号が変わるから

$$\begin{aligned} a_{\alpha_i}^\dagger (k-1 \text{ 個の } a^\dagger) a_{\alpha_{i+k}}^\dagger &= (-1)^k a_{\alpha_{i+k}}^\dagger a_{\alpha_i}^\dagger (k-1 \text{ 個の } a^\dagger) \\ &= (-1)^k (-1)^{k-1} a_{\alpha_{i+k}}^\dagger (k-1 \text{ 個の } a^\dagger) a_{\alpha_i}^\dagger \\ &= -a_{\alpha_{i+k}}^\dagger (k-1 \text{ 個の } a^\dagger) a_{\alpha_i}^\dagger \end{aligned}$$

になり, 任意の 2 粒子の入れ換えに対して符号変わる。また,  $\alpha_{i+k} = \alpha_i$  ならば

$$a_{\alpha_i}^\dagger (k-1 \text{ 個の } a^\dagger) a_{\alpha_i}^\dagger = (-1)^k (a_{\alpha_i}^\dagger)^2 (k-1 \text{ 個の } a^\dagger)$$

であるが, (12.70) より  $(a_\alpha^\dagger)^2 = 0$  になるから

$$a_{\alpha_i}^\dagger (k-1 \text{ 個の } a^\dagger) a_{\alpha_i}^\dagger = 0$$

つまり, 2 個の粒子が同じ 1 粒子状態を占めることはできず,  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$  はすべて異なる状態でなければならない (パウリの排他原理)。したがって,  $N$  粒子系の状態 (12.71) は対称化の要請 (12.4) を満たす。

反対称な  $N$  粒子系の状態 (12.71) は

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle_a = U|0\rangle, \quad U = a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger$$

と表せるから (1.30) より

$${}_a\langle \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \rangle_a = \langle 0 | U^\dagger U | 0 \rangle$$

(1.20) から  $U^\dagger = a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_2} a_{\alpha_1}$  になるから

$${}_a\langle \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \rangle_a = \langle 0 | a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_2} a_{\alpha_1} a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger | 0 \rangle$$

$a_{\alpha_1} a_{\alpha_1}^\dagger = 1 - a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_1}$  より

$$a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_2} a_{\alpha_1} a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger = a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_2} a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger - a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_2} a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_1} a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger$$

$\alpha_1$  は  $\alpha_2, \dots, \alpha_N$  とは異なるから  $a_{\alpha_1}$  と  $a_{\alpha_2}^\dagger, \dots, a_{\alpha_N}^\dagger$  は反可換である。したがって

$$\begin{aligned} a_{\alpha_1} a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle &= (-1)^{N-1} a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger a_{\alpha_1} |0\rangle = 0 \\ \therefore \langle 0 | a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_2} a_{\alpha_1} a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle &= \langle 0 | a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_2} a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle \end{aligned}$$

これを繰り返せば

$${}_a \langle \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \rangle_a = \langle 0 | a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_3} a_{\alpha_3}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle = \cdots = \langle 0 | 0 \rangle = 1$$

になり規格化されている。 $N$  個の同種フェルミオンの状態として、スレーター行列 (12.34) の代わりに (12.71) を用いてもよい。

(12.71) の状態に  $a_{\alpha_k}$ , ( $k = 1, 2, \dots, N$ ) を作用させる。(12.70) より  $k \neq i$  のとき  $\alpha_k$  と  $\alpha_i$  は異なるから  $a_{\alpha_k}$  と  $a_{\alpha_i}^\dagger$  は反可換である。したがって

$$U_1 = a_{\alpha_1}^\dagger \cdots a_{\alpha_{k-1}}^\dagger, \quad U_2 = a_{\alpha_{k+1}}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger$$

とすると

$$a_{\alpha_k} U_1 = (-1)^{k-1} U_1 a_{\alpha_k}, \quad a_{\alpha_k} U_2 = (-1)^{N-k} U_2 a_{\alpha_k}$$

になるから

$$\begin{aligned} a_{\alpha_k} | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \rangle_a &= a_{\alpha_k} U_1 a_{\alpha_k}^\dagger U_2 |0\rangle = (-1)^{k-1} U_1 a_{\alpha_k} a_{\alpha_k}^\dagger U_2 |0\rangle \\ &= (-1)^{k-1} U_1 (1 - a_{\alpha_k}^\dagger a_{\alpha_k}) U_2 |0\rangle \\ &= (-1)^{k-1} U_1 U_2 |0\rangle + (-1)^N U_1 U_2 a_{\alpha_k} |0\rangle \end{aligned}$$

$a_{\alpha_k} |0\rangle = 0$  であるから

$$\begin{aligned} a_{\alpha_k} | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \rangle_a &= (-1)^{k-1} U_1 U_2 |0\rangle \\ &= (-1)^{k-1} | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{k-1}, \alpha_{k+1}, \dots, \alpha_N \rangle_a \end{aligned} \tag{12.72}$$

になる。 $| \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{k-1}, \alpha_{k+1}, \dots, \alpha_N \rangle_a$  は状態  $\alpha_k$  に粒子が存在しない  $N-1$  粒子系の状態である。一般に  $a_{\alpha}$  は 1 粒子状態  $\alpha$  の粒子を消滅させる。 $a_{\alpha}$  を消滅演算子という。一方、 $a_{\alpha}^\dagger$  は 1 粒子状態  $\alpha$  の粒子を生成するから生成演算子という。 $\alpha \neq \alpha_k$ , ( $k = 1, 2, \dots, N$ ) ならば

$$a_{\alpha} | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \rangle_a = (-1)^N \prod_{i=1}^N a_{\alpha_i}^\dagger a_{\alpha} |0\rangle = 0 \tag{12.73}$$

状態  $\alpha$  に粒子が存在しないから、粒子を消滅させようがない。

エルミート演算子  $N_{\alpha} = a_{\alpha}^\dagger a_{\alpha}$  は

$$N_{\alpha}^2 = a_{\alpha}^\dagger a_{\alpha} a_{\alpha}^\dagger a_{\alpha} = a_{\alpha}^\dagger (1 - a_{\alpha}^\dagger a_{\alpha}) a_{\alpha} = a_{\alpha}^\dagger a_{\alpha} = N_{\alpha}$$

であるから、固有値  $n_{\alpha}$  は  $n_{\alpha}^2 = n_{\alpha}$  より  $n_{\alpha} = 0$  または  $n_{\alpha} = 1$  である。(12.72) より

$$N_{\alpha_k} | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \rangle_a = a_{\alpha_k}^\dagger (-1)^{k-1} U_1 U_2 |0\rangle = U_1 a_{\alpha_k}^\dagger U_2 |0\rangle = | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \rangle_a$$

(12.73) より  $\alpha \neq \alpha_k$ , ( $k = 1, \dots, N$ ) ならば

$$N_{\alpha} | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \rangle_a = 0$$

まとめると

$$N_\alpha |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle_a = n_\alpha |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle_a, \quad n_\alpha = \begin{cases} 1, & \alpha = \alpha_k, (k = 1, \dots, N) \\ 0, & \text{上記以外} \end{cases}$$

であり,  $n_\alpha$  は 1 粒子状態  $\alpha$  に存在する粒子数を表す。 $N_\alpha$  を個数演算子という。

$$\hat{N} = \sum_{\alpha} N_\alpha = \sum_{\alpha} a_\alpha^\dagger a_\alpha$$

とすると

$$\hat{N} |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle_a = N |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle_a$$

になり,  $\hat{N}$  の固有値は系の粒子数である。

### 演算子の表現

生成・消滅演算子を用いた演算子

$$F_a = \sum_{\alpha\alpha'} f_{\alpha\alpha'} a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}, \quad \text{ただし } f_{\alpha\alpha'} = \langle \alpha | f | \alpha' \rangle \quad (12.74)$$

を考える。(12.22) より, 1 粒子状態  $|\psi\rangle$  における 1 体演算子  $f$  の期待値は

$$\langle \psi | f | \psi \rangle = \sum_{\alpha\alpha'} \langle \alpha | f | \alpha' \rangle c_\alpha^* c_{\alpha'}$$

であるが, 係数  $c^*, c$  をそれぞれ生成演算子, 消滅演算子で置き換えると  $F_a$  になる。 $F_a$  が一体演算子 (12.35)

$$F = \sum_{i=1}^N f_i$$

と同等であることを 2 粒子系の場合で示す。2 粒子系の反対称な状態を

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sqrt{2}A |\alpha\rangle_1 |\beta\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\alpha\rangle_1 |\beta\rangle_2 - |\beta\rangle_1 |\alpha\rangle_2 \right) \\ |\Psi'\rangle &= \sqrt{2}A |\alpha'\rangle_1 |\beta'\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\alpha'\rangle_1 |\beta'\rangle_2 - |\beta'\rangle_1 |\alpha'\rangle_2 \right) \end{aligned}$$

とする。 $F$  は反対称演算子  $A$  と可換であるから

$$\begin{aligned} \langle \Psi | F | \Psi' \rangle &= {}_1\langle \alpha | {}_2\langle \beta | F A | \alpha' \rangle_1 | \beta' \rangle_2 \\ &= {}_1\langle \alpha | {}_2\langle \beta | \left( f_1 + f_2 \right) \left( |\alpha'\rangle_1 |\beta'\rangle_2 - |\beta'\rangle_1 |\alpha'\rangle_2 \right) \end{aligned}$$

になる。 $f_1$  は粒子 1 の状態だけ,  $f_2$  は粒子 2 の状態だけに作用するから, 例えば

$${}_1\langle \alpha | {}_2\langle \beta | f_1 | \alpha' \rangle_1 | \beta' \rangle_2 = \langle \alpha | f | \alpha' \rangle \langle \beta | \beta' \rangle = f_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'}$$

他の項も同様にすると

$$\langle \Psi | F | \Psi' \rangle = f_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} + f_{\beta\beta'} \delta_{\alpha\alpha'} - f_{\alpha\beta'} \delta_{\beta\alpha'} - f_{\beta\alpha'} \delta_{\alpha\beta'} \quad (12.75)$$

である。次に, 生成・消滅演算子を用いて求める。2 粒子系の状態は

$$|\alpha, \beta\rangle_a = a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger |0\rangle, \quad |\alpha', \beta'\rangle_a = a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}^\dagger |0\rangle$$

であるから

$${}_a\langle\alpha, \beta|F_a|\alpha', \beta'\rangle_a = \sum_{\mu\nu} f_{\mu\nu} {}_a\langle\alpha, \beta|a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}^\dagger|0\rangle$$

反交換関係 (12.70) を使うと

$$a_\nu a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}^\dagger = (\delta_{\nu\alpha'} - a_{\alpha'}^\dagger a_\nu) a_{\beta'}^\dagger = \delta_{\nu\alpha'} a_{\beta'}^\dagger - \delta_{\nu\beta'} a_{\alpha'}^\dagger + a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}^\dagger a_\nu \quad (12.76)$$

になるから

$${}_a\langle\alpha, \beta|F_a|\alpha', \beta'\rangle_a = \sum_{\mu} \left( f_{\mu\alpha'} {}_a\langle\alpha, \beta|a_\mu^\dagger a_{\beta'}^\dagger|0\rangle - f_{\mu\beta'} {}_a\langle\alpha, \beta|a_\mu^\dagger a_{\alpha'}^\dagger|0\rangle \right)$$

ところでエルミート共役の定義から

$$\begin{aligned} {}_a\langle\alpha, \beta|a_\mu^\dagger a_{\beta'}^\dagger|0\rangle &= \langle 0|(a_\mu^\dagger a_{\beta'}^\dagger)^\dagger|\alpha, \beta\rangle_a^* = \langle 0|a_{\beta'} a_\mu a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}^\dagger|0\rangle^* \\ &= \langle 0|a_{\beta'} (\delta_{\mu\alpha} a_{\beta'}^\dagger - \delta_{\mu\beta} a_{\alpha'}^\dagger)|0\rangle^* \\ &= \delta_{\mu\alpha} \langle 0|a_{\beta'} a_{\beta'}^\dagger|0\rangle - \delta_{\mu\beta} \langle 0|a_{\alpha'} a_{\beta'}^\dagger|0\rangle \end{aligned}$$

$\langle 0|a_{\beta'} a_{\beta'}^\dagger|0\rangle = \langle 0|(\delta_{\beta\beta'} - a_{\beta'}^\dagger a_{\beta'})|0\rangle = \delta_{\beta\beta'}$  であるから

$${}_a\langle\alpha, \beta|a_\mu^\dagger a_{\beta'}^\dagger|0\rangle = \delta_{\mu\alpha} \delta_{\beta\beta'} - \delta_{\mu\beta} \delta_{\alpha\beta'} \quad (12.77)$$

になる。したがって

$$\begin{aligned} {}_a\langle\alpha, \beta|F_a|\alpha', \beta'\rangle_a &= \sum_{\mu} \left( f_{\mu\alpha'} (\delta_{\mu\alpha} \delta_{\beta\beta'} - \delta_{\mu\beta} \delta_{\alpha\beta'}) - f_{\mu\beta'} (\delta_{\mu\alpha} \delta_{\beta\alpha'} - \delta_{\mu\beta} \delta_{\alpha\alpha'}) \right) \\ &= f_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} + f_{\beta\beta'} \delta_{\alpha\alpha'} - f_{\alpha\beta'} \delta_{\beta\alpha'} - f_{\beta\alpha'} \delta_{\alpha\beta'} \end{aligned}$$

になり

$$\langle\Psi|F|\Psi'\rangle = {}_a\langle\alpha, \beta|F_a|\alpha', \beta'\rangle_a$$

である。これは  $N$  粒子系の場合にも成り立つ。

2 体の演算子 (12.37) に対しては

$$V_a = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} v_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'}, \quad v_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} = \langle\alpha, \beta|v_{12}|\alpha', \beta'\rangle \quad (12.78)$$

になる。ただし  $|\alpha, \beta\rangle = |\alpha\rangle_1 |\beta\rangle_2$  である。生成・消滅演算子の順序に注意せよ。 $v_{21} = v_{12}$  であるから

$$v_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} = v_{\beta\alpha,\beta'\alpha'} \quad (12.79)$$

である。2 粒子系の場合  $V = v_{12}$  より

$$\begin{aligned} \langle\Psi|V|\Psi'\rangle &= 2 {}_1\langle\alpha| {}_2\langle\beta|v_{12}A|\alpha'\rangle_1 |\beta'\rangle_2 = {}_1\langle\alpha| {}_2\langle\beta|v_{12}(|\alpha'\rangle_1 |\beta'\rangle_2 - |\beta'\rangle_1 |\alpha'\rangle_2) \\ &= v_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} - v_{\alpha\beta,\beta'\alpha'} \end{aligned}$$

になる。一方

$${}_a\langle\alpha, \beta|V_a|\alpha', \beta'\rangle_a = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} v_{\mu\nu,\mu'\nu'} {}_a\langle\alpha, \beta|a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger a_{\nu'} a_{\mu'} a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}^\dagger|0\rangle$$



(12.76) より

$$\begin{aligned} {}_a\langle \alpha, \beta | V_a | \alpha', \beta' \rangle_a &= \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\nu'} \left( v_{\mu\nu, \alpha'\nu'} {}_a\langle \alpha, \beta | a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger a_{\nu'} | 0 \rangle - v_{\mu\nu, \beta'\nu'} {}_a\langle \alpha, \beta | a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger a_{\alpha'} | 0 \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \left( v_{\mu\nu, \alpha'\beta'} {}_a\langle \alpha, \beta | a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger | 0 \rangle - v_{\mu\nu, \beta'\alpha'} {}_a\langle \alpha, \beta | a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger | 0 \rangle \right) \end{aligned}$$

(12.77), (12.79) より

$${}_a\langle \alpha, \beta | V_a | \alpha', \beta' \rangle_a = \frac{1}{2} \left( v_{\alpha\beta, \alpha'\beta'} - v_{\beta\alpha, \alpha'\beta'} - v_{\alpha\beta, \beta'\alpha'} + v_{\beta\alpha, \beta'\alpha'} \right) = v_{\alpha\beta, \alpha'\beta'} - v_{\alpha\beta, \beta'\alpha'}$$

したがって  $\langle \Psi | V | \Psi' \rangle = {}_a\langle \alpha, \beta | V_a | \alpha', \beta' \rangle_a$  である。

フェルミオンの同種  $N$  粒子系を扱うとき、次の2つの形式がある。

1. スレーター行列式で状態を表し、1体演算子、2体演算子として

$$F = \sum_{i=1}^N f_i, \quad V = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij}$$

を使う。

2. 状態と演算子を生成・消滅演算子を用いて状態を

$$| \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \rangle_a = a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger | 0 \rangle$$

とし、1体演算子、2体演算子を

$$F = \sum_{\alpha\alpha'} f_{\alpha\alpha'} a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}, \quad V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} v_{\alpha\beta, \alpha'\beta'} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'}$$

とする。この場合、粒子1, 2などの区別はそもそもない。

### 量子化された場

(12.23) において係数  $c_\alpha$  を消滅演算子  $a_\alpha$  で置き換えた演算子

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} u_{\alpha, \sigma}(\mathbf{r}) a_\alpha$$

を考える。 $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$  が演算子であることを明確にするため  $\hat{\phantom{x}}$  を付けた。 $\hat{\psi}_\sigma$  と  $\hat{\psi}_\sigma^\dagger$  は反交換関係

$$\begin{aligned} \{ \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') \} &= \sum_{\alpha\alpha'} u_{\alpha, \sigma}(\mathbf{r}) u_{\alpha', \sigma'}^*(\mathbf{r}') \{ a_\alpha, a_{\alpha'}^\dagger \} \\ &= \sum_{\alpha} u_{\alpha, \sigma}(\mathbf{r}) u_{\alpha, \sigma'}^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'} \end{aligned} \quad (12.80)$$

$$\{ \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') \} = 0, \quad \{ \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \} = 0 \quad (12.81)$$

を満たす。

$a_\alpha$  を  $\hat{\psi}$  で表すと

$$\sum_{\sigma} \int d^3r u_{\alpha, \sigma}^*(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha'} a_{\alpha'} \sum_{\sigma} \int d^3r u_{\alpha, \sigma}^*(\mathbf{r}) u_{\alpha', \sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha'} a_{\alpha'} \delta_{\alpha\alpha'} = a_\alpha$$

である。これを多粒子系の 1 体演算子  $F_a$  に代入すると

$$F_a = \sum_{\alpha\alpha'} f_{\alpha\alpha'} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha'} = \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r d^3r' \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') S_{\sigma\sigma'}, \quad S_{\sigma\sigma'} = \sum_{\alpha\alpha'} u_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}) f_{\alpha\alpha'} u_{\alpha',\sigma'}^*(\mathbf{r}')$$

ところで

$$\begin{aligned} S_{\sigma\sigma'} &= \sum_{\alpha\alpha'} u_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}) \langle \alpha | f | \alpha' \rangle u_{\alpha',\sigma'}^*(\mathbf{r}') \\ &= \sum_{\sigma_1\sigma_2} \int d^3x \sum_{\alpha} u_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}) u_{\alpha,\sigma_1}^*(\mathbf{x}) \langle \sigma_1 | f(\mathbf{x}) | \sigma_2 \rangle \sum_{\alpha'} u_{\alpha',\sigma_2}(\mathbf{x}) u_{\alpha',\sigma'}^*(\mathbf{r}') \end{aligned}$$

$f = f(\mathbf{r})$  は空間的には局所演算子とし一点  $\mathbf{r}$  だけに依存するとする。微分演算子を含んでもよい。例えば  $f(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2$  である。このような場合, 上の  $f(\mathbf{x})$  に含まれる微分は  $u_{\alpha',\sigma_2}(\mathbf{x})$  にだけ作用する。 $f(\mathbf{r})$  はスピンの依存してもよい。(12.24) より

$$S_{\sigma\sigma'} = \sum_{\sigma_1\sigma_2} \int d^3x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) \delta_{\sigma\sigma_1} \langle \sigma_1 | f(\mathbf{x}) | \sigma_2 \rangle \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma'\sigma_2} = \langle \sigma | f(\mathbf{r}) | \sigma' \rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

になるから

$$F_a = \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \langle \sigma | f(\mathbf{r}) | \sigma' \rangle \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}) = \int d^3r \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (12.82)$$

ただし,  $f(\mathbf{r})$  は  $\langle \sigma | f(\mathbf{r}) | \sigma' \rangle$  を行列要素とする  $2 \times 2$  行列である。結局, 1 粒子状態  $|\psi\rangle$  における  $f$  の期待値

$$\langle \psi | f | \psi \rangle = \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r \psi_{\sigma}^*(\mathbf{r}) \langle \sigma | f(\mathbf{r}) | \sigma' \rangle \psi_{\sigma'}(\mathbf{r})$$

において, 波動関数  $\psi$  を演算子  $\hat{\psi}$  で置き換えると  $F_a$  になる。2 体演算子  $V_a$  の場合, 同様にすれば

$$V_a = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1\sigma_2\sigma'_1\sigma'_2} \int d^3r_1 d^3r_2 \hat{\psi}_{\sigma_1}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}_{\sigma_2}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) \langle \sigma_1, \sigma_2 | v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \sigma'_1, \sigma'_2 \rangle \psi_{\sigma'_2}(\mathbf{r}_2) \psi_{\sigma'_1}(\mathbf{r}_1) \quad (12.83)$$

である。

演算子  $\hat{\psi}(\mathbf{r})$  は普通の波動関数の展開係数  $c_{\alpha}$  を消滅演算子  $a_{\alpha}$  に置き換えたものであり, 量子力学の波動関数をいわば再度 “量子化” したことになる。このため, 生成・消滅演算子を用いた多体系の扱いを**第二量子化**という。あるいは, 波動関数  $\psi(\mathbf{r})$  を古典場とし, これを量子化した場  $\hat{\psi}(\mathbf{r})$  に置き換えると見なせるから, **場の量子化**と言ってもよい (357 ページ参照)。1 粒子状態

$$\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}_0) |0\rangle = \sum_{\alpha} u_{\alpha,\sigma}^*(\mathbf{r}_0) a_{\alpha}^{\dagger} |0\rangle$$

に対応する波動関数  $\varphi_{\sigma}(\mathbf{r})$  を求める。波動関数の変数  $\mathbf{r}$  と区別するため  $\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})$  の  $\mathbf{r}$  を  $\mathbf{r}_0$  とする。 $a_{\alpha}^{\dagger} |0\rangle$  に対応する波動関数  $u_{\alpha}(\mathbf{r})$  は (12.19) あるいは (12.20) であるから

$$\varphi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} u_{\alpha,\sigma}^*(\mathbf{r}_0) \sum_{\sigma'} u_{\alpha,\sigma'}(\mathbf{r}) | \sigma' \rangle = \sum_{\sigma'} \sum_{\alpha} u_{\alpha,\sigma}^*(\mathbf{r}_0) u_{\alpha,\sigma'}(\mathbf{r}) | \sigma' \rangle$$

(12.24) より

$$\varphi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta_{\sigma\sigma'} | \sigma' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) | \sigma \rangle$$

になる。 $\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}_0)$  は点  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$  に粒子を生成する場である。

**問題 12.9** (12.82) で  $f = s_z$  とした演算子を  $S_z$  とする。  $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r})|0\rangle$  は  $S_z$  の固有状態で固有値は  $\sigma$  になることを示せ。したがって、  $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r})|0\rangle$  の波動関数のスピン部分は  $|\sigma\rangle$  になる。

### ハートリー・フォック近似

第二量子化の形式で多体系を扱う場合、**ウィックの定理**は重要である。ウィックの定理は割愛するが(講義ノート 多体問題または相対論的量子力学 参照), その内容に沿ってハートリー・フォック近似を行う。ハミルトニアン (12.44) を  $a^\dagger, a$  で表すと

$$H = \sum_{\alpha\beta} h_{\alpha\beta} a_\alpha^\dagger a_\beta + V, \quad V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} v_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'}$$

である。2体の相互作用を1体ポテンシャルで近似する。そこで、  $a^\dagger a^\dagger a a$  において  $a^\dagger a$  の1組を基底状態  $|\Psi_0\rangle$  での期待値  $\langle \dots \rangle$  で置き換え、  $a^\dagger a^\dagger a a$  を1体演算子  $a^\dagger a$  にする。基底状態期待値に置き換える  $a^\dagger a$  を  $\overline{a^\dagger \dots a}$  で表すと

$$\left( a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} \right)_{\text{one}} \equiv \overline{a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'}} + \overline{a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'}} a_{\alpha'} + a_\alpha^\dagger \overline{a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'}} + a_\alpha^\dagger \overline{a_\beta^\dagger a_{\beta'}} a_{\alpha'}$$

$a^\dagger, a$  の反交換性を考慮して、奇数回入れ換えるとき符号を変える。つまり

$$\begin{aligned} \left( a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} \right)_{\text{one}} &= - \overline{a_\alpha^\dagger a_{\beta'}} a_{\beta'}^\dagger a_{\alpha'} + \overline{a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}} a_{\beta'}^\dagger a_{\beta'} + \overline{a_\beta^\dagger a_{\beta'}} a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} - \overline{a_\beta^\dagger a_{\alpha'}} a_\alpha^\dagger a_{\beta'} \\ &= \langle a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} \rangle a_{\beta'}^\dagger a_{\beta'} + \langle a_{\beta'}^\dagger a_{\beta'} \rangle a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} - \langle a_\alpha^\dagger a_{\beta'} \rangle a_{\beta'}^\dagger a_{\alpha'} - \langle a_{\beta'}^\dagger a_{\alpha'} \rangle a_\alpha^\dagger a_{\beta'} \end{aligned}$$

である。  $v_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} = v_{\beta\alpha,\beta'\alpha'}$  であるから

$$\begin{aligned} V_{\text{one}} &\equiv \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} v_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} \left( a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} \right)_{\text{one}} = \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} v_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} \left( \langle a_{\beta'}^\dagger a_{\beta'} \rangle a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} - \langle a_{\beta'}^\dagger a_{\alpha'} \rangle a_\alpha^\dagger a_{\beta'} \right) \\ &= \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \left( v_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} - v_{\alpha\beta,\beta'\alpha'} \right) \langle a_{\beta'}^\dagger a_{\beta'} \rangle a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} \end{aligned}$$

になる。基底状態  $|\Psi_0\rangle$  をスレーター行列式とする。簡単のため占有されている1粒子状態を  $|i\rangle$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$  で表すと

$$|\Psi_0\rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger \dots a_N^\dagger |0\rangle, \quad \begin{aligned} \beta' > N \text{ のとき } & a_{\beta'} |\Psi_0\rangle = 0, \quad a_{\beta'}^\dagger |\Psi_0\rangle \neq 0 \\ \beta' \leq N \text{ のとき } & a_{\beta'} |\Psi_0\rangle \neq 0, \quad a_{\beta'}^\dagger |\Psi_0\rangle = 0 \end{aligned}$$

である。これから  $\beta' > N$  のとき  $\langle a_{\beta'}^\dagger a_{\beta'} \rangle = 0$ ,  $\beta' \leq N$  のとき

$$\langle a_{\beta'}^\dagger a_{\beta'} \rangle = \langle \delta_{\beta\beta'} - a_{\beta'} a_{\beta'}^\dagger \rangle = \delta_{\beta\beta'} - \langle a_{\beta'} a_{\beta'}^\dagger \rangle^* = \delta_{\beta\beta'}$$

したがって

$$V_{\text{one}} = \sum_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^N \left( v_{\alpha i, \beta i} - v_{\alpha i, i \beta} \right) a_\alpha^\dagger a_\beta = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | V_{\text{HF}} | \beta \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta$$

ここで  $V_{\text{HF}}$  は (12.49) で定義した HF ポテンシャルである。  $H$  は

$$H = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | h_{\text{HF}} | \beta \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta + V - V_{\text{one}} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^\dagger a_{\alpha} + V - V_{\text{one}}, \quad h_{\text{HF}} = h + V_{\text{HF}}$$

になる。ただし、1粒子状態として HF 方程式 (12.48) の解を用いた。HF 近似は  $V - V_{\text{one}}$  を無視する近似である。

## 平面波による表現

1 粒子状態  $|\alpha\rangle$  として平面波 (12.40) を用いる。反交換関係は

$$\{a_{\mathbf{k}\sigma}, a_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \{a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, a_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\} = \{a_{\mathbf{k}\sigma}, a_{\mathbf{k}'\sigma'}\} = 0$$

である。

ポテンシャル  $V_0(\mathbf{r})$  と 2 体の相互作用  $v_{12}$  が粒子に作用する系を考える。 $V_0(\mathbf{r})$  と  $v_{12}$  はスピンに依存しないとする。 $h_0 = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_0(\mathbf{r})$  の行列要素は

$$\langle \mathbf{k}\sigma | h_0 | \mathbf{k}'\sigma' \rangle = \int d^3r u_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_0(\mathbf{r}) \right) u_{\mathbf{k}'\sigma'}(\mathbf{r}) = \varepsilon_k \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{L^3} U_0(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$$

ただし

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}, \quad U_0(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V_0(\mathbf{r})$$

になるから

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \langle \mathbf{k}\sigma | h_0 | \mathbf{k}'\sigma' \rangle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma'} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_k a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma} U_0(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma}$$

である。 $v_{12}$  が相対位置  $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  だけに依存する  $v_{12} = v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  の場合

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1\sigma_1, \mathbf{k}_2\sigma_2 | v_{12} | \mathbf{k}'_1\sigma'_1, \mathbf{k}'_2\sigma'_2 \rangle &= \int d^3r_1 d^3r_2 u_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) u_{\mathbf{k}_2\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) u_{\mathbf{k}'_1\sigma'_1}(\mathbf{r}_1) u_{\mathbf{k}'_2\sigma'_2}(\mathbf{r}_2) \\ &= \frac{\delta_{\sigma_1\sigma'_1} \delta_{\sigma_2\sigma'_2}}{(L^3)^2} \int d^3r d^3r_2 e^{i\mathbf{r}_2\cdot(\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)} e^{i\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}'_1-\mathbf{k}_1)} v(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

ただし  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}$  とした。積分領域は、例えば  $|x_2| \leq L/2$ ,  $|x_1| = |x_2 + x| \leq L/2$  であるが、 $L \rightarrow \infty$  では  $\mathbf{r}_2$  と  $\mathbf{r}$  の積分領域は両者ともに全空間になり独立に積分してよい。これから

$$\langle \mathbf{k}_1\sigma_1, \mathbf{k}_2\sigma_2 | v_{12} | \mathbf{k}'_1\sigma'_1, \mathbf{k}'_2\sigma'_2 \rangle = \frac{\delta_{\sigma_1\sigma'_1} \delta_{\sigma_2\sigma'_2}}{L^3} \delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2, \mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2} \mathcal{V}(\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_1), \quad \mathcal{V}(\mathbf{q}) = (12.56)$$

$v_{12}$  が相対位置だけに依存する場合  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2$  になり運動量の和は保存する。

$$\langle \mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'_1, \mathbf{k}'+\mathbf{q}'\sigma'_2 | v_{12} | \mathbf{k}\sigma_1, \mathbf{k}'\sigma_2 \rangle = \frac{1}{L^3} \mathcal{V}(\mathbf{q}) \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'} \delta_{\sigma_1\sigma'_1} \delta_{\sigma_2\sigma'_2}$$

とも書けるから (12.78) は

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \langle \mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma, \mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma' | v_{12} | \mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma' \rangle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma'} a_{\mathbf{k}\sigma} \\ &= \frac{1}{2L^3} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{V}(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma'} a_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned} \quad (12.84)$$

になる。

**問題 12.10**  $v_{12}$  がクーロン相互作用の場合, (11.34) で  $\mu = 0$  とすると  $\mathcal{V}(\mathbf{q}) = 4\pi g/q^2$ ,  $g = \alpha\hbar c$  になるから, (12.84) において  $\mathbf{q} = 0$  の寄与  $\mathcal{V}(0)$  は発散する。プラズマ中の電子系の場合 (338 ページ), この発散は除去できる。

1. 電子には電子間の  $v_{12}$  だけでなく、一様な密度  $\rho_+(\mathbf{r}) = N/L^3$  の正電荷による引力のポテンシャル (12.58) も作用する。また、正電荷のクーロン・エネルギー  $V_C$  も考慮する。

$$U_0(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V_0(\mathbf{r}) = -N\delta_{\mathbf{q},0}\mathcal{V}(0), \quad V_C = \frac{g}{2} \int d^3r d^3r' \frac{\rho_+(\mathbf{r})\rho_+(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \frac{\mathcal{V}(0)}{2L^3} N^2$$

を示せ。

2. 全ハミルトニアン  $H = H_0 + V + V_C$  が

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2L^3} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \mathcal{V}(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma'} a_{\mathbf{k}\sigma} + V_\infty$$

ただし

$$V_\infty = v_0 \left( (\hat{N} - N)^2 - \hat{N} \right), \quad v_0 = \frac{\mathcal{V}(0)}{2L^3}, \quad \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}$$

になることを示せ。

以上から

$$\sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + V_\infty = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - v_0) a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + v_0 (\hat{N} - N)^2$$

である。 $N, L \rightarrow \infty$  (ただし  $N/L^3 = \text{有限}$ ) の後で  $\mu \rightarrow 0$  とすれば  $v_0 \rightarrow 0$  になり、右辺第1項の  $v_0$  は無視できる。一方、 $N \rightarrow \infty$  であるから  $v_0 \rightarrow 0$  であっても第2項は不定である。ところで、 $N$  粒子系の任意の状態  $|\Psi\rangle$  に対して  $\hat{N}|\Psi\rangle = N|\Psi\rangle$  であり  $\hat{N} - N = 0$  としてよい。したがって、第2項も0になり  $H$  から発散項  $V_\infty$  は消える。

$\mathbf{k}$  が連続の場合

(10.67) より  $\mathbf{k}$  の和を積分に置き換えると

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{L^3}{(2\pi)^3} \sum_{\sigma} \int d^3k \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{L^3}{(2\pi)^6} \sum_{\sigma} \int d^3k d^3k' U_0(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma} \\ &= \sum_{\sigma} \int d^3k \varepsilon_{\mathbf{k}} \tilde{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\sigma} \int d^3k d^3k' U_0(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \tilde{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}'\sigma} \end{aligned} \quad (12.85)$$

ただし

$$\tilde{a}_{\mathbf{k}\sigma} \equiv \frac{L^{3/2}}{(2\pi)^{3/2}} a_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \{\tilde{a}_{\mathbf{k}\sigma}, \tilde{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\} = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'} \quad (12.86)$$

ここで (10.68) を用いた。(12.84) は

$$V = \frac{1}{2(2\pi)^3} \int d^3q \mathcal{V}(\mathbf{q}) \int d^3k d^3k' \sum_{\sigma\sigma'} \tilde{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}'\sigma'} \tilde{a}_{\mathbf{k}\sigma}$$

になる。場は

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) a_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \tilde{a}_{\mathbf{k}\sigma} \quad (12.87)$$

と表せる。

**問題 12.11** (12.87) をフーリエ逆変換して  $\tilde{a}_{\mathbf{k}\sigma}$  を  $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$  で表し反交換関係 (12.86) を示せ。

## 12.9 第二量子化 (ボソン)

反交換関係ではなく交換関係

$$[a_\alpha, a_{\alpha'}^\dagger] = \delta_{\alpha\alpha'}, \quad [a_\alpha, a_{\alpha'}] = 0, \quad [a_\alpha^\dagger, a_{\alpha'}^\dagger] = 0 \quad (12.88)$$

を満たす演算子を考える。これは調和振動子の生成・消滅演算子と同じ代数である。フェルミオンと同様に

$$a_\alpha |0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1$$

で真空を定義し

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle_a = a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle = \prod_{i=1}^N a_{\alpha_i}^\dagger |0\rangle \quad (12.89)$$

を1粒子状態  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$  に粒子が存在する  $N$  粒子系の状態とする。 $a_\alpha^\dagger$  と  $a_{\alpha'}^\dagger$  は可換であるから (12.89) は2粒子の入れ換えに対して不変であり, 対称化の要請 (12.4) を満たす。フェルミオンと異なり  $\alpha_i$  は同じ状態があってもよい。 $\alpha_1$  に  $n_1$  個,  $\alpha_2$  に  $n_2$  個,  $\dots$ ,  $\alpha_m$  に  $n_m$  個ある状態を

$$|\alpha_1^{n_1}, \alpha_2^{n_2}, \dots, \alpha_m^{n_m}\rangle_a = (a_{\alpha_1}^\dagger)^{n_1} (a_{\alpha_2}^\dagger)^{n_2} \cdots (a_{\alpha_m}^\dagger)^{n_m} |0\rangle, \quad \text{ただし} \quad \sum_{k=1}^m n_k = N \quad (12.90)$$

で表す。この場合,  $\alpha_1, \dots, \alpha_m$  は互いに異なる状態である。調和振動子で導いた (4.20) と同様に

$$a_\alpha^n (a_\alpha^\dagger)^n |0\rangle = n! |0\rangle$$

が成り立つから

$$\begin{aligned} {}_a\langle \alpha_1^{n_1}, \alpha_2^{n_2}, \dots, \alpha_m^{n_m} | \alpha_1^{n_1}, \alpha_2^{n_2}, \dots, \alpha_m^{n_m} \rangle_a &= \langle 0 | a_{\alpha_1}^{n_1} (a_{\alpha_1}^\dagger)^{n_1} \cdots a_{\alpha_m}^{n_m} (a_{\alpha_m}^\dagger)^{n_m} |0\rangle \\ &= n_1! n_2! \cdots n_m! \end{aligned}$$

したがって, 規格化した状態は

$$|\alpha_1^{n_1}, \alpha_2^{n_2}, \dots, \alpha_m^{n_m}\rangle_a = \prod_{k=1}^m \frac{1}{\sqrt{n_k!}} (a_{\alpha_k}^\dagger)^{n_k} |0\rangle$$

になる。

規格化した対称な2粒子系の状態は

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2(1+\delta_{\alpha\beta})}} (|\alpha\rangle_1 |\beta\rangle_2 + |\beta\rangle_1 |\alpha\rangle_2) = \sqrt{\frac{2}{1+\delta_{\alpha\beta}}} S |\alpha\rangle_1 |\beta\rangle_2 \\ |\Psi'\rangle &= \sqrt{\frac{2}{1+\delta_{\alpha'\beta'}}} S |\alpha'\rangle_1 |\beta'\rangle_2 \end{aligned}$$

ただし,  $S = (1 + P_{12})/2$  は (12.29) で定義した状態を対称にする置換演算子である。1体演算子に対して

$$\begin{aligned} \langle \Psi | F | \Psi' \rangle &= \frac{2}{\sqrt{(1+\delta_{\alpha\beta})(1+\delta_{\alpha'\beta'})}} {}_1\langle \alpha | {}_2\langle \beta | (f_1 + f_2) S |\alpha'\rangle_1 |\beta'\rangle_2 \\ &= \frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{\alpha\beta})(1+\delta_{\alpha'\beta'})}} (f_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} + f_{\alpha\beta'} \delta_{\beta\alpha'} + f_{\beta\beta'} \delta_{\alpha\alpha'} + f_{\beta\alpha'} \delta_{\alpha\beta'}) \end{aligned}$$

になる。2粒子系の状態は生成演算子で表すと

$$|\alpha, \beta\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{1+\delta_{\alpha\beta}}} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger |0\rangle, \quad |\alpha', \beta'\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{1+\delta_{\alpha'\beta'}}} a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}^\dagger |0\rangle$$

である。フェルミオンと同様に

$$F_a = \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta} a_\alpha^\dagger a_\beta$$

とする。

$$a_\nu a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}^\dagger |0\rangle = (\delta_{\nu\alpha'} a_{\beta'}^\dagger + \delta_{\nu\beta'} a_{\alpha'}^\dagger + a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}^\dagger a_\nu) |0\rangle = (\delta_{\nu\alpha'} a_{\beta'}^\dagger + \delta_{\nu\beta'} a_{\alpha'}^\dagger) |0\rangle \quad (12.91)$$

であるから

$$\begin{aligned} {}_a\langle\alpha, \beta|F_a|\alpha', \beta'\rangle_a &= \frac{1}{\sqrt{1+\delta_{\alpha'\beta'}}} \sum_{\mu\nu} f_{\mu\nu} {}_a\langle\alpha, \beta|a_\mu^\dagger a_\nu a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}^\dagger|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{1+\delta_{\alpha'\beta'}}} \sum_{\mu} \left( f_{\mu\alpha'} {}_a\langle\alpha, \beta|a_\mu^\dagger a_{\beta'}^\dagger|0\rangle + f_{\mu\beta'} {}_a\langle\alpha, \beta|a_\mu^\dagger a_{\alpha'}^\dagger|0\rangle \right) \end{aligned}$$

ところで

$${}_a\langle\alpha, \beta|a_\mu^\dagger a_{\beta'}^\dagger|0\rangle^* = \langle 0|a_{\beta'} a_\mu|\alpha, \beta\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{1+\delta_{\alpha\beta}}} \langle 0|a_{\beta'} a_\mu a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger|0\rangle$$

に (12.91) を適用すると

$$\begin{aligned} {}_a\langle\alpha, \beta|a_\mu^\dagger a_{\beta'}^\dagger|0\rangle^* &= \frac{1}{\sqrt{1+\delta_{\alpha\beta}}} \left( \delta_{\mu\alpha} \langle 0|a_{\beta'} a_\beta^\dagger|0\rangle + \delta_{\mu\beta} \langle 0|a_{\beta'} a_\alpha^\dagger|0\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1+\delta_{\alpha\beta}}} \left( \delta_{\mu\alpha} \delta_{\beta\beta'} + \delta_{\mu\beta} \delta_{\alpha\beta'} \right) \end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned} {}_a\langle\alpha, \beta|F_a|\alpha', \beta'\rangle_a &= \frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{\alpha\beta})(1+\delta_{\alpha'\beta'})}} \left( f_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} + f_{\beta\alpha'} \delta_{\alpha\beta'} + f_{\alpha\beta'} \delta_{\beta\alpha'} + f_{\beta\beta'} \delta_{\alpha\alpha'} \right) \\ &= \langle\Psi|F|\Psi'\rangle \end{aligned}$$

である。2 体演算子も、生成・消滅演算子で表すと、フェルミオンと同じ表現 (12.78) になる。

ボソンの場

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} u_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}) a_\alpha$$

は交換関係

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')] &= \sum_{\alpha\alpha'} u_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}) u_{\alpha',\sigma'}^*(\mathbf{r}') [a_\alpha, a_{\alpha'}^\dagger] \\ &= \sum_{\alpha} u_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}) u_{\alpha,\sigma'}^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'} \end{aligned} \quad (12.92)$$

$$[\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0, \quad [\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}')] = 0 \quad (12.93)$$

を満たす。

## 13 場の量子化

ある物理量が空間的に分布するとき、その物理量の場を考えることができる。一般に、場は空間の各点  $\mathbf{r}$  で時間的にも変化し、 $\mathbf{r}$  と時間  $t$  の関数である。これまでは古典力学的粒子の量子力学を扱ったが、古典力学的な場も量子力学の対象である。量子化した場は粒子的性質を示す。古典的電磁場を量子化すると、光子の量子系を扱う理論形式になり、光子の生成・消滅を含む過程を扱える。また、1 粒子の波動関数  $\psi(\mathbf{r}, t)$  を古典場と見なした量子化は、348 ページの**第二量子化**と同等である。

### 13.1 正準量子化

最小作用の原理により運動方程式を与えるラグランジアンを  $L(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n)$  とする。 $n$  は系の自由度である。一般化座標  $q_i(t)$  に対する正準共役な運動量は  $\pi_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$  であるが、(10.31) と同様に、同時刻において交換関係

$$[q_i(t), \pi_j(t)] = i\hbar \delta_{ij}, \quad [q_i(t), q_j(t)] = [\pi_i(t), \pi_j(t)] = 0 \quad (13.1)$$

を満たす演算子  $q_i, \pi_i$  で置き換える。これを**正準量子化**という。 $q_i, \pi_i$  はハイゼンベルク描像での演算子である。

実関数の古典場  $\phi(\mathbf{r}, t)$  を考える。複素数及び複数の場に拡張することは容易である。ここで、座標  $\mathbf{r}$  は 3 次元空間の位置を表すパラメータであり、時刻  $t$  における粒子の座標といった一般座標  $q_i(t)$  ではない。 $q_i(t)$  に対応する物理量は各点  $\mathbf{r}$  における場  $\phi(\mathbf{r}, t)$  になる。偏微分を

$$\dot{\phi}(\mathbf{r}, t) = \partial_0 \phi(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad \partial_k \phi(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \phi}{\partial x_k}, \quad k = 1, 2, 3$$

まとめて  $\partial_\mu \phi$ ,  $\mu = 0, 1, 2, 3$  で表す。

$$L = \int d^3r \mathcal{L}, \quad \mathcal{L} = \mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi)$$

とする。ラグランジアン密度  $\mathcal{L}$  は  $\phi(\mathbf{r}, t)$  と 4 つの導関数  $\partial_\mu \phi(\mathbf{r}, t)$  の関数で、例えば

$$\mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{c^2} (\partial_0 \phi)^2 - (\nabla \phi) \cdot (\nabla \phi) - \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \phi^2 \right) \quad (13.2)$$

である。 $\phi(\mathbf{r}, t)$  を微小変化  $\phi(\mathbf{r}, t) + \delta\phi(\mathbf{r}, t)$  させたとき、作用積分

$$I = \int_{t_1}^{t_2} dt L = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \mathcal{L}$$

の変分  $\delta I$  を求める。ただし  $\delta\phi(\mathbf{r}, t_1) = \delta\phi(\mathbf{r}, t_2) = 0$  とする。テイラー展開すると

$$\mathcal{L}(\phi + \delta\phi, \phi_\mu + \partial_\mu \delta\phi) = \mathcal{L}(\phi, \phi_\mu) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} \delta\phi + \sum_{\mu=0}^3 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_\mu} \partial_\mu \delta\phi + \dots, \quad \phi_\mu = \partial_\mu \phi$$

である。上式では  $\phi, \phi_\mu$  を独立変数として見なして偏微分する。これから

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} \delta\phi + \sum_{\mu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_\mu} \partial_\mu \delta\phi \right) = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \delta\phi \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \sum_{\mu} \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_\mu} \right)$$

第 2 項は部分積分した。任意の微小変分  $\delta\phi$  に対して  $\delta I = 0$  であるためには

$$\sum_{\mu=0}^3 \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} \quad (13.3)$$



でなければならない。これをオイラー・ラグランジュ方程式という。

空間を微小体積  $\Delta V$  に分割し,  $i$  番目の微小部分の位置を  $\mathbf{r}_i$  とすると

$$L = \sum_i \mathcal{L}(\phi_i, \partial_\mu \phi_i) \Delta V, \quad \phi_i(t) = \phi(\mathbf{r}_i, t)$$

である。  $q_i(t) = \phi_i(t) \Delta V$  を一般化座標と見なすと, これに共役な運動量  $\pi_i$  は

$$\pi_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial}{\partial(\dot{\phi}_i \Delta V)} \sum_j \mathcal{L}(\phi_j, \partial_\mu \phi_j) \Delta V = \frac{\partial \mathcal{L}(\phi_i, \partial_\mu \phi_i)}{\partial \dot{\phi}_i}, \quad \text{つまり} \quad \pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}}$$

である。系のハミルトニアン  $H$  は

$$H = \sum_i \pi_i \dot{q}_i - L = \sum_i \pi_i \dot{\phi}_i \Delta V - L = \int d^3r \mathcal{H}, \quad \mathcal{H} = \pi(\mathbf{r}, t) \dot{\phi}(\mathbf{r}, t) - \mathcal{L}$$

になる。

量子力学に移行するには, 座標  $q_i(t) = \phi_i(t) \Delta V$  と共役運動量  $\pi_i(t)$  を (13.1) を満たす演算子に置き換える。  $\delta_{ij}/\Delta V \xrightarrow{\Delta V \rightarrow 0} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$  であるから, 同時刻では

$$[\phi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)] = i\hbar \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad [\phi(\mathbf{r}, t), \phi(\mathbf{r}', t)] = [\pi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)] = 0 \quad (13.4)$$

になる。これはボソンに対する量子化条件であり, フェルミオンの場合, 反交換関係にする。  $\phi(\mathbf{r}, t)$ ,  $\pi(\mathbf{r}, t)$  はハイゼンベルグ描像での演算子である。以上は相対論にも適用できる。(13.2) は質量  $m$ , スピン 0 粒子の相対論的ラグランジアン密度である。

**例題** (13.2) の場合

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 \phi)} = \frac{1}{c^2} \partial_0 \phi, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_k \phi)} = -\partial_k \phi, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = -\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \phi$$

であるから (13.3) はクライン・ゴルドン方程式

$$\left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \phi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (13.5)$$

になる (問題 13.3 参照)。

## 13.2 シュレーディンガー方程式の量子化

**第二量子化** (348 ページ) を正準量子化で導く。フェルミオンの場合を考える。シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = h(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t), \quad h(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, \sigma) \quad (13.6)$$

を満たす波動関数  $\psi(\mathbf{r}, t)$  を古典場と見なす。  $\psi$  は 2 成分スピノール

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}, t) \\ \psi_-(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}, \quad \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) = (\psi_+^*(\mathbf{r}, t) \quad \psi_-^*(\mathbf{r}, t))$$

である。  $V$  はスピンに依存してもよい。ラグランジアン密度は実数であるから

$$\mathcal{L}_\psi = \frac{i\hbar}{2} \left( \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi \right) - \frac{\hbar^2}{2M} (\nabla \psi^\dagger) \cdot (\nabla \psi) - \psi^\dagger V \psi \quad (13.7)$$

とする。独立な実数場  $u, v$  を用いて  $\psi_\sigma = u_\sigma + iv_\sigma$  と表し ( $\sigma = \pm$ ),  $u$  と  $v$  について (13.3) を求めてもよいが, 221 ページで示したように  $\psi_\sigma$  と  $\psi_\sigma^*$  を独立と見なしてもよい。

$$\frac{\partial \mathcal{L}_\psi}{\partial \dot{\psi}_\sigma^*} = -\frac{i\hbar}{2} \psi_\sigma, \quad \frac{\partial \mathcal{L}_\psi}{\partial (\partial_i \psi_\sigma^*)} = -\frac{\hbar^2}{2M} \partial_i \psi_\sigma, \quad \frac{\partial \mathcal{L}_\psi}{\partial \psi_\sigma^*} = \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \psi_\sigma}{\partial t} - (V\psi)_\sigma$$

であるから (13.3) は

$$-\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \psi = \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \psi}{\partial t} - V\psi, \quad \therefore \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = h(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t)$$

になり (13.6) を満たす。 $\psi$  の変分からはこれのエルミート共役が求まる。 $\psi_\sigma, \psi_\sigma^*$  の正準運動量は

$$\pi_\sigma = \frac{\partial \mathcal{L}_\psi}{\partial \dot{\psi}_\sigma} = \frac{i\hbar}{2} \psi_\sigma^*, \quad \bar{\pi}_\sigma = \frac{\partial \mathcal{L}_\psi}{\partial \dot{\psi}_\sigma^*} = -\frac{i\hbar}{2} \psi_\sigma$$

であるが,  $(\psi_\sigma, \psi_\sigma^*)$  と共役変数  $(\pi_\sigma, \bar{\pi}_\sigma)$  が独立ではないため, 簡単には量子化できない。これを回避するために

$$\mathcal{L}_\psi = (13.7) + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) = i\hbar \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2M} (\nabla \psi^\dagger) \cdot (\nabla \psi) - \psi^\dagger V \psi \quad (13.8)$$

とする。 $\partial(\text{場の積})/\partial t$  は (13.3) には寄与しないから,  $\psi$  は (13.6) を満たす。

$$\pi_\sigma = \frac{\partial \mathcal{L}_\psi}{\partial \dot{\psi}_\sigma} = i\hbar \psi_\sigma^*(\mathbf{r}, t), \quad \bar{\pi}_\sigma = \frac{\partial \mathcal{L}_\psi}{\partial \dot{\psi}_\sigma^*} = 0$$

になるから  $\psi_\sigma$  と  $\pi_\sigma = i\hbar \psi_\sigma^*$  だけが正準共役である。ハミルトニアンは, 部分積分すれば

$$H_\psi = \int d^3r \left( \sum_\sigma \pi_\sigma \dot{\psi}_\sigma - \mathcal{L}_\psi \right) = \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) h(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (13.9)$$

である。

### 量子化 (第二量子化)

フェルミオンの場合, (13.4) に対応して同時刻での反交換関係

$$\{\psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \pi_{\sigma'}(\mathbf{r}', t)\} = i\hbar \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \{\psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}', t)\} = 0$$

を設定する。ただし  $\{A, B\} \equiv AB + BA$  である。複素共役  $\psi_\sigma^*$  は, 演算子ではエルミート共役  $\psi_\sigma^\dagger$  に置き換わるから, 上式は

$$\{\psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t)\} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \{\psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}', t)\} = 0 \quad (13.10)$$

になる。これは (12.80), (12.81) である。 $\psi_\sigma$  が複素数の場合  $\psi_\sigma$  と  $\psi_\sigma^*$  の順番は任意であるが, 演算子で置き換えるとき  $\psi_\sigma$  と  $\psi_\sigma^\dagger$  は非可換であるため, 順番が問題になる。 $\psi_\sigma^\dagger$  が  $\psi_\sigma$  の左側に来るようにする。ハミルトニアンは (13.9), ただし  $\psi^\dagger(\mathbf{r}, t) = (\psi_+^\dagger(\mathbf{r}, t) \quad \psi_-^\dagger(\mathbf{r}, t))$  である。

演算子

$$F = \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, \sigma'} \int d^3r \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}, t) f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}, t)$$

を考える。 $2 \times 2$  行列  $f(\mathbf{r})$  は微分演算子を含んでもよい。

$$\psi_\sigma(\mathbf{r}, t) \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t) f_{\sigma'\sigma''}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma''}(\mathbf{r}', t) = \left( \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'} - \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t) \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) \right) f_{\sigma'\sigma''}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma''}(\mathbf{r}', t)$$

$f$  が微分演算子を含む場合,  $f(\mathbf{r}')$  の微分演算子は  $\mathbf{r}'$  についてであるから,  $f_{\sigma'\sigma''}(\mathbf{r}')$  と  $\psi_\sigma(\mathbf{r}, t)$  は可換である。したがって

$$\left[ \psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t) f_{\sigma'\sigma''}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma''}(\mathbf{r}', t) \right] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'} f_{\sigma\sigma''}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma''}(\mathbf{r}, t)$$

になるから  $\mathbf{r}'$  について積分すると

$$\left[ \psi_\sigma(\mathbf{r}, t), F \right] = \left( f(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) \right)_\sigma, \quad F = \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (13.11)$$

である。 $f = h$  とすれば, ハイゼンベルグの運動方程式 (10.30) は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) = \left[ \psi_\sigma(\mathbf{r}, t), H_\psi \right] = (h(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t))_\sigma$$

になり, 場の演算子  $\psi(\mathbf{r}, t)$  はシュレーディンガー方程式 (13.6) を満たす。

(13.6) を満たす  $\psi$  は  $a_\alpha$  を任意の演算子として

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_\alpha a_\alpha e^{-iE_\alpha t/\hbar} u_\alpha(\mathbf{r}), \quad \text{ただし} \quad h(\mathbf{r}) u_\alpha(\mathbf{r}) = E_\alpha u_\alpha(\mathbf{r}) \quad (13.12)$$

と展開できる。2成分スピノール  $u_\alpha$  は  $h$  の固有関数である。直交性 (12.21) より

$$\int d^3r u_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha'} a_{\alpha'} e^{-iE_{\alpha'} t/\hbar} \int d^3r u_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) u_{\alpha'}(\mathbf{r}) = a_\alpha e^{-iE_\alpha t}$$

したがって

$$\begin{aligned} \{ a_\alpha, a_{\alpha'}^\dagger \} &= e^{i(E_\alpha - E_{\alpha'})t/\hbar} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r d^3r' u_{\alpha,\sigma}^*(\mathbf{r}) u_{\alpha',\sigma'}(\mathbf{r}') \{ \psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t) \} \\ &= e^{i(E_\alpha - E_{\alpha'})t/\hbar} \sum_\sigma \int d^3r u_{\alpha,\sigma}^*(\mathbf{r}) u_{\alpha',\sigma}(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\alpha'} \end{aligned}$$

同様にして  $\{ a_\alpha, a_{\alpha'} \} = 0$  になり (12.70) を得る。 $H_\psi$  は

$$H_\psi = \sum_{\alpha\alpha'} \int d^3r a_\alpha^\dagger e^{iE_\alpha t/\hbar} u_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) a_{\alpha'} e^{-iE_{\alpha'} t/\hbar} u_{\alpha'}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha E_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha \quad (13.13)$$

