

J Simplicity 量子力学

Preface

量子力学は20世紀初頭、複数の物理学者達によって創始されたミクロ世界を記述する物理学です。量子力学では力学的自然観に取って代わる量子力学的自然観とでもいべきものが形成されています。その自然観においては量子の粒子性と波動性の2重性こそがミクロ世界の本質であり、事象は確率的に記述されることになります。量子力学は相対性理論とともに20世紀の物理学の革命であり、常識的には受け入れられない概念・原理が登場してくることになります。

本 Report 量子力学の構成を説明しましょう。まず、Part1 では歴史的記述を行います。19世紀までの古典的な物理概念が破綻し、革命的な物理学がいかに関生してきたかについて取り扱います。

次に、Part2 では完成された量子力学の一つの形式として波動力学を記述します。波動力学はシュレディンガーによって1926年に創られました。まず、不確定性原理とシュレディンガー方程式という量子力学の根本となる事項を取り扱います。次に、量子力学の2つの基礎概念である量子状態とオブザーバブルを順番に取り上げます。そして、波動力学の展開としての定式化を実行します。さらに、以上の波動力学の一般論を具体的に見ていくため、例を取り上げます。先に一般論をまとめて導入した後、それを踏まえた上で例を挙げることになりますが、これは論理的構成を重視したためです。一般論と並行して、時折、例を見ながら読み進めると良いと思います。

波動力学で1つの閉じた体系を成しているのですが、量子力学には他の形式が3つ存在します。1925年、ハイゼンベルクは行列力学という量

量子力学の1つの体系を創り上げていました。さらに1927年ディラックは、波動力学と行列力学を特殊な場合として取り込んだ完全に一般的な体系である変換理論を構築しました。ここに、完成した量子力学が誕生したのです。その後、時代は下がりますが、1948年ファインマンは斬新な着想のもとに、経路積分という新しい量子力学を創り直しました。Part3ではこれらの理論を展開します。

Part4では量子力学の応用的な項目について解説します。特に、素粒子論への準備として重要な内容を扱っていきます。

Contents

Part1 量子力学へのあゆみ

Q01 原子的性質

Q02 エネルギー量子

Q03 光と物質の2重性

Q04 原子構造と前期量子論

Part2 波動力学の成立

Q05 不確定性原理

Q06 シュレディンガー方程式

Q07 量子状態（波動関数と確率振幅）

Q08 オブザーバブル（線形エルミート演算子と期待値・固有値）

Q09 波動力学の展開

Q10 束縛状態1:例1（自由粒子と井戸型ポテンシャル）

Q11 散乱状態1:例2（ポテンシャル障壁）

Q12 束縛状態2:例3（調和振動子）

Q13 束縛状態3:例4（中心力場内の粒子）

Part3 量子力学の展開

Q14 行列力学

Q15 変換理論（制作中）

Q16 経路積分（制作中）

Part4 量子力学の応用

Q17 散乱状態 2（散乱理論）（制作中）

Q18 束縛状態 4（束縛状態の近似法）（制作中）

Q19 散乱状態 3（散乱状態の近似法）（制作中）

Q20 対称性と角運動量（制作中）

Q21 同種粒子

Q22 場の量子化（第 2 量子化）

Q23 特殊相対論的量子力学

Part1 量子力学へのあゆみ

Q01 原子的性質

Q01-1 原子的性質

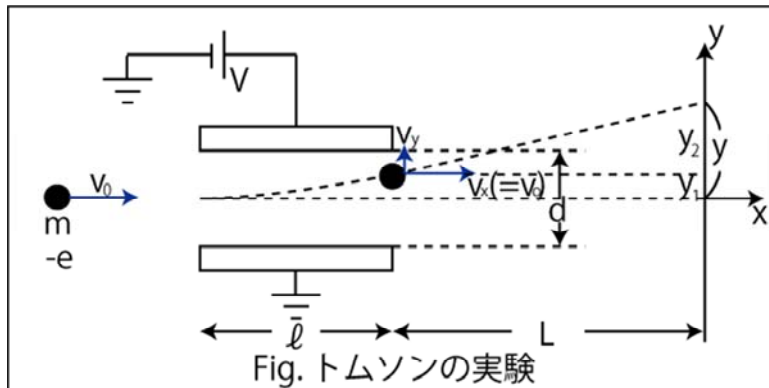
全ての物質は元素からなり，元素とは現代的な意味で原子の種類であると言えます．原子は原子核と電子から構成されていて，飛び飛びの構造をもつことが理解されています．この飛び飛びの構造をもつことを原子的性質と呼ぶことにしましょう．原子の多様な形態，結合により様々な物質が構成されています．近代の原子論の特徴は，物質というものが連続ではなく，飛び飛びの不連続な構造をもつことにあります．

Q01-2 電子の発見

ガラス管の中を真空に近い状態にして，高電圧をかけると放電現象が起こります．このとき見える線を陰極線といいます，つぎのような特徴があります．

- 1 物体によって遮られ，影ができます．
- 2 負の電荷を運びます．
- 3 当たった物体の温度を上昇させます．（エネルギーを運びます．）
- 4 電場や磁場によって曲がります．

この陰極線の正体は何でしょうか．1897年，J.J.トムソンはトムソンの実験と呼ばれるもので，このことについて考察しました．



実験装置は上図の通りです．質量 m ，電荷 $-e$ の陰極線の正体となる粒子を速さ v_0 で入射します．長さ ℓ ，間隔 d の極板間には V の電圧がかかっている，電場が生じ，粒子の運動は曲げられます．極板から出た後は等速直線運動します．図のように x 方向と y 方向をとります．まず，極板間の運動を考えます． x 方向には，力を受けないので慣性の法則より速さ v_0 で等速運動します．したがって，極板間を通過する時間は， $\frac{\ell}{v_0}$ であることがわかります． y 方向には，電場から力を受けますが，運動方程式より，

$$ma_y = eE$$

$$\therefore ma_y = e \frac{V}{d}$$

$$\therefore a_y = \frac{eV}{md}$$

となり，等加速度運動をすることがわかります．このとき，関係式，

$$v = v_0 + at$$

より,

$$\begin{aligned}v_y &= 0 + \frac{eV}{md} \cdot \frac{\ell}{v_0} \\&= \frac{e\ell V}{mv_0 d}\end{aligned}$$

となります. また, 関係式,

$$x = v_0 t + \frac{1}{2} a t^2$$

より, 極板間での y 方向の移動距離 y_1 は,

$$\begin{aligned}y_1 &= 0 \times \frac{\ell}{v_0} + \frac{1}{2} \times \frac{eV}{md} \times \left(\frac{\ell}{v_0}\right)^2 \\&= \frac{e\ell^2 V}{2mv_0^2 d}\end{aligned}$$

となります. 次に, 極板間を出た後の運動について考えましょう. x 方向の長さを L とすると, スクリーンに達するまでの時間は, $\frac{L}{v_0}$ です. したがって, y 方向の移動距離 y_2 は,

$$\begin{aligned}y_2 &= v_y \cdot \frac{L}{v_0} \\&= \frac{e\ell V}{mv_0 d} \cdot \frac{L}{v_0}\end{aligned}$$

$$= \frac{e\ell LV}{mv_0^2 d}$$

となります。故に、

$$y = y_1 + y_2$$

$$= \frac{e\ell^2 V}{2mv_0^2 d} + \frac{e\ell LV}{mv_0^2 d}$$

$$= \frac{e\ell(\ell + 2L)}{2mv_0^2 d} V$$

$$= \frac{e}{m} \cdot \frac{\ell(\ell + 2L)V}{2dv_0^2}$$

となります。ここで、 y , ℓ , L , V , d , v_0 に測定値を代入して計算すると、陰極線の粒子の比電荷 e/m は、

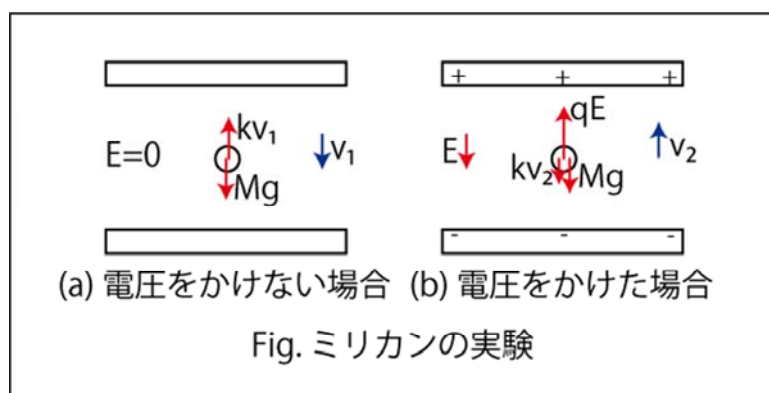
$$\frac{e}{m} = 1.75882012 \times 10^{11} [\text{C/kg}]$$

であることがわかりました。（値は、現在でのもの。）

この比電荷の値は、当時知られていた陽イオンである水素イオンの比電荷に比べて約 1 8 0 0 倍の値であることがわかります。陰極線の正体の粒子は、水素イオンと同じ質量で 1 8 0 0 倍の大きさの負電荷をもつ粒子か、または、水素イオンと電荷の大きさは同じで 1/1800 の質量をもつ粒子である可能性がありました。J.J.トムソンは後者を取り、その粒子を電子と名付けたのです。（電子の発見。）

Q01-3 電気素量の測定

トムソンの実験により、電子の電荷の大きさと質量の比である比電荷はわかったのですが、電子の電荷の大きさそのもの、あるいは電子の質量そのものは測定されていませんでした。1909年、ミリカンはミリカンの実験と呼ばれるもので、電子の電荷の大きさである電気素量の測定に成功しました。実験の概要を見ていきましょう。



微小な油滴を作り、それに電子数個を付着させます。油滴1個の質量を M 、電荷を $-q$ とします。極板間に油滴を噴霧させ、電圧をかけない場合（図の(a)になります。）、重力 Mg と空気の抵抗力 kv_1 がつりあい、油滴は速さ v_1 で等速運動をします。つりあいの式は、

$$kv_1 = Mg \quad (1)$$

です。次に、極板間に電圧をかけた場合（図の(b)になります。）、クーロン力 qE 、重力 Mg 、空気の抵抗力 kv_2 がつりあい、油滴は速さ v_2 で等速運動をします。つりあいの式は、

$$qE = Mg + kv_2$$

となり,

$$kv_2 = qE - Mg \quad (2)$$

の式が成立します. ここで, (2)÷(1)を実行して, 計算します.

$$\frac{kv_2}{kv_1} = \frac{qE - Mg}{Mg}$$

$$\therefore \frac{v_2}{v_1} = \frac{qE}{Mg} - 1$$

$$\therefore \frac{qE}{Mg} = \frac{v_2}{v_1} + 1$$

$$\therefore q = \left(\frac{v_2}{v_1} + 1\right) \frac{Mg}{E}$$

最後の式から, 油滴の電荷がわかり, それは電子の電荷数個分であるので, 電子 1 個の電荷の大きさ (これを電気素量といいます.) が把握されたのです. 電気素量 e は現在の精密な実験により, 次の値になります.

$$e = 1.60217653 \times 10^{-19} [\text{C}]$$

これと, 電子の比電荷の値をあわせて, 電子の質量も計算できます.

$$m = \frac{m}{e} \cdot e$$

$$= \frac{1}{1.75882012 \times 10^{11}} \times 1.60217653 \times 10^{-19}$$

$$= 0.91093825 \dots \times 10^{-30}$$

$$\cong 9.109383 \times 10^{-31}[\text{kg}]$$

電子の発見，及び，電気素量の測定は，物質は跳び跳びの構造もっており，原子的性質を備えていることを確立しました．これらの研究は19世紀の終わりから20世紀の初めにかけて行われ，量子力学が創始される時代の幕開けの準備となりました．

Q02 エネルギー量子

Q02-1 黒体輻射の問題

19世紀の終わりごろ、黒体輻射の問題といわれるものがクローズアップされていました。絶対温度を上げると、物体は光、すなわち電磁波を放出します。このことを輻射といいます。特に、光（電磁波）を反射しない黒色の物体である黒体といわれるものでできている箱、すなわち空洞からの輻射を黒体輻射といいます。実験によると、空洞内の光（電磁波）のスペクトル（振動数と強度の関係）は絶対温度 T のみに依存し、壁の物質、空洞の形、または大きさには一切関係しませんでした。実験から得られた黒体輻射のスペクトルを説明する式として、振動数の小さな領域でのレイリー-ジーンズの公式と、振動数の大きな領域でのウィーンの公式と呼ばれるものが経験式として判明していました。1900年、プランクは2つの公式を繋ぐ式として、次のプランクの公式を発見しました。

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi k \alpha}{c^3} \cdot \frac{\nu^3}{\exp \frac{\alpha \nu}{T} - 1} d\nu$$

ここで、 U は輻射の強度、 k はボルツマン定数、 c は光速、 ν は輻射の振動数です。また、 α は実験に合うように決定する定数になります。プランクの公式は全エネルギー領域に適用できて、レイリー-ジーンズの公式とウィーンの公式を極限として含むことが確かめられています。ここまでの話で終われば、プランクの公式の発見は単なる偶然に過ぎなかったかも知れません。この公式が成立する理由をプランクは徹底して追求しました。そのストーリーを次の Section で見ていきましょう。

Q02-2 エネルギー量子の発見

プランクの公式を理論的に導出することを、プランクは試みました。統計力学のボルツマン分布より、エネルギー E の状態にある確率は、 $\exp(-\beta E)$ に比例することが分かっています。ここで、 $\beta \equiv \frac{1}{kT}$ です。当時の常識により、エネルギーは連続量であるとする、その平均値は次のように計算されます。

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \frac{\int_0^\infty E \exp(-\beta E) dE}{\int_0^\infty \exp(-\beta E) dE} \\&= -\frac{d}{d\beta} \log \left\{ \int_0^\infty \exp(-\beta E) dE \right\} \\&= -\frac{d}{d\beta} \log \left[-\frac{1}{\beta} \exp(-\beta E) \right]_0^\infty \\&= -\frac{d}{d\beta} \log \frac{1}{\beta} \\&= \frac{1}{\beta} \\&= kT\end{aligned}$$

最後の式はエネルギー分配則であり、プランクの公式は導出されません。この間違った結論を導く議論の根本的な欠陥として、プランクはエネルギーが連続であるという、それまで当然のことと考えられていたことに問題があるのではないかと思い至りました。そして、エネルギーは跳び跳びの値をとる不連続量であるとするエネルギー量子仮説を思いついたのです。すなわち、エネルギー E を、

$$E = nh\nu \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

と仮定してみたのです。(エネルギー素量としては,

$$E = h\nu$$

で与えられます。これをエネルギー量子と呼ぶことにします。) ここで, h はプランク定数と呼ばれるようになったものです。このとき, エネルギーの平均値の計算は, 次のように, 積分が無限級数の和に置き換えられます。すなわち,

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n h\nu \exp(-\beta n h\nu)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta n h\nu)}$$

と表されます。この式の右辺を計算します。

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta n h\nu) &= \frac{1}{1 - \exp(-\beta h\nu)} \\ &= \frac{\exp(\beta h\nu)}{\exp(\beta h\nu) - 1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} n h\nu \cdot \exp(-\beta n h\nu) &= -\frac{d}{d\beta} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta n h\nu) \right\} \\ &= -\frac{d}{d\beta} \left\{ \frac{\exp(\beta h\nu)}{\exp(\beta h\nu) - 1} \right\} \end{aligned}$$

$$= - \frac{h\nu \cdot \exp(\beta h\nu) \{ \exp(\beta h\nu) - 1 \} - \exp(\beta h\nu) \{ h\nu \cdot \exp(\beta h\nu) \}}{\{ \exp(\beta h\nu) - 1 \}^2}$$

$$= \frac{h\nu \cdot \exp(\beta h\nu)}{\{ \exp(\beta h\nu) - 1 \}^2}$$

したがって、1つの振動数 ν の状態について、エネルギー E の平均値は、

$$\langle E \rangle = \frac{\frac{h\nu \cdot \exp(\beta h\nu)}{\{ \exp(\beta h\nu) - 1 \}^2}}{\frac{\exp(\beta h\nu)}{\exp(\beta h\nu) - 1}}$$

$$= \frac{h\nu}{\exp(\beta h\nu) - 1} \quad (1)$$

となります。

次に、 ν と $\nu+d\nu$ の間に振動数をもつ固有状態の数を求めてみましょう。
長さ L の1次元定常波の波長 λ は、1次元弦の定常波と同様に、

$$\lambda = \frac{2L}{n} \quad (n = 1, 2, \dots)$$

で与えられます。定常波の個数 n を固有状態の数、あるいは簡単に状態数と呼ぶことにします。このとき、固有振動数は、

$$\nu_n = \frac{c}{\lambda}$$

$$= \frac{cn}{2L}$$

となるので、状態数 n は、

$$n = \frac{2Lv_n}{c}$$

と表されます．ここで，3次元に拡張しましょう．黒体を一辺 L の立方体とし，辺に沿って xyz 軸をとります．このとき，黒体の中には定常波ができていますが， xyz 方向へのそれぞれの波長は次のように表されます．

$$\lambda_x = \frac{2L}{n_x} \quad (n_x = 1, 2, \dots)$$

$$\lambda_y = \frac{2L}{n_y} \quad (n_y = 1, 2, \dots)$$

$$\lambda_z = \frac{2L}{n_z} \quad (n_z = 1, 2, \dots)$$

ここで，

$$\lambda = \sqrt{\lambda_x^2 + \lambda_y^2 + \lambda_z^2}$$

の関係があります．よって，

$$\begin{aligned} \lambda &= \sqrt{\left(\frac{2L}{n_x}\right)^2 + \left(\frac{2L}{n_y}\right)^2 + \left(\frac{2L}{n_z}\right)^2} \\ &= \frac{2L}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}} \end{aligned}$$

となります。状態数は、 (n_x, n_y, n_z) の組み合わせで数えられます。ここで、3次元空間で直交座標系をとり、 (n_x, n_y, n_z) の集まりからなる格子を考えます。この座標系で、原点からの距離が r と $r+\Delta r$ の間にある条件、

$$r < \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} < r + \Delta r$$

にかなう格子点の数は、 $r \gg 1$ である限り、半径 r 及び $r+\Delta r$ の球面で限られた球殻の $\frac{1}{8}$ の象限にある部分の体積にほぼ等しくなります。この体積は、

$$\frac{1}{8} 4\pi r^2 \Delta r$$

です。これが、原点からの距離が r と $r+\Delta r$ の間にある条件にかなう状態数になります。ここで、

$$\lambda = \frac{2L}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}}$$

$$= \frac{2L}{r}$$

$$\therefore r = \frac{2L}{\lambda}$$

$$\therefore \Delta r = -\frac{2L}{\lambda^2} \Delta \lambda$$

となります。したがって、原点からの距離が r と $r+\Delta r$ の間にある条件にかなう格子点の数は、

$$\begin{aligned}\frac{1}{8}4\pi r^2\Delta r &= \frac{1}{2}\pi\left(\frac{2L}{\lambda}\right)^2\left(-\frac{2L}{\lambda^2}\Delta\lambda\right) \\ &= \frac{4\pi L^3}{\lambda^4}(-\Delta\lambda)\end{aligned}$$

となります。さらに、関係式 $c=v\lambda$ より、

$$\lambda = \frac{c}{v}$$

$$\therefore \Delta\lambda = -\frac{c}{v^2}\Delta v$$

です。上記の格子点の数、すなわち状態数は、

$$\begin{aligned}\frac{4\pi L^3}{\lambda^4}(-\Delta\lambda) &= \frac{4\pi L^3}{\left(\frac{c}{v}\right)^4}\left(\frac{c}{v^2}\Delta v\right) \\ &= \frac{4\pi V}{c^3}v^2\Delta v\end{aligned}$$

となります。（ $V \equiv L^3$ は黒体の体積です。）ここで、電磁波は横波であるので、偏りは2種類あることに注意します。すなわち、状態数を2倍します。故に、 v と $v+dv$ の間に固有振動数をもつ単位体積当たりの状態数は、

$$\frac{8\pi}{c^3}v^2dv \quad (2)$$

と求められます。

輻射の強度は一つの v に対するエネルギーの平均値(1)式に、状態数(2)

式を掛け合わせたものになります。

$$U(\nu, T) = \frac{h\nu}{\exp(\beta h\nu) - 1} \cdot \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu$$
$$= \frac{8\pi h}{c^3} \cdot \frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} d\nu$$

よって、プランクの公式、

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi k\alpha}{c^3} \cdot \frac{\nu^3}{\exp\frac{\alpha\nu}{T} - 1} d\nu$$

が導出することができました。ただし、

$$\alpha = \frac{h}{k}$$

であることがわかります。以上の導出の核心は言うまでもなく、エネルギー量子仮説です。

プランクのエネルギー量子仮説により、連続な値をとるものとされていたエネルギーが、不連続な値をとることが判明しました。物質が原子的性質、つまり、跳び跳びの構造をもつことがわかったことに続いて、エネルギーもが跳び跳びの性質をもつことが理解されるようになったのです。この事実は19世紀の最後の年、1900年に発見されました。そして、それは20世紀の量子力学の成立へと繋がっていくのです。上記のhはプランク定数でしたが、現在の精密な測定により次の値であることがわかっています。

$$h = 6.6260693 \times 10^{-34} [\text{J} \cdot \text{s}]$$

Q03 光と物質の二重性

Q03-1 光の二重性

光とは何だろうか？この問題については、古くから論争が続いていました。力学を創ったニュートンは、光は粒子であるとし、様々な現象を説明しました。それに対して、ホイヘンスは光の波動説を唱え、ニュートンの粒子説と対立しました。その後、19世紀の初めにヤングにより、二重スリットの実験が行われ、光が干渉することが判明しました。干渉は波動でしか起こらない現象であり、波動説が有利な立場になりました。さらに、マクスウェル電磁気学が確立して、光は電磁波の一種であることが理解され、光が波動であることは疑いのないものとされました。

光の波動説が定説となり、しばらくした後、19世紀の終わりに光電効果という現象が発見されました。これは紫外線や青色の光など、振動数の大きい電磁波を金属の表面に当てると、電子が飛び出す現象です。実験を繰り返し、次のような特徴を見出すことができました。

1 当てる電磁波の振動数が大きい程、飛び出す電子の運動エネルギーは大きくなります。反対に電磁波の振動数が小さくなると、飛び出す電子の運動エネルギーが小さくなり、やがて電子は飛び出さなくなります。振動数が小さいと、電磁波の振幅を大きくしても電子は飛び出しません。

2 当てる電磁波の振幅を増加させても、飛び出す電子の運動エネルギーには影響を与えません。ただし、飛び出す電子の個数が増えます。

これらの特徴について、光が波動であると考えると全く説明が付きません。つまり、当てる電磁波の振動数によって飛び出す電子の運動エネルギーが変わるなら、電子を飛び出させた電磁波のもつエネルギーが変化したこと

になります。しかし、波動のエネルギーは、振動数だけでなく振幅にも関係してきます。振幅の大きな波動程大きなエネルギーをもつという特徴があるので、振幅を大きくすると飛び出す電子の運動エネルギーは大きくなるはずですが、（特徴2と矛盾しています。）特に、光の振動数を小さくしても振幅を大きくしてやれば、電子は飛び出して来るはずですが、（特徴1と矛盾しています。）

このような状況の中で、1905年、アインシュタインはプランクのエネルギー量子仮説に基づき、光量子仮説を発表しました。（ちなみに、1905年、特許局の事務員だったアインシュタインは特殊相対性理論、ブラウン運動の理論も発表しています。この年は奇跡の年と呼ばれています。）この理論の中で、アインシュタインは振動数が ν の電磁波は $h\nu$ のエネルギーをもった粒子の集まりであると仮定し、その粒子を光量子（光子ともいいます。）と呼びました。特に、光量子のエネルギーは振動数のみに依存し、振幅とは無関係であるとししました。この仮説により、光電効果は次のように説明されます。振動数の大きな電磁波は、エネルギー $h\nu$ が大きな光量子の集団になります。そのエネルギーの大きな光量子を金属の表面にぶつけると、金属と電子の結合が切れて電子が飛び出して来るのです。振動数 ν が大きい程、光量子のエネルギー $h\nu$ が大きいので、電子は勢いよく飛び出すことになります。逆にある一定の振動数以下になると、金属と電子の結合を切るだけのエネルギー（これを仕事関数 W と言います。）を光量子がもてないため、電子は飛び出せなくなります。飛び出した電子1個の運動エネルギーの最大値 $\frac{1}{2}mv^2$ は、光量子1個のエネルギー $h\nu$ と次の関係にあります。

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W$$

つまり、光量子 1 個で 1 個の電子を叩き出しますが、光量子 1 個のエネルギーのうち一部を、電子を剥ぎ取るために仕事関数 W として使い、残りのエネルギーを電子の運動エネルギーに使うということになります。また、電磁波の振幅が大きくなるということは、電磁波の強度が増すことに相当します。このとき光量子の個数が増えると考えることができます。当てる電磁波の振幅が大きくなっても、光量子一つ一つのエネルギーは変化しませんが、光量子の個数が増えるので、それだけ跳び出す電子の個数が増加することになります。このようにアインシュタインは光量子仮説によって光電効果を完全に説明して、光の粒子説を復活させました。

アインシュタインが光子のエネルギー E をプランクのエネルギー量子仮説により、

$$E = h\nu$$

としたことは、上で述べた通りです。ここで、粒子である光子の運動量の大きさを表す式を導いてみましょう。特殊相対性理論より、

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$$

という関係式が成立しました。光子の場合、質量 $m=0$ であるので、その運動量の大きさ p は、次のように表されます。

$$p = \frac{E}{c}$$

$$= \frac{h\nu}{c\lambda}$$

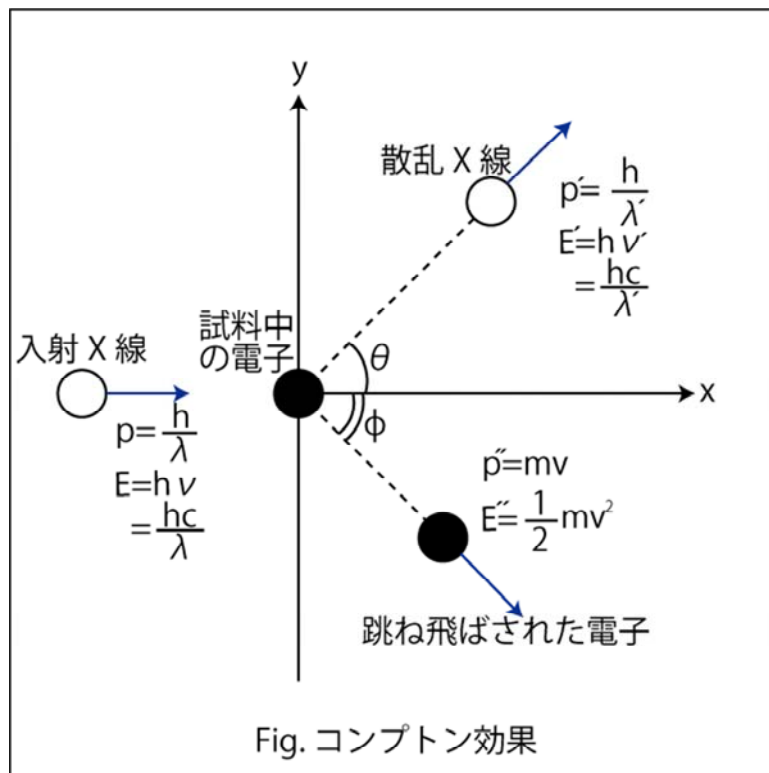
$$\therefore p = \frac{h}{\lambda}$$

粒子について、エネルギーと運動量の大きさに関するこれら2つの関係式をアインシュタインの関係式といいます。

光と同じ電磁波の一種であるX線は、ブラッグの実験というものにより、波動性をもつことが確認されていました。1923年、コンプトンはコンプトン効果と呼ばれる実験により、X線が粒子性を併せ持つことを確認しました。それでは、コンプトン効果について見ていくことにしましょう。この実験はX線をターゲットとなる物質に入射すると、X線が散乱されるという簡単なものです。次の2つの特徴があります。

- 1 散乱されたX線の中には、入射したX線の波長よりも長い波長のものが混ざります。
- 2 散乱角が大きくなる程、散乱されたX線の波長が長くなります。

この特徴を、X線がアインシュタインの関係式を満たす粒子であると考え、以下のように説明してみましょう。



この実験は、図のように、入射 X 線の光子と試料中の電子との 2 次元の完全弾性散乱です。このとき、x 方向と y 方向についての運動量保存則より、

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos \theta + mv \cdot \cos \phi \quad (1)$$

$$0 = \frac{h}{\lambda'} \sin \theta - mv \cdot \sin \phi \quad (2)$$

が成立します。また、エネルギー保存則より、

$$\frac{hc}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda'} + \frac{1}{2}mv^2 \quad (3)$$

が成り立ちます。以上の3つの式を連立して解いてみます。(1)式より,

$$mv \cdot \cos \phi = \frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'} \cos \theta$$

$$\therefore \cos \phi = \frac{h}{mv} \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \cos \theta \right)$$

となります。(2)式より,

$$mv \cdot \sin \phi = \frac{h}{\lambda'} \sin \theta$$

$$\therefore \sin \phi = \frac{h}{mv} \cdot \frac{\sin \theta}{\lambda'}$$

となります。ここで, 公式,

$$\cos^2 \phi + \sin^2 \phi = 1$$

を使い, 以下のように計算します。

$$\frac{h^2}{m^2 v^2} \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \cos \theta \right)^2 + \frac{h^2}{m^2 v^2} \frac{\sin^2 \theta}{\lambda'^2} = 1$$

$$\therefore \frac{h^2}{m^2 v^2} \left(\frac{1}{\lambda^2} - \frac{2}{\lambda \lambda'} \cos \theta + \frac{1}{\lambda'^2} \cos^2 \theta + \frac{1}{\lambda'^2} \sin^2 \theta \right) = 1$$

$$\therefore m^2 v^2 = h^2 \left\{ \frac{1}{\lambda^2} - \frac{2}{\lambda \lambda'} \cos \theta + \frac{1}{\lambda'^2} (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) \right\}$$

$$\therefore m^2 v^2 = h^2 \left(\frac{1}{\lambda^2} - \frac{2}{\lambda \lambda'} \cos \theta + \frac{1}{\lambda'^2} \right) \quad (4)$$

ここで, (3)式より,

$$\frac{1}{2} m v^2 = h c \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right)$$

$$\therefore m^2 v^2 = 2 m h c \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) \quad (5)$$

となります. (4)式と(5)式より,

$$2 m h c \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = h^2 \left(\frac{1}{\lambda^2} - \frac{2}{\lambda \lambda'} \cos \theta + \frac{1}{\lambda'^2} \right)$$

となります. この式の両辺に,

$$\frac{\lambda \lambda'}{h}$$

をかけて, 計算します.

$$2 m c (\lambda' - \lambda) = h \left(\frac{\lambda'}{\lambda} - 2 \cos \theta + \frac{\lambda}{\lambda'} \right)$$

$$\therefore 2 m c (\lambda' - \lambda) = h \left(\frac{\lambda'}{\lambda} + \frac{\lambda}{\lambda'} \right) - 2 h \cdot \cos \theta$$

ここで, $\lambda' \cong \lambda$ のとき,

$$\frac{\lambda'}{\lambda} + \frac{\lambda}{\lambda'} \cong 2$$

が成立するので,

$$2mc(\lambda' - \lambda) = 2h - 2h \cdot \cos \theta$$

$$\therefore 2mc(\lambda' - \lambda) = 2h(1 - \cos \theta)$$

$$\therefore \lambda' - \lambda \cong \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta)$$

$$\therefore \lambda' \cong \lambda + \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta)$$

となります。最後の式は、コンプトン効果の2つの特徴をよく表しています。つまり、X線の粒子性が確認されたのです。

以上のように、光（電磁波）は粒子としての性質をもつことが確認されました。しかし、従来の波動としての様々な現象が存在することも事実です。光（電磁波）は波動として振る舞うときと、粒子として振る舞うときがあるらしいことが判明してきたのです。このような波動性と粒子性の2つの性質を併せ持つことを、光（電磁波）の二重性と呼ぶことにします。光（電磁波）の二重性はミクロ世界の著しい特徴になっています。

Q03-2 物質の二重性

光（電磁波）の二重性が明らかになってきた頃、1923年にド・ブロイは、光に二重性があるのならば、粒子であるはずの電子にも波動性があるのではないかと考えました。電子が粒子であることは疑いのないものとされていましたが、その電子に波動性があるのではないかと思いついたのは、二重性こそがミクロ世界の本質であることをド・ブロイが見抜いたのではないかと推測されます。その後、電子線回折の実験等、電子の波動性

を確認する実験が行われました。物質（電子，陽子，中性子等）は粒子性と波動性の二重性を併せ持つことが理解されるようになったのです。物質（電子，陽子，中性子等）の波動のことをド・ブROI波，または物質波といいます。

光子の場合，エネルギーE と運動量の大きさ p は，次の2つの式のように与えられることが，アインシュタインによって理解されましたね。

$$E = h\nu$$

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

ド・ブROIはこれらの関係式が電子の場合もそのまま成立すると考えました。この2つの式は，物質（電子，陽子，中性子等）については，ド・ブROIの関係式といいます。

Q03-3 量子

光（電磁波）と物質（電子，陽子，中性子等）は二重性を併せ持つことが明らかになってきました。ここで，ミクロ世界において，二重性をもつものを量子と名付けることにしましょう。光子，電子，陽子，中性子等は量子になります。また，素粒子論でのクォークやレプトンも量子であるといえます。いままでの議論から，量子については次の2つの式からなるアインシュタイン-ド・ブROIの関係式が成立することが理解されます。

$$E = h\nu$$

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

これら 2 つの式を変形しておきましょう。

$$E = \frac{h}{2\pi} 2\pi\nu$$

$$p = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda}$$

となりますが、ここで、

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$$

とおくと、

$$E = \hbar\omega$$

$$p = \hbar k$$

となります。ただし、 ω は角振動数、 k は波数です。これら 2 式もアインシュタイン・ド・ブロイの関係式といいます。これらの関係式の左辺はエネルギーや運動量の大きさといった量子の粒子性に関する量を含んでいます。アインシュタイン・ド・ブロイの関係式は量子の二重性を関係付ける式として理解されるのです。

Q03-4 二重性の本質

以上のように、20 世紀の初め、光と物質の二重性が確認されましたが、最初はその本質が理解されませんでした。二重性はミクロ世界独特の特徴であって、常識的な従来の概念とは相いれないものであることが、その理

由となっていました。1910年代から1920年代の初めにかけての過渡的な理論を前期量子論といいます。その理論の立場では、一週間のうち、月、水、金の3日間は光や物質を波動と考え、火、木、土の3日間は光や物質を粒子と考えるというようにたとえられました。つまり、ある現象に対しては波動、別の現象に対しては粒子と考え分けて対応していたのです。しかし、このような理論が本物の理論であるとは到底考えられません。その後、1920年代半ばから1930年代にかけて満足のいく理論が確立しました。複数の物理学者達が創り上げた理論こそが量子力学と呼ばれるものです。その理論の内容を Part2 以降見ていくことにしましょう。その前に、次の Chapter では原子の構造、特にボーアの前期量子論について取り扱っておきましょう。

Q04 原子構造と前期量子論

Q04-1 原子モデルと原子による α 粒子の散乱実験

光と物質の二重性が明らかになっていくのと並行して、原子内部の構造についての研究も進められました。当時、原子構造のモデルは、まず、1904年にJ.J.トムソンによって考案されました。(原子的性質のChapterでのトムソンの実験をした物理学者と同一人物です。)それは原子の内部はレーズンパンのようなものであるというモデルです。大きさが 10^{-10}m 程度の正に帯電した球形の連続的な生地の中に、電子がレーズンのように散らばっていて、全体として電氣的に中性になっているという内容になっていました。

原子の構造を探るため、1909年、ラザフォードの指導のもとに、ガイガーとマースデンは、原子に α 粒子を衝突させ散乱させる実験を行いました。実験の内容は、ラジウムから出る α 粒子を薄い金属箔に衝突させるというものです。実験結果を2項目にまとめておきます。

- 1 入射した α 粒子の大部分はそのまま直進して散乱されません。
- 2 ごく少数の α 粒子だけ、 90° を越え、 180° 近くの大きな散乱角をもっています。

トムソンのモデルでは、2番目の特徴を説明することができません。ラザフォードは、原子の中心に正に帯電した原子核というものを考え、その周りに電子が回っているというモデルを提唱しました。このモデルによって、ラザフォードは量子論以前の古典論により理論を展開し、実験結果の2つの特徴を見事に説明しました。(1911年.)

Q04-2 水素原子のスペクトル

水素の気体をいれた放電管からでる光を、プリズムのような分光器にかけると、波長の違いによってできる飛び飛びの輝線である線スペクトルがみられます。1890年、線スペクトルの波長 λ を表す一般式は、リュードベリによって発見されました。その式は、

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{\ell^2} - \frac{1}{k^2} \right)$$

と表されます。これをリュードベリの公式といいます。ここで、 R はリュードベリ定数といい、

$$R = 1.097 \times 10^7 [1/\text{m}]$$

であることが測定されました。また、 ℓ と k は自然数で、

$$\ell = 1, 2, 3, \dots$$

$$k = \ell + 1, \ell + 2, \ell + 3, \dots$$

の関係を満たす線スペクトルが観測されました。（ ℓ と k の意味は実験結果を忠実に再現するという事実以上のことは理解されていませんでした。次の Section のボーアの理論で初めて理解されるのです。）リュードベリの公式は実験結果を再現する式ですが、経験式であって、当時あった法則から導出されたものではありませんでした。その後、水素原子の構造を研究し、リュードベリの公式を導出したのがボーアです。スペクトルには水素原子の構造に関する暗号のような情報が含まれていたのです。

Q04-3 ボーアの前期量子論

前述したように、1911年、ラザフォードは原子核の存在を実験によって明らかにしました。それに注目したボーアは、1913年に最も簡単な構造をもつ原子である水素原子の構造として、1個の原子核の周りの円軌道を軽い1個の電子が回り続けるという原子構造のモデルを考えて理論を展開しました。この理論は前 Section のリュードベリの公式を導き、その意味を明らかにするものとなりました。

電磁気学によれば、電子のような電荷をもった粒子が円運動をすると、その回転数に等しい振動数の電磁波が放出され、電子はエネルギーを失って原子核に落ち込んでしまうことになります。この困難を克服すべく、ボーアは次の量子条件と呼ばれる仮定をしました。

電子の運動量の大きさと円周の長さとの積が、プランク定数 h の定数倍に等しいときだけ、電子は安定な状態になります。

この条件を式で表現すると、

$$mv \times 2\pi r = nh \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (3)$$

となります。ここで、 m は電子の質量、 v は電子の運動の速さ、 r は軌道半径です。あるいは、 p を電子の運動量の大きさ、 q を座標変数として、

$$\oint p \, dq = nh \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

とすることもできます。ただし、積分は電子の軌道に沿って1周するものとし、量子条件を満たす特別な状態を定常状態といい、定常状態にお

ける電子のエネルギーをエネルギー順位といいます。ここで、量子条件の物理的意味について考えておきましょう。(3)式は次のように変形されます。

$$2\pi r = n \frac{h}{mv}$$

$$= n \frac{h}{p}$$

ここで、アインシュタイン-ド・ブロイの関係式、

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

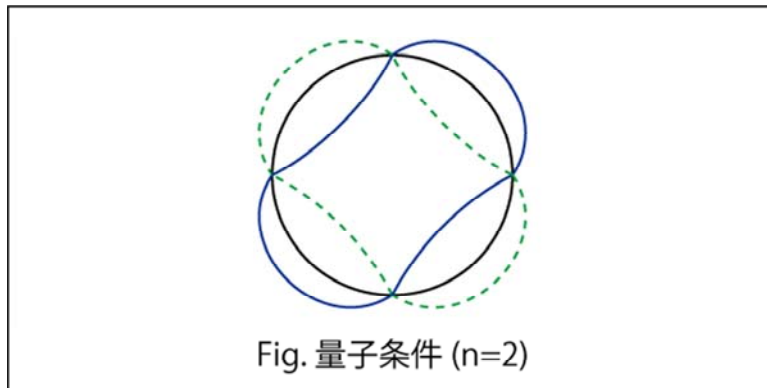
より、

$$2\pi r = n\lambda$$

となります。ただし、 λ はド・ブロイ波の波長を表します。この式は、

$$(\text{円周の長さ}) = (\text{整数}) \times (\text{ド・ブロイ波の波長})$$

となっています。すなわち、ド・ブロイ波が電子の軌道上で、定常波を形成する条件を表しています。実はボーアの理論が考えられた当時、まだド・ブロイの物質波の理論は存在しませんでした。量子条件の意味は後になってから理解されたのです。例として、 $n=2$ のときの定常波の様子を示しておきます。



電子は原子核の周りを等速円運動しています。（このとき，電子を粒子と考えていますが，状況に応じて電子を波動と考えたり，粒子と考えたりすることは，電子の二重性によるものです。）電子の軌道の半径を r ，速さを v ，電気素量を e とすると，円の中心方向への運動方程式は，

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad (4)$$

となります。円の中心方向にはクーロン力が働いていて，これが向心力の役目をしています。ここで，量子条件(3)式より，

$$v = \frac{nh}{2\pi mr} \quad (5)$$

となります。（5)式を(4)式に代入して計算します。

$$\frac{m}{r} \left(\frac{nh}{2\pi mr} \right)^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

$$\therefore \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2 \frac{n^2}{m} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} e^2 r$$

$$\therefore r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi} \cdot \frac{n^2}{m e^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (6)$$

(6)式は、電子の軌道半径が跳び跳びの値をとり、自然数 n は内側の軌道から何番目かを示す数となることを示しています。 r_n は n 番目の軌道の半径を示します。

次に定常状態のエネルギー E を求めましょう。 E は電子の運動エネルギーとクーロン力によるポテンシャルの和であるので、

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n}$$

ですが、(4)式より、

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n} \\ &= -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n} \end{aligned}$$

と計算されます。この式に(6)式を代入して計算すると、

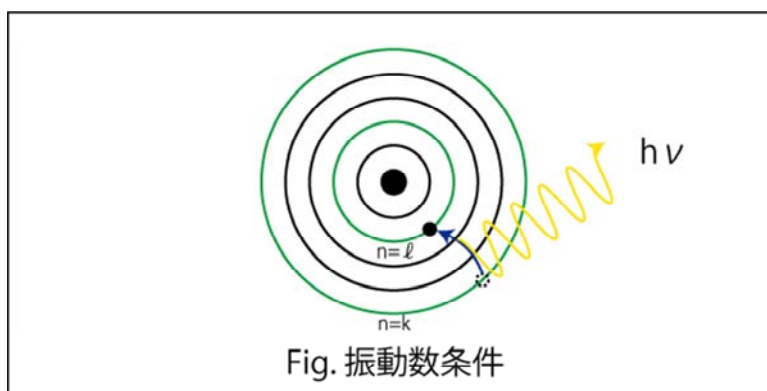
$$\begin{aligned} E &= -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{\pi}{\epsilon_0 h^2} \frac{m e^2}{n^2} \\ \therefore E_n &= -\frac{m e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (7) \end{aligned}$$

となります。 E_n は内側から n 番目の軌道のエネルギーを意味し、エネルギー

一準位といいます。軌道が外側になるほどエネルギーは高くなることに注意して下さい。ここで、ボーアは次の第2の条件を置きました。すなわち、振動数条件として、

$n=k$ から $n=\ell$ の定常状態に移るとき、エネルギーの差 $E_k - E_\ell$ と同じエネルギーの光子が1個放出されます。

と仮定しました。外側から内側に電子が落ち込んだ時、余ったエネルギーが光子のエネルギーに変化すると考えたのです。



振動数条件を式で表せば、

$$h\nu = E_k - E_\ell$$

となります。この式に(7)式を代入して計算します。

$$h \frac{c}{\lambda} = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{\ell^2} \right)$$

$$\therefore \frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 ch^3} \left(\frac{1}{\ell^2} - \frac{1}{k^2} \right)$$

最後の式はリュードベリの公式を再現したのになっています．確かに右辺の分数になっている係数を計算すると、

$$\begin{aligned} \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 ch^3} &= \frac{9.109 \times 10^{-31} \times (1.602 \times 10^{-19})^4}{8 \times (8.854 \times 10^{-12})^2 \times 2.998 \times 10^8 \times (6.626 \times 10^{-34})^3} \\ &= \frac{9.109 \times 1.602^4}{8 \times 8.854^2 \times 2.998 \times 6.626^3} \times \frac{10^{-31-76}}{10^{-24+8-102}} \\ &\cong \frac{60.00}{547000} \times 10^{11} \\ &\cong 0.0001097 \times 10^{11} \\ &= 1.097 \times 10^7 [1/m] \end{aligned}$$

となり、完全にリュードベリ定数と一致します．また、自然数 ℓ や k は電子の軌道の内側から数えて何番目かを表すという意味があることも理解されました．

1913年にボーアは、このようにリュードベリの公式を導くことに成功し、一段と高いレベルの理論を形成することができました．しかし、量子条件と振動数条件という天下りの仮定をしている点、二重性の本質について踏み込んだ議論をしていない点で不満が残ります．その後、1920年代半ばに量子力学という真の理論が誕生しました．水素原子の構造についても、量子力学の基礎方程式であるシュレディンガー方程式から解明することができるのです．このことについては、例4（中心力場内の粒子）のChapterで明らかにしましょう．量子力学が完成した後、ボーアの理論

は前期量子論として、過渡的な理論としての意義をもつようになったのです。

Part2 波動力学の成立

Q05 不確定性原理

Q05-1 量子力学について

この Chapter から完成された量子力学について考えていくことにします。光と物質の二重性の問題や前期量子論の不完全性を乗り越えて創造された、真の理論としての量子力学の概念と原理、さらに理論体系を導入していくことにします。

量子力学の理論について、大まかな流れを触れておくことにします。ド・ブロイの物質波の着想のもとに、1926年、シュレディンガーが創った理論体系を波動力学といいます。一方、その1年前の1925年、ハイゼンベルクは別の体系である行列力学を創始していました。その当時、この2つの物理体系は、計算方法は異なりますが、いつも同じ結果を出すことがわかってきました。そこで、シュレディンガーは2つの理論を分析し、両者の同等性を証明しました。さらにディラックは、この2つの理論を特殊な場合として取り込んでいる完全に一般的な体系を構築しました。これを変換理論といいます。(1927年)ここに、完成した量子力学が誕生したのです。その後、時代は下がりますが、ファインマンは斬新な着想のもとに、新しい量子力学を創り上げました。これを経路積分といいます。(1948年)これから量子力学1では、波動力学について詳しく取り扱うことにします。というのも、波動力学の理論が最も理解し易いからです。残りの3つの理論については量子力学2で見ていくことにします。

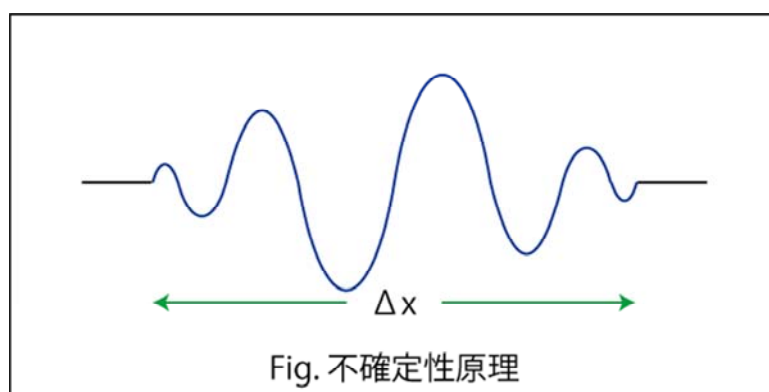
ここで、物理学の分類に関する言葉の定義を確認しておきましょう。ニュートン力学やマクスウェル電磁気学等、量子力学以前の理論を古典論といいます。相対性理論は20世紀になってから創始された理論であり、現代物理学に属しますが、量子力学による理論以前の物理学ですので古典論の範疇に属します。(古典物理学と古典論の違いに注意して下さい。)特に、

量子力学以降の物理理論は量子論と総称することにします。（量子論という言葉と古典論という言葉は対立する関係にあります。）場の量子論や弦理論は量子論になります。

Q05-2 不確定性原理

ニュートン力学においては、野球のボールや天体等、その運動において位置と運動量を厳密に、しかも同時に決定することができました。この事実はミクロな世界においては、そのまま成立するのでしょうか？

この問題について、二重性をもつ1個の量子（例えば電子等.）の波動（電子の場合はド・ブローイ波です.）で取り扱うことにしましょう。簡単のため、1次元の場合に設定し、波動が下図のように波束をつくっている場合を考えます。



波束の広がりである Δx が、無限大になれば正弦波の場合であり、 Δx が微小のときは波束が局在していることになります。上図の波束は、これら2つの場合を極限として含んでいることになります。量子の波動の正体は何であるかについては、まだ考えていませんが、この Δx の中に量子が存在しているはずで、したがって、量子の位置には Δx の幅があることにな

ります。波数 k_x は長さ 2π の中に含まれる波の数でありましたので、 Δx の領域にある波の数は、

$$k_x \times \frac{\Delta x}{2\pi}$$

で与えられます。ここで、 Δx の領域にある波束の両端の振幅が小さくなっていて、波の数を厳密に数えることができないことに注意しましょう。このとき、波数 k_x の不確定さを Δk_x とし、 Δx の領域での波の数に大雑把に見積もって、1 個程度の不確定性があるとします。この場合、

$$\Delta k_x \times \frac{\Delta x}{2\pi} \sim 1$$

の関係が成立します。(～は大体の程度が一致することを示します。) 故に、

$$\Delta x \cdot \Delta k_x \sim 2\pi$$

となります。さらに、両辺に $\hbar$ をかけて、量子についての関係である、アインシュタイン-ド・ブロイの関係式を使うと、

$$\Delta x \cdot \hbar \Delta k_x \sim 2\pi \hbar$$

$$\therefore \Delta x \cdot \Delta p_x \sim \hbar$$

が導かれます。(Δp_x は運動量の不確定さを表し、 $\hbar$ はプランク定数です。) 最後の関係をハイゼンベルクの不確定性原理といいます。

不確定性原理はミクロ世界において、位置と運動量を同時に決定することが不可能であることを意味しています。仮に、量子の位置を完全に正確

に決定すると、 $\Delta x=0$ になります。これは、1 点に局在した波束に対応しますが、このとき不確定性原理より、 $\Delta p_x = \infty$ になり、運動量の値が全くわからなくなります。逆に、運動量を完全に正確に決定すると、 $\Delta p_x = 0$ になります。この場合は不確定性原理より、 $\Delta x=\infty$ になり、位置がわからなくなります。波束が無限大に広がっているときとは、例えば、無限に広がっている正弦波等に対応します。不確定性原理は量子力学においては、もはや常識が通用せず、古典論と決別しなければならないことを示しているのです。

以上の 1 次元の議論を 3 次元に拡張します。この場合の不確定性原理は、 x 方向、 y 方向、 z 方向をとり、次のように表すことができます。

$$\begin{cases} \Delta x \cdot \Delta p_x \sim h \\ \Delta y \cdot \Delta p_y \sim h \\ \Delta z \cdot \Delta p_z \sim h \end{cases}$$

Q06 シュレディンガー方程式

Q06-1 1次元自由粒子のシュレディンガー方程式

電子の波動，つまりド・ブローイ波の正体が何かはわかっていません。しかし，波動である限り，波動についての一般量 ψ が存在するはずです。（古典論の場合， ψ の例としては，水波の場合の変位であったり，音波の場合の密度であったり，電磁波の場合の電場や磁場であったりします。）このド・ブローイ波の ψ の満たす方程式を導出してみましょう。簡単のため， x 方向のみの1次元の場合を考えます。 ψ の関数形は種々あるでしょうが，次の正弦波の場合を取り上げます。

$$\psi(t, x) = A \sin(\omega t - k_x x)$$

A は振幅， ω は角振動数， k_x は波数です。この最も簡単な波動である正弦波は，最も簡単な粒子の運動状態である自由粒子に対応することができるかと仮定します。（この仮定が正しいことは，後で，例1（自由粒子）のChapterで確認されます。）ここで，アインシュタイン-ド・ブローイの関係式，

$$\begin{cases} E = \hbar\omega \\ p_x = \hbar k_x \end{cases}$$

より，

$$\psi(t, x) = A \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x)$$

となります。この ψ を1次元波動方程式，

$$\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

に代入してみましょう。

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial t} = A \frac{E}{\hbar} \cos \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) \\ \frac{\partial \psi}{\partial x} = -A \frac{p_x}{\hbar} \cos \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) \end{cases}$$

$$\therefore \begin{cases} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -A \frac{E^2}{\hbar^2} \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -A \frac{p_x^2}{\hbar^2} \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) \end{cases}$$

より,

$$\frac{1}{v^2} \left\{ -A \frac{E^2}{\hbar^2} \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) \right\} = -A \frac{p_x^2}{\hbar^2} \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x)$$

$$\therefore E^2 = v^2 p_x^2$$

が導かれます。しかし、この式は古典論での自由粒子に対するエネルギーと運動量の関係である、

$$E = \frac{1}{2m} p_x^2$$

には、一致しません。

そこで、 ψ に対する波動方程式は、波動一般に成立する上記のものではなく、

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (1)$$

のような、形をした方程式になると思われます。この形の方程式からは、 E については1次、 p_x については2次の関係が出てきます。 α はある定数であり、今から決定するべきものです。もはや、 ψ は、最初の、

$$\psi(t, x) = A \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x)$$

の形では、方程式を満たすことができません。つまり、

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = A \frac{E}{\hbar} \cos \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -A \frac{p_x^2}{\hbar^2} \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x)$$

