

量子力学 I I

山田 満

平成 19 年 1 月 17 日

目 次

1	摂動によるエネルギー準位の変化	1
1.1	縮退していない準位の変化	1
1.1.1	摂動の 1 次	1
1.1.2	摂動の 2 次	2
1.1.3	3 次以上の摂動の漸化式	2
1.2	縮退がある準位の変化; 永年方程式	3
1.3	【摂動論の問題: 1 次元調和振動子】	4
1.4	【2 次元調和振動子の演習問題】	6
1.5	【2 次元調和振動子: 摂動の問題】	6
1.6	【問題: 2 次の摂動の特徴】	9
1.7	【問題: 井戸型ポテンシャル】	9
1.7.1	$\sin(\frac{\pi x}{L})$ 型の摂動	9
1.7.2	$\cos(\frac{\pi x}{L})$ 型の摂動	10
1.7.3	$\sin^2(\frac{\pi x}{L})$ 型の摂動	11
1.7.4	$\cos(\frac{2\pi x}{L})$ 型の摂動	11
1.8	【問題: 2 次元井戸型ポテンシャル】	13
1.9	【2 次元井戸型ポテンシャル (その 2)】	14
1.10	【2 次元井戸型ポテンシャル (その 3)】	14
1.11	【円周上の運動または、周期的境界条件】	14
1.12	【平面上の自由粒子: 周期的境界条件】	14
1.13	【2 次元の自由粒子: 周期的境界条件】	14
2	ユニタリ変換	15
2.1	ユニタリ変換とユニタリ作用素	15
2.2	時間の推進とエネルギー作用素	15
2.3	空間並進と運動量	16
2.4	鏡映と Parity	17

2.5	空間回転の作用素と角運動量	17
2.6	【演習問題】	18
3	空間回転と角運動量	19
3.1	角運動量の交換関係	19
3.2	固有値問題：行列表示による	19
3.3	軌道角運動量	20
3.4	演習問題	22
3.4.1	角運動量の交換関係	22
3.4.2	角運動量の固有値問題	22
3.4.3	軌道角運動量の行列表示	22
4	球面調和関数	24
4.1	軌道角運動量：球座標への移行	24
4.2	運動エネルギー：球座標への移行	24
4.3	考察：運動エネルギーの動径方向部分と球面方向部分	24
4.4	球面上の運動：例題	25
4.5	角運動量の固有関数	25
4.5.1	Legendre の球関数（帯球関数）	26
4.5.2	球面調和関数	26
4.5.3	実数にとった球面調和関数（縞球関数）	27
4.6	付録：球座標とデカルト座標	28
4.7	付録：Legendre 多項式と球面調和関数	29
4.8	付録：昇降演算子を利用する球面調和関数の計算	29
5	中心力による運動	31
5.1	重心座標と相対座標	31
5.2	動径方向の方程式	31
5.3	束縛状態と散乱状態：無限遠での振舞い	31
5.3.1	束縛状態でのエネルギー固有値および固有関数	32
5.4	3次元等方調和振動子：球座標による解法	32
5.5	3次元調和振動子：デカルト座標による解	34
5.5.1	1次元調和振動子の結果	34
5.5.2	3次元の場合	34
5.6	問題：重心と相対運動	34
5.7	問題：3次元調和振動子	34
6	水素原子	35
6.1	水素原子：Coulomb 引力による束縛状態	35
6.1.1	例題：単位系と次元	35
6.2	動径方向の方程式	35

6.2.1	基底状態	35
6.2.2	すべてのエネルギー固有値	35
6.2.3	Laguerre の微分方程式	36
6.2.4	冪級数による解	36
6.2.5	波動関数 $u_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$ の様子	37
6.3	付録：合流型超幾何関数	37
6.3.1	Laguerre の多項式との関係	37
6.3.2	水素原子の場合	38
6.3.3	問題：水素原子	38
6.3.4	3次元調和振動子の球座標による解	39
7	中心力による散乱	40
7.1	衝突実験、入射粒子と標的、終状態の channel	40
7.2	弾性散乱の断面積	40
7.3	物質中の散乱による減衰	41
7.4	散乱振幅	41
7.5	逐次近似による解法	42
7.5.1	散乱の Green 関数	42
7.5.2	準備：Yukawa ポテンシャルのフーリエ変換	43
7.5.3	Born 近似	43
7.6	動径方向の方程式	44
7.6.1	平面波の部分波展開	45
7.6.2	phase shift	45
8	電子のスピンと排他原理	47
8.1	スピン角運動量	47
8.1.1	Stern-Gerlach の実験	47
8.1.2	Uhlenbeck-Goudsmit の電子の自転のアイデア	47
8.2	電子の波動関数	47
8.3	多電子系の波動関数：Pauli の排他原理	48
8.4	素粒子のスピン、Fermi 粒子と Bose 粒子	49
8.5	電子の全角運動量	49
8.6	角運動量の合成	50
8.7	演習問題	51
8.7.1	スピン角運動量	51
8.7.2	電子の波動関数	51
8.7.3	多電子系の波動関数：Pauli の排他原理	51
8.7.4	素粒子のスピン、Fermi 粒子と Bose 粒子	51
8.7.5	電子の全角運動量	52
8.7.6	角運動量の合成	52

9 水素様原子	54
9.1 水素様原子	54
9.2 スピン軌道相互作用	55
9.3 特殊相対論的效果	56
9.4 超微細構造：核スピンの影響	57
10 多電子原子と元素の周期律	58
10.1 Helium 様原子：摂動の 1 次	58
10.2 変分法による近似	58
10.3 オルト状態とパラ状態：交換積分	59
10.4 電子の遮蔽効果と元素の周期律	60
11 電磁場中の荷電粒子の運動	62
11.1 電磁場中の荷電粒子のハミルトニアン	62
11.2 荷電粒子の磁気能率について	62
11.3 原子の系の Zeeman 効果	62
11.4 Stern-Gerlach の実験	63
11.5 波動関数のゲージ変換	63
11.6 一様磁場中の荷電粒子の運動：Landau 準位	64
11.7 Aharonov-Bohm 効果	64
11.8 電磁場中の荷電粒子の運動：演習問題	66
11.8.1 電磁場中の荷電粒子のハミルトニアン	66
11.8.2 荷電粒子の軌道角運動量による磁気能率について	66
11.8.3 原子系の Zeeman 効果	66
11.8.4 波動関数のゲージ変換	66
11.8.5 一様磁場中の荷電粒子の運動：Landau 準位	67
12 ハイゼンベルク方程式	68
12.1 Schroedinger Picture	68
12.2 Heisenberg Picture	68
12.3 期待値の時間発展：Ehrenfest の定理	68
12.4 ビリアル定理	69
12.5 演習問題：Schroedinger Picture	70
12.6 演習問題：Heisenberg Picture	70
12.7 演習問題：期待値の時間発展：Ehrenfest の定理	70
12.8 演習問題：ビリアル定理	71
13 摂動による状態の遷移	72
13.1 Dirac-Tomonaga Picture:相互作用表示	72
13.2 S行列による粒子の衝突実験の記述	73
13.3 時間によらない摂動による単位時間当たりの遷移確率	73

14 半古典的近似	75
14.1 WK B 近似	75
14.2 WKB 接続	75
14.2.1 一様な力を受ける粒子	75
14.2.2 鞍点法（峠道の方法）	76
14.2.3 冪と鞍点、最速降下ベクトル	76
14.2.4 $x > b$ の場合	77
14.2.5 $x < b$ の場合	77
14.2.6 Damping solution の接続	77
14.2.7 Blowing-Up solution の意味	78
14.3 半古典的量子条件	78
14.4 半古典的量子条件：例題	79
14.5 トンネル効果の半古典的近似	80
14.6 演習問題	81
15 ディラック方程式	82
15.1 相対論的波動方程式	82
15.2 相対論的波動関数	82
15.3 電磁場の中の方程式	83

1 摂動によるエネルギー準位の変化

系の Hamiltonian が二つの項の和

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V \quad (1.1)$$

からなり、 H_0 の固有値と固有関数はわかっていると
する。

1.1 縮退していない準位の変化

ここでは H_0 の離散で縮退していないエネルギー
固有値と固有状態の変化をかながえる。 λ は小さい
実数の Parameter として、Total Hamiltonian
 $H(\lambda)$ の固有値と固有関数を λ のべき級数の形でも
とめよう。非摂動系の Hamiltonian の固有値問題の
解を

$$H_0 \psi_m^{(0)} = E_m^{(0)} \psi_m^{(0)}, m = 1, 2, 3, \dots \quad (1.2)$$

$$(\psi_m^{(0)}, \psi_k^{(0)}) = \delta_{mk} \quad (1.3)$$

とする。 $H(\lambda)$ の固有値と固有関数は λ が 0 に近づ
くとき H_0 のものに近づくと考えてもよい。そこで
それらを $E_m(\lambda), \psi_m(\lambda), m = 1, 2, \dots$ と記すことに
し、固有値と固有関数を λ のべきに展開して

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (1.4)$$

$$\psi_n(\lambda) = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots \quad (1.5)$$

とする。

ここで摂動系の固有関数 $\psi_n(\lambda)$ の規格化について
通常条件 $\|\psi_n(\lambda)\| = 1$ をとらずに、

$$(\psi_n^{(0)}, \psi_n(\lambda)) = 1 \quad (1.6)$$

としたことに注意しよう。こうすることによって
 $\|\psi_n(\lambda)\| = 1 + \mathcal{O}(\lambda^2)$

となるが途中の計算を簡単化することができる。こ
うして $\psi_n^{(q)}, q \neq 0$ を非摂動系の固有関数 $\psi_k^{(0)}$ で展
開すると $k = n$ 以外の項のみ生じる。

$$\psi_n^{(q)} = \sum_{k \neq n} C_{kn}^{(q)} \psi_k^{(0)} \quad (1.7)$$

すなわち

$$C_{kn}^{(q)} = (\psi_k^{(0)}, \psi_n^{(q)}) \quad (1.8)$$

$H = H_0 + \lambda V$ の n 番目の固有値と固有関数について

$$\{H_0 + \lambda V - E_n(\lambda)\} \psi_n(\lambda) = 0 \quad (1.9)$$

が成り立つので $\psi_k^{(0)}$ との内積をとると、

$$\left(\psi_k^{(0)}, \left(E_k^{(0)} + \lambda V - E_n(\lambda) \right) \psi_n(\lambda) \right) = 0 \quad (1.10)$$

さらに λ の昇冪の順に整理すると

$$\begin{aligned} & \lambda \left\{ \left(\psi_k^{(0)}, \left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \psi_n^{(1)} \right) + \right. \\ & \quad \left. \left(\psi_k^{(0)}, \left(V - E_n^{(1)} \right) \psi_n^{(0)} \right) \right\} + \\ & \sum_{q=2}^{\infty} \lambda^q \left\{ \left(\psi_k^{(0)}, \left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \psi_n^{(q)} \right) + \right. \\ & \quad \left. \left(\psi_k^{(0)}, \left(V - E_n^{(1)} \right) \psi_n^{(q-1)} \right) \right. \\ & \quad \left. - \sum_{p=2}^q E_n^{(p)} \left(\psi_k^{(0)}, \psi_n^{(q-p)} \right) \right\} = 0 \end{aligned}$$

以後簡単のために次の記号を使う。

$$E_k^{(0)} - E_n^{(0)} = \omega_{kn} \quad (1.11)$$

$$(\psi_k^{(0)}, V \psi_n^{(0)}) = V_{kn} \quad (1.12)$$

1.1.1 摂動の 1 次

λ の 1 次の項において $k = n$ とおくと、摂動エネ
ルギーの 1 次を与える式を得る。

$$E_n^{(1)} = V_{nn} \quad (1.13)$$

この式では次数を整理するためのパラメタ λ が省か
れているが、混乱を防ぐために、パラメタを含めた
エネルギーの増分を ΔE で表そう。すなわち、

$$\Delta E_n^{(1)} = \lambda V_{nn} \quad (1.14)$$

また $k \neq n$ とおくと、

$$\omega_{kn} C_{kn}^{(1)} + V_{kn} = 0 \quad (1.15)$$

となり、摂動の1次での固有関数の変化を与える式を得る。

$$C_{kn}^{(1)} = \frac{V_{kn}}{\omega_{nk}}, \quad k \neq n \quad (1.16)$$

1.1.2 摂動の2次

λ の2次の項において $k = n$ とおくと、摂動エネルギーの2次を与える式を得る。

$$\Delta E_n^{(2)} = \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{\omega_{nk}} \quad (1.17)$$

非摂動系のわずかに異なったエネルギー準位は2次の摂動によってその差を広げることがわかる。

λ の2次の項において $k \neq n$ とおくと、2次での固有関数の変化を与える式を得る。

$$C_{kn}^{(2)} = \frac{1}{\omega_{nk}} \sum_{m=1, m \neq n}^{\infty} \frac{V_{km}V_{mn}}{\omega_{nm}} - \frac{V_{nn}V_{kn}}{\omega_{nk}^2} \quad (1.18)$$

1.1.3 3次以上の摂動の漸化式

3次以上の摂動について漸化式をもとめよう。

$$\begin{aligned} & (H_0 - E_n^{(0)} + \lambda V - \lambda E_n^{(1)} - \dots) \\ & \left\{ |n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots \right\} = 0 \end{aligned} \quad (1.19)$$

以後

$$\psi_n^{(0)} = |n\rangle \quad (1.20)$$

と記すことにして λ の1次と二次の項をひろうと

$$(H_0 - E_n^{(0)})|\psi_n^{(1)}\rangle + (V - E_n^{(1)})|n\rangle = 0 \quad (1.21)$$

$$\begin{aligned} & (H_0 - E_n^{(0)})|\psi_n^{(2)}\rangle \\ & + (V - E_n^{(1)})|\psi_n^{(1)}\rangle - E_n^{(2)}|n\rangle = 0 \end{aligned} \quad (1.22)$$

一般に $q = 2, 3, \dots$ として

$$\begin{aligned} & (H_0 - E_n^{(0)})|\psi_n^{(q)}\rangle + V|\psi_n^{(q-1)}\rangle \\ & - \sum_{p=1}^{q-1} E_n^{(p)}|\psi_n^{(q-p)}\rangle - E_n^{(q)}|n\rangle = 0 \end{aligned} \quad (1.23)$$

ここには $|\psi_n^{(q-1)}\rangle$ が二度あらわれることに注意しよう。 $\langle n|$ との内積をとると、 $E_n^{(q)}$ をもとめる漸化式を得る。

$$E_n^{(q)} = \langle n|V|\psi_n^{(q-1)}\rangle, \quad q = 2, 3, \dots \quad (1.24)$$

$|\psi_n^{(0)}\rangle = |n\rangle$ と解釈する限りこの式は $q = 1$ でもなりたつ。

固有関数を求めるために (1.23) の $\langle n|$ 以外の成分を求めよう。それには射影演算子 $I - \Pi_n$ を全体に operate すればよい。

$$\begin{aligned} & (H_0 - E_n^{(0)})|\psi_n^{(q)}\rangle + (I - \Pi_n)V|\psi_n^{(q-1)}\rangle \\ & - \sum_{p=1}^{q-1} E_n^{(p)}|\psi_n^{(q-p)}\rangle = 0 \end{aligned} \quad (1.25)$$

$q = 2, 3, \dots$ に対して

$$\begin{aligned} |\psi_n^{(q)}\rangle = & -\frac{I - \Pi_n}{H_0 - E_n^{(0)}}V|\psi_n^{(q-1)}\rangle + \\ & \sum_{p=1}^{q-1} \frac{E_n^{(p)}}{H_0 - E_n^{(0)}}|\psi_n^{(q-p)}\rangle \end{aligned} \quad (1.26)$$

が得られる。 $|\psi_n^{(0)}\rangle = |n\rangle$ と解釈し、さらに $\sum$ の項の寄与をゼロとおけば $q = 1$ のときにも成り立つ。

固有値と固有関数の展開係数 $C_{kn}^{(q)}$ は、上式の V の後ろに $I = \sum_r |r\rangle\langle r|$ をはさみ左から $\langle k|$ をかけることによって得られる。

$$E_n^{(q)} = \sum_{r \neq n} V_{nr} C_{rn}^{(q-1)}, \quad q = 2, 3, \dots \quad (1.27)$$

$$C_{kn}^{(q)} = \frac{1}{\omega_{nk}} \left\{ \sum_{r \neq n} V_{kr} C_{rn}^{(q-1)} - \sum_{p=1}^{q-1} E_n^{(p)} C_{kn}^{(q-p)} \right\}, \quad q = 2, 3, \dots, k \neq n \quad (1.28)$$

これらの式を $q = 1$ の場合に適用するには $C_{rn}^{(0)} = \delta_{rn}$ と拡張し、 $\sum_p$ の項をゼロとみなし、 $\sum_{r \neq n}$ を $\sum_r$ とおきかえればよい。この問題は ∞ 個の ∞ 行 ∞ 列の行列 $C_{mn}^{(q)}$ を求めることに帰着する。

すなわち $q = 0$ にたいする、初期値

$$C_{rn}^{(0)} = \delta_{rn} \quad (1.29)$$

が与えられたときに, $q = 1, 2, 3, \dots$ にたいして、

$$C_{kn}^{(q)} = \frac{1}{\omega_{nk}} \left\{ \sum_{r=1}^{\infty} V_{kr} C_{rn}^{(q-1)} - \sum_{p=1}^{q-1} E_n^{(p)} C_{kn}^{(q-p)} \right\} \quad (1.30)$$

$k \neq n$

$$C_{nn}^{(q)} = 0 \quad (1.31)$$

$$E_n^{(q)} = \sum_{r=1}^{\infty} V_{nr} C_{rn}^{(q-1)} \quad (1.32)$$

をとけばよい。入力する数値は V_{mn} および E_m^0 である。

1.2 縮退がある準位の変化; 永年方程式

固有値 E_n が g 重に縮退しているとして、この準位のずれを求めよう。摂動によって E_n の縮退が取り除かれ g 個の準位

$$E_{n\alpha}(\lambda), \alpha = 1, 2, \dots, g \quad (1.33)$$

に分かれるものとしよう。 λ による冪展開は

$$E_{n\alpha}(\lambda) = E_n + \lambda E_{n\alpha}^{(1)} + \lambda^2 E_{n\alpha}^{(2)} + \dots \quad (1.34)$$

以後

$$E_{n\alpha}(0) = E_n \quad (1.35)$$

として、 E_n, H の添え字 $^{(0)}, 0$ を省略することにする。固有状態のべき展開は

$$|\psi_{n\alpha}(\lambda)\rangle = |n\alpha\rangle + \lambda |\psi_{n\alpha}^{(1)}\rangle + \dots \quad (1.36)$$

となるが、 $|n\alpha\rangle$ は**未知である**。直交性と規格化は次のようにしよう。

$$\langle n\alpha | \psi_{n\beta}(\lambda) \rangle = \langle n\alpha | m\beta \rangle \quad (1.37)$$

$$= \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} \quad (1.38)$$

固有値方程式

$$\{H - E_{n\alpha}(\lambda)\} |\psi_{n\alpha}(\lambda)\rangle = 0 \quad (1.39)$$

にこれらを代入すると

$$\left(H + \lambda V - E_n - \lambda E_{n\alpha}^{(1)} - \dots \right) \times \left(|n\alpha\rangle + \lambda |\psi_{n\alpha}^{(1)}\rangle + \dots \right) = 0 \quad (1.40)$$

λ の 1 次の項をひろうと

$$(H - E_n) |\psi_{n\alpha}^{(1)}\rangle + (V - E_{n\alpha}^{(1)}) |n\alpha\rangle = 0 \quad (1.41)$$

これと $\langle n\beta |$ との内積をとると、つぎの永年方程式を得る。

$$\langle n\beta | V | n\alpha \rangle = E_{n\alpha}^{(1)} \delta_{\alpha\beta} \quad (1.42)$$

これは V をただしい固有状態 $\langle n\beta |, |n\alpha\rangle$ ではさんで行列表示すると、 $E_{n\alpha}^{(1)}, \alpha = 1, \dots, n$ を対角要素とする対角行列になることをしめしている。

固有関数 $|n\alpha\rangle, \alpha = 1, 2, \dots, g$ ははじめにはわからないので、適当に直交系をつかって、 $g \times g$ 行列 $\langle n\beta | V | n\alpha \rangle$ をつくと、これは対角行列にはなっていないが、Hermite 行列になり、固有値が $E_{n\alpha}^{(1)}, \alpha = 1, \dots, n$ をあたえ、そのときの固有ベクトルが正しい $|n\alpha\rangle, \alpha = 1, 2, \dots, g$ をあたえる。

λ の二次の項をひろうと

$$(H - E_n) |\psi_{n\alpha}^{(2)}\rangle + (V - E_{n\alpha}^{(1)}) |\psi_{n\alpha}^{(1)}\rangle - E_{n\alpha}^{(2)} |n\alpha\rangle = 0 \quad (1.43)$$

一般に $q = 2, 3, \dots$ として

$$(H - E_n) |\psi_{n\alpha}^{(q)}\rangle + V |\psi_{n\alpha}^{(q-1)}\rangle - \sum_{p=1}^{q-1} E_{n\alpha}^{(p)} |\psi_{n\alpha}^{(q-p)}\rangle - E_{n\alpha}^{(q)} |n\alpha\rangle = 0 \quad (1.44)$$

ここには $|\psi_{n\alpha}^{(q-1)}\rangle$ が二度あらわれることに注意しよう。

これからさらに近似を高めることができる。

1.3 【摂動論の問題：1次元調和振動子】

1次元調和振動子

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

の系では、長さの次元をもつのは $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ だけなので、

$$\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

をつかって、 $x = \ell y$ とすると、 y は無次元になる。エネルギー固有関数 $u_n(x)$ は Hermite の多項式 $H_n(y)$ を用いて

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{\ell}} \frac{H_n(y)}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{1}{2}y^2} \quad (1.45)$$

とあらわされる。昇降演算子

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{d}{dy} \right) \quad (1.46)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \frac{ip}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \quad (1.47)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right) \quad (1.48)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{ip}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \quad (1.49)$$

を導入すると、次の関係式がなりたつ。

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (1.50)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (1.51)$$

これらによって、代数的に種々の計算ができる。まず、

$$\begin{aligned} (a^\dagger)^k |n\rangle &= \sqrt{\frac{(n+k)!}{n!}} |n+k\rangle \\ (a)^k |n\rangle &= \sqrt{\frac{n!}{(n-k)!}} |n-k\rangle \end{aligned} \quad (1.52)$$

がえられる。 y については、

$$\begin{aligned} y|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \sqrt{n}|n-1\rangle + \sqrt{n+1}|n+1\rangle \} \\ y^2|n\rangle &= \frac{1}{2} \{ \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle + \\ (2n+1)|n\rangle &+ \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y^3|n\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \{ \sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle + \\ &3n\sqrt{n}|n-1\rangle + 3(n+1)\sqrt{n+1}|n+1\rangle + \\ &+ \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}|n+3\rangle \} \end{aligned} \quad (1.53)$$

さらにこれらを使って、

$$\begin{aligned} \langle n|y^2|n\rangle &= n + \frac{1}{2} \\ \langle n|y^4|n\rangle &= \frac{3}{4}(2n^2 + 2n + 1) \\ \langle n|y^6|n\rangle &= \frac{5}{8}(4n^3 + 6n^2 + 8n + 3) \end{aligned} \quad (1.54)$$

また直接波動関数を積分することによって、

$$\langle 0|y^{2n}|0\rangle = \frac{\Gamma(n + \frac{1}{2})}{\sqrt{\pi}} \quad (1.55)$$

がえられる。

1. 1次元調和振動子に摂動 $V = Ax + \frac{1}{2}Bx^2$ がかった場合の基底状態のエネルギーの変化を波動関数を積分することによって、摂動論の1次までもとめよ。

2. 1次元調和振動子に摂動 $V = Ax + \frac{1}{2}Bx^2$ がかった場合の基底状態のエネルギーの変化を昇降演算子をもちいて、摂動論の1次までもとめよ。

3. 1次元調和振動子に摂動 $V = Ax + \frac{1}{2}Bx^2$ がかった場合のすべてのエネルギー固有値の変化を摂動論の1次までもとめよ。

(答え)

$$\Delta E_n^{(1)} = \frac{B\hbar}{2m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (1.56)$$

4. 1次元調和振動子に摂動 $V = Ax + \frac{1}{2}Bx^2$ がかった場合の基底状態のエネルギー固有値の変化を摂動論の2次までもとめよ。

5. 1次元調和振動子に摂動 $V = Ax + \frac{1}{2}Bx^2$ がかった場合の摂動論の2次のエネルギー固有値の変化をもとめよ。

(答え)

$$\Delta E_n^{(2)} = -\frac{A^2}{2m\omega^2} - \frac{\hbar B^2}{8m^2\omega^3} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (1.57)$$

6. 1次元調和振動子に摂動 $V = Ax + \frac{1}{2}Bx^2$ がかった場合のエネルギー準位の厳密な値をもとめよ。

(答): $\Omega = \sqrt{\omega^2 + \frac{B}{m}}$ とするとエネルギー固有値は

$$E_n(a, b) = \hbar\Omega(n + \frac{1}{2}) - \frac{A^2}{2m\Omega^2} \quad (1.58)$$

また固有関数 $v_n(x)$ は非摂動系の固有関数を $u_n(\omega, x)$ として、

$$v_n(x) = u_n(\Omega, x + \frac{A}{m\Omega^2}) \quad (1.59)$$

となる。

7. 1次元調和振動子に摂動 $V = Ax^3 + Bx^4$ がかった場合の基底状態のエネルギー準位のずれを摂動の1次でもとめよ。(答): $\frac{3\hbar^2 B}{4m^2\omega^2}$
8. 1次元調和振動子に摂動 $V = Ax^3 + Bx^4$ がかった場合のエネルギー準位のずれを摂動の1次でもとめよ。(答): $\frac{3\hbar^2 B}{4m^2\omega^2}(2n^2 + 2n + 1)$
9. 1次元調和振動子に摂動 $V = Bx^3$ がかった場合の基底状態のエネルギー準位のずれを摂動の2次までもとめよ。(答): $-\frac{11B^2\hbar^2}{8m^3\omega^4}$
10. 1次元調和振動子に摂動 $V = Bx^3$ がかった場合のエネルギー準位のずれを摂動の2次までもとめよ。(答): $-\frac{B^2\hbar^2}{8m^3\omega^4}(30n^2 + 30n + 11)$
11. 1次元調和振動子に摂動 $V = Ax + Bx^3$ がかった場合の基底状態のエネルギー準位のずれを摂動の2次までもとめよ。(答):

$$-\frac{A^2}{2m\omega^2} - \frac{3AB\hbar}{2m^2\omega^3} - \frac{11B^2\hbar^2}{8m^3\omega^4}$$

12. 1次元調和振動子に摂動 $V = Ax + Bx^3$ がかった場合のエネルギー準位のずれを摂動の2次までもとめよ。

(答): 一次の摂動は $\Delta E_n^{(1)} = 0$ となる。2次の項を $\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ として計算しよう。まず $V|n\rangle$

を計算しておく。

$$\begin{aligned} V|n\rangle &= (A\ell y + B\ell^3 y^3)|n\rangle \\ &= \frac{A\ell}{\sqrt{2}}\{\sqrt{n}|n-1\rangle + \sqrt{n+1}|n+1\rangle\} + \\ &\quad \frac{B\ell^3}{2\sqrt{2}}\{\sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle + \\ &\quad 3n\sqrt{n}|n-1\rangle + 3(n+1)\sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ &\quad + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}|n+3\rangle\} \end{aligned} \quad (1.60)$$

$\Delta E_n^{(2)}$ への寄与は4つの中間状態 $|n-3\rangle, |n-1\rangle, |n+1\rangle, |n+3\rangle$ を経るものに分けられる。それぞれは、

$$\begin{aligned} \frac{|\langle n-3|V|n\rangle|^2}{3\hbar\omega} &= \frac{B^2\ell^6}{24\hbar\omega}n(n-1)(n-2) \\ \frac{|\langle n-1|V|n\rangle|^2}{\hbar\omega} &= \frac{n}{2\hbar\omega}(A\ell + \frac{3}{2}B\ell^3n)^2 \\ \frac{|\langle n+1|V|n\rangle|^2}{-\hbar\omega} &= -\frac{n+1}{2\hbar\omega}\{A\ell + \frac{3}{2}B\ell^3(n+1)\}^2 \\ \frac{|\langle n+3|V|n\rangle|^2}{-3\hbar\omega} &= -\frac{B^2\ell^6}{24\hbar\omega}(n+1)(n+2)(n+3) \end{aligned}$$

これらの合計が答になり、

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(2)} &= -\frac{1}{\hbar\omega} \times \\ &\quad \left\{ \frac{1}{2}A^2\ell^2 + \frac{3}{2}AB\ell^4(2n+1) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{8}B^2\ell^6(30n^2 + 30n + 11) \right\} \end{aligned}$$

1.4 【2次元調和振動子の演習問題】

2次元等方調和振動子

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

の系はいくつもの興味深い解釈と考察ができる。

これを平面上の質点の運動だとすると、Hookeの力 $-m\omega^2 \mathbf{r}$ によって原点に引かれる場合になる。

また、1直線状にある二つの質点が原点から Hookeの力をうけ、相互作用はない場合に相当する。

どの場合にも、エネルギー固有値問題は1次元調和振動子の固有値問題の結果を利用して解くことができる。

$$\begin{aligned} H &= h_x + h_y \\ h_x &= \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\ h_y &= \frac{1}{2m}p_y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 \end{aligned}$$

として考えよう。

1次元調和振動子の固有関数 $\psi_n(x)$ と $\psi_m(y)$ を利用して、2次元の波動関数 $\Psi(x, y)$ を求める方法と、2組の可換な昇降演算子 $a, a^\dagger, b, b^\dagger$ を使うやり方がある。

前者では、二つの非負の整数 n_1, n_2 によって、固有値と固有関数が次のように表される。

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega(n_1 + n_2 + 1) \quad (1.61)$$

$$\Psi_{n_1 n_2}(x, y) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y) \quad (1.62)$$

後者では、

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= 1 \\ [b, b^\dagger] &= 1 \\ [a, b] &= [a^\dagger, b] = [a, b^\dagger] = 0 \end{aligned} \quad (1.63)$$

を満たす演算子 $a, a^\dagger, b, b^\dagger$ と

$$a|0, 0\rangle = b|0, 0\rangle = 0 \quad (1.64)$$

を満たす基底状態 $|0, 0\rangle$ をつかう。このとき二つの非負の整数 n_1, n_2 によって、固有状態が次のように表される。

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{(a^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(b^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} |0, 0\rangle \quad (1.65)$$

1. 2次元等方調和振動子のエネルギー

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

の固有値をもとめよ。また、固有関数 $\Psi(x, y)$ を1次元調和振動子の固有関数 $\psi_n(x)$ を使ってあらわせ。

(答) 二つの非負の整数 n_1, n_2 によって、固有値と固有関数は

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega(n_1 + n_2 + 1) \quad (1.66)$$

$$\Psi_{n_1 n_2}(x, y) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y) \quad (1.67)$$

2. 2次元等方調和振動子のエネルギー固有値を

$$E_N = \hbar\omega(N + 1), \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (1.68)$$

とするとき、その多重度をもとめよ。

(答) $N + 1$

1.5 【2次元調和振動子：摂動の問題】

1. 2次元等方調和振動子に摂動 $V = Jxy$ がかった場合の縮退した $N = 1$ のエネルギー準位 $E_{N=1} = 2\hbar\omega$ のずれを永年方程式を使ってもとめよ。また、そのときの(0次の)固有状態をもとめよ。

(解答) 昇降演算子を使う場合は、

$$\begin{aligned} \ell &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ x &= \frac{\ell}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \\ y &= \frac{\ell}{\sqrt{2}}(b + b^\dagger) \end{aligned} \quad (1.69)$$

とし、縮退している状態を

$$\begin{aligned} |01\rangle &= b^\dagger|00\rangle \\ |10\rangle &= a^\dagger|00\rangle \end{aligned} \quad (1.70)$$

として、計算すればよい。

2 × 2 行列

$$\begin{pmatrix} \langle 01|V|01 \rangle & \langle 01|V|10 \rangle \\ \langle 10|V|01 \rangle & \langle 10|V|10 \rangle \end{pmatrix} = \frac{J\hbar}{2m\omega} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.71)$$

の固有値問題になる。固有値とそれぞれの固有ベクトルは

$$\pm \frac{J\hbar}{2m\omega} \quad (1.72)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|01 \rangle \pm |10 \rangle) \quad (1.73)$$

2. (**) 2次元等方調和振動子に摂動 $V = Jxy$ がかった場合のすべてのエネルギー準位のずれを摂動論の1次で求めよ。

(解答) $(N+1) \times (N+1)$ 行列の永年方程式を使う。答は

$$\Delta E_N^{(1)} = \frac{\hbar J}{2m\omega} \times (N, N-2, N-4, \dots, -N)$$

角運動量のところで勉強する L_x の行列表示とくらべてみよう。

また、次の問の厳密解をべき展開して求めたものと比べてみよう。

3. 2次元等方調和振動子に摂動 $V = Jxy$ がかった場合は厳密解を求めることができる。エネルギー準位の厳密解をもとめよ。

(解答) 古典力学の問題と考えればよい。 $\Omega_1 = \sqrt{\omega^2 + \frac{J}{m}}, \Omega_2 = \sqrt{\omega^2 - \frac{J}{m}}$ とすると答は $E_{n_1 n_2} = \hbar\Omega_1(n_1 + \frac{1}{2}) + \hbar\Omega_2(n_2 + \frac{1}{2})$

