

量子力学 I

神戸大学 神野隆介

jinno@phys.sci.kobe-u.ac.jp

目次

1 量子論の誕生	2
1.1 量子論とは	2
1.2 古典物理学の破綻	3
1.3 Schrödinger 方程式	9
1.4 規格化・確率流・期待値・分散	11
1.5 不確定性関係	14
2 時間に依存しない Schrödinger 方程式	19
2.1 変数分離	19
2.2 無限井戸型ポテンシャル	27
2.3 調和振動子	30
2.4 自由粒子	34
2.5 デルタ関数井戸	38
2.6 有限井戸型ポテンシャル	42
2.7 重要事項まとめ	50
3 量子論の基本的枠組み	51
3.1 ブラケット記法	51
3.2 量子状態	55
3.3 物理量	56
3.4 射影演算子・完全性関係	57
3.5 波動関数	61
3.6 離散スペクトルから連続スペクトルへ	63
3.7 Schrödinger 方程式	68
3.8 測定	75
3.9 不確定性関係	77
3.10 同時固有状態	84
4 調和振動子	88
4.1 復習：調和振動子に対する Schrödinger 方程式	88
4.2 生成消滅演算子	91
4.3 基底状態	94
4.4 励起状態	97
4.5 超対称量子力学	100

5	水素原子	107
5.1	3次元 Schrödinger 方程式	107
5.2	球対称 3次元 Schrödinger 方程式 (変数分離)	108
5.3	球対称 3次元 Schrödinger 方程式 (角度方向)	112
5.4	球対称 3次元 Schrödinger 方程式 (動径方向)	119
5.5	水素原子 (導入)	122
5.5.1	角度方向	122
5.5.2	動径方向	122
5.5.3	Lyman 系列・Balmer 系列・Paschen 系列	127
5.5.4	特殊関数まとめ	129
6	角運動量	143
6.1	角運動量代数	143
6.2	スピン	156
6.3	角運動量の合成 (導入)	177
7	発展的话题	190
7.1	Aharonov-Bohm 効果	190
7.2	Bell の不等式	195

前書き

以下の内容は、主に

[1] D. J. Griffiths and D. F. Schroeter, “Introduction to quantum mechanics”

[2] 猪木慶治, 川合光 『量子力学 I,II』

[3] 清水明 『新版 量子論の基礎』

[4] J.J. サクライ 『現代の量子力学』

を参照している。

1. 量子論の誕生

1.1 量子論とは

量子論は、古典論と対比される概念である。古典論とは、Newton 力学、Maxwell 電磁気学、相対性理論など、「各時刻に解析する対象 (質点・剛体・波など) の位置や速度が確定的に決まり、初期条件さえ与えられれば、その対象の位置や速度などの時間発展を確定的に追うことができる」理論のことを言う。例えば、質点と近似したボールを真上 (z 方向) に高さ $z = 0$ 、初速度 $\dot{z} = v_0$ で投げ上げた場合、ボールの運動は $ma = F \rightarrow m\ddot{z} = -mg$ と初期条件 $z(t = 0) = 0, \dot{z}(t = 0) = v_0$ で決まる。

驚くべきことに、ミクロな世界に行くと、我々の世界は古典論では記述できないことがわかっている。このミクロな世界を記述する理論が量子論である。歴史的には、古典論に従うと連続的な値を取れるはずの量¹がなぜかとびとびの値

¹ 例えば太陽の周りを回る惑星は、その角運動量に応じて、太陽からの距離を連続的に変えられることを思い起こしてほしい。

(= 量子) を取ることから、古典論の破綻の発見、および量子論の構築に至った。これが、今から習う、ミクロな世界を記述する理論を「量子論」と呼ぶ由縁である。では、早速その世界に飛び込んでみよう。

1.2 古典物理学の破綻

古典論が破綻する例は 19 世紀から見つかった。ここでは時系列に必ずしも拘らず、「波だと思われていたものが粒子の性質を示す例」「粒子だと思われていたものが波の性質を示す例」をいくつか紹介する。

まず、**波だと思われていたもの (= 光) が粒子の性質を示す例**を見てみよう。

- 黒体輻射 (blackbody radiation)

熱平衡下にある物質は一般に光を発している。溶鉱炉で鉄が赤く光るのを見たことがあるだろうか。熱平衡下にある物質が発する光のスペクトル (= 波長 λ あるいは周波数 ν の関数としての強度分布) をもとにその物質の温度を知ることは、産業上非常に重要であった。

問題を簡単にするため、どの波長の光も全て吸収してしまう理想的な物質を考えよう。これを「黒体」と言う。光を全て吸収するというのは反射光が存在しないという意味であり、熱平衡下に置かれたこの黒体自身から発せられる光は存在する。(近似的な) 黒体の例は、小さな覗き穴の付いた空洞、つまり溶鉱炉である。光は覗き穴から中に入っていくことができるが、覗き穴が小さいと、中で反射したその光が出ていく確率はほぼゼロである。「空洞内部の壁が黒体である」と言っているわけではないことに注意してほしい。内部の壁では、光の反射も吸収も起きていてよい。黒体は小さな覗き穴自身である。巨大な洞窟の小さな入り口に立つと、中は真っ暗に見えるだろう。その入り口は近似的に黒体なのだ。

さて、溶鉱炉のような近似的黒体から、黒体輻射のスペクトルは実験的に得られていた²。1900 年に Planck は、そのスペクトルを説明する式

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}, \quad (1.1)$$

を見出した。ここで c は光速、 $k_B = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J/K} = 1.381 \times 10^{-23} \text{ kg m}^2/\text{s}^2/\text{K}$ は Boltzmann 定数であり、また

Planck 定数

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ kg m}^2/\text{s} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}, \quad (1.2)$$

である。また $U(\nu, T)$ は、温度 T において光が振動数 ν 周りの微小幅 $d\nu$ の範囲で持つエネルギー密度 (= 単位体積あたりのエネルギー) が $U(\nu, T)d\nu$ であるものとして定義される。Planck は、

振動数 ν の光が持つエネルギーは、連続的な値を取ることができず、

$$E = nh\nu \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \text{ の値しか取ることができない}$$

と考えると、式 (1.1) が説明できることに気が付いた。説明は以下の通りである。熱力学・統計力学によると、温度 T においてエネルギー E の状態が現れる確率は $e^{-\frac{E}{k_B T}}$ に比例する。上記の仮説の下でエネルギーの平均値を求

² Planck 以前に黒体輻射のスペクトルを近似する式として、低振動数側ではレイリー・ジーンズの法則 (Rayleigh-Jeans law) $U_{\text{RJ}}(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2 k_B T}{c^3}$ 、高振動数側ではウィーンの法則 (Wien's law) $U_{\text{W}}(\nu, T) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^2} e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}$ が知られていた。これらは、式 (1.1) の近似式になっていることが確認できる。

めると

$$\langle E \rangle = \sum (\text{値}) \times (\text{確率}) = \sum_{n=0}^{\infty} nh\nu \times \frac{e^{-\frac{nh\nu}{k_B T}}}{\sum_{m=0}^{\infty} e^{-\frac{mh\nu}{k_B T}}} = \cdots = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}, \quad (1.3)$$

となる ([問 1.2] 参照)。ここに振動数 ν 周りの光子の状態数密度 (= 単位振動数・単位体積あたりの状態数) $\frac{8\pi\nu^2}{c^3}$ を掛けると式 (1.1) を得る。しかしながら、光が持つエネルギーが離散的な値しか取れない (= 量子化されている) というのは古典物理学では説明できない現象であった。

- 光電効果 (photoelectric effect)

光電効果とは、金属の表面に紫外線や X 線 (= 特定の振動数帯域の光) を当てると電子が飛び出してくる現象である (図 1)。入射する光の振動数と強度 (= 振幅の二乗) を変えたとき、

- (1) 飛び出す電子ひとつひとつのエネルギーは、入射する光の振動数のみに依存し、光の強度には依存しない
- (2) 飛び出してくる電子の数は、光の強度に比例する

という振る舞いが観測された。これは古典物理学の観点からはとても奇妙である。光の振動数を変えずに強度を上げていくと、期待されるのは飛び出す電子のエネルギーが上がっていくことである。しかし現実はそのではなく、飛び出す電子の個数が増えていった。しかも (1) に関連して、光の振動数がある値より小さいと、いくら強度を上げてても電子が出て来ない。1905 年、Einstein は

振動数 ν の光は、エネルギー $h\nu$ を持つ粒子の集団として振る舞う

とすることで光電効果を説明した。つまり、それまで光の強度を上げたと思っていたのは、実は光の個数を増やしていたのである。電子が光の粒子 (= 光子) 1 つを吸収してエネルギーを受け取る結果として金属表面から飛び出すとすると、電子が金属表面から飛び出するのに必要な仕事を W として、個々の光子のエネルギー $h\nu$ が W より大きければ電子は運動エネルギー $\frac{1}{2}m_e v^2 = h\nu - W$ で飛び出し、 $h\nu$ が W より小さければ電子が飛び出ることはない。また、飛び出す電子の数が光の強度に比例することも、光の強度が実は光子の個数であったと考えると説明がつく。

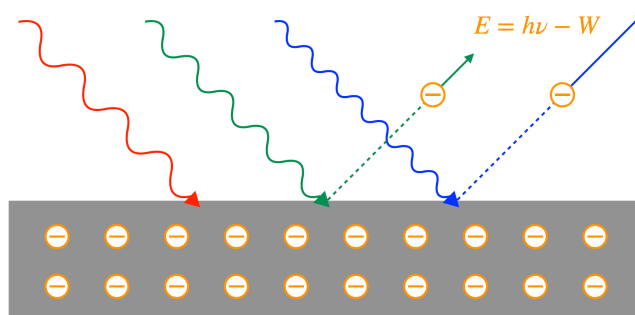


図 1: 光電効果の概念図。金属表面に光を入射すると、(1) 飛び出す電子のエネルギーは光の振動数に依存し、一定の振動数以下では飛び出さない。(2) 飛び出す電子の数は光の強度に比例する。

- Compton 効果

光が波であるとする、散乱によって振動数や波長が変わることはない。音波の例で言うと、人混みの先から聞こえる知り合いの声が、人混みがない場合と比べて高くなっていたり低くなっていたりすることはない。しかし、1923 年、Compton は電子によって散乱された光の波長が長くなる現象を観測した [5]。散乱前後の波長をそれぞれ

れ λ, λ' として、波長の変化は光の散乱角 θ にのみ依存し、

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta), \quad (1.4)$$

となることが判明した。この現象は、

振動数 ν の光は、エネルギー $h\nu$ 、運動量 $\frac{h\nu}{c} (= \frac{h}{\lambda})$ を持つ粒子として振る舞う

と考えることで説明できる (図 2 および [問 1.3] 参照)。

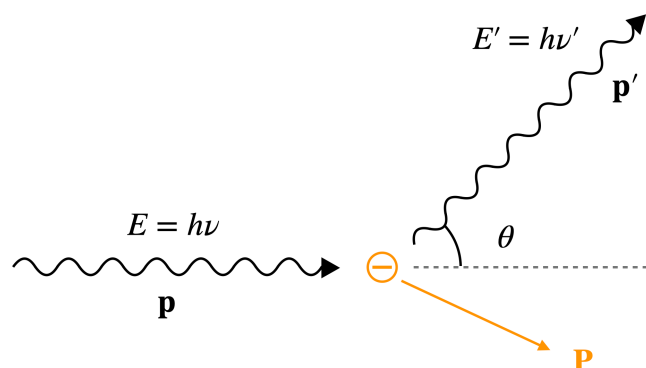


図 2: Compton 効果の概念図。

以上の現象は、光が粒子の性質を持つことを示す例であった。注意してほしいのは、光は波としての性質も同時に持ち続けていることである。1801-1805 年の Young の二重スリットの実験で観測されていたように、光は干渉縞を作る [6]。これは光が単に粒子だとすると説明できない事実である。

次に、**粒子**だと思われていたもの (= 電子) が**波**の性質を示す例を見てみよう。

- 電子の干渉縞

干渉縞の生成は波に特有の現象である。現代では電子の作る干渉縞が精度良く観測されている。図 3 に示したのは Tonomura et al. [7] の実験のセットアップと、それにより得られた電子の干渉縞 [8] である。この実験では、左から電子のビームを打ち込み、スリットを通過させ、右端のスクリーンで電子を検出する。電子 1 つのみでは干渉縞は見えないが、電子の個数を増やしていくと綺麗な干渉縞が得られることがわかる。もし電子が粒子としての性質だけを持つならば、上のスリットを通った電子の分布のピークと、下のスリットを通った電子の分布のピークの、2 つの山がスクリーンにできるはずである。しかし現実には多数の山と谷が干渉縞として観測される。

だがちょっと待ってほしい。干渉縞を作っているのは多数の電子の集まりであり、個々の電子はあくまで点として観測されている。これをどう解釈したらいいのだろうか。あり得る解釈は、個々の電子の**存在確率**に類する何かは波として存在しており、スクリーンを用いて**観測**すると、その存在確率に応じた場所で電子が見つかる、というものである。実際、次小節で導入する Schrödinger 方程式はそのような解釈を許す方程式系になっている。

- Davisson-Germer の実験と de Broglie 仮説

先の Tonomura et al. の実験は比較的现代の実験である。以下で見るように、電子の波長 (de Broglie 波長) はとても短いので、干渉縞を見るためにはスリット間の距離を非常に狭く調整する必要がある。そのような技術がない時代である 1925 年、Davisson と Germer は電子ビームを結晶表面に当てると、独特の回折パターンを示すことに偶然気が付いた [9]。この回折パターンは、結晶構造が実質的に上述のスリットの役割をしているために出現する ([1] 脚注 10)。

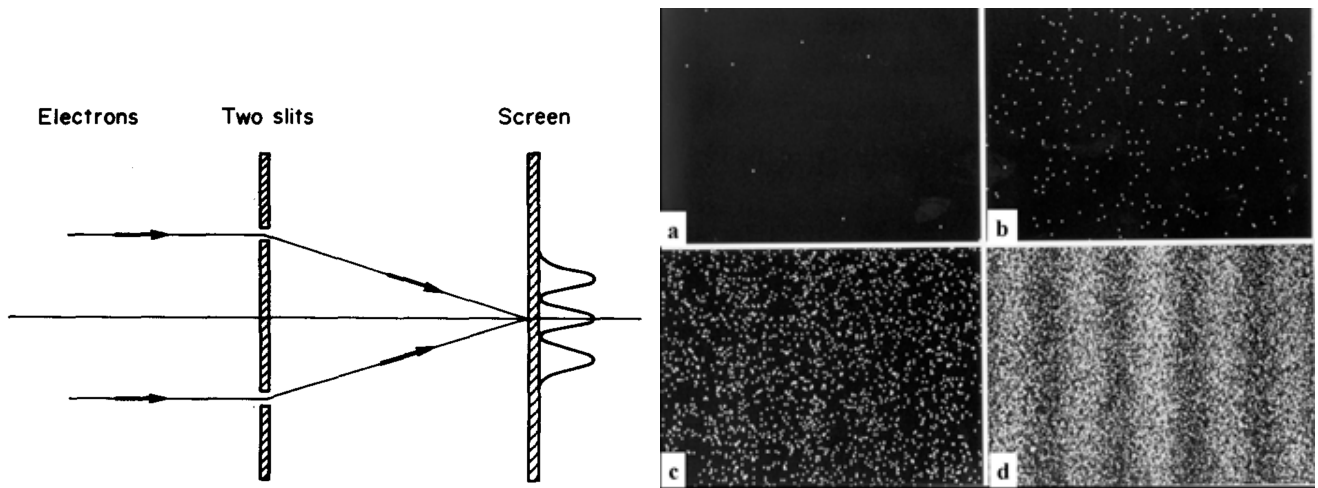


図 3: Tonomura et al. [7] の実験のセットアップと、それにより得られた電子の干渉縞 [8]。

この実験結果は、1923 年に提案された **de Broglie 仮説** の証拠として言及されるようになった。光子の場合、粒子としての性質であるエネルギー E と運動量 p は、波としての性質である振動数 ν と波長 λ をもとに

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda}, \quad (1.5)$$

と表されることが示唆されていた。de Broglie はこれを一般化し、**光子ではない物質粒子についても式 (1.5) が成立するのではないかと考えた [10]**。これを de Broglie 仮説と言う。また、式 (1.5) における物質粒子の波長

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (1.6)$$

λ を **de Broglie 波長** と言う。

さて、次節に進む前にいくつか事項を整理しよう。我々はエネルギーと振動数の関係式および運動量と波長の関係式を得たが、以降それらを Einstein の関係式および de Broglie の関係式と呼ぶ

Einstein の関係式と de Broglie の関係式

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda}. \quad (1.7)$$

また、振動数あるいは波長の代わりに、しばしば**角振動数**および**波数**

$$\omega = 2\pi\nu, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (1.8)$$

が用いられることがある (表 1 参照)。そうすると、Einstein および de Broglie の関係式は

Einstein の関係式と de Broglie の関係式

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k, \quad (1.9)$$

となる。ここに現れた $\hbar$ は

$$\hbar := \frac{h}{2\pi} = 1.055 \times 10^{-34} \text{ kg m}^2/\text{s}, \quad (1.10)$$

である。

時間 t に関連する量	空間 x に関連する量	粒子 $\leftrightarrow$ 波の関係
振動数 ν (単位時間あたりの波の数)	波長の逆数 $1/\lambda$ (単位空間あたりの波の数)	$E = h\nu, p = h/\lambda$
角振動数 $\omega = 2\pi\nu$	波数 $k = 2\pi/\lambda$	$E = \hbar\omega, p = \hbar k$

表 1: 波に関連する量。

[問 1.1]

- (1) Planck 定数の次元を MLT を用いて表せ。MLT とは M = mass(質量)、L = length(長さ)、T = time (時間) を用いた次元の表し方であり、例えば加速度 a は (長さ)/(時間)² なので、MLT で表すと $[a] = [\text{LT}^{-2}]$ となる。
- (2) 作用 S および角運動量 $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ の次元を MLT を用いて表せ。作用はラグランジアン¹の時間積分であること、およびラグランジアンはエネルギーと同じ次元を持っていることを用いるとよい。

[解 1.1]

- (1) $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ kg m}^2/\text{s}$ より、 $[h] = [\text{ML}^2\text{T}^{-1}]$ 。
- (2) 作用 S について、 $[S] = [\text{ML}^2\text{T}^{-2} \cdot \text{T}] = [\text{ML}^2\text{T}^{-1}]$ 。角運動量 $\mathbf{L}$ について、 $[\mathbf{x}] = [\text{L}]$ 、 $[\mathbf{p}] = [\text{MLT}^{-1}]$ より $[\mathbf{L}] = [\text{L} \cdot \text{ML}/\text{T}] = [\text{ML}^2\text{T}^{-1}]$ 。よって、Planck 定数は作用および角運動量と同じ次元を持つことがわかる。

[問 1.2] 式 (1.3) を証明しよう。逆温度 β を

$$\beta := \frac{1}{k_B T},$$

で定義すると、示すべきは

$$\frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-n\beta h\nu}}{\sum_{m=0}^{\infty} e^{-m\beta h\nu}} = \dots = \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1},$$

である。

- (1) 左辺分母について、

$$\sum_{m=0}^{\infty} e^{-m\beta h\nu} = \frac{e^{\beta h\nu}}{e^{\beta h\nu} - 1},$$

を示せ。

- (2) 左辺分子について、

$$\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-n\beta h\nu} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta h\nu},$$

であることを利用して、(1) の結果を微分することで

$$\sum_{n=0}^{\infty} nhve^{-n\beta hv} = \frac{hve^{\beta hv}}{(e^{\beta hv} - 1)^2},$$

を示し、(1) の結果と合わせて式 (1.3) を示せ。

[解 1.2]

(1)

$$\sum_{m=0}^{\infty} e^{-m\beta hv} = 1 + e^{-\beta hv} + e^{-2\beta hv} + \cdots = \frac{1}{1 - e^{-\beta hv}} = \frac{e^{\beta hv}}{e^{\beta hv} - 1}.$$

(2)

$$\sum_{n=0}^{\infty} nhve^{-n\beta hv} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta hv} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \frac{e^{\beta hv}}{e^{\beta hv} - 1} = \frac{hve^{\beta hv}}{(e^{\beta hv} - 1)^2}.$$

よって

$$\langle E \rangle = \frac{hve^{\beta hv}}{(e^{\beta hv} - 1)^2} \bigg/ \frac{e^{\beta hv}}{e^{\beta hv} - 1} = \frac{hv}{e^{\beta hv} - 1},$$

を得る。

[問 1.3] 式 (1.4) を導こう。運動量 $\mathbf{p}$ の入射光子が質量 m_e の静止した電子と衝突した結果、電子は運動量 $\mathbf{P}$ を受け取り、光子の運動量は $\mathbf{p}'$ になったとする。また、光子の散乱角を θ とする。

(1) (相対論的) エネルギー保存・運動量保存の式を立てよ。

(2) (1) で立てた式から $P := |\mathbf{P}|$ を消去することにより、式 (1.4) を導け。

[解 1.3]

(1) エネルギー保存

$$hv + m_e c^2 = hv' + \sqrt{m_e^2 c^4 + P^2 c^2},$$

運動量保存

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{P}.$$

(2) エネルギー保存より、

$$P^2 c^2 = \left[(hv - hv') + m_e c^2 \right]^2 - m_e^2 c^4 = (hv - hv')^2 + 2(hv - hv')m_e c^2.$$

一方、運動量保存より、

$$P^2 c^2 = (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2 c^2 = (hv)^2 + (hv')^2 - 2(hv)(hv') \cos \theta.$$

これらから $P^2 c^2$ を消去し、整理すると

$$(h\nu - h\nu')^2 + 2(h\nu - h\nu')m_e c^2 = (h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2(h\nu)(h\nu')\cos\theta \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\theta),$$

となるが、これは式 (1.4) である。

1.3 SCHRÖDINGER 方程式

我々が以下で取り扱うのは、次の Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = H\Psi(t, x), \quad (1.11)$$

である。Schrödinger 方程式を与えられたものとして進んでもよいのだが、以下ではこれを「導いて」みよう³。前小節で我々が得た関係式は

$$\text{粒子に関連する量} \left\{ \begin{array}{l} E = \hbar\omega \\ p = \hbar k \end{array} \right\} \quad \text{波に関連する量} \quad (1.12)$$

である。粒子が波動的描像を持ち、干渉縞が生じると言うことは、粒子を記述する何らかの関数 $\Psi(t, x)$ に**重ね合わせの原理**が働いていると推測できる。重ね合わせの原理とは、 $\Psi_1(t, x)$ が許される解であり、 $\Psi_2(t, x)$ も許される解であるとき、任意の複素数係数 c_1, c_2 を用いてこれらを足し合わせた $c_1\Psi_1(t, x) + c_2\Psi_2(t, x)$ も解となるという性質である。以下ではこれが成り立つと仮定する。

さて、問題を簡単にするため空間を 1 次元としよう。初期時刻を $t = 0$ に取り、その時刻における関数 $\Psi(t = 0, x)$ を考える。関数 $\Psi(t = 0, x)$ は、Fourier 変換により、様々な波数 k を持つ平面波 e^{ikx} の重ね合わせとして書くことができる

$$\Psi(t = 0, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) e^{ikx}. \quad (1.13)$$

ここで $c(k)$ は波数 k の平面波 e^{ikx} に対する重みであり、一般に複素数値を取る。直感的には、 $c(k)$ の絶対値が大きければ $\Psi(t = 0, x)$ は平面波 e^{ikx} を多く含んでおり、逆に $c(k)$ の絶対値が小さければ $\Psi(t = 0, x)$ は平面波 e^{ikx} をあまり含んでいない、ということである。

分解 (1.13) における平面波 e^{ikx} の時間発展を考えてみよう。この平面波が減衰や増幅することなく進んでいる場合、角振動数を ω として時間発展は

$$\Psi_{\text{plane}}(t, x) := e^{i(kx - \omega t)}, \quad (1.14)$$

と書ける。ということは、元の $\Psi(t, x)$ が平面波の重ね合わせである場合、

$$\Psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) e^{i(kx - \omega t)}. \quad (1.15)$$

という時間発展をしている。もちろん、波の進む速さは波数 k ごとに異なってよいため、 ω は k に依存する。平面波 $\Psi_{\text{plane}}(t, x)$ は x 方向に位相速度 $v_{\text{phase}} = \omega/k$ で進む波を表している。わざわざ「位相」速度と書いたのは、以下で異なる概念である「群」速度が出てくるからである。位相速度は、ある位相の値 ($= e^{i(\dots)}$ の $(\dots)$ の部分) を持つ点が進む速さ

³ ここで括弧「」を付けたのは、古典論しか知らない者にとって量子論を論理的に導くことはできないからである。このように、「」や“”などの括弧は、厳密にはそうではないことを暗に意味する場合がある。

を表している。さて、この平面波にとって「角振動数 ω を掛ける」という操作は、「時間 t で微分して i 倍する」という操作と同じである

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{plane}}(t, x) = \omega \Psi_{\text{plane}}(t, x). \quad (1.16)$$

同じように、この平面波にとって「波数 k を掛ける」という操作は、「位置 x で微分して $-i$ 倍する」という操作と同じである

$$-i \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{\text{plane}}(t, x) = k \Psi_{\text{plane}}(t, x). \quad (1.17)$$

ところで我々は、波に関連する量である ω と k が、 $E = \hbar\omega$ と $p = \hbar k$ を通じて粒子に関連する量に変換されるらしいと学んだ。(非相対論的) 粒子にはエネルギーと運動量の間に以下の関係がある

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (1.18)$$

ここで $V(x)$ は位置エネルギーあるいはポテンシャルエネルギーと呼ばれる実関数である。今考えている平面波が仮に微分方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{plane}}(t, x) = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi_{\text{plane}}(t, x) + V(x) \Psi_{\text{plane}}(t, x), \quad (1.19)$$

を満たしているとする、 $E = \hbar\omega$ と $p = \hbar k$ を通じて、粒子が持つべきエネルギーと運動量の関係を満たしているように見える。実際、微分方程式 (1.19) に具体的表式 (1.14) を代入すると

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{plane}}(t, x) &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi_{\text{plane}}(t, x) + V(x) \Psi_{\text{plane}}(t, x) \\ \Rightarrow (\hbar\omega) e^{i(kx - \omega t)} &= \frac{(\hbar k)^2}{2m} e^{i(kx - \omega t)} + V(x) e^{i(kx - \omega t)} \\ \xRightarrow{E = \hbar\omega, p = \hbar k} E e^{i(kx - \omega t)} &= \left[\frac{p^2}{2m} + V(x) \right] e^{i(kx - \omega t)} \\ \Rightarrow E &= \frac{p^2}{2m} + V(x), \end{aligned} \quad (1.20)$$

となる。ということは、式 (1.19) が、平面波 $\Psi_{\text{plane}}(t, x)$ の満たすべき方程式ではないかと推測できる。方程式 (1.19) は線形方程式なので、どの k を持つ平面波 $\Psi_{\text{plane}}(t, x)$ に対しても式 (1.19) が成り立っているなら、 $\Psi_{\text{plane}}(t, x)$ に複素数を掛けて足し合わせた関数である $\Psi(t, x)$ も同じ方程式を満たす

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(t, x). \quad (1.21)$$

これが Schrödinger 方程式である。 $\Psi(t, x)$ は**波動関数**と呼ばれ、 $[\dots]$ 部分は **Hamiltonian**

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad (1.22)$$

と呼ばれる。改めて書くと、

時間に依存する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = H \Psi(t, x), \quad (1.23)$$

である。「時間に依存する」と書いたのは、以下で「時間に依存しない Schrödinger 方程式」が出てくるからである。

ちなみに H は数ではなく微分演算子である。つまり、右に当たっている $\Psi(t, x)$ を微分したり、関数 $V(x)$ を掛けたりという操作をなさい、という記号である。また、Hamiltonian(1.22) は最も簡単な場合 (スピンのない単一粒子) の Hamiltonian であり、後で見るように、系のセットアップによって取るべき Hamiltonian は異なってくる。

さて、推測を重ねて Schrödinger 方程式を「導出」したが、

- 波動関数 $\Psi(t, x)$ は物質の何を表しているのか。
- Schrödinger 方程式を、推測するのではなく、厳密に導出できるのか。

といった疑問が出るかもしれない。1 つ目については第 3 節でも説明するが、Born の確率解釈「 $\Psi(t, x)$ は、 $|\Psi(t, x)|^2 dx$ が時刻 t に位置 $[x, x+dx]$ に粒子が発見される確率に比例するような、何らかの複素数」である。量子力学はこのように粒子の運動を確率的にしか論じられない⁴。人によっては、量子論は不完全な理論で、本当は何か隠れたパラメータの存在を見逃しているせいで確率的にしか論じられないのでは、と思うかもしれない。驚くべきことに、そのような隠れたパラメータが存在しないことが証明されている⁵。2 つ目については、Schrödinger 方程式の導出が不可能である理由が存在する。というのも、量子論はミクロな世界を記述する理論であるが、古典論に現れるマクロな物質 (質点・剛体等) も究極的にはミクロな物質で構成されている。したがって、量子論は原理的にはマクロな物質も記述しているはずの理論、つまり古典論を包含する理論である。古典論しか知らない者にとって、それを包含する理論である量子論を厳密に導く事はできない。なぜなら、導けたとしたらそれは古典論が量子論を含むことになってしまい、包含関係が逆転してしまうからである。したがって我々は量子論の基礎方程式を推測することしかできず、理論の正当性は実験結果と整合するかどうかで判定される。

1.4 規格化・確率流・期待値・分散

規格化 波動関数 $\Psi(t, x)$ の絶対値自乗 $|\Psi(t, x)|^2$ は、その時刻・位置での粒子の存在確率に比例すると述べた。今考えているのは粒子 1 つなので、全ての位置で積分すると 1 になるはずである

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(t, x)|^2 = 1. \quad (1.24)$$

これを波動関数の規格化と言う。ここで t は任意の時刻であるが、ある時刻に式 (1.24) が満たされていたとしても、その後の時刻で満たされなくなってしまう心配はないだろうか。式 (1.24) の左辺が時刻に応じてどう変わるか見るために t で微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(t, x)|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t, x)|^2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) + \left(\Psi^*(t, x) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) \right) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\left(-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^*(t, x) + \frac{i}{\hbar} V(x) \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) + \Psi^*(t, x) \left(\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x) - \frac{i}{\hbar} V(x) \Psi(t, x) \right) \right] \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) - \Psi^*(t, x) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x) \right) \right] \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) - \Psi^*(t, x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi(t, x) \right) \right] \\ &= 0, \end{aligned} \quad (1.25)$$

となる。式 (1.25) は、式 (1.24) の左辺が時刻によって変化しないことを意味している。よって、ある時刻で規格化されていれば、後の時刻でも規格化されていることがわかる。

⁴ 例えば位置の固有状態を取れば位置は確定するが、運動量を同時に確定させることはできない。

⁵ 後に Bell の不等式を用いて説明する。

確率流 電磁気で学んだように、保存する電荷 (= 空間全体で積分した総量が、時刻によらず一定になる電荷) がある場合、位置 $\vec{x}$ での電荷密度 ρ と電流 $\mathbf{j}$ は関係式

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t, \vec{x}) = -\nabla \cdot \mathbf{j}(t, \vec{x}), \quad (1.26)$$

を満たしていた。空間 1 次元の系では

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t, x) = -\frac{\partial}{\partial x} j(t, x), \quad (1.27)$$

である。簡単に言えば「位置 x で電荷 ρ が減った ($\frac{\partial}{\partial t} \rho(t, x) < 0$) なら、それは電流 j に乗って電荷が出て行った ($\frac{\partial}{\partial x} j(t, x) > 0$) から」ということである。今我々が考えている系も、

確率密度 ρ と確率流 j

$$\rho(t, x) = |\Psi(t, x)|^2, \quad j(t, x) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) - \Psi^*(t, x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi(t, x) \right) \right], \quad (1.28)$$

と置くと、Schrödinger 方程式 (1.23) から式 (1.27) が示せる。ここで、 $\rho = |\Psi|^2$ を確率密度と解釈すべきことは既に述べたが、 j がそれに対応する流れになっているので、確率流と呼ぶことにする。

[問 1.4]

Schrödinger 方程式

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

を用いて

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t, x) = -\frac{\partial}{\partial x} j(t, x),$$

を示せ。ただし、確率密度と確率流は

$$\rho(t, x) = |\Psi(t, x)|^2, \quad j(t, x) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) - \Psi^*(t, x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi(t, x) \right) \right],$$

で定義される。

[解 1.4]

Schrödinger 方程式を用いることで

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(t, x) &= \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t, x)|^2 \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) + \left(\Psi^*(t, x) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) \right) \\ &= \left(-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^*(t, x) + \frac{i}{\hbar} V(x) \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) + \Psi^*(t, x) \left(\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x) - \frac{i}{\hbar} V(x) \Psi(t, x) \right) \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) - \Psi^*(t, x) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x) \right) \right] \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) - \Psi^*(t, x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi(t, x) \right) \right] \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} j(t, x), \end{aligned}$$

となる。

期待値 波動関数は粒子の存在確率に比例することがわかった。では、粒子の位置の期待値 $\langle x \rangle$ はどうすれば計算できるだろうか。期待値の求め方

$$(\text{期待値}) = \sum (\text{値}) \times (\text{確率}), \quad (1.29)$$

を思い出そう。積分 $\int$ は和 $\sum$ と本質的に同じなので、期待値 $\langle x \rangle$ は

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\Psi(t, x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) x \Psi(t, x), \quad (1.30)$$

で求められる。最後の式変形で x を Ψ^* と Ψ の中に挟み込んだ理由は以下で述べる。一般に、 x で表せる量 $Q(x)$ の期待値を求めたいければ

$$\langle Q(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) Q(x) \Psi(t, x), \quad (1.31)$$

とすればよい。では、速度の期待値を求めたい時はどうすればいいだろうか。「期待値 $\langle x \rangle$ から構成した速度」であれば次のように求められる

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\Psi(t, x)|^2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx x \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) + \left(\Psi^*(t, x) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) \right) \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx x \frac{\partial}{\partial x} \left[- \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) + \Psi^*(t, x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi(t, x) \right) \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) - \Psi^*(t, x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi(t, x) \right) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \left(-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(t, x). \end{aligned} \quad (1.32)$$

最後の等号では第一項を部分積分し、表面項を落としたことに注意しよう。さて、欲しかったものは「速度 v の期待値」であるが、この最終表式が「 $-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x}$ の平均」のように見えないだろうか。そこで、速度 v とは $\Psi(t, x)$ にとっては微分演算子 $-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x}$ なのだと解釈し、 $v = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x}$ と表示することにする

$$\langle v \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \left(-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(t, x). \quad (1.33)$$

が得られる。ところで、量子力学では速度より運動量を用いることが多い。上と同様に、「期待値 $\langle x \rangle$ から構成した運動量」を計算すると

$$\langle p \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(t, x), \quad (1.34)$$

となるから、運動量 p とは $\Psi(t, x)$ にとっては微分演算子 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ であると解釈できる

運動量 p の x 表示

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (1.35)$$

分散 統計において重要な量に分散がある。分散とは「ある確率分布に従う量が、その平均値周りにどのくらい散らばって分布しているか」を表した量である。確率分布に従う量を Q と書くと、その分散 σ_Q^2 は、 Q の平均値からのずれ $\Delta Q := Q - \langle Q \rangle$ の二乗の平均として定義され、

$$\sigma_Q^2 := \langle (\Delta Q)^2 \rangle = \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle Q^2 - 2Q\langle Q \rangle + \langle Q \rangle^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2, \quad (1.36)$$

と求められる。まず、1 つ目の等号は σ_Q^2 の定義である。次に、 $\Delta Q (:= Q - \langle Q \rangle)$ は 2 文字で 1 つの量を意味しており、 $\Delta \times Q$ ではないことに注意しよう。最後の等号では、 $\langle \dots \rangle$ の中の $\langle Q \rangle$ は既に平均を取った後の「ただの数値」になっており、さらに平均を取っても値に変化はないため、 $\langle -2Q\langle Q \rangle \rangle = -2\langle Q \rangle \langle Q \rangle = -2\langle Q \rangle^2$ および $\langle \langle Q \rangle^2 \rangle = \langle Q \rangle^2$ となることに注意しよう。よって、例えば x および p の分散は

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) x^2 \Psi(t, x) - \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) x \Psi(t, x) \right]^2, \quad (1.37)$$

および

$$\sigma_p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi(t, x) - \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(t, x) \right]^2, \quad (1.38)$$

で求められる。

1.5 不確定性関係

古典論であれば、質点の位置と運動量を同時に指定できた。しかし量子論には「不確定性関係」と呼ばれる関係があり、粒子の位置と運動量を同時に指定できないことが知られている。

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (1.39)$$

証明は第 3 節で行うことにして、ここでは [問 1.7][問 1.8] で具体例をもとに不確定性関係 (1.39) が成り立つことを見る。

[問 1.5] ([1] Problem 1.3)

時刻 $t = 0$ における確率密度 $\rho(t = 0, x)$ が

$$\rho(t = 0, x) = A e^{-\lambda(x-a)^2},$$

で与えられているとする。ここで A, a, λ は正の実数である。

(1) 規格化定数 A を求めよ。必要であれば、以下の Gauss 積分の導出のヒント

$$\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\lambda x^2} \right]^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\lambda(x^2+y^2)} = \int_0^{\infty} r dr \int_0^{2\pi} d\theta e^{-\lambda r^2} = \int_0^{\infty} \frac{1}{2} d(r^2) \int_0^{2\pi} d\theta e^{-\lambda r^2},$$

を用いよ。

(2) 期待値 $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle$ および分散 σ_x^2 を求めよ。

(3) $\rho(t = 0, x)$ のグラフの概形を描け。

[解 1.5]

(1) Gauss 積分は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\lambda x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}},$$

となるから、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(t=0, x) = A \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}.$$

(2)

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx x \rho(t=0, x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} x e^{-\lambda(x-a)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} [(x-a) + a] e^{-\lambda(x-a)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} a e^{-\lambda(x-a)^2} = a, \\ \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \rho(t=0, x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} x^2 e^{-\lambda(x-a)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} [(x-a)^2 + 2a(x-a) + a^2] e^{-\lambda(x-a)^2} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} [(x-a)^2 + a^2] e^{-\lambda(x-a)^2} = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \left[-\frac{\partial}{\partial \lambda} + a^2 \right] \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\lambda(x-a)^2} = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \left[-\frac{\partial}{\partial \lambda} + a^2 \right] \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \\ &= \frac{1}{2\lambda} + a^2, \\ \sigma^2 &= \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{2\lambda}. \end{aligned}$$

(3) 略。

[問 1.6] ([1] Problem 1.7)

Schrödinger 方程式の下で、以下の関係式

Ehrenfest の定理

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle,$$

を示せ。ただし $\langle p \rangle = \left\langle -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(t, x)$ である。これは期待値が古典論の運動方程式に従うことを意味しており、Ehrenfest の定理と呼ばれる。

[解 1.6]

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}\langle p \rangle &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(t, x) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(t, x) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(t, x) + \Psi^*(t, x) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left(\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(t, x) \right) \right] \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(t, x) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(t, x) + \Psi^*(t, x) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) \right) \right) \right] \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[-H \Psi^*(t, x) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi(t, x) + \Psi^*(t, x) \cdot \frac{\partial}{\partial x} (H \Psi(t, x)) \right] \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[- \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi^*(t, x) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi(t, x) + \Psi^*(t, x) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(t, x) \right] \\
 &\stackrel{\text{部分積分}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[- \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi^*(t, x) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi(t, x) + \Psi^*(t, x) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(t, x) \right) \right] \\
 &= - \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \cdot \frac{\partial V}{\partial x} \cdot \Psi(t, x) \\
 &= - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle.
 \end{aligned}$$

ただし、部分積分の箇所では波動関数およびその微分たちが遠方で十分早く 0 になることを仮定した。

[問 1.7] ([1] Problem 1.9)

波動関数 $\Psi(t, x)$ が

$$\Psi(t, x) = A e^{-a \left(\frac{mx^2}{\hbar} + it \right)},$$

で与えられているとする。ただし m は考えている粒子の質量であり、 A, a は正の実数とする。

- (1) 規格化定数 A を a, m の関数として表せ。
- (2) どのようなポテンシャル $V(x)$ に対して、上記の波動関数は Schrödinger 方程式の解となっているか。
- (3) 任意の時刻 t における期待値 $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle, \langle p \rangle, \langle p^2 \rangle$ を求めよ。
- (4) 分散 σ_x^2, σ_p^2 を求め、それらが不確定性関係 $\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$ に従っていることを確かめよ。

[解 1.7]

(1)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(t, x)|^2 = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{2amx^2}{\hbar}} = A^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2am}} = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \left(\frac{2am}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}}.$$

(2)

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) &= a\hbar A e^{-a \left(\frac{mx^2}{\hbar} + it \right)} = a\hbar \Psi(t, x), \\
 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{4am^2 x^2}{\hbar^2} - \frac{2am}{\hbar} \right) \right] A e^{-a \left(\frac{mx^2}{\hbar} + it \right)} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{4am^2 x^2}{\hbar^2} - \frac{2am}{\hbar} \right) \right] \Psi(t, x),
 \end{aligned}$$

を Schrödinger 方程式に代入して、

$$V(x) \Psi(t, x) = 2a^2 m x^2 \Psi(t, x),$$

よって

$$V(x) = 2a^2 mx^2.$$

(3)

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\Psi(t, x)|^2 = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-\frac{2amx^2}{\hbar}} = 0, \\ \langle x^2 \rangle &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\frac{2amx^2}{\hbar}} = \frac{\hbar}{4am}, \\ \langle p \rangle &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(t, x) = 2iamA^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-\frac{2amx^2}{\hbar}} = 0, \\ \langle p^2 \rangle &= (-i\hbar)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x) = -\hbar^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{4am^2 x^2}{\hbar^2} - \frac{2am}{\hbar} \right) e^{-\frac{2amx^2}{\hbar}} = am\hbar.\end{aligned}$$

(4)

$$\begin{aligned}\sigma_x^2 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{\hbar}{4am} & \Rightarrow & \sigma_x = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}}, \\ \sigma_p^2 &= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = am\hbar & \Rightarrow & \sigma_p = \sqrt{am\hbar}.\end{aligned}$$

よって

$$\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2},$$

であるから、不確定性関係を満たしている。

[問 1.8] ([1] Problem 1.16)

時刻 $t = 0$ における波動関数が

$$\Psi(t = 0, x) = \begin{cases} A(a^2 - x^2) & (-a \leq x \leq a) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases},$$

と表されているとする。ただし A は正の実数とする。

- (1) 規格化定数 A を a の関数として表せ。
- (2) $\langle x \rangle$ を求めよ。
- (3) $\langle p \rangle$ を求めよ。
- (4) $\langle x^2 \rangle$ を求めよ。
- (5) $\langle p^2 \rangle$ を求めよ。
- (6) σ_x^2 を求めよ。
- (7) σ_p^2 を求めよ。
- (8) 不確定性関係 $\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$ が成り立っていることを確かめよ。

[解 1.8]

(1)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(t=0, x)|^2 = A^2 \int_{-a}^a dx (a^2 - x^2)^2 = \frac{16}{15} A^2 a^5 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{15}{16a^5}}.$$

(2)

$$\langle x \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x (a^2 - x^2)^2 = 0.$$

(3)

$$\langle p \rangle = -i\hbar A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx (a^2 - x^2) \frac{d}{dx} (a^2 - x^2) = 0.$$

(4)

$$\langle x^2 \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 (a^2 - x^2)^2 = \frac{a^2}{7}.$$

(5)

$$\langle p^2 \rangle = (-i\hbar)^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx (a^2 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} (a^2 - x^2) = \frac{5\hbar^2}{2a^2}.$$

(6)

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{a^2}{7}.$$

(7)

$$\sigma_p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \frac{5\hbar^2}{2a^2}.$$

(8)

$$\sigma_x \sigma_p = \sqrt{\frac{a^2}{7}} \sqrt{\frac{5\hbar^2}{2a^2}} = \sqrt{\frac{5}{14}} \hbar > \frac{\hbar}{2}.$$

2. 時間に依存しない SCHRÖDINGER 方程式

2.1 変数分離

この節では実際に Schrödinger 方程式 (1.23) の解き方について考える。改めて書くと

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x) + V(x) \Psi(t, x), \quad (2.1)$$

である。以下、ポテンシャル $V(x)$ は与えられているものとする。 $V(x)$ は一般には時刻 t にも依存するが、ここでは x 에만依存する場合のみ考える。まず波動関数が変数分離型

$$\Psi(t, x) = \psi(x) \varphi(t), \quad (2.2)$$

であると仮定する。後でわかることだが、これは $\Psi(t, x)$ が常に式 (2.2) のような分離した形で書けると言っているわけではなく、あくまで最終的な $\Psi(t, x)$ を表すための**構成要素**として式 (2.2) を満たす解を用いる、ということである。いずれにしても、今は式 (2.2) の形で書ける解をとりあえず考える、と思ってよい。Schrödinger 方程式に代入して、 $\frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = \psi(x) \frac{d\varphi(t)}{dt}$ および $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x) = \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \varphi(t)$ を用いると、

$$i\hbar \psi(t) \frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \varphi(t) + V(x) \psi(x) \varphi(t), \quad (2.3)$$

となる。両辺を $\psi(x) \varphi(t)$ で割ると

$$i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x), \quad (2.4)$$

となるが、左辺は t だけの関数、右辺は x だけの関数なので、これらが一致するには両辺が定数でないといけない。その定数を E と置こう。すると

$$i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = E, \quad (2.5)$$

より、2つの式

$$i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} = E \varphi(t), \quad (2.6)$$

および

時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$H\psi(x) = E\psi(x), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2.7)$$

を得る。**変数分離**の結果、 t と x 両方に依存する偏微分方程式が、 t だけ、あるいは x だけに依存する常微分方程式 (2.6), (2.7) に分解された。式 (2.6) はすぐに解くことができ、

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}, \quad (2.8)$$

を与える⁶。時間に依存しない Schrödinger 方程式 (2.7) の解と、そこから構成される (2.2) の性質をいくつか見よう。

⁶ 解 (2.8) には任意定数倍の不定性があるが、それは $\psi(x)$ に掛かる任意定数の不定性に吸収することにする。

- 解 $\Psi(t, x) = \psi(x)\varphi(t)$ は $\varphi(t)$ を通じて時間に依存している。しかし、

$$|\Psi(t, x)|^2 = \Psi^*(t, x)\Psi(t, x) = \varphi^*(t)\varphi(t)\psi^*(x)\psi(x) = e^{-\frac{i(E-E^*)t}{\hbar}} |\psi(x)|^2, \quad (2.9)$$

であるから、 E が実数である限り確率密度は時間に依存しない。逆に、 E が複素成分を持つと確率密度が時間依存することもわかる。時間に依存しない確率密度を持つ $\Psi(t, x)$ あるいは $\psi(x)$ を**定常状態 (stationary states)** と言う。特に、規格化可能な $\Psi(t, x) = \psi(x)\varphi(t)$ については E が実数となり⁷、したがって定常状態となる ([問 2.2] 参照)。定常状態に対しては、確率密度、確率流、および時間に陽に依存しない任意の物理量の期待値が時間に依存しなくなる。本節では特に断らない限り実数値の E を考える。

また、「状態」という用語を定義していないが、この章では関数 $\Psi(t, x)$ あるいは $\psi(x)$ のことだと思ってよい。より正確な定義は第 3 章で行う。また、今まで「波動関数」という言葉は $\Psi(t, x)$ を指していたが、 $\psi(x)$ も「波動関数」と呼ぶことが多い。どちらを指しているかは文脈で判断できる。

- 解 $\psi(x)$ は Hamiltonian の固有関数である。実際、式 (2.7) は $\psi(x)$ が演算子 H の固有関数であることを意味している。Hamiltonian の固有値を**エネルギー (energy)** と言い、したがって解 $\psi(x)$ は定まったエネルギーを持つ状態である。そのような $\psi(x)$ あるいは $\Psi(t, x)$ を**エネルギー固有状態 (energy eigenstate)** と言う。実際、エネルギー固有状態において、

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) H \Psi(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) H \psi(x) \stackrel{H\psi(x)=E\psi(x)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) E \psi(x) = E \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = E, \\ \langle H^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) H^2 \Psi(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) H^2 \psi(x) \stackrel{H\psi(x)=E\psi(x)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) E^2 \psi(x) = E^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = E^2, \end{aligned}$$

であるから、 H の分散が 0 となること

$$\sigma_H^2 = \langle (H - \langle H \rangle)^2 \rangle = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = 0, \quad (2.10)$$

が示せる。わざわざ「定まったエネルギーを持つ状態」と強調したことからわかるかもしれないが、「エネルギーが定まっていない状態」も存在する。それが以下である。

- 一般に、Schrödinger 方程式の解は変数分離した解 $\psi(x)\varphi(t)$ の重ね合わせである。実際、エネルギー固有値を E_n ($n = 1, 2, \dots$)、対応する解を $\Psi_n(t, x) = \psi_n(x)\varphi_n(t)$ と書くとして、それらを任意定数 c_n の重みで足し合わせた

$$\Psi(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \varphi_n(t), \quad (2.11)$$

は、元の時間に依存する Schrödinger 方程式の解である。確かめてみると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_n(t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) E_n \varphi_n(t), \quad (2.12)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi_n(x) \varphi_n(t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n E_n \psi_n(x) \varphi_n(t), \quad (2.13)$$

より 2 つは一致し、確かに元の Schrödinger 方程式を満たしている。

⁷ E が複素数値を取る例には共鳴状態などがある。Hamiltonian は Hermite 演算子なので固有値は実数と思うかもしれないが、それは自乗可積分な波動関数についてであり、自乗可積分でない波動関数についてはその限りではない。

[問 2.1] ([1] Example 2.1)

時刻 $t = 0$ において、粒子の波動関数が 2 つの定常状態の重ね合わせ

$$\Psi(t=0, x) = c_1 \psi_1(x) + c_2 \psi_2(x),$$

にあったとする。 $\psi_1(x), \psi_2(x)$ のエネルギーを E_1, E_2 とし、簡単のため c_1, c_2 は実数とする。一般の時刻 t における波動関数 $\Psi(t, x)$ を書き下せ。また、一般の時刻 t において位置 x に粒子を見出す確率密度 $|\Psi(t, x)|^2$ を書き下し、その振る舞いを見ることで、この状態は定常状態かどうか判定せよ。

[解 2.1] 波動関数は

$$\Psi(t, x) = c_1 \psi_1(x) e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} + c_2 \psi_2(x) e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}},$$

確率密度は

$$|\Psi(t, x)|^2 = \left| c_1 \psi_1(x) e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} + c_2 \psi_2(x) e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \right|^2 = c_1^2 \psi_1^2(x) + c_2^2 \psi_2^2(x) + 2c_1 c_2 \psi_1(x) \psi_2(x) \cos\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right),$$

となる。確率密度の最終項 $2c_1 c_2 \psi_1(x) \psi_2(x) \cos\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right)$ は角振動数 $\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}$ で振動するため、この状態は定常状態ではない。

[問 2.2] ([1] Problem 2.1 改)

(1) $\Psi_n(t, x)$ が規格化可能 (= 定数倍の再定義により、ある時刻において $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_n(t, x)|^2 = 1$ と設定することが可能) である場合、 E_n は実であることを次の方針で示せ。まず一般に

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_n(t, x)|^2 = e^{-\frac{i(E_n - E_n^*)t}{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2,$$

となることを示せ。ある時刻において左辺を $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_n(t, x)|^2 = 1$ と規格化できるなら、別の時刻でも $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_n(t, x)|^2 = 1$ となることを式 (1.25) で見た。これを用いて E_n が実であることを示せ。(この証明には、波動関数が規格化可能であること、および式 (1.25) において確率流が無限遠方で消えることを用いていることに注意。)

(2) 前問より実の E_n を考える。 $\psi_n(x)$ は実として一般性を失わないことを示せ。

[解 2.2]

(1) $E_n = \text{Re}E_n + i\text{Im}E_n$ と書く。

$$|\Psi_n(t, x)|^2 = \Psi_n^*(t, x) \Psi_n(t, x) = e^{-\frac{i(E_n - E_n^*)t}{\hbar}} \psi_n^*(x) \psi_n(x) = e^{-\frac{i(E_n - E_n^*)t}{\hbar}} |\psi_n(x)|^2,$$

であるから、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_n(t, x)|^2 = e^{-\frac{i(E_n - E_n^*)t}{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2,$$

となる。ある時刻において定数倍の再定義により左辺を $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_n(t, x)|^2 = 1$ と規格化できるなら、後の時刻でも $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_n(t, x)|^2 = 1$ となることを式 (1.25) で見た。左辺が有限値かつ t に依存しないので、右辺の t 依存性も消えなければならない。よって $E_n = E_n^*$ 、すなわち E_n は実である。

(2) $\psi_n(x)$ および $\psi_n^*(x)$ に対する Schrödinger 方程式は

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) + V(x) \psi_n(x) &= E_n \psi_n(x), \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n^*(x) + V(x) \psi_n^*(x) &= E_n \psi_n^*(x), \end{aligned}$$

である。後者の式は前者において複素共役を取って導いた。これらより

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} [\psi_n(x) + \psi_n^*(x)] + V(x) [\psi_n(x) + \psi_n^*(x)] &= E_n [\psi_n(x) + \psi_n^*(x)], \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} [i(\psi_n(x) - \psi_n^*(x))] + V(x) [i(\psi_n(x) - \psi_n^*(x))] &= E_n [i(\psi_n(x) - \psi_n^*(x))], \end{aligned}$$

が導かれる。よって $\psi_n(x)$ は、Schrödinger 方程式の解であるような実関数 $\psi_n(x) + \psi_n^*(x)$ あるいは $i(\psi_n(x) - \psi_n^*(x))$ の線型結合を用いて表すことができる。元々時間に依存しない Schrödinger 方程式を考えたのは、波動関数 $\Psi(t, x)$ を構成要素 $\Psi_n(x) = \psi_n(x) \varphi_n(t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$ を用いて表すことが目的であったが、 $\psi_n(x)$ の満たす Schrödinger 方程式と同じ方程式の解であるような実関数 $\psi_n(x) + \psi_n^*(x)$ および $i(\psi_n(x) - \psi_n^*(x))$ の線型結合を用いて $\psi_n(x)$ 自身を表すことができるため、初めから $\psi_n(x)$ を実の範囲で考えて一般性を失わない。

さて、波動関数が定常状態の線型結合

$$\Psi(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \varphi_n(t), \quad (2.14)$$

で表されることがわかったが、係数 c_n の物理的意味は何だろうか。正確な説明は第 3 節で与えるとして、ここでは

——— 係数 c_n の物理的意味 ———

粒子のエネルギー E を測定したときに、測定値 E_n を得る確率は $|c_n|^2$ である

という性質を述べておく。これを認めると、測定値はどれかの E_n を取るはずだから、確率の和に関して

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1, \quad (2.15)$$

が成り立つことがわかる。また、Hamiltonian H の期待値、つまりエネルギーの期待値は

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) H \Psi(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n, \quad (2.16)$$

となることも導かれる。

——— コラム：固有値とは？ ———

固有値とは何か覚えているだろうか。正方行列 A の固有値は、ある $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ について

$$A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}, \quad (2.17)$$

を満たすような λ である。この説明だけでは素っ気ないので、次のように言ってもいいかもしれない

- 行列 A は、あるベクトル $\mathbf{v}$ にとっては定数 λ と実質的に同じになる。そういうベクトル $\mathbf{v}$ と定数 λ を固有ベクトルおよび固有値と言う。

ベクトル v を雑に選んでしまうと、 Av が v の定数倍になるという偶然は普通起こらない。しかし、ある v に対しては A を掛ける効果が定数倍を掛けるのと同じになる、と言っている。さて、微分方程式にも固有値が存在する。 x 微分や x の関数を一般に含む演算子 $\mathcal{O}$ に対し、

$$\mathcal{O}\psi(x) = \lambda\psi(x), \quad (2.18)$$

を満たすような λ を固有値、 $\psi(x)$ を固有関数と言う。上と同じ言い方をすると、

- 演算子 $\mathcal{O}$ は、ある関数 $\psi(x)$ にとっては定数 λ と実質的に同じになる。そういう関数 $\psi(x)$ と定数 λ を固有関数および固有値と言う。

行列の場合と同じであることがわかるだろうか。行列も演算子も同じであることは、 x 軸を離散化して、次のように書くと納得できるかもしれない。例えば $\mathcal{O} = \frac{d^2}{dx^2}$ とすると

$$\frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & & \\ & \ddots & -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots \\ \cdots & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \ddots \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi(x=-2\Delta x) \\ \psi(x=-\Delta x) \\ \psi(x=0) \\ \psi(x=\Delta x) \\ \psi(x=2\Delta x) \\ \vdots \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi(x=-2\Delta x) \\ \psi(x=-\Delta x) \\ \psi(x=0) \\ \psi(x=\Delta x) \\ \psi(x=2\Delta x) \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

となる。行列に現れる $\cdots 1 -2 1 \cdots$ が 2 階微分 $\frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\psi(x+\Delta x) - \psi(x)}{\Delta x} - \frac{\psi(x) - \psi(x-\Delta x)}{\Delta x} \right)$ を作り出している。極限 $\Delta x \rightarrow 0$ を取ると、行列の固有値を求める操作が演算子の固有値を求める操作と同じになることがわかる。

[問 2.3]

Schrödinger 方程式 (2.7) について、式 (2.19) と同様の離散化された方程式を書け。

[解 2.3]

$$\begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & & \\ & \ddots & \frac{2}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} + V(x=-2\Delta x) & -\frac{1}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & -\frac{1}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} & \frac{2}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} + V(x=-\Delta x) & -\frac{1}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & -\frac{1}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} & \frac{2}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} + V(x=0) & -\frac{1}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & 0 & -\frac{1}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} & \frac{2}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} + V(x=\Delta x) & -\frac{1}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} & \cdots \\ \cdots & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} & \frac{2}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar^2}{2m} + V(x=2\Delta x) & \ddots \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi(x=-2\Delta x) \\ \psi(x=-\Delta x) \\ \psi(x=0) \\ \psi(x=\Delta x) \\ \psi(x=2\Delta x) \\ \vdots \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi(x=-2\Delta x) \\ \psi(x=-\Delta x) \\ \psi(x=0) \\ \psi(x=\Delta x) \\ \psi(x=2\Delta x) \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

エネルギー E についてどの範囲を考えるべきかについては、以下の定理が有用である。

ポテンシャル $V(x)$ が与えられたとき、時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (2.20)$$

において、 $V(x)$ の最小値を $V_{\min}$ と書くと、 $E < V_{\min}$ に対して規格化可能な解 $\psi(x)$ は存在しない。

証明は以下の通りである。規格化可能な $\psi(x)$ が存在するとする。まず [問 2.2] より $\psi(x)$ は実数として一般性を失わない。 $\psi(x)$ は規格化可能であるから $\psi(x \rightarrow \pm\infty) = 0$ でなければならないが、その場合、 $\psi(x) > 0$ かつ $\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) < 0$ 、あるいは $\psi(x) < 0$ かつ $\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) > 0$ 、となる点がなければならない (図 4 赤点)。しかし Schrödinger 方程式 $\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2m(V(x)-E)}{\hbar^2} \psi(x)$ において $E < V_{\min}$ より $\frac{d^2}{dx^2} \psi(x)$ と $\psi(x)$ は常に同じ符号を持つため、このような点は存在しない。したがって $E < V_{\min}$ に対して規格化可能な解は存在しない。

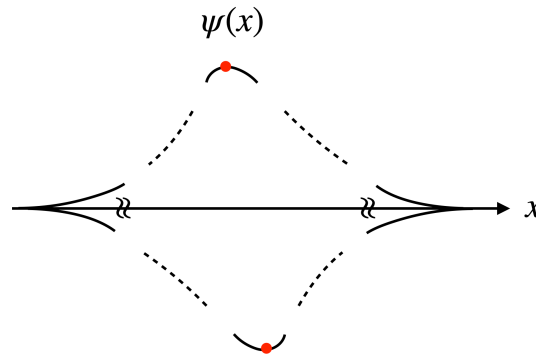


図 4: 規格化可能な $\psi(x)$ に対する、 $\psi(x) > 0$ かつ $\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) < 0$ 、あるいは $\psi(x) < 0$ かつ $\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) > 0$ 、となる点。

一般に、エネルギー E が $E < V(x \rightarrow -\infty)$ かつ $E < V(x \rightarrow \infty)$ のとき、エネルギーは離散的な値を取り、そうでない場合は連続的な値を取る。前者を**束縛状態 (bound state)**、後者を**散乱状態 (scattering state)**と呼ぶ。

[問 2.4] ([1] Problem 2.44)

空間 1 次元においては、束縛状態に**縮退 (degeneracy)**がないことを背理法により示そう。縮退とは、2 つ (あるいはそれ以上) の異なる波動関数 $\psi_n(x)$ が同じエネルギー固有値を持つことである。「異なる波動関数」という用語について、波動関数 $\psi_1(x), \psi_2(x)$ が定数倍の違いのみであれば同じ波動関数とする。以下の方針に従うとよい。

まず、異なる 2 つの波動関数を $\psi_1(x), \psi_2(x)$ とする。時間に依存しない Schrödinger 方程式は

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

であるが、ここから

$$\frac{\frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x)}{\psi_1(x)} = \frac{\frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x)}{\psi_2(x)},$$

となることを示し、これと各固有関数が無限遠で 0 であることから $\psi_1(x) \propto \psi_2(x)$ を導き、矛盾を示せ。

[解 2.4] 定数倍しても一致しない 2 つの固有関数 $\psi_1(x), \psi_2(x)$ に対し、 $E_1 = E_2$ とすると、

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

より

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

であるが、これを変形して

$$\frac{d}{dx} \left[\psi_1(x) \frac{d}{dx} \psi_2(x) - \psi_2(x) \frac{d}{dx} \psi_1(x) \right] = 0,$$

となる。したがって

$$\psi_1(x) \frac{d}{dx} \psi_2(x) - \psi_2(x) \frac{d}{dx} \psi_1(x) = \text{定数},$$

であるが、各固有関数が無限遠で十分速く 0 となることから、定数部分は 0 である。すると

$$\frac{d}{dx} [\ln \psi_1(x) - \ln \psi_2(x)] = 0,$$

となるから、

$$\ln \psi_1(x) = \ln \psi_2(x) + \text{定数},$$

すなわち $\psi_1(x) \propto \psi_2(x)$ である。これは 2 つの固有関数が定数倍しても一致しないことに矛盾する。よって背理法より、定数倍しても一致しない 2 つの固有関数 $\psi_1(x), \psi_2(x)$ に対してはエネルギー準位の縮退 $E_1 = E_2$ は起こらない。

[問 2.5] ([1] Problem 2.1 改)

$V(x)$ が偶関数である場合、束縛状態 $\psi_n(x)$ は偶関数もしくは奇関数のいずれかであることを示せ。 $\psi_n(x)$ および $\psi_n(-x)$ に対する時間に依存しない Schrödinger 方程式を書き下し、束縛状態にエネルギー準位の縮退がないことを用いるとよい。

[解 2.5] $\psi_n(x)$ および $\psi_n(-x)$ に対する時間に依存しない Schrödinger 方程式は

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) + V(x) \psi_n(x) &= E_n \psi_n(x), \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d(-x)^2} \psi_n(-x) + V(-x) \psi_n(-x) &= E_n \psi_n(-x), \end{aligned}$$

である。後者の式は、前者において変数を改めて $-x$ と呼ぶことで導いた。 $\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial (-x)^2}$ および $V(x) = V(-x)$ を用いると、 $\psi_n(x)$ と $\psi_n(-x)$ が同じ Schrödinger 方程式を満たしていることがわかる。ところで、束縛状態にエネルギー準位の縮退はないから、 $\psi_n(x)$ と $\psi_n(-x)$ は高々定数倍しか異ならない。 $\psi_n(x) = c \psi_n(-x)$ と置くと、 x を改めて $-x$ と呼ぶことで $\psi_n(-x) = c \psi_n(x)$ が成立し、したがって $\psi_n(x) = c \psi_n(-x) = c^2 \psi_n(x)$ となる。ここから $c = \pm 1$ のいずれかであることが導かれる。 $c = 1$ の場合は偶関数、 $c = -1$ の場合は奇関数である。

[問 2.6] ([1] Problem 2.45)

束縛状態の節 (= 値が 0 となる点) の個数がエネルギーと共に増加することを示そう。2 つの規格化されたエネルギー固有状態 ψ_n, ψ_m を用意し、それぞれのエネルギーを $E_n > E_m$ とする。[問 2.2] よりどちらも実関数として一

一般性を失わない。

(1)

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \psi_m(x) \cdot \psi_n(x) - \psi_m(x) \cdot \frac{d}{dx} \psi_n(x) \right) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - E_m) \psi_m(x) \psi_n(x),$$

を示せ。

(2) x_1, x_2 を $\psi_m(x)$ の隣り合う節とする。

$$\psi'_m(x_2) \psi_n(x_2) - \psi'_m(x_1) \psi_n(x_1) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - E_m) \int_{x_1}^{x_2} dx \psi_m(x) \psi_n(x),$$

を示せ。

(3) もし $\psi_n(x)$ が x_1 と x_2 の間に節を持たないとすると、 $x_1 < x < x_2$ で $\psi_n(x)$ の符号は一定であるが、これは前問の結果と矛盾することを示せ。よって背理法より、 $\psi_m(x)$ の隣り合う節の間に $\psi_n(x)$ は少なくとも1つ節を持たなければならない。ここから束縛状態の節の数がエネルギーと共に増えることが導かれる。(補足：普通「節」と言うときは無限遠点 $x \rightarrow \pm\infty$ を含めないが、この問題では x_1, x_2 は無限遠点も含めて節であると定義する。そうすると、 $\psi_m(x)$ より $\psi_n(x)$ の方が無限遠点も含めた節の数が多いことが導かれる。 $\psi_n(x), \psi_m(x)$ いずれも無限遠点の節の数は2つなので、通常の意味の節の数も $\psi_m(x)$ より $\psi_n(x)$ の方が多くなる。)

[解 2.6]

(1)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \psi_m(x) \cdot \psi_n(x) - \psi_m(x) \cdot \frac{d}{dx} \psi_n(x) \right) &= \frac{d^2}{dx^2} \psi_m(x) \cdot \psi_n(x) - \psi_m(x) \cdot \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_m \psi_m(x) \cdot \psi_n(x) + \psi_m(x) \cdot \frac{2m}{\hbar^2} E_n \psi_n(x) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - E_m) \psi_m(x) \psi_n(x). \end{aligned}$$

(2) (1) の結果を積分すると、左辺は

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \psi_m(x) \cdot \psi_n(x) - \psi_m(x) \cdot \frac{d}{dx} \psi_n(x) \right) \\ = [\psi'_m(x_1) \psi_n(x_1) - \psi_m(x_1) \psi'_n(x_1)] - [\psi'_m(x_2) \psi_n(x_2) - \psi_m(x_2) \psi'_n(x_2)] \\ = \psi'_m(x_1) \psi_n(x_1) - \psi'_m(x_2) \psi_n(x_2), \end{aligned}$$

となるから、

$$\psi'_m(x_2) \psi_n(x_2) - \psi'_m(x_1) \psi_n(x_1) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - E_m) \int_{x_1}^{x_2} dx \psi_m(x) \psi_n(x),$$

が導かれる。

(3) もし $\psi_n(x)$ が x_1 と x_2 の間に節を持たないとすると、 $x_1 < x < x_2$ で $\psi_n(x)$ の符号は一定である。 $\psi_n(x) > 0$ としても一般性を失わない。 x_1, x_2 は $\psi_m(x)$ の隣り合う節なので、 $\psi_m(x) > 0$ ($x_1 < x < x_2$) かつ $\psi'_m(x_1) > 0$ かつ $\psi'_m(x_2) < 0$ 、または $\psi_m(x) < 0$ ($x_1 < x < x_2$) かつ $\psi'_m(x_1) < 0$ かつ $\psi'_m(x_2) > 0$ である。いずれの場合も (2) の結果において左辺と右辺の符号が異なるため矛盾する。よって背理法より $\psi_n(x)$ は x_1 と x_2 の間に節を持つ。

2.2 無限井戸型ポテンシャル

Schrödinger 方程式を解析的に解ける例として、無限井戸型ポテンシャルを考える

無限井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq a), \\ \infty & (x < 0 \text{ or } a < x). \end{cases} \quad (2.21)$$

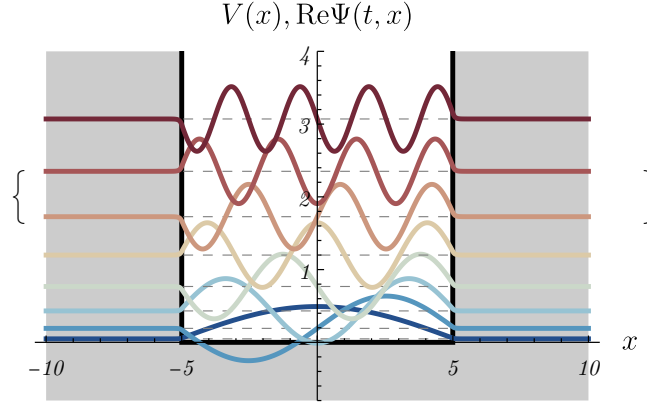


図 5: 無限井戸型ポテンシャル。

このポテンシャルは $x < 0$ および $a < x$ で無限の高さになっていて粒子が存在できないため、 $\psi(x) = 0$ がこの領域での解である。一方 $0 < x < a$ で Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x), \quad (2.22)$$

となる。固有値 E をパラメータ k

$$k^2 := \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (2.23)$$

で置き換えると $\psi''(x) = -k^2 \psi(x)$ となり、 $0 < x < a$ での一般解を簡潔に書くことができる

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx). \quad (2.24)$$

A と B は次のように決定する。境界条件 $\psi(0) = \psi(a) = 0$ から、まず

$$\psi(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0, \quad (2.25)$$

となり、次に

$$\psi(a) = 0 \quad \Rightarrow \quad A = 0 \text{ or } \sin(ka) = 0, \quad (2.26)$$

となる。このうち $A = 0$ は $\psi(x) = 0$ となって規格化できない解になってしまうため、 $\sin(ka) = 0$ となる解を考える。そのような k は

$$k = k_n := \frac{n\pi}{a} \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (2.27)$$

である。 $n = 0, -1, -2, \dots$ を除いた理由は以下の通りである。まず、 $n = 0$ は解が恒等的に $\psi(x) = 0$ となってしまう、 $A = 0$ の場合と同じく規格化できない。また、 $n = -1, -2, \dots$ は $\sin(-kx) = -\sin(kx)$ より $n = 1, 2, \dots$ の解の符号の不定性に吸収できる。これらの k_n に対し、エネルギーは

$$E = E_n := \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (2.28)$$

となる。取り得る**エネルギーが離散化している**ことに注意しよう。これ以外のエネルギーに対して Schrödinger 方程式 (2.7) を解こうとしても、境界条件 $\psi(0) = \psi(a) = 0$ を満たすような解が作れない。固有関数 $\psi_n(x)$ について、本来規格化されるべきは波動関数 $\Psi(t, x)$ であるが、 $\psi_n(x)$ についても規格化をしておくとなんて便利である。 $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2 = 1$ から

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2 = \int_0^a dx |A|^2 \sin^2(k_n x) = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}, \quad (2.29)$$

となる。 A には $e^{i\theta}$ ($\theta \in \mathbb{R}$) 倍の不定性があるが、この不定性は係数 c_n に吸収できるため、ここでは A は正の実数とした。結果、

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad (2.30)$$

がエネルギー E_n に対応する、規格化された波動関数である。いくつか性質を見ておこう。

- 偶関数・奇関数が交互に現れる
- エネルギーが上がるにつれ、節 (= 値が 0 となる点) の数が $0, 1, 2, \dots$ と増えていく
- 異なるエネルギーに属する固有関数は直交する

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = \delta_{nm}, \quad (2.31)$$

- 固有関数は完全系を成す。つまり、境界条件 $f(x) = f(a) = 0$ を満たすような任意の関数 $f(x)$ は、 $\psi_n(x)$ と複素定数 c_n を用いて

$$f(x) = \sum_n c_n \psi_n(x), \quad (2.32)$$

と表せる。実際、係数は $c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) f(x)$ から求まる。

時間発展まで含めると、 $\varphi_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar}$ を掛ければよいから、

$$\Psi_n(t, x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{n^2 \pi^2 \hbar}{2ma^2}t}, \quad (2.33)$$

となる。元の Schrödinger 方程式の解 $\Psi(t, x)$ は $\Psi_n(t, x)$ の重ね合わせで

$$\Psi(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(t, x), \quad (2.34)$$

と書くことができる。 $\Psi(t, x)$ の規格化条件から係数 c_n を決めることになるが、 $\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = \delta_{nm}$ より

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(t, x)|^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1, \quad (2.35)$$

という簡単な条件になる。

[問 2.7] ([1] Problem 2.5)

無限井戸型ポテンシャルにいる粒子の波動関数が、エネルギー $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ の定常状態 $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ のうち $n = 1, 2$ の線型結合

$$\Psi(t=0, x) = A(\psi_1(x) + \psi_2(x)),$$

で与えられているとする。

- (1) 規格化定数 A を求めよ。
- (2) $\Psi(t, x)$ および $|\Psi(t, x)|^2$ を求めよ。
- (3) $\langle x \rangle$ を任意の時刻 t において計算せよ。 $\langle x \rangle$ が時間とともに振動することを確認せよ。
- (4) $\langle p \rangle$ を任意の時刻 t において計算せよ。
- (5) この粒子のエネルギーを測定したとき、エネルギーの取り得る値、およびそれを得る確率を求めよ。また、この状態について、Hamiltonian H の期待値 $\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) H \Psi(t, x)$ を求めよ。求めた値は E_1, E_2 とどのような関係にあるか。

[解 2.7]

- (1) $\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_2^*(x) \psi_1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^*(x) \psi_2(x) = 0$ に注意して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(t=0, x)|^2 = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx (\psi_1(x) + \psi_2(x))^* (\psi_1(x) + \psi_2(x)) = 2A^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

- (2) $\omega = \frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}$ として

$$\begin{aligned} \Psi(t, x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar} \right] = \frac{1}{\sqrt{a}} \left[\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{-i\omega t} + \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) e^{-4i\omega t} \right], \\ |\Psi(t, x)|^2 &= \frac{1}{\sqrt{a}} \left[\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + 2 \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \cos(3\omega t) \right]. \end{aligned}$$

- (3)

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} \left[1 - \frac{32}{9\pi^2} \cos(3\omega t) \right].$$

- (4)

$$\langle p \rangle = \frac{8\hbar}{3a} \sin(3\omega t).$$

- (5) $E = E_1$ と $E = E_2$ をそれぞれ確率 $\frac{1}{2}$ で得る。 $\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_2^*(x) \psi_1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^*(x) \psi_2(x) = 0$ に注意して、

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar} \right]^* H \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar} \right] = \frac{E_1 + E_2}{2} = \frac{5\pi^2\hbar^2}{4ma^2},$$

であり、これは E_1 と E_2 の平均である。

2.3 調和振動子

調和振動子 (harmonic oscillator) を考える

調和振動子型ポテンシャル

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (2.36)$$

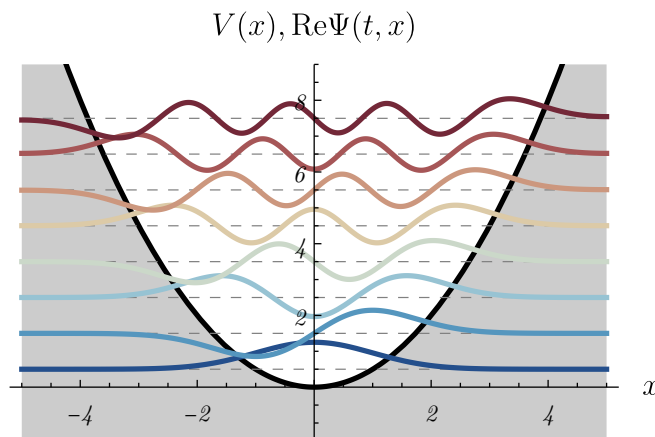


図 6: 調和振動子ポテンシャル。

実はこのタイプのポテンシャルを解析するには別の強力な手法があるのだが、今は Schrödinger 方程式が微分方程式として解けることを実感してもらうため、その手法は用いない。Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x), \quad (2.37)$$

である。表式を簡潔にするため、

$$\xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad K := \frac{2E}{\hbar\omega}, \quad (2.38)$$