になり時間に依存しない。ハイゼンベルグの運動方程式より  $i\hbar dH_\psi/dt = [H_\psi, H_\psi] = 0$  である。

スピン 0 のボソンの場合,  $\psi$  を 1 成分とし (13.10) の代わりに

$$[\psi(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t)] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad [\psi(\mathbf{r}, t), \psi(\mathbf{r}', t)] = 0$$

とする。場の演算子  $\psi(\mathbf{r}, t)$  は (13.6) を満たし, (12.88) が成り立つ。

### 13.3 真空中の古典電磁場

電場を  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ , 磁場を  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$  とすると, 真空中のマクスウェル方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (13.14)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (13.15)$$

である。  $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$  は真空中での光速である。(13.15) は (7.3)

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla A_0(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$$

とすれば自動的に満たされる。これを (13.14) に代入すると

$$\nabla^2 A_0 + \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{A} = 0, \quad \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A} + \nabla \left( \nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial A_0}{\partial t} \right) = 0 \quad (13.16)$$

になる。ラグランジアン密度を

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{em}} &= \frac{\varepsilon_0}{2} \mathbf{E}^2 - \frac{\mu_0}{2} \mathbf{B}^2 = \frac{\varepsilon_0}{2} \left( \nabla A_0 + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \\ &= \frac{\varepsilon_0}{2} \sum_{m=1}^3 (\partial_m A_0 + \dot{A}_m)^2 - \frac{1}{2\mu_0} \sum_{m,n=1}^3 \left( (\partial_m A_n)^2 - (\partial_m A_n)(\partial_n A_m) \right) \end{aligned} \quad (13.17)$$

とする。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial \dot{A}_0} &= 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial (\partial_i A_0)} = \varepsilon_0 (\partial_i A_0 + \dot{A}_i), \quad \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial A_0} = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial \dot{A}_k} &= \varepsilon_0 (\partial_k A_0 + \dot{A}_k), \quad \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial (\partial_i A_k)} = -\frac{1}{\mu_0} (\partial_i A_k - \partial_k A_i), \quad \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial A_k} = 0 \end{aligned}$$

であるから、オイラー・ラグランジュ方程式 (13.3) は

$$\sum_i \partial_i (\partial_i A_0 + \dot{A}_i) = 0, \quad \varepsilon_0 (\partial_k \dot{A}_0 + \ddot{A}_k) - \frac{1}{\mu_0} \sum_i (\partial_i^2 A_k - \partial_k \partial_i A_i) = 0$$

になり (13.16) を再現する。正準運動量は

$$\pi_0 = \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial \dot{A}_0} = 0, \quad \pi_i = \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial \dot{A}_i} = \varepsilon_0 (\partial_i A_0 + \dot{A}_i) \quad (13.18)$$

になるから

$$\mathcal{H}_{\text{em}} = \sum_i \pi_i \dot{A}_i - \mathcal{L}_{\text{em}} = \frac{\varepsilon_0}{2} (\dot{\mathbf{A}}^2 - (\nabla A_0)^2) + \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \quad (13.19)$$

$\pi_0 = 0$  より  $A_0$  は正準変数ではない。正準量子化するには  $A_0$  が現れない形式にする。

### クーロン・ゲージ

$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0$  を満たすゲージをクーロン・ゲージという。これは常に可能である。 $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \neq 0$  のとき、ゲージ変換 (7.13) において

$$\lambda(\mathbf{r}, t) = \int d^3 r' \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \nabla' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t)$$

とする。(16.29) より

$$\nabla^2 \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \nabla'^2 \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (13.20)$$

であるから  $\nabla^2 \lambda(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  になり、 $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \lambda$  は  $\nabla \cdot \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = 0$  を満たす。 $A_0$  は

$$A'_0(\mathbf{r}, t) = A_0(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial \lambda}{\partial t} = A_0(\mathbf{r}, t) - \int d^3 r' \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{\partial}{\partial t} \nabla' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t)$$

になる。一般に、電荷密度  $\rho_e(\mathbf{r}, t)$  が存在するとき、(13.16) の第1式は

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho_e(\mathbf{r}, t), \quad \text{つまり} \quad \nabla^2 A_0 + \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{A} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \rho_e(\mathbf{r}, t)$$

になるから

$$A'_0(\mathbf{r}, t) = A_0(\mathbf{r}, t) + \int d^3 r' \frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left( \nabla'^2 A_0(\mathbf{r}', t) + \frac{1}{\varepsilon_0} \rho_e(\mathbf{r}', t) \right) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3 r' \frac{\rho_e(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

ただし  $\nabla'^2$  では部分積分し (13.20) を用いた。したがって、クーロン・ゲージでは

$$A_0(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3 r' \frac{\rho_e(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (13.21)$$

である。 $A_0$  は静電場でのクーロン・ポテンシャルと同じ表現である。

自由場の場合 ( $\rho_e = 0$ )、クーロン・ゲージでは  $A_0 = 0$  になり  $A_0$  は消える。部分積分すると

$$\int d^3 r (\nabla \times \mathbf{A})^2 = \int d^3 r \mathbf{A} \cdot (\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A})) = \int d^3 r \mathbf{A} \cdot (\nabla \nabla \cdot \mathbf{A} - \nabla^2 \mathbf{A}) = - \int d^3 r \mathbf{A} \cdot \nabla^2 \mathbf{A}$$

であるから、(13.19) よりハミルトニアンは

$$H_{\text{em}} = \int d^3 r \mathcal{H}_{\text{em}} = \int d^3 r \left( \frac{\varepsilon_0}{2} \dot{\mathbf{A}}^2 - \frac{1}{2\mu_0} \mathbf{A} \cdot \nabla^2 \mathbf{A} \right) \quad (13.22)$$

になる。

### 平面波による展開

クーロン・ゲージ  $A_0 = \nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  では (13.16) の第1式は自動的に成り立つ。第2式は

$$\left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (13.23)$$

になる。 $\mathbf{C}$  を複素ベクトルとして  $\mathbf{C} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \pm i c|\mathbf{k}|t)$  は上式を満たすから、実数の一般解は

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \left( \mathbf{C}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}} t) + \mathbf{C}_{\mathbf{k}}^* \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + i\omega_{\mathbf{k}} t) \right), \quad \omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|$$

である。 $\mathbf{k}$  は連続変数であるが (364 ページ参照)、1 辺  $L$  の立方体で周期的境界条件を設定し離散化する。 $\mathbf{k}$  は (10.62) で与えられる。(13.23) は時間について2階であるから、(13.12) と異なり、2つの時間依存性  $e^{\pm i\omega_{\mathbf{k}} t}$  が現れる。

$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  である  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  を表すには、 $i$  軸方向の単位ベクトル  $\mathbf{e}_i$  ではなく

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k} \pm 1} = \mp (\mathbf{n}_{\mathbf{k}1} \pm i\mathbf{n}_{\mathbf{k}2})/\sqrt{2}, \quad \mathbf{e}_{\mathbf{k}0} = \mathbf{n}_{\mathbf{k}3} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}| \quad (13.24)$$

を用いた方が簡潔になる。ただし

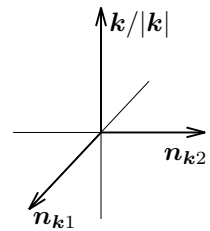
$$\mathbf{n}_{\mathbf{k}i} \cdot \mathbf{n}_{\mathbf{k}j} = \delta_{ij}, \quad \mathbf{n}_{\mathbf{k}i} \times \mathbf{n}_{\mathbf{k}j} = \sum_n \varepsilon_{ijn} \mathbf{n}_{\mathbf{k}n} \quad (13.25)$$

である ((5.136) 参照)。 $\mathbf{n}_{\mathbf{k}1}, \mathbf{n}_{\mathbf{k}2}$  は一意には決まらないが、(13.25) を満たせばよい。 $\mathbf{A}$  を

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad \lambda = 0, \pm 1 \quad (13.26)$$

で展開する。 $\lambda = \pm 1$  のとき  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} = 0$  より  $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} = i\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} = 0$  になるから、 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  を満たす (13.23) の実数解は  $C_{\mathbf{k}\lambda}$  を任意の複素数として

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \left( C_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} + C_{\mathbf{k}\lambda}^* \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}) e^{i\omega_{\mathbf{k}} t} \right) \quad (13.27)$$



とおける。 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  は  $\mathbf{k}$  方向に対して垂直に振動する横波  $\mathbf{u}_{\mathbf{k}, \pm 1}$  の重ね合わせである。

$\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$  の性質をまとめておく。(13.24), (13.25) より

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^* \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda'} &= \delta_{\lambda\lambda'}, & \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^* &= (-1)^\lambda \mathbf{e}_{\mathbf{k}-\lambda} \\ \mathbf{e}_{\mathbf{k}0} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} &= -i\lambda \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}, & \lambda, \lambda' = \pm 1 \text{ のとき } \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda'} &= -i\lambda \mathbf{e}_{\mathbf{k}0} \delta_{\lambda\lambda'} \end{aligned}$$

任意のベクトル  $\mathbf{V}$  は

$$\mathbf{V} = \sum_{\lambda=0, \pm 1} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^* \cdot \mathbf{V}, \quad \therefore V_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{V} = \sum_j V_j \sum_\lambda (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_j^*, \quad (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$$

になるから

$$\sum_{\lambda=0, \pm 1} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_j^* = \delta_{ij}, \quad P_{ij}(\mathbf{k}) \equiv \sum_{\lambda=\pm 1} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_j^* = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \quad (13.28)$$

である。 $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$  を列ベクトルで表すと

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad \sum_{\lambda=0, \pm 1} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger = 1 = 3 \times 3 \text{ の単位行列}$$

である。

$\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})$  は規格直交性

$$\int d^3r \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^* \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}'\lambda'} \int \frac{d^3r}{L^3} \exp(i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}) = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (13.29)$$

を満たす。137 ページで示したように、波動関数がベクトル場の場合、粒子のスピンは 1 である。(5.126) のスピン 1 行列  $\boldsymbol{\Sigma}$  の  $\mathbf{k}$  方向成分  $\Sigma_{\mathbf{k}} = \mathbf{e}_{\mathbf{k}0} \cdot \boldsymbol{\Sigma}$  を考える。運動量方向のスピン成分をヘリシティという。(5.127) より

$$\Sigma_{\mathbf{k}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} = i \mathbf{e}_{\mathbf{k}0} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} = \lambda \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$$

になるから、 $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$  はヘリシティの固有ベクトルで固有値は  $\lambda$  である。 $\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})$  はスピン 1 粒子のヘリシティ  $\lambda$ , 運動量  $\hbar \mathbf{k}$  の状態である。上式より

$$\sum_\lambda \lambda \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger = \Sigma_{\mathbf{k}}, \quad \text{つまり} \quad \sum_\lambda \lambda (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_j^* = (\Sigma_{\mathbf{k}})_{ij} = -i \sum_n \varepsilon_{nij} \frac{k_n}{|\mathbf{k}|}$$

である。 $\lambda = 0$  は寄与しない。

### 13.4 自由な電磁場の量子化

(13.18) より  $\pi_0 = 0$  であるから、交換関係は  $\mathbf{A}$  と  $\boldsymbol{\pi}$  について設定する。(13.4) と同様に

$$[A_i(\mathbf{r}, t), \pi_j(\mathbf{r}', t)] = i\hbar \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \text{ただし} \quad \boldsymbol{\pi} = \varepsilon_0(\nabla A_0 + \dot{\mathbf{A}})$$

とすると  $[A_i(\mathbf{r}, t), \nabla' \cdot \boldsymbol{\pi}(\mathbf{r}', t)] \neq 0$  であるが、(13.16) より  $\nabla \cdot \boldsymbol{\pi}(\mathbf{r}, t) = 0$  であり矛盾する。そこで、クーロン・ゲージ  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  を採用して  $A_1, A_2, A_3$  が独立でないようにする。自由場のクーロン・ゲージでは  $A_0 = 0$  になるから  $\boldsymbol{\pi} = \varepsilon_0 \dot{\mathbf{A}}$  である。

$$[A_i(\mathbf{r}, t), \varepsilon_0 \dot{A}_j(\mathbf{r}', t)] = i\hbar (\delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + f_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) = i\hbar \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} (\delta_{ij} + f_{ij}(\mathbf{k})) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (13.30)$$

とする。ただし,  $f_{ij}(\mathbf{r})$  をフーリエ変換した。  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  より

$$\begin{aligned} [\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \dot{A}_j(\mathbf{r}', t)] &= \frac{i\hbar}{\varepsilon_0} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_i (\delta_{ij} + f_{ij}(\mathbf{k})) \partial_i e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \\ &= -\frac{\hbar}{\varepsilon_0} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left( k_j + \sum_i k_i f_{ij}(\mathbf{k}) \right) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = 0 \end{aligned}$$

座標系の回転に対して  $f_{ij}$  はベクトルの  $i$  成分と  $j$  成分の積と同じ変換するから  $f_{ij}(\mathbf{k}) = -k_i k_j / \mathbf{k}^2$  になる。したがって

$$[A_i(\mathbf{r}, t), \dot{A}_j(\mathbf{r}', t)] = \frac{i\hbar}{\varepsilon_0} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left( \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{\mathbf{k}^2} \right) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (13.30)$$

右辺の  $(\dots)$  は (13.28) の  $P_{ij}$  である。任意の  $f(\mathbf{r})$  に対して

$$\nabla^2 \Delta^{-1} f(\mathbf{r}) = \Delta^{-1} \nabla^2 f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})$$

により  $\nabla^2$  の逆演算  $\Delta^{-1}$  を定義する。

$$\nabla^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{\mathbf{k}^2} = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

であるから

$$\Delta^{-1} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{\mathbf{k}^2}, \quad \therefore \quad \partial_i \partial_j \Delta^{-1} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k_i k_j}{\mathbf{k}^2} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$$

(13.30) は

$$[A_i(\mathbf{r}, t), \dot{A}_j(\mathbf{r}', t)] = \frac{i\hbar}{\varepsilon_0} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} P_{ij}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \frac{i\hbar}{\varepsilon_0} \left( \delta_{ij} - \partial_i \partial_j \Delta^{-1} \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (13.31)$$

と表せる。他の交換関係は

$$[A_i(\mathbf{r}, t), A_j(\mathbf{r}', t)] = [\dot{A}_i(\mathbf{r}, t), \dot{A}_j(\mathbf{r}', t)] = 0 \quad (13.32)$$

とする。ハイゼンベルグの運動方程式がマクスウェル方程式になることは (13.43) で示す。  $H_\psi$  と同様に, (13.22) のハミルトニアン  $H_{\text{em}}$  は時間に依存しない。

### 平面波による展開

(13.27) より  $C = \sqrt{\hbar/(2\varepsilon_0\omega_k)} b$  とすると

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_k}} \left( b_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_k t} + b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}) e^{i\omega_k t} \right), \quad \omega_k = c|\mathbf{k}| \quad (13.33)$$

とおける。  $b$  は演算子であるから複素共役はエルミート共役に置き換わる。(13.31), (13.32) は

$$[b_{\mathbf{k}\lambda}, b_{\mathbf{k}'\lambda'}] = 0, \quad [b_{\mathbf{k}\lambda}, b_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad \lambda, \lambda' = \pm 1 \quad (13.34)$$

と同等である。(13.34)  $\implies$  (13.31), (13.32) を示す (問題 13.1 参照)。(13.33) に  $\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}$  の具体形 (13.26) を代入すると

$$\begin{aligned} [A_i(\mathbf{r}, t), A_j(\mathbf{r}', t')] &= \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega_k} \left( (e_{\mathbf{k}\lambda})_i (e_{\mathbf{k}\lambda})_j^* e^{-i\omega_k(t-t')} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \right. \\ &\quad \left. - (e_{\mathbf{k}\lambda})_i^* (e_{\mathbf{k}\lambda})_j e^{i\omega_k(t-t')} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \right) \end{aligned}$$

2 行目で  $\mathbf{k}$  を  $-\mathbf{k}$  とし (13.28) を用いると

$$\begin{aligned} [A_i(\mathbf{r}, t), A_j(\mathbf{r}', t')] &= \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \sum_{\mathbf{k}} P_{ij}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \frac{1}{\omega_k} \left( e^{-i\omega_k(t-t')} - e^{i\omega_k(t-t')} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2\varepsilon_0} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} P_{ij}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \frac{1}{\omega_k} \left( e^{-i\omega_k(t-t')} - e^{i\omega_k(t-t')} \right) \end{aligned} \quad (13.35)$$

ただし, (10.67) により和を積分で置き換えた。  $t, t'$  で微分すると

$$\begin{aligned} [A_i(\mathbf{r}, t), \dot{A}_j(\mathbf{r}', t')] &= \frac{i\hbar}{2\varepsilon_0} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} P_{ij}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \left( e^{-i\omega_k(t-t')} + e^{i\omega_k(t-t')} \right) \\ [\dot{A}_i(\mathbf{r}, t), \dot{A}_j(\mathbf{r}', t')] &= \frac{\hbar}{2\varepsilon_0} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} P_{ij}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \omega_k \left( e^{-i\omega_k(t-t')} - e^{i\omega_k(t-t')} \right) \end{aligned}$$

$t' = t$  では (13.31), (13.32) を満たす。正準交換関係は生成・消滅演算子を用いて (13.34) になる。

**問題 13.1** (13.33) より

$$b_{\mathbf{k}\lambda} = e^{i\omega_k t} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \omega_k}{2\hbar}} \int d^3 r \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}) \cdot \left( \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{i}{\omega_k} \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \right)$$

を示せ。これから (13.31), (13.32)  $\Rightarrow$  (13.34) を示せ。

ハミルトニアン (13.22) を  $b, b^\dagger$  で表す。

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_k t} b_{\mathbf{k}\lambda} \pm \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}) e^{i\omega_k t} b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$$

とすると

$$\dot{\mathbf{A}} = -i \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar \omega_k}{2\varepsilon_0}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}^{(-)}(\mathbf{r}, t), \quad \nabla^2 \mathbf{A} = -\frac{1}{c^2} \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_k}} \omega_k^2 \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}^{(+)}(\mathbf{r}, t) \quad (13.36)$$

であるから

$$H_{\text{em}} = \frac{\hbar}{4} \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sqrt{\omega_k \omega_{k'}} \int d^3 r \left( -\mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}^{(-)}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{k}'\lambda'}^{(-)}(\mathbf{r}, t) + \frac{\omega_{k'}}{\omega_k} \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}^{(+)}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{k}'\lambda'}^{(+)}(\mathbf{r}, t) \right)$$

である。(13.29) より

$$\begin{aligned} \int d^3 r \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{k}'\lambda'}^{(\pm)}(\mathbf{r}, t) &= \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \left( \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{e}_{-\mathbf{k}\lambda'} e^{-2i\omega_k t} b_{\mathbf{k}\lambda} b_{-\mathbf{k}\lambda'} + \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^* \cdot \mathbf{e}_{-\mathbf{k}\lambda'}^* e^{2i\omega_k t} b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{-\mathbf{k}\lambda'}^\dagger \right) \\ &\quad \pm \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left( b_{\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda} \right) \end{aligned}$$

したがって

$$H_{\text{em}} = \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_k b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda} + E_{\text{vac}}, \quad E_{\text{vac}} = \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar \omega_k}{2}$$

になる。 $b_{\mathbf{k}\lambda}|0\rangle = 0$  である真空  $|0\rangle$  に対して  $H_{\text{em}}|0\rangle = E_{\text{vac}}|0\rangle$  であるから  $E_{\text{vac}}$  は真空のエネルギーである。 $E_{\text{vac}}$  は調和振動子の零点振動の和で発散するが,  $E_{\text{vac}}$  をエネルギーの基準にとれば

$$H_{\text{em}} = \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_k b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda} \quad (13.37)$$

になる。



電磁場の運動量  $\mathbf{P}$  はポインティング・ベクトル

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 \int d^3r \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = -\varepsilon_0 \int d^3r \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \times (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)) = \varepsilon_0 \int d^3r \sum_i A_i \nabla \dot{A}_i$$

で与えられる。ただし、最後では部分積分し  $\nabla \cdot \dot{\mathbf{A}} = 0$  を用いた。

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \frac{\hbar}{2} \sum_{\lambda, \lambda'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}'}}} \mathbf{k} \int d^3r \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}^{(+)}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{k}'\lambda'}^{(+)}(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{\hbar}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} (b_{\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} + b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} b_{\mathbf{k}\lambda}) + \frac{\hbar}{2} (\mathbf{K} + \mathbf{K}^{\dagger}) \end{aligned}$$

ただし

$$\mathbf{K} = \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} e_{\mathbf{k}\lambda} \cdot e_{-\mathbf{k}\lambda'} b_{\mathbf{k}\lambda} b_{-\mathbf{k}\lambda'} e^{-2i\omega_{\mathbf{k}}t}$$

$\mathbf{k}$  を  $-\mathbf{k}$  に置き換えれば  $\mathbf{K} = -\mathbf{K} = 0$  になるから

$$\mathbf{P} = \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} b_{\mathbf{k}\lambda}$$

である。

交換関係 (13.34) より  $[b_{\mathbf{k}'\lambda'}^{\dagger}, b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}$  になるから

$$H_{\text{em}} b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} |0\rangle = [H_{\text{em}}, b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}] |0\rangle = \hbar \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} |0\rangle, \quad \mathbf{P} b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} |0\rangle = [\mathbf{P}, b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}] |0\rangle = \hbar \mathbf{k} b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} |0\rangle$$

$b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} |0\rangle$  は  $H_{\text{em}}$  と  $\mathbf{P}$  の固有状態であり、固有値はそれぞれ  $\hbar \omega_{\mathbf{k}}$ ,  $\hbar \mathbf{k}$  になる。 $b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}$  は運動量  $\hbar \mathbf{k}$  の光子を生成する。

### $\mathbf{k}$ が連続的な場合

最初から  $\mathbf{k}$  を連続にすればよいが  $L \rightarrow \infty$  の極限として求める。

$$U_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \frac{L^{3/2}}{(2\pi)^{3/2}} u_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) e_{\mathbf{k}\lambda}, \quad B_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{L^{3/2}}{(2\pi)^{3/2}} b_{\mathbf{k}\lambda}$$

とする。(10.68) より交換関係は

$$[B_{\mathbf{k}\lambda}, B_{\mathbf{k}'\lambda'}^{\dagger}] = \frac{L^3}{(2\pi)^3} [b_{\mathbf{k}\lambda}, b_{\mathbf{k}'\lambda'}^{\dagger}] = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\lambda\lambda'}$$

になる。また、(10.67) より

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\lambda=\pm 1} \frac{(2\pi)^3}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_{\mathbf{k}}}} (U_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} B_{\mathbf{k}\lambda} + U_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}) e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} B_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}) \\ &\xrightarrow{L \rightarrow \infty} \sum_{\lambda=\pm 1} \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_{\mathbf{k}}}} (U_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} B_{\mathbf{k}\lambda} + U_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}) e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} B_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}) \\ H_{\text{em}} &= \sum_{\lambda=\pm 1} \frac{(2\pi)^3}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} B_{\mathbf{k}\lambda} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \sum_{\lambda=\pm 1} \int d^3k \hbar \omega_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} B_{\mathbf{k}\lambda} \end{aligned}$$

である。 $\mathbf{P}$  についても同様である。規格直交性は

$$\int d^3r U_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}) \cdot U_{\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\lambda\lambda'}$$

になる。

問題 13.2 異なる時刻での交換関係を求める。

$$G(\mathbf{r}, t) \equiv \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{e^{i\omega_k t} - e^{-i\omega_k t}}{2i\omega_k} = \frac{1}{4\pi c r} (\delta(r - ct) - \delta(r + ct))$$

を示せ。

$$\left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) G(\mathbf{r}, t) = 0, \quad G(\mathbf{r}, 0) = 0, \quad \left. \frac{\partial G}{\partial t} \right|_{t=0} = \delta(\mathbf{r})$$

である。(13.35) は

$$[A_i(\mathbf{r}, t), A_j(\mathbf{r}', t')] = -\frac{i\hbar}{\varepsilon_0} (\delta_{ij} - \partial_i \partial_j \Delta^{-1}) G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$$

と書ける。これから 電場  $\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}}$  と磁場  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  の交換関係

$$\frac{1}{c^2} [E_i(\mathbf{r}, t), E_j(\mathbf{r}', t')] = [B_i(\mathbf{r}, t), B_j(\mathbf{r}', t')] = \frac{i\hbar}{\varepsilon_0} (\delta_{ij} \nabla^2 - \partial_i \partial_j) G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$$

$$[E_i(\mathbf{r}, t), B_j(\mathbf{r}', t')] = -\frac{i\hbar}{\varepsilon_0} \sum_m \varepsilon_{ijm} \partial_m \partial_0 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$$

を示せ。また、同時刻での交換関係を求めよ。

問題 13.3 クライン・ゴルドン方程式 (13.5) の実数解は  $a_{\mathbf{k}}$  を複素数として

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\hbar c}{\sqrt{2E_k}} \left( e^{-iE_k t/\hbar + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}} + e^{iE_k t/\hbar - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}^* \right), \quad E_k = \sqrt{(mc^2)^2 + (\hbar c|\mathbf{k}|)^2}$$

と展開できることを示せ。演算子では複素共役  $a^*$  はエルミート共役  $a^\dagger$  に置き換わる。(13.4) より  $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ ,  $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}] = 0$  を示せ。

### 13.5 荷電粒子と電磁場の相互作用

#### 古典場

電磁場と相互作用する電荷  $q$  のフェルミオンを考える。フェルミオンはシュレーディンガー方程式で記述されたとする。電磁場中での  $\mathcal{L}_\psi$  は (13.8) において (7.8) のミニマル結合

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \rightarrow \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0 \right) \psi, \quad \nabla \psi \rightarrow \mathbf{D} \psi, \quad \mathbf{D} \equiv \nabla + \frac{q}{i\hbar} \mathbf{A}$$

の置き換えをして

$$\mathcal{L}_\psi = i\hbar \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2M} (\mathbf{D}\psi)^\dagger \cdot (\mathbf{D}\psi) - \psi^\dagger (qA_0 + V) \psi + \frac{\hbar q}{2M} \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi \cdot (\nabla \times \mathbf{A})$$

とする。磁場とスピンの相互作用 (最後の項) を加えた。ここでの  $\dagger$  はスピンに関するものであり  $\mathbf{D}^\dagger = \mathbf{D}^* = \nabla - q\mathbf{A}/i\hbar$  である。系全体では電磁場の (13.17) を加えて  $\mathcal{L} = \mathcal{L}_\psi + \mathcal{L}_{\text{em}}$  になる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\sigma} &= i\hbar \psi_\sigma^*, & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \psi_\sigma)} &= -\frac{\hbar^2}{2M} (D_i \psi_\sigma)^* \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{q}{i\hbar} \mathbf{A} \cdot (\mathbf{D}\psi_\sigma)^* - (\psi^\dagger (qA_0 + V))_\sigma + \frac{\hbar q}{2M} (\psi^\dagger \boldsymbol{\sigma})_\sigma \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) \end{aligned}$$

であるから、(13.3) はエルミート共役をとれば

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \mathbf{D}^2 + qA_0 + V - \frac{\hbar q}{2M} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) \right) \psi \quad (13.38)$$

になり (7.9) を再現する。

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_\mu} &= \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial \dot{A}_\mu}, & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i A_0)} &= \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial (\partial_i A_0)}, & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_0} &= -q \psi^\dagger \psi \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i A_k)} &= \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial (\partial_i A_k)} - \frac{\hbar q}{2M} \sum_j \varepsilon_{ijk} \psi^\dagger \sigma_j \psi, & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_k} &= \frac{i\hbar q}{2M} \left( (D_k \psi)^\dagger \psi - \psi^\dagger D_k \psi \right)\end{aligned}$$

であるから

$$\rho = \psi^\dagger \psi, \quad \mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2M} \left( (D\psi)^\dagger \psi - \psi^\dagger D\psi \right) + \boldsymbol{\Sigma}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \frac{\hbar}{2M} \nabla \times (\psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi) \quad (13.39)$$

とすると (13.3) は

$$\nabla^2 A_0 + \nabla \cdot \dot{\mathbf{A}} = -\frac{1}{\varepsilon_0} q\rho, \quad \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A} + \nabla \left( \nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial A_0}{\partial t} \right) = \mu_0 q\mathbf{j} \quad (13.40)$$

になる。 $A_\mu$  は電荷密度  $q\rho(\mathbf{r}, t)$ , 電流密度  $q\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  が存在する場合のマクスウェル方程式を満たす。 $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  は (7.21) である。(13.38) より連続の方程式  $\partial\rho/\partial t + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$  は成り立つ。

$\psi_\sigma$  の正準運動量は  $i\hbar\psi_\sigma^*$ ,  $\mathbf{A}$  の正準運動量は  $\boldsymbol{\pi} = \varepsilon_0(\nabla A_0 + \dot{\mathbf{A}})$  になる。ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}H &= \int d^3r \left( i\hbar \psi^\dagger \dot{\psi} + \boldsymbol{\pi} \cdot \dot{\mathbf{A}} - \mathcal{L} \right) \\ &= \int d^3r \left( \frac{\hbar^2}{2M} (D\psi)^\dagger \cdot (D\psi) + \psi^\dagger V\psi - q\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \right) + H_{\text{em}} + H_{\text{C}}\end{aligned} \quad (13.41)$$

ただし、磁場とスピンの相互作用では部分積分した。

$$H_{\text{em}} = \int d^3r \left( \frac{\varepsilon_0}{2} \dot{\mathbf{A}}^2 + \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right), \quad H_{\text{C}} = \int d^3r \left( qA_0\rho - \frac{\varepsilon_0}{2} (\nabla A_0)^2 \right)$$

である。クーロン・ゲージ (13.21) の場合  $H_{\text{em}}$  は (13.22) になる。

$$\varepsilon_0 \int d^3r (\nabla A_0)^2 = -\varepsilon_0 \int d^3r A_0 \nabla^2 A_0 = q \int d^3r A_0 \rho$$

であるから

$$H_{\text{C}} = \frac{q}{2} \int d^3r A_0(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3r d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

$H_{\text{C}}$  はクーロンエネルギーである。 $H$  は正準変数でない  $A_0$  を含まない表現になる。

**問題 13.4** 電場  $\mathbf{E}$  を用いると  $\frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r \dot{\mathbf{A}}^2 + H_{\text{C}} = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r \mathbf{E}^2$  になることを示せ。

### 量子化

以下では  $\psi^\dagger(\mathbf{r}, t) = (\psi_+^\dagger(\mathbf{r}, t) \ \psi_-^\dagger(\mathbf{r}, t))$  である。 $\psi$  と  $\mathbf{A}$  は独立な正準変数であるから、同時刻では

$$[\psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \mathbf{A}(\mathbf{r}', t)] = [\psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}', t)] = 0$$

とする。 $\psi_\sigma$  の正準運動量は  $i\hbar\psi_\sigma^\dagger$ ,  $\mathbf{A}$  の正準運動量は  $\boldsymbol{\pi} = \varepsilon_0(\nabla A_0 + \dot{\mathbf{A}})$  である。 $\rho = \psi^\dagger \psi$  より (13.21) の  $A_0(\mathbf{r}, t)$  は  $A_0(\mathbf{r}', t)$ ,  $\mathbf{A}(\mathbf{r}', t)$ ,  $\dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}', t)$  とは可換になるから、同時刻 (反) 交換関係は自由場と同じ (13.10), (13.31), (13.32) である。ただし、 $\psi$  は  $A_0$ ,  $\boldsymbol{\pi}$  とは非可換になる。また、自由場とは異なる運動方程式を満たすから、(13.12), (13.33) は適用できない。

$\psi$  を場の演算子で置き換えるとき  $\psi_\sigma^\dagger$  が  $\psi_\sigma$  の左側に来るようにする。更に

$$H_C = \frac{1}{2} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{v_{12}^c}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad v_{12}^c = \sum_{\sigma_1\sigma_2} \psi_{\sigma_1}^*(\mathbf{r}_1, t) \psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1, t) \psi_{\sigma_2}^*(\mathbf{r}_2, t) \psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2, t)$$

の場合, (12.83) に従い

$$v_{12}^c = \sum_{\sigma_1\sigma_2} \psi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1, t) \psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2, t) \psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2, t) \psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1, t) = \rho(\mathbf{r}_1, t) (\rho(\mathbf{r}_2, t) - \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) \quad (13.42)$$

とする。

$H$  が (13.41) のときハイゼンベルグの運動方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [\psi(\mathbf{r}, t), H], \quad i\hbar \frac{\partial \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [\dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t), H] \quad (13.43)$$

がシュレーディンガー方程式 (13.38) とマクスウェル方程式 (13.40) になることを示す。

$$H_{\psi A} = \int d^3r \left( \frac{\hbar^2}{2M} (\mathbf{D}\psi)^\dagger \cdot (\mathbf{D}\psi) + \psi^\dagger V \psi - q\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \right) \quad (13.44)$$

$$= \int d^3r \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \psi^\dagger \mathbf{D}^2 \psi + \psi^\dagger V \psi - \frac{\hbar q}{2M} \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) \right) \quad (13.45)$$

とする。部分積分すると 1 行目から 2 行目になる。 $\psi$  は  $H_{\text{em}}$  とは可換であるから

$$[\psi(\mathbf{r}, t), H] = [\psi(\mathbf{r}, t), H_{\psi A}] + [\psi(\mathbf{r}, t), H_C]$$

である。(13.11) において  $f(\mathbf{r})$  を  $\mathbf{D}^2$ ,  $V(\mathbf{r})$ ,  $\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times \mathbf{A})$  とすれば (13.45) より

$$[\psi(\mathbf{r}, t), H_{\psi A}] = -\frac{\hbar^2}{2M} \mathbf{D}^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) - \frac{\hbar q}{2M} (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \psi(\mathbf{r}, t)$$

になる。簡単のため  $t$  依存性を省略すると

$$\begin{aligned} \psi_\sigma(\mathbf{r}) v_{12}^c &= \sum_{\sigma_1\sigma_2} \left( \delta_{\sigma\sigma_1} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) - \psi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \psi_\sigma(\mathbf{r}) \right) \psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) \psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2) \psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \\ &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) \psi_\sigma(\mathbf{r}) - \sum_{\sigma_1\sigma_2} \psi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \left( \delta_{\sigma\sigma_2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) - \psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) \psi_\sigma(\mathbf{r}) \right) \psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2) \psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \\ &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) \psi_\sigma(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) \rho(\mathbf{r}_1) \psi_\sigma(\mathbf{r}) + v_{12}^c \psi_\sigma(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

であるから

$$[\psi_\sigma(\mathbf{r}, t), H_C] = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r_1 \frac{\rho(\mathbf{r}_1, t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) = qA_0(\mathbf{r}, t) \psi_\sigma(\mathbf{r}, t)$$

以上から,  $\psi$  のハイゼンベルグ方程式は (13.38) になる。

次に, (13.44) を用いて

$$[\dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t), H] = [\dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t), H_{\psi A}] + [\dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t), H_{\text{em}}]$$

を求める。 $t$  を省略すると (13.31) より

$$[\dot{A}_i(\mathbf{r}), A_k(\mathbf{r}') \Sigma_k(\mathbf{r}')] = -\frac{i\hbar}{\epsilon_0} \mathcal{D}_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Sigma_k(\mathbf{r}), \quad \mathcal{D}_{ik} = \delta_{ik} - \partial_i \partial_k \Delta^{-1}$$

$$[\dot{A}_i(\mathbf{r}), D'_k \psi(\mathbf{r}')] = \frac{q}{i\hbar} [\dot{A}_i(\mathbf{r}), A_k(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}')] = -\frac{q}{\epsilon_0} \mathcal{D}_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r})$$

である。(1.11) より

$$\begin{aligned} [\dot{A}_i(\mathbf{r}), (D'_k \psi(\mathbf{r}'))^\dagger D'_k \psi(\mathbf{r}')] &= (D'_k \psi(\mathbf{r}'))^\dagger [\dot{A}_i(\mathbf{r}), D'_k \psi(\mathbf{r}')] - [\dot{A}_i(\mathbf{r}), D'_k \psi(\mathbf{r}')]^\dagger D'_k \psi(\mathbf{r}') \\ &= -\frac{q}{\varepsilon_0} \mathcal{D}_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \left( (D_k \psi(\mathbf{r}))^\dagger \psi(\mathbf{r}) - \psi^\dagger(\mathbf{r}) D_k \psi(\mathbf{r}) \right) \end{aligned}$$

になるから

$$[\dot{A}_i(\mathbf{r}, t), H_{\psi A}] = \frac{i\hbar q}{\varepsilon_0} \sum_k \mathcal{D}_{ik} j_k(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar q}{\varepsilon_0} (j_i - \partial_i \Delta^{-1} \nabla \cdot \mathbf{j})$$

ただし  $\mathbf{j}$  は (13.39) である。(13.22) より

$$\begin{aligned} [\dot{A}_i(\mathbf{r}), H_{\text{em}}] &= -\frac{1}{2\mu_0} \int d^3 r' \sum_j \left( [\dot{A}_i(\mathbf{r}), A_j(\mathbf{r}')] \nabla'^2 A_j(\mathbf{r}') + A_j(\mathbf{r}') \nabla'^2 [\dot{A}_i(\mathbf{r}), A_j(\mathbf{r}')] \right) \\ &= \frac{i\hbar}{\mu_0 \varepsilon_0} \sum_j \left( \delta_{ij} - \partial_i \partial_j \Delta^{-1} \right) \nabla^2 A_j(\mathbf{r}) = i\hbar c^2 (\nabla^2 A_i - \partial_i \nabla \cdot \mathbf{A}) \end{aligned}$$

したがって

$$[\dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t), H] = i\hbar \frac{q}{\varepsilon_0} (\mathbf{j} - \nabla \Delta^{-1} \nabla \cdot \mathbf{j}) + i\hbar c^2 (\nabla^2 \mathbf{A} - \nabla \nabla \cdot \mathbf{A})$$

連続の方程式と (13.21) より

$$\Delta^{-1} \nabla \cdot \mathbf{j} = -\Delta^{-1} \dot{\rho}, \quad \nabla^2 A_0 = -q\rho/\varepsilon_0, \quad \therefore \quad q\Delta^{-1} \nabla \cdot \mathbf{j} = \varepsilon_0 \dot{A}_0$$

であるから  $\mathbf{A}$  のハイゼンベルグ方程式は (13.40) になる。(13.41) の  $H$  は時間に依存しない。

**問題 13.5** 交換子  $[\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), H]$  が  $i\hbar \dot{\mathbf{A}}$  になることを確かめよ。

### 摂動展開

自由場 (荷電粒子と電磁場間に相互作用がない場合) の運動方程式は,  $\psi$  と  $\mathbf{A}$  を独立に解くことができ, 生成・消滅演算子を用いて (13.12), (13.33) と表せる。一方, 荷電粒子と電磁場の相互作用がある場合,  $\psi$  と  $\mathbf{A}$  の運動方程式 (13.38), (13.40) は独立ではない。(13.41) は

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad H_0 = H_\psi + H_{\text{em}}, \quad H_{\text{int}} = H_C - \int d^3 r \left( q \mathbf{j}_0 \cdot \mathbf{A} - \frac{q^2}{2M} \rho \mathbf{A}^2 \right) \quad (13.46)$$

と表せる。 $H_\psi, H_{\text{em}}$  はそれぞれ (13.9), (13.22) で与えられ

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{j}_0(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}(\mathbf{A} = 0) = \frac{i\hbar}{2M} \left( (\nabla \psi^\dagger) \psi - \psi^\dagger \nabla \psi - i \nabla \times (\psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi) \right)$$

である。 $H_{\text{int}}$  を無視すれば自由場のハミルトニアンになるから  $H_{\text{int}}$  を摂動として近似的に扱う。ただし, (13.46) の  $H_0, H_{\text{int}}$  を構成する場は自由場ではないから, 摂動展開する前に (13.46) を自由場で表す。

場の演算子  $\psi_\sigma, \psi_\sigma^\dagger, A_i, \dot{A}_i$  をまとめて  $\phi_\mu(\mathbf{r}, t)$  で表す。自由場の  $\phi_\mu$  と相互作用がある場合の  $\phi_\mu$  は異なる演算子であるから, 後者を  $\Phi_\mu$  で表す。 $\phi_\mu$  の (反) 交換関係と  $\Phi_\mu$  の (反) 交換関係は同じである。ユニタリ変換で (反) 交換関係は不変であるから, ユニタリ演算子  $U$  を用いて

$$\Phi_\mu(\mathbf{r}, t) = U^\dagger(t) \phi_\mu(\mathbf{r}, t) U(t)$$

とおけるとする。 $UU^\dagger = 1$  を時間で微分すれば  $\dot{U}U^\dagger + U\dot{U}^\dagger = 0$  になるから  $\dot{U}^\dagger = -U^\dagger \dot{U} U^\dagger$  である。これから

$$\dot{\Phi}_\mu(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} (U^\dagger \phi_\mu U) = U^\dagger \left( \dot{\phi}_\mu(\mathbf{r}, t) + [\phi_\mu(\mathbf{r}, t), \dot{U} U^\dagger] \right) U \quad (13.47)$$

である。\$H\$ は \$\Phi\_\mu, \nabla\Phi\_\mu\$ の積の空間積分であり、例えば

$$\begin{aligned}\int d^3r \Phi_\mu(\mathbf{r}, t) \Phi_\mu(\mathbf{r}, t) &= \int d^3r U^\dagger(t) \phi_\mu(\mathbf{r}, t) U(t) U^\dagger(t) \phi_\mu(\mathbf{r}, t) U(t) \\ &= U^\dagger(t) \left( \int d^3r \phi_\mu(\mathbf{r}, t) \phi_\mu(\mathbf{r}, t) \right) U(t)\end{aligned}$$

であるから \$H(\Phi) = U^\dagger(t) H(\phi) U(t)\$ になる。\$H\$ は場の汎関数である。\$H\_0(\phi)\$ と \$H(\Phi)\$ は時間に依存しないが、\$H(\phi)\$ は時間に依存するから \$H(\phi, t)\$ と書く。

$$[\Phi_\mu(\mathbf{r}, t), H(\Phi)] = [U^\dagger \phi_\mu(\mathbf{r}, t) U, U^\dagger H(\phi, t) U] = U^\dagger [\phi_\mu(\mathbf{r}, t), H(\phi, t)] U$$

ハイゼンベルグの運動方程式 \$i\hbar \dot{\Phi}\_\mu(\mathbf{r}, t) = [\Phi\_\mu(\mathbf{r}, t), H(\Phi)]\$ は

$$i\hbar \left( \dot{\phi}_\mu(\mathbf{r}, t) + [\phi_\mu(\mathbf{r}, t), \dot{U} U^\dagger] \right) = [\phi_\mu(\mathbf{r}, t), H(\phi, t)]$$

になる。\$H(\phi, t) = H\_0(\phi) + H\_{\text{int}}(\phi, t)\$ と \$i\hbar \dot{\phi}\_\mu(\mathbf{r}, t) = [\phi\_\mu(\mathbf{r}, t), H\_0(\phi)]\$ より

$$i\hbar [\phi_\mu(\mathbf{r}, t), \dot{U} U^\dagger] = [\phi_\mu(\mathbf{r}, t), H_{\text{int}}(\phi, t)] \quad (13.48)$$

\$i\hbar \dot{U} U^\dagger - H\_{\text{int}}(\phi, t)\$ は全ての \$\phi\_\mu\$ と可換になるから、\$d\varepsilon/dt\$ を実関数として (演算子ではない)

$$i\hbar \dot{U} U^\dagger - H_{\text{int}}(\phi, t) = d\varepsilon/dt, \quad \text{つまり} \quad i\hbar \dot{U}(t) = (H_{\text{int}}(\phi, t) + \dot{\varepsilon}(t)) U(t)$$

になる。\$V(t) = e^{i\varepsilon(t)/\hbar} U(t)\$, \$V(t, t\_0) = V(t) V^\dagger(t\_0)\$ とすると、相互作用描像の (10.17)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} V(t, t_0) = H_{\text{int}}(\phi, t) V(t, t_0), \quad V(t_0, t_0) = 1$$

を得る。(10.25) より \$V(t, t\_0)\$ は自由場で表した \$H\_{\text{int}}(\phi, t)\$ のベキ級数で表せる。\$H\$ と同様に、場の汎関数である演算子は \$F(\Phi, t) = V^\dagger(t) F(\phi, t) V(t)\$ になるから

$$\langle f | F(\Phi, t) | i \rangle = {}_I \langle f(t) | F(\phi, t) | i(t) \rangle_I, \quad |\alpha(t)\rangle_I = V(t) |\alpha\rangle$$

と書ける。\$F(\phi, t)\$ は自由場の汎関数であり

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\alpha(t)\rangle_I = i\hbar \frac{dV}{dt} |\alpha\rangle = H_{\text{int}}(\phi, t) |\alpha(t)\rangle_I$$

は (10.29) である。以上で、ハイゼンベルグ描像から相互作用描像に移行したことになる。

\$H\_0(\phi)\$ は時間に依存しないから、\$\phi\_\mu\$ のハイゼンベルグ方程式は

$$\phi_\mu(\mathbf{r}, t) = e^{iH_0 t/\hbar} \phi_\mu(\mathbf{r}, 0) e^{-iH_0 t/\hbar}, \quad H_0 = H_0(\phi)$$

になる。これから \$F(\phi, t) = e^{iH\_0 t/\hbar} F(\phi, 0) e^{-iH\_0 t/\hbar}\$ である。行列要素は

$$\langle f | F(\Phi, t) | i \rangle = \langle f(t) | F(\phi, 0) | i(t) \rangle$$

ただし

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-iH_0 t/\hbar} V(t) |\alpha\rangle = e^{-iH_0 t/\hbar} V(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} |\alpha(t_0)\rangle$$

と表せる。これは状態がすべての時間依存を担うシュレーディンガー描像である。

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\alpha(t)\rangle = (H_0 + e^{-iH_0 t/\hbar} H_{\text{int}}(\phi, t) e^{iH_0 t/\hbar}) |\alpha(t)\rangle = (H_0 + H_{\text{int}}(\phi, 0)) |\alpha(t)\rangle$$

であるから、自由場で表した  $H(\phi, 0) = H_0 + H_{\text{int}}(\phi, 0)$  がシュレーディンガー描像でのハミルトニアンになる。時刻  $t_0$  で状態が  $|i\rangle$  のとき、時刻  $t$  で状態  $|f\rangle$  を見出す確率  $P_{if}(t)$  は

$$P_{if}(t_0, t) = \left| \langle f | e^{-iH_0 t/\hbar} V(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} | i \rangle \right|^2$$

になる。

**問題 13.6**  $\phi_\mu$  は  $A_i$  と  $\dot{A}_i$  を含むから、 $\phi = A_i$  とすると  $\Phi = U^\dagger \phi U$ ,  $\dot{\Phi} = U^\dagger \dot{\phi} U$  である。(13.47), (13.48) 及び  $\Phi = U^\dagger \phi U$  から  $\dot{\Phi} = U^\dagger \dot{\phi} U$  を導け。 $\phi = \psi_\sigma$  の場合  $\dot{\Phi} = U^\dagger \dot{\phi} U$  は成り立たない。

(13.46) より  $H_{\text{int}}(\phi, t)$  は  $H_{\text{int}}(\phi, t) = H_1(t) + H_2(t) + H_C(t)$ , ただし

$$H_1(t) = -q \int d^3r \mathbf{j}_0(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad H_2(t) = \frac{q^2}{2M} \int d^3r \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)^2$$

である。場  $\psi$ ,  $\mathbf{A}$  は自由場である。 $V(t, t_0)$  は電荷  $q$  を摂動パラメータとする摂動展開になる。 $q$  の 1 次では  $H_1$  の 1 次だけであるが、 $q$  の 2 次では  $H_1$  の 2 次と  $H_2 + H_C$  の 1 次を扱う必要がある。 $H_{\text{int}}(\phi, t)$  を自由場の生成・消滅演算子で表す。 $H_0 = H_\psi + H_{\text{em}}$  については (13.13), (13.37) である。

$$\begin{aligned} \rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) &= u_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) u_\beta(\mathbf{r}), & \rho_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= \int d^3r e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) &= \frac{i\hbar}{2M} \left( (\nabla u_\alpha^\dagger(\mathbf{r})) u_\beta(\mathbf{r}) - u_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) \nabla u_\beta(\mathbf{r}) \right) + \frac{\hbar}{2M} \nabla \times (u_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} u_\beta(\mathbf{r})) \\ \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= \int d^3r e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

とする。(13.12) より

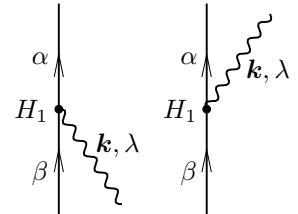
$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha\beta} e^{i\omega_{\alpha\beta}t} \rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) a_\alpha^\dagger a_\beta, \quad \mathbf{j}_0(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha\beta} e^{i\omega_{\alpha\beta}t} \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) a_\alpha^\dagger a_\beta, \quad \hbar\omega_{\alpha\beta} = E_\alpha - E_\beta$$

である。これと (13.33) から

$$H_1(t) = -\frac{q}{L^{3/2}} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_k}} \left( e^{i(\omega_{\alpha\beta}-\omega_k)t} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}\lambda} a_\alpha^\dagger a_\beta \right. \quad (13.49)$$

$$\left. + e^{i(\omega_{\alpha\beta}+\omega_k)t} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^* \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_\alpha^\dagger a_\beta \right) \quad (13.50)$$

である。(13.49) では、荷電粒子は光子を吸収 (消滅) して状態  $\beta$  から  $\alpha$  に遷移する。 $-\infty < t < \infty$  で時間積分すれば  $e^{i(\omega_{\alpha\beta}-\omega_k)t}$  は  $\delta(\omega_{\alpha\beta} - \omega_k)$  になるから  $E_\alpha = E_\beta + \hbar\omega_k$  の遷移だけ起こりエネルギー保存が成り立つ。(13.50) では、光子を放出 (生成) して荷電粒子は状態  $\beta$  から  $\alpha$  に遷移する。このとき  $E_\alpha = E_\beta - \hbar\omega_k$  である。右図にファインマン図形を示す。矢印の実線はフェルミオンの状態、波線は光子の状態を表し、下から上に向かって時間が経過する。 $H_2$  は



(13.49)

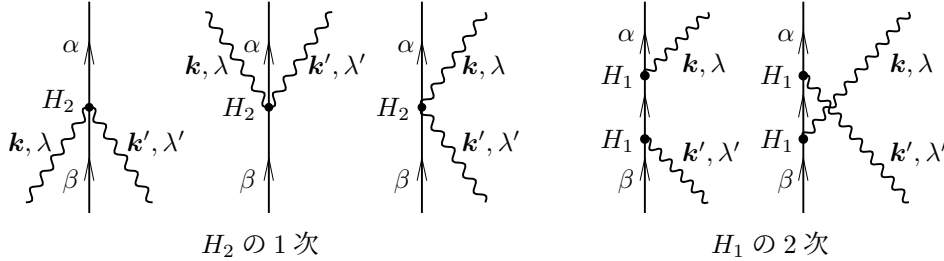
(13.50)

$$\begin{aligned} H_2(t) &= \frac{\hbar q^2}{4M\varepsilon_0 L^3} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{e^{i\omega_{\alpha\beta}t}}{\sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \left( e^{-i(\omega_k + \omega_{k'})t} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}'\lambda'} \rho_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{k}') b_{\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}'\lambda'} \right. \\ &\quad + e^{i(\omega_k + \omega_{k'})t} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^* \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}'\lambda'}^* \rho_{\alpha\beta}(-\mathbf{k} - \mathbf{k}') b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger \\ &\quad \left. + 2 e^{i(\omega_k - \omega_{k'})t} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^* \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}'\lambda'} \rho_{\alpha\beta}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}'\lambda'} \right) a_\alpha^\dagger a_\beta \end{aligned}$$

最後の行では

$$b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}'\lambda'} + b_{\mathbf{k}'\lambda'} b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger = 2b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}'\lambda'} + \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Rightarrow 2b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}'\lambda'}$$

とした。2光子の吸収・放出を伴う荷電粒子の遷移と光子・荷電粒子の散乱である。同じ過程は  $H_1$  の2次、つまり、前図を2つ組み合わせても起こる。光子・荷電粒子散乱に対しては下の右図である。



クーロンエネルギーに対応する  $H_C$  は (13.42) から

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} e^{i(\omega_{\alpha\delta} + \omega_{\beta\gamma})t} V_{\alpha\beta,\delta\gamma}^{(c)} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma a_\delta, \quad V_{\alpha\beta,\delta\gamma}^{(c)} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r d^3r' \frac{\rho_{\alpha\delta}(\mathbf{r}) \rho_{\beta\gamma}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = V_{\beta\alpha,\gamma\delta}^{(c)}$$

になる。クーロンポテンシャルにより2粒子は散乱され、状態  $\gamma, \delta$  から  $\alpha, \beta$  に遷移する。

**問題 13.7** 2粒子系  $a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle$  における  $H_C$  の期待値が  $\langle 0 | a_2 a_1 H_C a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle = V_{12,12}^{(c)} - V_{12,21}^{(c)}$  になることを示せ。 $V_{12,12}^{(c)}$  は直接積分、 $V_{12,21}^{(c)}$  は交換積分である。

#### 例題 双極子遷移

水素原子中の電子を考える。(13.6) の  $V(\mathbf{r})$  は  $V(\mathbf{r}) = -\alpha\hbar c/r$  であり  $q = -e$  である。励起状態  $a_i^\dagger |0\rangle$  にある電子が、光子  $|\mathbf{k}, \lambda\rangle = b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger |0\rangle$  を放出してエネルギーの低い状態  $a_f^\dagger |0\rangle$  に遷移する確率を求める。始状態は  $|i\rangle = a_i^\dagger |0\rangle$ 、終状態は  $|f\rangle = b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_f^\dagger |0\rangle$  であるから、遷移確率は

$$P_{if}(t_0, t) = |\langle f | V(t, t_0) | i \rangle|^2, \quad V(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_{\text{int}}(\phi, t') + \dots$$

である。 $q$  について1次の摂動では、(13.50) だけが  $|i\rangle = a_i^\dagger |0\rangle \rightarrow |f\rangle = b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_f^\dagger |0\rangle$  の遷移を引き起こす。 $t_0 \rightarrow -\infty, t \rightarrow +\infty$  とすれば

$$\begin{aligned} \langle f | V(t, t_0) | i \rangle &= -\frac{q}{i\hbar L^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_{\alpha\beta} \sum_{\lambda'=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}'} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_{\mathbf{k}'}}} e^{i(\omega_{\alpha\beta} + \omega_{\mathbf{k}'})t'} \mathbf{e}_{\mathbf{k}'\lambda'}^* \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}') \\ &\quad \mathbf{e}_{\mathbf{k}'\lambda'} \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}') \langle 0 | a_f b_{\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger a_\alpha^\dagger a_\beta a_i^\dagger |0\rangle \\ &= -\frac{q}{i\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{4\pi\epsilon_0\omega_k}} \frac{(2\pi)^{3/2}}{L^{3/2}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^* \cdot \mathbf{j}_{fi}(-\mathbf{k}) \delta(\omega_{fi} + \omega_k) \end{aligned}$$

$j_{if}^*(\mathbf{k}) = j_{fi}(-\mathbf{k})$  であるから

$$P_{if} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar \omega_k} \frac{(2\pi)^3}{L^3} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{j}_{if}(\mathbf{k})|^2 \left( \delta(\omega_{fi} + \omega_k) \right)^2$$

(10.42) より単位時間当たりの遷移確率  $p_{if}$  は

$$p_{if} = \frac{1}{2\pi} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar \omega_k} \frac{(2\pi)^3}{L^3} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{j}_{if}(\mathbf{k})|^2 \delta(\omega_{fi} + \omega_k)$$



になる。 $\delta(\omega_{fi} + \omega_k)$  はエネルギー保存則であり  $\hbar\omega_k = \hbar c|\mathbf{k}| = E_i - E_f$  になる。 $\mathbf{k}$  の大きさは決まるが、方向は任意である。可能な状態  $|\mathbf{k}, \lambda\rangle$  について  $p_{if}$  を足し合わせると、単位時間当たりの全遷移確率  $W_{if}$  になる。(10.64) より  $\mathbf{k}$  近傍の微小領域  $d^3k$  における運動量状態の数は

$$\frac{L^3}{(2\pi)^3} d^3k = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{1}{c^3} d\omega_k \omega_k^2 d\Omega_k$$

