

量子力学I 講義ノート

— 2017年度後期 —

棚橋 誠治

2017/07/16 版

目次

1	はじめに	1
1.1	Stern-Gerlach 実験	1
1.2	連続した SG 実験	2
1.3	SG 実験と光の偏極 (偏光) との類似	3
1.4	電磁気学での偏光の理解	4
1.5	状態の重ね合わせと SG 実験	7
1.6	2重スリット実験	10
1.7	粒子と波動関数	11
2	波動関数とシュレディンガー方程式	12
2.1	群速度	12
2.2	確率解釈	16
2.3	分散関係からシュレディンガー方程式へ	18
2.4	運動量空間での波動関数と不確定性関係	20
2.5	確率の保存と確率流	22
2.6	期待値	24
3	時間に依存しないシュレディンガー方程式	27
3.1	シュレディンガー方程式の変数分離	27
3.2	状態の時間発展	28
3.3	箱に閉じ込められた粒子	30
3.4	エネルギー固有関数とエネルギーの測定	31
3.5	エネルギー固有値が連続的な場合	32
4	1次元量子力学	33
4.1	散乱問題: 段差ポテンシャル	33
4.2	散乱問題: 井戸型ポテンシャル	36
4.3	散乱問題: ポテンシャル障壁	38
4.4	パリティ	39
4.5	束縛状態: 井戸型ポテンシャル	42

4.6	束縛状態: デルタ関数ポテンシャル	47
4.7	調和振動子	48
5	ヒルベルト空間とエルミート演算子	53
5.1	波動関数とヒルベルト空間	53
5.2	エルミート演算子と観測可能量	55
5.3	完全系と射影演算子	58
5.4	演算子の交換関係と同時観測可能量	61
5.5	ハイゼンベルグの不確定性関係	62
5.6	状態の無限小変換と演算子の交換関係、解析力学との対応	65
5.7	状態の時間発展とシュレディンガー方程式	67
6	演算子法	69
6.1	調和振動子のエネルギー準位	69
6.2	調和振動子の波動関数	72
6.3	シュレディンガー表示とハイゼンベルグ表示	73
7	角運動量の量子化: 球面調和関数	74
7.1	2次元の角運動量	74
7.2	3次元角運動量の交換関係	76
7.3	球面調和関数	77
7.4	球面調和関数の完全性	82
8	角運動量の量子化: 3次元回転群の表現	83
8.1	昇降演算子	83
8.2	N_{lm} の符号	86
8.3	状態の回転変換	87
8.4	角運動量の行列表示と3次元回転群 $SO(3)$ の表現	88
9	3次元量子力学の中心力問題	93
9.1	水素類似原子	93
9.2	エネルギー準位	94
A	複素ベクトル空間と内積	100
B	エルミート行列の性質	101
B.1	行列の成分表示	101
B.2	転置・複素共軛・エルミート共軛	102
B.3	エルミート行列	102
B.4	量子力学との類似	104
C	散乱行列 (S-行列) と転送行列 (M-行列)	105
D	ブロッホの定理	108

E	直交多項式	110
E.1	エルミート多項式	111
E.2	ルジャンドル多項式	113
E.3	ゲーゲンバウアー多項式	115
E.4	ラゲール多項式	117
F	コヒーレント状態	118
F.1	調和振動子の復習	118
F.2	量子ゆらぎ Δx と Δp	119
F.3	コヒーレント状態	120
F.4	コヒーレント状態の性質	122
F.5	ベーカー・キャンベル・ハウズドルフの公式	125
F.6	そのほかの最小不確定性状態	127
G	球座標・円筒座標系でのラプラシアン	128
G.1	デカルト座標系	128
G.2	円筒座標系	129
G.3	球座標系	130
H	球座標における角運動量の微分演算子	130
H.1	2次元極座標	130
H.2	3次元極座標 (球座標)	131
H.3	$(\vec{L}^{\text{op}})^2$ の具体形	132
I	超球面調和関数と $SO(4)$ 対称性	134
I.1	超球面調和関数	134
I.2	4次元空間角運動量の量子化 (演算子法)	137
J	球ベッセル関数と3次元井戸型ポテンシャル	139
J.1	3次元自由粒子波動関数の球座標表示	139
J.2	球ベッセル関数	139
J.3	球の内部に閉じ込められた粒子	144
J.4	3次元球対称井戸型ポテンシャル	145

この講義を聴いていて、疑問に感じる事があれば、講義時間内に積極的に質問すること。良い質問は、質問者だけでなく、多くの聴衆にとって有益である。(講義時間中になされた良い質問には、成績に特別加点を与える可能性もある。)

講義を聴いただけ、出題された演習問題を解いただけでは、量子力学を十分に理解するレベルには到達できない。自分にあった(できれば複数の)教科書を読みこなすなど、自主的に勉強することが望ましい。図書室には多くの量子力学の教科書が備えられているので、それらに目を通したうえで、自分にあった教科書を購入すること。その際、薄い教科書は必要な説明が省略されていることが多いので、初学者にはあまりお勧めできない。現在、^{いぎ}猪木・川合「量子力学 I, II」が量子力学の教科書の定番になっているようである。また、英語が原著の教科書を選択する場合、日本語訳は翻訳が硬く読みにくいこともある。大学院では英語での読み書きが必要になるので、今のうちに意識して英語の原著教科書を(も)読むことを勧める。電子書籍など、英語の原著本は翻訳本に比べて非常に安価に入手できる場合もある。

参考書 (今回の講義準備に用いる参考書)

- ガシオロウィッツ 「量子力学 I」丸善出版、林・北門 共訳
第2版の翻訳。例題がたくさん紹介されている。昨年度は品切れになって入手しにくかった。
- ^{いぎ}猪木・川合 「量子力学 I, II」講談社サイエンティフィック
日本での標準的な教科書。おすすめ。
- 桜井純 「現代の量子力学」吉岡書店、桜井明夫訳
今回の講義では Stern-Gerlach 実験を説明の出発点とするが、このスタイルはこの教科書にならったもの。高度な内容が含まれるので、初学者には少し難解かもしれない。今回の講義を履修することによって、この教科書を自習できるようになることを期待している。
- S. Gasiorowicz, “Quantum Physics”, 3rd edition, John Wiley & Sons Pub.
前述のガシオロウィッツの翻訳版の原書。第3版になって豊富な例題の多くがウェブページに移動し、教科書自体はコンパクトになった。
- J.J. Sakurai “Modern Quantum Mechanics”, Addison-Wesley Pub.
前述の桜井の翻訳版教科書の原書。こちらも原書は第2版になっている。
- R. Shankar “Principles of Quantum Mechanics”, Springer
G30 コースでの量子力学の教科書。詳しく説明されているので、英語を苦にしなければ比較的自習しやすい。ただし、その分、読むべき分量は多い。著者の講義の様子がビデオレクチャーとして公開されている。

参考書 (そのほか)

- 猪木・川合 「基礎 量子力学」講談社サイエンティフィック
コンサイス版の「猪木・川合」。
- 日笠健一 「量子力学」朝倉書店
量子力学で使う最低限の式や考え方が要領よくまとめられている。説明をわかりやすくするためといって記述が不正確になっていることもない。ひとつおりの量子力学を勉強したあとでこの教科書を読むと自分の理解が鮮明になる。

- 倉本・江沢「量子力学」朝倉書店
他のコンパクトな教科書ではあまり触れられないことのない事項、たとえば、厳密に解くことができる場合に存在する対称性や、現在の量子測定理論にも触れられている。特徴のある教科書。
- シッフ「量子力学 上, 下」井上訳、吉岡書店
演習問題が豊富。問題を解けるようになる教科書。発展的な話題も解説されている。
- メシア「量子力学 1, 2, 3」小出・田村 訳、東京図書
量子力学のさまざまな内容が広く網羅されている教科書。
- L.I. Schiff “Quantum Mechanics”, McGraw-Hill Inc.
前述のシッフの翻訳版教科書の原書。
- D.J. Griffiths “Introduction to Quantum Mechanics”, Cambridge University Press
簡潔な記述で、量子力学の要点が整理されている。重要な事項が枠で囲まれて強調されているなど、読みやすさも重視されている。基本的で量子力学を理解するのに役立つ演習問題も数多く収集されている。おすすめ。

講義資料

- この講義ノートの名古屋大学オープンコースウェア (OCW) に置く予定。講義ノートに記載されている数式等は板書を省略することがあるので、各自ダウンロードし、講義時にも持ってくる。なお、講義での説明の順番は、この講義ノートに書かれた順番にほぼ一致させるつもりである。次回の講義で進むと思われる箇所について、あらかじめ講義ノートにひととおり目を通しておくことを勧める。

演習問題／定期試験問題

- 前年度の演習問題／定期試験問題を

<http://www.eken.phys.nagoya-u.ac.jp/~tanabash/lecture/qm1-16/>

に置く。今年度の演習問題は後日配布する。演習問題を解く上で役立つ知識をこの講義ノートの付録 A～J にまとめておくので必要に応じて自習すること。

成績

- 定期試験による。

連絡先

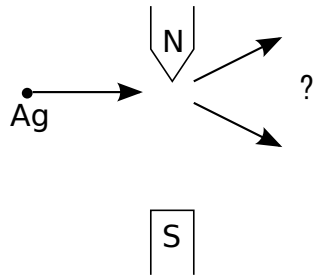
- 電子メール: tanabash@eken.phys.nagoya-u.ac.jp
- 内線: 2859
- 部屋: ES719

1 はじめに

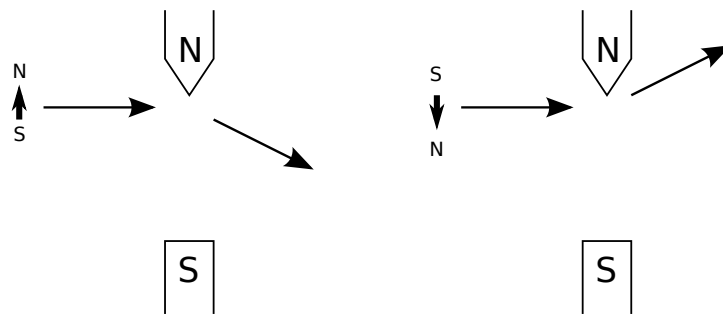
1.1 Stern-Gerlach 実験

シュテルン・ゲルラッハ (Stern-Gerlach) の実験 (1922)

銀原子を非一様な磁場に一定速度で入射するとどうなるか？

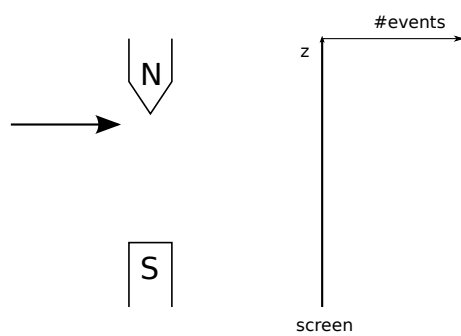


銀原子は、スピンと呼ばれる微小な磁気双極子モーメントの自由度を持ち、磁場を感じて軌道が曲げられる。古典力学では、

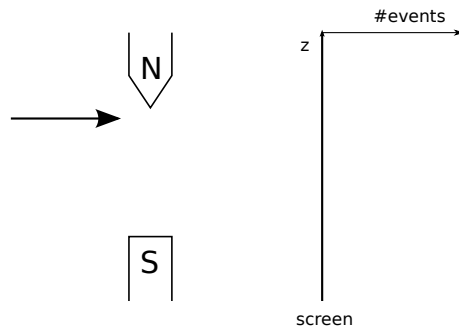


となることが予想される。

入射する銀原子の磁気双極子モーメントの方向がランダムなときはどうなるか？古典力学での予想では、(各自、下図に書き込むこと)



実際の SG 実験の結果は、(各自、下図に書き込むこと)



この結果が意味すること：銀原子の磁気双極子モーメントの z 成分はとびとびの値を持っている (量子化されている)。

このように磁気双極子モーメントが量子化される現象は古典力学では記述できないので、まったく新しい記述方法 (量子力学、Quantum Mechanics) が必要になる。量子力学では、物理量がとびとびの値になる現象がしばしば起きる。

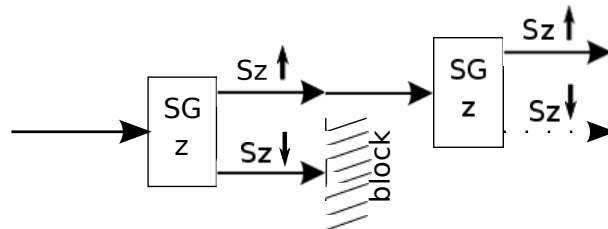
注意： z 方向だけでなく、 x 方向や、 y 方向に磁場をかけて同様の実験を行っても同じように量子化されていることがわかる。つまり、 z 方向が特別なのではない。

1.2 連続した SG 実験

複数の SG 実験を続けて行うとどうなるか？

- SG_{zz} 装置

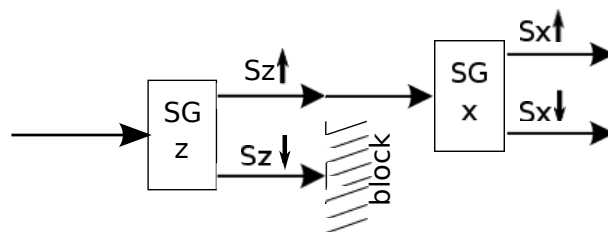
z 成分の磁気双極子モーメントを測る SG 実験 (SG_z 装置とよぶことにする) で z 方向 \uparrow 向きである銀原子 ($S_z \uparrow$) をあらかじめ選別してから、もう一度 SG_z 装置に銀原子ビームを通した場合。



結果: $S_z \uparrow$ のビームは出てくるが、 $S_z \downarrow$ のビームは出てこない。(あたりまえ)

- SG_{zx} 装置

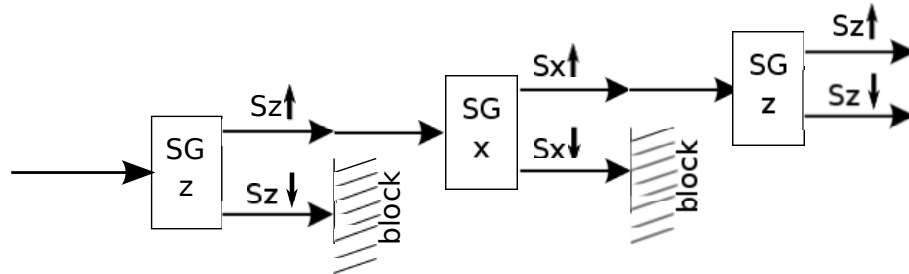
z 成分の磁気双極子モーメントを測る SG 実験 (SG_z 装置とよぶことにする) で z 方向 \uparrow 向きである銀原子 ($S_z \uparrow$) をあらかじめ選別したのち、 $S_z \uparrow$ であることが確定した銀原子ビームを今度は x 成分の磁気双極子モーメントを測る SG_x 装置にかけた場合。



結果: $S_x \uparrow$ の銀原子と $S_x \downarrow$ の銀原子の両方に分けられ、 $S_x \uparrow$ と $S_x \downarrow$ で同量のビームがでてくる。(ちょっと不思議?)

