

応用量子物性講義ノート

Yuto Masuda and Haruki Aoki

更新日 November 24, 2024



Abstract

物理情報工学科 2024 年度秋学期前半「応用量子物性」(担当: 安藤和也先生) の学生による自作講義ノートである。2 年生秋学期後半「量子力学入門」、3 年生春学期前半「量子力学」を履修済みであることが望ましい。また、2 年生秋学期「分布系の数理」を履修していると、散乱理論で用いた Green 関数の扱いや Helmholtz 方程式, Legendre 陪多項式の扱いを知っていると途中の数学的手続きを理解することができる。

Chapter1 は近似法として変分法と摂動法を学習する。厳密に解くことのできないハミルトニアンに近似を行い、固有状態及び固有エネルギーを求める手法を説明する。

Chapter2 は散乱理論である。散乱は物体の微視的構造を探る非常に有効な方法である。

Chapter3 では Dirac 方程式を基礎方程式とする相対論的量子論を学ぶ。特殊相対論を簡単に解説したあと、量子論が Lorentz 共変性をもつように修正する。

♠のついた部分は授業では扱っていない内容である。



Contents

1	近似法	4
1.1	変分法	4
1.1.1	基本原理	4
1.1.2	(変分法の例題) ヘリウム原子	8
1.1.3	変分法の誤差の評価	9
1.1.4	練習問題	10
1.2	摂動 I(定常摂動)	12
1.2.1	準備	12
1.2.2	1 次摂動	13
1.2.3	(1 次摂動の例題) ヘリウム原子	14
1.2.4	2 次摂動	14
1.2.5	(2 次摂動の例題) 量子閉じ込め Stark 効果	15
1.2.6	(2 次摂動の例題) Mott 絶縁体	16
1.2.7	縮退がある場合の摂動論	17
1.2.8	(定常摂動の例題) 物質中の電子	18
1.2.9	練習問題	21
1.3	摂動 II(非定常摂動)	22
1.3.1	相互作用表示	24
1.3.2	(相互作用表示の例題) Rabi 振動	26
1.3.3	非定常摂動の近似解	28
1.3.4	(非定常摂動の近似解の例題) 一定の摂動	29
1.3.5	(非定常摂動の近似解の例題) 調和摂動	31
1.4	電磁場中の電子	32
1.4.1	大域的 Gauge 変換	33
1.4.2	局所的 Gauge 変換	33
1.4.3	電磁場中の電子の摂動論	34
1.4.4	Landau 準位 ♠	36
2	散乱理論	38
2.1	立体角	38
2.2	散乱断面積	39
2.3	古典力学における散乱	39
2.4	量子力学における散乱	41
2.4.1	散乱問題の境界条件	41
2.4.2	散乱振幅と微分断面積の関係	41
2.4.3	散乱振幅の表式	43
2.5	Born 近似	47
2.6	Born 近似の評価	50
2.7	部分波展開の数学的準備 ♠	52
2.7.1	Strum-Liouville 演算子の Hermite 性	52
2.7.2	Legendre 多項式	53
2.7.3	Legendre 陪多項式	54
2.7.4	Bessel 関数	56
2.7.5	Helmholtz 方程式	58
2.8	部分波展開	61

2.8.1	散乱の条件	61
2.8.2	部分波展開の計算	62
2.8.3	散乱断面積と全断面積	63
2.9	位相シフト	63
2.10	練習問題	67
3	相対論的量子論	72
3.1	特殊相対論	72
3.2	量子力学の修正	78
3.3	角運動量の保存	84
3.4	スピン	86
3.5	電磁場中の電子	87
3.6	スピン軌道相互作用♠	90
3.7	スピノル♠	92
3.8	第3章のまとめ	92
A	参考文献	93
B	導いた種々の関係式	94

Contents



Chapter 1

近似法

1.1 変分法

$$\hat{H} |k\rangle = E_k |k\rangle \quad (1.1.1)$$

変分法 (variational principle) とはハミルトニアン \hat{H} の基底エネルギー E_0 の近似法である¹。変分法は式 (1.1.1) において \hat{H} の一般の固有値を求めることが困難であるとき、基底エネルギーのみを求めるにときに用いられる。量子系において、基底エネルギーは系の特徴の 1 つであるため、それが分かることだけでも、十分な議論となる場合があるのだ。

1.1.1 基本原理

変分法は、

1. 試行関数 $|\psi\rangle$ をたくさん用意し、
2. それぞれのエネルギー $E(\psi)$ を計算し、
3. その中で最小の $E(\psi)$ を E_0 の近似解とする

近似法である。

¹ 近似法には摂動法と変分法がある。摂動法はハミルトニアンが厳密に解ける項 \hat{H}^0 と摂動項 $\hat{\delta}$ を用いて、 $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{\delta}$ と表され、摂動項が小さいときのみ有効である。これに対し、変分法はどんなときでも有効である。



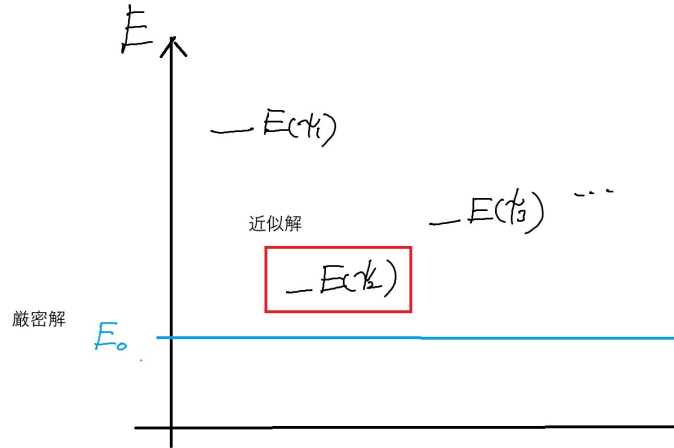


図 1.1: 変分法

ここでは、変分法の基本原理を説明する。

変分法の基本原理

任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対して $|\psi\rangle$ でのエネルギー関数 $E(\psi)$ について、

$$E(\psi) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (1.1.2)$$

なる不等式が成り立つ。ただし E_0 は \hat{H} の固有エネルギーの中で最低のものである。

Proof. 任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ を Hilbert 空間の基底 $|k\rangle$ を用いて、

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |k\rangle \quad (1.1.3)$$

と展開する。左から $\langle k'|$ を作用させると

$$\langle k' | \psi \rangle = \sum_k c_k \langle k' | k \rangle = \sum_k c_k \delta_{k',k} = c_{k'} \quad (1.1.4)$$

を得る。式 (1.1.4) は任意の k に対して成り立つので式 (1.1.3) は以下のように変形できる。

$$|\psi\rangle = \sum_k \langle k | \psi \rangle |k\rangle \quad (1.1.5)$$

$$= \sum_k |k\rangle \langle k | \psi \rangle \quad (1.1.6)$$

式 (1.1.6) を用いて式 (1.1.2) の分子を以下のように変形する。

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{H} \sum_k |k\rangle \langle k | \psi \rangle \quad (1.1.7)$$

$$= \sum_k \langle \psi | \hat{H} | k \rangle \langle k | \psi \rangle \quad (1.1.8)$$

$$= \sum_k E_k \langle \psi | k \rangle \langle k | \psi \rangle \quad (1.1.9)$$

$$= \sum_k E_k |\langle k | \psi \rangle|^2 \quad (1.1.10)$$

また,

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_k |\langle k | \psi \rangle|^2 \quad (1.1.11)$$

であるから,

$$E(\psi) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (1.1.12)$$

$$= \frac{\sum_k E_k |\langle k | \psi \rangle|^2}{\sum_k |\langle k | \psi \rangle|^2} \quad (1.1.13)$$

$$\geq \frac{\sum_k E_0 |\langle k | \psi \rangle|^2}{\sum_k |\langle k | \psi \rangle|^2} = E_0 \quad (1.1.14)$$

を得る. □

つまり, あらゆる状態ベクトル $|\psi\rangle$ のエネルギーは基底エネルギー E_0 以上である.

例題 1.1

ポテンシャル $V(x) = \lambda x^4$ 中に粒子がある系を考える. この系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \lambda x^4 \quad (1.1.15)$$

である. 予想される基底状態が満たすべき条件は

- $x = 0$ で存在確率が最大
- $|x| \rightarrow \infty$ で存在確率が 0
- 節がない^a

である. この条件と変分法を用いて, エネルギーの近似値を求めよ.

^a節があると微係数が大きい点が存在し, これは運動エネルギーを大きくしてしまう.

試行関数として $\psi(x, \alpha) = e^{-\alpha x^2/2}$, $\alpha > 0$ として, エネルギー関数を計算する. 見通しをよくするために,

$$I_0 := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx \quad (1.1.16)$$

$$I_1 := \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx \quad (1.1.17)$$

$$I_2 := \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx \quad (1.1.18)$$

とすると,

$$E(\alpha) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{H} \psi \, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx} \quad (1.1.19)$$

$$= \frac{\frac{\hbar^2}{2m} \alpha \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} \, dx - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} \, dx + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} \, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} \, dx} \quad (1.1.20)$$

$$= \frac{\frac{\hbar^2}{2m} \alpha I_0 - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} I_1 + \lambda I_2}{I_0} \quad (1.1.21)$$

である. I_1 は,

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d}{dx} \left(-\frac{e^{-\alpha x^2}}{2\alpha} \right) dx \quad (1.1.22)$$

$$= -\frac{1}{2\alpha} \left(\left[x e^{-\alpha x^2} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} \, dx \right) \quad (1.1.23)$$

$$= \frac{1}{2\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} \, dx \quad (1.1.24)$$

$$= \frac{1}{2\alpha} I_0 \quad (1.1.25)$$

と計算できる. I_2 は,

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^3 \frac{d}{dx} \left(-\frac{e^{-\alpha x^2}}{2\alpha} \right) dx \quad (1.1.26)$$

$$= -\frac{1}{2\alpha} \left(\left[x^3 e^{-\alpha x^2} \right]_{-\infty}^{\infty} - 3 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} \, dx \right) \quad (1.1.27)$$

$$= \frac{3}{2\alpha} I_1 \quad (1.1.28)$$

$$= \frac{3}{4\alpha^2} I_0 \quad (1.1.29)$$

であるから, 式 (1.1.21) は,

$$E(\alpha) = \frac{\frac{\hbar^2}{2m} \alpha I_0 - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{1}{2\alpha} I_0 + \lambda \frac{3}{4\alpha} I_0}{I_0} \quad (1.1.30)$$

$$= \frac{\hbar^2 \alpha}{4m} + \frac{3\lambda}{4\alpha^2} \quad (1.1.31)$$

となる. 第1項は運動エネルギーを, 第2項はポテンシャルエネルギーを, それぞれ表している^a. 式 (1.1.21) の最小値が基底エネルギー E_0 の近似解である. よって, $\frac{d}{d\alpha} E(\alpha_0) = 0$ となる α_0 を式 (1.1.21) に代入することで近似解,

$$E(\alpha_0) = \frac{3}{8} \left(\frac{6\hbar^4 \lambda}{m^2} \right)^{1/3} \quad (1.1.32)$$

を得る.

^aポテンシャルエネルギーの項は α が大きくなるほど小さくなる. これは, 波動関数が狭まり $x=0$ での存在確率が大きくなるためである. 一方, 運動エネルギーの項は α が大きくなるほど大きくなる. これは, 不確定性関係 $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ より, 運動量のばらつきが大きくなるためである.

1.1.2 (変分法の例題) ヘリウム原子

本節では、変分法の威力を確認するために、ヘリウム原子の基底エネルギーを考える。ヘリウム原子において、 $\frac{m}{M} \rightarrow 0$ であり、原子核が動かない (原子核の運動エネルギーが無視できる) とする。これを Born-Oppenheimer 近似という。ヘリウム原子は電荷 $2e$ の原子核と電荷 $-e$ の電子を 2 つもつので、ハミルトニアンは、

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad (1.1.33)$$

である。第 1 項から第 4 項は水素陽原子のハミルトニアン \hat{H}^0 であり厳密に解くことが出来ることを利用して、第 5 項を無視して考えたときと、試行関数を定めて変分法を用いたときを比較する。なお、実験によりヘリウム原子の基底エネルギーは -78.6 eV と求まっている。

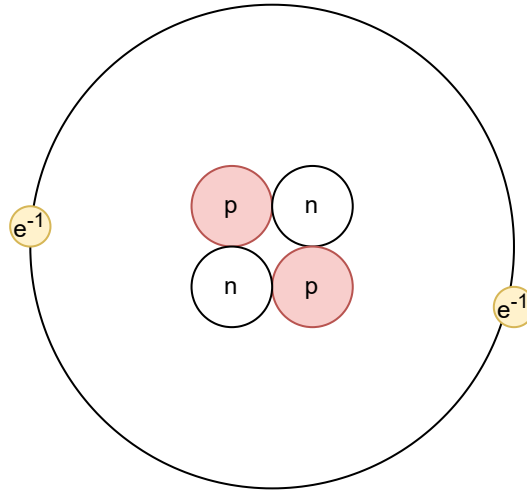


図 1.2: ヘリウム原子の構造

例題 1.2: ヘリウム原子の基底エネルギー (荒い近似)

計算を行うと、ヘリウムの原子番号を Z として \hat{H}^0 の基底波動関数,

$$\psi = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \exp\left(-Z \frac{r_1 + r_2}{a_0}\right) \quad (1.1.34)$$

と \hat{H}^0 の基底エネルギー,

$$E = -8 \text{ Ry} \approx -108.8 \text{ eV} \quad (1.1.35)$$

が求まる^{abc}.

$$^a a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 5.29 \times 10^{-11} \text{ m: Bohr 半径}$$

$$^b Z = 2$$

$$^c \text{Ry} = \frac{\hbar^2}{2m\omega^2} \approx 13.6 \text{ eV: Rydberg 定数}$$

例題 1.3: ヘリウム原子の基底エネルギー (変分法)

例題 1.2 の結果とヘリウム原子の基底エネルギーの測定結果は -78.6 eV と大きく異なっているため、相互作用の項を取り入れた近似を考える。式 (1.1.34) を試行関数 $\psi(Z)$ とする。 $\psi(Z)$ を用いてエネルギーを計算する。

$$E(Z) = \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{\int \psi^* \psi d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2} \quad (1.1.36)$$

$$= -2 \left(4Z - Z^2 - \frac{5}{8}Z \right) \text{ Ry} \quad (1.1.37)$$

となる。式 (1.1.37) が最小となるような Z を Z_0 とすると $Z_0 = 27/16$ であったので、

$$E(Z) \geq E(Z_0) = -77.5 \text{ eV} \quad (1.1.38)$$

となった。式 (1.1.38) と式 (1.1.35) を比べると、荒い近似の方が真の基底エネルギー -78.6 eV に近い値が得られた^{a,b}。

^a $Z_0 < 2$ は遮蔽効果により有効電荷が $2e$ より小さくなったことを意味する。

^b 積分の計算は David J. Griffith, *Introduction to Quantum Mechanics*, pp. 333-334 にある。

1.1.3 変分法の誤差の評価

真の基底状態 $|E_0\rangle$ に第 1 励起状態 $|E_1\rangle$ を 10% 含んだ試行関数 $|\psi\rangle = |E_0\rangle + \frac{1}{10}|E_1\rangle$ を使ってエネルギーを計算する。

$$E(\psi) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (1.1.39)$$

$$= \frac{\langle E_0 | \hat{H} | E_0 \rangle + \frac{1}{100} \langle E_1 | \hat{H} | E_1 \rangle}{1 + \frac{1}{100}} \quad (1.1.40)$$

$$= \frac{E_0 + 0.01E_1}{1.01} \quad (1.1.41)$$

$$\approx 0.99E_0 + 0.01E_1 \quad (1.1.42)$$

試行関数で 10% 含まれていた誤差がエネルギーでは 1% に収まっている。

例題 1.4

無限井戸型ポテンシャル $[-a, a]$ を考える。この問題を厳密に解けば n 番目のエネルギー準位は、

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{2a} \right)^2 \quad (1.1.43)$$

と計算できるが、ここでは変分法を用いて近似解を求める。予想される試行関数の条件は

- $\psi(a) = \psi(-a) = 0$
- 節がない

である。よって今回は

$$\psi(x) = a^2 - x^2 \quad (1.1.44)$$

を採用する。この試行関数を用いたときの基底エネルギーを見積もれ。

$$E(\psi) = \frac{\int_{-a}^a (a^2 - x^2) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) (a^2 - x^2) dx}{\int_{-a}^a (a^2 - x^2)^2 dx} \quad (1.1.45)$$

$$= \frac{10}{\pi^2} E_1 \quad (1.1.46)$$

$$\approx 1.01 E_1 \quad (1.1.47)$$

真の基底エネルギー E_1 に近い値が得られた^a.

^aこのくらいの計算が期末試験に出たことがある.

1.1.4 練習問題

練習問題 1.1: Griffith Example 8.1

1次元調和振動子 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ の基底エネルギーを見積もれ. ただし, 試行関数を $\psi(x) = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4} e^{-bx^2}$ とせよ. 試行関数は規格化されている.

$$E(b) = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) e^{-bx^2} dx \quad (1.1.48)$$

$$= \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m \omega^2}{8b} \quad (1.1.49)$$

次に $E(b)$ の最小値を求める.

$$\frac{d}{db} E(b_0) = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m \omega^2}{8b_0^2} = 0 \Rightarrow b_0 = \frac{m \omega}{2\hbar} \quad (1.1.50)$$

$$E(b_0) = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (1.1.51)$$

偶然にも試行関数は基底エネルギーの固有関数となっていたため, $E(b_0)$ は基底エネルギーと一致した.

練習問題 1.2: Griffith Example 8.2

デルタ関数型ポテンシャル $\hat{H} = \frac{d^2}{dx^2} - \alpha \delta(x)$ の基底エネルギーを見積もれ. ただし, 試行関数を $\psi(x) = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4} e^{-bx^2}$ とせよ. 試行関数は規格化されている.

$$\langle V \rangle = -\alpha \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} \delta(x) dx = -\alpha \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/2} \quad (1.1.52)$$

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} \quad (1.1.53)$$

$$E(b) = \frac{\hbar^2 b}{2m} - \alpha \left(\frac{2b}{\pi} \right)^{1/2} \quad (1.1.54)$$

$E(b)$ の最小値を求める.

$$\frac{d}{db} E(b_0) = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b_0}} = 0 \Rightarrow b_0 = \frac{2m^2 \alpha^2}{\pi \hbar^4} \quad (1.1.55)$$

よって, 基底エネルギーの近似解として

$$E(b_0) = -\frac{m\alpha^2}{\pi \hbar^2} \quad (1.1.56)$$

を得る^a.

^a厳密解を求めることができ, $\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}$, $E_0 = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$ である.

練習問題 1.3: Griffith Example 8.3

$[0, a]$ の無限井戸型ポテンシャルの基底エネルギーを見積もれ. ただし, 試行関数を

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax & \text{if } 0 \leq x \leq a/2 \\ A(a-x) & \text{if } a/2 \leq x \leq a \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.1.57)$$

とせよ.

規格化条件より, $A = \frac{2}{a} \sqrt{\frac{3}{a}}$ を得る. 波動関数の導関数は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \begin{cases} Ax & \text{if } 0 \leq x \leq a/2 \\ A(a-x) & \text{if } a/2 \leq x \leq a \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.1.58)$$

である. よって, 2 次の微係数として

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = A\delta(x) - 2A\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) + A\delta(x-a) \quad (1.1.59)$$

を得る. したがって近似解は

$$E = \int_0^a \psi(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi(x) dx \quad (1.1.60)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a A \left[\delta(x) - \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) + \delta(x-a) \right] \psi(x) dx \quad (1.1.61)$$

$$= \frac{12\hbar^2}{2ma^2} \quad (1.1.62)$$

である^a.

^a厳密解は $E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$

練習問題 1.4: Griffith Problem 8.4 (a)

試行関数 $|\psi\rangle$ が基底状態と直交するとき、つまり $\langle\psi|0\rangle$ のとき、

$$E(\psi) \geq E_1 \quad (1.1.63)$$

であることを示せ^a。ただし E_1 は第 1 励起状態のエネルギーである。 $|\psi\rangle$ は規格化されている。

^a例えば偶関数のポテンシャルに対し奇関数の試行関数で計算すれば第 1 励起状態のエネルギーの近似解が得られる。

Proof.

$$E(\psi) = \sum_{k=0} E_k |\langle\psi|k\rangle|^2 \quad (1.1.64)$$

$$= E_0 |\langle\psi|0\rangle|^2 + \sum_{k=1} |\langle\psi|k\rangle|^2 \quad (1.1.65)$$

$$= 0 + \sum_{k=1} |\langle\psi|k\rangle|^2 \quad (1.1.66)$$

$$\geq E_1 \sum_{k=1} |\langle\psi|k\rangle|^2 = E_1 \quad (1.1.67)$$

□

1.2 摂動 I(定常摂動)

ハミルトニアンが時間に依存しない定常摂動 (time-independent perturbation) を扱う。

1.2.1 準備

摂動が無い状態の Schödinger 方程式、

$$\hat{H}^{(0)} |n^{(0)}\rangle = E_0^{(0)} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.1)$$

が厳密に解くことができるとする。ここに摂動 \hat{V} を加わったこと²を考えると、摂動ハミルトニアンを \hat{V} として、

$$(\hat{H}^{(0)} + \hat{V}) |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (1.2.2)$$

とかける。摂動の大きさを表すパラメータを λ として式 (1.2.2) を

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{V} \quad (1.2.3)$$

とする。 $\lambda \rightarrow 0$ ならば明らかに、

$$\begin{cases} |n\rangle \rightarrow |n^{(0)}\rangle \\ E_n \rightarrow E_n^{(0)} \end{cases} \quad (1.2.4)$$

である。ここで、式 (1.2.3) の解が、

$$\begin{cases} |n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \\ E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \end{cases} \quad (1.2.5)$$

と書けたとする。 $|n^{(1)}\rangle$, $|n^{(2)}\rangle$, $E_n^{(1)}$, $E_n^{(2)}$ を考える。規格化条件として

$$\langle n^{(0)} | n \rangle = 1 \quad (1.2.6)$$

²摂動の例: 光, 電場

を定める．式 (1.2.5) を式 (1.2.3) に代入して， λ の次数ごとにまとめると，

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) |n^{(0)}\rangle = 0 \quad (1.2.7)$$

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) |n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle = \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.8)$$

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) |n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle = \hat{V} |n^{(1)}\rangle \quad (1.2.9)$$

$$(1.2.10)$$

を得る．

1.2.2 1 次摂動

まずエネルギー補正 $E_n^{(1)}$ について考える．式 (1.2.8) の両辺に $\langle n^{(1)}|$ を作用すると，

$$\langle n^{(1)}| (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) |n^{(1)}\rangle + \langle n^{(1)}| E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle = \langle n^{(1)}| \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.11)$$

$$\Leftrightarrow E_n^{(0)} \langle n^{(1)}| n^{(1)}\rangle - \langle n^{(1)}| \hat{H}^{(0)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} \langle n^{(1)}| n^{(0)}\rangle = \langle n^{(1)}| \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.12)$$

$$\Leftrightarrow 0 + E_n^{(1)} \langle n^{(0)}| n^{(0)}\rangle = \langle n^{(0)}| \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.13)$$

$$\Leftrightarrow E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}| \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.14)$$

を得る．よって，1 次摂動によるエネルギー補正は

1 次摂動によるエネルギー補正

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}| \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.15)$$

である．

次に固有ベクトル $|n^{(1)}\rangle$ の補正を求める．式 (1.2.8) の両辺に $\langle m^{(0)}|$ ，ただし $m \neq n$ を作用すると，

$$\langle m^{(0)}| (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) |n^{(1)}\rangle + \langle m^{(0)}| E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle = \langle m^{(0)}| \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.16)$$

$$E_n^{(0)} \langle m^{(0)}| n^{(1)}\rangle - E_m^{(0)} \langle m^{(0)}| n^{(1)}\rangle + 0 = \langle m^{(0)}| \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.17)$$

$$\langle m^{(0)}| n^{(1)}\rangle = \langle m^{(0)}| \hat{V} |n^{(0)}\rangle (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) \quad (1.2.18)$$

$$(1.2.19)$$

ただし，エネルギー縮退は無く，

$$E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \neq 0 \quad (1.2.20)$$

とする．ところで，Hermite 演算子である $\hat{H}^{(0)}$ の固有ベクトルに関する完全性より，

$$I = \sum_m |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}| \quad (1.2.21)$$

であるから，式 (1.2.21) の両辺に右から $|n^{(1)}\rangle$ をかけて，

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_m |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}| n^{(1)}\rangle \quad (1.2.22)$$

を得る．式 (1.2.22) を式 (1.2.18) に代入すると，



1 次摂動による固有ベクトル補正

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m^{(0)}\rangle \quad (1.2.23)$$

を得る.

1.2.3 (1 次摂動の例題) ヘリウム原子

再びヘリウム原子のエネルギーを考えてみよう. 今度は, 変分法ではなく, 1 次の摂動を用いる.

例題 1.5: ヘリウム原子の基底エネルギー (1 次摂動)

水素陽原子のハミルトニアンを \hat{H}_0 とし, 電子-電子相互作用を水素陽原子に対する摂動 \hat{V} と解釈してヘリウム原子の基底エネルギーを計算せよ. ただし,

$$\hat{H} := \hat{H}^{(0)} + \hat{V} \quad (1.2.24)$$

$$\hat{H}^{(0)} := -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \quad (1.2.25)$$

$$\hat{V} := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad (1.2.26)$$

$$(1.2.27)$$

である.

$\hat{H}^{(0)}$ の基底状態の固有関数は,

$$\psi^{(0)} = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \exp \left[-\frac{Z(r_1 + r_2)}{a_0} \right] \quad (1.2.28)$$

である. よって, \hat{V} による 1 次のエネルギー補正は以下のように計算できる.

$$E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V} | \psi^{(0)} \rangle \quad (1.2.29)$$

$$= \int \psi^{(0)*} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \psi^{(0)} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (1.2.30)$$

$$= \frac{5}{4} Z \text{ Ry} \quad (1.2.31)$$

よって, 基底エネルギー

$$E_0 = E^{(0)} + E^{(1)} \quad (1.2.32)$$

$$= -8 \text{ Ry} + \frac{5}{4} \times 2 \text{ Ry} \quad (1.2.33)$$

$$= -74.8 \text{ eV} \quad (1.2.34)$$

を得る^a.

^a測定値は -78.6 eV

1.2.4 2 次摂動

式 (1.2.9) の両辺に $\langle n^{(0)} |$ を作用すると,

$$\langle n^{(0)} | (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) | n^{(2)} \rangle + \langle n^{(0)} | E_n^{(1)} | n^{(1)} \rangle + \langle n^{(0)} | E_n^{(2)} | n^{(0)} \rangle = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle \quad (1.2.35)$$

$$E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle - E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle + E_n^{(1)} \langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle + E_n^{(2)} \langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle \quad (1.2.36)$$

$$E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle \quad (1.2.37)$$

となる．式 (1.2.23) を式 (1.2.37) に代入すると，

$$E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle \quad (1.2.38)$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle n^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle \quad (1.2.39)$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.2.40)$$

と計算できて，2 次摂動によるエネルギー補正を得る．

2 次摂動によるエネルギー補正

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.2.41)$$

また，基底状態においては $E_0^{(0)} < E_m^{(0)}$ である．常に式 (1.2.41) の和の部分の分母は負であるため，基底状態のエネルギーは 2 次摂動により必ず下がる．

1.2.5 (2 次摂動の例題) 量子閉じ込め Stark 効果

ここでは，2 次摂動を用いた例題として Stark 効果³⁴を考えよう．

例題 1.6: 量子閉じ込め Stark 効果

定常状態のハミルトニアン $\hat{H}^{(0)}$ に，電場による摂動 \hat{V} を加えたハミルトニアン \hat{H} を考える．ただし，定常状態のポテンシャルは，長さ L の無限井戸型ポテンシャル \hat{U} である． \hat{U} , \hat{V} , $\hat{H}^{(0)}$, \hat{H} は，

$$U(x) := \begin{cases} 0 & |x| \leq L/2 \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.2.42)$$

$$V(x) := -e\phi(x) = eEx \quad (e > 0) \quad (1.2.43)$$

$$\hat{H}^{(0)} := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{U}(x) \quad (1.2.44)$$

$$\hat{H} := \hat{H}^{(0)} + \hat{V}(x) \quad (1.2.45)$$

$$(1.2.46)$$

と定義される．また， $\hat{H}^{(0)}$ の固有エネルギーとそれに属する固有関数は，

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 n^2, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.2.47)$$

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & n : \text{odd} \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & n : \text{even} \end{cases} \quad (1.2.48)$$

のようになっている．このとき，2 次の摂動まで用いて \hat{V} の影響によるエネルギー補正を計算せよ．

³Johanes Stark(1874-1957)

⁴電場によるエネルギー準位の変化を Stark 効果という．

1 次摂動によるエネルギー補正は奇関数の積分になるため 0 である.^a.
2 次摂動によるエネルギー補正は,

$$E_1^{(2)} = \sum_{m \neq 1} \frac{|V_{m1}|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.2.49)$$

$$V_{m1} = eE \int \phi_m^* x \phi_1 dx \quad (1.2.50)$$

$$\begin{cases} = 0 & n : \text{odd} \\ \neq 0 & n : \text{even} \end{cases} \quad (1.2.51)$$

$$E_1^{(2)} = \frac{|V_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{|V_{41}|^2}{E_1^{(0)} - E_4^{(0)}} + \dots \quad (1.2.52)$$

$$\approx \frac{|V_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad (1.2.53)$$

$$= -\frac{256}{234\pi^4} \frac{(eEL)^2}{E_1^{(0)}} \quad (1.2.54)$$

と計算できて、2 次の摂動を考えるとエネルギーは低下することがわかる。

^aもし 0 でないならば、電場をかける向きによりエネルギーが変わることを意味するが、これは対称性より不合理である。

1.2.6 (2 次摂動の例題)Mott 絶縁体

例題 1.7: Mott insulator

Coulomb 力が強い 4 つのサイトに電子を 4 つ入れる。↑↑↑↑と↑↓↑↓のどちらが基底状態としてふさわしいだろうか。サイト間の電子の飛び移りを摂動として扱う。ここで重要なのは、基底状態のエネルギーは 2 次摂動により必ず下がるということである。↑↑↑↑に摂動を加えたとしても Pauli の排他律により電子の飛び移りは起こらない。摂動によってエネルギーは変化しない。しかし、↑↓↑↓は電子が反平行であるため電子のサイト間での飛び移りが許される。これは、2 次摂動によるエネルギーの低下を引き起こす。よって、↑↓↑↓の方が基底状態としてふさわしい^{abcd}。基底状態の様子を次の図に示す。

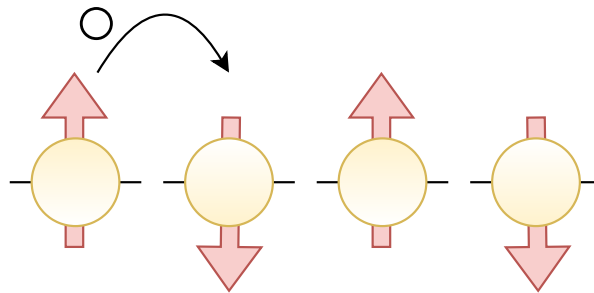


図 1.3: 反平行のとき

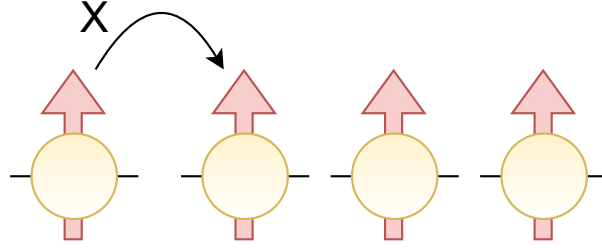


図 1.4: 平行のとき

^aNevill Francis Mott (1905-1996)

^bMott insulator は反強磁絶縁体である.