であるから

$$W_{if} = \sum_{\lambda=\pm 1} \frac{1}{c^3} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d\omega_k \omega_k^2 d\Omega_k p_{if} = \frac{\alpha \omega_{if}}{2\pi c^2} \sum_{\lambda=\pm 1} \int d\Omega_k |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{j}_{if}(\mathbf{k})|^2$$

ただし  $\alpha = q^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$  は微細構造定数である。 $W_{if}$  は仮想的な箱の大きさ  $L$  に依存しない。

$\mathbf{j}_{if}(\mathbf{k})$  を軌道部分  $\mathbf{j}_{if}^{(0)}(\mathbf{k})$  とスピン部分  $\mathbf{j}_{if}^{(\sigma)}(\mathbf{k})$  に分け  $\mathbf{j}_{if}(\mathbf{k}) = \mathbf{j}_{if}^{(0)}(\mathbf{k}) + \mathbf{j}_{if}^{(\sigma)}(\mathbf{k})$  とする。ただし

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{if}^{(0)}(\mathbf{k}) &= \frac{i\hbar}{2M} \int d^3r e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left( (\nabla u_i^\dagger(\mathbf{r})) u_f(\mathbf{r}) - u_i^\dagger(\mathbf{r}) \nabla u_f(\mathbf{r}) \right) \\ \mathbf{j}_{if}^{(\sigma)}(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar}{2M} \int d^3r e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla \times \left( u_i^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} u_f(\mathbf{r}) \right) = \frac{i\hbar}{2M} \int d^3r e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_i^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k} u_f(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

である。積分に寄与する領域を評価する。水素原子の場合  $\hbar\omega_{if} = \hbar c|\mathbf{k}| < \alpha^2 M c^2/2$  である。波動関数の広がり (6.41) の期待値  $\langle r \rangle$  の2倍程度であるから、 $u_i$  の主量子数を  $n$  とすると、積分に寄与する領域は

$$kr \lesssim \frac{\alpha^2 M c^2}{2\hbar c} 2n^2 \frac{\hbar}{\alpha M c} = \alpha n^2 \approx \frac{n^2}{137}$$

$n \ll 10$  ならば  $kr \ll 1$  になり  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$  としてよい。これから

$$\mathbf{j}_{if}^{(\sigma)}(\mathbf{k}) \approx \frac{i\hbar}{2M} \int d^3r u_i^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k} u_f(\mathbf{r}) = \frac{i\hbar}{2M} \langle u_i | \boldsymbol{\sigma} | u_f \rangle \times \mathbf{k}$$

$u_i$  と  $u_f$  の軌道部分の状態が異なる場合  $\langle u_i | \boldsymbol{\sigma} | u_f \rangle = 0$  になるから  $\mathbf{j}_{if}^{(\sigma)}(\mathbf{k})$  は無視する。

$$\mathbf{j}_{if}^{(0)}(\mathbf{k}) \approx -\frac{i\hbar}{M} \int d^3r u_i^\dagger(\mathbf{r}) \nabla u_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{M} \langle u_i | \mathbf{p} | u_f \rangle, \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla$$

$[\mathbf{r}, h] = i\hbar \mathbf{p}/M$  より

$$\mathbf{j}_{if}^{(0)}(\mathbf{k}) \approx \frac{1}{i\hbar} \langle u_i | [\mathbf{r}, h] | u_f \rangle = \frac{E_f - E_i}{i\hbar} \langle u_i | \mathbf{r} | u_f \rangle = i\omega_{if} \mathbf{d}, \quad \mathbf{d} = \langle u_i | \mathbf{r} | u_f \rangle$$

になる。(13.28) より

$$\sum_{\lambda=\pm 1} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{d}|^2 = \sum_{mn} \sum_{\lambda=\pm 1} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_m (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_n^* d_m d_n^* = \sum_{mn} \left( \delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{k^2} \right) d_m d_n^*$$

であるから

$$W_{if} = \frac{\alpha \omega_{if}^3}{2\pi c^2} \int d\Omega_k \sum_{\lambda=\pm 1} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{d}|^2 = \frac{\alpha \omega_{if}^3}{2\pi c^2} \sum_{mn} 4\pi \left( \delta_{mn} - \frac{1}{3} \delta_{mn} \right) d_m d_n^* = \frac{4\alpha \omega_{if}^3}{3c^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}^*$$

になる。(5.30) より

$$\mathbf{r} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{\mu=0,\pm 1} (-1)^\mu r Y_{1\mu}(\theta, \phi) \mathbf{e}_{-\mu}, \quad \mathbf{e}_{\pm 1} = \mp \frac{\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y}{\sqrt{2}}, \quad \mathbf{e}_0 = \mathbf{e}_z$$

と表せる。 $\mathbf{e}_\mu^* \cdot \mathbf{e}_\nu = \delta_{\mu\nu}$  であるから

$$W_{if} = \frac{4\alpha\omega_{if}^3}{3c^2} \frac{4\pi}{3} \sum_{\mu} |d_{\mu}|^2, \quad d_{\mu} = \langle u_i | r Y_{1\mu} | u_f \rangle$$

$\mathbf{r}$  はスピン状態を変えないから、軌道部分の状態だけ考えればよい。このとき

$$d_{\mu} = \int_0^{\infty} dr r \chi_{n_i \ell_i}(r) \chi_{n_f \ell_f}(r) \int d\Omega Y_{\ell_i m_i}^* Y_{1\mu} Y_{\ell_f m_f}, \quad \text{ただし } u(\mathbf{r}) = \frac{\chi_{n\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

である。

基底状態への遷移の場合  $n_f = 1, \ell_f = m_f = 0$  より

$$d_{\mu} = \int_0^{\infty} dr r \chi_{n_i \ell_i}(r) \chi_{10}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int d\Omega Y_{\ell_i m_i}^* Y_{1\mu} = \frac{\delta_{\ell_i 1} \delta_{m_i \mu}}{\sqrt{4\pi}} \int_0^{\infty} dr r \chi_{n_i \ell_i}(r) \chi_{10}(r)$$

したがって

$$W_{if} = \frac{4\alpha\omega_{if}^3}{9c^2} I_{n_i}^2 \delta_{\ell_i 1}, \quad I_n = \int_0^{\infty} dr r \chi_{n1}(r) \chi_{10}(r)$$

1 次の摂動で  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \approx 1$  の近似では、 $\ell = 1$  の状態だけが基底状態に遷移する。 $\ell = 1$  で最も低励起の状態は  $n = 2$  である。(6.37), (6.39) より

$$I_2 = \frac{1}{\sqrt{6} a^4} \int_0^{\infty} dr r^4 e^{-3r/(2a)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{2^8}{3^4} a, \quad a = \frac{\hbar}{\alpha M c}$$

$\hbar\omega_{if} = E_{2p} - E_{1s} = 3\alpha^2 M c^2 / 8$  であるから、 $2p \rightarrow 1s$  の単位時間当たりの遷移確率は

$$W_{if} = \frac{2^8}{3^8} \frac{M c^2}{\hbar} \alpha^5$$

(6.43) の値を代入すると  $W_{if} = 6.267 \times 10^8 \text{ sec}^{-1}$  である。寿命は  $\tau = 1/W_{if} = 1.596 \times 10^{-9} \text{ sec}$  になり、実験値  $\tau_{\text{exp}} = 1.60 \times 10^{-9} \text{ sec}$  を再現する。

## 14 ブラ・ケットによる量子力学の定式化

### 14.1 ブラベクトルとケットベクトル

量子力学の状態はヒルベルト空間と呼ばれるベクトル空間内のベクトルである。このベクトルを普通の3次元ベクトルと同様に  $\alpha$ ,  $\vec{\alpha}$  などで表わしてもよい。しかし、量子力学を定式化する場合、ディラックにより導入されたブラとケットの表記法を用いた方が、簡潔で見通しのよい方法を与える。状態ベクトルを  $|\alpha\rangle$  と書く。ただし、 $\alpha$  は複数のベクトルを区別するためのラベルである。このベクトルを**ケットベクトル** (ket vector) という。ケットベクトルは物理状態の情報を完全に含んでいると仮定する。ケットベクトルからどのようにして物理情報を引き出すかは次第に明らかになる。また、ケットと波動関数の関係についてはこの章の最後で述べる。ここでは、 $|\alpha\rangle$  なる抽象的なもので量子力学の状態が記述できるということを認めればよい。

ここで次の仮定をする。

1. 任意の物理状態は1つのケットベクトルに対応する。状態が他の幾つかの状態の重ね合わせである場合、その状態に対応するケットもそれらの幾つかの状態に対応するケットの1次結合として表わされ、そしてこの逆も成り立つ。
2. ある状態をそれ自身と重ね合わせても、もとの状態が再び現れるにすぎない。もとの状態を表わすケットを  $|\alpha\rangle$  とすると、それ自身と重ね合わせた状態は

$$c_1|\alpha\rangle + c_2|\alpha\rangle = (c_1 + c_2)|\alpha\rangle, \quad (c_1, c_2 \text{ は複素数})$$

である。したがって、ケットにゼロでない任意の複素数を掛けたケットは前と同じ状態を表わし、物理状態はケットの大きさに依らずに方向だけで決まる。ケットにゼロをかけてできるケットを**零ケット**という。

ケットベクトル空間と対をなす別のベクトル空間が存在することを要請する。この空間のベクトルを**ブラベクトル** (bra vector) と呼ぶ。任意のケット  $|\alpha\rangle$  に対して  $\langle\alpha|$  と書かれる1つのブラが対応する。 $c$  を複素数とすると  $c|\alpha\rangle$  に対応するブラベクトルは  $c\langle\alpha|$  ではなく  $c^*\langle\alpha|$  とする。ケットとブラの関係は列ベクトルと行ベクトル

$$\mathbf{A} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \iff \mathbf{A}^\dagger = (a_1^* \ a_2^* \ a_3^* \ \cdots)$$

の関係に似ている。ブラとケットは別空間のベクトルであるから、 $|\alpha\rangle + \langle\beta|$  は無意味である。

**内積**をブラベクトルとケットベクトルから作られる複素数であると定義する。ブラベクトルが  $\langle\alpha|$ 、ケットベクトルが  $|\beta\rangle$  のとき、内積を  $\langle\alpha|\beta\rangle$  で表わす。上の行列との対応関係で言えば

$$(a_1^* \ a_2^* \ a_3^* \ \cdots) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = a_1^*b_1 + a_2^*b_2 + a_3^*b_3 + \cdots$$

を考えることに相当する。内積の基本的性質として次のことを要請する。

1.  $\langle\alpha|(c|\beta\rangle + c'|\beta'\rangle) = c\langle\alpha|\beta\rangle + c'\langle\alpha|\beta'\rangle$ ,  $(c\langle\beta| + c'\langle\beta'|)|\alpha\rangle = c\langle\beta|\alpha\rangle + c'\langle\beta'|\alpha\rangle$

2.  $\langle \alpha | \alpha \rangle$  は実数で

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0 \quad (\text{等号は} |\alpha\rangle \text{ が零ケットのときのみ})$$

が成り立つとする。 $\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}$  を  $|\alpha\rangle$  のノルムという。

3.  $|\beta\rangle = c|\alpha\rangle$  とすると  $\langle \beta | = c^* \langle \alpha |$  であるから  $\langle \beta | \alpha \rangle = c^* \langle \alpha | \alpha \rangle$  である。 $\langle \alpha | \alpha \rangle$  は実数であるから

$$\langle \beta | \alpha \rangle^* = c \langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle$$

になる。そこで、一般に任意のベクトルに対して

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^* \quad (14.1)$$

とする。これは通常の実ベクトルの内積  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}$  と異なる点である。

$|\alpha\rangle$  が零ケットでないとき、

$$|\alpha'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} |\alpha\rangle$$

とすると  $\langle \alpha' | \alpha' \rangle = 1$  である。ノルムが 1 であるケットを規格化 (normalization) されたケットという。物理状態はケットの方向だけで決まるから、物理状態を表わすケットとして規格化されたケットを使う。 $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$  であるとき、2つのベクトルは直交しているという。

## 14.2 演算子

量子力学では、粒子の位置や運動量などの力学変数は、ベクトルに作用し別のベクトルを作る演算子 (operator) として表わされる。演算子  $X$  をケットベクトル  $|\alpha\rangle$  に作用すると、別のケットベクトル  $|\alpha'\rangle$  になるが、これを

$$|\alpha'\rangle = X|\alpha\rangle$$

と書く。演算子はケットベクトルに左側から作用すると定義する。

時間反転の演算子を除くと、演算子は線形である。つまり、 $c_\alpha$  と  $c_\beta$  を複素数とすると

$$X(c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle) = c_\alpha X|\alpha\rangle + c_\beta X|\beta\rangle$$

が成り立つ。時間反転については次章で扱う。

ブラベクトル  $\langle \alpha |$  とケットベクトル  $X|\beta\rangle$  の内積  $\langle \alpha | (X|\beta\rangle)$  は  $|\beta\rangle$  について線形であるから  $\langle \alpha | (X|\beta\rangle) = \langle \alpha' | \beta \rangle$  とおける。 $\langle \alpha' |$  は  $\langle \alpha |$  に  $X$  が作用して生じたと見なせるから

$$\langle \alpha' | = \langle \alpha | X, \quad \text{つまり} \quad (\langle \alpha | X) |\beta\rangle = \langle \alpha | (X|\beta\rangle) \quad (14.2)$$

で  $\langle \alpha | X$  を定義する。ブラベクトルに対して、演算子は右側から作用し、別のブラベクトルを生成する。線形演算子はブラ、ケットのどちらに作用しても同じであるから、括弧を省略して  $\langle \alpha | X |\beta\rangle$  でよい。 $X$  はブラベクトルに対しても線形である。

一般に積の順序は交換できない。 $XY = YX$  が成り立つ特別な場合、 $X$  と  $Y$  は可換であるという。

**エルミート共役** 演算子  $X$  のエルミート共役 (Hermitian conjugate)  $X^\dagger$  を

$$\langle \beta | X^\dagger |\alpha\rangle = \langle \alpha | X |\beta\rangle^* \quad (14.3)$$

で定義する。 $|\gamma\rangle = X|\beta\rangle$  とすると

$$\langle\beta|X^\dagger|\alpha\rangle = \langle\alpha|\gamma\rangle^* = \langle\gamma|\alpha\rangle, \quad \text{したがって} \quad \langle\gamma| = \langle\beta|X^\dagger$$

であるから  $X|\beta\rangle$  に対応するブラは  $\langle\beta|X^\dagger$  であり  $\langle\beta|X$  ではない。 $X = X^\dagger$  であるとき,  $X$  はエルミート ( Hermitian ) であるという。

1. 演算子の積のエルミート共役 定義から

$$\langle\alpha|XY|\beta\rangle = \langle\beta|(XY)^\dagger|\alpha\rangle^*$$

$|\gamma\rangle = Y|\beta\rangle$  とすると  $\langle\gamma| = \langle\beta|Y^\dagger$  であるから

$$\langle\alpha|XY|\beta\rangle = \langle\alpha|X|\gamma\rangle = \langle\gamma|X^\dagger|\alpha\rangle^* = \langle\beta|Y^\dagger X^\dagger|\alpha\rangle^*$$

したがって

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger \quad (14.4)$$

になる。これを  $n$  個の演算子の積に拡張するのは簡単である。

2. (14.3) から

$$\langle\beta|(X^\dagger)^\dagger|\alpha\rangle = \langle\alpha|X^\dagger|\beta\rangle^* = \langle\beta|X|\alpha\rangle$$

つまり  $(X^\dagger)^\dagger = X$  である。

3. ブラとケットの積  $|\alpha\rangle\langle\beta|$  を考える。ブラとケットに対する作用を

$$\left(|\alpha\rangle\langle\beta|\right)|\gamma\rangle = |\alpha\rangle\langle\beta|\gamma\rangle, \quad \langle\gamma|\left(|\alpha\rangle\langle\beta|\right) = \langle\gamma|\alpha\rangle\langle\beta|$$

で定義する。 $|\alpha\rangle\langle\beta|$  はケット  $|\gamma\rangle$  から  $|\alpha\rangle$  に数  $\langle\beta|\gamma\rangle$  を掛けたケットを作る。ブラの場合も同様である。したがって,  $|\alpha\rangle\langle\beta|$  は演算子である。 $X = |\alpha\rangle\langle\beta|$  とすると

$$\langle\alpha'|X|\beta'\rangle^* = \langle\beta'|X^\dagger|\alpha'\rangle$$

であるが

$$\langle\alpha'|X|\beta'\rangle^* = (\langle\alpha'|\alpha\rangle\langle\beta|\beta'\rangle)^* = \langle\alpha|\alpha'\rangle\langle\beta'|\beta\rangle = \langle\beta'|(|\beta\rangle\langle\alpha|)|\alpha'\rangle$$

より  $X^\dagger = |\beta\rangle\langle\alpha|$ , すなわち

$$\left(|\alpha\rangle\langle\beta|\right)^\dagger = |\beta\rangle\langle\alpha|$$

である。

### 14.3 固有値と固有ベクトル

演算子  $A$  が与えられたとき次の方程式を考える:

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (14.5)$$

ここで  $a$  は単なる数である。任意の  $|\alpha\rangle$  に対して  $A|\alpha\rangle$  が  $|\alpha\rangle$  の定数倍になるわけではない。(14.5) はある特別な  $|a\rangle$  について成り立つ。 $a$  を演算子  $A$  あるいはそれに対応する力学変数の固有値 ( eigenvalue ) といい,  $|a\rangle$  を固有ケットという。また, 固有ケット  $|a\rangle$  は固有値  $a$  に属するという。(14.5) を満たす固有値  $a$  と固有ケット  $|a\rangle$  を求めることは量子力学の基本的な問題である。

量子力学では, 通常, 演算子としてエルミート演算子 ( $A^\dagger = A$ ) を扱う。以下, エルミート演算子を考える。エルミート演算子の次の2つの性質は重要である。

1. エルミート演算子の固有値は実数である。

(14.5) と  $\langle a|$  との内積をとると  $\langle a|A|a\rangle = a\langle a|a\rangle$  である。この両辺の複素共役をとり、(14.1) と  $\langle a|a\rangle$  が実数であることを使うと

$$a^*\langle a|a\rangle = \langle a|A|a\rangle^* = \langle a|A^\dagger|a\rangle = \langle a|A|a\rangle = a\langle a|a\rangle$$

である。したがって、 $a = a^*$  になるから  $a$  は実数である。

2. エルミート演算子の異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する。

$A$  の 2 つの固有値を  $a, a'$  とする:

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (14.6)$$

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \quad (14.7)$$

$A^\dagger = A$  及び  $a'$  が実数であることを使うと、2 番目の式から

$$\langle a'|A = a'\langle a'| \quad (14.8)$$

(14.6) に  $\langle a'|$  を掛けると  $\langle a'|A|a\rangle = a'\langle a'|a\rangle$  であり、(14.8) に  $|a\rangle$  を掛けると  $\langle a'|A|a\rangle = a\langle a'|a\rangle$  である。この 2 式の差をとると

$$(a - a')\langle a'|a\rangle = 0$$

したがって、 $a \neq a'$  ならば  $\langle a'|a\rangle = 0$  であり、 $|a\rangle$  と  $|a'\rangle$  は直交する。クロネッカーのデルタ記号

$$\delta_{a'a} = \begin{cases} 1, & a' = a \text{ のとき} \\ 0, & a' \neq a \text{ のとき} \end{cases}$$

を用いれば、直交性は

$$\langle a'|a\rangle = \delta_{a'a}\langle a|a\rangle$$

になる。固有ケットが  $\langle a|a\rangle = 1$  と規格化されているならば

$$\langle a'|a\rangle = \delta_{a'a} \quad (14.9)$$

である。

物理系を数学的に表現するために、これまでいくつかの仮定を設けた。このような理論形式が自然を記述するには、観測結果と数学的形式を結び付ける必要がある。そこで、以下のような仮定を更に設定する:

1. 力学変数  $A$  を観測すると、系の状態は  $A$  の様々な固有状態の中のある 1 つに跳び移る。このとき、その固有状態の固有値が  $A$  の観測値になる。どの固有状態になるかはあらかじめ分らないが、ある固有値  $a$  を得る確率は

$$|\langle a|\alpha\rangle|^2$$

で与えられる。ここで、 $|\alpha\rangle$  は観測前の系の状態ベクトルであり、 $|a\rangle, |\alpha\rangle$  は規格化されているとする。

2. 観測値は常に実数であるから、固有値は実数でなければならない。これは、力学変数がエルミートであれば満たされる。そこで、力学変数はエルミートであると仮定する。

3. 力学変数の固有ケットの組みは**完全系** ( complete system ) をなす, つまり, 任意のケット  $|\alpha\rangle$  は固有ケットだけで展開できると仮定する。

$$|\alpha\rangle = \sum_a c_a |a\rangle \quad (14.10)$$

である。(14.9) を使うと

$$\langle a|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} \langle a|a'\rangle = \sum_{a'} c_{a'} \delta_{aa'} = c_a \quad (14.11)$$

になるから, 観測値が  $a$  である確率は  $|c_a|^2$  である。任意の固有状態へ跳び移れる可能性を保証するには, (14.10) の展開はすべての固有ケットを含まねばならない。このため, 固有ケットの組みが完全系をなすという仮定が必要になる。

2. と 3. の条件を満たす力学変数を特に**観測量**とか**オブザーバブル** ( observable ) とよぶ。

(14.11) を (14.10) に代入すると

$$|\alpha\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|\alpha\rangle = \left( \sum_a |a\rangle \langle a| \right) |\alpha\rangle$$

$|\alpha\rangle$  は任意のケットであるからエルミート演算子  $\sum_a |a\rangle \langle a|$  は恒等演算子

$$\sum_a |a\rangle \langle a| = 1 \quad (14.12)$$

である。これを**完備性** ( completeness ) といい,  $A$  の固有ケットの組みが完全系であることを表わす。完備性を使うと, すべての確率の和は

$$\sum_a |\langle a|\alpha\rangle|^2 = \sum_a \langle \alpha|a\rangle \langle a|\alpha\rangle = \langle \alpha| \left( \sum_a |a\rangle \langle a| \right) |\alpha\rangle = \langle \alpha|\alpha\rangle = 1$$

になる。また,  $|\alpha\rangle$  における  $A$  の期待値 (平均値)  $\langle A \rangle_\alpha$  は

$$\langle A \rangle_\alpha = \sum_a a |\langle a|\alpha\rangle|^2 = \sum_a a \langle \alpha|a\rangle \langle a|\alpha\rangle = \sum_a \langle \alpha|A|a\rangle \langle a|\alpha\rangle = \langle \alpha|A|\alpha\rangle \quad (14.13)$$

である。

(14.9) と (14.12) は固有ケットの組みが完全規格直交系であることを表わす。完全規格直交系をなすケットの組みは, 普通の 3 次元空間における互いに直交する 3 つの単位ベクトル  $\mathbf{e}_i$  の組みと同じ役割をする。固有ケットの規格直交性 (14.9) は, 単位ベクトル  $\mathbf{e}_i$  の規格直交性  $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}$  に対応する。任意のベクトル  $\mathbf{A}$  の  $i$  成分  $A_i$  は  $A_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A}$  であるから

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^3 A_i \mathbf{e}_i = \sum_i \mathbf{e}_i (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A})$$

と展開できる。これに対応するのは

$$|\alpha\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|\alpha\rangle$$

である。完全規格直交系をなす固有ケットの組は, ヒルベルト空間の基底ベクトルをなす。

**問題 14.1** 2つのケットベクトル  $|1\rangle, |2\rangle$  が完全規格直交系をなす場合を考える。 $E_0, \lambda$  を実数の定数としたとき

$$H = E_0|1\rangle\langle 1| - E_0|2\rangle\langle 2| + \lambda(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

とする。

1. 演算子  $H$  がエルミートであることを示せ。
2.  $|1\rangle, |2\rangle$  は完全系をなすから、 $H$  の固有ケットは  $c_1, c_2$  を定数として

$$c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$$

と表わすことができる。 $H$  の固有値と固有ケットを求めよ。

#### 14.4 行列表現

行列による表示法を明確にするため、この節だけ完全規格直交系の状態ベクトルを  $1, 2, \dots$  の番号で指定し

$$\alpha_i = \langle i|\alpha\rangle, \quad X_{ij} = \langle i|X|j\rangle, \quad i, j = 1, 2, 3, \dots$$

などと記す。 $|i\rangle$  は完全規格直交系ならば何でもよい。

量子力学は行列形式で表現できる。

$$\alpha \equiv \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \alpha^\dagger = (\alpha_1^* \quad \alpha_2^* \quad \dots), \quad X \equiv \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \dots \\ X_{21} & X_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

とすると、例えば

$$\langle \alpha|X|\beta\rangle = \sum_{ij} \langle \alpha|i\rangle \langle i|X|j\rangle \langle j|\beta\rangle = \alpha^\dagger X \beta$$

になる。また、 $|\beta\rangle = X|\alpha\rangle$  は  $\langle i|\beta\rangle = \langle i|X|\alpha\rangle = \sum_j \langle i|X|j\rangle \langle j|\alpha\rangle$  より

$$\beta_i = \sum_j X_{ij} \alpha_j = (X\alpha)_i \quad \text{つまり} \quad \beta = X\alpha$$

である。したがって

演算子  $\rightarrow$  行列, ケット  $\rightarrow$  列ベクトル, ブラ  $\rightarrow$  行ベクトル

を対応させれば、量子力学を行列形式で定式化できる。この表現では基底ケット  $|i\rangle$  は

$$|1\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |2\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \dots$$

に対応し、単位ベクトルになる。

オブザーバブル  $A$  の固有ケット  $|a\rangle$  と固有値  $a$

$$A|a\rangle = a|a\rangle$$



を求めよう。  $|a\rangle$  に対応する列ベクトルを  $\mathbf{a}$  とすると

$$\mathbf{A}\mathbf{a} = a\mathbf{a}, \quad A_{ij} = \langle i|A|j\rangle \quad (14.14)$$

である。  $A$  がエルミート演算子であるとき

$$A_{ij}^* = \langle i|A|j\rangle^* = \langle j|A^\dagger|i\rangle = \langle j|A|i\rangle = A_{ji}$$

であるから、行列  $\mathbf{A}$  はエルミート行列である。(14.14) はエルミート行列の固有値問題である。したがって、固有値  $a$  は行列式

$$\det(A_{ij} - a\delta_{ij}) = 0$$

から求まる。

**問題 14.2** 問題 14.1 で

$$|1\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

としたとき、 $H$  に対応する行列を求めよ。また、 $H$  の固有ケットを基底としたときについても求めよ。

## 14.5 可換な観測量

2つの観測量  $A, B$  が可換な場合を考える。 $AB - BA = 0$  であるから

$$\langle a'|(AB - BA)|a\rangle = (a' - a)\langle a'|B|a\rangle = 0$$

したがって、

$$\langle a'|B|a\rangle = \delta_{a'a}\langle a|B|a\rangle$$

である。両辺に  $|a'\rangle$  を掛け  $a'$  について和をとると

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|B|a\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \delta_{a'a} \langle a|B|a\rangle = |a\rangle \langle a|B|a\rangle$$

(14.12) を使うと

$$B|a\rangle = |a\rangle \langle a|B|a\rangle$$

になる。したがって、 $|a\rangle$  は  $A$  の固有ケットであると同時に、固有値が  $b = \langle a|B|a\rangle$  である  $B$  の固有ケットでもある。 $A$  と  $B$  の同時固有ケットであること明確にするために  $|a, b\rangle$  と書くことにする。

$$A|a, b\rangle = a|a, b\rangle, \quad B|a, b\rangle = b|a, b\rangle$$

である。

固有値  $a$  に属する固有ケットが1つしかない場合、固有ケットは  $|a\rangle$  と書けば一意に指定できるから、 $|a, b\rangle$  の  $b$  は必要ない。しかし、1次独立な2つ以上の固有ケットが同じ固有値  $a$  に属する場合(縮退 (degeneracy)), 縮退した各々の固有ケットの  $b$  は一般には異なるから、 $b$  を指定することで縮退した固有ケットを区別できる。 $a$  と  $b$  を指定すると  $|a, b\rangle$  がただ一つに決まるとき、規格直交性と完備性は

$$\langle a, b|a', b'\rangle = \delta_{aa'}\delta_{bb'}, \quad \sum_{a,b} |a, b\rangle \langle a, b| = 1$$

になる。これは、3つ以上の互いに可換な観測量がある場合にも一般化できる。可換な観測量の最大の集合が分かったとする。これらの演算子  $A, B, C, \dots$  の各々の固有値は縮退していてもよいが、1つの組み合わせ  $a, b, c, \dots$  を指定すると、 $A, B, C, \dots$  の同時固有ケット  $|a, b, c, \dots\rangle$  がただ1つ決まるとする。このとき、規格直交性と完備性は

$$\langle a, b, c, \dots | a', b', c', \dots \rangle = \delta_{aa'} \delta_{bb'} \delta_{cc'} \dots, \quad \sum_{a, b, c, \dots} |a, b, c, \dots\rangle \langle a, b, c, \dots| = 1$$

である。

$n$  個の演算子  $A_i$  が互いに可換ではあるが、固有値  $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_n)$  を指定しても同時固有ケットが一意に決まらない場合を考える。 $\mathbf{a}$  とは独立な実変数  $\lambda$  を指定すると、同時固有ケットが一意に決まるとする。

$$A_i |\mathbf{a}, \lambda\rangle = a_i |\mathbf{a}, \lambda\rangle, \quad \langle \mathbf{a}, \lambda | \mathbf{a}', \lambda' \rangle = \delta_{\mathbf{a}, \mathbf{a}'} \delta_{\lambda \lambda'}$$

である。ここで、エルミート演算子

$$A = \sum_{\mathbf{a}, \lambda} \lambda |\mathbf{a}, \lambda\rangle \langle \mathbf{a}, \lambda|$$

を考えると

$$A |\mathbf{a}, \lambda\rangle = \sum_{\mathbf{a}', \lambda'} \lambda' |\mathbf{a}', \lambda'\rangle \langle \mathbf{a}', \lambda' | \mathbf{a}, \lambda\rangle = \lambda |\mathbf{a}, \lambda\rangle$$

であり  $|\mathbf{a}, \lambda\rangle$  は  $A$  の固有ケットでもある。

$$A_i A = \sum_{\mathbf{a}, \lambda} \lambda a_i |\mathbf{a}, \lambda\rangle \langle \mathbf{a}, \lambda| = \sum_{\mathbf{a}, \lambda} \lambda |\mathbf{a}, \lambda\rangle \langle \mathbf{a}, \lambda| A_i = A A_i$$

になるから、 $n$  個の  $A_i$  と  $A$  が可換な観測量の最大の集合である。

## 14.6 連続的固有値

これまで考えてきた観測量は、固有値が離散的であると仮定してきた。しかし、位置や運動量などは連続的固有値をとる。ここで、離散的固有値で得られた結果を連続的な場合に拡張する。

連続的固有値をとる観測量を  $Q$ 、固有値を  $q$  とする。固有値方程式 (14.5) は

$$Q|q\rangle = q|q\rangle$$

である。ここで  $f(q)$  と  $g(q)$  を連続関数として

$$|\alpha\rangle = \int dq f(q) |q\rangle, \quad |\beta\rangle = \int dq g(q) |q\rangle \quad (14.15)$$

を考える。積分範囲は固有値  $q$  が存在する領域である。内積は

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \int dq f^*(q) \int dq' g(q') \langle q | q' \rangle = \int dq f^*(q) G(q), \quad G(q) = \int dq' g(q') \langle q | q' \rangle$$

になる。離散的固有値の場合と同様に、 $q' \neq q$  のとき  $\langle q | q' \rangle = 0$  である。したがって、 $\langle q | q \rangle$  が有限ならば  $G(q) = 0$  になり、常に  $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$  となってしまう。 $\langle \alpha | \beta \rangle$  がゼロ以外の値を取りうるためには、 $\langle q | q \rangle$  は無限大であってしかも  $G(q)$  を有限にする程度のものでなければならない。このた

め, 連続的固有値の場合の固有ケットの規格化は, (14.9) のクロネッカー記号の代わりにディラックのデルタ関数を使い

$$\langle q | q' \rangle = \delta(q - q') \quad (14.16)$$

とする。すると  $G(q) = g(q)$  であるから

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \int dq f^*(q) g(q)$$

となり, ゼロ以外の値になりうる。

$|q\rangle$  が完全系であるならば, 任意のケット  $|\alpha\rangle$  は (14.15) の様に展開できる。このとき

$$\langle q | \alpha \rangle = \int dq' f(q') \langle q | q' \rangle = \int dq' f(q') \delta(q - q') = f(q)$$

これから

$$|\alpha\rangle = \int dq |q\rangle f(q) = \int dq |q\rangle \langle q | \alpha \rangle$$

つまり

$$\int dq |q\rangle \langle q| = 1 \quad (14.17)$$

になる。これが連続的固有値の場合の完備性である。

連続的固有値を  $\Delta$  の微小な幅で離散化し  $q_k = k\Delta$  とする。(14.16), (14.17) は

$$\langle q_i | q_j \rangle = \frac{\delta_{ij}}{\Delta}, \quad \Delta \sum_i |q_i\rangle \langle q_i| = 1$$

になるから  $|\bar{q}_i\rangle = \sqrt{\Delta} |q_i\rangle$  とすると

$$\langle \bar{q}_i | \bar{q}_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_i |\bar{q}_i\rangle \langle \bar{q}_i| = 1, \quad |\alpha\rangle = \sum_i |\bar{q}_i\rangle \langle \bar{q}_i | \alpha \rangle$$

であり, 離散的固有値の場合と同じになる。 $Q$  を測定して  $q_i$  を得る確率は  $|\langle \bar{q}_i | \alpha \rangle|^2 = |\langle q_i | \alpha \rangle|^2 \Delta$  になる。したがって, 連続的固有値の場合,  $Q$  を観測したとき, 観測値を  $q$  と  $q + dq$  の微小区間に見出す確率は

$$|\langle q | \alpha \rangle|^2 dq$$

である。完備性 (14.17) から全確率は

$$\int dq |\langle q | \alpha \rangle|^2 = \int dq \langle \alpha | q \rangle \langle q | \alpha \rangle = \langle \alpha | \left( \int dq |q\rangle \langle q| \right) | \alpha \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle = 1$$

である。 $|\alpha\rangle$  における  $Q$  の期待値  $\langle Q \rangle_\alpha$  は

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_\alpha &= \int dq q |\langle q | \alpha \rangle|^2 = \int dq q \langle \alpha | q \rangle \langle q | \alpha \rangle \\ &= \int dq \langle \alpha | Q | q \rangle \langle q | \alpha \rangle = \langle \alpha | Q \left( \int dq |q\rangle \langle q| \right) | \alpha \rangle \\ &= \langle \alpha | Q | \alpha \rangle \end{aligned}$$

となり, 離散的固有値の場合の結果 (14.13) に一致する。

## 14.7 位置と運動量, 波動関数

簡単のため1次元を考える。位置演算子を  $\hat{x}$  とし, 運動量演算子を  $\hat{p}$  で表わす。ここでは演算子と固有値を区別するため, 演算子にハット^を付けた。 $\hat{x}$  と  $\hat{p}$  の交換関係は

$$[\hat{x}, \hat{p}] \equiv \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar \quad (14.18)$$

である。位置演算子  $\hat{x}$  の固有ケット  $|x\rangle$

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad \langle x|x'\rangle = \delta(x-x') \quad (14.19)$$

は完全系を作ると仮定する。 $\hat{x}$  は演算子であるが,  $x$  は固有値であり単なる数である。

$\partial_x = \partial/\partial x$  と略記する。

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar\partial_x\delta(x-x') \quad (14.20)$$

を示す。(14.18) より

$$\langle x|(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})|x'\rangle = (x-x')\langle x|\hat{p}|x'\rangle = i\hbar\langle x|x'\rangle = i\hbar\delta(x-x')$$

2変数関数  $F(x, x')$  が  $F(x, x) = \text{定数} = \lambda$  のとき,  $F(x, x')\delta(x-x') = \lambda\delta(x-x')$  の両辺を  $x$  で微分すると

$$F(x, x')\frac{\partial\delta(x-x')}{\partial x} = \lambda\frac{\partial\delta(x-x')}{\partial x} - \frac{\partial F(x, x')}{\partial x}\delta(x-x') \quad (14.21)$$

を得る。 $F(x, x') = x - x'$  とすれば  $(x-x')\partial_x\delta(x-x') = -\delta(x-x')$  になるから

$$(x-x')(\langle x|\hat{p}|x'\rangle + i\hbar\partial_x\delta(x-x')) = 0$$

である。これから (14.20) になりそうだが,  $x\delta(x) = 0$  を考慮すれば  $f(x)$  を任意関数として

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar\partial_x\delta(x-x') + f(x)\delta(x-x')$$

である。ただし  $\hat{p}$  はエルミート演算子であるから  $f(x)$  は実関数である。(14.19) で  $|x\rangle$  が完全に決まるわけではない。 $\theta(x)$  を任意の実関数として  $|x\rangle_\theta \equiv e^{i\theta(x)}|x\rangle$  も (14.19) を満たす。上式より

$$\theta\langle x|\hat{p}|x'\rangle_\theta = -i\hbar e^{i\theta(x')-i\theta(x)}\partial_x\delta(x-x') + f(x)\delta(x-x') \quad (14.22)$$

である。(14.21) で  $F(x, x') = e^{i\theta(x')-i\theta(x)}$  とすると  $\lambda = F(x, x) = 1$  より

$$e^{i\theta(x')-i\theta(x)}\partial_x\delta(x-x') = \partial_x\delta(x-x') + i\frac{d\theta}{dx}\delta(x-x')$$

になるから

$$\theta\langle x|\hat{p}|x'\rangle_\theta = -i\hbar\partial_x\delta(x-x') + \left(\hbar\frac{d\theta}{dx} + f(x)\right)\delta(x-x')$$

したがって

$$\hbar\frac{d\theta}{dx} + f(x) = 0, \quad \text{つまり} \quad \theta(x) = -\frac{1}{\hbar}\int dx f(x)$$

とし  $|x\rangle_\theta$  を単に  $|x\rangle$  と表せば (14.20) が成り立つ。

再度, (14.18) から

$$[\hat{x}, \hat{p}^2] = \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p} = 2i\hbar\hat{p}, \quad [\hat{x}, \hat{p}^3] = \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}^2] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p}^2 = 3i\hbar\hat{p}^2$$

同様に  $[\hat{x}, \hat{p}^n] = n i\hbar \hat{p}^{n-1}$  であるから、一般に

$$[\hat{x}, F(\hat{p})] = i\hbar F'(\hat{p}) \quad (14.23)$$

である。ただし  $F'(x)$  は  $F(x)$  の導関数である。特に  $S(x, \alpha) = e^{-i\alpha x/\hbar}$  とすると

$$[\hat{x}, S(\hat{p}, \alpha)] = \alpha S(\hat{p}, \alpha)$$

これから

$$(\hat{x}S(\hat{p}, \alpha) - S(\hat{p}, \alpha)\hat{x})|x\rangle = \hat{x}S(\hat{p}, \alpha)|x\rangle - xS(\hat{p}, \alpha)|x\rangle = \alpha S(\hat{p}, \alpha)|x\rangle$$

したがって

$$\hat{x}S(\hat{p}, \alpha)|x\rangle = (x + \alpha)S(\hat{p}, \alpha)|x\rangle$$

$S(\hat{p}, \alpha)|x\rangle$  は  $\hat{x}$  の固有ケットで固有値は  $x + \alpha$  であるから、 $|x\rangle$  の位相を適当にとれば

$$S(\hat{p}, \alpha)|x\rangle = |x + \alpha\rangle$$

になる。 $\alpha \rightarrow 0$  のとき  $S(\hat{p}, \alpha) = 1 - i\alpha\hat{p}/\hbar$  であるから

$$\hat{p}|x\rangle = i\hbar \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{|x + \alpha\rangle - |x\rangle}{\alpha} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}|x\rangle$$

したがって

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = i\hbar \partial_{x'} \langle x|x'\rangle = i\hbar \partial_{x'} \delta(x - x') = -i\hbar \partial_x \delta(x - x')$$

になり (14.20) が成り立つ。

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}^2|x'\rangle &= \int dy \langle x|\hat{p}|y\rangle \langle y|\hat{p}|x'\rangle = (-i\hbar)^2 \int dy \left( \partial_x \delta(x - y) \right) \partial_y \delta(y - x') \\ &= (-i\hbar)^2 \partial_x \int dy \delta(x - y) \partial_y \delta(y - x') \\ &= (-i\hbar \partial_x)^2 \delta(x - x') \end{aligned}$$

同様にして

$$\langle x|\hat{p}^n|x'\rangle = (-i\hbar \partial_x)^n \delta(x - x')$$

になる。一般に演算子  $F(\hat{p})$  に対しては

$$\langle x|F(\hat{p})|x'\rangle = F(-i\hbar \partial_x) \delta(x - x') \quad (14.24)$$

である。 $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$  であるから

$$\langle x|F(\hat{p})|x'\rangle = F(-i\hbar \partial_x) \langle x|x'\rangle$$

これに  $\langle x'|$  をかけ  $x'$  で積分すれば (14.24) は

$$\langle x|F(\hat{p}) = F(-i\hbar \partial_x) \langle x| \quad (14.25)$$

と表せる。したがって、任意のケット  $|\alpha\rangle$  に対して

$$\langle x|F(\hat{p})|\alpha\rangle = F(-i\hbar \partial_x) \langle x|\alpha\rangle \quad (14.26)$$

になる。一方、 $\hat{x}$  の関数  $F(\hat{x})$  は  $\langle x|F(\hat{x}) = \langle x|F(x)$  であるから

$$\langle x|F(\hat{x})|x'\rangle = F(x)\langle x|x'\rangle = F(x)\delta(x-x'), \quad \langle x|F(\hat{x})|\alpha\rangle = F(x)\langle x|\alpha\rangle \quad (14.27)$$

になる。 $F(\hat{x})$  は演算子であるが、 $F(x)$  は演算子ではなく単なる数である。

波動関数による量子力学の定式化は、基底ケットとして位置の固有ケット  $|x\rangle$  を採用した1つの表現である。この表現では、運動量演算子  $\hat{p}$  は  $-i\hbar\partial_x$  で置き換わる。

1.  $\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle$  とおく。すなわち

$$|\alpha\rangle = \int dx |x\rangle \psi_\alpha(x)$$

である。粒子を  $x$  と  $x+dx$  の間に見出す確率は

$$|\langle x|\alpha\rangle|^2 dx = |\psi_\alpha(x)|^2 dx$$

である。規格化は

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = \int dx \langle \alpha|x\rangle \langle x|\alpha\rangle = \int dx |\psi_\alpha(x)|^2 = 1$$

以上から分かるように  $\psi_\alpha(x)$  は波動関数である。波動関数は状態  $|\alpha\rangle$  を位置の固有ケット  $|x\rangle$  で展開したときの展開係数である。

2.  $\langle \beta|A|\alpha\rangle$  は

$$\langle \beta|A|\alpha\rangle = \int dx \int dx' \langle \beta|x\rangle \langle x|A|x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle = \int dx \int dx' \psi_\beta^*(x) \langle x|A|x'\rangle \psi_\alpha(x')$$

である。波動関数により  $\langle \beta|A|\alpha\rangle$  を求めるには、一般に非局所的な2点  $x$  と  $x'$  の関数  $\langle x|A|x'\rangle$  が必要である。しかし、 $A$  が  $\hat{x}$  または  $\hat{p}$  の関数の場合には、(14.26) と (14.27) から

$$\begin{aligned} \langle \beta|F(\hat{x})|\alpha\rangle &= \int dx \langle \beta|x\rangle \langle x|F(\hat{x})|\alpha\rangle = \int dx \psi_\beta^*(x) F(x) \psi_\alpha(x) \\ \langle \beta|F(\hat{p})|\alpha\rangle &= \int dx \langle \beta|x\rangle \langle x|F(\hat{p})|\alpha\rangle = \int dx \psi_\beta^*(x) F(-i\hbar\partial_x) \psi_\alpha(x) \end{aligned} \quad (14.28)$$

と簡単になる。

3. 時刻  $t$  におけるケットを  $|t\rangle$  とすると、 $|t\rangle$  の時間変化は

$$\left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right) |t\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |t\rangle \quad (14.29)$$

から求まる。ここで、 $m$  は粒子の質量、 $V$  はポテンシャルである。この式と  $\langle x|$  の内積をとると、(14.26) と (14.27) から

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t), \quad \psi(x, t) = \langle x|t\rangle \quad (14.30)$$

になる。これはシュレーディンガーの波動方程式に他ならない。(14.28), (14.30) から分かるように、基底ケットとして位置の固有ケットを用いた場合、演算子  $\hat{p}$  は  $-i\hbar\partial_x$  に置き換わる。

4. 運動量  $\hat{p}$  の固有ケット  $|p\rangle$

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad (14.31)$$

の固有関数  $u_p(x) = \langle x | p \rangle$  を求める。(14.26) より  $\langle x | \hat{p} | p \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | p \rangle$  であるから、 $u_p(x)$  は

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} u_p(x) = p u_p(x)$$

の解である。したがって

$$u_p(x) = N_p \exp(ipx/\hbar)$$

になる。 $N_p$  は規格化定数であり  $\langle p | p' \rangle = \delta(p - p')$  から決める。

$$\langle p | p' \rangle = \int dx \langle p | x \rangle \langle x | p' \rangle = N_p^* N_{p'} \int dx \exp(i(p' - p)x/\hbar) = |N_p|^2 2\pi\hbar \delta(p - p')$$

であるから、 $N_p = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$  ととればよい。結局

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ipx/\hbar) \quad (14.32)$$

である。 $|\alpha\rangle$  を  $|p\rangle$  で展開してもよい。 $\psi_\alpha(p) = \langle p | \alpha \rangle$  とすると

$$\psi_\alpha(p) = \int dx \langle p | x \rangle \langle x | \alpha \rangle = \int dx u_p(x)^* \psi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \exp(-ipx/\hbar) \psi_\alpha(x)$$

同様に

$$\psi_\alpha(x) = \int dp \langle x | p \rangle \langle p | \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \exp(ipx/\hbar) \psi_\alpha(p)$$

これらはフーリエ変換に他ならない。

5. 離散的固有値を持つ演算子  $A$  の固有ケット  $|a\rangle$  による展開

$$|\alpha\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a | \alpha \rangle$$

を波動関数で表わすと

$$\psi_\alpha(x) = \langle x | \alpha \rangle = \sum_a \langle x | a \rangle \langle a | \alpha \rangle = \sum_a c_a u_a(x)$$

ただし

$$c_a = \langle a | \alpha \rangle, \quad u_a(x) = \langle x | a \rangle$$

$u_a(x)$  は  $A$  の固有ケット  $|a\rangle$  の波動関数であり、**固有関数** ( eigenfunction ) と呼ばれる。完備性

$$\sum_a |a\rangle \langle a| = 1$$

は

$$\sum_a \langle x | a \rangle \langle a | x' \rangle = \langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$$

であるから固有関数で表すと

$$\sum_a u_a(x) u_a^*(x') = \delta(x - x')$$

である。

以上の議論は3次元に拡張できる。基底ケットとして位置  $\hat{\mathbf{x}}$  の固有ケット  $|\mathbf{x}\rangle$

$$\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle, \quad \hat{\mathbf{x}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}), \quad \mathbf{x} = (x, y, z)$$

を用いる。規格直交性と完備性は

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \int d^3x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = 1$$

である。  $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$  より

$$(x_i - x'_i) \langle \mathbf{x} | \hat{p}_j | \mathbf{x}' \rangle = i\hbar \delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \text{ただし} \quad \delta(\mathbf{x}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z)$$

である。見やすくするため  $j = 1$  の場合を考えると  $(x - x') \langle \mathbf{x} | \hat{p}_x | \mathbf{x}' \rangle = i\hbar \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  より

$$\langle \mathbf{x} | \hat{p}_x | \mathbf{x}' \rangle = -i\hbar \frac{\partial \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{\partial x} \delta(y - y') \delta(z - z') + f_x(x, y, y', z, z') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

である。  $(y - y') \langle \mathbf{x} | \hat{p}_x | \mathbf{x}' \rangle = (z - z') \langle \mathbf{x} | \hat{p}_x | \mathbf{x}' \rangle = 0$  であるから

$$(y - y') f_x(x, y, y', z, z') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = (z - z') f_x(x, y, y', z, z') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = 0$$

したがって

$$f_x(x, y, y', z, z') = f_x(x, y, z) \delta(y - y') \delta(z - z')$$

とおけるから

$$\langle \mathbf{x} | \hat{p}_x | \mathbf{x}' \rangle = -i\hbar \partial_x \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + f_x(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

になる。  $y$  成分,  $z$  成分についても同様にすれば

$$\langle \mathbf{x} | \hat{p}_i | \mathbf{x}' \rangle = -i\hbar \partial_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + f_i(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

である。

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \hat{p}_i \hat{p}_j | \mathbf{x}' \rangle &= \int d^3x'' \langle \mathbf{x} | \hat{p}_i | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | \hat{p}_j | \mathbf{x}' \rangle \\ &= \int d^3x'' \left( -i\hbar \frac{\partial \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'')}{\partial x_i} + f_i(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') \right) \\ &\quad \times \left( -i\hbar \frac{\partial \delta(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')}{\partial x_j'} + f_j(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}') \right) \\ &= \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - i\hbar f_j(\mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial x_i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - i\hbar f_i(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_j} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ &\quad + f_i(\mathbf{x}) f_j(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \end{aligned}$$

$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$  より

$$\left( f_j(\mathbf{x}) - f_j(\mathbf{x}') \right) \frac{\partial}{\partial x_i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \left( f_i(\mathbf{x}) - f_i(\mathbf{x}') \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = 0$$

である。(14.21) で  $F(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = f_j(\mathbf{x}) - f_j(\mathbf{x}')$  とすると  $\lambda = F(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 0$  より

$$\left( \frac{\partial f_j}{\partial x_i} - \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = 0$$



になるから

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_i} - \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = 0, \quad \therefore \quad \nabla \times \mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0$$

である。 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \nabla \phi(\mathbf{x})$  とおけるから

$$\langle \mathbf{x} | \hat{p}_i | \mathbf{x}' \rangle = -i\hbar \partial_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \partial_i \phi(\mathbf{x})$$

になる。 $\hat{p}_i$  はエルミート演算子であるから  $\phi$  は実数である。(14.22) と同様に  $|\mathbf{x}\rangle_\theta = e^{i\theta(\mathbf{x})} |\mathbf{x}\rangle$  とすれば

$$\begin{aligned} {}_\theta \langle \mathbf{x} | \hat{p}_i | \mathbf{x}' \rangle_\theta &= -i\hbar e^{i\theta(\mathbf{x}') - i\theta(\mathbf{x})} \partial_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \partial_i \phi(\mathbf{x}) \\ &= -i\hbar \partial_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + (\hbar \partial_i \theta + \partial_i \phi) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \end{aligned}$$

$\theta = -\phi/\hbar$  ととれば

$${}_\theta \langle \mathbf{x} | \hat{p}_i | \mathbf{x}' \rangle_\theta = -i\hbar \partial_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

になる。したがって、運動量演算子  $\hat{p}$  は  $|\mathbf{x}\rangle$  を基底にとる表現では  $-i\hbar \nabla$  に置き換えればよい。

**問題 14.3** 運動量演算子  $\hat{p}$  の固有ケットを  $|p\rangle$  とする。任意の状態  $|\alpha\rangle$  に対して

$$\langle p | \hat{x} | \alpha \rangle = i\hbar \frac{\partial \langle p | \alpha \rangle}{\partial p}$$

になることを (14.32) を用いて示せ。また, (14.29) は

$$\left( \frac{p^2}{2m} + V \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \right) \psi(p, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(p, t), \quad \psi(p, t) = \langle p | t \rangle$$

になることを示せ。

## 15 時間反転

### 15.1 反線形演算子

$c_1, c_2$  を定数とするとき

$$T(c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle) = c_1^*(T|a_1\rangle) + c_2^*(T|a_2\rangle)$$

を満たす演算子  $T$  を**反線形演算子**という。 $F(|a\rangle) = [\langle b|(T|a\rangle)]^*$  を  $|a\rangle$  の関数と見なすと

$$F(c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle) = [c_1^*\langle b|(T|a_1\rangle) + c_2^*\langle b|(T|a_2\rangle)]^* = c_1F(|a_1\rangle) + c_2F(|a_2\rangle)$$

になるから  $F(|a\rangle)$  は  $|a\rangle$  について線形である。したがって  $F(|a\rangle) = \langle b'|a\rangle$  とおける。ブラに対する線形演算子の作用 (14.2) と同様に,  $\langle b'| = \langle b|T$  と定義する。つまり

$$(\langle b|T)|a\rangle = [\langle b|(T|a\rangle)]^* \quad (15.1)$$

である。線形演算子  $F$  の場合  $(\langle b|F)|a\rangle = \langle b|(F|a\rangle)$  であるから括弧は省略できるが, 反線形演算子では括弧は省略できない。

$$\begin{aligned} [(c_1\langle a_1| + c_2\langle a_2|)T]|b\rangle &= [(c_1\langle a_1| + c_2\langle a_2|)(T|b\rangle)]^* \\ &= c_1^*[\langle a_1|(T|b\rangle)]^* + c_2^*[\langle a_2|(T|b\rangle)]^* \\ &= [c_1^*(\langle a_1|T) + c_2^*(\langle a_2|T)]|b\rangle \end{aligned}$$

であるから, ブラに対しても  $T$  は反線形である。

2つの反線形演算子  $T_1, T_2$  の積  $T_1T_2$  を

$$(T_1T_2)|a\rangle = T_1(T_2|a\rangle)$$

で定義する。 $T_1T_2$  は線形演算子であるから

$$\langle a|(T_1T_2)|b\rangle = \langle a|(T_1T_2|b\rangle) = (\langle a|T_1T_2)|b\rangle$$

である。 $\langle a|(T_1T_2)|b\rangle$  における括弧を省略すると

$$\langle a|T_1T_2|b\rangle = (\langle a|T_1)(T_2|b\rangle) = [\langle a|(T_1T_2|b\rangle)]^*$$

とも解釈でき混乱する。括弧は省略できない。

線形演算子  $P = |a\rangle\langle b|$  と反線形演算子  $T$  との積  $(P)T$  を考える。括弧を省略すると

$$|a\rangle\langle b|T|\psi\rangle = |a\rangle(\langle b|T)|\psi\rangle \quad \text{または} \quad |a\rangle\langle b|T|\psi\rangle = |a\rangle\langle b|(T|\psi\rangle) = |a\rangle[(\langle b|T)|\psi\rangle]^*$$

のどちらとも解釈でき, この場合も括弧は省略できない。 $(P)T$  が  $\langle\beta|$  に作用する場合  $\langle\beta|a\rangle\langle b|$  に  $T$  が作用し,  $|\alpha\rangle$  に作用する場合  $T|\alpha\rangle$  に  $P$  が作用するから

$$\langle\beta|(P)T = (\langle\beta|a\rangle\langle b|)T = \langle\beta|a\rangle^*(\langle b|T), \quad (P)T|\alpha\rangle = |a\rangle\langle b|(T|\alpha\rangle) \quad (15.2)$$

である。これから

$$(\langle\beta|(P)T)|\alpha\rangle = \langle\beta|a\rangle^*(\langle b|T)|\alpha\rangle = \langle\beta|a\rangle^*\langle b|(T|\alpha\rangle)^* = [\langle\beta|((P)T|\alpha\rangle)]^*$$

になり (15.1) が成り立つ。

**エルミート共役** 線形演算子  $F$  の場合, エルミート共役  $F^\dagger$  は  $\langle a|F^\dagger|b\rangle = \langle b|F|a\rangle^*$  で定義される線形演算子である。反線形演算子  $T$  のエルミート共役  $T^\dagger$  を

$$\langle a|(T^\dagger|b\rangle) = \langle b|(T|a\rangle) \quad (15.3)$$

で定義する。右辺で複素共役はとらない。 $|\alpha\rangle = c_1|b_1\rangle + c_2|b_2\rangle$  のとき  $\langle\alpha| = c_1^*\langle b_1| + c_2^*\langle b_2|$  であるから  $\langle a|(T^\dagger|\alpha\rangle) = \langle\alpha|(T|a\rangle)$  は

$$\langle a|(T^\dagger|\alpha\rangle) = c_1^*\langle b_1|(T|a\rangle) + c_2^*\langle b_2|(T|a\rangle) = \langle a|[c_1^*(T^\dagger|b_1\rangle) + c_2^*(T^\dagger|b_2\rangle)]$$