- SG_{zxx} 装置

銀原子ビームを次図のように SG_z, SG_x, SG_z に順番にかける。



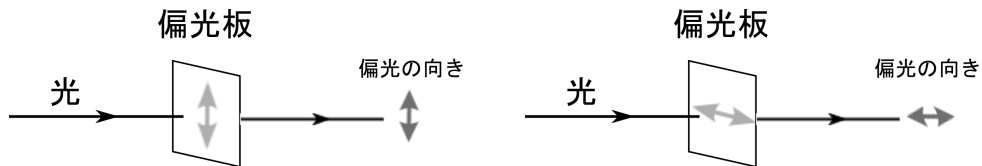
結果: $S_z \uparrow$ と $S_z \downarrow$ で同量のビームがでてくる。最初の SG_z 装置で、 $S_z \downarrow$ の銀原子はなくしているはずなのに、最後の段階でまた現れる。(かなり不思議??)

- SG_{zzx} 装置、SG_{xzz} 装置、SG_{zxxx} 装置について各自考えてみよう。

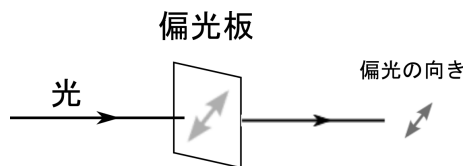
量子力学では、このような不思議な振る舞いが正しく記述されねばならない。

1.3 SG 実験と光の偏極 (偏光) との類似

偏光板を用いて、特定の方向に偏極 (偏光) した光を選ぶことができる。



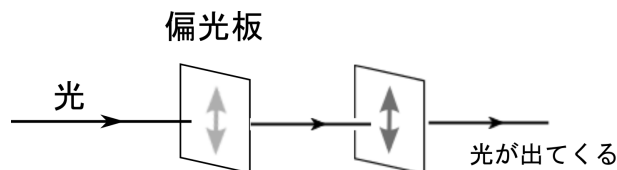
もちろん、斜め方向に偏極した光 (“↗” 偏極した光) を作ることもできる。

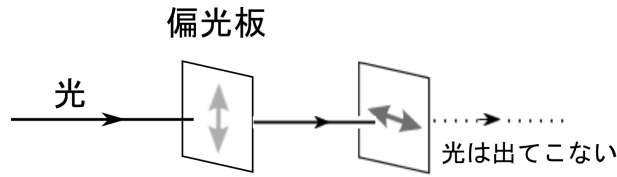


“↑” 偏極した光 (“↔” 偏極した光) を SG 実験での $S_z \uparrow$ 銀原子 ($S_z \downarrow$ 銀原子) に対応させて考えてみる。同様に、“↗” 偏極した光 (“↘” 偏極した光) を SG 実験での $S_x \uparrow$ 銀原子 ($S_x \downarrow$ 銀原子) を対応させて考える。偏光板を用いて、次のような SG 実験との類似実験を行おう。

- SG_{zz} 類似実験

“↑” 偏極した光を作ってから、“↑” 偏光板や“↔” 偏光板に通す。

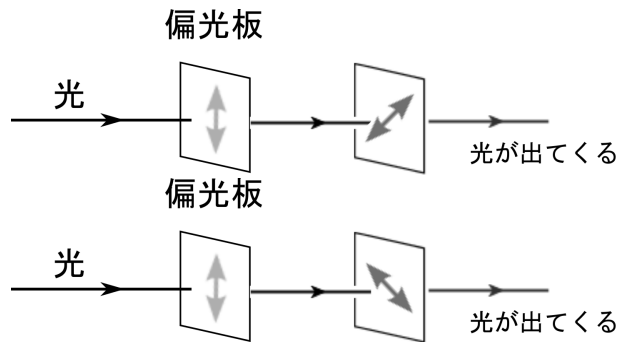




結果: “↑” 偏極した光はでてくるが、“↔” 偏極した光はでてこない。(あたりまえ)。

● SG_{zx} 類似実験

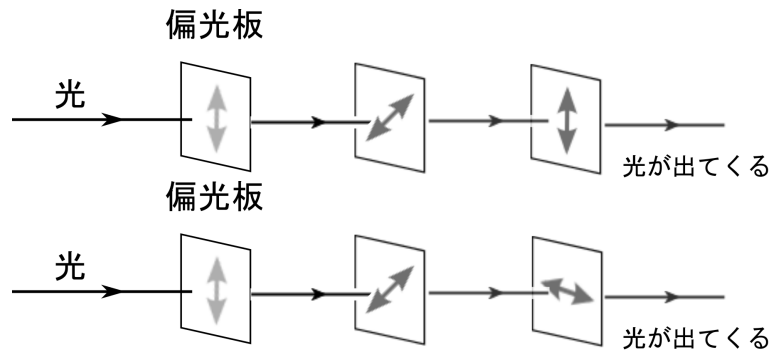
”↑” 偏極した光を作ってから、“↗” 偏光板や”↘” 偏光板に通す。



結果: “↗” 偏極した光と “↘” 偏極した光が同じ量だけで出てくる。(不思議?)

● SG_{zxz} 類似実験

”↑” 偏極した光を “↗” 偏光板に通したあとで、“↑” 偏光板や”↔” 偏光板に通す。



結果: “↑” 偏極した光と “↔” 偏極した光が同じ量だけで出てくる。(とても不思議??)

● SG_{zxx} 類似実験、SG_{xzz} 類似実験、SG_{zxzx} 類似実験について各自考えてみよう。

1.4 電磁気学での偏光の理解

前節では、SG 実験の結果が、光の偏光の実験結果と類似していることがわかった。では、光の偏光の実験結果は、電磁気学ではどのように理解できるだろうか？次にこのことを考えよう。

光（電磁波）の作る電場の方向として偏光を説明できる。真空中で、 y 方向に進む角振動数 ω の平面波の電磁波の作る電場は

$$\vec{E} = \alpha_z \vec{e}_z \sin(\omega(t - y/c) + \delta_z) + \alpha_x \vec{e}_x \sin(\omega(t - y/c) + \delta_x) \quad (1.1)$$

と書き表すことができる。ここで、 \vec{e}_z, \vec{e}_x は、それぞれ z 方向, x 方向の単位ベクトル。 c は真空中の光の速さである。電場の向きは、光の進行方向と垂直であることに注意。 α_z, α_x (δ_z, δ_x) は z 方向, x 方向の振幅 (位相) を表す。

前節の偏光板実験の “ \updownarrow ” を z 方向にとり、“ \leftrightarrow ” を x 方向にとって考える。

- “ \updownarrow ” 偏光板の役割：

$$\vec{E} \Rightarrow \vec{e}_z(\vec{e}_z \cdot \vec{E}).$$

- “ \leftrightarrow ” 偏光板の役割：

$$\vec{E} \Rightarrow \vec{e}_x(\vec{e}_x \cdot \vec{E}).$$

- “ \nearrow ” 偏光板の役割：

$$\vec{E} \Rightarrow \frac{1}{2}(\vec{e}_z + \vec{e}_x)((\vec{e}_z + \vec{e}_x) \cdot \vec{E}).$$

ここで、単位ベクトル $(\vec{e}_z + \vec{e}_x)/\sqrt{2}$ は \nearrow の方向であることに注意。

- “ \searrow ” 偏光板の役割：

$$\vec{E} \Rightarrow \frac{1}{2}(\vec{e}_z - \vec{e}_x)((\vec{e}_z - \vec{e}_x) \cdot \vec{E}).$$

ここで、単位ベクトル $(\vec{e}_z - \vec{e}_x)/\sqrt{2}$ は \searrow の方向であることに注意。

ここで、 $\vec{\alpha} \cdot \vec{\beta}$ は、ベクトル $\vec{\alpha}$ とベクトル $\vec{\beta}$ の内積を表す。

記号が煩雑になるのを避けるため、ディラックが導入したブラケット記法 (Bra-Ket notation) を使って説明しよう。この場合、

- ケット (Ket)：この節では、ベクトルを表す。例えば、

$$\begin{aligned} |\vec{E}\rangle &= \vec{E}, \\ |\updownarrow\rangle &= \vec{e}_z, \\ |\leftrightarrow\rangle &= \vec{e}_x, \\ |\nearrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\updownarrow\rangle + |\leftrightarrow\rangle), \\ |\searrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\updownarrow\rangle - |\leftrightarrow\rangle), \end{aligned}$$

のように使う。

- ブラ (Bra)：ケットに作用して内積を作る操作を表す。この節では、たとえば、任意のケット $|\alpha\rangle = \vec{\alpha}$ に対し

$$\begin{aligned} \langle \vec{E} | &: \langle \vec{E} | \vec{\alpha} \rangle = \vec{E} \cdot \vec{\alpha}, \\ \langle \updownarrow | &: \langle \updownarrow | \vec{\alpha} \rangle = \vec{e}_z \cdot \vec{\alpha}, \\ \langle \leftrightarrow | &: \langle \leftrightarrow | \vec{\alpha} \rangle = \vec{e}_x \cdot \vec{\alpha}, \\ \langle \nearrow | &: \langle \nearrow | \vec{\alpha} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_z + \vec{e}_x) \cdot \vec{\alpha}, \\ \langle \searrow | &: \langle \searrow | \vec{\alpha} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_z - \vec{e}_x) \cdot \vec{\alpha}, \end{aligned}$$

となる作用を示す。

ブラケット記法を用いると、偏光板の役割は

- “ \updownarrow ” 偏光板の役割： $|\updownarrow\rangle\langle\updownarrow|$

$$|\vec{E}\rangle \Rightarrow |\updownarrow\rangle\langle\updownarrow|\vec{E}\rangle$$

- “ \leftrightarrow ” 偏光板の役割： $|\leftrightarrow\rangle\langle\leftrightarrow|$

$$|\vec{E}\rangle \Rightarrow |\leftrightarrow\rangle\langle\leftrightarrow|\vec{E}\rangle$$

- “ \nearrow ” 偏光板の役割： $|\nearrow\rangle\langle\nearrow|$

$$|\vec{E}\rangle \Rightarrow |\nearrow\rangle\langle\nearrow|\vec{E}\rangle$$

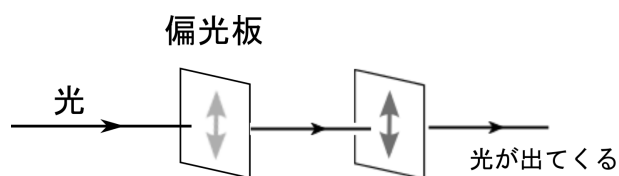
- “ \searrow ” 偏光板の役割： $|\searrow\rangle\langle\searrow|$

$$|\vec{E}\rangle \Rightarrow |\searrow\rangle\langle\searrow|\vec{E}\rangle$$

と簡潔に書き下すことができる。

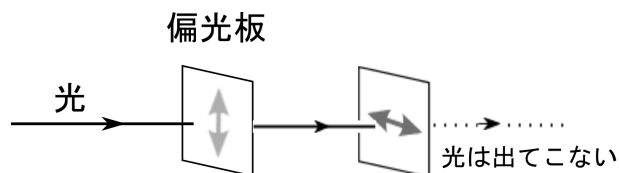
ブラケット記法を用いて、SG 類似実験を理解してみよう。

- SG_{zz} 類似実験



$$|\updownarrow\rangle\langle\updownarrow|\updownarrow\rangle\langle\updownarrow| = |\updownarrow\rangle\langle\updownarrow|$$

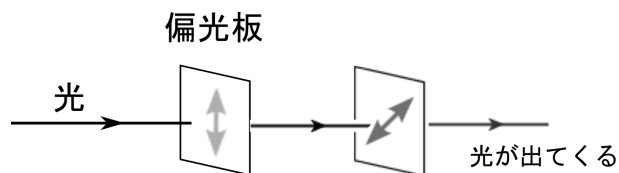
となって “ \updownarrow ” 偏光板が一枚ある場合に等しい。 $\langle\updownarrow|\updownarrow\rangle = 1$ に注意。



$$|\leftrightarrow\rangle\langle\leftrightarrow|\updownarrow\rangle\langle\updownarrow| = 0$$

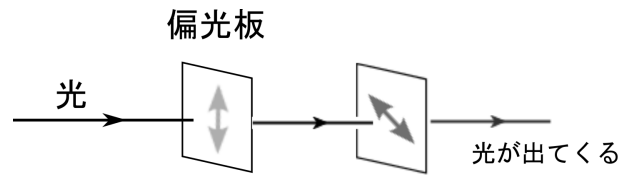
したがって、光はでてこない。 $\langle\leftrightarrow|\updownarrow\rangle = 0$ に注意。

- SG_{zx} 類似実験



$$|\nearrow\rangle\langle\nearrow|\updownarrow\rangle\langle\updownarrow| = \frac{1}{\sqrt{2}}|\nearrow\rangle\langle\updownarrow|$$

