

オイラーとガウスを主題とする
量子力学講義

Kuratsuji Hiroshi

2016

まえがき

本書の目標は、量子力学を微分積分の初歩から積み重ねることにより習得することである。物理学を数学で記述するということをはっきりと認識したのはニュートンである。彼は、ライプニッツと独立に微積分を発明して、それを彼の力学に適用して近代物理の基礎を築いた。しかし、これは歴史的なもので、現在われわれが学んでいる微積分学の記述の仕方はオイラー以後のものによっている。

オイラーの功績は、量子力学の数学的記述において決定的である。それは「オイラーの公式」に集約できる。

オイラーとならんで、量子力学を数学で記述するさいに決定的な役割をする数式（関数）を発明したのはガウスである。

本書は、この二人の偉大な碩学の発見した数学を基調とする量子力学を記述した試みである。いわば、量子力学を学習することにより、偉大な先達の考えたことに触れる縁（よすが）となろうというものである。

ギリシア文字

名称	小文字	大文字	読み方	コメント
alpha	α	A	アルファ	α : 放射線の名前
beta	β	B	ベータ	β : 放射線の名前
gamma	γ	Γ	ガンマ	γ : 放射線の名前
delta	δ	Δ	デルタ	δ : 微小量をあらわす
epsilon	ϵ, ε	E	エプシロン	ϵ : 微小量をあらわす
zeta	ζ	Z	ゼータ	
eta	η	E	イータ	
theta	θ, ϑ	T	シータ	θ : 角度をあらわす
iota	ι	I	イオタ	
kappa	κ	K	カッパ	
lambda	λ	Λ	ラムダ	
mu	μ	M	ミュー	
nu	ν	N	ニュー	
xi	ξ	Ξ	クシー	
omicron	o	O	オミクロン	
pi	π, ϖ	Π	パイ	π : 円周率のパイ
rho	ρ, ϱ	P	ロー	ρ : 密度をあらわす
sigma	σ, ς	Σ	シグマ	
tau	τ	T	タウ	
upsilon	υ	Υ	ウプシロン	
phi	ϕ, φ	Φ	ファイ	ϕ : 角度をあらわす
chi	χ	X	カイ	
psi	ψ	Ψ	プサイ	ψ : 量子力学の波動関数
omega	ω	Ω	オメガ	ω : 周期運動の振動数

目次

第 1 章	物理法則と微分方程式	5
1.1	変化率と微分の概念	5
1.2	微分方程式	7
1.3	微分方程式と解法	12
第 2 章	力学のこと	15
2.1	運動方程式からでてくる積分	15
2.2	ケプラー問題	17
2.3	万有引力から楕円軌道をもとめる	19
第 3 章	オイラーの公式	21
3.1	べき級数とテーラー展開	21
3.2	べき級数の微分方程式の解法への応用	24
3.3	$\exp[i\theta] = \cos \theta + i \sin \theta$	28
3.4	補足:無限積とゼータの特殊値	34
第 4 章	多変数の微分積分法	39
4.1	偏微分法	39
4.2	多重積分 (とくに 2 変数)	45
4.3	類型	46
第 5 章	ガウス積分	49
5.1	熱伝導方程式への応用	51
第 6 章	線積分とベクトル解析	57
6.1	線積分	57
6.2	面積分およびガウスの定理	60
6.3	ストークスの定理	63

第 7 章	複素関数論入門	67
7.1	複素関数の積分	67
7.2	コーシー＝リーマンの関係式	67
7.3	Cauchy の積分定理	69
7.4	Cauchy の積分公式	70
7.5	べき級数	72
第 8 章	量子, 波動およびハミルトン力学	75
8.1	波動関数	75
8.2	Lagrange の力学	78
8.3	Hamilton の力学	86
8.4	再び波動関数へ	90
8.5	量子力学の市場	97
第 9 章	波束の運動	103
9.1	数学の準備: フーリエ変換とデルタ関数	104
9.2	波束と不確定性関係	109
第 10 章	シュレーディンガー方程式と固有値問題	115
10.1	一般的枠組み	115
10.2	$\psi(x, t)$ の確率解釈	116
10.3	固有値問題	124
第 11 章	ポテンシャル問題その 1 (1 次元の場合)	133
11.1	初等関数で解ける問題	133
11.2	調和振動子	146
第 12 章	ポテンシャル問題その 2 (3 次元の場合)	153
12.1	3 次元中心力	153
12.2	水素原子	156
第 13 章	量子力学の一般形式	163
13.1	量子力学の一般的構造	164
13.2	量子力学的状態の記述: ブラケット表示	166
13.3	座標表示と運動量表示	173
第 14 章	Heisenberg の運動方程式	179

第 15 章	調和振動子の演算子法	183
第 16 章	角運動量	193
16.1	基本事項	193
16.2	固有関数と固有値の決定	193
16.3	スピン角運動量	198
第 17 章	摂動論	203
17.1	摂動論とは	203
17.2	定常摂動論	204
17.3	非定常摂動論 (時間依存摂動論)	208
17.4	定常摂動論の応用	215
第 18 章	散乱理論	221
第 19 章	多粒子系	229
19.1	フェルミおよびボーズ粒子系の統計力学	235
19.2	第 2 量子化	237
19.3	総括	244
第 20 章	量子力学の流体力学形式	249
第 21 章	密度行列	253
第 22 章	ガウス積分と経路積分	257
第 23 章	メモなど	261

第 1 章

物理法則と微分方程式

$$A = B \quad (1.1)$$

\swarrow
1つの量

\searrow
別の量

量 A が x の関数であり、 B もまた x の関数であるなら、ある x の値が上の関係式を満たす。その x を求めることを方程式を解く、または解を求めるという。 A や B に微分記号が含まれているような場合に、この関係式は微分方程式と呼ばれる。この章では、微分方程式というものが、どういう状況で登場するのかということと、微分方程式を解くという事について説明する。

1.1 変化率と微分概念

質点の位置を $x(t)$ とすると速度や加速度が

$$v(t) \equiv \frac{dx(t)}{dt} \quad (1.2)$$

$$a(t) \equiv \frac{dv(t)}{dt} = \frac{d^2x(t)}{dt^2} \quad (1.3)$$

となるので、ニュートンの運動方程式は微分方程式の典型である。

微分方程式は、次の節からみていくことにし、ここでは変化率の例をみていく。一般に X という量が時間とともに変化していくなれば、その変化率は次のように表すことができる。

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{X(t + \Delta t) - X(t)}{\Delta t} = \frac{dX}{dt} \quad (1.4)$$

量 $X(t)$ の変化速度は X を t で微分したものである。

問題 1. 半径 $r(t)$ が時間的に変化する時、円の面積の変化の速さはどうなるか。同様に、球の体積の変化速度は？

自然現象の中で、微分と言う概念がどのように現れているのか、いくつかの例をみてみよう。

■**熱の流れ** ある物体を考える。温度 T は位置 x に依存する； $T(x)$ 。このとき経験則として、“熱の流れ J は、温度の変化率に比例する。”

$$J = k \frac{dT}{dx} \quad (1.5)$$

温度という量と、熱の流れは別の物理量である。その対応関係の中に微分という概念が登場している。2つの物体を接触させたとき、温度差が大きい程、熱の移動量も大きくなる。それを連続な物体に拡張したものと考えられる。

■**電荷と電流** コンデンサーを含む閉じた回路を考える。コンデンサーに蓄えられた電荷 $Q(t)$ は時間的に変化する。電荷の時間変化は、その回路の電流 I である。

$$I = \frac{dQ}{dt} \quad (1.6)$$

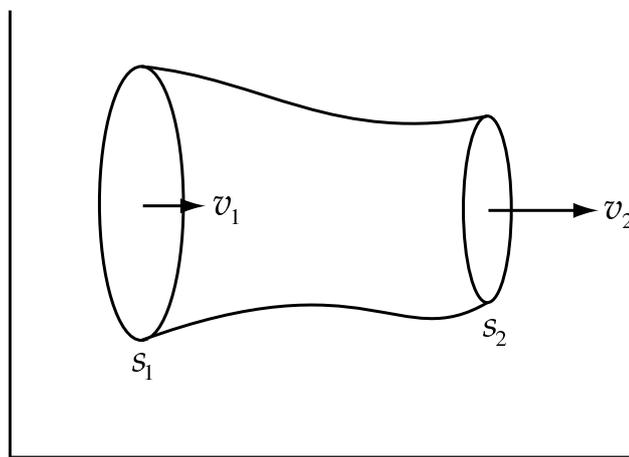


図 1.1 質量保存の法則

■**流体の流れの概念と質量保存** 断面積 S を単位時間あたりに流れる物質の量は、 Δt 時間に断面 S を通過する量 $S\Delta x$ (Δx は時間 Δt で流体が移動する距離) を $1/\Delta t$ 倍したものの、つまり

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{S\Delta x}{\Delta t} = S \frac{dx}{dt} = Sv \quad (1.7)$$

で与えられる。流体がチューブの中を流れているとき、その2つの断面の面積を、それぞれ、 S_1 と S_2 とすると

$$\rho S_1 v_1 = \rho S_2 v_2 \quad (1.8)$$

という関係式が得られる。ここで、 ρ は流体の単位あたりの質量、つまり密度をあらわす。

1.2 微分方程式

■**Newton の運動方程式** ニュートンは運動を記述する方程式を見出した。質点の加速度は、加わる力に比例する。加速度は、位置 $x(t)$ を時間で2回微分したものだから、運動方程式と呼ばれるものは、微分方程式である。

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F(x, t) \quad (1.9)$$

力学の問題を考えるというのは、質点の位置 x を時間の関数として表すことである。例えば、自由落下する質点の位置は

$$x(t) = -\frac{1}{2}gt^2 + v(0)t + x(0) \quad (1.10)$$

と時間の関数として書かれるが、式 (1.9) の右辺を $F(x, t) = -mg$ としたときの微分方程式を“解く”ことで、解 $x(t)$ を見出すことができる。

■**1 階の微分方程式と指数関数** 自己増殖する微生物の数がどのように時間変化するだろうか。ある瞬間の数の変化率が、そのときの個体数に比例するという、単純な状況が考えられる。

別の例だが、時間がたつと崩壊する粒子を寄せ集めたものを考えよう。ある1つの粒子に注目したとき、それがいつ崩壊するかは全く確率的なものとする。ある時刻の全体の数は $N(t)$ とする。1つの粒子が単位時間あたりに崩壊する確率を h とすると、時間 Δt の間に崩壊する数は $hN(t)\Delta t$ と考えられる。

これらの例を、すこし一般的に表現しよう。つまり、時間的に変化するある量 $X(t)$ について考える。 t において $X(t)$ だったものが、 $t + \Delta t$ において $X(t + \Delta t) = X(t) + \Delta X(t)$ になるとする。例の状況は、 Δt が十分小さいとき、この $\Delta X(t)$ が、 $X(t)\Delta t$ に比例するというものである。

$$\Delta X(t) = aX(t)\Delta t \quad (1.11)$$

よって $\Delta t \rightarrow 0$ のとき、微分方程式

$$\frac{dX}{dt} = aX \quad (1.12)$$

が得られる。この微分方程式の解はつぎのように求められる。一般的な解き方は以下で与えるが、とりあえず、指数関数の微分が、

$$\frac{d}{dx}(e^x) = e^x$$

に注目して、

$$Y(t) = X(t) \exp[at]$$

なる関数, $Y(t)$ を定義する。すると、

$$\frac{dY}{dt} = 0$$

なるので、 $Y(t) = A$, ここで、 C は一定値をとる。したがって、

$$X(t) = Ae^{at} \tag{1.13}$$

となることがわかる。ここで A は積分定数。この A は適当な時刻 t_0 における値 $X(t_0)$ が分かれば決めることができる。よく $t=0$ における値を与える。

$$X(0) = A \tag{1.14}$$

これは初期値や初期条件と呼ばれるものである。

今考えているような1階の微分方程式を解くとは、積分を1度行うことなので、出てくる積分定数も1つである。よって、初期条件を1つ与えると解が決まる。 $X(t) = Ae^{at}$ で $a < 0$ の場合が下図である。ひとつの微分方程式は無数の曲線群を与えるが、初期条件を与えてはじめてひとつの曲線になる。

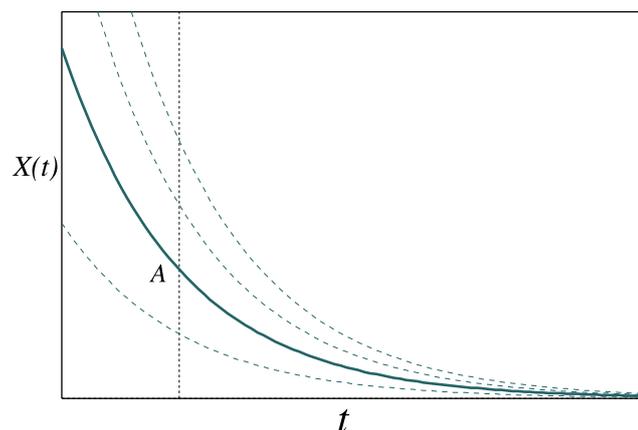


図 1.2 微分方程式の解は曲線群であり、初期条件 A の解を実線で書いた

今考えている微分方程式に対応するものを、いわゆる漸化式というもので考えてみよう。1ステップの変化量 $a_{n+1} - a_n$ が、量 a_n に比例していると翻訳できるから、

$$a_{n+1} - a_n = ca_n \tag{1.15}$$

つまり

$$a_{n+1} = (1+c)a_n \quad (1.16)$$

という，簡単な漸化式になる．よって，

$$a_n = (1+c)^n a_0 \quad (1.17)$$

となる． $a_0 = 1$ ， $c = -1/2$ の時の図を描かせると下のようになる．

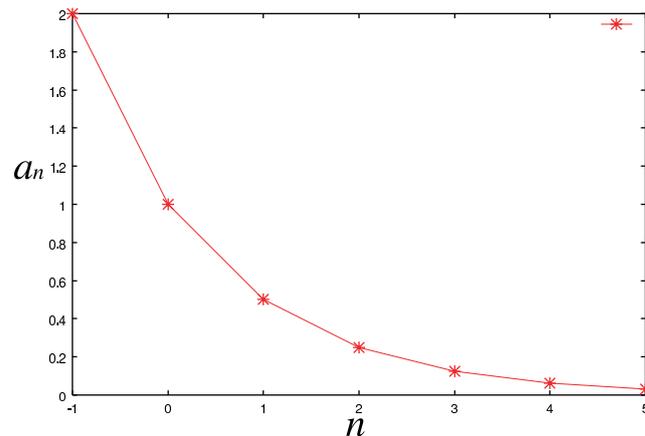


図 1.3 漸化式と微分方程式は連続か不連続の違いだけで，内容はほぼ同じであり，解曲線も似ている．

つぎに，物理の例題を考える．

例題 1. 容量 C のコンデンサーに電荷 Q_0 がたくわえられている．コンデンサーの両端を抵抗 R で結ぶとき，抵抗に流れる電流および電荷の変化を求めよ．

答え．電荷を時間の関数とする； $Q(t)$ ．流れる電流は，電荷の減少率であるから

$$I = -\frac{dQ}{dt} \quad (1.18)$$

抵抗 R における電圧降下はオームの法則より

$$V = RI \quad (1.19)$$

である．また，コンデンサーに蓄えられる電荷は，電圧に比例している．

$$Q = CV \quad (1.20)$$

以上から，次の微分方程式が得られる．

$$\frac{dQ}{dt} = -\frac{Q}{RC} \quad (1.21)$$

この微分方程式の解は $t = 0$ における値を Q_0 とすると

$$Q = Q_0 \exp\left(-\frac{t}{RC}\right)$$
$$I = -\frac{dQ}{dt} = \frac{Q_0}{RC} \exp\left(-\frac{t}{RC}\right)$$

となる.

□

問題 2. 回路に外部起電力が存在するときはどうなるか.

■step by step 解 微分方程式

$$\frac{df(x)}{dx} = f(x) \quad (1.22)$$

の解が $f(x) = f(0)e^x$ であることは、解を方程式の中に入れることで確認できる。しかしここでは、微分方程式 (1.22) だけから出発して、解が本当に上のように導かれるのかということの問題にする。うえで、数列の漸化式と微分方程式の対応を見たが、そこでの考え方を用いる。

x における $f(x)$ の値を知るために、区間 $[0, x]$ を n 等分する。すなわち、刻み幅 h を

$$h = \frac{x}{n} \quad (1.23)$$

とする。 n を十分大きくとれば、微分方程式はその定義から、

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_0} \sim \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} \quad (1.24)$$

という近似が成り立つ。これを、 $x = 0$ から一步一步 $x = x$ まで積み上げていく。

$$\begin{aligned} \frac{f(h) - f(0)}{h} &\sim f(0) && \longrightarrow && f(h) \sim (1+h)f(0) \\ \frac{f(2h) - f(h)}{h} &\sim f(h) && \longrightarrow && f(2h) \sim (1+h)^2 f(0) \\ &\vdots && && \vdots \\ \frac{f(nh) - f((n-1)h)}{h} &\sim f((n-1)h) && \longrightarrow && f(nh) \sim (1+h)^n f(0) \end{aligned}$$

ゆえに

$$f(x) = f(nh) \sim \left(1 + \frac{x}{n}\right)^n f(0) \quad (1.25)$$

$n \rightarrow \infty$ の極限を考えると、上の漸化式は近似でなくなり、さらに指数の定義

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n}\right)^n = e^x \quad (1.26)$$

を用いると

$$f(x) = f(0) \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n}\right)^n = f(0)e^x \quad (1.27)$$

となる。これは前に示した解とおなじである。

今見た方法は、刻み幅 h の間、曲線を直線で近似していることになる。すなわち、 $x = x_k$ における、 f の値と、傾き df/dx が分かっているならば、 $x = x_{k+1}$ における f の値は

$$f(x_{k+1}) \sim f(x_k) + \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_k} h \quad (1.28)$$

で得られる。

1.3 微分方程式と解法

1.3.1 微分方程式の種類

いま、関数 $y = f(x)$ を考える。その導関数は

$$f'(x) \equiv \frac{dy}{dx}, \quad f''(x) \equiv \frac{d^2y}{dx^2}, \quad \dots \quad (1.29)$$

典型的な関数として、指数関数 ($y = e^x$) を考える。その導関数は

$$\frac{dy}{dx} = e^x \quad (1.30)$$

となる。そしてこれから、もとの関数 (y) と導関数 (dy/dx) とのあいだにつきの関係があることがわかる。

$$\frac{dy}{dx} = y \quad (1.31)$$

この関係が、いわゆる“微分方程式”である。さらに微分すると、

$$\frac{d^2y}{dx^2} = e^x \quad (1.32)$$

となり、これから2階の微分が入った微分方程式が得られる。

$$\frac{d^2y}{dx^2} = y \quad (1.33)$$

いま見たことは、既知の関数に対して、そのみたく微分方程式を導いたのである。ところが本来は逆で、はじめに微分方程式を与えておいて、それからその微分方程式をみたす関数(未知関数)を求めることが問題となる。(ちなみに、上の2つの微分方程式を解いて得られる解は同じでない。)

このように、一般に、未知関数 ($y = f(x)$) とその任意の階数の導関数のあいだの関係を微分方程式と呼ぶ。また、微分方程式の未知関数を求めることを、微分方程式を解くといい、これは代数方程式の未知数をもとめることに対応する。

上で導いた微分方程式 (1.33) を少し拡張して

$$\frac{d^2y}{dx^2} + a \frac{dy}{dx} + by = 0 \quad (1.34)$$

とすると (a, b は定数)、その解はどのようになるであろうか。 b の符号によって解の振舞は特徴的に変わる。 b が負の場合は前の節で見たように指数関数的に増大する解か、指数関数的に減少する解である、逆に、 b の符号が正のときは、 x 軸を周期的に横切る振動解になる。 $a = 0, b = \omega^2/m$ とすると、それは力学における振動数 ω の単振動である。

1.3.2 簡単な微分方程式の解法

微分方程式の解を求める方法は一般に難しい。全てのタイプの微分方程式を包括的に解く方法は存在せず、個別の解法が必要である。しかし実際は解法が存在しないケースの方が多い。だからといって、小数派の解法が知られている場合の勉強をしなくていいわけではない。基本的な自然現象を記述する微分方程式だけを見ると、この小数派に属しているケースも少なくないからだ。

ここでは特に簡単な変数分離型と同次型についてだけ述べる。

■**変数分離型** 微分方程式が次のように変数分離が可能な場合がある。

$$\frac{dy}{dx} = f(x)g(y) \quad (1.35)$$

このとき、

$$\frac{1}{g(y)} \frac{dy}{dx} = f(x) \quad (1.36)$$

の両辺を x で積分すると

$$\int \frac{1}{g(y)} \frac{dy}{dx} dx = \int f(x) dx \quad (1.37)$$

となる。ここで、積分

$$I = \int \frac{dy}{g(y)} \quad (1.38)$$

を変数変換 $y = y(x)$ して、変数 x についての積分にしたとき

$$I = \int \frac{1}{g(y(x))} \frac{dy(x)}{dx} dx \quad (1.39)$$

となったことを思い出すと、式 (1.37) の左辺は変数 y についての積分になる。よって

$$\int \frac{dy}{g(y)} = \int f(x) dx \quad (1.40)$$

の積分を実行すれば解が得られる。この積分により、ひとつの積分定数が現れる。ここでは、少し丁寧な説明をしたが、実際に問題を解くときは次の例題のように計算すれば良い。

例題 2. 次の微分方程式の解を求めよ。

$$\frac{dy}{dx} = -xy$$

答え. 変数分離型であるから

$$\frac{dy}{y} = -x dx$$

のように変形^{*1}してから積分すると

$$\int \frac{dy}{y} = - \int x dx$$

となり, 両辺の不定積分は簡単に実行でき

$$\log y = -\frac{1}{2}x^2 + C$$

を得る. これを y について解いて

$$y = C' \exp \left[-\frac{1}{2}x^2 \right]$$

ともとまる. 初期条件 $y(0) = y_0$ などがある場合は, ここまで計算してから C' を決めれば良い. □

■**同次形** 同次形とは次の形にかけるものをいう.

$$\frac{dy}{dx} = f\left(\frac{y}{x}\right) \tag{1.41}$$

このとき

$$u(x) = \frac{y(x)}{x} \tag{1.42}$$

とおくと (1.41) の右辺は $f(u)$ となり, 左辺は

$$\frac{dy}{dx} = u + x \frac{du}{dx} \tag{1.43}$$

となるので, 微分方程式 (1.41) は x の関数 $u(x)$ についての変数分離型に帰着されるので, 解くことが可能になる.

^{*1} これは \int がないと適切な表現ではないかもしれないが, 計算のメモとしてこのように書くのは便利である.

第 2 章

力学のこと

2.1 運動方程式からでてくる積分

ニュートンの運動方程式が微分方程式であることを既に述べた。力学の詳細は別途講義でやられていることと思うが、ここで量子力学で必須の材料を思い切り簡略化してのべておこう。いわゆる解析力学については、後の章で簡単にふれる。

それは第 2 法則を微分方程式の形で書いたものである。

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F \quad (2.1)$$

これは 1 次元（直線上）の運動を記述するが、2（3）次元（平面、空間上）の運動はベクトル記号を用いて

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F} \quad (2.2)$$

となる。

ここでは、力が時間 t に依存しない場合を考える。

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F(x) \quad (2.3)$$

特別な $F(x)$ などについては、この微分方程式を解いて解 $x = x(t)$ を求めることができる。しかし、微分方程式が解けなくても、少し工夫することにより、一般的に成り立つ情報を引き出すことができる。

まず (2.3) の両辺に \dot{x} をかけると

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} \frac{dx}{dt} = F \frac{dx}{dt} \quad (2.4)$$

となる。この両辺を時間 t について t_1 から t_2 まで積分する。

$$\int_{t_1}^{t_2} m \frac{d^2 x}{dt^2} \frac{dx}{dt} dt = \int_{t_1}^{t_2} F \frac{dx}{dt} dt \quad (2.5)$$

ここで左辺には次の関係式を用いる.

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \right\} = m \frac{d^2x}{dt^2} \frac{dx}{dt} \quad (2.6)$$

また $F(x)$ は時間に依存しないので, 右辺は置換積分により次のようになる

$$\int_{t_1}^{t_2} F \frac{dx}{dt} dt = \int_{x_1}^{x_2} F dx \quad (2.7)$$

ここで $x_1 = x(t_1)$, $x_2 = x(t_2)$ とする. 以上より式 (2.5) は

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 \right) dt = \int_{x_1}^{x_2} F dx \quad (2.8)$$

となる. この左辺は積分できる

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 \right) dt = \frac{1}{2} m v_2^2 - \frac{1}{2} m v_1^2 \quad (2.9)$$

ここで $v_1 = v(t_1)$, $v_2 = v(t_2)$ とする. 右辺については, ポテンシャル関数 $V(x)$ を次のように導入する. まず, 適当な基準点 x_0 を決めると積分は

$$\int_{x_1}^{x_2} F dx = \int_{x_0}^{x_2} F dx + \int_{x_1}^{x_0} F dx \quad (2.10)$$

と分割できる. ここでポテンシャル関数を

$$V(x) \equiv \int_x^{x_0} F dx \quad (2.11)$$

で定義すると

$$\int_{x_1}^{x_2} F dx = -(V(x_2) - V(x_1)) \quad (2.12)$$

とかける. 以上をまとめると式 (2.8) は

$$\frac{1}{2} m v_2^2 - \frac{1}{2} m v_1^2 = V(x_1) - V(x_2) \quad (2.13)$$

となる. 移項することで

$$\frac{1}{2} m v(t_1)^2 + V(x(t_1)) = \frac{1}{2} m v(t_2)^2 + V(x(t_2)) \quad (2.14)$$

が得られるが, これは力学的エネルギー

$$E \equiv \frac{1}{2} m v^2(t) + V(x(t)) \quad (2.15)$$

が時間に依存しないことを示している.

ニュートンの運動方程式から出発して、力学的エネルギーの保存則という結論を得た。この結論を導くために必要だったことは、力が時間に依存せず、位置 x のみに依存することであった。このような場合は、力 $F(x)$ を x_1 から x_2 まで積分した値が、関数 $V(x)$ の x_2 における値と、 x_1 における値の差で与えられ、途中の解曲線 $x(t)$ がどのようなものであるかに依存しない。これがポテンシャルの概念である。ポテンシャル関数と力の関係は、その定義から

$$F = -\frac{dV}{dx} \quad (2.16)$$

である。このように定義される力のことをポテンシャル力、または保存力という。また、ポテンシャルの極値は、力が作用されないことがわかるので、平衡点（力の釣り合いの点）である。

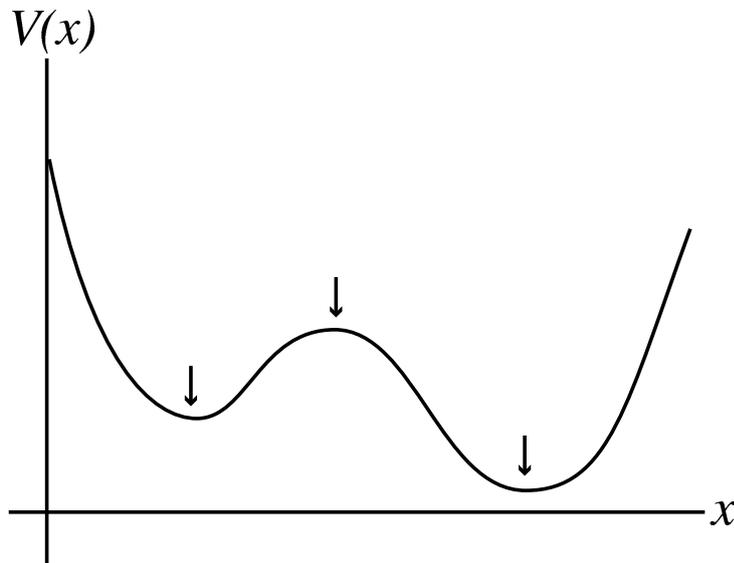


図 2.1 ポテンシャル関数；矢印は平衡点

2.2 ケプラー問題

2.2.1 準備

平面内での運動方程式は、力学でならうように、 x, y を座標として、

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F_x, \quad m \frac{d^2 y}{dt^2} = F_y$$

万有引力はいわゆる中心力である。つまり、力の中心からの距離 r だけに依存する力である。それは、ベクトルで表せば、

$$\mathbf{F} = f(r)\hat{r}$$

とかける。ここで、 $\mathbf{r} = (x, y)$, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ かつ、

$$\hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r}$$

であって、これを動径方向の単位ベクトルとよぼう。

さて、中心力の場合は、直角座標 (x, y) を用いるのは都合がよなくて、いわゆる極座標を用いるのが都合がよい。それは以下であたえられた

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta$$

この関係を用いて、運動方程式を (r, θ) のもの書き直せる。それを以下で実行する。それは、単に、微分の書き換えだけであるからまったく機械的に遂行できる。まず、速度の成分を計算すると

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{dr}{dt} \cos \theta - \frac{d\theta}{dt} r \sin \theta \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{dr}{dt} \sin \theta + \frac{d\theta}{dt} r \cos \theta \end{aligned}$$

これをもういちど微分すると

$$\begin{aligned} \frac{d^2x}{dt^2} &= \left\{ \frac{dr^2}{dt^2} - r \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \right\} \cos \theta - \left(r \frac{d^2\theta}{dt^2} + 2 \frac{dr}{dt} \frac{d\theta}{dt} \right) \sin \theta \\ \frac{d^2y}{dt^2} &= \left\{ \frac{dr^2}{dt^2} - r \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \right\} \sin \theta + \left(r \frac{d^2\theta}{dt^2} + 2 \frac{dr}{dt} \frac{d\theta}{dt} \right) \cos \theta \end{aligned}$$

ここで、極座標による基本ベクトルの変換（とりかえ）を考えなければならない。つぎの単位ベクトルを定義しよう。

$$\hat{\mathbf{r}} = \cos \theta \hat{x} + \sin \theta \hat{y}, \quad \hat{\theta} = -\sin \theta \hat{x} + \cos \theta \hat{y}$$

ここで、 θ は横方向の単位ベクトルとよばれる。これによって

$$\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \hat{\mathbf{r}} \left\{ \frac{dr^2}{dt^2} - r \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \right\} + \hat{\theta} \left(r \frac{d^2\theta}{dt^2} + 2 \frac{dr}{dt} \frac{d\theta}{dt} \right)$$

力が動径方向のみの成分をもつことに注意すると

$$m \left\{ \frac{dr^2}{dt^2} - r \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \right\} = f(r), \quad m \left(r \frac{d^2\theta}{dt^2} + 2 \frac{dr}{dt} \frac{d\theta}{dt} \right) = 0$$

これで準備がととのった。

2.3 万有引力から楕円軌道をもとめる

つぎの関係式

$$r \frac{d^2\theta}{dt^2} + 2 \frac{dr}{dt} \frac{d\theta}{dt} = \frac{1}{r} \frac{d}{dt} \left(r^2 \frac{d\theta}{dt} \right)$$

に注意すると、第2項から以下の保存法則がでてくる

$$r^2 \frac{d\theta}{dt} = h$$

これが『面積速度保存法則』といわれる。あるいは、角運動量保存法則である。ともかく、この保存法則を用いると、ひとつの変数 θ が消去される。つまり、 $r(t)$ に対する運動方程式に帰着される。

$$\frac{d^2r}{dt^2} - \frac{h^2}{r^3} = \frac{f(r)}{m}$$

万有引力は、

$$f(r) = -\frac{k}{r^2}$$

さて、運動方程式を解くことを考える。このために、つぎのような変数の変換をおこなう

$$r = \frac{1}{u}$$

時間の変数のかわりに、 θ を採用すると、微分計算をくりかえすと

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} = \frac{h}{r^2} \frac{dr}{d\theta} = -hu^2 \frac{dr}{du} \frac{du}{d\theta} = -h \frac{du}{d\theta}$$

さらに

$$\frac{d^2r}{dt^2} = -h \frac{d\theta}{dt} \frac{d}{d\theta} \left(\frac{du}{d\theta} \right) = -h^2 u^2 \frac{d^2u}{d\theta^2}$$

これから、

$$-h^2 u^2 \frac{d^2u}{d\theta^2} - h^2 u^3 = -\frac{k}{m} u^2$$

さらに

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = -\frac{k}{mh^2}$$

ここで、

$$X = u + \frac{k}{mh^2}$$

とおくと、

$$\frac{d^2X}{d\theta^2} + X = 0$$

となり、

$$X = C \cos \theta$$

となり、最終的に

$$r = \frac{1}{1 + C \cos \theta}$$

となる。これは楕円軌道をあたえる。

第3章

オイラーの公式

この章の主題は、「オイラーの公式」(あまりにも有名な)であるが、そのいくまでに、まず、テーラー展開、ベキ級数をやっておく。オイラーの公式自身は、かならずしもこれらを必要としないが、いずれ、のちに必要になるものである。

3.1 ベキ級数とテーラー展開

テーラー展開は、ある関数 $f(x)$ が、 $1, x, x^2, \dots, x^n, \dots$ に適当な係数 a_n をかけて足し合わせたものであらわすことができるということである。このようなことが常に可能かという疑問は後まわしにして、 e^x や $\sin x$ などの関数がベキ級数で表現できるとに慣れてもらいたい。そして、ベキ級数展開の典型的応用として微分方程式の解法を与える。

関数 $f(x)$ で x が小さいとき、多項式による近似ができる。

$$f(x) \sim \sum_{n=0}^N a_n x^n = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_N x^N \quad (3.1)$$

で x が小さいとき、 n が大きいところほど重要ではなくなる。例えば、 $\sin x \sim x$ という近似はおなじみである。 N をどんどん大きくしていくと、近似の精度は上がり、 $N \rightarrow \infty$ の極限で等式が成立すると予想される：

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots \quad (3.2)$$

関数をベキ級数に展開する例として次のようなものがある。

$$1 + x + x^2 + \dots = \frac{1}{1-x} \quad \text{ただし } |x| < 1 \quad (3.3)$$

この恒等式が正しいことは

$$(1-x)(1+x^2+x^3+\dots) \quad (3.4)$$

を展開して1になることを確かめれば良い。

もっと一般の関数について、つぎのように係数 a_n を決定する。

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots \quad (3.5)$$

と展開できたとして、両辺を微分する。

$$f'(x) = a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + 4a_4x^3 + \dots \quad (3.6)$$

$x = 0$ を代入すると

$$a_1 = f'(0) \quad (3.7)$$

が求まる。もう一度微分すると

$$f''(x) = 2a_2 + 3 \cdot 2a_3x + 4 \cdot 3a_4x^2 + 5 \cdot 4a_5x^3 + \dots \quad (3.8)$$

だから、同じように

$$a_2 = \frac{f''(0)}{2} \quad (3.9)$$

このような計算を繰り返すと

$$a_n = \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \quad (3.10)$$

であることが分かるので、 $f(x)$ は

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) x^n \quad (3.11)$$

と展開できる。しかし、すべての x で展開できるわけではない。先程みた

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \dots \quad (3.12)$$

の左辺は $|x| > 1$ でも定義されている関数であるが、右辺は $|x| > 1$ において明らかに発散する。また、 $x = -1$ のとき、左辺は $1/2$ になるのに対し、右辺は 1 と 0 を交互に繰り返すので、 $1/2$ に収束するとはいえない。したがって、この展開は $|x| < 1$ のとき、右辺の級数の値は左辺の値に収束する。

すべての x で、展開が正しいという場合もある。指数関数 e^x は、何回微分しても e^x であるから、 $f^{(n)}(0) = 1$ となるので

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n \quad (3.13)$$

と展開できるが、これは x の領域全てで収束する。収束領域が、どのようにしたら分かるかという詳細は、数学の講義でやるであろうと思うのでここでは述べないことにする。

問題 3. 以下の関数を $x = 0$ のまわりで Taylor 展開せよ。

$$\begin{array}{ll} (1) & y = \cos x \\ (2) & y = \log(1 - x) \\ (3) & y = \sqrt{1 + x} \\ (4) & y = \frac{1}{1 + x^2} \\ (5) & y = \cosh x \\ (6) & y = \sinh x \end{array}$$

テーラー展開を用いて、円周率 π を計算することを考える。次の恒等式に注目する。

$$\tan \frac{\pi}{4} = 1 \quad (3.14)$$

これは逆関数を用いると

$$\pi = 4 \arctan 1 \quad (3.15)$$

である。だから、 $f(x) = \arctan x$ のテーラー展開を求めよう。そこで、次の公式を用いる。

$$\arctan x = \int_0^x \frac{1}{1+t^2} dt \quad (3.16)$$

この被積分関数を展開すると

$$\frac{1}{1+t^2} = 1 - t^2 + t^4 - t^6 + \dots \quad (3.17)$$

となるから、

$$\arctan x = x - \frac{1}{3}x^3 + \frac{1}{5}x^5 - \frac{1}{7}x^7 + \dots \quad (3.18)$$

と求まる。さて、 $x = 1$ を代入して π の値を求めると

$$4 \times \left(1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \dots \right) \quad (3.19)$$

この計算を無限の項数計算すると π の値が決まる。しかし n 項目まで計算したとしても、最後の項の大きさ $\frac{1}{2n-1}$ の精度までしか分からない。したがって、上の式は円周率を無限級数で表すことができるという、ひとつの例を与えるという意味をもつ。

余談

テーラー展開の基本的な考え方は、“任意の（といっても制限がつくが）関数を無限個の基本の関数の和（つまり級数）で表現する” という思想に基づく。基本の関数として、べき関数 x^n をとったものが、テーラー展開である。さらに、任意の周期関数は三角関数の無限の和に展開される。これは、“フーリエ級数” とよばれるものになる。

3.2 ベキ級数の微分方程式の解法への応用

1章で微分方程式の解法をいくつか紹介したが，ここではべき級数を用いた微分方程式の解法を紹介する．基本のアイデアは，“微分方程式を満たす関数を求めるためにその関数の展開係数を求めることに帰着させる”ところにある．

■ 1 階の微分方程式 前の章でみた微分方程式

$$\frac{df(x)}{dx} = f(x) \quad (3.20)$$

を考える．この微分方程式の解 $f(x)$ は

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n + \cdots \quad (3.21)$$

と展開できる．両辺を微分すると

$$\frac{df(x)}{dx} = a_1 + 2a_2 x + 3a_3 x^2 + \cdots + n a_n x^{n-1} + \cdots \quad (3.22)$$

よって微分方程式 (3.20) は

$$(a_0 - a_1) + (a_1 - 2a_2)x + (a_2 - 3a_3)x^2 + \cdots = 0 \quad (3.23)$$

となり，この方程式が任意の x で成り立つためには

$$a_n = \frac{a_{n-1}}{n} = \frac{1}{n!} a_0 \quad (3.24)$$

である．したがって，

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_0 x^n = a_0 e^x \quad (3.25)$$

と解が求まる．

■ 2 階の微分方程式 次の微分方程式を考える．

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = f(x) \quad (3.26)$$

$f(x)$ は (3.21) のように展開できるとする．その2階微分は

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = 2 \cdot 1 a_2 + 3 \cdot 2 a_3 x^1 + 4 \cdot 3 a_4 x^2 + \cdots + n(n-1) a_n x^{n-2} \cdots \quad (3.27)$$

だから、微分方程式 (3.26) に代入すると

$$(2a_2 - a_0) + (3 \cdot 2a_3 - a_1)x + (4 \cdot 3a_4 - a_2)x^2 + \cdots = 0 \quad (3.28)$$

が得られる。この恒等式が成り立つためには $n \geq 2$ に対して

$$n(n-1)a_n - a_{n-2} = 0 \quad (3.29)$$

でなければならないことが分かる。係数の番号がひとつとぼしで関係づけられるので、 $a_0 \neq 0$ のとき偶数の係数は

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{1}{2 \cdot 1} a_0 \\ a_4 &= \frac{1}{4 \cdot 3} a_2 = \frac{1}{4!} a_0 \\ &\vdots \\ a_{2n} &= \frac{1}{(2n)!} a_0 \end{aligned} \quad (3.30)$$

となり、 $a_1 \neq 0$ のとき奇数の係数は

$$\begin{aligned} a_3 &= \frac{1}{3 \cdot 2} a_1 \\ a_5 &= \frac{1}{5 \cdot 4} a_3 = \frac{1}{5!} a_1 \\ &\vdots \\ a_{2n+1} &= \frac{1}{(2n+1)!} a_1 \end{aligned} \quad (3.31)$$

であることがわかる。この展開係数を (3.21) に代入すると、微分方程式の解が

$$f(x) = a_0 \left(1 + \frac{1}{2!} x^2 + \frac{1}{4!} x^4 + \cdots \right) + a_1 \left(x + \frac{1}{3!} x^3 + \frac{1}{5!} x^5 + \cdots \right) \quad (3.32)$$

であることが分かる。ここで、つぎの関数を導入しよう：

$$1 + \frac{1}{2!} x^2 + \frac{1}{4!} x^4 + \cdots = \frac{1}{2} (e^x + e^{-x}) = \cosh x \quad (3.33)$$

$$x + \frac{1}{3!} x^3 + \frac{1}{5!} x^5 + \cdots = \frac{1}{2} (e^x - e^{-x}) = \sinh x \quad (3.34)$$

これは双曲線関数とよばれる。(注意： $\frac{\sinh x}{\cosh x} = \tanh x$ も定義できる。) これを用いて、

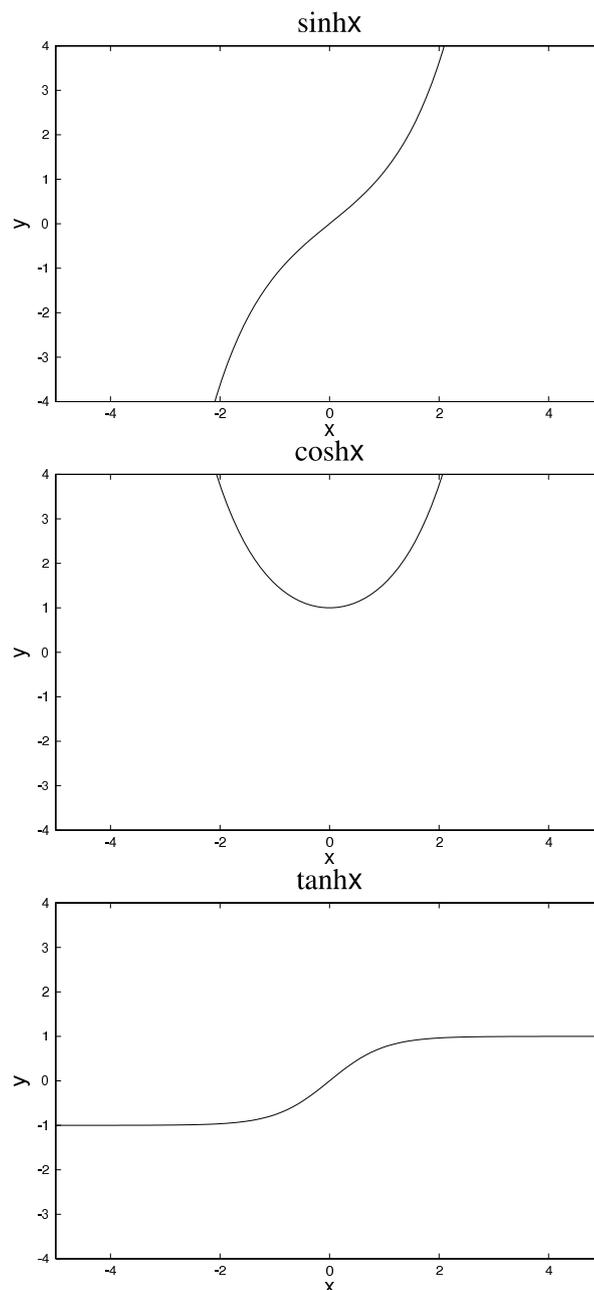
$$f(x) = a_0 \cosh x + a_1 \sinh x \quad (3.35)$$

であることがわかる。または

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2}(a_0 + a_1)e^x + \frac{1}{2}(a_0 - a_1)e^{-x} \\ &= b_1e^x + b_2e^{-x} \end{aligned} \quad (3.36)$$

としてもよい。これで、この2階の微分方程式は2つの定数をふくむ解が得られた。

[メモ]: ちなみに、双曲線関数を図示すると以下のようなになる。



問題 4. 微分方程式

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = -f(x) \quad (3.37)$$

の解を，上と同じように求めよ．

■ 2階線型常微分方程式の指数関数による解法 上でみた2階の微分方程式より，少し一般化された微分方程式

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + a \frac{df(x)}{dx} + bf(x) = 0 \quad (3.38)$$

もベキ級数の解法で一般解を導くことができる．しかし，ここでは別の方法を紹介する．指数関数は微分してもその次数が変わらないという特性がある．

$$(e^{cx})' = ce^{cx}, \quad (e^{cx})'' = c^2 e^{cx}, \quad \dots \quad (3.39)$$

そこで(3.38)の解を

$$f(x) = e^{\lambda x} \quad (3.40)$$

とおいてみる． λ は未知数とする．

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \lambda^2 e^{\lambda x} \quad (3.41)$$

$$\frac{df(x)}{dx} = \lambda e^{\lambda x} \quad (3.42)$$

を(3.38)に代入すると

$$(\lambda^2 + a\lambda + b)e^{\lambda x} = 0 \quad (3.43)$$

が得られる．したがって λ は

$$\lambda^2 + a\lambda + b = 0 \quad (3.44)$$

を満たさなければいけないので

$$\lambda = \frac{-a \pm \sqrt{a^2 - 4b}}{2} = \lambda_{\pm} \quad (3.45)$$

の2根が求まる．よって， $e^{\lambda_+ x}$ ， $e^{\lambda_- x}$ は微分方程式(3.38)の解である．より一般的な解は，2つの定数 C_1, C_2 を用いて

$$f(x) = C_1 e^{\lambda_+ x} + C_2 e^{\lambda_- x} \quad (3.46)$$

である．これは微分方程式(3.38)をみたす全ての曲線を表しており， C_1, C_2 の値を与えると具体的な1つの解曲線になる．

先程解いた微分方程式

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = f(x) \quad (3.47)$$

は $a = 0$, $b = -1$ のときだから $\lambda_+ = 1$, $\lambda_- = -1$ である. このときの解は 2 つの定数を用いて

$$f(x) = C_1 e^x + C_2 e^{-x} \quad (3.48)$$

である.

問題 2 でみた微分方程式

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = -f(x) \quad (3.49)$$

は, x を時間 t に, $f(x)$ を t における位置 $y(t)$ にすると, 調和振動子の運動方程式

$$m \frac{d^2 y(t)}{dt^2} = -ky(t) \quad (3.50)$$

とみなせる ($k/m = 1$ にする). この運動は, 振幅を A , 初期位相を θ_0 とすると解は

$$y(t) = A \sin(t + \theta_0) \quad (3.51)$$

であった. これは加法定理を用いると

$$y(t) = (A \sin \theta_0) \cos t + (A \cos \theta_0) \sin t \quad (3.52)$$

$$= C_1 \cos t + C_2 \sin t \quad (3.53)$$

ともあらわせる. ここで述べたかったことは, 2 階の微分方程式でひとつの解曲線を指定するのに, ふたつの任意定数を決めてやる必要があるということである.

問題 5. 調和振動子 ($m\ddot{x} = -kx$) に速度に比例する摩擦 $-a\dot{x}$ が働くときの運動方程式を解け. また振動しなくなる条件を考えよ.

3.3 $\exp[i\theta] = \cos \theta + i \sin \theta$

指数関数 e^x と三角関数 $\sin x, \cos x$ は, そのグラフをみても, 共通点があるようには思えない. しかし, これまで見てきたように, 指数関数は微分方程式

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = f(x) \quad (3.54)$$

の解であり, 三角関数は微分方程式

$$\frac{d^2 g(x)}{dx^2} = -g(x) \quad (3.55)$$

の解である. この 2 つの微分方程式は形は似ているが, 符号が異なることによって決定的に違ってくる.

後者の微分方程式の解は、2つあって

$$f(x) = \cos x, \quad \sin x \quad (3.56)$$

であることがわかっている。これから

$$\frac{d \cos x}{dx} = -\sin x, \quad \frac{d \sin x}{dx} = \cos x \quad (3.57)$$

となる。ここで、つぎのような複素数をつくってみる。

$$\xi(x) = \cos x + i \sin x \quad (3.58)$$

この $\xi(x)$ の満たす微分方程式は、上の2つから

$$\frac{d\xi}{dx} = i\xi \quad (3.59)$$

となることはただちにわかる。この方程式は、1階であるから解は求めることができ

$$\xi = \exp[ix] \quad (3.60)$$

これから、つぎのような形式的関係式が得られる：

$$\exp[ix] = \cos x + i \sin x \quad (3.61)$$

これが、あまりにも有名な“Eulerの公式”である。上で導いたやりかたは、なんとなくカマセを入れられた感がまぬかれない。以下では、Eulerの公式が成り立つことを3つの方法で確かめる。

■**Taylor 級数で** Eulerの公式の左辺 $e^{i\theta}$ を Taylor 級数で展開しよう。指数関数の展開は

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \quad (3.62)$$

だから、形式的に $x \rightarrow i\theta$ とおいてみると

$$\begin{aligned} e^{i\theta} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (i\theta)^n \\ &= \left(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \cdots \right) \\ &\quad + \left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \cdots \right) \times i \end{aligned}$$

これは $\sin \theta$, $\cos \theta$ を Taylor 展開したものだから、Eulerの公式

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta \quad (3.63)$$

が得られる。

■De Moivre の公式を用いるもの De Moivre の公式は

$$(\cos \theta + i \sin \theta)^n = \cos n\theta + i \sin n\theta \quad (3.64)$$

というものである。この式で、 $\theta \rightarrow \theta/n$ と書き直すと

$$(\cos \theta + i \sin \theta) = \left(\cos \frac{\theta}{n} + i \sin \frac{\theta}{n} \right)^n \quad (3.65)$$

となる。 $n \rightarrow \infty$ の極限では

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \cos \frac{\theta}{n} = 1, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \sin \frac{\theta}{n} = \frac{\theta}{n} \quad (3.66)$$

となるので式 (3.65) は

$$\cos \theta + i \sin \theta = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{i\theta}{n} \right)^n \quad (3.67)$$

となる。ここで公式

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n} \right)^n = e^x \quad (3.68)$$

をつかうと

$$\cos \theta + i \sin \theta = e^{i\theta} \quad (3.69)$$

が得られる。

問題 6. De Moivre の公式を証明せよ。

■もうひとつの方法 つぎの積分公式をもちいる。

$$\tan^{-1} x = \int_0^x \frac{dx}{1+x^2} \quad (3.70)$$

ここで、部分分数展開（虚数がでてくるが、形式的に因数分解するのである）

$$\frac{1}{1+x^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1-ix} + \frac{1}{1+ix} \right) \quad (3.71)$$

を用いて、積分をすると

$$\int_0^x \frac{dx}{1+x^2} = \frac{1}{2i} \log \left(\frac{1+ix}{1-ix} \right) \quad (3.72)$$

ゆえに

$$2i \tan^{-1} x = \log \left(\frac{1+ix}{1-ix} \right) \quad (3.73)$$

となつて、ここで $\tan^{-1} x = \theta$ とおけば

$$e^{2i\theta} = \frac{1 + ix}{1 - ix} \quad (3.74)$$

となる。さらに

$$\frac{1 + ix}{1 - ix} = \frac{1 - x^2}{1 + x^2} + \frac{2ix}{1 + x^2} \quad (3.75)$$

最後に三角関数の公式

$$\cos 2\theta = \frac{1 - x^2}{1 + x^2}, \quad \sin 2\theta = \frac{2x}{1 + x^2} \quad (3.76)$$

をつかえば Euler の公式がでてくる。

このように、Euler の公式が成り立つことを形式的に確認する方法に関しては、とくに異議を申し立てることはない。しかし、なにか釈然としたものが残る。指数関数と三角関数という一見異質なものが結びつくという事実はにわかには受け入れがたい（そんなことはないという諸君もいるかもしれないが）。気持ちがわるいことの原因は、虚数の取り扱いについてである。とくに、指数関数 e^x の変数 x が虚数であることの意味を考えることに抵抗を感じる。指数関数は、元来ある数の実数べきとして導入されたはずである。そこで、発想をいわば逆転して、この Euler の公式をもって“虚数べき”の定義を与えとみるのである（この発想は朝永振一郎氏による）。つまり、ある実数 a の純虚数べき a^{ib} (b を実数とする) の実部と虚部は Euler の公式から

$$a^{ib} = e^{ib \log a} = \cos(\log a^b) + i \sin(\log a^b) \quad (3.77)$$

と得られる。

■**加法定理** 三角関数の加法定理は、Euler 公式から導くことができる。指数法則から

$$e^{i(\alpha+\beta)} = e^{i\alpha} e^{i\beta} \quad (3.78)$$

であるが、左辺に Euler の公式を用いると

$$e^{i(\alpha+\beta)} = \cos(\alpha + \beta) + i \sin(\alpha + \beta) \quad (3.79)$$

となり、右辺は

$$\begin{aligned} e^{i\alpha} e^{i\beta} &= (\cos \alpha + i \sin \alpha) (\cos \beta + i \sin \beta) \\ &= (\cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta) + i (\sin \alpha \cos \beta + \sin \beta \cos \alpha) \end{aligned} \quad (3.80)$$

両辺の実部と虚部を比較すると

$$\cos(\alpha + \beta) = \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta \quad (3.81)$$

$$\sin(\alpha + \beta) = \sin \alpha \cos \beta + \cos \alpha \sin \beta \quad (3.82)$$

つまり、三角関数の加法定理が指数関数の指数法則に統一される。

■幾何学的同示 Euler の公式は、複素面上の点 z を指数関数を用いて表せることを示している。

$$\begin{aligned} z &= x + iy \\ &= r(\cos \theta + i \sin \theta) \\ &= re^{i\theta} \end{aligned} \tag{3.83}$$

偏角 $\theta \equiv \arg z$ について、 2π の周期性があることは、幾何学的には明らかである。

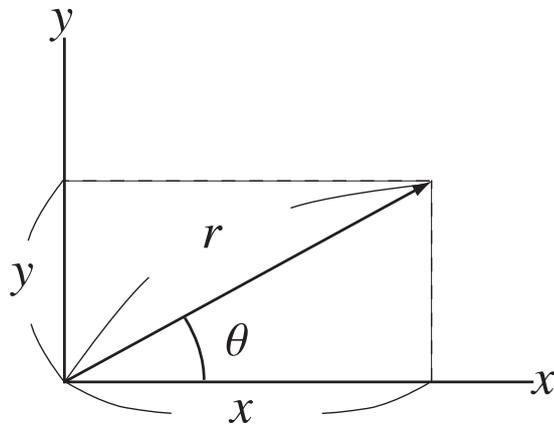


図 3.1 複素面 $z = re^{i\theta}$

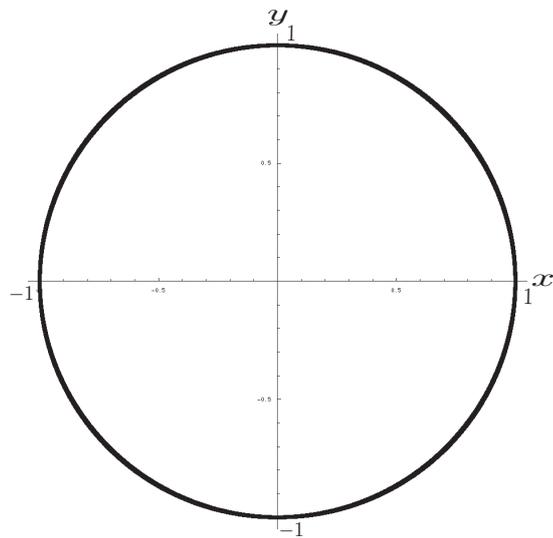


図 3.2 複素平面上的単位円

とくに、 $r = 1$ のときを考えると

$$z = e^{i\theta} \tag{3.84}$$

は θ を変えると、半径が 1 の円 (単位円とよぶ) を描く (なぜか?)。そこで、上で与えた加法定理は、ちょうど円周上で、角度 α と β である 2 つの回転をつづけて行くと、角度が $\alpha + \beta$ の回転になるという幾何学的な意味づけをあたえる。これを、高度な言葉でいうと、回転をひきつづき行う操作が「群」をなすということになる。

余談

複素数は、2 次方程式の根を通じて、 $x^2 = -1$ という不条理な関係から生じてきたものである。それでは、2 次方程式以上で、それを通じて、また別種の超複素数とでも呼ぶべきものが登場するかに思えるが、じつは、いかなる方程式であっても、複素数以上の数はでてこないのである。代数方程式の場合にこれを、明確に確定したのは、いわゆる、ガウスの『代数学の基本定理』と称するものである：『複素数を係数とする任意の次数の代数方程式の解は、また複素数で与えられる』残念ながら、証明は、ここではできない。これを、代数方程式以外の場合にも適用することができる。つまり、複素数を係数としてもつ任意の方程式の根は、複素数で尽くされるのである。こういう意味で、複素数のことを、難しい言葉でいえば、代数的閉体とよぶ。いかなる演算をしても複素数だけで閉じているという意味である。比喻でいえば、人類がそれで閉じているというようなものであろう。

複素数の関数というものが考えられて、その微分積分がやれるのである。これを、『関数論』とよばれる物理の応用に関してもきわめて重要な数学部門である。以下の章で簡単にふれる予定である。

問題 7. 2 つの適当な複素数を z_1, z_2 とする。

- (1) $z = z_1 + z_2$ を図示せよ。
- (2) $z = z_1 z_2$ を図示せよ。

(2) の解答例. $z = x + iy$ だから、 z_1, z_2 として複素平面内に適当な 2 点を選び、原点と直線で結ぶ。そしてもうひとつ $z_0 = 1$ という点を取り、原点と結ぶ。 $z = z_1 z_2$ を書き換えると

$$\frac{z}{z_2} = \frac{z_1}{z_0} \quad (3.85)$$

となる。これから、 z_0 と z_1 および原点でできる三角形と、 z_2 と $z (= z_1 z_2)$ および原点でできる三角形が相似になっていることが分かる。

3.3.1 双曲線関数と三角関数

次のように指数関数の組み合わせで書かれた関数を双曲線関数と呼ばれる:

$$\sinh x = \frac{1}{2}(e^x - e^{-x}), \quad (3.86)$$

$$\cosh x = \frac{1}{2}(e^x + e^{-x}), \quad (3.87)$$

$$\tanh x = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (3.88)$$

これは、オイラーの公式において、変数を $x \rightarrow ix$ と置き換えることによって得られることが容易にたしかめられるであろう。

問題 8. $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$ を示せ.

