09-1年度「量子力学B, C」講義録

大場一郎

量子力学Ｂ　目次

量子力学Ｃ　目次

第1章　はじめに
量子力学の多様性

現象の切り口の違いにより、いろいろな取り扱いがあり、決して一様でない。

1．エネルギーと質量

$$E = \sqrt{p^2c^2+m^2c^4} \sim mc^2 + \frac{1}{2m}p^2 + O(mc^2(\frac{p}{mc})^4) \tag{1}$$

$$mc \le p \qquad mc \gg p \tag{2}$$

$$\text{相対論的} \qquad \text{非相対論的} \tag{3}$$

$$\text{超相対論的}\ E \sim pc \quad E - mc^2 = \frac{1}{2m}p^2 = E_{\rm NR} \tag{4}$$

2．1体問題と多体問題

多体問題では、粒子間の相互作用を考慮しなければならない。

3．個数一定と個数不定

粒子が生成・消滅する場合は、個数が変化する。

多体問題や個数不定の場合には第2量子化、つまり、場の理論で考えたほうが都合よい。

量子化の多様性

Heisenberg の不確定性関係 $\Delta x \cdot \Delta p \ge \frac{\hbar}{2}$ に表されている量子論的揺らぎの採り入れ方による違い。

正準量子化

ハミルトンの正準形式を基礎におく。

時間 t で状態をスライスして、その時間発展をハミルトニアンによって記述する。

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} \qquad \{\cdots,\cdots\} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\cdots,\cdots]$$

正準共役変数はポアソン括弧式を満たすが、それを量子力学の交換関係で置き換える。

$$[x, p] = i\hbar$$

経路積分量子化

ファインマンが工夫した方法で、可能な確率振幅を足し上げる。

確率過程量子化

i) Parisi-Wu によるもので、仮想的な時間方向での確率過程で量子揺らぎを取り入れる。

ii) Nelson によるもので、実時間確率過程

量子論発展小史

熱輻射の問題：

黒体輻射、空洞輻射について考察する。

電磁場のエネルギー密度

$$U = \frac{1}{8\pi}(\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2)$$

これを電磁波の集合で表す：

$$\nu \quad \sim \quad \nu + d\nu \quad : \quad u_\nu d\nu$$

$$U = \int_0^\infty u_\nu d\nu$$

Stefan-Boltzmann の法則：

$$U = \sigma T^4$$

$$\sigma = 7.64 \times 10^{-15} \mathrm{erg}/(\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{K}^4)$$

有限なエネルギー密度、しかし、エネルギースペクトルを見てみるとどうなるか？

Rayleigh-Jeans の輻射式（古典論、$\frac{\nu}{T}$ が小さい領域）：

　黒体輻射での熱平衡

$$u_\nu d\nu = \frac{8\pi}{c^3} kT\nu^2 d\nu$$

ただし、k は Boltzmann 定数

$$k = \frac{R}{N} \sim 1.38 \times 10^{-16} \ (\mathrm{erg} \quad \mathrm{K}^{-1})$$

これを積分すれば発散してしまう。

Wien の変位法則：

$$u_\nu(\nu, T) = \nu^3 f(\frac{\nu}{T})$$

Rayleigh-Jeans の輻射式から

$$f(\frac{\nu}{T}) = \frac{8\pi}{c^3} k \frac{T}{\nu}$$

が得られる。

Wien の経験式（$\frac{\nu}{T}$ が大きい領域）：

$$f(\frac{\nu}{T}) = \frac{\alpha}{c^2} \mathrm{e}^{-\frac{\beta\nu}{T}}$$

α、β は実験によって決まる定数

1. Planck の輻射式（1900 年）：

$$u_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

$$f(\frac{\nu}{T}) \longrightarrow \begin{cases} \frac{8\pi}{c^3} k \frac{T}{\nu} & \text{for} \quad \frac{\nu}{T} \ll \frac{k}{h} \\ \frac{8\pi h}{c^3} \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) & \text{for} \quad \frac{\nu}{T} \gg \frac{k}{h} \end{cases}$$

$$\alpha = \frac{8\pi}{c} h, \quad \beta = \frac{h}{k}$$

ここで h は **Planck 定数**（Planck の作用定数）

$$h \ \sim \ 6.6 \times 10^{-27} \quad (\mathrm{erg\,s})$$

電磁場を調和振動子の集合とし、**エネルギー量子**

$$\epsilon = nh\nu \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

を仮設し、それに Boltzmann 統計を仮定すれば、Planck の輻射式が導ける。

参考 (1 次元)

$$\begin{aligned} < \epsilon > &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu \mathrm{e}^{-\frac{h\nu}{kT}n}}{\sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{h\nu}{kT}n}} &(5)\\ &= -\frac{\frac{\partial Z}{\partial(1/kT)}}{Z} &(6)\\ &= \frac{h\nu}{\mathrm{e}^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} &(7)\end{aligned}$$

2. Einstein の光量子仮説（1905 年）：

Planck の公式 $\longrightarrow$ エネルギーの揺らぎ $\longrightarrow$ 光の粒子性

Lenard の実験：光電効果

電子の速度分布は入射光の強度には無関係だが、振動数 ν には関係し、そして、振動数はある敷居値 ν_{th} 以上であることが必要

光子、光量子の仮説：物質から、振動数 ν の光の吸収・放出

$$\epsilon = h\nu$$

電子のエネルギー

$$E = h\nu - W, \qquad W: \text{仕事関数}$$

3. Bohr の原子構造に関する古典量子論（1913 年）：

$$\oint pdq = nh$$

原子の定常状態を選ぶ条件 $\longrightarrow$ エネルギー準位

4. de Broglie の物質波仮説（1924 年）：

Bohr の量子化条件を説明するために電子などの物質も波動的性格をもつと仮定

光の場合：

$$E = h\nu = cp, \quad p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

物質粒子：

$$E = h\nu, \qquad p = \frac{h}{\lambda}$$

この概念を、物質波、de Broglie 波という。

量子力学の実験的基礎

$$\begin{array}{ccccc} \text{粒子} & & & & \text{波動} \\ E & \longleftarrow & E = \hbar\omega & \longrightarrow & \omega \\ \mathbf{p} & \longleftarrow & \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} & \longrightarrow & \mathbf{k} \end{array}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Young の実験 $\cdots$ 電子でおこなう。
多数回の試行を重ね焼きする。
波動関数 $\Psi(x)$ で記述する。

$$\begin{aligned} \mid \Psi_a + \Psi_b \mid^2 &= \mid \Psi_a \mid^2 + \mid \Psi_b \mid^2 + 2\mathrm{Re}\Psi_a^* \Psi_b \\ &\neq \mid \Psi_a \mid^2 + \mid \Psi_b \mid^2 \end{aligned}$$

第２章　１次元シュレーディンガー方程式
波動力学の基本法則

波動性に力点をおいて粒子の運動を記述。

まず、1 粒子の運動状態を記述しよう。波動関数を Ψ とする。

1 $\cdots$de Broglie 波仮説と重ね合わせの原理

$$\mathbf{p} = \text{一定} \qquad (E = \text{一定})$$

「一定の $\mathbf{p}, E$ をもつ自由粒子の運動状態は平面波

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = C\exp(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)), \quad C \text{ は複素数}$$

によって表せる。」

2 $\cdots$ 重ね合わせの原理と Schrödinger 方程式

(i) 重ね合わせの原理

干渉の実験から分かるように量子力学では重ね合わせが本質的。

「いくつかの相異なる運動状態 $a, b, c, \cdots$ が可能な場合の波動関数 $\Psi_{abc\cdots}$ は、それぞれの運動状態の波動関数 $\Psi_a, \Psi_b, \Psi_c, \cdots$ の和

$$\Psi_{abc\cdot} = \Psi_a + \Psi_b + \Psi_c + \cdots$$

で表される。」

例　運動量 $\mathbf{p}_a$、$\mathbf{p}_b$ が許される系：

$$\Psi_a(\mathbf{r}, t) = C_a \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{r} - E_a t)}$$

$$\Psi_b(\mathbf{r}, t) = C_b \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_b\cdot\mathbf{r} - E_b t)}$$

a) 運動量一定の自由粒子

$$\Psi_a \quad \text{or} \quad \Psi_b$$

b) 相互作用があり、運動量は一定でない場合

$$\begin{aligned}\Psi_{ab}(\mathbf{r}, t) &= C_a(t)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{r} - E_a t)} + C_b(t)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_b\cdot\mathbf{r} - E_b t)} \\ &= B_a(t)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{r}} + B_b(t)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_b\cdot\mathbf{r}}\end{aligned}$$

一般には

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{p}'} B_{\mathbf{p}'}(t)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}$$

連続的な分布になると、

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int A(\mathbf{p}', t)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{p}'$$

フーリェ成分は

$$A(\mathbf{p}', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int \Psi(\mathbf{r}, t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}$$

また時間についてもフーリェ変換すれば、

$$\tilde{A}(\mathbf{p}', E') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2}\int \Psi(\mathbf{r}, t) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r} - E't)} d^3\mathbf{r} dt$$

これで波動関数を表せば、

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{4}{2}}}\int \tilde{A}(\mathbf{p}', E') \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r} - E't)} d^3\mathbf{p}' dE'$$

ここで、E' と $\mathbf{p}'$ の関係は動力学的に決まる。

(ii)Schrödinger 方程式　$\cdots$　系の時間発展

自由粒子の場合

$$E' = \frac{1}{2m}\mathbf{p}'^2$$

条件式

$$(E' - \frac{1}{2m}\mathbf{p}'^2)\tilde{A}(\mathbf{p}', E') = 0$$

が必要となり、波動関数の満たすべき式は

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{4}{2}}}\int (E' - \frac{1}{2m}\mathbf{p}'^2)\tilde{A}(\mathbf{p}', E') \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r} - E't)} d^3\mathbf{p}' dE' = 0$$

となる。ここで、代数関係を微分演算子

$$E' \longrightarrow -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}, \qquad \frac{1}{2m}\mathbf{p}'^2 \longrightarrow \frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{i}\nabla)^2$$

で置き換えると波動関数の満たすべき方程式

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

となる。これが自由粒子の Schrödinger 方程式である。また、適切に規格化すると、条件式の解は

$$\tilde{A}(\mathbf{p}', E') = \sqrt{2\pi\hbar}\,\delta(E' - \frac{1}{2m}\mathbf{p}'^2)a(\mathbf{p}')$$

と書けるので、解はドブロイ波の重ねあわせ、

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int a(\mathbf{p}') \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r} - \frac{1}{2m}\mathbf{p}'^2 t)} d^3\mathbf{p}'$$

で表せる。

正準量子化：

一般的なドブロイ波は微分方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}_0\Psi(\mathbf{r}, t)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2, \qquad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla, \qquad \text{演算子}$$

を満たしている。ここで現れた演算子と古典的に対応する共役変数との交換関係をとると、

$$[x, \hat{p}_x] = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x) = i\hbar$$

$$[y, \hat{p}_x] = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}y) = 0$$

などとなる。

これは古典的なポアソン括弧式を交換関係 $[\cdots,\cdots]/i\hbar$ で置き換えたことに相当する。そのため、このような量子化を正準量子化という。

保存場の場合のハミルトニアンも

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

と置き換えてみよう。すると保存力場中の Schrödinger 方程式

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = (-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}))\Psi(\mathbf{r},t)$$

が得られる。つまり

$$\text{ハミルトニアン}\begin{cases}\text{古典力学：物理量の時間発展の生成演算子}\\ \text{量子力学：波動関数の時間発展を記述}\end{cases}$$

「力が作用している粒子の運動は、運動量一定の状態を表す平面波を重ね合わせた波動となり、その時間空間変動は Schrödinger 方程式に従う。」

3· · ·Born の確率波とコペンハーゲン解釈

波動関数の物理的意味を規定する。まず、波動関数は次の性質をもつことに注意しよう。

(i) 複素関数 $\Longleftarrow$Schrödinger 方程式

(ii) 連続の式を満たす

(iii) 拡散型の時間発展

(ii) 連続の式はつぎのような推論から導ける。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\mathbf{r})\Psi \tag{1}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^* + V(\mathbf{r})\Psi^* \tag{2}$$

(1) に左から Ψ^* を掛けたものから、(2) に右から Ψ を掛けたものを引くと、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mid\Psi\mid^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Psi^*\nabla^2\Psi - (\nabla^2\Psi^*)\Psi)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi - (\nabla\Psi^*)\Psi)$$

つまり、連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

を得る。ここで、

$$\rho = \mid \Psi \mid^2, \qquad \mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im}(\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*)\Psi)$$

である。連続の式から直ちに保存量

$$\int \rho(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \text{一定}$$

がでてくる。

(iii) 拡散型の時間発展

位相速度

$$v_{\mathrm{ph}} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m}$$

は運動量 p に依存するため、要素の各平面波が運動量ごとに異なる位相速度をもち、全体の波形が崩れてゆく。つまり、分散性波動である。

$\rho = \mid \Psi \mid^2$ の意味としてとり得る可能性

(a) 粒子の電荷分布、質量分布 $\cdots\cdots$micro 粒子が macro に広がってしまい、電子の不可分性に矛盾

(b) 多数個の粒子集団の分布 $\cdots\cdots$ 干渉実験では粒子 1 個の属性を示している。

H. Born による解釈

$\rho = \mid \Psi \mid^2$ は存在確率密度に比例 $\longrightarrow$ 重ね焼きで山と谷の干渉縞ができることを説明

$\rho = \mid \Psi(\mathbf{r}, t) \mid^2$ $\cdots\cdots$ 粒子の位置の情報を与える。

運動量に関する情報は？

Parseval の等式

$$\int \mid \Psi(\mathbf{r}, t) \mid^2 \, d^3\mathbf{r} = \int \mid A(\mathbf{p}, t) \mid^2 \, d^3\mathbf{p}$$

を使おう。この式から右辺の $\mid A(\mathbf{p}, t) \mid^2$ が運動量についての確率分布を与えることがわかる。まとめると、

「時刻 t、位置 $\mathbf{r}$ のまわりの $d^3\mathbf{r} = dxdydz$ の微小領域中に見いだされる事象の確率は

$$\mid \Psi(\mathbf{r}, t) \mid^2 \, d^3\mathbf{r}$$

に比例する。」

「時刻 t、運動量 $\mathbf{p}$ のまわりの $d^3\mathbf{p} = dp_x dp_y dp_z$ の微小領域中に見いだされる事象の確率は

$$\mid A(\mathbf{p}, t) \mid^2 \, d^3\mathbf{p}$$

に比例する。」

ここで、規格化条件

$$\int \mid \Psi(\mathbf{r},t) \mid^2 d^3\mathbf{r} = \int \mid A(\mathbf{p},t) \mid^2 d^3\mathbf{p} = 1$$

をとろう。この時領域 Ω 中に粒子の見いだされる確率関数 $P(\Omega)$ は

$$P(\Omega) = \int_\Omega \mid \Psi(\mathbf{r},t) \mid^2 d^3\mathbf{r}$$

物理量の測定と波動関数

全空間を n 個に分割：$\Omega_1, \Omega_2, \cdots \Omega_n$

同じ粒子だが、1 個だけからなる系を N 個用意する（$N \gg 1$）。

この系は $\Psi(\mathbf{r},t)$ で記述されているとする。

これらの系で粒子の位置を繰り返し N 回測定する。

Ω_i 中に見いだした数を N_i としよう　($\sum_{i=1}^n N_i = N$)。このような事象の起こる確率は

$$w_i = \frac{N_i}{N} \longrightarrow \int_{\Omega_i} \mid \Psi(\mathbf{r},t) \mid^2 d^3\mathbf{r}, \quad N \ \rightarrow \ \infty$$

この結果を使えば、位置の x 座標の期待値は

$$< x >= \frac{\sum_{i=1}^n x_i N_i}{N} \longrightarrow \int x \mid \Psi(\mathbf{r},t) \mid^2 d^3\mathbf{r}$$

同様に、運動量の期待値は n 分割した p 空間で考えて

$$< p_x >= \frac{\sum_{i=1}^n p_{xi} N_i(p)}{N(p)} \longrightarrow \int p_x \mid A(\mathbf{p},t) \mid^2 d^3\mathbf{p}$$

一般に

$$\begin{aligned} < F >&= \int \Psi^*(\mathbf{r},t) F(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla) \Psi(\mathbf{r},t) d^3\mathbf{r} \\ &= \int A^*(\mathbf{p},t) F(i\hbar\nabla_\mathbf{p}, \mathbf{p}) \mathbf{A}(\mathbf{p},\mathbf{t}) \mathbf{d^3p} \end{aligned}$$

このような Ψ の解釈を**コペンハーゲン解釈**という。

N. Bohr と A. Einstein の論争

定常状態

“$\rho(\mathbf{r},t) =\mid \Psi(\mathbf{r},t)\mid^2$ が時間依存性をもたない。”

$$\Updownarrow$$

$$\operatorname{div}\mathbf{j}=0$$

Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi, \qquad \frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0$$

から出発し、変数分離型を仮定する。

$$\Psi(\mathbf{r},t)=u(\mathbf{r})\chi(t)$$

$$\begin{cases} \hat{H}u=Eu \\ i\hbar\frac{d\chi}{dt}=E\chi \quad\longrightarrow\quad \chi\sim\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et} \end{cases}$$

定数 E を決める式は $\hat{H}$ の固有方程式であり、E を固有値、u を固有関数という。

ここで E が実数であることを示そう。

$$(u,\hat{H}u)=E(u,u)$$

だから

$$E=\frac{(u,\hat{H}u)}{(u,u)}, \quad E^*=\frac{(u,\hat{H}u)^*}{(u,u)^*}=\frac{(\hat{H}u,u)}{(u,u)}=\frac{(u,\hat{H}^\dagger u)}{(u,u)}$$

したがって、ハミルトニアンがエルミートなら、E は実数

$$\hat{H}=\hat{H}^\dagger \quad\longrightarrow\quad E^*=E$$

エネルギー固有状態

$$\hat{H}u_\nu=E_\nu u_\nu$$

縮退 (degenerate)：一つの E_ν に二つ以上の固有関数が存在

一般に　　　　　　　　　　エネルギー固有状態の場合、定常状態である。

$$\Psi_\nu(\mathbf{r},t)=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_\nu t}u_\nu(\mathbf{r})$$

$$\rho(\mathbf{r},t)=\mid\Psi_\nu(\mathbf{r},t)\mid^2=\mid u_\nu(\mathbf{r})\mid^2$$

すなわち、存在確率密度が時間によらず一定、つまり、定常状態である。

ボーア理論

エネルギー値が不連続で、定常状態の存在を仮定 $\cdots$ Schrödinger 方程式の固有状態

$$A_\nu(\mathbf{p},t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_\nu t}a_\nu(\mathbf{p})$$
$$a_\nu(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int u_\nu(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}d^3\mathbf{r}$$

定常状態の $\rho_\nu(\mathbf{r})$ と $\mathbf{j}_\nu(\mathbf{r})$

$$\frac{\partial\rho_\nu}{\partial t} = 0, \quad \nabla\cdot\mathbf{j}_\nu = 0 \quad \longrightarrow \quad \int_S \mathbf{j}_\nu\cdot d\sigma = 0$$

つまり、湧き出しがない。一般に "$u_\nu(\mathbf{r})$ と $\nabla u_\nu(\mathbf{r})$ が連続関数のときは湧き出しがない"が、逆は真でない。例えば、δ 関数ポテンシャルや剛体壁がその例外である。この場合、波動関数の微分が不連続であっても、$\mathbf{j}$ は連続的な流れになりうる。

しかし、

$$u_\nu(\mathbf{r}): \quad \text{実関数} \longleftrightarrow \quad \mathbf{j}_\nu = 0$$

はいえる（演習問題）。

定常状態にない場合

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum c_\nu u_\nu(\mathbf{r})\mathbf{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_\nu t}$$
$$\mid\Psi(\mathbf{r},t)\mid^2 = \sum_\nu \mid c_\nu\mid^2\mid u_\nu(\mathbf{r})\mid^2 + \sum\sum_{\nu\neq\nu'} c_\nu^* c_{\nu'} u_\nu^*(\mathbf{r})u_{\nu'}(\mathbf{r})\mathbf{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_\nu - E_{\nu'})t}$$

エネルギー固有状態の重ね合わせだが、モード間の交差項が現れて、とりうるエネルギー値が不確定となる。

関与するレベル集団の持つ時間スケール

$$\Delta t \sim \hbar\cdot\frac{1}{\Delta E}$$

つまり、時間とエネルギーに関する不確定性関係

$$\Delta t\cdot\Delta E \sim \hbar$$

平面波の規格化

$$u_{\mathbf{p}} = C\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \qquad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$$

$$\rho_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mid C \mid^2, \qquad \mathbf{j}_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}}{m} \mid C \mid^2$$

(i) 周期的境界による規格化

$$u_{\mathbf{p}}(x+L, y, z) = u_{\mathbf{p}}(x, y, z)$$

$$k_x L = 2\pi n_x$$

つまり、

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L} n_x, \qquad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

同様に、

$$p_y = \frac{2\pi\hbar}{L} n_y, \qquad n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

$$p_z = \frac{2\pi\hbar}{L} n_z, \qquad n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

このような条件下で規格化する。

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mid u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \mid^2 dxdydz = L^3 \mid C \mid^2 = 1$$

これより

$$\mid C \mid = L^{-\frac{3}{2}}$$

したがって、波動関数は不連続な波数ベクトルで

$$u_{\mathbf{p}} = L^{-\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \qquad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}\mathbf{n}, \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

$$\begin{aligned} (u_{\mathbf{p}'}, u_{\mathbf{p}}) &= \frac{1}{L^3}\int_{-L/2}^{l/2} d^3 r \mathrm{e}^{i\frac{2\pi}{L}(\mathbf{n}-\mathbf{n}')\cdot\mathbf{r}} && (8) \\ &= \delta_{\mathbf{p}',\mathbf{p}} && (9) \end{aligned}$$

(ii)δ 関数による規格化 (無限領域)

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} u_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) dxdydz \tag{10}$$

$$= \quad C_{\mathbf{p}'}^* C_{\mathbf{p}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(p_x - p_x')x} dx \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(p_y - p_y')y} dy \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(p_z - p_z')z} dz \tag{11}$$

$$\longrightarrow_{L\to\infty} \quad \mid C_{\mathbf{p}} \mid^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \tag{12}$$

ここで

$$C_{\mathbf{p}} = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}$$

と選べば

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) dxdydz = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

(iii) 粒子流強度（単位流）規格化

$$N_0[1/\mathrm{sec}\cdot\mathrm{cm}^2] = \mid \mathbf{j}_{\mathbf{p}} \mid = \mid C \mid^2 \frac{p}{m}$$

これより

$$C = (\frac{N_0}{v})^{\frac{1}{2}}$$

1 次元定常状態の一般的性質

$$\frac{d^2u}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))u$$

左辺は曲線 $u(x)$ の曲率を与える。したがって u の正負を考えれば、

(i)$E > V$

　上半面：　上に凸

　下半面：　下に凸

つまり振動型

(ii)$E < V$

　上半面：　下に凸

　下半面：　上に凸

つまり、指数型

エネルギー一定の線で、実線部分は振動型、点線部分は古典的に運動不可能な領域で指数減衰型である。

束縛状態の境界条件

束縛状態では、無限遠で波動関数はゼロとなる。通常そこでのポテンシャルをゼロにとる。

$$\frac{d^2u_\nu}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E_\nu u_\nu, \qquad \frac{2m}{\hbar^2} \mid E_\nu \mid \equiv \kappa_\nu^2, \qquad E_\nu < 0$$

$$u_\nu \ \longrightarrow \ A\mathrm{e}^{\kappa_\nu x},\ (x<0)\ \mathrm{or}\ B\mathrm{e}^{-\kappa_\nu x},\ (x>0)$$

まとめれば

$$u_\nu \ \longrightarrow \ \mathrm{e}^{-\kappa_\nu |x|}$$

つまり、境界条件は

$$\begin{cases} \text{(i)} \ \ u_\nu \ \longrightarrow \ \mathrm{e}^{-\kappa_\nu |x|} & \mid x \mid \to \infty \\ \text{(ii)} \ \ u_\nu, \frac{du_\nu}{dx} \text{が連続} & \end{cases}$$

この条件を満たす解の集合に対して、$\hat{H}$ と $\hat{p}$ はエルミート

node（節）は量子数となり得る。

散乱状態

Ψ：1粒子の運動状態を記述しているものと考える。

$|\Psi|^2$：1個の粒子を測定した結果を多数回集めたものに対する確率分布

平面波（$p =$ 一定の一様な粒子ビーム）のポテンシャルによる散乱

入射波

透過波　定常的な粒子流

反射波　定常状態

左方投入の境界条件

$$u_p(x) \longrightarrow C[\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}px} + R\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}px}], \quad x \to -\infty$$

$$\longrightarrow CT\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}px}, \quad x \to +\infty$$

$$\frac{d^2u_p}{dx^2} + k^2u_p = 0, \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

反射確率と透過確率

$C\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}p_1x} + CR\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}p_1x}$　　$CT\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}p_2x}$

$p_1^2 = 2m(E - V_1)$　　$p_2^2 = 2m(E - V_2)$

ここで単位流規格化を実行する。

$$j^{(i)} = v_1 \mid C \mid^2 = N_0$$

$$C = \sqrt{\frac{N_0}{v_1}}$$

$$j^{(r)} = v_1 \mid C \mid^2 \mid R \mid^2 = N_0 \mid R \mid^2$$

$$j^{(t)} = v_2 \mid C \mid^2 \mid T \mid^2 = \frac{v_2}{v_1} N_0 \mid T \mid^2$$

反射確率：

$$P^{(r)} = \frac{j^{(r)}}{j^{(i)}} = \mid R \mid^2$$

透過確率：

$$P^{(t)} = \frac{j^{(t)}}{j^{(i)}} = \frac{v_2}{v_1} \mid T \mid^2$$

確率保存：

$$P^{(r)} + P^{(t)} = 1$$

空間反転対称性とパリティ

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + V(x)$$

　空間反転：$x \ \longrightarrow \ -x$

　このときポテンシャルは

$$V(x) \ \longrightarrow \ V(-x)$$

となる。特に、

$$V(x) \ = \ V(-x)$$

のとき**空間反転対称**という。このときハミルトニアンも**空間反転不変**である。Schrödinger 方程式

$$Hu_\nu(x) = E_\nu u_\nu(x)$$

を空間反転すると、

$$Hu_\nu(-x) = E_\nu u_\nu(-x)$$

縮退していないとすると、両者は同一の波動関数だから、

$$u_\nu(-x) = \eta_p u_\nu(x), \qquad \eta_p \ : \ 係数$$

空間反転を 2 度繰り返すと元に戻るので、

$$u_\nu(-(-x)) = \eta_p u_\nu(-x) = \eta_p^2 u_\nu(x) = u_\nu(x)$$

したがって

$$\eta_p^2 = 1 \ \longrightarrow \ \eta_p = \pm 1$$

$$\begin{cases} u_\nu(-x) = u_\nu(x) & \cdots \ \ u_\nu^{(+)}(x) \ \ +\text{パリティ} \\ u_\nu(-x) = -u_\nu(x) & \cdots \ \ u_\nu^{(-)}(x) \ \ -\text{パリティ} \end{cases}$$

この物理量を**偶奇性**、または**パリティ**という。H が空間反転不変だから、パリティは保存される。つまり、$u_\nu^{(+)}(x)$ はいつまでたっても $u_\nu^{(+)}(x)$ のまま、$u_\nu^{(-)}(x)$ はいつまでたっても $u_\nu^{(-)}(x)$ のまま。

1 次元剛体壁の場合のパリティ

　ポテンシャルの位置を対称的にする。

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + V(x), \quad V(x) = \begin{cases} 0 \ : & |\, x \,| < \frac{a}{2} \\ \infty \ : & |\, x \,| \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

$$u(x) = A\cos kx + B\sin kx$$

$$\begin{cases} u^{(+)}(x) = u^{(+)}(x) \\ u^{(-)}(x) = -u^{(-)}(x) \end{cases}$$

$$\begin{cases} u^{(+)}(x) = A\cos kx \\ u^{(-)}(x) = B\sin kx \end{cases}$$

接続条件：

$$\begin{cases} \cos k\frac{a}{2} = 0 & (+) \\ \sin k\frac{a}{2} = 0 & (-) \end{cases}$$

$$\begin{cases} (+): & k_\nu = \frac{\pi}{a}(2\nu+1), & \nu = 0, 1, 2, \cdots \\ (-): & k_\nu = \frac{\pi}{a}(2\nu), & \nu = 1, 2, \cdots \end{cases}$$

エネルギー固有値と固有関数：

$$\begin{cases} E_\nu = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(2\nu+1)^2 & u_\nu^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos[\frac{\pi}{a}(2\nu+1)x] \\ E_\nu = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(2\nu)^2 & u_\nu^{(-)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin[\frac{\pi}{a}(2\nu)x] \end{cases}$$

$\{\ u_\nu^{(+)},\ u_\nu^{(-)}\}$、同じことだが $\{\ \sin,\ \cos\}$ の完全性：

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}\left[u_\nu^{(+)}(x)u_\nu^{(+)*}(y) + u_\nu^{(-)}(x)u_\nu^{(-)*}(y)\right] \tag{13}$$

$$= \frac{2}{a}\sum_{\nu=0}^{\infty}\left[\cos\frac{\pi}{a}(2\nu+1)x\cos\frac{\pi}{a}(2\nu+1)y + \sin\frac{\pi}{a}2\nu x\sin\frac{\pi}{a}2\nu y\right] \tag{14}$$

$$= \frac{1}{a}\sum_{\nu=0}^{\infty}\left[\cos\frac{\pi}{a}(2\nu+1)(x+y) + \cos\frac{\pi}{a}(2\nu+1)(x-y)\right. \tag{15}$$

$$\left. - \cos\frac{\pi}{a}2\nu(x+y) + \cos\frac{\pi}{a}2\nu(x-y)\right] \tag{16}$$

$$= \frac{1}{a}\sum_{\nu=0}^{\infty}\left[\cos\frac{\pi}{a}\nu(x+y) - 2\cos\frac{\pi}{a}2\nu(x+y) + \cos\frac{\pi}{a}\nu(x-y)\right] \tag{17}$$

$$= \frac{1}{2a}\left[\delta(\frac{1}{2a}(x+y)) - 2\delta(\frac{1}{a}(x+y)) + \delta(\frac{1}{2a}(x-y))\right] \tag{18}$$

$$= \delta(x-y) \tag{19}$$

ゼロ点振動と不確定性関係

基底状態とは最低エネルギー状態のことであるが、そのエネルギーをゼロ点エネルギーともいう。これは Heisenberg の不確定性関係と以下のような意味で関係している。

Schrödinger 方程式の解からは

$$E_0 = \frac{h^2}{8a^2m}$$

である。不確定性関係は

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim \frac{\hbar}{2}$$

であるが、位置の不確定性はこの系のサイズから

$$\Delta x \sim a$$

と評価される。したがって運動量の不確定性は

$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{2a}$$

となり、エネルギーの不確定性に直せば

$$\Delta E = \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{8a^2m}$$

つまり、ゼロ点エネルギーとほぼ一致する。

箱型ポテンシャル問題（束縛状態）

$$\begin{cases} \mathrm{I} & u_\nu(x) = A\mathrm{e}^{\kappa_\nu(x+\frac{a}{2})} \\ \mathrm{II} & u_\nu(x) = B_1 \cos k_\nu x + B_2 \sin k_\nu x \\ \mathrm{III} & u_\nu(x) = D\mathrm{e}^{-\kappa_\nu(x-\frac{a}{2})} \end{cases}$$

束縛状態ではエネルギーが負なので $(V_0 > 0)$、

$$\kappa_\nu = \sqrt{\frac{2m \mid E_\nu \mid}{\hbar^2}}, \quad k_\nu = \sqrt{\frac{2m(V_0 - \mid E_\nu \mid)}{\hbar^2}}$$

このポテンシャルは

$$V(-x) = V(x)$$

なのでパリティを保存する。

パリティ$(+)$の場合：$u_\nu^{(+)}(-x) = u_\nu^{(+)}(x)$

$$A = D, \qquad B_2 = 0$$

$x = \pm\frac{a}{2}$ での接続条件

$$A - \cos\frac{k_\nu a}{2}\ B_1 = 0, \quad \kappa_\nu A - k_\nu \sin\frac{k_\nu a}{2}\ B_1 = 0$$

$$\begin{vmatrix} 1 & -\cos\frac{k_\nu a}{2} \\ \kappa_\nu & -k_\nu \sin\frac{k_\nu a}{2} \end{vmatrix} = 0$$

$$k_\nu \sin\frac{k_\nu a}{2} - \kappa_\nu \cos\frac{k_\nu a}{2} = 0$$

ここで新しい変数

$$\xi = \frac{k_\nu a}{2} = \sqrt{\frac{ma^2(V_0 - \mid E_\nu \mid)}{2\hbar^2}}, \quad w = \sqrt{\frac{ma^2 V_0}{2\hbar^2}}$$

を導入すると、超越方程式

$$\tan\xi = \frac{1}{\xi}\sqrt{w^2 - \xi^2}$$

を得る。図を用いての解法：

ポテンシャルとレンジの大きさによって、とりうる束縛状態数が決まる。

$$\begin{array}{lcl} w < \pi & : & 1 \\ \pi \leq w < 2\pi & : & 2 \\ 2\pi \leq w < 3\pi & : & 3 \\ \quad\cdots & & \cdots \end{array}$$

規格化

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_\nu^{(+)*}(x) u_\nu^{(+)}(x) dx = 1$$

すると

$$B_1 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a + 2}}$$

$$\begin{cases} \mathrm{I} & u_\nu^{(+)}(x) = B_1 \cos\frac{k_\nu a}{2}\ \mathrm{e}^{\kappa_\nu (x + \frac{a}{2})} \\ \mathrm{II} & u_\nu^{(+)}(x) = B_1 \cos k_\nu x \\ \mathrm{III} & u_\nu^{(+)}(x) = B_1 \cos\frac{k_\nu a}{2}\ \mathrm{e}^{-\kappa_\nu (x - \frac{a}{2})} \end{cases}$$

パリティ$(-)$の場合：$u_\nu^{(-)}(-x) = -u_\nu^{(-)}(x)$

$$A = -D, \qquad B_1 = 0$$

$x = \pm\frac{a}{2}$ での接続条件：

$$A + \sin\frac{k_\nu a}{2}\ B_2 = 0, \quad \kappa_\nu A - k_\nu \cos\frac{k_\nu a}{2}\ B_2 = 0$$

これが非自明解を持つ条件：

$$\begin{vmatrix} 1 & +\sin\frac{k_\nu a}{2} \\ \kappa_\nu & -k_\nu \cos\frac{k_\nu a}{2} \end{vmatrix} = 0$$

つまり、

$$k_\nu \cos\frac{k_\nu a}{2} + \kappa_\nu \sin\frac{k_\nu a}{2} = 0$$

書き直せば超越方程式

$$-\cot\xi = \frac{1}{\xi}\sqrt{w^2 - \xi^2}$$

を得る。同じく図解して求めれば、

とりうる束縛状態数

$$\begin{array}{lcl} w < \frac{\pi}{2} & : & 0 \\ \frac{\pi}{2} \le w < \frac{3\pi}{2} & : & 1 \\ \frac{3\pi}{2} \le w < \frac{5\pi}{2} & : & 2 \\ \cdots & & \cdots \end{array}$$

規格化

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_\nu^{(-)*}(x) u_\nu^{(-)}(x) dx = 1$$

すると

$$B_2 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a + 2}}$$

$$\begin{cases} \mathrm{I} & u_\nu^{(-)}(x) = -B_2 \sin\frac{k_\nu a}{2}\ \mathrm{e}^{\kappa_\nu (x+\frac{a}{2})} \\ \mathrm{II} & u_\nu^{(-)}(x) = B_2 \sin k_\nu x \\ \mathrm{III} & u_\nu^{(-)}(x) = B_2 \sin\frac{k_\nu a}{2}\ \mathrm{e}^{-\kappa_\nu (x-\frac{a}{2})} \end{cases}$$

箱型ポテンシャル問題（散乱状態）

入射エネルギーがポテンシャルの壁の高さより大きい場合と、壁の高さより小さい場合がある。

(i)$E > V_0$(V_0 は符号を含む)

$$\begin{cases} \mathrm{I} & C(\mathrm{e}^{ikx} + R\mathrm{e}^{-ikx}) \\ \mathrm{II} & C(B_1\mathrm{e}^{ik'x} + B_2\mathrm{e}^{-ik'x}) \\ \mathrm{III} & CT\mathrm{e}^{ikx} \end{cases}$$

ただし

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\qquad k'=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

$x=0$ における接続条件

$$\begin{cases} 1+R=B_1+B_2 \\ ik(1-R)=ik'(B_1-B_2) \end{cases}$$

$x=a$ における接続条件

$$\begin{cases} B_1\mathrm{e}^{ik'a}+B_2\mathrm{e}^{-ik'a}=T\mathrm{e}^{ika} \\ ik'(B_1\mathrm{e}^{ik'a}-B_2\mathrm{e}^{-ik'a})=ikT\mathrm{e}^{ika} \end{cases}$$

解くと

$$B_1=\frac{2k(k+k')}{(k+k')^2-(k-k')^2\mathrm{e}^{2ik'a}}$$

$$B_2=\frac{-2k(k-k')\mathrm{e}^{2ik'a}}{(k+k')^2-(k-k')^2\mathrm{e}^{2ik'a}}$$

$$\begin{aligned} R&=\frac{1}{2k}\{(k-k')B_1+(k+k')B_2\} \\ &=\frac{(k^2-k'^2)(1-\mathrm{e}^{2ik'a})}{(k+k')^2-(k-k')^2\mathrm{e}^{2ik'a}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T&=\frac{2k'}{k+k'}\mathrm{e}^{i(k'-k)a}B_1 \\ &=\frac{4kk'\mathrm{e}^{i(k'-k)a}}{(k+k')^2-(k-k')^2\mathrm{e}^{2ik'a}} \end{aligned}$$

したがって、反射確率、透過確率は

$$|R|^2=\left[1+\frac{4(kk')^2}{(k^2-k'^2)^2\sin^2 k'a}\right]^{-1}$$

$$|T|^2=\left[1+\frac{(k^2-k'^2)^2\sin^2 k'a}{4(kk')^2}\right]^{-1}$$

また、

$$|R|^2+|T|^2=1$$

つまり、**確率保存**が成立している。

特に

$$k'a=n\pi\quad(n=1,2,\cdots)\longrightarrow |R|^2=0,\quad |T|^2=1$$

が成り立ち、このときは**完全に透過**している。

(i)$E<V_0$

$$\begin{cases} \mathrm{I} & C(\mathrm{e}^{ikx}+R\mathrm{e}^{-ikx}) \\ \mathrm{II} & C(B_1\mathrm{e}^{-\kappa' x}+B_2\mathrm{e}^{\kappa' x}) \\ \mathrm{III} & CT\mathrm{e}^{ikx} \end{cases}$$

ただし

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \qquad \kappa'=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$$

全く同様にして

$$|\,R\,|^2=\left[1+\frac{4(k\kappa')^2}{(k^2+\kappa'^2)^2\sinh^2\kappa' a}\right]^{-1}$$

$$|\,T\,|^2=\left[1+\frac{(k^2+\kappa'^2)^2\sinh^2\kappa' a}{4(k\kappa')^2}\right]^{-1}$$

これらの解析で、$E>V_0$ でも反射確率はゼロでなく、また $E<V_0$ でも透過確率がゼロでない（**トンネル効果**）ことが分かる。これらは粒子と考えたときには古典的に起こり得ない現象であり、全くの**量子効果**そのものの現れである。

散乱状態から束縛状態への解析接続

エネルギー $E=\frac{\hbar^2}{2m}k^2$ を負に解析接続する。

まず入射波を消してみよう。

$$C=0, \quad CR=\mathrm{finite}$$

この場合、$x<0$ であることを考えて、

$$CR\mathrm{e}^{-ikx}\longrightarrow CR\mathrm{e}^{\kappa x}$$

になるためには

$$k=i\kappa, \qquad \kappa^2=-\frac{2m}{\hbar^2}E>0$$

の分岐を選ばねばならない。このとき透過波は

$$CT\mathrm{e}^{ikx}\longrightarrow CT\mathrm{e}^{-\kappa x}$$

となるので好ましい境界条件になっている。したがって後は C のゼロ点、R と T の極となる条件を満たす点を探せばよい。ここで R と T の共通分母は

$$(i\kappa+k')^2-(i\kappa-k')^2\mathrm{e}^{2ik'a}$$

なので、このゼロ点が束縛状態に対応する。

$$i\kappa+k'=\pm(i\kappa-k')\mathrm{e}^{ik'a}$$

つまり、

$$k'=\begin{cases} -\tan\frac{k'a}{2}\cdot\kappa \\ \cot\frac{k'a}{2}\cdot\kappa \end{cases}$$

$$\frac{k'a}{2}=\xi, \quad \frac{\kappa a}{2}=\sqrt{w^2-\xi^2}$$

$$\begin{cases} -\cot\xi = \frac{1}{\xi}\sqrt{w^2-\xi^2} \\ \tan\xi = \frac{1}{\xi}\sqrt{w^2-\xi^2} \end{cases}$$

となり、これは、束縛問題の結果と一致する。

Heisenberg の予想

S 行列、つまり、散乱問題の解がその系のあらゆる物理的知識を持つ。

場の理論における発散の困難は、微分的な運動法則によるもので、本来は普遍的な長さ（universal length）が存在して、発散の困難が救われる筈。(成功せず)

調和振動子（エルミート多項式による解法）

ハミルトニアン

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

Schrödinger eq. :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_\nu}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2u_\nu = E_\nu u_\nu$$

変数変換をする：

$$\xi = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x$$

$$\frac{d^2u_\nu}{d\xi^2} - \xi^2 u_\nu = -\epsilon_\nu u_\nu, \qquad \epsilon_\nu = \frac{2E_\nu}{\hbar\omega}$$

漸近形は

$$|\ \xi\ | \longrightarrow \infty, \quad u''_\nu - \xi^2 u_\nu = 0 \quad \Longrightarrow u_\nu \sim \mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

したがって、波動関数の形を

$$u_\nu(\xi) = CH_\nu(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

と仮定すると、Schrödinger eq. は

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi\frac{d}{d\xi} + (\epsilon_\nu - 1)\right] H_\nu(\xi) = 0$$

となる。そこで、H_ν を

$$H_\nu = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j$$

のようにべき展開して Schrödinger eq. に代入、ξ^j の項の係数を比較して

$$(j+2)(j+1)a_{j+2} - (2j+1-\epsilon_\nu)a_j = 0$$

したがって、解となる係数の間には 2 つの組が存在する。

$$\begin{cases} a_0, a_2, a_4, \cdots & (+)\ \text{パリティの解} \\ a_1, a_3, a_5, \cdots & (-)\ \text{パリティの解} \end{cases}$$