になり  $T^\dagger$  も反線形演算子である。 $|\alpha\rangle = T|a\rangle$  とおくと

$$\langle\alpha|b\rangle = \langle b|\alpha\rangle^* = [\langle a|(T^\dagger|b\rangle)]^* = (\langle a|T^\dagger|b\rangle)$$

$|\alpha\rangle = T|a\rangle$  のとき  $\langle\alpha| = \langle a|T^\dagger$  になる。これは線形演算子と同じである。

**反ユニタリ演算子**  $T$  が反線形演算子で

$$TT^\dagger = T^\dagger T = 1$$

であるとき,  $T$  を**反ユニタリ演算子**という。反ユニタリ演算子  $T$  により反ユニタリ変換

$$|\bar{a}\rangle = T|a\rangle, \quad \langle\bar{a}| = \langle a|T^\dagger, \quad \bar{F} = TFT^\dagger$$

が定まる。ただし,  $F$  は線形演算子である。 $T$  がユニタリ演算子ならば  $\langle\bar{a}_1|\bar{F}|\bar{a}_2\rangle = \langle a_1|F|a_2\rangle$  であるが, 反ユニタリ演算子の場合

$$\langle\bar{a}_1|\bar{F}|\bar{a}_2\rangle = (\langle a_1|T^\dagger)(TFT^\dagger)(T|a_2\rangle) = [\langle a_1|(T^\dagger T F T^\dagger T|a_2\rangle)]^* = \langle a_1|F|a_2\rangle^* \quad (15.4)$$

である。内積はその共役複素数に変換される。

交換関係  $[\bar{x}, \bar{p}]$  は

$$[\bar{x}, \bar{p}] = T x T^\dagger T p T^\dagger - T p T^\dagger T x T^\dagger = T (x p - p x) T^\dagger = T i \hbar T^\dagger = -i \hbar T T^\dagger = -i \hbar$$

である。定数  $c$  に対しては  $T c T^\dagger = c^*$  になることに注意する。一般に, 演算子の間の関係式は係数を複素共役に置き換えたものになる。

## 15.2 反線形演算子の表現

$\{|a\rangle\}$  を完全規格直交系とする。 $K_A$  を

$$K_A|a\rangle = |a\rangle \quad (15.5)$$

を満たす反線形演算子とする。これで  $K_A$  の作用は完全に決まる。任意のケット  $|\alpha\rangle$  に対しては

$$K_A|\alpha\rangle = K_A \sum_a |a\rangle \langle a|\alpha\rangle = \sum_a \langle a|\alpha\rangle^* K_A|a\rangle = \sum_a \langle a|\alpha\rangle^* |a\rangle \quad (15.6)$$

である。全ての係数  $\langle a|\alpha\rangle$  が実数ならば  $K_A|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$  であるが, 一般に  $\langle a|\alpha\rangle$  は複素数であるから任意の  $|\alpha\rangle$  に対して  $K_A|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$  は成り立たず  $K_A \neq 1$  である。

線形演算子  $K_A^2$  は

$$K_A^2|\alpha\rangle = K_A \sum_a \langle a|\alpha\rangle^* |a\rangle = \sum_a \langle a|\alpha\rangle |a\rangle = |\alpha\rangle, \quad \therefore K_A^2 = 1$$

である。更に

$$K_A^\dagger|\alpha\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|(K_A^\dagger|\alpha\rangle) = \sum_a |a\rangle \langle a|(K_A|a\rangle) = \sum_a |a\rangle \langle \alpha|a\rangle = K_A|\alpha\rangle$$

になるから  $K_A^\dagger = K_A$  である。  $K_A^\dagger K_A = K_A K_A^\dagger = K_A^2 = 1$ , つまり  $K_A$  は反ユニタリである。

表現  $\{|a\rangle\}$  における状態  $|\alpha\rangle$  の波動関数は  $\psi_\alpha(a) = \langle a|\alpha\rangle$  である。一方,  $|\bar{\alpha}\rangle = K_A|\alpha\rangle$  の波動関数は (15.6) より

$$\psi_{\bar{\alpha}}(a) \equiv \langle a|(K_A|\alpha\rangle) = \langle a|\alpha\rangle^* = \psi_\alpha^*(a)$$

である。  $K_A$  は表現  $\{|a\rangle\}$  における波動関数をその複素共役に変換する **複素共役演算子** である。また, 線形演算子  $\bar{F} = K_A F K_A^\dagger$  の行列要素は  $|\bar{a}\rangle = K_A|a\rangle = |a\rangle$  と (15.4) から

$$\langle a|\bar{F}|a'\rangle = \langle \bar{a}|\bar{F}|\bar{a}'\rangle = \langle a|F|a'\rangle^*$$

であり複素共役になる。特別な場合として

$$K_A F K_A^\dagger = \begin{cases} F, & \text{全ての } \langle a|F|a'\rangle \text{ が実数} \\ -F, & \text{全ての } \langle a|F|a'\rangle \text{ が純虚数} \end{cases} \quad (15.7)$$

である。

$\{|a\rangle\}$  とは別の完全規格直交系を  $\{|b\rangle\}$  とする。  $K_A$  と同様に  $K_B|b\rangle = |b\rangle$  を満たす反線形演算子  $K_B$  を考える。任意の状態  $|\alpha\rangle$  に対して

$$K_B|\alpha\rangle = K_B \sum_b |b\rangle \langle b|\alpha\rangle = \sum_b |b\rangle \langle b|\alpha\rangle^* = \sum_{ab} |b\rangle \langle b|a\rangle^* \langle a|\alpha\rangle^*$$

である。  $\langle a|(K_A|\alpha\rangle) = \langle a|\alpha\rangle^*$  及び (15.2) より

$$K_B|\alpha\rangle = (U)K_A|\alpha\rangle, \quad U = \sum_{ab} |b\rangle \langle b|a\rangle^* \langle a|$$

になるから  $K_B = (U)K_A$  である。  $\langle a|b\rangle$  がすべての  $a, b$  について実数ならば  $U = 1$  より  $K_B = K_A$  であるが, 一般には  $K_B \neq K_A$  であり複素共役演算子は基底に依存する。

反線形演算子  $T$  と複素共役演算子  $K$  との積  $F = TK$  は線形演算子である。  $T = TK^2 = FK$  になるから, 任意の反線形演算子は線形演算子と  $K$  の積で表わせる。

**問題 15.1**  $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$ ,  $(U)K_A = K_A(U^\dagger)$  を示せ。

### 15.3 時間反転：スピン 0 の場合

ニュートン方程式

$$\frac{d\mathbf{p}(t)}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{r}(t)), \quad \mathbf{p}(t) = m \frac{d\mathbf{r}(t)}{dt}$$

を考える。

$$\bar{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{r}(-t) \quad (15.8)$$

とすると ( $s = -t$ )

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{p}}(t) &= m \frac{d\bar{\mathbf{r}}(t)}{dt} = m \frac{ds}{dt} \frac{d\mathbf{r}(s)}{ds} = -\mathbf{p}(s) = -\mathbf{p}(-t) \\ \frac{d\bar{\mathbf{p}}(t)}{dt} &= -\frac{d\mathbf{p}(s)}{dt} = \frac{d\mathbf{p}(s)}{ds} = \mathbf{F}(\mathbf{r}(s)) = \mathbf{F}(\bar{\mathbf{r}}(t))\end{aligned}\quad (15.9)$$

したがって、保存力が作用する場合、時間を反転した運動  $\bar{\mathbf{r}}(t)$  もニュートン方程式の解である。これがニュートン力学での時間反転不変性である。

波動関数の時間変化はシュレーディンガー方程式

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

で決まる。古典力学と異なり  $\mathbf{r}$  と  $t$  は独立な変数である。 $\bar{\psi}(\mathbf{r}, t) \equiv \psi^*(\mathbf{r}, -t)$  とすると

$$i\hbar \frac{\partial \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = i\hbar \frac{ds}{dt} \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, s)}{\partial s} = -i\hbar \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, s)}{\partial s} = \left[ i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, s)}{\partial s} \right]^*$$

であるから

$$i\hbar \frac{\partial \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}, s) \right]^* = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)$$

になり  $\bar{\psi}(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, -t)$  もシュレーディンガー方程式を満たす。単に  $t$  を  $-t$  にした  $\psi(\mathbf{r}, -t)$  はシュレーディンガー方程式を満たさない。

位置と運動量に期待値を考える。

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_{\text{av}}(t) &= \int d^3r \, \mathbf{r} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2, & \bar{\mathbf{r}}_{\text{av}}(t) &= \int d^3r \, \mathbf{r} |\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)|^2 \\ \mathbf{p}_{\text{av}}(t) &= -i\hbar \int d^3r \, \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t), & \bar{\mathbf{p}}_{\text{av}}(t) &= -i\hbar \int d^3r \, \bar{\psi}^*(\mathbf{r}, t) \nabla \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\end{aligned}$$

とすると  $\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)$  の定義から

$$\bar{\mathbf{r}}_{\text{av}}(t) = \mathbf{r}_{\text{av}}(-t) \quad (15.10)$$

である。また、部分積分を使うと

$$\bar{\mathbf{p}}_{\text{av}}(t) = i\hbar \int d^3r \, \psi^*(\mathbf{r}, -t) \nabla \psi(\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{p}_{\text{av}}(-t) \quad (15.11)$$

である。(15.10) と (15.11) はそれぞれニュートン力学における (15.8) と (15.9) に対応する。したがって、波動関数  $\psi(\mathbf{r}, t)$  の時間反転した状態は  $\psi^*(\mathbf{r}, -t)$  で記述される。

位置演算子  $\hat{\mathbf{x}}$  と運動量演算子  $\hat{\mathbf{p}}$  とする。古典力学との対応関係から、時間反転演算子  $T$  を

$$T\hat{\mathbf{x}}T^\dagger = \hat{\mathbf{x}}, \quad T\hat{\mathbf{p}}T^\dagger = -\hat{\mathbf{p}}, \quad TT^\dagger = T^\dagger T = 1 \quad (15.12)$$

で定義する。この変換は交換関係の符号を変えるから  $T$  は反ユニタリ演算子である。

位置演算子  $\hat{\mathbf{x}}$  の固有ケット  $|\mathbf{r}\rangle$

$$\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle$$

に対して

$$K|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}\rangle, \quad KK^\dagger = K^\dagger K = 1 \quad (15.13)$$

を満たす反線形演算子を考える。位置と運動量の演算子  $\hat{x}, \hat{p}$  は

$$\langle \mathbf{r} | \hat{x} | \mathbf{r}' \rangle = \mathbf{r} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \text{実数}, \quad \langle \mathbf{r} | \hat{p} | \mathbf{r}' \rangle = -i\hbar \frac{\partial \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}} = \text{純虚数}$$

であるから, (15.7) より

$$K \hat{x} K^\dagger = \hat{x}, \quad K \hat{p} K^\dagger = -\hat{p}$$

したがって  $T = K$  とすればよい。

ハミルトニアン  $H$  が

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

である場合, (15.12) より  $THT^\dagger = H$ , つまり  $[H, T] = 0$  を満たす。 $H$  は時間反転に関して不変である。シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |t\rangle = H |t\rangle$$

に反線形演算子  $T$  を作用させると,  $Ti = -iT$ ,  $TH = HT$  であるから

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} T |t\rangle = HT |t\rangle, \quad \therefore \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} T |-t\rangle = HT |-t\rangle$$

$|t\rangle$  がシュレーディンガー方程式の解ならば  $|\bar{t}\rangle \equiv T |-t\rangle$  も解である。波動関数で書けば

$$\bar{\psi}(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \mathbf{r} | (T |-t)\rangle = [\langle \mathbf{r} | T | -t \rangle]^* = \langle \mathbf{r} | -t \rangle^* = \psi^*(\mathbf{r}, -t)$$

である。これは前に導いた結果である。 $\hat{x}, \hat{p}$  がエルミート演算子であることと (15.12) を使うと

$$\langle \bar{t} | \hat{x} | \bar{t} \rangle = [\langle -t | (T^\dagger \hat{x} T | -t) \rangle]^* = \langle -t | \hat{x} | -t \rangle^* = \langle -t | \hat{x} | -t \rangle$$

同様にして  $\langle \bar{t} | \hat{p} | \bar{t} \rangle = -\langle -t | \hat{p} | -t \rangle$  である。これらは (15.10), (15.11) である。

状態  $|\alpha\rangle$  が時間に依存しない場合でも  $|\bar{\alpha}\rangle = T|\alpha\rangle$  を時間反転した状態というが, これは運動を時間的に反転した状態を表し, 波動関数は  $\psi_{\bar{\alpha}}(\mathbf{r}) = \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r})$  になる。例えば, 運動量の固有状態  $|\mathbf{p}\rangle$  は  $\hat{p}T = -T\hat{p}$  より

$$\hat{p}|\bar{\mathbf{p}}\rangle = -\mathbf{p}|\bar{\mathbf{p}}\rangle, \quad |\bar{\mathbf{p}}\rangle \equiv T|\mathbf{p}\rangle$$

であるから, 位相因子は別にして  $|\bar{\mathbf{p}}\rangle = |- \mathbf{p}\rangle$  であり運動量の方向が逆転する。 $|\mathbf{p}\rangle$  の波動関数  $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$  は

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar)$$

であるから

$$\psi_{\bar{\mathbf{p}}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar) = \psi_{-\mathbf{p}}(\mathbf{r})$$

である。

軌道角運動量  $\mathbf{L} = \hat{x} \times \hat{p}$  は  $T\mathbf{L}T^\dagger = -\mathbf{L}$  であるから,  $\mathbf{L}^2$  と  $T$  は可換であり,  $L_z$  と  $T$  は反可換である。したがって,  $\mathbf{L}^2, L_z$  の同時固有状態  $|\ell, m\rangle$

$$\mathbf{L}^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |\ell, m\rangle, \quad L_z |\ell, m\rangle = \hbar m |\ell, m\rangle$$

の時間反転した状態  $|\bar{\ell}, \bar{m}\rangle$  は, 位相は別にして  $|\ell, -m\rangle$  になる。 $|\ell, m\rangle$  の波動関数は球面調和関数  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  であるから  $|\bar{\ell}, \bar{m}\rangle$  の波動関数は  $Y_{\ell m}^*(\theta, \phi)$  になる。球面調和関数の性質 (17.37) より

$$Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{\ell, -m}(\theta, \phi)$$

であるから、位相まで含めると  $|\overline{\ell}, m\rangle = (-1)^m |\ell, -m\rangle$  である。古典力学的に考えると、 $L_z \neq 0$  の運動は、 $z$  軸まわりの回転運動であり、これを反転した運動は  $L_z$  の符号が逆転する。

$|\alpha\rangle$  をハミルトニアン  $H$  の固有状態とする：

$$H|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$$

これに  $T$  を作用すると、固有値  $E_\alpha$  は実数であるから

$$TH|\alpha\rangle = E_\alpha T|\alpha\rangle$$

$H$  が時間反転に対して不変、つまり  $H$  と  $T$  が可換な場合

$$HT|\alpha\rangle = E_\alpha T|\alpha\rangle \quad (15.14)$$

になり、 $T|\alpha\rangle$  も  $H$  の固有状態で  $|\alpha\rangle$  と同じ固有値である。 $E_\alpha$  に縮退がなければ

$$T|\alpha\rangle = e^{i\theta}|\alpha\rangle$$

である。波動関数で表せば

$$\psi_{\bar{\alpha}}(\mathbf{r}) = \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) = e^{i\theta} \psi_{\alpha}(\mathbf{r})$$

$e^{i\theta/2} \psi_{\alpha}(\mathbf{r})$  を改めて  $\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$  とおけば  $\psi_{\bar{\alpha}}(\mathbf{r}) = \psi_{\alpha}(\mathbf{r})$  である。したがって、時間反転に関して不変なハミルトニアンの固有状態で縮退がない場合には、波動関数は実数である。

**問題 15.2**  $|\alpha\rangle$  を時間反転に関して不変なハミルトニアン  $H$  の固有状態で縮退がないとする。 $T$  と反可換なエルミート演算子  $F$  の期待値  $\langle \alpha | F | \alpha \rangle$  は 0 になることを示せ。

**問題 15.3** 運動量演算子の固有ケット  $|\mathbf{p}\rangle$  に対して  $K_p|\mathbf{p}\rangle = |\mathbf{p}\rangle$  である複素共役演算子を考える。時間反転演算子  $T$  は  $T = PK_p$  になることを示せ。ここで線形演算子  $P$  は

$$P\hat{x}P^\dagger = -\hat{x}, \quad P\hat{p}P^\dagger = -\hat{p}, \quad P^\dagger = P$$

で定義されるパリティ演算子である。 $\psi_{\alpha}(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \alpha \rangle$  とすると、 $\psi_{\bar{\alpha}}(\mathbf{p}) = \psi_{\alpha}^*(-\mathbf{p})$  を示せ。 $|\mathbf{p}\rangle$  を基底にした波動関数では、時間反転は単に複素共役をとるだけではない。

## 15.4 時間反転：スピンの 0 でない場合

時間反転をスピン  $S$  を持つ粒子に拡張する。軌道角運動量  $\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$  は

$$T\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}T^\dagger = -\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

である。スピンも角運動量の一種であるから軌道角運動量と同じ変換をしなければならない。したがって

$$T\hat{\mathbf{x}}T^\dagger = \hat{\mathbf{x}}, \quad T\hat{\mathbf{p}}T^\dagger = -\hat{\mathbf{p}}, \quad T\mathbf{S}T^\dagger = -\mathbf{S} \quad (15.15)$$

を満たす反線形演算子  $T$  を求める必要がある。

$\hat{\mathbf{x}}, S^2, S_z$  の同時固有ケットを  $|\mathbf{r}, m\rangle$  とする：

$$\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{r}, m\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}, m\rangle, \quad S^2|\mathbf{r}, m\rangle = s(s+1)|\mathbf{r}, m\rangle, \quad S_z|\mathbf{r}, m\rangle = m|\mathbf{r}, m\rangle$$

(15.13) と同様に複素共役演算子  $K$  を

$$K|\mathbf{r}, m\rangle = |\mathbf{r}, m\rangle \quad (15.16)$$

で定義する。  $S_{\pm} \equiv S_x \pm iS_y$  とすると

$$\langle m|S_+|m'\rangle = \delta_{m m'+1} \sqrt{s(s+1) - m'(m'+1)}, \quad \langle m|S_-|m'\rangle = \delta_{m m'-1} \sqrt{s(s+1) - m'(m'-1)}$$

であるから、行列要素  $\langle m|S|m'\rangle$  は  $S_z$  と  $S_x = (S_+ + S_-)/2$  の場合は実数、  $S_y = (S_+ - S_-)/(2i)$  は純虚数になる。(15.7) から

$$K\hat{x}K^\dagger = \hat{x}, \quad K\hat{p}K^\dagger = -\hat{p}$$

$$KS_xK^\dagger = S_x, \quad KS_yK^\dagger = -S_y, \quad KS_zK^\dagger = S_z$$

である。スピンを持つ粒子に対しては複素共役演算子  $K$  だけでは時間反転 (15.15) を満たさない。ところで、一般に、反線形演算子  $T$  は線形演算子  $F$  を用いて  $T = FK$  と表せるから、(15.15) が成り立つように  $F$  を定めよう。  $K^2 = 1$  より  $F = TK$ ,  $F^\dagger = K^\dagger T^\dagger$  である。したがって、上の  $K$  による変換と (15.15) より

$$F\hat{x}F^\dagger = \hat{x}, \quad F\hat{p}F^\dagger = \hat{p}$$

$$FS_xF^\dagger = -S_x, \quad FS_yF^\dagger = S_y, \quad FS_zF^\dagger = -S_z$$

$F$  は  $S_x$  と  $S_z$  の向きだけを変えるら、スピンについて  $y$  軸のまわりに  $\pi$  回転させる演算子をとればよい。したがって

$$F = \eta e^{-i\pi S_y}, \quad |\eta|^2 = 1$$

位相  $\eta$  は物理的意味を持たないから適当にとればよい。以上から、スピンを持つ粒子に対する時間反転演算子  $T$  は

$$T = \eta e^{-i\pi S_y} K \quad (15.17)$$

である。ただし、反線形演算子  $K$  は (15.16) で定義される。  $KiS_yK = iS_y$  に右側から  $K$  をかけ  $K^2 = 1$  を使うと  $KiS_y = iS_yK$  であり  $K$  と  $iS_y$  は可換である。したがって

$$T = \eta e^{-i\pi S_y} K = K\eta^* e^{-i\pi S_y}, \quad T^2 = e^{-2\pi i S_y} = (-1)^{2s}$$

である。  $T^2 = (-1)^{2s}$  になることは、状態を  $S^2, S_y$  の同時固有状態で展開すれば明らかである。

### スピン 1/2 の場合

$$e^{-i\pi S_y} = e^{-i\pi \sigma_y/2} = \cos(\pi/2) - i\sigma_y \sin(\pi/2) = -i\sigma_y$$

であるから

$$T = -i\sigma_y K = -Ki\sigma_y, \quad T^2 = \cos \pi - i\sigma_y \sin \pi = -1$$

になる。  $T^\dagger T = TT^\dagger = 1$  を使うと  $T^\dagger = -T$  である。したがって、エルミート共役の性質 (15.3) から、任意の状態  $|\alpha\rangle$  に対して

$$\langle \alpha|(T|\alpha\rangle) = \langle \alpha|(T^\dagger|\alpha\rangle) = -\langle \alpha|(T|\alpha\rangle) = 0$$

$|\alpha\rangle$  と  $T|\alpha\rangle$  は直交する。



$|\alpha\rangle$  をハミルトニアン  $H$  の固有状態とすると,  $H$  が時間反転に対して不変である場合, (15.14) から  $T|\alpha\rangle$  も  $H$  の固有状態である。スピン  $1/2$  では  $|\alpha\rangle$  と  $T|\alpha\rangle$  は直交し別の状態であるから, 時間反転に対して不変な  $H$  の各固有値は少なくとも  $2$  重に縮退し, 縮退度は必ず偶数である。これを**クラマースの縮退**という。 $n$  個のスピン  $1/2$  粒子系の場合,  $k$  番目の粒子のスピン演算子を  $S^{(k)}$  とすると, (15.17) の  $S_y$  は全スピンの  $y$  成分

$$\sum_{k=1}^n S_y^{(k)}$$

に置き換わるから

$$T^2 = \prod_{k=1}^n e^{-2\pi i S_y^{(k)}} = (-1)^n$$

である。したがって, 一般に奇数個のスピン  $1/2$  粒子系ではクラマースの縮退が起こる。

時間反転した状態は

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}, m | \bar{\alpha} \rangle &= -\langle \mathbf{r}, m | (K i \sigma_y | \alpha) \rangle = -[\langle \mathbf{r}, m | K i \sigma_y | \alpha \rangle]^* \\ &= i \langle \mathbf{r}, m | \sigma_y | \alpha \rangle^* = i \sum_{m'} \langle m | \sigma_y | m' \rangle^* \langle \mathbf{r}, m' | \alpha \rangle^* \end{aligned}$$

パウリ行列の具体形を使うと

$$\psi_{\bar{\alpha}}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r})$$

である。ここで  $\psi$  は  $2$  成分スピノールである。

**問題 15.4**  $\psi_{\alpha}$  として (5.72) で求めた  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の固有値  $\pm 1$  の固有状態を考える。時間反転した状態  $\psi_{\bar{\alpha}}$  は  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の固有値  $\mp 1$  の状態になることを示せ。

## 16 数学的補足

### 16.1 レビ・チビタの記号

$i, j, k$  を  $1, 2, 3$  のどれかとする。 $i, j, k$  がすべて異なる 3 つの並び  $ijk$  を考える。このうち 2 つを交換することを互換という。互換を繰り返すと、ある並び  $ijk$  から別の並び  $i'j'k'$  が得られる。最初の並び  $ijk$  と最後の並び  $i'j'k'$  を与えても、繰り返す互換の組み合わせは、一意には決まらない。例えば  $123$  から  $213$  を得るには  $\underline{1}23 \rightarrow 213$ ,  $\underline{12}3 \rightarrow 321 \rightarrow 231 \rightarrow 213$  など、いろいろある。しかし、現れる互換の回数が偶数回か奇数回かは定まる。偶 (奇) 数回必要な置換  $ijk \rightarrow i'j'k'$  を偶 (奇) 置換という。3 階反対称テンソル  $\varepsilon_{ijk}$  を

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 0 & \text{2 つの添字が等しいとき} \\ +1 & \text{ijk が 123 の偶置換であるとき} \\ -1 & \text{ijk が 123 の奇置換であるとき} \end{cases} \quad (16.1)$$

で定義する。具体的には

$$\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1, \quad \varepsilon_{132} = \varepsilon_{213} = \varepsilon_{321} = -1, \quad \text{その他の } \varepsilon_{ijk} = 0$$

である。 $\varepsilon_{ijk}$  をレビ・チビタ (Levi-Civita) の記号という。

- $ikj$  は  $ijk$  から互換を 1 回行えば得られる。したがって、 $ijk$  が偶置換 (奇置換) なら  $ikj$  は奇置換 (偶置換) であるから  $\varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{ikj}$  である。また  $\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{kij}$  である。 $ijk$  の順番を入れ替えるときには符号に注意する。
- 便利な関係式

$$\sum_{k=1}^3 \varepsilon_{kij} \varepsilon_{kmn} = \delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm} \quad (16.2)$$

が成り立つ。 $i = j$  または  $m = n$  のとき両辺ともに 0 になり成り立つ。 $i \neq j$  かつ  $m \neq n$  の場合、 $\varepsilon_{kij} \varepsilon_{kmn} \neq 0$  になるには、4 個の  $i, j, m, n$  は  $k$  と異なる 2 つ整数になる必要があるが、これが可能なのは  $i = m, j = n$  または  $i = n, j = m$  だけである。したがって

$$\sum_k \varepsilon_{kij} \varepsilon_{kmn} = \delta_{im} \delta_{jn} \sum_k \varepsilon_{kij}^2 + \delta_{in} \delta_{jm} \sum_k \varepsilon_{kij} \varepsilon_{kji} = (\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm}) \sum_k \varepsilon_{kij}^2$$

$i \neq j$  のとき  $\varepsilon_{kij}^2 = 1$  になる  $k$  が必ず 1 つだけ存在するから (16.2) が成り立つ。

- ベクトル  $A$  の  $x, y, z$  成分をそれぞれ  $A_1, A_2, A_3$  とする。ベクトル積  $A \times B$  の  $k$  成分は

$$(A \times B)_k = \sum_{ij} \varepsilon_{kij} A_i B_j \quad (16.3)$$

と書ける。例えば

$$(A \times B)_1 = \varepsilon_{123} A_2 B_3 + \varepsilon_{132} A_3 B_2 = \varepsilon_{123} A_2 B_3 - \varepsilon_{123} A_3 B_2 = A_2 B_3 - A_3 B_2$$

である。

問題 16.1 (16.2), (16.3) を使い

$$A \times (B \times C) = B(C \cdot A) - C(A \cdot B), \quad \text{つまり} \quad \left( A \times (B \times C) \right)_i = B_i A \cdot C - C_i A \cdot B$$

$$(A \times B) \cdot (C \times D) = (A \cdot C)(B \cdot D) - (B \cdot C)(A \cdot D)$$

を示せ。

## 16.2 合成関数の高階微分

$F(x) = f(g(x))$  の  $n$  階微分を求める。  $g_0 = g(x_0)$  とする。  $f(g)$  を  $g = g_0$  でテイラー展開すると

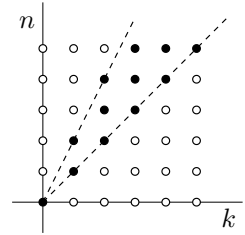
$$F(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(g_0)}{k!} (g(x) - g_0)^k, \quad f^{(k)}(g_0) = \left. \frac{d^k f(x)}{dx^k} \right|_{x=g_0}$$

である。これに

$$g(x) = g_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{g^{(n)}(x_0)}{n!} (\Delta x)^n, \quad \Delta x = x - x_0$$

を代入すると (16.6) を得るが、ここでは  $g(x) = x^2$  を考える。  $g(x) - g_0 = 2x_0\Delta x + (\Delta x)^2$  より

$$\begin{aligned} F(x) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(g_0)}{k!} \sum_{\ell=0}^k \frac{k!}{\ell! (k-\ell)!} (2x_0)^{k-\ell} (\Delta x)^{k+\ell} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=k}^{2k} \frac{f^{(k)}(g_0)}{(n-k)! (2k-n)!} (2x_0)^{2k-n} (\Delta x)^n \end{aligned}$$



和の順番を入れ換えると ( $[n/2] = n/2$  を超えない最大の整数)

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (\Delta x)^n \sum_{k=[\frac{n+1}{2}]}^n \frac{f^{(k)}(g_0)}{(n-k)! (2k-n)!} (2x_0)^{2k-n}, \quad \text{一方} \quad F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{F^{(n)}(x_0)}{n!} (\Delta x)^n$$

であるから

$$F^{(n)}(x) = \frac{d^n}{dx^n} f(x^2) = \sum_{k=[\frac{n+1}{2}]}^n \frac{n! f^{(k)}(x^2)}{(n-k)! (2k-n)!} (2x)^{2k-n} = \sum_{m=0}^{[n/2]} \frac{n! f^{(n-m)}(x^2)}{m! (n-2m)!} (2x)^{n-2m} \quad (16.4)$$

になる。例えば、  $f(x) = e^{-x}$  のとき  $f^{(k)}(x) = (-1)^k e^{-x}$  より

$$\frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} = (-1)^n e^{-x^2} \sum_{m=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^m n!}{m! (n-2m)!} (2x)^{n-2m} \quad (16.5)$$

である。

**問題 16.2** 一般に  $n \geq 1$  のとき

$$\frac{d^n}{dx^n} f(g(x)) = n! \sum_{k=1}^n f^{(k)}(g(x)) \sum_{m_1} \cdots \sum_{m_n} \prod_{i=1}^n \frac{1}{m_i!} \left( \frac{g^{(i)}(x)}{i!} \right)^{m_i} \quad (16.6)$$

を示せ。非負の整数  $m_1, m_2, \dots, m_n$  の和は

$$m_1 + m_2 + \cdots + m_n = k, \quad m_1 + 2m_2 + \cdots + nm_n = n$$

を満たす組合せについて行う。ただし、  $g^{(i)} = 0$  のとき  $m_i = 0$  である (解析概論, 練習問題 (2))。 (16.6) から (16.4) を求めよ。

## 16.3 ディラックのデルタ関数

次の条件を満たす “関数”  $\delta(x)$  をディラックのデルタ関数という:

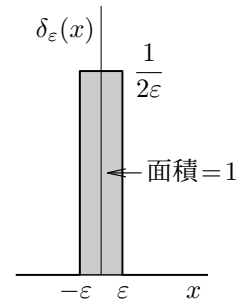
$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & x = 0 \\ 0, & x \neq 0 \end{cases}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$

デルタ関数の最も簡単な具体例は

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \delta_\varepsilon(x), \quad \delta_\varepsilon(x) = \frac{\theta(\varepsilon - |x|)}{2\varepsilon} = \begin{cases} 1/(2\varepsilon), & |x| < \varepsilon \\ 0, & |x| > \varepsilon \end{cases} \quad (16.7)$$

ただし  $\theta(x)$  は階段関数 (ヘビサイド関数)

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \text{ のとき} \\ 0, & x < 0 \text{ のとき} \end{cases} \quad (16.8)$$



である。関数  $f(x)$  に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(x-a) = f(a) \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-a) = f(a)$$

が成り立つ。 $x \neq a$  では  $\delta(x-a) = 0$  であるから、 $x \neq a$  での関数の値を  $f(a)$  で置き換えてもよい。デルタ関数を含む積分は、 $-\infty$  から  $\infty$  までする必要はなく、デルタ関数が発散する点を含めばよい。以下では積分領域が明示されていない場合は、デルタ関数の発散点を含んでいるとする。

**デルタ関数の基本的性質**

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a) \quad (16.9)$$

$$\delta(x) = \delta(-x) \quad (16.10)$$

$$x\delta(x) = 0 \quad (16.11)$$

$$x\delta'(x) = -\delta(x) \quad (16.12)$$

$$\delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x), \quad (c \neq 0) \quad (16.13)$$

$$\delta(x^2 - c^2) = \frac{1}{2|c|} (\delta(x-c) + \delta(x+c)), \quad (c \neq 0) \quad (16.14)$$

$$\delta(g(x)) = \sum_n \frac{1}{|g'(x_n)|} \delta(x - x_n), \quad (g(x_n) = 0, g'(x_n) \neq 0) \quad (16.15)$$

である。これらの等式は、両辺に任意の関数を掛け積分すると同じ結果を与えることを意味する。なお、 $\delta'(x)$  は  $\delta(x)$  の 1 階導関数である。また、(16.15) では、 $g(x)$  のすべての零点について和をとる。 $g(x)$  と  $g'(x)$  が同時に 0 になる点  $x$  がある場合、 $\delta(g(x))$  は意味をもたない。(16.13), (16.14) は (16.15) の具体例である。

(16.12) は部分積分を使うと

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) x \delta'(x) &= \left[ f(x) x \delta(x) \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx (f(x) x)' \delta(x) \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dx (f'(x) x \delta(x) + f(x) \delta(x)) = -f(0) \end{aligned}$$

になるから成り立つ。

(16.13) は  $t = cx$  とすると  $c > 0$  のとき

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(cx) = \frac{1}{c} \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t/c) \delta(t) = \frac{1}{c} f(0)$$

$c < 0$  のとき

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(cx) = \frac{1}{c} \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t/c) \delta(t) = -\frac{1}{c} \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t/c) \delta(t) = -\frac{1}{c} f(0)$$

まとめれば

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(cx) = \frac{1}{|c|} f(0) = \frac{1}{|c|} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(x), \quad \therefore \quad \delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x)$$

である。

(16.15)

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(g(x))$$

とする。 $g(x) \neq 0$  のとき  $\delta(g(x)) = 0$  であるから  $\varepsilon$  を正の微小量として

$$I = \sum_n \int_{x_n - \varepsilon}^{x_n + \varepsilon} dx f(x) \delta(g(x))$$

$x = x_n$  近傍では  $c_n = g'(x_n)$  とすると  $g(x) = c_n(x - x_n)$  になるから

$$I = \sum_n \int_{x_n - \varepsilon}^{x_n + \varepsilon} dx f(x) \delta(c_n(x - x_n)) = \sum_n \frac{1}{|c_n|} \int_{x_n - \varepsilon}^{x_n + \varepsilon} dx f(x) \delta(x - x_n) = \sum_n \frac{1}{|c_n|} f(x_n)$$

したがって、(16.15) が成り立つ。 $g(x) = x^2 - c^2$  とすれば (16.14) である。

### デルタ関数の具体例

$\varepsilon > 0$  として

$$\begin{aligned} \delta_\varepsilon(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(ikx - \varepsilon|k|) = \frac{1}{2\pi} \left( \left[ \frac{\exp(ikx - \varepsilon k)}{ix - \varepsilon} \right]_0^\infty + \left[ \frac{\exp(ikx + \varepsilon k)}{ix + \varepsilon} \right]_{-\infty}^0 \right) \\ &= \frac{i}{2\pi} \left( \frac{1}{x + i\varepsilon} - \frac{1}{x - i\varepsilon} \right) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \end{aligned} \quad (16.16)$$

を考えると、 $x \neq 0$  のとき  $\delta_\varepsilon(x) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$  であり、 $a, b$  を正の定数とすると

$$\int_{-a}^b dx \delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{\pi} \left[ \tan^{-1} \frac{x}{\varepsilon} \right]_{-a}^b \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} (\tan^{-1}(\infty) - \tan^{-1}(-\infty)) = 1$$

である。したがって、 $\varepsilon \rightarrow +0$  の極限では  $\delta_\varepsilon(x)$  はデルタ関数  $\delta(x)$  になる：

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(ikx - \varepsilon|k|) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \quad (16.17)$$

これから

$$\delta(x) = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-R}^R dk e^{ikx} = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\sin Rx}{\pi x} \quad (16.18)$$

を得る。

$$\int_{-\infty}^x dt \delta(t) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases} = \theta(x), \quad \therefore \quad \frac{d\theta(x)}{dx} = \delta(x) \quad (16.19)$$

階段関数  $\theta(x)$  の導関数はデルタ関数になる。

**多変数の場合** 以上は1変数の場合であるが, 多変数の場合に拡張するのは容易である。例えば3変数の場合,  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  とするとき, デルタ関数の積により

$$\delta(\mathbf{r}) \equiv \delta(x) \delta(y) \delta(z)$$

を定義すると ( $d^3r = dx dy dz$ )

$$\int d^3r \delta(\mathbf{r}) = \int dx \delta(x) \int dy \delta(y) \int dz \delta(z) = 1$$

である。 $F(x, y, z)$  を  $F(\mathbf{r})$  と略記すると

$$\int d^3r F(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = F(\mathbf{r}_0)$$

が成り立つ。(16.17) から

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (16.20)$$

と表せる。ただし  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = k_x x + k_y y + k_z z$ ,  $d^3k = dk_x dk_y dk_z$  である。

**問題 16.3** デルタ関数を (16.16)

$$\delta(x) = \frac{i}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left( \frac{1}{x + i\varepsilon} - \frac{1}{x - i\varepsilon} \right)$$

で定義するとき

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - a) \delta(x - b) = \delta(a - b)$$

を複素  $x$  平面上に積分路を拡張して示せ。

## 16.4 フーリエ変換

関数  $F(x)$  は形式的に

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \delta(x - y) F(y)$$

と表せる。

$$\delta(x - y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(ik(x - y))$$

を代入すると

$$F(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-iky} F(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \tilde{F}(k) \quad (16.21)$$

ただし

$$\tilde{F}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} F(x) \quad (16.22)$$

$\tilde{F}(k)$  を  $F(x)$  のフーリエ変換,  $F(x)$  を  $\tilde{F}(k)$  のフーリエ逆変換という。また,  $F(x)$  と  $\tilde{F}(k)$  の相互の変換をフーリエ変換と呼ぶこともある。本によっては

$$\tilde{F}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} F(x), \quad F(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \tilde{F}(k) \quad (16.23)$$

で定義する場合もある。

3次元の場合には

$$\tilde{F}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} d^3r \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) F(\mathbf{r}), \quad F(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \tilde{F}(\mathbf{k})$$

である。フーリエ逆変換を量子力学的に言えば、任意の波動関数は平面波  $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$  の重ね合わせで表せるということである。

例題

$$F(x) = \begin{cases} 1, & |x| < a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$$

のとき

$$\tilde{F}(k) = \int_{-a}^a dx e^{-ikx} = \left[ -\frac{e^{-ikx}}{ik} \right]_{-a}^a = \frac{2 \sin ak}{k}$$

である。したがって

$$F(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \tilde{F}(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \frac{\sin ak}{k}$$

オイラーの公式を使うと

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\cos kx \sin ak}{k} = F(x) = \begin{cases} 1, & |x| < a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$$

になる。特に  $x=0$  とすると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\sin ak}{k} = \pi, \quad \text{ただし } a > 0 \quad (16.24)$$

である。

フーリエ変換による微分方程式の解法 例として

$$(\nabla^2 - m^2) F(\mathbf{r}) = -g \delta(\mathbf{r}) \quad (16.25)$$

の解を求めてみよう。ただし、 $m, g$  は定数であり ( $m > 0$ )

$$\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

である。 $F(\mathbf{r})$  をフーリエ変換して

$$F(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \tilde{F}(\mathbf{k}) \quad (16.26)$$

とする。右辺で  $x$  に依存するのは  $\exp(ik_x x)$  の部分だけであるから

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} F(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{F}(\mathbf{k}) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{F}(\mathbf{k}) k_x^2 \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$$

$y, z$  についても同様にすると

$$\nabla^2 F(\mathbf{r}) = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{F}(\mathbf{k}) \mathbf{k}^2 \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}), \quad \text{ただし } \mathbf{k}^2 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$$

になる。デルタ関数が (16.20) で表せることに注意すると、(16.25) は

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{F}(\mathbf{k}) (\mathbf{k}^2 + m^2) \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) = g \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$$

になるから  $(\mathbf{k}^2 + m^2)\tilde{F}(\mathbf{k}) = g$  を得る。フーリエ変換を使うと、微分方程式は簡単な代数方程式になる。以上から、求める解は

$$F(\mathbf{r}) = \frac{g}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}{\mathbf{k}^2 + m^2} \quad (16.27)$$

である。後は3重積分を実行すればよい。 $\mathbf{r}$  と  $\mathbf{k}$  のなす角を  $\theta$  とする  $\mathbf{k}$  の極座標  $(k, \theta, \phi)$  を考えると、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kr \cos \theta$  であるから

$$\begin{aligned} F(\mathbf{r}) &= \frac{g}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\exp(ikr \cos \theta)}{k^2 + m^2} \\ &= \frac{g}{(2\pi)^2 i r} \int_0^\infty dk k \frac{\exp(ikr) - \exp(-ikr)}{k^2 + m^2} \\ &= \frac{g}{4i\pi^2 r} \int_{-\infty}^\infty dk \exp(ikr) \frac{k}{k^2 + m^2} = \frac{g}{4\pi} \frac{e^{-mr}}{r} \end{aligned} \quad (16.28)$$

(16.28) の積分の求め方は後で述べる。これで (16.25) の特解が求まった。 $m \rightarrow 0$  とすると

$$\nabla^2 \frac{1}{4\pi r} = -\delta(\mathbf{r}), \quad \frac{1}{4\pi r} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}{\mathbf{k}^2} \quad (16.29)$$

である。

2次元の場合

$$\nabla^2 F(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}), \quad \text{ただし} \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \quad \delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)$$

を満たす  $F(\mathbf{r})$  を求める。フーリエ変換して

$$F(\mathbf{r}) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \tilde{F}(\mathbf{k})$$

とする。3次元と同様にすれば  $-k^2 \tilde{F}(\mathbf{k}) = 1$  になるから

$$F(\mathbf{r}) = - \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}{k^2} = - \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\theta \frac{e^{ikr \cos \theta}}{k}, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$F(\mathbf{r})$  は  $r$  だけの関数である。

$$\frac{dF}{dr} = - \frac{i}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\theta \cos \theta e^{ikr \cos \theta}$$

$e^{-\varepsilon k}$ ,  $\varepsilon \rightarrow +0$  をかけて  $k$  の積分を行うと

$$\frac{dF}{dr} = - \frac{i}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \cos \theta \left[ \frac{e^{(ir \cos \theta - \varepsilon)k}}{ir \cos \theta - \varepsilon} \right]_{k=0}^{k=\infty} = \frac{i}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\cos \theta}{ir \cos \theta - \varepsilon} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\pi r}$$

になる。したがって

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \log r = 2\pi \delta(\mathbf{r}), \quad r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (16.30)$$

である。

素直に微分すれば  $r \neq 0$  のとき

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \log r = 0$$



になる。また、原点を中心とする半径  $a$  の円  $C$  の内部を  $D$  とすると

$$\int_D dx dy \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \log r = \int_D dx dy \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right)$$

ただし

$$A_y = \frac{\partial \log r}{\partial x} = \frac{x}{x^2 + y^2}, \quad A_x = -\frac{\partial \log r}{\partial y} = -\frac{y}{x^2 + y^2}$$

である。ストークスの定理から

$$\int_D dx dy \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \log r = \oint_C (A_x dx + A_y dy) = \frac{1}{a^2} \oint_C (-y dx + x dy)$$

$C$  上では  $x = a \cos \phi$ ,  $y = a \sin \phi$ ,  $0 \leq \phi \leq 2\pi$  とおけるから

$$\int_D dx dy \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \log r = \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi$$

したがって、(16.30) が成り立つ。

## 16.5 複素積分

**正則関数** 複素数  $z$  の関数  $f(z)$  の微分係数

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{f(z + \Delta z) - f(z)}{\Delta z}$$

が存在するとき、 $f(z)$  は**微分可能**であるという。微分可能性は複素平面のどの方向から  $z$  に近づいても、同じ極限値に収束することを要求しており、極めて強い条件である。 $f(z)$  の実部と虚部をそれぞれ  $u(z)$ ,  $v(z)$  とする。 $x, y$  を実数として  $z = x + iy$  で表すと

$$f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$$

である。

$$\begin{aligned} f'(z) &= \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{f(z + \Delta z) - f(z)}{\Delta z} \\ &= \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \left( \frac{u(x + \Delta x, y + \Delta y) - u(x, y)}{\Delta x + i\Delta y} + i \frac{v(x + \Delta x, y + \Delta y) - v(x, y)}{\Delta x + i\Delta y} \right) \end{aligned}$$

特に

$$\Delta y = 0 \text{ とすると } f'(z) = \frac{\partial u}{\partial x} + i \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \Delta x = 0 \text{ とすると } f'(z) = \frac{\partial v}{\partial y} - i \frac{\partial u}{\partial y}$$

したがって

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{\partial u}{\partial y}$$

でなければならない。これを**コーシー・リーマンの微分方程式**という。逆に、 $u, v$  がコーシー・リーマンの微分方程式を満たすならば  $f(z)$  は微分可能である。

複素平面上のある領域  $D$  内のすべての点で微分可能であるとき、 $f(z)$  は  $D$  で**正則**という。 $f(z)$  が  $z = z_0$  で微分可能でないとき、この点を  $f(z)$  の**特異点**という。

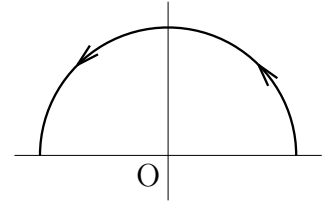
ガウス平面 (複素平面) 上の 2 点  $z_a, z_b$  を考える。この 2 点を結ぶ曲線  $C$  上の点  $z$  が、実数の変数  $t$  の関数  $z = z(t)$  で表されるとする。このとき、( $z_a$  から  $z_b$  に向かう) 径路  $C$  に沿った複素関数  $f(z)$  の積分を

$$\int_C dz f(z) \equiv \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{dz}{dt} f(z(t)), \quad \text{ただし } z_a = z(t_a), \quad z_b = z(t_b)$$

で定義する。例えば、 $C$  が右図のような半径  $R$  の半円ならば  $z = Re^{i\theta}$ , ( $0 \leq \theta \leq \pi$ ) であるから

$$\int_C dz f(z) = iR \int_0^\pi d\theta e^{i\theta} f(Re^{i\theta})$$

である。



### コーシーの定理

ガウス平面のある領域  $D$  で関数  $f(z)$  が正則で、この領域内の任意の閉曲線  $C$  がその内部も含めて  $D$  に属するとき、積分を実部と虚部で表せば

$$\begin{aligned} \int_C dz f(z) &= \int_C (u(x, y) + iv(x, y)) (dx + idy) \\ &= \int_C (u(x, y)dx - v(x, y)dy) + i \int_C (v(x, y)dx + u(x, y)dy) \end{aligned}$$

閉曲線  $C$  の内部を  $R$  とすると、グリーンの定理、あるいは、ストークスの定理より

$$\int_C dz f(z) = - \int_R \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) dx dy + i \int_R \left( \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) dx dy$$

である。 $u, v$  はコーシー・リーマンの微分方程式を満たすから、上の被積分関数は 0 になり

$$\int_C dz f(z) = 0$$

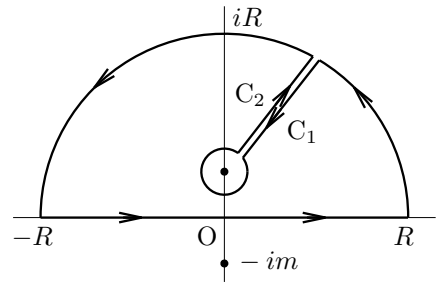
が成り立つ。これを**コーシーの定理**という。

(16.28) の積分を複素積分を用いて求める。

$$f(z) = \frac{z}{z^2 + m^2} e^{irz}$$

とする。 $f(z)$  は  $z = \pm im$  で発散するから、これらの点で  $f(z)$  は正則でない。そこで、図のような閉曲線  $C$  を考える。

$C$  は実軸上の区間  $[-R, R]$ , 反時計周りの原点を中心とした半径  $R$  の半円  $C_R$ , 時計周りの  $z = im$  を中心とした半径  $\varepsilon$  の円  $C_\varepsilon$ , 半円と円を結ぶ直線  $C_1, C_2$  からなる。 $C_1$  と  $C_2$  は補助的な径路である。これらは同じ線であるが、分かりやすくするため、ずらして描いてある。 $C_1$  と  $C_2$  の積分方向は逆であるから、2つの積分は打ち消し合う。 $f(z)$  の2つの特異点は閉曲線  $C$  の外側にあるから、 $f(z)$  を  $C$  について1周積分すると 0 になる。



$$\int_C dz f(z) = \int_{-R}^R dx f(x) + \int_{C_R} dz f(z) + \int_{C_\varepsilon} dz f(z) = 0 \quad (16.31)$$

である。 $C_R$  上では  $z = Re^{i\theta} = R \cos \theta + iR \sin \theta$  とおける。このとき

$$|e^{irz}| = |\exp(-rR \sin \theta + irR \cos \theta)| = \exp(-rR \sin \theta)$$

であるから

$$|f(z)| = \frac{Re^{-rR \sin \theta}}{|R^2 e^{i2\theta} + m^2|} \leq \frac{Re^{-rR \sin \theta}}{R^2 - m^2}$$

これから

$$\left| \int_{C_R} dz f(z) \right| \leq R \int_0^\pi d\theta |e^{iR\theta} f(Re^{i\theta})| \leq \frac{R^2}{R^2 - m^2} \int_0^\pi d\theta e^{-rR \sin \theta}$$

さらに  $0 \leq \theta \leq \pi/2$  のとき  $\sin \theta \geq 2\theta/\pi$  であるから

$$\int_0^\pi d\theta e^{-rR \sin \theta} = 2 \int_0^{\pi/2} d\theta e^{-rR \sin \theta} \leq 2 \int_0^{\pi/2} d\theta e^{-2rR \theta/\pi} = \frac{\pi}{rR} (1 - e^{-rR})$$

結局

$$\left| \int_{C_R} dz f(z) \right| \leq \frac{\pi}{rR} \frac{R^2}{R^2 - m^2} (1 - e^{-rR}) \rightarrow 0 \quad (R \rightarrow \infty)$$

したがって, (16.31) で  $R \rightarrow \infty$  とすると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) = - \int_{C_\varepsilon} dz f(z) = i \int_0^{2\pi} d\theta \alpha f(im + \alpha) = \int_0^{2\pi} d\theta \frac{im + \alpha}{2m - i\alpha} e^{-mr + ir\alpha}$$

になる。ただし  $\alpha = \varepsilon e^{i\theta}$  である。 $\varepsilon \rightarrow +0$  の極限を考えると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) = \frac{i}{2} e^{-mr} \int_0^{2\pi} d\theta = i\pi e^{-mr}$$

これから (16.28) が求まる。

以上の結果は**留数定理**を用いれば容易に求まる。 $z = \alpha$  が  $f(z)$  の特異点であるとき,  $f(z)$  は

$$f(z) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k (z - \alpha)^k$$

と展開できる。 $z = \alpha$  を中心とする半径  $\varepsilon$  の周上を反時計まわりに一周する経路を  $C$  とすると,  $C$  上では

$$z = \alpha + \varepsilon e^{i\theta}, \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi$$

とおけるから

$$\int_C (z - \alpha)^k dz = \int_0^{2\pi} (\varepsilon e^{i\theta})^k i\varepsilon e^{i\theta} d\theta = i\varepsilon^{k+1} \int_0^{2\pi} e^{i(k+1)\theta} d\theta = \begin{cases} 0, & k \neq -1 \\ 2\pi i, & k = -1 \end{cases}$$

したがって

$$\int_C f(z) dz = 2\pi i a_{-1} \quad (16.32)$$

になる。 $a_{-1}$  を  $f(z)$  の  $\alpha$  における**留数**といい  $a_{-1} = \text{Res}(\alpha)$  で表す。(16.32) の積分路は円である必要はない。 $z = \alpha$  を含む任意の閉曲線  $D$  ならばよいことは, コーシーの定理から明らかである。また, 閉曲線  $D$  内に複数の特異点  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$  がある場合は

$$\int_D f(z) dz = 2\pi i \sum_{k=1}^m \text{Res}(\alpha_k) \quad (16.33)$$

になる。これを**留数定理**という。

留数を直接  $f(z)$  を用いて表そう。 $\ell$  を正の整数として

$$f(z) = \sum_{k=-\ell}^{\infty} a_k (z - \alpha)^k, \quad a_{-\ell} \neq 0$$

であるとする。

$$(z - \alpha)^\ell f(z) = a_{-\ell} + a_{-\ell+1} (z - \alpha) + a_{-\ell+2} (z - \alpha)^2 + \dots + a_{-1} (z - \alpha)^{\ell-1} + \dots$$

であるから

$$\frac{d^{\ell-1}}{dz^{\ell-1}} (z-\alpha)^\ell f(z) = (\ell-1)! a_{-1} + \ell! a_0 (z-\alpha) + \cdots$$

したがって

$$\text{Res}(\alpha) = a_{-1} = \frac{1}{(\ell-1)!} \lim_{z \rightarrow \alpha} \frac{d^{\ell-1}}{dz^{\ell-1}} (z-\alpha)^\ell f(z)$$

である。

$f(z) = e^{irz}/(z^2 + m^2)$  の場合,  $z = im$  は  $\ell = 1$  の特異点であるから

$$\text{Res}(im) = \lim_{z \rightarrow im} (z - im) f(z) = \frac{e^{-mr}}{2im}$$

したがって

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) = - \int_{C_\varepsilon} dz f(z) = 2\pi i \frac{e^{-mr}}{2im} = \frac{\pi e^{-mr}}{m}$$

を得る。この結果

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{irx}}{x^2 + m^2} = \frac{\pi e^{-mr}}{m}$$

の両辺を  $r$  で微分すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x}{x^2 + m^2} e^{irx} = i\pi e^{-mr}$$

である。これから (16.28) の積分は

$$F(r) = \frac{i}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{k}{k^2 + m^2} e^{ikr} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-mr}}{r}$$

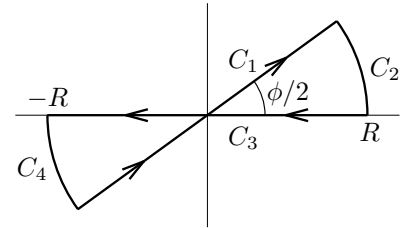
になる。

**ガウス積分** 複素定数  $a = re^{i\phi}$  が  $\text{Re } a \geq 0$  の場合

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \text{ただし} \quad \sqrt{a} = \sqrt{r} e^{i\phi/2} \quad (16.34)$$

を示す。  $\text{Re } a \geq 0$  であるから  $|\phi| \leq \pi/2$  である。  $z = e^{i\phi/2} x$  とおくと

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = e^{-i\phi/2} \int_{C_1} dz e^{-rz^2}$$



ここで  $C_1$  は複素平面上で原点を通る傾き  $\tan(\phi/2)$  の直線で

ある。図のような閉曲線  $C_1 + C_2 + C_3 + C_4$  を考えると ( $R \rightarrow \infty$ ),  $e^{-rz^2}$  は正則であるから

$$I_1 + I_2 + I_3 + I_4 = 0, \quad I_k = \int_{C_k} dz e^{-rz^2}$$

$C_2$  上では  $z = Re^{i\theta/2}$  とおける。ただし,  $\theta$  は  $\phi$  から 0 まで変化する。したがって

$$I_2 = \frac{iR}{2} \int_{\phi}^0 d\theta \exp(-rR^2 e^{i\theta})$$

これから

$$|I_2| \leq \frac{R}{2} \int_0^{|\phi|} d\theta |\exp(-rR^2 e^{i\theta})| = \frac{R}{2} \int_0^{|\phi|} d\theta \exp(-rR^2 \cos \theta)$$

$\cos \theta$  と直線  $1 - 2\theta/\pi$  の図を書けば明らかなように  $0 < \theta < |\phi| \leq \pi/2$  では  $\cos \theta > 1 - 2\theta/\pi$  になるから

$$|I_2| \leq \frac{R}{2} \int_0^{|\phi|} d\theta \exp\left(-rR^2 \left(1 - \frac{2\theta}{\pi}\right)\right) = \frac{\pi}{4rR} \left[ \exp\left(-\left(1 - \frac{2|\phi|}{\pi}\right)rR^2\right) - \exp(-rR^2) \right]$$