^cバンドギャップが大きくギャップ内にフェルミ準位があるバンド絶縁体と異なり, 運動エネルギーが小さく Coulomb 力が大きいため電子が移動できない絶縁体である.

^dRNiO₃, TaS₂, Sr₂IrO₄ など

1.2.7 縮退がある場合の摂動論

1 次摂動のエネルギー補正を求めるときに縮退が無いという条件である式 (1.2.20) を用いて,

$$\left(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}\right) |n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle = \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.55)$$

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.2.56)$$

と計算していた. では, エネルギー縮退が存在するとき, どのように計算すればよいだろうか. $\hat{H}^{(0)}$ の固有値 $E_n^{(0)}$ に, 異なる 2 つの固有ベクトル $|n_a^{(0)}\rangle, |n_b^{(0)}\rangle$ が属すると状況を考える. すなわち,

$$\hat{H}^{(0)} |n_a^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n_a^{(0)}\rangle \quad (1.2.57)$$

$$\hat{H}^{(0)} |n_b^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n_b^{(0)}\rangle \quad (1.2.58)$$

が成立するときである. ただし, Hermite 演算子の固有ベクトルは規格直交化できるので, $\langle n_i^{(0)} | n_j^{(0)} \rangle = \delta_{ij}$ とする. $|n_a^{(0)}\rangle$ と $|n_b^{(0)}\rangle$ は同じ固有値をもつため, これらの線形結合,

$$|n^{(0)}\rangle = \alpha |n_a^{(0)}\rangle + \beta |n_b^{(0)}\rangle \quad (1.2.59)$$

も, 固有値 $E_n^{(0)}$ に属する固有ベクトルである.

まず, 式 (1.2.55) の両辺に左から $\langle n_a^{(0)} |$ を作用すると,

$$\langle n_a^{(0)} | \left(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}\right) | n^{(1)} \rangle + \langle n_a^{(0)} | E_n^{(1)} | n^{(0)} \rangle = \langle n_a^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (1.2.60)$$

$$\Leftrightarrow E_n^{(0)} \langle n_a^{(0)} | n^{(1)} \rangle - E_n^{(0)} \langle n_a^{(0)} | n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \langle n_a^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \langle n_a^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (1.2.61)$$

$$\Leftrightarrow \alpha E_n^{(1)} = \langle n_a^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (1.2.62)$$

となる. $V_{ij} := \langle n_i^{(0)} | \hat{V} | n_j^{(0)} \rangle$ とすれば式 (1.2.62) は,

$$\alpha E_n^{(1)} = \alpha V_{aa} + \beta V_{ab} \quad (1.2.63)$$

と書ける．同様に式 (1.2.55) の両辺に左から $\langle n_b^{(0)} |$ を作用させたときも考えれば,

$$\begin{cases} \alpha V_{aa} + \beta V_{ab} = \alpha E_n^{(1)} \\ \alpha V_{ba} + \beta V_{bb} = \beta E_n^{(1)} \end{cases} \quad (1.2.64)$$

を得る．これは行列を用いて,

$$\begin{pmatrix} V_{aa} - E_n^{(1)} & V_{ab} \\ V_{ba} & V_{bb} - E_n^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.65)$$

のように書き直される．行列の部分が Hermite 行列になっているので，式 (1.2.65) は永年方程式である．永年方程式が非自明な解を持つ条件は,

$$\begin{vmatrix} V_{aa} - E_n^{(1)} & V_{ab} \\ V_{ba} & V_{bb} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (1.2.66)$$

である．よって 1 次の摂動エネルギーとして,

縮退がある場合の摂動論による 1 次エネルギー補正

$$E_n^{(1)} = \frac{1}{2} \left[(V_{aa} + V_{bb}) \pm \sqrt{(V_{aa} - V_{bb})^2 + 4|V_{ab}|^2} \right] \quad (1.2.67)$$

を得る．式 (1.2.67) をみると，定常状態では 1 種類であったエネルギーが，縮退が解けて 2 つに分かれている．

例題 1.8

$V_{aa} = V_{bb} = 0$, $V_{ab} = V_{ba} = V$ の場合式 (1.2.65) は,

$$\begin{pmatrix} -E_n^{(1)} & V \\ V & -E_n^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.68)$$

となる．よって 1 次エネルギー補正は,

$$E_n^{(1)} = \begin{cases} +V & \alpha = 1, \beta = 1 \\ -V & \alpha = 1, \beta = -1 \end{cases} \quad (1.2.69)$$

と求まる．これは摂動を加える前に縮退していた 2 つの状態 $|n^{(0)}\rangle = |n_a^{(0)}\rangle \pm |n_b^{(0)}\rangle$ の縮退が解け，エネルギー $E_n^{(0)} + V$ をもつ状態 $|n_a^{(0)}\rangle + |n_b^{(0)}\rangle$ とエネルギー $E_n^{(0)} - V$ をもつ状態 $|n_a^{(0)}\rangle - |n_b^{(0)}\rangle$ に分かれたことを意味している．

1.2.8 (定常摂動の例題) 物質中の電子

例題 1.9: バンドギャップ

長さ L の無限井戸型ポテンシャル中の 1 次元自由電子の波動関数 $\phi_k(x)$ とエネルギー固有値 $\varepsilon_0(k)$ は,

$$\phi_k(x) = \langle x | k \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \quad (1.2.70)$$

$$\varepsilon_0(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(k = \frac{2\pi}{L} N, N \in \mathbb{N} \right) \quad (1.2.71)$$

である。無限井戸型ポテンシャルに $V(x+a) = V(x)$ を満たすポテンシャル $V(x)$ が加わったときを考える。 $V(x)$ は、

$$V(x) = 2V \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \quad (1.2.72)$$

$$= V(e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x}) \quad (1.2.73)$$

$$= V(e^{igx} + e^{-igx}) \quad (1.2.74)$$

と書けるとする。ただし g は、

$$g := \frac{2\pi}{a} \quad (1.2.75)$$

である。

以下の問いに答えよ。

1. 結晶中の周期ポテンシャルによりバンドギャップができることを2次までの摂動論を用いて説明せよ。
2. 縮退のある場合の摂動論を用いてバンドギャップエネルギーを見積もれ。また、Brillouin ゾーン端近傍で近似した波動関数を表せ。
3. バンドギャップと Bragg の回折条件との関係について議論せよ。

1. バンドギャップの成り立ち

2 次の摂動によるエネルギー補正は、

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.2.76)$$

と書ける。式 (1.2.76) に対して離散 Fourier 変換を行うことで、式 (1.2.76) の状態とエネルギーのラベリングを n から k に変更する。 $V_{k'k} := \langle k' | \hat{V} | k \rangle$ とすると、

$$E(k) = \varepsilon^{(0)}(k) + V_{kk} + \sum_{k' \neq k} \frac{|V_{k'k}|^2}{\varepsilon^{(0)}(k) - \varepsilon^{(0)}(k')} \quad (1.2.77)$$

と書ける。摂動によるエネルギーは、

$$V_{k'k} = \frac{V}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \phi_{k'}^*(x) \hat{V}(x) \phi_k(x) dx \quad (1.2.78)$$

$$= V \left[\frac{\sin\left(\frac{q_+ L}{2}\right)}{\frac{q_+ L}{2}} + \frac{\sin\left(\frac{q_- L}{2}\right)}{\frac{q_- L}{2}} \right] \quad (1.2.79)$$

と計算される。ただし q_+ と q_- を、

$$q_+ := -k' + g + k \quad (1.2.80)$$

$$q_- := -k' - g + k \quad (1.2.81)$$

と定義した。摂動によるエネルギーは sinc 関数の形になっているので、 $L \rightarrow \infty$ では規格化されたデルタ関数 $\tilde{\delta}(x_1, x_2)$ と解釈できる。よって、

$$V_{k'k} = V \left(\tilde{\delta}(q_+, 0) + \tilde{\delta}(q_-, 0) \right) = \begin{cases} V & q_+ = 0 \text{ or } q_- = 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.2.82)$$

である。なお、 $q_+ = q_- = 0$ となるのは $g = 0$ であるが、 g の定義である式 (1.2.75) よりありえない。エネルギーは、

$$E(k) = \varepsilon^{(0)}(k) + \frac{V^2}{\varepsilon(k) - \varepsilon(k+g)} + \frac{V^2}{\varepsilon(k) - \varepsilon(k-g)} \quad (1.2.83)$$

となる。式 (1.2.83) の振る舞いを第 1 Brillouin ゾーンの内側と外側で確認する。ポテンシャルの対称性から右側のみを計算すればよい。

(a) 第 1 Brillouin ゾーン内側 ($k = k_1 < \frac{\pi}{a}$) の振る舞い

$\varepsilon(k)$ は放物線なので、

$$\begin{cases} \varepsilon(k_1) \ll \varepsilon^{(0)}(k_1 + g) \\ \varepsilon(k_1) < \varepsilon^{(0)}(k_1 - g) \end{cases} \quad (1.2.84)$$

が成り立つ。よって、 $E(k) < \varepsilon^{(0)}(k)$ が成り立ち、摂動が加わった後のエネルギーは加わる前のエネルギーより小さくなる。

(b) 第 1 Brillouin ゾーン外側 ($k = k_2 > \frac{\pi}{a}$) の振る舞い

第 1 Brillouin ゾーン内側のときと同様に考えると、

$$\begin{cases} \varepsilon(k_2) \ll \varepsilon^{(0)}(k_2 + g) \\ \varepsilon(k_2) > \varepsilon^{(0)}(k_2 - g) \end{cases} \quad (1.2.85)$$

を得る。よって、 $E(k) > \varepsilon^{(0)}(k)$ が成り立ち、摂動が加わった後のエネルギーは加わる前のエネルギーより大きくなる。

以上の議論により、結晶中の周期ポテンシャルによりバンドギャップが形成されることがわかった。

2. バンドギャップエネルギーの見積もりと波動関数

式 (1.2.83) に $k = \pm \frac{\pi}{a}$ を代入すると発散してしまう。以下では 2 重縮退があるときの摂動を考えバンドギャップエネルギー ΔE を求める。 k_+ と k_- を、

$$k_+ := \frac{\pi}{a} \quad (1.2.86)$$

$$k_- := -\frac{\pi}{a} \quad (1.2.87)$$

と定義する。 $V_{k_+k_+} = V_{k_-k_-} = 0$, $V_{k_+k_-} = V_{k_-k_+} = V$ なので、式 (1.2.67) より、1 次摂動によるエネルギーは、

$$E_n^{(1)} = \frac{1}{2} \left[(V_{k_+k_+} + V_{k_-k_-} \pm \sqrt{(V_{k_+k_+} - V_{k_-k_-})^2 + 4|V_{k_+k_-}|^2}) \right] \quad (1.2.88)$$

$$= \pm V \quad (1.2.89)$$

である。2 つのエネルギー補正の差がバンドギャップエネルギー ΔE と解釈できるので、

$$\Delta E = 2V \quad (1.2.90)$$

を得る。

式 (1.2.59) の α と β は式 (1.2.65) の解であるから、 $\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} = 1$ なる規格化条件を課すと、

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} & E_n^{(1)} = V \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} & E_n^{(1)} = -V \end{cases} \quad (1.2.91)$$

となる．よって， $\Delta E = \pm V$ に対応する波動関数は Brillouin ゾーン端で，

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{\pi/a} + \phi_{-\pi/a}) \propto \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) \quad (1.2.92)$$

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{\pi/a} - \phi_{-\pi/a}) \propto \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \quad (1.2.93)$$

であり，定在波が生じる．

3. バンドギャップと Bragg 反射

バンドギャップの起源は Bragg 反射である．Bragg 反射は，

$$2a \sin \theta = \lambda \quad (1.2.94)$$

を満たす．今回の場合は 1 次元なので $\theta = \pi/2$ であり，波数は $k = 2\pi/\lambda$ である．よって，Bragg 条件は

$$k = \frac{\pi}{a} \quad (1.2.95)$$

と書き換えられる．つまり，式 (1.2.95) を満たす波数のみが反射し定在波をつくる． $V(x) = 2V \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$ であったから，式 (1.2.92) で表される波動関数はポテンシャルが最小となる波数で確率振幅が最大となる．式 (1.2.93) で表される波動関数はポテンシャルが最大となる波数で確率振幅が最大となる．よって，エネルギーは ψ_+ が ψ_- より低くなる．これによりバンドギャップが生じる．

1.2.9 練習問題

練習問題 1.5: Griffith Example 7.1

[0, a] 無限井戸型ポテンシャルに次の摂動が加わったときの 1 次摂動によるエネルギーを求めよ．

$$V_1(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.2.96)$$

$$V_2(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq a/2 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.2.97)$$

$V_1(x)$ の場合

$$E_n^1(x) = \langle \psi_n^{(0)} | V_0 | \psi_n^{(0)} \rangle = V_0 \quad (1.2.98)$$

$V_2(x)$ の場合

$$E_n^1 = \frac{2V_0}{a} \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = V_0/2 \quad (1.2.99)$$

練習問題 1.6: Griffith Example 7.3

2 次元調和振動子 $\hat{H}^0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2)$ の第 1 励起状態は縮退している．

$$\psi_a^0 = \psi_0(x)\psi_1(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m\omega}{\hbar} y \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2 + y^2)\right) \quad (1.2.100)$$

$$\psi_a^0 = \psi_1(x)\psi_0(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m\omega}{\hbar} x \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2 + y^2)\right) \quad (1.2.101)$$

ここに摂動 $\hat{H}' = \varepsilon m\omega^2 xy$ を加える.

$$\begin{pmatrix} \omega_{aa} - E_n^1 & \omega_{ab} \\ \omega_{ba} & \omega_{bb} - E_n^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.102)$$

を用いて摂動を加えた後の固有関数及び摂動による補正エネルギーを求めよ.

$$W_{aa} = \int \int \psi_a^0 \hat{H}' \psi_a^0 dx dy \quad (1.2.103)$$

$$= \varepsilon m\omega^2 \int |\psi_0(x)|^2 x dx \int |\psi_1(x)|^2 y dy \quad (1.2.104)$$

$$= 0 = W_{bb} \quad (1.2.105)$$

$$W_{ab} = \left[\int \psi_0(x) \varepsilon m\omega^2 x \psi_1(x) dx \right]^2 \quad (1.2.106)$$

$$= \varepsilon \frac{\hbar\omega}{2} \left[\int \psi_0(x) (\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \psi_1(x) dx \right]^2 \quad (1.2.107)$$

$$= \varepsilon \frac{\hbar\omega}{2} \left[\int \psi_0(x) \psi_0(x) dx \right]^2 \quad (1.2.108)$$

$$= \varepsilon \frac{\hbar\omega}{2} \quad (1.2.109)$$

よって, 摂動による補正エネルギーは $E_1 = \pm \varepsilon \frac{\hbar\omega}{2}$, 固有関数は

$$\psi_{\pm}^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_b^0 \pm \psi_a^0) \quad (1.2.110)$$

である.

1.3 摂動 II(非定常摂動)

摂動項が時間に依存する場合の摂動 (time-dependent perturbation)⁵を扱う. 本節では, 量子系の時間発展が状態ベクトルの時間変化で描像する Schrödinger 描像で記述する. 時間に依存する Schrödinger 方程式,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1.3.1)$$

を考える. なお, $|\psi(t)\rangle$ は $\hat{H}^{(0)}$ の固有ベクトルを用いて,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (1.3.2)$$

と展開できたとする. $\hat{H}^{(0)}$ の固有ベクトルが完全系を成すので, 状態ベクトルが時間変化した空間は $\{|n\rangle \mid n = 0, 1, \dots\}$ が張る空間の部分空間となることに注意する. 以下の議論では特に断らない限り, $\hat{H}^{(0)}$ の固有ベクトルは Schmidt の直交化法などを用いて, 正規直交化してあるものとする. \hat{H} の性質ごとに $|\psi(t)\rangle$ の具体的な形を議論する.

1. $\hat{H} = \hat{H}^{(0)}$ の場合⁶

⁵電磁波による摂動など.

⁶ $\hat{H}^{(0)}$ は厳密に解けるハミルトニアン.

量子状態 $|\psi(t)\rangle$ の時間発展は時間発展演算子⁷⁸ $\exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)$ を用いて,

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{\hat{H}^{(0)}t}{\hbar}\right) |\psi(0)\rangle \quad (1.3.3)$$

$$= \sum_n c_n(0) \exp\left(-i\frac{\hat{H}^{(0)}t}{\hbar}\right) |n\rangle \quad (1.3.4)$$

$$= \sum_n c_n(0) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) |n\rangle \quad (1.3.5)$$

のように表すことができる.

時間発展演算子を用いることなく計算することもできる. 式 (1.3.2) を式 (1.3.1) に代入すると, \hat{H} が時間に依存しないことに注意すれば,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left(\sum_n c_n(t) |n\rangle \right) = \hat{H} \left(\sum_n c_n(t) |n\rangle \right) \quad (1.3.6)$$

$$\Leftrightarrow \sum_n \left(i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) |n\rangle \right) = \sum_n (c_n(t) E_n |n\rangle) \quad (1.3.7)$$

$$\Leftrightarrow \forall n \ i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) |n\rangle = c_n(t) E_n |n\rangle \quad (1.3.8)$$

$$\Leftrightarrow \forall n \ c_n(t) = \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) \quad (1.3.9)$$

を用いれば,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) |n\rangle \quad (1.3.10)$$

を得る.

2. $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{V}(t)$ の場合

このときは $|\psi(t)\rangle$ を簡単な形で書き下すことが出来ないから, 便宜的に,

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) |n\rangle \quad (1.3.11)$$

と展開しておく. なお, $c_n(t)$ が定数のときの $|\psi(t)\rangle$ との整合性をとるために $\exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)$ をかけてある. 原理的には $c_n(t)$ が求まれば量子系の時間発展の様子がわかる.

さて, いずれの場合でも, 量子系の性質を調べるには $c_n(t)$ の具体的な形がわかればよいことを発見した. 本節では, まず Schrödinger 表示から相互作用表示に書き換え, $c_n(t)$ を厳密に知ることが困難であることを知り, $c_n(t)$ の近似解を導く. 式 (1.3.1) と式 (1.3.11) をまとめて, Schrödinger 表示の非定常摂動基本方程式と呼ぶ.

⁷ $\Delta t \ll 1$ として,

$$|\psi(\Delta t)\rangle = \exp\left[-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t\right] |\psi(0)\rangle \approx \left(\hat{I} - i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t\right) |\psi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle + \Delta t \left(\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle\right) \Big|_{t=0}$$

より微分の形で書けることから, 確かに時間発展すると私は解釈する.

⁸ 演算子が交換するときは数字と同じ扱いをしても良いと考える. 一般に演算子は,

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = \exp\left\{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \dots\right\} \neq e^{\hat{A} + \hat{B}}$$

なる BCH 式を満たす.



1.3.1 相互作用表示

Schrödinger 表示の非定常摂動基本方程式は、式 (1.3.12) と式 (1.3.11) であり、

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}^{(0)} + \hat{V}(t)) |\psi(t)\rangle \\ |\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) |n\rangle \end{cases} \quad (1.3.12)$$

と書けるのであった。相互作用表示 (interaction picture) を式 (1.3.13) のような $|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle_I$ の変換を行って得られる状態ベクトルと定義する。

相互作用表示

$$|\psi(t)\rangle_I := \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) |\psi(t)\rangle \quad (1.3.13)$$

式 (1.3.13) を用いて、式 (1.3.12) と等価な基本方程式である、相互作用表示の非定常摂動基本方程式を導く。まず、式 (1.3.12) の第 2 式を用いて、

$$|\psi(t)\rangle_I = \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \sum_n c_n(t) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) |n\rangle \quad (1.3.14)$$

$$= \sum_n c_n(t) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) |n\rangle \quad (1.3.15)$$

$$= \sum_n c_n(t) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \exp\left(i\frac{E_n}{\hbar}t\right) |n\rangle \quad (1.3.16)$$

$$= \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (1.3.17)$$

と計算できる。

次に、相互作用表示の時間微分を計算してみる。相互作用表示での摂動項 \hat{V}_I を、

$$\hat{V}_I := \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \hat{V}(t) \exp\left(-i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \quad (1.3.18)$$

とする。計算の途中で、式 (1.3.12) の第 1 式を用いると、

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \frac{d}{dt} \left[\exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \right] |\psi(t)\rangle + \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \quad (1.3.19)$$

$$= i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar} \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) |\psi(t)\rangle + \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \frac{1}{i\hbar} (\hat{H}^{(0)} + \hat{V}(t)) |\psi(t)\rangle \quad (1.3.20)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}^{(0)}, \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \right] |\psi(t)\rangle + \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \hat{V}(t) |\psi(t)\rangle \quad (1.3.21)$$

$$= \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \hat{V}(t) |\psi(t)\rangle \quad (1.3.22)$$

$$= \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \hat{V}(t) \exp\left(-i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) |\psi(t)\rangle \quad (1.3.23)$$

$$= \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \hat{V}(t) \exp\left(-i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) |\psi(t)\rangle_I \quad (1.3.24)$$

$$= \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \quad (1.3.25)$$

を得る。式 (1.3.25) と式 (1.3.18) は Schrödinger 表示の非定常摂動基本方程式と等価な方程式であるから、これを**朝永・Schwinger 方程式**と呼ぶ。^{9 10 11 12}

朝永・Schwinger 方程式

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \\ \hat{V}_I(t) = \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \hat{V}(t) \exp\left(-i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \end{cases} \quad (1.3.26)$$

さて、定常状態の Schrödinger 方程式が、

$$\forall m \quad \hat{H}^{(0)} |m\rangle = E_m |m\rangle \quad (1.3.27)$$

を満たすとする。式 (1.3.26) の第 1 式に左から $\langle m|$ を演算する。途中、式 (1.3.17) を用いて $|\psi(t)\rangle_I$ を展開し、式 (1.3.26) の第 2 式を用いて $\hat{V}_I(t)$ を $\hat{V}(t)$ に戻す。また、 $\hat{V}_I(t)$ は $c_n(t)$ に作用しないものとする、

$$\left\langle m \left| i\hbar \frac{d}{dt} \right| \psi(t) \right\rangle_I = \left\langle m \left| \hat{V}_I(t) \right| \psi(t) \right\rangle_I \quad (1.3.28)$$

$$\Leftrightarrow \langle m | i\hbar \sum_n c_n(t) |n\rangle = \sum_n c_n(t) \left\langle m \left| \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \hat{V}(t) \exp\left(-i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \right| n \right\rangle \quad (1.3.29)$$

$$\Leftrightarrow i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) \langle m | n \rangle = \sum_n c_n(t) \exp\left(-i\frac{E_n - E_m}{\hbar}t\right) \langle m | \hat{V}(t) | n \rangle \quad (1.3.30)$$

$$\Leftrightarrow i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = \sum_n c_n(t) \exp\left(i\frac{E_m - E_n}{\hbar}t\right) \langle m | \hat{V}(t) | n \rangle \quad (1.3.31)$$

となる。 ω_{mn} と V_{mn} を、

$$\omega_{mn} := \frac{E_m - E_n}{\hbar} \quad (1.3.32)$$

$$V_{mn}(t) := \langle m | \hat{V}(t) | n \rangle \quad (1.3.33)$$

と定義する。非定常摂動量子系の時間発展は以下の式を満たす。

非定常摂動量子系の時間発展

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = \sum_n c_n(t) V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} \quad (1.3.34)$$

これは $c_n(t)$ の連立方程式になっていて、一般に解くことは困難である。例えば $\hat{V}(t)$ が有限次元であり、行列表示ができたとすると式 (1.3.34) は、

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11}(t) & V_{12}(t)e^{i\omega_{12}t} & \cdots & V_{1n}(t)e^{i\omega_{1n}t} \\ (V_{12}(t)e^{i\omega_{12}t})^* & V_{22}(t) & \cdots & V_{2n}(t)e^{i\omega_{2n}t} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (V_{1n}(t)e^{i\omega_{1n}t})^* & (V_{2n}(t)e^{i\omega_{2n}t})^* & \cdots & V_{nn}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \quad (1.3.35)$$

となる。途中で、

$$(V_{mn}(t)e^{i\omega_{mn}t})^* = V_{mn}(t)^* (e^{i\omega_{mn}t})^* \quad (1.3.36)$$

⁹Schrödinger 描像は量子状態が時間発展するとみなす。Heisenberg 描像は物理量が時間発展するとみなす。相互作用表示はその中間であるといえる。

¹⁰朝永振一郎 (1906-1979)

¹¹Julian Schwinger(1918-1994)

¹²朝永と Schwinger は 1964 年に Richard Feynmann とともにノーベル賞を受賞。

$$= \langle m | \hat{V}(t) | n \rangle^* \exp \left(-i \frac{E_m - E_n}{\hbar} t \right) \quad (1.3.37)$$

$$= \langle n | \hat{V}(t) | m \rangle \exp \left(i \frac{E_n - E_m}{\hbar} t \right) \quad (1.3.38)$$

$$= (V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t}) \quad (1.3.39)$$

を用いた。式 (1.3.35) の行列の部分も時間に依存することを考えると n が大きくなるときに厳密に解くことは困難である。

1.3.2 (相互作用表示の例題) Rabi 振動

前節の最後に、一般に時間発展する量子系を正確に追跡すること、すなわち、 $c_n(t)$ の厳密解を求めることが困難であると述べた。にもかかわらず、ある特殊な条件下では近似を行うことなく、厳密解を得ることができる。以下の例題 1.10 では、そのような物理現象として **Rabi 振動** (Rabi cycle)^{13 14} を議論する。

例題 1.10: Rabi 振動

厳密に解くことのできる 2 準位系、

$$|1\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.3.40)$$

$$|2\rangle := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.3.41)$$

$$\hat{H}^{(0)} := \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad (1.3.42)$$

を考える。明らかに、 E_1 と E_2 は $\hat{H}^{(0)}$ のエネルギー固有値で、それぞれに属する固有ベクトルは $|1\rangle$ と $|2\rangle$ である。この 2 準位系に、時刻 $t = 0$ から $\hat{V}(t)$ なる摂動を加える。ただし、 $\hat{V}(t)$ は、

$$\hat{V}(t) = \begin{pmatrix} 0 & \gamma e^{i\omega t} \\ \gamma e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \quad (1.3.43)$$

によって与えられる^a。系全体のハミルトニアンを $\hat{H} := \hat{H}^{(0)} + \hat{V}(t)$ とする。系の状態ベクトルを相互作用表示を用いて、

$$|\psi(t)\rangle_I := c_1(t) |1\rangle + c_2(t) |2\rangle \quad (1.3.44)$$

と書いたとき、以下の問いに答えよ。

1. $c_1(t)$ と $c_2(t)$ の時間発展を調べよ。ただし、初期条件は $c_1(0) = 1$, $c_2(0) = 0$ とする。
2. 1. の条件のもとで、 $c_2(t)$ の確率振幅が最大となる ω を求めよ。

^a γ は摂動の強さを表す。

1. $c_1(t)$ と $c_2(t)$ の時間発展

今回の設定での ω_{mn} や V_{mn} を計算すると、

$$\omega_{11} = \omega_{22} = 0 \quad (1.3.45)$$

$$\omega_{21} = -\omega_{12} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \quad (1.3.46)$$

$$V_{11} = V_{22} = 0 \quad (1.3.47)$$

$$V_{21} = V_{12}^* = \gamma e^{-i\omega t} \quad (1.3.48)$$

¹³I.I.Rabi(1898 - 1988)

¹⁴量子状態の振動を Rabi 振動という。

である。非定常摂動の時間発展の式より、

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} c_1(t) = c_1(t) V_{11} e^{i\omega_{11}t} + c_2(t) V_{12} e^{i\omega_{12}t} = c_2(t) \gamma e^{i(\omega + \omega_{12})t} \\ i\hbar \frac{d}{dt} c_2(t) = c_1(t) V_{21} e^{i\omega_{21}t} + c_2(t) V_{22} e^{i\omega_{22}t} = c_1(t) \gamma e^{-i(\omega - \omega_{21})t} \end{cases} \quad (1.3.49)$$

が成り立つ。次に、 $\Delta\omega := \omega - \omega_{21}$ として式 (1.3.49) を解く。2 式目を 1 式目に代入して $c_1(t)$ を消去すると、

$$\frac{d^2}{dt^2} c_2(t) + i\Delta\omega \frac{d}{dt} c_2(t) + \left(\frac{\gamma}{\hbar}\right)^2 c_2 = 0 \quad (1.3.50)$$

2 階の斉次微分方程式の解は $c_2(t) = e^{i\lambda t}$ と書けるので、これを式 (1.3.50) に代入すると、

$$\lambda^2 + \Delta\omega\lambda - \left(\frac{\gamma}{\hbar}\right) = 0 \quad (1.3.51)$$

$$\Rightarrow \lambda = -\frac{\Delta\omega}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\Delta\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\gamma}{\hbar}\right)^2} \quad (1.3.52)$$

を得る。 Ω を、

$$\Omega := \sqrt{\left(\frac{\Delta\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\gamma}{\hbar}\right)^2} \quad (1.3.53)$$

と定義して、これを Rabi 周波数と呼ぶ。 c_2 の一般解は、

$$c_2(t) = \exp\left(-i\frac{\Delta\omega}{2}t\right) (Ae^{i\Omega t} + Be^{-i\Omega t}) \quad (1.3.54)$$

と書ける。式 (1.3.54) を式 (1.3.49) の第 2 式に代入すると、

$$c_1(t) = \frac{\hbar}{\gamma} \exp\left(-i\frac{\Delta\omega}{2}t\right) \left[\frac{\Delta\omega}{2} (Ae^{i\Omega t} + Be^{-i\Omega t}) - \Omega (Ae^{i\Omega t} - Be^{-i\Omega t}) \right] \quad (1.3.55)$$

となる。初期条件を考えると、

$$\begin{cases} A + B = 0 \\ A - B = -\frac{\gamma}{\hbar\Omega} \end{cases} \quad (1.3.56)$$

であるから、

$$B = -A = \frac{\gamma}{2\hbar\Omega} \quad (1.3.57)$$

となる。よって、

$$c_1(t) = \exp\left(-i\frac{\Delta\omega}{2}t\right) \left(\cos \Omega t - i\frac{\Delta\omega}{2\Omega} \sin \Omega t \right) \quad (1.3.58)$$

$$c_2(t) = -i\frac{\gamma}{\hbar\Omega} \exp\left(-i\frac{\Delta\omega}{2}t\right) \sin \Omega t \quad (1.3.59)$$

である。時刻 t で $|1\rangle$, $|2\rangle$ に状態を見出す確率、 $|c_1(t)|^2$, $|c_2(t)|^2$ はそれぞれ、

$$|c_1(t)|^2 = \cos^2 \Omega t + \left(\frac{\Delta\omega}{2}\right)^2 \frac{1}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t \quad (1.3.60)$$

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2}{\hbar^2 \Omega^2} \sin^2 \Omega t \quad (1.3.61)$$

である。簡単な計算により、 $|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1$ となることが容易に確かめられる。

2. $c_2(t)$ の振幅が最大となる ω の値
 振幅の大きさは Ω の定義式 (1.3.53) より,

$$\frac{(\gamma/\hbar)^2}{(\gamma/\hbar)^2 + (\Delta\omega/2)^2} \quad (1.3.62)$$

と表されるので, $\Delta\omega = \omega - \omega_{21} = 0$ のときに最大となる. つまり, 摂動の周波数 ω と 2 準位のエネルギー差に由来する ω_{21} が一致したときに遷移が起こりやすい.