4. 2次元等方調和振動子に摂動 $V = Jp_x p_y$ がかった場合について以下の問に答えよ。

- (a) $N = 1$ のエネルギーレベルの1次のずれをもとめよ。また(0次の)エネルギー固有状態をもとめよ。

(解答) 昇降演算子を使う場合は、

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{-i\hbar}{\sqrt{2}\ell} (a - a^\dagger) \\ p_y &= \frac{-i\hbar}{\sqrt{2}\ell} (b - b^\dagger) \end{aligned} \quad (1.74)$$

として、計算すればよい。

永年方程式は 2 × 2 行列

$$\frac{Jm\omega\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.75)$$

の固有値問題になる。

固有値とそれぞれの固有ベクトルは

$$\pm \frac{Jm\omega\hbar}{2} \quad (1.76)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|01 \rangle \pm |10 \rangle) \quad (1.77)$$

- (b) (**) すべての N についてのエネルギーレベルの1次のずれをもとめよ。

(解答)

$$\begin{aligned} \Delta E_N^{(1)} &= \frac{\hbar m \omega J}{2} \\ &\times (N, N-2, N-4, \dots, -N) \end{aligned} \quad (1.78)$$

角運動量 L_x の行列表示とくらべてみよう。また、次の問の厳密解をべき展開して求めたものと比べてみよう。

- (c) エネルギー準位の厳密解をもとめよ。

(解答) 力学の問題と考えればよい。

$$\begin{aligned} E_{n_x n_y} &= \hbar\omega \times \\ &\{ \sqrt{1+mJ}(n_x + \frac{1}{2}) + \\ &\sqrt{1-mJ}(n_y + \frac{1}{2}) \} \end{aligned}$$

5. 平面上の荷電粒子に垂直な磁場がかかるときの運動は2次元等方調和振動子

$$H_0 = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2) \quad (1.79)$$

に摂動

$$V = \frac{e}{2m}B(xp_y - p_x y) \quad (1.80)$$

がかかったものとみなせる。(これは、Zeeman効果の2次元版と考えてもよい。)この場合に以下の問に答えよ。

- (a) $N = 1$ のエネルギーレベルの1次のずれをもとめよ。

(解答) 昇降演算子を使う場合は、

$$V = \frac{-i\hbar eB}{2m}(a^\dagger b - ab^\dagger) \quad (1.81)$$

の行列要素

$$\begin{pmatrix} \langle 01|V|01 \rangle & \langle 01|V|10 \rangle \\ \langle 10|V|01 \rangle & \langle 10|V|10 \rangle \end{pmatrix} = \frac{-i\hbar eB}{2m} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.82)$$

の固有値と固有ベクトルを求める問題になる。

固有値とそれぞれの固有ベクトルは

$$\mp \frac{eB\hbar}{2m} \quad (1.83)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|01 \rangle \mp i|10 \rangle) \quad (1.84)$$

- (b) (**) すべての N についてのエネルギーレベルの1次のずれをもとめよ。

(解答) $(N+1) \times (N+1)$ 行列の永年方程式を使う。

$$\Delta E_N^{(1)} = \frac{eB\hbar}{2m} \times (N, N-2, N-4, \dots, -N)$$

角運動量 L_y の行列表示とくらべてみよう。

- (c) (***) エネルギー準位の厳密解をもとめよ。

(解答) 略

6. 質量 m の2粒子が同一直線上を共通のポテンシャル $\frac{m\omega^2}{2}x^2$ のもとで運動しているとき、以下の問に答えよ。

- (a) 粒子間に力がはたらかないときの全系のエネルギー準位をもとめよ。

(解答) 2次元等方調和振動子の問題と同じになり、二つの非負の整数 n_1, n_2 によって、固有値と固有関数が次のように表される。

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega(n_1 + n_2 + 1)$$

$$\Psi_{n_1 n_2}(x, y) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)$$

エネルギー固有値を

$$E_N = \hbar\omega(N+1), \quad N = 0, 1, 2, \dots$$

と書くとき、その多重度は $N+1$ である。

- (b) 粒子間にも引力がはたらき、そのポテンシャルエネルギーが各々の座標を x, y として、

$$\frac{k}{2}(x-y)^2$$

とかけるとき、エネルギー準位の厳密解をもとめよ。

(解答) ハミルトン演算子が

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

$$\frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2) + \frac{k}{2}(x-y)^2 \quad (1.85)$$

となるが、 45° 傾いた直交座標様

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + Y)$$

$$y = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - Y)$$

を導入することによって、

$$H = \frac{1}{2m}(p_X^2 + p_Y^2) +$$

$$\frac{1}{2}(m\omega^2 + 2k)X^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 Y^2 \quad (1.86)$$

となるので、二つの非負の整数 n_1, n_2 によって、固有値は

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega \sqrt{1 + \frac{2k}{\omega^2}(n_1 + \frac{1}{2})} + \hbar\omega(n_2 + \frac{1}{2})$$

- (c) (**) 粒子間の引力を摂動と考えるとき、 k の 1 次までの近似でエネルギーをもとめよ。

(解答)

$$\Delta E_N^{(1)} = \frac{\hbar k}{m\omega}(\nu + \frac{1}{2}), \quad \nu = 0, 1, 2, \dots, N$$

1.6 【問題：2 次の摂動の特徴】

非常に接近した二つのエネルギー準位 $E_1 < E_2$ がある系に摂動が加わったとき、1 次でのエネルギーのずれが 0 になるとする。このときの 2 次のずれはこの 2 準位だけを考慮すればよい。このとき、2 次のずれは準位間の間隔を広げるように起こることを示せ。

(解答)

$$\begin{aligned} \Delta E_1^{(2)} &= \lambda^2 \frac{|V_{12}|^2}{E_1 - E_2} = -\lambda^2 \frac{|V_{12}|^2}{E_2 - E_1} < 0 \\ \Delta E_2^{(2)} &= \lambda^2 \frac{|V_{12}|^2}{E_2 - E_1} > 0 \end{aligned}$$

同じ量だけ反対方向にずれ、間隔がひろがる。

1.7 【問題：井戸型ポテンシャル】

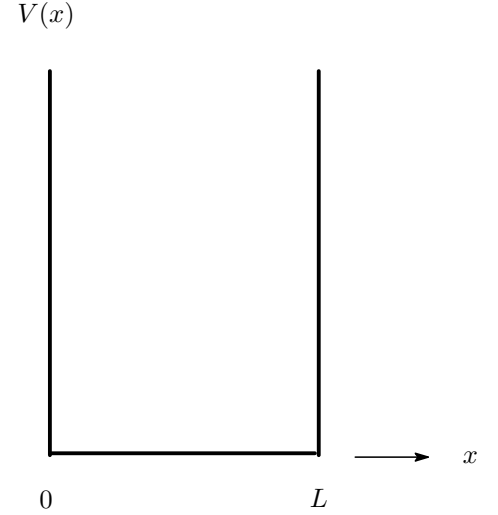


図 1: 無限に高い井戸型ポテンシャル

無限に高いポテンシャルによって、 $0 < x < L$ の範囲に閉じ込められた質量 m の粒子がある。

この系のエネルギー固有値と固有状態は

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 \quad (1.87)$$

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (1.88)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.89)$$

で与えられる。

以下の問題では次の式を使うことがある。

$$\cos Nx \sin nx = \frac{1}{2} \sin(n+N)x + \frac{1}{2} \sin(n-N)x$$

1.7.1 $\sin(\frac{\pi x}{L})$ 型の摂動

無限に高いポテンシャルによって、 $0 < x < L$ の範囲に閉じ込められた質量 m の粒子に摂動

$$\lambda V = \lambda \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (1.90)$$

がかけられたときを考えよう。

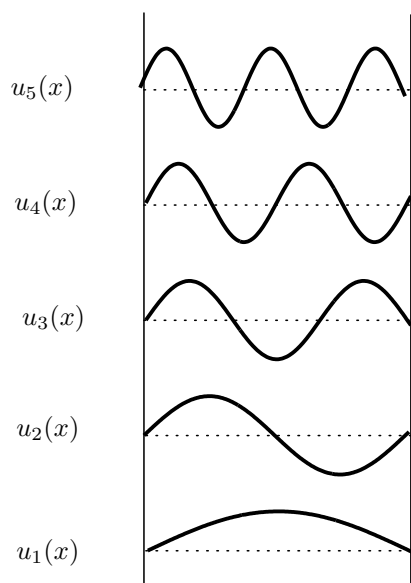


図 2: エネルギー固有状態

1. 基底状態のエネルギーの摂動の1次のずれ $\Delta E_1^{(1)}$ をもとめよ。

(解答)

$$\Delta E_1^{(1)} = \frac{8\lambda}{3\pi}$$

2. すべての n についての摂動の1次のエネルギーのずれ $\Delta E_n^{(1)}$ をもとめよ。

(解答)

$$\Delta E_n^{(1)} = \frac{2\lambda}{\pi} \frac{1}{1 - \frac{1}{4n^2}} \quad (1.91)$$

- 3.

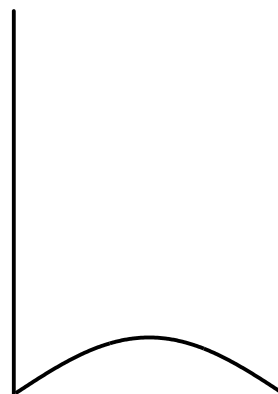
$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Delta E_n^{(1)} = \lambda \frac{2}{\pi}$$

となるわけを物理的、直感的に説明せよ。

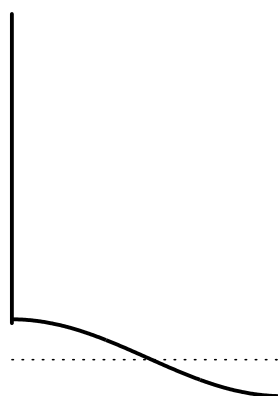
(解答) $n \rightarrow \infty$ の極限では、被積分関数のなかで、

$$\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \rightarrow \frac{1}{2}$$

とみなせるから。

図 3: $\sin(\frac{\pi x}{L})$ 型の摂動

1.7.2 $\cos(\frac{\pi x}{L})$ 型の摂動

図 4: $\cos(\frac{\pi x}{L})$ 型の摂動

無限に高いポテンシャルによって、 $0 < x < L$ の範囲に閉じ込められた質量 m の粒子に摂動

$$\lambda V = \lambda \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (1.92)$$

がかけられたときを考えよう。

この例では、摂動の1次では

$$\Delta E_n^{(1)} = \lambda \langle n | V | n \rangle = 0$$

したがって以下では摂動の2次を調べよう。

1. 基底状態のエネルギーの摂動の2次のずれ $\Delta E_1^{(2)}$ をもとめよ。

(解答)

$$\Delta E_1^{(2)} = -\frac{\lambda^2}{6} \frac{mL^2}{\pi^2 \hbar^2}$$

2. 次の式を証明せよ。

$$\begin{aligned} Vu_1 &= \frac{1}{2}u_2 \\ Vu_n &= \frac{1}{2}u_{n-1} + \frac{1}{2}u_{n+1}, \quad n = 2, 3, \dots \end{aligned}$$

3. 各エネルギーレベルの変化を摂動の2次までもとめよ。

(解答) $n > 1$ では、

$$\Delta E_n^{(2)} = \lambda^2 \frac{mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{4n^2 - 1}$$

1.7.3 $\sin^2(\frac{\pi x}{L})$ 型の摂動

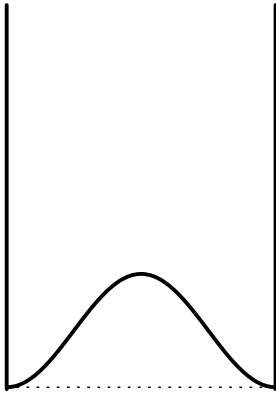


図 5: $\sin^2(\frac{\pi x}{L})$ 型の摂動

前問と同じ系に、摂動

$$\lambda V = \lambda \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (1.93)$$

がかけられたとする。

1. 基底状態のエネルギーのずれを摂動の2次までもとめよ。

(解答)

$$\begin{aligned} \Delta E_1^{(1)} &= \frac{3}{4}\lambda \\ \Delta E_1^{(2)} &= -\frac{\lambda^2}{64} \frac{mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \end{aligned}$$

- 2.

$$Vu_1 = -\frac{1}{4}u_3 + \frac{3}{4}u_1 \quad (1.94)$$

$$Vu_2 = -\frac{1}{4}u_4 + \frac{1}{2}u_2 \quad (1.95)$$

および、

$$\begin{aligned} Vu_n &= -\frac{1}{4}u_{n+2} + \frac{1}{2}u_n - \frac{1}{4}u_{n-2} \\ (n &= 3, 4, \dots) \end{aligned} \quad (1.96)$$

をしめせ。

3. このときのすべてのエネルギー順位の変化を摂動の1次でもとめよ。

(解答)

$$\Delta E_n^{(1)} = \frac{1}{2}\lambda, \quad n > 1$$

4. この摂動による2次のエネルギー変化をすべての準位についてもとめよ。

(解答)

$$\begin{aligned} \Delta E_1^{(2)} &= -\frac{\lambda^2}{64} \frac{mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \\ \Delta E_2^{(2)} &= -\frac{\lambda^2}{96} \frac{mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \end{aligned}$$

$n > 2$ にたいしては、

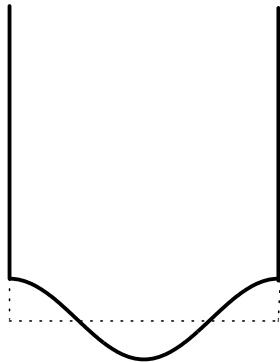
$$\Delta E_n^{(2)} = \frac{\lambda^2}{16} \frac{mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2 - 1}$$

1.7.4 $\cos(\frac{2\pi x}{L})$ 型の摂動

前問と同じ系に、摂動

$$\lambda V = \lambda \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \quad (1.97)$$

がかけられたとする。

図 6: $\cos(\frac{2\pi x}{L})$ 型の摂動

1. 基底状態のエネルギーのずれを摂動の 2 次までもとめよ。

(解答)

$$\begin{aligned}\Delta E_1^{(1)} &= -\frac{1}{2}\lambda \\ \Delta E_1^{(2)} &= -\frac{\lambda^2}{16} \frac{mL^2}{\pi^2 \hbar^2}\end{aligned}$$

2. 次の式が成り立つことを示せ。

$$Vu_1 = \frac{1}{2}u_3 - \frac{1}{2}u_1 \quad (1.98)$$

$$Vu_2 = \frac{1}{2}u_4 \quad (1.99)$$

$$\begin{aligned}Vu_n &= \frac{1}{2}u_{n+2} + \frac{1}{2}u_{n-2} \quad (1.100) \\ (n &= 3, 4, \dots)\end{aligned}$$

3. このときのすべての n (ただし $n > 1$) についてのエネルギー準位の変化を摂動の 2 次までもとめよ。

(解答) 基底状態以外について、1 次の摂動はきえる。

$$\Delta E_n^{(1)} = 0$$

2 次では、

$$\begin{aligned}\Delta E_1^{(2)} &= -\frac{\lambda^2}{16} \frac{mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \text{ (前出)} \\ \Delta E_2^{(2)} &= -\frac{\lambda^2}{24} \frac{mL^2}{\pi^2 \hbar^2}\end{aligned}$$

また、 $n > 2$ にたいして、

$$\Delta E_n^{(2)} = \frac{\lambda^2}{4} \frac{mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2 - 1}$$

4. この摂動

$$\lambda V_2 = \lambda \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \quad (1.101)$$

と、前問の摂動

$$\lambda V_1 = \lambda \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (1.102)$$

との間には関係

$$V_2 = 1 - V_1 \quad (1.103)$$

があるので、摂動の 1 次と 2 次について、前問の答からこの問題の結果を得るにはどうしたらよいか。

(解答) 摂動の 1 次については、

$$\Delta E(2) = \lambda - 2\Delta E(1) \quad (1.104)$$

2 次については

$$\Delta E(2) = 4\Delta E(1) \quad (1.105)$$

が各レベルについて成り立つ。

1.8 【問題：2次元井戸型ポテンシャル】

無限に高いポテンシャル壁によって、 $0 < x < L$ 、 $0 < y < L$ の範囲に閉じ込められた質量 m の粒子の場合には、先の 1 次元の波動関数をつかって、

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (n_1^2 + n_2^2) \quad (1.106)$$

$$u_{n_1 n_2} = \frac{2}{L} \sin \frac{n_1 \pi x}{L} \sin \frac{n_2 \pi y}{L} \quad (1.107)$$

$$n_1 = 1, 2, 3, \dots \quad (1.108)$$

$$n_2 = 1, 2, 3, \dots \quad (1.109)$$

がエネルギー固有値とエネルギー固有状態の完全系をあらわす。

1. 下から数えて 5 番目までのことになったエネルギー準位の多重度をもとめよ。【解答】

(a) $E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \times 2$ に属する固有状態：

$$(n_1, n_2) = (1, 1)$$

(b) $E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \times 5$ に属する固有状態：

$$(n_1, n_2) = (1, 2), (2, 1)$$

(c) $E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \times 8$ に属する固有状態：

$$(n_1, n_2) = (2, 2)$$

(d) $E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \times 10$ に属する固有状態：

$$(n_1, n_2) = (1, 3), (3, 1)$$

(e) $E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \times 13$ に属する固有状態：

$$(n_1, n_2) = (2, 3)$$

多重度は順に、1, 2, 1, 2, 1 である。

2. $E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \times 50$ なるエネルギー準位の多重度をもとめよ。

【解答】

$$(n_1, n_2) = (1, 7), (5, 5), (7, 1)$$

なる固有状態があるから、3 である。

3. $E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \times 65$ なるエネルギー準位の多重度をもとめよ。【解答】

$$(n_1, n_2) = (1, 8), (4, 7), (7, 4), (8, 1)$$

多重度は 4 である。

*****ここ
から先はまだ問題が完成していません。

1.9 【2次元井戸型ポテンシャル（その2）】

以下では $0 < x < L$ 、 $0 < y < L$ の範囲の2次元井戸型ポテンシャルのエネルギー準位が摂動

$$\lambda V = \lambda \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{\pi y}{L}$$

によってどのようにずれるかを考えよう。

1.10 【2次元井戸型ポテンシャル（その3）】

以下では $0 < x < L$ 、 $0 < y < L$ の範囲の2次元井戸型ポテンシャルのエネルギー準位が摂動

$$\lambda V = \lambda \sin^2 \frac{\pi x}{L} \sin^2 \frac{\pi y}{L}$$

によってどのようにずれるかを考えよう。

1.11 【円周上の運動または、周期的境界条件】

1.12 【平面上の自由粒子：周期的境界条件】

1.13 【2次元の自由粒子：周期的境界条件】

2 ユニタリ変換

2.1 ユニタリ変換とユニタリ作用素

ある量子力学系の波動関数の全体に作用する線型作用素で 1 対 1、かつノルムを不変に保つものを**ユニタリ作用素**という。状態をユニタリ作用素によって移す変換を**ユニタリ変換**という。

いまユニタリ作用素の作用（ユニタリ変換）を

$$\psi' = U\psi \quad (2.1)$$

と記すことにしよう。

例題 ノルム不変の条件

$$\|\psi'\| = \|\psi\| \quad (2.2)$$

は内積不変の条件

$$(\psi'_1, \psi'_2) = (\psi_1, \psi_2) \quad (2.3)$$

と同等であることを示せ。

（解）ユニタリ変換によって状態 $\psi_1 + \psi_2$ のノルムが不変だから、

$$\|\psi'_1 + \psi'_2\|^2 = \|\psi_1 + \psi_2\|^2 \quad (2.4)$$

となるが、これを内積を使って書き直すと次のようになる。

$$\begin{aligned} \|\psi'_1\|^2 + 2\Re(\psi'_1, \psi'_2) + \|\psi'_2\|^2 \\ = \|\psi_1\|^2 + 2\Re(\psi_1, \psi_2) + \|\psi_2\|^2 \end{aligned} \quad (2.5)$$

これからユニタリ変換は内積の実数部分を変えないことがわかる：

$$\Re(\psi'_1, \psi'_2) = \Re(\psi_1, \psi_2) \quad (2.6)$$

状態 $\psi_1 + i\psi_2$ にたいして同じ論法をくりかえして、

$$\Im(\psi'_1, \psi'_2) = \Im(\psi_1, \psi_2) \quad (2.7)$$

が得られる。以上をまとめて内積の不変

$$(\psi'_1, \psi'_2) = (\psi_1, \psi_2) \quad (2.8)$$

がしめされた。すなわちユニタリ変換は内積を変えない。

$$(U\psi_1, U\psi_2) = (\psi_1, \psi_2) \quad (2.9)$$

さてこのことから

$$(\psi_1, U^\dagger U \psi_2) = (\psi_1, \psi_2) \quad (2.10)$$

が任意の状態 $\psi_1 + i\psi_2$ についてなりたつので

$$U^\dagger U = I \quad (2.11)$$

1 対 1 だから逆作用素 U^{-1} が存在し、 $U^{-1} = U^\dagger$ となる。結局

$$U^\dagger U = U U^\dagger = I \quad (2.12)$$

がしめされた。この式をもってユニタリ作用素の定義としてもよい。

例題 unitary 作用素の固有値は絶対値が 1 の複素数であることをしめせ。

例題 Hermite 作用素 $\hat{F}$ をユニタリ作用素 U で相似変換したものの $U\hat{F}U^{-1}$ は Hermite 作用素であることを示せ。

例題 $\hat{F}$ が Hermite であるとき、 $U = e^{i\hat{F}}$ がユニタリであることを示せ。

2.2 時間の推進とエネルギー作用素

これまで考えてきた量子力学系の時間発展は状態関数が Schrodinger 方程式によって発展し、力学量はそれが陽に時間を含まない限り、時間的に不変である。¹

状態の時間変化が演算子 $U(t)$ をつかって、

$$\psi(t) = U(t)\psi(0) \quad (2.13)$$

と書けると仮定しよう。これを

$$\frac{d}{dt}\psi(t) = -\frac{i}{\hbar}H\psi(t) \quad (2.14)$$

¹この見方を後に **Schrodinger 描像 (picture)** と呼ぶようになる。

の形にかいた Schroedinger 方程式の両辺に代入すると、

$$\frac{d}{dt}U(t)\psi(0) = -\frac{i}{\hbar}HU(t)\psi(0) \quad (2.15)$$

これがすべての $\psi(0)$ について成り立つことから、演算子 $U(t)$ の満たすべき方程式

$$\frac{d}{dt}U(t) = -\frac{i}{\hbar}HU(t) \quad (2.16)$$

がえられる。簡単のため **Hamiltonian は時間を含まない**とすると初期条件 $U(0) = I$ のもとで、この常微分方程式を次のように形式的に解くことができる。

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \quad (2.17)$$

したがって Schroedinger 方程式の形式解は

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(0) \quad (2.18)$$

となる。 $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ は状態関数を t だけ進める演算子で、波動関数のノルムを変えず、かつ波動関数の間に 1 対 1 対応をあたえる。従ってこれはユニタリ演算子である。

さらに、任意の実数 a にたいして、ユニタリ作用素

$$U(a) = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{H}} \quad (2.19)$$

を考えよう。時刻 $t+a$ における状態ベクトル $\psi(t+a)$ は $\psi(t)$ からこのユニタリ作用素をほどこしてえられる。

$$U(a)\psi(t) = \psi(t+a) \quad (2.20)$$

このように、**ユニタリ作用素 $U(a) = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{H}}$ は時間を a だけ進める作用素で、ハミルトニアンはその無限少作用素になっている。**

2.3 空間並進と運動量

1 次元の系で波動関数 $\psi(x)$ を x 軸の方向へ a だけずらして得られる波動関数は $\psi(x-a)$ で表される。すべての波動関数をこのように変換する作用素を $U(a)$ とかこう。

$$U(a)\psi(x) = \psi(x-a) \quad (2.21)$$

容易にわかるようにはユニタリ作用素である。

$$U(a)^{-1} = U^\dagger = U(-a) \quad (2.22)$$

$U(0) = I$ であることに注意し、空間並進の作用素 $U(a)$ の形式的な表現をもとめよう。運動量演算子の定義より、

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^n \psi(x) = \left(\frac{i}{\hbar}\hat{p}\right)^n \psi(x), n = 1, 2, \dots \quad (2.23)$$

これを使うと、Taylor 展開が可能な波動関数 $\psi(x)$ にたいしては、

$$\begin{aligned} U(a)\psi(x) &= \psi(x-a) = \psi(x) \\ &+ \left(\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right)\psi(x) + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right)^2\psi(x) + \dots \\ &= \left\{1 + \left(\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right)^2 + \dots\right\}\psi(x) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}\psi(x) \end{aligned} \quad (2.24)$$

となるがこれが任意の $\psi(x)$ について成り立つのであるから、

$$U(a) = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}} \quad (2.25)$$

が得られる。すなわち、**ユニタリ作用素 $U(a) = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}$ は波動関数を a だけ空間並進させる演算子であり、運動量はその無限少作用素である。**

まったく同様に 3 次元空間内の n 粒子の状態 $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$ を空間的に $\mathbf{a}$ だけずらす作用素は

$$U(\mathbf{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\hat{\mathbf{P}}} \quad (2.26)$$

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2 + \dots + \hat{\mathbf{p}}_n \quad (2.27)$$

とかかれる。これは**全運動量**になることに注意しよう。

例題

$$U(a) = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}} \quad (2.28)$$

のとき、演算子の関係式として

$$U(a)^{-1}\hat{x}_iU(a) = \hat{x}_i + a \quad (2.29)$$

$$U(a)^{-1}\hat{p}_iU(a) = \hat{p}_i \quad (2.30)$$

が成り立つことをしめし、その物理的意味を述べよ。

2.4 鏡映と Parity

波動関数の x 座標の符号を変える作用素を I_x としよう。

$$I_x \psi(x, y, z) = \psi(-x, y, z) \quad (2.31)$$

同様に y 座標, z 座標に関する鏡映 I_y, I_z も考える. Parity 演算子は x 座標, y 座標, z 座標のすべての符号をかえる演算子である。

$$\begin{aligned} \Pi &= I_x I_y I_z \\ \Pi \psi(x, y, z) &= \psi(-x, -y, -z) \end{aligned} \quad (2.32)$$

例題 $I_x^2 = I_y^2 = I_z^2 = \Pi^2 = I$ をしめせ。

例題 I_x, I_y, I_z, Π のすべてについて, 固有値は ± 1 に限られることをしめせ。

例題 力のポテンシャル $V(x)$ が $V(-x) = V(x)$ を満たせば Hamiltonian と parity とが可換であり, したがって parity が保存することをしめせ。

例題 1次元の問題で, ポテンシャルが偶関数のとき, エネルギー固有関数の計算に際し, パリティ (この場合は I_x) が偶のものと奇のものにわけて求めることができるのはなぜか。

例題 1次元の問題で, 偶関数のポテンシャルのもとで, Schrodinger 方程式によって, 時間発展するとき, $t = 0$ において偶関数の波動関数はその後いつまでも偶関数にとどまり, $t = 0$ において奇関数の波動関数はその後いつまでも奇関数にとどまることを示せ。

2.5 空間回転の作用素と角運動量

いま波動関数 $\psi(x)$ を z 軸の回りに正の方向に角度 γ だけ回転する作用素を $R_z(\gamma)$ とすると,

$$R_z(\gamma) \psi(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi - \gamma) \quad (2.33)$$

ここで, $\psi(r, \theta, \phi)$ は球座標で表した波動関数である. これがユニタリ作用素であることはすぐにわかる。

そこで, 波動関数の Taylor 展開が可能であると仮定して,

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta, \phi - \gamma) &= \\ &\left\{ 1 - \left(\gamma \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \frac{1}{2} \left(\gamma \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^2 - \frac{1}{6} \left(\gamma \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^3 + \dots \right\} \\ &\psi(r, \theta, \phi) \end{aligned} \quad (2.34)$$

ここで球座標からデカルト座標への変換

$$x = r \sin \theta \cos \phi \quad (2.35)$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi \quad (2.36)$$

$$z = r \cos \theta \quad (2.37)$$

をもちいると,

$$\frac{\partial}{\partial \phi} = \frac{\partial x}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial z} \quad (2.38)$$

$$= x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \quad (2.39)$$

今,

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \phi} \right) = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (2.40)$$

と書くと,

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta, \phi - \gamma) &= \\ &\left\{ 1 + \left(-\frac{i}{\hbar} \gamma \hat{L}_z \right) + \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar} \gamma \hat{L}_z \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{6} \left(-\frac{i}{\hbar} \gamma \hat{L}_z \right)^3 + \dots \right\} \psi(r, \theta, \phi) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \gamma \hat{L}_z} \psi(r, \theta, \phi) \end{aligned} \quad (2.41)$$

このようにすべての波動関数に対して次の表現がなりたつ。

$$R_z(\gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar} \gamma \hat{L}_z} \quad (2.42)$$

同様に x 軸, y 軸のまわりの回転をもあわせて考えると

$$R_x(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_x} \quad (2.43)$$

$$R_y(\beta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \beta \hat{L}_y} \quad (2.44)$$

$$R_z(\gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar} \gamma \hat{L}_z} \quad (2.45)$$

が示される。ここで

$$\hat{L}_x = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \quad (2.46)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \quad (2.47)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \quad (2.48)$$

である。一方これらは角運動量

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (2.49)$$

のデカルト成分になっていることに気づく。

このように量子力学においては**角運動量の x, y, z 成分はそれぞれ x, y, z 軸の回りに空間を回転させるユニタリ変換の無限小作用素**である。

2.6 【演習問題】

1. U をユニタリ演算子、 $\{e_n|n = 1, 2, \dots\}$ を完全規格直交系とし、

$$f_n = Ue_n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.50)$$

とするとき、 $\{f_n|n = 1, 2, \dots\}$ もまた完全規格直交系をなすことを示せ。

2. 完全規格直交系 $\{|n\rangle|n = 1, 2, \dots\}$ をもちいて、ユニタリ演算子 U の行列表示

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots \\ u_{21} & u_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

$$u_{mn} = \langle m|U|n\rangle \quad (2.52)$$

を作るとき、行列 U はいかなる行列か。

3. Hermite 作用素 $\hat{F}$ をユニタリ作用素 U で相似変換したもの

$$\hat{F}' = U\hat{F}U^{-1} \quad (2.53)$$

は Hermite 作用素である。

- (a) このとき、固有値のスペクトルが変らないことをしめせ。

- (b) $\hat{F}$ の固有値と固有関数が

$$\hat{F}u_i = \lambda_i u_i \quad (2.54)$$

をみたしているとき、 $\hat{F}'$ の λ_i に属する固有関数はどうあらわされるか。

4. Hermite 作用素 $\hat{F}$ の関数として別の作用素 $f(\hat{F})$ があるとき、ユニタリ作用素 U にたいして、

$$Uf(\hat{F})U^{-1} = f(U\hat{F}U^{-1}) \quad (2.55)$$

となることをしめせ。ここで、作用素 $\hat{F}$ の関数はべき級数

$$f(\hat{F}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{F}^n \quad (2.56)$$

が収束するものとして定義するものとする。

3 空間回転と角運動量

3.1 角運動量の交換関係

前節で述べたように量子力学においては角運動量の各成分は該当する軸の回りの空間の回転の**ユニタリ変換の無限小作用素**である。

角運動量の各成分 $\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ の間には次のような交換関係が成り立つ。

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad (3.1)$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \quad (3.2)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \quad (3.3)$$

その絶対値の2乗: $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ は各成分と可換である。:

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad (3.4)$$

したがって $\hat{\mathbf{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ の同時固有関数で完全系をなすものがとれる。

上の例題でみたことを一般化すると、3次元のスカラー作用素 $\hat{S}$ と3次元のベクトル作用素 $\hat{\mathbf{V}}$ について次の交換関係が成り立つ。

$$[\hat{L}_i, \hat{S}] = 0 \quad (3.5)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{V}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{V}_k \quad (3.6)$$

ここで ϵ_{ijk} は3次元 Levi-Civita 記号である。また Einstein の規約にしたがって記号 $\sum_{k=1}^3$ を省略した。

3.2 固有値問題：行列表示による

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \quad (3.7)$$

としよう。これらは互いに hermite 共役であり、 $\hat{\mathbf{L}}^2$ と可換である。

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_{\pm}] = 0 \quad (3.8)$$

$$(\hat{L}_{+})^{\dagger} = \hat{L}_{-} \quad (3.9)$$

さらにつぎの交換関係がなりたつ。

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm\hbar \hat{L}_{\pm} \quad (3.10)$$

$$[\hat{L}_{+}, \hat{L}_{-}] = 2\hbar \hat{L}_z \quad (3.11)$$

また $\hat{\mathbf{L}}^2$ はつぎのように表してもよい。

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_{\pm} \hat{L}_{\mp} \mp \hbar \hat{L}_z + \hat{L}_z^2 \quad (3.12)$$

したがって $\hat{L}_{\pm} \hat{L}_{\mp}$ が $\hat{\mathbf{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ で表されることに注意しよう。

$$\hat{L}_{\pm} \hat{L}_{\mp} = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z(\hat{L}_z \mp \hbar) \quad (3.13)$$