問題 9. 加法定理 ; $\sinh(x+y) = \sinh x \cosh y + \cosh x \sinh y$ などを示せ.

問題 10. $y = \frac{1}{2}(e^x + e^{-x})$ より、逆関数 k を求めよ.

この関数は、特殊相対性理論におけるローレンツ変換といわれるもので使われる。それは、つぎのような変換

$$\begin{aligned} x' &= \cosh \theta x + \sinh \theta l \\ l' &= \sinh \theta x + \cosh \theta l \end{aligned} \quad (3.89)$$

で与えられる。

3.4 補足:無限積とゼータの特殊値

ベキ級数は無限級数, つまり, 無限の項の和であったが, 無限の積で定義される関数というものはあるかという疑問が生じる。以下では, これに関して, 三角関数の例を用いて「観察」してみよう。

三角関数, $f(x) = \sin x$ は, 無限個の根をもっていることがわかる。答えは $x = \pi, 2\pi, \dots$ というわけで, 一般的に, $x = n\pi (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ でおま。

そこで, ちょっと荒っぽいだが, $\sin x$ をこのことを根拠に因数分解してみることを考える。たとえば, $f(x) = x^2 - 5x + 4 = 0$ は, $x = 1, x = 4$ という根をもつことから, $x^2 - 5x + 4 = (x-1)(x-4)$ と因数分解できることを, 思い切り拡張しようというわけだ。

独白: 話は逆ではないかな? $x^2 - 5x + 4 = (x-1)(x-4)$ から, $x = 1, x = 4$ がでてくるんではないか。それに, 無限個の根があるのに因数分解とはなんのことやら。

しかし、あまりこまかいことは言わないでおきましょう。ともかく、無限も有限のつづきとしてやるわけです。オイラーやガウスはそのような感覚で数学を発展させてきたのですから。ともかく、えいやつと、

$$\sin x = \cdots (x + n\pi)(x + (n-1)\pi) \cdots (x+1)x(x-\pi)(x-2\pi) \cdots (x-n\pi) \cdots \quad (3.90)$$

ここで、このような無限の積をえんえんと書くのは面倒だから、総和記号のまねをして、積記号を導入する。つまり、 a_1, \dots, a_n の n 個の数値から

$$a_1 a_2 \cdots a_n \equiv \prod_{k=1}^n a_n \quad (3.91)$$

と定義する。この記号をつかうと、無限数列から、無限積ができる：

$$P = \prod_{n=1}^{\infty} a_n \quad (3.92)$$

いまの場合にあてはめると、 $a_n = x + n\pi, b_n = x - n\pi$ とおいて、

$$\begin{aligned} & \cdots (x + n\pi)(x + (n-1)\pi) \cdots (x+1)x(x-\pi)(x-2\pi) \cdots (x-n\pi) \cdots \\ & = x \prod_{n=1}^{\infty} (x + n\pi) \times \prod_{n=1}^{\infty} (x - n\pi) = x \prod_{n=1}^{\infty} (x^2 - n^2\pi^2) \end{aligned}$$

となる。

ここで、 $x + n\pi$ と、 $x - n\pi$ をペアにして積をとる、 $(x + n\pi)(x - n\pi) = x^2 - (n\pi)^2$ とやった。無限の積の場合には、はたしてこんなことをやるのが許されるか、という心配があるのだが。これで、ともかく、

$$\sin x = x \prod_{n=1}^{\infty} (x^2 - n^2\pi^2) \quad (3.93)$$

とおけそうなのであるが、ちょっとこまる。なにかというと、これを書き直して、

$$\frac{\sin x}{x} = \prod_{n=1}^{\infty} (x^2 - n^2\pi^2) \quad (3.94)$$

とし、ここで、 $x \rightarrow 0$ の極限をとるわけだ。すると、よく知られた、

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = 1 \quad (3.95)$$

はあきらかにでてこない。それどころか、

$$\lim_{x \rightarrow 0} \prod_{n=1}^{\infty} (x^2 - n^2\pi^2) = \prod_{n=1}^{\infty} (-n^2\pi^2) \quad (3.96)$$

となって、あきらかに無限大になってしまう。そこで、すこし、コスいことをして、

$$\frac{\sin x}{x} = C \prod_{n=1}^{\infty} (x^2 - n^2 \pi^2) \quad (3.97)$$

のように、定数 C を忍び込ませておく。この定数を入れておいてもサイン関数の根には影響しないことは明らかである。しかし、なんらかのかたちで、この C は決めなければならない。そこで、うへの極限公式をつかう。つまり、

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = C \prod_{n=1}^{\infty} (-n^2 \pi^2) = 1 \quad (3.98)$$

これから、

$$C = \left[\prod_{n=1}^{\infty} (-n^2 \pi^2) \right]^{-1} \quad (3.99)$$

したがって、

$$\frac{\sin x}{x} = \prod_{n=1}^{\infty} (x^2 - n^2 \pi^2) \left[\prod_{n=1}^{\infty} (-n^2 \pi^2) \right]^{-1} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \left(\frac{x}{n\pi} \right)^2 \right) \quad (3.100)$$

つまり、

$$\sin x = x \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \left(\frac{x}{n\pi} \right)^2 \right) \quad (3.101)$$

と表せることがわかった!!!!

独白：なんだか、カマされた気がするのだが

つまり、サイン関数は、かたや、テーラー展開で、

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots \quad (3.102)$$

かたや、このような無限積なる”エゲツない”表式であたえられることがわかった。つまり、

$$x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots = x \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \left(\frac{x}{n\pi} \right)^2 \right) \quad (3.103)$$

これはいったい何を意味するのか??? 両辺を比べてみることによりなにか、でてこないかを考える。

1: まず、 x を両辺でわると、

$$1 - \frac{x^2}{3!} + \frac{x^4}{5!} - \dots = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \left(\frac{x}{n\pi} \right)^2 \right) \quad (3.104)$$

そこで、右辺の x^2 までの展開を書き下すと、

$$1 - \left(\frac{1}{1^2\pi^2} + \frac{1}{2^2\pi^2} + \frac{1}{3^2\pi^2} + \cdots \right) x^2 = 1 - \frac{1}{\pi^2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \right) x^2 \quad (3.105)$$

これを、左辺の x^2 の係数と比べると、

$$\frac{1}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{1}{3!} \quad (3.106)$$

これから、

$$\frac{\pi^2}{6} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \quad (3.107)$$

なるおどろくべき式がでてくる。この右辺の無限和は、いわゆるゼータ関数

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}$$

に対する、 $s = 2$ における特殊値となっている。これが、オイラーが発見したものである。

2 : つぎに、等式 (3.101) の両辺の対数をとると、

$$\log \sin x = \log x + \sum_{n=1}^{\infty} \log \left(1 - \frac{x^2}{n^2\pi^2} \right) \quad (3.108)$$

この両辺を微分すると、

$$\frac{\cos x}{\sin x} = \cot x = \frac{1}{x} + 2x \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{x^2 - n^2\pi^2} \quad (3.109)$$

がでてくる。これが、有名な、 $\cot x$ を部分分数展開に展開する式である。

検討：うへの計算過程は、じつは、まったく逆で、 $\cot x$ の部分分数展開というものを最初に与えてそこから、 $\sin x$ の無限積にもっていくというやり方が正式のやりかたである。

□

オイラーとガウス

ニュートン、ライプニッツの発明以後、微積分の実質的發展をもたらせたのは、オイラーである。彼は、無数の数学的発見をしているが、そのうちもっとも有名なものが、ここで述べたオイラーの公式である。ガウスは、オイラー以後の数学者で最大の数学者であるといわれている。ガウスの名前のつく数学公式は、物理においても頻繁にあらわれる。ガウスもオイラーも数学の公式は、物理現象のように、数値的な“実験”をして発見したといわれている。

第 4 章

多変数の微分積分法

4.1 偏微分法

2 変数 (多変数) 関数

ひとつの値 x を与えると、ある値 $f(x)$ が決まる 1 変数の関数は扱いやすい。微分や積分の意味も直観的で分かりやすい。しかし、物理を記述するとき、1 つしか変数がない場合は重要ではあるけれども、特別な場合である。まず、多変数で記述される物理の例を見てみよう。

■**熱力学** 熱力学では圧力 p 、体積 V 、温度 T を独立変数として状態を記述した。扱う対象を“ N mol の理想気体”とした場合、この 3 つ物理量の間にはひとつの関係式がある。

$$pV = NkT \quad (4.1)$$

これは状態方程式と呼ばれる。

例えば、温度 T が一定の系を考えることにすると、状態方程式は下図のように $pV = \text{const}$ の曲線群になり、残りの変数 p 、 V の間に、ひとつの関係式を与える。したがって、 P 、 V のどちらかを独立変数と思えば良い。このように、状態方程式が成り立つ系では、状態を記述する独立変数の数は 2 つである。

熱力学の第 1 法則を見てみよう。

$$\Delta U = \Delta'Q + \Delta'W \quad (4.2)$$

ここで、 $\Delta'Q$ は系に流れ込む熱量であり、 $\Delta'W$ は系になされる仕事であるダッシュ (あるいはプライム) をつけたのは、熱量とか仕事というのは、なにか与えられた関数の変化とみなせないということを強調したかったからである。

仕事は、圧力 P で体積 dV だけ圧縮したものだから

$$\Delta'W = -P\Delta V \quad (4.3)$$

となる。

一方、熱のほうは、なにか、体積の変化による仕事というふうには書き表したいのであるが、それは、直感的なものがない。これが熱というものを複雑にわかりにくくしている原因でもある。しかし、“エントロピー”なるものを導入することによってみごとに解決された（クラジウスが導入した）。以下、すこしむつかしくなるが、くわしくは後期の熱の話のところで出てくるであろう。つまり、エントロピーの変化量を、つぎのように熱量の変化を温度（絶対温度）でわったものであると定義するのである：

$$\frac{\Delta'Q}{T} = \Delta S \quad (4.4)$$

あるいは、逆に、熱量は、エントロピーの変化量 ΔS を用いて、

$$\Delta'Q = T\Delta S \quad (4.5)$$

とかける。これにより、内部エネルギーの変化は、

$$\Delta U = T\Delta S - P\Delta V \quad (4.6)$$

となる。うえで、 ΔX は、量 X の変化を表しているが、実際は微分、 dX を用いて表す。すなわち、

$$dU = TdS - PdV \quad (4.7)$$

この表式から、内部エネルギーは、独立変数として S と V にとればよいことが分かる。補足：

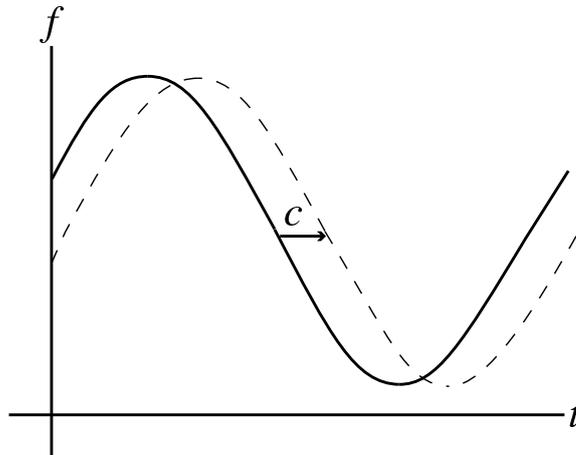
内部エネルギーは、いわゆる熱力学的関数の典型である。熱力学的関数とは、力学でいうポテンシャルを一般化したものである。以下に、内部エネルギー以外に、3つの熱力学ポテンシャルがある。

- 1: 自由エネルギー (独立変数 V と T) : $F = U - TS$, $dF = -SdT - PdV$
- 2: ギブズ自由エネルギー (独立変数 P と T) : $G = F + PV$, $dG = -SdT + VdP$
- 3: エンタルピー (独立変数 S と P) : $H = U + PV$, $dH = TdS + VdP$

■**波動** 波動は、変位 f を空間変数 x と時間変数 t の関数として表す。これは“場”という概念に一般化される。例えば、速度 c で伝播する波は

$$f(x, t) = A \cos \left(\frac{2\pi}{\lambda} (x - ct) \right) \quad (4.8)$$

とかける。



2 変数関数の微分

2 変数の関数を微分するとはどういうことか考えよう.

$$(x, y) \rightarrow (x + \Delta x, y + \Delta y) \quad (4.9)$$

という変数の変化に対して, 関数 $F(x, y)$ の変化する大きさは

$$\Delta F = F(x + \Delta x, y + \Delta y) - F(x, y) \quad (4.10)$$

と書ける. これをうまく表現する方法をみていくが, その準備として, 導関数の多変数版を導入しよう.

1. y を固定する. つまり $\Delta y = 0$ のとき

$$\Delta F = F(x + \Delta x, y) - F(x, y)$$

両辺を Δx で割って, $\Delta x \rightarrow 0$ とすると

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta F}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{F(x + \Delta x, y) - F(x, y)}{\Delta x} \quad (4.11)$$

$$\equiv \frac{\partial F}{\partial x}(x, y) \quad (4.12)$$

2. 同様に x を固定すると

$$\lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{F(x, y + \Delta y) - F(x, y)}{\Delta y} \equiv \frac{\partial F}{\partial y}(x, y) \quad (4.13)$$

このように“偏導関数”を定義する. 3 変数以上がある場合も同様である. この導関数の意味は難しくない. 関数 $z = F(x, y)$ は 3 次元の曲面だが, y を固定することは, y が一

定という平面で曲面を切ることある。この切り口は曲線になる。そこで、その曲線で接線をひくと、その傾きが $\frac{\partial F}{\partial x}$ となる。

さらに高次の導関数も定義できる。

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{(\partial F / \partial x)(x + \Delta x, y) - (\partial F / \partial x)(x, y)}{\Delta x} \equiv \frac{\partial^2 F}{\partial x^2}(x, y) = F_{xx} \quad (4.14)$$

これと同様にして

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial y} \right) = F_{xy} \\ \frac{\partial^2 F}{\partial y \partial x} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial x} \right) = F_{yx} \\ \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial y} \right) = F_{yy} \end{aligned}$$

と定義される。 $F_{xy} = F_{yx}$ がいつも成り立つとは限らない。

問題 11. つぎの関数を偏微分せよ。

$$(1) \quad f(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$(2) \quad f(x, y) = \cos^{-1} \frac{x}{y}$$

$$(3) \quad f(x, y) = \log(x^2 - y^2)$$

$$(4) \quad f(x, y) = \sqrt{1 - x^2 - y^2}$$

■勾配 (グラディエント) さて、2変数関数 $F(x, y)$ の変化 ΔF と偏導関数の関係を見よう。

$$\begin{aligned} \Delta F &= F(x + \Delta x, y + \Delta y) - F(x, y) \\ &= (F(x + \Delta x, y + \Delta y) - F(x, y + \Delta y)) \\ &\quad + (F(x, y + \Delta y) - F(x, y)) \end{aligned} \quad (4.15)$$

と分解する。これは $\Delta x \rightarrow 0, \Delta y \rightarrow 0$ とすると

$$\begin{aligned} F(x + \Delta x, y + \Delta y) - F(x, y + \Delta y) &\rightarrow \frac{\partial F}{\partial x} \Delta x \\ F(x, y + \Delta y) - F(x, y) &\rightarrow \frac{\partial F}{\partial y} \Delta y \end{aligned} \quad (4.16)$$

とかける。ここで、 $\Delta x \rightarrow dx, \Delta y \rightarrow dy$ とおきかえると (4.15) は

$$dF = \frac{\partial F}{\partial x} dx + \frac{\partial F}{\partial y} dy \quad (4.17)$$

この式を、2つのベクトルの内積と見よう*1。

*1 $\vec{A} \cdot \vec{B} = A_x B_x + A_y B_y$

そこで次のベクトルを導入する,

$$\text{grad}F = \left(\frac{\partial F}{\partial x}, \frac{\partial F}{\partial y} \right) = \frac{\partial F}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial F}{\partial y} \mathbf{j} \quad (4.18)$$

すなわち、関数 F の 2 つの偏導関数を成分とするベクトルである。これが関数の“勾配”(グラディエント) と呼ばれるものである。あるいは、つぎの記号; ∇ (ナブラと読む) を使う。

$$\text{grad}F \equiv \nabla F \quad (4.19)$$

ベクトル $d\mathbf{r} = (dx, dy)$ の方向に関数 $F(x, y)$ は dF 変化する, ということに関して, 勾配ベクトルを定義すると

$$dF = \nabla F \cdot d\mathbf{r} \quad (4.20)$$

と書くことができた。

この勾配 $\text{grad}F$ の方向は, 曲線 $F(x, y) = C$ (C は一定値) の法線である, ということを示しておこう。

いま, 曲線 $F(x, y) = C$ 上に, 微小な距離だけはなれた 2 点, $\mathbf{r} = (x, y)$, $\mathbf{r} + d\mathbf{r} = (x + dx, y + dy)$ をとると,

$$\begin{aligned} dF &= F(x + dx, y + dy) - F(x, y) \\ &= C - C = 0 \end{aligned} \quad (4.21)$$

したがって, 上の定義から, $\nabla F \cdot d\mathbf{r} = 0$ となる。すなわち, 2 つのベクトル ∇F と $d\mathbf{r}$ は垂直に交わる。 $d\mathbf{r}$ は, 曲線の接線方向を向いているから, ∇F はそれに垂直つまり, 法線方向をむいている。

■力学からの例 ポテンシャル関数 $V(x)$ を空間変数 x で微分したものが力であった。つまり

$$F = -\frac{dV(x)}{dx} \quad (4.22)$$

である。これは 1 次元の場合, すなわち線上の運動の場合である。2 次元の運動の場合, 変数は 2 つになりポテンシャル関数は $V(x, y)$ だから, 力の x 成分, y 成分は

$$F_x = -\frac{\partial V}{\partial x}, \quad F_y = -\frac{\partial V}{\partial y} \quad (4.23)$$

である。ベクトルで表すと

$$\mathbf{F} = -\text{grad}V \quad (4.24)$$

となる。

■補足: 2変数関数のテーラー展開 1変数の場合にテーラー展開というものをやった。そこで、2変数(以上)の関数の場合にも、できることが予想される。これについて、ごく簡単にふれておく。

1変数の場合とおなじく、 $f(x, y)$ を x, y のべき関数で展開するのである。ただし、今度は単項式 x^N のかわりに、 N 次の単項式は

$$x^n y^m \quad (4.25)$$

(ここで n, m は、 $N = n + m$ を満たすものすべてである) というかたちのものを、“単位”にとる。たとえば、 $N = 3$ のときには、

$$x^3, x^2y, xy^2, y^3 \quad (4.26)$$

の4つがある。一般には

$$x^N, x^{N-1}y, x^{N-2}y^2, \dots, y^N \quad (4.27)$$

の $N + 1$ 項がある。そこで、つぎのような展開を仮定する：

$$\begin{aligned} f(x, y) = & a_{00} + a_{10}x + a_{01}y + a_{20}x^2 + a_{11}xy + a_{02}y^2 \\ & + a_{30}x^3 + a_{21}x^2y + a_{12}xy^2 + a_{03}y^3 + \dots \end{aligned} \quad (4.28)$$

一般項は、

$$a_{N0}x^N + a_{N-1,1}x^{N-1}y + \dots + a_{1,N-1}xy^{N-1} + a_{0N}y^N \equiv \sum_{n,m} a_{nm}x^n y^m \quad (4.29)$$

ここで、展開係数をつぎのようにして決めていく。まず、 $x = 0, y = 0$ を代入すると

$$a_{00} = f(0, 0) \quad (4.30)$$

つぎに、1回偏微分して $x = 0, y = 0$ を代入すると

$$a_{10} = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x=0, y=0}, \quad a_{01} = \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{x=0, y=0} \quad (4.31)$$

さらに

$$2!a_{20} = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x=0, y=0}, \quad a_{11} = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right|_{x=0, y=0}, \quad 2!a_{02} = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right|_{x=0, y=0} \quad (4.32)$$

より

$$a_{20} = \left. \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x=0, y=0}, \quad a_{11} = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right|_{x=0, y=0}, \quad a_{02} = \left. \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right|_{x=0, y=0} \quad (4.33)$$

このプロセスを繰り返していくと

$$a_{nm} = \frac{1}{n!} \frac{1}{m!} \frac{\partial^n f}{\partial x^n} \frac{\partial^m f}{\partial y^m} \Big|_{x=0, y=0} \quad (4.34)$$

(ただし, $n + m = N$). これから展開公式

$$\begin{aligned} f(x, y) = & f(0, 0) + \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x=0, y=0} x + \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{x=0, y=0} y + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{x=0, y=0} x^2 \\ & + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \Big|_{x=0, y=0} xy + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \Big|_{x=0, y=0} y^2 + \cdots + \sum_{n, m} \frac{1}{n!} \frac{1}{m!} \frac{\partial^n f}{\partial x^n} \frac{\partial^m f}{\partial y^m} \Big|_{x=0, y=0} \end{aligned} \quad (4.35)$$

が得られる.

4.2 多重積分 (とくに2変数)

つぎに、多変数の積分を説明する.

普通の積分, すなわち1変数のとき, 積分はいわゆる区分求積法で定義した.

$$I = \sum f(x_i) \Delta x_i \rightarrow \int_a^b f(x) dx \quad (4.36)$$

この積分のアイデアを多変数の場合へ拡張しよう. 2つの独立変数をもつ関数 $F(x, y)$ を積分するとは, (x_i, y_j) における値に

$$I = \sum F(x_i, y_j) \Delta x \Delta y \rightarrow \iint_K F(x, y) dx dy \quad (4.37)$$

積分区間が積分領域になる.

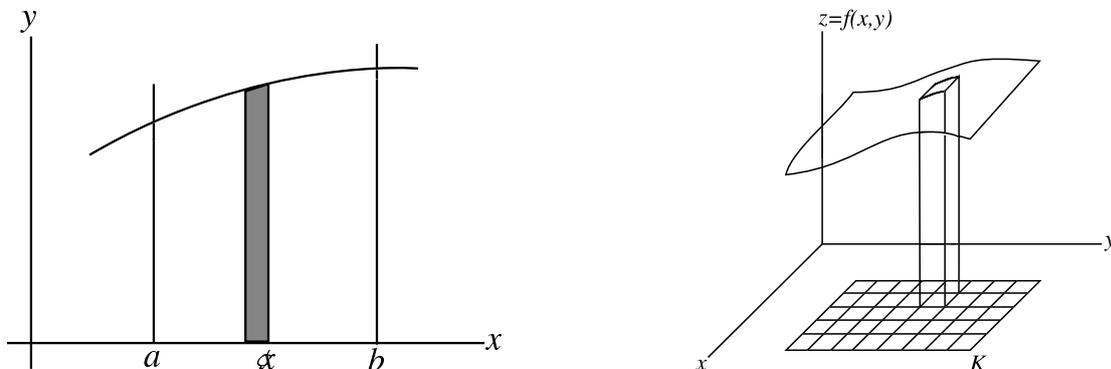


図 4.1

4.3 類型

積分をする領域の形によって計算もいろいろある. x, y の領域がそれぞれ指定された長方形型, 直線にはさまれた領域である三角形型, 他にも, 変数分離型や極座標がある.

1. まず, 領域が長方形の時をみてみよう. これは単純で

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b \left[\int_c^d F(x, y) dy \right] dx \\ &= \int_c^d \left[\int_a^b F(x, y) dx \right] dy \end{aligned}$$

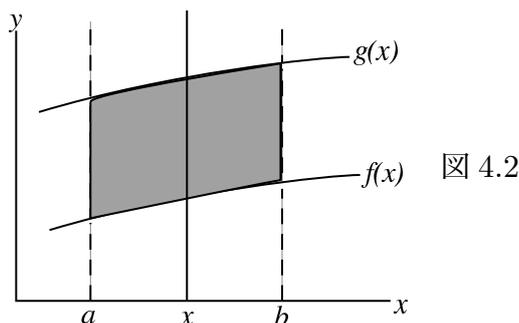
となる.

2. $f(x) \leq y \leq g(x)$ の領域. まず, x を固定して y で積分する.

$$\int_{f(x)}^{g(x)} F(x, y) dy = G(x) \quad (4.38)$$

これは x の関数である. つぎに x で積分する.

$$I = \int_a^b G(x) dx = \int_a^b \left[\int_{f(x)}^{g(x)} F(x, y) dy \right] dx \quad (4.39)$$



■例 直線 $y = \frac{b}{a}x$, $x = a$ および x 軸で囲まれる領域を計算しよう.

$$I = \iint_{\Delta} F(x, y)$$

$$\int_0^{\frac{b}{a}x} F(x, y) dy = G(x)$$

$$I = \int_0^a G(x) dx = \int_0^a \left[\int_0^{\frac{b}{a}x} F(x, y) dy \right] dx$$

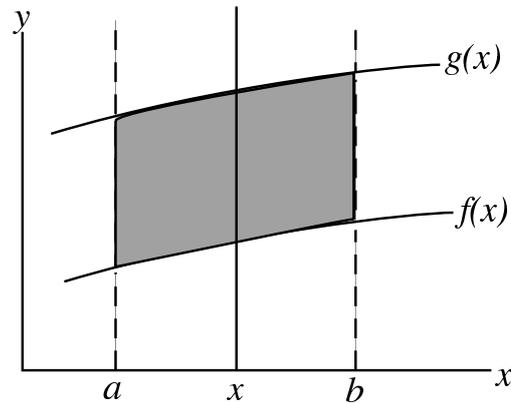


図 4.3

具体的に $F(x, y) = 1$ のときをみると,

$$G(x) = \int_0^{(\frac{b}{a})x} 1 dy = \frac{b}{a}x$$

$$I = \int_0^a \frac{b}{a}x dx = \left[\frac{b}{2a}x^2 \right]_0^a = \frac{b^2}{2a}a^2 = \frac{ab}{2}$$

3. 変数分離形

$$F(x, y) = f(x)g(y) \quad (4.40)$$

領域が長方形のとき

$$\int_c^d \int_a^b F(x, y) dx dy = \int_c^d g(y) dy \times \int_a^b f(x) dx$$

■例

$$I = \int\int_{\text{長方形}} e^{-(x^2+y^2)} dx dy = \int_a^b e^{-x^2} dx \times \int_c^d e^{-y^2} dy \quad (4.41)$$

4. 積分領域が、中心対称の時などは、積分変数を極座標にとると計算しやすい。被積分関数が $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ などのときである。つまり

$$I = \iint F(x^2 + y^2) dx dy \quad (4.42)$$

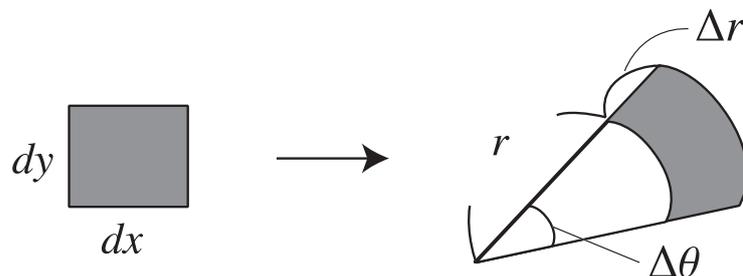
の形のとき

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta \quad (4.43)$$

という変数変換をする。

面積要素 $dx dy$ も r, θ で表さなければならない。

$$\Delta x \Delta y \rightarrow r \Delta \theta \Delta r \implies r dr d\theta \quad (4.44)$$



とすればいいことは、図から分かる。結局、変数 r だけの1変数の積分になった。

$$\iint F(x^2 + y^2) dx dy \implies \iint F(r^2) r dr d\theta \quad (4.45)$$

さらに、3次元の場合に拡張できる。こんどは、面積要素のかわりに体積要素である。3次元空間の極座標を考えて、扇のかわりに球殻をとればよい。半径が $(r, r + dr)$ で囲まれた球殻で、緯度が $(\theta, \theta + d\theta)$ 、かつ、経度が $(\phi, \phi + d\phi)$ にある部分の体積は、図から推測されるように、 $r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$ となることがわかる。したがって、体積要素は

$$dx dy dz = r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$$

となることがわかる。

第5章

ガウス積分

ここで、物理の種々の分野においてもっとも良く使われる Gauss 積分の計算方法を証明する。Gauss 積分とは

Gauss 積分

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$$

被積分関数 $\exp(-ax^2)$ は図のような曲線であり、これを $-\infty$ から ∞ まで積分、すなわちこの図の曲線で囲まれた領域の面積を求める。

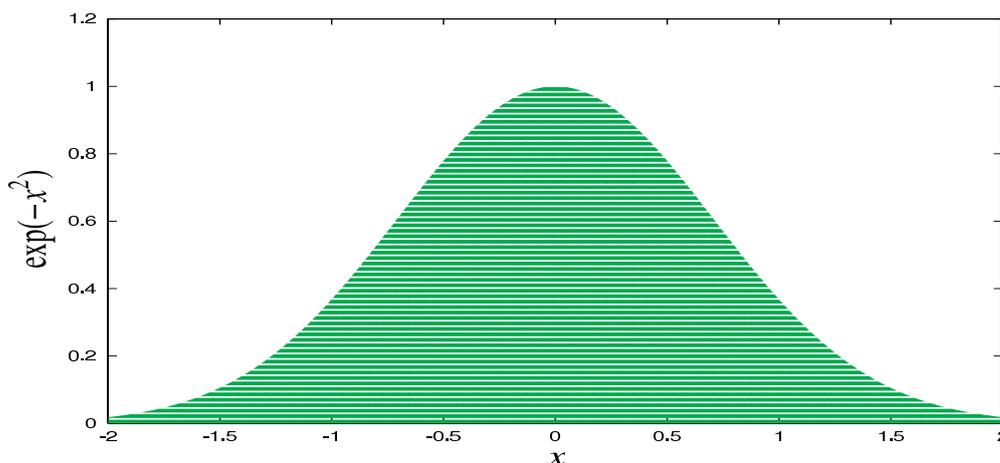


図 5.1

問題 12. ガウスの関数の入った積分として、次の積分

$$J = \int_0^{\infty} x e^{-x^2} dx$$

を計算せよ。これは初等的に計算できる例である。

Gauss 積分の計算は、巧妙な方法で行うことができる。積分 I を直接計算するのではなく、 I^2 を考える。それは次のようにできる。

$$I^2 = \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx \right]^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx \times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2} dy \quad (5.1)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x^2+y^2)} dx dy \quad (5.2)$$

これは、被積分関数が r の関数だから、極座標に変数変換ができる。

$$e^{-a(x^2+y^2)} dx dy = e^{-ar^2} r dr d\theta \quad (5.3)$$

積分領域は $[-\infty, \infty] \times [-\infty, \infty]$ から、半径 ∞ の円になおす。

まず半径 R の円を領域とする積分を計算する。

$$\begin{aligned} J(R) &= \iint e^{-ar^2} r dr d\theta \\ &= \int_0^{2\pi} 1 \cdot d\theta \times \int_0^R e^{-ar^2} r dr \end{aligned} \quad (5.4)$$

積分はそれぞれ

$$\int_0^{2\pi} 1 \cdot d\theta = 2\pi \quad (5.5)$$

$$\int_0^R r e^{-ar^2} dr = \frac{1}{2a} (1 - e^{-aR^2}) \quad (5.6)$$

となる。よって

$$J(R) = \frac{\pi}{a} (1 - e^{-aR^2}) \quad (5.7)$$

となるが、 $R \rightarrow \infty$ の極限をとることにより

$$I^2 = \lim_{R \rightarrow \infty} J(R) = \frac{\pi}{a} \quad (5.8)$$

よって Gauss 積分は

$$I = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (5.9)$$

となる。

5.1 熱伝導方程式への応用

5.1.1 準備

熱流に対して次の連続方程式が成り立つ.

$$\frac{\partial J}{\partial x} + \frac{\partial(cT)}{\partial t} = 0 \quad (5.10)$$

また, 流体を記述するときは, 速度を空間変数と時間変数の関数とする. すなわち, 速度の場合である.

$$v(x, t)$$

質量密度 ρ を導入すると

$$J(x, t) = \rho v(x, t) \quad (5.11)$$

連続方程式は

$$\frac{\partial J}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (5.12)$$

となる.

5.1.2 積分記号のもとでの微分

被積分関数にパラメーターが含まれるような例として, 次の積分を考える.

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\alpha x^2] dx \quad (5.13)$$

これはガウスの積分である. 上の積分は, x に関する積分で, α は普通の数のように扱うが, 積分結果は α を変数とする関数とみなせる.

そこで, こういうパラメーターの入った積分を計算するための, 巧妙な方法を説明する. 被積分関数のパラメーターを変数としてあらわに書いた積分

$$I(\alpha) = \int_a^b f(x, \alpha) dx \quad (5.14)$$

を α で微分することを考える.

$$\frac{dI}{d\alpha} = \frac{d}{d\alpha} \int_a^b f(x, \alpha) dx \quad (5.15)$$

微分の定義は,

$$\frac{dI}{d\alpha} = \lim_{\Delta\alpha \rightarrow 0} \frac{I(\alpha + \Delta\alpha) - I(\alpha)}{\Delta\alpha} \quad (5.16)$$

であり,

$$I(\alpha + \Delta\alpha) = \int_a^b f(x, \alpha + \Delta\alpha) dx \quad (5.17)$$

及び,

$$I(\alpha) = \int_a^b f(x, \alpha) dx \quad (5.18)$$

であるから, 上の \lim の中は次のようになる.

$$\frac{I(\alpha + \Delta\alpha) - I(\alpha)}{\Delta\alpha} = \int_a^b \frac{f(x, \alpha + \Delta\alpha) - f(x, \alpha)}{\Delta\alpha} dx \quad (5.19)$$

これから, α での微分は

$$\frac{dI}{d\alpha} = \frac{d}{d\alpha} \int_a^b f(x, \alpha) dx = \int_a^b \frac{\partial f}{\partial \alpha} dx \quad (5.20)$$

となる. これが, 積分記号もとでの微分である. 積分のあとで, パラメータ α で微分する (変数が1つだから常微分) のと, 先に α で微分 (偏微分) をして, 積分するのが等しい. 厳密にはいつでもこのようなことがいえるわけではないが, 例によって物理ででてくる健全な関数ではいつでも成立する.

これを使って次の積分を計算してみる.

$$J(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp[-\alpha x^2] dx \quad (5.21)$$

これは, x^2 がなければガウス積分である. 一方ガウス積分 $I(\alpha)$ を α で微分すると

$$\frac{dI(\alpha)}{d\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} (-x^2) \exp[-\alpha x^2] dx \quad (5.22)$$

となり, 考えている積分と同じ形になる. また, $I(\alpha) = \sqrt{\pi/\alpha}$ であるから, α で微分すると

$$\frac{d}{d\alpha} \left(\sqrt{\pi} \alpha^{-1/2} \right) = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha^{-3/2} \quad (5.23)$$

となる. 以上から考えている積分は

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp[-\alpha x^2] dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha^{-3/2} \quad (5.24)$$

と求まる,

5.1.3 熱伝導方程式の解

積分記号のもとでの微分的应用として, つぎのような問題を考える.

例題 3. 次の積分を考える.

$$I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \cos x\xi \, d\xi$$

x で微分することにより, $I(x)$ の微分方程式をつくれ. つぎに, 初期条件 $I(0)$ を求めて, この微分方程式を解くことにより, $I(x)$ をもとめよ.

解.

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dx} &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{\partial}{\partial x} (\cos x\xi) \, d\xi \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \xi \sin x\xi \, d\xi \end{aligned}$$

$e^{-\xi^2} \xi = -\frac{1}{2} \frac{d}{d\xi} (e^{-\xi^2})$ だから, 部分積分をすると

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dx} &= \left[\frac{1}{2} e^{-\xi^2} \sin x\xi \right]_{-\infty}^{\infty} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} x \cos x\xi \, d\xi \\ &= -\frac{1}{2} x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \cos x\xi \, d\xi \end{aligned}$$

よって, 微分方程式

$$\frac{dI}{dx} = -\frac{1}{2} x I$$

を満たしていることがわかる. これを解くと

$$I(x) = \sqrt{\pi} e^{-\frac{x^2}{4}}$$

となる. ($I(0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \cos 0 \, d\xi = \sqrt{\pi}$) □

例題 4. 前問を用いて, つぎの積分

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t\xi^2} \cos x\xi \, d\xi$$

を求めよ.

解. 積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-t\xi^2} \cos x\xi d\xi$$

において, $\xi' = \sqrt{t}\xi$ と置換すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \cos\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\xi'\right) \xi' \frac{d\xi'}{\sqrt{t}} = \frac{1}{\sqrt{t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \cos\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\xi'\right) \xi' d\xi'$$

となる. 前問の結果から

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-t\xi^2} \cos x\xi d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{t}} \exp\left[-\frac{x^2}{4t}\right]$$

□

例題 5. 関数

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{\pi}{t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4t}\right)$$

が微分方程式 (これが熱伝導方程式とよばれる)

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

を満たすことを示せ

解.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= - \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-t\xi^2} \cos x\xi d\xi \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= - \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-t\xi^2} \cos x\xi d\xi \end{aligned}$$

となるから, Ψ は

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

を満たす. つまり, $\Psi = \sqrt{\frac{\pi}{t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4t}\right)$ は上の微分方程式の解となっていることがわかる. □

さて, 例題を参考にして, 以下の問題をとけ.

問題 13. 時間 t と x の 2 つの関数 $\rho(x, t), j(x, t)$ の間に,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$$

なる関係がある.

(1) x の区間 $[a, b]$ で積分したものを

$$Q \equiv \int_a^b \rho dx,$$
$$J(b) - J(a) = \int_a^b \frac{\partial j}{\partial x} dx (\equiv J)$$

と定義する. Q と J の間の関係を導き, その意味を考えてみよ.

(2) 特に $\rho(x, t) = cT(x, t)$, $j = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x}$ で与えられる時, 関数 $T(x, t)$ に対する方程式を導け. これが歴史上有名な熱伝導の方程式である. ここで $T(x, t)$ は温度分布を与える.

(3) $T(x, t)$ を求めよ.

熱伝導方程式は, いわゆる“偏微分方程式”の典型であり, 物理においてもっとも重要な方程式のひとつである.

第 6 章

線積分とベクトル解析

この章では、量子力学にとって不可欠になるベクトルの微積分を与える。

6.1 線積分

まず、線積分についてふれる。線積分とは？ これは、少々高度な考えである。多変数関数の積分ではあるが、面積要素をもととする多重積分とは少し異なる。

線積分の考えは、物理においてきわめて重要深淵な内容を含んでいる。しかし、その出発点は、力学でおなじみの仕事の定義から来るものである。すでに、第 2 章でそれを与えておいた。つまり、 F を力として、直線上の x_1 から、 x_2 まで質点が移動したときになされる仕事は

$$W = \int_{x_1}^{x_2} F dx$$

であった。そこで、直線上の運動から、平面内での曲線上で質点が移動したときになす仕事に拡張してみよう。そのためには必然的に力をベクトルとみなさなければならない。つまり、

$$\mathbf{F} = (F_x, F_y)$$

とあらわすと、この成分は、一般に 2 変数 (x, y) の関数とみられる。そこで、曲線上の微小ベクトルを、

$$ds = (dx, dy)$$

とにおいて、微小仕事を内積

$$\mathbf{F} ds \equiv dW$$

によって与えられる。そこで、 P から Q まで曲線上で移動したときの仕事は、形式的に

$$W = \int_P^Q \mathbf{F} ds = \int_P^Q (F_x dx + F_y dy)$$

と表される. このように, 一般にベクトルで与えられる関数を曲線上で積分した線積分というものが定義される.

さて, 線積分の概念を, すでになじみの1変数の積分に帰着させられるという観点から説明しよう.

1変数の場合の積分を思い出してみると. 積分区間は, x 軸のうえの区間であった. この区間を2次元平面での任意の曲線におきかえるのである.

少々飲み込みにくい考えであるが, 曲線を「パラメータ表示する」という考えから出発するのが, もっとも合理的であると思えるのでそれに従う.

(x, y) 平面で,

$$x = f(s), y = g(s)$$

というパラメータ s の関数の組を考えてみる. ただし, 曲線は, 8の字になったり, つまり, それ自身で交わらない, かつ素直なもの(なめらかでもある)と仮定する. そして, 端があるものとしよう. 端がない, つまり, 閉じた曲線は(閉曲線)はそれ自身きわめて重要な対象であるが, それは別途考察することにする.

さて, 平面上で, 2つの点:

$$P_i = (a_i, b_i) : P_f = (a_f, b_f)$$

を考え, それが,

$$a_i = f(s_i), b_i = g(s_i); \quad a_f = f(s_f), b_f = g(s_f)$$

をみたとする. すると, s_1, s_2 が, 端の点をあたえるパラメータをあたえることになることがわかるであろう. ここで, 添字記号 i, f は, initial と final からとっている. これで, 第1段階は終わり.

つぎに, $A(x, y)$ および, $B(x, y)$ を適当な2変数関数とする. この関数が, いま定義した曲線のうえでどんな値をとるか考えると, これは単に, $f(x, y)$ の x, y に $f(s), g(s)$ を代入するだけである. すると, これは,

$$A(f(s), g(s)) \equiv F(s), \quad B(f(s), g(s)) \equiv G(s)$$

のように, パラメータ s の1変数関数に成り下がる? のである. これが第2段階.

つぎに, P_1, P_2 を端点とする曲線を微小部分にきざむ. これは, パラメータ s を,

$$(s_i, s_1 \cdots s_k, \cdots s_N, s_f)$$

のように, N 個の微小部分に分割することになる. この分割に応じて, 曲線上の点は,

$$P_i = (a_i, b_i), \quad P_1 = (x_1, y_1), \cdots P_k = (x_k, y_k), \cdots P_f = (a_f, b_f)$$

P_i と P_f を結ぶ曲線に沿った積分というのは、少々考えにくいですが、パラメータ s の関数は1変数であるから、 $H(s)$ をそのような関数として、つぎのような積分をつくる：

$$\int_{s_i}^{s_f} H(s) ds$$

これは、単に1変数 s の積分となる。このような1変数積分は以下のように構成できる：すなわち、曲線にそった微小部分： (dx, dy) を、

$$dx = \frac{dx}{ds} ds, \quad \frac{dy}{ds} ds$$

に書き換えて（合成関数の微分）、うえで導入しておいた、2変数関数 $A(x, y), B(x, y)$ に対して

$$A(f(s), g(s)) \frac{dx}{ds} + B(f(s), g(s)) \frac{dy}{ds} = F(s)x'(s) + G(s)y'(s) \equiv H(s)$$

とおくと、これは1変数関数であるから、通常の設定積分

$$I = \int_{s_i}^{s_f} [F(s)x'(s) + G(s)y'(s)] ds$$

が定義できる。これで、パラメータ s を通じて、積分を構成できた。これが第3段階。

最後に2変数関数の積分の形に直そう。これは、以下のように、被積分関数を

$$[A(f(s), g(s)) \frac{dx}{ds} + B(f(s), g(s)) \frac{dy}{ds}] ds = A(x, y) dx + B(x, y) dy$$

と (x, y) の関数の形に、形式的に書き直すことによってできる。この形は1変数の、いわゆる「微分」の形

$$f(x) dx$$

の形の2変数への拡張になっていることがわかるであろう。1変数の場合の設定積分は、これを

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

のように、「区間」の端; a, b のあいだで積分することになる。1変数の場合には、 x -軸という1次元の空間における「曲線」というのは、区間にほかならないから、2変数の場合の2次元平面での曲線の端 P_i から端 P_f まで積分するということは、

$$I = \int_{P_i}^{P_f} A(x, y) dx + B(x, y) dy$$

によって与えられることになる。これで、線積分が構成された。つまり、あたかも、 x で積分したものと y 変数で積分したものを足している形をしている。2重積分は面要素に関する積分であったのとかなり異なる。

さて、うえのようにパラメータ s を経由して定義したあとで、もとの変数 x, y の積分に戻したので、この途中経過の痕跡が残っているのではないかという疑念があるかもしれないが、そのような心配はない。

線に沿って積分するというのはどういうものか？ これは、じつは大変重要な考え方を含んでいる。それはある意味では単純なものであるが、最初はなかなか飲み込みにくいものである。つまり、「積分の値が、 P と Q を結ぶ曲線の形に依存する」という事実である。これは、熱力学において、「仕事は経路に依存する」という形で表現されて、いわゆる熱力学的な状態量（内部エネルギーは自由エネルギー、エントロピーなど）と決定的に異なる概念であるという事実としてとらえられる。

うえの構成をながめると、これは2変数の関数に限らず、3次元空間での曲線に対しても形式的にはすぐに拡張できることがわかるであろう。すなわち、

$$I = \int_{P_i}^{P_f} A(x, y)dx + B(x, y)dy + C(x, y)dz$$

これに関しては、各自確かめてみよ。空間曲線に関しては、力学で習っているであろう。

とくに重要な場合は、積分経路が閉曲線の場合である。この場合は、以下にみるように物理的に格別の意味をもってくる。3次元空間に描かれた閉曲線 C にそった線積分

$$I(C) = \int_C A(x, y, z)dx + B(x, y, z)dy + C(x, y, z)dz$$

あるいは、ベクトル記号:

$$\mathbf{V}(x, y, z) = (A(x, y, z), B(x, y, z), C(x, y, z))$$

とかけば、

$$I(C) = \int_C \mathbf{V} \cdot d\mathbf{x}$$

あるいは、

$$\mathbf{V} \cdot d\mathbf{x} = V_t ds$$

とかかれる。 V_t は接線成分をあらわす。この量は、 C をつらぬくフラックス (flux) とよばれる量である。電磁気学の例をだせば、磁束が典型的なものである。

6.2 面積分およびガウスの定理

うえで便宜的に導入したベクトルの関数 $\mathbf{V}(x, y, z)$ は、空間の各点のベクトルが配置されているものとみられる。これはしばしばベクトルの「場」とよばれる。現実には、電

磁場, 重力場, 流体における速度の場, などが典型的な場の量である. これに対して, 通常関数, つまり, 成分をもたない関数が空間の各点で与えられたものはスカラー的場である. スカラーも一成分のベクトルとみなせば, ベクトル場で統一的な扱いができる.

そこで, ベクトルの場に体する微積分の公式がとくに重要になってくる. 以下, 量子力学において必要になってくる公式の説明を行う.

3次元空間のなかで関数 $f(P)$ (ここで, P は空間の点の座標をあらわす) が定義され, 曲面 S が与えられたとき, 曲面 S を微小面積 σ_i に区切って, 和

$$I = \sum_i F(P_i)\sigma_i$$

を考えて, 分割を無限にしたときの極限值を

$$I = \int_S F(P)d\sigma$$

と書き, 面積分と称する. 物理でとくに重要な場合は, ベクトルの場に対する面積分は

$$I = \int_S \mathbf{V} \cdot d\sigma = \int_S V_n d\sigma$$

の形で与えられる. つまり, 曲面の領域 S を積分範囲として V_n を積分したものである (図を参照).

ここで, V_n は, \mathbf{V} の外向き法線 \mathbf{n} の成分; $\mathbf{V} \cdot \mathbf{n} = V_n$ をあらわす. さらに, 法線が, x, y, z とす角度の余弦を

$$(\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma)$$

とすれば, うえの積分は, 成分表示: $\mathbf{V} = (A, B, C)$ をつかって

$$\int_S (A dydz + B dzdx + C dxdy)$$

と表すことができる. これは,

$$d\sigma \cos \alpha = dydz, d\sigma \cos \beta = dzdx, d\sigma \cos \gamma = dxdy$$

からでてくる.

以下のベクトルの場の微積分の公式を用いる際に慣用の記号を導入する.

1: 発散 (divergence)

ベクトル場: $\mathbf{V} = (A, B, C)$ に対して

$$\operatorname{div} \mathbf{V} \equiv \nabla \cdot \mathbf{V} = \frac{\partial A}{\partial x} + \frac{\partial B}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z}$$

2: 回転 (rotation)

$$\operatorname{rot} \mathbf{V} \equiv \nabla \times \mathbf{V} = \left(\frac{\partial B}{\partial z} - \frac{\partial C}{\partial y}, \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial A}{\partial z}, \frac{\partial A}{\partial y} - \frac{\partial B}{\partial x} \right)$$

面積分に関するもっとも重要な定理がガウスの定理である。ベクトルの場 $\mathbf{V}(x, y, z)$ に対して、閉曲面 S のうえの積分に対して、

$$\int \operatorname{div} \mathbf{V} dx dy dz = \int_S \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S}$$

が成立する。以下で、略証をあたえる。

3次元空間における曲面は、かたがた形のものがあるが、ここでは、図のような (x, y) 面への射影したときに筒面が曲面と接する曲線によって上下の2つの部分 S_1, S_2 に分割されている場合を考える。この場合に

$$\int \frac{\partial V_z}{\partial z} dx dy dz = \int_S V_z \cos \gamma d\sigma$$

が成立することを示そう。

(x, y) 平面の領域の微小部分に相当する細い円柱部分が、 S_1, S_2 を切る微小部分の外向きの法線が z に平行な直線となす角度を γ とする。

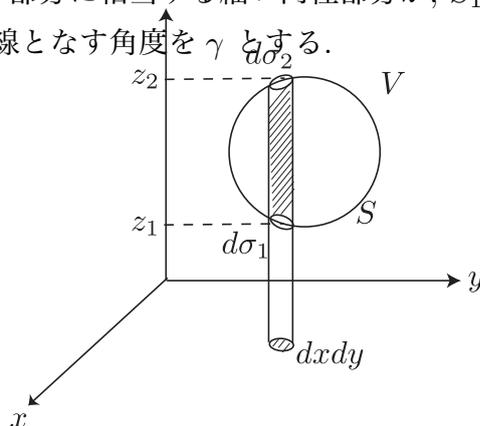


図 6.1

$$\int_V \frac{\partial C}{\partial z} dx dy dz = \int dx dy \left[\int_{z_1}^{z_2} \frac{\partial C}{\partial z} dz \right] = \int dx dy [C(x, y, z_2) + C(x, y, z_1)]$$

となる. ここで便宜的に

$$\begin{aligned} -C(x, y, z_1) dx dy &= C(x, y, z_1) \cos \beta d\sigma_1 \\ +C(x, y, z_2) dx dy &= C(x, y, z_2) \cos \alpha d\sigma_2 \\ (0 < \alpha < \frac{\pi}{2}, \quad \frac{\pi}{2} < \beta < \pi) \end{aligned}$$

を用意すると先ほどの積分は

$$\int dx dy [C(x, y, z_2) + C(x, y, z_1)] = \int_S C(x, y, z) \cos \gamma d\sigma = \int_S C(x, y, z) dx dy$$

となる. ここで $\cos \gamma$ は

$$\cos \gamma = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{z})$$

で与えられ γ は (x, y) 平面上の点が動くとき連続的に変化する. また A, B 成分についても同様に成立することが示せる.