$1 - 2|\phi|/\pi \geq 0$  より  $R \rightarrow \infty$  のとき  $I_2 \rightarrow 0$  になる。同様にして  $I_4 \rightarrow 0$  であるから

$$I_1 = -I_3 = -\int_R^{-R} dz e^{-rz^2} = \int_{-R}^R dz e^{-rz^2} \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{r}}, \quad R \rightarrow \infty$$

したがって  $I = e^{-i\phi/2} I_1$  は (16.34) になる。

$\operatorname{Re} a = 0$  の場合  $a = ik$  とする。 $k > 0$  ならば  $\phi = \pi/2$  であるから

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx^2} = \sqrt{\frac{\pi}{k}} e^{-i\pi/4} = \sqrt{\frac{\pi}{2k}} (1 - i)$$

実部と虚部に分ければフレネル積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(kx^2) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sin(kx^2) = \sqrt{\frac{\pi}{2k}}$$

を得る。

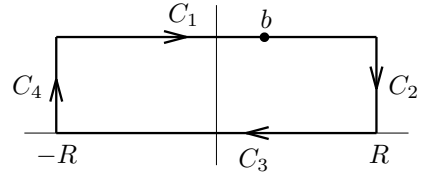
(16.34) の両辺を  $a$  で  $n$  回微分すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^{2n} e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{1 \cdot 3 \cdots (2n-1)}{(2a)^n} \quad (16.35)$$

になる。

一般に,  $a, b$  を複素定数として

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a(x+b)^2}$$



の場合, 図のような径路について積分すると ( $R \rightarrow \infty$ )

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a(x+b)^2} = \int_{C_1} dz e^{-az^2} = -\int_{C_2} dz e^{-az^2} - \int_{C_3} dz e^{-az^2} - \int_{C_4} dz e^{-az^2}$$

$C_2$  上では  $z = R + iy$  で  $y$  は  $b_i = \operatorname{Im} b$  から 0 まで変化するから

$$I_2 = \int_{C_2} dz e^{-az^2} = i \int_{b_i}^0 dy e^{-a(R+iy)^2}$$

になる。

$$a(R+iy)^2 = a_r(R^2 - y^2) - 2a_i Ry + i(a_i(R^2 - y^2) + 2a_r Ry), \quad a_r = \operatorname{Re} a, \quad a_i = \operatorname{Im} a_i$$

より  $a_r > 0$  ならば  $R \rightarrow \infty$  のとき  $I_2 \rightarrow 0$  になる。 $C_4$  についても同様であるから

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a(x+b)^2} = -\int_{C_2} dz e^{-az^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \text{ただし } \operatorname{Re} a > 0 \quad (16.36)$$

$a_r = 0$  の場合,  $b_i = 0$  ならば上式が成り立つ。 $b_i \neq 0$  では  $e^{-a(x+b)^2}$  は  $x \rightarrow \infty$  あるいは  $x \rightarrow -\infty$  のどちらか一方で発散する。

## 16.6 鞍点法

正則な関数  $f(z) = u(z) + iv(z)$  を考える。ある点  $z_0$  近傍での  $f(z)$  の変化は

$$f(z) = f(z_0) + f'(z_0)(z - z_0) + \cdots$$

であるが,  $f'(z_0) = |f'(z_0)|e^{i\alpha}$ ,  $z - z_0 = re^{i\theta}$  とおくと

$$f(z) = f(z_0) + |f'(z_0)|re^{i(\alpha+\theta)} + \cdots$$

になるから

$$u(z) = u(z_0) + |f'(z_0)|r \cos(\theta + \alpha) + \cdots, \quad v(z) = v(z_0) + |f'(z_0)|r \sin(\theta + \alpha) + \cdots$$

したがって,  $v$  が変化しない  $\sin(\theta + \alpha) = 0$  の方向に  $z$  を変化させると  $u$  は最も大きく変化する。つまり,  $v(z) = \text{一定}$  の曲線上では  $u$  は最も大きく変化する。

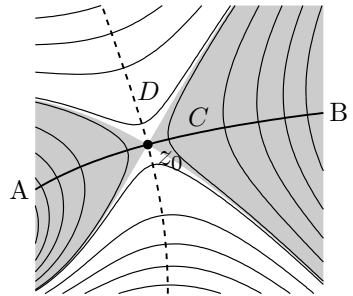
$f(z)$  が  $z = z_0 = x_0 + iy_0$  で停留値になるとする。この点では  $df/dz = 0$  より

$$f(z) = f(z_0) + \frac{f''(z_0)}{2}(z - z_0)^2 + \cdots = f(z_0) + \frac{|f''(z_0)|}{2}r^2e^{i(2\theta+\beta)} + \cdots$$

ただし,  $f''(z_0) = |f''(z_0)|e^{i\beta}$ ,  $z - z_0 = re^{i\theta}$  とした。これから

$$u(z) = u(z_0) + \frac{|f''(z_0)|}{2}r^2 \cos(2\theta + \beta) + \cdots, \quad v(z) = v(z_0) + \frac{|f''(z_0)|}{2}r^2 \sin(2\theta + \beta) + \cdots$$

である。 $\theta$  が  $\cos(2\theta + \beta) > 0$  を満たす方向では  $u(z_0)$  は極小になり  $\cos(2\theta + \beta) < 0$  の方向では極大になる。したがって,  $z = z_0$  を通り  $u(z) = \text{一定} = u(z_0)$  の2つの曲線を境にして, 曲面  $u = u(z)$  は山と谷に分かれる。 $f'(z_0) = 0$  を満たす点で  $u(z)$  は極大でも極小でもない。図では  $u(z)$  の等高線を細い実線で示した。影をつけた部分が谷を表す。 $z = z_0$  は曲面  $u = u(z)$  の峠になっており,  $z = z_0$  近傍ではこの曲面は馬の鞍の形をしているので  $z_0$  を鞍点 (saddle point) という。曲線  $v(z) = \text{一定}$  は  $u(z)$  が最も大きく変化する方向を表すが, 特に鞍点  $z = z_0$  を通る曲線は図に示した太い実線  $C$  と破線  $D$  の2本ある。これらの曲線の  $z = z_0$  での接線方向は, 実線の場合  $2\theta + \beta = \pi$ , 破線では  $2\theta + \beta = 0$  である。谷を通る  $C$  上では  $u(z)$  が最も急速に減少するから,  $C$  を最急降下曲線という。



複素積分で定義される関数

$$F(t) = \int_{C_0} dz e^{tf(z)} g(z)$$

の  $|t| \rightarrow \infty$  での近似式を求める。 $tf(z) = u(z) + iv(z)$  とすると

$$e^{tf(z)} = e^{u(z)} (\cos v(z) + i \sin v(z))$$

である。積分路  $C_0$  を  $u(z)$  の鞍点を通る最急降下曲線  $C$  に変更できるとする。 $|t| \rightarrow \infty$  のとき鞍点近傍では  $e^{u(z)}$  は非常に鋭いピークになるだろうから, 積分を  $z = z_0$  近傍だけで近似できよう。一般に,  $|t| \rightarrow \infty$  では  $\cos v(z)$  と  $\sin v(z)$  は  $z$  が変化すると激しく振動するため積分の評価は困難であるが, 最急降下曲線上の積分では  $v(z)$  は定数である。 $z = z_0$  近傍では

$$tf(z) = tf(z_0) + \frac{tf''(z_0)}{2}(z - z_0)^2 + \cdots$$

である。

$$tf''(z_0) = |tf''(z_0)|e^{i\beta}, \quad z - z_0 = re^{i\theta}$$

とおく。ただし、 $\theta$  は  $z = z_0$  で曲線  $C$  と接する直線の角度であり、 $r > 0$  の方向が積分路の方向になるように  $\theta$  をとる。上図でいえば、積分方向が  $A \rightarrow B$  と  $B \rightarrow A$  では  $\theta$  は  $\pi$  だけ異なる。最急降下曲線  $C$  では  $e^{i(2\theta+\beta)} = -1$ 、つまり  $2\theta + \beta = (2n+1)\pi$  より

$$tf(z) = tf(z_0) + \frac{|tf''(z_0)|}{2} r^2 e^{i(2\theta+\beta)} + \dots = tf(z_0) - \frac{|tf''(z_0)|}{2} r^2 + \dots$$

あるいは

$$u(z) = u(z_0) - \frac{|tf''(z_0)|}{2} r^2 + \dots, \quad v(z) = v(z_0)$$

になる。 $|t| \rightarrow \infty$  のとき、 $r = 0$  近傍以外では  $e^{tf(z)} \approx 0$  になるから、積分区間を  $-\infty < r < \infty$  とし、 $tf(z)$  を上式で近似する。また、 $g(z) \approx g(z_0)$  としてよい。 $dz = e^{i\theta} dr$  より

$$F(t) = \int_C dz e^{tf(z)} g(z) \approx e^{tf(z_0)} g(z_0) \int_{-\infty}^{\infty} dr e^{i\theta} e^{-|tf''(z_0)|r^2/2} = e^{tf(z_0)+i\theta} g(z_0) \sqrt{\frac{2\pi}{|tf''(z_0)|}}$$

になる。 $\sqrt{tf''(z_0)} = \sqrt{|tf''(z_0)|} e^{i\beta/2} = \sqrt{|tf''(z_0)|} ie^{-i\theta+i\pi n}$  より

$$\int_{C_0} dz e^{tf(z)} g(z) \approx \pm i e^{tf(z_0)} g(z_0) \sqrt{\frac{2\pi}{|tf''(z_0)|}}$$

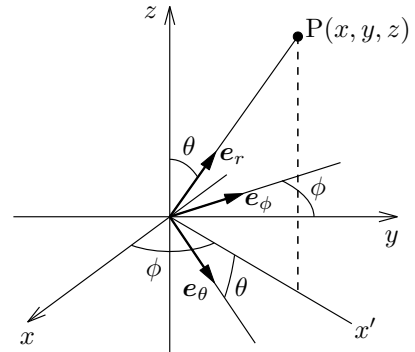
とも表せる。符号は積分路  $C_0$  と鞍点を通る積分路  $C$  の向きで決まる。この近似法を**鞍点法**という。

## 16.7 極座標, 円柱座標, 放物線座標

### 極座標

図のような互いに直交する単位ベクトル  $e_r, e_\theta, e_\phi$  を考える。 $e_\phi$  は  $xy$  平面上にある。ベクトル  $r$  の方向が変化すると、これらの単位ベクトルの方向も変化する。図から

$$\begin{aligned} e_r &= e_x \sin \theta \cos \phi + e_y \sin \theta \sin \phi + e_z \cos \theta \\ e_\theta &= e_x \cos \theta \cos \phi + e_y \cos \theta \sin \phi - e_z \sin \theta \\ e_\phi &= -e_x \sin \phi + e_y \cos \phi \end{aligned} \quad (16.37)$$



である。 $\partial_x = \partial/\partial x$  などと略記する。上式より

$$\begin{aligned} \partial_\theta e_r &= e_\theta, & \partial_\theta e_\theta &= -e_r, & \partial_\theta e_\phi &= 0 \\ \partial_\phi e_r &= e_\phi \sin \theta, & \partial_\phi e_\theta &= e_\phi \cos \theta, & \partial_\phi e_\phi &= -e_r \sin \theta - e_\theta \cos \theta \end{aligned} \quad (16.38)$$

になる。 $r = r e_r(\theta, \phi)$  より

$$dr = dr e_r + r de_r = dr e_r + r(d\theta \partial_\theta e_r + d\phi \partial_\phi e_r) = dr e_r + r d\theta e_\theta + r \sin \theta d\phi e_\phi$$

である。任意の関数  $F(r)$  の全微分は

$$dF = dx \partial_x F + dy \partial_y F + dz \partial_z F = dr \partial_r F + d\theta \partial_\theta F + d\phi \partial_\phi F$$

つまり

$$\begin{aligned} d\mathbf{r} \cdot \nabla F &= \left( dr \mathbf{e}_r + r d\theta \mathbf{e}_\theta + r \sin \theta d\phi \mathbf{e}_\phi \right) \cdot \left( \mathbf{e}_r \partial_r F + \frac{\mathbf{e}_\theta}{r} \partial_\theta F + \frac{\mathbf{e}_\phi}{r \sin \theta} \partial_\phi F \right) \\ &= d\mathbf{r} \cdot \left( \mathbf{e}_r \partial_r F + \frac{\mathbf{e}_\theta}{r} \partial_\theta F + \frac{\mathbf{e}_\phi}{r \sin \theta} \partial_\phi F \right) \end{aligned}$$

であるから

$$\nabla = \mathbf{e}_r \partial_r + \frac{\mathbf{e}_\theta}{r} \partial_\theta + \frac{\mathbf{e}_\phi}{r \sin \theta} \partial_\phi \quad (16.39)$$

になる。ラプラシアンは  $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\phi$  の直交性と (16.38) より

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \left( \mathbf{e}_r \partial_r + \frac{\mathbf{e}_\theta}{r} \partial_\theta + \frac{\mathbf{e}_\phi}{r \sin \theta} \partial_\phi \right) \cdot \left( \mathbf{e}_r \partial_r + \frac{\mathbf{e}_\theta}{r} \partial_\theta + \frac{\mathbf{e}_\phi}{r \sin \theta} \partial_\phi \right) \\ &= \partial_r^2 + \frac{1}{r} \left( \partial_r + \frac{1}{r} \partial_\theta^2 \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \left( \sin \theta \partial_r + \frac{\cos \theta}{r} \partial_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi^2 \right) \\ &= \partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \left( \partial_\theta^2 + \cot \theta \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \right) \end{aligned} \quad (16.40)$$

である。

**問題 16.4**  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = A_r(\mathbf{r})\mathbf{e}_r + A_\theta(\mathbf{r})\mathbf{e}_\theta + A_\phi(\mathbf{r})\mathbf{e}_\phi$  とすると

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 A_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \left( \partial_\theta (A_\theta \sin \theta) + \partial_\phi A_\phi \right) \quad (16.41)$$

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{A} &= \frac{\mathbf{e}_r}{r \sin \theta} \left( \partial_\theta (A_\phi \sin \theta) - \partial_\phi A_\theta \right) + \frac{\mathbf{e}_\theta}{r \sin \theta} \left( \partial_\phi A_r - \sin \theta \partial_r (r A_\phi) \right) \\ &\quad + \frac{\mathbf{e}_\phi}{r} \left( \partial_r (r A_\theta) - \partial_\theta A_r \right) \end{aligned} \quad (16.42)$$

になることを示せ。

**円柱座標**

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta, \quad \text{あるいは} \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \tan \theta = \frac{y}{x} \quad (16.43)$$

とし,  $x, y, z$  の代わりに  $r, \theta, z$  を用いる。

$$\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z = r\mathbf{e}_r + z\mathbf{e}_z$$

$$d\mathbf{r} = \mathbf{e}_r dr + r \frac{d\mathbf{e}_r}{d\theta} d\theta + \mathbf{e}_z dz = \mathbf{e}_r dr + r\mathbf{e}_\theta d\theta + \mathbf{e}_z dz$$

ただし

$$\mathbf{e}_r = \mathbf{e}_x \cos \theta + \mathbf{e}_y \sin \theta, \quad \mathbf{e}_\theta = -\mathbf{e}_x \sin \theta + \mathbf{e}_y \cos \theta \quad (16.44)$$

$\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_z$  は互いに直交する単位ベクトルである。ある関数  $F(\mathbf{r})$  の全微分は

$$dF = \frac{\partial F}{\partial x} dx + \frac{\partial F}{\partial y} dy + \frac{\partial F}{\partial z} dz = \frac{\partial F}{\partial r} dr + \frac{\partial F}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial F}{\partial z} dz$$

$$\therefore d\mathbf{r} \cdot \nabla F = \left( \mathbf{e}_r dr + r\mathbf{e}_\theta d\theta + \mathbf{e}_z dz \right) \cdot \left( \mathbf{e}_r \frac{\partial F}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial F}{\partial \theta} + \mathbf{e}_z \frac{\partial F}{\partial z} \right)$$

したがって

$$\nabla = \mathbf{e}_r \partial_r + \frac{\mathbf{e}_\theta}{r} \partial_\theta + \mathbf{e}_z \partial_z \quad (16.45)$$



である。 $\frac{de_r}{d\theta} = e_\theta$ ,  $\frac{de_\theta}{d\theta} = -e_r$  より

$$\nabla^2 = \left( e_r \partial_r + \frac{e_\theta}{r} \partial_\theta + e_z \partial_z \right) \cdot \left( e_r \partial_r + \frac{e_\theta}{r} \partial_\theta + e_z \partial_z \right) = \partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\theta^2 + \partial_z^2 \quad (16.46)$$

になる。 $z = \text{一定}$  の場合、円柱座標は 2 次元の極座標である。

**問題 16.5**  $A(\mathbf{r}) = A_r(\mathbf{r})e_r + A_\theta(\mathbf{r})e_\theta + A_z(\mathbf{r})e_z$  とすると

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r} \partial_r (r A_r) + \frac{1}{r} \partial_\theta A_\theta + \partial_z A_z \quad (16.47)$$

$$\nabla \times \mathbf{A} = e_r \left( \frac{1}{r} \partial_\theta A_z - \partial_z A_\theta \right) + e_\theta \left( \partial_z A_r - \partial_r A_z \right) + \frac{e_z}{r} \left( \partial_r (r A_\theta) - \partial_\theta A_r \right) \quad (16.48)$$

になることを示せ。

### 放物線座標

放物線座標  $u, v, \phi$  を

$$x = \sqrt{uv} \cos \phi, \quad y = \sqrt{uv} \sin \phi, \quad z = \frac{u-v}{2}, \quad u \geq 0, \quad v \geq 0, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \quad (16.49)$$

で定義する。 $u, v, \phi$  を  $x, y, z$  で表すと

$$u = r + z, \quad v = r - z, \quad \phi = \tan^{-1} \frac{y}{x}$$

である。 $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$  とする。 $u^2 = \rho^2 + 2z^2 + 2zr$  より

$$z = -\frac{\rho^2 - u^2}{2u}, \quad z = \frac{\rho^2 - v^2}{2v}$$

$u$  を与えたとき  $z = z(\rho)$  を図示すると右図の実線になる。破線

は  $v$  を与えたときである。3 次元空間では、放物線を  $z$  軸まわ

りに回転させた放物面になる。 $u, v, \phi$  を与えると、実線と破線の放物線の交点から  $x, y, z$  が決まる。2 つの放物線の交点では  $\rho = \sqrt{uv}$  である。この点における放物線の接線の傾きは、実線の場合  $dz/d\rho = -\sqrt{v/u}$ , 破線の場合  $dz/d\rho = \sqrt{u/v}$  になるから、実線と破線の放物線は直交する。 $u, v, \phi$  の 1 つが一定の面 (座標面) は互いの直交するから、放物線座標は直交曲線座標である。

ラプラシアンを放物線座標で表す。 $u = r(1 + \cos \theta)$ ,  $v = r(1 - \cos \theta)$  より

$$\partial_r = \frac{\partial u}{\partial r} \partial_u + \frac{\partial v}{\partial r} \partial_v = \frac{1}{r} (u \partial_u + v \partial_v), \quad \partial_\theta = \frac{\partial u}{\partial \theta} \partial_u + \frac{\partial v}{\partial \theta} \partial_v = r \sin \theta (\partial_v - \partial_u)$$

$$\partial_r^2 = -\frac{1}{r^2} (u \partial_u + v \partial_v) + \frac{1}{r^2} (u \partial_u + v \partial_v)^2, \quad \partial_\theta^2 = r \cos \theta (\partial_v - \partial_u) + r^2 \sin^2 \theta (\partial_v - \partial_u)^2$$

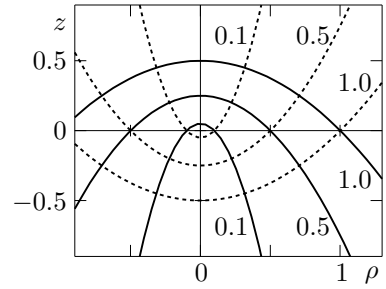
$$r^2 \sin^2 \theta = uv, \quad 2r \cos \theta = u - v \quad \text{より}$$

$$\begin{aligned} r^2 \partial_r^2 + 2r \partial_r + \partial_\theta^2 + \cot \theta \partial_\theta &= (u \partial_u + v \partial_v)^2 + u \partial_u + v \partial_v + uv (\partial_v - \partial_u)^2 + (u - v) (\partial_v - \partial_u) \\ &= (u \partial_u)^2 + (v \partial_v)^2 + v \partial_u u \partial_u + u \partial_v v \partial_v \\ &= (u + v) (\partial_u u \partial_u + \partial_v v \partial_v) \end{aligned}$$

したがって、(16.40) は

$$\nabla^2 = \frac{4}{u+v} (\partial_u u \partial_u + \partial_v v \partial_v) + \frac{1}{uv} \partial_\phi^2 \quad (16.50)$$

になる。



## 16.8 曲線座標でのラプラシアン

行列の基本的性質として, 正方行列  $A = (a_{ij})$  の余因子を  $\Delta_{ij}$  とすると, 行列式と逆行列は

$$\det A = \sum_k a_{ik} \Delta_{ik}, \quad (A^{-1})_{ij} = \frac{\Delta_{ji}}{\det A}$$

で与えられる。 $\Delta_{ik}$  は  $a_{ij}$  を含まないから

$$\frac{\partial}{\partial a_{ij}} \det A = \frac{\partial}{\partial a_{ij}} \sum_k a_{ik} \Delta_{ik} = \Delta_{ij} = (A^{-1})_{ji} \det A$$

したがって,  $a_{ij}$  が変数  $t$  の関数のとき

$$\frac{\partial}{\partial t} \det A = \sum_{ij} \frac{\partial a_{ij}}{\partial t} \frac{\partial}{\partial a_{ij}} \det A = \det A \sum_{ij} (A^{-1})_{ji} \frac{\partial a_{ij}}{\partial t} = \det A \operatorname{Tr} \left( A^{-1} \frac{\partial A}{\partial t} \right) \quad (16.51)$$

になる。

デカルト座標  $x = x_1, y = x_2, z = x_3$  が 3 つの変数  $q_1, q_2, q_3$  の関数の場合を考える。 $q_i$  は一般に曲面になる。2 つの平面  $x_2 = \text{一定}, x_3 = \text{一定}$  の交線が  $x_1$  軸になるが, これと同様に, 2 つの曲面  $q_2 = \text{一定}, q_3 = \text{一定}$  の交線が  $q_1$  軸である。この軸は一般に曲線になる。

$x_i$  の微分と  $q_i$  の微分は

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \sum_j a_{ij} \frac{\partial}{\partial q_j}, \quad \frac{\partial}{\partial q_i} = \sum_j b_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j}, \quad \text{ただし} \quad a_{ij} = \frac{\partial q_j}{\partial x_i}, \quad b_{ij} = \frac{\partial x_j}{\partial q_i} \quad (16.52)$$

で結ばれる。

$$\delta_{ij} = \frac{\partial x_j}{\partial x_i} = \sum_k \frac{\partial q_k}{\partial x_i} \frac{\partial x_j}{\partial q_k} = \sum_k a_{ik} b_{kj} = (AB)_{ij}, \quad \therefore \quad AB = BA = I = \text{単位行列}$$

行列  $A = (a_{ij}), B = (b_{ij})$  は互いに逆行列である。積分変数を  $x_i$  から  $q_i$  に変換するときのヤコビアン  $\det B$  は (16.51) より

$$\frac{1}{\det B} \frac{\partial \det B}{\partial q_k} = \sum_{ij} (B^{-1})_{ij} \frac{\partial b_{ji}}{\partial q_k} = \sum_{ij} a_{ij} \frac{\partial b_{ji}}{\partial q_k}$$

ところで

$$\frac{\partial b_{ji}}{\partial q_k} = \frac{\partial}{\partial q_k} \frac{\partial x_i}{\partial q_j} = \frac{\partial b_{ki}}{\partial q_j}, \quad \therefore \quad \frac{1}{\det B} \frac{\partial \det B}{\partial q_k} = \sum_{ij} a_{ij} \frac{\partial b_{ki}}{\partial q_j} = \sum_i \frac{\partial b_{ki}}{\partial x_i}$$

になる。任意関数  $f(\mathbf{r})$  に対して

$$\sum_{ik} \frac{\partial}{\partial x_i} (a_{nk} b_{ki} f) = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (\delta_{ni} f) = \frac{\partial f}{\partial x_n}$$

である。一方

$$\begin{aligned} \sum_{ik} \frac{\partial}{\partial x_i} (a_{nk} b_{ki} f) &= \sum_{ik} \left( \frac{\partial b_{ki}}{\partial x_i} a_{nk} f + b_{ki} \frac{\partial}{\partial x_i} (a_{nk} f) \right) \\ &= \sum_k \left( \frac{1}{\det B} \frac{\partial \det B}{\partial q_k} a_{nk} f + \frac{\partial}{\partial q_k} (a_{nk} f) \right) = \frac{1}{\det B} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} ((\det B) a_{nk} f) \end{aligned}$$

したがって

$$\frac{\partial}{\partial x_n} = \frac{1}{\det B} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} (\det B) a_{nk}$$

である。これと (16.52) から

$$\nabla^2 = \sum_n \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} = \frac{1}{\det B} \sum_{nk\ell} \frac{\partial}{\partial q_k} (\det B) a_{nk} a_{n\ell} \frac{\partial}{\partial q_\ell}$$

になる。

$$h_{k\ell} = \sum_n a_{nk} a_{n\ell} = \sum_n \frac{\partial q_k}{\partial x_n} \frac{\partial q_\ell}{\partial x_n}, \quad g_{k\ell} = \sum_n b_{kn} b_{\ell n} = \sum_n \frac{\partial x_n}{\partial q_k} \frac{\partial x_n}{\partial q_\ell} \quad (16.53)$$

を定義する。これらは対称行列である。行列  $A$  の転置行列を  $\tilde{A}$  で表すと,  $H = \tilde{A}A$ ,  $G = B\tilde{B}$  より  $HG = GH = I$  であり  $G = (g_{ij})$  と  $H = (h_{ij})$  は互いに逆行列である。 $(\det H)^{-1} = \det G = (\det B)^2$  になるから

$$\nabla^2 = \sqrt{\det H} \sum_{k\ell} \frac{\partial}{\partial q_k} \frac{h_{k\ell}}{\sqrt{\det H}} \frac{\partial}{\partial q_\ell} = \frac{1}{\sqrt{\det G}} \sum_{k\ell} \frac{\partial}{\partial q_k} \sqrt{\det G} (G^{-1})_{k\ell} \frac{\partial}{\partial q_\ell} \quad (16.54)$$

と表せる。 $dx_i = \sum_k b_{ki} dq_k$  より  $q_i$  と  $q_i + dq_i$  の2点間の距離  $ds$  は

$$(ds)^2 = \sum_i (dx_i)^2 = \sum_i \sum_{k\ell} b_{ki} dq_k b_{\ell i} dq_\ell = \sum_{k\ell} g_{k\ell} dq_k dq_\ell$$

になる。 $G$  を計量テンソルという。

#### 直交曲線座標

$q_i$  = 一定の座標面が互いに直交する曲線座標を直交曲線座標という。 $q_i$  = 一定の曲面上の2点を  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$  とすると ( $\mathbf{e}_i = x_i$  軸の単位ベクトル)

$$dq_i = \sum_j \frac{\partial q_i}{\partial x_j} dx_j = \sum_j a_{ji} dx_j = \mathbf{a}_i \cdot d\mathbf{r} = 0, \quad \text{ただし} \quad \mathbf{a}_i = \sum_j a_{ji} \mathbf{e}_j$$

になるから,  $\mathbf{a}_i$  は  $q_i$  = 一定の曲面に直交する法線ベクトルである。したがって, 直交曲線座標である条件は

$$i \neq j \text{ のとき } \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j = \sum_n a_{ni} a_{nj} = h_{ij} = 0, \quad \text{つまり } G, H \text{ が対角行列}$$

である。このとき

$$\nabla^2 = \sqrt{\det H} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \frac{h_{kk}}{\sqrt{\det H}} \frac{\partial}{\partial q_k} = \frac{1}{\sqrt{\det G}} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \frac{\sqrt{\det G}}{g_{kk}} \frac{\partial}{\partial q_k} \quad (16.55)$$

行列式及び  $ds$  は

$$(\det B)^2 = \det G = \prod_k g_{kk}, \quad (ds)^2 = \sum_k g_{kk} (dq_k)^2$$

になる。勾配, 発散, 回転も直交曲線座標で表せる。詳細は **物理数学** の講義ノートを見よ。

#### 極座標

$q_1 = r$ ,  $q_2 = \theta$ ,  $q_3 = \phi$  とすれば

$$B = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \\ r \cos \theta \cos \phi & r \cos \theta \sin \phi & -r \sin \theta \\ -r \sin \theta \sin \phi & r \sin \theta \cos \phi & 0 \end{pmatrix}, \quad \therefore \quad G = B\tilde{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix}$$

あるいは

$$(ds)^2 = (dr)^2 + r^2(d\theta)^2 + r^2 \sin^2 \theta (d\phi)^2$$

から行列  $G$  は直ちに求まる。極座標は直交曲線座標である。 $\sqrt{\det G} = r^2 \sin \theta$  より (16.55) は

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left( \frac{\partial}{\partial r} r^2 \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \end{aligned}$$

になる。これは (16.40) である。

**問題 16.6** (16.55) より (16.46), (16.50) を求めよ。

## 16.9 ラグランジュの未定乗数法

### 例題 1

関数  $F(x_1, x_2, x_3)$  を条件  $G(x_1, x_2, x_3) = \text{一定} = c$  のもとで停留値にする場合を考える。 $x_1, x_2, x_3$  は独立ではない。 $\partial G / \partial x_3 \neq 0$  ならば,  $G(x_1, x_2, x_3) = c$  より  $x_3$  は  $x_1, x_2$  の関数  $x_3 = x_3(x_1, x_2)$  になる (陰関数の存在定理)。2つの独立な変数  $x_1, x_2$  の関数

$$f(x_1, x_2) = F(x_1, x_2, x_3(x_1, x_2))$$

の停留値を求めればよいから  $\partial_k = \partial / \partial x_k$  と略記すると

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \frac{\partial F}{\partial x_1} + \frac{\partial x_3}{\partial x_1} \frac{\partial F}{\partial x_3} = \partial_1 F + (\partial_1 x_3) \partial_3 F = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial x_2} = \partial_2 F + (\partial_2 x_3) \partial_3 F = 0$$

である。 $G(x_1, x_2, x_3(x_1, x_2)) = c$  より

$$\partial_1 G + (\partial_1 x_3) \partial_3 G = 0, \quad \partial_2 G + (\partial_2 x_3) \partial_3 G = 0, \quad \therefore \quad \partial_1 x_3 = -\frac{\partial_1 G}{\partial_3 G}, \quad \partial_2 x_3 = -\frac{\partial_2 G}{\partial_3 G}$$

になるから

$$\partial_1 F - \frac{\partial_3 F}{\partial_3 G} \partial_1 G = 0, \quad \partial_2 F - \frac{\partial_3 F}{\partial_3 G} \partial_2 G = 0 \quad (16.56)$$

が停留値の条件である。次に,  $\lambda$  を任意定数として

$$\tilde{F}(x_1, x_2, x_3) = F(x_1, x_2, x_3) + \lambda G(x_1, x_2, x_3) \quad (16.57)$$

の停留値を求める。ただし, 条件  $G(x_1, x_2, x_3) = c$  は考慮せず  $x_1, x_2, x_3$  は独立とする。停留値の条件は

$$\partial_k \tilde{F} = \partial_k F + \lambda \partial_k G = 0, \quad k = 1, 2, 3$$

$k = 3$  より  $\lambda = -\partial_3 F / \partial_3 G$  であるから  $k = 1, 2$  の条件は (16.56) になる。したがって,  $F(x_1, x_2, x_3)$  を条件  $G(x_1, x_2, x_3) = c$  のもとで停留値にする問題は,  $x_1, x_2, x_3$  を独立変数として (16.57) の停留値を求めよ。これを**ラグランジュの未定乗数 (係数) 法**という。

一般に,  $n$  個の変数の関数  $F(x_1, \dots, x_n)$  を条件  $G_i(x_1, \dots, x_n) = \text{一定} = c_i, i = 1, 2, \dots, m < n$  のもとで停留値にする場合,  $\lambda_i$  を未定乗数として

$$\tilde{F}(x_1, \dots, x_n) = F(x_1, \dots, x_n) + \sum_{i=1}^m \lambda_i G_i(x_1, \dots, x_n)$$

とし  $\partial_1 \tilde{F} = \cdots = \partial_n \tilde{F} = 0$  である。

### 例題 2

関数  $x(t)$  の関数  $F(x(t), \dot{x}(t), t)$ ,  $G(x(t), \dot{x}(t), t)$  を考える。条件

$$x(a) = \text{一定} = x_a, \quad x(b) = \text{一定} = x_b, \quad \int_a^b dt G(x(t), \dot{x}(t), t) = \text{一定} = c \quad (16.58)$$

のもとで

$$I_F = \int_a^b dt F(x(t), \dot{x}(t), t)$$

を停留値にする  $x(t)$  を求める。 $a \leq x \leq b$  を  $n$  個の等分割すると  $\Delta t = (b - a)/n$  として

$$I_F = \sum_{k=0}^n F(x_k, \dot{x}_k, t_k) \Delta t, \quad t_k = a + k\Delta t, \quad x_k = x(t_k)$$

と表せるから  $I_F$  は  $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}$  の関数である。したがって  $\lambda$  を未定乗数として

$$\tilde{I}_F = \sum_{k=0}^n F(x_k, \dot{x}_k, t_k) \Delta t + \lambda \sum_{k=0}^n G(x_k, \dot{x}_k, t_k) \Delta t$$

を停留値にすればよい。積分で表すと

$$\tilde{I}_F = \int_a^b dt \tilde{F}(x(t), \dot{x}(t), t), \quad \tilde{F}(x(t), \dot{x}(t), t) = F(x(t), \dot{x}(t), t) + \lambda G(x(t), \dot{x}(t), t)$$

である。 $x(t)$  を微小変化  $x(t) + \delta x(t)$  させると

$$\delta \tilde{F} = \tilde{F}(x + \delta x, \dot{x} + \delta \dot{x}, t) - \tilde{F}(x, \dot{x}, t) = \frac{\partial \tilde{F}}{\partial x} \delta x + \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x}$$

になるから

$$\delta \tilde{I}_F = \int_a^b dt \delta \tilde{F} = \int_a^b dt \left( \frac{\partial \tilde{F}}{\partial x} \delta x + \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} \right)$$

$\delta \dot{x} = d\delta x/dt$  より部分積分すると

$$\int_a^b dt \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} = \left[ \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \dot{x}} \delta x \right]_{t=a}^{t=b} - \int_a^b dt \delta x \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \dot{x}}$$

$x(a) = \text{一定}, x(b) = \text{一定}$  より  $\delta x(a) = \delta x(b) = 0$  になるから

$$\delta \tilde{I}_F = \int_a^b dt \delta \tilde{F} = \int_a^b dt \delta x(t) \left( \frac{\partial \tilde{F}}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \dot{x}} \right)$$

停留値  $\delta \tilde{I}_F = 0$  であるためには

$$\frac{\partial \tilde{F}}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \dot{x}} = 0, \quad \tilde{F} = F(x(t), \dot{x}(t), t) + \lambda G(x(t), \dot{x}(t), t)$$

これはオイラー・ラグランジュ方程式であるが、この方程式から  $x = x(t)$  が求まる。 $x$  に含まれる  $\lambda$  と任意定数は束縛条件 (16.58) を満たすように決める。

## 16.10 汎関数微分

1 変数の関数  $f(x)$  を考えるが, 多変数の関数  $f(x_1, x_2, \dots)$  の場合に拡張するのは容易である。関数  $f(x)$  は変数  $x$  に値  $f$  を対応させるが, 関数  $f(x)$  に値  $F$  を対応させるものを汎関数という。定積分  $\int_a^b dx f(x)$  は汎関数の最も簡単な例である。汎関数は特定の  $x$  における値  $f(x)$  に依存するのではなく関数  $f(x)$  全体に依存する。汎関数は  $[ ]$  に関数名を入れて  $F[f]$  などで表す。

$x$  の区間を微小間隔  $\Delta x$  で分割し  $i$  番目の点を  $x_i$  とする。 $f_i = f(x_i)$  とおくと汎関数  $F[f]$  はすべての  $f_i$  に依存する多変数の関数  $F(\dots, f_i, f_{i+1}, \dots)$  と見なせる。 $f(x)$  を  $f(x) + \eta(x)$  に変化したとき, テイラー展開すれば

$$\begin{aligned} F[f + \eta] &= F(\dots, f_i + \eta_i, \dots) = F[f] + \sum_i \frac{\partial F}{\partial f_i} \eta_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 F}{\partial f_i \partial f_j} \eta_i \eta_j + \dots \\ &= F[f] + \sum_i K_i^{(1)} \eta_i \Delta x + \frac{1}{2} \sum_{ij} K_{ij}^{(2)} \eta_i \eta_j \Delta x \Delta x + \dots \end{aligned}$$

ただし

$$K_i^{(1)} = \frac{1}{\Delta x} \frac{\partial F}{\partial f_i}, \quad K_{ij}^{(2)} = \frac{1}{(\Delta x)^2} \frac{\partial^2 F}{\partial f_i \partial f_j}$$

$\Delta x \rightarrow 0$  とすると和は積分に置き変わるから  $x = x_i, y = x_j$  として

$$F[f + \eta] = F[f] + \int dx K^{(1)}(x) \eta(x) + \frac{1}{2} \int dx dy K^{(2)}(x, y) \eta(x) \eta(y) + \dots$$

になる。 $K^{(1)}, K^{(2)}$  を

$$K^{(1)}(x) = \frac{\delta F}{\delta f(x)} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} \frac{\partial F}{\partial f_i}, \quad K^{(2)}(x, y) = \frac{\delta^2 F}{\delta f(x) \delta f(y)} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{(\Delta x)^2} \frac{\partial^2 F}{\partial f_i \partial f_j}$$

と書き  $F[f]$  の  $f$  に関する汎関数微分という。汎関数微分は関数  $f$  全体に依存するだけでなく  $x$  または  $y$  にも依存する。一般には

$$F[f + \eta] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dx_1 dx_2 \dots dx_n \frac{\delta^n F}{\delta f(x_1) \delta f(x_2) \dots \delta f(x_n)} \eta(x_1) \eta(x_2) \dots \eta(x_n)$$

により  $n$  階の汎関数微分を定義する。

$f(x)$  の関数  $F$  と  $g(x)$  の積分

$$G[f, g] = \int_a^b dx g(x) F(f(x)) = \sum_k g_k F(f_k) \Delta x$$

の場合

$$\frac{1}{\Delta x} \frac{\partial G}{\partial f_i} = g_i F'(f_i), \quad \frac{1}{(\Delta x)^2} \frac{\partial^2 G}{\partial f_i \partial f_j} = g_i F''(f_i) \frac{\delta_{ij}}{\Delta x}$$

になるから  $a < x, y < b$  のとき

$$\frac{\delta G}{\delta f(x)} = g(x) F'(f(x)), \quad \frac{\delta^2 G}{\delta f(x) \delta f(y)} = g(x) F''(f(x)) \delta(x - y)$$

特に  $g(x) = \delta(x - y), F(f) = f$  とすれば

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) F(f(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - y) f(x) = f(y), \quad \therefore \frac{\delta f(y)}{\delta f(x)} = \delta(x - y)$$

である。

$$\frac{\delta G}{\delta g(x)} = \int_a^b dy \frac{\delta g(y)}{\delta g(x)} F(f(y)) = F(f(x)), \quad \frac{\delta^2 G}{\delta g(x) \delta g(y)} = 0$$

になる。

$x(t)$ ,  $\dot{x} = dx/dt$  の関数  $L(t) = L(x(t), \dot{x}(t))$  に対して

$$S[x] = \int_a^b dt L(x(t), \dot{x}(t))$$

の汎関数微分は  $a < t < b$  のとき

$$\begin{aligned} \frac{\delta S}{\delta x(t)} &= \int_a^b ds \left( \frac{\partial L(s)}{\partial x(s)} \frac{\delta x(s)}{\delta x(t)} + \frac{\partial L(s)}{\partial \dot{x}(s)} \frac{\delta \dot{x}(s)}{\delta x(t)} \right) \\ &= \int_a^b ds \left( \frac{\partial L(s)}{\partial x(s)} \delta(s-t) + \frac{\partial L(s)}{\partial \dot{x}(s)} \frac{d}{ds} \delta(s-t) \right) = \frac{\partial L(t)}{\partial x(t)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L(t)}{\partial \dot{x}(t)} \end{aligned}$$

である。

#### 問題 16.7

$$F[f] = \exp \left( \frac{1}{2} \int dx \int dy f(x) D(x, y) f(y) \right), \quad \text{ただし} \quad D(x, y) = D(y, x)$$

の場合

$$\frac{\delta F}{\delta f(x)} = F[f] \int dy D(x, y) f(y), \quad \left. \frac{\delta^2 F}{\delta f(x) \delta f(y)} \right|_{f=0} = D(x, y)$$

を示せ。

## 17 特殊関数

### 17.1 エルミート多項式

定義

$$H_n(q) \equiv (-1)^n e^{q^2} \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2} = \sum_{k=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^k n!}{k! (n-2k)!} (2q)^{n-2k} \quad (17.1)$$

2 番目の等式は (16.5) である。具体的には

$$H_0(q) = 1, \quad H_1(q) = 2q, \quad H_2(q) = 4q^2 - 2, \quad H_3(q) = 8q^3 - 12q \quad (17.2)$$

である。 $H_{2m}(0)$  に寄与するのは  $k = m$  だけであるから

$$H_{2m}(0) = (-1)^m \frac{(2m)!}{m!} = (-2)^m (2m-1)!! , \quad H_{2m+1}(0) = 0 \quad (17.3)$$

になる。

漸化式 ライプニッツの公式より

$$\frac{d^n}{dq^n} qf(q) = q \frac{d^n f}{dq^n} + n \frac{d^{n-1} f}{dq^{n-1}}$$

であるから

$$\frac{d^{n+1}}{dq^{n+1}} e^{-q^2} = -2 \frac{d^n}{dq^n} q e^{-q^2} = -2 \left( q \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2} + n \frac{d^{n-1}}{dq^{n-1}} e^{-q^2} \right)$$

これに  $(-1)^{n+1} e^{q^2}$  をかければ

$$H_{n+1}(q) = 2qH_n(q) - 2nH_{n-1}(q) \quad (17.4)$$

$H_n$  の定義から

$$\frac{dH_n}{dq} = (-1)^n \frac{d}{dq} \left( e^{q^2} \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2} \right) = (-1)^n \left( 2q e^{q^2} \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2} + e^{q^2} \frac{d^{n+1}}{dq^{n+1}} e^{-q^2} \right)$$

したがって

$$\frac{dH_n}{dq} = 2qH_n(q) - H_{n+1}(q) = 2nH_{n-1}(q) \quad (17.5)$$

である。

微分方程式 (17.5) から

$$\frac{d^2 H_n}{dq^2} = \frac{d}{dq} (2qH_n - H_{n+1}) = 2H_n + 2q \frac{dH_n}{dq} - \frac{dH_{n+1}}{dq} = 2H_n + 2q \frac{dH_n}{dq} - 2(n+1)H_n$$

したがって

$$\left( \frac{d^2}{dq^2} - 2q \frac{d}{dq} + 2n \right) H_n = 0 \quad (17.6)$$

あるいは

$$\left( \frac{d}{dq} e^{-q^2} \frac{d}{dq} + 2n e^{-q^2} \right) H_n = 0 \quad (17.7)$$

である。



母関数  $f(q) = e^{-q^2}$  とすると  $H_n(q) = (-1)^n e^{q^2} f^{(n)}(q)$  であるから、テイラー展開

$$f(q+t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(q)}{n!} t^n$$

に注意すると

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(q)}{n!} t^n = e^{q^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(q)}{n!} (-t)^n = e^{q^2} f(q-t), \quad \therefore \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(q)}{n!} t^n = e^{-t^2+2tq} \quad (17.8)$$

である。(4.25) から

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n(q)}{\sqrt{n!}} t^n = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} e^{-q^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(q)}{n!} \left( \frac{t}{\sqrt{2}} \right)^n = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} e^{-(q^2+t^2)/2+\sqrt{2}tq} \quad (17.9)$$

になる。

直交性

$$I(n, n') = \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-q^2} H_n(q) H_{n'}(q)$$

とする。 $n \geq n'$  としても一般性を失わない。 $H_n$  を定義式で書き直すと

$$\begin{aligned} I(n, n') &= (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{d^n e^{-q^2}}{dq^n} H_{n'}(q) = (-1)^n \left[ \frac{d^{n-1} e^{-q^2}}{dq^{n-1}} H_{n'} \right]_{-\infty}^{\infty} - (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{d^{n-1} e^{-q^2}}{dq^{n-1}} \frac{dH_{n'}}{dq} \\ &= (-1)^{n+1} \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{d^{n-1} e^{-q^2}}{dq^{n-1}} \frac{dH_{n'}}{dq} \end{aligned}$$

ただし、部分積分を行い

$$\frac{d^k e^{-q^2}}{dq^k} = q \text{ の多項式} \times e^{-q^2} \xrightarrow{q \rightarrow \pm \infty} 0$$

を使った。部分積分を繰り返し  $H_{n'}$  に (17.1) のべき展開を代入すると

$$\begin{aligned} I(n, n') &= \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-q^2} \frac{d^n H_{n'}}{dq^n} = \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-q^2} \frac{d^n}{dq^n} \left( (2q)^{n'} - n'(n'-1)(2q)^{n'-2} + \dots \right) \\ &= \begin{cases} 0, & n > n' \\ 2^n n! \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-q^2} = 2^n n! \sqrt{\pi}, & n' = n \end{cases} \end{aligned}$$

になり

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-q^2} H_n(q) H_{n'}(q) = \sqrt{\pi} n! 2^n \delta_{nn'} \quad (17.10)$$

である。これから固有関数 (4.25) の規格直交性

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_n(x) \varphi_{n'}(x) = \delta_{nn'}$$

を導ける。なお、母関数 (17.8) を用いれば

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_n(q)}{n!} \frac{H_m(q)}{m!} t^n s^m = e^{-t^2+2tq-s^2+2sq}$$

である。これに  $e^{-q^2}$  をかけて積分すると

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^n s^m}{n! m!} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-q^2} H_n(q) H_m(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dq \exp(2ts - (q - s - t)^2) = \sqrt{\pi} e^{2ts} \quad (17.11)$$

$e^{2ts}$  をテイラー展開すれば

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^n s^m}{n! m!} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-q^2} H_n(q) H_m(q) = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n t^n s^n}{n!}$$

両辺の  $t^n s^m$  の係数を比較すれば (17.10) を得る。

**問題 17.1** (17.7) に  $H_{n'}(x)$  をかけた式と  $n$  と  $n'$  を入れ換えた式の差を積分することで  $n \neq n'$  のとき  $I(n, n') = 0$  を示せ。

**問題 17.2** 母関数 (17.8) を用いて

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq q^2 e^{-q^2} H_n(q) H_{n'}(q)$$

を求めよ。この結果から  $\langle n' | x^2 | n \rangle$  を求め (4.28) と比較せよ。

## 17.2 ルジャンドル多項式

定義

ルジャンドル ( Legendre ) 陪関数

$$P_\ell^m(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^\ell, \quad \text{ただし } -\ell \leq m \leq \ell, \quad |x| \leq 1 \quad (17.12)$$

$P_\ell^m(x)$  は  $(1-x^2)^{m/2}$  と  $\ell-m$  次の多項式の積である。 $m=0$  のとき単に  $P_\ell(x)$  と書く。 $P_\ell(x)$  は  $\ell$  次の多項式でルジャンドル多項式という。 $m \geq 0$  のとき

$$P_\ell^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_\ell(x)$$

である。定義より

$$P_\ell^m(-x) = (-1)^{\ell+m} P_\ell^m(x) \quad (17.13)$$

また

$$P_\ell^\ell(x) = \frac{(2\ell)!}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{\ell/2} = (2\ell-1)!! (1-x^2)^{\ell/2}, \quad P_{\ell+1}^\ell(x) = (2\ell+1)x P_\ell^\ell(x) \quad (17.14)$$

具体形は

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{3x^2-1}{2}, \quad P_3(x) = \frac{5x^3-3x}{2}$$

**対称性**  $P_\ell^{-m}(x)$  は

$$P_\ell^{-m}(x) = \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{m/2} F(x), \quad F(x) = (x^2-1)^{-m} \frac{d^{\ell-m}}{dx^{\ell-m}} (x^2-1)^\ell$$

と表せる。 $u = x - 1$ ,  $v = x + 1$  とし, ライプニッツの公式を用いると

$$\begin{aligned} F(x) &= u^{-m} v^{-m} \frac{d^{\ell-m}}{dx^{\ell-m}} u^{\ell} v^{\ell} = u^{-m} v^{-m} \sum_{k=0}^{\ell-m} \frac{(\ell-m)!}{k! (\ell-m-k)!} \frac{d^k u^{\ell}}{dx^k} \frac{d^{\ell-m-k} v^{\ell}}{dx^{\ell-m-k}} \\ &= \sum_k \frac{(\ell-m)!}{k! (\ell-m-k)!} \frac{\ell!}{(\ell-k)!} \frac{\ell!}{(k+m)!} u^{\ell-k-m} v^k \end{aligned}$$

$k$  についての和は全ての階乗が負にならない範囲で行う。 $n = k + m$  とおくと

$$F(x) = \sum_n \frac{(\ell-m)!}{(n-m)! (\ell-n)!} \frac{\ell!}{(\ell+m-n)!} \frac{\ell!}{n!} u^{\ell-n} v^{n-m}$$

同様に, ライプニッツの公式を用いると

$$\frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} u^{\ell} v^{\ell} = \sum_k \frac{(\ell+m)!}{k! (\ell+m-k)!} \frac{\ell!}{(\ell-k)!} \frac{\ell!}{(k-m)!} u^{\ell-k} v^{k-m} = \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} F(x)$$

になるから

$$P_{\ell}^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_{\ell}^m(x) \quad (17.15)$$

**ベキ展開**  $(x^2 - 1)^{\ell}$  を二項定理で展開すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2 - 1)^{\ell} &= \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \sum_{k=0}^{\ell} \frac{(-1)^k \ell!}{k! (\ell-k)!} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} x^{2\ell-2k} \\ &= \sum_k \frac{(-1)^k (2\ell-2k)!}{2^{\ell} k! (\ell-k)! (\ell-m-2k)!} x^{\ell-m-2k} \end{aligned}$$

$k$  についての和は全ての階乗が非負の範囲で行う。 $m = 0$  とすれば

$$P_{\ell}(x) = \sum_{k=0}^{[\ell/2]} \frac{(-1)^k (2\ell-2k)!}{2^{\ell} k! (\ell-k)! (\ell-2k)!} x^{\ell-2k} \quad (17.16)$$

$x = 0$  での値は

$$P_{\ell}^m(0) = \begin{cases} \frac{(-1)^{(\ell-m)/2} (\ell+m)!}{2^{\ell} ((\ell-m)/2)! ((\ell+m)/2)!} & \ell - m \text{ が偶数} \\ 0 & \ell - m \text{ が奇数} \end{cases} \quad (17.17)$$

になる。

$x = 1 - 2u$  とし二項定理を用いると

$$\begin{aligned} \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2 - 1)^{\ell} &= \frac{(-1)^{\ell+m}}{2^m \ell!} \frac{d^{\ell+m}}{du^{\ell+m}} u^{\ell} (u-1)^{\ell} = \frac{1}{2^m} \sum_{k=0}^{\ell} \frac{(-1)^{k+m}}{k! (\ell-k)!} \frac{d^{\ell+m}}{du^{\ell+m}} u^{\ell+k} \\ &= \frac{1}{2^m} \sum_k \frac{(-1)^{k+m} (\ell+k)!}{k! (k-m)! (\ell-k)!} u^{k-m} \end{aligned} \quad (17.18)$$

$m \geq 0$  のとき  $k \geq m$ ,  $m \leq 0$  のとき  $k \geq 0$  であるから

$$P_{\ell}^m(x) = \begin{cases} u^{m/2} (1-u)^{m/2} \frac{(\ell+m)!}{m! (\ell-m)!} \left( 1 - \frac{(\ell+1+m)(\ell-m)}{m+1} u + \cdots \right), & m \geq 0 \\ u^{-m/2} (1-u)^{m/2} \frac{(-1)^m}{(-m)!} \left( 1 + \frac{\ell(\ell+1)}{m-1} u + \cdots \right), & m \leq 0 \end{cases} \quad (17.19)$$

したがって  $x = 1$  ( $u = 0$ ) とすると

$$P_\ell(1) = 1, \quad P_\ell(-1) = (-1)^\ell, \quad P_\ell^m(\pm 1) = 0 \quad (m \neq 0), \quad P'_\ell(1) = \frac{\ell(\ell+1)}{2} \quad (17.20)$$

母関数  $1/\sqrt{1-x}$  のマクローリン展開を用いれば

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} (2xt - t^2)^n$$

$(2xt - t^2)^n$  に二項定理を用いると

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} (2xt)^{n-k} (-t^2)^k \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k (2n)!}{2^{n+k} n! k! (n-k)!} x^{n-k} t^{n+k} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{[\ell/2]} \frac{(-1)^k (2\ell-2k)!}{2^\ell (\ell-k)! k! (\ell-2k)!} x^{\ell-2k} t^\ell \end{aligned}$$

したがって

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(x) t^\ell \quad (17.21)$$

である。これを  $x$  について  $m$  回微分すると

$$\frac{(2m-1)!! (1-x^2)^{m/2}}{(1-2xt+t^2)^{m+1/2}} = \sum_{\ell=m}^{\infty} t^{\ell-m} P_\ell^m(x), \quad \text{ただし } m \geq 0 \quad (17.22)$$

になる。(17.21), (17.22) は、一般に複素数  $x, t$  に対して  $|t| < \min |x \pm \sqrt{x^2-1}|$  であれば成立する。 $x$  が実数で  $|x| \leq 1$  の場合  $|t| < 1$  である。

漸化式 (17.22) を  $t$  で微分すると

$$(2m-1)!! (1-x^2)^{m/2} \frac{(2m+1)(x-t)}{(1-2xt+t^2)^{m+3/2}} = \sum_{\ell=m}^{\infty} (\ell-m) t^{\ell-m-1} P_\ell^m(x) \quad (17.23)$$

$1-2xt+t^2$  をかけ左辺に (17.22) を代入すると

$$\sum_{\ell=m}^{\infty} \left( (2m+1)(x-t) t^{\ell-m} P_\ell^m(x) - (\ell-m) t^{\ell-m-1} (1-2xt+t^2) P_\ell^m(x) \right) = 0$$

整理すれば

$$\sum_{\ell=m}^{\infty} \left( (\ell+m) P_{\ell-1}^m - (2\ell+1) x P_\ell^m + (\ell+1-m) P_{\ell+1}^m \right) t^{\ell-m} = 0$$

したがって

$$(\ell+1-m) P_{\ell+1}^m - (2\ell+1) x P_\ell^m + (\ell+m) P_{\ell-1}^m = 0 \quad (17.24)$$

である。(17.15) より  $m < 0$  でも成り立つ。また, (17.14) より  $P_{m-1}^m = 0$  と規約すれば  $\ell = m$  のときも成り立つ。 $m \geq 0$  を与えたとき  $P_{m-1}^m = 0$  及び (17.14) を初期値として,  $\ell \geq m$  である  $P_\ell^m(x)$  を求めることができる。

(17.22) を  $x$  で微分すると

$$\sum_{\ell=m}^{\infty} (1-x^2) \frac{dP_\ell^m}{dx} t^{\ell-m} = \frac{(2m-1)!! (1-x^2)^{m/2}}{(1-2xt+t^2)^{m+1/2}} \left( -mx + \frac{t(2m+1)(1-x^2)}{1-2xt+t^2} \right) \quad (17.25)$$

である。

$$\frac{1-x^2}{1-2xt+t^2} = 1 - \frac{(x-t)^2}{1-2xt+t^2}$$

とすると

$$\begin{aligned} \sum_{\ell=m}^{\infty} (1-x^2) \frac{dP_{\ell}^m}{dx} t^{\ell-m} &= \left( (2m+1)t - mx \right) \frac{(2m-1)!!(1-x^2)^{m/2}}{(1-2xt+t^2)^{m+1/2}} \\ &\quad - t(x-t) \frac{(2m-1)!!(1-x^2)^{m/2}(2m+1)(x-t)}{(1-2xt+t^2)^{m+3/2}} \end{aligned}$$