$\hat{\mathbf{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ の固有値をそれぞれ $\eta\hbar^2, m\hbar$ とし (ここで η, m は次元のない実数である。)、それらの規格化された同時固有関数を $|\eta\hbar^2, m\hbar\rangle$ とすると、

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 |\eta\hbar^2, m\hbar\rangle &= \eta\hbar^2 |\eta\hbar^2, m\hbar\rangle \\ \hat{L}_z |\eta\hbar^2, m\hbar\rangle &= m\hbar |\eta\hbar^2, m\hbar\rangle \\ \langle \eta\hbar^2, m\hbar | \eta'\hbar^2, m'\hbar \rangle &= \delta_{\eta, \eta'} \delta_{m, m'} \end{aligned} \quad (3.14)$$

となる。さきの交換関係 (3.10) を使うと、

$$\hat{L}_z \left(\hat{L}_{\pm} |\eta\hbar^2, m\hbar\rangle \right) = (m \pm 1)\hbar \left(\hat{L}_{\pm} |\eta\hbar^2, m\hbar\rangle \right)$$

が示されるので $\hat{L}_{\pm} |\eta\hbar^2, m\hbar\rangle$ は $\hat{L}_z$ の固有値 $(m \pm 1)\hbar$ に属する固有関数である。これでわかるように $\hat{L}_{\pm}$ は**昇降演算子**の性質をもつ。すなわち

$$\hat{L}_{\pm} |\eta\hbar^2, m\hbar\rangle = \text{const} \times |\eta\hbar^2, (m \pm 1)\hbar\rangle \quad (3.15)$$

ここの定数係数はのちに正しく求めることにしよう。このように $\hat{L}_{\pm}$ をかけることによって同じ η をもち m が1だけ異なる固有状態を次々に作っていくことができる。しかし m の絶対値は η によって限られているので、ある範囲 $m_2 \geq m \geq m_1$ にあることになり、

$$\hat{L}_{-} |\eta\hbar^2, m_1\hbar\rangle = 0 \quad (3.16)$$

$$\hat{L}_{+} |\eta\hbar^2, m_2\hbar\rangle = 0 \quad (3.17)$$

なる状態 $|\eta\hbar^2, m_1\hbar\rangle, |\eta\hbar^2, m_2\hbar\rangle$ が存在する。(3.16) に $\hat{L}_+$ を、(3.17) に $\hat{L}_-$ をそれぞれ作用させ (3.13) を使うと、

$$\begin{aligned}\hat{L}_+\hat{L}_-|\eta\hbar^2, m_1\hbar\rangle &= (\eta + m_1 - m_1^2)|\eta\hbar^2, m_1\hbar\rangle = 0 \\ \hat{L}_-\hat{L}_+|\eta\hbar^2, m_2\hbar\rangle &= (\eta - m_2 - m_2^2)|\eta\hbar^2, m_2\hbar\rangle = 0\end{aligned}$$

これより

$$\eta = m_1(m_1 - 1) = m_2(m_2 + 1) \quad (3.18)$$

したがって

$$(m_1 + m_2)(m_1 - m_2 - 1) = 0 \quad (3.19)$$

が得られる。 $m_1 - m_2 - 1 < 0$ だから

$$m_1 = -\ell \quad (3.20)$$

$$m_2 = \ell \quad (3.21)$$

$$\eta = \ell(\ell + 1) \quad (3.22)$$

となる数 ℓ が存在して、 2ℓ が整数であることから

$$\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots \quad (3.23)$$

でなければならない。そこで ℓ がきまると m のとりうる値は

$$m = \ell, \ell - 1, \ell - 2, \dots, -\ell \quad (3.24)$$

の $2\ell + 1$ 個の値に限られることになる。

今後 $|\ell(\ell + 1)\hbar^2, m\hbar\rangle$ のことを単純に $|\ell, m\rangle$ と書くことにしよう。

3.3 軌道角運動量

ところで、 $\hat{L}$ は波動関数 $\psi(\mathbf{x})$ に作用することから、 ℓ は整数に限られることが次のようにして、わかる。

前節の考察によれば状態 $|\ell, m\rangle$ に z 軸の回りの回転のユニタリ変換 $R_z(\gamma)$ を施したとき

$$R_z(\gamma)|\ell, m\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\gamma \times m\hbar\right]|\ell, m\rangle = e^{-im\gamma}|\ell, m\rangle$$

に変換される。もし ℓ が (整数 + $\frac{1}{2}$) の値をもつと 360° の回転で波動関数が符号を変えてしまう。このようなことがあると波動関数が1価でなくなるので、 ℓ が整数に限られるとしなくてはならない。こうして**軌道角運動量**にたいして

$$\ell = 0, 1, 2, \dots \quad (3.25)$$

このように角運動量の固有値はどの場合も離散的な値をとる。このことはしばしば**方向の量子化**などと言われ、 ℓ を方位量子数、 m を磁気量子数とよぶこともある。

(3.15) を書き直すと

$$\hat{L}_\pm|\ell, m\rangle = C_\pm(\ell, m)|\ell, m \pm 1\rangle \quad (3.26)$$

$C_\pm(\ell, m)$ は一般には複素定数である。両辺のノルムの2乗をとると、

$$|C_\pm(\ell, m)|^2 = \langle \ell, m | \hat{L}_\mp \hat{L}_\pm | \ell, m \rangle \quad (3.27)$$

ここでふたたび (3.13) を使うと

$$|C_\pm(\ell, m)|^2 = (\ell \pm m + 1)(\ell \mp m)\hbar^2 \quad (3.28)$$

が得られる。こうして $|\ell, m\rangle$ の位相を調節すると

$$C_-(\ell, m) = \hbar\sqrt{(\ell - m + 1)(\ell + m)} \quad (3.29)$$

と取ることができる。またエルミト性から、

$$C_+(\ell, m) = \hbar\sqrt{(\ell + m + 1)(\ell - m)} \quad (3.30)$$

$\hat{L}_+, \hat{L}_-, \hat{L}_z$ の行列要素は

$$\begin{aligned}\langle \ell, m' | \hat{L}_\pm | \ell, m \rangle &= \delta_{m', m+1} C_+(\ell, m) + \delta_{m', m-1} C_-(\ell, m) \\ \langle \ell, m' | \hat{L}_z | \ell, m \rangle &= m\hbar \delta_{m', m}\end{aligned} \quad (3.31)$$

であるから、以下のように $\hat{L}$ の行列要素をすべて求めることができる：

ここで、 ℓ をひとつの値に固定し、固有状態 $|\ell, \ell\rangle, |\ell, \ell-1\rangle, \dots, |\ell, -\ell\rangle$ をそれぞれ、数ベクトル

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

で表示したとき、
 $\hat{L}_{\pm}$ の行列表示は、

$$\hat{L}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1}\sqrt{2\ell} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\sqrt{2\ell-1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}\sqrt{2\ell-2} & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \sqrt{2\ell-1}\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \sqrt{2\ell}\sqrt{1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

$$\hat{L}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1}\sqrt{2\ell} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\sqrt{2\ell-1} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}\sqrt{2\ell-2} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \sqrt{2\ell-1}\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \sqrt{2\ell}\sqrt{1} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

$$\hat{L}_z = \hbar \begin{pmatrix} \ell & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ell-1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ell-2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -\ell+1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -\ell \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

となる。

例題 $\ell = 1$ および $\ell = 2$ の場合に $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ を行列表示せよ。

3.4 演習問題

3.4.1 角運動量の交換関係

1. 角運動量

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (3.36)$$

のデカルト成分各成分 ($\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$) の間には次のような交換関係が成り立つことをしめせ。

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad (3.37)$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \quad (3.38)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \quad (3.39)$$

2. 角運動量の絶対値の2乗: $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ は各成分と可換である。:

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad (3.40)$$

このことをしめせ。

3. $\mathbf{L}$ の成分と $\mathbf{x}$ の成分の間の交換関係をもとめよ。

4. $\mathbf{L}$ の成分と $\mathbf{p}$ の成分の間の交換関係をもとめよ。

5. $\mathbf{L}$ の成分と $\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}$ の間の交換関係をもとめよ。

3.4.2 角運動量の固有値問題

1.

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \quad (3.41)$$

としよう。これらは互いに hermite 共役であり, $\hat{\mathbf{L}}^2$ と可換である。

$$(\hat{L}_{+})^{\dagger} = \hat{L}_{-} \quad (3.42)$$

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_{\pm}] = 0 \quad (3.43)$$

このことをしめせ。

2. つぎの交換関係をしめせ。

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm\hbar \hat{L}_{\pm} \quad (3.44)$$

$$[\hat{L}_{+}, \hat{L}_{-}] = 2\hbar \hat{L}_z \quad (3.45)$$

3. $\hat{\mathbf{L}}^2$ と $\hat{L}_{\pm}\hat{L}_{\mp}$ は次のようにあらわせることをしめせ。

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_{\pm}\hat{L}_{\mp} \mp \hbar \hat{L}_z + \hat{L}_z^2 \quad (3.46)$$

$$\hat{L}_{\pm}\hat{L}_{\mp} = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z(\hat{L}_z \mp \hbar) \quad (3.47)$$

3.4.3 軌道角運動量の行列表示

固有ベクトル $|\ell, m\rangle$ はすべて、長さノルム1に規格化されていて、

$$\hat{L}_{\pm}|\ell, m\rangle = C_{\pm}(\ell, m)|\ell, m \pm 1\rangle \quad (3.48)$$

とするとき、 $C_{\pm}(\ell, m)$ を次のようにとることができる。

$$C_{-}(\ell, m) = \hbar\sqrt{(\ell - m + 1)(\ell + m)} \quad (3.49)$$

$$C_{+}(\ell, m) = \hbar\sqrt{(\ell + m + 1)(\ell - m)} \quad (3.50)$$

このことを使って 以下にこたえよ。

1. $\ell = 1$ および $\ell = 2$ の場合に $\hat{L}_{+}, \hat{L}_{-}, \hat{L}_z$ の行列要素を求めよ。

2. $\ell = 1$ および $\ell = 2$ の場合に $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ の行列要素を求めよ。

3. 一般の ℓ に対する $\mathbf{L}$ の行列表示をつかって、次の関係式を導け。

$$\begin{aligned} e^{-i\frac{\pi}{2\hbar}L_z}L_xe^{i\frac{\pi}{2\hbar}L_z} &= L_y \\ e^{-i\frac{\pi}{2\hbar}L_z}L_ye^{i\frac{\pi}{2\hbar}L_z} &= -L_x \end{aligned} \quad (3.51)$$

またこれらのもつ直感的な意味をのべよ。

4. $\mathbf{L}$ の成分の間の交換関係をつかって、次の関係式を導け。

$$\begin{aligned} L_x &= e^{-i\frac{\pi}{2\hbar}L_y}L_z e^{i\frac{\pi}{2\hbar}L_y} \\ L_y &= -e^{-i\frac{\pi}{2\hbar}L_x}L_z e^{i\frac{\pi}{2\hbar}L_x} \end{aligned} \quad (3.52)$$

5. ℓ を固定するとき、 L_x, L_y の固有値スペクトルはどうなるか。

4 球面調和関数

4.1 軌道角運動量：球座標への移行

角運動量についてデカルト座標から球座標へ次の変換を使う。球座標とデカルト座標の関係式

$$x = r \sin \theta \cos \phi \quad (4.1)$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi \quad (4.2)$$

$$z = r \cos \theta \quad (4.3)$$

から、微分演算の変換式

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi \sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned}$$

がえられる。

すると角運動量作用素の各成分は

$$\hat{L}_x = i\hbar(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi}) \quad (4.4)$$

$$\hat{L}_y = i\hbar(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi}) \quad (4.5)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (4.6)$$

となり、さらに

$$\hat{L}_{\pm} = \hbar e^{\pm i\phi} (\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi}) \quad (4.7)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (4.8)$$

である。

このように角運動量の作用素は θ, ϕ およびその微分 $\frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{\partial}{\partial \phi}$ だけを含む作用素なので、球面上の波動関数 $\psi(\theta, \phi)$ に作用することがわかる。

4.2 運動エネルギー：球座標への移行

3次元の質点の運動エネルギーはデカルト座標で Laplacian を使って

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (4.9)$$

と表される。ベクトル解析の結果をつかうと、Laplacian にたいする球座標での次の表式をうる。

$$\begin{aligned} \Delta \psi &= \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right\} \psi \end{aligned} \quad (4.10)$$

そこで球座標の量子力学では粒子の運動エネルギーが

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 \quad (4.11)$$

と表されることがわかる。

4.3 考察：運動エネルギーの動径方向部分と球面方向部分

平面極座標では速度ベクトルと角運動量が

$$\mathbf{v} = \dot{r} \mathbf{e} + r \dot{\theta} \mathbf{f} \quad (4.12)$$

$$L = mr^2 \dot{\theta} \quad (4.13)$$

となることをつかうと、運動エネルギーが

$$T = \frac{m}{2} \dot{r}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} \quad (4.14)$$

とあらわせた。

また、3次元空間で同じように考えると、角運動量ベクトル

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (4.15)$$

を使って

$$T = \frac{m}{2} \dot{r}^2 + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} \quad (4.16)$$

となることをわかる。

一方、ハミルトン力学で r に共役な運動量が

$$p_r = m\dot{r} \quad (4.17)$$

であるので、

$$T = \frac{1}{2m} p_r^2 + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} \quad (4.18)$$

となる。

球座標で単位球面上の面積要素が $dV = \sin \theta d\theta d\phi$ であることから、 $\hat{r}$ に共役な Hermite 作用素を

$$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \quad (4.19)$$

とすることが示唆される。(例題 5 を参照すること) このようにすると、球座標の量子力学では粒子の運動エネルギーが

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2mr^2} \hat{\mathbf{L}}^2 \quad (4.20)$$

と表されることが理解できる。²

例題

1. 単なる微分作用素 $\frac{\partial}{\partial x}$ は Hermite 作用素か？
2. 1 直線上の問題について、運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ が Hermite であることをしめせ。
3. エネルギー作用素

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{V} \quad (4.21)$$

が Hermite であることを示せ。

4. 内積が重み $\rho(x)$ によって

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)^* \psi_2(x) \rho(x) dx \quad (4.22)$$

と定義されているとき、 $-i\nabla$ は Hermite でなくなり、 $-\frac{i}{\sqrt{\rho}} \nabla \sqrt{\rho}$ が Hermite となることを示せ。

² この理由付けは 3 次元空間でのみ正しい結果をもたらす。一般に d 次元の球座標を使うと、

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{d-1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Omega$$

となる。ここで Ω は $(d-1)$ 次元単位球面上の Laplace 作用素である。

4.4 球面上の運動：例題

半径 a の球面上を運動する粒子の波動関数は一般に θ, ϕ の関数であり、 $\psi(\theta, \phi)$ のようにかける。それらの内積は

$$(\psi_1, \psi_2) = a^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \psi_1(\theta, \phi)^* \psi_2(\theta, \phi) \quad (4.23)$$

である。

このときは動径は $r = a$ に拘束されているので、(4.11) より運動エネルギーが

$$\frac{m}{2} v^2 = \frac{1}{2ma^2} \hat{\mathbf{L}}^2 \quad (4.24)$$

であることがわかる。粒子が受ける力は球面上のポテンシャルエネルギー $V(\theta, \phi)$ であらわされる。従ってこの系のハミルトニアン $\hat{H}$ は

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2ma^2} + V(\theta, \phi) \quad (4.25)$$

である。

例題

1. 半径 a の球面に滑らかに拘束された粒子のエネルギー固有値とその多重度を求めよ。

(答え)

$$E_\ell = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \ell(\ell+1) \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (4.26)$$

各固有値は $2\ell+1$ 重に縮退している。

2. 一様重力 $V = -mga \cos \theta$ のなかの球面上の粒子のハミルトニアンを求めよ。

4.5 角運動量の固有関数

球面上において $\hat{\mathbf{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ の同時固有関数 $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ を求めよう。固有値方程式は

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m} \quad (4.27)$$

$$\hat{L}_z Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m} \quad (4.28)$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots \quad (4.29)$$

$$m = -\ell, -\ell+1, -\ell+2, \dots, \ell \quad (4.30)$$

また規格化は

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_{\ell' m'}(\theta, \phi)^* Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \delta_{\ell' \ell} \delta_{m' m}$$

としておこう。 $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ を変数分離して

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \Phi(\phi) \Theta(\cos \theta) \quad (4.31)$$

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (4.32)$$

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right\} \Theta(\cos \theta) = 0 \quad (4.33)$$

が得られる。ここで変数を $z = \cos \theta$ に変えると

$$\left\{ (1-z^2) \frac{d^2}{dz^2} - 2z \frac{d}{dz} + \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{(1-z^2)} \right\} \Theta(z) = 0 \quad (4.34)$$

となる。

4.5.1 Legendre の球関数 (帯球関数)

まず $m = 0$ のときの解を求めよう。

$$\left\{ (1-z^2) \frac{d^2}{dz^2} - 2z \frac{d}{dz} + \ell(\ell+1) \right\} \Theta(z) = 0 \quad (4.35)$$

この解で $z = \pm 1$ で有限なものは Legendre の多項式 $P_\ell(z)$ として知られている：

$$P_\ell(z) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \left(\frac{d}{dz} \right)^\ell (z^2 - 1)^\ell \quad (4.36)$$

はじめの数例は、

$$P_0(x) = 1 \quad (4.37)$$

$$P_1(x) = x \quad (4.38)$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \quad (4.39)$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \quad (4.40)$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) \quad (4.41)$$

$$P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x) \quad (4.42)$$

Legendre の多項式 $P_\ell(z)$ は ℓ 次の多項式で $-1 < z < 1$ の範囲に ℓ 個の零点をもつ。また、

$$\int_{-1}^1 P_n(z) P_m(z) dz = \frac{2}{2n+1} \delta_{n,m} \quad (4.43)$$

がなりたつ。

球面上で考えると、Legendre の多項式 $P_\ell(\cos \theta)$ は ℓ 本の緯線を節として持つ。 ℓ 本の緯線によって球面は $\ell+1$ 個の帯に分かたれる。そこでこれらは**帯球関数** (zonal harmonics) と呼ばれる。 $P_{\ell+1}(\cos \theta)$ の節は $P_\ell(\cos \theta)$ の帯の中に生じる。したがって、 ℓ がひとつ増えるごとに緯線の数が増える。

4.5.2 球面調和関数

ここで Legendre の陪関数を

$$P_\ell^\mu(z) = \left(\sqrt{1-z^2} \right)^\mu \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^\mu P_\ell(z) \quad (4.44)$$

と定義する。Legendre の陪関数は球面上で

$$P_\ell^\mu(z) = (\sin \theta)^\mu \times (\cos \theta \text{ の } (\ell - \mu) \text{ 次多項式}) \quad (4.45)$$

の形をもっており、球面上で $(\ell - \mu)$ 本の緯線を節としてもち、それにより球面は $(\ell - \mu + 1)$ 個の帯に分かたれる。さらに北極と南極に μ 位の零点をもつ。それは

$$\int_{-1}^1 P_n^\mu(z) P_\ell^\mu(z) dz = \delta_{n\ell} \frac{2 \cdot (\ell + \mu)!}{(2\ell + 1) \cdot (\ell - \mu)!} \quad (4.46)$$

の直交性をもつ。こうして

$$Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = \pm \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2}}{2\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - |m|)!}{(\ell + |m|)!}} e^{im\phi} P_\ell^{|m|}(\cos \theta)$$

は**球面調和関数** (spherical harmonics) と呼ばれ、完全直交性

$$(Y_{\ell m}, Y_{\ell' m'}) = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'} \quad (4.47)$$

をみたす。ここでの内積は

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_{\ell' m'}(\theta, \phi)^* Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \delta_{\ell' \ell} \delta_{m' m}$$

の意味である。

ところで、符号 $\pm$ はどちらをとってもよいが、

$$\hat{L}_{\pm}|\ell, m\rangle = C_{\pm}(\ell, m)|\ell, m \pm 1\rangle \quad (4.48)$$

$$C_{\pm}(\ell, m) = \hbar\sqrt{(\ell \pm m + 1)(\ell \mp m)} \quad (4.49)$$

が成り立つようにするには固定しなければならない。詳しい計算によれば、

$$(-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \quad (4.50)$$

が正しい。

また反転公式

$$\begin{aligned} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\theta, \phi) Y_{\ell m}^*(\theta', \phi') \\ = \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\phi - \phi') \end{aligned} \quad (4.51)$$

が成り立つ。したがって球面上の規格化可能な任意の関数 $\psi(\theta, \phi)$ を球面調和関数で展開できる。すなわち

$$\psi(\theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (4.52)$$

$$c_{\ell m} = (Y_{\ell m}, \psi) \quad (4.53)$$

である。

4.5.3 実数にとった球面調和関数（縞球関数）

各 ℓ にたいして $2\ell+1$ 個の関数 $Y_{\ell m}, m = -\ell, \dots, \ell$ のかわりに、 $2\ell+1$ 個の次のような独立な実数値関数をとることができる：

$Y_{\ell 0}$

および $\mu = 1, 2, \dots, \ell$ として

$Y_{\ell \mu \cos}$ および $Y_{\ell \mu \sin}$

ここで

$$Y_{\ell 0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2}}{2\pi}} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (4.54)$$

$$Y_{\ell \mu \cos}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2}}{\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - \mu)!}{(\ell + \mu)!}} P_{\ell}^{\mu}(\cos \theta) \cos(\mu \phi)$$

$$Y_{\ell \mu \sin}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2}}{\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - \mu)!}{(\ell + \mu)!}} P_{\ell}^{\mu}(\cos \theta) \sin(\mu \phi)$$

これらの関数は球面を横割りだけでなく、縦割りにする節線をもつことから**縞球関数** (tesseral harmonics) と呼ばれる。球面上でこれらの関数のもつ節線の数を数えてみよう。 $Y_{\ell 0}$ は ℓ 個の緯線を節線としてもつ。 $Y_{\ell \mu \cos}$ および $Y_{\ell \mu \sin}$ の節線は $\ell - \mu$ 個の緯線と 2μ 個の経線である。 2μ 個の経線は z 軸を含む μ 個の平面が球面と交わってできる交線である。このように縞球関数の節線は球面と ℓ 個の平面との交線である。球面に包丁を ℓ 回入れたものといえることができる。

4.6 付録：球座標とデカルト座標

球座標とデカルト座標の関係式

$$x = r \sin \theta \cos \phi \quad (4.55)$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi \quad (4.56)$$

$$z = r \cos \theta \quad (4.57)$$

から、微分演算の変換式

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi \sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned}$$

が導かれる。このための簡便なやり方は、

$$\begin{aligned} dx &= \sin \theta \cos \phi dr + r \cos \theta \cos \phi d\theta - r \sin \theta \sin \phi d\phi \\ dy &= \sin \theta \sin \phi dr + r \cos \theta \sin \phi d\theta + r \sin \theta \cos \phi d\phi \\ dz &= \cos \theta dr - r \sin \theta d\theta \end{aligned} \quad (4.58)$$

を得た後、次の置き換えをすることである。

$$\begin{aligned} dx &\longrightarrow \frac{\partial}{\partial x} \\ dy &\longrightarrow \frac{\partial}{\partial y} \\ dz &\longrightarrow \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned} \quad (4.59)$$

$$\begin{aligned} dr &\longrightarrow \frac{\partial}{\partial r} \\ d\theta &\longrightarrow \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ d\phi &\longrightarrow \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned} \quad (4.60)$$

詳細はベクトル解析の授業にゆずる。

1. 角運動量作用素の各成分の球座標による以下の表式をしめせ。

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_y &= i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned} \quad (4.61)$$

2. 角運動量作用素の各成分の球座標による以下の表式をしめせ。

$$\begin{aligned} \hat{L}_{\pm} &= \hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \end{aligned} \quad (4.62)$$

3. 単なる微分作用素 $\frac{\partial}{\partial x}$ は Hermite 作用素か？
4. 直線状の問題について、運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ が Hermite であることをしめせ。
5. 内積が重み $\rho(x)$ によって

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)^* \psi_2(x) \rho(x) dx \quad (4.63)$$

と定義されているとき、 $-i\nabla$ は Hermite でなくなり、 $-\frac{i}{\sqrt{\rho}} \nabla \sqrt{\rho}$ が Hermite となることを示せ。

6. 球座標において、演算子

$$p_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \quad (4.64)$$

が Hermite と考えられることをしめせ。

7. 半径 a の球面に滑らかに拘束された粒子のエネルギー固有値とその多重度を求めよ。
(答え)

$$E_{\ell} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \ell(\ell+1) \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (4.65)$$

各固有値は $2\ell+1$ 重に縮退している。

8. 一様重力 $V = mga \cos \theta$ のなかの球面上の粒子のハミルトニアンを求めよ。

4.7 付録：Legendre 多項式と球面調和関数

関数空間 $L_2(-1, 1)$ において単項式の列

$$S = \{1, x, x^2, x^3, \dots\}$$

に Gramm-Schmidt の直交化を施してえられる多項式を

$$P_n(1) = 1 \quad (4.66)$$

$$P_n(-1) = (-1)^n \quad (4.67)$$

が成り立つように規格化して得られるのが、Legendre の多項式 $\{P_n(x); n = 0, 1, 2, \dots\}$ である。

1. Legendre の多項式の最初の $\{P_n(x); n = 0, 1, 2\}$ までをもとめよ。

(答)

$$P_0(x) = 1 \quad (4.68)$$

$$P_1(x) = x \quad (4.69)$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \quad (4.70)$$

以下は、

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \quad (4.71)$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) \quad (4.72)$$

$$P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x) \quad (4.73)$$

2. $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ のばあいについて、球面上にできる $P_\ell(\cos \theta)$ の節 (node) をスケッチせよ。

3. 直接角度積分することによって、

$$Y_{\ell,0}(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{2\pi}} P_\ell(\cos \theta) \quad (4.74)$$

が球面上の波動関数として、正しく規格化されていることをしめせ。

4. 縞球関数は $\hat{L}^2$ と $(\hat{L}_z)^2$ の同時固有関数であることをしめせ。また、 $\hat{L}_z$ の固有関数にはなっていないことを示せ。

5. $\ell = 1, \dots, 5$ および $\mu = 0, \dots, \ell$ について、球面上の関数 $Y_{\ell,\mu,\cos}(\theta, \phi)$ の節線をスケッチせよ。

6. x, y, z の関数として、 $Y_{1,0}, Y_{1,1,\cos}, Y_{1,1,\sin}$ をあらわせ。

7. Legendre の多項式 および Legendre の陪関数の公式

$$P_\ell(z) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \left(\frac{d}{dz}\right)^\ell (z^2 - 1)^\ell \quad (4.75)$$

$$P_\ell^\mu(z) = \left(\sqrt{1-z^2}\right)^\mu \left(\frac{\partial}{\partial z}\right)^\mu P_\ell(z)$$

$$\mu = 0, 1, 2, \dots, \ell \quad (4.76)$$

を使って次の球面調和関数を $\ell = 0, 1, 2$ の場合に求めよ。

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2}}{2\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - |m|)!}{(\ell + |m|)!}} e^{im\phi} P_\ell^{|m|}(\cos \theta) \quad (4.77)$$

8. 空間反転 (parity) $\Pi : \mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$ のもとでの球面調和関数の変換性をもとめよ。

$$(\text{答え}) \quad \Pi Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = (-1)^\ell Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$$

4.8 付録：昇降演算子を利用する球面調和関数の計算

$Y_{\ell,0}$ が特別に見慣れた Legendre の多項式

$$Y_{\ell,0} = \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2}}{2\pi}} P_\ell(\cos \theta) \quad (4.78)$$

で表されることがわかったので、一般の $Y_{\ell,m}$ はこれに昇降演算子

$$\hat{L}_\pm = \hbar e^{\pm i\phi} \left(\mp \sqrt{1-z^2} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{iz}{\sqrt{1-z^2}} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (4.79)$$

を何度も作用させてえられる。ここで、 $z = \cos \theta$ である。

昇降演算子の作用は、

$$C_{\pm}(\ell, m) = \hbar \sqrt{(\ell \pm m + 1)(\ell \mp m)} \quad (4.80)$$

とすると、

$$\hat{L}_{\pm}|\ell, m\rangle = C_{\pm}(\ell, m)|\ell, m \pm 1\rangle \quad (4.81)$$

であったから、 $\mu = 1, 2, \dots, \ell$ として $|\ell, 0\rangle$ から $|\ell, \pm\mu\rangle$ を得るためには

$$|\ell, \pm\mu\rangle = \sqrt{\frac{(\ell - \mu)!}{(\ell + \mu)!}} \left(\frac{\hat{L}_{\pm}}{\hbar} \right)^{\mu} |\ell, 0\rangle \quad (4.82)$$

すなわち

$$Y_{\ell, \pm\mu} = \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2}}{2\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - \mu)!}{(\ell + \mu)!}} \left(\frac{\hat{L}_{\pm}}{\hbar} \right)^{\mu} P_{\ell}(z) \quad (4.83)$$

とすればよい。まず $m > 0$ の場合は

$$\begin{aligned} Y_{\ell, \mu}(\theta, \phi) &= (-1)^{\mu} \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2}}{2\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - \mu)!}{(\ell + \mu)!}} \\ &\left(e^{i\phi} \left(\sqrt{1 - z^2} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{iz}{\sqrt{1 - z^2}} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right)^{\mu} P_{\ell}(z) \end{aligned} \quad (4.84)$$

これをひとつずつ演算して行くと、

$$\begin{aligned} Y_{\ell, \mu}(\theta, \phi) &= \\ &(-1)^{\mu} \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2}}{2\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - \mu)!}{(\ell + \mu)!}} e^{i\mu\phi} \\ &\left(\sqrt{1 - z^2} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{(\mu - 1)z}{\sqrt{1 - z^2}} \right) \\ &\left(\sqrt{1 - z^2} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{(\mu - 2)z}{\sqrt{1 - z^2}} \right) \dots \\ &\dots \left(\sqrt{1 - z^2} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{2z}{\sqrt{1 - z^2}} \right) \\ &\left(\sqrt{1 - z^2} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{z}{\sqrt{1 - z^2}} \right) \left(\sqrt{1 - z^2} \frac{\partial}{\partial z} \right) P_{\ell}(z) \end{aligned} \quad (4.85)$$

ところで $n = 1, 2, \dots$ のとき微分作用素として

$$\begin{aligned} &\left(\sqrt{1 - z^2} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{nz}{\sqrt{1 - z^2}} \right) (\sqrt{1 - z^2})^n \\ &= (\sqrt{1 - z^2})^{n+1} \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned} \quad (4.86)$$

がなりたつので、

$$\begin{aligned} Y_{\ell, \mu}(\theta, \phi) &= (-1)^{\mu} \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2}}{2\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - \mu)!}{(\ell + \mu)!}} \times \\ &e^{i\mu\phi} (\sqrt{1 - z^2})^{\mu} \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^{\mu} P_{\ell}(z) \end{aligned} \quad (4.87)$$

ここで **Legendre の陪関数**を

$$P_{\ell}^{\mu}(z) = (\sqrt{1 - z^2})^{\mu} \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^{\mu} P_{\ell}(z) \quad (4.88)$$

と定義すると

$$Y_{\ell, \mu} = (-1)^{\mu} \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2}}{2\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - \mu)!}{(\ell + \mu)!}} e^{i\mu\phi} P_{\ell}^{\mu}(z) \quad (4.89)$$

同様な計算を $m = -\mu < 0$ の場合におこなえば

$$Y_{\ell, -\mu} = \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2}}{2\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - \mu)!}{(\ell + \mu)!}} e^{-i\mu\phi} P_{\ell}^{\mu}(z) \quad (4.90)$$

が得られる。

いっぽう $Y_{\ell, m}$ は微分方程式 (4.34) を直接解いても求まる。

$$\begin{aligned} &\left\{ (1 - z^2) \frac{d^2}{dz^2} - 2z \frac{d}{dz} + \ell(\ell + 1) - \frac{\mu^2}{(1 - z^2)} \right\} \\ &\Theta(z) = 0 \end{aligned} \quad (4.91)$$

は Legendre の陪微分方程式とよばれ、 $\theta = 0, \pi$ で有限な解は Legendre の陪関数 $P_{\ell}^{\mu}(z)$ で与えられる。

5 中心力による運動

5.1 重心座標と相対座標

質量 m_1, m_2 の 2 粒子がポテンシャル $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ による中心力を受けるとき、全系のハミルトニアンは、

$$\hat{H}_{tot} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (5.1)$$

$$= \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(r) \quad (5.2)$$

ここで換算質量を m とした。このうち相対座標に関する部分は

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(r) \quad (5.3)$$

となる。この固有値を E とすると $\hat{H}_{tot}$ の固有値は

$$E_{tot} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + E \quad (5.4)$$

となる。したがって以下では相対運動の Hamiltonian について考えれば十分である。 $\hat{H}$ は角運動量 $\hat{\mathbf{L}}$ と可換なので、エネルギー固有値 E と定常状態 $u(\mathbf{r})$ を $\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z$ の同時固有値問題として求めよう。

5.2 動径方向の方程式

運動エネルギーは球座標で次の形をとる：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{1}{2mr^2}\hat{\mathbf{L}}^2 \quad (5.5)$$

$\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z$ の同時固有関数 $u(r, \theta, \phi)$ を球座標で変数分離して

$$u(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \quad (5.6)$$

とする。 $R(r)$ にたいする方程式は

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m^2}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{1}{2mr^2}\hbar^2\ell(\ell+1) + V(r)\right\}R(r) = ER(r) \quad (5.7)$$