係数を比較すると

$$\frac{a_{j+2}}{a_j} = \frac{(2j+1-\epsilon_\nu)}{(j+2)(j+1)} \longrightarrow \frac{2}{j}, \quad j \to \infty$$

$$このべき級数 \quad \sim \quad \xi^N e^{\xi^2}$$

その理由は

$$e^{\xi^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \xi^{2n}$$

$$\frac{a_{2n+2}}{a_{2n}} = \frac{n!}{(n+1)!} = \frac{1}{n+1} \longrightarrow \frac{1}{n} = \frac{2}{2n}$$

したがって、有限な波動関数であるためには、この級数の列が途中で 0 となる必要がある。

$$2n + 1 - \epsilon_n = 0$$

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1) \\ &= \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \qquad n = 0, 1, 2, \cdots \end{aligned}$$

求めたエネルギー値を元の方程式に代入すると

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0$$

これをエルミートの微分方程式、そしてその解をエルミート多項式という。

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

これは n 次の多項式である。
　母関数：

$$e^{-t^2+2tz} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(z)$$

$$H_n(z) = \left. \frac{d^n}{dt^n} e^{-t^2+2tz} \right|_{t=0} \tag{20}$$

$$= (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} \tag{21}$$

漸化式

$$\frac{d}{dz} H_n(z) = 2nH_{n-1} \tag{22}$$

$$zH_n(z) = nH_{n-1}(z) + \frac{1}{2} H_{n+1}(z) \tag{23}$$

n が小さいときの具体形：

$$H_0 = 1 \tag{24}$$

$$H_1 = 2\xi \tag{25}$$

$$H_2 = 4\xi^2 - 2 \tag{26}$$

$$H_3 = 8\xi^3 - 4\xi \tag{27}$$

$$H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \tag{28}$$

直交性：

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_{n'}(\xi)H_n(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2}d\xi = 2^n n!\sqrt{\pi}\delta_{n'n}$$

証明：$n \geq n'$ として一般性を失わない。

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} H_{n'}(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2}(-1)^n\mathrm{e}^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2}d\xi &= \int_{-\infty}^{\infty} H_{n'}(\xi)(-1)^n\frac{d^n}{d\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2}d\xi &(29)\\
&= (-1)^{n+1}\int_{-\infty}^{\infty} H'_{n'}(\xi)\frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}}\mathrm{e}^{-\xi^2}d\xi &(30)\\
&\cdots\cdots &(31)\\
&= (-1)^{n+m}\int_{-\infty}^{\infty} H^{(m)}_{n'}(\xi)\frac{d^{n-m}}{d\xi^{n-m}}\mathrm{e}^{-\xi^2}d\xi &(32)
\end{aligned}$$

ここで、$m > n'$ ならばエルミート多項式の微分は 0 となるので、$m > n'$ なら 0、$n' = n$ のとき部分積分は $m = n$ までである。また、

$$H^{(n)}_n(\xi) = \frac{d^n}{d\xi^n}(2\xi)^n = (2n)!!$$

であることを使うと

$$左辺 = \delta_{n'n}(2n)!!\sqrt{\pi}$$

　したがって、調和振動子の規格化された波動関数は

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^*_{n'}(x)u_n(x)dx = \delta_{nn'}$$

基底状態：　$n = 0$

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\begin{aligned}
u_0(x) &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \qquad <x>=0 &(33)\\
(\Delta x)^2 &= <(x-<x>)^2>=<x^2>=\frac{\hbar}{2m\omega} &(34)
\end{aligned}$$

一方、運動量空間では

$$\begin{aligned}
a_0(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} u_0(x)\mathrm{e}^{-\frac{ipx}{\hbar}}dx &(35)\\
&= \left(\frac{1}{m\omega\hbar\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}} \qquad <p>=0 &(36)\\
(\Delta p)^2 &= <(p-<p>)^2>=<p^2>=\frac{\hbar m\omega}{2} &(37)
\end{aligned}$$

位置と運動量の不確定性関係：

$$\Delta x\cdot\Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

これを満たす波束を極小波束という。このときの調和振動子のエネルギーの不確定性がまさに最小固有エネルギー：

$$\Delta E = \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2 = \frac{\hbar\omega}{2} = E_0$$

波束の時空間発展

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int a(\mathbf{p}')\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}-E_{\mathbf{p}'}t)}d^3\mathbf{p}'$$

$\mid a(\mathbf{p}')\mid$ が $\mathbf{p}$ の周りに鋭いピークを持って分布していたとする。このときエネルギーを展開して、

$$E(\mathbf{p}')=E(\mathbf{p})+\frac{\partial E}{\partial p_i}(p'-p)_i+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 E}{\partial p_i p_j}(p'-p)_i(p'-p)_j+\cdots$$

無変形近似：1 次までとる。すると

$$\Psi(\mathbf{r},t)\simeq \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-E_{\mathbf{p}}t)}\Phi\left(\mathbf{r}-\frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}}t\right)$$

ただし

$$\Phi(\mathbf{R})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int a(\mathbf{p}')\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{R}}d^3\mathbf{p}'$$

$$\mathbf{R}=\mathbf{r}-\frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}}t$$

波動関数 Ψ の前の因子は振動している平面波であるが、$\mathbf{R}=\mathbf{r}-\frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}}t$ が一定ならば 包絡線関数 $\Phi(\mathbf{R})$ も一定である。かつ、Riemann-Lebesque の定理によって、$\mid \mathbf{R}\mid\to\infty$ ならば $\Phi\to 0$ である。すなわち、時空間的に局在しており、包絡線の形は崩れずに時間空間を伝搬し、波束となっている。波束の速度

$$\mathbf{v}_g=\frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}}=\frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}}$$

を群速度という。

変形と拡散：2 次までとる。（自由粒子の場合は 2 次までしかない。）

$$\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{v}_g t - \frac{1}{2}\left[(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right] \mathbf{v}_g t$$

右辺第 3 項が $\mathbf{p}'$ に依存するため、包絡線関数 $\Phi(\mathbf{r}, t)$ が時間とともに変形してゆく。$|\ \mathbf{p}' - \mathbf{p}\ |$ が大きいと、群速度が大きくなるので、波束は拡散してゆく。

1 次元自由粒子

$$\begin{aligned} E_{p'} &= \frac{p'^2}{2m} \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{p}{m}(p' - p) + \frac{1}{2m}(p' - p)^2 \\ &= \frac{p^2}{2m} + v_g q + \frac{1}{2m} q^2, \qquad q = (p' - p) \end{aligned}$$

極小波束

初期分布を

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}$$

としよう。すると、運動量空間では

$$\begin{aligned} a(q) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar} q x} dx \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2\pi\hbar}} (2\pi\sigma^2)^{1/4} \mathrm{e}^{-\frac{\sigma^2 q^2}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

となるので、包絡線関数の時間発展は

$$\begin{aligned} \Phi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} a(q) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}[qx - (v_g q + \frac{1}{2m} q^2) t]} dq && (38) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \frac{1}{(\sigma + \frac{i\hbar}{2m\sigma} t)^{1/2}} \exp\left\{ -\frac{(x - v_g t)^2}{4\sigma^2 + i\frac{2\hbar}{m} t} \right\} && (39) \end{aligned}$$

従って全体の波動関数は

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \frac{1}{(\sigma + \frac{i\hbar}{2m\sigma} t)^{1/2}} \exp\{ -\frac{(x - v_g t)^2}{4\sigma^2 + i\frac{2\hbar}{m} t} \} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar}(px - \frac{p^2}{2m} t) \right\}$$

となり、その絶対値の 2 乗は

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma^2})^{1/2}} \exp\left\{ -\frac{(x - v_g t)^2}{2(\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma^2})} \right\}$$

位置と運動量の期待値の分散：

$$\begin{array}{ll} < x >= v_g t, & \Delta x = \sqrt{\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma^2}} \\ < p >= p, & \Delta p = \frac{\hbar}{2\sqrt{\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma^2}}} \end{array}$$

位置と運動量の不確定性関係：

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

座標表示と運動量表示

座標表示：

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int A(\mathbf{p}',t) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{p}'$$

運動量表示：

$$A(\mathbf{p},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Psi(\mathbf{r},t) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}$$

$$\begin{array}{lll} |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 & \cdots & \text{存在確率密度} \\ |A(\mathbf{p},t)|^2 & \cdots & \text{運動量確率分布} \end{array}$$

r 表示

$$\hat{\mathbf{p}}\phi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) = \mathbf{p}'\phi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}), \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$$

運動量の固有関数

$$\phi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}$$

$$\hat{\mathbf{r}}\chi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}'\chi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}),$$

座標変数の固有関数

$$\chi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

座標空間での内積は

$$(\phi, \Psi) \equiv \int \phi^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},t) d^3\mathbf{r}$$

$$\Psi(\mathbf{r}',t) = (\chi_{\mathbf{r}'}, \Psi) \longrightarrow |\Psi(\mathbf{r}',t)|^2 = |(\chi_{\mathbf{r}'}, \Psi)|^2$$

$$A(\mathbf{p}',t) = (\phi_{\mathbf{p}'}, \Psi) \longrightarrow |A(\mathbf{p}',t)|^2 = |(\phi_{\mathbf{p}'}, \Psi)|^2$$

Dirac の bra ベクトルと ket ベクトル

$$(\phi, \Psi) \equiv < \phi, \Psi >$$

n 次元ベクトル空間 (基底：$\{\vec{e}_i\}$) での類推

$$\vec{A} = \sum_{i=1}^{n} A_i \vec{e}_i \quad A_i = (\vec{e}_i \cdot \vec{A})$$

$$\vec{A} = \sum_{i=1}^{n} \vec{e}_i (\vec{e}_i \cdot \vec{A})$$

この形式をヒルベルト空間に拡張：

$$|\Psi > = \int d^3\mathbf{r} |\mathbf{r} >< \mathbf{r}|\Psi >$$

つまり、この表示での完全性は

$$\int d^3\mathbf{r} |\mathbf{r} >< \mathbf{r}| = \mathbf{1}$$

また、直交性は

$$< \mathbf{r}'|\mathbf{r}" > = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}")$$

と書ける。この表示での位置と運動量の固有ベクトルを調べてみる。それをブラベクトルとケットベクトルの基底と選び、演算子の座標表示、運動量表示を求める。

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}' > &= \mathbf{r}'|\mathbf{r}' > && (40) \\ \hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}' > &= \mathbf{p}'|\mathbf{p}' > && (41) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{r}"|\mathbf{r}" >< \mathbf{r}"|\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}' > &= \mathbf{r}' \int d^3\mathbf{r}"|\mathbf{r}" >< \mathbf{r}"|\mathbf{r}' > && (42) \\ &= \mathbf{r}'|\mathbf{r}' > && (43) \\ < \mathbf{r}"|\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}' > &= \mathbf{r}'\delta(\mathbf{r}" - \mathbf{r}') && (44) \\ \int d^3\mathbf{p}"|\mathbf{p}" >< \mathbf{p}"|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}' > &= \mathbf{p}' \int d^3\mathbf{p}"|\mathbf{p}" >< \mathbf{p}"|\mathbf{p}' > && (45) \\ < \mathbf{p}"|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}' > &= \mathbf{p}'\delta(\mathbf{p}" - \mathbf{p}') && (46) \end{aligned}$$

$\hat{\mathbf{p}}$ の座標表示は次のようにしてもとまる。

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}'|\mathbf{r} >< \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}' >< \mathbf{r}'|\mathbf{p}' > &= \mathbf{p}' \int d^3|\mathbf{r} >< \mathbf{r}|\mathbf{p}' > && (47) \\ < \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}' > &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')(-i\hbar\vec{\nabla}_{\mathbf{r}}) && (48) \end{aligned}$$

ここで

$$< \mathbf{r}|\mathbf{p}' > = \frac{1}{2\pi\hbar}^{3/2} \mathrm{e}^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}$$

を使った。同様に

$$< \mathbf{p}|\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{p}' > = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')(i\hbar\vec{\nabla}_{\mathbf{p}})$$

が求められる。

確率解釈の一般化

「状態 Ψ において、状態 ϕ を見いだす確率は $|\,(\phi,\Psi)\,|^2$ に比例する。」

$\{\chi_{\mathbf{r}'}\}$ の直交性と完全性：

$$(\chi_{\mathbf{r}'},\chi_{\mathbf{r}''})=\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')$$

$$\int \chi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r})\chi^*_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}'')d^3\mathbf{r}'=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')$$

$\{\phi_{p'}\}$ の直交性と完全性：

$$(\phi_{\mathbf{p}'},\phi_{\mathbf{p}''})=\delta(\mathbf{p}'-\mathbf{p}'')$$

$$\int \phi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}')\phi^*_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}'')d^3\mathbf{p}'=\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')$$

したがって波動関数は、両方の表示で表せる。

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\int \chi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r})(\chi_{\mathbf{r}'},\Psi)d^3\mathbf{r}'$$

$$=\int \phi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})(\phi_{\mathbf{p}'},\Psi)d^3\mathbf{p}'$$

力学量の期待値

古典論での力学量 $F(\mathbf{r},\mathbf{p})$ を $\mathbf{p}\longrightarrow -i\hbar\nabla$ にしたがって、演算子

$$\hat{F}\equiv F(\mathbf{r},-i\hbar\nabla)$$

で置き換える。

$$<F>=\int \Psi^*(\mathbf{r},t)F(\mathbf{r},-i\hbar\nabla)\Psi(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r}$$

p 表示

同じことを運動量表示で行う。運動量演算子の固有方程式、固有関数は

$$\hat{\mathbf{p}}\tilde{\phi}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p})=\mathbf{p}'\tilde{\phi}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p})$$

$$\tilde{\phi}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p})=\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$$

理由は、座標表示での平面波の固有方程式を Fourie 変換してみればよい。

$$\hat{\mathbf{p}}\phi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})=\mathbf{p}'\phi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})$$

$$\hat{\mathbf{p}}\tilde{\phi}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p})=\mathbf{p}'\tilde{\phi}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p})$$

$$\tilde{\phi}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p})=(\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}})^2\int \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}d^3\mathbf{r}$$

$$=\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$$

座標演算子の固有方程式、固有関数は

$$\hat{\mathbf{r}}\tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}(\mathbf{p})=\mathbf{r}'\tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}(\mathbf{p})$$

$$\tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}(\mathbf{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'}$$

理由は、座標表示での固有方程式を Fourie 変換してみればよい。

$$\tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'}d^3\mathbf{r}$$

これから、運動量表示での座標演算子は

$$\hat{\mathbf{r}} \longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}$$

となることがわかる。

Parseval の等式：

$$\begin{aligned}(\tilde{\varphi},\tilde{\psi}) &= \int \tilde{\varphi}^*(\mathbf{p})\tilde{\psi}(\mathbf{p})d^3\mathbf{p}\\ &= (\varphi,\psi)\end{aligned}$$

つまり、座標空間と運動量空間でのノルムは保存する。

波動関数を、運動量表示での固有関数で表すと

$$\begin{aligned}A(\mathbf{p},t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\Psi(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r}\\ &= \tilde{\Psi}(\mathbf{p},t)\\ A(\mathbf{p}',t) &= (\tilde{\phi}_{\mathbf{p}'},A(\mathbf{p},t)) = (\tilde{\phi}_{\mathbf{p}'},\tilde{\Psi})\\ \Psi(\mathbf{r}',t) &= (\tilde{\chi}_{\mathbf{r}'},A(\mathbf{p},t)) = (\tilde{\chi}_{\mathbf{r}'},\tilde{\Psi})\end{aligned}$$

$\{\tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}\}$ の直交性と完全性：

$$\begin{aligned}(\tilde{\chi}_{\mathbf{r}'},\tilde{\chi}_{\mathbf{r}''}) &= \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')\\ \int \tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}(\mathbf{p})\tilde{\chi}^*_{\mathbf{r}'}(\mathbf{p}'')d^3\mathbf{r}' &= \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'')\end{aligned}$$

$\{\tilde{\phi}_{p'}\}$ の直交性と完全性：

$$\begin{aligned}(\tilde{\phi}_{\mathbf{p}'},\tilde{\phi}_{\mathbf{p}''}) &= \delta(\mathbf{p}'-\mathbf{p}'')\\ \int \tilde{\phi}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p})\tilde{\phi}^*_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}'')d^3\mathbf{p}' &= \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'')\end{aligned}$$

$F(\mathbf{r},\mathbf{p})$ の p 表示

$$\begin{aligned}\text{Fourie 変換}\,\{F(\mathbf{r},-i\hbar\nabla)\Psi(\mathbf{r},t)\} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}F(\mathbf{r},-i\hbar\nabla)\Psi(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r}\\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}F(\mathbf{r},-i\hbar\nabla)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}\tilde{\Psi}(\mathbf{p}',t)d^3\mathbf{p}'d^3\mathbf{r}\\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int F(\mathbf{r},\mathbf{p}')\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}}\tilde{\Psi}(\mathbf{p}',t)d^3\mathbf{p}'d^3\mathbf{r}\\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int F(i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}},\mathbf{p}')\tilde{\Psi}(\mathbf{p}',t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}}d^3\mathbf{p}'d^3\mathbf{r}\\ &= F(i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}},\mathbf{p})\tilde{\Psi}(\mathbf{p},t)\end{aligned}$$

したがって

$$\hat{F} = F(i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}},\mathbf{p})$$

まとめ

物理量		座標表示	運動量表示
波動関数		$\Psi(\mathbf{r},t)$	$\tilde{\Psi}(\mathbf{p},t)=A(\mathbf{p},t)$
位置座標	$\mathbf{r}$	$\mathbf{r}$	$i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}$
固有関数		$\chi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r})=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$	$\tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}(\mathbf{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'}$
運動量	$\mathbf{p}$	$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}$	$\mathbf{p}$
固有関数		$\phi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}$	$\phi_{\mathbf{p}'}=\delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$
力学量	$F(\mathbf{r},\mathbf{p})$	$F(\mathbf{r},-i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}})$	$F(i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}},\mathbf{p})$
存在確率密度		$\mid(\chi_{\mathbf{r}'},\Psi)\mid^2$	$\mid(\tilde{\chi}_{\mathbf{r}'},\tilde{\Psi})\mid^2$
運動量分布		$\mid(\phi_{\mathbf{p}'},\Psi)\mid^2$	$\mid(\tilde{\phi}_{\mathbf{p}'},\tilde{\Psi})\mid^2$

量子条件と交換関係

r 表示

$$-i\hbar\left\{x\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}x\right\}\psi(\mathbf{x},t)=i\hbar\psi(\mathbf{x},t)$$

$$-i\hbar\left\{x\frac{\partial}{\partial y}-\frac{\partial}{\partial y}x\right\}\psi(\mathbf{x},t)=0$$

$$\cdots\cdots\cdots$$

任意の ψ に対して成立 $\longrightarrow$

$$x\hat{p}_x-\hat{p}_xx=i\hbar,\qquad x\hat{p}_y-\hat{p}_yx=0,\qquad\cdots\cdots$$

p 表示

$$i\hbar\left\{\frac{\partial}{\partial p_x}p_x-p_x\frac{\partial}{\partial p_x}\right\}\widetilde{\psi}(\mathbf{p},t)=i\hbar\widetilde{\psi}(\mathbf{p},t)$$

$$i\hbar\left\{\frac{\partial}{\partial p_x}p_y-p_y\frac{\partial}{\partial p_x}\right\}\widetilde{\psi}(\mathbf{p},t)=0$$

$$\cdots\cdots\cdots$$

任意の ψ に対して成立 $\longrightarrow$

$$\hat{x}p_x-p_x\hat{x}=i\hbar,\qquad \hat{x}p_y-p_y\hat{x}=0,\qquad\cdots\cdots$$

帰納的結論 (表示によらず)

$$\hat{x}_\alpha\hat{p}_\beta-\hat{p}_\beta\hat{x}_\alpha=i\hbar\delta_{\alpha\beta},\qquad(\alpha,\beta=1,2,3)$$

$$\hat{x}_\alpha\hat{x}_\beta-\hat{x}_\beta\hat{x}_\alpha=0$$

$$\hat{p}_\alpha\hat{p}_\beta-\hat{p}_\beta\hat{p}_\alpha=0$$

演繹的手法

発想を逆転し、以上の関係式を **量子条件**(quantum condition) と呼び、これを出発点とする。

交換子 (commutator):

$$[\hat{a}, \hat{b}] = \hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}$$

交換関係(commutation relation):

$$\begin{aligned}
&[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}, \\
&[\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta] = 0, \qquad [\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = 0, \\
&(\alpha, \beta = 1, 2, 3)
\end{aligned}$$

Poisson 括弧式と交換子

古典力学での正準変数

$$\{x_\alpha, p_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}, \tag{49}$$

$$\{x_\alpha, x_\beta\} = 0, \qquad \{p_\alpha, p_\beta\} = 0, \tag{50}$$

$$(\alpha, \beta = 1, 2, 3) \tag{51}$$

量子化の規則 (正準量子化法) (quantization)

$$\{a, b\} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\hat{a}, \hat{b}]$$

交換子の満たす恒等式

$$\begin{aligned}
&[\hat{a}, \hat{b}] = -[\hat{b}, \hat{a}] \\
&[\hat{a}, C] = 0, \qquad [C\hat{a}, \hat{b}] = C[\hat{a}, \hat{b}] \qquad (C \text{ は定数}) \\
&[\hat{a} + \hat{b}, \hat{c}] = [\hat{a}, \hat{c}] + [\hat{b}, \hat{c}] \\
&[\hat{a}\hat{b}, \hat{c}] = \hat{a}[\hat{b}, \hat{c}] + [\hat{a}, \hat{c}]\hat{b} \\
&[\hat{a}, [\hat{b}, \hat{c}]] + [\hat{b}, [\hat{c}, \hat{a}]] + [\hat{c}, [\hat{a}, \hat{b}]] = 0 \qquad (\text{Jacobi の恒等式})
\end{aligned}$$

第３章　量子力学の理論体系

I 量子力学的状態の存在

(Ia) 量子数の存在

力学系の状態を過不足なく完全に指定できる実数の組 $a = (a_1, a_2, \cdots, a_n)$ が存在する。これを**量子数** (quantum number) という。

(Ib) 重ね合わせの原理と確率解釈

力学系の運動状態は確率解釈の意味で、量子数空間 R_a 上で定義された線形関数空間 $\mathcal{H}_a$ 内の複素数値関数 $\psi(a)$ によって記述される。

$$P_{21} = |\ (\psi_1, \psi_2)\ |^2 \quad \text{状態 2 の中に状態 1 の見出される確率}$$

$$(\psi_1, \psi_2) = \int \psi_1^*(a)\psi_2(a)\rho(a)da$$

座標表示 (配置空間) と運動量表示 (運動量空間) との関係

$$(\psi_1, \psi_2) = (\widetilde{\psi}_1, \widetilde{\psi}_2)$$

II 力学量の定義

(IIa) 力学量の規定

力学量は 線形 Hermite 演算子によって表され、その固有関数は 完全系 を張る。また、その力学量の取る値は演算子の固有値のどれか一つに限られる。力学量が一定の値を取る場合、力学系はその固有値に属する固有関数によって表される状態にある。

線形エルミート演算子の例：

ハミルトニァン　H:

線形：

$$\hat{H}(\psi_a + \psi_b) = \hat{H}\psi_a + \hat{H}\psi_b$$

物理的役割：系の時間発展

$$\psi(\mathbf{r}, t+\delta t) = U_H(\delta t)\psi(\mathbf{r}, t), \quad U_H(\delta t) = \mathrm{e}^{-iH\delta t/\hbar} \tag{52}$$

$$= \psi - \frac{i}{\hbar}H\psi\delta t + O((\delta t)^2) \tag{53}$$

$$= \psi + \frac{\partial\psi}{\partial t}\delta t + O((\delta t)^2) \tag{54}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}\delta t = (-\frac{i}{\hbar}H\delta t)\psi$$

運動量演算子　$\hat{\mathbf{p}}$:

$$\hat{\mathbf{p}}(\psi_a + \psi_b) = \hat{\mathbf{p}}\psi_a + \hat{\mathbf{p}}\psi_b$$

物理的意味：位置のずらし

$$\psi(\mathbf{r}+\delta\mathbf{r}, t) = U_{\mathbf{p}}(\delta\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t), \quad U_{\mathbf{p}}(\delta\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\frac{\delta\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}} \tag{55}$$

$$= \psi + i\frac{\delta\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}\psi + O((\delta\mathbf{r})^2) \tag{56}$$

$$= [1 + \frac{1}{1!}(\delta\mathbf{r}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}) + \frac{1}{2!}(\delta\mathbf{r}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}})^2 + \cdots\cdots]\psi(\mathbf{r}, t) \tag{57}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{r}}\cdot\delta\mathbf{r} = i\delta\mathbf{r}\cdot\frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}\psi$$

位置座標　$\hat{\mathbf{r}}$:

$$\hat{\mathbf{r}}(\psi_a+\psi_b) = \hat{\mathbf{r}}\psi_a + \hat{\mathbf{r}}\psi_b$$

運動量演算子と同様に

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}+\delta\mathbf{p},t) = \hat{U}_{\mathbf{r}}(\delta\mathbf{p}) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\delta\mathbf{p}\cdot\hat{\mathbf{r}}}$$

から

$$\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial\mathbf{p}}\cdot\delta\mathbf{p} = -i\delta\mathbf{p}\cdot\frac{\hat{\mathbf{r}}}{\hbar}\tilde{\psi}$$

まとめると

$\hat{H}\cdots$　時間の無限小発展を与える生成演算子
$\hat{p}\cdots$　位置座標の無限小変化を与える生成演算子
$\hat{r}\cdots$　運動量の無限小変化を与える生成演算子

これらの演算子の持つ性質：

線形性

$$F(\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathbf{p}})(\psi_a+\psi_b) = F\psi_a + F\psi_b$$

Hermite、自己共役:

Hermite 演算子の特徴:$\longrightarrow$ 固有値が実数、異なる固有値に属する固有関数が直交。

$$\hat{F}u_\nu = \lambda_\nu u_\nu$$

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F} \longrightarrow \lambda_\nu^* = \lambda_\nu, \qquad (u_\nu, u'_\nu) = 0, \qquad (\lambda_\nu \neq \lambda'_\nu)$$

状態 u_ν と状態 u'_ν は互いに排他的確率事象

エルミート共役演算：

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}, \qquad \hat{B}^\dagger = \hat{B} \longrightarrow (\hat{A}+\hat{B})^\dagger = \hat{A}+\hat{B}$$

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}, \qquad \hat{B}^\dagger = \hat{B} \longrightarrow (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}\hat{A} \neq \hat{A}\hat{B}$$

非交換の演算子の積では順序が重要：

Weyl の方法

これは演算子の対称積であり、Fourier 変換を利用する：

$$\tilde{F}(\xi,\eta) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\int F(\mathbf{r},\mathbf{p})\exp[-i(\xi\cdot\mathbf{r}+\eta\cdot\mathbf{p})]d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}$$

$$F(\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathbf{p}}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\int \tilde{F}(\xi,\eta)\exp[i(\xi\cdot\hat{\mathbf{r}}+\eta\cdot\hat{\mathbf{p}})]d^3\xi d^3\eta$$

例：xp

$$\begin{aligned}
\tilde{F} &= -2\pi\frac{\partial^2}{\partial\xi\partial\eta}\delta(\xi)\delta(\eta) &(58)\\
F &= -\int d\xi d\eta \mathrm{e}^{i(\xi\hat{x}+\eta\hat{p})}\frac{\partial^2}{\partial\xi\partial\eta}\delta(\xi)\delta(\eta) &(59)\\
&= -\int d\xi d\eta\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi\partial\eta}(-\frac{1}{2})(\xi\hat{x}\eta\hat{p}+\eta\hat{p}\xi\hat{x})\right)\delta(\xi)\delta(\eta) &(60)\\
&= \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}) &(61)
\end{aligned}$$

完全系:

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}) &= \sum_{\nu'} c_{\nu'}u_{\nu'}(\mathbf{r}) \qquad c_{\nu'} = (u_{\nu'},\psi) &(62)\\
\psi(\mathbf{r}) &= \sum_{\nu'}(u_{\nu'},\psi)u_{\nu'}(\mathbf{r}) &(63)\\
&= \int\sum_{\nu'} u_{\nu'}(\mathbf{r})u^*_{\nu'}(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}' &(64)\\
\sum_{\nu'} u_{\nu'}(\mathbf{r})u^*_{\nu'}(\mathbf{r}') &= \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad \text{固有関数の完全性} &(65)
\end{aligned}$$

ブラベクトルとケットベクトルによる表示：

$$\begin{aligned}
\hat{F} &= F(\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathbf{p}})\cdots\text{linear} &(66)\\
\hat{F}^\dagger &= \hat{F}\cdots\text{エルミート性、自己共役性} &(67)\\
\hat{F}|u_\nu> &= \lambda_\nu|u_\nu>, \quad \lambda^*_\nu = \lambda_\nu\cdots\text{固有方程式と固有値、実数の固有値} &(68)\\
<u_\nu|u_{\nu'}> &= \delta_{\nu,\nu'}, \quad \sum_\nu |u_\nu><u_\nu| = \mathbf{1}\cdots\text{正規直交性と完全性} &(69)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\forall|\Psi> &\in \mathcal{H}, \quad \exists c_\nu &(70)\\
|\Psi> &= \sum_\nu c_\nu|u_\nu> &(71)\\
&= \sum_\nu |u_\nu><u_\nu|\Psi> &(72)
\end{aligned}$$

力学量の測定と期待値

$$\begin{aligned}
c_\nu &= (u_\nu,\psi) &(73)\\
w_\nu &= \frac{|\ c_\nu\ |^2}{\sum_\nu |\ c_\nu\ |^2} \qquad \text{力学量}\hat{F}\text{が値}\lambda_\nu\text{をとる事象が起こる確率} &(74)\\
\bar{F} &= \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_\nu \lambda_\nu N_\nu \qquad \text{平均値} &(75)\\
<\hat{F}> &= \sum_\nu \lambda_\nu w_\nu = \frac{\sum_\nu \lambda_\nu |\ c_\nu\ |^2}{\sum_\nu |\ c_\nu\ |^2} \qquad \text{期待値 (expectation value)} &(76)\\
&= \frac{\int\int \psi^*(\mathbf{r},t)\sum_\nu \lambda_\nu u_\nu(\mathbf{r})u^*_\nu(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}',t)d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}'}{\int\int \psi^*(\mathbf{r},t)\sum_\nu u_\nu(\mathbf{r})u^*_\nu(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}',t)d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}'} &(77)
\end{aligned}$$

$$= \frac{\int\int \psi^*(\mathbf{r},t)\hat{F}(\mathbf{r},\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}})\{\sum_\nu u_\nu(\mathbf{r})u_\nu^*(\mathbf{r}')\}\psi(\mathbf{r}',t)d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}'}{\int \psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r}} \tag{78}$$

$$= \frac{\int\int \psi^*(\mathbf{r},t)\hat{F}(\mathbf{r},\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}})\psi(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r}}{\int \psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r}} \tag{79}$$

$$= \frac{(\psi,\hat{F}\psi)}{(\psi,\psi)} \tag{80}$$

ブラケット表示：

$$\frac{\sum_\nu \lambda_\nu \mid c_\nu \mid^2}{\sum_\nu \mid c_\nu \mid^2} = \frac{\sum <\psi|u_\nu> \lambda_\nu <u_\nu|\psi>}{<\psi \sum |u_\nu><u_\nu|\psi>} \tag{81}$$

$$= \frac{<\psi|\hat{F}\sum |u_\nu><u_\nu|\psi>}{<\psi|\psi>} \tag{82}$$

$$= \frac{<\psi|\hat{F}|\psi>}{<\psi|\psi>} \tag{83}$$

$$(\Delta F)^2 =< (\hat{F}- <\hat{F}>)^2 >=< \hat{F}^2 > - < \hat{F} >^2$$

偏差　$(\Delta F) = \sqrt{< (\hat{F}- <\hat{F}>)^2 >} = 0 \quad \rightleftharpoons$　固有状態に限る。

証明：固有状態でないと仮定しよう。

$$\sum_\nu |c_\nu|^2\lambda_\nu^2 - \sum_\nu\sum_{\nu'} |c_\nu|^2|c_{\nu'}|^2\lambda_\nu\lambda_{\nu'} = 0 \tag{84}$$

$$\sum_\nu |c_\nu|^2\left((1-|c_\nu|^2)\lambda_\nu^2 - 2\sum_{\nu<\nu'}|c_{\nu'}|^2\lambda_\nu\lambda_{\nu'}\right) = 0 \tag{85}$$

$$1-|c_\nu|^2 = \sum_{\nu'\neq\nu}|c_{\nu'}|^2 \tag{86}$$

$$\sum_{(\nu,\nu'),\nu\neq\nu'}|c_\nu|^2|c_{\nu'}|^2(\lambda_\nu-\lambda_{\nu'})^2 = 0 \tag{87}$$

和は$\nu\neq\nu'$ $\to$ 2つ以上のゼロでないc_νが存在すれば、左辺$\neq 0$ (88)

固有状態でないとする仮定が矛盾 (89)

不確定性関係

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F} \qquad \hat{G}^\dagger = \hat{G}$$

次の状態ψ'とそのノルムを考えてみよう：

$$\psi' = \left[(\xi(\hat{F}- <\hat{F}>) + i(\hat{G}- <\hat{G}>)\right]\psi \tag{90}$$

$$(\psi',\psi') = \xi^2(\Delta\hat{F})^2 + \xi < i[\hat{F},\hat{G}] > +(\Delta\hat{G})^2 \tag{91}$$

$$= (\Delta\hat{F})^2\left\{(\xi-\xi_0)^2 - \frac{D}{4(\Delta\hat{F})^2}\right\} \geq 0 \tag{92}$$

$$\xi_0 = - < i[\hat{F},\hat{G}] > /2(\Delta\hat{F})^2 \tag{93}$$

ξについての判別式 ($< i[\hat{F},\hat{G}] >$は実数)

$$D =< i[\hat{F},\hat{G}] >^2 -4(\Delta\hat{F})^2(\Delta\hat{G})^2 \leq 0$$

から **不確定性関係**

$$(\Delta\hat{F})(\Delta\hat{G}) \geq \frac{1}{2} \mid < i[\hat{F}, \hat{G}] > \mid$$

を得る。

(i)$[\hat{F}, \hat{G}] = 0$ の時、同時固有関数が存在する。

$$\hat{F}u_{\nu\rho} = \lambda_\nu u_{\nu\rho} \qquad \hat{G}u_{\nu\rho} = \mu_\rho u_{\nu\rho}$$

$$(\Delta\hat{F}) = (\Delta\hat{G}) = 0$$

(ii) 等号が成立し、かつ $\xi = \xi_0$ のとき、ψ' はゼロノルムだから、状態関数 ψ は

$$(\xi_0(\hat{F} - <\hat{F}>) + i(\hat{G} - <\hat{G}>))\psi_0 = 0$$

を満たさねばならない。

特に

$$\hat{F} = \hat{x}_\alpha, \qquad \hat{G} = \hat{p}_\alpha$$

の場合を考えてみる。

(i) 不確定性関係　$< i[\hat{F}, \hat{G}] > = -\hbar$

$$\Delta x_\alpha \Delta p_\alpha \geq \frac{\hbar}{2} \qquad (\alpha = 1, 2, 3)$$

(ii) 極小波束　$\xi_0 = \frac{\hbar}{2(\Delta x_\alpha)^2}$,　$\Delta x_\alpha \Delta p_\alpha$（和はとらない）

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \frac{i}{\hbar} < p_\alpha > + \frac{1}{2(\Delta x_\alpha)^2}(x_\alpha - < x_\alpha >)\right]\psi_0(\mathbf{r}) = 0$$

この解は

$$\psi_0(\mathbf{r}) = [(2\pi)^3 \Pi_\alpha (\Delta x_\alpha)^2]^{-1/4} \exp\left[\frac{i}{\hbar} < \mathbf{p} > \cdot \mathbf{r} - \sum_\alpha \frac{(x_\alpha - < x_\alpha >)^2}{4(\Delta x_\alpha)^2}\right]$$

となる。これらは波動現象の一般的性格に過ぎない。この場合は状態関数が Schrödinger 波動方程式を満たしているからである。次の一般的な波動を考えてみよう。

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

いま、振幅 A の主要な寄与は、ある波数 k_0 を中心とした有限領域にかぎられるとしよう。

$$A(k) \approx 0, \qquad \text{for} \mid k - k_0 \mid \geq *\Delta k$$

このとき $k = k_0 + \xi$ と変数変換すると、波動関数は

$$\psi(x) \cong \exp(ik_0 x)\Phi(x)$$

と書ける。ここで

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} A(k_0 + \xi) \exp(i\xi x) d\xi$$

であるが、この関数は

$$\Phi(x) \cong 定数, \qquad \text{for} \mid x \mid \leq *(\Delta k)^{-1} \tag{94}$$

$$\Phi(x) \cong 0, \qquad \text{for} \mid x \mid \gg *(\Delta k)^{-1} \tag{95}$$

である。したがって波動関数がゼロでない領域から

$$\Delta x \Delta k \cong 1 \quad \longrightarrow \quad \Delta x \Delta p \cong \hbar$$

となり、同様に

$$\Delta t \Delta \omega \cong 1 \quad \longrightarrow \quad \Delta t \Delta E \cong \hbar$$

であることも示せる。但し、後者の場合 t と E は単にパラメーターであり、力学変数でもないし、ましてや互いに共役でもない。繰り返すことになるが、不確定性関係だけに限れば、それは波動現象の一般的性質にしか過ぎない。古典現象で身近な例として、楽器の音程をとる際、極端にみじかな音の音程はピチッと定められないのは技能の問題でなく、波動現象の本質にかかわる問題なのである。

(IIb) 古典論から量子論への移行

結局分かったことは古典的な力学量 $F, G \longrightarrow \hat{F}, \hat{G}$ に対応して、

$$\{F, G\} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{G}]$$

と置き換えることが、正準量子化となっている。

III 系の時間発展

Schrödinger 描像と Heisenberg 描像

Schrödinger 描像

状態関数の時間発展は Scrödinger 方程式によって記述される。

$$i\hbar \frac{\partial \psi_S(t)}{\partial t} = \hat{H} \psi_S(t)$$

力学量の時間変化は

$$< \hat{F} > (t) = \frac{(\psi_S(t), \hat{F}_S \psi_S(t))}{(\psi_S(t), \psi_S(t))}$$

によって与えられる。

Heisenberg 描像

一方で、状態関数は固定し、演算子が時間発展を担うような表示を考えてみよう。その状態関数として、時刻 $t = 0$ のときの Schrödinger 波動関数を選ぼう。

$$\psi_0 = \psi_S(t = 0) \equiv \psi_H$$

そして、時刻 t のときの Schrödinger 波動関数

$$\psi_S(t) = \hat{U}(t)\psi_0$$

を与えるユニタリー時間発展演算子 $\hat{U}$ を導入する。この演算子の満たすべき方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}, \qquad \hat{U}(0) = 1$$

だから、解は

$$\hat{U}(t) = \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)$$

となる。この表示での力学量の時間変化は Schrödinger 表示の式に上の関係式を代入して

$$< \hat{F} > (t) = \frac{(\psi_H, \hat{U}^\dagger\hat{F}_S(t)\hat{U}\psi_H)}{(\psi_H, \psi_H)} \tag{96}$$

$$= \frac{(\psi_H, \hat{F}_H(t)\psi_H)}{(\psi_H, \psi_H)} \tag{97}$$

ただし $$\hat{F}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{F}_S\hat{U}(t) \tag{98}$$

Heisenberg 演算子の満たす方程式は

$$\frac{d\hat{F}_H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}_H(t), \hat{H}]$$

となり、これを **Heisenberg の運動方程式**という。座標、運動量演算子

$$\hat{\mathbf{x}}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{\mathbf{x}}_S\hat{U}(t)$$

$$\hat{\mathbf{p}}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{\mathbf{p}}_S\hat{U}(t)$$

ハミルトニアン：U と H は可換だから、変わらない。

$$H_H = \hat{U}^\dagger H\hat{U} = H \tag{99}$$

$$H_H(\hat{\mathbf{r}}_H(t), \hat{\mathbf{p}}_H(t)) = H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \tag{100}$$

正準交換関係はユニタリー変換で不変だから、以下の同時刻交換関係も不変。

$$[\hat{x}_{H\alpha}(t), \hat{p}_{H\beta}(t)] = i\hbar\delta_{\alpha\beta} \tag{101}$$

$$[\hat{x}_{H\alpha}(t), \hat{x}_{H\beta}(t)] = 0 \tag{102}$$

$$[\hat{p}_{H\alpha}(t), \hat{p}_{H\beta}(t)] = 0 \tag{103}$$

Heisenberg の運動方程式

ハミルトニアンを

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

とすると、Heisenberg の運動方程式は

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{r}}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathbf{r}}(t), \hat{H}(\hat{\mathbf{r}}(t), \hat{\mathbf{p}}(t))] \tag{104}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{p}}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathbf{p}}(t), \hat{H}(\hat{\mathbf{r}}(t), \hat{\mathbf{p}}(t))] \tag{105}$$

となる。ここで

$$\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x}_\alpha(t), \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2\right] = \frac{1}{2i\hbar m}\{\hat{p}_\beta[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] + [\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta]\hat{p}_\beta\} \tag{106}$$

$$= \frac{\hat{p}_\alpha}{m} \tag{107}$$

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_\alpha, V(\hat{\mathbf{r}})] = -\left[\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\right]_{\mathbf{r}=\hat{\mathbf{r}}(t)} \tag{108}$$

であることを使えば、

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{r}}(t) = \frac{1}{m}\hat{\mathbf{p}}(t) \tag{109}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{p}}(t) = -\left[\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}\right]_{\mathbf{r}=\hat{\mathbf{r}}(t)} \tag{110}$$

となる。

Ehrenfest の定理

量子力学の平均的運動が、古典的運動に対応する。

$$\frac{d}{dt} < \hat{\mathbf{r}} > = \frac{1}{m} < \hat{\mathbf{p}} > \tag{111}$$

$$\frac{d}{dt} < \hat{\mathbf{p}} > = -\left\langle\left[\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}\right]_{\mathbf{r}=\hat{\mathbf{r}}}\right\rangle \tag{112}$$

例１．１次元自由粒子

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{r}}(t) = \frac{1}{m}\hat{\mathbf{p}}(t) \tag{113}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{p}}(t) = 0 \tag{114}$$

初期値を

$$\hat{x}(0) = \hat{x}_0, \qquad < \hat{x}_0 > = 0, \qquad \Delta x = \sigma \tag{115}$$

$$\hat{p}(0) = \hat{p}_0, \qquad < \hat{p}_0 > = p, \qquad \Delta p = \frac{\hbar}{2\sigma} \tag{116}$$

$$< \hat{x}_0\hat{p}_0 + \hat{p}_0\hat{x}_0 > = 0 \tag{117}$$

とすると、解は

$$\hat{p}(t) = \hat{p}_0, \qquad \hat{x}(t) = \frac{1}{m}\hat{p}_0 t + \hat{x}_0$$