例題 1.10 では, Rabi 振動に関する 2 つの重要な物理量を得たので, 下にまとめる.

Rabi 周波数

$$\Omega = \sqrt{(\Delta\omega/2)^2 + (\gamma/\hbar)^2} \quad (1.3.63)$$

共鳴条件

$$\omega = \omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \quad (1.3.64)$$

1.3.3 非定常摂動の近似解

非定常摂動量子系の時間発展は,

$$\begin{cases} |\psi(t)\rangle_I = \sum_n c_n(t) |n\rangle \\ \forall i \quad \hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = \sum_n V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} c_n(t) \end{cases} \quad (1.3.65)$$

で表されるのであった. 一般に式 (1.3.65) を解くことはできないので, 近似解を得ることを考える. $\hat{V}(t) \rightarrow \lambda \hat{V}(t)$ とし $c_m(t)$ をべき級数展開すると,

$$c_m(t) = c_m^{(0)}(t) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \lambda^2 c_m^{(2)}(t) + \dots \quad (1.3.66)$$

となる. 式 (1.3.66) を式 (1.3.65) の第 2 式に代入すると,

$$\forall m \quad i\hbar \frac{d}{dt} \left(c_m^{(0)}(t) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \lambda^2 c_m^{(2)}(t) + \dots \right) = \sum_n \lambda V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} \left(c_m^{(0)}(t) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \lambda^2 c_m^{(2)}(t) + \dots \right) \quad (1.3.67)$$

となるから,

$$\begin{cases} \lambda^0: \quad \forall m \quad i\hbar \frac{d}{dt} c_m^{(0)}(t) = 0 \\ \lambda^1: \quad \forall m \quad i\hbar \frac{d}{dt} c_m^{(1)}(t) = \sum_n V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} c_n^{(0)}(t) \end{cases} \quad (1.3.68)$$

式 (1.3.68) の λ^0 の項の結果より,

$$\forall m \quad c_m^{(0)}(t) = \text{const.} \quad (1.3.69)$$

である.

$t = t_0$ から摂動 $\hat{V}(t)$ を加え始めたときを考える. $t = t_0$ で系の量子状態が $|i\rangle$ であったとする. このとき,

$$c_m^{(0)}(t_0) = \delta_m^i \quad (1.3.70)$$

である。式 (1.3.69) より、0 次の係数 $c_m(t)$ は時間変化しないので、

$$c_m^{(0)}(t) = \delta_m^i \quad (1.3.71)$$

となる。この系の状態は初期状態 $|i\rangle$ に依ることがわかったので、これからは $c_m(t) \rightarrow c_{m,i}(t)$, $c_m^{(0)}(t) \rightarrow c_{m,i}^{(0)}(t)$, $c_m^{(1)}(t) \rightarrow c_{m,i}^{(1)}(t)$ のように書き替える。式 (1.3.68) の λ^1 の係数より、

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_{m,i}^{(1)}(t) = \sum_n V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} c_{n,i}^{(0)}(t) \quad (1.3.72)$$

$$= V_{m,i}(t) e^{i\omega_{mi}t} \quad (1.3.73)$$

$$\Rightarrow c_{m,i}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{m,i}(t) e^{i\omega_{mi}t} dt \quad (1.3.74)$$

となり、 $c_{m,i}^{(1)}(t)$ が求まった。また、系の量子状態を λ^1 の項までで近似すると、

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_n c_{n,i}(t) |n\rangle \quad (1.3.75)$$

$$\simeq \sum_n \left(c_{n,i}^{(0)}(t) + c_{n,i}^{(1)}(t) \right) |n\rangle \quad (1.3.76)$$

$$= |i\rangle + \sum_n c_{n,i}^{(1)}(t) |n\rangle \quad (1.3.77)$$

$$= |i\rangle + c_{i,i}^{(1)}(t) |i\rangle + \sum_{n \neq i} c_{n,i}^{(1)}(t) |n\rangle \quad (1.3.78)$$

と表される。なお今後のために、 $c_{n,i}^{(1)}$ で $n = i$ と $n \neq i$ に分けた。まとめると、 $|\psi(t_0)\rangle_I = |i\rangle$ の時間発展は以下のように書ける。

$|\psi(t_0)\rangle_I = |i\rangle$ の時間発展

$$\begin{cases} |\psi(t)\rangle_I &= \left(1 + c_{i,i}^{(1)}(t) \right) |i\rangle + \sum_{n \neq i} c_{n,i}^{(1)}(t) |n\rangle \\ c_{n,i}^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{n,i} e^{i\omega_{ni}t} dt \end{cases} \quad (1.3.79)$$

また、始状態 $|i\rangle$ から終状態 $|f\rangle$ ($f \neq i$) への遷移確率は、

$$|\langle f | \psi(t) \rangle_I|^2 = \left| \left(1 + c_{i,i}^{(1)}(t) \right) \langle f | i \rangle + \sum_{n \neq i} c_{n,i}^{(1)}(t) \langle f | n \rangle \right|^2 \quad (1.3.80)$$

$$= \left| c_{f,i}^{(1)}(t) \right|^2 \quad (1.3.81)$$

である。

さて、このようにして得られた $|\psi\rangle_I$ の時間発展について、次節では \hat{V} が一定のときを、次々節では \hat{V} が余弦関数で書けるときを議論する。

1.3.4 (非定常摂動の近似解の例題) 一定の摂動

本節では、摂動の大きさが時間に依存しない場合を考える。摂動の大きさが時間に依存しないことは、定常摂動とは異なる。定常摂動では、量子系に摂動をかけ始めてから十分長い時間が経った状況のみ扱えるが、非定常摂動を考えると、量子系の時間変化を任意の時刻で追跡できる。

さて、時刻 $t = 0$ から一定の摂動 \hat{V} を加え始めたとき考える。 $\hat{V}(t)$ は、

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} 0 & t \leq 0 \\ \hat{V} & t \geq 0 \end{cases} \quad (1.3.82)$$

と書ける。 $V_{fi}(t)$ は,

$$V_{fi}(t) = \langle f | \hat{V}(t) | i \rangle = \begin{cases} 0 & t \leq 0 \\ \langle f | \hat{V} | i \rangle & t \geq 0 \end{cases} \quad (1.3.83)$$

である。 V_{fi} を

$$V_{fi} := \langle f | \hat{V} | i \rangle \quad (1.3.84)$$

定義する。 また、 $t = 0$ で量子状態は $|i\rangle$ であったとする。 時刻 t で状態 $|f\rangle$ である確率を考える。 式 (1.3.79) の第 2 式より,

$$c_{f,i}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{fi} e^{i\omega_{fi}t'} dt' \quad (1.3.85)$$

$$= -\frac{V_{fi}}{\hbar\omega_{fi}} (e^{i\omega_{fi}t} - 1) \quad (1.3.86)$$

$$= -\frac{V_{fi}}{\hbar\omega_{fi}} \exp\left(\frac{i\omega_{fi}}{2}t\right) \left[\exp\left(\frac{i\omega_{fi}}{2}t\right) - \exp\left(-\frac{i\omega_{fi}}{2}t\right) \right] \quad (1.3.87)$$

$$= 2i \frac{V_{fi}}{\hbar\omega_{fi}} \exp\left(\frac{i\omega_{fi}}{2}t\right) \cdot \sin\left(\frac{\omega_{fi}}{2}t\right) \quad (1.3.88)$$

と計算できるから、 $|i\rangle$ から $|f\rangle$ への遷移確率 $|c_{f,i}^{(1)}(t)|^2$ は,

$$|c_{f,i}^{(1)}(t)|^2 = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} \left[\frac{\sin\left(\frac{\omega_{fi}}{2}t\right)}{\left(\frac{\omega_{fi}}{2}\right)} \right]^2 \quad (1.3.89)$$

$$= \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} t^2 \left[\frac{\sin\left(\frac{\omega_{fi}}{2}t\right)}{\left(\frac{\omega_{fi}}{2}t\right)} \right]^2 \quad (1.3.90)$$

である。 式 (1.3.90) において、 t を固定して ω_{fi} が満たすべき物理条件を考える。 まず、 $|c_{f,i}^{(1)}(t)|^2$ が 0 でない、つまり、 $|i\rangle$ から $|f\rangle$ への遷移が起きるのは、 $\sin\left(\frac{\omega_{fi}}{2}t\right)$ が 0 でないときである。 また、 $\left[\frac{\sin\left(\frac{\omega_{fi}}{2}t\right)}{\left(\frac{\omega_{fi}}{2}\right)} \right]^2$ を ω_{fi} の関数とみたとき、 \sin が 1 周期の間のみで有効な値を持つ。 言い換えれば、 $|\omega_{fi}| < \frac{2\pi}{t}$ で有効な値をもつ。 これは、 \sin の 2 周期目の最大値が 1 周期目の最大値の $\left(\frac{2}{3\pi}\right)^2 \simeq 4.4\%$ 程度であること依る。 従って、 t が小さいときはこの範囲が十分広く、 $\omega_{fi} \neq 0$ の状態への遷移が起こるが、 t が大きいときは $\omega_{fi} \simeq 0$ の状態 (\sin の 1 周期目) への遷移しか起きない。 摂動を与えた瞬間に測定を行うことは困難であるという実験上の理由から、 通常は $t \rightarrow \infty$ としておけば良い。 また、規格化されたデルタ関数 $\tilde{\delta}$ を用いると、 sinc 関数の性質から、

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin\left(\frac{\omega_{fi}t}{2}\right)}{\frac{\omega_{fi}t}{2}} \right)^2 = \frac{2\pi}{t} \tilde{\delta}(\omega_{fi}) \quad (1.3.91)$$

を使うと¹⁵,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |c_{f,i}^{(1)}(t)|^2 = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} 2\pi t \delta(\omega_{fi}) \quad (1.3.92)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) t \quad (1.3.93)$$

¹⁵ $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$

が得られる。\$t\$ をあまりにも大きくすると、\$|c_{f,i}^{(1)}(t)|^2 > 1\$ となり、\$|c_{f,i}^{(1)}(t)|^2\$ の時刻 \$t\$ での \$|i\rangle\$ から \$|f\rangle\$ への遷移確率という物理的な意味が失われることに注意しながら、\$t \to \infty\$ の領域での単位時間当たりの \$|i\rangle\$ から \$|f\rangle\$ への遷移確率 \$\omega_{i \to f}\$ は、

$$\omega_{i \to f} = \frac{|c_{f,i}^{(1)}(t)|^2}{t} \quad (1.3.94)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (1.3.95)$$

である。これを **Fermi の黄金律** という¹⁶。

Fermi の黄金律

$$\omega_{i \to f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (1.3.96)$$

例題 1.11: 電子の弾性散乱

弾性散乱では散乱前後で粒子のエネルギーが保存される。電子のエネルギーは

$$E_{\mathbf{k}'} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}'|^2}{2m} \quad (1.3.97)$$

と表される。よって、終状態は多く存在する。始状態 \$i\$ から終状態集合 \$\{f\}\$ への遷移確率を求める。

$$\omega_{i \to \{f\}} = \sum_f \omega_{i \to f} \quad (1.3.98)$$

$$= \sum_f \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (1.3.99)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \overline{\left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2} \sum_f \delta(E_f - E_i) \quad (1.3.100)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \overline{\left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2} \rho(E_f) \quad (1.3.101)$$

\$\overline{\left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2}\$ は散乱体の性質を、状態密度 \$\rho(E_f)\$ は物質の性質を反映している。この関係も Fermi の黄金律という。

1.3.5 (非定常摂動の近似解の例題) 調和摂動

時間に依存する摂動を調和摂動という。以下の摂動を考える¹⁷。

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} 0 & t \leq 0 \\ 2V \cos \omega t & t > 0 \end{cases} \quad (1.3.102)$$

\$2V \cos \omega t = V(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})\$ であるので、

$$c_{f,i}^{(1)}(t) = \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle f | \hat{V} | i \rangle (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) e^{i\omega_{fi} t} dt \quad (1.3.103)$$

$$= -\frac{V_{fi}}{\hbar} \left(\frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} \right) \quad (1.3.104)$$

¹⁶Enrico Fermi(1901-1954)

¹⁷光のイメージ

を得る．ここで $V_{fi} = \langle f | \hat{V} | i \rangle$ とした．

1. $\omega_{fi} - \omega \approx 0$ のとき

式 (1.3.103) の第 2 項は第 1 項より十分大きい．よって、

$$c_{f,i}^{(1)}(t) \approx -\frac{V_{fi}}{\hbar} \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} = -\frac{V_{fi}}{\hbar} e^{i\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t} \frac{\sin \frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t}{\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}} \quad (1.3.105)$$

と近似できる．このとき $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$ の遷移確率は、

$$\left| c_{f,i}^{(1)}(t) \right|^2 = \frac{V_{fi}^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t}{\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2} \right)^2} \quad (1.3.106)$$

$\frac{\sin^2 \frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t}{\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2} \right)^2}$ は $t \rightarrow \infty$ で $2\pi t \delta(\omega_{fi} - \omega) = 2\pi \hbar \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$ と近似できるので単位時間当たりの遷移確率は、

$$\omega_{f \rightarrow i} = \frac{\left| c_{f,i}^{(1)}(t) \right|^2}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (1.3.107)$$

である．これも Fermi の黄金律という． $E_f = E_i + \hbar\omega$ へと遷移することがわかる．

2. $\omega_{fi} + \omega \approx 0$ のとき

式 (1.3.103) の第 1 項が支配的となる．上記の議論を $\omega \rightarrow -\omega$ と置き換えて繰り返すと単位時間当たりの遷移確率として

$$\omega_{i \rightarrow f} = \frac{\left| c_{f,i}^{(1)}(t) \right|^2}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \quad (1.3.108)$$

を得る． $E_f = E_i - \hbar\omega$ へと遷移することがわかる．

1.4 電磁場中の電子

以下ではまず、古典の電磁気学を考えよう．電磁場中の電子の運動方程式は、

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (1.4.1)$$

と書けるのであった．電磁場中の電子のハミルトニアンは、

電磁場中の電子のハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - e\phi \quad (1.4.2)$$

である．ただし \mathbf{A} はベクトルポテンシャルで、

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \quad (1.4.3)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1.4.4)$$

を満たす．本節では $U(1)^{18}$ Gauge 対称性を扱い説明し電磁場の起源を探る．

¹⁸Unitary

1.4.1 大域的 Gauge 変換

まず、大域的 Gauge 変換を議論する。波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ を、

$$\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow e^{i\alpha} \psi(\mathbf{r}, t) =: \psi'(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.5)$$

のように変換することを大域的ゲージ変換という。 $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\alpha} \psi'(\mathbf{r}, t)$ を Schrödinger 方程式に代入すると、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.6)$$

$$\Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\alpha} \psi'(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 e^{-i\alpha} \psi'(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.7)$$

$$\Leftrightarrow e^{-i\alpha} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\mathbf{r}, t) = -e^{-i\alpha} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi'(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.8)$$

$$\Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi'(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.9)$$

となる。つまり、大域的ゲージ変換によって、Schrödinger 方程式は影響を受けない。当然、期待値も、

$$\langle \psi' | \hat{A} | \psi' \rangle = \langle \psi | e^{-i\alpha} \hat{A} e^{i\alpha} | \psi \rangle \quad (1.4.10)$$

$$= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (1.4.11)$$

となるから、物理は大域的ゲージ変換に対して不変であると言える。

1.4.2 局所的 Gauge 変換

次に局所ゲージ変換を議論する。波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ を、

$$\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi'(\mathbf{r}, t) := e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.12)$$

のように変換することを局所ゲージ変換という。局所ゲージ変換では、 α が \mathbf{r} に依存することに注意する。簡単な考察により、局所ゲージ変換に Schrödinger 方程式は影響を受けることが分かる。

例えば波動関数の勾配を計算すると、

$$\nabla \psi'(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \nabla e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} + e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \nabla \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.13)$$

$$= i(\nabla \alpha(\mathbf{r}, t)) e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \psi(\mathbf{r}) + e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \nabla \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.14)$$

$$= e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} (\nabla + i \nabla \alpha(\mathbf{r}, t)) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.15)$$

となり、 $\nabla \psi$ と $\nabla \psi'$ が一致しない。時間発展する Schrödinger 方程式と物理量 \hat{A} の期待値についても同様に計算を行えば、

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' \neq -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi' \\ \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \neq \langle \psi' | \hat{A} | \psi' \rangle \end{cases} \quad (1.4.16)$$

である。したがって、局所ゲージ変換に対して物理は不変ではない。そこで、**局所ゲージ不変性を基本原理とする物理を再構築する。**

今まで用いていた物理の模型の欠点は、積の微分をおこなったときに余分な項が出てきてしまうことであった。そこで、局所ゲージ不変性を満たすように物理の模型を変更するために、微分の定義を変更することを考える。以下では、今まで考えていた模型において空間に対する微分であった勾配を、共変微分 \hat{D} で、時間微分を \hat{D}_t で書き換えることによって、局所ゲージ不変な物理模型を作る。 \hat{D} と \hat{D}_t を、

$$\hat{D} := \nabla + i \frac{e}{\hbar} \hat{A} \quad (1.4.17)$$

$$\hat{D}_t := \frac{\partial}{\partial t} - i \frac{e}{\hbar} \phi \quad (1.4.18)$$

と定義する．また， $\hat{\mathbf{A}}$ と ϕ の局所ゲージ変換則を，

$$\hat{\mathbf{A}} \rightarrow \hat{\mathbf{A}} - \frac{\hbar}{e} \nabla \alpha(\mathbf{r}, t) =: \hat{\mathbf{A}}' \quad (1.4.19)$$

$$\phi \rightarrow \phi + \frac{\hbar}{e} \frac{\partial}{\partial t} \alpha(\mathbf{r}, t) =: \phi' \quad (1.4.20)$$

と定義する． $\hat{\mathbf{D}}$ と \hat{D}_t を局所ゲージ変換すると，

$$\hat{\mathbf{D}} \rightarrow \hat{\mathbf{D}}' = \nabla + i \frac{e}{\hbar} \hat{\mathbf{A}}' = \nabla + i \frac{e}{\hbar} \hat{\mathbf{A}} - i \nabla \alpha(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.21)$$

$$\hat{D}_t \rightarrow \hat{D}_t' = \frac{\partial}{\partial t} - i \frac{e}{\hbar} \phi' = \frac{\partial}{\partial t} - i \frac{e}{\hbar} \phi - i \frac{\partial}{\partial t} \alpha(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.22)$$

となる．このように微分を定義すると，

$$\hat{\mathbf{D}}' \psi'(\mathbf{r}, t) = e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \hat{\mathbf{D}} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.23)$$

$$\hat{D}_t' \psi'(\mathbf{r}, t) = e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \hat{D}_t \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.24)$$

$$\hat{D}_t' \psi'(\mathbf{r}, t) = e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \hat{D}_t \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.25)$$

となることが確かめられる．

式 (1.4.24) や式 (1.4.25) を使いながら，元の Schrödinger 方程式において，勾配を， $\hat{\mathbf{D}}$ で，時間微分を \hat{D}_t で書き換えると，

$$i\hbar \hat{D}_t' \psi' = -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\mathbf{D}}'^2 \psi' \quad (1.4.26)$$

$$\Leftrightarrow e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} i\hbar \hat{D}_t \psi = -e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \frac{\hbar^2}{2m} \hat{\mathbf{D}}^2 \psi \quad (1.4.27)$$

となり，局所ゲージ変換に対して不変な Schrödinger 方程式となった．また，式 (1.4.27) において式 (1.4.17) と式 (1.4.18) を式 (1.4.27) に代入すると，

局所ゲージ変換に対して不変な Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}})^2 - e\phi \right] \psi \quad (1.4.28)$$

を得る．

以上の流れをまとめると，局所ゲージ不変性を要請することにより，ゲージ場 \mathbf{A} が導入された．逆に，電磁場の起源は局所ゲージ不変性であるといえる．

1.4.3 電磁場中の電子の摂動論

式 (1.4.2) より，電磁場中のハミルトニアンは，

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - e\phi \quad (1.4.29)$$

と書けるのであった．今回は $\phi = 0$ とする．電磁場が十分弱いという条件のもと，式 (1.4.29) を量子化すると，

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}})^2 \quad (1.4.30)$$

$$\simeq \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}}^2 + e\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}} + e\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \quad (1.4.31)$$

$$(1.4.32)$$

と近似する．ここで， $\hat{H}^{(0)} := \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$ ，摂動項 $\hat{V}(t) := \frac{e}{2m} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}})$ とする．さらに， $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ となるように \mathbf{A} を決める¹⁹．すると，

$$(\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A})\psi = -i\hbar \nabla \cdot (\hat{\mathbf{A}}\psi) \quad (1.4.33)$$

¹⁹Coulomb ゲージ

$$= i\hbar \left[(\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}}) \psi + \hat{\mathbf{A}} \cdot (\nabla \psi) \right] \quad (1.4.34)$$

$$= (\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \psi \quad (1.4.35)$$

となる．よって，電子と電磁場の相互作用を摂動として加えたハミルトニアン，

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \frac{e}{m} (\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \quad (1.4.36)$$

を得る．

例題 1.12: 直線偏光

ベクトルポテンシャル $\hat{\mathbf{A}}$ が，

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = 2A_0 \mathbf{e}_x \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (1.4.37)$$

であるときを考える．ただし， $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \mathbf{e}_z$ とする．ベクトルポテンシャルと電磁場の関係より，

$$\begin{cases} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \hat{\mathbf{A}}}{\partial t} = E_0 \mathbf{e}_x \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \hat{\mathbf{A}} = \frac{E_0}{c} \mathbf{e}_y \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \\ E_0 = -2\omega A_0 \end{cases} \quad (1.4.38)$$

が成り立っている．摂動項は，

$$\hat{V}(t) = \frac{e}{m} (\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \quad (1.4.39)$$

$$= \frac{2eA_0}{m} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \mathbf{e}_x \cdot \hat{\mathbf{p}} \quad (1.4.40)$$

$$= \frac{eA_0}{m} \left[e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right] \hat{p}_x \quad (1.4.41)$$

$$= \frac{eA_0}{m} (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{p}_x e^{-i\omega t} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{p}_x e^{i\omega t}) \quad (1.4.42)$$

と表せる．光の吸収を考えるときは，第1項 $\frac{eA_0}{m} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{p}_x$ が支配的なのでこの項を \hat{V} とする．単位時間当たりの遷移確率を計算する．式 (1.3.96) より， $\omega_{i \rightarrow f}$ は，

$$\omega_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (1.4.43)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eA_0}{m} \right)^2 \left| \langle f | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{p}_x | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (1.4.44)$$

と表せる．さて， $\left| \langle f | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{p}_x | i \rangle \right|^2$ を電気双極子近似を用いて計算する．電気双極子近似とは，電磁場の変化の項である $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ を1とみなす近似である．これは次のような議論から正当化される．原子の準位間隔は $E_f - E_i \sim 1 \text{ eV}$ である．これと相互作用する電磁場のエネルギーは $\hbar\omega \sim 1 \text{ eV}$ である．これを波長に換算すると，

$$\lambda = \frac{2\pi}{\hbar} = \frac{2\pi c}{\omega} \sim 1000 \text{ nm} \quad (1.4.45)$$

である．これは原子のスケール 1 \AA よりもはるかに大きいので，電子・原子を扱う上では電磁場は空間的に一様だとみなせる．よって，

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \simeq 1 + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \dots \simeq 1 \quad (1.4.46)$$

と近似できる．

電気双極子近似を用いると，

$$\langle f | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{p}_x | i \rangle \simeq \langle f | \hat{p}_x | i \rangle \quad (1.4.47)$$

を得る．さらに

$$[\hat{x}, \hat{H}^{(0)}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x \quad (1.4.48)$$

であるため

$$\langle f | \hat{p}_x | i \rangle = \frac{m}{i\hbar} \langle f | [\hat{x}, \hat{H}^{(0)}] | i \rangle \quad (1.4.49)$$

$$= \frac{m}{i\hbar} (\langle f | \hat{x} \hat{H}^{(0)} | i \rangle - \langle f | \hat{H}^{(0)} \hat{x} | i \rangle) \quad (1.4.50)$$

$$= \frac{m}{i\hbar} (\langle f | \hat{x} E_i | i \rangle - \langle f | E_f \hat{x} | i \rangle) \quad (1.4.51)$$

$$= \frac{m}{i\hbar} (E_i - E_f) \langle f | \hat{x} | i \rangle \quad (1.4.52)$$

を得る．よって，電磁場による単位時間当たりの遷移確率

$$\omega_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar^3} (eA_0)^2 (E_i - E_f)^2 |\langle f | \hat{x} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (1.4.53)$$

を得る．これは $\langle f | \hat{x} | i \rangle \neq 0$ のときのみ $\omega_{i \rightarrow f} \neq 0$ であるという選択則を表している．

1.4.4 Landau 準位♠

一様な磁場中の荷電粒子の運動を考える．磁場は z 軸と平行で大きさは B とする．これを満たすベクトルポテンシャルとして

$$\begin{cases} A_x = 0 \\ A_y = Bx \\ A_z = 0 \end{cases} \quad (1.4.54)$$

を採用する． z に対しては対称なので，以降は xy 平面内での運動を考える．ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} [\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y + eB\hat{x})^2] \quad (1.4.55)$$

$$= \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{(eB)^2}{2m} \left(\hat{x} + \frac{\hat{p}_y}{eB} \right)^2 \quad (1.4.56)$$

である．このハミルトニアンは \hat{y} を含まないので

$$[\hat{H}, \hat{p}_y] = 0 \quad (1.4.57)$$

であることがわかる． y 方向に関しては自由粒子の運動となる．また， p_y の固有値が定まるので，これを $\hbar k_y$ とする．ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{(eB)^2}{2m} \left(\hat{x} + \frac{\hbar k_y}{eB} \right)^2 \quad (1.4.58)$$

と書き換えられ，これは調和振動子型のハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} \quad (1.4.59)$$

と同じ形をしている．よって，エネルギー固有値は

$$E = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.4.60)$$

$$\omega_c = \frac{|e|B}{m} \quad (1.4.61)$$

である．平面内の自由粒子のエネルギーが垂直磁場を加えることで離散化された．これを **Landau 準位** (Landau level) という²⁰．また， ω_c を**サイクロトロン周波数**という．

²⁰ この現象は量子 Hall 効果へとつながる．

次に, x 方向に長さ L_x , y 方向に長さ L_y の周期的境界条件を課す. すると,

$$k_y = \frac{2\pi}{L_y} l \quad (l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (1.4.62)$$

となる. また x 方向の調和振動子は $\frac{\hbar k_y}{eB}$ だけずれている. これが 0 と L_x の間にあるためには

$$0 \leq \frac{\hbar k_y}{eB} = \frac{\hbar}{eB} \frac{2\pi}{L_y} l \leq L_x \quad (1.4.63)$$

でなければならない. これは

$$0 \leq l \leq \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y \quad (1.4.64)$$

と直される. よって, l は $\frac{|e|B}{2\pi\hbar} L_x L_y$ 通りの値を取ることがわかる. したがって, 単位面積当たりの縮退度は

$$\frac{|e|B}{2\pi\hbar} \quad (1.4.65)$$

である.