となる。 $R(r)$ は ℓ にだけ依存する。1 変数 r だけに關する 1 次元の固有値問題に帰着したが、境界 $r = 0$ での制約を詳しくみてみよう。

動径方向の波動関数 $R(r)$ の $r \rightarrow 0$ での漸近形を

$$R(r) = cr^s + \mathcal{O}(r^{s+1}) \quad (5.8)$$

とおこう。 $r \rightarrow 0$ で $V(r)$ が遠心力の項 $\frac{1}{2mr^2}\hbar^2\ell(\ell+1)$ に比べて無視できるなら、

$$s(s+1) = \ell(\ell+1) \quad (5.9)$$

がえられる。これから $s = -\ell - 1$ また $s = \ell$ はのどちらかでなくてはならないが、前者は $R(r)$ を原点で $\frac{1}{r}$ 以上に発散させる。したがって

$$R(r) = cr^\ell + \mathcal{O}(r^{\ell+1}) \quad (5.10)$$

でなくてはならない。³

$\chi(r) = rR(r)$ として、動径方向の固有値方程式 $\chi(r)$ をつかって書きなおすと、直感的な理解がしやすくなる。

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r)\right\}\chi(r) = E\chi(r) \quad (5.11)$$

この方程式は実効的なポテンシャル

$$V(r) + \frac{1}{2mr^2}\hbar^2\ell(\ell+1) \quad (5.12)$$

を受けて、半直線 $0 < r < \infty$ 上を運動する粒子のエネルギー固有値問題になった。ここで、 $r \rightarrow 0$ のとき

$$\chi(r) = \text{const.} \times r^{\ell+1} \quad (5.13)$$

を満たす固有関数をもとめればよい。

5.3 束縛状態と散乱状態：無限遠での振舞い

まずポテンシャル $V(r)$ が

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0 \quad (5.14)$$

³ここで、 $\ell = 0$ の場合、および $V(r) = \frac{v_0}{r}$ とあらわされる場合を注意深く考察しなければならないが、結論は同じである。

を満たす場合は、無限遠で力が働かないことをしめしている。このときの $r \rightarrow \infty$ での $R(r)$ または $\chi(r)$ の漸近形を調べよう。

もし $E > 0$ であれば

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (5.15)$$

なる k によって 1 次元の自由粒子の波動関数と類似の

$$\chi(r) \approx \text{const.} \times \cos[kr + \delta] \quad (5.16)$$

となって、振動解をあて、エネルギー固有値は連続スペクトル $0 < E < \infty$ をなすことがわかる。このとき、波動関数は規格化できない。この状態は**散乱状態**をあらわす。

中心力が引力であれば、**束縛状態** ($E < 0$) の解が存在する。このときには

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 \quad (5.17)$$

なる κ を使って、次のような減衰形の解がえられる。

$$\chi(r) \approx (\text{多項式}) \times \exp[-\kappa r] \quad (5.18)$$

これは、束縛状態の解になり、エネルギースペクトルは離散である。

これに対して

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = +\infty \quad (5.19)$$

のときは、散乱状態は存在できない。

5.3.1 束縛状態でのエネルギー固有値および固有関数

散乱状態については、後の節であつかうことにして、この節では束縛状態を考える。このときには $R(r)$ または $\chi(r)$ は遠方で急速に減衰するので、それらの零点の数 n_r によって状態を分類すること便利である。

まず ℓ を固定したとき、 $\chi(r)$ のゼロ点の数を $n_r = 0, 1, 2, \dots$ として、固有関数の性質について一般的に成り立つ定理を証明抜きに述べておこう。

1. エネルギー固有値の多重度は 1 である。

2. n_r で固有値のラベルをつけて、 E_{n_r} とするとき、エネルギーは n_r について単調増大である。

3. 固有関数 $\chi_{n_r}(r)$ の隣り合うゼロ点の間に $\chi_{n_r+1}(r)$ のゼロ点のひとつ存在する。

さらに ℓ も考慮にいれて、 ℓ と n_r で固有値のラベルをつけて、 E_{ℓ, n_r} とするとき、

4. n_r と ℓ のどちらについても単調増大である。

このとき動径方向に n_r 個の節をもつ解を $\chi_{\ell, n_r}(r)$ とかくことにすれば、固有関数は

$$\begin{aligned} R_{\ell, n_r}(r) &= r \chi_{\ell, n_r}(r) \\ u(r, \theta, \phi) &= R_{\ell, n_r}(r) Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (5.20)$$

となる。このように、異なった ℓ による縮退がなければ、エネルギー固有値は二つの整数 ℓ, n_r で区別され、おのおのの固有値は $(2\ell + 1)$ 重に縮退している。

5.4 3次元等方調和振動子：球座標による解法

原点に Hooke の法則により球対称に束縛された粒子のポテンシャルは、

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \quad (5.21)$$

これを球座標で解こう。 $\chi(r)$ に対する方程式をたてると、

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 - E \right\} \chi(r) = 0 \quad (5.22)$$

$r \rightarrow 0$ では $\chi \rightarrow r^{\ell+1}$ 、 $r \rightarrow \infty$ では $\chi \rightarrow e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2}$ の形を持つことがわかる。そこで、

$$\chi(r) = r^{\ell+1} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2} \xi(r) \quad (5.23)$$

とすると、 $\xi(r)$ は定数から始まる偶関数でなくてはならない。したがって実際は r^2 の関数になる。 $\xi(r)$ に対する方程式をたてると、

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2} \xi(r) + 2 \left(\frac{\ell+1}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r \right) \frac{d}{dr} \xi(r) \\ + \left\{ -\frac{m\omega}{\hbar} (2\ell+3) + \frac{2mE}{\hbar^2} \right\} \xi(r) = 0 \end{aligned}$$

ここで、次元のない量 ν, ρ を導入して

$$E = \hbar\omega\nu; \quad \rho = \sqrt{\frac{m\omega^2}{\hbar}}r \quad (5.24)$$

とすると、

$$\frac{d^2}{d\rho^2}\xi + 2\left(\frac{\ell+1}{\rho} - \nu\right)\frac{d}{d\rho}\xi + (2\nu - 2\ell - 3)\xi = 0 \quad (5.25)$$

ξ をあらためて $\xi(\rho^2)$ と書くと ρ^2 を独立変数とする次の微分方程式がえられる。

$$\left\{ \left(\frac{d}{d\rho^2} \right)^2 + \left(\frac{\ell + \frac{3}{2}}{\rho^2} - 1 \right) \left(\frac{d}{d\rho^2} \right) + \frac{\frac{1}{2}(\nu - \ell - \frac{3}{2})}{\rho^2} \right\} \xi(\rho^2) = 0$$

$\xi(\rho^2)$ をべき展開して、

$$\xi(\rho^2) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^{2n} \quad (5.26)$$

とすると、係数の間の漸化式

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = -\frac{2\nu - 2\ell - 3 - 4n}{2(n+1)(2n+2\ell+3)} \quad (5.27)$$

がえられる。 $\xi(\rho^2)$ が無限遠で ρ^2 のように発散しないためには、 ξ が多項式にならなければならない。そこで ρ^2 の n_r 次式であるとしよう。すなわち

$$a_{n_r+1} = 0 \quad (5.28)$$

このとき、 $\xi(r)$ が、 $r > 0$ の範囲で動径方向に n_r 個のゼロ点をあたえることを示すことができる。(証明略)。したがってこの n_r は動径方向の節の数である。この条件から次のエネルギー準位がえられる。

$$E = \hbar\omega(2n_r + \ell + \frac{3}{2}), n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (5.29)$$

$\xi(0) = 1$ と約束すると多項式 $\xi(\rho^2)$ は合流型超幾何関数 $F(\alpha, \gamma, z)$ を使って

$$\xi(\rho^2) = F(-n_r, \ell + \frac{3}{2}, \rho^2) \quad (5.30)$$

と書かれる。合流型超幾何関数については、水素原子の波動関数にも使われるので、後の節で説明する。

最初の数例をあげると、

$$F(0, \ell + \frac{3}{2}, \rho^2) = 1 \quad (5.31)$$

$$F(-1, \ell + \frac{3}{2}, \rho^2) = 1 - \frac{1}{\ell + \frac{3}{2}}\rho^2 \quad (5.32)$$

$$F(-2, \ell + \frac{3}{2}, \rho^2) = 1 - \frac{2}{\ell + \frac{3}{2}}\rho^2 + \frac{1}{(\ell + \frac{3}{2})(\ell + \frac{5}{2})}\rho^4 \quad (5.33)$$

一般に、 $(1 - \rho^2)^{n_r}$ を 2 項展開して、

$$\rho^{2k} \rightarrow \frac{\rho^{2k}}{(\ell + \frac{3}{2})(\ell + \frac{5}{2}) \dots (\ell + k + \frac{1}{2})}$$

の置き換えをしたものになっている。

例題 $\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ を列に、 $n_r = 0, 1, 2$ を行にとって、 $\frac{E}{\hbar\omega}$ の値を表に表せ。

(解答)

表 1: 中心力 $\frac{m\omega^2}{2}r^2$ のもとでのエネルギー固有状態

ℓ	0	1	2	3	4
多重度 $2\ell + 1$	1	3	5	7	9
$n_r = 0$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{7}{2}$	$\frac{9}{2}$	$\frac{11}{2}$
$n_r = 1$	$\frac{7}{2}$	$\frac{9}{2}$	$\frac{11}{2}$	$\frac{13}{2}$	$\frac{15}{2}$
$n_r = 2$	$\frac{11}{2}$	$\frac{13}{2}$	$\frac{15}{2}$	$\frac{17}{2}$	$\frac{19}{2}$

例題 下から 5 番目までの準位の多重度はいくつか。(答え: 1, 3, 6, 10, 15)

例題 $2n_r + \ell = N$ と記すと、エネルギー準位は

$$E = \hbar\omega(N + \frac{3}{2}), N = 0, 1, 2, \dots \quad (5.34)$$

とかける。

$N = 0, 1, 2$ までのエネルギー固有関数を球関数によって、あらわせ。

5.5 3次元調和振動子：デカルト座標による解

5.5.1 1次元調和振動子の結果

直線上をポテンシャル $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$ のもとで、運動する質量 m の粒子の Hamilton 演算子は

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (5.35)$$

エネルギー固有値は

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}); \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.36)$$

基底状態の波動関数は

$$u_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (5.37)$$

となる。すべての固有関数は

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (5.38)$$

で与えられる。 $H_n(y)$ は Hermite の多項式と呼ばれ次のように順次計算できる。

$$H_n(y) = e^{y^2} \left(-\frac{d}{dy}\right)^n e^{-y^2} \quad (5.39)$$

ここで a および

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{ip}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \quad (5.40)$$

なる昇降作用素を導入すると Hamiltonian および、すべての規格化されたエネルギー固有関数が

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}) \\ u_n &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n u_0 \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (5.41)$$

となる。

5.5.2 3次元の場合

3次元等方調和振動子の場合には Hamiltonian が

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \quad (5.42)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_x &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \\ \hat{H}_y &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{m\omega^2}{2} y^2 \\ \hat{H}_z &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{m\omega^2}{2} z^2 \end{aligned} \quad (5.43)$$

と分解され、それぞれの固有関数がわかっている。したがってデカルト座標では3次元の問題が直ちに解けて、

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) &= E_{n_x n_y n_z} \psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) \\ \psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) &= u_{n_x}(x) u_{n_y}(y) u_{n_z}(z) \\ E_{n_x n_y n_z} &= \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \end{aligned} \quad (5.44)$$

となる。エネルギーの固有値は $N = n_x + n_y + n_z$ でラベルされ、多重度は、

$$\sum_{i=1}^{N+1} i = \frac{1}{2}(N+1)(N+2) \quad (5.45)$$

である。

5.6 問題：重心と相対運動

1. 一直線上を運動する質量 m_1, m_2 の2粒子がポテンシャル $V(x_1, x_2) = \frac{k}{2}(x_1 - x_2)^2$ による相互作用をするときの全体系のエネルギー固有値をもとめよ。

5.7 問題：3次元調和振動子

球座標を使って解いたものと、デカルト座標による結果とを比較してみよう。

1. 基底状態の波動関数関数が球座標で求めたものと一致すること確かめよ。
2. 球座標で求めた、 $\ell = 1, n_r = 0$ の固有関数をデカルト座標の $N = 1$ の固有状態であらわせ。
3. 球座標で求めた、 $\ell = 0, n_r = 1$ と $\ell = 2, n_r = 0$ の固有関数をデカルト座標の $N = 2$ の固有関数であらわせ。

6 水素原子

6.1 水素原子：Coulomb 引力による束縛状態

水素原子内の電子のうけるポテンシャルはC G S 単位系で

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \quad (6.1)$$

とかける。⁴

6.1.1 例題：単位系と次元

1. 定数 $\hbar, e^2$, および質量 m から長さの次元をもつ量をもとめよ。(解) $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$
水素原子についてのこの長さは Bohr 半径と呼ばれる。

$$a_{Bohr} = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.53 \text{ \AA} \quad (6.2)$$

2. MKS(SI) 単位系での Bohr 半径の表式をもとめよ。

6.2 動径方向の方程式

$\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ の同時固有関数 $u(r, \theta, \phi)$ を変数分離でもとめるとき、球面調和関数 $Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$ の係数の $R(r)$ にたいする方程式は

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \right) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r} - E \right\} R(r) = 0 \quad (6.3)$$

⁴陽子と電子のかわりに電荷が Ze と $-Z'e$ の2粒子の問題に当てはめるときには

$$-\frac{e^2}{r} \longrightarrow -\frac{ZZ'e^2}{r}$$

の置き換えをすればよい。MKS 単位系を使うときには以下で現れる数式中で

$$e^2 \longrightarrow \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

の置き換えをすればよい。

$\chi(r)$ を使えば

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r} - E \right\} \chi(r) = 0 \quad (6.4)$$

今、 E の代わりに

$$\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} = \kappa \quad (6.5)$$

を使うことにしよう。 $r=0$ と $r=\infty$ での漸近形を考えると

$$\chi(r) = r^{\ell+1} \mathcal{L}(r) e^{-\kappa r} \quad (6.6)$$

という形をしていることがすぐわかる。詳しい計算によれば r 方向の規格化ができるためには、 $\mathcal{L}(r)$ は r の多項式である必要がある。 $\mathcal{L}(r)$ の次数が高くなれば r 方向にもちうる節の数が多くなる。

6.2.1 基底状態

基底状態では $\ell=0$ となることを予想すると、動径方向の Schroedinger 方程式は次のようになる。

$$\left\{ \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{r} + E \right) \right\} R(r) = 0 \quad (6.7)$$

このとき、 $R(r) = e^{-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} r}$ という解があり、直ちに基底状態のエネルギー固有値

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -13.6 \text{ eV} \quad (6.8)$$

がえられる。

6.2.2 すべてのエネルギー固有値

そこで、まず

$$\chi(r) = F(r) e^{-\kappa r} \quad (6.9)$$

とすると、

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} \chi(r) = e^{-\kappa r} \frac{1}{r} \left(\frac{d}{dr} - \kappa \right)^2 F(r) \quad (6.10)$$

だから

$$0 = (H - E)R(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}e^{-\kappa r}\frac{1}{r}\left(\frac{d^2}{dr^2} - 2\kappa\frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2me^2}{\hbar^2 r}\right)F(r) \quad (6.11)$$

さらに

$$F(r) = r^{\ell+1}\mathcal{L}(r) \quad (6.12)$$

と置くことによって、

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{2(\ell+1)}{r} - 2\kappa\right)\frac{d}{dr} + \frac{1}{r}\left(-2\kappa(\ell+1) + \frac{2me^2}{\hbar^2}\right)\right\}\mathcal{L}(r) = 0 \quad (6.13)$$

このとき波動関数に節がないとして、

$$\mathcal{L}(r) = 1 \quad (6.14)$$

とすると、エネルギー固有値

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{\ell+1} \quad (6.15)$$

がえられる。

$\mathcal{L}$ が k 次式であるとして、

$$\mathcal{L} = 1 + \beta_1 r + \beta_2 r^2 + \dots + \beta_k r^k \quad (6.16)$$

としてみると、最高次の係数を比較するだけで、完全なエネルギースペクトル

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{k+\ell+1} \quad (6.17)$$

がえられる。のこる条件から係数 $\beta_1, \dots, \beta_k$ がもとまる。このようにして、すべての束縛状態が求まる。

多項式 $\mathcal{L}(r)$ は k 個の零点をすべて $r > 0$ の範囲にもつことが証明できる。したがって動径方向の節の数を n_r とかくと、 $n_r = k$ であり、

$$n = n_r + \ell + 1 \quad (6.18)$$

この整数 $n = 1, 2, \dots$ は Coulomb ポテンシャルの問題に特徴的にあらわれる量子数で、**主量子数**と呼ばれる。こうして水素原子のエネルギー準位の公式

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -13.6\frac{1}{n^2}\text{eV} \quad (6.19)$$

がえられる。

例題

水素原子のエネルギー固有値をあらわす MKS(SI) 単位系での表式をであらわせ。

6.2.3 Laguerre の微分方程式

r のかわりに次元のない変数

$$\rho = \frac{r}{\hbar}\sqrt{-8mE} = 2\kappa r \quad (6.20)$$

をつかうことにしよう。

$$L(\rho) = \mathcal{L}\left(\frac{\rho}{2\kappa}\right) \quad (6.21)$$

に対する微分方程式に書き直すと、

$$L''(\rho) + \left(\frac{2\ell+2}{\rho} - 1\right)L'(\rho) + \frac{n-\ell-1}{\rho}L(\rho) = 0 \quad (6.22)$$

を得る。(Laguerre の微分方程式) ここで

$$n = \frac{1}{\kappa a} = \frac{e^2}{\hbar}\sqrt{-\frac{m}{2E}} \quad (6.23)$$

としたが、これが整数かどうかはまだ仮定しないで、それを導くことを試みよう。

6.2.4 冪級数による解

$L(\rho)$ を Taylor 展開して

$$L(\rho) = \sum_{k=0} c_k \rho^k \quad (6.24)$$

としたものを Laguerre の微分方程式に代入して整理すると、

$$L''(\rho) + \frac{2\ell+2}{\rho}L'(\rho) = L'(\rho) - \frac{n-\ell-1}{\rho}L(\rho) \quad (6.25)$$

これから、係数に対する漸化式をもとめると、

$$(k+1)(2\ell+2+k)c_{k+1} = -(n-\ell-1-k)c_k \quad (6.26)$$

すなわち

$$\begin{aligned} c_k &= \frac{(-1)^k(n-\ell-k)\cdots(n-\ell-1)}{k!(2\ell+2)(2\ell+3)\cdots(2\ell+k+1)} \\ k &= 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (6.27)$$

がえられる。 $L(\rho)$ が無限級数だと、 $k \rightarrow \infty$ のときの c_k の漸近値が $\frac{1}{k!}c_0$ となり、

$$L(\rho) \rightarrow c_0 e^\rho \quad (6.28)$$

$$R(r) \rightarrow \text{const.} e^{\frac{1}{2}\rho} \quad (6.29)$$

となり、規格化できなくなってしまうので、 $L(\rho)$ は多項式でなければならない (Laguerre の多項式)。 $L(\rho)$ が n_r 次の多項式になる条件 $c_{n_r+1} = 0$ を課すと

$$n = n_r + \ell + 1 \quad (6.30)$$

となる。ここで ρ と r の関係の中に n が入ってきて

$$\rho = \frac{2}{na_B} r \quad (6.31)$$

となることに注意が必要である。

6.2.5 波動関数 $u_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$ の様子

水素原子の波動関数は

$$u_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \quad (6.32)$$

これらの関数を空間的に思い浮かべるには、関数が 0 となるところ (節、あるいは面) の位置を正しく把握するとよい。

また ϕ 方向の節をもつ実数にとった波動関数 $R_{n\ell}(r)Y_{\ell, \mu, \cos}(\theta, \phi)$ と $R_{n\ell}(r)Y_{\ell, \mu, \sin}(\theta, \phi)$ のほうが特徴をよくとらえている面もある。

6.3 付録：合流型超幾何関数

重要な二つの場合について、(3次元調和振動子と水素原子) 動径方向の Schroedinger 方程式は次の 2 階常微分方程式 (合流型超幾何微分方程式) に帰着する。

$$u''(z) + \left(\frac{\gamma}{z} - 1\right)u'(z) - \frac{\alpha}{z}u(z) = 0 \quad (6.33)$$

どちらの場合にも $u(0) = 1$ となる解が必要となる。これを合流型超幾何関数 $F(\alpha, \gamma, z)$ と呼ぶ。 $u(z)$ を Taylor 展開

$$u(z) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k \quad (6.34)$$

してもとの式

$$u''(z) + \frac{\gamma}{z}u'(z) = u'(z) + \frac{\alpha}{z}u(z) \quad (6.35)$$

に代入して整理すると、係数に対する漸化式

$$(k+1)(\gamma+k)c_{k+1} = (\alpha+k)c_k \quad (6.36)$$

がえられる。これを順次適用すると、

$$\begin{aligned} c_k &= \frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+k-1)}{k!\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+k-1)}c_0 \\ k &= 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (6.37)$$

がえられる。ここで $c_0 = 1$ としたものが合流型超幾何関数 $F(\alpha, \gamma, z)$ である。

$$\begin{aligned} F(\alpha, \gamma, z) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+k-1)}{k!\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+k-1)} z^k \\ &= 1 + \frac{\alpha}{\gamma}z + \frac{\alpha(\alpha+1)}{2!\gamma(\gamma+1)}z^2 + \dots \end{aligned} \quad (6.38)$$

6.3.1 Laguerre の多項式との関係

$u(z)$ の Taylor 級数が無限級数だと、 $k \rightarrow \infty$ のときの c_k の漸近値が $\frac{1}{k!}c_0$ となり、 $u(z)$ の漸近形が

$$u(z) \approx c_0 e^z \quad (6.39)$$

のように発散してしまう。しかし $\alpha = -N$ として、 $N = 0, -1, -2, \dots$ であれば N 次多項式で止まる。このとき一般に Laguerre の多項式とよばれ、次のように書かれる。

$$F(-N, \gamma, z) = L_N^\gamma(z) \quad (6.40)$$

6.3.2 水素原子の場合

水素原子の場合は

$$\rho = \frac{2r}{na} \quad (6.41)$$

$$n = n_r + \ell + 1 \quad (6.42)$$

として、

$$R_{\ell, n_r} = c(n, \ell) \rho^\ell e^{-\frac{\rho}{2}} F(-n_r, 2\ell + 2, \rho) \quad (6.43)$$

とかける。ここで使われる関数は

$$\begin{aligned} F(-n_r, 2\ell + 2, \rho) = & \sum_{k=0}^{n_r} \frac{n_k C_k(-\rho)^k}{(2\ell + 2)(2\ell + 3) \cdots (2\ell + k + 1)} \\ & 1 - \frac{n_r}{2\ell + 2} \rho + \frac{n_r(n_r - 1)}{2!(2\ell + 2)(2\ell + 3)} \rho^2 \\ & - \frac{n_r(n_r - 1)(n_r - 2)}{3!(2\ell + 2)(2\ell + 3)(2\ell + 4)} \rho^3 + \dots \end{aligned} \quad (6.44)$$

これは、 $(1 - \rho)^{n_r}$ の 2 項展開で、

$$\rho^k \longrightarrow \frac{\rho^k}{(2\ell + 2)(2\ell + 3) \cdots (2\ell + k + 1)}$$

と置き換えた多項式になっている。

最初の数例は

$$F(0, 2\ell + 2, \rho) = 1 \quad (6.45)$$

$$F(-1, 2\ell + 2, \rho) = 1 - \frac{1}{2\ell + 2} \rho \quad (6.46)$$

$$\begin{aligned} F(-2, 2\ell + 2, \rho) = & 1 - \frac{2}{2\ell + 2} \rho \\ & + \frac{1}{(2\ell + 2)(2\ell + 3)} \rho^2 \end{aligned} \quad (6.47)$$

波動関数の規格化をおこなうために、次の公式を使おう。

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2\ell+2} \{F(-n_r, 2\ell + 2, \rho)\}^2 d\rho \\ = \frac{2(n_r + \ell + 1) \cdot n_r! \{(2\ell + 1)!\}^2}{(n_r + 2\ell + 1)!} \end{aligned} \quad (6.48)$$

動径波動関数が

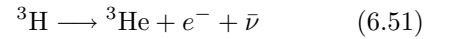
$$\int_0^\infty (R(r)_{\ell, n_r})^2 r^2 dr = 1 \quad (6.49)$$

と規格化されるためにはつぎのようにとればよい。

$$\begin{aligned} c(n, \ell) &= \left(\frac{2}{na}\right)^{3/2} \cdot \sqrt{\frac{n+\ell C_{n_r}}{2n \cdot (2\ell + 1)!}} \\ c(n, \ell) &= \frac{2}{n^2(2\ell + 1)!} \sqrt{\left(\frac{1}{a}\right)^3 \frac{(n+\ell)!}{n_r!}} \end{aligned} \quad (6.50)$$

6.3.3 問題：水素原子

1. $n = 1, 2, 3$ までの動径波動関数 $R_{n, \ell}$ の様子をスケッチせよ。
2. 一価のヘリウムイオン He^+ の基底状態のエネルギーと波動関数をもとめよ。それらを普通の水素原子のものと比較せよ。
3. トリチウム原子が基底状態にあるとき、その原子核がベータ崩壊を起こした。



この結果後に残ったヘリウムの陽イオン He^+ がどのような電子状態に取り残されるかを考えてみよう。

- (a) 1s-状態にある確率をもとめよ。(答え 0.702)
- (b) 2s-状態にある確率を求めよ。(答え 0.25)
- (c) このときの角運動量量子数 ℓ の選択則をもとめよ。(答え $\Delta\ell = 0$)

6.3.4 3次元調和振動子の球座標による解

3次元調和振動子の波動関数を極座標で表すときは、唯一の長さの次元の量 $L = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ を使って、 $r = L\rho$ として、 ρ^2 を独立変数にとれば、前述の動径微分方程式は

$$\left\{ \left(\frac{d}{d\rho^2} \right)^2 + \left(\frac{\ell + \frac{3}{2}}{\rho^2} - 1 \right) \left(\frac{d}{d\rho^2} \right) + \frac{\frac{1}{2}(\nu - \ell - \frac{3}{2})}{\rho^2} \right\} \xi(\rho^2) = 0 \quad (6.52)$$

だから、

$$n_r = -\frac{1}{2}(\ell + \frac{3}{2} - \nu) = 0, -1, -2, \dots \quad (6.53)$$

として、

$$\xi = F(-n_r, \ell + \frac{3}{2}, \rho^2) \quad (6.54)$$

でなければならない。エネルギー準位は

$$N = \nu + \frac{3}{2} \quad (6.55)$$

として、

$$E = \hbar\omega(N + \frac{3}{2}), \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (6.56)$$

となる。

したがって動径波動関数は

$$R_{\ell, n_r} = c\rho^\ell e^{-\frac{1}{2}\rho^2} F(-n_r, \ell + \frac{3}{2}, \rho^2) \quad (6.57)$$

となる。

$$\int_0^\infty (R_{\ell, n_r})^2 \rho^2 d\rho = 1 \quad (6.58)$$

とするためには規格化定数を

$$c = \frac{1}{\Gamma(\ell + \frac{3}{2})} \sqrt{\frac{2\Gamma(\ell + n_r + \frac{3}{2})}{n_r!}} \quad (6.59)$$

とすればよい。ここで

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \rho^{2\ell+2} e^{-\rho^2} \left\{ F(-n_r, \ell + \frac{3}{2}, \rho^2) \right\}^2 d\rho \\ &= \frac{n_r! \left\{ \Gamma(\ell + \frac{3}{2}) \right\}^2}{2\Gamma(n_r + \ell + \frac{3}{2})} \end{aligned} \quad (6.60)$$

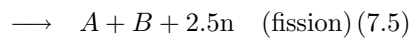
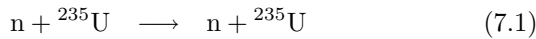
を使った。

7 中心力による散乱

7.1 衝突実験、入射粒子と標的、終状態の channel

原子やそれより小さいスケールの対象の物理的情報をえる重要な手段のひとつが粒子を加速し標的にぶつけて散乱させそれを観測する実験である。

標的原子 (target) からなる物質に入射粒子 (projectile) の beam をあてると、粒子同士の衝突により、きまった確率でいろいろな終状態が起こり、それらは終状態の channel と呼ばれる。たとえば中性子をウランウムの原子核に衝突させる実験では次のようないろいろな反応がおこる。



この例の最初の channel は反応前後で構成粒子の種類が同じで、入射粒子の方向だけが変わえられる。反応前後で構成粒子の種類が同じの散乱は**弾性散乱**とよばれ、それ以外は全部、非弾性散乱または**非弾性反応**とよばれる。

これらの反応の起こりやすさを表す重要な概念は断面積という量である。いま、入射粒子の beam の個数密度を ρ 、速度を v とするとき、 $\phi = \rho v$ という量は線束 (flux) とよばれる。これは beam に垂直な単位面積を単位時間に入射粒子がとおりすぎる個数をあらわす。

標的のなかの一個の原子のみに注目しよう。一個の target により起こる i -番目のチャンネルの反応の毎秒あたりの回数 N_i は ϕ に比例するから、

$$N_i = \phi \sigma_i \quad (7.7)$$

と書くとき、 σ_i をその反応の断面積と呼ぶ。標原子

がどれかの反応を起こす頻度は全断面積

$$\sigma_{tot} = \sum_i \sigma_i \quad (7.8)$$

に $\text{flux} \phi$ をかけたものになる。

よく使われる断面積の単位は $\text{barn} = 10^{-24} \text{cm}^2$ である。

7.2 弾性散乱の断面積

以下では弾性散乱のみをあつかうこととする。また散乱が入射粒子と標的との中心力によって起こる場合のみをあつかう。非弾性反応や非中心力による散乱はよりすすんだ量子力学の範囲にはいる。target を頂点とする立体角 $d\Omega$ 内に毎秒散乱される粒子の個数 dN は ϕ と $d\Omega$ に比例する微小量だから

$$dN = \phi \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega \quad (7.9)$$

と書き、 $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)$ を微分断面積と呼ぶ。これは散乱の角度 θ, ϕ の関数であり、実験で直接測定される量である。

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} (\theta, \phi) \right)$$

$$d\sigma = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega \quad \text{とすると、}$$

$$dN = \phi d\sigma \quad (7.10)$$

のなるので、 $d\sigma$ が立体角 $d\Omega$ 内に散乱されるための入射ビームに垂直な断面積の大きさと考えてもよい。これを全部合計したものは、微分断面積を角度積分したものになり、弾性散乱の**全断面積** σ_{el} と呼ぶ。

$$\sigma_{el} = \int d\sigma = \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega \quad (7.11)$$

散乱断面積を直感的に理解するために次の力学の問題を考えよう。

例題

半径 a の完全剛体球に質点が散乱されるとき

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = \frac{a^2}{4} \quad (7.12)$$

$$\sigma_{el} = \pi a^2 \quad (7.13)$$

をしめせ。

(解答)

剛体の中心は原点にあり、質点は z 軸の正の方向に直線 $x = b, a > b > 0$ に沿って入射し、球面にぶつかるとする。 xz 平面において質点が球面にぶつかる点を $(-a \sin \alpha, a \cos \alpha)$ とすると、

$$b = a \cos \alpha \quad (7.14)$$

さらに、その点で球面への接線と法線を考える。 α は接線が z 軸となす角であることになる。質点は接平面からさらに α だけ回った方向に反射されるから、散乱角 θ は

$$\theta = 2\alpha \quad (7.15)$$

今半径 z 軸に垂直な半径 b の円の面積は πb^2 , b が変ることによる面積の変化と衝突係数 b の変化による散乱角の変化を求めると、

$$\begin{aligned} d\sigma &= d(\pi b^2) = d(a \cos \alpha)^2 = d(a^2 \cos^2 \alpha) \\ &= d\left(a^2 \frac{1 + \cos \theta}{2}\right) = \frac{1}{2} \pi a^2 \sin \theta d\theta \end{aligned} \quad (7.16)$$

いっぽう立体角の変化量は

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta \quad (7.17)$$

したがって、両者の比を取って

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = \frac{a^2}{4} \quad (7.18)$$

角度積分をして、

$$\sigma_{el} = \pi a^2 \quad (7.19)$$

これは当然の結果である。

上の例では断面積が入射速度によらなかったが、原子、分子、原子核、素粒子を対象として量子論であつかうと、一般に断面積が入射粒子のエネルギーによって激しく変動し、それが重要な情報をあたえてくれる。