となる。したがって平均的な運動は

$$< \hat{x}(t) >= \frac{1}{m}pt, \qquad < \hat{p}(t) >= p$$

となり、古典的は運動と同じになるが、量子効果として、**広がり**がでてくる。

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2 &= < \hat{x}^2(t) > - < \hat{x}(t) >^2 &(118)\\ &= \frac{1}{m^2}\{< \hat{p}_0^2 > - < \hat{p}_0 >^2\}t^2 + < \hat{x}_0^2 > &(119)\\ &= \frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^2}t^2 + \sigma^2 &(120)\end{aligned}$$

と広がって行く。$\hat{p}$ は一定なので $\Delta p = \hbar/(2\sigma)$ だから不確定性関係は

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma^4}}$$

となり、極小波束からずれていく。

例２．一様な重力場中の運動

ポテンシャルは

$$V(\mathbf{r}) = mgz$$

であるから、Heisenberg の運動方程式は

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{r}}(t) &= \frac{1}{m}\hat{\mathbf{p}}(t) &(121)\\ \frac{d}{dt}\hat{\mathbf{p}}(t) &= -mg\mathbf{k} &(122)\end{aligned}$$

となる。初期値を極小波束

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{r}}(0) = \hat{\mathbf{r}}_0, \quad < \hat{\mathbf{r}}_0 > &= 0, \quad \Delta x = \Delta y = \Delta z = \sigma &(123)\\ \hat{\mathbf{p}}(0) = \hat{\mathbf{p}}_0, \quad < \hat{\mathbf{p}}_0 > &= \mathbf{p}, \quad \Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z = \frac{\hbar}{2\sigma} &(124)\\ < \hat{x}_{i0}\hat{p}_{i0} + \hat{p}_{i0}\hat{x}_{i0} > &= 0 \quad \text{和はとらない} &(125)\end{aligned}$$

とすると、解は

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{p}}(t) &= -mgt\mathbf{k} + \hat{\mathbf{p}}_0 &(126)\\ \hat{\mathbf{r}}(t) &= -\frac{1}{2}gt^2\mathbf{k} + \frac{1}{m}t\hat{\mathbf{p}}_0 + \hat{\mathbf{r}}_0 &(127)\end{aligned}$$

となる。したがって、平均的な運動は

$$\begin{aligned}< \hat{\mathbf{p}}(t) > &= -mgt\mathbf{k} + < \hat{\mathbf{p}}_0 >= -mgt\mathbf{k} + \mathbf{p} &(128)\\ < \hat{\mathbf{r}}(t) > &= -\frac{1}{2}gt^2\mathbf{k} + \frac{1}{m}t < \hat{\mathbf{p}}_0 >= -\frac{1}{2}gt^2\mathbf{k} + \frac{1}{m}t\mathbf{p} &(129)\end{aligned}$$

となる。次ぎに広がりを求めてみる。

$$\begin{aligned}\hat{x}_i^2(t) &= \frac{1}{4}g^2t^4\delta_{i,z} + \frac{1}{m^2}t^2\hat{p}_{i0}^2 + \hat{x}_{i0}^2 - \frac{gt^3}{m}\hat{p}_{i0}\delta_{i,z} + \frac{1}{m}t(\hat{p}_{i0}\hat{x}_{i0} + \hat{x}_{i0}\hat{p}_{i0}) - gt^2\hat{x}_{i0}\delta_{i,z} &(130)\\ < \hat{x}_i^2(t) > &= \frac{1}{4}g^2t^4\delta_{i,z} + \frac{1}{m^2}t^2 < \hat{p}_{i0}^2 > + < \hat{x}_{i0}^2 > - \frac{gt^3}{m}p_i\delta_{i,z} &(131)\end{aligned}$$

だから、広がりは

$$(\Delta x)^2 = (\Delta y)^2 = (\Delta z)^2 = \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma^2} + \sigma^2 \tag{132}$$

$$(\Delta p_x)^2 = (\Delta p_y)^2 = (\Delta p_z)^2 = \left(\frac{\hbar}{2\sigma}\right)^2 \tag{133}$$

$$\Delta x_i \Delta p_i = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^4}t^2} \tag{134}$$

となり、３次元自由粒子の場合と同じになる。

1 次元調和振動子問題の代数的解法

ハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}\hat{p}^2(t) + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2(t)$$

であるから、Heisenberg の運動方程式は

$$\frac{d\hat{q}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}(t), \hat{H}] = \frac{\hat{p}(t)}{m}, \tag{135}$$

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}(t), \hat{H}] = -m\omega^2\hat{q}(t) \tag{136}$$

となる。ここで行列形に書き換えれば、

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\hat{q}\\ \hat{p}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & \frac{1}{m}\\ -m\omega^2 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{q}\\ \hat{p}\end{pmatrix}$$

となる。この解を求めるには対角化すればよい。その変換行列は

$$A = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\begin{pmatrix}m\omega & i\\ m\omega & -i\end{pmatrix} \tag{137}$$

$$A^{-1} = \frac{\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2m\omega}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ -im\omega & im\omega\end{pmatrix} \tag{138}$$

$$A\begin{pmatrix}0 & \frac{1}{m}\\ -m\omega^2 & 0\end{pmatrix}A^{-1} = \begin{pmatrix}-i\omega & 0\\ 0 & i\omega\end{pmatrix} \tag{139}$$

であり、変換した変数は

$$\begin{pmatrix}\hat{a}(t)\\ \hat{a}^\dagger(t)\end{pmatrix} = A\begin{pmatrix}\hat{q}(t)\\ \hat{p}(t)\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\begin{pmatrix}m\omega\hat{q} + i\hat{p}\\ m\omega\hat{q} - i\hat{p}\end{pmatrix}$$

となる。したがって方程式は

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\hat{a}(t)\\ \hat{a}^\dagger(t)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-i\omega & 0\\ 0 & i\omega\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{a}(t)\\ \hat{a}^\dagger(t)\end{pmatrix}$$

となる。この解は

$$\hat{a}(t) = \hat{a}\mathrm{e}^{-i\omega t}, \qquad \hat{a}(t)^\dagger = \hat{a}^\dagger\mathrm{e}^{i\omega t}$$

と書けるが、元に戻して座標・運動量演算子の解は

$$\begin{pmatrix} \hat{q}(t) \\ \hat{p}(t) \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} \hat{a}(t) \\ \hat{a}^\dagger(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\hat{a}\mathrm{e}^{-i\omega t} + \hat{a}^\dagger \mathrm{e}^{i\omega t}] \\ -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}[\hat{a}\mathrm{e}^{-i\omega t} - \hat{a}^\dagger \mathrm{e}^{i\omega t}] \end{pmatrix}$$

となる。初期値を

$$\hat{q}(0) = \hat{q}, \qquad \hat{p}(0) = \hat{p}$$

とすれば

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\hat{a} + \hat{a}^\dagger], \qquad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}[\hat{a} - \hat{a}^\dagger]$$

だから、ハイゼンベルグ演算子の解は

$$\hat{q}(t) = \hat{q}\cos\omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega}\sin\omega t \tag{140}$$

$$\hat{p}(t) = \hat{p}\cos\omega t - m\omega\hat{q}\sin\omega t \tag{141}$$

となり、形式的には古典的運動方程式の解と一致する。

量子化するには

$$[\hat{q}(t), \hat{p}(t)] = i\hbar, \quad [\hat{q}(t), \hat{q}(t)] = [\hat{p}(t), \hat{p}(t)] = 0$$

とすれば良い。この交換関係を新しい変数に書き換えれば、

$$[\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t)] = 1 \quad [\hat{a}(t), \hat{a}(t)] = [\hat{a}^\dagger(t), \hat{a}^\dagger(t)] = 0$$

となる。

以下ではしばらく Schrödinger 表示で計算しよう。ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hbar\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}]$$

となる。ここで個数演算子:

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$$

を定義すると、その代数関係は

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hat{a} \tag{142}$$

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \tag{143}$$

となる。$\hat{N}$ の固有方程式

$$\hat{N} \mid n >= \lambda_n \mid \lambda_n >$$

から、$\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ は昇降演算子となっていることが分かる。
消滅演算子:

$$\hat{N}\hat{a} \mid \lambda_n >= \hat{a}(\hat{N} - 1) \mid \lambda_n >= (\lambda_n - 1)\hat{a} \mid \lambda_n >$$

生成演算子:

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger \mid \lambda_n >= \hat{a}^\dagger(\hat{N} + 1) \mid \lambda_n >= (\lambda_n + 1)\hat{a}^\dagger \mid \lambda_n >$$

つまり

$$\hat{a}|\lambda_n > \;\; \propto \;\; |\lambda_n - 1 > \tag{144}$$
$$\hat{a}^\dagger|\lambda_n > \;\; \propto \;\; |\lambda_n + 1 > \tag{145}$$

となっている。ここで最低固有値状態を求めてみよう。固有値 λ_n は

$$\lambda_n =< \lambda_n \mid \hat{N} \mid \lambda_n >= \int dq \, |< q \mid \hat{a} \mid \lambda_n >|^2 \geq 0$$

であるから、必ず λ_n の最低値が存在する。

$$\min \lambda_n = \lambda_0, \qquad \text{固有状態} \quad \hat{N} \mid \lambda_0 >= \lambda_0 \mid \lambda_0 >$$

この状態に対して、$\hat{a}$ を作用させると、$|\lambda_0 - 1 >$ の固有状態は存在しないので、

$$\hat{a} \mid \lambda_0 >= 0 \longrightarrow \lambda_0 =< \lambda_0 \mid \hat{N} \mid \lambda_0 >=< \lambda_0 \mid \hat{a}^\dagger \hat{a} \mid \lambda_0 >= 0$$

とならねばならない。つまり、

$$\lambda_0 = 0, \quad |\lambda_0 >\equiv |0>$$

となる。したがって、一般的に

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger \mid 0 > \;\; = \;\; 1\,\hat{a}^\dagger \mid 0 > \tag{146}$$
$$\cdots \tag{147}$$
$$\hat{N}(\hat{a}^\dagger)^n \mid 0 > \;\; = \;\; n\,(\hat{a}^\dagger)^n \mid 0 > \tag{148}$$

となる。纏めると固有値と固有関数は

$$\lambda_n \;\; = \;\; n, \qquad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{149}$$
$$|n > \;\; \propto \;\; (\hat{a})^n|0> \tag{150}$$

となる。固有状態の規格化 $< n|n >= 1$ を実行しよう。

$$\hat{a}^\dagger|n > \;\; = \;\; c_{n+1}|n+1> \tag{151}$$
$$\hat{a}|n > \;\; = \;\; d_{n-1}|n-1> \tag{152}$$

とすれば、

$$|c_{n+1}|^2 \;\; = \;\; < n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n > \tag{153}$$
$$= \;\; < n|(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)|n > \tag{154}$$
$$= \;\; n + 1 \tag{155}$$

となり、したがって

$$c_{n+1} = \sqrt{n+1}, \quad \text{同様に} \quad d_{n-1} = \sqrt{n}$$

と係数が決定され、

$$\hat{a}^\dagger \mid n >= \sqrt{n+1} \mid n+1 >, \quad \hat{a} \mid n >= \sqrt{n} \mid n-1 >$$

となる。この関係式を繰り返し使えば、個数演算子の固有状態は

$$\mid n > \;=\; \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n \mid 0 > \tag{156}$$

$$\hat{N} \mid n > \;=\; n \mid n > \tag{157}$$

$$< n|m >= \delta_{n,m} \tag{158}$$

となることが分かる。従って、エネルギー固有状態とエネルギー固有値は

$$\hat{H} \mid n > \;=\; \hbar\omega \left[\hat{N} + \frac{1}{2}\right] \mid n > \tag{159}$$

$$\;=\; \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \mid n > \tag{160}$$

$$E_n \;=\; \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{161}$$

となる。

次に基底状態の波動関数:

$$< q \mid 0 >= \phi_0(q)$$

を求めてみよう。まず

$$\hat{a} \mid 0 >= \int dq dq' \mid q >< q \mid \left\{\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(i\hat{p} + m\omega\hat{q})\right\} \mid q' >< q' \mid 0 >= 0$$

を満たさねばならない。ここで演算子の q 表示

$$< q \mid (i\hat{p} + m\omega\hat{q}) \mid q' >= \left[\hbar\frac{d}{dq} + m\omega q\right]\delta(q - q')$$

を使うと、

$$\hat{a} \mid 0 >= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int dq \mid q > \left[\frac{d}{dq} + \frac{m\omega q}{\hbar}\right]\phi_0 = 0$$

となり、したがって満たすべき方程式は

$$\left[\frac{d}{dq} + \frac{m\omega q}{\hbar}\right]\phi_0 = 0$$

となる。この微分方程式の解は

$$\phi_0 = N_0 \exp\left(-\frac{m\omega q^2}{2\hbar}\right), \quad N_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}$$

と求められる。

励起状態の波動関数:

$$< q \mid n >= \phi_n(q)$$

を求めてみよう。同様に生成演算子を座標表示して、

$$\phi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}})^n \left(-\hbar\frac{d}{dq} + m\omega q\right)^n \phi_0(q)$$

となる。ここで変数変換

$$\xi = \beta q, \qquad \beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

をすれば

$$\phi_n(q) = N_n \left[\xi - \frac{d}{d\xi}\right]^n \exp(-\xi^2/2), \quad N_n = \sqrt{\frac{\beta}{\pi^{1/2} n! 2^n}}$$

となる。ここで関係式

$$\begin{aligned}
\left[\xi - \frac{d}{d\xi}\right] \mathrm{e}^{\frac{\xi^2}{2}} f(\xi) &= \mathrm{e}^{\frac{\xi^2}{2}} \left(-\frac{d}{d\xi}\right) f && (162)\\
&\cdots && (163)\\
\left[\xi - \frac{d}{d\xi}\right]^n \mathrm{e}^{\frac{\xi^2}{2}} f(\xi) &= (-1)^n \mathrm{e}^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n}{d\xi^n} f && (164)
\end{aligned}$$

に $f = \mathrm{e}^{-\xi^2}$ を代入すれば

$$\begin{aligned}
\left[\xi - \frac{d}{d\xi}\right]^n \exp(-\xi^2/2) &= (-1)^n \mathrm{e}^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n}{d\xi^n} \mathrm{e}^{-\xi^2} && (165)\\
&= \mathrm{e}^{\frac{-\xi^2}{2}} H_n(\xi) && (166)
\end{aligned}$$

となる。つまり **Hermite の多項式**を使って

$$\begin{aligned}
\phi_n(q) &= N_n H_n(\xi) \exp(-\xi^2/2) && (167)\\
H_n(\xi) &= (-1)^n \mathrm{e}^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \mathrm{e}^{-\xi^2} && (168)
\end{aligned}$$

と表示できる。

各種演算子の**行列表示**を求めておく。まず

$$< m \mid \hat{q}(t) \mid n >= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[< m \mid \hat{a} \mid n > \mathrm{e}^{-i\omega t} + < m \mid \hat{a}^\dagger \mid n > \mathrm{e}^{i\omega t}\right]$$

となるが、**昇降演算子**の行列要素は

$$< m \mid \hat{a}^\dagger \mid n >= \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}, \qquad < m \mid \hat{a} \mid n >= \sqrt{n}\delta_{m,n-1}$$

である。また**個数演算子**は

$$< m \mid \hat{N} \mid n >= n\delta_{m,n}$$

となる。したがって**座標演算子**の行列要素は

$$< m \mid \hat{q}(t) \mid n >= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n}\delta_{m,n-1}\mathrm{e}^{-i\omega t} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\mathrm{e}^{i\omega t}\right]$$

と書ける。同様に**運動量演算子**の行列要素は

$$< m \mid \hat{p}(t) \mid n >= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left[\sqrt{n}\delta_{m,n-1}\mathrm{e}^{-i\omega t} - \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\mathrm{e}^{i\omega t}\right]$$

基底状態における不確定性関係を求めてみる。

$$
\begin{aligned}
<0 \mid \hat{q}(t) \mid 0> &= 0 && (169)\\
<0 \mid \hat{p}(t) \mid 0> &= 0 && (170)\\
<0 \mid \hat{q}^2(t) \mid 0> &= <0 \mid \hat{q}(t) \mid 1><1 \mid \hat{q}(t) \mid 0>= \frac{\hbar}{2m\omega} && (171)\\
<0 \mid \hat{p}^2(t) \mid 0> &= <0 \mid \hat{p}(t) \mid 1><1 \mid \hat{p}(t) \mid 0>= \frac{m\hbar\omega}{2} && (172)
\end{aligned}
$$

これらから、

$$\Delta q(t)\,\Delta p(t) = \frac{\hbar}{2}$$

となり、基底状態は、時間が経過しても極小波束状態であり続ける。

多体系の量子力学

波動関数

N 体系の量子力学的状態は波動関数

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N, t)$$

によって記述される。その物理的意味は時刻 t のとき、一番目の粒子を $\mathbf{r}_1$ の周りの微小領域 $d^3\mathbf{r}_1$ 中に、二番目の粒子を $\mathbf{r}_2$ の周りの微小領域 $d^3\mathbf{r}_2$ 中に、$\cdots$、 N 番目の粒子を $\mathbf{r}_N$ の周りの微小領域 $d^3\mathbf{r}_N$ 中に、見いだされる確率が

$$\mid \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N, t) \mid^2 \, d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \cdots d^3\mathbf{r}_N$$

によって与えられるとすることにある。ただし波動関数は

$$\int \cdots \int \mid \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N, t) \mid^2 \, d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \cdots d^3\mathbf{r}_N = 1$$

と規格化されている。一方で運動量空間では Fourier 変換

$$
\begin{aligned}
A(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \cdots, \mathbf{p}_N, t) &= \frac{1}{\left(\sqrt{(2\pi\hbar)^3}\right)^N} \int \cdots \int \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N, t) && (173)\\
&\quad \times \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{N} \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}_i\right] d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \cdots d^3\mathbf{r}_N && (174)
\end{aligned}
$$

で振幅が、確率は

$$|A(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \cdots, \mathbf{p}_N, t)|^2 d^3\mathbf{p}_1 d^3\mathbf{p}_2 \cdots d^3\mathbf{p}_N$$

で与えられる。ハミルトニアンは

$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \cdots, \mathbf{p}_N,)$$

と書け、Schrödinger 方程式による時間発展は

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N, -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_1}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_2}, \cdots, -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_N}\right)\psi$$

で与えられる。

同種粒子

同種粒子２個の場合の波動関数

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$$

を考えよう。１番目の粒子が ν_1 に、２番目の粒子が ν_2 にある場合の確率振幅は

$$C(\nu_1, \nu_2, t) = \int\int u_{\nu_1} * (\mathbf{r}) u_{\nu_2} * (\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}'$$

で与えられる。一方で、それぞれの固有状態 $\{u_{\nu_i}\}$ が完全正規直交系をなすことから

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_{\nu_1, \nu_2} C(\nu_1, \nu_2, t) u_{\nu_1}(\mathbf{r}) u_{\nu_2}(\mathbf{r}')$$

と展開できる。次に１番目の粒子が ν_2 に、２番目の粒子が ν_1 にある場合の確率振幅は

$$C(\nu_2, \nu_1, t)$$

となるが、両者の状態は区別できない。つまり $|\epsilon| = 1$ として

$$\begin{aligned} C(\nu_1, \nu_2, t) &= \epsilon C(\nu_2, \nu_1, t) &(175)\\ &= \epsilon^2 C(\nu_1, \nu_2, t) &(176) \end{aligned}$$

したがって、

$$\begin{aligned} \epsilon &= \pm 1 &(177)\\ C(\nu_1, \nu_2, t) &= \pm C(\nu_2, \nu_1, t) &(178)\\ \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &= \pm\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t) &(179) \end{aligned}$$

となることが分かる。つまり

「同種粒子系の波動関数は状態指定の量子数を含む粒子座標の入れ換えに対して対称であるか、または、反対称のいずれかでなければならない。」

　また**「波動関数の対称性または反対称性は粒子の種類に固有の性質であり、時間の経過によっても決して変わらない。」**ことが言える。ここで粒子交換演算子 $\hat{P}_{12}$ を導入する:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{12}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &= \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t) &(180)\\ &= \pm\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &(181) \end{aligned}$$

固有値は ± 1 であり、また

$$\hat{P}_{12}^2 = 1, \qquad \hat{P}_{12}^{-1} = \hat{P}_{12}$$

となる。この演算子を Schrödinger 方程式に作用させると

$$\begin{aligned} \hat{P}_{12}\hat{H}\psi &= (\hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}^{-1})\hat{P}_{12}\psi &(182)\\ &= \hat{H}\hat{P}_{12}\psi &(183) \end{aligned}$$

となるが、ここで、ハミルトニアンは粒子を入れ換えても変わらないこと

$$\hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}^{-1} = \hat{H}$$

を使った。したがって、

$$\begin{aligned} \hat{P}_{12}\hat{H} &= \hat{H}\hat{P}_{12} && (184) \\ [\hat{P}_{12}, \hat{H}] &= 0 && (185) \end{aligned}$$

である。つまり、

$$\psi(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)\psi_0 \longrightarrow \hat{P}_{12}\psi(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)\hat{P}_{12}\psi_0$$

となり、波動関数の対称性は不変。

波動関数の対称性・反対称性の物理的意味：$\nu_1 = a,\ \nu_2 = b$

古典論の場合

$$C(a,a), \quad C(b,b), \quad C(a,b), \quad C(b,a) \qquad \text{４通り}$$

量子論の場合

(i) 対称の場合

$$C(a,a), \quad C(b,b), \quad C(a,b) = C(b,a) \qquad \text{３通り}$$

(ii) 反対称の場合

$$C(a,a) = C(b,b) = 0, \quad C(a,b) = -C(b,a) \qquad \text{１通り}$$

(i) 対称の場合ー Bose-Einstein 統計　**Bose 粒子、boson**

$$\psi(\cdots, \mathbf{r}_i, \cdots, \mathbf{r}_j, \cdots) = \psi(\cdots, \mathbf{r}_j, \cdots, \mathbf{r}_i, \cdots)$$

一つの状態に何個の粒子でも入れる。

(ii) 反対称の場合ー Fermi-Dirac 統計　**Fermi 粒子、fermion**

$$\psi(\cdots, \mathbf{r}_i, \cdots, \mathbf{r}_j, \cdots) = -\psi(\cdots, \mathbf{r}_j, \cdots, \mathbf{r}_i, \cdots)$$

この場合は一つの状態に１個の粒子しか入れない。　これらの粒子を **フェルミオン**、この法則を **パウリの排他律** と言う。

スピンと統計（W. Pauli）$\cdots$ 相対論的場の量子論

$$\begin{aligned} \text{整数スピン}\ (S = 0, 1, 2, \cdots) &\longrightarrow \text{Bose} - \text{Einstein 統計} && (186) \\ \text{半整数スピン}\ (S = 1/2, 3/2, \cdots) &\longrightarrow \text{Fermi} - \text{Dirac 統計} && (187) \end{aligned}$$

第４章　古典表示と古典近似

古典論への回帰

まず最初に古典的運動に近い場合には

$$< \hat{p} > -p = O(\hbar)$$

つまり、量子論と古典論との違いが $\hbar$ 程度の大きさになることを示そう。そのため、波動関数を

$$\psi = A\exp(\frac{i}{\hbar}W), \qquad A \text{ と } W \text{ は実数}$$

とおいて Schrödinger 方程式に代入すると

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{m}A^2\frac{\partial W}{\partial x}\right) = 0 \tag{188}$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + V + \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{A}\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} = 0 \tag{189}$$

となるが、これらを量子力学の古典的記述という（Schrödinger 方程式と等価）。第１式は $\rho = A^2,\ j_x = \left(\frac{1}{m}A^2\frac{\partial W}{\partial x}\right)$ であることに注意すれば、確率保存則になっている。第２式

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\frac{\partial W}{\partial x})^2 + V + O(\hbar^2) = 0$$

の第４項を無視し、古典論のハミルトン・ヤコビ理論では

$$p = \frac{\partial W}{\partial x}$$

であることに注意すれば、

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{2m}p^2 + V = 0$$

つまり、

$$\frac{\partial W}{\partial t} + H(x,p) = 0$$

となる。この解を求めるために

$$W(x,t) = S(x) + F(t)$$

と変数分離形を仮定する。すると

$$\frac{dF}{dt} = -\left(\frac{1}{2m}p^2 + V\right) = \text{const.} = E$$

だから

$$F = Et + \text{const.}$$

となる。また

$$p = \frac{dS}{dx} \quad \to \quad S = \int pdx$$

だから、合わせれば

$$W = \int pdx - Et + \mathrm{constant}$$

と書けるので、Schrödinger 方程式の古典近似解は

$$\psi = A\exp\left(\frac{i}{\hbar}(\int pdx - Et)\right)$$

となることが分かる。この解に対し、

$$\hat{p}\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = \left(p - i\hbar\frac{1}{A}\frac{\partial A}{\partial x}\right)\psi = (p + O(\hbar))\psi$$

となるので、

$$\hat{p} = p + O(\hbar)$$

であることが証明された。因みに、無視した項

$$V_Q = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{A}\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}$$

は量子力学的ポテンシャルと言う。

次に、

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}[\hat{F},\hat{G}] = \{F,G\}$$

となることを示そう。

Weyl の方法による対応関係（多変数の場合への拡張は自明）を使用する。

古典的力学量:

$$F(x,p) = \int\int \tilde{F}(\xi,\eta)\exp[i(\xi x + \eta p)]d\xi d\eta \tag{190}$$

$$G(x,p) = \int\int \tilde{G}(\xi',\eta')\exp[i(\xi' x + \eta' p)]d\xi' d\eta' \tag{191}$$

量子力学的力学量:

$$\hat{F}(\hat{x},\hat{p}) = \int\int \tilde{F}(\xi,\eta)\exp[i(\xi\hat{x} + \eta\hat{p})]d\xi d\eta \tag{192}$$

$$\hat{G}(\hat{x},\hat{p}) = \int\int \tilde{G}(\xi',\eta')\exp[i(\xi'\hat{x} + \eta'\hat{p})]d\xi' d\eta' \tag{193}$$

古典的 Poisson 括弧式の Fourier 分解:

$$\{F,G\} = \left\{\frac{\partial F}{\partial x}\frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial G}{\partial x}\frac{\partial F}{\partial p}\right\} \tag{194}$$

$$= \int\cdots\int \tilde{F}(\xi,\eta)\tilde{G}(\xi',\eta')(\eta\xi' - \xi\eta') \tag{195}$$

$$\times\exp[i(\xi x + \eta p)]\exp[i(\xi' x + \eta' p)]d\xi d\eta d\xi' d\eta' \tag{196}$$

これに対し、量子力学での交換関係は

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{F},\hat{G}]\psi = \int\cdots\int \tilde{F}(\xi,\eta)\tilde{G}(\xi,\eta) \tag{197}$$

$$\times\frac{1}{i\hbar}[\exp(i(\xi\hat{x} + \eta\hat{p})), \exp(i(\xi'\hat{x} + \eta'\hat{p}))]\psi d\xi d\eta d\xi' d\eta' \tag{198}$$

となる。ここで x 表示で計算し、関係式

$$\exp(i(\xi x + \eta\hat{p}))\cdot x\cdot\exp(-i(\xi x + \eta\hat{p})) = x + \hbar\eta$$

$$\exp(i(\xi x + \eta\hat{p}))\cdot \hat{p}\cdot\exp(-i(\xi x + \eta\hat{p})) = \hat{p} - \hbar\xi$$

から

$$\exp(i(\xi x + \eta\hat{p}))\exp(-i(\xi' x + \eta'\hat{p}))\exp(-i(\xi x + \eta\hat{p})) \\ = \exp(-i(\xi'(x+\hbar\eta) + \eta'(\hat{p}-\hbar\xi)))$$

を使えば、

$$\exp(i(\xi x + \eta\hat{p})) = \exp(-i(\xi'(x+\hbar\eta) + \eta'(\hat{p}-\hbar\xi))) \\ \times\exp(i(\xi x + \eta\hat{p}))\exp(i(\xi' x + \eta'\hat{p}))$$

だから、被積分関数の中の交換子は

$$\{1 - \exp(i(\xi' x + \eta'\hat{p}))\exp(-i(\xi'(x+\hbar\eta) + \eta'(\hat{p}-\hbar\xi)))\} \\ \times\exp(i(\xi x + \eta\hat{p}))\exp(i(\xi' x + \eta'\hat{p})) \\ = \{1 - \exp(-i\hbar(\eta\xi' - \xi\eta'))\}\exp(i(\xi x + \eta\hat{p}))\exp(i(\xi' x + \eta'\hat{p}))$$

となる。ここで古典への極限移行　$\hbar \to 0$　を行い、

$$\{1 - \exp(-i\hbar(\eta\xi' - \xi\eta'))\} = i\hbar(\eta\xi' - \xi\eta') + O(\hbar^2)$$

$$\hat{p} \to p$$

とすると、

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{F},\hat{G}]\psi \to \{\{F,G\} + O(\hbar)\}\psi$$

となり、古典論への回帰が証明された。

Max Born

量子論の確率解釈を提唱（1926 年 6 月）。

しかし、第 2 論文（1926 年 7 月）で個々の事象の因果的記述を与える隠れた変数が存在する可能性を示唆 → Bell の不等式。

Born の結論：測定できなければ、何の重要性も持たない。

ＷＫＢ近似，古典近似　　G. Wentzel, A. Krammers and L. Brillouin

１次元の古典的記述で、A が時間に依らないとし、また

$$\psi(x,t) = A(x)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}W(x,t)},\quad W = S(x) - Et$$

と置くと

$$\frac{\partial}{\partial x}(A^2\frac{\partial S}{\partial x}) = 0 \tag{199}$$

$$(\frac{\partial S}{\partial x})^2 - 2m(E-V) - \hbar^2\frac{1}{A}\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} = 0 \tag{200}$$

となる。第１式から、

$$A = A_0 (S')^{-1/2}$$

を得るので、これを第２式に代入すると、

$$(S')^2 = 2m(E-V) + \hbar^2 \left[\frac{3}{4} (\frac{S''}{S'})^2 - \frac{1}{2} \frac{S'''}{S'} \right]$$

となる。ここで S を $\hbar^2$ のべきで展開するが、最低次の項 S_0 は $S_0' = O(\hbar)$ なので、次は２次から始まることに注意して

$$S = S_0 + \hbar^2 S_1 + \cdots$$

と展開する。２次と３次の項から、

$$(S_0')^2 = 2m(E-V)$$

$$2 S_0' S_1' = \frac{3}{4} \left(\frac{S_0''}{S_0'} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{S_0'''}{S_0'}$$

を得る。第２式はWＫＢ近似の成り立つ領域を評価するのに使う。

１．古典的に許容領域 (a)：$E - V(x) > 0$

$$k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V(x))} \tag{201}$$

$$S_0 = \pm \hbar \left(\int_{x_1}^{x} k(x') dx' + \phi \right) \tag{202}$$

と書けるので、波動関数は

$$\psi(x,t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et \right) u_0(x) \tag{203}$$

$$u_0(x) = \frac{A_0}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\int_{x_1}^{x} k(x') dx' + \phi \right] \tag{204}$$

となる。ただし、$\frac{A_0}{\sqrt{\hbar}} \to A_0$ とした。

２．古典的に禁止領域 (f)：$E - V(x) < 0$

$$\kappa(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V-E)}$$

を定義すれば、解は

$$u_0 = \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \left[A_0 \exp(\int_{x_1}^{x} \kappa(x') dx') + B_0 \exp(- \int_{x_1}^{x} \kappa(x') dx') \right]$$

と書ける。

これらの近似式の適用限界は $|\hbar^2 S_1| < \hbar \sim S_0$、つまり

$$\hbar \mid S_1 \mid < 1 \tag{5}$$

で評価される。評価式に $S_0' = \pm\hbar k(x) \quad (\text{for} \quad E - V > 0)$ を代入すると、

$$\begin{aligned} S_1' &= \pm\frac{1}{4\hbar}\left[\frac{3}{2}\frac{k'^2}{k^3} - \frac{k''}{k^2}\right] && (205) \\ &= \mp\frac{1}{4\hbar}\left[(\frac{k'}{k^2})' + \frac{1}{2}k(\frac{k'}{k^2})^2\right] && (206) \end{aligned}$$

従って、

$$\hbar S_1 = \mp\frac{1}{4}\left[\frac{k'}{k^2} + \frac{1}{2}\int_{x_1}^{x} k(\frac{k'}{k^2})^2 dx'\right]$$

となり、評価式が成立するためには、

$$\frac{k'}{k^2} < 1$$

であればよい。また、$E - V < 0$ の領域では $k \to \kappa$ と置き換えればよく、まとめれば、

$$\frac{m\hbar \mid V' \mid}{[2m \mid E - V(x) \mid]^{3/2}} < 1 \qquad (6)$$

となる。

次に、（1.）と（2.）の解の転回点、回帰点 (turning point) での接続を考える。ここでは $k(x) = 0$ となるため、条件 (6) が成り立たない。そこで、ポテンシャルを線形で近似して、Schrödinger 方程式を解き、それに基づき近似解を接続する。

$$\begin{aligned} V(x) &\simeq E - \frac{\hbar^2}{2m}c^2(x - x_1) \qquad x \simeq x_1 && (207) \\ \frac{\hbar^2}{2m}c^2 &= \left|\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x_1}\right| && (208) \end{aligned}$$

$$(a) : \text{allowed} \qquad k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)) = c^2(x - x_1) \qquad x > x_1 \qquad (209)$$

$$(f) : \text{forbidden} \qquad \kappa^2(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)) = -c^2(x - x_1) \qquad x < x_1 \qquad (210)$$

Schrödinger 方程式

$$(a) \quad \frac{d^2u}{dx^2} + c^2(x - x_1)u = 0 \qquad x > x_1$$

$$(f) \quad \frac{d^2u}{dx^2} - c^2(x - x_1)u = 0 \qquad x < x_1$$

解は

$$u_a^{\pm} = A_{\pm} y^{1/3} J_{\pm 1/3}(y) \qquad x > x_1$$
$$u_f^{\pm} = B_{\pm} z^{1/3} I_{\pm 1/3}(z) \qquad x < x_1$$

但し、

$$y = \int_{x_1}^{x} k(x')dx' = \frac{2}{3}c(x-x_1)^{3/2} \qquad x > x_1 \tag{211}$$
$$z = \int_{x}^{x_1} \kappa(x')dx' = \frac{2}{3}c(x_1-x)^{3/2} = \frac{2}{3}c \mid x - x_1 \mid^{3/2} \qquad x < x_1 \tag{212}$$

ここで漸近形を調べよう。

$$J_{\pm 1/3}(y) \quad \to_{y\to 0} \quad \frac{(y/2)^{\pm 1/3}}{\Gamma(1\pm\frac{1}{3})}, \quad \to_{y\to\infty} \left(\frac{\pi}{2}y\right)^{-\frac{1}{2}} \cos\left(y \mp \frac{\pi}{6} - \frac{\pi}{4}\right) \tag{213}$$
$$I_{\pm 1/3}(z) \quad \to_{z\to 0} \quad \frac{(z/2)^{\pm 1/3}}{\Gamma(1\pm\frac{1}{3})}, \quad \to_{z\to\infty} (2\pi z)^{-\frac{1}{2}} \left(\mathrm{e}^{z} + \mathrm{e}^{-z}\mathrm{e}^{-(\frac{1}{2}\pm\frac{1}{3})\pi i}\right) \tag{214}$$

(i) 転回点での近似解は $\mid x - x_1 \mid$ が小さいときの漸近形を利用して

$$u_a^{+} \simeq A_{+}\frac{2^{-1/3}(2c/3)^{2/3}}{\Gamma(4/3)}(x-x_1) \tag{215}$$
$$u_a^{-} \simeq A_{-}\frac{2^{1/3}}{\Gamma(2/3)} \tag{216}$$
$$u_f^{+} \simeq B_{+}\frac{2^{-1/3}(2c/3)^{2/3}}{\Gamma(4/3)} \mid x - x_1 \mid \tag{217}$$
$$u_f^{-} \simeq B_{-}\frac{2^{1/3}}{\Gamma(2/3)} \tag{218}$$

となる。したがって接続条件は

$$u_a^{+} \longleftrightarrow u_f^{+} \qquad \Longrightarrow \qquad A_{+} = -B_{+} \tag{219}$$
$$u_a^{-} \longleftrightarrow u_f^{-} \qquad \Longrightarrow \qquad A_{-} = B_{-} \tag{220}$$

つまり、

$$A_{+} = -B_{+} = A, \quad A_{-} = B_{-} = A'$$

と選べばよい。このとき解は 2 種類となる。

$$u_{\mathrm{a}}^{+} \quad \longrightarrow_{|x-x_1|\to\infty} \quad A\left(\frac{2}{\pi k(x)}\right)^{1/2} \cos\left(y - \frac{5\pi}{12}\right) \qquad E - V > 0 \tag{221}$$
$$u_{\mathrm{f}}^{+} \quad \longrightarrow_{|x-x_1|\to\infty} \quad -A(2\pi\kappa(x))^{-1/2}[\mathrm{e}^{z} + \mathrm{e}^{-z}\mathrm{e}^{-i\pi 5/6}] \qquad E - V < 0 \tag{222}$$
$$u_{\mathrm{a}}^{-} \quad \longrightarrow_{|x-x_1|\to\infty} \quad A'\left(\frac{2}{\pi k(x)}\right)^{1/2} \cos\left(y - \frac{\pi}{12}\right) \qquad E - V > 0 \tag{223}$$
$$u_{\mathrm{f}}^{-} \quad \longrightarrow_{|x-x_1|\to\infty} \quad A'(2\pi\kappa(x))^{-1/2}[\mathrm{e}^{z} + \mathrm{e}^{-z}\mathrm{e}^{-i\pi/6}] \qquad E - V < 0 \tag{224}$$

Airy function

$$\Phi(z)=\begin{cases}\frac{1}{3}\sqrt{\frac{z}{\pi}}(I_{-\frac{1}{3}}(\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}})-I_{\frac{1}{3}}(\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}})) & z>0\\ \frac{1}{3}\sqrt{\pi}z(J_{\frac{1}{3}}(\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}})+J_{-\frac{1}{3}}(\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}})) & z<0\end{cases}$$

ここで、$z>0$ であることを考慮すれば、古典的に禁止領域での解の漸近形として $A=A'$ とおき,

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(u_{\mathrm{f}}^{+}+u_{\mathrm{f}}^{-}) \quad \longrightarrow_{|x-x_1|\to\infty} \quad 3^{-\frac{1}{2}}A(2\pi\kappa)^{-\frac{1}{2}}(\mathrm{e}^{-i\frac{\pi}{6}}-\mathrm{e}^{-i\frac{5\pi}{6}})\mathrm{e}^{-z} \tag{225}$$

$$= \quad A\frac{1}{\sqrt{2\pi\kappa}}\mathrm{e}^{-z} \tag{226}$$

ととらねばならない。これは許容領域に

$$\frac{1}{\sqrt{3}}A\left(\frac{2}{\pi k(x)}\right)^{1/2}\left[\cos\left(y-\frac{5\pi}{12}\right)+\cos(y-\frac{\pi}{12})\right]=A\left(\frac{2}{\pi k(x)}\right)^{1/2}\cos\left(y-\frac{\pi}{4}\right)$$

のように接続することを意味する。ここで第 1 の接続公式（禁止 → 許容）

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa}}\mathrm{e}^{-z}\to\frac{2}{\sqrt{k}}\cos\left(y-\frac{\pi}{4}\right)$$

が得られた。

逆に、古典的に許容領域での解、

$$u(x)_{\mathrm{a}}=\frac{1}{\sqrt{k(x)}}\cos(y+\phi')$$

を u_{a}^{+} と u_{a}^{-} で作るには

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(u_{\mathrm{a}}^{+}+u_{\mathrm{a}}^{-}) \quad \to \quad \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\cos\left(y-\frac{5\pi}{12}\right)+\cos\left(y-\frac{\pi}{12}\right)\right)=\cos\left(y-\frac{\pi}{4}\right) \tag{227}$$

$$u_{\mathrm{a}}^{+}-u_{\mathrm{a}}^{-} \quad \to \quad \cos\left(y-\frac{5\pi}{12}\right)-\cos\left(y-\frac{\pi}{12}\right)=\sin\left(y-\frac{\pi}{4}\right) \tag{228}$$

さらに

$$\cos\left(y-\frac{\pi}{4}\right)\cos\phi-\sin\left(y-\frac{\pi}{4}\right)\sin\phi=\cos\left(y-\frac{\pi}{4}+\phi\right)$$

であることに注意すれば、上の式で $\phi'=\phi-\frac{\pi}{4}$ と置いて、求める組み合わせは

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\cos\phi(u_{\mathrm{a}}^{+}+u_{\mathrm{a}}^{-})-\sin\phi(u_{\mathrm{a}}^{+}-u_{\mathrm{a}}^{-})\to_{y\to\infty}A\sqrt{\frac{2}{\pi k}}\cos\left(y-\frac{\pi}{4}+\phi\right)$$

となることが分かる。これを禁止領域へ接続するには、すでに

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(u_{\mathrm{f}}^{+}+u_{\mathrm{f}}^{-})\to_{|x-x_1|\to\infty}A\frac{1}{\sqrt{2\pi\kappa}}\mathrm{e}^{-z}$$

となることを見ている。残りは

$$(u_{\mathrm{f}}^{+}-u_{\mathrm{f}}^{-})\to_{|x-x_1|\to\infty}-2A\frac{1}{\sqrt{2\pi\kappa}}\left[\mathrm{e}^{z}-i\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-z}\right]$$

なので、求める漸近形は

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\cos\phi(u_{\rm f}^{+}+u_{\rm f}^{-})-\sin\phi(u_{\rm f}^{+}-u_{\rm f}^{-})\to_{z\to\infty}A\sqrt{\frac{2}{\pi\kappa}}\left[\sin\phi{\rm e}^{z}+\frac{1}{2}{\rm e}^{-z-i\phi}\right]$$

となる。したがって $\phi\neq 0$ と $\phi=0$ に応じて 2 つの接続公式（許容 → 禁止）

$$\frac{1}{\sqrt{k}}\cos\left(y-\frac{\pi}{4}+\phi\right)\quad\to\quad\frac{1}{\sqrt{\kappa}}\sin\phi\,{\rm e}^{z} \tag{229}$$

$$\frac{1}{\sqrt{k}}\cos\left(y-\frac{\pi}{4}\right)\quad\to\quad\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\kappa}}{\rm e}^{-z} \tag{230}$$

を得る。y と z の定義を転回点から遠ざかると増加するように決め、接続公式を矢印の方向で使用するとすれば、これら 3 つの公式で充分である。

束縛状態の理論－前期量子論の量子条件の導出

接続公式 (7) を満たすように $x=x_1$ の近傍では、

$$u_0 = \frac{A}{\sqrt{\kappa(x)}}\exp\left[-\int_x^{x_1}\kappa(x')dx'\right]\quad x<x_1 \tag{231}$$

$$u_0 = \frac{2A}{\sqrt{k(x)}}\cos\left[\int_{x_1}^{x}k(x')dx'-\frac{\pi}{4}\right]\quad x_1<x<x_2 \tag{232}$$