という2つの式は、任意の位相（正弦や余弦の角度部分）について、イコールでは結ばれません。そこで、

$$\psi(t, x) = A \cos \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) + B \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x)$$

と、置き直し、 A と B を求めることにします。まず、 ψ を t について偏微分します。

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -A \frac{E}{\hbar} \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) + B \frac{E}{\hbar} \cos \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x)$$

次に、 ψ を x で2回偏微分します。

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = A \frac{p_x}{\hbar} \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) - B \frac{p_x}{\hbar} \cos \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x)$$

$$\therefore \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -A \frac{p_x^2}{\hbar^2} \cos \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) - B \frac{p_x^2}{\hbar^2} \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x)$$

ここで, (1)式より,

$$\begin{aligned} -A \frac{E}{\hbar} \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) + B \frac{E}{\hbar} \cos \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) \\ = \alpha \left\{ -A \frac{p_x^2}{\hbar^2} \cos \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) - B \frac{p_x^2}{\hbar^2} \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) \right\} \end{aligned}$$

となりますが, 任意の位相について, イコールが成立するとします. このとき, 正弦と余弦の係数を比較して,

$$\begin{cases} -A \frac{E}{\hbar} = -\alpha B \frac{p_x^2}{\hbar^2} \\ B \frac{E}{\hbar} = -\alpha A \frac{p_x^2}{\hbar^2} \end{cases}$$

$$\therefore \begin{cases} AE = \alpha B \frac{p_x^2}{\hbar} \\ BE = -\alpha A \frac{p_x^2}{\hbar} \end{cases}$$

の関係が成立します. ここで, 自由粒子の場合の関係,

$$E = \frac{1}{2m} p_x^2$$

を使うと,

$$\begin{cases} A = \frac{2m}{\hbar} \alpha B \\ B = -\frac{2m}{\hbar} \alpha A \end{cases}$$

$$\therefore A = -\left(\frac{2m}{\hbar}\right)^2 \alpha^2 A$$

$$\therefore \alpha^2 = -\left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2$$

$$\therefore \alpha = \pm \frac{\hbar}{2m} i$$

と α が求められます。さらに、 B を求めると、

$$\begin{aligned} B &= -\frac{2m}{\hbar} \left(\pm \frac{\hbar}{2m} i\right) A \\ &= \mp A i \end{aligned}$$

となります。（複号同順。）この B を元の ψ の式に代入します。

$$\begin{aligned} \psi(t, x) &= A \cos \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) \mp A \cdot i \cdot \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) \\ &= A \left\{ \cos \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) \mp i \cdot \sin \frac{1}{\hbar} (Et - p_x x) \right\} \\ &= A \exp \left\{ \mp \frac{i}{\hbar} (Et - p_x x) \right\} \end{aligned}$$

この場合、複号はどちらをとっても良いです。また、 A は振幅であると考

えられます。この ψ は確かに正弦波の形をしています。しかし、複素数の波動になっています。古典論では、微分方程式の解で複素数が出てきた場合は、ことごとく虚数部を捨て、実数部のみを現実の解とすることが常套手段です。しかし、波動力学では、複素数そのものが実在であると考えerのです。そして、この複素数の ψ をシュレディンガーは波動関数と名付けました。波動関数はド・ブロイ波から生まれた概念です。概念の発展の繋がりを示しておきます。

ド・ブロイ波→波動関数 ψ （複素数）

一方、(1)式に a を代入します。

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \pm \frac{\hbar}{2m} i \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

$$\therefore i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mp \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

となります。複号は通常の表記に従って、上の符号を採用ことにします。つまり、

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

とします。また、複号で上の符号を選んだので、上記の波動関数は、

$$\psi(t, x) = A \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)\right\}$$

$$\therefore \psi(t, x) = A \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)\right\}$$

となります。この波動関数を、(2)式に代入して、自由粒子に対するエネルギーと運動量の関係式、

$$E = \frac{1}{2m} p_x^2$$

が成立していることを確認しておきましょう。ψをtで1回偏微分して、

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E A \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)\right\}$$

となります。ψをxで2回偏微分して、

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p_x A \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)\right\}$$

$$\therefore \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p_x^2}{\hbar^2} A \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)\right\}$$

となります。これらを(2)式に代入して計算します。

$$i\hbar \left[-\frac{i}{\hbar} E A \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)\right\}\right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{p_x^2}{\hbar^2} A \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)\right\}\right]$$

$$\therefore E\psi = \frac{1}{2m} p_x^2 \psi \quad (3)$$

$$\therefore E = \frac{1}{2m} p_x^2$$

と確かに導かれます。つまり、自由粒子のエネルギーと運動量の関係式を満たす波動方程式(2)式が求められたことになり、当初の目的が達成されました。(2)式を自由粒子の1次元シュレディンガー方程式といいます。

Q06-2 量子化

(3)式を見ると、古典論の自由粒子に対するエネルギーと運動量の関係式に波動関数がかけられていることがわかります。この式をヒントにして、古典論から波動力学の方程式を導くことを考えましょう。(3)式から(2)式を導く方法として、

$$E \rightarrow \hat{E} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\frac{1}{2m} p_x^2 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

の置き換えをすればよいことがわかります。(E の上にある記号ハットは、それが演算子であることを示します。) 書き直すと、運動量については、

$$p_x \rightarrow \hat{p}_x \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

とすればよいです。この古典的物理量から演算子への置き換えを量子化といいます。ここで、自由粒子に対する、古典論から波動力学へ移行する手続きをまとめておきましょう。

- 1 古典論での物理量の間の関係式を求めます。
- 2 量子化により古典的物理量を演算子に置き換え、演算子の間の関係

式を導きます。

3 演算子の関係式を波動関数に左からかけます。(演算子をかけることを作用するといいます。)

自由粒子の場合を考えて、以上の手続きを導入しましたが、この手続きは一般的に採用される方法です。量子化を手掛かりにして、一般の場合のシュレディンガー方程式を求めていきましょう。

Q06-3 一般的なシュレディンガー方程式

(2)式を力がはたらいている場合、つまり、ポテンシャル $V(x)$ がある場合について拡張しましょう。古典論では、

$$E = \frac{1}{2m} p_x^2 + V(x)$$

の関係式があります。ここで、量子化、

$$E \rightarrow \hat{E} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$p_x \rightarrow \hat{p}_x \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

を行い、演算子に置き換えます。このとき、

$$\frac{1}{2m} p_x^2 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

となりました。また、ポテンシャル $V(x)$ は位置 x の関数ですが、位置 x の量子化は、

$$x \rightarrow \hat{x} \equiv x$$

であることが知られています。つまり、位置 x については波動力学でも、古典論と同様に x のままです。したがって、ポテンシャルは量子化されても $V(x)$ のままです。すなわち、量子化後の演算子の間の関係式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

となります。この式の両辺を波動関数 ψ に作用させて、

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

が成立します。この式を 1 次元シュレディンガー方程式といいます。

さらに、3次元に拡張します。3次元の場合、エネルギーについての古典的關係式は、

$$E = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(\vec{x})$$

です。ここで、量子化、

$$E \rightarrow \hat{E} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$p_x \rightarrow \hat{p}_x \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$p_y \rightarrow \hat{p}_y \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

$$p_z \rightarrow \hat{p}_z \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

を行い、演算子に置き換えます。このとき、

$$\frac{1}{2m} p_x^2 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\frac{1}{2m} p_y^2 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

$$\frac{1}{2m} p_z^2 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

となります。ポテンシャルは量子力学でも変わらず $V(\vec{x})$ のままです。このとき、演算子の間の関係式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\vec{x})$$

です。この式の両辺を波動関数 ψ に左から作用させて、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\vec{x}) \right\} \psi(t, \vec{x})$$

が成立します。ここで、よく使用される記号であるナブラ ∇ を定義します。

$$\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

∇ と ∇ で内積をとります。

$$\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

となりますので、上記の方程式は次のように表されます。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right\} \psi(t, \vec{x})$$

この方程式こそが波動力学の基礎方程式であるシュレディンガー方程式です。ここで、以上の議論はシュレディンガー方程式の証明にはなっていないことに注意しましょう。この方程式が正しいことを実証する方法は、様々な場合について、この微分方程式を解き、その結果が実験に一致することを確認しなければなりません。長い年月の検証に耐え、シュレディンガー方程式は、ニュートン力学において運動方程式が果たした役割を、波動力学において担い続けているのです。

Q06-4 ハミルトニアン

3次元におけるエネルギーについての古典的關係式、

$$E = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(\vec{x})$$

は、解析力学ではハミルトニアン H そのものです。

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

ハミルトニアンは対象にしている物理系を記述する古典的物理量です。このハミルトニアンを量子化して、波動力学での系を記述する物理量として使用することができます。一般に、波動力学はハミルトニアン定式化で記述されるのです。ハミルトニアンを量子化すると、

$$H \rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x})$$

となります。このとき、シュレディンガー方程式は、

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = \hat{H} \psi(t, \vec{x})} \quad (\text{Q06-1})$$

と書き直されます。

Q06-5 時間に依存しないシュレディンガー方程式

波動関数の物理的な意味を考えるのは、次の Chapter で行いますが、波動に関する何らかの量であることは間違いありません。波動一般について、時間的に進行しない定常波という状態が存在しました。波動関数が定常波を形成して、時間的に進行しない場合、シュレディンガー方程式がどのようなになるのかを考えてみましょう。波動関数 ψ が次式のように、時間だけ

の関数 T と空間だけの関数 ϕ との積で表される場合を取り扱います。

$$\psi(t, \vec{x}) = T(t)\phi(\vec{x})$$

このとき、関数 ϕ は時間に依存しません。この式をシュレディンガー方程式(q06-1)に代入します。

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} \phi(\vec{x}) = T(t) \hat{H} \phi(\vec{x})$$

両辺を $T(t)\phi(\vec{x})$ で割ると、

$$i\hbar \frac{\frac{dT(t)}{dt}}{T(t)} = \frac{\hat{H}\phi(\vec{x})}{\phi(\vec{x})}$$

となります。この等式において、左辺は t だけの関数であり、右辺は $\vec{x}$ だけの関数です。これらが恒等的に等しくなるためには定数にならなければなりません。この定数を E とおきます。このとき、

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = ET(t)$$

$$\boxed{\hat{H}\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x})} \quad (\text{q06-2})$$

の2式が得られます。(q06-2)式の左辺は ϕ にハミルトニアンがかかっています。したがって、右辺の E はエネルギーと考えられます。また、第1式を解くと、

$$\frac{dT}{T} = -i \frac{E}{\hbar} dt$$

$$\therefore \int \frac{dT}{T} = -i \frac{E}{\hbar} \int dt$$

$$\therefore \log|T| = -i \frac{E}{\hbar} t + \text{const}$$

$$\therefore |T| = \exp(-i \frac{E}{\hbar} t + \text{const})$$

$$= \text{const} \cdot \exp(-i \frac{E}{\hbar} t)$$

となります。ただし、最後の式は const を置き直しました。故に、

$$T = \pm \text{const} \cdot \exp(-i \frac{E}{\hbar} t)$$

となりますが、さらに、 $\pm \text{const}$ を A と置き直して、

$$T = A \exp(-i \frac{E}{\hbar} t)$$

となります。ここで、E はエネルギーであったので、アインシュタイン・ブロイの関係式、

$$E = \hbar \omega$$

より、

$$T = A \exp(-i \omega t)$$

となります。したがって、 $\phi(\vec{x})$ は定常波のそれぞれの位置での振幅を表し、 $T(t)$ は定常波の各位置における振動の時間的变化を表していると考えられます。前述した(q06-1)式を時間に依存するシュレディンガー方程式といいます。それに対して、(q06-2)式を時間に依存しないシュレディンガー方程式といいます。また、 ψ を時間に依存する波動関数、 ϕ を時間に依存しない波動関数といいます。ここで、 T の式を ψ に代入して、 ψ と ϕ の間に、

$$\psi(t, \vec{x}) = A \exp(-i\omega t) \phi(\vec{x})$$

の関係があることがわかります。

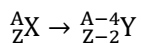
Q07 量子状態（波動関数と確率振幅）

Q07-1 原子核の崩壊

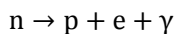
波動関数とは何でしょうか？ 量子的な事象を取り扱い、その物理的意味を考え、量子力学の基礎的な概念と原理を導入することにしましょう。

最初の量子的な事象として、原子核の崩壊というのを見ていくことにします。ある特定の物質が自発的に放射線を出すはたらきを放射能といいます。放射線にはα線、β線、γ線の3つがあります。α線の正体はヘリウムの原子核であり、電離作用が大きく、透過度は小さいという特徴があります。β線の正体は電子であり、電離作用、透過度はともに中程度です。γ線の正体は振動数の大きい電磁波であり、電離作用が小さく、透過度は大きいという特徴があります。

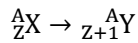
放射線が発生するのは、放射性物質の原子核が崩壊し、元素が変換するためです。古来、錬金術の研究が行われた時代がありましたが、原子核の崩壊は現代における錬金術ということが言えるでしょう。α線を放出する崩壊をα崩壊といいます。この過程では原子核からヘリウムの原子核が出るので、次のように表せます。



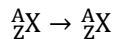
原子番号 Z は 2 減少し、質量数 A は 4 減少します。X や Y は元素の種類を一般的に表しています。元素の種類が変換されています。次に、β線を放出する崩壊であるβ崩壊を考えましょう。この過程では、原子核内部で、



というように、中性子 n が陽子 p、電子 e とニュートリノ γ に変換しています。この結果、元素は次のように変換します。



原子核内部で中性子が陽子になったので，原子番号 Z は 1 増えますが，質量数 A は変化しません．そして， α 崩壊または β 崩壊した直後の不安定な状態にある原子核が，余分なエネルギーを電磁波として γ 線を放出する過程が， γ 崩壊です．



このように， γ 崩壊しても原子番号 Z と質量数 A は変化せず，元素の種類はもとのままです． γ 崩壊は原子核内部の反応なので，放出されるエネルギーが大きく，振動数の高い電磁波が放出されます．このことはアインシュタイン-ド・ブロイの関係式の第 1 式，

$$E = h\nu$$

から理解されます．（原子内部の電子の軌道間の遷移による反応では，放出されるエネルギーが γ 崩壊よりも小さく， γ 線よりも振動数の低い電磁波である可視光線が放出されることが，よく知られています．原子の構造の Chapter を参照して下さい．）

それでは，原子核崩壊のメカニズムについて考えてみましょう．原子核が $X \rightarrow Y$ と崩壊するとき，原子核 X の初めの数 N_0 が $\frac{1}{2}$ になるまでの時間，その残りの X の数 $\frac{N_0}{2}$ がまた $\frac{1}{2}$ になるまでの時間，そのまた残った X の数 $\frac{N_0}{4}$ がさらに $\frac{1}{2}$ になるまでの時間は全て同じになります．（以下，続く．）このことは，原子核が崩壊する過程が，本質的に確率的なものであることを意味しています．つまり，ある特定の原子核がいつ崩壊するかを決定することは

不可能なのです。ここで、もとの原子核が半分になる時間を半減期といい、 T で表します。（もし、決定論的に原子核が崩壊するならば、 $2T$ 経過すると、全ての原子核 X が Y に崩壊してしまうはずですね。）ある時間 t における残った元素 X の原子核の個数を N とすると、次式が成立します。

$$N = N_0 \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{t}{T}} \quad (1)$$

この(1)式において、 t を $T, 2T, 3T, \dots$ を代入すると、上記の崩壊の状況が確認されます。

さらに、原子核崩壊の問題を微分方程式で取り扱ってみましょう。以下の議論により、原子核崩壊の現象の本質が確率的性質をもっていることが、はっきりと理解されます。1 個の原子核が、ある時刻 t から次の 1 秒の間に崩壊する確率を λ とすれば、 N 個の原子核の中で、微小時間 Δt 間に $\lambda N \Delta t$ 個だけが崩壊することになります。（ λ を崩壊定数といいます。）したがって、 N の変化量 ΔN は次のように表されます。

$$\Delta N = -\lambda N \cdot \Delta t$$

ここで、極限をとると、

$$dN = -\lambda N \cdot dt$$

となります。両辺を N で割って、

$$\frac{dN}{N} = -\lambda \cdot dt$$

ですが、両辺を不定積分して計算します。

$$\int \frac{dN}{N} = -\lambda \int dt$$

$$\therefore \log N = -\lambda t + C$$

$$\therefore N = \exp(-\lambda t + C)$$

$$\therefore N = \exp C \cdot \exp(-\lambda t)$$

ただし, C は積分定数です. ここで, 初期条件として, $t=0$ で元素 X が N_0 個あったとすると,

$$N_0 = \exp C$$

となるので,

$$N = N_0 \exp(-\lambda t) \quad (2)$$

が微分方程式の解になります. (1)式と(2)式を比較すると,

$$\exp(-\lambda t) = \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{t}{T}}$$

となります. この方程式を解くと,

$$-\lambda t = \log\left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{t}{T}}$$

$$= -\frac{t}{T} \log 2$$

$$\therefore T = \frac{\log 2}{\lambda}$$

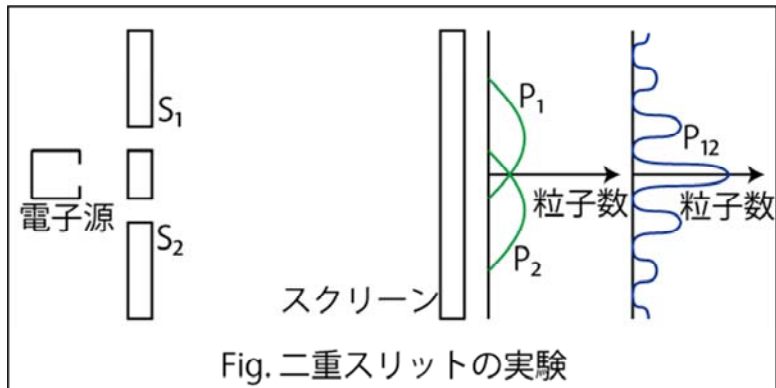
$$\cong \frac{0.695}{\lambda}$$

の関係があることがわかります。崩壊の過程を確率的であるとした微分方程式による方法が、経験式である(1)式を再現することが確認できました。

原子核の崩壊が確率論的に起こるということは、量子力学の本質を表しています。すなわち、ミクロ世界においては、ニュートン力学的な決定論ではなく確率論的な自然法則が支配しているのです。このことの一端を原子核の崩壊現象は示しています。

Q07-2 二重スリットの実験

前の Section に引き続き、量子的な概念と原理を導入するため、特に波動関数 ψ の意味を知るため、二重スリットの実験というものを取り扱うことにします。この実験は光についてのヤングの実験としてお馴染みのものです。その内容は、同位相の光を二重スリットに通すと、スクリーン上に干渉模様が現れ、光の波動性を示すものとして知られています。ここでは、光の代わりに電子を考えてみます。



実験装置は上図の通りです．左にある電子源から電子のビームをスリットに打ち込み，右にあるスクリーン上で電子を観測します．観測される電子は紛れもなく粒子です．この事実は電子の二重性のうちの粒子性を表していると考えられます．ここで，観測される電子の粒子数について考えてみましょう．仮に，スリット S_2 が閉じていて，スリット S_1 のみが開いている場合には，粒子数の分布は図の P_1 のようになります．逆に，スリット S_1 が閉じていて，スリット S_2 のみが開いている場合には，粒子数の分布は図の P_2 のようになります．この分布は電子が粒子であるとしても，波動であるとしても同じ結果になります．それでは，2つのスリット S_1 とスリット S_2 が両方とも開いていたらどうなるのでしょうか？もし，粒子数の分布が中央をピークとした1つの山だけのものになった場合は，すなわち，

$$P_{12} = P_1 + P_2$$

となったときには，電子の粒子性が現われていると結論できます．（この粒子数の分布は図には示していません．）しかし，正しい結論はこのようにはなりません．波動力学に従うと，粒子数の分布 P_{12} は上図に示したように綺麗な干渉模様になります．ここに電子の波動性が現われています．こ

のとき,

$$P_{12} \neq P_1 + P_2$$

の関係が成立します。以上の議論により、スリットを通る前、スリットを通るとき、スリットから出てスクリーンに到達するまで、電子は波動として振る舞い、スクリーンで観測されたとき、電子は粒子として存在することが結論付けられます。

では、スクリーン上で観測される前の波動の正体は何でしょうか？さらに問題を深く考えるため、電子のビームの強度を極端に弱くしてみましょう。例えば、電子を1個しか送らなかったとしましょう。当然、スクリーン上には1個の電子しか発見されません。これでは干渉の効果を測定しようがなく、電子の波動性がはっきりとわかりません。しかし、実は、この場合も干渉模様を観測することができます。その方法は、電子を1個ずつ、時間をかけて送り続けるのです。最初はポツリポツリとしか、電子は観測されません。ここで、スクリーンのどの場所に電子が観測されるかを決定することは不可能です。しかし、長時間にわたって観測された電子の粒子数の分布を描いてみれば、見事な干渉模様が現れます。つまり、この場合も電子は1個だけでも、スリットを通る前、スリットを通るとき、スリットから出てスクリーンに到達するまでといった過程において、波動として存在します。特に、二重スリットを通過するとき、1個の電子は、波動として2つのスリットを同時に通るように振る舞うのです。そうでないならば、1個の電子は干渉しようがありません。そして、スクリーンに到達して、はじめて1個の粒子として確認されます。

上記のように、電子がスクリーンのどの場所で観測できるかを決定することが不可能であるという事実は、干渉模様を示している粒子数の分布 P_{12}

が、粒子として存在する確率に比例することを意味します。そこで、 P を粒子 1 個の存在確率として定義し直し、

$$P(t, x) = \rho(t, x)dx$$

と表します。 $\rho(t, x)$ は存在確率密度です。つまり、 $\rho(t, x)dx$ は時刻 t において微小 1 次元空間 dx の中に、1 個の粒子が観測される確率を表します。また、1 次元空間全体（スクリーン上）で粒子が存在する確率が 1 であるという規格化条件、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(t, x)dx = 1$$

が成立します。（粒子は 1 次元空間全てにわたって存在する可能性があります。したがって、 $-\infty$ から $+\infty$ まで積分しました。）前の Section の原子核の崩壊で触れたように、ミクロ世界では決定論ではなく確率的性質が本質的な役割を果たします。ニュートンの力学的自然観の中心的概念である決定論的因果律を否定し、確率法則が支配する量子力学的自然観を打ち立てようとしているのです。アインシュタインは“神がサイコロをふるものか。”と言い、量子力学が不完全な理論であると反論しましたが、現在において、多くの実験結果は量子力学が正しいことを立証しています。

それでは、波動関数 ψ と存在確率密度 ρ の関係を考えましょう。一般に波動の強度（エネルギー）は、振幅の 2 乗と角振動数の 2 乗に比例します。ここで、最も簡単な自由粒子の場合、波動関数は正弦波です。すなわち、

$$\psi(t, x) = A \exp\{i(kx - \omega t)\}$$

の波動を考えましょう。（ A は振幅です。）このとき、

$$\begin{aligned}
|\psi(t, x)|^2 &= \psi^*(t, x)\psi(t, x) \\
&= A^* \exp\{-i(kx - \omega t)\} \cdot A \exp\{i(kx - \omega t)\} \\
&= |A|^2
\end{aligned}$$

となります。したがって、波動関数の強度は ψ の絶対値の2乗に比例します。今、正弦波を考えましたが、波動関数が任意の場合にも拡張し、存在確率密度 ρ は ψ の絶対値の2乗に比例すると仮定することにします。

$$\rho(t, x) = a|\psi(t, x)|^2$$

ここで、 a は比例定数です。規格化条件より、

$$\int_{-\infty}^{\infty} a |\psi(t, x)|^2 dx = 1$$

が成立するので、

$$\frac{1}{\sqrt{a}} \psi(t, x)$$

を改めて、 ψ と置き直すと、(ψ の定数倍も ψ と同じ性質の波動関数を表します。)

$$\rho(t, x) = |\psi(t, x)|^2$$

となります。このように、確率密度を与える量として、 ψ を確率振幅と呼

ぶことにします。ド・ブロイ波は波動関数で表されますが、その正体は複素数の確率の波動だったのです。（この波動関数の確率解釈を唱えたのはボルンです。）

ド・ブロイ波→波動関数 ψ （複素数）＝確率振幅 ψ （複素数）

概念の発展の繋がりを表記しました。

ここで、二重スリットの実験に戻りましょう。スリット S_1 から出た波動の確率振幅は ψ_1 であり、スリット S_2 から出た波動の確率振幅は ψ_2 となります。もし、スリットの片方が閉じていれば干渉は起こりませんでした。スリット S_1 が開いていて、スリット S_2 が閉じていれば、すなわち、存在確率密度分布は、

$$\rho_1 = |\psi_1|^2$$

となります。スリット S_2 が開いていて、スリット S_1 が閉じていれば、すなわち、存在確率密度分布は、

$$\rho_2 = |\psi_2|^2$$

となります。スリットが両方とも開いている場合は、存在確率密度分布 ρ_{12} は、 $\rho_1 + \rho_2$ にはなりません。（存在確率密度分布は粒子数の分布と同じ干渉模様になりますね。）

$$\rho_{12} \neq \rho_1 + \rho_2$$

正しい関係式を見つけましょう。2つのスリットが開いているとき、電子

の波動の一般量である確率振幅 ψ は、重ね合わせの原理と呼ばれる波動一般について成立する関係によって合成されます。その内容は、2つの確率振幅が存在するときは、重ね合わされて、その和が合成された確率振幅になるということです。

$$\psi(t, x) = \psi_1(t, x) + \psi_2(t, x)$$

2つの確率振幅は、同位相で二重スリットを通過するため、重ね合わせの原理に従い、合成され、スクリーン上で干渉を起こします。その理由は、水波、音波、光波といった波動一般の場合から類推されますが、ここでは、複素数の重ね合わせによる干渉になります。複素数である確率振幅は、

$$\begin{cases} \psi_1 = |\psi_1| \exp(i\theta_1) \\ \psi_2 = |\psi_2| \exp(i\theta_2) \end{cases}$$

と表されます。ここで θ は複素平面における位相です。よって、スリットを両方とも開けた場合の、存在確率密度は次式で求められます。

$$\begin{aligned} \rho_{12} &= |\psi_{12}|^2 \\ &= \psi_{12}^* \psi_{12} \\ &= (\psi_1^* + \psi_2^*)(\psi_1 + \psi_2) \\ &= |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1 \\ &= \rho_1 + \rho_2 + |\psi_1| \exp(-i\theta_1) |\psi_2| \exp(i\theta_2) \\ &\quad + |\psi_2| \exp(-i\theta_2) |\psi_1| \exp(i\theta_1) \\ &= \rho_1 + \rho_2 + |\psi_1| |\psi_2| [\exp\{i(\theta_1 - \theta_2)\} + \exp\{-i(\theta_1 - \theta_2)\}] \end{aligned}$$

$$= \rho_1 + \rho_2 + 2|\psi_1||\psi_2| \cos(\theta_1 - \theta_2)$$

ここで、 ψ^* は ψ の複素共役を表します。最後の式の第3項が干渉の効果を示しています。

スクリーンに到達して電子を観測したとき、それは紛れもなく粒子でした。スクリーンに到達するまで確率振幅をもつ波動として空間的に広がって存在していた電子が、スクリーン上で観測された瞬間に粒子になります。空間的に広がっていた波動が、観測した瞬間に1点に集まる、つまり局在することになります。これを量子飛躍といいます。（もっとも、スクリーンに到達する前の過程においても、観測を行えば量子飛躍が起こり、粒子が現れますが、いまはそういったことは行わないことにします。）このように、観測という行為は特別な意味を持っています。観測による波動関数の量子飛躍について、

$$\psi(t, x) \rightarrow \phi_{x'}$$

と表しておきましょう。矢印の左側の波動関数 ψ は、 t と x の関数であり、時間的に変動し、空間的に広がっています。矢印の右側の波動関数は ϕ と記しましたが、これは時間的変化しない波動関数になったことを意味しています。（空間的にも局在します。） ϕ の右下の x' は電子が局在する位置を表します。この量子飛躍の前後において因果関係はなく、観測される確率のみを波動関数、すなわち確率振幅から計算することができます。

波動関数（確率振幅）は、以上のように確率の波動という意味をもち、観測により量子飛躍する存在です。このような性質をもつ存在を、より抽象化して量子状態と名付けることにしましょう。波動関数並びに確率振幅は、波動力学における量子状態の表現形式なのです。概念の発展の繋がり

を示しておきます。

ド・ブロイ波 → 波動力学的状態; 波動関数 = 確率振幅
→ 量子力学的状態; 量子状態

Q07-3 量子状態についての3つの原理

前 Section の重ね合わせの原理,

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \psi_1(t, \mathbf{x}) + \psi_2(t, \mathbf{x})$$

を拡張して一般化しましょう。シュレディンガー方程式を満たす,

$$\psi_1(t, \vec{x}), \psi_2(t, \vec{x}), \dots, \psi_N(t, \vec{x})$$

の N 個の ψ が存在するとき,

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_{n=1}^N c_n \psi_n(t, \vec{x})$$

もシュレディンガー方程式を満たすという定理が成立します。(空間は3次元に拡張しました。 $\vec{x} = (x, y, z)$) ここで, c_n は一般に複素数の定数です。この定理の証明にはシュレディンガー方程式の線形性を使います。

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \{c_1 \psi_1(t, \vec{x}) + c_2 \psi_2(t, \vec{x}) + \dots + c_N \psi_N(t, \vec{x})\} \\ &= c_1 \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1(t, \vec{x}) + c_2 \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2(t, \vec{x}) + \dots + c_N \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_N(t, \vec{x}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= c_1 \hat{H} \psi_1(t, \vec{x}) + c_2 \hat{H} \psi_2(t, \vec{x}) + \cdots + c_N \hat{H} \psi_N(t, \vec{x}) \\
&= \hat{H} \{c_1 \psi_1(t, \vec{x}) + c_2 \psi_2(t, \vec{x}) + \cdots + c_N \psi_N(t, \vec{x})\} \\
&= \hat{H} \psi(t, \vec{x})
\end{aligned}$$

(証明終.) (N は無限大までとることができます.) この定理も重ね合わせの原理といいます.

ここで, この Chapter で見てきた原理をまとめておきます. (空間は3次元に拡張しておきます.)

1 ボルンの確率解釈; 粒子の存在確率密度は, 量子状態を表す規格化された確率振幅の絶対値の2乗で求められます.

$$\rho(t, \vec{x}) = |\psi(t, \vec{x})|^2$$

この量を全空間にわたって積分したものは全確率1になります. (規格化条件)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(t, \vec{x})|^2 dx dy dz = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz = 1$$

積分は3重積分で, 3次元空間の x, y, z それぞれについて, $-\infty$ から $+\infty$ までとります.

2 重ね合わせの原理; 系の量子状態を表す波動関数,

$$\psi_1(t, \vec{x}), \psi_2(t, \vec{x}), \cdots, \psi_N(t, \vec{x})$$

がシュレディンガー方程式の解であるならば、重ね合わせた波動関数、

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(t, \vec{x})$$

もシュレディンガー方程式の解になります。（通常、 n は 1 から無限大までとります。）

3 観測による量子状態の量子飛躍；波動として時間的に変動し、空間的に広がっている量子状態を表す ψ は、観測という行為によって量子飛躍し、局在します。

$$\psi(t, \vec{x}) \rightarrow \phi_{\vec{x}'}$$

その結果、粒子が観測されます。量子飛躍に因果関係はなく、ただ存在確率のみを知ることができます。

以上、3つの原理は波動力学の本質であり、古典的な概念とは相いれないものです。物質（電子）の二重性は解明されたのです。

Q07-4 時間に依存しない量子状態 ϕ について、3つの原理の変形

前 Section の3つの原理は、時間に依存する波動関数 ψ についてのものでした。これらの原理を時間に依存しない波動関数 ϕ について、書き直しておきましょう。まず、規格化条件がどのようなになるか、確認しておきます。シュレディンガー方程式の Chapter の最後の方で出てきた、 ψ と ϕ の関係式、

$$\psi(t, \vec{x}) = A \exp(-i\omega t) \phi(\vec{x})$$

において、 ϕ の定数倍も ϕ と同じ量子状態を表すので、

$$\phi(\vec{x}) \rightarrow \frac{1}{A} \phi(\vec{x})$$

と、置き直します。この場合、

$$\psi(t, \vec{x}) = \exp(-i\omega t) \phi(\vec{x})$$

が成立します。（この式が、 ψ と ϕ の間の一般的な関係式です。）これを、 ψ についての規格化条件、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(t, \vec{x})|^2 dx dy dz = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz = 1$$

に代入し

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t) \phi^*(\vec{x}) \cdot \exp(-i\omega t) \phi(\vec{x}) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(\vec{x}) \phi(\vec{x}) dx dy dz \end{aligned}$$

となります。故に、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(\vec{x})|^2 dx dy dz = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(\vec{x}) \phi(\vec{x}) dx dy dz = 1$$

という ϕ についての規格化条件が得られました。また, ψ のときと同様に,

$$\rho(\vec{x}) = |\phi(\vec{x})|^2$$

という量で, ϕ についての存在確率密度を与えることができます。

ψ について,

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(t, \vec{x})$$

が時間に依存するシュレディンガー方程式の解であるという, 重ね合わせの原理が成立しました。この関係を, ϕ を使って表しておきましょう。 ψ と ϕ の関係式,

$$\psi_n(t, \vec{x}) = \exp(-i\omega_n t) \phi_n(\vec{x})$$

より, (ここで, $n = 1, 2, \dots, \infty$ としておきます。)

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp(-i\omega_n t) \phi_n(\vec{x})$$

となります。ここで,

$$c_n(t) \equiv c_n \exp(-i\omega_n t)$$

とおくと,

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \phi_n(\vec{x})$$

と、 ψ を無限個の ϕ によって展開して表すことができます。

観測による波動関数 ψ の量子飛躍、

$$\psi(t, \vec{x}) \rightarrow \phi_{\vec{x}'}$$

も書き直しておきます。すなわち、

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_{m=1}^{\infty} c_m(t) \phi_m(\vec{x}) \rightarrow \phi_n(\vec{x})$$

となります。波動関数 ψ は展開した ϕ の中の一つに量子飛躍するのです。

ここで、無限個の自然数 m によって添え字が付けられた ϕ の中の一つ n 番目の ϕ に量子飛躍する場合を挙げました。実は ϕ の添え字の付け方には連続した数を使うこともあります。例えば、連続量の位置 $\vec{x}$ によって添え字を付けることもあります。いままでの電子をある位置 $\vec{x}'$ に観測するときの量子飛躍は、添え字 n の代わりに添え字 $\vec{x}'$ が使われています。

Q07-5 確率の保存と確率の流れ

ボールの確率解釈が首尾一貫したものになるためには、規格化条件、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(t, \vec{x})|^2 dx dy dz = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz = 1$$

が、時間に依存しないものである必要があります。時間で微分して、確かめてみましょう。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(t, \vec{x})|^2 dx dy dz \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \psi^*(t, \vec{x}) \frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*(t, \vec{x})}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) \right\} dx dy dz \end{aligned}$$

となります。ここで、シュレディンガー方程式より、

$$\frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(t, \vec{x}) + V \psi(t, \vec{x}) \right)$$

となります。この式の複素共役をとり、ポテンシャルは実数とすると、

$$\frac{\partial \psi^*(t, \vec{x})}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(t, \vec{x}) + V \psi^*(t, \vec{x}) \right)$$

となります。これらの式を代入して計算します。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(t, \vec{x})|^2 dx dy dz \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \psi^* \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi \right) - \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V \psi^* \right) \psi \right\} dx dy dz \\ = -\frac{\hbar}{2mi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \psi^* \nabla^2 \psi - (\nabla^2 \psi^*) \psi \right\} dx dy dz \\ = -\frac{\hbar}{2mi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \nabla \cdot \left\{ \psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi \right\} dx dy dz \end{aligned}$$

ここで、

$$\vec{j}(t, \vec{x}) \equiv \frac{\hbar}{2mi} \{ \psi^*(t, \vec{x}) \nabla \psi(t, \vec{x}) - (\nabla \psi^*(t, \vec{x})) \psi(t, \vec{x}) \}$$

を定義し、ベクトル解析のガウスの定理、

$$\iiint \nabla \cdot \vec{A} dV = \iint \vec{A} \cdot \vec{n} dS$$

を使います。(左辺は体積積分で、右辺は面積分です。また、右辺の $\vec{n}$ は面積分する表面の単位法線ベクトルです。)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(t, \vec{x})|^2 dx dy dz &= - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \nabla \cdot \vec{j}(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \iint \vec{j}(t, \vec{x}) \cdot \vec{n} dS \end{aligned}$$

ここで、波束の場合、遠方で ψ は0になるので、最後の表面積分は0になります。したがって、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(t, \vec{x})|^2 dx dy dz &= 0 \\ \therefore \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(t, \vec{x})|^2 dx dy dz &= \text{const} \end{aligned}$$

となります。 ψ に適当な定数を掛けて規格化すると、その規格化条件は常に成立することが保障されたことになります。

上の議論を局所的な関係に書き直しておきましょう。存在確率密度、

$$\rho(t, \vec{x}) = \psi^*(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x})$$

を時間で偏微分します。

$$\frac{\partial \rho(t, \vec{x})}{\partial t} = \psi^*(t, \vec{x}) \frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*(t, \vec{x})}{\partial t} \psi(t, \vec{x})$$

ここで、シュレディンガー方程式より、

$$\frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(t, \vec{x}) + V\psi(t, \vec{x}) \right)$$

となります。この式の複素共役をとり、ポテンシャルは実数とすると、

$$\frac{\partial \psi^*(t, \vec{x})}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(t, \vec{x}) + V\psi^*(t, \vec{x}) \right)$$

となります。これらの式を代入して計算します。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \psi^* \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi \right) - \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V\psi^* \right) \psi \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla^2 \psi - (\nabla^2 \psi^*) \psi) \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot \{ \psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi \} \\ &= -\nabla \cdot \vec{j} \end{aligned}$$

となります。したがって、

$$\frac{\partial \rho(t, \vec{x})}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(t, \vec{x}) = 0$$

という関係式が成立します。この式は流体力学でお馴染みのものであり、湧き出しや吸い込みがない場合に、密度 $\rho(t, \vec{x})$ 、流れ $\vec{j}(t, \vec{x})$ をもつ流体の保存則です。したがって、 $\vec{j}(t, \vec{x})$ を確率の流れ密度として、上式は確率の流れの保存則と考えることができます。

この Chapter では、量子力学の基礎概念である量子状態について考えました。次の Chapter では、もう一つの基礎概念であるオブザーバブルについて見ていきましょう。

Q08 オブザーバブル (線形エルミート演算子と期待値・固有値)

Q08-1 古典的物理量

前の Chapter の量子状態に引き続き、この Chapter では、量子力学の 2 つ目の基礎概念を考えていきましょう。その基礎概念は、量子力学的な物理量であるオブザーバブルといいます。(量子力学を構成する基礎概念は、量子状態とオブザーバブルの 2 つしかありません。)

この Section では、古典論における物理量の意味を確認しておきます。物理量には、位置、運動量、エネルギー、角運動量といったものがありますが、物理量の間の関係を方程式で表し、物理法則を表現することが常套手段です。古典論における物理量というものを、次の 3 つに分類することができます。

- 1 文字式を使って、数学的に表現されるもの。(古典的数学表現)
- 2 数学的表現を使い、物理法則を表す方程式から計算によって理論的に予測されるもの。(古典的理論値)
- 3 古典的理想装置により、測定されるもの。(古典的理想測定値)

実験すると測定値が得られますが、通常、誤差が生じます。これは実験装置の不備、あるいは人為的な要因によるものです。仮に、完全に誤差を生じない古典的理想装置というものを考えましょう。(このように理想化された思考実験を考えます。) この古典的理想装置による測定値を古典的理想測定値と名付けます。この場合、古典的理想測定値は古典的理論値と常に完全に一致します。古典論は決定論であり、完全に予測可能な理論であることを特徴としていましたね。したがって、古典論では上に挙げた 3 つ

の物理量は一意的なものであり，区別する必要はありません．

Q08-2 演算子

波動力学では物理量とはどのようなものでしょうか？シュレディンガー方程式を導入する際，古典的物理量の間で成立する関係式において，物理量を演算子に置き換える手続きをしたことを思い出して下さい．この手続きを量子化といいましたが，量子化は形式的なものに留まらず，深い意味をもっています．つまり，

波動力学における物理量の数学的表現は演算子です．

ということが，一般に成立するのです．以後，演算子にはハットを付けて，一般に，

$$\hat{A}$$

と表すことにします．

例を挙げていきましょう．（シュレディンガー方程式の Chapter の量子化の Section を参照して下さい．）まず，位置の物理量については，古典的数学表現は $\vec{x} = (x, y, z)$ ですが，波動力学における数学的表現は，古典論のものがそのまま波動力学で適用されました．すなわち，

$$\begin{cases} x \rightarrow \hat{x} = x \\ y \rightarrow \hat{y} = y \\ z \rightarrow \hat{z} = z \end{cases}$$

です．これらを位置演算子といいます．次に，運動量の古典的数学表現は $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ ですが，波動力学における数学的表現は，量子化して，

$$\begin{cases} p_x \rightarrow \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ p_y \rightarrow \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ p_z \rightarrow \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{cases}$$

となります。これらを運動量演算子といいます。また、エネルギーの古典的数学表現は E と一文字で表しますが、波動力学における数学的表現は、量子化して、

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

です。これをエネルギー演算子といいます。最後の例として、角運動量についても考えてみましょう。古典論における数学的表現は、

$$\vec{L} \equiv \vec{r} \times \vec{p}$$

$$\therefore \begin{cases} L_x = yp_z - zp_y \\ L_y = zp_x - xp_z \\ L_z = xp_y - yp_x \end{cases}$$

です。波動力学での数学的表現は、位置を位置演算子に、運動量を運動量演算子に置き換えて量子化します。

$$\begin{cases} L_x \rightarrow \hat{L}_x = y(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z}) - z(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}) \\ L_y \rightarrow \hat{L}_y = z(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) - x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z}) \\ L_z \rightarrow \hat{L}_z = x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}) - y(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \end{cases}$$

$$\therefore \begin{cases} L_x \rightarrow \hat{L}_x = -i\hbar(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}) \\ L_y \rightarrow \hat{L}_y = -i\hbar(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}) \\ L_z \rightarrow \hat{L}_z = -i\hbar(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) \end{cases}$$

最後の式が角運動量演算子です。

Q08-3 交換関係

波動力学において、物理量の数学的表現が演算子であることを見ました。演算子は古典的物理量の数学表現である単なる文字式とは異なる性質をもっています。古典的物理量を表す2つの文字式の間には、掛け算の順序によって結果が異なることはありませんでした。例えば、位置 x と運動量 p_x の積においては、どちらから先に書いてもよいものです。つまり、

$$xp_x = p_x x$$

という恒等式が成立します。このように古典的理論では積の順序は意識する必要はないのです。古典的物理量の数学的表現である文字式のことを c-数 (cardinal number; 計量数) といいます。

波動力学を考えましょう。演算子の積の順序が違ふ場合の結果を確認します。例えば、位置演算子同士の場合を考えます。演算子は波動関数に作用してはじめて意味があるので、そのようにしておきます。

$$\hat{x} \cdot \hat{y} \phi(\vec{x}) = xy \phi(\vec{x})$$

$$= yx \phi(\vec{x})$$

$$= \hat{y} \cdot \hat{x} \phi(\vec{x})$$

特に問題はありません。それでは、位置演算子と運動量演算子の間でどうなるのか確かめてみましょう。

$$\hat{x} \hat{p}_x \phi(\vec{x}) = x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \phi(\vec{x})$$

$$\hat{p}_x \hat{x} \phi(\vec{x}) = (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) x \phi(\vec{x})$$

$$= -i\hbar \phi(\vec{x}) + x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \phi(\vec{x})$$

$$\therefore \hat{p}_x \hat{x} \phi(\vec{x}) = -i\hbar \phi(\vec{x}) + \hat{x} \hat{p}_x \phi(\vec{x})$$

最後の式で分かるように、位置演算子と運動量演算子の作用する順番を換えた量は同じにはなりません。古典的物理量の数学的に表現された量とはここが全く相違するのです。最後の式をもう少し見やすい形にしていきましょう。移項して、整理していきます。

$$\hat{x} \hat{p}_x \phi(\vec{x}) - \hat{p}_x \hat{x} \phi(\vec{x}) = i\hbar \phi(\vec{x})$$

$$\therefore (\hat{x} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{x}) \phi(\vec{x}) = i\hbar \phi(\vec{x})$$

ここで、便利な記号である交換子というものを次のように定義します。

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

このとき、

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\phi(\vec{x}) = i\hbar\phi(\vec{x})$$

となります。ここで、波動関数を書かずに、演算子の間だけの関係を記すと、

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

となります。このような式を交換関係といいます。（演算子だけの関係式ですが、いつも波動関数に作用しているということに気を付けて下さい。交換関係は物理量である演算子の性質を規定するものです。）波動力学では、物理量が演算子で示されるため、その積が交換する場合と交換しない場合があるのです。交換する場合を交換可能（可換）、交換しない場合を交換不可能（非可換）といいます。また、交換関係で規定される物理量を表す演算子のことを、q-数（quantum mechanical number）ともいいます。位置演算子と運動量演算子について、上で計算した量以外のものについても、同様に計算ができます。まとめて書いておきます。

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{x}, \hat{p}_z] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_z] = [\hat{z}, \hat{p}_x] = [\hat{z}, \hat{p}_y] = 0$$

次に、計算が複雑になりますが、角運動量演算子の成分間に成立する交換関係についても取り扱っておきましょう。まず、交換関係に関する恒等式を証明しておきます。

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

$$= \widehat{A}\widehat{B}\widehat{C} - \widehat{A}\widehat{C}\widehat{B} + \widehat{A}\widehat{C}\widehat{B} - \widehat{C}\widehat{A}\widehat{B}$$

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

$$[\widehat{A}\widehat{B}, \widehat{C}] = \widehat{A}\widehat{B}\widehat{C} - \widehat{C}\widehat{A}\widehat{B}$$

$$= \widehat{A}\widehat{B}\widehat{C} - \widehat{A}\widehat{C}\widehat{B} + \widehat{A}\widehat{C}\widehat{B} - \widehat{C}\widehat{A}\widehat{B}$$

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

$$[\widehat{A}\widehat{B}, \widehat{C}\widehat{D}] = \widehat{A}[\widehat{B}, \widehat{C}\widehat{D}] + [\widehat{A}, \widehat{C}\widehat{D}]\widehat{B}$$

$$= \widehat{A}[\widehat{B}, \widehat{C}]\widehat{D} + \widehat{A}\widehat{C}[\widehat{B}, \widehat{D}] + [\widehat{A}, \widehat{C}]\widehat{D}\widehat{B} + \widehat{C}[\widehat{A}, \widehat{D}]\widehat{B}$$

恒等式の最後の式を使って、次のように計算できます。

$$[\widehat{L}_x, \widehat{L}_y] = [\widehat{y}\widehat{p}_z - \widehat{z}\widehat{p}_y, \widehat{z}\widehat{p}_x - \widehat{x}\widehat{p}_z]$$

$$= [\widehat{y}\widehat{p}_z, \widehat{z}\widehat{p}_x] - [\widehat{y}\widehat{p}_z, \widehat{x}\widehat{p}_z] - [\widehat{z}\widehat{p}_y, \widehat{z}\widehat{p}_x] + [\widehat{z}\widehat{p}_y, \widehat{x}\widehat{p}_z]$$

$$= \widehat{y}[\widehat{p}_z, \widehat{z}]\widehat{p}_x + \widehat{y}\widehat{z}[\widehat{p}_z, \widehat{p}_x] + [\widehat{y}, \widehat{z}]\widehat{p}_x\widehat{p}_z + \widehat{z}[\widehat{y}, \widehat{p}_x]\widehat{p}_z$$

$$+ \widehat{y}[\widehat{p}_z, \widehat{x}]\widehat{p}_z + \widehat{y}\widehat{x}[\widehat{p}_z, \widehat{p}_z] + [\widehat{y}, \widehat{x}]\widehat{p}_z\widehat{p}_z + \widehat{x}[\widehat{y}, \widehat{p}_z]\widehat{p}_z$$

$$+ \widehat{z}[\widehat{p}_y, \widehat{z}]\widehat{p}_x + \widehat{z}\widehat{z}[\widehat{p}_y, \widehat{p}_x] + [\widehat{z}, \widehat{z}]\widehat{p}_x\widehat{p}_y + \widehat{z}[\widehat{z}, \widehat{p}_x]\widehat{p}_y$$

$$+ \widehat{z}[\widehat{p}_y, \widehat{x}]\widehat{p}_z + \widehat{z}\widehat{x}[\widehat{p}_y, \widehat{p}_z] + [\widehat{z}, \widehat{x}]\widehat{p}_z\widehat{p}_y + \widehat{x}[\widehat{z}, \widehat{p}_z]\widehat{p}_y$$

$$= \widehat{y}(-i\hbar)\widehat{p}_x + \widehat{y}\widehat{z} \cdot 0 + 0 \cdot \widehat{p}_x\widehat{p}_z + \widehat{z} \cdot 0 \cdot \widehat{p}_z$$

$$+ \widehat{y} \cdot 0 \cdot \widehat{p}_z + \widehat{y}\widehat{x} \cdot 0 + 0 \cdot \widehat{p}_z\widehat{p}_z + \widehat{x} \cdot 0 \cdot \widehat{p}_z$$

$$+\hat{z} \cdot 0 \cdot \hat{p}_x + \hat{z}\hat{z} \cdot 0 + 0 \cdot \hat{p}_x\hat{p}_y + \hat{z} \cdot 0 \cdot \hat{p}_y$$

$$+\hat{z} \cdot 0 \cdot \hat{p}_z + \hat{z}\hat{x} \cdot 0 + 0 \cdot \hat{p}_z\hat{p}_y + \hat{x}(i\hbar)\hat{p}_y$$

$$= i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)$$

$$= i\hbar\hat{L}_z$$

$$\therefore [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$$

他の角運動量の成分間の交換関係も同様に計算することができます。その結果をここでまとめておきます。

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_z$$

波動力学において、物理量の数学的表現が演算子であることについて考えてきました。それでは、演算子から物理量の理論値はどのように計算されるのでしょうか？また、理論値と測定値はどのように関係しているのでしょうか？次の Section 以降で、考えていくことにしましょう。

Q08-4 期待値

この Chapter の最初の Section で古典的物理量を考えた場合、古典的理論値と古典的理想測定値は、常に完全に一致し、決定論的に予測することができることを説明しました。量子力学の場合を考えてみましょう。古典論の説明のときと同様に、思考実験をしていきます。まず、完全に誤差のない実験装置を想定します。これを量子力学的理想装置と名付けます。そして、そのときの測定値を量子力学的理想測定値とします。複数回の実験

をして、複数の理想測定値のデータを採ったとしましょう。このとき、量子力学に従うと、測定値の結果にはバラツキが生じます。（理想的な思考実験なので、装置の不備、あるいは人為的な誤差は完全に 0 のはずです。）残念ながら、量子力学では一つの決定論的な理論値を計算することは不可能なのです。ここで、量子力学は本質的に確率の理論であることを強調しておきましょう。実験する前から、一つの確定値を得ることはできませんが、確率的に理論値を求めることができます。この Section では、バラツキのある量子力学的理想測定値の平均値に、完全に一致する理論値（これを期待値といいます。）を求める方法を見ていきましょう。

一般に、物理量の期待値を次のように表します。

$$\langle \hat{A} \rangle$$

具体的に期待値を表す式を求めていきます。まず、位置の期待値 $\langle \hat{x} \rangle$ を求めましょう。粒子の存在確率密度が、

$$\begin{aligned} \rho(t, \vec{x}) &= |\psi(t, \vec{x})|^2 \\ &= \psi^*(t, \vec{x})\psi(t, \vec{x}) \end{aligned}$$

であったことを考慮して、

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x \rho(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \hat{x} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \end{aligned}$$

となります。同様にして、

$$\langle \hat{y} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \hat{y} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz$$

$$\langle \hat{z} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \hat{z} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz$$

となります。これら3式をまとめて書くと,

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \hat{x} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz$$

となります。

次に, 運動量の期待値を求めます。準備として, $\langle \hat{x} \rangle$ の時間微分を求めます。これは古典論での速度に対応する量であると考えられます。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \hat{x} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \psi^*(t, \vec{x}) x \frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*(t, \vec{x})}{\partial t} x \psi(t, \vec{x}) \right\} dx dy dz \end{aligned}$$

となります。ここで, シュレディンガー方程式,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right\} \psi(t, \vec{x})$$

と, その複素共役をとった式,

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(t, \vec{x}) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right\} \psi^*(t, \vec{x})$$

を使います。ただし、ポテンシャルは実数と仮定しました。（ $V^* = V$ ）

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle \hat{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [\psi^*(t, \vec{x}) x \frac{1}{i\hbar} \{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x})\} \psi(t, \vec{x}) - \frac{1}{i\hbar} \{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \\ &\quad + V(\vec{x})\} \psi^*(t, \vec{x}) x \psi(t, \vec{x})] dx dy dz \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [-\psi^*(t, \vec{x}) x \{\nabla^2 \psi(t, \vec{x})\} \\ &\quad + \{\nabla^2 \psi^*(t, \vec{x})\} x \psi(t, \vec{x})] dx dy dz\end{aligned}$$

となります。ここで、ベクトル解析のグリーンの定理、

$$\iiint (\phi \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \phi) dV = \iint (\phi \frac{\partial \psi}{\partial n} - \psi \frac{\partial \phi}{\partial n}) dS$$

を使います。（左辺は体積積分で、右辺は面積分です。右辺の $\frac{\partial \psi}{\partial n}$ と $\frac{\partial \phi}{\partial n}$ は面積分する表面の法線（ $\vec{n}$ ベクトル）方向への方向微分です。）このとき、

$$\begin{aligned}\iiint [x\psi(t, \vec{x}) \nabla^2 \psi^*(t, \vec{x}) - \psi^*(t, \vec{x}) \nabla^2 \{x\psi(t, \vec{x})\}] dV \\ = \iint [x\psi(t, \vec{x}) \frac{\partial \psi^*(t, \vec{x})}{\partial n} - \psi^*(t, \vec{x}) \frac{\partial \{x\psi(t, \vec{x})\}}{\partial n}] dS\end{aligned}$$

が確かめられます。右辺の面積分の表面は無限遠にありますが、そこで、 ψ は0になります。（波動関数が波動の局在した状態である波束を形成しているときは、この条件は問題なく満たされます。）したがって、右辺の値は0です。故に、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x \psi(t, \vec{x}) \nabla^2 \psi^*(t, \vec{x}) dx dy dz \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \nabla^2 \{x \psi(t, \vec{x})\} dx dy dz \end{aligned}$$

となります。したがって,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle &= \frac{\hbar}{2mi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [-\psi^*(t, \vec{x}) x \{\nabla^2 \psi(t, \vec{x})\} \\ &\quad + \{\nabla^2 \psi^*(t, \vec{x})\} x \psi(t, \vec{x})] dx dy dz \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [-\psi^*(t, \vec{x}) x \{\nabla^2 \psi(t, \vec{x})\} \\ &\quad + \psi^*(t, \vec{x}) \nabla^2 \{x \psi(t, \vec{x})\}] dx dy dz \end{aligned}$$

となります。最後の式の被積分第2項で,

$$\begin{aligned} \nabla^2 \{x \psi(t, \vec{x})\} &= \nabla \cdot (\nabla x \cdot \psi + x \nabla \psi) \\ &= \nabla^2 x \cdot \psi + 2 \nabla x \cdot \nabla \psi + x \nabla^2 \psi \\ &= 0 \cdot \psi + 2(1, 0, 0) \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial y}, \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + x \nabla^2 \psi \\ &= 2 \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \nabla^2 \psi \end{aligned}$$

となりますので,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle &= \frac{\hbar}{2mi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [-\psi^*(t, \vec{x}) x \{\nabla^2 \psi(t, \vec{x})\} + \psi^*(t, \vec{x}) \{2 \frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial x} \\ &\quad + x \nabla^2 \psi(t, \vec{x})\}] dx dy dz \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (t, \vec{x}) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz$$

と変形できます． 故に，運動量の x 成分の期待値は，

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}_x \rangle &= m \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (t, \vec{x}) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (t, \vec{x}) \hat{p}_x \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \end{aligned}$$

と求められます． y 成分と z 成分も同様にして，

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}_y \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (t, \vec{x}) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (t, \vec{x}) \hat{p}_y \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ \langle \hat{p}_z \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (t, \vec{x}) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial z}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (t, \vec{x}) \hat{p}_z \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \end{aligned}$$

となります． まとめて書くと，

$$\langle \hat{\vec{p}} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (t, \vec{x}) \hat{\vec{p}} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz$$

と表すことができます。

以上，位置と運動量の期待値を表す式を導きましたが，一般に波動力学においては，物理量の期待値 $\langle \hat{A} \rangle$ は，物理量の数学的表現である演算子 $\hat{A}$ を用いて，

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \hat{A} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz$$

で与えられるのです。

Q08-5 エーレンフェストの定理

波動力学では平均の物理量を表す期待値を取り扱えることがわかりました。それではミクロ世界を記述する波動力学とニュートン力学との関係を見ていきましょう。波動力学は20世紀初頭，革新的な理論でしたが，ニュートン力学を全面的に否定するのではなく，それを古典的・マクロ的な極限として含んでいる理論であることを確認していきます。前 Section で得た運動量の x 成分の期待値を表す式，

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}_x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \hat{p}_x \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \end{aligned}$$

をもう一度時間で微分します。

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\partial \psi^*(t, \vec{x})}{\partial t} \frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial x} + \psi^*(t, \vec{x}) \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} \psi(t, \vec{x}) \right\} dx dy dz$$

ここで、シュレディンガー方程式,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right\} \psi(t, \vec{x})$$

と, その複素共役をとった式,

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(t, \vec{x}) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right\} \psi^*(t, \vec{x})$$

を代入して計算します.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right\} \psi^*(t, \vec{x}) \frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. - \psi^*(t, \vec{x}) \frac{\partial}{\partial x} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right\} \psi(t, \vec{x}) \right] dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \{ \nabla^2 \psi^*(t, \vec{x}) \} \frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hbar^2}{2m} \psi^*(t, \vec{x}) \frac{\partial}{\partial x} \{ \nabla^2 \psi(t, \vec{x}) \} \right. \\ &\quad \left. - \psi^*(t, \vec{x}) \frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x} \psi(t, \vec{x}) \right] dx dy dz \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\{ \nabla^2 \psi^*(t, \vec{x}) \} \frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. - \psi^*(t, \vec{x}) \nabla^2 \left\{ \frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial x} \right\} \right] dx dy dz \\ &\quad - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \psi^*(t, \vec{x}) \frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x} \psi(t, \vec{x}) \right\} dx dy dz \end{aligned}$$

ここで、ベクトル解析のグリーンの定理,

$$\iiint (\phi \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \phi) dV = \iint (\phi \frac{\partial \psi}{\partial n} - \psi \frac{\partial \phi}{\partial n}) dS$$

使います.