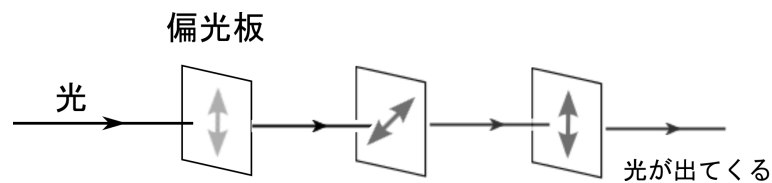
$\langle\nearrow|\updownarrow\rangle = 1/\sqrt{2}$ に注意。



$$|\nearrow\rangle\langle\nearrow|\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \frac{1}{\sqrt{2}}|\nearrow\rangle\langle\downarrow|$$

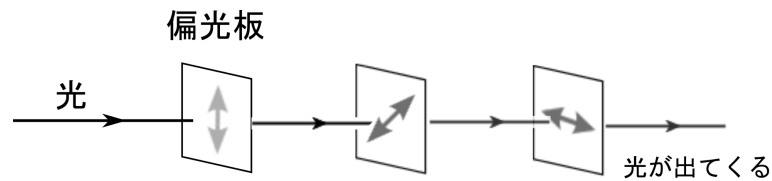
$\langle\nearrow|\downarrow\rangle = 1/\sqrt{2}$ に注意。

- SG_{zxx} 類似実験



$$|\downarrow\rangle\langle\swarrow|\nwarrow\rangle\langle\nwarrow|\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow|$$

$\langle\downarrow|\swarrow\rangle = \langle\nwarrow|\downarrow\rangle = 1/\sqrt{2}$ に注意。



$$|\leftrightarrow\rangle\langle\leftrightarrow|\swarrow\rangle\langle\nwarrow|\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \frac{1}{2}|\leftrightarrow\rangle\langle\downarrow|$$

$\langle\leftrightarrow|\swarrow\rangle = \langle\nwarrow|\downarrow\rangle = 1/\sqrt{2}$ に注意。

- SG_{zzx} 類似実験、SG_{xzz} 類似実験、SG_{zxx} 類似実験について各自考えてみよう。

偏光板の働きを理解するための鍵は、ベクトルの重ね合わせと内積。

1.5 状態の重ね合わせと SG 実験

光の偏極のときと同様の方法を使って、SG 装置の振る舞いを理解するには、銀原子の $S_z \uparrow$ 状態と $S_z \downarrow$ 状態の重ね合わせを考える必要がある。¹そこで、偏光のときと同様に、ディラックのブラケット記法を使って、銀原子の状態を表すことにする。

- 銀原子の $S_z \uparrow$ 状態： $|S_z \uparrow\rangle$
- 銀原子の $S_z \downarrow$ 状態： $|S_z \downarrow\rangle$

¹このように状態の「重ね合わせ」を考えることが、古典力学と異なる量子力学の本質的特徴である。

内積は

$$\langle S_z \uparrow | S_z \uparrow \rangle = \langle S_z \downarrow | S_z \downarrow \rangle = 1, \quad \langle S_z \uparrow | S_z \downarrow \rangle = \langle S_z \downarrow | S_z \uparrow \rangle = 0.$$

SG 実験と偏光との対応

$$\begin{aligned} S_z \uparrow \text{銀原子} &\Leftrightarrow \text{“}\uparrow\text{” 偏光,} & S_z \downarrow \text{銀原子} &\Leftrightarrow \text{“}\leftrightarrow\text{” 偏光} \\ S_x \uparrow \text{銀原子} &\Leftrightarrow \text{“}\nearrow\text{” 偏光,} & S_x \downarrow \text{銀原子} &\Leftrightarrow \text{“}\nwarrow\text{” 偏光} \end{aligned}$$

に注意すると、銀原子の $S_x \uparrow$ 状態と $S_x \downarrow$ 状態は

$$\begin{aligned} |S_x \uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|S_z \uparrow\rangle + |S_z \downarrow\rangle), \\ |S_x \downarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|S_z \uparrow\rangle - |S_z \downarrow\rangle), \end{aligned}$$

であることが期待される。

この解釈では、銀原子の磁気双極子モーメントの任意の状態は、 $|S_z \uparrow\rangle$ と $|S_z \downarrow\rangle$ との重ね合わせの状態

$$|S\rangle = |S_z \uparrow\rangle s_{z\uparrow} + |S_z \downarrow\rangle s_{z\downarrow} \quad (1.2)$$

で書き表される。ここで、 $s_{z\uparrow}$ と $s_{z\downarrow}$ は $|s_{z\uparrow}|^2 + |s_{z\downarrow}|^2 = 1$ となる複素数。(複素数とせねばならない事情については、演習問題を参照。) 同じ状態 $|S\rangle$ は、 $|S_x \uparrow\rangle$ と $|S_x \downarrow\rangle$ との重ね合わせの状態としても

$$|S\rangle = |S_x \uparrow\rangle s_{x\uparrow} + |S_x \downarrow\rangle s_{x\downarrow}, \quad (1.3)$$

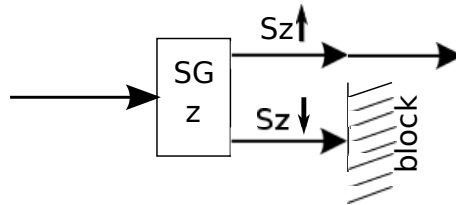
と書き表すことができるはずで、重ね合わせの係数 $s_{x\uparrow}$, $s_{x\downarrow}$ は

$$\begin{pmatrix} s_{x\uparrow} \\ s_{x\downarrow} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} s_{z\uparrow} \\ s_{z\downarrow} \end{pmatrix}, \quad T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

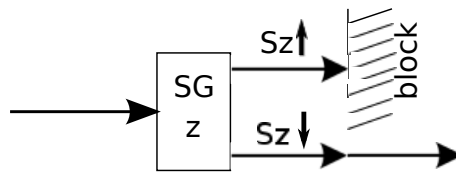
と計算できる (各自、確かめてみよ)。

この解釈で、SG 実験の結果を正しく説明できることを、具体的に見てみよう。

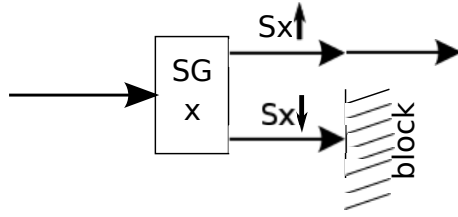
- $S_z \uparrow$ だけを通過させる SG_z 装置の役割: $|S_z \uparrow\rangle \langle S_z \uparrow|$



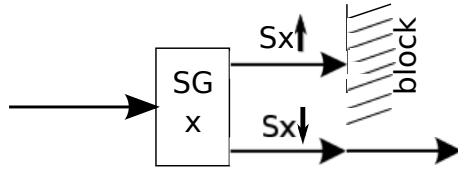
- $S_z \downarrow$ だけを通過させる SG_z 装置の役割: $|S_z \downarrow\rangle \langle S_z \downarrow|$



- $S_x \uparrow$ だけを通過させる SG_x 装置の役割: $|S_x \uparrow\rangle \langle S_x \uparrow|$

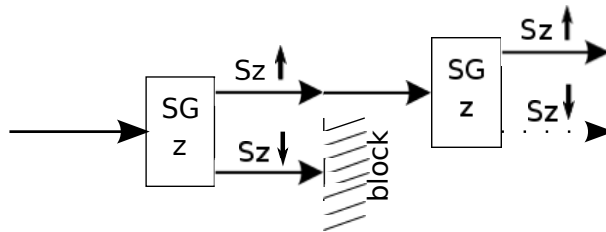


- $S_x \downarrow$ だけを通過させる SG_x 装置の役割: $|S_x \downarrow\rangle \langle S_x \downarrow|$



であることに着目する。これより

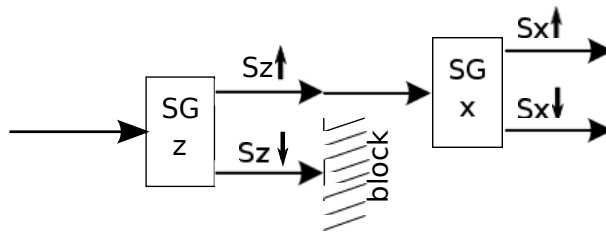
- SG_{zz} 装置



$$|S_z \uparrow\rangle \langle S_z \uparrow | S_z \uparrow\rangle \langle S_z \uparrow| = |S_z \uparrow\rangle \langle S_z \uparrow|,$$

$$|S_z \downarrow\rangle \langle S_z \downarrow | S_z \uparrow\rangle \langle S_z \uparrow| = 0.$$

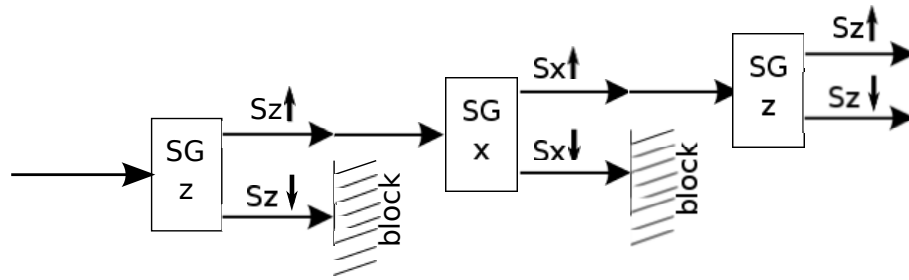
- SG_{zx} 装置



$$|S_x \uparrow\rangle \langle S_x \uparrow | S_z \uparrow\rangle \langle S_z \uparrow| = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x \uparrow\rangle \langle S_z \uparrow|,$$

$$|S_x \downarrow\rangle \langle S_x \downarrow | S_z \uparrow\rangle \langle S_z \uparrow| = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x \downarrow\rangle \langle S_z \uparrow|.$$

- SG_{zxx} 装置



$$|S_z \uparrow\rangle \langle S_z \uparrow| S_x \uparrow\rangle \langle S_x \uparrow| S_z \uparrow\rangle \langle S_z \uparrow| = \frac{1}{2} |S_z \uparrow\rangle \langle S_z \uparrow|,$$

$$|S_z \downarrow\rangle \langle S_z \downarrow| S_x \uparrow\rangle \langle S_x \uparrow| S_z \uparrow\rangle \langle S_z \uparrow| = \frac{1}{2} |S_z \downarrow\rangle \langle S_z \downarrow|.$$

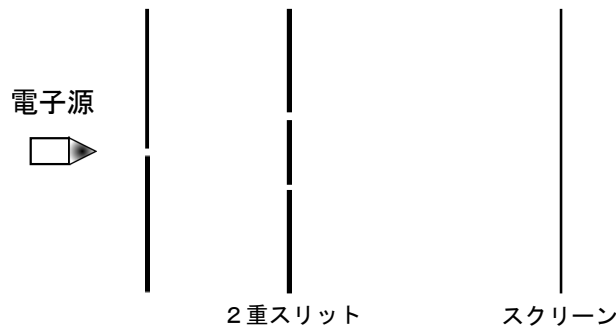
- SG_{zxx} 装置、SG_{xzz} 装置、SG_{zxxz} 装置について各自考えてみよう。

となり、SG 実験の結果を正しく説明できる。

1.6 2重スリット実験

前節までで、SG 実験の結果を説明しようとする、状態の「重ね合わせ」を考えねばならないことを説明した。状態の「重ね合わせ」の概念の必要性を示すもうひとつの実験結果（2重スリット実験）を紹介しよう。

1989年に外村彰らは、次図のように点状の電子線源から、ひとつずつ電子を発射させ、2重スリットを通過させたあとで、スクリーンのどこの場所に当たったかを調べる実験を行った。この実験については、印象的な写真とビデオが<http://www.hitachi.com/rd/portal/highlight/quantum/#anc04>（日立製作所のウェブページ）に置いてある。



電子はひとつずつスクリーンに到達し、実験開始直後にスクリーンに当たった電子の場所は、写真 a や写真 b（ハイパーテキスト）の白点のようになる。ここで、写真 b は写真 a よりも後の時刻にとったデータであり、より多くの電子が到達している。これらの写真を見ると、ひとつひとつの電子がスクリーン上の各点に到達しており、電子がたしかに粒子として振舞っていることがわかる。スクリーンで位置を測定した時点で、その位置が点として確定している。

しかしながら、より長い時間の記録（スクリーン上の電子の到達場所）を写真にすると写真 c や写真 d（ハイパーテキスト）のようになり、明らかな干渉縞が現れ、なんらかの意味で電子が波動

として振る舞うことが明らかになった。この間、電子はひとつずつ発射されており、この装置のなかで同時に存在する電子の数はひとつだけであったことに注意すること。

1.7 粒子と波動関数

前節の実験の結果から、電子が位置の確定した点として、つまり粒子としての性質を持つとともに、干渉縞という波動としての性質を併せ持つことが可視化された。では、この結果が、状態の「重ね合わせ」でどのように理解できるかを考えてみよう。

電子の位置が座標 x に確定した状態を

$$|x\rangle$$

とする²。式 (1.2) や式 (1.3) で見たように、一般の状態は、線形独立な状態の「重ね合わせ」である。座標 x は連続的な変数なので、式 (1.2) や式 (1.3) での和の代わりに積分で「重ね合わせ」を書き下すと、一般の状態は、

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \psi(x),$$

と書くことができる。ここで、 $\psi(x)$ は波動関数と呼ばれる「重ね合わせ」の係数である。量子力学では、位置が確定した粒子としての性質は状態 $|x\rangle$ が受け持ち、波動として性質は波動関数 $\psi(x)$ が受け持っている。

² この節以降、しばらくの間、波動関数を考えるときに、空間は x 方向 1 次元だけを考えることにする。 y 方向、 z 方向まで含めて 3 次元に拡張することは容易である。

演習問題で見ると、重ね合わせの係数(波動関数) $\psi(x)$ は一般的には複素数である。位置が確定した状態の内積を

$$\langle x'|x \rangle = \delta(x - x')$$

として、状態 $|\psi\rangle$ 同士の内積を考えてみよう。ここで $\delta(x - x')$ はディラックのデルタ関数である。ディラックのデルタ関数は、任意の関数 $f(x)$ に対し