Chapter 2

散乱理論

2.1 立体角

今後の議論のために**立体角**を導入する．立体角とは1点を中心としたときの広がり具合を表す指標である．2次元の場合，微小円弧と半径の比は角度にのみ依り， r に依らない．つまり，

$$\frac{dl_1}{r_1} = \frac{dl_2}{r_2} = \frac{d\theta}{1} \quad (2.1.1)$$

が成り立つ．この関係から平面角を，

$$d\theta := \frac{dl}{r} \quad (2.1.2)$$

と定義する．これを3次元に拡張する．**図 2.1** として，今考えている状況の模式図を示す．単位球上の面積を考えると，

$$\frac{dS_1}{r_1^2} = \frac{dS_2}{r_2^2} = \frac{dS}{1} \quad (2.1.3)$$

である．ゆえに立体角を，

$$d\Omega = \frac{dS}{r^2} \quad (2.1.4)$$

と定義する．また，これを球座標表示に変換すると，

$$d\Omega = \frac{dS}{r^2} = \frac{r^2 \sin \theta d\theta d\phi}{r^2} = \sin \theta d\theta d\phi \quad (2.1.5)$$

である．

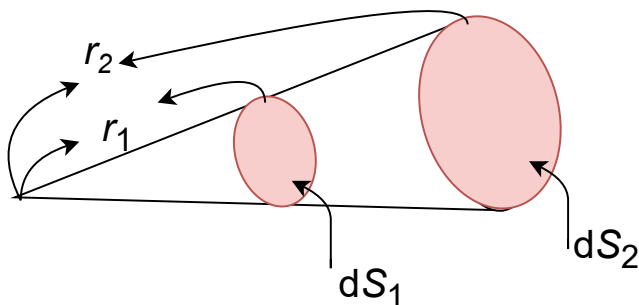


図 2.1: 立体角

2.2 散乱断面積

単位時間単位面積当たり n 個の粒子を z 軸方向に入射する．図 2.2 に散乱の様子を示す．粒子は等方的に散乱される仮定のもと，単位時間内に散乱体からの位置 (r, θ, ϕ) にある面積 dS の検出器に到達する粒子数は，入射した単位時間単位面積当たり粒子数 n と検出器の面積 dS に比例し，距離の 2 乗に反比例するから，

$$dN \propto n \frac{dS}{r^2} = n d\Omega \quad (2.2.1)$$

と書ける．比例係数を微分断面積 $\sigma(\theta, \phi)$ といい，

$$\sigma(\theta, \phi) := \frac{dN}{n d\Omega} \quad (2.2.2)$$

と定義する． $\sigma(\theta, \phi)$ をという．散乱が z 軸まわりに軸対称なとき， ϕ 依存性を取り除き $\sigma(\theta, \phi) = \sigma(\theta)$ とできる．また，全断面積を，

$$\sigma^{\text{tot}} := \int \sigma(\theta) d\Omega = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \sigma(\theta) \sin \theta \quad (2.2.3)$$

$$= 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) \sin \theta d\theta \quad (2.2.4)$$

のように定義する．

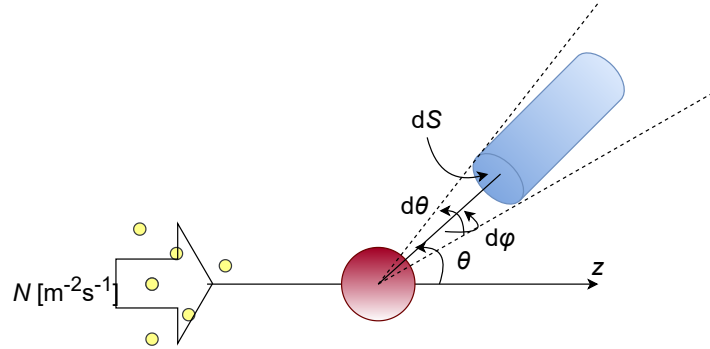


図 2.2: 散乱体と検出器

2.3 古典力学における散乱

z 軸に沿って粒子を単位時間単位面積当たり n 個入射する． z 軸から距離 b (衝突パラメータ)，角度 $d\phi$ ，面積 dS' のスリットを単位時間当たりに通過する粒子数は，

$$n dS' = n d\phi (b d\phi) \quad (2.3.1)$$

を満たす．

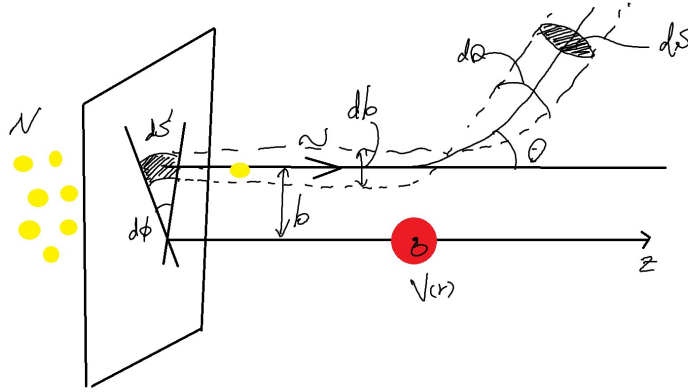


図 2.3: 古典力学における散乱

また，単位時間に検出器に到達する粒子数は微分断面積の定義から，

$$dN = \sigma(\theta) N d\Omega \quad (2.3.2)$$

である．古典力学ではこれらは必ず一致するため，

$$\sigma(\theta) n d\Omega = n d\phi (b db) \quad (2.3.3)$$

を得る．よって，微分断面積は，

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{\sin \theta} b \left| \frac{db}{d\theta} \right| \quad (2.3.4)$$

と表される．

例題 2.1: 剛体球

散乱体を半径 a の剛体球

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r < a \\ 0 & r > a \end{cases} \quad (2.3.5)$$

とする．衝突パラメータを b ，粒子が散乱体の角度 ϕ の位置で散乱し，その散乱角を θ とする．これらのパラメータは，

$$\begin{cases} 2\phi + \theta = \pi \\ b = a \sin \phi \end{cases} \quad (2.3.6)$$

を満たすため，

$$b = a \cos \frac{\theta}{2} \quad (2.3.7)$$

を得る．よって，微分断面積は

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{\sin \theta} b \left| \frac{db}{d\theta} \right| \quad (2.3.8)$$

$$= \frac{a^2}{4} \quad (2.3.9)$$

となる． θ に依存しない等方散乱であることがわかる．また，全断面積は

$$\sigma^{\text{tot}} = \int \sigma(\theta) d\Omega = \pi a^2 \quad (2.3.10)$$

である．剛体球の断面積と一致する．

2.4 量子力学における散乱

本節では量子力学的に散乱を議論する．量子力学では波動関数を用いて散乱体の様子を調べる．まず，散乱帯のポテンシャルを紹介して，散乱振幅 $f(\theta)$ を求めればよいことを知る．次に，散乱振幅と微分断面積の関係を調べる．最後に，具体的に散乱振幅の表式を導く．

2.4.1 散乱問題の境界条件

散乱体が球対称ポテンシャル $V(r)$ を持つとする．Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.4.1)$$

である．ここで， $V(r)$ は $r \rightarrow \infty$ で r^{-1} より早く $V \rightarrow 0$ となるとする．なお， $r \rightarrow \infty$ で r^{-1} より早く 0 に収束することを，十分早く収束するというにすることにする． z 軸方向への進行波である入射波は平面波なので，

$$\psi_{\text{in}} = e^{ikz} \quad (z \rightarrow \infty) \quad (2.4.2)$$

と表せる．また，散乱波は外向きの球面波となるので，

$$\psi_{\text{sc}} \simeq \frac{e^{ikr}}{r} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.4.3)$$

である．散乱問題とは， $r \rightarrow \infty$ で

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{\text{in}} + \psi_{\text{sc}} \quad (2.4.4)$$

$$= e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.4.5)$$

を満たす式 (2.4.1) の定常解を求めることである． $f(\theta)$ を散乱振幅という．上式は重要なので強調しておく．

散乱問題の境界条件

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.4.6)$$

2.4.2 散乱振幅と微分断面積の関係

この問題を解くための準備として確率密度 $\rho := \psi^* \psi$ の時間変化を考える．時間変化する Schrödinger 方程式より，

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (2.4.7)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \quad (2.4.8)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi^* \quad (2.4.9)$$

であることを用いると,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) \quad (2.4.10)$$

$$= \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.4.11)$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi^* \right] \psi + \psi^* \frac{1}{i\hbar} \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi \right] \quad (2.4.12)$$

$$= \frac{\hbar}{2im} [(\nabla^2 \psi^*) \psi - \psi^* (\nabla^2 \psi)] \quad (2.4.13)$$

$$= -\frac{\hbar}{2im} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (2.4.14)$$

確率流密度を,

$$\mathbf{j} := \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (2.4.15)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \text{Im} (\psi^* \nabla \psi) \quad (2.4.16)$$

と定義する. 式 (2.4.15) を式 (2.4.14) に代入すると, 確率密度に対する連続の式である,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\nabla \cdot \mathbf{j} \quad (2.4.17)$$

を得る¹.

次に微分断面積と散乱振幅の関係を考える. z 軸方向へ進行波である入射波は,

$$\psi_{\text{in}} = e^{ikz} \quad (2.4.18)$$

と書けるのであった. 入射波は z 軸方向にのみ進行するので, その確率流密度の z 成分 j_z は式 (??) より,

$$j_z = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial z} \psi \right) \quad (2.4.19)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \text{Im} (e^{-ikz} i k e^{ikz}) \quad (2.4.20)$$

$$= \frac{\hbar k}{m} \quad (2.4.21)$$

である.

散乱波は,

$$\psi_{\text{sc}} = \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \quad (2.4.22)$$

と書けるのであった. 散乱波は r 軸方向にのみ進行するので, その確率流密度の r 成分 $j_r(\theta)$ は,

$$j_r(\theta) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi_{\text{sc}}^* \frac{\partial}{\partial r} \psi_{\text{sc}} \right) \quad (2.4.23)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[\frac{f(\theta)^*}{r} e^{-ikr} \left(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2} \right) f(\theta) e^{ikr} \right] \quad (2.4.24)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[-\frac{|f(\theta)|^2}{r^3} + ik \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \right] \quad (2.4.25)$$

$$= \frac{\hbar}{m} k \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \quad (2.4.26)$$

$$= \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} j_z \quad (2.4.27)$$

¹両辺に電荷をかければ電荷保存の法則となる.

である。

さて、微分断面積と散乱振幅の関係について考えよう。微分断面積と粒子数の関係の両辺を n で割ると、

$$dN = \sigma(\theta)n d\Omega \quad (2.4.28)$$

$$\Leftrightarrow \frac{dN}{n} = \sigma(\theta) d\Omega \quad (2.4.29)$$

となる。 $\frac{dN}{n}$ は、

$$\frac{dN}{n} = \frac{(\text{単位時間に位置 } (r, \theta) \text{ にある 検出器 } dS \text{ に入射する粒子数})}{(\text{単位時間単位面積当たりの入射粒子数})} \quad (2.4.30)$$

$$= \frac{(\text{単位時間に位置 } (r, \theta) \text{ にある検出器 } dS \text{ に粒子が入射する確率})}{(\text{単位時間単位面積当たりに粒子が入射する確率})} \quad (2.4.31)$$

$$= \frac{j_r dS}{j_z} \quad (2.4.32)$$

と書けるので、

$$\sigma(\theta) d\Omega = |f(\theta)|^2 \frac{dS}{r^2} \quad (2.4.33)$$

が得られる。式 (2.1.4) より、 $d\Omega = \frac{dS}{r^2}$ であるから、

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (2.4.34)$$

という関係が成り立つ。これは、散乱振幅から微分断面積が求められることを意味する。

散乱振幅と微分断面積の関係

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (2.4.35)$$

2.4.3 散乱振幅の表式

最後に散乱振幅 $f(\theta)$ の表式を求める。散乱の Schrödinger 方程式は、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.4.36)$$

であった。 κ , $U(\mathbf{r})$ を、

$$\kappa := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (2.4.37)$$

$$U(\mathbf{r}) := \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \quad (2.4.38)$$

と定義すると、

$$(\nabla^2 + \kappa^2) \psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.4.39)$$

と書ける。式 (2.4.39) の解は、Helmholtz 方程式型の斉次式、

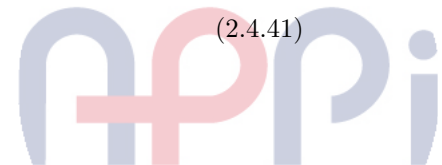
$$(\nabla^2 + \kappa^2) \phi(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.4.40)$$

の z 方向に入射した場合の一般解 $\phi(\mathbf{r}) = e^{i\kappa z}$ と、非斉次の方程式、

$$(\nabla^2 + \kappa^2) \chi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \chi(\mathbf{r}) \quad (2.4.41)$$

の解となる $\chi(\mathbf{r})$ の和である。

では、式 (2.4.41) の特解を求めよう。レシピはこうである。



1. $(\nabla^2 + \kappa^2)G_0(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$ を満たす Green 関数 G_0 を求める.

2. $\chi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}')$ から特解を求める.

2. から特解が求められるのは,

$$(\nabla^2 + \kappa^2)\chi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' (\nabla^2 + \kappa^2)G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (2.4.42)$$

$$= \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (2.4.43)$$

$$= U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.4.44)$$

が成り立つからだ.

まず, 1. で定義した Green 関数の関係式,

$$(\nabla^2 + \kappa^2)G_0(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \quad (2.4.45)$$

の両辺を Fourier 変換すると,

$$\int d\mathbf{r} (\nabla^2 + \kappa^2)G_0(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \int d\mathbf{r} \delta(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.4.46)$$

$$\Leftrightarrow [(-i\mathbf{k})^2 + \kappa^2] \int d\mathbf{r} G_0(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = 1 \quad (2.4.47)$$

となる. Green 関数 $G_0(\mathbf{r})$ の Fourier 変換を $\tilde{G}_0(\mathbf{k})$ と書くと,

$$\tilde{G}_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{\kappa^2 - k^2} \quad (2.4.48)$$

を得る. よって Green 関数は $\tilde{G}_0(\mathbf{k})$ を逆 Fourier 変換して,

$$G_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{\kappa^2 - k^2} \quad (2.4.49)$$

と表される. 極座標に変換して式 (2.4.49) の積分を実行すると,

$$G_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{\kappa^2 - k^2} \quad (2.4.50)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{\exp(ikr \cos \theta)}{\kappa^2 - k^2} \quad (2.4.51)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\phi=0}^{2\pi} d\phi \int_{k=0}^{\infty} dk \int_{\theta=0}^{\pi} d\theta \frac{\exp(ikr \cos \theta)}{\kappa^2 - k^2} k^2 \sin \theta \quad (2.4.52)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} 2\pi \int_{k=0}^{\infty} k^2 dk \int_{\theta=0}^{\pi} d\theta \sin \theta \frac{\exp(ikr \cos \theta)}{\kappa^2 - k^2} \quad (2.4.53)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k^2 \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr(\kappa^2 - k^2)} dk \quad (2.4.54)$$

$$= \frac{1}{4\pi^2 i r} \int_0^{\infty} k \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} dk \quad (2.4.55)$$

$$= \frac{1}{8\pi^2 i r} \int_{-\infty}^{\infty} k \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} dk \quad (2.4.56)$$

$$= \frac{1}{8\pi^2 i r} \int_{-\infty}^{\infty} k \left[\frac{e^{ikr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} - \frac{e^{-ikr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} \right] dk \quad (2.4.57)$$

$$= \frac{i}{8\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} k \left[\frac{e^{ikr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} - \frac{e^{-ikr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} \right] dk \quad (2.4.58)$$

$$= \frac{i}{4\pi^2 r} I \quad (2.4.59)$$

となる。ただし、 I は、

$$I := \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k e^{ikr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} dk \quad (2.4.60)$$

である。式変形の途中で、

$$-\int_{-\infty}^{\infty} k \frac{e^{-ikr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} dk = -\int_{\infty}^{-\infty} (-k) \frac{e^{-i(-k)r}}{((-k) - \kappa)((-k) + \kappa)} (-dk) \quad (2.4.61)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} k \frac{e^{ikr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} dk = I \quad (2.4.62)$$

なる関係を用いた。 I を計算するには留数定理を用いる。

留数定理

複素関数 $f(z)$ が閉経路 C 内に m 個の特異点 b_1, \dots, b_m を持つとすると、

$$\oint_C f(z) dz = 2\pi i \sum_{l=1}^m \text{Res}(b_l; f) \quad (2.4.63)$$

が成立する。

今回の場合は特異点は κ と $-\kappa$ である。しかし、極の避け方にはいくつかのパターンがあり、それに応じて Green 関数の計算結果は複数存在する。これは何ら不自然なことではない。今計算しているのは、 $(\nabla^2 + \kappa^2)$ なる演算子の固有関数 G_0 を求めているので、複数存在してもよい。まず、図 2.4 のように $-\kappa$ を上に避け、 κ を下に避けると、積分経路 C で囲まれている領域に存在する特異点は、 $k = \kappa$ のみであるので、

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k e^{ikr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} dk \quad (2.4.64)$$

$$= 2\pi i \frac{e^{i\kappa r}}{2} \quad (2.4.65)$$

$$= \pi i e^{i\kappa r} \quad (2.4.66)$$

となるから、

$$G_0(\mathbf{r}) = \frac{i}{4\pi^2 r} I \quad (2.4.67)$$

$$= -\frac{e^{i\kappa r}}{4\pi r} \quad (2.4.68)$$

となる²。計算しているのは、外向き球面波解であるため、図 2.4 で示した経路で積分した結果が最も合理的であるから、この Green 関数を採用して以下の計算を行う。Green 関数を用いると式 (2.4.1) の形式解は、

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \chi(\mathbf{r}) \quad (2.4.69)$$

$$= e^{i\kappa z} + \int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (2.4.70)$$

$$= e^{i\kappa z} - \int \frac{e^{i\kappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \cdot \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.4.71)$$

²積分経路 C に $-\kappa$ と κ がそれぞれ含まれるか否かを分類して求めた Green 関数は、

$$G_0(\mathbf{r}) = \begin{cases} \text{不適} & -\kappa: \text{含まない}, \kappa: \text{含まない} \\ \frac{e^{i\kappa r}}{4\pi r} & -\kappa: \text{含まない}, \kappa: \text{含む} \\ \frac{e^{-i\kappa r}}{4\pi r} & -\kappa: \text{含む}, \kappa: \text{含まない} \\ i \frac{\sin(\kappa r)}{4\pi r} & -\kappa: \text{含む}, \kappa: \text{含む} \end{cases}$$

$-\kappa$ と κ をともに含まない経路で計算したとき、 $I = 0$ となるが、固有関数は 0 であってはいけないから、不適である。

$$= e^{i\kappa z} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{i\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.4.72)$$

である。

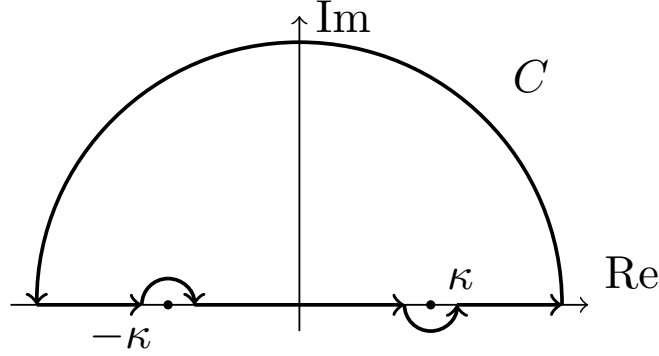


図 2.4: 積分経路

次に式 (2.4.72) から散乱振幅 $f(\theta)$ を求める。 $V(\mathbf{r}')$ は $r' < a$ でのみ $V \neq 0$ であると仮定する。式 (2.4.72) において $r \gg r'$ では,

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' + r'^2} \quad (2.4.73)$$

$$= r \left[1 - \frac{2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} + \left(\frac{r'}{r} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (2.4.74)$$

$$\simeq r - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}' \quad (2.4.75)$$

が成り立つ。よって,

$$e^{i\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \simeq e^{i\kappa(r-\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}')} \quad (2.4.76)$$

$$= e^{i\kappa r} - e^{-i\boldsymbol{\kappa}' \cdot \mathbf{r}'} \quad (2.4.77)$$

と近似できる。ただし, $\boldsymbol{\kappa}' := \kappa \mathbf{n}$ を z 軸と角度 θ をなす散乱方向の波数ベクトルと定義した。また,

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{r} \left[1 - \frac{2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} + \left(\frac{r'}{r} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (2.4.78)$$

$$\simeq \frac{1}{r} \quad (2.4.79)$$

と近似する。式 (2.4.77) や式 (2.4.79) で行った近似結果を式 (2.4.72) に代入すると,

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\kappa z} - \left(\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\boldsymbol{\kappa}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right) \frac{e^{i\kappa r}}{r} \quad (2.4.80)$$

を得る。

さて, 考えている散乱問題の波動関数は式 (2.4.6) より,

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\kappa z} + f(\theta) \frac{e^{i\kappa r}}{r} \quad (2.4.81)$$

と書けるのであった。式 (2.4.81) と式 (2.4.80) を比較すると, 式 (2.4.80) において $\kappa \rightarrow k$, $\boldsymbol{\kappa}' \rightarrow \mathbf{k}'$ とすれば,

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\kappa z} - \left(\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right) \frac{e^{i\kappa r}}{r} \quad (2.4.82)$$

となる。したがって散乱振幅は、

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.4.83)$$

となる。

一般のポテンシャルでの散乱振幅

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.4.84)$$

2.5 Born 近似

一般に、散乱の波動関数は、

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + \int G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.5.1)$$

と表されるのであった。この波動関数を厳密に求めることは困難であるため近似を考える。まず、式 (2.5.1) を簡略化して、

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 + \int gV\psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.5.2)$$

と表現する。ただし、

$$g(\mathbf{r}) := G_0(\mathbf{r}) \frac{2m}{\hbar^2} \quad (2.5.3)$$

である。式 (2.5.2) を再帰的に代入すると、

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 + \int gV\psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.5.4)$$

$$= \psi_0 + \int gV \left(\psi_0 + \int gV\psi(\mathbf{r}'') d\mathbf{r}'' \right) d\mathbf{r}' \quad (2.5.5)$$

$$= \psi_0 + \int gV\psi_0(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \iint gVgV\psi(\mathbf{r}'') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \quad (2.5.6)$$

$$= \psi_0 + \int gV\psi_0(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \iint gVgV\psi_0(\mathbf{r}'') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' + \iiint gVgVgV\psi_0(\mathbf{r}''') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' d\mathbf{r}''' + \dots \quad (2.5.7)$$

を得る。式 (2.5.7) を第 1 項までで近似して、残りの項を捨てる。これは散乱の波動関数を平面波で近似することに相当する。つまり、

$$\psi \simeq \psi_0 \quad (2.5.8)$$

とする。これを**第 1 Born 近似**という³⁴。

Born 近似を用いて散乱振幅を求める。 $\mathbf{k} := k\mathbf{e}_z$, $\mathbf{r} := z\mathbf{e}_z$ とすると、 $\psi(\mathbf{r}') = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'}$ となるから、

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.5.9)$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.5.10)$$

³Max Born(1882-1970)

⁴砂川, 散乱の量子論, 「第 1 Born 近似がとくによく利用される理由は、何といてもその簡単さにある。したがって、ある散乱問題を手がけたとき、だれもが最初に試してみるのが、この近似である。そして思わしい結果がえられないとき、他の近似法を考えるのである。」

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.5.11)$$

となる。ただし、散乱による運動量変化に対応する物理量を $\mathbf{q} := \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ と定義した。式 (2.5.11) を見ると、散乱振幅はポテンシャル $V(r)$ の Fourier 変換から得られることがわかる⁵。また、球対称ポテンシャルのとき式 (2.5.11) は簡略化できて、 $V(\mathbf{r}') \rightarrow V(r')$ としてよいから、

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} V(r') d\mathbf{r}' \quad (2.5.12)$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_{\phi'=0}^{2\pi} d\phi' \int_{\theta'=0}^{\pi} d\theta' \int_{r'=0}^{\infty} r'^2 \sin \theta' dr' e^{-iqr' \cos \theta'} V(r') \quad (2.5.13)$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} 2\pi \int_{r'=0}^{\infty} V(r') r'^2 \int_{\theta'=0}^{\pi} e^{-iqr' \cos \theta'} \sin \theta' d\theta' dr' \quad (2.5.14)$$

$$= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} r'^2 V(r') \frac{e^{iqr'} - e^{-iqr'}}{iqr'} dr' \quad (2.5.15)$$

$$= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} rV(r) \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iq} dr \quad (2.5.16)$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^{\infty} rV(r) \sin(qr) dr \quad (2.5.17)$$

となる。

球対称ポテンシャルの散乱振幅

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} rV(r) \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iq} dr \quad (2.5.18)$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^{\infty} rV(r) \sin(qr) dr \quad (2.5.19)$$

例題 2.2: 湯川ポテンシャル

球対称ポテンシャル $V(r)$ が、湯川ポテンシャルの場合を考える。湯川ポテンシャルは、

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r} \quad (2.5.20)$$

と書ける。による散乱を考える^a。これは、 $V(r)$ の到達距離が μ^{-1} ほどであり、核子同士に働く力を表す。物質中では、伝導電子に遮蔽された不純物の Coulomb ポテンシャルを表す。 $\mu = 1, 2$ 及び Coulomb ポテンシャルのグラフを図 2.5 に示す。このポテンシャルの下で散乱振幅 $f^{(1)}(\theta)$ と散乱断面積 $\sigma^{(1)}(\theta)$ を求めよ。

^a湯川秀樹 (1907-1981)

散乱振幅は式 (2.5.18) より、

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} rV(r) \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iq} dr \quad (2.5.21)$$

$$= -\frac{m}{i\hbar^2 q \mu} \int_0^{\infty} rV_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r} \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iq} dr \quad (2.5.22)$$

$$= -\frac{mV_0}{i\hbar^2 q \mu} \int_0^{\infty} [\exp\{(-\mu + iq)r\} - \exp\{(-\mu - iq)r\}] dr \quad (2.5.23)$$

$$= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 \mu} \frac{1}{\mu^2 + q^2} \quad (2.5.24)$$

⁵ $f^{(n)}$ は第 n Born 近似による散乱振幅を意味する。

散乱振幅は,

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left| f^{(1)}(\theta) \right|^2 \quad (2.5.25)$$

$$= \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2 \mu} \right)^2 \frac{1}{(\mu^2 + q^2)^2} \quad (2.5.26)$$

$$= \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2 \mu} \right)^2 \frac{1}{[\mu^2 + 4k^2 \sin^2(\theta/2)]^2} \quad (2.5.27)$$

である. なお, \mathbf{k}' と \mathbf{k} のなす角が θ であるので余弦定理より, $q = 2k \sin \theta/2$ であることを用いた.

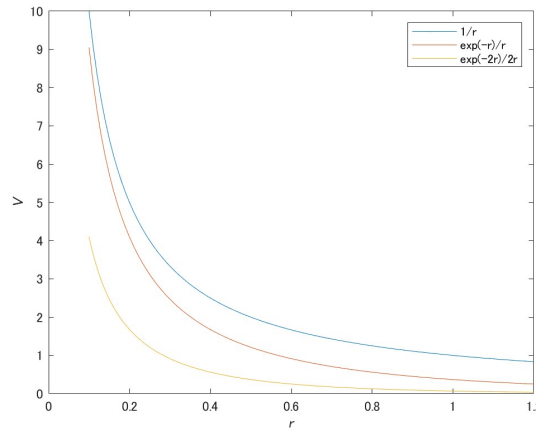


図 2.5: 湯川ポテンシャルと Coulomb ポテンシャルの比較

例題 2.3: Rutherford 散乱 (Griffith Example 10.6)

湯川ポテンシャルで $V_0 = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0}$, $\mu = 0$ とすると Coulomb ポテンシャル

$$V(r) = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \quad (2.5.28)$$

と一致する. 式 (2.5.19) に代入して散乱振幅を求める.