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \iiint [\{\nabla^2 \psi^*(t, \vec{x})\} \frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial x} - \psi^*(t, \vec{x}) \nabla^2 \{\frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial x}\}] dV \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \iint \{\frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial x} \frac{\partial \psi^*(t, \vec{x})}{\partial n} - \psi^*(t, \vec{x}) \frac{\partial}{\partial n} \frac{\partial \psi(t, \vec{x})}{\partial x}\} dS \end{aligned}$$

前 Section と同様に, 右辺の面積分の表面は無限遠にあります, そこで, ψ は 0 になります. (波動関数が波束を形成しているときは, この条件は問題なく満たされます.) したがって, 右辺の値は 0 です. したがって,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle &= - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \{ \psi^*(t, \vec{x}) \frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x} \psi(t, \vec{x}) \} d^3x \\ \therefore m \frac{d^2}{dx^2} \langle \hat{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \left(-\frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x} \right) \psi(t, \vec{x}) d^3x \\ \therefore m \frac{d^2}{dx^2} \langle \hat{x} \rangle &= \langle -\frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x} \rangle \end{aligned}$$

となります. また, y 成分と z 成分も同様な計算により,

$$\begin{aligned} m \frac{d^2}{dx^2} \langle \hat{y} \rangle &= \langle -\frac{\partial V(\vec{x})}{\partial y} \rangle \\ m \frac{d^2}{dx^2} \langle \hat{z} \rangle &= \langle -\frac{\partial V(\vec{x})}{\partial z} \rangle \end{aligned}$$

が求められます. まとめて書くと,

$$m \frac{d^2}{dx^2} \langle \hat{x} \rangle = \langle -\nabla V(\vec{x}) \rangle$$

が成立します。これはニュートン力学の中核的方程式である運動方程式を波動力学的に表していると考えられます。つまり、量子が良い近似で局在していて、確率を表す波動関数が波束を形成しているとき、その波束の運動が運動方程式に従うということです。これをエーレンフェストの定理といいます。波動力学は、量子が局在しているという極限でニュートン力学を含んでいることになり、理論上望ましい条件を満たしていると言えるのです。

Q08-6 線形エルミート演算子

波動力学においては、物理量の数学的表現は演算子であることを確認しました。ここでは特に、波動力学における演算子の性質について考えておくことにしましょう。

一般に、演算子 $\hat{A}$ が、

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2 + \cdots$$

という関係を満たしているとき、 $\hat{A}$ は線形演算子と言います。(ただし、 c_n は定数、 ψ_n は $\hat{A}$ が作用する関数です。)例えば、位置演算子は線形演算子です。実際に、次のように確かめられます。

$$\begin{aligned} \hat{x}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots) &= x(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots) \\ &= c_1x\psi_1 + c_2x\psi_2 + \cdots \end{aligned}$$

$$= c_1 \hat{x} \psi_1 + c_2 \hat{x} \psi_2 + \dots$$

同様に、運動量演算子は線形演算子です。

$$\begin{aligned} \hat{p}_x(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots) \\ &= c_1(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})\psi_1 + c_2(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})\psi_2 + \dots \\ &= c_1 \hat{p}_x \psi_1 + c_2 \hat{p}_x \psi_2 + \dots \end{aligned}$$

また、波動関数についての重ね合わせの原理を、シュレディンガー方程式を使って確認した際、エネルギー演算子とハミルトニアン演算子の線形性を使ったことも思い出して下さい。一般に、波動力学での物理量を表す演算子は線形演算子であることが要請されます。

前 Section で見たように、物理量の平均値に対応する期待値は、一般に、

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \hat{A} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz$$

で与えられます。ここで、複素共役をとると、

$$\langle \hat{A} \rangle^* = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \{ \hat{A} \psi(t, \vec{x}) \}^* \psi(t, \vec{x})^3 dx dy dz$$

となります。期待値は理想測定値の平均値であるので、実数であることが要請されます。したがって、

$$\langle \hat{A} \rangle^* = \langle \hat{A} \rangle$$

より,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \{\hat{A}\psi(t, \vec{x})\}^* \psi(t, \vec{x}) dx dy dz = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \hat{A}\psi(t, \vec{x}) dx dy dz$$

の式が成立します。この関係式を満たす演算子 $\hat{A}$ をエルミート演算子といいます。このようにエルミート演算子は、実数の概念を演算子に拡張したものであるということがいえます。波動力学での物理量の数学的表現である演算子はエルミート演算子であることが要請されます。物理量がエルミート演算子で数学的に表現されていれば、その期待値は実数であることが保証されるのです。

エルミート演算子のより一般的な定義を述べておきます。任意の演算子 $\hat{A}$ が任意の $\psi_1(t, \vec{x}), \psi_2(t, \vec{x})$ に対して,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \{\hat{A}\psi_1(t, \vec{x})\}^* \psi_2(t, \vec{x}) dx dy dz \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(t, \vec{x}) \hat{A}^+ \psi_2(t, \vec{x}) dx dy dz \end{aligned}$$

を満たすとき、 $\hat{A}^+$ を $\hat{A}$ に対するエルミート共役演算子といいます。特に,

$$\hat{A}^+ = \hat{A}$$

のとき、つまり自己共役の場合、 $\hat{A}$ を一般的なエルミート演算子といいます。このとき、 $\psi_1 = \psi_2 = \psi$ とおくと,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \{\hat{A}\psi(t, \vec{x})\}^* \psi(t, \vec{x}) dx dy dz = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \hat{A}\psi(t, \vec{x}) dx dy dz$$

となり、最初のエルミート演算子の定義と一致することが確かめられます。

波動力学においては、物理量の数学的表現である演算子について、

波動力学での物理量を表す演算子は線形エルミート演算子です。

ということが、基本的事項として要請されます。概念の発展の繋がりは、

古典的物理量→波動力学的物理量の数学表現；線形エルミート演算子

と表記されます。

Q08-7 固有値

量子力学的理想装置の理想測定値の平均値である期待値の求め方については、前述しました。それでは、バラツキのある理想測定値の一つ一つの個別値に一致する波動力学的理論値を求める方法について考えましょう。

古典論において、理想的でない誤差の生じる装置で実験した場合、測定値 a と決定論的に決まる真の値 A の間の誤差 ΔA は、

$$\Delta A \equiv a - A$$

と表せます。この場合の ΔA は実験装置の不備あるいは人為的な要因によるものです。この式を参考にして、波動力学の場合を考えましょう。思考実験をしますが、誤差の生じない理想装置で測定すると、測定値にはバラツキが生じます。これは実験装置の不備あるいは人為的なものではなく、

波動力学の確率的性質によるものです。上の古典論での誤差の式を参考に
して、波動力学における、

$$\widehat{\Delta A} \equiv \widehat{A} - \langle \widehat{A} \rangle$$

という演算子を導入します。 $\widehat{A}$ は物理量を表すエルミート演算子であり、
 $\langle \widehat{A} \rangle$ は期待値なので実数です。したがって、 $\widehat{\Delta A}$ はエルミート演算子になり
ます。エルミート演算子 $\widehat{\Delta A}$ は、バラツキのある理想測定値とその平均値で
ある期待値との差を表す演算子であるということがいえます。この演算子
 $\widehat{\Delta A}$ の期待値をとると、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \widehat{\Delta A} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) (\widehat{A} - \langle \widehat{A} \rangle) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \widehat{A} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &\quad - \langle \widehat{A} \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \langle \widehat{A} \rangle - \langle \widehat{A} \rangle \cdot 1 \\ &= 0 \end{aligned}$$

となってしまいます。バラツキのある理想測定値を平均すると期待値にな
るので、この演算子 $\widehat{\Delta A}$ の期待値が0になるのは理解できます。しかし、こ
のままだでは、理想測定値のバラツキの程度を表すことができません。そこ
で、演算子 $\widehat{\Delta A}$ を2乗して期待値をとることにします。

$$\langle (\widehat{\Delta A})^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) (\widehat{\Delta A}) (\widehat{\Delta A}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz$$

この量を分散といいます。ここで、一般にエルミート演算子は、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \{ \widehat{A} \psi(t, \vec{x}) \}^* \psi(t, \vec{x}) dx dy dz = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \widehat{A} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz$$

という関係で表せますので、以下計算すると、

$$\begin{aligned} \langle (\widehat{\Delta A})^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) (\widehat{\Delta A}) (\widehat{\Delta A}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \{ (\widehat{\Delta A}) \psi(t, \vec{x}) \}^* (\widehat{\Delta A}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |(\widehat{\Delta A}) \psi(t, \vec{x})|^2 dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |(\widehat{A} - \langle \widehat{A} \rangle) \psi(t, \vec{x})|^2 dx dy dz \end{aligned}$$

となります。いままで、量子力学的理想装置で、複数回の理想実験を実行して、複数のバラツキのある理想測定値を得ている場合を考えています。ここで、その中の確定した一つの理想測定値に着目します。この一つの理想測定値を測定するとき、波動関数の量子飛躍が起こっているはずで

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_{m=1}^{\infty} c_m(t) \phi_m(\vec{x}) \rightarrow \phi_n(\vec{x})$$

添え字の m は、複数ある、時間に依存しない量子状態を区別するためのものです。その中のある n 番目の量子状態に量子飛躍するとしています。
 (量子状態の Chapter の内容を思い出して下さい。) この際、期待値も量子飛躍した時間に依存しない波動関数 ϕ で計算された、次の量に置き換えることにします。

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \hat{A} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(t, \vec{x}) \hat{A} \phi_n(\vec{x}) dx dy dz\end{aligned}$$

この量は、もはや期待値とは言えませんが、今、着目している一つの理想測定値と考えることができます。(この確定値を a_n と置きます。) このとき、分散は 0 です。すなわち、

$$\begin{aligned}\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi(t, \vec{x})|^2 dx dy dz \\ &\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |(\hat{A} - a_n) \phi_n(\vec{x})|^2 dx dy dz = 0\end{aligned}$$

となります。この式の矢印の右にある積分の被積分関数は絶対値の 2 乗の量であるので、常に正または 0 です。したがって、この積分が 0 になるということは、

$$(\hat{A} - a_n) \phi_n(\vec{x}) = 0$$

$$\therefore \hat{A} \phi_n(\vec{x}) = a_n \phi_n(\vec{x})$$

が成立します。

最後の方程式を固有値方程式、 $\phi_n(\vec{x})$ を固有関数、 a_n を固有値といいます。固有値方程式においては、演算子 $\hat{A}$ が関数 ϕ に作用し、その結果が ϕ の定数倍になる関係になっています。そして、固有値方程式を解く問題を固有値問題といいます。固有値は跳び跳びの値をもつ離散固有値の場合と、連続的な値をもつ連続固有値の場合がありますが、どちらも解は無限個あります。これまでの議論により、量子力学的理想装置における理想測定値は、この固有値の中のいずれかになることは確実であることが理解できます。特に、量子状態 $\phi_n(\vec{x})$ の状態で測定すると、確実に測定値 a_n になります。しかし、時間に依存する量子状態 ψ の状態で測定する場合、測定する前に固有値の中の特定のどれになるかを決定することは不可能であり、その中の確率のみを求めることができます。（確率の求め方は波動力学の展開の Chapter を参照して下さい。）固有値問題の例としては、時間に依存しないシュレディンガー方程式、

$$\hat{H}\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x})$$

を挙げることができます。この微分方程式を解くと、波動関数は固有関数として、エネルギーはエネルギー固有値として求められます。具体的な固有値問題の解法については、例を取り扱っている後の4つの Chapter を見て下さい。また、固有値問題の詳しい議論は波動力学の展開の Chapter を参照して下さい。

固有値について、一つ定理を挙げておきます。それは、

エルミート演算子の固有値は実数になります。

というものです。この定理を証明しておきます。固有値方程式、

$$\hat{A}\phi_n(\vec{x}) = a_n\phi_n(\vec{x})$$

が成立するものとします。ここで、 $\hat{A}$ がエルミート演算子の場合、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \{\hat{A}\phi_n(\vec{x})\}^* \phi_n(\vec{x}) dx dy dz = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \hat{A}\phi_n(\vec{x}) dx dy dz$$

$$\therefore a_n^* \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \phi_n(\vec{x}) dx dy dz = a_n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \phi_n(\vec{x}) dx dy dz$$

$$\therefore a_n^* = a_n$$

となります。したがって、固有値 a_n は実数です。(証明終。) 理想実験による測定値は固有値のいずれかになりますが、そこ固有値が実数であることが保証されたことになります。

量子力学における物理量一般のことをオブザーバブルといいます。その意味は観測可能量です。ここで、物理量についての概念の発展の繋がりをまとめておきます。

古典的物理量

$$\rightarrow \text{波動力学的物理量; } \left\{ \begin{array}{l} \text{数学的表現; 線形エルミート演算子} \\ \text{理論値 1; 期待値} = \text{理想測定値の平均値} \\ \text{理論値 2; 固有値} = \text{理想測定値の個別値} \end{array} \right\}$$

$\rightarrow$ 量子力学的物理量; オブザーバブル

Q09 波動力学の展開

Q09-1 離散固有関数と離散固有値

波動力学においては，多くの微分方程式は固有方程式で表されます．跳び跳びの性質をもつ離散固有関数と離散固有値について調べましょう．一般に離散固有方程式は，

$$\hat{A}\phi_n(\vec{x}) = a_n\phi_n(\vec{x})(n = 1, 2, \dots)$$

という形式をしています． $\hat{A}$ は線形エルミート演算子， ϕ_n は離散固有関数， a_n は離散固有値です．離散固有関数と離散固有値は，それぞれ添え字の自然数 n で区別しています．(n は跳び跳びに変化しますが，一般に無限個あります．) (時間に依存しないシュレディンガー方程式の解について，波動関数 ϕ が離散固有関数になり，固有値が離散固有値となる量子状態を一般に束縛状態といいます．) これから述べることは，時間に依存しないシュレディンガー方程式の離散エネルギー固有関数と離散エネルギー固有値だけに限らず，線形エルミート演算子の離散固有関数と離散固有値一般について言えることです．

エルミート演算子 $\hat{A}$ について，

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \{ \hat{A}\psi_1(t, \vec{x}) \}^* \psi_2(t, \vec{x}) dx dy dz \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(t, \vec{x}) \hat{A}\psi_2(t, \vec{x}) dx dy dz \end{aligned}$$

の関係が成立します．ここで，時間と位置の関数 ψ において，時間を固定し，位置のみの関数 ϕ を特別な場合としてとることができます．そこで， $\psi_1 = \phi_n, \psi_2 = \phi_m$ とおきます．

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \{\hat{A}\phi_n(\vec{x})\}^* \phi_m(\vec{x}) dx dy dz = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(t) \hat{A} \phi_m(\vec{x}) dx dy dz$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a_n^* \phi_n^*(\vec{x}) \phi_m(\vec{x}) dx dy dz = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(t) a_m \phi_m(\vec{x}) dx dy dz$$

エルミート演算子の固有値は実数なので,

$$a_n^* = a_n$$

です. よって,

$$a_n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \phi_m(\vec{x}) dx dy dz = a_m \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \phi_m(\vec{x}) dx dy dz$$

$$\therefore (a_n - a_m) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \phi_m(\vec{x}) dx dy dz = 0$$

となります. 異なる固有関数についての固有値が等しくないとき, つまり,

$$a_n \neq a_m$$

の場合,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \phi_m(\vec{x}) dx dy dz = 0$$

の関係が成立します. このとき, 固有関数は直交するといいます. すなわち,

エルミート演算子の異なる離散固有値に属する2つの離散固有関数は直交します。

という定理が証明されました。また、全空間での1個の粒子が観測される確率が1であるという、時間に依存しない波動関数 ϕ についての規格化条件、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(\vec{x})|^2 dx dy dz = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(\vec{x}) \phi(\vec{x}) dx dy dz = 1$$

において、 ϕ としてある n 番目の離散固有関数をとります。このとき、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \phi_n(\vec{x}) dx dy dz = 1$$

の関係が成立します。

さて、ある一つの固有値に対して、固有関数が1個しかないとき、固有関数は縮退していないといいます。一方、ある一つの固有値に対して、固有関数が g 個 ($g \geq 2$) 存在するとき、固有関数は g 重に縮退しているといいます。上の議論は固有関数が縮退していないことを前提としていましたが、縮退している場合には、次のグラム-シュミットの直交化法を使います。いま、

$$\phi_1(\vec{x}), \phi_2(\vec{x}), \dots, \phi_g(\vec{x})$$

が同じ固有値をもつ g 重に縮退した固有関数とします。まず、

$$\phi'_1(\vec{x}) = \alpha \phi_1(\vec{x})$$

とおき, $\phi'_1(\vec{x})$ についての規格化条件,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1'^* (\vec{x}) \phi_1'(\vec{x}) dx dy dz = 1$$

を満たすように, 定数 α を決めます. 次に,

$$\phi_2'(\vec{x}) = \beta_1 \phi_1'(\vec{x}) + \beta_2 \phi_2(\vec{x})$$

とおき, $\phi'_1(\vec{x})$ と $\phi'_2(\vec{x})$ の直交条件,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1'^* (\vec{x}) \phi_2'(\vec{x}) dx dy dz \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1'^* (\vec{x}) \{ \beta_1 \phi_1'(\vec{x}) + \beta_2 \phi_2(\vec{x}) \} dx dy dz \\ = \beta_1 + \beta_2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1'^* (\vec{x}) \phi_2(\vec{x}) dx dy dz = 0 \end{aligned}$$

と, $\phi'_2(\vec{x})$ の規格化条件,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2'^* (\vec{x}) \phi_2'(\vec{x}) dx dy dz = 1$$

より, β_1, β_2 を決定し, $\phi'_2(\vec{x})$ を求めます. さらに,

$$\phi_3'(\vec{x}) = \gamma_1 \phi_1'(\vec{x}) + \gamma_2 \phi_2'(\vec{x}) + \gamma_3 \phi_2(\vec{x})$$

とおき, 同様な議論をします. 以下, その繰り返しです. 最終的に得られ

た規格化条件と直交条件を満たす複数の固有関数のダッシュをとります。
このように、縮退がある場合も必ず直交化することができます。

規格化条件と直交条件を同時に満たす条件を規格直交条件といい、次の条件式で表すことができます。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \phi_m(\vec{x}) dx dy dz = \delta_{nm}$$

このときの ϕ の集合全体を規格直交系といいます。ただし、右辺の記号はクロネッカーの δ （デルタ）といい、

$$\delta_{nm} \equiv \begin{cases} 1 & (n = m) \\ 0 & (n \neq m) \end{cases}$$

で定義されます。言い直すと、離散固有関数について、

離散固有値をもつエルミート演算子の離散固有関数の全体は、規格直交系を形成しています。

という重要な性質があります。

時間に依存する波動関数 ψ についての重ね合わせの原理を、時間に依存しない波動関数 ϕ について適用した議論を思い出しましょう。（量子状態のChapterを参照して下さい。）そのとき、

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \phi_n(\vec{x})$$

の関係式が成立しました。ここで、 ϕ として規格直交系を形成する離散固

有関数の集合全体 $\{\phi_1(\vec{x}), \phi_2(\vec{x}), \dots\}$ を採った場合, 任意の ψ は, 上記のように展開して表せます. (一般に, 固有関数は無限個あるので, 添え字 n は 1 から無限大まで和をとります. 以下, 断りがなければ同様とします.) このとき, 規格直交系 $\{\phi_1(\vec{x}), \phi_2(\vec{x}), \dots\}$ を完全系であるといいます. 完全系を成し任意の ψ を展開して表せるということと, 規格直交系の条件を満たすという意味で, $\{\phi_1(\vec{x}), \phi_2(\vec{x}), \dots\}$ を基底といいます. ここで, 展開係数は,

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} c_m(t) \phi_m(\vec{x}) \right\} dx dy dz \\
 &= \sum_{m=1}^{\infty} c_m(t) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \phi_m(\vec{x}) dx dy dz \\
 &= \sum_{m=1}^{\infty} c_m(t) \delta_{nm} \\
 &= c_1(t) \delta_{n1} + c_2(t) \delta_{n2} + \dots + c_{n-1}(t) \delta_{n,n-1} + c_n(t) \delta_{nn} \\
 &\quad + c_{n+1}(t) \delta_{n,n+1} + \dots \\
 &= c_1(t) \cdot 0 + c_2(t) \cdot 0 + \dots + c_{n-1}(t) \cdot 0 + c_n(t) \cdot 1 \\
 &\quad + c_{n+1}(t) \cdot 0 + \dots \\
 &= c_n(t)
 \end{aligned}$$

$$\therefore c_n(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz$$

より, 求められます. また, 波動関数 ψ に対する規格化条件より,

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} c_n^* (t) \phi_n^* (\vec{x}) \right\} \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} c_m (t) \phi_m (\vec{x}) \right\} dx dy dz \\
 &= \sum_{n,m} c_n^* (t) c_m (t) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^* (\vec{x}) \phi_m (\vec{x}) dx dy dz \\
 &= \sum_{n,m} c_n^* (t) c_m (t) \delta_{nm} \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n^* (t) \{ c_1 (t) \delta_{n1} + c_2 (t) \delta_{n2} + \cdots + c_{n-1} (t) \delta_{n,n-1} + c_n (t) \delta_{nn} \\
 &\quad + c_{n+1} (t) \delta_{n,n+1} + \cdots \} \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n^* (t) \{ c_1 (t) \cdot 0 + c_2 (t) \cdot 0 + \cdots + c_{n-1} (t) \cdot 0 + c_n (t) \cdot 1 + c_{n+1} (t) \cdot 0 \\
 &\quad + \cdots \} \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n^* (t) c_n (t) \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} |c_n (t)|^2 \\
 \therefore \sum_{n=1}^{\infty} |c_n (t)|^2 &= 1
 \end{aligned}$$

となります。ここで,

$$c_n(t) \equiv c_n \exp(-i\omega_n t)$$

という関係がありました。(量子状態の Chapter を参照して下さい。) したがって,

$$\begin{aligned} |c_n(t)|^2 &= c_n^*(t) c_n(t) \\ &= c_n^* \exp(i\omega_n t) \cdot c_n \exp(-i\omega_n t) \\ &= |c_n|^2 \end{aligned}$$

より,

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1 \quad (1)$$

の関係式が成立します。また, 物理量の期待値は,

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \hat{A} \psi(t, \vec{x}) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} c_n^*(t) \phi_n^*(\vec{x}) \right\} \hat{A} \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} c_m(t) \phi_m(\vec{x}) \right\} dx dy dz \\ &= \sum_{n,m} c_n^*(t) c_m(t) a_m \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\vec{x}) \phi_m(\vec{x}) dx dy dz \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n,m} c_n^*(t) c_m(t) a_m \delta_{nm} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} a_n |c_n(t)|^2 \\
\therefore \langle \hat{A} \rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n |c_n|^2 \quad (2)
\end{aligned}$$

つまり、期待値は固有値 a_n に $|c_n|^2$ をかけて、全て n についての和をとったものになります。この(2)式と、その上にある(1)式より、 $|c_n|^2$ は状態が ϕ_n になり、固有値 a_n を測定する確率であると解釈することができます。ここで、オブザーバブルの Chapter も参考にして、離散固有関数と離散固有値について、まとめておきます。

離散固有値問題で設定された物理系で、理想実験し観測すると、固有値の中のいずれか（例えば a_n ）を測定することになります。（理論値である固有値の中のいずれかが量子力学的理想測定値と一致することになります。）一旦、固有値 a_n を測定すると、量子状態を表す波動関数はその固有値 a_n の固有状態 $\phi_n(\vec{x})$ に量子飛躍します。

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_{m=1}^{\infty} c_m(t) \phi_m(\vec{x}) \rightarrow \phi_n(\vec{x})$$

逆に、固有状態 $\phi_n(\vec{x})$ において測定すると、測定値は必ず固有値 a_n になります。量子飛躍は不連続的に起こり、その前後で因果関係はありません。ただし、波動関数が $\phi_n(\vec{x})$ になり、測定値に一致する固有値が a_n になる確率は、展開係数の絶対値の2乗 $|c_n|^2$ で与えられます。

Q09-2 δ関数

次に連続固有関数と連続固有値を取り扱いますが、その前に数学的準備をしておきましょう。離散固有関数を取り扱う際、クロネッカーのデルタという量を頻繁に使いました。定義を再掲すると、

$$\delta_{nm} \equiv \begin{cases} 1 & (n = m) \\ 0 & (n \neq m) \end{cases}$$

でした。連続固有関数の場合、それに代わってディラックのδ関数という関数を導入します。定義は次のようになります。

$$\delta(x - x') \equiv \begin{cases} +\infty & (x = x') \\ 0 & (x \neq x') \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') dx = 1$$

δ関数は直観的には、 $x = x'$ の点で無限大になる針のように尖った関数で、 $x \neq x'$ では 0 の値をとります。そして、その面積は積分してみると丁度 1 になります。このような関数は普通の関数ではなく超関数と呼ばれるものです。δ関数の満たす公式を幾つか導いておきます。任意の関数 $f(x)$ に対して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x') dx$$

という積分を考えます。 $x \neq x'$ で、 $\delta(x - x') = 0$ なので、 $x \neq x'$ での $f(x)$ の

値は上の積分には寄与しません。したがって、

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x') dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') \delta(x - x') dx$$

ここで、 $f(x')$ は定数なので、積分の外に出すことができます。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x') dx &= f(x') \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') dx \\ &= f(x') \cdot 1 \end{aligned}$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x') dx = f(x')$$

離散固有関数においてクロネッカーのデルタが使われたように、連続固有関数において、最後の関係式はよく使われます。次に、 δ 関数が偶関数であることを証明します。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(-x) dx &= \int_{\infty}^{-\infty} f(-\xi) \delta(\xi) (-d\xi) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(-\xi) \delta(\xi) d\xi \\ &= f(-0) \\ &= f(0) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx \end{aligned}$$

$$\therefore \delta(x) = \delta(-x)$$

また,

$$x\delta(x) = 0$$

が成立します. 証明は次の通りです. $f(x)$ を任意の関数として,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\{x\delta(x)\}dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \{f(x)x\}\delta(x)dx \\ &= f(0) \cdot 0 \\ &= 0\end{aligned}$$

となります. 故に,

$$x\delta(x) = 0$$

が証明されました. ($f(x)$ は任意の関数です.) 最後に,

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

を導きます.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(ax)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{\xi}{a}\right)\delta(\xi)\frac{d\xi}{a}$$

$$= \frac{1}{a} f(0)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{\delta(x)}{a} dx$$

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

(以上, 証明終.)

ここで, 一般に関数 $f(x)$ のフーリエ変換,

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-ikx) dx$$

とフーリエ逆変換,

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) \exp(ikx) dk$$

を考えます. $f(x)$ として, δ 関数 $\delta(x)$ を代入すると, フーリエ変換より,

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \exp(-ikx) dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-ik \cdot 0)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

となります. さらに, フーリエ逆変換より,

$$\delta(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx) dk$$

$$\therefore \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ikx) dk$$

この δ 関数の表式はよく使われます．また，3次元の δ 関数を次の式で定義しておきます．

$$\delta(\vec{x} - \vec{x}') \equiv \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z')$$

上の複素数の指数関数を使った表式も3次元で表しておきます．

$$\delta(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) dk_x dk_y dk_z$$

Q09-3 連続固有関数と連続固有値

連続した性質をもつ連続固有関数と連続固有値について調べましょう．
一般に連続固有方程式は，

$$\hat{A}\phi_a(\vec{x}) = a\phi_a(\vec{x})$$

という形式をしています． $\hat{A}$ は線形エルミート演算子， ϕ_a は連続固有関数， a は連続固有値です．連続固有関数と連続固有値は， a で区別しています．

(a は連続的に変化します．無限個の連続固有関数と無限個の連続固有値があります．)(時間に依存しないシュレディンガー方程式の解について，波動関数 ϕ が連続固有関数になり，固有値が連続固有値となる量子状態を

一般に散乱状態といいます.) 以下の記述については, 時間に依存しないシュレディンガー方程式の連続エネルギー固有関数と連続エネルギー固有値だけに限らず, 線形エルミート演算子の連続固有関数と連続固有値一般について言えることです.

離散固有関数の場合と同じように, 波動関数 Ψ を連続固有関数 ϕ で展開することができます. ただし, 離散固有関数の場合は無限級数の和でしたが, 連続固有関数の場合は積分になります.

$$\Psi(t, \vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} c_a(t) \phi_a(\vec{x}) da$$

ここで, 離散固有関数の場合と同様に, $c_a(t)$ は確率に関する展開係数で,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |c_a(t)|^2 da = \int_{-\infty}^{\infty} c_a^*(t) c_a(t) da = 1$$

を満たします. 離散固有関数の場合と同様に,

$$\begin{aligned} |c_a(t)|^2 &= c_a^*(t) c_a(t) \\ &= c_a^* \exp(i\omega_a t) \cdot c_a \exp(-i\omega_a t) \\ &= |c_a|^2 \end{aligned}$$

となります. $|c_a(t)|^2 da = |c_a|^2 da$ は状態が ϕ_a になり, 固有値 a を測定する確率であると解釈することができます. また, Ψ は規格化条件を満たします.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) dx dy dz = 1$$

この式に上の Ψ を展開した式を代入して計算します.

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} c_a^*(t) \phi_a^*(\vec{x}) da \right\} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} c_b(t) \phi_b(\vec{x}) db \right\} dx dy dz = 1 \\ \therefore & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_a^*(t) c_b(t) da db \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_a^*(\vec{x}) \phi_b(\vec{x}) dx dy dz = 1 \end{aligned}$$

最後の式と, 上述した,

$$\int_{-\infty}^{\infty} c_a^*(t) c_a(t) da = 1$$

の式を比較して,

$$c_a(t) = \int_{-\infty}^{\infty} c_b(t) db \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_a^*(\vec{x}) \phi_b(\vec{x}) dx dy dz$$

が得られます. このとき, δ 関数の性質より,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_a^*(\vec{x}) \phi_b(\vec{x}) dx dy dz = \delta(a - b)$$

の関係式が成立します. この式を連続固有関数の δ 関数規格直交条件といいます. (このとき, 上の式の右辺に代入して計算すると,

$$\int_{-\infty}^{\infty} c_b(t) db \delta(a - b) = c_a(t)$$

と確かめられます.) この Section の最後に連続固有関数と連続固有値について, 離散固有関数, 離散固有値に対比させてまとめておきます.

連続固有値問題で設定された物理系で, 理想実験し観測すると, 固有値の中のいずれか (例えば a .) を測定することになります. (理論値である固有値の中のいずれかが量子力学的理想測定値と一致することになります.) 一旦, 固有値 a を測定すると, 量子状態を表す波動関数はその固有値 a の固有状態 $\phi_a(\vec{x})$ に量子飛躍します.

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} c_b(t) \phi_b(\vec{x}) db \rightarrow \phi_a(\vec{x})$$

逆に, 固有状態 $\phi_a(\vec{x})$ において測定すると, 測定値は必ず固有値 a になります. 量子飛躍は不連続的に起こり, その前後で因果関係はありません. 状態が ϕ_a になり, 固有値 a を測定する確率は $|c_a|^2 da$ で与えられます.

Q09-4 表示

時間に依存しないシュレディンガー方程式の離散固有方程式,

$$\hat{H}\phi_n(\vec{x}) = E_n\phi_n(\vec{x}) \quad (n = 1, 2, \dots)$$

を解くと, 完全系

$$\{\phi_1(\vec{x}), \phi_2(\vec{x}), \dots\}$$

が得られ, これを基底に選び, 任意の関数を展開することができます.

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \phi_n(\vec{x})$$

また、時間に依存しないシュレディンガー方程式の連続固有方程式、

$$\hat{H}\phi_E = E\phi_E$$

を解くと、完全系、

$$\{\phi_E(\vec{x})\}$$

が得られ、これを基底に選び、任意の関数を展開することができます。

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} c_E(t) \phi_E(\vec{x}) dE$$

このように時間に依存しないシュレディンガー方程式のエネルギー固有関数を基底として選び任意の関数を表すことを、エネルギー表示をとるといいます。

表示の取り方、つまり基底の選択の方法として、他に位置表示と運動量表示というものが存在します。位置表示から考えましょう。位置演算子に対する固有方程式はどのような形になるのでしょうか？いままでの固有方程式の形式で表現すると、位置演算子 $\hat{x} = x$ について、

$$\hat{x}\phi_{x'}(x) = x'\phi_{x'}(x)$$

となるでしょう。（1次元で考えました。x が位置の変数、x' は、ある位

置の定数です.) 実はこの方程式を満たす固有関数はδ関数であることがわかっています. つまり,

$$\hat{x}\delta(x-x') = x'\delta(x-x')$$

が成立します. (連続固有方程式になります.) 証明は, 左辺と右辺をそれぞれ積分すればできます.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{x} \delta(x-x') dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \delta(x-x') dx$$

$$= x'$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x' \delta(x-x') dx = x' \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x') dx$$

$$= x'$$

3次元に一般化すると, 位置演算子の固有方程式は次のようになります.

$$\hat{\vec{x}}\delta(\vec{x}-\vec{x}') = \vec{x}'\delta(\vec{x}-\vec{x}')$$

位置表示を考えましょう. 固有関数であるδ関数を基底にとり, 任意の関数ψを展開します.

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_{\vec{x}'}(t) \delta(\vec{x}-\vec{x}') dx' dy' dz'$$

位置演算子の連続固有関数であるδ関数は, 次のδ関数規格直交条件を満たしています.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\vec{x} - \vec{x}') \delta(\vec{x} - \vec{x}'') dx dy dz = \delta(\vec{x}'' - \vec{x}')$$

導出は、 δ 関数の性質、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{x}) \delta(\vec{x} - \vec{x}') dx dy dz = f(\vec{x}')$$

により実行することができます。観測による量子飛躍についても考えておきます。連続固有関数と連続固有値の Section を参考にして、全く同じ形式に揃えて記述すると、

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_{\vec{x}''}(t) \delta(\vec{x} - \vec{x}'') dx'' dy'' dz'' \rightarrow \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

となります。この結果は、直観的に非常にわかりやすいものとなっています。すなわち、時間的に変動していて空間的に広がっている波動関数が、観測した瞬間に、ある位置 $\vec{x}'$ に局在し、粒子として発見されることとなります。このことは、量子状態の Chapter での観測による量子飛躍の表式、

$$\psi(t, \vec{x}) \rightarrow \phi_{\vec{x}'}$$

と完全に一致します。つまり、矢印の右にある波動関数は、ある位置 $\vec{x}'$ に状態が局在することを示しているのですが、それが位置演算子の固有関数である δ 関数 $\delta(\vec{x} - \vec{x}')$ だったということが判明したのです。

それでは、運動量表示についても考えてみます。1次元の運動量演算子についての固有方程式は、

$$\hat{p}_x \phi_{p_x}(x) = p_x \phi_{p_x}(x)$$

$$\therefore -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \phi_{p_x}(x) = p_x \phi_{p_x}(x)$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial x} \phi_{p_x}(x) = \frac{i}{\hbar} p_x \phi_{p_x}(x)$$

この微分方程式を満たす ϕ は,

$$\phi_{p_x}(x) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x\right)$$

となります。C は積分定数です。3次元に拡張すると,

$$\phi_{\vec{p}}(x) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right)$$

となります。このとき,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\vec{p}}^*(\vec{x}) \phi_{\vec{p}}(x) dx dy dz \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} C^* \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) C \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |C|^2 dx dy dz \end{aligned}$$

となりますが, この積分は発散します。そこで, 連続固有関数の場合に取り扱う δ 関数規格直交条件を考えましょう。

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\vec{p}'}^*(\vec{x}) \phi_{\vec{p}}(\vec{x}) dx dy dz \\
= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} C^* \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}\right) C \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) \\
= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |C|^2 \exp\left\{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{x}\right\} dx dy dz
\end{aligned}$$

ここで、 δ 関数の表式、

$$\delta(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) dk_x dk_y dk_z$$

を使うと、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\vec{p}'}^*(\vec{x}) \phi_{\vec{p}}(\vec{x}) dx dy dz = (2\pi\hbar)^3 |C|^2 \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

となります。ここで、 δ 関数規格直交条件、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\vec{p}'}^*(\vec{x}) \phi_{\vec{p}}(\vec{x}) dx dy dz = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

が成立しなければならないとします。このとき、

$$(2\pi\hbar)^3 |C|^2 = 1$$

$$\therefore |C| = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}$$

となります。したがって運動量演算子の連続固有関数は、

$$\phi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right)$$

と求められます．

この Section では，表示の方法，つまり任意の波動関数を固有関数系で展開する場合の基底の選び方について見てきました．ここで，基底の変換について言及しておきます． δ 関数の Section で， δ 関数のフーリエ変換とフーリエ逆変換について考えました．3次元に拡張しておくと，

$$\begin{aligned} g(\vec{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\vec{x} - \vec{x}') \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) dx dy dz \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}') \end{aligned}$$

となり，位置演算子の固有関数である δ 関数を，フーリエ変換すると運動量演算子の固有関数になります．フーリエ逆変換を考えると，

$$\delta(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}') \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) dk_x dk_y dk_z$$

となりますが，右辺を計算すると，

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')\} dk_x dk_y dk_z = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

が確かめられます．このように，運動量演算子の固有関数系の基底をフーリエ逆変換したものは位置演算子の固有関数系の基底である δ 関数になり

ます.

Q09-5 併立するオブザーバブル

これから2つのSectionで演算子の交換関係について成立する定理を与えておきます. オブザーバブルが2つある場合について, 次の定理が成立します.

$[\hat{A}, \hat{B}] \Leftrightarrow \hat{A}$ の固有状態と $\hat{B}$ の固有状態は同時固有状態をなします.

同時固有状態とは, その状態が $\hat{A}$ の固有状態でもあり, $\hat{B}$ の固有状態でもある量子状態のことです. まず, $(\Rightarrow)$ 向きの証明を実行します. $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が交換可能なので,

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$

が成り立ちます. この演算子を $\hat{A}$ の固有状態 ϕ_a に作用させます.

$$\begin{aligned}\hat{A}\hat{B}\phi_a &= \hat{B}\hat{A}\phi_a \\ &= a\hat{B}\phi_a\end{aligned}$$

故に, $\hat{B}\phi_a$ は演算子 $\hat{A}$ の固有状態になっています. したがって, $\hat{B}\phi_a$ は ϕ_a の定数倍になるはずです.

$$\hat{B}\phi_a = b\phi_a$$

この式は, $\hat{A}$ の固有状態 ϕ_a が $\hat{B}$ の固有状態であることを示しています. つまり, $\hat{A}$ の固有状態と $\hat{B}$ の固有状態が同時固有状態であることが証明されまし

た.

次に, 逆方向 ($\Leftarrow$) について証明します. まず, $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有状態 ϕ_n に交換子 $[\hat{A}, \hat{B}]$ を作用させます.

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] \phi_n &= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \phi_n \\ &= (a_n b_n - b_n a_n) \phi_n \\ &= 0 \end{aligned}$$

ここで, n について和をとります.

$$\begin{aligned} \sum_n [\hat{A}, \hat{B}] \phi_n &= 0 \\ \therefore [\hat{A}, \hat{B}] \sum_n \phi_n &= 0 \end{aligned}$$

ここで,

$$\phi \equiv \sum_n \phi_n$$

とおくと,

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

となりますが, 任意の ϕ について成立すると仮定すると,

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

よって、定理は証明されました。

Q09-6 併立しないオブザーバブル

2つのオブザーバブル（演算子）が非可換の場合、次の定理が成立します。

$$[\hat{A}, \hat{B}] \Rightarrow \Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$$

ΔA と ΔB は理想測定値の不確定性を表します。また、右辺の絶対値の中の記号は演算子の期待値でした。この定理は、不確定性原理の Chapter において思考実験で導いておいた原理を一般的に表したものです。具体例として、位置と運動量の間の不確定性を挙げておきます。（1次元で考えています。）交換関係、

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

が成立しましたので、

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{1}{2} |\langle i\hbar \rangle|$$

$$\therefore \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \hbar$$

最後の式が、位置と運動量の不確定性原理の正確な表式です。それでは、もとの一般的な定理を証明しましょう。まず、2つのエルミート演算子を定義します。

$$\begin{cases} \hat{\alpha} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \\ \hat{\beta} \equiv \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \end{cases}$$

ここで、次の状態 χ をつくります.

$$\chi = (\hat{\alpha} + i\lambda\hat{\beta})\phi$$

ただし、 λ は実数とします. ここで、状態の絶対値の2乗は0以上なので、 χ について次の式が成立します.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^* \chi dx dy dz \geq 0$$

χ に上述の式を代入して計算します.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^* \chi dx dy dz &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^* (\hat{\alpha} - i\lambda\hat{\beta})(\hat{\alpha} + i\lambda\hat{\beta})\phi dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \{\hat{\alpha}^2 + \lambda i(\hat{\alpha}\hat{\beta} - \hat{\beta}\hat{\alpha}) + \lambda^2\hat{\beta}^2\}\phi dx dy dz \\ &= \langle \hat{\beta}^2 \rangle \lambda^2 + \langle i[\hat{\alpha}, \hat{\beta}] \rangle \lambda + \langle \hat{\alpha}^2 \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

最後の不等式を変形していきます.

$$\langle \hat{\beta}^2 \rangle (\lambda^2 + 2 \frac{\langle i[\hat{\alpha}, \hat{\beta}] \rangle}{2\langle \hat{\beta}^2 \rangle} \lambda + \frac{\langle i[\hat{\alpha}, \hat{\beta}] \rangle^2}{4\langle \hat{\beta}^2 \rangle^2}) + \frac{1}{4\langle \hat{\beta}^2 \rangle} (4\langle \hat{\alpha}^2 \rangle \langle \hat{\beta}^2 \rangle - \langle i[\hat{\alpha}, \hat{\beta}] \rangle^2) \geq 0$$

$$\therefore \langle \hat{\beta}^2 \rangle (\lambda + \frac{\langle i[\hat{\alpha}, \hat{\beta}] \rangle}{2\langle \hat{\beta}^2 \rangle})^2 + \frac{1}{4\langle \hat{\beta}^2 \rangle} (4\langle \hat{\alpha}^2 \rangle \langle \hat{\beta}^2 \rangle - \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2) \geq 0$$

最後の不等式が常に成立するためには、最小値、

$$\frac{1}{4\langle\hat{\beta}^2\rangle}(4\langle\hat{\alpha}^2\rangle\langle\hat{\beta}^2\rangle - \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2)$$

が 0 以上にならなければなりません。よって、

$$4\langle\hat{\alpha}^2\rangle\langle\hat{\beta}^2\rangle - \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2 \geq 0$$

$$\therefore 2\sqrt{\langle\hat{\alpha}^2\rangle}\sqrt{\langle\hat{\beta}^2\rangle} \geq |\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$$

$$\therefore \Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$$

(証明終.)