6.3 ストークスの定理

閉曲線 C での線積分に関して

$$\oint_C \mathbf{V} \cdot d\mathbf{l} = \int_S \text{rot} \mathbf{V} \cdot d\mathbf{s}$$

が成り立つ. この等式の右辺は

$$\int (\text{rot} \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}) d\sigma = \text{rot} \mathbf{V}_x (\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}) d\sigma + \text{rot} \mathbf{V}_y (\mathbf{n} \cdot \mathbf{y}) d\sigma + \text{rot} \mathbf{V}_z (\mathbf{n} \cdot \mathbf{z}) d\sigma$$

となる. ここで

$$dydz = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}) d\sigma = \cos \alpha d\sigma, \quad dzdx = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{y}) d\sigma \cos \beta d\sigma, \quad dxdy = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{z}) d\sigma \cos \gamma d\sigma$$

となることから等式の右辺は

$$\int \left[\left(\frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial B}{\partial z} \right) dydz + \left(\frac{\partial A}{\partial z} - \frac{\partial C}{\partial x} \right) dzdx + \left(\frac{\partial B}{\partial x} - \frac{\partial A}{\partial y} \right) dxdy \right]$$

となる. この積分をそれぞれ A, B, C の部分に分ければよい. 例えば A についての積分について

$$\int \left(\frac{\partial A}{\partial z} dzdx - \frac{\partial A}{\partial y} dxdy \right) = \int_C A dx$$

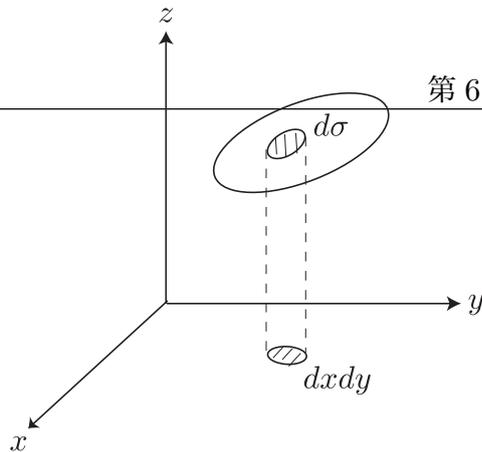


図 6.2

が成り立つことを示せばよい.

まず (u, v) の 2 つの独立のパラメータによる曲面のパラメータ表示

$$x = x(u, v), y = y(u, v), z = z(u, v)$$

を用意する. ここで $dxdy \neq dudv$ なので $dxdy$ と $dudv$ 間の関係を Jacobian(ヤコビアン)

$$\text{Jacobian} = \frac{\partial(x, y)}{\partial(u, v)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} \\ \frac{\partial x}{\partial v} & \frac{\partial y}{\partial v} \end{vmatrix}$$

を用いると $dxdy$ は

$$dxdy = \frac{\partial(x, y)}{\partial(u, v)} dudv$$

となる. このことから示すべき等式の左辺は

$$\int \left(\frac{\partial A}{\partial z} dz dx - \frac{\partial A}{\partial y} dxdy \right) = \int \left[\frac{\partial A}{\partial z} \left(\frac{\partial z}{\partial u} \frac{\partial x}{\partial v} - \frac{\partial x}{\partial u} \frac{\partial z}{\partial v} \right) - \frac{\partial A}{\partial y} \left(\frac{\partial x}{\partial u} \frac{\partial y}{\partial v} - \frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial x}{\partial v} \right) \right] dudv$$

となる. 次に以下の 2 つの式

$$\frac{\partial A}{\partial u} \frac{\partial x}{\partial v} = \left(\frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial u} + \frac{\partial A}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial u} + \frac{\partial A}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial u} \right) \frac{\partial x}{\partial v}$$

$$\frac{\partial A}{\partial v} \frac{\partial x}{\partial u} = \left(\frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial v} + \frac{\partial A}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial v} + \frac{\partial A}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial v} \right) \frac{\partial x}{\partial u}$$

の差を計算すると

$$\frac{\partial A}{\partial u} \frac{\partial x}{\partial v} - \frac{\partial A}{\partial v} \frac{\partial x}{\partial u} = \frac{\partial A}{\partial z} \left(\frac{\partial z}{\partial u} \frac{\partial x}{\partial v} - \frac{\partial x}{\partial u} \frac{\partial z}{\partial v} \right) - \frac{\partial A}{\partial y} \left(\frac{\partial x}{\partial u} \frac{\partial y}{\partial v} - \frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial x}{\partial v} \right)$$

を得る. よって先ほどの積分は

$$\begin{aligned} \int \left(\frac{\partial A}{\partial z} dz dx - \frac{\partial A}{\partial y} dx dy \right) &= \int \left(\frac{\partial A}{\partial u} \frac{\partial x}{\partial v} - \frac{\partial A}{\partial v} \frac{\partial x}{\partial u} \right) \\ &= \int_S \left[\frac{\partial}{\partial u} \left(A \frac{\partial x}{\partial u} \right) - \frac{\partial}{\partial v} \left(A \frac{\partial x}{\partial v} \right) \right] dudv \\ &= \int_C \left(A \frac{\partial x}{\partial u} du + A \frac{\partial x}{\partial v} dv \right) \end{aligned}$$

となる. 最後の変形には (u, v) 平面における Green の定理

$$\oint_C Adu + Bdv = \int_S \left(\frac{\partial B}{\partial u} - \frac{\partial A}{\partial v} \right) dudv$$

を用いた. さらに全微分の関係

$$\frac{\partial x}{\partial u} du + \frac{\partial x}{\partial v} dv = dx$$

を使うと

$$\oint_C \left(\frac{\partial A}{\partial z} dz dx - \frac{\partial A}{\partial y} dx dy \right) = \int_C A dx$$

が示せる. A, B の部分も同様に示すことができる.

文献

最後に、数学の参考書として、高木貞治の名著、『解析概論』をあげておく.

この本は、低回生にとっては高度なものであるが、まったく歯がたたないものでもない.

第 7 章

複素関数論入門

7.1 複素関数の積分

ここでは複素平面から別の複素平面への写像 $w = f(z)$ を考えてみよう。複素平面上では各点は複素数で表され、複素数 w と v は実変数の組 (x, y) と (u, v) を用いて $w = u + iv$ と $z = x + iy$ と書ける。このように定義した複素関数 $f(z)$ の性質をここでは調べてみよう。複素関数の積分は複素平面上での線積分として定義される。すなわち経路 C を N 等分した各点 $\Delta z_i = z_{i+1} - z_i$ と定義すると積分は

$$\int_C f(z) dz = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N f(z_i) \Delta z_i \quad (7.1)$$

と表される。このとき z は経路 C 上での位置を表す変数であり、直交座標系の変数ではないことに注意しよう。この積分を先ほどのように実数を用いて書き直そう。実数 (x, y) と (u, v) を用いて $f(z) = u + iv$ かつ $dz = dx + idy$ であるので、

$$f(z) dz = (u + iv)(dx + idy) = (u dx - v dy) + i(v dx + u dy)$$

これより先の積分の式を書き直して、

$$\boxed{\int_C f(z) dz = \int_C (u dx - v dy) + i \int_C (v dx + u dy)} \quad (7.2)$$

となる。

7.2 コーシー＝リーマンの関係式

次に複素関数の導関数を考え、その際に微分可能性を調べることでコーシー＝リーマンの関係式 (C-R 関係式) を導こう。

h を複素数の微小量とすると複素関数 $f(z)$ の $z = z_0$ での導関数 $f'(z_0)$ は実関数の場合と同様に

$$f'(z_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(z_0 + h) - f(z_0)}{h} \quad (7.3)$$

と表される。この極限值 $f'(z_0)$ が存在するとき、複素関数 $f(z)$ は $z = z_0$ で正則であるという。

しかし、実平面上と違い複素平面上では $h \rightarrow 0$ に近づく経路が無数に考えられるため、式 (7.3) はどのような近付き方をしても極限が一定の値に収束するという意味が含まれている。この要請を複素関数の微分可能性という。

次にこのように $f'(z)$ が経路によらず収束するための条件を考える。まず準備として次のようにおく。

$$\frac{f(z+h) - f(z)}{h} = \frac{\Delta W}{\Delta z}$$

ただし ΔW と Δz は先ほどのように実数を用いて

$$\begin{aligned} \Delta W &= \Delta u + i\Delta v \\ \Delta z &= \Delta x + i\Delta y \end{aligned}$$

と表される。これより、

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\Delta W}{\Delta z} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0, \Delta y \rightarrow 0} \frac{\Delta u + i\Delta v}{\Delta x + i\Delta y} \quad (7.4)$$

ここでは $\Delta x = 0$ と $\Delta y = 0$ の二つの経路を考える。

■1. $\Delta y = 0$ の経路について

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta W}{\Delta z} &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta u + i\Delta v}{\Delta x} \\ &= \frac{\partial u}{\partial x} + i \frac{\partial v}{\partial x} \end{aligned} \quad (7.5)$$

■2. $\Delta x = 0$ の経路について

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{\Delta W}{\Delta z} &= \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{\Delta u + i\Delta v}{i\Delta y} \\ &= -i \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \end{aligned} \quad (7.6)$$

これらが等しくなければならぬという要請から実部と虚部を比較して以下のコーシー＝リーマンの関係式が得られる。

$$\boxed{\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{\partial u}{\partial y}} \quad (7.7)$$

また式 (7.7) を x と y とで偏微分した式を組み合わせることで、 u と v が次のラプラス方程式を満たすことがわかる。

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (7.8)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = 0 \quad (7.9)$$

またコーシーリーマン関係式の別の意味を考えてみよう。 $f(z)$ が z だけの関数として z^* を含まないものとする。その成分を実数 x と y で表すと、次のように書くことができる。

$$\frac{\partial f}{\partial z^*} = 0 \quad (7.10)$$

$$\begin{cases} z = x + iy \\ z^* = x - iy \end{cases}, \quad \begin{cases} x = \frac{1}{2}(z + z^*) \\ y = \frac{1}{2i}(z - z^*) \end{cases}, \quad \begin{cases} \frac{\partial x}{\partial z^*} = \frac{1}{2} \\ \frac{\partial y}{\partial z^*} = \frac{i}{2} \end{cases} \quad (7.11)$$

これらの関係を用いることで

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial z^*} &= \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial z^*} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial z^*} \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial x} + i \frac{\partial f}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

すなわち

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} + i \frac{\partial f}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial x} + i \frac{\partial v}{\partial x} + i \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial y} &= 0 \end{aligned}$$

実部と虚部を比べることで

$$\therefore \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{\partial u}{\partial y}$$

これはコーシー＝リーマンの関係式である。これより、C-R 関係式は複素関数 $f(z)$ が z^* の関数ではない、という意味も含んでいる事を示している。

7.3 Cauchy の積分定理

C を複素平面上での $f(z)$ の特異点 (極など) を含まないとする。閉曲線 C で囲まれる領域で $f(z)$ が正則であれば

$$\oint_C f(z) dz = 0 \quad (7.12)$$

これを Cauchy の積分定理という。

■証明 式 (7.2) とグリーンの公式を用いて

$$\begin{aligned}\oint_C f(z)dz &= \oint_C (u dx - v dy) + i \oint_C (v dx + u dy) \\ &= \oint \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) dxdy + i \oint \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) dxdy\end{aligned}$$

また閉曲線 C で囲まれる領域では $f(z)$ が正則であるので実数 u と v は C-R 関係式 (7.7) を満たす。上式の括弧の中はそれぞれ C-R の関係式より 0 となる。それゆえ、

$$\oint f(z)dz = 0$$

が証明できた。

7.4 Cauchy の積分公式

ここでは $z = 0$ を一位の極とする複素関数 $f(z) = 1/z$ を正則な領域 D で周回積分することを考えよう。

正則な領域 D 内にとった閉曲線 C についての周回積分は $z = 0$ を中心とする単位円の回りの周回積分に変形できる。

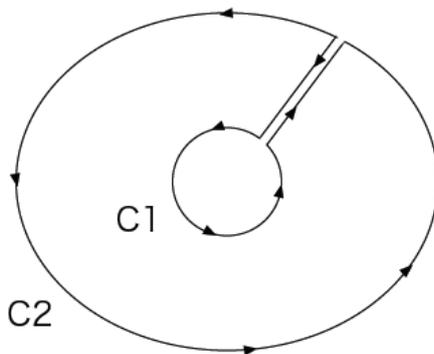


fig1. 閉曲線 C の分解

というのも、閉曲線 C_1 を $z = 0$ を中心とする単位円とし、元の閉曲線 C と C_1 を結ぶ閉曲線を C_2 とすると、

$$\oint_C f(z)dz = \oint_{C_1} f(z)dz + \oint_{C_2} f(z)dz$$

となるが、(7.12) より C_2 についての周回積分は 0 になるためである。いま積分経路 C を $z = 0$ を中心とする単位円で置き換えたので $z = e^{i\theta}$ と書き換えることができる。これ

から

$$dz = ie^{i\theta} d\theta \quad \text{よって} \quad \frac{dz}{z} = id\theta$$

これを用いると

$$\oint_C \frac{dz}{z} = i \int_0^{2\pi} d\theta = 2\pi i \quad (7.13)$$

書き換えて、

$$\boxed{\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{dz}{z} = 1} \quad (7.14)$$

今は一位の極を $z = 0$ としたが、一位の極が $z = a$ の場合には同様に

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{1}{z-a} dz = 1 \quad (7.15)$$

が成り立つ。ただし、閉曲線 C は内部に $z = a$ の点を含んでいる。

これより次の Cauchy の積分公式が導かれる。

$$\boxed{f(a) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z-a} dz} \quad (7.16)$$

これが Cauchy の積分公式と呼ばれるものである。以下に証明を載せる。

■証明 まず、

$$\frac{f(z)}{z-a} = \frac{f(z) - f(a)}{z-a} + \frac{f(a)}{z-a}$$

この両辺を周回積分して $2\pi i$ で割ると

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z-a} dz = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z) - f(a)}{z-a} + \frac{f(a)}{2\pi i} \oint_C \frac{dz}{z-a}$$

ここで式 (7.15) より右辺第二項は $f(a)$ である。また

$$\lim_{z \rightarrow a} \frac{f(z) - f(a)}{z-a} = f'(a)$$

とした。ここで第一項の積分範囲を a の回りの微小な円 ϵ になおすと

$$\oint_C \frac{f(z) - f(a)}{z-a} dz = f'(a) \oint_{\epsilon} dz$$

$\epsilon \rightarrow 0$ であるときは右辺は 0 に近似できる。変形して式 (7.15) を用いると

$$\begin{aligned} \oint_C \frac{f(z)}{z-a} dz &= \oint_C \frac{f(a)}{z-a} dz \\ &= 2\pi i f(a) \end{aligned}$$

よって

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z-a} dz = f(a)$$

これで Cauchy の積分公式が証明された。

■問 Cauchy の積分定理から C-R の関係式を導け

$$\oint_C f(z) dz = \oint_C (u dx - v dy) + i \oint_C (v dx + u dy) = 0$$

であり、実部と虚部それぞれについて考えて

$$\begin{aligned} \text{実部: } \int \int_S \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) dx dy &= 0 \\ \text{虚部: } \int \int_S \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) dx dy &= 0 \end{aligned}$$

となる。平面上のグリーンの定理を用いて書き換えて、

$$\begin{aligned} &\oint_C (u dx - v dy) + \oint_C (v dx + u dy) \\ &= \int \int_S \left(-\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) x dy + i \int \int_S \left(-\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) dx dy \end{aligned}$$

これは任意の S について成り立つので

$$\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

これは C-R 関係式そのものである。

7.5 べき級数

複素関数 $f(z)$ を $z = z_0$ の回りで展開することを考えて、Cauchy の積分定理を一般化してみよう。 $f(z)$ は

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (z - z_0)^n \tag{7.17}$$

と展開できる。ただし

$$a_n = \frac{f^{(n)}(z_0)}{n!} \quad (7.18)$$

である。ここで a_n を Cauchy 積分定理を用いて積分表示することができる。 $f(z)$ を $(z - z_0)^{n+1}$ で割ったものを考えて、

$$\begin{aligned} \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+1}} &= \frac{a_0}{(z - z_0)^{n+1}} + \frac{a_1}{(z - z_0)^n} + \frac{a_2}{(z - z_0)^{n-1}} + \cdots + \frac{a_n}{(z - z_0)} \\ &\quad + a_{n+1} + a_{n+2}(z - z_0) + \dots \end{aligned}$$

また今考えているのは $z = z_0$ の回りでの展開であるので $z \neq z_0$ である。そのため上式を周回積分して Cauchy の積分定理 (7.12) を用いると、 a_n の項以外は全て 0 となる。よって、

$$\oint_C \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz = a_n \oint_C \frac{dz}{z - z_0} = 2\pi i a_n$$

これより

$$\boxed{a_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz} \quad (7.19)$$

式 (7.18) から次のように書くこともできる。

$$\boxed{f^{(n)}(z_0) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz} \quad (7.20)$$

これらは Cauchy 積分定理の一般化である。

第 8 章

量子, 波動およびハミルトン力学

8.1 波動関数

ここで、力学がどのように現代物理学、すなわち量子力学をもとにした現代物理学に結びついてくか簡単に紹介しておこう。量子力学の体系は、これまで学んできた力学とは根本的に異なったもので、原子以下のレベルの物理法則を記述する。これと対比するために、通常の力学を便宜的に古典力学と称する。そして、それは我々のふつうの経験世界を記述する体系を与える。しかし、古典力学と量子力学は奇跡的なやり方でつながっている。

de Broglie の物質波の考えは、Einstein の光量子の概念をいわば逆さまに考えたわけで、もともと粒子であったものに波の属性が備わっているということを主張している。de Broglie は、たぶん『ふと』思いついたのだろう。現代の観点からすれば、ほとんど当たり前（自明）のことだが、物理学上重要な概念は、現代の観点から過去をふりかえると、このように単純なものである。しかし表面上単純なものほど、内容が深いということは歴史が教えているところである。つまり、この単純な概念をいざ現実に運用するということになると、実にさまざまな技巧が必要とされるわけで、これが一筋縄ではいかない。その意味で物理学という学問は、深さという観点からすれば最も深い学問といえる。

いま、力を受けない粒子（これを自由粒子と呼ぶ）を考える。はじめに 1 次元の場合をやる。波動の基本は \sin 、 \cos で表すが、量子力学では指数関数を使って

$$\psi = A \exp [i(kx - \omega t)] \quad (8.1)$$

と書く。ただし A は複素数の振幅である。 k は波数といわれるもので、波長と

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (8.2)$$

の関係がある。これは次のように、粒子の運動量と波数の間の関係

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad (8.3)$$

に直される。これが de Broglie のアイディアの基本である。(ここで『 \hbar とは』。それは

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

つまり Planck 定数を 2π で割ったもの。この記号は、他の多くの量子力学における独特の記号と同様、かの天才 Dirac が導入したもので、Dirac の定数と呼ぶ人もいる。これは以後ことわりなしに使う)

さて、上で述べた運動量と波数の関係は、粒子のエネルギーと振動数の関係にも適用される。すなわち

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad (8.4)$$

この関係は、運動量とエネルギーが1組のものであるという有名な Einstein の関係、言い換えれば、エネルギーは『第4番目』の運動量とみることができるといふ事実に根拠をもつ。このことから、

$$\phi = kx - \omega t = \frac{px - Et}{\hbar} \quad (8.5)$$

と書ける。この ϕ はいわゆる『位相』である。

さて、自由粒子の場合には、エネルギーは

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \quad (8.6)$$

であるが、これを運動量を用いてあらわすと

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (8.7)$$

となる。そこで

$$S = px - Et \quad (8.8)$$

とおいて、さらに

$$\frac{p^2}{2m} = H \quad (8.9)$$

という記号を導入しよう。あとで詳述するが、この H はハミルトニアンと呼ぶ。すると S は

$$S = \int (p\dot{x} - H) dt \quad (8.10)$$

と書ける。この関数は、あとで定義するが、力学の用語で作用関数と呼ばれるものである。この作用関数は粒子の軌道がわかればそれによって決まる量である。いまの場合は、

力がはたらかないのでもちろん軌道は直線である。これは力がはたらく場合（この場合の力はポテンシャルから導ける）にも拡張できて、それは H のところにポテンシャルを付け加えればよいだけである。

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (8.11)$$

これが一般の Hamilton 関数である。そこで上の S の中の H にこれを代入すれば、力ははたしている場合の位相が計算されて、それから粒子の波動関数が構成されることになると期待される。たしかに、その意図自体は正しい方向を指し示しているが、正確ではない。ともあれ、この意図が正しいということを説明してみよう。

つまり、これで粒子の力学と波動関数が結びついているという雰囲気はわかっていただけだろう。これを『対応原理』と呼ぶ。対応原理の意味するところは、要するに、古典力学が量子力学とつながっているということを主張する。そのときに要の役割をする量が『Planck 定数』である。つまり、位相と作用関数の比例定数ではないか。

最後に、1次元の話をも3次元に拡張しておこう。波動関数は

$$\psi(x, y, z, t) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - \omega t) \right] \quad (8.12)$$

となる。ここで

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - \omega t = \text{一定} \quad (8.13)$$

はいわゆる平面波を与える。

さて、上で述べたことは、単に当てはめて適当にいつているという印象を与えたかもしれない。しかし、なにともあれ、これはかの Schrödinger が、あまりにも有名な彼の方程式 (Schrödinger 方程式) を提案したときに使った手がかりであったと推測される。

8.2 Lagrange の力学

さて、以上で軌道を求めるというのが主たる目的である力学と、波動というものを扱う新しい力学（これは Schrödinger の当時、波動力学と呼ばれていたようだが、現在では量子力学という一般的な呼称に包括されている）と関係がついたわけで、ここで鍵を握るのが、もう1度強調するが『作用関数』である。そこでこの作用関数なるものが、如何なる経路で出てくるものか、少し計算がくどいが順をおって説明していこう。

話は力学を書き換えることから始まる。要するに力学の解析的記述、俗にいう『解析力学』である。これは大体 19 世紀に完成された。

それを説明するには、力学のイロハからはじめるのが適切である。力学を習ったときに、最初にやることは力の釣り合いだったろう。つまり

$$\mathbf{F} = 0 \quad (8.14)$$

ここで F は物体にはたらいっているすべての合力である。また、簡単のために、物体といっても大きさは無視できるとする。つまり質点を考えている。

さて、Newton の運動の第2法則は

$$m\alpha = \mathbf{F} \quad (8.15)$$

だが、この式を

$$m\alpha + (-\mathbf{F}) = 0 \quad (8.16)$$

と書き換えよう。すると、

$$\mathbf{F}' = m\alpha - \mathbf{F} \quad (8.17)$$

という新しい力 F' を定義すれば、 $\mathbf{F}' = 0$ というつり合いの式になる。あるいはつり合いという言葉通りに解釈すれば、2種類の力 \mathbf{F} と $-m\alpha$ がつり合っているとみることができ。前者は普通の力であるが、後者をあらたに『慣性力』とでも呼ぼう。この見方がそもそも力学を飛躍的に発展させるキッカケを与えた（少なくとも私は）思う。その意味を以下で説明しよう。

それを説明する前に、はじめに言ったつり合いの式に対して、ある見方ができるところから始めよう。諸君は力のする仕事を学んでいるので、有限の距離を変位するときになす仕事は

$$W = \sum_i F \Delta x_i \quad (8.18)$$

であった。ここで Δx_i は微小変位である。特に、力がいわゆるポテンシャルから導かれる場合を考えてみよう。つまり

$$F = -\frac{\partial V}{\partial x}. \quad (8.19)$$

このとき、仕事は2点間ポテンシャルの差になった。しかし、ここでの話は仕事という用語の中身を少し変えてみよう。そのために、つり合いの位置の話をもう一度思い出そう。ポテンシャルから導かれる場合、力のつり合いの位置は、ポテンシャルが極値をとるところになるというのはすぐわかる:

$$-\frac{\partial V}{\partial x} = 0 \quad (8.20)$$

だから。この条件をちょいと変えてみるのである。つまり、つり合いの位置で『何でもいから』 δx だけずらせてみる。ここで『何でもいから』というところに注意してほしい。この変位は、実際に実現する位置の変化でなくてもよい。だからわざと δ と小文字で書いた。 Δ のほうは『実際』の微小変位である。そこで、この δ のことを仮想変位と呼ぶ。ともかく、この仮想変位 δ をかけてみると、つり合いの式は

$$\frac{\partial V}{\partial x} \delta x = 0 \quad (8.21)$$

となる。 δx はこのように仮想変位だが、微量には違いがないのだから、この式は Taylor 展開の最初の近似を用いて

$$V(x + \delta x) - V(x) = 0 \quad (8.22)$$

と書いてよいだろう。ここでさらに

$$\delta V = V(x + \delta x) - V(x) \quad (8.23)$$

を定義し、これをポテンシャルの『変分』と呼ぼう。変分とはなにか。微分ではない。微分というのは、実際の変化によって起こったものの差であるから。ともかくも、上の変分は

$$\delta V = 0 \quad (8.24)$$

と書いて、これがつり合いの式の別の表現を与えることになる。

さて、このつり合いの式の書き換えを運動方程式に拡張しよう。そこで、加速度は $\alpha = \ddot{x}$ と書いて、式 (8.21) において力を $F - m\alpha$ と置き換えるだけで

$$(m\ddot{x} - F)\delta x = 0 \quad (8.25)$$

としたいところだが、ちょっと具合が悪い。(じつは、それでも悪くはないのだが。) なぜかという、拡張された力 F' は時間の関数になっているので、話は単純ではない。そこ

で軌道 $x(t)$ の時間依存性をあらわに書いて、初期値 $x(t_i)$ と終値 $x(t_f)$ を固定して、あいだの時間をたくさんに（実際には『無限個』に）区切る。つまり

$$x(t_1), \dots, x(t_n)$$

と n 個に区切ってみる。（この n を最後は $n \rightarrow \infty$ にもっていくのだ。）それに応じて力 F' は

$$(m\ddot{x} - F)_1, \dots, (m\ddot{x} - F)_n$$

となる。ここで $(\dots)_k$ と書いたのは、時刻 t_k での値という意味である。これらの n 個のものは全部、お互い別々のもの（つまり独立）であるということに注目しよう。そこで

$$\sum_k (m\ddot{x} - F)_k \delta x(t_k) \epsilon \quad (8.26)$$

という和を考える。ここで最後の ϵ は時間間隔である。すると上の和は、実は時間に関する積分そのものである。

$$I = \int (m\ddot{x} - F) \delta x(t) dt \quad (8.27)$$

この積分は2つの項に分けられる。

$$I = \int m\ddot{x} \delta x(t) dt - \int F \delta x(t) dt \quad (8.28)$$

ここで $\delta x(t)$ という量は、あたかも時間の関数のように扱えることに注目しよう。つまり、時刻 t における質点の位置 $x(t)$ に勝手な変位（何度もいうが、これは微分ではない）を与えるわけで、その変位は各時刻によって別々に値をとることができる。その意味で時間の関数と考えられるというわけである。ここで

$$\delta x(t_i) = 0, \quad \delta x(t_f) = 0 \quad (8.29)$$

を設定する。これは端が固定されている条件と呼ばれるものだ。直感的には、軌道を2個のピンでとめた『ひも』と考えると、ピンの位置は端にあたるが、変分はこのひもの『全体としての変位』を表すといってよい。

このように考えると、積分の第1項は部分積分を使えば

$$[m\dot{x}(t)\delta x(t)]_{t_i}^{t_f} - \int m\dot{x}(t) \frac{d\delta x(t)}{dt} dt \quad (8.30)$$

となる。ここで、さらに

$$\frac{d\delta x}{dt} = \delta \left(\frac{dx}{dt} \right) \quad (8.31)$$

という関係を使う。これは、微分の定義から

$$\frac{dx}{dt} = \lim_{\Delta t} \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} \quad (8.32)$$

かつ

$$\delta(x(t + \Delta t) - x(t)) = \delta x(t + \Delta t) - \delta x(t) \quad (8.33)$$

に注意すると出てくる。そこで、被積分関数は

$$m\dot{x}(t)\delta\dot{x} = \frac{1}{2}\delta\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 \quad (8.34)$$

あるいは

$$\delta\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2\right) \quad (8.35)$$

となる。つぎに第2項だが、力がポテンシャルから導かれるということから

$$F = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad (8.36)$$

したがって

$$F\delta x = -\frac{\partial V}{\partial x}\delta x = -\delta V \quad (8.37)$$

となる。結局、積分 I は

$$I = [m\dot{x}(t)\delta x(t)]_{t_i}^{t_f} - \int \delta\left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)\right] dt \quad (8.38)$$

となる。式 (8.38) の第2の積分は、 $[\dots]$ の中の変分をとったものを積分したもののなので、それを

$$\int \delta\left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)\right] dt = \delta \int \left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)\right] dt \quad (8.39)$$

と書いてよい。つまり、先に積分をしてからその変分をとってもよい。一方、式 (8.38) の第1項だが、最後のツメとしてこれはゼロになることを示そう。これは

$$[m\dot{x}(t)\delta x(t)]_{t_i}^{t_f} = x(t_f)\delta x(t_f) - x(t_i)\delta x(t_i) \quad (8.40)$$

となる。端の固定の条件

$$\delta x(t_i) = 0, \quad \delta x(t_f) = 0$$

から上の値はゼロになる。まとめると

$$I = -\delta \int \left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)\right] dt \quad (8.41)$$

そこで、新たに次のような量

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x) \quad (8.42)$$

を導入する。すると

$$I = -\delta \int L dt \quad (8.43)$$

と表せる。さらに

$$S = \int L dt \quad (8.44)$$

という量を定義すると

$$I = -\delta S \quad (8.45)$$

となる。式 (8.42)、式 (8.44) で定義した2つの量、 L 、 S はそれぞれ

$$\begin{aligned} L &= \text{Lagrange 関数} \\ S &= \text{作用関数} \end{aligned}$$

と呼ぶ。このように、われわれの目標とする『作用関数 (あるいは作用積分とも呼ぶ)』が導入されたわけである。さて、積分量 I はもとをただせば力 $F' = m\alpha - F$ の積分

$$I = \int (m\ddot{x} - F)\delta x(t) dt$$

であったわけだから、現実におこる運動に関しては、当然

$$m\ddot{x} - F = 0 \quad (8.46)$$

これから

$$I = -\delta S = 0 \quad (8.47)$$

となる。この式を静止した質点のつり合いの式、すなわちポテンシャルの変分がゼロになるという式と見比べてみよう。ポテンシャルの代わりに作用関数が出てくるのである。そこで

定理：現実の運動に対しては作用関数が極値をとる。

が成立する。これを逆にいうと、作用関数 S の変分をゼロにするような $x(t)$ が現実の運動を与えられると言うことができる。このような観点を変分原理 (あるいは最小作用の原理) と呼ぶ。

ここまでくると話を逆転させる。つまり、はじめに Lagrange の関数が与えられたとしてその積分の変分がゼロになる、すなわち作用関数の極値をとるという条件から、運動方程式を導こう。そこで再び

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$$

とする。作用積分をつくって変分をとると、上でやったことを逆にたどって

$$\delta S = \delta \int L dt = \int \left(m\ddot{x} + \frac{\partial V}{\partial x} \right) \delta x dt \quad (8.48)$$

となる。ここで S が極値をとる、すなわち変分がゼロになるためには

$$m\ddot{x} + \frac{\partial V}{\partial x} = 0 \quad (8.49)$$

でなければならないことが言えそうである。もう少し丁寧に言えば、『任意の』 δx に対して δS がゼロになるためには、式 (8.48) の積分の中の (...) の中がゼロにならないといけないということが出てくるのである。

さらに一般的にすると次のようになる。Lagrange 関数を x と、その微分 (つまり速度) \dot{x} を用いて $L(x, \dot{x})$ と書く。すると

$$\delta S = \delta \int L dt = \int \delta L(x, \dot{x}) \quad (8.50)$$

となり、かつ

$$\delta L = \frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} \quad (8.51)$$

となる。ここで \dot{x} で偏微分するということは、あたかも \dot{x} を x とは独立の変数のように考えて偏微分しているのだということを意味している (位置と速度は微分で結びついているが、物理的な量としては独立のものであるから)。さらに、 $\delta \dot{x} = \frac{d\delta x}{dt}$ に注意すると、部分積分をして

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} dt &= \int \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \frac{d\delta x}{dt} dt \\ &= \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \right]_{t_i}^{t_f} - \int \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \delta x dt \end{aligned} \quad (8.52)$$

となるから、端の条件より第 1 項がゼロになることに注意すると

$$\int \left[\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \right] \delta x dt = 0 \quad (8.53)$$

となる。これから

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = 0 \quad (8.54)$$

が得られる。この方程式がいわゆる『Lagrange 方程式』と呼ばれるものである。上の例では、最も簡単な 1 変数の問題を考えたが、もっと一般的に多数の変数がある場合にも形式的に拡張するのは難しくない。それは

$$L = L(x_1, \dots, x_n; \dot{x}_1, \dot{x}_n) \quad (8.55)$$

と n 変数で与えられた場合、

$$\delta L = \sum_i \frac{\partial L}{\partial x_i} \delta x_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \delta \dot{x}_i \quad (8.56)$$

で与えられ、部分積分をすると

$$\begin{aligned} \int \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \delta \dot{x}_i dt &= \int \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \frac{d\delta x_i}{dt} dt \\ &= \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \delta x_i \right]_{t_i}^{t_f} - \int \sum_i \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) \delta x_i dt \end{aligned} \quad (8.57)$$

となって単に

$$\int \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) \right] \delta x_i dt = 0 \quad (8.58)$$

となるだけである。したがって δx_i がすべて独立であるから、

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) = 0 \quad (8.59)$$

が得られる。ただし、これらは n 個の連立方程式になる。これが一般の Lagrange 方程式である。

8.2.1 例

ひとつの応用として、すでに習ったバネの運動方程式を Lagrange の方法で導いてみよう。まず、それぞれの質点の平衡位置からのバネの伸びを x_1 、 x_2 とする。ポテンシャルエネルギーは

$$V(x_1, x_2) = \frac{1}{2} k x_1^2 + \frac{1}{2} k (x_1 - x_2)^2 + \frac{1}{2} k x_2^2 \quad (8.60)$$

と表される。第2項は、2つの質点の相対的な伸びに対するポテンシャルエネルギーである。運動エネルギーは、単に2個の質点のその和

$$T = \frac{1}{2} m_1 \dot{x}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{x}_2^2 \quad (8.61)$$

となる。そこで Lagrange 関数は

$$L = T - V = \frac{1}{2} m_1 \dot{x}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{x}_2^2 - \frac{1}{2} k x_1^2 - \frac{1}{2} k (x_1 - x_2)^2 - \frac{1}{2} k x_2^2 \quad (8.62)$$

となり、したがって運動方程式は

$$m_1 \frac{d^2 x_1}{dt^2} = -2k x_1 + k x_2 \quad (8.63)$$

$$m_2 \frac{d^2 x_2}{dt^2} = k x_1 - 2k x_2 \quad (8.64)$$

となる。

(変分というのは、ちょっと難しかったかもしれない。しかし、変分の考えは物理学では決定的に重要であるので、ちょっと早いかなと思いつつあえて説明しようと試みたわけである。変分に関する事柄を付録に簡単にやっている。)

8.2.2 一般座標

Lagrange の方法の利点は、出発点になる変数 x が、実は直角座標でなくてもよく、なんでもよいことである。なんでもよいというのはちょっと言い過ぎなのだが、たとえば極座標のようなものでもよい。そういう意味で、それを『一般座標』と呼ぶ。一般座標というのは要するに、考えている力学系を記述する変数（これを力学変数と呼ぶ）を適当な座標を用いて表したものである。

そこで練習のため、中心力の場合をやっておこう。極座標での運動エネルギーは

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) \quad (8.65)$$

である。故に Lagrange 関数は

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - V(r) \quad (8.66)$$

一般化座標は、いまの場合 (r, θ) である。したがって Lagrange 方程式は

$$\frac{\partial L}{\partial r} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right) = 0 \quad (8.67)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \theta} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} \right) = 0 \quad (8.68)$$

これは

$$m(\ddot{r} - r\dot{\theta}^2) = -\frac{\partial V}{\partial r} \quad (8.69)$$

$$\frac{d}{dt}(mr^2\dot{\theta}) = 0 \quad (8.70)$$

とすでにお馴染みのものになる。

8.3 Hamilton の力学

前節で、作用関数が Lagrange の力学という過程で登場した。しかし波動関数に出てきた形ではない。そこで話をもう少し拡張しておく。

話のきっかけとして、調和振動子の運動方程式を考える。

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx \quad (8.71)$$

これを見てもみると、2階の微分方程式になっている。だから1階の方程式に比べてずっと難しい。そこでこれを1階に書き換えることを試みる。いま、

$$p = m \frac{dx}{dt} \quad (8.72)$$

で新しい変数 p を定義する。するともとの方程式 (8.71) は

$$\frac{dp}{dt} = -kx \quad (8.73)$$

となります。これは1階だが、残念ながら変数が増えている。つまり、一对の (x, p) が入り用になるわけだ。上の2式をまとめて

$$\begin{aligned} m \frac{dx}{dt} &= p \\ \frac{dp}{dt} &= -kx \end{aligned}$$

である。これは (x, p) に関する連立方程式とみることができる。物理的には p は運動量である。だから2階を1階に直したおかげで連立になるのはやむを得ないわけだが、上の手法をもっと合理的に系統的に整理できないかという問題が発生する。これを Lagrange の力学から誘導してみよう。まず

$$\int \delta L dt = \int \left(\frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} \right) dt \quad (8.74)$$

となり、ここで

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = p \quad (8.75)$$

でもって『一般化運動量』というものを定義する。すると Lagrange の運動方程式 (8.54) より

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\partial L}{\partial x} \quad (8.76)$$

となる。これを使うと

$$\int \delta L dt = \int (\dot{p} \delta x + p \delta \dot{x}) dt \quad (8.77)$$

と書き直される。また

$$p\delta\dot{x} = \delta(p\dot{x}) - \dot{x}\delta p \quad (8.78)$$

と用いると

$$\int \delta L dt = \int [\delta(p\dot{x}) + \dot{p}\delta x - \dot{x}\delta p] dt \quad (8.79)$$

これを

$$\int \delta(p\dot{x} - L) dt = \int (\dot{x}\delta p - \dot{p}\delta x) dt \quad (8.80)$$

と書き換え、かつ

$$H = p\dot{x} - L \quad (8.81)$$

を導入しよう。ここで独立変数を x, \dot{x} から x, p に切り替える。ここで言葉の定義をしておく。 p のことを x に『共役な』運動量と呼ぶ。そして (x, p) の対を『正準変数』という。すると、この H は正準変数 x, p で書き換えられる。これを Hamilton 関数と呼ぶ。すると

$$\delta H = \frac{\partial H}{\partial x} \delta x + \frac{\partial H}{\partial p} \delta p \quad (8.82)$$

ゆえ、

$$\int \left(\frac{\partial H}{\partial x} \delta x + \frac{\partial H}{\partial p} \delta p \right) dt = \int (\dot{x}\delta p - \dot{p}\delta x) dt \quad (8.83)$$

$$\therefore \int \left[\left(\dot{x} - \frac{\partial H}{\partial p} \right) \delta p - \left(\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial x} \right) \delta x \right] dt = 0 \quad (8.84)$$

である。ここで $\delta x, \delta p$ が任意の変分であるから、この等式が成立するためには

$$\dot{x} - \frac{\partial H}{\partial p} = 0 \quad (8.85)$$

$$\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial x} = 0 \quad (8.86)$$

を満たす。これが『Hamilton の正準方程式』と呼ばれるものである。最後に Hamiltonian を具体的に (x, p) で表す仕事が残っている。これは 1 次元のポテンシャル問題の場を取り上げると

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x)$$

より、

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \quad (8.87)$$

$$\dot{x} = \frac{p}{m} \quad (8.88)$$

である。かつ式 (8.81) より

$$\begin{aligned} H &= p\dot{x} - \left[\frac{1}{2}m\dot{x} - V(x) \right] \\ &= \frac{p^2}{m} - \left[\frac{p^2}{2m} - V(x) \right] \\ &= \frac{p^2}{2m} + V(x) \end{aligned} \quad (8.89)$$

となる。これはちょうど力学的エネルギーそのものになる。

上の導き方は、なにか物足りない気がする。「式を変形しただけはないか」という感じを受けるだろう。もっとメリハリをつけると、Lagrange 関数を Hamilton 関数でもって

$$L = p\dot{x} - H(x, p) \quad (8.90)$$

と書き換える。そして、これから作用関数

$$S = \int L dt = \int (p\dot{x} - H) dt \quad (8.91)$$

が出てくる。それから変分原理

$$\delta S = \int \delta L dt \quad (8.92)$$

とやって、あとは同じ論法を用いる。これは最小作用の原理の Hamilton 版、とでも呼ぶべきものである。

もう一度書くが、作用関数の形

$$S = \int (p\dot{x} - H) dt$$

の形に注目されたい。これがわれわれの目標の作用関数の形である。

上の話は 1 つの自由度だったが、多自由度、つまりたくさんの変数の組； $(x_1, p_1; x_2, p_2; \dots; x_n, p_n)$ で与えられるような系に対しても、形式的に拡張するだけで出てくる。すなわち Hamilton 関数は、この n 個の対でもって

$$H = H(x_1, p_1; x_2, p_2; \dots; x_n, p_n) \quad (8.93)$$

と与えられて

$$\dot{x}_k - \frac{\partial H}{\partial p_k} = 0 \quad (8.94)$$

$$\dot{p}_k + \frac{\partial H}{\partial x_k} = 0 \quad (8.95)$$

が得られる。この方程式を上でやった変分原理によって導くことは、諸君の練習問題として残しておこう。

Lagrange の力学、Hamilton の力学は、単に力学だけではなく電磁気学、流体力学、その他の問題でも、それによる定式化がなされる。これによって、Newton 力学の個別的な取扱いから一般的な枠組みに構成できたといえる。そういう意味で、現代物理学には不可欠のものである。また、統計力学の基礎においても本質的な役割をする。

8.4 再び波動関数へ

前節までで作用関数という力学の概念を説明したわけであるが、それが波動関数の概念と結びついているという意味で、古典力学と量子力学とが密接に結びついていることが確認できると思う。

8.4.1 Schödinger 方程式

さて、波動関数というのはそれ自身よりもそれを解とするような方程式に実は興味がある。ちょうど力学では、軌道よりもそれのもとになる運動方程式にまず興味があるのと同じである。この方程式こそ Schödinger 方程式である。自由粒子を例にとって、それを導いておこう。

そこで、

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (8.96)$$

に注目する。この関係が出てくるように微分しよう。まず、

$$\psi(x, t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar}(px - Et) \right] \quad (8.97)$$

を x で微分する。

$$\frac{\partial}{\partial x} \exp \left[\frac{i}{\hbar}(px - Et) \right] = \frac{i}{\hbar} p \exp \left[\frac{i}{\hbar}(px - Et) \right] \quad (8.98)$$

もう一度微分して

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \exp \left[\frac{i}{\hbar}(px - Et) \right] = -\frac{p^2}{\hbar^2} \exp \left[\frac{i}{\hbar}(px - Et) \right] \quad (8.99)$$

となる。つぎに ψ を t で微分する。

$$\frac{\partial}{\partial t} \exp \left[\frac{i}{\hbar}(px - Et) \right] = -\frac{i}{\hbar} E \exp \left[\frac{i}{\hbar}(px - Et) \right] \quad (8.100)$$

そして上の E と p の関係 (8.96) を使うと、式 (8.97) の ψ に対して

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (8.101)$$

が出てくる。これが1次元の自由粒子に対する Schödinger 方程式で、最も簡単な Schödinger 方程式である。同じ要領で、3次元の場合、つまり

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z, t) &= \exp \left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et) \right] \\ &= \exp \left[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z - Et) \right] \end{aligned} \quad (8.102)$$

の場合には

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{p^2}{2m} \nabla^2 \psi \quad (8.103)$$

が得られる。ここで

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (8.104)$$

で、いわゆるラプラシアンと呼ばれる微分の演算記号である。式 (8.104) の導出は、諸君の練習問題に残しておこう。

さて、上の導出過程をみてもみると、一回 x で微分するごとに運動量 p が出てくる。そこで、次のような対応関係

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (8.105)$$

がありそうである。すると

$$p^2 \rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (8.106)$$

となる。このことに注意すると、一般にポテンシャルがある場合には、エネルギーの式において運動エネルギー $\frac{p^2}{2m}$ にポテンシャルが付け加わっているのだから

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (8.107)$$

と置き換えてよさそうである。よって

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x) \psi \quad (8.108)$$

がより一般的な Schödinger 方程式である。

さらに、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x) \psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \psi \quad (8.109)$$

と括弧でくくると、括弧の中の微分の『演算』の部分（これを『演算子』と呼ぶ）は上でやったことから

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \rightarrow \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (8.110)$$

という対応関係があるらしいことを考えると、いわゆる Hamiltonian に関係があるらしいということが匂ってきそうである。そこで、なんでもよいから Hamilton 関数をもってきて、それに対して『Hamilton 演算子』なるものを定義できれば、さらに一般の Schödinger 方程式というものが得られるのである。

8.4.2 シュレーディンガー方程式を解くとは

ここで、量子力学の基礎方程式であるシュレーディンガー方程式の扱い方について、ここで要点を述べておこう。うへであたえた Schödinger 方程式方程式は偏微分方程式である。

平面波がみたすもっとも簡単な偏微分方程式から、ポテンシャルが存在する場合に、単なる「勘」で導いたもので、なにほどこかの説得力をもつものではないが、ともかく、この根拠については、本格的に展開することとして、ともかく、波動方程式を解くということについてのべておこう。

まずは、時間に関する 1 階の微分方程式であるから、 $\psi(x, y, z, t)$ の時間発展完全に決定される。いわゆる初期値問題である。

つぎに、具体的に、ある与えられたポテンシャルのもと、粒子が束縛されている状況を考える。このとき、粒子の存在可能な領域は有限であるという制限がつく。このことを、シュレーディンガー方程式が波に関する方程式であることを考え合わせると、これは波動方式の境界値問題、すなわち両端を固定された弦のような状況である。このような状況では、弦の振動数はある許されたとびとびの値しか取ることができない。いわゆる固有振動の問題である。いま、振動数は de Broglie の関係式により、粒子のエネルギーと結びついている。すなわち、シュレーディンガー方程式を解くことは波の固有値問題を解くことであり、それは粒子の取得するエネルギーの値を求めることに相当する。古典力学においては、粒子はどんなエネルギーの値でも持つことができたが、量子力学によって扱われるミクロの粒子においては、粒子の取り得るエネルギーの値はとびとびの値に制限されてしまうのである。この許されるエネルギーの値のことをエネルギー固有値といい、各々のエネルギーを持った状態を準位いう。また、各準位ごとの波形をエネルギー固有函数という。

8.4.3 軌道の量子化

前節の方程式の導出は、根拠がないわけではない、ということがなんとなく了解されたと思う。つまり Hamilton 関数が、鍵を握っているという『雰囲気』である。

さて、この辺で少し歴史的な経緯にふれておこう。つまり量子力学というのは Schödinger 方程式が発見されて始まったというわけではないということである。実はもうひとつのルートがあって、こちらのほうが量子力学の正当な由来を与えていると言ったほうがよい。

話を再び Hamilton の力学にもどそう。Hamilton の力学は、たぶん彼がこれを提案したとき、みんな冷淡だったのではないだろうか。力学をこんなに複雑にしてなにが面白い

のか、という疑問である。Newton 力学で十分やんげ、というだろう。しかし不思議なもので、これが量子力学の建設の際に奇跡的に有効になった。

■**プランクの輻射法則 [量子論]** 量子的話となると、プランク定数の出所に関してふれな
いわけにはいかない。

それは、黒体輻射のエネルギー分布に関する問題からでてきた。

振動数 ν の関数であるエネルギー密度 $U(\nu)$ を考える。 ν と $\nu + \Delta\nu$ の間の振動数をも
つ電磁波がもっているエネルギーは $U(\nu)\Delta\nu$ となる。 $U(\nu)$ は次のような関数である*1。

$$U(\nu) = \frac{\nu^3}{\exp\left[\frac{h\nu}{kT}\right] - 1} \quad (8.111)$$

空間には、振動数が無限に小さいものから、無限に大きいものまで起こり得る。よって、
全エネルギーは全てを足し上げたものである。

$$E = \int_0^{\infty} U(\nu) d\nu = \int_0^{\infty} \frac{\nu^3 d\nu}{\exp\left[\frac{h\nu}{kT}\right] - 1} \quad (8.112)$$

この積分が有限であることが重要である。

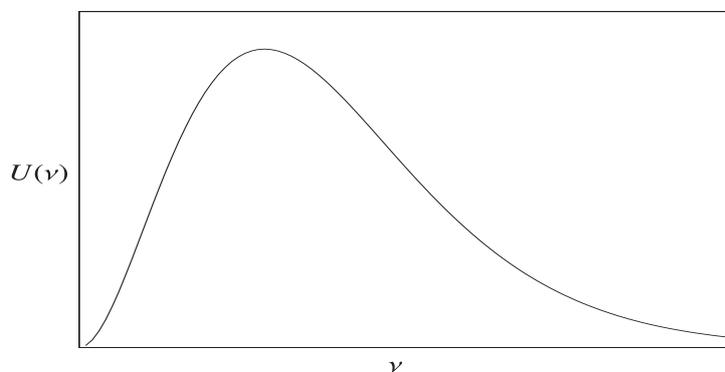


図 8.1 プランクの分布；横軸が振動数 ν で縦軸がエネルギー密度 $U(\nu)$

問題 14. 積分 (8.112) は積分変数以外の変数がたくさんあってみにくい。そこで $x = \frac{h\nu}{kT}$
と変数変換を行い、 E を x の積分になおせ。この積分を実際に計算するのは、少し技巧が
いる。

おまけ：レイリー-ジーンズの法則 上にあげたプランクの輻射法則より以前に考えら
れていた、エネルギーの計算方法である。式 (8.111) のように、複雑なエネルギー密度

*1 h ：プランク定数， T ：温度， k ：ボルツマン定数

ではない。もっと単純に、振動数 ν をもつ電磁波のエネルギーは ν の自乗に比例する；
 $U(\nu) = \nu^2$ 。この場合、全体のエネルギーは

$$E = \int_0^{\infty} \nu^2 d\nu \quad (8.113)$$

となるが、これを計算してみると積分は発散する。エネルギーが無限大というのは、実際にはあり得ない。プランクの輻射法則はこの発散の困難を回避するために発見されたものである。

そのころの経緯を簡単に述べておこう。話は『軌道の量子化』という概念である。諸君は水素原子が円軌道を描くときに

$$mvr = 2n\hbar \quad (8.114)$$

(ここで n は正の整数値) という式を習ったわけである。なんでこんなものが出てくるかといったことがわからないまま。この式は Hamilton の力学でもって

$$\oint_c pdq = 2n\hbar \quad (8.115)$$

という一般公式の特殊な場合である。

ここままで、この話のつづきは、別途ということにしよう。

APPENDIX

変分法入門

ある未知関数を含んだ量の定積分が極値をとるように、未知関数を決定するという問題を扱う一般理論を変分法と呼ぶ。しかし、数学の講義でもきちんと教えていないと思われる。残念なことである。

そこで変分法の応用として、典型的な問題を取り上げてみる。それは次のような問題である。いま、平面の上で2つの点を考えて、それを結ぶいろいろな曲線のうちで長さが最小になるものはなにか。答えは直線に決まっているが、それが変分法をつかえばエレガントに証明される。そこで2点を $A(0, 0)$ 、 $B(a, b)$ にとる。曲線の方程式を

$$y = f(x) \quad (8.116)$$

とおこう。 AB 間の距離はよく知られているように、微小距離

$$ds = \sqrt{dx^2 + dy^2} = \sqrt{1 + y'^2} dx \quad (8.117)$$

を積分したもの

$$l = \int_0^a \sqrt{1 + y'^2} dx \quad (8.118)$$

である。ここで被積分関数は、形式的に上でやった力学での Lagrange 関数に相当する。つまり

$$L = \sqrt{1 + y'^2} \quad (8.119)$$

である。ただし、時間 t の代わりに座標 x がその役割をするわけである。そこで、長さ l に対する極値条件を与える Lagrange 方程式をつくると

$$\frac{\partial L}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y'} \right) = 0 \quad (8.120)$$

となる。ただし $y' = \frac{dy}{dx}$ である。 L は y を含まないので

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y'} \right) = 0 \quad (8.121)$$