を導入すると

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) + (K - \xi^2) \psi(\xi) = 0, \quad (2.39)$$

となる⁸。 $\xi \rightarrow \pm\infty$ でのこの方程式の振る舞いを考えよう。(定数) $-\xi^2$ の中の (定数) 部分を ξ^2 に比べて無視することによって、大まかな振る舞いは

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) - \xi^2 \psi(\xi) \simeq 0 \quad \implies \quad \psi(\xi) \simeq Ae^{-\xi^2/2} + Be^{+\xi^2/2}, \quad (2.40)$$

と予想できる。発散する解は捨てることにすると、右辺第 2 項が $\xi \rightarrow \pm\infty$ で発散しないためには $B = 0$ である必要があり、したがって $\psi(\xi) \propto e^{-\xi^2/2}$ と予想される。この部分を括り出した残りを $h(\xi)$ と書き、 $\psi(\xi)$ の代わりに $h(\xi)$ を求めることにしよう

$$\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\xi^2/2}. \quad (2.41)$$

⁸ これは物理で頻繁に見られる用法で、 $\psi(x)$ の x に $x(\xi)$ を代入した $\psi(x(\xi))$ のことを改めて $\psi(\xi)$ と呼んでいる。 $\psi(x)$ に $x = \xi$ を代入したものではないことに注意。

元の方程式に代入すると、 $h(\xi)$ に対する方程式は

$$\frac{d^2}{d\xi^2} h(\xi) - 2\xi \frac{d}{d\xi} h(\xi) + (K-1)h(\xi) = 0, \quad (2.42)$$

となる。 $h(\xi)$ をテーラー展開し

$$h(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j = a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + \cdots, \quad (2.43)$$

と書くと、

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j] \xi^j = 0, \quad (2.44)$$

が成り立っている。これはどの ξ の値についても成り立っている必要があるので、係数がすべて 0 である以外に可能性はない

$$(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j = 0 \quad \Rightarrow \quad a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)} a_j \quad (j=0, 1, \dots). \quad (2.45)$$

ところが、どの j についても分子の $2j+1-K$ が 0 にならないとすると、大きな j について

$$a_{j+2} \simeq \frac{2}{j} a_j = \frac{1}{j/2} a_j \quad \Rightarrow \quad a_j \simeq \frac{a_0}{(j/2)!} \quad \text{or} \quad \frac{a_1}{(j/2)!}, \quad (2.46)$$

となるから、 $h(\xi)$ は $\xi \rightarrow \infty$ で

$$h(\xi) \sim \sum_{j:\text{even}} \frac{a_0}{(j/2)!} \xi^j + \sum_{j:\text{odd}} \frac{a_1}{(j/2)!} \xi^j \sim \sum_{j'} \frac{a_0}{j'!} (\xi^2)^{j'} + \sum_{j'} \frac{a_1}{j'!} (\xi^2)^{j'} \sim e^{\xi^2}, \quad (2.47)$$

と振る舞ってしまう。これでは規格化可能な解にならないから、解が存在するための唯一の可能性は、ある j について a_j の漸化式 (2.45) の分子の $2j+1-K$ が 0 になっていることである。その j を改めて n と呼ぶことにする。つまり、

$$K = 2n+1 \quad (n \in \mathbb{Z}, n \geq 0), \quad (2.48)$$

であり、この場合にしか規格化可能な解は存在しない。 $K = \frac{2E}{\hbar\omega}$ より対応するエネルギーは

調和振動子のエネルギー準位

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.49)$$

であり、無限井戸型ポテンシャルの場合と同じく**エネルギーが離散化している**ことに注意してほしい。 n が偶数のときは、偶数系列は $a_{n+2} = a_{n+4} = \cdots = 0$ であると同時に、奇数系列は $a_1 = a_3 = \cdots = 0$ でなければならない。同様に、 n が奇数のときは奇数系列が $a_{n+2} = a_{n+4} = \cdots = 0$ であり、偶数系列は $a_0 = a_2 = a_4 = \cdots = 0$ でなければならない。このことから、 $\psi_n(\xi)$ は以下のように求められる。

• $n=0$

$a_2 = a_4 = \cdots = 0$ かつ $a_1 = a_3 = \cdots = 0$ より、

$$\psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2}, \quad (2.50)$$

である。規格化定数は $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_0(x)|^2 = 1$ より、 a_0 を正の実数として $a_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}}$ となる。

• $n = 1$

$a_0 = a_2 = a_4 = \cdots = 0$ かつ $a_3 = \cdots = 0$ より、

$$\psi_1(\xi) = a_1 \xi e^{-\xi^2/2}, \quad (2.51)$$

である。規格化定数は $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_1(x)|^2 = 1$ より、 a_1 を正の実数として $a_1 = \left(\frac{4m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$ となる。

• $n = 2$

$a_2 = -2a_0$ かつ $a_4 = \cdots = 0$ かつ $a_1 = a_3 = \cdots = 0$ より、

$$\psi_2(\xi) = (a_0 + a_2 \xi^2) e^{-\xi^2/2} = a_0 (1 - 2\xi^2) e^{-\xi^2/2}, \quad (2.52)$$

である。規格化定数は $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_2(x)|^2 = 1$ より、 a_0 を正の実数として $a_0 = \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$ となる。

上述のように解を逐一求めることは可能であるが、実は一般解が **Hermite 多項式 (Hermite polynomials)** $H_n(\xi)$ というよく知られた関数を用いて書けることが知られている

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}. \quad (2.53)$$

Hermite 多項式は Rodrigues の公式 (Rodrigues formula) から求めることができる

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2}. \quad (2.54)$$

これについては後ほど慣れることにして、今は解がどのような見目をしているか、図 6 を参考に確認しよう。

[問 2.8] ([1] Problem 2.15 改)

調和振動子

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2.$$

について、励起状態の波動関数を求めよう。

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x,$$

を導入すると、波動関数 $\Psi(t, x) = \psi(x)\varphi(t)$ の $\psi(x)$ 部分について、

$$\psi(\xi) = (a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + \cdots) e^{-\xi^2/2}.$$

と展開したときの係数が漸化式

$$a_{j+2} = \frac{(2j+1)-K}{(j+1)(j+2)} a_j \quad (j = 0, 1, \dots).$$

を満たすことを見た。さらに、波動関数が発散しないためには

$$K = 2n + 1 \quad (n \in \mathbb{Z}, n \geq 0),$$

でなければならないことも見た。さて、この漸化式を用いて $\psi_5(x)$ および $\psi_6(x)$ を求めよ。規格化定数は求めな

くてよい。また、それらが Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ に対する Rodrigues の公式

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2}.$$

を用いて求めた $\psi_5(\xi)$ および $\psi_6(\xi)$ に比例することを確認せよ。

[解 2.8] $n = 5$ について、偶数系列は $a_0 = a_2 = \dots = 0$ である。奇数系列は漸化式より

$$a_3 = \frac{3-11}{2 \cdot 3} a_1 = -\frac{4}{3} a_1, \quad a_5 = \frac{7-11}{4 \cdot 5} a_3 = \frac{4}{15} a_1, \quad a_7 = \frac{11-11}{6 \cdot 7} a_5 = 0,$$

となる。 $n = 6$ について、奇数系列は $a_1 = a_3 = \dots = 0$ である。偶数系列は漸化式より

$$a_2 = \frac{1-13}{1 \cdot 2} a_0 = -6a_0, \quad a_4 = \frac{5-13}{3 \cdot 4} a_2 = 4a_0, \quad a_6 = \frac{9-13}{5 \cdot 6} a_4 = -\frac{8}{15} a_0, \quad a_8 = \frac{13-13}{7 \cdot 8} a_6 = 0,$$

となる。また、Hermite 多項式は Rodrigues の公式より

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, \\ H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi, \\ H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \\ H_5(\xi) &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi, \\ H_6(\xi) &= 64\xi^6 - 480\xi^4 + 720\xi^2 - 120, \end{aligned}$$

であるから、

$$\begin{aligned} \psi_5(\xi) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^5 5!}} (120\xi - 160\xi^3 + 32\xi^5) e^{-\xi^2/2}, \\ \psi_6(\xi) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^6 6!}} (-120 + 720\xi^2 - 480\xi^4 + 64\xi^6) e^{-\xi^2/2}. \end{aligned}$$

となり、漸化式を使って求めた結果に比例している。

[問 2.9] ([1] Problem 2.14 改)

調和振動子の基底状態 $\psi_0(\xi)$ について、波動関数が古典的には禁止されている領域 ($E_0 < V(x)$ となる領域) にも分布していることがわかる。粒子の位置を測定したとき、この古典的な禁止領域に粒子を見つける確率はいくらか、図 7 を参考に大まかに見積もれ。

[解 2.9] $|\psi_0(\xi)|^2 \propto e^{-\xi^2}$ であり、また

$$E_0 < V(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar\omega}{2} < \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad \Rightarrow \quad \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} < x^2 \quad \Rightarrow \quad \xi < -1 \text{ or } \xi > 1,$$

である。図 7 より、大雑把に $\xi < -1, \xi > 1$ にはどちらも全体の 10% 程度の確率が分布している。よって、古典的禁止領域に粒子を見つける確率は約 20% である。(正確に見積もると約 15.7% となる。)

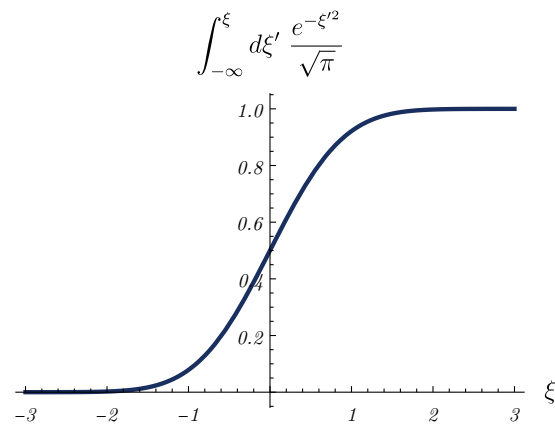


図 7: [問 2.9] の参考図。

2.4 自由粒子

重要な例として自由粒子 (free particle) を取り扱う。「自由」というのは、ポテンシャルが 0 という意味である

自由粒子ポテンシャル

$$V(x) = 0.$$

(2.55)

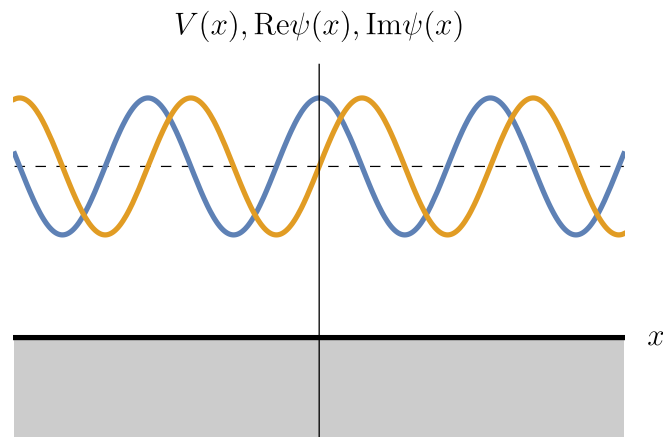


図 8: 自由粒子ポテンシャル。

時間に依存しない Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x), \quad (2.56)$$

である。固有値 E の取り得る範囲を考えると、 $E < 0$ の場合 $\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = (\text{正の量}) \times \psi(x)$ より $\psi(x) = Ae^{x\sqrt{(\text{正の量})}} + Be^{-x\sqrt{(\text{正の量})}}$ であるが、これは $x \rightarrow -\infty$ もしくは $x \rightarrow +\infty$ で発散するので除外し、 $E > 0$ を考える。正の量 k を

$$k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (2.57)$$

で導入すると、Schrödinger 方程式は

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x), \quad (2.58)$$

となるから、一般解は

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (2.59)$$

となる。無限井戸型ポテンシャルや調和振動子の場合とは異なり、境界条件 ($x \rightarrow \pm\infty$ での振る舞い) からの制約を受けないため、**エネルギーが離散化していない**ことに注意しよう。

上記の解 (2.59) は規格化不可能である。実際、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx (|A|^2 + |B|^2 + AB^* e^{2ikx} + A^* B e^{-2ikx}), \quad (2.60)$$

であり、 $A = B = 0$ でない限り有限値に収束しない。このような解は許されるのだろうか。思い出してほしいのは、最終的に規格化されるべきは $\Psi(t, x)$ であるということだ。以下で見るように、規格化不可能な $\psi(x)$ を用いて規格化可能な $\Psi(t, x)$ を構成できるため、解 $\psi(x)$ が規格化できなくても問題ない。

順に見ていこう。まず、無限井戸型ポテンシャルや調和振動子の例では、エネルギーのラベル n に対応する波動関数は 1 つだけで、それを $\psi_n(x)$ と書いていた。今の場合は、エネルギーのラベル k に対応する波動関数 (2.59) に 2 つの成分 e^{ikx} と e^{-ikx} があり、それぞれが独立に Schrödinger 方程式 (2.56) を満たしている。これらは、時間依存性 $\varphi(t) = e^{-iE_k t/\hbar}$ を含めると

$$e^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m} t)}, \quad e^{-ik(x + \frac{\hbar k}{2m} t)}, \quad (2.61)$$

という振る舞いをしており、それぞれの物理的意味は「速度 $v = \frac{\hbar k}{2m}$ で伝播する波」と「速度 $v = -\frac{\hbar k}{2m}$ で伝播する波」である。 $k > 0$ であるから、前者が x 正方向に伝播する波、後者が x 負方向に伝播する波である。さて、 k は正の量として定義していたが、これを変更し、 $-\infty < k < \infty$ とする代わりに

$$\Psi_k(t, x) = e^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m} t)}, \quad (2.62)$$

のみを考えることにしても同値である。規格化はできないので、全体に掛かる定数部分は除いて定義した。

規格化可能な波動関数の構成に移ろう。答えを先に述べると、何らかの関数 $c(k)$ を用いて

波束を用いた波動関数の構成

$$\Psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) \Psi_k(t, x), \quad (2.63)$$

と構成することができる。ここで $c(k)$ は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk |c(k)|^2 = 1, \quad (2.64)$$

さえ満たしていれば何でもよい。実際、 $\Psi(t, x)$ が規格化されていることをチェックしよう。補遺??に記載のデルタ関数お

よび Fourier 変換の性質を用いると、

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(t, x)|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \Psi(t, x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk' c^*(k') e^{-i(k'x - \frac{\hbar k'^2}{2m}t)} \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dk' \int_{-\infty}^{\infty} dk c^*(k') c(k) e^{i(k-k')x} e^{-i\frac{\hbar(k^2-k'^2)}{2m}t} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \int_{-\infty}^{\infty} dk c^*(k') c(k) (2\pi) \delta(k-k') e^{-i\frac{\hbar(k^2-k'^2)}{2m}t} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dk |c(k)|^2 \\
&= 1,
\end{aligned} \tag{2.65}$$

と、確かに規格化されていることがわかる。波動関数 (2.63) は、異なる k に属する $\Psi_k(t, x)$ を、関数 $c(k)$ で指定される重みに従って足し合わせている。このような波を**波束 (wave packet)** と呼ぶ。その理由を図 9 を参考に理解しよう。この図では、波数 k_0 を中心とした Gaussian $c(k) \propto e^{-(k-k_0)^2/2\sigma^2}$ を用いて波束を構成した。波束に 2 つの構造があることがわかる。1 つは細かい振動構造であり、これは e^{ikx} で決まっている。もう 1 つは全体を包絡するような構造であり、こちらが $c(k)$ で決まっている。

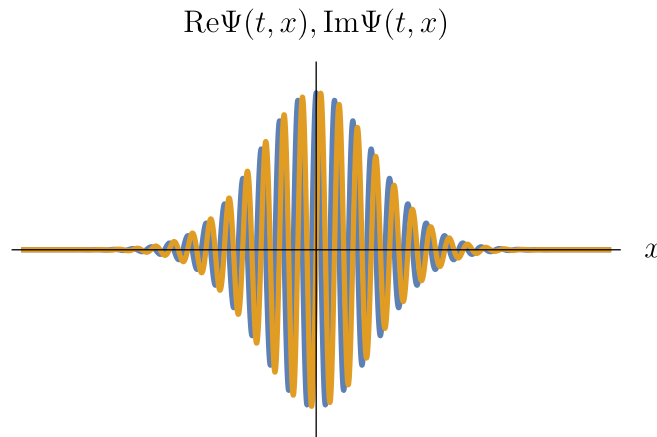


図 9: 波束。

この 2 つの構造に対応して、波束には**位相速度 (phase velocity)** と**群速度 (group velocity)** という 2 種類の速度が定義される。

位相速度と群速度

- 位相速度：波動関数 $\Psi(t, x)$ を構成するそれぞれの波 $\Psi_k(t, x)$ が伝播する速度
- 群速度：波動関数 $\Psi(t, x)$ の包絡 (envelope) が伝播する速度

これらの違いを見るには動画がわかりやすい。講義資料にアニメーションを用意した。2 つの速度が明らかに違うのがわかるだろうか。この振る舞いを数式で理解するため、波動関数の構成要素 $\Psi_k(t, x)$ を次のように書いてみよう

$$\Psi_k(t, x) = e^{i(kx - \omega t)}, \tag{2.66}$$

今の場合もちろん $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ である。さて、位相速度は $\Psi_k(t, x)$ の位相 ($= kx - \omega t$ が一定値を取るような点 $x(t)$) の伝播速

度であったから、

$$v_{\text{phase}}(k) = \frac{\omega}{k}, \quad (2.67)$$

である。一方、群速度を求めるにはテクニックが要る。波束を構成する $c(k)$ が、 $k = k_0$ を中心とした分布を持つとし、 $k = k_0$ 周りで ω を次のように近似してみよう

$$\omega \simeq \omega_0 + \omega'_0(k - k_0). \quad (2.68)$$

ただし $\omega_0 = \omega|_{k=k_0}$, $\omega'_0 = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}$ である。この近似の下で、

$$\begin{aligned} \Psi(t, x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, c(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} \\ &\stackrel{l=k-k_0}{\simeq} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dl \, c(k_0 + l) e^{i(kx - (\omega_0 + \omega'_0 l)t)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{\infty} dl \, c(k_0 + l) e^{il(x - \omega'_0 t)}, \end{aligned} \quad (2.69)$$

となる。積分の外に出ていた $e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$ は位相速度に対応している。一方、積分の中身は $x - \omega'_0 t$ の関数であり、これは速度

$$v_{\text{group}} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}, \quad (2.70)$$

で伝播する波を表している。これを群速度 (group velocity) と言う。ところで、古典的な粒子の速度に対応するのは位相速度と群速度のどちらだろうか。マクロな世界にいる我々にとっては、波束の中心の移動が粒子の移動に見えるのであり、したがって古典的な粒子の速度に対応させるべき量は群速度である。

[問 2.10]

非相対論的量子力学では、波動関数の位相速度と群速度が 2 倍異なることを示せ。

[解 2.10]

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m},$$

であるから、

$$v_{\text{phase}} = \left. \frac{\omega}{k} \right|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{2m}, \quad v_{\text{group}} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m},$$

より、 $v_{\text{group}} = 2v_{\text{phase}}$ である。

[問 2.11] ([1] Problem 2.18)

自由粒子の波動関数 $\Psi(t, x) = \Psi_k(t, x) := e^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m}t)}$ ($-\infty < k < \infty$) について、確率流

$$j(t, x) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(t, x) \right) \Psi(t, x) - \Psi^*(t, x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi(t, x) \right) \right],$$

を計算せよ。確率流はどちらの向きに流れているか。

[解 2.11]

$$j(t, x) = \frac{\hbar k}{m},$$

であり、 k の符号の向きに流れている。

2.5 デルタ関数井戸

ポテンシャルが負係数を持つデルタ関数である場合を考える

デルタ関数井戸

$$V(x) = -\alpha \delta(x) \quad (\alpha > 0). \quad (2.71)$$

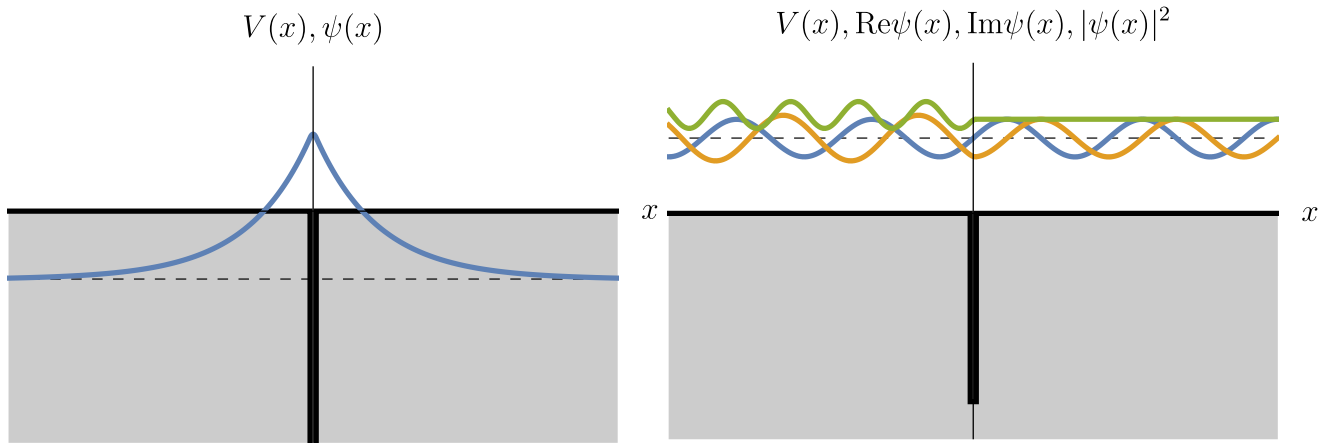


図 10: デルタ関数井戸ポテンシャル。左図は束縛状態、右図は散乱状態。数値的な都合上、デルタ関数は細いピークで近似している。

Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - \alpha \delta(x) \psi(x) = E \psi(x), \quad (2.72)$$

である。この場合、固有値 E は正負どちらの可能性もある。

$E < 0$ について 正の量 κ を

$$\kappa := \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad (2.73)$$

で定義する。 $x \neq 0$ では $\delta(x) = 0$ であるから、この領域で Schrödinger 方程式は

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \kappa^2 \psi(x), \quad (2.74)$$

となり、一般解

$$\psi(x) = A e^{-\kappa x} + B e^{\kappa x}, \quad (2.75)$$

が得られる。自由粒子についての式 (2.56) 以下の説明を思い出すと、この関数形は $A = B = 0$ でない限り $x < 0$ もしくは $x > 0$ で発散してしまうので、0 でない解はすべて発散すると思うかもしれない。しかし今回は $x < 0$ と $x > 0$ が無限大のポテンシャル $V(x) = -\alpha\delta(x)$ により隔てられているため、 $x < 0$ と $x > 0$ で別の係数のセットを持つてくることが許される。実際、 $x < 0$ で $(A, B) = (0, \neq 0)$ 、 $x > 0$ で $(A, B) = (\neq 0, 0)$ となるような解

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x} & (x < 0), \\ Ae^{-\kappa x} & (x > 0), \end{cases} \quad (2.76)$$

を仮定し、 $x = 0$ で Schrödinger 方程式 (2.72) を満たす A, B が定まれば、それは正当な解となる。 $x = 0$ で Schrödinger 方程式を満たすかどうかの解析には、ポテンシャルが無限大のときの波動関数 $\psi(x)$ の振る舞いを知る必要があるが、以下の一般的なルールを知っておくと役に立つ。

時間に依存しない Schrödinger 方程式の境界条件

- (1) $\psi(x)$ は常に連続
- (2) $\frac{d}{dx}\psi(x)$ は基本的に連続であるが、ポテンシャルが無限大となる場所では不連続になることもある

今の場合、条件 (1) より $A = B$ が導かれる。条件 (2) については、デルタ関数は積分されることが前提の関数であるため、Schrödinger 方程式を $x = 0$ 周りで積分する必要がある。小さな量 $\epsilon > 0$ を取り、 $x \in [-\epsilon, \epsilon]$ で Schrödinger 方程式を積分しよう。そうすると

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \left[\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right] - \alpha \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx [\delta(x) \psi(x)] = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi(x) \\ \Rightarrow & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d\psi}{dx}(x = \epsilon) - \frac{d\psi}{dx}(x = -\epsilon) \right] - \alpha \psi(0) = 0 \\ \Rightarrow & -\frac{\hbar^2}{2m} (-A\kappa - A\kappa) - \alpha A = 0 \\ \Rightarrow & \kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2}, \end{aligned} \quad (2.77)$$

と、 κ の満たすべき式が得られる。1 行目から 2 行目は、1 項目については通常の積分、2 項目についてはデルタ関数の性質を用い、右辺は $\epsilon \rightarrow 0$ で積分区間が無限小かつ被積分関数 $\psi(x)$ が有限であることから 0 とした。よって、許されるエネルギーは

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}, \quad (2.78)$$

となる。規格化すると、波動関数は最終的に

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|}, \quad (2.79)$$

と求まる。

$E > 0$ について 正の量 k を

$$k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (2.80)$$

で定義する。 $x \neq 0$ では $\delta(x) = 0$ であるから、この領域で Schrödinger 方程式は

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x), \quad (2.81)$$

となる。一般解は e^{ikx} と e^{-ikx} の線形結合であるが、 $E < 0$ の場合と同様、 $x < 0$ と $x > 0$ で別の係数のセットを持つてくることが許される。そこで

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0), \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & (x > 0), \end{cases} \quad (2.82)$$

と置こう。時間に依存しない Schrödinger 方程式の境界条件のうち、まず条件 (1) から

$$A + B = F + G, \quad (2.83)$$

が得られる。条件 (2) については Schrödinger 方程式を積分する必要がある。先程と同様にすると

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \left[\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right] - \alpha \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx [\delta(x) \psi(x)] = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi(x) \\ \Rightarrow & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d\psi}{dx}(x=\epsilon) - \frac{d\psi}{dx}(x=-\epsilon) \right] - \alpha \psi(0) = 0 \\ \Rightarrow & -\frac{\hbar^2}{2m} ik [(F-G) - (A-B)] - \alpha(A+B) = 0 \\ \Rightarrow & F - G = (1 + 2i\beta)A - (1 - 2i\beta)B, \quad \beta := \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} = \frac{\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}}. \end{aligned} \quad (2.84)$$

が得られる。Schrödinger 方程式 (2.72) の $E > 0$ の一般解は式 (2.82) と条件 (2.83)(2.84) で尽きており、定まっていないパラメータは k と A, B, F, G のうち条件 (2.83)(2.84) を満たす組み合わせで、計 3 つである。

ここからは、さらに物理的状況を指定することによって係数を制限する。まず、 $k > 0$ について、 e^{ikx} と e^{-ikx} はそれぞれ右向きおよび左向き進行波を表していたことを思い出そう。左から粒子を打ち込んでいる状況を仮定すると、 $x < 0$ の領域には左からやってきた波とデルタ関数で跳ね返った波が共存している一方、 $x > 0$ の領域では右からやってくる波が存在せず、左からやってきた波しかないことが予想される。そこで、左から粒子を打ち込んだ場合に対応する追加の境界条件

$$G = 0, \quad (2.85)$$

を課してみよう。すると条件 (2.83)(2.84) から

$$B = \frac{i\beta}{1 - i\beta} A, \quad F = \frac{1}{1 - i\beta} A, \quad (2.86)$$

を得る。さて、 $x < 0$ の領域に存在する e^{ikx} と e^{-ikx} の係数は、本質的には入射波と反射波の比率を決めているはずである。また、 $x < 0$ の領域に存在する e^{ikx} と $x > 0$ の領域に存在する e^{ikx} の係数は、入射波と透過波の比率を決めているはずである。そこで**反射係数 (reflection coefficient) R** と**透過係数 (transmission coefficient) T** を定義しよう

反射係数と透過係数

$$\text{反射係数 } R := \frac{|\text{反射波振幅}|^2}{|\text{入射波振幅}|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad \text{透過係数 } T := \frac{|\text{透過波振幅}|^2}{|\text{入射波振幅}|^2} = \frac{|F|^2}{|A|^2}. \quad (2.87)$$

定義に 2 乗が入っているのは、量子力学においては振幅の絶対値自乗が粒子の存在確率に比例するためである。今の場合これらの係数は

$$R = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} = \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E + m\alpha^2}, \quad T = \frac{1}{1 + \beta^2} = \frac{2\hbar^2 E}{2\hbar^2 E + m\alpha^2}, \quad (2.88)$$

となり、 $R + T = 1$ を満たしていることがわかる。これは確率の保存から期待される結果である。

以下いくつかコメントがある。まず、 $E > 0$ について上記の手続きで求めた波動関数 $\psi(x)$ は規格化できない。これについては自由粒子の場合と状況は完全に同じである。規格化されるべきは波動関数 $\Psi(t, x)$ であることを思い出すと、自由粒子の場合と同じく、波束 $c(k)$ を用いて規格化された波動関数 $\Psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) \Psi_k(t, x)$ を構成することができる。ここで $\Psi_k(t, x)$ は上記の手続きで求めたエネルギー $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ の波動関数 $\psi(x)$ と時間依存部分 $\varphi(t)$ の積であり、自由粒子の場合と同じく k の範囲を $k > 0$ から $-\infty < k < \infty$ に拡張した。波束 $\phi(k)$ が k 空間で $k = k_0$ を中心とした鋭い分布を持つとすると、上記の反射係数・透過係数の引数 k を $k = k_0$ に置き換えたものが、 $\Psi(t, x)$ にとっての反射・透過の割合を表すことになる。

次に、時間 t をあからさまに扱っていないのに、「反射」「透過」という現象が議論できていることに注意しよう。これは、ポテンシャルが存在しない領域 ($V(x) = 0$ となる領域の意) で x 部分波動関数が e^{ikx}, e^{-ikx} と表せている場合、 t 依存性を復活させると自動的にこれらが右向き・左向き進行波に対応することがわかるからである。このように、時間依存性を分離する手法は非常に強力である。

最後に、ポテンシャルを正係数を持つデルタ関数 $V(x) = \alpha\delta(x)$ にした場合について考えてみよう。答えは「束縛状態 $E < 0$ は存在せず、散乱状態 $E > 0$ のみ存在する」である。束縛状態がいなくなる原因は、正の量 κ を α を用いて表せなくなるからである。散乱状態については負係数の場合と同様に存在し、反射係数・透過係数が同様に求められる。これについては図 11 も参考に各自確かめてほしい。

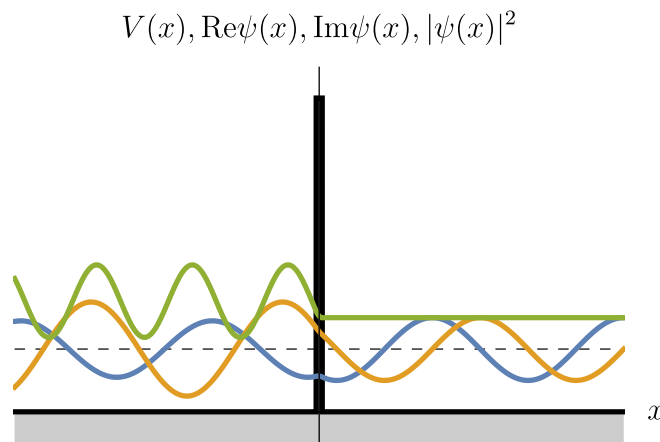


図 11: デルタ関数障壁型ポテンシャル。数値的な都合上、デルタ関数は細いピークで近似している。

まとめ デルタ関数井戸について重要事項をまとめると

- $E < 0$ (束縛状態: bound states) と $E > 0$ (散乱状態: scattering states) の両方が存在する
- 散乱状態の波動関数には、入射波・反射波・透過波という分類が存在し、それらの係数(振幅)の絶対値自乗で反射係数・透過係数が定義される

[問 2.12] ([1] Problem 2.25)

デルタ関数井戸について、束縛状態の解は

$$\psi_{\text{bound}}(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|},$$

と求まった。一方、散乱状態の解は

$$\psi_{\text{scattering}}(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0), \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & (x > 0), \end{cases}$$

$$A + B = F + G, \quad F - G = (1 + 2i\beta)A - (1 - 2i\beta)B, \quad \beta := \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} = \frac{\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}}.$$

と求まった。以下、追加の境界条件 $G = 0$ は指定しないで考えよう。束縛状態の解と散乱状態の解が直交すること

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{\text{bound}}^*(x) \psi_{\text{scattering}}(x) = 0,$$

を示せ。

[解 2.12]

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{\text{bound}}^*(x) \psi_{\text{scattering}}(x) \\ &= \int_{-\infty}^0 dx \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} \left[Ae^{(ik + \frac{m\alpha}{\hbar^2})x} + Be^{(-ik + \frac{m\alpha}{\hbar^2})x} \right] + \int_0^{\infty} dx \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} \left[Fe^{(ik - \frac{m\alpha}{\hbar^2})x} + Ge^{(-ik - \frac{m\alpha}{\hbar^2})x} \right] \\ &= \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar k} \left[\frac{A}{\beta + i} + \frac{B}{\beta - i} + \frac{F}{\beta - i} + \frac{G}{\beta + i} \right] \\ &= \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar k} \frac{(\beta - i)(A + G) + (\beta + i)(B + F)}{\beta^2 + 1}, \end{aligned}$$

であるが、ここで

$$A + B = F + G, \quad F - G = (1 + 2i\beta)A - (1 - 2i\beta)B,$$

の第1式を β 倍したものに第2式を $-i$ 倍したものを足すと

$$\beta(A + B) - i(F - G) = \beta(F + G) - i[(1 + 2i\beta)A - (1 - 2i\beta)B] \quad \Rightarrow \quad (\beta - i)(A + G) + (\beta + i)(B + F) = 0,$$

となるので示された。

2.6 有限井戸型ポテンシャル

井戸型ポテンシャルのうち、井戸の深さが有限である (= 無限でない) 場合を考える

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & (-a \leq x \leq a), \\ 0 & (x < -a \text{ or } a < x). \end{cases} \quad (2.89)$$

井戸の外側の高さを 0、中央を $-V_0$ (ただし $V_0 > 0$) とした。[問 2.5] で見た通り、井戸を $x \leftrightarrow -x$ に関して対称にすることで計算の見通しが良くなるのが以下でわかる。Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (2.90)$$

において、定理 (2.20) より、エネルギー E の取り得る範囲は $E > -V_0$ である。

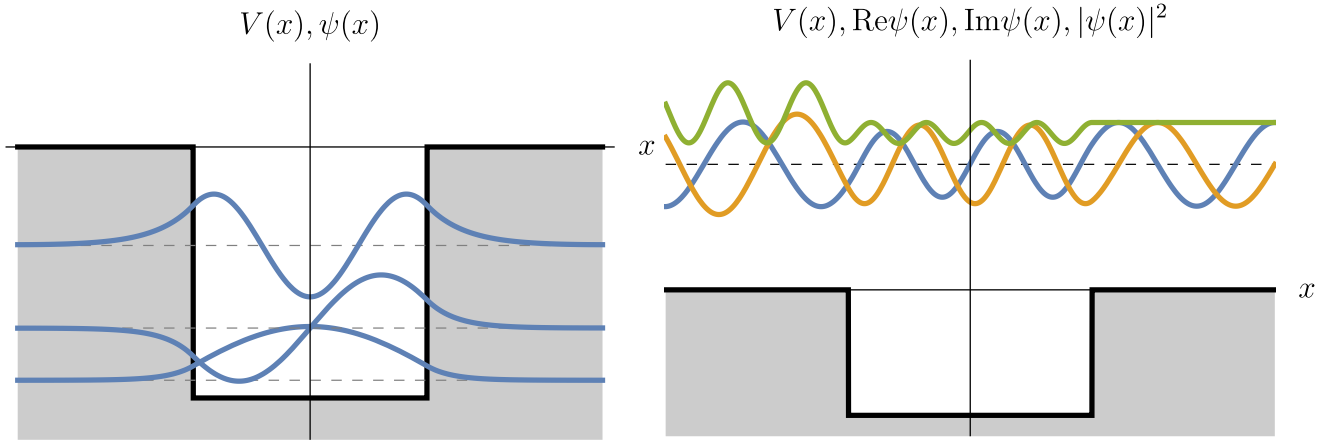


図 12: 有限井戸型ポテンシャル。左図は束縛状態、右図は散乱状態。

$-V_0 < E < 0$ について まず $-V_0 < E < 0$ の場合について考える。 $x < -a$ あるいは $a < x$ での時間に依存しない Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \kappa^2 \psi(x), \quad \kappa := \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad (2.91)$$

であるから、それぞれの場合について、 $x \rightarrow -\infty$ あるいは $x \rightarrow \infty$ で発散しないという条件を課すと

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x} & (x < -a), \\ Fe^{-\kappa x} & (a < x), \end{cases} \quad (2.92)$$

となる。一方、 $-a < x < a$ で Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - V_0 \psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -l^2 \psi(x), \quad l := \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}, \quad (2.93)$$

であるから、一般解は

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx), \quad (2.94)$$

となる。ここで $\psi(x) = C'e^{ilx} + D'e^{-ilx}$ と置くことも可能だが、実はこの問題の場合は $\sin, \cos$ の方が見通しが良い。以上より、 $x = \mp a$ での境界条件を考慮する前の一般解は

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x} & (x < -a), \\ C \sin(lx) + D \cos(lx) & (-a < x < a), \\ Fe^{-\kappa x} & (a < x). \end{cases} \quad (2.95)$$

とわかった。 κ と l は条件

$$\kappa^2 + l^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}, \quad (2.96)$$

で関連付いていることに注意しよう。さて、[問 2.5] から、 $\psi(x)$ として偶関数もしくは奇関数のみを考えればよいことがわかる⁹。偶関数の場合は $B = F$ かつ $C = 0$ 、奇関数の場合は $B = -F$ かつ $D = 0$ である。

まず $B = F$ かつ $C = 0$ の場合について考えよう。 $x = a$ での境界条件だけ考えれば、 $x = -a$ での境界条件は自動的に満たされる。 $x = a$ での $\psi(x)$ および $\frac{d}{dx}\psi(x)$ に関する境界条件は

$$D \cos(la) = Fe^{-\kappa a}, \quad -Dl \sin(la) = -F\kappa e^{-\kappa a}, \quad (2.101)$$

となり、両辺の比を取ると

$$\kappa = l \tan(la), \quad (2.102)$$

が得られる。式 (2.96)(2.102) から κ, l が求まり、その結果と式 (2.101) から D と F の比が求まる。比だけしか求まらないのは、波動関数を定数倍する自由度は規格化条件を入れないと定まらないためである。式 (2.96)(2.102) から κ, l を求める際は、 κ を消去し、

$$\tan(z) = \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}, \quad z := la, \quad z_0 := \frac{a\sqrt{2mV_0}}{\hbar}, \quad (2.103)$$

として、図 13 左図のように $y = \tan(z)$ と $y = \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}$ のグラフの交点から数値的に求めることができる。

⁹ [問 2.5] の結果を用いずに愚直に求めることもできる。 $\psi(x)$ に関する境界条件から、 $x = \mp a$ それぞれについて

$$(1) \quad Be^{-\kappa a} = -C \sin(la) + D \cos(la), \quad C \sin(la) + D \cos(la) = Fe^{-\kappa a}, \quad (2.97)$$

が得られ、 $\frac{d}{dx}\psi(x)$ に関する境界条件から同様に

$$(2) \quad B\kappa e^{-\kappa a} = Cl \cos(la) + Dl \sin(la), \quad Cl \cos(la) - Dl \sin(la) = -F\kappa e^{-\kappa a}, \quad (2.98)$$

が得られる。これらをよく見ると

$$\begin{aligned} (Be^{-\kappa a})^2 - (Fe^{-\kappa a})^2 &= [-C \sin(la) + D \cos(la)]^2 - [C \sin(la) + D \cos(la)]^2 \\ &= -2CD \sin(la) \cos(la) \\ &= -\frac{1}{l^2} [(Cl \cos(la) + Dl \sin(la))^2 - (Cl \cos(la) - Dl \sin(la))^2] \\ &= -\frac{1}{l^2} [(B\kappa e^{-\kappa a})^2 - (F\kappa e^{-\kappa a})^2], \end{aligned} \quad (2.99)$$

となっているから、

$$(B^2 - F^2) \left(1 + \frac{\kappa^2}{l^2}\right) e^{-2\kappa a} = 0 \quad \Rightarrow \quad B^2 - F^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad B = \pm F, \quad (2.100)$$

が導かれる。

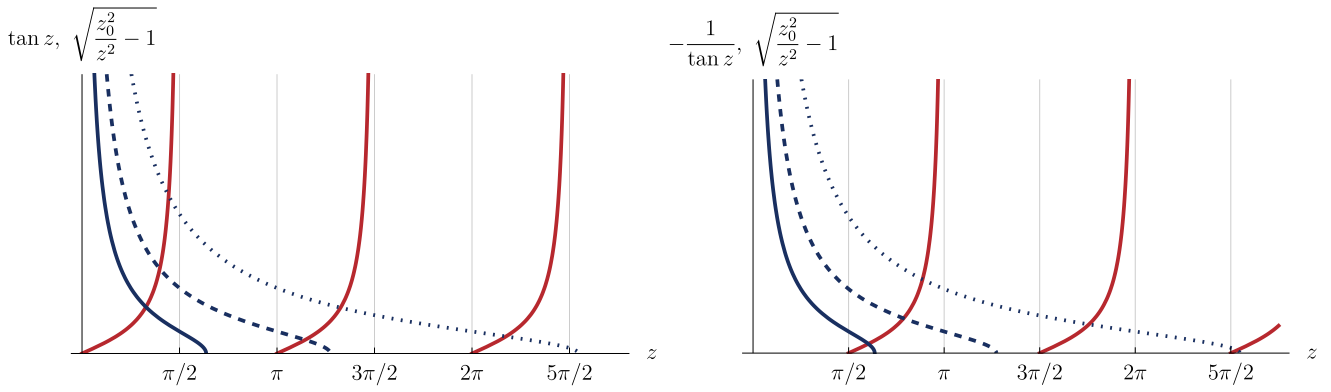


図 13: $y = \tan(z)$ (左図赤線) もしくは $y = -\frac{1}{\tan(z)}$ (右図赤線)、および $y = \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}$ (青線)。後者は $z_0 = 2$ (実線), $z_0 = 4$ (破線), $z_0 = 8$ (点線) とした。

次に $B = -F$ かつ $D = 0$ の場合について考えよう。 $x = a$ での $\psi(x)$ および $\frac{d}{dx}\psi(x)$ に関する境界条件は

$$C \sin(la) = Fe^{-\kappa a}, \quad Cl \cos(la) = -F\kappa e^{-\kappa a} \quad (2.104)$$

が得られ、両辺の比を取ると

$$\kappa = -\frac{l}{\tan(la)}, \quad (2.105)$$

が得られる。式 (2.96)(2.105) から κ, l が求まり、その結果と式 (2.104) から C と F の比が求まる。式 (2.96)(2.105) から κ, l を求める際は、 κ を消去し、

$$-\frac{1}{\tan(z)} = \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}, \quad z := la, \quad z_0 := \frac{a\sqrt{2mV_0}}{\hbar}, \quad (2.106)$$

として、図 13 右図のように $y = -\frac{1}{\tan(z)}$ と $y = \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}$ のグラフの交点から数値的に求めることができる。

[問 2.13]

有限井戸型ポテンシャルについて、 z_0 が小さい極限 (a を固定したままポテンシャルを浅くする極限 $V_0 \rightarrow 0$) を考える。このとき束縛状態の数はどうなるか。

[解 2.13] $V_0 \rightarrow 0$ で $y = \tan(z)$ と $y = \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}$ の交点の数は 1、 $y = -\frac{1}{\tan(z)}$ と $y = \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}$ の交点の数は 0 となる。ポテンシャルが浅い極限でも束縛状態が必ず 1 つは存在することに注意。

[問 2.14]

有限井戸型ポテンシャルについて、 z_0 が大きい極限 (a を固定したまま $V_0 \rightarrow \infty$ とした極限) を考える。このとき、無限井戸型ポテンシャルの結果と整合することを説明せよ。

[解 2.14] $V_0 \rightarrow \infty$ で $y = \tan(z)$ と $y = \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}$ の交点は $z = \frac{n\pi}{2}$ ($n = 1, 3, 5, \dots$)、 $y = -\frac{1}{\tan(z)}$ と $y = \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}$ の交点は $z = \frac{n\pi}{2}$ ($n = 2, 4, 6, \dots$) となる。無限井戸型ポテンシャルの結果と対応させるには、井戸の底から測ったエネルギーを考えるべきであることに注意して、

$$E + V_0 \stackrel{l = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}}{=} \frac{\hbar^2 l^2}{2m} \stackrel{z=la=\frac{n\pi}{2}}{=} \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2},$$

となる。無限井戸型ポテンシャルの場合は幅 a の井戸を考えていたが、今は幅 $2a$ の井戸を考えていることに注意すると、エネルギー準位が同じになっていることがわかる。

$E > 0$ について 次に $E > 0$ の場合について考える。 $x < -a$ あるいは $a < x$ での時間に依存しない Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x), \quad k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (2.107)$$

である。 $x \rightarrow \infty$ で右向き進行波のみであるという条件を課すと

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < -a), \\ Fe^{ikx} & (a < x), \end{cases} \quad (2.108)$$

となる。一方、 $-a < x < a$ では時間に依存しない Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - V_0 \psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -l^2 \psi(x), \quad l := \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}, \quad (2.109)$$

であるから、一般解は

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx), \quad (2.110)$$

となる。以上より、 $x = \mp a$ での境界条件を考慮する前の一般解は

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < -a), \\ C \sin(lx) + D \cos(lx) & (-a < x < a), \\ Fe^{ikx} & (a < x), \end{cases} \quad (2.111)$$

とわかった。 k と l は条件

$$-k^2 + l^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}, \quad (2.112)$$

に関連付いていることに注意しよう。さて、散乱状態については束縛状態で用いたような偶奇性が必ずしも使えない。 $\psi(x)$ に関する境界条件から、 $x = \mp a$ それぞれについて

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C \sin(la) + D \cos(la), \quad C \sin(la) + D \cos(la) = Fe^{ika}, \quad (2.113)$$

が得られ、 $\frac{d}{dx} \psi(x)$ に関する境界条件から同様に

$$ikAe^{-ika} - ikBe^{ika} = Cl \cos(la) + Dl \sin(la), \quad Cl \cos(la) - Dl \sin(la) = ikFe^{ika}, \quad (2.114)$$

が得られる。行列で書くと

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ ike^{-ika} & -ike^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(la) & \cos(la) \\ l \cos(la) & l \sin(la) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \sin(la) & \cos(la) \\ l \cos(la) & -l \sin(la) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = Fe^{ika} \begin{pmatrix} 1 \\ ik \end{pmatrix}, \quad (2.115)$$

となるから、 C, D を消去して

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = F e^{ika} \begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ i k e^{-ika} & -i k e^{ika} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -\sin(la) & \cos(la) \\ l \cos(la) & l \sin(la) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin(la) & \cos(la) \\ l \cos(la) & -l \sin(la) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ i k \end{pmatrix}$$

$$= F \begin{pmatrix} e^{2ika} [\cos(2la) - i \frac{k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la)] \\ i \frac{-k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la) \end{pmatrix}, \quad (2.116)$$

が得られる。ここから反射係数・透過係数が求まる

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\left| i \frac{-k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la) \right|^2}{\left| \cos(2la) - i \frac{k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la) \right|^2} = \frac{(k^2 - l^2)^2 \sin^2(2la)}{4k^2 l^2 + (k^2 - l^2)^2 \sin^2(2la)}, \quad (2.117)$$

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{\left| \cos(2la) - i \frac{k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la) \right|^2} = \frac{4k^2 l^2}{4k^2 l^2 + (k^2 - l^2)^2 \sin^2(2la)}. \quad (2.118)$$

面白いことに、

$$\sin(2la) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad E = E_n = -V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}, \quad (2.119)$$

のときは完全透過 $T = 1$ が起こる。

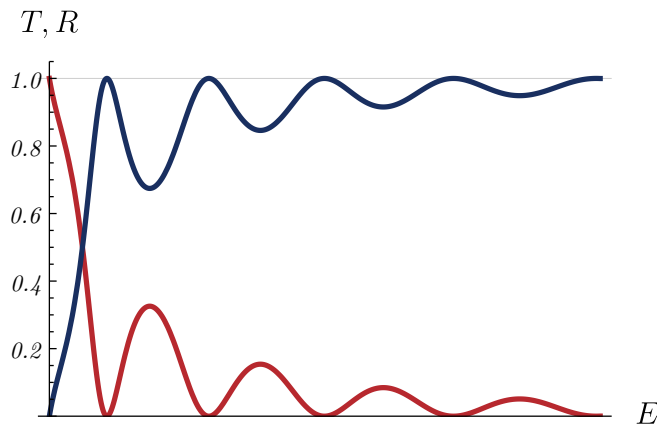


図 14: 透過係数 T (青線) および反射係数 R (赤線)。

[問 2.15] ([1] Problem 2.53)

ポテンシャルにより粒子が散乱される現象を一般化して理解しよう。図 15 のように、領域 II のみでポテンシャル $V(x)$ が非自明な関数形を持ち、領域 I, III では $V(x) = 0$ という状況を考えよう。領域 I, III での Schrödinger 方程式の一般解は、 $k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ として

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & (\text{領域 I}), \\ F e^{ikx} + G e^{-ikx} & (\text{領域 III}), \end{cases}$$

である。領域 II ではポテンシャルの具体形がわからない限り $\psi(x)$ の関数形を特定することはできないが、Schrödinger 方程式が 2 階の線形微分方程式なので、2 つの線形独立な解 $f(x), g(x)$ を用いて

$$\psi(x) = Cf(x) + Dg(x) \quad (\text{領域 II}),$$

と書ける。領域 I, II の境界、および領域 II, III の境界で $\psi(x)$ と $\frac{d}{dx}\psi(x)$ に対する境界条件が存在するので、 A, B, C, D, F, G に対して 4 つの等式が成り立っている。この 4 つから C, D を消去することで、 A, B, F, G に対する 2 つの方程式

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix},$$

が得られる。ここに現れる行列 $S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$ を**散乱行列 (scattering matrix, S-matrix)** と言う。なぜ A, G

を用いて B, F を表すかというと、左右から領域 II に波が入射した (A, G) 結果、どのような波が左右に出ていくか (B, F) を知りたいからである。左側での反射係数 R_l および透過係数 T_l は、 $A \neq 0$ かつ $G = 0$ のときの B および G で

$$R_l = \left. \frac{|B|^2}{|A|^2} \right|_{G=0} = |S_{11}|^2, \quad T_l = \left. \frac{|F|^2}{|A|^2} \right|_{G=0} = |S_{21}|^2,$$

と与えられる。また、右側での反射係数 R_r および透過係数 T_r は、 $A = 0$ かつ $G \neq 0$ のときの F および B で

$$R_r = \left. \frac{|F|^2}{|G|^2} \right|_{A=0} = |S_{22}|^2, \quad T_r = \left. \frac{|B|^2}{|G|^2} \right|_{A=0} = |S_{12}|^2,$$

と与えられる。

(1) デルタ関数井戸

$$V(x) = -\alpha\delta(x) \quad (\alpha > 0),$$

に対する S-matrix を構成せよ。

(2) 有限井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & (-a \leq x \leq a), \\ 0 & (x < -a \text{ or } a > x). \end{cases}$$

に対する S-matrix を構成せよ。

[解 2.15]

(1) デルタ関数井戸に対しては、領域 II の幅が無限に狭いため領域 I, III を直接繋ぐことができる。まず $\psi(x)$ に対する条件から

$$A + B = F + G,$$

が得られ、 $\frac{d}{dx}\psi(x)$ に対する条件については Schrödinger 方程式を原点周りの微小領域で積分すると

$$F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta), \quad \beta := \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} = \frac{\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}},$$

が得られる。よって

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \frac{1}{1 - i\beta} \begin{pmatrix} i\beta & 1 \\ 1 & i\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix},$$

となるから、

$$S = \frac{1}{1 - i\beta} \begin{pmatrix} i\beta & 1 \\ 1 & i\beta \end{pmatrix},$$

である。

(2) まず領域 III から領域 II への入射波がない ($G = 0$) 場合は、 $\psi(x)$ に関する境界条件から、 $x = \mp a$ それぞれについて

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C \sin(la) + D \cos(la), \quad C \sin(la) + D \cos(la) = Fe^{ika},$$

が得られ、 $\frac{d}{dx}\psi(x)$ に関する境界条件から同様に

$$ikAe^{-ika} - ikBe^{ika} = Cl \cos(la) + Dl \sin(la), \quad Cl \cos(la) - Dl \sin(la) = ikFe^{ika},$$

が得られる。行列で書くと

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ ike^{-ika} & -ike^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(la) & \cos(la) \\ l \cos(la) & l \sin(la) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \sin(la) & \cos(la) \\ l \cos(la) & -l \sin(la) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = Fe^{ika} \begin{pmatrix} 1 \\ ik \end{pmatrix},$$

となるから、 C, D を消去して

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= F \begin{pmatrix} e^{2ika} [\cos(2la) - i \frac{k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la)] \\ i \frac{-k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la) \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} &= \frac{A}{e^{2ika} [\cos(2la) - i \frac{k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la)]} \begin{pmatrix} i \frac{-k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la) \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

が得られる。 k と l は条件 $-k^2 + l^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ で関連付いていることに注意しよう。さて、今の場合ポテンシャルは偶関数 $V(x) = V(-x)$ であるから、左右の入射波を入れ替える変換 $A \leftrightarrow G$ および左右の反射波を入れ替える変換 $B \leftrightarrow F$ をした式も成立する。よって

$$\begin{pmatrix} F \\ B \end{pmatrix} = \frac{G}{e^{2ika} [\cos(2la) - i \frac{k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la)]} \begin{pmatrix} i \frac{-k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la) \\ 1 \end{pmatrix},$$

となるから、

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \frac{1}{e^{2ika} [\cos(2la) - i \frac{k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la)]} \begin{pmatrix} i \frac{-k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la) & 1 \\ 1 & i \frac{-k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix},$$

となる。したがって S-matrix は

$$S = \frac{1}{e^{2ika} [\cos(2la) - i \frac{k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la)]} \begin{pmatrix} i \frac{-k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la) & 1 \\ 1 & i \frac{-k^2 + l^2}{2kl} \sin(2la) \end{pmatrix},$$

である。

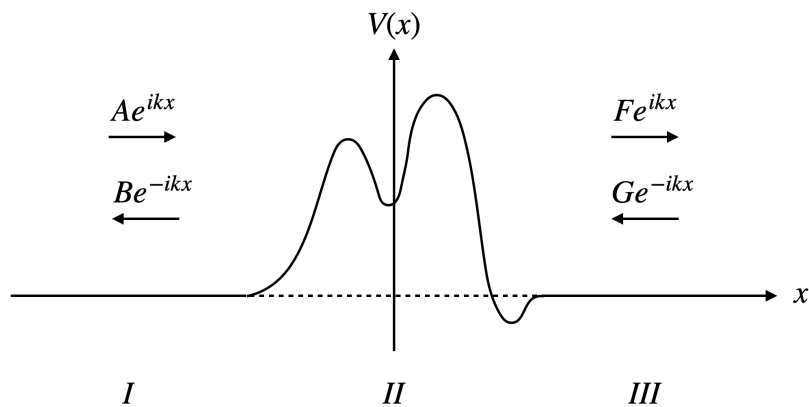


図 15: ポテンシャルが領域 II でのみ非自明な関数形を持ち、領域 I, III で $V(x) = 0$ である例。

2.7 重要事項まとめ

時間に依存しない Schrödinger 方程式まとめ

- 波動関数 $\Psi(t, x)$ は、各エネルギー固有値 E_n に属する解 $\Psi_n(t, x) = \psi_n(x)\varphi_n(t)$ の重ね合わせ $\Psi(t, x) = \sum_n c_n \Psi_n(t, x) = \sum_n c_n \psi_n(x)\varphi_n(t)$ として書かれる。 $\psi(x)$ は時間に依存しない Schrödinger 方程式 $H\psi(x) = E\psi(x)$ の解、 $\varphi(t)$ は $\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$ である。解く際には、エネルギーの範囲は $E > V_{\min}$ だけ考慮すればよい。
- 波動関数 $\psi(x)$ には束縛状態 (bound states) と散乱状態 (scattering states) がある。
 束縛状態は、エネルギー E が $V(x \rightarrow -\infty)$ および $V(x \rightarrow \infty)$ より低い場合に存在することがあり、エネルギー準位は離散的で、波動関数は規格化可能である (例：無限井戸型ポテンシャル・調和振動子・デルタ関数井戸・有限井戸型ポテンシャル)。
 散乱状態は、エネルギー E が $V(x \rightarrow -\infty)$ もしくは $V(x \rightarrow \infty)$ より高い場合に存在し、エネルギー準位は連続的で、波動関数は規格化不可能である (例：自由粒子・デルタ関数井戸・有限井戸型ポテンシャル)。
- 規格化不可能な波動関数 $\psi(x)$ であっても、波束を用いると規格化可能な $\Psi(t, x)$ を構成できる。これが、散乱状態に対してもエネルギー固有状態を考える理由である。

3. 量子論の基本的枠組み

前節まで、様々な状況における波動関数 $\Psi(t, x)$ の計算に取り組んでもらった。次節以降ではさらに現実的な系を解析する。しかしその前に、量子論の基本的な枠組みについて一旦説明することにする。というのも、実は

波動関数 $\Psi(t, x)$ は量子論の 1 つの見方にすぎない

のだが、一旦計算に溺れてしまうとこれを忘れてしまい、波動関数 $\Psi(t, x)$ が量子論の本質なのだと勘違いする恐れがあるからである。例えば、重要な事実の一つに

**波動関数 $\Psi(t, x)$ は各時刻 t の系の状態 $|\Psi(t)\rangle$ を基底 $|x\rangle$ で表示したものであり、
他の基底、例えば $|p\rangle$ で表示しても等価である**

というのがあるが、波動関数 $\Psi(t, x)$ だけを扱っているとこれを見落としがちになる。これが本節で量子論の基本的枠組みを説明する動機である。

3.1 ブラケット記法

まずは記法から入ろう。量子論においてはブラケット (bracket) 記法あるいは Dirac の記法というものがよく用いられる。以下簡単のため有限次元を考えるが、無限次元でも基本的に同様である。

まず、 n 次元複素ベクトル空間のベクトルを

$$|v\rangle, \quad (3.1)$$

と書こう。文字 v はこのベクトルに付けた名前であり、 v でなくてももちろんよい。これをケット (ket) ベクトルあるいは**ケット**と言う。適当な基底を持ってきて成分表示すれば

$$|v\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

となる。成分表示は基底に依るので、 $\stackrel{\text{表示}}{=}$ と書いた。次に、それを転置して複素共役を取ったベクトルを

$$\langle v|, \quad (3.3)$$

と書こう。成分表示すれば

$$\langle v| \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} v_1^* & v_2^* & \cdots & v_n^* \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

となる。これをブラ (bra) ベクトルあるいは**ブラ**と言う。すると、ケット $|v\rangle$ とブラ $\langle u|$ に対し 2 通りの積が定義できる。1 つは 1 行 1 列の量 $\langle u|v\rangle$ で、

$$\langle u|v\rangle := \langle u||v\rangle = u_1^* v_1 + u_2^* v_2 + \cdots + u_n^* v_n. \quad (3.5)$$

これは複素ベクトル $|u\rangle$ と $|v\rangle$ の内積である。内積は表示に依らないので通常の等号を用いた。もう 1 つは n 行 n 列の量

であるから、合成写像である $\hat{A}|v\rangle$ をケット $|\hat{A}v\rangle$ と書くことが正当化される。次に右の等号について、 V の任意の元 u, v に対し $(u, \hat{A}v) = (\hat{A}^\dagger u, v)$ となるような $\hat{A}^\dagger$ を $\hat{A}$ の **Hermite 共役** と言う。 $\langle u|\hat{A}$ は $\langle u| : V \rightarrow \mathbb{C}$ と $\hat{A} : V \rightarrow V$ を合成したもの $\langle u|\hat{A} : V \rightarrow \mathbb{C}$ であり、任意の $w \in V$ に対し

$$\begin{aligned} & \langle u|\hat{A}(w) \\ & \text{まず } w \text{ に線型写像 } \hat{A} \text{ を作用させる } \langle u|(\hat{A}w) \\ & \text{次に線型写像 } \langle u| \text{ を作用させる } (u, \hat{A}w) \\ & \text{Hermite 共役の定義 } (\hat{A}^\dagger u, w) \\ & = \langle \hat{A}^\dagger u|(w), \end{aligned} \tag{3.15}$$

であるから、合成写像である $\langle u|\hat{A}$ をケット $\langle \hat{A}^\dagger u|$ と書くことが正当化される。

さて、話が難しくなったが、基本的にケット $|v\rangle$ は縦ベクトル、 $\langle v|$ は横ベクトルとして計算して問題ない。以下、計算に役立つ性質をいくつかまとめる。

- 内積の複素共役について

$$\langle u|v\rangle^* = \langle v|u\rangle \tag{3.16}$$

これは $\langle u|v\rangle = u_1^* v_1 + u_2^* v_2 + \cdots + u_n^* v_n$ から明らかであろう。

- 演算子の作用について

任意の演算子¹⁰(= V から V への線型写像) $\hat{A}$ は、ケットには左から、ブラには右から作用する。任意の $\langle u|$ および $|v\rangle$ に対して

$$\langle u|(\hat{A}|v\rangle) = (\langle u|\hat{A})|v\rangle, \tag{3.17}$$

が成り立ち、これを $\langle u|\hat{A}|v\rangle$ と書く。これも行列の演算と見れば明らかであろう。

- 演算子 $|v\rangle\langle u|$ について

上で述べたように、任意の $\langle u|$ と $|v\rangle$ を用いて演算子 $|v\rangle\langle u|$ を作ることができる。この演算子を任意の $|w\rangle$ に作用させると

$$(|v\rangle\langle u|)|w\rangle = |v\rangle\langle u|w\rangle, \tag{3.18}$$

となる。最後の量はケット $|v\rangle$ に定数 $\langle u|w\rangle$ を掛けたものなので、 $\langle u|w\rangle|v\rangle$ と書いてもよい。同様に、任意の $\langle w|$ に対し

$$\langle w|(|v\rangle\langle u|) = \langle w|v\rangle\langle u|, \tag{3.19}$$

となる。

- $\hat{A}|v\rangle$ の $+$ に関して

任意の $\hat{A}$ および $|v\rangle$ に対し

$$(\hat{A}|v\rangle)^\dagger = \langle v|\hat{A}^\dagger, \tag{3.20}$$

¹⁰ 量子論では線型な演算子のみ考えるので、線型演算子と書わずに単に演算子と書くことにする。

が成り立つ。 $\hat{A}^\dagger = (\hat{A})^*$ は $\hat{A}$ の **Hermite 共役** ($= \hat{A}$ を転置して複素共役を取ったもの) である。

• 記法に関して

$\hat{A}|v\rangle$ を $|\hat{A}v\rangle$ と書くことがよくある。では、 $|\hat{A}v\rangle$ の $\dagger$ をどう書くべきだろうか。まず、 $(|\hat{A}v\rangle)^\dagger = (\hat{A}|v\rangle)^\dagger = \langle v|\hat{A}^\dagger$ である。一方、ケットとブラの対応 $(|v\rangle)^\dagger = \langle v|$ から $(|\hat{A}v\rangle)^\dagger = \langle \hat{A}v|$ と書いてもよいはずである。したがって

$$\hat{A}|v\rangle = |\hat{A}v\rangle, \quad \langle v|\hat{A}^\dagger = \langle \hat{A}v|, \quad (3.21)$$

となる。特に後者の式に注意してほしい。

• 用語「正規化」「規格化」について

ベクトル $|v\rangle$ について $\langle v|v\rangle = 1$ にすることを正規化、関数 $f(x)$ について $\int dx |f(x)|^2 = 1$ にすることを規格化と言うことが多いが、量子力学ではベクトルも関数も本質的に同じである。ベクトルの長さを 1 にする操作を本節では正規化と呼ぶことにするが、他の節では規格化と呼ぶこともある。

[問 3.1] ([1] Problem 3.26 改)

3 つの正規直交化されたベクトル $|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle$ を考える。正規直交化されているというのは、正規 ($i = j$ に対して $\langle e_i|e_j\rangle = 1$) かつ直交 ($i \neq j$ に対して $\langle e_i|e_j\rangle = 0$) という意味である。以下の 2 つのベクトル

$$|u\rangle = i|e_1\rangle - 2|e_2\rangle - i|e_3\rangle, \quad |v\rangle = i|e_1\rangle + 2|e_3\rangle,$$

を考える。

- (1) $\langle u|, \langle v|$ を $\langle e_1|, \langle e_2|, \langle e_3|$ で表せ。
- (2) $\langle u|v\rangle$ および $\langle v|u\rangle$ を計算し、 $\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*$ であることを確認せよ。
- (3) $\hat{A} := |u\rangle\langle v|$ とする。演算子 $\hat{A}$ を基底 $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$ で表示した行列を求めよ。つまり、 ij 成分が $\langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle$ であるような 3×3 の行列を求めよ。

[解 3.1]

- (1) 係数に複素共役が取られることに注意して、

$$\langle u| = -i\langle e_1| - 2\langle e_2| + i\langle e_3|, \quad \langle v| = -i\langle e_1| + 2\langle e_3|,$$

- (2) (1) の結果より

$$\langle u|v\rangle = (-i\langle e_1| - 2\langle e_2| + i\langle e_3|)(i|e_1\rangle + 2|e_3\rangle) = (-i)(i)\langle e_1|e_1\rangle + (i)(2)\langle e_3|e_3\rangle = 1 + 2i,$$

$$\langle v|u\rangle = (-i\langle e_1| + 2\langle e_3|)(i|e_1\rangle - 2|e_2\rangle - i|e_3\rangle) = (-i)(i)\langle e_1|e_1\rangle + (2)(-i)\langle e_3|e_3\rangle = 1 - 2i,$$

であるから、 $\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*$ である。

- (3) 各成分を求めると

$$\begin{aligned} \langle e_1|\hat{A}|e_1\rangle &= \langle e_1|u\rangle\langle v|e_1\rangle = 1, & \langle e_1|\hat{A}|e_2\rangle &= \langle e_1|u\rangle\langle v|e_2\rangle = 0, & \langle e_1|\hat{A}|e_3\rangle &= \langle e_1|u\rangle\langle v|e_3\rangle = 2i, \\ \langle e_2|\hat{A}|e_1\rangle &= \langle e_2|u\rangle\langle v|e_1\rangle = 2i, & \langle e_2|\hat{A}|e_2\rangle &= \langle e_2|u\rangle\langle v|e_2\rangle = 0, & \langle e_2|\hat{A}|e_3\rangle &= \langle e_2|u\rangle\langle v|e_3\rangle = -4, \\ \langle e_3|\hat{A}|e_1\rangle &= \langle e_3|u\rangle\langle v|e_1\rangle = -1, & \langle e_3|\hat{A}|e_2\rangle &= \langle e_3|u\rangle\langle v|e_2\rangle = 0, & \langle e_3|\hat{A}|e_3\rangle &= \langle e_3|u\rangle\langle v|e_3\rangle = -2i, \end{aligned}$$

であるから、求める行列は

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 2i \\ 2i & 0 & -4 \\ -1 & 0 & -2i \end{pmatrix},$$

である。

3.2 量子状態

物理の話に入ろう。量子論においては、「系の状態」という言葉が頻繁に登場する。まず系についてここでは

系 (system)

系とは、自然全体から切り取った、考察する対象たちのこと

と説明することにする。例えば、投げ上げたボールの運動を考えているとき、普通はおそらく「ボール、それを跳ね返す地面、地球から及ぼされる重力」などを考え、マゼラン星雲の存在は無視するはずである。このように、自然科学においては、考察する対象を自然全体から一部だけ取り出すということが行われる。この取り出された対象たちのことを系と言う。自然科学においては、系の変化を追ったり予言したりするわけだが、変化を議論するためには系の状態を指定しなければならない。古典論では例えば「ボールが高さ $z = 10 \text{ m}$ にあり、速度 $\dot{z} = 5 \text{ m/s}$ で動いている状態」というような指定をしていた。量子論では、系の状態を次のように指定する

系の状態 (state)

系の純粋状態は、複素 Hilbert 空間の元として表される

ここで「純粋状態」という指定をしたが、純粋でない状態については後の節で説明するので、それまで系の状態は常に純粋状態だと考えてよい。また、複素 Hilbert 空間とは

複素 Hilbert 空間 (complex Hilbert space)

複素 Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ とは、内積が定義され、極限も適切に存在するような複素ベクトル空間である

である¹¹。要するに、量子論においては、系の各時刻での状態は何らかの抽象的なベクトルで表され、そのベクトルは内積の計算ができるタイプのベクトルである、と言っている。前小節で $\langle u|$ や $|v\rangle$ について議論する際に用いたベクトル空間 V として、この Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ を取る。したがって、例えば

「時刻 $t = 0$ における系の状態を $|\Psi(t = 0)\rangle$ とする」

などという使い方をする。ちなみに、系の状態を表すベクトルは、全体を複素定数倍するような違いであれば同じものを表すとする¹²。また、以下では「複素」を省略したり、 $\mathcal{H}$ だけで複素 Hilbert 空間を指したりする。

最後に重要なこととして、

Hilbert 空間の次元は有限なこともあれば、無限なこともある

¹¹ 正確には「 $\mathbb{C}$ 上の完備な内積空間」と言う。

¹² 「系の純粋状態は、複素 Hilbert 空間の規格化された斜線 (ray) で表される」と言う。

ことを覚えておいてほしい。有限な場合は例えば 2 次元であり、スピン系で登場する。一方無限な場合は実はすでに目にしており、粒子の x 空間での運動を考えたい場合などがこれに該当する。注意してほしいのは、

Hilbert 空間の次元は、時間 (1 次元) や空間 (3 次元) の次元とは関係がない

ことである。3 次元空間の粒子を考えるからといって、Hilbert 空間が 3 次元なわけではない。具体的にどのような Hilbert 空間を取るべきかは、以降の小節で見ていくことにする。

3.3 物理量

まず、Hermite 演算子を定義する。

Hermite 演算子

演算子 $\hat{A}$ の Hermite 共役 $\hat{A}^\dagger$ が自身と一致する、つまり

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad (3.22)$$

であるとき、 $\hat{A}$ を Hermite 演算子と言う。

$\hat{A}$ の **Hermite 共役** $\hat{A}^\dagger$ とは、行列の場合は $\hat{A}$ を転置して複素共役を取ったもの $\hat{A}^\dagger = (\hat{A}^t)^*$ 、より厳密には内積の定義されたベクトル空間 V の任意の元 u, v に対し $(u, \hat{A}v) = (\hat{A}^\dagger u, v)$ となる演算子 $\hat{A}$ であった。Hermite 演算子には

Hermite 演算子の性質

- Hermite 演算子の固有値は、全て実数である
- Hermite 演算子の異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する
- Hermite 演算子の固有ベクトルの全体は完全系を成す

という性質がある¹³。2つのベクトル $|\alpha\rangle, |\alpha'\rangle$ が直交するとは $\langle\alpha|\alpha'\rangle = 0$ となることであり、あるベクトルの集合 $\{|\alpha_n\rangle\}_n = \{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \dots\}$ が完全系を成すとは任意のベクトル $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ が係数 $\{c_n\}_n = \{c_1, c_2, \dots\}$ を用いて $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\alpha_n\rangle$ と展開できることである。

固有値が実数であることについて、証明は以下の通りである。 $\hat{A}$ の固有値を α 、対応する固有ベクトルを $|\alpha\rangle$ としよう。

$$\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle = \langle\alpha|(\hat{A}|\alpha\rangle) = \langle\alpha|\alpha\rangle\alpha = \alpha\langle\alpha|\alpha\rangle, \quad (3.23)$$

であるが、一方

$$\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle = (\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle)^* = (\langle\alpha|\hat{A}^\dagger|\alpha\rangle)^* \stackrel{\hat{A} \text{ は Hermite}}{=} (\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle)^* = (\alpha\langle\alpha|\alpha\rangle)^* = \alpha^*\langle\alpha|\alpha\rangle, \quad (3.24)$$

であり、固有ベクトル $|\alpha\rangle$ は 0 ベクトルではないので、 $\alpha\langle\alpha|\alpha\rangle - \alpha^*\langle\alpha|\alpha\rangle = 0 \implies \alpha = \alpha^*$ である。また、固有ベクトルの直交性について、2つの異なる固有値を α, α' 、対応する固有ベクトルを $|\alpha\rangle, |\alpha'\rangle$ としよう。

$$\langle\alpha|\hat{A}|\alpha'\rangle = \langle\alpha|(\hat{A}|\alpha'\rangle) = \langle\alpha|\alpha'\rangle\alpha' = \alpha'\langle\alpha|\alpha'\rangle, \quad (3.25)$$

¹³ 正確には、Hermite 演算子と自己共役演算子という異なる概念がある。Hermite 演算子の定義は $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ であるが、さらにこれら 2つの演算子の定義域が一致する場合は自己共役演算子と呼ばれる。固有値が実になるという性質は自己共役演算子の性質であるが、多くの場合 Hermite 演算子と自己共役演算子の区別は重要にならないため、ここでは Hermite 演算子の性質として紹介する。

であるが、一方

$$\langle \alpha | \hat{A} | \alpha' \rangle = (\langle \alpha | \hat{A} | \alpha' \rangle)^* = (\langle \alpha' | \hat{A}^\dagger | \alpha \rangle)^* \stackrel{\hat{A} \text{ は Hermite}}{=} (\langle \alpha' | \hat{A} | \alpha \rangle)^* = (\alpha \langle \alpha' | \alpha \rangle)^* = \alpha^* \langle \alpha | \alpha' \rangle \stackrel{\alpha \text{ は実数}}{=} \alpha \langle \alpha | \alpha' \rangle, \quad (3.26)$$

であるから、 $\alpha \neq \alpha'$ であるなら $\alpha' \langle \alpha | \alpha' \rangle - \alpha \langle \alpha | \alpha' \rangle = 0 \implies \langle \alpha | \alpha' \rangle = 0$ である。

さて、量子論においては、物理量 (observable)¹⁴ に対して以下が要請される。

物理量

物理量は Hermite 演算子で表される

この要請により、物理量が実数であることが保証される。

[問 3.2] 以下の行列を **Pauli 行列** と言う。

$$\sigma^1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

これらが Hermite 行列であることを確認せよ。また、それぞれについて、固有値が実数であること、異なる固有値に属する固有ベクトルが直交すること、固有ベクトルが完全系を成すこと (= 2 つの固有ベクトルで任意の 2 成分ベクトルを表せること) を示せ。

[解 3.2] $(\sigma^i)^\dagger = ((\sigma^i)^t)^* = \sigma^i$ よりこれらは Hermite 行列である。 σ^i の固有値を $\lambda_{1,2}^{(i)}$ 、固有ベクトルを $\vec{v}_{1,2}^{(i)}$ とする。

$$\det(\lambda - \sigma^1) = 0 \implies \lambda^2 - 1 = 0 \implies \lambda_1^{(1)} = 1 \left(\vec{v}_1^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right), \quad \lambda_2^{(1)} = -1 \left(\vec{v}_2^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right),$$

$$\det(\lambda - \sigma^2) = 0 \implies \lambda^2 - 1 = 0 \implies \lambda_1^{(2)} = 1 \left(\vec{v}_1^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \right), \quad \lambda_2^{(2)} = -1 \left(\vec{v}_2^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \right),$$

$$\det(\lambda - \sigma^3) = 0 \implies \lambda^2 - 1 = 0 \implies \lambda_1^{(3)} = 1 \left(\vec{v}_1^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right), \quad \lambda_2^{(3)} = -1 \left(\vec{v}_2^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right),$$

より固有値は実数であり、 $\vec{v}_1^{(i)*} \cdot \vec{v}_2^{(i)} = \vec{v}_2^{(i)*} \cdot \vec{v}_1^{(i)} = 0$ なので異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する。また、 σ^i のそれぞれについて固有ベクトルは 1 次独立なので完全系を成す。

3.4 射影演算子・完全性関係

さて、ここでいくつか数学的テクニックを学ぼう。

射影演算子 正規化されたベクトル $|e\rangle$ から構成された次の演算子

$$\hat{P}(|e\rangle) := |e\rangle\langle e|, \quad (3.27)$$

¹⁴ 観測量、可観測量、観測可能量とも言われる。

を考えよう。任意のベクトル $|\Psi\rangle$ にこれを演算すると、

$$\hat{P}(|e\rangle)|\Psi\rangle = \langle e|\Psi\rangle|e\rangle, \quad (3.28)$$