前の Section とこの Section の定理により、次の事項が理解されます。すなわち、2つのオブザーバブルが交換可能の場合は量子状態が同時固有状態になり、2つのオブザーバブルに対して、同時に正確に理論値の計算ができて、そして不確定性なしにそれぞれの確定値を同時に測定することができます。それに対して、2つのオブザーバブルが交換不可能の場合は、2つのオブザーバブルの間に不確定性関係が成立し、同時に正確な理論値や測定値を得ることができません。

この Chapter まで波動力学の一般論を述べてきました。次の4つの Chapter では具体例を取り扱っていきたいと思います。

Q10 束縛状態 1:例 1 (自由粒子と井戸型ポテンシャル)

Q10-1 1次元無限空間の中の自由粒子

前の Chapter まで、波動力学の一般論を展開しました。この Chapter から具体例を取り扱うことにします。最も簡単な例は、1 個の自由粒子だと考えられます。自由という意味は電場や磁場などの外場がなく、他のいづれとも相互作用しないということです。言い直すとポテンシャルは 0 になります。自由粒子の粒子というのは、量子のことを意味し、例えば電子などを想像して下さい。ここで、簡単のため、空間次元は 1 次元と限定します。もともとなる時間に依存しないシュレディンガー方程式は、

$$\hat{H}\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x}) \quad (q06 - 2)$$

ですが、一般に、ハミルトニアンは、

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\vec{x})$$

と与えられています。今考えている、空間次元が 1 次元でポテンシャルが 0 の場合は、ハミルトニアンは、

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

となります。したがって、解くべきシュレディンガー方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) = E\phi(x)$$

となります。これを少し変形します。

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x)$$

ここで、自由粒子のエネルギーE は正なので、

$$k_x^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$$

とおくと、方程式は、

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) = -k_x^2 \phi(x)$$

となります。この微分方程式は固有方程式です。以下、解法を示しておくことにします。

$$\phi = \alpha \exp(\lambda x)$$

とおき、微分方程式に代入します。(αとλは複素数の定数とします。)

$$\alpha \lambda^2 \exp(\lambda x) = -k_x^2 \alpha \exp(\lambda x)$$

$$\therefore \lambda^2 = -k_x^2$$

$$\therefore \lambda = \pm i k_x$$

故に、解は、

$$\phi = \alpha_1 \exp(i k_x x) + \alpha_2 \exp(-i k_x x) \quad (1)$$

となります。さらに、複素数の指数関数を三角関数で表して計算します。

$$\begin{aligned}\phi &= \alpha_1(\cos k_x x + i \sin k_x x) + \alpha_2(\cos k_x x - i \sin k_x x) \\ &= (\alpha_1 - \alpha_2)i \cdot \sin k_x x + (\alpha_1 + \alpha_2) \cos k_x x\end{aligned}$$

ここで、2つの複素数の定数を導入して、

$$\begin{cases} A \equiv (\alpha_1 - \alpha_2)i \\ B \equiv \alpha_1 + \alpha_2 \end{cases}$$

とおくと、

$$\phi = A \sin k_x x + B \cos k_x x \quad (2)$$

という一般解が得られます。(波動関数は一般に複素数の関数でしたね。)
この波動関数 ϕ が1次元空間いっぱいに広がっていて、粒子はどこにあるかは、観測前はわかりません。(二重性の中の波動性が現れています。)ただその存在確率のみ計算することができるのです。このような状況の中で、観測という行為を行うと波動関数が量子飛躍し、1次元の全空間の中のどこかに電子が発見されます。(粒子性が現れます。)

ここで、注意しなければならないことがあります。今、1次元空間は負の無限大から正の無限大にとってあるので、規格化条件を計算すると無限大になってしまうということです。実際に計算してみます。((1)式の一般解を使います。)

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \phi dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \{ \alpha_1^* \exp(-ik_x x) \\
&\quad + \alpha_2^* \exp(ik_x x) \} \{ \alpha_1 \exp(ik_x x) + \alpha_2 \exp(-ik_x x) \} dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \{ |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + \alpha_1^* \alpha_2 \exp(-ik_x x) + \alpha_1 \alpha_2^* \exp(ik_x x) \} dx \\
&= [(|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2)x + \frac{1}{ik_x} \{ -\alpha_1^* \alpha_2 \exp(-ik_x x) \\
&\quad + \alpha_1 \alpha_2^* \exp(ik_x x) \}]_{-\infty}^{\infty} \\
&= (|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2) \{ \infty - (-\infty) \} + \frac{1}{ik_x} (\text{有限値}) \\
&= \infty
\end{aligned}$$

このことは、1次元全宇宙空間に1個の自由粒子が存在していた場合、波動関数は遠方でも減衰しないため、無限遠から無限遠まで存在確率は0ではないことを反映しています。しかし、全体の存在確率が1ではなく、無限大になってしまう状況は、物理的に意味がありません。次のSectionで回避策を考えましょう。

Q10-2 1次元箱の中の自由粒子

存在確率の無限大を避ける簡単な方法は、量子を箱の中に入れることです。今考えているのは1次元ですから、箱というのは、この場合線分になります。（以下この線分のことを箱ということにします。）この箱の中に量子状態を表す波動関数が存在しています。その解は、前Sectionより、

$$\phi = A \sin k_x x + B \cos k_x x \quad (2)$$

であることがわかっています。量子は箱の中に存在しているので、その箱

の中以外での存在確率は 0 になります。したがって、量子状態を表す波動関数も箱の中以外では 0 の値をとります。一般に、波動関数に関しては、座標についてなめらかな連続関数でなければならないという条件が付きます。つまり、 ϕ とその一階微分の ϕ' が至る所で連続でなければなりません。しかし、この場合、箱の外は完全に存在確率 0 としているので、境界でなめらかなという条件、すなわち ϕ' が連続であるという条件は成立しません。そこで、箱の境界で ϕ が連続であるという境界条件のみを書くと、次のようになります。

$$\phi(0) = \phi(L) = 0$$

(1 次元の箱の長さを L にして、0 から L までの領域に箱を置きました。)
この境界条件を(2)式の一般解に適用します。 $\phi(0) = 0$ より、

$$\phi(0) = A \cdot 0 + B \cdot 1 = 0$$

$$\therefore B = 0$$

$$\therefore \phi = A \sin k_x x$$

となります。さらに、 $\phi(L) = 0$ より、

$$\phi(L) = A \sin k_x L = 0$$

となります。ここで、 $A=0$ とすると、波動関数が恒等的に 0 になってしまい、不適となります。したがって、

$$\sin k_x L = 0$$

$$\therefore k_x L = n\pi$$

$$\therefore k_x = \frac{n\pi}{L}$$

となります。ここで、 n は整数です。故に、固有関数は、

$$\phi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{L} x$$

と表せます。(これは離散固有関数であることがわかります。したがって、量子状態は束縛状態ということになりますね。) $n=0$ とすると、波動関数が位置によらずに 0 になり、意味のある量子状態になりません。また、 $n = -1, -2, \dots$ などは、 $n = 1, 2, \dots$ のときの逆符号になるだけで、独立な解にはなりません。よって、 $n = 1, 2, \dots$ となります。(n を量子数といいます。) $n=1$ の状態を基底状態といい、 $n = 2, 3, \dots$ の状態を励起状態といいます。また、離散エネルギー固有値は、

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 \\ &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \end{aligned}$$

となり、跳び跳びの値をもちます。エネルギー固有値は、 $n=1$ のとき最小値をとりますが、0 にはなりません。これを零点エネルギーといいます。絶対零度の場合でもエネルギーは 0 ではないのです。このことは古典的に

は考えられない、量子力学の特徴です。

次に、箱（１次元の線分）の全領域における存在確率が１であるという規格化条件を適用して、定数 A を決定します。

$$\begin{aligned}\int_0^L \phi_n^2 dx &= A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx \\&= A^2 \int_0^L \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)}{2} dx \\&= A^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{L}{4n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right) \right]_0^L \\&= A^2 \frac{L}{2} = 1\end{aligned}$$

$$\therefore A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\therefore \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \quad (n = 1, 2, \dots)$$

最後の式が規格化された離散固有関数になります。さらに、量子数の異なる離散固有関数が直交することをお確かめしておきます。 $n \neq m$ のとき、

$$\begin{aligned}\int_0^L \phi_n^* \phi_m dx &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) dx \\&= -\frac{1}{L} \int_0^L \left\{ \cos \frac{(n+m)\pi}{L}x - \cos \frac{(n-m)\pi}{L}x \right\} dx\end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{L} \left[\frac{L}{(n+m)\pi} \sin \frac{(n+m)\pi}{L} x - \frac{L}{(n-m)\pi} \sin \frac{(n-m)\pi}{L} x \right]_0^L$$

$$= 0$$

となります。まとめると、離散固有関数は規格直交条件、

$$\int_0^L \phi_n^* \phi_m dx = \delta_{nm}$$

を満たし、規格直交系を成すということが確認されました。

Q10-3 3次元箱の中の自由粒子

空間を1次元にすることは、状況を簡単にして、また計算をしやすくするというメリットがありますが、現実の空間は3次元です。そこで、3次元の箱の中にある1個の自由粒子を考えていきましょう。箱は立方体の場合を考え、直交座標で、(0,0,0), (L,0,0), (0,L,0), (0,0,L), (L,L,0), (L,0,L), (0,L,L), (L,L,L)を頂点にとります。もともになる時間に依存しないシュレディンガー方程式は、

$$\hat{H}\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x}) \quad (q06-2)$$

で、ハミルトニアンは、

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\vec{x})$$

でした。ここで、自由粒子を扱いますので、ポテンシャルは0です。した

がって、シュレディンガー方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x})$$

となります。この微分方程式を変数分離の方法で解くことにします。すなわち、波動関数 ϕ を、

$$\phi(\vec{x}) \equiv X(x)Y(y)Z(z)$$

とし、 x 、 y 、 z のそれぞれの関数の積であるとしします。このとき、微分方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2X}{dx^2}YZ + \frac{d^2Y}{dy^2}XZ + \frac{d^2Z}{dz^2}XY\right) = EXYZ$$

$$\therefore \frac{\frac{d^2X}{dx^2}}{X} + \frac{\frac{d^2Y}{dy^2}}{Y} + \frac{\frac{d^2Z}{dz^2}}{Z} = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

となります。最後の式で、左辺第1項は x だけの関数、左辺第2項は y だけの関数、左辺第3項は z だけの関数です。そして、この3つの項が右辺の定数に等しいということは、それぞれの項が定数でなければならないということになります。ここで、 x 方向、 y 方向、 z 方向については特別な方向がなく、3方向は同等な方向であることに注意しましょう。右辺の定数が負の値をとっているということは、左辺のそれぞれの項も負の定数になります。そこで、

$$\begin{cases} \frac{d^2X}{dx^2} = -k_x^2 \\ \frac{d^2Y}{dy^2} = -k_y^2 \\ \frac{d^2Z}{dz^2} = -k_z^2 \end{cases}$$

と置くことができます。故に,

$$\begin{cases} \frac{d^2X}{dx^2} = -k_x^2 X \\ \frac{d^2Y}{dy^2} = -k_y^2 Y \\ \frac{d^2Z}{dz^2} = -k_z^2 Z \end{cases}$$

という微分方程式が導かれます。これは前 Section の 1 次元箱の中の自由粒子と全く同じ方程式で, 境界条件もそれぞれの変数について 0 から L までと同じになっています。よって, 解は,

$$\begin{cases} X_\ell(x) = A \sin \frac{\ell\pi}{L} x \ (\ell = 1, 2, \dots) \\ Y_m(y) = B \sin \frac{m\pi}{L} y \ (m = 1, 2, \dots) \\ Z_n(z) = C \sin \frac{n\pi}{L} z \ (n = 1, 2, \dots) \end{cases}$$

となります。全体の波動関数は, ABC をあらためて A と置きなおして,

$$\phi_{\ell mn}(\vec{x}) = A \sin\left(\frac{\ell\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}z\right) \ (\ell, m, n = 1, 2, \dots)$$

となります。次に、規格化条件から定数 A の値を決定します。

$$\int_0^L \Phi_{\ell mn}^2 dx = A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\ell\pi}{L}x\right) dx \int_0^L \sin^2\left(\frac{m\pi}{L}y\right) dy \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}z\right) dz$$

ここで,

$$\begin{aligned} \int_0^L \sin^2\left(\frac{\ell\pi}{L}x\right) dx &= \int_0^L \frac{1 - \cos\left(\frac{2\ell\pi}{L}x\right)}{2} dx \\ &= \left[\frac{x}{2} - \frac{L}{4\ell\pi} \sin\left(\frac{2\ell\pi}{L}x\right)\right]_0^L \\ &= \frac{L}{2} \end{aligned}$$

なので,

$$\int_0^L \Phi_{\ell mn}^2 dx = A^2 \left(\frac{L}{2}\right)^3 = 1$$

$$\therefore A = \sqrt{\frac{8}{L^3}}$$

となります。まとめると,

$$\Phi_{\ell mn}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{\ell\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}z\right) \quad (\ell, m, n = 1, 2, \dots)$$

となります。また、エネルギー固有値は,

$$-k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

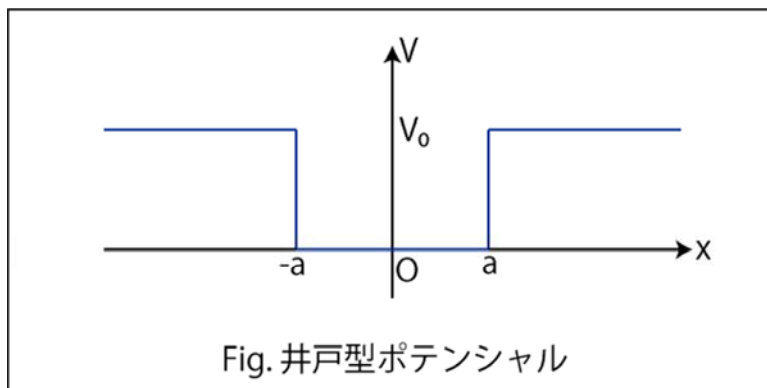
$$\therefore E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$\therefore E_{\ell mn} = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left(\frac{\ell\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{m\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 \right\} (\ell, m, n = 1, 2, \dots)$$

と求められます。ℓ = m = n = 1の場合が基底状態、それ以外のエネルギーの高い状態が励起状態です。

箱の中に1個の量子が自由に存在している場合、観測前は波動関数φが箱一杯に定常波を形成して広がっています。波動性が現れていて、粒子性は表に出てきません。ここで、何らかの方法で観測すると量子飛躍が起こり、箱の中のどこかに粒子が1個見つかります。（粒子性の現れ。）観測の前後に因果関係はなく、波動関数からその存在確率のみを計算することができるのです。

Q10-4 1次元井戸型ポテンシャルとシュレディンガー方程式



1次元井戸型ポテンシャルとは、図のような形をしたポテンシャルです。
式で書くと、

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

となります。ただし、 a と V_0 は正の定数です。このポテンシャルの中に1個の量子（例えば電子。）がある状況を考えましょう。この量子のエネルギー E が V_0 より小さく正の場合を取り扱ってみます。

$$0 < E < V_0$$

このとき、量子状態は束縛状態になり、量子はポテンシャルの井戸の底付近に局在することになります。束縛状態の場合は離散固有関数と離散固有値が得られるはずです。

それでは、この系について時間に依存しないシュレディンガー方程式を立てましょう。もともになる時間に依存しないシュレディンガー方程式は、

$$\hat{H}\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x}) \quad (q06 - 2)$$

ですが、一般に、ハミルトニアンは、

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\vec{x})$$

と与えられています。1次元の系では、 x 方向のみが関係してきます。

ここで、 $-a < x < a$ の領域を考えます。ポテンシャルの値が 0 なので、

ハミルトニアンは,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

となります。したがって、解くべきシュレディンガー方程式は,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) = E\phi(x)$$

となります。これを少し変形します。

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x)$$

ここで、量子のエネルギーEは正なので、

$$k_x^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$$

とおくと、方程式は,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) = -k_x^2 \phi(x) \quad (3)$$

となります。

次に、 $x < -a, x > a$ の領域を見てみます。1次元なのでx方向のみ関係し、ポテンシャルの値は定数 V_0 なので、ハミルトニアンは,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0$$

となります。したがって、シュレディンガー方程式は、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0\right)\phi(x) = E\phi(x)$$

となります。この式を変形していきます。

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi = (V_0 - E)\phi$$

$$\therefore \frac{d^2}{dx^2} \phi = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \phi$$

ここで、 $E < V_0$ なので、右辺の係数は正になります。そこで、

$$\alpha^2 \equiv \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

とおくことができます。解くべき固有方程式は、

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = \alpha^2 \phi(x) \quad (4)$$

となります。

Q10-5 シュレディンガー方程式の解とパリティ

前の Section の 2 つの固有方程式の解を求めましょう。 $-a < x < a$ の領域における(3)式は、自由粒子の微分方程式と全く同じ方程式なので、

$$\phi(x) = A \sin k_x x + B \cos k_x x \quad (2)$$

という解を持ちます。ただし、 A と B は定数です。

次に、 $x < -a, x > a$ の領域を考えます。

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = \alpha^2 \phi(x) \quad (4)$$

を解きます。

$$\phi = \beta \exp(\lambda x)$$

とおき、微分方程式(4)式に代入します。(β と λ は複素数の定数とします。)

$$\beta \lambda^2 \exp(\lambda x) = \alpha^2 \beta \exp(\lambda x)$$

$$\therefore \lambda^2 = \alpha^2$$

$$\therefore \lambda = \pm \alpha$$

故に、解は、

$$\phi(x) = C \exp(-\alpha x) + D \exp(\alpha x)$$

となります。(C と D は定数です。) ここで、 $x < -a$ の領域では、 $x \rightarrow -\infty$ において ϕ が発散しないという境界条件より、 $C=0$ になります。同様に、 $x > a$ の領域では、 $x \rightarrow +\infty$ において ϕ が発散しないという境界条件より、 $D=0$ になります。まとめると、

$$\phi(x) = \begin{cases} D\exp(\alpha x) & (x < -a) \\ C\exp(-\alpha x) & (x > a) \end{cases} \quad (5)$$

となります。

次に、1次元井戸型ポテンシャルの問題について、パリティという概念を導入します。1次元井戸型ポテンシャルが偶関数であることに注意しましょう。($V(x)=V(-x)$.) 時間に依存しない1次元シュレディンガー方程式,

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

において、 $x \rightarrow -x$ と置き換えると、

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

となり、 $\phi(-x)$ も解になります。独立な解が1つの場合、解 $\phi(-x)$ は解 $\phi(x)$ の定数倍になります。つまり、

$$\phi(-x) = c\phi(x)$$

が成立します。(c は定数です.) さらに、 $x \rightarrow -x$ と置き換えると、

$$\phi(x) = c\phi(-x)$$

$$= c \cdot c\phi(x)$$

$$= c^2\phi(x)$$

となります。故に、

$$c^2 = 1$$

$$\therefore c = \pm 1$$

と、 c は特定されます。したがって、波動関数 $\phi(x)$ は偶関数、または奇関数のどちらかになります。このことを量子状態のパリティは偶または奇であるといいます。

Q10-6 パリティ偶の解

この Section では、パリティが偶の場合を取り扱います。この場合、波動関数は偶関数になります。領域は $x > 0$ を考えれば十分です。このとき、解は次のようになります。(2)式と(5)式より、

$$\phi(x) = B \cos k_x x \quad (0 < x < a)$$

$$\phi(x) = C \exp(-\alpha x) \quad (x > a)$$

となります。(ϕ は偶関数なので、 $A=0$ としました。) これら 2 式をそれぞれ x で微分すると、

$$\phi'(x) = -k_x B \sin k_x x \quad (0 < x < a)$$

$$\phi'(x) = -\alpha C \exp(-\alpha x) \quad (x > a)$$

となります。このとき、 $x=a$ で ϕ はなめらかに接続していなければなりません。したがって、 $x=a$ で ϕ が連続であるという条件より、

$$B \cos k_x a = C \exp(-\alpha a) \quad (6)$$

の関係が成立します。さらに、 $x=a$ で ϕ' が連続であるという条件より、

$$-k_x B \sin k_x a = -\alpha C \exp(-\alpha a)$$

$$\therefore k_x B \sin k_x a = \alpha C \exp(-\alpha a) \quad (7)$$

の関係が成立します。ここで、 $(7) \div (6)$ をつくると次のようになります。

$$\frac{k_x B \sin k_x a}{B \cos k_x a} = \frac{\alpha C \exp(-\alpha a)}{C \exp(-\alpha a)}$$

$$\therefore k_x \tan k_x a = \alpha$$

見やすくするために、

$$\begin{cases} \xi \equiv k_x a \\ \eta \equiv \alpha a \end{cases}$$

とおくと、

$$\xi \tan \xi = \eta \quad (8)$$

が成立します。ここで、

$$\begin{aligned} \xi^2 + \eta^2 &= (k_x^2 + \alpha^2) a^2 \\ &= \left\{ \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right\} a^2 \end{aligned}$$

$$\therefore \xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \quad (9)$$

の関係があります。(8)式と(9)式を連立すればエネルギー固有値を求めることができます。ただし、解析的な方法ではなく、グラフを使って解くこととなります。このとき、エネルギー固有値は跳び跳びの値をとります。(離散エネルギー固有値になります。)

Q10-7 パリティ奇の解

この Section では、パリティが奇の場合を取り扱います。この場合、波動関数は奇関数になります。領域は $x > 0$ を考えれば十分です。このとき、解は次のようになります。(2)式と(5)式より、

$$\phi(x) = A \sin k_x x \quad (0 < x < a)$$

$$\phi(x) = C \exp(-\alpha x) \quad (x > a)$$

となります。(φは奇関数なので、 $B=0$ としました。) これら2式をそれぞれ x で微分すると、

$$\phi'(x) = k_x A \cos k_x x \quad (0 < x < a)$$

$$\phi'(x) = -\alpha C \exp(-\alpha x) \quad (x > a)$$

となります。このとき、 $x=a$ でφはなめらかに接続していなければなりません。したがって、 $x=a$ でφが連続であるという条件より、

$$A \sin k_x a = C \exp(-\alpha a) \quad (10)$$

の関係が成立します。さらに, $x=a$ で φ' が連続であるという条件より,

$$k_x A \cos k_x a = -\alpha C \exp(-\alpha a) \quad (11)$$

の関係が成立します。ここで, (11)÷(10)をつくと次のようになります。

$$\frac{k_x A \cos k_x a}{A \sin k_x a} = \frac{-\alpha C \exp(-\alpha a)}{C \exp(-\alpha a)}$$

$$\therefore k_x \cot k_x a = -\alpha$$

見やすくするために,

$$\begin{cases} \xi \equiv k_x a \\ \eta \equiv \alpha a \end{cases}$$

とおくと,

$$\xi \cot \xi = -\eta \quad (12)$$

が成立します。ここで, 前 Section の

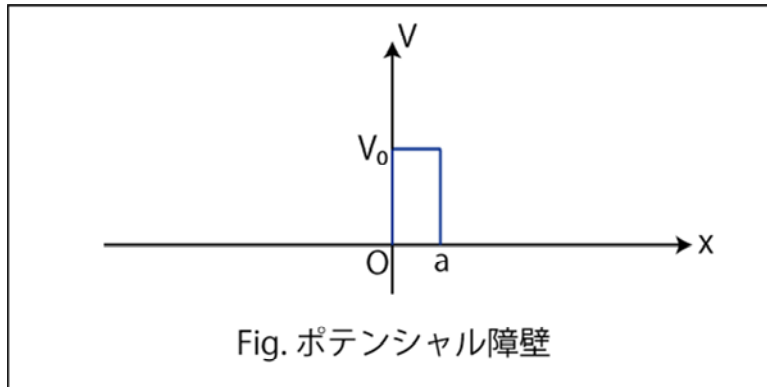
$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \quad (9)$$

の関係がありました。(12)式と(9)式を連立すればエネルギー固有値を求めることができます。ただし, 解析的な方法ではなく, グラフを使って解くことになります。このとき, エネルギー固有値は跳び跳びの値をとります。(離散エネルギー固有値になります。)

エネルギーの値は、 $0 < E < V_0$ の場合を考えました。このとき、古典的には $x < -a, x > a$ の領域で量子は存在しないはずですが、上記のように波動関数 ϕ は0ではなく、したがって存在確率密度 $|\phi|^2$ も0ではありません。この原因は量子の波動性が現れていると考えることができます。つまり、観測する前は量子状態が確率の波として存在し、それが染み出ているという訳です。ポテンシャルの壁の外側に量子が染み出る現象をトンネル効果といいます。古典論では考えられない、量子力学特有の現象です。

Q11 散乱状態 1 :例 2 (ポテンシャル障壁)

Q11-1 1次元ポテンシャル障壁



1次元ポテンシャル障壁のポテンシャルは、図のような形をしたものです。式で書くと、

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

となります。ただし、 a と V_0 は正の定数です。物理的な状況設定としては、 $x = -\infty$ からエネルギー E の量子のビームが入射され、障壁において透過または反射するようにします。(古典的には $0 < E < V_0$ ならば全て反射するはずですが。波動力学においてはどのようなになるのでしょうか?) なお、入射波、反射波、透過波は一定の状態に落ち着いており、定常状態になっていると考えることができます。時間に依存しないシュレディンガー方程式を用いて議論していきましょう。

Q11-2 $0 < E < V_0$ の場合のシュレディンガー方程式とその解

まず、 $0 < E < V_0$ の場合を考えましょう。この系について時間に依存し

ないシュレディンガー方程式を立てます。もともになる方程式は,

$$\hat{H}\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x}) \quad (q06 - 2)$$

ですが, 一般に, ハミルトニアンは,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\vec{x})$$

と与えられています。1次元の系を考えていますので, x 方向のみが関係してきます。 $x < 0$, $x > a$ の領域においてはポテンシャルが 0 なので, シュレディンガー方程式は,

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

となります。これを少し変形します。

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x)$$

ここで, 量子のエネルギー E は正なので,

$$k_x^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$$

とおくと, 方程式は,

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = -k_x^2 \phi(x)$$

となります。 $x < 0$ の領域において、この微分方程式の一般解は指数関数を使うと、

$$\phi(x) = A \exp(ik_x x) + B \exp(-ik_x x) \quad (x < 0)$$

となります。この ϕ から時間に依存する波動関数 Ψ を表すとき、 ϕ に $\exp(-i\omega t)$ をかけることとなります。したがって、解の第1項は x の正の方向に進行する波、つまり入射波を表し、解の第2項は x の負の方向に進行する波、つまり反射波を表していることとなります。 $x > a$ の解も同形の、

$$\phi(x) = C \exp(ik_x x) + D \exp(-ik_x x)$$

となりますが、この領域では透過波のみが存在するので、 $D=0$ となります。すなわち、

$$\phi(x) = C \exp(ik_x x) \quad (x > a)$$

となります。次に、 $0 < x < a$ の領域を考えましょう。この領域ではポテンシャルが V_0 なので、シュレディンガー方程式は、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0\right) \phi(x) = E \phi(x)$$

となります。これを少し変形します。

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \phi(x)$$

ここで, $0 < E < V_0$ の場合を考えているので,

$$\alpha^2 \equiv \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

とおくと, 方程式は,

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = \alpha^2 \phi(x)$$

となります. この方程式の一般解は,

$$\phi(x) = F \exp(\alpha x) + G \exp(-\alpha x) \quad (0 < x < a)$$

となります.

波動関数はなめらかな連続関数でなければならないので, $x=0$ と $x=a$ において, ϕ と ϕ' が連続であるという境界条件を満たすことになります. 境界条件を立てる前に, ϕ' を求めておきます.

$$\phi'(x) = ik_x A \exp(ik_x x) - ik_x B \exp(-ik_x x) \quad (x < 0)$$

$$\phi'(x) = ik_x C \exp(ik_x x) \quad (x > a)$$

$$\phi'(x) = \alpha F \exp(\alpha x) - \alpha G \exp(-\alpha x) \quad (0 < x < a)$$

それでは, 境界条件を立てましょう. $x=0$ で ϕ が連続であるという条件は,

$$A + B = F + G \quad (1)$$

となります. $x=0$ で ϕ' が連続であるという条件は,

$$ik_x(A - B) = \alpha(F - G) \quad (2)$$

となります。 $x=a$ で φ が連続であるという条件は,

$$C\exp(ik_x a) = F\exp(\alpha a) + G\exp(-\alpha a) \quad (3)$$

となります。 $x=a$ で φ' が連続であるという条件は,

$$ik_x C\exp(ik_x a) = \alpha F\exp(\alpha a) - \alpha G\exp(-\alpha a) \quad (4)$$

となります。未知量が5つあり式が4つなので、未知量の値を求めることはできませんが、 B/A , C/A といった係数の比を求めることはできます。以下、計算していきます。(1)× a +(2)より

$$(\alpha + ik_x)A + (\alpha - ik_x)B = 2\alpha F$$

となります。(1)× a -(2)より

$$(\alpha - ik_x)A + (\alpha + ik_x)B = 2\alpha G$$

となります。(3)× a +(4)より

$$(\alpha + ik_x)C\exp(ik_x a) = 2\alpha F\exp(\alpha a)$$

となります。(3)× a -(4)より

$$(\alpha - ik_x)C\exp(ik_x a) = 2\alpha G\exp(-\alpha a)$$

となります。上の1番目と2番目の式を、それぞれ3番目と4番目の式に代入すると、次式を得ることができます。

$$(\alpha + ik_x)C \exp(ik_x a) = \{(\alpha + ik_x)A + (\alpha - ik_x)B\} \exp(\alpha a) \quad (5)$$

$$(\alpha - ik_x)C \exp(ik_x a) = \{(\alpha - ik_x)A + (\alpha + ik_x)B\} \exp(-\alpha a) \quad (6)$$

ここで、(5)÷(6)をつくり、計算していきます。

$$\frac{\alpha + ik_x}{\alpha - ik_x} = \frac{\{(\alpha + ik_x)A + (\alpha - ik_x)B\} \exp(\alpha a)}{\{(\alpha - ik_x)A + (\alpha + ik_x)B\} \exp(-\alpha a)}$$

$$\therefore \frac{\alpha + ik_x}{\alpha - ik_x} = \frac{\{(\alpha + ik_x) + (\alpha - ik_x) \frac{B}{A}\} \exp(2\alpha a)}{(\alpha - ik_x) + (\alpha + ik_x) \frac{B}{A}}$$

$$\begin{aligned} \therefore (\alpha + ik_x) \{(\alpha - ik_x) + (\alpha + ik_x) \frac{B}{A}\} \\ = (\alpha - ik_x) \{(\alpha + ik_x) + (\alpha - ik_x) \frac{B}{A}\} \exp(2\alpha a) \end{aligned}$$

$$\therefore (\alpha^2 + k_x^2) + (\alpha + ik_x)^2 \frac{B}{A} = (\alpha^2 + k_x^2) \exp(2\alpha a) + (\alpha - ik_x)^2 \frac{B}{A} \exp(2\alpha a)$$

$$\therefore \{(\alpha + ik_x)^2 - (\alpha - ik_x)^2 \exp(2\alpha a)\} \frac{B}{A} = (\alpha^2 + k_x^2) \{\exp(2\alpha a) - 1\}$$

$$\therefore \frac{B}{A} = \frac{(\alpha^2 + k_x^2) \{\exp(2\alpha a) - 1\}}{(\alpha + ik_x)^2 - (\alpha - ik_x)^2 \exp(2\alpha a)}$$

$$\therefore \frac{B}{A} = \frac{(k_x^2 + \alpha^2) \{\exp(2\alpha a) - 1\}}{(ik_x + \alpha)^2 - (ik_x - \alpha)^2 \exp(2\alpha a)}$$

最後の式は, 反射波の複素振幅 B と入射波の複素振幅 A の比を表しています。また, (5)式の両辺を A で割って計算していきます。

$$\begin{aligned}
 (\alpha + ik_x) \frac{C}{A} \exp(ik_x a) &= \left\{ (\alpha + ik_x) + (\alpha - ik_x) \frac{B}{A} \right\} \exp(\alpha a) \\
 \therefore \frac{C}{A} &= \left(1 + \frac{\alpha - ik_x}{\alpha + ik_x} \cdot \frac{B}{A} \right) \exp(\alpha a) \exp(-ik_x a) \\
 &= \left[1 + \frac{\alpha - ik_x}{\alpha + ik_x} \cdot \frac{(k_x^2 + \alpha^2) \{ \exp(2\alpha a) - 1 \}}{(ik_x + \alpha)^2 - (ik_x - \alpha)^2 \exp(2\alpha a)} \right] \exp(\alpha a) \exp(-ik_x a) \\
 &= \frac{(\alpha + ik_x) \{ (ik_x + \alpha)^2 - (ik_x - \alpha)^2 \exp(2\alpha a) \} + (\alpha - ik_x) (k_x^2 + \alpha^2) \{ \exp(2\alpha a) - 1 \}}{(\alpha + ik_x) \{ (ik_x + \alpha)^2 - (ik_x - \alpha)^2 \exp(2\alpha a) \} \times \exp(\alpha a) \exp(-ik_x a)} \\
 (\text{分子}) &= (ik_x + \alpha)^3 - (-k_x^2 - \alpha^2)(ik_x - \alpha) \exp(2\alpha a) \\
 &\quad + (\alpha - ik_x)(k_x^2 + \alpha^2) \exp(2\alpha a) - (\alpha - ik_x)(k_x^2 + \alpha^2) \\
 &= (ik_x + \alpha)^3 - (\alpha - ik_x)(k_x^2 + \alpha^2) \\
 &= -ik_x^3 - 3k_x^2 \alpha + 3ik_x \alpha^2 + \alpha^3 - k_x^2 \alpha - \alpha^3 + ik_x^3 + ik_x \alpha^2 \\
 &= -4k_x^2 \alpha + 4ik_x \alpha^2 \\
 &= 4ik_x \alpha (ik_x + \alpha) \\
 \therefore \frac{C}{A} &= \frac{4ik_x \alpha (ik_x + \alpha)}{(ik_x + \alpha)^3 - (-k_x^2 - \alpha^2)(ik_x - \alpha) \exp(2\alpha a)} \exp(\alpha a) \exp(-ik_x a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{4ik_x\alpha(ik_x + \alpha)}{(ik_x + \alpha)^3 - (ik_x + \alpha)(ik_x - \alpha)(ik_x - \alpha)\exp(2\alpha a)} \exp(\alpha a)\exp(-ik_x a) \\
&= \frac{4ik_x\alpha\exp\{(\alpha - ik_x)a\}}{(ik_x + \alpha)^2 - (ik_x - \alpha)^2\exp(2\alpha a)}
\end{aligned}$$

最後の式は透過波の複素振幅 C と入射波の複素振幅 A の比を表しています。

ここで, 入射波, 反射波, 透過波の確率の流れ密度 j を調べておきます。

量子状態の Chapter で定義したように,

$$\vec{j}(t, \vec{x}) \equiv \frac{\hbar}{2mi} \{ \psi^*(t, \vec{x}) \nabla \psi(t, \vec{x}) - (\nabla \psi^*(t, \vec{x})) \psi(t, \vec{x}) \}$$

ですが, 1次元に書きなおすと,

$$\vec{j}(t, \vec{x}) = \frac{\hbar}{2mi} \{ \psi^*(t, x) \frac{d}{dx} \psi(t, x) - \left(\frac{d}{dx} \psi^*(t, x) \right) \psi(t, x) \}$$

となります。ここで,

$$\phi(x) = A\exp(ik_x x) + B\exp(-ik_x x) \quad (x < 0)$$

に対して確率の流れ密度を計算します。

$$\begin{aligned}
\vec{j}(t, \vec{x}) &= \frac{\hbar}{2mi} [\{ A^* \exp(-ik_x x) + B^* \exp(ik_x x) \} \{ ik_x A \exp(ik_x x) \\
&\quad - ik_x B \exp(-ik_x x) \} - \{ -ik_x A^* \exp(-ik_x x) \\
&\quad + ik_x B^* \exp(ik_x x) \} \{ A \exp(ik_x x) + B \exp(-ik_x x) \}] \\
&= \frac{\hbar}{2mi} (2ik_x |A|^2 - 2ik_x |B|^2)
\end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar k_x}{m} (|A|^2 - |B|^2)$$

ここで、入射波の流れ密度 j_A と反射波の流れ密度 j_B を次のように表すことができるでしょう.

$$j_A = \frac{\hbar k_x}{m} |A|^2$$

$$j_B = \frac{\hbar k_x}{m} |B|^2$$

同様に,

$$\phi(x) = C \exp(ik_x x) \quad (x > a)$$

に対して、確率の流れ密度を計算します.

$$\begin{aligned} \vec{j}(t, \vec{x}) &= \frac{\hbar}{2mi} \{ C^* \exp(-ik_x x) ik_x C \exp(ik_x x) + ik_x C^* \exp(-ik_x x) C \exp(ik_x x) \} \\ &= \frac{\hbar}{2mi} (2ik_x |C|^2) \\ &= \frac{\hbar k_x}{m} |C|^2 \end{aligned}$$

よって、透過波の流れ密度 j_C を次のように表すことができるでしょう.

$$j_C = \frac{\hbar k_x}{m} |C|^2$$

確率の流れ密度の比により，反射率と透過率を計算することができます．

反射率は，

$$\begin{aligned}\frac{j_B}{j_A} &= \frac{\frac{\hbar k_x}{m} |B|^2}{\frac{\hbar k_x}{m} |A|^2} \\ &= \left| \frac{B}{A} \right|^2\end{aligned}$$

となり，透過率は，

$$\begin{aligned}\frac{j_C}{j_A} &= \frac{\frac{\hbar k_x}{m} |C|^2}{\frac{\hbar k_x}{m} |A|^2} \\ &= \left| \frac{C}{A} \right|^2\end{aligned}$$

と表されます．

それでは，実際に反射率と透過率を計算してみましょう．まず，反射率を求めます．

$$\begin{aligned}\left| \frac{B}{A} \right|^2 &= \left(\frac{B}{A} \right)^* \frac{B}{A} \\ &= \frac{(k_x^2 + \alpha^2) \{ \exp(2\alpha a) - 1 \}}{(-ik_x + \alpha)^2 - (-ik_x - \alpha)^2 \exp(2\alpha a)} \\ &\quad \times \frac{(k_x^2 + \alpha^2) \{ \exp(2\alpha a) - 1 \}}{(ik_x + \alpha)^2 - (ik_x - \alpha)^2 \exp(2\alpha a)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\text{分母}}{\text{分母}}\right) &= \{(-ik_x + \alpha)(ik_x + \alpha)\}^2 - \{(ik_x + \alpha)^4 + (ik_x - \alpha)^4\} \exp(2\alpha a) \\ &\quad + \{(ik_x + \alpha)(ik_x - \alpha)\}^2 \exp(4\alpha a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= (k_x^2 + \alpha^2)^2 - \{(-k_x^2 + 2ik_x\alpha + \alpha^2)^2 \\ &\quad + (-k_x^2 - 2ik_x\alpha + \alpha^2)^2\} \exp(2\alpha a) + (k_x^2 \\ &\quad + \alpha^2)^2 \exp(4\alpha a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= (k_x^2 + \alpha^2)^2 - (2k_x^4 - 8k_x^2\alpha^2 + 2\alpha^4 - 4k_x^2\alpha^2) \exp(2\alpha a) + (k_x^2 \\ &\quad + \alpha^2)^2 \exp(4\alpha a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= (k_x^2 + \alpha^2)^2 - 2(k_x^4 - 6k_x^2\alpha^2 + \alpha^4) \exp(2\alpha a) + (k_x^2 \\ &\quad + \alpha^2)^2 \exp(4\alpha a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore \left|\frac{B}{A}\right|^2 &= \left[\frac{(k_x^2 + \alpha^2)^2 - 2(k_x^4 - 6k_x^2\alpha^2 + \alpha^4) \exp(2\alpha a) + (k_x^2 + \alpha^2)^2 \exp(4\alpha a)}{(k_x^2 + \alpha^2)^2 \{\exp(2\alpha a) - 1\}^2}\right]^{-1} \\ &= \left[\frac{(k_x^2 + \alpha^2)^2 \exp(-2\alpha a) - 2(k_x^4 - 6k_x^2\alpha^2 + \alpha^4) + (k_x^2 + \alpha^2)^2 \exp(2\alpha a)}{(k_x^2 + \alpha^2)^2 \{\exp(\alpha a) - \exp(-\alpha a)\}^2}\right]^{-1} \end{aligned}$$

$$(k_x^2 + \alpha^2)^2 \exp(-2\alpha a) - 2(k_x^4 - 6k_x^2\alpha^2 + \alpha^4) + (k_x^2 + \alpha^2)^2 \exp(2\alpha a)$$

$$\begin{aligned} &= (k_x^2 + \alpha^2)^2 \{\exp(2\alpha a) + \exp(-2\alpha a) - 2\} + 2(k_x^2 + \alpha^2)^2 \\ &\quad - 2(k_x^4 - 6k_x^2\alpha^2 + \alpha^4) \end{aligned}$$

$$= (k_x^2 + \alpha^2)^2 \{\exp(\alpha a) - \exp(-\alpha a)\}^2 + 16k_x^2\alpha^2$$

$$\therefore \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{16k_x^2\alpha^2}{(k_x^2 + \alpha^2)^2 \{\exp(\alpha a) - \exp(-\alpha a)\}^2}\right]^{-1}$$

$$\begin{aligned} &= \left[1 + \frac{4k_x^2\alpha^2}{(k_x^2 + \alpha^2)^2 \left\{\frac{\exp(\alpha a) - \exp(-\alpha a)}{2}\right\}^2}\right]^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left\{ 1 + \frac{4k_x^2 \alpha^2}{(k_x^2 + \alpha^2)^2 \sinh^2 \alpha a} \right\}^{-1} \\
&= \left[1 + \frac{4 \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}{\left\{ \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right\}^2 \sinh^2 \alpha a} \right]^{-1} \\
&= \left\{ 1 + \frac{16m^2 E(V_0 - E)}{4m^2 V_0^2 \sinh^2 \alpha a} \right\}^{-1} \\
&= \left\{ 1 + \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2 \alpha a} \right\}^{-1}
\end{aligned}$$

次に透過率を計算します．

$$\begin{aligned}
\left| \frac{C}{A} \right|^2 &= \left(\frac{C}{A} \right)^* \frac{C}{A} \\
&= \frac{-4ik_x \alpha \exp\{(\alpha + ik_x)a\}}{(-ik_x + \alpha)^2 - (-ik_x - \alpha)^2 \exp(2\alpha a)} \\
&\quad \times \frac{4ik_x \alpha \exp\{(\alpha - ik_x)a\}}{(ik_x + \alpha)^2 - (ik_x - \alpha)^2 \exp(2\alpha a)} \\
\left(\text{分母} \right) &= \{(-ik_x + \alpha)(ik_x + \alpha)\}^2 - \{(-ik_x + \alpha)^4 + (ik_x + \alpha)^2\} \exp(2\alpha a) \\
&\quad + \{(ik_x + \alpha)(ik_x - \alpha)\}^2 \exp(4\alpha a) \\
&= (k_x^2 + \alpha^2)^2 - \{(-k_x^2 - 2ik_x \alpha + \alpha^2)^2 \\
&\quad + (-k_x^2 + 2ik_x \alpha + \alpha^2)^2\} \exp(2\alpha a) + (k_x^2 \\
&\quad + \alpha^2)^2 \exp(4\alpha a) \\
&= (k_x^2 + \alpha^2)^2 - (2k_x^4 - 8k_x^2 \alpha^2 + 2\alpha^4 - 4k_x^2 \alpha^2) \exp(2\alpha a) + (k_x^2 \\
&\quad + \alpha^2)^2 \exp(4\alpha a)
\end{aligned}$$

$$= (k_x^2 + \alpha^2)^2 - 2(k_x^4 - 6k_x^2\alpha^2 + \alpha^4) \exp(2\alpha a) + (k_x^2 + \alpha^2)^2 \exp(4\alpha a)$$

$$\begin{aligned} & \therefore \left| \frac{C}{A} \right|^2 \\ &= \left\{ \frac{(k_x^2 + \alpha^2)^2 - 2(k_x^4 - 6k_x^2\alpha^2 + \alpha^4) \exp(2\alpha a) + (k_x^2 + \alpha^2)^2 \exp(4\alpha a)}{16k_x^2\alpha^2 \exp(2\alpha a)} \right\}^{-1} \\ &= \left\{ \frac{(k_x^2 + \alpha^2)^2 \exp(-2\alpha a) - 2(k_x^4 - 6k_x^2\alpha^2 + \alpha^4) + (k_x^2 + \alpha^2)^2 \exp(2\alpha a)}{16k_x^2\alpha^2} \right\}^{-1} \\ &= \left[\frac{16k_x^2\alpha^2 + (k_x^2 + \alpha^2)^2 \{\exp(2\alpha a) + \exp(-2\alpha a)\} - 2(k_x^4 + 2k_x^2\alpha^2 + \alpha^4)}{16k_x^2\alpha^2} \right]^{-1} \\ &= \left[1 + \frac{(k_x^2 + \alpha^2)^2 \{\exp(2\alpha a) + \exp(-2\alpha a) - 2\}}{16k_x^2\alpha^2} \right]^{-1} \\ &= \left[1 + \frac{(k_x^2 + \alpha^2)^2 \left\{ \frac{\exp(\alpha a) + \exp(-\alpha a)}{2} \right\}^2}{4k_x^2\alpha^2} \right]^{-1} \\ &= \left\{ 1 + \frac{(k_x^2 + \alpha^2)^2 \sinh^2 \alpha a}{4k_x^2\alpha^2} \right\}^{-1} \\ &= \left[1 + \frac{\left\{ \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right\}^2 \sinh^2 \alpha a}{4 \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \right]^{-1} \\ &= \left\{ 1 + \frac{4m^2 V_0^2 \sinh^2 \alpha a}{16m^2 E(V_0 - E)} \right\}^{-1} \\ &= \left\{ 1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}{4E(V_0 - E)} \right\}^{-1} \end{aligned}$$

古典的には, $0 < E < V_0$ の場合, 透過率は 0 になると思われます. しかし, 上記のように波動力学による計算では, 確かに透過率が存在するのです. この現象も井戸型ポテンシャルの場合と同じようにトンネル効果の現れです. 波動関数の存在により, 量子はポテンシャルの壁を透過するのです. また, 予想されるように, 反射率と透過率を足し合わせた値は 1 になります.

$$\begin{aligned}
 \left| \frac{B}{A} \right|^2 + \left| \frac{C}{A} \right|^2 &= \frac{1}{1 + \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}} + \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}{4E(V_0 - E)}} \\
 &= \frac{1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}{4E(V_0 - E)} + 1 + \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}}{\left\{ 1 + \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2 \alpha a} \right\} \left\{ 1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}{4E(V_0 - E)} \right\}} \\
 &= \frac{2 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}{4E(V_0 - E)} + \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}}{2 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}{4E(V_0 - E)} + \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}} \\
 &= 1
 \end{aligned}$$

Q11-3 $E > V_0$ の場合のシュレディンガー方程式とその解

この Section では, $E > V_0$ の場合を考えます. $x < 0$, $x > a$ の領域においてはポテンシャルが 0 なので, シュレディンガー方程式は,

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

となります。これは、前 Section の場合と全く同じ方程式です。したがって、

$$k_x^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$$

とおくと、解は次のようになります。 $x < 0$ の領域において、

$$\phi(x) = A \exp(ik_x x) + B \exp(-ik_x x) \quad (x < 0)$$

となります。解の第 1 項は入射波を表し、解の第 2 項は反射波を表しています。 $x > a$ の解は、

$$\phi(x) = C \exp(ik_x x) \quad (x > a)$$

となります。次に、 $0 < x < a$ の領域を考えましょう。シュレディンガー方程式は、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0\right) \phi(x) = E \phi(x)$$

となります。これを少し変形します。

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \phi(x)$$

ここで、 $E > V_0$ の場合を考えているので、

$$\beta^2 \equiv \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

とおくと、方程式は、

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = -\beta^2 \phi(x)$$

となります。この方程式の一般解は、

$$\phi(x) = F \exp(i\beta x) + G \exp(-i\beta x) \quad (0 < x < a)$$

となります。

ここで、 $x=0$ と $x=a$ において、 ϕ と ϕ' が連続であるという境界条件を満たさなければなりません。境界条件を立てる前に、 ϕ' を求めておきます。

$$\phi'(x) = ik_x A \exp(ik_x x) - ik_x B \exp(-ik_x x) \quad (x < 0)$$

$$\phi'(x) = ik_x C \exp(ik_x x) \quad (x > a)$$

$$\phi'(x) = i\beta F \exp(i\beta x) - i\beta G \exp(-i\beta x) \quad (0 < x < a)$$

それでは、境界条件を立てましょう。 $x=0$ で ϕ が連続であるという条件は、

$$A + B = F + G \quad (7)$$

となります。 $x=0$ で ϕ' が連続であるという条件は、

$$k_x(A - B) = \beta(F - G) \quad (8)$$

となります。 $x=a$ で ϕ が連続であるという条件は、

$$C\exp(ik_x a) = F\exp(i\beta a) + G\exp(-i\beta a) \quad (9)$$

となります。 $x=a$ で φ' が連続であるという条件は、

$$k_x C\exp(ik_x a) = \beta F\exp(i\beta a) - \beta G\exp(-i\beta a) \quad (10)$$

となります。未知量が5つあり式が4つなので、未知量の値を求めることはできませんが、 B/A 、 C/A といった係数の比を求めることはできます。以下、計算していきます。(7)× β +(8)より

$$(\beta + k_x)A + (\beta - k_x)B = 2\beta F$$

となります。(7)× β -(8)より

$$(\beta - k_x)A + (\beta + k_x)B = 2\beta G$$

となります。(9)× β +(10)より

$$(\beta + k_x)C\exp(ik_x a) = 2\beta F\exp(i\beta a)$$

となります。(9)× β -(10)より

$$(\beta - k_x)C\exp(ik_x a) = 2\beta G\exp(-i\beta a)$$

となります。上の1番目と2番目の式を、それぞれ3番目と4番目の式に代入すると、次式を得ることができます。

$$(\beta + k_x)C\exp(ik_x a) = \{(\beta + k_x)A + (\beta - k_x)B\}\exp(i\beta a) \quad (11)$$

$$(\beta - k_x)C \exp(ik_x a) = \{(\beta - k_x)A + (\beta + k_x)B\} \exp(-i\beta a) \quad (12)$$

ここで、(11)÷(12)をつくり、計算していきます。

$$\frac{\beta + k_x}{\beta - k_x} = \frac{\{(\beta + k_x)A + (\beta - k_x)B\} \exp(2i\beta a)}{(\beta - k_x)A + (\beta + k_x)B}$$

$$\therefore \frac{\beta + k_x}{\beta - k_x} = \frac{\left\{(\beta + k_x) + (\beta - k_x) \frac{B}{A}\right\} \exp(2i\beta a)}{(\beta - k_x) + (\beta + k_x) \frac{B}{A}}$$

$$\begin{aligned} \therefore (\beta + k_x) \left\{(\beta - k_x) + (\beta + k_x) \frac{B}{A}\right\} \\ = (\beta - k_x) \left\{(\beta + k_x) + (\beta - k_x) \frac{B}{A}\right\} \exp(2i\beta a) \end{aligned}$$

$$\therefore (\beta^2 - k_x^2) + (\beta + k_x)^2 \frac{B}{A} = (\beta^2 - k_x^2) \exp(2i\beta a) + (\beta - k_x)^2 \frac{B}{A} \exp(2i\beta a)$$

$$\therefore \{(\beta + k_x)^2 - (\beta - k_x)^2 \exp(2i\beta a)\} \frac{B}{A} = (\beta^2 - k_x^2) \{\exp(2i\beta a) - 1\}$$

$$\therefore \frac{B}{A} = \frac{(\beta^2 - k_x^2) \{\exp(2i\beta a) - 1\}}{(\beta + k_x)^2 - (\beta - k_x)^2 \exp(2i\beta a)}$$

$$\therefore \frac{B}{A} = \frac{(k_x^2 - \beta^2) \{1 - \exp(2i\beta a)\}}{(k_x + \beta)^2 - (k_x - \beta)^2 \exp(2i\beta a)}$$

最後の式は、反射波の複素振幅 B と入射波の複素振幅 A の比を表しています。また、(11)式の両辺を A で割って計算していきます。

$$(\beta + k_x) \frac{C}{A} \exp(ik_x a) = \left\{(\beta + k_x) + (\beta - k_x) \frac{B}{A}\right\} \exp(i\beta a)$$

$$\begin{aligned}
\therefore \frac{C}{A} &= \left(1 + \frac{\beta - k_x}{\beta + k_x} \cdot \frac{B}{A}\right) \exp\{i(\beta - k_x)a\} \\
&= \left[1 + \frac{\beta - k_x}{\beta + k_x} \cdot \frac{(k_x^2 - \beta^2)\{1 - \exp(2i\beta a)\}}{(k_x + \beta)^2 - (k_x - \beta)^2 \exp(2i\beta a)}\right] \exp\{i(\beta - k_x)a\} \\
&= \frac{(\beta + k_x)\{(k_x + \beta)^2 - (k_x - \beta)^2 \exp(2i\beta a)\} + (\beta - k_x)(k_x^2 - \beta^2)\{1 - \exp(2i\beta a)\}}{(\beta + k_x)\{(k_x + \beta)^2 - (k_x - \beta)^2 \exp(2i\beta a)\}} \\
&\quad \times \exp\{i(\beta - k_x)a\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\text{分子}) &= (k_x + \beta)^3 - (k_x^2 - \beta^2)(k_x - \beta) \exp(2i\beta a) + (\beta - k_x)(k_x^2 - \beta^2) \\
&\quad - (\beta - k_x)(k_x^2 - \beta^2) \exp(2i\beta a)
\end{aligned}$$

$$= (k_x + \beta)^3 + (\beta - k_x)(k_x^2 - \beta^2)$$

$$= k_x^3 + 3k_x^2\beta + 3k_x\beta^2 + \beta^3 + k_x^2\beta - \beta^3 - k_x^3 + k_x\beta^2$$

$$= 4k_x^2\beta + 4k_x\beta^2$$

$$= 4k_x\beta(k_x + \beta)$$

$$\therefore \frac{C}{A} = \frac{4k_x\beta(k_x + \beta)}{(\beta + k_x)\{(k_x + \beta)^2 - (k_x - \beta)^2 \exp(2i\beta a)\}} \exp\{i(\beta - k_x)a\}$$

$$= \frac{4k_x\beta \exp\{i(\beta - k_x)a\}}{(k_x + \beta)^2 - (k_x - \beta)^2 \exp(2i\beta a)}$$

最後の式は透過波の複素振幅Cと入射波の複素振幅Aの比を表しています。

それでは、反射率と透過率を計算してみましょう。まず、反射率を求めます。

$$|\frac{B}{A}|^2 = (\frac{B}{A})^* \frac{B}{A}$$

$$= \frac{(k_x^2 - \beta^2)\{1 - \exp(-2i\beta a)\}}{(k_x + \beta)^2 - (k_x - \beta)^2 \exp(-2i\beta a)} \times \frac{(k_x^2 - \beta^2)\{1 - \exp(2i\beta a)\}}{(k_x + \beta)^2 - (k_x - \beta)^2 \exp(2i\beta a)}$$

$$\left(\frac{\text{分子}}{\text{分母}}\right) = (k_x + \beta)^4 - (k_x^2 - \beta^2)^2 \{ \exp(2i\beta a) + \exp(-2i\beta a) \} + (k_x - \beta)^4$$

$$= (k_x^2 + 2k_x\beta + \beta^2)^2 + (k_x^2 - 2k_x\beta + \beta^2)^2 - (k_x^2 - \beta^2)^2 \{ \exp(2i\beta a) + \exp(-2i\beta a) \}$$

$$= (2k_x^4 + 8k_x^2\beta^2 + 2\beta^4 + 4k_x^2\beta^2) - (k_x^2 - \beta^2)^2 \{ \exp(2i\beta a) + \exp(-2i\beta a) \}$$

$$= 2(k_x^4 + 6k_x^2\beta^2 + \beta^4) - (k_x^2 - \beta^2)^2 \{ \exp(2i\beta a) + \exp(-2i\beta a) \}$$

$$\therefore |\frac{B}{A}|^2 = \left[\frac{2(k_x^4 + 6k_x^2\beta^2 + \beta^4) - (k_x^2 - \beta^2)^2 \{ \exp(2i\beta a) + \exp(-2i\beta a) \}}{(k_x^2 - \beta^2)^2 \{ 1 - \exp(2i\beta a) \} \{ 1 - \exp(-2i\beta a) \}} \right]^{-1}$$

$$= \left[\frac{(k_x^2 - \beta^2)^2 \{ 2 - \exp(2i\beta a) - \exp(-2i\beta a) \} - 2(k_x^2 - \beta^2)^2 + 2(k_x^4 + 6k_x^2\beta^2 + \beta^4)}{(k_x^2 - \beta^2)^2 \{ 2 - \exp(2i\beta a) - \exp(-2i\beta a) \}} \right]^{-1}$$

$$= \left[1 - \frac{16k_x^2\beta^2}{(k_x^2 - \beta^2)^2 \{ \exp(i\beta a) - \exp(-i\beta a) \}^2} \right]^{-1}$$

$$= \left[1 + \frac{4k_x^2\beta^2}{(k_x^2 - \beta^2)^2 \left\{ \frac{\exp(i\beta a) - \exp(-i\beta a)}{2i} \right\}^2} \right]^{-1}$$

$$= \left\{ 1 + \frac{4k_x^2\beta^2}{(k_x^2 - \beta^2)^2 \sin^2 \beta a} \right\}^{-1}$$

$$\begin{aligned}
&= \left[1 + \frac{4 \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}{\left\{ \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \right\}^2 \sin^2 \beta a} \right]^{-1} \\
&= \left\{ 1 + \frac{16m^2 E(E - V_0)}{4m^2 V_0^2 \sin^2 \beta a} \right\}^{-1} \\
&= \left\{ 1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 \beta a} \right\}^{-1}
\end{aligned}$$