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

となる性質を持つ。

内積 $\langle \psi|\psi \rangle$ が正定値の実数となるように、ブラ $\langle \psi|$ は波動関数 ψ の複素共軛³ をとって

$$\langle \psi| = \int dx' \psi^*(x') \langle x'|$$

とする。つまり、内積が

$$\langle \psi_1|\psi_2 \rangle = \int dx \int dx' \psi_1^*(x') \psi_2(x) \langle x'|x \rangle = \int dx \psi_1^*(x) \psi_2(x)$$

となるようにしておく。従って、 $\langle \psi_1|\psi_2 \rangle$ の複素共軛は

$$(\langle \psi_1|\psi_2 \rangle)^* = \langle \psi_2|\psi_1 \rangle$$

であることを注意しておく。上記の内積の定義から

$$\langle \psi|\psi \rangle \geq 0$$

を示すことは容易である。

区間 $x_0 < x < x_1$ に粒子を見出す測定装置の役割は

$$\int_{x_0}^{x_1} dx' |x' \rangle \langle x'|$$

で与えられる。つまり、

$$\int_{x_0}^{x_1} dx' |x' \rangle \langle x'| \psi \rangle = \int_{x_0}^{x_1} dx' \int dx |x' \rangle \langle x'| \psi(x) = \int_{x_0}^{x_1} dx |x \rangle \psi(x)$$

である。

2 波動関数とシュレディンガー方程式

2.1 群速度

1次元の複素数の波動で x 方向正の向きに進む平面波

$$\psi_k(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx - \omega t)} \quad (2.1)$$

³ 「共役」という表記は「共軛」の代用(「軛」が常用漢字ではないため)。「軛」の音読みは「ヤク」(呉音)または「アク」(漢音)。訓読みは「くびぎ」。したがって、「共軛」を「きょうえき」と発音してはならない。「軛(くびぎ)」は、牛車で複数の牛を横につなぐ棒のことを意味するらしい。転じて、数学でふたつの量がセットになっているときに使われる漢字である。「共役」という語で代用すると、このニュアンスが伝わりにくく、しばしば誤読を誘発する。そこで、この講義ノートでは「共軛」と書くことにする。

を考える。ここで k は波数であり、波長 λ を用いて $k = 2\pi/\lambda$ と書ける。また、 ω は角振動数であり、振動数 ν を用いて $\omega = 2\pi\nu$ で与えられる。

平面波 (2.1) が、なんらかの波動方程式 (t と x の偏微分方程式) の解であるとする、角振動数 ω は、波数 k の関数

$$\omega = \omega(k) \quad (2.2)$$

になる。この関係 (2.2) を分散関係 (dispersion relation) と呼ぶ。例えば、真空中の光 (電磁波) の伝播の場合は、 c を光速として

$$\omega = kc$$

となり分散関係は線形になっている。

この章でのとりあえずの目標は、自由粒子の状態

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \psi(x)$$

をあらわす波動関数 ψ にとっての適切な分散関係を求めることである。

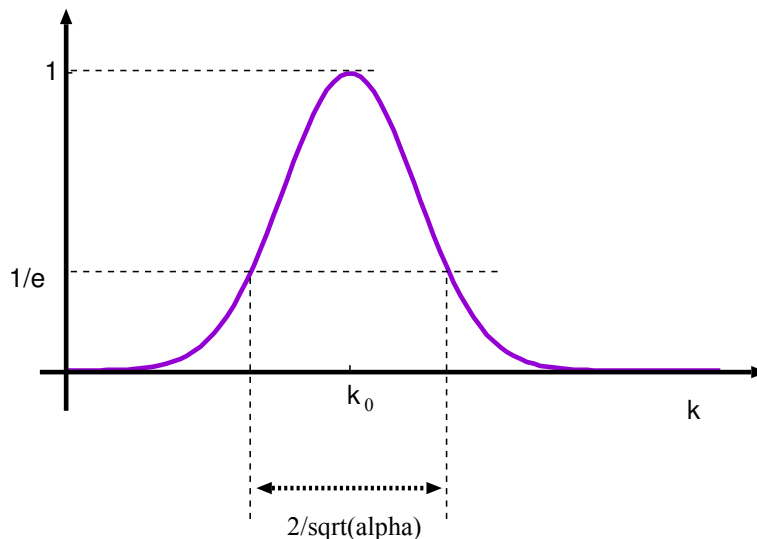
平面波のように無限に広がった波動ではなく、有限の領域に局在する波動で、遠方からはあたかも点粒子のように見える波 (波束) を構成してみよう。そのために次のような平面波の重ね合わせを考える。

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} A(k) e^{i(kx - \omega t)}. \quad (2.3)$$

ここで波数 k の関数 $A(k)$ は

$$A(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2/2}$$

で与えられる。 α は正の実数とする。下図のように、 $|A|^2$ は波数空間で k_0 を中心とし幅 $2/\sqrt{\alpha}$ 程度に広がっていることに注意。



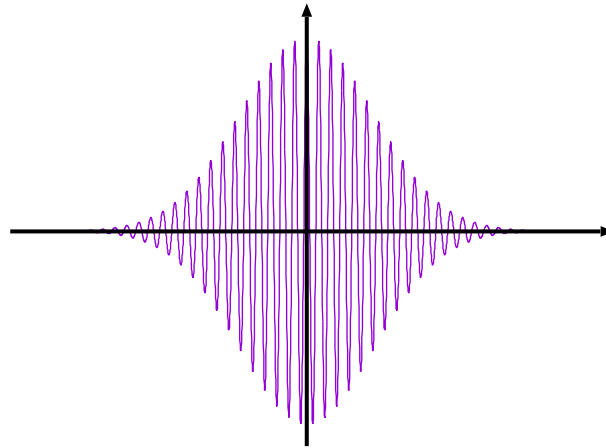
時刻 $t = 0$ での ψ を具体的に求めてみる。(各自、チェックしてみよ。)

$$\begin{aligned}
 \psi(x, 0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} A(k) e^{ikx} \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp \left[-\frac{\alpha}{2} (k - k_0)^2 + ikx \right] \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp \left[-\frac{\alpha}{2} \left(k - k_0 - i\frac{x}{\alpha} \right)^2 - \frac{x^2}{2\alpha} + ik_0x \right] \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \exp \left(-\frac{x^2}{2\alpha} \right) e^{ik_0x}.
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

上の式の最終行の式変形で、ガウス積分の公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dX e^{-X^2} = \sqrt{\pi}$$

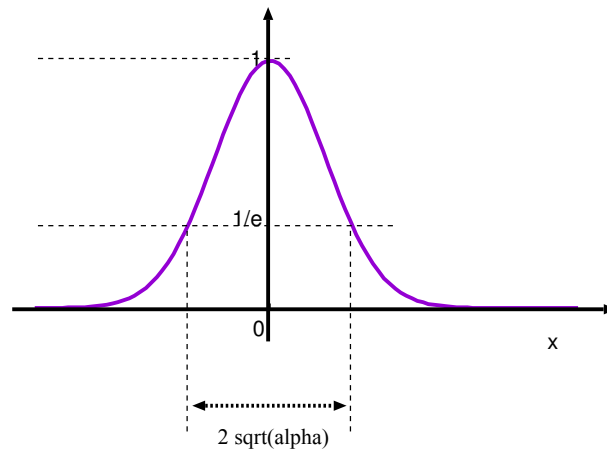
を用いた。 $\psi(x, 0)$ の実数部をプロットすると



となって $x = 0$ 近辺に局在した波束になっていることがわかる。空間での波束の拡がりをもう少し見やすくするために

$$\frac{|\psi(x, 0)|^2}{|\psi(0, 0)|^2} = \exp \left(-\frac{x^2}{\alpha} \right).$$

をプロットすると



が得られ、 $x = 0$ 近辺に $2\sqrt{\alpha}$ の拡がりを持っていることがわかる。

この波束において、波数空間 k での拡がり $\Delta k \sim 2/\sqrt{\alpha}$ と座標空間 (実空間) x での拡がり $\Delta x \sim 2\sqrt{\alpha}$ が反比例していること

$$\Delta k \cdot \Delta x \sim 4$$

の帰結をあとで議論するので覚えておくこと。

次に、式 (2.3) で与えられる波束が時刻 $t > 0$ でどのように振る舞うかを考えてみよう。そのためには、分散関係 $\omega(k)$ を具体的に与える必要があるが、ここでは、 $k = k_0$ の近傍でテイラー展開

$$\omega(k) = \omega_0 + (k - k_0)v_g + \frac{1}{2}(k - k_0)^2\beta + \dots,$$

$$\omega_0 = \omega(k_0), \quad v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}, \quad \beta = \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k=k_0},$$

の 2 次までで近似して計算してみよう。このとき、

$$kx - \omega t \simeq (k_0x - \omega_0t) + (k - k_0)(x - v_g t) - \frac{1}{2}(k - k_0)^2\beta t$$

であることを使うと

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} A(k) e^{i(kx - \omega t)} \\ &\simeq e^{i(k_0x - \omega_0t)} \int \frac{dk}{2\pi} \exp \left[-\frac{\alpha}{2}(k - k_0)^2 + i(k - k_0)(x - v_g t) - \frac{i}{2}\beta t(k - k_0)^2 \right] \\ &= e^{i(k_0x - \omega_0t)} \int \frac{dk}{2\pi} \exp \left[-\frac{1}{2}(\alpha + i\beta t) \left(k - k_0 - i \frac{x - v_g t}{\alpha + i\beta t} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{(x - v_g t)^2}{\alpha + i\beta t} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\alpha + i\beta t}} e^{i(k_0x - \omega_0t)} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{(x - v_g t)^2}{\alpha + i\beta t} \right) \end{aligned} \quad (2.5)$$

が得られる。ここで、最後の行の式変形でガウス積分の公式を用いた。

空間での波束の拡がりの様子をより見やすくするために、

$$\frac{|\psi(x, t)|^2}{|\psi(0, 0)|^2} = \sqrt{\frac{\alpha^2}{\alpha^2 + \beta^2 t^2}} \exp \left[-\frac{\alpha(x - v_g t)^2}{\alpha^2 + \beta^2 t^2} \right] \quad (2.6)$$

と式変形する。式 (2.6) からわかることは以下の通りである。

- 時刻 t での波束の中心 (絶対値が最大になる場所) は $x = v_g t$ であり、この波束は速度 v_g で移動している。

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} \quad (2.7)$$

を波束の群速度 (group velocity) と呼ぶ。

- 時刻 t での波束の拡がりは $\sqrt{\alpha + \beta^2 t^2}/\alpha$ に比例している。つまり、波束は時間と共にその幅が広がっていく。例外は、真空中の電磁波の伝播のように分散関係が線形の場合、つまり

$$\beta = \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k=k_0} \quad (2.8)$$

で与えられる β がゼロのときであり、このとき、波束は群速度 v_g でそのまま形を変えずに移動していく。

このように分散関係 $\omega = \omega(k)$ が波束の伝播の様子を決定することがわかる。

2.2 確率解釈

真空中の光の伝播の場合は、電場の大きさの自乗 \vec{E}^2 が伝播する光の強度に比例する。ブラケット記法では、この量は

$$\langle \vec{E} | \vec{E} \rangle = \vec{E}^2$$

と書ける。“ \uparrow ” 偏光板 ($|\uparrow\rangle\langle\uparrow|$) を通った後の電場は

$$|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \vec{E}$$

と書けることに注意すると、そのときの光の強度は

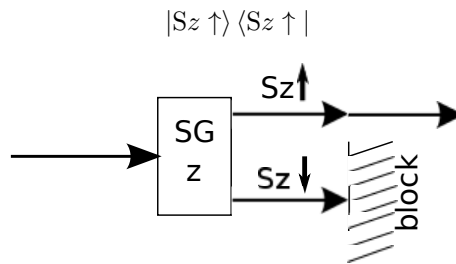
$$\langle \vec{E} | \uparrow\rangle\langle\uparrow| \uparrow\rangle\langle\uparrow| \vec{E} \rangle = \langle \vec{E} | \uparrow\rangle\langle\uparrow| \vec{E} \rangle$$

のように $\langle \star | \star \rangle$ の形で書けることがわかる。

SG 実験での対応を考えよう。銀原子はひとつずつ SG 装置を通過するので、ビーム強度は考えることができない。 $\langle \star | \star \rangle$ によって与えられるのは、SG 実験の場合は、銀原子の通過確率であると考えられる。たとえば、状態

$$|S\rangle = |S_z \uparrow\rangle_{s_{z\uparrow}} + |S_z \downarrow\rangle_{s_{z\downarrow}}$$

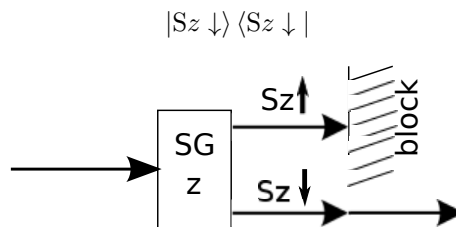
の銀原子が $S_z \uparrow$ だけを通過させる SG_z 装置



を通過する確率は、この状態に $|S_z \uparrow\rangle\langle S_z \uparrow|$ を作用させた状態が $|S_z \uparrow\rangle\langle S_z \uparrow|S\rangle = |S_z \uparrow\rangle_{s_{z\uparrow}}$ であることから、

$$\langle S | S_z \uparrow\rangle\langle S_z \uparrow | S_z \uparrow\rangle\langle S_z \uparrow | S \rangle = \langle S | S_z \uparrow\rangle\langle S_z \uparrow | S \rangle = |s_{z\uparrow}|^2$$

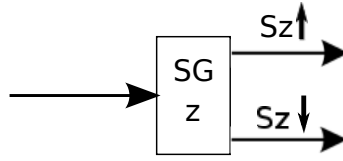
で与えられる。同様に $S_z \downarrow$ だけを通過させる SG_z 装置



を通過する確率は

$$\langle S | S_z \downarrow\rangle\langle S_z \downarrow | S_z \downarrow\rangle\langle S_z \downarrow | S \rangle = \langle S | S_z \downarrow\rangle\langle S_z \downarrow | S \rangle = |s_{z\downarrow}|^2$$