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r} \sin(qr) dr \quad (2.5.29)$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2 q} \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \sin(qr) dr \quad (2.5.30)$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2 q} \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{1}{q} [\cos(qr)]_0^\infty \right) \quad (2.5.31)$$

$$\simeq -\frac{mq_1 q_2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 q^2} \quad (2.5.32)$$

$$= -\frac{mq_1 q_2}{8\pi\epsilon_0 \hbar^2 \sin^2 \theta/2} \quad (2.5.33)$$

2.6 Born 近似の評価

Born 近似の適用範囲について考える．式 (2.4.84) より，一般に散乱振幅は，

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.6.1)$$

と書けるのであった．また式 (2.5.7) より，散乱の波動関数は，

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \dots \quad (2.6.2)$$

であった．第 1 Born 近似とは，波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ を，

$$\psi(\mathbf{r}) \simeq \psi_0(\mathbf{r}) \quad (2.6.3)$$

と近似するものであった．第 1 Born 近似が十分良い評価である，つまり，

$$\int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.6.4)$$

を正しく評価できるには， $V(\mathbf{r}) \neq 0$ なる $r \simeq 0$ で，

$$\psi(\mathbf{r}) \simeq \psi_0(\mathbf{r}) \quad (2.6.5)$$

と近似できる必要がある． $r \simeq 0$ で式 (2.6.2) の第 1 項がそれ以外の項より十分大きければ良いから，

$$|\psi_0(0)| \gg \left| \int g(0 - \mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right| \quad (2.6.6)$$

となればよい．整理すると，

$$|e^{ikz}| \gg \left| \int -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{4\pi r} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \right| \quad (2.6.7)$$

$$1 \gg \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int \frac{e^{ikr}}{r} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \right| \quad (2.6.8)$$

を得る．これが第 1 Born 近似が有効であるための条件である．

例題 2.4: 第 1 Born 近似の適用条件

球対称ポテンシャル $V(r)$,

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (r \leq a) \\ 0 & (r \geq a) \end{cases} \quad (2.6.9)$$

による散乱を考える．Born 近似の適用条件である式 (2.6.8) を用いて，満たすべき条件とその物理的意味を述べよ．

式 (2.6.8) より Born 近似が成立する条件は，

$$1 \gg \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int \frac{e^{ikr'}}{r'} V(r') e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \right| \quad (2.6.10)$$

$$= \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int \frac{e^{ikr'}}{r'} V(r') e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \right| \quad (2.6.11)$$

$$= \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int_{\phi'=0}^{2\pi} d\phi' \int_{\theta'=0}^{\pi} d\theta' \int_{r'=0}^{\infty} dr' V(r') e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} r'^2 \sin \theta' \right| \quad (2.6.12)$$

$$= \frac{mV_0}{2\pi\hbar^2} \left| \int_{\phi'=0}^{2\pi} d\phi' \int_{\theta'=0}^{\pi} d\theta' \int_{r'=0}^a dr' \frac{e^{ikr'}}{r'} e^{ikr' \cos \theta'} r'^2 \sin \theta' \right| \quad (2.6.13)$$

$$= \frac{mV_0}{\hbar^2} \left| \int_{r'=0}^a r' e^{ikr'} dr' \int_{\theta'=0}^{\pi} e^{ikr' \cos \theta'} \sin \theta' d\theta' \right| \quad (2.6.14)$$

$$= \frac{mV_0}{\hbar^2} \left| \int_{r'=0}^a r' e^{ikr'} \frac{e^{ikr'} - e^{-ikr'}}{ikr'} dr' \right| \quad (2.6.15)$$

$$= \frac{mV_0}{\hbar^2 k} \left| \int_{r'=0}^a \left(e^{2ikr'} - 1 \right) dr' \right| \quad (2.6.16)$$

$$= \frac{mV_0}{2\hbar^2 k^2} |e^{2ika} - 1 - 2ika| \quad (2.6.17)$$

を得る^a。これを低エネルギー散乱と高エネルギー散乱に場合分けして見積もる。式 (2.6.17) の絶対値の中では、 ka がまとめて1つの変数のようになっていることに注意する。また、式 (2.4.37) で定めた κ の定義と、 $\kappa \rightarrow k$ と書き換えたことより、

$$ka = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a \quad (2.6.18)$$

であるから、 ka はエネルギーの $1/2$ 乗に比例することに注意する。

1. 低エネルギー散乱 ($ka \ll 1$)

式 (2.6.17) の絶対値の部分を近似すると、

$$|e^{2ika} - 1 - 2ika| = \left| \left(1 + 2ika + \frac{1}{2}(2ika)^2 + \dots \right) - 1 - 2ika \right| \quad (2.6.19)$$

$$\simeq \left| \left(1 + 2ika + \frac{1}{2}(2ika)^2 \right) - 1 - 2ika \right| \quad (2.6.20)$$

$$= 2k^2 a^2 \quad (2.6.21)$$

となるから、Born 近似の適用条件は

$$1 \gg \frac{mV_0}{2\hbar^2 k^2} 2k^2 a^2 = \frac{mV_0 a^2}{\hbar^2} \quad (2.6.22)$$

である。式 (2.6.22) において、 m と \hbar は定数であるから、ポテンシャルの大きさ V_0 または半径 a が小さい時に近似が有効であることがわかる。

2. 高エネルギー散乱 ($ka \gg 1$)

式 (2.6.17) の絶対値の部分を近似すると、 $ka \gg 1$ の領域では、 $|e^{2ika}| \simeq |-1| \gg |2ika|$ であるから、

$$|e^{2ika} - 1 - 2ika| \simeq 2ka \quad (2.6.23)$$

となる。よって Born 近似の適用条件は、

$$1 \gg \frac{mV_0 a}{\hbar^2 k} = \frac{mV_0 a}{\hbar \sqrt{2mE}} \quad (2.6.24)$$

である。式 (2.6.24) を見ると、 $k \rightarrow \infty$ に対して近似が成立することがわかる。つまり、Born 近似は高エネルギー粒子に対して常によい近似であることがわかる。

^a授業中の教員の発言:「試験に出そうな計算。」

2.7 部分波展開の数学的準備♠

本節では、次節にて行う部分波展開について、数学的な準備を行う。最初に、以下で扱う演算子のクラスである Strum-Liouville 演算子についての性質を調べる。まず、Legendre 多項式と Legendre 陪多項式の性質を調べて、直交性を知る。次に、Bessel 微分方程式の解である Bessel 関数の表式を求めて、球 Bessel 関数と球 Neumann 関数、球 Hankel 関数を定義する。続いて、Legendre 多項式を用いて波動関数を展開して、展開係数 B_{ml} が満たすべき微分方程式を導く。最後に、展開係数 B_{ml} が球 Bessel 関数と球 Neumann 関数の線型結合で書けることを確かめて、線型結合の係数が波動関数の特徴づけるものだと知る。

2.7.1 Strum-Liouville 演算子の Hermite 性

$a < b$ として、 $x \in [a, b]$ で定義された関数空間 V を考える。 $\rho(x)$ を非負の実数関数として、 $f, g \in V$ に対して、

$$\langle f, g \rangle := \int_a^b f^*(x)g(x)\rho(x) dx \quad (2.7.1)$$

なる内積を入れる。関数空間 V 上の演算子として \mathcal{L} を、

$$\mathcal{L} := \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} \right\} + q(x) \right] \quad (2.7.2)$$

とする。式 (2.7.2) なる形をした演算子を Strum-Liouville 演算子という。境界条件を、 $\forall f \in V$ について、

$$\begin{cases} f(a) = f(b) \\ p(a)f'(a) = p(b)f'(b) \end{cases} \quad (2.7.3)$$

とすると、

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (2.7.4)$$

が成立する。式 (2.7.4) なる関係が成り立つ演算子 \mathcal{L} を Hermite 演算子という。

Proof. 内積の定義より、

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \int_a^b f^*(x) \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} g(x) \right\} + q(x)g(x) \right] \rho(x) dx \quad (2.7.5)$$

$$= \int_a^b f^*(x) \left[\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} g(x) \right\} + q(x)g(x) \right] dx \quad (2.7.6)$$

$$= [f^*(x)g'(x)]_a^b - \int_a^b f'^*(x)p(x)g'(x) dx + \int_a^b f^*(x)q(x)g(x) dx \quad (2.7.7)$$

$$= [f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [f'^*(x)p(x)g(x)]_a^b + \int_a^b g(x) \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} f^*(x) \right) + q(x)f^*(x) \right] \rho(x) dx \quad (2.7.8)$$

$$= [f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [f'^*(x)p(x)g(x)]_a^b + \langle g, \mathcal{L}f \rangle^* \quad (2.7.9)$$

$$= [f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [g(x)p(x)f'^*(x)]_a^b + \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (2.7.10)$$

となる。第 1 項と第 2 項について、第 1 項に $f(a) = f(b)$ を、第 2 項に $p(x)$ が実数値関数であり $p(a)f'(a) = p(b)f'(b)$ であることを用いると

$$[f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [f'^*(x)p(x)g(x)]_a^b = \{p(b)g'(b) - p(a)f'(a)\}f^*(a) - \{g(b) - g(a)\}p(a)f'(a) \quad (2.7.11)$$

を得る。今度は、第 1 項に $p(x)$ が実数値関数であり $p(a)g'(a) = p(b)g'(b)$ であることを、第 2 項に $g(a) = g(b)$ を用いれば、

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (2.7.12)$$

を得る。 □

2.7.2 Legendre 多項式

式 (2.7.2) において, $a = -b = 1$ とする. また,

$$\rho(x) := 1 \quad (2.7.13)$$

$$p(x) := 1 - x^2 \quad (2.7.14)$$

$$q(x) := -\frac{m^2}{1 - x^2}, \quad m \in \{0, 1, \dots\} \quad (2.7.15)$$

とすると,

$$\mathcal{L}_m = \frac{d}{dx} \left\{ (1 - x^2) \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{1 - x^2} \quad (2.7.16)$$

となる. 関数の内積は,

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 f^*(x) g(x) dx \quad (2.7.17)$$

と定義しておく. また, 境界条件は,

$$p(\pm 1) f^*(\pm 1) g'(\pm 1) = 0 \quad (2.7.18)$$

とする. これより, 演算子 \mathcal{L} が Hermite 演算子であると確かめられる. たとえば, $g'(x) = p(x)$ となるように $g(x)$ を定めれば, $f(1) = f(-1) = 0$ となる. また, $f(x) = 1$ となるように $f(x)$ を定めれば, $p(1)g'(1) = p(-1)g'(1) = 0$ となるので, 前節で示した境界条件を満足する. さて, Legendre 多項式 $P_n(x)$ は n を非負整数として,

$$\mathcal{L}_0 P_n(x) = -n(n+1) P_n(x) \quad (2.7.19)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dx} \left\{ (1 - x^2) \frac{d}{dx} P_n(x) \right\} = -n(n+1) P_n(x) \quad (2.7.20)$$

なる $P_n(x)$ のうち, $x = 0$ 周りで級数展開したもので,

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (2.7.21)$$

と書いたとき,

$$u_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2} \quad (2.7.22)$$

$$u_{n+1} = 0 \quad (2.7.23)$$

なるものである. 式 (2.7.21) を式 (2.7.20) に代入すると,

$$\frac{d}{dx} \left\{ (1 - x^2) \frac{d}{dx} \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \right\} = -n(n+1) \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (2.7.24)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j u_j \frac{d}{dx} (x^{j-1} - x^{j+1}) = -n(n+1) \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (2.7.25)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) u_j x^{j-2} - \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) u_j x^j = -n(n+1) \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (2.7.26)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) u_j x^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} u_j [j(j+1) - n(n+1)] x^j \quad (2.7.27)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1) u_j x^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} u_j [j(j+1) - n(n+1)] x^j \quad (2.7.28)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2)u_{j+2}x^j = \sum_{j=0}^{\infty} u_j[j(j+1) - n(n+1)]x^j \quad (2.7.29)$$

となるから,

$$(j+1)(j+2)u_{j+2} = [j(j+1) - n(n+1)]u_j \quad (2.7.30)$$

なる漸化式が成立する. 式 (2.7.30) において $j = n$ を代入すると, $u_{n+2} = 0$ となる. また, $j = n+1$ を代入すると式 (2.7.23) より $u_{n+1} = 0$ である. よって,

$$0 = u_{n+1} = u_{n+2} = u_{n+3} = u_{n+4} = \cdots \quad (2.7.31)$$

となる. また, 式 (2.7.30) に $j = n-2$ を代入すると,

$$u_{n-2} = -\frac{n(n-1)}{2(2n-1)}u_n \quad (2.7.32)$$

となる. よって, 式 (2.7.22) と式 (2.7.32) を用いて式 (2.7.21) を表すと,

$$P_n(x) = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2} \left[x^n - \frac{n(n-1)}{2(2n-1)}x^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2 \cdot 4 \cdot (2n-1)(2n-3)}x^{n-4} + \cdots \right] \quad (2.7.33)$$

$$= \sum_{s=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^s \frac{(2n-2s)!}{2^n s!(n-s)!(n-2s)!} x^{n-2s} \quad (2.7.34)$$

となる. なお, Legendre 多項式は,

$$\frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n = \sum_{s=0}^n \frac{d^n}{dx^n} (-1)^s \binom{n}{s} x^{2n-2s} \quad (2.7.35)$$

$$= \sum_{s=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^s \frac{n!}{s!(n-s)!} \frac{(2n-2s)!}{(n-2s)!} \quad (2.7.36)$$

なる関係を用いると,

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (2.7.37)$$

となる. なお, 式 (2.7.37) は Rodrigues の公式として知られている.

2.7.3 Legendre 陪多項式

Legendre 陪多項式 $P_n^m(x)$ は $m \leq n$ として,

$$P_n^m(x) := (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \quad (2.7.38)$$

と定義されて, 式 (2.7.37) を用いれば,

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \quad (2.7.39)$$

$$= (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (2.7.40)$$

$$= \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2 - 1)^n \quad (2.7.41)$$

となる. また, P_n^m は Legendre の陪微分方程式,

$$\mathcal{L}_m P_n^m(x) + n(n+1)P_n^m(x) = 0 \quad (2.7.42)$$

を満たす. Legendre 陪多項式の直交性は \mathcal{L}_m が Hermite 演算子であり, その固有関数である $P_n^m(x)$ が直交することより従う. 自分自身との内積, つまり, $\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle$ の値を計算する. 式 (2.7.41) を用いて, 式 (2.7.17) で示した内積の定義に従って計算する. $n+m$ 回部分積分を行うと,

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \int_{-1}^1 \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} dx \quad (2.7.43)$$

$$= \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \frac{d}{dx} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2-1)^m \right\} dx \quad (2.7.44)$$

$$= \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \left[(1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2-1)^m \right\} \right]_{-1}^1 \quad (2.7.45)$$

$$- \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 \left\{ \frac{d}{dx} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \right\} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2-1)^m \right\} dx \quad (2.7.46)$$

$$= -\frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 \left\{ \frac{d}{dx} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \right\} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2-1)^m \right\} dx \quad (2.7.47)$$

$$= \dots \quad (2.7.48)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^n \right\} \right\} dx \quad (2.7.49)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n \left[\sum_{k=0}^{n+m} \binom{n+m}{k} \left\{ \frac{d^{n+m-k}}{dx^{n+m-k}} (1-x^2)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m+k}}{dx^{n+m+k}} (x^2-1)^n \right\} \right] dx \quad (2.7.50)$$

となる. 最終行で Leibniz の公式を用いた. 式 (2.7.50) の和の中の $n+m-k$ 階微分と $n+m+k$ 階微分を考える. $(1-x^2)^m$ と $(x^2-1)^n$ の最高次数は, それぞれ $2m$ と $2n$ であるから, $2m \geq n+m-k$ かつ $2n \geq n+m+k$ なる k でのみ和の中は 0 でなくなる. つまり, $n-m \leq k$ かつ $n-m \geq k$ なる k は $k = n-m$ のみである. よって, 式 (2.7.50) は,

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n \left[\sum_{k=0}^{n+m} \binom{n+m}{k} \left\{ \frac{d^{n+m-k}}{dx^{n+m-k}} (1-x^2)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m+k}}{dx^{n+m+k}} (x^2-1)^n \right\} \right] dx \quad (2.7.51)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n \left[\binom{n+m}{n-m} \left\{ \frac{d^{2m}}{dx^{2m}} (1-x^2)^m \right\} \left\{ \frac{d^{2n}}{dx^{2n}} (x^2-1)^n \right\} \right] dx \quad (2.7.52)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} (-1)^m (2m)!(2n)! \frac{(n+m)!}{(n-m)!(2m)!} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n dx \quad (2.7.53)$$

積分は, $x = \cos \theta$ と置換すると,

$$\int_{-1}^1 (x^2-1)^n dx = (-1)^n \int_0^\pi \sin^{2n+1} \theta d\theta \quad (2.7.54)$$

となる. I_{2n+1} を,

$$I_{2n+1} := \int_0^\pi \sin^{2n+1} \theta d\theta \quad (2.7.55)$$

と定義すると,

$$I_{2n+1} = \int_0^\pi \sin^{2n} \theta \frac{d}{d\theta} (-\cos \theta) d\theta \quad (2.7.56)$$

$$= [\sin^{2n} \theta \cdot (-\cos \theta)]_0^\pi + 2n \int_0^\pi \sin^{2n-1} \theta \cos^2 \theta d\theta \quad (2.7.57)$$

$$= 2n I_{2n-1} - 2n I_{2n+1} \quad (2.7.58)$$

となるので,

$$I_{2n+1} = \frac{2n}{2n+1} I_{2n-1} \quad (2.7.59)$$

$$= \frac{2n}{2n+1} \frac{2n-2}{2n-1} I_{2n-3} \quad (2.7.60)$$

$$= \dots \quad (2.7.61)$$

$$= \frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} I_1 \quad (2.7.62)$$

$$= 2 \frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} \quad (2.7.63)$$

$$= 2 \cdot 2^n n! \cdot \frac{2^n n!}{(2n+1)!} \quad (2.7.64)$$

となる. 2重階乗について,

$$(2n)!! = 2^n n! \quad (2.7.65)$$

$$(2n+1)!! = \frac{(2n+1)!}{(2n)!!} = \frac{(2n+1)!}{2^n n!} \quad (2.7.66)$$

なる関係が成り立つことを用いると,

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n} (n!)^2} (-1)^m (2m)! (2n)! \frac{(n+m)!}{(n-m)! (2m)!} (-1)^n 2 \frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} \quad (2.7.67)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n} (n!)^2} (-1)^m (2m)! (2n)! \frac{(n+m)!}{(n-m)! (2m)!} (-1)^n 2 \cdot 2^n n! \cdot \frac{2^n n!}{(2n+1)!} \quad (2.7.68)$$

$$= \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (2.7.69)$$

となる. Legendre 多項式の直交性とまとめて書くと,

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \delta_n^{n'} \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (2.7.70)$$

となる.

2.7.4 Bessel 関数

Legendre 陪多項式を考えていたときとは別の Sturm-Liouville 演算子を考える. 式 (2.7.2) において, $a \rightarrow 0$, $b \rightarrow a$ とする. また,

$$\rho(z) := x \quad (2.7.71)$$

$$p(z) := x \quad (2.7.72)$$

$$q(z) := -\frac{\nu^2}{z}, \quad \nu \geq 0 \quad (2.7.73)$$

とする. すなわち,

$$\mathcal{L}_\nu = \frac{1}{z} \left[\frac{d}{dz} \left\{ z \frac{d}{dz} \right\} - \frac{\nu^2}{z} \right] \quad (2.7.74)$$

$$\langle f, g \rangle = \int_0^a f^*(z) g(z) x dz \quad (2.7.75)$$

である. さて,

$$\mathcal{L}_\nu J_\nu(z) = -J_\nu(z) \quad (2.7.76)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + 1 - \frac{\nu^2}{z^2} \right) = 0 \quad (2.7.77)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2}{dz^2} J_\nu(z) + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} J_\nu(z) - \frac{\nu^2}{z^2} J_\nu(z) = J_\nu(z) \quad (2.7.78)$$

なる $J_\nu(z)$ を考える。1 階微分の項と微分をしない項は $z=0$ で発散するが、それぞれ z と z^2 をかければ発散しないので確定特異点である。このとき、 $z=0$ の周りで $J_\nu(z)$ を指数 α の Frobenius 展開をすると、

$$J_\nu(z) = z^\alpha \sum_n u_n z^n \quad (2.7.79)$$

となる。ただし、計算の簡単のために $n < 0$ なる任意の n に対して $u_n = 0$ と定めた。また、 $u_0 \neq 0$ とする。式 (2.7.79) を式 (2.7.78) に代入することを考える。 $J_\nu(z)$ の 1 階微分と 2 階微分が、

$$\frac{d}{dz} J_\nu(z) = \sum_n (n + \alpha) u_n z^{n+\alpha-1} \quad (2.7.80)$$

$$\frac{d^2}{dz^2} J_\nu(z) = \sum_n (n + \alpha)(n + \alpha - 1) u_n z^{n+\alpha-2} \quad (2.7.81)$$

と書けることを用いると、

$$\sum_n [(n + \alpha)(n + \alpha - 1) + (n + \alpha) - \nu^2] u_n z^{n+\alpha-2} = - \sum_n u_n z^{n+\alpha} \quad (2.7.82)$$

$$\Leftrightarrow \sum_n [(n + \alpha)(n + \alpha - 1) + (n + \alpha) - \nu^2] u_n z^{n+\alpha-2} = - \sum_n u_{n-2} z^{n+\alpha-2} \quad (2.7.83)$$

となる。係数を比較すると、

$$[(n + \alpha)^2 - \nu^2] u_n = -u_{n-2} \quad (2.7.84)$$

となる。式 (2.7.84) に $n = 1$ を代入すると $u_{-1} = 0$ より、

$$0 = u_1 = u_3 = \dots \quad (2.7.85)$$

を得る。また、 $n = 0$ を代入すると $u_0 \neq 0$ より、

$$(0 + \alpha)^2 - \nu^2 = 0 \quad (2.7.86)$$

$$\Rightarrow \alpha = \pm \nu \quad (2.7.87)$$

となる。 $\alpha = \nu$ を採用して式 (2.7.84) を用いると、

$$u_{n+2} = - \frac{1}{(n + \nu + 2)^2 - \nu^2} u_n \quad (2.7.88)$$

を得る。 $\nu \in \mathbb{Z}$ のときは、

$$J_\nu(z) = u_0 z^\nu \left(1 - \frac{1}{2(2\nu + 2)} z^2 + \frac{1}{2 \cdot 4(2\nu + 2)(2\nu + 4)} z^4 + \dots + (-1)^n \frac{(2\nu)!!}{(2n)!!(2\nu + 2n)!!} z^{2n} + \dots \right) \quad (2.7.89)$$

$$= u_0 z^\nu \sum_{n=0} (-1)^n \frac{2^\nu \nu!}{2^n n! (\nu + n)! 2^{\nu+n}} z^{2n} \quad (2.7.90)$$

$$= u_0 \nu! 2^\nu \sum_{n=0} \frac{1}{n! (\nu + n)!} \left(\frac{z}{2} \right)^{\nu+2n} \quad (2.7.91)$$

となる。 $\nu \notin \mathbb{Z}$ のときも、表せるようにガンマ関数をもちいて一般化する。式 (2.7.78) の形より、明らかに定数倍が許容されるから、

$$u_0 = \frac{1}{2^\nu \Gamma(\nu + 1)} \quad (2.7.92)$$

となるように u_0 を定めておくと,

$$J_\nu(z) = \sum_n \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(\nu + k + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2n} \quad (2.7.93)$$

を得る. $J_\nu(z)$ を Bessel 関数という. また, $\alpha = -\nu$ を採用したときは,

$$J_{-\nu}(z) = \sum_n \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(-\nu + k + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu+2n} \quad (2.7.94)$$

となり, これは $\nu \notin \mathbb{Z}$ のときに $J_\nu(z)$ と独立な解となることが示せる. $J_{-\nu}(z)$ を Neumann 関数という. 得られた Bessel 関数と Neumann 関数を用いて,

$$j_n(z) := \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n+\frac{1}{2}}(z) \quad (2.7.95)$$

$$y_n(z) := (-1)^{n+1} \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{-n-\frac{1}{2}}(z) \quad (2.7.96)$$

$$(2.7.97)$$

を定義する. $j_n(z)$ と $y_n(z)$ はそれぞれ, 球 Bessel 関数, 球 Neumann 関数という. さらに, 球 Bessel 関数と球 Neumann 関数を用いて,

$$h_n^{(1)}(z) := j_n(z) + i y_n(z) \quad (2.7.98)$$

$$h_n^{(2)}(z) := j_n(z) - i y_n(z) \quad (2.7.99)$$

を定義する. $h_n^{(1)}$ と $h_n^{(2)}$ はそれぞれ, 第 1 種 Hankel 関数, 第 2 種 Hankel 関数という.

2.7.5 Helmholtz 方程式

Helmholtz 方程式,

$$(\nabla^2 + \kappa^2)u(r, \theta, \phi) = 0 \quad (2.7.100)$$

を考える. $u(\mathbf{r})$ を直交基底である $e^{im\phi}$ で展開すると,

$$A_m(r, \theta) := \int_0^{2\pi} u(r, \theta, \phi) e^{-im\phi} d\phi \quad (2.7.101)$$

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} \quad (2.7.102)$$

$$(2.7.103)$$

となる. また, 極座標ラプラシアンは,

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (2.7.104)$$

である. 式 (2.7.100) に式 (2.7.104) を用いて, 式 (2.7.102) を代入すると,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} \\ & + \kappa^2 \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} = 0 \end{aligned} \quad (2.7.105)$$

$$\Leftrightarrow \sum_m e^{im\phi} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} A_m(r, \theta) \right) - \frac{m^2}{r^2 \sin^2 \theta} A_m(r, \theta) + \kappa^2 A_m(r, \theta) \right] = 0 \quad (2.7.106)$$

となる．式 (2.7.106) に左から $\int_0^{2\pi} d\phi e^{-im\phi}$ をかける，すなわち， $e^{im\phi}$ に射影すると，

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} A_m(r, \theta) \right) - \frac{m^2}{r^2 \sin^2 \theta} A_m(r, \theta) + \kappa^2 A_m(r, \theta) = 0 \quad (2.7.107)$$

を得る．Legendre 陪多項式を定義するときに用いた \mathcal{L}_m において， $x = \cos \theta$ とすると，

$$\mathcal{L}_m = \frac{d}{dx} \left\{ (1 - \cos^2 \theta) \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{1 - \cos^2 \theta} \quad (2.7.108)$$

$$= \frac{d}{dx} \left\{ \sin^2 \theta \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \quad (2.7.109)$$

$$= \frac{d\theta}{dx} \frac{d}{dx} \left\{ \sin^2 \theta \frac{d\theta}{dx} \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \quad (2.7.110)$$

$$= -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{dx} \left\{ \sin^2 \theta \left(-\frac{1}{\sin \theta} \right) \right\} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \quad (2.7.111)$$

$$= \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{dx} \left\{ \sin \theta \frac{d}{d\theta} \right\} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \quad (2.7.112)$$

であるから，式 (2.7.107) は，

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2} \mathcal{L}_{|m|} A_m(r, \theta) + \kappa^2 A_m(r, \theta) = 0 \quad (2.7.113)$$

となる．

続いて， $A_m(r, \theta)$ を直交基底である Legendre 陪多項式を用いて，

$$A_m(r, \theta) = \sum_{n=|m|}^{\infty} B_{nm}(r) P_n^{|m|}(\cos \theta) \quad (2.7.114)$$

と展開する．式 (2.7.113) の両辺に $P_n^{|m|}(\cos \theta)$ との内積をとる．式 (2.7.70) より，

$$\langle P_n^m(\cos \theta), P_n^m(\cos \theta) \rangle = \delta_n^{n'} \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (2.7.115)$$

であることと，式 (2.7.42) より，

$$\mathcal{L}_m P_n^m(x) + n(n+1) P_n^m(x) = 0 \quad (2.7.116)$$

であることを用いれば，

$$\left\langle P_n^m(\cos \theta), \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2} \mathcal{L}_{|m|} A_m(r, \theta) + \kappa^2 A_m(r, \theta) \right\rangle = 0 \quad (2.7.117)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{r^2} \left\langle P_n^m(\cos \theta), \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) \right\rangle + \frac{1}{r^2} \langle P_n^m(\cos \theta), \mathcal{L}_{|m|} A_m(r, \theta) \rangle + \langle P_n^m(\cos \theta), \kappa^2 A_m(r, \theta) \rangle = 0 \quad (2.7.118)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{d}{dr} r^2 \left\{ \frac{d}{dr} B_{nm}(r) \right\} \right\} \langle P_n^m(\cos \theta), P_n^m(\cos \theta) \rangle + \frac{1}{r^2} B_{nm}(r) \langle P_n^m(\cos \theta), \mathcal{L}_{|m|} P_n^m(\cos \theta) \rangle + \kappa^2 B_{nm}(r) \langle P_n^m(\cos \theta), P_n^m(\cos \theta) \rangle = 0 \quad (2.7.119)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{1}{r^2} \left\{ \frac{d}{dr} r^2 \left\{ \frac{d}{dr} B_{nm}(r) \right\} \right\} \right) - \frac{1}{r^2} n(n+1) B_{nm}(r) + \kappa^2 B_{nm}(r) \langle P_n^m(\cos \theta), P_n^m(\cos \theta) \rangle = 0 \quad (2.7.120)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{d}{dr} r^2 \left\{ \frac{d}{dr} B_{nm}(r) \right\} \right\} - \frac{1}{r^2} n(n+1) B_{nm}(r) + \kappa^2 B_{nm}(r) = 0 \quad (2.7.121)$$

を得る．

式 (2.7.121) において，

$$\rho := \kappa r \quad (2.7.122)$$

と変数変換して,

$$C_{nm}(\rho) := \sqrt{\rho} B_{nm}(r) \quad (2.7.123)$$

と定義して代入すれば,

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 - \frac{1}{\rho^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right\} C_{nm}(\rho) = 0 \quad (2.7.124)$$

を得る. 式 (2.7.124) と式 (2.7.77) である,

$$\mathcal{L}_\nu J_\nu(z) = -J_\nu(z) \quad (2.7.125)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + 1 - \frac{\nu^2}{z^2} \right) = 0 \quad (2.7.126)$$

を比べると, 式 (2.7.126) において,

$$z \rightarrow x \quad (2.7.127)$$

$$\nu = n + \frac{1}{2} \quad (2.7.128)$$

としたものであると分かる. つまり, $C_{nm}(\rho)$ は Bessel 関数 $J_{n+\frac{1}{2}}(\rho)$ と Neumann 関数 $J_{-n-\frac{1}{2}}(\rho)$ の線型結合で書かれるので, 係数をそれぞれ a'_{nm} , b'_{nm} として,

$$C_{nm}(\rho) = a'_{nm} J_{n+\frac{1}{2}}(\rho) + b'_{nm} J_{-n-\frac{1}{2}}(\rho) \quad (2.7.129)$$

と書く. 今後の変形のために, 球 Bessel 関数 $j_n(\rho)$ と球 Neumann 関数 $y_n(\rho)$ を用いて式 (2.7.129) を書き直せば,

$$C_{nm}(\rho) = a'_{nm} J_{n+\frac{1}{2}}(\rho) + b'_{nm} J_{-n-\frac{1}{2}}(\rho) \quad (2.7.130)$$

$$= \sqrt{\frac{2\rho}{\pi}} a'_{nm} \pi^{-1} j_n(\rho) + \sqrt{\frac{2\rho}{\pi}} b'_{nm} y_n(\rho) \quad (2.7.131)$$

$$= \sqrt{\rho} [a_{nm} j_n(\rho) + b_{nm} y_n(\rho)] \quad (2.7.132)$$

である. ただし,

$$a_{nm} := a'_{nm} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \quad (2.7.133)$$

$$b_{nm} := b'_{nm} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \quad (2.7.134)$$

と定めた.