(17.22), (17.23) を代入すると

$$\begin{aligned} \sum_{\ell=m}^{\infty} (1-x^2) \frac{dP_{\ell}^m}{dx} t^{\ell-m} &= \sum_{\ell=m}^{\infty} \left( \left( (2m+1)t - mx \right) t^{\ell-m} - (x-t)(\ell-m)t^{\ell-m} \right) P_{\ell}^m \\ &= \sum_{\ell=m}^{\infty} \left( (\ell+m)P_{\ell-1}^m - \ell x P_{\ell}^m \right) t^{\ell-m} \end{aligned}$$

したがって

$$(1-x^2) \frac{dP_{\ell}^m}{dx} = (\ell+m)P_{\ell-1}^m - \ell x P_{\ell}^m = (\ell+1)x P_{\ell}^m - (\ell+1-m)P_{\ell+1}^m \quad (17.26)$$

最後の等式では (17.24) を用いた。  $m < 0$  でも成り立つ。

微分方程式 (17.25) より

$$\sum_{\ell=m}^{\infty} (x-t) \frac{dP_{\ell}^m}{dx} t^{\ell-m} = \frac{(2m-1)!!(1-x^2)^{m/2}}{(1-2xt+t^2)^{m+1/2}} \left( -\frac{mx(x-t)}{1-x^2} + t \frac{(2m+1)(x-t)}{1-2xt+t^2} \right)$$

(17.22), (17.23) を代入すると

$$\sum_{\ell=m}^{\infty} (x-t) \frac{dP_{\ell}^m}{dx} t^{\ell-m} = -\frac{mx(x-t)}{1-x^2} \sum_{\ell=m}^{\infty} t^{\ell-m} P_{\ell}^m(x) + \sum_{\ell=m}^{\infty} (\ell-m)t^{\ell-m} P_{\ell}^m(x)$$

$t$  のべきをそろえれば

$$x \frac{dP_{\ell}^m}{dx} - \frac{dP_{\ell-1}^m}{dx} = \left( \ell - \frac{m}{1-x^2} \right) P_{\ell}^m + \frac{mx}{1-x^2} P_{\ell-1}^m$$

(17.26) より  $P_{\ell-1}^m$  を代入すると

$$(\ell+m) \frac{dP_{\ell-1}^m}{dx} = \ell x \frac{dP_{\ell}^m}{dx} + \left( \frac{m^2}{1-x^2} - \ell^2 \right) P_{\ell}^m$$

(17.26) を  $x$  で微分した式にこれを代入すると

$$\left( \frac{d}{dx}(1-x^2) \frac{d}{dx} - \frac{m^2}{1-x^2} + \ell(\ell+1) \right) P_{\ell}^m(x) = 0 \quad (17.27)$$

を得る。  $x = \cos \theta$  とすると

$$\left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + \ell(\ell+1) \right) P_{\ell}^m(\cos \theta) = 0 \quad (17.28)$$

である。

直交性 (17.27) より

$$P_\ell^m \frac{d}{dx} \left( (1-x^2) \frac{dP_k^m}{dx} \right) - P_k^m \frac{d}{dx} \left( (1-x^2) \frac{dP_\ell^m}{dx} \right) + (k(k+1) - \ell(\ell+1)) P_\ell^m P_k^m = 0$$

積分すると

$$\begin{aligned} & (\ell(\ell+1) - k(k+1)) \int_{-1}^1 dx P_\ell^m P_k^m \\ &= \int_{-1}^1 dx \left( P_\ell^m \frac{d}{dx} \left( (1-x^2) \frac{dP_k^m}{dx} \right) - P_k^m \frac{d}{dx} \left( (1-x^2) \frac{dP_\ell^m}{dx} \right) \right) \\ &= \left[ P_\ell^m(x) (1-x^2) \frac{dP_k^m}{dx} - P_k^m(x) (1-x^2) \frac{dP_\ell^m}{dx} \right]_{-1}^1 = 0 \end{aligned}$$

最後は部分積分を行った。したがって  $\ell \neq k$  のとき

$$\int_{-1}^1 dx P_\ell^m(x) P_k^m(x) = 0$$

である。  $F(x) = x^2 - 1$  とすると

$$\int_{-1}^1 dx (P_\ell^m(x))^2 = \int_{-1}^1 dx \frac{d^{\ell+m} F^\ell}{dx^{\ell+m}} H(x), \quad H(x) \equiv \frac{(-1)^m}{(2^\ell \ell!)^2} F^m \frac{d^{\ell+m} F^\ell}{dx^{\ell+m}}$$

部分積分を行うと

$$\int_{-1}^1 dx (P_\ell^m(x))^2 = \left[ \frac{d^{\ell+m-1} F^\ell}{dx^{\ell+m-1}} H \right]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 dx \frac{d^{\ell+m-1} F^\ell}{dx^{\ell+m-1}} \frac{dH}{dx}$$

[...] 内の関数は  $2\ell+1$  次の奇関数であるから右辺第1項は0である。したがって

$$\int_{-1}^1 dx (P_\ell^m(x))^2 = - \int_{-1}^1 dx \frac{d^{\ell+m-1} F^\ell}{dx^{\ell+m-1}} \frac{dH}{dx}$$

部分積分を繰り返し行えば

$$\int_{-1}^1 dx (P_\ell^m(x))^2 = (-1)^{\ell+m} \int_{-1}^1 dx F^\ell \frac{d^{\ell+m} H}{dx^{\ell+m}} = \frac{(-1)^\ell}{(2^\ell \ell!)^2} \int_{-1}^1 dx F^\ell \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} \left( F^m \frac{d^{\ell+m} F^\ell}{dx^{\ell+m}} \right)$$

になる。ところで  $F^\ell = x^{2\ell} - \ell x^{2\ell-2} + \dots$  であるから

$$\frac{d^{\ell+m} F^\ell}{dx^{\ell+m}} = 2\ell(2\ell-1) \cdots (\ell-m+1) x^{\ell-m} + \dots = \frac{(2\ell)!}{(\ell-m)!} x^{\ell-m} + \dots$$

したがって

$$\frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} \left( F^m \frac{d^{\ell+m} F^\ell}{dx^{\ell+m}} \right) = \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} \left( \frac{(2\ell)!}{(\ell-m)!} x^{\ell+m} + \dots \right) = (2\ell)! \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}$$

これから

$$\int_{-1}^1 dx (P_\ell^m(x))^2 = \frac{(2\ell)!}{(2^\ell \ell!)^2} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \int_{-1}^1 dx (1-x^2)^\ell = \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}$$

ここで (5.28) を用いた。まとめると

$$\int_{-1}^1 dx P_\ell^m(x) P_k^m(x) = \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \delta_{\ell k} \quad (17.29)$$

である。

**問題 17.3**  $\int_{-1}^1 dx F(x) P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \int_{-1}^1 dx \frac{d^\ell F}{dx^\ell} (1-x^2)^\ell$  を示せ。したがって,  $F(x)$  が  $n$  次の多項式ならば  $\ell > n$  のとき積分は 0 になる。

**問題 17.4**  $\int_{-1}^1 dx (P'_\ell(x))^2 = \ell(\ell+1)$  を示せ。

**問題 17.5**  $|x| \leq 1$  で定義された関数  $F(x)$  は

$$F(x) = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell P_\ell(x) \quad (17.30)$$

と展開できる。

$$a_\ell = \frac{2\ell+1}{2} \int_{-1}^1 dx F(x) P_\ell(x) = \frac{2\ell+1}{2^{\ell+1} \ell!} \int_{-1}^1 dx \frac{d^\ell F}{dx^\ell} (1-x^2)^\ell$$

を示せ。また

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) P_\ell(x) P_\ell(x') = 2\delta(x-x'), \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (4n+1)(2n)!}{2^{2n+1} (n!)^2} P_{2n}(x) = \delta(x) \quad (17.31)$$

を示せ。 $x' = \pm 1$  の場合, 発散点が積分の端点になるから

$$\int_{-1}^1 dx \delta(x \pm 1) = \frac{1}{2}$$

である。したがって

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) P_\ell(x) = 4\delta(x-1), \quad \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)(-1)^\ell P_\ell(x) = 4\delta(x+1) \quad (17.32)$$

になる。

### 17.3 球面調和関数

**定義** 球面調和関数  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  を

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} e^{im\phi} P_\ell^m(\cos \theta), \quad -\ell \leq m \leq \ell \quad (17.33)$$

で定義する。(17.14) より

$$Y_{\ell \ell}(\theta, \phi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} (2\ell)! \sin^\ell \theta e^{i\ell\phi} \quad (17.34)$$

また, (17.20) から

$$Y_{\ell m}(0, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \delta_{m0} \quad (17.35)$$

である。

**対称性**

$$C_{\ell m} \equiv (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}$$

とする。(17.13), (17.15) から

$$Y_{\ell m}(\pi - \theta, \phi + \pi) = C_{\ell m}(-1)^m e^{im\phi} P_{\ell}^m(-\cos \theta) = (-1)^{\ell} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (17.36)$$

$$Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) = C_{\ell m} e^{-im\phi} (-1)^m \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!} P_{\ell}^{-m}(\cos \theta) = (-1)^m Y_{\ell -m}(\theta, \phi) \quad (17.37)$$

微分方程式 (17.28) より

$$\mathbf{L}^2 Y_{\ell m} = \ell(\ell + 1) Y_{\ell m}, \quad \text{ただし} \quad \mathbf{L}^2 = (-i\mathbf{r} \times \nabla)^2 = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

である。

$$L_{\pm} = e^{\pm i\phi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

に対しては  $x = \cos \theta$  とすると

$$L_{\pm} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = C_{\ell m} \frac{e^{i(m \pm 1)\phi}}{\sqrt{1-x^2}} \left( \mp (1-x^2) \frac{d}{dx} - mx \right) P_{\ell}^m(x)$$

$P_{\ell}^m(x)$  の定義 (17.12) から

$$\begin{aligned} (1-x^2) \frac{dP_{\ell}^m}{dx} &= \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \left( -mx(1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} + (1-x^2)^{m/2+1} \frac{d^{\ell+m+1}}{dx^{\ell+m+1}} \right) (x^2-1)^{\ell} \\ &= -mx P_{\ell}^m + \sqrt{1-x^2} P_{\ell}^{m+1} \end{aligned}$$

したがって

$$L_{+} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = -C_{\ell m} e^{i(m+1)\phi} P_{\ell}^{m+1} = \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)} Y_{\ell, m+1} \quad (17.38)$$

である。一方

$$L_{-} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = C_{\ell m} \frac{e^{i(m-1)\phi}}{\sqrt{1-x^2}} \left( (1-x^2) \frac{d}{dx} - mx \right) \frac{F(x)}{\sqrt{1-x^2}} = C_{\ell m} e^{i(m-1)\phi} \left( \frac{dF}{dx} - \frac{m-1}{1-x^2} xF \right)$$

ただし

$$F(x) = \left( (1-x^2) \frac{d}{dx} + (m-1)x \right) P_{\ell}^{m-1}$$

(17.27) より

$$\frac{dF}{dx} = \left( \frac{(m-1)^2}{1-x^2} - \ell(\ell+1) + m-1 \right) P_{\ell}^{m-1} + (m-1)x \frac{dP_{\ell}^{m-1}}{dx}$$

になるから

$$L_{-} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = -C_{\ell m} e^{i(m-1)\phi} \left( \ell(\ell+1) - m(m-1) \right) P_{\ell}^{m-1} = \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)} Y_{\ell, m-1} \quad (17.39)$$

$L_{\pm} Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  は角運動量の交換関係から導けるが、ここでは  $Y_{\ell m}$  の定義から求めた。

完全規格直交性 (17.29) より

$$\int d\Omega Y_{\ell m}(\theta, \phi) Y_{\ell' m'}^*(\theta, \phi) = \delta_{\ell \ell'} \delta_{mm'}, \quad \text{ただし} \quad \int d\Omega \cdots = \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \cdots \quad (17.40)$$

を満たす。



$\theta, \phi$  の関数  $F(\theta, \phi)$  は  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  により

$$F(\theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

と展開できる。規格直交性 (17.40) から

$$\int d\Omega F(\theta, \phi) Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) = \sum_{\ell'=0}^{\infty} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} a_{\ell' m'} \int d\Omega Y_{\ell m}^* Y_{\ell' m'} = a_{\ell m}$$

である。この表現を展開式に代入すると

$$\begin{aligned} F(\theta, \phi) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \int d\Omega' F(\theta', \phi') Y_{\ell m}^*(\theta', \phi') \\ &= \int_0^{\pi} d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' F(\theta', \phi') \sin \theta' \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\theta, \phi) Y_{\ell m}^*(\theta', \phi') \end{aligned}$$

したがって

$$\sin \theta' \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\theta, \phi) Y_{\ell m}^*(\theta', \phi') = \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi')$$

あるいは

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\theta, \phi) Y_{\ell m}^*(\theta', \phi') = \delta(\Omega - \Omega'), \quad \delta(\Omega - \Omega') \equiv \frac{\delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi')}{\sin \theta} \quad (17.41)$$

これは球面調和関数の完全性を表す。なお、 $\delta(\Omega - \Omega')$  の定義から

$$\int d\Omega F(\theta, \phi) \delta(\Omega - \Omega_0) = \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi F(\theta, \phi) \delta(\theta - \theta_0) \delta(\phi - \phi_0) = F(\theta_0, \phi_0)$$

である。

**加法定理** 2つの位置ベクトル  $\mathbf{r}_1$  と  $\mathbf{r}_2$  を極座標で表して

$$\mathbf{r}_1 = r_1 (\sin \theta_1 \cos \phi_1, \sin \theta_1 \sin \phi_1, \cos \theta_1), \quad \mathbf{r}_2 = r_2 (\sin \theta_2 \cos \phi_2, \sin \theta_2 \sin \phi_2, \cos \theta_2)$$

とする。 $\mathbf{r}_1$  と  $\mathbf{r}_2$  のなす角  $\alpha$  は

$$\cos \alpha = \frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2}{r_1 r_2} = \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\phi_1 - \phi_2) + \cos \theta_1 \cos \theta_2$$

である。簡単のため  $c_1 = \cos \theta_1$ ,  $s_1 = \sin \theta_1$  などと略記すると,  $u = \cos \alpha$  の関数  $F(u)$  に対して

$$\begin{aligned} s_1 \frac{\partial}{\partial \theta_1} F(u) &= s_1 \frac{\partial u}{\partial \theta_1} \frac{dF}{du} = (c_1 u - c_2) \frac{dF}{du} \\ \frac{1}{s_1} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \left( s_1 \frac{\partial}{\partial \theta_1} F(u) \right) &= \left( \frac{u - c_1 c_2}{s_1^2} - 2u \right) \frac{dF}{du} + \left( \frac{(u - c_1 c_2)^2}{s_1^2} + c_2^2 - u^2 \right) \frac{d^2 F}{du^2} \end{aligned}$$

また

$$\frac{\partial F}{\partial \phi_1} = -s_1 s_2 \sin(\phi_1 - \phi_2) \frac{dF}{du}, \quad \frac{\partial^2 F}{\partial \phi_1^2} = -(u - c_1 c_2) \frac{dF}{du} + (s_1^2 s_2^2 - (u - c_1 c_2)^2) \frac{d^2 F}{du^2}$$

したがって  $\mathbf{L}_1 = -i \mathbf{r}_1 \times \nabla_1$  に対して

$$\mathbf{L}_1^2 F(u) = - \left( \frac{1}{s_1} \frac{\partial}{\partial \theta_1} s_1 \frac{\partial}{\partial \theta_1} + \frac{1}{s_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} \right) F(u) = (u^2 - 1) \frac{d^2 F}{du^2} + 2u \frac{dF}{du} \quad (17.42)$$

$\mathbf{L}_2^2 F(u)$  も同じになる。ただし,  $\mathbf{L}_2 = -i \mathbf{r}_2 \times \nabla_2$  である。次に

$$(\mathbf{L}_1)_{\pm} F(u) = e^{\pm i \phi_1} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta_1} + i \cot \theta_1 \frac{\partial}{\partial \phi_1} \right) F = \pm (c_1 s_2 e^{\pm i \phi_2} - s_1 c_2 e^{\pm i \phi_1}) \frac{dF}{du}$$

より

$$(\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)_{\pm} F(u) = 0$$

である。また

$$(\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)_z F(u) = -i \left( \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \frac{\partial}{\partial \phi_2} \right) F(u) = 0$$

である。

$F(u) = P_{\ell}(u)$  の場合, (17.27), (17.42) より

$$\mathbf{L}_1^2 P_{\ell}(u) = (u^2 - 1) \frac{d^2 P_{\ell}}{du^2} + 2u \frac{dP_{\ell}}{du} = \ell(\ell + 1) P_{\ell}(u)$$

$Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1)$  と同じ微分方程式を満たすから

$$P_{\ell}(u) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_m(\theta_2, \phi_2) Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1)$$

と展開できる。 $\mathbf{L}_2^2 P_{\ell}(u) = \ell(\ell + 1) P_{\ell}(u)$  及び  $(\mathbf{L}_2)_z P_{\ell}(u) = -(\mathbf{L}_1)_z P_{\ell}(u)$  に代入すると

$$\mathbf{L}_2^2 a_m(\theta_2, \phi_2) = \ell(\ell + 1) a_m(\theta_2, \phi_2), \quad (\mathbf{L}_2)_z a_m(\theta_2, \phi_2) = -m a_m(\theta_2, \phi_2)$$

でなければならないから  $a_m(\theta_2, \phi_2) = c_m Y_{\ell -m}(\theta_2, \phi_2)$  とおける。このとき, (17.38), (17.39) から

$$\begin{aligned} (\mathbf{L}_1)_+ P_{\ell}(u) &= \sum_m c_m \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} Y_{\ell m+1}(\theta_1, \phi_1) Y_{\ell -m}(\theta_2, \phi_2) \\ (\mathbf{L}_2)_+ P_{\ell}(u) &= \sum_m c_m \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1) Y_{\ell -m+1}(\theta_2, \phi_2) \\ &= \sum_m c_{m+1} \sqrt{(\ell + m + 1)(\ell - m)} Y_{\ell m+1}(\theta_1, \phi_1) Y_{\ell -m}(\theta_2, \phi_2) \end{aligned}$$

$(\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)_+ P_{\ell}(u) = 0$  より  $c_m + c_{m+1} = 0$  になるから  $c_m = (-1)^m c_0$  とおける

$$P_{\ell}(u) = c_0 \sum_m (-1)^m Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1) Y_{\ell -m}(\theta_2, \phi_2) = c_0 \sum_m Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1) Y_{\ell m}^*(\theta_2, \phi_2)$$

$\theta_2 = 0$  とすると (17.34) より

$$P_{\ell}(\cos \theta_1) = c_0 \sum_m Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1) \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi}} \delta_{m0} = c_0 \frac{2\ell + 1}{4\pi} P_{\ell}(\cos \theta_1)$$

したがって, 加法定理

$$P_{\ell}(\cos \alpha) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1) Y_{\ell m}^*(\theta_2, \phi_2) \quad (17.43)$$

が成り立つ。 $\theta_1 = \theta_2 = \theta$ ,  $\phi_1 = \phi_2 = \phi$  とすると  $P_{\ell}(1) = 1$  であるから

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 = \frac{2\ell + 1}{4\pi} \quad (17.44)$$

になる。

## 問題 17.6

1. (17.21) より

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>^{\ell+1}}} P_{\ell}(\cos \alpha) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1} \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>^{\ell+1}}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_1) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}_2) \quad (17.45)$$

を証明せよ。ただし,  $|\mathbf{r}_1|, |\mathbf{r}_2|$  の大きい方を  $r_{>}$ , 小さい方を  $r_{<}$  で表し,  $\alpha$  は  $\mathbf{r}_1$  と  $\mathbf{r}_2$  のなす角である。

2. 1. の右边を  $F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  とすると

$$F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1} F_{\ell}(r_1, r_2) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_1) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}_2)$$

ただし

$$F_{\ell}(r_1, r_2) = \theta(r_1 - r_2) \frac{r_2^{\ell}}{r_1^{\ell+1}} + \theta(r_2 - r_1) \frac{r_1^{\ell}}{r_2^{\ell+1}}, \quad \theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

と表せる。これから

$$\nabla_1^2 F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \nabla_2^2 F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -4\pi \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

を示せ。これは  $\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\mathbf{r})$  より当然成り立つべき式である。

## 17.4 ガンマ関数とベータ関数

ガンマ関数の定義

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^{x-1} \quad (17.46)$$

ただし, 積分が下限で発散しないためには  $x-1 > -1$  でなければならない。部分積分を行うと

$$\Gamma(x+1) = -[e^{-t} t^x]_{t=0}^{t=\infty} + x \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^{x-1} = x\Gamma(x) \quad (17.47)$$

である。この関係式を用いて  $x < 0$  に拡張する。

$$\Gamma(x) = \frac{\Gamma(x+1)}{x} = \frac{\Gamma(x+2)}{x(x+1)} = \cdots = \frac{\Gamma(x+n)}{x(x+1)\cdots(x+n-1)} \quad (17.48)$$

$x = 1$  とすると

$$\Gamma(n+1) = n! \Gamma(1) = n! \quad (17.49)$$

$x = 1/2$  とすると

$$\Gamma(n+1/2) = \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdots \frac{2n-1}{2} \Gamma(1/2) = \frac{(2n-1)!!}{2^n} \Gamma(1/2)$$

ただし

$$(2n-1)!! = 1 \cdot 3 \cdots (2n-3) \cdot (2n-1) = \frac{(2n)!}{2^n n!}$$

である。 $u = \sqrt{t}$  とすると

$$\Gamma(1/2) = \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^{-1/2} = 2 \int_0^{\infty} du e^{-u^2} = \sqrt{\pi}$$

になるから

$$\Gamma(n+1/2) = \frac{(2n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi} = \frac{(2n)!}{2^{2n}n!} \sqrt{\pi} \quad (17.50)$$

$x = -n + 1/2$  とすれば

$$\begin{aligned} \Gamma(-n+1/2) &= \frac{\Gamma(1/2)}{(-n+1/2)(-n+1+1/2)\cdots(-3/2)\cdot(-1/2)} \\ &= \frac{(-2)^n}{(2n-1)!!} \sqrt{\pi} = \frac{(-4)^nn!}{(2n)!} \sqrt{\pi} \end{aligned} \quad (17.51)$$

である。

$k$  を正の整数として  $x = -k + \delta$  のとき, (17.48) で  $n = k + 1$  とすると

$$\Gamma(-k+\delta) = \frac{\Gamma(1+\delta)}{(-k+\delta)(-k+1+\delta)\cdots(-1+\delta)\delta} \xrightarrow{\delta \rightarrow 0} \frac{(-1)^k}{k!} \frac{1}{\delta} \quad (17.52)$$

したがって,  $\Gamma(x)$  は  $x$  が 0 または負の整数のとき発散する。

(17.48) より  $y = 1 - x - n$  とすると

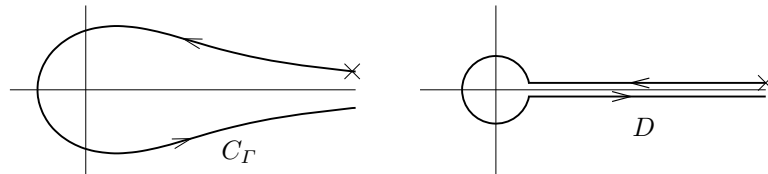
$$\begin{aligned} \Gamma(1-x) &= \Gamma(y+n) = y(y+1)\cdots(y+n-2)(y+n-1)\Gamma(y) \\ &= (-1)^n(x+n-1)(x+n-2)\cdots(x+1)x\Gamma(1-x-n) \\ &= (-1)^n \frac{\Gamma(x+n)}{\Gamma(x)} \Gamma(1-x-n) \end{aligned}$$

したがって

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = (-1)^n \Gamma(x+n)\Gamma(1-x-n) \quad (17.53)$$

である。(17.59) より  $\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \pi/\sin(\pi x)$  になる。

### ガンマ関数の複素積分表現



上図に示したように,  $\operatorname{Re}(z) > 0$  である無限遠から出発して, 原点を反時計まわりに 1 周し, 再び  $\operatorname{Re}(z) > 0$  である無限遠に戻る経路  $C_\Gamma$  を考える。× で示した無限遠での  $z$  の偏角を 0 とする

$$F(x) = \int_{C_\Gamma} dz e^{-z} z^{x-1}$$

を求める。積分路  $C_\Gamma$  は実軸上を往復する部分と原点まわりの半径  $\varepsilon$  の円周からなる積分路  $D$  に変更できる。最初に, 無限遠から  $\varepsilon$  に向かう経路では  $z = t$ ,  $\infty > t \geq \varepsilon$  とおけるから

$$I_- = \int_{\infty}^{\varepsilon} dt e^{-t} t^{x-1} = - \int_{\varepsilon}^{\infty} dt e^{-t} t^{x-1}$$

原点まわりの円周上では  $z = \varepsilon e^{i\theta}$ ,  $0 \leq \theta \leq 2\pi$  であるから

$$I_0 = i\varepsilon \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\theta} \exp(-\varepsilon e^{i\theta}) (\varepsilon e^{i\theta})^{x-1} = i\varepsilon^x \int_0^{2\pi} d\theta e^{ix\theta} \exp(-\varepsilon e^{i\theta})$$

$\varepsilon \rightarrow 0$  の場合  $\exp(-\varepsilon e^{i\theta}) \rightarrow 1$  になるから

$$I_0 = i\varepsilon^x \int_0^{2\pi} d\theta e^{ix\theta} = (e^{2\pi ix} - 1) \frac{\varepsilon^x}{x}$$

である。最後に、実軸上で  $\varepsilon$  から無限遠に向かう経路では、 $z$  の偏角は  $2\pi$  増加して  $z = te^{2\pi i}$ ,  $\varepsilon \leq t < \infty$  になるから

$$I_+ = \int_{\varepsilon}^{\infty} dt e^{-t} (te^{2\pi i})^{x-1} = e^{2\pi ix} \int_{\varepsilon}^{\infty} dt e^{-t} t^{x-1}$$

したがって

$$\begin{aligned} F(x) &= \int_{C_R} dz e^{-z} z^{x-1} = \int_D dz e^{-z} z^{x-1} = I_- + I_0 + I_+ \\ &= (e^{2\pi ix} - 1) \left( \frac{\varepsilon^x}{x} + \int_{\varepsilon}^{\infty} dt e^{-t} t^{x-1} \right) \end{aligned} \quad (17.54)$$

$x > 0$  のとき  $\varepsilon^x \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$  になるから  $F(x) = (e^{2\pi ix} - 1) \Gamma(x)$ , つまり

$$\Gamma(x) = \frac{1}{e^{2\pi ix} - 1} \int_{C_R} dz e^{-z} z^{x-1} = -\frac{1}{2i \sin(\pi x)} \int_{C_R} dz e^{-z} (-z)^{x-1}, \quad -z = e^{-i\pi} z \quad (17.55)$$

(17.55) は整数以外の任意の複素数  $x$  に対して  $\Gamma(x)$  を定義する。 $\operatorname{Re}(x) < 0$  の場合  $\varepsilon \rightarrow 0$  とすると、 $I_0, I_{\pm}$  の各々は発散するが、和は有限になる。

$x$  が整数のとき  $e^{2\pi ix} - 1 = 0$  になり (17.55) は発散するが、正の整数については、(17.54) より

$$\frac{1}{e^{2\pi ix} - 1} \int_{C_R} dz e^{-z} z^{x-1} = \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^{x-1} \quad (17.56)$$

になり最初の定義式 (17.46) に一致するから、正の整数  $x$  は除去しうる特異点である。

(17.55) より整数以外の任意の複素数  $x$  に対して

$$\Gamma(x+1) = -\frac{1}{e^{2\pi ix} - 1} \int_{C_R} dz \frac{de^{-z}}{dz} z^x$$

部分積分を行えば

$$\Gamma(x+1) = -\frac{1}{e^{2\pi ix} - 1} \left( [e^{-z} z^x]_{C_R} - x \int_{C_R} dz e^{-z} z^{x-1} \right)$$

ここで  $[f(z)]_{C_R} = f(\text{終点}) - f(\text{始点})$  であるが、 $C_R$  の終点と始点では  $\operatorname{Re}(z) \rightarrow +\infty$  より  $e^{-z} \rightarrow 0$  になるから

$$\Gamma(x+1) = \frac{x}{e^{2\pi ix} - 1} \int_{C_R} dz e^{-z} z^{x-1} = x\Gamma(x)$$

である。

### ベータ関数

$$B(p, q) = \int_0^1 dx x^{p-1} (1-x)^{q-1} = \int_0^{\infty} dt \frac{t^{p-1}}{(1+t)^{p+q}} \quad (17.57)$$

をベータ関数という。 $\Gamma$  関数の定義式で  $t = (1+u)s$ , ( $1+u > 0$ ) とし  $x = p+q$  とすると

$$\int_0^{\infty} ds e^{-(1+u)s} s^{p+q-1} = \frac{\Gamma(p+q)}{(1+u)^{p+q}}$$

$u^{p-1}$  をかけて  $u$  について積分すると

$$\int_0^\infty du u^{p-1} \int_0^\infty ds e^{-(1+u)s} s^{p+q-1} = \Gamma(p+q) \int_0^\infty du \frac{u^{p-1}}{(1+u)^{p+q}} = \Gamma(p+q) B(p, q)$$

ところで

$$\text{左辺} = \int_0^\infty ds e^{-s} s^{p+q-1} \int_0^\infty du u^{p-1} e^{-us}$$

$t = us$  とすると

$$\text{左辺} = \int_0^\infty ds e^{-s} s^{p+q-1} \frac{1}{s^p} \int_0^\infty dt t^{p-1} e^{-t} = \Gamma(q) \Gamma(p)$$

したがって

$$B(p, q) = \frac{\Gamma(p) \Gamma(q)}{\Gamma(p+q)} \quad (17.58)$$

である。

$p = x, q = 1 - x$  とすると

$$\Gamma(x) \Gamma(1-x) = B(x, 1-x) = \int_0^\infty dt \frac{t^{x-1}}{t+1}$$

である。積分路  $D$  に  $D_R$  を加えた閉曲線の経路  $D + D_R$  を考える。

(17.54) と同様に,  $e^{-z}$  を  $1/(z+1)$  で置き換えれば,  $x > 0$  のとき

$$\int_D dz \frac{z^{x-1}}{z+1} = (e^{2\pi i x} - 1) \int_0^\infty dt \frac{t^{x-1}}{t+1}$$

$D_R$  では  $z = Re^{i\theta}$ , ( $\theta: 2\pi \rightarrow 0$ ) であるから

$$I_R = \int_{D_R} dz \frac{z^{x-1}}{z+1} = - \int_0^{2\pi} d\theta \frac{iR^x e^{i(x-1)\theta}}{Re^{i\theta} + 1} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} -iR^{x-1} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i(x-1)\theta}$$

$x-1 < 0$  のとき  $I_R \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0$  になるから,  $0 < x < 1$  の場合

$$\oint_{D+D_R} dz \frac{z^{x-1}}{z+1} = (e^{2\pi i x} - 1) \int_0^\infty dt \frac{t^{x-1}}{t+1}$$

である。閉曲線内に  $z^{x-1}/(z+1)$  は一位の極  $z = -1 = e^{i\pi}$  をもつから, 留数定理より ( $D + D_R$  は反時計回りでなく時計回り)

$$\oint_{D+D_R} dz \frac{z^{x-1}}{z+1} = -2\pi i (e^{i\pi})^{x-1} = 2\pi i e^{i\pi x}$$

したがって

$$\int_0^\infty dt \frac{t^{x-1}}{t+1} = 2\pi i \frac{e^{i\pi x}}{e^{2\pi i x} - 1} = \frac{\pi}{\sin \pi x}, \quad \therefore \Gamma(x) \Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin \pi x} \quad (17.59)$$

この結果は任意の複素数  $x$  について成り立つ。  $\Gamma(z)^* = \Gamma(z^*)$  であるから,  $x$  が実数のとき

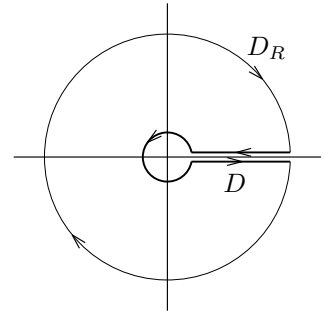
$$|\Gamma(1/2 + ix)|^2 = \Gamma(1/2 + ix) \Gamma(1/2 - ix) = \frac{\pi}{\sin(\pi/2 + ix\pi)} = \frac{\pi}{\cosh(\pi x)} \quad (17.60)$$

である。

### ガンマ関数の無限乗積表現

$n$  を正の整数として

$$F_n(x) = \int_0^n dt t^{x-1} \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n = n^x \int_0^1 ds s^{x-1} (1-s)^n$$



とする。  $n \rightarrow \infty$  のとき  $(1 - t/n)^n \rightarrow e^{-t}$  より  $F_n(x) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \Gamma(x)$  である。部分積分すると

$$F_n(x) = \frac{n^x}{x} \left( [s^x(1-s)^n]_0^1 + n \int_0^1 ds s^x(1-s)^{n-1} \right) = n^x \frac{n}{x} \int_0^1 ds s^x(1-s)^{n-1}$$

これを繰り返すと

$$\begin{aligned} F_n(x) &= n^x \frac{n}{x} \frac{n-1}{x+1} \cdots \frac{2}{x+n-2} \frac{1}{x+n-1} \frac{1}{x+n} \\ &= \frac{n^x}{x} \frac{1}{x+1} \frac{2}{x+2} \cdots \frac{n}{x+n} \\ &= \frac{e^{-\gamma_n x}}{x} \frac{e^x}{1+x} \frac{e^{x/2}}{1+x/2} \cdots \frac{e^{x/n}}{1+x/n}, \quad \gamma_n = 1 + \frac{1}{2} + \cdots + \frac{1}{n} - \log n \end{aligned}$$

になる。したがって

$$\frac{1}{\Gamma(x)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{F_n(x)} = x e^{\gamma x} \prod_{k=1}^{\infty} \left( 1 + \frac{x}{k} \right) e^{-x/k} \quad (17.61)$$

ただし

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( 1 + \frac{1}{2} + \cdots + \frac{1}{n} - \log n \right) = \text{オイラー定数} = 0.57721 \cdots$$

である。

**問題 17.7** デイ・ガンマ関数  $\psi(x)$  は  $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$  で定義される。(17.61) より

$$\psi(x) = -\gamma - \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{1}{x+k} - \frac{1}{k+1} \right) \quad (17.62)$$

を示せ。  $\Gamma(1) = 1$ ,  $\Gamma'(1) = \Gamma(1)\psi(1) = -\gamma$  より

$$\Gamma(1+x) = 1 - \gamma x + O(x^2), \quad \Gamma(x) = \frac{\Gamma(1+x)}{x} = \frac{1}{x} - \gamma + O(x) \quad (17.63)$$

である。

## 17.5 球ベッセル関数

$\ell$  を 0 または正の整数とすると微分方程式

$$\left( \frac{1}{x} \frac{d^2}{dx^2} x + 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right) w_\ell(x) = \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} + 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right) w_\ell(x) = 0 \quad (17.64)$$

の解を求める。オーソドックスな方法は 問 17.10 のベキ級数展開であるが, ここでは別な方法で求める。  $w_\ell(x) = x^\ell v_\ell(x)$  とすると

$$\frac{1}{x} \frac{d^2}{dx^2} (x w_\ell) = \frac{1}{x} \frac{d^2}{dx^2} (x^{\ell+1} v_\ell) = x^\ell \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2(\ell+1)}{x} \frac{d}{dx} + \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right) v_\ell$$

であるから

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2(\ell+1)}{x} \frac{d}{dx} + 1 \right) v_\ell = 0 \quad (17.65)$$

になる。

$$\begin{aligned} \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2(\ell+2)}{x} \frac{d}{dx} + 1 \right) \frac{v'_\ell}{x} &= \frac{1}{x} \left( v_\ell''' + \frac{2(\ell+1)}{x} v_\ell'' - \frac{2(\ell+1)}{x^2} v'_\ell + v'_\ell \right) \\ &= \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2(\ell+1)}{x} \frac{d}{dx} + 1 \right) v_\ell = 0 \end{aligned}$$

したがって  $v'_\ell/x$  は (17.65) で  $\ell$  を  $\ell+1$  に置き換えた方程式を満たすから  $C_\ell$  を任意係数として

$$v_{\ell+1}(x) = \frac{C_\ell}{x} \frac{dv_\ell}{dx} = C_\ell C_{\ell-1} \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^2 v_{\ell-1} = \cdots = N_{\ell+1} \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^{\ell+1} v_0$$

比例係数  $N_{\ell+1}$  は適当に取ればよい。  $N_\ell = (-1)^\ell$  とすれば

$$w_\ell(x) = x^\ell \left( -\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell w_0$$

(17.64) で  $\ell=0$  とすると  $(xw_0)'' + xw_0 = 0$  になるから  $xw_0$  は  $\sin x$  と  $\cos x$  の線形結合で表せる。そこで,  $xw_0 = \sin x$  あるいは  $xw_0 = -\cos x$  とし, (17.64) の解として

$$j_\ell(x) = x^\ell \left( -\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \frac{\sin x}{x}, \quad n_\ell(x) = -x^\ell \left( -\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \frac{\cos x}{x} \quad (17.66)$$

を定義する。  $j_\ell$  を球ベッセル関数,  $n_\ell$  を球ノイマン関数という。また

$$h_\ell^{(1)}(x) = j_\ell(x) + in_\ell(x) = -ix^\ell \left( -\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \frac{e^{ix}}{x} \quad (17.67)$$

$$h_\ell^{(2)}(x) = j_\ell(x) - in_\ell(x) = ix^\ell \left( -\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \frac{e^{-ix}}{x} \quad (17.68)$$

としたとき,  $h_\ell^{(1)}(x)$  を第1種球ハンケル関数,  $h_\ell^{(2)}(x)$  を第2種球ハンケル関数という。

(17.64) の一般解は  $j_\ell(x)$ ,  $n_\ell(x)$ ,  $h_\ell^{(1)}(x)$ ,  $h_\ell^{(2)}(x)$  の任意の2つの線形結合で表せる。電磁気学などで馴染みのヘルムホルツ方程式  $(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = 0$  は, 球面調和関数  $Y_{\ell m_\ell}$  を用いて

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} F_{\ell m_\ell}(r) Y_{\ell m_\ell}(\theta, \phi)$$

と展開し (6.5) を使うと

$$\left( \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + k^2 \right) F_{\ell m_\ell}(r) = 0$$

になる。  $x = kr$  とすれば上式は (17.64) になるから  $A_{\ell m_\ell}$ ,  $B_{\ell m_\ell}$  を任意定数として

$$F_{\ell m_\ell}(r) = A_{\ell m_\ell} j_\ell(kr) + B_{\ell m_\ell} n_\ell(kr)$$

と表せる。  $h_\ell^{(1)}(kr)$ ,  $h_\ell^{(2)}(kr)$  を用いてもよい。したがって, ヘルムホルツ方程式の一般解は

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} \left( A_{\ell m_\ell} j_\ell(kr) + B_{\ell m_\ell} n_\ell(kr) \right) Y_{\ell m_\ell}(\theta, \phi) \quad (17.69)$$

になる。要するに,  $j_\ell$ ,  $n_\ell$ ,  $h_\ell^{(1)}$ ,  $h_\ell^{(2)}$  を代表的に  $f_\ell$  と書けば  $(\nabla^2 + k^2) f_\ell(kr) Y_{\ell m_\ell} = 0$  であり,  $f_\ell(kr) Y_{\ell m_\ell}$  はヘルムホルツ方程式の特解である。  $k \rightarrow 0$  とし漸近形 (17.77), (17.78) を用いると, (17.69) はラプラス方程式  $\nabla^2 \psi = 0$  の一般解になる。なお, 平面波  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  は  $(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = 0$  を満たすから (17.69) のように展開できる ( (17.83) 参照 )。

**具体形**  $\ell$  が小さいとき (17.66) の微分を実行すれば

$$\begin{aligned} j_0(x) &= \frac{\sin x}{x}, & j_1(x) &= \frac{\sin x - x \cos x}{x^2}, & j_2(x) &= \frac{(3-x^2)\sin x - 3x \cos x}{x^3} \\ n_0(x) &= -\frac{\cos x}{x}, & n_1(x) &= -\frac{\cos x + x \sin x}{x^2}, & n_2(x) &= -\frac{(3-x^2)\cos x + 3x \sin x}{x^3} \\ h_0^{(1)}(x) &= -i \frac{e^{ix}}{x}, & h_1^{(1)}(x) &= -\frac{(x+i)e^{ix}}{x^2}, & h_2^{(1)}(x) &= -\frac{(3x+i(3-x^2))e^{ix}}{x^3} \end{aligned} \quad (17.70)$$



漸化式  $j_\ell, n_\ell, h_\ell^{(1)}, h_\ell^{(2)}$  を代表的に  $f_\ell$  と書けば

$$f_\ell(x) = x^\ell \left( -\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell f_0(x)$$

である。この定義から

$$\frac{df_\ell}{dx} = \ell x^{\ell-1} \left( -\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell f_0 + x^\ell \frac{d}{dx} \left( -\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell f_0 = \frac{\ell}{x} f_\ell - f_{\ell+1}$$

これから

$$\frac{df_{\ell+1}}{dx} = \frac{d}{dx} \left( \frac{\ell}{x} f_\ell - \frac{df_\ell}{dx} \right) = -\frac{\ell}{x^2} f_\ell + \frac{\ell}{x} \frac{df_\ell}{dx} - \frac{d^2 f_\ell}{dx^2}$$

(17.64) より  $d^2 f_\ell / dx^2$  を書き換えれば

$$\begin{aligned} \frac{df_{\ell+1}}{dx} &= \frac{\ell+2}{x} \frac{df_\ell}{dx} + \left( 1 - \frac{\ell(\ell+2)}{x^2} \right) f_\ell = \frac{\ell+2}{x} \left( \frac{\ell}{x} f_\ell - f_{\ell+1} \right) + \left( 1 - \frac{\ell(\ell+2)}{x^2} \right) f_\ell \\ &= f_\ell - \frac{\ell+2}{x} f_{\ell+1} \end{aligned}$$

したがって

$$\frac{df_\ell}{dx} = f_{\ell-1} - \frac{\ell+1}{x} f_\ell = \frac{\ell}{x} f_\ell - f_{\ell+1}, \quad f_{\ell-1} + f_{\ell+1} = \frac{2\ell+1}{x} f_\ell \quad (17.71)$$

を満たす。なお,  $j_{-1} = -n_0, n_{-1} = j_0$  とすれば  $\ell = 0$  のときでも成り立つ。

$$\ell \frac{df_\ell}{dx} = \ell f_{\ell-1} - \frac{\ell(\ell+1)}{x} f_\ell, \quad (\ell+1) \frac{df_\ell}{dx} = \frac{\ell(\ell+1)}{x} f_\ell - (\ell+1) f_{\ell+1}$$

両式をたせば

$$(2\ell+1) \frac{df_\ell}{dx} = \ell f_{\ell-1} - (\ell+1) f_{\ell+1}$$

である。

**ベキ展開** マクローリン展開

$$\frac{\sin x}{x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n}$$

を使うと

$$\begin{aligned} \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \frac{\sin x}{x} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} 2n x^{2(n-1)} \\ \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^2 \frac{\sin x}{x} &= \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} 2^2 n(n-1) x^{2(n-2)} \end{aligned}$$

一般に

$$\begin{aligned} \left( -\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \frac{\sin x}{x} &= (-1)^\ell \sum_{n=\ell}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} 2^\ell n(n-1) \cdots (n-\ell+1) x^{2(n-\ell)} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+2\ell} (k+\ell)!}{(2k+2\ell+1)! k!} x^{2k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2^k (2k+2\ell+1)!! k!} x^{2k} \end{aligned}$$

したがって

$$j_\ell(x) = x^\ell \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2^n (2n+2\ell+1)!! n!} x^{2n} \quad (17.72)$$

(17.50) より

$$j_\ell(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(\ell + n + 3/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n+\ell} \quad (17.73)$$

と表せる。次に

$$\frac{\cos x}{x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n-1}$$

であるから

$$\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \frac{\cos x}{x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} (2n-1) x^{2n-3}, \quad \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^2 \frac{\cos x}{x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} (2n-1)(2n-3) x^{2n-5}$$

$\ell$  回微分すると

$$n_\ell(x) = \frac{(-1)^{\ell+1}}{x^{\ell+1}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n C_{n\ell}}{(2n)!} x^{2n} \quad (17.74)$$

ただし

$$C_{n\ell} = \begin{cases} 1, & \ell = 0 \\ (2n-1)(2n-3) \cdots (2n+1-2\ell), & \ell > 0 \end{cases}$$

(17.48), (17.50) より

$$C_{n\ell} = \frac{2^\ell \Gamma(n+1/2)}{\Gamma(n-\ell+1/2)} = \frac{2^\ell}{\Gamma(n-\ell+1/2)} \frac{(2n)!}{2^{2n} n!} \sqrt{\pi}$$

になるから

$$n_\ell(x) = (-1)^{\ell+1} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(n-\ell+1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n-\ell-1} \quad (17.75)$$

である。ガンマ関数  $\Gamma(x)$  は  $x$  が 0 または負の整数でなければよい。(17.73), (17.75) を  $\ell$  が負の整数の場合にも拡張すると、任意の整数  $\ell$  に対して

$$j_{-\ell-1}(x) = (-1)^{\ell+1} n_\ell(x) \quad (17.76)$$

になる。

**漸近形**  $x \rightarrow 0$  のとき (17.72), (17.74) から

$$j_\ell(x) = \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!} \left(1 - \frac{x^2}{2(2\ell+3)} + \cdots\right) \quad (17.77)$$

$$n_\ell(x) = -\frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}} \left(1 + \frac{x^2}{2(2\ell-1)} + \cdots\right) \quad (17.78)$$

$n_\ell(x)$  は原点で発散する。 $h_\ell^{(1)}(x) = j_\ell(x) + in_\ell(x)$  は

$$h_\ell^{(1)}(x) = -\frac{i(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}} \times \begin{cases} \left(1 + ix + \frac{x^2}{2(2\ell-1)} + \cdots\right), & \ell = 0 \\ \left(1 + \frac{x^2}{2(2\ell-1)} + \cdots\right), & \ell > 0 \end{cases} \quad (17.79)$$

になる。 $x \rightarrow \infty$  のとき

$$\left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^\ell \frac{f(x)}{x} = \frac{1}{x^{\ell+1}} \left(\frac{d^\ell f}{dx^\ell} - \frac{\ell(\ell+1)}{2x} \frac{d^{\ell-1} f}{dx^{\ell-1}} + O(x^{-2})\right)$$

である ( $\ell = 1, 2, 3$  の場合に確かめてみよ)。したがって, (17.67), (17.68) より

$$\begin{aligned} h_\ell^{(1)}(x) &= -i \left( 1 + i \frac{\ell(\ell+1)}{2x} + \cdots \right) \frac{e^{i(x-\ell\pi/2)}}{x} \\ h_\ell^{(2)}(x) &= i \left( 1 - i \frac{\ell(\ell+1)}{2x} + \cdots \right) \frac{e^{-i(x-\ell\pi/2)}}{x} \end{aligned} \quad (17.80)$$

これから

$$\begin{aligned} j_\ell(x) &= \frac{1}{x} \left( \sin(x - \ell\pi/2) + \frac{\ell(\ell+1)}{2x} \cos(x - \ell\pi/2) + \cdots \right) \\ n_\ell(x) &= \frac{1}{x} \left( -\cos(x - \ell\pi/2) + \frac{\ell(\ell+1)}{2x} \sin(x - \ell\pi/2) + \cdots \right) \end{aligned} \quad (17.81)$$

である。厳密な展開式は (18.22), (18.23) である。

**ロンスキアン** (17.71) より

$$j_\ell \frac{dn_\ell}{dx} - n_\ell \frac{dj_\ell}{dx} = j_\ell n_{\ell-1} - n_\ell j_{\ell-1} = j_{\ell+1} n_\ell - n_{\ell+1} j_\ell$$

になるから  $\ell$  に依存しない。したがって

$$x^2 \left( j_\ell \frac{dn_\ell}{dx} - n_\ell \frac{dj_\ell}{dx} \right) = x^2 (j_1 n_0 - n_1 j_0) = 1 \quad (17.82)$$

である。

**問題 17.8** (17.71) より  $\frac{d}{dx} x^{\ell+1} f_\ell(x) = x^{\ell+1} f_{\ell-1}(x)$ ,  $\frac{d}{dx} x^{-\ell} f_\ell(x) = -x^{-\ell} f_{\ell+1}(x)$  を示せ。

**問題 17.9** (17.64) から

$$x j_\ell \frac{d}{dx} x n_\ell - x n_\ell \frac{d}{dx} x j_\ell = x^2 \left( j_\ell \frac{dn_\ell}{dx} - n_\ell \frac{dj_\ell}{dx} \right)$$

が定数になることを示せ。

**問題 17.10** (17.64) を満たす  $w_\ell(x)$  をベキ級数で表して

$$w_\ell(x) = x^\alpha \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n, \quad a_0 \neq 0$$

とする。

1. 上のベキ級数を (17.64) に代入し  $\alpha = \ell, -\ell - 1, a_1 = 0$  及び

$$((\alpha + 2 + n)(\alpha + 3 + n) - \ell(\ell + 1))a_{n+2} + a_n = 0$$

でなければならないことを示せ。

2.  $n$  が奇数のとき  $a_n = 0$  になるから,  $n$  が偶数  $n = 2k$  の場合を考える。  $b_k = a_{2k}$  とすれば

$$b_k = - \frac{b_{k-1}}{(\alpha + 2k)(\alpha + 1 + 2k) - \ell(\ell + 1)}$$

である。  $\alpha = \ell$  のとき, この漸化式を解き

$$b_k = \frac{(-1)^k (2\ell + 1)!!}{2^k k! (2\ell + 2k + 1)!!} b_0$$

になることを示せ。  $b_0 = 1/(2\ell + 1)!!$  とすれば (17.72) を得る。同様に  $\alpha = -\ell - 1$  のとき  $b_0 = -(2\ell - 1)!!$  とすれば (17.74) が求まることを示せ。

問題 17.11  $|x| \leq 1$  のとき, 問題 17.5 より

$$e^{iqx} = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_{\ell}(q) P_{\ell}(x), \quad a_{\ell}(q) = \frac{2\ell+1}{2^{\ell+1}\ell!} \int_{-1}^1 dx \frac{d^{\ell} e^{iqx}}{dx^{\ell}} (1-x^2)^{\ell}$$

と展開できる。

1.  $a_{\ell}(q) = i^{\ell}(2\ell+1)I_{\ell}(q)$  になることを示せ。ただし

$$I_{\ell}(q) = \frac{1}{2^{\ell}\ell!} q^{\ell} \left(1 + \frac{d^2}{dq^2}\right)^{\ell} j_0(q)$$

2. 数学的帰納法により  $I_{\ell}(q) = j_{\ell}(q)$  を示せ。

3. 以上の結果と加法定理 (17.43) から

$$\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} j_{\ell}(kr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{k}}) \quad (17.83)$$

を示せ。 $\hat{\mathbf{a}}$  は  $\mathbf{a}$  方向の単位ベクトルでその方向の角度を表す。

### 3次元自由粒子のグリーン関数

(11.18) のグリーン関数に関連して

$$F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{e^{ik|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

を多重極展開する。 $\mathbf{r}_1$  と  $\mathbf{r}_2$  のなす角を  $\alpha$  とすると

$$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \alpha}, \quad r_1 = |\mathbf{r}_1|, \quad r_2 = |\mathbf{r}_2|$$

であるから, ルジャンドル多項式  $P_{\ell}(x)$  を用いて

$$F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) F_{\ell}(r_1, r_2) P_{\ell}(\cos \alpha) = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} F_{\ell}(r_1, r_2) \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_1) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}_2)$$

と展開できる。 $F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  は微分方程式

$$(\nabla_1^2 + k^2) F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -4\pi \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -4\pi \frac{\delta(r_1 - r_2)}{r_1^2} \delta(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)$$

を満たすから (6.5) より

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \left( \frac{1}{r_1} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} r_1 - \frac{\ell(\ell+1)}{r_1^2} + k^2 \right) F_{\ell}(r_1, r_2) \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_1) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}_2) = -\frac{\delta(r_1 - r_2)}{r_1^2} \delta(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)$$

$Y_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}}_2)$  をかけ角度  $\hat{\mathbf{r}}_2$  について積分すると  $Y_{\ell m}$  の直交性より

$$\left( \frac{1}{r_1} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} r_1 - \frac{\ell(\ell+1)}{r_1^2} + k^2 \right) F_{\ell}(r_1, r_2) = -\frac{\delta(r_1 - r_2)}{r_1^2} \quad (17.84)$$

同様にして

$$\left( \frac{1}{r_2} \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} r_2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r_2^2} + k^2 \right) F_{\ell}(r_1, r_2) = -\frac{\delta(r_1 - r_2)}{r_2^2} \quad (17.85)$$

である。 $r_1 \neq r_2$  の場合

$$\left( \frac{1}{r_1} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} r_1 - \frac{\ell(\ell+1)}{r_1^2} + k^2 \right) F_{\ell}(r_1, r_2) = 0, \quad \left( \frac{1}{r_2} \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} r_2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r_2^2} + k^2 \right) F_{\ell}(r_1, r_2) = 0$$

になる。この微分方程式は  $x = kr_1$  あるいは  $x = kr_2$  とすれば (17.64) である。  $r_1 < r_2$  の場合を考える。  $r_2$  を固定し  $r_1$  の関数と見なすと、  $F_\ell(r_1, r_2)$  は  $j_\ell(kr_1)$ ,  $n_\ell(kr_1)$  あるいは  $h_\ell^{(1)}(kr_1)$ ,  $h_\ell^{(2)}(kr_1)$  の線形結合で表せるが、  $F(r_1, r_2)$  は  $r_1 = 0$  で有限であるから (17.77) より

$$F_\ell(r_1, r_2) = g_\ell(r_2)j_\ell(kr_1)$$

とおける。次に、  $r_1$  を固定し  $r_2$  の関数と見なすと、  $g_\ell(r_2)$  は  $j_\ell(kr_2)$ ,  $n_\ell(kr_2)$  あるいは  $h_\ell^{(1)}(kr_2)$ ,  $h_\ell^{(2)}(kr_2)$  の線形結合で表せる。  $r_2 > r_1$  であるから  $r_2 = 0$  とはできないが、  $r_2 \rightarrow \infty$  としてよい。このとき  $F(r_1, r_2) \rightarrow e^{ikr_2}/r_2$  になる。この境界条件を満たすためには (17.81) より

$$g_\ell(r_2) = C_\ell h_\ell^{(1)}(kr_2), \quad C_\ell = \text{定数}$$

でなければならない。したがって  $r_1 < r_2$  のとき

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) C_\ell j_\ell(kr_1) h_\ell^{(1)}(kr_2) P_\ell(\cos \alpha)$$

である。係数  $C_\ell$  を求める。  $r_2 \rightarrow \infty$  のとき

$$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = r_2 \sqrt{1 - 2\frac{r_1}{r_2} \cos \alpha + \frac{r_1^2}{r_2^2}} = r_2 \left( 1 - \frac{r_1}{r_2} \cos \alpha + \dots \right)$$

これと  $h_\ell^{(1)}$  の漸近形 (17.80) より

$$e^{-ikr_1 \cos \alpha} = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) (-i)^{\ell+1} C_\ell j_\ell(kr_1) P_\ell(\cos \alpha)$$

になる。この複素共役と (11.6) を比較すれば  $C_\ell = ik$  である。  $r_1 > r_2$  の場合  $r_1$  と  $r_2$  を入れ替えればよいから

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = ik \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) j_\ell(kr_{<}) h_\ell^{(1)}(kr_{>}) P_\ell(\cos \alpha) \quad (17.86)$$

になる。ただし、  $r_1, r_2$  の大きい方を  $r_{>}$ 、小さい方を  $r_{<}$  で表し、  $\alpha$  は  $\mathbf{r}_1$  と  $\mathbf{r}_2$  のなす角である。(17.86) は  $k$  が複素数でも成り立つ。  $k \rightarrow 0$  とすると (17.45) である。

$ih_0^{(1)}(x) = e^{ix}/x$  であるから (17.86) は

$$h_0^{(1)}(k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) j_\ell(kr_{<}) h_\ell^{(1)}(kr_{>}) P_\ell(\cos \alpha)$$