で与えられる。ただし、もともとの SG_z 装置



は、銀原子を $S_z \uparrow$ か $S_z \downarrow$ のどちらかの状態に必ず決定するので、確率の和は

$$|s_{z\uparrow}|^2 + |s_{z\downarrow}|^2 = 1$$

を満たさねばならない⁴。

同様の考察を波動関数 $\psi(x)$ で表される状態

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \psi(x)$$

について行ってみよう⁵。

区間 $x_0 < x < x_1$ のどこかに粒子を見出す測定装置の役割が

$$\int_{x_0}^{x_1} dx' |x'\rangle \langle x'|$$

だったことを思い出すと、この測定装置を通過後の状態は

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_1} dx' |x'\rangle \langle x'|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{x_0}^{x_1} dx' |x'\rangle \langle x'|x\rangle \psi(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{x_0}^{x_1} dx' |x'\rangle \delta(x-x') \psi(x) \\ &= \int_{x_0}^{x_1} dx |x\rangle \psi(x) \end{aligned}$$

である。つまり、区間 $x_0 < x < x_1$ のどこかに粒子を見出す確率は

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_1} dx' \int_{x_0}^{x_1} dx \langle x'|x\rangle \psi^*(x') \psi(x) &= \int_{x_0}^{x_1} dx' \int_{x_0}^{x_1} dx \delta(x-x') \psi^*(x') \psi(x) \\ &= \int_{x_0}^{x_1} dx \psi^*(x) \psi(x) \end{aligned}$$

で与えられる。

このことから、

$$P(x) = |\psi(x)|^2 = \psi^*(x) \psi(x)$$

が確率密度を表すことがわかる。つまり、

$$P(x)dx$$

は、 x から $x + dx$ までの微小区間に粒子を見出す確率である。

とくに $x_0 = -\infty, x_1 = +\infty$ の場合は、この区間のどこかにはかならず粒子が存在するはずなので、確率は 1 でなければならない。つまり、波動関数は、条件

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

⁴ 実は、このことを説明せずに §.1 で既にこの事実を使っていた。

⁵ ここでは、特定の時刻 t について考えることとし、時間変数 t をあらわに書かない。

を満たさねばならない。この条件は、波動関数の規格化条件と呼ばれる。

規格化されていない波動関数 $\psi(x)$ が与えられた場合、もし、積分

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2$$

が有限の値を持てば、定数倍 (N 倍)

$$\psi_{\text{norm}}(x) = N\psi(x),$$

$$N = \frac{1}{\sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2}}$$

することで規格化された波動関数 ψ_{norm} を構成するのは容易である。

状態

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \psi(x)$$

が、ふたつの状態

$$|\psi_1\rangle = \int dx |x\rangle \psi_1(x), \quad |\psi_2\rangle = \int dx |x\rangle \psi_2(x)$$

の重ね合わせで

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle, \quad \psi(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$$

のように書けると、確率密度は

$$|\psi(x)|^2 \neq |c_1|^2|\psi_1(x)|^2 + |c_2|^2|\psi_2(x)|^2$$

であることに注意しよう。正しい確率密度は

$$|\psi(x)|^2 = |c_1|^2|\psi_1(x)|^2 + |c_2|^2|\psi_2(x)|^2 + 2\text{Re}(c_1c_2^*\psi_1(x)\psi_2^*(x))$$

を計算せねばならない。この式の最後の項を干渉項と呼び、2重スリット実験で干渉縞があらわれる起源となっている。

2.3 分散関係からシュレディンガー方程式へ

前節では、

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

が確率密度を与えることがわかった。また、前々節では、波数空間で $k = k_0$ にピークをもつ波束を作ったとき、座標空間での波束の移動の速度が群速度

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}$$

で与えられることを見た。このことから、質量 m の自由粒子を表す波動関数 $\psi(x, t)$ にとって、どのような分散関係 $\omega = \omega(k)$ が適切かを考えてみよう。そのためには、古典力学での運動量 p_0 の自由粒子の速度と波動関数の波束の群速度に対応をつけてみる。

$$\left. \frac{dE}{dp} \right|_{p=p_0} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}. \quad (2.9)$$

ここで古典力学での質量 m の粒子の運動量 p とエネルギー E が

$$p = mv, \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

で与えられ、運動量 p を持つ粒子の速度 v は

$$v = \frac{p}{m} = \frac{d}{dp} \left(\frac{p^2}{2m} \right) = \frac{dE}{dp}$$

と表されることを用いた。

式 (2.9) の左辺は古典力学の点粒子の性質、右辺は波動関数の波束の性質を表す量で書いてあることに注意。 E と ω に対応関係があり、 p と k に対応関係があると考えればよさそうである。ここでは、比例定数 \hbar をおいて、対応関係を

$$(E, p) \Leftrightarrow (\hbar\omega, \hbar k)$$

としてみる。このようにして考えると、古典力学でのエネルギーと運動量の関係が、分散関係 $\omega = \omega(k)$ に対応すると考えることができ、対応関係

$$E = \frac{p^2}{2m} \Leftrightarrow \hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

が得られる。つまり、質量 m の自由粒子を表す量子力学の波動関数の分散関係は

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \tag{2.10}$$

であることが期待できる。

では、式 (2.10) の分散関係を導く波動方程式はどのようなものだろうか。平面波

$$\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \tag{2.11}$$

に対し、

$$\hbar\omega\psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t), \quad \hbar k\psi(x, t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x, t),$$

であることから、

$$E \Leftrightarrow \hbar\omega \Leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \tag{2.12}$$

$$p \Leftrightarrow \hbar k \Leftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \tag{2.13}$$

との対応関係をつけることができ、

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

に対応する波動方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t) \tag{2.14}$$

であることがわかる。実際、平面波 (2.11) を式 (2.14) に代入して、分散関係 (2.10) を得ることは容易である。式 (2.14) は、自由粒子に対するシュレディンガー (Schrödinger) 方程式と呼ばれ、量子力学において、波動関数の時間発展を求めるために用いられる基礎方程式である。

ポテンシャル $V(x)$ 中の粒子の運動を表す波動方程式は、

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

から、前述の対応関係を用いて、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t) \quad (2.15)$$

であると考えられる。式 (2.15) はポテンシャル中の 1 粒子の量子力学を記述するシュレディンガー方程式になっている。⁶

比例定数 \hbar は、プランク定数⁷ と呼ばれる物理定数である。プランク定数の物理次元は角運動量と同じ (長さ × 運動量) である。精密測定によってその値は

$$\hbar = 1.054\,571\,726(47) \times 10^{-34} \text{ J s}$$

であることが知られている。ここで (47) は最後の 2 桁に対する誤差を表す。

2.4 運動量空間での波動関数と不確定性関係

これまでは位置が確定した状態 $|x\rangle$ の重ね合わせ

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \psi(x) \quad (2.16)$$

として状態 $|\psi\rangle$ を考えてきた⁸。波動関数として平面波

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

を選ぶと、これは波数が $k = p/\hbar$ に確定した波である。運動量と波数の関係から、この波動関数で表される状態

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle e^{ipx/\hbar} \quad (2.17)$$

は、運動量が p に確定した状態である。位置が確定した状態から運動量が確定した状態をつくる操作は、おおむねフーリエ変換に対応していることがわかる。運動量が確定した状態の内積は

$$\begin{aligned} \langle p'|p\rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x'|x\rangle e^{i(p'x - px)/\hbar} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x') e^{i(p'x - px)/\hbar} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i(p-p')x/\hbar} \\ &= \delta(p - p') \end{aligned}$$

が得られる。式 (2.17) とは逆に、運動量が確定した状態 $|p\rangle$ を用いて、位置が確定した状態 $|x\rangle$ を書き表すことも容易である (逆フーリエ変換に対応する)。

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp |p\rangle e^{-ipx/\hbar}. \quad (2.18)$$

⁶ より系統的な「量子化」の手続きでのシュレディンガー方程式の導入は、§. 5.7 で触れることになる。

⁷ $h = 2\pi\hbar$ をプランク定数と呼び、 \hbar を換算プランク定数と呼ぶ場合もある。量子力学の問題を解く上で、 h ではなく \hbar を基本定数だと考える方が計算がやりやすい。

⁸ この節でも特定の時刻 t のみについて考えることとし、時間変数 t をあらわに書かない。

実際に、式 (2.18) が成り立つことを、式 (2.18) の右辺に (2.17) を代入して、各自、確かめてみよ。
状態 (2.16) の積分変数を x' に書き直し

$$|\psi\rangle = \int dx' |x'\rangle \psi(x')$$

ブラ $\langle x|$ を作用させると

$$\begin{aligned} \langle x|\psi\rangle &= \int dx' \langle x|x'\rangle \psi(x') \\ &= \int dx' \delta(x' - x) \psi(x') \\ &= \psi(x) \end{aligned}$$

が得られる。つまり、波動関数 $\psi(x)$ は $\langle x|\psi\rangle$ に他ならない。波動関数の複素共軛は

$$\langle \psi| = \int dx' \psi^*(x') \langle x'|$$

と $|x\rangle$ との内積をとって

$$\langle \psi|x\rangle = \psi^*(x)$$

となる。同様に、状態 (2.16) にブラ $\langle p|$ を作用させると

$$\begin{aligned} \langle p|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \int dx' e^{-ipx/\hbar} \langle x|x'\rangle \psi(x') \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \\ &= \tilde{\psi}(p) \end{aligned}$$

が得られる。ここで、 $\tilde{\psi}(p)$ は

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \quad (2.19)$$

で定義される関数で、これは本質的に波動関数のフーリエ変換に他ならない。式 (2.19) は運動量空間での波動関数と呼ばれ、もとの状態 $|\psi\rangle$ は、運動量空間での波動関数 $\tilde{\psi}$ を用いて

$$|\psi\rangle = \int dp |p\rangle \tilde{\psi}(p) \quad (2.20)$$

のように表示することもできる。

$$\langle \psi|p\rangle = \tilde{\psi}^*(p)$$

を示すことも容易である。

表式 (2.16) と (2.20) が、 x と p の入れ替えにとって対称的であることに注意すること。また、

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle, \quad \tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle \quad (2.21)$$

も対称的である。座標空間での波動関数 $\psi(x)$ を使う代わりに、運動量空間の波動関数 $\tilde{\psi}(x)$ を使っても、同じように状態を指定することができる。

最後に、座標空間での波動関数の拡がり と 運動量空間での波動関数の拡がりの間の関係についてコメントしておこう。

座標空間での波動関数が

$$\psi(x) = C \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\alpha}\right) e^{ip_0x/\hbar}$$

であり座標空間での波動関数の拡がり

$$\Delta x \sim 2\sqrt{\alpha}$$

のとき、運動量空間の波動関数は、

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \\ &= C' \exp\left(-\frac{\alpha}{2\hbar^2}(p-p_0)^2\right) e^{i(p-p_0)x_0/\hbar}, \quad C' = \sqrt{\frac{\alpha}{\hbar}} C \end{aligned}$$

であり、その拡がり

$$\Delta p \sim \frac{2\hbar}{\sqrt{\alpha}}$$

と計算できる。つまり座標空間での波動関数の拡がり

$$\Delta x \Delta p \sim 4\hbar.$$

これは §.2.1 で見た波数空間での波束の拡がり

2.5 確率の保存と確率流

§.2.2 で波動関数が規格化されねばならないことを見た。§.2.3 でシュレディンガー方程式を導入し、波動関数がどのように時間発展するかを考えたが、時刻 $t = 0$ で規格化されていた波動関数

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x, t=0)|^2$$

が、シュレディンガー方程式 (2.15) による時間発展の結果、 $t \neq 0$ では規格化条件

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

を満たさなくなる虞はないのだろうか？以下ではこのことを調べていこう。そのため

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x, t)|^2 &= i\hbar \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x, t) \psi(x, t) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x, t) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right] - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(x, t) \right] \psi(x, t) \end{aligned} \quad (2.22)$$

を考える。シュレディンガー方程式とその複素共軛

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

を用いると、式 (2.22) は

$$i\hbar \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x,t)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* \right) \psi - \psi^* \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right) \right] + (V - V^*) \psi^* \psi \right]$$

と変形できる。ここで質量 m は実数であるとした。さらに

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* \right) \psi - \psi^* \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \psi - \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi \right) \right]$$

であることに注意してこの式を計算していくと

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x,t)|^2 &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \psi - \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi \right) \right] \\ &\quad + \int_{-\infty}^{+\infty} dx (V - V^*) \psi^* \psi \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \psi - \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi \right) \right] \Big|_{x=+\infty} \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \psi - \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi \right) \right] \Big|_{x=-\infty} \\ &\quad + \int_{-\infty}^{+\infty} dx (V - V^*) \psi^* \psi. \end{aligned} \quad (2.23)$$

波束で考えたように、波動関数が有限の領域に局在していると考えると式 (2.23) の表面項 ($x = \pm\infty$ の項) はゼロになる。したがって、

$$i\hbar \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x,t)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx (V - V^*) \psi^* \psi$$

が得られ、ポテンシャル V (と質量 m) が実数であれば

$$i\hbar \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x,t)|^2 = 0,$$

言い換えると、確率が保存されていることがわかる。つまり、 $t=0$ で波動関数が規格化されていれば、 $t \neq 0$ での規格化は、シュレディンガー方程式を満たす限り自動的なのである。

以降では、質量 m とポテンシャル V はいつも実数であると仮定する。

全体の確率は保存するが、確率密度

$$P(x,t) = \psi^*(x,t)\psi(x,t)$$

は時間と共に変化することに注意しよう。実際、シュレディンガー方程式を用いて

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} j(x,t), \quad j(x,t) = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi \right) - \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \psi \right)$$

と計算できる。空間3次元の場合は、

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\vec{x},t) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x},t), \quad \vec{j}(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi \right) \quad (2.24)$$

と書ける。 $\vec{j}(\vec{x},t)$ (あるいは $j(x,t)$) は、確率の流れを表すベクトル量であり、確率流 (probability current) と呼ばれる。