であるから、 $\hat{P}(|e\rangle)$ は $|\Psi\rangle$ から $|e\rangle$ に平行な成分だけ取り出す演算子である。 $\hat{P}(|e\rangle)$ を $|e\rangle$ で張られた 1 次元部分空間への射影演算子 (projection operator) と呼ぶ。以下では、 $\hat{P}(|e\rangle)$ を省略して $\hat{P}(e)$ と書いたり、単に $\hat{P}$ と書くこともある。このようなベクトルが 1 つ以上あり、正規直交系 $\{|e_n\rangle\}_n = \{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ (ただし完全系とは限らない) を成している場合、

$$\hat{P}(|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots) := \sum_n |e_n\rangle\langle e_n|, \quad (3.29)$$

を同様に $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ で張られた部分空間への射影演算子と言う。

[問 3.3] 正規化されたベクトル $|e\rangle$ から構成された射影演算子

$$\hat{P} := |e\rangle\langle e|,$$

について、 $\hat{P}^2 = \hat{P}$ であることを示せ。この性質を**冪等 (idempotent)** と言う。また、 $\hat{P}$ の固有値としてあり得る値は何か。

[解 3.3] $\hat{P}^2 = \hat{P}$ は

$$\hat{P}^2 = |e\rangle\langle e|e\rangle\langle e| \stackrel{\langle e|e\rangle=1}{=} |e\rangle\langle e| = \hat{P},$$

より示される。また、 $\hat{P}$ の固有値を λ 、固有ベクトルを $|\alpha\rangle$ として、

$$\hat{P}^2|\alpha\rangle = \hat{P}\hat{P}|\alpha\rangle = \hat{P}\lambda|\alpha\rangle = \lambda\hat{P}|\alpha\rangle = \lambda^2|\alpha\rangle,$$

である一方、

$$\hat{P}^2|\alpha\rangle \stackrel{\hat{P}^2=\hat{P}}{=} \hat{P}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle,$$

であるから、固有ベクトルは 0 ベクトルでないことも用いて

$$\lambda^2|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle \quad \Rightarrow \quad \lambda^2\langle\alpha|\alpha\rangle = \lambda\langle\alpha|\alpha\rangle \quad \Rightarrow \quad \lambda^2 = \lambda \quad \Rightarrow \quad \lambda(\lambda - 1) = 0,$$

となる。したがって、許される値は $\lambda = 0, 1$ である。

完全性関係 さらに、 $\{|e_n\rangle\}_n = \{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ が正規直交**完全系**を成している場合には、

$$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n| = 1, \quad (3.30)$$

が成り立つ。右辺は恒等演算子の意味である。「正規直交系」ではなく「正規直交完全系」であることに注意しよう。証明は以下の通りである。 $\{|e_n\rangle\}_n$ は完全系なので、任意のベクトル $|\Psi\rangle$ は

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |e_n\rangle, \quad (3.31)$$

と展開される。係数 c_n は左から $\langle e_n |$ を作用させることにより $\langle e_n | \Psi \rangle = \sum_n c_n \langle e_n | e_n \rangle = \sum_n c_n \delta_{nn} = c_n$ つまり

$$c_n = \langle e_n | \Psi \rangle, \quad (3.32)$$

と求まるので、

$$|\Psi\rangle = \sum_n \langle e_n | \Psi \rangle |e_n\rangle, \quad (3.33)$$

である。さて、式 (3.30) の左辺を $|\Psi\rangle$ に作用させると

$$\sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \Psi \rangle, \quad (3.34)$$

であるが、これは式 (3.33) より $|\Psi\rangle$ であるから、任意のベクトル $|\Psi\rangle$ に対し $\sum_n |e_n\rangle \langle e_n|$ は恒等演算子として振る舞う。よって式 (3.30) が示された。

完全性関係 (3.30) を用いると、 $|\Psi\rangle$ を $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ で展開したときの展開係数が $\langle e_n | \Psi \rangle$ で与えられることが

$$|\Psi\rangle = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \Psi \rangle, \quad (3.35)$$

よりすぐにわかる。また、2 種類の正規直交完全系 $\{|e_n\rangle\}_n = \{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ および $\{|e'_n\rangle\}_{n'} = \{|e'_1\rangle, |e'_2\rangle, \dots\}$ があるとすると、2 種類の展開

$$|\Psi\rangle = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \Psi \rangle = \sum_{n'} |e'_{n'}\rangle \langle e'_{n'} | \Psi \rangle, \quad (3.36)$$

が可能であるが、その展開係数 $\langle e_n | \Psi \rangle$ と $\langle e'_{n'} | \Psi \rangle$ の間の関係が

$$\langle e'_{n'} | \Psi \rangle = \sum_n \langle e'_{n'} | e_n \rangle \langle e_n | \Psi \rangle, \quad (3.37)$$

と与えられることがすぐにわかる。同一のベクトル $|\Psi\rangle$ であっても用いる基底が異なると成分 $\langle e_n | \Psi \rangle$ および $\langle e'_{n'} | \Psi \rangle$ は異なり (図 16)、式 (3.37) がそれらの成分の間の変換則を与えている。

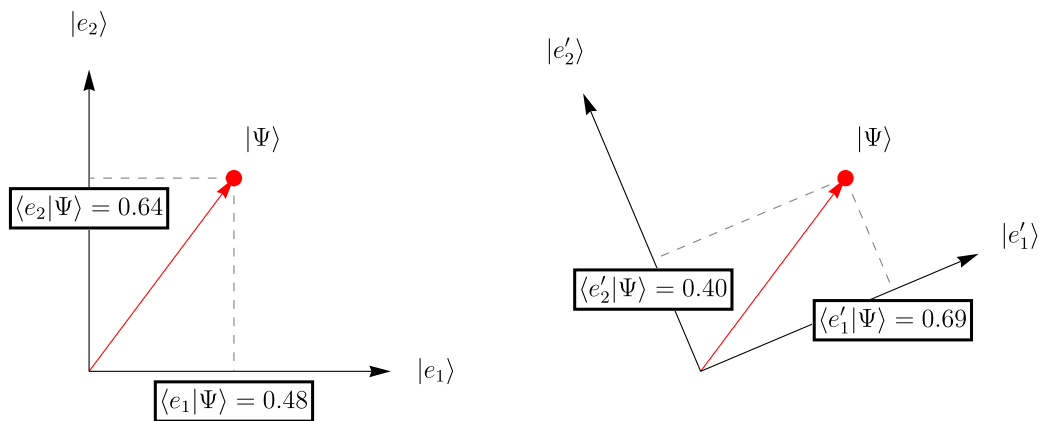


図 16: 基底の取り替えについて。ベクトル $|\Psi\rangle$ は左右で同じだが、用いる基底が異なるために異なる成分 $\langle e_n | \Psi \rangle$ および $\langle e'_{n'} | \Psi \rangle$ として表示される。

Hermite 演算子の固有ベクトルは正規直交完全系に取ることができるから、 $\{|e_n\rangle\}_n$ を何らかの Hermite 演算子の固有ベクトルに取って上記の議論を展開することが多い。

[問 3.4] ([1] Problem 3.27)

射影演算子を用いた**スペクトル分解 (spectral decomposition)** について学ぼう。演算子 $\hat{A}$ が正規直交完全系 $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ の各々を固有ベクトルに持つとし、その固有値を $\alpha_1, \alpha_2, \dots$ としよう。つまり

$$\hat{A}|e_n\rangle = \alpha_n|e_n\rangle \quad (n = 1, 2, \dots),$$

である。

(1) $\hat{A}$ は

$$\hat{A} = \sum_n \alpha_n |e_n\rangle \langle e_n|,$$

と書けることを示せ。任意のベクトル $|\Psi\rangle$ に対し、 $\hat{A}|\Psi\rangle$ と $(\sum_n \alpha_n |e_n\rangle \langle e_n|)|\Psi\rangle$ が等しくなることを示すとよい。

(2) 演算子の関数 $f(\hat{A})$ を定義する方法がいくつか存在する。1 つは級数展開

$$f(\hat{A}) := \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) \hat{A}^n = f(0) + \frac{1}{1!} f'(0) \hat{A} + \frac{1}{2!} f''(0) \hat{A}^2 + \dots,$$

であり、もう 1 つはスペクトル分解

$$f(\hat{A}) := \sum_n f(\alpha_n) |e_n\rangle \langle e_n|,$$

である。 $f(x) = e^x$ について、これら 2 つの方法で定義された $f(\hat{A})$ が等価となることを示せ。任意のベクトル $|\Psi\rangle$ に演算したときに、両者が同じものを返すことを示すとよい。

[解 3.4]

(1) 任意のベクトル $|\Psi\rangle$ に対し、 $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ は完全系であるから

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |e_n\rangle,$$

と展開できる。係数 c_n は左から $\langle e_n|$ を作用させることにより

$$c_n = \langle e_n | \Psi \rangle,$$

と求まるので、

$$|\Psi\rangle = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \Psi \rangle,$$

である。ここに $\hat{A}$ を作用させると

$$\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_n \hat{A}|e_n\rangle \langle e_n | \Psi \rangle \stackrel{\hat{A}|e_n\rangle = \alpha_n|e_n\rangle}{=} \sum_n \alpha_n |e_n\rangle \langle e_n | \Psi \rangle = \left(\sum_n \alpha_n |e_n\rangle \langle e_n| \right) |\Psi\rangle,$$

である。これが任意の $|\Psi\rangle$ について成り立つので、

$$\hat{A} = \sum_n \alpha_n |e_n\rangle \langle e_n|,$$

である。

(2) 前者を f_{former} 、後者を f_{latter} とする。任意のベクトル $|\Psi\rangle$ に対し、

$$\begin{aligned} f_{\text{former}}(\hat{A})|\Psi\rangle &= \left(\sum_m \frac{1}{m!} \hat{A}^m \right) \left(\sum_n |e_n\rangle \langle e_n|\Psi\rangle \right) \\ &= \sum_n \left(\sum_m \frac{1}{m!} \hat{A}^m \right) |e_n\rangle \langle e_n|\Psi\rangle \\ &\stackrel{\hat{A}|e_n\rangle=\alpha_n|e_n\rangle, \hat{A}^2|e_n\rangle=\alpha_n^2|e_n\rangle, \dots}{=} \sum_n \left(\sum_m \frac{1}{m!} \alpha_n^m \right) |e_n\rangle \langle e_n|\Psi\rangle \\ &= \sum_n e^{\alpha_n} |e_n\rangle \langle e_n|\Psi\rangle \\ &= f_{\text{latter}}(\hat{A})|\Psi\rangle, \end{aligned}$$

となるから、両者の方法で定義された $f(\hat{A})$ は一致する。

3.5 波動関数

さて、数学的テクニックを学んだので、第 1-2 節の伏線を少しずつ回収していこう。我々が扱ってきた波動関数は、本節の構成からは次のように定義される。

波動関数

系の状態 $|\Psi\rangle$ に対し、正規直交完全系 $\{|\alpha\rangle\}$ が与えられたとき、 $\langle\alpha|\Psi\rangle$ を「 $\{|\alpha\rangle\}$ 表示の波動関数」と言う。
あるいは、正規直交完全系 $\{|\alpha\rangle\}$ を固有ベクトルとして与える Hermite 演算子を $\hat{A}$ として、
「 $\hat{A}$ 表示の波動関数」とも言う。

もう少し詳しく説明しよう。正規直交完全系 $\{|\alpha_n\rangle\}_n = \{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \dots\}$ に対し、前小節で導入した完全性関係を使うと、系の状態 $|\Psi\rangle$ を

$$|\Psi\rangle = \sum_n |\alpha_n\rangle \langle\alpha_n|\Psi\rangle, \quad (3.38)$$

と展開することができる。ここに現れる $\langle\alpha_n|\Psi\rangle$ は「 $|\Psi\rangle$ に $|\alpha_n\rangle$ がどのくらいあるか」を表す量であり、これを「 $\{|\alpha_n\rangle\}_n$ 表示の波動関数」と呼ぶ。この言い方からも分かる通り、波動関数というのは一般的にどの基底を用いるかに依存する概念である。別の正規直交基底 $\{|\beta_n\rangle\}_n$ が与えられた場合、波動関数の変換則は

$$\langle\beta_{n'}|\Psi\rangle = \sum_n \langle\beta_{n'}|\alpha_n\rangle \langle\alpha_n|\Psi\rangle, \quad (3.39)$$

により与えられる。以下、「 $\{|\alpha\rangle\}$ 表示の波動関数」という表現について、簡潔に「 $|\alpha\rangle$ 表示の波動関数」「 $|\alpha\rangle$ で見た波動関数」と言うことがある。

第 1,2 節で取り扱った波動関数 $\Psi(t, x)$ とは似ても似つかない、と思うかもしれない。それはもっともで、我々はまだ位置演算子 $\hat{x}$ とその固有状態 $|x\rangle$ というものを導入していなかった。これを次小節で導入すると、波動関数 $\Psi(t, x)$ は系の状態 $|\Psi(t)\rangle$ を基底 $\{|x\rangle\}$ で表示した波動関数 $\langle x|\Psi(t)\rangle$ であることがわかる。

[問 3.5] 系の状態が正規直交基底 $\{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle\}$ を用いて

$$|\Psi\rangle = \frac{3}{5} |\alpha_1\rangle - \frac{4}{5} |\alpha_2\rangle,$$

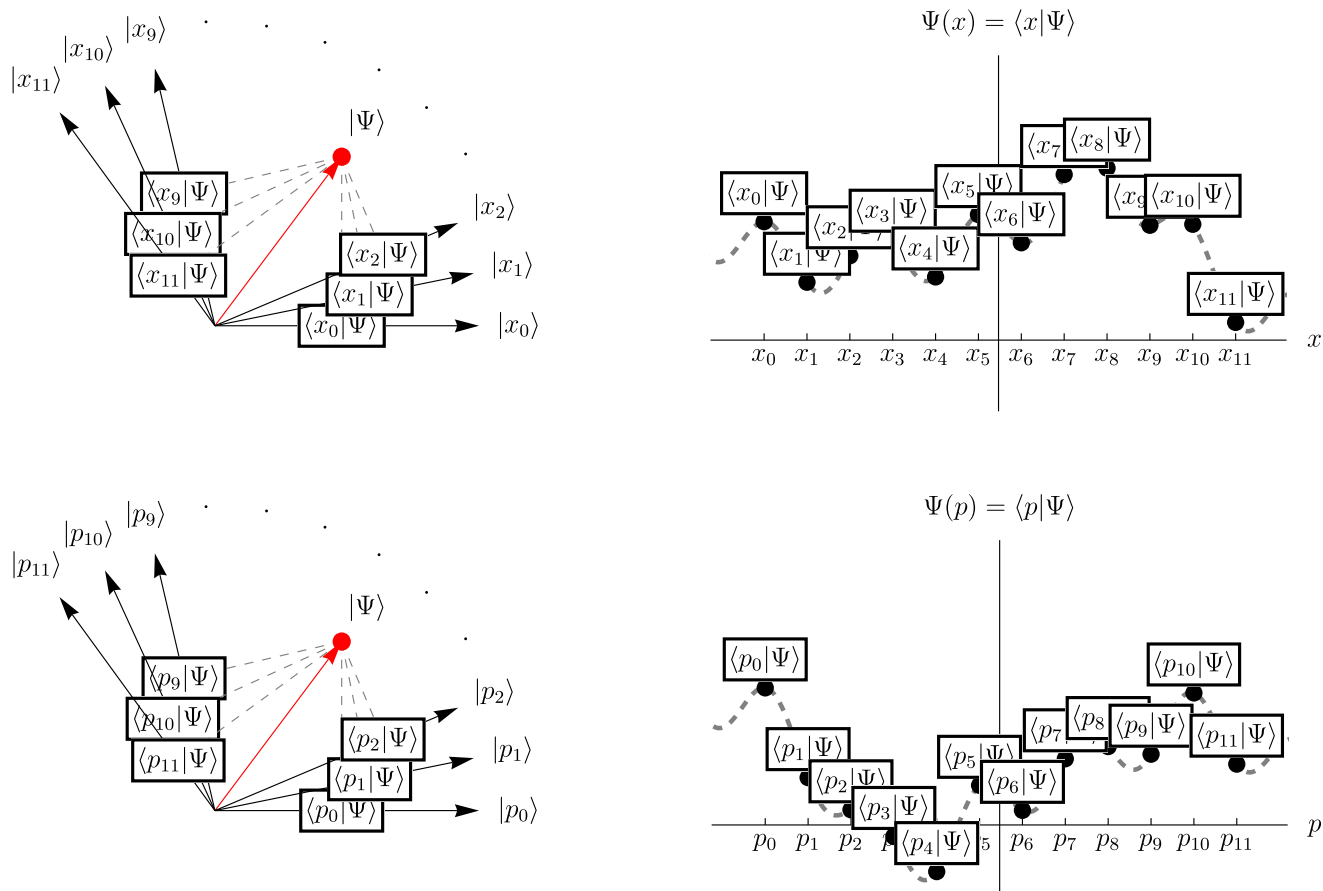


図 17: $|x\rangle$ 表示の波動関数と $|p\rangle$ 表示の波動関数の概念図。上図では状態 $|\Psi\rangle$ を無限個の基底 $\{|x\rangle\}$ で表示した結果、波動関数 $\langle x|\Psi\rangle$ が得られている。下図では代わりに基底 $\{|p\rangle\}$ を用いることで波動関数 $\langle p|\Psi\rangle$ が得られている。上下で状態 $|\Psi\rangle$ は同一であるが、用いる基底が異なるために波動関数 $\langle x|\Psi\rangle$ および $\langle p|\Psi\rangle$ は異なる関数となる。

と書かれているとする。

- (1) $\{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle\}$ 表示の波動関数を求めよ。
- (2) 別の正規直交基底 $\{|\beta_1\rangle, |\beta_2\rangle\}$ を

$$\begin{pmatrix} |\alpha_1\rangle \\ |\alpha_2\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\beta_1\rangle \\ |\beta_2\rangle \end{pmatrix},$$

で定義する。 $\{|\beta_1\rangle, |\beta_2\rangle\}$ 表示の波動関数を求めよ。

[解 3.5]

(1)

$$\begin{pmatrix} \langle \alpha_1 | \Psi \rangle \\ \langle \alpha_2 | \Psi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ -\frac{4}{5} \end{pmatrix}.$$

(2)

$$\begin{pmatrix} \langle \beta_1 | \Psi \rangle \\ \langle \beta_2 | \Psi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \beta_1 | \alpha_1 \rangle & \langle \beta_1 | \alpha_2 \rangle \\ \langle \beta_2 | \alpha_1 \rangle & \langle \beta_2 | \alpha_2 \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \alpha_1 | \Psi \rangle \\ \langle \alpha_2 | \Psi \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ -\frac{4}{5} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\frac{1}{5} \\ -\frac{7}{5} \end{pmatrix}.$$

3.6 離散スペクトルから連続スペクトルへ

一般に、演算子の固有値の集合をその演算子の固有値スペクトルあるいは単に**スペクトル (spectrum)** と言う。これまで離散スペクトルを持つ Hermite 演算子について議論してきた。本小節ではこれを連続スペクトルに拡張する。離散スペクトルと連続スペクトルの対応を表 2 にまとめた。離散スペクトルについては固有値 $|\alpha_n\rangle$ を離散変数 n で、連続スペクトルについては固有値 $|\alpha\rangle$ を連続変数 α でラベルしている。

	離散	連続
正規直交性	$\langle \alpha_n \alpha_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$	$\langle \alpha \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$
完全性関係	$1 = \sum_n \alpha_n\rangle \langle \alpha_n $	$1 = \int d\alpha \alpha\rangle \langle \alpha $
Born の確率規則	$P(\alpha_n) = \langle \alpha_n \Psi \rangle ^2$	$P(\alpha - \Delta, \alpha + \Delta) = \int_{\alpha-\Delta}^{\alpha+\Delta} d\alpha' \langle \alpha' \Psi \rangle ^2$

表 2: 離散スペクトルと連続スペクトルの対応。Born の確率規則については後の小節で説明する。

なぜこのような「離散 $\leftrightarrow$ 連続」の対応があるのだろうか。直交性については、離散の場合の「 $n = n'$ だけで 0 でない値を返す」という条件が、連続の場合の「 $\alpha = \alpha'$ だけで 0 でない値を返す」に対応している。正規性については、離散の場合は Kronecker のデルタで正規化した。これが連続の場合のデルタ関数に対応するのは、「全部足しあげる」という操作が離散では $\sum_n$ であり、連続では $\int d\alpha$ であることを思い出すと、

$$\text{離散} : \sum_n \delta_{nn'} = 1 = \int d\alpha \delta(\alpha - \alpha') : \text{連続}, \quad (3.40)$$

であるという理由による。この 2 つを定めると完全性関係の式が定まる。離散の場合については先に説明した通りで、連続の場合については完全性が任意の $|\Psi\rangle$ を $|\Psi\rangle = \int d\alpha c(\alpha) |\alpha\rangle$ と展開できるという意味であることを思い出すと、左から $\langle \alpha' |$ を掛けることで $\langle \alpha' | \Psi \rangle = \int d\alpha c(\alpha) \langle \alpha' | \alpha \rangle \stackrel{\text{正規直交性}}{=} c(\alpha') \Rightarrow |\Psi\rangle = \int d\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha | \Psi \rangle \Rightarrow 1 = \int d\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha|$ より示される。

連続スペクトルを与える代表的な演算子として位置演算子 $\hat{x}$ を導入しよう。この演算子は位置 x を固有値として返すものとする、位置は実数であるから、 $\hat{x}$ は Hermite 演算子として導入するのが自然である。簡単のため空間 1 次元で考えるが、高次元への一般化は容易である。

位置演算子 $\hat{x}$

Hermite 性: $\hat{x} = \hat{x}^\dagger$, 正規直交性: $\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$, 固有値: x , 固有ベクトル: $|x\rangle$.

固有値および固有ベクトルを求める方程式 $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ において、左辺の $\hat{x}$ は演算子であるが、右辺の x はただの数値であることに注意しよう。量子論において空間を移動できる自由度のある粒子を考える場合、このような演算子 $\hat{x}$ の存在を仮定することになる。前節の波動関数の定義に従うと、 $|x\rangle$ 表示の波動関数を議論できる。

——— $|x\rangle$ 表示の波動関数 ———

$$\Psi(t, x) := \langle x | \Psi(t) \rangle. \quad (3.41)$$

第 1-2 節で推測を重ねて導入した $\Psi(t, x)$ と、第 3 節で構成論的に導入した $\langle x | \Psi(t) \rangle$ を同一視していることに注意しよう。この同一視が成り立つかはあらゆる観点からチェックすべきであるが、この同一視を認めたとして、第 3 節の手法の大きな利点を紹介する。第 1-2 節で、波動関数は規格化条件 $\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \Psi(t, x) = 1$ を満たすものとして導入された。これを完全性関係 $\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x| = 1$ を用いて第 3 節の言葉に焼き直すと、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) \Psi(t, x) = 1 \iff \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \Psi(t) | x \rangle \langle x | \Psi(t) \rangle \right) \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1, \quad (3.42)$$

となる。つまり、波動関数の規格化条件は、Hilbert 空間の状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ の大きさが 1 である、という条件に言い換えられる。重要なのは、第 1-2 節で x の関数として構成された理論が、第 3 節の構成法により x という概念を離れた点である。

さて、第 2 節において、我々は運動量 p を波動関数 $\Psi(t, x)$ に対する微分演算子 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ とみなしていた。例えば粒子の運動量の平均値を計算するとき、 $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \Psi(t, x)$ として計算していた。その根拠は、平均値 $\langle x \rangle$ から作った運動量に Schrödinger 方程式を適用すると $m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(t, x) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \Psi(t, x)$ となるからであった。ということは、運動量演算子 $\hat{p}$ なるものがあるとすれば、それが $|\Psi(t)\rangle$ に作用した ($= \hat{p}|\Psi(t)\rangle$) なら、 $|x\rangle$ で見たとき ($= \langle x | \hat{p} | \Psi(t) \rangle$) に、元の波動関数 $\langle x | \Psi(t) \rangle$ が微分 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ されたものに相当するはずである。状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ は時刻 t における Hilbert 空間のベクトルであるが、時刻がいつであるかは今は特に重要でないから $|\Psi\rangle$ と書くことにして、上記を数式にすると以下ようになる

$$\langle x | \hat{p} | \Psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | \Psi \rangle. \quad (3.43)$$

あるいは別の言い方をしよう。運動量演算子 $\hat{p}$ なるものがあるとすれば、状態 $|\Psi\rangle$ におけるその期待値 $\langle \Psi | \hat{p} | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \Psi | x \rangle \langle x | \hat{p} | \Psi \rangle$ は、 $\int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \Psi | x \rangle (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \langle x | \Psi \rangle$ と一致するはずである。この議論からも式 (3.43) が導かれる。これは任意の $|\Psi\rangle$ について成り立つから、以下の式が示される

$$\langle x | \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x|. \quad (3.44)$$

式 (3.43) あるいは式 (3.44) から、運動量演算子 $\hat{p}$ が満たすべき性質がいくつか導かれる。

——— 運動量演算子 $\hat{p}$ ———

Hermite 性 : $\hat{p} = \hat{p}^\dagger$, 直交性 : $\langle p | p' \rangle = \delta(p - p')$, 固有値 : p , 固有ベクトル : $|p\rangle$.

- 運動量は実数であるから、 $\hat{p}$ も Hermite 演算子になると期待される。このことは、任意の状態 $|\Psi\rangle, |\Psi'\rangle$ を用いて

以下のように示される

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | \hat{p}^\dagger | \Psi' \rangle &= \langle \Psi' | \hat{p} | \Psi \rangle^* \\
&\stackrel{\text{完全性関係}}{=} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \Psi' | x' \rangle \langle x' | \hat{p} | x \rangle \langle x | \Psi \rangle \right]^* \\
&\stackrel{\text{式 (3.43)}}{=} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \Psi' | x' \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | x \rangle \right) \langle x | \Psi \rangle \right]^* \\
&\stackrel{|x\rangle \text{ の正規直交性}}{=} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \Psi' | x' \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x' - x) \right) \langle x | \Psi \rangle \right]^* \\
&\stackrel{\frac{\partial}{\partial x'} \delta(x' - x) = -\frac{\partial}{\partial x} \delta(x' - x)}{=} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \Psi' | x' \rangle \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x' - x) \right) \langle x | \Psi \rangle \right]^* \\
&\stackrel{\delta(x' - x) = \delta(x - x')}{=} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \Psi' | x' \rangle \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \right) \langle x | \Psi \rangle \right]^* \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \Psi | x \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \right) \langle x' | \Psi' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \Psi | x \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | x' \rangle \right) \langle x' | \Psi' \rangle \\
&\stackrel{\text{式 (3.43)}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \Psi | x \rangle \langle x | \hat{p} | x' \rangle \langle x' | \Psi' \rangle \\
&\stackrel{\text{完全性関係}}{=} \langle \Psi | \hat{p} | \Psi' \rangle.
\end{aligned} \tag{3.45}$$

- 運動量固有状態 $|p\rangle$ と位置固有状態 $|x\rangle$ はどういう関係にあるだろうか。式 (3.43) において、系の状態 $|\Psi\rangle$ は任意であったから、運動量固有状態 $|p\rangle$ に取ってもよいはずである。すると

$$\langle x | \hat{p} | p \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | p \rangle \quad \Longrightarrow \quad p \langle x | p \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | p \rangle, \tag{3.46}$$

となるが、これは $\langle x | p \rangle$ に対する微分方程式であり、

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}, \tag{3.47}$$

が得られる。定数部分の任意性については、以下で見るように正規性を満たす正の実数であるように取った。

- 運動量演算子 $\hat{p}$ の正規直交性は

$$\langle p | p' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p | x \rangle \langle x | p' \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i(p-p')x/\hbar} = \delta(p - p'), \tag{3.48}$$

より示される。

- 運動量演算子 $\hat{p}$ の性質として、この演算子を定数倍して e の肩に乗せた演算子 $e^{i\hat{p}a/\hbar} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{ia}{\hbar} \right)^n \hat{p}^n$ が任意の状態 $|\Psi\rangle$ に掛かると、 $|x\rangle$ で見たときに a だけの推進を引き起こしている、つまり $\langle x | \Psi \rangle$ の x を $x+a$ に置き換えたものに相当している

$$\langle x | e^{i\hat{p}a/\hbar} | \Psi \rangle = \langle x+a | \Psi \rangle, \tag{3.49}$$

ことを見よう。実際、

$$\begin{aligned}
\langle x|e^{i\hat{p}a/\hbar}|\Psi\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{ia}{\hbar}\right)^n \langle x|\hat{p}^n|\Psi\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{ia}{\hbar}\right)^n \langle x|\hat{p} \cdot \hat{p}^{n-1}|\Psi\rangle \\
&\stackrel{\text{式 (3.43) における任意の状態 } |\Psi\rangle \text{ をここでの } \hat{p}^{n-1}|\Psi\rangle \text{ とする}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{ia}{\hbar}\right)^n \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \langle x|\hat{p}^{n-1}|\Psi\rangle \\
&= \dots \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{ia}{\hbar}\right)^n \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \langle x|\Psi\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a^n \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \langle x|\Psi\rangle \\
&\stackrel{x \text{ 周りでの Maclaurin 展開}}{=} \langle x+a|\Psi\rangle,
\end{aligned} \tag{3.50}$$

より示される。この結果が妥当であることは、上式において a が微小であるとする

$$\langle x|\left(1 + \frac{ia\hat{p}}{\hbar}\right)|\Psi\rangle = \langle x|\Psi\rangle + a \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\Psi\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle x|\hat{p}|\Psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\Psi\rangle, \tag{3.51}$$

となり、式 (3.43) を再現することからもわかる。この意味で、 $\hat{p}$ は $|x\rangle$ 表示での微小推進を引き起こす、と言う。

- 最後に、演算子 $\hat{x}$ と $\hat{p}$ の **交換関係 (commutation relation)** を得ることが可能である。交換関係とは、演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対する交換子 $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ の具体的表式である。これを見てみよう。任意の状態 $|\Psi\rangle, |\Psi'\rangle$ に対して、デルタ関数の性質および部分積分を使うと

$$\begin{aligned}
&\langle \Psi | [\hat{x}, \hat{p}] | \Psi' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \Psi | x \rangle \langle x | [\hat{x}, \hat{p}] | x' \rangle \langle x' | \Psi' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \Psi | x \rangle \langle x | (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) | x' \rangle \langle x' | \Psi' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \Psi | x \rangle (x - x') \langle x | \hat{p} | x' \rangle \langle x' | \Psi' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \Psi | x \rangle (x - x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | x' \rangle \right) \langle x' | \Psi' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle \Psi | x \rangle \right) (x - x') \langle x | x' \rangle \langle x' | \Psi' \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \Psi | x \rangle \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x - x') \right) \langle x | x' \rangle \langle x' | \Psi' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle \Psi | x \rangle \right) (x - x') \delta(x - x') \langle x' | \Psi' \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \Psi | x \rangle \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x - x') \right) \delta(x - x') \langle x' | \Psi' \rangle \\
&= 0 + \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \Psi | x \rangle i\hbar \langle x | x' \rangle \langle x' | \Psi' \rangle \\
&= i\hbar \langle \Psi | \Psi' \rangle,
\end{aligned} \tag{3.52}$$

すなわち $\hat{x}$ と $\hat{p}$ の交換関係

正準交換関係 (canonical commutation relation)

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \tag{3.53}$$

が得られる。

[問 3.6] $\hat{p}$ 演算子が任意の状態 $|\Psi\rangle$ に作用した状態 $\hat{p}|\Psi\rangle$ を $|x\rangle$ 表示で見ると、

$$\langle x|\hat{p}|\Psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\Psi\rangle,$$

であった。では、 $\hat{x}$ 演算子が $|\Psi\rangle$ に作用した状態 $\hat{x}|\Psi\rangle$ を $|p\rangle$ 表示で見るとどうなるだろうか。

$$\langle p|\hat{x}|\Psi\rangle,$$

に完全性関係 $1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x|$ を挟み込み、 $\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ あるいはその複素共役 $\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar}$ を用いることで求めよ。

[解 3.6]

$$\begin{aligned} \langle p|\hat{x}|\Psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p|x\rangle \langle x|\hat{x}|\Psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} x \langle x|\Psi\rangle \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \langle x|\Psi\rangle \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p|x\rangle \langle x|\Psi\rangle \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \langle p|\Psi\rangle. \end{aligned}$$

[問 3.7] ([1] Problem 3.11 改)

調和振動子を思い出そう。時間に依存する Schrödinger 方程式は

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

であった。これを変数分離解 $\Psi_n(t, x) = \psi_n(x) \varphi_n(t)$ の線型結合 $\Psi(t, x) = \sum_n c_n \psi_n(x) \varphi_n(t)$ で書いたとき、 $\psi_n(x)$ たちの満たす方程式が時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$H \psi(x) = E \psi(x),$$

であり、その解が $E = E_n$ および $\psi(x) = \psi_n(x)$ で、時間依存性は $\varphi_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar}$ であった。そして調和振動子とは、ポテンシャルが

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2,$$

で与えられる系のことであり、基底状態 ($n = 0$ の状態) は

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}, \quad E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega,$$

であった。以上を、ブラケット記法の言葉で扱ってみよう。

(1) 時刻 $t = 0$ の基底状態 $\Psi_0(t = 0, x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ について考える。ブラケット記法では、この状態は

$$|\Psi_0(t = 0)\rangle,$$

と書かれる。そして、波動関数 $\Psi_0(t = 0, x)$ とは

$$\langle x|\Psi_0(t = 0)\rangle = \Psi_0(t = 0, x),$$

のことであった。運動量表示の波動関数 $\langle p|\Psi(t = 0)\rangle$ を求めよ。 $|x\rangle$ 表示の波動関数と $|p\rangle$ 表示の波動関数は基底の変換

$$\langle p|\Psi_0(t = 0)\rangle \stackrel{\text{完全性関係}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x| \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p|x\rangle\langle x|\Psi_0(t = 0)\rangle,$$

で結びついており、 $\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar}$ であることを用いるとよい。また、Gauss 積分 $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-(x-x_0)^2} = \sqrt{\pi}$ が複素数の x_0 についても成り立つことも用いるとよい。

(2) (1) の解が正規化条件 $\int_{-\infty}^{\infty} dp \langle \Psi(t = 0)|p\rangle\langle p|\Psi(t = 0)\rangle = 1$ を満たしていることを確かめよ。

[解 3.7]

(1)

$$\begin{aligned} \langle p|\Psi_0(t = 0)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p|x\rangle\langle x|\Psi_0(t = 0)\rangle \\ &\stackrel{\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar}}{=} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ &\stackrel{\text{平方完成}}{=} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x + \frac{ip}{m\omega}\right)^2} e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}} \\ &\stackrel{\text{Gauss 積分}}{=} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{m\omega}} e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}} \\ &= \left(\frac{1}{\pi\hbar m\omega}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}}. \end{aligned}$$

(2)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \langle \Psi(t = 0)|p\rangle\langle p|\Psi(t = 0)\rangle = \sqrt{\frac{1}{\pi\hbar m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\frac{p^2}{\hbar m\omega}} = \sqrt{\frac{1}{\pi\hbar m\omega}} \sqrt{\pi\hbar m\omega} = 1.$$

3.7 SCHRÖDINGER 方程式

第 1-2 節で我々が見てきた Schrödinger 方程式を、第 3 節の定式化に従って、 x に依存しない形で以下のように書き直すことができる。

Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle. \quad (3.54)$$

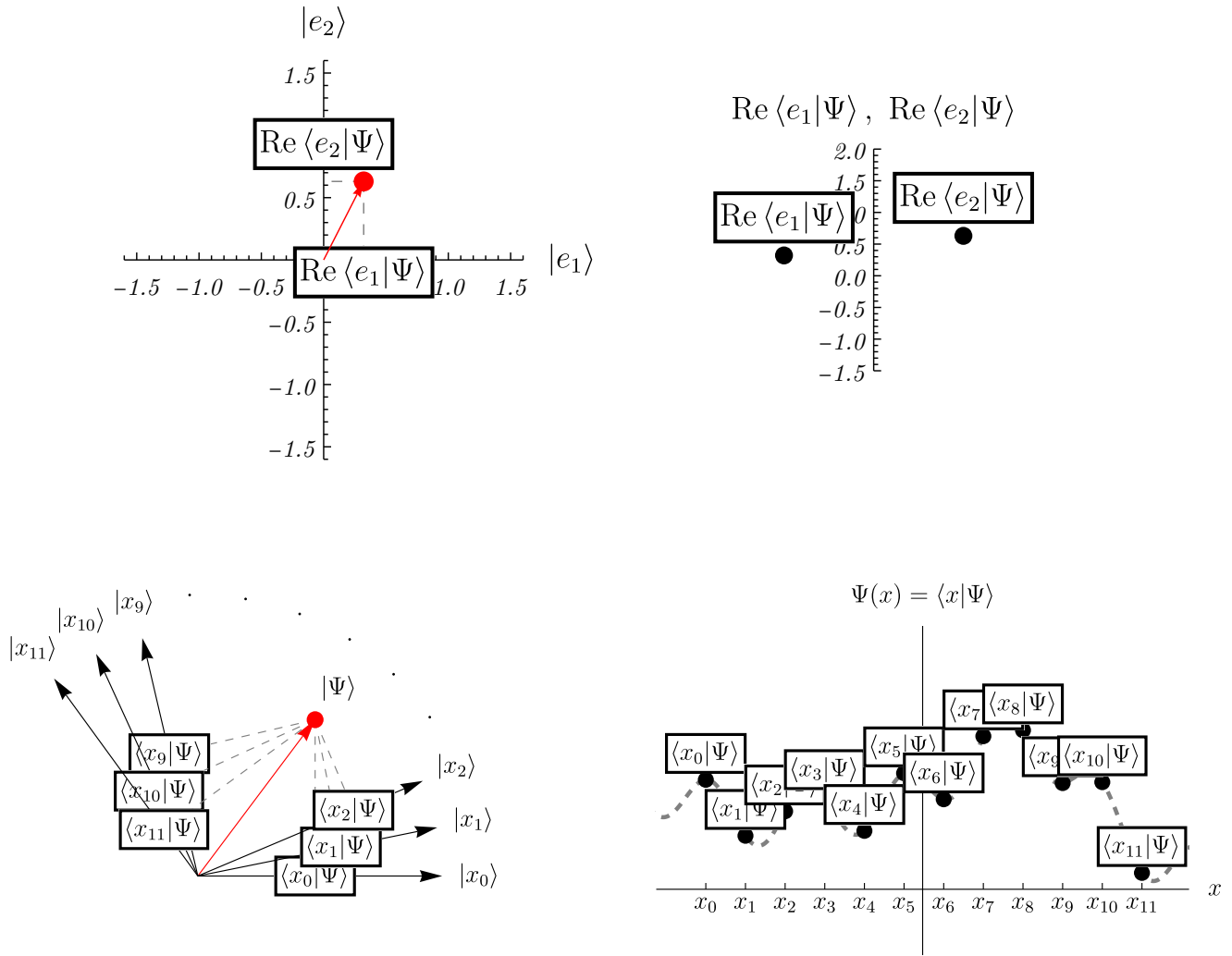


図 18: 2 準位系の時間発展 (上) と 1 次元空間中の粒子の時間発展 (下)。いずれも Hilbert 空間の元 $|\Psi\rangle$ が時間発展することにより波動関数が時間発展する。上図の場合は基底が $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$ (2 次元)、下図の場合は基底が $\{|x\rangle\}$ (無限次元) であるが、いずれも概念的には同じである。上図は 2 次元系の実際の時間発展から取っているため実部 $\langle e_n|\Psi\rangle$ を表示している一方、下図は概念的な図であり実際の時間発展からは取っていない。

つまり、Hilbert 空間上のベクトル $|\Psi(t)\rangle$ が何らかの演算子 $\hat{H}$ で時間発展する方程式を Schrödinger 方程式と言う、ということである。ここで、1 次元空間の粒子を考えるのであれば、Hamiltonian $\hat{H}$ は

1 次元空間中の粒子の Hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad (3.55)$$

である。先の小節で強調したように、Schrödinger 方程式 (3.54) は x という概念から解放されていることに注意しよう。もちろん、1 次元空間中の粒子の Hamiltonian を考えるのであれば式 (3.55) のように $\hat{x}$ と $\hat{p}$ が入ってくるのだが、実はより一般的なセットアップにおいては式 (3.55) ではない Hamiltonian で記述されるべき系が出てくる¹⁵。

¹⁵例えば Newton 力学 $ma = F$ では、状況に応じて異なる力を考えることで異なる系の時間発展を記述した。ばねであれば $F = -kx$ 、万有引力であれば $F = -\frac{GmM}{r^2}$ である。今の場合、Schrödinger 方程式において異なる Hamiltonian を考えることで、異なる量子系の時間発展を記述することができる。

少し先取りして具体例を見てみよう。1次元空間の粒子については、Hamiltonian は式 (3.55) で、Hilbert 空間は $\hat{x}$ の固有ベクトルの集合 $\{|x\rangle\}$ で張られる空間を考えていれば十分だった¹⁶。この Hilbert 空間を $\mathcal{H}_{\text{space,1d}}$ と書こう。3次元空間の粒子について、 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ の固有ベクトルの集合 $\{|x, y, z\rangle\}$ で張られる Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\text{space,3d}}$ を考えれば十分だろうか。答えはなんと否である。実は電子のような粒子には、空間的な自由度を記述する Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\text{space,3d}}$ に加えて、スピンと呼ばれる内部自由度があり、それを記述する Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ を同時に考慮しないといけない。そのため、考えるべき Hilbert 空間が $\mathcal{H}_{\text{total}} = \mathcal{H}_{\text{space,3d}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}$ となる。これについては後ほど見ることにする。

さて、Hamiltonian (3.55) で記述される Schrödinger 方程式 (3.54) が、第 1-2 節の $|x\rangle$ 表示の Schrödinger 方程式に帰着することは、 $|x\rangle$ 表示で見ることで

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x|\Psi(t)\rangle = \langle x|\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right)|\Psi(t)\rangle \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x|\Psi(t)\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \langle x|\Psi(t)\rangle, \quad (3.56)$$

と示される。同様に、 $|p\rangle$ 表示で見ることで、 $|p\rangle$ 表示の Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle p|\Psi(t)\rangle = \langle p|\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right)|\Psi(t)\rangle \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle p|\Psi(t)\rangle = \left(\frac{p^2}{2m} + V\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right)\right) \langle p|\Psi(t)\rangle, \quad (3.57)$$

を得ることもできる。何度か強調しているように、どちらの表示を用いても等価である。

コラム：あれも波動関数、これも波動関数

Schrödinger 方程式 (3.54) を見る方法は $|x\rangle$ 表示と $|p\rangle$ 表示だけだろうか。これらの表示を用いた理由は、Hermite 演算子である $\hat{x}$ や $\hat{p}$ の固有状態が正規直交完全系を張るからであった。ところで、もう 1 つ重要な Hermite 演算子を忘れていないだろうか。そう、Hamiltonian $\hat{H}$ である。Hamiltonian の固有状態

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad (3.58)$$

で Schrödinger 方程式を見るとどうなるだろうか。実は、第 2 節で変数分離法を用いた理由がここに関わってくる。図 19 に Schrödinger 方程式の様々な表示方法を示した。 $|x\rangle$ 表示や $|p\rangle$ 表示と同様に、 $|\psi_n\rangle$ 表示の Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_n|\Psi(t)\rangle = \langle \psi_n|\hat{H}|\Psi(t)\rangle \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_n|\Psi(t)\rangle = E_n \langle \psi_n|\Psi(t)\rangle, \quad (3.59)$$

を得ることができる。 $\langle x|\Psi(t)\rangle$ が $|x\rangle$ 表示の波動関数、 $\langle p|\Psi(t)\rangle$ が $|p\rangle$ 表示の波動関数と呼ばれていたのと同様に、 $\langle \psi_n|\Psi(t)\rangle$ は $|\psi_n\rangle$ 表示の波動関数である。この方程式はすぐに解くことができ、 $\langle \psi_n|\Psi(t)\rangle = \langle \psi_n|\Psi(t=0)\rangle e^{-iE_n t/\hbar}$ を得る。系の状態 $|\Psi(t)\rangle$ は

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|\Psi(t)\rangle, \quad (3.60)$$

と展開できるから、式 (3.58) を解いて基底 $\{|\psi_n\rangle\}$ を求め、 $|\psi_n\rangle$ 表示の Schrödinger 方程式 (3.59) を解いて $\langle \psi_n|\Psi(t)\rangle$ を求めることで、系の時間発展が解ける。

さて、式 (3.58)–(3.59) に見覚えがないだろうか。これらは、 $|x\rangle$ 表示の Schrödinger 方程式を変数分離した際に現れた方程式である。図 19 も参照して整理すると、実は変数分離の操作

$$\Psi(t, x) = \sum_n c_n \varphi_n(t) \psi_n(x), \quad (3.61)$$

¹⁶ $\hat{p}$ の固有ベクトルの集合 $\{|p\rangle\}$ で張られる空間、と言っても同じ意味であることに注意しよう。 $\{|x\rangle\}$ と $\{|p\rangle\}$ は $|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p|x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-ipx/\hbar} |p\rangle$ および $|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ipx/\hbar} |x\rangle$ でお互いに移り変わることができる。

は、 $|x\rangle$ 表示から $|\psi_n\rangle$ 表示へ、完全系関係 $\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1$ を用いて移る操作

$$\langle x|\Psi(t)\rangle = \sum_n \langle x|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\Psi(t)\rangle, \quad (3.62)$$

であったことがわかる。実際、次のような対応がある。

- $\psi_n(x)$ は $\langle x|\psi_n\rangle$ のことであり、満たすべき方程式は式 (3.58) に $\langle x|$ を掛けた $H\langle x|\psi_n\rangle = E_n\langle x|\psi_n\rangle$ である。
- $\langle\psi_n|\Psi(t)\rangle$ は $c_n\varphi_n(t)$ のことであり、満たすべき方程式は $|\psi_n\rangle$ 表示の Schrödinger 方程式 (3.59) である。解 $\langle\psi_n|\Psi(t)\rangle = \langle\psi_n|\Psi(t=0)\rangle e^{-iE_nt/\hbar}$ のうち $\langle\psi_n|\Psi(t=0)\rangle$ が c_n 、 $e^{-iE_nt/\hbar}$ が $\varphi_n(t)$ に対応している。

ということは、 $|x\rangle$ 表示の Schrödinger 方程式に対する変数分離の操作は、第 3 節の観点からすると「一旦 $|x\rangle$ 表示を採用して次に $|\psi_n\rangle$ 表示に移る」という二度手間な操作であったことがわかる。むしろ初めから $|\psi_n\rangle$ 表示で解き切れば楽ではないだろうか。調和振動子の場合はこの手続きがエレガントにできるのである。これについては次節で見ることにしよう。

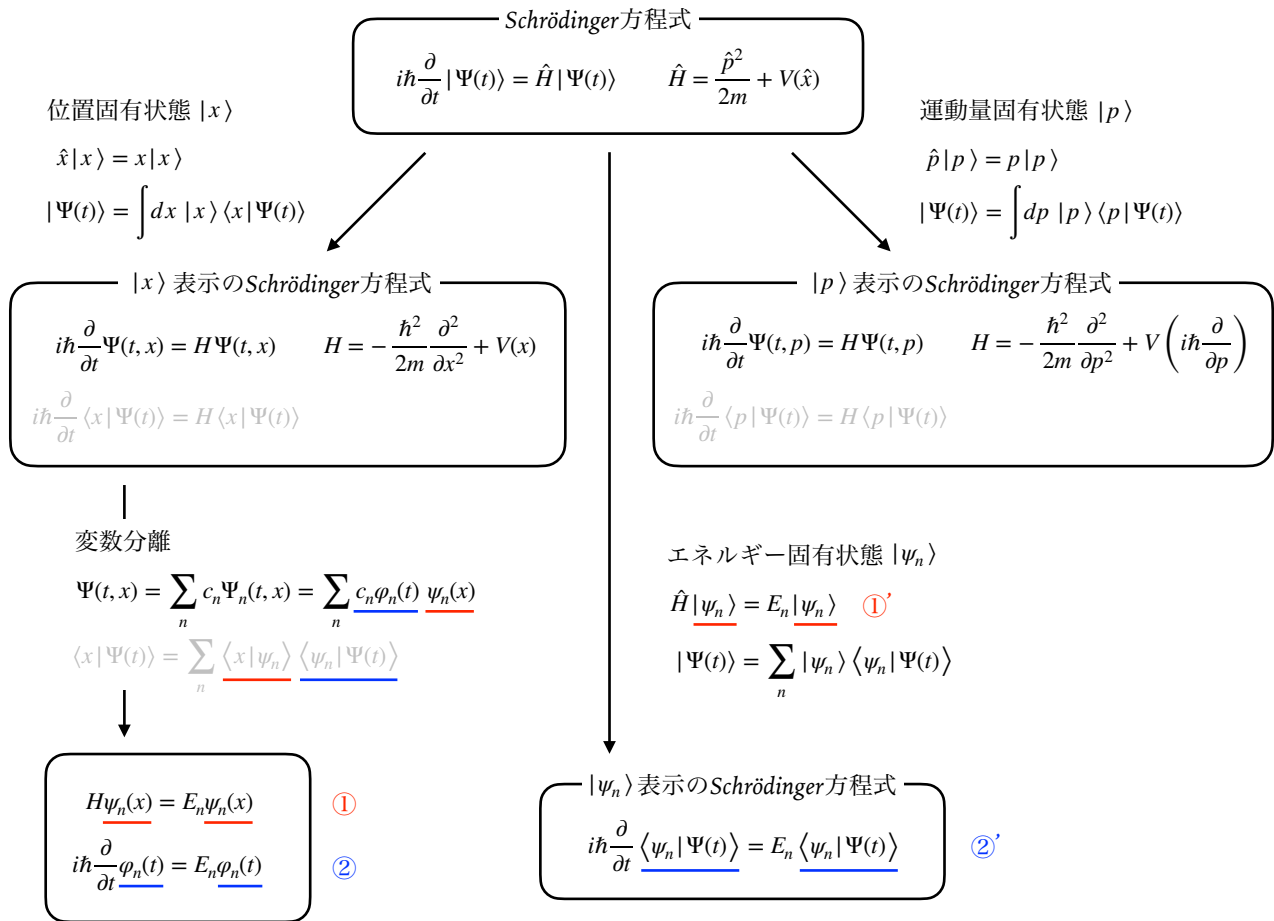


図 19: Schrödinger 方程式の様々な表示方法。第 2 節において $|x\rangle$ 表示の Schrödinger 方程式に行った変数分離の操作は、実はエネルギー固有状態へ表示を変える操作であったことがわかる。①と①'、②と②' が対応している。

[問 3.8] ([1] Example 3.8)

2つの正規直交基底

$$|1\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

で Hamiltonian が

$$\hat{H} = h|1\rangle\langle 1| + g|1\rangle\langle 2| + g|2\rangle\langle 1| + h|2\rangle\langle 2| \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix},$$

と与えられる系を考える。ここで g, h は実数である。時刻 $t = 0$ において系の初期状態は $|\Psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ である。この系が Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle,$$

に従って発展するとき、任意の時刻 t における状態 $|\Psi(t)\rangle$ を求めたい。

- (1) $\hat{H}$ が Hermite 演算子であることを確かめよ。
- (2) $\hat{H}$ の固有状態の線型結合で元の方程式の解を表したい。

$$\hat{H} |s\rangle = E |s\rangle,$$

を解くことで、2つの固有値 E_+, E_- および正規化されたエネルギー固有状態 $|s_+\rangle, |s_-\rangle$ を求めよ。

- (3) Schrödinger 方程式に左から $\langle s_{\pm}|$ を掛けることで、 $|s_{\pm}\rangle$ 表示の波動関数 $\langle s_{\pm}|\Psi(t)\rangle$ に対する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle s_{\pm}|\Psi(t)\rangle = E_{\pm} \langle s_{\pm}|\Psi(t)\rangle,$$

が得られることを示せ。また、この微分方程式を解くことで、 $\langle s_{\pm}|\Psi(t)\rangle$ を初期値 $\langle s_{\pm}|\Psi(t=0)\rangle$ を用いて表せ。

- (4) 初期状態が $|\Psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ であることを用いて、 $\langle s_{\pm}|\Psi(t=0)\rangle$ を求めよ。
- (5) 任意の時刻 t における状態 $|\Psi(t)\rangle$ を g, h を用いて表せ。完全性関係より

$$|\Psi(t)\rangle = |s_+\rangle \langle s_+|\Psi(t)\rangle + |s_-\rangle \langle s_-|\Psi(t)\rangle,$$

であることを用いるとよい。

[解 3.8]

- (1) $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ より $\hat{H}$ は Hermite 演算子である。
- (2) 固有値は

$$\det \begin{pmatrix} h-E & g \\ g & h-E \end{pmatrix} = 0 \quad \Longrightarrow \quad E = E_{\pm} := h \pm g,$$

であり、対応するエネルギー固有状態は

$$|s\rangle = |s_{\pm}\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \pm |2\rangle) \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix},$$

である。

(3) Schrödinger 方程式に左から $\langle s_{\pm}|$ を掛け、 $\langle s_{\pm}|\hat{H} = E_{\pm}\langle s_{\pm}|$ を用いると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle s_{\pm}|\Psi(t)\rangle = E_{\pm} \langle s_{\pm}|\Psi(t)\rangle,$$

を得る。解は

$$\langle s_{\pm}|\Psi(t)\rangle = \langle s_{\pm}|\Psi(t=0)\rangle e^{-iE_{\pm}t/\hbar},$$

である。

(4) $|\Psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ より

$$\langle s_{+}|\Psi(t=0)\rangle = \langle s_{-}|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

である。

(5) 完全性関係を用いて

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= |s_{+}\rangle \langle s_{+}|\Psi(t)\rangle + |s_{-}\rangle \langle s_{-}|\Psi(t)\rangle \\ &= |s_{+}\rangle \langle s_{+}|\Psi(t=0)\rangle e^{-iE_{+}t/\hbar} + |s_{-}\rangle \langle s_{-}|\Psi(t=0)\rangle e^{-iE_{-}t/\hbar} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |s_{+}\rangle e^{-iE_{+}t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}} |s_{-}\rangle e^{-iE_{-}t/\hbar} \\ &\stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{2} e^{-i(h+g)t/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} e^{-i(h-g)t/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ &= e^{-iht/\hbar} \begin{pmatrix} \cos(gt/\hbar) \\ -i \sin(gt/\hbar) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

となる。

[問 3.9] ([1] Example 3.44 改)

Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad \hat{H} \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ b & 0 & a \end{pmatrix},$$

に従って時間発展する系を考える。ここで a, b, c は 0 でない実数であり、 $b > 0$ とする。

(1) $\hat{H}$ が Hermite 演算子であることを確かめよ。

(2) $\hat{H}$ の固有値 E_1, E_2, E_3 および正規化された固有状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle$ を求めよ。

(3) Schrödinger 方程式に左から $\langle\psi_n|$ ($n = 1, 2, 3$) を掛けることで、 $|\psi_n\rangle$ 表示の波動関数 $\langle\psi_n|\Psi(t)\rangle$ に対する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi_n|\Psi(t)\rangle = E_n \langle\psi_n|\Psi(t)\rangle,$$

が得られることを示せ。また、この微分方程式を解くことで、 $\langle\psi_n|\Psi(t)\rangle$ を初期値 $\langle\psi_n|\Psi(t=0)\rangle$ を用いて表せ。

(4) 時刻 $t=0$ において系の状態が

$$|\Psi(t=0)\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

であるとする。任意の時刻における系の状態 $|\Psi(t)\rangle$ を求めよ。

(5) 時刻 $t=0$ において系の状態が

$$|\Psi(t=0)\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

であるとする。任意の時刻における系の状態 $|\Psi(t)\rangle$ を求めよ。

[解 3.9]

(1) $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ より $\hat{H}$ は Hermite 演算子である。

(2) 固有値は

$$\det \begin{pmatrix} a-E & 0 & b \\ 0 & c-E & 0 \\ b & 0 & a-E \end{pmatrix} = (a-E)^2(c-E) - b^2(c-E) = ((a-E)^2 - b^2)(c-E) = 0$$

$$\Rightarrow E = a-b (=E_1), a+b (=E_2), c (=E_3)$$

であり、対応する固有ベクトルは

$$|\psi_1\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_2\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_3\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

である。

(3) Schrödinger 方程式に左から $\langle s_\pm|$ を掛け、 $\langle\psi_n|\hat{H} = E_n\langle\psi_n|$ を用いると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi_n|\Psi(t)\rangle = E_n \langle\psi_n|\Psi(t)\rangle,$$

を得る。解は

$$\langle \psi_n | \Psi(t) \rangle = \langle \psi_n | \Psi(t=0) \rangle e^{-iE_n t/\hbar},$$

である。

(4) $\langle \psi_n | \Psi(t=0) \rangle$ を求めると

$$\langle \psi_1 | \Psi(t=0) \rangle = \langle \psi_2 | \Psi(t=0) \rangle = 0, \quad \langle \psi_3 | \Psi(t=0) \rangle = 1,$$

であるから、

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \Psi(t) \rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \Psi(t=0) \rangle e^{-iE_n t/\hbar} \stackrel{\text{表示}}{=} e^{-ict/\hbar} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

となる。

(5) $\langle \psi_n | \Psi(t=0) \rangle$ を求めると

$$\langle \psi_1 | \Psi(t=0) \rangle = \langle \psi_2 | \Psi(t=0) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle \psi_3 | \Psi(t=0) \rangle = 0,$$

であるから、

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \Psi(t) \rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \Psi(t=0) \rangle e^{-iE_n t/\hbar} \\ &\stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{2} e^{-i(a-b)t/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} e^{-i(a+b)t/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = e^{-iat/\hbar} \begin{pmatrix} \cos(bt/\hbar) \\ 0 \\ -i \sin(bt/\hbar) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

となる。

3.8 測定

この小節では、Hermite 演算子 $\hat{A}$ に対応する物理量の測定によって何が起こるか議論する。Hermite 演算子 $\hat{A}$ に対応する物理量を以下では単に物理量 $\hat{A}$ と呼ぶこともある。量子論においては、以下の Born の確率規則が要請される。

Born の確率規則

系の状態 $|\Psi\rangle$ について、Hermite 演算子 $\hat{A}$ に対応する物理量を測定すると、測定値は $\hat{A}$ の固有値 $\{\alpha\}$ のどれかになる。

- 離散固有値の場合、固有値 α を測定する確率 $\text{Prob}(\alpha)$ は α に属する固有空間への射影の長さの自乗 $\text{Prob}(\alpha) = |\hat{P}(\alpha)|\Psi\rangle|^2$ となる。ここで、 $\hat{P}(\alpha) := |\alpha\rangle\langle\alpha|$ である。
- 連続固有値の場合、区間 $[\alpha-\Delta, \alpha+\Delta]$ に測定値が得られる確率 $\text{Prob}(\alpha-\Delta, \alpha+\Delta)$ は区間 $[\alpha-\Delta, \alpha+\Delta]$ に属する固有空間への射影の長さの自乗 $\text{Prob}(\alpha-\Delta, \alpha+\Delta) = |\hat{P}(\alpha-\Delta, \alpha+\Delta)|\Psi\rangle|^2$ となる。ここで、 $\hat{P}(\alpha-\Delta, \alpha+\Delta) :=$

$$\int_{\alpha-\Delta}^{\alpha+\Delta} d\alpha' \hat{P}(\alpha') \text{ である。}$$

射影演算子たちは冪等性 $\hat{P}(\alpha)^2 = \hat{P}(\alpha)$ および $\hat{P}(\alpha - \Delta, \alpha + \Delta)^2 = \hat{P}(\alpha - \Delta, \alpha + \Delta)$ を満たしていることに注意しよう。離散固有値の場合、固有値 α の状態に縮退がある可能性を考慮し、その縮退した状態たちを m_α でラベルすると

$$\begin{aligned} P(\alpha) &= |\hat{P}(\alpha)|\Psi\rangle|^2 = \langle\P|\hat{P}(\alpha)^\dagger \hat{P}(\alpha)|\Psi\rangle = \langle\P|\hat{P}(\alpha)\hat{P}(\alpha)|\Psi\rangle = \langle\P|\hat{P}(\alpha)|\Psi\rangle \\ &= \sum_{m_\alpha} \langle\P|\alpha, m_\alpha\rangle \langle\alpha, m_\alpha|\Psi\rangle = \sum_{m_\alpha} |\langle\alpha, m_\alpha|\Psi\rangle|^2 = \sum_{m_\alpha} |\Psi(\alpha, m_\alpha)|^2, \end{aligned} \quad (3.63)$$

となり、 $|\alpha, m_\alpha\rangle$ 表示の波動関数の絶対値自乗を m_α について足し上げたものが観測確率になる。特に縮退がない場合は、

$$P(\alpha) = |\hat{P}(\alpha)|\Psi\rangle|^2 = \dots = |\Psi(\alpha)|^2, \quad (3.64)$$

となる。連続固有値の場合、

$$\begin{aligned} P(\alpha - \Delta, \alpha + \Delta) &= |\hat{P}(\alpha - \Delta, \alpha + \Delta)|\Psi\rangle|^2 = \langle\P|\hat{P}(\alpha - \Delta, \alpha + \Delta)^\dagger \hat{P}(\alpha - \Delta, \alpha + \Delta)|\Psi\rangle \\ &= \langle\P|\hat{P}(\alpha - \Delta, \alpha + \Delta)^2|\Psi\rangle = \langle\P|\hat{P}(\alpha - \Delta, \alpha + \Delta)|\Psi\rangle \\ &= \int_{\alpha-\Delta}^{\alpha+\Delta} d\alpha' \langle\P|\hat{P}(\alpha')|\Psi\rangle = \int_{\alpha-\Delta}^{\alpha+\Delta} d\alpha' \sum_{m_{\alpha'}} \langle\P|\alpha', m_{\alpha'}\rangle \langle\alpha', m_{\alpha'}|\Psi\rangle \\ &= \int_{\alpha-\Delta}^{\alpha+\Delta} d\alpha' \sum_{m_{\alpha'}} |\langle\alpha', m_{\alpha'}|\Psi\rangle|^2 = \int_{\alpha-\Delta}^{\alpha+\Delta} d\alpha' \sum_{m_{\alpha'}} |\Psi(\alpha', m_{\alpha'})|^2 = \sum_{m_\alpha} |\Psi(\alpha, m_\alpha)|^2 d\alpha, \end{aligned} \quad (3.65)$$

であり、特に縮退がない場合は

$$P(\alpha - \Delta, \alpha + \Delta) = \dots = \int_{\alpha-\Delta}^{\alpha+\Delta} d\alpha' |\Psi(\alpha')|^2 = |\Psi(\alpha)|^2 d\alpha, \quad (3.66)$$

となる。ここで、最後の等号では Δ が微量であることを仮定し、 $\Delta = d\alpha/2$ と取った。以上から、系の状態 $|\Psi\rangle$ が Hermite 演算子 $\hat{A}$ の固有値 α に属する固有ベクトル $|\alpha\rangle$ である場合、 $\hat{A}$ に対応する物理量を測定したときに必ず値 α が得られることがわかる。

ところで、第 1-2 節で粒子の発見確率についていくつか先取りして述べてあった。第 1 節では「 $|\Psi(t, x)|^2$ は、 $|\Psi(t, x)|^2$ が時刻 t および位置 x に粒子が発見される確率に比例するような、何らかの複素数」(正確には、「 $|\Psi(t, x)|^2 dx$ が時刻 t および位置 $[x - dx/2, x + dx/2)$ に粒子が発見される確率に比例するような、何らかの複素数」) であること、第 2 節では「 $\Psi(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \varphi_n(t)$ である」とすると、粒子のエネルギー E を測定したときに、測定値 E_n を得る確率は $|c_n|^2$ である」ことを述べていた。これらは Hermite 演算子 $\hat{A}$ としてそれぞれ位置演算子 $\hat{x}$ および Hamiltonian $\hat{H}$ を取った場合の Born の確率規則に相当する。

さて、測定によりどのような物理量が得られるかはわかったが、測定後の系はどうなるのだろうか。これに関する量子論の要請は**射影仮説**と呼ばれる。

射影仮説

測定直前に状態 $|\Psi\rangle$ であった系に、物理量 $\hat{A}$ の測定を行った結果、固有ベクトル $|\alpha\rangle$ を持つ固有値 α を測定値として得たとする。そのとき、測定直後の系の状態 $|\Psi'\rangle$ は一般に元の状態ではなく、

$$|\Psi'\rangle = \frac{1}{|\hat{P}(\alpha)|\Psi\rangle|} \hat{P}(\alpha)|\Psi\rangle, \quad (3.67)$$

となっている。

古典論では反作用のない測定が原理的に可能であると仮定されていたのに対し、量子論では測定の反作用が系の状態を変えてしまう。例えば物理量として位置演算子 $\hat{x}$ を選び、測定値として x を得たとすると、測定直後の状態は $|x\rangle$ に比例したベクトルになっている。これを**波束の収縮**と言う。

[問 3.10]

(1) Hermite 演算子 $\hat{A}$ の、固有値 α_1, α_2 の正規化された固有ベクトル $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle$ を考える。ある時刻において、系の状態 $|\Psi\rangle$ が

$$|\Psi\rangle = \frac{3}{5}|\alpha_1\rangle - \frac{4}{5}|\alpha_2\rangle,$$

で与えられているとする。 $\hat{A}$ に対応する物理量を観測したとき、 α_1 を得る確率および α_2 を得る確率を求めよ。

(2) Hermite 演算子 $\hat{x}$ の、固有値 x の正規化された固有ベクトルの集合 $\{|x\rangle\}$ を考える。ある時刻において、系の状態 $|\Psi\rangle$ が $|x\rangle$ 表示で

$$\langle x|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{a}}e^{-\frac{|x|}{a}},$$

で与えられているとする。 $\hat{x}$ に対応する物理量である位置 x を観測したとき、 $-a < x < a$ の範囲に粒子を見出す確率を求めよ。

[解 3.10]

(1)

$$P(\alpha_1) = \left(\frac{3}{5}\right)^2 = \frac{9}{25}, \quad P(\alpha_2) = \left(-\frac{4}{5}\right)^2 = \frac{16}{25}.$$

(2)

$$P(-a, a) = \int_{-a}^a dx \frac{1}{a} e^{-\frac{2|x|}{a}} = \int_0^a dx \frac{2}{a} e^{-\frac{2x}{a}} = 1 - e^{-2} (\simeq 84\%).$$

3.9 不確定性関係

系の状態 $|\Psi\rangle$ が Hermite 演算子 $\hat{A}$ の固有状態 $|\alpha\rangle$ である場合、物理量 $\hat{A}$ の測定で必ず値 α を得ることを見た。本小節では、そのような系に対し**他の**物理量の測定を行ったとき、どのような値を得るかについて考える。

一般論 まず、重要な量として交換子を導入する。

交換関係 (commutation relation)

演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対し、

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \quad (3.68)$$

を $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の交換子と言い、その具体的表式を交換関係と言う。 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ となる場合、 $\hat{A}, \hat{B}$ は交換すると言う。

例えば、位置と運動量に関しては既に式 (3.53) で $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ となることを見た。 $[\hat{x}, \hat{p}]$ を $\hat{x}$ と $\hat{p}$ の交換子と言い、 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を $\hat{x}$ と $\hat{p}$ の交換関係と言う。この交換関係を用いて、以下の不確定性関係を示すことができる。

不確定性関係

任意の状態 $|\Psi\rangle$ と Hermite 演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対し、演算子 $\Delta\hat{A} := \hat{A} - \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$, $\Delta\hat{B} := \hat{B} - \langle\Psi|\hat{B}|\Psi\rangle$ の分散 $\sigma_A^2 := \langle\Psi|(\Delta\hat{A})^2|\Psi\rangle$, $\sigma_B^2 := \langle\Psi|(\Delta\hat{B})^2|\Psi\rangle$ は以下の関係式を満たす

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle\Psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\Psi\rangle \right)^2. \quad (3.69)$$

これを不確定性関係と言う。

証明は以下の通りである。式を簡単にするため、 $\langle\Psi|\cdots|\Psi\rangle =: \langle\cdots\rangle$ と書こう。 $\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}$ が Hermite 演算子であること、および Cauchy-Schwarz の不等式より、

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \stackrel{\text{Hermite 性}}{=} \langle\Psi|\Delta\hat{A}^\dagger \Delta\hat{A}|\Psi\rangle \times \langle\Psi|\Delta\hat{B}^\dagger \Delta\hat{B}|\Psi\rangle = |\Delta\hat{A}|\Psi\rangle|^2 \times |\Delta\hat{B}|\Psi\rangle|^2 \stackrel{\text{Cauchy-Schwarz}}{\geq} |\langle\Psi|\Delta\hat{A} \Delta\hat{B}|\Psi\rangle|^2 = |\langle\Delta\hat{A} \Delta\hat{B}\rangle|^2, \quad (3.70)$$

である。ここで任意の複素数 z に対し

$$|z|^2 = (\text{Re}z)^2 + (\text{Im}z)^2 \geq (\text{Im}z)^2 = \left(\frac{1}{2i} (z - z^*) \right)^2, \quad (3.71)$$

であるから、

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} (\langle\Delta\hat{A} \Delta\hat{B}\rangle - \langle\Delta\hat{B} \Delta\hat{A}\rangle) \right)^2 = \left(\frac{1}{2i} \langle[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]\rangle \right)^2 = \left(\frac{1}{2i} \langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle \right)^2, \quad (3.72)$$

である。最終等号は $[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = (\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle) - (\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle) = \cdots = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]$ を用いた。 $\langle\hat{A}\rangle, \langle\hat{B}\rangle$ はただの数なので、 $\langle\hat{A}\rangle\hat{B} = \hat{B}\langle\hat{A}\rangle$ や $\langle\hat{B}\rangle\hat{A} = \hat{A}\langle\hat{B}\rangle$ が成り立つことに注意しよう。以上より不確定性関係が証明された。

不確定性関係 (3.69) についていくつか注意を述べる。

- $[\hat{A}, \hat{B}]$ が定数の場合、その定数を $[\hat{A}, \hat{B}] = ic$ としよう。 $c \neq 0$ であれば、不確定性関係 (3.69) は $\hat{A}, \hat{B}$ の両方が定まっている状態は存在しないことを示している。例えば、状態 $|\Psi\rangle$ を $\hat{A}$ の固有状態 $|\alpha\rangle$ に選ぶと $\sigma_A^2 = 0$ となるが、この状態は $\hat{B}$ の値が全く定まらない状態 $\sigma_B^2 \rightarrow \infty$ である。
- $[\hat{A}, \hat{B}]$ が定数とは限らない一般の場合、状態 $|\Psi\rangle$ の取り方によっては、 $\hat{A}, \hat{B}$ の両方が定まっている状態は存在し得る。実際、 $|\Psi\rangle$ が $\hat{A}, \hat{B}$ の固有状態であり、かつ $[\hat{A}, \hat{B}]|\Psi\rangle = 0$ となるような状態であれば、不確定性関係 (3.69) の右辺は 0 となるから、そのような状態に対しては $\hat{A}, \hat{B}$ の両方が定まっている。

位置と運動量の不確定性関係 不確定性関係 (3.69) を $\hat{x}, \hat{p}$ に適用することで、以下を得る。

位置と運動量の不確定性関係

任意の状態 $|\Psi\rangle$ に対し、 $\Delta\hat{x} := \hat{x} - \langle\Psi|\hat{x}|\Psi\rangle$, $\Delta\hat{p} := \hat{p} - \langle\Psi|\hat{p}|\Psi\rangle$ の分散 $\sigma_x^2 := \langle\Psi|(\Delta\hat{x})^2|\Psi\rangle$, $\sigma_p^2 := \langle\Psi|(\Delta\hat{p})^2|\Psi\rangle$ は以下の関係式を満たす

$$\sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \iff \sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.73)$$

演算子 $\hat{x}, \hat{p}$ は上記のうち $[\hat{A}, \hat{B}]$ が定数の場合に相当するので、どのような状態 $|\Psi\rangle$ に対しても $\hat{x}, \hat{p}$ は同時には定まらない。これは古典論とは相容れない結果である。

では、 $\hat{x}, \hat{p}$ の不確定性関係 (3.73) の等号が成立する場合はいつだろうか。不確定性関係 (3.69) の証明において不等号が現れた箇所は2箇所あった。1つは Cauchy-Schwarz の不等式、もう1つは $(\text{Re}z)^2 + (\text{Im}z)^2 \geq (\text{Im}z)^2$ である。これらについて等号が成立することを要求してみよう。まず Cauchy-Schwarz について、等号成立は2つのベクトル $\Delta\hat{A}|\Psi\rangle, \Delta\hat{B}|\Psi\rangle$ が平行なときであるから、 $\Delta\hat{p}|\Psi\rangle = a'\Delta\hat{x}|\Psi\rangle$ (a' は定数) と置ける。もう一方の等号成立は $\text{Re}\langle\Psi|\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}|\Psi\rangle = \text{Re}a'\langle\Psi|\Delta\hat{x}\Delta\hat{x}|\Psi\rangle = 0$ であるから、定数 a' は純虚数であることがわかる。よって実数 a を用いて $a' = ia$ と置き、

$$\Delta\hat{p}|\Psi\rangle = ia\Delta\hat{x}|\Psi\rangle, \quad (3.74)$$

を得る。左から $\langle x|$ を作用させ、演算子 $\hat{p}$ の性質 (3.43) を使うと、波動関数 $\langle x|\Psi\rangle$ に対する微分方程式

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \langle\hat{p}\rangle\right)\langle x|\Psi\rangle = ia(x - \langle\hat{x}\rangle)\langle x|\Psi\rangle, \quad (3.75)$$

を得る。解は A を定数として

$$\langle x|\Psi\rangle = Ae^{-\frac{a(x-\langle\hat{x}\rangle)^2}{2\hbar}} e^{i\langle\hat{p}\rangle x/\hbar}, \quad (3.76)$$

となる ([問 3.12])。これは $\langle\hat{x}\rangle$ 周りに局所化した Gaussian である。

エネルギーと時間の不確定性関係 「位置と運動量の不確定性関係」と並んでよく語られる不確定性関係に「エネルギーと時間の不確定性関係」がある。位置や運動量は演算子である一方、時間は演算子ではないため、これらの不確定性関係は全くの別物である。これに注意しつつ、エネルギーと時間の不確定性関係について学んでみよう。

任意の状態 $|\Psi\rangle$ と Hermite 演算子 $\hat{A}$ を考える。系の状態 $|\Psi\rangle$ は時刻 t に依存すること、および演算子 $\hat{A}$ も t に陽に依存する場合がある (例えば $\hat{A} = t\hat{x}$ など) ことを思い出すと、 $\hat{A}$ の期待値の時間発展は、Schrödinger 方程式を用いることにより

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle &= \left(\frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi|\right)\hat{A}|\Psi\rangle + \langle\Psi|\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}\right)|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{A}\left(\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle\right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|\hat{H}\hat{A}|\Psi\rangle + \langle\Psi|\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}\right)|\Psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|\hat{A}\hat{H}|\Psi\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}\langle\Psi|[\hat{H}, \hat{A}]|\Psi\rangle + \langle\Psi|\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}\right)|\Psi\rangle \\ \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle &= \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H}, \hat{A}]\rangle + \left\langle\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}\right\rangle, \end{aligned} \quad (3.77)$$

と書ける。最後では略記法 $\langle\Psi|\dots|\Psi\rangle = \langle\dots\rangle$ を用いた。さて、 $\hat{A}$ が Hermite 演算子である場合を考え、不確定性関係 (3.69) を $\hat{H}, \hat{A}$ に適用し、さらに $\hat{A}$ は時間に陽に依存しないとすると

$$\sigma_H^2 \sigma_A^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{H}, \hat{A}]\rangle\right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \left(\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle\right)^2. \quad (3.78)$$

を得る。 $\langle\hat{A}\rangle$ の時間依存性は状態 $|\Psi\rangle$ の時間依存性から来ていることに注意しよう。これを以下のように書き直せる。

エネルギーと時間の不確定性関係

$$\sigma_H \frac{\sigma_A}{d\langle\hat{A}\rangle/dt} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.79)$$

エネルギーと時間の不確定性関係 (3.79) は以下を意味している。 $\frac{\sigma_A}{d\langle\hat{A}\rangle/dt}$ は期待値 $\langle\hat{A}\rangle$ が標準偏差 σ_A だけ変化するのにかかる時間を表している。もちろん $\hat{A}$ は任意なので、 $\frac{\sigma_A}{d\langle\hat{A}\rangle/dt}$ はどの演算子 $\hat{A}$ を選ぶかによって異なる。しかし、 σ_H が小