と選び、$x=x_2$ の近傍では

$$u_0 = \frac{B}{\sqrt{\kappa(x)}}\exp\left[-\int_{x_2}^{x}\kappa(x')dx'\right]\quad x>x_2 \tag{233}$$

$$u_0 = \frac{2B}{\sqrt{k(x)}}\cos\left[\int_{x}^{x_2}k(x')dx'-\frac{\pi}{4}\right]\quad x_1<x<x_2 \tag{234}$$

と選べる。ここで同一領域で定義されている 2 つの振動解が同一であるための条件を求めれば良い。後者を変形すれば、

$$\frac{2B}{\sqrt{k(x)}}\cos\left[\int_{x}^{x_1}k(x')dx'-\frac{\pi}{4}+\int_{x_1}^{x_2}k(x')dx'\right] \tag{235}$$

$$= \frac{2B}{\sqrt{k(x)}}\cos\left[-\int_{x}^{x_1}k(x')dx'+\frac{\pi}{4}-\int_{x_1}^{x_2}k(x')dx'\right] \tag{236}$$

$$= \frac{2B}{\sqrt{k(x)}}\cos\left[\int_{x_1}^{x}k(x')dx'-\frac{\pi}{4}-(\int_{x_1}^{x_2}k(x')dx'-\frac{\pi}{2})\right] \tag{237}$$

となる。従って、前者の振動解と比較して、

$$\int_{x_1}^{x_2} k(x')dx' - \frac{\pi}{2} = n\pi, \qquad B = (-1)^n A$$

を得るが、

$$k(x) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-V)} = \frac{2\pi}{\mathrm{h}}p$$

だから

$$2\int_{x_1}^{x_2} pdx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\mathrm{h}$$

つまり

$$\oint_{x_1}^{x^2} pdx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\mathrm{h}$$

となる。右辺の $\frac{1}{2}\mathrm{h}$ を除けば、Bohr-Sommerfeld の量子条件が Schrödinger 方程式の近似解から導出できた。

衝突散乱の理論-反射確率と透過確率公式の導出

左方領域での振動解 $\frac{1}{\sqrt{k(x)}}\cos(\int_x^{x_1} kdx - \frac{\pi}{4})$ を入射波、反射波であらわす：

$$\psi_I = \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\exp\left[-i(\int_x^{x_1} k(x')dx' - \frac{\pi}{4})\right] + R\frac{1}{\sqrt{k(x)}}\exp\left[i\left(\int_x^{x_1} k(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right)\right] \quad (238)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\left[(1+R)\cos\left(\int_x^{x_1} k(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right) - i(1-R)\sin\left(\int_x^{x_1} k(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right)\right] \quad (239)$$

ここで sin の項は位相が $\phi = -\pi/2$ であることに注意して、領域 II へ接続すると

$$\psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\left[\frac{1}{2}(1+R)\exp\left(-\int_{x_1}^{x} \kappa(x')dx'\right) + i(1-R)\exp\left(\int_{x_1}^{x} \kappa(x')dx'\right)\right]$$

となる。領域 III の振動解 $\frac{1}{\sqrt{k(x)}}\exp\left[i(\int_{x_2}^{x} kdx - \frac{\pi}{4})\right]$ となるべきだから、

$$\psi_{III} = T\frac{1}{\sqrt{k(x)}}\exp\left[i\left(\int_{x_2}^{x} k(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right)\right] \quad (240)$$

$$= T\frac{1}{\sqrt{k(x)}}\left[\cos\left(\int_{x_2}^{x} k(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right) + i\sin\left(\int_{x_2}^{x} k(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right)\right] \quad (241)$$

となる。これを領域IIへ接続すると、同じく sin の項は位相が $\phi = -\pi/2$ だから、

$$
\begin{aligned}
\psi_{II} &= T\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\left[\frac{1}{2}\exp\left(-\int_x^{x_2}\kappa(x')dx'\right) - i\exp\left(\int_x^{x_2}\kappa(x')dx'\right)\right] && (242)\\
&= T\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\left[\frac{S}{2}\exp\left(\int_{x_1}^{x}\kappa(x')dx'\right) - \frac{i}{S}\exp\left(-\int_{x_1}^{x}\kappa(x')dx'\right)\right] && (243)\\
S &= \exp\left(-\int_{x_1}^{x_2}\kappa(x')dx'\right) && (244)
\end{aligned}
$$

となる。左右からつないだ 2 つの解を比較すれば、

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}(1+R) &= -\frac{i}{S}T, && (245)\\
i(1-R) &= \frac{S}{2}T && (246)
\end{aligned}
$$

を得る。透過係数と反射係数を求めれば

$$
\begin{aligned}
T &= \frac{iS}{1+\frac{1}{4}S^2} \simeq iS, && (247)\\
R &= \frac{1-\frac{1}{4}S^2}{1+\frac{1}{4}S^2} \simeq 1-\frac{S^2}{2} && (248)
\end{aligned}
$$

となるので、透過確率は

$$
\begin{aligned}
P_{\text{transmission}} &= S^2 && (249)\\
&\simeq \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(V(x)-E)}dx\right] && (250)
\end{aligned}
$$

となることが分かる。

第５章　３次元中心力場の量子力学Ｉ

２粒子系の波動関数

ポテンシャルが粒子間距離のみの関数である場合：

$$H = \frac{1}{2m_1}\mathbf{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2}\mathbf{p}_2^2 + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

重心座標と相対座標に分離できる。

　重心座標と相対座標の導入：

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \qquad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

$$H = \frac{1}{2M}\mathbf{P}^2 + \frac{1}{2\mu}\mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r})$$

ただし、

$$M = m_1 + m_2, \qquad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

この場合の量子化は

$$[R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}, \qquad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

その他の交換関係は全てゼロ。

Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{R},\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r})\right]\Psi(\mathbf{R},\mathbf{r},t)$$

変数分離型の微分方程式

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{R},\mathbf{r},t) &= \exp\left[i\frac{1}{\hbar}\left(\mathbf{P}\cdot\mathbf{R} - \frac{\mathbf{P}^2}{2M}t\right)\right]\psi(\mathbf{r},t) && (251) \\ i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r},t) && (252) \end{aligned}$$

以下では相対座標のみについて扱うので、添え字 $\mathbf{r}$ を省略する。

球座標表示と軌道角運動量

$$\begin{aligned} L_x^2 &= (yp_z - zp_y)^2 = y^2p_z^2 + z^2p_y^2 - yp_zzp_y - zp_yyp_z && (253) \\ &= y^2p_z^2 + z^2p_y^2 - yzp_zp_y - zyp_yp_z + i\hbar(yp_y + zp_z) && (254) \end{aligned}$$

従って、他の成分も加え合わせれば、

$$\mathbf{L}^2 = \mathbf{r}^2\cdot\mathbf{p}^2 - \mathbf{r}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})\cdot\mathbf{p} + 2i\hbar(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})$$

ここで、

$$\mathbf{p} \longrightarrow -i\hbar\nabla$$

と置き換え、$\mathbf{r}\cdot\mathbf{p} \longrightarrow -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}$ に注意すれば

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 r^2 \nabla^2 + \hbar^2 r \left(r\frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{\partial}{\partial r} + 2\hbar^2 \left(r\frac{\partial}{\partial r} \right)$$

となる。ここで $[r, \mathbf{L}] = 0$ だから、r^2 で割算して、

$$-\hbar^2\nabla^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} \tag{255}$$

$$= -\hbar^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} \tag{256}$$

となる。したがって中心力場の Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \right]\psi(\mathbf{r},t)$$

を満たす。

ここで、ポテンシャルが角度変数を含まないため、この部分を処理しよう。そこで球座標に変数変換

$$x = r\sin\theta\cos\varphi \qquad y = r\sin\theta\sin\varphi \qquad z = r\cos\theta$$

をすると、逆変換は

$$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2} \qquad \cos\theta = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \qquad \cos\varphi = \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}$$

で与えられるので、変換行列は

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial x} & \frac{\partial r}{\partial y} & \frac{\partial r}{\partial z} \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} & \frac{\partial \theta}{\partial y} & \frac{\partial \theta}{\partial z} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} & \frac{\partial \varphi}{\partial y} & \frac{\partial \varphi}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta \\ \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r} & \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r} & -\frac{\sin\theta}{r} \\ -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} & \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} & 0 \end{pmatrix}$$

となる。したがって、

$$L_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right) \tag{257}$$

$$= -i\hbar\left(y\left\{ \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\varphi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\varphi} \right\} - z\left\{ \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\varphi} \right\} \right) \tag{258}$$

$$= -i\hbar\left[-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} \right] \tag{259}$$

となる。同様に

$$L_y = -i\hbar\left[\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} \right] \tag{260}$$

$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{261}$$

だから、

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]$$

となる。

直交曲線座標系による方法

線素を

$$ds^2 = h_1^2 dx_1^2 + h_2^2 dx_2^2 + h_3^2 dx_3^2$$

で定義すると、ラプラシアンは

$$\nabla^2 = \frac{1}{h_1 h_2 h_3}\left[\frac{1}{h_1}\frac{\partial}{\partial x_1}\left(h_2 h_3 \frac{\partial}{\partial x_1}\right)\right. \tag{262}$$

$$\left. +\frac{1}{h_2}\frac{\partial}{\partial x_2}\left(h_3 h_1 \frac{\partial}{\partial x_2}\right) + \frac{1}{h_3}\frac{\partial}{\partial x_3}\left(h_1 h_2 \frac{\partial}{\partial x_3}\right)\right] \tag{263}$$

で表せる。これを球座標に適用する。この座標系での線素は

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2\theta d\varphi^2$$

と書けるので、計量は

$$h_1 = 1, \qquad h_2 = r, \qquad h_3 = r\sin\theta$$

となる。ラプラシアンは一般的処方にしたがって

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{264}$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2} \tag{265}$$

と求められる。

ここで、定常解を求めるために $\psi(\mathbf{r}, t) = \exp[-\frac{i}{\hbar}Et]\psi(\mathbf{r})$ と置けば、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + V(r)\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

を得る。この方程式は動径方向と角変数について変数分離型になっているので、

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\theta, \varphi)$$

と置くと

$$\mathbf{L}^2 Y(\theta,\varphi) = \hbar^2\lambda Y(\theta,\varphi) \tag{266}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left(\frac{\hbar^2\lambda}{2\mu r^2} + V(r)\right)R(r) = ER(r) \tag{267}$$

と分離できる。動径方向の方程式は $R(r) = u(r)/r$ と置けば

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2\lambda}{2\mu r^2} + V(r)\right)u(r) = Eu(r)$$

と書ける。まず角運動量の固有値問題を考えよう。

$$
-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi)=\lambda Y(\theta,\varphi)
$$

ここで $Y(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ と置くと、

$$
-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}=\frac{\sin^2\theta}{\Theta}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\lambda\Theta\right]=m^2\quad(\text{一定})
$$

となり、角度部分についても

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+m^2\Phi &= 0 &(268)\\
-\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta &= \lambda\Theta &(269)
\end{aligned}
$$

と分離できる。第１式の解は

$$
\Phi(\varphi)=\exp[im\varphi]
$$

であるが、波動関数の一価性 $\Phi(\varphi+2\pi)=\Phi(\varphi)$ を仮定すると

$$
m=0,\quad \pm1,\quad \pm2,\quad \cdots
$$

となる。第２式の解は $z=\cos\theta$ と変数変換をすれば、

$$
\left[\frac{d}{dz}\left(1-z^2\right)\frac{d}{dz}+\lambda-\frac{m^2}{1-z^2}\right]\Theta=0
$$

となる。解は固有値

$$
\lambda=l(l+1)\qquad l=0,\quad 1,\quad 2,\quad \cdots
$$

を持つ **Legendre の陪関数**

$$
P_l^m(z)=\frac{(-1)^l}{2^l l!}(1-z^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{l+|m|}}{dz^{l+|m|}}(z^2-1)^l,\quad m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l
$$

で与えられる。したがって、$\mathbf{L}^2$ と L_z の固有値 $\hbar^2 l(l+1)$ と $\hbar m$ に属する規格化された固有関数は

$$
Y_l^m(\theta,\varphi)=(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\mathrm{e}^{im\varphi}P_l^m(\cos\theta)
$$

となり、これを**球面調和関数**という。

$$
\begin{aligned}
\mathbf{L}^2Y_l^m(\theta,\varphi) &= l(l+1)\hbar^2Y_l^m(\theta,\varphi) &(270)\\
L_zY_l^m(\theta,\varphi) &= m\hbar Y_l^m(\theta,\varphi) &(271)
\end{aligned}
$$

直交性

$$
\int Y_l^{m*}(\theta,\varphi)Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)d(\cos\theta)d\varphi=\delta_{ll'}\delta_{mm'}
$$

動径方向の方程式

$$
\begin{aligned}
\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}+V(r)\right]R_l(r) &= ER_l(r) &(272)\\
\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}+V(r)\right]u_l(r) &= Eu_l(r) &(273)
\end{aligned}
$$

３次元井戸型ポテンシャルによる束縛状態

質量 m の粒子が、半径 a の井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (V_0 > 0) \quad r < a \\ 0 & \qquad\qquad\quad r \geq a \end{cases}$$

によって束縛されている。動径方向の関数 $R_l(r)$ の満たす方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2R_l}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr}\right] + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right)R_l = - \mid E \mid R_l$$

となる。ここで

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - \mid E \mid)}, \qquad \rho = \alpha r$$

を導入すると、

(i) $r < a$ の領域

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\right]R_l = 0$$

あるいは

$$R_l(\rho) = f_l(\rho)/\sqrt{\rho}$$

と書き換えれば、

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho} + \left(1 - \frac{(l+\frac{1}{2})^2)}{\rho^2}\right)\right]f_l = 0$$

となる。この解は $(l+\frac{1}{2})$ 次の **Bessel 関数** $J_{l+\frac{1}{2}}(\rho)$ と **Neumann 関数** $N_{l+\frac{1}{2}}(\rho)$ となることが知られており、$R_l(\rho)$ に書き直すと、**球 Bessel 関数** $j_l(\rho)$ と**球 Neumann 関数** $n_l(\rho)$

$$j_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}J_{l+\frac{1}{2}}(\rho) \tag{274}$$

$$n_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}N_{l+\frac{1}{2}}(\rho) \tag{275}$$

と表せる。これらの関数には次の関係式が成り立つ：

$$n_l(\rho) = (-1)^{l+1}j_{-l-1}(\rho) \tag{276}$$

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l\left(\frac{\sin\rho}{\rho}\right) \tag{277}$$

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l\left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right) \tag{278}$$

Schrödinger 方程式の解は原点での境界条件を考慮して決めていく。漸近形が

$$j_l(\rho) \longrightarrow_{\rho\to 0} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \tag{279}$$

$$n_l(\rho) \longrightarrow_{\rho\to 0} -(2l-1)!!\rho^{-l-1} \tag{280}$$

だから、$R_l(0)=\text{finite}$ であることを考えれば、解は

$$R_l(\rho)=Aj_l(\rho)$$

となることが分かる。

(ii)$r\geq a$ の領域

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\left(\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\mid E\mid\right)\right]R_l=0$$

変数変換

$$\beta=\sqrt{\frac{2m\mid E\mid}{\hbar^2}},\qquad \rho=i\beta r$$

をすれば

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}+\left(1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\right]R_l(\rho)=0$$

となる。従って、この解も球 Bessel 関数と球 Neumann 関数で表されるが、無限遠での漸近形を考えて、その１次結合である第１種、第２種の**球 Hankel 関数**

$$h_l^{(1)} = j_l(\rho)+in_l(\rho) \tag{281}$$

$$h_l^{(2)} = j_l(\rho)-in_l(\rho) \tag{282}$$

を使う。無限遠での漸近形が

$$h_l^{(1)} \longrightarrow_{\rho\to\infty} \frac{1}{\rho}\exp\left(i\left[\rho-\frac{(l+1)\pi}{2}\right]\right) \tag{283}$$

$$h_l^{(2)} \longrightarrow_{\rho\to\infty} \frac{1}{\rho}\exp\left(-i\left[\rho-\frac{(l+1)\pi}{2}\right]\right) \tag{284}$$

であることに注意し、発散しない解をとって、

$$R_l(r)=Bh_l^{(1)}(i\beta r)$$

となる。井戸型ポテンシャル内外の解が求められたので、接続条件を要請する。特異性を持たないポテンシャルなので対数微分が連続であればよい。

$$\left[\frac{dj_l(\alpha r)}{dr}/j_l(\alpha r)\right]_{r=a}=\left[\frac{dh_l^{(1)}(i\beta r)}{dr}/h_l^{(1)}(i\beta r)\right]_{r=a}$$

ここで α と β は独立でなく、$\xi=\alpha a,\quad \eta=\beta a$ とすると、

$$\xi^2+\eta^2=\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$$

となる。固有値は β(または α) についての超越方程式を解き、$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\beta^2$ から求まる。しかし、l が小さいときには図解により、解の概要を知ることができる。

(a)$l=0$ の場合（偶パリティ）

$$\xi\cot\xi=-\eta$$

(b)$l=1$ の場合（奇パリティ）

$$\frac{\cot\xi}{\xi}-\frac{1}{\xi^2}=\frac{1}{\eta}+\frac{1}{\eta^2}$$

(参考)

$u_0(r)$ の Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+V(r)\right]u_0(r) = Eu_0(r) \tag{285}$$

$$u_0(0) = 0 \tag{286}$$

は 1 次元 Schrödinger 方程式の奇パリティ解と等価

第６章　摂動論 I

　Schrödinger eq. が厳密に解けるのはごく少数例
　現実の物理系における Schrödinger eq. は解析的に解くことは困難

とり得る方法

i) 波動関数によって与えられている全ての情報を知ることは諦め、特定な、重要な物理量だけに限定する。例：エネルギー
ii) 複雑な系を、厳密解が知られているハミルトニアンが H_0 のより簡単な系と比較して情報を得る。$\longrightarrow$ 摂動論

$$H = H_0 + \lambda H' \qquad \lambda : \text{real}$$

ここで、右辺の最後の項は比較的小さな項で、摂動項といわれる。

束縛状態摂動論 $(E < 0)$
　適用限界　　$\mid \lambda H'_{kk} \mid \ll \mid E_k \mid$
定常摂動論
　i) 縮退のない場合
　ii) 縮退のある場合

i) 縮退のない場合

　出発点

$$\begin{cases} H_0 u_k = E_k u_k \\ (u_k, u_j) = \delta_{kj} \end{cases}$$

　ここで

$$H\psi = E\psi$$

が存在するとしよう。そしてこの固有方程式が、

$$\begin{cases} \psi = \psi_0 + \lambda\psi_1 + \lambda^2\psi_2 + \cdots \\ E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \cdots \end{cases}$$

と展開できるとしよう。代入して λ の各次数で比較すると、

$$\lambda^0 \quad : \qquad H_0\psi_0 = E^{(0)}\psi_0 \longrightarrow \psi_0 \equiv u_k, \quad E^{(0)} = E_k \tag{287}$$

$$\lambda^1 \quad : \qquad H_0\psi_1 + H'\psi_0 = E^{(1)}\psi_0 + E^{(0)}\psi_1 \tag{288}$$

$$\lambda^2 \quad : \qquad H_0\psi_2 + H'\psi_1 = E^{(2)}\psi_0 + E^{(1)}\psi_1 + E^{(0)}\psi_2 \tag{289}$$

$$\cdots \tag{290}$$

ここで、ψ_1 は $\{u_n\}$ で展開できる、つまり

$$\psi_1 = \sum c_n^{(1)} u_n$$

と仮定をして、(1) に代入する。

$$H'u_k + \sum c_n^{(1)} E_n u_n = E^{(1)} u_k + E_k \sum c_n^{(1)} u_n$$

左から、u_j を内積

$$(u_j, H'u_k) + \sum c_n^{(1)} E_n (u_j, u_n) = E^{(1)} (u_j, u_k) + E_k \sum c_n^{(1)} (u_j, u_n)$$

ここで、直交関係 $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$ を使って、

$$(H')_{jk} + c_j^{(1)} E_j = E^{(1)} \delta_{jk} + E_k c_j^{(1)}$$

したがって、

$$j = k \qquad E^{(1)} = (H')_{kk}$$

そして、縮退がないから、$j \neq k$ のとき $E_k \neq E_j$ だから、

$$j \neq k \qquad c_j^{(1)} = \frac{(H')_{jk}}{E_k - E_j}$$

と求められる。$c_k^{(1)}$ は規格化によって決められる。

$$\begin{aligned} 1 &= (\psi, \psi) && (291) \\ &= 1 + \lambda[(\psi_1, \psi_0) + (\psi_0, \psi_1)] + \lambda^2[(\psi_2, \psi_0) + (\psi_1, \psi_1) + (\psi_0, \psi_2)] + \cdots && (292) \end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned} (\psi_1, \psi_0) + (\psi_0, \psi_1) &= 0 && (293) \\ (\sum c_n^{(1)} u_n, u_k) + (u_k, \sum c_n^{(1)} u_n) &= 0 && (294) \\ c_k^{(1)*} + c_k^{(1)} &= 0 && (295) \\ c_k^{(1)} = i\alpha \qquad \alpha &= \mathrm{real} && (296) \end{aligned}$$

となる。ここで λ の 1 次まで考えると、

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_0 + \lambda \psi_1 && (297) \\ &= (1 + i\alpha\lambda) u_k + \lambda \sum_{n \neq k} \frac{(H')_{nk}}{E_k - E_n} u_n && (298) \end{aligned}$$

となるが、右辺第 1 項の係数は

$$(1 + i\alpha\lambda) \sim \mathrm{e}^{i\alpha\lambda}$$

となって、位相だけに寄与する。したがって

$$c_k^{(1)} = 0$$

とできる。つまり、u_k **の寄与は既に 0 次項に取り込まれている。**

(別の方法として、$(\psi_0, \psi) = 1$ で決めてもよい。)

$E^{(2)}$ の決め方：

　同じく ψ_2 も $\{u_n\}$ で展開可能としよう。

$$\psi_2 = \sum_m c_m^{(2)} u_m$$

を (2) に代入して u_k を内積

$$c_k^{(2)} E_k + \sum (H')_{km} c_m^{(1)} = E^{(2)} + E^{(1)} c_k^{(1)} + E_k c_k^{(2)}$$

右辺第 2 項はゼロなので、

$$E^{(2)} = \sum_{m \neq k} \frac{(H')_{km}(H')_{mk}}{E_k - E_m}$$

まとめると、

$$\begin{aligned}
\psi &= u_k + \lambda \sum_{n \neq k} \frac{(H')_{nk}}{E_k - E_n} u_n && (299)\\
&\quad + \lambda^2 \sum_n \left\{ \sum_m \frac{(H')_{nm}(H')_{mk}}{(E_k - E_n)(E_k - E_m)} - \frac{(H')_{nk}(H')_{kk}}{(E_k - E_n)^2} \right\} u_n && (300)\\
E &= E_k + \lambda (H')_{kk} + \lambda^2 \sum_{n \neq k} \frac{\mid (H')_{nk} \mid^2}{E_k - E_n} && (301)
\end{aligned}$$

例　anharmonic oscillator

$$\begin{aligned}
H &= H_0 + \lambda x^4 && (302)\\
H_0 &= \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} k x^2 && (303)
\end{aligned}$$

基底状態

$$\begin{aligned}
E_0 &= \frac{1}{2} \hbar \omega, \qquad \omega^2 = \frac{k}{m} && (304)\\
\psi_0 &= \left(\frac{k}{\pi \hbar \omega} \right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\frac{kx^2}{2\hbar\omega}} && (305)\\
E^{(1)} &= (\psi_0, H' \psi_0) && (306)\\
&= \left(\frac{k}{\pi \hbar \omega} \right)^{\frac{1}{2}} \lambda \int_{-\infty}^{\infty} x^4 \mathrm{e}^{-\frac{kx^2}{\hbar\omega}} dx && (307)\\
&= \frac{3\lambda}{4} \left(\frac{\hbar\omega}{k}\right)^2 && (308)\\
E &= \frac{\hbar\omega}{2} [1 + \frac{3\lambda}{2} (\frac{\hbar\omega}{k^2})] && (309)
\end{aligned}$$

ii) 縮退のある場合—Rayleigh-Schrödinger の方法

摂動論が有効であるための条件

$$\lambda |(H')_{lk}| < |E_l^{(0)} - E_k^{(0)}|, \quad l \neq k$$

そうでないと

$$E_k^{(2)} = \sum_{l\neq k} \frac{|\ (H')_{lk}\ |^2}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

が大きくなる。特に、$E_l^{(0)} = E_k^{(0)}$ のとき、この表示は無限大になり、破綻する。

こういった場合、**表示を変えて** $(H')_{lk} = 0$ **としなければならない。**

表示の変更

$$H = H_0 + \lambda H'$$

いま、H_0 の固有値 $E_k^{(0)}$ が g_k 重に縮退しているとしよう。

$$H_0 \mid k, m >^{(0)} \quad = \quad E_k^{(0)} \mid k, m >^{(0)} \tag{310}$$

$$\text{固有状態} \qquad |k, 1>^{(0)}, |k, 2>^{(0)}, \cdots, |k, g_k>^{(0)} \tag{311}$$

これらの状態の張る**部分空間**内での変換については、不変。$\longrightarrow$ 対称性
摂動項によって対称性が破れ、縮退が解ける。
H' を対角化する表示に変換する。

$$\mid \psi_{kn} > \ = \ \sum_m a_{nm}^k \mid k, m >^{(0)} \tag{312}$$

$$H' \mid \psi_{kn} > \ = \ E'_{kn} \mid \psi_{kn} > \tag{313}$$

$$\sum_m a_{nm}^k H' \mid k, m >^{(0)} \ = \ E'_{kn} \sum_m a_{nm}^k \mid k, m >^{(0)} \tag{314}$$

ここで、${}^{(0)} < k, j|$ を内積した

$${}^{(0)} < k, j \mid H' \mid k, m >^{(0)} \equiv H'^k_{jm}$$

を定義すれば、

$$\sum_m (H'^k_{jm} - E'_{kn}\delta_{jm}) a_{nm}^k = 0$$

したがって

$$\det(H'^k_{jm} - E'_{kn}\delta_{jm}) = 0$$

これによって a_{nm}^k が決まり、H の固有値 $E = E_k^0 + E'_{kn}$ と固有関数 $\mid \psi_{kn} >, \quad n = 1, 2, \cdots, g_k$ が求まることになる。

advanced cource

k のほかに l についても g_l 重に縮退しているとしよう。

$$\mid k, m >^{(1)} = \sum_n^{g_k} a_{km,n} \mid \psi_{kn} > + \sum_n^{g_l} \sum_l a_{km,ln} \mid \psi_{ln} >$$

(2) に代入して $a_{km,n}$ と $a_{km,ln}$ を決める。結果は

$$|k, m>^{(1)} \ = \ \sum_{p\neq m}^{g_k} \sum_{n=1}^{g_l} \sum_{l\neq k} \frac{|\psi_{kp} >< \psi_{kp}|H'|\psi_{ln} >< \psi_{ln}|H'|\psi_{km} >}{(E_k^{(0)} - E_l^{(0)})[< \psi_{km}|H'|\psi_{km} > - < \psi_{kp}|H'|\psi_{kp} >]} \tag{315}$$

$$+ \sum_{n=1}^{g_l} \sum_{l\neq k} \frac{|\psi_{ln} >< \psi_{ln}|H'|\psi_{km} >}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}} \tag{316}$$

$$E_{km}^{(2)} \ = \ \sum_{n=1}^{g_l} \sum_{l\neq k} \frac{|< \psi_{km} \mid H' \mid \psi_{ln} >|^2}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}} \tag{317}$$

つまり、縮退しているということは、ある変換について対称性があるということであり、それに摂動項が加われば対称性が破れ、縮退が解けて摂動計算が実行できることになる。

例　水素原子の 2s-2p state に電場を掛ける。シュタルク (Stark) 効果

2p, 2s 状態が縮退 — $g = 4$

$$\begin{array}{llll} n=2 & l=0 & m=0 & |\,2,1>^{(0)}=u_{200} \\ & l=1 & m=0 & |\,2,2>^{(0)}=u_{210} \\ & & m=1 & |\,2,3>^{(0)}=u_{211} \\ & & m=-1 & |\,2,4>^{(0)}=u_{21-1} \end{array}$$

この基底で H' を対角化する。

$$|2>=c_1|2,1>^{(0)}+c_2|2,2>^{(0)}+c_3|2,3>^{(0)}+c_4|2,4>^{(0)}$$

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E^{(1)} & H'_{12} & H'_{13} & H'_{14} \\ H'_{21} & H'_{22}-E^{(1)} & H'_{23} & H'_{24} \\ H'_{31} & H'_{32} & H'_{33}-E^{(1)} & H'_{34} \\ H'_{41} & H'_{42} & H'_{43} & H'_{44}-E^{(1)} \end{vmatrix}=0$$

z 方向に静電場を掛けると球対称性が破れる。

$$H' = eEz = eEr\cos\theta \tag{318}$$

$$|\,2,1> = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}a_0^{-\frac{3}{2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}} \tag{319}$$

$$|\,2,2> = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}a_0^{-\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta \tag{320}$$

$$|\,2,3> = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}a_0^{-\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\mathrm{e}^{i\phi} \tag{321}$$

$$|\,2,4> = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}a_0^{-\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\mathrm{e}^{-i\phi} \tag{322}$$

$$H'_{ij} = eE\int\int\int r^2dr\sin\theta d\theta d\phi < i\,|\,r\cos\theta\,|\,j> \tag{323}$$

ϕ と θ の積分からそれぞれ

$$\delta_{mm'},\qquad H'_{ii}=0$$

となるので、行列式は

$$\begin{vmatrix} -E^{(1)} & H'_{12} & 0 & 0 \\ H'_{21} & -E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} \end{vmatrix}=0$$

となる。ここで

$$H'_{12}=H'_{21}=\frac{eE}{32\pi a_0^3}\int\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}r^3\cos^2\theta\sin\theta drd\theta d\phi$$

θ と ϕ で積分し、$\frac{r}{a_0} = \xi$ と置き換えれば

$$H'_{12} = \frac{eEa_0}{24} \int_0^\infty (2-\xi)\xi^4 \mathrm{e}^{-\xi} d\xi = -3eEa_0$$

となる。ここで

$$\int \xi^n \mathrm{e}^{-\xi} d\xi = \Gamma(n+1) = n!$$

を使った。したがって、摂動エネルギーと H' を対角化する状態は

$$E^{(1)} = \mp 3eEa_0 \qquad \begin{cases} \mid 2,+>= \frac{1}{\sqrt{2}}(u_{200} + u_{210}) \\ \mid 2,->= \frac{1}{\sqrt{2}}(u_{200} - u_{210}) \end{cases}$$

全体では

$$E = \begin{cases} E_{n=2} - 3eEa_0 & |2,+> \\ E_{n=2} + 3eEa_0 & |2,-> \\ E_{n=2} & u_{211} \\ E_{n=2} & u_{21-1} \end{cases}$$

となる。

第７章　３次元中心力場 II
水素型原子問題

中心力場の Schrödinger equation

内側の電子軌道状態は全て電子によって占められて、閉殻を構成し、最外殻に１個の電子だけが存在するような原子をいう。この場合の最外殻にある電子の感じるポテンシャルは、

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

となる。

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l(r) = 0$$

ここで、方程式を無次元化しよう。

$$\beta^2 = -\frac{8\mu E}{\hbar^2} \quad (E < 0) \tag{324}$$

$$\lambda = \frac{Z2\mu e^2}{\hbar^2\beta} \tag{325}$$

$$\rho \equiv \beta r \tag{326}$$

$$\left[\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\rho^2\frac{d}{d\rho} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4}\right]R_l(\rho) = 0$$

この方程式の解の概形を知るため、領域の両端での漸近形を調べる：

$$\rho \sim 0 \quad \left[\frac{d}{d\rho}\rho^2\frac{d}{d\rho} - l(l+1)\right]R_l(\rho) \sim 0 \tag{327}$$

$$R_l \sim \rho^l, \quad \rho^{-(l+1)} \tag{328}$$

$$\rho \to \infty \quad \left[\frac{d}{d\rho}\rho^2\frac{d}{d\rho} - \frac{\rho^2}{4}\right]R_l(\rho) \sim 0 \tag{329}$$

$$R_l \sim \mathrm{e}^{\pm\frac{\rho}{2}} \tag{330}$$

正しい漸近形を選択し、解の形を

$$R_l \equiv \rho^l \mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}} F_l$$

とおくと、F_l の満たすべき方程式は

$$\left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + (2l + 2 - \rho)\frac{d}{d\rho} - (l + 1 - \lambda)\right]F_l(\rho) = 0$$

となる。そこで、

$$F_l=\sum_{\nu=0}a^\nu\rho^\nu$$

とおいて、係数を比較すれば

$$a^{\nu+1}=\frac{\lambda-(l+\nu+1)}{2(\nu+1)(l+1)+\nu(\nu+1)}a^\nu$$

となる。有限で和が閉じるためには

$$\lambda=l+\nu+1=n$$

となる。ここで、n と ν は

n：total quantum number
ν：radial quantum number $\quad\Longrightarrow n'$

と呼ばれている。

$\beta=\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2\lambda}=\frac{2\mu Ze^2}{n\hbar^2}$、$E=-\frac{\beta^2\hbar^2}{8\mu}$ からエネルギー固有値は

$$E_n=-\frac{\mu Z^2e^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}$$

となる。$l=0,\ 1,\ \cdots$ そして $n'=0,\ 1,\ \cdots$ だから $n=n'+l+1$ のとり得る範囲は

$$n\geq l-1\geq m$$

となる。n を固定したとき、l と m のとり得る値は

$$l \;=\; 0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ (n-1) \tag{331}$$

$$m \;=\; -l,\ -(l-1)\ ,\cdots,l \quad\Longrightarrow (2l+1)\text{ 個} \tag{332}$$

したがってエネルギー E_n の状態は

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$$

に縮退している。ただし固有関数は n と l に依存するが、それは

$$F_{nl}(\rho)\longrightarrow \text{Laguerre 多項式}\ \ L_{n+l}^{2l+1}$$

で書ける。

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho)=-\frac{[(n+1)!]^2}{(2l+1)!(n-l-1)!}F(l+1-n,2l+2;\rho)$$

ここで F は Kummer の合流型超幾何関数である：

$$F(\alpha,\ \gamma;\ z)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+n-1)}{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+n-1)}\frac{z^n}{n!}$$

全体の波動関数

$$u_{nlm}(\mathbf{r}) = \left[\beta^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} Y_l^m(\theta,\phi)\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \tag{333}$$

$$= \left[\left(\frac{2\mu Ze^2}{n\hbar^2}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} Y_l^m(\theta,\phi)\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \tag{334}$$

規格化は

$$\int u^*_{n'l'm'} u_{nlm} r^2 dr d(\cos\theta) d\phi = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

である。n が小さい場合の具体形をあげておく。

$$a_B = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = 0.53 \times 10^{-8}\mathrm{cm}$$

とおくと

$$R_{10}(r) = \left(\frac{Z}{a_B}\right)^{\frac{3}{2}} 2\mathrm{e}^{-\frac{Zr}{a_B}} \tag{335}$$

$$R_{20}(r) = \left(\frac{Z}{2a_B}\right)^{\frac{3}{2}} 2\left(1 - \frac{Zr}{2a_B}\right)\mathrm{e}^{-\frac{Zr}{2a_B}} \tag{336}$$

$$R_{21}(r) = \left(\frac{Z}{a_B}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Zr}{a_B}\right)\mathrm{e}^{-\frac{Zr}{2a_B}} \tag{337}$$

第８章　角運動量の一般論

一般的角運動量

　G を変換の生成演算子、ϵ を微小パラメータ、W を物理量とすると変換 G の下での微小変位は

$$\delta W = \epsilon\{G, W\}$$

だから、量子力学では

$$\delta W = -\frac{i\epsilon}{\hbar}[G, W] \quad G : \text{生成演算子}$$

と書ける。

軌道角運動量の場合：

　座標系を z 軸の回りに ϵ だけ回転しよう。新たな系での座標は

$$\begin{cases} x \longrightarrow x' = x\cos\epsilon + y\sin\epsilon \sim x + \epsilon y \\ y \longrightarrow y' = y\cos\epsilon - x\sin\epsilon \sim y - \epsilon x \\ z \longrightarrow z' = z \end{cases}$$

となることに注意し、軌道角運動量との交換関係を調べると、

$$-\frac{i\epsilon}{\hbar}[L_z, x] = -\frac{i\epsilon}{\hbar}[xp_y - yp_x, x] = \frac{i\epsilon}{\hbar}y[p_x, x] \tag{338}$$

$$= \epsilon y = \delta x \tag{339}$$

$$-\frac{i\epsilon}{\hbar}[L_z, y] = -\frac{i\epsilon}{\hbar}[xp_y, y] \tag{340}$$

$$= -\epsilon x = \delta y \tag{341}$$

$$-\frac{i\epsilon}{\hbar}[L_z, z] = 0 = \delta z \tag{342}$$

すなわち、L_z は z 軸のまわりの回転の生成演算子である。L_x、L_y も同様

これらの角運動量演算子の交換関係はよく知られているように、

$$\begin{cases} [L_x, L_y] = i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] = i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] = i\hbar L_y \end{cases}$$

$$[\mathbf{L}^2, \mathbf{L}] = 0$$

となる。これらの交換関係から、例えば L_z、そして $\mathbf{L}^2$ が同時に対角化できる。その固有関数は前に求めたように、

$$\mathbf{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi) \tag{343}$$

$$L_z Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi) \tag{344}$$

となる。また正規直交性は

$$\int Y_{l'}^{m'*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) d(\cos\theta) d\phi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

となる。次にこれらの関係を一般化しよう。

無限小回転の演算子 D の満たす代数を調べよう。以下では $\hbar=1$ とおく。

$$\begin{cases} D_x(\epsilon)=1-i\epsilon J_x \\ D_y(\epsilon)=1-i\epsilon J_y \\ D_z(\epsilon)=1-i\epsilon J_z \end{cases}$$

ここで D はユニタリーだから J_x, J_y, J_z はエルミート演算子である。有限回転の場合、例えば $\mathbf{n}$ 軸の回りに θ だけ回転するとしよう。微小回転は

$$D_{\mathbf{n}}(\epsilon)=1-i\epsilon\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}$$

と書ける。N を十分大きくとると、$\frac{\theta}{N}$ は微小量なので

$$D_{\mathbf{n}}(\theta) = \left[D_{\mathbf{n}}\left(\frac{\theta}{N}\right)\right]^N \tag{345}$$

$$= \left(1-i\frac{\theta}{N}\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}\right)^N \tag{346}$$

$$\longrightarrow_{N\to\infty} \mathrm{e}^{-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}} \tag{347}$$

つまり、$\mathbf{n}$ 軸のまわりの有限回転演算子は

$$D_{\mathbf{n}}(\theta)=\mathrm{e}^{-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}}$$

となる。ここで単位球上の点の回転を考えると、演算子の間に次の式が成立していることが分かる。

$$\mathrm{e}^{i\eta J_y}\mathrm{e}^{i\epsilon J_x}\mathrm{e}^{-i\eta J_y}\mathrm{e}^{-i\epsilon J_x}=\mathrm{e}^{i\epsilon\eta J_z}$$

順に x 軸、y 軸、x 軸、最後に y 軸の回りに、ϵ、η、$-\epsilon$、$-\eta$ だけ回転すると、結局 z 軸のまわりに $-\epsilon\eta$ だけ回転したことになる。0 次、1 次項は消えるので、2 次の項で消えない $\epsilon\eta$ の係数

を比較して、

$$J_xJ_y - J_yJ_x = i\hbar J_z$$

が満たされねばならない。同様に

$$J_yJ_z - J_zJ_y = i\hbar J_x \tag{348}$$
$$J_zJ_x - J_xJ_z = i\hbar J_y \tag{349}$$

一般に

$$[J_i, J_j] = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} J_k$$

これはパリティ変換を除いた 3 次元直交群 (回転群)（$O(3) \simeq SU(2)$）のリー代数である。

<u>**J** の表示（一般論）</u>

このリー代数を満たす演算子の一般的表現を求めてみよう。交換関係

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}] = 0$$

が成り立つので、同時対角化が可能となる。固有値を k、m とすると

$$\begin{cases} \mathbf{J}^2 a^{(m)} = k a^{(m)} \\ J_z a^{(m)} = m a^{(m)} \end{cases}$$

ここで、群の表現を求める際の常套手段として

$$J_\pm \equiv J_x \pm iJ_y$$

を定義すると

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm$$

という交換関係が得られ、昇降演算子となっていることが分かる。これは

$$b \equiv J_- a^{(m)}$$

という状態を定義すると

$$J_z b = J_z J_- a^{(m)} = J_-(J_z - 1)a^{(m)} \tag{350}$$
$$= (m-1)J_- a^{(m)} = (m-1)b \tag{351}$$

つまり

$$b = ca^{(m-1)}$$

となるからである。規格化 $a^{(m)*}a^{(m)} = 1$(m は任意) としよう。

$$a^{(m-1)} = \frac{1}{c} J_- a^{(m)}$$

だから

$$1 = \frac{1}{c^*c}(J_- a^{(m)})^*(J_- a^{(m)}) \tag{352}$$
$$= \frac{1}{|\, c\,|^2} a^{(m)*}(J_+J_-)a^{(m)} \tag{353}$$
$$= \frac{(k - m^2 + m)}{|\, c\,|^2} a^{(m)*}a^{(m)} \tag{354}$$

したがって

$$c = \sqrt{k - m(m-1)}$$

を得る。ここで関係式

$$J_\pm J_\mp = J_x^2 + J_y^2 \pm i[J_y, J_x] = \mathbf{J}^2 - J_z^2 \pm J_z$$

を使った。

つぎに k の値を定めよう。m の最低状態を $a^{(-j)}$ とすると、

$$J_- a^{(-j)} = 0$$

となる。J_+ を左から作用させて

$$J_+ J_- a^{(-j)} = 0 \quad \longrightarrow \quad k - j(j+1) = 0$$

つまり、

$$k = j(j+1)$$

を得る。また、最大の m を j' としよう。同様にして、

$$J_+ a^{(j')} = 0 \quad \longrightarrow \quad k = j'(j'+1)$$

となる。それ故 $j = j'$ を得る。j を決めたとき m の取り得る値は

$$m = -j,\ -(j-1),\ \cdots,\ j-1,\ j$$

となるので

$$\text{全状態数} = j - (-j) + 1 = 2j + 1 = \text{正の整数}$$

である。これから j は整数か、半整数に限られる。k の値を代入すると、

$$c = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

なので、固有状態 $|j, m>$ と演算子の間には

$$j_-|j,m> \;=\; \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j,m-1> \tag{355}$$

$$j_+|j,m> \;=\; \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j,m+1> \tag{356}$$

となる。これらの関係式から、演算子の行列要素が容易に求められる。

小さい場合の例を挙げよう：

(1) 状態数 1　$j = 0$

(2) 状態数 2　$j = \frac{1}{2}$

(3) 状態数 3　$j = 1$

(2) の場合、$m = \frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}$

2 自由度だから、固有ベクトルを

$$a^{(1/2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad a^{(-1/2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