とも表せる。  $h_\ell^{(1)}$  を  $j_\ell, n_\ell$  で表せば

$$\begin{aligned} j_0(k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) &= \frac{\sin k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) j_\ell(kr_{<}) j_\ell(kr_{>}) P_\ell(\cos \alpha) \\ n_0(k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) &= -\frac{\cos k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) j_\ell(kr_{<}) n_\ell(kr_{>}) P_\ell(\cos \alpha) \end{aligned}$$

になる。  $j_0$  の式で  $\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2$  とすれば

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) j_\ell^2(x) = 1 \quad (17.87)$$

である。

**問題 17.12**  $F_\ell(r_1, r_2) = ikj_\ell(kr_<)h_\ell^{(1)}(kr_>)$  が (17.84) あるいは (17.85) を満たすことを確かめよ。

$$F_\ell(r_1, r_2) = ik \left( \theta(r_2 - r_1) j_\ell(kr_1) h_\ell^{(1)}(kr_2) + \theta(r_1 - r_2) j_\ell(kr_2) h_\ell^{(1)}(kr_1) \right)$$

と表せる。

**問題 17.13**  $p(x), q(x), f(x)$  を与えられた関数とすると, 2 階の常微分方程式

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + p(x) \frac{d}{dx} + q(x) \right) w(x) = f(x) \quad (17.88)$$

の解  $w(x)$  は  $a, b$  を適当な定数として

$$w(x) = w_1(x) \int_a^x dx' \frac{w_2(x') f(x')}{W(x')} - w_2(x) \int_b^x dx' \frac{w_1(x') f(x')}{W(x')} \quad (17.89)$$

で与えられる。ただし

$$W(x) = w_2(x) \frac{dw_1}{dx} - w_1(x) \frac{dw_2}{dx}$$

であり,  $w_1(x), w_2(x)$  は  $f(x) = 0$  とした同次微分方程式の独立な解である。

1. (17.89) が (17.88) を満たすことを示せ。
2.  $r_2$  を定数と見なした (17.84) に (17.89) を適用して  $F_\ell(r_1, r_2)$  を求めよ。  $a = 0, b = \infty$  とすると便利である。

## 17.6 ベッセル関数

$\nu$  を定数とするとき

$$\left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} x \frac{d}{dx} + 1 - \frac{\nu^2}{x^2} \right) w(x) = \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} + 1 - \frac{\nu^2}{x^2} \right) w(x) = 0 \quad (17.90)$$

をベッセルの微分方程式という。

$$w(x) = x^\rho \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k, \quad a_0 \neq 0 \quad (17.91)$$

として微分方程式に代入すると

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left( (k+\rho)^2 - \nu^2 \right) a_k x^{k+\rho-2} + \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^{k+\rho} = 0$$

第 2 項目で  $k = k' - 2$  とすると

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left( (k+\rho)^2 - \nu^2 \right) a_k x^{k+\rho-2} + \sum_{k'=2}^{\infty} a_{k'-2} x^{k'+\rho-2} = 0$$

したがって

$$(\rho^2 - \nu^2) a_0 x^{\rho-2} + \left( (\rho+1)^2 - \nu^2 \right) a_1 x^{\rho-1} + \sum_{k=2}^{\infty} \left( \left( (k+\rho)^2 - \nu^2 \right) a_k + a_{k-2} \right) x^{k+\rho-2} = 0$$

これから

$$(\rho^2 - \nu^2) a_0 = 0, \quad \left( (\rho+1)^2 - \nu^2 \right) a_1 = 0, \quad k \geq 2 \text{ のとき } \left( (k+\rho)^2 - \nu^2 \right) a_k + a_{k-2} = 0$$

である。 $a_0 \neq 0$  より  $\rho = \pm \nu$  になる。第2式は  $(1+2\rho)a_1 = 0$  になるから  $\rho \neq -1/2$  ならば  $a_1 = 0$  である。 $\rho = -1/2$  の場合  $a_1 \neq 0$  とできるが、これは  $\rho = 1/2$  と同じである。したがって  $a_1 = 0$  としてよい。第3式より  $k$  が奇数のとき  $a_k = 0$  であり、 $k$  が偶数のとき  $k = 2m$  とおくと

$$\begin{aligned} a_{2m} &= -\frac{1}{4m(m+\rho)} a_{2(m-1)} = \frac{(-1)^2}{4^2 m(m-1)(m+\rho)(m-1+\rho)} a_{2(m-2)} \\ &= \frac{(-1)^m}{4^m m! (m+\rho)(m-1+\rho) \cdots (1+\rho)} a_0 \\ &= \frac{(-1)^m \Gamma(\rho+1)}{4^m m! \Gamma(\rho+m+1)} a_0 \end{aligned}$$

になる。ただし、ガンマ関数の性質 (17.48) を用いた。したがって

$$w(x) = x^\rho \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m} x^{2m} = a_0 \Gamma(\rho+1) x^\rho \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(\rho+m+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m}$$

$a_0$  は任意定数であるが、 $a_0 = 1/(2^\rho \Gamma(\rho+1))$  とすれば

$$w(x) = J_\rho(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(\rho+m+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\rho}, \quad \text{ただし } \rho = \pm \nu \quad (17.92)$$

になる。これを  $\rho$  次のベッセル関数という。

$\nu \neq 0$  のとき微分方程式 (17.90) の解として  $J_\nu(x)$  と  $J_{-\nu}(x)$  の2つの解が得られた。 $\nu$  が整数でない場合  $J_\nu(x)$  と  $J_{-\nu}(x)$  は1次独立である。一方、 $n = 1, 2, 3, \dots$  のとき

$$J_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(n+m+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+n} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! (n+m)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+n}$$

であるが

$$J_{-n}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(-n+m+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m-n}$$

では  $-n+m+1 \leq 0$  のとき  $\Gamma(-n+m+1)$  は発散するから  $m \leq n-1$  の項は消える。 $m = n+k$  とすると

$$J_{-n}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+k}}{(n+k)! \Gamma(k+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2k} = (-1)^n J_n(x)$$

になる。 $J_n(x)$  と  $J_{-n}(x)$  は1次独立ではない。

$J_\nu(x)$  と1次独立な解として

$$N_\nu(x) = \frac{1}{\sin \pi \nu} \left( J_\nu(x) \cos \pi \nu - J_{-\nu}(x) \right), \quad \nu \neq \text{整数} \quad (17.93)$$

がよく使われる。これを  $\nu$  次のノイマン (Neumann) 関数という。 $\nu = n$  のとき、分母と分子は0になるから  $N_n$  を

$$N_n(x) = \lim_{\nu \rightarrow n} N_\nu = \frac{\frac{\partial}{\partial \nu} \left( J_\nu(x) \cos \pi \nu - J_{-\nu}(x) \right)}{\frac{\partial \sin \pi \nu}{\partial \nu}} \bigg|_{\nu=n} = \frac{1}{\pi} \left( \frac{\partial J_\nu}{\partial \nu} - (-1)^n \frac{\partial J_{-\nu}}{\partial \nu} \right)_{\nu=n}$$

で定義する。 $N_n(x)$  は  $J_n(x)$  と1次独立である。

$\ell$  を整数として  $\nu = \ell + 1/2$  のとき (17.73) より

$$J_{\ell+1/2}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(\ell+m+3/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\ell+1/2} = \sqrt{\frac{2x}{\pi}} j_\ell(x) \quad (17.94)$$

定義式 (17.93) より  $N_{\ell+1/2}(x) = (-1)^{\ell+1} J_{-\ell-1/2}(x)$  である。これと (17.76) から

$$N_{\ell+1/2}(x) = (-1)^{\ell+1} \sqrt{\frac{2x}{\pi}} j_{-\ell-1}(x) = \sqrt{\frac{2x}{\pi}} n_{\ell}(x) \quad (17.95)$$

になる。

$x \rightarrow \infty$  における  $J_{\nu}(x)$ ,  $N_{\nu}(x)$  の漸近形は (17.81) において  $\ell = \nu - 1/2$  と置き換えればよい。

$$\begin{aligned} J_{\nu}(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left( \sin\left(x - \frac{2\nu-1}{4}\pi\right) + \frac{4\nu^2-1}{8x} \cos\left(x - \frac{2\nu-1}{4}\pi\right) + \cdots \right) \\ N_{\nu}(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left( -\cos\left(x - \frac{2\nu-1}{4}\pi\right) + \frac{4\nu^2-1}{8x} \sin\left(x - \frac{2\nu-1}{4}\pi\right) + \cdots \right) \end{aligned} \quad (17.96)$$

である。

**漸化式** (17.92) に  $x^{\nu}$  をかけ微分すると

$$\frac{d}{dx} x^{\nu} J_{\nu}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m (\nu+m)}{m! \Gamma(\nu+m+1)} \frac{x^{2\nu+2m-1}}{2^{\nu+2m-1}} = x^{\nu} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(\nu+m)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu-1} = x^{\nu} J_{\nu-1}(x)$$

$x^{-\nu}$  をかけ微分すると

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} x^{-\nu} J_{\nu}(x) &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(m-1)! \Gamma(\nu+m+1)} \frac{x^{2m-1}}{2^{\nu+2m-1}} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m+1}}{m! \Gamma(\nu+m+2)} \frac{x^{2m+1}}{2^{\nu+2m+1}} \\ &= -x^{-\nu} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(\nu+m+2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu+1} = -x^{-\nu} J_{\nu+1}(x) \end{aligned}$$

したがって

$$x \frac{dJ_{\nu}}{dx} + \nu J_{\nu} - x J_{\nu-1} = 0, \quad x \frac{dJ_{\nu}}{dx} - \nu J_{\nu} + x J_{\nu+1} = 0$$

両者の和と差から

$$2 \frac{dJ_{\nu}}{dx} = J_{\nu-1} - J_{\nu+1}, \quad \frac{2\nu}{x} J_{\nu} = J_{\nu-1} + J_{\nu+1} \quad (17.97)$$

同じ関係式は  $N_{\nu}$  についても成り立つ。(17.94), (17.95) を上式に代入すれば (17.71) を得る。

**ロンスキャン** (17.90) より

$$\frac{d}{dx} x \left( J_{\nu}(x) \frac{dJ_{-\nu}}{dx} - J_{-\nu}(x) \frac{dJ_{\nu}}{dx} \right) = 0$$

である。漸近形 (17.96) を用いると

$$J_{\nu}(x) \frac{dJ_{-\nu}}{dx} - J_{-\nu}(x) \frac{dJ_{\nu}}{dx} = -\frac{2 \sin \pi \nu}{\pi x} \quad (17.98)$$

になる。 $J'_{\nu} = J_{\nu-1} - (\nu/x) J_{\nu}$ ,  $J'_{-\nu} = -J_{-\nu+1} - (\nu/x) J_{-\nu}$  を代入すると

$$J_{\nu}(x) J_{-\nu+1}(x) + J_{-\nu}(x) J_{\nu-1}(x) = \frac{2 \sin \pi \nu}{\pi x} \quad (17.99)$$

を得る。

**母関数**

$$F(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) t^n$$



とすると

$$\frac{\partial}{\partial x} F(x, t) = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left( J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x) \right) t^n = \frac{1}{2} \left( t - \frac{1}{t} \right) F(x, t)$$

$F(0, t) = J_0(0) = 1$  であるから

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) t^n = \exp \left( \frac{x}{2} \left( t - \frac{1}{t} \right) \right) \quad (17.100)$$

になる。 $t = e^{i\theta}$  とすると

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) e^{in\theta} = e^{ix \sin \theta} \quad (17.101)$$

$\theta$  を  $-\theta$  としたものの和あるいは差をとれば

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) \cos n\theta = J_0(x) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(x) \cos 2n\theta = \cos(x \sin \theta)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) \sin n\theta = 2 \sum_{n=0}^{\infty} J_{2n+1}(x) \sin(2n+1)\theta = \sin(x \sin \theta)$$

になる。 $\theta = 0$  とすると

$$J_0(x) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(x) = 1$$

である。複素  $t$  平面上で原点を中心とした半径 1 の円の経路を  $C$  とすると, (17.100) より

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) \oint_C dt t^{n-k-1} = \oint_C dt t^{-k-1} \exp \left( \frac{x}{2} \left( t - \frac{1}{t} \right) \right)$$

$C$  上では  $t = e^{i\theta}$ ,  $-\pi \leq \theta \leq \pi$  とおけるから,  $k$  が整数のとき

$$\frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{i(n-k)\theta} = J_k(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{i(x \sin \theta - k\theta)}$$

である。これと (17.101) から

$$J_0^2(x) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_n^2(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{i(x \sin \theta - n\theta)} = 1$$

になる。

## 17.7 合流型超幾何関数

$a, b$  を任意定数とすると (ただし  $b \neq -n, n = 0, 1, 2, \dots$ )

$$\left( x \frac{d^2}{dx^2} + (b-x) \frac{d}{dx} - a \right) w(x) = 0 \quad (17.102)$$

を合流型超幾何微分方程式という。 $x = 0$  は確定特異点である。解  $w(x)$  をベキ展開して

$$w(x) = x^\mu \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k, \quad c_0 \neq 0$$

とする。これを (17.102) に代入すると

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k (\mu + k) (\mu + k - 1 + b) x^{\mu+k-1} - \sum_{k=0}^{\infty} c_k (\mu + k + a) x^{\mu+k} = 0$$

第1項目と第2項目のべきを揃える。そのため第1項で  $k' = k - 1$  とし  $k'$  を改めて  $k$  とすれば

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k (\mu + k) (\mu + k - 1 + b) x^{\mu+k-1} = \sum_{k=-1}^{\infty} c_{k+1} (\mu + k + 1) (\mu + k + b) x^{\mu+k}$$

$k = -1$  と  $k \geq 0$  に別ければ

$$c_0 \mu (\mu - 1 + b) x^{\mu-1} + \sum_{k=0}^{\infty} (c_{k+1} (\mu + k + 1) (\mu + k + b) - c_k (\mu + k + a)) x^{\mu+k} = 0$$

これが任意の  $x$  で成り立つためには

$$c_0 \mu (\mu - 1 + b) = 0, \quad c_{k+1} (\mu + k + 1) (\mu + k + b) - c_k (\mu + k + a) = 0 \quad (17.103)$$

$c_0 \neq 0$  であるから第1式より  $\mu = 0$  または  $\mu = 1 - b$  でなければならない。

$\mu = 0$  のとき (17.103) の第2式より

$$c_{k+1} = \frac{1}{k+1} \frac{a+k}{b+k} c_k \quad (17.104)$$

になる。 $b$  は0または負の整数ではないから  $k = 0, 1, 2, \dots$  のとき  $b+k \neq 0$  である。

$$c_1 = \frac{a}{b} c_0, \quad c_2 = \frac{1}{2} \frac{a+1}{b+1} c_1 = \frac{1}{2} \frac{a(a+1)}{b(b+1)} c_0, \quad c_3 = \frac{1}{3} \frac{a+2}{b+2} c_2 = \frac{1}{3!} \frac{a(a+1)(a+2)}{b(b+1)(b+2)} c_0$$

一般に

$$c_k = \frac{1}{k!} \frac{(a)_k}{(b)_k} c_0, \quad (a)_k \equiv \begin{cases} 1, & k = 0 \\ a(a+1) \cdots (a+k-1), & k > 0 \end{cases} \quad (17.105)$$

であるから

$$w(x) = c_0 M(a, b, x), \quad \text{ただし} \quad M(a, b, x) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k}{(b)_k} \frac{x^k}{k!} \quad (17.106)$$

になる。 $M(a, b, x)$  を合流型超幾何関数という。Handbook of Mathematical Functions (Dover) の表記法を用いる。

$\mu = 1 - b$  の場合, (17.103) の第2式は

$$c_{k+1} = \frac{1}{k+1} \frac{a-b+1+k}{2-b+k} c_k$$

になる。これは (17.104) で  $a, b$  をそれぞれ  $a-b+1, 2-b$  で置き換えたものであるから

$$w(x) = c_0 x^{1-b} M(a-b+1, 2-b, x)$$

になる。以上から, 合流型超幾何微分方程式の一般解は  $C, D$  を任意定数として

$$w(x) = C M(a, b, x) + D x^{1-b} M(a-b+1, 2-b, x) \quad (17.107)$$

で与えられる。 $b$  が2以上の整数の場合  $M(a-b+1, 2-b, x)$  は一般に発散する。この場合も含めた一般解は

$$w(x) = C M(a, b, x) + D U(a, b, x) \quad (17.108)$$

になる。ただし

$$U(a, b, x) = \frac{\pi}{\sin \pi b} \left( \frac{M(a, b, x)}{\Gamma(1+a-b)\Gamma(b)} - x^{1-b} \frac{M(1+a-b, 2-b, x)}{\Gamma(a)\Gamma(2-b)} \right)$$

である。 $U(a, b, x)$  は  $b \rightarrow \pm n$  でも発散しない。 $\operatorname{Re} b \geq 2$  のとき

$$U(a, b, x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)} x^{1-b}$$

になる。

(17.105), (17.48) より  $n = 0, 1, 2, \dots$  として

$$a = -n \text{ のとき } (-n)_k = \begin{cases} \frac{(-1)^k n!}{(n-k)!}, & k \leq n \\ 0, & k > n \end{cases}, \quad a \neq -n \text{ のとき } (a)_k = \frac{\Gamma(a+k)}{\Gamma(a)} \quad (17.109)$$

である。なお, (17.52) より  $\Gamma(a+k)/\Gamma(a) \xrightarrow{a \rightarrow -n} (-n)_k$  になる。

$a = -n$  の場合  $k > n$  のとき  $(a)_k = 0$  になるから  $M(-n, b, x)$  は  $x$  に関して  $n$  次の多項式になる。具体的には

$$M(0, b, x) = 1, \quad M(-1, b, x) = 1 - \frac{x}{b}, \quad M(-2, b, x) = 1 - \frac{2}{b}x + \frac{x^2}{b(b+1)} \quad (17.110)$$

などである。一方,  $a \neq -n$  のとき  $M(a, b, x)$  は無限級数である。 $k \gg 1$  での係数比

$$\frac{c_k}{c_{k+1}} = (k+1) \frac{b+k}{a+k} \approx k+1$$

は指数関数  $e^x$  の展開係数比  $(k+1)!/k!$  と同じである。 $x \rightarrow \infty$  では  $k \rightarrow \infty$  の項が主な寄与をするから,  $M(a, b, x)$  は  $x \rightarrow \infty$  で  $e^x$  のように振舞う (詳しい漸近形は (18.13))。したがって

$$e^{-x/2} M(a, b, x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0 \text{ になる条件は } a = -n = 0, -1, -2, \dots \quad (17.111)$$

である。この条件は束縛状態を扱うとき度々現れる。なお,  $c_k/c_{k+1} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \infty$  であるから, 無限級数  $M(a, b, x)$  の収束半径は  $\infty$  である。

$b \neq -n$  としたが, これは  $b = -n$  のとき  $k \geq n+1$  では  $(b)_k = 0$  になり  $M(a, b, x)$  が定義できないためである。ところで  $a = -m$ , ( $m = 0, 1, 2, \dots$ ) のとき

$$m < n \text{ ならば } M(-m, -n, x) = \sum_{k=0}^m \frac{(-m)_k}{(-n)_k} \frac{x^k}{k!} = \frac{m!}{n!} \sum_{k=0}^m \frac{(n-k)!}{(m-k)! k!} x^k \quad (17.112)$$

になり係数が発散することはないから,  $b = -n$  であっても  $M(-m, -n, x)$  は存在する。

**$n$  次の多項式  $M(-n, b, x)$**

$$M(-n, b, x) = \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k n!}{k! (n-k)! (b)_k} x^k = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k! (b)_k} (-x)^k \quad (17.113)$$

を考える。これはラゲール陪多項式 (17.124) である。ライプニッツの公式を用いると

$$\frac{d^n}{dx^n} x^{b+n-1} e^{-x} = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k! (n-k)!} \frac{d^k e^{-x}}{dx^k} \frac{d^{n-k} x^{b+n-1}}{dx^{n-k}} = e^{-x} \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k n!}{k! (n-k)!} \frac{d^{n-k} x^{b+n-1}}{dx^{n-k}}$$

である。

$$\begin{aligned}\frac{d^{n-k}x^{b+n-1}}{dx^{n-k}} &= (b+n-1)(b+n-2)\cdots(b+n-1-(n-k)+1)x^{b-1+k} \\ &= \frac{b(b+1)\cdots(b+n-1)}{b(b+1)\cdots(b+k-1)}x^{b-1+k} = \frac{(b)_n}{(b)_k}x^{b-1+k}\end{aligned}$$

より

$$\frac{e^x x^{-b+1}}{(b)_n} \frac{d^n}{dx^n} x^{b+n-1} e^{-x} = \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k n!}{k! (n-k)! (b)_k} x^k = M(-n, b, x) \quad (17.114)$$

になる。

$\nu + b > 0$  のとき、積分

$$I_\nu(n, b) = \int_0^\infty dx e^{-x} x^{b+\nu-1} M^2(-n, b, x) = \frac{1}{(b)_n} \int_0^\infty dx x^\nu M(-n, b, x) \frac{d^n f}{dx^n}, \quad f(x) = x^{b+n-1} e^{-x}$$

を求める。部分積分を行うと

$$I_\nu(n, b) = \frac{1}{(b)_n} \left[ x^\nu M(-n, b, x) \frac{d^{n-1} f}{dx^{n-1}} \right]_0^\infty - \frac{1}{(b)_n} \int_0^\infty dx \left( x^\nu M(-n, b, x) \right)' \frac{d^{n-1} f}{dx^{n-1}}$$

$x \rightarrow \infty$  のとき  $[\cdots]$  内の関数は 0 になる。 $x \rightarrow 0$  でも  $x^{\nu+b}$  に比例するから  $\nu + b > 0$  より 0 になる。したがって、部分積分を繰り返せば

$$I_\nu(n, b) = \frac{(-1)^n}{(b)_n} \int_0^\infty dx x^{b+n-1} e^{-x} \frac{d^n}{dx^n} x^\nu M(-n, b, x) \quad (17.115)$$

一般の  $\nu$  について  $I_\nu$  を求められるが複雑になるので  $\nu = 0, \pm 1$  の場合だけ求める。(17.113) より

$$x^\nu M(-n, b, x) = \frac{(-1)^n}{(b)_n} \left( x^{n+\nu} - n(b+n-1)x^{n+\nu-1} + \cdots \right)$$

であるから

$$\frac{d^n}{dx^n} M(-n, b, x) = \frac{(-1)^n}{(b)_n} n!, \quad \frac{d^n}{dx^n} x M(-n, b, x) = \frac{(-1)^n}{(b)_n} n! \left( (n+1)x - n(b+n-1) \right)$$

したがって

$$\begin{aligned}I_0(n, b) &= \frac{n!}{[(b)_n]^2} \int_0^\infty dx x^{b+n-1} e^{-x} = \frac{n!}{[(b)_n]^2} \Gamma(b+n) = \frac{n! \Gamma(b)}{(b)_n} \\ I_1(n, b) &= \frac{n!}{[(b)_n]^2} \int_0^\infty dx x^{b+n} e^{-x} \left( (n+1)x - n(b+n-1) \right) = \frac{n! \Gamma(b)}{(b)_n} (b+2n)\end{aligned}$$

$\nu = -1$  のとき

$$\frac{d^n}{dx^n} x^{-1} M(-n, b, x) = \frac{d^n}{dx^n} \left( \frac{1}{x} + (n-1) \text{ 次の多項式} \right) = \frac{(-1)^n n!}{x^{n+1}}$$

になるから

$$I_{-1}(n, b) = \frac{n!}{(b)_n} \int_0^\infty dx x^{b-2} e^{-x} = \frac{n! \Gamma(b-1)}{(b)_n}$$

$\nu = \pm 2$  の場合も同様にすると、 $\nu + b > 0$  で  $\nu = 0, \pm 1, \pm 2$  のとき

$$\begin{aligned}\int_0^\infty dx e^{-x} x^{b+\nu-1} M^2(-n, b, x) &= \frac{n! \Gamma(b+\nu)}{(b)_n} \left( 1 + \frac{\nu(\nu+1)n}{b} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(\nu-1)\nu(\nu+1)(\nu+2)n(n-1)}{4b(b+1)} \right) \quad (17.116)\end{aligned}$$

になる。

漸化式

$$(a-1)_k = \frac{a-1}{a+k-1}(a)_k, \quad (a+1)_k = \frac{a+k}{a}(a)_k$$

より

$$(a-b)M(a-1, b, x) + (b-2a)M(a, b, x) + aM(a+1, b, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k(b+k-1)}{a+k-1} \frac{(a)_k}{(b)_k} \frac{x^k}{k!}$$

である。 $k=0$  は寄与しない。 $k \geq 1$  のとき  $(a)_k = (a+k-1)(a)_{k-1}$  になるから漸化式

$$(a-b)M(a-1, b, x) + (b-2a-x)M(a, b, x) + aM(a+1, b, x) = 0 \quad (17.117)$$

が成り立つ。

## 17.8 超幾何関数

$a, b$  を任意定数,  $c$  を 0 または負の整数でない定数とするとき

$$x(1-x)\frac{d^2w}{dx^2} + \left(c - (1+a+b)x\right)\frac{dw}{dx} - abw(x) = 0 \quad (17.118)$$

を超幾何微分方程式という。この方程式は  $a, b$  について対称である。解  $w(x)$  をベキ展開して

$$w(x) = x^\mu \sum_{k=0}^{\infty} d_k x^k, \quad d_0 \neq 0$$

とする。これを (17.118) に代入すると

$$\sum_{k=0}^{\infty} (\mu+k)(\mu+k-1+c) d_k x^{\mu+k-1} - \sum_{k=0}^{\infty} (\mu+k+a)(\mu+k+b) d_k x^{\mu+k} = 0$$

第1項目と第2項目のベキを揃える。そのため第1項で  $k' = k-1$  とし  $k'$  を改めて  $k$  とすれば

$$\sum_{k=-1}^{\infty} (\mu+k+1)(\mu+k+c) d_{k+1} x^{\mu+k} - \sum_{k=0}^{\infty} (\mu+k+a)(\mu+k+b) d_k x^{\mu+k} = 0$$

$k = -1$  と  $k \geq 0$  に別ければ

$$\mu(\mu-1+c)d_0 x^{\mu-1} + \sum_{k=0}^{\infty} \left( (\mu+k+1)(\mu+k+c) d_{k+1} - (\mu+k+a)(\mu+k+b) d_k \right) x^{\mu+k} = 0$$

これが任意の  $x$  で成り立つためには

$$\mu(\mu-1+c)d_0 = 0, \quad (\mu+k+1)(\mu+k+c) d_{k+1} - (\mu+k+a)(\mu+k+b) d_k = 0 \quad (17.119)$$

$d_0 \neq 0$  であるから第1式より  $\mu = 0$  または  $\mu = 1-c$  でなければならない。

$\mu = 0$  のとき (17.119) の第2式から

$$d_{k+1} = \frac{1}{k+1} \frac{(a+k)(b+k)}{c+k} d_k \quad (17.120)$$

である。(17.105) で定義した  $(a)_k$  を用いれば

$$d_k = \frac{1}{k!} \frac{(a)_k (b)_k}{(c)_k} d_0$$

になるから

$$w(x) = d_0 F(a, b, c, x), \quad \text{ただし} \quad F(a, b, c, x) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k (b)_k}{(c)_k} \frac{x^k}{k!} \quad (17.121)$$

である。 $F(a, b, c, x)$  を超幾何関数という。

$\mu = 1 - c$  のとき

$$d_{k+1} = \frac{1}{k+1} \frac{(a-c+1+k)(b-c+1+k)}{2-c+k} d_k$$

これは (17.120) において,  $a, b, c$  をそれぞれ  $a-c+1, b-c+1, 2-c$  に置き換えたものであるから, 超幾何微分方程式の第 2 の解として

$$w(x) = x^{1-c} F(a-c+1, b-c+1, 2-c, x)$$

を得る。ただし,  $2-c$  が 0 または負の整数の場合は除く。したがって,  $c$  が整数でないとき, 超幾何微分方程式の一般解は  $A, B$  を任意定数として

$$w(x) = AF(a, b, c, x) + Bx^{1-c} F(a-c+1, b-c+1, 2-c, x) \quad (17.122)$$

になる。

$n = 0, 1, 2, \dots$  とするとき,  $a = -n$  または  $b = -n$  ならば  $F(a, b, c, x)$  は  $n$  次の多項式になる。 $F(a, b, c, x)$  が無限級数の場合, 収束半径は

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{d_k}{d_{k+1}} \right| = \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{(k+1)(c+k)}{(a+k)(b+k)} \right| = 1$$

であるから,  $|x| < 1$  のとき級数 (17.121) は収束するが,  $|x| > 1$  では発散する。 $|x| > 1$  では超幾何微分方程式の解  $w(x)$  は  $x$  のべきでは展開できず, 別の表現を用いる必要がある。

超幾何関数の性質として  $0 < x < 1$  のとき

$$\begin{aligned} F(a, b, c, x) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} F(a, b, a+b-c+1, 1-x) \\ &\quad + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-x)^{c-a-b} F(c-a, c-b, c-a-b+1, 1-x) \end{aligned} \quad (17.123)$$

が成り立つ。証明は, 例えば Whittaker & Watson, A Course of Modern Analysis (Cambridge Univ., 1996) 291 ページ参照。

$t = bx$  とすると (17.118) は

$$t \left( 1 - \frac{t}{b} \right) \frac{d^2 w}{dt^2} + \left( c - \frac{1+a+b}{b} t \right) \frac{dw}{dt} - a w = 0$$

と表せる。 $b \rightarrow \infty$  とすると合流型超幾何微分方程式

$$t \frac{d^2 w}{dt^2} + (c-t) \frac{dw}{dt} - a w = 0, \quad \therefore \quad \lim_{b \rightarrow \infty} F(a, b, c, t/b) = M(a, c, t)$$

になる。実際

$$F(a, b, c, t/b) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{(a)_k}{(c)_k} (b)_k \left( \frac{t}{b} \right)^k \xrightarrow{b \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{(a)_k}{(c)_k} t^k = M(a, c, t)$$

である。(17.118) は

$$\frac{d^2 w}{dx^2} + p(x) \frac{dw}{dx} + q(x)w(x) = 0, \quad p(x) = \frac{c - (1 + a + b)x}{x(1 - x)}, \quad q(x) = -\frac{ab}{x(1 - x)}$$

と表せるが,  $p(x)$  と  $q(x)$  の特異点は  $x = 0, 1$ , つまり,  $t = bx = 0, b$  である。 $b \rightarrow \infty$  とすると, 超幾何微分方程式の特異点  $t = b$  は無限遠に合流し, 有限な点での特異点は  $t = 0$  だけの微分方程式になる。このため, この微分方程式を合流型超幾何微分方程式という。

## 17.9 ラゲール多項式

定義 (17.114) より

$$L_n^\alpha(x) \equiv \frac{e^x x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x} x^{n+\alpha} = \frac{(\alpha+1)_n}{n!} M(-n, \alpha+1, x) \quad (17.124)$$

をラゲール (Laguerre) 陪多項式,  $\alpha = 0$  の場合, 単に  $L_n(x)$  と書きラゲール多項式という。 $\alpha + 1$  が負の整数のとき  $M(-n, \alpha+1, x)$  は定義できないこともあるが,  $(\alpha+1)_n M(-n, \alpha+1, x)$  はそのようなことはない。ラゲール陪多項式の定義は教科書で異なる。例えば

$$(L_n^k)_{\text{Schiff}} = n! (-1)^k L_{n-k}^k, \quad (L_n^k)_{\text{Messiah}} = (n+k)! L_n^k$$

である。(17.124) は数学公式 III と同じである。

(17.124) にライプニッツの公式を適用する, あるいは (17.113) から

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m C_{nm}(\alpha)}{m! (n-m)!} x^m, \quad \text{ただし} \quad C_{nm}(\alpha) = \frac{(\alpha+1)_n}{(\alpha+1)_m} = \frac{\Gamma(\alpha+1+n)}{\Gamma(\alpha+1+m)} \quad (17.125)$$

である。 $k = 0, 1, 2, \dots$  のとき  $C_{nm}(k) = (n+k)!/(m+k)!$  になるから

$$L_n^k(x) = \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m (n+k)!}{m! (n-m)! (m+k)!} x^m, \quad L_{n+k}(x) = \sum_{m=0}^{n+k} \frac{(-1)^m (n+k)!}{m! (n+k-m)! m!} x^m$$

したがって

$$\frac{d^k}{dx^k} L_{n+k}(x) = \sum_{m=k}^{n+k} \frac{(-1)^m (n+k)!}{m! (n+k-m)! m!} \frac{m!}{(m-k)!} x^{m-k}$$

$m-k$  を  $m$  と置き直すと

$$\frac{d^k}{dx^k} L_{n+k}(x) = (-1)^k \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m (n+k)!}{m! (n-m)! (m+k)!} x^m = (-1)^k L_n^k(x) \quad (17.126)$$

である。

母関数  $|t| < 1$  のとき

$$f(x, t) = \frac{1}{(1-t)^{\alpha+1}} \exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-x)^m}{m!} t^m (1-t)^{-m-\alpha-1}$$

を考える。 $(1-t)^{-m-\alpha-1}$  をテイラー展開すると

$$(1-t)^{-m-\alpha-1} = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} (\alpha+m+1)(\alpha+m+2) \cdots (\alpha+m+k) t^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{C_{m+k,m}(\alpha)}{k!} t^k$$

であるから

$$f(x, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-x)^m C_{m+k, m}(\alpha)}{m! k!} t^{m+k} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{(-x)^m C_{nm}(\alpha)}{m! (n-m)!} t^n = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\alpha(x) t^n$$

ただし  $k = n - m$  とした。したがって

$$\frac{1}{(1-t)^{\alpha+1}} \exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\alpha(x) t^n, \quad |t| < 1 \quad (17.127)$$

になる。

漸化式  $L_{n+1}^\alpha$  の定義より

$$\begin{aligned} (n+1)L_{n+1}^\alpha &= \frac{e^x x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x} x^{n+1+\alpha} = \frac{e^x x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \left( (n+1+\alpha) e^{-x} x^{n+\alpha} - e^{-x} x^{n+1+\alpha} \right) \\ &= (n+1+\alpha) L_n^\alpha - \frac{e^x x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x} x^{n+1+\alpha} \end{aligned}$$

$f(x) = e^{-x} x^{n+\alpha}$  としてライプニッツの公式を使うと

$$\frac{d^n}{dx^n} e^{-x} x^{n+1+\alpha} = \frac{d^n x f(x)}{dx^n} = x \frac{d^n f(x)}{dx^n} + n \frac{d^{n-1} f(x)}{dx^{n-1}}$$

であるから

$$(n+1)L_{n+1}^\alpha = (n+1+\alpha-x)L_n^\alpha - \frac{e^x x^{-\alpha}}{(n-1)!} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x} x^{n+\alpha}$$

ところで

$$\frac{d}{dx} e^{-x} x^{n+\alpha} = (n+\alpha) x^{n+\alpha-1} e^{-x} - e^{-x} x^{n+\alpha}$$

の両辺を  $n-1$  回微分すると

$$\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x} x^{n+\alpha} = (n+\alpha) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x} x^{n+\alpha-1} - \frac{d^n}{dx^n} e^{-x} x^{n+\alpha}$$

になるから

$$\frac{e^x x^{-\alpha}}{(n-1)!} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x} x^{n+\alpha} = (n+\alpha) L_{n-1}^\alpha - n L_n^\alpha \quad (17.128)$$

したがって

$$(n+1)L_{n+1}^\alpha = (2n+\alpha+1-x)L_n^\alpha - (n+\alpha)L_{n-1}^\alpha \quad (17.129)$$

である。これは (17.117) から導ける。

次に、ライプニッツの公式から

$$x L_n^{\alpha+1} = \frac{e^x x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x} x^{n+\alpha+1} = \frac{e^x x^{-\alpha}}{n!} \left( x \frac{d^n}{dx^n} e^{-x} x^{n+\alpha} + n \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x} x^{n+\alpha} \right)$$

(17.128) を代入すると

$$x L_n^{\alpha+1} = (x-n) L_n^\alpha + (n+\alpha) L_{n-1}^\alpha = (n+\alpha+1) L_n^\alpha - (n+1) L_{n+1}^\alpha \quad (17.130)$$

である。

$L_n^\alpha$  の微分は

$$\frac{dL_n^\alpha}{dx} = L_n^\alpha - \frac{\alpha}{x} L_n^\alpha + \frac{e^x x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x} x^{n+\alpha}$$



ところで

$$\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x} x^{n+1+\alpha} = x \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x} x^{n+\alpha} + (n+1) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x} x^{n+\alpha}$$

つまり

$$L_{n+1}^\alpha = \frac{e^x x^{-\alpha}}{(n+1)!} x \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x} x^{n+\alpha} + L_n^\alpha$$

したがって

$$x \frac{dL_n^\alpha}{dx} = (x - \alpha) L_n^\alpha + (n+1)(L_{n+1}^\alpha - L_n^\alpha) \quad (17.131)$$

$$= n L_n^\alpha - (n + \alpha) L_{n-1}^\alpha \quad (17.132)$$

微分方程式 (17.132) を微分すると

$$x(L_n^\alpha)'' + (L_n^\alpha)' = n(L_n^\alpha)' - (n + \alpha)(L_{n-1}^\alpha)'$$

(17.131) より

$$x(L_{n-1}^\alpha)' = nL_n^\alpha + (x - \alpha - n)L_{n-1}^\alpha = nL_n^\alpha + \frac{x - \alpha - n}{n + \alpha} (nL_n^\alpha - x(L_n^\alpha)')$$

したがって

$$\left( x \frac{d^2}{dx^2} + (\alpha + 1 - x) \frac{d}{dx} + n \right) L_n^\alpha(x) = 0 \quad (17.133)$$

あるいは

$$\left( \frac{d}{dx} e^{-x} x^{\alpha+1} \frac{d}{dx} + n e^{-x} x^\alpha \right) L_n^\alpha(x) = 0 \quad (17.134)$$

を満たす。(17.133) は合流型超幾何微分方程式で  $a = -n$ ,  $b = \alpha + 1$  としたものである。

**直交性**  $\alpha + 1 > 0$  のとき

$$I_{nm} \equiv \int_0^\infty dx e^{-x} x^\alpha L_n^\alpha(x) L_m^\alpha(x) = \frac{1}{n!} \int_0^\infty dx L_m^\alpha(x) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x} x^{n+\alpha}$$

を考える。部分積分を行えば

$$I_{nm} = \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{n+\alpha} \frac{d^n}{dx^n} L_m^\alpha(x)$$

$n \geq m$  としても一般性を失わない。 $L_m^\alpha(x)$  は  $m$  次の多項式であるから、 $n > m$  のとき  $n$  階微分は 0 である。(17.125) より

$$L_n^\alpha(x) = \frac{(-1)^n}{n!} x^n + (n-1) \text{ 次}, \quad \therefore \quad I_{nn} = \frac{1}{n!} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{n+\alpha} = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!}$$

したがって

$$\int_0^\infty dx e^{-x} x^\alpha L_n^\alpha(x) L_m^\alpha(x) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!} \delta_{nm} \quad (17.135)$$

になる。(17.134) に  $L_m^\alpha$  をかけた式と  $n, m$  を入れ替えた式の差をとり積分すれば  $n \neq m$  のとき  $I_{nm} = 0$  を示せる。

## 18 漸近形

### 18.1 合流型超幾何関数の漸近形

#### 積分表示

原点で正則な微分方程式 (17.102) の解  $M(a, b, x)$  をラプラス変換して

$$M(a, b, x) = \int_C dz e^{xz} v(z) \quad (18.1)$$

とする。ここで  $C$  は  $z$  複素平面上の適当な経路であり、開曲線でも閉曲線でもよい。

$$\begin{aligned} \left( x \frac{d^2}{dx^2} + (b-x) \frac{d}{dx} - a \right) M(a, b, x) &= \int_C dz v(z) \left( x \frac{d^2}{dx^2} + (b-x) \frac{d}{dx} - a \right) e^{xz} \\ &= \int_C dz v(z) (xz^2 + (b-x)z - a) e^{xz} \\ &= \int_C dz v(z) \left( (z^2 - z) \frac{d}{dz} + bz - a \right) e^{xz} \end{aligned}$$

第1項を部分積分すると

$$\begin{aligned} \left( x \frac{d^2}{dx^2} + (b-x) \frac{d}{dx} - a \right) M(a, b, x) &= [(z^2 - z) e^{xz} v(z)]_C \\ &\quad + \int_C dz e^{xz} \left( ((b-2)z - a + 1) v(z) - (z^2 - z) \frac{dv}{dz} \right) \end{aligned}$$

ただし、 $[f(z)]_C$  は積分路の終点と始点での  $f(z)$  の差で、閉曲線なら一周したときの差である。したがって

$$[(z^2 - z) e^{xz} v(z)]_C = 0, \quad ((b-2)z - a + 1) v(z) - (z^2 - z) \frac{dv}{dz} = 0$$

ならば (18.1) は (17.102) の解である。微分方程式の解は  $v_0$  を定数として  $v(z) = v_0 z^{a-1} (1-z)^{b-a-1}$  であるから

$$M(a, b, x) = v_0 \int_C dz e^{xz} z^{a-1} (1-z)^{b-a-1}, \quad [e^{xz} z^a (1-z)^{b-a}]_C = 0 \quad (18.2)$$

になる。なお、 $a, b$  が整数でないとき複素数  $z$  に対して  $z^a, (1-z)^{b-a}$  は多価関数である。

$\operatorname{Re} b > \operatorname{Re} a > 0$  のとき、 $C$  が  $z = 0$  から  $z = 1$  までの実軸上の線分ならば、経路の両端  $z = 0, 1$  では  $e^{xz} z^a (1-z)^{b-a} = 0$  になり (18.2) の条件は満たす。したがって

$$M(a, b, x) = v_0 \int_0^1 dz e^{xz} z^{a-1} (1-z)^{b-a-1}$$

である。 $M(a, b, 0) = 1$  及び (17.57) より

$$1 = v_0 \int_0^1 dz z^{a-1} (1-z)^{b-a-1} = v_0 B(a, b-a) = v_0 \frac{\Gamma(a) \Gamma(b-a)}{\Gamma(b)}$$

になるから

$$M(a, b, x) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a) \Gamma(b-a)} \int_0^1 dz e^{xz} z^{a-1} (1-z)^{b-a-1}, \quad \text{ただし } \operatorname{Re} b > \operatorname{Re} a > 0 \quad (18.3)$$

を得る。指数関数をベキ展開し (17.57), (17.58) を用いれば

$$M(a, b, x) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a) \Gamma(b-a)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} \int_0^1 dz z^{a+k-1} (1-z)^{b-a-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k}{(b)_k} \frac{x^k}{k!}$$

これは  $M(a, b, x)$  の定義式 (17.106) である。

経路  $C$  のとり方はいろいろある。  $C$  として  $z=0$  と  $z=1$  を一周する経路を考える。実軸上を往復する経路  $C_0$  とすると、  $C$  と  $C_0$  に挟まれた領域では  $e^{xz}z^{a-1}(1-z)^{b-a-1}$  は正則であるから

$$\int_C dz e^{xz} z^{a-1} (1-z)^{b-a-1} = \int_{C_0} dz e^{xz} z^{a-1} (1-z)^{b-a-1}$$

になる。  $z = re^{i\theta_0}$ ,  $1-z = r'e^{i\theta_1}$  とするとき、  $z:1 \rightarrow 0$  の経路上で  $\theta_0 = 0$ ,  $\theta_1 = 0$  にとる。  $z=0$  で一周すると  $\theta_0 = 2\pi$ ,  $\theta_1 = 0$  になり、更に、  $z=1$  で一周すると  $\theta_0 = 2\pi$ ,  $\theta_1 = 2\pi$  になるから、  $0 < z = x < 1$  から出発して  $x \rightarrow 0 \rightarrow 1 \rightarrow x$  と1周すると

$$[z^a(1-z)^{b-a}]_C = (e^{2\pi i}x)^a (e^{2\pi i}(1-x))^{b-a} - x^a(1-x)^{b-a} = (e^{2\pi i} - 1)x^a(1-x)^{b-a}$$

$b \neq \text{整数}$  の場合  $z^a(1-z)^{b-a}$  は元の値に戻らない。そこで、下の左図の経路を考える。これは右図の経路  $C_d$  と同等である。  $C_d$  は実軸上の積分路と  $z=0, 1$  を中心とした半径  $\varepsilon$  の円周からなる。太線の経路上で  $\theta_0 = \theta_1 = 0$  にとる。

$$\begin{aligned} (\theta_0, \theta_1) &= (0, 0) \xrightarrow{z=0 \text{ で反時計回り}} (2\pi, 0) \xrightarrow{z=1 \text{ で時計回り}} (2\pi, -2\pi) \\ &\xrightarrow{z=0 \text{ で時計回り}} (0, -2\pi) \xrightarrow{z=1 \text{ で反時計回り}} (0, 0) \end{aligned}$$

になるから  $[z^a(1-z)^{b-a}]_{C_d} = 0$  を満たす。



$v_0$  を決めるため  $\text{Re } b > \text{Re } a > 0$  とする。結果はこの制限に依らない。  $\varepsilon \rightarrow 0$  のとき  $z=0, z=1$  まわりの円周経路の寄与は、それぞれ  $\varepsilon^a, \varepsilon^{b-a}$  に比例し 0 になる。実軸上の積分は

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_1^0 dr e^{xr} r^{a-1} (1-r)^{b-a-1} & I_2 &= \int_0^1 dr e^{xr} (e^{2\pi i}r)^{a-1} (1-r)^{b-a-1} \\ I_3 &= \int_1^0 dr e^{xr} (e^{2\pi i}r)^{a-1} (e^{-2\pi i}(1-r))^{b-a-1} & I_4 &= \int_0^1 dr e^{xr} r^{a-1} (e^{-2\pi i}(1-r))^{b-a-1} \end{aligned}$$

であるから

$$M(a, b, x) = v_0 \sum_{k=1}^4 I_k = v_0 (1 - e^{2\pi i a}) (e^{2\pi i(a-b)} - 1) \int_0^1 dr e^{xr} r^{a-1} (1-r)^{b-a-1}$$

(18.3) より

$$v_0(a, b) = \frac{1}{(1 - e^{2\pi i a})(e^{2\pi i(a-b)} - 1)B(a, b-a)}, \quad B(a, b-a) = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)}$$

である。  $M(a, b, x)$  の積分表示として

$$M(a, b, x) = v_0(a, b) \int_{C_d} dz e^{xz} z^{a-1} (1-z)^{b-a-1} \quad (18.4)$$

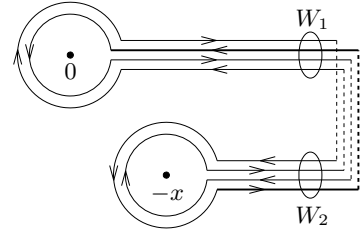
を得る。 (18.3) と異なり、 (18.4) は  $\text{Re } b > \text{Re } a > 0$  でなくても成り立つ。

$u = -xz$  とすると

$$M(a, b, x) = v_0(a, b)(-x)^{-a} \int_U du e^{-u} u^{a-1} \left(1 + \frac{u}{x}\right)^{b-a-1}$$

になる。複素  $z$  平面上の経路  $C_d$  は、複素  $u$  平面では右図の  $U$  に変更できる。破線部分の虚軸に平行な経路では  $u = R + iy$  とおける。 $|e^{-u}| = e^{-R} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0$  になるから  $M$  は  $u = 0$  まわりの寄与  $W_1$  と  $u = -x$  まわりの寄与  $W_2$  に分離し

$$M(a, b, x) = W_1(a, b, x) + W_2(a, b, x) \quad (18.5)$$



と表せる。 $W_1$  は反時計回りの寄与  $I_1$  と時計回りの寄与  $I_2$  からなる。 $\operatorname{Re} b > \operatorname{Re} a > 0$  のとき  $\varepsilon \rightarrow 0$  とする。太い経路は  $\theta_0 = \theta_1 = 0$  に対応し

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{\infty}^0 dr e^{-r} r^{a-1} \left(1 + \frac{r}{x}\right)^{b-a-1} + \int_0^{\infty} dr e^{-r} (e^{2\pi i} r)^{a-1} \left(1 + \frac{r}{x}\right)^{b-a-1} \\ &= (1 - e^{2\pi i a}) \int_{\infty}^0 dr e^{-r} r^{a-1} \left(1 + \frac{r}{x}\right)^{b-a-1} \end{aligned}$$

時計回りの経路の始点側では  $\theta_0 = 2\pi$ ,  $\theta_1 = -2\pi$  になるから

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{\infty}^0 dr e^{-r} (e^{2\pi i} r)^{a-1} \left(e^{-2\pi i} \frac{r+x}{x}\right)^{b-a-1} + \int_0^{\infty} dr e^{-r} r^{a-1} \left(e^{-2\pi i} \frac{r+x}{x}\right)^{b-a-1} \\ &= (e^{2\pi i a} - 1) e^{2\pi i(a-b)} \int_{\infty}^0 dr e^{-r} r^{a-1} \left(1 + \frac{r}{x}\right)^{b-a-1} = -e^{2\pi i(a-b)} I_1 \end{aligned}$$

であり

$$W_1(a, b, x) = v_0(-x)^{-a} (I_1 + I_2) = \frac{(-x)^{-a}}{e^{2\pi i a} - 1} \frac{1}{B(a, b-a)} \int_{C_F} dz e^{-z} z^{a-1} \left(1 + \frac{z}{x}\right)^{b-a-1} \quad (18.6)$$

になる。ここで、経路  $C_F$  は 431 ページに示した経路であり、無限遠の始点で  $z$  の偏角を 0 にとる。

$u = -x$  まわりの  $W_2$  も反時計回りの寄与  $J_1$  と時計回りの寄与  $J_2$  からなる。反時計回りの始点側では  $\theta_0 = 0$ ,  $\theta_1 = -2\pi$  であり、 $u + x = e^{-2\pi i} r$ ,  $r : \infty \rightarrow 0$  になるから

$$\begin{aligned} J_1 &= \int_{\infty}^0 dr e^{-r+x} (r-x)^{a-1} \left(e^{-2\pi i} \frac{r}{x}\right)^{b-a-1} + \int_0^{\infty} dr e^{-r+x} (r-x)^{a-1} \left(\frac{r}{x}\right)^{b-a-1} \\ &= (1 - e^{2\pi i(a-b)}) \int_0^{\infty} dr e^{-r+x} (r-x)^{a-1} \left(\frac{r}{x}\right)^{b-a-1} \end{aligned}$$

時計回りの始点側では  $\theta_0 = 2\pi$ ,  $\theta_1 = 0$  より

$$\begin{aligned} J_2 &= \int_{\infty}^0 dr e^{-r+x} (e^{2\pi i} (r-x))^{a-1} \left(\frac{r}{x}\right)^{b-a-1} + \int_0^{\infty} dr e^{-r+x} (e^{2\pi i} (r-x))^{a-1} \left(e^{-2\pi i} \frac{r}{x}\right)^{b-a-1} \\ &= -e^{2\pi i a} J_1 \end{aligned}$$

になるから

$$W_2(a, b, x) = v_0(-x)^{-a} (J_1 + J_2) = \frac{x^{a-b} e^x}{B(a, b-a)} \int_0^{\infty} dr e^{-r} r^{b-a-1} \left(1 - \frac{r}{x}\right)^{a-1}$$

である。

$$I_2(a, b, x) \equiv \int_{C_F} dz e^{-z} z^{b-a-1} \left(1 - \frac{z}{x}\right)^{a-1} = (e^{2\pi i(b-a)} - 1) \int_0^{\infty} dr e^{-r} r^{b-a-1} \left(1 - \frac{r}{x}\right)^{a-1}$$

であるから

$$W_2(a, b, x) = \frac{x^{a-b} e^x}{e^{2\pi i(b-a)} - 1} \frac{I_2(a, b, x)}{B(a, b-a)} = e^x W_1(b-a, b, -x) \quad (18.7)$$

になる。(18.6), (18.7) は  $\operatorname{Re} b > \operatorname{Re} a > 0$  でなくても成り立つ。

$C_\Gamma$  の始点と終点では  $e^{-z} \rightarrow 0$  になるから ( $A = (e^{2\pi ia} - 1)B(a, b-a)$ )

$$\left(x \frac{d^2}{dx^2} + (b-x) \frac{d}{dx} - a\right) W_1(a, b, x) = \frac{a+1-b}{Ax} \left[ e^{-z} \left(-\frac{z}{x}\right)^a \left(1 + \frac{z}{x}\right)^{b-a-2} \right]_{C_\Gamma} \quad (18.8)$$

$$= 0$$

であり,  $W_1(a, b, x)$  と  $W_2(a, b, x)$  は合流型超幾何微分方程式の独立な解である。

**問題 18.1** (18.8) を示せ。

**漸近級数**

$$g(a, b, x) = \frac{1}{(e^{2\pi ia} - 1) \Gamma(a)} \int_{C_\Gamma} dz e^{-z} z^{a-1} \left(1 - \frac{z}{x}\right)^{-b} \quad (18.9)$$

と定義する。(18.6), (18.7) より

$$W_1(a, b, x) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-x)^{-a} g(a, a+1-b, -x) \quad (18.10)$$

$$W_2(a, b, x) = e^x W_1(b-a, b, -x) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^x x^{a-b} g(b-a, 1-a, x) \quad (18.11)$$

である。 $f(x) = (1-x)^{-b}$  のとき

$$(1-x)^{-b} = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(0)}{k!} x^k + O(x^{n+1}) = \sum_{k=0}^n \frac{(b)_k}{k!} x^k + O(x^{n+1})$$

であるから

$$g(a, b, x) = g_n(a, b, x) + O(x^{-n-1}), \quad g_n(a, b, x) = \sum_{k=0}^n \frac{D_k}{x^k} \quad (18.12)$$

ただし, (17.55) 及び  $(a)_k = \Gamma(a+k)/\Gamma(a)$  より

$$D_k = \frac{(b)_k}{k!} \frac{1}{(e^{2\pi ia} - 1) \Gamma(a)} \int_{C_\Gamma} dz e^{-z} z^{a+k-1} = \frac{(a)_k (b)_k}{k!}, \quad D_0 = 1, \quad D_1 = ab, \quad \dots$$

になる。したがって,  $|x| \rightarrow \infty$  のとき

$$M(a, b, x) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-x)^{-a} \left(1 - \frac{a(a+1-b)}{x} + \dots\right) + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^x x^{a-b} \left(1 + \frac{(1-a)(b-a)}{x} + \dots\right) \quad (18.13)$$

である。

任意の  $k$  に対して  $D_k \neq 0$  のとき, 無限級数  $g_\infty(a, b, x)$  の収束半径  $R$  は

$$R = \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{D_k}{D_{k+1}} \right| = \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{k+1}{(a+k)(b+k)} \right| = 0$$

になるから  $g_\infty(a, b, x)$  は任意の  $x$  について発散する。一方,  $n$  を固定すると  $g_n(a, b, x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} g(a, b, x)$  である。発散級数  $g_\infty(a, b, x)$  の部分和  $g_n(a, b, x)$  は  $|x| \gg 1$  における  $g(a, b, x)$  の近似式としての意味はある。一般に

$$\text{発散級数 } \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c_k}{x^k} \text{ の部分和 } f_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{c_k}{x^k}$$

がある関数  $f(x)$  に対して

$$\lim_{x \rightarrow \infty} x^n (f(x) - f_n(x)) = 0 \quad (18.14)$$

を満たすとき、発散級数を  $f(x)$  の漸近級数あるいは漸近展開という。

$g_n(a, b, x)$  の性質を具体的に考える。(17.56) と同様にして  $a = 1$  のとき

$$g(1, b, -x) = \int_0^\infty du e^{-u} \left( \frac{x}{u+x} \right)^b = x^b e^x \int_x^\infty du \frac{e^{-u}}{u^b}$$

$b, x$  が正の実数の場合を考える。部分積分を行うと

$$g(1, b, -x) = x^b e^x \left( - \left[ \frac{e^{-u}}{u^b} \right]_{u=x}^{u=\infty} - b \int_x^\infty du \frac{e^{-u}}{u^{b+1}} \right) = 1 + \frac{b}{-x} g(1, b+1, -x)$$

この漸化式を繰り返し適用すれば

$$g(1, b, -x) = 1 + \frac{b}{-x} + \frac{b(b+1)}{(-x)^2} g(1, b+2, -x) = \cdots = g_n(1, b, -x) + R_n(x) \quad (18.15)$$

ただし

$$R_n(x) = \frac{(b)_{n+1}}{(-x)^{n+1}} g(1, b+n+1, -x) = (-1)^{n+1} (b)_{n+1} x^b e^x \int_x^\infty du \frac{e^{-u}}{u^{b+n+1}}$$