さて, 今 Helmholtz 方程式の解の基底展開を行っているのであった. 今までに定義した展開を全てまとめると,

$$\text{式 (2.7.102) より } u(r, \theta, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m(r, \theta) e^{im\phi} \quad (2.7.135)$$

$$\text{式 (2.7.114) より } A_m(r, \theta) = \sum_{n=|m|}^{\infty} B_{nm}(r) P_n^{|m|}(\cos \theta) \quad (2.7.136)$$

$$\text{式 (2.7.122) より } \rho = \kappa r \quad (2.7.137)$$

$$\text{式 (2.7.123) より } B_{nm}(r) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} C_{nm}(\rho) \quad (2.7.138)$$

$$\text{式 (2.7.132) より } C_{nm}(\rho) = \sqrt{\rho} [a_{nm} j_n(\rho) + b_{nm} y_n(\rho)] \quad (2.7.139)$$

となる. 下から上に全て代入して整理すると,

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=|m|}^{\infty} [a_{nm} j_n(\kappa r) + b_{nm} y_n(\kappa r)] P_n^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (2.7.140)$$

となる．今後の計算を行うとき、

$$\langle e^{im'\phi}, e^{im\phi} \rangle = 2\pi \delta_m^{m'} \quad (2.7.141)$$

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \delta_n^{n'} \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (2.7.142)$$

となっているのはいささか都合が悪いので、球面分布関数 $Y_{nm}(\theta, \phi)$ を、

$$Y_{nm}(\theta, \phi) := (-1)^m \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{2n+1}{2} \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \right) P_n^m(x) e^{im\phi} \quad (2.7.143)$$

$$= (-1)^m \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_n^m(x) e^{im\phi} \quad (2.7.144)$$

として定義しておく．球面分布関数を用いて式 (2.7.140) を書き換えれば、

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=|m|}^{\infty} [a_{nm} j_n(\kappa r) + b_{nm} y_n(\kappa r)] (-1)^m \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_n^m(x) e^{im\phi} \quad (2.7.145)$$

となる．定数倍は a_{nm} や b_{nm} で吸収することにする．

2.8 部分波展開

近似法の一つである部分波展開を扱う．まず、半古典論を用いて散乱が起こる条件から、方位量子数 l ごとに波動関数を展開して、 l が小さい波動関数のみ考えればよいことが分かる．次に、波動関数の基底展開について議論を行う．前節の議論より、球 Bessel 関数と球 Neumann 関数を用いて任意の関数が展開できるのであった．また、散乱には ϕ 依存性が無いという条件を用いれば、球 Neumann 関数の成分は 0 であると分かる．さらに、球 Bessel 関数にかかる係数のラベルは方位量子数のラベルと一致することが分かる．

2.8.1 散乱の条件

古典力学において角運動量 \mathbf{L} は、

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v} \quad (2.8.1)$$

と書けるのであった．球対称ポテンシャルの下では、

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = m \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{v} + m\mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (2.8.2)$$

$$= \mathbf{r} \times \mathbf{F} \quad (2.8.3)$$

$$= \mathbf{r} \times (-\nabla V(r)) \quad (2.8.4)$$

$$= \mathbf{r} \times |\nabla V| \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (2.8.5)$$

$$= 0 \quad (2.8.6)$$

より、角運動量は保存される．衝突パラメータを b 、運動量を \mathbf{p} とした粒子の角運動量は、

$$|\mathbf{L}| = |\mathbf{r} \times \mathbf{p}| \quad (2.8.7)$$

$$= pb \quad (2.8.8)$$

である．散乱体を半径 a の球とすると、衝突の条件は

$$b < a \quad (2.8.9)$$

$$L/p < a \quad (2.8.10)$$

$$L < pa \quad (2.8.11)$$

である。つまり、角運動量が小さい粒子のみ散乱することがわかる。

式 (2.8.11) を半古典的な散乱条件へ書き直すことを考える。量子力学では、角運動量の大きさ L は、 $l = 0, 1, 2, \dots$ の値を取る方位量子数 l を用いて $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ と書ける。また、式 (2.7.42) と、式 (2.7.113) の第 2 項以降を見ると、球面分布関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ がラプラシアン of 角度部分の固有関数になっていて、ラプラシアン of 角度部分は、角運動量演算子を \hbar で割ったものであるから角運動量の固有値が $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ であることが分かる。衝突の条件は、

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} < pa = \hbar ka \quad (2.8.12)$$

と書ける。式 (2.8.12) を見れば、散乱の影響を受けるのは l が小さいときのみであることがわかる。よって波動関数を、

$$\psi = \psi^{(l=0)} + \psi^{(l=1)} + \dots \quad (2.8.13)$$

のように異なる l に属する固有関数で展開し、 l が小さい状態についてだけ散乱の影響を考える。これを**部分波展開**という。

2.8.2 部分波展開の計算

波動関数は式 (2.7.145) より、

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{l=|m|}^{\infty} [a_{lm}j_l(\kappa r) + b_{lm}y_l(\kappa r)] (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(x) e^{im\phi} \quad (2.8.14)$$

と書けるのであった。ただし、角運動量演算子の固有関数とラベルを合わせるために $n \rightarrow l$ とした。散乱において、 ϕ 依存性が無いので、 $m = 0$ のみを考えてよく、

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} [a_l j_l(\kappa r) + b_l y_l(\kappa r)] \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(x) \quad (2.8.15)$$

となる。 $a_l := a_{l0}$, $b_l := b_{l0}$ である。また、 $P_l^0 = P_l$ であることに注意する。球 Bessel 関数と球 Neumann 関数は $x \rightarrow 0$ で、

$$j_l(r) \sim \frac{r^l}{(2l+1)!} \left(1 - \frac{r^2}{2(2l+3)} \dots \right) \quad (2.8.16)$$

$$n_l(r) \sim -\frac{(2l-1)!!}{r^{l+1}} \quad (2.8.17)$$

となることが知られている。 $r = 0$ で $\psi(r, \theta)$ が発散しないために、 $\forall l, b_l = 0$ とする。まず、平面波を部分波展開すると、Rayleigh の公式より、

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (2.8.18)$$

と書ける。

球面波は未定係数 a_l をつけて、

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.8.19)$$

と展開される。したがって、部分波展開した散乱の波動関数は、

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.8.20)$$

である。

部分波展開した散乱の波動関数

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.8.21)$$

部分波展開した散乱の散乱振幅

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta) \quad (2.8.22)$$

2.8.3 散乱断面積と全断面積

部分波展開した波動関数より計算した散乱断面積は,

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (2.8.23)$$

$$= \sum_l \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1) a_l^* a_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \quad (2.8.24)$$

である. 全断面積は,

$$\sigma^{\text{tot}} = 2\pi \int \sigma(\theta) \sin \theta d\theta \quad (2.8.25)$$

$$= 2\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)^2 |a_l|^2 \left(\frac{2}{2l+1} \right) \quad (2.8.26)$$

$$= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |a_l|^2 \quad (2.8.27)$$

である. ここで, Legendre 多項式の直交性,

$$\int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'} \quad (2.8.28)$$

を用いた. 以上の議論から, 部分波展開を用いた散乱問題は未定係数 a_l を求めることに帰着する.

2.9 位相シフト

量子力学における散乱では, 散乱の前後で位相が変化する. これを**位相シフト** (Phase shift) とよぶ. 以下の 1 次元の例で位相シフトを確認する. ポテンシャル $V(x)$ の壁が,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ V_0 & (x \geq 0) \end{cases} \quad (2.9.1)$$

のように書かれて, その壁に左から入射する粒子を考える. 入射粒子のエネルギーは $E < V_0$ とする. Schrödinger 方程式を解くことにより波動関数は,

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \frac{k - i\alpha}{k + i\alpha} e^{-ikx} & x < 0 \\ \frac{2k}{k + i\alpha} e^{-\alpha x} & x \geq 0 \end{cases} \quad (2.9.2)$$

となる. ただし, $k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $\alpha := \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$ とおいた. 式 (2.9.2) の第 1 式において, 第 1 項は入射波を, 第 2 項は反射波を表している. 反射波は, $\delta_k := \arg(k + i\alpha)$ とすると, 波動関数は,

$$\psi(x) = e^{ikx} + e^{-2i\delta_k} e^{-ikx} \quad (2.9.3)$$

となる. この δ_k は位相シフトと呼ばれ, 量子力学的散乱を特徴づけるパラメータである.

位相シフトの現象を 3 次元に拡張する. 式 (2.8.21) において $r \rightarrow \infty$ とすると,

$$j_l(kr) \rightarrow \frac{\exp\{i(kr - \frac{l\pi}{2})\} - \exp\{-i(kr - \frac{l\pi}{2})\}}{2ikr} \quad (2.9.4)$$

であるため,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ikr} \left[i^l \left(\exp \left\{ i(kr - \frac{l\pi}{2}) \right\} - \exp \left\{ -i(kr - \frac{l\pi}{2}) \right\} \right) + (2ik)a_l e^{ikr} \right] P_l(\cos \theta) \quad (2.9.5)$$

を得る. さらに,

$$i^l \left[\exp \left\{ i(kr - \frac{l\pi}{2}) \right\} - \exp \left\{ -i(kr - \frac{l\pi}{2}) \right\} \right] = i^l \exp \left(-i \frac{l\pi}{2} \right) (e^{ikr} - e^{-ikr} e^{il\pi}) \quad (2.9.6)$$

$$= 1 \cdot (e^{ikr} - (-1)^l) e^{-ikr} \quad (2.9.7)$$

なる関係を用いると波動関数は,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} [(1 + 2ika_l) e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}] P_l(\cos \theta) \quad (2.9.8)$$

と書ける. 第1項は外向き球面波, 第2項は内向き球面波を表す. この散乱は全反射であるため入射波と反射波の振幅は等しい. つまり,

$$|1 + 2ika_l| = 1 \quad (2.9.9)$$

が成り立つ. よって, 散乱による位相のずれを δ_l とおくと a_l は,

$$1 + 2ika_l = e^{2i\delta_l} \quad (2.9.10)$$

$$\Leftrightarrow a_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) \quad (2.9.11)$$

$$\Leftrightarrow a_l = \frac{1}{2ik} (\cos^2 \delta_l + 2i \sin \delta_l \cos \delta_l - \sin^2 \delta_l - 1) \quad (2.9.12)$$

$$\Leftrightarrow a_l = \frac{1}{2ik} (1 - \sin^2 \delta_l + 2i \sin \delta_l \cos \delta_l - \sin^2 \delta_l - 1) \quad (2.9.13)$$

$$\Leftrightarrow a_l = \frac{1}{2ik} (2i \sin \delta_l \cos \delta_l - 2 \sin^2 \delta_l) \quad (2.9.14)$$

$$\Leftrightarrow a_l = \frac{1}{k} (\cos \delta_l + i \sin \delta_l) \sin \delta_l \quad (2.9.15)$$

$$\Leftrightarrow a_l = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l \quad (2.9.16)$$

である. 全断面積 σ^{tot} は,

$$\sigma^{\text{tot}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |a_l|^2 \quad (2.9.17)$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (2.9.18)$$

である. 散乱振幅 $f(\theta)$ は,

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta) \quad (2.9.19)$$

$$= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (2.9.20)$$

である. 特に $\theta = 0$ のとき,

$$f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (\cos \delta_l + i \sin \delta_l) \sin \delta_l P_l(1) \quad (2.9.21)$$

$$= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(\cos \delta_l + i \sin \delta_l) \sin \delta_l \quad (2.9.22)$$

が成り立つ。したがって以下の**光学定理**が成り立つ。

光学定理

$$\sigma^{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0) \quad (2.9.23)$$

これは全断面積が前方散乱の散乱振幅からわかることを示している⁶。

例題 2.5: 半径 a の剛体球による散乱

散乱体のポテンシャルを,

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r \leq a \\ 0 & r \geq a \end{cases} \quad (2.9.24)$$

とする。低エネルギー散乱 ($ka \ll 1$) とする。このとき、散乱の影響を受けるのはほぼ $l=0$ のみである。式 (2.9.8) において $l=0$ とすることで,

$$\psi(r) = \frac{1}{2ikr} [(1 + 2ika_0)e^{ikr} - e^{-ikr}] P_0(\cos \theta) \quad (2.9.25)$$

を得る。位相シフトを考慮し $e^{2i\delta_0} = 1 + 2ika_0$ とおく。境界条件より

$$\psi(a) = 0 \quad (2.9.26)$$

であるから

$$e^{2i\delta_0} e^{ika} - e^{-ika} = 0 \quad (2.9.27)$$

が成り立つ。よって位相シフトは,

$$\delta_0 = -ka \quad (2.9.28)$$

である。全断面積は

$$\sigma^{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \quad (2.9.29)$$

$$\simeq \frac{4\pi}{k^2} \delta_0^2 \quad (2.9.30)$$

$$= 4\pi a^2 \quad (2.9.31)$$

である。これは古典力学における剛体級の散乱 $\sigma^{\text{tot}} = \pi a^2$ の4倍の値である。波長 $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ が散乱体の半径 a より十分に大きいため、回折によって剛体球を取り囲み、球の表面積を疑似的に増加させたためと説明できる。

例題 2.6: 位相シフトの問題

散乱体から十分遠方での境界条件を満たし、ポテンシャル外における部分波展開した波動関数として,

$$\psi(r) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{2l+1}{2} \left[e^{2i\delta_l} h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr) \right] P_l(\cos \theta) \quad (2.9.32)$$

⁶砂川, 散乱の量子論, 「光学定理は, 前方散乱によって, 入射波の強度が減少した分だけ, 四方に散乱されるという, まことに当然なことを述べているのである。」

を用い, 半径 a の剛体球

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases} \quad (2.9.33)$$

による散乱を考える. 特に, ka が小さい低エネルギー散乱において, l の増大に伴ってその寄与が散乱に対してどの程度小さくなるか調べる. ここで,

$$h_l^{(1)}(kr) = j_l(kr) + in_l(kr), \quad h_l^{(2)}(kr) = j_l(kr) - in_l(kr) \quad (2.9.34)$$

は球 Hankel 関数であり, $j_l(kr)$ は球 Bessel 関数, $n_l(kr)$ は球 Neumann 関数である.

1. 波動関数の境界条件をかんがえることで, 散乱による位相シフト $\tan \delta_l$ を $j_l(ka)$ と $n_l(ka)$ を用いて表せ.

2. 低エネルギー散乱 ($ka \ll 1$) を考える. このとき,

$$j_l(ka) \rightarrow \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(ka) \rightarrow -\frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}} \quad (2.9.35)$$

$$(2l+1)!! = (2l+1)(2l-1) \cdots 5 \cdot 3 \cdot 1 \quad (2.9.36)$$

$$(2l-1)!! = (2l-1)(2l-3) \cdots 3 \cdot 1 \cdot 1 \quad (2.9.37)$$

であることを用いて, $l = 0, 1, 2$ についての位相シフト $\tan \delta_l$ を求めよ. 得られる $\tan \delta_0, \tan \delta_1, \tan \delta_2$ は l の増加と共に位相シフトが急激に小さくなり, ka が小さい時, $l = 0$ だけ考えれば十分であることを示すものである.

1. 波動関数は剛体球の中に侵入できないため $r = a$ で $\psi = 0$ である. よって,

$$e^{2i\delta_l} h_l^{(1)}(ka) + h_l^{(2)}(ka) = 0 \quad (2.9.38)$$

$$e^{2i\delta_l} (j_l(ka) + in_l(ka)) + (j_l(ka) - in_l(ka)) = 0 \quad (2.9.39)$$

$$(e^{2i\delta_l} + 1)j_l(ka) + i(e^{2i\delta_l} - 1)n_l(ka) = 0 \quad (2.9.40)$$

$$2 \cos \delta_l j_l(ka) - 2 \sin \delta_l n_l(ka) = 0 \quad (2.9.41)$$

となり, 位相シフトとして,

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)} \quad (2.9.42)$$

が得られる.

2. 式 (2.9.35) を式 (2.9.42) に代入すると,

$$\tan \delta_l \rightarrow \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!} \left(-\frac{(ka)^{l+1}}{(2l-1)!!} \right) \quad (2.9.43)$$

$$= -\frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \quad (2.9.44)$$

$$(2.9.45)$$

となる. $l = 0, 1, 2$ を代入する. ここで, $(n-2)!! = \frac{n!}{n}$ であることに注意すると,

$$\tan \delta_0 = -ka \quad (2.9.46)$$

$$\tan \delta_1 = -\frac{1}{3}(ka)^3 \quad (2.9.47)$$

$$\tan \delta_2 = -\frac{1}{45}(ka)^5 \quad (2.9.48)$$

となる.

2.10 練習問題

練習問題 2.1: Griffith Problem 10.21 Neutron diffraction

結晶による中性子散乱を考える．中性子と原子核の相互作用は短距離で，

$$V(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2 b}{m} \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (2.10.1)$$

と近似されたとする．ここで， \mathbf{r}_i は i 番目の原子核の位置である． b は nuclear scattering length である．

1. 第 1Born 近似により散乱断面積は

$$\sigma = b^2 \left| \sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \right|^2 \quad (2.10.2)$$

となることを示せ．ここで， $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ ， \mathbf{k} は入射波， \mathbf{k}' は散乱波とする．

2. 原子核が間隔 a の格子状で並んでいるとし，

$$\mathbf{r}_i = la\mathbf{e}_x + ma\mathbf{e}_y + na\mathbf{e}_z \quad (2.10.3)$$

とする．ここで l, m, n は 0 から $N-1$ の整数である．

$$\sigma = b^2 \Pi_{i=x,y,z} \frac{\sin^2(Nq_i a/2)}{\sin^2(q_i a/2)} \quad (2.10.4)$$

となることを示せ．

- 3.

$$\frac{1}{N} \frac{\sin^2(Nq_x a/2)}{\sin^2(q_x a/2)} \quad (2.10.5)$$

を $N = 1, 5, 10$ について横軸を $q_x a$ としたグラフを図示せよ．

1. 散乱振幅を計算する．

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{2\pi\hbar^2 b}{m} \sum_i \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \quad (2.10.6)$$

$$= -b \sum_i \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) d\mathbf{r}' \quad (2.10.7)$$

$$= -b \sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \quad (2.10.8)$$

よって散乱断面積は

$$\sigma = \left| f^{(1)}(\theta) \right|^2 = b^2 \left| \sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \right|^2 \quad (2.10.9)$$

である．

- 2.

$$\sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} = \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} e^{-i(laq_x + maq_y + naq_z)} \quad (2.10.10)$$

$$= \sum_{l=0}^{N-1} e^{-ilaq_x} \sum_{m=0}^{N-1} e^{-imaq_y} \sum_{n=0}^{N-1} e^{-inaq_z} \quad (2.10.11)$$

$$= \prod_{i=x,y,z} \frac{1 - e^{-iNaq_i}}{1 - e^{-iaq_i}} \quad (2.10.12)$$

$$= \prod_{i=x,y,z} \frac{\sin(Nq_i a/2)}{\sin(q_i a/2)} \quad (2.10.13)$$

よって,

$$\sigma = b^2 \prod_{i=x,y,z} \frac{\sin^2(Nq_i a/2)}{\sin^2(q_i a/2)} \quad (2.10.14)$$

が得られる.

3. 散乱パターンは下図のようになる.

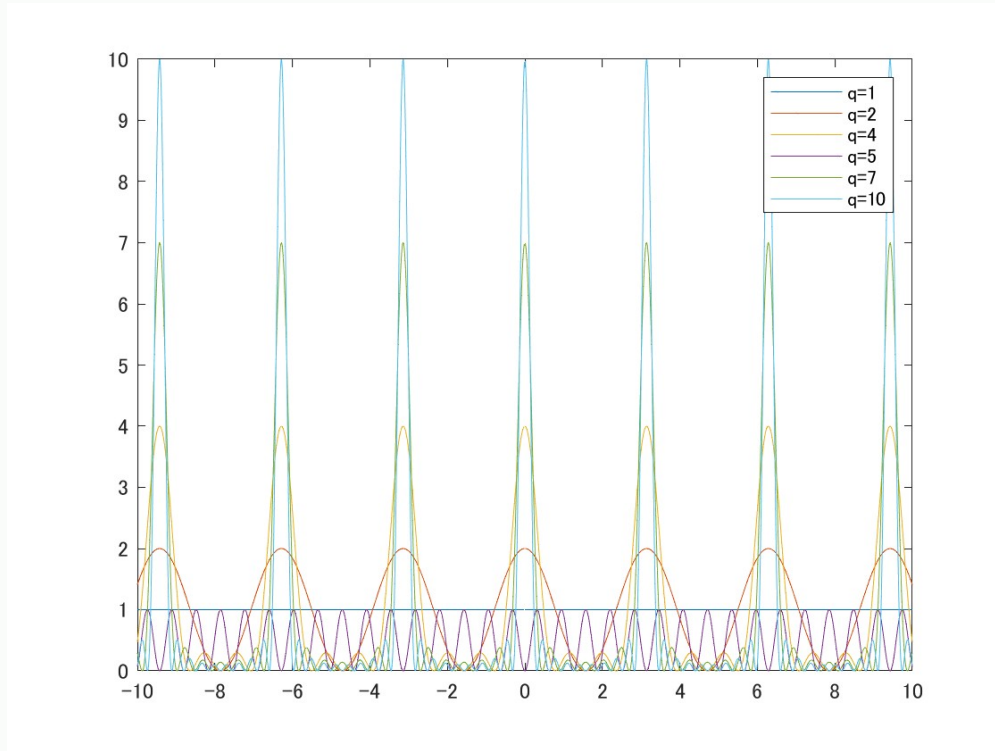


図 2.6: 散乱パターン

練習問題 2.2: Griffith Problem10.22 2次元散乱理論

2次元の散乱を考える.

1. 極座標ラプラシアン

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad (2.10.15)$$

を用いてポテンシャル $V(r)$ の下での波動関数を求めよ. ここで $u(r) = \sqrt{r}R(r)$ が

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(j^2 - 1/4)}{r^2} \right] u = Eu \quad (2.10.16)$$

を満たすことを用いてよい。 j は整数である。

2. r が十分大きいときの式 (2.10.16) を考えることにより,

$$R(r) \sim \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} \quad (2.10.17)$$

であることを示せ。ここで, $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ である。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r, \theta) = E \psi(r, \theta) \quad (2.10.18)$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + V(r) \right] \psi(r, \theta) = E \psi(r, \theta) \quad (2.10.19)$$

$\psi(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$ とし, 上式を整理すると

$$\frac{r^2}{R(r)} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} R(r) \right) - \frac{r}{R(r)} \left(\frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) - \frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Theta(\theta) = 0 \quad (2.10.20)$$

となる。

$$-\frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Theta(\theta) = j^2 \quad (2.10.21)$$

とすれば

$$\Theta(\theta) = e^{ij\theta} \quad (2.10.22)$$

が得られる。さらに,

$$\Theta(\theta) = \Theta(\theta + 2\pi) \quad (2.10.23)$$

だから j は整数であることがわかる。よって r に関する部分は

$$\frac{r^2}{R(r)} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} R(r) \right) - \frac{r}{R(r)} \left(\frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) = -j^2 \quad (2.10.24)$$

である。整理すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} R(r) - \frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\partial}{\partial r} R(r) + (V(r) - E)R(r) + \frac{\hbar^2 j^2}{2mr^2} R(r) = 0 \quad (2.10.25)$$

である。これは式 (2.10.16) に $u = \sqrt{r}R$ を代入した式と同一である。よって波動関数は

$$\psi(r, \theta) = R(r)e^{ij\theta} \quad (2.10.26)$$

と表されることがわかる。ただし, j は整数, $u = \sqrt{r}R$ が

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(j^2 - 1/4)}{r^2} \right] u = Eu \quad (2.10.27)$$

を満たすとする。

式 (2.10.16) で $r \rightarrow \infty$ とすれば

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{du^2} = Eu \quad (2.10.28)$$

であるため,

$$R(r) = \frac{u}{\sqrt{r}} = \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} \quad (2.10.29)$$

であることがわかる.

以上の結果は 2 次元の散乱問題の境界条件が

$$\psi(r, \theta) \simeq e^{ikx} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}, \text{ for } r \rightarrow \infty \quad (2.10.30)$$

であることを示唆している. また, 2 次元の部分波展開は Hankel 関数 $H^{(1)}$ を用いて,

$$\psi(r, \theta) = e^{ikx} + \sum_j c_j H_j^{(1)}(kr) e^{ij\theta} \quad (2.10.31)$$

となる.

練習問題 2.3: Griffith example11.2

Fermi の黄金律を用いてポテンシャル $V(\mathbf{r})$ に対する散乱断面積を求めよ.

初期状態と終状態はそれぞれ入射波と散乱波であるため

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.10.32)$$

$$\psi_f = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \quad (2.10.33)$$

と表される. ここで, 規格化のために周期 L の周期的境界条件を課した. また, この周期的境界条件により,

$$\mathbf{k}' = \frac{2\pi}{L} (n_x \mathbf{e}_x + n_y \mathbf{e}_y + n_z \mathbf{e}_z) \quad (2.10.34)$$

が得られる. n_x, n_y, n_z は整数である. 散乱体のポテンシャル $V(\mathbf{r})$ を摂動として取り入れると

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle = \int \psi_f^* V(\mathbf{r}) \psi_i d\mathbf{r} = \frac{1}{L^3} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.10.35)$$

を得る.