次に透過率を計算します．

$$\begin{aligned}
\left| \frac{C}{A} \right|^2 &= \left(\frac{C}{A} \right)^* \frac{C}{A} \\
&= \frac{4k_x \beta \exp\{-i(\beta - k_x)a\}}{(k_x + \beta)^2 - (k_x - \beta)^2 \exp(-2i\beta a)} \times \frac{4k_x \beta \exp\{i(\beta - k_x)a\}}{(k_x + \beta)^2 - (k_x - \beta)^2 \exp(2i\beta a)} \\
(\text{分母}) &= (k_x + \beta)^4 - (k_x^2 - \beta^2)^2 \{\exp(2i\beta a) + \exp(-2i\beta a)\} + (k_x - \beta)^4 \\
&= (k_x^2 + 2k_x \beta + \beta^2)^2 + (k_x^2 - 2k_x \beta + \beta^2)^2 - (k_x^2 - \beta^2)^2 \{\exp(2i\beta a) + \exp(-2i\beta a)\} \\
&= (2k_x^4 + 8k_x^2 \beta^2 + 2\beta^4 + 4k_x^2 \beta^2) - (k_x^2 - \beta^2)^2 \{\exp(2i\beta a) + \exp(-2i\beta a)\} \\
&= (2k_x^4 + 12k_x^2 \beta^2 + 2\beta^4) - (k_x^2 - \beta^2)^2 \{\exp(2i\beta a) + \exp(-2i\beta a)\} \\
\therefore \left| \frac{C}{A} \right|^2 &= \left\{ \frac{(2k_x^4 + 12k_x^2 \beta^2 + 2\beta^4) - (k_x^2 - \beta^2)^2 \{\exp(2i\beta a) + \exp(-2i\beta a)\}}{16k_x^2 \beta^2} \right\}^{-1}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left\{ \frac{16k_x^2\beta^2 + 2(k_x^4 - 2k_x^2\beta^2 + \beta^4) - (k_x^2 - \beta^2)^2\{\exp(2i\beta a) + \exp(-2i\beta a)\}}{16k_x^2\beta^2} \right\}^{-1} \\
&= \left[1 - \frac{(k_x^2 - \beta^2)^2\{\exp(2i\beta a) + \exp(-2i\beta a) - 2\}}{16k_x^2\beta^2} \right]^{-1} \\
&= \left[1 - \frac{(k_x^2 - \beta^2)^2\{\exp(i\beta a) - \exp(-i\beta a)\}^2}{16k_x^2\beta^2} \right]^{-1} \\
&= \left[1 + \frac{(k_x^2 - \beta^2)^2\left\{\frac{\exp(i\beta a) - \exp(-i\beta a)}{2i}\right\}^2}{4k_x^2\beta^2} \right]^{-1} \\
&= \left\{ 1 + \frac{(k_x^2 - \beta^2)^2\sin^2\beta a}{4k_x^2\beta^2} \right\}^{-1} \\
&= \left[1 + \frac{\left\{\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\right\}^2\sin^2\beta a}{4\frac{2mE}{\hbar^2}\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \right]^{-1} \\
&= \left\{ 1 + \frac{4m^2V_0^2\sin^2\beta a}{16m^2E(E - V_0)} \right\}^{-1} \\
&= \left\{ 1 + \frac{V_0^2\sin^2\beta a}{4E(E - V_0)} \right\}^{-1}
\end{aligned}$$

予想されるように、反射率と透過率を足し合わせた値は1になります。

$$\left| \frac{B}{A} \right|^2 + \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2\sin^2\beta a}} + \frac{1}{1 + \frac{V_0^2\sin^2\beta a}{4E(E - V_0)}}$$

$$\begin{aligned}
& 1 + \frac{V_0^2 \sin^2 \beta a}{4E(E - V_0)} + 1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 \beta a} \\
= & \frac{\left(1 + \frac{V_0^2 \sin^2 \beta a}{4E(E - V_0)}\right) + \left(1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 \beta a}\right)}{\left(1 + \frac{V_0^2 \sin^2 \beta a}{4E(E - V_0)}\right) \left(1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 \beta a}\right)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& 2 + \frac{V_0^2 \sin^2 \beta a}{4E(E - V_0)} + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 \beta a} \\
= & \frac{2 + \frac{V_0^2 \sin^2 \beta a}{4E(E - V_0)} + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 \beta a}}{2 + \frac{V_0^2 \sin^2 \beta a}{4E(E - V_0)} + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 \beta a}}
\end{aligned}$$

$$= 1$$

Q12 束縛状態 2 :例 3 (調和振動子)

Q12-1 1次元調和振動子のシュレディンガー方程式

古典的には調和振動子とは、ばね振り子や単振り子のような系でした。そして、全ての任意の振動はフーリエ解析により、調和振動子に分解できるという強力な性質をもっています。その調和振動子を量子力学的に取り扱ってみましょう。簡単のため、空間は1次元にします。時間に依存しないシュレディンガー方程式を立ててみます。もともになる方程式は、

$$\hat{H}\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x}) \quad (q06 - 2)$$

ですが、一般に、ハミルトニアンは、

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\vec{x})$$

と与えられています。1次元の系を考えていますので、x方向のみが関係してきます。また、古典論における1次元調和振動子のポテンシャルは、

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

と表すことができます。ただし、m は質量、 ω は角振動数です。(振動の中心を原点にとっています。) このポテンシャルは量子化しても、同じ式で表せます。故に、シュレディンガー方程式は、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \phi(x) = E \phi(x)$$

となります。この方程式を解きやすくするために、

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \xi)$$

$$\lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (E = \frac{\hbar\omega\lambda}{2})$$

$$f(\xi) = \phi(x)$$

という変数の変換をします．このとき，

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{d\xi}{dx} \frac{df}{d\xi}$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{df}{d\xi}$$

$$\therefore \frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)$$

$$= \frac{d\xi}{dx} \frac{d}{d\xi} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{df}{d\xi} \right)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{d\xi} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{df}{d\xi} \right)$$

$$= \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2f}{d\xi^2}$$

となります．新しい変数でシュレディンガー方程式を書きなおすと，次のようになります．

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{\hbar}{m \omega} \xi^2\right) f(\xi) = \frac{\hbar \omega \lambda}{2} f(\xi)$$

$$\therefore \left(-\frac{\hbar \omega}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{\hbar \omega}{2} \xi^2\right) f(\xi) = \frac{\hbar \omega \lambda}{2} f(\xi)$$

$$\therefore \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right) f(\xi) = \lambda f(\xi) \quad (1)$$

(1)式は常微分方程式の固有方程式です。次の Section 以降で解いていきましょう。

Q12-2 エルミート多項式による解法

この Section では、(1)式を解析的に解くことを試みます。 $\xi \rightarrow \pm\infty$ の極限を考えると、 $\xi > \lambda$ なので、方程式は、

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} \cong \xi^2 f$$

と、近似されます。この式の漸近解は、

$$f(\xi) \cong A \exp\left(\pm \frac{\xi^2}{2}\right)$$

です。(ただし、A は定数です。) ここで、指数関数の肩で正の符号をとると、 $\xi \rightarrow \pm\infty$ で f は発散してしまい、量子の存在確率が無限大になってしまいます。そこで、指数関数の肩の符号は負であると決定されます。

この漸近解をもとに、方程式の一般解を求めましょう。そのために、 ξ の関数 $u(\xi)$ を導入して、

$$f(\xi) = u(\xi)\exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

と、置きます。ここで、 f を ξ で微分していくと、次のようになります。

$$\frac{df}{d\xi} = \frac{du}{d\xi}\exp(-\frac{\xi^2}{2}) - u\xi\exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

$$\therefore \frac{d^2f}{d\xi^2} = \frac{d^2u}{d\xi^2}\exp(-\frac{\xi^2}{2}) - 2\frac{du}{d\xi}\xi\exp(-\frac{\xi^2}{2}) - u\exp(-\frac{\xi^2}{2}) + u\xi^2\exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

このとき、(1)式は、

$$\begin{aligned} -\left\{\frac{d^2u}{d\xi^2}\exp(-\frac{\xi^2}{2}) - 2\frac{du}{d\xi}\xi\exp(-\frac{\xi^2}{2}) - u\exp(-\frac{\xi^2}{2}) + u\xi^2\exp(-\frac{\xi^2}{2})\right\} \\ + \xi^2 u \exp(-\frac{\xi^2}{2}) = \lambda u \exp(-\frac{\xi^2}{2}) \end{aligned}$$

$$\therefore \frac{d^2u}{d\xi^2}\exp(-\frac{\xi^2}{2}) - 2\frac{du}{d\xi}\xi\exp(-\frac{\xi^2}{2}) - u\exp(-\frac{\xi^2}{2}) + \lambda u \exp(-\frac{\xi^2}{2}) = 0$$

$$\therefore \frac{d^2u}{d\xi^2} - 2\xi\frac{du}{d\xi} + (\lambda - 1)u = 0 \quad (2)$$

となります。(2)式を解くために、 u は ξ のべき級数で展開できると仮定します。すなわち、

$$u = c_0 + c_1\xi + c_2\xi^2 + \cdots = \sum_{s=0}^{\infty} c_s \xi^s$$

とします。(c_s は展開係数です。) ここで、 u を ξ で微分していきます。

$$\frac{du}{d\xi} = c_1 + 2c_2\xi + 3c_3\xi^2 + \cdots = \sum_{s=0}^{\infty} s c_s \xi^{s-1}$$

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} = 2c_2 + 2 \cdot 3c_3\xi + \cdots = \sum_{s=0}^{\infty} (s+1)(s+2)c_{s+2}\xi^s$$

これらの式を，(2)式に代入して計算します．

$$\sum_{s=0}^{\infty} (s+1)(s+2)c_{s+2}\xi^s - 2\xi \sum_{s=0}^{\infty} s c_s \xi^{s-1} + (\lambda - 1) \sum_{s=0}^{\infty} c_s \xi^s = 0$$

$$\therefore \sum_{s=0}^{\infty} (s+1)(s+2)c_{s+2}\xi^s - 2 \sum_{s=0}^{\infty} s c_s \xi^s + (\lambda - 1) \sum_{s=0}^{\infty} c_s \xi^s = 0$$

$$\therefore \sum_{s=0}^{\infty} (s+1)(s+2)c_{s+2}\xi^s - \sum_{s=0}^{\infty} (2s+1-\lambda)c_s \xi^s = 0$$

最後の式が成立するためには， ξ^s の係数は全て 0 にならなければなりません．したがって，

$$(s+1)(s+2)c_{s+2} = (2s+1-\lambda)c_s$$

が成り立ちます．ここで，1次元調和振動子のポテンシャルが偶関数であることに注意しましょう．このとき，例2（井戸型ポテンシャル）のChapterでのパリティについての議論により，波動関数 $\varphi(x)$ は偶関数または奇関数であることがわかります．すなわち， $f(\xi)$ が偶関数または奇関数なので，結局 $u(\xi)$ が偶関数または奇関数ということになります．よって，

u は ξ について、偶べきのみか、または奇べきのみの級数になります。また、この級数は ξ についての無限級数ではなく、有限な級数にならないけません。何故ならば、古典的な 1 次元調和振動子は原点付近で振動を続けますが、量子力学的な系においても、波動関数は原点付近に局在することが考えられるからです。つまり、 $x \rightarrow \pm\infty$ ($\xi \rightarrow \pm\infty$) において、 φ (つまり f , すなわち u) が 0 にならないけません。繰り返しますが、 u は偶べきのみ、または奇べきのみの級数です。その級数が有限であるためには、上式より、

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

の関係が満たされていることが、条件になります。このとき、級数の途中から、

$$c_{s+2}, c_{s+4}, c_{s+6}, \dots$$

は、全て 0 になります。

ここで、エネルギー固有値 E_n を求めます。

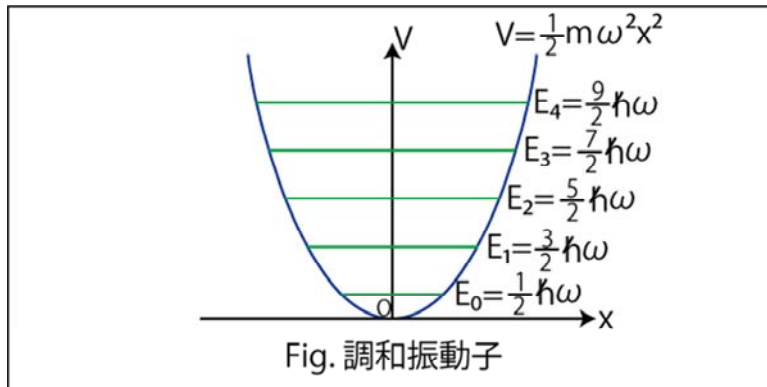
$$E = \frac{\hbar\omega\lambda}{2}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}(2n + 1)$$

$$\therefore E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

ポテンシャルの中でのエネルギー固有値を図で示しておきます。エネルギー

一固有値は離散的な値をもつことが理解できます。また、量子は束縛状態にあることも確認できます。



量子数 n が増えるに従って、エネルギーは増大していきます。 $n=0$ の状態を基底状態、 n が 2 以上の状態を励起状態といいます。 $n=0$ のとき、エネルギーが最小値をとり、絶対零度の状態になります。古典的にはエネルギーは 0 になるはずですが、この場合も量子は零点振動をしています。量子力学では不確定性原理のため、量子は静止することができないのです。

次に、(2)式、

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} - 2\xi \frac{du}{d\xi} + (\lambda - 1)u = 0 \quad (2)$$

の解を求めましょう。この式に、

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

を代入すると、

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} - 2\xi \frac{du}{d\xi} + 2nu = 0$$

となります。この方程式と同形の,

$$\frac{d^2H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0 \quad (3)$$

の微分方程式を満たす ξ の n 次の多項式 $H_n(\xi)$ をエルミート多項式といいます。 u は H_n で表されます。エルミート多項式は母関数,

$$S(\xi, t) = \exp(-t^2 + 2\xi t)$$

を用いて定義することができます。その方法は、母関数を展開して、

$$S(\xi, t) = \exp(-t^2 + 2\xi t)$$

$$= 1 + (-t^2 + 2\xi t) + \frac{1}{2!}(-t^2 + 2\xi t)^2 + \dots$$

$$= 1 + 2\xi t + \frac{1}{2!}(4\xi^2 - 2)t^2 + \dots$$

としておいて、

$$S(\xi, t) = \exp(-t^2 + 2\xi t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} t^n \quad (4)$$

によって、エルミート多項式 $H_n(\xi)$ を定義するのです。このとき、具体的には、

$$H_0(\xi) = 1$$

$$H_1(\xi) = 2\xi$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

のように, なります. それでは, この母関数を用いた定義, (4)式による $H_n(\xi)$ が確かに, (3)式の微分方程式の解になっていることを示しておきます.

(4)式を ξ で偏微分すると, 左辺は,

$$\begin{aligned} 2t \cdot \exp(-t^2 + 2\xi t) &= 2t \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} t^n \\ &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} t^{n+1} \end{aligned}$$

となります. 右辺も ξ で偏微分します.

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(\xi)}{n!} t^n$$

故に,

$$2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} t^{n+1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(\xi)}{n!} t^n$$

となります. この式の両辺の t^n の係数を比較して,

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

すなわち,

$$H'_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi) \quad (5)$$

の関係式を得ることができます。また, (4)式を, t で偏微分します。左辺は,

$$(-2t + 2\xi) \exp(-t^2 + 2\xi t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2t + 2\xi)}{n!} H_n(\xi) t^n$$

となります。このとき, 右辺も t で偏微分すると,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{(n-1)!} t^{n-1}$$

となります。したがって,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{(n-1)!} t^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2t + 2\xi)}{n!} H_n(\xi) t^n$$

という等式が成立します。ここで, t^n の係数を比較して,

$$\frac{H_{n+1}(\xi)}{n!} = \frac{-2H_{n-1}(\xi)}{(n-1)!} + \frac{2\xi H_n(\xi)}{n!}$$

となります。よって,

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) \quad (6)$$

の関係式が成立します．この式を ξ で微分します．

$$H'_{n+1}(\xi) = 2H_n(\xi) + 2\xi H'_n(\xi) - 2nH'_{n-1}(\xi)$$

ここで，前出した関係式(5)式，

$$H'_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi) \quad (5)$$

を使い，計算していきます．

$$2(n+1)H_n(\xi) = 2H_n(\xi) + 2\xi H'_n(\xi) - H''_n(\xi)$$

$$\therefore H''_n(\xi) - 2\xi H'_n(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0$$

最後の式はエルミート多項式の微分方程式です．したがって，母関数(4)式により定義されたエルミート多項式 $H_n(\xi)$ が，微分方程式(3)式を満たすことが確認されました．

これまでの議論により，1次元調和振動子の n 番目の固有関数は，

$$H_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

に比例することが理解されますが，この関数を規格化しましょう．そのために，次の積分を考えます．

$$G(s, t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} S(\xi, s)S(\xi, t) \exp(-\xi^2) d\xi$$

ここで、この積分に母関数 S を表す(4)式,

$$S(\xi, t) = \exp(-t^2 + 2\xi t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} t^n \quad (4)$$

の $H_n(\xi)$ を含む展開式を代入します.

$$\begin{aligned} G(s, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_m(\xi)}{m!} s^m \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} t^n \exp(-\xi^2) d\xi \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^m t^n}{m! n!} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi) H_n(\xi) \exp(-\xi^2) d\xi \end{aligned}$$

一方、積分に(4)式の指数関数を使った母関数を代入して計算します.

$$\begin{aligned} G(s, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-s^2 + 2\xi s) \exp(-t^2 + 2\xi t) \exp(-\xi^2) d\xi \\ &= \exp(2st) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-(\xi^2 + s^2 + t^2 + 2st - 2\xi s - 2\xi t)\} d\xi \\ &= \exp(2st) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-(\xi - s - t)^2\} d\xi \end{aligned}$$

ここで,

$$\xi' \equiv \xi - s - t$$

と置き換えます．

$$G(s, t) = \exp(2st) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi'^2) d\xi'$$

数学公式,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}$$

より,

$$G(s, t) = \sqrt{\pi} \exp(2st)$$

となります．さらに，指数関数を展開して，

$$G(s, t) = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n s^n t^n}{n!}$$

となります．以上， G に対する 2 つの表式をイコールで結びます．

$$\sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^m t^n}{m! n!} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi) H_n(\xi) \exp(-\xi^2) d\xi = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n s^n t^n}{n!}$$

したがって， $m \neq n$ の場合は，

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi) H_n(\xi) \exp(-\xi^2) d\xi = 0$$

となり, $m=n$ の場合は,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n t^n}{(n!)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \{H_n(\xi)\}^2 \exp(-\xi^2) d\xi = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n s^n t^n}{n!}$$

$$\therefore \frac{s^n t^n}{(n!)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \{H_n(\xi)\}^2 \exp(-\xi^2) d\xi = \sqrt{\pi} \frac{2^n s^n t^n}{n!}$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} \{H_n(\xi)\}^2 \exp(-\xi^2) d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi}$$

となります. まとめて表すと,

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi) H_n(\xi) \exp(-\xi^2) d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}$$

が成立します. この式を使って, 1次元調和振動子の固有関数,

$$\phi_n(x) = f_n(\xi) = A_n H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

を規格化します. (ただし,

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \xi$$

の関係があります.) 規格化条件,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_n(x)|^2 dx = 1$$

より，規格化定数 A_n を次のように決定します．

$$A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \{H_n(\xi)\}^2 \exp(-\xi^2) \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} d\xi = 1$$

$$\therefore A_n^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} 2^n n! \sqrt{\pi} = 1$$

$$\therefore A_n^2 = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\therefore A_n = \frac{1}{(2^n n!)^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

したがって，固有関数 ϕ は次式で表されます．

$$\phi_n(x) = \frac{1}{(2^n n!)^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

$$\therefore \phi_n(x) = \frac{1}{(2^n n!)^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$$

この固有関数 ϕ は規格直交系を形成します．

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m(x) \phi_n(x) dx = \delta_{mn}$$

Q12-3 演算子法による解法

この Section では、前 Section のエルミート多項式の関係式をもとに、演算子法と呼ばれる方法で、1次元調和振動子の問題を取り扱ってみます。まず、

$$\frac{d}{d\xi} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = H'_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) - \xi H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \quad (7)$$

の恒等式より、

$$\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = H'_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

となります。ここで、(5)式、

$$H'_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi) \quad (5)$$

を右辺に代入すると、

$$\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = 2nH_{n-1}(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

となります。ここで、

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

$$\frac{d}{d\xi} = \frac{dx}{d\xi} \frac{d}{dx}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx}$$

を代入して計算します.

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = 2n H_{n-1}(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

$$\therefore \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = 2n H_{n-1}(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

$$\begin{aligned} \therefore \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \frac{1}{(2^n n!)^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \\ = 2n \frac{1}{(2^n n!)^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} H_{n-1}(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \frac{1}{(2^n n!)^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \\ = \sqrt{2n} \frac{1}{\{2^{n-1} (n-1)!\}^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} H_{n-1}(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \end{aligned}$$

$$\therefore \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \phi_n(x) = \sqrt{n} \phi_{n-1}(x)$$

$$\therefore \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left\{ x + \frac{i}{m\omega} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \right\} \phi_n(x) = \sqrt{n} \phi_{n-1}(x)$$

$$\therefore \left\{ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \right\} \phi_n(x) = \sqrt{n} \phi_{n-1}(x)$$

ここで, 左辺の中括弧の中の第2項の中にあるのは運動量演算子,

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

です． よって, 新しく演算子,

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}_x$$

を導入すると,

$$\hat{a}\phi_n(x) = \sqrt{n}\phi_{n-1}(x)$$

が成立します．

一方, (7)より,

$$\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)H_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = 2\xi H_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) - H'_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

$$\therefore \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)H_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = \{2\xi H_n(\xi) - H'_n(\xi)\}\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

となります． ここで, エルミート多項式の関係式(6)式,

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) \quad (6)$$

の右辺第 2 項に, 関係式(5)式,

$$H'_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi) \quad (5)$$

を代入します.

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

これを, 先程の式に代入して,

$$(\xi - \frac{d}{d\xi})H_n(\xi)\exp(-\frac{\xi^2}{2}) = H_{n+1}(\xi)\exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

が成立します. ここで,

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

$$\frac{d}{d\xi} = \frac{dx}{d\xi} \frac{d}{dx}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx}$$

を代入して計算します.

$$(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx})H_n(\xi)\exp(-\frac{\xi^2}{2}) = H_{n+1}(\xi)\exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

$$\therefore \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx})H_n(\xi)\exp(-\frac{\xi^2}{2}) = H_{n+1}(\xi)\exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

$$\begin{aligned}\therefore \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \frac{1}{(2^n n!)^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \\ = \frac{1}{(2^n n!)^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} H_{n+1}(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\therefore \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \frac{1}{(2^n n!)^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \\ = \sqrt{2(n+1)} \frac{1}{\{2^{n+1}(n+1)!\}^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} H_{n+1}(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)\end{aligned}$$

$$\therefore \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \phi_n(x) = \sqrt{n+1} \phi_{n+1}(x)$$

$$\therefore \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left\{ x - \frac{i}{m\omega} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \right\} \phi_n(x) = \sqrt{n+1} \phi_{n+1}(x)$$

$$\therefore \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}_x \right) \phi_n(x) = \sqrt{n+1} \phi_{n+1}(x)$$

新しく演算子,

$$\hat{a}^+ \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}_x$$

を導入すると,

$$\hat{a}^+ \phi_n(x) = \sqrt{n+1} \phi_{n+1}(x)$$

が成立します.

新しい演算子の性質を調べていきましょう. 演算子は,

$$\begin{cases} \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}_x \\ \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}_x \end{cases}$$

です。これらを辺々加えて,

$$\hat{a} + \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \hat{x}$$

$$\therefore \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+)$$

と表せます。辺々引くと,

$$\hat{a} - \hat{a}^+ = i \sqrt{\frac{2}{m\omega\hbar}} \hat{p}_x$$

$$\therefore \hat{p}_x = -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^+)$$

と表せます。また,

$$\begin{cases} \hat{a}\phi_n(x) = \sqrt{n}\phi_{n-1}(x) \\ \hat{a}^+\phi_n(x) = \sqrt{n+1}\phi_{n+1}(x) \end{cases}$$

の関係式が成立します。よって,

$$\hat{a}^+\hat{a}\phi_n(x) = \hat{a}^+\sqrt{n}\phi_{n-1}(x)$$

$$\therefore \hat{a}^+ \hat{a} \phi_n(x) = n \phi_n(x)$$

と,

$$\hat{a} \hat{a}^+ \phi_n(x) = \hat{a} \sqrt{n+1} \phi_{n+1}(x)$$

$$\therefore \hat{a} \hat{a}^+ \phi_n(x) = (n+1) \phi_n(x)$$

が成立します。したがって,

$$(\hat{a} \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a}) \phi_n(x) = \phi_n(x)$$

$$\therefore [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$$

の交換関係が成り立ちます。ここで, 個数演算子,

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^+ \hat{a}$$

を定義すると, 先程の式より,

$$\hat{N} \phi_n = n \phi_n$$

の固有方程式が成立します。つまり, 個数演算子の固有値は量子数 n になります。また,

$$\hat{N} \hat{a} \phi_n = \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} \phi_n$$

$$= (\hat{a} \hat{a}^+ - 1) \hat{a} \phi_n$$

$$= (n - 1)\hat{a}\phi_n$$

が成立するので, $\hat{a}\phi_n$ は固有値 $n-1$ をもつ, $\hat{N}$ の固有関数になっています.
 このように, $\hat{a}$ は n の値を1つ下げる演算子なので消滅演算子といいます.
 同様に,

$$\hat{N}\hat{a}^+\phi_n = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\phi_n$$

$$= \hat{a}^+(\hat{a}^+\hat{a} + 1)\phi_n$$

$$= (n + 1)\hat{a}^+\phi_n$$

が成立するので, $\hat{a}^+\phi_n$ は固有値 $n+1$ をもつ, $\hat{N}$ の固有関数になっています.
 このように, $\hat{a}^+$ は n の値を1つ上げる演算子なので生成演算子といいます.

生成消滅演算子を使ってエネルギー固有値を求めましょう. ハミルトニアンは次のようになります.

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \\ &= \frac{1}{2m}\left\{-i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^+)\right\}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\left\{\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^+)\right\}^2 \\ &= -\frac{\hbar\omega}{4}(\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+) + \frac{\hbar\omega}{4}(\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a})\end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} \{(\hat{a}^+ \hat{a} + 1) + \hat{a}^+ \hat{a}\}$$

$$= \hbar\omega(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2})$$

$$= \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2})$$

このハミルトニアンを固有関数 ϕ に作用させます.

$$\hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2})\phi_n(x) = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})\phi_n(x)$$

故に, エネルギー固有値は,

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

となります. この結果は前の Section と同じになっています.

Q13 束縛状態 3 :例 4 (中心力場内の粒子)

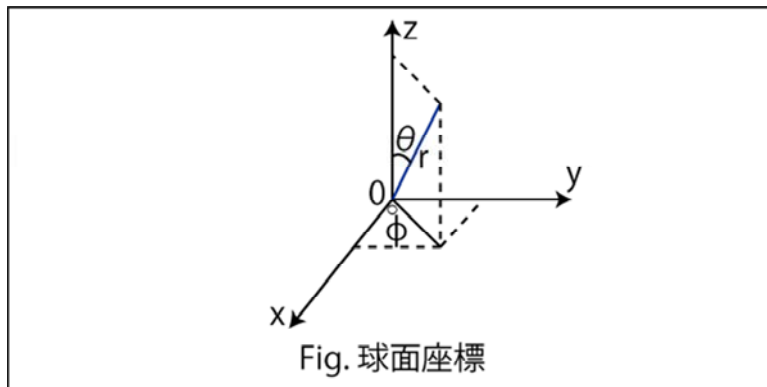
Q13-1 中心力場内の粒子のシュレディンガー方程式

原点からの距離 r にのみ依存する力を中心力といいます。その中心力の場合の中で 1 個だけの粒子が運動している系を取り扱ってみましょう。このような系の具体例としては、水素原子が挙げられます。原子構造と前期量子論の Chapter でボーアの前期量子論を議論し、水素原子を取り扱いましたが、それは不完全なものでした。本 Chapter では完成した波動力学を使い、完全に説明します。

中心力場が生じている場合、そのポテンシャルは原点からの距離 r だけの関数 $V(r)$ と表すことができます。定常状態を考えると、時間に依存しないシュレディンガー方程式は次式のようになります。

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(r) \right\} \phi(\vec{x}) = E \phi(\vec{x})$$

この方程式を解くために、直交座標の代わりに球面座標を用います。



このとき、

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \\ \tan^2 \theta = \frac{x^2 + y^2}{z^2} \\ \tan \phi = \frac{y}{x} \end{cases} \quad (2)$$

が成立します．合成関数の偏微分の公式は，

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{cases}$$

です．ここで，(2)式の第1式を x , y , z で偏微分して計算します．

$$2r \frac{\partial r}{\partial x} = 2x$$

$$\therefore \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin \theta \cos \phi$$

$$2r \frac{\partial r}{\partial y} = 2y$$

$$\therefore \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin \theta \sin \phi$$

$$2r \frac{\partial r}{\partial z} = 2z$$

$$\therefore \frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos \theta$$

(2)式の第2式を x, y, z で偏微分して計算します.

$$2 \tan \theta \frac{1}{\cos^2 \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{2x}{z^2}$$

$$\therefore \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\cos^2 \theta}{\tan \theta} \frac{r \sin \theta \cos \phi}{(r \cos \theta)^2}$$

$$= \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi$$

$$2 \tan \theta \frac{1}{\cos^2 \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{2y}{z^2}$$

$$\therefore \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos^2 \theta}{\tan \theta} \frac{r \sin \theta \sin \phi}{(r \cos \theta)^2}$$

$$= \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi$$

$$2 \tan \theta \frac{1}{\cos^2 \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{(x^2 + y^2)(-2z)}{z^4}$$

$$\therefore \frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\cos^2 \theta}{\tan \theta} \frac{x^2 + y^2}{z^3}$$

$$= -\frac{\cos^3 \theta}{\sin \theta} \frac{(r \sin \theta \cos \phi)^2 + (r \sin \theta \sin \phi)^2}{(r \cos \theta)^3}$$

$$= -\frac{1}{r} \sin \theta$$

(2)式の第3 式を x, y, z で偏微分して計算します.

$$\frac{1}{\cos^2\phi} \frac{\partial\phi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2}$$

$$\therefore \frac{\partial\phi}{\partial x} = -\frac{r \sin \theta \sin \phi}{(r \sin \theta \sin \phi)^2} \cos^2\phi$$

$$= -\frac{\sin \phi}{r \sin \theta}$$

$$\frac{1}{\cos^2\phi} \frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{1}{x}$$

$$\therefore \frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{1}{r \sin \theta \cos \phi} \cos^2\phi$$

$$= \frac{\cos \phi}{r \sin \theta}$$

$$\frac{1}{\cos^2\phi} \frac{\partial\phi}{\partial z} = 0$$

$$\therefore \frac{\partial\phi}{\partial z} = 0$$

故に,

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \end{cases}$$

となります。これらの式からラプラシアンを計算します。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= (\sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}) (\sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} \\ &\quad + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}) \\ &= \sin^2 \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \sin \theta \cos \theta \cos^2 \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \sin \theta \cos \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} \\ &\quad + \frac{\sin \phi \cos \phi}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{\sin \phi \cos \phi}{r} \frac{\partial^2}{\partial r \partial \phi} \\ &\quad + \frac{1}{r} \cos^2 \theta \cos^2 \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \sin \theta \cos \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} \\ &\quad - \frac{1}{r^2} \sin \theta \cos \theta \cos^2 \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \cos^2 \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \\ &\quad + \frac{\cos^2 \theta \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{\cos \theta \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} \\ &\quad + \frac{1}{r} \sin^2 \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \phi} + \frac{\cos \theta \sin^2 \phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ &\quad - \frac{\cos \theta \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} + \frac{\sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ &\quad + \frac{\sin^2 \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \\ &= \sin^2 \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \cos^2 \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\sin^2 \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \end{aligned}$$

$$+ \frac{2}{r} \sin \theta \cos \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} - \frac{2 \cos \theta \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} \\ - \frac{2}{r} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \phi}$$

$$+ \frac{1}{r} (\cos^2 \theta \cos^2 \phi + \sin^2 \phi) \frac{\partial}{\partial r} \\ + \frac{\cos \theta}{r^2} \left(-2 \sin \theta \cos^2 \phi + \frac{\sin^2 \phi}{\sin \theta} \right) \frac{\partial}{\partial \theta} \\ + \frac{\sin \phi \cos \phi}{r^2} \left(1 + \frac{1 + \cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} \right) \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = (\sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}) (\sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} \\ + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi})$$

$$= \sin^2 \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \sin \theta \cos \theta \sin^2 \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \sin \theta \cos \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} \\ - \frac{\sin \phi \cos \phi}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\sin \phi \cos \phi}{r} \frac{\partial^2}{\partial r \partial \phi}$$

$$+ \frac{1}{r} \cos^2 \theta \sin^2 \phi \frac{\partial}{\partial r} \\ + \frac{1}{r} \sin \theta \cos \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} - \frac{1}{r^2} \sin \theta \cos \theta \sin^2 \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \\ + \frac{1}{r^2} \cos^2 \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{\cos^2 \theta \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ + \frac{\cos \theta \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi}$$

$$+ \frac{1}{r} \cos^2 \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \phi} + \frac{\cos \theta \cos^2 \phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ + \frac{\cos \theta \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} - \frac{\sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ + \frac{\cos^2 \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

$$\begin{aligned}
&= \sin^2 \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \cos^2 \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos^2 \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \\
&\quad + \frac{2}{r} \sin \theta \cos \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} + \frac{2 \cos \theta \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} \\
&\quad \quad + \frac{2}{r} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \phi} \\
&\quad + \frac{1}{r} (\cos^2 \theta \sin^2 \phi + \cos^2 \phi) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta}{r^2} (-2 \sin \theta \sin^2 \phi + \frac{\cos^2 \phi}{\sin \theta}) \frac{\partial}{\partial \theta} \\
&\quad \quad - \frac{\sin \phi \cos \phi}{r^2} (1 + \frac{1 + \cos^2 \theta}{\sin^2 \theta}) \frac{\partial}{\partial \phi} \\
\\
&\frac{\partial^2}{\partial z^2} = (\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) (\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) \\
&= \cos^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \sin \theta \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \sin \theta \cos \theta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} \\
&\quad + \frac{1}{r} \sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \cos \theta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} + \frac{1}{r^2} \sin \theta \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \sin^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \\
&= \cos^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \sin^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r} \sin \theta \cos \theta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} + \frac{1}{r} \sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial r} \\
&\quad \quad + \frac{2}{r^2} \sin \theta \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \\
\\
&\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \sin^2 \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \cos^2 \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\sin^2 \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \\
&\quad + \frac{2}{r} \sin \theta \cos \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} - \frac{2 \cos \theta \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} \\
&\quad \quad - \frac{2}{r} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \phi}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{r} (\cos^2 \theta \cos^2 \phi + \sin^2 \phi) \frac{\partial}{\partial r} \\
& \quad + \frac{\cos \theta}{r^2} \left(-2 \sin \theta \cos^2 \phi + \frac{\sin^2 \phi}{\sin \theta} \right) \frac{\partial}{\partial \theta} \\
& \quad + \frac{\sin \phi \cos \phi}{r^2} \left(1 + \frac{1 + \cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \\
& + \sin^2 \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \cos^2 \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos^2 \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \\
& + \frac{2}{r} \sin \theta \cos \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} + \frac{2 \cos \theta \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} \\
& \quad + \frac{2}{r} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \phi} \\
& + \frac{1}{r} (\cos^2 \theta \sin^2 \phi + \cos^2 \phi) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta}{r^2} \left(-2 \sin \theta \sin^2 \phi + \frac{\cos^2 \phi}{\sin \theta} \right) \frac{\partial}{\partial \theta} \\
& \quad - \frac{\sin \phi \cos \phi}{r^2} \left(1 + \frac{1 + \cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \\
& + \cos^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \sin^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r} \sin \theta \cos \theta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} + \frac{1}{r} \sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial r} \\
& \quad + \frac{2}{r^2} \sin \theta \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \\
& = \{ \sin^2 \theta (\sin^2 \phi + \cos^2 \phi) + \cos^2 \theta \} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \{ \cos^2 \theta (\sin^2 \phi + \cos^2 \phi) \\
& \quad + \sin^2 \theta \} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \\
& + \frac{\sin^2 \phi + \cos^2 \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{2}{r} \sin \theta \cos \theta (\sin^2 \phi + \cos^2 \phi) \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} \\
& \quad - \frac{2}{r} \sin \theta \cos \theta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{r} \{ \cos^2 \theta (\sin^2 \phi + \cos^2 \phi) + (\sin^2 \phi + \cos^2 \phi) + \sin^2 \theta \} \frac{\partial}{\partial r} \\
& + \frac{\cos \theta}{r^2} \{ -2 \sin \theta (\sin^2 \phi + \cos^2 \phi) + \frac{\sin^2 \phi + \cos^2 \phi}{\sin \theta} + 2 \sin \theta \} \frac{\partial}{\partial \theta} \\
& = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \\
& = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}
\end{aligned}$$

ここで,

$$\Lambda \equiv \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

とおくと,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda$$

となります。この式が球面座標で表されたラプラシアンです。したがって、時間に依存しないシュレディンガー方程式は次式のようになります。

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda \right) + V(r) \right\} \phi(r, \theta, \phi) = E \phi(r, \theta, \phi)$$

この微分法方程式を解くために、変数分離の方法にしたがって、

$$\phi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

と、おきます。このとき、方程式は次のように変形されます。

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\Lambda\right) + V(r)\right\}R(r)Y(\theta, \phi) = ER(r)Y(\theta, \phi)$$

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right)Y + \frac{R}{r^2}\Lambda Y\right\} + V(r)RY = ERY$$

$$\begin{aligned}\therefore \left(-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{r^2}{RY}\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left\{\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right)Y + \frac{R}{r^2}\Lambda Y\right\} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{r^2}{RY}V(r)RY \\ = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{r^2}{RY}ERY\end{aligned}$$

$$\therefore \frac{r^2}{R}\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) + \frac{\Lambda Y}{Y} - \frac{2m}{\hbar^2}r^2V(r) = -\frac{2m}{\hbar^2}r^2E$$

$$\therefore \frac{r^2}{R}\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}r^2\{E - V(r)\} = -\frac{\Lambda Y}{Y}$$

最後の式は、左辺が r だけの関数で、右辺は θ と ϕ だけの関数になっています。これらが等式で結ばれるためには、ある定数に等しくならなければなりません。そこで、この定数を λ とおきます。このとき、

$$\frac{r^2}{R}\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}r^2\{E - V(r)\} = \lambda$$

$$\therefore \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) + \{E - V(r)\}R = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\lambda}{r^2}R$$

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{\lambda}{r^2}R\right) + V(r)R = ER$$

という動径部分の方程式と、

$$-\frac{\Lambda Y}{Y} = \lambda$$

$$\therefore \Lambda Y + \lambda Y = 0$$

という角度部分の方程式が成立します.

最後の式をさらに変形していきます. Λ に式を代入すると,

$$\therefore \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \lambda Y = 0$$

となります. ここで, さらに変数分離して,

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

と, おきます. このとき, 方程式は次のように変形されます.

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \Phi + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} \Theta + \lambda \Theta \Phi = 0$$

$$\therefore \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \frac{1}{\Theta} + \lambda \sin^2 \theta = - \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} \frac{1}{\Phi}$$

最後の式で, 左辺は θ だけの関数で, 右辺は ϕ だけの関数になっています. これらが等号で結ばれるためには, 定数に等しくならなければなりません. そこで, その定数を ν とおきます. このとき,

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \frac{1}{\Theta} + \lambda \sin^2 \theta = \nu$$

$$\therefore \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{\nu}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0$$

という θ 部分の方程式と,

$$-\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} \frac{1}{\Phi} = \nu$$

$$\therefore \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + \nu \Phi = 0$$

という ϕ 部分の方程式が成立します.

Q13-2 ϕ 部分の微分方程式の解

ϕ 部分の方程式の一般解を求めましょう. $\nu=0$ の場合は,

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = 0$$

$$\therefore \frac{d\Phi}{d\phi} = A$$

$$\therefore \Phi = A\phi + B$$

となります. ただし, A と B は定数です. Φ は ϕ について 2π の周期をもっていないとなりません. そのためには,

$$A = 0$$

$$\therefore \Phi = B$$

が解になります。しかし、この解は物理的に意味をなしません。次に、 $v < 0$ の場合、微分方程式は、

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = (-v)\Phi$$

$$\therefore \Phi = A\exp(\sqrt{-v}\phi) + B\exp(-\sqrt{-v}\phi)$$

という解をもちます（ A と B は定数です。）が、 Φ は ϕ について 2π の周期をもっていなければならないので、不適になります。 $v > 0$ の場合、微分方程式は、

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -v\Phi$$

$$\therefore \Phi = A\exp(i\sqrt{v}\phi) + B\exp(-i\sqrt{v}\phi)$$

という解をもちます。（ A と B は定数です。）また、 $\sqrt{v}$ が整数でないと、 ϕ についての 2π 毎の周期性が成り立たないので、

$$\sqrt{v} = m \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

とおくことにします。このとき、

$$\Phi = A\exp(im\phi) \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

となります。 Φ についてだけでも規格化条件を課しておきましょう。

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\phi &= \int_0^{2\pi} A^2 \exp(-im\phi) \exp(im\phi) d\phi \\
&= A^2 \int_0^{2\pi} d\phi \\
&= A^2 \cdot 2\pi
\end{aligned}$$

規格化条件より，最後の式が 1 に等しくなります．

$$A^2 \cdot 2\pi = 1$$

$$\therefore A = \pm \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

符号は正の方をとると，

$$\Phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\phi) \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

となります．また，この関数は直交していることも確かめられます． $m \neq n$ のとき，

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} \Phi_m^* \Phi_n d\phi &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(-im\phi) \exp(in\phi) d\phi \\
&= \frac{1}{2\pi} \left[\frac{1}{i(n-m)} \exp\{i(n-m)\phi\} \right]_0^{2\pi} \\
&= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{i(n-m)} (1 - 1)
\end{aligned}$$

$$= 0$$

となります。

Q13-3 θ 部分の微分方程式

次に、 θ 部分の方程式を変形していきましょう。 $v = m^2$ より、 θ 部分の方程式は次のようになります。

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\theta}{d\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \theta = 0$$

ここで、

$$z = \cos \theta$$

と変数変換します。 このとき、

$$dz = -\sin \theta \cdot d\theta$$

になります。 また、

$$P(z) = \theta(\theta)$$

と、おきます。 方程式は次のように変形されます。

$$-\frac{d}{-\sin \theta \cdot d\theta} \left(-\sin^2 \theta \frac{d\theta}{-\sin \theta \cdot d\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \theta = 0$$

$$\therefore -\frac{d}{dz} \left\{ (z^2 - 1) \frac{dP}{dz} \right\} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - z^2} \right) P = 0$$

$$\therefore \frac{d}{dz} \left\{ (1-z^2) \frac{dP}{dz} \right\} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-z^2} \right) P = 0 \quad (3)$$

ここで、 θ は0から π まで変化するので、 z は1から-1まで変わります。
この方程式で $m=0$ とおいた式は、

$$\frac{d}{dz} \left\{ (1-z^2) \frac{dP}{dz} \right\} + \lambda P = 0$$

$$\therefore (1-z^2) \frac{d^2P}{dz^2} - 2z \frac{dP}{dz} + \lambda P = 0 \quad (4)$$

となります。(4)式を解くために、 P は z のべき級数で展開できると仮定します。すなわち、

$$P = c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + \cdots = \sum_{s=0}^{\infty} c_s z^s$$

と、おきます。 P を z で微分していくと次式を得ます。

$$\frac{dP}{dz} = c_1 + 2c_2 z + 2 \cdot 3c_3 z^2 + \cdots = \sum_{s=0}^{\infty} s c_s z^{s-1}$$

$$\frac{d^2P}{dz^2} = 2c_2 + 2 \cdot 3c_3 z + \cdots = \sum_{s=0}^{\infty} (s+1)(s+2)c_{s+2} z^s$$

これらの式を(4)式に代入します。

$$\begin{aligned}
(1-z^2) \sum_{s=0}^{\infty} (s+1)(s+2)c_{s+2}z^s - 2z \sum_{s=0}^{\infty} s c_s z^{s-1} + \lambda \sum_{s=0}^{\infty} c_s z^s &= 0 \\
\therefore - \sum_{s=0}^{\infty} (s+1)(s+2)c_{s+2}z^{s+2} + \sum_{s=0}^{\infty} (s+1)(s+2)c_{s+2}z^s \\
&+ \sum_{s=0}^{\infty} (-2s+\lambda)c_s z^s = 0
\end{aligned}$$

最後の式において, z^s の係数を 0 とおくと,

$$-(s-1)sc_s + (s+1)(s+2)c_{s+2} + (-2s+\lambda)c_s = 0$$

$$\therefore (s+1)(s+2)c_{s+2} = \{s(s+1) - \lambda\}c_s$$

となります. ベキ級数が有限項で終わるためには,

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

でなければなりません. この式を(3)式に代入すると,

$$\frac{d}{dz} \left\{ (1-z^2) \frac{dp_\ell^{[m]}}{dz} \right\} + \left\{ \ell(\ell+1) - \frac{|m|^2}{1-z^2} \right\} p_\ell^{[m]} = 0 \quad (5)$$

となります. ここで, m に絶対値を付けたのは, 正負にかかわらず, 同じ方程式になるからです. (5)式をルジャンドル陪微分方程式といいます.

($p_\ell^{[m]}$ のことをルジャンドル陪関数といいます.) ここで, $m=0$ とおいたものをルジャンドル微分方程式といいます. すなわち,

$$\frac{d}{dz}\{(1-z^2)\frac{dP_\ell}{dz}\} + \ell(\ell+1)P_\ell = 0 \quad (6)$$

となります。ルジャンドル微分方程式(6)式を満たす多項式 $P_\ell(z)$ をルジャンドル多項式といいます。

Q13-4 ルジャンドル多項式

ルジャンドル多項式は母関数,

$$S(z, t) = (1 - 2zt + t^2)^{-\frac{1}{2}}$$

を用いて定義することができます。この式を $-2zt + t^2$ で展開すると,

$$S(z, t) = 1 - \frac{1}{2}(1+0)^{-\frac{3}{2}}(-2zt + t^2) + \frac{1}{2!}\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{3}{2}\right)(1+0)^{-\frac{5}{2}}(-2zt + t^2)^2 + \dots$$

$$= 1 - \frac{1}{2}(-2zt + t^2) + \frac{3}{8}(-2zt + t^2)^2 + \dots$$

$$= 1 + zt + \frac{1}{2}(3z^2 - 1)t^2 + \dots$$

となります。ここで,

$$S(z, t) = (1 - 2zt + t^2)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(z)t^\ell$$

によってルジャンドル多項式 $P_\ell(z)$ を定義することにします。具体的に次数の小さな例を挙げると,

$$P_0 = 1$$

$$P_1 = z$$

$$P_2 = \frac{1}{2}(3z^2 - 1)$$

のようになります．次に，この母関数による定義の $P_\ell(z)$ が，確かにルジャンドル微分方程式(6)式の解になっていることを示しておきます．この式を z で偏微分して変形していくと，

$$\frac{\partial S(z, t)}{\partial z} = -\frac{1}{2}(1 - 2zt + t^2)^{-\frac{3}{2}}(-2t) = \sum_{\ell} P'_\ell t^\ell$$

$$\therefore \frac{t}{(1 - 2zt + t^2)^{\frac{3}{2}}} = \sum_{\ell} P'_\ell t^\ell$$

$$\therefore t(1 - 2zt + t^2)^{-\frac{1}{2}} = (1 - 2zt + t^2) \sum_{\ell} P'_\ell t^\ell$$

$$\therefore (1 - 2zt + t^2) \sum_{\ell} P'_\ell t^\ell - t \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(z) t^\ell = 0$$

となります．故に， $t^{\ell+1}$ の係数を比較して，

$$P'_{\ell+1} - 2zP'_\ell + P'_{\ell-1} - P_\ell = 0$$

$$\therefore P'_{\ell+1} + P'_{\ell-1} = 2zP'_\ell + P_\ell \quad (7)$$

の関係式を得ます．また， $P_\ell(z)$ の母関数による定義式を，同様に t で偏微分して変形していくと，

$$\frac{\partial S(z, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}(1 - 2zt + t^2)^{-\frac{3}{2}}(-2z + 2t) = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell \ell t^{\ell-1}$$

$$\therefore \frac{z - t}{(1 - 2zt + t^2)^{\frac{3}{2}}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \ell P_\ell t^{\ell-1}$$

$$\therefore (z - t)(1 - 2zt + t^2)^{-\frac{1}{2}} = (1 - 2zt + t^2) \sum_{\ell=0}^{\infty} \ell P_\ell t^{\ell-1}$$

$$\therefore (1 - 2zt + t^2) \sum_{\ell=0}^{\infty} \ell P_\ell t^{\ell-1} + (t - z) \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell t^\ell = 0$$

となります．故に， t^ℓ の係数を比較して，

$$(\ell + 1)P_{\ell+1} - 2\ell z P_\ell + (\ell - 1)P_{\ell-1} + P_{\ell-1} - z P_\ell = 0$$

$$\therefore (2\ell + 1)z P_\ell = (\ell + 1)P_{\ell+1} + \ell P_{\ell-1}$$

を得ます．この式を z で微分すると，

$$(2\ell + 1)P_\ell + (2\ell + 1)z P'_\ell = (\ell + 1)P'_{\ell+1} + \ell P'_{\ell-1} \quad (8)$$

となります． $2 \times (8) + (2\ell + 1) \times (7)$ より，

$$\begin{aligned} 2(2\ell + 1)P_\ell + 2(2\ell + 1)z P'_\ell + (2\ell + 1)(P'_{\ell+1} + P'_{\ell-1}) \\ = 2(\ell + 1)P'_{\ell+1} + 2\ell P'_{\ell-1} + (2\ell + 1)(2z P'_\ell + P_\ell) \end{aligned}$$

$$\therefore P'_{\ell+1} - P'_{\ell-1} = (2\ell + 1)P_{\ell} \quad (9)$$

となります。 $\frac{1}{2} \times \{(7) + (9)\}$ より,

$$\frac{1}{2} \times \{(P'_{\ell+1} + P'_{\ell-1}) + (P'_{\ell+1} - P'_{\ell-1})\} = \frac{1}{2} \times \{(2zP'_{\ell} + P_{\ell}) + (2\ell + 1)P_{\ell}\}$$

$$\therefore P'_{\ell+1} = (\ell + 1)P_{\ell} + zP'_{\ell}$$

$$\therefore P'_{\ell} = \ell P_{\ell-1} + zP'_{\ell-1} \quad (10)$$

となります。 $\frac{1}{2} \times \{(7) - (9)\}$ より,

$$\frac{1}{2} \times \{(P'_{\ell+1} + P'_{\ell-1}) - (P'_{\ell+1} - P'_{\ell-1})\} = \frac{1}{2} \times \{(2zP'_{\ell} + P_{\ell}) - (2\ell + 1)P_{\ell}\}$$

$$\therefore P'_{\ell-1} = -\ell P_{\ell} + zP'_{\ell} \quad (11)$$

となります。 (10)+z×(11)より,

$$P_{\ell} + zP'_{\ell-1} = (\ell P_{\ell-1} + zP'_{\ell-1}) + (-\ell zP_{\ell} + z^2 P'_{\ell})$$

$$\therefore (1 - z^2)P'_{\ell} = \ell P_{\ell-1} - \ell zP_{\ell}$$

となります。 この式を z で微分して計算します。

$$-2zP'_{\ell} + (1 - z^2)P''_{\ell} = \ell P'_{\ell-1} - \ell P_{\ell} - \ell zP'_{\ell}$$

$$\therefore (1 - z^2)P''_{\ell} = -\ell P_{\ell} + (2 - \ell)zP'_{\ell} + \ell P'_{\ell-1} \quad (12)$$

(12)+ $\ell \times (11)$ より,

$$(1 - z^2)P_\ell'' + \ell P_{\ell-1}' = \{-\ell P_\ell + (2 - \ell)zP_\ell' + \ell P_{\ell-1}'\} + (-\ell^2 P_\ell + \ell zP_\ell')$$

$$\therefore (1 - z^2)P_\ell'' - 2zP_\ell' + \ell(\ell + 1)P_\ell = 0$$

$$\therefore \frac{d}{dz} \left\{ (1 - z^2) \frac{dP_\ell}{dz} \right\} + \ell(\ell + 1)P_\ell = 0$$

となります．最後の式はルジャンドル微分方程式(6)です．したがって，母関数によって定義された $P_\ell(z)$ が微分方程式を満たすことが確認されました．

ℓ の違う 2 つのルジャンドル多項式は直交します．すなわち，

$$\int_{-1}^1 P_\ell(z) P_m(z) dz = 0 \quad (\ell \neq m)$$

が成立します．この式を証明しましょう．ルジャンドル微分方程式(6)式，

$$\frac{d}{dz} \left\{ (1 - z^2) \frac{dP_\ell}{dz} \right\} + \ell(\ell + 1)P_\ell = 0 \quad (6)$$

において， P_m を掛けて， -1 から 1 まで積分します．

$$\int_{-1}^1 P_m \frac{d}{dz} \left\{ (1 - z^2) \frac{dP_\ell}{dz} \right\} dz + \ell(\ell + 1) \int_{-1}^1 P_m P_\ell dz = 0$$

この式の第 1 項は，

$$[P_m(1-z^2)\frac{dP_\ell}{dz}]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 (1-z^2)\frac{dP_m}{dz}\frac{dP_\ell}{dz}dz = - \int_{-1}^1 (1-z^2)\frac{dP_\ell}{dz}\frac{dP_m}{dz}dz$$

となります。故に,

$$- \int_{-1}^1 (1-z^2)\frac{dP_\ell}{dz}\frac{dP_m}{dz}dz + \ell(\ell+1) \int_{-1}^1 P_\ell P_m dz = 0$$

となります。ここで, ℓ と m の役割を交換して差をとり計算します。

$$\{\ell(\ell+1) - m(m+1)\} \int_{-1}^1 P_\ell P_m dz = 0$$

$$\therefore \{(\ell+m)(\ell-m) + (\ell-m)\} \int_{-1}^1 P_\ell P_m dz = 0$$

$$\therefore \{(\ell-m)(\ell+m+1)\} \int_{-1}^1 P_\ell P_m dz = 0$$

$$\therefore \int_{-1}^1 P_\ell P_m dz = 0$$

(証明終) 次に, $\ell = m$ の場合を考えましょう。ルジャンドル多項式の母関数についての式,

$$S(z, t) = (1 - 2zt + t^2)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(z) t^\ell$$