7.3 物質中の散乱による減衰

原子密度が ν の target 物質中に入射粒子の平面波が x 方向に伝わる時、 dx だけすすむごとにすべての種類の散乱によってどれだけ beam が弱まるかを考えよう。位置 x における flux の強さを $I(x)$ とすると、

$$I(x) - I(x + dx) = I(x) \sigma_{\text{tot}} \nu dx \quad (7.20)$$

これよりえられる方程式

$$\frac{dI}{dx} = -\nu \sigma_{\text{tot}} I(x) \quad (7.21)$$

から

$$I(x) = I(0) e^{-\kappa x} \quad (7.22)$$

$$\kappa = \nu \sigma_{\text{tot}} \quad (7.23)$$

となる。 κ は減衰定数、その逆数 $\ell = \frac{1}{\kappa}$ は平均自由行路とよばれる。

7.4 散乱振幅

入射粒子が原点にある標的から中心力ポテンシャル $V(r)$ を受けているとき、ハミルトン演算子は

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \quad (7.24)$$

である。いま、力は中心力であることを仮定した。

入射粒子は z 方向に進んでくるとすると、

$$e^{ikz} \quad (7.25)$$

なる波動関数で記述される。ここで $k = p/\hbar$ である。散乱された波は原点で弾性散乱を受けた後、エネルギーを失うことなく、放射状にすすむので、十分離れたところでは、

$$f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (7.26)$$

とかけるはずである。 $f(\theta)$ のことを**散乱振幅**とよぶ。

したがって定常状態の波動関数は次の漸近形をもつ。

$$\psi(\mathbf{x}) \approx e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (7.27)$$

入射波の flux は $v = \frac{\hbar k}{m}$ とすると $\phi = v$ であり、散乱波については、flux が

$$v \left| f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right|^2 = v |f(\theta)|^2 \frac{1}{r^2} \quad (7.28)$$

なので、毎秒立体角 $d\Omega$ の中に散乱される粒子個数は

$$v |f(\theta)|^2 \frac{1}{r^2} \times r^2 d\Omega = v |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (7.29)$$

そこで、

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = \frac{1}{\phi} \frac{dN}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (7.30)$$

であることがわかる。

ゆえに Schroedinger 方程式をもちいて、散乱状態の波動関数で上のような漸近形をもつ解をもとめて、 $f(\theta)$ を求めれば散乱実験のデータと比べられることになる。この状態のエネルギーは $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ であるので、解くべき Schroedinger 方程式は

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right\} \psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi \quad (7.31)$$

これをとくことにより、厳密解が得るまえに、逐次近似法を考えよう。

7.5 逐次近似による解法

7.5.1 散乱の Green 関数

散乱の問題を解くには漸近形

$$\psi(\mathbf{x}) \approx e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (7.32)$$

をもつ定常状態をシュレディンガー方程式

$$\{H_0 + V(|\mathbf{x}|)\} \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x}) \quad (7.33)$$

から求める必要がある。

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (7.34)$$

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} v(r) \quad (7.35)$$

とすると、

$$\{\Delta + k^2\} \psi(\mathbf{x}) = v(|\mathbf{x}|) \psi(\mathbf{x}) \quad (7.36)$$

と簡単化される。ここで右辺を 0 とおいたものは単なる自由粒子の波動関数 ψ_0 に過ぎない。

$$\{\Delta + k^2\} \psi_0(\mathbf{x}) = 0 \quad (7.37)$$

いま

$$\{\Delta + k^2\} G(\mathbf{x}) = \delta^3(\mathbf{x}) \quad (7.38)$$

なる非線形方程式の解 G がひとつ見つかったとして、関数

$$\psi(\mathbf{x}) - \int d\mathbf{y} G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) v(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \quad (7.39)$$

に $(\Delta + k^2)$ を作用すると、0 がえられる。したがって、この関数は自由粒子の波動関数になるので、 ψ_0 とおくと、上の微分方程式の代わりとなる次の積分方程式が得られる。

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{y} G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) v(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \quad (7.40)$$

Schroedinger 方程式という微分方程式が積分方程式に置き換わったわけであるが、記号的にかくと、

$$\psi = \psi_0 + \int G v \psi \quad (7.41)$$

という形になる。逐次近似によって記号的に解を求めてみよう。

$$\psi = \psi_0 + \int G v \psi_0 + \int \int G v G v \psi_0 + \dots \quad (7.42)$$

右辺で $v = 0$ とおくと、特定の自由粒子の波動関数 ψ_0 に収束するという性質をもっている。

そこで

$$\psi_0(\mathbf{x}) = e^{ikz} \quad (7.43)$$

とすると、これを入射波とする散乱解が v の冪級数の形でもとまることになる。

そのために、Green 関数 $G(\mathbf{x})$ を求めてみよう。

7.5.2 準備: Yukawa ポテンシャルのフーリエ変換

Yukawa potential

$$\frac{e^{-\mu r}}{4\pi r} \quad (7.44)$$

(ただし、 $\mu > 0$) がフーリエ積分

$$\int \frac{1}{k^2 + \mu^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (7.45)$$

によって与えられることを球座標による計算で示しておこう。

以下で、 $\mathbf{x}$ 方向に $\mathbf{k}$ の z 軸をとって球座標を使う。

$$\begin{aligned} & \int \frac{1}{k^2 + \mu^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ &= \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^\infty k^2 dk \frac{1}{k^2 + \mu^2} e^{ikr \cos\theta} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{k^2 + \mu^2} \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr} \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \int_{-\infty}^\infty dk \frac{k}{k^2 + \mu^2} \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr} \\ &= \frac{1}{16\pi^2 i r} \int_{-\infty}^\infty dk \left(\frac{1}{k + i\mu} + \frac{1}{k - i\mu} \right) \\ & \quad \times (e^{ikr} - e^{-ikr}) \\ &= \frac{1}{16\pi^2 i r} (2\pi i e^{-\mu r} \times 2) \\ &= \frac{1}{4\pi r} e^{-\mu r} \end{aligned} \quad (7.46)$$

導出の過程でわかるようにこの積分は $\Re\mu > 0$ の範囲でも正しい。

7.5.3 Born 近似

上の積分で、 $\mu = \mp ik + \epsilon$, $\epsilon > 0$, $k > 0$ とおくと、

$$\frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r} = \int \frac{1}{q^2 - k^2 \mp i\epsilon} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \quad (7.47)$$

となる。

$$-\frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r} = G_{\pm}(\mathbf{x}) \quad (7.48)$$

とおくと、

$$(\Delta + k^2)G_{\pm}(\mathbf{x}) = \delta^3(\mathbf{x}) \quad (7.49)$$

となって、どちらも Green 関数になることがわかる。ところで

$$G_{\pm}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = -\frac{e^{\pm ik|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}}{4\pi|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \quad (7.50)$$

の式を使う際 $\mathbf{y}$ は原点に近いところだけが重要で、 $\mathbf{x}$ は遠方にあるときだけを求めればよいので、 $|\mathbf{y}|/|\mathbf{x}|$ の高次の項は無視することにしよう。そうすると、 $|\mathbf{x}| = r$ と記すことにして、

$$\begin{aligned} |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2 &= (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\ &= |\mathbf{x}|^2 - 2(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}) + |\mathbf{y}|^2 \approx r^2 \left(1 - \frac{2(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y})}{r^2} \right) \end{aligned} \quad (7.51)$$

から

$$|\mathbf{x} - \mathbf{y}| = r - \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}}{r} \quad (7.52)$$

$$\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} = \frac{1}{r} + \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}}{r^3} \quad (7.53)$$

ここで波数 $\mathbf{k}_0$ から波数 $\mathbf{k}$ への散乱を考えて、

$$\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 \quad (7.54)$$

$$\mathbf{k}_0 = (0, 0, k) \quad (7.55)$$

$\mathbf{x}$ は原点から見て $\mathbf{k}$ 方向にあるので、

$$\mathbf{k} = k \frac{\mathbf{x}}{r} \quad (7.56)$$

とすると、

$$k|\mathbf{x} - \mathbf{y}| = kr - \mathbf{k} \cdot \mathbf{y} \quad (7.57)$$

したがってこの近似では

$$G_{\pm}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \approx -\frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r} e^{\mp i\mathbf{k} \cdot \mathbf{y}} \quad (7.58)$$

とできる。

G_+ をつかうと、散乱波がえられ、 G_- をつかうと、原点に向かう収束波が得られることがわかる。

後者は実際の解にはなりえないので、以後、 G_+ のみを使わなければならない。こうして、

$$G_+(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \approx -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{y}} \quad (7.59)$$

を逐次近似の式に代入すると、

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) - \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{y}} v(\mathbf{y}) \psi_0(\mathbf{y}) d\mathbf{y} + \dots$$

ところで、

$$\psi_0(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}} \quad (7.60)$$

だから、

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{y}} v(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (7.61)$$

がえられる。もとのポテンシャルになおすと、

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{y}} V(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (7.62)$$

平面波の表示

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (7.63)$$

をつかうと、

$$f(\theta) = -4\pi^2 m \hbar \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}_0 \rangle \quad (7.64)$$

ともかける。

散乱振幅をポテンシャルの1次の近似で求めるこの式は **(第1) Born 近似** と呼ばれる。

例題 (Rutherford 散乱公式)

古典力学のクーロンポテンシャル

$$V(r) = \frac{Ze^2}{r} \quad (7.65)$$

による散乱の微分断面積の Rutherford の公式

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = \left(\frac{Ze^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (7.66)$$

$$E = \frac{1}{2} m v^2 \quad (7.67)$$

が Born 近似の第1項と一致することを示せ。またこのとき、 $\sigma_{tot} = \infty$ も示せ。

(解答)

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}_0 \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{Ze^2}{r} d\mathbf{r} \\ &= \frac{Ae^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi}{(\Delta k)^2} \end{aligned} \quad (7.68)$$

ここで

$$(\Delta k)^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (7.69)$$

だから、

$$f(\theta) = -\frac{mZe^2}{2\hbar^2 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \quad (7.70)$$

これを

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (7.71)$$

をつかってあらわすと、

$$f(\theta) = -\frac{Ze^2}{4E} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} \quad (7.72)$$

これより、

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = \left(\frac{Ze^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (7.73)$$

7.6 動径方向の方程式

今度は動径方向の波動関数を厳密に求める方法を考えよう。今考えている状況では L_z の固有値は $m = 0$ であるから、 $P_\ell(\cos \theta)$ で展開できる。

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) R_\ell(r) P_\ell(\cos \theta) \quad (7.74)$$

$R(r)$ にたいする方程式は

$$\begin{aligned} &\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{1}{2mr^2} \hbar^2 \ell(\ell+1) + V(r) \right\} R(r) \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} R(r) \end{aligned} \quad (7.75)$$

となり $R(r)$ にたいする方程式をもう一度記すと、

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{1}{2mr^2} \hbar^2 \ell(\ell+1) + V(r)\right\} R(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} R(r) \quad (7.76)$$

この方程式で、 $V(r) = 0$ とするとき、

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left\{k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\} R = 0 \quad (7.77)$$

となる。

これを次の球 Bessel 微分方程式と比べてみよう。

$$\frac{d^2 w}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{dw}{dz} + \left\{1 - \frac{n(n+1)}{z^2}\right\} w(z) = 0 \quad (7.78)$$

この方程式の 1 次独立な解は

$$j_n(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n+\frac{1}{2}}(z) \quad (7.79)$$

$$n_n(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} N_{n+\frac{1}{2}}(z) \quad (7.80)$$

である。ここで J, N は Bessel 関数と Neumann 関数であり、 j, n は球 Bessel 関数と球 Neumann 関数とよばれる。

このうち $z = 0$ で正則なのは $j_n(z)$ だけで、そこでの漸近形は

$$j_n(z) \approx \frac{z^n}{(2n+1)!!} \quad (7.81)$$

である。 $z = \infty$ での漸近形は

$$j_n(z) \approx \frac{1}{z} \cos\left(z - \frac{1}{2}(n+1)\pi\right) \quad (7.82)$$

$$n_n(z) \approx \frac{1}{z} \sin\left(z - \frac{1}{2}(n+1)\pi\right) \quad (7.83)$$

j, n は次のように初等関数になる。

$$j_n(z) = (-1)^n z^n \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^n \frac{\sin z}{z} \quad (7.84)$$

$$n_n(z) = (-1)^n z^n \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^n \frac{\cos z}{z} \quad (7.85)$$

したがって厳密に $V(r) = 0$ の時には j_n だけが解としてあらわれ、原点から遠く離れた $V(r) \approx 0$ とみなせる領域の漸近解としては、 j, n の一次結合があらわれる。

7.6.1 平面波の部分波展開

このときには $j_\ell(kr)$ が解になる。これは $r = 0$ を

$$\frac{(kr)^\ell}{(2\ell+1)!!} \quad (7.86)$$

で出発して $r \rightarrow \infty$ で

$$\frac{1}{kr} \cos\left(kr - \frac{1}{2}(n+1)\pi\right) \quad (7.87)$$

の漸近形に達する。

これで平面波 e^{ikz} を展開したものは

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos \theta) \quad (7.88)$$

となる。

7.6.2 phase shift

$V(r) \approx 0$ とみなせる領域の漸近解は一般に

$$R(r) = \alpha j_\ell(kr) + \beta n_\ell(kr) \quad (7.89)$$

とかける。 α, β のかわりに実数の δ_ℓ と複素数の A を使って

$$\alpha = A \cos \delta_\ell \quad (7.90)$$

$$\beta = -A \sin \delta_\ell \quad (7.91)$$

としてもよい。このようにとると、

$$R(r) \approx \frac{A}{kr} \cos\left(kr - \frac{1}{2}(n+1)\pi + \delta_\ell\right) \quad (7.92)$$

これが先の漸近形を持つという条件を課してみよう。進行波の厳密な展開は

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos \theta) \quad (7.93)$$

であることがわかっている。いっぽう散乱波の漸近形の展開は

$$\psi = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) R_\ell(r) P_\ell(\cos \theta) \quad (7.94)$$

という形を仮定したのだから、差をとると、

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}) - e^{ikz} &\approx f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \{R_{\ell}(r) - i^{\ell} j_{\ell}(kr)\} P_{\ell}(\cos \theta)\end{aligned}$$

このなかに e^{-ikr} に比例する項が含まれず、散乱波 e^{ikr} のみがふくまれることを課すと、

$$A = i^{\ell} e^{i\delta_{\ell}} \quad (7.95)$$

がえられ、さらに散乱振幅の展開

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \{e^{2i\delta_{\ell}} - 1\} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (7.96)$$

がえられる。これにより、再び

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = |f(\theta)|^2 \quad (7.97)$$

が得られる。

このように $V(r) = 0$ のとき $\delta_{\ell} = 0$ となり、 $f(\theta) = 0$ 、また $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = 0$ となる。 δ_{ℓ} は相互作用がないときとくらべて、動径波動関数が原点に引き込まれる度合いを位相または角度であらわしたもので、**位相のずれ** phase shift とよばれる。

8 電子のスピンと排他原理

8.1 スピン角運動量

8.1.1 Stern-Gerlach の実験

軌道角運動量 ℓ をもつ原子が z 方向をむいた均一な磁場 $\mathbf{B}$ の中にあるとき、電子の回転によって生じる磁気能率 $\vec{\mu}$ により、余分なエネルギー

$$-\vec{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (8.1)$$

をもつ。もしこの磁場が不均一な磁場 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ であると、その中を運動するとき、場所に依存する余分なエネルギー

$$U(\mathbf{x}) = -\vec{\mu} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}) \quad (8.2)$$

をもつので、これはポテンシャルエネルギーとおなじ働きをする。簡単のため、不均一な磁場を

$$\mathbf{B} = (0, 0, B_z(x))$$

と仮定すると原子は次のような力

$$-\text{grad}U(\mathbf{x}) = (F_x, 0, 0)$$

をうける。

$$F_x = \mu_z \frac{dB_z(x)}{dx} \quad (8.3)$$

ここで、古典論から推論できるとおり、

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m_e} \mathbf{L} \quad (8.4)$$

だから、量子論では

$$F_x = m \frac{e\hbar}{2m_e} \frac{dB_z(x)}{dx} \quad (8.5)$$

$$m = \ell, \ell - 1, \dots, -\ell \quad (8.6)$$

となって、原子のビームは ∇B_z の方向に $2\ell + 1$ 本にわかれることになる。ここで電子は質量 m_e 、電荷 $e (< 0)$ を持つとした。この現象は磁気能率をもつ粒子が不均一な磁場の中をすすむとき起きる現象で、Stern-Gerlach の実験という。

Stern と Gerlach は銀の原子のビームが不均一な磁場の中を通り抜けるとき、2本に分かれる現象を発見した(1921)。このことは、原子の中の電子が角運動量を持ち、それにともなって、磁気能率をもつことを示しているが、2本に分かれることは謎であった。

8.1.2 Uhlenbeck-Goudsmit の電子の自転のアイデア

Uhlenbeck と Goudsmit は1925年、電子は角運動量 $\frac{1}{2}\hbar$ の自転をしていて、それに伴って、 $(-\frac{e\hbar}{2m})$ の磁気能率をもつとすれば Stern-Gerlach の実験事実を説明できることをしめした。

大きさ $\frac{1}{2}\hbar$ の角運動量は軌道運動としては許されないものであるが、行列表示は可能であり、2行2列の行列で表される。電子のスピンに関するこれらのことが正しいことは Dirac 方程式によって解明される。

例題電子のスピン角運動量の行列表示

1. 大きさ $\frac{1}{2}$ のスピンの各成分 S_x, S_y, S_z の行列要素をもとめよ。

(答え) $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i, i = 1, 2, 3$. ただし、 σ_i は Pauli のスピン行列。

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (8.7)$$

8.2 電子の波動関数

スピン $\frac{1}{2}$ をもつ粒子のスピン状態関数は次のようなスピンの z 成分 S_z の固有状態で展開できるはずである。

$$|\frac{1}{2}, m_s\rangle, \quad m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \quad (8.8)$$

より具体的に次のように書いてもよい。

$$|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.9)$$

$$|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (8.10)$$

一般のスピン状態はこれらの1次結合

$$\alpha|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle + \beta|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (8.11)$$

である。

位置座標 $\mathbf{x}$ まで考えるときは、 $\mathbf{x}$ とスピンの z -成分 S_z が可換な Observable なので、それらの同時固有状態を $|\mathbf{x}, \xi\rangle$ としよう。 ξ は m_s と書いたものとおなじもので $\xi = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ である。

$$\langle \mathbf{x}, \xi | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}, \xi) \quad (8.12)$$

このことは波動関数が2成分をもつようになると考えてもよい。

$$\begin{pmatrix} \psi(\mathbf{x}, \frac{1}{2}) \\ \psi(\mathbf{x}, -\frac{1}{2}) \end{pmatrix} = \psi(\mathbf{x}) \quad (8.13)$$

次のような記法をとることもある。

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (8.14)$$

例題 spin を考慮したときの電子の2成分の波動関数 $\psi(\mathbf{x})$ のノルム $\|\psi\|$ をもとめよ。

8.3 多電子系の波動関数：Pauli の排他原理

簡単のためスピンもたない同種粒子の2体系を考えよう。2粒子の各々が状態 $\phi_1(\mathbf{x})$ と $\phi_2(\mathbf{x})$ にある状態として

$$\Psi = \phi_1(\mathbf{x}_1)\phi_2(\mathbf{x}_2) \quad (8.15)$$

が考えられる。しかし、素粒子はそれぞれの個性がないのだから、 $\mathbf{x}_1$ と $\mathbf{x}_2$ をいれかえても同じ状態に

移らなければならない。そこでそのような状態として、次の二つが考えられる。

$$\Psi_{\text{対称}} = \phi_1(\mathbf{x}_1)\phi_2(\mathbf{x}_2) + \phi_2(\mathbf{x}_1)\phi_1(\mathbf{x}_2)$$

$$\Psi_{\text{反対称}} = \phi_1(\mathbf{x}_1)\phi_2(\mathbf{x}_2) - \phi_2(\mathbf{x}_1)\phi_1(\mathbf{x}_2)$$

(8.16)

$\Psi_{\text{反対称}}$ のほうはいつも行列式を使って

$$\Psi_{\text{反対称}} = \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{x}_1) & \phi_1(\mathbf{x}_2) \\ \phi_2(\mathbf{x}_1) & \phi_2(\mathbf{x}_2) \end{vmatrix} \quad (8.17)$$

とかけ、 $\mathbf{x}_1$ と $\mathbf{x}_2$ をいれかえると、符号が変わる。また $\phi_1 = \phi_2$ だと0になる。

電子の2体系ではスピンを考慮しなければならない。2つの電子が、状態 $\phi_1(\mathbf{x}, \xi)$ と $\phi_2(\mathbf{x}, \xi)$ にある状態として

$$\Psi_{\text{対称}} = \phi_1(\mathbf{x}_1, \xi_1)\phi_2(\mathbf{x}_2, \xi_2) + \phi_2(\mathbf{x}_1, \xi_1)\phi_1(\mathbf{x}_2, \xi_2)$$

$$\Psi_{\text{反対称}} = \phi_1(\mathbf{x}_1, \xi_1)\phi_2(\mathbf{x}_2, \xi_2) - \phi_2(\mathbf{x}_1, \xi_1)\phi_1(\mathbf{x}_2, \xi_2)$$

(8.18)

が考えられる。

Pauli の排他原理は「二つの電子が同じ状態を占めることはできない」と主張する。いいかえると、二つの電子の座標 $(\mathbf{x}_1, \xi_1)$ と $(\mathbf{x}_2, \xi_2)$ が同じとき、波動関数は0になる。あるいは、座標 $(\mathbf{x}_1, \xi_1)$ と $(\mathbf{x}_2, \xi_2)$ を入れ替えるとき、状態関数の符号が変わる。したがって2電子の波動関数は $\Psi_{\text{反対称}}$ でなければならないことになる。すなわち2電子の規格化された波動関数は

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \xi_1, \mathbf{x}_2, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{x}_1, \xi_1) & \phi_1(\mathbf{x}_2, \xi_2) \\ \phi_2(\mathbf{x}_1, \xi_1) & \phi_2(\mathbf{x}_2, \xi_2) \end{vmatrix} \quad (8.19)$$

である。

8.4 素粒子のスピン、Fermi 粒子と Bose 粒子

粒子の座標の入れ替えに際して、対称な波動関数で記述される粒子を Bose 粒子、反対称な波動関数で記述される粒子を Fermi 粒子とよぶ。

相対論的な場の量子論からの重要な帰結として、スピンが整数スピンをもつ粒子は Bose 粒子であり、(整数 $+\frac{1}{2}$) のスピンを持つ粒子は Fermi 粒子になる。これが 1940 年に P a u l i が発見したスピンと統計との関係である。

例題素粒子はどんなスピンの大きさをもつだろうか。またそれらを Fermi 粒子と Bose 粒子に分類せよ。

8.5 電子の全角運動量

1 個の電子が中心力の中にあるとしよう。このときの角運動量はスピンもあるので、

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (8.20)$$

となる。いま力には関係ないとして、 ℓ は決まった値をとるとしよう。電子の持つ全角運動量は大きさがそれぞれ ℓ と $\frac{1}{2}$ の 2 種の角運動量から作られるものになる。したがって、 $(2\ell+1) \times 2$ だけの状態

$$|\ell, m\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \xi\rangle \quad (8.21)$$

のなかから、つぎの固有値方程式をみたす全角運動量の固有状態

$$|\ell, \frac{1}{2}; j, j_z\rangle \text{ あるいは } ||j, j_z\rangle \quad (8.22)$$

を見つけることができるはずである。

$$J^2 ||j, j_z\rangle = j(j+1)\hbar ||j, j_z\rangle \quad (8.23)$$

$$J_z ||j, j_z\rangle = j_z \hbar ||j, j_z\rangle \quad (8.24)$$

J^2 の固有値 $j(j+1)$ をもつ状態はかならず J_z の固有値

$$j_z = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (8.25)$$

をもつ $(2j+1)$ 次元の空間をなすはずである。

また $|\ell, m\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \xi\rangle$ は J_z の固有値 $m + \xi$ に属する固有状態である。

これだけの手がかりから、以下のようにして全角運動量の固有状態を見つけ出そう。

まず、 J_z の固有値

$$-\ell - \frac{1}{2}, -\ell + \frac{1}{2}, \dots, \ell - \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}$$

に属する固有状態の数をかぞえ、次の表になる。

j_z	Multiplicity
$-\ell - \frac{1}{2}$	1
$-\ell + \frac{1}{2}$	2
$-\ell + \frac{3}{2}$	2
$\dots$	$\dots$
$\ell - \frac{3}{2}$	2
$\ell - \frac{1}{2}$	2
$\ell + \frac{1}{2}$	1

そこで状態

$$\psi = |\ell, \ell\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \quad (8.26)$$

は必然的に

$$\psi = ||\ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}\rangle \quad (8.27)$$

でもある。これに J_- を順次作用させて

$$||\ell + \frac{1}{2}, -(\ell + \frac{1}{2})\rangle = |\ell, -\ell\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad (8.28)$$

までを作っていくことができる。この個数は $2\ell+2$ である。残りの 2ℓ 次元について、 J_z の固有値をしらべると、 $-\ell + \frac{1}{2}, \dots, \ell - \frac{1}{2}$ であり、ちょうど、 $j = \ell - \frac{1}{2}$ の状態の数に一致する。

例題

1. 状態 $||\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle$ をもとめよ。規格化すること。

2. つぎに、 $||\ell - \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle$ をもとめよ。やはり規格化すること。

こうして、可換な 2 種類の角運動量 ℓ と $\frac{1}{2}$ とから、合成された角運動量 $\ell + \frac{1}{2}$ と $\ell - \frac{1}{2}$ を作

ることができ、このことは記号的に

$$\ell \otimes \frac{1}{2} \longrightarrow (\ell + \frac{1}{2}) \oplus (\ell - \frac{1}{2}) \quad (8.29)$$

のようにかきあらわせる。

例題より一般に $J_z = m + \frac{1}{2}$ の状態は独立なものが2つある。

1. それらの1次結合

$$\alpha|\ell, m\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \beta|\ell, m+1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad (8.30)$$

が $j = \ell + \frac{1}{2}$ をもつとして、 α, β をさだめよ。
 $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ と規格化しておくこと。

2. また $j = \ell - \frac{1}{2}$ をもつとして、 α, β をさだめよ。

(答え)

$$\begin{aligned} &||\ell + \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}\rangle\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\ell + m + 1}{2\ell + 1}}|\ell, m\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{\ell - m}{2\ell + 1}}|\ell, m+1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad (8.31) \end{aligned}$$

$$\text{ここで、} m = \ell, \ell - 1, \dots, -\ell - 1 \quad (8.32)$$

$$\begin{aligned} &||\ell - \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}\rangle\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\ell - m}{2\ell + 1}}|\ell, m\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ &- \sqrt{\frac{\ell + m + 1}{2\ell + 1}}|\ell, m+1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad (8.33) \end{aligned}$$

$$\text{ここで } m = \ell - 1, \ell - 2, \dots, -\ell \quad (8.34)$$

8.6 角運動量の合成

一般的に大きさ ℓ_1 と ℓ_2 の可換な二つの角運動量 L_1 と L_2 を合成して、全角運動量 $J = L_1 + L_2$ の固有状態をつくろう。前節では、大きさ ℓ と $\frac{1}{2}$ の軌道角運動量とスピン角運動量を合成したが、今回も J_z の固有値とその多重度をしらべてみよう。

j_z	Multiplicity
$-\ell_1 - \ell_2$	1
$-\ell_1 - \ell_2 + 1$	2
...	...
$-\ell_1 + \ell_2$	$2\ell_2 + 1$
...	...
$\ell_1 - \ell_2$	$2\ell_1 + 1$
$\ell_1 - \ell_2 + 1$	$2\ell_2$
...	...
$\ell_1 + \ell_2 - 1$	2
$\ell_1 + \ell_2$	1

今のばあい、大きさ

$$\ell_1 + \ell_2, \ell_1 + \ell_2 - 1, \dots, |\ell_1 - \ell_2|$$

の合成角運動量の状態がそれぞれ一回ずつ現れることがみてとれる。すなわち、角運動量の合成則は記号的に、

$$\ell_1 \otimes \ell_2 \longrightarrow (\ell_1 + \ell_2) \oplus (\ell_1 + \ell_2 - 1) \oplus \dots \oplus |\ell_1 - \ell_2| \quad (8.35)$$

のようにかきあらわせる。

例題

1. 二つの独立（可換）な角運動量演算子 L, S がありそれらの和を $J = L + S$ とする。 L, S の大きさ ℓ, s が与えられているとき、 J の大きさ j の可能な値をもとめよ。

(答え) $j = |\ell - s|, |\ell - s| + 1, \dots, \ell + s$ が1度ずつあらわれる。

2. 多粒子の結合状態を1個の粒子とみなすと、そのなかに Fermi 粒子が奇数個含まれるときだけ、全体が Fermi 粒子になる。それ以外のときは Bose 粒子になる。このことを角運動量の合成則からしめせ。

8.7 演習問題

8.7.1 スピン角運動量

1. Pauli のスピン行列 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ がつぎの関係式を満たすことをしめせ。

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I \quad (8.36)$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad (8.37)$$

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}I + i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad (8.38)$$

ここで ϵ_{ijk} は 3 次元 Levi-Civita 記号、式の各項について二度現れる添字については和の記号を略するものとする (Einstein の規約)。たとえば a_ib_i は $\sum_{i=1}^3 a_ib_i$ のことである。

2. 考えている系の角運動量を $\mathbf{J}$ とし、その大きさが $j = \frac{1}{2}$ のとき、次の空間回転を表す unitary 行列を求めよ。

- (a) x 軸のまわりの角度 α の空間回転の演算子

$$R_x(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_x}$$

- (b) y 軸のまわりの角度 β の空間回転の演算子

$$R_y(\beta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_y}$$

- (c) z 軸のまわりの角度 γ の空間回転の演算子

$$R_z(\gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{J}_z}$$

- (d) 角度ベクトル $\boldsymbol{\theta} = (\alpha, \beta, \gamma)$ に関する空間回転の演算子

$$R(\boldsymbol{\theta}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\theta}\mathbf{J}} \quad (8.39)$$

3. (*) 空間回転を Euler 角 (ψ, θ, ϕ) で parametrize して

$$R(\psi, \theta, \phi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\psi\hat{J}_z}e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{J}_y}e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\hat{J}_x} \quad (8.40)$$

とし、角運動量 $\mathbf{J}$ の固有状態を $|j, m\rangle$ と書けば、その行列要素は

$$\begin{aligned} \langle j, m | R(\psi, \theta, \phi) | j, m' \rangle &= e^{-im\psi - im'\phi} d_{mm'}^{(j)}(\theta) \\ d_{mm'}^{(j)}(\theta) &= \langle j, m | e^{-i\theta\hat{J}_y} | j, m' \rangle \end{aligned}$$

となる。 $j = \frac{1}{2}$ の場合についてこれらの行列要素を計算せよ。

8.7.2 電子の波動関数

例題 spin を考慮したときの電子の 2 成分の波動関数

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (8.41)$$

のノルム $\|\psi\|$ をもとめよ。

8.7.3 多電子系の波動関数：Pauli の排他原理

Pauli の排他原理は「二つの電子が同じ状態を占めることはできない」と主張する。いいかえると、二つの電子の座標 $(\mathbf{x}_1, \xi_1)$ と $(\mathbf{x}_2, \xi_2)$ が同じとき、波動関数は 0 になる。あるいは、座標 $(\mathbf{x}_1, \xi_1)$ と $(\mathbf{x}_2, \xi_2)$ を入れ替えるとき、状態関数の符号が変わる。したがって 2 電子の波動関数は $\Psi_{\text{反対称}}$ でなければならないことになる。すなわち 2 電子の規格化された波動関数は

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \xi_1, \mathbf{x}_2, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{x}_1, \xi_1) & \phi_1(\mathbf{x}_2, \xi_2) \\ \phi_2(\mathbf{x}_1, \xi_1) & \phi_2(\mathbf{x}_2, \xi_2) \end{vmatrix} \quad (8.42)$$

である。それでは 2 個以上の電子の波動関数について考えよう。

1. 電子の 1 粒子状態 $\phi(\mathbf{x}, \xi)$ を簡単に ϕ とかくとき、 n 個の電子が n 個の状態 $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{n-1}, \phi_n$ を占めている状態を行列式をつかって、あらわす。 ϕ がノルム 1 に規格化されているときには n 粒子状態をどのように規格化すればよいか。

8.7.4 素粒子のスピン、Fermi 粒子と Bose 粒子

例題 素粒子はどんなスピンの大きさをもつだろうか。またそれらを Fermi 粒子と Bose 粒子に分類せよ。

8.7.5 電子の全角運動量

1. 軌道角運動量とスピン角運動量について、

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(L_+S_- + L_-S_+) + L_zS_z$$

をしめせ。

2. 電子について軌道角運動量の大きさが
- ℓ
- であるとき、

$$\mathbf{J}^2 = \ell(\ell+1) + \frac{3}{4} + L_+S_- + L_-S_+ + 2L_zS_z$$

が成り立つことをしめせ。

- 3.

$$|\ell, \ell\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \left|\ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}\right\rangle \quad (8.43)$$

であることに着目して、これに J_- を作用させることにより、規格化された状態 $|\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle$ をもとめよ。

(答え)

$$\begin{aligned} & \left|\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}} |\ell, \ell-1\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{1}{2\ell+1}} |\ell, \ell\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \quad (8.44) \end{aligned}$$

4. うえでもとめた状態
- $|\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle$
- に直交するという条件を使って、
- $|\ell - \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle$
- をもとめよ。

(答え)

$$\begin{aligned} & \left|\ell - \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\ell+1}} |\ell, \ell-1\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ &- \sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}} |\ell, \ell\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \quad (8.45) \end{aligned}$$

- 5.
- $J_z = m + \frac{1}{2}$
- の状態

$$\alpha|\ell, m\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \beta|\ell, m+1\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \quad (8.46)$$

は $j = \ell + \frac{1}{2}$ と $j = \ell - \frac{1}{2}$ との1次結合になっている。 $j = \ell + \frac{1}{2}$ の状態をもとめよ。すなわち、そのときの α, β を $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ として、さだめよ。