が得られる。結局

$$\frac{d}{dx} \frac{y'}{\sqrt{1 + y'^2}} = 0 \quad (8.122)$$

ゆえに

$$\frac{y'}{\sqrt{1 + y'^2}} = C \quad (8.123)$$

となる。これから

$$y' = k$$

$$k = \frac{C}{\sqrt{1-C^2}}$$

となり、最終的に直線の式

$$y = kx + D \quad (8.124)$$

が得られる。原点を通ることから $D = 0$ 。また $k = \frac{b}{a}$ ととればよい。これで長さが極小になる曲線は、直線になることがわかる。

Q：上の説明では、長さが極値を与えても、最小になるという保証はないのでは？

A：じつによい質問です。しかし、これに答えるのは残念ながらここではできません。大域変分法という数学の難しい部門があつて、そこではじめて厳密に証明されます。

変分原理というのは要するに、高等学校でも習い、かつ受験数学の花でもある関数の最大値、最小値を求めるという問題を思いきり拡張したものと考えていいだろう。原理と呼ばれる所以は、それが自然現象において、非常に厳格な意味で法則を支配しているからである。実際多くの物理法則は変分原理に支配されている。たとえば統計力学において、エントロピー最大の原理というのがあるが、これなども変分原理の応用といえる。また、量子力学の問題を解くときにも変分概念は不可欠である。

物理学の法則は、普通それが帰納的に得られたものにせよ、習うときには頭から与えられたものとして出発する。しかし、それよりさらに上に位置するいわば神の意志というべき大原則から導かれるというのが、近代の物理学の共通認識になってきたといえるだろう。変分原理というのは、まさにそのような原理なのである。かの偉大な物理学者 Planck は、彼のエッセイにおいて、変分原理について1章を費やしている。

Q：変分原理というのは、なぜ極値をとるかという疑問には答えていないと思うのですが、もっと根本的なものから導けないのでしょうか？

A：なかなか鋭い質問です。それはあると言えます。しかし今の段階では答えるのはむずかしい。

8.5 量子力学の市場

さて、どのような学問にもその歴史がある。量子力学の歴史はそれだけでも多大なる興味があるが、ここではその出生についてだけ述べる。それは 1925, 1926 のあいだに突如誕生してそれから5年くらいのあいだに完全に完成されてしまった。個々の難問が解決されたというのは大事件であるが、包括的な学問大系がこんなに短期間のうちに完成されてしまうというのは、科学の歴史の上でも希有のことである。いわゆる、波動力学と行列力学というものが現れて、それが統一理論として量子力学となった。このあたりの経緯は、朝永教授の本が参考になるかもしれない。

いずれにしても、かくのごとく非常に「高齢な」学問ではあるが、その基礎的学問という性格からして当然年齢だけでは計ることができない。一方、現代物理学はなんらかの形で量子力学の応用問題とみられる。これに異論をとるものもでてくるかもしれないが、事実であるから仕方がない。そういう意味では、個々の分野には寿命というものがあつてはやり廃りは止むを得ないことではある。しかし、そのような学問の流行を、「つねに改革の渦のなかにおいてわくわくする」と感じる人もいるようである。たとえば、素粒子や原子核で粒子衝突の問題は加速器が華やかになりしころは随分とはやったものだが、現在ではブームが去ってしまった。数学者の小平邦彦氏は、自分がやっているような数学（複素多様体論）は何十年後に消滅しているだろうと言っている。このような謙虚な意見を率直に述べるのは偉大なる学者としての資質であるかもしれない。

閑話休題：そういうわけで、量子力学は、たえずその適用対象をみつけて、当初の予想をはるかに超えたところまで進化しつづけたといえよう。

量子力学は物理の学生諸君にとって魅力的な学問であると同時に難関であるともたしかで、具体的問題を解けるようになるまでは随分と時間がかかる。その大きな部分が量子力学の数学的面倒もさることながら、背後にある物理が見えにくいということにおおいにあると思う。

というわけで、どんな問題があるかということをざっと見てみよう。量子力学は、不思議なことに、通常の力学ときわめて似ている。それは、ひとことでいってしまえばプランク定数がゼロとみなせる極限で古典力学に移行するということの反映なのであるが。古典力学との対応関係をもとに、力学においてなじみの問題のほとんどすべてを量子力学へそっくりそのまま読み替えることができる。剛体の問題、流体の問題ですらそうである。

第一のジャンル

ポテンシャル問題。調和振動子。水素原子。これらは、「質点力学」を転化したものとみられる。

第2のジャンル

量子力学に特有の属性であるスピンあるいは内部自由度に関係した問題。磁場中のスピン； ニュートリノ振動；K-中間子崩壊。

第3のジャンル

分子系：量子化学というひとくくりでまとめられるもの代表。

第4のジャンル

沢山の粒子が相互作用する系：俗にいう多体問題で、典型的問題として、固体のなかの電子の「ガス」をあつかうが、太陽系の惑星軌道を解析するというものとまったくことなる手法が要求される。典型が、超伝導のBCS理論である。これは、「クーパー対」という2つの電子の「分子」をもとに電子系の波動関数が構成されるというカラクリを説明する。

第5のジャンル

電磁場のような「場」という時間空間の各点に配置された物理量を量子力学の対象とする。いわゆる「場の量子論」といわれるものである。

その他のジャンル

糸のような曲がりくねった1次元的对象の量子力学的理論。素粒子のストリング理論といわれるものが典型。最近ではもっと高次元の対象に拡張されているようである。また、量子計算機。これらはいずれも現在の流行のもので、近い将来消滅するかもしれない。

文献

解析力学のテキストだが、昔から定評があるものとして

山内恭彦、『一般力学』、岩波書店

Goldstein、『古典力学』(訳本)、吉岡書店

がある。(これらは戸田盛和のテキストでも紹介されていたものである。)

また、戸田教授自身は物理学の名人で、非常によいテキストをたくさん書いている。

『力学 30 講』、朝倉書店

というのが、普通の本には書いていない面白い例題を取り上げていて、力学が楽しいものであることをいきいきと描いている。

Q and A

Q：量子力学は、物理の学生が一番力を入れる科目であることは確かです。そこで、限られた時間で学習（習得）するには、どんな仕方がよいのでしょうか。

A：まず、量子力学は3回生の専門科目のなっているので、電磁気学、統計熱力学の基礎を一応マスターしておくのが必要です。しかしくりかえし言いますが、物理学はひとつの学問であるから、量子力学を学ぶ過程で電磁気学、統計力学も同時に学ぶという気構えで学習するとよいでしょう。そうすれば、物理は孤立した知識の集合体ではないということがわかるでしょう。

Q：自分で勉強するにはテキストが必要なわけです。どのようなものがよいのでしょうか。テキストはすでにゴマンとあるわけで、どれを選べばよいか迷ってしまいそうです。

A：昔から定評のあるもの、たとえば Dirac の『量子力学』（朝永振一郎訳）が量子力学の創始者自身によるテキストで、いまだにその価値は失われていませんが、残念ながら本当に基本理論しか説明していません。あとは自分でやれ、というのが天才 Dirac の哲学ですから。しかも、初学者にはかなり数学的です。量子力学は出来上がってからすでに70年以上たったのですから、それぞれの分野、たとえば原子物理学あるいは固体物理学から派生した無数の問題があるわけで、そのような具体的な問題から入っていくのが得策でしょうね。このような現代ニーズに応えるものとして、たとえば Gasiorowicz の”Quantum physics”は非常にすぐれた本であると思います。じつは私は、最近の講義のテキストにこの本を使っているのですがね。この本を一通り読み終えてから、Dirac を読むのがよいでしょう。そうすれば、量子力学の創始者がどうしてこんな理論体系を考えついたかが理解する糸口がつかめるかもしれません。

それと、テキストを一つ決めると、ほかの本をわたり歩かないで、それを最後まで読み通すようにすることです。初学者がいろいろな本をかじりまわすのは、往々にしてバラバラな知識を断片的に脈略なく詰め込むだけで、深い理解には至らないということになるからです。いろいろなテキストを眺めて、よいところをピックアップすることができるようになるには、かなり学習に慣れてからです。いずれにしても、結局どんな学問を習得するのも同じでしょうが、自分で主体的に考えるクセをつけることが大切です。物理の習得では、特に必要です。暗記科目ではないのですから。

もちろん、現在の学生諸君にはいろいろと誘惑が多く、それに負けて挫折することもあるかもしれません。そんなときには、みんなで励まし合ってやるのがよいでしょう。それ

でもダメなときは、担当教授のところに行きなさい。その教授が誠実な方であれば、いつでも相談にのってくれるでしょう。せつかく大学の物理学科にきたのですから、4年間にせめて現代物理学の根本的なところだけでも確実にマスターして卒業しましょう。

第 9 章

波束の運動

平面波として、三角函数

$$\cos \frac{2\pi}{\lambda}(x - vt) = \sin(kx - \omega t) \quad (9.1)$$

(こちらの v は位相速度という) を用いて合成計算を行うことはなじみのことである。(初等物理のコースでは、波数 k の代わりに波長 λ を、角振動数 ω の代わりに振動数 ν を用いる。) . これらの量の関係は、

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = 2\pi\nu \quad (9.2)$$

であり、 $v = \lambda\nu$ に相当する関係は、 $\omega = kv$ である。de Broglie の関係式を波数、角振動数を用いて書いておくと、

$$k = \frac{p}{\hbar}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}, \quad (9.3)$$

ここに \hbar はプランク定数 h を 2π で割ったもので、ときにディラック定数と呼ばれる。

以下では、三角函数のかわりに、オイラーの公式 $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ を用いることにする。すなわち波の式として指数函数 $e^{i(kx - \omega t)}$ を用いる。

以上のことをもとに、波束とは何かを述べよう。それは粒子の如く空間的に局在したパルス波のことであり、これは平面波をいくつも (適当な重みをつけて) 重ね合わせることで作ることができるのである。波束とは平面波の重ね合わせで空間的に局在した波を作ったものである：

$$\psi(x, t) = \sum_{\text{すべての } k} A(k) e^{i(kx - \omega t)} \quad (9.4)$$

このように、空間的にどこまでも広がった波と局在した粒子のあいだの一見相反するものがひとつにまとまるように見える。すなわち、粒子は実は波束と同一視できるといえそ

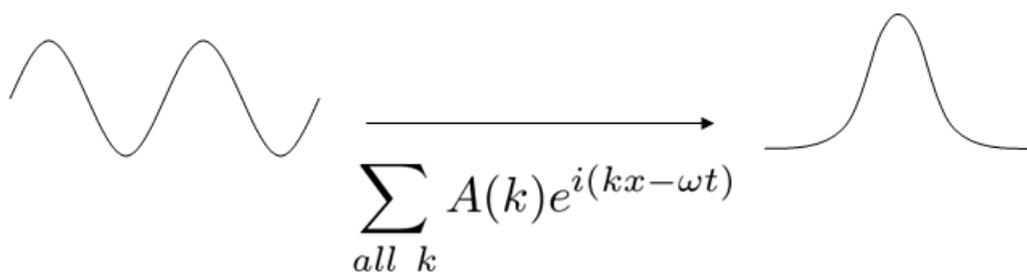


図 9.1 波束

うである。実際、ドブロイ、シュレーディンガーはそのような、「実在波」という考えを最後までもっていたようである。この実在波の従う方程式として、量子力学の基礎方程式である Schrödinger 方程式が導かれた。この方程式を解くことで、波束 $\psi(x, y, z, t)$ の時間発展：すなわち粒子の運動は完全に決定される。

9.1 数学の準備：フーリエ変換とデルタ関数

うえでみたように、一般の波を平面波の重ねあわせで表すという考えは、数学の分野では「調和解析」という専門部門として知られている。

基本の関数のセットで、任意の（ある条件をみたま）関数を展開するというのは、べき級数でおなじみである：

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \quad (9.5)$$

のように、 x, x^2, x^3, \dots のようなべき関数の級数に展開できる。

関数 $f(x)$ が周期 2π のとき、すなわち $f(x + 2\pi) = f(x)$ を満たす場合には、

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx) \quad (9.6)$$

のように、 $\cos x, \cos 2x, \dots, \sin x, \sin 2x, \dots$ のような三角関数の級数に展開できるのである。これをフーリエ級数という。ここで、周期 2π を一般の周期（有限な）への拡張は容易である。すなわち周期 $2L$ の関数 ($f(x + 2L) = f(x)$) については、

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(A_n \cos \frac{n\pi x}{L} + B_n \sin \frac{n\pi x}{L} \right) \quad (9.7)$$

と展開できるからである（問題：証明せよ）。例によって、ここでは三角関数を用いたが、

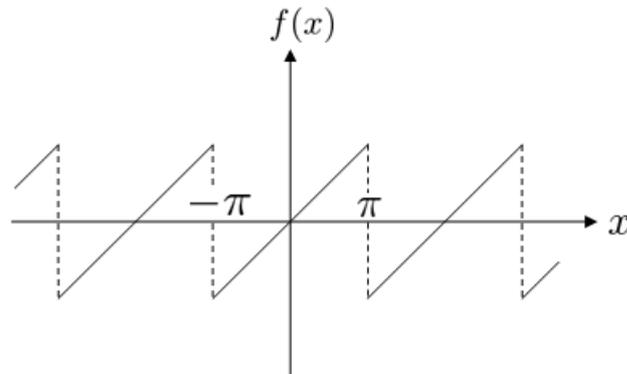


図 9.2 $f(x) = x \quad (|x| < \pi)$ この例はここじゃない方がいいかも

指数函数を用いる方が便利である. すなわち

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \exp\left(\frac{in\pi}{L}x\right). \quad (9.8)$$

テイラー級数の際には, 展開係数は $f^{(n)}(0)/n!$ であったが, それではフーリエ級数における展開係数はどのように与えられるだろうか. これは次の公式 (問題: 証明せよ)

$$\frac{1}{2L} \int_{-L}^L \exp\left(\frac{i(n-m)\pi}{L}x\right) dx = \delta_{n,m} = \begin{cases} 1 & (n = m), \\ 0 & (n \neq m) \end{cases} \quad (9.9)$$

を用いればよい. すなわち,

$$a_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) \exp\left(-\frac{in\pi}{L}x\right) dx. \quad (9.10)$$

さて, 次に $f(x)$ が周期函数であるという制限をはずそう. これは有限の周期を, 極限をとる, すなわち, 周期 $L \rightarrow \infty$ することにより実現される. まず

$$k_n \equiv \frac{n\pi}{L} \quad (9.11)$$

としてラベルを n から k_n に変更しておく.

$$\Delta n = 1, \quad \Delta k_n = \frac{\Delta n \pi}{L} \quad (9.12)$$

に注意する.

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{La_n}{\pi} \exp(ik_n x) \Delta k_n \quad (9.13)$$

と書けるので,

$$\frac{A_n}{\sqrt{2\pi}} \equiv \frac{La_n}{\pi} \quad (9.14)$$

とすると

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{A_n}{\sqrt{2\pi}} \exp(ik_n x) \Delta k_n \quad (9.15)$$

$L \rightarrow \infty$ で $k_n \rightarrow k$ と連続変数になり,

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx} dk \quad (9.16)$$

一方,

$$A_n = \sqrt{2\pi} \frac{La_n}{\pi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-L}^L f(x) \exp\left(-\frac{in\pi}{L}x\right) dx. \quad (9.17)$$

だから $L \rightarrow \infty$ で

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (9.18)$$

(9.16)(9.18) を互いにフーリエ変換の反転公式という.

多変数への拡張は, 形式的に多重積分を用いて, つぎのように書かれる:

$$f(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} g(k_1, \dots, k_n) e^{i(k_1 x_1 + \dots + k_n x_n)} dk_1 \dots k_n \quad (9.19)$$

$$g(k_1, \dots, k_n) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_n) e^{-i(k_1 x_1 + \dots + k_n x_n)} dx_1 \dots x_n \quad (9.20)$$

なお (9.18) を (9.16) に代入すると

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(y) e^{-iky} dy \right\} e^{ikx} dk \quad (9.21)$$

積分順序を交換すると

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-y)} dk \right\} f(y) dy \quad (9.22)$$

括弧の中を

$$G(x-y) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-y)} dk \quad (9.23)$$

と書くと

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x-y)f(y)dy \quad (9.24)$$

このような関数をデルタ関数といい $G(x-y) = \delta(x-y)$ と書く。よってデルタ関数の積分表示

$$\delta(x-y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-y)} dk \quad (9.25)$$

を得る。特に $y = 0$ の時の形

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk \quad (9.26)$$

となることに注意する。

9.1.1 デルタ関数の性質

ここで、のちに必要となるデルタ関数の性質を幾つか挙げておく。

■1.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a) \quad (9.27)$$

これは上で説明したとおり。

■2.

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x) \quad (9.28)$$

[証明]

$$I \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(ax)dx \quad (9.29)$$

$y \equiv ax$ とおく. $dx = dy/a$.

$a > 0$ のとき,

$$I = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{y}{a}\right) \delta(y) dy = \frac{1}{a} f(0) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx$$

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

$a < 0$ のとき,

$$I = \frac{1}{a} \int_{\infty}^{-\infty} f\left(\frac{y}{a}\right) \delta(y) dy = -\frac{1}{a} f(0) = -\frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx$$

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

従って

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x). \quad (9.30)$$

■3.

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|} \{\delta(x + a) + \delta(x - a)\} \quad (9.31)$$

さらにこの一般化として,

■4.

$$\delta[f()] = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|f'(x_i)|} \quad (9.32)$$

ここに x_i は $f(x) = 0$ の根, すなわち $f(x_i) = 0$.

■5.

$$\boxed{\delta(x) = \frac{d\epsilon(x)}{dx}} \quad (9.33)$$

ここで, $\epsilon(x)$ はステップ関数で,

$$\epsilon(x) \equiv \begin{cases} 1 & x > 0, \\ 0 & x < 0. \end{cases} \quad (9.34)$$

[証明]

$$\left\{ \begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{d\epsilon}{dx} dx &= [f(x)\epsilon(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{dx} \epsilon dx \\ &= f(\infty) - \int_0^{\infty} \frac{df}{dx} dx \\ &= f(\infty) - [f(x)]_0^{\infty} \\ &= f(0) \end{aligned} \right. \quad (9.35)$$

従って, $\frac{d\epsilon(x)}{dx} = \delta(x)$.

9.2 波束と不確定性関係

ここで、波束の特殊な場合をとりあげよう。

9.2.1 ガウス波束

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (9.36)$$

$g(k)$ の具体形として

$$g(k) = \exp[-\alpha(k - k_0)^2] \quad (9.37)$$

すなわち

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\alpha(k - k_0)^2 + ikx] dk \quad (9.38)$$

の関数形を見てみる。 $k' \equiv k - k_0$ と変数変換すると

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0x} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\alpha k'^2 + ik'x] dk' \quad (9.39)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\alpha\left(k' - \frac{ix}{2\alpha}\right)^2\right] dk' \quad (9.40)$$

さらに $\xi \equiv k' + ix/2\alpha$ と変数変換すると、ガウス積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha\xi^2} d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (9.41)$$

より

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} e^{ik_0x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \quad (9.42)$$

$\alpha(\Delta k)^2 \simeq 1$, $(\Delta x)^2/4\alpha \simeq 1$ より,

$$\Delta k \simeq \frac{2}{\sqrt{\alpha}}, \quad \Delta x \simeq 2\sqrt{\alpha}$$

ゆえに、 $\Delta x \Delta k \sim 4$, これは

$$\begin{aligned} f(x) \text{ が広がる} &\iff g(k) \text{ がせばまる} \\ f(x) \text{ がせばまる} &\iff g(k) \text{ が広がる} \end{aligned}$$

という様相を示している。この事実は、 $g(k)$ と $f(x)$ の拡がり、
「互いに相補的 (complementary)」な関係にあるといわれる。

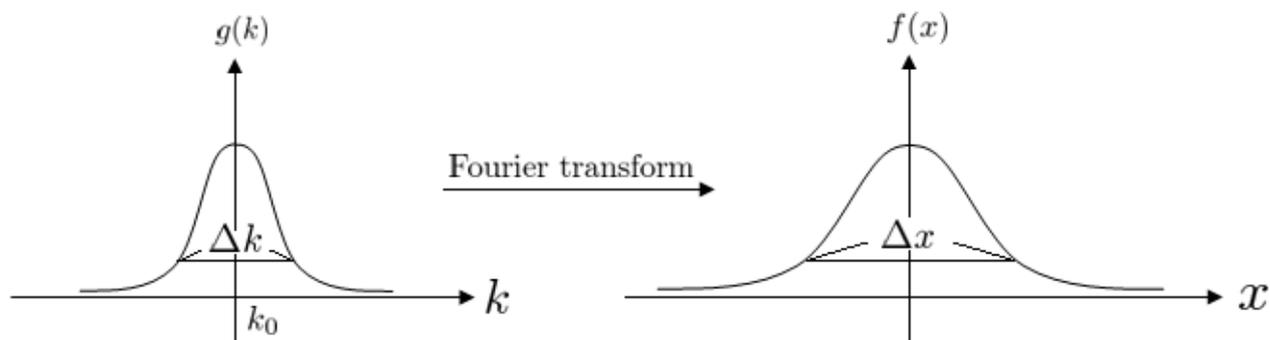


図 9.3 ガウス波束のフーリエ変換

9.2.2 自由粒子のような運動をする波束

波形 e^{ikx} を動かすと $e^{i(kx-\omega t)}$. 波束では

$$f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i(kx-\omega(k)t)} dk \quad (9.43)$$

ただし $\omega = \omega(k)$ の関数関係, 分散関係, ガウス波束では

$$f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{i(kx-\omega(k)t)} dk \quad (9.44)$$

$k' = k - k_0$ と変数変換して $\omega(k)$ を k_0 のまわりでテイラー展開して 2 次まで取ると

$$\omega(k) = \omega(k' + k_0) \simeq \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} k' + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k=k_0} k'^2 \quad (9.45)$$

1 次の係数

$$\frac{d\omega}{dk} = v_g \quad (9.46)$$

は群速度, 一方,

$$\frac{\omega}{k} = v \quad (9.47)$$

は位相速度, 2 次の係数を

$$\beta \equiv \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k=k_0} \quad (9.48)$$

とおく.

$$f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha k'^2} \exp [i\{(k + k_0)x - (\omega(k_0) + v_g k' + \beta k'^2)t\}] dk \quad (9.49)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \int_{-\infty}^{\infty} \exp [-(\alpha + i\beta t)k'^2 + i(x - v_g t)k'] dk \quad (9.50)$$

ガウス積分より直ちに導かれる公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2 + bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}} \quad (9.51)$$

を用いて

$$f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2(\alpha + i\beta t)}} e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \exp \left[-\frac{(x - v_g t)^2}{4(\alpha + i\beta t)} \right] \quad (9.52)$$

絶対値 2 乗は

$$|f(x, t)|^2 = \frac{1}{2\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 t^2}} \exp \left[-\frac{\alpha(x - v_g t)^2}{2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)} \right] \quad (9.53)$$

波束は時間的に広がる.

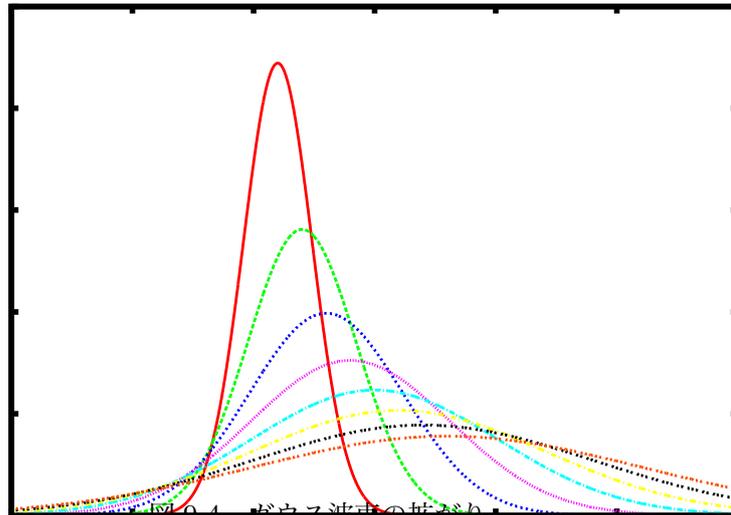


図 9.4 ガウス波束の拡がり

9.2.3 物質波の波束

波束

$$f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (9.54)$$

ドブロイ波. 量子的粒子に付随する波 (物質波) の波束.

$$p = \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} \quad (9.55)$$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega \quad (9.56)$$

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - E(p)t)\right] dp \quad (9.57)$$

波束の運動

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (9.58)$$

群速度

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = \text{粒子の速度} \quad (9.59)$$

$E = p^2/2m$ の分散関係のもとでの波動方程式を求める. 時間微分

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \phi(p) \left(-\frac{i}{\hbar}E\right) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right] dp \quad (9.60)$$

座標 2 階微分

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \phi(p) \left(-\frac{p^2}{\hbar^2}\right) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right] dp \quad (9.61)$$

したがって自由粒子に対する Schrödinger 方程式 (1次元) として

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \quad (9.62)$$

3次元自由粒子波束は

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right)^3 \iiint_{-\infty}^{\infty} \phi(p_1, p_2, p_3) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)\right] dp_1 dp_2 dp_3 \quad (9.63)$$

ただし $\vec{p} \cdot \vec{x} = p_1x + p_2y + p_3z$ となり, 先と同様に考えて 3次元自由粒子に対する Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) \quad (9.64)$$

あるいは ∇ を用いて

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi} \quad (9.65)$$

] これは時間について1階. 一方, 古典的な弦や音波の変位 $f(x, t)$ に関する波動方程式は

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0 \quad (9.66)$$

で時間について2階. 温度分布 $T(x, t)$ に関する熱伝導方程式 (拡散方程式) は時間について1階で,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (9.67)$$

9.2.4 Heisenberg (ハイゼンベルク) の不確定性関係

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx} dk \quad (9.68)$$

$\phi(k) \sim e^{-\alpha k^2}$ とすると $\psi(x) \sim e^{-\frac{x^2}{4\alpha}}$ となるのであった. $\alpha(\Delta k)^2 \simeq 1$, $(\Delta x)^2/4\alpha \simeq 1$ より, $\Delta k \simeq \frac{2}{\sqrt{\alpha}}$, $\Delta x \simeq 2\sqrt{\alpha}$ で,

$$\psi(x) \text{ が拡がる} \iff \phi(k) \text{ がせばまる}$$

$$\psi(x) \text{ がせばまる} \iff \phi(k) \text{ が拡がる}$$

という関係にある. $\Delta x \Delta k \sim 4$. かつ, $\hbar k = p$ より $\hbar \Delta k = \Delta p$ であるから,

$$\Delta p \Delta x \sim 4\hbar \quad (9.69)$$

位置と運動量は同時測定不可能を示唆している. ここで, $\hbar \simeq 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{sec}$.

Heisenberg の思考実験

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \phi} \quad (9.70)$$

反跳運動量. コンプトン効果.

$$\Delta p \sim \frac{2h\nu}{c} \sin \phi \quad (9.71)$$

よって

$$\Delta x \Delta p \sim \frac{\lambda}{\sin \phi} \frac{2h\nu}{c} \sin \phi = 2h \quad (9.72)$$

不確定性関係の応用

水素原子のエネルギーの概算 (Order estimation).

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad (9.73)$$

$\Delta x \rightarrow r$, $\Delta p \rightarrow p$ とすると

$$rp \sim \hbar \quad (9.74)$$

よって

$$E(r) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{r} \right)^2 - \frac{e^2}{r} \quad (9.75)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \quad (9.76)$$

$E(r)$ の最小値が基底状態.

$$\frac{dE}{dr} = -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0 \quad (9.77)$$

より

$$r_{\min} = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (9.78)$$

ボーア半径. $r_{\min} \sim 5.29 \times 10^{-11}$.

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{me^2}{\hbar^2} \right)^2 - \frac{me^4}{\hbar^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \quad (9.79)$$

水素原子の正確なエネルギー準位は, のちほどみるように,

$$E_n = -\frac{me^4}{2n^2\hbar^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (9.80)$$

で与えられる.

第 10 章

シュレーディンガー方程式と固有値問題

10.1 一般的枠組み

自由粒子に対しては、1次元のときの波動方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (10.1)$$

となり、3次元のときには、 $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$ は、ラプラシアンで置き換えたもの:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) \quad (10.2)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \quad (10.3)$$

になる。ここで、発見的であるが、つぎの対応関係に注目する:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \Rightarrow p^2 \quad (10.4)$$

すなわち、波動関数 $\psi(x)$ に作用するものとして、

$$\frac{1}{2m} \underbrace{\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)}_p \underbrace{\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)}_p \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (10.5)$$

とみるのである。[ここで、微分演算子が関数 ψ に作用させた場合の規則

$$\begin{aligned} A = f(x) &\rightarrow A\psi = f(x)\psi \\ A = \frac{\partial}{\partial x} &\rightarrow A\psi = \frac{\partial}{\partial x}\psi = \frac{\partial\psi}{\partial x} \\ A = \frac{\partial^2}{\partial x^2} &\rightarrow A\psi = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \end{aligned}$$

をつかっている]. すると、これは運動エネルギー; $p^2/2m$ そのものに対応しているとみることができる。さらに、ポテンシャルがある場合

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)} \quad (10.6)$$

のように拡張しよう。すなわち、

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi \quad (10.7)$$

3次元の場合も同様に、

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x, y, z)\right)\psi \quad (10.8)$$

より一般に、つぎの形の方程式が成立するであろうことが期待される:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi} \quad (10.9)$$

ここで、 H は、一般のハミルトン演算子とよばれるものになる。この一般理論に関する詳細は後の章で説明をする。

10.2 $\psi(x, t)$ の確率解釈

波動関数は発見的に導入されたものであるが、現実の問題を解く際になんらかの意味をあたえておく必要がある。まず、とりあえず時間変数、 t に依存しない場合を考えよう。

まず、注意すべき k とは、 ψ は、一般に複素数値で与えられる関数である。ただし、複素関数論であつかう関数ではないことに注意しよう。天下りのではあるが、以下の事実が決定的である:

■(A)

$$|\psi(x)|^2 dx = \text{区間 } (x, x + dx) \text{ に粒子を見出す確率} \quad (10.10)$$

その意味で、 $\psi(x)$ 自体は、『確率振幅 (possibility amplitude)』とよばれることもある。

■(B) $\psi(x)$ は位相をもつ、つまり、

$$\psi = |\psi|e^{i\alpha} \quad (10.11)$$

α という位相を持つ。「位相」なる代物は、量子力学全体を貫徹するきわめて重大な意味をはらむ概念である。

10.2.1 干渉

合成振幅

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 \quad (10.12)$$

$$\begin{aligned} |\psi|^2 &= |\psi_1 + \psi_2|^2 \\ &= (\psi_1 + \psi_2)(\psi_1^* + \psi_2^*) \\ &= |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \underbrace{\psi_1^*\psi_2 + \psi_1\psi_2^*}_{\text{干渉項}} \end{aligned} \quad (10.13)$$

$\psi_1 = R_1e^{i\theta_1}$, $\psi_2 = R_2e^{i\theta_2}$ とすると

$$\begin{aligned} \psi_1^*\psi_2 + \psi_1\psi_2^* &= R_1e^{-i\theta_1}R_2e^{i\theta_2} + R_1e^{i\theta_1}R_2e^{-i\theta_2} \\ &= R_1R_2 \left(e^{-i(\theta_1-\theta_2)} + e^{i(\theta_1-\theta_2)} \right) \\ &= 2R_1R_2 \cos(\theta_1 - \theta_2) \end{aligned} \quad (10.14)$$

■スリット実験

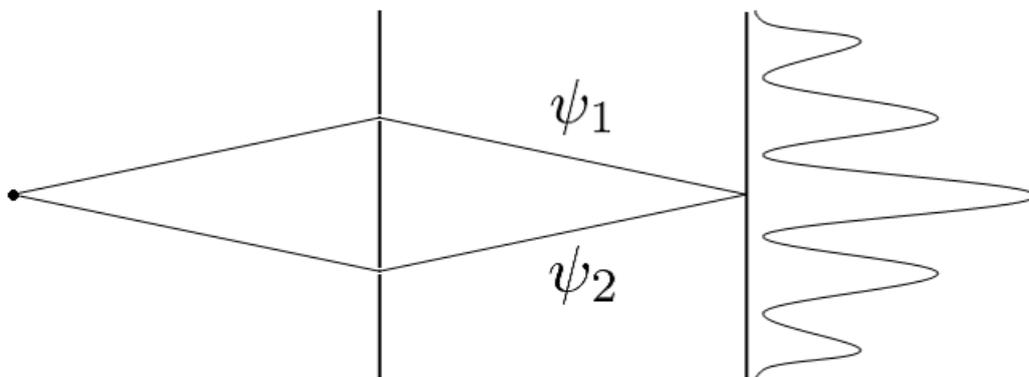


図 10.1 スリット実験

10.2.2 確率保存

つぎに、シュレーディンガー方程式から派生する関係式に注目しよう。

$$|\psi(x, t)|^2 = \psi^* \psi \equiv \rho(x, t) \quad (10.15)$$

を確率密度と称する。

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi \quad (10.16)$$

およびその複素共役 (V は実数)

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi^* \quad (10.17)$$

より

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ &= \psi \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi^* - \psi^* \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[-\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \right] \end{aligned} \quad (10.18)$$

したがって

$$\boxed{j \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right)} \quad (10.19)$$

とすると

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0} \quad (10.20)$$

確率保存の法則。同様に考えて 3 次元の場合、

$$\boxed{\mathbf{j} \equiv \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)} \quad (10.21)$$

はベクトルとなり,

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0} \quad (10.22)$$

($\nabla \cdot \mathbf{j} = \text{div} \mathbf{j}$). この式は、まさに、流体力学での質量保存の法則に他ならない。つまり、 ρ を質量密度、 \mathbf{j} を流れに対応するとみられる。波動関数で記述される確率的「もの (entity)」をを、“確率流体” と捉えて体積領域 V について積分すると

$$\int_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} \right) dV = 0 \quad (10.23)$$

移項してガウスの定理を用いると

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = - \int_V \nabla \cdot \mathbf{j} = - \int_S \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = S \text{ から流出する確率} \quad (10.24)$$

のように書き換えられる。ここで、 S は V の境界、閉曲面。

10.2.3 物理量の期待値 (平均値)

N 個の x_i に対して、おのおの p_i の確率で当たるとする。確率の和は 1

$$\sum_{i=1}^N p_i = 1 \quad (10.25)$$

量 x の期待値の定義は

$$\boxed{\langle x \rangle = \sum_{i=1}^N x_i p_i} \quad (10.26)$$

確率 p_i の役割を $|\psi|^2$ がなうから

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1 \quad (10.27)$$

でなければならない。つまり ψ は 2 乗可積分 (積分値が有限) で、かつ規格化されていなければならない。積分値は有限であるが規格化されておらず

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = N (< \infty) \quad (10.28)$$

となる場合には,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\psi^*}{\sqrt{N}} \frac{\psi}{\sqrt{N}} = 1 \quad (10.29)$$

であるから, $\psi' \equiv \psi/\sqrt{N}$ と定義すれば ψ' は規格化される. 位置 x の関数 $f(x)$ の期待値は

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) |\psi(x)|^2 dx \quad (10.30)$$

運動量の期待値はどうなるか? 古典力学での運動量は

$$p = mv = m \frac{dx}{dt} \quad (10.31)$$

であった. そこで, つぎの関係式に注目する:

$$\langle p \rangle = m \left\langle \frac{dx}{dt} \right\rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle \quad (10.32)$$

確率振幅 $\psi(x, t)$ が時間に依存していれば $f(x)$ の期待値 $\langle f(x) \rangle$ も時間に依存する.

$$\begin{aligned} \langle f(x) \rangle(t) &= \int f(x) |\psi(x, t)|^2 dx \\ &= \int \psi^*(x, t) f(x) \psi(x, t) dx \end{aligned} \quad (10.33)$$

と書き直しておくとも微分しやすい.

$$\begin{aligned} m \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= m \frac{d}{dt} \int \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx \\ &= m \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} x \psi + \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dx \end{aligned} \quad (10.34)$$

シュレーディンガー方程式とその複素共役を用いて

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} x \psi - \psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) dx \quad (10.35)$$

積分の中身は部分積分によって

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} x \psi - \psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi - \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi - \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \psi \right) + 2\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \end{aligned} \quad (10.36)$$

となるから

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\hbar}{2i} \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi - \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \psi \right]_{-\infty}^{\infty} + \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx \quad (10.37)$$

$\psi(x)$ が2乗可積分であることより

$$\psi(\pm\infty) = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial x}(\pm\infty) = 0 \quad (10.38)$$

でなければならないから、第1項の境界項は0となる。よって

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx\end{aligned}\quad (10.39)$$

ψ^* と ψ とで、運動量演算子

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (10.40)$$

をサンドイッチした形である。

このようにいったん運動量演算子が定義できたとすると、古典論からの運動エネルギーに対するものとして、

$$\frac{p^2}{2m} = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (10.41)$$

に注意して、ハミルトニアン演算子（ハミルトニアン）が得られる：

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (10.42)$$

3次元の場合には、運動量が3成分あることに対応して、

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (10.43)$$

に注意すると、ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}H &= \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V\end{aligned}\quad (10.44)$$

と書かれる。

10.2.4 運動量表示

$\psi(x)$ と $\phi(p)$ には対称な関係

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \phi(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp \\ \phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) dx\end{aligned}\quad (10.45)$$

が成立するから、 $\phi(p)$ は運動量空間での“波動関数”とみることができる。すなわち p の関数 $f(p)$ の期待値は

$$\langle f(p) \rangle = \int \phi^*(p) f(p) \phi(p) \quad (10.46)$$

で与えられる。特に $f(p) = p$ の場合について証明しておこう。

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx \\ &= \int \psi^*(x) \left[\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \phi(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp \right] dx \\ &= \int \psi^*(x) \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int p \phi(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp \right] dx \end{aligned} \quad (10.47)$$

積分順序を変えて

$$\langle p \rangle = \int \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi^*(x) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dx \right] p \phi(p) dp \quad (10.48)$$

括弧の中は

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) dx \quad (10.49)$$

の複素共役

$$\phi^*(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi^*(x) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dx \quad (10.50)$$

だから

$$\langle p \rangle = \int \phi^*(p) p \phi(p) \quad (10.51)$$

$\phi(p)$ の規格化も確認しておこう。

$$\begin{aligned} \int \phi^*(p) \phi(p) dp &= \int \phi^*(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) dx dp \\ &= \int \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \phi^*(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) dp \right] \psi(x) dx \\ &= \int \psi^*(x) \psi(x) dx \end{aligned} \quad (10.52)$$

したがって $\psi(x)$ が規格化されていれば $\phi(p)$ も規格化されている。

■問

$$x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \quad (10.53)$$

を証明せよ。フーリエ変換を用いて

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int \phi^*(p) x \phi(p) dp \\ &= \dots\dots \\ &= \int \phi^*(p) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \phi(p) dp \end{aligned} \quad (10.54)$$

を示せばよい。

10.2.5 演算子の積

■演 算子の積は非可換なること。この陳述は、後の章での一般理論の先取りである。すでにみたように、 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ なる微分演算の場合に、 $xp \neq px$ となることは予想されるであろう。この場合に、

$$px - xp = \frac{\hbar}{i} \quad (10.55)$$

なる関係式が導かれる。ここで、交換子 (commutator) を

$$\boxed{[A, B] \equiv AB - BA} \quad (10.56)$$

によって定義しよう。

$$\begin{aligned} [p, x] &= px - xp \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x - x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (10.57)$$

これを任意の関数に作用させると

$$\begin{aligned} [p, x]\psi(x) &= \left\{ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x - x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} \psi \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ &= -i\hbar \psi - i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ &= -i\hbar \psi \end{aligned} \quad (10.58)$$

よって

$$[p, x]\psi = -i\hbar \psi \quad (10.59)$$

ψ は任意だから

$$\boxed{[p, x] = -i\hbar} \quad (10.60)$$

これと明らかな関係

$$[x, x] = 0, \quad [p, p] = 0 \quad (10.61)$$

とを併せて、基本交換関係という。

10.3 固有値問題

ハミルトン演算子

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (10.62)$$

の固有値問題

$$H\Phi = E\Phi \quad (10.63)$$

を考える。線形代数の固有値問題と対比を表 10.1 に示した。

線形代数の固有値問題	量子力学の固有値問題
$Ax = ax$	$H\Phi = E\Phi$
A : 行列	H : ハミルトン演算子 (一般に微分演算子)
x : ベクトル	Φ : 関数 (ヒルベルト空間でのベクトル)
a : 固有値	E : エネルギー固有値

表 10.1 線形代数の固有値問題の比較

ここで、数学的な煩雑さがもっとも少なく、かつ物理的に興味がある例によって議論しておくのが適切である。

例 1. 1 次元の箱に閉じこめられた粒子

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ 0 & (0 \leq x \leq a) \\ \infty & (a < x) \end{cases}$$

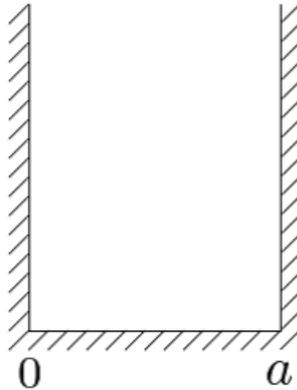


図 10.2 1次元の箱に閉じこめられた粒子

$0 \leq x \leq a$ の領域を考える. $H\Phi = E\Phi$ に $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ を代入.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} = E\phi \quad (10.64)$$

移項して, $\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \phi = 0$. 古典的な対応をみると. $H = p^2/2m \geq 0$ より運動エネルギー $E \geq 0$ でなければならない.

第2項の係数を, $k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$ とおく.

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + k^2\phi = 0 \quad (10.65)$$

一般解は, 容易に求められて,

$$\phi(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (10.66)$$

$x < 0, a < x$ については境界条件 (boundary condition) $\phi(0) = 0, \phi(a) = 0$ として考慮すればよい. 従って,

$$\begin{aligned} \phi(0) &= A \cos 0 + B \sin 0 = A = 0, \\ \phi(a) &= B \sin ka = 0 \end{aligned} \quad (10.67)$$

$\phi(x) \neq 0$ だから $B \neq 0$ で, $\sin ka = 0$. すなわち $ka = n\pi$ ($n = 1, 2, 3, \dots$).

$$k = \frac{n\pi}{a} \quad (10.68)$$

これは波数の量子化をあたえている. 固有値は, 従って, つぎのように与えられる:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (10.69)$$

かつ、対応する固有関数は

$$\phi_n(x) = B_n \sin \frac{n\pi}{a}x \quad (10.70)$$

B_n は規格化より求めることができる。固有関数を具体的にみておくと

$$\begin{aligned} n=1 \quad \phi_1(x) &= \sin \frac{\pi}{a}x, \\ n=2 \quad \phi_2(x) &= \sin \frac{2\pi}{a}x \end{aligned} \quad (10.71)$$

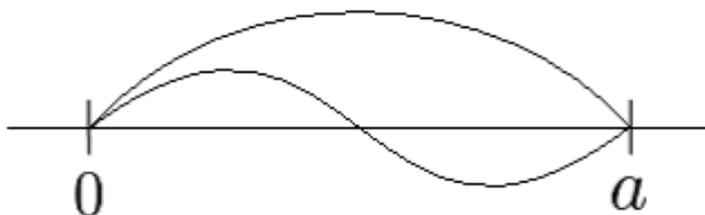


図 10.3 1次元の箱の中の粒子の波動関数 ($n=1, 2$)

このように、この問題は、まさに弦の固有振動を求める問題に対応する。境界条件; $\phi(0) = 0, \phi(a) = 0$ は、弦の両端を固定することに相当する。

■直交関数展開 量子力学の演算子

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (10.72)$$

と線形代数の演算子 (行列)

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (10.73)$$

との関係はどのようなものであろうか。固有関数 $\{\phi_n(x)\}$ ($n=1, 2, \dots, \infty$) の空間は、後の章でみるように、「無限次元ヒルベルト空間」における基底ベクトルの役割をする。

任意の規格化可能な波動関数 $\phi(x)$ は、 a_n を展開係数として、固有 $\phi_n(x)$ で展開できる。

$$\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x) \quad (10.74)$$

これは任意のベクトル \boldsymbol{x} の基底ベクトル $\{\boldsymbol{e}_n\}$ による展開

$$\boldsymbol{x} = \sum_{n=1}^N a_n \boldsymbol{e}_n \quad (10.75)$$

に相当する。ハミルトン演算子の固有関数として得られた $\{\phi_n(x)\}$ は、『直交関数系をなす』といわれる。ベクトルの言葉で言えば正規直交基底，すなわち内積

$$\boldsymbol{e}_n \cdot \boldsymbol{e}_m = \delta_{nm} = \begin{cases} 1 & (n = m) \\ 0 & (n \neq m) \end{cases} \quad (10.76)$$

先の例 $\phi_n(x) = B_n \sin(n\pi x/a)$ で正規直交性を確かめる。内積は

$$(\phi_n, \phi_m) \equiv \int_0^a \phi_n^*(x) \phi_m(x) dx \quad (10.77)$$

で定義する。 $n = m$ のとき

$$(\phi_n, \phi_n) = B_n^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} dx = \frac{a}{2} B_n^2 \quad (10.78)$$

したがって

$$B_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (10.79)$$

とすると $(\phi_n, \phi_n) = 1$ となって規格化されている。一方、 $n \neq m$ のときは

$$(\phi_n, \phi_m) = B_n B_m \int_0^a \sin \frac{n\pi}{a} \sin \frac{m\pi}{a} dx = 0 \quad (10.80)$$

となり直交している。したがって

$$(\phi_n, \phi_m) = \delta_{nm} \quad (10.81)$$

■期待値 期待値を固有関数による展開の観点から見直そう。ハミルトニアン期待値は

$$\langle H \rangle = \int \phi^*(x) H \phi(x) dx \quad (10.82)$$

であって、 $\phi(x)$ を H の固有関数 $\phi_n(x)$ で展開すると;

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int \phi^*(x) H \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x) dx \\ &= \int \phi^*(x) \sum_{n=1}^{\infty} a_n H \phi_n(x) dx \end{aligned} \quad (10.83)$$

となり, $H\phi_n = E_n\phi_n$ を用いると

$$\begin{aligned}\langle H \rangle &= \int \phi^*(x) \sum_{n=1}^{\infty} a_n E_n \phi_n(x) dx \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n E_n \int \phi^*(x) \phi_n(x) dx\end{aligned}\quad (10.84)$$

ここで,

$$\int \phi^*(x) \phi_n(x) dx = \int \sum_{m=1}^{\infty} a_m^* \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx$$

かつ,

$$\sum_{m=1}^{\infty} a_m^* \int \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = \sum_{m=1}^{\infty} a_m^* \delta_{mn} = a_n^*$$

に注意すると

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n |a_n|^2 \quad (10.85)$$

と表される.

$\phi(x)$ の規格化を固有関数展開の観点で見直すと (これはうへの計算で $H \rightarrow 1, E_n \rightarrow 1$ と置けばよいから)

$$\int \phi^*(x) \phi(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 = 1 \quad (10.86)$$

このことは, つまり, $\phi(x)$ が規格化されているとき,

$$a_n = \text{粒子が } \phi_n(x) \text{ の状態に見出される確率振幅} \quad (10.87)$$

という解釈がなされることを意味している.

以上でのべたことは, 具体的に箱に閉じ込められた粒子という具体的に構成できる固有関数系を用いたのであるが, 一般の固有関数系について一般化できる. ほとんど, うへの議論の繰り返しになるが, それについてふれておく.

$\{\phi_n(x)\}$ を演算子 A の固有関数で, それは規格直交系とする. すなわち

$$A\phi_n(x) = a_n\phi_n(x) \quad (10.88)$$

および

$$(\phi_n(x), \phi_m(x)) \equiv \int \phi_n^*(x) \phi_m(x) dx = \delta_{nm} = \begin{cases} 1 & (n = m) \\ 0 & (n \neq m) \end{cases} \quad (10.89)$$

このとき、規格化された任意の波動関数 $\phi(x)$ 、すなわち

$$\int \phi^*(x)\phi(x) = 1 \quad (10.90)$$

となる $\phi(x)$ は $\{\phi_n(x)\}$ で

$$\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) \quad (10.91)$$

と展開できる。演算子 A の期待値は

$$\langle A \rangle \equiv \int \phi^*(x)A\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |c_n|^2 \quad (10.92)$$

となる。また、 $\phi(x)$ の規格化は

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1 \quad (10.93)$$

を保証し、展開係数 c_n には

$$|c_n|^2 = \phi(x) \text{ に固有関数 } \phi_n(x) \text{ が“混合”している確率} \quad (10.94)$$

という解釈がなされる。

10.3.1 運動量演算子の固有関数

うへの議論はハミルトニアン固有値問題を考えたが、ここで運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ 自身の固有関数を調べておこう。それは、『連続固有値』の概念が具体的に登場するもつとも簡単な場合と考えられるからである。

つまり、固有値方程式: $\hat{p}\phi_p(x) = p\phi_p(x)$ を考える。左辺の \hat{p} は演算子、右辺の p は固有値である。演算子を格別に区別するために、帽子（ハット記号）をつけておく。

$$-i\hbar \frac{d\phi_p}{dx} = p\phi_p \quad (10.95)$$

と書き直すと、ただちに、

$$\phi_p(x) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) \quad (10.96)$$

ができる。これは平面波そのものである。物理的に明らかなように、固有値 p はすべての実数値をとる。直交関係は

$$\begin{aligned} (\phi_p, \phi_{p'}) &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_p^* \phi_{p'} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} c^* \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) c \exp\left(\frac{i}{\hbar} p'x\right) dx \\ &= |c|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (p' - p)x\right) dx \end{aligned} \quad (10.97)$$

ここで

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iax} dx = \delta(a) \quad (10.98)$$

より

$$(\phi_p, \phi_{p'}) = 2\pi |c|^2 \delta\left(\frac{p' - p}{\hbar}\right) \quad (10.99)$$

さらに、 $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$ に注意すると、

$$(\phi_p, \phi_{p'}) = 2\pi \hbar |c|^2 \delta(p' - p) \quad (10.100)$$

$$= \begin{cases} 0 & (p' \neq p) \\ \infty & (p' = p) \end{cases} \quad (10.101)$$

$\int |\phi_p|^2 dx = \infty$ であり、通常の意味での規格化はできない。そこで $2\pi \hbar c^2 = 1$ となるように、つまり、 $c = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}}$ のように c を選ぶと

$$(\phi_p, \phi_{p'}) = \delta(p' - p) \quad (10.102)$$

となる。すなわち、

$$\phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) \quad (10.103)$$

これは、 δ 関数的に規格化された運動量の固有関数とよばれるべきものである。

固有値にはこのような**連続固有値**と、先に見たような整数 $n = 1, 2, \dots$ で番号づけられる**離散固有値**とがある。

連続固有値の場合には、関数の展開は和 (\sum) のかわりに積分 (\int) になる。また番号 n の代わりに固有値 p そのものを使う。すなわち波動関数の $\phi_p(x)$ による展開は、展開係数を $\phi(p)$ として

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) \phi_p(x) dp \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px} dp \end{aligned} \quad (10.104)$$

となるが、これはフーリエ変換に他ならない。フーリエ逆変換

$$\begin{aligned}\phi(p) &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \phi_p^*(x) dx\end{aligned}\quad (10.105)$$

を用いると $\psi(x)$ を $\phi_p(x)$ で展開した係数 $\phi(p)$ を求められる。この関係は離散固有値の場合の

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \phi_n^*(x) dx \quad (10.106)$$

に相当する。

離散固有値の場合の c_n の解釈より、連続固有値の場合の $\phi(p)$ の解釈は次のようになる。

$$|\phi(p)|^2 dp = \psi(x) \text{ の中に } (p, p+dp) \text{ の値を持つ運動量固有関数が“混合する”確率} \quad (10.107)$$

ここで、『型のごとく』3次元に拡張しておこう。 $\mathbf{x} = (x, y, z) = (x_1, x_2, x_3)$, $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$ と定義すると、

$$\hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (10.108)$$

固有値方程式は、

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \phi_{\mathbf{p}} = p_i \phi_{\mathbf{p}} \quad (10.109)$$

となるので、各成分にたいしてそれぞれ独立に解くことにより、

$$\begin{aligned}\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}p_1x_1\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}p_2x_2\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}p_3x_3\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_1x_1 + p_2x_2 + p_3x_3)\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right)\end{aligned}\quad (10.110)$$

が得られる。位相を一定とした $\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} = \text{Const.}$ は、3次元空間での平面を表すことに注意すると、これは3次元の平面波を表す。この固有関数による展開式は

$$\boxed{\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \iiint \phi(p_1, p_2, p_3) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_1x_1 + p_2x_2 + p_3x_3)\right) dp_1 dp_2 dp_3} \quad (10.111)$$

第 11 章

ポテンシャル問題その 1 (1 次元の場合)

この章と次の章では、シュレーディンガー方程式をポテンシャル問題に対して適用して解析的な解が求められる場合を考察する。量子力学のもっとも典型的な問題である。具体的には、1 個の粒子がポテンシャルの中で運動するという古典力学の質点問題を量子力学に適用したものとみられる。この章では、もっぱら一次元の場合をあつかう。

11.1 初等関数で解ける問題

階段形ポテンシャル

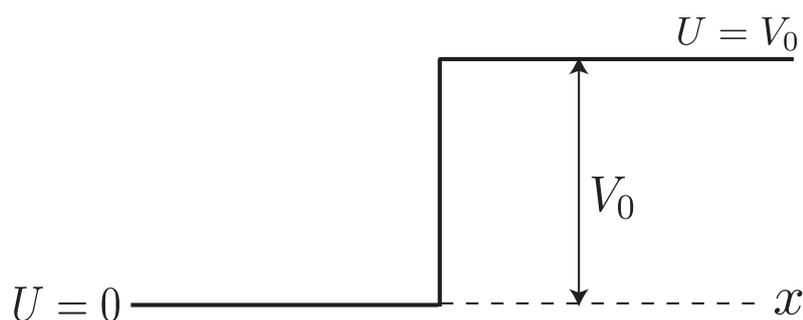


図 11.1 ステップポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} V_0 (> 0) & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases} \quad (11.1)$$

Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (11.2)$$

を $x \geq 0$, $x < 0$ の領域ごとに書くと

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (x < 0) \quad (11.3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \quad (x \geq 0) \quad (11.4)$$

古典力学的考察.