電荷密度 $\rho(\vec{x},t)$ と電流密度 $\vec{j}(\vec{x},t)$ を用いて電磁気での電荷保存則が

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

のように書けたことを思い出そう。確率保存の式 (2.24) は上記の電荷保存則の式と類似する式になっている。

2.6 期待値

確率密度が

$$P(x) = \psi^*(x)\psi(x)$$

であることから、粒子の位置 x を測定する場合の期待値 \bar{x} が

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x)x\psi(x) \quad (2.25)$$

で計算できることがわかる⁹。ブラケット記法を用いると式 (2.25) をコンパクトに表記できる。このことを確認するには

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle, \quad \psi^*(x) = \langle\psi|x\rangle,$$

を式 (2.25) の右辺に代入し、

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle\psi|x\rangle x \langle x|\psi\rangle \\ &= \langle\psi| \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle x \langle x| \right) |\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle \end{aligned}$$

と式変形すればよい。つまり、状態 $|\psi\rangle$ における粒子の位置の期待値は、ブラケット記法では

$$\bar{x} = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle \quad (2.26)$$

のようにコンパクトに表記できるのである。ここで、 \hat{x} は

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle x \langle x| \quad (2.27)$$

と定義され、位置演算子と呼ばれる。

同様に、状態 $|\psi\rangle$ の粒子の運動量を測定するときの期待値 \bar{p} は、運動量空間における波動関数がわかれば、

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{\psi}^*(p)p\tilde{\psi}(p)$$

を用いて計算できる。位置の期待値のときと同様の方法で、ブラケット記法を用いた書き直しをすると、

$$\bar{p} = \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle \quad (2.28)$$

とコンパクトに表記できる。ここで \hat{p} は運動量演算子と呼ばれ、

$$\hat{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} dp |p\rangle p \langle p| \quad (2.29)$$

で定義される。

ここで、演算子という耳慣れない単語が現れたので、この単語の意図するところを簡潔に説明しておこう。一般的には、演算子（数学の言葉では作用素）は、集合の元に作用し、別の元を得る写像のことを表すが、量子力学ではケット（ないしブラ）に作用して別のケット（ないしブラ）を作る演算のことを表す。

⁹ この節でも特定の時刻 t のみに着目するので、変数 t をあらわに表示しない。

例えば、位置演算子 \hat{x} が、ケット

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \psi(x)$$

に作用すると

$$\begin{aligned} \hat{x}|\psi\rangle &= \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle x' \langle x'| \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \psi(x) \right) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x'\rangle x' \langle x'|x\rangle \psi(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle x \psi(x) \end{aligned}$$

が得られる。運動量演算子 \hat{p} が、ケット $|\psi\rangle$ に作用すると

$$\begin{aligned} \hat{p}|\psi\rangle &= \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dp |p\rangle p \langle p| \right) |\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp |p\rangle p \tilde{\psi}(p) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp p \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle e^{ipx'/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle e^{ipx'/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{-ipx/\hbar} \right] \psi(x) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle e^{ipx'/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right] \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-ip(x-x')/\hbar} \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle \delta(x' - x) \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right] \end{aligned}$$

が得られる。ここで、1行目から2行目への式変形には、運動量表示の波動関数 $\tilde{\psi}(p)$ を用いて表示したケット $|\psi\rangle$ の式(2.20)を用い、2行目から3行目への変形には、状態 $|p\rangle$ を状態 $|x\rangle$ で表す式(2.17)と運動量表示の波動関数 $\tilde{\psi}(p)$ を座標表示の波動関数 $\psi(x)$ で表す式(2.19)を用いた。4行目から5行目の変形では部分積分を使って x 微分の位置をとりかえ、5行目から6行目では積分順序のとりかえ、それ以降はデルタ関数に関する公式を用いた。

同様に、位置演算子 \hat{x} がブラ

$$\langle\psi| = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \langle x|$$

に作用すると

$$\langle\psi|\hat{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx [x\psi(x)]^* \langle x|$$

を与え、運動量演算子 \hat{p} が $\langle\psi|$ に作用すると

$$\langle\psi|\hat{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right]^* \langle x|$$

となることを示すことは容易である（各自で計算せよ。）

これまでに計算したことより、波動関数 $\psi(x)$ で表される状態に位置演算子 \hat{x} が状態に作用すると、波動関数は

$$\hat{x}: \quad \psi(x) \rightarrow x\psi(x)$$

と写像され、運動量演算子 \hat{p} が作用すると、波動関数は

$$\hat{p}: \quad \psi(x) \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$$

と写像されることがわかった。おおくの教科書では

$$p_{\text{op}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

のような微分演算子として p_{op} が導入され、運動量演算子 \hat{p} と同一の記号で表示している。この同一視は大抵の場合は便利であるが、しばしば概念的な混乱を生じて正確な理解が困難になることがあるので、このノートでは、一貫して \hat{p} と p_{op} を区別して取り扱うことにする。同様に、位置演算子 \hat{x} と位置座標 x も区別して取り扱う。

これから量子力学の問題を解いていく上で、しばしば

$$\langle \psi_1 | \hat{p} | \psi_2 \rangle$$

のような量を計算する必要がある。この場合、 $\langle \psi_1 | \hat{p}$ を先に計算してから $|\psi_2\rangle$ と内積をとって $(\langle \psi_1 | \hat{p} | \psi_2 \rangle)$ を求めればよいのであろうか？それとも、 $\langle \psi_1 |$ と $\hat{p} | \psi_2 \rangle$ との内積 $\langle \psi_1 | (\hat{p} | \psi_2 \rangle)$ を計算せねばならないのであろうか？実は、 \hat{p} の定義 (2.29) がブラとケットについて同等に扱っていたことから期待されるように、このふたつの計算は、最終的には同一の結果を与えるので、どちらか計算がやり易い方法で計算すれば十分である。以下では、このことを波動関数の言葉を使って具体的に確かめてみよう。先に求めた \hat{p} のブラへの作用の仕方から

$$(\langle \psi_1 | \hat{p} | \psi_2 \rangle) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_1(x) \right]^* \psi_2(x)$$

である。一方、ケットへの \hat{p} の作用の仕方からは

$$\langle \psi_1 | (\hat{p} | \psi_2 \rangle) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_1^*(x) \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_2(x) \right]$$

が得られる。その差を計算すると、

$$\begin{aligned} (\langle \psi_1 | \hat{p} | \psi_2 \rangle) - \langle \psi_1 | (\hat{p} | \psi_2 \rangle) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\partial}{\partial x} (\psi_1^*(x) \psi_2(x)) \\ &= 0 \end{aligned}$$

となり、確かに両者が同一の結果を与えることがわかる。

同様に

$$(\langle \psi_1 | \hat{x} | \psi_2 \rangle) = \langle \psi_1 | (\hat{x} | \psi_2 \rangle)$$

を確かめることも容易い（各自でチェックすること）。

量子力学での演算子について、もうひとつ注意せねばならない点は、演算子の積が交換しない場合があることである。例えば、演算子の積 $\hat{x}\hat{p}$ を状態 $|\psi\rangle$ に作用させると

$$\hat{x}\hat{p}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \left[-i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right]$$

であるのに対し、 $\hat{p}\hat{x}$ が作用すると

$$\hat{p}\hat{x}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi(x)) \right]$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned} [\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}]|\psi\rangle &= i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \psi(x) \\ &= i\hbar|\psi\rangle \end{aligned}$$

となり、

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (2.30)$$

であることがわかる。ここで、 $[\hat{x}, \hat{p}]$ は

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$$

で定義される量で、 \hat{x} と \hat{p} の交換関係と呼ばれる。後に見るように、式 (2.30) は、量子力学の体系を整備する上で出発点となる式であり、不確定性関係を精密に理解したり、古典力学との対応をみていくのに重要な関係式である。

3 時間に依存しないシュレディンガー方程式

前章までで、シュレディンガー方程式が導入され、確率密度や粒子の位置・運動量の期待値を計算するための準備が整った。この章では、具体的にシュレディンガー方程式を解くための道具を考えていこう。

3.1 シュレディンガー方程式の変数分離

ポテンシャル $V(x)$ の下での粒子の運動を記述するシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t) \quad (3.1)$$

を考える。式 (3.1) の解として、時間変数 t だけの関数 $T(t)$ と座標変数 x だけの関数 $u(x)$ の積で書くことができる場合 (変数分離ができる場合)

$$\psi(x, t) = T(t) u(x) \quad (3.2)$$

が特に重要である (その理由は次節で説明する)。式 (3.2) をシュレディンガー方程式 (3.1) に代入し、両辺を $T(t)u(x)$ で割ると

$$i\hbar \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = \frac{1}{u} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u \quad (3.3)$$

が得られる。式 (3.3) の左辺は t のみの関数で x 依存性がないこと、右辺は x のみの関数で t 依存性がないことに注意。したがって、左辺も右辺も、 x にも t にも依存しない定数にならねばならないことがわかる。この定数を E とすると、式 (3.3) は

$$ET(t) = i\hbar \frac{d}{dt} T(t), \quad (3.4)$$

と

$$E u(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) \quad (3.5)$$

に分解できることがわかる。

式 (3.4) を解くのは容易で、

$$T(t) = C e^{-iEt/\hbar}$$

が得られる。ここで C は定数である。したがって、シュレディンガー方程式 (3.1) の変数分離解を求めるには、常微分方程式 (3.5) の解を求めればよいことがわかる。式 (3.5) は「時間に依存しないシュレディンガー方程式」と呼ばれる。

3.2 状態の時間発展

シュレディンガー方程式にしたがって時間とともに変化する状態ケット

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \psi(x, t)$$

を考えよう。ここで $\psi(x, t)$ はシュレディンガー方程式 (3.1) の解だとする。このとき、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t). \end{aligned} \quad (3.6)$$

また、§.2.1 で導いた、演算子のケットへの作用から

$$\begin{aligned} \hat{p}^2 |\psi(t)\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \right], \\ V(\hat{x}) |\psi(t)\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle V(x) \psi(x, t), \end{aligned}$$

が得られる。これらの式を用いて式 (3.6) を書き直すと、状態ケット $|\psi(t)\rangle$ の満たすシュレディンガー方程式が

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (3.7)$$

とコンパクトに書けることがわかる。ここで \hat{H} は、ハミルトニアン演算子¹⁰ と呼ばれる演算子で、

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(\hat{x}) \quad (3.8)$$

である。これは、古典力学でのハミルトニアンにおける座標 x と運動量 p を、それぞれ対応する演算子 \hat{x} と \hat{p} に置き換えたものである。

時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$E u_E(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u_E(x) \quad (3.9)$$

の解 $u_E(x)$ から状態ケットを作る。

$$|u_E\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle u_E(x). \quad (3.10)$$

¹⁰ 量子力学の問題では演算子であることが明白なので、単にハミルトニアンと呼ぶことも多い。

状態 $|u_E\rangle$ が

$$E|u_E\rangle = \hat{H}|u_E\rangle \quad (3.11)$$

を満たすことは明らかであろう。ケットがベクトルに類似した概念であったことを思い出すと、式 (3.11) は、線形代数における固有値 E の固有値方程式に他ならないことがわかる。そのため、 E をハミルトニアン \hat{H} の固有値 (eigenvalue) ないしはエネルギー固有値と呼ぶ。ケット $|u_E\rangle$ 、関数 $u_E(x)$ は、それぞれ、ハミルトニアンの固有状態 (eigenstate)、固有関数 (eigenfunction) と呼ばれる¹¹。

エネルギー固有値の解 E は一般に複数存在し、離散的な場合 (整数 n で $E = E_n$ としてラベルできる場合) と、連続的な場合の双方が存在する。整数 n でラベルできる離散的な場合は、ハミルトニアンの固有関数を u_n 、固有状態を $|u_n\rangle$ と表記することになると

$$\langle u_{n'} | u_n \rangle = \delta_{n'n} \quad (3.12)$$

として規格化しておくくと便利であり、連続的な場合は

$$\langle u_{E'} | u_E \rangle = \delta(E - E') \quad (3.13)$$

として規格化する。

前節で考えた変数分離ができる場合は、きわめて特殊な場合であったが、多くの場合、 $t = 0$ の状態 $|\psi(t = 0)\rangle$ は、エネルギー固有状態の重ね合わせとして

$$|\psi(t = 0)\rangle = \sum_n |u_n\rangle C_n + \int dE |u_E\rangle C(E) \quad (3.14)$$

のように書き表すことができる¹²。ここで、重ね合わせの係数は

$$C_n = \langle u_n | \psi(t = 0) \rangle, \quad C(E) = \langle u_E | \psi(t = 0) \rangle \quad (3.15)$$

として求めることができる。式 (3.15) が成り立つことは式 (3.12) と式 (3.13) を用いて簡単に導くことができる。

前節の結果より、シュレディンガー方程式の解が

$$\psi(x, t) = T(t) u(x)$$

のように変数分離できる場合は、状態の時間発展は

$$|\psi(t)\rangle = |u_E\rangle e^{-iEt/\hbar} \quad (3.16)$$

で与えられる。したがって、 $t = 0$ の状態 (3.14) の時間発展は、式 (3.16) の重ね合わせとして、

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |u_n\rangle C_n e^{-iE_n t/\hbar} + \int dE |u_E\rangle C(E) e^{-iEt/\hbar} \quad (3.17)$$

として与えられる。

状態の時間発展の式 (3.17) を、波動関数を用いて表現すると

$$\psi(x, t) = \sum_n C_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} + \int dE C(E) u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (3.18)$$

である。

¹¹ 同様に $|x\rangle$ は座標演算子 \hat{x} の固有状態であり、その固有値は x である。このことを式に示すと $x|x\rangle = \hat{x}|x\rangle$ と書ける。また、 $p|p\rangle = \hat{p}|p\rangle$ から、 $|p\rangle$ は運動量演算子 \hat{p} の固有値 p の固有状態である。

¹² 具体例については §.3.4 を参照。

3.3 箱に閉じ込められた粒子

これまでの節で準備が整ったので、いよいよ最も簡単な量子力学の問題（1次元の箱に閉じ込められた粒子のシュレディンガー方程式）を解いていこう。

粒子を $0 < x < a$ の箱に閉じ込めるため、ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{for } x < 0 \\ 0 & \text{for } 0 < x < a \\ +\infty & \text{for } a < x \end{cases}$$

を導入する（ a は正の数）。時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$E u(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x)$$

の解 $u(x)$ は、箱の外 ($x < 0, x > a$) では

$$u(x) = 0$$

となり、箱の中では微分方程式

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] u = 0, \quad k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (3.19)$$