さい ($\approx$ 系の状態 $|\Psi\rangle$ がエネルギー固有状態に近い) 限り、どの演算子 $\hat{A}$ に対しても、その期待値が変化するのにかかる時間 $\frac{\sigma_A}{d\langle\hat{A}\rangle/dt}$ は大きい ($\approx \langle\hat{A}\rangle$ はゆっくりとしか変化しない)。あるいは別の言い方をすると、ある演算子 $\hat{A}$ の期待値 $\langle\hat{A}\rangle$ が急激に変化した ($\approx \frac{\sigma_A}{d\langle\hat{A}\rangle/dt}$ が小さい) とすると、 σ_H は大きい ($\approx$ 系の状態 $|\Psi\rangle$ がエネルギー固有状態から大きくずれている)。

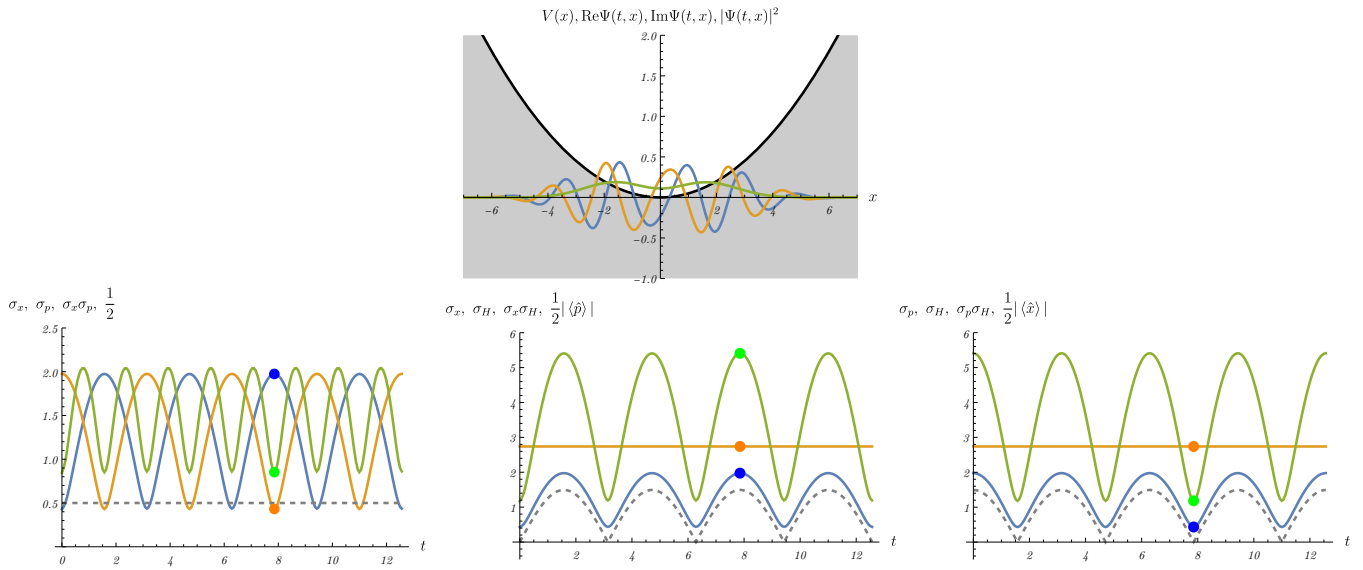


図 20: 不確定性関係の例。調和振動子 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ において適当な初期状態から時間発展させたときの波動関数 $\Psi(t, x)$ の実部 (上図青線)、虚部 (上図黄線)、および確率密度 $|\Psi(t, x)|^2$ (上図緑線)。下図左は σ_x (青線)、 σ_p (黄線)、 $\sigma_x\sigma_p$ (緑線)、および $\frac{1}{2i}\langle\Psi|[\hat{x}, \hat{p}]|\Psi\rangle = \frac{\hbar}{2}$ (点線)。下図中央は σ_x (青線)、 σ_H (黄線)、 $\sigma_x\sigma_H$ (緑線)、および $|\frac{1}{2i}\langle\Psi|[\hat{x}, \hat{H}]|\Psi\rangle| = \frac{\hbar}{2m}|\langle\Psi|\hat{p}|\Psi\rangle|$ (点線)。下図右は σ_p (青線)、 σ_H (黄線)、 $\sigma_p\sigma_H$ (緑線)、および $|\frac{1}{2i}\langle\Psi|[\hat{p}, \hat{H}]|\Psi\rangle| = \frac{\hbar m\omega^2}{2}|\langle\Psi|\hat{x}|\Psi\rangle|$ (点線)。数値計算においては $\hbar = m = \omega = 1$ とした。下図のいずれも緑線が点線より上側にあることがわかる。

[問 3.11] ([1] Problem 3.14 改)

(1) 以下の関係式を示せ。

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

(2) 以下の関係式を示せ。

$$[\hat{x}^n, \hat{p}] = i\hbar n\hat{x}^{n-1}.$$

(3) 以下の関係式を示せ。関数 $f(x)$ は Taylor 展開可能とする。

$$[f(\hat{x}), \hat{p}] = i\hbar \frac{d}{d\hat{x}} f(\hat{x}).$$

[解 3.11]

(1)

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

(2) 帰納法による。 $n = 1$ のとき

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

より成立。 $n = k \in \mathbb{N}$ のとき成立すると仮定すると、(1) の結果を用いて

$$[\hat{x}^{k+1}, \hat{p}] = [\hat{x}\hat{x}^k, \hat{p}] = \hat{x}[\hat{x}^k, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{x}^k = \hat{x}i\hbar k\hat{x}^{k-1} + i\hbar\hat{x}^k = i\hbar(k+1)\hat{x}^k,$$

であるから、 $n = k + 1$ でも成立。

(3) Taylor 展開可能であるという仮定、および (2) の結果を用いて

$$\begin{aligned} [f(\hat{x}), \hat{p}] &= \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) \hat{x}^n, \hat{p} \right] \stackrel{[1, \hat{p}] = 0}{=} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) \hat{x}^n, \hat{p} \right] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) i\hbar n \hat{x}^{n-1} = i\hbar \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} f^{(n)}(0) \hat{x}^{n-1} = i\hbar \frac{d}{d\hat{x}} f(\hat{x}). \end{aligned}$$

[問 3.12] ([1] Problem 3.17)

位置と運動量の不確定性関係が成り立つことを、具体例を用いて確認しよう。

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle \hat{p} \rangle \right) \langle x | \Psi \rangle = ia(x - \langle \hat{x} \rangle) \langle x | \Psi \rangle,$$

を解くことで、

$$\langle x | \Psi \rangle \propto e^{-\frac{a(x - \langle \hat{x} \rangle)^2}{2\hbar}} e^{i\langle \hat{p} \rangle x / \hbar},$$

を得よ。ただし、 $\langle \hat{x} \rangle, \langle \hat{p} \rangle$ は定数であることに注意せよ。

[解 3.12]

$$\begin{aligned} &\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle \hat{p} \rangle \right) \langle x | \Psi \rangle = ia(x - \langle \hat{x} \rangle) \langle x | \Psi \rangle \\ \Rightarrow &\frac{1}{\langle x | \Psi \rangle} \frac{\partial}{\partial x} \langle x | \Psi \rangle = -\frac{a}{\hbar} (x - \langle \hat{x} \rangle) + \frac{i}{\hbar} \langle \hat{p} \rangle \\ \Rightarrow &\ln \langle x | \Psi \rangle = -\frac{ax^2}{2\hbar} + \left(\frac{a}{\hbar} \langle \hat{x} \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \hat{p} \rangle \right) x \\ \Rightarrow &\langle x | \Psi \rangle \propto e^{-\frac{ax^2}{2\hbar} + \left(\frac{a}{\hbar} \langle \hat{x} \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \hat{p} \rangle \right) x} = e^{\frac{a(\hat{x})^2}{2\hbar}} e^{-\frac{a(x - \langle \hat{x} \rangle)^2}{2\hbar}} e^{i\langle \hat{p} \rangle x / \hbar} \propto e^{-\frac{a(x - \langle \hat{x} \rangle)^2}{2\hbar}} e^{i\langle \hat{p} \rangle x / \hbar}. \end{aligned}$$

[問 3.13] ([1] Problem 3.36 改)

時刻 $t = 0$ における $|x\rangle$ 表示の波動関数 $\langle x|\Psi(t=0)\rangle = \Psi(t=0, x)$ が

$$\langle x|\Psi(t=0)\rangle = \frac{A}{x^2 + a^2},$$

で与えられているとする。ここで A, a は正の実数とする。必要であれば以下を用いよ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{(x^2 + 1)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2}{(x^2 + 1)^2} = \frac{\pi}{2},$$

- (1) 規格化条件より A を a で表せ。
- (2) $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle, \sigma_x$ を求めよ。
- (3) $|p\rangle$ 表示の波動関数 $\langle p|\Psi(t=0)\rangle$ を求めよ。波動関数の変換則

$$\langle p|\Psi(t=0)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p|x \rangle \langle x|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \langle x|\Psi(t=0)\rangle,$$

および留数積分を用いるとよい。

- (4) $\langle p \rangle, \langle p^2 \rangle, \sigma_p$ を求めよ。
- (5) 不確定性関係 $\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$ が成り立っていることを確かめよ。

[解 3.13]

(1)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{A}{x^2 + a^2} \right)^2 \stackrel{x=ax'}{=} \frac{A^2}{a^3} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{1}{(x'^2 + 1)^2} = \frac{\pi A^2}{2a^3} = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}}.$$

(2)

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x}{(x^2 + a^2)^2} = 0, \\ \langle x^2 \rangle &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2}{(x^2 + a^2)^2} \stackrel{x=ax'}{=} \frac{A^2}{a} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{x'^2}{(x'^2 + 1)^2} = \frac{\pi A^2}{2a} = a^2, \\ \sigma_x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = a. \end{aligned}$$

(3)

$$\begin{aligned} \langle p|\Psi(t=0)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p|x \rangle \langle x|\Psi(t=0)\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \langle x|\Psi(t=0)\rangle \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \frac{1}{(x - ia)(x + ia)} \\ &\stackrel{\text{留数積分}}{=} \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} (-2\pi i) e^{-ip(-ia)/\hbar} \frac{1}{-ia - ia} & (p > 0) \\ \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} (2\pi i) e^{-ip(ia)/\hbar} \frac{1}{ia + ia} & (p < 0) \end{cases} \\ &= \sqrt{\frac{a}{\hbar}} e^{-a|p|/\hbar}. \end{aligned}$$

(4)

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \frac{a}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp p e^{-2a|p|/\hbar} = 0, \\ \langle p^2 \rangle &= \frac{a}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp p^2 e^{-2a|p|/\hbar} = \frac{a}{\hbar} \frac{\hbar^2}{4} \frac{\partial^2}{\partial a^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-2a|p|/\hbar} = \frac{a}{\hbar} \frac{\hbar^2}{4} \frac{\partial^2}{\partial a^2} \left(\frac{\hbar}{a} \right) = \frac{\hbar^2}{2a^2}, \\ \sigma_p &= \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}a}.\end{aligned}$$

(5)

$$\sigma_x \sigma_p = a \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2}a} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} > \frac{\hbar}{2}.$$

[問 3.14] ([1] Example 3.5)

時刻 $t = 0$ において、系の状態 $|\Psi\rangle$ が 2 つのエネルギー固有状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ の重ね合わせ

$$|\Psi\rangle = a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle,$$

で与えられているとする。ただし簡単のため a, b は実数とし、 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ は束縛状態とする。それぞれのエネルギーを E_1, E_2 として、 $|x\rangle$ 表示の波動関数は

$$\Psi(t, x) = a\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + b\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar},$$

となる。[問 2.2] より $\psi_1(x), \psi_2(x)$ は実関数として一般性を失わない。このときの粒子の存在確率分布は

$$|\Psi(t, x)|^2 = a^2\psi_1(x)^2 + b^2\psi_2(x)^2 + 2ab\psi_1(x)\psi_2(x)\cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right),$$

となることを以前に見た。

(1) 粒子の存在確率は時間の関数として振動する。その振動周期 τ を求めよ。

(2) 大雑把に $\Delta E := E_2 - E_1, \Delta t := \tau$ とする。 $\Delta E \Delta t$ の値を求め、エネルギーと時間の不確定性関係 (3.79) と比較せよ。

[解 3.14]

(1) 振動部分は $\cos(\dots)$ から来るので

$$\tau = \frac{2\pi\hbar}{E_2 - E_1}.$$

(2)

$$\Delta E \Delta t = (E_2 - E_1) \frac{2\pi\hbar}{E_2 - E_1} = 2\pi\hbar > \frac{\pi}{2}\hbar.$$

3.10 同時固有状態

系の状態が Hermite 演算子 $\hat{A}$ の固有状態 $|\alpha\rangle$ であれば、物理量 $\hat{A}$ の測定値は対応する $\hat{A}$ の固有値 α をばらつきなく返し、したがって $|\alpha\rangle$ は物理量 $\hat{A}$ が確定した状態であることを見た。これら固有状態は完全系を張るので、任意の状態 $|\Psi\rangle$ は固有状態 $\{|\alpha_n\rangle\}_n = \{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \dots\}$ を用いて $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\alpha_n\rangle$ と展開できる¹⁷。実際、Hermite 演算子 $\hat{H}$ の固有状態を考えることで、第 1 節の $\Psi(t, x) = \langle x | \Psi(t) \rangle$ に対する時間に依存した Schrödinger 方程式は、第 2 節の $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ に対する時間に依存しない Schrödinger 方程式に帰着した。

では、「Hermite 演算子 $\hat{A}$ の固有値 α に加えて Hermite 演算子 $\hat{B}$ の固有値 β で状態を指定した方が良い」場合はあるだろうか。この問いに答えるには、「良い」の意味を考えなければならない。例えばある状態 $|\Psi\rangle$ が $\hat{A}, \hat{B}$ の固有値 α, β の固有状態になっていたとしよう。このように $\hat{A}$ の固有状態かつ $\hat{B}$ の固有状態であるような状態を $\hat{A}, \hat{B}$ の**同時固有状態**と言う。この場合、 $|\Psi\rangle$ を $|\alpha, \beta\rangle$ と呼ぶことができる。しかし、仮に $\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有状態 $|\alpha, \beta\rangle$ の線型結合を用いて表せない状態 $|\Psi'\rangle$ が存在してしまうとすると、 α, β で状態をラベルするという手法に利点がなくなってしまう ([問 3.17(1)] 参照)。したがって、「良い」とは、どのような状態も $\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有状態で展開できること、すなわち $\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有状態が完全系を張ることであり、答えるべき問いは「Hermite 演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有状態が完全系を張るのはどのような場合か」である。

同時固有状態が完全系を張るとすると、任意の状態 $|\Psi\rangle$ を

$$|\Psi\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} |\alpha_n, \beta_m\rangle, \quad (3.80)$$

と展開できる。固有値 α_n, β_m の状態が縮退している可能性があるが、そのラベルは簡単のため省略した。ここで唐突であるが両辺に $[\hat{A}, \hat{B}]$ を当ててみよう。右辺は $\sum_{n,m} c_{n,m} [\hat{A}, \hat{B}] |\alpha_n, \beta_m\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} (\beta_m \alpha_n - \alpha_n \beta_m) |\alpha_n, \beta_m\rangle = 0$ を返すので、任意の状態 $|\Psi\rangle$ に対し $[\hat{A}, \hat{B}] |\Psi\rangle = 0$ 、つまり $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ である。逆に、 $\hat{A}, \hat{B}$ が $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ を満たすとする、 $\hat{A}$ の固有ベクトルおよび $\hat{B}$ の固有ベクトル双方を、 $\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有ベクトルであるように選ぶことができる (証明略)。これを一般化することで、次が成り立つ。

同時固有状態

Hermite 演算子 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ がどの 2 つを取っても交換するならば、これらの演算子の任意の固有ベクトルを同時固有ベクトル $|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle$ に選ぶことができる。そのように取った固有ベクトルは、物理量 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ の値が定まっている状態であり、その全体 $\{|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle\}$ は正規直交完全系に取ることができる。

[問 3.15] ([1] Problem 3.16 改)

2 つの交換しない演算子 $\hat{P}, \hat{Q}$ に対し、それらに共通する固有ベクトルでは完全系を張ることはできないことを証明せよ。背理法を用いるとよい。つまり、2 つの交換しない演算子 $\hat{P}, \hat{Q}$ に共通する固有ベクトル $\{|\alpha_n\rangle\}_n$ で完全系が張れたとする。その場合、任意のベクトル $|\Psi\rangle$ は $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\alpha_n\rangle$ と展開できるが、これに $[\hat{P}, \hat{Q}]$ を演算することで矛盾を示せ。

[解 3.15] 2 つの交換しない演算子 $\hat{P}, \hat{Q}$ に共通する固有ベクトル $\{|\alpha_n\rangle\}_n$ で完全系が張れたとする。任意のベクトル $|\Psi\rangle$ は $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\alpha_n\rangle$ と展開できるが、これに $[\hat{P}, \hat{Q}]$ を演算すると

$$[\hat{P}, \hat{Q}] |\Psi\rangle = \sum_n c_n [\hat{P}, \hat{Q}] |\alpha_n\rangle = 0,$$

となる。任意の $|\Psi\rangle$ に対し上式が成り立つから $[\hat{P}, \hat{Q}] = 0$ となるが、これは $\hat{P}, \hat{Q}$ が交換しない演算子であること

¹⁷ 縮退がある場合は、固有値 α_n の状態たちを $|\alpha_n, m_n\rangle$ ($m_n = 1, 2, \dots$) として $|\Psi\rangle = \sum_n \sum_{m_n} c_{n,m_n} |\alpha_n, m_n\rangle$ とすればよい。

に反する。よって背理法より、 $\hat{P}, \hat{Q}$ に共通する固有ベクトルでは完全系を張ることはできないことが証明された。

[問 3.16] 以下の交換関係を満たす Hermite 演算子の組 $(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ を考えよう。

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

ただし、交換子は $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ で定義される。

(1) $\hat{L}^2 := \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ は $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ と交換することを示せ。 $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$ を用いるとよい。 L_z について示せば他も同様なので、 $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$ を示せば十分である。

(2) 不確定性関係

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle \Psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \Psi \rangle \right)^2.$$

を $\hat{A} = \hat{L}_x, \hat{B} = \hat{L}_y$ に適用し、 $\sigma_{L_x} \sigma_{L_y}$ の下限を $\langle \Psi | \hat{L}_z | \Psi \rangle$ で表せ。ただし、 $|\Psi\rangle$ は任意の状態であり、 σ_A^2, σ_B^2 は $\Delta A := \hat{A} - \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle, \Delta B := \hat{B} - \langle \Psi | \hat{B} | \Psi \rangle$ の分散 $\sigma_A^2 := \langle \Psi | (\Delta A)^2 | \Psi \rangle, \sigma_B^2 := \langle \Psi | (\Delta B)^2 | \Psi \rangle$ である。

[解 3.16]

(1) L_z について示す。他は同様である。

$$\begin{aligned} [\hat{L}^2, \hat{L}_z] &= [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_z] \\ &= [\hat{L}_x^2, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_z] \\ &= \hat{L}_x [\hat{L}_x, \hat{L}_z] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z] \hat{L}_x + \hat{L}_y [\hat{L}_y, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y, \hat{L}_z] \hat{L}_y \\ &= \hat{L}_x (-i\hbar\hat{L}_y) + (-i\hbar\hat{L}_y) \hat{L}_x + \hat{L}_y (i\hbar\hat{L}_x) + (i\hbar\hat{L}_x) \hat{L}_y \\ &= 0. \end{aligned}$$

(2)

$$\sigma_{L_x}^2 \sigma_{L_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle \Psi | [\hat{L}_x, \hat{L}_y] | \Psi \rangle \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \langle \Psi | \hat{L}_z | \Psi \rangle \right)^2 \implies \sigma_{L_x} \sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \Psi | \hat{L}_z | \Psi \rangle|.$$

[問 3.17] 以下の Hermite 演算子を考える

$$\hat{A} \text{ 表示 } \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} \text{ 表示 } \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{C} \text{ 表示 } \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

(1) $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ であるが、

$$|v\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

は $\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有ベクトルであることを示せ。

(2) $[\hat{A}, \hat{C}] = 0$ であるが、

$$|v'_+\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |v'_-\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

は $\hat{C}$ の固有ベクトルである一方、 $\hat{A}$ の固有ベクトルではないことを示せ。また、

$$|v\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |v_+\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |v_-\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

は $\hat{A}, \hat{C}$ の同時固有ベクトルであることを示せ。

(3) (1)(2) の結果を用いて、以下の主張のうち誤りを含むものを全て選べ。

- 交換しない Hermite 演算子に同時固有ベクトルを取ることはできない。
- 交換する Hermite 演算子であれば、片方の固有ベクトルは自動的にもう一方の固有ベクトルになっている。
- 交換する Hermite 演算子であれば、固有ベクトルを適切に選ぶことで、双方の固有ベクトルとなっているようなベクトルで完全系を張ることができる。

[解 3.17]

(1)

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2i & 0 \\ 0 & 0 & -2i \end{pmatrix} \neq 0,$$

であるが、

$$\hat{A}|v\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |v\rangle, \quad \hat{B}|v\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |v\rangle,$$

より $|v\rangle$ は $\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有ベクトルである。

(2)

$$[\hat{A}, \hat{C}] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0,$$

である。また、

$$\hat{C}|v'_+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |v'_+\rangle, \quad \hat{C}|v'_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |v'_-\rangle,$$

より $|v'_+\rangle, |v'_-\rangle$ は $\hat{C}$ の固有ベクトルであるが、

$$\hat{A}|v'_+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |v'_-\rangle, \quad \hat{A}|v'_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |v'_+\rangle,$$

より $|v'_+\rangle, |v'_-\rangle$ は $\hat{A}$ の固有ベクトルではない。そして、

$$\begin{aligned} \hat{A}|v\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |v\rangle, & \hat{A}|v_+\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |v_+\rangle, & \hat{A}|v_-\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} = -|v_-\rangle, \\ \hat{C}|v\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |v\rangle, & \hat{C}|v_+\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |v_+\rangle, & \hat{C}|v_-\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = |v_-\rangle, \end{aligned}$$

より $|v\rangle, |v_+\rangle, |v_-\rangle$ は $\hat{A}, \hat{C}$ の同時固有ベクトルである。

(3) (1)(2)の結果より、最初の2つの主張は誤りである。

4. 調和振動子

本節では、第 2 節で考察した調和振動子を再考する。第 3 節で状態 $|\Psi(t)\rangle$ に対する Schrödinger 方程式 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$ を導入し、位置演算子と運動量演算子の間に交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \quad (4.1)$$

が成り立つことを見た。これをうまく使って調和振動子の Schrödinger 方程式を解く方法を見てみよう。

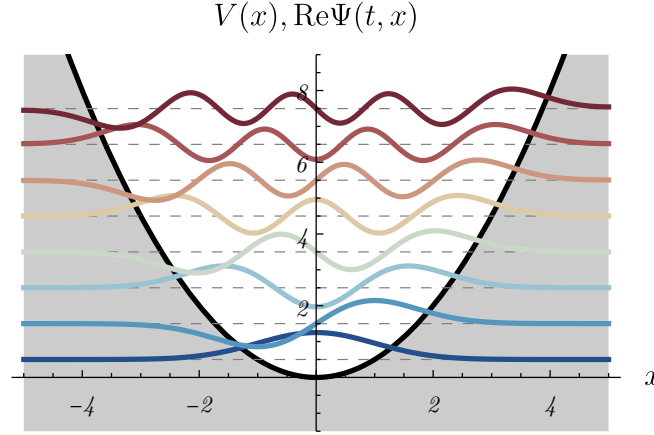


図 21: 調和振動子ポテンシャルとエネルギー固有状態。

4.1 復習：調和振動子に対する SCHRÖDINGER 方程式

まず、第 2 節で調和振動子のエネルギー固有状態の波動関数をどのように得たのか復習しよう。時間に依存する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = H \Psi(t, x), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad (4.2)$$

から始めて、波動関数 $\Psi(t, x)$ の構成要素として変数分離型の波動関数 $\Psi(t, x) = \psi(x)\varphi(t)$ を考えると、2 つの微分方程式

$$i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} = E\varphi(t), \quad H\psi(x) = E\psi(x), \quad (4.3)$$

が得られるのだった。このうち時間依存部分は $\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$ と簡単に解くことができる。空間依存部分 $\psi(x)$ の満たす方程式は時間に依存しない Schrödinger 方程式と呼ばれる。調和振動子

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (4.4)$$

に対して時間に依存しない Schrödinger 方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E\psi(x), \quad (4.5)$$

となる。表式を簡潔にするため、

$$\xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad K := \frac{2E}{\hbar\omega}, \quad (4.6)$$

を導入すると

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} + (K - \xi^2) \right] \psi(\xi) = 0, \quad (4.7)$$

を得る。遠方での解の振る舞いを考慮して

$$\psi(\xi) = (a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots) e^{-\xi^2/2} = \left(\sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j \right) e^{-\xi^2/2}, \quad (4.8)$$

と書き、上式に代入すると

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j] \xi^j = 0, \quad (4.9)$$

が得られる。これはどの ξ の値についても成り立っているため、係数はすべて 0 であり、

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)} a_j \quad (j=0,1,\dots), \quad (4.10)$$

となる。これを用いると偶数系列 $a_0 \rightarrow a_2 \rightarrow a_4 \rightarrow \dots$ および奇数系列 $a_1 \rightarrow a_3 \rightarrow a_5 \rightarrow \dots$ が順次求まるが、いずれかの系列が 0 にならないまま無限に続いてしまうと $\psi(\xi)$ は発散してしまう。そうならないための条件は

$$K = 2n+1 \quad (n \text{ は } 0 \text{ 以上の整数}), \quad (4.11)$$

であり、この場合にしか規格化可能な解は存在しない (第 2 節参照)。例えば $n=0$ の場合は偶数系列について $a_0 \neq 0$ かつ $a_2 = a_4 = \dots = 0$ 、奇数系列について $a_1 = a_3 = a_5 = \dots = 0$ である。同様に $n=1$ の場合は偶数系列について $a_0 = a_2 = a_4 = \dots = 0$ 、奇数系列について $a_1 \neq 0$ かつ $a_3 = a_5 = \dots = 0$ である。このようにして、得られる解は $n=0,1,2,\dots$ について

$$\psi_0(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\xi^2/2}, \quad \psi_1(\xi) = \left(\frac{4m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \xi e^{-\xi^2/2}, \quad \psi_2(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} (1 - 2\xi^2) e^{-\xi^2/2}, \quad \dots \quad (4.12)$$

となることがわかり、一般解は Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ を用いて

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2}, \quad (4.13)$$

となるのであった。

[問 4.1] 調和振動子に対する時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$H\psi(x) = E\psi(x), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2,$$

について、以下の問いに答えよ。

(1) 変数変換

$$\xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad K := \frac{2E}{\hbar\omega},$$

を行うと、

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} + (K - \xi^2) \right] \psi(\xi) = 0,$$

が得られることを示せ。ただし、 $\psi(\xi)$ は $\psi(x)$ に $x = x(\xi)$ を代入した $\psi(x(\xi))$ の略記である。

(2) 解を

$$\psi(\xi) = (a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \cdots) e^{-\xi^2/2} = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j e^{-\xi^2/2},$$

と書いたとき、

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j] \xi^j = 0,$$

が得られることを示せ。

(3) (2) より

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)} a_j \quad (j=0,1,\dots),$$

が得られる。これと $\psi(\xi)$ が発散しないための条件

$$K = 2n+1 \quad (n \text{ は } 0 \text{ 以上の整数}),$$

より、具体的に $n=2$ について

$$\psi_2(\xi) \propto (1 - 2\xi^2) e^{-\xi^2/2},$$

が得られることを示せ。規格化定数は求めなくてよい。

[解 4.1]

(1) 調和振動子に対する時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E\psi(x),$$

に

$$\xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad K := \frac{2E}{\hbar\omega},$$

を代入すると

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega} \xi^2 \right] \psi(\xi) = \frac{\hbar\omega K}{2} \psi(\xi) \quad \Rightarrow \quad \left[\frac{d^2}{d\xi^2} + (K - \xi^2) \right] \psi(\xi) = 0,$$

となる。

(2) (1) の結果に

$$\psi(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j e^{-\xi^2/2},$$

を代入すると、

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\xi}\psi(\xi) &= \sum_{j=0}^{\infty} (ja_j\xi^{j-1} - a_j\xi^{j+1})e^{-\xi^2/2}, \\ \frac{d^2}{d\xi^2}\psi(\xi) &= \frac{d}{d\xi}\left(\frac{d}{d\xi}\psi(\xi)\right) \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} [(j-1)ja_j\xi^{j-2} - (j+1)a_j\xi^j - ja_j\xi^j + a_j\xi^{j+2}]e^{-\xi^2/2}, \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2}\xi^j - (2j+1)a_j\xi^j + a_j\xi^{j+2}]e^{-\xi^2/2},\end{aligned}$$

および

$$(K - \xi^2)\psi(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} (Ka_j\xi^j - a_j\xi^{j+2})e^{-\xi^2/2},$$

より、

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} + (K - \xi^2)\right]\psi(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j]\xi^j = 0,$$

となる。

(4) $K = 5$ である。

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)}a_j \quad (j = 0, 1, \dots),$$

を用いて、偶数系列に対し

$$a_2 = -2a_0, \quad a_4 = a_6 = \dots = 0,$$

となる。一方、奇数系列に対しては漸化式の分子は 0 になり得ないから、 $a_1 = a_3 = a_5 = \dots = 0$ でなければならない。よって

$$\psi(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j e^{-\xi^2/2} = (a_0 + a_2 \xi^2) e^{-\xi^2/2} \propto (1 - 2\xi^2) e^{-\xi^2/2},$$

となる。

4.2 生成消滅演算子

調和振動子のエネルギー固有状態の波動関数を、第 3 節の定式化を用いて導出する方法を見てみよう。以下では系の状態を $|\psi\rangle (= |\Psi(t=0)\rangle)$ と書く。また、 $|x\rangle$ 表示での波動関数は $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle (= \langle x|\Psi(t=0)\rangle)$ である。

出発点は時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2, \quad (4.14)$$

である。第 3 節で見たように、左から $\langle x|$ を掛けて、 $\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx} \langle x|\psi\rangle$ および $\langle x|\hat{x}|\psi\rangle = x \langle x|\psi\rangle$ を用いると、見慣れ

た $|x\rangle$ 表示での Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (4.15)$$

となるのだが、ここでは $|x\rangle$ 表示をしない元の Schrödinger 方程式を用いることにする。まず、 $\hat{x}$ と $\hat{p}$ には正準交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \quad (4.16)$$

があるのだった。ここで生成消滅演算子を以下のように定義する

生成消滅演算子

$$\text{消滅演算子 } \hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (i\hat{p} + m\omega\hat{x}), \quad \text{生成演算子 } \hat{a}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-i\hat{p} + m\omega\hat{x}). \quad (4.17)$$

逆に、生成消滅演算子 $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ を用いて $\hat{x}, \hat{p}$ を表すこともできる

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \quad (4.18)$$

生成消滅演算子が満たす交換関係は、正準交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を用いて

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (i\hat{p} + m\omega\hat{x}), \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \right] \\ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} [i\hat{p} + m\omega\hat{x}, -i\hat{p} + m\omega\hat{x}] = \frac{1}{2\hbar m\omega} ([i\hat{p}, -i\hat{p}] + [i\hat{p}, m\omega\hat{x}] + [m\omega\hat{x}, -i\hat{p}] + [m\omega\hat{x}, m\omega\hat{x}]) = 1, \end{aligned} \quad (4.19)$$

となる。また、 $[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0$ も確認できる。改めて書くと

生成消滅演算子の交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0, \quad (4.20)$$

である。生成消滅演算子を用いて次のように Hamiltonian を書き直すことができる

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 = \frac{1}{2m} \left[i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \right]^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \right]^2 = -\frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 + \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \\ &= -\frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger) + \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger) = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.21)$$

改めて書くと

調和振動子の Hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad (4.22)$$

である。これを用いると Schrödinger 方程式は

$$\hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (4.23)$$

という形を取る。

さて、ある状態 $|\psi\rangle$ (ただし $\langle\psi|\psi\rangle \neq 0$) が時間に依存しない Schrödinger 方程式 $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ を満たしているとする。

このとき、

- $\hat{a}|\psi\rangle$ も Schrödinger 方程式の解であり、 $\hat{a}|\psi\rangle$ は (0 ベクトルでない限り) $\hat{H}$ の固有値 $E - \hbar\omega$ の固有ベクトルになっている
- $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ も Schrödinger 方程式の解であり、 $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ は (0 ベクトルでない限り) $\hat{H}$ の固有値 $E + \hbar\omega$ の固有ベクトルになっている

ことを示そう。まず $\hat{a}|\psi\rangle$ について、

$$\begin{aligned}\hat{H}(\hat{a}|\psi\rangle) &= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)(\hat{a}|\psi\rangle) = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{a}\right)|\psi\rangle \stackrel{\text{交換関係 (4.20)}}{=} \hbar\omega\left[(\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1)\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{a}\right]|\psi\rangle \\ &= \hat{a}\left[\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega\right]|\psi\rangle = \hat{a}(\hat{H} - \hbar\omega)|\psi\rangle \stackrel{|\psi\rangle \text{ の定義}}{=} \hat{a}(E - \hbar\omega)|\psi\rangle \stackrel{\hat{a} \text{ と数は交換する}}{=} (E - \hbar\omega)(\hat{a}|\psi\rangle).\end{aligned}\quad (4.24)$$

最後の表式は、状態 $\hat{a}|\psi\rangle$ が (0 ベクトルでない限り) $\hat{H}$ の固有値 $E - \hbar\omega$ の固有ベクトルになっていることを示している。同様に、 $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ について、

$$\begin{aligned}\hat{H}(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle) &= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle) = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \frac{1}{2}\hat{a}^\dagger\right)|\psi\rangle \stackrel{\text{交換関係 (4.20)}}{=} \hbar\omega\left[\hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1) + \frac{1}{2}\hat{a}^\dagger\right]|\psi\rangle \\ &= \hat{a}^\dagger\left[\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\right]|\psi\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{H} + \hbar\omega)|\psi\rangle \stackrel{|\psi\rangle \text{ の定義}}{=} \hat{a}^\dagger(E + \hbar\omega)|\psi\rangle \stackrel{\hat{a}^\dagger \text{ と数は交換する}}{=} (E + \hbar\omega)(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle).\end{aligned}\quad (4.25)$$

最後の表式は、状態 $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ が (0 ベクトルでない限り) $\hat{H}$ の固有値 $E + \hbar\omega$ の固有ベクトルになっていることを示している。このエネルギーを $\hbar\omega$ だけ下げたり上げたりする性質が、 $\hat{a}$ および $\hat{a}^\dagger$ を生成消滅演算子と呼ぶ理由である。

[問 4.2]

- (1) 生成消滅演算子は、位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ を用いて

$$\text{消滅演算子 } \hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p} + m\omega\hat{x}), \quad \text{生成演算子 } \hat{a}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i\hat{p} + m\omega\hat{x}),$$

と定義される。 $\hat{x}$ と $\hat{p}$ に成り立つ正準交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を用いて

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1,$$

を示せ。ただし、任意の演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対して交換子は $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ で定義される。

- (2) 調和振動子の Hamiltonian

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

が

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

と表されることを示せ。

- (3) 状態 $|\psi\rangle$ が時間に依存しない Schrödinger 方程式 $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ を満たしているとする。このとき、(1)(2) の結果を使うことにより

$$\hat{H}(\hat{a}|\psi\rangle) = (E - \hbar\omega)(\hat{a}|\psi\rangle),$$

$$\hat{H}(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle) = (E + \hbar\omega)(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle),$$

となることを示せ。これは、

- $\hat{a}|\psi\rangle$ も Schrödinger 方程式の解であり、エネルギー固有値 $E - \hbar\omega$ の固有ベクトルである
- $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ も Schrödinger 方程式の解であり、エネルギー固有値 $E + \hbar\omega$ の固有ベクトルである

ことを意味している。ただし、 $\hat{a}|\psi\rangle$ も $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ も 0 ベクトルではないとする。

[解 4.2]

(1) 正準交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を用いて

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (i\hat{p} + m\omega\hat{x}), \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \right] \\ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} [i\hat{p} + m\omega\hat{x}, -i\hat{p} + m\omega\hat{x}] = \frac{1}{2\hbar m\omega} ([i\hat{p}, -i\hat{p}] + [i\hat{p}, m\omega\hat{x}] + [m\omega\hat{x}, -i\hat{p}] + [m\omega\hat{x}, m\omega\hat{x}]) = 1, \end{aligned}$$

となる。

(2) 生成消滅演算子を用いて Hamiltonian を書き直すと

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \\ &= \frac{1}{2m} \left[i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \right]^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \right]^2 = -\frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 + \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \\ &= -\frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger) + \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger) = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right), \end{aligned}$$

となる。

(3) まず $\hat{a}|\psi\rangle$ について、

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{a}|\psi\rangle) &= \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) (\hat{a}|\psi\rangle) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{a} \right) |\psi\rangle \stackrel{\text{交換関係 (4.20)}}{=} \hbar\omega \left[(\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1)\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{a} \right] |\psi\rangle \\ &= \hat{a} \left[\hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega \right] |\psi\rangle = \hat{a} (\hat{H} - \hbar\omega) |\psi\rangle \stackrel{|\psi\rangle \text{ の定義}}{=} \hat{a} (E - \hbar\omega) |\psi\rangle \stackrel{\hat{a} \text{ と数は交換する}}{=} (E - \hbar\omega) (\hat{a}|\psi\rangle). \end{aligned}$$

同様に、 $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ について、

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle) &= \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) (\hat{a}^\dagger|\psi\rangle) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \frac{1}{2}\hat{a}^\dagger \right) |\psi\rangle \stackrel{\text{交換関係 (4.20)}}{=} \hbar\omega \left[\hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1) + \frac{1}{2}\hat{a}^\dagger \right] |\psi\rangle \\ &= \hat{a}^\dagger \left[\hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \right] |\psi\rangle = \hat{a}^\dagger (\hat{H} + \hbar\omega) |\psi\rangle \stackrel{|\psi\rangle \text{ の定義}}{=} \hat{a}^\dagger (E + \hbar\omega) |\psi\rangle \stackrel{\hat{a}^\dagger \text{ と数は交換する}}{=} (E + \hbar\omega) (\hat{a}^\dagger|\psi\rangle). \end{aligned}$$

4.3 基底状態

前小節の結果から、ある規格化可能な状態 $|\psi\rangle$ がエネルギー固有状態 $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ である場合、 $|\psi\rangle$ に消滅演算子 $\hat{a}$ を複数回掛けた

$$\hat{a}|\psi\rangle, \hat{a}^2|\psi\rangle, \hat{a}^3|\psi\rangle, \dots \quad (4.26)$$

は、 $\hat{H}$ の固有値が

$$E - \hbar\omega, E - 2\hbar\omega, E - 3\hbar\omega, \dots \quad (4.27)$$

であるような状態となる。しかし、定理 (2.20) によると $E < V_{\min}$ に対して規格化可能な状態は存在しないから、 $\hat{a}$ を掛ける回数を増やしていくと、あるところで規格化できない状態になるはずである。これはつまり、状態 $\hat{a}|\psi\rangle, \hat{a}^2|\psi\rangle, \hat{a}^3|\psi\rangle, \dots$ のうちある状態 $|\psi_0\rangle$ に対し $\hat{a}$ を作用させると 0 ベクトルになることを意味している

$$\hat{a}|\psi_0\rangle = 0. \quad (4.28)$$

この $|\psi_0\rangle$ を基底状態と呼ぶ。基底状態のエネルギーは

$$\hat{H}|\psi_0\rangle = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)|\psi_0\rangle \stackrel{\hat{a}|\psi_0\rangle=0}{=} \frac{\hbar\omega}{2}|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle, \quad (4.29)$$

より、

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (4.30)$$

であることがわかる。

さて、状態 $|\psi_0\rangle$ のままだと抽象的でわかりにくいので、 $|x\rangle$ 表示に移行してみよう。つまり、 $|x\rangle$ との内積を取ることで波動関数 $\psi_0(x) := \langle x|\psi_0\rangle$ を考えてみよう。 $|\psi_0\rangle$ の定義

$$\hat{a}|\psi_0\rangle = 0, \quad (4.31)$$

から出発し、 $\langle x|$ を掛けると

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{a}|\psi_0\rangle = 0 &\quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \langle x|(i\hat{p} + m\omega\hat{x})|\psi_0\rangle = 0 \\ \stackrel{\langle x|\hat{p}|\dots\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|\dots\rangle}{\Rightarrow} &\quad \left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\langle x|\psi_0\rangle = 0 \\ \stackrel{\psi_0(x) := \langle x|\psi_0\rangle}{\Rightarrow} &\quad \left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0(x) = 0, \end{aligned} \quad (4.32)$$

となる。これは波動関数 $\psi_0(x)$ を求める微分方程式になっていて、 a_0 を定数として

$$\psi_0(x) = a_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad (4.33)$$

が解である。そしてこれは式 (2.50) で求めた結果と一致している。 a_0 を正の実数に選ぶと、規格化条件より

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad (4.34)$$

が求まる。

[問 4.3] 調和振動子の基底状態 $|\psi_0\rangle$ は、

$$\hat{a}|\psi_0\rangle = 0,$$

で定義される。ただし生成消滅演算子は、

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p} + m\omega\hat{x}), \quad \hat{a}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i\hat{p} + m\omega\hat{x}),$$

である。

(1) 基底状態 $|\psi_0\rangle$ の定義式 $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$ に左から $\langle x|$ を掛け、 $\langle x|\hat{x}|\dots\rangle = x\langle x|\dots\rangle$ および $\langle x|\hat{p}|\dots\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|\dots\rangle$ を

用いることにより、 $\psi_0(x) = \langle x | \psi_0 \rangle$ に対する微分方程式

$$\left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0(x) = 0,$$

を導け。

(2) (1) の微分方程式を解くことで、

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2},$$

が得られることを示せ。ただし解は $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_0(x)|^2 = 1$ により規格化し、規格化定数は正の実数に取るものとする。

(3) 粒子の位置の自乗の期待値を次の 2 つの方法で求め、それらが一致することを示せ。

- 方法 1: 波動関数 $\psi_0(x)$ を用いる方法

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_0^*(x) x^2 \psi_0(x).$$

- 方法 2: $\hat{x}$ を生成消滅演算子 $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ で表し、 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ と $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$ およびその Hermite 共役 $\langle\psi_0|\hat{a}^\dagger = 0$ を用いる方法

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \langle \psi_0 | \hat{x}^2 | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \right)^2 | \psi_0 \rangle.$$

[解 4.3]

(1) $|\psi_0\rangle$ の定義式より

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{a} | \psi_0 \rangle = 0 & \implies \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \langle x | (i\hat{p} + m\omega\hat{x}) | \psi_0 \rangle = 0 \\ \langle x | \hat{p} | \dots \rangle = -i\hbar \frac{d}{dx} \langle x | \dots \rangle & \implies \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \langle x | \psi_0 \rangle = 0 \\ \psi_0(x) := \langle x | \psi_0 \rangle & \implies \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0(x) = 0, \end{aligned}$$

となる。

(2) (1) の微分方程式を解くと

$$\begin{aligned} \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0(x) = 0 & \implies \frac{d}{dx} \ln \psi_0(x) = -\frac{m\omega}{\hbar} x \\ & \implies \ln \psi_0(x) = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \\ & \implies \ln \psi_0(x) = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \text{定数} \\ & \implies \psi_0(x) = a_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}, \end{aligned}$$

となる。ただし a_0 は正の実数に取る。規格化条件より

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_0(x)|^2 = a_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} = a_0^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1 \implies a_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}},$$

であるから、

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},$$

となる。

(3) それぞれの方法について

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_0^*(x) x^2 \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{\hbar}{2m\omega},$$

および

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}^2 \rangle &= \langle \psi_0 | \hat{x}^2 | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \right)^2 | \psi_0 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_0 | (\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger) | \psi_0 \rangle \\ &\stackrel{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]=1}{=} \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_0 | (\hat{a}\hat{a} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + 1) | \psi_0 \rangle \stackrel{\hat{a}|\psi_0\rangle=0, \langle\psi_0|\hat{a}^\dagger=0}{=} \frac{\hbar}{2m\omega}, \end{aligned}$$

となるから、確かに一致している。

4.4 励起状態

式 (4.25) より、 $\hat{a}^\dagger$ がエネルギー固有状態に作用するとエネルギー固有値が $\hbar\omega$ だけ大きくなるので、基底状態 (4.28) から始めて次々に励起状態 (= エネルギー固有状態のうち、固有値が基底状態より大きいもの) を作り出すことができる。規格化された第 n 励起状態を

$$|\psi_n\rangle = A_n (\hat{a}^\dagger)^n |\psi_0\rangle, \quad (4.35)$$

と置こう。規格化定数 A_n は以下で求めるが、その前にこの励起状態のエネルギーは

$$\begin{aligned} \hat{H}|\psi_n\rangle &= \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) |\psi_n\rangle \\ &\stackrel{|\psi_n\rangle=A_n(\hat{a}^\dagger)^n|\psi_0\rangle}{=} A_n \hbar\omega \hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^n |\psi_0\rangle + \frac{1}{2} \hbar\omega |\psi_n\rangle \\ &\stackrel{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]=1, |\psi_n\rangle=A_n(\hat{a}^\dagger)^n|\psi_0\rangle}{=} A_n \hbar\omega (\hat{a}^\dagger)^2 \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^{n-1} |\psi_0\rangle + \frac{3}{2} \hbar\omega |\psi_n\rangle \\ &\stackrel{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]=1, |\psi_n\rangle=A_n(\hat{a}^\dagger)^n|\psi_0\rangle}{=} A_n \hbar\omega \left((\hat{a}^\dagger)^3 \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^{n-2} \right) |\psi_0\rangle + \frac{5}{2} \hbar\omega |\psi_n\rangle = \cdots = A_n \hbar\omega (\hat{a}^\dagger)^{n+1} \hat{a} |\psi_0\rangle + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega |\psi_n\rangle \\ &\stackrel{\hat{a}|\psi_0\rangle=0}{=} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega |\psi_n\rangle, \end{aligned} \quad (4.36)$$

より、確かに

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad (4.37)$$

であり、式 (2.49) と一致していることがわかる。規格化定数については、 $\langle \psi_n | \psi_n \rangle$ を $\langle \psi_{n-1} | \psi_{n-1} \rangle$ と関連付けることで、まず a_n と a_{n-1} の関係が得られる

$$1 = \langle \psi_n | \psi_n \rangle = A_n^2 \langle \psi_0 | (\hat{a})^n (\hat{a}^\dagger)^n | \psi_0 \rangle = A_n^2 \langle \psi_0 | (\hat{a})^{n-1} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) (\hat{a}^\dagger)^{n-1} | \psi_0 \rangle = \frac{A_n^2}{A_{n-1}^2} \langle \psi_{n-1} | (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) | \psi_{n-1} \rangle$$

$$\stackrel{\hat{H}=\hat{a}\hat{a}^\dagger+1}{=} \frac{A_n^2}{A_{n-1}^2} \left(\frac{1}{\hbar\omega} \langle \psi_{n-1} | \hat{H} | \psi_{n-1} \rangle + \frac{1}{2} \right) = \frac{A_n^2}{A_{n-1}^2} \left(\frac{1}{\hbar\omega} \hbar\omega \left((n-1) + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \right) = \frac{A_n^2}{A_{n-1}^2} n. \quad (4.38)$$

これと $A_0 = 1$ より A_n を正の実数として

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}, \quad (4.39)$$

となるから、

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |\psi_0\rangle, \quad (4.40)$$

が得られる。ところで、式 (4.36) と同様の計算により

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |\psi_n\rangle = n |\psi_n\rangle, \quad (4.41)$$

が示せるが、この演算子 $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ を個数演算子

個数演算子 $\hat{n}$

$$\hat{n} := \hat{a}^\dagger \hat{a}. \quad (4.42)$$

と呼ぶ。

最後に、励起状態の $|x\rangle$ 表示での波動関数を得る手続きについて示そう。第 1 励起状態は

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}} \hat{a}^\dagger |\psi_0\rangle, \quad (4.43)$$

である。ここから、 $|x\rangle$ 表示での波動関数 $\psi_1(x) = \langle x | \psi_1 \rangle$ が、基底状態の波動関数 $\psi_0(x) = \langle x | \psi_0 \rangle$ を用いて次のように求まる

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \langle x | \psi_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{1}} \langle x | \hat{a}^\dagger | \psi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \langle x | (-i\hat{p} + m\omega x) | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \langle x | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0(x). \end{aligned} \quad (4.44)$$

実際、これと式 (2.50) で求めた $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$ より、

$$\psi_1(x) = \left(\frac{4m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}, \quad (4.45)$$

となるが、これは式 (2.51) と一致している。同様に、第 2 励起状態は

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}^\dagger |\psi_1\rangle, \quad (4.46)$$

より

$$\begin{aligned}\psi_2(x) &= \langle x|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle x|\hat{a}^\dagger|\psi_1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_1(x) = -\left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\left(1 - \frac{2m\omega}{\hbar}x^2\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},\end{aligned}\quad (4.47)$$

となるが、これは正負の符号を除いて式 (2.52) と一致している。また、より高次の励起状態の波動関数も同様の操作で求まる。

[問 4.4] 第 3 励起状態 $|\psi_3\rangle$ について、同様の操作で波動関数 $\psi_3(x)$ を求めよ。

[解 4.4] 第 3 励起状態は

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}^\dagger|\psi_2\rangle,$$

より

$$\begin{aligned}\psi_3(x) &= \langle x|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\langle x|\hat{a}^\dagger|\psi_2\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_2(x) = -\left(\frac{9m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}x - \frac{2}{3}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}x^3\right]e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},\end{aligned}$$

となる。

[問 4.5] ([1] Problem 2.12 改)

調和振動子の第 n 励起状態 $|\psi_n\rangle$ について、

$$\langle x\rangle, \quad \langle p\rangle, \quad \langle x^2\rangle, \quad \langle p^2\rangle, \quad \langle T\rangle = \frac{1}{2m}\langle p^2\rangle, \quad \langle V\rangle = \frac{m\omega}{2}\langle x^2\rangle,$$

を、生成消滅演算子を用いて計算せよ。ここで $\langle\cdots\rangle := \langle\psi_n|\cdots|\psi_n\rangle$ である。

[解 4.5] 調和振動子の第 n 励起状態は

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{n!}(\hat{a}^\dagger)^n|\psi_0\rangle,$$

であり、また $\hat{x}, \hat{p}$ を $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ で表すと

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger),$$

である。よって

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \langle \psi_n | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | \psi_n \rangle \\
&= \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{n!} \langle \psi_0 | (\hat{a})^n (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) (\hat{a}^\dagger)^n | \psi_0 \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\sqrt{(n+1)!n!}}{n!} (\langle \psi_{n+1} | \psi_n \rangle + \langle \psi_n | \psi_{n+1} \rangle) = 0, \\
\langle p \rangle &= (-i)^n \left(\frac{\hbar m\omega}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \langle \psi_n | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) | \psi_n \rangle \\
&= (-i)^n \left(\frac{\hbar m\omega}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{n!} \langle \psi_0 | (\hat{a})^n (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) (\hat{a}^\dagger)^n | \psi_0 \rangle = (-i)^n \left(\frac{\hbar m\omega}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\sqrt{(n+1)!n!}}{n!} (\langle \psi_{n+1} | \psi_n \rangle - \langle \psi_n | \psi_{n+1} \rangle) = 0, \\
\langle x^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_n | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 | \psi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{1}{n!} \langle \psi_0 | (\hat{a})^n (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 (\hat{a}^\dagger)^n | \psi_0 \rangle \\
&\quad \hat{a} \text{ と } \hat{a}^\dagger \text{ の個数が異なる項は } 0 \text{ を返す } \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{1}{n!} \langle \psi_0 | (\hat{a})^n (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) (\hat{a}^\dagger)^n | \psi_0 \rangle \\
&\quad \stackrel{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]=1}{=} \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{1}{n!} \langle \psi_0 | (\hat{a})^n (2\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1) (\hat{a}^\dagger)^n | \psi_0 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{1}{n!} [2(n+1)! \langle \psi_{n+1} | \psi_{n+1} \rangle - n! \langle \psi_n | \psi_n \rangle] = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right), \\
\langle p^2 \rangle &= -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle \psi_n | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 | \psi_n \rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2} \frac{1}{n!} \langle \psi_0 | (\hat{a})^n (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 (\hat{a}^\dagger)^n | \psi_0 \rangle \\
&\quad \hat{a} \text{ と } \hat{a}^\dagger \text{ の個数が異なる項は } 0 \text{ を返す } \frac{\hbar m\omega}{2} \frac{1}{n!} \langle \psi_0 | (\hat{a})^n (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) (\hat{a}^\dagger)^n | \psi_0 \rangle \\
&\quad \stackrel{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]=1}{=} \frac{\hbar m\omega}{2} \frac{1}{n!} \langle \psi_0 | (\hat{a})^n (2\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1) (\hat{a}^\dagger)^n | \psi_0 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \frac{1}{n!} [2(n+1)! \langle \psi_{n+1} | \psi_{n+1} \rangle - n! \langle \psi_n | \psi_n \rangle] = \hbar m\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \\
\langle T \rangle &= \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right), \\
\langle V \rangle &= \frac{m\omega^2}{2} \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right).
\end{aligned}$$

4.5 超対称量子力学

調和振動子の議論を一般化することで、超対称量子力学 (supersymmetric quantum mechanics = SUSY QM) について学ぼう (文献 [11] 第 2 節)。演算子 $\hat{A}, \hat{A}^\dagger$ を

$$\hat{A} := i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x}), \quad \hat{A}^\dagger := -i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x}),$$

で定義し、2 種類の Hamiltonian を

$$\hat{H}_1 := \hat{A}^\dagger \hat{A} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_1(\hat{x}), \quad \hat{H}_2 := \hat{A} \hat{A}^\dagger = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_2(\hat{x}),$$

で定義する。 $W(\hat{x})$ は superpotential と呼ばれ、 $[W(\hat{x})]^\dagger = W(\hat{x})$ を満たしているとする。任意の $f(\hat{x})$ に対し $[f(\hat{x}), \hat{p}] = i\hbar f'(\hat{x})$ であること ([問 3.11]) に注意して、 $V_1(\hat{x}), V_2(\hat{x})$ を $W(\hat{x})$ で表すと

$$\begin{aligned}
\hat{A}^\dagger \hat{A} &= \dots \left(-i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x}) \right) \left(i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x}) \right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{i}{\sqrt{2m}} [\hat{p}, W(\hat{x})] + W^2(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + W^2(\hat{x}) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(\hat{x}), \\
\hat{A} \hat{A}^\dagger &= \dots \left(i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x}) \right) \left(-i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x}) \right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{i}{\sqrt{2m}} [\hat{p}, W(\hat{x})] + W^2(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + W^2(\hat{x}) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(\hat{x}),
\end{aligned}$$

であるから、

$$V_1(\hat{x}) = W^2(\hat{x}) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(\hat{x}), \quad V_2(\hat{x}) = W^2(\hat{x}) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(\hat{x}),$$

となる。また、 $\hat{H}_1|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle$ のとき $\hat{H}_2\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle$ であること、および $\hat{H}_2|\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)}|\psi_n^{(2)}\rangle$ のとき $\hat{H}_1\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)}\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle$ であることが以下のように示される

$$\begin{aligned}\hat{H}_1|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle &\quad \Rightarrow \quad \hat{H}_2\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle = \hat{A}\hat{A}^\dagger\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle = \hat{A}\hat{H}_1|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle, \\ \hat{H}_2|\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)}|\psi_n^{(2)}\rangle &\quad \Rightarrow \quad \hat{H}_1\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle = \hat{A}^\dagger\hat{A}\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle = \hat{A}^\dagger\hat{H}_2|\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)}\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle.\end{aligned}$$

この結果は $\hat{H}_1$ に対する $|\psi_n^{(1)}\rangle$ と $\hat{H}_2$ に対する $\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle$ が (0 ベクトルでない限り) 同じ固有値の固有状態として対応し、 $\hat{H}_2$ に対する $|\psi_n^{(2)}\rangle$ と $\hat{H}_1$ に対する $\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle$ も同様に (0 ベクトルでない限り) 対応することを示している。つまり Hamiltonian $\hat{H}_1, \hat{H}_2$ は、異なるポテンシャルを持つにも関わらず同じエネルギー固有値を持つ。ただし、 $\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle$ や $\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle$ が 0 ベクトルになってしまう場合は固有ベクトルとして不適格なので、そのような場合は対応する状態がないこともある。

具体的にいくつか superpotential $W(\hat{x})$ を取って固有値を示したものが図 22-24 である。左図は $V_1(x)$ と対応するエネルギー固有値および固有関数、右図は $V_2(x)$ と対応するエネルギー固有値および固有関数である。superpotential はそれぞれの図について $W(\hat{x}) = \frac{A}{\sqrt{2}}\hat{x}$, $W(\hat{x}) = -\frac{A}{\sqrt{2}}\frac{\pi/L}{\tan(\pi\hat{x}/L)}$, $W(\hat{x}) = A\tan(\alpha\hat{x})$ に取った。いずれの場合も、 $\hat{H}_1$ の基底状態を除いてエネルギー固有値が縮退していることがわかる。

ところで、図 22-24 のいずれも $V_1(x)$ の最低エネルギー固有値が $E_0 = 0$ となっていることに気が付いただろうか。実は、 $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ となる 0 ベクトルでない状態 $|\psi_0\rangle$ が存在すると、それがエネルギー固有値 $E_0 = 0$ の状態であり、かつ基底状態であることが示せる。実際、任意の状態 $|\psi\rangle$ に対して $\langle\psi|\hat{H}_1|\psi\rangle = |\hat{A}|\psi\rangle|^2 \geq 0$ であるために $\hat{H}_1$ の固有値は全て 0 以上であるが、 $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ となる状態 $|\psi_0\rangle$ が存在すると、 $\hat{H}_1|\psi_0\rangle = \hat{A}^\dagger\hat{A}|\psi_0\rangle = 0|\psi_0\rangle$ よりこの $|\psi_0\rangle$ が $\hat{H}_1$ のあり得る固有値のうち最低のものを実現する固有状態となるためである。

さて、図 22-24 の superpotential $W(\hat{x})$ は $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ となる $|\psi_0\rangle$ が存在する例であるが、 $W(\hat{x})$ によっては基底状態 $|\psi_0\rangle$ が $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ を満たさないこともある。実際、 $W(\hat{x}) = g\hat{x}^2 + \hat{x}$ (g は実数) とすると、 $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ となるような $|\psi_0\rangle$ は存在しなくなる (文献 [12] 第 6 節)。このとき、Hamiltonian $\hat{H}_1$ の最低エネルギーは $0 < g \ll 1$ に対して $E_0 \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{\sqrt{2}}{3g^2}}$ 程度の値を持つ。このように、 $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ を満たさない基底状態 $|\psi_0\rangle$ を SUSY が破れた状態という。

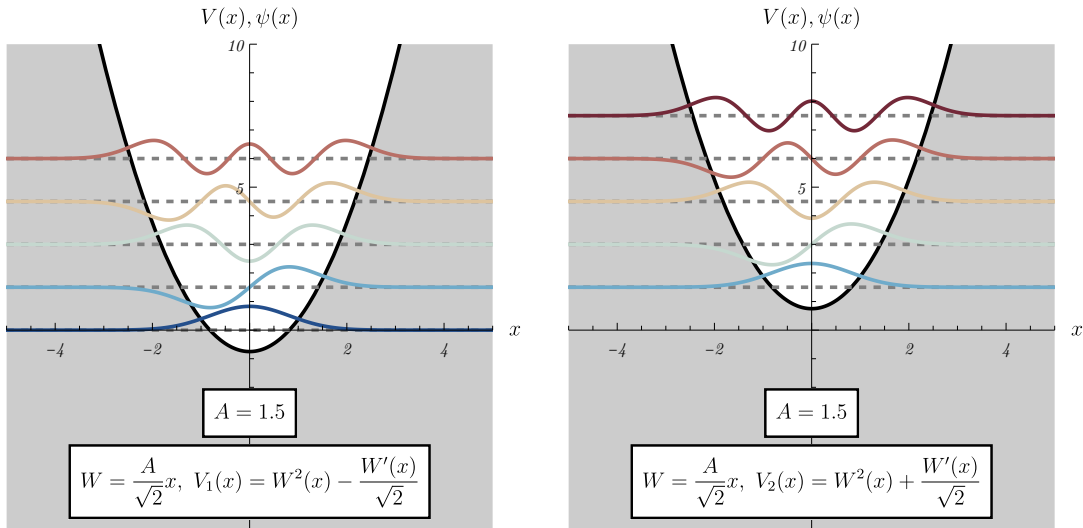


図 22: 超対称量子力学におけるエネルギー準位の例 1。superpotential は $W(\hat{x}) = \frac{A}{\sqrt{2}}\hat{x}$ とした。この場合、 $V_1(x)$ と $V_2(x)$ はお互いに高さが $\hbar\omega$ だけずれた調和振動子になる。

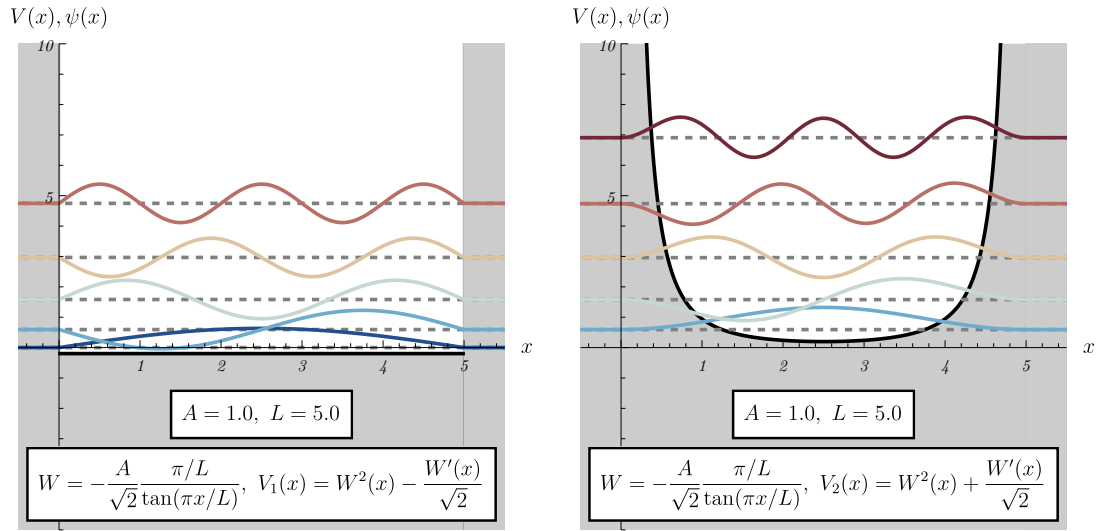


図 23: 超対称量子力学におけるエネルギー準位の例 2。superpotential は $W(\hat{x}) = -\frac{A}{\sqrt{2}} \frac{\pi/L}{\tan(\pi \hat{x}/L)}$ とした。 $A = 1$ のとき $V_1(x)$ は無限井戸型ポテンシャルに帰着する。

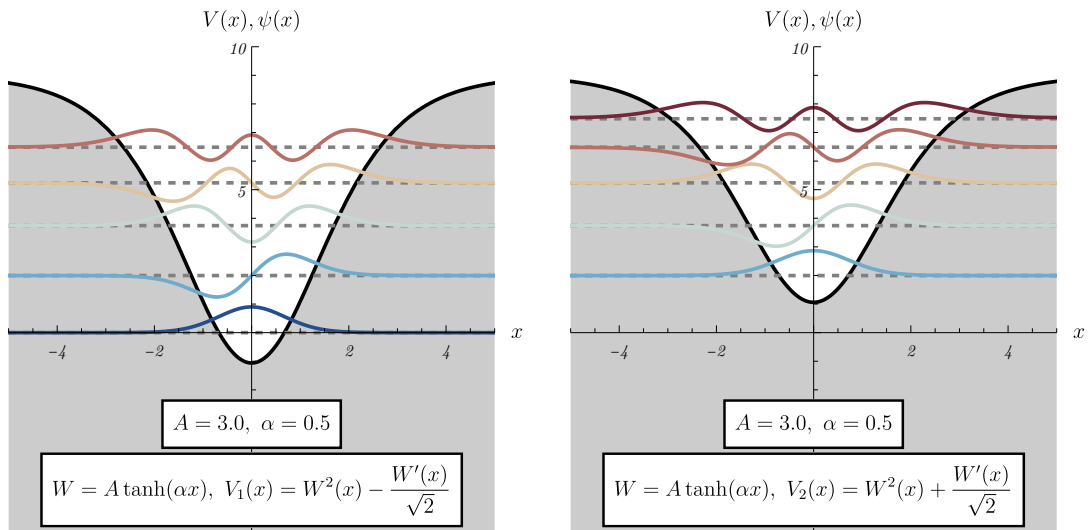


図 24: 超対称量子力学におけるエネルギー準位の例 3。superpotential は $W(\hat{x}) = A \tanh(\alpha \hat{x})$ とした。

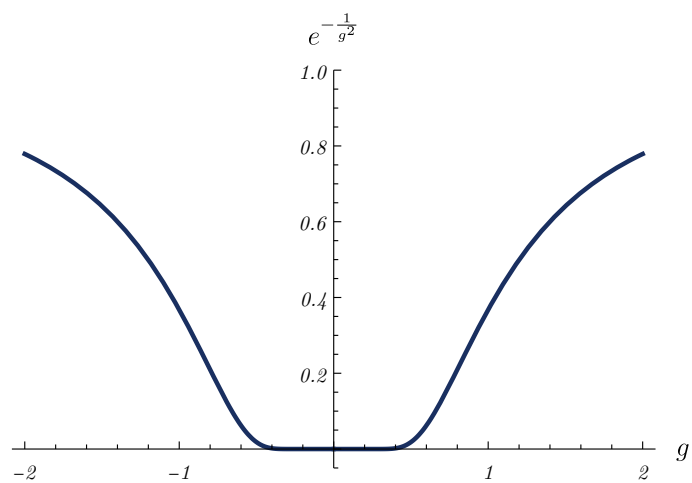


図 25: g の非摂動関数 $e^{-\frac{1}{g^2}}$ 。

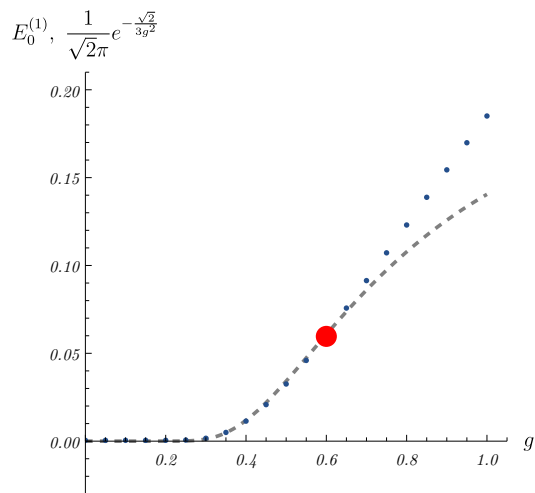
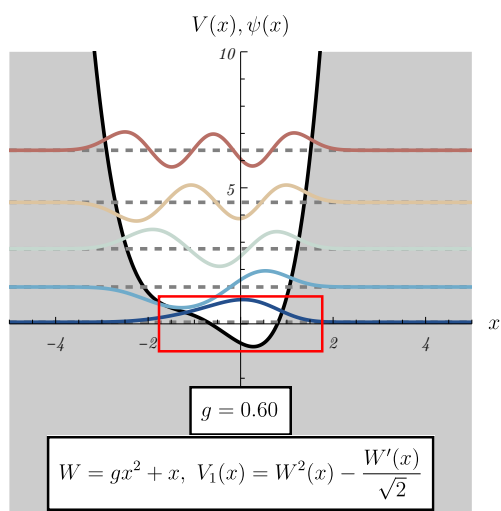


図 26: 超対称量子力学における dynamical SUSY breaking の例。superpotential は $W(\hat{x}) = g\hat{x}^2 + \hat{x}$ とした。Hamiltonian $\hat{H}_1$ の基底状態が $E_0 \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\sqrt{2}}{3g^2}} > 0$ となる。

[問 4.6] 調和振動子の議論を一般化することで、超対称量子力学 (supersymmetric quantum mechanics = SUSY QM) について学ぼう (文献 [11] 第 2 節)。演算子 $\hat{A}, \hat{A}^\dagger$ を

$$\hat{A} = i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x}), \quad \hat{A}^\dagger = -i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x}),$$

で定義し、2 種類の Hamiltonian を

$$\hat{H}_1 := \hat{A}^\dagger \hat{A} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_1(\hat{x}), \quad \hat{H}_2 := \hat{A} \hat{A}^\dagger = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_2(\hat{x}),$$

で定義する。 $W(\hat{x})$ は superpotential と呼ばれ、 $(W(\hat{x}))^\dagger = W(\hat{x})$ を満たしているとする。

- (1) $V_1(\hat{x}), V_2(\hat{x})$ を $W(\hat{x})$ で表せ。任意の $f(\hat{x})$ に対し $[\hat{p}, f(\hat{x})] = -i\hbar f'(\hat{x})$ であることに注意せよ (第 5 回演習)。
(2) $\hat{H}_1 |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle$ のとき $\hat{H}_2 \hat{A} |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)} \hat{A} |\psi_n^{(1)}\rangle$ であること、および $\hat{H}_2 |\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)} |\psi_n^{(2)}\rangle$ のとき $\hat{H}_1 \hat{A}^\dagger |\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)} \hat{A}^\dagger |\psi_n^{(2)}\rangle$ であることを示せ。

この結果は $\hat{H}_1$ に対する $|\psi_n^{(1)}\rangle$ と $\hat{H}_2$ に対する $\hat{A} |\psi_n^{(1)}\rangle$ が (0 ベクトルでない限り) 同じ固有値の固有状態として対応し、 $\hat{H}_2$ に対する $|\psi_n^{(2)}\rangle$ と $\hat{H}_1$ に対する $\hat{A}^\dagger |\psi_n^{(2)}\rangle$ も同様に (0 ベクトルでない限り) 対応することを示している。つまり Hamiltonian $\hat{H}_1, \hat{H}_2$ は、異なるポテンシャルを持つにも関わらず同じエネルギー固有値を持つ。ただし、 $\hat{A} |\psi_n^{(1)}\rangle$ や $\hat{A}^\dagger |\psi_n^{(2)}\rangle$ が 0 ベクトルになってしまう場合は固有ベクトルとして不適格なので、そのような場合は対応する状態がないこともある。

- (3) $\hat{H}_1$ の基底状態 (= エネルギー固有値が最低の状態) を $|\psi_0\rangle$ としよう。仮に $\hat{A} |\psi_0\rangle = 0$ を満たす 0 ベクトルでない状態 $|\psi_0'\rangle$ が存在するとしたら、この $|\psi_0'\rangle$ が基底状態 $|\psi_0\rangle$ である。なぜなら、任意の状態 $|\psi\rangle$ に対して $\langle \psi | \hat{H}_1 | \psi \rangle = \langle \hat{A} | \psi \rangle^2 \geq 0$ であるために $\hat{H}_1$ の固有値は全て 0 以上である一方、 $\hat{H}_1 |\psi_0'\rangle = \hat{A}^\dagger \hat{A} |\psi_0'\rangle = 0 |\psi_0'\rangle$ より $|\psi_0'\rangle$ は $\hat{H}_1$ の固有値 $E_0^{(1)} = 0$ の状態であるからである。さて、基底状態が $\hat{A} |\psi_0\rangle = 0$ を満たすとして、この式を $|x\rangle$ 表示することで、 $W(x)$ を $\psi_0(x)$ を用いて表せ。

- (4) $V_1(\hat{x})$ に対する $V_2(\hat{x})$ 、あるいはその逆を、SUSY partner potential と言う。無限井戸型ポテンシャルの SUSY partner potential を求めよう。[問 3](1) で求めた $\psi_1(x)$ が本問の基底状態 $\psi_0(x)$ に相当することに注意して、(3) の結果を使うことによりまず $W(x)$ を求めよ。[問 3](1) で求めた $\psi_1(x)$ は、井戸の深さを定数分だけずらした

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & (0 \leq x \leq a), \\ \infty & (x < 0 \text{ or } a < x). \end{cases}$$

に対しても Schrödinger 方程式の解になっていることに注意して、 $W(x)$ から求めた $V_1(x)$ が上記のポテンシャル形となることを確認し、SUSY partner potential $V_2(x)$ を求めよ。 $0 \leq x \leq a$ の範囲だけ考察すれば十分である。

- (5) Hamiltonian $\hat{H}_1, \hat{H}_2$ および演算子 $\hat{A}, \hat{A}^\dagger$ を 2×2 行列に配置した

$$\hat{H} := \begin{pmatrix} \hat{H}_1 & 0 \\ 0 & \hat{H}_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{Q} := \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hat{A} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{Q}^\dagger := \begin{pmatrix} 0 & \hat{A}^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

を考える。交換関係および反交換関係

$$[\hat{H}, \hat{Q}] = [\hat{H}, \hat{Q}^\dagger] = 0, \quad \{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\} = \hat{H}, \quad \{\hat{Q}, \hat{Q}\} = \{\hat{Q}^\dagger, \hat{Q}^\dagger\} = 0,$$

を示せ。交換関係は $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ 、反交換関係は $\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ で定義される。

(6) superpotential $W(\hat{x})$ によっては、基底状態 $|\psi_0\rangle$ が $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ を満たさないこともある。実際 $W(\hat{x}) = g\hat{x}^2 + \hat{x}$ (g は実数) とすると、 $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ となるような $|\psi_0\rangle$ は存在せず、Hamiltonian $\hat{H}_1$ の最低エネルギーは $0 < g \ll 1$ に対して $E_0 \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\sqrt{2}}{3g^2}}$ 程度の値を持つ。 $W(\hat{x}) = g\hat{x}^2 + \hat{x}$ について $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ を満たす状態が存在しない理由を

考察せよ (文献 [12] 第 6 節)。このように、 $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ を満たさない基底状態 (言い換えると、 $\hat{Q} \begin{pmatrix} |\psi_0\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \neq 0$ となる基底状態) $|\psi_0\rangle$ を SUSY が破れた状態という。

[解 4.6]

(1)

$$\begin{aligned}\hat{A}^\dagger \hat{A} &= \left(-i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x})\right) \left(i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x})\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{i}{\sqrt{2m}} [\hat{p}, W(\hat{x})] + W^2(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + W^2(\hat{x}) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(\hat{x}), \\ \hat{A} \hat{A}^\dagger &= \left(i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x})\right) \left(-i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x})\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{i}{\sqrt{2m}} [\hat{p}, W(\hat{x})] + W^2(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + W^2(\hat{x}) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(\hat{x}),\end{aligned}$$

であるから、

$$V_1(\hat{x}) = W^2(\hat{x}) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(\hat{x}), \quad V_2(\hat{x}) = W^2(\hat{x}) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(\hat{x}).$$

(2)

$$\begin{aligned}\hat{H}_1 |\psi_n^{(1)}\rangle &= E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{H}_2 \hat{A} |\psi_n^{(1)}\rangle = \hat{A} \hat{A}^\dagger \hat{A} |\psi_n^{(1)}\rangle = \hat{A} \hat{H}_1 |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)} \hat{A} |\psi_n^{(1)}\rangle, \\ \hat{H}_2 |\psi_n^{(2)}\rangle &= E_n^{(2)} |\psi_n^{(2)}\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{H}_1 \hat{A}^\dagger |\psi_n^{(2)}\rangle = \hat{A}^\dagger \hat{A} \hat{A}^\dagger |\psi_n^{(2)}\rangle = \hat{A}^\dagger \hat{H}_2 |\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)} \hat{A}^\dagger |\psi_n^{(2)}\rangle.\end{aligned}$$

(3)

$$\begin{aligned}\hat{A} |\psi_0\rangle &= 0 \quad \Rightarrow \quad \langle x | \left(i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x})\right) |\psi_0\rangle = 0 \\ &\Rightarrow \quad \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \psi_0'(x) + W(x) \psi_0(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)}.\end{aligned}$$

(4) [問 3] の結果より、本問の $\psi_0(x)$ は $0 \leq x \leq a$ で

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right),$$

であるから、(3) の結果に代入して

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\pi}{a} \frac{1}{\tan\left(\frac{\pi x}{a}\right)},$$