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) = E \quad (11.5)$$

より

$$p^2 = 2m(E - V(x)) \geq 0 \quad (11.6)$$

よって

$$E \geq V(x) \quad (11.7)$$

この不等式より得られる x の範囲が可動区間である. $x \geq 0$ のとき

$$p^2 = 2m(E - V_0) \geq 0 \quad (11.8)$$

$x < 0$ のとき

$$p^2 = 2mE \geq 0 \quad (11.9)$$

E の値によって 2 つの場合に分けられる.

- (1) $E \geq V_0$ の場合, 可動区間は $-\infty < x < \infty$
- (2) $0 < E < V_0$ の場合, 可動区間は $x < 0$

■(1) $E \geq V_0$ の場合

$$\frac{2mE}{\hbar^2} \equiv k^2, \quad \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \equiv q^2 \quad (11.10)$$

とおく.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi(x < 0), \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -q^2\psi \quad (x \geq 0) \quad (11.11)$$

一般解は

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0) \\ Ce^{iqx} + De^{-iqx} & (x \geq 0) \end{cases} \quad (11.12)$$

$x = -\infty$ から粒子を入射させる状況を考える。この場合には、

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & (x < 0) \\ Te^{iqx} & (x \geq 0) \end{cases} \quad (11.13)$$

となる。 e^{ikx} が入射波、 Re^{-ikx} が反射波、 Te^{iqx} が透過波である。 R, T は複素数。

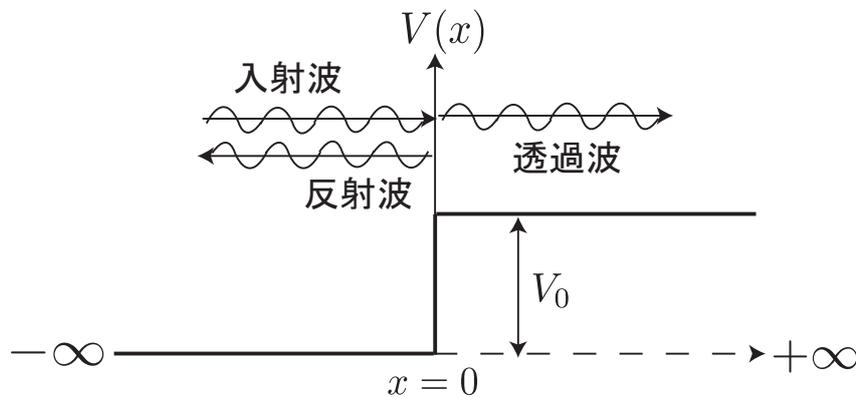


図 11.2 ステップポテンシャルに $-\infty$ から粒子を入射させる

確率の流れをみる。

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) \quad (11.14)$$

において、

$$\frac{d\psi}{dx} = \begin{cases} ik(e^{ikx} - Re^{-ikx}) & (x < 0) \\ iqTe^{iqx} & (x \geq 0) \end{cases} \quad (11.15)$$

であるから、代入して計算すれば

$$j = \begin{cases} \frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2) & (x < 0) \\ \frac{\hbar q}{m} |T|^2 & (x \geq 0) \end{cases} \quad (11.16)$$

$$\hbar k/m \equiv v_-, \quad \hbar q/m \equiv v_+ \quad (11.17)$$

はおのおの $x < 0, x \geq 0$ における粒子の速度と考えられるから、これは単位時間、単位面積あたり通過する粒子の数がおのおの

$$j_1 = v_-(1 - |R|^2), \quad j_2 = v_+|T|^2 \quad (11.18)$$

ということである。両者は等しく

$$\frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) \stackrel{?}{=} \frac{\hbar q}{m}|T|^2 \quad (11.19)$$

となることが期待されるが、実際そうになっているか調べよう。 R, T を求めればよいが、これらは接続条件より求められる。

$$\psi_1(x) \equiv e^{ikx} + Re^{-ikx} \quad (x < 0) \quad (11.20)$$

$$\psi_2(x) \equiv Te^{iqx} \quad (x \geq 0) \quad (11.21)$$

として、接続条件は、

(a) $x = 0$ において連続であること

$$\boxed{\psi_1(0) = \psi_2(0)} \quad (11.22)$$

(b) $x = 0$ においてなめらかにつながる

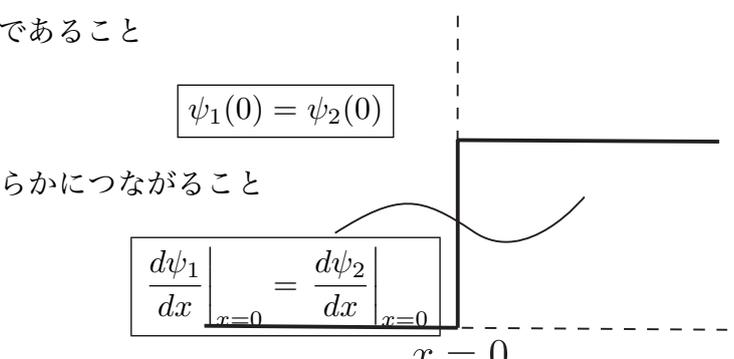
$$\boxed{\left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=0}} \quad (11.23)$$


図 11.3 接続条件

(a) より

$$1 + R = T \quad (11.24)$$

(b) より

$$ik(1 - R) = iqT \rightarrow 1 - R = \frac{q}{k}T \quad (11.25)$$

これらより

$$T = \frac{2k}{k + q}, \quad R = \frac{k - q}{k + q} \quad (11.26)$$

これは確かに

$$\frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m}|T|^2 \quad (11.27)$$

を満たしている.

接続条件において, なめらかに接続することの根拠を示しておく.

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{a+\epsilon} - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{a-\epsilon} = \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx \quad (11.28)$$

と書けることに注意し, Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (11.29)$$

より

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\psi \quad (11.30)$$

であるから,

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{a+\epsilon} - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{a-\epsilon} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} (V(x) - E)\psi(x) dx \quad (11.31)$$

$x = a$ で $V(x)$ が有限であれば, 微小な ϵ に対しては

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{a+\epsilon} - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{a-\epsilon} \simeq \frac{2m}{\hbar^2} 2\epsilon(V(a) - E)\psi(a) \quad (11.32)$$

となるから, $\epsilon \rightarrow 0$ の極限で

$$\left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_a - \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_a \rightarrow 0 \quad (11.33)$$

となる. なお例外的な問題として,

$$V(x) = V_0\delta(x) \quad (11.34)$$

のような有限でないポテンシャルに対しては, 同様の考察より

$$\left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_a - \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_a = \frac{2m}{\hbar^2} V_0\psi(0) \quad (11.35)$$

となる.

■(2) $E < V_0$ の場合

$$q^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} < 0 \quad (11.36)$$

であるから, $q \equiv i\kappa$ とおくと透過波は

$$e^{iqx} = e^{-\kappa x} \quad (11.37)$$

は指数的に減衰する関数となる. すなわち波動関数は

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & (x < 0) \\ Te^{-\kappa x} & (x \geq 0) \end{cases} \quad (11.38)$$

となり, $x = 0$ における接続条件より

$$1 + R = T, \quad ik(1 - R) = -\kappa T \quad \rightarrow \quad 1 - R = i\frac{\kappa}{k}T \quad (11.39)$$

したがって

$$T = \frac{2k}{k + i\kappa}, \quad R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \quad (11.40)$$

$$|T|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + \kappa^2} \quad (11.41)$$

となるが, これは透過確率というよりは, “しみこむ” 確率というべきだろう. $x < 0$ での流れはまた

$$|R|^2 = 1 \quad (11.42)$$

より

$$j = \frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) = 0 \quad (x < 0) \quad (11.43)$$

これは正の方向に向かう粒子と負の方向に向かう粒子が同数だからである. $x > 0$ における流れは

$$\frac{d\psi}{dx} = -\kappa\psi \quad (x > 0) \quad (11.44)$$

より

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \frac{d\psi^*}{dx} \psi \right) = 0 \quad (11.45)$$

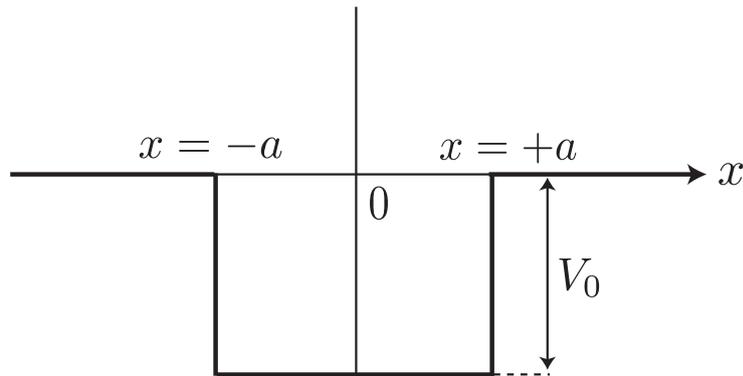


図 11.4 箱形ポテンシャル

11.1.1 箱形ポテンシャル

箱形ポテンシャル. $V_0 > 0$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| \geq a) \\ -V_0 & (|x| < a) \end{cases} \quad (11.46)$$

■(1) $E \geq 0$ の場合 Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (|x| \geq a), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi \quad (|x| < a) \quad (11.47)$$

より

$$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad q^2 \equiv \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \quad (11.48)$$

とおくと

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad (|x| \geq a), \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -q^2\psi \quad (|x| < a) \quad (11.49)$$

$x = -\infty$ から入射するものとする

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) \equiv e^{ikx} + Re^{-ikx} & (x \leq -a) \\ \psi_2(x) \equiv Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & (|x| < a) \\ \psi_3(x) \equiv Te^{ikx} & (x \geq a) \end{cases} \quad (11.50)$$

(a) $x = -a$ での接続条件. $\psi_1(-a) = \psi_2(-a)$ より

$$e^{-ikx} + Re^{ika} = Ae^{-iqa} + Be^{iqa} \quad (11.51)$$

$d\psi_1/dx(-a) = d\psi_2/dx(-a)$ より

$$ik(e^{-ika} - Re^{ika}) = iq(Ae^{-iqa} - Be^{iqa}) \quad (11.52)$$

(b) $x = a$ での接続条件, $\psi_2(a) = \psi_3(a)$ より

$$Ae^{iqa} + Be^{-iqa} = Te^{ika} \quad (11.53)$$

$d\psi_1/dx(-a) = d\psi_2/dx(-a)$ より

$$iq(Ae^{iqa} - Be^{-iqa}) = ikTe^{ika} \quad (11.54)$$

これらより

$$R = ie^{-2ika} \frac{(q^2 - k^2) \sin 2qa}{2kq \cos 2qa - i(q^2 + k^2) \sin 2qa} \quad (11.55)$$

$$T = e^{-2ika} \frac{2kq}{2kq \cos 2qa - i(q^2 + k^2) \sin 2qa} \quad (11.56)$$

反射係数 R の分子が 0 になるところは $\sin 2qa = 0$ より

$$qa = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (11.57)$$

$q^2 \equiv 2m(E + V_0)/\hbar^2$ であつたからこれは

$$E = -V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 \quad (11.58)$$

Ramsauer-Townsend 効果.

$E \simeq 0$ のとき, 低エネルギーの散乱現象, $qa = n\pi$. Fabry-Perot 干渉計, ポテンシャルの存在は屈折率の変化に対応, 光の屈折.

図 11.5 低エネルギー散乱

■(2) $E < 0$ の場合 この場合は束縛状態 (bound state) でエネルギー準位ができる, つまり E が量子化される.

ポテンシャルは反転対称性 $V(x) = V(-x)$ を持つ, ここで定理を一つ.

■定理 ポテンシャルが

$$V(x) = V(-x) \quad (11.59)$$

のときエネルギー固有関数 $\psi(x)$ は

$$\text{偶関数 } \psi(-x) = \psi(x), \quad \text{奇関数 } \psi(-x) = -\psi(x) \quad (11.60)$$

の2つに分類される.

まずパリティ演算子 P を導入しておくくと便利である. パリティ演算子の定義は

$$Pf(x) \equiv f(-x) \quad (11.61)$$

その固有値, 固有関数を $\pi, \psi_\pi(x)$ とする. 固有方程式

$$P\psi_\pi(x) = \pi\psi_\pi(x) \quad (11.62)$$

に P をもう一度作用させると

$$P^2\psi_\pi(x) = \pi P\psi_\pi(x) \quad (11.63)$$

$$= \pi^2\psi_\pi(x) \quad (11.64)$$

一方, P の定義より $P^2f(x) = Pf(-x) = f(x)$ だから恒等的に $P^2 = 1$ で,

$$\psi_\pi(x) = \pi^2\psi_\pi(x) \quad (11.65)$$

すなわち $\pi^2 = 1$ であり

$$\pi = \pm 1 \quad (11.66)$$

$\pi = +1$ なるパリティ固有関数 $\psi_+(x)$ は

$$P\psi_+(x) = \psi_+(-x) = +\psi_+(x) \quad (11.67)$$

より偶関数, $\pi = -1$ なるパリティ固有関数 $\psi_-(x)$ は

$$P\psi_-(x) = \psi_-(-x) = -\psi_-(x) \quad (11.68)$$

より奇関数である. そこで偶関数, 奇関数のことを各々偶パリティ, 奇パリティともいう.

定理の証明に戻る. Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (11.69)$$

において $x \rightarrow -x$ と置き換えると

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(-x)}{d(-x)^2} + V(-x)\psi(-x) = E\psi(-x) \quad (11.70)$$

$V(-x) = V(x)$ ならば

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(-x)}{dx^2} + V(x)\psi(-x) = E\psi(-x) \quad (11.71)$$

つまり $\psi(-x)$ は $\psi(x)$ と同じ固有値 E を持つ固有関数である。ところが実は 1 次元では同一の固有値 E に属する固有関数は 1 つのみであることが証明できる。よって

$$\psi(-x) = c\psi(x) \quad (11.72)$$

左辺は $P\psi(x)$ と書けるから, c はパリティ演算子の固有値で, $c = \pm 1$ すなわち

$$\psi(-x) = \pm\psi(x) \quad (11.73)$$

でなければならない (証明終わり).

箱形ポテンシャルの束縛問題に戻る. $E < 0$ で, Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (|x| \geq a), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi \quad (|x| < a) \quad (11.74)$$

において

$$\kappa^2 \equiv \frac{-2mE}{\hbar^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \quad q^2 \equiv \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} = \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} \quad (11.75)$$

とおくと

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi \quad (|x| \geq a), \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -q^2\psi \quad (|x| < a) \quad (11.76)$$

境界条件として, $\psi(\pm\infty) = 0$ を考慮すると,

(i) 偶の解

$$\psi(x) = \begin{cases} ce^{\kappa x} & (x \leq -a) \\ A \cos qx & (|x| < a) \\ ce^{-\kappa x} & (x \geq a) \end{cases} \quad (11.77)$$

(ii) 奇の解

$$\psi(x) = \begin{cases} ce^{\kappa x} & (x \leq -a) \\ A \sin qx & (|x| < a) \\ -ce^{-\kappa x} & (x \geq a) \end{cases} \quad (11.78)$$

が得られる. 各々の場合に接続条件を用いて, エネルギー固有値が求まる. 対称性より接続条件として $x = a$ だけ考えれば $x = -a$ も自動的に接続される.

■(i) 偶関数解 (even parity) 接続条件より

$$A \cos qa = ce^{-\kappa a}, \quad -qA \sin qa = -\kappa ce^{-\kappa a} \quad (11.79)$$

したがって

$$\kappa = q \tan qa \quad (11.80)$$

κ, q は独立ではなく

$$\kappa^2 + q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (11.81)$$

の関係にあり, κ を消去し,

$$y \equiv qa, \quad \lambda \equiv \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \quad (11.82)$$

とおくと

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = \tan y \quad (11.83)$$

すなわち左辺, 右辺のグラフの交点より E の固有値が定まる. λ が大きくなると交点の数が増加するが, これはポテンシャルの深さ V_0 を大きくすると束縛状態の数が増えることを意味する.

$$|E| = V_0 - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \quad (11.84)$$

また $V_0 (> 0)$ がいかなる値でも交点は存在するから, ポテンシャルの深さにかかわらず, 束縛状態が一つは存在する.

■(ii) 奇関数解 (odd parity) 接続条件より

$$A \sin qa = -ce^{-\kappa a}, \quad qA \cos qa = \kappa ce^{-\kappa a} \quad (11.85)$$

したがって

$$\kappa = -q \cot qa \quad (11.86)$$

偶の場合同様,

$$\kappa^2 + q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (11.87)$$

を用いて κ を消去し,

$$y \equiv qa, \quad \lambda \equiv \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \quad (11.88)$$

とおくと

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = -\cot y \quad (11.89)$$

左辺, 右辺のグラフの交点より E の固有値が定まる. 注意すべきは

$$\lambda < \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \quad (11.90)$$

のとき交点は存在しない. すなわち

$$V_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\pi m a^2} \quad (11.91)$$

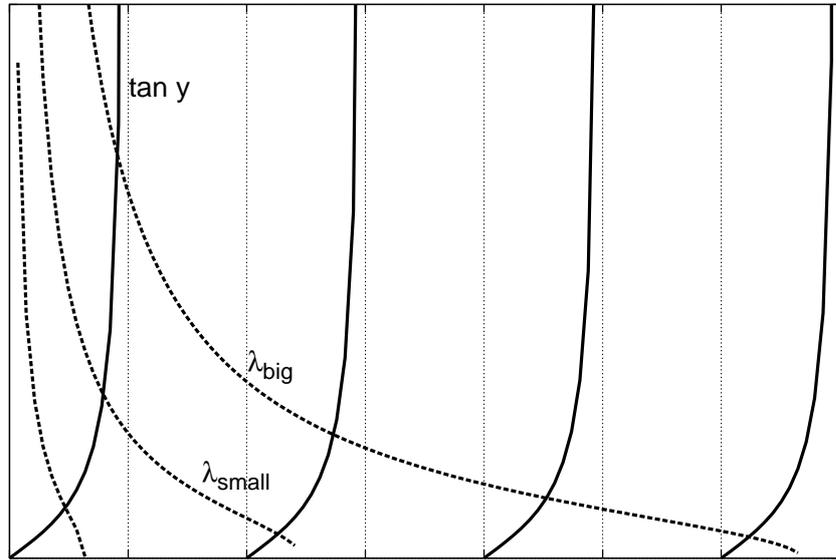
のとき奇パリティの束縛状態は存在しない.

■問題 対称なポテンシャルの基底状態 (最低エネルギー固有状態) は偶パリティであると予想される. 何故か?

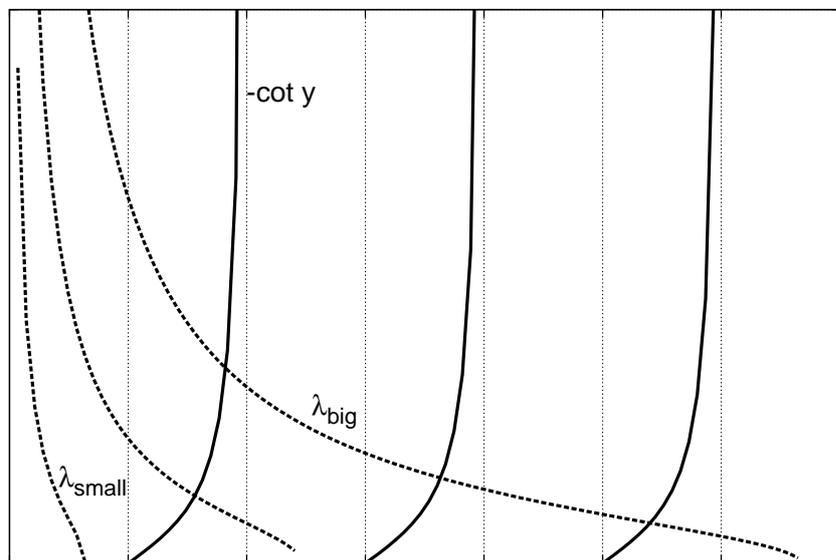
ヒント:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (11.92)$$

の期待値を計算せよ.



0 図 11.16 節形式 (4) の本質的能 (偶ノリニ解)



0 図 11.17 節形式 (4) の本質的能 (奇ノリニ解)

11.2 調和振動子

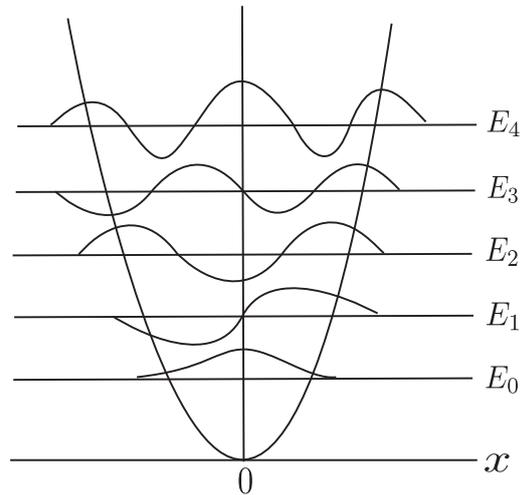


図 11.8 調和振動子

調和振動子ポテンシャル

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 \quad (11.93)$$

に対する Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi = E\psi \quad (11.94)$$

これを

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 \right) \psi = 0 \quad (11.95)$$

として変数のスケール変換

$$y \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \quad \epsilon \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (11.96)$$

を行えば

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + (\epsilon - y^2)\psi = 0 \quad (11.97)$$

となる。

$|y| \rightarrow \infty$ での振る舞いを見るために ϵ を無視すると

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} \simeq y^2\psi \quad (|y| \rightarrow \infty) \quad (11.98)$$

その近似解として

$$\psi_0 = \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \quad (11.99)$$

なるガウス型関数を仮定すると,

$$\frac{d\psi_0}{dy} = -y\psi_0 \quad (11.100)$$

$$\frac{d^2\psi_0}{dy^2} = -\psi_0 + y^2\psi_0 \quad (11.101)$$

$$\simeq y^2\psi_0 \quad (|y| \rightarrow \infty) \quad (11.102)$$

より $|y| \rightarrow \infty$ において近似解となっている。(近似しなければ

$$\frac{d^2\psi_0}{dy^2} + (1 - y^2)\psi_0 = 0 \quad (11.103)$$

であるから, ψ_0 は $\epsilon = 1$ とした場合の厳密解となっている.)

解の形として

$$\psi(y) = h(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \quad (11.104)$$

を仮定. $\psi(y)$ についての微分方程式を $h(y)$ についての微分方程式に変換する.

$$\frac{d\psi}{dy} = \left(\frac{dh}{dy} - yh\right) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \quad (11.105)$$

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} = \left(\frac{d^2h}{dy^2} - 2y\frac{dh}{dy} + (y^2 - 1)h\right) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \quad (11.106)$$

より

$$\frac{d^2h}{dy^2} - 2y\frac{dh}{dy} + (\epsilon - y^2)h = 0 \quad (11.107)$$

これはエルミート (Hermite) の微分方程式.

べき級数解を求める.

$$h(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k \quad (11.108)$$

およびその微分,

$$\frac{dh}{dy} = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k y^{k-1} \quad (11.109)$$

$$\frac{d^2h}{dy^2} = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k y^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2} y^k \quad (11.110)$$

これらをエルミートの微分方程式に代入すると

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(k+2)(k+1) a_{k+2} - (2k+1-\epsilon) a_k] y^k = 0 \quad (11.111)$$

よって係数 a_k の漸化式

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\epsilon}{(k+2)(k+1)} a_k \quad (11.112)$$

を得る. 一つ飛ばしで決まる. 2 階微分方程式だから積分定数は 2 個. ポテンシャルが対称だから固有関数は偶パリティ解と奇パリティ解に分けられる.

$$h(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k \quad (11.113)$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k} y^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k+1} y^{2k+1} \quad (11.114)$$

無限遠での振る舞いの因子 $\psi_0 = \exp(-y^2/2)$ は偶だから, a_0, a_2, a_4, \dots の系列が偶パリティ. a_1, a_3, a_5, \dots の系列が奇パリティ.

もし a_k が有限項で切れないとすると, $k \rightarrow \infty$ で

$$a_{k+2} \simeq \frac{2k}{k^2} a_k = \frac{2}{k} a_k \quad (11.115)$$

より, たとえば偶パリティ系列は

$$a_{2k} \sim \frac{2^k}{k!} a_0 \quad (11.116)$$

となる (本当か??). このとき偶パリティ解は

$$h = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k} y^{2k} \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k}{k!} a_0 y^{2k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2y^2)^k}{k!} a_0 = a_0 e^{2y^2} \quad (11.117)$$

よって

$$\psi(y) = h(y)\psi_0(y) \quad (11.118)$$

$$\sim a_0 e^{2y^2} e^{-\frac{y^2}{2}} = a_0 e^{\frac{3}{2}y^2} \quad (11.119)$$

となるが、これは $|y| \rightarrow \infty$ で発散するから不適である。すなわち a_k の系列は有限で終わる必要がある。 a_k が $k = n$ で終わり $a_{n+2} = 0$ となるためには、

$$\epsilon = 2n + 1 \quad (11.120)$$

でなければならない。よってエネルギー固有値は

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (11.121)$$

と定まる。また $h(y)$ は n 次多項式となるが、これを n 次のエルミート多項式といい $H_n(y)$ と表す。

$$H_0 = a, \quad H_1 = a_1 y, \quad H_2 = a_0 + a_2 y^2, \quad H_3 = a_1 y + a_3 y^3, \dots \quad (11.122)$$

係数は漸化式において $\epsilon = 2n + 1$ とした

$$a_{k+2} = \frac{2(k-n)}{(k+2)(k+1)} a_k \quad (11.123)$$

より決まる。

まとめると、調和振動子の固有値は

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (11.124)$$

固有関数は

$$\psi_n(y) = H_n(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \quad (11.125)$$

ただし H_n は n 次のエルミート多項式。

特に $n = 0$ の基底状態では、

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (11.126)$$

となるが、これをゼロ点エネルギーという。

エルミート多項式の母関数 (generating function)

$$T(y, t) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(y)}{n!} t^n = \exp(2yt - t^2) \quad (11.127)$$

をエルミート多項式の母関数という。

エルミート多項式はエルミートの微分方程式で $\epsilon = 2n + 1$ とした場合の解である.

$$\frac{d^2 H_n}{dy^2} - 2y \frac{dH_n}{dy} + 2nH_n = 0 \quad (11.128)$$

母関数の展開係数は

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad (11.129)$$

となる.

調和振動子の固有関数

$$\psi_n(y) = H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \quad (11.130)$$

は直交関数系をなす.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(y) \psi_m(y) dy = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{n,m} \quad (11.131)$$

エルミート多項式で書けば

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(y) H_m(y) e^{-y^2} dy = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{n,m} \quad (11.132)$$

$n = m$ のとき

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(y)|^2 dy = 2^n n! \sqrt{\pi} \quad (11.133)$$

従って, 規格化は

$$\widetilde{\psi}_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \psi_n(y) \quad (11.134)$$

とすればよい.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\widetilde{\psi}_n(y)|^2 dy = 1 \quad (11.135)$$

母関数を用いた直交関係の証明.

$$e^{2yt-t^2} = \sum_n \frac{H_n(y)}{n!} t^n \quad (11.136)$$

$$e^{2ys-s^2} = \sum_m \frac{H_m(y)}{m!} s^m \quad (11.137)$$

の積を取り,

$$e^{2y(t+s)-(t^2+s^2)} = \sum_n \sum_m \frac{H_n(y) H_m(y)}{n! m!} t^n s^m \quad (11.138)$$

両辺に e^{-y^2} をかけて積分すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{2y(t+s)-(t^2+s^2)-y^2} dy = \sum_n \sum_m \frac{1}{n!m!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(y)H_m(y)dy t^n s^m \quad (11.139)$$

左辺指数部は

$$2y(t+s) - (t^2 + s^2) - y^2 = -\{y - (t+s)\}^2 + 2ts \quad (11.140)$$

となるから、左辺は

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{2y(t+s)-(t^2+s^2)-y^2} dy = e^{2ts} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\{y-(t+s)\}^2} dy = \sqrt{\pi}e^{2ts} \quad (11.141)$$

よって

$$\sqrt{\pi}e^{2ts} = \sum_n \sum_m \frac{1}{n!m!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(y)H_m(y)dy t^n s^m \quad (11.142)$$

e^{2ts} をテイラー展開すると

$$e^{2ts} = \sum_n \frac{(2ts)^n}{n!} \quad (11.143)$$

$$= \sum_n \frac{2^n t^n s^n}{n!} \quad (11.144)$$

$$= \sum_n \sum_m \frac{2^n t^n s^m \delta_{n,m}}{n!} \quad (11.145)$$

したがって

$$\sqrt{\pi} \sum_n \sum_m \frac{2^n t^n s^m \delta_{n,m}}{n!} = \sum_n \sum_m \frac{1}{n!m!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(y)H_m(y)dy t^n s^m \quad (11.146)$$

$t^n s^m$ の係数を拾えば

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(y)H_m(y)dy = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{n,m} \quad (11.147)$$

第 12 章

ポテンシャル問題その 2 (3次元の場合)

前の章に続いて, この章では 3 次元のポテンシャル問題, とくに, 中心力場のなかでの粒子に対するシュレーディンガー方程式を扱う.

12.1 3次元中心力

12.1.1 極座標表示

角度 θ, φ によらず距離 $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ だけに依存するポテンシャル $V(r)$ から導かれる力は中心力である.

$$\mathbf{F} = -\nabla V(r) = -\frac{dV}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (12.1)$$

中心力は角運動量保存則を導く. 角運動量保存則は古典的には面積速度一定を意味する.

中心力ポテンシャルのもとでの角運動量保存則は量子論では現れるか. 中心力ポテンシャルの元での 3 次元 Schrödinger 方程式は,

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi = E\psi \quad (12.2)$$

となる. 極座標 (r, θ, φ)

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad (12.3)$$

を用いてラプラシアンを書き直すと, つぎのように書ける:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Lambda(\theta, \varphi) \quad (12.4)$$

ただし

$$\Lambda(\theta, \varphi) \equiv \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (12.5)$$

■**変数分離** 演算子 Λ の意味をみってみる. これは『軌道角運動量』の大きさの2乗をあたえることがわかる. いきなり角運動量が出てくるのは唐突であるが, 詳細は後の章にまわすことにして, ここで軌道角運動量の演算子の定義だけ与えておく. それは, 古典力学における定義において, 運動量を微分演算子におきかえたもので与えられる:

$$\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{r} \times (-i\hbar \nabla) \quad (12.6)$$

より

$$l_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right),$$

(のこりの成分はサイクリックにとる). そして交換関係は,

$$[l_x, l_y] = l_x l_y - l_y l_x = i\hbar l_z$$

(のこりの交換関係はサイクリックにとる) となって l_x, l_y, l_z は互いに非可換である. また角運動量の大きさは

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 = -\hbar^2 \Lambda(\theta, \varphi) \quad (12.7)$$

となることがわかる. つまり, $\Lambda(\theta, \varphi)$ は実質的に角運動量の大きさ2乗であった.

Schrödinger 方程式をラプラシアンを極座標で書いて

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Lambda(\theta, \varphi) \right] \psi(r, \theta, \varphi) + V(r) \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi) \quad (12.8)$$

ここで, Λ の代わりに l^2 で表せば

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{2mr^2} l^2 \psi + V(r) \psi = E \psi \quad (12.9)$$

と書ける. 変数分離解

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (12.10)$$

を仮定すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) Y + \frac{R}{2mr^2} l^2 Y + V(r) R Y = E R Y \quad (12.11)$$

両辺を RY で割ると

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2 R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{2mr^2 Y} \mathbf{l}^2 Y + V(r) = E \quad (12.12)$$

右辺を移項して $2mr^2$ を両辺にかけると

$$\underbrace{2mr^2 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2 R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + V(r) - E \right]}_{r \text{ のみ}} + \underbrace{\frac{1}{Y} \mathbf{l}^2 Y}_{\theta, \varphi \text{ のみ}} = 0 \quad (12.13)$$

第1項と第2項は大きさ等しく逆符号の定数値関数であり、これを便宜上 $l(l+1)\hbar^2$ とおくと

$$\frac{1}{Y} \mathbf{l}^2 Y = l(l+1)\hbar^2 \quad (12.14)$$

$$2mr^2 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2 R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + V(r) - E \right] = -l(l+1)\hbar^2 \quad (12.15)$$

Y についての微分方程式

$$\mathbf{l}^2 Y = l(l+1)\hbar^2 Y \quad (12.16)$$

は \mathbf{l}^2 についての固有方程式であり、その固有関数は球面調和関数（球関数）といい $Y_{l,m}$ と書く。固有値における l は $l = 0, 1, 2, \dots$ の値をとる。 Λ を用いて書けば

$$\Lambda(\theta, \varphi) Y_{l,m} = -l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m} \quad (12.17)$$

$Y_{l,m}$ は角運動量の z 成分

$$l_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (12.18)$$

の固有関数でもあり、固有値は $m\hbar$ 、すなわち

$$l_z Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m} \quad (12.19)$$

を満たす。固有値における m は

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots, +l-2, +l-1, +l \quad (12.20)$$

の値をとる。このように、中心力場中の波動関数の角度部分は球面調和関数で表され、ポテンシャル $V(r)$ の形にはよらない。

一方、 R についての微分方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R = ER \quad (12.21)$$

第1項は

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{1}{r^2} \left(2r \frac{dR}{dr} + r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} \right) = \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{d^2 R}{dr^2} \quad (12.22)$$

と変形できるから,

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R = 0 \quad (12.23)$$

このままでは1次元の Schrödinger 方程式とは似ていないが, 次のような変換をすると1次元 Schrödinger 方程式の形になる.

$$u(r) \equiv rR(r) \quad (12.24)$$

実際,

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{1}{r} \frac{d^2 u}{dr^2} \quad (12.25)$$

であるから,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] u = Eu \quad (12.26)$$

ここで, $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ の項は遠心力のポテンシャルで, 本義のポテンシャルと合わせたもの

$$V_{\text{eff}}(r) \equiv V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad (12.27)$$

を有効ポテンシャルという.

12.2 水素原子

クーロン引力ポテンシャル

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \quad (12.28)$$

に対するエネルギー固有関数を求める.

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R = 0 \quad (12.29)$$

束縛状態は古典的には $E < 0$ の楕円軌道に対応する.

変数のスケールを変換する.

$$\rho = \left(\frac{8m|E|}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} r, \quad \lambda = \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{m}{2|E|} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (12.30)$$

とすると

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right) R = 0 \quad (12.31)$$

$\rho \rightarrow \infty$ での振る舞いを見ると

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R \simeq 0 \quad (12.32)$$

となるから, $R(\rho) \simeq e^{\pm \frac{\rho}{2}}$ ($\rho \rightarrow \infty$) のように振るまう. ここで, $e^{+\frac{\rho}{2}}$ は発散するから捨てて, $R(\rho)$ を

$$R(\rho) = G(\rho)e^{-\frac{\rho}{2}} \quad (12.33)$$

とおく. $G(\rho)$ のみたす微分方程式は

$$\frac{d^2 G}{d\rho^2} - \left(1 - \frac{2}{\rho} \right) \frac{dG}{d\rho} + \left[\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] G = 0 \quad (12.34)$$

$\rho \sim 0$ 付近の振る舞いは

$$\frac{d^2 G}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dG}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} G \simeq 0 \quad (12.35)$$

となるから, $G(\rho) \sim \rho^l$ であれば

$$\frac{2}{\rho} \frac{dG}{d\rho} \sim 2l\rho^{l-2}, \quad \frac{d^2 G}{d\rho^2} \sim l(l-1)\rho^{l-2} \quad (12.36)$$

であるから満たされる. そこで

$$G(\rho) = \rho^l H(\rho) \quad (12.37)$$

とおき, $G(\rho)$ についての微分方程式を $H(\rho)$ についての微分方程式に変換すれば

$$\frac{d^2 H}{d\rho^2} + \left(\frac{2l+2}{\rho} - 1 \right) \frac{dH}{d\rho} + \left(\frac{\lambda - l - 1}{\rho} \right) H = 0 \quad (12.38)$$

ここでべき級数解

$$H(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (12.39)$$

を仮定する. 代入すれば

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{ (k+1)(k+2l+2)a_{k+1} + (\lambda - k - l - 1)a_k \} \rho^{k-1} = 0 \quad (12.40)$$

となり漸化式

$$a_{k+1} = \frac{k+l+1-\lambda}{(k+1)(k+2l+2)} a_k \quad (12.41)$$

を得る. a_k が有限で切れずに無限に続くと仮定すると $k \rightarrow \infty$ で

$$a_{k+1} \simeq \frac{k}{k^2} a_k = \frac{a_k}{k} \quad (12.42)$$

すなわち

$$a_k \simeq \frac{a_0}{k!} \quad (12.43)$$

このとき

$$H(\rho) \simeq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\rho^k}{k!} a_0 = a_0 e^\rho \quad (12.44)$$

となるから

$$R(r) = G(\rho) e^{-\frac{\rho}{2}} = H(\rho) \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} \simeq \rho^l e^{\frac{\rho}{2}} \quad (12.45)$$

となって $\rho \rightarrow \infty$ で発散するから不適である. ゆえに a_k は有限のところまで終わらねばならない. $k = n_r$ を最終項とすると, $n_r + l + 1 - \lambda = 0$ であれば $a_{n_r+1} = 0$ となって $H(\rho)$ は n_r 次の多項式となって, 固有値は

$$\lambda = n_r + l + 1 \quad (12.46)$$

より定まる. 主量子数 n を

$$n \equiv n_r + l + 1 \quad (12.47)$$

で定義すると固有値の式は, $\lambda = n$ と書ける. つまり,

$$\lambda = \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{m}{2|E|} \right)^{\frac{1}{2}} = n \quad (12.48)$$

$E < 0$ だから

$$E_n = -\frac{me^4}{2n^2\hbar^2} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (12.49)$$

これはバルマー公式に他ならない.

■縮退度 主量子数 $n (\geq 1)$ が与えられたとき, $n_r = n - l - 1 \geq 0$ より $l \leq n - 1$ ($n \geq 1$) , これから

$$\left\{ \begin{array}{l} n = 1 \text{ のとき } l = \{0\} \\ n = 2 \text{ のとき } l = \{0, 1\} \\ n = 3 \text{ のとき } l = \{0, 1, 2\} \\ n = 4 \text{ のとき } l = \{0, 1, 2, 3\} \\ \dots \end{array} \right.$$

さらに, 軌道角運動量の固有関数は, l^2, l_z の同時の固有関数で

$$l^2 Y_{l,m} = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m}, l_z Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m} \quad (m = -l, -l+1, \dots, l-1, l) \quad (12.50)$$

をみることがわかっている. 球関数 $Y_{l,m}$ は, l が与えられたとき $2l+1$ 個の独立な状態 (m) がある. たとえば $n=3$ のとき, l は $l=0, 1, 2$ の3通りであり,

$$\left\{ \begin{array}{l} n = 3, l = 0 \text{ のとき } m = \{0\} \\ n = 3, l = 1 \text{ のとき } m = \{-1, 0, 1\} \\ n = 3, l = 2 \text{ のとき } m = \{-2, -1, 0, 1, 2\} \end{array} \right.$$

となるから, $n=3$ のときには $1+3+5=9$ 個の独立な状態がある. 一般に, 主量子数 n を持つ独立な状態の数は

$$N = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (12.51)$$

同一の固有値を与える n に異なる固有関数が対応している. これを状態の縮退といい, 今の場合, 主量子数 n をもつ状態の縮退度 (degree of degeneracy) は n^2 である

動径方向の固有関数に戻る. a_k が漸化式より定まり, $H(\rho)$ は $n_r = n - l - 1$ 次多項式となる. これをラゲールの倍多項式といい,

$$H(\rho) = L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho) \quad (12.52)$$

と表す. 動径固有関数は

$$R_{n,l}(\rho) = \rho^l L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho) e^{-\frac{\rho}{2}} \quad (12.53)$$

以下, 水素原子以外のポテンシャルの動径固有関数を見てみる.

12.2.1 自由粒子

動径固有関数に対する方程式

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) R = 0 \quad (12.54)$$

において $V = 0$, $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ とおくと

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0 \quad (12.55)$$

$\rho = kr$ とおくと

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R = 0 \quad (12.56)$$

この微分方程式の解は球ベッセル関数 $j_l(\rho)$, $n_l(\rho)$ と呼ばれるものとなる。

■ベッセル関数との関係

$$R(r) = \frac{1}{\sqrt{r}} F(r) \quad (12.57)$$

とにおいて $F(r)$ に関する微分方程式に変換する。

$$\begin{cases} \frac{dR}{dr} &= \frac{1}{\sqrt{r}} \frac{dF}{dr} - \frac{1}{2} r^{-\frac{3}{2}} F \\ \frac{d^2 R}{dr^2} &= \frac{1}{\sqrt{r}} \frac{d^2 F}{dr^2} - r^{-\frac{3}{2}} \frac{dF}{dr} + \frac{3}{4} r^{-\frac{5}{2}} F \end{cases} \quad (12.58)$$

より,

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} = \frac{1}{\sqrt{r}} \frac{d^2 F}{dr^2} + r^{-\frac{3}{2}} \frac{dF}{dr} - \frac{1}{4} r^{-\frac{5}{2}} F \quad (12.59)$$

したがって

$$\frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dF}{dr} + \left(k^2 - \frac{(l + \frac{1}{2})^2}{r^2} \right) F = 0 \quad (12.60)$$

$\rho = kr$ とすれば

$$\frac{d^2 F}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dF}{d\rho} + \left(1 - \frac{(l + \frac{1}{2})^2}{\rho^2} \right) F = 0 \quad (12.61)$$

これはベッセルの微分方程式であり, その解は

$$F(\rho) = J_{l+\frac{1}{2}}(\rho) \quad (12.62)$$

したがって

$$j_l(\rho) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho) \quad (12.63)$$

ちなみに、球ベッセル関数の漸近形をあたえる。

$\rho \gg 1$ のとき

$$j_l(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)$$

$$n_l(\rho) \sim \frac{-1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)$$

$\rho \ll 1$ のとき

$$j_l(\rho) \sim \frac{\rho^l}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1)}$$

$$n_l(\rho) \sim \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l-1)}{\rho^{l+1}}$$

$\rho \rightarrow 0$ で $n_l(\rho) \rightarrow \infty$, $j_l(\rho) \rightarrow 0$.

球の中に閉じこめられた粒子

半径 a の球の中に閉じこめられた粒子

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (a < r) \\ 0 & (a \leq r \leq a) \end{cases} \quad (12.64)$$

動径固有関数の微分方程式は $E = \hbar^2 k^2 / 2m, \rho \equiv kr$ として

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{d\rho} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R = 0 \quad (0 \leq r \leq a) \quad (12.65)$$

一般解は

$$R(\rho) = A j_l(\rho) + B n_l(\rho) \quad (12.66)$$

境界条件は

$$R(0) = \text{有限}, \quad R(ka) = 0 \quad (12.67)$$

$n_l(0) = \infty$ となることから $B = 0$ で

$$R(\rho) = A j_l(\rho) \quad (12.68)$$

さらに

$$R(ka) = A j_l(ka) = 0 \quad (12.69)$$

より k が決まり、エネルギー E が決まる。(これは1次元では $\sin ka = 0$ より $ka = n\pi$ となることに対応する。)

第 13 章

量子力学の一般形式

本章以下では、前の章で与えたシュレーディンガー方程式の具体的な取り扱いを中心としたところから一歩すすんだ、量子力学の統一的理論を展開する。

歴史的には、シュレーディンガーは、かれの方程式を基盤として波動力学を展開したのであるが、それより少し早く、ハイゼンベルクを嚆矢とする行列力学が登場した。これら 2 つの形式を統一理論として一挙に作り上げたのがディラックのいわゆる『変換理論』である。この呼称は、現代的な観点からすると、時代がかっているが、以下では、ディラックの手法を簡易化した形式で一般理論を展開することにする。

ちなみに、以下の章でとりあげる項目を列挙しておこう。

- 状態ベクトルと演算子の一般的定義
- 量子代数（交換関係）、非可換性

$$[x, p] = xp - px = i\hbar$$

- Heisenberg の運動方程式

$$i\hbar \frac{dX}{dt} = [X, H] \quad (13.1)$$

- ユニタリー変換

$$T(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} Ht\right] \quad (13.2)$$

- 調和振動子の演算子による解法 → 光子の生成，消滅
- 角運動量（軌道角運動量，スピン）の交換関係

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z, \quad [J_y, J_z] = i\hbar J_x, \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y$$

より固有値，固有関数を導く

- 摂動論 (perturbation theory)

$$\begin{cases} \text{定常摂動} & \rightarrow \text{エネルギー順位のずれ} \\ \text{時間依存摂動論} & \rightarrow \text{1つの状態から別の状態に移る確率 (レーザーの原理)} \end{cases}$$

- 散乱の理論

■波動力学の復習 前の章では、波動関数 $\psi(x, t)$ は、Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

をみだし、古典力学のハミルトニアン $H = H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ は座標 \mathbf{x} とそれに共役な運動量 \mathbf{p} の関数だが、 $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ と置き換えをすればハミルトン演算子

$$\hat{H} = \hat{H}(\mathbf{x}, -i\hbar\nabla) \quad (13.3)$$

が得られた。さらに、量子力学は、二つの概念要素からなる:

$$\begin{cases} \text{波動関数} & \rightarrow \text{量子力学的状態ベクトル} \\ \text{観測される物理量} & \rightarrow \text{状態ベクトルに作用する演算子} \end{cases}$$

これらの状態が、棲息する空間は無有限次元ベクトル空間である: 標語的にいえば、

$$\begin{aligned} \text{状態ベクトル全体の空間} &= \text{無有限次元のベクトル空間} \\ &\dots \text{ヒルベルト (Hilbert) 空間} \end{aligned}$$

このような一般形式を数学的に量子力学の一般理論を展開したのが、例えば、Hermann Weyl (ヘルマン・ワイル) 『群論と量子力学』『時間・空間・物質』

13.1 量子力学の一般的構造

前章でやられたことを少々くりかえす。一般の $\psi(x)$ の展開。

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) \quad (13.4)$$

ただし n は離散的 (discrete) な量子数と仮定した。連続 (continuous) な場合は和の代わりに積分となる。いずれにせよ $\psi(x)$ は無限個の状態の重ね合わせで書ける。 c_n が展開係数である。 $\phi_n(x)$ は正規直交系を示す。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \phi_m(x) dx = \delta_{n,m} = \begin{cases} 1 & (n = m) \\ 0 & (n \neq m) \end{cases} \quad (13.5)$$

左辺の積分は内積の類似であった。展開係数 c_n は次の方法で求められる

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \phi_n^*(x) dx \quad (13.6)$$

展開係数は確率解釈をもつ:

$$|c_n|^2 = \text{状態} \psi(x) \text{ において固有値 } E_n \text{ が観測される確率} \quad (13.7)$$

これを一般化できる: すなわち, $H \rightarrow$ 一般のエルミート演算子 \hat{A} とすれば, \hat{A} の離散固有値, 連続固有値を a_n, a とし対応する固有関数を $\phi_n(x), \phi_a(x)$ とすると, $\psi(x)$ の, \hat{A} の固有関数による展開:

$$\psi(x) = \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x)}_{\text{離散}} + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} c_a \phi_a(x) da}_{\text{連続}} \quad (13.8)$$

において, 展開係数は

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \phi_n^*(x) dx \quad (13.9)$$

$$c_a = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \phi_a^*(x) dx \quad (13.10)$$

証明は $\phi_n(x), \phi_a(x)$ の直交関係

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \phi_m(x) dx = \underbrace{\delta_{n,m}}_{\text{クロネッカーデルタ}} \quad (13.11)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_{a'}^*(x) \phi_a(x) dx = \underbrace{\delta(a-a')}_{\text{ディラックデルタ}} \quad (13.12)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \phi_a(x) dx = 0 \quad (13.13)$$

を用いる.

確率解釈は

$$|c_n|^2 = \text{状態} \psi(x) \text{ において} \hat{A} \text{ の固有値 } a_n \text{ を観測する確率} \quad (13.14)$$

$$|c_a|^2 da = \text{状態} \psi(x) \text{ において} \hat{A} \text{ の固有値 } (a, a + da) \text{ を観測する確率} \quad (13.15)$$

全確率 = 1 でなければならないから

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 + \int_{-\infty}^{\infty} |c_a|^2 da = 1 \quad (13.16)$$

(特に固有値が完全に離散的な場合には

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1 \quad (13.17)$$

完全に離散的な場合には

$$\int_{-\infty}^{\infty} |c_a|^2 da = 1 \quad (13.18)$$

となる。) この条件は実は $\psi(x)$ の規格化条件と等しい。すなわち

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 + \int_{-\infty}^{\infty} |c_a|^2 da = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \quad (13.19)$$

これから、 \hat{A} の期待値はつぎのようになる。

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |c_n|^2 + \int_{-\infty}^{\infty} a |c_a|^2 \quad (13.20)$$

13.2 量子力学的状態の記述: ブラケット表示

量子力学的状態は無限次元のベクトルで表されるといわれる。このことを確認するために、線形代数の基本的なところを思い出そう。

N 次元ベクトル空間の基本ベクトルを \mathbf{e}_i ($i = 1, 2, \dots, N$) とする。この基本ベクトルは単位ベクトルで互に外に直交するとする。

$$(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \delta_{i,j} \quad (13.21)$$

(この式の固有関数における対応物が

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x)\phi_m(x)dx = \delta_{m,n} \quad (13.22)$$

である。) また任意のベクトルは基本ベクトルによって展開できて

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^N x_i \mathbf{e}_i \quad (13.23)$$

と表される。(この式の固有関数における対応物が

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) \quad (13.24)$$

である。) 展開係数 x_i は一意に決まる.

$$x_i = (\mathbf{x}, \mathbf{e}_i) \quad (13.25)$$

(この式の固有関数における対応物が

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \phi_n^*(x) dx \quad (13.26)$$

である.)

うえてみたように, 波動関数というものが, ベクトル空間のベクトルであるといわれるが, 関数がベクトル空間の要素であるといわれてもなんとなくピンとこない. 実際, 展開係数 (成分) を計算するときに, 積分するということの『意味』がつかみにくい (と昔筆者は思った).

そこで, もっと直接的に量子力学のベクトルという形で記述する枠組みがあればいいのではないか. 実際, これを首尾一貫する形で量子力学的状態として構成したのがディラック表示形式である. いわゆる, ディラックのブラ・ケット形式である. これに従えば, 波動関数, $\psi(x)$ という概念は自然にでてくることがわかる.

$$\langle \dots \text{bra (ブラ) ベクトル} \quad (13.27)$$

$$| \dots \text{ket (ケット) ベクトル} \quad (13.28)$$

bra と ket の内積を

$$\langle \quad | \quad \rangle \quad (13.29)$$

の代わりに, 間の棒を一本省略し

$$\langle \quad | \quad \rangle \quad (13.30)$$

と書くと, 括弧ができる. bra と ket で bracket (括弧) というわけである.

ブラベクトルとケットベクトルは双対的 (dual), すなわち

$$|\psi\rangle \overset{1 \text{ 対 } 1}{\longleftrightarrow} \langle\psi| \quad (13.31)$$

で, 量子的状態としては同じものを表す.

ブラとケットの内積を

$$\langle\phi|\psi\rangle \quad (13.32)$$

と書く.

13.2.1 ブラとケットの計算規則

■1. 和

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \quad (13.33)$$

ベクトルの合成 \Rightarrow 重ね合わせ.

c_1, c_2 は一般に複素数.

双対な式は

$$\langle\psi| = c_1^*\langle\psi_1| + c_2^*\langle\psi_2| \quad (13.34)$$

双対なベクトルの規則

$$\boxed{c|\psi\rangle \longleftrightarrow c^*\langle\psi|} \quad (13.35)$$

■2. 内積 内積 $\langle\phi|\psi\rangle$ は一般に複素数. 内積の物理的意味は 2 つの量子力学的状態の重なり. 完全に重なったときは $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ となる.

$$\boxed{\langle\phi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\phi\rangle} \quad (13.36)$$

特別な場合として, $|\phi\rangle = |\psi\rangle$ のとき, $\langle\phi| = \langle\psi|$ で,

$$\langle\psi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\psi\rangle \quad (13.37)$$

$$\therefore \langle\psi|\psi\rangle = \text{実数} \quad (13.38)$$

となるが,

$$\langle\psi|\psi\rangle = |\psi\rangle \text{ の大きさ (ノルム) の 2 乗} \quad (13.39)$$

これは通常のベクトルにおける

$$(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = |\mathbf{a}|^2 = |\mathbf{a}| \text{ の 2 乗} \quad (13.40)$$

に対応する.