次に, 状態密度を決定する. エネルギーが $[E, E + dE]$ の状態は, 厚さ k , 立体角 $d\Omega$ の球殻の中に

$$\frac{k^2 dk d\Omega}{(2\pi/L)^3} \quad (2.10.36)$$

個含まれている. よって,

$$\rho(E) dE = \frac{k^2 dk d\Omega}{(2\pi/L)^3} = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 k^2 \frac{dk}{dE} dE d\Omega \quad (2.10.37)$$

$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ なので,

$$\rho(E) = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{\sqrt{2m^3 E}}{\hbar^3} d\Omega \quad (2.10.38)$$

が得られる. よって, Fermi の黄金律から, 単位時間に立体角 $d\Omega$ に粒子が到達する確率は

$$\omega_{i \rightarrow d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{L^6} \left| \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{\sqrt{2m^3 E}}{\hbar^3} d\Omega \quad (2.10.39)$$

である。さらに,

$$\sigma d\Omega = \frac{(\text{単位時間に立体角 } d\Omega \text{ に粒子が到達する確率})}{(\text{単位時間単位面積あたりに粒子が入射する確率})} \quad (2.10.40)$$

であり, 分子は入射波の確率の流れである。これは

$$J = \frac{1}{L^3} \frac{\hbar k}{m} \quad (2.10.41)$$

である。以上より, 散乱断面積

$$\sigma = \frac{\omega_{i \rightarrow d\Omega}}{J d\Omega} = \left| -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2 \quad (2.10.42)$$

が得られる。これは第 1Born 近似で得られた式と同一である。



Chapter 3

相対論的量子論

3.1 特殊相対論

特殊相対性理論 (Special Relativity) は次の 2 つの事柄を原理とする。

特殊相対性原理

あらゆる慣性系で同じ物理法則が成り立つ。

光速不変の原理

あらゆる慣性系で真空中の光の速さは同一である。

この原理の下で成り立つ座標変換の法則 (Lorentz 変換) を導く。まず、慣性系 X 系の原点 O と X' 系の原点 O' が $t = t' = 0$ で一致している。 $t = t' = 0$ で光が原点 ($O = O'$) を通過したとする。 X 系の空間座標を (x, y, z) , X' 系の空間座標を (x', y', z') とすると、光速不変の原理より、

$$\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{t} = \frac{\sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2}}{t'} = c \quad (3.1.1)$$

が成り立つ。上式から世界長さ (spacetime interval)

$$s^2 = x^2 + y^2 + z^2 - (ct)^2 \quad (3.1.2)$$

が不変であることが導かれる。

次に、世界長さ不変性から、慣性系間の座標変換の法則である **Lorentz 変換** (Lorentz Transformation) を導出する。慣性系 X' が x 軸正の方向に速さ v で移動しているとする。このとき $y = y', z = z'$ である。わかりやすいように $T = it$ とおく。光速不変より、

$$x^2 - (ct)^2 = x'^2 - (ct')^2 \quad (3.1.3)$$

$$x^2 + (cT)^2 = x'^2 + (cT')^2 \quad (3.1.4)$$

が成り立つ。これが回転座標変換と類似していることから、

$$\begin{pmatrix} cT' \\ x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} cT \\ x \end{pmatrix} \quad (3.1.5)$$

と置く。表示を t に戻すと

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & i \sin \theta \\ i \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \end{pmatrix} \quad (3.1.6)$$

である。さらに、 $\theta = i\phi$ とすると

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \phi & -\sinh \phi \\ -\sinh \phi & \cosh \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \end{pmatrix} \quad (3.1.7)$$



となる。よって、

$$x' = (-\sinh \phi)ct + (\cosh \phi)x \quad (3.1.8)$$

を得る。\$X\$ 系において時刻 \$t\$ が経過したとする。\$X\$ 系から見る \$X'\$ 系の原点の位置は \$x = vt\$ である。一方、\$X'\$ 系から見ると \$x' = 0\$ である。よって上式から

$$0 = (-\sinh \phi)ct + (\cosh \phi)vt \quad (3.1.9)$$

が成り立つ。よって、これを变形すると

$$\frac{v}{c} = \frac{\sinh \phi}{\cosh \phi} = \tanh \phi \quad (3.1.10)$$

である。以上より、

$$\begin{cases} \sinh \phi = \frac{v/c}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \\ \cosh \phi = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \end{cases} \quad (3.1.11)$$

であることがわかる。したがって、

Lorentz 変換

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \begin{pmatrix} 1 & -v/c \\ -v/c & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \end{pmatrix} \quad (3.1.12)$$

を得る。Lorentz 変換

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \quad (3.1.13)$$

において \$v \ll c\$ とすると

$$x' = x - vt \quad (3.1.14)$$

となる。これは Galilei 変換と一致している。

次に、相対論的效果を取り込んだ速度の合成則について示す。状況は、\$X\$ 系は静止し、\$X'\$ 系が速さ \$v\$ で \$x\$ 軸方向に移動しているとする。さらに \$X'\$ 系では粒子が速さ \$u'\$ で \$x'\$ 軸方向に運動している。\$X\$ 系から見た粒子の速度 \$V\$ を求める。式 (3.1.12) において \$v \to -v\$ とすると

$$\begin{pmatrix} c dt \\ dx \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \begin{pmatrix} 1 & v/c \\ v/c & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c dt' \\ dx' \end{pmatrix} \quad (3.1.15)$$

となる。\$V = \frac{dx}{dt}\$ なので

$$V = \frac{dx}{dt} = \frac{v dt' + dx'}{dt' + (v/c^2) dx'} \quad (3.1.16)$$

$$= \frac{v + \frac{dx'}{dt'}}{1 + (v/c^2) \frac{dx'}{dt'}} \quad (3.1.17)$$

$$= \frac{v + u'}{1 + \frac{vu'}{c^2}} \quad (3.1.18)$$

を得る。



速度の合成

$$V = \frac{v + u'}{1 + \frac{vu'}{c^2}} \quad (3.1.19)$$

例として $u' = v = c$ とすると

$$V = \frac{2c}{1 + c^2/c^2} = c \quad (3.1.20)$$

である。速度が合成されても光速を超えることは決してないことがわかる。

Lorentz 収縮 (Length Contractions) について説明する。速さ v で運動している X' 系から、 $t' = 0$ において、静止している X 系の2点を見る。1点は原点 $O: (x, t) = (0, 0)$ もう1点は $P: (x, t) = (L, t)$ とする。まず、原点 O は X' 系から見ると

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \begin{pmatrix} 1 & -v/c \\ -v/c & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.1.21)$$

である。点 P を X' 系から見ると、

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \begin{pmatrix} 1 & -v/c \\ -v/c & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ L \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \begin{pmatrix} ct - \frac{v}{c}L \\ -vt + L \end{pmatrix} \quad (3.1.22)$$

である。 $t' = 0$ で観測しているため、 $t' = 0$ を代入し

$$0 = ct - \frac{v}{c}L \quad (3.1.23)$$

$$t = \frac{v}{c^2}L \quad (3.1.24)$$

を得る。よって、

$$x' = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \left(-\left(\frac{v}{c}\right)^2 L + L \right) = \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2} L \quad (3.1.25)$$

である。これは動いている慣性系から静止系での距離 (L) を測る (L') と縮んで見えることを意味している。

Lorentz 収縮

$$L' = \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2} L \quad (3.1.26)$$

また、その対象に対して静止している観測者が測った距離を**固有長さ** (proper length) という。今回は L が固有長さである。

次に**時間の遅れ** (Time Dilations) について説明する。同様の X 系と X' 系を考える。時計が X' 系の原点 $x' = 0$ に置かれており、観測者は X' 系においてこの時計を見ている。 X' 系に置かれた時計の時刻が t' のときの時空点 P_1 , $t' + \Delta T_0$ の時空点を P_2 とする。 P_1 は、

$$\begin{pmatrix} ct_1 \\ x_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \begin{pmatrix} 1 & v/c \\ v/c & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct' \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \begin{pmatrix} ct' \\ vt' \end{pmatrix} \quad (3.1.27)$$

P_2 は、

$$\begin{pmatrix} ct_1 \\ x_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \begin{pmatrix} 1 & v/c \\ v/c & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c(t' + \Delta T_0) \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \begin{pmatrix} c(t' + \Delta T_0) \\ v(t' + \Delta T_0) \end{pmatrix} \quad (3.1.28)$$

である。よって、 X 系での時間経過 $\Delta T = t_2 - t_1$ は、

$$\Delta T = t_2 - t_1 = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \Delta T_0 \quad (3.1.29)$$

である。これは X' 系は X 系に比べて時間の流れが遅いことを示している。

時間の遅れ

$$\Delta T = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \Delta \tau \quad (3.1.30)$$

観測者に対して 2 つの事象が同一の空間座標で起きたとき、その時間間隔 $\Delta \tau$ を**固有時間** (proper time) という。

電磁場の双対性について説明する。マクスウェル方程式は 3 次元では次の 4 つの式である。

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{j} \end{cases} \quad (3.1.31)$$

これを Lorentz 変換に対して共変な形式に書き直す。まず、 \mathbf{B} と bmE はベクトルポテンシャル \mathbf{A} とスカラーポテンシャル ϕ を用いて

$$\begin{cases} \mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \\ \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \end{cases} \quad (3.1.32)$$

と表される。ここで、座標を

$$(x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z) \quad (3.1.33)$$

と表し¹、4 元ベクトルポテンシャルを

$$A^\mu = (\phi, c\mathbf{A}) \quad (3.1.34)$$

$$A_\mu = (\phi, -c\mathbf{A}) \quad (3.1.35)$$

と定義する。この 4 元ベクトルポテンシャルを使うと電場と磁場は

$$B_x = c \frac{\partial A_z}{\partial y} - c \frac{\partial A_y}{\partial z} \quad (3.1.36)$$

$$= -\frac{\partial A_3}{\partial x^2} + \frac{\partial A_2}{\partial x^3} \quad (3.1.37)$$

$$= \partial_3 A_2 - \partial_2 A_3 \quad (3.1.38)$$

$$E_x = -\frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} \quad (3.1.39)$$

$$= -\frac{\partial A_0}{\partial x^1} + \frac{\partial A_1}{\partial x^0} \quad (3.1.40)$$

$$= \partial_0 A_1 - \partial_1 A_0 \quad (3.1.41)$$

のように書ける。ここで、電磁場テンソル

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (3.1.42)$$

を定義する。これを行列の形で表すと

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} F_{00} & F_{01} & F_{02} & F_{03} \\ F_{10} & F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{20} & F_{21} & F_{22} & F_{23} \\ F_{30} & F_{31} & F_{32} & F_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ -E_x & 0 & -cB_z & cB_y \\ -E_y & cB_z & 0 & -cB_x \\ -E_z & -cB_y & cB_x & 0 \end{pmatrix} \quad (3.1.43)$$

¹このような 4 次元空間を **Minkovski 空間**という。

である．明らかに $F_{\mu\nu} = -F_{\nu\mu}$ である．また，この定義から

$$\partial_\mu F_{\nu\lambda} + \partial_\nu F_{\lambda\mu} + \partial_\lambda F_{\mu\nu} = 0 \quad (3.1.44)$$

が成り立つ．実際に計算してみると

$$\partial_\mu F_{\nu\lambda} + \partial_\nu F_{\lambda\mu} + \partial_\lambda F_{\mu\nu} \quad (3.1.45)$$

$$= (\partial_\mu \partial_\nu A_\lambda - \partial_\mu \partial_\lambda A_\nu) + (\partial_\nu \partial_\lambda A_\mu - \partial_\nu \partial_\mu A_\lambda) + (\partial_\lambda \partial_\mu A_\nu - \partial_\lambda \partial_\nu A_\mu) \quad (3.1.46)$$

$$= 0 \quad (3.1.47)$$

である．これは Faraday の電磁誘導の法則と磁束密度に関する Gauss の法則を表している．例えば $\mu = 0, \nu = 1, \lambda = 2$ とすると

$$\partial_0 F_{12} + \partial_1 F_{20} + \partial_2 F_{01} \quad (3.1.48)$$

$$= -\frac{\partial(cB_z)}{\partial(ct)} + \frac{\partial}{\partial x}(-E_y) + \frac{\partial}{\partial y}(-E_x) \quad (3.1.49)$$

$$= -(\nabla \times \mathbf{E})_z - \frac{\partial B_z}{\partial t} = 0 \quad (3.1.50)$$

$\mu = 1, \nu = 2, \lambda = 3$ とすると

$$\partial_1 F_{23} + \partial_2 F_{31} + \partial_3 F_{12} \quad (3.1.51)$$

$$= c(\partial_x B_x + \partial_y B_y + \partial_z B_z) \quad (3.1.52)$$

$$= c\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3.1.53)$$

が得られる．さらに，磁場/電束密度テンソル $H_{\mu\nu}$ を

$$H_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & H_{02} & H_{03} \\ H_{10} & H_{11} & H_{12} & H_{13} \\ H_{20} & H_{21} & H_{22} & H_{23} \\ H_{30} & H_{31} & H_{32} & H_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & cD_x & cD_y & cD_z \\ -cD_x & 0 & -H_z & H_y \\ -cD_y & H_z & 0 & -H_x \\ -cD_z & -H_y & H_x & 0 \end{pmatrix} \quad (3.1.54)$$

4 次元の電流密度を j^μ を

$$j^\mu = (c\rho, \mathbf{j}) \quad (3.1.55)$$

と定義する．明らかに $H_{\mu\nu} = -H_{\nu\mu}$ である．すると，電束密度に関する Gauss の法則と Ampère の法則は次の式で表される．

$$\partial^\nu H_{\nu\mu} = j_\mu \quad (3.1.56)$$

例えば $\mu = 0$ とすると

$$\partial^1 H_{10} + \partial^2 H_{20} + \partial^3 H_{30} = j_0 \quad (3.1.57)$$

$$\partial_x D_x + \partial_y D_y + \partial_z D_z = \rho \quad (3.1.58)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (3.1.59)$$

が導かれる．さらに，電荷保存則

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (3.1.60)$$

から

$$\frac{\partial(c\rho)}{\partial(ct)} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (3.1.61)$$

よって

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (3.1.62)$$

が得られる。以上をまとめると Maxwell 方程式は

$$\begin{cases} \partial_\mu F_{\nu\lambda} + \partial_\nu F_{\lambda\mu} + \partial_\lambda F_{\mu\nu} = 0 \\ \partial^\nu H_{\nu\mu} = j_\mu \\ \partial_\mu j^\mu = 0 \end{cases} \quad (3.1.63)$$

と書くことができる。これらの式はテンソルとテンソル、ベクトルとベクトルというように、Lorentz 変換に対して同じ変換則をもつものどうしが結ばれている。よってこれらは Lorentz 変換に対して共変である。

Lorentz 変換に対して共変な Maxwell 方程式

$$\partial_\mu F_{\nu\lambda} + \partial_\nu F_{\lambda\mu} + \partial_\lambda F_{\mu\nu} = 0 \quad (3.1.64)$$

$$\partial^\nu H_{\nu\mu} = j_\mu \quad (3.1.65)$$

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (3.1.66)$$

運動する電荷と電流を例に電磁場の双対性を確認してみよう。導線には z 軸上向きに電流 I が流れている。電荷 $+q$ が z 軸上向きに速さ v_0 で運動している。導線の中では面電荷密度 $\lambda_\pm = \pm\lambda/2$ の正(負)電荷が速さ v で上(下)向きに動いているとする。まずは静止系で考える。導線の中では

$$\lambda_+ + \lambda_- = 0 \quad (3.1.67)$$

が成り立つため、電氣的に中性である。よって導線の周りには電場は無い。電流は $I = \lambda v$ と表される。導線の周りには

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0 I}{2\pi r} \mathbf{e}_\phi = \frac{\mu_0 \lambda v}{2\pi r} \mathbf{e}_\phi \quad (3.1.68)$$

の磁束密度が発生している。よって電荷は

$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} = -qv_0 \frac{\mu_0 \lambda v}{2\pi r} \mathbf{e}_r \quad (3.1.69)$$

の力を感じる。

これを電荷とともに動く系で考える。非相対論的に考えると $v = 0$ であるため電荷は力を感じない。しかし、特殊相対性原理よりこれはありえない。相対論的效果を考慮してこの状況を眺める必要がある。観測者からは導線中の正電荷は $v - v_0$ で、負電荷は $v + v_0$ で運動して見える。それぞれで Lorentz 収縮を計算する。

$$\lambda_+ = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v-v_0}{c}\right)^2}} \frac{\lambda}{2} \quad (3.1.70)$$

$$\lambda_- = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v+v_0}{c}\right)^2}} \left(-\frac{\lambda}{2}\right) \quad (3.1.71)$$

明らかに

$$\lambda_+ + \lambda_- \neq 0 \quad (3.1.72)$$

であることがわかる。よって、導線の周りには電場が発生している。 $v, v_0 \ll c$ とすると

$$\lambda_+ + \lambda_- = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v-v_0}{c}\right)^2}} \frac{\lambda}{2} - \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v+v_0}{c}\right)^2}} \frac{\lambda}{2} \quad (3.1.73)$$

$$\simeq \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{v-v_0}{c}\right)^2\right) \frac{\lambda}{2} - \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{v+v_0}{c}\right)^2\right) \frac{\lambda}{2} \quad (3.1.74)$$

$$= -\frac{\lambda v_0 v}{c^2} \equiv \Delta\lambda \quad (3.1.75)$$

と計算でき、導線は負に帯電していることがわかる。よって、電荷の受ける力は

$$\mathbf{F} = q \frac{\Delta\lambda}{2\pi r \epsilon_0} \mathbf{e}_r \quad (3.1.76)$$

$$= -qv_0 \frac{\mu_0 \lambda v}{2\pi r} e_r \quad (3.1.77)$$

これは先ほどの計算結果と一致している。以上の考察から、電場と磁場は観測する系によって入り混じることがわかる。

3.2 量子力学の修正

本節では Shrödinger 方程式を修正し、Lorentz 共変性を有する **Dirac 方程式** を導く。

Shrödinger 方程式は、ハミルトニアン $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V = E$ と運動量 \mathbf{p} に対して

$$E \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + V, \quad \mathbf{p} \Rightarrow -i\hbar \nabla \quad (3.2.1)$$

という置き換えをすることにより得られた。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi \quad (3.2.2)$$

しかし、式 (3.2.2) は Lorentz 共変性をもたない、つまり、相対論と矛盾している。なぜなら、相対論によると時間と空間は同等であるが、式 (3.2.2) は時間の 1 階微分、空間の 2 階微分をなっているからである。

相対論的な電子の運動を記述する試みの一つに **Klein-Gordon 方程式** がある²。まずはこれを導いてみる。静止している X 系と一定の速さ v で動く X' 系を考える。 $t = d\tau$ における X' 系の原点 O' の座標は

$$\begin{cases} X' \text{ 系} & (c d\tau, 0, 0, 0) \\ X \text{ 系} & (c dt, dx, dy, dz) \end{cases} \quad (3.2.3)$$

である。世界長さ不変性より

$$dx^2 + dy^2 + dz^2 - (c dt)^2 = -(c d\tau)^2 \quad (3.2.4)$$

が成り立つ。上式に m^2 を乗じ、 $(d\tau^2)$ で割る。

$$\left(m \frac{dx}{dt} \right)^2 + \left(m \frac{dz}{dt} \right)^2 + \left(m \frac{dy}{dt} \right)^2 - \left(mc \frac{dt}{d\tau} \right)^2 = -(mc)^2 \quad (3.2.5)$$

左辺の第 1 項から第 3 項は運動量 p_x, p_y, p_z と同じ形をしているので

$$\mathbf{p}^2 \equiv \left(m \frac{dx}{dt} \right)^2 + \left(m \frac{dz}{dt} \right)^2 + \left(m \frac{dy}{dt} \right)^2 \quad (3.2.6)$$

と置く。左辺第 4 項はとりあえず p_0 と置いておく。つまり、

$$\mathbf{p}^2 - p_0^2 = -(mc)^2 \quad (3.2.7)$$

である。 p_0 について計算を進めると、

$$\mathbf{p}^2 - p_0^2 = -(mc)^2 \quad (3.2.8)$$

$$p_0^2 = \mathbf{p}^2 + (mc)^2 \quad (3.2.9)$$

$$p_0 = \sqrt{\mathbf{p}^2 + (mc)^2} \quad (3.2.10)$$

$$= mc \sqrt{1 + \frac{\mathbf{p}^2}{m^2 c^2}} \quad (3.2.11)$$

$$\simeq mc + \frac{1}{2} mc \frac{\mathbf{p}^2}{m^2 c^2} \quad (|\mathbf{p}| \ll mc^2) \quad (3.2.12)$$

$$= mc + \frac{\mathbf{p}^2}{2mc} \quad (3.2.13)$$

²O.Klein(1894-1977), W.Gordon(??)

を得る．最後の式の右辺第2項はエネルギーを c で割ったものになっていることに気づく．よって， p_0 に c を乗じたものはエネルギーを表すと解釈する．したがって，

$$E \equiv p_0 c = mc^2 + \frac{p^2}{2m} \quad (3.2.14)$$

が得られる．これが相対論的な粒子のエネルギーであり， mc^2 は**静止質量エネルギー**と呼ばれている³．

式 (3.2.7) に $p_0 = E/c$ を代入する．

$$p^2 - \left(\frac{E}{c}\right)^2 = -(mc)^2 \quad (3.2.15)$$

これに対し素直に

$$E \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + V, \quad p \Rightarrow -i\hbar \nabla \quad (3.2.16)$$

という量子化を実行し，波動関数に作用させる．

$$\left(-\hbar^2 \nabla^2 + \frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \psi = -m^2 c^2 \psi \quad (3.2.17)$$

これを变形すると Klein-Gordon 方程式

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi = 0 \quad (3.2.18)$$

が得られる．また，これはダランベルシアン (d'Alembertian) $\square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 = \partial^\mu \partial_\mu = \partial^2$ を用いて，

$$\left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi = 0 \quad (3.2.19)$$

と書くことができる．

Klein-Gordon 方程式

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi = 0 \quad (3.2.20)$$

Klein-Gordon 方程式は時間と空間を同等に扱っており，Lorentz 共変性を満たしている．しかし，これには波動関数の確率解釈が成り立たないという問題がある．これは以下のように説明される．式 (3.2.18) は2階の微分方程式である．よって， ψ と $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ は独立に指定される．そのため，粒子の存在確率が保存するためには

$$\frac{d}{dt} \left[\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}^2 \right] = 0 \quad (3.2.21)$$

が必要であるが， ψ と $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ が独立に決められるため

$$\frac{d}{dt} \left[\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}^2 \right] \quad (3.2.22)$$

$$= \int \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] d\mathbf{r} \neq 0 \quad (3.2.23)$$

となってしまう．よって，波動関数の確率解釈が成り立たないため，量子状態を記述する方程式として不適である⁴．

³有名な $E = mc^2$ である．

⁴Klein-Gordon 方程式はスピン 0 の粒子の場の方程式である．

以上の議論から、相対論的粒子の運動を記述する方程式は時間と空間の1階微分であることが必要だと推察される。Diracはこの問題を次のように解決した。まずは

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \hat{\alpha} \cdot \nabla + i\hat{\beta}\frac{mc}{\hbar}\right)\psi = 0 \quad (3.2.24)$$

を出発点とする。式(3.2.18)と式(3.2.24)を見比べて演算子が

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \hat{\alpha} \cdot \nabla - i\hat{\beta}\frac{mc}{\hbar}\right)\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \hat{\alpha} \cdot \nabla + i\hat{\beta}\frac{mc}{\hbar}\right) \quad (3.2.25)$$

のように因数分解できればよいとわかる⁵。見やすくするために少し表記を変える。

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \hat{\alpha} \cdot \nabla + i\hat{\beta}\frac{mc}{\hbar} = \frac{1}{c}\partial_t + \sum_{i=x,y,z} \hat{\alpha}_i \partial_i + i\hat{\beta}\frac{mc}{\hbar} \quad (3.2.26)$$

こうすると、

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \hat{\alpha} \cdot \nabla - i\hat{\beta}\frac{mc}{\hbar}\right)\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \hat{\alpha} \cdot \nabla + i\hat{\beta}\frac{mc}{\hbar}\right) \quad (3.2.27)$$

$$= \left(\frac{1}{c}\partial_t - \sum_{i=x,y,z} \hat{\alpha}_i \partial_i - i\hat{\beta}\frac{mc}{\hbar}\right)\left(\frac{1}{c}\partial_t + \sum_{j=x,y,z} \hat{\alpha}_j \partial_j + i\hat{\beta}\frac{mc}{\hbar}\right) \quad (3.2.28)$$

$$= \frac{1}{c^2}\partial_t^2 + \frac{1}{c}\partial_t \left(-\sum_{i=x,y,z} \hat{\alpha}_i \partial_i + \sum_{j=x,y,z} \hat{\alpha}_j \partial_j\right) + \frac{1}{c}i\hat{\beta}\frac{mc}{\hbar} - \frac{1}{c}i\hat{\beta}\frac{mc}{\hbar} - \sum_{i=x,y,z} \sum_{j=x,y,z} \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j \partial_i \partial_j \quad (3.2.29)$$

$$- i\frac{mc}{\hbar} \left(\sum_{i=x,y,z} \hat{\alpha}_i \hat{\beta} \partial_i + \sum_{j=x,y,z} \hat{\beta} \hat{\alpha}_j \partial_j\right) + \hat{\beta}^2 \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \quad (3.2.30)$$

$$= \frac{1}{c^2}\partial_t^2 - \sum_{i=x,y,z} \hat{\alpha}_i^2 \partial_i^2 - \sum_{i=x,y,z} \sum_{j=x,y,z, i \neq j} \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j \partial_i \partial_j - i\frac{mc}{\hbar} \left(\sum_{i=x,y,z} (\hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i) \partial_i\right) + \hat{\beta}^2 \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \quad (3.2.31)$$

を得る。よって、この因数分解が成り立つには $\hat{\alpha}$ と $\hat{\beta}$ が

$$\begin{cases} \sum_{i=x,y,z} \hat{\alpha}_i^2 = \hat{\beta}^2 = 1 \\ \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_j = 0 \quad (j \neq k) \\ \hat{\alpha}_j \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_j = 0 \end{cases} \quad (3.2.32)$$

を満たさなければならない。この条件を満たすには $\hat{\alpha}$ と $\hat{\beta}$ が行列である必要がある⁶。

次に、 α_i と β を求めていく⁷。ハミルトニアンはエルミート演算子なので、 α_i 、 β もエルミート行列である。さらに、式(??)より、

$$\alpha_i^2 = I, \quad \beta^2 = I \quad (3.2.33)$$

である。まずは β に関して考える。エルミート行列は適当なユニタリ行列によって対角化される。つまり、適当なユニタリ行列を V として

$$\beta' = V^\dagger \beta V = \text{diag}(b_1, b_2, \dots, b_n) \quad (3.2.34)$$

とできる。diagは()内を対角成分とする対角行列を表す。 n は行列の次元である。さらに

$$\beta'^2 = (V^\dagger \beta V)^2 = V^\dagger \beta^2 V = \text{diag}(b_1^2, b_2^2, \dots, b_n^2) \quad (3.2.35)$$

⁵ α (の各成分)と β が交換関係を満たす数字であるか否かは明確ではないのでハットをつけた。

⁶行列であることが明確なのでハットを外す。

⁷Dirac-Pauli表示まで読み飛ばしてよい。



である。 $\beta^2 = I$ より、

$$\beta'^2 = V^\dagger IV = I \quad (3.2.36)$$

だから、

$$b_1^2 = b_2^2 = \dots = b_n^2 = 1 \quad (3.2.37)$$

を得る。よって、 β の固有値は ± 1 であることがわかる。また、

$$\hat{\alpha}_j \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_j = 0 \quad (3.2.38)$$

より、

$$\beta = -\alpha_i \beta \alpha_i^{-1} = -\alpha_i \beta \alpha_i \quad (3.2.39)$$

が成り立つ。これを用いて β のトレースを計算する。

$$\text{tr}(\beta) = \text{tr}(\beta I) \quad (3.2.40)$$

$$= \text{tr}(\beta \alpha_i^2) \quad (3.2.41)$$

$$= \text{tr}(\alpha_i \beta \alpha_i) \quad (3.2.42)$$

$$= -\text{tr}(\beta) \quad (3.2.43)$$

$$\Rightarrow 2 \text{tr}(\beta) = 0 \quad (3.2.44)$$

よって、 β の対角成分の和は 0 である。対角成分は ± 1 であることがわかっているので、 β は偶数次元の行列であることがわかる。以上の議論は α^i でも同様である。ここで式 (3.2.24) を眺めてみると、 $m \neq 0$ の場合、独立な 4 つの行列が必要なことが確認できる。偶数次元で最小行列は 2 行 2 列である。しかし、2 行 2 列で独立なエルミート行列は 3 つ (Pauli 行列など) しかない。よって、質量をもつ粒子の運動を記述するのに必要なエルミート行列の次元は 4 以上であることがわかる⁸。

その中の一つが **Dirac-Pauli 表示**で、以下のように表される⁹。

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.45)$$

$$\alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.46)$$

$$\alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.47)$$

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (3.2.48)$$

4 行 4 列のエルミート行列で式 (3.2.32) を満たすものは、これらか、そのユニタリ同値なものしかない¹⁰。
式 (3.2.24) を変形することで **Dirac 方程式**が得られる。

⁸質量 0 の粒子を記述する Weyl 行列は 2 行 2 列の行列を用いる。

⁹実際に計算して確かめよ。

¹⁰これは Clifford 代数を考えることで導ける。らしい。Clifford 代数とは

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu} I \quad (3.2.49)$$

という関係のことである。 $\eta^{\mu\nu}$ は計量テンソル。



Dirac 方程式

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} - \beta mc^2 \right) \psi = 0 \quad (3.2.50)$$

α , β は式 (3.2.32) を満たす。また, Dirac-Pauli 表示を用いると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \begin{pmatrix} mc^2 I & -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \\ -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} & -mc^2 I \end{pmatrix} \psi \quad (3.2.51)$$

と書ける。成分表示で

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & -i\hbar c \partial_z & -i\hbar c (\partial_x - i\partial_y) \\ 0 & mc^2 & -i\hbar c (\partial_x + i\partial_y) & i\hbar c \partial_z \\ -i\hbar c \partial_z & -i\hbar c (\partial_x - i\partial_y) & -mc^2 & 0 \\ -i\hbar c (\partial_x + i\partial_y) & i\hbar c \partial_z & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \psi \quad (3.2.52)$$

である。

Dirac 方程式を見ると, 波動関数も 4 成分必要であることがわかる。つまり,

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (3.2.53)$$

である。このような量を **Dirac spinor** という。4 成分であるが, 4 元ベクトルとは異なる数学的性質をもつ。

Dirac 方程式が確率の保存則を満たすことを確認する。確率密度を

$$\rho = \psi^\dagger \psi \quad (3.2.54)$$

と定義する。Dirac 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2) \psi \quad (3.2.55)$$

より,

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi = -c \boldsymbol{\alpha} \cdot (\boldsymbol{\nabla} \psi) - i \frac{mc^2}{\hbar} \beta \psi \quad (3.2.56)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger = -(\boldsymbol{\nabla} \psi^\dagger) \cdot c \boldsymbol{\alpha} + i \frac{mc^2}{\hbar} \psi^\dagger \beta \quad (3.2.57)$$

が成り立っている。よって, 確率密度の時間変化は

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger \right) \psi + \psi^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi \right) \quad (3.2.58)$$

$$= -c (\boldsymbol{\nabla} \psi^\dagger) \cdot \boldsymbol{\alpha} \psi + i \frac{mc^2}{\hbar} \psi^\dagger \beta \psi - c \psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \cdot (\boldsymbol{\nabla} \psi) - i \frac{mc^2}{\hbar} \psi^\dagger \beta \psi \quad (3.2.59)$$

$$= -c [(\boldsymbol{\nabla} \psi^\dagger) \cdot \boldsymbol{\alpha} \psi + \psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \cdot (\boldsymbol{\nabla} \psi)] \quad (3.2.60)$$

$$= -c \boldsymbol{\nabla} \cdot (\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi) \quad (3.2.61)$$

となる。したがって,

$$\mathbf{j} = c \boldsymbol{\nabla} \cdot (\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi) \quad (3.2.62)$$

と定義すれば

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j} \quad (3.2.63)$$

が成立する。

例として, Dirac 方程式の平面波解

$$\psi = e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \quad (3.2.64)$$

を考える. これを式 (3.2.52) に代入する.