を満たし、さらに境界条件

$$u(0) = u(a) = 0$$

を満足する¹³。

境界条件 $u(x=0) = 0$ を満たす微分方程式 (3.19) の解は、 A を定数として

$$u(x) = A \sin kx$$

と求められる。この解が境界条件 $u(x=a) = 0$ を満たすには、

$$ka = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

でなければならない。つまり、この場合のエネルギー固有値は離散的、つまり、整数 $n = 1, 2, 3, \dots$ でラベルすることができ、

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad (3.20)$$

で与えられる。定数 A は規格化によって求められ、ハミルトニアン固有関数は結局、

$$u_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & \text{for } 0 < x < a \\ 0 & \text{for } a < x \end{cases} \quad (3.21)$$

となるのがわかる。

これらの時間に依存しないシュレディンガー方程式の解について、いくつか注目すべき点を列挙していこう。

¹³ この境界条件の意味は、直感的には分かりやすいであろう。より精密な議論を行うためには、§4.5で行う議論と同様に、有限な高さのポテンシャル障壁 V_0 の箱の議論を行ってから、 $V_0 \rightarrow +\infty$ とする必要がある。（演習問題参照）

- 異なる n のエネルギー固有状態は直交している。つまり、

$$\langle u_{n'} | u_n \rangle = \delta_{n'n}$$

または

$$\int_0^a dx u_{n'}^*(x) u_n(x) = \delta_{n'n}.$$

- 状態 $|u_n\rangle$ における運動量演算子の期待値は

$$\langle u_n | \hat{p} | u_n \rangle = \int_0^a dx u_n^*(x) [-i\hbar \frac{d}{dx}] u_n(x) = 0$$

となりゼロ。しかし、運動量演算子の二乗の期待値は

$$\langle u_n | \hat{p}^2 | u_n \rangle = \int_0^a dx u_n^*(x) [-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}] u_n(x) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2} n^2 = 2mE_n$$

となりゼロにはならない。これは不確定性関係の帰結である。

- 基底状態（最低エネルギー状態）のエネルギー固有値がゼロではない。

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \neq 0$$

これは、同じ箱に閉じ込められた古典力学に従う粒子の最低エネルギー状態（静止した粒子）のエネルギーがゼロであることと対照的である。これは運動量演算子の二乗の期待値がゼロではないこと、つまり、不確定性関係の結果である。

- 固有状態の波動関数の節の数が $n-1$ に対応しており、節の数が多いほどエネルギー固有値が大きくなる。
- エネルギー固有状態の波動関数を、変換 $x \rightarrow x' = a-x$ での偶奇性で分類できる。 n が奇数のときは、エネルギー固有状態の波動関数を

$$u_n = (-1)^{(n-1)/2} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{a} \left(x - \frac{a}{2}\right)\right)$$

と書き直すことができ、この波動関数は、変換 $x \rightarrow x' = a-x$ のもとで偶である。一方、 n が偶数のときは、

$$u_n = (-1)^{n/2} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} \left(x - \frac{a}{2}\right)\right)$$

であり、変換 $x \rightarrow x' = a-x$ のもとで奇である。

3.4 エネルギー固有関数とエネルギーの測定

前節で考えた $0 < x < a$ の箱に閉じ込められた粒子の $t=0$ での波動関数 $\psi(x, t=0)$ が、境界条件 $\psi(x, t=0)|_{x=0} = \psi(x, t=0)|_{x=a} = 0$ を満たす区分的になめらかな関数で与えられたとしよう。この場合、フーリエ級数で習ったように、区間 $0 < x < a$ で与えられる関数 $\psi(x, t=0)$ は、

$$\psi(x, t=0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \quad (3.22)$$

のようにフーリエ級数展開することが可能である。フーリエ級数展開 (3.22) に現れる三角関数がハミルトニアン固有関数 (3.21) に他ならないことに注意しよう。したがって、この場合は §.3.2 で考えた一般論のひとつの具体例となっており、 $t = 0$ での波動関数が、ハミルトニアンの固有関数 $u_n(x)$ を用いて

$$\psi(x, t = 0) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n u_n(x) \quad (3.23)$$

と展開できることがわかる。フーリエ係数 C_n は、フーリエ級数展開の通常の手続きにしたがって

$$C_n = \int_0^a dx u_n^*(x) \psi(x, t = 0) \quad (3.24)$$

で求めることができるが、式 (3.24) は式 (3.15) の具体例に他ならない。したがって、任意の初期条件 $\psi(x, t = 0)$ について、式 (3.17) あるいは式 (3.18) を用いてシュレディンガー方程式を解くことが可能であり、

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |u_n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} C_n, \quad (3.25)$$

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-iE_n t/\hbar} u_n(x) \quad (3.26)$$

を得る。

§.2.3 では位置を測定する測定装置を考察し、波動関数に確率解釈を与えたことを思い出そう。§.2.3 の議論と同様に、エネルギーが E_n の状態のみをピックアップする装置

$$|u_n\rangle \langle u_n|$$

を考えよう。状態 (3.25) をこの装置にかけると

$$|u_n\rangle \langle u_n | \psi(t)\rangle = |u_n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} C_n$$

であり、この装置でピックアップされてエネルギーが E_n である確率が

$$|C_n|^2$$

で与えられることがわかる。エネルギーを測定するときの期待値は、したがって、

$$\sum_{n=1}^{\infty} E_n |C_n|^2$$

で与えられる。この式を

$$\langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t)\rangle$$

と書き換えることができることを示すことも容易である。

3.5 エネルギー固有値が連続的な場合

前節ではエネルギー固有値が離散的である場合を考察したので、次は、エネルギー固有値が連続的な場合を考えよう。

エネルギー固有値が連続的になる典型例は、ポテンシャル $V(x) = 0$ の場合、つまり、自由粒子の場合である。このときのハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 \quad (3.27)$$

であり、運動量演算子の固有状態

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle e^{ipx/\hbar}$$

がエネルギー固有状態となる。そのエネルギー固有値は

$$E = \frac{1}{2m} p^2 \quad (3.28)$$

となり、たしかに連続的である。

この場合、同一のエネルギー固有値をもつ状態が複数存在することに注意。実際、

$$|p\rangle, \quad |-p\rangle$$

は、同一のエネルギー固有値 (3.28) を与えるふたつの状態になっている。このように同一のエネルギー固有値の状態が複数存在する場合、「縮退がある」とよぶ。

4 1次元量子力学

この章では、いくつかの典型的な1次元量子力学の問題を実際に解くことで量子力学への理解を深めていこう。

4.1 散乱問題: 段差ポテンシャル

まず最初に、ポテンシャル

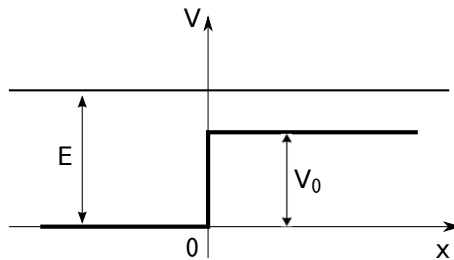
$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{for } x < 0, \\ V_0, & \text{for } 0 < x, \end{cases} \quad (4.1)$$

に左側 ($x < 0$ 側) から右向きにエネルギー E の粒子が入射する問題を考えてみよう。入射した粒子がポテンシャルによって反射したり透過したりする様子を調べることを、1次元量子力学での散乱問題と呼ぶ。

定常状態を考えることとして、時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$E u(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) \quad (4.2)$$

を解いてみよう。最初に、下図に示すような $E > V_0$ の場合について考えよう。



微分方程式 (4.2) を解くと、 $x < 0$ の領域での解は一般に

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (4.3)$$

であることがわかる。確率流を

$$\begin{aligned} j &= \frac{\hbar}{2im} \left(u^* \left(\frac{d}{dx} u \right) - \left(\frac{d}{dx} u^* \right) u \right) \\ &= \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) \end{aligned} \quad (4.4)$$

と求めてみればわかるように、式 (4.3) のなかで、定数 A に比例する項は右向きの波（入射波）を表し、定数 B に比例する項は左向きの波（反射波）を表していることに注意。

同様に、 $x > 0$ の領域での解は、

$$u(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (4.5)$$

その確率流は

$$j = \frac{\hbar q}{m} (|C|^2 - |D|^2) \quad (4.6)$$

である。式 (4.5) のなかで、 C に比例する項は右向きの波（透過波）を、 D に比例する項は左向きの波を表す。

式 (4.2) は 2 階微分方程式なので、問題設定の状況に適合した解を求めるには、状況を理解して、適切な境界条件を与える必要がある。いま考えたい状況設定では、領域 $x < 0$ では右向きの入射波とともに、ポテンシャルによって入射波の一部が跳ね返って左向きの波になった反射波が存在する。一方、領域 $x > 0$ では、右向きの透過波のみが存在して、左向きの波は存在しない。従って、境界条件として $D = 0$ を選ぶのが適切である。このとき、 $x < 0$ での確率流の表式 (4.4) と $x > 0$ での表式 (4.6) から、粒子の透過率と反射率が、

$$\text{透過率:} \quad T_{l \rightarrow r} = \frac{q}{k} \frac{|C|^2}{|A|^2}, \quad (4.7)$$

$$\text{反射率:} \quad R_{l \rightarrow l} = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad (4.8)$$

と求めることができることに注目しておく。

次に、 $x = 0$ での解の接続について考えてみよう。時間に依存しないシュレディンガー方程式 (4.2) を、 $x = 0$ を含む区間 $-\epsilon < x < +\epsilon$ ($\epsilon > 0$ とする) で積分すると

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx E u(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} u \Big|_{x=+\epsilon} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} u \Big|_{x=-\epsilon} + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx V(x) u(x) \quad (4.9)$$

となる。式 (4.9) で $\epsilon \downarrow 0$ 極限をとると

$$\lim_{x \downarrow 0} \frac{d}{dx} u = \lim_{x \uparrow 0} \frac{d}{dx} u \quad (4.10)$$

であることがわかる。つまり、関数 $u(x)$ の傾きは $x = 0$ で連続でなければならない。同様に、関数 $u(x)$ 自体も $x = 0$ で連続、つまり、

$$\lim_{x \downarrow 0} u = \lim_{x \uparrow 0} u \quad (4.11)$$

であることを示すことも容易である。接続条件 (4.10) と (4.11) を、解 (4.3), (4.5) に当てはめると

$$Aik - Bik = Ciq, \quad (4.12)$$

および

$$A + B = C \quad (4.13)$$

を得、連立方程式 (4.12), (4.13) を解くことによって、係数

$$\frac{B}{A} = \frac{k - q}{k + q}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + q} \quad (4.14)$$

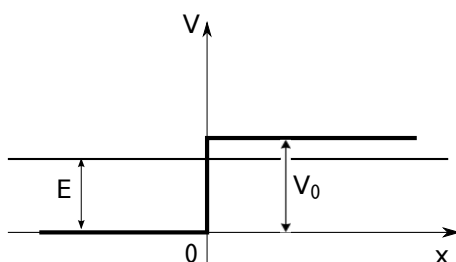
を求めることができる。この結果から、透過率と反射率が

$$\text{透過率: } T_{l \rightarrow r} = \frac{q}{k} \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{4\sqrt{E(E - V_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^2}, \quad (4.15)$$

$$\text{反射率: } R_{l \rightarrow l} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \right)^2 \quad (4.16)$$

であることがすぐに計算できる。

次に $E < V_0$ の場合を考えよう。



この場合の領域 $x > 0$ での微分方程式 (4.2) の解は、

$$u(x) = \tilde{C}e^{-\kappa x} + \tilde{D}e^{+\kappa x}, \quad \kappa = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar}, \quad (4.17)$$

である。ただし、 \tilde{D} に比例する項は、 $x \rightarrow \infty$ で確率密度が無限大になってしまい、問題の状況設定と矛盾してしまう。そこで、境界条件として、 $\tilde{D} = 0$ を採用することにする。これ以降は、 $E > V_0$ の場合と同様に考えると、解の形としては結局

$$u(x) = \begin{cases} \tilde{A}e^{ikx} + \tilde{B}e^{-ikx}, & \text{for } x < 0, \\ \tilde{C}e^{-\kappa x}, & \text{for } 0 < x, \end{cases} \quad (4.18)$$

を採用すれば良い。 $E > V_0$ の場合と異なって、 $x > 0$ での確率流はゼロになっていることに注意。

$x = 0$ での解の接続条件 (4.10) と (4.11) を解 (4.18) に適用すると、

$$\tilde{A}ik - \tilde{B}ik = -\tilde{C}\kappa, \quad (4.19)$$

$$\tilde{A} + \tilde{B} = \tilde{C}, \quad (4.20)$$

となり、

$$\frac{\tilde{B}}{\tilde{A}} = -\frac{\kappa + ik}{\kappa - ik}, \quad \frac{\tilde{C}}{\tilde{A}} = -\frac{2ik}{\kappa - ik} \quad (4.21)$$

を得る。 $x > 0$ での確率流がゼロになることと、(4.21)から計算される $|\tilde{B}/\tilde{A}|^2$ が恒等的に 1 になることより、この場合の透過率と反射率は

$$\text{透過率: } T_{l \rightarrow r} = 0, \quad (4.22)$$

$$\text{反射率: } R_{l \rightarrow l} = \left| \frac{\tilde{B}}{\tilde{A}} \right|^2 = 1, \quad (4.23)$$

である。

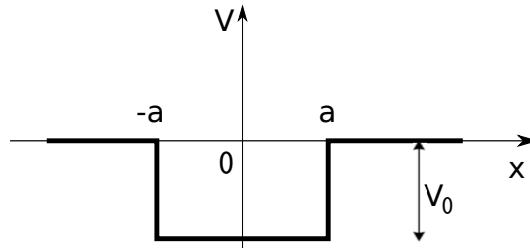
最後に、これまで計算した段差ポテンシャルでの量子力学的粒子の散乱について、注目しておいて欲しい点を列挙しておく。