■3. 1 次演算子 (linear operator)

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle \quad (13.41)$$

のように \hat{A} は $|\psi\rangle$ なるベクトルを $|\psi'\rangle$ なる別のベクトルに変換する演算子とする. 線形性と呼ばれる次の 2 つの性質を満たすとき, 1 次演算子という.

$$\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle \quad (13.42)$$

$$(\hat{A} + \hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle \quad (13.43)$$

双対性は

$$\boxed{\hat{A}|\psi\rangle \longleftrightarrow \langle\psi|\hat{A}^\dagger} \quad (13.44)$$

ここに \hat{A}^\dagger は \hat{A} のエルミート共役といい、複素共役の演算子における拡張概念である。

■4. 自己共役演算子 (エルミート演算子)

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle \quad (13.45)$$

となるが,

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \quad (13.46)$$

となる演算子を自己共役演算子 (エルミート演算子) という。

■5. 固有値 (eigenvalue) と固有ベクトル (eigenvector)

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad (13.47)$$

なる a を \hat{A} の固有値, $|a\rangle$ を対応する固有ベクトルという。双対性は

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \longleftrightarrow \langle a|\hat{A}^\dagger = a^*\langle a| \quad (13.48)$$

定理.

$$\boxed{\hat{A}^\dagger = \hat{A} \text{ (エルミート) のとき } \hat{A} \text{ の固有値は実数である}} \quad (13.49)$$

証明. $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ に $\langle a|$ をかけると, $\langle a|\hat{A}|a\rangle = a\langle a|a\rangle$. この複素共役をとると左辺は, $\langle a|\hat{A}|a\rangle^* = \langle a|\hat{A}^\dagger|a\rangle = \langle a|\hat{A}|a\rangle$ となつて変わらず, 右辺は, $a^*\langle a|a\rangle$ となる. 従つて, $a\langle a|a\rangle = a^*\langle a|a\rangle$ より, $a = a^*$ となり a は実数となる.

■6. 直交関係 エルミート演算子 \hat{A} の離散固有値 a_i ($i = 1, 2, \dots$), 連続固有値 a に対して, 各々固有ベクトルを $|a_i\rangle$, $|a\rangle$ とする. すなわち

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle, \quad \hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad (13.50)$$

定理.

$$\langle a_i|a_j\rangle \propto \delta_{ij}, \quad \langle a|a'\rangle \propto \delta(a - a') \quad (13.51)$$

証明. (i): 離散固有値の場合, $\hat{A}|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle$ に $\langle a_i|$ をかけると $\langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle = a_j\langle a_i|a_j\rangle$. 一方,

$$\langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle = \langle a_j|\hat{A}^\dagger|a_i\rangle^* = \langle a_j|\hat{A}|a_i\rangle^* = a_i^*\langle a_j|a_i\rangle^* = a_i\langle a_i|a_j\rangle \quad (13.52)$$

ゆえに, $a_i \langle a_i | a_j \rangle = a_j \langle a_i | a_j \rangle$. すなわち, $(a_i - a_j) \langle a_i | a_j \rangle = 0$. 従って,

$$a_i \neq a_j \text{ のとき } \langle a_i | a_j \rangle = 0 \quad (13.53)$$

$$i = j \text{ のとき } \langle a_i | a_i \rangle = c > 0 \quad (13.54)$$

なお次のようにして規格化できる: $|\tilde{a}_i\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{c}}|a_i\rangle$ とおけば

$$\langle \hat{a}_i | \hat{a}_i \rangle = \frac{1}{c} \langle a_i | a_i \rangle = 1$$

(ii) a が連続固有値の場合, 同様にして, $(a - a') \langle a | a \rangle = 0$ となるので, デルタ関数の性質; $x\delta(x) = 0$ より,

$$\langle a | a' \rangle = c\delta(a - a') \quad (13.55)$$

となる.

■7. 任意の状態の固有ベクトルによる展開 任意のケットベクトルを, あるエルミート演算子の固有ケットで展開しよう. 一般的に, 固有状態は, 離散固有値と連続固有値をもつものとする:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} c_i |a_i\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} c(a) |a\rangle da \quad (13.56)$$

ここで, 展開係数は, 固有状態の直交性を用いれば,

$$c_i = \langle a_i | \psi \rangle, \quad c(a) = \langle a | \psi \rangle \quad (13.57)$$

これを展開式に代入して, つぎのように変形する:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{i=1}^{\infty} \langle a_i | \psi \rangle \cdot |a_i\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} \langle a | \psi \rangle \cdot |a\rangle da \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} |a_i\rangle \langle a_i | \psi \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} da |a\rangle \langle a | \psi \rangle \\ &= \left[\sum_{i=1}^{\infty} |a_i\rangle \langle a_i | + \int_{-\infty}^{\infty} da |a\rangle \langle a | \right] |\psi\rangle \end{aligned} \quad (13.58)$$

この最後の行の [] の部分は, あたかも, 演算子のようにみえる. そして, 任意の状態 $|\psi\rangle$ にたいして, この等式が成立することから,

$$\sum_{i=1}^{\infty} |a_i\rangle \langle a_i | + \int_{-\infty}^{\infty} da |a\rangle \langle a | = \mathbf{1} \text{ (単位演算子)} \quad (13.59)$$

これを完全性関係とよばれる. 特に固有値が個別に離散的ないし完全に連続的であれば,

$$\sum_{i=1}^{\infty} |a_i\rangle\langle a_i| = \mathbf{1}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} da |a\rangle\langle a| = \mathbf{1} \quad (13.60)$$

展開係数から, あらためて, 量子力学の確率解釈 (Max Born) に対する一般的な statement をおくことができる:

$$|c_i|^2 = |\langle a_i|\psi\rangle|^2 \quad \dots \quad |\psi\rangle \text{ において } \hat{A} \text{ を観測したとき固有値 } a_i \text{ を見出す確率} \quad (13.61)$$

■表示の拡張 これまでの議論は, 単独のエルミート演算子の固有状態を対象にしてきた. ここで, 複数の演算子が存在する場合に議論を拡張する. 演算子が複数個存在する場合に, それらは一般には, 交換しない (非可換) であることは明らかである. そこで, とくに, それらが, お互いに交換する場合を考えよう: つまり, 可換な n 個の演算子の組を考える:

$$(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n); \quad [\hat{A}_i, \hat{A}_j] = 0$$

このとき,

■主張 : \hat{A}_i は同時の固有関数を形成する. ただし, 各固有値に対応する固有状態は, たったひとつの状態しか存在しないものとする. たったひとつしかないということは, 『縮退がない』といわれる.

証明: 2つの演算子がある場合を考察するだけで十分である. \hat{A}_1 の固有状態を, $|a_1\rangle$ とする: $\hat{A}_1|a_1\rangle = a_1|a_1\rangle$. これに, \hat{A}_2 を作用させると, 可換の条件より,

$$\hat{A}_2\hat{A}_1|a_1\rangle = \hat{A}_1\hat{A}_2|a_1\rangle = a_1\hat{A}_2|a_1\rangle$$

となる. これは, $\hat{A}_2|a_1\rangle$ が, \hat{A}_1 の固有状態であることを示している. 固有値 a_1 に対応する固有状態は, ひとつであるという仮定から,

$$\hat{A}_2|a_1\rangle = a_2|a_1\rangle$$

とおくことができる. このことは, a_2 が, \hat{A}_2 の固有値であることを示している. そこで, あらためて, $|a_1\rangle$ を, $|a_1, a_2\rangle$ と書き直してまとめると,

$$\hat{A}_1|a_1, a_2\rangle = a_1|a_1, a_2\rangle, \quad \hat{A}_2|a_1, a_2\rangle = a_2|a_1, a_2\rangle$$

これを一般化すると,

$$\hat{A}_1|a_1, \dots, a_n\rangle = a_1|a_1, \dots, a_n\rangle, \dots, \hat{A}_n|a_1, a_2\rangle = a_n|a_1, \dots, a_n\rangle \quad (13.62)$$

となる.

さらに記号を一般化して, 異なる自由度に属する状態の『直積状態』なる状態を定義することができる: つまり, いくつかの独立な自由度に対応する状態 $|\phi_i\rangle (i = 1\bar{n})$ に対して,

$$|\phi_1 \cdots \phi_n\rangle = \prod_i |\phi_i\rangle \quad (13.63)$$

これに対するブラベクトルは, 当然

$$\langle \phi_1 \cdots \phi_n | = \prod_i \langle \phi_i | \quad (13.64)$$

となる.

■**行列表示** ここで, エルミート演算子の行列表示をあたえておこう.

すなわち任意の演算子 \hat{A} は任意 (\hat{A} でなくてもよい) の固有状態の系列 $|i\rangle, |j\rangle (i, j = 1, 2, \dots)$ を用いて,

$$A_{ij} \equiv \langle i | \hat{A} | j \rangle \quad (13.65)$$

と行列表示することができる.

\hat{A} のエルミート性 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ は, 行列表示においては

$$\langle i | \hat{A}^\dagger | j \rangle = \langle i | \hat{A} | j \rangle \quad (13.66)$$

において i, j を入れ替え, 複素共役をとることで

$$\langle j | \hat{A}^\dagger | i \rangle^* = \langle j | \hat{A} | i \rangle^* \quad (13.67)$$

となるが, 左辺に双対性を用いると

$$\langle i | \hat{A} | j \rangle = \langle j | \hat{A} | i \rangle^* \quad (13.68)$$

となるから,

$$\boxed{A_{ij} = A_{ij}^*} \quad (13.69)$$

すなわちエルミート行列であることとして表される.

演算子の積の行列表示は, 完全性関係

$$\sum_k |k\rangle \langle k| = \mathbf{1} \quad (13.70)$$

を用いて,

$$(AB)_{ij} = \langle i|AB|j\rangle \quad (13.71)$$

$$= \sum_k \langle i|A|k\rangle \langle k|B|j\rangle \quad (13.72)$$

$$= \sum_k A_{ik} B_{kj} \quad (13.73)$$

となって行列の積の規則に一致する.

13.3 座標表示と運動量表示

ここで, 量子力学において最も基本的である, 位置演算子と運動量演算子に対して固有状態について述べ, すでに導入されている波動関数の概念をあらためて定義し直そう.

13.3.1 座標表示と波動関数および運動量表示

以下において, 通常の数と区別するために, 位置および運動量演算子をそれぞれ, ハット記号をつけておく:

$$\begin{cases} \text{位置の演算子 } \hat{x} \\ \text{運動量演算子 } \hat{p} \end{cases} \quad (13.74)$$

これらは, 交換関係を満たすことがわかっている:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar \quad (13.75)$$

固有値, x および, p はともに連続固有値をとることは直感的に明らかである.

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad \hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad (13.76)$$

完全性関係は, 従って

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x| = \mathbf{1}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p| = \mathbf{1} \quad (13.77)$$

そして, $|x\rangle$ による展開係数が, 波動関数を定義する.

$$\boxed{\langle x|\psi\rangle = \psi(x)} \quad (13.78)$$

これによって, 『 $\psi(x)$ が波動関数を与える』ということの意味が確定する. 一般理論の立場からは座標表示 (Schrödinger 表示) による波動関数という.

さらに、一般論の確率解釈を適用すれば、

$$|\langle x|\psi\rangle|^2 dx = |\psi(x)|^2 dx = (x, x + dx) \text{ に見出す確率} \quad (13.79)$$

となる。一方、運動量の固有関数 $|p\rangle$ による展開も可能であり、

$$\langle p|\psi\rangle = \psi(p) \quad (13.80)$$

を運動量表示による波動関数とよばれる。

■状態間の内積と波動関数の内積 $|x\rangle$ に対する完全性関係を用いると、 $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|1|\psi\rangle$ に注意して、

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle\phi|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(x) \psi(x) \quad (13.81)$$

となつて、状態間の内積が波動関数によって書き表せることがわかった。これによって、以前に、波動関数を用いて与えられた天下りの内積の定義が確定的な意味を与えられることがわかった。

■座標表示から運動量表示への変換 運動量表示に対する完全性関係を用いると

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle x|p\rangle \psi(p) \end{aligned} \quad (13.82)$$

となつて、座標表示と運動量表示の関係が得られる。ここに現れた『変換因子』 $\langle x|p\rangle$ を求める。 $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ に注意すると、

$$\hat{p}|p\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx}|p\rangle = p|p\rangle \quad (13.83)$$

$\langle x|$ をかけると、 $-i\hbar \frac{d}{dx} \langle x|p\rangle = p \langle x|p\rangle$. これから、

$$\langle x|p\rangle = C \exp\left[\frac{i}{\hbar} px\right] \quad (13.84)$$

すなわち平面波となる。 $c = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ と選ぶと、座標表示と運動量表示の関係はちょうど、フーリエ変換になっている:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{i}{\hbar} px\right] \psi(p) dp \quad (13.85)$$

コメント：変換因子を求めるに際して、 $-i\hbar \frac{d}{dx} \langle x|p\rangle = p \langle x|p\rangle$ の関係に『疑念』がありそうである。つまり、(13.83) に左から、 $\langle x|$ をかけたときに、 $-i\hbar \frac{d}{dx} \langle x|p\rangle$ に素通りするか

というところに議論の余地がある。この議論は深く詮索すると面倒になるので、はなしを逆にして、このプロセスを変換因子が平面波であることを認めただうえで、導くことを考えてみる: つぎのように

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{p}|\psi\rangle &= \langle x|\int_{-\infty}^{\infty} dp|p\rangle\langle p|\hat{p}|\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp\langle x|p\rangle\langle p|\hat{p}|\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp p\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle\end{aligned}\quad (13.86)$$

ここで

$$p\langle x|p\rangle = \frac{p}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}px\right] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}px\right] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|p\rangle\quad (13.87)$$

と書けるから

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{p}|0\rangle &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} dp\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle \\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \langle x|\int_{-\infty}^{\infty} dp|p\rangle \\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle\end{aligned}\quad (13.88)$$

13.3.2 多自由度への拡張

これまでの議論は1自由度に限ったものであったが、多自由度への拡張は形式的である。つまり、

$$\begin{cases} \hat{x} & \rightarrow (\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_n) \\ \hat{p} & \rightarrow (\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_n) \end{cases}$$

と置き換えて、基本交換関係は

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j}\quad (13.89)$$

となることに注意する。つまり、異なる自由度の位置演算子、運動量演算子は可換であり、同時に固有状態をつくれる。つまり、多自由度の状態ベクトルは1自由度の状態ベクトルから直積を用いて

$$|x_1, \dots, x_n\rangle \equiv |x_1\rangle|x_2\rangle\cdots|x_n\rangle\quad (13.90)$$

$$|p_1, \dots, p_n\rangle \equiv |p_1\rangle|p_2\rangle\cdots|p_n\rangle\quad (13.91)$$

として与えられる。そして、完全性関係は

$$\int \cdots \int |x_1, \cdots, x_n\rangle \langle x_1, \cdots, x_n| dx_1 \cdots dx_n = \mathbf{1} \quad (13.92)$$

$$\int \cdots \int |p_1, \cdots, p_n\rangle \langle p_1, \cdots, p_n| dp_1 \cdots dp_n = \mathbf{1} \quad (13.93)$$

ここで、2つ以上の独立な系の状態の積の双対性は、 $|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle \iff \langle\psi_1|\langle\psi_2|$ に注意する。
 n 自由度系の波動関数の、座標表示と運動量表示は

$$\psi(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \langle x_1, x_2, \cdots, x_n | \psi \rangle \quad (13.94)$$

$$\psi(p_1, p_2, \cdots, p_n) = \langle p_1, p_2, \cdots, p_n | \psi \rangle \quad (13.95)$$

で与えられ、両者の関係は

$$\psi(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^n} \int \cdots \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^n p_i x_i \right] \psi(p_1, p_2, \cdots, p_n) dp_1 \cdots dp_n \quad (13.96)$$

13.3.3 不確定性関係と交換関係

交換関係が

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \neq 0 \quad (13.97)$$

であることは、 \hat{x} と \hat{p} が「両立しない」ことを意味する。このことを一般的に証明する。

\hat{A} , \hat{B} の対を $|\psi\rangle$ で測定するものとする。 \hat{A} , \hat{B} はエルミート演算子である。期待値は各々

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx \quad (13.98)$$

$$\langle \hat{B} \rangle = \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{B} \psi(x) dx \quad (13.99)$$

で与えられる。期待値からのずれの演算子を

$$\Delta \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \quad (13.100)$$

$$\Delta \hat{B} \equiv \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \quad (13.101)$$

で定義する。誤差の 2 乗平均が

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | (\Delta \hat{A})^2 | \psi \rangle \quad (13.102)$$

$$(\Delta B)^2 = \langle \psi | (\Delta \hat{B})^2 | \psi \rangle \quad (13.103)$$

で与えられる。このとき、次の定理が成立する。

$$\boxed{(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2} \quad (13.104)$$

証明. λ を実数値パラメータとする。任意の状態 $|\psi\rangle$ に対して

$$|\phi(\lambda)\rangle \equiv (\lambda\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})|\psi\rangle \quad (13.105)$$

なる λ をパラメータとして含む状態を考える。

$$f(\lambda) \equiv \langle \phi(\lambda) | \phi(\lambda) \rangle \geq 0 \quad (13.106)$$

であるが、 $f(\lambda)$ を実際に計算すると

$$f(\lambda) = \langle \psi | (\lambda\Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B})(\lambda\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B}) | \psi \rangle \quad (13.107)$$

$$= \lambda^2 \langle \psi | (\Delta\hat{A})^2 | \psi \rangle - i\lambda \langle \psi | [\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] | \psi \rangle + \langle \psi | (\Delta\hat{B})^2 | \psi \rangle \quad (13.108)$$

λ についての2次関数

$$f(\lambda) = \lambda^2 + a\lambda + b \quad (13.109)$$

が負にならない条件は判別式

$$D = a^2 - 4b \leq 0 \quad (13.110)$$

であるから、

$$D = (-i\langle \psi | [\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] | \psi \rangle)^2 - 4\langle \psi | (\Delta\hat{B})^2 | \psi \rangle \leq 0 \quad (13.111)$$

これより先の定理が得られる。

第 14 章

Heisenberg の運動方程式

■ Schrödinger 方程式の形式解と時間推進演算子 常微分方程式

$$\frac{dx(t)}{dt} = ax \quad (14.1)$$

の解が

$$x(t) = Ce^{at} \quad (14.2)$$

であることになぞらえて, Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (14.3)$$

の形式解は, \hat{H} が t を陽に含まなければ,

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right] |\psi(0)\rangle \quad (14.4)$$

と表される. ここに演算子の指数関数は

$$e^{\hat{X}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{X}^n \quad (14.5)$$

で定義される. 形式解は初期時刻の状態 $|\psi(0)\rangle$ に時間推進演算子 (time evolution operator)

$$T(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right] \quad (14.6)$$

を作用させた形になっている. この時間推進演算子はユニタリー演算子である. 実際,

$$T^\dagger(t) = \exp\left[+\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right] \quad (14.7)$$

より

$$\boxed{T^\dagger(t)T(t) = T(t)T^\dagger(t) = 1} \quad (14.8)$$

形式解の双対性は

$$\langle \psi(t) | = \langle \psi(0) | \exp \left[+\frac{i}{\hbar} \hat{H}t \right] \quad (14.9)$$

である。まとめると、

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = T(t)|\psi(0)\rangle, \quad \langle \psi(t) | = \langle \psi(0) | T^\dagger(t)} \quad (14.10)$$

■Heisenberg の運動方程式 \hat{X} は時間 t に陽にはよらない演算子とする。状態 $|\psi(t)\rangle$ における \hat{X} の期待値は

$$\begin{aligned} \langle \hat{X} \rangle &= \langle \psi(t) | \hat{X} | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | T^\dagger(t) \hat{X} T(t) | \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \hat{X}(t) | \psi(0) \rangle \end{aligned} \quad (14.11)$$

とも表される。ここに

$$\boxed{\hat{X}(t) \equiv T^\dagger \hat{X} T = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \hat{X} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}} \quad (14.12)$$

は Heisenberg 演算子と呼ばれ、時間発展が状態ベクトルでなく演算子の方に押しつけられたわけである。このような時間発展の見方を Heisenberg 描像 (picture) という。

Heisenberg 描像における演算子 $\hat{X}(t)$ の運動方程式を求めよう。

$$\frac{d\hat{X}(t)}{dt} = \frac{d}{dt} T^\dagger(t) \hat{X} T(t) \quad (14.13)$$

$T(t), T^\dagger(t)$ の時間微分を調べると、

$$\begin{aligned} \frac{dT(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} T(t) \end{aligned} \quad (14.14)$$

同様に

$$\frac{dT^\dagger(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \hat{H} T^\dagger(t) \quad (14.15)$$

となるから,

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{X}(t)}{dt} &= \frac{dT^\dagger(t)}{dt}\hat{X}T(t) + T^\dagger(t)\hat{X}\frac{dT(t)}{dt} \\ &= \frac{i}{\hbar}\hat{H}T^\dagger(t)\hat{X}T(t) - \frac{i}{\hbar}T^\dagger(t)\hat{X}\hat{H}T(t)\end{aligned}\quad (14.16)$$

$T(t)$ は演算子としては \hat{H} だけを含むので \hat{H} と可換である.

$$\hat{H}T(t) = T(t)\hat{H}\quad (14.17)$$

ゆえに

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{X}(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\hat{H}T^\dagger(t)\hat{X}T(t) - \frac{i}{\hbar}T^\dagger(t)\hat{X}T(t)\hat{H} \\ &= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{X}(t) - \hat{X}(t)\hat{H}\right)\end{aligned}\quad (14.18)$$

よって Heisenberg の運動方程式

$$\boxed{\frac{d\hat{X}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{X}(t) - \hat{X}(t)\hat{H}\right)}\quad (14.19)$$

ないし

$$\boxed{i\hbar\frac{d\hat{X}(t)}{dt} = [\hat{X}(t), \hat{H}]}\quad (14.20)$$

を得る.

■まとめ Schrödinger picture

$$i\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi(t)\rangle\quad (14.21)$$

Heisenberg picture

$$i\hbar\frac{d\hat{X}(t)}{dt} = [\hat{X}(t), \hat{H}]\quad (14.22)$$

両描像の演算子 $\hat{X}, \hat{X}(t)$ は時間推進演算子

$$T(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right]\quad (14.23)$$

を用いて

$$\hat{X}(t) = T^\dagger(t)\hat{X}T(t)\quad (14.24)$$

で結ばれている.

14.0.1 交換子とポアソン括弧

Heisenberg の運動方程式

$$i\hbar \frac{d\hat{X}(t)}{dt} = [\hat{X}(t), \hat{H}] \quad (14.25)$$

は、古典力学（解析力学）における運動方程式

$$\frac{dX(t)}{dt} = \{X, H\} \quad (14.26)$$

に類似している。ここに $\{X, H\}$ はポアソン括弧 (Poisson bracket) で

$$\{A, B\} \equiv \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right) \quad (14.27)$$

と定義される。 A, B は位相空間での関数,

$$A = A(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n), \quad B = B(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n) \quad (14.28)$$

である。交換子とポアソン括弧には類似性が成り立つ。実際,

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \\ [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \\ [\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] &= 0 \quad (\text{Jacobi 恒等式}) \end{aligned} \quad (14.29)$$

に対応して,

$$\begin{aligned} \{A, B + C\} &= \{A, B\} + \{A, C\} \\ \{A, BC\} &= \{A, B\}C + B\{A, C\} \\ \{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} &= 0 \end{aligned} \quad (14.30)$$

が成立する。

特別な場合として正準方程式を書いておく。

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial q_i}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial q_i}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) = \sum_{j=1}^n \delta_{ij} \frac{\partial H}{\partial p_j} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (14.31)$$

および

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial p_i}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial p_i}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) = - \sum_{j=1}^n \delta_{ij} \frac{\partial H}{\partial q_j} = - \frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (14.32)$$

第 15 章

調和振動子の演算子法

すでに、以前の章で、シュレーディンガー方程式を直接解く手法によって調和振動子ハミルトニアン固有値と固有関数を求めた。この章では、演算子の交換関係をもとにした純代数的なやりかたで固有値問題をあつかう。

15.0.1 昇降演算子

かなめになるのは、昇降演算子という一風変わった演算子を導入するところにある。それは、調和振動子が、位置と運動量の 2 次式で書かれることに由来する。

■Step1. 昇降演算子の導入 古典的なハミルトニアンでは次のような変形が可能である。

$$H = \frac{1}{2m}(p^2 + m^2\omega^2x^2) \quad (15.1)$$

$$= \frac{1}{2m}(p + im\omega x)(p - im\omega x) \quad (15.2)$$

量子力学に移行させると、エルミート演算子への量子化: $x \rightarrow \hat{x}$, $p \rightarrow \hat{p}$ によって、交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$ によって最後の因数分解のステップに修正が必要となる。すなわちハミルトン演算子においては

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2) \quad (15.3)$$

$$= \frac{1}{2m}(\hat{p} + im\omega\hat{x})(\hat{p} - im\omega\hat{x}) - \frac{1}{2m}im\omega(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) \quad (15.4)$$

あるいは、

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p} + im\omega\hat{x})(\hat{p} - im\omega\hat{x}) + \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (15.5)$$

と書かれる. ここで昇演算子 a^\dagger , 降演算子 a を

$$a^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\hat{p} + im\omega\hat{x}), \quad a \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\hat{p} - im\omega\hat{x}) \quad (15.6)$$

を導入しよう. 両者は互いにエルミート共役で $(a^\dagger)^\dagger = a$ を満たす. 量子光学においてはこれらは生成, 消滅演算子と呼ばれる. 昇演算子, 降演算子という呼び名は語呂がわるいので, 以下ではしばしば, 生成, 消滅演算子と呼ぶことにする.

この記号によって, ハミルトン演算子は

$$\hat{H} = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}) \quad (15.7)$$

と表される.

■Step2. 昇降演算子の代数　うえて導入した演算子は, 基本交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \quad [\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0 \quad (15.8)$$

を満たす (証明せよ). さらに, つぎの分配法則 (証明せよ)

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad (15.9)$$

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C] \quad (15.10)$$

をつかえば, 昇降演算子の基本交換関係

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad [a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0 \quad (15.11)$$

および

$$[a, a^\dagger a] = a \quad [a^\dagger, a^\dagger a] = -a^\dagger \quad (15.12)$$

が導かれる. 上の関係から昇降演算子とハミルトン演算子の交換関係が得られる:

$$\begin{aligned} [H, a^\dagger] &= [\hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}), a^\dagger] \\ &= \hbar\omega[a^\dagger a, a^\dagger] + [\frac{1}{2}\hbar\omega, a^\dagger] \\ &= -\hbar\omega[a^\dagger, a^\dagger a] \end{aligned} \quad (15.13)$$

のように計算して,

$$[H, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger, \quad [H, a] = -\hbar\omega a \quad (15.14)$$

を得る. これは, つぎのように書き直される:

$$Ha^\dagger = a^\dagger(H + \hbar\omega), \quad Ha = a(H - \hbar\omega) \quad (15.15)$$

■Step3. エネルギー準位の昇降 ハミルトン演算子の1つの固有値と対応する固有ベクトルが E , $|E\rangle$ で与えられるとする:

$$H|E\rangle = E|E\rangle \quad (15.16)$$

このとき, $a^\dagger|E\rangle$, $a|E\rangle$ もまたハミルトン演算子の固有ベクトルとなる. 実際,

$$Ha^\dagger|E\rangle = a^\dagger(H + \hbar\omega)|E\rangle \quad (15.17)$$

$$= a^\dagger(E + \hbar\omega)|E\rangle \quad (15.18)$$

$$= (E + \hbar\omega)a^\dagger|E\rangle \quad (15.19)$$

すなわち

$$\boxed{Ha^\dagger|E\rangle = (E + \hbar\omega)a^\dagger|E\rangle} \quad (15.20)$$

同様にして

$$\boxed{Ha|E\rangle = (E - \hbar\omega)a|E\rangle} \quad (15.21)$$

したがって昇降演算子の働きは

$$\begin{cases} a^\dagger & \cdots & \hbar\omega \text{ だけエネルギー準位を上昇させる} \\ a & \cdots & \hbar\omega \text{ だけエネルギー準位を下降させる} \end{cases} \quad (15.22)$$

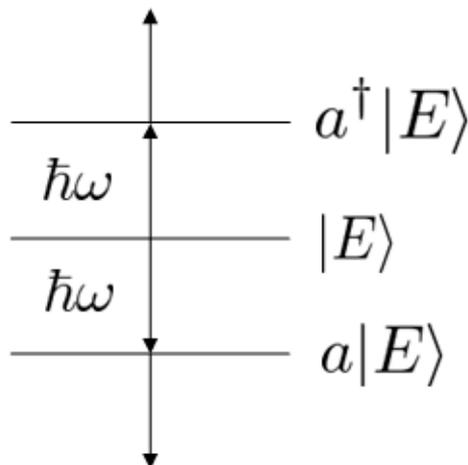


図 15.1 昇降演算子の働き

■Step4. エネルギー固有値の決定 固有値方程式より, $\hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})|E\rangle = E|E\rangle$. これに, $\langle E|$ をかければ

$$\hbar\omega\langle E|a^\dagger a|E\rangle + \frac{1}{2}\hbar\omega\langle E|E\rangle = E\langle E|E\rangle \quad (15.23)$$

移項すると

$$(E - \frac{1}{2}\hbar\omega)\langle E|E\rangle = \hbar\omega\langle E|a^\dagger a|E\rangle \quad (15.24)$$

$\langle E|E\rangle > 0$ であり, また $\langle E|a^\dagger a|E\rangle$ についても $|\psi\rangle \equiv a|E\rangle$ とすれば

$$\langle E|a^\dagger a|E\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \geq 0 \quad (15.25)$$

となる. したがって, $E - \frac{1}{2}\hbar\omega \geq 0$ となる. これから, 最低エネルギー状態 (基底状態) が得られる:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (15.26)$$

そして, 基底状態, $|0\rangle$ は

$$a|0\rangle = 0 \quad (15.27)$$

をみtas. つまり, 消滅演算子を基底状態に作用させれば, ゼロになる, いいかえれば, 『状態が存在しない』ということの意味する. この関係は, あとでみるように生成消滅演算子に関する計算において決定的に重要な役割をする.

昇降演算子のエネルギー上げ下げの機構から固有値が以下のように決定される: 消滅演算子を作用することで, $\hbar\omega$ ずつ下げていって, 最低エネルギー状態に到達するためには, 固有値 E_n は, つぎの形でなければならないことは明白である:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (15.28)$$

この固有値に対応する固有状態は, 生成演算子を, n 回作用させることで得られる:

$$|\psi_n\rangle \equiv (a^\dagger)^n|0\rangle \quad (15.29)$$

15.0.2 固有ベクトルの規格化と波動関数

上で構成された生成消滅演算子から, 調和振動子の状態に関する基本的な事項を列挙しておこう.

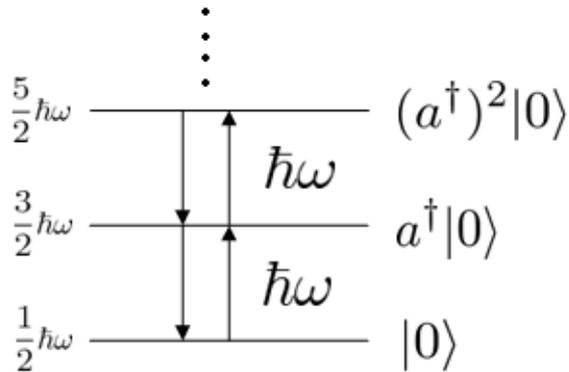


図 15.2 調和振動子のエネルギー準位

規格化

まず状態は、一般に、生成演算子の関数として、

$$|\psi\rangle = f(\hat{a}^\dagger)|0\rangle \quad (15.30)$$

と書かれて、 $f(\hat{a}^\dagger)$ は

$$f(\hat{a}^\dagger) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k (\hat{a}^\dagger)^k$$

によって与えられる。係数 C_n は一般に複素数である。

■ 典型的な交換関係

$$[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n] = n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}, \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^n] = -n\hat{a}^{n-1}, \quad (15.31)$$

これらの式は、数学的帰納法を適用すれば容易に確かめることができる。

■ 規格化とフォック表示 まず、基底状態は規格化されているとしてよい: $\langle 0|0\rangle = 1$. つぎに、第 1 励起状態に対して、 $\langle 0|aa^\dagger|0\rangle$ をみると、基本交換関係より $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ であるから、

$$\langle 0|aa^\dagger|0\rangle = \langle 0|(1 + a^\dagger a)|0\rangle = \langle 00\rangle + \langle 0|a^\dagger a|0\rangle$$

ここで、 $a|0\rangle = 0$ より

$$\langle 0|aa^\dagger|0\rangle = 1 \quad (15.32)$$

が得られる。これを第 n 励起状態に拡張する。つまり、

$$N^2 = \langle 0|a^n(a^\dagger)^n|0\rangle \quad (15.33)$$

$a(a^\dagger)^n = [\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n] + (a^\dagger)^n a$ に注意して、上でもとめた交換関係をつかうと、

$$a(a^\dagger)^n = (a^\dagger)^n a + n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}$$

したがって、 $\langle 0|a^n(a^\dagger)^n|0\rangle = \langle 0|a^{n-1}a(a^\dagger)^n|0\rangle = \langle 0|a^{n-1}((a^\dagger)^n a + n(\hat{a}^\dagger)^{n-1})|0\rangle$ のように変形して、 $a|0\rangle = 0$ に注意すると、

$$\langle 0|a^n(a^\dagger)^n|0\rangle = n\langle 0|a^{n-1}(a^\dagger)^{n-1}|0\rangle \quad (15.34)$$

という漸化式が得られる。これから、

$$\boxed{\langle 0|a^n(a^\dagger)^n|0\rangle = n!} \quad (15.35)$$

これによって、規格化された n 番目の励起状態は

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle \quad (15.36)$$

これは特別の呼び名がついていて、『フォック (Fock) の表示』とよばれる。フォック表示に生成消滅演算子を作用させると、

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^{n+1}|0\rangle = \frac{\sqrt{(n+1)!}}{\sqrt{n!}}|n+1\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (15.37)$$

および

$$\hat{a}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle = \frac{n}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^{n-1}|0\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (15.38)$$

を得る。フォック表示の物理的な意味をのべる。そのために

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (15.39)$$

なる演算子を導入する。これを量子 (光子) 数演算子という。これらを用いると

$$\hat{N}|n\rangle = \hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = \hat{a}^\dagger \sqrt{n}|n-1\rangle = \sqrt{n} \times \sqrt{(n-1)+1}|n\rangle$$

となり、

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \quad (15.40)$$

すなわち $|n\rangle$ は \hat{N} の固有値 n に対応する固有状態となる。

■昇降演算子に対する微分演算

\hat{x}, \hat{p} の基本交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ と座標表示における運動量演算子 $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ との関係に注目すると、昇降演算子の基本交換関係

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (15.41)$$

に対して、そこで、少々乱暴な類推によって、

$$a^\dagger = \frac{\partial}{\partial a} \quad \text{ないし} \quad a = \frac{\partial}{\partial a^\dagger} \quad (15.42)$$

の対応がつくことがわかる。数学的な証明はにおいて、以下はこれを認めることにしよう。 a^\dagger 表示を用いることにすると、 $n \geq m$ のとき

$$\langle 0 | a^m (a^\dagger)^n | 0 \rangle = \langle 0 | \frac{\partial^m}{\partial a^{\dagger m}} (a^\dagger)^n | 0 \rangle \quad (15.43)$$

$$= n(n-1) \cdots (n-m+1) \langle 0 | (a^\dagger)^{n-m} | 0 \rangle \quad (15.44)$$

特に $n = m$ のとき

$$\langle 0 | a^n (a^\dagger)^n | 0 \rangle = n! \quad (15.45)$$

■波動関数 波動力学で調和振動子を解いた経験から、固有ベクトルのフォック表示

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle \quad (15.46)$$

に対して、

$$\langle x | n \rangle = \psi_n(x) = H_n(x) e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$$

が成り立つはずである。ここで、 $H_n(x)$ はエルミート多項式で、 $\alpha \equiv m\omega/\hbar$ 。ここではこの Schrödinger 表示の波動関数を求める。方針として、基底状態 $\psi_0(x) = \langle x | 0 \rangle$ から励起状態は a^\dagger を作用させることで得られる。 $\psi_0(x)$ を求めるには $a|0\rangle = 0$ を用いて、 $\psi_0(x)$ についての微分方程式を求めればよい。

そのまゝに、昇降演算子の座標表示における形を求めておく。

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (p + im\omega x) = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left(\frac{d}{dx} - \frac{m\omega}{\hbar} x \right) \quad (15.47)$$

同様にして

$$a = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left(\frac{d}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar} x \right) \quad (15.48)$$

これらを準備として、基底状態を求める。 $\langle x|a|0\rangle = 0$ より

$$\langle x|\hat{p}|0\rangle - im\omega x\langle x|0\rangle = 0 \quad (15.49)$$

左辺第 1 項は、前の章であたえた関係式を用いると

$$\langle x|\hat{p}|0\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|0\rangle \quad (15.50)$$

したがって $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$ の満たす微分方程式は

$$\frac{d\psi_0}{dx} + \frac{m\omega x}{\hbar}\psi_0 = 0 \quad (15.51)$$

従って、

$$\psi_0(x) = C \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right] \quad (15.52)$$

でガウス型である。また励起状態は

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \langle x|\left(\frac{-i\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right)^n\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{m\omega}{\hbar}x\right)^n|0\rangle \\ &= \left(\frac{-i\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right)^n\langle x|\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{m\omega}{\hbar}x\right)^n|0\rangle \\ &= \left(\frac{-i\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right)^n\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{m\omega}{\hbar}x\right)^n\psi_0(x) \\ &= H_n(x)\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right] \end{aligned} \quad (15.53)$$

15.0.3 Heisenberg の運動方程式

昇降演算子で書かれたハミルトニアン: $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})$ により、昇降演算子の Heisenberg 演算子は、つぎのように書かれる

$$\begin{cases} \hat{a}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\ \hat{a}^\dagger(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \end{cases} \quad (15.54)$$

これから、

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}^\dagger\hat{a}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\ &= \exp\left[i\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})t\right]\hat{a}^\dagger\hat{a}\exp\left[-i\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})t\right] \\ &= \hat{a}^\dagger\hat{a} \end{aligned} \quad (15.55)$$

であるからハミルトン演算子は

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t) + \frac{1}{2} \right) \quad (15.56)$$

のように Heisenberg 演算子で書いてもよい。これを用いて、 $\hat{a}^\dagger(t), \hat{a}(t)$ に対する運動方程式を導く。

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{a}(t)}{dt} &= [\hat{a}(t), \hat{H}] = \hbar\omega [\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t) + \frac{1}{2}] \\ &= \hbar\omega [\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t)] = \hbar\omega \hat{a}(t) \end{aligned} \quad (15.57)$$

したがって

$$\frac{d\hat{a}(t)}{dt} = -i\omega \hat{a}(t) \quad (15.58)$$

同様にして

$$\frac{d\hat{a}^\dagger(t)}{dt} = i\omega \hat{a}^\dagger(t) \quad (15.59)$$

これらはただちに解けて

$$\begin{cases} \hat{a}(t) = \hat{a}(0)e^{-i\omega t} \\ \hat{a}^\dagger(t) = \hat{a}^\dagger(0)e^{i\omega t} \end{cases} \quad (15.60)$$

第 16 章

角運動量

16.1 基本事項

■定義 角運動量には，波動力学で中心力ポテンシャルを扱った際に現れた軌道角運動量 $l = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ の他に，スピン角運動量 \mathbf{s} なるものがある．一般の角運動量をここでは \mathbf{J} で表す．角運動量

$$\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z) \quad (16.1)$$

は次の交換関係で定義される．

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z, \quad [J_y, J_z] = i\hbar J_x, \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y \quad (16.2)$$

添え字が cyclic change していることに注意．位置演算子

$$\mathbf{r} = (x, y, z) \quad (16.3)$$

と運動量演算子

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (16.4)$$

の外積である軌道角運動量

$$\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = (yp_z - zp_y, zp_x - xp_z, xp_y - yp_x) \quad (16.5)$$

はこの交換関係を満たす: $[l_x, l_y] = i\hbar l_z$ (cyclic).

16.2 固有関数と固有値の決定

角運動量の固有値問題を解くのに，昇降演算子の方法を用いることができる．

■Step1. 昇降演算子 J_{\pm} 調和振動子の昇降演算子に対応して, 昇降演算子

$$J_+ \equiv J_x + iJ_y, \quad J_- \equiv J_x - iJ_y \quad (16.6)$$

を導入し, (J_x, J_y, J_z) の代わりに (J_+, J_-, J_z) の組で議論する. $J_+^\dagger = J_-$ に注意.

■Step2. 同時固有状態 $|\lambda, m\rangle$ 大きさ 2 乗の演算子

$$\mathbf{J}^2 \equiv J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \quad (16.7)$$

を導入する.

$$[J_x, \mathbf{J}^2] = 0, \quad [J_y, \mathbf{J}^2] = 0, \quad [J_z, \mathbf{J}^2] = 0 \quad (16.8)$$

が成立する. これは大きさと成分の同時固有状態が作れることを意味する. ただし, J_x, J_y, J_z は非可換であるから, これらは同時の固有状態をつくれない. そこで, J_z と \mathbf{J}^2 の同時固有状態を構成する. 大きさ 2 乗, z 成分の固有値を各々 $\lambda, m\hbar$ で表し, その同時固有状態を $|\lambda, m\rangle$ と表す.

$$\mathbf{J}^2|\lambda, m\rangle = \lambda|\lambda, m\rangle, \quad J_z|\lambda, m\rangle = m|\lambda, m\rangle \quad (16.9)$$

■Step3. J_{\pm}, J_z の交換関係と \mathbf{J}^2 の計算 J_{\pm}, J_z の交換関係は

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z, \quad [J_z, J_+] = \hbar J_+, \quad [J_z, J_-] = -\hbar J_- \quad (16.10)$$

となる. ($[J_z, J_+] = [J_z, J_x + iJ_y] = [J_z, J_x] + i[J_z, J_y] = i\hbar J_y + i(-i\hbar J_x) = \hbar(J_x + iJ_y) = \hbar J_+$)

つぎに, 大きさの 2 乗: $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ を J_{\pm}, J_z で書き直す. J_+J_-, J_-J_+ を計算してみると

$$J_+J_- = (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i[J_y, J_x] = J_x^2 + J_y^2 + i(-i\hbar J_z) \quad (16.11)$$

J_-J_+ の方も同様にして計算すると,

$$\mathbf{J}^2 = \begin{cases} J_+J_- + J_z^2 - \hbar J_z \\ J_-J_+ + J_z^2 + \hbar J_z \end{cases} \quad (16.12)$$

■Step4. J_{\pm} の働き 昇降演算子の交換関係をつかうと,

$$J_z J_+ = J_+(J_z + \hbar), \quad J_z J_- = J_-(J_z - \hbar) \quad (16.13)$$

$$J_z J_+ |\lambda, m\rangle = J_+(J_z + \hbar) |\lambda, m\rangle = J_+(m\hbar + \hbar) |\lambda, m\rangle \quad (16.14)$$

すなわち

$$\boxed{J_z J_+ |\lambda, m\rangle = (m+1)\hbar J_+ |\lambda, m\rangle} \quad (16.15)$$

$J_z J_-$ の方も同様にして

$$\boxed{J_z J_- |\lambda, m\rangle = (m-1)\hbar J_- |\lambda, m\rangle} \quad (16.16)$$

$J_{\pm} |\lambda, m\rangle$ は J_z の固有値が $(m \pm 1)\hbar$ の固有状態である.

■Step5. J^2 の固有値 λ 大きさ 2 乗の固有方程式

$$\mathbf{J}^2 |\lambda, m\rangle = \lambda |\lambda, m\rangle \quad (16.17)$$

に $\langle \lambda, m |$ をかけて $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ を用いると

$$\lambda \langle \lambda, m | \lambda, m \rangle = \langle \lambda, m | J_x^2 | \lambda, m \rangle + \langle \lambda, m | J_y^2 | \lambda, m \rangle + \langle \lambda, m | J_z^2 | \lambda, m \rangle > 0 \quad (16.18)$$

すなわち, $\lambda > 0$ となることがわかる.

大きさ λ が与えられると, z 成分 $m\hbar$ の取り得る値には制限が付くことをみてみよう. 先と同様にして, ただし今度は $\mathbf{J}^2 = J_+ J_- + J_z^2 - \hbar J_z$ を用いると

$$\lambda \langle \lambda, m | \lambda, m \rangle = \langle \lambda, m | (J_+ J_- + J_z^2 - \hbar J_z) | \lambda, m \rangle \quad (16.19)$$

$$= \langle \lambda, m | J_+ J_- | \lambda, m \rangle + (m^2 - m)\hbar^2 \langle \lambda, m | \lambda, m \rangle \quad (16.20)$$

右辺第 1 項に注目する. J_{\pm} は互いにエルミート共役で, $|\psi\rangle \equiv J_- |\lambda, m\rangle$ とすると, その双対は, $\langle \psi | = \langle \lambda, m | J_+$ であるから, $\langle \lambda, m | J_+ J_- | \lambda, m \rangle = \langle \psi | \psi \rangle \geq 0$ よって

$$\langle \lambda, m | J_+ J_- | \lambda, m \rangle = \{\lambda - (m^2 - m)\hbar^2\} \langle \lambda, m | \lambda, m \rangle > 0 \quad (16.21)$$

より, $\lambda \geq (m^2 - m)\hbar^2$ となる. 同様の議論で, $\mathbf{J}^2 = J_- J_+ + J_z^2 + \hbar J_z$ を用いると, $\lambda \geq (m^2 + m)\hbar^2$ を得る. このように λ が与えられると m の値には最小値, 最大値があるから, それを各々

$$\begin{cases} J_z \text{の最小固有値} = m_- \\ J_z \text{の最大固有値} = m_+ \end{cases} \quad (16.22)$$

とすると,

$$J_- |\lambda, m_-\rangle = 0, \quad J_+ |\lambda, m_+\rangle = 0 \quad (16.23)$$

でなければならない.

■Step6. m の取り得る範囲

$$\langle \lambda, m_- | J_+ J_- | \lambda, m_- \rangle = 0, \quad \langle \lambda, m_+ | J_- J_+ | \lambda, m_+ \rangle = 0 \quad (16.24)$$

より

$$\lambda = (m_-^2 - m_-)\hbar^2, \quad \lambda = (m_+^2 + m_+)\hbar^2 \quad (16.25)$$

となるから, $m_-^2 - m_- = m_+^2 + m_+$ これは, $(m_+ + m_-)(m_+ - m_- + 1) = 0$ と因数分解されるから, $m_+ - m_- + 1 > 0$ より

$$m_+ = -m_- \equiv j \quad (16.26)$$

とおくと,

$$m_{\pm} = \pm J \quad (16.27)$$

となつて, z 成分の固有値 $m\hbar$ の取り得る値は

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (16.28)$$

となり, λ を j で書けば

$$\lambda = j(j+1)\hbar^2 \quad (16.29)$$

となる. j は

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (16.30)$$

の値をとることがわかる.

■まとめ 角運動量演算子は大きさ 2 乗 $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ と z 成分 J_z (あるいは J_x ないし J_y) が

$$[\mathbf{J}^2, J_z] = 0 \quad (16.31)$$

のごとく可換であるから, 同時固有状態を持つ. \mathbf{J}^2, J_z の固有値を各々 $j(j+1)\hbar^2, m\hbar$, 対応する固有ベクトルを (以後 $|\lambda, m\rangle$ の代わりに) $|j, m\rangle$ と書くと, 固有方程式は

$$\mathbf{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \quad (16.32)$$

$$J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \quad (16.33)$$

j は

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (16.34)$$

の値をとる. m は

$$m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j \quad (16.35)$$

の値をとり, j を一つ与えると m が $2j + 1$ 個対応しうる. すなわち, 角運動量の “大きさ” j の状態は $2j + 1$ 重に “縮退 (degenerate)” している.

$j = 0, 1, 2, \dots$ の整数値は軌道角運動量で実現できる. (ただし, 逆は真ではない). 中心力の場合を簡単に復習しておく, 波動関数は

$$\psi(r, \theta, \varphi) = cR_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (16.36)$$

と変数分離され, 角度部分に球関数 Y_{lm} が現れる. 軌道角運動量は

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 = -\hbar^2 \Lambda(\theta, \varphi) \quad (16.37)$$

ここで, $\Lambda(\theta, \varphi)$ は

$$\Lambda(\theta, \varphi) = \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (16.38)$$

で, 球関数はその固有関数であり,

$$\Lambda(\theta, \varphi)Y_{lm} = l(l + 1)Y_{lm} \quad (16.39)$$

また

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm} = imY_{lm} \quad (16.40)$$

であるから,

$$\begin{cases} l^2 \text{の固有値} = l(l + 1)\hbar^2 \\ l_z \text{の固有値} = m\hbar \end{cases} \quad (16.41)$$

m の取り得る値は

$$m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l \quad (16.42)$$

であり, 方向量子数 l の状態は $2l + 1$ 重に縮退している.

それでは $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ の半整数値はどんなときに実現されるだろうか?

16.3 スピン角運動量

$j = \frac{1}{2}$ は電子（素粒子）スピンとして現れる。記号としては s を使い、

$$s = \frac{1}{2}\hbar \rightarrow s_z \text{の固有値} = \pm \frac{1}{2}\hbar \quad (2 \text{個}) \quad (16.43)$$

軌道角運動量の場合には、 $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times (-i\hbar\nabla)$ のように

デカルト座標 (x, y, z) (あるいは極座標 (r, θ, φ)) で表された。しかしスピン (s_x, s_y, s_z) は空間の自由度とは独立であり、“点粒子”が自転？しているように考えねばならない。

スピンはパウリ（スピン）行列

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (16.44)$$

を用いて

$$s_x = \frac{1}{2}\hbar\sigma_x, \quad s_y = \frac{1}{2}\hbar\sigma_y, \quad s_z = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z \quad (16.45)$$

と表すのが最もよく用いられる記述法である。このとき角運動量の交換関係が確認できる。

$$\begin{aligned} [s_x, s_y] &= \left(\frac{1}{2}\hbar\right)^2 [\sigma_x, \sigma_y] \\ &= \left(\frac{1}{2}\hbar\right)^2 \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\} \\ &= \left(\frac{1}{2}\hbar\right)^2 \left\{ \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \right\} \\ &= \left(\frac{1}{2}\hbar\right)^2 2i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= i\hbar s_z \end{aligned} \quad (16.46)$$

など。

■ $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ の性質 交換関係,

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y \quad (16.47)$$

かつ, UNIPOTENT (ユニポテント) 関係

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (16.48)$$

反交換子を

$$[A, B]_+ \equiv AB + BA \quad (16.49)$$

で定義して、反交換関係、

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y]_+ &= \sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0 \\ [\sigma_y, \sigma_z]_+ &= \sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y = 0 \\ [\sigma_z, \sigma_x]_+ &= \sigma_z \sigma_x + \sigma_x \sigma_z = 0 \end{aligned} \quad (16.50)$$

これは $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ が

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x \quad (16.51)$$

なる反可換代数にしたがうことを意味する。このような交換関係においてマイナスをプラスに変えたものが突如でてくるというのは、まったく偶然ではなく、後にのべる、フェルミ粒子の特性を反映したものとみることができる。

■スピンの状態 一般論で見た固有状態をスピンの場合には

$$|j, m\rangle \rightarrow |s, s_z\rangle \quad (16.52)$$

と書き、固有値は、 $s = \frac{1}{2}\hbar$, $s_z = \pm\frac{1}{2}\hbar$ の値をとる。2つの状態を各々

$$\begin{aligned} |\psi_\uparrow\rangle &= \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{up}) \\ |\psi_\downarrow\rangle &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{down}) \end{aligned} \quad (16.53)$$

と表す。一般の状態は重ね合わせで

$$|\psi\rangle = a|\psi_\uparrow\rangle + b|\psi_\downarrow\rangle \quad (16.54)$$

と表される。

■状態の行列表示 スピンをパウリ行列 (2×2 行列) で表したことに対応して、状態もまた行列 (2×1 行列) で表される。

$$s^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3}{4}\hbar^2 \mathbf{1} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (16.55)$$

$$s_z = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (16.56)$$

であり, 固有方程式は

$$\mathbf{s}^2 |s, s_z\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} |s, s_z\rangle = \lambda |s, s_z\rangle \quad (16.57)$$

$$s_z |s, s_z\rangle = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} |s, s_z\rangle = m |s, s_z\rangle \quad (16.58)$$

となる. $|s, s_z\rangle$ を

$$|s, s_z\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (16.59)$$

と書けば,

$$\frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (16.60)$$

$$\frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = m \hbar \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (16.61)$$

なる行列の固有値問題となる. まず $\lambda = \frac{3}{4} \hbar^2$ がすぐに分かるが, $\lambda = j(j+1)\hbar^2$ であることから, $\frac{3}{4} = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)$ より, $j = \frac{1}{2}$ が確認される. 次に

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \hbar a = m \hbar a \\ -\frac{1}{2} \hbar b = m \hbar b \end{cases} \quad (16.62)$$

より,

$$\left(m - \frac{1}{2}\right) a = 0, \quad \left(m + \frac{1}{2}\right) b = 0 \quad (16.63)$$

a, b は同時にゼロではないので,

$$\begin{aligned} m = \frac{1}{2} \text{ のとき } b = 0, \quad a \text{ は任意} \\ m = -\frac{1}{2} \text{ のとき } a = 0, \quad b \text{ は任意} \end{aligned} \quad (16.64)$$

簡単のため各々 $a = 1, b = 1$ とすれば, 固有ベクトルは

$$|\chi_\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\chi_\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (16.65)$$

と表される. 一般の状態はこれらの重ね合わせで

$$|\chi\rangle = a|\chi_\uparrow\rangle + b|\chi_\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (16.66)$$

と表される. これは, スピノールと呼ばれる量になっている.

■**具体例: 磁場中のスピン** 磁場 B の中にある粒子のハミルトニアンは, 磁気モーメント μ を用いて

$$H = -\mu \cdot B \quad (16.67)$$

と表されるが, 磁気モーメントはスピント, つぎの関係にある.

$$\mu \propto s \quad (16.68)$$

■**一般の J の行列表示** 実はスピンに限らず, 軌道角運動量など一般の角運動量も行列で表すことができる.

■ **J_z, J_{\pm} の $|j, m\rangle$ による行列表示** 角運動量の大きさ 2 乗 J^2 と z 成分 J_z の同時固有状態 $|j, m\rangle$ の直交性は

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm} \quad (16.69)$$

である. $j' = j$ 以外は 0 になってしまうから, $j' = j$ のところだけに注目して J_z, J_{\pm} を行列表示してみる.

J_z は

$$J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \quad (16.70)$$

であるから,

$$\langle j, m' | J_z |j, m\rangle = m\hbar \delta_{m'm} \quad (16.71)$$

と表示される.