となる。この $W(x)$ から $V_1(x)$ を求めると

$$V_1(x) = W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2},$$

より、確かに [問 3] の井戸の深さを定数分だけずらしたものになっている。対応する SUSY partner potential は

$$V_2(x) = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} \frac{\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + 1}{\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)},$$

である。

(5)

$$[\hat{H}, \hat{Q}] = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hat{H}_2 \hat{A} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hat{A} \hat{H}_1 \end{pmatrix} = 0, \quad [\hat{H}, \hat{Q}^\dagger] = \begin{pmatrix} \hat{H}_1 \hat{A}^\dagger & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hat{A} \hat{H}_2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$$\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\} = \hat{Q} \hat{Q}^\dagger + \hat{Q}^\dagger \hat{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hat{A} \hat{A}^\dagger \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{A}^\dagger \hat{A} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{H}, \quad \{\hat{Q}, \hat{Q}\} = 2\hat{Q} \hat{Q} = 0, \quad \{\hat{Q}^\dagger, \hat{Q}^\dagger\} = 2\hat{Q}^\dagger \hat{Q}^\dagger = 0.$$

(6) $W(\hat{x}) = g\hat{x}^2 + \hat{x}$ について、(3) の結果より

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi'_0(x)}{\psi_0(x)} \quad \Rightarrow \quad \ln \psi_0(x) = -\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^x dx' W(x') + (\text{定数}) = -\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \left(\frac{gx^3}{3} + \frac{x^2}{2} \right) + (\text{定数}),$$

となる。 $\psi_0(x)$ が規格化可能な解となるためには $\psi_0(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$ である必要があるが、 $x \rightarrow \pm\infty$ で主要となる $\frac{gx^3}{3}$ 項が $x \rightarrow \pm\infty$ で異なる符号に発散し、 $\psi_0(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$ を実現することが不可能なため、この場合の基底状態は $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ では与えられなくなっている。

5. 水素原子

本節では、まず球対称ポテンシャル $V(r)$ の下での 3 次元 Schrödinger 方程式の一般論を述べた後、水素原子の解析に入る。本節の水素原子の取り扱いはいくまで導入的であり、より完全な取扱いは次節以降の角運動量およびスピンを学んでからとなる。

5.1 3 次元 SCHRÖDINGER 方程式

まず、第 1-2 節の 1 次元 Schrödinger 方程式を 3 次元に拡張する。時間に依存する Schrödinger 方程式自体は以前と変わらず

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x, y, z) = H \Psi(t, x, y, z), \quad (5.1)$$

であるが、Hamiltonian は 1 次元粒子の Hamiltonian を 3 次元に拡張した

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z), \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (5.2)$$

を考える。

時間に依存する 3 次元 Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x, y, z) = H \Psi(t, x, y, z), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z), \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (5.3)$$

ここで ∇^2 は **Laplacian** と呼ばれる。第 1-2 節と同様、波動関数は規格化

$$\int d^3r |\Psi(t, x, y, z)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz |\Psi(t, x, y, z)|^2 = 1, \quad (5.4)$$

されているとする。

方程式 (5.3) は、第 3 節の言葉で言う以下になる。まず、第 1-2 節で取り扱った系は、Hilbert 空間が位置演算子 $\hat{x}$ の固有状態 ($|x\rangle$) で張られていた。この節では、互いに交換する位置演算子 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ を導入し、その固有状態 ($|x, y, z\rangle$) で張られる Hilbert 空間を考える¹⁸。これら位置演算子に対して対応する共役運動量 $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ が導入され、交換関係は

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \quad [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar, \quad (5.6)$$

であり、その他の交換子は 0 である。系の状態 $|\Psi(t)\rangle$ に対して Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}), \quad (5.7)$$

で与えられる。 $|\Psi(t)\rangle$ を $|x, y, z\rangle$ 表示で見ると、波動関数

$$\Psi(t, x, y, z) := \langle x, y, z | \Psi(t) \rangle, \quad (5.8)$$

に対する Schrödinger 方程式として (5.3) が得られる。

¹⁸ 位置固有状態 $|x, y, z\rangle$ は、演算子 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ に対して

$$\hat{x}|x, y, z\rangle = x|x, y, z\rangle, \quad \hat{y}|x, y, z\rangle = y|x, y, z\rangle, \quad \hat{z}|x, y, z\rangle = z|x, y, z\rangle, \quad (5.5)$$

を返す。1 次元の場合と同じく、左辺に現れる $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ は演算子であり、右辺に現れる x, y, z は数であることに注意。

1次元 Schrödinger 方程式の場合と同様、変数分離型の解 $\Psi(t, x, y, z) = \psi(x, y, z)\varphi(t)$ を用いて一般の $\Psi(t, x, y, z)$ を表すことができる。変数分離型の解のうち、 $\varphi(t)$ はすぐに解くことができ、

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}, \quad (5.9)$$

となる一方 $\psi(x, y, z)$ に対する方程式は

$$H\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x, y, z), \quad (5.10)$$

となる。この方程式の解を n で区別することになると、一般の $\Psi(t, x, y, z)$ を

$$\Psi(t, x, y, z) = \sum_n c_n \psi_n(x, y, z) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (5.11)$$

と書くことができる。

5.2 球対称 3 次元 SCHRÖDINGER 方程式 (変数分離)

多くの物理的状況において、ポテンシャル $V(x, y, z)$ が中心からの距離 $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ のみに依存することがある。このようなポテンシャルを**中心力ポテンシャル (central potential)** と言い、以下ではそのような場合を考える。

中心力ポテンシャル

$$V(x, y, z) = V(r). \quad (5.12)$$

[問 5.1] で示されるように、極座標での Laplacian は

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}, \quad (5.13)$$

となるから¹⁹、3次元 Schrödinger 方程式 (5.74) は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z), \quad (5.15)$$

となる。

さて、 $\varphi(t)$ と $\psi(x, y, z)$ を分離したときと同様、 $\psi(x, y, z)$ の構成要素となる波動関数を求めるために以下のような変数分離型の解を探すことにしよう

$$\psi(x, y, z) = R(r)Y(\theta, \phi). \quad (5.16)$$

ここで、 $R(r)$ と $Y(\theta, \phi)$ はそれぞれ独立に規格化されているとする。つまり、元の規格化条件は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz |\psi(x, y, z)|^2 = \int_0^{\infty} dr r^2 |R(r)|^2 \int d\Omega |Y(\theta, \phi)|^2 = 1, \quad (5.17)$$

¹⁹ これは、Laplacian が任意の関数 f に作用するとき

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} f \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} f \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} f, \quad (5.14)$$

となる、という意味である。

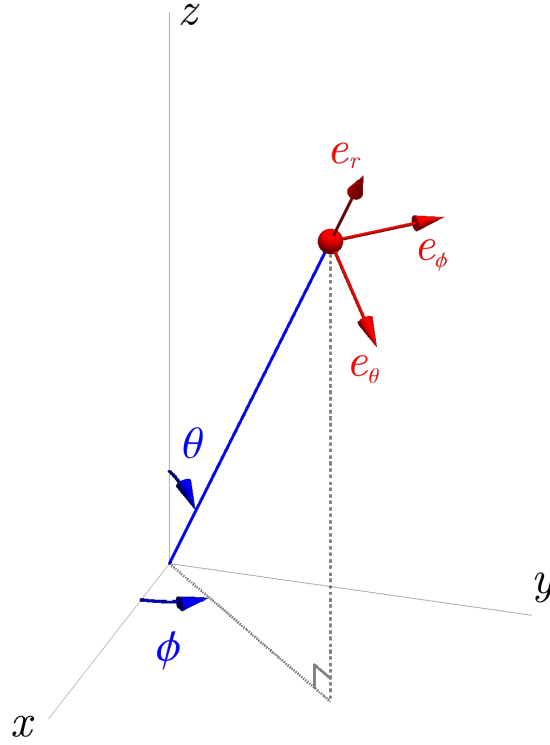


図 27: 極座標の取り方。

であるが、ここに現れるそれぞれが規格化されている

$$\int_0^\infty dr r^2 |R(r)|^2 = 1, \quad \int d\Omega |Y(\theta, \phi)|^2 = 1, \quad (5.18)$$

として規格化条件を定める。ここで $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ であり、積分範囲を明示すると $\int d\Omega = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$ である。式 (5.16) を Schrödinger 方程式 (5.74) に代入すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{Y(\theta, \phi)}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) + \frac{R(r)}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} Y(\theta, \phi) \right) + \frac{R(r)}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} Y(\theta, \phi) \right] + V(r) R(r) Y(\theta, \phi) = E R(r) Y(\theta, \phi), \quad (5.19)$$

となり、これに $-\frac{2m}{\hbar^2} \frac{r^2}{R(r)Y(\theta, \phi)}$ を掛けて整理すると

$$\left[\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) \right] = -\frac{1}{Y(\theta, \phi)} \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} Y(\theta, \phi) \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} Y(\theta, \phi) \right], \quad (5.20)$$

が得られる。このうち左辺は r のみ、右辺は θ, ϕ のみに依存しているから、これらは定数となるはずである。その定数を $l(l+1)$ ($l = 0, 1, 2, \dots$) と置くと

$$\left[\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) \right] = l(l+1), \quad (5.21)$$

$$\frac{1}{Y(\theta, \phi)} \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} Y(\theta, \phi) \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} Y(\theta, \phi) \right] = -l(l+1), \quad (5.22)$$

が得られる。定数を $l(l+1)$ ($l = 0, 1, 2, \dots$) と置いた理由は、後者の方程式がこの場合以外解を持たないからである。

【問 5.1】 極座標での Laplacian の表式

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2},$$

を簡単な計算で示そう。以下、 $s_\theta := \sin \theta$, $c_\theta := \cos \theta$, $s_\phi := \sin \phi$, $c_\phi := \cos \phi$ とし、また $\partial_x := \frac{\partial}{\partial x}$, $\partial_y := \frac{\partial}{\partial y}$, $\partial_z := \frac{\partial}{\partial z}$, $\partial_r := \frac{\partial}{\partial r}$, $\partial_\theta := \frac{\partial}{\partial \theta}$, $\partial_\phi := \frac{\partial}{\partial \phi}$ とする。

(1) 図 27 を参考に

$$\begin{pmatrix} e_x & e_y & e_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_r & e_\theta & e_\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rule{1cm}{0.4pt} & \rule{1cm}{0.4pt} & \rule{1cm}{0.4pt} \\ \rule{1cm}{0.4pt} & \rule{1cm}{0.4pt} & \rule{1cm}{0.4pt} \\ \rule{1cm}{0.4pt} & \rule{1cm}{0.4pt} & \rule{1cm}{0.4pt} \end{pmatrix},$$

の空欄を埋めよ。また、

$$\begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rule{1cm}{0.4pt} & \rule{1cm}{0.4pt} & \rule{1cm}{0.4pt} \\ \rule{1cm}{0.4pt} & \rule{1cm}{0.4pt} & \rule{1cm}{0.4pt} \\ \rule{1cm}{0.4pt} & \rule{1cm}{0.4pt} & \rule{1cm}{0.4pt} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\phi \end{pmatrix},$$

の空欄を埋めよ。

(2) 図 27 を参考に

$$\begin{aligned} \partial_r e_r &= \rule{1cm}{0.4pt}, & \partial_\theta e_r &= \rule{1cm}{0.4pt}, & \partial_\phi e_r &= \rule{1cm}{0.4pt}, \\ \partial_r e_\theta &= \rule{1cm}{0.4pt}, & \partial_\theta e_\theta &= \rule{1cm}{0.4pt}, & \partial_\phi e_\theta &= \rule{1cm}{0.4pt}, \\ \partial_r e_\phi &= \rule{1cm}{0.4pt}, & \partial_\theta e_\phi &= \rule{1cm}{0.4pt}, & \partial_\phi e_\phi &= \rule{1cm}{0.4pt}, \end{aligned}$$

の空欄を埋めよ。

(3) (1) より、

$$\begin{aligned} \nabla &= e_x \partial_x + e_y \partial_y + e_z \partial_z = \begin{pmatrix} e_x & e_y & e_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_r & e_\theta & e_\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{rs_\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\phi \end{pmatrix} \\ &= e_r \partial_r + \frac{1}{r} e_\theta \partial_\theta + \frac{1}{rs_\theta} e_\phi \partial_\phi, \end{aligned}$$

であることを示せ。

(4) (2)(3) より

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{1}{r^2 s_\theta} \partial_\theta (s_\theta \partial_\theta) + \frac{1}{r^2 s_\theta^2} \partial_\phi^2,$$

であることを示せ。

【解 5.1】

(1) 図 27 を参考に

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{e}_r & \mathbf{e}_\theta & \mathbf{e}_\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_\theta c_\phi & s_\theta s_\phi & c_\theta \\ c_\theta c_\phi & c_\theta s_\phi & -s_\theta \\ -s_\theta & -c_\phi & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_\theta c_\phi & \frac{c_\theta c_\phi}{r} & -\frac{s_\phi}{rs_\theta} \\ s_\theta s_\phi & \frac{c_\theta s_\phi}{r} & \frac{c_\phi}{rs_\theta} \\ c_\theta & -\frac{s_\theta}{r} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\phi \end{pmatrix},$$

となる。

(2) 図 27 を参考に

$$\begin{aligned} \partial_r \mathbf{e}_r &= 0, & \partial_\theta \mathbf{e}_r &= \mathbf{e}_\theta, & \partial_\phi \mathbf{e}_r &= s_\theta \mathbf{e}_\phi, \\ \partial_r \mathbf{e}_\theta &= 0, & \partial_\theta \mathbf{e}_\theta &= -\mathbf{e}_r, & \partial_\phi \mathbf{e}_\theta &= c_\theta \mathbf{e}_\phi, \\ \partial_r \mathbf{e}_\phi &= 0, & \partial_\theta \mathbf{e}_\phi &= 0, & \partial_\phi \mathbf{e}_\phi &= -s_\theta \mathbf{e}_r - c_\theta \mathbf{e}_\theta, \end{aligned}$$

となる。

(3) (1) より

$$\begin{aligned} \nabla &= \mathbf{e}_x \partial_x + \mathbf{e}_y \partial_y + \mathbf{e}_z \partial_z \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{e}_r & \mathbf{e}_\theta & \mathbf{e}_\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_\theta c_\phi & s_\theta s_\phi & c_\theta \\ c_\theta c_\phi & c_\theta s_\phi & -s_\theta \\ -s_\theta & -c_\phi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_\theta c_\phi & \frac{c_\theta c_\phi}{r} & -\frac{s_\phi}{rs_\theta} \\ s_\theta s_\phi & \frac{c_\theta s_\phi}{r} & \frac{c_\phi}{rs_\theta} \\ c_\theta & -\frac{s_\theta}{r} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\phi \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{e}_r & \mathbf{e}_\theta & \mathbf{e}_\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{rs_\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\phi \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{e}_r \partial_r + \frac{1}{r} \mathbf{e}_\theta \partial_\theta + \frac{1}{rs_\theta} \mathbf{e}_\phi \partial_\phi, \end{aligned}$$

となる。

(4) (2)(3) より

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \mathbf{e}_r \partial_r \left(\mathbf{e}_r \partial_r + \frac{1}{r} \mathbf{e}_\theta \partial_\theta + \frac{1}{rs_\theta} \mathbf{e}_\phi \partial_\phi \right) + \frac{1}{r} \mathbf{e}_\theta \partial_\theta \left(\mathbf{e}_r \partial_r + \frac{1}{r} \mathbf{e}_\theta \partial_\theta + \frac{1}{rs_\theta} \mathbf{e}_\phi \partial_\phi \right) + \frac{1}{rs_\theta} \mathbf{e}_\phi \partial_\phi \left(\mathbf{e}_r \partial_r + \frac{1}{r} \mathbf{e}_\theta \partial_\theta + \frac{1}{rs_\theta} \mathbf{e}_\phi \partial_\phi \right) \\ &= (\partial_r^2) + \left(\frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\theta^2 \right) + \left(\frac{1}{r} \partial_r + \frac{c_\theta}{r^2 s_\theta} \partial_\theta + \frac{1}{r^2 s_\theta^2} \partial_\phi^2 \right) \\ &= \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{1}{r^2 s_\theta} \partial_\theta (s_\theta \partial_\theta) + \frac{1}{r^2 s_\theta^2} \partial_\phi^2, \end{aligned}$$

となる。

5.3 球対称 3 次元 SCHRÖDINGER 方程式 (角度方向)

式 (5.21), (5.22) のうち角度方向の方程式

時間に依存しない 3 次元 Schrödinger 方程式 (角度方向)

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y(\theta, \phi) \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y(\theta, \phi) = -l(l+1)Y(\theta, \phi), \quad (5.23)$$

について考える。最終的には球面調和関数 (spherical harmonics) $Y_{lm}(\theta, \phi)$ として知られた

$$Y(\theta, \phi) = Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta), \quad (5.24)$$

が解となるのだが、それを一つ一つ見ていくことにする。

角度方向の微分方程式はまだ θ, ϕ の 2 変数を含んでいるので、構成要素として変数分離型の

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi), \quad (5.25)$$

を考えよう。代入して整理すると

$$\frac{1}{\Theta(\theta)} \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta(\theta) \right) + l(l+1) \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2}{d\phi^2} \Phi(\phi), \quad (5.26)$$

となり、左辺は θ のみ、右辺は ϕ のみの関数であるから、これらは定数である。その定数を m^2 と置くと

$$\frac{1}{\Theta(\theta)} \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta(\theta) \right) + l(l+1) \sin^2 \theta = m^2, \quad (5.27)$$

$$\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2}{d\phi^2} \Phi(\phi) = -m^2, \quad (5.28)$$

が得られる。ここで慣習的な理由により定数として m^2 を用いたが、粒子の質量 m と混同しないよう注意が必要である。後者 (ϕ 方向) は簡単に解けて、

$$\frac{d^2}{d\phi^2} \Phi(\phi) = -m^2 \Phi(\phi) \quad \Rightarrow \quad \Phi(\phi) = e^{im\phi}, \quad (5.29)$$

となる。規格化定数は $\Theta(\theta)$ の方に押し付けるものとした。ところで、 r と θ を固定したとき $\phi + 2\pi$ と ϕ は同一の空間点を表すから、波動関数がこれらの点で同じ値を取ること、すなわち $\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi)$ を要求すると、 m は整数値

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (5.30)$$

のみ許されることがわかる。また本来 $e^{im\phi}$ と $e^{-im\phi}$ の両方が解となるが、式 (5.29) では $e^{im\phi}$ のみ考慮している。これは、 $m > 0$ と $m < 0$ を独立に考えることで式 (5.28) の 2 つの解を $e^{im\phi}$ で表せるためである。

次に前者 (θ 方向) であるが、これは数学的に **Legendre 陪関数 (associated Legendere function)** $P_l^m(x)$ と呼ばれる関数を用いて解けることが知られていて、

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta(\theta) \right) + [l(l+1) \sin^2 \theta - m^2] \Theta(\theta) = 0 \quad \Rightarrow \quad \Theta(\theta) \propto P_l^m(\cos \theta), \quad (5.31)$$

となる。Legendre 陪関数は、まず整数 $m \geq 0$ について

$$P_l^m(x) := (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dx} \right)^m P_l(x), \quad (5.32)$$

で定義され、**Legendre 多項式 (Legendre polynomials)** $P_l(x)$ は整数 $l \geq 0$ について **Rodrigues の公式 (Rodrigues formula)**

$$P_l(x) := \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l, \quad (5.33)$$

で定義される。Legendre 陪関数について、 $m > l$ とすると微分の次数 m が微分される多項式の次数 l を超えるために $P_l^m(x) = 0$ となることがわかる。したがって以下 $m \leq l$ のみ考える。式 (5.32)(5.33) を合わせると

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dx} \right)^{l+m} (x^2 - 1)^l, \quad (5.34)$$

と書けるが、このように書くと $0 \leq m \leq l$ だけでなく $-l \leq m \leq l$ について $P_l^m(x)$ が求まるため、こちらを改めて定義とする²⁰。この範囲以外の l, m については $P_l^m(x) = 0$ である。

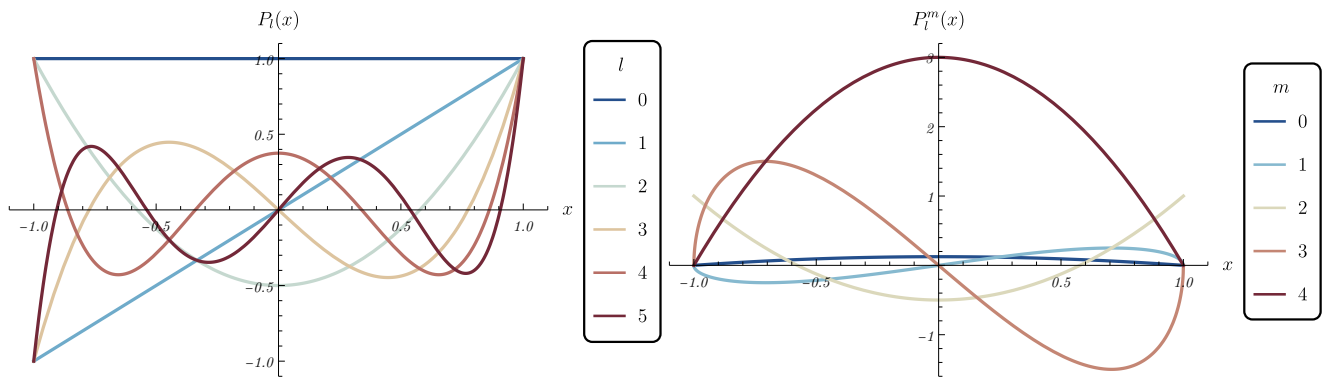


図 28: Legendre 多項式 $P_l(x)$ (左) および Legendre 陪関数 $P_l^m(x)$ (右)。

以上の $\Theta(\theta)$ と $\Phi(\phi)$ から構成した $Y(\theta, \phi)$ に対し、式 (5.18) の規格化条件を満たすように取ったものを**球面調和関数 (spherical harmonics)**

球面調和関数

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta). \quad (5.35)$$

と呼ぶ。 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ は実際

$$\int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = 1, \quad (5.36)$$

を満たすため、式 (5.18) の規格化条件を満たしている。ここで $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ であり、積分範囲を明示すると $\int d\Omega = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$ である。

²⁰ Legendre 陪関数の定義は本によって違うことがあるので注意が必要である。

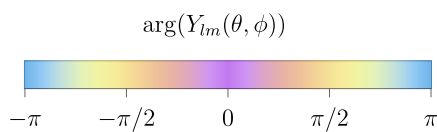
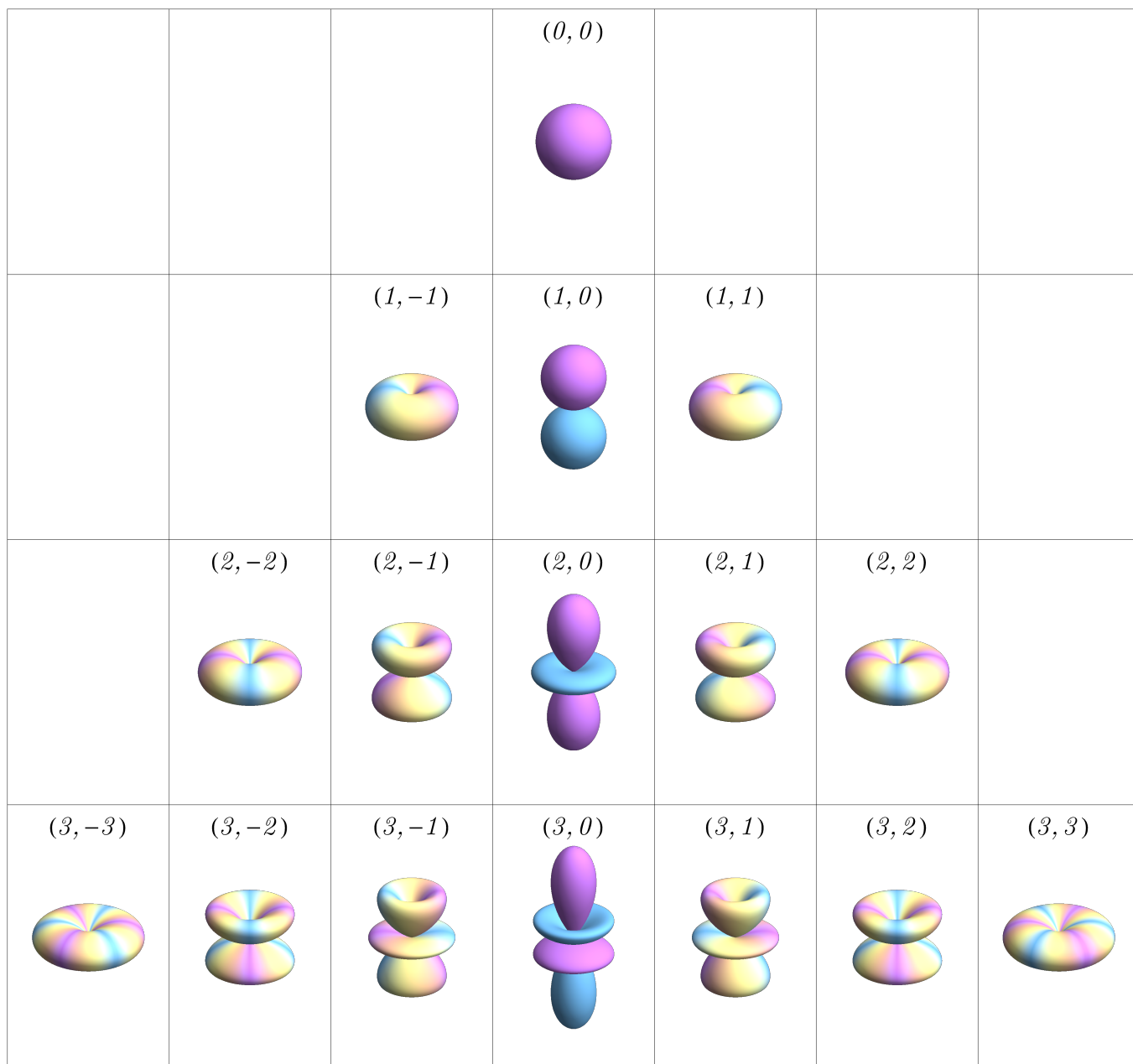


図 29: 各 (l, m) についての球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ の振る舞い。各方向 (θ, ϕ) について、絶対値 $|Y_{lm}(\theta, \phi)|$ が動径 r で示され、位相 $\arg(Y_{lm}(\theta, \phi))$ が色で示されている。

コラム：「解ける」とは？

我々は式 (5.31) の解を $P_l^m(\cos \theta)$ と置いて満足しているが、それで解いたことになるのだろうか。例えば試験で「 $\frac{d^2}{dx^2}f(x) + \frac{d}{dx}f(x) + f(x) = 0$ を解け」と言われたとき、「解は $f(x) = \mathcal{F}(x)$ である！ここで $\mathcal{F}(x)$ は微分方程式 $\frac{d^2}{dx^2}\mathcal{F}(x) + \frac{d}{dx}\mathcal{F}(x) + \mathcal{F}(x) = 0$ の解である！」と宣言すれば解けたことになるのだろうか。

そもそも「解ける」とは何だろうか？「微分方程式 $f''(x) = -f(x)$ を解け」と言われて、「解は $f(x) = A \sin x + B \cos x$ 」

と言われれば解けた気がするだろう。しかしよく考えたら、 $\sin x$ だって $\cos x$ だって、任意の x に対して値を知ろうと思ったら数値的・近似的にしかわからないのであって、ではこれはどういう意味で「解けて」いるのだろう。

初めて三角関数を習ったとき、「 $\cos \theta$ は斜辺と底辺の比である」と言われて、「そんな簡単な比を改めて関数として書いて何の役に立つのか」と思った経験はないだろうか。しかしこのノートを読んでいる人はおそらく、 $\sin, \cos$ が当初の定義からは想像も付かないほど有用で、性質を調べ尽くす価値があり、実際にそうされていることを知っているだろう。

人間はしばしば、(1) 重要で基本的と思われる対象に名前を付け、(2) その対象を調べ尽くし、(3) 種々の問題をその対象に帰着する、ということを行っている。(1) が $\sin, \cos$ であったり、今の場合 Legendre 陪関数 P_l^m である。そして P_l^m は実際よく研究されていて、性質のわかっている関数である。数学の分野で積み上げられた (1)(2) の知見を基に物理の問題に対して (3) を行う、ということが頻繁に行われ、この行為を「解く」と呼ぶことがある。Schrödinger 方程式の角度方向の微分方程式という物理の一問題を、数学的に性質のよく知られた Legendre 陪関数に帰着する、という (3) の意味で「解いた」のである。

[問 5.2] ([1] Problem 4.4, 4.7 改)

(1) 球面調和関数の定義

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta),$$

を用いて $Y_{00}(\theta, \phi), Y_{21}(\theta, \phi), Y_{32}(\theta, \phi)$ を構成せよ。Legendre 多項式 $P_l(x)$ に対する Rodrigues の公式、および Legendre 陪関数 $P_l^m(x)$ の定義

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l, \quad P_l^m(x) = (-1)^m (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dx} \right)^m P_l(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dx} \right)^{l+m} (x^2 - 1)^l,$$

も参照せよ。

(2) $Y_{00}(\theta, \phi), Y_{21}(\theta, \phi)$ が

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

の意味で規格直交化されていることを確かめよ。

(3) $Y(\theta, \phi) = Y_{32}(\theta, \phi)$ が $l = 3$ に対する角度方向の Schrödinger 方程式

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y(\theta, \phi) \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y(\theta, \phi) = -l(l+1) Y(\theta, \phi),$$

を満たしていることを確認せよ。

[解 5.2]

(1) 定義より

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{21}(\theta, \phi) = -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}, \quad Y_{32}(\theta, \phi) = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{2i\phi},$$

となる。

(2) それぞれ

$$\begin{aligned}\int d\Omega Y_{00}^*(\theta, \phi) Y_{00}(\theta, \phi) &= \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{4\pi} = 1, \\ \int d\Omega Y_{21}^*(\theta, \phi) Y_{21}(\theta, \phi) &= \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{15}{8\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \theta \\ &= \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\phi \frac{15}{8\pi} (1 - \cos^2 \theta) \cos^2 \theta = \frac{15}{8\pi} \cdot \frac{4}{15} \cdot 2\pi = 1, \\ \int d\Omega Y_{00}^*(\theta, \phi) Y_{21}(\theta, \phi) &= \left[\int d\Omega Y_{21}^*(\theta, \phi) Y_{00}(\theta, \phi) \right]^* \\ &= \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{15}{8\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi} \overset{\text{積分}}{=} 0,\end{aligned}$$

となるので示された。

(3) $Y_{21}(\theta, \phi) = -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$ より

$$\begin{aligned}& \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y(\theta, \phi) \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y(\theta, \phi) \\ &= -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \sin \theta \cos \theta \right) e^{i\phi} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \sin \theta \cos \theta \frac{d^2}{d\phi^2} e^{i\phi} \right] \\ &= -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\cos \theta (\cos^2 \theta - 5 \sin^2 \theta)}{\sin \theta} e^{i\phi} - \frac{\cos \theta}{\sin \theta} e^{i\phi} \right] \\ &= -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (-6) \sin \theta \cos \theta e^{i\phi} \\ &= -2(2+1) Y_{21}(\theta, \phi),\end{aligned}$$

となるので示された。

[問 5.3] Rodrigues の公式

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

を用いて $P_0(x), P_1(x), P_2(x), P_2^{-2}(x), P_2^{-1}(x), P_2^0(x), P_2^1(x), P_2^2(x)$ を求めよ。

[解 5.3]

$$\begin{aligned}P_0(x) &= 1, & P_1(x) &= x, & P_2(x) &= P_2^0(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \\ P_2^{-2}(x) &= \frac{1}{8}(1 - x^2), & P_2^{-1}(x) &= \frac{1}{2}x\sqrt{1 - x^2}, & P_2^1(x) &= -3x\sqrt{1 - x^2}, & P_2^2(x) &= 3(1 - x^2).\end{aligned}$$

[問 5.4] ([1] Problem 4.8 改)

Rodrigues の公式

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

を用いて、Legendre 多項式の直交性

$$\int_{-1}^1 dx P_l(x) P_{l'}(x) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'},$$

を示せ。ここで l, l' は 0 以上の整数である。

(1) $l \neq l'$ について $\int_{-1}^1 dx P_l(x) P_{l'}(x) = 0$ であることを示そう。 $l > l'$ として一般性を失わない。このとき、部分積分を繰り返すことにより

$$(2^l l!)(2^{l'} l'!) \int_{-1}^1 dx P_l(x) P_{l'}(x) = \cdots = (-1)^l \int_{-1}^1 dx (x^2 - 1)^l \left(\frac{d}{dx} \right)^{l+l'} (x^2 - 1)^{l'},$$

となることを示し、右辺が 0 であることを示せ。

(2) $l = l'$ について、 $\int_{-1}^1 dx P_l(x)^2 = \frac{2}{2l+1}$ であることを示そう。部分積分により (1) と同様の式変形をし、最後の積分を評価せよ。

[解 5.4]

(1) $l > l'$ として一般性を失わない。最初の部分積分について

$$\begin{aligned} & (2^l l!)(2^{l'} l'!) \int_{-1}^1 dx P_l(x) P_{l'}(x) \\ &= \int_{-1}^1 dx \left[\left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l \right] \left[\left(\frac{d}{dx} \right)^{l'} (x^2 - 1)^{l'} \right] \\ &= \left[\left(\frac{d}{dx} \right)^{l-1} (x^2 - 1)^l \right] \left[\left(\frac{d}{dx} \right)^{l'} (x^2 - 1)^{l'} \right] \Big|_{-1}^1 - \int_{-1}^1 dx \left[\left(\frac{d}{dx} \right)^{l-1} (x^2 - 1)^l \right] \left[\left(\frac{d}{dx} \right)^{l'+1} (x^2 - 1)^{l'} \right], \end{aligned}$$

であるが、右辺第 1 項のうち $\left(\frac{d}{dx} \right)^{l-1} (x^2 - 1)^l \Big|_{-1}^1$ は微分の次数が $(l-1)$ 次しかないため、 $(x^2 - 1)^l$ に微分を全て当てた際に因子 $(x^2 - 1)$ が残る。例えば $\left(\frac{d}{dx} \right)^0 (x^2 - 1)^1 = (x^2 - 1)$, $\left(\frac{d}{dx} \right)^1 (x^2 - 1)^2 = 4x(x^2 - 1)$, $\left(\frac{d}{dx} \right)^2 (x^2 - 1)^3 = 6(x^2 - 1)^2 + 24x^2(x^2 - 1)$ である。したがって表面項は $x = \pm 1$ で 0 となる。以降の部分積分も同様であり、

$$(2^l l!)(2^{l'} l'!) \int_{-1}^1 dx P_l(x) P_{l'}(x) = \cdots = (-1)^l \int_{-1}^1 dx (x^2 - 1)^l \left(\frac{d}{dx} \right)^{l+l'} (x^2 - 1)^{l'},$$

を得る。ここで $l > l'$ より $(x^2 - 1)^{l'}$ の x の次数 $2l'$ は微分の次数 $l + l'$ 未満であるから、積分の中身は 0 となり、したがって

$$\int_{-1}^1 dx P_l(x) P_{l'}(x) = 0 \quad (l \neq l'),$$

を得る。

(2) $l = l'$ について、(1) と同様の式変形により

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

を得る。 $\left(\frac{d}{dx} \right)^{2l} (x^2 - 1)^l = (2l)!$ より

$$(2^l l!)^2 \int_{-1}^1 dx P_l(x) P_l(x) = (-1)^l (2l)! \int_{-1}^1 dx (x^2 - 1)^l = 2(2l)! \int_0^1 dx (1 - x^2)^l,$$

であるが、

$$\begin{aligned} \int_0^1 dx (1-x^2)^l &\stackrel{\text{部分積分}}{=} - \int_0^1 dx x [-2lx(1-x^2)^{l-1}] = \frac{2l}{1} \int_0^1 dx x^2 (x^2-1)^{l-1} \\ &\stackrel{\text{部分積分}}{=} - \frac{2l}{1} \int_0^1 dx \frac{x^3}{3} [-2lx(x^2-1)^{l-2}] = \frac{2l \cdot 2(l-1)}{1 \cdot 3} \int_0^1 dx x^4 (x^2-1)^{l-2} \\ &= \dots = \frac{2l \cdot 2(l-1) \cdots 2}{1 \cdot 3 \cdots (2l-1)} \int_0^1 dx x^{2l} = \frac{2l \cdot 2(l-1) \cdots 2}{1 \cdot 3 \cdots (2l+1)} = \frac{2^l l!}{(2l+1)!/(2^l l!)} = \frac{2^{l+1} (l!)^2}{(2l+1)!}, \end{aligned}$$

であるため、

$$(2^l l!)^2 \int_{-1}^1 dx P_l(x) P_l'(x) = 2(2l)! \frac{2^{l+1} (l!)^2}{(2l+1)!} = \frac{2^{l+2} (l!)^2}{2l+1} \quad \Rightarrow \quad \int_{-1}^1 dx P_l(x) P_l'(x) = \frac{2}{2l+1},$$

となる。

[問 5.5] Legendre 陪関数

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

が微分方程式

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta(\theta) \right) + [l(l+1) \sin^2 \theta - m^2] \Theta(\theta) = 0,$$

の解 $\Theta(\theta) = P_l^m(\cos \theta)$ であることを示そう。

(1) 恒等式

$$(x^2-1) \frac{d}{dx} (x^2-1)^l = 2lx(x^2-1)^l,$$

を示せ。

(2) (1) の式に $\frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}}$ を作用させることにより、Legendre 多項式が Legendre の微分方程式

$$(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} P_l(x) - 2x \frac{d}{dx} P_l(x) + l(l+1) P_l(x) = 0,$$

を満たすことを示せ。

(3) (2) の式に $\frac{d^m}{dx^m}$ を作用させることで、Legendre 陪関数が微分方程式

$$(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} P_l^m(x) - 2x \frac{d}{dx} P_l^m(x) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_l^m(x) = 0,$$

を満たすことを示せ。

(4) (3) の式において $x = \cos \theta$ とすると $\Theta(\theta)$ が満たすべき微分方程式に帰着することを示せ。

[解 5.5]

(1) 微分を実行すると

$$(x^2-1) \frac{d}{dx} (x^2-1)^l = (x^2-1) 2lx(x^2-1)^{l-1} = 2lx(x^2-1)^l,$$

となるので示される。

(2) (1) の式の左辺に $\frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}}$ を作用させると

$$\begin{aligned} & \frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}} \left[(x^2 - 1) \frac{d}{dx} (x^2 - 1)^l \right] \\ &= {}_{l+1}P_2 \left[\frac{d^2}{dx^2} (x^2 - 1) \right] \left[\frac{d^{l-1}}{dx^{l-1}} (x^2 - 1)^l \right] + {}_{l+1}P_1 \left[\frac{d}{dx} (x^2 - 1) \right] \left[\frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \right] + (x^2 - 1) \left[\frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}} (x^2 - 1)^l \right] \\ &= l(l+1)P_l(x) + 2(l+1)x \frac{d}{dx} P_l(x) + (x^2 - 1) \frac{d^2}{dx^2} P_l(x), \end{aligned}$$

であり、右辺に $\frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}}$ を作用させると

$$\frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}} [2lx(x^2 - 1)^l] = 2l {}_{l+1}P_1 \left[\frac{d}{dx} x \right] \left[\frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \right] + 2lx \left[\frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}} (x^2 - 1)^l \right] = 2l(l+1)P_l(x) + 2lx \frac{d}{dx} P_l(x),$$

であるから、整理すると示される。

(3) (2) の式に $\frac{d^m}{dx^m}$ を作用させると、1 項目は

$$\frac{d^m}{dx^m} \left[(1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} P_l(x) \right] = -m(m-1) \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) - 2mx \frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}} P_l(x) + (1 - x^2) \frac{d^{m+2}}{dx^{m+2}} P_l(x),$$

2 項目は

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

3 項目は

$$\frac{d^m}{dx^m} [l(l+1)P_l^m(x)] = l(l+1) \frac{d^m}{dx^m} P_l^m(x),$$

であるから、まとめると

$$(1 - x^2) \frac{d^{m+2}}{dx^{m+2}} P_l(x) + 2(1 - m) \frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}} P_l(x) + [l(l+1) - m(m+1)] P_l(x) = 0,$$

を得る。ここに $\frac{d^m}{dx^m} P_l(x) = (-1)^m (1 - x^2)^{-\frac{m}{2}} P_l^m(x)$ を代入して整理すると示される。

(4) $\sin \theta = \sqrt{1 - x^2}$ と $\frac{d}{d\theta} = \frac{d \cos \theta}{d\theta} \frac{d}{d \cos \theta} = -\sqrt{1 - x^2} \frac{d}{dx}$ に注意して

$$\begin{aligned} & \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta(\theta) \right) + [l(l+1) \sin^2 \theta - m^2] \Theta(\theta) = 0, \\ \Rightarrow & -(1 - x^2) \frac{d}{dx} \left(-(1 - x^2) \frac{d}{dx} \Theta \right) + [l(l+1)(1 - x^2) - m^2] \Theta = 0, \\ \Rightarrow & (1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} \Theta - 2x \frac{d}{dx} \Theta + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1 - x^2} \right] \Theta = 0, \end{aligned}$$

より示される。

5.4 球対称 3 次元 SCHRÖDINGER 方程式 (動径方向)

式 (5.21), (5.22) のうち動径方向の方程式

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) R(r) = l(l+1) R(r), \quad (5.37)$$

について考える。整理すると

$$\frac{d^2}{dr^2} R(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R(r) - \left[\frac{2m(V(r) - E)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0, \quad (5.38)$$

となるが、式を見やすくするため

$$u(r) = rR(r), \quad (5.39)$$

と定義する。 $u(r)$ の規格化は、式 (5.18) より

$$\int_0^\infty dr |u(r)|^2 = 1, \quad (5.40)$$

で与えられる。代入して整理すると、

$$\frac{d^2}{dr^2} u(r) - \left[\frac{2m(V(r) - E)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u(r) = 0, \quad (5.41)$$

となることがわかる。この方程式は、1 次元の時間に依存しない Schrödinger 方程式 (2.7) に似ていないだろうか。実際、**有効ポテンシャル (effective potential)** V_{eff} の下での 1 次元 Schrödinger 方程式

$$\frac{d^2}{dr^2} u(r) - \frac{2m(V_{\text{eff}}(r) - E)}{\hbar^2} u(r) = 0, \quad V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad (5.42)$$

に帰着する。有効ポテンシャル V_{eff} の第 2 項 $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$ は、角運動量 l によって中心に近づきにくくなる効果、すなわち**遠心力 (centrifugal force)** に相当する。

[問 5.6] ([1] Problem 4.1)

3 次元無限井戸型ポテンシャルの下での動径方向の Schrödinger 方程式

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) R(r) = l(l+1) R(r), \quad V(r) = \begin{cases} 0 & (r \leq a), \\ \infty & (r > a), \end{cases}$$

を考える。整数 $l \geq 0$ は与えられているものとする。

(1) 有効ポテンシャル $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$ は常に正であるから、エネルギーの範囲としては $E > 0$ を考えればよい。1 次元 Schrödinger 方程式と同様に $k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ を用いると、動径方向の Schrödinger 方程式が $r \leq a$ において

$$\frac{d^2}{dr^2} R(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R(r) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0,$$

となることを示せ。

(2) 任意の実数 α に対して、球 Bessel 関数 $j_\alpha(x)$ および球 Neumann 関数 $n_\alpha(x)$ は、次の $f(x)$ に対する球 Bessel

微分方程式

$$\frac{d^2}{dx^2}f(x) + \frac{2}{x} \frac{d}{dx}f(x) + \left[1 - \frac{\alpha(\alpha+1)}{x^2}\right]f(x) = 0,$$

の2つの独立な解を与えるものとして知られている。整数 $\alpha \geq 0$ に対しては、具体形は

$$j_\alpha(x) = (-x)^\alpha \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^\alpha \frac{\sin x}{x}, \quad n_\alpha(x) = -(-x)^\alpha \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^\alpha \frac{\cos x}{x},$$

を用いて求めることができる。まず、 $j_l(kr), n_l(kr)$ が動径方向の Schrödinger 方程式を満たすことを示せ。次に、原点 $r=0$ で $R(r)$ が正則である (発散しない) という条件から、解が球 Bessel 関数 $j_l(kr)$ に限られることを示せ。 $\frac{\sin x}{x}, \frac{\cos x}{x}$ を Taylor 展開し、 $x \rightarrow 0$ で最も発散する項の振る舞いを見るとよい。最後に、 $l=0, 1, 2$ について球 Bessel 関数 $j_l(x)$ および球 Neumann 関数 $n_l(x)$ の具体形を求め、図示せよ。

(3) Bessel 関数 $j_\alpha(x)$ の N 番目の零点 ($j_\alpha(x)=0$ となる点 $x \geq 0$ のうち、 N 番目に原点に近いもの) を $\beta_{N\alpha}$ とする。 $r=a$ での境界条件を考慮し、エネルギー準位が

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{Nl}^2,$$

となることを示せ。

[解 5.6]

(1) 動径方向の Schrödinger 方程式

$$\frac{d^2}{dr^2}R(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}R(r) - \left[\frac{2m(V(r)-E)}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0,$$

において、 $V(r)=0$ ($r \leq a$) および k の定義式を用いる。

(2) 動径方向の Schrödinger 方程式の両辺を k^2 で割り、 $x=kr$ と置くと球 Bessel 微分方程式に一致するため、 $j_l(kr), n_l(kr)$ が動径方向の Schrödinger 方程式を満たすことが示された。球 Neumann 関数は、 $x \rightarrow 0$ において最も発散する項だけ取り出すと

$$n_\alpha(x) = -(-x)^\alpha \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^\alpha \left(\frac{1}{x} - \frac{x}{2} + \dots\right) = -(-x)^\alpha (-1)^\alpha [(2\alpha-1)(2\alpha-3)\dots 1] \frac{1}{x^{\alpha+1}} = -\frac{(2\alpha)!}{2^\alpha \alpha!} \frac{1}{x^{\alpha+1}} + \dots,$$

と振る舞うので、 $n_l(kr)$ は $r \rightarrow 0$ で発散し、 $R(r)$ の解として不適である。また、球 Bessel 関数も同様に $x \rightarrow 0$ において最も発散する項だけ取り出すと

$$j_\alpha(x) = (-x)^\alpha \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^\alpha \left(1 - \frac{x^2}{6} + \dots\right) = (-x)^\alpha \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^\alpha \left[\frac{(-1)^\alpha}{(2\alpha+1)!} x^{2\alpha} \right] = \frac{2^\alpha \alpha!}{(2\alpha+1)!} x^\alpha,$$

と振る舞うので、原点で正則である。よって、解は球 Bessel 関数に限られる。

(3) $R(a)=0$ すなわち $j_l(ka)=0$ であるから、 ka は球 Bessel 関数 $j_l(x)$ のいずれかの零点に一致しなければならない。それを N 番目の零点とすると、

$$ka = \beta_{Nl},$$

であり、よってエネルギー E は

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{Nl}^2,$$

となる。

5.5 水素原子 (導入)

前小節までの球対称 3 次元 Schrödinger 方程式の手法を用いて、水素原子の解析に入ろう。現実の水素原子には様々な効果が存在するため、本節ではいくつかの簡単化を行う²¹。

本節での水素原子に関する前提

- 粒子のスピンの効果は無視する。
- 陽子 p の質量 m_p は電子 e^- の質量 m_e より十分大きいものとする。
- 電磁場の量子効果は無視する。

特にスピンについては次節以降の角運動量の理解が必要となるため、後に再考することにする。前小節までの流れと同じく、 $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ と置いたときの角度方向 $Y(\theta, \phi)$ と動径方向 $R(r)$ を順番に見ていこう。以下、Schrödinger 方程式に現れる粒子の質量を電子の質量 m_e とする。

5.5.1 角度方向

角度方向 $Y(\theta, \phi)$ については、変数分離した後の Schrödinger 方程式

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y(\theta, \phi) \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y(\theta, \phi) = -l(l+1)Y(\theta, \phi), \quad (5.43)$$

から分かる通り、解は中心力ポテンシャルの詳細に依存しない。したがって、球面調和関数

$$Y(\theta, \phi) = Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta), \quad (5.44)$$

が解となる。繰り返しになるが、定数 m を粒子の質量と混同しないよう注意が必要である。

5.5.2 動径方向

動径方向 $R(r)$ については、まず方程式を得た過程

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) - \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R(r) = l(l+1)R(r) \\ \Rightarrow & \frac{d^2}{dr^2} R(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R(r) - \left[\frac{2m_e(V(r) - E)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0, \\ \xRightarrow{u(r)=rR(r)} & \frac{d^2}{dr^2} u(r) - \frac{2m_e(V_{\text{eff}}(r) - E)}{\hbar^2} u(r) = 0, \quad V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2}, \end{aligned} \quad (5.45)$$

を思い出そう。電荷 q_1, q_2 を持った 2 粒子間のポテンシャルは $V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r}$ であり、陽子の電荷は $+e$ 、電子の電荷は $-e$ であるから、水素原子の場合は

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}, \quad (5.46)$$

である。ここで ϵ_0 は真空の誘電率である。したがって、動径方向の Schrödinger 方程式は

$$\frac{d^2}{dr^2} u(r) - \frac{2m_e(V_{\text{eff}}(r) - E)}{\hbar^2} u(r) = 0, \quad V_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad (5.47)$$

²¹ それぞれ微細構造、超微細構造、Lamb シフトを無視するための近似である。

となる。有効ポテンシャル $V_{\text{eff}}(r)$ はそれぞれの l について図 30 の黒線のようにになっている。第 2 節での結果から、エネルギー準位 $E < 0$ については束縛状態、 $E > 0$ については散乱状態が現れる。水素原子は電子が陽子に束縛されてできるため、我々の興味があるのは束縛状態 $E < 0$ である。具体的な計算に入る前に、図 30 に図示されている束縛状態の波動関数 $u(r)$ およびエネルギー準位を観察しよう。面白いことに、異なる l の値に対してラベル n で示されるエネルギー準位の縮退が起こっていることがわかる。また、 n が大きいほど波動関数が遠方まで分布していることもわかる。

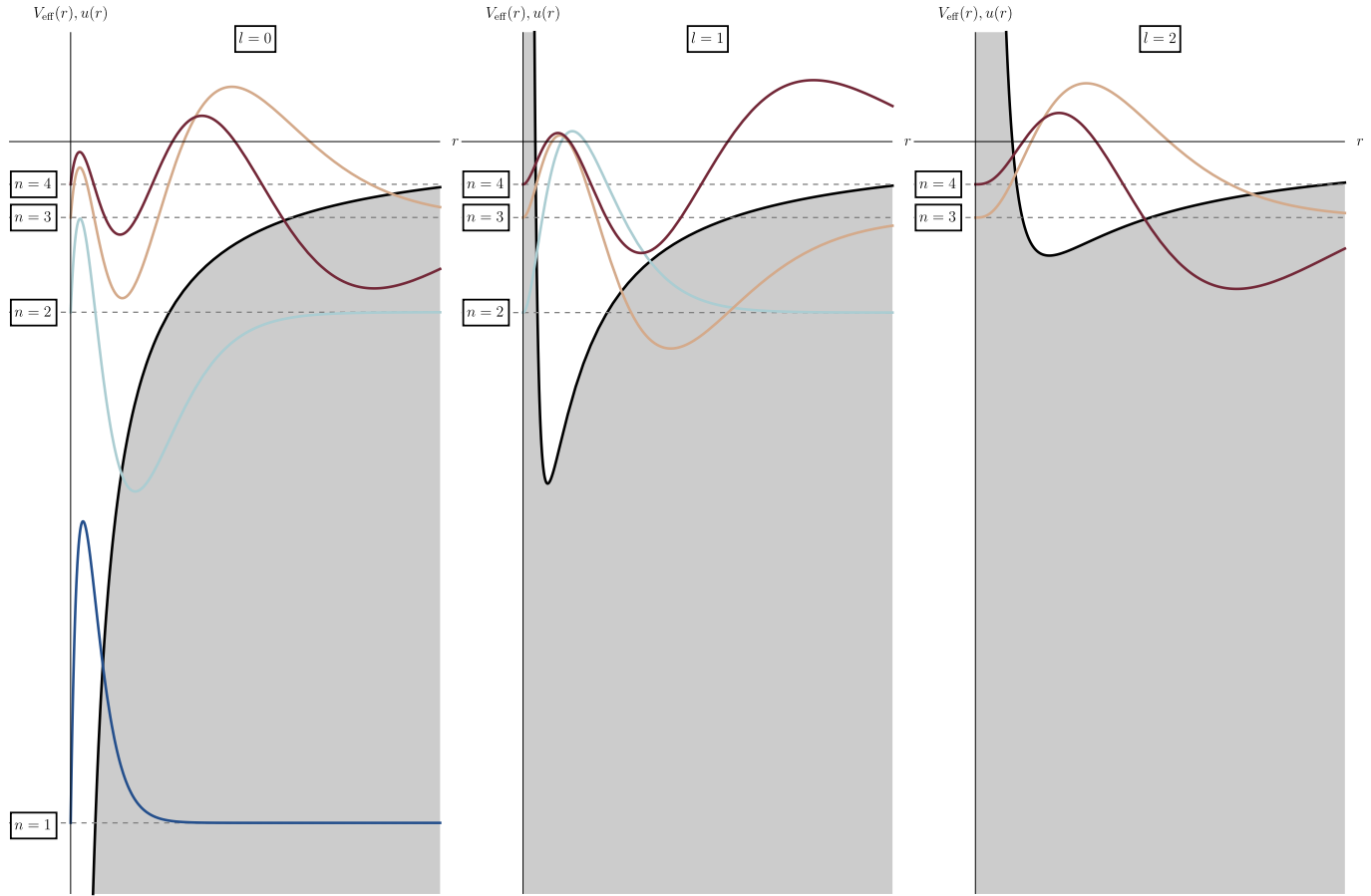


図 30: 水素原子の有効ポテンシャル $V_{\text{eff}}(r)$ および束縛状態の波動関数 $u(r)$ 。異なる l の値に対してエネルギー準位の縮退が起こることがわかる。また、 n が大きいほど波動関数が遠方まで分布していることもわかる。

さて、動径方向の Schrödinger 方程式を解くことで、図 30 のエネルギー準位を求めよう。 $E < 0$ であることに注意して、

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2m_e E}}{\hbar}, \quad \rho_0 = \frac{m_e e^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa}, \quad (5.48)$$

を導入し、動径方向の変数を

$$\rho = \kappa r, \quad (5.49)$$

と定義すると、動径方向の Schrödinger 方程式は

$$\frac{d^2}{d\rho^2} u(\rho) = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(\rho), \quad (5.50)$$

となる。ここで $u(\rho)$ は $u(r)$ に $r = \rho$ を代入したものではなく、 $u(r(\rho))$ を省略して $u(\rho)$ と書いていることに注意しよう。

さて、式 (5.50) は $\rho \rightarrow \infty$ で

$$\frac{d^2}{d\rho^2}u(\rho) \simeq u(\rho) \quad \Longrightarrow \quad u(\rho) \simeq Ae^{-\rho}, \quad (5.51)$$

となる。ここで、許される解 $u(\rho) \simeq Ae^{-\rho} + Be^{\rho}$ のうち波動関数が規格化可能であるという条件から $B = 0$ とした。一方、式 (5.50) は $\rho \rightarrow 0$ で

$$\frac{d^2}{d\rho^2}u(\rho) \simeq \frac{l(l+1)}{\rho^2}u(\rho) \quad \Longrightarrow \quad u(\rho) \simeq C\rho^{l+1}, \quad (5.52)$$

となる。ここで、許される解 $u(\rho) \simeq C\rho^{l+1} + D\rho^{-l}$ のうち、 $\rho \rightarrow 0$ で正則なものを取った。式 (5.51)–(5.52) より、

$$u(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho), \quad (5.53)$$

と置いて $v(\rho)$ の満たす方程式を求めると見通しが良いことがわかる。式 (5.50) に代入して

$$\frac{d^2}{d\rho^2}v(\rho) + \frac{2(l+1-\rho)}{\rho} \frac{d}{d\rho}v(\rho) + \frac{\rho_0 - 2(l+1)}{\rho}v(\rho) = 0, \quad (5.54)$$

を得る。第 2.3 節と同じ方法で動径方向の固有関数を求めてみよう。 $v(\rho)$ を ρ の多項式で

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j, \quad (5.55)$$

と展開し、式 (5.54) に代入すると、

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1)c_j \rho^{j-2} + \frac{2(l+1-\rho)}{\rho} \sum_{j=0}^{\infty} jc_j \rho^{j-1} + \frac{\rho_0 - 2(l+1)}{\rho} \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0 \\ \xRightarrow{\rho \text{ 倍}} & \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1)c_j \rho^{j-1} + 2(l+1) \sum_{j=0}^{\infty} jc_j \rho^{j-1} - 2 \sum_{j=0}^{\infty} jc_j \rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)] \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0 \\ \xRightarrow{\text{ラベル } j \text{ の付け替え}} & \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)jc_{j+1} \rho^j + 2(l+1) \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)c_{j+1} \rho^j - 2 \sum_{j=0}^{\infty} jc_j \rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)] \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0 \\ \Rightarrow & [(j+1)j + 2(l+1)(j+1)]c_{j+1} + [-2j + \rho_0 - 2(l+1)]c_j = 0 \quad (j = 0, 1, 2, \dots) \\ \Rightarrow & c_{j+1} = \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} c_j \quad (j = 0, 1, 2, \dots), \end{aligned} \quad (5.56)$$

という漸化式が得られる。

この漸化式の解は以下で見るとように Laguerre 多項式としてよく知られているのだが、実は数学的な議論に深入りしなくともエネルギー準位を求めることができる。以下ではまずそれを見よう。分子がどの $j = 0, 1, 2, \dots$ についても 0 にならないとすると、 $j \rightarrow \infty$ での係数 c_j の振る舞いが

$$c_{j+1} \simeq \frac{2}{j+1} c_j \quad \Longrightarrow \quad c_j \simeq \frac{2^j}{j!} c_0, \quad (5.57)$$

となるため、

$$v(\rho) \simeq c_0 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2^j}{j!} \rho^j = c_0 e^{2\rho} \quad \Longrightarrow \quad u(\rho) \simeq c_0 \rho^{l+1} e^{\rho}, \quad (5.58)$$

となり、 $u(\rho)$ は $\rho \rightarrow \infty$ で発散してしまう。これでは規格化可能な解にならないから、どこかで漸化式 (5.56) の分子が 0 となる必要がある。そこで、式 (5.56) の分子が初めて 0 となる j を $N-1$ と置こう。つまり N は $c_{N-1} \neq 0$ かつ $c_N = 0$

となるような自然数である。すると、式 (5.56) の分子から

$$2(N+l)-\rho_0=0, \quad (5.59)$$

となる。後の都合のため

$$n:=N+l \quad (\geq l+1), \quad (5.60)$$

と定義すると、

$$\rho_0=2n, \quad (5.61)$$

が規格化可能な波動関数となるための必要十分条件であることがわかる。 n の取り得る範囲は、 $N \geq 1$ より

$$n \geq l+1, \quad (5.62)$$

となる。表 3 に n, l の取り得る範囲を示してある。また、角度方向の議論で $-l \leq m \leq l$ であったことを思い出そう。これら n, l, m には名前が付いており、

水素原子の量子数

n : 主量子数 (principal quantum number),
 l : 方位量子数 (azimuthal quantum number),
 m : 磁気量子数 (magnetic quantum number),

と呼ばれる。図 30 に現れていた n はこの主量子数である。 ρ_0 が量子化されたので、式 (5.48) より κ や E も量子化されていることがわかる。まず κ は

$$\kappa = \kappa_n := \frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{n} = \frac{1}{an}, \quad (5.63)$$

と書ける。ここに現れる定数 a は、水素原子における典型的な電子の広がりを与える定数であり、**Bohr 半径 (Bohr radius)** と呼ばれる

Bohr 半径

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \simeq 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}. \quad (5.64)$$

したがってエネルギーは

$$E = E_n := -\frac{\hbar^2}{2m_e} \kappa_n^2 = -\frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}, \quad (5.65)$$

となる。 E_1 を基準に取ることで、これを

水素原子のエネルギー単位

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}, \quad E_1 = -\frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \simeq -13.6 \text{ eV}, \quad (5.66)$$

と書くことが多い。これを **Bohr の公式 (Bohr's formula)** あるいは **Bohr エネルギー (Bohr energy)** と呼ぶ。エネルギー

E_1 は n の取り得る最小値 $n = 1$ における水素原子のエネルギーである。準位 $n = 1$ は原子核に最も深く束縛された電子のエネルギー準位であり、 $|E_1|$ はこの電子を原子核から引き剥がして無限遠まで持っていくのに必要なエネルギーである。

動径方向の具体的な表式を求める前に、図 30 に現れていたエネルギー準位の縮退について考えよう。式 (5.66) においてエネルギー準位が n だけに依存する形で求めたが、波動関数自体は 3 つの数 n, l, m によって $\psi(r, \theta, \phi) = \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ とラベルされる。これはつまり、異なる l, m の間でエネルギーが同じになる、すなわち**エネルギー準位に縮退がある**ことを意味している。 l, m の取る範囲は

$$l = 0, 1, \dots, n-1, \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l, \quad (5.67)$$

であるから、エネルギー E_n を持つ準位の数

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l 1 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2, \quad (5.68)$$

である。つまり、**水素原子のエネルギー準位は n^2 重に縮退している**ことがわかる。

$\begin{array}{c} l \\ \backslash \\ n \end{array}$	0	1	2	3	...
1	○	×	×	×	...
2	○	○	×	×	...
3	○	○	○	×	...
4	○	○	○	○	...
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	

表 3: 主量子数 n および方位量子数 l の取り得る範囲。磁気量子数 m は $-l \leq m \leq l$ の範囲の整数値を取る。

最後に動径方向の具体的表式を導こう。漸化式 (5.56) の解は数学でよく知られており、**Laguerre 多項式 (Laguerre polynomials)**

$$L_q(x) := \frac{e^x}{q!} \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^q), \quad (5.69)$$

およびそこから作られる **Laguerre 陪多項式 (associated Laguerre polynomials)**

$$L_q^p(x) := (-1)^p \left(\frac{d}{dx} \right)^p L_{p+q}(x) = \frac{(-1)^p}{(p+q)!} \left(\frac{d}{dx} \right)^p \left[e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^{p+q} (e^{-x} x^{p+q}) \right], \quad (5.70)$$

を用いて

$$\begin{aligned} v(\rho) \propto L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) &\implies u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho) \propto \rho^{l+1} e^{-\rho} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) \\ &\implies R(r) = \frac{u(\kappa r)}{r} \propto \frac{1}{r} (\kappa r)^{l+1} e^{-\kappa r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa r), \end{aligned} \quad (5.71)$$

と表すことができる (問 [5.9] 参照)。いくつかの Laguerre 多項式および Laguerre 陪多項式が表 4 および図 31 に示されている。ここで比例記号 $\propto$ を用いたのは規格化定数を考慮していないためである。解 $R(r)$ は n, l でラベルされるので、改めて $R_{nl}(r)$ と呼ぶことにしよう。規格化定数も含めると、

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{2^{2l+2}}{a} \frac{(n-l-1)!}{n^2(n+l)!}} \frac{1}{r} \left(\frac{r}{na} \right)^{l+1} e^{-\frac{r}{na}} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na} \right), \quad (5.72)$$

となることがわかるので (問 [5.10] 参照)、整理して

水素原子の動径方向の解

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l e^{-\frac{r}{na}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right), \quad (5.73)$$

を得る。

$L_0(x) = 1$	$L_0^1(x) = 1$	$L_0^2(x) = 1$	$L_0^3(x) = 1$
$L_1(x) = -x + 1$	$L_1^1(x) = -x + 2$	$L_1^2(x) = -x + 3$	$L_1^3(x) = -x + 4$
$L_2(x) = \frac{1}{2}x^2 - 2x + 1$	$L_2^1(x) = \frac{1}{2}x^2 - 3x + 3$	$L_2^2(x) = \frac{1}{2}x^2 - 4x + 6$	$L_2^3(x) = \frac{1}{2}x^2 - 5x + 10$
$L_3(x) = -\frac{1}{6}x^3 + \frac{3}{2}x^2 - 3x + 1$	$L_3^1(x) = -\frac{1}{6}x^3 + 2x^2 - 6x + 4$	$L_3^2(x) = -\frac{1}{6}x^3 + \frac{5}{2}x^2 - 10x + 10$	$L_3^3(x) = -\frac{1}{6}x^3 + 3x^2 - 15x + 20$

表 4: Laguerre 多項式 $L_q(x)$ および Laguerre 陪多項式 $L_q^p(x)$ 。

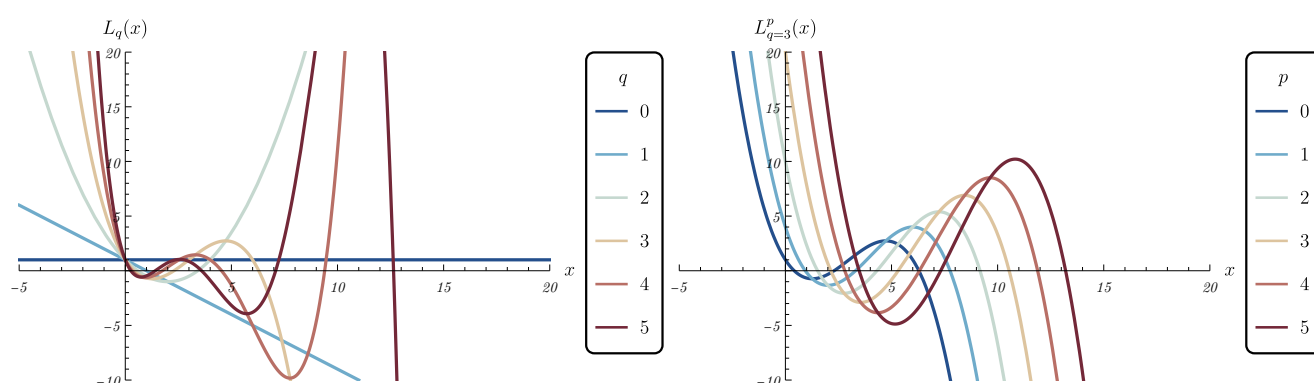


図 31: Laguerre 多項式 $L_q(x)$ (左) および Laguerre 陪多項式 $L_q^p(x)$ (右)。

また、角度方向も合わせると、

水素原子の解

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l e^{-\frac{r}{na}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (5.74)$$

が解となる。いくつかの $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ の挙動を図 32 にプロットする。重要な事実として以下のことがわかる。

水素原子の波動関数の特徴

- r 方向には $N-1 = n-l-1$ 個の節 (= 関数の値が 0 になる部分) が存在する。
- θ 方向には $l-m$ 個の節が存在し、 ϕ 方向に一周すると位相が $2\pi m$ だけ回る。

このうち後者は球面調和関数に由来する角度方向の性質なので、一般の中心力ポテンシャルに共通である。

5.5.3 Lyman 系列・Balmer 系列・Paschen 系列

水素原子があるエネルギー準位にいる場合、本節の取り扱いの中では、その水素原子は永遠にそのエネルギー準位に存在し続ける。しかし、光子を量子的に取り扱くと、エネルギー準位間の遷移 (transition) が起こり、それに伴って特定

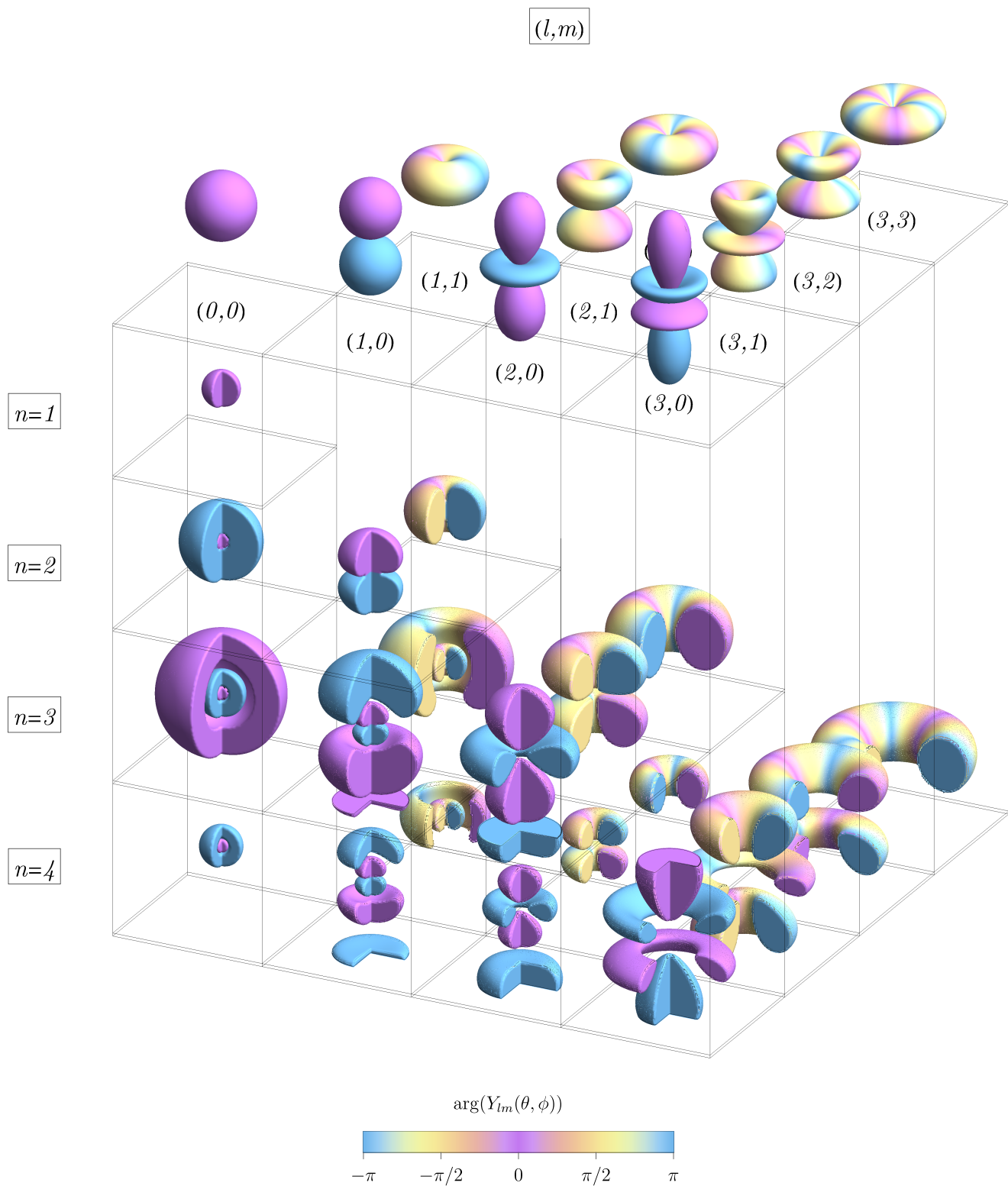


図 32: 水素原子の波動関数 $\psi_{lmn}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ の振る舞い。垂直方向は異なる n 、水平方向は異なる (l, m) (ただし $m \geq 0$ のみ表示) に対応している。波動関数の絶対値が一定以上の領域を塗りつぶしてあり、色は波動関数の位相を示している。また、中の様子が見えるように角度 $-\frac{\pi}{2} < \phi < 0$ の領域を切り取ってある。最上部に角度方向 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ の概形も示してある。

の波長を持つ光子が放出される。前節までの計算で、水素原子の遷移に伴う光の波長が説明できる。光子のエネルギー

を E_γ と書こう。第 1 節で述べたプランクの公式

$$E_\gamma = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \quad (5.75)$$

およびエネルギー保存を考慮すると、準位 (n_i, l_i, m_i) から準位 (n_f, l_f, m_f) への遷移に伴って放出される光子の波長は

$$\begin{aligned} \frac{hc}{\lambda} = (\text{放出された光子のエネルギー}) &= (\text{遷移により水素原子が失ったエネルギー}) = |E_1| \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \\ \Rightarrow \quad \frac{1}{\lambda} &= \mathcal{R} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \end{aligned} \quad (5.76)$$

となる。定数 $\mathcal{R}$ は E_1 と

$$\mathcal{R} = \frac{|E_1|}{hc} = \frac{|E_1|}{2\pi\hbar c} = \frac{m_e}{4\pi\hbar^3 c} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \simeq 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}, \quad (5.77)$$

の関係にあり、**Rydberg 定数 (Rydberg constant)** と呼ばれる。

歴史的に、準位 $n_f = 1$ への遷移は **Lyman 系列 (Lyman series)**、準位 $n_f = 2$ への遷移は **Balmer 系列 (Balmer series)**、準位 $n_f = 3$ への遷移は **Paschen 系列 (Paschen series)** と呼ばれる。図 33 にそれぞれの遷移が示されている。

5.5.4 特殊関数まとめ

本節では様々な特殊関数が登場した。表 5 にそれぞれの登場箇所をまとめてある。

名称	登場箇所	式
Hermite 多項式 (Hermite polynomials)	調和振動子	式 (2.54)
Legendre 多項式 (Legendre polynomials)	3 次元 Schrödinger 方程式 (角度方向)	式 (5.33)
球 Bessel 関数 (spherical Bessel functions)	3 次元 Schrödinger 方程式 (動径方向・無限井戸型ポテンシャル)	式 (5.43)
Laguerre 多項式 (Laguerre polynomials)	水素原子	式 (5.69)

表 5: 量子力学に現れる様々な特殊関数。

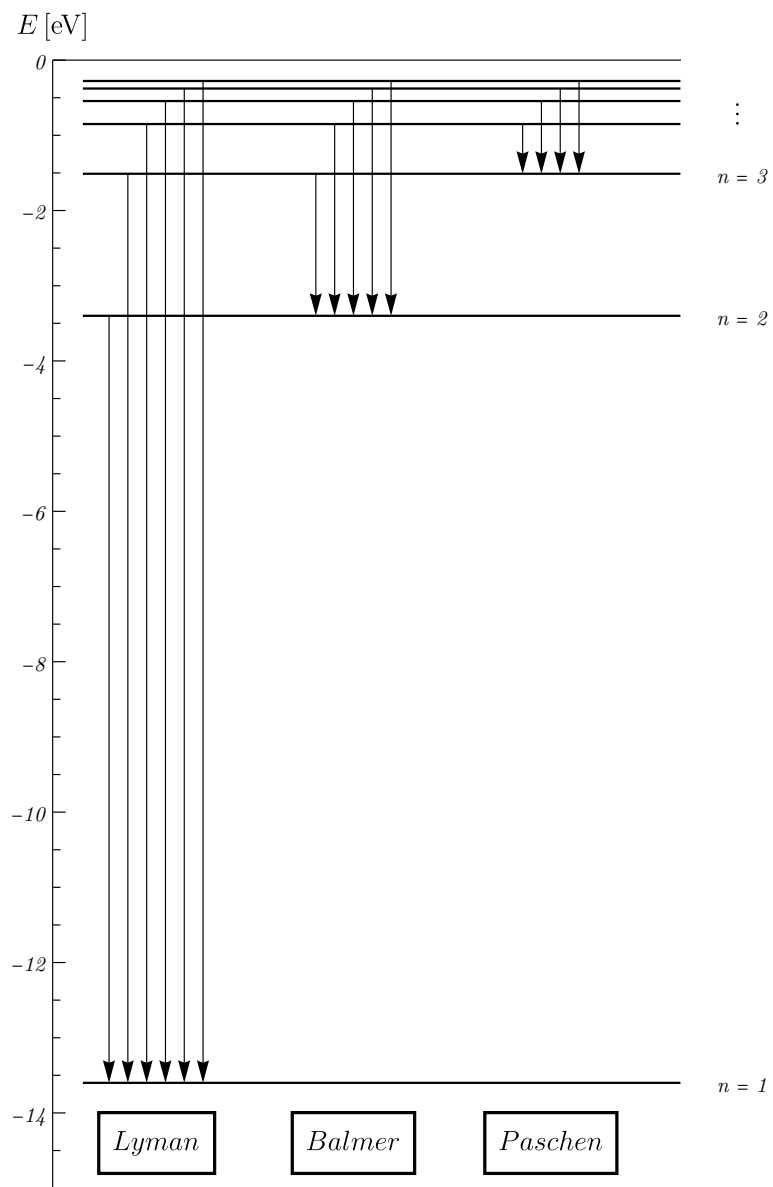


図 33: Lyman, Balmer, Paschen の各系列の遷移。

[問 5.7]