である。 $b+n > 0$  より  $u > x$  のとき  $u^{b+n+1} > x^{b+n+1}$  であるから

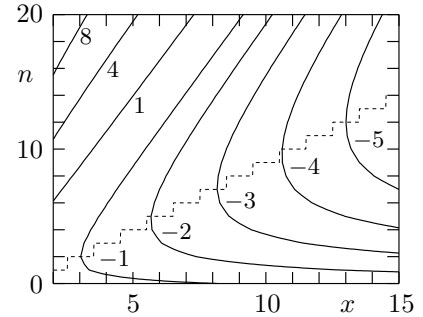
$$|R_n(x)| < (b)_{n+1} x^b e^x \int_x^\infty du \frac{e^{-u}}{x^{b+n+1}} = \frac{(b)_{n+1}}{x^{n+1}} \quad (18.16)$$

$n$  を固定して  $x$  を大きくすると  $|R_n(x)|$  は 0 に近づくから  $g_n(1, b, -x)$  は  $g(1, b, -x)$  のよい近似になる。一方,  $x$  を固定して  $n$  を増加させる場合

$$\frac{(b)_{n+1}}{x^{n+1}} = \frac{b}{x} \frac{b+1}{x} \cdots \frac{b+n}{x}$$

であるから,  $b+n < x$  である間は  $|R_n(x)|$  の上限は減少し  $g_n(1, b, -x)$  の近似の精度はよくなる。しかし,  $b+n > x$  になると  $|R_n(x)|$  の上限は増加に転じる。 $b=1$  での  $|R_n(x)| = 10^k$  の曲線を右図に示す。曲線に付けた数値は  $k$  である。 $n$  を固定して  $x$  を増加させると  $|R_n(x)|$  は減少し 0 に収束する。一方,  $x$  を固定して  $n$  を増加させると,  $n \approx x$  付近までは

$|R_n(x)|$  は減少するが, その後は増加し  $n \rightarrow \infty$  では  $|R_n(x)| \rightarrow \infty$  になる。破線は  $x$  を与えたとき  $|R_n(x)|$  が最小になる  $n$  を表す。有限な  $x$  に対しては  $g(a, b, x)$  を  $g_n(a, b, x)$  で近似する精度には限界がある。例えば,  $x \approx 6$  では  $10^{-2}$  程度,  $x \approx 13$  では  $10^{-5}$  程度が限界である。



### 球ベッセル関数

球ベッセル関数の微分方程式 (17.64) は

$$w_\ell(x) = x^\ell e^{ix} v(z), \quad z = -2ix$$

とすると

$$\left( z \frac{d^2}{dz^2} + (2\ell + 2 - z) \frac{d}{dz} - (\ell + 1) \right) v = 0 \quad (18.17)$$

になる。したがって

$$H_\ell^{(1)}(x) = \frac{2^{\ell+1} \ell!}{(2\ell+1)!} x^\ell e^{ix} W_1(\ell+1, 2\ell+2, -2ix) = (-i)^{\ell+1} \frac{e^{ix}}{x} g(\ell+1, -\ell, 2ix)$$

$$H_\ell^{(2)}(x) = \frac{2^{\ell+1}\ell!}{(2\ell+1)!} x^\ell e^{ix} W_2(\ell+1, 2\ell+2, -2ix) = i^{\ell+1} \frac{e^{-ix}}{x} g(\ell+1, -\ell, -2ix)$$

は (17.64) の 2 つの独立な解である。(17.109), (18.12) より

$$H_\ell^{(1)}(x) = (-i)^{\ell+1} \frac{e^{ix}}{x} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\ell+1)_k (-\ell)_k}{k!} \frac{1}{(2ix)^k} = (-i)^{\ell+1} \frac{e^{ix}}{x} \sum_{k=0}^{\ell} \frac{(\ell+k)!}{(\ell-k)! k!} \left(\frac{i}{2x}\right)^k$$

である。

$$F = \sum_{k=0}^{\ell-1} \left( \frac{(\ell+1+k)!}{(\ell+1-k)!} - \frac{(\ell-1+k)!}{(\ell-1-k)!} \right) \frac{1}{k!} \left(\frac{i}{2x}\right)^k = i \frac{2\ell+1}{x} \sum_{k=0}^{\ell-2} \frac{(\ell+k)!}{(\ell-k)! k!} \left(\frac{i}{2x}\right)^k$$

とすると

$$\begin{aligned} H_{\ell+1}^{(1)} + H_{\ell-1}^{(1)} &= (-i)^{\ell+2} \frac{e^{ix}}{x} \left( F + \frac{(2\ell+1)!}{\ell!} \left(\frac{i}{2x}\right)^\ell + \frac{(2\ell+2)!}{(\ell+1)!} \left(\frac{i}{2x}\right)^{\ell+1} \right) \\ &= \frac{2\ell+1}{x} (-i)^{\ell+1} \frac{e^{ix}}{x} \left( \frac{x}{(2\ell+1)i} F + \frac{(2\ell-1)!}{(\ell-1)!} \left(\frac{i}{2x}\right)^{\ell-1} + \frac{(2\ell)!}{\ell!} \left(\frac{i}{2x}\right)^\ell \right) \\ &= \frac{2\ell+1}{x} (-i)^{\ell+1} \frac{e^{ix}}{x} \sum_{k=0}^{\ell} \frac{(\ell+k)!}{(\ell-k)! k!} \left(\frac{i}{2x}\right)^k = \frac{2\ell+1}{x} H_\ell^{(1)} \end{aligned}$$

であり漸化式 (17.71) を満たす。(17.70) より  $\ell = 0, 1$  のとき  $H_\ell^{(1)}(x) = h_\ell^{(1)}(x)$  になるから、任意の  $\ell$  に対して  $H_\ell^{(1)}(x) = h_\ell^{(1)}(x)$  である。ハンケル関数は

$$h_\ell^{(1)}(x) = \frac{2^{\ell+1}\ell!}{(2\ell+1)!} x^\ell e^{ix} W_1(\ell+1, 2\ell+2, -2ix) = (-i)^{\ell+1} \frac{e^{ix}}{x} \sum_{k=0}^{\ell} \frac{(\ell+k)!}{(\ell-k)! k!} \left(\frac{i}{2x}\right)^k \quad (18.18)$$

$$h_\ell^{(2)}(x) = \frac{2^{\ell+1}\ell!}{(2\ell+1)!} x^\ell e^{ix} W_2(\ell+1, 2\ell+2, -2ix) = i^{\ell+1} \frac{e^{-ix}}{x} \sum_{k=0}^{\ell} \frac{(\ell+k)!}{(\ell-k)! k!} \left(-\frac{i}{2x}\right)^k \quad (18.19)$$

と表せる。球ベッセル関数  $j_\ell(x) = (h_\ell^{(1)}(x) + h_\ell^{(2)}(x))/2$  は

$$\begin{aligned} j_\ell(x) &= \frac{2^\ell \ell!}{(2\ell+1)!} x^\ell e^{ix} \left( W_1(\ell+1, 2\ell+2, -2ix) + W_2(\ell+1, 2\ell+2, -2ix) \right) \\ &= \frac{2^\ell \ell!}{(2\ell+1)!} x^\ell e^{ix} M(\ell+1, 2\ell+2, -2ix) \end{aligned} \quad (18.20)$$

球ノイマン関数  $n_\ell(x) = (h_\ell^{(1)}(x) - h_\ell^{(2)}(x))/2i$  は

$$n_\ell(x) = -i \frac{2^\ell \ell!}{(2\ell+1)!} x^\ell e^{ix} \left( W_1(\ell+1, 2\ell+2, -2ix) - W_2(\ell+1, 2\ell+2, -2ix) \right) \quad (18.21)$$

になる。(18.18), (18.19) より

$$\begin{aligned} j_\ell(x) &= \frac{\sin(x - \ell\pi/2)}{x} \sum_{k=0}^{[\ell/2]} \frac{(\ell+2k)!}{(\ell-2k)! (2k)!} \frac{(-1)^k}{(2x)^{2k}} \\ &\quad + \frac{\cos(x - \ell\pi/2)}{x^2} \sum_{k=0}^{[(\ell-1)/2]} \frac{(\ell+2k+1)!}{(\ell-2k-1)! (2k+1)!} \frac{(-1)^k}{(2x)^{2k}} \end{aligned} \quad (18.22)$$

$$\begin{aligned}
n_\ell(x) = & -\frac{\cos(x - \ell\pi/2)}{x} \sum_{k=0}^{[\ell/2]} \frac{(\ell+2k)!}{(\ell-2k)!(2k)!} \frac{(-1)^k}{(2x)^{2k}} \\
& + \frac{\sin(x - \ell\pi/2)}{x^2} \sum_{k=0}^{[(\ell-1)/2]} \frac{(\ell+2k+1)!}{(\ell-2k-1)!(2k+1)!} \frac{(-1)^k}{(2x)^{2k}}
\end{aligned} \quad (18.23)$$

である。

**問題 18.2** (18.17) の 2 つの解は  $M(a, b, z)$  と  $z^{1-b}M(a-b+1, 2-b, z)$  と表すこともできる。ただし  $a = \ell+1$ ,  $b = 2\ell+2 = 2a$  である。 $M(a, b, z)$  は  $j_\ell(x)$  で表せる。 $z^{1-b}M(a-b+1, 2-b, z)$  が  $h_\ell^{(1)}$  で表せることを示せ。

## 18.2 エアリー関数

微分方程式

$$\frac{d^2 w}{dq^2} - qw(q) = 0 \quad (18.24)$$

の解を求める。 $w(q)$  をフーリエ変換して

$$w(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikq} v(k)$$

とおくと

$$\frac{d^2 w}{dq^2} = - \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikq} k^2 v(k), \quad qw(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dk v(k) (-i) \frac{\partial}{\partial k} e^{ikq} = i \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikq} \frac{dv(k)}{dk} \quad (18.25)$$

最後は  $k \rightarrow \pm\infty$  のとき  $v(k) \rightarrow 0$  であるとして部分積分した。(18.24) は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikq} \left( k^2 + i \frac{d}{dk} \right) v(k) = 0, \quad \therefore \frac{dv}{dk} = ik^2 v(k)$$

したがって  $v(k) \propto e^{ik^3/3}$  であるから  $C$  を任意定数として  $w(q) = CAi(q)$  になる。ただし

$$Ai(q) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\left(\frac{ik^3}{3} + ikq\right) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \cos\left(\frac{k^3}{3} + kq\right) \quad (18.26)$$

である。 $Ai(q)$  を**エアリー (Airy) 関数**という。 $z = aq$  とすると

$$\left( \frac{d^2}{dq^2} - q \right) Ai(aq) = a^2 \left( \frac{d^2}{dz^2} - \frac{z}{a^3} \right) Ai(z)$$

$a = e^{\pm 2\pi i/3}$  ならば  $a^3 = 1$  であるから  $Ai(e^{\pm 2\pi i/3} q)$  も (18.24) の解である。(18.34) で示すように,  $Ai(q)$  と  $Ai(e^{\pm 2\pi i/3} q)$  のうち 1 次独立な解は 2 つである。そこで

$$Bi(q) = i \left( e^{-2\pi i/3} Ai(e^{-2\pi i/3} q) - e^{2\pi i/3} Ai(e^{2\pi i/3} q) \right)$$

を定義する。 $q$  が実数のとき  $Ai(q)$  は実数であり

$$Bi(q) = 2 \operatorname{Im} \left( e^{2\pi i/3} Ai(e^{2\pi i/3} q) \right)$$

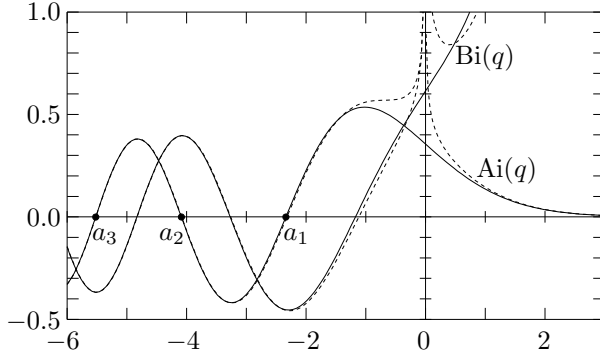
も実数である。(18.24) の一般解は  $C, D$  を任意定数として  $w(q) = CAi(q) + DBi(q)$  になる。



下図に  $\text{Ai}(q)$  と  $\text{Bi}(q)$  を示す。 $q \rightarrow \infty$  では  $\text{Ai}(q)$  は指数関数的に減少し、 $\text{Bi}(q)$  は増加する。一方、 $q \rightarrow -\infty$  では両者共に振動し振幅は  $|q|^{-1/4}$  でゆっくり減少する。 $a_n$  は  $\text{Ai}(a_n) = 0$  であるエアリー関数の零点である。破線は後で求める漸近形 (18.36) または (18.37) であり、 $|q| \gtrsim 2$  ならばよい近似になる。 $q \rightarrow -\infty$  の漸近形 (18.36) を使うと、 $a_n$  は近似的に

$$a_n \approx - \left[ \frac{3\pi}{2} \left( n - \frac{1}{4} \right) \right]^{2/3} \quad (18.27)$$

で与えられる。(18.27) と数値的に求めた  $a_n$  を比較すると右表になる ( $\varepsilon = 1 - (18.27)/\text{数値解}$ )。



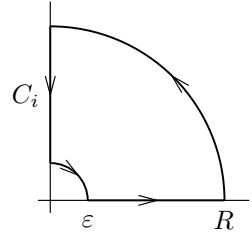
$n$	数値解	(18.27)	$\varepsilon \times 10^3$
1	-2.33811	-2.32025	7.6
2	-4.08795	-4.08181	1.5
3	-5.52056	-5.51716	0.62
4	-6.78671	-6.78445	0.33
5	-7.94413	-7.94249	0.21
6	-9.02265	-9.02137	0.14

$\text{Ai}(0)$ ,  $\text{Bi}(0)$  は解析的に求まる。 $t = k^3/3$  とすると

$$\text{Ai}(0) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \cos \frac{k^3}{3} = \frac{3^{-2/3}}{\pi} \text{Re } I, \quad I = \int_0^\infty dt t^{-2/3} e^{it}$$

になる。複素  $t$  平面上の経路 (右図) の内部で  $t^{-2/3} e^{it}$  は正則であり、 $R \rightarrow \infty$ ,  $\varepsilon \rightarrow 0$  のとき円弧からの寄与は 0 になるから

$$I + \int_{C_i} dt t^{-2/3} e^{it} = 0, \quad C_i = \text{虚軸上の経路}$$



$C_i$  上では  $t = e^{i\pi/2} s$ ,  $s: \infty \rightarrow 0$  より

$$I = e^{i\pi/2 - i\pi/3} \int_0^\infty ds s^{-2/3} e^{-s} = e^{i\pi/6} \Gamma(1/3)$$

したがって

$$\text{Ai}(0) = 3^{-2/3} \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \Gamma(1/3) = \frac{3^{-2/3}}{\Gamma(2/3)}, \quad \text{Bi}(0) = 2\text{Ai}(0) \text{Im } e^{2\pi i/3} = \frac{3^{-1/6}}{\Gamma(2/3)} \quad (18.28)$$

ただし, (17.59) より  $\Gamma(1/3)\Gamma(2/3) = \pi/\sin(\pi/3)$  である。導関数は

$$\text{Ai}'(q) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dk k \sin\left(\frac{k^3}{3} + kq\right)$$

$\text{Ai}(0)$  と同様にすれば

$$\text{Ai}'(0) = -\frac{3^{-1/3}}{\pi} \text{Im} \left( e^{i\pi/3} \int_0^\infty ds s^{-1/3} e^{-s} \right) = -3^{-1/3} \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \Gamma(2/3) = -\frac{3^{-1/3}}{\Gamma(1/3)} = -\frac{\text{Bi}'(0)}{\sqrt{3}} \quad (18.29)$$

### 積分表示

(18.1) と同様に, 複素平面上の適当な経路を  $C$  として

$$w(q) = \int_C dz e^{iqz} v(z) \quad (18.30)$$

とする。 $e^{qz}$  でもよいがフーリエ変換との関連で  $e^{iqz}$  とした。

$$\frac{d^2 w}{dq^2} - qw(q) = - \int_C dz (z^2 + q) e^{iqz} v(z) = \int_C dz \left( i \frac{de^{iqz}}{dz} v(z) - z^2 e^{iqz} v(z) \right)$$

第1項を部分積分すると

$$\frac{d^2 w}{dq^2} - qw(q) = i [e^{iqz} v(z)]_C - \int_C dz e^{iqz} \left( i \frac{dv}{dz} + z^2 v(z) \right)$$

したがって

$$i \frac{dv}{dz} + z^2 v(z) = 0, \quad [e^{iqz} v(z)]_C = 0$$

ならば (18.30) は解になる。ただし,  $[f(z)]_C$  は積分路の終点と始点での  $f(z)$  の差で, 閉曲線なら一周したときの差である。 $v_0$  を任意定数として  $v(z) = v_0 e^{iz^3/3}$  になるから

$$w(q) = v_0 \int_C dz e^{iqz + iz^3/3}, \quad [e^{iqz + iz^3/3}]_C = 0$$

である。 $f(z) = e^{iqz + iz^3/3}$  は正則であるから  $C$  として閉曲線をとれば  $[f(z)]_C = 0$  になるが, コーシーの定理から  $w(q) = 0$  になり無意味である。 $C$  が開曲線の場合, 任意の実数  $q$  に対して積分路の始点と終点で  $f(z)$  の値が一致しなければならない。 $z = Re^{i\theta}$  とすると

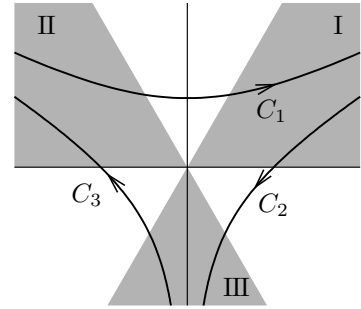
$$iqz + iz^3/3 = -qR \sin \theta - \frac{R^3}{3} \sin 3\theta + i \left( qR \cos \theta + \frac{R^3}{3} \cos 3\theta \right)$$

である。 $\sin 3\theta > 0$ , つまり

$$\text{I} : 0 < \theta < \frac{\pi}{3}, \quad \text{II} : \frac{2\pi}{3} < \theta < \pi, \quad \text{III} : \frac{4\pi}{3} < \theta < \frac{5\pi}{3}$$

の領域で  $R \rightarrow \infty$  とすると  $\text{Re}(iqz + iz^3/3) \rightarrow -\infty$  より  $e^{iqz + iz^3/3} \rightarrow 0$  になるから, 両端が  $\sin 3\theta > 0$  領域で無限遠に遠ざかるように  $C$  をとれば  $[f(z)]_C = 0$  を満たす。

両端が I, II, III のいずれかの同じ領域にある場合, 両端を結ぶ経路を  $D$  とすると, 閉曲線  $C + D$  に対してコーシーの定理より  $C + D$  の積分は 0 になる。また,  $D$  は無限遠にとることができ  $D$  上では  $f(z) \rightarrow 0$  になるから  $D$  は積分に寄与しない。このため  $w(q) = 0$  になり  $C$  の両端を別の領域にとる必要がある。したがって,  $C$  として



$$\begin{aligned} C_1 & \text{ 始点が II の無限遠} \rightarrow \text{終点が I の無限遠} \\ C_2 & \text{ 始点が I の無限遠} \rightarrow \text{終点が III の無限遠} \\ C_3 & \text{ 始点が III の無限遠} \rightarrow \text{終点が II の無限遠} \end{aligned} \quad (18.31)$$

の3種類ある(積分の向きは逆でもよい)。  $C_1$  と同じ条件を満たす別の積分路を  $C'_1$  とし,  $C_1$  と  $C'_1$  の始点を結ぶ曲線を  $D_i$ , 終点を結ぶ曲線を  $D_f$  とすると,  $C_1 + D_f - C'_1 + D_i$  は閉曲線をなすから

$$\int_{C_1} dz f(z) + \int_{D_i} dz f(z) - \int_{C'_1} dz f(z) + \int_{D_f} dz f(z) = 0$$

$D_i$  と  $D_f$  の寄与は 0 になるから

$$\int_{C_1} dz f(z) = \int_{C'_1} dz f(z)$$

である。したがって、 $C_k$  は (18.31) の条件さえ満たせば自由に変更できる。

$$w_k(q) = v_0 \int_{C_k} dz f(z) = v_0 \int_{C_k} dz e^{iqz + iz^3/3}, \quad k = 1, 2, 3 \quad (18.32)$$

とする。 $D_k$  を  $C_k$  の終点と  $C_{k+1}$  の始点を結ぶ曲線 (ただし  $C_4 = C_1$ ) とすれば、 $C_1 + D_1 + C_2 + D_2 + C_3 + D_3$  は閉曲線をなし、 $D_k$  の積分は 0 になるから

$$\int_{C_1} dz f(z) + \int_{C_2} dz f(z) + \int_{C_3} dz f(z) = 0, \quad \therefore w_1(q) + w_2(q) + w_3(q) = 0 \quad (18.33)$$

である。 $w_1(q), w_2(q), w_3(q)$  のうち独立な解は 2 つである。

$v_0 = 1/(2\pi)$  とする。 $C_1$  を実軸に移動すると

$$w_1(q) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{iqx + ix^3/3} = \text{Ai}(q)$$

になる。 $C_2$  は  $\theta = -2\pi/3$  の直線に変更できる。 $z = e^{-2\pi i/3}x, -\infty < x < \infty$  より

$$w_2(q) = \frac{e^{-2\pi i/3}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(iqe^{-2\pi i/3}x + ix^3/3\right) = e^{-2\pi i/3} \text{Ai}(qe^{-2\pi i/3})$$

である。同様に、 $C_3$  は  $\theta = 2\pi/3$  の直線に変更できるから  $w_3(q) = e^{2\pi i/3} \text{Ai}(qe^{2\pi i/3})$  である。(18.33) より

$$\text{Ai}(q) + e^{-2\pi i/3} \text{Ai}(qe^{-2\pi i/3}) + e^{2\pi i/3} \text{Ai}(qe^{2\pi i/3}) = 0 \quad (18.34)$$

これと  $\text{Bi}(q)$  の定義より

$$e^{\pm 2\pi i/3} \text{Ai}(qe^{\pm 2\pi i/3}) = -\frac{\text{Ai}(q) \mp i \text{Bi}(q)}{2} \quad (18.35)$$

と表せる。

### エアリー関数の漸近形

$q$  は実数とする。(18.32) より  $z = \sqrt{|q|} z'$  とすると

$$\text{Ai}(q) = w_1(q) = \frac{\sqrt{|q|}}{2\pi} \int_{C'_1} dz' e^{\lambda f_{\pm}(z')}, \quad \text{ただし } \lambda = |q|^{3/2}, \quad f_{\pm}(z) = \frac{iz^3}{3} \pm iz$$

$q > 0$  のとき  $f_+(z)$ ,  $q < 0$  のとき  $f_-(z)$  である。複素  $z'$  平面上においても積分路  $C'_1$  は始点が領域 II, 終点は領域 I の無限遠である。以下、' は落とす。積分路  $C_1$  を  $f_{\pm}(z)$  の鞍点を通る最急降下曲線に変更し、410 ページの鞍点法を用いて  $|q| \rightarrow \infty$  での  $\text{Ai}(q)$  の近似式を求める。

$q > 0$  の場合  $f'_+(z_0) = i(z_0^2 + 1) = 0$  である鞍点  $z_0$  は  $z_0 = \pm i$  である。 $z = x + iy$  とすると  $z_0 = i$  の場合

$$\text{Im} f_+(z) = x \left( \frac{x^2}{3} - y^2 + 1 \right) = \text{一定} = \text{Im} f_+(z_0) = 0$$

より  $z_0 = i$  を通る最急降下曲線の候補は  $x = 0$  または  $y = \sqrt{x^2/3 + 1}$  である。 $f_+(z)$  を  $z = z_0 = i$  まわりでテイラー展開すると ( $z = z_0 + re^{i\theta}$ )

$$\begin{aligned} f_+(z) &= f_+(z_0) + \frac{f''_+(z_0)}{2} (z - z_0)^2 + \cdots \\ &= f_+(z_0) + iz_0 (z - z_0)^2 + \cdots = -\frac{2}{3} - r^2 e^{2i\theta} + \cdots \end{aligned}$$

になる。最急降下曲線では  $e^{2i\theta} = 1$  であるから  $\theta = 0, \pi$  である。虚軸  $x = 0$  上では  $\theta = \pm \pi/2$  になり  $x = 0$  は最急降下曲線ではない。一方、 $y = \sqrt{x^2/3 + 1}$  の曲線は  $z = i$  近傍では  $x$  軸に平行になるから  $\theta = 0, \pi$  であり最急降下曲線である。これを図示すると図の  $C_i$  になる。 $C_1$  として  $C_i$  を採用すれば

$$\text{Ai}(q) = \frac{\sqrt{q}}{2\pi} \int_{C_1} dz e^{\lambda f_+(z)}$$

である。 $\lambda \rightarrow \infty$  の場合  $r = 0$  近傍の微小区間  $-\varepsilon \leq r \leq \varepsilon$  のみが寄与するから

$$\text{Ai}(q) \approx \frac{\sqrt{q}}{2\pi} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dr \frac{dz}{dr} e^{\lambda f_+(z)} = \frac{\sqrt{q}}{2\pi} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dr \exp\left(-\frac{2}{3}\lambda - \lambda r^2 + \dots\right)$$

ただし、積分の方向を考慮すると  $\theta = 0$  であるから  $dz/dr = e^{i\theta} = 1$  である。

$$\text{Ai}(q) \approx \frac{\sqrt{q}}{2\pi} e^{-2\lambda/3} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dr e^{-\lambda r^2} = \frac{\sqrt{q}}{2\pi} e^{-2\lambda/3} \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\varepsilon\sqrt{\lambda}}^{\varepsilon\sqrt{\lambda}} ds e^{-s^2}$$

$\lambda \rightarrow \infty$  では  $\varepsilon\sqrt{\lambda} \rightarrow \infty$  としてよいから

$$\text{Ai}(q) \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi} q^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}q^{3/2}\right)$$

になる。

$q < 0$  の場合  $f'_-(z_0) = 0$  である  $z_0$  は  $z_0 = \pm 1$  になる。最急降下曲線は

$$z_0 = \pm 1 \text{ のとき } x \left( \frac{x^2}{3} - y^2 - 1 \right) = \text{一定} = \text{Im } f_-(z_0) = \mp \frac{2}{3}$$

これを図示すると上図の  $C_{\pm}$  になる。積分路  $C_1$  は  $C_+ + C_-$  に変更できるから

$$\text{Ai}(q) = I_+ + I_-, \quad I_{\pm} = \frac{\sqrt{|q|}}{2\pi} \int_{C_{\pm}} dz e^{\lambda f_-(z)}$$

$f_-(z)$  を  $z_0 = \pm 1$  でテイラー展開すると ( $z - z_0 = re^{i\theta_{\pm}}$ )

$$f_-(z) = f_-(z_0) + \frac{f''_-(z_0)}{2} (z - z_0)^2 + \dots = \mp \frac{2i}{3} - r^2 e^{2i\theta_{\pm} \mp i\pi/2} + \dots$$

最急降下曲線では  $e^{2i\theta_{\pm} \mp i\pi/2} = 1$  であるが、積分の向きから  $\theta_{\pm} = \pm \pi/4$  になる。 $dz = dr e^{i\theta_{\pm}}$  に注意し  $q > 0$  の場合と同様にすれば

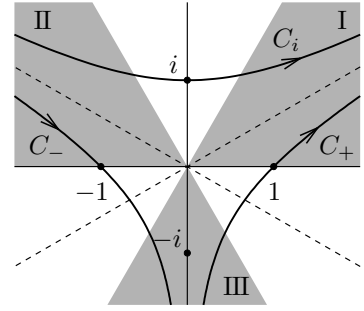
$$I_{\pm} \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi} |q|^{1/4}} \exp\left(\mp i \left( \frac{2}{3} |q|^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right)\right)$$

したがって

$$\text{Ai}(q) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi} |q|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3} |q|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi} |q|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3} |q|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)$$

以上から

$$\text{Ai}(q) \rightarrow \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi} q^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}q^{3/2}\right), & q \rightarrow \infty \\ \frac{1}{\sqrt{\pi} |q|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}|q|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & q \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (18.36)$$



である。

次に  $\text{Bi}(q)$  を求める。

$$e^{2\pi i/3} \text{Ai}(e^{2\pi i/3} q) = w_3(q) = \frac{\sqrt{|q|}}{2\pi} \int_{C_3} dz e^{\lambda f_{\pm}(z)}$$

$\text{Ai}(q)$  との違いは積分路が  $C_1$  ではなく  $C_3$  ( 始点が領域 III, 終点が領域 II の無限遠 ) である。したがって,  $q < 0$  の場合, 最急降下曲線  $C_3$  として  $-C_-$  を採用すればよい。これから  $q \rightarrow -\infty$  のとき

$$e^{2\pi i/3} \text{Ai}(e^{2\pi i/3} q) = -I_- \approx -\frac{1}{2\sqrt{\pi}|q|^{1/4}} \exp\left(i\left(\frac{2}{3}|q|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)\right)$$

になる。 $q > 0$  の場合, 鞍点は  $z_0 = \pm i$  になるが,  $z_0 = -i$  では

$$x = 0 \quad \text{または} \quad y = -\sqrt{\frac{x^2}{3} + 1}$$

が最急降下曲線の候補である。 $z = z_0 = -i$  近傍では

$$f_+(z) = f_+(z_0) + \frac{f_+''(z_0)}{2}(z - z_0)^2 + \cdots = \frac{2}{3} + r^2 e^{2i\theta} + \cdots$$

$x = 0$  上では  $\theta = \pm \pi/2$  より  $f_+(z) = 2/3 - r^2 + \cdots$  になるから  $x = 0$ , つまり, 虚軸が最急降下曲線になる。そこで  $C_3$  を虚軸上の  $-\infty$  を始点とし  $z = -i$  を通過後, 領域 II に至る経路とすると

$$e^{2\pi i/3} \text{Ai}(e^{2\pi i/3} q) \approx \frac{\sqrt{q}}{2\pi} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dr e^{i\pi/2} e^{2\lambda/3 - \lambda r^2} \approx \frac{i}{2\sqrt{\pi} q^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3} q^{3/2}\right)$$

したがって

$$\text{Bi}(q) = 2 \text{Im} \left( e^{2\pi i/3} \text{Ai}(e^{2\pi i/3} q) \right) \rightarrow \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi} q^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3} q^{3/2}\right), & q \rightarrow \infty \\ \frac{1}{\sqrt{\pi} |q|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3} |q|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & q \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (18.37)$$

になる。

### エアリー関数とベッセル関数

$w(q) = \sqrt{q} v(q)$  とすると (18.24) は

$$\left( q \frac{d}{dq} q \frac{d}{dq} - q^3 - \frac{1}{4} \right) v = 0$$

になる。 $a, b$  を定数として  $q = (x/a)^b$  とおくと  $q \frac{d}{dq} = \frac{x}{b} \frac{d}{dx}$  であるから

$$\left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} x \frac{d}{dx} - \frac{b^2}{a^{3b}} \left( x^{3b-2} + \frac{a^{3b}}{4x^2} \right) \right) v = 0$$

$3b - 2 = 0$ ,  $b^2/a^{3b} = -1$ , つまり,  $a = \pm 2i/3$ ,  $b = 2/3$  とすると

$$\left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} x \frac{d}{dx} + 1 - \frac{(1/3)^2}{x^2} \right) v = 0$$

これは  $\nu = \pm 1/3$  としたベッセルの微分方程式 (17.90) であるから

$$\text{Ai}(q) = \sqrt{q} \left( C J_{-1/3}(ix) + D J_{1/3}(ix) \right), \quad x = \frac{2}{3} q^{3/2}$$

と表せる。 $(ix)^\nu = (e^{i\pi/2}x)^\nu = e^{i\pi\nu/2}x^\nu$  とする。

$q > 0$  のとき  $x$  は実数になる。ベッセル関数の定義 (17.92) から  $q \rightarrow 0$  のとき

$$\begin{aligned} \text{Ai}(q) &\rightarrow \sqrt{q} \left( \frac{C}{\Gamma(2/3)} \left( \frac{ix}{2} \right)^{-1/3} + \frac{D}{\Gamma(4/3)} \left( \frac{ix}{2} \right)^{1/3} + \cdots \right) \\ &= C \frac{3^{1/3} e^{-i\pi/6}}{\Gamma(2/3)} + D \frac{3^{2/3} e^{i\pi/6}}{\Gamma(1/3)} q + O(q^3) \end{aligned}$$

これと (18.28), (18.29) より

$$C = \frac{e^{i\pi/6}}{3}, \quad D = -\frac{e^{-i\pi/6}}{3}$$

になり

$$\text{Ai}(q) = \frac{\sqrt{q}}{3} \left( e^{i\pi/6} J_{-1/3}(ix) - e^{-i\pi/6} J_{1/3}(ix) \right)$$

である。(17.96) より  $q \rightarrow \infty$  では

$$\begin{aligned} \text{Ai}(q) &\rightarrow \frac{1}{3} \sqrt{\frac{2q}{i\pi x}} \left( e^{i\pi/6} \sin\left(ix + \frac{5\pi}{12}\right) - e^{-i\pi/6} \sin\left(ix + \frac{\pi}{12}\right) \right) \\ &= \frac{1}{3} \sqrt{\frac{3}{i\pi\sqrt{q}}} e^{i\pi/4} \sin \frac{\pi}{3} e^{-x} = \frac{1}{2\sqrt{\pi} q^{1/4}} e^{-x} \end{aligned}$$

これは  $q \rightarrow \infty$  での漸近形 (18.36) である。

$q < 0$  のとき  $\sqrt{q} = \sqrt{-|q|} = e^{i\pi/2} \sqrt{|q|}$  とすると

$$ix = \frac{2}{3} e^{i\pi/2} e^{3\pi i/2} |q|^{3/2} = e^{2\pi i} y, \quad y = \frac{2}{3} |q|^{3/2}$$

になる。(17.92) より  $J_\nu(e^{2\pi i} y) = e^{2\pi i \nu} J_\nu(y)$  であるから

$$\text{Ai}(q) = \frac{e^{i\pi/2} \sqrt{|q|}}{3} \left( e^{i\pi/6} e^{-2\pi i/3} J_{-1/3}(y) - e^{-i\pi/6} e^{2\pi i/3} J_{1/3}(y) \right) = \frac{\sqrt{|q|}}{3} \left( J_{-1/3}(y) + J_{1/3}(y) \right)$$

あるいは  $q < 0$  のとき

$$\text{Ai}(q) = \frac{\sqrt{|q|}}{3} \left( C' J_{-1/3}(y) + D' J_{1/3}(y) \right)$$

と表せる。 $|q| \rightarrow 0$  のとき

$$\text{Ai}(q) \rightarrow \frac{\sqrt{|q|}}{3} \left( \frac{C'}{\Gamma(2/3)} \left( \frac{y}{2} \right)^{-1/3} + \frac{D'}{\Gamma(4/3)} \left( \frac{y}{2} \right)^{1/3} \right) = \frac{3^{-2/3}}{\Gamma(2/3)} C' + \frac{3^{-1/3}}{\Gamma(1/3)} D' |q| + O(q^3)$$

(18.28), (18.29) より  $C' = D' = 1$  である。 $q \rightarrow -\infty$  では

$$\text{Ai}(q) \rightarrow \frac{\sqrt{|q|}}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi y}} \left( \sin\left(y + \frac{5\pi}{12}\right) + \sin\left(y + \frac{\pi}{12}\right) \right) = \frac{1}{\sqrt{\pi|q|^{1/2}}} \sin\left(y + \frac{\pi}{4}\right)$$

になり (18.36) を再現する。エアリー関数をベッセル関数で表すと

$$\text{Ai}(q) = \frac{\sqrt{|q|}}{3} \times \begin{cases} \left( e^{i\pi/6} J_{-1/3}(ix) - e^{-i\pi/6} J_{1/3}(ix) \right), & q > 0 \\ \left( J_{-1/3}(x) + J_{1/3}(x) \right), & q < 0 \end{cases}, \quad x = \frac{2}{3} |q|^{3/2}$$

である。なお

$$I_\nu(q) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(q/2)^{2m+\nu}}{m! \Gamma(\nu+m+1)} = \begin{cases} e^{-i\pi\nu/2} J_\nu(e^{i\pi/2} q), & -\pi < \arg q \leq \pi/2 \\ e^{i3\pi\nu/2} J_\nu(e^{-i3\pi/2} q), & \pi/2 < \arg q \leq \pi \end{cases}$$

を変形ベッセル関数という。

問題 18.3 (18.28), (18.29) より

$$\text{Bi}(q) = \sqrt{\frac{|q|}{3}} \times \begin{cases} \left( e^{i\pi/6} J_{-1/3}(ix) + e^{-i\pi/6} J_{1/3}(ix) \right), & q > 0 \\ \left( J_{-1/3}(x) - J_{1/3}(x) \right), & q < 0 \end{cases}, \quad x = \frac{2}{3}|q|^{3/2}$$

を示せ。これから (18.37) を求めよ。

### 18.3 エルミート多項式の漸近形

エルミート多項式の母関数

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{H_k(q)}{k!} z^k = e^{-z^2+2qz}$$

を用いた  $z$  の複素平面上の積分

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{H_k(q)}{k!} \int_C dz z^{k-n-1} = \int_C dz e^{-z^2+2qz} \frac{1}{z^{n+1}}$$

を考える。積分路  $C$  が原点まわりに 1 周する場合

$$\int_C dz z^{k-n-1} = \begin{cases} 2\pi i, & n = k \\ 0, & n \neq k \end{cases}$$

であるから

$$H_n(q) = \frac{n!}{2\pi i} \int_C dz e^{-z^2+2qz} \frac{1}{z^{n+1}} = \frac{n!}{2\pi i} \int_C dz \exp(-z^2 + 2qz - (n+1) \log z)$$

この積分表示を用いて  $n \rightarrow \infty$  での  $H_n(q)$  を求める。

調和振動子ポテンシャルにおいてエネルギーが  $\hbar\omega(n+1/2)$  のとき、古典力学の回帰点は  $q^2 = 2n+1$  である。そこで  $q = \sqrt{2n+1}q'$ ,  $z = \sqrt{2n+1}z'$  とすると

$$H_n(\sqrt{2n+1}q) = \frac{1}{2\pi i} \frac{n!}{(2n+1)^{n/2}} \int_C dz \exp\left((2n+1)f(z) - \frac{1}{2} \log z\right)$$

ただし

$$f(z) = -z^2 + 2qz - \frac{1}{2} \log z$$

になる。ここで、 $q', z'$  を改めて  $q, z$  と置きなおした。この表現は  $n \rightarrow \infty$  で鞍点法が使える形式である。 $z = Re^{i\theta}$  とおくと

$$\text{Re } f(z) = -R^2 \cos 2\theta + 2qR \cos \theta - \frac{1}{2} \log r$$

であるから  $\cos 2\theta > 0$  ならば  $R \rightarrow \infty$  のとき  $e^{(2n+1)f(z)} \rightarrow 0$  になる。したがって、積分路を  $-\pi/4 < \theta < \pi/4$ ,  $3\pi/4 < \theta < 5\pi/4$  の領域で無限に遠ざかる経路に変更できる。

$f(z)$  が極値になる  $z$  は  $f'(z) = -2z + 2q - 1/(2z) = 0$  であるから

$$z = z_{\pm} = \frac{q \pm \sqrt{q^2 - 1}}{2}$$

$z_{\pm}^2 = qz_{\pm} - 1/4$  より

$$f(z_{\pm}) = \frac{1}{4} + qz_{\pm} - \frac{1}{2} \log z_{\pm}$$

また  $4z_+z_- = 1$  から

$$f''(z_{\pm}) = \frac{1 - 4z_{\pm}^2}{2z_{\pm}^2} = 2 \frac{z_{\mp} - z_{\pm}}{z_{\pm}} = 8z_{\mp}(z_{\mp} - z_{\pm})$$

になる。

$|q| < 1$  の場合

$$q = \sin \phi, \quad \sqrt{1 - q^2} = \cos \phi, \quad |\phi| < \frac{\pi}{2}$$

とおける。このとき

$$z_{\pm} = \frac{1}{2}(\sin \phi \pm i \cos \phi) = \frac{1}{2}e^{\mp i(\pi/2 - \phi)}, \quad f''(z_{\pm}) = -4 \cos \phi e^{\pm i\phi}$$

であるから,  $z = z_{\pm}$  近傍では  $z - z_{\pm} = re^{i\theta_{\pm}}$  とすると

$$f(z) = f_{\pm} + \frac{f''(z_{\pm})}{2}(z - z_{\pm})^2 = f_{\pm} - 2r^2 \cos \phi e^{i(2\theta_{\pm} \pm \phi)}, \quad f_{\pm} = f(z_{\pm})$$

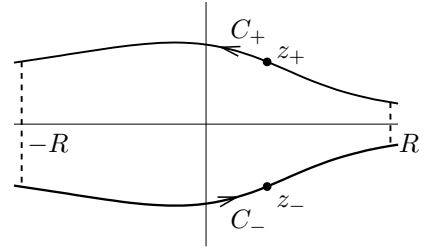
になる。 $z = z_{\pm}$  を通る最急降下曲線上では  $r^2$  の係数は負の実数であるから  $e^{i(2\theta_{\pm} \pm \phi)} = 1$ , つまり

$$\theta_{\pm} = \mp \frac{\phi}{2}, \quad \pi \mp \frac{\phi}{2}$$

どちらを採用するかは積分の方向で決まる。最急降下曲線

$$\operatorname{Im} f(z) = -2xy + 2qy - \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{y}{x} = \text{一定} = \operatorname{Im} f(z_{\pm})$$

を右図に示す。 $C_{\pm}$  を図のようにとり, この2つを破線で結んだ閉曲線は原点を一周するから積分路  $C$  にできる。 $R \rightarrow \infty$  のとき破線からの寄与は 0 になるから



$$H_n(\sqrt{2n+1}q) = \frac{1}{2\pi i} \frac{n!}{(2n+1)^{n/2}} (I_- + I_+)$$

ただし

$$I_{\pm} = \int_{C_{\pm}} dz e^{(2n+1)f(z) - \frac{1}{2} \log z}$$

であり  $\theta_- = \frac{\phi}{2}$ ,  $\theta_+ = \pi - \frac{\phi}{2}$  になる。 $n \rightarrow \infty$  では積分に寄与するのは  $z = z_{\pm}$  近傍であるから

$$\begin{aligned} I_{\pm} &\approx \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dr e^{i\theta_{\pm}} \exp\left((2n+1)f_{\pm} - 2(2n+1)r^2 \cos \phi - \frac{1}{2} \log z_{\pm}\right) \\ &\approx \exp\left(i\theta_{\pm} + (2n+1)f_{\pm} - \frac{1}{2} \log z_{\pm}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dr \exp\left(-2(2n+1)r^2 \cos \phi\right) \\ &= \exp\left(i\theta_{\pm} + (2n+1)f_{\pm} - \frac{1}{2} \log z_{\pm}\right) \sqrt{\frac{\pi}{2(2n+1) \cos \phi}} \end{aligned}$$

ここで

$$i\theta_+ - \frac{1}{2} \log z_+ = i\pi - \frac{i}{2}\phi - \frac{1}{2} \log \left(\frac{1}{2}e^{-i(\phi - \pi/2)}\right) = i\pi + \log \sqrt{2} - \frac{i\pi}{4}$$

$$i\theta_- - \frac{1}{2} \log z_- = \log \sqrt{2} + \frac{i\pi}{4}$$

より

$$\exp\left(i\theta_{\pm} - \frac{1}{2} \log z_{\pm}\right) = \sqrt{2} i e^{\pm i\pi/4}$$



また,  $f_{\pm}$  は

$$f_{\pm} = f(z_{\pm}) = \frac{1}{4} \pm \frac{i}{2} e^{\mp i\phi} \sin \phi + \frac{1}{2} \log 2 \pm \frac{i}{2} \left( \phi - \frac{\pi}{2} \right) = \frac{f_1 \pm i f_2}{2}$$

ただし

$$f_1 = \frac{1}{2} + \log 2 + \sin^2 \phi, \quad f_2 = \sin \phi \cos \phi + \phi - \frac{\pi}{2}$$

になるから

$$I_{\pm} \approx i \exp \left( (n+1/2) f_1 \pm i \left( (n+1/2) f_2 + \frac{\pi}{4} \right) \right) \sqrt{\frac{\pi}{(2n+1) \cos \phi}}$$

したがって

$$\begin{aligned} H_n(\sqrt{2n+1} q) &\approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{n!}{(2n+1)^{(n+1)/2}} \frac{e^{(n+1/2)f_1}}{\sqrt{\cos \phi}} \cos \left( (n+1/2) f_2 + \frac{\pi}{4} \right) \\ &= D_n \frac{e^{(n+1/2) \sin^2 \phi}}{\sqrt{\cos \phi}} \cos \left( (n+1/2) \left( \sin \phi \cos \phi + \phi \right) - \frac{n\pi}{2} \right) \\ &= D_n \frac{e^{(n+1/2)q^2}}{(1-q^2)^{1/4}} \cos \left( \frac{2n+1}{2} \left( q\sqrt{1-q^2} + \sin^{-1} q \right) - \frac{n\pi}{2} \right) \end{aligned}$$

ただし

$$D_n = \sqrt{\frac{2^n (n!)^2}{\pi (n+1/2)^{n+1} e^{-(n+1/2)}}}$$

$n \gg 1$  のとき

$$(n+1) \log \left( n + \frac{1}{2} \right) \approx (n+1) \left( \log n + \frac{1}{2n} \right) \approx (n+1) \log n + \frac{1}{2}$$

であるから  $(n+1/2)^{n+1} \approx n^{n+1} e^{1/2}$  になる。これとスターリングの公式  $n^n e^{-n} \approx n!/\sqrt{2\pi n}$  より

$$D_n \approx \left( \frac{2^{n+1/2} n!}{\sqrt{n\pi}} \right)^{1/2} \quad (18.38)$$

になる。

$q > 1$  の場合, 鞍点と最急降下曲線を図示すると図のようになるから,  $z_-$  を通る最急降下曲線  $C_-$  だけを考えればよい。

$$H_n(\sqrt{2n+1} q) = \frac{1}{2\pi i} \frac{n!}{(2n+1)^{n/2}} \int_{C_-} dz e^{(2n+1)f(z) - \frac{1}{2} \log z}$$

である。 $z = z_-$  近傍では

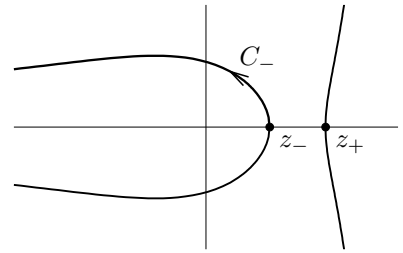
$$f(z) = f(z_-) + \mu r^2 e^{2i\theta}, \quad z - z_- = r e^{i\theta}$$

ただし

$$\mu = \frac{1}{2} f''(z_-) = 4z_+ (z_+ - z_-) = 2 \left( q + \sqrt{q^2 - 1} \right) \sqrt{q^2 - 1}$$

は正の実数であるから  $e^{2i\theta} = -1$  になる。図の積分方向より  $\theta = \pi/2$  である。したがって

$$\begin{aligned} H_n(\sqrt{2n+1} q) &\approx \frac{1}{2\pi i} \frac{n!}{(2n+1)^{n/2}} \exp \left( (2n+1) f(z_-) - \frac{1}{2} \log z_- \right) \int_{-\infty}^{\infty} i dr e^{-(2n+1)\mu r^2} \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{n!}{(2n+1)^{n/2}} e^{(2n+1)f(z_-)} \sqrt{\frac{\pi}{(2n+1)\mu z_-}} \end{aligned}$$



$\mu z_- = \sqrt{q^2 - 1}$  及び

$$f(z_-) = \frac{1}{4} + qz_- - \frac{1}{2} \log z_- = \frac{1}{4} + qz_- + \frac{1}{2} \log z_+ + \log 2$$

より

$$\begin{aligned} H_n(\sqrt{2n+1}q) &\approx \frac{D_n}{2} \frac{(2z_+)^{n+1/2}}{(q^2-1)^{1/4}} \exp((2n+1)qz_-) \\ &= \frac{D_n}{2} \frac{(q + \sqrt{q^2-1})^{n+1/2}}{(q^2-1)^{1/4}} \exp\left(\frac{2n+1}{2} (q^2 - q\sqrt{q^2-1})\right) \end{aligned}$$

になる。ただし,  $D_n$  は (18.38) である。

$\sqrt{2n+1}q$  を  $q$  と置きなおし  $z = q/\sqrt{2n+1}$  とすると

$$H_n(q) = D_n \frac{\exp(q^2/2)}{|1-z^2|^{1/4}} \times \begin{cases} \cos\left(\frac{2n+1}{2} (z\sqrt{1-z^2} + \sin^{-1} z) - \frac{n\pi}{2}\right), & |z| < 1 \\ \frac{1}{2} (z + \sqrt{z^2-1})^{n+1/2} \exp\left(-\frac{2n+1}{2} z\sqrt{z^2-1}\right), & z > 1 \end{cases} \quad (18.39)$$

である。

## 索引

## あ

アハラノフ・ボーム効果	181
$\alpha$ 崩壊	236
鞍点	409
鞍点法	410
位相速度	18
位相のずれ	274
井戸型ポテンシャル (1 次元)	28
井戸型ポテンシャル (3 次元)	151, 297
ウィグナー・エッカルトの定理	142
運動量	1, 4, 17, 383
エアリー関数	39, 459
永年方程式	190, 203
エーレンフェストの定理	6, 246
S 行列	275, 290
エネルギーバンド	38
エルミート演算子	8
エルミート共役	8, 375
エルミート多項式	80, 419, 466
円柱座標	411
オイラー・ラグランジュ方程式	356
オルソヘリウム	323

## か

ガイガー・ヌッタルの法則	238
階段関数	399
回転	136
可換	5
角運動量	98
角運動量の合成	127
確率の流れ	3, 56, 107, 175
確率保存	2
下降演算子	102
重ね合わせの原理	2
仮想状態	296
加法定理 (球面調和関数)	429
ガモフの透過因子	235
完全系	9, 32, 84, 93, 378
完備性	378

ガンマ関数	430
幾何学的位相	264
規格化	3
規格直交性	9
軌道角運動量	147
逆 (演算子の)	11
キャンベル・ハウスドルフの公式	91, 246
球ノイマン関数	435
球ハンケル関数	435
球ベッセル関数	152, 435, 457
球面調和関数	106, 426
球面テンソル演算子	141
共鳴状態	280, 292
行列表現	110, 379
極座標	410
局所密度近似	339
曲線座標	413
クープマンの定理	336
クーロン・ゲージ	359
クーロン散乱	303, 319
クーロン相互作用	320, 338
クーロンポテンシャル	153, 210, 303
クライン・ゴルドン方程式	356
クラマースの関係式	151, 154
クラマースの縮退	396
グリーン関数	21, 74, 89, 269, 439
クレブシュ・ゴルダン係数	130
クロニヒ・ペニーの模型	37
群速度	20
計量テンソル	414
ゲージ変換	174
ケットベクトル	374
光学定理	269
交換関係	1, 5
交換子	1
交換積分	323
合流型超幾何関数	444
コーシーの定理	405
コーシー・リーマンの微分方程式	404

コヒーレント状態	89, 257	スレーター行列式	330
固有関数	8	正準量子化	175, 355
固有値	8, 376	生成演算子	83, 177, 344, 352
混合状態	121	正則関数	404
<b>さ</b>		ゼーマン効果	123, 187, 212
最急降下曲線	409	接続条件	27
散乱振幅	268	摂動ハミルトニアン	190
散乱半径	283, 295	零点エネルギー	28, 80, 85
$g$ 因子	144, 172	遷移確率	247, 248
磁荷	185	漸近級数	201, 457
時間順序積	242	相互作用描像	127, 244
時間反転	391	<b>た</b>	
磁気共鳴	125	第二量子化	349, 357
自己無撞着	336	WKB 近似	227, 285
磁束量子	179	断熱因子	249
射影演算子	120, 205	断熱近似	261
射影定理	143	断面積	267
周期的境界条件	259	置換演算子	326
周期律	332	超幾何関数	448
縮小行列要素	142	調和振動子 (1 次元)	79
縮退	8, 26, 99, 139, 148, 154, 163	調和振動子 (2 次元)	95
シュタルク効果	213	調和振動子 (3 次元)	163
シュミットの方法	9	直接積分	323
主量子数	153	直交性	9, 93, 420, 424
シュレーディンガー方程式	2, 15	ディ・ガンマ関数	434
シュレーディンガー描像	16, 244	定常状態	15
シュワルツの不等式	14	ディラックの表記法	7, 111
準古典近似	227, 285	ディラック描像	127, 244
純粋状態	121	デルタ関数	398
昇降演算子	102	透過率	57
上昇演算子	102	同時固有関数	99
状態密度	259	トンネル効果	60, 215, 235
消滅演算子	83, 344, 352	<b>な</b>	
数値計算	50, 170, 202, 211, 311	ヌメロフ法	51
スカラー演算子	138	ノイマン関数	442
スピノール	116	ノード	30, 46, 149, 233
スピン	113	<b>は</b>	
スピン 1 重項	132	ハートリー・フォック・スレーター方程式	339
スピン 1 粒子	139, 361	ハートリー・フォック方程式	335, 350
スピン・軌道相互作用	167, 187, 211		
スピン 3 重項	132		

ハイゼンベルグ描像	16, 244	分散	20
ハイゼンベルグ方程式	245	分散式	300
パウリ行列	117	平均場近似	334
パウリの排他原理	314, 329	平面波	18
波束	20, 71, 86	ベータ関数	432
パッシェン・バック効果	189	ベクトル演算子	139
パデ近似	202	ベッセル関数	442, 464
波動関数	2, 385	ヘビサイド関数	399
場の量子化	349, 355	ベリー位相	264
パラヘリウム	323	ヘリシティ	361
パリティ	44, 84, 107, 149	ベルの不等式	134
汎関数	417	ヘルマン・ファインマンの定理	198, 214
汎関数微分	417	ヘルムホルツ方程式	435
半減期	237	偏極	317
反交換関係	344	変形ベッセル関数	465
反射率	57	変分法	221, 321, 334
反線形演算子	389	放物線座標	156, 216, 303, 412
反ユニタリ演算子	390	ボーア磁子	123, 144
微細構造	168, 212	ボーア・ゾンマーフェルトの量子化条件	232
微細構造定数	153	ボーズ・アインシュタイン凝縮	332
微分断面積	250, 267	母関数	419, 423, 450
ビリアル定理	17, 151, 164, 199	ボゴリューボフ変換	196
ファインマン図形	370	ボソン	314
ファインマンの公式	273	保存則	5
フーリエ変換	401	ボルン近似	70, 249, 271
フェルミエネルギー	332	<b>ま</b>	
フェルミオン	314	マンデルスタム・タムの不等式	22
フェルミガス	333	密度行列演算子	121
フェルミの黄金律	248	ミニマル結合	172, 365
フェルミ波数	333	メラーの公式	84
不確定性関係	13, 20, 85, 87, 103, 108, 173	モースポテンシャル	41
不確定性関係 (時間とエネルギー)	22, 252	モットの公式	319
複素共役演算子	391	モノポール	185
節	30, 46, 149, 233	<b>や</b>	
部分波	274	有効距離	295
部分波振幅	275	湯川ポテンシャル	273, 338
部分波展開	274	ユニタリ演算子	11
ブラベクトル	374	ヨスト関数	289
ブライト・ウィグナーの公式	282, 292	<b>ら</b>	
プラズマ	338, 351	ラーモア歳差運動	125
ブリルアン・ウィグナーの摂動論	199		
ブロッホの定理	37		

ラグランジュの未定乗数法	224, 334, 415
ラゲール (陪) 多項式	181, 450
ラザフォードの散乱公式	304
ランダウ準位	177
ランデの $g$ 因子	144, 189
留数	406
留数定理	406
ルジャンドル陪関数	106, 421
ルジャンドル多項式	106, 421
ルンゲ・ベクトル	160, 166
レイリー・シュレーディンガーの摂動論	190
レビ・チビタの記号	397
レビンソンの定理	282, 301
連続的固有値	381
連続の方程式	3, 56, 175
ロンスキャン	26, 289

---

**わ**

和則	342
----	-----