とかこう。すると

$$
\begin{array}{ll}
J_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & J_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \\
J_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0, & J_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
J_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & J_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{array}
$$

したがって、$\mathbf{J}$ を行列表示すると

$$
J_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad J_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}
$$

$$
J_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{2}\sigma_z
$$

となる。また、J_x と J_y は

$$
J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{2}\sigma_x
$$

$$
J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{2}\sigma_y
$$

と求められる。ここでよく知られたパウリ行列

$$
\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
$$

が現れた。$\sigma_i = 2J_i$ の交換関係は一般的な関係式を使って

$$
[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k
$$

また、明らかに

$$
[\sigma_i, \sigma_j]_+ = 2\delta_{ij}
$$

が成り立つ。ここで、上の 2 式の辺々を加え、2 で割ると、

$$
\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k
$$

となる。これを使うと以下の関係式が成り立つことが分かる：

$$
\begin{aligned}
(\vec{A}\cdot\vec{\sigma})(\vec{B}\cdot\vec{\sigma}) &= \vec{A}\cdot\vec{B} + i\epsilon_{ijk}A_iB_j\sigma_k && (357) \\
&= \vec{A}\cdot\vec{B} + i(\vec{A}\times\vec{B})\cdot\vec{\sigma} && (358) \\
\mathrm{e}^{i\frac{\theta}{2}\vec{n}\cdot\vec{\sigma}} &= \cos\frac{\theta}{2} + i\sin\frac{\theta}{2}\,\vec{n}\cdot\vec{\sigma} && (359)
\end{aligned}
$$

角運動量の合成と分解

互いに独立な2粒子系、あるいは一般的に独立な2つの角運動量 $\mathbf{J}_1$、$\mathbf{J}_2$、 $[\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2] = 0$ を考えよう。

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}_1^2, J_{1z} \quad &: \quad j_1(j_1+1), \quad m_1 = -j_1, \cdots, j_1, \quad \text{状態数} = (2j_1+1) && (360)\\
&\quad \text{固有状態：} \; |j_1, m_1> && (361)\\
\mathbf{J}_2^2, J_{2z} \quad &: \quad j_2(j_2+1), \quad m_2 = -j_2, \cdots, j_2, \quad \text{状態数} = (2j_2+1) && (362)\\
&\quad \text{固有状態：} \; |j_2, m_2> && (363)
\end{aligned}$$

全体では　$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ だが、積表現

$$|j_1, j_2; m_1, m_2 > \equiv |j_1, m_1 > |j_2, m_2 > \qquad \text{全体数} = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

を用意しよう。交換関係

$$[J_x, J_y] = iJ_z, \quad [J_y, J_z] = iJ_x, \quad [J_z, J_x] = iJ_y$$

を使って固有関数を求めよう。

$$\begin{aligned}
&[\mathbf{J}_1^2, J_z] = [\mathbf{J}_2^2, J_z] = 0 && (364)\\
&[\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}^2] = [\mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}^2] = 0 && (365)\\
&[J_{iz}, \mathbf{J}^2] = 2[J_{iz}, \mathbf{J_1} \cdot \mathbf{J_2}] \neq 0 && (366)
\end{aligned}$$

に注意すれば、同時対角化可能な物理量は $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}^2, J_z$ だから、同時固有関数は

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}^2 \mid j_1, j_2; j, m > \quad &= \quad j(j+1) \mid j_1, j_2; j, m > && (367)\\
J_z \mid j_1, j_2; j, m > \quad &= \quad m \mid j_1, j_2; j, m > && (368)
\end{aligned}$$

となる。昇降演算子を導入しよう:

$$\begin{aligned}
J_\pm \quad &\equiv \quad J_x \pm iJ_y = J_{1\pm} + J_{2\pm} && (369)\\
J_{i\pm} \quad &\equiv \quad J_{ix} \pm iJ_{iy} && (370)
\end{aligned}$$

交換関係

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm$$

から関係式

$$J_\pm |j_1, j_2; j, m >= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \mid j_1, j_2; j, m \pm 1 >$$

を得る。一方、$|j_1, m_1 >, |j_2, m_2 >$ はともに完全系を作る：

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2; m_1, m_2 >< j_1, j_2; m_1, m_2| = 1$$

固有ベクトルにこの完全性をかけると、

$$\begin{aligned}
|j_1, j_2; j, m > \quad &= \quad \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2; m_1, m_2 >< j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m > && (371)\\
&= \quad \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} C(j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m) |j_1, j_2; m_1, m_2 > && (372)
\end{aligned}$$

となる。ここで

$$C(j_1 m_1 j_2 m_2 \mid j_1 j_2 j m) \equiv < j_1, j_2; m_1, m_2 \mid j_1, j_2; j, m >$$

を **Clebsch-Gordan 係数**という。この場合、j_1, j_2 は固定されているので、略記して、

$$\mid j, m >= \sum_{m_1} \sum_{m_2} \mid m_1, m_2 >< m_1, m_2 \mid j, m >$$

と書かれる場合もある。m_1, m_2 の値は

$$J_z|j, m > \;=\; \sum_{m_1} \sum_{m_2} (J_{1z} + J_{2z})|m_1, m_2 >< m_1, m_2 \mid j, m > \tag{373}$$

$$m|j, m > \;=\; \sum_{m_1} \sum_{m_2} (m_1 + m_2)|m_1, m_2 >< m_1, m_2|j, m > \tag{374}$$

から求まる。最後の式の右辺を移項すれば

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} (m_1 + m_2 - m)|m_1, m_2 >< m_1, m_2|j, m >= 0$$

となる。左から $< m_1', m_2'|$ を掛けると、C-G 係数 $< m_1', m_2'|j, m >$ が 0 でない限り $m_1' + m_2' = m$、つまり

$$m_1 + m_2 = m$$

となる。次に j の値を求めよう。最大値は

$$j\mathrm{max} = (j_z)\mathrm{max} = (m_1 + m_2)\mathrm{max} = j_1 + j_2$$

と定まる。一方、j_{min} はどうなるであろうか？

$j_1 > j_2$ としたときの、m の値の分布を書いてみよう。

$m_2 \quad m_1$	j_1	$j_1 - 1$	$\cdots$	$j_1 - 2j_2$	$\cdots$	$-j_1 + 1$	$-j_1$	状態数
j_2	$j_1 + j_2$	$j_1 + j_2 - 1$	$\cdots$	$j_1 - j_2$	$\cdots$	$-j_1 + j_2 + 1$	$-j_1 + j_2$	$2(j_1 - j_2) + 1$
$j_2 - 1$	$j_1 + j_2 - 1$	$j_1 + j_2 - 2$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$
$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$
$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$
$-j_2 + 1$	$j_1 - j_2 + 1$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$-j_1 - j_2 + 1$	$2(j_1 + j_2 - 1) + 1$
$-j_2$	$j_1 - j_2$	$j_1 - j_2 - 1$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$-j_1 - j_2 + 1$	$-j_1 - j_2$	$2(j_1 + j_2) + 1$

これで $|j, m >$ の可能な状態を尽くしているように見えるが、状態数を勘定してみよう：

$$\sum_{i=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2i + 1) \;=\; \sum_{i=1}^{j_1+j_2} (2i + 1) - \sum_{i=1}^{j_1-j_2-1} (2i + 1) \tag{375}$$

$$= (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) + (j_1 + j_2) - (j_1 - j_2 - 1)(j_1 - j_2) - (j_1 - j_2 - 1) \tag{376}$$

$$= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \tag{377}$$

したがって、すべての状態が尽くされており、とり得る j の値は

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \cdots, |j_1 - j_2|$$

となる。また、m を固定した部分空間で $|j,m>$ は完全系を張るので

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} |\, j,m><j,m\,|=1$$

であり、この関係式を使えば積表現が固有関数で逆展開できる。

$$\begin{aligned} |m_1,m_2> &= \sum_j |j,m><j,m|m_1,m_2> \qquad (378)\\ &= \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} C^*(j_1m_1,j_2m_2;j_1j_2jm)|jm> \qquad (379)\end{aligned}$$

$j_1=j_2=\frac{1}{2}$ の場合（スピン $\frac{1}{2}$ の 2 個の粒子系）

$$\begin{array}{ccc} j \quad m_2 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & \sqrt{\frac{m+1}{2}} & \sqrt{\frac{1-m}{2}} \\ 0 & -\sqrt{\frac{1-m}{2}} & \sqrt{\frac{m+1}{2}} \end{array}$$

$$j=1,\begin{cases} m=1 & |1,1>=|\,\alpha>|\,\alpha> \\ m=0 & |1,0>=\frac{1}{\sqrt{2}}\{|\,\alpha>|\,\beta>+|\,\beta>|\,\alpha>\} \\ m=-1 & |1,-1>=|\,\beta>|\,\beta> \end{cases} \qquad 3\text{ 重項（対称）}$$

$$j=0, \quad m=0 \quad |0,0>=\frac{1}{\sqrt{2}}\{|\alpha>|\beta>-|\beta>|\alpha>\} \quad 1\text{ 重項（反対称）}$$

$j_1=l, j_2=\frac{1}{2}$ の場合（軌道角運動量 l、スピン $\frac{1}{2}$ の 1 個の粒子）

$$j=l\pm\frac{1}{2} \qquad \text{ただし } l\neq 0$$

$$\begin{array}{ccc} j \quad m_2 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ l+\frac{1}{2} & \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} & \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \\ l-\frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} & \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \end{array}$$

したがって、全体の波動関数は

$$\begin{aligned} \left|l+\frac{1}{2},m\right\rangle &= \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}Y_l^{m-\frac{1}{2}}\alpha+\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}Y_l^{m+\frac{1}{2}}\beta \qquad (380)\\ \left|l-\frac{1}{2},m\right\rangle &= -\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}Y_l^{m-\frac{1}{2}}\alpha+\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}Y_l^{m+\frac{1}{2}}\beta \qquad (381)\end{aligned}$$

スピン交換演算子

$$\mathbf{J}=\mathbf{S_1}+\mathbf{S_2},\quad \mathbf{S}^2\to\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)=\frac{3}{4}$$

ここで次の演算子を考えてみる。

$$\begin{aligned} S_{12}\equiv\mathbf{J}^2-1 &= \mathbf{S_1}^2+\mathbf{S_2}^2+2\mathbf{S_1}\cdot\mathbf{S_2}-1=2\mathbf{S_1}\cdot\mathbf{S_2}+\frac{1}{2} &(382)\\ &= S_{1+}S_{2-}+S_{1-}S_{2+}+2S_{1z}S_{2z}+\frac{1}{2} &(383)\\ & &(384)\end{aligned}$$

これに固有関数に作用させれば、

$$S_{12}\longrightarrow j(j+1)-1=\begin{cases}1 & j=1\\ -1 & j=0\end{cases}$$

となる。したがって、この演算子は

$$\begin{cases}S_{12}\chi_t=\chi_t\\ S_{12}\chi_s=-\chi_s\end{cases}$$

つまり S_{12} はスピン交換演算子である。

さらに**粒子交換演算子** P_{12} を定義しよう。同種粒子なら区別できないので、

$$P_{12}\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{S}_1;\mathbf{r}_2,\mathbf{S}_2)=\eta\Psi(\mathbf{r}_2,\mathbf{S}_2;\mathbf{r}_1,\mathbf{S}_1)$$

となる。もう一度交換すると、元に戻るので、

$$P_{12}P_{12}=1,\qquad \eta^2=1$$

となる。つまり

$$\eta=\pm1\begin{cases}\text{ボース}\\ \text{フェルミ}\end{cases}$$

である。たとえば

$$\left.\begin{array}{l}\text{位置座標関数}\phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\\ \text{スピン座標関数}\chi(\mathbf{S}_1,\mathbf{S}_2)\end{array}\right\}\quad \Psi=\phi\chi$$

としよう。フェルミ統計ならば

$$P_{12}\Psi=-\Psi$$

となるので、全体の波動関数は

$$\Psi=\begin{cases}\phi_S\chi_A, & \chi_A=|0,0>\\ \phi_A\chi_S, & \chi_S=|1,m>\end{cases}$$

となる。

ここで位置座標波動関数の例を挙げておく:

$$\phi_S(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_a(\mathbf{r}_1)u_b(\mathbf{r}_2)+u_b(\mathbf{r}_1)u_a(\mathbf{r}_2)) \tag{385}$$

$$\phi_A(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_a(\mathbf{r}_1)u_b(\mathbf{r}_2)-u_b(\mathbf{r}_1)u_a(\mathbf{r}_2)) \tag{386}$$

Slator determinant

$$\phi_A(\{\mathbf{r}_i\}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_a(\mathbf{r}_1), & u_b(\mathbf{r}_1), & \cdots, & u_c(\mathbf{r}_1) \\ u_a(\mathbf{r}_2), & u_b(\mathbf{r}_2), & \cdots, & u_c(\mathbf{r}_2) \\ \cdots, & \cdots, & \cdots, & \cdots \\ u_a(\mathbf{r}_N), & u_b(\mathbf{r}_N), & \cdots, & u_c(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}$$

スピンをもつ粒子の物理

スペクトル線の2重項（doublet）

アルカリ金属の主系列のスペクトル

水素型原子のスペクトル $E_n(n,l,m)$ は量子数 l,m について縮退しているはずだが、しかし実際には微細構造があった。

$$\begin{array}{ll} s\,\text{項}\ (l=0) & :\ 1\,\text{重項 (singlet)} \\ p,d,\cdots\,\text{項}\ (l=1,2,\cdots) & :\ 2\,\text{重項 (doublet)} \end{array}$$

例　ナトリウムのD線

1925年　Uhlenbeck, Goudsmit（カウシュミット）

自由度2の角運動量 $\longrightarrow$ 電子のスピンを仮説

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$$

$$l \neq 0 \quad : \quad j = l \pm \frac{1}{2} \Longrightarrow \text{分離する、2重項} \tag{387}$$

$$l = 0 \quad : \quad j = \frac{1}{2} \Longrightarrow \text{分離しない、1重項} \tag{388}$$

LS結合(spin-orbit interaction term)

水素型原子

相対論的効果

i) 遅延ポテンシャル

$$\mathbf{B} = -\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E}$$

一般的な磁気能率による相互作用

loop current: $d\vec{\mu} = id\mathbf{s}/c$
非相対論的電子 $\longrightarrow$ 円電流
$i = -\frac{ev}{2\pi r} \quad (e > 0)$
$\mu = -\frac{ev}{2\pi rc}\pi r^2 = -\frac{epr}{2m_e c}$
したがって、

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e c}\mathbf{L}, \quad \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

一方、一様磁場の場合

$$L_{\rm int} = -H_{\rm int} = -\frac{e}{c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{v} = -\frac{e}{2c}(\mathbf{B}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{v} \tag{389}$$

$$= -\frac{e}{2m_e c}(\mathbf{r}\times\mathbf{p})\cdot\mathbf{B} = \vec{\mu}\cdot\mathbf{B} \tag{390}$$

つまり

$$H_{\rm int} = -\vec{\mu}\cdot\mathbf{B}$$

と書けるが、この形は一般的な場合にも成立する。
スピン $\mathbf{S}$ の場合

$$\vec{\mu} = g(-\frac{e}{2m_e c}\mathbf{S})$$

ここで g は g-因子、gyromagnetic ratio と呼ばれる。それでは

$$H_{\rm int} = g\frac{e}{2m_e c}\mathbf{B}\cdot\mathbf{S}?$$

と書いてよいのであろうか。ここで

$$\frac{e\hbar}{2m_e c}$$

はボーア磁子と呼ばれる。一方で Zeeman 効果から $g \longrightarrow 2$ となることが分かるので

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{m_e c}\mathbf{S}$$

となる。しかし自然はこう簡単ではなかった。

ii)Thomas factor

電子の固有座標系が慣性系ではなく加速度運動しているため、相対性理論の効果により、更なる角加速度が寄与し

$$H_{\rm int} \longrightarrow \frac{1}{2}H_{\rm int}$$

となる。これをトーマス因子という。原子内の電場は

$$-e\mathbf{E} = -\vec{\nabla}V(r) \tag{391}$$
$$= -\frac{dV}{dr}\cdot\frac{\mathbf{r}}{r} \tag{392}$$

となるので、正しいハミルトニアンは

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2}(-\vec{\mu}\cdot\mathbf{B}) = \frac{1}{2}\vec{\mu}\cdot(\frac{1}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{E}) \tag{393}$$
$$= \frac{e}{2m_e^2c^2}\mathbf{S}\cdot(\mathbf{E}\times\mathbf{p}) \tag{394}$$

つまり

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$$

となる。ただし

$$V = -\frac{Ze^2}{r}$$

である。したがって、全体のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m_e}\mathbf{p}^2 + V(r) + \frac{1}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$$

となる。ここで、最後の項 H_{int} を摂動で扱う。

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \tag{395}$$
$$= \frac{1}{2}\left\{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right\}\hbar^2 \tag{396}$$

量子数 (n, l, j) のうち、n, l が縮退、j でスペクトルの縮退が解ける。

$$E'_{nlj} = \frac{\hbar^2}{4m_e^2c^2}\left\langle\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle_{nl}\left\{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right\}\hbar^2$$

2 重項 $j = l \pm \frac{1}{2}$ のエネルギー差は

$$\Delta E_{\text{doublet}} = \frac{Ze^2\hbar^2}{4m_e^2c^2}(2l+1)\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{nl}$$

これを微細構造という。

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.0359895(61)} \quad \text{微細構造定数}$$

正常ゼーマン効果

外部一様静磁場 $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{r}$ 中における荷電粒子のスペクトル
水素型原子の電子

1896年　Zeeman,　まだスピンの存在は未知

$$H = \frac{1}{2m_e}\left(\mathbf{p} - (-e)\frac{1}{c}\mathbf{A}\right)^2 + V(r) \tag{397}$$
$$= \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V(r) + \frac{e}{2m_e}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + \mathbf{A}\cdot\mathbf{p}) + \frac{e^2}{2m_e c^2}\mathbf{A}^2 \tag{398}$$

最後の項は弱磁場なので無視する。また、

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}\psi = (\mathbf{p}\cdot\mathbf{A})\psi + \mathbf{A}\cdot(\mathbf{p}\psi) = \mathbf{A}\cdot(\mathbf{p}\psi) \tag{399}$$
$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{B}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}\times\mathbf{p})\cdot\mathbf{B} = \frac{1}{2}\mathbf{B}\cdot\mathbf{L} \tag{400}$$

だから、

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V(r) + \frac{e}{m_e c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p} \tag{401}$$
$$= \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V(r) + \frac{e}{2m_e c}\mathbf{B}\cdot\mathbf{L} \tag{402}$$

となる。ここで $\mathbf{B} = (0,0,B)$、固有関数を ψ_{nlm} として摂動計算すれば、エネルギーシフトは

$$\Delta E_{nlm} = \frac{e\hbar B}{2m_e c}\cdot m$$

となるが、実はこうではなかった。

異常ゼーマン効果

スピンがある場合には、原子内のクーロン力によるＬＳ結合と磁気能率と外部磁場との結合の項をつけ加えなければならない。

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V(r) + \frac{e}{2m_e c}\mathbf{B}\cdot\mathbf{L} + \frac{1}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} + \frac{e}{m_e c}\mathbf{B}\cdot\mathbf{S} \tag{403}$$
$$= H_0 + \frac{e}{2m_e c}\mathbf{B}\cdot(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \tag{404}$$
$$= H_0 + \frac{e}{2m_e c}\mathbf{B}\cdot(\mathbf{J} + \mathbf{S}) \tag{405}$$

となる。ただし、

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V(r) + \frac{1}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$$

ここで、外部磁場を $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ ととると、

$$H = H_0 + \omega(J_z + S_z) \qquad \omega = \frac{e}{2m_e c}B$$

摂動エネルギーは

$$\Delta E = \omega < J_z + S_z >= m\hbar\omega + \omega < S_z >$$

となる。そして

$$< S_z >= \frac{\hbar}{2l+1} \times \begin{cases} m & j = l + \frac{1}{2} \\ -m & j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

　であることを使うと

$$\Delta E_{ljm} = m\hbar\omega \frac{2j+1}{2l+1} \qquad m = j, j-1, \cdots, -j$$

となる。ここで次の関係式を使用した。

$$j = l + \frac{1}{2};\ |j, m> \ = \ \sqrt{\frac{j+m}{2l+1}} Y_l^{m-\frac{1}{2}} \alpha + \sqrt{\frac{j-m}{2l+1}} Y_l^{m+\frac{1}{2}} \beta \tag{406}$$

$$j = l - \frac{1}{2};\ |j, m> \ = \ -\sqrt{\frac{j+1-m}{2l+1}} Y_l^{m-\frac{1}{2}} \alpha + \sqrt{\frac{j+1+m}{2l+1}} Y_l^{m+\frac{1}{2}} \beta \tag{407}$$

$$< S_z >= \frac{1}{2l+1} \times \begin{cases} \left(\frac{j+m}{2} - \frac{j-m}{2}\right) = \frac{m}{2l+1} & j = l + \frac{1}{2} \\ \left(\frac{j+1-m}{2} - \frac{j+1+m}{2}\right) = -\frac{m}{2l+1} & j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

第９章　原子構造と周期律表

中心力場では電子の量子状態は

$$n, l, m, S_z$$

によって決まる。

パウリの原理

原子の量子状態について、

$$n, l, m, S_z$$

で与えられる一つの量子状態に、2 個以上の電子が占めることはできない。

状態数の勘定

主量子数

主量子数 n	1,	2,	3,	4,	5,	6,	7
殻の名称	K	L	M	N	O	P	Q

方位量子数

方位量子数 l ：	0,	1,	2,	3,	4,	5,	6,	7,	$\cdots$,	$n-1$
電子軌道の名称 ：	s	p	d	f	g	h	i	k	$\cdots$	

磁気量子数

$$m = l, l-1, \cdots, -l \implies (2l+1) \text{ 状態}$$

スピン量子数

$$S_z = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \implies 2 \text{ 状態}$$

軌道に占められる最大電子数

s :	$2(1) = 2$	
p :	$2(2 \cdot 1 + 1) = 6$	短周期 (IA, IIA, $\cdots$, VIIIA)
d :	$2(2 \cdot 2 + 1) = 10$	長周期 (IB, IIB, $\cdots$, XB)
f :	$2(2 \cdot 3 + 1) = 14$	La−, Ac−系列を作る

基底状態原子の電子配置

	n	1	2		3			4				5				6			7	
	l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	0	1	2	0	
		$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$	$4s$	$4p$	$4d$	$4f$	$5s$	$5p$	$5d$	$5f$	$6s$	$6p$	$6d$	$7s$	
1	H	1																		IA
2	He	2																		VIIIA
3	Li	2	1																	IA
4	Be	2	2																	IIA
5	B	2	2	1																IIIA
6	C	2	2	2																IVA
7	O	2	2	3																VA
8	N	2	2	4																VIA
9	F	2	2	5																VIIA
10	Ne	2	2	6																VIIIA
11	Na	2	2	6	1															IA
12	Mg	2	2	6	2															IIA
13	Al	2	2	6	2	1														IIIA
14	Si	2	2	6	2	2														IVA
15	P	2	2	6	2	3														VA
16	S	2	2	6	2	4														VIA
17	Cl	2	2	6	2	5														VIIA
18	A	2	2	6	2	6														VIIIA
19	K	2	2	6	2	6		1												IA
20	Ca	2	2	6	2	6		2												IIA
21	Sc	2	2	6	2	6	1	2												IIIB
22	Ti	2	2	6	2	6	2	2												IVB
23	V	2	2	6	2	6	3	2												VB
24	Cr	2	2	6	2	6	5	1												VIB
25	Mn	2	2	6	2	6	5	2												VIIB
26	Fe	2	2	6	2	6	6	2												VIIIB
27	Co	2	2	6	2	6	7	2												VIIIB
28	Ni	2	2	6	2	6	8	2												VIIIB
29	Cu	2	2	6	2	6	10	1												IB
30	Zn	2	2	6	2	6	10	2												IIB
31	Ga	2	2	6	2	6	10	2	1											IIIA
32	Ge	2	2	6	2	6	10	2	2											IVA
33	As	2	2	6	2	6	10	2	3											VA
34	Se	2	2	6	2	6	10	2	4											VIA
35	Br	2	2	6	2	6	10	2	5											VIIA
36	Kr	2	2	6	2	6	10	2	6											VIIIA

	n	1	2		3			4				5				6			7	
	l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	0	1	2	0	
		$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$	$4s$	$4p$	$4d$	$4f$	$5s$	$5p$	$5d$	$5f$	$6s$	$6p$	$6d$	$7s$	
37	Rb	2	2	6	2	6	10	2	6			1								IA
38	Sr	2	2	6	2	6	10	2	6			2								IIA
39	Y	2	2	6	2	6	10	2	6	1		2								IIIB
40	Zr	2	2	6	2	6	10	2	6	2		2								IVB
41	Nb	2	2	6	2	6	10	2	6	4		1								VB
42	Mo	2	2	6	2	6	10	2	6	5		1								VIB
43	Tc	2	2	6	2	6	10	2	6	6		1								VIIB
44	Ru	2	2	6	2	6	10	2	6	7		1								VIIIB
45	Rh	2	2	6	2	6	10	2	6	8		1								VIIIB
46	Pd	2	2	6	2	6	10	2	6	10										VIIIB
47	Ag	2	2	6	2	6	10	2	6	10		1								IB
48	Cd	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2								IIB
49	In	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	1							IIIA
50	Sn	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	2							IVA
51	Sb	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	3							VA
52	Te	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	4							VIA
53	I	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	5							VIIA
54	Xe	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6							VIIIA
55	Cs	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			1				IA
56	Ba	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2				IIA
57	La	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6	1		2				IIIB
58	Ce	2	2	6	2	6	10	2	6	10	1	2	6	1		2				IIIB
59	Pr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	3	2	6			2				IIIB
60	Nd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	4	2	6			2				IIIB
61	Pm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	5	2	6			2				IIIB
62	Sm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	6	2	6			2				IIIB
63	Eu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6			2				IIIB
64	Gd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6	1		2				IIIB
65	Tb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	9	2	6			2				IIIB
66	Dy	2	2	6	2	6	10	2	6	10	10	2	6			2				IIIB
67	Ho	2	2	6	2	6	10	2	6	10	11	2	6			2				IIIB
68	Er	2	2	6	2	6	10	2	6	10	12	2	6			2				IIIB
69	Tm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	13	2	6			2				IIIB
70	Yb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6			2				IIIB
71	Lu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	1		2				IIIB
72	Hf	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	2		2				IVB
73	Ta	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	3		2				VB
74	W	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	4		2				VIB
75	Re	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	5		2				VIIB
76	Os	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	6		2				VIIIB
77	Ir	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	7		2				VIIIB
78	Pt	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	8		2				VIIIB
79	Au	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		1				IB
80	Hg	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2				IIB
81	Tl	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	1			IIIA
82	Pb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	2			IVA
83	Bi	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	3			VA
84	Po	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	4			VIA
85	At	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	5			VIIA
86	Rn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6			VIIIA

	n	1	2		3			4				5				6			7
	l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	0	1	2	0
		$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$	$4s$	$4p$	$4d$	$4f$	$5s$	$5p$	$5d$	$5f$	$6s$	$6p$	$6d$	$7s$
87	Fr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6		1
88	Ra	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6		2
89	Ac	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	1	2
90	Th	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	2	2
91	Pa	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	3	2
92	U	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	3	2	6	1	2
93	Np	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	4	2	6	1	2
94	Pu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	6	2	6		2
95	Am	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6		2
96	Cm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6		2

La-系列 (15 種)

La(57),Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu(71)

Ac-系列 (15 種)

Ac(89), Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr(103)

第１０章　２体系とスピン配列

n 体波動関数

$$\Psi(\mathbf{r}_1\mathbf{S}_1, \mathbf{r}_2\mathbf{S}_2, \cdots, \mathbf{r}_n\mathbf{S}_n)$$

パウリの原理

$$\Psi(\mathbf{r}_1\mathbf{S}_1, \cdots, \mathbf{r}_i\mathbf{S}_i, \cdots, \mathbf{r}_j\mathbf{S}_j, \cdots, \mathbf{r}_n\mathbf{S}_n) \tag{408}$$

$$= \begin{cases} +\Psi(\mathbf{r}_1\mathbf{S}_1, \cdots, \mathbf{r}_j\mathbf{S}_j, \cdots, \mathbf{r}_i\mathbf{S}_i, \cdots, \mathbf{r}_n\mathbf{S}_n) & \text{ボース統計} \\ -\Psi(\mathbf{r}_1\mathbf{S}_1, \cdots, \mathbf{r}_j\mathbf{S}_j, \cdots, \mathbf{r}_i\mathbf{S}_i, \cdots, \mathbf{r}_n\mathbf{S}_n) & \text{フェルミ統計} \end{cases} \tag{409}$$

特にフェルミ統計で 2 体系の場合

$$\Psi(\mathbf{r}_1\mathbf{S}_1, \mathbf{r}_2\mathbf{S}_2) = 0, \quad \text{for } \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2,\ \mathbf{S}_1 = \mathbf{S}_2$$

多体波動関数におけるスピンと統計の効果

例 1.　He 原子

$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, \mathbf{S}\cdot\mathbf{S}$ の相互作用は無視する。

$$H = H_0 + \frac{e^2}{r_{12}} \tag{410}$$

$$H_0 = \frac{1}{2m_e}\mathbf{p}_1^2 + \frac{1}{2m_e}\mathbf{p}_2^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} \tag{411}$$

最後の項を摂動項として扱う。この電子間のクーロン相互作用を無視した H_0 のハミルトニアンの下では、1 粒子と 2 粒子の力学が分離する。その時の量子数は $(n_i, l_i, m_{li}) \quad i = 1, 2$ だが、方位量子数と磁気量子数については縮退している。

$$E_{n_1,n_2} = -2m_e c^2\alpha^2\left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2}\right), \quad \alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c}$$

位置座標波動関数

$$u_{n_i l_i m_{li}}(\mathbf{r}_i) \quad i = 1, 2$$

スピン波動関数

$$\chi_{Sm_s} = \begin{cases} \chi_{1m_s} & \text{:triplet} \\ \chi_{00} & \text{:singlet} \end{cases}$$

2 体系の演算子

$$H, \quad P_{12}, \quad \mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2, \quad \mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$$

交換する演算子と対応する固有値

$$\begin{array}{llllll} H, & P_{12}, & \mathbf{L}^2, & \mathbf{S}, & L_z, & S_z \\ E, & A, & l(l+1), & S, & m_l, & m_s \end{array}$$

ここでひとつが $n=1$、もう一方が n として、$\frac{e^2}{r_{12}}$ の項を無視したときの波動関数

$$\Psi_{1nlSm_lm_s} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} [u_{100}(1)u_{nlm_l}(2) + u_{100}(2)u_{nlm_l}(1)]\chi_{00} \\ [u_{100}(1)u_{nlm_l}(2) - u_{100}(2)u_{nlm_l}(1)]\chi_{1m_s} \end{cases}$$

を考えよう。摂動エネルギーは

$$\left\langle 1nlSm_lm_s \mid \frac{e^2}{r_{12}} \mid 1nlSm_lm_s \right\rangle = A \pm B \qquad \begin{cases} \text{singlet} \\ \text{triplet} \end{cases}$$

$$A \equiv \left(u_{100}(1)u_{nlm_l}(2), \frac{e^2}{r_{12}} u_{100}(1)u_{nlm_l}(2) \right) \tag{412}$$

$$B \equiv \left(u_{100}(1)u_{nlm_l}(2), \frac{e^2}{r_{12}} u_{100}(2)u_{nlm_l}(1) \right) > 0 \tag{413}$$

ここで、B は交換積分、交換エネルギーと呼ばれる。これが正なので、

$$E(\text{singlet}) > E(\text{triplet})$$

となることが分かる。この内容的には、前者が $\mathbf{r}_1 \simeq \mathbf{r}_2$ で波動関数が有限値をもち、強いクーロン斥力効果を受けるのに対し、後者は $\mathbf{r}_1 \simeq \mathbf{r}_2$ で波動関数がゼロとなるため、互いに遠くにいく確率が大きくなり、クーロン斥力効果は弱くなる。

He のレベル ($n=1$ と n の 2 電子)

i)$n=1$、つまり 2 個とも基底状態にあるときには ${}^3S$ は存在しない。

　（$u_{100}(1)u_{100}(2)-u_{100}(2)u_{100}(1)=0$）

ii)$E(s)>E(t)$

iii)$n=1$ の ${}^1S$ は極めて深く束縛されている。（2 電子とも核のそばに近づけ、強いクーロン引力を受ける。）

iv)n が大きくなると、内側の電子が核の+電荷を打ち消してしまい、実効的には核電荷+1 の水素原子のレベルに近づく。

例 2 水素分子　　価電子結合

A,B:水素核、固定する。

1,2:電子、これらの運動を考察する。

スピンの力は無視する。

ハミルトニアン

$$H=\frac{1}{2m_e}\mathbf{p}_1^2+\frac{1}{2m_e}\mathbf{p}_2^2-\left(\frac{e^2}{r_{A1}}+\frac{e^2}{r_{A2}}+\frac{e^2}{r_{B1}}+\frac{e^2}{r_{B2}}\right)+\frac{e^2}{r_{AB}}+\frac{e^2}{r_{12}}$$

ここで

$u_A(\mathbf{r}_1)$:	A と 1 で水素原子を構成しているときの波動関数
$u_B(\mathbf{r}_2)$:	B と 2 で水素原子を構成しているときの波動関数

$$\int d\mathbf{r}_1 u_A^*(\mathbf{r}_1)u_A(\mathbf{r}_1)=\int d\mathbf{r}_2 u_B^*(\mathbf{r}_2)u_B(\mathbf{r}_2)=1$$

として次の近似を行う。

$$\Psi(\mathbf{r}_1\mathbf{S}_1;\mathbf{r}_2\mathbf{S}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[u_A(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_2)\pm u_A(\mathbf{r}_2)u_B(\mathbf{r}_1)\right]\chi_{s,t}$$

次の量を定義しよう。

$$S \equiv \int d\mathbf{r}_1 u_A^*(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_1) \qquad \text{overlap integral} \tag{414}$$

$$A \equiv \int d\mathbf{r}_1 u_A^*(\mathbf{r}_1)\left[-\frac{1}{2m_e}\nabla^2-\frac{e^2}{r_{A1}}\right]u_A(\mathbf{r}_1) \tag{415}$$

$$A' \equiv \int d\mathbf{r}_1 u_A^*(\mathbf{r}_1)\left[-\frac{1}{2m_e}\nabla^2-\frac{e^2}{r_{A1}}\right]u_B(\mathbf{r}_1) \tag{416}$$

$$E_c \equiv \int d\mathbf{r}_1\frac{e^2}{r_{B1}}|u_A(\mathbf{r}_1)|^2 \tag{417}$$

$$E_c' \equiv \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\frac{e^2}{r_{12}}|u_A(\mathbf{r}_1)|^2|u_B(\mathbf{r}_2)|^2 \tag{418}$$

$$E_e \equiv \int d\mathbf{r}_1\frac{e^2}{r_{A1}}u_A^*(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_1) \tag{419}$$

$$E_e' \equiv \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\frac{e^2}{r_{12}}u_A^*(\mathbf{r}_1)u_B^*(\mathbf{r}_2)u_A(\mathbf{r}_2)u_B(\mathbf{r}_1) \tag{420}$$

最後の2項は exchange integral といわれる。
上記波動関数を用いて singlet 項に対するエネルギー期待値を計算する：

$$
\begin{aligned}
E &= < H > && (421) \\
&= 2\frac{A + A'S}{1+S^2} - \frac{2(E_c + E_e S) - (E'_c + E'_e)}{1+S^2} + \frac{e^2}{r_{AB}} && (422)
\end{aligned}
$$

r_{AB} を変分パラメータとして停留値を探す。

水素分子のエネルギーレベル

1重項状態に、実効的に引力が働いている。

例3 散乱振幅と粒子交換

同種粒子、スピン 1/2

$\Longleftrightarrow$

粒子交換

$$
F_{sc} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[f(\theta) \pm f(\pi - \theta)\right]\chi_{s,t}
$$

スピンを観測しない場合の微分断面積

$$
\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{(2S_1+1)(2S_2+1)}\sum_{\text{final spin}} |F_{sc}|^2 && (423) \\
&= \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}\left\{\frac{1}{2}|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2 + \frac{3}{2}|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2\right\} && (424)
\end{aligned}
$$

$$= \frac{1}{2}\left\{|f(\theta)|^2 - \mathrm{Re}f^*(\theta)f(\pi-\theta) + |f(\pi-\theta)|^2\right\} \tag{425}$$

$\theta \leftrightarrow \pi - \theta$ に対して不変、つまり、$\theta = \pi/2$ に関して対称。

スピン 0 の場合

$$F_{sc} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[f(\theta) + f(\pi-\theta)\right] \tag{426}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2}\left\{|f(\theta)|^2 + 2\mathrm{Re}f^*(\theta)f(\pi-\theta) + |f(\pi-\theta)|^2\right\} \tag{427}$$

これもまた $\theta \leftrightarrow \pi - \theta$ に対して不変、つまり、$\theta = \pi/2$ に関して対称だが、この場合は当然。

第１１章　摂動論II
散乱理論（定常的取扱い）

定常状態摂動論

　散乱状態 — 始状態、終状態のエネルギーは既知であり、散乱振幅を求める。

　定常状態として取り扱える理由は境界条件が

$$\psi(\mathbf{r},t) \longrightarrow \mathrm{e}^{-i\frac{Et}{\hbar}} \left\{ \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} \right\}$$

入射平面波 + 外向き球面波

という形になっているからである。ハミルトニアンを

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

としよう。固有方程式は

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \qquad E > 0 \qquad (E \text{ は既知で連続スペクトル})$$

となる。ここで

$$\mathbf{k}^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \qquad U(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{r})$$

と置けば

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$$

と書ける。ここで、ポテンシャルについて以下の仮定をする。

$$\text{仮定：} \quad r^2U(\mathbf{r}) \ \longrightarrow\ 0, \quad r \ \longrightarrow\ \infty$$

例外は Coulomb ポテンシャル $rU(\mathbf{r}) \ \longrightarrow\ \text{const.}, \quad r \ \longrightarrow\ \infty$

$$\psi(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \psi_{scatt}(\mathbf{r})$$

カレントの定義

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*(\nabla\psi) - (\nabla\psi^*)\psi)$$

したがって、

$$\mathbf{j}_{inc} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} = \mathbf{v}$$

中心から距離 R だけ離れた点での微小面積 ds の見込む立体角を $d\Omega$ とすると

$$ds = R^2 d\Omega$$

また、散乱されたカレントのそれに垂直な成分は散乱振幅が球対称であることを考慮すれば、

$$\mathbf{j}_{scatt} \cdot \hat{\mathbf{r}} ds = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^*_{sactt} \frac{\partial \psi_{scatt}}{\partial r} - \frac{\partial \psi^*_{sactt}}{\partial r} \psi_{scatt} \right) \bigg|_{r=R} R^2 d\Omega \quad \longrightarrow \quad R \text{ indep.}$$

したがって、漸近形は

$$\psi^*_{sact} \left. \frac{\partial \psi_{scatt}}{\partial r} \right|_{r=R} \quad \longrightarrow \quad \frac{\text{const}}{R^2}, \qquad R \longrightarrow \infty$$

基本的には球面波であるから、

$$\lim_{R \to \infty} \psi_{scatt}(R) = f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\mathrm{e}^{ikR}}{R}$$

となる。ここで

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f(k, \theta)$$

は**散乱振幅**といわれる。したがって、全体では

$$\psi(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(k, \theta) \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}$$

となる。散乱断面積を漸近領域での ds 中を垂直に通過するフラックスと入射フラックスとの比で定義すれば

$$d\sigma = \lim_{R \to \infty} \frac{\mathbf{j}_{scatt} \cdot \hat{\mathbf{r}} ds}{\mid \mathbf{j}_{inc} \mid} = \mid f(k, \theta) \mid^2 d\Omega$$

となるので、微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \mid f(k, \theta) \mid^2$$

と表現できる。

Green 関数

方程式

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$$

を解くには Green 関数を導入すればよい。

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

Fourier 変換する。

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \tilde{G}(\mathbf{q}) d^3q \tag{428}$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d^3q \tag{429}$$

$$(k^2 - q^2)\tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \tag{430}$$

したがって、

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = -\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[P\frac{1}{q^2 - k^2} + c\delta(q^2 - k^2) \right]$$

c の選び方は境界条件によって決まる。一般に

$$\frac{1}{x \mp i\epsilon} = \frac{x}{x^2 + \epsilon^2} \pm i\frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2}$$

$$\longrightarrow \quad P\frac{1}{x} \pm i\pi\delta(x), \quad \epsilon \longrightarrow 0$$

だから

$$c = \pm i\pi$$

と選べば、

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = -\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{q^2 - k^2 \mp i\epsilon} \tag{431}$$

$$G^{\pm}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{q^2 - (k^2 \pm i\epsilon)} d^3q \tag{432}$$

となる。ここで

$$d^3q = q^2 dq d(\cos\theta) d\phi$$

のうち、まず ϕ について積分すると、残りは

$$G^{\pm}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty q^2 dq \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \frac{\mathrm{e}^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\cos\theta}}{q^2 - (k^2 \pm i\epsilon)} \tag{433}$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{i}{(2\pi)^2 \mid \mathbf{r} - \mathbf{r}' \mid} \int_0^\infty q dq \frac{1}{q^2 - (k^2 \pm i\epsilon)} (\mathrm{e}^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - \mathrm{e}^{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}) \tag{434}$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{i}{4\pi^2 \mid \mathbf{r} - \mathbf{r}' \mid} \int_{-\infty}^\infty \frac{\mathrm{e}^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{q^2 - (k^2 \pm i\epsilon)} q dq \tag{435}$$

積分路の選び方

$$G^{+}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\ \mathbf{r}-\mathbf{r}'\ |} \tag{436}$$

$$G^{-}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\ \mathbf{r}-\mathbf{r}'\ |} \tag{437}$$

つまり、この選択は順に外向き境界条件、内向き境界条件をとっていることに相当する。それぞれの境界条件による Schrödinger 方程式の解の満たすべき方程式は

$$\psi^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \psi^{(0)}(\mathbf{r}) + \int G^{\pm}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi^{(\pm)}(\mathbf{r}')d^3r'$$

となる。ただし、

$$(\nabla^2 + k^2)\psi^{(0)} = 0$$

散乱状態の解は、外向き境界条件をとり、$\psi^{(0)} = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ に注意すれば**散乱振幅の満たす積分方程式**は

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\int \frac{\mathrm{e}^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\ \mathbf{r}-\mathbf{r}'\ |}V(\mathbf{r}')\psi^{(+)}(\mathbf{r}')d^3r'$$

となる。

Born 近似

摂動論を展開するが、その条件は

$$|\ \frac{m}{\hbar^2}VL^2\ | \quad < \quad 1$$

となる。積分方程式に繰り返し代入していけば

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) = \psi^{(0)}(\mathbf{r}) + \int d^3r' G^{+}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi^{(0)}(\mathbf{r}') \tag{438}$$

$$+\int d^3r' \int d^3r'' G^{+}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')G^{+}(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')U(\mathbf{r}'')\psi^{(0)}(\mathbf{r}'') + \cdots \tag{439}$$