の両辺を 2 乗します。

$$\frac{1}{1-2zt+t^2} = \left\{ \sum_{\ell=0}^{\infty} P_{\ell}(z) t^{\ell} \right\}^2$$

-1 から 1 まで積分すると,

$$\int_{-1}^1 \frac{dz}{1-2zt+t^2} = \sum_{\ell=0}^{\infty} t^{2\ell} \int_{-1}^1 (P_{\ell})^2 dz$$

となります. このとき,

$$y = 1 - 2zt + t^2$$

とおくと,

$$dy = -2tdz$$

となり, 上の積分の式の左辺は,

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \frac{dz}{1-2zt+t^2} &= \frac{1}{-2t} \int_{(1+t)^2}^{(1-t)^2} \frac{dy}{y} \\ &= \frac{1}{2t} [\log y]_{(1+t)^2}^{(1-t)^2} \\ &= \frac{1}{2t} \{ \log(1-t)^2 - \log(1+t)^2 \} \\ &= \frac{1}{t} \log \frac{1-t}{1+t} \end{aligned}$$

となります. ここで,

$$\log(1+t) = t - \frac{t^2}{2} + \frac{t^3}{3} - \frac{t^4}{4} + \frac{t^5}{5} - \dots$$

$$\log(1-t) = -t - \frac{t^2}{2} - \frac{t^3}{3} - \frac{t^4}{4} - \frac{t^5}{5} - \dots$$

$$\therefore \log(1+t) - \log(1-t) = 2t + \frac{2}{3}t^3 + \frac{2}{5}t^5 + \dots$$

$$\therefore \log \frac{1+t}{1-t} = 2\left(t + \frac{1}{3}t^3 + \frac{1}{5}t^5 + \dots\right)$$

$$\therefore \frac{1}{t} \log \frac{1+t}{1-t} = 2\left(1 + \frac{1}{3}t^2 + \frac{1}{5}t^4 + \dots\right)$$

$$= \sum_{\ell=0}^{\infty} t^{2\ell} \frac{2}{2\ell+1}$$

なので,

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} t^{2\ell} \frac{2}{2\ell+1} = \sum_{\ell=0}^{\infty} t^{2\ell} \int_{-1}^1 (P_{\ell})^2 dz$$

となり,

$$\int_{-1}^1 (P_{\ell})^2 dz = \frac{2}{2\ell+1}$$

が成立します. $\ell \neq m$ の場合も含めてまとめると,

$$\int_{-1}^1 P_\ell P_m dz = \frac{2\delta_{\ell m}}{2\ell + 1}$$

となります。

Q13-5 θ 部分の微分方程式の解（ルジャンドル陪関数）

θ 部分の微分方程式である，ルジャンドル陪微分方程式(5)式，

$$\frac{d}{dz} \left\{ (1-z^2) \frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz} \right\} + \left\{ \ell(\ell+1) - \frac{|\mathbf{m}|^2}{1-z^2} \right\} P_\ell^{|\mathbf{m}|} = 0 \quad (5)$$

を解き， θ 部分の解を求めましょう。（ $P_\ell^{|\mathbf{m}|}$ はルジャンドル陪関数といいましたね.）

ルジャンドル微分方程式(6)式，

$$\frac{d}{dz} \left\{ (1-z^2) \frac{dP_\ell}{dz} \right\} + \ell(\ell+1)P_\ell = 0 \quad (6)$$

を，

$$(1-z^2) \frac{d^2 P_\ell}{dz^2} - 2z \frac{dP_\ell}{dz} + \ell(\ell+1)P_\ell = 0$$

としておきます．この式を z で微分して整理します．（1回目）

$$(1-z^2) \frac{d^3 P_\ell}{dz^3} - 2z \frac{d^2 P_\ell}{dz^2} - 2z \frac{d^2 P_\ell}{dz^2} - 2 \frac{dP_\ell}{dz} + \ell(\ell+1) \frac{dP_\ell}{dz} = 0$$

$$\therefore (1-z^2) \frac{d^3 P_\ell}{dz^3} - 4z \frac{d^2 P_\ell}{dz^2} - 2 \frac{dP_\ell}{dz} + \ell(\ell+1) \frac{dP_\ell}{dz} = 0$$

この式を z で微分して整理します．（２回目）

$$(1 - z^2) \frac{d^4 P_\ell}{dz^4} - 2z \frac{d^3 P_\ell}{dz^3} - 4z \frac{d^3 P_\ell}{dz^3} - 4 \frac{d^2 P_\ell}{dz^2} - 2 \frac{d^2 P_\ell}{dz^2} + \ell(\ell + 1) \frac{d^2 P_\ell}{dz^2} = 0$$

$$\therefore (1 - z^2) \frac{d^4 P_\ell}{dz^4} - 6z \frac{d^3 P_\ell}{dz^3} - 6 \frac{d^2 P_\ell}{dz^2} + \ell(\ell + 1) \frac{d^2 P_\ell}{dz^2} = 0$$

この式を z で微分して整理します．（３回目）

$$(1 - z^2) \frac{d^5 P_\ell}{dz^5} - 2z \frac{d^4 P_\ell}{dz^4} - 6z \frac{d^4 P_\ell}{dz^4} - 6 \frac{d^3 P_\ell}{dz^3} - 6 \frac{d^3 P_\ell}{dz^3} + \ell(\ell + 1) \frac{d^3 P_\ell}{dz^3} = 0$$

$$\therefore (1 - z^2) \frac{d^5 P_\ell}{dz^5} - 8z \frac{d^4 P_\ell}{dz^4} - 12 \frac{d^3 P_\ell}{dz^3} + \ell(\ell + 1) \frac{d^3 P_\ell}{dz^3} = 0$$

この式を z で微分して整理します．（ $|m|$ 回目）

$$(1 - z^2) \frac{d^{|m|+2} P_\ell}{dz^{|m|+2}} - 2(|m| + 1)z \frac{d^{|m|+1} P_\ell}{dz^{|m|+1}} - |m|(|m| + 1) \frac{d^{|m|} P_\ell}{dz^{|m|}} + \ell(\ell + 1) \frac{d^{|m|} P_\ell}{dz^{|m|}} = 0$$

$$\therefore (1 - z^2) \frac{d^{|m|+2} P_\ell}{dz^{|m|+2}} - 2(|m| + 1)z \frac{d^{|m|+1} P_\ell}{dz^{|m|+1}} + \{\ell(\ell + 1) - |m|(|m| + 1)\} \frac{d^{|m|} P_\ell}{dz^{|m|}} = 0$$

ここで,

$$\frac{d^{|m|} P_\ell}{dz^{|m|}} = v$$

とおくと,

$$(1 - z^2) \frac{d^2 v}{dz^2} - 2(|m| + 1)z \frac{dv}{dz} + \{\ell(\ell + 1) - |m|(|m| + 1)\}v = 0$$

となります。さらに,

$$w = (1 - z^2)^{\frac{|m|}{2}} v$$

において計算します。

$$(1 - z^2) \frac{d^2}{dz^2} \{(1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}} w\} - 2(|m| + 1)z \frac{d}{dz} \{(1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}} w\} + \{\ell(\ell + 1) - |m|(|m| + 1)\}(1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}} w = 0$$

$$\begin{aligned} \therefore (1 - z^2) \frac{d}{dz} \left\{ -\frac{|m|}{2} (1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}-1} (-2z)w + (1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}} \frac{dw}{dz} \right\} \\ - 2(|m| + 1)z \left\{ -\frac{|m|}{2} (1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}-1} (-2z)w + (1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}} \frac{dw}{dz} \right\} + \{\ell(\ell + 1) - |m|(|m| + 1)\}(1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}} w \\ = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore (1 - z^2) \{ |m|(1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}-1} w + |m| \left(-\frac{|m|}{2} - 1 \right) (1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}-2} (-2z)zw \\ + |m|(1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}-1} z \frac{dw}{dz} - \frac{|m|}{2} (1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}-1} (-2z) \frac{dw}{dz} \\ + (1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}} \frac{d^2 w}{dz^2} \} - \{ 2|m|(|m| + 1)(1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}-1} z^2 w \\ + 2(|m| + 1)z(1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}} \frac{dw}{dz} \} + \{\ell(\ell + 1) - |m|(|m| + 1)\}(1 - z^2)^{-\frac{|m|}{2}} w = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore \{ & |m|(1-z^2)^{-\frac{|m|}{2}}w + |m|(|m|+2)(1-z^2)^{-\frac{|m|}{2}-1}z^2w + 2|m|(1 \\ & -z^2)^{-\frac{|m|}{2}}z\frac{dw}{dz} + (1-z^2)^{-\frac{|m|}{2}+1}\frac{d^2w}{dz^2}\} - \{2|m|(|m|+1)(1 \\ & -z^2)^{-\frac{|m|}{2}-1}z^2w + 2(|m|+1)z(1-z^2)^{-\frac{|m|}{2}}\frac{dw}{dz}\} \\ & + \{\ell(\ell+1) - |m|(|m|+1)\}(1-z^2)^{-\frac{|m|}{2}}w = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore \{ & |m|w + |m|(|m|+2)(1-z^2)^{-1}z^2w + 2|m|z\frac{dw}{dz} + (1-z^2)\frac{d^2w}{dz^2}\} \\ & - \{2|m|(|m|+1)(1-z^2)^{-1}z^2w + 2(|m|+1)z\frac{dw}{dz}\} \\ & + \{\ell(\ell+1) - |m|(|m|+1)\}w = 0 \end{aligned}$$

$$\therefore (1-z^2)\frac{d^2w}{dz^2} - |m|^2(1-z^2)^{-1}z^2w - 2z\frac{dw}{dz} + \{\ell(\ell+1) - |m|^2\}w = 0$$

$$\therefore (1-z^2)\frac{d^2w}{dz^2} - 2z\frac{dw}{dz} + \ell(\ell+1)w - \frac{|m|^2\{z^2 + (1-z^2)\}}{1-z^2} = 0$$

$$\therefore (1-z^2)\frac{d^2w}{dz^2} - 2z\frac{dw}{dz} + \{\ell(\ell+1) - \frac{|m|^2}{1-z^2}\}w = 0$$

最後の式は、ルジャンドル陪関数 $P_\ell^{|m|}$ についての微分方程式と一致しています。つまり、解 $P_\ell^{|m|}$ は w です。

$$P_\ell^{|m|} = (1-z^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}P_\ell}{dz^{|m|}}$$

P_ℓ は ℓ 次の多項式なので、

$$|m| \leq \ell$$

の条件が成り立たなければなりません。

さて、ルジャンドル陪関数について、

$$\int_{-1}^1 P_{\ell}^{[m]} P_{\ell'}^{[m]} dz = \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!} \delta_{\ell\ell'}$$

が成立します。以下、この式を証明します。まず、 $\ell \neq \ell'$ の場合を取り扱います。

$$\frac{d}{dz} \left\{ (1-z^2) \frac{dP_{\ell}^{[m]}}{dz} \right\} + \left\{ \ell(\ell+1) - \frac{|m|^2}{1-z^2} \right\} P_{\ell}^{[m]} = 0 \quad (5)$$

において、両辺に $P_{\ell'}^{[m]}$ をかけます。

$$P_{\ell'}^{[m]} \frac{d}{dz} \left\{ (1-z^2) \frac{dP_{\ell}^{[m]}}{dz} \right\} + \left\{ \ell(\ell+1) - \frac{|m|^2}{1-z^2} \right\} P_{\ell'}^{[m]} P_{\ell}^{[m]} = 0$$

ここで、 ℓ と ℓ' を入れ替えて、

$$P_{\ell}^{[m]} \frac{d}{dz} \left\{ (1-z^2) \frac{dP_{\ell'}^{[m]}}{dz} \right\} + \left\{ \ell'(\ell'+1) - \frac{|m|^2}{1-z^2} \right\} P_{\ell'}^{[m]} P_{\ell}^{[m]} = 0$$

となります。辺々引いて、

$$P_{\ell}^{[m]} \frac{d}{dz} \left\{ (1-z^2) \frac{dP_{\ell'}^{[m]}}{dz} \right\} - P_{\ell'}^{[m]} \frac{d}{dz} \left\{ (1-z^2) \frac{dP_{\ell}^{[m]}}{dz} \right\} + \left\{ \ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1) \right\} P_{\ell'}^{[m]} P_{\ell}^{[m]} = 0$$

となります。-1 から 1 まで z で積分すると、

$$\int_{-1}^1 d z P_{\ell}^{|\mathbf{m}|} \frac{d}{dz} \left\{ (1-z^2) \frac{d P_{\ell'}^{|\mathbf{m}|}}{dz} \right\} - \int_{-1}^1 d z P_{\ell'}^{|\mathbf{m}|} \frac{d}{dz} \left\{ (1-z^2) \frac{d P_{\ell}^{|\mathbf{m}|}}{dz} \right\} + \{ \ell'(\ell' + 1) - \ell(\ell + 1) \} \int_{-1}^1 d z P_{\ell'}^{|\mathbf{m}|} P_{\ell}^{|\mathbf{m}|} = 0$$

$$\begin{aligned} \therefore [P_{\ell}^{|\mathbf{m}|} \{ (1-z^2) \frac{d P_{\ell'}^{|\mathbf{m}|}}{dz} \}]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 d z \frac{d P_{\ell}^{|\mathbf{m}|}}{dz} \{ (1-z^2) \frac{d P_{\ell'}^{|\mathbf{m}|}}{dz} \} \\ - [P_{\ell'}^{|\mathbf{m}|} \{ (1-z^2) \frac{d P_{\ell}^{|\mathbf{m}|}}{dz} \}]_{-1}^1 + \int_{-1}^1 d z \frac{d P_{\ell'}^{|\mathbf{m}|}}{dz} \{ (1-z^2) \frac{d P_{\ell}^{|\mathbf{m}|}}{dz} \} \\ + \{ \ell'(\ell' + 1) - \ell(\ell + 1) \} \int_{-1}^1 d z P_{\ell'}^{|\mathbf{m}|} P_{\ell}^{|\mathbf{m}|} = 0 \end{aligned}$$

$$\therefore \{ \ell'(\ell' + 1) - \ell(\ell + 1) \} \int_{-1}^1 d z P_{\ell'}^{|\mathbf{m}|} P_{\ell}^{|\mathbf{m}|} = 0$$

$$\therefore \int_{-1}^1 d z P_{\ell}^{|\mathbf{m}|} P_{\ell'}^{|\mathbf{m}|} = 0 \quad (\ell \neq \ell')$$

となります．次に $\ell = \ell'$ の場合を考えます．ルジャンドル陪関数,

$$P_{\ell}^{|\mathbf{m}|} = (1-z^2)^{\frac{|\mathbf{m}|}{2}} \frac{d^{|\mathbf{m}|} P_{\ell}}{dz^{|\mathbf{m}|}}$$

を z で微分します．

$$\frac{d P_{\ell}^{|\mathbf{m}|}}{dz} = (1-z^2)^{\frac{|\mathbf{m}|}{2}} \frac{d^{|\mathbf{m}|+1} P_{\ell}}{dz^{|\mathbf{m}|+1}} + \frac{|\mathbf{m}|}{2} (1-z^2)^{\frac{|\mathbf{m}|}{2}-1} (-2z) \frac{d^{|\mathbf{m}|} P_{\ell}}{dz^{|\mathbf{m}|}}$$

両辺に $(1-z^2)^{\frac{1}{2}}$ をかけて変形します．

$$(1-z^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d P_{\ell}^{|\mathbf{m}|}}{dz} = (1-z^2)^{\frac{|\mathbf{m}|+1}{2}} \frac{d^{|\mathbf{m}|+1} P_{\ell}}{dz^{|\mathbf{m}|+1}} - |\mathbf{m}| z (1-z^2)^{\frac{|\mathbf{m}|-1}{2}} \frac{d^{|\mathbf{m}|} P_{\ell}}{dz^{|\mathbf{m}|}}$$

$$\therefore (1-z^2)^{\frac{1}{2}} \frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz} = P_\ell^{|\mathbf{m}|+1} - |\mathbf{m}|z(1-z^2)^{-\frac{1}{2}}P_\ell^{|\mathbf{m}|}$$

$$\therefore P_\ell^{|\mathbf{m}|+1} = (1-z^2)^{\frac{1}{2}} \frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz} + |\mathbf{m}|z(1-z^2)^{-\frac{1}{2}}P_\ell^{|\mathbf{m}|}$$

$$\therefore (P_\ell^{|\mathbf{m}|+1})^2 = (1-z^2)\left(\frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz}\right)^2 + 2|\mathbf{m}|z\frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz}P_\ell^{|\mathbf{m}|} + \frac{|\mathbf{m}|^2z^2}{1-z^2}(P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2$$

$$\begin{aligned} \therefore \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|+1})^2 dz &= \int_{-1}^1 (1-z^2) \frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz} \frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz} dz + 2|\mathbf{m}| \int_{-1}^1 z P_\ell^{|\mathbf{m}|} \frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz} dz \\ &\quad + |\mathbf{m}|^2 \int_{-1}^1 \frac{z^2}{1-z^2} (P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2 dz \end{aligned}$$

ここで、右辺第 1 項と第 2 項は部分積分法により、次のようになります。

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 (1-z^2) \frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz} \frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz} dz &= [(1-z^2) \frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz} P_\ell^{|\mathbf{m}|}]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \left[\frac{d}{dz} \{ (1-z^2) \frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz} \} P_\ell^{|\mathbf{m}|} \right] dz \\ &= \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2 \{ \ell(\ell+1) - \frac{|\mathbf{m}|^2}{1-z^2} \} dz \end{aligned}$$

$$I = \int_{-1}^1 z P_\ell^{|\mathbf{m}|} \frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz} dz$$

$$= [z P_\ell^{|\mathbf{m}|} P_\ell^{|\mathbf{m}|}]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|} + z \frac{dP_\ell^{|\mathbf{m}|}}{dz}) P_\ell^{|\mathbf{m}|} dz$$

$$(P_\ell^{|\mathbf{m}|} = (1 - z^2)^{\frac{|\mathbf{m}|}{2}} \frac{d^{|\mathbf{m}|} P_\ell}{dz^{|\mathbf{m}|}} \quad \therefore P_\ell^{|\mathbf{m}|}(1) = P_\ell^{|\mathbf{m}|}(-1) = 0)$$

$$= - \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2 dz - I$$

$$\therefore 2I = - \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2 dz$$

$$\therefore I = - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2 dz$$

したがって,

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|+1})^2 dz \\ &= \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2 \left\{ \ell(\ell+1) - \frac{|\mathbf{m}|^2}{1-z^2} \right\} dz - |\mathbf{m}| \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2 dz \\ &+ |\mathbf{m}|^2 \int_{-1}^1 \frac{z^2}{1-z^2} (P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2 dz \\ &= \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2 \left\{ \ell(\ell+1) + \frac{-|\mathbf{m}|^2 - |\mathbf{m}|(1-z^2) + |\mathbf{m}|^2 z^2}{1-z^2} \right\} dz \\ &= \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2 (\ell^2 + \ell - |\mathbf{m}|^2 - |\mathbf{m}|) dz \\ &= \{(\ell + |\mathbf{m}|)(\ell - |\mathbf{m}|) + (\ell - |\mathbf{m}|)\} \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2 dz \\ &= (\ell - |\mathbf{m}|)(\ell + |\mathbf{m}| + 1) \int_{-1}^1 (P_\ell^{|\mathbf{m}|})^2 dz \end{aligned}$$

となります。 $|m|$ を 1 ずつ減らしていくと,

$$\int_{-1}^1 (P_\ell^{|m|})^2 dz = (\ell - |m| + 1)(\ell + |m|) \int_{-1}^1 (P_\ell^{|m|-1})^2 dz$$

$$\int_{-1}^1 (P_\ell^{|m|-1})^2 dz = (\ell - |m| + 2)(\ell + |m| - 1) \int_{-1}^1 (P_\ell^{|m|-2})^2 dz$$

...

$$\int_{-1}^1 (P_\ell^1)^2 dz = \ell(\ell + 1) \int_{-1}^1 (P_\ell)^2 dz$$

となります。 故に,

$$\int_{-1}^1 (P_\ell^{|m|})^2 dz = (\ell - |m| + 1)(\ell + |m|) \int_{-1}^1 (P_\ell^{|m|-1})^2 dz$$

$$= (\ell - |m| + 1)(\ell + |m|)(\ell - |m| + 2)(\ell + |m| - 1) \int_{-1}^1 (P_\ell^{|m|-2})^2 dz$$

...

$$= (\ell - |m| + 1)(\ell + |m|)(\ell - |m| + 2)(\ell + |m| - 1) \cdots \ell (\ell + 1) \int_{-1}^1 (P_\ell)^2 dz$$

$$= \{\ell \cdots (\ell - |m| + 2)(\ell - |m| + 1)\} \{(\ell + |m|)(\ell + |m| - 1) \cdots (\ell + 1)\} \int_{-1}^1 (P_\ell)^2 dz$$

$$= \frac{\ell!}{(\ell - |m|)!} \frac{(\ell + |m|)!}{\ell!} \int_{-1}^1 (P_\ell)^2 dz$$

$$= \frac{(\ell + |m|)!}{(\ell - |m|)!} \int_{-1}^1 (P_\ell)^2 dz$$

となります。ここで,

$$\int_{-1}^1 P_\ell P_m dz = \frac{2\delta_{\ell m}}{2\ell + 1}$$

の関係式が成立したので,

$$\int_{-1}^1 (P_\ell^{(|m|)})^2 dz = \frac{2}{2\ell + 1} \frac{(\ell + |m|)!}{(\ell - |m|)!}$$

となります。よって,

$$\int_{-1}^1 P_\ell^{(|m|)} P_{\ell'}^{(|m|)} dz = \frac{2}{2\ell + 1} \frac{(\ell + |m|)!}{(\ell - |m|)!} \delta_{\ell \ell'}$$

の関係式が証明されました。

規格直交系の形で $\Theta(\theta)$ を与えると,

$$\Theta_\ell^{(|m|)}(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{2} \frac{(\ell - |m|)!}{(\ell + |m|)!}} P_\ell^{(|m|)}(\cos \theta)$$

となります。このとき, 規格直交条件は次式で表されます。(dz = -sin θ dθ)

$$\int_0^\pi \Theta_\ell^{|\mathbf{m}|}(\theta) \Theta_{\ell'}^{|\mathbf{m}|}(\theta) \sin \theta \, d\theta = \delta_{\ell\ell'}$$

Q13-6 角度部分の微分方程式の解（球面調和関数）

θ 部分の解は前 Section の最後に与えられました。一方, ϕ 部分の解は,

$$\Phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(i\mathbf{m}\phi) \quad (\mathbf{m} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

でした。角度部分の解は,

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

の形で与えられます。結論として, 解は,

$$Y_{\ell\mathbf{m}}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-|\mathbf{m}|)!}{(\ell+|\mathbf{m}|)!}} P_\ell^{|\mathbf{m}|}(\cos \theta) \exp(i\mathbf{m}\phi)$$

$$\begin{cases} \ell = 0, 1, 2, \dots \\ \mathbf{m} = -\ell, -\ell+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell-1, \ell \end{cases}$$

となります。 $Y_{\ell\mathbf{m}}(\theta, \phi)$ を球面調和関数といいます。球面調和関数は条件,

$$\int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{\ell\mathbf{m}}^*(\theta, \phi) Y_{\ell'\mathbf{m}'}(\theta, \phi) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}$$

を満たし, 規格直交系を形成します。

Q13-7 軌道角運動量

中心力場における量子の回転を，軌道角運動量を用いて取り扱ってみましょう。オブザーバブルの Chapter で前出したように，角運動量演算子は，

$$\begin{cases} \hat{L}_x = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ \hat{L}_y = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ \hat{L}_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{cases}$$

と表されました。ここで，球面座標を用いることにします。このとき，最初の Section で出てきたように，

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \end{cases}$$

の関係がありました。したがって，

$$\begin{aligned} \hat{L}_x = -i\hbar \{ & r \sin \theta \sin \phi (\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) - r \cos \theta (\sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} \\ & + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}) \} \end{aligned}$$

$$= -i\hbar(r \sin \theta \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} - \sin^2 \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - r \sin \theta \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} \\ - \cos^2 \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \theta \cos \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi})$$

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

$$\hat{L}_y = -i\hbar\{r \cos \theta (\sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}) \\ - r \sin \theta \cos \phi (\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta})\}$$

$$= -i\hbar(r \sin \theta \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \cos^2 \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \theta \sin \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ - r \sin \theta \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \sin^2 \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta})$$

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

$$\hat{L}_z = -i\hbar\{r \sin \theta \cos \phi (\sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}) \\ - r \sin \theta \sin \phi (\sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \\ - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi})\}$$

$$= -i\hbar(r \sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \sin \theta \cos \theta \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos^2 \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \\ - r \sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} - \sin \theta \cos \theta \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \\ + \sin^2 \phi \frac{\partial}{\partial \phi})$$

$$= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

となります。故に、

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \\
&= -\hbar^2 \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\
&\quad - \hbar^2 \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right. \\
&\quad \left. + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \\
&= -\hbar^2 \left(\sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{1}{\sin^2 \theta} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \cot \theta \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} \right. \\
&\quad + \cot \theta \cos^2 \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} \\
&\quad - \cot^2 \theta \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \cot^2 \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \\
&\quad + \frac{1}{\sin^2 \theta} \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \cot \theta \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} \\
&\quad + \cot \theta \sin^2 \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \cos \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} \\
&\quad \left. + \cot^2 \theta \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \cot^2 \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \\
&= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \\
&= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \\
&= -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \\
&= -\hbar^2 \Lambda
\end{aligned}$$

となります。 $\hat{L}^2$ に対する固有方程式は、固有関数を Y 、固有値を $\lambda\hbar^2$ とおくと、

$$\hat{L}^2 Y = \lambda\hbar^2 Y$$

$$\therefore -\hbar^2 \Delta Y = \lambda\hbar^2 Y$$

となりますが、これは前の Section の角度部分の微分方程式、

$$\Delta Y + \lambda Y = 0$$

と同じ形をしています。したがって、 $\lambda = \ell(\ell + 1)$ であり、固有方程式の固有関数は球面調和関数になります。つまり、

$$\hat{L}^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1)\hbar^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

の関係が成立します。故に、 $\hat{L}^2$ の固有値は $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ となります。（正確な表現ではありませんが、軌道角運動量 $\hat{L}$ の大きさは $\ell\hbar$ である、ということがよくあります。）

次に、 $\hat{L}_x$ 、 $\hat{L}_y$ 、 $\hat{L}_z$ のうち、最も簡単な形をしている $\hat{L}_z$ について固有方程式を考えましょう。固有関数を Φ 、固有値を $m\hbar$ とおくと、

$$\hat{L}_z \Phi = m\hbar \Phi$$

$$\therefore -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \Phi = m\hbar \Phi$$

$$\therefore \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} = im\Phi$$

となります。この微分方程式の一般解は、

$$\Phi = A \exp(im\phi)$$

になります。ただし、 A は積分定数です。ここで、 ϕ が 2π 増減しても、 Φ は等しい値に戻れなければなりません。よって、 m は整数です。

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

ここで、 Φ について、規格化条件を課しておきます。

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\phi &= \int_0^{2\pi} A^2 \exp(-im\phi) \exp(im\phi) d\phi \\ &= A^2 \int_0^{2\pi} d\phi \\ &= A^2 \cdot 2\pi = 1 \end{aligned}$$

$$\therefore A = \pm \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

符号は正の方をとると、

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\phi) \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

となります。これはシュレディンガー方程式の ϕ 部分の解 Φ と一致します。

ここで、固有方程式、

$$\hat{L}_z \Phi = m\hbar \Phi$$

の両辺に関数 $\Theta(\theta)$ を掛けてみると、

$$\hat{L}_z \Theta \Phi = m\hbar \Theta \Phi$$

$$\therefore \hat{L}_z Y_{\ell m}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

となります。すなわち、 $\hat{L}_z$ の固有関数も球面調和関数になります。 $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_z$ の固有関数がともに球面調和関数であることが判明しました。 $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_z$ の固有関数が同時固有関数になっていることを確かなものにするためには、一般論に従って交換可能である条件、

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

が成立することが必要十分条件になります。実際に計算してみます。

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = \hat{L}^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^2$$

$$\begin{aligned} &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left(-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right) \\ &= i\hbar^3 \left(\frac{\partial^3}{\partial \theta^2 \partial \phi} + \cot \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^3}{\partial \phi^3} \right) - i\hbar^3 \left(\frac{\partial^3}{\partial \theta^2 \partial \phi} \right. \\ &\quad \left. + \cot \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \phi} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^3}{\partial \phi^3} \right) \end{aligned}$$

$$= 0$$

まとめると, $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_z$ の固有関数は同時固有関数である球面調和関数であり, 固有値はそれぞれ $\ell(\ell+1)\hbar^2$ と $m\hbar$ になります.

ℓ は軌道角運動量の大きさのようなものを表す量で, 方位量子数といいます. m は軌道角運動量の z 成分を示す量で, 磁気量子数といいます. そして, 次のような跳び跳びの値をとりました.

$$\ell = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = -\ell, -\ell+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell-1, \ell$$

このとき, ひとつの ℓ に対して, m のとりうる値は $(2\ell+1)$ 個あります. すなわち, $\hat{L}^2$ の固有値 $\ell(\ell+1)\hbar^2$ は $(2\ell+1)$ 重に縮退しています.

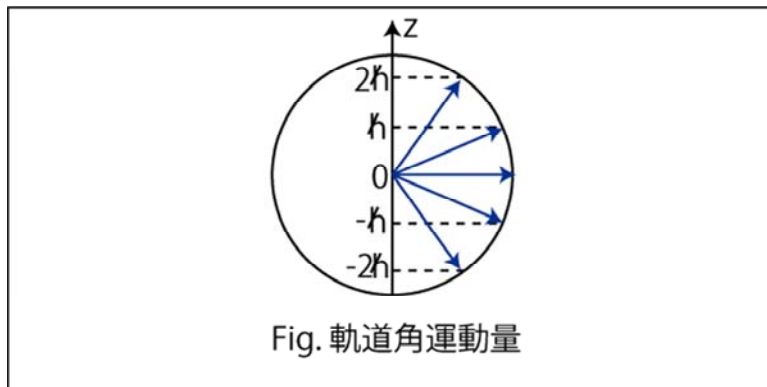
ℓ と m の関係を直観的に把握するため, 具体的に $m=2$ の場合について考えておきましょう. (ただし, 以下の議論は理解を助けるため, 古典的な考え方も利用していることを了承して下さい.) この場合, $\hat{L}^2$ の固有値は,

$$2(2+1)\hbar^2 = 6\hbar^2$$

になります. よって,

$$|\hat{L}| = \sqrt{6}\hbar \cong 2.45\hbar$$

になります. $m=-2, -1, 0, 1, 2$ の値をとるので, 軌道角運動量の z 成分は, $-2\hbar, -\hbar, 0, \hbar, 2\hbar$ になります. 以上の関係を古典的に図示すると, 次のようになります.



$\ell = 2$ のとき, 軌道角運動量として許されるのは, 上図の 5 本のベクトルだけになります. (5 重に縮退しています.)

Q13-8 水素原子の動径部分の微分方程式

動径部分の方程式,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{\lambda}{r^2} R \right) + V(r)R = ER$$

において,

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

を代入すると,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} R \right\} + V(r)R = ER$$

が得られます. ここで,

$$R(r) = \frac{1}{r} \chi(r)$$

と、おきます。この式を r で微分していきます。

$$\frac{dR}{dr} = -\frac{1}{r^2} \chi + \frac{1}{r} \frac{d\chi}{dr}$$

$$\begin{aligned} \therefore \frac{d^2 R}{dr^2} &= \frac{2}{r^3} \chi - \frac{1}{r^2} \frac{d\chi}{dr} - \frac{1}{r^2} \frac{d\chi}{dr} + \frac{1}{r} \frac{d^2 \chi}{dr^2} \\ &= \frac{1}{r} \frac{d^2 \chi}{dr^2} - \frac{2}{r^2} \frac{d\chi}{dr} + \frac{2}{r^3} \chi \end{aligned}$$

微分方程式に代入して計算します。

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r} \frac{d^2 \chi}{dr^2} - \frac{2}{r^2} \frac{d\chi}{dr} + \frac{2}{r^3} \chi + \frac{2}{r} \left(-\frac{1}{r^2} \chi + \frac{1}{r} \frac{d\chi}{dr} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \frac{1}{r} \chi \right\} + V(r) \frac{1}{r} \chi \\ = E \frac{1}{r} \chi \end{aligned}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{d^2 \chi}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \chi \right\} + V(r) \chi = E \chi$$

この方程式は 1 次元シュレディンガー方程式とよく似ていますが、 $\{ \}$ 内の第 2 項の部分が異なります。これは遠心力に相当するポテンシャルです。

水素原子では中心に $+e$ の電荷をもつ陽子があり、その周りを $-e$ の電荷をもつ電子が円運動しています。その間に働く力はクーロン力であり、そのポテンシャルは、

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

で与えられます。このとき、微分方程式は次のように変形されていきます。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{d^2\chi}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\chi\right\} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\chi = E\chi$$

$$\therefore \frac{1}{\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}}\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2}{r}\chi - \frac{\ell(\ell+1)}{\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}r^2}\chi + \frac{2\cdot 4\pi\epsilon_0}{e^2}E\chi = 0$$

$$\therefore \frac{1}{\frac{m^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^4}}\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2}{\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}r}\chi - \frac{\ell(\ell+1)}{\frac{m^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^4}r^2}\chi + \frac{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}{me^4}E\chi = 0$$

ここで、

$$a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

とおくと、

$$\therefore \frac{1}{\frac{1}{a_0^2}}\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2}{\frac{1}{a_0}r}\chi - \frac{\ell(\ell+1)}{\frac{1}{a_0^2}r^2}\chi + \frac{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}{me^4}E\chi = 0$$

となります。さらに、

$$\rho \equiv \frac{r}{a_0}$$

$$\eta \equiv \frac{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}{me^4}E$$

とおくと、(E<0 より、 $\eta<0$ となります.)

$$\therefore \frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \left\{ \frac{2}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right\} \chi + \eta\chi = 0$$

となります。 ρ が大きいとき、第2項と第3項を落として、この微分方程式は、

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} = -\eta\chi$$

となります。 その解は、

$$\chi = \exp(\pm\sqrt{-\eta}\rho)$$

です。 $r \rightarrow \infty$, ($\rho \rightarrow \infty$) で $\chi \rightarrow 0$ の境界条件を満たすためには指数関数のべきは負でなければなりません。 すなわち、

$$\chi = \exp(-\sqrt{-\eta}\rho)$$

となります。 任意の ρ で χ を解くために、

$$\chi(\rho) = \rho^{\ell+1} \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) L(\rho)$$

と、おきます。 χ を ρ で微分していくと、

$$\begin{aligned}
\frac{d\chi}{d\rho} &= (\ell + 1)\rho^\ell \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) L + \rho^{\ell+1}(-\sqrt{-\eta}) \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) L \\
&\quad + \rho^{\ell+1} \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) \frac{dL}{d\rho} \\
&= [\{(\ell + 1) - \sqrt{-\eta}\rho\}L + \rho \frac{dL}{d\rho}] \rho^\ell \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) \\
\therefore \frac{d^2\chi}{d\rho^2} &= [\{(\ell + 1) - \sqrt{-\eta}\rho\} \frac{dL}{d\rho} - \sqrt{-\eta}L + \frac{dL}{d\rho} + \rho \frac{d^2L}{d\rho^2}] \rho^\ell \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) \\
&\quad + [\{(\ell + 1) - \sqrt{-\eta}\rho\}L + \rho \frac{dL}{d\rho}] \{\ell \rho^{\ell-1} \\
&\quad + \rho^\ell(-\sqrt{-\eta})\} \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) \\
&= \rho^\ell \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) [\rho \frac{d^2L}{d\rho^2} + \{(\ell + 2) - \sqrt{-\eta}\rho\} \frac{dL}{d\rho} - \sqrt{-\eta}L \\
&\quad + \{(\ell + 1 - \sqrt{-\eta}\rho)L + \rho \frac{dL}{d\rho}\} (\frac{\ell}{\rho} - \sqrt{-\eta})] \\
&= \rho^\ell \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) [\rho \frac{d^2L}{d\rho^2} + 2\{(\ell + 1) - \sqrt{-\eta}\rho\} \frac{dL}{d\rho} + \{-\sqrt{-\eta} \\
&\quad + \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho} - (\ell + 1)\sqrt{-\eta} - \ell\sqrt{-\eta} - \eta\rho\}L] \\
&= \rho^\ell \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) [\rho \frac{d^2L}{d\rho^2} + 2\{(\ell + 1) - \sqrt{-\eta}\rho\} \frac{dL}{d\rho} \\
&\quad + \{-2(\ell + 1)\sqrt{-\eta} - \eta\rho + \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho}\}L]
\end{aligned}$$

となります。これらをもとの微分方程式に代入して計算します。

$$\begin{aligned}
\rho^\ell \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) [\rho \frac{d^2L}{d\rho^2} + 2\{(\ell + 1) - \sqrt{-\eta}\rho\} \frac{dL}{d\rho} + \{-2(\ell + 1)\sqrt{-\eta} - \eta\rho \\
+ \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho}\}L] + \{\frac{2}{\rho} - \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho^2}\} \rho^{\ell+1} \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) L \\
+ \eta \rho^{\ell+1} \exp(-\sqrt{-\eta}\rho) L = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore \rho \frac{d^2 L}{d\rho^2} + 2\{(\ell + 1) - \sqrt{-\eta}\rho\} \frac{dL}{d\rho} + \{-2(\ell + 1)\sqrt{-\eta} - \eta\rho + \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho}\}L \\ + \{2 - \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho}\}L + \eta\rho L = 0 \end{aligned}$$

$$\therefore \rho \frac{d^2 L}{d\rho^2} + 2(\ell + 1 - \rho\sqrt{-\eta}) \frac{dL}{d\rho} + 2\{1 - (\ell + 1)\sqrt{-\eta}\}L = 0 \quad (13)$$

Q13-9 水素原子のエネルギー固有値（ボーア前期量子論との一致）

(13)式において、 $L(\rho)$ が ρ のべき級数に展開できると仮定してみます．

$$L = c_0 + c_1\rho + c_2\rho^2 + c_3\rho^3 + \cdots = \sum_{s=0}^{\infty} c_s \rho^s$$

L を ρ で微分していくと、次式を得ます．

$$\frac{dL}{d\rho} = c_1 + 2c_2\rho + 3c_3\rho^2 + \cdots = \sum_{s=0}^{\infty} (s + 1)c_{s+1}\rho^s$$

$$\therefore \frac{d^2 L}{d\rho^2} = 2c_2 + 2 \cdot 3c_3\rho + \cdots = \sum_{s=0}^{\infty} (s + 1)(s + 2)c_{s+2}\rho^s$$

これらを微分方程式(13)式に代入して計算します．

$$\begin{aligned} \rho \sum_{s=0}^{\infty} (s + 1)(s + 2)c_{s+2}\rho^s + 2(\ell + 1 - \rho\sqrt{-\eta}) \sum_{s=0}^{\infty} (s + 1)c_{s+1}\rho^s \\ + 2\{1 - (\ell + 1)\sqrt{-\eta}\} \sum_{s=0}^{\infty} c_s \rho^s = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore \sum_{s=0}^{\infty} s(s+1)c_{s+1}\rho^s + 2(\ell+1) \sum_{s=0}^{\infty} (s+1)c_{s+1}\rho^s - 2\sqrt{-\eta} \sum_{s=0}^{\infty} s c_s \rho^s \\ + 2\{1 - (\ell+1)\sqrt{-\eta}\} \sum_{s=0}^{\infty} c_s \rho^s = 0 \end{aligned}$$

両辺の ρ^s の係数を比較して,

$$s(s+1)c_{s+1} + 2(\ell+1)(s+1)c_{s+1} - 2\sqrt{-\eta}sc_s + 2\{1 - (\ell+1)\sqrt{-\eta}\}c_s = 0$$

$$\therefore (s+1)(2\ell+s+2)c_{s+1} = 2\{(\ell+s+1)\sqrt{-\eta} - 1\}c_s$$

を得ます．級数が有限項で終わるためには，ある s の値 n' で，

$$(\ell+n'+1)\sqrt{-\eta} - 1 = 0$$

とならなければなりません．ここで，

$$n \equiv \ell + n' + 1$$

と，おき， n を主量子数と名付けます．このとき，

$$\sqrt{-\eta} = \frac{1}{n}$$

$$\therefore \eta = -\frac{1}{n^2}$$

$$\therefore \frac{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}{me^4}E = -\frac{1}{n^2}$$

$$\therefore E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$\therefore E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$\therefore E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

という水素原子のエネルギー準位の式が導出されます。この式は原子の構造の Chapter のボーアの前期量子論での式と完全に一致します。ボーアの理論での天下りの仮定をせずに、シュレディンガー方程式を用いた完成された量子力学によって、一段と高いレベルから同じ結果を再現することができたのです。

Part3 量子力学の展開

Q14 行列力学

Q14-1 数学的準備 1 (3次元実ベクトル空間の線形代数)

この Chapter での議論の準備として, この Section と次の Section で線形代数の知識を整理しておきます. 直交座標で表される3次元空間の実ベクトル,

$$\vec{\psi} = (c_1, c_2, c_3)$$

を考えましょう. (各成分はそれぞれ実数で, 順番に x 成分, y 成分, z 成分を表します.) この現実の空間についてのベクトルで張られる空間を3次元実ベクトル空間といいます. ベクトルを縦に表記して, 列ベクトルとして表すこともできます.

$$|\bar{\psi}\rangle \equiv \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

左辺の記号をケットといい, 列ベクトルのことをケットベクトルといいます. ψ の上に示したバーは行列であることを表す記号です. このケットベクトルと対をなす行ベクトルを約束しましょう.

$$\langle\bar{\psi}| \equiv (c_1, c_2, c_3)$$

左辺の記号をブラといい, この行ベクトルのことをブラベクトルといいます. ブラベクトルはケットベクトルの転置行列になります. (行と列を入れ換えた行列を転置行列といいます.) ブラとケットは bracket (括弧) という言葉からの造語であり, ディラックの発案によります. 次に, ブラベ

クトルとケットベクトルを使い、内積と呼ばれる量を定義します。すなわち、

$$\langle \bar{\chi} | = (d_1, d_2, d_3)$$

$$|\bar{\psi}\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

のブラベクトルとケットベクトルに対して、

$$\begin{aligned} \langle \bar{\chi} | \bar{\psi} \rangle &= (d_1, d_2, d_3) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \\ &= d_1 c_1 + d_2 c_2 + d_3 c_3 \end{aligned}$$

の量が内積です。特に、内積の値が 0 のとき、直交しているといいます。また、ベクトルの大きさをノルムといいます。自分自身との内積はノルムの 2 乗になります。自分自身との内積が 1 のとき、規格化されているといいます。つまり、規格化条件は、

$$\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle = c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 = 1$$

と表せます。

3次元空間のベクトルに対して、何らかの操作をして、他のベクトルをつくる演算を考えましょう。例えば、あるベクトル (c_1, c_2, c_3) をz軸回りに角度 θ だけ回転させて新たにベクトルをつくった場合、

$$(c_1, c_2, c_3) \rightarrow (c'_1, c'_2, c'_3) = (c_1 \cos \theta - c_2 \sin \theta, c_1 \sin \theta + c_2 \cos \theta, c_3)$$

と変換されます。これを，ケットベクトルを使って表すと，

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ c_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \cos \theta - c_2 \sin \theta \\ c_1 \sin \theta + c_2 \cos \theta \\ c_3 \end{pmatrix}$$

となります。さらに 3×3 行列を使い変形すると，

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ c_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

となります。あるベクトルから何らかの操作をして，他のベクトルをつくる場合，上の式のような形式で表されることになります。これを，一般に，

$$|\bar{\psi}'\rangle = \hat{A}|\bar{\psi}\rangle$$

と表します。ただし， $\hat{A}$ はケットベクトルに作用する行列であり，作用素行列と名付けることにします。ハットは作用素であることを示し，バーは行列であることを表しています。記号が二重になっていますが，意味を考えてこのようにしました。一般に，作用素行列 $\hat{A}$ は，

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

のように，行列要素をもちます。ここで，例における作用素行列に対して，

$$\begin{pmatrix} c_1 \cos \theta - c_2 \sin \theta \\ c_1 \sin \theta + c_2 \cos \theta \\ c_3 \end{pmatrix} \left\{ \alpha \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix} \right\} \\
= \alpha \begin{pmatrix} c_1 \cos \theta - c_2 \sin \theta \\ c_1 \sin \theta + c_2 \cos \theta \\ c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} c_1 \cos \theta - c_2 \sin \theta \\ c_1 \sin \theta + c_2 \cos \theta \\ c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix}$$

という関係が確かめられます。(αとβは実数の定数です。) 一般に,

$$\hat{A}\{\alpha|\bar{\psi}_1\rangle + \beta|\bar{\psi}_2\rangle\} = \alpha\hat{A}|\bar{\psi}_1\rangle + \beta\hat{A}|\bar{\psi}_2\rangle$$

という関係を満たす作用素行列 $\hat{A}$ を線形作用素行列といいます。

ここで, 標準基底ベクトルといわれるベクトルを導入します。具体的に示すと, ケットベクトルの標準基底ベクトルは,

$$|\bar{\phi}_1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |\bar{\phi}_2\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\bar{\phi}_3\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

で定義されます。つまり, それぞれの座標軸の向きの単位ベクトルが標準基底ベクトルです。標準基底ベクトルにより, 任意のケットベクトルは次のように表すことができます。

$$\begin{aligned}
|\bar{\psi}\rangle &= \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \\
&= c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
&= c_1|\bar{\phi}_1\rangle + c_2|\bar{\phi}_2\rangle + c_3|\bar{\phi}_3\rangle
\end{aligned}$$

$$= \sum_{n=1}^3 c_n |\bar{\Phi}_n\rangle$$

ブラベクトルに対しても、同様に標準基底ベクトルを定義することができます。

$$\langle \bar{\Phi}_1| \equiv (1 \quad 0 \quad 0), \quad \langle \bar{\Phi}_2| \equiv (0 \quad 1 \quad 0), \quad \langle \bar{\Phi}_3| \equiv (0 \quad 0 \quad 1)$$

これらの標準基底ベクトルにより、任意のブラベクトルが表されることはケットベクトルの場合と同様です。

$$\langle \bar{\Psi}| = \sum_{n=1}^3 c_n \langle \bar{\Phi}_n|$$

標準基底ベクトルの間には、次の規格直交条件が成立します。

$$\langle \bar{\Phi}_m | \bar{\Phi}_n \rangle = \delta_{mn}$$

ただし、右辺はクロネッカーのデルタといい、次のように定義されます。

$$\delta_{mn} \equiv \begin{cases} 1 & (m = n) \\ 0 & (m \neq n) \end{cases}$$

この規格直交条件は、具体的に、

$$\langle \bar{\Phi}_1 | \bar{\Phi}_1 \rangle = (1 \quad 0 \quad 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 1$$

$$\langle \bar{\Phi}_1 | \bar{\Phi}_2 \rangle = (1 \quad 0 \quad 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

のように、計算して確かめられます。規格直交条件を満たしている標準基底ベクトルは規格直交系を成しているといえます。標準基底ベクトルを使うと、ケットベクトルの行列要素は、例えば、

$$c_1 = (1 \quad 0 \quad 0) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \langle \bar{\Phi}_1 | \psi \rangle$$

のように、表されます。したがって、

$$c_n = \langle \bar{\Phi}_n | \psi \rangle$$

です。また、作用素行列の行列要素は、例えば、

$$a_{12} = (1 \quad 0 \quad 0) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \langle \bar{\Phi}_1 | \hat{A} | \bar{\Phi}_2 \rangle$$

のように、表されます。したがって、

$$a_{mn} = \langle \bar{\Phi}_m | \hat{A} | \bar{\Phi}_n \rangle$$

です。

標準基底ベクトルは直交座標の座標軸の向きの単位ベクトルですが、例えば、座標軸を回転させるような操作を考えてみましょう。そのときには、新しい基底ベクトルがつくられることになります。座標軸の回転に限らず、

ある直交座標の基底ベクトルから何らかの操作をして、他の直交座標の基底ベクトルをつくることを基底の変換と言います。基底の変換を式で書くと、

$$|\bar{\Phi}'_1\rangle = u_{11}|\bar{\Phi}_1\rangle + u_{12}|\bar{\Phi}_2\rangle + u_{13}|\bar{\Phi}_3\rangle$$

$$|\bar{\Phi}'_2\rangle = u_{21}|\bar{\Phi}_1\rangle + u_{22}|\bar{\Phi}_2\rangle + u_{23}|\bar{\Phi}_3\rangle$$

$$|\bar{\Phi}'_3\rangle = u_{31}|\bar{\Phi}_1\rangle + u_{32}|\bar{\Phi}_2\rangle + u_{33}|\bar{\Phi}_3\rangle$$

となります。まとめて書くと、

$$|\bar{\Phi}'_m\rangle = \sum_{n=1}^3 u_{mn} |\bar{\Phi}_n\rangle$$

と表されます。左辺のダッシュがついたケットベクトルが変換後の基底ベクトルであり、右辺のダッシュの付いていないケットベクトルが変換前の基底ベクトルです。また、右辺の u の実数の行列要素の行列が変換の関係を表します。（この行列を $\bar{u}$ で表すことにします。）この式のケットベクトルの転置をとり、ブラベクトルをつくると、

$$\langle \bar{\Phi}'_m| = \sum_{n=1}^3 u_{mn} \langle \bar{\Phi}_n|$$

です。変換後の基底ベクトルは新しい直交座標の座標軸の向きの単位ベクトルなので、規格直交系をなしていなければなりません。すなわち、

$$\langle \bar{\Phi}'_m | \bar{\Phi}'_n \rangle = \delta_{mn}$$

が成立します。ここで、左辺を計算すると、

$$\begin{aligned}
 \langle \bar{\phi}'_m | \bar{\phi}'_n \rangle &= \sum_{i=1}^3 u_{mi} \langle \bar{\phi}_i | \sum_{j=1}^3 u_{nj} | \bar{\phi}_j \rangle \\
 &= \sum_{i,j} u_{mi} u_{nj} \delta_{ij} \\
 &= \sum_{i=1}^3 u_{mi} u_{ni}
 \end{aligned}$$

です。よって、

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^3 u_{mi} u_{ni} &= \delta_{mn} \\
 \therefore \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{21} & u_{31} \\ u_{12} & u_{22} & u_{32} \\ u_{13} & u_{23} & u_{33} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

となります。前述したように、行と列を入れ換えた行列を転置行列といい
ますが、 $\bar{U}$ の転置行列を $\bar{U}^T$ で表します。このとき、上の式は、

$$\bar{U} \bar{U}^T = \bar{E}$$

となります。ただし、 $\bar{E}$ は単位行列です。したがって、 $\bar{U}$ の転置行列は $\bar{U}$ の
逆行列になります。

$$\bar{U}^T = \bar{U}^{-1}$$

この関係を満たす行列を直交行列と言います。すなわち,

“直交座標系の基底ベクトルの変換を表す行列は直交行列です。”

という結論が得られました。(直交行列による変換を直交変換と言います.)

ここで, $\bar{U} = \bar{U}$ の両辺に左から, $\bar{U}^T$ を作用させると,

$$\bar{U}^T \bar{U} = \bar{E}$$

$$\therefore \begin{pmatrix} u_{11} & u_{21} & u_{31} \\ u_{12} & u_{22} & u_{32} \\ u_{13} & u_{23} & u_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\therefore \sum_{i=1}^3 u_{im} u_{in} = \delta_{mn}$$

という関係が成立することも確かめられます。また, 基底ベクトルの逆変換も求めておきましょう。変換式は,

$$|\bar{\Phi}'_m\rangle = \sum_{n=1}^3 u_{mn} |\bar{\Phi}_n\rangle$$

でしたが, 両辺に u_{mi} をかけて m について和をとり, 計算します。

$$\sum_{m=1}^3 u_{mi} |\bar{\Phi}'_m\rangle = \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 u_{mi} u_{mn} |\bar{\Phi}_n\rangle$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{n=1}^3 \delta_{in} |\bar{\Phi}_n\rangle \\
 &= |\bar{\Phi}_i\rangle
 \end{aligned}$$

添え字の i を n に書き直すと,

$$|\bar{\Phi}_n\rangle = \sum_{m=1}^3 u_{mn} |\bar{\Phi}'_m\rangle$$

という変換後の基底ベクトルを変換前の基底ベクトルに逆変換する式が導かれました.