(1) 水素原子の動径方向の Schrödinger 方程式

$$\frac{d^2}{dr^2}R(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}R(r) - \left[\frac{2m_e(V(r) - E)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0, \quad V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r},$$

において $u(r) := rR(r)$ とすることで

$$\frac{d^2}{d\rho^2}u(\rho) = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(\rho), \quad \kappa := \frac{\sqrt{-2m_e E}}{\hbar}, \quad \rho_0 := \frac{m_e e^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa}, \quad \rho := \kappa r,$$

が得られることを示せ。ただしエネルギーの範囲は $E < 0$ とする。

(2) (1) の結果に

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho),$$

を代入することで、 $v(\rho)$ の満たすべき微分方程式

$$\frac{d^2}{d\rho^2}v(\rho) + \frac{2(l+1-\rho)}{\rho} \frac{d}{d\rho}v(\rho) + \frac{\rho_0 - 2(l+1)}{\rho} v(\rho) = 0,$$

を導け。

(3) $v(\rho)$ を

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j,$$

と多項式展開することで、漸化式

$$c_{j+1} = \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} c_j \quad (j = 0, 1, 2, \dots),$$

を導け。また、この漸化式の右辺がある $j = N-1 (\geq 0)$ で 0 となるという、波動関数が発散しないための条件から、 ρ_0, κ, E の量子化条件

$$\rho_0 = 2n, \quad \kappa = \frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{n}, \quad E = -\frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2},$$

を導け。ここで $n := N+l$ である。

(4) 水素原子における電子の典型的な広がりを与える定数である Bohr 半径

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2},$$

を、単位を m として有効数字 2 桁で計算せよ。これは $n=1$ のときの $1/\kappa$ に相当する。計算の際は、微細構造定数

$$\alpha := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137},$$

電子の質量 (を光速 c を用いてエネルギーに換算した)

$$m_e c^2 \simeq 511 \text{ keV} = 5.11 \times 10^5 \text{ eV},$$

電子ボルト eV とジュール J の変換則

$$1 \text{ eV} \simeq 1.602 \times 10^{-19} \text{ J},$$

および換算 Planck 定数と光速

$$\hbar \simeq 1.055 \times 10^{-34} \text{ kg m}^2/\text{s}, \quad c \simeq 2.998 \times 10^8 \text{ m/s},$$

を用いるとよい。

[解 5.7]

(1) 水素原子の動径方向の Schrödinger 方程式

$$\frac{d^2}{dr^2} R(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R(r) - \left[\frac{2m_e(V(r) - E)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0, \quad V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r},$$

に $R(r) = u(r)/r$ を代入し

$$\begin{aligned} & \frac{d^2}{dr^2} \frac{u(r)}{r} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \frac{u(r)}{r} - \left[\frac{2m_e(V(r) - E)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \frac{u(r)}{r} = 0 \\ \Rightarrow & \left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} u(r) - \frac{2}{r^2} \frac{d}{dr} u(r) + \frac{2u(r)}{r^3} \right] + \frac{2}{r} \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} u(r) - \frac{u(r)}{r^2} \right] - \left[\frac{2m_e(V(r) - E)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \frac{u(r)}{r} = 0 \\ \Rightarrow & \frac{d^2}{dr^2} u(r) - \left[\frac{2m_e(V(r) - E)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u(r) = 0 \\ \stackrel{\rho := \kappa r}{\Rightarrow} & \kappa^2 \frac{d^2}{d\rho^2} u(\rho) - \left[\frac{2m_e}{\hbar^2} \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\kappa}{\rho} - E \right) + \kappa^2 \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0 \\ \stackrel{\kappa := \frac{\sqrt{-2m_e E}}{\hbar}}{\Rightarrow} & \frac{d^2}{d\rho^2} u(\rho) - \left[-\frac{1}{\kappa} \frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\rho} + 1 + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0 \\ \stackrel{\rho_0 := \frac{m_e e^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa}}{\Rightarrow} & \frac{d^2}{d\rho^2} u(\rho) = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(\rho), \end{aligned}$$

となるので示された。

(2) (1) の結果に

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho),$$

を代入し、

$$\begin{aligned} & \frac{d^2}{d\rho^2} [\rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho)] = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho) \\ \Rightarrow & (l+1)l\rho^{l-1} e^{-\rho} v(\rho) + \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho) + \rho^{l+1} e^{-\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} v(\rho) \\ & - 2(l+1)\rho^l e^{-\rho} v(\rho) - 2\rho^{l+1} e^{-\rho} \frac{d}{d\rho} v(\rho) + (l+1)\rho^l e^{-\rho} \frac{d}{d\rho} v(\rho) = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho) \\ \Rightarrow & \frac{(l+1)l}{\rho^2} v(\rho) + v(\rho) + \frac{d^2}{d\rho^2} v(\rho) - \frac{2(l+1)}{\rho} v(\rho) - 2 \frac{d}{d\rho} v(\rho) + \frac{l+1}{\rho} \frac{d}{d\rho} v(\rho) = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] v(\rho) \\ \Rightarrow & \frac{d^2}{d\rho^2} v(\rho) - \frac{2(l+1)}{\rho} v(\rho) - 2 \frac{d}{d\rho} v(\rho) + \frac{l+1}{\rho} \frac{d}{d\rho} v(\rho) = -\frac{\rho_0}{\rho} v(\rho) \\ \Rightarrow & \frac{d^2}{d\rho^2} v(\rho) + \frac{2(l+1-\rho)}{\rho} \frac{d}{d\rho} v(\rho) + \frac{\rho_0 - 2(l+1)}{\rho} v(\rho) = 0, \end{aligned}$$

となるので示された。

(3) (2) の結果に多項式展開

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j,$$

を代入し、

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1)c_j \rho^{j-2} + \frac{2(l+1-\rho)}{\rho} \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^{j-1} + \frac{\rho_0 - 2(l+1)}{\rho} \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0 \\ \xRightarrow{\rho \text{ 倍}} & \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1)c_j \rho^{j-1} + 2(l+1) \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^{j-1} - 2 \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)] \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0 \\ \xRightarrow{\text{ラベル } j \text{ の付け替え}} & \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)j c_{j+1} \rho^j + 2(l+1) \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j - 2 \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)] \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0 \\ \Rightarrow & [(j+1)j + 2(l+1)(j+1)]c_{j+1} + [-2j + \rho_0 - 2(l+1)]c_j = 0 \quad (j = 0, 1, 2, \dots) \\ \Rightarrow & c_{j+1} = \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} c_j \quad (j = 0, 1, 2, \dots), \end{aligned}$$

となる。分子に現れる $2(j+l+1) - \rho_0$ が $j = N-1 (\geq 0)$ で 0 となる条件より、 $n := N+l$ として

$$\rho_0 = 2n,$$

が示される。 $\rho_0 := \frac{m_e e^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa}$ から

$$\kappa = \frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{n},$$

が、また $\kappa := \frac{\sqrt{-2m_e E}}{\hbar}$ から

$$E = -\frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2},$$

が示される。

(4) 問題文より

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar c}{e^2} \frac{\hbar c}{m_e c^2} \simeq 137 \times \frac{1.055 \times 10^{-34} \times 2.998 \times 10^8 \text{ kg m}^3/\text{s}^2}{5.11 \times 10^5 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}} \simeq 5.3 \times 10^{-11} \text{ m},$$

となる。

[問 5.8] ([1] Problem 4.13, 4.18 改)

水素原子の波動関数に関して、以下の問いに答えよ。Bohr 半径 a を用いてよい。

(1) 水素原子の動径方向の波動関数 $R_{10}(r), R_{20}(r), R_{21}(r)$ を

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l e^{-\frac{r}{na}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right),$$

を用いて求めよ。ここで Laguerre 多項式および Laguerre 陪多項式は

$$L_q(x) := \frac{e^x}{q!} \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^q), \quad L_q^p(x) := (-1)^p \left(\frac{d}{dx} \right)^p L_{p+q}(x) = \frac{(-1)^p}{(p+q)!} \left(\frac{d}{dx} \right)^p \left[e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^{p+q} (e^{-x} x^{p+q}) \right],$$

で与えられる。

(2) 水素原子の波動関数 $\psi_{200}(r, \theta, \phi)$, $\psi_{211}(r, \theta, \phi)$, $\psi_{210}(r, \theta, \phi)$, $\psi_{21-1}(r, \theta, \phi)$ を

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi),$$

を用いて求めよ。ここで球面調和関数は

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta),$$

で与えられ、Legendre 多項式 $P_l(x)$ および Legendre 陪関数 $P_l^m(x)$ は

$$P_l(x) := \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l, \quad P_l^m(x) := (-1)^m (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dx} \right)^m P_l(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dx} \right)^{l+m} (x^2 - 1)^l,$$

で与えられる。

[解 5.8]

(1) 必要な Laguerre 多項式は

$$L_0^1(x) = 1, \quad L_1^1(x) = -x + 2, \quad L_0^3(x) = 1,$$

である。これらより

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-\frac{r}{a}}, \quad R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2} a^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a} \right) e^{-\frac{r}{2a}}, \quad R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6} a^{3/2}} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}},$$

を得る。

(2) 必要な球面調和関数は

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1\pm 1}(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi},$$

である。これらと (1) の結果を合わせて

$$\begin{aligned} \psi_{200}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{8\pi} a^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a} \right) e^{-\frac{r}{2a}}, \\ \psi_{210}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{32\pi} a^{3/2}} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}} \cos \theta, \quad \psi_{21\pm 1}(r, \theta, \phi) = \mp \frac{1}{\sqrt{64\pi} a^{3/2}} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}} \sin \theta e^{\pm i\phi}, \end{aligned}$$

と求まる。

[問 5.9] 水素原子の動径方向の波動関数について、 $v(\rho)$ の満たす微分方程式

$$\frac{d^2}{d\rho^2} v(\rho) + \frac{2(l+1-\rho)}{\rho} \frac{d}{d\rho} v(\rho) + \frac{\rho_0 - 2(l+1)}{\rho} v(\rho) = 0,$$

の解が Laguerre 陪多項式を用いて

$$v(\rho) \propto L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho),$$

と与えられることを示そう。ここで Laguerre 多項式および Laguerre 陪多項式は

$$L_q(x) := \frac{e^x}{q!} \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^q), \quad L_q^p(x) := (-1)^p \left(\frac{d}{dx} \right)^p L_{p+q}(x) = \frac{(-1)^p}{(p+q)!} \left(\frac{d}{dx} \right)^p \left[e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^{p+q} (e^{-x} x^{p+q}) \right],$$

で与えられる。ただし p, q は 0 以上の整数である。

(1) 恒等式

$$x \frac{d}{dx} (e^{-x} x^q) = -e^{-x} x^{q+1} + q e^{-x} x^q,$$

を示せ。

(2) (1) で導いた式に $\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}$ を作用させることにより、Laguerre 多項式が Laguerre の微分方程式

$$x \frac{d^2}{dx^2} L_q(x) + (1-x) \frac{d}{dx} L_q(x) + q L_q(x) = 0,$$

を満たすことを示せ。計算すべき項は

$$\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} \left[x \frac{d}{dx} (e^{-x} x^q) \right], \quad \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} [-e^{-x} x^{q+1}], \quad \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} [q e^{-x} x^q],$$

であるが、1 項目については $q+1$ 回の微分 $\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}$ のうち何回が x に当たり、何回が $\frac{d}{dx} (e^{-x} x^q)$ に当たるか考えるといふ。同様に 2 項目については

$$\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} [-e^{-x} x^{q+1}] = \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} [-e^{-x} x^q \cdot x]$$

と分解した上で $q+1$ 回の微分 $\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}$ のうち何回が $e^{-x} x^q$ に当たり、何回が x に当たるか考えるとよい。

(3) (2) で導いた式において、まず $q \rightarrow q+p$ とすることで

$$x \frac{d^2}{dx^2} L_{p+q}(x) + (1-x) \frac{d}{dx} L_{p+q}(x) + (p+q) L_{p+q}(x) = 0,$$

を得る。ここに $\frac{d^p}{dx^p}$ を作用させることで、Laguerre 陪多項式

$$L_q^p(x) := (-1)^p \left(\frac{d}{dx} \right)^p L_{p+q}(x),$$

が微分方程式

$$x \frac{d^2}{dx^2} L_q^p(x) + (1+p-x) \frac{d}{dx} L_q^p(x) + q L_q^p(x) = 0,$$

を満たすことを示せ。

(4) (3) で導いた式において、 $p = 2l+1, q = n-l-1, x = 2\rho$ とすると $v(\rho)$ の満たすべき微分方程式に帰着することを示せ。動径方向の波動関数が規格化可能であるという条件より、 $\rho_0 = 2n$ が得られていることに注意すること。

[解 5.9]

(1) 微分を実行し

$$x \frac{d}{dx} (e^{-x} x^q) = x (-e^{-x} x^q + q e^{-x} x^{q-1}) = -e^{-x} x^{q+1} + q e^{-x} x^q,$$

となるので示された。

(2) (1) で得られた式の左辺に $\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}$ を作用させると

$$\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} \left[x \frac{d}{dx} (e^{-x} x^q) \right] = (q+1) \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} (e^{-x} x^q) + x \frac{d^{q+2}}{dx^{q+2}} (e^{-x} x^q),$$

であり、右辺に $\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}$ を作用させると

$$\begin{aligned} \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} [-e^{-x} x^{q+1} + q e^{-x} x^q] &= \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} (-e^{-x} x^q \cdot x) + q \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} (e^{-x} x^q) \\ &= -x \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} (e^{-x} x^q) - (q+1) \frac{d^q}{dx^q} (e^{-x} x^q) + q \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} (e^{-x} x^q), \end{aligned}$$

であるから、整理すると

$$x \frac{d^{q+2}}{dx^{q+2}} (e^{-x} x^q) + (x+1) \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}} (e^{-x} x^q) + (q+1) \frac{d^q}{dx^q} (e^{-x} x^q) = 0,$$

となる。これを Laguerre 多項式と結び付けるために

$$\frac{d^q}{dx^q} (e^{-x} x^q) = \frac{q!}{e^x} L_q(x),$$

を代入すると

$$x \frac{d^2}{dx^2} \left[\frac{q!}{e^x} L_q(x) \right] + (x+1) \frac{d}{dx} \left[\frac{q!}{e^x} L_q(x) \right] + (q+1) \left[\frac{q!}{e^x} L_q(x) \right] = 0,$$

を得るので、整理して

$$x \frac{d^2}{dx^2} L_q(x) + (1-x) \frac{d}{dx} L_q(x) + q L_q(x) = 0,$$

を得る。

(3) (2) で得られた式に $q \rightarrow q+p$ としてから $\frac{d^p}{dx^p}$ を作用させると、1 項目は

$$\frac{d^p}{dx^p} \left[x \frac{d^2}{dx^2} L_{q+p}(x) \right] = (-1)^p \left[p \frac{d}{dx} L_q^p(x) + x \frac{d^2}{dx^2} L_q^p(x) \right],$$

2 項目は

$$\frac{d^p}{dx^p} \left[(1-x) \frac{d}{dx} L_{q+p}(x) \right] = (-1)^p \left[-p L_q^p(x) + (1-x) \frac{d}{dx} L_q^p(x) \right],$$

3 項目は

$$\frac{d^p}{dx^p} [(q+p) L_{q+p}(x)] = (-1)^p (q+p) L_q^p(x),$$

であるから、まとめると

$$x \frac{d^2}{dx^2} L_q^p(x) + (1+p-x) \frac{d}{dx} L_q^p(x) + q L_q^p(x) = 0,$$

を得る。

(4) $p = 2l+1, q = n-l-1, x = 2\rho$ と置くと、 $\frac{d}{dx} = \frac{1}{2} \frac{d}{d\rho}$ に注意して

$$\frac{d^2}{d\rho^2} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) + \frac{2(l+1-\rho)}{\rho} \frac{d}{d\rho} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) + \frac{2(n-l-1)}{\rho} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) = 0,$$

を得るが、これはまさしく $v(\rho)$ の満たすべき微分方程式である。

[問 5.10] 水素原子の動径方向の解

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l e^{-\frac{r}{na}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right),$$

における規格化定数を求めよう。ここで Laguerre 多項式および Laguerre 陪多項式は

$$L_q(x) := \frac{e^x}{q!} \left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x} x^q), \quad L_q^p(x) := (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_{p+q}(x) = \frac{(-1)^p}{(p+q)!} \left(\frac{d}{dx}\right)^p \left[e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^{p+q} (e^{-x} x^{p+q}) \right],$$

で与えられる。ただし p, q は 0 以上の整数である。

(1) Laguerre 陪多項式の直交性

Laguerre 陪多項式の直交性

$$\int_0^\infty dx e^{-x} x^p L_{q_1}^p(x) L_{q_2}^p(x) = 0 \quad (q_1 \neq q_2),$$

を示そう。まず、前問の Laguerre 陪関数に対する微分方程式を用いることで

$$\frac{d}{dx} \left[e^{-x} x^{p+1} \frac{d}{dx} L_{q_1}^p(x) \right] = -q_1 e^{-x} x^p L_{q_1}^p(x),$$

を示せ。次に、この式および $q_1 \rightarrow q_2$ とした式

$$\frac{d}{dx} \left[e^{-x} x^{p+1} \frac{d}{dx} L_{q_2}^p(x) \right] = -q_2 e^{-x} x^p L_{q_2}^p(x),$$

を考える。前者の式に $L_{q_2}^p(x)$ を掛けたものと、後者の式に $L_{q_1}^p(x)$ を掛けたものの差を取り、 $0 \leq x < \infty$ で積分することで

$$0 = (q_2 - q_1) \int_0^\infty dx e^{-x} x^p L_{q_1}^p(x) L_{q_2}^p(x),$$

となることを示し、題意の式を示せ。ただし p, q_1, q_2 は 0 以上の整数とする。

(2) Laguerre 陪多項式の規格化

$$\int_0^\infty dx e^{-x} x^p \left(L_q^p(x) \right)^2 = \frac{(p+q)!}{q!},$$

を示そう。まず

$$L_q^p(x) := (-1)^p \left(\frac{d}{dx} \right)^p L_{p+q}(x) = \frac{(-1)^p}{(p+q)!} \left(\frac{d}{dx} \right)^p \left[e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^{p+q} (e^{-x} x^{p+q}) \right],$$

から始めて

$$L_q^p(x) = \frac{e^x x^{-p}}{q!} \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^{p+q}),$$

を示せ。次に、 $\left(\frac{d}{dx} \right)^q L_q^p(x) = (-1)^q q!$ であることを示せ。最後に、これらを用いて

$$\int_0^\infty dx e^{-x} x^p \left(L_q^p(x) \right)^2 = \frac{1}{q!} \int_0^\infty dx L_q^p(x) \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^{p+q}) = \frac{(-1)^q}{q!} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{p+q} \left(\frac{d}{dx} \right)^q L_q^p(x) = \frac{(p+q)!}{q!},$$

を示せ。ただし p, q は 0 以上の整数とする。

(3) 動径方向の波動関数を

$$R_{nl}(r) = \frac{A}{r} \left(\frac{r}{na} \right)^{l+1} e^{-\frac{r}{na}} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na} \right),$$

と書こう。ただし規格化定数 A は正の実数とする。 A を求めるには

$$\int_0^\infty dr r^2 [R_{nl}(r)]^2 \propto \int_0^\infty dr r^{2l+2} e^{-\frac{2r}{na}} \left[L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na} \right) \right]^2,$$

を計算する必要があるが、 r^{2l+1} ではなく r^{2l+2} が現れるため、(2) の式において $p = 2l+1$ としたものを直接使うことはできない。そこで、まず Laguerre 陪多項式の 3 項間漸化式

$$(q+1)L_{q+1}^p(x) - (p+2q+1-x)L_q^p(x) + (p+q)L_{q-1}^p(x) = 0,$$

を示せ。ただし q は自然数である。次にこれを

$$\int_0^\infty dx e^{-x} x^{p+1} \left(L_q^p(x) \right)^2 = \int_0^\infty dx e^{-x} x^p L_q^p(x) \cdot x L_q^p(x)$$

に適用し、Laguerre 陪多項式の規格直交性を適用して A を決定せよ。

[解 5.10]

(1) 計算すると

$$\frac{d}{dx} \left[e^{-x} x^{p+1} \frac{d}{dx} L_{q_1}^p(x) \right] = e^{-x} x^p \left[x \frac{d^2}{dx^2} L_{q_1}^p(x) + (p+1-x) \frac{d}{dx} L_{q_1}^p(x) \right] = -q_1 e^{-x} x^p L_{q_1}^p(x),$$

となる。最後の等式には Laguerre の陪微分方程式を用いた。この式および $q_1 \rightarrow q_2$ とした式

$$\frac{d}{dx} \left[e^{-x} x^{p+1} \frac{d}{dx} L_{q_2}^p(x) \right] = -q_2 e^{-x} x^p L_{q_2}^p(x),$$

を考え、前者の式に $L_{q_2}^p(x)$ を掛けたものと、後者の式に $L_{q_1}^p(x)$ を掛けたものとの差を取り、 $0 \leq x < \infty$ で積分す

る。左辺は

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty dx \left[L_{q_2}^p(x) \frac{d}{dx} \left[e^{-x} x^{p+1} \frac{d}{dx} L_{q_1}^p(x) \right] - L_{q_1}^p(x) \frac{d}{dx} \left[e^{-x} x^{p+1} \frac{d}{dx} L_{q_2}^p(x) \right] \right] \\ &= \int_0^\infty dx \left[-e^{-x} x^{p+1} \frac{d}{dx} L_{q_2}^p(x) \frac{d}{dx} L_{q_1}^p(x) + e^{-x} x^{p+1} \frac{d}{dx} L_{q_1}^p(x) \frac{d}{dx} L_{q_2}^p(x) \right] \\ &= 0, \end{aligned}$$

であり、右辺は

$$(q_2 - q_1) \int_0^\infty dx e^{-x} x^p L_{q_1}^p(x) L_{q_2}^p(x),$$

であるから、題意の式が示された。ここで左辺の部分積分で表面項が消える理由は、Laguerre 陪多項式が x の多項式であること、および $x=0$ については x^{p+1} が、 $x \rightarrow \infty$ については e^{-x} があることによる。

(2) Laguerre 倍多項式の定義より

$$\begin{aligned} L_q^p(x) &= \frac{(-1)^p}{(p+q)!} \left(\frac{d}{dx} \right)^p \left[e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^{p+q} (e^{-x} x^{p+q}) \right] \\ &= \frac{(-1)^p}{(p+q)!} \left(\frac{d}{dx} \right)^p \left[e^x \sum_{s=0}^{p+q} \frac{(p+q)!}{s!(p+q-s)!} \left(\frac{d}{dx} \right)^s e^{-x} \left(\frac{d}{dx} \right)^{p+q-s} x^{p+q} \right] \\ &= \frac{(-1)^p}{(p+q)!} \left(\frac{d}{dx} \right)^p \left[e^x \sum_{s=0}^{p+q} \frac{(p+q)!}{s!(p+q-s)!} (-1)^s e^{-x} \frac{(p+q)!}{s!} x^s \right] \\ &= \frac{(-1)^p}{(p+q)!} \left(\frac{d}{dx} \right)^p \left[\sum_{s=0}^{p+q} \frac{(p+q)!^2}{s!^2(p+q-s)!} (-1)^s x^s \right] \\ &= \frac{1}{(p+q)!} \sum_{s=p}^{p+q} \frac{(p+q)!^2}{s!^2(p+q-s)!} (-1)^{p+s} \left(\frac{d}{dx} \right)^p x^s \\ &= \frac{1}{(p+q)!} \sum_{s=p}^{p+q} \frac{(p+q)!^2}{s!^2(p+q-s)!} (-1)^{p+s} \frac{s!}{(s-p)!} x^{s-p} \\ &= \sum_{s=p}^{p+q} \frac{(p+q)!}{s!(s-p)!(p+q-s)!} (-1)^{p+s} x^{s-p} \\ &= \sum_{s=0}^q \frac{(p+q)!}{(p+s)!s!(q-s)!} (-1)^{s+2p} x^s \\ &= \sum_{s=0}^q \frac{(p+q)!}{(p+s)!s!(q-s)!} (-1)^s x^s, \end{aligned}$$

であり、一方

$$\begin{aligned} \frac{e^x x^{-p}}{q!} \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^{p+q}) &= \frac{e^x x^{-p}}{q!} \sum_{s=0}^q \frac{q!}{s!(q-s)!} \left(\frac{d}{dx} \right)^s e^{-x} \left(\frac{d}{dx} \right)^{q-s} x^{p+q} \\ &= \frac{e^x x^{-p}}{q!} \sum_{s=0}^q \frac{q!}{s!(q-s)!} (-1)^s e^{-x} \frac{(p+q)!}{(p+s)!} x^{p+s} \\ &= \sum_{s=0}^q \frac{(p+q)!}{(p+s)!s!(q-s)!} (-1)^s x^s, \end{aligned}$$

であるから、

$$L_q^p(x) = \frac{e^x x^{-p}}{q!} \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^{p+q}),$$

が示される。この式の右辺において、 $e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^{p+q})$ は x の $(p+q)$ 次の多項式であるから、 $L_q^p(x)$ は x の q 次の多項式である。よって $\left(\frac{d}{dx} \right)^q L_q^p(x)$ に寄与する部分は $L_q^p(x)$ のうち x の最高次である x^q の項のみであり、

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dx} \right)^q L_q^p(x) &= \left(\frac{d}{dx} \right)^q \left[\frac{e^x x^{-p}}{q!} \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^{p+q}) \right] \\ &\stackrel{\text{微分が } e^{-x} \text{ にのみ当たる項が最高次を与える}}{=} \left(\frac{d}{dx} \right)^q \left[\frac{e^x x^{-p}}{q!} (-1)^q e^{-x} x^{p+q} \right] = (-1)^q, \end{aligned}$$

が得られる。これらを用いて、

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty dx e^{-x} x^p (L_q^p(x))^2 \\ &\stackrel{\text{片方の } L_q^p(x) \text{ に } L_q^p(x) = \frac{e^x x^{-p}}{q!} \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^{p+q}) \text{ を適用}}{=} \frac{1}{q!} \int_0^\infty dx L_q^p(x) \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^{p+q}) \\ &\stackrel{\text{部分積分}}{=} \frac{(-1)^q}{q!} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{p+q} \left(\frac{d}{dx} \right)^q L_q^p(x) \\ &\stackrel{\left(\frac{d}{dx} \right)^q L_q^p(x) = (-1)^q}{=} \frac{1}{q!} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{p+q} \\ &= \frac{(p+q)!}{q!}, \end{aligned}$$

となる。

(3) Laguerre 陪多項式の 3 項間漸化式

$$(q+1)L_{q+1}^p(x) - (p+2q+1-x)L_q^p(x) + (p+q)L_{q-1}^p(x) = 0,$$

を示す。ただし p は 0 以上の整数、 q は自然数である。まず $p=0$ の場合に対応する

$$(q+1)L_{q+1}(x) - (2q+1-x)L_q(x) + qL_{q-1}(x) = 0,$$

が成立することを示す。 $L_q(x)$ の定義より

$$e^x \frac{d}{dx} (e^{-x} L_q(x)) = \frac{e^x}{q!} \left(\frac{d}{dx} \right)^{q+1} (e^{-x} x^q),$$

であるが、左辺は

$$e^x \frac{d}{dx} (e^{-x} L_q(x)) = \frac{d}{dx} L_q(x) - L_q(x),$$

右辺は

$$\begin{aligned} \frac{e^x}{q!} \left(\frac{d}{dx} \right)^{q+1} (e^{-x} x^q) &= \frac{e^x}{q!} \left(\frac{d}{dx} \right)^q (-e^{-x} x^q + q e^{-x} x^{q-1}) \\ &= -L_q(x) + \frac{e^x}{(q-1)!} \left(\frac{d}{dx} \right)^q e^{-x} x^{q-1} = -L_q(x) + \frac{d}{dx} L_{q-1}(x) - L_{q-1}(x), \end{aligned}$$

であるから、

$$\frac{d}{dx}L_q(x) = \frac{d}{dx}L_{q-1}(x) - L_{q-1}(x),$$

となり、したがって

$$\frac{d}{dx}L_q(x) = -L_{q-1}(x) - L_{q-2}(x) - \cdots - L_0(x) + \frac{d}{dx}L_0(x) = -\sum_{s=0}^{q-1} L_s(x),$$

となる。これを用いると、

$$\begin{aligned} (q+1)L_{q+1}(x) &= (q+1)\frac{e^x}{(q+1)!}\left(\frac{d}{dx}\right)^{q+1}(e^{-x}x^{q+1}) \\ &= \frac{e^x}{q!}\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{q+1}(e^{-x}x^q) \cdot x + (q+1)\left(\frac{d}{dx}\right)^q(e^{-x}x^q)\right] \\ &= \frac{e^x}{q!}\left(\frac{d}{dx}\right)^{q+1}(e^{-x}x^q) \cdot x + \frac{e^x}{q!}(q+1)\left(\frac{d}{dx}\right)^q(e^{-x}x^q) \\ &= x\frac{d}{dx}L_q(x) - xL_q(x) + (q+1)L_q(x) \\ &= x\frac{d}{dx}L_q(x) + (q+1-x)L_q(x) \\ &= -x\sum_{s=0}^{q-1}L_s(x) + (q+1-x)L_q(x), \end{aligned}$$

であるから、 $q \geq 2$ の場合は $q \rightarrow q-1$ としたものの差を取って 3 項間漸化式

$$\begin{aligned} (q+1)L_{q+1}(x) - qL_q(x) &= -xL_{q-1}(x) + (q+1-x)L_q(x) - (q-x)L_{q-1}(x) \\ \Rightarrow (q+1)L_{q+1}(x) &= (2q+1-x)L_q(x) - qL_{q-1}(x), \end{aligned}$$

が得られる。 $q=1$ の場合は $2L_2(x) = (3-x)L_1(x) - L_0(x)$ は確かに成立していることがわかる。次に $L_q^p(x)$ に対する 3 項間漸化式であるが、帰納法を用いる。ある 0 以上の整数 p に対して

$$(q+1)L_{q+1}^p(x) - (p+2q+1-x)L_q^p(x) + (p+q)L_{q-1}^p(x) = 0,$$

が任意の $q \geq 1$ で成立すると仮定する。このとき、 $q \geq 2$ に対して

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}\left[(q+1)L_{q+1}^p(x) - (p+2q+1-x)L_q^p(x) + (p+q)L_{q-1}^p(x)\right] &= 0, \\ \Rightarrow -(q+1)L_q^{p+1}(x) + (p+2q+1-x)L_{q-1}^{p+1}(x) + L_q^p(x) - (p+q)L_{q-2}^{p+1}(x) &= 0, \end{aligned}$$

であるが、ここに

$$\begin{aligned} L_q^{p+1}(x) &= \frac{e^x x^{-p-1}}{q!}\left(\frac{d}{dx}\right)^q(e^{-x}x^{p+q} \cdot x) \\ &= \frac{e^x x^{-p-1}}{q!}\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^q(e^{-x}x^{p+q}) \cdot x + q\left(\frac{d}{dx}\right)^{q-1}(e^{-x}x^{p+q})\right] \\ &= L_p^q(x) + L_{q-1}^{p+1}(x), \end{aligned}$$

から従う $L_q^p(x) = L_q^{p+1}(x) - L_{q-1}^{p+1}(x)$ を用いると、

$$-qL_q^{p+1}(x) + (p+2q-x)L_{q-1}^{p+1}(x) - (p+q)L_{q-2}^{p+1}(x) = 0,$$

が $q \geq 2$ に対し成立し、したがって

$$-(q+1)L_{q+1}^{p+1}(x) + (p+2q+2-x)L_q^{p+1}(x) - (p+q+1)L_{q-1}^{p+1}(x) = 0,$$

が $q \geq 1$ に対し成立する。また $p=0$ の場合の成立は先に示した通りである。したがって帰納法より 3 項間漸化式が示され、よって $q \geq 1$ に対し

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{p+1} (L_q^p(x))^2 &= \int_0^\infty dx e^{-x} x^p L_q^p(x) \cdot x L_q^p(x) \\ &= \int_0^\infty dx e^{-x} x^p L_q^p(x) [-(q+1)L_{q+1}^p(x) + (p+2q+1)L_q^p(x) - (p+q)L_{q-1}^p(x)] \\ &= (p+2q+1) \int_0^\infty dx e^{-x} x^p (L_q^p(x))^2 \\ &= \frac{(p+2q+1)(p+q)!}{q!}, \end{aligned}$$

となる。ここで Laguerre 陪多項式の規格直交性を用いた。また $q=0$ の場合の成立は $L_0^p(x) = 1$ より自明に成立する。規格化定数 A は、上式において $q = n-l-1$, $p = 2l+1$ としたものをを用いることで

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty dr r^2 [R_{nl}(r)]^2 \\ &= \frac{A^2}{(na)^{2l+2}} \int_0^\infty dr r^{2l+2} e^{-\frac{2r}{na}} \left[L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na} \right) \right]^2 \\ &= \frac{A^2}{(na)^{2l+2}} \left(\frac{na}{2} \right)^{2l+3} \int_0^\infty dx x^{2l+2} e^{-x} \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(x) \right]^2 \\ &= \frac{A^2}{(na)^{2l+2}} \left(\frac{na}{2} \right)^{2l+3} \frac{(2n)(n+l)!}{(n-l-1)!} \\ &= A^2 \frac{a}{2^{2l+2}} \frac{n^2(n+l)!}{(n-l-1)!}, \end{aligned}$$

となるので、

$$A = \sqrt{\frac{2^{2l+2}}{a} \frac{(n-l-1)!}{n^2(n+l)!}},$$

となり、水素原子の動径方向の解

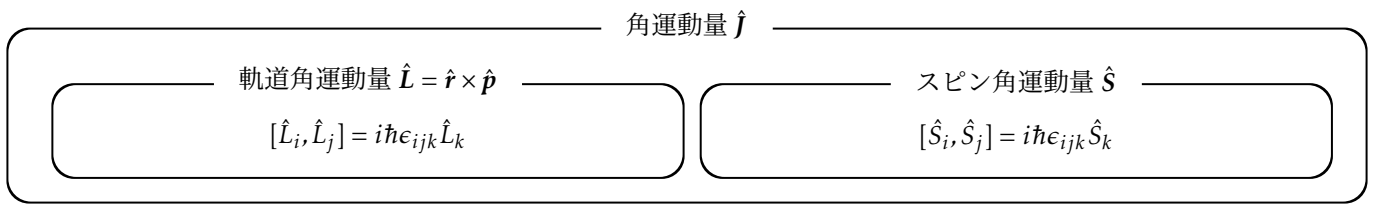
$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \left(\frac{2r}{na} \right)^l e^{-\frac{r}{na}} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na} \right),$$

が得られる。

6. 角運動量

本節では、まず球対称ポテンシャルの下で 3 次元 Schrödinger 方程式の角度方向として登場した球面調和関数について、角運動量演算子の観点から再考する。次に、この角運動量演算子と同じ代数関係を満たす演算子としてスピンを導入する。その後、角運動量の合成について議論し、最後にスピンを含めて水素原子を再考する。

スピンは電子を始めとする粒子が持つ内部自由度である。これは一言で言えば、「粒子がある位置に観測される確率を与える波動関数」だけでは現実の系は記述できず、「粒子がある位置に、ある内部自由度の状態として観測される確率を与える波動関数」を考慮しなければならないことを意味している。Hilbert 空間の言葉で言えば、空間的な自由度を記述する Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\text{space,3d}} := \{|x, y, z\rangle\}$ だけでは粒子の記述には不十分で、これとは別の、内部自由度を記述するための別の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ を用意して、それらを合わせた $\mathcal{H}_{\text{total}} = \mathcal{H}_{\text{space,3d}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}$ を考えなければならないことを意味している。スピンは角運動量の一様であるが、内部自由度でない通常の角運動量と区別するために、それぞれスピン角運動量および軌道角運動量と呼ぶことが多い。



6.1 角運動量代数

本小節では、第 5 節で登場した球面調和関数を角運動量演算子の観点から再考する。その理由を図 34 に示す。

我々は第 2.3 節で調和振動子を取り扱った。その際、1 次元 Schrödinger 方程式を微分方程式として解くことで、無限遠方で発散しない解として波動関数および対応するエネルギー準位を得た。第 4 節では、これらの波動関数とエネルギー準位は演算子の交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ の帰結として容易に理解できることを見た。実は、3 次元 Schrödinger 方程式の角度方向も似た状況になっている。我々は第 5 節において、3 次元 Schrödinger 方程式を微分方程式として解くことで、角度方向の解として方位量子数 l と磁気量子数 m で指定される球面調和関数を得た。その際、定数 $l(l+1), m^2$ の由来や m の取る範囲 $m = -l, -(l-1), \dots, (l-1), l$ については所与としていた。以下では、これらが角運動量演算子の交換関係から容易に理解できることを見る。

角運動量演算子 まず復習として、(球対称ポテンシャルの下とは限らない)3 次元 Schrödinger 方程式において、位置演算子 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ および運動量演算子 $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ が導入されたことを思い出そう。それらの間の交換関係は

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \quad [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar, \quad (6.1)$$

であり、その他の交換関係は全て 0 である。ここで、古典力学における角運動量

$$\mathbf{L} := \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}, \quad (6.2)$$

を量子力学にも拡張し、**角運動量演算子**を次のように導入する

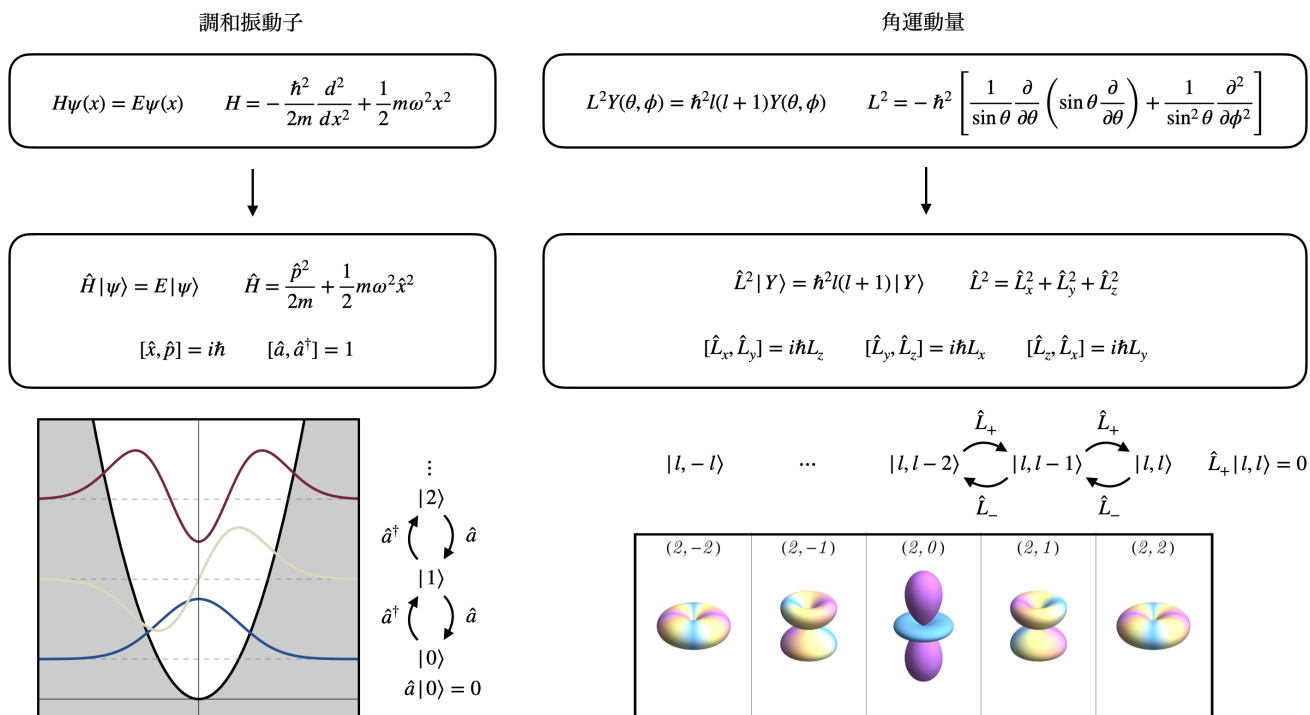


図 34: 球面調和関数を角運動量演算子の観点から見直す動機。調和振動子においては、生成消滅演算子 $a, a^\dagger$ を導入することで、各エネルギー準位をこれら演算子による上げ下げとして理解できた。球対称ポテンシャルの下での 3 次元 Schrödinger 方程式においては、磁気量子数 m の違いは昇降演算子 $\hat{L}_+, \hat{L}_-$ による上げ下げとして理解できる。また、方位量子数 l は角運動量の二乗 $\hat{L}^2$ の固有値を特徴付ける量として理解できる。

角運動量演算子

$$\hat{\mathbf{L}} := \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix}. \quad (6.3)$$

これらは Hermite 演算子である。実際、

$$\hat{L}_x^\dagger = \hat{p}_z^\dagger \hat{y}^\dagger - \hat{p}_y^\dagger \hat{z}^\dagger \stackrel{\text{Hermite 性}}{=} \hat{p}_z \hat{y} - \hat{p}_y \hat{z} \stackrel{[\hat{y}, \hat{p}_z]=0, [\hat{z}, \hat{p}_y]=0}{=} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \hat{L}_x, \quad (6.4)$$

より $\hat{L}_x$ は Hermite であり、 $\hat{L}_y, \hat{L}_z$ についても同様である。角運動量演算子の間に成り立つ交換関係は以下のようになる。
例えば

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z], \quad (6.5)$$

であるが、右辺のそれぞれの項は

$$[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] = \hat{z}[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{p}_x] + [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x = 0 + [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x = (\hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}] + [\hat{y}, \hat{z}]\hat{p}_z)\hat{p}_x = -i\hbar \hat{y}\hat{p}_x, \quad (6.6)$$

$$[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] = \hat{x}[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{p}_z] + [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}]\hat{p}_z = 0 + 0 = 0, \quad (6.7)$$

$$[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] = \hat{z}[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}]\hat{p}_x = 0 + 0 = 0, \quad (6.8)$$

$$[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] = \hat{x}[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_z] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}]\hat{p}_z = \hat{x}(\hat{z}[\hat{p}_y, \hat{p}_z] + [\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y) = i\hbar \hat{x}\hat{p}_y, \quad (6.9)$$

であるから、

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar\hat{L}_z, \quad (6.10)$$

となる。他についても同様に計算することで、

角運動量の交換関係

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = -[\hat{L}_y, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_z, \quad (6.11)$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = -[\hat{L}_z, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_x, \quad (6.12)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = -[\hat{L}_x, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_y, \quad (6.13)$$

を得る。ここで**角運動量の二乗** $\hat{L}^2$ を

$$\hat{L}^2 := \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \quad (6.14)$$

で定義しよう。この演算子は $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ のいずれとも交換する

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0, \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0, \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0. \quad (6.15)$$

実際、例えば

$$\begin{aligned} [\hat{L}^2, \hat{L}_x] &= [\hat{L}_x^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] \\ &= 0 + (\hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x]\hat{L}_y) + (\hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_z) \\ &= -i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z - i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y + i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y + i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z \\ &= 0, \end{aligned} \quad (6.16)$$

であり、 $\hat{L}_y, \hat{L}_z$ についても同様である。式 (6.15) を 3 成分まとめて

$$[\hat{L}^2, \hat{\mathbf{L}}] = 0, \quad (6.17)$$

と書くこともある。

同時固有状態 第 3.10 節の内容を思い出すと、交換する Hermite 演算子については同時固有状態を取ることが可能であった。今の場合、演算子 $\hat{L}^2, \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ のうち $\hat{L}^2$ は他の全ての演算子と交換する。しかし $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ はお互いに交換しないため、交換する Hermite 演算子の数は最大で 2 個である (図 35)。慣習的に交換する演算子を $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ とすることが多いため、本ノートもそれに従う。 $\hat{L}^2$ の固有値を λ 、 $\hat{L}_z$ の固有値を μ とし、規格化された同時固有状態を $|\lambda, \mu\rangle$ と記すと

$$\hat{L}^2|\lambda, \mu\rangle = \lambda|\lambda, \mu\rangle, \quad \hat{L}_z|\lambda, \mu\rangle = \mu|\lambda, \mu\rangle, \quad (6.18)$$

となる。

$\hat{L}^2, \hat{L}_z$ の同時固有状態に対して $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ に対応する物理量を測定すると、 $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ が $\hat{L}_z$ と交換しないことから、測定値は分散を持つ。分散の下限を不確定性関係 (3.69) を用いて見積もることができる。任意の状態 $|\psi\rangle$ に対し、 $\Delta\hat{L}_x := \hat{L}_x - \langle\psi|\hat{L}_x|\psi\rangle$, $\Delta\hat{L}_y := \hat{L}_y - \langle\psi|\hat{L}_y|\psi\rangle$ の分散 $\sigma_{L_x}^2 := \langle\psi|(\Delta\hat{L}_x)^2|\psi\rangle$, $\sigma_{L_y}^2 := \langle\psi|(\Delta\hat{L}_y)^2|\psi\rangle$ は

$$\sigma_{L_x}^2 \sigma_{L_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle\psi|[\hat{L}_x, \hat{L}_y]|\psi\rangle \right)^2 = \frac{\hbar^2}{4} \langle\psi|\hat{L}_z|\psi\rangle^2 \quad \Rightarrow \quad \sigma_{L_x} \sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2} |\langle\psi|\hat{L}_z|\psi\rangle|, \quad (6.19)$$

を満たすから、特に $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ の同時固有状態 $|\lambda, \mu\rangle$ に対しては

$$\sigma_{L_x}^2 \sigma_{L_y}^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \mu^2 \quad \Rightarrow \quad \sigma_{L_x} \sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2} |\mu|, \quad (6.20)$$

が成り立つ。

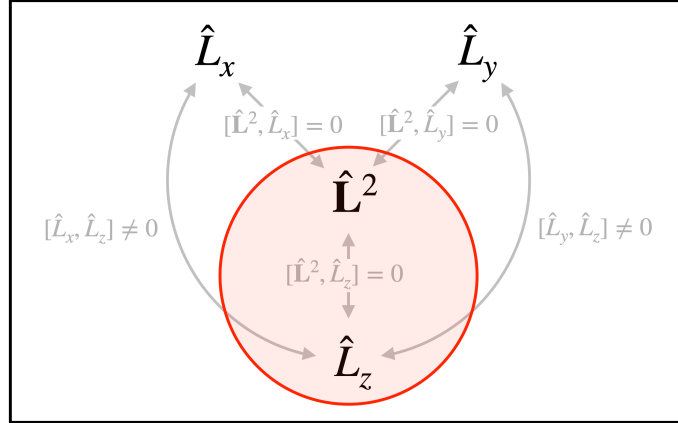


図 35: 角運動量代数における交換する Hermite 演算子の組。演算子 $\hat{L}^2, \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ のうち $\hat{L}^2$ は他の全ての演算子と交換するが、 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ はお互いに交換しないため、交換する Hermite 演算子の数は最大で 2 個となる。

昇降演算子 演算子 $\hat{L}_z$ については、固有値 μ を変化させる**昇降演算子 (ladder operator)** $\hat{L}_\pm$ を $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ を用いて構成することができる

昇降演算子

$$\hat{L}_\pm := \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y. \quad (6.21)$$

これらが $\hat{L}_z$ の固有値を変化させることは以下のようにしてわかる。 $\hat{L}_z$ と $\hat{L}_\pm$ の交換関係は

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \pm i[\hat{L}_z, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_y \pm i(-i\hbar\hat{L}_x) = \pm\hbar(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y) = \pm\hbar\hat{L}_\pm, \quad (6.22)$$

であるから、

$$\hat{L}_z(\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle) = (\hat{L}_\pm\hat{L}_z \pm \hbar\hat{L}_\pm)|\lambda, \mu\rangle = (\mu\hat{L}_\pm \pm \hbar\hat{L}_\pm)|\lambda, \mu\rangle = (\mu \pm \hbar)(\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle), \quad (6.23)$$

であり、 $\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle$ は $\hat{L}_z$ の固有値 $\mu \pm \hbar$ を持つ。また、 $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_\pm$ の交換関係は

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = [\hat{L}^2, \hat{L}_x] \pm i[\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0, \quad (6.24)$$

であるから、

$$\hat{L}^2(\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle) = \hat{L}_\pm\hat{L}^2|\lambda, \mu\rangle = \lambda(\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle), \quad (6.25)$$

であり、 $\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle$ は $|\lambda, \mu\rangle$ と同じ $\hat{L}^2$ の固有値 λ を持つ。よって $\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle = (\text{定数}) \times |\lambda, \mu \pm \hbar\rangle$ であることがわかる。 $\hat{L}_\pm$ が昇降演算子と呼ばれる理由は、 $\hat{L}_z$ の固有値を $\hbar$ だけ上げ増減させる性質による。

さて、 $\hat{L}_\pm$ により $\hat{L}_z$ の固有値が増減することがわかったが、では $\hat{L}_\pm$ を作用させ続けることで $\hat{L}_z$ の固有値は正の無限

大あるいは負の無限大になるのだろうか。実はそれは不可能である。実際、

$$\langle \lambda, \mu | \hat{L}^2 | \lambda, \mu \rangle = \langle \lambda, \mu | (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2) | \lambda, \mu \rangle, \quad (6.26)$$

において $|\lambda, \mu\rangle$ が規格化されているとすると

$$\langle \lambda, \mu | \hat{L}^2 | \lambda, \mu \rangle = \lambda, \quad \langle \lambda, \mu | \hat{L}_z^2 | \lambda, \mu \rangle = \mu^2, \quad (6.27)$$

$$\langle \lambda, \mu | \hat{L}_x^2 | \lambda, \mu \rangle \stackrel{\hat{L}_x \text{ の Hermite 性}}{=} |\hat{L}_x | \lambda, \mu \rangle|^2 \geq 0, \quad \langle \lambda, \mu | \hat{L}_y^2 | \lambda, \mu \rangle \stackrel{\hat{L}_y \text{ の Hermite 性}}{=} |\hat{L}_y | \lambda, \mu \rangle|^2 \geq 0, \quad (6.28)$$

となるから

$$\lambda \geq \mu^2, \quad (6.29)$$

であるが、 $\hat{L}_\pm$ を作用させ続けて作った状態は μ^2 が際限なく大きくなり、この不等式を破ってしまう。よって、 $\hat{L}_\pm$ をいくら作用させても状態 $|\lambda, \mu\rangle$ が規格化されている、という仮定が誤りであることがわかる。したがって、0 ベクトルでないある状態 $|\lambda, \mu_{\max}\rangle$ に対し

$$\hat{L}_+ | \lambda, \mu_{\max} \rangle = 0, \quad (6.30)$$

となり、同様に 0 ベクトルでないある状態 $|\lambda, \mu_{\min}\rangle$ に対し

$$\hat{L}_- | \lambda, \mu_{\min} \rangle = 0, \quad (6.31)$$

となる。これら $\mu_{\max}, \mu_{\min}$ を改めて $\hbar l, \hbar l'$ と呼ぶことにすると

$$\hat{L}^2 | \lambda, \mu_{\max} \rangle = \lambda | \lambda, \mu_{\max} \rangle, \quad \hat{L}_z | \lambda, \mu_{\max} \rangle = \hbar l | \lambda, \mu_{\max} \rangle, \quad (6.32)$$

$$\hat{L}^2 | \lambda, \mu_{\min} \rangle = \lambda | \lambda, \mu_{\min} \rangle, \quad \hat{L}_z | \lambda, \mu_{\min} \rangle = \hbar l' | \lambda, \mu_{\min} \rangle, \quad (6.33)$$

となる。ここで

$$\hat{L}_\pm \hat{L}_\mp = (\hat{L}_x \pm i \hat{L}_y)(\hat{L}_x \mp i \hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \mp i(\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x) = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \pm \hbar \hat{L}_z, \quad (6.34)$$

であるから、

$$\hat{L}^2 | \lambda, \mu_{\max} \rangle = (\hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z) | \lambda, \mu_{\max} \rangle = (0 + \mu_{\max}^2 + \hbar \mu_{\max}) | \lambda, \mu_{\max} \rangle = \hbar^2 l(l+1) | \lambda, \mu_{\max} \rangle, \quad (6.35)$$

$$\hat{L}^2 | \lambda, \mu_{\min} \rangle = (\hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z) | \lambda, \mu_{\min} \rangle = (0 + \mu_{\min}^2 - \hbar \mu_{\min}) | \lambda, \mu_{\min} \rangle = \hbar^2 l'(l'-1) | \lambda, \mu_{\min} \rangle, \quad (6.36)$$

を得る。よって

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1) = \hbar^2 l'(l'-1), \quad (6.37)$$

がわかる。ここから面白い帰結が得られる。 $\hbar^2 l(l+1) = \hbar^2 l'(l'-1) \implies l' = -l \text{ or } l+1$ であるが、 $\hbar l$ が $\hat{L}_z$ の最大固有値、 $\hbar l'$ が $\hat{L}_z$ の最小固有値であったことを思い出すと、 $l' = l+1$ は不適であり、

$$l' = -l, \quad (6.38)$$

がわかる。 $\hat{L}_z$ の固有値 $\hbar l$ から始めて、固有値を $\hbar$ だけ下げた $\hat{L}_-$ を整数 $N (\geq 0)$ 回演算して固有値 $\hbar l' = -\hbar l$ に至る必要があるから、 $l = \frac{N}{2}$ 、すなわち l は 0 以上の整数もしくは半整数である。また、 $\hat{L}_z$ の固有値を $\hbar m$ と置くと、上記の構成

法から $m = -l, -(l-1), \dots, (l-1), l$ となることがわかる。以上で $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_z$ の固有値が満たすべき条件がわかったので、以下では状態の指定方法を、 λ, μ でラベルする $|\lambda, \mu\rangle$ から l, m でラベルする $|l, m\rangle$ へと変更することにする

$$|\lambda, \mu\rangle \xrightarrow{\text{状態の指定のラベルを変更する}} |l, m\rangle. \quad (6.39)$$

まとめると、

角運動量の固有値

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle, \quad \hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle, \quad (6.40)$$

$$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots, \quad m = -l, -(l-1), \dots, (l-1), l, \quad (6.41)$$

となる。それぞれの l の値に対し、 m の取り得る値は $2l+1$ 個あることがわかる。

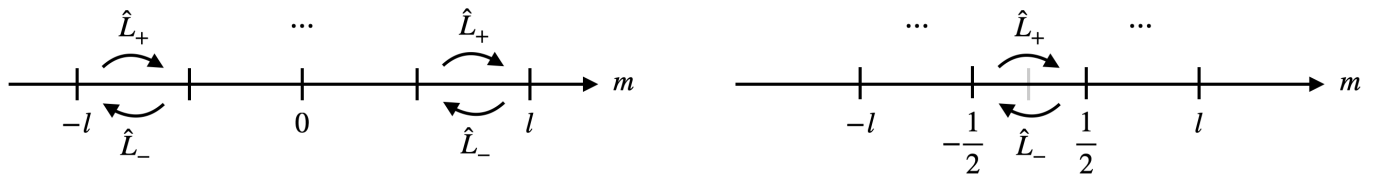


図 36: l が整数である場合 (左) と半整数である場合 (右)。

角運動量演算子の固有値を図 37 のように説明することがある。矢印の長さは $\hat{L}^2$ の固有値の平方根 $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ を表しており、また各矢印の z 成分は $\hat{L}_z$ の固有値 $\hbar m$ を表している。この図では $l=2$ を例に取っている。矢印の長さ $\hbar\sqrt{l(l+1)} (= \sqrt{6}\hbar)$ が z 成分の最大値 $2\hbar$ より大きいことに注意しよう。仮にこれら 2 つが同じ値を取るとすると、矢印が z 軸に揃うことになるが、そうすると $\hat{L}_x$ および $\hat{L}_y$ が完全に決まることになり、 $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_z$ の同時固有状態に対し $\hat{L}_x$ と $\hat{L}_y$ の測定値に生じる不確定性関係に反することになる。逆に言うと、矢印の長さが z 成分の最大値より大きいことが、 $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ に加えて $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ の固有値を同時に指定できないことを示唆している。

上で l は 0 以上の整数もしくは半整数であると述べたが、実は本小節で議論している軌道角運動量については、 l は 0 以上の整数であり、半整数を取れないことをいくつかの理由から説明できる。最も単純な理由は波動関数の一価性である。以下で見るように角運動量の固有関数として球面調和関数が現れるが、球面調和関数には磁気量子数依存性 $Y_{lm}(\theta, \phi) \propto e^{im\phi}$ があつた。 l が半整数の場合、 $m = -l, -(l-1), \dots, (l-1), l$ より m も半整数であり、空間的の同一点を表す ϕ と $\phi + 2\pi$ で波動関数が一意に定まらない。他の理由としては、 $|l, l\rangle$ から $\hat{L}_-$ 演算子で磁気量子数を下げて得られた $|l, -l\rangle$ が $\hat{L}_- |l, -l\rangle = 0$ から求めた $|l, -l\rangle$ と関数形が一致しないことや、0 以上の整数 l のみで構成した球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ の集合で完全系がすでに張れることが挙げられる [4]。一方、次小節で見るスピンは軌道角運動量と同一の交換関係を持つが、粒子の内部自由度に相当するために空間的な一価性の制約を受けない。そのため、スピンにおいては l に相当する量子数が半整数を取ることが許される。

角運動量演算子の $|r, \theta, \phi\rangle$ 表示と球面調和関数 以下、角運動量演算子の作用を $|r, \theta, \phi\rangle$ 表示で見ることにする。系の任意の状態を $|\psi\rangle$ として、

$$\langle r, \theta, \phi | \hat{L} | \psi \rangle = L \langle r, \theta, \phi | \psi \rangle (= L \psi(r, \theta, \phi)), \quad (6.42)$$

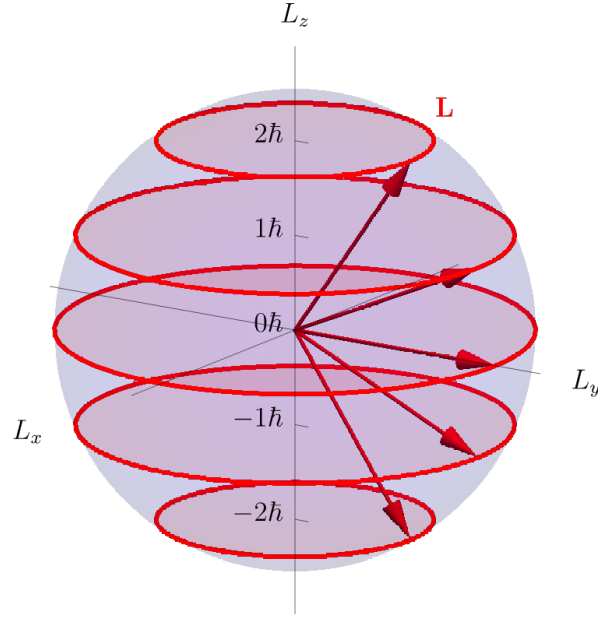


図 37: 角運動量演算子の固有値。

と書くことにしよう。 L は微分演算子である。角運動量の定義

$$\hat{L} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}, \quad (6.43)$$

より、

$$L \langle r, \theta, \phi | \psi \rangle = \langle r, \theta, \phi | \hat{L} | \psi \rangle = \langle r, \theta, \phi | \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla \langle r, \theta, \phi | \psi \rangle \quad \Rightarrow \quad L = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla, \quad (6.44)$$

であるが、

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad (6.45)$$

および $\mathbf{r} = r \mathbf{e}_r$ より

$$\begin{aligned} L &= -i\hbar r \mathbf{e}_r \times \left(\mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= -i\hbar r \left((\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_r) \frac{\partial}{\partial r} + (\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\theta) \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + (\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\phi) \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= -i\hbar r \left(0 \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= -i\hbar \left(\mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \end{aligned} \quad (6.46)$$

となる。極座標における基底ベクトルは直交座標における基底ベクトルと

$$\mathbf{e}_r = \sin \theta \cos \phi \mathbf{e}_x + \sin \theta \sin \phi \mathbf{e}_y + \cos \theta \mathbf{e}_z, \quad (6.47)$$

$$\mathbf{e}_\theta = \cos \theta \cos \phi \mathbf{e}_x + \cos \theta \sin \phi \mathbf{e}_y - \sin \theta \mathbf{e}_z, \quad (6.48)$$

$$\mathbf{e}_\phi = -\sin \phi \mathbf{e}_x + \cos \phi \mathbf{e}_y, \quad (6.49)$$

の関係があるから、

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= -i\hbar \left[\left(-\sin\phi \mathbf{e}_x + \cos\phi \mathbf{e}_y \right) \frac{\partial}{\partial\theta} - \left(\cos\theta \cos\phi \mathbf{e}_x + \cos\theta \sin\phi \mathbf{e}_y - \sin\theta \mathbf{e}_z \right) \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right] \\ &= -i\hbar \left[\mathbf{e}_x \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) + \mathbf{e}_y \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial\phi} \right], \end{aligned} \quad (6.50)$$

となり、したがって

$$L_x = -i\hbar \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right), \quad L_y = -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right), \quad L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}, \quad (6.51)$$

が得られる。角運動量の二乗を求めるには、昇降演算子

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = -i\hbar \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \pm \hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) = \pm \hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm \frac{i}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right), \quad (6.52)$$

を用いると便利である。昇降演算子の積は

$$L_{\pm}L_{\mp} = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\tan^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \pm i \frac{\partial}{\partial\phi} \right), \quad (6.53)$$

となるから ([問 6.3])、式 (6.34) から従う $L^2 = L_{\pm}L_{\mp} + L_z^2 \mp \hbar L_z$ より、

$$\begin{aligned} L^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\tan^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \pm i \frac{\partial}{\partial\phi} \right) + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \right)^2 \mp \hbar \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right) \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right], \end{aligned} \quad (6.54)$$

を得る。以上から、 L^2, L_z の固有関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ を求める式は

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (6.55)$$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (6.56)$$

となる。これらは以前に変数分離を用いて導出した角度方向の Schrödinger 方程式 (5.23) および (5.28) と等価である。この理由により、上式において固有関数をあらかじめ $Y_{lm}(\theta, \phi)$ と書いた。第 5.2-5.3 節においては変数分離した際の定数を $l(l+1)$ および m^2 と取る理由について詳しく説明しなかったが、それは実は本小節の角運動量演算子の代数関係から理解できる。

最後に、本小節の議論における球対称性の必要性についてコメントする。第 5 節においては球対称ポテンシャルを仮定した上で、変数分離により動径方向および角度方向の方程式を分離し、特に角度方向から球面調和関数を導出した。一方、本小節の議論は特に球対称ポテンシャルを仮定していないことに注意しよう。なぜなら、3次元 Schrödinger 方程式において角運動量演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ や角運動量の二乗 $\hat{L}^2$ は常に構成することができ、 $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ の固有関数としての球面調和関数を求める議論もポテンシャルとは独立だからである。よって、球対称ポテンシャルでない場合も、状態 $|\psi\rangle$ (本小節では時間に依存しない Schrödinger 方程式を考えているため、 $|\psi\rangle$ はエネルギー固有状態であるとする) を $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ の固有状態で展開すること自体は可能である。具体的には、 $|\psi\rangle$ は n 番目のエネルギー固有状態 $|\psi_n\rangle$ であるとして、 $|\psi_n\rangle = \int dr \sum_{l,m} c_{nlm}(r) |r\rangle \otimes |l, m\rangle$ と展開、あるいは $|r, \theta, \phi\rangle$ 表示では $\psi_n(r, \theta, \phi) = \sum_{l,m} c_{nlm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ と展開できる。しかしこの場合、動径方向の関数 $c_{nlm}(r)$ は全ての量子数 n, l, m に依ってしまい、特に球面調和関数で展開する恩恵がないことがわかる。つまり、角運動量の保存しないようなポテンシャルに対して、角運動量の二乗やその z 成分の固有関数

で展開しても単に「見方が悪い」ということである。

[問 6.1] ([1] Problem 4.22 改)

角運動量演算子

$$\hat{\mathbf{L}} := \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix}.$$

について、以下の問いに答えよ。

(1) 交換関係

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{x}] &= i\hbar\hat{y}, & [\hat{L}_z, \hat{y}] &= -i\hbar\hat{x}, & [\hat{L}_z, \hat{z}] &= 0, \\ [\hat{L}_z, \hat{p}_x] &= i\hbar\hat{p}_y, & [\hat{L}_z, \hat{p}_y] &= -i\hbar\hat{p}_x, & [\hat{L}_z, \hat{p}_z] &= 0, \end{aligned}$$

を示せ。

(2) 交換関係

$$[\hat{L}_z, \hat{r}^2] = 0, \quad [\hat{L}_z, \hat{p}^2] = 0,$$

を示せ。ただし $\hat{r}^2 := \hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2$, $\hat{p}^2 := \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$ である。

(3) 中心力ポテンシャル $V(r)$ に対して、 $\hat{\mathbf{L}}$ の任意の成分が Hamiltonian $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$ と交換すること

$$[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0 \quad (i = x, y, z),$$

を示せ。特に $i = z$ について示せば十分である。この結果により、

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{H}] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{H}] = \hat{L}_x[\hat{L}_x, \hat{H}] + [\hat{L}_x, \hat{H}]\hat{L}_x + \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{H}] + [\hat{L}_y, \hat{H}]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{H}] + [\hat{L}_z, \hat{H}]\hat{L}_z = 0,$$

がわかり、結果として $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{L}_z$ が交換する演算子の組であることがわかる。

[解 6.1]

(1)

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{x}] &= [\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, \hat{x}] = [\hat{x}\hat{p}_y, \hat{x}] - [\hat{y}\hat{p}_x, \hat{x}] = 0 - \hat{y}[\hat{p}_x, \hat{x}] = i\hbar\hat{y}, \\ [\hat{L}_z, \hat{y}] &= [\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, \hat{y}] = [\hat{x}\hat{p}_y, \hat{y}] - [\hat{y}\hat{p}_x, \hat{y}] = \hat{x}[\hat{p}_y, \hat{y}] - 0 = -i\hbar\hat{x}, \\ [\hat{L}_z, \hat{z}] &= [\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, \hat{z}] = [\hat{x}\hat{p}_y, \hat{z}] - [\hat{y}\hat{p}_x, \hat{z}] = 0 - 0 = 0, \\ [\hat{L}_z, \hat{p}_x] &= [\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, \hat{p}_x] = [\hat{x}\hat{p}_y, \hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_x, \hat{p}_x] = [\hat{x}, \hat{p}_x]\hat{p}_y - 0 = i\hbar\hat{p}_y, \\ [\hat{L}_z, \hat{p}_y] &= [\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, \hat{p}_y] = [\hat{x}\hat{p}_y, \hat{p}_y] - [\hat{y}\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0 - [\hat{y}, \hat{p}_y]\hat{p}_x = -i\hbar\hat{p}_x, \\ [\hat{L}_z, \hat{p}_z] &= [\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, \hat{p}_z] = [\hat{x}\hat{p}_y, \hat{p}_z] - [\hat{y}\hat{p}_x, \hat{p}_z] = 0 - 0 = 0. \end{aligned}$$

(2)

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{r}^2] &= [\hat{L}_z, \hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2] \\ &= \hat{x}[\hat{L}_z, \hat{x}] + [\hat{L}_z, \hat{x}]\hat{x} + \hat{y}[\hat{L}_z, \hat{y}] + [\hat{L}_z, \hat{y}]\hat{y} + \hat{z}[\hat{L}_z, \hat{z}] + [\hat{L}_z, \hat{z}]\hat{z} \\ &= i\hbar\hat{x}\hat{y} + i\hbar\hat{y}\hat{x} - i\hbar\hat{y}\hat{x} - i\hbar\hat{x}\hat{y} + 0 + 0 = 0, \\ [\hat{L}_z, \hat{p}^2] &= [\hat{L}_z, \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2] \\ &= \hat{p}_x[\hat{L}_z, \hat{p}_x] + [\hat{L}_z, \hat{p}_x]\hat{p}_x + \hat{p}_y[\hat{L}_z, \hat{p}_y] + [\hat{L}_z, \hat{p}_y]\hat{p}_y + \hat{p}_z[\hat{L}_z, \hat{p}_z] + [\hat{L}_z, \hat{p}_z]\hat{p}_z \\ &= i\hbar\hat{p}_x\hat{p}_y + i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_x - i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_x - i\hbar\hat{p}_x\hat{p}_y + 0 + 0 = 0. \end{aligned}$$

(3) 任意の状態 $|\psi\rangle$ に対し、

$$\begin{aligned} \langle x, y, z | [\hat{L}_z, V(\hat{r})] | \psi \rangle &= \langle x, y, z | [\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, V(\hat{r})] | \psi \rangle \\ &= \langle x, y, z | \hat{x}\hat{p}_y V(\hat{r}) | \psi \rangle - \langle x, y, z | V(\hat{r}) \hat{x}\hat{p}_y | \psi \rangle - \langle x, y, z | \hat{y}\hat{p}_x V(\hat{r}) | \psi \rangle + \langle x, y, z | V(\hat{r}) \hat{y}\hat{p}_x | \psi \rangle \\ &= x(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial y} (V(r)\psi(x, y, z)) - xV(r)(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial y} \psi(x, y, z) - y(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} (V(r)\psi(x, y, z)) + yV(r)(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, y, z) \\ &= x(-i\hbar)\psi(x, y, z) \frac{\partial}{\partial y} V(r) - y(-i\hbar)\psi(x, y, z) \frac{\partial}{\partial x} V(r) \\ &= x(-i\hbar)\psi(x, y, z) V'(r) \frac{\partial r}{\partial y} - y(-i\hbar)\psi(x, y, z) V'(r) \frac{\partial r}{\partial x} \\ &= x(-i\hbar)\psi(x, y, z) V'(r) \frac{y}{r} - y(-i\hbar)\psi(x, y, z) V'(r) \frac{x}{r} \\ &= 0, \end{aligned}$$

であるから、 $[\hat{L}_z, V(\hat{r})] = 0$ である。また、(2) より $[\hat{L}_z, \hat{p}^2] = 0$ である。よって

$$[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0,$$

が示される。

[問 6.2] ([1] Problem 4.21 改)

昇降演算子 $\hat{L}_\pm := \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ について、

$$\hat{L}_+ |l, m\rangle = A_l^m |l, m+1\rangle, \quad \hat{L}_- |l, m\rangle = B_l^m |l, m-1\rangle.$$

に現れる定数 A_l^m, B_l^m を以下の手続きで求めよ。ただし状態 $|l, m\rangle, |l, m\pm 1\rangle$ は規格化されているものとし、 A_l^m, B_l^m は正の実数とする。

(1) 昇降演算子が

$$\hat{L}_\pm^\dagger = \hat{L}_\mp,$$

を満たすことを示せ。

(2) 昇降演算子の積が

$$\hat{L}_{\mp}\hat{L}_{\pm} = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z,$$

を満たすことを示せ。ただし $\hat{L}^2 := \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ である。

(3) (2) の結果に左右から $\langle l, m | \cdots | l, m \rangle$ を作用させることで、

$$\begin{aligned} A_l^m &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \quad (= \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}), \\ B_l^m &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \quad (= \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}), \end{aligned}$$

を示せ。

[解 6.2]

(1) $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$ および $\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z$ より

$$\begin{aligned} \hat{L}_x^\dagger &= \hat{p}_z^\dagger \hat{y}^\dagger - \hat{p}_y^\dagger \hat{z}^\dagger \stackrel{\text{Hermite 性}}{=} \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y \stackrel{[\hat{y}, \hat{p}_z]=0, [\hat{z}, \hat{p}_y]=0}{=} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \hat{L}_x, \\ \hat{L}_y^\dagger &= \hat{p}_x^\dagger \hat{z}^\dagger - \hat{p}_z^\dagger \hat{x}^\dagger \stackrel{\text{Hermite 性}}{=} \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z \stackrel{[\hat{z}, \hat{p}_x]=0, [\hat{x}, \hat{p}_z]=0}{=} \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = \hat{L}_y, \end{aligned}$$

より $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ は Hermite である。よって

$$\hat{L}_\pm^\dagger = (\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)^\dagger = \hat{L}_x \mp i\hat{L}_y = \hat{L}_\mp,$$

となる。

(2) 昇降演算子の定義および交換関係から

$$\hat{L}_\mp \hat{L}_\pm = (\hat{L}_x \mp i\hat{L}_y)(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \pm i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] \stackrel{[\hat{L}_x, \hat{L}_y]=i\hbar\hat{L}_z}{=} \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \mp \hbar\hat{L}_z \stackrel{\hat{L}^2 := \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2}{=} \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z.$$

となる。

(3) (1) より

$$\langle l, m | \hat{L}_\mp \hat{L}_\pm | l, m \rangle = |\hat{L}_\pm | l, m \rangle|^2 = (A_l^m)^2 \text{ or } (B_l^m)^2,$$

である一方、(2) より

$$\langle l, m | \hat{L}_\mp \hat{L}_\pm | l, m \rangle = \langle l, m | (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z) | l, m \rangle = \hbar^2 [l(l+1) - m^2 \mp m] = \hbar^2 [l(l+1) - m(m \pm 1)],$$

であるから、

$$\begin{aligned} A_l^m &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \quad (= \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}), \\ B_l^m &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \quad (= \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}), \end{aligned}$$

となる。

[問 6.3] ([1] Problem 4.24)

角運動量の二乗に対する表式

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right],$$

を導こう。

(1) 角運動量

$$\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla,$$

に対し、 $\mathbf{r} = r\mathbf{e}_r$ および

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi},$$

を用いて、

$$\mathbf{L} = -i\hbar \left(\mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right),$$

を示せ。

(2) 極座標における基底ベクトルと直交座標における基底ベクトルの関係

$$\mathbf{e}_r = \sin \theta \cos \phi \mathbf{e}_x + \sin \theta \sin \phi \mathbf{e}_y + \cos \theta \mathbf{e}_z,$$

$$\mathbf{e}_\theta = \cos \theta \cos \phi \mathbf{e}_x + \cos \theta \sin \phi \mathbf{e}_y - \sin \theta \mathbf{e}_z,$$

$$\mathbf{e}_\phi = -\sin \phi \mathbf{e}_x + \cos \phi \mathbf{e}_y,$$

を用いて、

$$\mathbf{L} = -i\hbar \left[\mathbf{e}_x \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \mathbf{e}_y \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial \phi} \right],$$

を示し、

$$L_x = -i\hbar \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad L_y = -i\hbar \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi},$$

を示せ。

(3) 昇降演算子の表式

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = \pm \hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm \frac{i}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right),$$

を示せ。

(4) 昇降演算子の積が

$$L_{\pm} L_{\mp} = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\tan^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \pm i \frac{\partial}{\partial \phi} \right),$$

となることを示し、 $L^2 = L_{\pm} L_{\mp} + L_z^2 \mp \hbar L_z$ と合わせて

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right],$$

を示せ。

[解 6.3]

(1) 題意より

$$\begin{aligned}
 L &= -i\hbar r \mathbf{e}_r \times \left(\mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\
 &= -i\hbar r \left((\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_r) \frac{\partial}{\partial r} + (\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\theta) \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + (\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\phi) \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\
 &= -i\hbar r \left(0 \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\
 &= -i\hbar \left(\mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right),
 \end{aligned}$$

となる。

(2) 題意より

$$\begin{aligned}
 L &= -i\hbar \left[(-\sin \phi \mathbf{e}_x + \cos \phi \mathbf{e}_y) \frac{\partial}{\partial \theta} - (\cos \theta \cos \phi \mathbf{e}_x + \cos \theta \sin \phi \mathbf{e}_y - \sin \theta \mathbf{e}_z) \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \\
 &= -i\hbar \left[\mathbf{e}_x \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \mathbf{e}_y \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial \phi} \right],
 \end{aligned}$$

であるから、

$$L_x = -i\hbar \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad L_y = -i\hbar \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi},$$

が得られる。

(3) (2) の結果より、昇降演算子は

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = -i\hbar \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \pm \hbar \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = \pm \hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm \frac{i}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right),$$

が得られる。

(4) (3) の結果より、昇降演算子の積は

$$L_{\pm} L_{\mp} = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\tan^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \pm i \frac{\partial}{\partial \phi} \right),$$

となる。これと $L^2 = L_{\pm} L_{\mp} + L_z^2 \mp \hbar L_z$ より、

$$\begin{aligned}
 L^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\tan^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \pm i \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^2 \mp \hbar \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\
 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \\
 &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right],
 \end{aligned}$$