ここで $\psi^{(0)} = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ として、摂動の第 2 項までとった近似式を**ボルン近似** ((first) Born approximation) という。

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\int \frac{\mathrm{e}^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\ \mathbf{r}-\mathbf{r}'\ |}V(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}d^3r'$$

観測地点 $\mathbf{r}$ がポテンシャルの及ぼされている領域からはるかに離れているとしてよいことに注意して、右辺第 2 式を簡単化してゆこう。

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = \left(r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\alpha\right)^{1/2} = r\left(1 - \frac{2}{r}r'\cos\alpha + \frac{r'^2}{r^2}\right)^{1/2} \tag{440}$$

$$\sim \quad r - r'\cos\alpha, \quad r \longrightarrow \infty \tag{441}$$

そして

$$\frac{1}{|\ \mathbf{r}-\mathbf{r}'\ |} = \frac{1}{r}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r'}{r}\right)^l P_l(\cos\alpha) \sim \frac{1}{r} + \frac{r'}{r^2}\cos\alpha$$

であるが、これらの漸近展開を使えば、

$$\frac{\mathrm{e}^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\ \mathbf{r}-\mathbf{r}'\ |} \sim \frac{1}{r}\exp(ik(r-r'\cos\alpha))$$

となる。これをもとの式に代入すれば、

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) \ \longrightarrow \ \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}\int V(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'-kr'\cos\alpha)}d^3r' \tag{442}$$

$$= \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}f(k,\theta) \tag{443}$$

したがって、**ボルン近似による散乱振幅**は

$$f(k,\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'}d^3r'$$

となる。ここで

$$kr'\cos\alpha = \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'$$

を使った。また、**ポテンシャルが球対称** $V(r')$ のときは運動量遷移

$$\mathbf{q} \equiv \mathbf{k}-\mathbf{k}'$$

を定義して、

$$q^2 = k^2 + k'^2 - 2kk'\cos\theta, \qquad k = k'$$
$$= 2k^2(1-\cos\theta) = 4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}$$

であることを使えば、

$$f(k,\theta) \ = \ -\frac{m}{\hbar^2 k\sin\frac{\theta}{2}}\int V(r')\sin(2kr'\sin\frac{\theta}{2})r'dr' \tag{444}$$

$$= \ -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int V(r')\sin(qr')r'dr' \tag{445}$$

となる。

例　湯川ポテンシャル（遮蔽クーロン (screened Coulomb) ポテンシャル）

ポテンシャルは

$$V(\mathbf{r}) = -V_0\frac{\mathrm{e}^{-\mu r}}{r}$$

ボルン振幅は

$$f(k,\theta) \ = \ \frac{mV_0}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\mathrm{e}^{-\mu r'+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}}{r'}r'^2dr'd(\cos\theta)d\phi \tag{446}$$

$$= \ \frac{mV_0}{iq\hbar^2}\int_0^\infty dr'\mathrm{e}^{-\mu r'}[\mathrm{e}^{iqr'}-\mathrm{e}^{-iqr'}] \tag{447}$$

$$= \ \frac{mV_0}{iq\hbar^2}\left[\frac{1}{\mu-iq}-\frac{1}{\mu+iq}\right] = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\frac{1}{q^2+\mu^2} \tag{448}$$

$$= \ \frac{2mV_0}{\hbar^2}\frac{1}{4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}+\mu^2} \tag{449}$$

したがって、微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{(4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}+\mu^2)^2}$$

となる。特に $\mu = 0$ の場合は純粋のクーロン散乱であり、電荷 $Z_1 e$ と $Z_2 e$ の原子核の散乱では、

$$V_0 = Z_1 Z_2 e^2, \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

なので、

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16E^2}\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}$$

と書き表せるが、これを**ラザフォード (Rutherford) の散乱公式**という。

ボルン近似の成立条件

ボルン近似の第 1 項と第 2 項の大きさをポテンシャル中心で比較する。

$$\left|\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\int\frac{\mathrm{e}^{ikr'}}{r'}V(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}d^3r'\right| \ll |\ \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\ |_{\mathbf{r}=0} = 1$$

ポテンシャルが短距離力の場合を考える。

$\bar{V}$:　ポテンシャルの平均的な強さ
a :　到達距離

i)$pa/\hbar \ll 1$**、つまり低エネルギーの場合**

$\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \sim 1$ だから

$$\frac{m}{\hbar^2}\bar{V}a^2 \ll 1$$

ii)$pa/\hbar \gg 1$**、つまり高エネルギーの場合**

$V(\mathbf{r}')$ を $\bar{V}$ で置き換え、$\cos\theta$ に付いて積分してでてくる因子が、$\left|\ \frac{\sin\frac{pr}{\hbar}}{\frac{pr}{\hbar}}\ \right| < \frac{\hbar}{pr}$ のように抑えられるので、

$$\frac{m}{\hbar^2}\bar{V}a^2\frac{\hbar}{pa} \ll 1$$

つまり、この場合

$$\frac{m}{\hbar^2}\bar{V}a^2 \ll \frac{pa}{\hbar}$$

となる。

アイコナル (eikonal) 近似（高エネルギー小角度散乱）

$$ka \gg 1, \qquad |\ \bar{V}\ | \ll E$$

この条件の元で散乱現象を解析する。この場合は平面波を入射させれば、散乱波もかなり平面波に近いものとなろう。したがって方程式

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_k(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar}V(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r})$$

において、$\phi_k(\mathbf{r})$ を空間的にゆっくり変化する関数として、

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\phi_k(\mathbf{r})$$

と置くことにしよう。すると

$$[2i\mathbf{k}\cdot\nabla + \nabla^2]\phi_k(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V\phi_k(\mathbf{r})$$

となるが、ゆっくり変化するという近似で、左辺第2項を無視する。さらに、$k = (0, 0, k)$ ととると、

$$\frac{\partial\phi_k}{\partial z} = -\frac{i}{\hbar v}V\phi_k$$

境界条件

$$\phi_k \quad \longrightarrow \quad 1, \qquad z \quad \longrightarrow \quad -\infty$$

を考慮すると解は

$$\phi_k(x,y,z) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar v}\int_{-\infty}^{z}V(x,y,z')dz'\right] \tag{450}$$

$$\psi_k(x,y,z) = \exp\left[ikz - \frac{i}{\hbar v}\int_{-\infty}^{z}V(x,y,z')dz'\right] \tag{451}$$

と書ける。この解をボルン近似式に代入する。

$$f(k,\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})\psi_k(x,y,z)d^3r \tag{452}$$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})\exp\left[-\frac{i}{\hbar v}\int_{-\infty}^{z}V(x,y,z')dz'\right]d^3r \tag{453}$$

$$d^3\mathbf{r} = d^{(2)}\mathbf{b}dz \tag{454}$$

$$(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r} = (\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{b} + [(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\hat{\mathbf{e}}_z]z$$

いま $\theta \ll 1$ とすれば、$\gamma \sim \frac{\pi}{2}$ となる。ここで $\frac{\hbar v}{V_0}$ という因子はポテンシャルによる位相変化が1程度になる距離として $d = \min(a, \frac{\hbar v}{V_0})$ と書こう。すると、

$$\mid [(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\hat{\mathbf{e}}_z]z \mid \sim kd\theta^2 \ll 1$$

であれば、この項は無視できる。その条件は

$$\theta^2 \ll \frac{1}{kd}$$

つまり、**小角散乱**であれば良い。このとき、積分変数は

$$\mathbf{r}=\mathbf{b}+\hat{\mathbf{e}}_z z$$

と書け、元の式に代入して、

$$\begin{aligned}
f(k,\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^{(2)}\mathbf{b}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{b}}V(\mathbf{b}+\hat{\mathbf{e}}_z z) && (455)\\
&\qquad \exp\left[-\frac{i}{\hbar v}\int_{-\infty}^{z}V(\mathbf{b}+\hat{\mathbf{e}}_z z')dz'\right]dz && (456)\\
&= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left(-\frac{\hbar v}{i}\right)\int d^{(2)}\mathbf{b}\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{b}}\exp\left[-\frac{i}{\hbar v}\int_{-\infty}^{z}V(\mathbf{b}+\hat{\mathbf{e}}_z z')dz'\right]_{-\infty}^{\infty} && (457)
\end{aligned}$$

ここで第 2 式の [ ] の中が、第 1 式の原始関数となっていることを使った。したがって、アイコナール近似式は

$$\begin{aligned}
f(k,\theta) &= \frac{k}{2\pi i}\int d^{(2)}\mathbf{b}\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{b}}[\mathrm{e}^{i\chi(\mathbf{b})}-1] && (458)\\
\chi(\mathbf{b}) &= -\frac{1}{\hbar v}\int_{-\infty}^{\infty}V(\mathbf{b}+\hat{\mathbf{e}}_z z')dz' && (459)
\end{aligned}$$

ポテンシャル V が z 軸のまわりに軸対称な場合は少し簡単になる。$\gamma=\frac{\pi}{2}$ だから、極座標 (b,ϕ) を使って

$$\begin{aligned}
(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{b} &= b\Delta\sin\gamma\cos\phi\sim b\Delta\cos\phi && (460)\\
\Delta &\equiv |\mathbf{k}-\mathbf{k}'|=2k\sin\frac{\theta}{2} && (461)\\
\chi(b) &= -\frac{1}{\hbar v}\int_{-\infty}^{\infty}V(b,z')dz' && (462)\\
\int_0^{2\pi}\mathrm{e}^{ib\Delta\cos\phi}d\phi &= 2\pi J_0(b\Delta) && (463)
\end{aligned}$$

なので、最終的には、

$$f(k,\theta)=\frac{k}{i}\int_0^{\infty}J_0(b\Delta)[\mathrm{e}^{i\chi(b)}-1]bdb$$

となる。

部分波展開 (partial wave expansion)

古典論：$L=bp,\qquad b$ の展開
量子論：$\hat{L},\hat{L}^2\to l(l+1)\qquad l$ の展開

散乱過程には、i) **入射平面波**と、ii) **外向き散乱波**とが存在する。

i) 入射平面波
角運動量演算子

$$\begin{aligned}
L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} && (464)\\
\mathbf{L}^2 &= -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] && (465)
\end{aligned}$$

固有関数

$$\begin{cases} L_z Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar m Y_l^m(\theta,\phi) \\ \mathbf{L}^2 Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta,\phi) \end{cases}$$

ここで

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \left[\frac{(2l+1)(l-\mid m\mid)!}{4\pi(l+\mid m\mid)!}\right]^{\frac{1}{2}} P_l^{|m|}(\cos\theta)\mathrm{e}^{im\phi} \tag{466}$$

$$\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\int_0^{2\pi} d\phi Y_l^{m*}(\theta,\phi)Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{467}$$

入射平面波を球面調和関数（実はルジャンドル関数）で展開しよう。

$$\mathrm{e}^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} a_{lm}(r)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{468}$$

$$a_{lm} = \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\int_0^{2\pi} d\phi \mathrm{e}^{ikr\cos\theta}Y_l^{m*}(\theta,\phi) \tag{469}$$

ここで

$$\int_0^{2\pi} d\phi \mathrm{e}^{-im\phi} = 2\pi\delta_{m0}$$
$$Y_l^0 = \sqrt{\tfrac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta)$$

を使うと、

$$a_{lm}(r) = \delta_{m0}\sqrt{\pi(2l+1)}\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\mathrm{e}^{ikr\cos\theta}P_l(\cos\theta) \tag{470}$$

$$= \delta_{m0}\sqrt{\pi(2l+1)}2i^l j_l(kr) \tag{471}$$

したがって、**入射平面波の展開**は

$$\mathrm{e}^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta)$$

となる。散乱波と比較するためにこの漸近的振る舞いを調べてみよう。まず、球ベッセル関数は

$$j_l(kr) \longrightarrow \frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right), \quad r\longrightarrow\infty \tag{472}$$

$$= \frac{1}{2ikr}\left[\mathrm{e}^{i(kr-\frac{l}{2}\pi)} - \mathrm{e}^{-i(kr-\frac{l}{2}\pi)}\right] \tag{473}$$

だから、その漸近形は

$$\mathrm{e}^{ikr\cos\theta} \longrightarrow \frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l[\mathrm{e}^{i(kr-\frac{l}{2}\pi)} - \mathrm{e}^{-i(kr-\frac{l}{2}\pi)}]P_l(\cos\theta)$$

となる。つまり、無限遠では平面波は外向きと内向きの球面波の重ね合わせとなっている。次に散乱波の方を見てみよう。

ii) 散乱波

Schrödinger 方程式

$$(\nabla^2 + k^2)\psi^{(+)}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi^{(+)}(\mathbf{r})$$

振幅を部分波で展開する：

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} b_{lm}(r) Y_l^m(\theta,\phi) \tag{474}$$

$$b_{lm} = \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\int_0^{2\pi} d\phi \psi^{(+)}(\mathbf{r}) Y_l^{m*}(\theta,\phi) \tag{475}$$

ここで球対称なポテンシャル $U(\mathbf{r}) = U(r)$ の場合を考え、$\mathbf{k}$ 方向を z 軸に選べば、$d\phi$ の積分から、δ_{m0} の項が出てくるので

$$b_{lm} = \delta_{m0}\sqrt{\pi(2l+1)}\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\psi^{(+)}(\mathbf{r})P_l(\cos\theta)$$

ここで、入射平面波の係数と比較して、定数を適切に決めて (後ほどキチンと決める)、

$$2i^l c_l \chi_l(kr) \equiv \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\psi^{(+)}(\mathbf{r})P_l(\cos\theta)$$

で部分波振幅 χ_l を定義すれば、求める散乱波の展開は

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l c_l \chi_l(kr)P_l(\cos\theta)$$

となる。これを Schrödinger 方程式に代入し、$P_l(\cos\theta)$ をかけ、$d(\cos\theta)$ で積分する（部分波に射影する:$u_l = r\chi_l$）。

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}\right] r\chi_l = k^2 r\chi_l$$

ここで部分波振幅の $r \to 0$ における漸近形を調べよう。

$$-\frac{d^2}{dr^2}(r\chi_l) + \frac{l(l+1)}{r^2} r\chi_l = 0$$

この解は

$$\chi_l \propto \begin{cases} r^{-(l+1)} & : \text{singular} \\ r^l & : \text{nonsingular} \end{cases}$$

となるが、原点で特異的でない解は

$$\chi_l(kr) \propto (kr)^l$$

となる。一方、$r \to \infty$ での漸近形は、散乱波の漸近形を調べることによって求まる。

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) \longrightarrow \mathrm{e}^{ikr\cos\theta} + \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} f(k,\theta)$$

ここで、散乱振幅を

$$f(k,\theta) \equiv \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)T_l(k)P_l(\cos\theta)$$

と展開する。一方平面波は

$$\mathrm{e}^{ikr\cos\theta} \longrightarrow \frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l[\mathrm{e}^{i(kr-\frac{l}{2}\pi)} - \mathrm{e}^{-i(kr-\frac{l}{2}\pi)}]P_l(\cos\theta)$$

だから、合わせれば、

$$\psi^{(+)} \longrightarrow \frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\left[(1+2iT_l)\mathrm{e}^{i(kr-\frac{l}{2}\pi)}-\mathrm{e}^{-i(kr-\frac{l}{2}\pi)}\right]P_l(\cos\theta)$$

ここで、外向き球面波に掛かっている係数を

$$S_l \equiv 1+2iT_l$$

で定義する。

定常状態では外向き確率流と内向き確率流が釣り合っているから、

$$\mid S_l \mid^2 = 1$$

しかし、一般的には弾性散乱の他に非弾性散乱もあるので、

$$\mid S_l \mid^2 \leq 1$$

となる。したがって一般に

$$S_l(k) \equiv \mathrm{e}^{2i\delta_l(k)}$$

と書ける。ここで $\delta_l(k)$ は**位相のずれ (phase shift)** と呼ばれる。これは

$$\delta_l(k) = \mathrm{Re}\delta_l(k) + i\mathrm{Im}\delta_l(k)$$

だが、$|S_l|^2 = \mathrm{e}^{-2\mathrm{Im}\delta_l} \leq 1$ だから

$$\mathrm{Im}\delta_l(k) \geq 0$$

となる。一般に、$\mathrm{Im}\delta_l(k) \neq 0$ のときは非弾性散乱である。

以下では**弾性散乱** $(\mathrm{Im}\delta_l(k)=0)$ を扱う。散乱波の漸近形に位相のずれを代入すれば、

$$\psi^{(+)} \longrightarrow \frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\mathrm{e}^{i\delta_l}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi+\delta_l\right)P_l(\cos\theta)$$

これを散乱波の展開形と比較して、部分波の $r\to\infty$ での漸近形

$$\chi_l(kr) \longrightarrow \frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi+\delta_l\right)$$

を得る。これはさきに導入した係数を $c_l = \mathrm{e}^{i\delta_l}$ と選んだことに相当する。

まとめると $r \to \infty$ での漸近形は

$$\left\{\begin{array}{llll} \text{入射平面波} & j_l(kr)kr & \longrightarrow & \sin(kr - \frac{l}{2}\pi) \\ \text{散乱波} & \chi_l(kr)kr & \longrightarrow & \sin(kr - \frac{l}{2}\pi + \delta_l) \end{array}\right.$$

$\frac{l}{2}\pi$ という因子は遠心力ポテンシャルの効果である。

位相のずれと散乱波の関係

一般に

$$\left\{\begin{array}{lll} \delta_l < 0, & \text{押し出される,} & V > 0 \\ \delta_l > 0, & \text{引き込まれる,} & V < 0 \end{array}\right.$$

といえる。ここで散乱振幅を位相のずれで表そう。

$$T_l = \frac{S_l - 1}{2i} = \frac{\mathrm{e}^{2i\delta_l} - 1}{2i} \tag{476}$$

$$= \mathrm{e}^{i\delta_l} \sin\delta_l \tag{477}$$

したがって、

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)$$

となる。微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \tag{478}$$

$$= \frac{1}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{l'=0}^{\infty}(2l+1)(2l'+1)\mathrm{e}^{i(\delta_l - \delta_{l'})}\sin\delta_l \sin\delta_{l'} P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) \tag{479}$$

となる。全散乱断面積は

$$\sigma = \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\int_0^{2\pi} d\phi \mid f(\theta) \mid^2$$

だが、直交関係

$$\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}$$

を使うと

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1) \mid T_l(k) \mid^2 \tag{480}$$
$$= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \tag{481}$$

と書き表せる。

光学定理 (optical theorem)

確率保存に対応する unitarity condition

$$S_l^*(k)S_l(k) = 1$$

から、以下のことが分かる。

$$(1-2iT_l^*)(1+2iT_l) = 1 \tag{482}$$
$$\mathrm{Im}T_l = |T_l|^2 \tag{483}$$
$$\mathrm{Im}f(0) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{Im}T_l(k)P_l(\cos\theta=0) \tag{484}$$
$$= \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|T_l|^2 \tag{485}$$
$$= \frac{k}{4\pi}\sigma \tag{486}$$

つまり、

$$\mathrm{Im}f(0) = \frac{k}{4\pi}\sigma$$

となる。これを**光学定理**という。

運動学的極限

具体的なポテンシャルに依存せず、

$$\mid T_l \mid = \mid \sin\delta_l \mid \leq 1$$

が成り立つので、部分波の断面積の上限は

$$\sigma_l \equiv \frac{4\pi}{k^2}(2l+1) \mid T_l \mid^2 \leq \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)$$

で押さえられる。

共鳴散乱

部分波が最大になるときは

$$\mid T_l \mid = 1, \qquad \longrightarrow \delta_l = \frac{\pi}{2}(\times(2n+1))$$

のときである。いま $k=k_{0l},\ E=E_{0l}$ のときに実現したとする。

$$\delta_l(k)=\frac{\pi}{2}+\left.\frac{d\delta_l}{dE}\right|_{E=E_{0l}}(E-E_{0l})+o(E-E_{0l})^2$$

となるが、

$$\left.\frac{d\delta_l}{dE}\right|_{E=E_{0l}}\equiv\frac{2}{\Gamma_l}$$

を導入すると、$E\sim E_{0l}$ で

$$\delta_l(k)=\frac{\pi}{2}+\frac{2(E-E_{0l})}{\Gamma_l}$$

となる。一方

$$\begin{aligned} T_l=\mathrm{e}^{i\delta_l}\sin\delta_l &= \frac{\sin\delta_l}{\cos\delta_l-i\sin\delta_l} && (487)\\ &= \frac{1}{\cot\delta_l-i} && (488)\end{aligned}$$

であるが、

$$\cot(\frac{\pi}{2}+\epsilon)\sim-\epsilon,\qquad|\,\epsilon\,|\ll 1$$

を使うと、

$$T_l\sim\frac{1}{-\frac{2(E-E_{0l})}{\Gamma_l}-i}=-\frac{\Gamma_l}{2}\frac{1}{E-E_{0l}+i\frac{\Gamma_l}{2}}$$

となる。したがって、部分波の散乱断面積は

$$\sigma_l\sim\frac{\pi}{k^2}(2l+1)\frac{\Gamma_l^2}{(E-E_{0l})^2+\frac{\Gamma_l^2}{4}}$$

と書ける。これを **Breit-Wigner の共鳴散乱公式**という。ここで、

$$\begin{cases} E_{0l} & : \text{共鳴エネルギー準位}\\ \Gamma_l & : \text{共鳴幅、半値幅}\end{cases}$$

という。

位相のずれの計算

散乱振幅

$$f(k,\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})\psi_k^{(+)}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}$$

を部分波に展開しよう。以下の関係式を代入する。

$$\begin{cases} \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(-i)^l j_l(kr)P_l(\cos\alpha') \\ \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l \mathrm{e}^{i\delta_l}\chi_l(kr)P_l(\cos\alpha) \end{cases}$$

ルジャンドル関数の加法定理を使って簡単にする。

$$\begin{aligned} P_l(\cos\alpha') &= P_l(\cos\alpha)P_l(\cos\theta) && (489) \\ &\quad +2\sum_{m=1}^{l}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^m(\cos\alpha)P_l^m(\cos\theta)\cos m(\beta-\phi) && (490) \\ d^3\mathbf{r} &= r^2 dr d(\cos\alpha)d\beta && (491) \end{aligned}$$

β の積分から $2\pi\delta_{m0}$ がでてくるので、

$$\begin{aligned} f(k,\theta) &= -\frac{m}{\hbar^2}\int_0^{\infty} r^2 dr V(r)\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{l'=0}^{\infty}(2l+1)(2l'+1) && (492) \\ &\quad \times(-i)^l i^{l'}\mathrm{e}^{i\delta_{l'}}j_l(kr)\chi_{l'}(kr)\int_{-1}^{1}d(\cos\alpha)P_l(\cos\alpha)P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\alpha) && (493) \end{aligned}$$

$\cos\alpha$ の積分から、$\frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}$ がでてくるので、

$$f(k,\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{i\delta_l}\int_0^{\infty} r^2 dr V(r) j_l(kr)\chi_l(kr)P_l(\cos\theta)$$

となる。したがって**位相のずれ**は

$$\sin\delta_l = -\frac{2mk}{\hbar^2}\int_0^{\infty} r^2 dr V(r) j_l(kr)\chi_l(kr)$$

のように書き表せる。有限な到達力のポテンシャルの場合、低エネルギー極限における位相のずれの波数依存性が次のようにして求められる。

$$\begin{aligned} &r^2 V(r)\to 0, \qquad j_l, \chi_l \propto (kr)^l \\ &\qquad\qquad \Longrightarrow \delta_l \propto k^{2l+1}, \quad k\to 0 \end{aligned}$$

また、散乱の部分波振幅を平面波の部分波で置き換えれば、**位相のずれのボルン近似**

$$\sin\delta_l = -\frac{2mk}{\hbar^2}\int_0^\infty r^2 dr V(r)[j_l(kr)]^2$$

が得られる。

有効距離近似

$ka \ll 1$ で s 波散乱を考える ($l=0$)。振幅を

$$kr\chi_0(kr) = \phi(r)$$

としよう。境界条件は

$$\begin{cases} \phi(r=0) = 0 \\ \phi(r\to\infty) \longrightarrow u(r) = c\sin(kr+\delta) \end{cases}$$

ここで、ポテンシャルのある場合、ない場合、それぞれについて、波数が $k, 0$ の 2 つの解 $\phi,\ u$、$\phi_0,\ u_0$ を用意する。

$$\begin{cases} -\frac{d^2\phi}{dr^2} + U(r)\phi(r) = k^2\phi(r) & (1) \\ -\frac{d^2\phi_0}{dr^2} + U(r)\phi_0(r) = 0 & (2) \\ -\frac{d^2u}{dr^2} = k^2u(r) & (3) \\ -\frac{d^2u_0}{dr^2} = 0 & (4) \end{cases}$$

$\phi_0\times(1) - \phi\times(2)$ を作ると、

$$\frac{d}{dr}(\phi\phi_0' - \phi_0\phi') = k^2\phi\phi_0 \tag{5}$$

$u_0\times(3) - u\times(4)$ を作ると、

$$\frac{d}{dr}(uu_0' - u_0u') = k^2uu_0 \tag{6}$$

((6) − (5)) を $[0,\infty]$ で積分する。

$$[(uu_0' - u_0u') - (\phi\phi_0' - \phi_0\phi')]_0^\infty = k^2\int_0^\infty (uu_0 - \phi\phi_0)dr$$

ここで、$r\to\infty$ で $\phi\to u,\quad \phi_0\sim u_0$ なので

$$-[(uu_0' - u_0u') - (\phi\phi_0' - \phi_0\phi')]_{r=0} = k^2\int_0^\infty (uu_0 - \phi\phi_0)dr$$

となる。ここで、$u(r)$ の係数を決める。$u(0)=1$ とすると、$c = \frac{1}{\sin\delta}$ となるので、

$$\begin{aligned} u(r) &= \frac{\sin(kr+\delta)}{\sin\delta} = \cos kr + \cot\delta\sin kr && (494) \\ &\sim 1 + \cot\delta\cdot kr + 0((kr)^2) && (495) \end{aligned}$$

一方、u_0 は r の 1 次関数なので、

$$u_0(r) = 1 - \frac{r}{a}$$

として、係数を比較すれば、

$$a = -\lim_{k\to 0}\frac{1}{k}\tan\delta$$

を得る。これを**散乱の長さ (scattering length)** という。以上のパラメトリゼーションを用いて、左辺を評価しよう。$r=0$ で

$$\begin{aligned} \phi = \phi_0 = 0, &\qquad u = u_0 = 1 \\ u' = k\cot\delta, &\qquad u_0' = -\tfrac{1}{a} \end{aligned}$$

だから、

$$k\cot\delta = -\frac{1}{a} + k^2\int_0^\infty (uu_0 - \phi\phi_0)dr$$

を得る。特に、右辺で、$u \sim u_0,\ \phi\sim\phi_0$ と近似し、**有効距離 (effective rnge)**

$$r_0 \equiv 2\int_0^\infty (u_0^2 - \phi_0^2)dr$$

を定義すれば、位相のずれは

$$k\cot\delta = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2}r_0k^2$$

と表せる。これを**有効距離公式**という。

強い引力	斥力、または弱い引力
束縛状態	束縛状態なし
$\frac{\pi}{2} < \delta < \pi$	$0 < \delta < \frac{\pi}{2}$

有効距離近似では 2 つのパラメータ a, r_0 によって表せれるが、これらはポテンシャルの大きさ V_0 とそのレンジのみによって決まり、ポテンシャルの具体的形状には無関係である。そのため、これは**形状独立近似 (shape independent approximation)** といわれる。

最後に、低エネルギー極限では

$$\frac{1}{k}\tan\delta \to -a, \quad k\to 0$$

なので、散乱断面積は

$$\sigma_s(k) = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta \to 4\pi a^2$$

となる。

例）剛体球による散乱

$$V(r)=\begin{cases}\infty & : \quad r\le a \quad \rightarrow \quad \underline{\psi=0} \\ 0 & : \quad r>a \quad \rightarrow \quad \text{自由波}\end{cases}$$

$r>a$ では自由波になっているので

$$\frac{d^2}{dr^2}\chi_l+\frac{2}{r}\frac{d\chi_l}{dr}+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l=0$$

この解は**球ベッセル、球ノイマン関数** (spherical Bessel, spherical Neumann function)、$j_l(kr),\ n_l(kr)$ である。これらの漸近形は

$$\begin{array}{lll} j_l(x) & \rightarrow \frac{1}{x}\cos[x-\frac{\pi}{2}(l+1)],(x\rightarrow\infty) & \rightarrow \frac{x^l}{1\cdot3\cdots(2l+1)},(x\rightarrow 0) \\ n_l(x) & \rightarrow \frac{1}{x}\sin[x-\frac{\pi}{2}(l+1)],(x\rightarrow\infty) & \rightarrow -\frac{1\cdot3\cdots(2l-1)}{x^{l+1}},(x\rightarrow 0)\end{array}$$

したがって、これらの 1 次結合をとれば正しい外向き、内向き球面波が得られる。それは

$$\begin{array}{ll} h_l^{(1)}=j_l+in_l & \rightarrow \frac{\mathrm{e}^{i(x-\frac{\pi}{2}(l+1))}}{x}, \quad (x\rightarrow\infty) \\ h_l^{(2)}=j_l-in_l & \rightarrow \frac{\mathrm{e}^{-i(x-\frac{\pi}{2}(l+1))}}{x}, \quad (x\rightarrow\infty)\end{array}$$

である。したがって、$r>a$ での解は、外向き波に位相因子をかけて、

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r})=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\left[\mathrm{e}^{2i\delta_l}h_l^{(1)}+h_l^{(2)}\right]P_l(\cos\theta)$$

と書けるので、部分波振幅は

$$\begin{aligned}\chi_l &= \mathrm{e}^{2i\delta_l}h_l^{(1)}+h_l^{(2)} && (496)\\ &= \mathrm{e}^{i\delta_l}\left[(j_l+in_l)\mathrm{e}^{i\delta_l}+(j_l-in_l)\mathrm{e}^{-i\delta_l}\right] && (497)\\ &= 2\mathrm{e}^{i\delta_l}\left[j_l(kr)\cos\delta_l-n_l(kr)\sin\delta_l\right] && (498)\end{aligned}$$

と求められる。ここで剛体壁での境界条件 $\chi_l(ka)=0$ を使うと、**剛体壁散乱の位相のずれ**は

$$\tan\delta_l=\frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}$$

となる。ここまでは近似なしの結果であるが、最後に低エネルギーと高エネルギー両極限での値を求めておく。

i) 低エネルギー極限 $(ka\ll 1)$

$$\begin{aligned}\tan\delta_l &\sim \frac{(ka)^l}{1\cdot3\cdots(2l+1)}\left[-\frac{(ka)^{l+1}}{1\cdot3\cdots(2l-1)}\right] && (499)\\ &= -\frac{(ka)^{2l+1}2^{2l-1}l!(l-1)!}{(2l+1)!(2l-1)!} && (500)\end{aligned}$$

$l=0$ が主要な寄与なので、

$$\tan\delta_0 = \frac{j_0(ka)}{n_l(ka)} = -\tan ka \tag{501}$$
$$\delta_0 = -ka \tag{502}$$

したがって、散乱断面積は

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}(ka)^2 = 4\pi a^2$$

となる。この特徴は a) 等方的で、b) 古典的な断面積 πa^2 の 4 倍となっていることである。

ii) 高エネルギー極限 $(ka \gg 1)$

$$\sin^2\delta_l = \frac{j_l^2(ka)}{j_l^2(ka)+n_l^2(ka)} \to \cos^2\left[ka - \frac{\pi}{2}(l+1)\right]$$

力の到達範囲が a だから、寄与する部分波は $l < ka$ に限定される。

$$\sigma \sim \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{ka}(2l+1)\cos^2\left[ka - \frac{\pi}{2}(l+1)\right]$$

$\cos^2[ka - \frac{\pi}{2}(l+1)]$ は k とともに激しく振動するので、平均値 $1/2$ で置き換えて、

$$\sigma \sim \frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{ka}(2l+1) \sim \frac{2\pi}{k^2}(ka)^2 = 2\pi a^2$$

となる。高エネルギー極限では古典的断面積の 2 倍となっている。

アイコナル近似とユニタリティ

$$f(k,\theta) = \frac{k}{2\pi i}\int d^2\mathbf{b}\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{b}}[\mathrm{e}^{i\chi(\mathbf{b})}-1] \tag{503}$$
$$\sigma_{el} = \int \mid f(\mathbf{k},\mathbf{k}') \mid^2 d\Omega_{k'} \tag{504}$$
$$= (\frac{k}{2\pi})^2\int d\Omega_{k'}\int d^2\mathbf{b}\int d^2\mathbf{b}'\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{b}-\mathbf{b}')} \tag{505}$$
$$\times[\mathrm{e}^{i\chi(\mathbf{b})}-1][\mathrm{e}^{i\chi(\mathbf{b}')}-1]^* \tag{506}$$

この場合、前方散乱が主要なので、$d\Omega_{k'}$ の積分を入射波数ベクトルに垂直な成分の積分

$$d\Omega_{k'} \sim \frac{d^2\mathbf{k}_\perp}{k^2}$$

で置き換えられる。すると、

$$\int \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{b}-\mathbf{b}')} d\Omega_{k'} \sim \left(\frac{2\pi}{k}\right)^2 \delta^{(2)}(\mathbf{b}-\mathbf{b}')$$

となるので、弾性散乱断面積は

$$\sigma_{el} = \int |\ \mathrm{e}^{i\chi(\mathbf{b})} - 1\ |^2\ d^2\mathbf{b}$$

となる。ポテンシャルが実数の場合はアイコナル関数 χ が実数なので、これは全散乱断面積に等しい。しかし、一般的には**光学定理**により、

$$\begin{aligned} \sigma_{tot} &= \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(k,k) && (507) \\ &= 2\int(1-\mathrm{Re}\,\mathrm{e}^{i\chi(\mathbf{b})})d^2\mathbf{b} && (508) \end{aligned}$$

となる。したがって、吸収断面積は

$$\begin{aligned} \sigma_{abs} &= \sigma_{tot} - \sigma_{el} && (509) \\ &= \int(1-|\ \mathrm{e}^{i\chi(\mathbf{b})}\ |^2)d^2\mathbf{b} && (510) \end{aligned}$$

となる。これは必ず非負だから、ポテンシャルの虚数部分に対して条件

$$\mathrm{Im}\chi > 0, \qquad \mathrm{Im}V < 0$$

がつくことになる。

完全吸収による散乱、回折散乱

ポテンシャルは

$$V(r) = \begin{cases} -i\infty, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

だから、アイコナル関数は

$$\begin{aligned} \chi(b) &= -\tfrac{1}{\hbar v}\textstyle\int_{-\infty}^{\infty} V(b,z)dz \\ &= \begin{cases} i\infty, & b < a \\ 0, & b > a \end{cases} \end{aligned}$$

となる。したがって、

$$\mathrm{e}^{i\chi} = \begin{cases} 0, & b < a \\ 1, & b > a \end{cases}$$

だから、散乱振幅は

$$\begin{aligned} f(k,\theta) &= -\frac{k}{i}\int_0^a J_0\left(2kb\sin\frac{\theta}{2}\right)bdb && (511) \\ &= ia\frac{J_1(2ka\sin\frac{\theta}{2})}{2\sin\frac{\theta}{2}} && (512) \end{aligned}$$

この場合の各種断面積を書くと

$$\sigma_{el} = \int |e^{i\chi(\mathbf{b})} - 1|^2 d^2\mathbf{b} = \pi a^2 \tag{513}$$

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im} f(k, \theta = 0) = 2\pi a^2 \tag{514}$$

$$\sigma_{abs} = \int (1 - |e^{i\chi(\mathbf{b})}|^2) d^2\mathbf{b} = \pi a^2 \tag{515}$$

この場合の吸収散乱を**影散乱**という。

時間に依存する摂動論

遷移確率

無摂動系 $\underset{\text{摂動}}{\longrightarrow}$ エネルギーシフト　時間に依存する摂動

E_f　状態間の遷移

E_i　$| k >$

$| m >$　H'

H_0　H

時間発展演算子を求めよう。ハミルトニアンと固有状態は

$$H = H_0 + \lambda H'(t) \tag{516}$$

$$H_0|n> = E_n|n> \tag{517}$$

ここで、初期と終状態を決めよう。

$$\begin{array}{ll} t = 0: & |m> \\ t: & |\psi(t) >= U(t)|m>, \quad U(0) = 1 \end{array}$$

Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi >= H|\psi >$$

から、U の満たすべき方程式は

$$i\hbar\frac{\partial U}{\partial t} = HU$$

となる。したがって、時刻 t で $|k>$ となっている**遷移確率**の 2 乗は

$$P_{m,k} =|< k \mid U(t) \mid m >|^2$$

となる。U の解は、積分して

$$U(t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t')U(t')dt'$$

と書ける。しかし、一般的にこれを解くことは極めて難しい。そこで、以下のような方法が取られる。

相互作用表示

U の代わりに次のような U_I を導入する。まず、自由場の方程式を満たす

$$i\hbar\frac{\partial U^{(0)}(t)}{\partial t} = H_0 U^{(0)}(t), \quad U^{(0)}(0) = 1$$

で、$U^{(0)}$ を定義し、これを用いて相互作用表示における時間発展演算子 $U_I(t)$ を定義する。

$$U(t) = U^{(0)}(t)U_I(t)$$

$U_I(t)$ の満たす方程式は

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial U_I}{\partial t} &= \lambda H_I(t)U_I, \quad U_I(0) = 1 & (518) \\ H_I(t) &\equiv U^{(0)\dagger}H'U^{(0)} & (519) \end{aligned}$$

となる。これを **Tomonaga-Schwinger の方程式**という。この導き方は以下の通り。

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial U_I}{\partial t} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(U^{(0)\dagger}U) = i\hbar\frac{\partial U^{(0)\dagger}}{\partial t}U + U^{(0)\dagger}i\hbar\frac{\partial U}{\partial t} & (520) \\ &= -U^{(0)\dagger}H_0U + U^{(0)\dagger}HU & (521) \\ &= \lambda U^{(0)\dagger}H'U^{(0)}U_I & (522) \\ &= \lambda H_I(t)U_I & (523) \end{aligned}$$

Tomonaga-Schwinger の方程式の解は逐次的に解いて、

$$\begin{aligned} U_I(t) &= 1 - \frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^t H_I(t_1)U_I(t_1)dt_1 & (524) \\ &= 1 - \frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^t dt_1 H_I(t_1) + \left(\frac{-i\lambda}{\hbar}\right)^2\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2 H_I(t_1)H_I(t_2) & (525) \\ &\quad + \cdots + \left(\frac{-i\lambda}{\hbar}\right)^n\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2\cdots\int_0^{t_{n-1}} dt_n H_I(t_1)H_I(t_2)\cdots H_I(t_n) + \cdots & (526) \end{aligned}$$

となる。つまり、

$$\begin{aligned} U_I(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} U_I^{(n)}(t) & (527) \\ & U_I^{(n)}(t) \equiv \left(\frac{-i\lambda}{\hbar}\right)^n\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2\cdots\int_0^{t_{n-1}} dt_n H_I(t_1)H_I(t_2)\cdots H_I(t_n) & (528) \end{aligned}$$

である。これを H' で書き換え、$U(t)$ に代入すれば、

$$\begin{aligned} U(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} U^{(n)}(t) & (529) \\ & U^{(n)}(t) \equiv U^{(0)}(t)\left(\frac{-i\lambda}{\hbar}\right)^n\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2\cdots\int_0^{t_{n-1}} dt_n & (530) \\ & \times U^{(0)\dagger}(t_1)H'(t_1)U^{(0)}(t_1)U^{(0)\dagger}(t_2)H'(t_2)U^{(0)}(t_2)\cdots U^{(0)\dagger}(t_n)H'(t_n)U^{(0)}(t_n) & (531) \end{aligned}$$

となる。時間順序積を用いて書けば、同じことだが

$$U_I(t) = T\exp\left(-\frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^t H_I(t')dt'\right) \tag{532}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i\lambda}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_0^t dt_1\cdots\int_0^t dt_n T(H_I(t_1)\cdots H_I(t_n)) \tag{533}$$

特に自由場のハミルトニアンが時間に依存しない場合、

$$H_0(t) = H_0$$

の場合、$U^{(0)}(t)$ は容易に求まる。

$$i\hbar\frac{\partial U^{(0)}(t)}{\partial t} = H_0 U^{(0)}(t), \qquad \longrightarrow \qquad U^{(0)}(t) = \mathrm{e}^{-\frac{iH_0}{\hbar}t} \tag{534}$$

$$< k \mid U(t) \mid m > \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} < k \mid U^{(n)}(t) \mid m > \tag{535}$$

最初の数項を書いておく。

$$< k \mid U^{(0)}(t) \mid m >= \mathrm{e}^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}\delta_{km}$$
$$< k \mid U^{(1)}(t) \mid m >= -\frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^t dt_1 \mathrm{e}^{-i\frac{E_k}{\hbar}(t-t_1)} < k \mid H'(t_1) \mid m > \mathrm{e}^{-i\frac{E_m}{\hbar}t_1}$$
$$< k \mid U^{(2)}(t) \mid m >= \left(-\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \mathrm{e}^{-i\frac{E_k}{\hbar}(t-t_1)}$$
$$\times \sum_n < k \mid H'(t_1) \mid n > \mathrm{e}^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t_1-t_2)} < n \mid H'(t_2) \mid m > \mathrm{e}^{-i\frac{E_m}{\hbar}t_2}$$

直接的な計算

Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial|\psi(t)>}{\partial t} = H|\psi(t)>$$

の解を H_0 の固有状態で展開する。

$$|\psi(t)>= \sum U(t)|m>= \sum a_n(t)\mathrm{e}^{-\frac{iE_n}{\hbar}t} \mid n>$$

Schrödinger 方程式に代入すると、

$$i\hbar\sum \dot{a}_n \mathrm{e}^{-\frac{iE_n}{\hbar}t} \mid n> + \sum a_n E_n \mid n> \mathrm{e}^{-\frac{iE_n}{\hbar}t} = \sum a_n(H_0 + \lambda H') \mid n> \mathrm{e}^{-\frac{iE_n}{\hbar}t}$$

ここで、$\mid n>$ が H_0 の固有状態であることを使うと、

$$i\hbar\sum \dot{a}_n \mathrm{e}^{-\frac{iE_n}{\hbar}t} \mid n>= \lambda\sum a_n H' \mid n> \mathrm{e}^{-\frac{iE_n}{\hbar}t}$$

$< k|$ を掛けると

$$\dot{a}_k(t) = -\frac{i\lambda}{\hbar}\sum_n < k \mid H' \mid n > a_n(t)\mathrm{e}^{i\omega_{kn}t}$$