$$\hbar\omega \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & \hbar ck & 0 \\ 0 & mc^2 & 0 & -\hbar ck \\ \hbar ck & 0 & -mc^2 & 0 \\ 0 & -\hbar ck & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 a_1 + \hbar ck a_3 \\ mc^2 a_2 - \hbar ck a_4 \\ -mc^2 a_3 + \hbar ck a_1 \\ -mc^2 a_4 - \hbar ck a_2 \end{pmatrix} \quad (3.2.65)$$

a_1 と a_3 に関する部分を取り出すと

$$\hbar\omega \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & cp \\ cp & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} \quad (3.2.66)$$

a_2 と a_4 に関する部分を取り出すと

$$\hbar\omega \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & -cp \\ -cp & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} \quad (3.2.67)$$

である. これらの式で

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.68)$$

以外の解が存在するには

$$\det \begin{pmatrix} \hbar\omega - mc^2 & \pm cp \\ \pm cp & \hbar\omega + mc^2 \end{pmatrix} = 0 \quad (3.2.69)$$

が必要である. よって

$$\hbar\omega = \pm \sqrt{(mc^2)^2 + (cp)^2} \quad (3.2.70)$$

が得られる. したがって, 式 (3.2.66) と式 (3.2.67) の固有関数は

$$\tan 2\theta = \frac{p}{mc} \quad (3.2.71)$$

として

$\hbar\omega = \sqrt{(mc^2)^2 + (cp)^2}$ のとき

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ -\sin \theta \end{pmatrix} \quad (3.2.72)$$

$\hbar\omega = -\sqrt{(mc^2)^2 + (cp)^2}$ のとき

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.2.73)$$

である. また, 式 (3.2.65) の固有値問題の解は

$$\begin{cases} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases} \quad (3.2.74)$$

と

$$\begin{cases} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} a_2 \\ a_4 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases} \quad (3.2.75)$$

の線形結合で表される．ここではこれら2つの独立解の意味を考えてみる． $p \ll mc$ とする．

まず $E = \hbar\omega = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$ のとき，独立解は

$$\psi_{\uparrow}^+ = e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ 0 \\ \sin \theta \\ 0 \end{pmatrix} \simeq e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.76)$$

と

$$\psi_{\downarrow}^+ = e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 0 \\ \cos \theta \\ 0 \\ -\sin \theta \end{pmatrix} \simeq e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.77)$$

である．これらは上2成分は今まで慣れ親しんできたアップスピンとダウンスピンの固有ベクトルと一致していることに気づくだろう．これは粒子解を示している．

次に $E = \hbar\omega = -\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$ のとき，独立解は

$$\psi_{\uparrow}^- = e^{i(kz - \omega t)} \simeq e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.78)$$

と

$$\psi_{\downarrow}^- = e^{i(kz - \omega t)} \simeq e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.2.79)$$

である．これらは下2成分のみで表されており，反粒子解である．

しかし，負のエネルギーが存在すると，正エネルギーの電子が負エネルギーの状態に落ち込み，電子が安定でなくなってしまう．負エネルギー解の存在は深刻な問題である．これに対し，Dirac は以下の**空孔理論** (hole theory) を提案した．空孔理論は，真空を，負エネルギーの電子が完全に埋まっている状態として定義する．この負エネルギー状態が電子で埋め尽くされている状態を **Dirac の海** という．真空状態に1個の電子を導入したとき，Pauli の排他律により電子は正エネルギー状態に配置される．これにより，電子の安定性は保証される．また，電磁場を真空に加えた時，負エネルギー状態の電子が Dirac の海を飛び出し正エネルギー状態に励起される．負エネルギー電子が減ったので，エネルギーは増えたとして観測される．Dirac の海に空いた穴は電子と同じ質量，反対の電荷をもつ．これを**陽電子**という．一般に，同じ質量をもち同じ大きさの異符号の電荷をもつ粒子は**反粒子**と呼ばれる．

3.3 角運動量の保存

角運動量 \mathbf{L} は Schrödinger 方程式においては保存されるが，Dirac 方程式では保存されない．本節ではこれを確認し，次節でスピンが自然に導入される．

角運動量演算子は

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (3.3.1)$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{pmatrix} \quad (3.3.2)$$

である。これは自由粒子の Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad (3.3.3)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \quad (3.3.4)$$

においては、 \hat{L} とハミルトニアンが交換するため保存する。実際に計算してみる。

$$[\hat{H}, \hat{L}_x] = \frac{1}{2m} [\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2, \hat{L}_x] \quad (3.3.5)$$

$$= \frac{1}{2m} ([\hat{p}_x^2, \hat{L}_x] + [\hat{p}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{p}_z^2, \hat{L}_x]) \quad (3.3.6)$$

$$= \frac{1}{2m} (\hat{p}_x [\hat{p}_x, \hat{L}_x] + [\hat{p}_x, \hat{L}_x] \hat{p}_x + \hat{p}_y [\hat{p}_y, \hat{L}_x] + [\hat{p}_y, \hat{L}_x] \hat{p}_y + \hat{p}_z [\hat{p}_z, \hat{L}_x] + [\hat{p}_z, \hat{L}_x] \hat{p}_z) \quad (3.3.7)$$

$$= \frac{1}{2m} (0 + 0 - i\hbar \hat{p}_y \hat{p}_z - i\hbar \hat{p}_z \hat{p}_y + i\hbar \hat{p}_z \hat{p}_y + i\hbar \hat{p}_y \hat{p}_z) \quad (3.3.8)$$

$$= 0 \quad (3.3.9)$$

\hat{L}_y と \hat{L}_z も同様であり、よって、

$$[\hat{H}, \hat{L}] = 0 \quad (3.3.10)$$

であることがわかる¹¹。つまり、角運動量は保存量である。

これを Dirac 方程式で計算する。

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2 \quad (3.3.14)$$

を使うと、

$$[\hat{H}, \hat{L}_x] = [c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2, \hat{L}_x] \quad (3.3.15)$$

$$= c([\alpha_x \hat{p}_x, \hat{L}_x] + [\alpha_y \hat{p}_y, \hat{L}_x] + [\alpha_z \hat{p}_z, \hat{L}_x]) + [\beta mc^2, \hat{L}_x] \quad (3.3.16)$$

$$= c(\alpha_x [\hat{p}_x, \hat{L}_x] + \alpha_y [\hat{p}_y, \hat{L}_x] + \alpha_z [\hat{p}_z, \hat{L}_x]) \quad (3.3.17)$$

$$= -i\hbar c(\alpha_y \hat{p}_z - \alpha_z \hat{p}_y) \quad (3.3.18)$$

が得られる。同様に、

$$[\hat{H}, \hat{L}_y] = -i\hbar c(\alpha_z \hat{p}_x - \alpha_x \hat{p}_z) \quad (3.3.19)$$

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = -i\hbar c(\alpha_x \hat{p}_y - \alpha_y \hat{p}_x) \quad (3.3.20)$$

が得られる。よって、

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}] \neq 0 \quad (3.3.21)$$

であり、角運動量が保存量ではないことがわかる。しかし、対称性から、全角運動量が保存されないのは不自然である。このことは \mathbf{L} 以外の角運動量が存在することを示唆している。

¹¹ 上記の計算には

$$[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = [\varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k, \hat{p}_j] \quad (3.3.11)$$

$$= \varepsilon_{ijk} (\hat{x}_j [\hat{p}_k, \hat{p}_j] + [\hat{x}_j, \hat{p}_j] \hat{p}_k) \quad (3.3.12)$$

$$= i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k \quad (3.3.13)$$

を用いた。



3.4 スピン

全角運動量が保存するために、

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}] = 0 \quad (3.4.1)$$

を満たす \mathbf{S} が Dirac 方程式に含まれていると考える。スピン演算子を次のように導入する。

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix} \quad (3.4.2)$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix} \quad (3.4.3)$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \quad (3.4.4)$$

σ_i ($i = x, y, z$) は Pauli 行列である。このようにスピン演算子を導入すると、これらは交換関係

$$[\alpha_i, \hat{S}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \alpha_k \quad (3.4.5)$$

$$[\beta, \hat{S}_i] = 0 \quad (3.4.6)$$

を満たすため

$$[\hat{H}, \hat{S}_x] = i\hbar c(\alpha_y \hat{p}_z - \alpha_z \hat{p}_y) \quad (3.4.7)$$

$$[\hat{H}, \hat{S}_y] = i\hbar c(\alpha_z \hat{p}_x - \alpha_x \hat{p}_z) \quad (3.4.8)$$

$$[\hat{H}, \hat{S}_z] = i\hbar c(\alpha_x \hat{p}_y - \alpha_y \hat{p}_x) \quad (3.4.9)$$

で得られる。これらは

$$[\hat{H}, \hat{S}_i] = -[\hat{H}, \hat{L}_i] \quad (3.4.10)$$

であるため、

$$[\hat{H}, \hat{L}_x + \hat{S}_x] = [\hat{H}, \hat{L}_y + \hat{S}_y] = [\hat{H}, \hat{L}_z + \hat{S}_z] = 0 \quad (3.4.11)$$

が成り立つ。よって、Dirac 方程式において

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}] = 0 \quad (3.4.12)$$

であり、**全角運動量** $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ が保存されることがわかる。ここで、 $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$ は**スピン角運動量**である。まとめると、非相対論的量子論では軌道角運動量 \mathbf{L} が保存量であった。しかし、相対論を取り入れた Dirac 方程式ではスピン角運動量 \mathbf{S} も含めた全角運動量 \mathbf{J} が保存量なのである¹²。

以上の議論では、スピンの存在が自然に導入された。この議論に用いた要請は

スピンの存在のために用いた要請

1. Lorentz 共変性
2. 状態の時間発展が時間の 1 階微分で表されること

である。1 は Schrödinger 方程式と相対論の矛盾を解決するために用いた。2 は波動関数の確率解釈を可能にするために用いた。以上の要請から Dirac 方程式が導かれ、その式にはスピンの存在が内包されていた。

ここで、Dirac 方程式の平面波解

$$\psi_{\uparrow}^{+} = e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \psi_{\downarrow}^{+} = e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \psi_{\uparrow}^{-} = e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \psi_{\downarrow}^{-} = e^{i(kz - \omega t)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.4.13)$$

¹² これを実験的に確かめたのが **Einstein-de Haas 効果**や **Barnett 効果**である。前者は、強磁性体の磁化の向きがそろった時、つまりスピン角運動量が変化したとき、強磁性体全体が力学的回転をするというものであり、Einstein が生涯で行った唯一の実験と言われている。後者は、逆に、力学的回転により磁化の向きがそろうというものである。これらは**磁気回転効果** (gyromagnetic effect) と言われている。磁気回転効果は常磁性体、核スピン、液体金属流体、常磁性金属薄膜、強磁性金属薄膜、クォーク・グルオンプラズマでも観測されている。

に \hat{S}_z を作用させてみると,

$$\begin{cases} \hat{S}_z \psi_{\uparrow}^+ &= \frac{\hbar}{2} \psi_{\uparrow}^+ \\ \hat{S}_z \psi_{\downarrow}^+ &= -\frac{\hbar}{2} \psi_{\downarrow}^+ \end{cases} \quad (3.4.14)$$

$$\begin{cases} \hat{S}_z \psi_{\uparrow}^- &= \frac{\hbar}{2} \psi_{\uparrow}^- \\ \hat{S}_z \psi_{\downarrow}^- &= -\frac{\hbar}{2} \psi_{\downarrow}^- \end{cases} \quad (3.4.15)$$

が成り立つ。よって、平面波解は \hat{S}_z の固有状態であることがわかる。
全角運動量以外の保存量としてヘリシティがある¹³。

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \quad (3.4.16)$$

として、ヘリシティは

$$h = \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \quad (3.4.17)$$

と定義される。これが保存量であることは以下のように確かめられる。

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \hat{h} = \frac{1}{p} \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \quad (3.4.18)$$

$$= \frac{1}{p} \begin{pmatrix} 0 & (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \\ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) & 0 \end{pmatrix} \quad (3.4.19)$$

$$= \frac{1}{p} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\mathbf{p}}^2 \\ \hat{\mathbf{p}}^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.4.20)$$

$$= \hat{h}(\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \quad (3.4.21)$$

よって

$$[\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{h}] = 0 \quad (3.4.22)$$

$$[\beta, \hat{h}] = 0 \quad (3.4.23)$$

したがって,

$$[\hat{H}, \hat{h}] = 0 \quad (3.4.24)$$

ヘリシティは保存量である。

3.5 電磁場中の電子

最後に、電磁場中の電子を考え、Dirac 方程式の非相対論的極限 ($|\mathbf{p}| \ll c$) が Schrödinger 方程式であることを示す。
Dirac 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2) \psi \quad (3.5.1)$$

である。ここに電磁場を次のように導入する。

$$\begin{cases} \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A} (e > 0) \\ \phi = 0 \end{cases} \quad (3.5.2)$$

¹³授業では触れていない。

これを用いると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) + \beta mc^2) \psi \quad (3.5.3)$$

である。ここで、解の形を

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} \quad (3.5.4)$$

とする。これを式 (3.5.3) に代入する。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} \quad (3.5.5)$$

$$= c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \begin{pmatrix} \psi_b \\ \psi_a \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \psi_a \\ -\psi_b \end{pmatrix} \quad (3.5.6)$$

また、粒子のエネルギーを静止質量エネルギー (mc^2) と非相対論的エネルギーの項 (ε_{NR}) に分け、

$$\varepsilon \sim mc^2 + \varepsilon_{\text{NR}} \quad (3.5.7)$$

波動関数の時間発展を次のように記述する。

$$\begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} \quad (3.5.8)$$

この表式を用いると式 (3.5.3) の左辺は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} \right] e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} + mc^2 \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} \quad (3.5.9)$$

となる。これより、

$$i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} \right] e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} + mc^2 \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} = c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \begin{pmatrix} \psi_b^0 \\ \psi_a^0 \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ -\psi_b^0 \end{pmatrix} \quad (3.5.10)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_a^0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} = c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \begin{pmatrix} \psi_b^0 \\ \psi_a^0 \end{pmatrix} - 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_b^0 \end{pmatrix} \quad (3.5.11)$$

が得られる。上式の2行目に着目する。両辺を mc^2 で割ると

$$\frac{1}{mc^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_b^0 \right) = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})}{mc} \psi_a^0 - 2\psi_b^0 \quad (3.5.12)$$

である。ここで左辺は

$$\frac{1}{mc^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\frac{\varepsilon_{\text{NR}}}{\hbar}t} \right) \propto \frac{\varepsilon_{\text{NR}}}{mc^2} \quad (3.5.13)$$

である。また、

$$\varepsilon_{\text{NR}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (3.5.14)$$

だから非相対論的極限 ($|\mathbf{p}| \ll c$) で左辺は0となる。よって

$$\psi_b^0 = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})}{2mc} \psi_a^0 \quad (3.5.15)$$

$$(3.5.16)$$

を得る．これは粒子解と反粒子解を結ぶ式である．この式から，反粒子の成分 ψ_b^0 は粒子の成分 ψ_a^0 より v/c のオーダーで小さく，非相対論的極限では重要ではないことがわかる．これを用いると 1 行目は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a^0 = c \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \psi_b^0 \quad (3.5.17)$$

$$= \frac{[\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})][\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})]}{2m} \psi_a^0 \quad (3.5.18)$$

と書き直される．次に $[\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})][\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})]$ を計算する．まず，Pauli 行列には次の性質がある．

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{a}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{b}}) = \left(\sum_i \sigma_i \hat{a}_i \right) \left(\sum_j \sigma_j \hat{b}_j \right) \quad (3.5.19)$$

$$= \sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j \hat{a}_i \hat{b}_j \quad (3.5.20)$$

$$= \sum_i \sum_j \frac{1}{2} (\{\sigma_i, \sigma_j\} + [\sigma_i, \sigma_j]) \hat{a}_i \hat{b}_j \quad (3.5.21)$$

$$= \sum_i \sum_j \frac{1}{2} (2\delta_{ij} + 2i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k) \hat{a}_i \hat{b}_j \quad (3.5.22)$$

$$= \sum_i \hat{a}_i \hat{b}_i + i \sigma_k \sum_i \sum_j \sum_k \varepsilon_{ijk} \hat{a}_i \hat{b}_j \quad (3.5.23)$$

$$= \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}} + i \sum_k \sigma_k (\hat{\mathbf{a}} \times \hat{\mathbf{b}})_k \quad (3.5.24)$$

$$= \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{a}} \times \hat{\mathbf{b}}) \quad (3.5.25)$$

ここで ε_{ijk} は Levi-Civita の完全反対称テンソルで

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & (i, j, k) = (x, y, z), (y, z, x), (z, x, y) \\ -1 & (i, j, k) = (z, y, x), (y, x, z), (x, z, y) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.5.26)$$

である．これを使えば外積は

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_k = \sum_i \sum_j \varepsilon_{ijk} a_i b_j \quad (3.5.27)$$

と表される．また， $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ は反交換関係で

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (3.5.28)$$

という演算子である．式 (??) を用いると

$$[\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})][\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})] = (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot [(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}) \times (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})] \quad (3.5.29)$$

$$= (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 + ie\boldsymbol{\sigma} \cdot [(\mathbf{A} \times \hat{\mathbf{p}}) + (\hat{\mathbf{p}} \times e\mathbf{A})] \quad (3.5.30)$$

$$(3.5.31)$$

と変形される．ここで，

$$[(\mathbf{A} \times \hat{\mathbf{p}}) + (\hat{\mathbf{p}} \times e\mathbf{A})]\psi = (\mathbf{A} \times \hat{\mathbf{p}})\psi + (\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{A})\psi \quad (3.5.32)$$

$$= -i\hbar[(\mathbf{A} \times \boldsymbol{\nabla})\psi + (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A})\psi] \quad (3.5.33)$$

$$= -i\hbar[\mathbf{A} \times (\boldsymbol{\nabla}\psi) + (\boldsymbol{\nabla}\psi) \times \mathbf{A} + (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A})\psi] \quad (3.5.34)$$

$$= -i\hbar[-(\boldsymbol{\nabla}\psi) \times \mathbf{A} + (\boldsymbol{\nabla}\psi) \times \mathbf{A} + (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A})\psi] \quad (3.5.35)$$

$$= -i\hbar(\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A})\psi \quad (3.5.36)$$

が成り立つ。以上より,

$$[\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})][\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A})] = (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) \quad (3.5.37)$$

$$= (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (3.5.38)$$

したがって,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a^0 = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 + \frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \psi_a^0 \quad (3.5.39)$$

が得られる。右辺第2項 $\frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$ は Zeeman 相互作用によるエネルギーを表す。これは磁場中の自由粒子の Schrödinger 方程式と一致している。つまり、電磁場中の自由粒子の Dirac 方程式の非相対論的極限は、電磁場中の自由粒子の Schrödinger 方程式と一致する。

3.6 スピン軌道相互作用♠

スピン軌道相互作用 (spin-orbit coupling) はスピントロニクス (spintronics) において非常に重要な役割を担っている。スピン軌道相互作用によるハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{SO}} = \lambda_{\text{SO}} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (3.6.1)$$

で表される。

これは定性的には次のように導出される。原子核の周りを動く電子を考える。静止系から見ると電子は電場 $\mathbf{E} = -\frac{\partial V(r)}{\partial t} \frac{\mathbf{r}}{r}$ を感じている。これを電子と共に動く慣性系で見る。この系では電子は静止しており、その周りを原子核が回っている。荷電粒子の運動は磁場を発生させるため、電子は磁場 \mathbf{B} を感じる。この磁場は Lorentz 変換により

$$\mathbf{B} = -\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} \quad (3.6.2)$$

で電場と結ばれている。また、スピンと磁場は以下のように相互作用する。

$$-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \propto -\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (3.6.3)$$

以上よりスピン軌道相互作用が得られる。

$$H_{\text{SO}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \propto -\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (3.6.4)$$

$$= \mathbf{S} \cdot \left(\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} \right) \quad (3.6.5)$$

$$= \mathbf{S} \cdot \left(\frac{\mathbf{v}}{c} \times -\frac{\partial V(r)}{\partial t} \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \quad (3.6.6)$$

$$= \lambda_{\text{SO}} \mathbf{S} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \quad (3.6.7)$$

$$= \lambda_{\text{SO}} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (3.6.8)$$

つまり、電子の感じる仮想的な磁場がスピン軌道相互作用の起源である。

Dirac 方程式を用いてスピン軌道相互作用を導出する。Dirac 方程式は以下である。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 + e\phi)\psi \quad (3.6.9)$$

前節と同様に

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} \quad (3.6.10)$$

とする。さらにエネルギー演算子を

$$\hat{E} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \equiv \hat{E}' + mc^2 \quad (3.6.11)$$



と置く．最右辺ではエネルギーを静止エネルギーと非相対論的エネルギーに分けた．電磁場を $\mathbf{A} = 0$ として加え，前節と同様に計算を進める．

$$(\hat{E}' + mc^2) \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} \psi_b \\ \psi_a \end{pmatrix} mc^2 \begin{pmatrix} \psi_a \\ -\psi_b \end{pmatrix} + e\phi \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} \quad (3.6.12)$$

上式より連立方程式

$$\begin{cases} (\hat{E}' - e\phi)\psi_a - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\psi_b = 0 \\ (\hat{E}' + 2mc^2 - e\phi)\psi_b - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\psi_a = 0 \end{cases} \quad (3.6.13)$$

を得る．2式目を1式目に代入する．

$$(\hat{E}' - e\phi)\psi_a = (c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\hat{E}' + 2mc^2 - e\phi)^{-1} c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\psi_a \quad (3.6.14)$$

$$\simeq \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \left(1 - \frac{\hat{E}' - e\phi}{2mc^2} \right) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\psi_a \quad (3.6.15)$$

$$(3.6.16)$$

ここで，

$$\hat{\mathbf{p}}(e\phi) = (e\phi)\hat{\mathbf{p}} - i\hbar\nabla\phi \quad (3.6.17)$$

であるため，さらに変形を進めて，

$$(\hat{E}' - e\phi)\psi_a = \frac{1}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{\hat{E}' - (e\phi)\hat{\mathbf{p}} + i\hbar\nabla\phi}{2mc^2} \right) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\psi_a \quad (3.6.18)$$

$$= \left[\frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) - \frac{\hat{E}' - e\phi}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) - i\frac{e\hbar}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\phi)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \right] \psi_a \quad (3.6.19)$$

$$= \left[\left(1 - \frac{\hat{E}' - e\phi}{2mc^2} \right) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - i\frac{e\hbar}{4m^2c^2}(\nabla\phi) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla\phi \times \hat{\mathbf{p}}) \right] \psi_a \quad (3.6.20)$$

が得られる．4項目

$$\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla\phi \times \hat{\mathbf{p}}) \quad (3.6.21)$$

がスピン軌道相互作用を表している．特に，球対称ポテンシャルのとき，

$$\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla\phi \times \hat{\mathbf{p}}) = \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \frac{2}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \left(\frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} \right) \quad (3.6.22)$$

$$= \frac{e}{2m^2c^2r} \frac{d\phi}{dr} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (3.6.23)$$

となり，スピン角運動量と軌道角運動量がカップリングしていることがわかる．

次に，スピン軌道相互作用の大きさを考える．全角運動量を \mathbf{J} として

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (3.6.24)$$

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2 \quad (3.6.25)$$

だから $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ の期待値は

$$\langle \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \rangle = \frac{1}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right] \hbar^2 \quad (3.6.26)$$

である． $j = l \pm 1/2$ だから， $\langle \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \rangle = \frac{1}{2}l\hbar^2, -\frac{1}{2}(l+1)\hbar^2$ である．これを $\nu\hbar^2$ とおく． $\phi(r) = -Ze/r$ (Z は原子番号) とすると，

$$\left\langle \frac{e}{2m^2c^2r} \frac{d\phi}{dr} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\rangle = \nu\hbar^2 \left\langle \frac{e}{2m^2c^2r} \frac{d\phi}{dr} \right\rangle \quad (3.6.27)$$

$$= \mu \hbar^2 \int_0^\infty r^2 dr |R_{nl}|^2 \left(\frac{e}{2m^2 c^2 r} \frac{d\phi}{dr} \right) \quad (3.6.28)$$

$$= \frac{\mu \hbar^2 Z e^2}{2m^2 c^2} \int_0^\infty \frac{1}{r} R_{nl}^2 dr \quad (3.6.29)$$

$$= \frac{\mu \hbar^2 Z^4 e^2}{2m^2 c^2 a_0^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)} \quad (3.6.30)$$

がスピン軌道相互作用の期待値である。ここで、 $a_0 = \hbar^2/(\mu e^2)$, $\mu = M m_e/(M + m_e)$ である。重要なのはスピン軌道相互作用の大きさは原子番号 Z の 4 乗に比例することである。つまり、周期表の下にある重い元素ほどスピン軌道相互作用が強いことがわかる。

3.7 スピノル♠

3.8 第3章のまとめ

第3章の流れをまとめる。

特殊相対性原理と光速度不変の原理を要請することで特殊相対性理論が導かれた。この理論は、観測者のとる慣性系によって時間や空間の間隔が変化することを主張する。特殊相対性理論により、時間軸と空間座標は同等であることがわかった。

しかし、上記の主張は今まで用いてきた Schrödinger 方程式と矛盾する。なぜなら、Schrödinger 方程式は空間の 1 階微分と時間の 2 階微分を含むからである。よって、Schrödinger 方程式の修正が必要になった。相対論的量子論の基礎方程式の候補となったのが Klein-Gordon 方程式である。これはハミルトニアンに静止質量エネルギーを加えることで得られた。この方程式は時間と空間を同等に扱っているが、波動関数の確率解釈が成り立たないという問題を抱えていた。この問題は時間の 2 階微分に起因する。そこで、時間と空間の 1 階微分から構成された方程式が必要になった。それが Dirac 方程式である。Dirac 方程式は特殊相対論との矛盾を解決し、かつ、波動関数の確率解釈も可能にした。

Dirac 方程式は 2 つ新たな概念を自然に含んでいた。1 つが反粒子の存在である。Dirac 方程式はスピノルという、4 成分をもつ量の方程式であり、そこには正エネルギー解と負エネルギー解が存在する。Dirac はこの負エネルギー解を反粒子解と解釈することで説明した。もう 1 つは、スピンの存在である。Schrödinger 方程式では保存量であった軌道角運動量 \mathbf{L} が Dirac 方程式では保存量ではなくなった。そこで、角運動量保存を成り立たせるために導入されたのがスピン角運動量 \mathbf{S} である。相対論を取り込んだ Dirac 方程式では全角運動量 $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ が保存量なのである。



Appendix A

参考文献

1. David J. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, Cambridge University Press
2. 砂川重信, 散乱の量子論, 岩波全書
3. 川村嘉春, 相対論的量子力学, 裳華房
4. J.J. サクライ, 現代の量子力学, 吉岡書店
5. 安藤陽一, トポロジカル絶縁体入門, 講談社
6. 藤谷洋平, 分布系の数理 (授業資料), 慶應義塾大学理工学部
7. 猪木慶治・川合光, 量子力学, 講談社



Appendix B

導いた種々の関係式

変分法の基本原理

任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対して $|\psi\rangle$ でのエネルギー関数 $E(\psi)$ について,

$$E(\psi) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0$$

なる不等式が成り立つ. ただし E_0 は \hat{H} の固有エネルギーの中で最低のものである.

1 次摂動によるエネルギー補正

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle$$

1 次摂動による固有ベクトル補正

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m^{(0)}\rangle$$

2 次摂動によるエネルギー補正

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

縮退がある場合の摂動論による 1 次エネルギー補正

$$E_n^{(1)} = \frac{1}{2} \left[(V_{aa} + V_{bb} \pm \sqrt{(V_{aa} - V_{bb})^2 + 4|V_{ab}|^2}) \right]$$

相互作用表示

$$|\psi(t)\rangle_I := \exp\left(i \frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar} t\right) |\psi(t)\rangle$$

朝永・Schwinger 方程式

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \\ \hat{V}_I(t) = \exp\left(i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \hat{V}(t) \exp\left(-i\frac{\hat{H}^{(0)}}{\hbar}t\right) \end{cases}$$

非定常摂動量子系の時間発展

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = \sum_n c_n(t) V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t}$$

共鳴条件

$$\omega = \omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

$|\psi(t_0)\rangle_I = |i\rangle$ の時間発展

$$\begin{cases} |\psi(t)\rangle_I = \left(1 + c_{i,i}^{(1)}(t)\right) |i\rangle + \sum_{n \neq i} c_{n,i}^{(1)}(t) |n\rangle \\ c_{n,i}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{n,i} e^{i\omega_{ni}t} dt \end{cases}$$

Fermi の黄金律

$$\omega_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i)$$

電磁場中の電子のハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - e\phi$$

局所ゲージ変換に対して不変な Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}})^2 - e\phi \right] \psi$$

散乱問題の境界条件

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

散乱振幅と微分断面積の関係

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$$

球対称ポテンシャルの散乱振幅

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r V(r) \sin qr \, dr$$

部分波展開した散乱の波動関数

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

光学定理

$$\sigma^{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0)$$

特殊相対性原理

あらゆる慣性系で同じ物理法則が成り立つ.

光速不変の原理

あらゆる慣性系で真空中の光の速さは同一である.

Lorentz 変換

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \begin{pmatrix} 1 & -v/c \\ -v/c & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \end{pmatrix}$$

速度の合成

$$V = \frac{v + u'}{1 + \frac{vu'}{c^2}}$$

Lorentz 収縮

$$L' = \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2} L$$

時間の遅れ

$$\Delta T = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \Delta \tau$$

Lorentz 変換に対して共変な Maxwell 方程式

$$\partial_\mu F_{\nu\lambda} + \partial_\nu F_{\lambda\mu} + \partial_\lambda F_{\mu\nu} = 0$$

$$\partial^\nu H_{\nu\mu} = j_\mu$$

$$\partial_\mu j^\mu = 0$$

Klein-Gordon 方程式

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi = 0$$

Dirac 方程式

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} - \beta mc^2 \right) \psi = 0$$