直交行列による基底ベクトルの変換に伴い, 任意のベクトルと作用素行列はどのように変換するのでしょうか? まず, ケットベクトルですが, 変換前の基底ベクトルで表しておき, 変換前の基底ベクトルを変換後の基底ベクトルで表した逆変換の式を代入して計算すると,

$$\begin{aligned}
 |\bar{\Psi}\rangle &= \sum_{n=1}^3 c_n |\bar{\Phi}_n\rangle \\
 &= \sum_{n=1}^3 c_n \left(\sum_{m=1}^3 u_{mn} |\bar{\Phi}'_m\rangle \right) \\
 &= \sum_{m=1}^3 \left(\sum_{n=1}^3 u_{mn} c_n \right) |\bar{\Phi}'_m\rangle
 \end{aligned}$$

となります. この式と, $|\bar{\Psi}\rangle$ を変換後の基底ベクトルで表した式,

$$|\bar{\psi}\rangle = \sum_{m=1}^3 c'_m |\bar{\phi}'_m\rangle$$

を比較して,

$$c'_m = \sum_{n=1}^3 u_{mn} c_n$$

となります. 故に,

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ c'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

$$\therefore |\bar{\psi}'\rangle = U|\bar{\psi}\rangle$$

を得ます. この式の両辺の転置行列をとると,

$$\langle\bar{\psi}'| = \langle\bar{\psi}|U^T$$

というブラベクトルの変換式も求められます. 内積の変換式も見ておきましょう.

$$\langle\bar{\chi}'|\bar{\psi}'\rangle = (\langle\bar{\chi}|U^T)(U|\bar{\psi}\rangle)$$

$$= \langle\bar{\chi}|E|\bar{\psi}\rangle$$

$$= \langle\bar{\chi}|\bar{\psi}\rangle$$

となるので, 内積は直交変換に対して不変です. 次に, 作用素行列の変換

式も求めておきましょう。もとの作用素行列,

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

に対して, 基底を変換した場合の新しい作用素行列を,

$$\hat{A}' = \begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & a'_{13} \\ a'_{21} & a'_{22} & a'_{23} \\ a'_{31} & a'_{32} & a'_{33} \end{pmatrix}$$

とします。行列要素は,

$$a_{mn} = \langle \bar{\Phi}_m | \hat{A} | \bar{\Phi}_n \rangle$$

から,

$$a'_{mn} = \langle \bar{\Phi}'_m | \hat{A} | \bar{\Phi}'_n \rangle$$

へ変換されます。最後の式は次のように計算されます。

$$\begin{aligned} a'_{mn} &= \left(\sum_{i=1}^3 u_{mi} \langle \bar{\Phi}_i | \right) \hat{A} \left(\sum_{j=1}^3 u_{nj} | \bar{\Phi}_j \rangle \right) \\ &= \sum_{i,j} u_{mi} a_{ij} u_{nj} \\ &= \sum_{i,j} u_{mi} a_{ij} (u_{jn})^T \end{aligned}$$

$$= \sum_{i,j} u_{mi} a_{ij} (u_{jn})^{-1}$$

$$\begin{aligned} \therefore \begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & a'_{13} \\ a'_{21} & a'_{22} & a'_{23} \\ a'_{31} & a'_{32} & a'_{33} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \end{pmatrix}^{-1} \end{aligned}$$

$$\therefore \hat{A}' = \bar{U} \hat{A} \bar{U}^{-1}$$

故に，作用素行列の変換式が求められました．また，変換式の両辺に左から $\bar{U}^{-1}$ ，右から $\bar{U}$ を作用させて計算すると，

$$\bar{U}^{-1} \hat{A}' \bar{U} = \bar{U}^{-1} \bar{U} \hat{A} \bar{U}^{-1} \bar{U}$$

$$= \hat{E} \hat{A} \hat{E}$$

$$= \hat{A}$$

$$\therefore \hat{A} = \bar{U}^{-1} \hat{A}' \bar{U}$$

となります．

Q14-2 数学的準備 2 (N 次元複素ベクトル空間の線形代数)

前の Section のベクトル空間の次元を N 次元に (N は自然数とします.)，行列要素を複素数に拡張しましょう．この抽象化されたベクトル空間を N 次元複素ベクトル空間と言います．

ケットベクトルは,

$$|\bar{\psi}\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}$$

と表されます. このケットベクトルに対するブラベクトルは,

$$\langle\bar{\psi}| = (c_1^* \quad c_2^* \quad \cdots \quad c_N^*)$$

で定義されます. ブラベクトルはケットベクトルの転置共役行列です. また, 内積は,

$$\begin{aligned} \langle\bar{\chi}|\bar{\psi}\rangle &= (d_1^* \quad d_2^* \quad \cdots \quad d_N^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} \\ &= d_1^* c_1 + d_2^* c_2 + \cdots + d_N^* c_N \end{aligned}$$

です. 作用素行列は,

$$|\bar{\psi}'\rangle = \hat{A}|\bar{\psi}\rangle$$

の式の $\hat{A}$ であることには変わりはありませんが,

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix}$$

のように、行列要素をもちます。一般に、

$$\hat{A}(\alpha|\bar{\psi}_1\rangle + \beta|\bar{\psi}_2\rangle) = \alpha\hat{A}|\bar{\psi}_1\rangle + \beta\hat{A}|\bar{\psi}_2\rangle$$

という関係を満たす作用素行列のことを線形作用素行列といいます。(αとβは複素数の定数.)

標準基底ベクトルは、

$$|\bar{\Phi}_1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, |\bar{\Phi}_2\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, |\bar{\Phi}_N\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

で定義されます。この標準基底ベクトルにより、任意のケットベクトルは次のように表すことができます。

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} \\ &= c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + c_N \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \sum_{n=1}^N c_n |\bar{\Phi}_n\rangle \end{aligned}$$

ブラベクトルに対しても、同様に標準基底ベクトルを定義することができ

ます.

$$\langle \bar{\Phi}_1 | \equiv (1 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \cdots \quad 0)$$

$$\langle \bar{\Phi}_2 | \equiv (0 \quad 1 \quad 0 \quad 0 \quad \cdots \quad 0)$$

$\vdots$

$$\langle \bar{\Phi}_N | \equiv (0 \quad 0 \quad 0 \quad \cdots \quad 0 \quad 1)$$

これらの標準基底ベクトルにより, 任意のブラベクトルが表されることはケットベクトルの場合と同様です.

$$|\bar{\Psi}\rangle = \sum_{n=1}^N c_n^* \langle \bar{\Phi}_n |$$

標準基底ベクトルの間には, 次の規格直交条件が成立します.

$$\langle \bar{\Phi}_m | \bar{\Phi}_n \rangle = \delta_{mn}$$

この式は, 具体的に,

$$\langle \bar{\Phi}_1 | \bar{\Phi}_1 \rangle = (1 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \cdots \quad 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = 1$$

$$\langle \bar{\Phi}_1 | \bar{\Phi}_2 \rangle = (1 \ 0 \ 0 \ 0 \ \dots \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

のように，計算して確かめられます．規格直交条件を満たしている標準基底ベクトルは規格直交系を成しているといいます．また，標準基底ベクトルを使うと，ケットベクトルの行列要素は，例えば，

$$c_1 = (1 \ 0 \ 0 \ 0 \ \dots \ 0) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = \langle \bar{\Phi}_1 | \bar{\Psi} \rangle$$

のように，表されます．従って，

$$c_n = \langle \bar{\Phi}_n | \bar{\Psi} \rangle$$

です．また，作用素行列の行列要素は，例えば，

$$a_{12} = (1 \ 0 \ 0 \ 0 \ \dots \ 0) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \dots & a_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \langle \bar{\Phi}_1 | \hat{A} | \bar{\Phi}_2 \rangle$$

のように，表されます．したがって，

$$a_{mn} = \langle \bar{\Phi}_m | \hat{A} | \bar{\Phi}_n \rangle$$

となります。標準基底ベクトルに限らず、ある規格直交系を成す基底ベクトルから何らかの操作をして、他の規格直交系を成す基底ベクトルをつくることを基底の変換と言います。基底の変換を式で書くと、

$$|\bar{\phi}'_m\rangle = \sum_{n=1}^N u_{mn}^* |\bar{\phi}_n\rangle$$

と表されます。（U行列の複素共役を使って定義しましたが、このようにすれば、後の共役の関係がすっきりとしたものになります。）この式の両辺の複素共役をとり、さらにケットベクトルを転置して、

$$\langle\bar{\phi}'_m| = \sum_{n=1}^N u_{mn} \langle\bar{\phi}_n|$$

となります。新しい基底ベクトルも規格直交系を成していますので、

$$\langle\bar{\phi}'_m|\bar{\phi}'_n\rangle = \delta_{mn}$$

が成立します。ここで、左辺を計算すると、

$$\begin{aligned} \langle\bar{\phi}'_m|\bar{\phi}'_n\rangle &= \sum_{i=1}^N u_{mi} \langle\bar{\phi}_i| \sum_{j=1}^N u_{nj}^* |\bar{\phi}_j\rangle \\ &= \sum_{i,j} u_{mi} u_{nj}^* \delta_{ij} \end{aligned}$$

$$= \sum_{i=1}^N u_{mi} u_{ni}^*$$

となります。よって、

$$\sum_{i=1}^N u_{mi} u_{ni}^* = \delta_{mn}$$

$$\therefore \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1N} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N1} & u_{N2} & \cdots & u_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11}^* & u_{21}^* & \cdots & u_{N1}^* \\ u_{12}^* & u_{22}^* & \cdots & u_{N2}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{1N}^* & u_{2N}^* & \cdots & u_{NN}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

となります。 $\bar{U}$ の転置をとり行列要素を複素共役にした行列を転置共役行列と言いますが、これを $\bar{U}^+$ で表します。このとき、上の式は、

$$\bar{U}\bar{U}^+ = \bar{E}$$

となります。従って、 $\bar{U}$ の転置共役行列は $\bar{U}$ の逆行列になります。

$$\bar{U}^+ = \bar{U}^{-1}$$

この関係式を満たす行列をユニタリー行列と言います。すなわち、

“規格直交系の基底ベクトルの変換を表す行列はユニタリー行列です。”

という結論が得られました。（ユニタリー行列による変換をユニタリー変換と言います。）ここで、 $\bar{U} = \bar{U}$ の両辺に左から $\bar{U}^+$ を作用させると、

$$\bar{U}^+ \bar{U} = \bar{E}$$

$$\therefore \begin{pmatrix} u_{11}^* & u_{21}^* & \cdots & u_{N1}^* \\ u_{12}^* & u_{22}^* & \cdots & u_{N2}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{1N}^* & u_{2N}^* & \cdots & u_{NN}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1N} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N1} & u_{N2} & \cdots & u_{NN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

$$\therefore \sum_{i=1}^N u_{im}^* u_{in} = \delta_{mn}$$

という関係式も成立します。また，基底ベクトルの逆変換も求めておきましょう。変換式は，

$$|\bar{\Phi}'_m\rangle = \sum_{n=1}^N u_{mn}^* |\bar{\Phi}_n\rangle$$

でしたが，両辺に u_{mi} をかけて m について和をとり，計算します。

$$\sum_{m=1}^N u_{mi} |\bar{\Phi}'_m\rangle = \sum_{m=1}^N u_{mi} u_{mn}^* |\bar{\Phi}_n\rangle$$

$$= \sum_{n=1}^N \delta_{in} |\bar{\Phi}_n\rangle$$

$$= |\bar{\Phi}_i\rangle$$

添え字の i を n に置き直すと，

$$|\bar{\Phi}_n\rangle = \sum_{m=1}^N u_{mn} |\bar{\Phi}'_m\rangle$$

という新しい基底ベクトルを古い基底ベクトルに逆変換する式が導かれました。

ユニタリー行列による基底ベクトルの変換に伴い、任意のベクトルと作用素行列はどのように変換するのでしょうか？まず、ケットベクトルですが、変換前の基底ベクトルで表し、それを変換後の基底ベクトルに逆変換した式を代入すると、

$$\begin{aligned} |\bar{\psi}\rangle &= \sum_{n=1}^N c_n |\bar{\phi}'_n\rangle \\ &= \sum_{n=1}^N c_n \left(\sum_{m=1}^N u_{mn} |\bar{\phi}'_m\rangle \right) \\ &= \sum_{m=1}^N \left(\sum_{n=1}^N u_{mn} c_n \right) |\bar{\phi}'_m\rangle \end{aligned}$$

となります。この式と、変換後の基底ベクトルで表した式、

$$|\psi\rangle = \sum_{m=1}^N c'_m |\bar{\phi}'_m\rangle$$

を比較して、

$$c'_m = \sum_{n=1}^N u_{mn} c_n$$

となります。故に、

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1N} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N1} & u_{N2} & \cdots & u_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}$$

$$\therefore |\bar{\psi}'\rangle = \bar{U}|\bar{\psi}\rangle$$

を得ます。最後の式の両辺の転置共役をとると、

$$\langle\bar{\psi}'| = \langle\bar{\psi}|\bar{U}^+$$

というブラベクトルの変換式も求められます。内積の変換式も求めておきましょう。

$$\langle\bar{\chi}'|\bar{\psi}'\rangle = (\langle\bar{\chi}|\bar{U}^+)(\bar{U}|\bar{\psi}\rangle)$$

$$= \langle\bar{\chi}|\bar{\psi}\rangle$$

となるので、内積はユニタリー変換に対して不変です。作用素行列の変換式も求めておきましょう。もとの作用素行列、

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix}$$

に対して、基底を変換した場合の新しい作用素行列を、

$$\hat{A}' = \begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \cdots & a'_{1N} \\ a'_{21} & a'_{22} & \cdots & a'_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a'_{N1} & a'_{N2} & \cdots & a'_{NN} \end{pmatrix}$$

とします．行列要素は,

$$a_{mn} = \langle \bar{\phi}_m | \hat{A} | \bar{\phi}_n \rangle$$

から,

$$a'_{mn} = \langle \bar{\phi}'_m | \hat{A} | \bar{\phi}'_n \rangle$$

へ変換されます．最後の式は次のように計算されます．

$$\begin{aligned} a'_{mn} &= \left(\sum_{i=1}^N u_{mi} \langle \bar{\phi}_i | \right) \hat{A} \left(\sum_{j=1}^N u_{nj}^* | \bar{\phi}_j \rangle \right) \\ &= \sum_{i,j} u_{mi} a_{ij} u_{nj}^* \\ &= \sum_{i,j} u_{mi} a_{ij} (u_{jn})^+ \\ &= \sum_{i,j} u_{mi} a_{ij} (u_{jn})^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \therefore \begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \cdots & a'_{1N} \\ a'_{21} & a'_{22} & \cdots & a'_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a'_{N1} & a'_{N2} & \cdots & a'_{NN} \end{pmatrix} \\
& = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1N} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N1} & u_{N2} & \cdots & u_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1N} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N1} & u_{N2} & \cdots & u_{NN} \end{pmatrix}^{-1}
\end{aligned}$$

$$\therefore \hat{A}' = \bar{U} \hat{A} \bar{U}^{-1}$$

故に, 変換式が求められました. また, この変換式の両辺に左から $\bar{U}^{-1}$ を, 右から $\bar{U}$ を作用させて計算すると,

$$\bar{U}^{-1} \hat{A}' \bar{U} = \bar{U}^{-1} \bar{U} \hat{A} \bar{U}^{-1} \bar{U}$$

$$= \widehat{E A E}$$

$$= \hat{A}$$

$$\therefore \hat{A} = \bar{U}^{-1} \hat{A}' \bar{U}$$

となります.

次に, 作用素行列の中で, 特に,

$$\hat{A} = \hat{A}^+$$

の関係を満たす行列を考えましょう. この行列をエルミート作用素行列と言います. エルミート作用素行列に対しては,

$$\langle \bar{x} | \hat{A} | \bar{\psi} \rangle = \langle \bar{x} | \hat{A}^+ | \bar{\psi} \rangle$$

$$\therefore \langle \bar{\chi} | \hat{A} | \bar{\psi} \rangle = \langle \hat{A} \bar{\chi} | \bar{\psi} \rangle$$

の関係式が成立します。ここで、エルミート作用素行列をユニタリー変換してみましょう。

$$\hat{A}' = \bar{U} \hat{A} \bar{U}^{-1}$$

と新しい作用素行列をつくり、転置共役をとり、計算します。

$$\begin{aligned} \hat{A}'^+ &= (\bar{U} \hat{A} \bar{U}^{-1})^+ \\ &= (\bar{U}^{-1})^+ \hat{A}^+ \bar{U}^+ \\ &= \bar{U} \hat{A} \bar{U}^{-1} \\ &= \hat{A}' \end{aligned}$$

すなわち、

“エルミート作用素行列をユニタリー変換した行列もエルミート作用素行列です。”

という結論が得られます。

関数の場合と同様に、ベクトル空間の場合も固有値問題を考えることができます。

$$\hat{A}|\bar{\psi}\rangle = a|\bar{\psi}\rangle$$

この方程式を固有方程式, $|\bar{\psi}\rangle$ を固有ベクトル, a は一般に複素数の定数で固有値と言います. 固有ベクトルは N 個あります. 固有値は最大で N 個ですが, 場合によっては 1 つの固有ベクトルに対して複数の固有値が対応することがあります. これを縮退と呼ぶのは, 関数の場合と同様です. ここで, 次の定理が成立します.

“エルミート作用素行列の固有値は実数です.”

この定理を証明しましょう. 固有方程式,

$$\hat{A}|\bar{\psi}\rangle = a|\bar{\psi}\rangle$$

が成立するものとします. ここで, $\hat{A}$ はエルミート作用素行列なので,

$$\langle\bar{\psi}|\hat{A}|\bar{\psi}\rangle = \langle\hat{A}\bar{\psi}|\bar{\psi}\rangle$$

$$\therefore a\langle\bar{\psi}|\bar{\psi}\rangle = a^*\langle\bar{\psi}|\bar{\psi}\rangle$$

$$\therefore a = a^*$$

したがって, 固有値 a は実数です. (証明終.) 次に, エルミート作用素行列 $\hat{A}$ についての, 固有ベクトルの性質について調べましょう.

$$\langle\bar{x}|\hat{A}|\bar{\psi}\rangle = \langle\hat{A}\bar{x}|\bar{\psi}\rangle$$

の関係において, ブラベクトル, ケットベクトルをそれぞれ m 番目と n

番目の固有ベクトルとして, $\langle \chi | = \langle \bar{\phi}_m |, |\bar{\psi} \rangle = |\bar{\phi}_n \rangle$ とおき, 計算します.

$$\langle \bar{\phi}_m | \hat{A} | \bar{\phi}_n \rangle = \langle \hat{A} \bar{\phi}_m | \bar{\phi}_n \rangle$$

$$\therefore a_n \langle \bar{\phi}_m | \bar{\phi}_n \rangle = a_m^* \langle \bar{\phi}_m | \bar{\phi}_n \rangle$$

エルミート演算子の固有値は実数なので,

$$(a_m - a_n) \langle \bar{\phi}_m | \bar{\phi}_n \rangle = 0$$

となります. 異なる固有状態についての固有値が等しくないとき, すなわち,

$$a_m \neq a_n$$

の場合,

$$\langle \bar{\phi}_m | \bar{\phi}_n \rangle = 0$$

の関係が成立します. つまり,

“エルミート作用素行列の異なる固有値に属する2つの固有ベクトルは直交します.”

という定理が証明されました. また, 固有ベクトルに適当な定数を掛けて規格化することができます.

$$\langle \bar{\phi}_n | \bar{\phi}_n \rangle = 1$$

固有ベクトルが g 重に縮退している場合を考えましょう。上の議論は縮退していないことを前提としていましたが、縮退しているときは次のグラム-シュミットの直交化法を使います。いま、

$$|\bar{\Phi}_1\rangle, |\bar{\Phi}_2\rangle, \dots, |\bar{\Phi}_g\rangle$$

が同じ固有値をもつ g 重に縮退した固有ベクトルとします。まず、

$$|\bar{\Phi}'_1\rangle = a|\bar{\Phi}_1\rangle$$

とおき、

$$\langle\bar{\Phi}'_1|\bar{\Phi}'_1\rangle = 1$$

となるように定数 a を決めます。次に、

$$|\bar{\Phi}'_2\rangle = b_1|\bar{\Phi}'_1\rangle + b_2|\bar{\Phi}_2\rangle$$

とおき、

$$\langle\bar{\Phi}'_1|\bar{\Phi}'_2\rangle = b_1 + b_2\langle\bar{\Phi}'_1|\bar{\Phi}_2\rangle = 0$$

$$\langle\bar{\Phi}'_2|\bar{\Phi}'_2\rangle = 1$$

の条件より、 b_1, b_2 を決定して、 $|\bar{\Phi}'_2\rangle$ を求めます。さらに、

$$|\bar{\Phi}'_3\rangle = c_1|\bar{\Phi}'_1\rangle + c_2|\bar{\Phi}'_2\rangle + c_3|\bar{\Phi}_3\rangle$$

とおき、同様な議論をします。以下、その繰り返しです。最終的に得られた直交条件を満たす固有ベクトルのダッシュをとります。このように縮退がある場合も必ず直交化することができます。以上の、直交条件と規格化条件をまとめると、

$$\langle \bar{\Phi}_m | \bar{\Phi}_n \rangle = \delta_{mn}$$

が成立します。すなわち、

“エルミート作用素行列の固有ベクトルの全体は、規格直交系を形成します。”

という重要な性質が判明しました。いままでの議論により、規格直交系を成すベクトルによって任意のベクトルが表されることが理解されます。従って、

“エルミート作用素行列の固有ベクトル全体は、基底ベクトルを張ることができます。”

という結論が得られました。

Q14-3 量子状態（状態ベクトル:ケットベクトルとブラベクトル）

いままでの Chapter で見てきた量子力学は、シュレディンガー方程式を中心とした波動力学と呼ばれる形式でした。波動力学では、量子状態は波動関数で、オブザーバブルは演算子で表されました。ここで、前の Section

で取り扱った N 次元複素ベクトル空間をさらに拡張した、無限次元複素ベクトル空間の行列を使って、新たに行列力学という形式の量子力学に書き直してみましょう。ベクトルの大きさのことをノルムと言いますが、ノルムの収束する無限次元複素ベクトル空間のことをヒルベルト空間と言います。行列表力学はヒルベルト空間によって記述されます。

量子状態とオブザーバブルという量子力学の2つの基礎概念を、行列を使って表しましょう。まず、この Section では量子状態を考えます。波動力学では、量子状態を表す任意の波動関数 ψ は、完全系である規格直交系 $\{\phi_1(\vec{x}), \phi_2(\vec{x}), \dots\}$ によって、次のように展開して表されました。

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \phi_n(\vec{x})$$

この式を、ケットベクトルを使って、次のように表しましょう。

$$|\bar{\psi}\rangle = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

要素はもとの n と同様に無限個あります。このケットベクトルは波動関数に代わるものであり、量子状態を表すものなので状態ベクトルと呼ばれます。状態ベクトルのブラベクトルは、

$$\langle \bar{\psi} | = (c_1^*(t) \quad c_2^*(t) \quad \dots)$$

です。ブラベクトルはケットベクトルの転置共役行列でした。概念の繋がりは、

ド・ブロイ波

$$\rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{波動力学；波動関数 = 確率振幅} \\ \text{行列力学；状態ベクトル（ケットベクトルとブラベクトル）} \end{array} \right\}$$

→ 量子状態

となります。ブラベクトルとケットベクトルの内積をつくると、

$$\begin{aligned} \langle \bar{\psi} | \psi \rangle &= (c_1^*(t) \quad c_2^*(t) \quad \cdots) \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \\ &= c_1^*(t)c_1(t) + c_2^*(t)c_2(t) + \cdots \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} |c_n(t)|^2 \\ &= 1 \end{aligned}$$

となりますが、これは粒子の存在確率が1であるという、状態ベクトルの規格化条件を表しています。

次に、規格直交系を成す標準基底ベクトルのケットベクトルを表します。

$$|\bar{\Phi}_1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, |\bar{\Phi}_2\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \cdots, |\bar{\Phi}_n\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1(n \text{ 番目}) \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \cdots$$

任意のケットベクトルは標準基底ベクトルで表されます。

$$\begin{aligned}
|\bar{\psi}\rangle &= \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \\
&= c_1(t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} + c_2(t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} + \cdots \\
&= c_1(t)|\bar{\phi}_1\rangle + c_2(t)|\bar{\phi}_2\rangle + \cdots \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t)|\bar{\phi}_n\rangle
\end{aligned}$$

ブラベクトルの標準基底ベクトルも同様に定義できます。

$$\begin{aligned}
\langle\bar{\phi}_1| &\equiv (1 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \cdots) \\
\langle\bar{\phi}_2| &\equiv (0 \quad 1 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \cdots) \\
&\vdots \\
\langle\bar{\phi}_n| &\equiv (0 \quad \cdots \quad 0 \quad 1(\text{n 番目}) \quad 0 \quad \cdots) \\
&\vdots
\end{aligned}$$

ケットベクトルの場合と同様に、任意のブラベクトルは標準基底ベクトルで展開できます。

$$\langle\bar{\psi}| = \sum_{n=1}^{\infty} c_n^*(t)\langle\bar{\phi}_n|$$

標準基底ベクトルの間には,

$$\langle \bar{\phi}_m | \bar{\phi}_n \rangle = \delta_{mn}$$

が成り立っています. この条件は規格直交条件とありますが, 具体的に標準基底ベクトルを使い,

$$\langle \bar{\phi}_1 | \bar{\phi}_1 \rangle = (1 \quad 0 \quad 0 \quad \dots) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = 1$$

$$\langle \bar{\phi}_1 | \bar{\phi}_2 \rangle = (1 \quad 0 \quad 0 \quad \dots) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0$$

のように, 確認されます. また, 規格直交条件は波動力学での,

$$\int \phi_m^*(\vec{x}) \phi_n(\vec{x}) d^3x = \delta_{mn}$$

という関係式 (これも規格直交条件といいました.) に対応していることは明らかですね.

Q14-4 オブザーバブル (線形エルミート行列)

波動力学では, オブザーバブルは線形エルミート演算子 $\hat{A}$ で表現されました. ここで, 波動力学での固有方程式,

$$\hat{A} \phi_n(\vec{x}) = a_n \phi_n(\vec{x})$$

において、左から $\phi_m^*(\vec{x})$ を掛け、空間について積分します。

$$\int \phi_m^*(\vec{x}) \hat{A} \phi_n(\vec{x}) d^3x = a_n \int \phi_m^*(\vec{x}) \phi_n(\vec{x}) d^3x$$

$$= a_n \delta_{mn}$$

この関係式を m 行 n 列の行列要素をもつ行列の式と見なすことができます。(もとの固有関数が無限個あるので、 m と n の次元は無限大になります。) すなわち、

$$A_{mn} \equiv \int \phi_m^*(\vec{x}) \hat{A} \phi_n(\vec{x}) d^3x$$

と定義すると、上式は、

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \cdots \\ 0 & a_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

と表すことができます。ここで、ブラケットの記法を使うと、

$$A_{mn} = \langle \bar{\phi}_m | \hat{A} | \bar{\phi}_n \rangle$$

と表すことができます。

* この表式で、ケットベクトル $|\bar{\phi}_n\rangle$ やブラベクトル $\langle \bar{\phi}_m|$ は具体的に何を表すのか？標準基底ベクトルか？

A_{mn} は線形エルミート行列です。(線形エルミート作用素行列というべきかもしれませんが、波動力学での線形エルミート演算子という用語と対照的するために、作用素という言葉は省略することにします。) A_{mn} は行列ですから、線形性をもっていることは、

のように示すことができます。エルミート性については、以下のように証明できます。

Q14-5 行列力学の展開 1（表示）

Q14-6 行列力学の展開 2（併立するオブザーバブル）

Q14-7 行列力学の展開 3（併立しないオブザーバブル）

Q14-8 行列力学の展開 4 (時間発展演算子)

Q14-9 行列力学の展開 5 (描像とハイゼンベルク方程式)

Q21 同種粒子

Q21-1 同種粒子

同種粒子とは、原理的に区別することができない粒子のことをいいます。素粒子は同種粒子です。つまり、電子、陽子、中性子、クォーク、レプトンといった粒子は、それぞれにおいて同種粒子です。

Q21-2 対称的状態と反対称的状態

1 種類の同種粒子からなる多粒子系について考えます。N 粒子系の状態の波動関数を、次のように表します。

$$\psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$$

N 粒子系の状態について、対称的状態と反対称的状態というものを定義しておきましょう。対称的状態とは、1 対の粒子の入れ替えについて、変化しない状態のことをいいます。

$$\psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_N) = \psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_N)$$

それに対して、反対称的状態とは、1 対の粒子の入れ替えについて、符号が反対になる状態のことをいいます。

$$\psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_N) = -\psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_N)$$

同種粒子からなる多粒子系については、次のような原理が成立します。

原理: “同種粒子の状態は、対称的状態か、または反対称的状態です。”

この原理を導出しておきましょう。まず、粒子の入れ替えを行う演算子 $\hat{P}$ を次のように定義しておきます。

$$\hat{P}_{ij}\psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_N) = \psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_N)$$

このとき、同種粒子の場合、この式の右辺は元の状態の定数倍になると仮定しましょう。

$$\begin{aligned}\hat{P}_{ij}\psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_N) &= \psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_N) \\ &= c\psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_N)\end{aligned}$$

ここで、2回続けて同じ1対の粒子の入れ替えを行うと、

$$\begin{aligned}\hat{P}_{ij} \cdot \hat{P}_{ij}\psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_N) &= \hat{P}_{ij}c\psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_N) \\ &= c^2\psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_N)\end{aligned}$$

となります。2回同じ1対の粒子を入れ換えると、元の状態と完全に一致するはずです。

$$c^2\psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_N) = \psi(t; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_N)$$

したがって、

$$c^2 = 1$$

$$\therefore c = \pm 1$$

となります。故に、同種粒子の状態は、対称的状态か、または反対称的状态になります。

Q21-3 スピンと統計の関係

一般に、角運動量の値は整数か、または半整数になります。スピンの場合も例外ではありません。整数スピンをもつ粒子をボーズ粒子（ボゾン）といい、半整数スピンをもつ粒子をフェルミ粒子（フェルミオン）といいます。ボゾンの状態は対称的状态であり、ボーズ統計に従います。フェルミオンの状態は反対称的状态であり、フェルミ統計に従います。ボゾンの代表例は光子（フォトン）であり、フェルミオンの代表例は電子です。

Q21-4 パウリの排他律

フェルミオンの場合、その状態は反対称的状态でした。N 個のフェルミオンからなる系の波動関数を、

$$\psi = \psi(t; \vec{x}_1, \sigma_1, \dots, \vec{x}_i, \sigma_i, \dots, \vec{x}_j, \sigma_j, \dots, \vec{x}_N, \sigma_N)$$

と表します。ただし、 σ はスピン座標です。このとき、任意の2つのフェルミオンの座標の入れ替えを行うと、

$$\begin{aligned} \hat{P}_{ij}\psi(t; \vec{x}_1, \sigma_1, \dots, \vec{x}_i, \sigma_i, \dots, \vec{x}_j, \sigma_j, \dots, \vec{x}_N, \sigma_N) \\ = \psi(t; \vec{x}_1, \sigma_1, \dots, \vec{x}_j, \sigma_j, \dots, \vec{x}_i, \sigma_i, \dots, \vec{x}_N, \sigma_N) \end{aligned}$$

となります。フェルミオンの状態は反対称的状态ですので、

$$\begin{aligned} \psi(t; \vec{x}_1, \sigma_1, \dots, \vec{x}_j, \sigma_j, \dots, \vec{x}_i, \sigma_i, \dots, \vec{x}_N, \sigma_N) \\ = -\psi(t; \vec{x}_1, \sigma_1, \dots, \vec{x}_i, \sigma_i, \dots, \vec{x}_j, \sigma_j, \dots, \vec{x}_N, \sigma_N) \end{aligned}$$

の関係が成立します。ただし、 i と j は、1 から N までの中の任意の 2 個の粒子を表します。ここで、もし、2 つのフェルミオンが同じ座標を占めて、それが $(\vec{x}_i, \sigma_i)$ と $(\vec{x}_j, \sigma_j)$ だったとします。このとき、上の式からわかるように、波動関数は 0 になってしまいます。つまり、

“フェルミオンはスピンを含め、同一の状態を 2 つ以上占めることができません。”

というパウリの排他律という原理が成立するのです。

Q22 波動場の正準量子化（第二量子化）

Q22-1 波動場の正準量子化（第二量子化）とハイゼンベルク方程式

量子力学を発展させて素粒子論や物性理論へ進んだ場合、場を量子化する必要性が生じてきます。場といえば、電磁場がすぐに思いつきますが、時間と空間に依存した物理量で、物理的に意味のあるものならば、考えるべき対象となります。例えば、時間と空間に依存する量である波動関数も、場であるということが言えます。それ以外に、特殊相対論的量子力学で登場してくる方程式を満たす場も取り扱います。（詳しくは場の量子論の Report で取り扱います。）それらの場を量子化する場合、物理量すなわちオブザーバブルである場を、量子力学の一般論に従い、演算子に格上げします。場の量子化のことを第二量子化ともいいます。演算子に格上げされた場は、フーリエ展開されると、その展開係数が、ある代数的関係を満たします。その代数的関係というのが、調和振動子の代数学です。以下の Section で見ていくように、場の量は、調和振動子の代数学を満たす生成消滅演算子と呼ばれるもので表されることになります。

場の量子化を扱うこの Chapter では、ハイゼンベルク描像で議論を進めます。この描像ではオブザーバブルが時間的に変化する、ケットやブラの量子状態には時間依存性はありません。このとき、基礎方程式であるハイゼンベルク方程式が成立します。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}]$$

$\hat{A}(t)$ は一般的なオブザーバブル、 $\hat{H}$ はハミルトニアンを表します。また、右辺の括弧は交換子で、

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

と定義されるもので、文字の上の記号ハットはその量が演算子であることを示しています。

ハイゼンベルク方程式を基礎にして、量子化を実行する方法について、調和振動子を考えてみましょう。調和振動子の座標を x 、その角振動数を ω とすると、古典論での運動方程式は、

$$\frac{d^2}{dt^2}x(t) = -\omega^2 x(t)$$

です。この方程式は、

$$\begin{cases} m \frac{d}{dt}x(t) = p(t) \\ \frac{d}{dt}p(t) = -m\omega^2 x(t) \end{cases} \quad (1)$$

と同等になります。(1)式が、ハイゼンベルク方程式、

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt}\hat{x}(t) = [\hat{x}(t), \hat{H}] \\ i\hbar \frac{d}{dt}\hat{p}(t) = [\hat{p}(t), \hat{H}] \end{cases} \quad (2)$$

と一致するように、ハミルトニアン $\hat{H}$ と、 $\hat{x}(t), \hat{p}(t)$ の満たす代数関係を同時に決めてみましょう。(1)式は古典論の方程式、(2)式は量子力学の方程式です。代数関係を決定することで、量子化を実現することができるのです。何故なら、 $x(t), p(t)$ が量子化される前は、ただの数です(c-数といいます。)が、それらが、代数関係を設定した後では演算子になっているからです。(q-数といいます。演算子は作用の順番が意味を持つのでしたね。

ですから、代数関係によって、c-数を、演算子である q-数に格上げできるのです。) 代数関係を設定することにより、実行される量子化のことを正準量子化といいます。次の2つの Section で、2通りの場合について考えてみます。

Q22-2 調和振動子の代数学と生成消滅演算子 1 (ボゾンの場合)

最初の設定として、

$$\begin{cases} \hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2(t) + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2(t) \\ [\hat{x}(t), \hat{p}(t)] = i\hbar \\ [\hat{x}(t), \hat{x}(t)] = 0 \\ [\hat{p}(t), \hat{p}(t)] = 0 \end{cases} \quad (3)$$

として量子化する場合を考えます。これらは、通常の調和振動子のハミルトニアンと量子力学一般に成立する交換関係です。この交換関係が、代数関係になります。ここで、ハイゼンベルク方程式(2)式を使って、古典的な方程式(1)式の関係を量子化したものが導出されることを確認しておきます。

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{x}(t) &= [\hat{x}(t), \hat{H}] \\ &= \left[\hat{x}(t), \frac{1}{2m}\hat{p}^2(t) + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2(t) \right] \\ &= \frac{1}{2m} [\hat{x}(t), \hat{p}^2(t)] \\ &= \frac{1}{2m} (\hat{p}(t)[\hat{x}(t), \hat{p}(t)] + [\hat{x}(t), \hat{p}(t)]\hat{p}(t)) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2m} (\hat{p}(t) \cdot i\hbar + i\hbar \hat{p}(t))$$

$$= \frac{i\hbar}{m} \hat{p}(t)$$

$$\therefore m \frac{d}{dt} \hat{x}(t) = \hat{p}(t)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{p}(t) = [\hat{p}(t), \hat{H}]$$

$$= \left[\hat{p}(t), \frac{1}{2m} \hat{p}^2(t) + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2(t) \right]$$

$$= \frac{m\omega^2}{2} [\hat{p}(t), \hat{x}^2(t)]$$

$$= \frac{m\omega^2}{2} (\hat{x}(t) [\hat{p}(t), \hat{x}(t)] + [\hat{p}(t), \hat{x}(t)] \hat{x}(t))$$

$$= \frac{m\omega^2}{2} \{ \hat{x}(t) (-i\hbar) + (-i\hbar) \hat{x}(t) \}$$

$$= -i\hbar m\omega^2 \hat{x}(t)$$

$$\therefore \frac{d}{dt} \hat{p}(t) = -m\omega^2 \hat{x}(t)$$

確かに、(1)式の関係量子化したものが導出されました。

(3)式のような交換関係による量子化は、通常の調和振動子を正準変数で量子化したものと同じであり、ハミルトニアンは、固有値、

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

をもちました。(Report “量子力学 1”の Chapter “束縛状態:例 (調和振動子)”を参照されてください。) ここで,

$$\begin{cases} \hat{a}(t) \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}(t) + i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}(t) \\ \hat{a}^+(t) \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}(t) - i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}(t) \end{cases} \quad (4)$$

を定義して新しい演算子を導入します。右辺の係数が気になりますが, (4) 式は, Chapter “束縛状態:例 (調和振動子)”の Section “演算子法による解法”で出てきた式と全く同じです。(3)式の交換関係を使って計算すると,

$$\begin{aligned} [\hat{a}(t), \hat{a}^+(t)] &= [\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}(t) + i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}(t), \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}(t) - i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}(t)] \\ &= -\frac{i}{2\hbar} [\hat{x}(t), \hat{p}(t)] + \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}(t), \hat{x}(t)] \\ &= -\frac{i}{2\hbar} i\hbar + \frac{i}{2\hbar} (-i\hbar) \end{aligned}$$

$$\therefore [\hat{a}(t), \hat{a}^+(t)] = 1$$

となります。また,

$$[\hat{a}(t), \hat{a}(t)] = [\hat{a}^+(t), \hat{a}^+(t)] = 0$$

は, 明らかに成立します。(4)式の逆変換も計算しておきます。(4)式の 2

つの式を辺々足して,

$$\hat{a}(t) + \hat{a}^+(t) = 2\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}(t)$$

$$\therefore \hat{x}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}(t) + \hat{a}^+(t))$$

となります. (4)式の2つの式を辺々引くと,

$$\hat{a}(t) - \hat{a}^+(t) = 2i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}(t)$$

$$\therefore \hat{p}(t) = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}(t) - \hat{a}^+(t))$$

となります.

演算子 $\hat{a}(t), \hat{a}^+(t)$ はボーズ演算子といいますが, その性質をみておくことにしましょう. まず, (3)式のハミルトニアンを計算します.

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m}\hat{p}^2(t) + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2(t) \\ &= \frac{1}{2m}\left\{-i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}(t) - \hat{a}^+(t))\right\}\left\{-i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}(t) - \hat{a}^+(t))\right\} \\ &\quad + \frac{1}{2}m\omega^2\left\{\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}(t) + \hat{a}^+(t))\right\}\left\{\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}(t) + \hat{a}^+(t))\right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{4}\hbar\omega(\hat{a}(t)\hat{a}(t) - \hat{a}(t)\hat{a}^+(t) - \hat{a}^+(t)\hat{a}(t) + \hat{a}^+(t)\hat{a}^+(t)) \\
&\quad + \frac{1}{4}\hbar\omega(\hat{a}(t)\hat{a}(t) + \hat{a}(t)\hat{a}^+(t) + \hat{a}^+(t)\hat{a}(t) \\
&\quad + \hat{a}^+(t)\hat{a}^+(t))
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}(t)\hat{a}^+(t) + \hat{a}^+(t)\hat{a}(t))$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\{(\hat{a}^+(t)\hat{a}(t) + 1) + \hat{a}^+(t)\hat{a}(t)\}$$

$$= \hbar\omega(\hat{a}^+(t)\hat{a}(t) + \frac{1}{2})$$

と表されます．ここで，ボーズ演算子 $\hat{a}(t)$ に対して，ハイゼンベルク方程式，

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}]$$

を適用して，その時間依存性を調べてみます．

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{a}(t) = [\hat{a}(t), \hbar\omega(\hat{a}^+(t)\hat{a}(t) + \frac{1}{2})]$$

$$= \hbar\omega[\hat{a}(t), \hat{a}^+(t)\hat{a}(t)]$$

$$= \hbar\omega(\hat{a}^+(t)[\hat{a}(t), \hat{a}(t)] + [\hat{a}(t), \hat{a}^+(t)]\hat{a}(t))$$

$$= \hbar\omega(\hat{a}^+(t) \cdot 0 + 1 \cdot \hat{a}(t))$$

$$\therefore \frac{d}{dt} \hat{a}(t) = -i\omega \hat{a}(t)$$

$$\therefore \hat{a}(t) = \text{const} \times \exp(-i\omega t)$$

$$\therefore \hat{a}(0) = \text{const} \times 1$$

$$\therefore \hat{a}(t) = \hat{a}(0) \cdot \exp(-i\omega t)$$

ここで,

$$\hat{a} \equiv \hat{a}(0) \quad (\hat{a}^+ \equiv \hat{a}^+(0))$$

と定義すると,

$$\hat{a}(t) = \hat{a} \cdot \exp(-i\omega t)$$

となります。さらに、この式の両辺の複素共役をとると,

$$\hat{a}^+(t) = \hat{a}^+ \cdot \exp(i\omega t)$$

となります。 $\hat{a}(t), \hat{a}^+(t)$ についての交換関係の式で、 $t=0$ において、 $\hat{a}, \hat{a}^+$ についての交換関係,

$$\begin{cases} [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \\ [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^+, \hat{a}^+] = 0 \end{cases}$$

が成立します。話をハミルトニアンに戻しましょう。調和振動子のエネルギー固有値は,

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

でしたので、演算子 $\hat{a}^+(t)\hat{a}(t)$ は、固有値 $n(=0,1,2,\dots)$ をもつことがわかります。そこで、演算子 $\hat{a}^+(t)\hat{a}(t)$ を個数演算子 $\hat{N}$,

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^+(t)\hat{a}(t)$$

として定義しましょう。このとき、

$$\hat{N} = \hat{a}^+ \cdot \exp(i\omega t) \times \hat{a} \cdot \exp(-i\omega t)$$

$$= \hat{a}^+ \hat{a}$$

となって、個数演算子 $\hat{N}$ は時間に依存しません。したがって、 $\hat{N}$ の固有値 n も時間には無関係になります。さらに、固有状態を $|n\rangle$ と表しますが、ハイゼンベルク描像では状態ベクトルは無条件に時間に依存しません。結局、固有方程式は、

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

と表せますが、全てのパーツが時間に依りません。そこで、以下この Section では、ボーズ演算子は、 $\hat{a}(t), \hat{a}^+(t)$ ではなく、時間に依存しない $\hat{a}, \hat{a}^+$ を使うことにします。

さて、次の計算をします。

$$|(\hat{a}|n\rangle)|^2 \geq 0$$

$$\therefore (\hat{a}|n\rangle)^+(\hat{a}|n\rangle) \geq 0$$

$$\therefore \langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle \geq 0$$

$$\therefore n\langle n|n\rangle \geq 0$$

$$\therefore n \geq 0$$

となります。確かに、 n は 0 または正であることが確認されました。また、

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{a}] &= \hat{N}\hat{a} - \hat{a}\hat{N} \\ &= \hat{a}^+\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} \\ &= (\hat{a}^+\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+)\hat{a} \\ &= -\hat{a} \end{aligned}$$

$$\therefore \hat{N}\hat{a} - \hat{a}\hat{N} = -\hat{a}$$

$$\therefore \hat{N}\hat{a}|n\rangle - \hat{a}\hat{N}|n\rangle = -\hat{a}|n\rangle$$

$$\therefore \hat{N}\hat{a}|n\rangle - n(\hat{a}|n\rangle) = -\hat{a}|n\rangle$$

$$\therefore \hat{N}\hat{a}|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle$$

したがって、状態 $\hat{a}|n\rangle (= |n-1\rangle)$ は $\hat{N}$ の固有状態で、 $n-1$ の固有値をもちます。演算子 $\hat{a}$ は個数演算子の固有値を1つ減らす働きをもつことになりましたので、消滅演算子といいます。消滅演算子 $\hat{a}$ を繰り返し状態 $|n\rangle$ に作用させていくと、その固有値はいずれ0になります。（ $n \geq 0$ の性質があるので、負の固有値はありません。）固有値0の状態を真空状態といい、記号 $|0\rangle$ で表し、次式で定義します。

$$\hat{a}|0\rangle \equiv 0$$

さらに，規格化条件，

$$\langle 0|0\rangle = 1$$

も成立するとしておきます．このとき，

$$\hat{N}|0\rangle = \hat{a}^+\hat{a}|0\rangle$$

$$= \hat{a}^+ \cdot 0$$

$$= 0$$

となります．つまり，真空状態の個数演算子の固有値は 0 になります．（粒子数が 0 の状態が真空状態です．）演算子 $\hat{a}^+$ の性質も調べましょう．

$$[\hat{N}, \hat{a}^+] = \hat{N}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{N}$$

$$= \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}$$

$$= \hat{a}^+(\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a})$$

$$= \hat{a}^+$$

$$\therefore \hat{N}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{N} = \hat{a}^+$$

$$\therefore \hat{N}\hat{a}^+|n\rangle - \hat{a}^+\hat{N}|n\rangle = \hat{a}^+|n\rangle$$

$$\therefore \hat{N}\hat{a}^+|n\rangle - n(\hat{a}^+|n\rangle) = \hat{a}^+|n\rangle$$

$$\therefore \hat{N}\hat{a}^+|n\rangle = (n+1)\hat{a}^+|n\rangle$$

したがって、状態 $\hat{a}^+|n\rangle (= |n+1\rangle)$ は $n+1$ の固有値をもちます。演算子 $\hat{a}^+$ は個数演算子の固有値を1つ増やす働きをもつことになりましたので、生成演算子といいます。

ここで、生成演算子 $\hat{a}^+$ を n 回だけ真空状態 $|0\rangle$ に作用させると、粒子が n 個生成されますので、固有状態 $|n\rangle$ をつくることができます。規格化条件まで考慮して、

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle$$

とします。このとき、固有方程式が成立することが、次のように確認されます。

$$\begin{aligned}\hat{N}|n\rangle &= \hat{a}^+\hat{a} \cdot \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}^+(\hat{a}^+\hat{a} + 1)(\hat{a}^+)^{n-1}|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}(\hat{a}^+)^{n-1}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}^+\hat{a}^+(\hat{a}^+\hat{a} + 1)(\hat{a}^+)^{n-2}|0\rangle + |n\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^3\hat{a}(\hat{a}^+)^{n-2}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle + |n\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^3\hat{a}(\hat{a}^+)^{n-2}|0\rangle + 2|n\rangle\end{aligned}$$

⋮

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n \hat{a} \hat{a}^+ |0\rangle + (n-1)|n\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n (\hat{a}^+ \hat{a} + 1) |0\rangle + (n-1)|n\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^{n+1} \hat{a} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle + (n-1)|n\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^{n+1} \times 0 + n|n\rangle$$

$$\therefore \hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

次のように，規格化条件も成立します．

$$\langle n|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle 0|(\hat{a})^n \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle$$

$$= \frac{1}{n!} \langle 0|(\hat{a})^{n-1} (\hat{a}^+ \hat{a} + 1) (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle$$

$$= \frac{1}{n} \left(\frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} \langle 0|(\hat{a})^{n-1} \hat{a}^+ \hat{a} \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle \right. \\ \left. + \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} \langle 0|(\hat{a})^{n-1} \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle \right)$$

$$= \frac{1}{n} (\langle n-1|\hat{a}^+ \hat{a}|n-1\rangle + \langle n-1|n-1\rangle)$$

$$= \frac{1}{n} \{ (n-1) \langle n-1 | n-1 \rangle + \langle n-1 | n-1 \rangle \}$$

$$= \langle n-1 | n-1 \rangle$$

$$\vdots$$

$$= \langle 0 | 0 \rangle$$

$$\therefore \langle n | n \rangle = 1$$

直交条件も成立します。 $m \neq n$ のとき、

$$\langle m | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{m!}} \langle 0 | (\hat{a})^m \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n | 0 \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{m!}} \cdot \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle 0 | (\hat{a})^{m-1} (\hat{a}^+ \hat{a} + 1) (\hat{a}^+)^{n-1} | 0 \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{m}} \cdot \frac{1}{\sqrt{n}} \left(\frac{1}{\sqrt{(m-1)!}} \langle 0 | (\hat{a})^{m-1} \hat{a}^+ \hat{a} \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} (\hat{a}^+)^{n-1} | 0 \rangle \right. \\ \left. + \frac{1}{\sqrt{(m-1)!}} \langle 0 | (\hat{a})^{m-1} \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} (\hat{a}^+)^{n-1} | 0 \rangle \right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{m}} \cdot \frac{1}{\sqrt{n}} (\langle m-1 | \hat{a}^+ \hat{a} | n-1 \rangle + \langle m-1 | n-1 \rangle)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{m}} \cdot \frac{1}{\sqrt{n}} \{ (n-1) \langle m-1 | n-1 \rangle + \langle m-1 | n-1 \rangle \}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{m}} \cdot \frac{1}{\sqrt{n}} n \langle m-1 | n-1 \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{m}} \cdot \frac{1}{\sqrt{n}} n \frac{1}{\sqrt{m-1}} \cdot \frac{1}{\sqrt{n-1}} (n-1) \langle m-2 | n-2 \rangle$$

⋮

となります． $m > n$ の場合，

$$\langle m | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{m(m-1) \cdots \{m-(n-1)\}}} \frac{1}{\sqrt{n(n-1) \cdots \{n-(n-1)\}}} n(n-1) \cdots \{n-(n-1)\} \langle m-n | 0 \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{m(m-1) \cdots \{m-(n-1)\}}} \frac{1}{\sqrt{n!}} n! \frac{1}{\sqrt{(m-n)!}} \langle 0 | (\hat{a})^{m-n} | 0 \rangle$$

$$= 0$$

となります． ただし， 最後の変形は， 真空の定義式，

$$\hat{a}|0\rangle \equiv 0$$

を使いました． 一方， $m < n$ の場合，

$$\langle m | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{m(m-1) \cdots \{m-(m-1)\}}} \frac{1}{\sqrt{n(n-1) \cdots \{n-(m-1)\}}} n(n-1) \cdots \{n-(m-1)\} \langle 0 | n-m \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{m!}} \frac{1}{\sqrt{n(n-1) \cdots \{n-(m-1)\}}} n(n-1) \cdots \{n-(m-1)\} \frac{1}{\sqrt{(n-m)!}} \langle 0 | (\hat{a}^+)^{n-m} | 0 \rangle$$

$$= 0$$

となります。ただし、最後の変形は、真空の定義式のエルミート共役をとった式、

$$\langle 0|\hat{a}^+ = 0$$

を使いました。まとめて、規格直交条件、

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$$

と表しておきます。ただし、右辺の記号はクロネッカのデルタ、

$$\delta_{mn} \equiv \begin{cases} 1 & (m = n) \\ 0 & (m \neq n) \end{cases}$$

です。

生成消滅演算子を用いて、個数演算子の固有値 n の数を 1 つずつ増減できます。したがって、固有値 n の数を粒子数とみなすことができます。場の量子論において、粒子は生まれたり、消えたりする量になります。このように、交換関係が成立する生成消滅演算子 $\hat{a}^+, \hat{a}$ については、粒子数が 0 から無限大になります。この場合、粒子はボゾンです。

実際のボーズ粒子は運動量をもっていますから、そのような場合に応用できるように、代数を拡張しておきます。すなわち、演算子 $\hat{a}, \hat{a}^+$ を $\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}^+(\vec{k})$ としておきます。このとき、交換関係は、

$$\begin{cases} [\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}^+(\vec{k}')] = \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \\ [\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}(\vec{k}')] = [\hat{a}^+(\vec{k}), \hat{a}^+(\vec{k}')] = 0 \end{cases}$$

となります。拡張された個数演算子 $\hat{N}(\vec{k})$,

$$\hat{N}(\vec{k}) \equiv \hat{a}^+(\vec{k})\hat{a}(\vec{k})$$

の固有値 n_ℓ は,

$$n_\ell = 0, 1, 2, \dots, \infty \quad (\ell = 1, 2, \dots)$$

であり, 規格直交する状態ベクトルは,

$$\begin{aligned} |n_1, \vec{k}_1; n_2, \vec{k}_2; \dots\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n_1!}} (\hat{a}^+(\vec{k}_1))^{n_1} \cdot \frac{1}{\sqrt{n_2!}} (\hat{a}^+(\vec{k}_2))^{n_2} \cdot \dots |0\rangle \\ &= \prod_{\ell=1} \frac{1}{\sqrt{n_\ell!}} (\hat{a}^+(\vec{k}_\ell))^{n_\ell} |0\rangle \end{aligned}$$

で与えられます。この状態ベクトルの空間をフォック空間といいます。ただし, ケットベクトル $|0\rangle$ は真空状態で,

$$\hat{a}(\vec{k})|0\rangle \equiv 0 = \langle 0|\hat{a}^+(\vec{k})$$

$$\langle 0|0\rangle = 1$$

を満たします。

Q22-3 調和振動子の代数学と生成消滅演算子 2 (フェルミオンの場合)

調和振動子の運動方程式(1)式が, ハイゼンベルク方程式(2)と一致するような 2 番目の量子化の方法として,

$$\begin{cases} \hat{H} = i\omega\hat{x}(t)\hat{p}(t) \\ \{\hat{x}(t), \hat{p}(t)\}_+ = 0 \\ \{\hat{x}(t), \hat{x}(t)\}_+ = 2\hat{x}^2(t) = \frac{\hbar}{m\omega} \\ \{\hat{p}(t), \hat{p}(t)\}_+ = 2\hat{p}^2(t) = \hbar m\omega \end{cases} \quad (5)$$

と設定してみましょう。ただし,

$$\{\hat{A}, \hat{B}\}_+ \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

と定義される括弧は, 反交換子と呼ばれる記号です。したがって, (5)の3つの式からなる代数関係は, 反交換関係といいます。(5)式のハミルトニアンも反交換関係も, (3)式のものとは全く異なるものです。しかし, ハイゼンベルク方程式(2)式を計算してみると, 調和振動子の方程式(1)式を量子化したものに一致することが, 以下のように確認されます。

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{x}(t) &= [\hat{x}(t), \hat{H}] \\ &= [\hat{x}(t), i\omega\hat{x}(t)\hat{p}(t)] \\ &= i\omega(\hat{x}(t)\hat{x}(t)\hat{p}(t) - \hat{x}(t)\hat{p}(t)\hat{x}(t)) \\ &= i\omega\{\hat{x}(t)\hat{x}(t)\hat{p}(t) - \hat{x}(t)(-\hat{x}(t)\hat{p}(t))\} \\ &= i\omega 2\hat{x}^2(t)\hat{p}(t) \\ &= i\omega \frac{\hbar}{m\omega} \hat{p}(t) \\ &= \frac{i\hbar}{m} \hat{p}(t) \end{aligned}$$

$$\therefore \frac{d}{dt} \hat{x}(t) = \frac{1}{m} \hat{p}(t)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{p}(t) = [\hat{p}(t), \hat{H}]$$

$$= [\hat{p}(t), i\omega \hat{x}(t) \hat{p}(t)]$$

$$= i\omega (\hat{p}(t) \hat{x}(t) \hat{p}(t) - \hat{x}(t) \hat{p}(t) \hat{p}(t))$$

$$= i\omega \{(-\hat{x}(t) \hat{p}(t)) \hat{p}(t) - \hat{x}(t) \hat{p}(t) \hat{p}(t)\}$$

$$= -i\omega \hat{x}(t) \cdot 2\hat{p}^2(t)$$

$$= -i\omega \hat{x}(t) \hbar m \omega$$

$$= -i\hbar m \omega^2 \hat{x}(t)$$

$$\therefore \frac{d}{dt} \hat{p}(t) = -m\omega^2 \hat{x}(t)$$

確かに、(1)式の関係を量子化したものが導出されました。

また、

$$(\hat{H} - \frac{1}{2} \hbar \omega)(\hat{H} + \frac{1}{2} \hbar \omega) = \hat{H}^2 - \frac{1}{4} \hbar^2 \omega^2$$

$$= -\omega^2 \hat{x}(t) \hat{p}(t) \hat{x}(t) \hat{p}(t) - \frac{1}{4} \hbar^2 \omega^2$$

$$= -\omega^2 \hat{x}(t) (-\hat{x}(t) \hat{p}(t)) \hat{p}(t) - \frac{1}{4} \hbar^2 \omega^2$$

$$\begin{aligned}
&= \omega^2 \hat{x}^2(t) \hat{p}^2(t) - \frac{1}{4} \hbar^2 \omega^2 \\
&= \omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{\hbar m\omega}{2} - \frac{1}{4} \hbar^2 \omega^2 \\
&= 0
\end{aligned}$$

と、なります。したがって、ハミルトニアン固有値は、

$$E = \pm \frac{1}{2} \hbar \omega$$

すなわち、

$$E_n = \hbar \omega \left(n - \frac{1}{2} \right) \quad (n = 0, 1)$$

と表せます。ここで、(4)式と同様に、

$$\begin{cases} \hat{C}(t) \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}(t) + i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}(t) \\ \hat{C}^+(t) \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}(t) - i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}(t) \end{cases} \quad (6)$$

と、新しい演算子を定義します。このとき、

$$\begin{aligned}
\{\hat{C}(t), \hat{C}^+(t)\}_+ &= \left\{ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}(t) + i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}(t), \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}(t) - i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}(t) \right\}_+ \\
&= \frac{m\omega}{2\hbar} \{\hat{x}(t), \hat{x}(t)\}_+ + \frac{1}{2m\omega\hbar} \{\hat{p}(t), \hat{p}(t)\}_+
\end{aligned}$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar} \frac{\hbar}{m\omega} + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hbar m\omega$$

$$\therefore \{\hat{C}(t), \hat{C}^+(t)\}_+ = 1$$

$$\{\hat{C}(t), \hat{C}(t)\}_+ = \left\{ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}(t) + i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}(t), \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}(t) + i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}(t) \right\}_+$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar} \{\hat{x}(t), \hat{x}(t)\}_+ - \frac{1}{2m\omega\hbar} \{\hat{p}(t), \hat{p}(t)\}_+$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar} \frac{\hbar}{m\omega} - \frac{1}{2m\omega\hbar} \hbar m\omega$$

$$\therefore \{\hat{C}(t), \hat{C}(t)\}_+ = 0$$

$$\therefore \{\hat{C}^+(t), \hat{C}^+(t)\}_+ = 0$$

が、成立します。(6)式の逆変換も計算しておきます。(6)式の2つの式を
辺々足して、

$$\hat{C}(t) + \hat{C}^+(t) = 2\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}(t)$$

$$\therefore \hat{x}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{C}(t) + \hat{C}^+(t))$$

となります。(6)式の2つの式を辺々引くと、

$$\hat{C}(t) - \hat{C}^+(t) = 2i \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}(t)$$

$$\therefore \hat{p}(t) = -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{C}(t) - \hat{C}^+(t))$$

となります．

演算子 $\hat{C}(t), \hat{C}^+(t)$ はフェルミ演算子といいますが，その性質をみておくことにしましょう．まず，(5)式のハミルトニアンを計算します．

$$\begin{aligned} \hat{H} &= i\omega \hat{x}(t) \hat{p}(t) \\ &= i\omega \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{C}(t) + \hat{C}^+(t)) \left\{ -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{C}(t) - \hat{C}^+(t)) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \hbar\omega (\hat{C}(t)\hat{C}(t) - \hat{C}(t)\hat{C}^+(t) + \hat{C}^+(t)\hat{C}(t) - \hat{C}^+(t)\hat{C}^+(t)) \\ &= \frac{1}{2} \hbar\omega \{0 - (-\hat{C}^+(t)\hat{C}(t) + 1) + \hat{C}^+(t)\hat{C}(t) - 0\} \\ &= \frac{1}{2} \hbar\omega (2\hat{C}^+(t)\hat{C}(t) - 1) \\ &= \hbar\omega (\hat{C}^+(t)\hat{C}(t) - \frac{1}{2}) \end{aligned}$$

と表されます．ここで，フェルミ演算子 $\hat{C}(t)$ に対して，ハイゼンベルク方程式，

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}]$$

を適用して, その時間依存性を調べてみます.