(答え)

$$\begin{aligned} & \left|\ell + \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}\right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\ell+m+1}{2\ell+1}} |\ell, m\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{\ell-m}{2\ell+1}} |\ell, \ell\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \quad (8.47) \end{aligned}$$

6. 同様に
- $j = \ell - \frac{1}{2}$
- になるように
- α, β
- をさだめよ。

(答え)

$$\begin{aligned} & \left|\ell + \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}\right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\ell-m}{2\ell+1}} |\ell, m\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ &+ -\sqrt{\frac{\ell+m+1}{2\ell+1}} |\ell, \ell\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \quad (8.48) \end{aligned}$$

8.7.6 角運動量の合成

一般的に大きさ ℓ_1 と ℓ_2 の可換な角運動量を合成する規則は、記号的に、

$$\ell_1 \otimes \ell_2 \longrightarrow (\ell_1 + \ell_2) \oplus (\ell_1 + \ell_2 - 1) \oplus \dots \oplus |\ell_1 - \ell_2| \quad (8.49)$$

のようにかきあらわせる。

1. 軌道角運動量 $\mathbf{L}$ とスピン角運動量 $\mathbf{S}$ があるとき、それらの和を $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ とする。 $\mathbf{L}, \mathbf{S}$ の大きさ ℓ, s が与えられているとき、 $\mathbf{J}$ の大きさ j の可能な値をもとめよ。(答え) $j = |\ell - s|, |\ell - s| + 1, \dots, \ell + s$ が1度ずつあらわれる。

2. 大きさ ℓ_1 と ℓ_2 の可換な角運動量を合成して、整数の角運動量が得られるときは、 ℓ_1 と ℓ_2 がどのような量のときか？
3. 大きさ ℓ_1 と ℓ_2 の可換な角運動量を合成して、(整数 $+\frac{1}{2}$) の角運動量が得られるときは、 ℓ_1 と ℓ_2 がどのような量のときか？
4. 多粒子の結合状態を1個の粒子とみなすと、そのなかに Fermi 粒子が奇数個含まれるときだけ、全体が Fermi 粒子になる。それ以外の場合は Bose 粒子になる。このことを角運動量の合成則からしめせ。
5. 二つの電子のスピン合成スピンの大きさが、0 または 1 であることをしめせ。
6. 二つの電子のスピン合成スピンの大きさのそれぞれのばあいについて、合成スピンの固有関数をもとめよ。
7. スピン $\frac{1}{2}$ をもつ粒子が軌道角運動量の大きさ $\ell = 1$ をもつとき、全角運動量の固有ベクトル $|j, m\rangle$ をもとめよ。
8. スピンをもたない二粒子がおのおの軌道角運動量 1 をもつとき、この系の回転不変な状態 $|1, 1; 0, 0\rangle$ を求めよ。

(答) $\frac{1}{\sqrt{3}}(|\downarrow\downarrow\rangle - |\rightarrow\rightarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)$

または

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(|-1\rangle \otimes |1\rangle - |0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |-1\rangle)$$

(参考)

$$|\ell, \frac{1}{2}; \ell + \frac{1}{2}, m\rangle = \frac{\sqrt{\ell + \frac{1}{2} + m}}{\sqrt{2\ell + 1}} Y_{\ell, m-\frac{1}{2}} |\uparrow\rangle + \frac{\sqrt{\ell + \frac{1}{2} - m}}{\sqrt{2\ell + 1}} Y_{\ell, m+\frac{1}{2}} |\downarrow\rangle$$

$$\text{ここで、} m = \ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}, \dots, -\ell - \frac{1}{2} \quad (8.50)$$

$$|\ell, \frac{1}{2}; \ell - \frac{1}{2}, m\rangle = \frac{\sqrt{\ell + \frac{1}{2} - m}}{\sqrt{2\ell + 1}} Y_{\ell, m-\frac{1}{2}} |\uparrow\rangle - \frac{\sqrt{\ell + \frac{1}{2} + m}}{\sqrt{2\ell + 1}} Y_{\ell, m+\frac{1}{2}} |\downarrow\rangle$$

ここで、 $m = \ell - \frac{1}{2}, \dots, -\ell + \frac{1}{2}$ (8.51)

9 水素様原子

9.1 水素様原子

Potential

$$-\frac{Ze^2}{r} \quad (9.1)$$

の中に1個の電子が束縛されているときの問題を考える。水素原子にたいしてえられた結果で

$$e^2 \longrightarrow Ze^2 \quad (9.2)$$

の置き換えをすればよいから、原子半径は

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} \longrightarrow \frac{a_B}{Z} \quad (9.3)$$

にかわる。エネルギー順位は

$$E_n = -\frac{Z^2 me^4}{2\hbar^2 n^2} = -13.6\text{eV} \times \frac{Z^2}{n^2} \quad (9.4)$$

これは $Z=1$ のときと比べて、potential が Z 倍に、平均半径が $(1/Z)$ 倍になることからわかる。

動径部分の波動関数では

$$a = \frac{a_B}{Z} \quad (9.5)$$

$$\rho = \frac{2Z}{na_B} r \quad (9.6)$$

の置き換えをする必要がある。動径部分の規格化された波動関数を $R_{n\ell}^Z(r)$ と記すと、

$$R_{n\ell}^Z(r) = \frac{2}{n^2(2\ell+1)!} \sqrt{\left(\frac{Z}{a_B}\right)^3} \sqrt{\frac{(n+\ell)!}{n_r!}} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^\ell F(-n_r, 2\ell+2, \rho)$$

ここで

$$\rho = \frac{2Z}{na_B} r \quad (9.7)$$

$$n_r = n - \ell - 1 \quad (9.8)$$

を代入しなければならない。水素原子の場合と比べると、動径方向に $\frac{1}{Z}$ 倍に縮まり、規格化定数が $\sqrt{Z^3}$ 倍になるだけである。

Laguerre の多項式の部分では、最初の数例がつきようになる。

$$F(0, 2\ell+2, \rho) = 1 \quad (9.9)$$

$$F(-1, 2\ell+2, \rho) = 1 - \frac{1}{2\ell+2} \rho \quad (9.10)$$

$$F(-2, 2\ell+2, \rho) = 1 - \frac{2}{2\ell+2} \rho + \frac{1}{(2\ell+2)(2\ell+3)} \rho^2 \quad (9.11)$$

たとえば s 状態では、

$$t = \frac{r}{a_B}, \rho = \frac{2}{n} t \quad (9.12)$$

の置き換えをした上で、 $\ell=0$ とすると、

$$R_{n,0}^Z(r) = 2 \sqrt{\left(\frac{Z}{na_B}\right)^3} e^{-\frac{Zt}{n}} F(-(n-1), 2, \frac{2Zt}{n}) \quad (9.13)$$

となる。これを用いて次の問題を解こう。

例題

1. 水素 3 の原子が基底状態にあるとき、原子核がベータ崩壊して、ヘリウム 3 の 1 価イオンに変わった。このとき、ヘリウム原子のどの状態が残されるか考えてみよう。 $R_{n,0}^Z(r)$ の式で水素原子では、

$$R_{1,0}^1(r) = (a_B)^{-\frac{3}{2}} 2e^{-t} \quad (9.14)$$

ヘリウム原子では、

$$\begin{aligned} R_{1,0}^2(r) &= (a_B)^{-\frac{3}{2}} 4\sqrt{2}e^{-2t} \\ R_{2,0}^2(r) &= (a_B)^{-\frac{3}{2}} 2e^{-t}(1-t) \\ R_{3,0}^2(r) &= (a_B)^{-\frac{3}{2}} \frac{4\sqrt{6}}{9} e^{-\frac{2}{3}t} \left(1 - \frac{4}{3}t + \frac{8}{27}t^2\right) \end{aligned} \quad (9.15)$$

- (a) 1s 状態に残される確率をもとめよ。

(答え)

$$(\phi_{1s}^{He}, \phi_{1s}^H) = \frac{16\sqrt{2}}{27} \quad (9.16)$$

確率は $(\frac{8}{9})^3$ である。

(b) 2s 状態に残される確率をもとめよ。

$$(\phi_{2s}^{He}, \phi_{1s}^H) = -\frac{1}{2} \quad (9.17)$$

確率は $\frac{1}{4}$ である。

(c) 3s 状態に残される確率をもとめよ。

$$(\phi_{3s}^{He}, \phi_{1s}^H) = -\frac{2^4 3^2 \sqrt{6}}{5^5} \quad (9.18)$$

確率は $\frac{2^9 3^5}{5^{10}}$ すなわち、0.0127 である。

2. 原子番号 Z の水素原子型のイオン

($\text{He}^+, \text{Li}^{++}, \text{Be}^{+++}, \dots$)

の基底状態の波動関数が $r = |\mathbf{x}|$ かつ、 α を定数として、

$$\psi(\mathbf{x}) = e^{-\alpha r} \quad (9.19)$$

の形を持つことを仮定して、つぎの問いにこたえよ。

(a) α はいくつか? (答え $\frac{Z}{a_B}$)

(b) そのエネルギーはいくらか?

(c) $r^p, p = -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots$ の期待値を求めよ。(答え $\langle r^p \rangle = (\frac{a_B}{2Z})^p \frac{(p+2)!}{2}$)

(ヒント)

$$\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n!$$

なお一般に次の結果がわかっている。

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2 n^4 \left[1 + \frac{3}{2} \left\{1 - \frac{\ell(\ell+1) - \frac{1}{3}}{n^2}\right\}\right]$$

$$\langle r \rangle = \left(\frac{a_B}{Z}\right) n^2 \left[1 + \frac{1}{2} \left\{1 - \frac{\ell(\ell+1)}{n^2}\right\}\right] \quad (9.20)$$

$$\langle r^{-1} \rangle = \left(\frac{Z}{a_B}\right) \frac{1}{n^2} \quad (9.21)$$

$$\langle r^{-2} \rangle = \left(\frac{Z}{a_B}\right)^2 \frac{1}{n^3 \left(\ell + \frac{1}{2}\right)} \quad (9.22)$$

$$\langle r^{-3} \rangle = \left(\frac{Z}{a_B}\right)^3 \frac{1}{n^3 \ell \left(\ell + \frac{1}{2}\right) (\ell + 1)} \quad (9.23)$$

9.2 スピン軌道相互作用

エネルギー準位の式

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13.6\text{eV} \times \frac{Z^2}{n^2} \quad (9.24)$$

で、微細構造定数

$$\frac{e^2}{\hbar c} = \alpha \approx \frac{1}{137} \quad (9.25)$$

をつかうと、

$$\frac{E_n}{mc^2} = -\frac{Z^2 \alpha^2}{2n^2} \quad (9.26)$$

とかけることには注意しておこう。電子の結合エネルギーは静止エネルギーに比べると、 $\alpha^2 = 5. \times 10^{-5}$ 程度の大きさになる。

軌道角運動量がある状態では、電子が核のクーロン力の中を回転しているから、特殊相対論の効果でその電子は

$$\mathbf{B} = -\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} \quad (9.27)$$

だけの磁場を感じ取る。

【MKS 単位系では c を c^2 とおきかえること。】

核のクーロン力は静電ポテンシャル ϕ をつかって一般に

$$\mathbf{E} = -\frac{d\phi}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (9.28)$$

としておこう。そこで電子の感じる磁場は

$$\mathbf{B} = -\mathbf{r} \times \frac{\mathbf{p}}{mc^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \quad (9.29)$$

となる。ところで電子はスピンの磁気能率

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{m} \mathbf{S} \quad (9.30)$$

をもっている。

【MKS 系では m を mc でおきかえること。】

したがってこの磁場の中で Zeeman 効果のエネルギー

$$-\vec{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (9.31)$$

が生じるはずである。ところが正しくはこの半分の

$$H'_{SO} = -\frac{e}{m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \times \frac{1}{2} \quad (9.32)$$

となる。ここで最後の $\frac{1}{2}$ は Thomas の $\frac{1}{2}$ 因子と呼ばれ、Dirac 方程式からは正しく導かれる。

このように軌道電子はスピン-軌道結合のエネルギー

$$H'_{SO} = f(r)(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) \quad (9.33)$$

$$f(r) = -\frac{e}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \quad (9.34)$$

をもつ。水素様原子では、 $\phi(r) = \frac{Ze}{r}$ だから

$$f(r) = \frac{Ze^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \quad (9.35)$$

となる。 $\ell \neq 0$ のときの期待値

$$\langle n\ell | \frac{1}{r^3} | n\ell \rangle = \frac{1}{\ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)n^3} \left(\frac{Z}{a_B} \right)^3 \quad (9.36)$$

および

$$\begin{aligned} & \langle j\ell | (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) | j\ell \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \left\{ j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right\} \end{aligned} \quad (9.37)$$

を使って水素様原子のスピン-軌道結合によるエネルギーのずれを計算できる。 $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ にたいしては、

$$\begin{aligned} & \langle j\ell | (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) | j\ell \rangle \\ &= \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2}(\ell) & (j = \ell + \frac{1}{2} \text{ のとき}) \\ \frac{\hbar^2}{2}(-\ell - 1) & (j = \ell - \frac{1}{2} \text{ のとき}) \end{cases} \end{aligned} \quad (9.38)$$

この項のために $\mathbf{L}$ と $\mathbf{S}$ が反平行のときにエネルギーがさがる。

これから水素原子のエネルギーの微細構造を与える式

$$H'_{SO} = \left(\frac{E_n^2}{mc^2} \right) n \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}}{\ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)} \quad (9.39)$$

が求まる。

$$\left(\frac{E_n^2}{mc^2} \right) = mc^2 \times \frac{Z^4 \alpha^4}{4n^4}$$

だからこのエネルギーは α^2 がかることにより、さらに微細になる。

9.3 特殊相対論の効果

相対論的エネルギー $E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$ の $\frac{1}{c}$ に
よる展開

$$mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \dots \quad (9.40)$$

の代 3 項が水素様原子に与える摂動

$$\begin{aligned} H'_{rel} &= -\frac{p^4}{8m^3 c^2} \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 \end{aligned} \quad (9.41)$$

の寄与を計算してみよう。

$$\left(\frac{p^2}{2m} \right) \psi_{n\ell m} = \left(\hat{H} + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi_{n\ell m} \quad (9.42)$$

$$= \left(E_n + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi_{n\ell m} \quad (9.43)$$

だから

$$\begin{aligned} & \left\| \left(\frac{p^2}{2m} \right) \psi_{n\ell m} \right\|^2 = \\ & \left(\psi_{n\ell m}, \left(E_n^2 + \frac{2E_n Ze^2}{r} + \frac{Z^2 e^4}{r^2} \right) \psi_{n\ell m} \right) \\ &= E_n^2 + 2E_n Ze^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + Z^2 e^4 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \end{aligned} \quad (9.44)$$

ここで、 $\langle \dots \rangle$ は $\psi_{n\ell m}$ での期待値をしめす。

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{n^2 a_B} \quad (9.46)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{(\ell + \frac{1}{2})n^3 a_B^2} \quad (9.47)$$

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2a_B} \frac{1}{n^2} \quad (9.48)$$

をつかうと、

$$\langle H'_{rel} \rangle = \frac{E_n^2}{mc^2} \left(\frac{3}{2} - \frac{2n}{\ell + \frac{1}{2}} \right) \quad (9.49)$$

前節でもとめたスピン軌道相互作用と同じ order になる。両者を合計すると、次の微細構造を与える式がえられる。

$$E_{fs} = \left(\frac{E_n^2}{mc^2} \right) \left(\frac{3}{2} - \frac{2n}{j + \frac{1}{2}} \right) \quad (9.50)$$

例題 $\langle H'_{SO} \rangle + \langle H'_{rel} \rangle = E_{fs}$ となることを示せ。

(解) $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ にたいして、

$$n \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}}{\ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell+1)} + \frac{2n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{2n}{\ell + \frac{1}{2}} = 0 \quad (9.51)$$

を示せばよい。そのために因数 $(j - \ell)^2 - \frac{1}{4}$ をくくりだせることを示せばよい。

例題 水素原子のエネルギーの縮退はどのように取り除かれるか？

(解) n と j によって、エネルギーがきまる。これまで縮退していた E_n は n 本のレベル

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - \frac{1}{2}$$

にわかれる。

$\ell = j + \frac{1}{2}$ と $\ell = j - \frac{1}{2}$ の 2 重の縮退はまだのこる。各状態を $(n\ell_j)$ のように記すと

$$\begin{aligned} 1s_{\frac{1}{2}} &<< \\ 2s_{\frac{1}{2}} = 2p_{\frac{1}{2}} &< 2p_{\frac{3}{2}} << \\ 3s_{\frac{1}{2}} = 3p_{\frac{1}{2}} &< 3p_{\frac{3}{2}} = 3d_{\frac{3}{2}} < 3d_{\frac{5}{2}} << \\ 4s_{\frac{1}{2}} &\dots \end{aligned} \quad (9.52)$$

例題 E_{fs} は mc^2 に比して Z と α の何次の order であるか。

(解)

$$\frac{E_n^2}{mc^2} = mc^2 \frac{Z^4 \alpha^4}{4n^4} \quad (9.53)$$

したがって、 mc^2, E_n, E_{fs} は順に $Z^2 \alpha^2$ ずつ order があがる。

参考 Dirac の相対論的量子論によればクーロン場のなかのエネルギー順位は厳密にとけて、

$$E_{nj} = mc^2 \times \frac{a}{\sqrt{1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{\nu^2}}}$$

$$\begin{aligned} \nu &= n + \sqrt{k^2 - Z^2 \alpha^2} - k \\ k &= j + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (9.54)$$

例題

Dirac の相対論的量子論の結果の $Z^4 \alpha^4$ の項がまさしく E_{fs} となることをしめせ。

9.4 超微細構造：核スピンの影響

原子核のスピン I に伴う磁気モーメント $\vec{\mu}$ が作る双極子磁場のなかで電子のスピン双極子モーメントがもつエネルギーによっても、水素様原子のエネルギーに変化が生じる。 $Z = 1$ とし、原子核は陽子であるとする。

$$\vec{\mu} = g_p \cdot \frac{e}{2m_p} \mathbf{I} \quad (9.55)$$

と書くとき、 $g_e = 2.0$ であるのに対して $g_p = 5.6$ の値をとる。これは陽子がハドロンであり、クォークの束縛状態であることによる。これによる水素原子の基底状態のエネルギー変化は、

$$E_{hf} = \frac{4g_p \hbar^4}{3m_p m_e^2 c^2 a_B^4} \cdot \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{for spin-spin triplet state} \\ -\frac{3}{4} & \text{for spin-spin singlet state} \end{cases} \quad (9.56)$$

となり、基底状態の縮退がとれ、エネルギー間隔

$$\Delta E_{hp} = 5.88 \times 10^{-6} \text{ eV} \quad (9.57)$$

を生じる。この間の遷移は波長 21cm のマイクロウェーブ輻射を放出する。これが宇宙空間にあまねく存在することが、水素原子の豊富さをしめすので重要である。

例題 mc^2 に比べて水素原子の超微細構造が

$$\alpha^4 \frac{m_e}{m_p}$$

のオーダーであることをしめせ。

10 多電子原子と元素の周期律

10.1 Helium 様原子：摂動の 1 次

ここでは、Helium 原子のほか、一般に、 $\text{Li}^+, \text{Be}^{++}, \dots$ などのイオンも考えることにしよう。2 電子が質量数 Z の原子核のクーロン力を受ける系のハミルトニアンは次の二つの項の和になる。

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} \quad (10.1)$$

$$\hat{V} = \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \quad (10.2)$$

まず非摂動系の基底状態の波動関数を考えよう。エネルギーを最低にするために軌道部分が対称になるから、スピン部分は反対称になり、 $S=0$ のシンプレット状態をなす。

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (10.3)$$

1 電子の $1s$ 状態の波動関数の動径部分は、

$$R_{1,0}^Z(r) = 2\sqrt{\left(\frac{Z}{a_B}\right)^3} e^{-\frac{Zr}{a_B}}$$

だから 2 電子の状態は

$$U^Z(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{4\pi} 4 \left(\frac{Z}{a_B}\right)^3 e^{-\frac{Z}{a_B}(r_1+r_2)} \quad (10.4)$$

これが固有値方程式

$$\hat{H}_0 U^Z(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = E_0 U^Z(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \quad (10.5)$$

$$\begin{aligned} E_0 &= -\frac{Z^2 e^2}{2a_B} \times 2 \\ &= -Z^2 \times 27.2\text{eV} \end{aligned} \quad (10.6)$$

をみtas。摂動の 1 次ではスピン状態は無視できて、の寄与は

$$\begin{aligned} \Delta E_0 &= \langle U^Z | \hat{V} | U^Z \rangle = \\ &= \frac{16}{(4\pi)^2} \left(\frac{Z}{a_B}\right)^6 \int e^{-\frac{2Z}{a_B}(r_1+r_2)} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \end{aligned} \quad (10.7)$$

をあたえる。変数変換

$$\mathbf{s}_1 = \left(\frac{2Z}{a_B}\right) \mathbf{x}_1 \quad (10.8)$$

$$\mathbf{s}_2 = \left(\frac{2Z}{a_B}\right) \mathbf{x}_2 \quad (10.9)$$

をおこなおう。

$$\begin{aligned} \Delta E_0 &= \frac{16e^2}{(4\pi)^2} \left(\frac{Z}{a_B}\right)^6 \left(\frac{a_B}{2Z}\right)^5 I \\ &= \frac{Ze^2}{32\pi^2 a_B} I \end{aligned} \quad (10.10)$$

ここで

$$I = \int e^{-(s_1+s_2)} \frac{1}{|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2|} d\mathbf{s}_1 d\mathbf{s}_2 \quad (10.11)$$

$$= (4\pi)^2 \frac{5}{4} \quad (10.12)$$

を使うことにしよう。(詳しくは Griffiths, Quantum Mechanics など参照せよ)

$$\Delta E_0 = \frac{5Ze^2}{8a_B} = -\frac{5}{8}Z \times 27.2\text{eV} \quad (10.13)$$

ヘリウム原子 $Z=2$ のとき

$$E_0 = -108.8\text{eV} \quad (10.14)$$

$$\Delta E_0 = 34\text{eV} \quad (10.15)$$

$$E_0 + \Delta E_0 = -74.8\text{eV} \quad (10.16)$$

に対して実測値は

$$E_{exp} = -78.8\text{eV} \quad (10.17)$$

である。

10.2 変分法による近似

上で求めた非摂動系の固有関数で規格化条件を課したまま Z を変えたものを、 $U^Z(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ とおくと、これはもはや $\hat{H}_0$ の固有状態にはならないが、 $\hat{H}_0 + \hat{V}$ の基底状態に近づく可能性がある。

$$U^Z(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{4\pi} 4 \left(\frac{Z}{a_B}\right)^3 e^{-\frac{Z}{a_B}(r_1+r_2)} \quad (10.18)$$

Z を Z からどれだけずらしたところで、 $\langle U^Z | \hat{H}_0 + \hat{V} | U^Z \rangle$ が最小になるかを調べよう。そのときの期待値が試行関数 U^Z があたえる最良のエネルギーである。ここで $\hat{H}_0 + \hat{V}$ は Z でなくて Z を含んでいることを留意しよう。いまこのハミルトニアンを $\hat{H}^Z$ とかこう。 U^Z は $\hat{H}_0^Z$ の固有値 $E^Z = -\frac{Z^2}{2a_B} \times 2$ に属する固有状態になっている。さらに $\hat{H}^Z$ についての Virial 定理によれば、

$$\begin{aligned} \langle U^Z | \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} | U^Z \rangle &= -E^Z \\ \langle U^Z | -\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} | U^Z \rangle &= -\frac{2Z}{Z} E^Z \\ \langle U^Z | \hat{V} | U^Z \rangle &= \frac{5e^2 Z}{8a_B} \end{aligned}$$

これらを使って、

$$\langle U^Z | \hat{H}^Z | U^Z \rangle = (Z^2 - 2ZZ + \frac{5}{8}Z) \frac{e^2}{a_B}$$

となるので、

$$\frac{\partial}{\partial Z} \langle U^Z | \hat{H}^Z | U^Z \rangle = 0 \quad (10.19)$$

から

$$Z = Z - \frac{5}{16} \quad (10.20)$$

がえられる。このときのエネルギーの最小値は

$$E = -\frac{e^2}{a_B} (Z - \frac{5}{16})^2 \quad (10.21)$$

ヘリウムの場合、

$$E = 77.5 \text{ eV} \quad (10.22)$$

となり、摂動論より優れた結果がえられる。

10.3 オルト状態とパラ状態:交換積分

2 電子原子の励起状態では、まずひとつの電子が 1s 状態をとり、もうひとつが 2s、または、2p 状態をとる場合が考えられる。これをひとまず

$$|1s, 2\ell m\rangle \quad (10.23)$$

と書こう。 $\ell = 0, 1$ $m = -\ell, \dots, \ell$ である。

このとき、スピン波動関数は 2 粒子の取替えに関して、対称 (スピン Triplet)

$$\chi_T = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (10.24)$$

または、反対称 (スピン Singlet)

$$\chi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (10.25)$$

のどちらも可能である。

軌道部分に関して対称と反対称にした 2 電子波動関数を

$$|2\ell m \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1s, 2\ell m\rangle \pm |2\ell m, 1s\rangle) \quad (10.26)$$

とかくことにしよう。左辺では、1s は自明なので、省略して書いてある。

電子はフェルミオンだから全体で反対称になっていなければならないので、

$$|2\ell m -\rangle = \chi_T \quad (10.27)$$

および

$$|2\ell m +\rangle = \chi_S \quad (10.28)$$

の 1 次結合になっていなければならない。エネルギー固有値を摂動論で検討してみよう。

摂動によるエネルギーの縮退がとれる様子は、永年方程式による。ここでは、行列

$$\langle 2\ell m \pm | V | 2\ell' m' \pm \rangle \quad (10.29)$$

の固有値問題を解けばよい。 $|2\ell m \pm\rangle$ の全軌道角運動量は (ℓm) であり、 V は全軌道角運動量と可換なので、この行列要素は対角的である。

$$\langle 2\ell m \pm | V | 2\ell' m' \pm \rangle = \delta_{\ell, \ell'} \delta_{m, m'} v(\ell, m) \quad (10.30)$$

1 電子波動関数との対応は、

$$|2\ell m \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_{1s}(\mathbf{x}_1) \phi_{2\ell m}(\mathbf{x}_2) \pm \phi_{1s}(\mathbf{x}_2) \phi_{2\ell m}(\mathbf{x}_1) \} \quad (10.31)$$

となるので、

$$v(\ell, \pm) = J_\ell \pm K_\ell \quad (10.32)$$

と表せ、 J_ℓ は次のような積分であらわされる。

$$J_\ell = \int \int |\phi_{1s}(\mathbf{x}_1)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} |\phi_{2\ell m}(\mathbf{x}_2)|^2 d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \quad (10.33)$$

一方 K_ℓ のほうは

$$K_\ell = \int \int \phi_{1s}(\mathbf{x}_1)^* \phi_{2\ell m}(\mathbf{x}_2)^* \times \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \phi_{1s}(\mathbf{x}_2) \phi_{2\ell m}(\mathbf{x}_1) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \quad (10.34)$$

前者は明らかに正で 2 電子間の静電エネルギーを表しているが、後者は古典的には説明がつかないもので、交換積分と呼ばれる。

$$J_\ell > K_\ell > 0 \quad (10.35)$$

かなりたつ。 $K_\ell > 0$ であるわけは、 $\frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}$ の因子は $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$ の付近で支配的になり、そこでは J_ℓ の積分と同じ寄与をあたえるからである。こうして、2 電子が $(1s)(2\ell)$ の配位をとる状態では、

$$|2\ell m - \rangle \chi_T : (\text{オルト状態}) \quad (10.36)$$

が低いエネルギーをもち、

$$|2\ell m + \rangle \chi_S : (\text{パラ状態}) \quad (10.37)$$

が高いエネルギーをもつ。

例題 $\ell = 0$ が $\ell = 1$ よりエネルギーが低いことは一般に示せるか？ $J_\ell, K_\ell (\ell = 0, 1)$ の数値積分を求めよ。

10.4 電子の遮蔽効果と元素の周期律

He 原子の基底状態を変分法をつかって解いた時の考えを振り返ってみよう。1 つの電子は原子核から

の引力ともうひとつの電子からの反発力の両方を受ける。それらの合力は平均すると中心力になると仮定しよう。このとき、中心の核の電荷を $Z \rightarrow Z - \frac{5}{16}$ とおきかえその代わり、電子の反発力は無視してもとまる軌道にしたから 2 つ電子がつまったものとして、He 原子の状態をもとめた。

もっと電子の多い原子にもこの考えを適用し、次のような**中心力場の近似**または**平均場の近似**をおこなおう。

Z の電子の各々は核の電荷 $+Ze$ と他の電子の広がった電荷 $-(Z-1)e$ からのクーロン力を受けるが、平均すると中心力になる。このときもはやクーロンポテンシャルではないので、エネルギーレベルは

$$E_{n,\ell}, \quad n = \ell + n_r + 1 \quad (10.38)$$

とラベルされ、1 粒子の波動関数は

$$\psi_{n,\ell,m}(\mathbf{x}, m_s), m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (10.39)$$

となる。

原子の基底状態はしたから Z この軌道がつまったものになる。

外側の (ℓ が大きい) 軌道は遮蔽によってどんどんエネルギーがあがる。それは水素原子の波動関数では n を固定して $\ell = 0, 1, \dots, n-1$ の動径波動関数をくらべると、 ℓ が大きくなると $\langle r \rangle$ は減少するが、一方、遠心力の効果で

$$R(r) \rightarrow r^\ell \quad (10.40)$$

だから、電子が原子核の近くに來なくなる。そこで他の電子の遮蔽をうけて、エネルギーはかえって高くなる。こうして、3d 電子は 4s と 4p の間に入る。また 4d、4f、5f の軌道についても同様な理由でエネルギーが高くなる。こうして 3d、4d 電子と、4f、5f 電子は遷移元素を生じる。f 軌道がつまって行く途中の元素はそれぞれ、4f (ランタノイド)、5f (アクチノイド) である。

詳しい数値計算は Hartree, および Hartree-Fock 近似とよばれる。それによれば

$$n + \ell = 1, 2, 3, \dots \quad (10.41)$$

の順に、またおなじ $n + \ell$ のうちでは、 n が大きくなる順に電子が詰まって行く。そして、($1s$) 軌道と、 p 軌道が満たされたところで大きなエネルギー差が生じ、不活性元素ができる。

例題

1. 元素の周期律表で電子軌道の満たされてゆく順序は各周期ごとに、

1s;
2s,2p;
3s,3p;
4s,3d,4p;
5s,4d,5p;
6s,4f,5d,6p;
7s,5f,...

となる。不活性元素の原子番号を小さいものから順に 6 個記せ。

11 電磁場中の荷電粒子の運動

11.1 電磁場中の荷電粒子のハミルトニアン

電磁場中の荷電粒子のハミルトン関数は電磁場がないときのものからつぎの minimal なおきかえによって得られる.