を得る。

[問 6.4] ([1] Problem 4.26 改)

方位量子数 $l = 2$ および磁気量子数 $m = 1$ の状態 $|2, 1\rangle$ について、 $|\theta, \phi\rangle$ 表示の波動関数

$$\langle\theta, \phi|2, 1\rangle = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{i\phi} (= Y_{21}(\theta, \phi)),$$

が与えられているとする。このとき、 $\hat{L}_+|2, 1\rangle$ を $|\theta, \phi\rangle$ 表示することで、

$$\langle\theta, \phi|2, 2\rangle = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{2i\phi} (= Y_{22}(\theta, \phi)),$$

が得られることを示せ。ただし、任意の状態 $|\psi\rangle$ に対し

$$\langle\theta, \phi|\hat{L}_\pm|\psi\rangle = \pm\hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm \frac{i}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle\theta, \phi|\psi\rangle,$$

であることを用いよ。また、規格化定数については前問の結果を用いよ。

[解 6.4] 前問の結果より、

$$\hat{L}_+|2, 1\rangle = \hbar\sqrt{2(2+1)-1(1+1)}|2, 2\rangle = 2\hbar|2, 2\rangle,$$

である。よって

$$\begin{aligned} \langle\theta, \phi|2, 2\rangle &= \frac{1}{2\hbar} \langle\theta, \phi|\hat{L}_+|2, 1\rangle \\ &= \frac{1}{2\hbar} \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{i}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle\theta, \phi|2, 1\rangle \\ &= \frac{1}{2\hbar} \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{i}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \left[-\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{i\phi} \right] \\ &= \frac{1}{2\hbar} \hbar e^{i\phi} \left(-\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \right) \left[\cos^2\theta - \sin^2\theta - \frac{1}{\tan\theta} \sin\theta \cos\theta \right] e^{i\phi} \\ &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{2i\phi}, \end{aligned}$$

が得られる。

6.2 スピン

古典力学には 2 種類の角運動量があった。**軌道角運動量 (orbital angular momentum)** $L = r \times p$ と **スピン角運動量 (spin angular momentum)** S である。軌道角運動量は剛体の重心自体の移動に由来し、スピン角運動量は重心周りの運動に由来していた。量子力学においても似たようなことが起こる。粒子が空間を運動することに由来する軌道角運動量に加え、粒子自体に由来するスピン角運動量が存在する。本小節で学ぶのは、このスピン角運動量の取り扱いである。

古典力学においてこれらの区別はあくまで便宜的なものであった。剛体のスピン角運動量は、元を辿れば剛体を構成する質量たちが重心周りを運動することにより生じる軌道角運動量であるから、これら角運動量の区別はあくまでこれらの分類上の都合であった。一方量子力学においては、これらの区別は本質的である。電子などの粒子は、空間中を軌道運動することに由来する軌道角運動量と、それとは全く関係ない、粒子自身の内部自由度としての角運動量を持つことがわかっている。古典力学の場合と異なり、量子力学におけるスピン角運動量はより小さな構成要素の軌道角運動量とは見なせず、したがってスピンという名前はあくまで古典力学との類推を付けるためにそう呼んでいるにすぎない。

量子力学におけるスピン角運動量は内部自由度であるから、今まで仮定してきたような空間的な自由度を記述する Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\text{space,3d}} := \{|x, y, z\rangle\}$ (あるいは $\{|p_x, p_y, p_z\rangle\}$ や $\{|r, \theta, \phi\rangle\}$) では記述できず、これとは別の、内部自由度を記述するための別の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ を用意して記述することになる。最終的にはこれらを合わせた $\mathcal{H}_{\text{total}} = \mathcal{H}_{\text{space,3d}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}$ を考えることになるが、とりあえず本小節では空間部分 $\mathcal{H}_{\text{space,3d}}$ を無視し、 $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ のみ考えた取り扱いを学ぶ。これは例えば、粒子が空間的にトラップされているために粒子の位置に興味がなく、その内部状態にしか興味がない場合を想像すればよい。

スピン演算子 スピン角運動量は角運動量的一种であるから、軌道角運動量の代数関係と同じものを仮定しよう。つまり、3 種類の演算子 $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ に対し

スピン角運動量の交換関係

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = -[\hat{S}_y, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_z, \quad (6.57)$$

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = -[\hat{S}_z, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_x, \quad (6.58)$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = -[\hat{S}_x, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_y, \quad (6.59)$$

を仮定する。以降の議論は軌道角運動量の場合と同様である。スピン角運動量の二乗 $\hat{S}^2$ を

$$\hat{S}^2 := \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2, \quad (6.60)$$

で導入すると、この演算子は $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ のいずれとも交換する

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_x] = 0, \quad [\hat{S}^2, \hat{S}_y] = 0, \quad [\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0. \quad (6.61)$$

演算子 $\hat{S}^2, \hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ のうち $\hat{S}^2$ は他の全ての演算子と交換するが、 $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ はお互いに交換しない。したがって交換する Hermite 演算子の数は最大で 2 個であり、慣習的に交換する演算子を $\hat{S}^2, \hat{S}_z$ と取る。昇降演算子 $\hat{S}_\pm$ を $\hat{S}_x, \hat{S}_y$ を用いて

$$\hat{S}_\pm := \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y, \quad (6.62)$$

と構成することができ、これらは $[\hat{S}_z, \hat{S}_\pm] = \pm\hbar \hat{S}_\pm$ より、演算子 $\hat{S}_\pm$ の固有値を $\pm\hbar$ だけ変化させる。

固有状態 $\hat{S}^2$ と $\hat{S}_z$ の固有値の求め方も軌道角運動量と同様であり、

スピン角運動量の固有値

$$\hat{S}^2 |s, m\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m\rangle, \quad \hat{S}_z |s, m\rangle = \hbar m |s, m\rangle, \quad (6.63)$$

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots, \quad m = -s, -(s-1), \dots, (s-1), s, \quad (6.64)$$

を得る。また、昇降演算子の作用は

$$\hat{S}_\pm |s, m\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} |s, m \pm 1\rangle, \quad (6.65)$$

である ([問 6.2] 参照)。ここで s, m はそれぞれ $\hat{S}^2$ および $\hat{S}_z$ の固有値を特徴付ける量子数であり、軌道角運動量の場合の l, m に対応している。スピン角運動量の m は軌道角運動量の m と区別するため s_m と書くこともあるが、本ノートでは記号が煩雑になるのを避けるため単に m と書く。

さて、ここまでの議論では、それぞれの粒子がどの s あるいは m を取るかには言及していなかった。実は自然界の粒子は、その粒子種によって s の値が決まっている

粒子は、その粒子種に応じて、定まった s の値を取る。

そしてしばしば「スピン角運動量の二乗 $\hat{S}^2$ を特徴付ける量子数である s の値が... である」を省略して「スピン...」と言うことがある。例えば π 中間子や Higgs 粒子はスピン 0 (前者は複合粒子であり、後者は現時点でわかっている限り素粒子である)、電子はスピン $\frac{1}{2}$ 、光子はスピン 1、 Δ バリオンはスピン $\frac{3}{2}$ 、重力子はスピン 2、である。あくまで s の値が $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$ なのであって、 $\hat{S}^2$ の固有値は $\hbar^2 s(s+1)$ であることに注意してほしい。

スピン $\frac{1}{2}$ 最も重要な例はスピン $\frac{1}{2}$ である。このタイプの粒子種には、

$$(s, m) = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right), \quad (6.66)$$

の 2 種類の内部状態が存在する。対応する状態を

$$|\chi_+\rangle := \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \quad |\chi_-\rangle := \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle, \quad (6.67)$$

と書く。これらを

$$|\uparrow\rangle := \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \quad |\downarrow\rangle := \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle, \quad (6.68)$$

と、上下の矢印で書く場合もある。繰り返しになるが、これらの状態は先の 3 次元 Schrödinger 方程式において現れた状態 $|x, y, z\rangle$ や $|r, \theta, \phi\rangle$ が属する Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\text{space}, 3d}$ ではなく、粒子の内部状態を記述する Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ の元である。それぞれの状態について、 $\hat{S}^2$ および $\hat{S}_z$ の固有値は

$$\hat{S}^2 \left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 \left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle, \quad \hat{S}_z \left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle = \pm\frac{\hbar}{2} \left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle, \quad (6.69)$$

である。また、一般の状態 $|\chi\rangle$ は

$$|\chi\rangle = a|\chi_+\rangle + b|\chi_-\rangle = a\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + b\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle, \quad a, b \in \mathbb{C}, \quad (6.70)$$

である。

以下、これら状態や演算子の具体的な表示について見ていこう。状態 $\left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle$ は 2 つの直交する規格化されたベクトルであるから、表示方法の 1 つとして

$$|\chi_+\rangle := \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\chi_-\rangle := \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (6.71)$$

を用い、この基底での表示を $\{|\chi_\pm\rangle\}$ 表示と呼ぶ。この場合、先の任意の状態は

$$|\chi\rangle = a|\chi_+\rangle + b|\chi_-\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad (6.72)$$

となる。成分を具体的に

$$\hat{S}^2 \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} c' & d' \\ e' & f' \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_\pm \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} c_\pm & d_\pm \\ e_\pm & f_\pm \end{pmatrix}, \quad (6.73)$$

として、式 (6.69), (6.71) から

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{3}{4} \hbar^2 \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \quad \hat{S}^2 \text{表示} \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{6.74}$$

および

$$\begin{aligned}\hat{S}_z \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle &= \pm \frac{\hbar}{2} \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} c' & d' \\ e' & f' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c' & d' \\ e' & f' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \quad \hat{S}_z \text{表示} \begin{pmatrix} c' & d' \\ e' & f' \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{6.75}$$

が求まる。また、昇降演算子については式 (6.65) より

$$\begin{aligned}\left. \begin{aligned}\hat{S}_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - \left(-\frac{1}{2} \right) \left(-\frac{1}{2} + 1 \right)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \hat{S}_+ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= 0\end{aligned} \right\} \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} c_+ & d_+ \\ e_+ & f_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c_+ & d_+ \\ e_+ & f_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \quad \hat{S}_+ \text{表示} \begin{pmatrix} c_+ & d_+ \\ e_+ & f_+ \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{6.76}$$

および

$$\begin{aligned}\left. \begin{aligned}\hat{S}_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= 0 \\ \hat{S}_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - \left(\frac{1}{2} \right) \left(\frac{1}{2} - 1 \right)} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle\end{aligned} \right\} \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} c_- & d_- \\ e_- & f_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0, \quad \begin{pmatrix} c_- & d_- \\ e_- & f_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \quad \hat{S}_- \text{表示} \begin{pmatrix} c_- & d_- \\ e_- & f_- \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{6.77}$$

となるので、 $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$ より

$$\hat{S}_x = \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2} \text{表示} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2i} \text{表示} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\tag{6.78}$$

が求まる。 $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ の行列表示に現れる以下の行列

$$\sigma_x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},\tag{6.79}$$

を **Pauli 行列** と言う。これらを用いると、

$$\hat{S}_x \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad \hat{S}_y \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad \hat{S}_z \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad (6.80)$$

となる。

さて、式 (6.72) の規格化された状態 $|\chi\rangle$ に対し、物理量 $\hat{S}_z$ の測定を考える。 $\hat{S}_z$ の規格化された固有状態は $|\chi_{\pm}\rangle$ であり、固有値はそれぞれ $\pm\frac{\hbar}{2}$ であるから、第 3 節の Born の確率規則より、確率 $|a|^2$ で測定値 $+\frac{\hbar}{2}$ を、確率 $|b|^2$ で測定値 $-\frac{\hbar}{2}$ を得ることがわかる。規格化条件は

$$\langle\chi|\chi\rangle = |a|^2 + |b|^2 = 1, \quad (6.81)$$

であるから、全確率が 1 となっていることもわかる。ところで、この状態 $|\chi\rangle$ に対し $\hat{S}_x, \hat{S}_y$ を測定すると何が起こるだろう

うか。 $\hat{S}_x$ の固有値 $\lambda_{\pm}^{(x)}$ は、固有ベクトルを $|\chi_{\pm}^{(x)}\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \alpha^{(x)} \\ \beta^{(x)} \end{pmatrix}$ として

$$\begin{aligned} \hat{S}_x |\chi_{\pm}^{(x)}\rangle = \lambda_{\pm}^{(x)} |\chi_{\pm}^{(x)}\rangle &\stackrel{\text{表示}}{\Rightarrow} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^{(x)} \\ \beta^{(x)} \end{pmatrix} = \lambda_{\pm}^{(x)} \begin{pmatrix} \alpha^{(x)} \\ \beta^{(x)} \end{pmatrix} \\ \Rightarrow |\chi_+^{(x)}\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} &\quad \left(\lambda_+^{(x)} = \frac{\hbar}{2} \right), \quad |\chi_-^{(x)}\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \left(\lambda_-^{(x)} = -\frac{\hbar}{2} \right), \end{aligned} \quad (6.82)$$

となる。元の状態 $|\chi\rangle$ は $|\chi_{\pm}^{(x)}\rangle$ を用いて

$$|\chi\rangle = \frac{a+b}{\sqrt{2}} |\chi_+^{(x)}\rangle + \frac{a-b}{\sqrt{2}} |\chi_-^{(x)}\rangle, \quad (6.83)$$

と展開できるから、同じく Born の確率規則に従うと、「確率 $\frac{|a+b|^2}{2}$ で測定値 $\frac{\hbar}{2}$ を得て、確率 $\frac{|a-b|^2}{2}$ で測定値 $-\frac{\hbar}{2}$ を得る」となる。確率の合計は $\frac{|a+b|^2}{2} + \frac{|a-b|^2}{2} = \frac{|a|^2 + a^*b + ab^* + |b|^2}{2} + \frac{|a|^2 - a^*b - ab^* + |b|^2}{2} = \frac{|a|^2 + |b|^2}{2} = 1$ となっていることもわかる。 $\hat{S}_y$ についても同様の議論により「確率 $\frac{|a-ib|^2}{2}$ で測定値 $\frac{\hbar}{2}$ を得て、確率 $\frac{|a+ib|^2}{2}$ で測定値 $-\frac{\hbar}{2}$ を得る」となる。

[問 6.5]

状態 $|\chi\rangle = a|\chi_+\rangle + b|\chi_-\rangle$ に対して物理量 $\hat{S}_y$ の測定を行うとき、「確率 $\frac{|a-ib|^2}{2}$ で測定値 $\frac{\hbar}{2}$ を得て、確率 $\frac{|a+ib|^2}{2}$ で測定値 $-\frac{\hbar}{2}$ を得る」ことを、 $\hat{S}_x$ のときと同様の議論を行うことにより示せ。

[解 6.5] $\hat{S}_y$ の固有値 $\lambda_{\pm}^{(y)}$ は、固有ベクトルを $|\chi_{\pm}^{(y)}\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \alpha^{(y)} \\ \beta^{(y)} \end{pmatrix}$ として

$$\begin{aligned} \hat{S}_y |\chi_{\pm}^{(y)}\rangle = \lambda_{\pm}^{(y)} |\chi_{\pm}^{(y)}\rangle &\stackrel{\text{表示}}{\Rightarrow} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^{(y)} \\ \beta^{(y)} \end{pmatrix} = \lambda_{\pm}^{(y)} \begin{pmatrix} \alpha^{(y)} \\ \beta^{(y)} \end{pmatrix} \\ \Rightarrow |\chi_+^{(y)}\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} &\quad \left(\lambda_+^{(y)} = \frac{\hbar}{2} \right), \quad |\chi_-^{(y)}\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad \left(\lambda_-^{(y)} = -\frac{\hbar}{2} \right), \end{aligned}$$

となる。元の状態 $|\chi\rangle$ は

$$|\chi\rangle = \frac{a-ib}{\sqrt{2}} |\chi_+^{(y)}\rangle + \frac{a+ib}{\sqrt{2}} |\chi_-^{(y)}\rangle,$$

と展開できる。第 3 節の Born の確率規則に従い、「確率 $\frac{|a-ib|^2}{2}$ で測定値 $\frac{\hbar}{2}$ を得て、確率 $\frac{|a+ib|^2}{2}$ で測定値 $-\frac{\hbar}{2}$ を得る」ことがわかる。

[問 6.6] ([1] Problem 4.29)

スピン演算子 $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ が Pauli 行列

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

を用いて

$$\hat{S}_x \text{ 表示 } = \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad \hat{S}_y \text{ 表示 } = \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad \hat{S}_z \text{ 表示 } = \frac{\hbar}{2} \sigma_z,$$

と与えられている。以下、 $(x, y, z) \leftrightarrow (1, 2, 3)$ で対応付ける。

(1) Pauli 行列が

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} + i \sum_l \epsilon_{jkl} \sigma_l,$$

を満たすことを示せ。ここで **Levi-Civita 記号** ϵ_{jkl} は

$$\epsilon_{jkl} := \begin{cases} +1 & (j, k, l) = (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2), \\ -1 & (j, k, l) = (1, 3, 2), (2, 1, 3), (3, 2, 1), \\ 0 & \text{他,} \end{cases}$$

で定義される。

(2) スピン演算子の満たすべき交換関係

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

が満たされていることを、行列を計算することにより示せ。

[解 6.6]

(1) 題意の式は

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \\ \sigma_x \sigma_y &= -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z, & \sigma_y \sigma_z &= -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x, & \sigma_z \sigma_x &= -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y, \end{aligned}$$

となる。1 行目については Pauli 行列を二乗することにより示される。2 行目については

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

より示される。

(2) (1) より

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y,$$

であるから、

$$\begin{aligned}[\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 [\sigma_x, \sigma_y] = \frac{i\hbar^2}{2} \sigma_z = i\hbar \hat{S}_z, \\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 [\sigma_y, \sigma_z] = \frac{i\hbar^2}{2} \sigma_x = i\hbar \hat{S}_x, \\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 [\sigma_z, \sigma_x] = \frac{i\hbar^2}{2} \sigma_y = i\hbar \hat{S}_y,\end{aligned}$$

と示される。

[問 6.7] ([1] Problem 4.30)

電子のスピン状態 $|\chi\rangle$ が

$$|\chi\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} A \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix},$$

で与えられているとする。

(1) 状態 $|\chi\rangle$ を規格化することで定数 A を求めよ。ただし A は正の実数とする。

(2) この状態に対するスピン $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ の期待値を求めよ。ただし $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ は

$$\hat{S}_x \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad \hat{S}_y \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad \hat{S}_z \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \sigma_z,$$

で与えられているとする。

(3) 分散 $\sigma_{\hat{S}_x}^2, \sigma_{\hat{S}_y}^2, \sigma_{\hat{S}_z}^2$ の平方根 $\sigma_{S_x}, \sigma_{S_y}, \sigma_{S_z}$ を求めよ。

(4) 不確定性関係

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle \chi | [\hat{A}, \hat{B}] | \chi \rangle \right)^2,$$

が $\hat{A} = \hat{S}_x, \hat{B} = \hat{S}_y$ に対して成り立っていることを示せ。

[解 6.7]

(1)

$$\langle \chi | \chi \rangle \stackrel{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} = 25A^2 = 1, \quad \Rightarrow \quad A = \frac{1}{5}.$$

(2)

$$\langle \chi | \hat{S}_x | \chi \rangle \stackrel{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} = 0,$$

$$\langle \chi | \hat{S}_y | \chi \rangle \stackrel{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} = -\frac{12}{25}\hbar,$$

$$\langle \chi | \hat{S}_z | \chi \rangle \stackrel{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} = -\frac{7}{50}\hbar,$$

(3)

$$\sigma_{S_x}^2 = \langle \chi | (\hat{S}_x - \langle \chi | \hat{S}_x | \chi \rangle)^2 | \chi \rangle = \langle \chi | \hat{S}_x^2 | \chi \rangle - \langle \chi | \hat{S}_x | \chi \rangle^2$$

$$\stackrel{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} - 0^2 = \frac{\hbar^2}{4} \quad \Rightarrow \quad \sigma_{S_x} = \frac{\hbar}{2},$$

$$\sigma_{S_y}^2 = \langle \chi | (\hat{S}_y - \langle \chi | \hat{S}_y | \chi \rangle)^2 | \chi \rangle = \langle \chi | \hat{S}_y^2 | \chi \rangle - \langle \chi | \hat{S}_y | \chi \rangle^2$$

$$\stackrel{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} - \left(-\frac{12}{25}\hbar \right)^2 = \frac{49}{2500}\hbar^2 \quad \Rightarrow \quad \sigma_{S_y} = \frac{7}{50}\hbar,$$

$$\sigma_{S_z}^2 = \langle \chi | (\hat{S}_z - \langle \chi | \hat{S}_z | \chi \rangle)^2 | \chi \rangle = \langle \chi | \hat{S}_z^2 | \chi \rangle - \langle \chi | \hat{S}_z | \chi \rangle^2$$

$$\stackrel{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} - \left(-\frac{7}{50}\hbar \right)^2 = \frac{576}{2500}\hbar^2 \quad \Rightarrow \quad \sigma_{S_z} = \frac{12}{25}\hbar.$$

(4) $\hat{A} = \hat{S}_x, \hat{B} = \hat{S}_y$ に対する不確定性関係は

$$\sigma_{S_x}^2 \sigma_{S_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle \chi | [\hat{S}_x, \hat{S}_y] | \chi \rangle \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \langle \chi | \hat{S}_z | \chi \rangle \right)^2,$$

であるが、

$$\sigma_{S_x}^2 \sigma_{S_y}^2 = \left(\frac{7}{100}\hbar^2 \right)^2 \geq \left(\frac{\hbar}{2} \langle \chi | \hat{S}_z | \chi \rangle \right)^2 = \left(\frac{7}{100}\hbar^2 \right)^2,$$

より確かに成り立っている。

[問 6.8] ([1] Problem 4.33)

スピンの $\mathbf{n}$ 方向成分に相当する演算子を

$$\hat{S}_n := \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \quad \mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix},$$

で構成する。 $\hat{S}_n$ の規格化された固有ベクトルが、絶対値 1 の複素定数倍を除いて

$$|\chi_+^{(n)}\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |\chi_-^{(n)}\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix},$$

となることを示せ。ただし、スピン演算子は Pauli 行列を用いて

$$\hat{S}_x \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad \hat{S}_y \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad \hat{S}_z \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \sigma_z,$$

とする。

[解 6.8] 演算子 $\hat{S}_n$ は

$$\hat{S}_n = \sin \theta \cos \phi \hat{S}_x + \sin \theta \sin \phi \hat{S}_y + \cos \theta \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix},$$

となる。 $|\chi_{\pm}^{(n)}\rangle$ にこれを作用させると

$$\begin{aligned} \hat{S}_n |\chi_+^{(n)}\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \frac{\theta}{2} + \sin \theta \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \left(\sin \theta \cos \frac{\theta}{2} + \cos \theta \sin \frac{\theta}{2} \right) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} |\chi_+^{(n)}\rangle, \\ \hat{S}_n |\chi_-^{(n)}\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \left(\cos \theta \sin \frac{\theta}{2} - \sin \theta \cos \frac{\theta}{2} \right) \\ \sin \theta \sin \frac{\theta}{2} + \cos \theta \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} |\chi_-^{(n)}\rangle, \end{aligned}$$

となるので、 $|\chi_{\pm}^{(n)}\rangle$ は $\hat{S}_n$ の固有値 $\pm \frac{\hbar}{2}$ の固有ベクトルであり、また $|\chi_{\pm}^{(n)}\rangle$ はすでに規格化されているので示された。

Larmor 歳差運動 粒子のスピンの重要な帰結の一つとして**磁気モーメント (magnetic moment)** の存在がある²²。古典電磁気学では、円電流に磁気モーメントが生じるのであった。量子力学においても、例えば電子のように電荷とスピンを同時に持つ粒子には、同じように磁気モーメントが生じる。ただし古典電磁気との類推は完全には通用せず、ファクター分のずれが生じることが知られている。

まず前提として、古典電磁気学で円電流 I が作り出す磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ は、その電流が囲む面積を $|\mathbf{A}|$ として

$$\boldsymbol{\mu} = I\mathbf{A}, \tag{6.84}$$

²² 磁気能率と呼ばれることもある。

である。ここで、 $\boldsymbol{\mu}$ と $\boldsymbol{A}$ はベクトル量であり、向きは電流面に垂直な方向として定義される (図 38)。これは、この円電流を十分遠方から見たとき、 $\boldsymbol{I}\boldsymbol{A} = q_m \boldsymbol{d} / \mu_0$ であるような仮想的な正負の磁荷 $\pm q_m$ が変位 $\boldsymbol{d}$ で置かれている場合と区別がつかない、ということである。ここで μ_0 は真空の透磁率である。そして、このような円電流を外部磁束密度 $\boldsymbol{B}$ の中に置いたとき、系のエネルギーは

$$E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}, \quad (6.85)$$

となる。

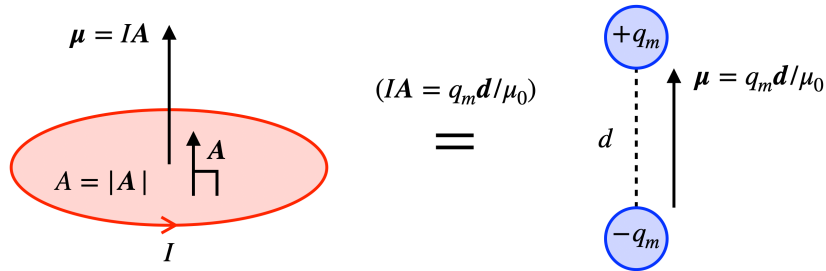


図 38: 円電流が作り出す磁気モーメント (左) と、仮想的な磁気双極子が作り出す磁気モーメント (右)。

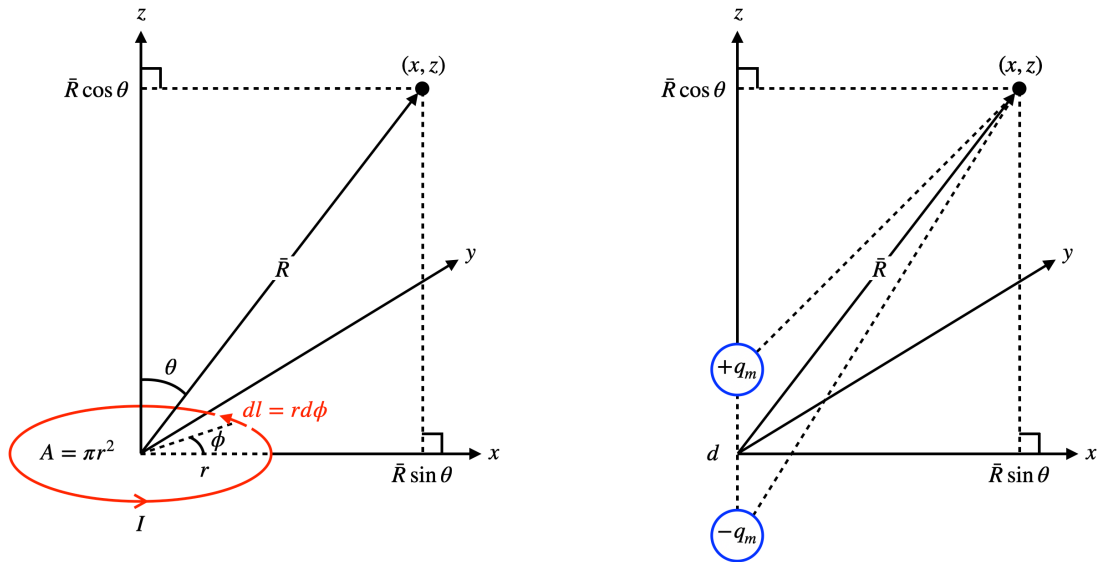


図 39: 円電流と磁気双極子が同様の磁場を作り出す様子。

コラム：円電流が作り出す磁気モーメント

図 38 で、両者が作り出す磁場が $\bar{R} := \sqrt{x^2 + z^2} \gg r, d$ の下で等しくなることを見よう。図 39 を参考にする。

- 円電流について、Maxwell 方程式から従う Biot-Savart の法則により

$$d\boldsymbol{H} = \frac{I}{4\pi} \frac{d\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{R}}{R^3}, \quad (6.86)$$

であるが、

$$d\mathbf{l} = \begin{pmatrix} -r \sin \phi \\ r \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix} d\phi, \quad \mathbf{R} = \begin{pmatrix} x - r \cos \phi \\ -r \sin \phi \\ z \end{pmatrix}, \quad (6.87)$$

より

$$d\mathbf{H} = \frac{I}{4\pi} \frac{d\phi}{[(x - r \cos \phi)^2 + (-r \sin \phi)^2 + z^2]^{\frac{3}{2}}} \begin{pmatrix} rz \cos \phi \\ rz \sin \phi \\ r^2 - rx \cos \phi \end{pmatrix} \stackrel{\bar{R} \gg r}{\simeq} \frac{I}{4\pi} \frac{d\phi}{\bar{R}^3} \left(1 + \frac{3rx \cos \phi}{\bar{R}^2} \right) \begin{pmatrix} rz \cos \phi \\ rz \sin \phi \\ r^2 - rx \cos \phi \end{pmatrix}, \quad (6.88)$$

であるから、 ϕ 方向を積分して

$$\mathbf{H} = \int d\mathbf{H} \simeq \frac{I}{4\pi \bar{R}^3} \begin{pmatrix} \frac{3\pi r^2 x z}{\bar{R}^2} \\ 0 \\ 2\pi r^2 - \frac{3\pi r^2 x^2}{\bar{R}^2} \end{pmatrix} = \frac{I r^2}{2\bar{R}^3} \begin{pmatrix} \frac{3}{2} \cos \theta \sin \theta \\ 0 \\ 1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta \end{pmatrix} \stackrel{A = \pi r^2}{=} \frac{IA}{2\pi \bar{R}^3} \begin{pmatrix} \frac{3}{2} \cos \theta \sin \theta \\ 0 \\ 1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta \end{pmatrix}, \quad (6.89)$$

となる。

- 磁気双極子について、磁気ポテンシャルは

$$U = \frac{q_m}{4\pi\mu_0} \left[\frac{1}{\left[x^2 + \left(z - \frac{d}{2} \right) \right]^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{\left[x^2 + \left(z + \frac{d}{2} \right) \right]^{\frac{1}{2}}} \right] \stackrel{\bar{R} \gg d}{\simeq} \frac{q_m}{4\pi\mu_0} \left[\frac{1}{\bar{R}} \left(1 + \frac{zd}{2\bar{R}^2} \right) - \frac{1}{\bar{R}} \left(1 - \frac{zd}{2\bar{R}^2} \right) \right] = \frac{q_m d}{4\pi\mu_0} \frac{z}{\bar{R}^3}, \quad (6.90)$$

であるから、磁場は

$$\mathbf{H} = -\nabla U \simeq -\frac{q_m d}{4\pi\mu_0} \begin{pmatrix} -\frac{3xz}{\bar{R}^5} \\ 0 \\ \frac{1}{\bar{R}^3} - \frac{3z^2}{\bar{R}^5} \end{pmatrix} = \frac{q_m d}{4\pi\mu_0 \bar{R}^3} \begin{pmatrix} 3 \cos \theta \sin \theta \\ 0 \\ -1 + 3 \cos^2 \theta \end{pmatrix} = \frac{q_m d}{2\pi\mu_0 \bar{R}^3} \begin{pmatrix} \frac{3}{2} \cos \theta \sin \theta \\ 0 \\ 1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta \end{pmatrix}, \quad (6.91)$$

となる。

よって、 $IA = q_m d / \mu_0$ であれば $\bar{R} \gg r, d$ の下で両者の区別はつかないことになる。向きを付けた場合にも一般化でき、対応関係は $IA = q_m \mathbf{d} / \mu_0$ となる。

コラム：磁場中の磁気モーメントのエネルギー

上記の磁気モーメントを磁束密度 B の中に置いたときのエネルギーを求めよう。磁束密度中では図 40 のようにトルクが働く。初期位置 $\theta = \theta_0 (> 0)$ から安定点 $\theta = 0$ まで持って行った際に磁束密度による力 F が系に行う仕事は系の元のエネルギーである。

- 円電流について。図 40 の円周は、電流の向きに沿って円周を周る方向を ϕ 方向として、

$$\mathbf{l} = \begin{pmatrix} r \cos \theta \cos \phi \\ r \sin \phi \\ -r \sin \theta \cos \phi \end{pmatrix}, \quad (6.92)$$

と書くことができる。微小長さ $d\mathbf{l}$ に働く微小力 $d\mathbf{F}$ は

$$d\mathbf{F} = I d\mathbf{l} \times \mathbf{B} = I \begin{pmatrix} -r \cos \theta \sin \phi \\ r \cos \phi \\ r \sin \theta \sin \phi \end{pmatrix} d\phi \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} = IBr \begin{pmatrix} \cos \phi \\ r \cos \theta \sin \phi \\ 0 \end{pmatrix} d\phi, \quad (6.93)$$

であるから、微小モーメント $d\mathbf{N}$ は

$$d\mathbf{N} = \mathbf{l} \times d\mathbf{F} = IBr^2 \begin{pmatrix} \cos \theta \sin \theta \cos \phi \sin \phi \\ -\sin \theta \cos^2 \phi \\ \cos^2 \theta \cos \phi \sin \phi + \cos \phi \sin \phi \end{pmatrix} d\phi, \quad (6.94)$$

となる。よってモーメント $\mathbf{N}$ は

$$\mathbf{N} = \int d\mathbf{N} = \int_0^{2\pi} d\phi IBr^2 \begin{pmatrix} \cos \theta \sin \theta \cos \phi \sin \phi \\ -\sin \theta \cos^2 \phi \\ \cos^2 \theta \cos \phi \sin \phi + \cos \phi \sin \phi \end{pmatrix} = IBr^2 \begin{pmatrix} 0 \\ -\pi \sin \theta \\ 0 \end{pmatrix} \stackrel{A=\pi r^2}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ -IAB \sin \theta \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.95)$$

となるので、求めるエネルギーは

$$E = \int_{\theta_0}^0 d\theta N_y = IAB(1 - \cos \theta_0) = |\boldsymbol{\mu}|B - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}, \quad (6.96)$$

となる。

- 磁気双極子について。最安定位置までそれぞれの磁荷が距離 $\frac{d}{2}(1 - \cos \theta_0)$ 動くことと、磁場 $\mathbf{H}$ と磁束密度 $\mathbf{B}$ の関係 $\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0}$ を用いると

$$E = 2 \cdot q_m H \cdot \frac{d}{2}(1 - \cos \theta_0) = \frac{q_m dB}{\mu_0}(1 - \cos \theta_0) = |\boldsymbol{\mu}|B - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}, \quad (6.97)$$

となる。

よって、いずれの場合もエネルギーは等しいことがわかる。エネルギーの基準点は自由に設定してよいから、 $\theta_0 = \frac{\pi}{2}$ の場合を基準にとる

$$E = [|\boldsymbol{\mu}|B - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}]_{\theta_0} - [|\boldsymbol{\mu}|B - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}]_{\theta_0 = \frac{\pi}{2}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}, \quad (6.98)$$

となる。

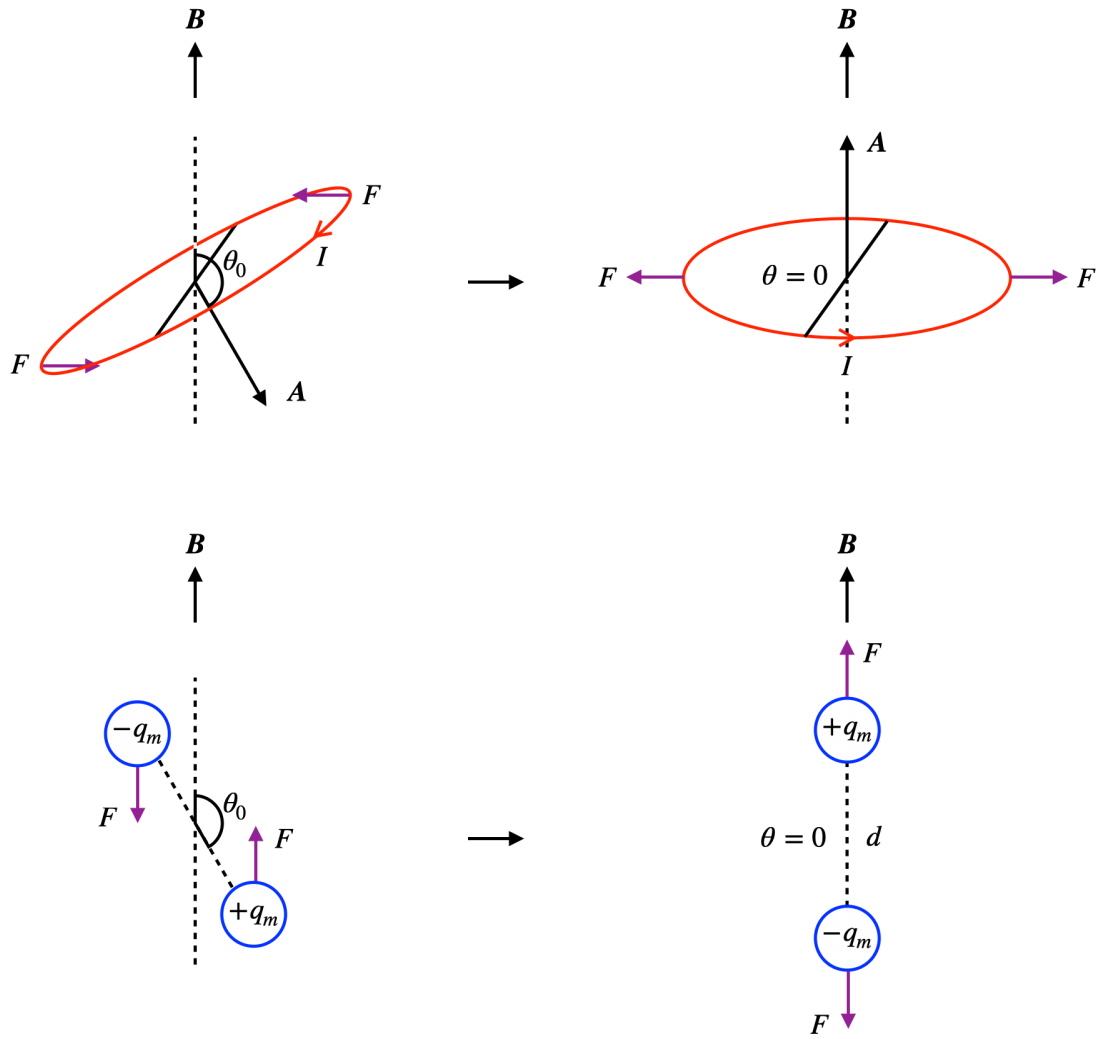


図 40: 磁束密度中の磁気モーメントのエネルギー。初期位置 (左) から最安定位置 (右) まで磁束密度 B によってなされる仕事、初期位置におけるエネルギーである。

さて、円電流の例として点電荷 q が角速度 ω で回る状況を考えよう。点電荷の速度は $v = r\omega$ であり、電流は単位時間に断面を通過する電荷量であることを考えると、磁気モーメントは

$$\mu = \frac{q}{2\pi r/v} \cdot \pi r^2 = \frac{q}{2} r^2 \omega, \quad (6.99)$$

となる。一方、この系の軌道角運動量 L は

$$L = mrv = mr^2\omega, \quad (6.100)$$

なので、これらの比は

$$\mu = \frac{q}{2m} L, \quad (6.101)$$

となる。全電荷 q と全質量 m が同じ分布 $P(\mathbf{x})$ で存在している場合も同じ結果が得られる。実際、微小領域 d^3x に存在する電荷が作り出す微小磁気モーメント $d\mu$ と微小角運動量 dL は、上式において $q \rightarrow qP(\mathbf{x})d^3x$, $m \rightarrow mP(\mathbf{x})d^3x$ とすればよいので

$$d\mu = \frac{q}{2} r^2 \omega P(\mathbf{x}) d^3x, \quad dL = mr^2 \omega P(\mathbf{x}) d^3x, \quad (6.102)$$

となり、よってどのような分布であっても

$$\mu = \int d\mu = \frac{q\omega}{2} \int d^3x r^2 P(\mathbf{x}), \quad L = \int dL = m\omega \int d^3x r^2 P(\mathbf{x}) \quad \Rightarrow \quad \mu = \frac{q}{2m} L, \quad (6.103)$$

となる。磁気双極子モーメントと軌道角運動量には方向があったことを思い出すと

古典電磁気学における磁気モーメントと軌道角運動量の関係

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2m} \mathbf{L}, \quad (6.104)$$

となる。これを量子力学の軌道角運動量 L およびスピン角運動量 S に拡張する。古典力学とのずれが生じる可能性を考慮して、以下のような g 因子 (g -factor) を導入する。

量子力学における磁気モーメントと軌道角運動量の関係

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_L = g_L \frac{q}{2m} \hat{\mathbf{L}}. \quad (6.105)$$

量子力学における磁気モーメントとスピン角運動量の関係

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_S = g_S \frac{q}{2m} \hat{\mathbf{S}}. \quad (6.106)$$

電子の場合、電荷は $q = -e$ (< 0) であり、 $g_L = 1$, $g_S \simeq 2$ である。後者は Dirac 方程式をよく観察すると出てくるが、量子力学では与えられたものとして扱う。軌道角運動量 $\hat{\mathbf{L}}$ およびスピン角運動量 $\hat{\mathbf{S}}$ の固有値は典型的に $\hbar$ 程度なので、それを括り出し、

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_L = g_L \mu_B \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar}, \quad \hat{\boldsymbol{\mu}}_S = g_S \mu_B \frac{\hat{\mathbf{S}}}{\hbar}, \quad \mu_B := \frac{q\hbar}{2m}, \quad (6.107)$$

と書くこともある。この μ_B を **Bohr 磁子 (Bohr magneton)** と呼ぶ。本小節ではスピン角運動量だけに着目していたので、それに従い以下では式 (6.106) だけ考える。また、 g 因子を含む煩雑な数ファクターを、以下のように**磁気回転比 (gyromagnetic ratio もしくは magnetogyric ratio) γ** に押し込めることにする

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_S = \gamma \hat{\mathbf{S}}, \quad \gamma := g_S \frac{q}{2m}. \quad (6.108)$$

以下スピン角運動量のみを考えるので、添字 S は省略し、

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma \hat{\mathbf{S}}. \quad (6.109)$$

と書く。

上の議論により、磁気モーメントが磁束密度 $\mathbf{B}$ の中に置かれるとエネルギー $E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ が生じるのであった。よって、この系の Hamiltonian は

スピン磁場相互作用の Hamiltonian

$$\hat{H} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} = -\gamma \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}, \quad (6.110)$$

と推察される。スピンを持つ粒子を磁束密度中に置くと、この Hamiltonian に従って **Larmor 歳差運動 (Larmor pre-**

cession) という振る舞いが現れる。以下ではこれを計算する。一様な磁束密度 $\mathbf{B}$ は z 方向を向いている

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (6.111)$$

とすると、Hamiltonian は

$$\hat{H} = -\gamma B_0 \hat{S}_z \stackrel{\text{表示}}{=} -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (6.112)$$

となる。この Hamiltonian に対するエネルギー固有状態は、以前求めた $\hat{S}_z$ の固有状態 $|\chi_{\pm}\rangle$ であり、対応するエネルギー固有値と合わせて

$$|\chi_{+}\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \left(E_{+} = -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2}\right), \quad |\chi_{-}\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \left(E_{-} = \frac{\gamma B_0 \hbar}{2}\right), \quad (6.113)$$

と求まる。Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\chi(t)\rangle = \hat{H} |\chi(t)\rangle, \quad (6.114)$$

であるが、これはすぐに解けて、

$$|\chi(t)\rangle = e^{-\frac{iE_{+}t}{\hbar}} |\chi_{+}\rangle \langle \chi_{+} | \chi(t=0) \rangle + e^{-\frac{iE_{-}t}{\hbar}} |\chi_{-}\rangle \langle \chi_{-} | \chi(t=0) \rangle, \quad (6.115)$$

となるのであった。ここで初期状態を

$$\langle \chi_{+} | \chi(t=0) \rangle = a, \quad \langle \chi_{-} | \chi(t=0) \rangle = b, \quad (6.116)$$

としよう。規格化条件から

$$|a|^2 + |b|^2 = 1, \quad (6.117)$$

である。全体にかかる位相は観測量に影響しないので、その不定性を用いて a を実数とし、

$$a = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right), \quad b = e^{i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right), \quad (6.118)$$

と置く。このとき、一般の時刻 t での状態は

$$|\chi(t)\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \\ e^{i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix}, \quad (6.119)$$

となることがわかる。この状態の下で、スピン演算子の期待値は

$$\langle \hat{S}_x \rangle := \langle \chi(t) | \hat{S}_x | \chi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \cos(\gamma B_0 t - \delta), \quad (6.120)$$

$$\langle \hat{S}_y \rangle := \langle \chi(t) | \hat{S}_y | \chi(t) \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sin \alpha \sin(\gamma B_0 t - \delta), \quad (6.121)$$

$$\langle \hat{S}_z \rangle := \langle \chi(t) | \hat{S}_z | \chi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \alpha, \quad (6.122)$$

となるため、期待値 $\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$ は z 軸から角度 α だけ傾いたまま、**Larmor 振動数 (Larmor frequency)**

$$\omega = \gamma B_0, \quad (6.123)$$

で歳差運動をすることがわかる (図 41)。

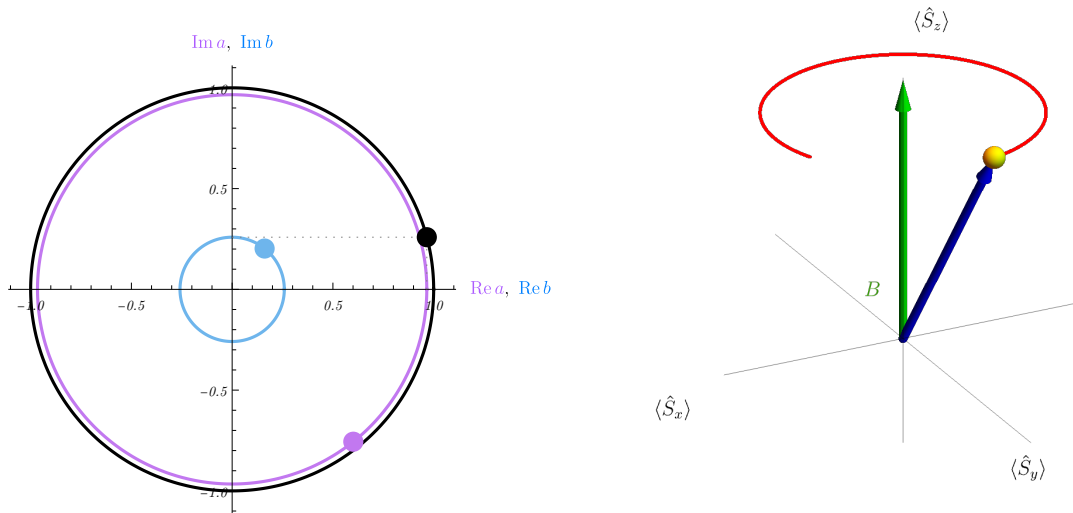


図 41: Larmor 歳差運動の様子。初期条件は $\alpha = \frac{\pi}{6}$, $\delta = 0$ とした。左図は a, b の実部および虚部であり、右図はスピン演算子の期待値である。

Stern-Gerlach の実験 スピン磁場相互作用の Hamiltonian

$$\hat{H} = -\gamma \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}, \quad (6.124)$$

がもたらす別の帰結を見てみよう。図 42 のように、 z 方向の磁束密度

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (6.125)$$

の中にこの粒子を置く。粒子の波束は空間的に十分局在しているとし、まずはスピン状態だけに着目すると、粒子のそれぞれのスピン状態 $|\chi_{\pm}\rangle$ に対し、エネルギーは

$$E_{\pm} = \mp \frac{\hbar \gamma}{2} B_0, \quad (6.126)$$

となることがわかる。ここで磁場が z 方向に変化しているとする、この粒子には

$$F_{\pm} = -\frac{\partial}{\partial z} E_{\pm} = \pm \frac{\hbar\gamma}{2} \frac{\partial}{\partial z} B_0(z), \quad (6.127)$$

の力がかかる。つまり、この粒子は $\hat{S}_z$ の固有値に応じて異なる空間運動をすることが期待される。

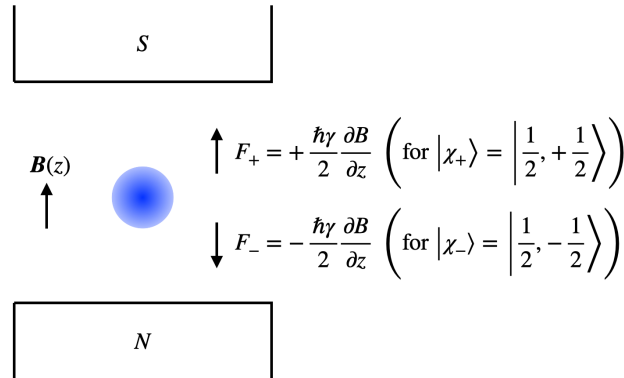


図 42: 磁気モーメントを持つ粒子を磁束密度中に置いた場合に、 $\hat{S}_z$ の固有値によって異なる力が働く様子。

これを確かめたのが **Stern-Gerlach の実験** である。図 43 のように、磁気モーメントを持つ粒子のビームを磁束密度中に打ち込むことを考える。磁石の幅を l とし、ビームの速度を v とする。いくつか注意点がある。

- 粒子が電荷を持っている場合、上記のスピン状態に依存した力だけではなく、ローレンツ力 $\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ が働くため議論が複雑になる。しかし実は電氣的に中性な粒子でも、それが電荷を持つ複数の構成要素から成る複合粒子である場合、それぞれの構成要素の電荷は打ち消し合うが磁気モーメントは必ずしも打ち消さないため、一般に磁気モーメントを持つ。よってここでは電氣的に中性な、しかし磁気モーメントは持っているような粒子を考える。
- 実験室系で磁場のみが存在する図 43 のような場合でも、粒子の重心系から見ると、Lorentz 変換により磁場と電場が両方存在するように見える。ここではこの効果が無視できるくらい低速のビームを打ち込んだ場合を考える。
- 図 43 ではビームの z 方向の変位が強調されているが、実際には軌道の変化はわずかである。

さて、この粒子の初期状態が $|\chi_{\pm}\rangle$ のいずれかである場合、磁石の間を通過する際の z 方向の加速度は

$$\frac{F_{\pm}}{m} = \pm \frac{\hbar\gamma}{2m} \frac{\partial}{\partial z} B_0(z), \quad (6.128)$$

であるから、通過時間が $\frac{l}{v}$ であることを考慮して、磁石を通過した直後には

$$\Delta z_{\pm} = \frac{1}{2} \frac{F_{\pm}}{m} \left(\frac{l}{v} \right)^2 = \pm \frac{\hbar\gamma l^2}{2mv^2} \frac{\partial}{\partial z} B_0(z), \quad (6.129)$$

の変位が生じていることがわかる。入射粒子が一般の状態 (6.72) の場合には、確率 $|a|^2$ と $|b|^2$ で粒子がそれぞれの軌道に観測される。重要なことは、**スピン状態 $|\chi_{\pm}\rangle$ に応じて、軌道が離散的に分離すること** である。磁気モーメントが古典物理的な要因からもたらされている場合、特に軌道が離散化する理由は見当たらない。しかし量子論においては、粒子のスピン状態が $\hat{S}_z$ の固有状態として分離しているため、軌道も離散的になることが予想される。したがって、軌道の離散的な分離は量子論の直接的な証拠になっている。また、Stern-Gerlach の実験は

- 不明な初期状態から、スピン演算子の特定の固有状態を選び出すこと
- スピン状態を測定すること

が原理的に可能であることを示している。実際、特定の固有状態を選び出すには離散化した粒子のビームのうち片方のみを取り出せばよく、またスピン状態の測定は磁石の通過直後の位置にスクリーンを置けばよい。このことから、Stern-Gerlachの実験は量子論の哲学的側面に重要な寄与をした [1]。

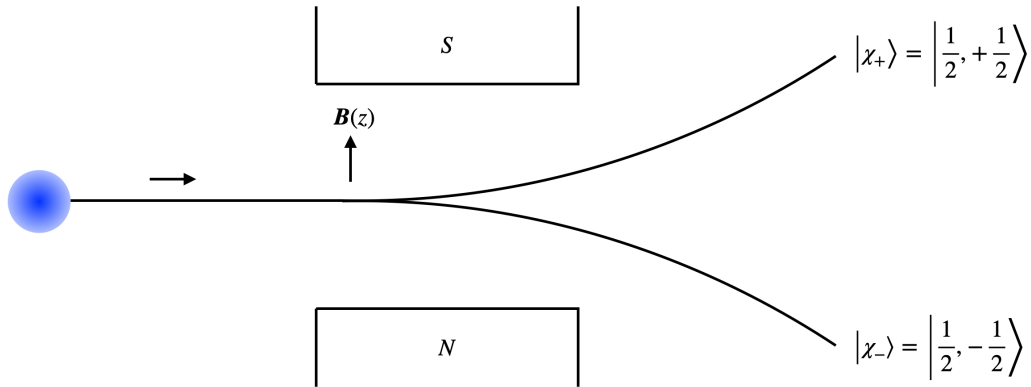


図 43: Stern-Gerlach の実験のセットアップ。実際の実験は銀原子を用いて行われている ([1] 脚注 49)。

コラム：E-H 対応と E-B 対応

Maxwell 方程式には、電場 $\mathbf{E}$ と電束密度 $\mathbf{D}$ 、および磁場 $\mathbf{H}$ と磁束密度 $\mathbf{B}$ が現れる。これらのうち前者 2 つと後者 2 つをどう対応付けるかに流儀があり、表 6 を参考にこれを解説する。磁気モーメントの定義にもこれに関わってくる。電荷を ρ 、電流を $\mathbf{j}$ として、Maxwell 方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (6.130)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (6.131)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (6.132)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (6.133)$$

である。まず気付くのは、仮に磁荷 q_m およびそれが動くことにより生じる磁流 $\mathbf{j}_m$ があったとすると、Maxwell 方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (6.134)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mathbf{j}_m - \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (6.135)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = \rho_m \quad (6.136)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (6.137)$$

となり、 $(\mathbf{E}, \mathbf{D})$ 側と $(\mathbf{H}, \mathbf{B})$ 側で対称的になることである。特に電場 $\mathbf{E}$ に対応するものは磁場 $\mathbf{H}$ であり、そのためこれを E-H 対応と言う。この場合、電荷 q および磁荷 q_m に力を与えるのが電場 $\mathbf{E}$ および磁場 $\mathbf{H}$ であり、これらから生み出されるのが電束密度 $\mathbf{D}$ および磁束密度 $\mathbf{B}$ となる。

しかしこの対応には問題が 1 つだけある。**磁荷は観測されていない**のである。式が対称的になるからといって、観測されていないものを基に理論を作るのはいただけない。そこで、 $(\mathbf{H}, \mathbf{B})$ 側について主体を磁荷 q_m ではなく電流 I とすることでこの問題を解決する。これを E-B 対応と言い、現在では主流の対応関係はこちらである。E-H

対応と比べて、 $E-B$ 対応では $\mathbf{H}$ と $\mathbf{B}$ のどちらが力を与え、どちらが生み出されるかが逆転する。実際、電流 I は磁場 $\mathbf{H}$ を生み出し ($d\mathbf{H} = \frac{I}{4\pi} \frac{d\mathbf{l} \times \mathbf{R}}{R^3}$)、磁束密度 $\mathbf{B}$ が電流 I に力を与える ($d\mathbf{F} = I d\mathbf{l} \times \mathbf{B}$)。ちなみに、主体に力を与える場を力場、主体から生み出される場を源場と言うこともある。 $E-B$ 対応では力場は電場 $\mathbf{E}$ と磁束密度 $\mathbf{B}$ 、源場は電束密度 $\mathbf{D}$ と磁場 $\mathbf{H}$ である。

さて、磁気モーメントの定義であるが、 $E-H$ 対応であれば (磁荷) $\times$ (距離) で $\boldsymbol{\mu} = q_m \mathbf{d}$ と定義されるのだが、本ノートで用いている $E-B$ 対応では電流を基準に定義するため、 $\boldsymbol{\mu} = I \mathbf{A}$ と定義される。 $I \mathbf{A} = q_m \mathbf{d} / \mu_0$ で対応を付ける場合、両者の磁気モーメントは真空の透磁率 μ_0 倍だけ異なる。

電荷 q に力を与える	電荷 q が生み出す	電荷 q に力を与える	電荷 q が生み出す
電場 $\mathbf{E}$	電束密度 $\mathbf{D}$	電場 $\mathbf{E}$	電束密度 $\mathbf{D}$
磁荷 q_m に力を与える	磁荷 q_m が生み出す	電流 I が生み出す	電流 I に力を与える
磁場 $\mathbf{H}$	磁束密度 $\mathbf{B}$	磁場 $\mathbf{H}$	磁束密度 $\mathbf{B}$

表 6: $E-H$ 対応 (左) と $E-B$ 対応 (右)。

[問 6.9] ([1] Problem 4.35 改)

Larmor 歳差運動の時間発展を計算しよう。Hamiltonian および Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\chi(t)\rangle = \hat{H} |\chi(t)\rangle, \quad \hat{H} = -\gamma \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B},$$

で与えられ、外部から印加された磁束密度 $\mathbf{B}$ は

$$B_x = 0, \quad B_y = 0, \quad B_z = B_0,$$

とする。また、スピン演算子は

$$\hat{S}_x \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

で与えられる。

(1) Hamiltonian の固有状態が

$$|\chi_+\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\chi_-\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

で与えられることを示し、対応するエネルギー固有値を求めよ。

(2) 初期状態

$$|\chi(t=0)\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ e^{i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix},$$

に対し、一般の時刻 t における状態 $|\chi(t)\rangle$ を求めよ。また、この歳差運動の角振動数を求めよ。

(3) 時刻 t におけるスピンの期待値 $\langle \chi(t) | \hat{S}_x | \chi(t) \rangle, \langle \chi(t) | \hat{S}_y | \chi(t) \rangle, \langle \chi(t) | \hat{S}_z | \chi(t) \rangle$ を求め、歳差運動の角振動数を求めよ。また、時刻 t において $\hat{S}_x$ を測定したとき、測定値 $+\frac{\hbar}{2}$ を得る確率および $-\frac{\hbar}{2}$ を得る確率をそれぞれ求めよ。

[解 6.9]

(1) Hamiltonian は

$$\hat{H} \stackrel{\text{表示}}{=} -\frac{\hbar}{2} \gamma B_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

であるから、

$$\hat{H} |\chi_+\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} -\frac{\hbar}{2} \gamma B_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \gamma B_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{H} |\chi_-\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} +\frac{\hbar}{2} \gamma B_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \gamma B_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

より確かに $|\chi_{\pm}\rangle$ は Hamiltonian の固有状態であり、対応する固有値は $E_{\pm} := \mp \frac{\hbar}{2} \gamma B_0$ である。

(2) それぞれのエネルギー固有状態は $e^{-\frac{iE_{\pm}t}{\hbar}}$ で時間発展するから、

$$|\chi(t)\rangle = e^{-\frac{iE_+t}{\hbar}} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) |\chi_+\rangle + e^{-\frac{iE_-t}{\hbar}} e^{i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) |\chi_-\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \\ e^{i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix},$$

となる。

(3) スピンの期待値は

$$\begin{aligned} \langle \chi(t) | \hat{S}_x | \chi(t) \rangle &\stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} & e^{-i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \\ e^{i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \cos(\gamma B_0 t - \delta), \\ \langle \chi(t) | \hat{S}_y | \chi(t) \rangle &\stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} & e^{-i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \\ e^{i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \sin \alpha \sin(\gamma B_0 t - \delta), \\ \langle \chi(t) | \hat{S}_z | \chi(t) \rangle &\stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} & e^{-i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \\ e^{i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cos \alpha, \end{aligned}$$

となるので、歳差運動の角振動数は $\omega = \gamma B_0$ である。また、 $|\chi(t)\rangle$ を $\hat{S}_x$ の固有値 $\pm \frac{\hbar}{2}$ の固有状態

$$|\chi_+^{(x)}\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\chi_-^{(x)}\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

を用いて表すと

$$|\chi(t)\rangle = \frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} + e^{i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}}}{\sqrt{2}} |\chi_+^{(x)}\rangle + \frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} - e^{i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}}}{\sqrt{2}} |\chi_-^{(x)}\rangle,$$

であるから、測定値 $\pm \frac{\hbar}{2}$ を得る確率 $P_{\pm}^{(x)}(t)$ はそれぞれ

$$P_+^{(x)}(t) = \left| \frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} + e^{i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}}}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sin \alpha \cos(\gamma B_0 t - \delta),$$

$$P_-^{(x)}(t) = \left| \frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} - e^{i\delta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}}}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin \alpha \cos(\gamma B_0 t - \delta),$$

となる。

[問 6.10] ([1] Problem 4.74)

Stern-Gerlach の実験を Schrödinger 方程式から記述しよう。以下、空間は x, z 方向だけを考える。Hamiltonian および Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \gamma \hat{S} \cdot \mathbf{B},$$

で与えられ、 $\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_z^2$ である。また $\mathbf{B}$ は外部から印加された磁束密度であり、 B_0, α を定数として

$$B_x = -\alpha x, \quad B_z = B_0 + \alpha z,$$

とする。空間に関しては $\{|x, z\rangle\}$ 表示、スピンに関しては $\{|\chi_{\pm}\rangle\}$ 表示を用いると、

$$|\Psi(t)\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \Psi_+(t, x, z) \\ \Psi_-(t, x, z) \end{pmatrix}, \quad \hat{p}_x \stackrel{\text{表示}}{=} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_z \stackrel{\text{表示}}{=} -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}, \quad \hat{S}_x \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

であることに注意して、以下の問いに答えよ。

- (1) 上記の表示を Schrödinger 方程式に代入することにより、 $\Psi_{\pm}(t, x, z)$ に対する方程式を導け。
- (2) (1) で得られた方程式を簡潔にするため

$$\Psi_{\pm}(t, x, z) =: e^{\pm \frac{i\gamma B_0 t}{2}} \tilde{\Psi}_{\pm}(t, x, z),$$

とする。 $\tilde{\Psi}_{\pm}(t, x, z)$ に対する方程式を導け。

- (3) B_0 が大きい場合、(2) で求めた方程式のうち $e^{\pm i\gamma B_0 t}$ を含む部分は激しく振動しキャンセルするため無視してよい。このとき、 $\tilde{\Psi}_{\pm}(t, x, z)$ に対する方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}_{\pm}(t, x, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \tilde{\Psi}_{\pm}(t, x, z) + V_{\pm}(x, z) \tilde{\Psi}_{\pm}(t, x, z),$$

の形に帰着する。 $V_{\pm}(x, z)$ を求め、軌道が分離することを説明せよ。

[解 6.10]

(1) 与えられた表式を Schrödinger 方程式に代入し、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Psi_+(t, x, z) \\ \Psi_-(t, x, z) \end{pmatrix} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \begin{pmatrix} \Psi_+(t, x, z) \\ \Psi_-(t, x, z) \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \gamma \alpha x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_+(t, x, z) \\ \Psi_-(t, x, z) \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2} \gamma (B_0 + \alpha z) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_+(t, x, z) \\ \Psi_-(t, x, z) \end{pmatrix},$$

となるので、整理して

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_+(t, x, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi_+(t, x, z) + \frac{\hbar}{2} \gamma \alpha x \Psi_-(t, x, z) - \frac{\hbar}{2} \gamma (B_0 + \alpha z) \Psi_+(t, x, z),$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_-(t, x, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi_-(t, x, z) + \frac{\hbar}{2} \gamma \alpha x \Psi_+(t, x, z) + \frac{\hbar}{2} \gamma (B_0 + \alpha z) \Psi_-(t, x, z),$$

となる。

(2) 与えられた表式を (1) の結果に代入し、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}_+(t, x, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \tilde{\Psi}_+(t, x, z) + \frac{\hbar}{2} \gamma \alpha x e^{-i\gamma B_0 t} \tilde{\Psi}_-(t, x, z) - \frac{\hbar}{2} \gamma \alpha z \tilde{\Psi}_+(t, x, z),$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}_-(t, x, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \tilde{\Psi}_-(t, x, z) + \frac{\hbar}{2} \gamma \alpha x e^{i\gamma B_0 t} \tilde{\Psi}_+(t, x, z) + \frac{\hbar}{2} \gamma \alpha z \tilde{\Psi}_-(t, x, z),$$

となる。

(3) (2) の結果から振動部分を除くと

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}_+(t, x, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \tilde{\Psi}_+(t, x, z) - \frac{\hbar}{2} \gamma \alpha z \tilde{\Psi}_+(t, x, z),$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}_-(t, x, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \tilde{\Psi}_-(t, x, z) + \frac{\hbar}{2} \gamma \alpha z \tilde{\Psi}_-(t, x, z),$$

となるが、これはポテンシャル

$$V_{\pm}(x, z) = \mp \frac{\hbar}{2} \gamma \alpha z,$$

の下で運動する粒子の Schrödinger 方程式である。よって、例えば $\gamma > 0, \alpha > 0$ の場合、 $\Psi_{\pm}(t, x, z)$ の波束はそれぞれ $\pm z$ 方向へ分離する。

6.3 角運動量の合成 (導入)

動機 前小節まで、単独の粒子の軌道角運動量およびスピン角運動量を取り扱ってきた。軌道角運動量は量子数 l, m で

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle, \quad \hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle, \quad (6.138)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = -l, -(l-1), \dots, (l-1), l, \quad (6.139)$$

のように指定され、スピン角運動量は量子数 s, m で

$$\hat{S}^2 |s, m\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m\rangle, \quad \hat{S}_z |s, m\rangle = \hbar m |s, m\rangle, \quad (6.140)$$

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots, \quad m = -s, -(s-1), \dots, (s-1), s, \quad (6.141)$$

のように指定されるのであった。また、粒子種によって s の値は決まっており、対応する m の値が内部自由度になっていた。例えば電子は $s = \frac{1}{2}$ を持つ粒子であり、 $m = \pm \frac{1}{2}$ が 2 通りの内部状態に対応していた。

さて、本小節で答える問いは、

角運動量が複数ある場合、系全体の角運動量はどうなるか

である。この「角運動量が複数」にはいくつかのパターンがある。例えば

- 1 つの粒子が外部自由度としての軌道角運動量をもち、同時に内部自由度としてのスピン角運動量も持っている場合
- 軌道角運動量を見捨てる系で、2 つの粒子がスピン角運動量を持っている場合

等である。この、角運動量が複数ある場合に、系全体の角運動量を求める手続きを**角運動量の合成**と言う (図 44)。本小節では、導入として後者の場合に着目し、 $s = \frac{1}{2}$ の粒子が 2 つある系全体の角運動量について見ることにする。

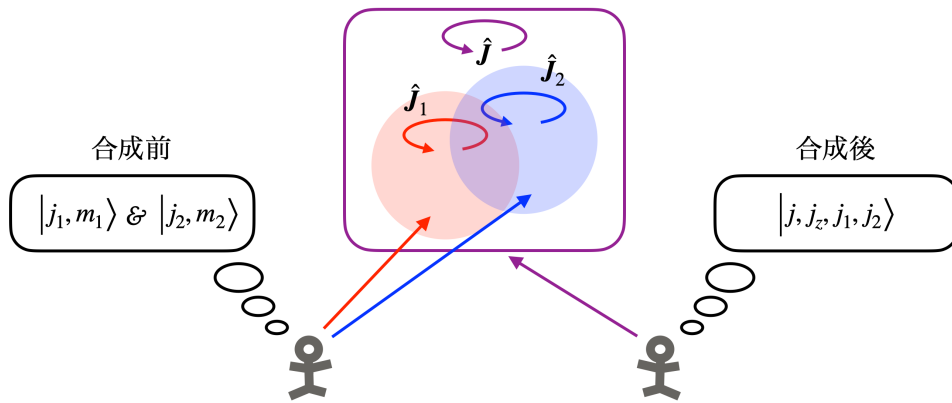


図 44: 系の角運動量に対する複数の見方。それぞれの構成要素の角運動量を見たい場合もあれば (左)、系全体の角運動量を見たい場合もある (右)。角運動量 j_1, j_2 は軌道角運動量でもスピン角運動量でもよい。

スピン $\frac{1}{2}$ の合成 まず、2 つの粒子に対応したスピン演算子を導入する

$$\text{粒子 1: } \hat{S}_1 = \begin{pmatrix} \hat{S}_{1x} \\ \hat{S}_{1y} \\ \hat{S}_{1z} \end{pmatrix}, \quad \text{粒子 2: } \hat{S}_2 = \begin{pmatrix} \hat{S}_{2x} \\ \hat{S}_{2y} \\ \hat{S}_{2z} \end{pmatrix}. \quad (6.142)$$

粒子 1 と粒子 2 のスピン演算子は交換する

$$[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_{2j}] = 0 \quad (i, j = x, y, z). \quad (6.143)$$

また、これらは独立に角運動量の交換関係を満たす

$$[\hat{S}_{1x}, \hat{S}_{1y}] = -[\hat{S}_{1y}, \hat{S}_{1x}] = i\hbar \hat{S}_{1z}, \quad [\hat{S}_{1y}, \hat{S}_{1z}] = -[\hat{S}_{1z}, \hat{S}_{1y}] = i\hbar \hat{S}_{1x}, \quad [\hat{S}_{1z}, \hat{S}_{1x}] = -[\hat{S}_{1x}, \hat{S}_{1z}] = i\hbar \hat{S}_{1y}, \quad (6.144)$$

$$[\hat{S}_{2x}, \hat{S}_{2y}] = -[\hat{S}_{2y}, \hat{S}_{2x}] = i\hbar \hat{S}_{2z}, \quad [\hat{S}_{2y}, \hat{S}_{2z}] = -[\hat{S}_{2z}, \hat{S}_{2y}] = i\hbar \hat{S}_{2x}, \quad [\hat{S}_{2z}, \hat{S}_{2x}] = -[\hat{S}_{2x}, \hat{S}_{2z}] = i\hbar \hat{S}_{2y}. \quad (6.145)$$

スピン角運動量の二乗はそれぞれの粒子について

$$\hat{S}_1^2 := \hat{S}_{1x}^2 + \hat{S}_{1y}^2 + \hat{S}_{1z}^2, \quad (6.146)$$

$$\hat{S}_2^2 := \hat{S}_{2x}^2 + \hat{S}_{2y}^2 + \hat{S}_{2z}^2, \quad (6.147)$$

で導入される。以前と同様、前者は $\hat{S}_{1x}, \hat{S}_{1y}, \hat{S}_{1z}$ のいずれとも交換し、後者は $\hat{S}_{2x}, \hat{S}_{2y}, \hat{S}_{2z}$ のいずれとも交換する

$$[\hat{S}_1^2, \hat{S}_{1x}] = 0, \quad [\hat{S}_1^2, \hat{S}_{1y}] = 0, \quad [\hat{S}_1^2, \hat{S}_{1z}] = 0, \quad (6.148)$$

$$[\hat{S}_2^2, \hat{S}_{2x}] = 0, \quad [\hat{S}_2^2, \hat{S}_{2y}] = 0, \quad [\hat{S}_2^2, \hat{S}_{2z}] = 0. \quad (6.149)$$

粒子 1, 2 それぞれについて交換する演算子の組を $\hat{S}_1^2, \hat{S}_{1z}$ および $\hat{S}_2^2, \hat{S}_{2z}$ に取り、昇降演算子を

$$\hat{S}_{1\pm} := \hat{S}_{1x} \pm i\hat{S}_{1y}, \quad \hat{S}_{2\pm} := \hat{S}_{2x} \pm i\hat{S}_{2y}, \quad (6.150)$$

で構成する。これらは $[\hat{S}_{1z}, \hat{S}_{1\pm}] = \pm\hbar \hat{S}_{1\pm}, [\hat{S}_{2z}, \hat{S}_{2\pm}] = \pm\hbar \hat{S}_{2\pm}$ より、演算子 $\hat{S}_{1z}$ および $\hat{S}_{2z}$ の固有値を $\pm\hbar$ だけ変化させる。

さて、この系の状態をどう指定するべきだろうか。粒子 1 だけあるいは粒子 2 だけであれば、粒子 1, 2 の状態を指定する量子数を (s_1, m_1) および (s_2, m_2) として、 $|s_1, m_1\rangle$ あるいは $|s_2, m_2\rangle$ とすればよかった。今の場合粒子が 2 つあるので、状態の指定には $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ としなければならない。ラベルの順番が s_1, m_1, s_2, m_2 でなく s_1, s_1, m_2, m_2 であるのは慣習に従っている。実は状態 $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ は**テンソル積**と呼ばれるベクトル空間の合成を考えていることに対応し、正確には $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle = |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle$ の略記である。重要な点は「状態 $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ は粒子 1 のスピン演算子に対しては $|s_1, m_1\rangle$ として振る舞い、粒子 2 のスピン演算子に対しては $|s_2, m_2\rangle$ として振る舞う」ということである。別の言い方をすると、粒子 1 および粒子 2 について交換する演算子がそれぞれ $\hat{S}_1^2, \hat{S}_{1z}$ および $\hat{S}_2^2, \hat{S}_{2z}$ であり、粒子 1 と粒子 2 のスピン演算子同士は交換するので、計 4 つの交換する演算子があり、対応するラベルを (s_1, m_1, s_2, m_2) としている。今の場合スピン $\frac{1}{2}$ の粒子を考えているため $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ であるから、

$$\hat{S}_1^2 |s_1, s_2; m_1, m_2\rangle = \hbar^2 s_1(s_1 + 1) |s_1, s_2; m_1, m_2\rangle, \quad \hat{S}_{1z} |s_1, s_2; m_1, m_2\rangle = \hbar m_1 |s_1, s_2; m_1, m_2\rangle, \quad s_1 = \frac{1}{2}, \quad m_1 = \pm \frac{1}{2}, \quad (6.151)$$

$$\hat{S}_2^2 |s_1, s_2; m_1, m_2\rangle = \hbar^2 s_2(s_2 + 1) |s_1, s_2; m_1, m_2\rangle, \quad \hat{S}_{2z} |s_1, s_2; m_1, m_2\rangle = \hbar m_2 |s_1, s_2; m_1, m_2\rangle, \quad s_2 = \frac{1}{2}, \quad m_2 = \pm \frac{1}{2}, \quad (6.152)$$

となる。また、昇降演算子の作用は

$$\hat{S}_{1\pm} |s_1, s_2; m_1, m_2\rangle = \hbar \sqrt{s_1(s_1 + 1) - m_1(m_1 \pm 1)} |s_1, s_2; m_1 \pm 1, m_2\rangle, \quad (6.153)$$

$$\hat{S}_{2\pm} |s_1, s_2; m_1, m_2\rangle = \hbar \sqrt{s_2(s_2 + 1) - m_2(m_2 \pm 1)} |s_1, s_2; m_1, m_2 \pm 1\rangle, \quad (6.154)$$

である ([問 6.2] 参照)。

ここまでは粒子 1, 2 をいわば別々に導入した。本小節の目的である角運動量の合成というのは、粒子 1, 2 を合わせた

系が、スピン演算子

$$\hat{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \hat{S}_{1x} + \hat{S}_{2x} \\ \hat{S}_{1y} + \hat{S}_{2y} \\ \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z} \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2, \quad (6.155)$$

の固有状態の観点からどう見えるか、という話である。この全スピン角運動量 $\hat{\mathbf{S}}$ の性質を調べてみよう。まず、各成分が角運動量の交換関係を満たすことがわかる

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = -[\hat{S}_y, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_z, \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = -[\hat{S}_z, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_x, \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = -[\hat{S}_x, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_y. \quad (6.156)$$

また、全スピン角運動量の二乗を

$$\hat{\mathbf{S}}^2 := \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2, \quad (6.157)$$

で導入すると、これは $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ のいずれとも交換することがわかる

$$[\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_x] = 0, \quad [\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_y] = 0, \quad [\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_z] = 0. \quad (6.158)$$

これらの交換関係は、 $\hat{\mathbf{S}} := \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ であること、および $\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2$ の交換関係に立ち戻って導くことができる。全スピン角運動量の二乗については、合成前のスピン演算子を用いて以下のようにも書ける

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}^2 &= (\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2)^2 \stackrel{[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_{2j}]=0}{=} \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 = \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}) \\ &= \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}. \end{aligned} \quad (6.159)$$

また、昇降演算子を

$$\hat{S}_{\pm} := \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y = (\hat{S}_{1x} + \hat{S}_{2x}) \pm i(\hat{S}_{1y} + \hat{S}_{2y}) = \hat{S}_{1\pm} + \hat{S}_{2\pm}, \quad (6.160)$$