ただし、

$$\omega_{kn} \equiv \frac{E_k - E_n}{\hbar}; \quad \dot{a}_n = 0, \quad t < 0$$

初期条件は

$$a_k(0) = \delta_{km}$$

だから、この解は

$$a_{k,m}(t) = \delta_{km} - \frac{i\lambda}{\hbar}\sum_n \int_0^t dt' a_{n,m}(t') < k \mid H'(t') \mid n > \mathrm{e}^{i\omega_{kn}t'}$$

という積分方程式で表せる。これを摂動で計算すると、

$$\begin{aligned}
a^{(0)}_{k,m}(t) &= \delta_{km} && (536)\\
a^{(1)}_{k,m}(t) &= -\frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^t dt_1 \mathrm{e}^{i\omega_{km}t_1} < k \mid H'(t_1) \mid m > && (537)\\
a^{(2)}_{k,m}(t) &= \left(-\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \sum_n \mathrm{e}^{i\omega_{kn}t_1} < k \mid H'(t_1) \mid n > && (538)\\
&\qquad \times \mathrm{e}^{i\omega_{nm}t_2} < n \mid H'(t_2) \mid m > && (539)\\
&\cdots && (540)
\end{aligned}$$

例. $\frac{\partial H'}{\partial t} = 0$ の場合

$$\begin{aligned}
a^{(1)}_{k,m}(t) &= -\frac{i\lambda}{\hbar} < k \mid H' \mid m > \int_0^t dt_1 \mathrm{e}^{i\omega_{km}t_1} && (541)\\
&= -\frac{i\lambda}{\hbar} < k \mid H' \mid m > \frac{\mathrm{e}^{i\omega_{km}t} - 1}{i\omega_{km}} && (542)\\
\mid a^{(1)}_{k,m}(t) \mid^2 &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |< k \mid H' \mid m >|^2 \frac{4\sin^2 \frac{1}{2}\omega_{km}t}{\omega^2_{km}} && (543)
\end{aligned}$$

主要な寄与：$\omega_{km} < \frac{2\pi}{t}$ の領域

$$\begin{aligned}
t \cdot (E^{(0)}_k - E^{(0)}_m) &\sim \hbar 2\pi && (544)\\
\Delta t \cdot \Delta E &\sim h && (545)
\end{aligned}$$

つまり、**時間・エネルギー不確定性関係**が得られる。典型的な例で、これらの量を評価してみる。

$$\hbar\omega_{km} \sim 1\mathrm{eV}, \quad t \sim \frac{1}{\omega_{km}} \sim 10^{-16}\mathrm{sec}$$

通常の測定時間では

$$t \gg 10^{-16}\mathrm{sec}$$

したがって、数学的な関係式

$$\lim_{t\to\infty}\frac{t}{\pi}\left(\frac{\sin xt}{xt}\right)^2 = \delta(x)$$

を使うと、

$$\begin{aligned} \frac{4\sin^2\frac{\omega_{km}t}{2}}{\omega_{km}^2} &\longrightarrow \pi\delta\left(\frac{E_k^{(0)}-E_m^{(0)}}{2\hbar}\right)t \quad (546)\\ &= 2\hbar\pi\delta(E_k^{(0)}-E_m^{(0)})t \quad (547)\end{aligned}$$

つまり、エネルギー保存則がでてくる。したがって遷移振幅の 2 乗は

$$\mid a_{k,m}^{(1)}(t)\mid^2 = \frac{2\pi}{\hbar}\lambda^2 \mid< k \mid H' \mid m >\mid^2 \delta(E_k^{(0)}-E_m^{(0)})t$$

だから、単位時間あたりの転移確率は $\lambda = 1$ とおいて

$$w_{km} = \frac{\mid a_{k,m}^{(1)}(t)\mid^2}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} \mid< k \mid H' \mid m >\mid^2 \delta(E_k^{(0)}-E_m^{(0)})$$

となる。これを **Fermi の黄金律 (golden rule)** という。

散乱の微分断面積

散乱現象を $(L\times L\times L)$ の有限領域内に閉じこめる。その理由は平面波の規格化に ∞ が現れないようにするためである。
平面波解の境界条件：

$$\begin{cases}\psi(x+L,y,z)=\psi(x,y,z)\\ \psi(x,y+L,z)=\psi(x,y,z)\\ \psi(x,y,z+L)=\psi(x,y,z)\end{cases}$$

$$\begin{cases}\mathrm{e}^{ik_xL}=1, & k_x=\frac{2\pi}{L}n_x, & n_x=0,\pm1,\pm2,\cdots\\ \mathrm{e}^{ik_yL}=1, & k_y=\frac{2\pi}{L}n_y, & n_y=0,\pm1,\pm2,\cdots\\ \mathrm{e}^{ik_zL}=1, & k_z=\frac{2\pi}{L}n_z, & n_z=0,\pm1,\pm2,\cdots\end{cases}$$

規格化：

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}}\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (548)\\ \int d^3\mathbf{r}\psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \quad (549)\end{aligned}$$

したがって、

$$\text{入射波}:\ \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}}\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},\quad \text{散乱波}:\ \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}}\mathrm{e}^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}},$$

と書ける。規格化は箱 L^3 の中に 1 粒子が存在している。golden rule より、

$$\begin{aligned} w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{\mid a_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(1)}(t)\mid^2}{t} &= \frac{2\pi}{\hbar}\mid< \mathbf{k}' \mid V(\mathbf{r}) \mid \mathbf{k} >\mid^2 \delta(E_{k'}^{(0)}-E_k^{(0)}) \quad (550)\\ < \mathbf{k}' \mid V(\mathbf{r}) \mid \mathbf{k} > &= \frac{1}{L^3}\int d^3\mathbf{r}\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (551)\end{aligned}$$

$\Delta E_{k'}$、$\Delta\Omega_{k'}$ について積分しよう。$\Delta^3\mathbf{k}'$ の中に含まれる状態数は

$$
\begin{aligned}
\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \Delta k'_x \Delta k'_y \Delta k'_z && (552)\\
&= \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \Delta^3\mathbf{p}' && (553)\\
&= \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 p'^2 \Delta p' \Delta\Omega_{k'} && (554)\\
&= \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \rho(E^{(0)}_{k'})\Delta E^{(0)}_{k'}\Delta\Omega_{k'} && (555)
\end{aligned}
$$

ただし、

$$\rho(E^{(0)}_{k'}) = p'^2 \frac{dp'}{dE^{(0)}_{k'}}$$

だが、これを**状態密度関数**という。したがって $\Delta E_{k'}$、$\Delta\Omega_{k'}$ について積分した単位時間あたりの遷移確率 $\Delta w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ は

$$
\begin{aligned}
\Delta w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} &= \sum w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z && (556)\\
&= \frac{2\pi}{\hbar}\int |< \mathbf{k}' \mid V(\mathbf{r}) \mid \mathbf{k} >|^2 \, \delta(E^{(0)}_{k'} - E^{(0)}_{k}) \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \rho(E^{(0)}_{k'}) dE^{(0)}_{k'} \Delta\Omega_{k'} && (557)\\
&= \frac{2\pi}{\hbar} |< \mathbf{k}' \mid V(\mathbf{r}) \mid \mathbf{k} >|^2 \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \rho(E^{(0)}_{k}) \Delta\Omega_{k'} && (558)
\end{aligned}
$$

単位体積中に $\frac{1}{L^3}$ 個の規格化なので、フラックスは $\frac{v}{L^3}$ となる。したがって、微分散乱断面積は

$$
\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{\frac{dw_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}}{d\Omega_{k'}}}{\frac{v}{L^3}} && (559)\\
&= \frac{2\pi}{\hbar v} |< \mathbf{k}' \mid V(\mathbf{r}) \mid \mathbf{k} >|^2 \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \rho(E^{(0)}_{k}) L^3 && (560)\\
&= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|\int d^3\mathbf{r} V(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}\right|^2 && (561)
\end{aligned}
$$

となる。これは Born 近似による結果と一致している。

不安定粒子・状態の寿命とエネルギーの不確定性

　時間依存性は

$$\psi \sim \mathrm{e}^{-iE_0 t/\hbar}\mathrm{e}^{-\Gamma t/2\hbar}, \quad t > 0$$

したがって

$$|\,\psi\,|^2 \sim \mathrm{e}^{-\Gamma t/\hbar}, \quad \Delta t \sim \frac{\hbar}{\Gamma}$$

また、このフーリェ変換は

$$
\begin{aligned}
\tilde{\psi}(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\frac{iEt}{\hbar}} \psi(t) dt && (562)\\
&\sim \int_{0}^{\infty} \mathrm{e}^{i(E-E_0+i\frac{\Gamma}{2})t/\hbar} dt && (563)\\
&= \frac{i\hbar}{E - E_0 + i\frac{\Gamma}{2}} && (564)
\end{aligned}
$$

したがって、エネルギー面での振る舞いは規格化して

$$
\begin{aligned}
|\,\tilde{\psi}(E)\,|^2 &\sim \frac{\frac{\hbar^2}{4}}{(E-E_0)^2+\frac{\Gamma^2}{4}} && (565) \\
\Delta E &\sim \Gamma && (566)
\end{aligned}
$$

つまり、寿命とエネルギーの不確定性関係

$$\Delta t\,\Delta E \sim \hbar$$

第１２章　電磁場と荷電粒子の相互作用

$\frac{\partial H'}{\partial t} \neq 0$ の場合

i) 原子による光の吸収・放出：輻射場が粒子系に影響を与える。

ii) 自然放出：粒子系が輻射場に影響を与える。

　これらの現象を正しく記述するためには、粒子系、輻射場、いずれも粒子的に扱わなければならない。つまり、場の量子論で取り扱う必要がある。しかしここでは近似的に、対応論的に取り扱う。すなはち、輻射場は古典的で量子化せず、外場的に取り扱う。

準備：荷電粒子と電磁場との相互作用。
粒子のハミルトニアン：

$$H_0 = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + V$$

電磁場のポテンシャル（MKSA 有理系）：

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \qquad \phi(\mathbf{r}, t)$$

粒子と電磁場のハミルトニアン：電荷 e

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

Schrödinger 方程式：

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{ie\hbar}{m}\mathbf{A}\cdot\nabla + \frac{ie\hbar}{2m}(\nabla\cdot\mathbf{A}) + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2 + e\phi + V\right]\psi$$

ここで電磁場にはゲージの選び方の任意性があることに注意しよう。
Maxwell 方程式：

$$\begin{cases} \nabla\times\mathbf{E} + \frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad \cdots(1) & \nabla\times\mathbf{H} = \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{i} \quad \cdots(2) \\ \nabla\cdot\mathbf{D} = \rho \quad \cdots(3) & \nabla\cdot\mathbf{B} = 0 \quad \cdots(4) \end{cases}$$

$$\mathbf{D} = \epsilon_0\mathbf{E}, \qquad \mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H}$$

(4) は

$$\mathbf{B} = \nabla\times\mathbf{A}$$

と置くことによって満たされる。(1) は

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}$$

と置くことによって満たされる。残りの (2) と (3) は順に

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\mathbf{A} - \nabla\left(\nabla\cdot\mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = -\mu_0\mathbf{i} \tag{5}$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\phi + \frac{\partial}{\partial t}\left(\nabla\cdot\mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{6}$$

ただし、

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}$$

ゲージ変換の自由度

$$\begin{cases} \mathbf{A} & \longrightarrow & \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi \\ \phi & \longrightarrow & \phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t} \end{cases}$$

この変換に対し、(5) と (6) は不変であり、また

$$\mathbf{E}' = \mathbf{E}, \qquad \mathbf{B}' = \mathbf{B}$$

つまり、場の関係式は χ に依存しない。そこで、このゲージ関数 χ を任意に選べる自由度がある。

i)Lorentz ゲージ：

Lorentz 条件 $\nabla\cdot\mathbf{A}' + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi'}{\partial t} = 0$ を満たすようにとる。つまり、

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\chi = -\left(\nabla\cdot\mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)$$

ii)Coulomb ゲージ（放射ゲージ）：

$\nabla\cdot\mathbf{A}' = 0$ を満たすようにとる。つまり、

$$\nabla^2\chi = -\nabla\cdot\mathbf{A}$$

ここでは Coulomb ゲージをとる（$\nabla\cdot\mathbf{A}' = 0$；横波)。

$$\mathbf{B}' = \nabla\times\mathbf{A}' \tag{567}$$

$$\mathbf{E}' = -\nabla\phi' - \frac{\partial\mathbf{A}'}{\partial t} \tag{568}$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\mathbf{A}' = -\mu_0\mathbf{i} + \frac{1}{c^2}\nabla\frac{\partial\phi'}{\partial t} \tag{569}$$

$$\nabla^2\phi' = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{570}$$

しかし、ここでさらにゲージ変換しても、場の関係式はもう変わらない。その理由は以下の通り。

$$\mathbf{A}'' = \mathbf{A}' + \nabla\chi', \quad \phi'' = \phi' - \frac{\partial\chi'}{\partial t}$$

とさらにゲージ変換する。ゲージ条件は

$$0 = \nabla\cdot\mathbf{A}'' = \nabla\cdot(\mathbf{A}' + \nabla\chi')$$

だから、ゲージ関数は

$$\nabla^2\chi' = 0$$

を満たさねばならない。無限大の空間領域にわたりこの方程式を満たす有界な χ' は

$$\chi' = \mathrm{const}$$

つまり、

$$\mathbf{A}'' = \mathbf{A}', \qquad \phi'' = \phi'$$

真空の場合：

$$\mathbf{i} = 0, \qquad \rho = 0$$

だから、以下では (') をとって

$$\nabla^2 \phi = 0 \ \longrightarrow \phi = 0$$

したがって、解くべき方程式は

$$\begin{cases} (\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2})\mathbf{A} = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \end{cases}$$

電磁場のエネルギー密度の流れ（**Poynting vector**）：

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} = \mathbf{E} \times \frac{\mathbf{B}}{\mu_0}$$

Poynting vector をポテンシャルで表そう。

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \qquad \mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0}\nabla \times \mathbf{A}$$

ポテンシャルを平面波で表示する。

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} + \mathrm{c.c.}$$

$$\mathrm{div}\, \mathbf{A} = 0 \ \longrightarrow \ \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_0 = 0$$

$$\begin{cases} \mathbf{E} = i\omega \mathbf{A}_0 \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} + \mathrm{c.c.} \\ \mathbf{H} = \frac{i}{\mu_0}\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0 \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} + \mathrm{c.c.} \end{cases}$$

したがって、Poynting vector は時間で平均して

$$\mathbf{S} = \frac{\omega}{\mu_0}\left[\mathbf{A}_0 \times (\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0^*) + \mathbf{A}_0^* \times (\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0)\right]$$

$\mathbf{A}_0 \times (\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0)$ や $\mathbf{A}_0^* \times (\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0^*)$ の項は平均すると消える。また $\mathbf{A}_0 \times (\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0^*) = |\mathbf{A}_0|^2 \mathbf{k}$ なので

$$\mathbf{S} = \frac{2\omega^2}{\mu_0 c}\hat{e}_k \mid \mathbf{A}_0 \mid^2$$

となる。

第１３章　原子による光の吸収・放出 (半古典論)

i) 原子による光の吸収・放出：

摂動論を展開する。Coulomb gauge では Schrödinger 方程式は

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= (H_0+H')\psi && (571)\\
H_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r}) && (572)\\
H' &= \frac{ie\hbar}{m}\mathbf{A}\cdot\nabla && (573)
\end{aligned}
$$

なので、遷移振幅は

$$
a^{(1)}_{km}(t)=-\frac{H'_{km}}{\hbar}\frac{\mathrm{e}^{i(\omega_{km}-\omega)t}-1}{\omega_{km}-\omega}-\frac{H''_{km}}{\hbar}\frac{\mathrm{e}^{i(\omega_{km}+\omega)t}-1}{\omega_{km}+\omega}
$$

となる。ただし

$$
H'_{km}=\frac{ie\hbar}{m}\int u_k^*\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{A}_0\cdot\nabla u_m d^3\mathbf{r},\quad (E_k\sim E_m+\hbar\omega)
$$

$$
H''_{km}=\frac{ie\hbar}{m}\int u_k^*\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{A}_0^*\cdot\nabla u_m d^3\mathbf{r},\quad (E_k\sim E_m-\hbar\omega)
$$

輻射場の強度と電磁ポテンシャルの振幅との関係は、原理的には放射電磁波のスペクトルは連続となるので、単位角振動数あたりのエネルギー密度を $I(\omega)$ とすると、

$$
\begin{aligned}
I(\omega)\Delta\omega &= \mid\mathbf{S}\mid && (574)\\
&= \frac{2\omega^2}{\mu_0 c}\mid\mathbf{A}_0\mid^2 && (575)
\end{aligned}
$$

書き換えれば

$$
\mid\mathbf{A}_0\mid^2=\frac{1}{2c\epsilon_0\omega^2}I(\omega)\Delta\omega
$$

また、以下では

$$
\mathbf{A}_0\cdot\nabla=\mid\mathbf{A}_0\mid\nabla_A
$$

と書こう。ここで ∇_A は偏極方向についての微分である。

i)$E_k\sim E_m+\hbar\omega$ の場合：

$$
\begin{aligned}
\mid a^{(1)}_{km}(t)\mid^2 &= \sum_\omega\frac{4\mid H'_{km}\mid^2\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)t}{\hbar^2(\omega_{km}-\omega)^2} && (576)\\
&= \sum_\omega\frac{2e^2}{m^2c\epsilon_0\omega^2}I(\omega)\Delta\omega\left|\int u_k^*\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\nabla_A u_m d^3\mathbf{r}\right|^2\frac{\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)t}{(\omega_{km}-\omega)^2} && (577)
\end{aligned}
$$

ここで

$$
\frac{\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)t}{(\omega_{km}-\omega)^2}\longrightarrow\frac{\pi}{2}t\delta(\omega_{km}-\omega),\quad t\to\infty
$$

であることに注意すれば、単位時間あたりの遷移確率は

$$\frac{1}{t} \mid a_{km}^{(1)}(t) \mid^2 \longrightarrow \frac{\pi e^2}{\epsilon_0 m^2 \omega_{km}^2} \int d\omega \delta(\omega_{km} - \omega) I(\omega) \left| \int u_k^* \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla_A u_m d^3\mathbf{r} \right|^2 \tag{578}$$

$$= \frac{\pi e^2}{c\epsilon_0 m^2 \omega_{km}^2} I(\omega_{km}) \left| \int u_k^* \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla_A u_m d^3\mathbf{r} \right|^2, \quad k = \frac{\omega_{km}}{c} \tag{579}$$

ii)$E_{k'} \sim E_m - \hbar\omega$ の場合：

$$\frac{1}{t} \mid a_{k'm}^{(1)}(t) \mid^2 \longrightarrow \frac{\pi e^2}{c\epsilon_0 m^2 \omega_{mk'}^2} I(\omega_{mk'}) \left| \int u_{k'}^* \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla_A u_m d^3\mathbf{r} \right|^2, \quad k = \frac{\omega_{mk'}}{c}$$

$E_k \sim E_m + \hbar\omega$	$E_{k'} \sim E_m - \hbar\omega$
光の吸収	光の誘導放出

多重極展開

$$\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 1 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + \frac{1}{2!}(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})^2 + \cdots$$

ここで、典型的な原子のエネルギー準位と広がりを調べてみる。

$$\hbar\omega_0 \sim E_{\mathrm{Ryd}} = \frac{mc^2\alpha^2}{2}, \qquad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} \tag{580}$$

$$a_B \sim \frac{\lambda_c}{\alpha} = \frac{1}{\alpha}\frac{\hbar}{mc} \tag{581}$$

変数の大きさを評価すると

$$\mid \mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \mid \sim \frac{\omega_0}{c} a_B = \frac{\alpha}{2} \ll 1$$

なので、主要な寄与は順に第 1 項、第 2 項 $\cdots$ となる。それらを、双極子、4 重極子という。

双極子近似

この場合

$$\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sim 1$$

と近似する。すると

$$\begin{aligned}\int u_k^*\nabla u_m d^3\mathbf{r} &= \frac{i}{\hbar}\int u_k^*\mathbf{p}u_m d^3\mathbf{r} &(582)\\ &= \frac{im}{\hbar}\int u_k^*\frac{d\mathbf{r}}{dt}u_m d^3\mathbf{r} &(583)\\ &= \frac{im}{\hbar}\frac{i}{\hbar}\int u_k^*[H_0,\mathbf{r}]u_m d^3\mathbf{r} &(584)\\ &= -\frac{m}{\hbar}\omega_{km}\int u_k^*\mathbf{r}u_m d^3\mathbf{r} &(585)\\ &= -\frac{m}{\hbar}\omega_{km}(\mathbf{r})_{km} &(586)\end{aligned}$$

ここで

$$u_k^*[H_0,\mathbf{r}]u_m = (E_k - E_m)\mathbf{r}$$

を使った。したがって、単位時間当たりの光の吸収・放出は

$$\frac{\pi e^2}{c\hbar^2\epsilon_0}I(\omega_{km}) \mid (r_A)_{km} \mid^2$$

ここで、添字 A は偏極方向成分を意味する。

行列要素の主要部分は双極子能率 $e\mathbf{r}$ の期待値である。偏極方向と座標ベクトルとのなす角を θ とすると、

$$(r_A)_{km} = \mid (\mathbf{r})_{km} \mid \cos\theta$$

上の式に代入すると、

$$\frac{\pi e^2}{c\hbar^2\epsilon_0}I(\omega_{km}) \mid (\mathbf{r})_{km} \mid^2 \cos^2\theta$$

となる。角度について平均すれば、

$$\frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\cos^2\theta = \frac{1}{3}$$

したがって、最終的な表現は 2 つの偏光状態をあわせて

$$\frac{2\pi e^2}{3\hbar^2 c\epsilon_0}I(\omega_{km}) \mid (\mathbf{r})_{km} \mid^2$$

となる。

自然放出と対応論的輻射論

古典論

振動荷電粒子

i) 振動する外部電磁場中にある場合：

電磁場にエネルギーを与える。$\cdots$ 光の放出

電磁場からエネルギーを貰う。$\cdots$ 光の吸収

ii) 外部電磁場がない場合：

自発的に光を放出

本来は光を量子化しなければならない。⟶ 場の量子論
ここでは対応論的に扱う。
古典的電磁場 ⟶ 古典的な輻射の公式 ⟶ 量子論で置き換える。

$$\begin{cases} \mathbf{H}(\mathbf{r},t) & = \mathbf{H}(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-i\omega t} & +\mathrm{c.c.} \\ \mathbf{E}(\mathbf{r},t) & = \mathbf{E}(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-i\omega t} & +\mathrm{c.c.} \\ \mathbf{i}(\mathbf{r},t) & = \mathbf{i}(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-i\omega t} & +\mathrm{c.c.} \end{cases}$$

$\mathbf{i}=0$ の領域では

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\frac{1}{\epsilon_0\omega}\nabla\times\mathbf{H}(\mathbf{r})$$

その理由は以下のとおり：

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + c.c., \quad \mathbf{A}_0\cdot\mathbf{k}=0 \tag{587}$$

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} = i\omega\mathbf{A}_0\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + c.c. \tag{588}$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0}\nabla\times\mathbf{A} = \frac{i}{\mu_0}\mathbf{k}\times\mathbf{A}_0\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + c.c. \tag{589}$$

$$\mathbf{A}_0 = -\frac{1}{k^2}(\mathbf{k}\times(\mathbf{k}\times A_0)) \tag{590}$$

$$\mathbf{E} = -\frac{i\omega}{k^2}(\mathbf{k}\times(\mathbf{k}\times A_0))\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + c.c. \tag{591}$$

$$= -\frac{\omega}{k^2}\mu_0\mathbf{k}\times\mathbf{H} \tag{592}$$

マックスウェル方程式 (1)、(4) より、

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\mathbf{H}(\mathbf{r},t) = -\nabla\times\mathbf{i}(\mathbf{r},t) \tag{593}$$

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\mathbf{H}(\mathbf{r}) = -\nabla\times\mathbf{i}(\mathbf{r}), \quad k=\frac{\omega}{c} \tag{594}$$

この解は

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi}\int\frac{\nabla_{\mathbf{r}'}\times\mathbf{i}(\mathbf{r}')}{\mid\mathbf{r}-\mathbf{r}'\mid}\mathrm{e}^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3\mathbf{r}' \tag{595}$$

$$\longrightarrow \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{4\pi r}\int\nabla_{\mathbf{r}'}\times\mathbf{i}(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{-ikr'\cos\theta}d^3\mathbf{r}',\ r\to\infty \tag{596}$$

$\mathbf{r}$ を z 軸方向に選ぶ。

$$H_x \longrightarrow \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{4\pi r}\int\left(\frac{\partial i_z}{\partial y'} - \frac{\partial i_y}{\partial z'}\right)\mathrm{e}^{-ikz'}d^3\mathbf{r}' \tag{597}$$

$$= \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{4\pi}\left[\int dx'dz'\mathrm{e}^{-ikz'}i_z\Big|_{y'=-\infty}^{y'=\infty} - \int dx'dy'\mathrm{e}^{-ikz'}i_y\Big|_{z'=-\infty}^{z'=\infty}\right. \tag{598}$$

$$\left. -ik\int i_y\mathrm{e}^{-ikz'}d^3\mathbf{r}'\right] \tag{599}$$

$$= -i\frac{k\mathrm{e}^{ikr}}{4\pi r}\int i_y(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{-ikz'}d^3\mathbf{r}' \tag{600}$$

$$
\begin{aligned}
H_y &\longrightarrow i\frac{k\mathrm{e}^{ikr}}{4\pi r}\int i_x(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{-ikz'}d^3\mathbf{r}' &(601)\\
H_z &\longrightarrow 0 &(602)\\
E_x &\longrightarrow i\frac{k\mathrm{e}^{ikr}}{4\pi\epsilon_0 cr}\int i_x(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{-ikz'}d^3\mathbf{r}' &(603)\\
E_y &\longrightarrow i\frac{k\mathrm{e}^{ikr}}{4\pi\epsilon_0 cr}\int i_y(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{-ikz'}d^3\mathbf{r}' &(604)\\
E_z &\longrightarrow 0 &(605)
\end{aligned}
$$

測定されるポイティング・ベクトルは輻射場を時間平均して、

$$
\begin{aligned}
\mathbf{S} &= \overline{\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\times\mathbf{H}(\mathbf{r},t)} &(606)\\
&\longrightarrow 4\mathrm{Re}\mathbf{E}(\mathbf{r})\times\mathbf{H}^*(\mathbf{r}) &(607)
\end{aligned}
$$

成分で書けば、

$$
\begin{aligned}
S_x &= S_y = 0 &(608)\\
S_z &= \frac{k^2}{4\pi^2 r^2 c\epsilon_0}\left(\left|\int i_x(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{-ikz'}d^3\mathbf{r}'\right|^2+\left|\int i_y(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{-ikz'}d^3\mathbf{r}'\right|^2\right) &(609)
\end{aligned}
$$

電磁波が横波であることを考えれば、動径ベクトル $\mathbf{r}$ と伝搬する方向、$\mathbf{k}$ は一致している。したがって、一般には動径方向に

$$
S_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{4\pi^2 r^2 c\epsilon_0}\left|\int i_\perp(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}d^3\mathbf{r}'\right|^2
$$

となる。ここで $i_\perp(\mathbf{r}')$ は $\mathbf{k}$ に垂直成分である。

双極子放射の場合を考えよう。

$$
\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}\sim 1,\qquad |\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'\,|\ll 1
$$

したがって

$$
S_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{\pi^2 r^2 c\epsilon_0}\left|\int i_\perp(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}'\right|^2
$$

ここで、

$$
\mathbf{I}_0 = \int \mathbf{i}(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}'
$$

とおき、$r=$一定で積分すれば、古典論の結果は

$$
\int_{r:\mathrm{fixed}} S_{\mathbf{k}} r^2\sin\theta d\theta d\phi = \frac{2}{3}\frac{k^2}{c\epsilon_0}\,|\,\mathbf{I}_0\,|^2
$$

となる。ここで、対応論的な扱いを導入する。

$$
\mathbf{i}\longrightarrow \frac{ie\hbar}{m}u_n^*(\mathbf{r})\nabla u_k(\mathbf{r})
$$

と置き換えると、

$$
\begin{aligned}
\mathbf{I}_0 &= \frac{ie\hbar}{m}\int u_n^*(\mathbf{r})\nabla u_k(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} &(610)\\
&= -ie\omega_{nk}(\mathbf{r})_{nk} &(611)
\end{aligned}
$$

となる。これをポインティング・ベクトルに代入し、光子のエネルギーで割れば、放出光子数は

$$\frac{S_{\mathbf{k}}}{\hbar\omega_{kn}} = \frac{2k^2}{3\pi c\epsilon_0} e^2 \omega_{kn}^2 \mid (\mathbf{r})_{nk} \mid^2 / \hbar\omega_{kn} \tag{612}$$

$$= \frac{2e^2\omega_{kn}^3}{3\hbar\pi c^3\epsilon_0} |(\mathbf{r})_{nk}|^2 \tag{613}$$

となる。ここで、$\mid \omega_{kn} \mid = kc$ を使った。

Planck 分布式

黒体輻射で光子の放射と吸収が温度 T で熱平衡に達しているとして Planck 分布式を導出しよう。

放射：

$$\left(\frac{2\pi e^2}{3\hbar^2 c\epsilon_0} I(\omega) \mid (\mathbf{r})_{kn} \mid^2 + \frac{2e^2\omega^3}{3\pi\hbar c^3\epsilon_0} \mid (\mathbf{r})_{kn} \mid^2 \right) \mathrm{e}^{-\frac{E_k}{kT}}$$

吸収：

$$\frac{2\pi e^2}{3\hbar^2 c\epsilon_0} I(\omega) \mid (\mathbf{r})_{kn} \mid^2 \mathrm{e}^{-\frac{E_n}{kT}}$$

平衡状態にあるので、

$$\mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \left(\frac{\pi^2}{\hbar} I(\omega) + \frac{\omega^3}{c^2} \right) = \frac{\pi^2}{\hbar} I(\omega)$$

となり、輻射の公式が得られる。

$$I(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^2 (\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1)}$$

選択則

双極子遷移が起こる条件は

$$\mid (\mathbf{r})_{kn} \mid \neq 0$$

この条件を球座標で表現しよう。

$$\begin{aligned} z &= r\cos\theta && (614) \\ x \pm iy &= r\sin\theta \mathrm{e}^{\pm i\phi} && (615) \end{aligned}$$

したがって、各成分の行列要素は $n=(l',\, m'),\ k=(l,\, m)$ として

$$\begin{aligned} <z>_{kn} &= \int u_k^* r\cos\theta u_n d^3\mathbf{r} && (616) \\ &\propto \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta Y_l^{m*}(\theta,\phi)\cos\theta Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi) && (617) \\ &\propto \int_0^{2\pi} d\phi \mathrm{e}^{i(m'-m)\phi} \int_{-1}^{1} dw w P_l^m(w) P_{l'}^{m'}(w) && (618) \end{aligned}$$

ϕ の積分から、$2\pi\delta_{mm'}$ がでてくる。また、関係式

$$wP_l^m(w) = \frac{l+\mid m\mid}{2l+1}P_{l-1}^m + \frac{l-\mid m\mid +1}{2l+1}P_{l+1}^m$$

と、ルジャンドル関数の直交性を使えば

$$<z>_{kn} \propto\ \delta_{mm'}\delta_{l',l\pm1}$$

を得る。同様に、

$$\begin{aligned} <x\pm iy>_{kn} &= \int u_k^* r\sin\theta \mathrm{e}^{\pm i\phi} u_n d^3\mathbf{r} && (619) \\ &\propto \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta Y_l^{m*}(\theta,\phi)\sin\theta \mathrm{e}^{\pm i\phi} Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi) && (620) \\ &\propto \int_0^{2\pi} d\phi \mathrm{e}^{i(m'-m\pm1)\phi} \int_{-1}^{1} dw\sqrt{1-w^2} P_l^m(w) P_{l'}^{m'}(w) && (621) \end{aligned}$$

ϕ の積分から、$2\pi\delta_{m',m\mp1}$ がでてくる。関係式

$$\sqrt{1-w^2}P_l^m(w) = \left\{ \begin{array}{l} -\frac{(l-|m|+2)(l-|m|+1)}{2l+1}P_{l+1}^{m-1} + \frac{(l+|m|)(l+|m|-1)}{2l+1}P_{l-1}^{m-1} \\ \frac{1}{2l+1}P_{l+1}^{m+1} - \frac{1}{2l+1}P_{l-1}^{m+1} \end{array} \right.$$

を使えば、

$$<x\pm iy>_{kn} \propto\ \delta_{m',m\mp1}\delta_{l',l\pm1}$$

を得る。結果をまとめると、

許容遷移

$$\begin{array}{rcc} (z)_{kn}\neq 0 & m'=m & l'=l\pm1 \\ (x+iy)_{kn}\neq 0 & m'=m-1 & l'=l\pm1 \\ (x-iy)_{kn}\neq 0 & m'=m+1 & l'=l\pm1 \end{array}$$

これら以外は禁止転移

この物理的背景は

$$V(\mathbf{r}) = V(r), \qquad \text{球対称}$$

の場合、固有関数は

$$u(\mathbf{r}) = R(r)Y_l^m(\theta,\phi)$$

ここで、$Y_l^m(\theta,\phi)$ は回転群の表現。しかるに遷移を起こす演算子は

$$\cos\theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_1^0, \quad \mathrm{e}^{\pm i\phi}\sin\theta = \pm\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_1^{\pm 1}$$

なので、Y_l^m のかけ算、つまり角運動量の合成から選択則がでる。

(参考)

spectroscopy:

$l=0$			
1	s	:	sharp
2	p	:	principal
3	d	:	diffuse
4	f	:	fundamental

原子スペクトルの自然幅

電荷を持つ振動子 $\longrightarrow$ 電磁波放出 $\longrightarrow$ エネルギー散逸

この場合の波動関数の時間依存性は

$$\psi(t) \sim \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\gamma t}\mathrm{e}^{-i\omega_0 t}$$

このフーリェ成分は

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-i(\omega_0 - i\frac{\gamma}{2})t}\mathrm{e}^{i\omega t}dt \sim \frac{1}{(\omega-\omega_0)+i\frac{\gamma}{2}}$$

$$\text{強度} \propto \frac{1}{(\omega-\omega_0)^2+\frac{\gamma^2}{4}}$$

γ： **自然幅**

$$\begin{aligned}
\text{自然幅} &\Longrightarrow \text{「古典的電荷振動子のエネルギー減少率」} \\
&= \text{「励起状態にある確率の減少率」} \\
&= \tfrac{2e^2\omega_{kn}^3}{3\pi\hbar c^3\epsilon_0}|(\mathbf{r})_{kn}|^2
\end{aligned}$$

したがって、ω_{kn} との比をとれば

$$\frac{\gamma}{\omega_{kn}} = \frac{2e^2k^2}{3\pi\hbar c\epsilon_0} \mid (\mathbf{r})_{kn} \mid^2 \sim 10^{-6}$$

となり、これより原子の双極子遷移によるスペクトル線はハッキリした輪郭を持つことが分かるが、それを原子の双極子遷移線という。

第１４章　その他の話題
タム・ダンコフの方法

有限系で行われる有効な方法である。

$$H = H_0 + H_1 \tag{622}$$
$$H_0 = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 \\ 0 & \epsilon_2 \end{pmatrix} \tag{623}$$
$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & v \\ v^* & 0 \end{pmatrix} \tag{624}$$

固有方程式は

$$(H_0 + H_1) \mid \psi >= E \mid \psi >, \qquad \mid \psi >= \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

行列で書き直せば

$$\begin{pmatrix} \epsilon_1 - E & v \\ v^* & \epsilon_2 - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

非自明解の存在条件

$$\begin{vmatrix} \epsilon_1 - E & v \\ v^* & \epsilon_2 - E \end{vmatrix} = 0$$

したがって固有値は

$$E = \frac{1}{2}\left\{(\epsilon_1 + \epsilon_2) \pm \sqrt{(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 + 4 \mid v \mid^2}\right\}$$

となる。摂動では

$$\begin{cases} E_1 = \epsilon_1 + \frac{|v|^2}{\epsilon_1 - \epsilon_2} \\ E_2 = \epsilon_2 + \frac{|v|^2}{\epsilon_2 - \epsilon_1} \end{cases}$$

$\frac{|v|}{|\epsilon_1 - \epsilon_2|} \ll 1$ のときは厳密解と近似的に等しい。しかしながら、$\epsilon_1 \to \epsilon_2$ のときは無摂動系のエネルギーが縮退し、摂動論は破綻する。

変分法

波動関数 ψ、ϕ の汎関数

$$F[\psi, \phi] =< \phi \mid H \mid \psi > -\lambda < \phi \mid \psi >$$

を考えてみよう。ϕ、ψ で変分すると、

$$\frac{\delta F}{\delta \phi} = 0 \quad \longrightarrow \quad H \mid \psi >= \lambda \mid \psi > \tag{625}$$
$$\frac{\delta F}{\delta \psi} = 0 \quad \longrightarrow \quad < \phi \mid H = \lambda < \phi \mid \tag{626}$$

ハミルトニアンはエルミートだから、後者は

$$H \mid \phi >= \lambda^* \mid \phi >$$

となる。つまり、ハミルトニアンがエルミートであるとき、変分関数が停留値をとることを仮定すれば、固有値と変分関数について、

$$\lambda = \lambda^*, \qquad | \psi >=| \phi >$$

となることが分かる。

定理

$$H = H^\dagger, \qquad E_0: \text{ 最低固有値} \qquad \Longrightarrow$$

$$\text{for } \forall | \psi >, \qquad E_0 \le \frac{< \psi | H | \psi >}{< \psi | \psi >}$$

証明

$$H | \psi_n >= E_n | \psi_n >$$

としよう。期待値を固有関数で評価すると、

$$\begin{aligned}
< \psi | H | \psi > &= < \psi | H \sum_n | \psi_n >< \psi_n | \psi > && (627)\\
&= \sum_n E_n < \psi | \psi_n >< \psi_n | \psi > && (628)\\
&\ge E_0 \sum_n |< \psi | \psi_n >|^2 && (629)\\
&= E_0 |< \psi | \psi >| && (630)
\end{aligned}$$

それでは誤差を評価してみよう。いま基底状態からオーダー ϵ で試行波動関数が誤差を含むとしよう。

$$\begin{aligned}
| \psi > &= | \psi_0 > +\epsilon | \psi_1 > && (631)\\
\text{ただし、} \qquad & < \psi_0 | \psi_0 >=< \psi_1 | \psi_1 >= 1 && (632)\\
& H | \psi_0 >= E_0 | \psi_0 > && (633)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
< H > &= \frac{< \psi | H | \psi >}{< \psi | \psi >} && (634)\\
&= E_0 + \epsilon^2 \frac{< \psi_1 | H | \psi_1 > -E_0}{1 + 2\epsilon \mathrm{Re} < \psi_1 | \psi_0 > +\epsilon^2} && (635)
\end{aligned}$$

つまり、

$$\begin{cases} \text{波動関数が} & \epsilon \text{のオーダーの誤差} \\ < H > \text{は} & \epsilon^2 \text{のオーダーの誤差} \end{cases}$$

次に基底状態以外にも適用できる誤差評価をしてみよう。

$$H | \psi_i >= E_i | \psi_i >$$

試行波動関数を $\mid \psi >$, $< \psi \mid \psi >= 1$ としよう。近似値

$$\Lambda =< \psi \mid H \mid \psi >$$

の誤差は、次の関数のノルムをとることで評価できる。

$$\begin{aligned} \mid R > &\equiv (H - \Lambda) \mid \psi > && (636) \\ < R \mid R > &= < \psi \mid (H - \Lambda)^2 \mid \psi > && (637) \\ &= < \psi \mid (H - \Lambda) \sum_i \mid \psi_i >< \psi_i \mid (H - \Lambda) \sum_j \mid \psi_j >< \psi_j \mid \psi > && (638) \\ &= \sum_i \mid < \psi \mid \psi_i > \mid^2 (E_i - \Lambda)^2 && (639) \end{aligned}$$

ここで、近似値 Λ に一番近い固有値を E_k としよう。そのとき、

$$\begin{aligned} < R \mid R > &\geq \sum_i \mid < \psi \mid \psi_i > \mid^2 (E_k - \Lambda)^2 && (640) \\ &= (E_k - \Lambda)^2 && (641) \end{aligned}$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned} \Lambda - \Delta \leq E_k \leq \Lambda + \Delta && (642) \\ E_k - \Delta \leq \Lambda \leq E_k + \Delta && (643) \end{aligned}$$

つまり、

$$E_k = \Lambda, \qquad \text{誤差} = \pm\Delta, \qquad \Delta = \sqrt{< R \mid R >}$$

となる。

Schwinger の変分法（位相のずれ）

散乱波のしたがう Schrödinger 方程式

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR_l}{dr}) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r} - U(r)\right] R_l = 0$$

解の形とその漸近形：

$$R_l(r) = j_l(kr) + \chi_l(r) \longrightarrow j_l(kr) - \tan\delta_l\, n_l(kr), \quad r \to \infty$$

χ に対する方程式：

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\chi_l}{dr}\right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r}\right]\chi_l = U(r)R_l$$

これを Green 関数を使って解く。

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d}{dr}) + k^2 - \frac{l(l+1)}{r}\right] G(r,r') = \frac{\delta(r-r')}{r'^2}$$

ここで、右辺の分母は、球座標における体積要素の同じ因子を消すために導入してある。この解は

$$G(r,r') = kj_l(kr_<)n_l(kr_>)$$

したがって、Schrödinger 方程式の解は

$$\chi_l = \int_0^\infty G(r,r')U(r')R_l(r')r'^2 dr'$$

を使って

$$R_l(r) = j_l(kr) + \int_0^\infty G(r,r')U(r')R_l(r')r'^2 dr'$$

となる。積分範囲は観測点 r に比べて原点に近いので、$r' < r$ だから

$$R_l(r) \to j_l(kr) + kn_l(kr)\int_0^\infty j_l(r')U(r')R_l(r')r'^2 dr'$$

したがって、位相のずれは

$$\tan\delta_l = -k\int_0^\infty j_l(r')U(r')R_l(r')r'^2 dr'$$

となる。ここで、変分形式を作るときに問題となる点を挙げよう。
問題点：

i)　$R_l(r)$ の具体形はポテンシャル内のみでよい。
ii) $R_l(r)$ の規格化に依存しない形にしたい。
iii)$R_l(r)$ の変分について極値を取る形にしたい。

i) についてはポテンシャルとの積で書かれているので、問題ない。
ii) と iii) を満たす形式を探すとそれは以下のようなもの：

$$\tan\delta_l\left[\int_0^\infty R_l^2(r)U(r)r^2 dr \quad - \quad \int_0^\infty\int_0^\infty R_l(r)U(r)G(r,r')U(r')R_l(r')r^2 dr r'^2 dr'\right] \tag{644}$$

$$= \quad -k[\int_0^\infty j_l(kr)U(r)R_l(r)r^2 dr]^2 \tag{645}$$

この公式に変分法を適用できる証明：
いま、解 R_l を変分させたとき、$\tan\delta_l$ が極値をとることを示そう。そこで、

$$R_l(r) \quad \longrightarrow \quad R_l(r) + \delta R_l(r)$$

としたとき、位相のずれが

$$\tan\delta_l \quad \longrightarrow \quad \tan\delta_l + \delta(\tan\delta_l)$$

となったとする。このとき、

$$\delta(\tan\delta_l)\{\text{ 左辺の [ ] の部分 }\} \tag{646}$$

$$+\tan\delta_l\left[2R_l(r)U(r)r^2\delta R_l(r) - 2U(r)r^2\delta R_l(r)\int_0^\infty G(r,r')U(r')R_l(r')r'^2 dr'\right] \tag{647}$$

$$= -2kj_l(kr)U(r)r^2\delta R_l(r)\int_0^\infty j_l(kr)U(r)R_l(r)r^2 dr \tag{648}$$