$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A} \quad (11.1)$$

$$H \longrightarrow H - e\phi \quad (11.2)$$

したがって電磁場以外の力がないときは、

$$H = \frac{1}{2m} \{\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})\}^2 + e\phi(\mathbf{r}) \quad (11.3)$$

例題 一様で一定な磁場 $\mathbf{B}$ のベクトルポテンシャルを $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ ととると、粒子のハミルトニアンが

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e}{2m} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} + \frac{e^2}{8m} \{B^2 r^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})^2\} \quad (11.4)$$

となることをしめせ。ここで $\mathbf{L}$ は粒子の軌道角運動量である。

(ヒント) $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}$ を使え。

11.2 荷電粒子の磁気能率について

磁気能率は磁場の中におかれると、その方向を向くようにトルクをうけるが、それはハミルトニアンに $-\vec{\mu} \cdot \mathbf{B}$ の項が生じるためである。磁気能率の次元は、MKS 単位系では m^2A であり、面積 S の小ループ状電流 I による磁気能率が IS となるように定義される。

質量 m 、電荷 e をもつ粒子が小ループを描いて定常運動をしているとき、軌道角運動量を $\mathbf{L}$ とすると、磁気能率

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m} \mathbf{L} \quad (11.5)$$

をもつことを古典物理学から導くことができる。このことは粒子の軌道運動による磁気回転比が $\frac{e}{2m}$ であるといいかえてもよい。

前の例題でみたように、荷電粒子が軌道角運動量を持つときには量子論でも、 e の 1 次でハミルトニアンに $-\frac{e}{2m} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}$ の項が生じ、おなじことがいえる。 $\mu_{\text{Bohr}} = \frac{|e|\hbar}{2m}$ という単位を **Bohr 磁子 (magneton)** とよぶ。

ところで、電子の電荷を e とするとき ($e < 0$)、そのスピン $\mathbf{S}$ による磁気能率は

$$\vec{\mu} = \frac{e}{m} \mathbf{S} \quad (11.6)$$

となるのが **Dirac の相対論的電子の量子論** によってみちびかれる。

このことは電子のスピン角運動量による磁気回転比が $\frac{e}{m}$ であるということで、古典的な期待の 2 倍になる。

11.3 原子の系の Zeeman 効果

spin を考慮に入れないとき、原子のエネルギー順位は磁気量子数 m により、 $(2\ell+1)$ 重に縮退しているが、磁場の中におかれると、その縮退が解ける。スピンを考慮すると、より複雑な考察が必要になるが、一般に磁場を強くして行くと、縮退しているエネルギー順位が何本かにわかれる。この現象を Zeeman 効果とよぶ。

原子では、 eB の 1 次までとれば十分である。スピンも考慮するため、磁場の中にある荷電粒子はハミルトニアンの付加項

$$\Delta H = -\frac{e}{2m} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \quad (11.7)$$

をもつ。

ここで $\mathbf{L}$ や $\mathbf{S}$ としたのは、水素様原子では 1 電子のものであるが、多電子原子の場合には、最外殻のいくつかの電子が作っている合成のものと考えよう。

水素原子の場合には、 $\mathbf{L}$ $\mathbf{S}$ 結合と相対論効果のためエネルギー順位は微細構造をもち、 n, j に依存するようになり、

$$E_{fs} = \left(\frac{E_n^2}{mc^2} \right) \left(\frac{3}{2} - \frac{2n}{j + \frac{1}{2}} \right) \quad (11.8)$$

で与えられるのであった。

このとき $\ell = j + \frac{1}{2}$ と $\ell = j - \frac{1}{2}$ の 2 重の縮退がのこる。Zeeman 効果による準位の分裂はこの二つの場合に異なった大きさを持つ。 $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ のそれぞれについて、

$$g = 1 \pm \frac{1}{2\ell + 1} \quad (11.9)$$

となることを容易に示すことができる。

一般の多電子原子に対しては、もっと注意深い考察が必要になるが、Zeeman 効果の付加項は

$$\Delta H = -\frac{e\hbar B}{2m_e} g j_z; j_x = -j, -j+1, \dots, j \quad (11.10)$$

のようにまとめられ、 g のことを Lande の分裂因子とよび、

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \quad (11.11)$$

のようにあたえられる。

11.4 Stern-Gerlach の実験

軌道角運動量 ℓ をもつ原子が z 方向をむいた不均一な磁場 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ の中を運動するとき、場所に依存する余分なエネルギー

$$U(\mathbf{x}) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}) \quad (11.12)$$

をもつので、これはポテンシャルエネルギーとおなじ働きをする。簡単のため、不均一な磁場を $\mathbf{B} = (0, 0, B(x))$ と仮定すると原子は次のような力 $(F_x, 0, 0)$ をうける。

$$F_x = \mu_z \frac{dB(x)}{dx} \quad (11.13)$$

ここで、 μ_z は次のような固有値をもつ。

$$\begin{aligned} \mu_z &= g j_z \\ j_z &= j, j-1, \dots, -j \end{aligned} \quad (11.14)$$

その結果、原子のビームは ∇B の方向に $2j+1$ 本にわかれる。この現象は磁気能率をもつ粒子が不均一な磁場の中をすすむとき起きる現象であり、この実験を Stern-Gerlach の実験という。

11.5 波動関数のゲージ変換

$\chi(\mathbf{r}, t)$ をスカラーの関数として、

$$\phi' = \phi + \frac{d\chi}{dt} \quad (11.15)$$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \text{grad} \chi \quad (11.16)$$

としてもおなじ電磁場を生ずる。このように、電磁場を変えないでポテンシャルを変える変換のことをゲージ変換といい、ゲージ変換で結ばれるポテンシャルを**ゲージ同値**であるという。関数 $\chi(\mathbf{r}, t)$ のことをゲージ変換関数と呼ぼう。

このとき、力学における作用と Lagrange 関数は変わるだろうか。Lagrange 関数はあきらかに、

$$\Delta L = -e \frac{d\chi}{dt} - e \mathbf{v} \cdot \nabla \chi \quad (11.17)$$

の変化をうける。径路の始点と終点を A, B とすると、作用の変化は

$$\Delta S = \int_{t_A}^{t_B} \Delta L dt \quad (11.18)$$

$$= -e \int_{t_A}^{t_B} \left(\frac{d\chi}{dt} + \nabla \chi \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt} \right) dt \quad (11.19)$$

$$= -e \{ \chi(B) - \chi(A) \} \quad (11.20)$$

だけの変化をうける。

量子論で Schroedinger 方程式と波動関数がゲージ変換によってどのように変わるかをしらべよう。簡単のため電磁場による以外の力は略するものとする、Schroedinger 方程式と波動関数は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = H \psi \quad (11.21)$$

$$H = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - e\mathbf{A})^2 + e\phi \quad (11.22)$$

そこで波動関数に関する共変微分を

$$D_0 = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{ie}{\hbar} \phi \quad (11.23)$$

$$\mathbf{D} = \nabla - \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A} \quad (11.24)$$

で導入してこれらで Schroedinger 方程式を次のようにかくことができる。

$$i\hbar D_0 \psi = -\frac{\hbar}{2m} \mathbf{D}^2 \psi \quad (11.25)$$

ゲージ変換後の新しいポテンシャル $\phi', \mathbf{A}'$ を使った共変微分は

$$D'_0 = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{ie}{\hbar}\phi' \quad (11.26)$$

$$\mathbf{D}' = \nabla - \frac{ie}{\hbar}\mathbf{A}' \quad (11.27)$$

となるので、新しい波動関数 ψ' は

$$i\hbar D'_0 \psi' = -\frac{\hbar}{2m}(\mathbf{D}')^2 \psi' \quad (11.28)$$

を満たさなくてはならない。

いま時間に依存するユニタリ演算子

$$U(t) = e^{-i\frac{e}{\hbar}\chi(t, \mathbf{x})} \quad (11.29)$$

を使うと、

$$U(t)D_0U(t)^{-1} = D'_0 \quad (11.30)$$

$$U(t)\mathbf{D}U(t)^{-1} = \mathbf{D}' \quad (11.31)$$

が成り立つので、

$$\psi' = U(t)\psi \quad (11.32)$$

が新しい波動方程式の解であることがわかる。すなわち、 $U(t)$ は波動関数のゲージ変換をあたえるユニタリ作用素である。

11.6 一様磁場中の荷電粒子の運動：Landau 準位

磁場を $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, ヴェクトルポテンシャルを

$$\mathbf{A} = (0, Bx, 0) \quad (11.33)$$

とする。ハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m} \{p_x^2 + (p_y - eBx)^2 + p_z^2\} \quad (11.34)$$

まず、 $[H, p_z] = 0$ だから、 p_z の固有値を k_z とすれば、エネルギー固有値には $\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$ が加わり、波動関数には $\exp[\frac{i}{\hbar}k_z z]$ が加わるだけなので、以後、 z の自由度は無視し、

$$H = \frac{1}{2m} \{p_x^2 + (p_y - eBx)^2\} \quad (11.35)$$

としてもよい。さらに $[H, p_y] = 0$ だから p_y を固有値 k_y でおきかえて、 $\omega = \frac{eB}{m}$ とすると、

$$H = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}\left(x - \frac{k_y}{eB}\right)^2 \quad (11.36)$$

これは $x = \frac{k_y}{eB}$ を中心とする調和振動子である。そのエネルギーは

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

となる。 n, k_y とでラベルされる固有関数は Hermite の多項式を $H_n(x)$ つかってあらわされる。

$$x_0 = \frac{k_y}{eB}$$

として、

$$\begin{aligned} \psi_{nk_y}(x, y) &= e^{\frac{i}{\hbar}k_y y} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(x - x_0)\right) \\ &\times \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x - x_0)^2\right] \end{aligned} \quad (11.37)$$

エネルギー E_n は k_y に依存しないので k_y または x_0 による縮退がある。したがって異なる k_y に属する固有関数を重ね合わせても (k_y で積分しても) 同じエネルギー E_n に属する状態がえられる。

これに p_z の固有関数 $\exp[\frac{i}{\hbar}k_z z]$ をかけたものが最初のハミルトニアンの固有関数 $\psi_{nk_y k_z}(x, y, z)$ になる。全エネルギーは

$$\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (11.38)$$

となる。一様磁場中の荷電粒子のこのエネルギースペクトルのことを **Landau 準位** という。

11.7 Aharonov-Bohm 効果

電磁場は物理的に測定できる量であるが、ベクトルポテンシャルは実験で測定されることはないというのが、電磁気学での通常の考えである。ところが以下に述べる Aharonov-Bohm 効果と呼ばれる現象では一見、磁場が無いところを通る電子がヴェク

トルポテンシャルの影響を受けると解釈される量子論特有の現象である。

z 軸に沿った半径 a の無限に長いソレノイドのなかに磁束 Φ がとおっていて、その外側では磁場のものはないとしよう。このときソレノイドの外側を回る積分路について

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \int \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \Phi \quad (11.39)$$

がなりたつ。このような磁場 $B_z = \frac{\Phi}{\pi a^2}$ を生じるベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ を円柱座標 (r, θ, z) であらわすと、

$$B_z = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} r A_\theta - \frac{\partial}{\partial \theta} A_r \right) \quad (11.40)$$

だから、

$$A_r = A_z = 0, \quad A_\theta = \begin{cases} \frac{\Phi}{2\pi r} & r > a \\ \frac{\Phi}{2\pi a^2} r & 0 \leq r < a \end{cases} \quad (11.41)$$

となる。ソレノイドの単位長さあたりの電流は $i = \frac{\Phi}{\pi a^2 \mu_0}$ である。ソレノイドの外側では磁場が存在せず、ベクトルポテンシャルだけがある。ソレノイドの外側を流れる電子のビームがこのベクトルポテンシャルを感知することが次のような干渉実験によってしめされる。

x 軸方向に進む一本の電子ビームがソレノイドの手前の点 Q で二つにわけられ、それぞれソレノイドの上下をとおり、後方のスクリーン上で再び一緒にすると干渉縞を生ずる。スクリーン上の一点を P とし、それぞれのビームに沿う電子の径路を QAP および QBP とする。

電子の波動関数はこのベクトルポテンシャルを使って、Schroedinger 方程式をとくことによって、求めることができる。Bohm と Aharonov によって計算されたその結果はつぎのように要約できる。

P におけるそれぞれのビームの $\Phi = 0$ のときと比べた位相のずれの因子は、

$$\exp(-i \frac{e}{\hbar} \int_{QAP} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}) \text{ と } \exp(-i \frac{e}{\hbar} \int_{QBP} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}) \quad (11.42)$$

であるので、干渉縞の因子はソレノイド内の磁束が

無いときとくらべて、

$$\exp(-i \frac{e}{\hbar} \oint_{QAPBQ} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}) = e^{-i \frac{e}{\hbar} \Phi} \quad (11.43)$$

だけ変化する。したがってソレノイドの磁束を変化させて、電子の干渉縞を動かすことができる。また Φ を変化させていくと、 n を整数として

$$\frac{e\Phi}{\hbar} = 2\pi n \quad (11.44)$$

となるときだけ、磁束の影響が打ち消されるように周期的に変化する。

この現象は磁場を変化させることによって、磁場のないところを運動する電子の運動に影響を与えることができるかのように解釈されているが、諸君の考えはどうであろうか？

11.8 電磁場中の荷電粒子の運動: 演習問題

11.8.1 電磁場中の荷電粒子のハミルトニアン

例題一様で一定な磁場 $\mathbf{B}$ のベクトルポテンシャルを $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ ととると、粒子のハミルトニアンが

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e}{2m}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L} + \frac{e^2}{8m}\{B^2 r^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})^2\} \quad (11.45)$$

となることをしめせ。ここで $\mathbf{L}$ は粒子の軌道角運動量である。

(ヒント) $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}$ を使え。

11.8.2 荷電粒子の軌道角運動量による磁気能率について

1. z 軸方向の一様磁場 $\mathbf{B}$ の中に置かれた半径 a の球面上に拘束された質量 M 、電荷 e の粒子のハミルトン演算子が

$$H = \frac{1}{2Ma^2}\mathbf{L}^2 - \frac{e}{2M}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L} + \frac{e^2}{8M}a^2 B^2 \sin^2\theta \quad (11.46)$$

となることをしめせ。ただし、ベクトルポテンシャルを $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ ととる。

2. 前問において e の 1 次までのエネルギー固有値と固有関数をもとめよ。粒子の質量を M とする。

(答) 固有値は $E = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Ma^2} - \frac{e\hbar}{2M}mB$ 、固有関数は $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ である。

こうして磁場の中にある荷電粒子はハミルトニアンの付加項

$$\Delta H = -\frac{e}{2m}\mathbf{B} \cdot (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \quad (11.47)$$

をもつ。

11.8.3 原子系の Zeeman 効果

1. 前にあげた水素原子の Lande の因子 $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ のそれぞれについて、

$$g = 1 \pm \frac{1}{2\ell + 1} \quad (11.48)$$

を Clebsch-Gordan 係数を使って導け。

2. $\mathbf{L}, \mathbf{S}, \mathbf{J}$ の大きさがそれぞれ、 ℓ, s, j であるときの上述の Lande の分裂因子 g の表式を導け。

11.8.4 波動関数のゲージ変換

1. 粒子の存在確率とその流束はゲージ変換により不変であることをしめせ。

(答)

$$\rho = \psi^* \psi \quad (11.49)$$

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}\{\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi)^* \psi\} - \frac{e}{m}\mathbf{A}\psi^* \psi \quad (11.50)$$

とくに後者は $\mathbf{A}$ をふくんでいるが

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}\{\psi^* \mathbf{D} \psi - (\mathbf{D} \psi)^* \psi\} \quad (11.51)$$

と書けるので、ゲージ不変である。

2. 今後はゲージ変換関数は時間を含まない場合のみあつかおう。

$$\phi' = \phi \quad (11.52)$$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \text{grad} \chi \quad (11.53)$$

このとき、ゲージ同値なポテンシャル $\mathbf{A}, \mathbf{A}'$ をむすぶゲージ変換関数 $\chi(\mathbf{r})$ をもとめよ。

(答)

$$\chi(\mathbf{r}) = -\int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} (\mathbf{A}'(\mathbf{x}) - \mathbf{A}(\mathbf{x})) \cdot d\mathbf{x} \quad (11.54)$$

$\text{rot} \mathbf{A} = \text{rot} \mathbf{A}' = \mathbf{B}$ だから、この線積分は途中の径路に依存しない。また $\mathbf{r}_0$ は任意である。

3. 次のベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ がすべて同一の一定磁場 $\mathbf{B}$ を与えることを示せ。

$$(a) \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$$

$$(b) \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

$\mathbf{r}_0$ は任意の位置ベクトル。

$$(c) \mathbf{A}(\mathbf{r}) = (-By, 0, 0)、ただし \mathbf{B} = (0, 0, B)$$

(d) $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (0, Bx, 0)$ 、ただし $\mathbf{B} = (0, 0, B)$

4. 前問において (a) のベクトルポテンシャルの下での定常状態の波動関数から (b)、(c)、(d) のベクトルポテンシャルの下での波動関数に移るための波動関数のゲージ変換を求めよ.

(答)

$$\chi_{a \rightarrow b} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_0 \times \mathbf{r}) \cdot \mathbf{B} \quad (11.55)$$

$$\chi_{a \rightarrow c} = \frac{1}{2}Bxy \quad (11.56)$$

$$\chi_{a \rightarrow d} = -\frac{1}{2}Bxy \quad (11.57)$$

5. 前問において (c) のベクトルポテンシャルの下での定常状態の波動関数から (d) のベクトルポテンシャルの下での波動関数に移るための波動関数のゲージ変換を求めよ. (答)

$$\chi_{c \rightarrow d} = \chi_{c \rightarrow a} + \chi_{a \rightarrow d} = -Bxy \quad (11.58)$$

11.8.5 一様磁場中の荷電粒子の運動：Landau 単位

前節で $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ なるゲージで一様磁場中の荷電粒子のエネルギー固有値と、固有関数をもとめた。

まったく同様に $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ なるゲージで解いてみよう。

$y_0 = -\frac{k_x}{eB}$ として、

$$\begin{aligned} \psi'_{nk_x}(x, y) &= e^{\frac{i}{\hbar}k_x x} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(y - y_0) \right) \\ &\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(y - y_0)^2\right] \end{aligned} \quad (11.59)$$

エネルギーはまったく同じ E_n である。

したがってさきに求めた $\psi_{nk_y}(x, y)$ を k_y により重ね合わせた後、 $U = \exp[-\frac{e}{\hbar}Bxy]$ によるゲージ変換をすると ψ'_{nk_x} が得られるはずである。このことをいかで確かめてみる。

Hermite の多項式の性質

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy H_n(y) e^{-\frac{1}{2}y^2 - i q y} = (-i)^n \sqrt{2\pi} e^{-\frac{1}{2}q^2} H_n(q) \quad (11.60)$$

をつかうと、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \psi_{nk_x}(x, y) e^{-\frac{i}{\hbar}k_y y_0} e^{-\frac{e}{\hbar}Bxy} \\ = i^n \sqrt{m\omega\hbar} \psi'_{nk_x}(x, y) \end{aligned} \quad (11.61)$$

を示すことができる。

12 ハイゼンベルク方程式

12.1 Schroedinger Picture

これまで考えてきた量子力学系の時間発展は状態関数が Schroedinger 方程式によって発展し、力学量はそれが陽に時間を含まない限り、時間的に不変であった。この見方を **Schroedinger 描像 (picture)** と呼ぼう。

状態の時間変化が演算子 $U(t)$ をつかって、

$$\psi(t) = U(t)\psi(0) \quad (12.1)$$

と書けると仮定しよう。これを

$$\frac{d}{dt}\psi(t) = -\frac{i}{\hbar}H\psi(t) \quad (12.2)$$

の形にかいた Schroedinger 方程式の両辺に代入すると、

$$\frac{d}{dt}U(t)\psi(0) = -\frac{i}{\hbar}HU(t)\psi(0) \quad (12.3)$$

これがすべての $\psi(0)$ について成り立つことから、演算子 $U(t)$ の満たすべき方程式

$$\frac{d}{dt}U(t) = -\frac{i}{\hbar}HU(t) \quad (12.4)$$

がえられる。簡単のため Hamiltonian は時間を含まないとすると初期条件 $U(0) = I$ のもとで、この常微分方程式を形式的に解くことができ、

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \quad (12.5)$$

がえられる。したがって Schroedinger 方程式の形式解は

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(0) \quad (12.6)$$

となる。 $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ は状態関数を t だけ進める演算子で、波動関数のノルムを変えず、かつ波動関数の間に 1 対 1 対応をあたえる。したがってこれはユニタリ変換である。

12.2 Heisenberg Picture

いま Schroedinger 方程式によって変わって行く波動関数 $\psi(t)$ に演算子 $e^{\frac{i}{\hbar}Ht}$ をかけてみると、時刻 $t = 0$ の状態に戻されてしまい、動かない。

$$e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(t) = \psi(0) \quad (12.7)$$

簡単のため時間を陽に含まない Observable F にたいして、時間的に発展する演算子 F_H

$$F_H = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}Fe^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \quad (12.8)$$

を考えよう。

$$\frac{d}{dt}e^{-iHt} = -iHe^{-iHt} = -ie^{-iHt}H \quad (12.9)$$

をつかうと、演算子 F_H の時間発展は次のように Commutator で与えられる。

$$\frac{d}{dt}F_H = \frac{1}{i\hbar}[F_H, H] \quad (12.10)$$

$e^{\frac{i}{\hbar}Ht}$ を使って状態を $t = 0$ での値に押し戻して静止させ、力学量のほうを $e^{\frac{i}{\hbar}Ht}$ による相似変換で時間的に動かしても力学系の時間発展を記述できる。力学系の時間発展をこのように見る見方を **Heisenberg の描像** とよび、上の方程式を Heisenberg 方程式とよぶ。

ところで古典力学では時間を含まない力学変量 $F(q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f)$ の時間変化が

$$\frac{d}{dt}F = \{F, H\} \quad (12.11)$$

と与えられる。Heisenberg Picture における力学量の時間発展に関しては古典力学での Poisson 括弧式を量子力学的交換子で置き換えてえられることがわかる。

$$\{A, B\} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{B}] \quad (12.12)$$

12.3 期待値の時間発展：Ehrenfest の定理

observable F の期待値は Schroedinger Picture では

$$\overline{F} = (\psi(t), F\psi(t)) \quad (12.13)$$

となる。同じ量が Heisenberg Picture では

$$\overline{\overline{F}} = (\psi(0), F_H \psi(0)) \quad (12.14)$$

と書かれるのでその時間的変化は Heisenberg 方程式から次のように求められる。

$$\frac{d}{dt} \overline{\overline{F}} = \frac{d}{dt} (\psi(0), F_H \psi(0)) \quad (12.15)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} (\psi(0), [F_H, H] \psi(0)) \quad (12.16)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \overline{\overline{[F_H, H]}} \quad (12.17)$$

古典力学では時間を含まない力学変数 $F(q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f)$ を T と V の斉次性をつかうと時間変化が

$$\frac{d}{dt} F = \{F, H\} \quad (12.18)$$

と与えられる。量子力学における observable の期待値の時間変化については古典力学が与える通りの結果を与える。これは Ehrenfest の定理と呼ばれる。

例題波束中心の運動

エネルギーが $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ で与えられている量子力学系の波束中心の運動が Newton 方程式

$$m \frac{d^2}{dt^2} \overline{\overline{x}} = \overline{\overline{F}} \quad (12.19)$$

に従うことを示せ。ここで力の演算子は次のように定義される。

$$\hat{F} = -\frac{dV}{dx}(\hat{x}) \quad (12.20)$$

Observable が **保存量**とは Heisenberg の描像で、それが時間によらないことである。その条件はそれが Hamiltonian と可換なことである。すなわち、

$$[F, H] = 0 \text{ なら } \frac{d}{dt} F_H = 0 \quad (12.21)$$

12.4 ビリアル定理

Hamilton 力学においてエネルギーが運動エネルギーと位置エネルギーの和 $H(q, p) = T(p) + V(q)$ であり、 T は p の斉次 2 次式、 V は x の斉次 n 次

式であると仮定する。 $F = \sum_{i=1}^f q_i p_i$ という量の時間微分を計算してみよう。

$$\frac{d}{dt} F = \{F, H\} \quad (12.22)$$

$$= \sum_{i=1}^f \{q_i p_i, H\} \quad (12.23)$$

$$= \sum_{i=1}^f (\{q_i, H\} p_i + q_i \{p_i, H\}) \quad (12.24)$$

$$= \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial T}{\partial p_i} p_i - q_i \frac{\partial V}{\partial q_i} \right) \quad (12.25)$$

$$\frac{d}{dt} F = 2T - nV \quad (12.26)$$

運動はすべての時間にわたって相空間の有限な領域内で行われるとする。このとき両辺の時間平均をとることが意味をもち、

$$\overline{l.h.s.} = \overline{\frac{d}{dt} F} \quad (12.27)$$

$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \frac{dF}{dt} dt \quad (12.28)$$

$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \{F(T) - F(0)\} \quad (12.29)$$

$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{i=1}^f \{q_i(T) p_i(T) - q_i(0) p_i(0)\} \quad (12.30)$$

$$= 0 \quad (12.31)$$

および

$$\overline{r.h.s.} = 2\overline{T} - n\overline{V} \quad (12.32)$$

したがって

$$\overline{T} : \overline{V} = \frac{1}{2} : \frac{1}{n} \quad (12.33)$$

これが古典力学において virial 定理として知られている。

例題調和振動子 $n = 2$ の場合の例を考察せよ。

例題クーロン力 $n = -1$ の場合の例を考察せよ。

量子系では同種の下で得られる関係式

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}] = 2\hat{T} - n\hat{V} \quad (12.34)$$

から始める。状態 ψ をエネルギー E に属する定常状態の規格化した波動関数であるとしよう。この状態は束縛状態になる。上式の左辺を ψ ではさむと 0 になる。右辺は $2\bar{T} - n\bar{V}$ となるので、

$$\bar{T} : \bar{V} = \frac{1}{2} : \frac{1}{n} \quad (12.35)$$

が得られる。これより定常状態の運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの値がわかり、

$$\bar{T} = \frac{n}{n+2} E \quad (12.36)$$

$$\bar{V} = \frac{2}{n+2} E \quad (12.37)$$

となる。これは量子 virial 定理と呼ばれている。

12.5 演習問題：Schroedinger Picture

古典力学の問題。

1. x 軸上を運動する物体が原点から $-m\omega^2 x$ の力を受けるときの、Lagrange 関数と Hamilton 関数をもとめよ。(1次元調和振動子)
2. 1次元調和振動子の問題でハミルトンの運動方程式をたて、これがNewton方程式と同等であることをしめせ。

12.6 演習問題：Heisenberg Picture

1. 1次元調和振動子の量子力学で Heisenberg picture をとるときの $\hat{x}, \hat{p}$ に対する Heisenberg 方程式をたて、これが古典力学の運動方程式と形式上同一であることをしめせ。
2. 古典力学では時間を含まない力学変量 $F(q_1, q_2, \dots, q_f, p_1$ の時間変化が

$$\frac{d}{dt} F = \{F, H\}_{P.B.} \quad (12.38)$$

と与えられることをしめせ。ここで $\{A, B\}_{P.B.}$ はポアソンの括弧式である。

3. 量子力学で Heisenberg picture をとるとき演算子 F_H の時間発展は次のように与えられることをしめせ。

$$\frac{d}{dt} F_H = \frac{1}{i\hbar} [F_H, H] \quad (12.39)$$

12.7 演習問題：期待値の時間発展：Ehrenfest の定理

1. Heisenberg Picture をつかうと、observable F の期待値 $\bar{F}$ の時間的变化が次の方程式を満たすことをしめせ。

$$\frac{d}{dt} \bar{F} = \frac{1}{i\hbar} \overline{[F_H, H]} \quad (12.40)$$

2. 波束中心の運動

エネルギーが $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ で与えられている量子力学系の波束中心の運動が Newton 方程式

$$m \frac{d^2}{dt^2} \bar{x} = \bar{F} \quad (12.41)$$

に従うことを示せ。ここで力の演算子は次のように定義される。

$$\hat{F} = -\frac{dV}{dx}(\hat{x}) \quad (12.42)$$

3. 1次元調和振動子における波束の中心の運動は Newton 方程式と同一の

$$\frac{d^2}{dt^2} \bar{x} = -m\omega^2 \bar{x} \quad (12.43)$$

を満たすことをしめせ。

12.8 演習問題：ビリアル定理

1. ビリアル定理を応用して、1次元調和振動子がエネルギー $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ の定常状態にあるとき、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの時間平均 $\langle T \rangle, \langle V \rangle$ をもとめよ。
2. 水素原子内の電子のポテンシャルエネルギーは $-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ である。ビリアル定理を使って、水素原子が基底状態のエネルギー -13.6eV をもつとき、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの時間平均 $\langle T \rangle, \langle V \rangle$ をもとめよ。

13 摂動による状態の遷移

13.1 Dirac-Tomonaga Picture:相互作用表示

時間にあからさまに依存しない H_0 と V によって、系のハミルトニアンが

$$H = H_0 + V \quad (13.1)$$

とあらわされ、 H_0 による状態変化はわかっていて、 V は小さい演算子であるとしよう。このとき、状態の新たな記述として、

$$\psi_D(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \psi_S(t) \quad (13.2)$$

を導入し、observable F にたいし、

$$F_D(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} F e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (13.3)$$

なる時間に依存する演算子を定義しよう。そして、それらで系の状態変化を記述することをかんがえる。 $F_D(t)$ の時間的な変化はわかっており、 $\psi_D(t)$ はゆっくりと変化するとみなせる。 $\psi_D(t)$ の $t_0 < t < t_1$ の間の動きをユニタリ演算子 $U(t_1, t_0)$ をつかって、

$$\psi_D(t_1) = U(t_1, t_0) \psi_D(t_0) \quad (13.4)$$

とかこう。あきらかに

$$U(t_1, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t_1} e^{-\frac{i}{\hbar} H(t_1 - t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t_0} \quad (13.5)$$

となるが、 $(t_1 - t_0)$ だけに依存するわけではない。

t_0, t_1 が有限である限り $U(t_1, t_0)$ はユニタリ作用素であり、

$$U(t_1, t_0)^{-1} = U(t_1, t_0)^\dagger \quad (13.6)$$

$$U(t_1, t_0)^{-1} = U(t_0, t_1) \quad (13.7)$$

および

$$U(t_0, t_0) = I \quad (13.8)$$

$$U(t_0, t_1) U(t_1, t_2) = U(t_0, t_2) \quad (13.9)$$

がなりたつ。簡単のため $t_1 = t, t_0 = 0$ として、 $U(t, 0)$ の t による変化をみよう。

$$\frac{d}{dt} U(t, 0) = -\frac{i}{\hbar} V_D(t) U(t, 0) \quad (13.10)$$

となる。この微分方程式は V の逐次近似によって形式的にとける。両辺を積分することにより

$$U(t, 0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_D(s_1) U(s_1, 0) ds_1 \quad (13.11)$$

となるが、右辺にこれを n 回使うことにより、

$$\begin{aligned} U(t, 0) = & I - \frac{i}{\hbar} \int_0^t ds_1 V_D(s_1) \\ & \left[I - \frac{i}{\hbar} \int_0^{s_1} ds_2 V_D(s_2) \right. \\ & \left\{ I - \frac{i}{\hbar} \int_0^{s_2} ds_3 V_D(s_3) \right. \\ & \left. \left(\dots \left(I - \frac{i}{\hbar} \int_0^{s_{n-1}} ds_n V_D(s_n) U(s_n, 0) \right) \right) \right\} \Big] \end{aligned} \quad (13.12)$$

V の次数ごとにまとめると、

$$\begin{aligned} U(t, 0) = & I - \frac{i}{\hbar} \int_0^t ds_1 V_D(s_1) \\ & + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 V_D(s_1) V_D(s_2) \\ & + \dots \\ & + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_0^t ds_1 \dots \int_0^{s_{n-1}} ds_n \\ & \times V_D(s_1) \dots V_D(s_n) U(s_n, 0) \end{aligned} \quad (13.13)$$

ところでこの多重積分の被積分関数は時間の早いものが右に並んでいる。そこで時間順序積（P積）の操作を次のように導入することにしよう。

n 個の時刻 $t_1, t_2, \dots, t_n$, を入れ替えて、 $t_a \geq t_b \geq \dots \geq t_c$ が成り立つようにするとき、

$$P \{ F_1(t_1) F_2(t_2) \dots F_n(t_n) \} = F_a(t_a) F_b(t_b) \dots F_c(t_c) \quad (13.14)$$

とする。すなわち演算子をその時間について、後のものを左に、先のものを右に時間順序に並べ替える操作を表している。

この記号をつかうとたとえば2重積分のときでは、

$$\begin{aligned} & \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 V_D(s_1)V_D(s_2) \\ &= \frac{1}{2!} \int_0^t ds_1 \int_0^t ds_2 P\{V_D(s_1)V_D(s_2)\} \end{aligned}$$

と積分の上限をそろえることができる。そこでこの無限級数が収束するものと仮定すると、

$$U(t_1, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t \dots \int_0^t ds_1 \dots ds_n$$

$$P[V_D(s_1) \dots V_D(s_n)] \quad (13.15)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n P\left(\int_0^t ds V_D(s)\right)^n \quad (13.16)$$

$$= P \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_D(t) dt \right\} \quad (13.17)$$

となる。

状態と observable のこのような見方を Dirac(-Tomonaga) Picture または相互作用表示とよぶ。

13.2 S 行列による粒子の衝突実験の記述

粒子の散乱または衝突実験をいろんな picture で記述するときの特徴をかんがえよう。Schroedinger picture では、 $\psi_S(t)$ は $t \rightarrow -\infty$ および $t \rightarrow \infty$ では H_0 によって動き、との途中の時刻では $H_0 + V$ によってうごく。これにたいして、Dirac picture では、 $\psi_D(t)$ は $t \rightarrow -\infty$ および $t \rightarrow \infty$ では状態の動きが完全にとまってしまう。途中の時刻では $V_D(t)$ によって、ゆっくり動く。

そこで、

$$\lim_{t_f \rightarrow \infty} \lim_{t_i \rightarrow -\infty} U(t_f, t_i) \quad (13.18)$$

なる演算子が存在しそうである。これを S-行列と呼ぶ。

$$S = U(\infty, -\infty) \quad (13.19)$$

$$= P \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_D(t) dt \right\} \quad (13.20)$$

$t = -\infty$ で $|i\rangle$ に準備された状態がその後相互作用（衝突）を経て $t = \infty$ になって到達する状態は

$$S|i\rangle \quad (13.21)$$

である。したがって $t = \infty$ に系が $|f\rangle$ に見出される確率は

$$|\langle f|S|i\rangle|^2 \quad (13.22)$$

である。ここにあらわれた確率振幅 $\langle f|S|i\rangle$ のことを **S 行列要素** という。

13.3 時間によらない摂動による単位時間当たりの遷移確率

$t \leq 0$ では非摂動系が H_0 の固有状態 $|\alpha\rangle$ にあり、 $t > 0$ で摂動 V がかかるとしよう。その後の時刻で系が別の状態 $|\beta\rangle$ にある確率

$$P_t(\beta, \alpha) = |\langle \beta|U(t, 0)|\alpha\rangle|^2 \quad (13.23)$$

を考えよう。摂動の1次で、

$$U(t, 0) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_D(s) ds \quad (13.24)$$

だから

$$\begin{aligned} \langle \beta|U(t, 0)|\alpha\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \langle \beta|V|\alpha\rangle \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar}(E_\beta - E_\alpha)s} ds \\ &= -\frac{\langle \beta|V|\alpha\rangle}{E_\beta - E_\alpha} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar}(E_\beta - E_\alpha)t} - 1 \right\} \end{aligned} \quad (13.25)$$