J_{\pm} は

$$J_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle \quad (16.72)$$

$$J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle \quad (16.73)$$

より

$$\langle j, m' | J_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{m', m+1} \quad (16.74)$$

$$\langle j, m' | J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{m', m-1} \quad (16.75)$$

となり, 各々 $m' = m \pm 1$ とのきのみ 0 でない.

なお J_x, J_y の行列表示は, $J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$
 $J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$ より J_{\pm} の行列表示より得られる.

■問題 (磁場中のスピンのハミルトニアン) 磁場 B 中のスピンのハミルトニアンは

$$H \propto \mathbf{s} \cdot \mathbf{B} \quad (16.76)$$

$$= s_x B_x + s_y B_y + s_z B_z \quad (16.77)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} B_x + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} B_y + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} B_z \quad (16.78)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix} \quad (16.79)$$

(比例定数まで含めて正確に言うと,

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (16.80)$$

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{eg}{2mL} \mathbf{s} \quad (\text{磁気モーメント}) \quad (16.81)$$

これは電磁気学ないし統計力学で学んでいるはずである) この H の固有状態を求めるには, 行列の固有値問題

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (16.82)$$

を解けばよく, 対角化の手法で固有値 λ , 固有状態 $\chi = (a, b)^T$ が求まる.

実際の問題としては, 例えば磁気共鳴における共振の問題として,

$$\mathbf{B} = (B \cos \omega t, B \sin \omega t, B_0) \quad (16.83)$$

のような振動磁場が与えられる.

■スピンの期待値 状態 $|\psi\rangle$ における物理量 \hat{X} の期待値は

$$\langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle \quad (16.84)$$

で求められた. いまスピン \hat{s} の場合には, $\chi^\dagger = (a^*, b^*)$ として

$$\chi^\dagger \hat{s} \chi \equiv \mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z) \quad (16.85)$$

とすればよいが, この期待値 \mathbf{s} をスピンベクトルという. スピノールの合成によってベクトルが得られるという関係である. 成分ごとに書くと

$$s_x = \chi^\dagger s_x \chi = \frac{\hbar}{2} \chi^\dagger \sigma_x \chi \quad (16.86)$$

$$s_y = \chi^\dagger s_y \chi = \frac{\hbar}{2} \chi^\dagger \sigma_y \chi \quad (16.87)$$

$$s_z = \chi^\dagger s_z \chi = \frac{\hbar}{2} \chi^\dagger \sigma_z \chi \quad (16.88)$$

パウリ行列の表式を代入して計算してみよ.

第 17 章

摂動論

17.1 摂動論とは

摂動論 (perturbation theory) とは、古典力学における軌道の微小なずれを計算する手法として考えられたものである。

まず例として代数方程式を用いて基本的なアイデアを示す。

$$\epsilon x^2 + 2x + 3 = 0 \quad (17.1)$$

ただし ϵ は $\epsilon \ll 1$ なる微小量とする。これを根の公式を使わずに、近似解を求める。まず $\epsilon = 0$ のときの解を求めると

$$2x + 3 = 0 \quad \rightarrow \quad x = -\frac{3}{2} \quad (17.2)$$

となるが、 $\epsilon \neq 0$ の真の解は、この値に微小な値 α を加えたくらいのものであらうと考え、

$$x = -\frac{3}{2} + \alpha \quad (17.3)$$

とする。これを真の方程式に代入すると、

$$\epsilon x^2 + 2x + 3 = \epsilon \left(-\frac{3}{2} + \alpha \right)^2 + 2 \left(-\frac{3}{2} + \alpha \right) + 3 \quad (17.4)$$

$$= \epsilon \left(\frac{9}{4} - 3\alpha + \alpha^2 \right) + 2\alpha \quad (17.5)$$

$$= 0 \quad (17.6)$$

となるが、 $\epsilon\alpha^2, \epsilon\alpha$ は高次の微小量であるとして無視すると

$$\frac{9}{4}\epsilon + 2\alpha \simeq 0 \quad \rightarrow \quad \alpha \simeq -\frac{9}{8}\epsilon \quad (17.7)$$

したがって近似解

$$x \simeq -\frac{3}{2} - \frac{9}{8}\epsilon \quad (17.8)$$

を得る.

摂動論には,

1. 定常摂動論 (time-independent)
2. 非定常摂動論 (time-dependent)

の 2 つがある.

17.2 定常摂動論

定常摂動論は量子力学においては固有値問題の近似解に用いられる.

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (17.9)$$

において

$$H = H_0 + V \quad (17.10)$$

のように, H が解析的に解ける無摂動部分 H_0 と, 時間を含まない摂動項 V に分けられる場合を扱う. (先の代数方程式の場合で言うと, ϵx^2 が摂動項である.) H_0 の固有値問題が解けており,

$$\boxed{H_0|\phi_n\rangle = E_n^0|\phi_n\rangle} \quad (17.11)$$

を満たす $|\phi_n\rangle$, E_n^0 が既知 (解析的に与えられる) とする. 解くべき固有値問題は

$$(H_0 + V)|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (17.12)$$

目標は, $(|\psi_n\rangle, E_n)$ を, 摂動項 V を微小量と見て, $(|\phi_n\rangle, E_n^0, V)$ を用いて近似的に求めることである. 逐次 (iteration) 近似の方法で解くことができる.

以下, λ を微小量として, V を $V \rightarrow \lambda V$ と置き換えておく. 従って, ハミルトニアンは $H = H_0 + \lambda V$ となる.

縮退のない場合

ここでは仮定として

- 無摂動状態は離散的かつ $|E_n^0 - E_{n+1}^0| \gg |\lambda V|$ (準位間隔が摂動に比べてずっと大きい)

- $|\phi_n\rangle$ は縮退なし (non-degenerate) つまり E_n^0 に対応する状態は 1 つだけ

とする.

無摂動の状態を展開した

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (17.13)$$

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\phi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\phi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (17.14)$$

および $|\phi_n^{(1)}\rangle, |\phi_n^{(2)}\rangle, \dots$ などを無摂動状態で展開した

$$|\phi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle \quad (17.15)$$

$$|\phi_n^{(2)}\rangle = \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\phi_k\rangle \quad (17.16)$$

などを固有方程式に代入すると

$$\begin{aligned} & (H_0 + \lambda V) \left(|\phi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\phi_k\rangle + \dots \right) \\ &= (E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) \left(|\phi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\phi_k\rangle + \dots \right) \end{aligned} \quad (17.17)$$

■逐次近似 λ の次数を比較して

$$0 \text{ 次: } H_0 |\phi_n\rangle = E_n^0 |\phi_n\rangle \quad (\text{既知}) \quad (17.18)$$

$$1 \text{ 次: } H_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + V |\phi_n\rangle = E_n^0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + E_n^{(1)} |\phi_n\rangle \quad (17.19)$$

$$2 \text{ 次: } H_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\phi_k\rangle + V \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle = E_n^0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\phi_k\rangle + E_n^{(1)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + E_n^{(2)} |\phi_n\rangle \quad (17.20)$$

これより $E_n^{(1)}, c_{nk}^{(1)}, E_n^{(2)}, c_{nk}^{(2)}, \dots$ を逐次的に求めていく.

うえで述べた $|E_n^0 - E_{n+1}^0| \gg |\lambda V|$ という仮定は, エネルギーのずれ

$$\Delta E \equiv \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (17.21)$$

が $|E_{n+1}^0 - E_n^0| \gg \Delta E$ となることを保証する.

さて, 以下の計算で基本となるのは直交関係 $\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}$ である.

まず $E_n^{(1)}$ を求める. (17.19) に $\langle \phi_n |$ を左からかけて

$$\langle \phi_n | H_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + \langle \phi_n | V |\phi_n\rangle = E_n^0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \langle \phi_n | \phi_k\rangle + E_n^{(1)} \langle \phi_n | \phi_n\rangle \quad (17.22)$$

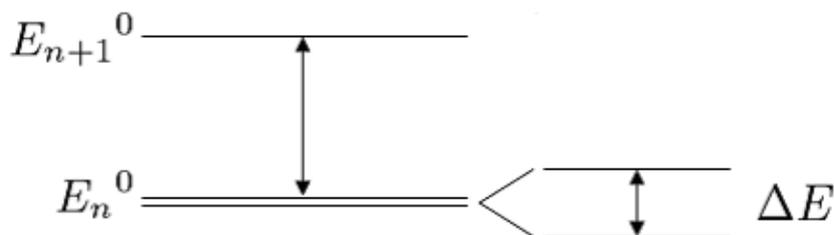


図 17.1 摂動によるエネルギーのずれ

$\langle \phi_n | E_0 = \langle \phi_n | E_n^0$ だから, 結局, $E_n^{(1)} = \langle \phi_n | V | \phi_n \rangle$ すなわち 1 次のエネルギーのずれは

$$\boxed{\Delta E_n^{(1)} \equiv \lambda E_n^{(1)} = \langle \phi_n | \lambda V | \phi_n \rangle} \quad (17.23)$$

のように摂動項の期待値として得られる.

$c_{nk}^{(1)}$ を求める. (17.19) に $\langle \phi_m |$ を左からかけて

$$\langle \phi_m | H_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} | \phi_k \rangle + \langle \phi_m | V | \phi_n \rangle = E_n^0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \langle \phi_m | \phi_k \rangle + E_n^{(1)} \langle \phi_m | \phi_n \rangle \quad (17.24)$$

$$E_m^0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \langle \phi_m | \phi_k \rangle + \langle \phi_m | V | \phi_n \rangle = E_n^0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \langle \phi_m | \phi_k \rangle + 0 \quad (17.25)$$

$\langle \phi_m | \phi_k \rangle = \delta_{mk}$ だから

$$(E_n^0 - E_m^0) c_{nm}^{(1)} = \langle \phi_m | V | \phi_n \rangle \quad (17.26)$$

したがって

$$\boxed{c_{nm}^{(1)} = \frac{\langle \phi_m | V | \phi_n \rangle}{E_n^0 - E_m^0}} \quad (17.27)$$

$E_n^{(2)}$ を求める. (17.20) に $\langle \phi_n |$ をかける.

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \langle \phi_n | V | \phi_k \rangle \quad (17.28)$$

$$= \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_k | V | \phi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \langle \phi_n | V | \phi_k \rangle \quad (17.29)$$

$V^\dagger = V$ だから 2 次のエネルギーのずれは

$$\boxed{\Delta E_n^{(2)} \equiv \lambda^2 E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \phi_n | \lambda V | \phi_k \rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0}} \quad (17.30)$$

この式は電場中の電気双極子や, 磁場中の磁気双極子が受けるエネルギーのずれの計算などに用いられる.

縮退のある場合

縮退がある場合、摂動が入ると縮退が無くなる。

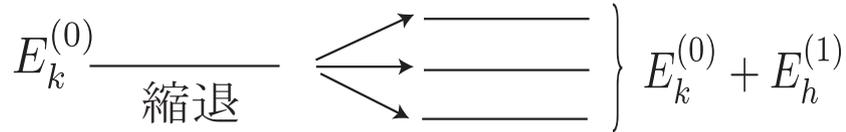


図 17.2 縮退がある場合の摂動の効果

H_0 の一つの固有値 E_n^0 に複数の固有状態 $|\phi_n^{(i)}\rangle$ ($i = 1, \dots, N$) が対応するとする。

$$H_0|\phi_n^{(i)}\rangle = E_n^0|\phi_n^{(i)}\rangle \quad (i = 1, \dots, N) \quad (17.31)$$

ただし、これらの縮退する固有状態にも直交関係が成立すると仮定する、

$$\langle\phi_n^{(i)}|\phi_n^{(j)}\rangle = \delta_{ij} \quad (17.32)$$

もちろん異なる固有値に対応する固有状態は直交するから、より一般に

$$\boxed{\langle\phi_n^{(i)}|\phi_m^{(j)}\rangle = \delta_{mn}\delta_{ij}} \quad (17.33)$$

と書くことができる。

縮退がある場合の議論は、先に見た縮退がない場合の議論において、

$$|\phi_k\rangle \Rightarrow \sum_{i=1}^N \alpha_i |\phi_k^{(i)}\rangle \quad (17.34)$$

などの置き換えを行えばよい。

1 次の摂動は

$$H_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \sum_{i=1}^N \alpha_i |\phi_k^{(i)}\rangle + V \sum_{i=1}^N \alpha_i |\phi_n^{(i)}\rangle = E_n^0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \sum_{i=1}^N \alpha_i |\phi_k^{(i)}\rangle + E_n^{(1)} \sum_{i=1}^N \alpha_i |\phi_n^{(i)}\rangle \quad (17.35)$$

左から $\langle\phi_n^{(j)}|$ をかけると

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i \langle\phi_n^{(j)}|V|\phi_n^{(i)}\rangle = E_n^{(1)} \alpha_j \quad (17.36)$$

これは α_i ($i = 1, \dots, N$) に対する連立 1 次方程式で、

$$[\mathbf{V}]_{ij} \equiv \langle\phi_n^{(i)}|V|\phi_n^{(j)}\rangle \quad (17.37)$$

なる $N \times N$ 行列および

$$X \equiv \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} \quad (17.38)$$

として行列形で書けば

$$\mathbf{V}X = E_n^{(1)}X \quad (17.39)$$

$X = 0$ でない, 非自明解を持つためには

$$\det(\mathbf{V} - E_n^{(1)}\mathbf{1}) = 0 \quad (17.40)$$

したがって $E_n^{(1)}$ に関する N 次の代数方程式

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E_n^{(1)} & V_{12} & \cdots & V_{1N} \\ V_{12} & V_{22} - E_n^{(1)} & \cdots & V_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{N1} & V_{N2} & \cdots & V_{NN} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (17.41)$$

を解けばよく, これは N 個の根を持つ. このことは摂動によって E_n^0 が N 個の $E_n \simeq E_n^0 + \lambda E_n^{(1)}$ に分裂することを意味する.

17.3 非定常摂動論 (時間依存摂動論)

状態の運動方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H(t)\psi \quad (17.42)$$

であった. ハミルトン演算子が

$$H(t) = H_0 + \underbrace{\lambda V(t)}_{\text{摂動項}} \quad (17.43)$$

のように書かれ, 無摂動部分 H_0 が解析的に求まるとする.

無摂動部分の解法を復習しておく.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_0 \psi \quad (17.44)$$

において H_0 は時間を陽に含まず, 変数分離

$$\psi(x, t) = T(t)\phi(x) \quad (17.45)$$

を行うと

$$i\hbar \frac{dT}{dt} \phi(x) = T(t) H_0 \phi(x) \quad (17.46)$$

より

$$\frac{1}{T(t)} i\hbar \frac{dT}{dt} = \frac{1}{\phi(x)} H_0 \phi(x) = E \text{ (一定)} \quad (17.47)$$

となって t のみ, x のみの式に分離され,

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E T \quad \rightarrow \quad T(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E t \right] \quad (17.48)$$

および

$$H_0 \phi(x) = E \phi(x) \quad \rightarrow \quad \text{固有値問題} \quad H_0 \phi_n(x) = E_n^0 \phi_n(x) \quad (17.49)$$

よって一般解は重ね合わせで

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t \right] \phi_n(x) \quad (17.50)$$

となる. c_n は初期条件より決まる任意定数. 波動関数と状態ベクトルの関係は

$$\langle x | n(t) \rangle = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t \right] \langle x | n \rangle = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t \right] \phi_n(x) \quad (17.51)$$

であり, 状態ベクトルで

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n |n(t)\rangle \quad (17.52)$$

と書く.

ここでは, 無摂動状態は離散的で, 縮退がなく, 直交性 $\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$ の成立を仮定する.

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = (H + \lambda V(t)) |\psi(t)\rangle \quad (17.53)$$

に, 無摂動固有状態の一般解において

$$c_n \text{ (任意定数)} \quad \rightarrow \quad c_n(t) \text{ (未定関数)} \quad (17.54)$$

とした展開式

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} |n\rangle \quad (17.55)$$

を代入し, 問題を $c_n(t)$ を求めることに帰着させる. 左辺は

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \sum_n \left(i\hbar \frac{dc_n}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} |n\rangle + E_n^0 c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} |n\rangle \right) \quad (17.56)$$

となり, これに $\langle m|$ をかければ

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^0 t} + E_m^0 c_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^0 t} \quad (17.57)$$

となる. 一方, 右辺は

$$(H + \lambda V(t)) |\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) (H_0 + \lambda V(t)) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} |n\rangle \quad (17.58)$$

$$= \sum_n c_n(t) E_n^0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} |n\rangle + \sum_n c_n(t) \lambda V(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} |n\rangle \quad (17.59)$$

となり, $\langle m|$ をかければ

$$c_m(t) E_m^0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^0 t} + \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \langle m | \lambda V(t) | n \rangle \quad (17.60)$$

となる. したがって

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^0 t} + E_m^0 c_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^0 t} = c_m(t) E_m^0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^0 t} + \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \langle m | \lambda V(t) | n \rangle \quad (17.61)$$

よって c_m に対する微分方程式

$$\boxed{i\hbar \frac{dc_m}{dt} = \lambda \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n^0 - E_m^0) t} \langle m | V(t) | n \rangle} \quad (17.62)$$

を得る. これは無限次元連立常微分方程式である.

逐次近似の方法で解く. 特定の m に対して,

$$c_m(t) = c_m^0(t) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \lambda^2 c_m^{(2)}(t) + \dots \quad (17.63)$$

と展開して代入すると

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{d}{dt} (c_m^0(t) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \lambda^2 c_m^{(2)}(t) + \dots) \\ &= \lambda \sum_n (c_n^0(t) + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \dots) e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n^0 - E_m^0) t} \langle m | V(t) | n \rangle \end{aligned} \quad (17.64)$$

以下, 簡単のため

$$\omega_{nm} = \frac{E_n^0 - E_m^0}{\hbar} \quad (17.65)$$

とおく。0次項は

$$i\hbar \frac{dc_m^0}{dt} = 0 \quad (17.66)$$

1次項は

$$i\hbar \frac{dc_m^{(1)}}{dt} = \sum_n c_n^0 e^{-i\omega_{nm}t} \langle m|V(t)|n\rangle \quad (17.67)$$

2次項以降も同様の式となり、 $c^0 \rightarrow c^{(1)} \rightarrow c^{(2)} \rightarrow \dots$ と逐次的に求めていくことになる。
0次項の式より

$$c_m^0(t) = \text{一定} \quad (17.68)$$

となる。初期条件として、はじめ特定の無摂動固有状態にあったとして、

$$|\psi(0)\rangle = |k\rangle \quad (17.69)$$

という場合を考える。これは

$$c_m(0) = \delta_{mk} \quad (17.70)$$

ということであるから、

$$\boxed{c_m^0(t) = \delta_{mk}} \quad (17.71)$$

を得る。(よくわからなければ次のように計算する。

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0)|n\rangle = |k\rangle \quad (17.72)$$

に $\langle m|$ をかけると

$$c_m(0) = \langle m|\psi(0)\rangle = \langle m|k\rangle = \delta_{mk} \quad (17.73)$$

となる。)

よって1次項の式は

$$\boxed{i\hbar \frac{dc_m^{(1)}}{dt} = e^{-i\omega_{km}t} \langle m|V(t)|k\rangle} \quad (17.74)$$

となる。この解は積分によってただちに得られる。

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{-i\omega_{km}t'} \langle m|V(t')|k\rangle dt' \quad (17.75)$$

よって λ の 1 次までとる近似で

$$c_m(t) \simeq \delta_{mk} + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t e^{-i\omega_{km}t'} \langle m|V(t')|k\rangle dt' \quad (17.76)$$

となる.

ここで他の固有状態への遷移確率を計算してみる. 状態 $|\psi(t)\rangle$ の中に固有状態 $|m\rangle$ を見出す確率振幅は

$$\langle m|\psi(t)\rangle = \langle m|\sum_n c_n(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^0 t}|n\rangle \quad (17.77)$$

$$= c_m(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_m^0 t} \quad (17.78)$$

だから, 遷移確率は

$$|\langle m|\psi(t)\rangle| = |c_m(t)|^2 \quad (17.79)$$

で求められる. よって, 最初 $|k\rangle$ にあったのが, 時間 t だけ経過して他の状態 $|m\rangle$ ($m \neq k$) に遷移する確率は

$$\boxed{|c_m(t)|^2 \simeq \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{-i\omega_{km}t'} \langle m|\lambda V(t')|k\rangle dt' \right|^2} \quad (17.80)$$

$V(t)$ の関数形として特に

$$V(t) = Ve^{-i\omega t} + V^\dagger e^{i\omega t} \quad (17.81)$$

という角振動数 ω で時間的に振動するポテンシャルの場合をしてみる. ここで $V = V(x)$, $V^\dagger = V^\dagger(x)$ はともに t を含まないものとする. これは原子 (双極子) が電磁波と相互作用するときの形である.

$$\begin{aligned} c_m(t) &\simeq \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t e^{-i\omega_{km}t'} \langle m|V(t')|k\rangle dt' \\ &= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t e^{-i\omega_{km}t'} e^{-i\omega t'} \langle m|V|k\rangle dt' + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t e^{-i\omega_{km}t'} e^{+i\omega t'} \langle m|V^\dagger|k\rangle dt' \\ &= \frac{\lambda}{i\hbar} \langle m|V|k\rangle \int_0^t e^{-i(\omega_{km}+\omega)t'} dt' + \frac{\lambda}{i\hbar} \langle m|V^\dagger|k\rangle \int_0^t e^{-i(\omega_{km}-\omega)t'} dt' \end{aligned}$$

ここで積分は

$$\int_0^t e^{-i\omega t'} dt' = \left[\frac{e^{-i\omega t'}}{-i\omega} \right]_0^t = \frac{1 - e^{-i\omega t}}{i\omega} = \frac{e^{i\omega t/2} - e^{-i\omega t/2}}{i\omega e^{i\omega t/2}} = \frac{\sin(\omega t/2)}{(\omega/2)e^{i\omega t/2}} \quad (17.82)$$

となるから,

$$c_m(t) \simeq \frac{\lambda}{i\hbar} \langle m|V|k \rangle \frac{\sin\{(\omega_{km} + \omega)t/2\}}{\{(\omega_{km} + \omega)/2\}} e^{i(\omega_{km} + \omega)t/2} + \frac{\lambda}{i\hbar} \langle m|V^\dagger|k \rangle \frac{\sin\{(\omega_{km} - \omega)t/2\}}{\{(\omega_{km} - \omega)/2\}} e^{i(\omega_{km} - \omega)t/2} \quad (17.83)$$

よって

$$|c_m(t)|^2 \simeq \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \left| \langle m|V|k \rangle \frac{\sin\{(\omega_{km} + \omega)t/2\}}{(\omega_{km} + \omega)/2} e^{-i\frac{\omega_{km} + \omega}{2}t} + \langle m|V^\dagger|k \rangle \frac{\sin\{(\omega_{km} - \omega)t/2\}}{(\omega_{km} - \omega)/2} e^{-i\frac{\omega_{km} - \omega}{2}t} \right|^2 \quad (17.84)$$

ここで

$$|A + B|^2 = |A|^2 + |B|^2 + AB^* + A^*B = |A|^2 + |B|^2 + 2 \times (AB^* \text{の実部}) \quad (17.85)$$

であるが, クロスタームからは $\cos \omega t$ のファクターが出てくる. 測定にはマクロな時間を要するから本来長時間平均をとるべきであり, その際 $\cos \omega t$ の長時間平均は 0 になるから, クロスタームは無視することにする,

$$|c_m(t)|^2 \simeq \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |\langle m|V|k \rangle|^2 \frac{\sin^2\{(\omega_{km} + \omega)t/2\}}{\{(\omega_{km} + \omega)/2\}^2} + \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |\langle m|V^\dagger|k \rangle|^2 \frac{\sin^2\{(\omega_{km} - \omega)t/2\}}{\{(\omega_{km} - \omega)/2\}^2} \quad (17.86)$$

ここで

$$\Delta \equiv \omega_{km} \pm \omega \quad (17.87)$$

とおいて, t が大きいところでの振る舞いを見る.

$$g(\Delta) \equiv \frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \frac{\Delta t}{2} \quad (17.88)$$

のグラフは $\Delta = 0$ のところにピークを持ち, t が大きいときにはデルタ関数のように振る舞うことが予想される. デルタ関数の性質,

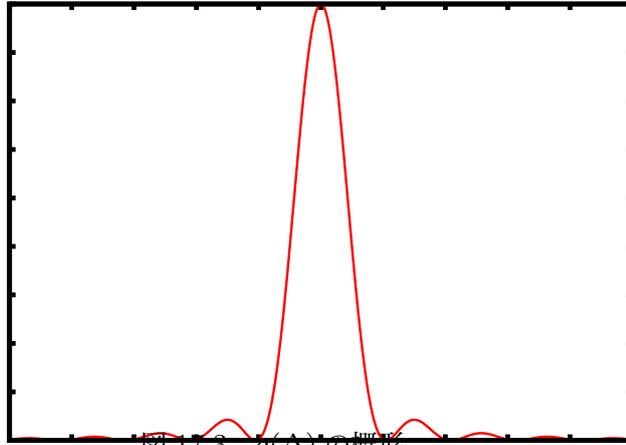
$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0) \quad (17.89)$$

を思い出して,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\Delta)g(\Delta)d\Delta = \int_{-\infty}^{\infty} f(\Delta) \frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \frac{\Delta t}{2} d\Delta \quad (17.90)$$

を計算してみると, t が大きいときには

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\Delta)g(\Delta)d\Delta \simeq f(0) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \frac{\Delta t}{2} d\Delta \quad (17.91)$$

図 17.3 $g(\Delta)$ の概形

と近似できて, さらに

$$y \equiv \frac{\Delta}{2}t \quad (17.92)$$

と変数変換すれば

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\Delta)g(\Delta)d\Delta \simeq 2tf(0) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 y}{y^2} dy \quad (17.93)$$

$$= 2\pi tf(0) \quad (17.94)$$

となる. すなわち t が大きいとき

$$g(\Delta) \equiv \frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \frac{\Delta t}{2} \simeq 2\pi t \delta(\Delta) \quad (17.95)$$

$$\Delta \equiv \omega_{km} \pm \omega = \frac{E_k^0 - E_m^0 \pm \hbar\omega}{\hbar} \quad (17.96)$$

およびデルタ関数の公式

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (17.97)$$

より

$$g(\Delta) \simeq 2\pi \hbar t \delta(E_k^0 - E_m^0 \pm \hbar\omega) \quad (17.98)$$

よって

$$|c_m(t)|^2 \simeq \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |\langle m|V|k\rangle|^2 \frac{\sin^2\{(\omega_{km} + \omega)t/2\}}{\{(\omega_{km} + \omega)/2\}^2} + \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |\langle m|V^\dagger|k\rangle|^2 \frac{\sin^2\{(\omega_{km} - \omega)t/2\}}{\{(\omega_{km} - \omega)/2\}^2} \quad (17.99)$$

$$\simeq \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |\langle m|V|k\rangle|^2 2\pi\hbar t \delta(E_k^0 - E_m^0 + \hbar\omega) + \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |\langle m|V^\dagger|k\rangle|^2 2\pi\hbar t \delta(E_k^0 - E_m^0 - \hbar\omega) \quad (17.100)$$

単位時間あたりの遷移確率は

$$\Gamma_{k \rightarrow m} \equiv \frac{|c_m(t)|^2}{t} \quad (17.101)$$

で計算され、それは

$$\Gamma_{k \rightarrow m} \simeq \frac{2\pi}{\hbar} [|\langle m|\lambda V|k\rangle|^2 \delta(E_k^0 - E_m^0 + \hbar\omega) + |\langle m|\lambda V^\dagger|k\rangle|^2 \delta(E_k^0 - E_m^0 - \hbar\omega)] \quad (17.102)$$

となる。これをフェルミの黄金律 (Golden rule) という。

17.4 定常摂動論の応用

定常摂動論が応用できる問題を 2, 3 挙げる。

■1. シュタルク (Stark) 効果 水素原子

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad (17.103)$$

に電圧

$$V = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} \quad (17.104)$$

をかける。

■2. 電場と双極子の相互作用

$$V = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \quad (17.105)$$

ここに \mathbf{p} は双極子モーメントで、電荷を $\pm e$ 、負電荷から正電荷への変位ベクトルを \mathbf{r} として

$$\mathbf{p} = e\mathbf{r} \quad (17.106)$$

で与えられる。

■3. 磁気モーメントと磁場の相互作用 μ を磁気モーメントとして,

$$V = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (17.107)$$

■シュタルク効果の計算 以下, シュタルク効果を例にとって摂動論の計算を行ってみる. 電場は一様で, z 方向とする.

$$\mathbf{E} = (0, 0, E_z) \quad (17.108)$$

摂動項は

$$V = ezE_z \quad (17.109)$$

となる.

■(i)1 次の摂動による基底状態のエネルギーのずれ 水素原子の固有状態は

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (17.110)$$

であり, 特に基底状態は $n = 1, l = m = 0$ で

$$\langle \mathbf{r} | 1, 0, 0 \rangle = \psi_{1,0,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}} e^{-\frac{r}{a}} \quad (17.111)$$

であった. ここに a はボーア半径で

$$a \equiv \frac{me^4}{\hbar^2} \quad (17.112)$$

基底エネルギー E_1 に対する 1 次の摂動の効果は

$$\Delta E_1^{(1)} = \langle 1, 0, 0 | ezE_z | 1, 0, 0 \rangle = eE_z \langle 1, 0, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle \quad (17.113)$$

ここで, 完全性関係を用いれば

$$\begin{aligned} \langle 1, 0, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle &= \langle 1, 0, 0 | z \mathbf{1} | 1, 0, 0 \rangle \\ &= \langle 1, 0, 0 | z \int \int \int dxdydx |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | 1, 0, 0 \rangle \\ &= \int \int \int dxdydx z \langle 1, 0, 0 | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | 1, 0, 0 \rangle \\ &= \int \int \int dxdydx z |\langle 1, 0, 0 | \mathbf{r} \rangle|^2 \end{aligned} \quad (17.114)$$

となるが，極座標に変換すると，

$$\begin{aligned}
 \langle 1, 0, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle &= \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi r^2 \sin\theta \times r \cos\theta \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}} \\
 &= \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi r^3 e^{-\frac{2r}{a}} \sin\theta \cos\theta \\
 &= \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty dr r^3 e^{-\frac{2r}{a}} \underbrace{\int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos\theta}_{0} \int_0^{2\pi} d\varphi \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{17.115}$$

となり，1次の摂動からの寄与はない。

■(ii)2次の摂動（縮退なし） 実際には水素原子の励起状態には縮退があるが，ここでは縮退はないものとして扱う．基底エネルギーのずれに対する2次の摂動の効果は

$$\Delta E_1^{(2)} = \sum_{k \neq 1} \frac{|\langle 1, 0, 0 | e E_z z | k, l, m \rangle|^2}{E_1^0 - E_k^0} \tag{17.116}$$

で与えられる．水素原子のエネルギースペクトルは

$$E_k^0 = -\frac{me^4}{2k^2\hbar^2} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2k^2} \quad (k = 1, 2, \dots) \tag{17.117}$$

もし連続スペクトルまで含めて考えるならば，

$$\Delta E_1^{(2)} = e^2 E_z^2 \left(\sum_{k \neq 1} \frac{|\langle 1, 0, 0 | z | k, l, m \rangle|^2}{E_1^0 - E_k^0} + \int \frac{|\langle 1, 0, 0 | z | k \rangle|^2}{E_1^0 - E^0(k)} dk \right) \tag{17.118}$$

大雑把に，分母を

$$E_1^0 - E_k^0 \simeq E_1^0 - E_2^0 \tag{17.119}$$

と置き換えると

$$\begin{aligned}
 \Delta E_1^{(2)} &\simeq \frac{e^2 E_z^2}{E_1^0 - E_2^0} \sum_{k \neq 1} |\langle 1, 0, 0 | z | k, l, m \rangle|^2 \\
 &= \frac{e^2 E_z^2}{E_1^0 - E_2^0} \sum_{k \neq 1} \langle 1, 0, 0 | z | k, l, m \rangle \langle k, l, m | z | 1, 0, 0 \rangle
 \end{aligned} \tag{17.120}$$

となるが，完全性関係

$$\sum_{k=1}^{\infty} |k, l, m\rangle \langle k, l, m| = \mathbf{1} \tag{17.121}$$

より

$$\sum_{k \neq 1} |k, l, m\rangle \langle k, l, m| = \mathbf{1} - |1, 0, 0\rangle \langle 1, 0, 0| \quad (17.122)$$

となることを用いると

$$\begin{aligned} \Delta E_1^{(2)} &\simeq \frac{e^2 E_z^2}{E_1^0 - E_2^0} \langle 1, 0, 0 | z \left(\mathbf{1} - |1, 0, 0\rangle \langle 1, 0, 0| \right) z | 1, 0, 0 \rangle \\ &\simeq \frac{e^2 E_z^2}{E_1^0 - E_2^0} \langle 1, 0, 0 | z^2 | 1, 0, 0 \rangle - \frac{e^2 E_z^2}{E_1^0 - E_2^0} \langle 1, 0, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle^2 \end{aligned} \quad (17.123)$$

しかし先に見たように第 2 項は 0 になるから、

$$\Delta E_1^{(2)} \simeq \frac{e^2 E_z^2}{E_1^0 - E_2^0} \langle 1, 0, 0 | z^2 | 1, 0, 0 \rangle \quad (17.124)$$

ここで、完全性関係を用いれば

$$\begin{aligned} \langle 1, 0, 0 | z^2 | 1, 0, 0 \rangle &= \langle 1, 0, 0 | z^2 \mathbf{1} | 1, 0, 0 \rangle \\ &= \langle 1, 0, 0 | z^2 \iiint dxdydx |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | 1, 0, 0 \rangle \\ &= \iiint dxdydx z^2 \langle 1, 0, 0 | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | 1, 0, 0 \rangle \\ &= \iiint dxdydx z^2 |\langle 1, 0, 0 | \mathbf{r} \rangle|^2 \end{aligned} \quad (17.125)$$

となるが、極座標に変換すると、

$$\begin{aligned} \langle 1, 0, 0 | z^2 | 1, 0, 0 \rangle &= \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi r^2 \sin \theta \times r^2 \cos^2 \theta \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}} \\ &= \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi r^4 \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}} \sin \theta \cos^2 \theta \\ &= \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty dr r^4 e^{-\frac{2r}{a}} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos^2 \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \end{aligned} \quad (17.126)$$

角度部分は $4\pi/3$ を与え、動径部分は部分積分を繰り返せば $3a^5/4$ となることがわかる。よって

$$\langle 1, 0, 0 | z^2 | 1, 0, 0 \rangle = a^2 \quad (17.127)$$

また

$$E_1^0 - E_2^0 = -\frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (17.128)$$

であるから,

$$\Delta E_1^{(2)} \simeq -\frac{4}{3} \frac{2ma^2}{\hbar^2} \cdot e^2 E_z^2 \cdot a^2 \quad (17.129)$$

したがって

$$\boxed{\Delta E_1^{(2)} \simeq -\frac{8}{3} E_z^2 a^3} \quad (17.130)$$

シュタルク効果による 2 次の摂動まで考えた水素原子の基底エネルギーは

$$E_1^0 + \Delta E_1^{(2)} \equiv U(E_z) \quad (17.131)$$

$$d = -\frac{\partial U}{\partial E_z} = -\frac{16}{3} a^3 E_z \quad (17.132)$$

分極率は

$$p = \frac{d}{E_z} \sim a^3 \quad (17.133)$$

第 18 章

散乱理論

1次元ポテンシャルの散乱問題は、例えば

$$V(x) = \frac{k}{\cosh^2 x} \quad (18.1)$$

に対して、 $x = -\infty$ から粒子を入射させると、反射と透過が起こり

$$\psi(x) \sim \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & (x \rightarrow -\infty) \\ Te^{ikx} & (x \rightarrow \infty) \end{cases} \quad (18.2)$$

となるのであった。3次元でも $r \rightarrow \infty$ での振る舞いを同じように考える。

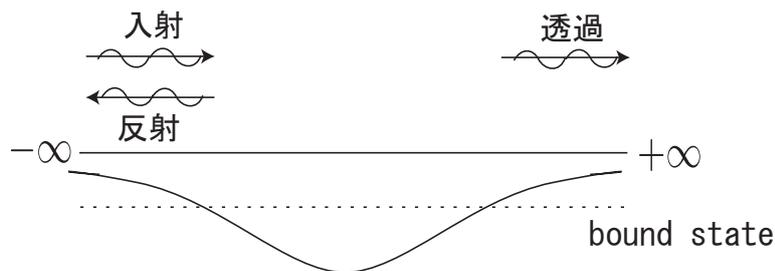


図 18.1 1次元ポテンシャルでの散乱

18.0.1 散乱振幅

$z = -\infty$ から入射した粒子（平面波）が原点にある散乱体によって散乱される。簡単のため z 軸の周りに対称な散乱体を考える。 $r \rightarrow \infty$ では散乱波はほぼ球面波のように減衰していくであろうが、散乱体の形状によって、散乱波には方向（散乱角 θ ）依存性がある

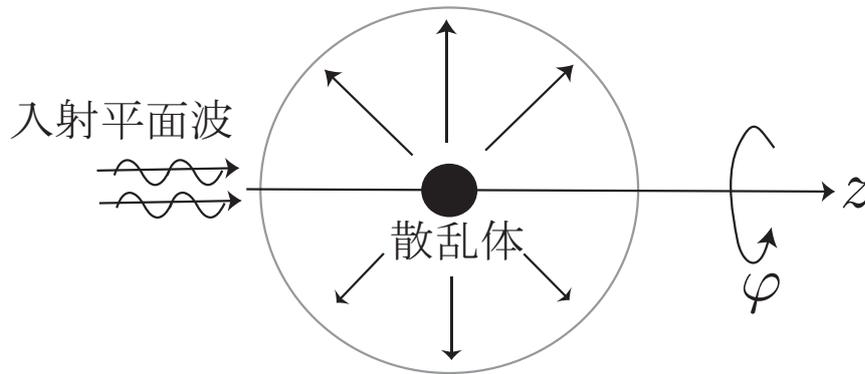


図 18.2 3次元ポテンシャル散乱

はずである. よって $r \rightarrow \infty$ での振る舞いは

$$\psi \sim e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \quad (18.3)$$

となる. $f(\theta)$ を散乱振幅といい, これを求めることが散乱理論の主題である.

■中心力に対する部分波展開法

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l R_{nl} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (18.4)$$

ここに Y_{lm} は球関数で,

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \sim e^{im\varphi} P_l(\cos \theta) \quad (18.5)$$

いま φ 依存性がないので, $m = 0$ のところ,

$$Y_{l0} \propto P_l(\cos \theta) \quad (18.6)$$

ここに $P_l(\cos \theta)$ は Legendre 多項式.

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} R_{nl}(r) (2l+1) P_l(\cos \theta) \quad (r \rightarrow \infty) \quad (18.7)$$

■短距離力の仮定 ここで扱うポテンシャルは短距離力であるとする. 例えば陽子-中性子間の核力を井戸形ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (r < a) \\ 0 & (r > a) \end{cases} \quad (18.8)$$

で近似すると, $a \sim 10^{-12} \text{m}$ くらいである.

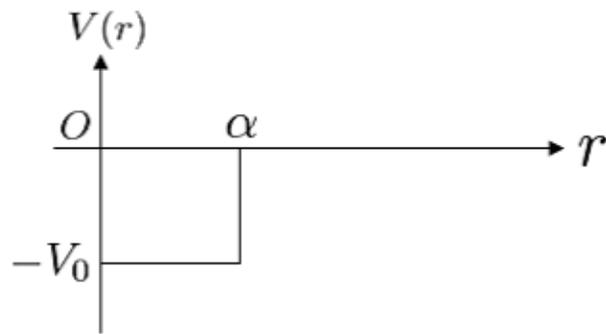
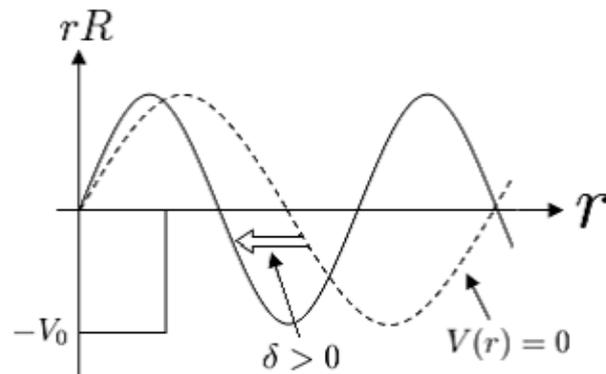


図 18.3 p-n 間の核力

■ phase shift (位相のずれ) 短距離力の影響で, $R_{nl}(r)$ の $r \rightarrow \infty$ 漸近形は

$$R_{nl}(r) \sim \frac{ce^{i\delta_l}}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \quad (18.9)$$

となる. δ_l を phase shift という. V が引力のとき $\delta > 0$, 斥力のとき $\delta < 0$ となる.

図 18.4 p-n 間の核力における $l = 0$ 波の phase shift

指数関数を使って書き換えると

$$\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) = \frac{i}{2} \left(e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} - e^{i(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} \right) \quad (18.10)$$

となるから

$$\psi(r) \sim \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{r} \left\{ e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} - e^{i(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} \right\} P_l(\cos \theta) \quad (18.11)$$

$e^{-i\delta_l}$ をくくり出せば

$$\psi(r) \sim \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{r} \left\{ e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{2i\delta_l} e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right\} P_l(\cos \theta) \quad (18.12)$$

$e^{2i\delta_l}$ の項を

$$e^{2i\delta_l} = (e^{2i\delta_l} - 1) + 1 \quad (18.13)$$

と書き直すと

$$\begin{aligned} \psi(r) \sim & \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{r} \left\{ e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right\} P_l(\cos \theta) \\ & - \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{r} (e^{2i\delta_l} - 1) e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (18.14)$$

ここで公式

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l(kr) (2l+1) P_l(\cos \theta) \quad (18.15)$$

ただし j_l は球ベッセル関数で

$$j_l(x) = \frac{1}{\sqrt{s}} J_{l+\frac{1}{2}}(x) \quad (18.16)$$

を用いると、第 1 項は $r \rightarrow \infty$ での漸近形が $e^{ikr \cos \theta}$ だから入射波である。よって第 2 項が散乱球面波であり、散乱振幅は

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{s_l - 1}{2ik} P_l(\cos \theta) \quad (18.17)$$

ただし $s_l \equiv e^{2i\delta_l}$ とおいた。これが部分波展開による散乱振幅の公式である。

18.0.2 散乱断面積

$$\psi \sim e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \quad (18.18)$$

第 1 項の入射波を ψ_1 、第 2 項の散乱波を ψ_2 とする。

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 \quad (18.19)$$

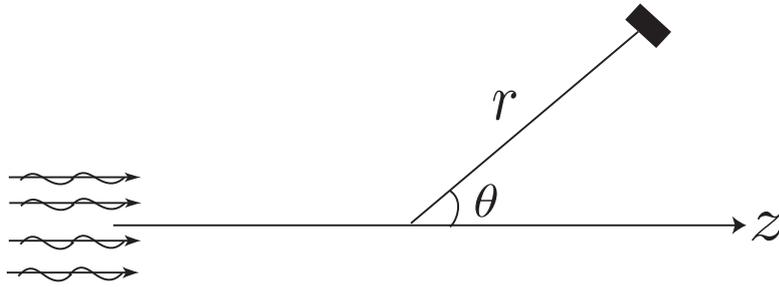


図 18.5 散乱断面積

確率流と確率密度は

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (18.20)$$

$$\rho = \psi^* \psi \quad (18.21)$$

であり，確率保存

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (18.22)$$

が成立した。いま確率流を計算すると

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar k}{m} \hat{z} + \frac{\hbar k}{r^2} |f(\theta)|^2 \hat{r} + (\text{入射波と散乱波の干渉項}) \quad (18.23)$$

となる。ただし \hat{z}, \hat{r} は各々， z 方向，動径方向の単位ベクトル。第 1 項が入射波のカレント，第 2 項が散乱波のカレントである。以下，干渉項を無視する。

$$\text{単位時間に単位面積を通過する粒子の数 } v = \frac{\hbar k}{m} \quad (18.24)$$

また

$$\begin{aligned} &(\theta, \varphi) \text{ 方向に立体角 } d\Omega (= \sin \theta d\theta d\varphi) \text{ へと散乱される粒子の数} \\ &= \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} |f(\theta)|^2 r^2 d\Omega = v |f(\theta)|^2 d\Omega \end{aligned} \quad (18.25)$$

より，

$$\text{散乱される確率 } d\sigma = \frac{v |f(\theta)|^2 d\Omega}{v} = |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (18.26)$$

これを (θ, φ) 方向への微分断面積という。全断面積は

$$\sigma = \int d\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (18.27)$$

■ $R_{nl} \sim \frac{c}{r} \sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)$ の導き方 井戸形ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (r < a) \\ 0 & (r > a) \end{cases} \quad (18.28)$$

の場合.

Schrödinger 方程式より

$$\begin{cases} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) R = 0 & (r < a) \\ \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} E R = 0 & (r > a) \end{cases} \quad (18.29)$$

ここで

$$K^2 \equiv \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}, \quad k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (18.30)$$

とおくと, 一般解は球ベッセル関数を用いて

$$R_l(r) = \begin{cases} A j_l(Kr) + A' n_l(Kr) & (r < a) \\ B j_l(kr) + C n_l(kr) & (r > a) \end{cases} \quad (18.31)$$

まず $r = 0$ で発散しないためには

$$A' = 0 \quad (18.32)$$

また $r = a$ での接続条件より

$$\begin{cases} B j_l(ka) + C n_l(ka) = A j_l(Ka) \\ B \left(\frac{dj_l}{dr} \right)_{r=a} + C \left(\frac{dn_l}{dr} \right)_{r=a} = A \left(\frac{dj_l}{dr} \right)_{r=a} \end{cases} \quad (18.33)$$

これから C/B が決定される.

$r \rightarrow \infty$ での j_l, n_l の漸近形より,

$$R_l(r) \sim \frac{B}{2ikr} \left\{ e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right\} - \frac{C}{2kr} \left\{ e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} + e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right\} \quad (18.34)$$

$$= \frac{C - iB}{2kr} \left\{ e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} + \left(\frac{C + iB}{C - iB} \right) e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right\} \quad (18.35)$$

ここで

$$\left| \frac{C + iB}{C - iB} \right| = 1 \quad (18.36)$$

だから

$$\frac{C + iB}{C - iB} = -e^{i\delta_l} \quad (18.37)$$

とにおいて,

$$R_l(r) \simeq \frac{-C + iB}{2kr} \left\{ e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{2i\delta_l} e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right\} \quad (18.38)$$

$$= \frac{(-C + iB)e^{i\delta_l}}{2kr} \left\{ e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} - e^{i(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} \right\} \quad (18.39)$$

$$= \frac{K}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \quad (18.40)$$

ここに

$$K = i(-C + iB)e^{e\delta_l} = -(B + iC)e^{i\delta_l} \quad (18.41)$$

第 19 章

多粒子系

19.0.1 ボーズ粒子系とフェルミ粒子系

同種粒子は本質的に区別不可能である。したがって N 個の同種粒子系の状態は、粒子の座標の入れ替え（置換）

$$P = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & N \\ i & \cdots & m \end{pmatrix} \quad (19.1)$$

によって、符号を除いて元の値に戻らねばならない。

$$\psi(x_i, \cdots, x_m) = \pm \psi(x_1, \cdots, x_N) \quad (19.2)$$

座標の置換演算子 P を

$$P\psi(x_1, \cdots, x_N) \equiv \psi(x_i, \cdots, x_m) \quad (19.3)$$

で定義する。特に互換

$$P_{ij} = \begin{pmatrix} i & j \\ j & i \end{pmatrix} \quad (19.4)$$

の演算子を P_{ij} とする。

「任意の置換は互換の“積”で表せる」というのはよく知られた定理であるが、互換の積で表したとき、偶数個の互換で表されるものを偶置換、奇数個の互換で表されるものを奇置換という。

すべての置換 P に対して、

$$P\psi(x_1, \cdots, x_N) = \psi(x_1, \cdots, x_N) \quad (19.5)$$

のとき、 $\psi(x_1, \cdots, x_N)$ は対称状態 (symmetric) であるという。対称状態のみが実現する粒子系をボーズ粒子系という。

すべての置換 P に対して,

$$P\psi(x_1, \dots, x_N) = \begin{cases} \psi(x_1, \dots, x_N) & (P \text{ が偶置換のとき}) \\ -\psi(x_1, \dots, x_N) & (P \text{ が奇置換のとき}) \end{cases} \quad (19.6)$$

のとき, $\psi(x_1, \dots, x_N)$ は反対称状態 (anti-symmetric) であるという. 反対称状態のみが実現する粒子系をフェルミ粒子系という.

19.0.2 1 粒子状態からの構成

対称, 反対称な $\psi(x_1, \dots, x_N)$ を 1 粒子状態 $\phi(x)$ から作ることができる.