で構成すると、 $[\hat{S}_z, \hat{S}_{\pm}] = \pm\hbar\hat{S}_{\pm}$ より演算子 $\hat{S}_{\pm}$ の固有値を $\pm\hbar$ だけ変化させることもわかる。

さて、これまでと同様に $\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_z$ を交換する演算子の組として取ることができるが、ここで交換する演算子が何個あるはずか考えてみよう。元々この系には $\hat{\mathbf{S}}_1^2, \hat{S}_{1z}, \hat{\mathbf{S}}_2^2, \hat{S}_{2z}$ の4つの交換する演算子があった。よって $\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_z$ 以外に、これらと交換する演算子がまだ2つ残っているはずである。実はその2つの演算子は $\hat{\mathbf{S}}_1^2, \hat{\mathbf{S}}_2^2$ であることがわかる。実際、 $\hat{\mathbf{S}}_1^2$ については

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{S}}_1^2] &= [\hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \hat{\mathbf{S}}_1^2] \stackrel{[\hat{S}_1^2, \hat{S}_1^2]=0, [\hat{S}_2^2, \hat{S}_1^2]=0}{=} 2[\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \hat{\mathbf{S}}_1^2] = 2[\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}, \hat{\mathbf{S}}_1^2] \\ &\stackrel{[\hat{S}_{2j}, \hat{\mathbf{S}}_1^2]=0}{=} 2\left([\hat{S}_{1x}, \hat{\mathbf{S}}_1^2]\hat{S}_{2x} + [\hat{S}_{1y}, \hat{\mathbf{S}}_1^2]\hat{S}_{2y} + [\hat{S}_{1z}, \hat{\mathbf{S}}_1^2]\hat{S}_{2z}\right) \stackrel{[\hat{S}_{1i}, \hat{\mathbf{S}}_1^2]=0}{=} 0. \end{aligned} \quad (6.161)$$

となり、 $\hat{\mathbf{S}}_2^2$ についても同様である。以前は $\hat{\mathbf{S}}_1^2$ と交換する演算子として $\hat{S}_{1z}$ を取っていたが、この $\hat{S}_{1z}$ は $\hat{\mathbf{S}}^2$ と交換しないため、もはや交換する演算子の組に入れられないことに注意しよう。実際、

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_{1z}] &= [\hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \hat{S}_{1z}] \stackrel{[\hat{\mathbf{S}}_1^2, \hat{S}_{1z}]=0, [\hat{\mathbf{S}}_2^2, \hat{S}_{1z}]=0}{=} 2[\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \hat{S}_{1z}] = 2[\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}, \hat{S}_{1z}] \\ &= 2\left([\hat{S}_{1x}, \hat{S}_{1z}]\hat{S}_{2x} + [\hat{S}_{1y}, \hat{S}_{1z}]\hat{S}_{2y}\right) = 2i\hbar(-\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1x}\hat{S}_{2y}) \neq 0, \end{aligned} \quad (6.162)$$

より交換しないことがわかる。 $\hat{S}_{2z}$ と $\hat{\mathbf{S}}^2$ についても同様に交換しない。以上をまとめると、交換する演算子の組として

交換する演算子の組

$$\text{合成前: } \hat{S}_1^2, \hat{S}_{1z}, \hat{S}_2^2, \hat{S}_{2z}, \quad (6.163)$$

$$\text{合成後: } \hat{S}^2, \hat{S}_z, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \quad (6.164)$$

を取ることがわかる。対応して、状態の指定方法は

状態の指定

$$\text{合成前: } |s_1, s_2, m_1, m_2\rangle, \quad (6.165)$$

$$\text{合成後: } |s, m, s_1, s_2\rangle \quad (\text{略記 } |s, m\rangle), \quad (6.166)$$

とする。合成後については、ラベル s_1, s_2 を省略して $|s, m\rangle$ と書き、合成前とのラベルの個数を変えることで混乱を避けることがあり、本ノートでもそれに従う。以上を表 7 にまとめる。

	$\hat{S}^2$	$\hat{S}_z$	$\hat{S}_1^2$	$\hat{S}_{1z}$	$\hat{S}_2^2$	$\hat{S}_{2z}$	状態の指定	状態の指定 (略記)
合成前			○	○	○	○	$ s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$	$ s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$
合成後	○	○	○		○		$ s, m, s_1, s_2\rangle$	$ s, m\rangle$

表 7: 交換する演算子の組。合成前についてラベルの順番が s_1, m_1, s_2, m_2 でなく s_1, s_1, m_2, m_2 であるのは単に慣習である。合成後については s_1, s_2 を省略して $|s, m\rangle$ と書き、合成前とのラベルの個数を変えることで混乱を避けることがある。

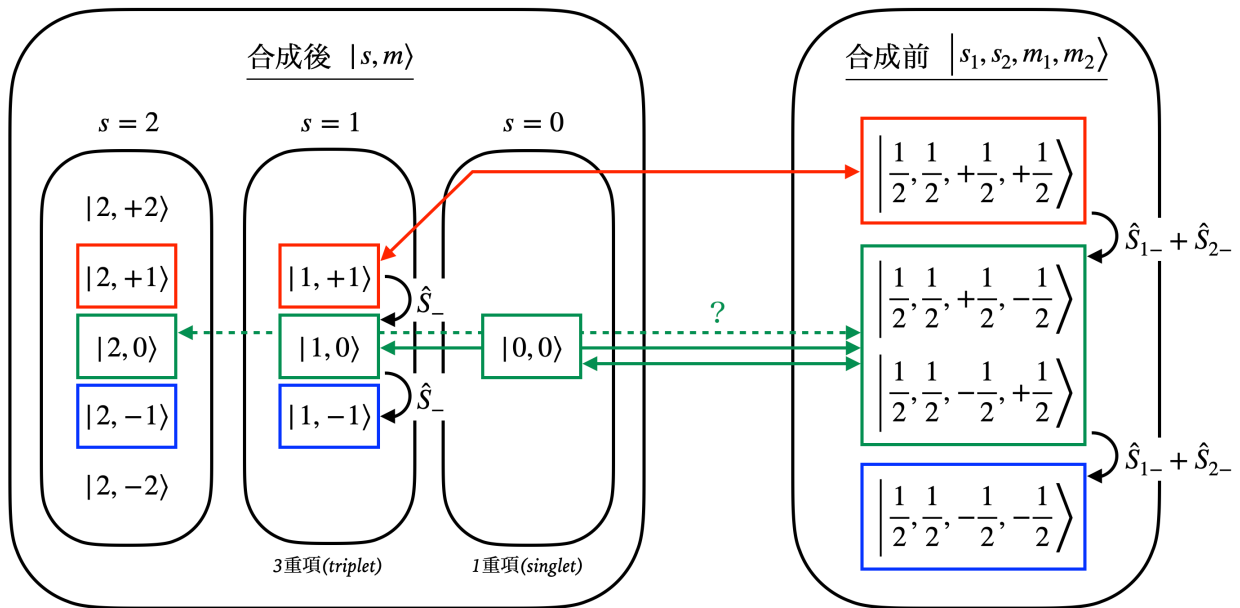


図 45: スピン $\frac{1}{2}$ の合成。色は $m = m_1 + m_2$ の値に対応している。

さて、我々は合成後の状態が合成前の状態とどう関連付いているか、つまり状態 $|s, m\rangle$ に状態 $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ がどれくらい含まれているか、あるいは状態 $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ に状態 $|s, m\rangle$ がどれくらい含まれているかに興味がある。これを定量化したものが、以下の Clebsch-Gordan 係数である

$$C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s} := \langle s, m | s_1, s_2, m_1, m_2 \rangle. \quad (6.167)$$

以下、スピン $\frac{1}{2}$ 粒子 $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ についてこの Clebsch-Gordan 係数を求めよう。合成前の状態 $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ は 4 つの直交するベクトルであり、つまり Hilbert 空間は 4 次元である。合成後の Hilbert 空間がどの $|s, m\rangle$ で張られ、各 $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ との内積がいくらかを求めるのが以下の作業になる。状況を図 45 に示す。

- まず、合成前の 4 つの状態 $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ は、実はすでに合成後の $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$ の固有ベクトルになっていることがわかる。実際、

$$\hat{S}_z |s_1, s_2, m_1, m_2\rangle = (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}) |s_1, s_2, m_1, m_2\rangle = (\hbar m_1 + \hbar m_2) |s_1, s_2, m_1, m_2\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |s_1, s_2, m_1, m_2\rangle, \quad (6.168)$$

であるから、 $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ は $\hat{S}_z$ の固有値 $\hbar(m_1 + m_2)$ の固有ベクトルである。一方、 $|s, m\rangle$ も $\hat{S}_z$ の固有値 $\hbar m$ の固有ベクトルである。そして Hermite 演算子の異なる固有値の固有ベクトルは直交するから、 $|s, m\rangle$ の中には $m = m_1 + m_2$ となるような $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ 以外は含まれていないことがわかる。これを数式で示すと、

$$\begin{aligned} \hbar m \langle s, m | s_1, s_2, m_1, m_2 \rangle &= \langle s, m | \hat{S}_z | s_1, s_2, m_1, m_2 \rangle = \langle s, m | (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}) | s_1, s_2, m_1, m_2 \rangle = \hbar(m_1 + m_2) \langle s, m | s_1, s_2, m_1, m_2 \rangle \\ \Rightarrow \hbar(m - m_1 - m_2) \langle s, m | s_1, s_2, m_1, m_2 \rangle &= 0 \\ \Rightarrow C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s} := \langle s, m | s_1, s_2, m_1, m_2 \rangle &= 0 \quad (m \neq m_1 + m_2), \end{aligned} \quad (6.169)$$

となる。したがって、図 45 に色で示したように、対応関係はこの時点で $m = m_1 + m_2$ であるものに限られる。ただし、 $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ は今のところ様々な s の値の $|s, m = m_1 + m_2\rangle$ と 0 でない内積を持つ可能性がある。

- 次に、図 45 に赤で示したような、 m_1, m_2 が許される最大値 $m_1 = s_1, m_2 = s_2$ を取る合成前の状態 $|s_1, s_2, m_1 = s_1, m_2 = s_2\rangle$ を考える。この状態は、 $s = s_1 + s_2$ となる合成後の状態 $|s = s_1 + s_2, m = m_1 + m_2\rangle$ とだけ内積を持つことが以下のよう示せる。まず、合成後のスピン演算子の二乗 $\hat{S}^2$ が以下のように書けたことを思い出そう

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}. \quad (6.170)$$

ここで、 $|s_1, s_2, m_1 = s_1, m_2 = s_2\rangle$ は $\hat{S}_{1+}$ あるいは $\hat{S}_{2+}$ で上げることはできない状態であるから、 $\hat{S}_{1+}$ あるいは $\hat{S}_{2+}$ を作用させると 0 になる。これを用いて、

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 |s_1, s_2, m_1 = s_1, m_2 = s_2\rangle &= (\hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}) |s_1, s_2, m_1 = s_1, m_2 = s_2\rangle \\ &= (\hbar^2 s_1(s_1 + 1) + \hbar^2 s_2(s_2 + 1) + 2 \cdot \hbar s_1 \cdot \hbar s_2) |s_1, s_2, m_1 = s_1, m_2 = s_2\rangle \\ &= \hbar^2(s_1 + s_2)(s_1 + s_2 + 1) |s_1, s_2, m_1 = s_1, m_2 = s_2\rangle, \end{aligned} \quad (6.171)$$

を得る。一方、

$$\hat{S}^2 |s, m = m_1 + m_2\rangle = \hbar^2 s(s + 1) |s, m = m_1 + m_2\rangle, \quad (6.172)$$

であるから、

$$\begin{aligned}
& \langle s, m = m_1 + m_2 | \hat{S}^2 | s_1, s_2, m_1 = s_1, m_2 = s_2 \rangle \\
&= \hbar^2 (s_1 + s_2)(s_1 + s_2 + 1) \langle s, m = m_1 + m_2 | s_1, s_2, m_1 = s_1, m_2 = s_2 \rangle \\
&= \hbar^2 s(s+1) \langle s, m = m_1 + m_2 | s_1, s_2, m_1 = s_1, m_2 = s_2 \rangle \\
\Rightarrow C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s} &:= \langle s, m = m_1 + m_2 | s_1, s_2, m_1 = s_1, m_2 = s_2 \rangle = 0 \quad (s \neq s_1 + s_2), \quad (6.173)
\end{aligned}$$

となる。つまり、合成前の状態 $|s_1, s_2, m_1 = s_1, m_2 = s_2\rangle$ と 0 でない内積を持つ合成後の状態は 1 つしかなく、それは $|s = s_1 + s_2, m = m_1 + m_2\rangle$ である。絶対値 1 の複素定数分の不定性があるが、通常それは 1 に取り、

$$|1, 1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (6.174)$$

となる。

- 式 (6.174) に $\hat{S}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}$ を作用させることで、合成後の $|s = s_1 + s_2, m = m_1 + m_2\rangle$ に対応する合成前の $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ が芋蔓式にわかる。これを示したのが図 45 の黒矢印である。実際、式 (6.174) に $\hat{S}_-$ を作用させ、

$$\hat{S}_- |1, 1\rangle = \hbar \sqrt{1(1+1) - 1(1-1)} |1, 0\rangle = \sqrt{2}\hbar |1, 0\rangle, \quad (6.175)$$

および

$$\begin{aligned}
\hat{S}_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle &= (\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \hbar \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}-1\right)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle + \hbar \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}-1\right)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \hbar \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right), \quad (6.176)
\end{aligned}$$

を得るので、

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right), \quad (6.177)$$

がわかる。もう一度 $\hat{S}_-$ を作用させると、

$$\hat{S}_- |1, 0\rangle = \hbar \sqrt{1(1+1) - 0(0-1)} |1, -1\rangle = \sqrt{2}\hbar |1, -1\rangle, \quad (6.178)$$

および

$$\begin{aligned}
\hat{S}_- \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}) \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{S}_{1-} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{S}_{2-} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \sqrt{2}\hbar \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (6.179)
\end{aligned}$$

を得るので、

$$|1, -1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (6.180)$$

がわかる。

- さて、合成後の3つの状態 $|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle$ について合成前との対応がついた。合成前の Hilbert 空間は4次元であるから、合成後の Hilbert 空間も4次元である。仮に $|s,m\rangle$ のうち $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ のいずれかに残りの1つの状態が含まれているとすると、上と同様に $\hat{S}_\pm$ を掛けていくことで、合成前の状態と0でない内積を持つ状態が複数得られてしまう。図 45 で言うと、例えば緑破線のように $|2,0\rangle$ が合成前の状態と内積を持つとすると、 $\hat{S}_\pm$ を作用させることで、 $|2,1\rangle, |2,-1\rangle$ も合成前の状態と内積を持つてしまうことがわかる。これでは Hilbert 空間の次元勘定が合わないので、残りの1つの状態としてあり得る可能性は $|0,0\rangle$ に絞られる。 $|0,0\rangle$ は $|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle$ のいずれとも直交している必要があるので、絶対値1の複素定数倍の不定性を除いて

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right), \quad (6.181)$$

と決まる。この表式の複素定数は慣習に従ったものである。

以上をまとめると

$$|1,1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle, \quad |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right), \quad |1,-1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (6.182)$$

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right), \quad (6.183)$$

が、我々の求める答えである。よって Clebsch-Gordan 係数 $C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s}$ は

$$C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} = 1, \quad C_{\frac{1}{2} -\frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad C_{-\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad C_{-\frac{1}{2} -\frac{1}{2} -1}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} = 1, \quad (6.184)$$

$$C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad C_{-\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0} = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (6.185)$$

と求まる。状態 (6.182) および (6.183) は、合成後のスピン演算子 $\hat{S}$ で見ると $s=1$ および $s=0$ の状態である。このうち前者を**三重項 (triplet)**、後者を**一重項 (singlet)** と言う。実は、角運動量合成の一般論によると、合成後の状態 $|s,m\rangle$ として現れるのは

$$s = |s_1 - s_2|, |s_1 - s_2| + 1, \dots, s_1 + s_2, \quad (6.186)$$

および、各 s について

$$m = -s, -(s-1), \dots, (s-1), s, \quad (6.187)$$

である。今の場合、 $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ であるから、現れる状態は

$$s = 1, \quad m = -1, 0, 1, \quad (6.188)$$

$$s = 0, \quad m = 0, \quad (6.189)$$

であり、確かに上の結果と整合している。

コラム：テンソル積

テンソル積とは、複数のベクトル空間を用いて新たなベクトル空間を作る演算である。本小節で導入した $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ は、実はテンソル積 $|s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle$ のことである。以下ではこれを説明する。

簡単のため2次元複素ベクトル空間 V, W を考え、それぞれの基底を $\{v_1, v_2\}, \{w_1, w_2\}$ としよう。これらを用いて

新たなベクトル $v_1 \otimes w_1, v_1 \otimes w_2, v_2 \otimes w_1, v_2 \otimes w_2$ を定義し、これらを基底に持つベクトル空間を考えることができる。このベクトル空間は、複素数 $c_{1,1}, c_{1,2}, c_{2,1}, c_{2,2}$ を用いて

$$u = c_{1,1}(v_1 \otimes w_1) + c_{1,2}(v_1 \otimes w_2) + c_{2,1}(v_2 \otimes w_1) + c_{2,2}(v_2 \otimes w_2), \quad (6.190)$$

と表すことのできる全ての u で構成される。これを V, W のテンソル積 $V \otimes W$ と言う。また、 V の元 $v = c_1^{(v)} v_1 + c_2^{(v)} v_2 \in V$ および W の元 $w = c_1^{(w)} w_1 + c_2^{(w)} w_2 \in W$ に対して、 $V \otimes W$ の元を

$$v \otimes w := c_1^{(v)} c_1^{(w)} (v_1 \otimes w_1) + c_1^{(v)} c_2^{(w)} (v_1 \otimes w_2) + c_2^{(v)} c_1^{(w)} (v_2 \otimes w_1) + c_2^{(v)} c_2^{(w)} (v_2 \otimes w_2), \quad (6.191)$$

と構成することもできる。この構成法からわかる通り、例えば $(2v_1) \otimes w_1$ と $v_1 \otimes (2w_1)$ はどちらも $2(v_1 \otimes w_1)$ になる。注意すべきこととして、 $V \otimes W$ の元 u は必ずしも $v \otimes w$ と書けるわけではない。例えば、 $u = 1(v_1 \otimes w_1) + 1(v_1 \otimes w_2) + 1(v_2 \otimes w_1) + 1(v_2 \otimes w_2)$ であれば $v = v_1 + v_2 \in V$ と $w = w_1 + w_2 \in W$ を用いて $u = v \otimes w$ と書けるが、 $u = 1(v_1 \otimes w_1) + 2(v_1 \otimes w_2) + 2(v_2 \otimes w_1) + 1(v_2 \otimes w_2)$ のときは $u = v \otimes w$ の形には書けない。

本小節で導入した $\{|s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2}, m_1 = \pm \frac{1}{2}, m_2 = \pm \frac{1}{2}\rangle\}$ は、 $\{|s_1 = \frac{1}{2}, m_1 = \pm \frac{1}{2}\rangle\}$ を基底とするベクトル空間 V と $\{|s_1 = \frac{1}{2}, m_1 = \pm \frac{1}{2}\rangle\}$ を基底とするベクトル空間 W に対し、上の構成法を用いて作った $V \otimes W$ の基底である。では、 $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ に作用する演算子

$$\hat{S}_1^2, \quad \hat{S}_{1z}, \quad \hat{S}_2^2, \quad \hat{S}_{2z}, \quad (6.192)$$

はどう解釈したらいいのだろうか。これらの演算子は元々 $|s_1, m_1\rangle$ あるいは $|s_2, m_2\rangle$ に作用するものとして導入され、 $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ に作用するようには作られていなかった。実はこれらは、 $V \otimes W$ に作用する演算子

$$\hat{S}_1^2 \otimes \hat{1}, \quad \hat{S}_{1z} \otimes \hat{1}, \quad \hat{1} \otimes \hat{S}_2^2, \quad \hat{1} \otimes \hat{S}_{2z}, \quad (6.193)$$

の略記と考えることができる。これらの演算子は、 $u = c_{1,1}(v_1 \otimes w_1) + c_{1,2}(v_1 \otimes w_2) + c_{2,1}(v_2 \otimes w_1) + c_{2,2}(v_2 \otimes w_2) \in V \otimes W$ に対して、例えば

$$\begin{aligned} (\hat{S}_1^2 \otimes \hat{1})(u) &= c_{1,1}(\hat{S}_1^2 \otimes \hat{1})(v_1 \otimes w_1) + c_{1,2}(\hat{S}_1^2 \otimes \hat{1})(v_1 \otimes w_2) + c_{2,1}(\hat{S}_1^2 \otimes \hat{1})(v_2 \otimes w_1) + c_{2,2}(\hat{S}_1^2 \otimes \hat{1})(v_2 \otimes w_2) \\ &= c_{1,1}((\hat{S}_1^2 v_1) \otimes w_1) + c_{1,2}((\hat{S}_1^2 v_1) \otimes w_2) + c_{2,1}((\hat{S}_1^2 v_2) \otimes w_1) + c_{2,2}((\hat{S}_1^2 v_2) \otimes w_2), \end{aligned} \quad (6.194)$$

のように作用するものとして定義される。つまり、 $\hat{S}_1^2 \otimes \hat{1}$ は v_1, v_2 に対しては $\hat{S}_1^2$ として作用し、 w_1, w_2 に対しては恒等演算子 (= 何もしない演算子) として作用する。

そして実は、第 5 節で導入した $|x, y, z\rangle$ も、基底 $\{|x\rangle\}, \{|y\rangle\}, \{|z\rangle\}$ で張られるベクトル空間 U, V, W のテンソル積 $U \otimes V \otimes W$ の基底 $|x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$ と見なせる。その意味で、我々はすでにテンソル積に相当する演算を自然と行っていたのである。

コラム：singlet-triplet と 21cm 線

本小節で学んだスピン $\frac{1}{2}$ の合成は様々な場面で重要になるが、そのうち宇宙論的に重要な応用を 1 つ紹介する。これは **21cm 線の宇宙論 (21-cm cosmology)** と呼ばれ、**宇宙の夜明け (cosmic dawn)** や**暗黒時代 (dark age)** を探る手段となる可能性がある。

実際の水素原子には、第5節で見たエネルギー準位に様々な補正が加わる。このうち、 $(n, l, m) = (1, 0, 0)$ に対応する4つのエネルギー準位の分裂を与えるのが超微細構造である。 $(n, l, m) = (1, 0, 0)$ は基底状態なのになぜエネルギー準位が4つあるのか? と思うかもしれないが、第5節では陽子や電子に対するスピンの存在は無視していた。実際には陽子も電子もスピン $\frac{1}{2}$ の粒子なので、それぞれの $\hat{S}_z$ の固有値 $\pm\frac{\hbar}{2}$ に対応する $2 \times 2 = 4$ つのエネルギー準位が $(n, l, m) = (1, 0, 0)$ に存在している。本小節の $\hat{S}_1$ を陽子に対するスピン演算子、 $\hat{S}_2$ を電子に対するスピン演算子としよう。また、略記として $|\uparrow\uparrow\rangle := |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle := |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle := |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$, $|\downarrow\downarrow\rangle := |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ としよう。合成後の基底で見ると、

$$|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle, \quad (6.195)$$

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (6.196)$$

の4つが存在するが、このうち $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$ と $|0, 0\rangle$ の間にエネルギー準位の分裂が起こる。その原因は、陽子の磁気モーメントと電子の磁気モーメントの相互作用である。実はこの情報さえあれば、本節までの知識でどの程度の大きさの分裂が起こるか評価できる。以下オーダー評価をしよう。陽子と電子のスピンによる磁気モーメント μ_p, μ_e は

$$\mu_p = g_p \frac{e}{2m_p} S_{1z} \sim g_p \frac{e\hbar}{m_p}, \quad \mu_e = -g_e \frac{e}{2m_e} S_{2z} \sim g_e \frac{e\hbar}{m_e}, \quad (6.197)$$

程度であった。ここに現れる g 因子は、観測的に $g_p \simeq 5.59$, $g_e \simeq 2$ であることが知られている。陽子の磁気モーメントが作り出す磁場 $\mathbf{H}$ を電子の磁気モーメントが感じることでエネルギーが生じると考えると、陽子の磁気モーメントにより生成される磁場 (6.89) を、 $I\mathbf{A} \sim \mu_p$ および $\bar{R} \sim$ (電子の位置) $\sim$ (Bohr 半径) $\sim a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m_e c}$ (ただし $\alpha := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ は微細構造定数) で評価すればよいから、

$$\mathbf{H} \sim \frac{\mu_p}{a^3} \sim \mu_p \left(\frac{\alpha m_e c}{\hbar} \right)^3, \quad (6.198)$$

を得る。この磁場により電子の磁気モーメントが持つエネルギー ΔE は、

$$\Delta E \sim \mu_e \cdot \mathbf{B} \sim \mu_e \cdot \mu_0 \mathbf{H} \sim \mu_e \mu_p \mu_0 \left(\frac{\alpha m_e c}{\hbar} \right)^3 \sim g_p \frac{e\hbar}{m_p} g_e \frac{e\hbar}{m_e} \mu_0 \left(\frac{\alpha m_e c}{\hbar} \right)^3 \stackrel{\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}, c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0\epsilon_0}}}{\sim} g_p g_e \alpha^4 \frac{m_e^2}{m_p} c^2, \quad (6.199)$$

程度とわかる。 ΔE は Bohr エネルギー $\alpha^2 m_e c^2$ に比べて $\mathcal{O}(10) \times \alpha^2 \frac{m_e}{m_p} \sim 10^{-6}$ 倍も小さな分裂であるため、**超微細構造 (hyperfine structure)** あるいは**超微細分裂 (hyperfine splitting)** と呼ばれる。

この分裂したエネルギー準位間に、非常に稀であるが遷移が起こる。Lyman・Balmer・Paschen 系列で見たように、エネルギー準位の遷移は光子の吸収・放出を伴う。光の波長は $\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$ すなわち $\lambda = \frac{hc}{\Delta E}$ で評価でき、 $\alpha \simeq \frac{1}{137}$, $m_e \simeq 511$ keV, $m_p \simeq 938$ MeV, $c \simeq 2.98 \times 10^8$ m/s, $h \simeq 6.63 \times 10^{-34}$ kg m²/s, 1 eV $\simeq 1.60 \times 10^{-19}$ J を用いると

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} \sim (0.1 - 1) \text{ m}, \quad (6.200)$$

が得られる。正確に見積もると波長は約 **21cm** となるため、この光のことを **21cm 線** と呼ぶ。

この 21cm 線が、図 46 に示すように「宇宙の夜明け」やその前の「暗黒時代」を探る鍵になる可能性がある。「宇宙の夜明け」とは、宇宙の歴史で初めて星形成あるいはその後の銀河形成が起きた時期のことで、「暗黒時代」と

はさらにその前の、初代星すら存在していなかった時期のことである。これら暗黒時代や宇宙の夜明けにも、それ以前の「宇宙の晴れ上がり」時に放出された宇宙背景放射が飛び交い、水素原子が漂っていた。この水素原子は、本小節で学んだような超微細構造に伴って、波長 21 cm の光子の吸収・放出を行っている。この光子の吸収・放出の痕跡が、まるで古文書のように宇宙背景放射のスペクトルに残っており、それを探ることで宇宙の夜明けや暗黒時代の様子を明らかにする研究が進んでいる [13]。

効果	オーダー
Bohr エネルギー	$\alpha^2 m_e c^2$
微細構造 (fine structure)	$\alpha^4 m_e c^2$
Lamb シフト (Lamb shift)	$\alpha^5 m_e c^2$
超微細構造 (hyperfine structure)	$\alpha^4 \frac{m_e^2}{m_p} c^2$

表 8: 水素原子に対するエネルギー準位の補正。Bohr エネルギーは陽子による Coulomb ポテンシャル内の電子の典型的エネルギー (5.66) であり、微細構造・Lamb シフト・超微細構造が補正である。

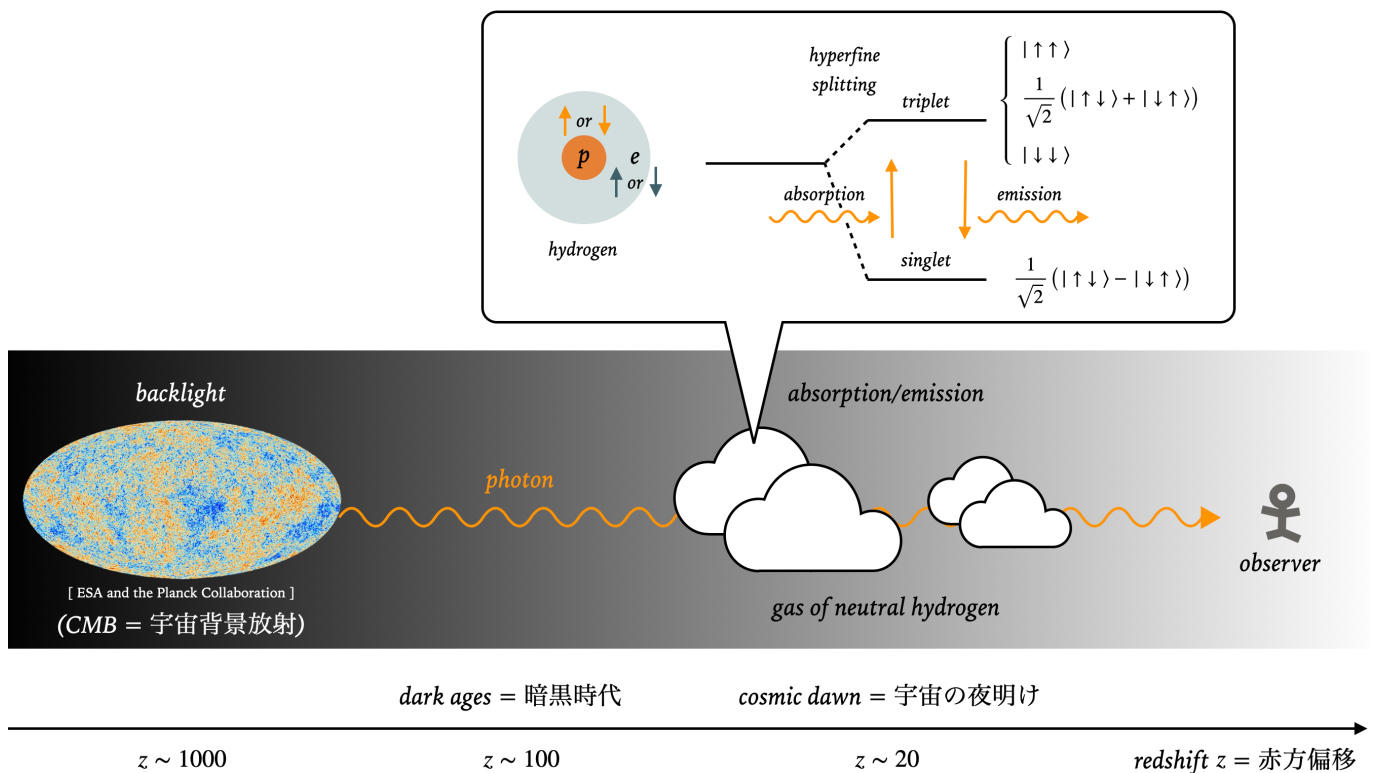


図 46: 宇宙の夜明けと暗黒時代。赤方偏移 z は大きいほど過去に遡る。

[問 6.11] スピン角運動量の合成について、交換する演算子の組を理解しよう。以下のように、粒子 1, 粒子 2 に

対応した 2 種類のスピン演算子を導入する

$$\text{粒子 1: } \hat{\mathbf{S}}_1 = \begin{pmatrix} \hat{S}_{1x} \\ \hat{S}_{1y} \\ \hat{S}_{1z} \end{pmatrix}, \quad \text{粒子 2: } \hat{\mathbf{S}}_2 = \begin{pmatrix} \hat{S}_{2x} \\ \hat{S}_{2y} \\ \hat{S}_{2z} \end{pmatrix}.$$

粒子 1 と粒子 2 のスピン演算子は $[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_{2j}] = 0$ ($i, j = x, y, z$) および $[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_{1j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_{1k}$, $[\hat{S}_{2i}, \hat{S}_{2j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_{2k}$ ($i, j, k = x, y, z$) を満たす。また、それぞれについて昇降演算子は $\hat{S}_{1\pm} := \hat{S}_{1x} \pm i\hat{S}_{1y}$, $\hat{S}_{2\pm} := \hat{S}_{2x} \pm i\hat{S}_{2y}$ で定義される。このとき、粒子 1, 2 を合わせたスピン演算子

$$\hat{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \hat{S}_{1x} + \hat{S}_{2x} \\ \hat{S}_{1y} + \hat{S}_{2y} \\ \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z} \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2,$$

について、以下の問いに答えよ。

(1) 全スピン角運動量の二乗が

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z},$$

と書けることを示せ。

(2) $\hat{S}^2$ と $\hat{S}_1^2$ および $\hat{S}^2$ と $\hat{S}_2^2$ が交換することを示せ。

(3) $\hat{S}^2$ と $\hat{S}_{1z}$ および $\hat{S}^2$ と $\hat{S}_{2z}$ が交換しないことを示せ。

[解 6.11]

(1) 定義を代入し、

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 &= (\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2)^2 \stackrel{[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_{2j}]=0}{=} \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 \\ &= \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}) = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}, \end{aligned}$$

と示される。

(2) $\hat{S}^2$ と $\hat{S}_1^2$ について、

$$\begin{aligned} [\hat{S}^2, \hat{S}_1^2] &= [\hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \hat{S}_1^2] \stackrel{[\hat{S}_1^2, \hat{S}_1^2]=0, [\hat{S}_2^2, \hat{S}_1^2]=0}{=} 2[\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \hat{S}_1^2] = 2[\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}, \hat{S}_1^2] \\ &\stackrel{[\hat{S}_{2j}, \hat{S}_1^2]=0}{=} 2\left([\hat{S}_{1x}, \hat{S}_1^2]\hat{S}_{2x} + [\hat{S}_{1y}, \hat{S}_1^2]\hat{S}_{2y} + [\hat{S}_{1z}, \hat{S}_1^2]\hat{S}_{2z}\right) \stackrel{[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_1^2]=0}{=} 0, \end{aligned}$$

と示される。 $\hat{S}^2$ と $\hat{S}_2^2$ についても同様である。

(3) $\hat{S}^2$ と $\hat{S}_{1z}$ について、

$$\begin{aligned} [\hat{S}^2, \hat{S}_{1z}] &= [\hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \hat{S}_{1z}] \stackrel{[\hat{S}_1^2, \hat{S}_{1z}]=0, [\hat{S}_2^2, \hat{S}_{1z}]=0}{=} 2[\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \hat{S}_{1z}] = 2[\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}, \hat{S}_{1z}] \\ &= 2\left([\hat{S}_{1x}, \hat{S}_{1z}]\hat{S}_{2x} + [\hat{S}_{1y}, \hat{S}_{1z}]\hat{S}_{2y}\right) = 2i\hbar(-\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1x}\hat{S}_{2y}) \neq 0, \end{aligned}$$

と示される。 $\hat{S}^2$ と $\hat{S}_{2z}$ についても同様である。

[問 6.12] スピン $\frac{1}{2}$ の合成を復習しよう。

(1) まず

$$|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle,$$

から始めて、 $\hat{S}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}$ を作用させることにより $|1, 0\rangle$ および $|1, -1\rangle$ を合成前の状態 $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ で表せ。ここで $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ は略記

$$|\uparrow\uparrow\rangle := \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle, \quad |\uparrow\downarrow\rangle := \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad |\downarrow\uparrow\rangle := \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle, \quad |\downarrow\downarrow\rangle := \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle,$$

であり、また昇降演算子の作用は

$$\hat{S}_{\pm} |s, m\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} |s, m \pm 1\rangle,$$

である。

(2) 次に、残りの状態

$$|0, 0\rangle,$$

が $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$ のいずれとも直交していることを利用し、 $|0, 0\rangle$ を合成前の状態 $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ で表せ。

[解 6.12]

(1) 与式

$$|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle,$$

に $\hat{S}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}$ を作用させると、

$$\hat{S}_- |1, 1\rangle = \sqrt{2}\hbar |1, 0\rangle, \quad (\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}) |\uparrow\uparrow\rangle = \hbar (|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle) \quad \Rightarrow \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle),$$

を得る。ここにさらに $\hat{S}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}$ を作用させると、

$$\hat{S}_- |1, 0\rangle = \sqrt{2}\hbar |1, -1\rangle, \quad (\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) = \hbar |\downarrow\downarrow\rangle \quad \Rightarrow \quad |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle,$$

を得る。

(2) $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$ のいずれとも直交する状態は

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle),$$

となる。ただし、絶対値 1 の複素定数倍の不定性がある。

7. 発展的話題

本節では、ここまで取り上げることはできなかった話題をいくつか取り扱う。

7.1 AHARONOV-BOHM 効果

Aharonov-Bohm 効果とは、量子力学において、たとえ荷電粒子の軌道上で電場 $\mathbf{E}$ および磁束密度 $\mathbf{B}$ が 0 であっても、電磁ポテンシャル $\mathbf{A}$ が 0 でなければ、粒子の観測確率の干渉縞に電磁ポテンシャルの影響が現れる効果である。

まず、古典電磁気学において電荷 q を持つ粒子の Hamiltonian は

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(t, \mathbf{x}))^2 + q\varphi(t, \mathbf{x}), \quad (7.1)$$

であった (以下のコラム参照)。ここで $\varphi(t, \mathbf{x}), \mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ は電磁ポテンシャルであり、電場 $\mathbf{E}(t, \mathbf{x})$ および磁束密度 $\mathbf{B}(t, \mathbf{x})$ はこれらを用いて

$$\mathbf{E}(t, \mathbf{x}) = -\nabla\varphi(t, \mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{B}(t, \mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{A}(t, \mathbf{x}), \quad (7.2)$$

と表すことができる。電場 $\mathbf{E}(t, \mathbf{x})$ および磁束密度 $\mathbf{B}(t, \mathbf{x})$ は、実関数 $\Lambda(t, \mathbf{x})$ を用いて

$$\varphi'(t, \mathbf{x}) := \varphi(t, \mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial t}\Lambda(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{A}'(t, \mathbf{x}) := \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) + \nabla\Lambda(t, \mathbf{x}), \quad (7.3)$$

と定義される $\varphi'(t, \mathbf{x})$ および $\mathbf{A}'(t, \mathbf{x})$ を使って

$$\mathbf{E}(t, \mathbf{x}) = -\nabla\varphi'(t, \mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}'(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{B}(t, \mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{A}'(t, \mathbf{x}), \quad (7.4)$$

と、全く同じ形で書くことができる。これを古典電磁気学における**ゲージ不変性 (gauge invariance)** と言う。

さて、荷電粒子の振る舞いを量子力学で記述するには、Hamiltonian (7.1) から、

荷電粒子の時間に依存する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(t, \mathbf{x}) = H\Psi(t, \mathbf{x}), \quad H = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}(t, \mathbf{x}))^2 + q\varphi(t, \mathbf{x}), \quad (7.5)$$

を解けばよいと期待される。そしてこの荷電粒子の Schrödinger 方程式にもゲージ不変性がある。実際、 $\Psi(t, \mathbf{x})$ が Schrödinger 方程式 (7.5) を満たしているとする、

$$\Psi'(t, \mathbf{x}) := e^{\frac{iq\Lambda(t, \mathbf{x})}{\hbar}}\Psi(t, \mathbf{x}), \quad (7.6)$$

で定義される $\Psi'(t, \mathbf{x})$ は、 $\varphi'(t, \mathbf{x})$ および $\mathbf{A}'(t, \mathbf{x})$ で書かれた Hamiltonian の下での Schrödinger 方程式を満たしている。そして、 $e^{\frac{iq\Lambda(t, \mathbf{x})}{\hbar}}$ は任意の時空点で絶対値 1 の複素数であることに注意すると、 $\Psi(t, \mathbf{x})$ と $\Psi'(t, \mathbf{x})$ の違いは位相の違いだけであることがわかる。ここから期待されるのは、電磁ポテンシャル $\varphi(t, \mathbf{x}), \mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ は波動関数 $\Psi(t, \mathbf{x})$ の位相の取り方で変化する量であるため物理量には直接影響せず、むしろ影響するのは $\mathbf{E}(t, \mathbf{x}), \mathbf{B}(t, \mathbf{x})$ であるということである。

しかし実際には、 $\mathbf{E}(t, \mathbf{x}), \mathbf{B}(t, \mathbf{x})$ が 0 であっても $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ が 0 でないような状況で、荷電粒子の物理量が $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ の値に応じて変化することが判明した。この効果を **Aharonov-Bohm 効果** と言う。以下では、Aharonov と Bohm の提案したセットアップを見る前に、より簡単な例を用いて電磁ポテンシャル $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ が観測量に影響することを確認し、それから彼らの提案したセットアップを考察する。

リング上の荷電粒子 図 47 のような、半径 b のリング上のみを動く粒子を考えよう。このリングの中央を半径 a の無限に長いソレノイドコイルが貫いており、コイルには一定の電流 I が流れているとする。ソレノイドの外部のベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ は

$$\mathbf{A}(t, \mathbf{x}) = \frac{\Phi}{2\pi r} \mathbf{e}_\phi \quad (r > a), \quad (7.7)$$

で表すことができる。ここで $\Phi = \pi a^2 B$ はソレノイドを貫く磁束である。また、スカラーポテンシャル $\varphi(t, \mathbf{x})$ は 0 である。Hamiltonian (7.1) は

$$H = \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \nabla^2 + 2i\hbar q \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) \cdot \nabla + q^2 \mathbf{A}^2(t, \mathbf{x}) \right], \quad (7.8)$$

となるから、時間に依存しない Schrödinger 方程式 $H\psi(\phi) = E\psi(\phi)$ は

$$\frac{1}{2mb^2} \left[-\hbar^2 \frac{d^2}{d\phi^2} + i\hbar \frac{q\Phi}{\pi} \frac{d}{d\phi} + \left(\frac{q\Phi}{2\pi} \right)^2 \right] \psi(\phi) = E\psi(\phi), \quad (7.9)$$

となる。式を簡単にするため

$$\beta := \frac{q\Phi}{2\pi\hbar}, \quad \epsilon := \frac{2mb^2 E}{\hbar^2} - \beta^2, \quad (7.10)$$

を定義すると、

$$\frac{d^2}{d\phi^2} \psi(\phi) - 2i\beta \frac{d}{d\phi} \psi(\phi) + \epsilon \psi(\phi) = 0, \quad (7.11)$$

を得る。波動関数の一価性から、解は

$$\psi(\phi) = A e^{in\phi} \quad (n \in \mathbb{Z}), \quad (7.12)$$

の形に限られる。代入して

$$-n^2 + 2n\beta + \epsilon = 0 \quad \implies \quad n = \beta \pm \frac{b}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad (7.13)$$

を得るが、これはエネルギー準位が

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mb^2} \left(n - \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \right)^2 \quad (n \in \mathbb{Z}), \quad (7.14)$$

の形に量子化されていることを意味する。重要なことは、粒子が存在できるリング上で電場 $\mathbf{E}(t, \mathbf{x})$ や磁束密度 $\mathbf{B}(t, \mathbf{x})$ は 0 であるにも関わらず、観測量であるエネルギー準位がソレノイド内部の磁束 Φ に影響されていることである。また、このエネルギー準位の変化はすべての $n \in \mathbb{Z}$ に共通する定数分の変化ではなく、 n の値に依存した変化であるため観測可能量である。以上の議論から、粒子の存在位置において電場 $\mathbf{E}(t, \mathbf{x})$ や磁束密度 $\mathbf{B}(t, \mathbf{x})$ が 0 であっても、0 でない電磁ポテンシャル $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ が存在すれば、物理量に影響があることがわかる。

Aharonov-Bohm のセットアップ Aharonov と Bohm により提案されたセットアップを見てみよう。図 48 上に、左から入射した荷電粒子のビームを点 A で 2 つに分離する。分離したビームはそれぞれ点 B, C を経由して点 F で干渉を起こす。2 つのビームの間にはソレノイドコイルがあり、一定の磁束 Φ が磁束密度 $\mathbf{B}$ で紙面手前方向に印加されている。ソレノイド外部の電磁ポテンシャルは先程と同じく

$$\varphi(t, \mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) \left(= \frac{\Phi}{2\pi r} \mathbf{e}_\phi \right), \quad (7.15)$$

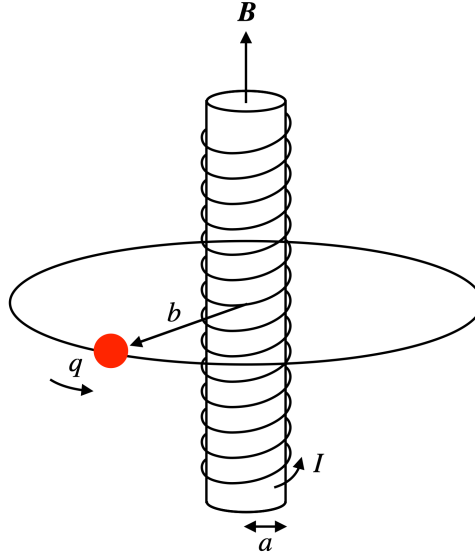


図 47: リング上のみを動く荷電粒子。中央のソレノイドコイルには一様な磁束密度 B がかけられており、磁束の総量は $\Phi = \pi a^2 |B|$ である。

で記述されるので、粒子の時間発展を記述する Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \mathbf{x}) = \left[\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{x}))^2 \right] \Psi(t, \mathbf{x}), \quad (7.16)$$

となる。

さて、2つのビームは十分に分離しているので、点 F での波動関数は、点 C 側に吸収壁を置いた場合の波動関数 $\Psi_1(t, \mathbf{x})$ と点 B 側に吸収壁を置いた場合の波動関数 $\Psi_2(t, \mathbf{x})$ の和として書かれるはずである

$$\Psi(t, \mathbf{x}) \simeq \Psi_1(t, \mathbf{x}) + \Psi_2(t, \mathbf{x}). \quad (7.17)$$

ここで以下の事実を用いる。 $\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x}) = 0$ かつ単連結な領域に対して、任意の始点 O を用いて

$$\Psi'(t, \mathbf{x}) := e^{-ig(t, \mathbf{x})} \Psi(t, \mathbf{x}), \quad g(t, \mathbf{x}) := \frac{q}{\hbar} \int_O^{\mathbf{x}} \mathbf{A}(\mathbf{x}') \cdot d\mathbf{x}', \quad (7.18)$$

と定義すると、Schrödinger 方程式は電磁ポテンシャル $\varphi(t, \mathbf{x}), \mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ の存在しない場合の方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(t, \mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi'(t, \mathbf{x}), \quad (7.19)$$

に帰着する。 $\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x}) = 0$ を課したのは、そうしないと $\int_O^{\mathbf{x}} \mathbf{A}(\mathbf{x}') \cdot d\mathbf{x}'$ が一意に定まらないからである。図 48 下の赤 (= 領域 1) および青 (= 領域 2) それぞれについて関数 $g(t, \mathbf{x})$ の始点 O を点 A に取ってこの操作を行い、得られた解 $\Psi'(t, \mathbf{x})$ をそれぞれ $\Psi'_1(t, \mathbf{x}), \Psi'_2(t, \mathbf{x})$ と置く。解 $\Psi'_1(t, \mathbf{x}), \Psi'_2(t, \mathbf{x})$ は電磁ポテンシャルに影響されないことに注意しよう。上記の点 C 側あるいは点 B 側に吸収壁を置いた場合の波動関数は、この $\Psi'_1(t, \mathbf{x}), \Psi'_2(t, \mathbf{x})$ から

$$\Psi_1(t, \mathbf{x}) = e^{ig_1(t, \mathbf{x})} \Psi'_1(t, \mathbf{x}), \quad \Psi_2(t, \mathbf{x}) = e^{ig_2(t, \mathbf{x})} \Psi'_2(t, \mathbf{x}), \quad (7.20)$$

と構成できる。ここで注意すべきなのは、領域 1 と領域 2 の両方に属する点 $\mathbf{x}$ であっても、 $g_1(t, \mathbf{x})$ と $g_2(t, \mathbf{x})$ は一般に異なる値を取ることである。なぜなら、 $g_1(t, \mathbf{x})$ と $g_2(t, \mathbf{x})$ は単連結な領域に対して定義されているため、始点 A から取るべき経路が領域 1 と領域 2 で異なるからである。

この結果、領域 1, 2 を通って点 F に到達する 2つのビームが引き起こす干渉縞が、電磁ポテンシャル $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ に影響さ

れることがわかる。実際、点 F における粒子の観測確率

$$|\Psi(t, \mathbf{x})|^2 \simeq |\Psi_1(t, \mathbf{x}) + \Psi_2(t, \mathbf{x})|^2 = |\Psi_1(t, \mathbf{x})|^2 + |\Psi_2(t, \mathbf{x})|^2 + \Psi_1^*(t, \mathbf{x})\Psi_2(t, \mathbf{x}) + \Psi_1(t, \mathbf{x})\Psi_2^*(t, \mathbf{x}), \quad (7.21)$$

を考えると、

$$\Psi_1^*(t, \mathbf{x})\Psi_2(t, \mathbf{x}) \simeq e^{i(g_2(t, \mathbf{x}) - g_1(t, \mathbf{x}))} \Psi_1'^*(t, \mathbf{x})\Psi_2'(t, \mathbf{x}) \quad (7.22)$$

であるから、電磁ポテンシャル $A(t, \mathbf{x})$ の周回積分に依存する位相差

$$g(t, \mathbf{x}) := g_2(t, \mathbf{x}) - g_1(t, \mathbf{x}) = \frac{q}{\hbar} \oint A(t, \mathbf{x}') \cdot d\mathbf{x}' = \frac{q\Phi}{\hbar} \int \frac{1}{2\pi r} \mathbf{e}_\phi \cdot r \mathbf{e}_\phi d\phi = \frac{q\Phi}{\hbar}, \quad (7.23)$$

が現れる。重要な点は、粒子の存在確率の干渉縞として観測可能な位相差が、ビームの通過領域において $E(t, \mathbf{x})$ や $B(t, \mathbf{x})$ が 0 であるにも関わらず、ソレノイドを貫く磁束 Φ に応じて変わることである。

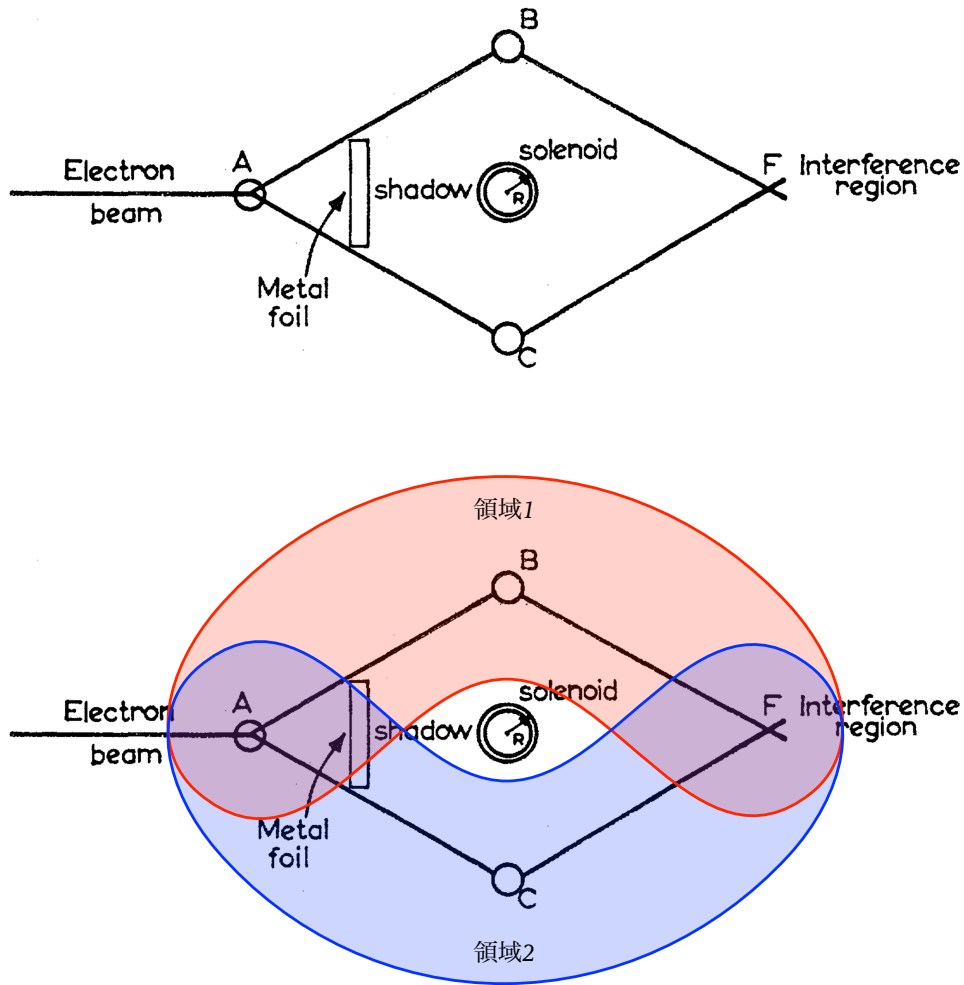


図 48: (上) Aharonov-Bohm の実験のセットアップ [14]。 (下) 点 A を基準とした 2 つの単連結な領域。

荷電粒子の Hamiltonian(7.1) を導出しよう。まず Lorentz 力は

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = q(\mathbf{E}(t, \mathbf{x}) + \dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B}(t, \mathbf{x})), \quad (7.24)$$

と書ける。電場 $\mathbf{E}$ と磁束密度 $\mathbf{B}$ は静電ポテンシャル ϕ と電磁ポテンシャル $\mathbf{A}$ を用いて

$$E_i(t, \mathbf{x}) = -\frac{\partial}{\partial x^i} \phi(t, \mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial t} A_i(t, \mathbf{x}), \quad B_i(t, \mathbf{x}) = \epsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial x^j} A_k(t, \mathbf{x}), \quad (7.25)$$

と書けるので、 $\epsilon_{ijk}\epsilon_{klm} = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}$ を用いると Lorentz 力は

$$\begin{aligned} F_i(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) &= q \left[-\frac{\partial}{\partial x^i} \phi(t, \mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial t} A_i(t, \mathbf{x}) + \epsilon_{ijk} \dot{x}^j \epsilon_{klm} \frac{\partial}{\partial x^l} A_m(t, \mathbf{x}) \right] \\ &= q \left[-\frac{\partial}{\partial x^i} \phi(t, \mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial t} A_i(t, \mathbf{x}) + (\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}) \dot{x}^j \frac{\partial}{\partial x^l} A_m(t, \mathbf{x}) \right] \\ &= q \left[-\left(\frac{\partial}{\partial t} + v^j \frac{\partial}{\partial x^j} \right) A_i(t, \mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial x^i} (\phi(t, \mathbf{x}) - \dot{x}^j A_j(t, \mathbf{x})) \right] \\ &= q \left[-\frac{d}{dt} A_i(t, \mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial x^i} (\phi(t, \mathbf{x}) - \dot{x}^j A_j(t, \mathbf{x})) \right] \\ &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{x}^i} U(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \right) - \frac{\partial}{\partial x^i} U(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}), \end{aligned} \quad (7.26)$$

と簡単な形で書ける。ここでポテンシャル $U(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})$ は

$$U(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = q(\phi(t, \mathbf{x}) - \dot{x}^j A_j(t, \mathbf{x})), \quad (7.27)$$

であり、 $\frac{d}{dt}$ は粒子の動きに沿った微分すなわち $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \dot{x}^j \frac{\partial}{\partial x^j}$ である。この Lorentz 力を出すような Lagrangian は

$$L(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 - qU(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}), \quad (7.28)$$

である。実際、Euler-Lagrange 方程式は

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} L(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \right) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} L(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = 0 \quad \Rightarrow \quad m\ddot{\mathbf{x}} = q \left[-\frac{d}{dt} \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\phi(t, \mathbf{x}) - \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}(t, \mathbf{x})) \right], \quad (7.29)$$

となり、右辺の力は式 (7.26) に一致する。Lagrangian から Hamiltonian へは、共役運動量

$$\mathbf{p}(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} L(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = m\dot{\mathbf{x}} + q\mathbf{A}(t, \mathbf{x}), \quad (7.30)$$

を用いて

$$H(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) = [\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} - L(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})]_{\dot{\mathbf{x}}=\dot{\mathbf{x}}(t, \mathbf{x}, \mathbf{p})} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A}(t, \mathbf{x}))^2 + q\phi(t, \mathbf{x}), \quad (7.31)$$

と移行できる。

波動関数 $\Psi(t, \mathbf{x})$ が荷電粒子の時間に依存する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \mathbf{x}) = H \Psi(t, \mathbf{x}), \quad H = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A}(t, \mathbf{x}))^2 + q\varphi(t, \mathbf{x}),$$

の解であるとき、

$$\Psi'(t, \mathbf{x}) := e^{\frac{iq\Lambda(t, \mathbf{x})}{\hbar}} \Psi(t, \mathbf{x}),$$

で定義される $\Psi'(t, \mathbf{x})$ は、実関数 $\Lambda(t, \mathbf{x})$ を用いて

$$\varphi'(t, \mathbf{x}) := \varphi(t, \mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{A}'(t, \mathbf{x}) := \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) + \nabla \Lambda(t, \mathbf{x})$$

と定義される $\varphi'(t, \mathbf{x})$ および $\mathbf{A}'(t, \mathbf{x})$ の下での荷電粒子の Schrödinger 方程式を満たしていることを示せ。

[解 7.1] 定義より

$$\Psi(t, \mathbf{x}) = e^{-\frac{iq\Lambda(t, \mathbf{x})}{\hbar}} \Psi'(t, \mathbf{x}),$$

である。Schrödinger 方程式の左辺は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-\frac{iq\Lambda(t, \mathbf{x})}{\hbar}} \Psi'(t, \mathbf{x}) \right) = e^{-\frac{iq\Lambda(t, \mathbf{x})}{\hbar}} \left[q\Psi'(t, \mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(t, \mathbf{x}) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(t, \mathbf{x}) \right],$$

であり、右辺は

$$\begin{aligned} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A}(t, \mathbf{x})) \left(e^{-iq\Lambda(t, \mathbf{x})} \Psi'(t, \mathbf{x}) \right) &= e^{-iq\Lambda(t, \mathbf{x})} (-i\hbar \nabla - q(\mathbf{A}(t, \mathbf{x}) + \nabla \Lambda(t, \mathbf{x}))) \Psi'(t, \mathbf{x}), \\ (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A}(t, \mathbf{x}))^2 \left(e^{-iq\Lambda(t, \mathbf{x})} \Psi'(t, \mathbf{x}) \right) &= e^{-iq\Lambda(t, \mathbf{x})} (-i\hbar \nabla - q(\mathbf{A}(t, \mathbf{x}) + \nabla \Lambda(t, \mathbf{x})))^2 \Psi'(t, \mathbf{x}), \end{aligned}$$

より

$$H \left(e^{-iq\Lambda(t, \mathbf{x})} \Psi'(t, \mathbf{x}) \right) = e^{-iq\Lambda(t, \mathbf{x})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (-i\hbar \nabla - q(\mathbf{A}(t, \mathbf{x}) + \nabla \Lambda(t, \mathbf{x})))^2 + q\varphi(t, \mathbf{x}) \right] \Psi'(t, \mathbf{x}),$$

であるから、

$$\begin{aligned} q\Psi'(t, \mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(t, \mathbf{x}) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(t, \mathbf{x}) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (-i\hbar \nabla - q(\mathbf{A}(t, \mathbf{x}) + \nabla \Lambda(t, \mathbf{x})))^2 + q\varphi(t, \mathbf{x}) \right] \Psi'(t, \mathbf{x}) \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(t, \mathbf{x}) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (-i\hbar \nabla - q(\mathbf{A}(t, \mathbf{x}) + \nabla \Lambda(t, \mathbf{x})))^2 + q \left(\varphi(t, \mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(t, \mathbf{x}) \right) \right] \Psi'(t, \mathbf{x}), \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(t, \mathbf{x}) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A}'(t, \mathbf{x}))^2 + q\varphi'(t, \mathbf{x}) \right] \Psi'(t, \mathbf{x}), \end{aligned}$$

となるので示された。

7.2 BELL の不等式

Bell の不等式は、古典論 (正確には因果律を守るような古典論、すなわち局所実在論) の範囲内で必ず満たされる不等式である。この不等式は量子論では破れることがあり、その破れは実験的にも観測されている。本小節では Bell の不等式の 1 つである CHSH (Clauser-Horne-Shimony-Holt) 不等式を説明する。

ある地点から 2 個の粒子が同時に放出される。それぞれの粒子は、空間的に離れた 2 地点にいる Alice および Bob によって独立に測定される。簡単のため、2 人の測定する物理量は測定値が +1 もしくは -1 を取るものとする。Alice お

よび Bob の測定器には自由に設定できるパラメータ θ_a, θ_b があり、このパラメータの下で 2 人の測定する物理量をそれぞれ $A(\theta_a), B(\theta_b)$ と書く。この測定を多数回繰り返した際の平均を $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ で表すことにし、以下の量

$$C(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b) := \langle\langle A(\theta_a)B(\theta_b) \rangle\rangle + \langle\langle A(\theta'_a)B(\theta_b) \rangle\rangle - \langle\langle A(\theta_a)B(\theta'_b) \rangle\rangle + \langle\langle A(\theta'_a)B(\theta'_b) \rangle\rangle,$$

を考える²³。また、個々の測定における $A(\theta_a), B(\theta_b)$ の測定値をそれぞれ a, b と書く。

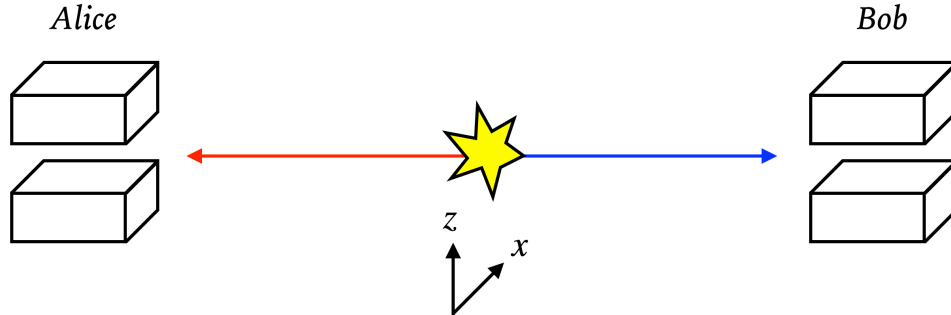


図 49: 中央部分で放出された 2 つの粒子を、十分離れた 2 地点で Alice と Bob が観測する。2 人は Stern-Gerlach の装置を持っており、その向きを xz 平面内で回すことにより粒子の $\hat{n}$ 方向のスピン $\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ (に $\frac{\hbar}{2}$ を掛けたもの) を測定する。

局所实在論では、Alice および Bob による測定は以下のように考えられる。2 人が測定する物理量の値は、各粒子がお互いに関係なく (局所性) すでに性質として持っている (实在性)。粒子が放出される際に決まる未知のパラメータ λ が測定値に影響する可能性も考慮すると、

$$A(\theta_a) = a(\theta_a, \lambda), \quad B(\theta_b) = b(\theta_b, \lambda)$$

と書くことができる。パラメータ λ が、 $P(\lambda) \geq 0$ および $\sum_{\lambda} P(\lambda) = 1$ を満たすある確率分布 $P(\lambda)$ に従って決まるとすると、多数回平均は例えば

$$\langle\langle A(\theta_a) \rangle\rangle = \sum_{\lambda} P(\lambda) a(\theta_a, \lambda), \quad \langle\langle B(\theta_b) \rangle\rangle = \sum_{\lambda} P(\lambda) b(\theta_b, \lambda), \quad \langle\langle A(\theta_a)B(\theta_b) \rangle\rangle = \sum_{\lambda} P(\lambda) a(\theta_a, \lambda) b(\theta_b, \lambda), \quad \dots$$

と書くことができる。この場合、[問 7.2] で見るように、不等式

$$-2 \leq C(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b) \leq 2,$$

が示される。これを CHSH 不等式と言う。

量子論で CHSH 不等式が破られることは、例えば以下の状況を考えて示すことができる。Alice および Bob の測定する物理量に対応する Hermite 演算子を、単位ベクトル $\mathbf{n} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)^T$ 方向のスピン演算子 $\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ (に $\frac{\hbar}{2}$ を掛けたもの) としよう。実際、スピン演算子 $\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ の固有値は $\pm \frac{\hbar}{2}$ であるから、Alice および Bob の測定値は ± 1 となる。Pauli 行

²³ 右辺は、測定器のパラメータを θ_a, θ_b にセットした上で多数の粒子のペアについて $A(\theta_a)B(\theta_b)$ の平均を取り、次にパラメータを θ'_a, θ_b にセットした上で別の多数の粒子のペアについて $A(\theta'_a)B(\theta_b)$ の平均を取り ... とした上で、それらの結果を足し引きするという意味である。

列を用いると、これらの演算子は

$$\begin{aligned}\hat{A}(\theta_a) \otimes \mathbf{1} &\stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos \theta_a & \sin \theta_a \\ \sin \theta_a & -\cos \theta_a \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1} \quad (= (\sin \theta_a \cdot \sigma_x + \cos \theta_a \cdot \sigma_z) \otimes \mathbf{1}), \\ \mathbf{1} \otimes \hat{B}(\theta_b) &\stackrel{\text{表示}}{=} \mathbf{1} \otimes \begin{pmatrix} \cos \theta_b & \sin \theta_b \\ \sin \theta_b & -\cos \theta_b \end{pmatrix} \quad (= \mathbf{1} \otimes (\sin \theta_b \cdot \sigma_x + \cos \theta_b \cdot \sigma_z)),\end{aligned}$$

と書ける。また、放出された 2 粒子の系は状態

$$|\psi\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \quad \left(= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) \right),$$

にあるとする。このとき、量子論における $C(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b)$ である

$$\tilde{C}(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b) := \langle \psi | \hat{A}(\theta_a) \otimes \hat{B}(\theta_b) | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A}(\theta'_a) \otimes \hat{B}(\theta_b) | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A}(\theta_a) \otimes \hat{B}(\theta'_b) | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A}(\theta'_a) \otimes \hat{B}(\theta'_b) | \psi \rangle,$$

は

$$\tilde{C}(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b) = -\cos(\theta_a - \theta_b) - \cos(\theta'_a - \theta_b) + \cos(\theta_a - \theta'_b) - \cos(\theta'_a - \theta'_b),$$

となる。ここで例えば

$$\theta_a = \frac{3\pi}{4}, \quad \theta'_a = \frac{\pi}{4}, \quad \theta_b = \frac{\pi}{2}, \quad \theta'_b = 0,$$

と測定器をセットすると

$$\tilde{C}(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b) = -\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{2}} = -2\sqrt{2} < -2,$$

となるので、CHSH 不等式は量子論では破れることがわかる。

[問 7.2]

(1) 局所实在論の場合について、不等式

$$-2 \leq [a(\theta_a, \lambda) + a(\theta'_a, \lambda)] b(\theta_b, \lambda) - [a(\theta_a, \lambda) - a(\theta'_a, \lambda)] b(\theta'_b, \lambda) \leq 2,$$

を示せ。問題の設定から、 $a(\theta_a, \lambda) = \pm 1$, $a(\theta'_a, \lambda) = \pm 1$, $b(\theta_b, \lambda) = \pm 1$, $b(\theta'_b, \lambda) = \pm 1$ が全ての場合であることに注意せよ。

(2) (1) の結果より、局所实在論の場合について、不等式

$$-2 \leq C(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b) \leq 2,$$

を示せ。これを CHSH 不等式と言う。

(3) 量子論では CHSH 不等式が破られることを見る。Alice および Bob の測定する物理量に対応する Hermite 演算子を、単位ベクトル $\mathbf{n} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)^T$ 方向のスピン演算子 $\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ (に $\frac{2}{\hbar}$ を掛けたもの) とすると、Pauli 行列

を用いて

$$\begin{aligned}\hat{A}(\theta_a) \otimes \mathbf{1} &\stackrel{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos \theta_a & \sin \theta_a \\ \sin \theta_a & -\cos \theta_a \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1} = (\sin \theta_a \cdot \sigma_x + \cos \theta_a \cdot \sigma_z) \otimes \mathbf{1}, \\ \mathbf{1} \otimes \hat{B}(\theta_b) &\stackrel{\text{表示}}{=} \mathbf{1} \otimes \begin{pmatrix} \cos \theta_b & \sin \theta_b \\ \sin \theta_b & -\cos \theta_b \end{pmatrix} = \mathbf{1} \otimes (\sin \theta_b \cdot \sigma_x + \cos \theta_b \cdot \sigma_z),\end{aligned}$$

と書ける。また、放出された 2 粒子の系は状態

$$|\psi\rangle \stackrel{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle),$$

にあるとする。このとき、

$$\langle \psi | \hat{A}(\theta_a) \otimes \hat{B}(\theta_b) | \psi \rangle = -\cos(\theta_a - \theta_b),$$

となることを示せ。

(4) (3) の結果より、量子論における $C(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b)$ である

$$\tilde{C}(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b) := \langle \psi | \hat{A}(\theta_a) \otimes \hat{B}(\theta_b) | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A}(\theta'_a) \otimes \hat{B}(\theta_b) | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A}(\theta_a) \otimes \hat{B}(\theta'_b) | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A}(\theta'_a) \otimes \hat{B}(\theta'_b) | \psi \rangle,$$

は

$$\tilde{C}(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b) = -\cos(\theta_a - \theta_b) - \cos(\theta'_a - \theta_b) + \cos(\theta_a - \theta'_b) - \cos(\theta'_a - \theta'_b),$$

となる。 $\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b$ をうまく選ぶと $-2 \leq \tilde{C}(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b) \leq 2$ を破ることを示せ。

[解 7.2]

(1) $a = a(\theta_a, \lambda)$, $a' = a(\theta'_a, \lambda)$, $b = b(\theta_b, \lambda)$, $b' = b(\theta'_b, \lambda)$ とする。 $2^4 = 16$ 通りについて、

$$(a + a')b - (a - a')b' = \begin{cases} +2 & ((a, a', b, b') = (+1, +1, +1, \pm 1), (+1, -1, \pm 1, -1), (-1, +1, \pm 1, +1), (-1, -1, -1, \pm 1)), \\ -2 & ((a, a', b, b') = (+1, +1, -1, \pm 1), (+1, -1, \pm 1, +1), (-1, +1, \pm 1, -1), (-1, -1, +1, \pm 1)), \end{cases}$$

となるので示された。

(2) (1) の結果である

$$-2 \leq a(\theta_a, \lambda)b(\theta_b, \lambda) + a(\theta'_a, \lambda)b(\theta_b, \lambda) - a(\theta_a, \lambda)b(\theta'_b, \lambda) - a(\theta'_a, \lambda)b(\theta'_b, \lambda) \leq 2,$$

に $P(\lambda)$ を掛けて λ に関する和を取る。 $P(\lambda) \geq 0$ より不等号の向きは変わらず、また $\sum_{\lambda} P(\lambda) = 1$ であるから

$$-2 \leq C(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b) \leq 2,$$

となる。

(3) 与えられた表式を代入し

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \hat{A}(\theta_a) \otimes \hat{B}(\theta_b) | \psi \rangle &= \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \left[\begin{pmatrix} \cos \theta_a & \sin \theta_a \\ \sin \theta_a & -\cos \theta_a \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \cos \theta_b & \sin \theta_b \\ \sin \theta_b & -\cos \theta_b \end{pmatrix} \right] \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \\
&\quad - \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \left[\begin{pmatrix} \cos \theta_a & \sin \theta_a \\ \sin \theta_a & -\cos \theta_a \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \cos \theta_b & \sin \theta_b \\ \sin \theta_b & -\cos \theta_b \end{pmatrix} \right] \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \\
&\quad - \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \left[\begin{pmatrix} \cos \theta_a & \sin \theta_a \\ \sin \theta_a & -\cos \theta_a \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \cos \theta_b & \sin \theta_b \\ \sin \theta_b & -\cos \theta_b \end{pmatrix} \right] \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \left[\begin{pmatrix} \cos \theta_a & \sin \theta_a \\ \sin \theta_a & -\cos \theta_a \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \cos \theta_b & \sin \theta_b \\ \sin \theta_b & -\cos \theta_b \end{pmatrix} \right] \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_a & \sin \theta_a \\ \sin \theta_a & -\cos \theta_a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_b & \sin \theta_b \\ \sin \theta_b & -\cos \theta_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
&\quad - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_a & \sin \theta_a \\ \sin \theta_a & -\cos \theta_a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_b & \sin \theta_b \\ \sin \theta_b & -\cos \theta_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&\quad - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_a & \sin \theta_a \\ \sin \theta_a & -\cos \theta_a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_b & \sin \theta_b \\ \sin \theta_b & -\cos \theta_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
&\quad + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_a & \sin \theta_a \\ \sin \theta_a & -\cos \theta_a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_b & \sin \theta_b \\ \sin \theta_b & -\cos \theta_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= -\frac{1}{2} \cos \theta_a \cos \theta_b - \frac{1}{2} \sin \theta_a \sin \theta_b - \frac{1}{2} \sin \theta_a \sin \theta_b - \frac{1}{2} \cos \theta_a \cos \theta_b \\
&= -\cos \theta_a \cos \theta_b - \sin \theta_a \sin \theta_b \\
&= -\cos(\theta_a - \theta_b),
\end{aligned}$$

となるので示された。

(4) (3) の結果より

$$\tilde{C}(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b) = -\cos(\theta_a - \theta_b) - \cos(\theta'_a - \theta_b) + \cos(\theta_a - \theta'_b) - \cos(\theta'_a - \theta'_b),$$

となるが、例えば

$$\theta_a = \frac{3\pi}{4}, \quad \theta'_a = \frac{\pi}{4}, \quad \theta_b = \frac{\pi}{2}, \quad \theta'_b = 0,$$

と取ると

$$\tilde{C}(\theta_a, \theta'_a, \theta_b, \theta'_b) = -2\sqrt{2} < -2,$$

となるので CHSH 不等式は破られる。

参考文献

- [1] D. J. Griffiths and D. F. Schroeter, *Introduction to quantum mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge ; New York, NY, third edition ed., 2018.
- [2] 猪木慶治 and 川合光, *量子力学 I,II*. 講談社サイエンティフィク, 1994.
- [3] 清水明, *新版 量子論の基礎*. サイエンス社, 2004.
- [4] J.J. サクライ, *第 3 版 現代の量子力学*. 吉岡書店, 2022.
- [5] A. H. Compton, “A quantum theory of the scattering of x-rays by light elements,” *Phys. Rev.* **21** (May, 1923) 483–502.
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.21.483>.
- [6] T. Young, *A course of lectures on natural philosophy and the mechanical arts*, vol. 1. London, Printed for J. Johnson, 1807.
<https://www.biodiversitylibrary.org/item/63005>. <https://www.biodiversitylibrary.org/bibliography/22458>.
- [7] A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki, and H. Ezawa, “Demonstration of single - electron buildup of an interference pattern,” *American Journal of Physics* **57** no. 2, (02, 1989) 117–120,
https://pubs.aip.org/aapt/ajp/article-pdf/57/2/117/11558956/117_1_online.pdf.
<https://doi.org/10.1119/1.16104>.
- [8] <https://www.hitachi.com/rd/research/materials/quantum/doubleslit/index.html>.
- [9] C. Davisson and L. H. Germer, “Diffraction of electrons by a crystal of nickel,” *Phys. Rev.* **30** (Dec, 1927) 705–740.
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.30.705>.
- [10] L. V. P. R. de Broglie, “Recherches sur la théorie des quanta,” *Annals Phys.* **2** (1925) 22–128.
- [11] F. Cooper, A. Khare, and U. Sukhatme, “Supersymmetry and quantum mechanics,” *Phys. Rept.* **251** (1995) 267–385,
[arXiv:hep-th/9405029](https://arxiv.org/abs/hep-th/9405029).
- [12] E. Witten, “Dynamical Breaking of Supersymmetry,” *Nucl. Phys. B* **188** (1981) 513.
- [13] J. R. Pritchard and A. Loeb, “21-cm cosmology,” *Rept. Prog. Phys.* **75** (2012) 086901, [arXiv:1109.6012](https://arxiv.org/abs/1109.6012) [astro-ph.CO].
- [14] Y. Aharonov and D. Bohm, “Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory,” *Phys. Rev.* **115** (1959) 485–491.