これは一見 $E_\beta - E_\alpha \neq 0$ の状態へも遷移が起こることをしめしているが、その可能性は無視できることが以下のようにわかる。 $E_\beta - E_\alpha = \epsilon$ とすると、

$$\langle \beta|U(t, 0)|\alpha\rangle = -\langle \beta|V|\alpha\rangle \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon t} - 1}{\epsilon} \quad (13.26)$$

がえられ

$$P_t(\beta, \alpha) = \frac{4 \sin^2(\frac{\epsilon t}{2\hbar})}{\epsilon^2} |\langle \beta|V|\alpha\rangle|^2 \quad (13.27)$$

となる。

終わりの状態はエネルギーの連続スペクトルの中にあり、 $|\beta\rangle = |E, \lambda\rangle$ のようにかける。この状態は $\rho(E)$ を状態密度として、

$$\int dE \quad \rho(E) \sum_{\lambda} |E, \lambda\rangle \langle E, \lambda| = I \quad (13.28)$$

なる完全系をなしているとしよう。

$$P_t((E, \lambda) \leftarrow \alpha) = \frac{4 \sin^2(\frac{\epsilon t}{2\hbar})}{\epsilon^2} |\langle E, \lambda | V | \alpha \rangle|^2$$

$$\epsilon = E - E_{\alpha} \quad (13.29)$$

となる。時間がたつにつれて因子 $\frac{\sin^2(\frac{\epsilon t}{2\hbar})}{\epsilon^2}$ のピークは鋭くなる。あるいは

$$\lim_{a \rightarrow 0} \sin^2(\epsilon a) / \epsilon^2 = |a| \pi \delta(\epsilon) \quad (13.30)$$

をつかって、

$$P_t((E, \lambda) \leftarrow \alpha) = \frac{2\pi t}{\hbar} |\langle E_{\alpha}, \lambda | V | \alpha \rangle|^2 \delta(E - E_{\alpha}) \quad (13.31)$$

E_{α} とほぼ同じエネルギーの状態に移る確率として、

$$\int dE \quad \rho(E) P_t((E, \lambda) \leftarrow \alpha) = \frac{2\pi t}{\hbar} |\langle E_{\alpha}, \lambda | V | \alpha \rangle|^2 \rho(E_{\alpha}) \quad (13.32)$$

がえられる。また 1 秒あたりの遷移確率は

$$T((E_{\alpha}, \lambda) \leftarrow \alpha) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle E_{\alpha}, \lambda | V | \alpha \rangle|^2 \rho(E_{\alpha}) \quad (13.33)$$

がえられる。

14 半古典的近似

14.1 WKB 近似

1 次元の時間を含まない Schrodinger 方程式

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \{V(x) - E\} \psi(x) \quad (14.1)$$

において

$$p(x) = \sqrt{2m\{E - V(x)\}} \quad (14.2)$$

とする。 $E - V(x) = 0$ を満たす点 (古典的回帰点) $x = a$ があると、 $p(x)$ はそこで $\sqrt{\pm(x-a)}$ 形の特異性をもつ。固有関数を複素数値関数 $S(x)$ を使って

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \quad (14.3)$$

の形に書き、 $S(x), p(x)$ を使って Schrodinger 方程式を書きなおすと

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2} p(x)^2 \right\} e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} = 0 \quad (14.4)$$

となり、 $S(x)$ に対する方程式が得られる：

$$(S')^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \right) S'' + p(x)^2 = 0 \quad (14.5)$$

$S(x)$ を $\frac{\hbar}{i}$ の幂で展開すると

$$S(x) = S_0(x) + \frac{\hbar}{i} S_1(x) + \cdots \quad (14.6)$$

これから最初の 2 項を求めると

$$S_0(x) = \pm \int^x p(x) dx \quad (14.7)$$

$$S_1(x) = \ln \frac{1}{\sqrt{p(x)}} + \text{const.} \quad (14.8)$$

したがってここまでの近似で波動関数が次のように表される。

$$\psi(x) = \text{const.} \times \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x p(x) dx} \quad (14.9)$$

始めの方程式は 2 階微分方程式だったから、独立なものは 2 つ求まるが、両方とも規格化可能とは限らない。

$V(x) < E$ の領域における一般解は、 $p(x) = \text{実数}$ だから、

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \int^x p(x) dx} + e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x p(x) dx} \right\} \quad (14.10)$$

とあらわされる。第 1 項は x の正方向への進行波、第 2 項は x の負方向への進行波を表す。

$V(x) > E$ の領域では一般解が

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left\{ e^{\frac{1}{\hbar} \int^x |p(x)| dx} + e^{-\frac{1}{\hbar} \int^x |p(x)| dx} \right\} \quad (14.11)$$

となる。この第 1 項は x の正方向に増大する波、第 2 項は x の正方向に減衰する波を表す。

これらの表式においては各積分の下限が 2 つの任意定数に相当する。エネルギー固有関数のこれらの形は **WKB 近似** と呼ばれる。

14.2 WKB 接続

14.2.1 一様な力を受ける粒子

運動量表示の量子力学では、Hamiltonian $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ は次のような微分作用素になる：

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(i\hbar \frac{d}{dp}) \quad (14.12)$$

一様な力の potential の図

$V(x) = E$ なる点 (古典的転回点) の両側での解の接続を調べるために、1 次元の一様な力 ($-k$) を受ける粒子のエネルギー固有関数を運動量表示の量子力学で調べよう。そのためには $k > 0$ としてハミルトン作用素

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + i\hbar k \frac{d}{dp} \quad (14.13)$$

の固有値方程式

$$\hat{H}\phi(p) = E\phi(p) \quad (14.14)$$

をとけばよい。スペクトルは連続で任意の実数 E が固有値になる。固有関数に対する微分方程式

$$\frac{d}{dp} \phi(p) = \frac{i}{k\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} - E \right) \phi(p) \quad (14.15)$$

はすぐにとけて、一意的な解

$$\phi(p) = \exp\left[\frac{i}{k\hbar} \int^p \left(\frac{p^2}{2m} - E\right) dp\right] \quad (14.16)$$

$$= \exp\left[\frac{i}{k\hbar} \left(\frac{p^3}{6m} - Ep\right)\right] \quad (14.17)$$

が得られる。

$$(\phi_E, \phi_{E'}) = \delta(E - E') \quad (14.18)$$

と規格化した固有関数 ϕ_E は

$$\phi_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi k\hbar}} \exp\left[\frac{i}{k\hbar} \left(\frac{p^3}{6m} - Ep\right)\right] \quad (14.19)$$

である。x-表示の波動関数に直すには Fourier 変換をすればよい。

$$\psi_E(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_E(p) e^{\frac{i}{\hbar} px} dp \quad (14.20)$$

以下ではこの積分をガウス平面内の複素積分と考えて評価しよう。

14.2.2 鞍点法 (峠道の方法)

複素積分

$$I_C = \int_C e^{-\Phi(t)} dt \quad (14.21)$$

において、関数 $\Phi(t)$ の停留点 (鞍点) の一つを t_0 とし $\Phi'(t_0) = 0$; $\Phi''(t_0) \neq 0$ とする。変数変換

$$t = t_0 + \frac{\xi}{\sqrt{\Phi''(t_0)}} \quad (14.22)$$

を行うと、 t_0 付近では関数 $\Phi(t)$ は

$$\Phi(t) = \Phi(t_0) + \frac{1}{2}\xi^2 + \mathcal{O}(\xi^3) \quad (14.23)$$

とかける。ここで $\sqrt{\Phi''(t_0)}$ には二とおりの取り方があることに注意しておこう。

鞍点と最速降下ベクトルの図

いま積分経路 C を、 t_0 を $\frac{1}{\sqrt{\Phi''(t_0)}}$ の向きに通るように変形すると、もとの積分 I_C の値に

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi = \sqrt{2\pi} \quad (14.24)$$

に比例する寄与を生じる。もし積分 I_C がこの寄与だけで近似できるとすると、

$$I_C \approx \frac{1}{\sqrt{\Phi''(t_0)}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\Phi(t_0) - \frac{1}{2}\xi^2} d\xi \quad (14.25)$$

$$\approx \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{\Phi''(t_0)}} e^{-\Phi(t_0)} \quad (14.26)$$

がなりたつ。いくつかの鞍点の寄与を加えなければならないときには、

$$I_C \approx \sum_{t_0} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{\Phi''(t_0)}} e^{-\Phi(t_0)} \quad (14.27)$$

となる。

14.2.3 冪と鞍点、最速降下ベクトル

一様な力を受ける粒子の波動関数にもどって x-表示の波動関数

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{i}{k\hbar} \left(\frac{p^3}{6m} - Ep\right)\right] e^{\frac{i}{\hbar} px} dp \quad (14.28)$$

に鞍点法を適用しよう。冪およびその導関数は

$$\Phi(p) = -\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{p^3}{6mk} + (x-b)p \right\} \quad (14.29)$$

$$\Phi'(p) = -\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{p^2}{2mk} + x-b \right\} \quad (14.30)$$

$$\Phi''(p) = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p}{mk} \right) \quad (14.31)$$

ここで $V(x) = E$ なる点 (古典的転回点) を b と書いた。鞍点は一般に

$$p = \pm p(x) \quad (14.32)$$

$$= \pm \sqrt{2mk(b-x)} \quad (14.33)$$

に二つ生じ、そこでは

$$\Phi(p) = \frac{i}{3mk\hbar} p^3 \quad (14.34)$$

がなりたつ。

14.2.4 $x > b$ の場合

二つの鞍点を

$$p_1 = i\sqrt{2m}\sqrt{kx - E} = i|p(x)| \quad (14.35)$$

$$p_2 = -i\sqrt{2m}\sqrt{kx - E} = -i|p(x)| \quad (14.36)$$

と書く． $p(x)$ を使って書いたのは WKB 接続に応用するためである．そこでの最速降下ベクトルと冪の値は

$$\frac{1}{\sqrt{\Phi''(p_1)}} = \frac{\sqrt{mk\hbar}}{\sqrt{|p(x)|}} \quad (14.37)$$

$$\frac{1}{\sqrt{\Phi''(p_2)}} = i \frac{\sqrt{mk\hbar}}{\sqrt{|p(x)|}} \quad (14.38)$$

ととることができる．おのおのの鞍点での冪の値は

$$\Phi(p_1) = \frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x)| dx \quad (14.39)$$

$$\Phi(p_2) = -\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x)| dx \quad (14.40)$$

それぞれの鞍点の波動関数への寄与を I_1, I_2 と書くと

$$I_1 = \frac{\sqrt{2\pi\hbar mk}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x)| dx} \quad (14.41)$$

$$I_2 = i \frac{\sqrt{2\pi\hbar mk}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{+\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x)| dx} \quad (14.42)$$

もとの積分の積分路 $\int_{-\infty}^{\infty} dp$ を変形して鞍点 p_1 を水平に通るようにできるから、 I_1 は $x \rightarrow \infty$ における $\psi(x)$ の漸近形を与える．そのことは I_1 が $x \rightarrow \infty$ で減衰することからもわかる．

一方、鞍点 p_2 の寄与については、積分路を変形して鞍点 p_2 を垂直に積分したものが $\psi(x)$ の近似値になっているとは考えられない． $x \rightarrow \infty$ で増大する解 I_2 は、そのような寄与の結果得られたものである．その意味については後に考えよう．

14.2.5 $x < b$ の場合

二つの鞍点を

$$p_1 = \sqrt{2m}\sqrt{E - kx} = p(x) \quad (14.43)$$

$$p_2 = -\sqrt{2m}\sqrt{E - kx} = -p(x) \quad (14.44)$$

と書く．そこでの最速降下ベクトルと冪の値は

$$\frac{1}{\sqrt{\Phi''(p_1)}} = \sqrt{i} \frac{\sqrt{mk\hbar}}{\sqrt{p(x)}} \quad (14.45)$$

$$\frac{1}{\sqrt{\Phi''(p_2)}} = \sqrt{-i} \frac{\sqrt{mk\hbar}}{\sqrt{p(x)}} \quad (14.46)$$

ととることができる．ここで、 $\exp[\pm \frac{i\pi}{4}] = \sqrt{\pm i}$ と書いた．おのおのの鞍点での冪の値は

$$\Phi(p_1) = \frac{i}{\hbar} \int_x^b p(x) dx \quad (14.47)$$

$$\Phi(p_2) = -\frac{i}{\hbar} \int_x^b p(x) dx \quad (14.48)$$

となる．この場合は積分路 $\int_{-\infty}^{\infty} dp$ を変形して鞍点 p_2, p_1 を順に通るようにしたものが $x \rightarrow -\infty$ における $\psi(x)$ の漸近形を与える．すなわち $\psi(x)$ の漸近形は二つの鞍点の寄与の和であり、次のように書ける．

$$\psi(x) = I(p_1) + I(p_2) \quad (14.49)$$

$$I(p_1) = \frac{\sqrt{2\pi\hbar mk}}{\sqrt{p(x)}} \left\{ \sqrt{i} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^b p(x) dx} \right\} \quad (14.50)$$

$$I(p_2) = \frac{\sqrt{2\pi\hbar mk}}{\sqrt{p(x)}} \left\{ \sqrt{-i} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^b p(x) dx} \right\} \quad (14.51)$$

14.2.6 Damping solution の接続

固有関数 $\psi(x)$ の漸近形は

$$\psi(x) = \begin{cases} I_1 & x \rightarrow \infty \\ I(p_1) + I(p_2) & x \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (14.52)$$

となることがわかった．いま $x < b$ において

$$\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^b p(x) dx + \frac{i\pi}{4}} \quad (14.53)$$

$$\xi_- = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_x^b p(x) dx - \frac{i\pi}{4}} \quad (14.54)$$

$x > b$ において

$$\xi_D = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x)| dx} \quad (14.55)$$

$$\xi_B = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{+\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x)| dx} \quad (14.56)$$

としよう。

$$\xi_D \leftrightarrow (\xi_+ + \xi_-) \quad (14.57)$$

はそれぞれ $x > b$ および $x < b$ の領域での波動関数

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar mk}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\Phi(p)} dp \quad (14.58)$$

の漸近形である。

14.2.7 Blowing-Up solution の意味

$|p|$ のもとの積分の integrand の絶対値は

$$\exp\left[\frac{1}{6\hbar km} \Re ip^3\right] \quad (14.59)$$

のように振舞うので、 $p = |p|e^{i\theta}$ とするとき

$$(I) 0 < \theta < \frac{1}{3}\pi \quad (14.60)$$

$$(II) \frac{2}{3}\pi < \theta < \pi \quad (14.61)$$

$$(III) \frac{4}{3}\pi < \theta < \frac{5}{3}\pi \quad (14.62)$$

の方向で減衰する。積分

$$I_C = \int_C e^{-\Phi(p)} dp \quad (14.63)$$

は C の始点と終点がこのいずれかの方向の無限遠にあるとき、収束し、そのときにはいつも Schrodinger 方程式の解を与える。先の $\psi(x)$ は $\infty(II)$ から $\infty(I)$ への場合に他ならない。

$x > b$ の領域での関数 I_2 は

$$\frac{1}{2} \left(\int_{\infty(III)}^{\infty(II)} + \int_{\infty(III)}^{\infty(I)} \right) e^{-\Phi(p)} dp \quad (14.64)$$

を与える。この積分は $x < b$ では

$$\frac{1}{2} (I(p_1) - I(p_2)) \quad (14.65)$$

の漸近形をとる。したがって Blowing-Up solution の接続は次のようになる。

$$i\xi_B \leftrightarrow \frac{1}{2}(\xi_+ - \xi_-) \quad (14.66)$$

WKB 接続の行列形に書くことができる。

$$\begin{pmatrix} \xi_D \\ \xi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\frac{i}{2} & \frac{i}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_+ \\ \xi_- \end{pmatrix} \quad (14.67)$$

$$\begin{pmatrix} \xi_+ \\ \xi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & i \\ \frac{1}{2} & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_D \\ \xi_B \end{pmatrix} \quad (14.68)$$

14.3 半古典的量子条件

古典的可動区間が $a < x < b$ であるとき波動関数が区間の両側で減衰し規格化可能となる条件からエネルギー固有値を求めることができる。

半古典的量子条件によってエネルギーがわかる場合の図

まず $b < x$ で減衰解に接続する条件から、 $a < x < b$ の解は

$$p(x)^{-\frac{1}{2}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx + \frac{\pi}{4}\right\} \quad (14.69)$$

と表されなくてはならない。これを变形すると

$$-p(x)^{-\frac{1}{2}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} - \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx\right\} \quad (14.70)$$

となるが、これは $n = 0, 1, 2, \dots$ にたいして

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = (n + \frac{1}{2})\pi \quad (14.71)$$

が満たされるときのみ、 $a < x$ において減衰解

$$(-)^n |p(x)|^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^b |p(x)| dx} \quad (14.72)$$

に接続される。上の条件は解析力学の言葉では

$$\oint p(x) dx = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2}) \quad (14.73)$$

とかかれ、Sommerfeld の半古典的量子条件と呼ばれる。

【半古典的近似：問題】

- potential $V(x)$ の片方が無限に高い壁になっているときの半古典的量子化の規則は

$$\oint p(x) dx = 2\pi\hbar(n + \frac{3}{4}), n = 0, 1, 2, \dots$$

となること、また $V(x)$ の両方が無限に高い壁になっているときはそれが

$$\oint p(x)dx = 2\pi\hbar(n+1), n=0, 1, 2, \dots$$

となることを示せ。

2. 1次元の運動においてポテンシャルが次のように与えられているとき、半古典的量子化によってエネルギーレベルをもとめよ。

(a) $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 、ただし m は質量、 ω は正の定数。

$$(b) V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ \infty & L < x \end{cases}$$

$$(c) V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ fx & 0 < x < L \\ \infty & L < x \end{cases}$$

f は正の定数

$$(d) V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2x^2 & x < 0 \\ \infty & 0 < x \end{cases}$$

(e) $V(x) = f|x|$ 、ただし f は正の定数

(f) $V(x) = f|x|$ 、ただし f は正の定数

3. 半径の円周上を運動する粒子の Lagrangian が

$$L = \frac{ma^2}{2}\dot{\theta}^2 - V(\theta)$$

$$V(\theta + 2\pi) = V(\theta)$$

であたえられるとき、

(a) θ に共役な運動量 p_θ と Hamiltonian を求めよ。

(b) 半古典的量子化条件が

$$\int_0^{2\pi} p_\theta(\theta)d\theta = 2\pi\hbar(n+1), n=0, 1, 2, \dots$$

となることを示せ。ここで

$$p_\theta(\theta) = \sqrt{2ma^2}\sqrt{E - V(\theta)}$$

14.4 半古典的量子条件：例題

古典的可動区間が $a < x < b$ であるとき、エネルギー保存則

$$\frac{1}{2m}p(x)^2 + V(x) = E \quad (14.74)$$

からきまる関数

$$p(x) = \sqrt{2m}\sqrt{E - V(x)} \quad (14.75)$$

を用いて、条件

$n = 0, 1, 2, \dots$ にたいして

$$\int_a^b p(x)dx = (n + \frac{1}{2})\pi\hbar \quad (14.76)$$

なる制限をおくと、エネルギー E に飛び飛びの値を決めることができる。

上の条件はハミルトン力学の相空間の言葉では周回積分を使って

$$\oint p(x)dx = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2}) \quad (14.77)$$

とかかれ、Sommerfeld の半古典的量子条件と呼ばれる。

【半古典的近似：問題】 1次元の運動においてポテンシャルが次のように与えられているとき、半古典的量子化によってエネルギーレベルをもとめよ。

1. $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 、ただし m は質量、 ω は正の定数。

答え。 $E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$

2. $V(x) = f|x|$ 、ただし f は正の定数

答え。 $E = \left\{ \frac{3\pi f\hbar(n+\frac{1}{2})}{4\sqrt{2m}} \right\}^{\frac{2}{3}}$

3. 一般に、 $\alpha > 0, \nu > 0$ として、

$$V(x) = \alpha|x|^\nu \quad (14.78)$$

のとき。

答え。 $E^{\frac{1}{\nu}+\frac{1}{2}} = 2\pi\hbar(n+\frac{1}{2})\frac{\nu\alpha^{\frac{1}{\nu}}}{4\sqrt{2m}B(\frac{3}{2},\frac{1}{\nu})}$
 からもとまる。ここに $B(\alpha,\beta) = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)}$

4. 半径の円周上を運動する粒子の Lagrangian が

$$L = \frac{ma^2}{2}\dot{\theta}^2 - V(\theta)$$

$$V(\theta+2\pi) = V(\theta)$$

であたえられるとき、

(a) θ に共役な運動量 p_θ と Hamiltonian を求めよ。

(b) 半古典的量子化条件が

$$\int_0^{2\pi} p_\theta(\theta)d\theta = 2\pi\hbar(n+1), n=0,1,2,\dots$$

となることを示せ。

ここで

$$p_\theta(\theta) = \sqrt{2ma^2}\sqrt{E-V(\theta)} \quad (14.79)$$

5. potential $V(x)$ の片方が無限に高い壁になっているときの半古典的量子化の規則は

$$\oint p(x)dx = 2\pi\hbar(n+\frac{3}{4}), n=0,1,2,\dots$$

となること、また $V(x)$ の両方が無限に高い壁になっているときはそれが

$$\oint p(x)dx = 2\pi\hbar(n+1), n=0,1,2,\dots$$

となることを示せ。

$$6. V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ \infty & L < x \end{cases}$$

$$7. V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ fx & 0 < x < L \\ \infty & L < x \end{cases}$$

f は正の定数

$$8. V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2x^2 & x < 0 \\ \infty & 0 < x \end{cases}$$

9. $V(x) = f|x|$ 、ただし f は正の定数

14.5 トンネル効果の半古典的近似

こんどは $b < x < a$ において $E < V(x)$ となる場合を考えよう。この時にはポテンシャル障壁の左側から進行波が入射すると、それが反射波と透過波をひきおこす。

ポテンシャル障壁のトンネル効果

potential 障壁の内側 ($b < x < a$) では一般に減衰、および増大する指数関数型の波動関数の複素数係数による 1 次結合で表される。ポテンシャル障壁の右側では透過波のみが存在する。

まずでの透過波を

$$\xi_-(a) = p(x)^{-\frac{1}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(x)dx - \frac{i\pi}{4}} \quad (14.80)$$

とし、これを potential 障壁の内側 ($a < x < b$) にまで接続すると、次のようになる。

$$\xi_-(a) = \frac{1}{2}\xi_D(a) - i\xi_B(a) \quad (14.81)$$

ここで

$$I = \int_b^a |p(x)|dx \quad (14.82)$$

をつかって、 $x = b$ の付近の波動関数に書きなおすと、

$$\frac{1}{2}e^{-I}\xi_B(b) - ie^I\xi_D(b) \quad (14.83)$$

これをさらにポテンシャル障壁の左側まで接続すると次のような反射波と入射波の重ね合わせが得られる。

$$-i(e^I + \frac{1}{4}e^{-I})\xi_+(a) - i(e^I - \frac{1}{4}e^{-I})\xi_-(a) \quad (14.84)$$

このように入射波、反射波、透過波をそれぞれ

$$\phi_i = p(x)^{-\frac{1}{2}}ae^{-\frac{i}{\hbar}\int_x^b p(x)dx + \frac{i\pi}{4}} \quad (14.85)$$

$$\phi_r = p(x)^{-\frac{1}{2}}re^{\frac{i}{\hbar}\int_x^b p(x)dx - \frac{i\pi}{4}} \quad (14.86)$$

$$\phi_t = p(x)^{-\frac{1}{2}}te^{\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(x)dx - \frac{i\pi}{4}} \quad (14.87)$$

とかくと、次の比例関係が成り立つ。

$$a : r : t = (e^I + \frac{1}{4}e^{-I}) : (e^I - \frac{1}{4}e^{-I}) : i \quad (14.88)$$

波動関数の透過係数は

$$\frac{t}{a} = \frac{i}{e^I + \frac{1}{4}e^{-I}} \quad (14.89)$$

障壁を透過する確率は

$$\left|\frac{t}{a}\right|^2 = \frac{1}{(e^I + \frac{1}{4}e^{-I})^2} \quad (14.90)$$

$$\approx e^{-2 \int_b^a |p(x)| dx} \quad (14.91)$$

このような漸近解においても確率の保存則は成り立っている：

$$|a|^2 = |r|^2 + |t|^2 \quad (14.92)$$

しかしこの近似では $I \rightarrow 0$ の極限をとると、

$$|a| : |r| : |t| = 5 : 3 : 4 \quad (14.93)$$

なる無意味な関係を生じる。

14.6 演習問題

準古典的近似をもちいて、次の問にこたえよ。

1. 中心力の中での粒子の動径部分の波動関数を準古典的近似をもちいて、もとめよ。
2. 角運動量 ℓ の自由粒子の動径部分の波動関数を準古典的近似をもちいてもとめ、正確な解と比較せよ。
3. 水素原子の動径部分の波動関数に準古典的近似をもちいてエネルギー固有値をもとめよ。
4. 準古典的近似をもちいて任意の中心力ポテンシャル $V(r)$ の中の束縛状態のエネルギー準位の数分布をもとめよ。

15 ディラック方程式

15.1 相対論的波動方程式

古典力学のハミルトン関数

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (15.1)$$

を相対論的に拡張して、

$$H = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (15.2)$$

を量子力学でのハミルトン演算子と考えると、ルートのなかに微分演算子をふくむので、困難につきあたる。ハミルトニアンは運動量の1次関数であることが望ましいので、

$$H = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}c + \beta mc^2 \quad (15.3)$$

とし、 $\boldsymbol{\alpha}, \beta$ を数とすると、相対論の要請

$$H^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (15.4)$$

にあわない。そこで、 $\boldsymbol{\alpha}, \beta$ を $n \times n$ 行列に拡張すると、行列として

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}c + \beta mc^2)^2 = (\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4)I \quad (15.5)$$

がみたされれば、上の要請をみたす。これから、

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij}I \quad (15.6)$$

$$\{\alpha_i, \beta\} = 0 \quad (15.7)$$

$$\beta^2 = I \quad (15.8)$$

がえられる。このような行列が存在する一番簡単な場合が $n = 4$ とする場合である。

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (15.9)$$

$$\beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \quad (15.10)$$

ここで σ_i は 2×2 Pauli 行列、 I_2 は 2×2 単位行列である。4つの行列 α_i, β は Hermitian

列であることに注意しよう。別の3つの行列

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & I_2 \\ I_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (15.11)$$

$$\rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & -iI_2 \\ iI_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (15.12)$$

$$\rho_3 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 \end{pmatrix} \quad (15.13)$$

をつかうと、 ρ_i も Pauli 行列と同じ代数を満たす。これを使うと、

$$\boldsymbol{\alpha} = \rho_1 \boldsymbol{\sigma} \quad (15.14)$$

$$\beta = \rho_3 \quad (15.15)$$

とかける。

こうして、相対論的量子力学に導く見込みのある古典力学的ハミルトン関数は

$$H = \begin{pmatrix} mc^2 I_2 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}c \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}c & -mc^2 I_2 \end{pmatrix} \quad (15.16)$$

となった。

15.2 相対論的波動関数

波動関数は4成分になり、

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (15.17)$$

Schroedinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \begin{pmatrix} mc^2 I_2 & -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \\ -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} & -mc^2 I_2 \end{pmatrix} \psi \quad (15.18)$$

となる。波動関数がこのように時間変化するとき、ノルム $\|\psi\|$ を

$$\|\psi\|^2 = \sqrt{\sum_{i=1}^4 \int |\psi_i|^2 d\mathbf{x}} \quad (15.19)$$

とすると、時間に依存しない。そこで、粒子の存在確率を

$$\rho(t, \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^4 |\psi_i(t, \mathbf{x})|^2 \quad (15.20)$$

と解釈しても確率の保存には矛盾しない。それでは、波動関数の各成分 $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ は何を意味するのであろうか。それを知るために自由粒子を表す Schroedinger 方程式の解を調べてみよう。

定常状態をもとめよう。次のような平面波の解が存在する。

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right) \xi(\mathbf{p}) \quad (15.21)$$

この形の解を代入すると、方程式は

$$E\xi(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} mc^2 I_2 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}c \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}c & -mc^2 I_2 \end{pmatrix} \xi(\mathbf{p}) \quad (15.22)$$

となる。これは 4×4 行列の固有値問題の形になっている。いま 4 成分の波動関数を上の 2 成分と下の成分にわけて

$$\xi(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} u(\mathbf{p}) \\ v(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \quad (15.23)$$

とすると、2 成分の波動関数に対する条件

$$\begin{pmatrix} (E - mc^2)I_2 & -\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}c \\ -\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}c & (E + mc^2)I_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(\mathbf{p}) \\ v(\mathbf{p}) \end{pmatrix} = 0 \quad (15.24)$$

がえられる。

$$u(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} c}{E - mc^2} v(\mathbf{p}) \quad (15.25)$$

$$v(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} c}{E + mc^2} u(\mathbf{p}) \quad (15.26)$$

これらが両立する条件はちょうど相対論の要請に類似している。

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (15.27)$$

しかし、ここで正エネルギーの固有値

$$E = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (15.28)$$

のほかに負エネルギー解

$$E = -\sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (15.29)$$

が存在する。この解の意味については後に考えよう。

正エネルギーの解については、速度が光速に比して十分小さければ

$$v(\mathbf{p}) \approx \frac{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2mc} u(\mathbf{p}) \quad (15.30)$$

なので下の成分は上に比べて $\mathcal{O}(\frac{v}{c})$ の程度の大きさになり無視できる。

反対に負エネルギーの解については、下の 2 成分が支配的な大きさを持つことがわかる。

15.3 電磁場の中の方程式

Dirac の方程式が何を表しているかは、電磁場の中の運動を調べることによって、はっきりする。

電磁場の中の電荷 q の粒子については、minimal なおきかえ

$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{x}) \quad (15.31)$$

$$H \longrightarrow H - qA_0(\mathbf{x}) \quad (15.32)$$

をすることによって電磁相互作用が記述されたので、ここでもこの原理を適用してみよう。ここで、

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{x}) \quad (15.33)$$

と略記することしよう。

$$H = c(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\alpha}) + mc^2 \beta + qA_0(\mathbf{x}) \quad (15.34)$$

$$= \begin{pmatrix} mc^2 I_2 + qA_0(\mathbf{x}) & \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} c \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} c & -mc^2 I_2 + qA_0(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (15.35)$$

4 成分の波動関数を

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{x}) \\ \chi(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (15.36)$$

として、

$$\begin{aligned} (H - E)\psi &= \begin{pmatrix} mc^2 I_2 + qA_0(\mathbf{x}) - E & \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} c \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} c & -mc^2 I_2 + qA_0(\mathbf{x}) - E \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{x}) \\ \chi(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = 0 \end{aligned} \quad (15.37)$$

これから、

$$\begin{aligned}(mc^2 I_2 + qA_0(\mathbf{x}) - E)\phi(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} c\chi(\mathbf{x}) &= 0 \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} c\phi(\mathbf{x}) + (-mc^2 I_2 + qA_0(\mathbf{x}) - E)\chi(\mathbf{x}) &= 0\end{aligned}\quad (15.38)$$

これより

$$\chi(\mathbf{x}) = \frac{1}{mc^2 - qA_0(\mathbf{x}) + E} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} c\phi(\mathbf{x}) \quad (15.39)$$

となるが、電磁場の中にあってもエネルギーは正で、 mc^2 から大きく離れることはないとする、

$$mc^2 - qA_0(\mathbf{x}) + E \approx 2mc^2 \quad (15.40)$$

と近似することができる。こうすると、

$$\chi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \phi(\mathbf{x}) \quad (15.41)$$

を第1の式に代入して、

$$\begin{aligned}\left\{ mc^2 I_2 + \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) + qA_0(\mathbf{x}) - E \right\} \\ \phi(\mathbf{x}) = 0\end{aligned}\quad (15.42)$$

がえられる。さて

$$\begin{aligned}\frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 = \\ \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{x}))^2 - \frac{q\hbar}{2m} (\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma})\end{aligned}\quad (15.43)$$

なので ϕ に対する方程式は

$$\begin{aligned}H = mc^2 \\ + \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{x}))^2 - \frac{q\hbar}{2m} (\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + qA_0(\mathbf{x})\end{aligned}\quad (15.44)$$

に対する固有値方程式

$$H\phi(\mathbf{x}) = E\phi(\mathbf{x}) \quad (15.45)$$

に他ならないことがわかった。

これはスピンの $\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$ で、その磁気能率が $\frac{q\hbar}{m}$ ではなくて $\frac{q\hbar}{2m}$ となっている。これはまさしく電子の性質である。

他方

$$\phi(\mathbf{x}) = -\frac{1}{mc^2 + qA_0(\mathbf{x}) - E} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} c\chi(\mathbf{x}) \quad (15.46)$$

となるが、 E が $-mc^2$ に近いとすると、

$$mc^2 + qA_0(\mathbf{x}) - E \approx 2mc^2 \quad (15.47)$$

と近似することができ、 χ に対する方程式はハミルトン演算子

$$\begin{aligned}H = -mc^2 \\ - \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{x}))^2 + \frac{q}{2m} (\mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + qA_0(\mathbf{x})\end{aligned}\quad (15.48)$$

に対する固有値方程式

$$H\chi(\mathbf{x}) = E\chi(\mathbf{x}) \quad (15.49)$$

になる。これに対する解釈は後に行おう。