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d}{dt} \hat{C}(t) &= [\hat{C}(t), \hat{H}] \\&= [\hat{C}(t), \hbar\omega(\hat{C}^+(t)\hat{C}(t) - \frac{1}{2})] \\&= \hbar\omega(\hat{C}(t)\hat{C}^+(t)\hat{C}(t) - \hat{C}^+(t)\hat{C}(t)\hat{C}(t)) \\&= \hbar\omega\{(-\hat{C}^+(t)\hat{C}(t) + 1)\hat{C}(t) - \hat{C}^+(t)\hat{C}(t)\hat{C}(t)\} \\&= \hbar\omega(-\hat{C}^+(t) \cdot 2\hat{C}^2(t) + \hat{C}(t)) \\&= \hbar\omega(-\hat{C}^+(t) \cdot 0 + \hat{C}(t))\end{aligned}$$

$$\therefore \frac{d}{dt} \hat{C}(t) = -i\omega \hat{C}(t)$$

$$\therefore \hat{C}(t) = \text{const} \times \exp(-i\omega t)$$

$$\therefore \hat{C}(0) = \text{const} \times 1$$

$$\therefore \hat{C}(t) = \hat{C}(0) \cdot \exp(-i\omega t)$$

ここで,

$$\hat{C} \equiv \hat{C}(0) \quad (\hat{C}^+ \equiv \hat{C}^+(0))$$

と定義すると,

$$\hat{C}(t) = \hat{C} \cdot \exp(-i\omega t)$$

となります。さらに、この式の両辺の複素共役をとると、

$$\hat{C}^+(t) = \hat{C}^+ \cdot \exp(i\omega t)$$

となります。 $\hat{C}(t), \hat{C}^+(t)$ についての反交換関係の式で、 $t=0$ において、 $\hat{C}, \hat{C}^+$ についても反交換関係、

$$\begin{cases} \{\hat{C}, \hat{C}^+\}_+ = 1 \\ \{\hat{C}, \hat{C}\}_+ = \{\hat{C}^+, \hat{C}^+\}_+ = 0 \end{cases}$$

が成立します。話をハミルトニアンに戻しましょう。エネルギー固有値は先程、求めたように、

$$E_n = \hbar\omega(n - \frac{1}{2}) \quad (n = 0, 1)$$

でしたので、演算子 $\hat{C}^+(t)\hat{C}(t)$ は、固有値 $n(=0, 1)$ をもつことがわかります。そこで、演算子 $\hat{C}^+(t)\hat{C}(t)$ を個数演算子 $\hat{N}$ 、

$$\hat{N} \equiv \hat{C}^+(t)\hat{C}(t)$$

として定義しましょう。このとき、

$$\begin{aligned} \hat{N} &\equiv \hat{C}^+(t)\hat{C}(t) \\ &= \hat{C}^+ \cdot \exp(i\omega t) \times \hat{C} \cdot \exp(-i\omega t) \\ &= \hat{C}^+\hat{C} \end{aligned}$$

となって、個数演算子 $\hat{N}$ は時間に依存しません。したがって、個数演算子 $\hat{N}$ の固有値 n も時間には無関係になります。さらに、固有状態を $|n\rangle$ と表しますが、ハイゼンベルク描像では状態ベクトルは無条件に時間に依存しません。結局、固有方程式は、

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

と表せますが、全てのパーツが時間に依りません。そこで、以下この Section では、フェルミ演算子は、 $\hat{c}^+(t), \hat{c}(t)$ ではなく、時間に依存しない $\hat{c}^+, \hat{c}$ を使うことにします。

さて、次の計算をします。

$$|(\hat{c}|n\rangle)|^2 \geq 0$$

$$\therefore (\hat{c}|n\rangle)^\dagger (\hat{c}|n\rangle) \geq 0$$

$$\therefore \langle n|\hat{c}^\dagger \hat{c}|n\rangle \geq 0$$

$$\therefore n\langle n|n\rangle \geq 0$$

$$\therefore n \geq 0$$

と、なります。故に、 n は 0 または正です。また、

$$[\hat{N}, \hat{c}] = \hat{N}\hat{c} - \hat{c}\hat{N}$$

$$= \hat{c}^\dagger \hat{c} \hat{c} - \hat{c} \hat{c}^\dagger \hat{c}$$

$$= \hat{C}^+ \cdot 0 - (1 - \hat{C}^+ \hat{C}) \hat{C}$$

$$= -\hat{C} + \hat{C}^+ \cdot 0$$

$$= -\hat{C}$$

$$\therefore \hat{N} \hat{C} - \hat{C} \hat{N} = -\hat{C}$$

$$\therefore \hat{N} \hat{C} |n\rangle - \hat{C} \hat{N} |n\rangle = -\hat{C} |n\rangle$$

$$\therefore \hat{N} \hat{C} |n\rangle - n(\hat{C} |n\rangle) = -\hat{C} |n\rangle$$

$$\therefore \hat{N} \hat{C} |n\rangle = (n-1) \hat{C} |n\rangle$$

したがって、状態 $\hat{C} |n\rangle (= |n-1\rangle)$ は $n-1$ の固有値をもちます。演算子 $\hat{C}$ は個数演算子の固有値を1つ減らす働きをもつことになりましたので、消滅演算子といいます。消滅演算子 $\hat{C}$ を繰り返し状態 $|n\rangle$ に作用させていくと、その固有値はいずれ0になります。（ $n \geq 0$ の性質があるので、負の固有値はありません。）固有値0の状態を真空状態といい、記号 $|0\rangle$ で表し、次式で定義します。

$$\hat{C} |0\rangle \equiv 0$$

さらに、規格化条件、

$$\langle 0|0\rangle = 1$$

も成立するとしておきます。このとき、

$$\hat{N} |0\rangle = \hat{C}^+ \hat{C} |0\rangle$$

$$= \hat{C}^+ \cdot 0$$

$$= 0$$

となります。つまり、真空状態の個数演算子の固有値は 0 になります。（粒子数が 0 の状態が真空状態です。）演算子 $\hat{C}^+$ の性質も調べましょう。

$$[\hat{N}, \hat{C}^+] = \hat{N}\hat{C}^+ - \hat{C}^+\hat{N}$$

$$= \hat{C}^+\hat{C}\hat{C}^+ - \hat{C}^+\hat{C}^+\hat{C}$$

$$= \hat{C}^+(1 - \hat{C}^+\hat{C}) - 0 \cdot \hat{C}$$

$$= \hat{C}^+ - 0 \cdot \hat{C}$$

$$= \hat{C}^+$$

$$\therefore \hat{N}\hat{C}^+ - \hat{C}^+\hat{N} = \hat{C}^+$$

$$\therefore \hat{N}\hat{C}^+|n\rangle - \hat{C}^+\hat{N}|n\rangle = \hat{C}^+|n\rangle$$

$$\therefore \hat{N}\hat{C}^+|n\rangle - n(\hat{C}^+|n\rangle) = \hat{C}^+|n\rangle$$

$$\therefore \hat{N}\hat{C}^+|n\rangle = (n+1)\hat{C}^+|n\rangle$$

したがって、状態 $\hat{C}^+|n\rangle (= |n+1\rangle)$ は $n+1$ の固有値をもちます。演算子 $\hat{C}^+$ は個数演算子の固有値を 1 つ増やす働きをもつことになりましたので、生成演算子といいます。生成消滅演算子を用いて、個数演算子の固有値 n の数を 1 つずつ増減できます。固有値 n の数を粒子数とみなすことができます。

場の量子論において、粒子は生まれたり、消えたりする量になります。

さらに、

$$\hat{N}^2 = \hat{C}^+ \hat{C} \hat{C}^+ \hat{C}$$

$$= \hat{C}^+ (1 - \hat{C}^+ \hat{C}) \hat{C}$$

$$= \hat{C}^+ \hat{C}$$

$$= \hat{N}$$

$$\therefore \hat{N}^2 |n\rangle = \hat{N} |n\rangle$$

$$\therefore n^2 |n\rangle = n |n\rangle$$

$$\therefore n(n-1) |n\rangle = 0$$

$$\therefore n(n-1) \langle n | n \rangle = 0$$

$$\therefore n(n-1) = 0$$

$$\therefore n = 0 \text{ or } 1$$

となります。したがって、個数演算子 $\hat{N} \equiv \hat{C}^+ \hat{C}$ の固有値 n は 0 または 1 の値をとり、固有状態 $|n\rangle$ は、 $|0\rangle$ または $|1\rangle$ のどちらかであるという定理が証明されました。以下のような関係式も導出することができます。

$$\hat{N} \hat{C}^+ |0\rangle = \hat{C}^+ \hat{C} \hat{C}^+ |0\rangle$$

$$= \hat{C}^+ (1 - \hat{C}^+ \hat{C}) |0\rangle$$

$$= 1 \cdot \hat{C}^+|0\rangle$$

$$\therefore \hat{C}^+|0\rangle = |1\rangle$$

$$\hat{C}|1\rangle = \hat{C}\hat{C}^+|0\rangle$$

$$= (1 - \hat{C}^+\hat{C})|0\rangle$$

$$= |0\rangle$$

$$\therefore \hat{C}|1\rangle = |0\rangle$$

$$\hat{C}^+|1\rangle = \hat{C}^+\hat{C}^+|0\rangle$$

$$= 0 \cdot |0\rangle$$

$$= 0$$

$$\therefore \hat{C}^+|1\rangle = 0$$

このように、反交換関係が成立する生成消滅演算子 $\hat{C}^+, \hat{C}$ においては、粒子数が 0 または 1 になります。この場合のパウリ原理を満たす粒子はフェルミオンです。

実際のフェルミオンは運動量をもっていますから、そのような場合に應用できるように、代数を拡張しておきます。すなわち、演算子 $\hat{C}, \hat{C}^+$ を $\hat{C}(\vec{k}), \hat{C}^+(\vec{k})$ としておきます。このとき、反交換関係は、

$$\begin{cases} \{\hat{C}(\vec{k}), \hat{C}^+(\vec{k}')\}_+ = \delta(\vec{k} - \vec{k}') \\ \{\hat{C}(\vec{k}), \hat{C}(\vec{k}')\}_+ = \{\hat{C}^+(\vec{k}), \hat{C}^+(\vec{k}')\}_+ = 0 \end{cases}$$

となります．拡張された個数演算子 $\hat{N}(\vec{k})$,

$$\hat{N}(\vec{k}) \equiv \hat{C}^+(\vec{k})\hat{C}(\vec{k})$$

の固有値 n_ℓ は,

$$n_\ell = 0, 1 \ (\ell = 1, 2, \dots)$$

であり, 規格直交する状態ベクトルは,

$$|n_1, \vec{k}_1; n_2, \vec{k}_2; \dots\rangle = (\hat{C}^+(\vec{k}_1))^{n_1} (\hat{C}^+(\vec{k}_2))^{n_2} \dots |0\rangle$$

で与えられます． n_ℓ は 0 か 1 なので, ボソンの場合に必要だった規格化因子,

$$\frac{1}{\sqrt{n_\ell!}}$$

は不要です．上の状態ベクトルの空間をフォック空間といいます．ただし, ケットベクトル $|0\rangle$ は真空状態で,

$$\hat{C}(\vec{k})|0\rangle \equiv 0 = \langle 0|\hat{C}^+(\vec{k})$$

$$\langle 0|0\rangle = 1$$

を満たします．

Q22-4 場の古典論と波動場の正準量子化（第二量子化）

場の量子化の準備として、古典場の解析力学を取り扱っておきましょう。古典場を一般に、 $\phi(t, \vec{x})$ と表しておきます。そして、系のラグランジアン L をラグランジアン密度 $\mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}, \nabla\phi)$ で表します。（ $\dot{\phi}$ は場 ϕ の時間微分です。）すなわち、 $\mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}, \nabla\phi)$ を空間 3 次元について積分して、

$$L = \int \mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}, \nabla\phi) d^3\vec{x}$$

とします。（ $d^3\vec{x} = dx dy dz$ 。）さらに、ラグランジアン L を時間で積分した量を作用 S といいます。

$$S \equiv \int L dt = \int \mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}, \nabla\phi) dt \cdot d^3\vec{x}$$

ここで、ある領域 Ω に対して、場 $\phi(t, \vec{x})$ を、

$$\phi(t, \vec{x}) \rightarrow \phi(t, \vec{x}) + \delta\phi(t, \vec{x})$$

となるように、変化させます。ただし、領域の境界で、

$$\delta\phi(t, \vec{x}) = 0 \text{ (Boundary)}$$

が成立するものとします。場 $\phi(t, \vec{x})$ が上述のように変わるとき、作用 S は、

$$S \rightarrow S + \delta S$$

と表記されますが、

$$\delta S = 0$$

となることを自然は要求します。言い直すと、作用 S を最小にするように自然はできているのです。この原理を最小作用の原理と言います。ここで、左辺を次のように計算します。

$$\begin{aligned}\delta S &= \int dt \cdot d^3\vec{x} \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} \delta\phi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \delta\dot{\phi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla\phi)} \cdot \delta(\nabla\phi) \right\} \\ &= \int dt \cdot d^3\vec{x} \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} \delta\phi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \frac{\partial}{\partial t} (\delta\phi) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla\phi} \cdot \nabla(\delta\phi) \right\}\end{aligned}$$

ここで、右辺第 2, 第 3 項は,

$$\begin{aligned}& \int dt \cdot d^3\vec{x} \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \frac{\partial}{\partial t} (\delta\phi) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla\phi} \cdot \nabla(\delta\phi) \right\} \\ &= \int dt \cdot d^3\vec{x} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \delta\phi \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \right) \delta\phi + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial}{\partial x} \phi \right)} \delta\phi \right) \right. \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial}{\partial x} \phi \right)} \right) \delta\phi + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial}{\partial y} \phi \right)} \delta\phi \right) \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial}{\partial y} \phi \right)} \right) \delta\phi + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial}{\partial z} \phi \right)} \delta\phi \right) \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial}{\partial z} \phi \right)} \right) \delta\phi \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int dx dy dz \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \delta \phi \right]_{t:\text{Boundary}} + \int dt dy dz \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial}{\partial x} \phi \right)} \delta \phi \right]_{x:\text{Boundary}} \\
&\quad + \int dt dx dz \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial}{\partial y} \phi \right)} \delta \phi \right]_{y:\text{Boundary}} \\
&\quad + \int dt dx dy \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial}{\partial z} \phi \right)} \delta \phi \right]_{z:\text{Boundary}} \\
&\quad - \int dt \cdot d^3 \vec{x} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi} \right) \right\} \delta \phi \\
&= 0 - \int dt \cdot d^3 \vec{x} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi} \right) \right\} \delta \phi
\end{aligned}$$

最後の変形には境界面において,

$$\delta \phi = 0$$

であることを使いました. よって,

$$\begin{aligned}
\delta S &= \int dt \cdot d^3 \vec{x} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} \delta \phi - \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi} \right) \right\} \delta \phi \right] \\
&= \int dt \cdot d^3 \vec{x} \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi} \right) \right\} \delta \phi = 0
\end{aligned}$$

となります. 任意の $\delta \phi$ について, この式が成立するためには, 被積分が 0 にならなければなりません. 故に,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi} \right) = 0$$

が成立します. この場の方程式をオイラー-ラグランジュ方程式と言いま

す.

次に、ハミルトニアンについて見ておきます。通常の解析力学を場について拡張した議論を行います。まず、場の共役運動量密度 π を、

$$\pi(t, \vec{x}) \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(t, \vec{x})}$$

で定義します。更に、ハミルトニアン密度 $\mathcal{H}$ を定義します。

$$\mathcal{H} \equiv \pi(t, \vec{x})\dot{\phi}(t, \vec{x}) - \mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}, \nabla\phi)$$

このハミルトニアン密度から、ハミルトニアン H が計算されます。すなわち、

$$H = \int d^3\vec{x} \mathcal{H}$$

から求められます。

場の古典論は以上にして、次に、場を量子化する方法について考えましょう。量子論ではオブザーバブルは演算子で表されることになります。場 ϕ を演算子に格上げした瞬間に、場の量子化が実行されたことになります。この際、演算子は積の順序が問題となりますので、交換関係を設定することになります。このような交換関係による量子化のことを正準量子化といいます。量子力学での位置演算子と運動量演算子の間の交換関係、

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{x}, \hat{p}_z] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_z] = [\hat{z}, \hat{p}_x] = [\hat{z}, \hat{p}_y] = 0$$

$$[\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{y}, \hat{y}] = [\hat{z}, \hat{z}] = [\hat{p}_x, \hat{p}_x] = [\hat{p}_y, \hat{p}_y] = [\hat{p}_z, \hat{p}_z] = 0$$

$$[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{y}, \hat{z}] = [\hat{z}, \hat{x}] = [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = [\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0$$

を参考にして, 場 ϕ とその一般化運動量 π の間に次の同時刻交換関係を設定します.

$$\begin{cases} [\hat{\phi}(t, \vec{x}), \hat{\pi}(t, \vec{x}')] = i\hbar\delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \\ [\hat{\phi}(t, \vec{x}), \hat{\phi}(t, \vec{x}')] = [\hat{\pi}(t, \vec{x}), \hat{\pi}(t, \vec{x}')] = 0 \end{cases}$$

と設定します. 場は空間に対して連続量なので, 第 1 式の右辺ではデルタ関数が使われています. 注意すべきことは, これらの同時刻交換関係による正準量子化はボソンについて適用されるということです. フェルミオンについては, 次の同時刻反交換関係を設定します.

$$\begin{cases} \{\hat{\phi}(t, \vec{x}), \hat{\pi}(t, \vec{x}')\}_+ = i\hbar\delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \\ \{\hat{\phi}(t, \vec{x}), \hat{\phi}(t, \vec{x}')\}_+ = \{\hat{\pi}(t, \vec{x}), \hat{\pi}(t, \vec{x}')\}_+ = 0 \end{cases}$$

交換関係や反交換関係による場の量子化のことを第二量子化ともいいます. 一般的な場 ϕ についての議論は以上です. 次の Section から, 具体的な場としてシュレディンガー場について見ていきます.

Q22-5 シュレディンガー場の古典論

具体的に量子化すべき場には, 電磁場や特殊相対論的量子力学の方程式に従う場などがあります. これらは Report “場の量子論” で取り扱っていきます. (Chapter “Klein-Gordon 場”, “Dirac 場”, “Maxwell 場” を見てください.) その前に, 最初に取り上げる例として, シュレディンガー方程式に従う波動関数 $\psi(t, \vec{x})$ を取り上げましょう. 波動関数については, 既に

量子化が完了しているのではないかと考える人も多いと思います。確かに、 $E=H$ という古典論の方程式を量子化してシュレディンガー方程式、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = \hat{H} \psi(t, \vec{x}) \quad (\text{q06} - 1)$$

を導きました。ここではさらに、時間と空間の関数である、すなわち場である波動関数 $\psi(t, \vec{x})$ を、演算子に格上げして量子化するのです。ですから、この場合、2回量子化することになりますね。この2回目の量子化、つまり場の量子化のことを第二量子化というのです。（第二量子化の言葉の意味がわかりましたね。）そして、場としての波動関数のことをシュレディンガー場といいます。第二量子化する前のシュレディンガー場は、古典場であることに注意しておきましょう。

第二量子化の準備として、シュレディンガー場の古典論を論じていきます。まず、ラグランジアン密度を、

$$\mathcal{L} = i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi - V(t, \vec{x}) \psi^* \psi$$

としておきます。いきなり与えられましたので、この式はどこから導かれたのだらうと思われると思います。実は、ラグランジアン密度は、そのオイラー-ラグランジュ方程式が場の方程式、この場合シュレディンガー方程式、になるように発見されたのです。それでは、前 Section のオイラー-ラグランジュ方程式において、一般の場 ϕ をシュレディンガー場 ψ に置き換えた式、

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \psi} \right) = 0$$

に代入すると、確かにシュレディンガー方程式が導出されることを確認しておきましょう。まず、第1項は、

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = -V(t, \vec{x})\psi^*$$

となります。第2項は、

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right) &= -\frac{\partial}{\partial t} (i\hbar \dot{\psi}^*) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \end{aligned}$$

となります。第3項は、

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \psi} \right) &= -\nabla \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* \end{aligned}$$

となります。よって、

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \psi} \right) = -V(t, \vec{x})\psi^* - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* = 0$$

$$\therefore -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V(t, \vec{x})\psi^*$$

となります。この式はシュレディンガー方程式の複素共役をとった式です。複素共役をとる前の、元のシュレディンガー方程式を導くには、オイラー-ラグランジュ方程式で、一般の場 ϕ をシュレディンガー場 ψ に置き換え、さらに複素共役をとった式、

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \psi^*} \right) = 0$$

を計算します。第1項は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} &= i\hbar \dot{\psi} - V(t, \vec{x})\psi \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi - V(t, \vec{x})\psi \end{aligned}$$

となります。第2項は、

$$-\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} \right) = -0$$

です。第3項は、

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \psi^*} \right) &= -\nabla \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \end{aligned}$$

となります。したがって、

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \psi^*} \right) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi - V(t, \vec{x})\psi - 0 + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = 0$$

$$\therefore i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(t, \vec{x})\psi$$

となり、シュレディンガー方程式が導かれました。上で与えたラグランジアン密度は、正しかったことが確認されたのです。

ハミルトニアン密度も求めておきましょう。一般化運動量 π は、

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}}$$

$$= i\hbar \psi^*$$

となります。したがって、ハミルトニアン密度は、

$$\mathcal{H} = \pi \dot{\psi} - \mathcal{L}$$

$$= i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \left\{ i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi - V(t, \vec{x}) \psi^* \psi \right\}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi + V(t, \vec{x}) \psi^* \psi$$

と導かれます。

Q22-6 シュレディンガー場の正準量子化（第二量子化） 1（ボゾンの場合）

一般論に従い，シュレディンガー場 ψ を正準量子化しましょう．まず，ボゾンの場合を考えます．場 ψ とその一般化運動量 π の間に次の同時刻交換関係を設定します．

$$\begin{cases} [\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\pi}(t, \vec{x}')] = i\hbar\delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \\ [\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\psi}(t, \vec{x}')] = [\hat{\pi}(t, \vec{x}), \hat{\pi}(t, \vec{x}')] = 0 \end{cases}$$

ここで，古典論では，一般化運動量は，

$$\pi(t, \vec{x}) = i\hbar\psi^*(t, \vec{x})$$

でしたので，量子化して演算子に格上げして，

$$\hat{\pi}(t, \vec{x}) = i\hbar\hat{\psi}^+(t, \vec{x})$$

としておきます．このとき，同時刻交換関係は，

$$\begin{cases} [\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\psi}^+(t, \vec{x}')] = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \\ [\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\psi}(t, \vec{x}')] = [\hat{\psi}^+(t, \vec{x}), \hat{\psi}^+(t, \vec{x}')] = 0 \end{cases}$$

となります．次に，場 $\hat{\psi}(t, \vec{x})$ をボーズ演算子 $\hat{a}(t, \vec{k})$ を使ってフーリエ展開します．

$$\hat{\psi}(t, \vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{V}} \{\hat{a}(t, \vec{k})\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x})\}$$

ここで，

$$\hat{a}(t) = \hat{a} \cdot \exp(-i\omega t)$$

でしたので,

$$\hat{a}(t, \vec{k}) = \hat{a}(\vec{k}) \cdot \exp(-i\omega t)$$

の式が成立します. したがって,

$$\hat{\psi}(t, \vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{V}} \hat{a}(\vec{k}) \exp\{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\}$$

となります. エルミート共役をとると,

$$\hat{\psi}^+(t, \vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{V}} \hat{a}^+(\vec{k}) \exp\{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\}$$

です. 逆に, $\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}^+(\vec{k})$ を $\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\psi}^+(t, \vec{x})$ によって, 表すことができます. 次の計算をします.

$$\begin{aligned} & \int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \hat{\psi}(t, \vec{x}) \exp\{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\} \\ &= \int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \int \frac{d^3\vec{k}'}{\sqrt{V}} \hat{a}(\vec{k}') \exp\{-i(\omega' t - \vec{k}' \cdot \vec{x})\} \exp\{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\} \\ &= \int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \int \frac{d^3\vec{k}'}{\sqrt{V}} \hat{a}(\vec{k}') \exp\{i(\omega - \omega')t\} \exp\{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}\} \\ &= \int d^3\vec{k}' \hat{a}(\vec{k}') \exp\{i(\omega - \omega')t\} \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \end{aligned}$$

デルタ関数によって, $\vec{k} = \vec{k}'$ となりますが,

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$

により, $\omega = \omega'$ となります. 故に, 最後の式は $\hat{a}(\vec{k})$ になります. つまり,

$$\hat{a}(\vec{k}) = \int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \hat{\psi}(t, \vec{x}) \exp\{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\}$$

と表されます. この式の両辺のエルミート共役をとって,

$$\hat{a}^+(\vec{k}) = \int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \hat{\psi}^+(t, \vec{x}) \exp\{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\}$$

も成り立ちます. ここで, $\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}^+(\vec{k}')$ の間の交換関係を計算します.

$$\begin{aligned} [\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}^+(\vec{k}')] &= \left[\int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \hat{\psi}(t, \vec{x}) \exp\{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\}, \int \frac{d^3\vec{x}'}{\sqrt{V}} \hat{\psi}^+(t, \vec{x}') \exp\{-i(\omega' t - \vec{k}' \cdot \vec{x}')\} \right] \\ &= \int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \int \frac{d^3\vec{x}'}{\sqrt{V}} [\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\psi}^+(t, \vec{x}')] \exp\{i(\omega - \omega')t\} \exp\{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \vec{k}' \cdot \vec{x}')\} \\ &= \int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \int \frac{d^3\vec{x}'}{\sqrt{V}} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \exp\{i(\omega - \omega')t\} \exp\{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \vec{k}' \cdot \vec{x}')\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int \frac{d^3\vec{x}}{V} \exp\{i(\omega - \omega')t\} \exp\{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}\} \\
&= \exp\{i(\omega - \omega')t\} \delta^3(\vec{k} - \vec{k}')
\end{aligned}$$

デルタ関数によって, $\vec{k} = \vec{k}'$ となりますが,

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$

により, $\omega = \omega'$ となります. 故に, 計算の結果は,

$$[\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}^+(\vec{k}')] = \delta^3(\vec{k} - \vec{k}')$$

となります. 同様に, $\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}(\vec{k}')$ の間の交換関係, $\hat{a}^+(\vec{k}), \hat{a}^+(\vec{k}')$ の間の交換関係を計算して, その結果をまとめると次のようになります.

$$\begin{cases} [\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}^+(\vec{k}')] = \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \\ [\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}(\vec{k}')] = [\hat{a}^+(\vec{k}), \hat{a}^+(\vec{k}')] = 0 \end{cases}$$

確かに, 展開係数 $\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}^+(\vec{k})$ はボーズ演算子の交換関係を満たしていることが確認されました.

次に, 古典ハミルトニアン密度,

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\psi^* \cdot \nabla\psi + V(t, \vec{x})\psi^*\psi$$

を量子化します. 場 ψ を上の同時刻交換関係をみたす演算子で置き換え,

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\psi}^+(t, \vec{x}) \cdot \nabla \hat{\psi}(t, \vec{x}) + V(t, \vec{x}) \hat{\psi}^+(t, \vec{x}) \hat{\psi}(t, \vec{x})$$

とします。したがって、量子化されたハミルトニアンは、

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d^3x \hat{\mathcal{H}} \\ &= \int d^3x \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\psi}^+(t, \vec{x}) \cdot \nabla \hat{\psi}(t, \vec{x}) + V(t, \vec{x}) \hat{\psi}^+(t, \vec{x}) \hat{\psi}(t, \vec{x}) \right\} \end{aligned}$$

です。ここで、 $\hat{\psi}(t, \vec{x})$, $\hat{\psi}^+(t, \vec{x})$ をフーリエ展開した式を代入し、ハミルトニアンをボーズ演算子 $\hat{a}(\vec{k})$, $\hat{a}^+(\vec{k})$ で表してみます。

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d^3x \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{V}} \hat{a}^+(\vec{k}) \exp\{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\} \cdot \nabla \int \frac{d^3\vec{k}'}{\sqrt{V}} \hat{a}(\vec{k}') \exp\{-i(\omega' t \right. \\ &\quad \left. - \vec{k}' \cdot \vec{x})\} + V(t, \vec{x}) \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{V}} \hat{a}^+(\vec{k}) \exp\{i(\omega t - \vec{k} \right. \\ &\quad \left. \cdot \vec{x})\} \int \frac{d^3\vec{k}'}{\sqrt{V}} \hat{a}(\vec{k}') \exp\{-i(\omega' t - \vec{k}' \cdot \vec{x})\} \right] \\ &= \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{V}} \int \frac{d^3\vec{k}'}{\sqrt{V}} \int d^3x \cdot \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \{ \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) \} \cdot \nabla \{ \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{x}) \} + \exp(-i\vec{k} \right. \\ &\quad \left. \cdot \vec{x}) V(t, \vec{x}) \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{x}) \right] \hat{a}^+(\vec{k}) \hat{a}(\vec{k}') \exp\{i(\omega - \omega')\} \end{aligned}$$

ここで、部分積分により、

$$\begin{aligned} &\int d^3x \nabla \{ \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) \} \cdot \nabla \{ \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{x}) \} \\ &= [\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) \cdot \nabla \{ \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{x}) \}]_{\text{Boundary}} - \int d^3x \\ &\quad \cdot \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) \nabla^2 \{ \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{x}) \} \end{aligned}$$

$$= - \int d^3x \cdot \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) \nabla^2 \{ \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{x}) \}$$

となります。

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{V}} \int \frac{d^3\vec{k}'}{\sqrt{V}} \int d^3x \cdot [\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) \{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(t, \vec{x}) \} \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{x})] \hat{a}^+(\vec{k}) \hat{a}(\vec{k}') \exp\{i(\omega - \omega')\} \\ &= \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{V}} \int \frac{d^3\vec{k}'}{\sqrt{V}} \int d^3x \cdot [\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) E(\vec{k}') \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{x})] \hat{a}^+(\vec{k}) \hat{a}(\vec{k}') \exp\{i(\omega - \omega')\} \\ &= \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{V}} \int \frac{d^3\vec{k}'}{\sqrt{V}} \int d^3x \cdot [E(\vec{k}') \exp\{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}\}] \hat{a}^+(\vec{k}) \hat{a}(\vec{k}') \exp\{i(\omega - \omega')\} \\ &= \int d^3\vec{k} \int d^3\vec{k}' \cdot E(\vec{k}') \delta(\vec{k}' - \vec{k}) \hat{a}^+(\vec{k}) \hat{a}(\vec{k}') \exp\{i(\omega - \omega')\} \end{aligned}$$

デルタ関数によって, $\vec{k} = \vec{k}'$ となりますが,

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$

により, $\omega = \omega'$ となります。故に,

$$\hat{H} = \int d^3\vec{k} \cdot E(\vec{k}) \hat{a}^+(\vec{k}) \hat{a}(\vec{k})$$

です。個数演算子,

$$\hat{N}(\vec{k}) = \hat{a}^+(\vec{k})\hat{a}(\vec{k})$$

は、固有値、

$$n(\vec{k}) = 0, 1, 2, \dots, \infty$$

をもち、ハミルトニアンはボゾンのものであることが理解されます。場の量子化（第二量子化）により、波動場が 0 個、1 個、2 個、…と数えることができる粒子性をもつ量になったのです。

Q22-7 シュレディンガー場の正準量子化（第二量子化）2（フェルミオンの場合）

シュレディンガー場 ψ が、フェルミオンの場合について正準量子化しましょう。ボゾンの場合は、場 ψ と一般化運動量 π の間に同時刻交換関係を設定しましたが、フェルミオンの場合は、次の同時刻反交換関係を設定します。

$$\begin{cases} \{\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\pi}(t, \vec{x}')\}_+ = i\hbar\delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \\ \{\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\psi}(t, \vec{x}')\}_+ = \{\hat{\pi}(t, \vec{x}), \hat{\pi}(t, \vec{x}')\}_+ = 0 \end{cases}$$

ここで、古典論では、一般化運動量は、

$$\pi(t, \vec{x}) = i\hbar\psi^*(t, \vec{x})$$

でしたので、量子化して演算子に格上げして、

$$\hat{\pi}(t, \vec{x}) = i\hbar\hat{\psi}^+(t, \vec{x})$$

としておきます。このとき、同時刻反交換関係は、

$$\begin{cases} \{\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\psi}^+(t, \vec{x}')\}_+ = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \\ \{\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\psi}(t, \vec{x}')\}_+ = \{\hat{\psi}^+(t, \vec{x}), \hat{\psi}^+(t, \vec{x}')\}_+ = 0 \end{cases}$$

となります。次に、場 $\hat{\psi}(t, \vec{x})$ をフェルミ演算子 $\hat{C}(t, \vec{k})$ を使ってフーリエ展開します。

$$\hat{\psi}(t, \vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{V}} \{\hat{C}(t, \vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x})\}$$

ここで、

$$\hat{C}(t) = \hat{C} \cdot \exp(-i\omega t)$$

でしたので、

$$\hat{C}(t, \vec{k}) = \hat{C}(\vec{k}) \cdot \exp(-i\omega t)$$

の関係式が成立します。したがって、

$$\hat{\psi}(t, \vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{V}} \hat{C}(\vec{k}) \exp\{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\}$$

となります。エルミート共役をとると、

$$\hat{\psi}^+(t, \vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{V}} \hat{C}^+(\vec{k}) \exp\{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\}$$

です。逆に, $\hat{\mathcal{C}}(\vec{k}), \hat{\mathcal{C}}^+(\vec{k})$ を $\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\psi}^+(t, \vec{x})$ によって, 表すことができます。
ボゾンの場合と全く同様な計算により,

$$\hat{\mathcal{C}}(\vec{k}) = \int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \hat{\psi}(t, \vec{x}) \exp\{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\}$$

が成立します。この式の両辺のエルミート共役をとって,

$$\hat{\mathcal{C}}^+(\vec{k}) = \int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \hat{\psi}^+(t, \vec{x}) \exp\{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\}$$

です。ここで, $\hat{\mathcal{C}}(\vec{k}), \hat{\mathcal{C}}^+(\vec{k}')$ の間の反交換関係を計算します。

$$\begin{aligned} \{\hat{\mathcal{C}}(\vec{k}), \hat{\mathcal{C}}^+(\vec{k}')\}_+ &= \left\{ \int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \hat{\psi}(t, \vec{x}) \exp\{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})\}, \int \frac{d^3\vec{x}'}{\sqrt{V}} \hat{\psi}^+(t, \vec{x}') \exp\{-i(\omega' t - \vec{k}' \cdot \vec{x}')\} \right\}_+ \\ &= \int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \int \frac{d^3\vec{x}'}{\sqrt{V}} \{\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\psi}^+(t, \vec{x}')\}_+ \exp\{i(\omega - \omega')t\} \exp\{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \vec{k}' \cdot \vec{x}')\} \\ &= \int \frac{d^3\vec{x}}{\sqrt{V}} \int \frac{d^3\vec{x}'}{\sqrt{V}} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \exp\{i(\omega - \omega')t\} \exp\{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \vec{k}' \cdot \vec{x}')\} \\ &= \int \frac{d^3\vec{x}}{V} \exp\{i(\omega - \omega')t\} \exp\{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}\} \\ &= \exp\{i(\omega - \omega')t\} \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \end{aligned}$$

デルタ関数によって, $\vec{k} = \vec{k}'$ となりますが,

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$

により, $\omega = \omega'$ となります. 故に, 計算の結果は,

$$\{\hat{c}(\vec{k}), \hat{c}^+(\vec{k}')\}_+ = \delta^3(\vec{k} - \vec{k}')$$

となります. 同様に, $\hat{c}(\vec{k}), \hat{c}(\vec{k}')$ の間の反交換関係, $\hat{c}^+(\vec{k}), \hat{c}^+(\vec{k}')$ の間の反交換関係を計算して, その結果をまとめると次のようになります.

$$\begin{cases} \{\hat{c}(\vec{k}), \hat{c}^+(\vec{k}')\}_+ = \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \\ \{\hat{c}(\vec{k}), \hat{c}(\vec{k}')\}_+ = \{\hat{c}^+(\vec{k}), \hat{c}^+(\vec{k}')\}_+ = 0 \end{cases}$$

確かに, 展開係数 $\hat{c}(\vec{k}), \hat{c}^+(\vec{k})$ はフェルミ演算子の交換関係を満たしていることが確認されました.

次に, 古典ハミルトニアン密度,

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\psi^* \cdot \nabla\psi + V(t, \vec{x})\psi^*\psi$$

を量子化します. 場 ψ を上の同時刻反交換関係をみたす演算子で置き換え,

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\hat{\psi}^+(t, \vec{x}) \cdot \nabla\hat{\psi}(t, \vec{x}) + V(t, \vec{x})\hat{\psi}^+(t, \vec{x})\hat{\psi}(t, \vec{x})$$

とします. したがって, 量子化されたハミルトニアンは, ボゾンの場合と同じ式,

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\mathcal{H}}$$

$$= \int d^3x \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\psi}^+(t, \vec{x}) \cdot \nabla \hat{\psi}(t, \vec{x}) + V(t, \vec{x}) \hat{\psi}^+(t, \vec{x}) \hat{\psi}(t, \vec{x}) \right\}$$

です。ここで、 $\hat{\psi}(t, \vec{x}), \hat{\psi}^+(t, \vec{x})$ をフーリエ展開した式を代入し、ハミルトニアンをフェルミ演算子 $\hat{c}(\vec{k}), \hat{c}^+(\vec{k})$ で表してみます。ボゾンの場合と全く同じ計算です。反交換関係は使いません。 $\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}^+(\vec{k})$ を $\hat{c}(\vec{k}), \hat{c}^+(\vec{k})$ で置き直して、

$$\hat{H} = \int d^3k \cdot E(\vec{k}) \hat{c}^+(\vec{k}) \hat{c}(\vec{k})$$

です。個数演算子、

$$\hat{N}(\vec{k}) = \hat{c}^+(\vec{k}) \hat{c}(\vec{k})$$

は、固有値、

$$n(\vec{k}) = 0, 1$$

をもち、ハミルトニアンはフェルミオンのものであることが理解されます。場の量子化（第二量子化）により、フェルミオンの波動場が0個または1個と数えることができる、パウリ原理に従う粒子性をもつ量になったのです。

Q23 特殊相対論的量子力学

Q23-1 クライン-ゴールドン方程式

古典論とは量子化していない物理を意味します。したがって、相対性理論は古典論になります。しかし、古典物理学という用語を使用する場合は、19世紀までの物理学を指し、相対性理論は現代物理学の範疇に属するものとします。量子論の基礎方程式であるシュレディンガー方程式は、古典力学の関係式 $E=H$ を量子化して得られるものでした。ここで、特殊相対性理論と量子力学を融合する問題を考えてみましょう。特殊相対性理論の基礎的な関係式、

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4 \quad (1)$$

において、物理量を次のように演算子で置き換えて量子化します。

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$p_x \rightarrow \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, p_y \rightarrow \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, p_z \rightarrow \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

このとき、(1)式は、

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} = c^2 \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + m^2 c^4$$

$$\therefore \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} = 0$$

となりますが、この演算子の関係を状態 ϕ に作用させます。

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right)\phi(t, \vec{x}) = 0$$

この特殊相対論的量子力学の基礎方程式をクライン-ゴルドン方程式といいます．ここで，特殊相対性理論の表記方法を導入しましょう．つまり，座標ベクトルは，

$$x \equiv x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (t, \vec{x})$$

$$x_\mu = \eta_{\mu\nu} x^\nu = (t, -\vec{x})$$

とします．上付き添え字は反変ベクトル，下付き添え字は共変ベクトルです． η は計量テンソルで，

$$\eta_{\mu\nu} = \eta^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

と定義します．計量テンソルによって，添え字の上げ下げができます．また，

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right)$$

$$\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right)$$

という微分演算子を導入します．これらの演算子の縮約をとると，

$$\partial_\mu \partial^\mu = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2$$

となります。このとき、クライン-ゴールドン方程式は、

$$\left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \phi(x) = 0 \quad (\text{q23_1})$$

と表せます。

Q23-2 ディラック方程式

特殊相対性理論の基礎的な関係式、

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4 \quad (1)$$

を、もう一つ別の方法で量子化して、ディラック方程式と呼ばれる2つ目の特殊相対論的量子力学の基礎方程式を導きましょう。(1)式を運動量について1次式で表し、次式のようにおいてみます。

$$\frac{E}{c} = \sqrt{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + m^2 c^2} = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta m c \quad (2)$$

この式を2乗すると、次のようになります。

$$\begin{aligned} p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + m^2 c^2 &= \alpha_1^2 p_1^2 + \alpha_2^2 p_2^2 + \alpha_3^2 p_3^2 + \beta^2 m^2 c^2 \\ &+ (\alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1) p_1 p_2 + (\alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_2) p_2 p_3 + (\alpha_3 \alpha_1 + \alpha_1 \alpha_3) p_3 p_1 \\ &+ (\alpha_1 \beta + \beta \alpha_1) p_1 m c + (\alpha_2 \beta + \beta \alpha_2) p_2 m c + (\alpha_3 \beta + \beta \alpha_3) p_3 m c \end{aligned}$$

この式をもとの(1)式と比較すると、 α と β は次の関係式を満たさなければなりません。

$$\begin{cases} \alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \beta^2 = 1 \\ \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 0 \ (i, j = 1, 2, 3, i \neq j) \\ \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \ (i = 1, 2, 3) \end{cases} \quad (3)$$

(2)式の両辺を c 倍した式,

$$E = \alpha_1 c p_1 + \alpha_2 c p_2 + \alpha_3 c p_3 + \beta m c^2$$

を量子化しましょう。すなわち、次のようにエネルギーと運動量を演算子に置き換えます。

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$p_i \rightarrow \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \ (i = 1, 2, 3)$$

このとき,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -i\hbar \alpha_1 \frac{\partial}{\partial x_1} - i\hbar \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x_2} - i\hbar \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x_3} + \beta m c^2$$

$$\therefore i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -i\hbar \sum_{i=1}^3 \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} + \beta m c^2$$

となりますが、この演算子の関係式を状態 ψ に作用させます。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = (-i\hbar \sum_{i=1}^3 \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} + \beta mc^2) \psi(x) \quad (4)$$

この(4)式をディラック方程式といいます。ここで、 α と β は(3)式を満たさなければなりません。この条件を満足するのは、普通の数ではなく、次のディラック行列と呼ばれる 4×4 行列です。

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}$$

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

ここで、 σ は 2×2 のパウリ行列、 1 と記してあるのは 2×2 単位行列です。また、状態 ψ は 4×1 のスピノルと呼ばれる量です。

Q23-3 γ 行列

ディラック方程式をシンプルな形で表現するために、 γ 行列と呼ばれる行列を、次のように定義して導入します。

$$\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^i) \equiv (\beta, \beta\alpha_i)$$

このとき、 γ 行列は次の関係式を満たします。

$$[\gamma^\mu, \gamma^\nu]_+ = 2\eta^{\mu\nu} \quad (5)$$

ただし、左辺の括弧は反交換子で、

$$[A, B]_+ \equiv AB + BA$$

で定義される記号で，右辺の η は次の式で定義される行列です．

$$\eta^{\mu\nu} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ここで，1 は 4×4 単位行列を表します．(5)式の導出は次の通りです．

$$[\gamma^0, \gamma^0]_+ = \gamma^0 \gamma^0 + \gamma^0 \gamma^0 = 2\gamma^0 \gamma^0 = 2\beta^2 = 2 \cdot 1$$

$$[\gamma^0, \gamma^i]_+ = \gamma^0 \gamma^i + \gamma^i \gamma^0 = \beta \cdot \beta \alpha_i + \beta \alpha_i \cdot \beta = \beta(\beta \alpha_i + \alpha_i \beta) = 0$$

$$[\gamma^i, \gamma^j]_+ = \gamma^i \gamma^j + \gamma^j \gamma^i = \beta \alpha_i \beta \alpha_j + \beta \alpha_j \beta \alpha_i = -\alpha_i \beta \beta \alpha_j - \alpha_j \beta \beta \alpha_i$$

$$= -\alpha_i \alpha_j - \alpha_j \alpha_i = 2(-\delta_{ij})$$

ただし，(3)式を使いました．また， γ 行列は次の関係式も満たします．

$$\gamma^0 (\gamma^\mu)^+ \gamma^0 = \gamma^\mu \quad (6)$$

(6)式の導出は次の通りです．第0行列は，

$$(\gamma^0)^+ = \beta^+ = \beta = \gamma^0$$

$$\therefore \gamma^0 (\gamma^0)^+ \gamma^0 = \gamma^0 \gamma^0 \gamma^0 = 1 \cdot \gamma^0 = \gamma^0$$

となります．第*i*行列 ($i=1,2,3$) は，

$$(\gamma^i)^+ = (\beta \alpha_i)^+ = \alpha_i^+ \beta^+ = \alpha_i \beta = -\beta \alpha_i = -\gamma^i$$

$$\therefore \gamma^0(\gamma^i)^+\gamma^0 = \gamma^0(-\gamma^i)\gamma^0 = \gamma^0\gamma^0\gamma^i = 1 \cdot \gamma^i = \gamma^i$$

(証明終.)

γ 行列を使って, ディラック方程式(4)式をシンプルに表しておきましょう.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = (-i\hbar \sum_{i=1}^3 \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} + \beta mc^2) \psi(x) \quad (4)$$

$$\therefore (i\hbar \beta \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar \sum_{i=1}^3 \beta \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} - \beta^2 mc) \psi(x) = 0$$

$$\therefore (i\hbar \gamma^0 \partial_0 + i\hbar \sum_{i=1}^3 \gamma^i \partial_i - mc) \psi(x) = 0$$

$$\therefore \boxed{(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi(x) = 0} \quad (q23_2)$$

さらに, ディラック方程式は次のようにも表せます.

$$(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi(x) = 0 \quad (q23_2)$$

において, 両辺のエルミート共役をとり, 計算します. ($\tilde{\partial}_\mu$ は左に演算する微分演算子です.)

$$\psi^+(x) \{-i\hbar (\gamma^\mu)^+ \tilde{\partial}_\mu - mc\} = 0$$

$$\therefore \psi^+(x) \gamma^0 \gamma^0 \{i\hbar (\gamma^\mu)^+ \tilde{\partial}_\mu \gamma^0 + mc \gamma^0\} = 0$$

$$\therefore \psi^+(x)\gamma^0\{i\hbar\gamma^0(\gamma^\mu)^+\gamma^0\overleftarrow{\partial}_\mu + mc\gamma^0\gamma^0\} = 0$$

ここで,

$$\bar{\psi}(x) \equiv \psi^+(x)\gamma^0$$

とおき, (6)式と(5)式を使うと,

$$\boxed{\bar{\psi}(x)(i\hbar\gamma^\mu\overleftarrow{\partial}_\mu + mc) = 0} \quad (\text{q23_3})$$

が導かれます.