右辺の積分が $-\frac{1}{k}\tan\delta_l$ であることから、この式を整理すると

$$\delta(\tan\delta_l)\{\text{ 左辺の [ ] の部分 }\} \tag{649}$$

$$+\tan\delta_l 2U(r)r^2\delta R_l(r)\left[R_l(r) - \int_0^\infty G(r,r')U(r')R_l(r')r'^2 dr'\right] \tag{650}$$

$$= \tan\delta_l j_l(kr)2U(r)r^2\delta R_l(r) \tag{651}$$

となるが、左辺第 2 項の括弧の中は $j_l(kr)$ なので、ちょうど右辺と消し合う。したがって、

$$\delta(\tan\delta_l)\,\{\,\text{左辺の}\,[\quad]\,\text{の部分}\,\} = 0$$

つまり、

$$\delta(\tan\delta_l) = 0$$

となり、変分法として使えることが分かる。試行関数として $u(r)$ をとれば、位相のずれの変分公式は

$$k\cot\delta_l = \frac{\int_0^\infty\int_0^\infty u(r)U(r)G(r,r')U(r')u(r')r^2drr'^2dr' - \int_0^\infty u^2(r)U(r)r^2dr}{[\int_0^\infty j_l(kr)U(r)u(r)r^2dr]^2}$$

となる。

Aharonov-Bohm効果

場の強度がゼロであってもゲージ場が物質場の位相に影響を及ぼす現象

磁場中の荷電粒子には Lorentz 力が働く。
局在する磁場 $\longrightarrow$ 古典的には局在領域外では Lorentz 力はゼロ
しかし、$\vec{A}$ は存在 $\longrightarrow$ 量子力学的には影響
Schrödinger eq. を解くには境界条件が必要。
ゲージ場の大域的情報が解に影響する。

二重スリット実験

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\vec{\nabla}+i\frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)^2\psi \quad = \quad E\psi \tag{652}$$

$$\left(\nabla^2+2\frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\right)\psi \quad = \quad k^2\psi\,, \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \tag{653}$$

仮定：$\vec{A}=0$ のときの解を ψ^0:

$$\psi \approx \mathrm{e}^{-i\frac{S(\vec{x})}{\hbar}}\psi^0$$

$$\Big(-\frac{i}{\hbar}\nabla^2 S-\frac{1}{\hbar^2}(\vec{\nabla}S)^2+\nabla^2-2\frac{i}{\hbar}\vec{\nabla}S\cdot\vec{\nabla} \tag{654}$$

$$+2\frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\cdot(-\frac{i}{\hbar}\vec{\nabla}S)+2\frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\Big)\psi^0 \quad = \quad k^2\psi^0 \tag{655}$$

$$-2\frac{i}{\hbar}(\vec{\nabla}S-\frac{e}{c}\vec{A})\cdot\vec{\nabla}\psi^0 \quad = \quad 0 \tag{656}$$

$$\vec{\nabla}S \quad = \quad \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x}) \tag{657}$$

$$S_i \quad = \quad \int_{C_i}^{\vec{x}}\frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x}'\,,\,t)\cdot d\vec{x}' \tag{658}$$

Aharonov-Bohm の位相：

$$\psi_i=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}S_i(\vec{x})}\psi_0(\vec{x})$$

干渉項 $\propto \mathrm{Re}\psi_I^*\psi_{II} \propto \cos\left(\frac{S_I-S_{II}}{\hbar}+(\vec{A}=0\,\text{のときの位相差})\right)$

$$\frac{S_I-S_{II}}{\hbar}=\frac{e}{\hbar c}\oint\vec{A}\cdot d\vec{x}=\Phi\,,\quad \Phi:\text{磁束}$$

具体例

　半径 ρ_0 の無限に長いソレノイド

　円筒座標系：$(\rho\,,\varphi\,,z)\quad \rho=\sqrt{x^2+y^2}\,,\quad \tan\varphi=\frac{y}{x}$

$$\Phi=\int_0^{\rho_0}B(\rho\,,z=0)2\pi\rho d\rho$$

ベクトルポテンシャル

$$\rho \;<\; \rho_0 \tag{659}$$
$$A_\rho(\rho,z)=A_z(\rho,z)=0 \tag{660}$$
$$A_\varphi(\rho,z)=\frac{1}{2\pi\rho}\int_0^\rho B_z(\rho',0)2\pi\rho' d\rho' \tag{661}$$
$$\rho \;>\; \rho_0 \tag{662}$$
$$A_\rho(\rho,z)=A_z(\rho,z)=0 \tag{663}$$
$$A_\varphi(\rho,z)=\frac{1}{2\pi\rho}\Phi \tag{664}$$

$$\vec{\nabla}=\vec{e}_\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\vec{e}_\varphi\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\vec{e}_z\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\vec{\nabla}\times\vec{A}=\Big(\frac{1}{\rho}\frac{\partial A_z}{\partial\varphi}-\frac{\partial A_\varphi}{\partial z}\Big)\vec{e}_\rho+\Big(\frac{\partial A_\rho}{\partial z}-\frac{\partial A_z}{\partial\rho}\Big)\vec{e}_\varphi+\Big(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho A_\varphi)-\frac{1}{\rho}\frac{\partial A_\rho}{\partial\varphi}\Big)\vec{e}_z$$

ハミルトニアン

$$H \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\vec{\nabla}-i\frac{q}{\hbar c}\vec{A}\Big)^2 \tag{665}$$
$$\;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\Big(\frac{\partial}{\partial\varphi}-i\frac{q\Phi}{2\pi\hbar c}\Big)^2+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] \tag{666}$$

　この効果を調べるため、以下の例について計算

$\rho \longrightarrow 0$ のときの散乱問題：
　古典的には原点以外はいたるところ磁場の強度ゼロ

Schrödinger eq.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\Big(\frac{\partial}{\partial\varphi}+i\frac{e\Phi}{2\pi\hbar c}\Big)^2\right]\psi = E\psi$$

$$\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\Big(\frac{\partial}{\partial\varphi}+i\alpha\Big)^2+k^2\right]\psi(\rho\,,\varphi)=0\,,\quad \alpha=\frac{e\Phi}{2\pi\hbar c}$$

$\alpha =$ 整数のときは、$\psi \longrightarrow \mathrm{e}^{-i\alpha\varphi}\psi$ と置き換えれば α は消去 $\Longrightarrow \vec{A}=0$ の散乱問題
$\alpha \neq$ 整数 $\Longrightarrow$Aharonov-Bohm 効果
境界条件：

$$\psi \quad \longrightarrow_{x\to-\infty} \quad \psi_{\rm inc}(\rho,\varphi) \tag{667}$$

$$\longrightarrow_{x\to+\infty} \quad \psi_{\rm inc}(\rho,\varphi)+\psi_{\rm scatt}(\rho,\varphi) \tag{668}$$

カレント：

$$\vec{j}=-i\frac{\hbar}{2m}\left[\psi^*\Big(\vec{\nabla}+i\frac{e}{\hbar c}\vec{A}\Big)\psi-\Big(\vec{\nabla}-i\frac{e}{\hbar c}\vec{A}\Big)\psi^*\cdot\psi\right]$$

然るに

$$(x,y,z)\text{ 座標系で}\qquad \vec{j}_{\rm inc}=\Big(\frac{\hbar k}{m}\,,0\,,0\Big)$$

円筒座標系と直角座標系の変換

$$A_x = A_\rho\cos\varphi - A_\varphi\sin\varphi = -\frac{y}{2\pi(x^2+y^2)}\Phi \tag{669}$$

$$A_y = A_\rho\sin\varphi + A_\varphi\cos\varphi = \frac{x}{2\pi(x^2+y^2)}\Phi \tag{670}$$

$$A_z = A_z = 0 \tag{671}$$

$$\varphi = \tan^{-1}\frac{y}{x} \tag{672}$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x} = \frac{1}{1+\frac{y^2}{x^2}}\Big(-\frac{y}{x^2}\Big) = -\frac{y}{x^2+y^2} \tag{673}$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{1}{1+\frac{y^2}{x^2}}\Big(\frac{1}{x}\Big) = \frac{x}{x^2+y^2} \tag{674}$$

これらの演算を利用して上記の入射カレントが導かれるような $\psi_{\rm inc}$ を決める。$x\to-\infty$ では $\psi_{\rm inc}$ のみだから、1価性を満たすように定める。$x\to+\infty$ では $\psi_{\rm scatt}$ も存在するので、$\psi_{\rm inc}$ 単独では1価でなくともよく、$\psi_{\rm scatt}$ と合わせて ψ が1価であればよい。その結果、$|\varphi|<\pi$ として、

$$\psi_{\rm inc}=\sqrt{N_0}{\rm e}^{ik\rho\cos\varphi-i\alpha\varphi}{\rm e}^{\pm i\pi\alpha}$$

と書けることがわかる。但し、位相因子の複号は順に $\varphi\rangle 0$, $\varphi<0$ の場合に対応する。こうすることにより $\varphi=\pm\pi$ で2つの関数が一致している。

一方、$\psi_{\rm scatt}$ の漸近形を考えると、$x\to\infty$ での ψ の漸近形は

$$\psi\longrightarrow_{x\to\infty}\sqrt{N_0}\left[{\rm e}^{ik\rho\cos\varphi-i\alpha\varphi}{\rm e}^{\pm i\pi\alpha}+\frac{1}{\sqrt{\rho}}{\rm e}^{ik\rho}f(\rho)\right]$$

となり、これから評価した動径方向のカレントは $j_{\rm scatt}=N_0\frac{\hbar k}{m\rho}|f|^2$。したがって断面積は

$$d\sigma=\frac{|j_{\rm scatt}|}{|\vec{j}_{\rm in}|}\rho d\varphi=|f(\varphi)|^2d\varphi$$

f を求めるために Schrödinger 方程式を解こう。z 軸に関して対称なので、角運動量が保存している。

$$\psi(\rho,\varphi)={\rm e}^{im\varphi}R(\rho)\,,\qquad m\ =\ \text{integer} \tag{675}$$
$$\left[\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{d}{d\rho}\right)+k^2-\frac{1}{\rho^2}(m+\alpha)^2\right]R(\rho)\ =\ 0 \tag{676}$$
$$\xi=k\rho\,,\qquad m+\alpha\ =\ \nu \tag{677}$$
$$\left[\frac{1}{\xi}\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{d}{d\xi}\right)+1-\frac{\nu^2}{\xi^2}\right]R(\xi)\ =\ 0 \tag{678}$$

この方程式の解は $J_{|\nu|}(\xi)$, $N_{|\nu|}(\xi)$ だが、後者は $\xi=0$ で特異的

したがって一般解は

$$\psi=\sum_{-\infty}^{\infty}a_m^\alpha J_{|m+\alpha|}(\xi){\rm e}^{im\varphi}$$

係数 a_m^α の決め方：

$\psi_{\rm inc}$ を ${\rm e}^{im\varphi}$ で展開した形に変形する。

$\varphi\rangle 0$ とする。($\varphi<0$ も同様。)

$$\psi_{\rm inc}\ =\ \sqrt{N_0}{\rm e}^{ik\rho\cos\varphi-i\alpha}{\rm e}^{i\pi\alpha} \tag{679}$$
$$=\ \sqrt{N_0}{\rm e}^{-ik\rho\cos\theta+i\alpha\theta}\,,\quad \theta=\pi-\varphi \tag{680}$$
$$=\ \sqrt{N_0}\int_{-\pi}^{\pi}{\rm e}^{-ik\rho\cos\theta'+i\alpha\theta'}\delta(\theta-\theta')d\theta'\,,\quad \delta(\theta-\theta')=\frac{1}{2\pi}\sum_{-\infty}^{\infty}{\rm e}^{-im(\theta-\theta')} \tag{681}$$
$$=\ \frac{\sqrt{N_0}}{2\pi}\sum_{-\infty}^{\infty}{\rm e}^{-im\theta}\int_{-\pi}^{\pi}{\rm e}^{-ik\rho\cos\theta'}(\cos\nu\theta'+i\sin\nu\theta')d\theta'\,,\quad \nu=m+\alpha \tag{682}$$
$$=\ \frac{\sqrt{N_0}}{\pi}\sum_{-\infty}^{\infty}{\rm e}^{-im\theta}\int_0^{\pi}{\rm e}^{-ik\rho\cos\theta'}\cos\nu\theta'd\theta' \tag{683}$$

一方、ベッセル関数の積分表示

$$J_{|\nu|}(\xi)=\frac{i^{|\nu|}}{\pi}\left\{\int_0^{\pi}dt{\rm e}^{-i\xi\cos t}\cos\nu t-\sin|\nu|\pi\int_0^{\infty}dt{\rm e}^{-|\nu|t+i\xi\cosh t}\right\}$$

をψに代入し、$\psi_{\rm inc}$と比較すると、上式の第一項がそれに対応することがわかり、係数は、

$$a_m^\alpha = \mathrm{e}^{-im\pi}(-i)^{|\nu|}\sqrt{N_0}$$

のように定まる。したがって、散乱波は

$$\psi - \psi_{\rm inc} = -\frac{\sqrt{N_0}}{\pi}\sum_{-\infty}^{\infty}\sin|\nu|\pi\int_0^\infty dt\mathrm{e}^{-|\nu|t+i\xi\cosh t}\mathrm{e}^{-im\theta}$$

ここで、$\nu = m+\alpha$の中に入っている整数部分を処理しよう。$\alpha = n+\alpha'$, $0 < \alpha' < 1$, $n =$integer とおくと、ψは

$$\begin{aligned}
\psi &= \sqrt{N_0}\sum \mathrm{e}^{-im\pi}(-i)^{|m+n+\alpha'|}J_{|m+n+\alpha'|}(\xi)\mathrm{e}^{im\varphi} &(684)\\
&= \mathrm{e}^{in(\pi-\varphi)}\sqrt{N_0}\sum \mathrm{e}^{-i(m+n)\pi}(-i)^{|m+n+\alpha'|}J_{|m+n+\alpha'|}(\xi)\mathrm{e}^{i(m+n)\varphi} &(685)\\
&= \mathrm{e}^{in\theta}\psi(\xi;\,\alpha\to\alpha') &(686)
\end{aligned}$$

となる。$\psi_{\rm inc}$についても

$$\begin{aligned}
\psi_{\rm inc} &= \sqrt{N_0}\mathrm{e}^{-i\xi\cos\theta+i(n+\alpha')\theta} &(687)\\
&= \mathrm{e}^{in\theta}\psi_{\rm inc}(\xi;\,\alpha\to\alpha') &(688)
\end{aligned}$$

これでnについては処理できた。

$$\psi - \psi_{\rm inc} = -\frac{\sqrt{N_0}}{\pi}\mathrm{e}^{in\theta}\sum_{-\infty}^{\infty}\sin|m+\alpha'|\pi\mathrm{e}^{-im\theta}\int_0^\infty dt\mathrm{e}^{-|m+\alpha'|t+i\xi\cosh t}$$

次にmを処理しよう。

$$\begin{aligned}
&\sum_{-\infty}^{\infty}\sin(|m+\alpha'|\pi)\mathrm{e}^{-im\theta-|m+\alpha'|t} &(689)\\
=&\sum_{-\infty}^{-1}\sin(-(m+\alpha')\pi)\mathrm{e}^{-im\theta+(m+\alpha')t}+\sum_{0}^{\infty}\sin((m+\alpha')\pi)\mathrm{e}^{-im\theta-(m+\alpha')t} &(690)\\
=&\sum_{1}^{\infty}\sin(\alpha'\pi)\mathrm{e}^{\alpha't}(-1)^m\mathrm{e}^{-(t-i\theta)m}+\sum_{0}^{\infty}\sin(\alpha'\pi)\mathrm{e}^{-\alpha't}(-1)^m\mathrm{e}^{-(t+i\theta)m} &(691)\\
=&\sin\alpha'\pi\left[\frac{\mathrm{e}^{\alpha't}}{1+\mathrm{e}^{t-i\theta}}+\frac{\mathrm{e}^{-\alpha't}}{1+\mathrm{e}^{-t-i\theta}}\right] &(692)
\end{aligned}$$

このように処理できたので、元の式に代入し、2つの項をまとめると、

$$\psi - \psi_{\rm inc} = -\frac{\sqrt{N_0}}{\pi}\mathrm{e}^{in\theta}\sin\alpha'\pi\int_{-\infty}^{\infty}dt\frac{\mathrm{e}^{-\alpha't}}{1+\mathrm{e}^{-t-i\theta}}\mathrm{e}^{i\xi\cosh t}$$

無限遠点$\xi\to\infty$で評価しよう。そこでは$\cosh t$がminimum、つまり$t=0$からが主要な寄与。

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty}dt\frac{\mathrm{e}^{-\alpha't}}{1+\mathrm{e}^{-t-i\theta}}\mathrm{e}^{i\xi\cosh t} &\sim_{\xi\to\infty} \frac{1}{1+\mathrm{e}^{-i\theta}}\lim_{\epsilon\to0}\int_{-\infty}^{\infty}dt\mathrm{e}^{i(\xi+i\epsilon)\cosh t} &(693)\\
&= \frac{\mathrm{e}^{i\frac{\theta}{2}}}{\cos\frac{\theta}{2}}\lim_{\epsilon\to0}K_0(-i\xi+\epsilon) &(694)\\
&\sim_{\xi\to\infty} \frac{\mathrm{e}^{i\frac{\theta}{2}}}{\cos\frac{\theta}{2}}\mathrm{e}^{i\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{\pi}{2\xi}}\mathrm{e}^{i\xi} &(695)
\end{aligned}$$

$\alpha' = \alpha - n\,, \theta = \pi - \varphi\,, (|\varphi| < \pi)$ を代入すれば、散乱振幅は

$$f(\varphi) = \mathrm{e}^{-i(n+\frac{1}{2})\varphi}\mathrm{e}^{i\frac{\pi}{4}}\frac{\sin\alpha\pi}{\sqrt{2\pi k}}\frac{1}{\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)}$$

微分散乱断面積は

$$\frac{d\Omega}{d\varphi} = |f(\varphi)|^2 = \frac{\sin^2\alpha\pi}{2\pi k}\frac{1}{\sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)}\,, \qquad \left(\alpha = \frac{e\Phi}{2\pi\hbar c}\right)$$

となり、α が半整数でなければ、ゼロでない寄与が存在する。

調和振動子型ポテンシャルによる束縛問題

$$\psi = \mathrm{e}^{im\varphi}\rho^{|\nu|}\chi(\rho)\,, m = \text{integer}\,, \quad \nu = m + \alpha \tag{696}$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_e}\left\{\frac{d^2}{d\rho^2} + (2|\nu|+1)\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right\} - V(\rho) + E\right]\chi \;=\; 0 \tag{697}$$

$$V = \frac{k}{2}\rho^2\ (k\rangle 0)\,, \quad x^2 \equiv \frac{\sqrt{m_e k}}{\hbar}\rho^2 \tag{698}$$

$$\left[\left\{\frac{d^2}{dx^2} + (2|\nu|+1)\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right\} - \frac{1}{2}x^2 + \frac{E}{\frac{1}{2}\sqrt{\frac{k}{m_e}}}\right]\chi \;=\; 0 \tag{699}$$

この固有値と固有関数：

$$E_n \;=\; \hbar\sqrt{\frac{k}{m_e}}(2n + |m+\alpha| + 1) \tag{700}$$

$$\chi_n \;=\; \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}x}L_n^{|m+\alpha|}(x)\,, \quad n = 0.1, 2, \cdots \tag{701}$$

$$L_n^{|\nu|}(x) \;=\; \sum_{j=0}^{n}\begin{pmatrix} n+|\nu| \\ n-j \end{pmatrix}\frac{(-x)^j}{j!}\,, \quad \text{generalized Laguerre polynomial} \tag{702}$$

ランダウ レベルと量子ホール効果

Landau level

磁場 $\vec{B} = (0, 0, B)$ のもとでの電子の 2 次元運動

ゲージ：$\vec{A} = (-yB, 0, 0)$

Schrödinger eq.：

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left[-i\frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB}{\hbar c}y\right]^2 - \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right\}\psi \;=\; E\psi \tag{703}$$

$$l \equiv \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}(\,= 50 \sim 100\mathring{A})\,, \qquad \psi = \mathbf{e}^{ikx}\varphi(y) \tag{704}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left[k - \frac{y}{l^2}\right]^2 - \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right\}\varphi \;=\; E\varphi \tag{705}$$

$$\frac{\hbar^2}{2ml^2}\left\{-l^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\left[lk-\frac{y}{l}\right]^2\right\}\varphi \;=\; E\varphi \tag{706}$$

$$\frac{\hbar^2}{2ml^2}=\frac{\hbar}{2}\frac{eB}{mc}=\frac{\hbar}{2}\omega_{\mathrm{c}} \tag{707}$$

$$\frac{\hbar\omega_{\mathrm{c}}}{2}\left\{-l^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\left[lk-\frac{y}{l}\right]^2\right\}\varphi \;=\; E\varphi \tag{708}$$

$$\omega_{\mathrm{c}}=\frac{eB}{mc}:\quad \text{サイクロトロン振動数}$$

したがって、固有解と固有値は

$$\varphi_{ik}(y) \;\propto\; H_i\left(\frac{y}{l}-lk\right)\exp\left(-\frac{(y-l^2k)^2}{2l^2}\right) \tag{709}$$

$$E_{ik} \;=\; \hbar\omega_{\mathrm{c}}\left(i+\frac{1}{2}\right),\quad i=0,1,2,\cdots \tag{710}$$

後の都合により、ここではレベルを表す量子数を i とする。

とり得るランダウ レベル数を評価しよう。

系の大きさを w:

$$0<y<w \;\longrightarrow\; 0<k<\frac{w}{l^2}$$

x 方向に周期的境界条件 $\psi(x+L,y)=\psi(x,y)$ を課す。

$$k=\frac{2\pi}{L}j\,,\qquad j=1,2,3,\cdots$$

量子数 i を固定したとき、すなわち 1 つのランダウレベルのところに，x 方向の波数の自由度から、取りえるレベル数 N は $\frac{2\pi}{L}j<\frac{w}{l^2}$ より $N=\frac{wL}{2\pi l^2}$ となる。これから単位面積当たりのレベル数、つまり縮退度 n_{B} は、

$$n_{\mathrm{B}}=\frac{N}{wL}=\frac{1}{2\pi l^2}=\frac{eB}{2\pi\hbar c}$$

となる。一方で、ランダウ レベルの間隔が $\hbar\omega_{\mathrm{c}}$ だから，2 次元電子系の単位面積、単位エネルギー当たりの縮退度 n を計算すると、

$$n=\frac{n_{\mathrm{B}}}{\hbar\omega_{\mathrm{c}}}=\frac{m}{2\pi\hbar^2}$$

となるが、これは B を含まないことから、2 次元自由電子の状態密度でもある。

上記の Schrödinger eq. による分析は、B をかけると、一様に分布していた自由電子の状態が、フェルミレベル以下にある一つ一つのランダウレベルに集中することを意味する。

しかし、現実には不純物準位効果や、電界をかけるなどの影響により、フェルミレベル以下のランダウ準位にデルタ関数的集中するのではなく、広がったエネルギー状態に分布する。この状況を表す充填率 (filling factor)ν、

$$\nu = \frac{n}{n_{\mathrm{B}}}$$

を定義しておくが、これは分数量子ホール効果に重要な役割を果たす。

量子ホール効果

ホール効果：平板状の金属に磁場に垂直に電場をかけると、磁場と電場に垂直な方向に電位差が生じる。

古典論：

緩和時間 τ_0 のときの電子の運動方程式：

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} + \frac{m\vec{v}}{\tau_0} = -e\left[\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{v} \times \vec{B}\right]$$

定常解 $\frac{d\vec{v}}{dt} = 0$ のときの電流 $\vec{j}$ を求める：

$$\begin{aligned} \vec{j} &= -n_{\mathrm{e}}e\vec{v} = \sigma\vec{E}\,, \qquad \sigma : \text{伝導率テンソル} && (711) \\ &= \sigma_0\vec{E} - \sigma_0\frac{1}{n_{\mathrm{e}}ec}\vec{j} \times \vec{B}\,, \qquad \sigma_0 = \frac{n_{\mathrm{e}}e^2\tau_0}{m} && (712) \end{aligned}$$

ここで n_{e} は電子密度

2 次元の場合 $(\vec{B} = (0\,,0\,,B)\,,\vec{j} = (j_x\,,j_y\,,0))$ の具体的な式：

$$\begin{aligned} E_x &= \frac{1}{\sigma_0}j_x + \frac{B}{n_{\mathrm{e}}ec}j_y && (713) \\ E_y &= -\frac{B}{n_{\mathrm{e}}ec}j_x + \frac{1}{\sigma_0}j_y && (714) \end{aligned}$$

すなわち

$$\vec{E} = \rho\vec{j}\,, \qquad \rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_0} & \frac{B}{n_\mathrm{e}ec} \\ -\frac{B}{n_\mathrm{e}ec} & \frac{1}{\sigma_0} \end{pmatrix} \quad \rho\text{：抵抗率テンソル}$$

$$\sigma = \rho^{-1}$$

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{\frac{1}{\sigma_0}}{\frac{1}{\sigma_0^2} + \left(\frac{B}{n_\mathrm{e}ec}\right)^2} = \frac{\sigma_0}{1+\omega_\mathrm{c}^2\tau_0^2} \tag{715}$$

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{n_\mathrm{e}ec}{B} - \frac{1}{\omega_\mathrm{c}\tau_0}\sigma_{xx} = \frac{\sigma_0\omega_\mathrm{c}\tau_0}{1+\omega_\mathrm{c}^2\tau_0^2} \tag{716}$$

ただし，$\frac{B}{n_\mathrm{e}ec} = \frac{\omega_c\tau_0}{\sigma_0}$
ここで、x の方向に 2 次元電流 $\vec{j} = (j_x\,, 0\,, 0)$ を流す：

$$E_x = \frac{1}{\sigma_0}j_x \tag{717}$$

$$E_y = -\frac{B}{n_\mathrm{e}ec}j_x \tag{718}$$

したがってホール伝導率は

$$\sigma_\mathrm{H} = \frac{j_x}{E_y} = -\frac{n_\mathrm{e}ec}{B} = -\frac{1}{\rho_{xy}} = \frac{1}{\rho_{yx}}$$

となる。
ここで、もし

$$\sigma_{xx} = 0$$

となるような状況が起こったとしよう。そのとき、

$$\sigma_{xy} = -\sigma_\mathrm{H} = \frac{n_\mathrm{e}ec}{B}$$

ここまでは古典論

MOSFET(metal-oxide-silicon field-effect-transister) 中の 2 次元電子系 (1980)
K. von Klitzing, G. Dorda, M. Pepper
整数量子ホール効果

$$\begin{cases} \rho_{xy} & = & \frac{h}{e^2}\frac{1}{i}\,, \quad i = 1\,, 2\,, 3\,, \cdots \\ \sigma_{xx} & \sim & 0 \end{cases}$$

半古典的な説明：

$$\sigma_{xy} = \frac{n_{\mathrm{e}}ec}{B} - \frac{1}{\omega_{\mathrm{c}}\tau_0}\sigma_{xx}$$

i 番目のランダウ準位までは電子が占有されていて、$i+1$ 以上は真空であったとしよう。このとき、E_i と E_{i+1} のエネルギー密度のところでは (実は整数量子ホール効果では全てのレベルでそうなるのであるが)、$\sigma_{xx} = 0$ となったとすると、

$$\sigma_{xy} = \frac{n_{\mathrm{e}}ec}{B}$$

ここで、電子密度 n_{e} を評価しよう。
各レベルにつき：

$$n_{\mathrm{B}} = \frac{eB}{2\pi\hbar c}$$

i 番目のレベルまで占有されているから、全体では

$$n_{\mathrm{e}} = i\frac{eB}{2\pi\hbar c}$$

となり、伝導率テンソルの式に代入すると

$$\sigma_{xy} = i\frac{e^2}{h}$$

これが、整数量子ホール効果である。

$\sigma_{xx} = 0$ となる理由：
前述したように、現実のランダウレベルの分布はデルタ関数型の理想的な分布でなく、$E_i = \hbar\omega_c(i + \frac{1}{2})$ をピークとし、ある幅をもった分布となる。
ランダウレベルを取る条件を満たす領域はピーク付近は資料全体に広がっている (広がった状態) が、ピークの裾あたりでは、資料の一部の領域に限られてしまう (局在状態)。B を変化させていき、ちょうどフェルミレベルがその領域にあるときには、電位差のある方向 (x 方向) に電流が流れなくなる (それに垂直方向 (y) には流れる)。

Bellの定理とEinstein-Podolsky-Rosenのパラドックス

アインシュタインの物理的実在

「いかなる方法でも系を乱さずに，ある物理量の値を確実に予言できる」

EPR パラドックス

粒子１，２からなる複合系（$L \gg$ 相互作用距離）

$$\Psi = \delta(x_1 - x_2 - L)\delta(p_1 + p_2)$$

$$[x_1 - x_2, p_1 + p_2] = 0$$

この系ではっきり決まっている量:相対距離 L と全運動量 0

ここで系 S_1 について x_1 を測定 $\longrightarrow x_2(= L + x_1)$ が精確に決まる．
S_1 における測定は S_2 になんらの影響も及ぼさない．$\longrightarrow x_2$ は物理的実体

同様に，p_1 を測定 $\longrightarrow p_2(= -p_1)$ が精確に決まる．
S_1 における測定は S_2 になんらの影響も及ぼさない．$\longrightarrow p_2$ は物理的実体

しかるに，$[x_2, p_2] = i\hbar,\ \Delta x_2 \cdot \Delta p_2 \geq \frac{\hbar}{2} \longrightarrow$ 上の結果と矛盾 !!，EPR パラドックス

アインシュタインの否とする概念の選択:

１．　波動関数 Ψ による記述は完全である．
２．　真に空間的に分離された状態は互いに独立である．
　$\longrightarrow$ １．を捨て，2．をとった．

アインシュタインの局所性：

「S_2 における真の状態は S_2 から空間的に離れている S_1 で行われたこととは無関係である.」

ボーアの回答:

「S_1 と S_2 における実験は互いにどのように設定してもそれは独立.
しかし,（例えば S_1 で）互いに相容れない実験を行い，その結果を比較しても，
物理的な結果は得られない.」

EPR パラドックルのスピン版：（D. Bohm）

$\pi^0 \to e^- e^+$ 崩壊

π^0 のスピンは 0 だから，電子ー陽電子系のスピンは 1 重項（反対称）

電子のスピン $s_x^{(-)}(s_y^{(-)}, s_z^{(-)})$ の向きを測定
$\longrightarrow$ 陽電子のスピンは $s_x^{(+)}(s_y^{(+)}, s_z^{(+)}) = -s_x^{(-)}(-s_y^{(-)}, -s_z^{(-)})$

したがって $s_x^{(+)}(s_y^{(+)}, s_z^{(+)})$ は物理的実体，精確に決められる．

しかしこのことは $[s_i^{(+)}, s_j^{(+)}] = i\epsilon_{ijk}s_k^{(+)}$ と矛盾

原子 SPS カスケードによる 2 光子生成

完全に決定論的な量子現象

S 波励起状態にある原子 $\longrightarrow$ γ 線を放出して P 波励起状態に，ついで
$\longrightarrow$ γ 線を放出して S 基底起状態に崩壊する．

この現象で 2 光子が back to back に放出される事例を採用する．

この過程では角運動量が保存 $\longrightarrow$2 光子系の $J = 0$，かつパリティ＋

進行方向を z 軸とすると，偏極は $x - y$ 平面，そこで直線偏光とする．

$|x\rangle$ ：x 軸方向に偏光
$|y\rangle$ ：y 軸方向に偏光

角運動量の固有状態に直せば，

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + i|y\rangle) = |1, +1\rangle$ ：右円旋光
$\frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - i|y\rangle) = |1, -1\rangle$ ：左円旋光

したがって，直線偏光は

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1\rangle + |1, -1\rangle) \tag{719}$$
$$|y\rangle = -i\frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1\rangle - |1, -1\rangle) \tag{720}$$

これらの結果から，スピン 0 の 2 光子状態は表示 $|l, m\rangle$ の l を省いて書けば，

$$\Psi_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+1\rangle|-1\rangle + |-1\rangle|+1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x_1\rangle|x_2\rangle + |y_1\rangle|y_2\rangle)$$

ここで直線偏光 $|x\rangle$ を $x - y$ 面で θ だけ回転してみよう．

$$|x\rangle \longrightarrow \cos\theta|x\rangle + \sin\theta|y\rangle$$

この状態への projection op. は

$$P_\theta = (\cos\,\theta|x\rangle + \sin\,\theta|y\rangle)(\cos\,\theta\langle x| + \sin\,\theta\langle y|) \tag{721}$$
$$= \cos^2\theta|x\rangle\langle x| + \sin^2\theta|y\rangle\langle y| + \cos\theta\sin\,\theta(|x\rangle\langle y| + |y\rangle\langle x|) \tag{722}$$
$$P_\theta^2 = P_\theta \tag{723}$$

以上の準備をした上で θ 方向の偏光にたいして+1，それに直交する偏光にたいして
-1 となる偏光子を定義すると，

$$\Pi_\theta = 2P_\theta - 1 \tag{724}$$
$$= \cos\,2\theta(|x\rangle\langle x| - |y\rangle\langle y|) + \sin\,2\theta(|x\rangle\langle y| + |y\rangle\langle x|) \tag{725}$$
$$\Pi_\theta^2 = 1 \tag{726}$$

ここで光子 1 については角度 α，光子 2 については β だけ傾けた偏光子で測定し，
その相関をとると，

$$\langle\Psi_{12}|\Pi_\alpha(1)\otimes\Pi_\beta(2)|\Psi_{12}\rangle = \cos 2(\alpha-\beta)$$

これが SPS カスケード光子についての量子相関である．
この計算は次のとおり:

$$\begin{aligned}\Pi_\alpha\otimes\Pi_\beta(|x_1\rangle|x_2\rangle + |y_1\rangle|y_2\rangle) &= (|x_1\rangle\cos 2\alpha + |y_1\rangle\sin 2\alpha)(|x_2\rangle\cos 2\beta + |y_2\rangle\sin 2\beta)\\ &\quad +(-|y_1\rangle\cos 2\alpha + |x_1\rangle\sin 2\alpha)(-|y_2\rangle\cos 2\beta + |x_2\rangle\sin 2\beta)\\ &= (|x_1\rangle|x_2\rangle + |y_1\rangle|y_2\rangle)\cos 2(\alpha-\beta)\\ &\qquad +(|x_1\rangle|y_2\rangle - |y_1\rangle|x_2\rangle)\cos 2(\alpha+\beta)\end{aligned}$$

期待値にすると最後の行の第 1 項のみが残る．

Bell の不等式

特定の物理法則には依存せずに，
「局所因果性の原理 (Einstein の非局所性，つまり物理的実体の存在) を仮定すると，
離れた事象間の相関に上限がある」
ことがいえる．これを不等式で表したもの．

静止系でスピン $\vec{J}=0$ の粒子 $\longrightarrow$ 同じスピンの 2 粒子 $\vec{J_1}\,,\vec{J_2}$ $(\vec{J_1}+\vec{J_2}=0)$ に崩壊

古典的計算

N 個の $\vec{J}=0$ の粒子を用意する．

崩壊した 2 粒子のスピンの向きを観測する軸を，それぞれ $\vec{\alpha}$，$\vec{\beta}$ とする．

この観測の物理量の定義：

$$a = \mathrm{sign}(\vec{\alpha} \cdot \vec{J}_1), \quad b = \mathrm{sign}(\vec{\beta} \cdot \vec{J}_2)$$

観測値は明らかに $a = \pm 1, \quad b = \pm 1$

N 回観測するうち，j 番目の事例の観測値を $a_j, \quad b_j$ とすると，平均値は

$$\langle a \rangle = \frac{\sum a_j}{N}, \quad \langle b \rangle = \frac{\sum b_j}{N} \sim O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

だが，$\vec{\alpha} = \vec{\beta}$ のときは $a_j = -b_j$ だから，一般には

$$\langle ab \rangle = \frac{\sum a_j b_j}{N} \neq 0$$

古典相関：
この値は単位ベクトル $\vec{\alpha}$ と $\vec{\beta}$ を含む単位球を考えることにより得られる．単位球を $\vec{\alpha}$ を北極として上半球と下半球に分割する．同様に $\vec{\beta}$ を北極として 2 つの半球に分割する．こので $\vec{\alpha}$ と $\vec{\beta}$ なす角を θ とすると，相関が負となる部分は $4\pi \times \frac{\pi-\theta}{\pi}$，相関が正となる部分は $4\pi \times \frac{\theta}{\pi}$ だから，

$$\langle ab \rangle = \frac{\theta}{\pi} - \frac{\pi - \theta}{\pi} = -1 + \frac{2\theta}{\pi}$$

一方で量子相関:$J = 0$，$J_1 = J_2 = 1/2$ の場合

$$a = \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}_1, \quad b = \vec{\beta} \cdot \vec{\sigma}_2$$

$$\vec{\sigma}_1 \Psi = -\vec{\sigma}_2 \Psi \quad \text{for singlet state.}$$

$$\begin{aligned} \langle ab \rangle &= \Psi^\dagger (\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}_1)(\vec{\beta} \cdot \vec{\sigma}_2) \Psi & (727) \\ &= -\Psi^\dagger (\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}_1)(\vec{\beta} \cdot \vec{\sigma}_1) \Psi & (728) \\ &= -\Psi^\dagger \left[\vec{\alpha} \cdot \vec{\beta} + i (\vec{\alpha} \times \vec{\beta}) \cdot \vec{\sigma}_1 \right] \Psi & (729) \\ &= -\vec{\alpha} \cdot \vec{\beta} = -\cos\theta & (730) \end{aligned}$$

したがって，スピン 1/2 の場合，常に

$$|\,\text{量子相関}\,| > |\,\text{古典相関}\,|$$

SPS カスケード光子の場合はこう簡単でない ($\cos(2\theta)$).

Bell の不等式の導出：
SPS カスケード 2 光子のうちの光子 1 を Bob が Π_α または Π_γ，光子 2 を Alice が Π_β または Π_γ の測定をする．このとき α, β, γ として得た観測値を a, b, c とかく．

実験として次のように設定する．Bob と Alice が独立に測定を繰り返し，その相関
$ab,\ ac,\ cb,\ cc$ を考えるが，常に $cc=1$ なので，この場合は平均からはずす．したがって
3 つの測定が考えられるが，実際に実行できるのは多くても 2 個だけである．
例えば，Bob が a を選択すれば，Alice は b と c を選択でき，(ab) と (ac) の相関実験ができる．
Bob が c を選択すれば，Alice は b を選択でき，(cb) の相関実験ができる．
Bob のほうから考えれば (ab) と (cb)，あるいは (ac) である．したがって，3 個の相関の
うち少なくても 1 個は反実証的実験である．
ここで，これらの物理量は $a,\, b,\, c=\pm 1$ であることから，次の関係が恒等的に成り立つ．

$$a(b-c)\equiv \pm(1-bc)$$

理由は
(i) $b=c \quad \longrightarrow 0=0$
(ii) $b=-c \quad \longrightarrow |2|=|2|$

然るに，スピン相関が物理的実体に裏づけされているなら，実験する，しない
にかかわらず,（隠れた変数を使えば）j 番目の事象で

$$a_j,\ b_j,\ c_j$$

がすべて決まり，すべての j で

$$a_j(b_j-c_j)=\pm(1-b_jc_j)$$

がなりたつ．ここで隠れた変数を使えば量子力学と矛盾しない期待値が出せる枠組みが
つくれることが知られている．隠れた変数について和をとることは j について平均を
取ることに相当.
$1-b_jc_j\geq 0$ だから，

$$-(1-b_jc_j)\leq a_jb_j-a_jc_j\leq 1-b_jc_j$$

j で平均を取れば

$$-(1-\langle bc\rangle)\leq \langle ab\rangle-\langle ac\rangle\leq 1-\langle bc\rangle$$

したがって

$$|\langle ab\rangle-\langle ac\rangle|\leq 1-\langle bc\rangle$$

すなわち

$$|\langle ab\rangle-\langle ac\rangle|+\langle bc\rangle\leq 1$$

これが Bell の不等式である．

量子力学での検証:

SPS 光子では $\langle ab\rangle=\cos 2(\alpha-\beta)$ などだから，Bell の不等式が成立していれば

$$|\cos 2(\alpha-\beta)-\cos 2(\alpha-\gamma)|+\cos 2(\beta-\gamma)\leq 1$$

となっているはず．しかし，例えば $\alpha-\beta=\pi/6,\ \alpha-\gamma=\pi/3,\ \beta-\gamma=\pi/6$ と

して実験すれば,

$$左辺 = \left|\frac{1}{2} - (-\frac{1}{2})\right| + \frac{1}{2} = \frac{3}{2} > 1$$

Bell の不等式が満たされていない !!　物理的実体の存在が否定された.

アスペ (A. Aspect) たちの SPS 光子による実験 (Phys. Rev. Letteres 49(1982) 1804.)

実際には Bob と Alice が 2 つずつの軸を選ぶ実験を行った．Bob が選ぶ軸を $\vec{\alpha}, \vec{\gamma}$，Alice が選ぶ軸を $\vec{\beta}, \vec{\delta}$，観測量を a, c, b, d とすると，$a, b, c, d = \pm 1$ だから，Bell の不等式のときと同様な推論で

$$b_j(a_j + c_j) - d_j(a_j - c_j) = \pm 2$$

だから，平均を取って

$$|\langle ab\rangle + \langle bc\rangle + \langle cd\rangle - \langle da\rangle| \leq 2$$

が成り立つ.

これを **CHSH 不等式**という．(J.F. Clauser, et. al., Phys. Rev. Letters 23 (1969) 880.)

SPS 光子実験で物理的実体があるなら

$$|\cos 2(\alpha - \beta) + \cos 2(\beta - \gamma) + \cos 2(\gamma - \delta) - \cos 2(\delta - \alpha)| \leq 2$$

が成立するはず．ところが

$$\alpha - \beta = \beta - \gamma = \gamma - \delta = -(\delta - \alpha) = \pi/8$$

とすると，左辺 $= 2\sqrt{2}$ となり，この不等式は破れている．Aspect たちの実験はまさにこの結果を出した.

（ちなみにこの結果は量子力学でもこの実験で最大に破れている場合でもある.）