同種粒子が相互作用せず集まっている場合には, 系のハミルトニアンは 1 粒子のハミルトニアン $h(x)$ を用いて

$$H = h(x_1) + h(x_2) + \dots + h(x_N) = \sum_{i=1}^N h(x_i) \quad (19.7)$$

と与えられる. このような系を考える. 1 粒子ハミルトニアンとしては例えば,

$$h = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (19.8)$$

のようなものを想定しておけばよい. 固有方程式

$$H\psi(x_1, \dots, x_N) = E\psi(x_1, \dots, x_N) \quad (19.9)$$

は

$$(h(x_1) + h(x_2) + \dots + h(x_N))\psi(x_1, \dots, x_N) = E\psi(x_1, \dots, x_N) \quad (19.10)$$

であるが, 変数分離

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\cdots\phi_N(x_N) \quad (19.11)$$

を仮定すると, 同一の境界条件に従う 1 粒子固有値問題

$$h(x_i)\phi_i(x_i) = \epsilon_i\phi_i(x_i) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (19.12)$$

および

$$\sum_{i=1}^N \epsilon_i = E \quad (19.13)$$

に帰着される. この 1 粒子固有値問題の解を $\epsilon_{k_i}, \phi_{k_i}(x_i)$ と書くと系の固有値は

$$E_{k_1, \dots, k_N} = \sum_{i=1}^N \epsilon_{k_i} \quad (19.14)$$

固有関数は

$$\phi_{k_1}(x_1) \cdots \phi_{k_N}(x_N) \quad (19.15)$$

となる。これを用いて対称状態，反対称状態を作る。（単純にこれを置換しても，

$$P\phi_{k_1}(x_1) \cdots \phi_{k_N}(x_N) = \phi_{k_1}(x_i) \cdots \phi_{k_N}(x_m) \neq \phi_{k_1}(x_1) \cdots \phi_{k_N}(x_N) \quad (19.16)$$

だから対称ではないことに注意。）

対称状態は，

$$\psi_S(x_1, \cdots, x_N) = \sum_P P\{\phi_{k_1}(x_1) \cdots \phi_{k_N}(x_N)\} \quad (19.17)$$

として作ることができる。ただし和はすべての置換（ $N!$ 通り）についてとる。実際，任意の置換 \tilde{P} に対して，

$$\tilde{P}\psi_S(x_1, \cdots, x_N) = \tilde{P} \sum_P P\{\phi_{k_1}(x_1) \cdots \phi_{k_N}(x_N)\} \quad (19.18)$$

$$= \sum_P \tilde{P}P\{\phi_{k_1}(x_1) \cdots \phi_{k_N}(x_N)\} \quad (19.19)$$

となるが， $\tilde{P}P$ はまた一つの置換を与え，そのすべてについて和をとるので，

$$\sum_P \tilde{P}P = \sum_P P \quad (19.20)$$

である（置換全体は群を作ることに注意。これを置換群という）。よって

$$\tilde{P}\psi_S = \psi_S \quad (19.21)$$

反対称状態は

$$\psi_A(x_1, \cdots, x_N) = \sum_P \text{sign}(P)P\{\phi_{k_1}(x_1) \cdots \phi_{k_N}(x_N)\} \quad (19.22)$$

として作ることができる。ただし

$$\text{sign}(P) = \begin{cases} 1 & (P \text{ が偶置換}) \\ -1 & (P \text{ が奇置換}) \end{cases} \quad (19.23)$$

これはまた行列式の定義になっているから，

$$\psi_A(x_1, \cdots, x_N) = \det \phi_{k_i}(x_j) \quad (19.24)$$

$$= \begin{vmatrix} \phi_{k_1}(x_1) & \phi_{k_2}(x_1) & \cdots & \phi_{k_N}(x_1) \\ \phi_{k_1}(x_2) & \phi_{k_2}(x_2) & \cdots & \phi_{k_N}(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k_1}(x_N) & \phi_{k_2}(x_N) & \cdots & \phi_{k_N}(x_N) \end{vmatrix} \quad (19.25)$$

とも書くことができる。これを Slater 行列式という。行列式の性質（行または列を入れ替えると符号が変わる）より

$$\tilde{P}_{\text{偶}}\psi_A(x_1, \dots, x_N) = \psi_A(x_1, \dots, x_N) \quad (19.26)$$

$$\tilde{P}_{\text{奇}}\psi_A(x_1, \dots, x_N) = -\psi_A(x_1, \dots, x_N) \quad (19.27)$$

が確かめられる。また、 $k_i = k_j$ のとき $\psi_A = 0$ となってしまう。これは 2 個以上の粒子が同じ状態をしめることができないということで、Pauli 原理という。

量子統計においては、フェルミ粒子系のしたがう統計法則をフェルミ統計、ボーズ粒子系のしたがう統計法則をボーズ統計という。フェルミ粒子系においてはフェルミ準位というものが現れ、ボーズ粒子系においてはボーズ凝縮 (Bose condensation) という現象が現れる。

19.0.3 対称状態と反対称状態

まずボーズ粒子とフェルミ粒子での粒子の入れ替えに対する違いを見てみよう。最初に粒子が $(1, 2, \dots, N)$ という順番で並んでいる状態に一組の粒子の入れ替えの演算子 P が作用して並びが α, \dots, ω になることは

$$P\psi(1, \dots, N) = (\text{定数}) \times \psi(\alpha, \dots, \omega)$$

と表すことができる。ただし同種粒子は互いに区別できないため (α, \dots, ω) は $(1, \dots, N)$ と一致している。同じ理由で波動関数のノルムが変わってはいけないので定数は 1 か -1 であるとわかる。以上から、粒子の入れ替えに対する対称状態と反対称状態を次のように定義する。

$$P\psi(x_1, \dots, x_N) = \psi(x_1, \dots, x_N) \quad \text{対称状態} \quad (19.28)$$

$$P\psi(x_1, \dots, x_N) = \begin{cases} +\psi(x_1, \dots, x_N) & \text{for } P = P_{\text{even}} \\ -\psi(x_1, \dots, x_N) & \text{for } P = P_{\text{odd}} \end{cases} \quad \text{反対称状態} \quad (19.29)$$

ただし、 P_{even} は偶数個の置換の積である偶置換、 P_{odd} は奇数個の置換の積である奇置換を表している。

$\psi(x_1, \dots, x_N)$ の具体的な構成は粒子それぞれの一体状態の積を用いて

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \psi_{\alpha_1}(s_1)\psi_{\alpha_2}(x_2)\cdots\psi_{\alpha_N}(x_N) \quad (19.30)$$

と書くことができるが、置換演算子を作用させると

$$\begin{aligned} P_{12}\psi_{\alpha_1}(x_1)\psi_{\alpha_2}(x_2)\cdots\psi_{\alpha_N}(x_N) &= \psi_{\alpha_1}(x_2)\psi_{\alpha_2}(x_1)\cdots\psi_{\alpha_N}(x_N) \\ &\neq \psi_{\alpha_1}(x_1)\psi_{\alpha_2}(x_2)\cdots\psi_{\alpha_N}(x_N) \end{aligned}$$

となることに注意しよう。

19.0.4 対称状態

\sum_P を考えられる全ての置換についての和とし、次のように対称状態の波動関数 ψ_s を定義する。

$$\sum_P P\psi_{\alpha_1}(x_1)\cdots\psi_{\alpha_N}(x_N) = \psi_s(x_1, \dots, x_N) \quad (19.31)$$

ただし、任意の置換 P' を \sum_P に作用させても \sum_P 自体は変わらず

$$P' \sum_P P = \sum_P (P'P) = \sum_P P$$

となっている。これより

$$\begin{aligned} P'\psi_s(x_1, \dots, x_N) &= \sum_P P'P\psi_{\alpha_1}(x_1)\cdots\psi_{\alpha_N}(x_N) \\ &= \sum_P P\psi_{\alpha_1}(x_1)\cdots\psi_{\alpha_N}(x_N) \\ &= \psi_s(x_1, \dots, x_N) \end{aligned} \quad (19.32)$$

対称状態 ψ_s は入れ替えの演算子 P に対して対称であることがわかる。

19.0.5 反対称状態

反対称状態の波動関数 ψ_A は次のように書ける。

$$\sum_P \text{sign}(P)P\psi_{\alpha_1}(x_1)\cdots\psi_{\alpha_N}(x_N) = \psi_A(x_1, \dots, x_N) \quad (19.33)$$

ただし

$$\text{sign}(P) = \begin{cases} +1 & \text{for } P = P_{\text{even}} \\ -1 & \text{for } P = P_{\text{odd}} \end{cases} \quad (19.34)$$

である。 ψ_A は任意の置換を \hat{P} とすることで

$$P'\psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_P \text{sign}(P)P'P\psi_A(x_1, \dots, x_N) \quad (19.35)$$

の関係を満たす。ここで P' が偶置換ならば P の置換の偶奇を変えず、また奇置換ならば P の置換の偶奇を変えるため、

$$P' = P_{\text{even}} \text{ のとき } \text{sign}(P'P) = +\text{sign}(P) \quad (19.36)$$

$$P' = P_{\text{odd}} \text{ のとき } \text{sign}(P'P) = -\text{sign}(P) \quad (19.37)$$

の関係が成り立っている。これより P_{even} と P_{odd} に関して多体系の波動関数 ψ_A は次のように変換される。

$$\begin{aligned} P'_{\text{even}} \psi_A(x_1, \dots, x_N) &= \sum_{PP'} \text{sign}(P'_{\text{even}} P) P' P \psi_{\alpha_1}(x_1) \cdots \psi_{\alpha_N}(x_N) \\ &= \psi_A(x_1, \dots, x_N) \end{aligned} \quad (19.38)$$

$$\begin{aligned} P'_{\text{odd}} \psi_A(x_1, \dots, x_N) &= \sum_{PP'} \text{sign}(P'_{\text{odd}} P) P' P \psi_{\alpha_1}(x_1) \cdots \psi_{\alpha_N}(x_N) \\ &= -\psi_A(x_1, \dots, x_N) \end{aligned} \quad (19.39)$$

また ψ_A は次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} \psi_A(x_1, \dots, x_N) &= \det \psi_{\alpha_i}(x_i) \\ &= \begin{vmatrix} \psi_{\alpha_1}(x_1) & \psi_{\alpha_1}(x_2) & \cdots & \psi_{\alpha_1}(x_N) \\ \psi_{\alpha_2}(x_1) & \psi_{\alpha_2}(x_2) & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\alpha_N}(x_1) & \psi_{\alpha_N}(x_2) & \cdots & \psi_{\alpha_N}(x_N) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (19.40)$$

行番号は状態番号 i を、列番号は粒子番号 j を表している。もし $\alpha_i = \alpha_j$ であれば

$$\psi_A(x_1, \dots, x_N) = 0$$

となるがこれは Pauli 原理を表している。

19.1 フェルミおよびボーズ粒子系の統計力学

目標： 区別ができない（量子力学的に）粒子の多体系に対する統計力学の基礎を築く。

○ 準備

● カノニカル分布

以下では、量子力学的な状態を考えているので離散的なエネルギー状態のみを考察する。

$$w_n = \exp[(F - E_n)/kT]$$

$$F = -kT \log \sum_n \exp[-E_n/kT] \equiv -kT \log Z$$

ここで、分配関数

$$Z = \sum_n \exp[-E_n/kT]$$

これを粒子数の変化を許容するような場合に拡張すると、

● グランドカノニカル分布

$$w_{nN} = \exp[(\Omega + \mu N - E_n)/kT]$$

$$\Omega = -kT \log \sum_N \exp[\mu N/kT] \left\{ \sum_n \exp[-E_n/kT] \right\}$$

あるいは、

● μ 化学ポテンシャル：粒子数 N に共役な量 \iff 体積 V と圧力 P が共役: \implies これに関しては別途説明する

○ 量子統計

目的：熱平衡状態において、『1粒子（量子）状態』 k ；（この概念が重要）に入りうる平均粒子数の分布をもとめる。

k 番目の1粒子状態のエネルギーを ϵ_k とおく。かつにある粒子数を n_k とおく。すると、全エネルギーは

$$E_{nN} = \sum_{n_k} \epsilon_k n_k$$

となる。かつ全粒子数は

$$N = \sum_k n_k$$

そこで、グランドカノニカル分布の公式にあてはめると

$$Z = \sum_{\{ \dots n_k \dots \}} \exp\left[\mu \sum_k n_k / kT\right] \exp\left[\sum_k \epsilon_k n_k / kT\right]$$

これは

$$Z = \left(\sum_{n_{k_1}} \exp[(\mu - \epsilon_{k_1}) n_{k_1} / kT] \right) \cdots \left(\sum_{n_k} \exp[(\mu - \epsilon_k) n_k / kT] \right) \cdots \equiv \prod_k \left(\sum_{n_k} \exp[(\mu - \epsilon_k) n_k / kT] \right)$$

従って、熱力学的ポテンシャル

$$\Omega (= F - \mu N) = -kT \sum_k \log \left(\sum_{n_k} \exp[(\mu - \epsilon_k) n_k / kT] \right) \equiv \sum_k \Omega_k$$

すなわち、1 粒子状態のポテンシャル Ω_k の和となる。

ここで、 \sum_{n_k} のとりかたで、フェルミとボーズ分布が得られる。

○ フェルミ粒子系

パウリ原理 より、 $n_k = 0, 1$ の 2 とおりのみ：従って、

$$\Omega_k = -kT \log(1 + \exp[(\mu - \epsilon_k) / kT])$$

○ ボーズ粒子系

$n_k = 0 \cdots \infty$ のすべてをとれるので、

$$\Omega_k = -kT \log \sum_{n_k=0}^{\infty} \exp[(\mu - \epsilon_k) n_k / kT] = -kT \log \left(\frac{1}{1 - \exp[(\mu - \epsilon_k) / kT]} \right)$$

ここで、

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x} \quad (x < 1)$$

• 最後に、各状態の平均粒子数 \bar{n}_k は

$$\bar{n}_k = -\frac{\partial \Omega_k}{\partial \mu}$$

をもちいると（この公式は別途説明する）：

$$\bar{n}_k = \frac{1}{\exp[(\epsilon_k - \mu) / kT] \pm 1}$$

ここで、 \pm は、それぞれ、フェルミ、ボーズ分布であることはいうまでもない。

19.2 第2量子化

19.2.1 ボーズ粒子系

ここではボーズ粒子の代表として光子の統計性を考えてみよう。光子は電磁場を量子化することで無限個の調和振動子の集合に置き換えることができた。電磁場の代わりに Schrödinger 方程式を満たす場 ψ を用いる。Schrödinger 方程式は

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

ここでは $\psi(x, t)$ を古典的な場と見なすことで Schrödinger 方程式を Maxwell 方程式と対応させて考える。 $\psi(x, t)$ を直交関数展開した形は

$$\psi(x, t) = \sum_n C_n(t) \phi_n(x) \quad (19.41)$$

$$\begin{aligned} H\phi_n(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \phi_n(x) \\ &= E_n \phi_n(x) \end{aligned} \quad (19.42)$$

を用いて ψ 場のエネルギーは

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \int \psi^*(x, t) H \psi(x, t) dx \\ &= \int \sum_m C_m^*(t) \phi_m^*(x) H \sum_n C_n(t) \phi_n(x) dx \\ &= \sum_m \sum_n C_m^*(t) C_n(t) \underbrace{\int \phi_m^*(x) H \phi_n(x) dx}_{E_n \delta_{nm}} \\ \therefore \mathcal{H} &= \sum_n E_n C_n^*(t) C_n(t) \end{aligned} \quad (19.43)$$

次にこの $C_n^*(t)$ と $C_n(t)$ の満たす運動方程式を考えよう。

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_n C_n(t) \phi_n(x) &= H \sum_n C_n(t) \phi_n(x) \\ &= \sum_n C_n(t) E_n \phi_n(x) \end{aligned} \quad (19.44)$$

左から ϕ_m^* を掛けて積分して

$$\sum_n i\hbar \frac{dC_n(t)}{dt} \underbrace{\int \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx}_{\delta_{mn}} = C_n(t) E_n \sum_n \underbrace{\int \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx}_{\delta_{mn}} \quad (19.45)$$

これより

$$\begin{aligned} \therefore i\hbar \frac{dC_n}{dt} &= E_n C_n \\ \frac{dC_n}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} E_n C_n \\ \text{同様に } \frac{dC_m^*}{dt} &= \frac{i}{\hbar} E_m C_m^* \\ \frac{E_n}{\hbar} &= \omega_n, \quad E_n = \hbar\omega \quad \text{とおくことで} \end{aligned}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{dC_n}{dt} &= -i\omega_n C_n \\ \frac{dC_n^*}{dt} &= i\omega_n C_n^* \end{aligned}} \quad (19.46)$$

これが複素形式での調和振動子の運動方程式である。

19.2.2 ブラケット形式

状態番号 i 、粒子番号 k のケットベクトルを $|\alpha_k^i\rangle$ として表すと、 n 粒子系の波動関数を次のように表すことができる。

$$|\alpha_1^a\rangle|\alpha_2^b\rangle\cdots|\alpha_n^g\rangle \equiv |\alpha_1^a\alpha_2^b\cdots\alpha_n^g\rangle \quad (19.47)$$

$$\langle x_1\cdots x_n|\alpha_1^a\alpha_2^b\rangle \equiv \langle x_1|\alpha_1^a\rangle\langle x_2|\alpha_2^b\rangle\cdots\langle x_n|\alpha_n^g\rangle \quad (19.48)$$

すなわち

$$\psi_{a,b,\dots,g}(x_1,\dots,x_n) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2)\cdots\psi_g(x_n) \quad (19.49)$$

対称化の例として規格化されたボース粒子系を考える。粒子状態 (a,b,\dots,g) のみが問題となるため粒子番号 $(1,2,\dots,n)$ は省略することができて、

$$\frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_P P|\alpha_1^a\alpha_2^b\cdots\alpha_n^g\rangle \equiv S|\alpha^a\alpha^b\cdots\alpha^g\rangle \quad (19.50)$$

と書ける。ここで対称化演算子として $S = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_P P$ を用いている。

19.2.3 占拠数表示

今はボース粒子を扱っているので n 個の状態 α^i の中で同じ状態があってもよい。そこで、状態 $\alpha^{(i)}$ のものが n_i 個あるとするとを集めて表して

$$\alpha^a + \alpha^b + \cdots = n_1\alpha^{(1)} + n_2\alpha^{(2)} + \cdots \quad (19.51)$$

となる。ただし $n_1 + n_2 + \dots = n$ を満たしているものとする。

占拠数 n_i を用いた表式で状態を表そう。 i 番目の調和振動子のブラベクトルはこの占拠数 n_i を用いて $|n_i\rangle$ と表すことができる。また C_i は古典シュレディンガー場に対応する i 番目の調和振動子であったが、演算子 \hat{C}_i^\dagger や \hat{C}_i は i 番目の調和振動子の生成消滅演算子であった。そのため $|n_i\rangle$ は真空状態 $|0_i\rangle$ を用いて

$$\boxed{|n_i\rangle = \frac{(\hat{C}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}|0_i\rangle} \quad (19.52)$$

となる。全系のブラベクトルは

$$|n_1 n_2 \dots\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle \dots \quad (19.53)$$

であるので、これより

$$\begin{aligned} |n_1, n_2, \dots\rangle &= |n_1\rangle |n_2\rangle \dots \\ &= \frac{1}{\sqrt{n_1!}} (C_1^\dagger)^{n_1} |0_1\rangle \frac{1}{\sqrt{n_2!}} (C_2^\dagger)^{n_2} |0_2\rangle \dots \\ &= \frac{1}{\sqrt{n_1!} \sqrt{n_2!} \dots} (C_1^\dagger)^{n_1} (C_2^\dagger)^{n_2} \dots |0_1\rangle |0_2\rangle \dots \\ &= (n_1! n_2! \dots)^{-\frac{1}{2}} (C_1^\dagger)^{n_1} (C_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle \end{aligned} \quad (19.54)$$

ただし $|0\rangle = |0_1\rangle |0_2\rangle \dots$ としている。

対称状態を $|n_i\rangle$ を用いて表そう。規格化するために係数 N を用いて

$$S|\alpha^a \alpha^b \dots \alpha^g\rangle = N|n_1 n_2 \dots\rangle \quad (19.55)$$

とすると、

$$\langle \alpha^a \alpha^b \dots \alpha^g | S^\dagger S | \alpha^a \alpha^b \dots \alpha^g \rangle = n_1! n_2! \dots \quad (19.56)$$

より $N^2 = n_1! n_2! \dots$ である。規格化して占拠数表示のブラベクトルが得られる。

$$\boxed{\frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} S | \alpha^a \alpha^b \dots \alpha^g \rangle = |n_1 n_2 \dots\rangle} \quad (19.57)$$

19.2.4 交換関係

\hat{C}_i と \hat{C}_j^\dagger の間に次のような交換関係が成り立つとする。

$$\boxed{\begin{aligned} [\hat{C}_i^\dagger, \hat{C}_i] &= [\hat{C}_i, \hat{C}_i^\dagger] = 0 \\ \hat{C}_i^\dagger \hat{C}_j^\dagger &= \hat{C}_j^\dagger \hat{C}_i^\dagger, \quad \hat{C}_i \hat{C}_j = \hat{C}_j \hat{C}_i \\ [\hat{C}_i, \hat{C}_j^\dagger] &= \delta_{i,j} \end{aligned}} \quad (19.58)$$

すると二行目から i 番目の粒子と j 番目の粒子の交換に対して状態が対称化されていることがわかる。また、

$$\langle \cdots | SS | \alpha^a \alpha^b \cdots \alpha^g \rangle = n_1! n_2! \cdots \quad (19.59)$$

より

$$S | \alpha^a \alpha^b \cdots \alpha^g \rangle = C_a^\dagger C_b^\dagger \cdots | 0 \rangle \quad (19.60)$$

ただしこの生成演算子 \hat{C}_a^\dagger は個々の粒子についての演算子であり、占拠数表示の演算子 \hat{C}_i^\dagger とは別物である。

19.2.5 演算子の \hat{C}^\dagger, \hat{C} による表示

これまでは一つの状態に作用する演算子（一体演算子）を主に扱ってきたが、ここでは多体に対する演算子を考えてみよう。例えば二体演算子 $\hat{V}_{i,j}$ であれば具体的には i 番目の状態から j 番目の状態に遷移する際のポテンシャルなどがこれに相当する。

これらの多体演算子の粒子の入れ替えに対する性質は次のようになる。

$$\begin{aligned} \text{一体} \quad \hat{X} &= \sum_{i=1}^n \hat{X}_i && \text{入れ替えに対して不変} \\ \text{二体} \quad \hat{Y} &= \sum_{i,j} \hat{Y}_{i,j} && \text{任意の } i, j \text{ の入れ替えに対して不変} \\ \text{三体} \quad \hat{Z} &= \sum_{i,j,k} \hat{Z}_{i,j,k} && \text{任意の } i, j, k \text{ の入れ替えに対して不変} \\ &\vdots && \end{aligned}$$

以下では一体の演算子を生成消滅演算子を用いて表そう。 $\hat{T} = \sum_i \hat{t}_i$ なる一体演算子について

$$\begin{aligned} \hat{T} | \alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \cdots \rangle &= \sum_i \hat{t}_i | \alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \cdots \underbrace{\alpha_i^{x_i}}_{i \text{ 番目}} \cdots \rangle \\ &= \sum_{\alpha_i} | \alpha_1^{x_1} \cdots \underbrace{\cdots}_{i \text{ 番目}} \rangle \hat{t}_i | \alpha_i^{x_i} \rangle \quad (|\alpha_i^{x_i}\rangle \text{ を後ろに持ってきた}) \\ &= \sum_i \left(\sum_{\alpha_i} | \alpha_1^{x_1} \cdots \underbrace{\cdots}_{i \text{ 番目}} \rangle | \alpha_i \rangle \langle \alpha_i | \hat{t}_i | \alpha_i^{x_i} \rangle \right) \\ &= \sum_i \left(\sum_a | \alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \cdots \underbrace{\alpha_i^a}_{i \text{ 番目}} \cdots \rangle \langle a | \hat{t}_i | x_i \rangle \right) \end{aligned}$$

ただし、最後の行で α_i を a に置き換え、 $|\alpha^{x_i}\rangle$ などを $|x_i\rangle$ のように書いている。これをまとめて

$$\hat{T}|\alpha_1^{x_1}\alpha_2^{x_2}\dots\rangle = \sum_i \left(\sum_a |\alpha_1^{x_1}\alpha_2^{x_2}\dots\alpha_i^a\dots\rangle \langle a|\hat{t}_i|x_i\rangle \right) \quad (19.61)$$

これに対称化演算子 S を作用させる。式 (19.60) を考慮して

$$\begin{aligned} S \left(\sum_i \hat{t}_i \right) |\alpha_1^{x_1}\alpha_2^{x_2}\dots\rangle &= \left(\sum_i \hat{t}_i \right) S |\alpha_1^{x_1}\alpha_2^{x_2}\dots\rangle \\ &= \sum_i \sum_a S |\alpha_1^{x_1}\alpha_2^{x_2}\dots\alpha_i^a\dots\rangle \langle a|\hat{t}_i|x_i\rangle \\ &= \sum_a \sum_i \hat{C}_a^\dagger \hat{C}_{x_i}^{-1} \underbrace{\hat{C}_{x_1}^\dagger \hat{C}_{x_2}^\dagger \dots |0\rangle}_{|\alpha_1^{x_1}\alpha_2^{x_2}\dots\alpha_i^{x_i}\dots\rangle} \langle a|\hat{t}_i|x_i\rangle \end{aligned}$$

ただし $\hat{C}_{x_i}^{-1}$ は $\hat{C}_{x_i}^\dagger$ を取り除く演算子 $\frac{\partial}{\partial \hat{C}_{x_i}^\dagger}$ を表している。両辺共に書き直して

$$\begin{aligned} \left(\sum_{i=1}^n \hat{t}_i \right) \hat{C}_{x_1}^\dagger \hat{C}_{x_2}^\dagger \dots |0\rangle &= \sum_a \sum_i \hat{C}_a^\dagger \hat{C}_{x_i}^{-1} \hat{C}_{x_1}^\dagger \hat{C}_{x_2}^\dagger \dots |0\rangle \langle a|\hat{t}_i|x_i\rangle \\ &= \sum_{a,b} \sum_i \hat{C}_a^\dagger \hat{C}_{x_i}^{-1} \hat{C}_{x_1}^\dagger \hat{C}_{x_2}^\dagger \dots |0\rangle \langle a|\hat{t}_i|b\rangle \langle b|x_i\rangle \\ &= \sum_{a,b} \hat{C}_a^\dagger \underbrace{\sum_i \hat{C}_{x_i}^{-1} \hat{C}_{x_1}^\dagger \hat{C}_{x_2}^\dagger \dots |0\rangle}_{\hat{C}_b^{-1} \hat{C}_{x_1}^\dagger \hat{C}_{x_2}^\dagger \dots |0\rangle} \delta_{bx_i} \langle a|\hat{t}_i|b\rangle \end{aligned}$$

これより

$$\left(\sum_{i=1}^n \hat{t}_i \right) \hat{C}_{x_1}^\dagger \hat{C}_{x_2}^\dagger \dots |0\rangle = \sum_{ab} \hat{C}_a^\dagger \langle a|\hat{t}_i|b\rangle \hat{C}_b \hat{C}_{x_1}^\dagger \hat{C}_{x_2}^\dagger \dots |0\rangle \quad (19.62)$$

両辺を比較することで

$$\sum_{i=1}^n \hat{t}_i = \sum_{a,b} \hat{C}_a^\dagger \langle a|\hat{t}_i|b\rangle \hat{C}_b \quad (19.63)$$

一体の演算子を生成消滅演算子で表すことができた。

19.2.6 フェルミ粒子系の第 2 量子化

反対称状態はフェルミ粒子系の状態に相当する。ボース粒子系では \hat{S} を対称化演算子とすると

$$\left(\frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_P P \right) |\alpha_1^a \alpha_2^b \dots\rangle = S |\alpha^a \alpha^b \dots\rangle$$

としていた。この演算子 S に対応する反対称化演算子を A とすると

$$\left(\frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_P \text{sign}(P) P \right) |\alpha_1^a \alpha_2^b \dots\rangle = A |\alpha^a \alpha^b \dots\rangle \quad (19.64)$$

ただし、

$$\text{sign}(P) = \begin{cases} +1 & \text{for } P = P_{\text{even}} \\ -1 & \text{for } P = P_{\text{odd}} \end{cases} \quad (19.65)$$

であった。ここで

$$A |\alpha_1^a \alpha_2^b \dots\rangle = \det \begin{vmatrix} |a_1\rangle & |a_2\rangle & \dots \\ |b_1\rangle & |b_1\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \quad (19.66)$$

これはパウリ原理を表している。反交換関係 $[A, B]_{\dagger} = AB + BA$ を満たす昇降演算子を新たに定義して

$$\boxed{[\hat{C}_a^{\dagger}, \hat{C}_b]_{+} = \delta_{ab}, [\hat{C}_a, \hat{C}_b]_{+} = [\hat{C}_a^{\dagger}, \hat{C}_b^{\dagger}]_{+} = 0} \quad (19.67)$$

この昇降演算子を用いて反対称状態を書き直して

$$\boxed{A |\alpha^a \alpha^b \dots\rangle = \hat{C}_a^{\dagger} \hat{C}_b^{\dagger} \dots |0\rangle} \quad (19.68)$$

また対称状態の時のように占拠数 n_i を使って状態を書き直した場合

$$\alpha^a + \alpha^b + \dots = n_1 \alpha^{(1)} + n_2 \alpha^{(2)} + \dots \quad (19.69)$$

であるが、 $n_i = 1$ または 0 である。

19.2.7 生成消滅演算子の導入

ボース粒子の場合と同様に一粒子状態に関しては $\psi(x, t)$ は Schrödinger 方程式を満たす古典的場とみなす。そして、直交関数系 $\pi_n(x)$ で展開して展開係数 C_n に対数調和振動子型ハミルトニアンが定義される。

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon_n C_n^* C_n \quad (19.70)$$

$C_n C_n^\dagger$ を量子化して $\hat{C}_n \hat{C}_n^\dagger$ と表記する。ここで反交換関係を採用すると

$$[\hat{C}_n, \hat{C}_m^\dagger]_+ = \delta_{mn} \quad (19.71)$$

$$[\hat{C}_n, \hat{C}_n]_+ = 0 \quad (19.72)$$

$$[\hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_n^\dagger]_+ = 0 \quad (19.73)$$

反交換関係を採用したのは式 (19.29) の下段と $\hat{C}_a^\dagger \hat{C}_b^\dagger = -\hat{C}_b^\dagger \hat{C}_a^\dagger$ が対応しているためである。ここで、Fock 表示を考える。

$$|n_1 n_2 \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!}} \frac{1}{\sqrt{n_2!}} \dots (\hat{C}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{C}_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle \quad (19.74)$$

ただし $n_i = 1$ または 0 である。

19.2.8 反対称状態での演算子の表示

反交換関係による符号の変化に注意すると対称状態と同様に計算すると

$$\begin{aligned} TA|\alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \dots\rangle &= \sum_r \sum_a A|\alpha_1^{x_1} \dots \underbrace{\alpha_r^a}_{r \text{ 番目}} \dots\rangle \langle a|\hat{t}|x_r\rangle \\ &= \sum_r \sum_{ab} \underbrace{\hat{C}_{x_1}^\dagger \hat{C}_{x_2}^\dagger \dots \hat{C}_a^\dagger}_{r-1 \text{ 個}} \dots |0\rangle \langle a|\hat{t}|b\rangle \langle b|x_r\rangle \\ &= \sum_r \sum_{ab} \hat{C}_a^\dagger (-1)^{r-1} \hat{C}_{x_r} \hat{C}_{x_1}^\dagger \hat{C}_{x_2}^\dagger \dots |0\rangle \langle a|\hat{t}|b\rangle \delta_{bx_r} \end{aligned}$$

ただし、 $(-1)^{r-1}$ があるのは3行目で \hat{C}_a^\dagger が左隣の演算子と $r-1$ 回交換しているためである。また、 \hat{C}_b を次のように定義すると

$$\hat{C}_b^\dagger \equiv \sum_r (-1)^{r-1} \hat{C}_{x_r} \delta_{bx_r} \quad (19.75)$$

上式を書き直して

$$T\hat{C}_{x_1}^\dagger\hat{C}_{x_2}^\dagger\cdots|0\rangle = \sum_{ab}\hat{C}_a^\dagger\hat{C}_b\langle a|t|b\rangle\hat{C}_{x_1}^\dagger\hat{C}_{x_2}^\dagger\cdots|0\rangle \quad (19.76)$$

また、

$$T = \sum_{ab}\hat{C}_a^\dagger\langle a|t|b\rangle\hat{C}_b \quad (19.77)$$

であるが、これはボーズ粒子と同じ表式である。

19.3 総括

19.3.1 生成消滅演算子

<p>(i) ボーズ粒子</p> $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$ $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0$ <p>(ii) フェルミ粒子</p> $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_+ = \delta_{ij}$ $[\hat{a}_i, \hat{a}_j]_+ = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]_+ = 0$	(19.78)
---	---------

<p>一体演算子</p> $\sum_{k=1}^N t_k = T$ $T = \sum_{ij} \langle i t j\rangle a_i^\dagger a_j$ $\langle i t j\rangle = \int \psi_i^*(x)t(x)\psi_j(x)dx$	(19.79)
<p>二体演算子</p> $\sum_{k=1}^N v_{ij} = V$ $V = \sum_{ijkl} \langle ij v kl\rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l$ $\langle ij v kl\rangle = \iint \psi_i^*(x)\psi_j^*(x')v(x,x')\psi_k(x')\psi_l(x)dx dx'$	

19.3.2 二体相互作用をする多体系

相互作用エネルギーを $V_{ij} = V(\vec{x}_i - \vec{x}_j)$ とすると全系のハミルトニアンを書き直して

$$\mathcal{H} = \sum t_i + \sum V_{ij} \quad (19.80)$$

ただし $t = -\hbar/2m\nabla^2 + U(x)$ とする。これを第二量子化して

$$\mathcal{H} = \sum_{ij} \langle i|t|j \rangle a_i^\dagger a_j + \sum_{ijkl} \langle ij|v|kl \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l \quad (19.81)$$

19.3.3 場の演算子

古典場の波動関数 ψ を直交関数系 ϕ_n で展開すると

$$\psi(x, y) = \sum a_n \phi_n(x) \quad (19.82)$$

この係数 a_n を演算子 \hat{a}_n で置き換えることで第二量子化ができる。

このとき古典場の波動関数 $\psi(x, t)$ は場の演算子 $\hat{\psi}(x, t)$ となり

$$\begin{cases} \hat{\psi}(x, t) &= \sum \hat{a}_n(t) \phi_n(x) \\ \hat{\psi}^\dagger(x, t) &= \sum \hat{a}_n^\dagger(t) \phi_n^*(x) \end{cases} \quad (19.83)$$

である。この演算子 $\hat{\psi}(x, t)$ は時刻 t 位置 x において粒子を消す演算子として解釈できるだろう。同じように $\hat{\psi}^\dagger(x, t)$ は時刻 t 位置 x において粒子を生成する演算子といえる。

−の添字をボーズ粒子に対して交換関係、+の添字をフェルミ粒子に対して反交換関係を行うものとする。場の演算子に対する交換関係、反交換関係は以下のようになる。

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(y)]_{\mp} &= \left[\sum_n \hat{a}_n \phi_n(x), \sum_m \hat{a}_m^\dagger \phi_m^*(y) \right]_{\mp} \\ &= \sum_{nm} \phi_n(x) \phi_m^*(y) [\hat{a}_n, \hat{a}_m^\dagger]_{\mp} \\ &= \sum_{nm} \phi_n(x) \phi_m^*(y) \delta_{n,m} \\ &= \sum_n \phi_n(x) \phi_n^*(y) \\ &= \delta(x - y) \end{aligned} \quad (19.84)$$

$$[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(y)]_{\mp} = [\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(y)]_{\mp} = 0 \quad (19.85)$$

19.3.4 ハイゼンベルグの運動方程式

ハイゼンベルグの運動方程式は

$$i\hbar \frac{dA}{dt} = [A, \mathcal{H}]$$

であった。ここでは演算子 \hat{a} と \hat{a}^\dagger に対するハイゼンベルグの運動方程式を考えよう。ただし場の演算子によるハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \int \hat{\psi}^\dagger(x) h(x) \hat{\psi}(x) dx + \int \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') V(x, x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) dx \quad (19.86)$$

$h(x) = -\hbar^2/2m\nabla^2 + U(x)$ である。

ハイゼンベルグの運動方程式を解いて時間変化する場の演算子を次のように書ける。

$$\begin{cases} \hat{\psi}(x, t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} \hat{\psi}(x) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} \\ \hat{\psi}^\dagger(x, t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} \hat{\psi}^\dagger(x) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} \end{cases} \quad (19.87)$$

同時刻 t での交換関係、反交換関係は、

$$\left[\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}^\dagger(x', t) \right]_{\mp} = \delta(x - x') \quad (19.88)$$

である。

19.3.5 \hat{a}_n 、 \hat{a}_n^\dagger に対するハイゼンベルグの運動方程式

同様にハイゼンベルグの運動方程式から

$$\begin{cases} \hat{a}(x, t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} \hat{a}(x) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} \\ \hat{a}^\dagger(x, t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} \hat{a}^\dagger(x) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} \end{cases} \quad (19.89)$$

ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \underbrace{\sum t_{tm} \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_m}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{\sum V_{ij;kl} \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l}_{\mathcal{H}_{\text{int}}} \quad (19.90)$$

とすると

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{a}_n(t)}{dt} &= [\hat{a}_n, \mathcal{H}] \\ &= [\hat{a}_n, \mathcal{H}_0] + [\hat{a}_n, \mathcal{H}_{\text{int}}] \end{aligned} \quad (19.91)$$

一項目は

$$\begin{aligned} [\hat{a}_n, \mathcal{H}_0] &= \sum_{ij} t_{ij} \underbrace{[\hat{a}_n, \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j]}_{\delta_{n,i} \hat{a}_j} \\ &= \sum_{ij} t_{ij} \delta_{n,i} \hat{a}_j \\ &= \sum_j t_{nj} \hat{a}_j \end{aligned} \quad (19.92)$$

二項目は $[\hat{a}_n, f] = df/d\hat{a}_n^\dagger$ を考慮して

$$\begin{aligned}
 [\hat{a}_n, \mathcal{H}_{\text{int}}] &= \sum V_{ij;kl} [\hat{a}_n, \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l] \\
 &= \sum V_{ij;kl} \frac{d}{d\hat{a}_n^\dagger} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l) \\
 &= \sum V_{ij;kl} (\delta_{nj} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l) + \sum V_{ijkl} (\delta_{nj} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l) \\
 &= \sum_{ikl} V_{njkl} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l + \sum_{ikl} V_{in kl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l \\
 &= \sum_{ikl} (V_{nikl} + V_{in kl}) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l
 \end{aligned} \tag{19.93}$$

$[\hat{a}_n^\dagger, \mathcal{H}_{\text{int}}]$ も同様に計算してまとめると

$$i\hbar \frac{d\hat{a}_n}{dt} = \sum_j t_{nj} \hat{a}_j + \sum_{ikl} (V_{nikl} + V_{in kl}) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l \tag{19.94}$$

$$i\hbar \frac{d\hat{a}_n^\dagger}{dt} = - \sum_i t_{in} \hat{a}_i - \sum_{ikl} (V_{ikln} + V_{iknl}) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \tag{19.95}$$

第 20 章

量子力学の流体力学形式

ポテンシャル $V(x)$ 中の粒子に対するシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi \quad (20.1)$$

とかけて, $\psi(\vec{x}, t)$ は複素数値関数である. ここで, $\psi(\vec{x}, t)$ を極表示すると

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= F(\vec{x}, t) e^{i\alpha(\vec{x}, t)} & (20.2) \\ F(\vec{x}, t) &= \text{振幅} \\ \alpha(\vec{x}, t) &= \text{位相} \end{aligned}$$

と表せる. 確率密度 ρ は

$$\rho = |\psi|^2 = F^2 \quad (20.3)$$

であるから, $F = \sqrt{\rho}$ が成り立つ. 式 (20.2) をシュレーディンガー方程式に代入して ρ と α の式に変形していく.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial F}{\partial t} + i \frac{\partial \alpha}{\partial t} F \right) \exp[i\alpha] \quad (20.4)$$

$$\nabla \psi = (\nabla F + i \nabla \alpha F) \exp[i\alpha] \quad (20.5)$$

$$\nabla^2 \psi = \{ \nabla^2 F + i F \nabla^2 \alpha + 2i \nabla \alpha \nabla F - F (\nabla \alpha)^2 \} \exp[i\alpha] \quad (20.6)$$

以上の式を用いると, シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \left(\frac{\partial F}{\partial t} + i \frac{\partial \alpha}{\partial t} F \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \{ \nabla^2 F + i F \nabla^2 \alpha + 2i \nabla \alpha \nabla F - F (\nabla \alpha)^2 \} + VF \quad (20.7)$$

と変形できる.

虚部を比較すると

$$\hbar \frac{\partial F}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} (F \nabla^2 \alpha + 2 \nabla \alpha \nabla F) \quad (20.8)$$

であり, 両辺に F をかけると

$$F \frac{\partial F}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} (F^2 \nabla^2 \alpha + 2F \nabla \alpha \nabla F) \quad (20.9)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial (F)^2}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} (F^2 \nabla^2 \alpha + \nabla \alpha \nabla (F)^2) \quad (20.10)$$

ここで

$$\vec{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla \alpha \quad (20.11)$$

とおくと, 式 (20.3) より

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \cdot \vec{v} + \rho \nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (20.12)$$

となり, さらに

$$\begin{aligned} \nabla \rho \cdot \vec{v} + \rho \nabla \cdot \vec{v} &= \nabla \cdot (\rho \vec{v}) \\ &= \operatorname{div} (\rho \vec{v}) \end{aligned} \quad (20.13)$$

であるから, 連続方程式

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \vec{v}) = 0} \quad (20.14)$$

が成り立つ.

次に実部を比較すると

$$-\hbar F \frac{\partial \alpha}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \{ \nabla^2 F - F (\nabla \alpha)^2 \} + V F \quad (20.15)$$

であり, 両辺に F をかけると

$$\hbar F^2 \frac{\partial \alpha}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \{ F \nabla^2 F - F^2 (\nabla \alpha)^2 \} - V F^2 \quad (20.16)$$

$$(20.17)$$

となる. さらに両辺を m で割ると

$$F^2 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\hbar \alpha}{m} \right) = \frac{\hbar^2}{2m^2} F \nabla^2 F - \frac{F^2}{2} \left(\nabla \frac{\hbar \alpha}{m} \right)^2 - \frac{V}{m} F^2 \quad (20.18)$$

が得られて, ここで

$$\beta = -\frac{\hbar \alpha}{m} \quad (20.19)$$

とおくと, 式 (20.3), (20.11) より

$$\rho \frac{\partial \beta}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m^2} F \nabla^2 F + \frac{\rho}{2} \vec{v}^2 + \frac{V}{m} \rho \quad (20.20)$$

となる. これは流体力学の基本方程式であるオイラー方程式に対応している. また, この式の両辺に m をかけると

$$m\rho \frac{\partial \beta}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} F \nabla^2 F + \frac{m\rho}{2} \vec{v}^2 + \rho V \quad (20.21)$$

が得られる. これは

$$\begin{aligned} \frac{m\rho}{2} \vec{v}^2 + \rho V &= \text{流体の力学的エネルギー密度} \\ \left\{ \begin{array}{ll} \frac{m\rho}{2} \vec{v}^2 & \text{運動エネルギー} \\ \rho V & \text{ポテンシャルエネルギー} \end{array} \right. \end{aligned}$$

と解釈できる.

超流体 (量子凝縮体) の場合

$$\psi(\vec{x}, t) = \text{秩序変数 (order parameter)}$$

$$\rho = |\psi(\vec{x}, t)|^2 = \text{超流動状態にある粒子密度}$$

シュレーディンガー方程式 \Rightarrow ランダウギンツブルク方程式

第 21 章

密度行列

古典統計力学の分布関数の概念を量子論的に拡張することができる。古典統計の分布関数は微分方程式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\} \quad (21.1)$$

$$\{H, \rho\} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial \rho}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \right) \quad (21.2)$$

に従う。この方程式をリュービル方程式という。量子統計ではリュービル方程式を量子論的に翻訳することができる。

古典的リュービル方程式はハミルトン正準方程式より導かれるが、量子論的リュービル方程式はシュレーディンガー方程式より導かれる。(と予想される。)

密度演算子 $\hat{\rho}$ を次のように定義する。

$$\hat{\rho} = \sum_{m=1}^N |m\rangle P_m \langle m| \quad (21.3)$$

$\hat{\rho}$ をフォン・ノイマン密度行列という。ただし $\{ |m\rangle : m = 1 \sim N \}$ は量子状態の集合で、 P_m は $|m\rangle$ をとる確率を表す。さらにこの確率 P_m は時間に依らないとする。各 $|m\rangle$ はシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial |m\rangle}{\partial t} = \hat{H} |m\rangle \quad (21.4)$$

に従う.

$$\begin{aligned}
 \rho(x', x) &= \langle x' | \hat{\rho} | x \rangle \\
 &= \sum_{m=1}^N \langle x' | m \rangle P_m \langle m | x \rangle \\
 &= \sum_{m=1}^N \psi_m(x') P_m \psi_m^*(x)
 \end{aligned} \tag{21.5}$$

■ $\hat{\rho}$ の運動方程式

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} &= \sum_{m=1}^N \frac{\partial \langle m |}{\partial t} P_m \langle m | + | m \rangle P_m \frac{\partial \langle m |}{\partial t} \\
 &= \sum_{m=1}^N \frac{1}{i\hbar} \hat{H} | m \rangle P_m \langle m | - \frac{1}{i\hbar} | m \rangle P_m \langle m | \hat{H} \\
 &= \frac{1}{i\hbar} (\hat{H} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H})
 \end{aligned} \tag{21.6}$$

ゆえに

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]} \tag{21.7}$$

となり, これはまさに量子論的なリウビル方程式とみることができる.

注意: ハイゼンベルク運動方程式

$$i\hbar \frac{\partial \hat{X}}{\partial t} = [\hat{X}, \hat{H}] \tag{21.8}$$

と符号が異なる.

とくに定常状態を考える.

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = 0 \tag{21.9}$$

だから

$$[\hat{H}, \hat{\rho}] = 0 \tag{21.10}$$

つまり \hat{H} と $\hat{\rho}$ は交換する. 一番簡単な仮定として, $\hat{\rho}$ は \hat{H} のみの関数として与えられるとこの条件は満たされる.

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}(\hat{H}) \tag{21.11}$$

$\hat{\rho}(\hat{H})$ の具体的形として古典統計力学との類推をすると

$$\hat{\rho}(\hat{H}) = e^{-\beta\hat{H}} \quad (\Rightarrow \text{量子論的カノニカル分布}) \quad (21.12)$$

x 表示で表すと

$$\begin{aligned} \langle x' | \hat{\rho} | x \rangle &= \langle x' | e^{-\beta\hat{H}} | x \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle x' | n \rangle \langle n | e^{-\beta\hat{H}} | m \rangle \langle m | x \rangle \\ &= \sum_n \varphi_n(x') e^{-\beta E_n} \varphi_n^*(x) \end{aligned} \quad (21.13)$$

$$(\because \langle n | e^{-\beta\hat{H}} | m \rangle = e^{-\beta E_n} \langle n | m \rangle = \delta_{nm} e^{-\beta E_n})$$

例 1 : 自由粒子

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (21.14)$$

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} |p\rangle = \frac{p^2}{2m} |p\rangle \quad (21.15)$$

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} px\right] \quad (21.16)$$

$$\begin{aligned} \therefore \langle x' | \hat{\rho} | x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(x') \exp\left[-\frac{p^2}{2m}\beta\right] \psi_p^*(x) dp \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{p^2}{2m}\beta + \frac{i}{\hbar} p(x' - x)\right] dp \end{aligned} \quad (21.17)$$

ガウス積分を実行すると

$$\begin{aligned} \langle x' | \hat{\rho} | x \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \exp\left[-\frac{(x' - x)^2}{2m\beta\hbar^2}\right] \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \exp\left[-\frac{(x' - x)^2}{2m\beta\hbar^2}\right] \end{aligned} \quad (21.18)$$

例 2 : 調和振動子

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (21.19)$$

$$\begin{cases} a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (\hat{p} + im\omega\hat{x}) \\ a = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (\hat{p} - im\omega\hat{x}) \end{cases} \quad (21.20)$$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle \quad \text{Fock 表示} \quad (21.21)$$

コヒーレント state 表示

$$a|z\rangle = z|z\rangle \quad (21.22)$$

$$\langle z|a^\dagger = \langle z|z^* \quad (21.23)$$

$$|z\rangle = \exp[za^\dagger] |0\rangle \quad (21.24)$$

$$\langle z'| \hat{\rho} |z\rangle = \sum_{n,m=0}^{\infty} \langle z'|n\rangle \langle n|e^{-\beta\hat{H}}|m\rangle \langle m|z\rangle$$

ここで

$$\begin{cases} \langle z|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle z|(a^\dagger)^n|0\rangle \\ = \frac{1}{\sqrt{n!}} (z^*)^n \langle z|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (z^*)^n \\ \langle n|z\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} z^n \end{cases} \quad (21.25)$$

に注意すると

$$\begin{aligned} \langle z'| \hat{\rho} |z\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (zz'^*)^n \exp\left[-\beta\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\right] \\ &= \exp\left[-\frac{\hbar\omega}{2}\beta\right] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(zz'^*)^n}{n!} e^{-n\hbar\omega\beta} \\ &= \exp\left[-\frac{\hbar\omega}{2}\beta\right] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (zz'^* e^{-\hbar\omega\beta})^n \\ &= \exp\left[-\frac{\hbar\omega}{2}\beta\right] \exp[zz'^* e^{-\hbar\omega\beta}] \end{aligned} \quad (21.26)$$

故に

$$\boxed{\langle z'| \hat{\rho} |z\rangle = \exp\left[zz'^* e^{-\hbar\omega\beta} - \frac{\hbar\omega}{2}\beta\right]} \quad (21.27)$$

とくに $z = z'$ のとき

$$\boxed{\langle z| \hat{\rho} |z\rangle = \exp\left[zz^* e^{-\hbar\omega\beta} - \frac{\hbar\omega}{2}\beta\right]} \quad (21.28)$$

第 22 章

ガウス積分と経路積分

ガウス積分は、ガウス関数、つまり指数関数の肩に 2 次関数をのせたものの積分であるが、多変数の場合には、2 次形式が指数関数の肩にくる。2 次形式をもっと一般化したものはある種の積分となることが予想されるが、そのいちばん簡単なものは、力学における作用積分

$$S = \int \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 dt$$

あるいは、もうすこし一般化した形のもの

$$S = \int \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - \frac{1}{2} k x^2 \right] dt$$

が考えられる。

以下、量子力学と関連したガウス積分の典型的問題として経路積分なるものを取りあげてみる。

1. 以下、ポテンシャル問題, すなわち, ハミルトニアンが

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

で与えられる場合を考察する。ここで、位置演算子 \hat{x} を用いている。

シュレディンガー表示によると時刻 0 の状態ベクトル $|\psi(0)\rangle$ と時刻 t の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ は次のような関係がある。

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} |\psi(0)\rangle$$

また、状態ベクトルに対応する波動関数は位置固有ケットを使って

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$$

とあらわされる。このことから次の結果が得られる。

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \langle x|e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|\psi(0)\rangle = \int dx' \langle x|e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|x'\rangle \langle x'|\psi(0)\rangle$$

すなわち、 $\langle x|e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|x'\rangle$ を計算できる形に変形したら初期時刻 0 の波動関数から時刻 t の波動関数が求まるのである。これが**伝搬関数**と呼ばれ、

$$K(xt|x'0) = \langle x|e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|x'\rangle$$

とあらわそう。 $K(xt|x'0)$ を具体的に計算する方法を考える。これが経路積分というものである。まずはじめに、自由粒子、つまり、ハミルトニアンが $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ の場合をとりあげる。

準備として、自由粒子に対して、 $K(xt|x'0)$ が時間に依存するシュレーディンガー方程式をみたすことに注意する：

$$i\hbar \frac{\partial K}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 K}{\partial x^2}$$

初期条件： $K(x0|x'0) = \delta(x' - x)$ (ディラックのデルタ) に注意すれば、

$$K(xt|x'0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar it}} \exp\left[\frac{m(x-x')^2}{2\hbar t}i\right]$$

となる。(問題：これを示せ)。

(a) さて、 $\langle x|e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|x'\rangle$ を 以下のように書き直してみる。すなわち、 t を無限小の時間間隔にわけて、つまり、時刻 t' から時刻 t までの時間を $N+1$ 分割し、

$$t_1 = t', t_2 = t' + \Delta t, \dots, t_N = t + N\Delta t, t_{N+1} = t \\ x_1 = x', \dots, x_{N+1} = x$$

としたとき、時間推進演算子は

$$e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t} \dots e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t}$$

と無限積の形に書ける。ここで、各時刻 t_k において、完全性関係

$$\int |x_k\rangle \langle x_k| dx_k = 1$$

を挿入することにより、次のように表されることがわかる：

$$\langle x|e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|x'\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{k=1}^N \langle x_{k+1}|e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t}|x_k\rangle \prod_{k=1}^N dx_k \quad (22.1)$$

すなわち、『無限次元の積分』で書かれるのである。嗚呼！無限(情)？

(b) そこで無限小の時間変化 Δt の部分を処理することが問題になる。

ここで、やっかいなのは、指数関数の部分である。指数関数の肩のハミルトニアンは、おたがいに交換しない運動エネルギー項とポテンシャル項の和になっているので、指数法則が適用できない：

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right] \neq \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{V}(\hat{x})\Delta t\right]$$

しかし、無限小の時間間隔の場合には、近似的に

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right] \approx \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{V}(\hat{x})\Delta t\right]$$

が成立してよいものとしよう。(厳密な証明はむずかしいが、みとめよう)。

$$\langle x_{k+1}|e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t}|x_k\rangle = \langle x_{k+1}|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}\Delta t\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{V}(\hat{x})\Delta t\right]|x_k\rangle$$

ここで、ポテンシャル部分は

$$j \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{V}(\hat{x})\Delta t\right]|x_k\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}V(x_k)\Delta t\right]|x_k\rangle$$

に注意すると、

$$\langle x_{k+1}|e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t}|x_k\rangle = \langle x_{k+1}|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}\Delta t\right]|x_k\rangle \exp\left[-\frac{i}{\hbar}V(x_k)\Delta t\right]$$

のように、演算子から脱皮できる。残りの運動エネルギー部分であるが、これは、準備のところでおいたように、ちょうど自由粒子の伝搬関数の無限小時間の部分にほかならない。それゆえ、

$$\langle x_{k+1}|e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t}|x_k\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\Delta t}} \exp\left[\frac{m(x_{k+1}-x_k)^2}{2\hbar\Delta t}i\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}V(x_k)\Delta t\right]$$

指数関数関数のなかをまとめると、

$$\exp\left[\frac{m(x_{k+1}-x_k)^2}{2\hbar\Delta t}i\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}V(x_k)\Delta t\right] = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\Delta t}\right)^2 - V(x_k)\right\}\Delta t\right]$$

となって、指数関数の肩は、ちょうどラグランジアンと時間間隔の積となっている！！

この無限小の部分を、(1a) に代入することにより、伝搬関数に対する無限次元積分表示が得られる：

$$K(xt|x'0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \cdots \int \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N L_k \Delta t\right] \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\Delta t}}\right)^N \prod_{k=1}^N dx_k$$

$$L_k = \frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\Delta t}\right)^2 - V(x_k)$$

ここで、指数関数の肩は、解析力学でなろう作用関数関数そのものである：

$$S = \int_0^t \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right) dt$$

最後にうえの無限次元積分を記号的に

$$K(xt|x'0) = \int \exp\left[\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right] D[x(t)] \quad (22.2)$$

と表す。これが、いわゆる、Feynman の経路積分とよばれているものである。

注意： $C = \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \Delta t}} \right)^N$ なる因子は、おそろしい量である。 $N \rightarrow \infty$ かつ、 $\Delta t \rightarrow 0$ において、このような量は定義できない!! それゆえ、経路積分は、数学的にきちんと定義できていないものである??!!

(c) 問題：自由粒子の場合すなわち $V(x) = 0$ の場合に経路積分を計算せよ。

参考文献：J.J. 桜井；量子力学（吉岡書店）

第 23 章

メモなど

その 1 ; 外場がかけられているとき、外場の影響で、ヒルベルト空間の構造が変化するか。なんの話やといわれそうだけど。つまり、たとえば、非常に強い磁場がかけられたときに、量子力学の法則が変化するか。つまり場がないときに比べて、基底ベクトルが変化するようなことがないか。そんなもの、変わる可能性があるにきまっている。磁場中の問題（ランダウレベルなど）とどこがちがうのかというのが、すぐでてくる反論。それでは、量子系にものすごい高圧をかけたとする。あるいは、歪力をかけたとする。このとき、ヒルベルト空間の構造は変化するか？

式に書くと、簡単でヒルベルト空間の一般的状態 Ψ が外場によっているとして、それを $\tau_i (i = 1 \dots n)$ で総称する。それを明示するために、 $\Psi(\tau)$ と書こう。そこで、Dirac のまねをして、「局所」ユニタリー変換 T によって外場が消去された仮想的状態 $\tilde{\Psi}$ を考えて、

$$\tilde{\Psi} = T(\tau)\Psi(\tau)$$

を考えると、

$$i \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial \tau_i} = T \left(i \frac{\partial \Psi}{\partial \tau_i} - iT^{-1} \frac{\partial T}{\partial \tau_i} \Psi \right)$$

そこで、

$$iT^{-1} \frac{\partial T}{\partial \tau_i} \equiv M_i(\tau)$$

と定義する。これは、パラメータ空間に誘起された接続（形のうえで Yang-Mills 場とおなじ）とみられる。 n コ成分をもっている。 $M = (M_i)$.

そこで、 $i \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial \tau_i} = 0$ なるときは、いわゆる「平行移動」にほかならない。つまり、変換された状態がパラメータ空間の場所によらないということである。これを Ψ の方程式に直すと、

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial \tau_i} = M_i(\tau) \Psi$$

となる。これは、 n コの連立微分方程式である。

さて、この方程式から重要な帰結がでてくる。

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau_i \partial \tau_j} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau_j \partial \tau_i} = \left(\frac{\partial M_j}{\partial \tau_i} - \frac{\partial M_i}{\partial \tau_j} + [M_i, M_j] \right) \Psi$$

右辺にでてくる演算子の項は (F_{ij} とでも表す) 一般にゼロにならない。いいかえれば、このような接続を有限のループにそってつづけていくと、非可積分位相が生じる。いいかえれば、外場が存在することによって、「ヒルベルト空間が 1 価でなくなる」ということになる。