1. 古典力学とは異なり、 $V_0 < E$ であっても反射が起きる。
2. $|V_0| \ll E$ ではほとんど反射しない。
3. $V_0 \geq E$ では全反射。
4. $V_0 \rightarrow -\infty$ でも全反射。
5. 透過率と反射率の和は 1 になる。これは確率の保存の帰結である。したがって、もっと複雑なポテンシャルによる散乱であっても定常状態を考える限り成立する。

4.2 散乱問題: 井戸型ポテンシャル

つぎに、もう少しだけ複雑なポテンシャルでの量子力学的粒子の散乱問題を解こう。この節では井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{for } x < -a, \\ -V_0, & \text{for } -a < x < a, \\ 0, & \text{for } a < x, \end{cases} \quad (4.24)$$



に左側からエネルギー E の粒子が入射する問題を考えてみよう。

前節と同様の議論により、

$$u(x) = \begin{cases} A_L e^{+ikx} + B_L e^{-ikx}, & \text{for } x < -a, \\ C e^{+iqx} + D e^{-iqx}, & \text{for } -a < x < a, \\ A_R e^{+ikx} + B_R e^{-ikx}, & \text{for } a < x, \end{cases} \quad (4.25)$$

の形の波動関数が、それぞれの領域 $x < -a$, $-a < x < a$, $a < x$ での時間に依存しないシュレディンガー方程式を満たし、必要な境界条件は

$$B_R = 0 \quad (4.26)$$

で与えられる。ここで、 k と q は

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \quad (4.27)$$

で与えられる波数である。

波動関数とその微分が $x = -a$ で連続であることを要請すると

$$M_1 \begin{pmatrix} A_L \\ B_L \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

を得る。ここで行列 M_1, M_2 は

$$M_1 = \begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{+ika} \\ ke^{-ika} & -ke^{+ika} \end{pmatrix}, \quad M_2 = \begin{pmatrix} e^{-iqa} & e^{+iqa} \\ qe^{-iqa} & -qe^{+iqa} \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

で定義される行列である。同様に $x = +a$ での条件から、 C, D, A_R, B_R は条件

$$M_3 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = M_4 \begin{pmatrix} A_R \\ B_R \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

$$M_3 = \begin{pmatrix} e^{+iqa} & e^{-iqa} \\ qe^{+iqa} & -qe^{-iqa} \end{pmatrix}, \quad M_4 = \begin{pmatrix} e^{+ika} & e^{-ika} \\ ke^{+ika} & -ke^{-ika} \end{pmatrix} \quad (4.31)$$

を満たさねばならないことがわかる。

これで必要な式はすべて出揃ったので、あとは、式 (4.28) と式 (4.30) を連立方程式として解いて、 B_L/A_L と A_R/A_L を求めていけばよい。ただし、余分な変数 C, D が存在するので、計算がかなり煩雑になる。そこで、ここでは、行列の言葉を使ってもう少し見通し良く計算していくことにしよう。

まず最初にやることは、式 (4.28) と式 (4.30) から余分な変数 C, D を消去して

$$M_2^{-1} M_1 \begin{pmatrix} A_L \\ B_L \end{pmatrix} = M_3^{-1} M_4 \begin{pmatrix} A_R \\ B_R \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

とすることである。この式に境界条件から与えられる $B_R = 0$ を代入し、 A_R と B_L を求めていけばよいが、その具体的な計算は、求めたい変数 A_R と B_L が式 (4.32) の両辺に分かれて存在するため若干面倒である。転送行列 M と散乱行列 S の関係を用いる一般的な解法については付録 C で紹介することにして、ここでは、

$$M_{21} = M_2^{-1} M_1 = \begin{pmatrix} M_{21}^{11} & M_{21}^{12} \\ M_{21}^{21} & M_{21}^{22} \end{pmatrix}, \quad M_{34} = M_3^{-1} M_4 = \begin{pmatrix} M_{34}^{11} & M_{34}^{12} \\ M_{34}^{21} & M_{34}^{22} \end{pmatrix} \quad (4.33)$$

とにおいて、 $B_R = 0$ を代入した式 (4.32) を

$$\begin{pmatrix} M_{21}^{11} \\ M_{21}^{21} \end{pmatrix} A_L = \begin{pmatrix} M_{34}^{11} & M_{34}^{12} \\ M_{34}^{21} & M_{34}^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_R \\ -B_L \end{pmatrix} \quad (4.34)$$

と書き換え、 B_L と A_R を両方とも右辺にもってくる方法を使うことにしよう。

あとは愚直に計算していけばよい。式 (4.33) の定義にしたがって、具体的に行列 M_{21} や M_{34} を求めるのは、ノート半ページ程度の計算で十分である。答えは

$$M_{21} = \frac{1}{2q} \begin{pmatrix} (q+k)e^{i(q-k)a} & (q-k)e^{i(q+k)a} \\ (q-k)e^{-i(q+k)a} & (q+k)e^{-i(q-k)a} \end{pmatrix}, \quad (4.35)$$

$$M_{34} = \frac{1}{2q} \begin{pmatrix} (q+k)e^{-i(q-k)a} & (q-k)e^{-i(q+k)a} \\ (q-k)e^{i(q+k)a} & (q+k)e^{i(q-k)a} \end{pmatrix}, \quad (4.36)$$

となる。この結果を式 (4.34) に代入すると

$$\begin{pmatrix} (q+k)e^{i(q-k)a} \\ (q-k)e^{-i(q+k)a} \end{pmatrix} A_L = \begin{pmatrix} (q+k)e^{-i(q-k)a} & (q-k)e^{i(q+k)a} \\ (q-k)e^{i(q+k)a} & (q+k)e^{-i(q-k)a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_R \\ -B_L \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

が得られる。これから

$$\begin{pmatrix} A_R \\ -B_L \end{pmatrix} = \frac{e^{-2ika}}{(q+k)^2 e^{-2iqa} - (q-k)^2 e^{2iqa}} \begin{pmatrix} (q+k)^2 - (q-k)^2 \\ -(q^2 - k^2)e^{2iqa} + (q^2 - k^2)e^{-2iqa} \end{pmatrix} A_L, \quad (4.38)$$

さらに

$$\frac{A_R}{A_L} = e^{-2ika} \frac{2kq}{2kq \cos 2qa - i(q^2 + k^2) \sin 2qa}, \quad (4.39)$$

$$\frac{B_L}{A_L} = ie^{-2ika} \frac{(q^2 - k^2) \sin 2qa}{2kq \cos 2qa - i(q^2 + k^2) \sin 2qa} \quad (4.40)$$

が得られる。

$x < -a$ の領域と $a < x$ の領域では同じ波数なので、確率流を計算すると、このポテンシャルの透過率は単純に

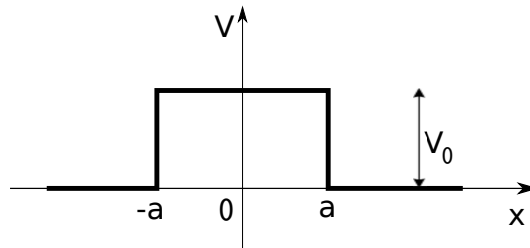
$$T_{l \rightarrow r} = \left| \frac{A_R}{A_L} \right|^2 \quad (4.41)$$

で与えられることがわかる。式 (4.39) を見ると、 $|V_0| \ll E$ のとき ($q \simeq k$ のとき) 透過率がほぼ 1 になることがわかる。また、 $2qa = n\pi$ のとき、完全に透過率が 1 になることもわかる。これは透過共鳴と呼ばれる現象である。

4.3 散乱問題: ポテンシャル障壁

この節ではポテンシャル障壁

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{for } x < -a, \\ V_0, & \text{for } -a < x < a, \\ 0, & \text{for } a < x, \end{cases} \quad (4.42)$$



に左側からエネルギー $E < V_0$ の粒子が入射する問題を考えてみよう。古典力学では、ポテンシャル障壁よりもエネルギーの低い粒子が入射すると完全に反射されるが、量子力学ではどのようなことが起きるだろうか？

具体的な計算方法は、前節の問題とほとんど同様である。領域ごとにシュレディンガー方程式を解くことで

$$u(x) = \begin{cases} A_L e^{+ikx} + B_L e^{-ikx}, & \text{for } x < -a, \\ C e^{-\kappa x} + D e^{+\kappa x}, & \text{for } -a < x < a, \\ A_R e^{+ikx} + B_R e^{-ikx}, & \text{for } a < x, \end{cases} \quad (4.43)$$

の形を得る。前節の問題との違いは、 $E < V_0$ のため、 $-a < x < a$ の領域で波動関数が振動解にはならず、指数関数としてふるまうことである。 k と κ は

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (4.44)$$

で与えられる。この問題の境界条件から

$$B_R = 0 \quad (4.45)$$

であることに注意しよう。

あとは $x = +a$ と $x = -a$ で解の接続をして A_R と B_L を求めればよい。前節の手法を使って愚直に計算を実行すると、透過率が

$$T_{l \rightarrow r} = \left| \frac{A_R}{A_L} \right|^2 = \frac{(2k\kappa)^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(2\kappa a) + (2k\kappa)^2} \quad (4.46)$$

と求められる。古典力学と異なり、量子力学では透過率がゼロにならないことに注意しよう。これは、トンネル効果として知られている現象である。

$\kappa a \gg 1$ のとき、 \sinh は

$$\sinh(2\kappa a) \simeq \frac{1}{2} e^{2\kappa a}$$

と近似でき、透過率は

$$T_{l \rightarrow r} \simeq \left(\frac{4\kappa k}{\kappa^2 + k^2} \right)^2 e^{-4\kappa a} \quad (4.47)$$

となって指数関数的抑制をうけることに注目しよう。このことから、障壁の幅が十分に厚いとトンネル効果が起こりにくくなることがわかる。

4.4 パリティ

1次元ポテンシャルによる粒子の散乱（透過と反射）についての説明はだいたい終わったので、次に、1次元ポテンシャルによって束縛された粒子について考えることにしよう。ここで考える束縛状態は、定まったエネルギー固有値 E を持ち、無限遠方で波動関数がゼロになる状態である。

このとき、考えているポテンシャルがパリティ対称性を持てば、パリティ演算子の固有状態に着目することによって、束縛状態の波動関数とエネルギー固有値を簡単に求められるようになる場合がある。この節では、パリティ対称性とパリティ演算子についてあらかじめ簡単に説明しておくことにする。

パリティ演算子 \hat{P} は、状態

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \psi(x)$$

に作用し

$$\begin{aligned}\hat{P}|\psi\rangle &= |\psi_P\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx | -x\rangle \psi(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \psi(-x)\end{aligned}$$

との変換を与える演算子である。以降の便利のため、関数 $\psi_P(x)$ を

$$\psi_P(x) = \psi(-x)$$

と定義しておく。

たとえば、式 (3.27) で与えられる自由粒子ハミルトニアン \hat{H} とパリティ演算子は交換する、つまり、

$$\hat{P}\hat{H} = \hat{H}\hat{P} \quad (4.48)$$

∴

$$\begin{aligned}\hat{P}\hat{H}|\psi\rangle &= \hat{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \psi(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial (-x)^2} \right] \psi(-x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \psi_P(x) \\ &= \hat{H} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \psi_P(x) \\ &= \hat{H}\hat{P}|\psi\rangle\end{aligned}$$

となる。このようにパリティ演算子とハミルトニアンが交換するとき、そのハミルトニアン（ポテンシャル）はパリティ対称性を持つという。

パリティ対称性をもつハミルトニアン \hat{H} の固有状態 $|u\rangle$ （エネルギー固有値 E ）に (4.48) の両辺を作用させると

$$\hat{P}\hat{H}|u\rangle = \hat{H}\hat{P}|u\rangle \quad (4.49)$$

が得られる。式 (4.49) の左辺は

$$\begin{aligned}\hat{P}\hat{H}|u\rangle &= E\hat{P}|u\rangle \\ &= E|u_P\rangle,\end{aligned}$$

右辺は、

$$\hat{H}\hat{P}|u\rangle = \hat{H}|u_P\rangle$$

と変形できるので、結局、式 (4.49) は

$$E|u_P\rangle = \hat{H}|u_P\rangle \quad (4.50)$$

を与える。つまり、状態 $|u_P\rangle = \hat{P}|u\rangle$ もエネルギー固有値 E の固有状態であることがわかる。もし、 $|u\rangle$ と $|u_P\rangle$ が線形独立であれば、エネルギー固有値に縮退があることがわかるのである。

このことに注意すると、自由粒子ハミルトニアンのもとでのふたつの状態 $|p\rangle$ と $|-p\rangle$ のエネルギー固有値が縮退していたことは、

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

によって簡単に理解できるようになる。

一般に、対称性の考察は、量子力学の問題を具体的に解くにあたって、役立つことが多い。パリティ対称性はそのもっとも簡単な例になっている。

次に、ハミルトニアン \hat{H} がパリティ変換のもとで対称性を持つ場合、一般に、エネルギー固有状態がパリティ演算子の固有値で分類できることを見ていこう。

固有値 E のエネルギー固有状態 $|u\rangle$ を考えよう。このとき、式 (4.50) で示されたように、状態 $|u_P\rangle = \hat{P}|u\rangle$ も固有値 E の固有状態である。仮に $|u_P\rangle$ が $|u\rangle$ に線形従属なのであれば、適当な定数 C を用いて

$$\hat{P}|u\rangle = C|u\rangle \quad (4.51)$$

と書けるはずである。一方で、パリティ変換を2回繰り返すともとの状態に必ず戻ることから

$$\hat{P}^2 = 1 \quad (4.52)$$

が成り立ち、式 (4.51) の両辺に \hat{P} を作用させることで

$$|u\rangle = C^2|u\rangle \quad (4.53)$$

を得る。つまり、定数 C は ± 1 のいずれかの値しかとることができない。

$$\hat{P}|u\rangle = +|u\rangle \quad (4.54)$$

の場合は、パリティ偶の状態と呼ばれ、

$$\hat{P}|u\rangle = -|u\rangle \quad (4.55)$$

の場合は、パリティ奇の状態と呼ばれる。

状態 $|u_P\rangle$ と状態 $|u\rangle$ が線形独立な場合は、線形独立な基底を取り替えて、状態

$$|u_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u\rangle + |u_P\rangle), \quad (4.56)$$

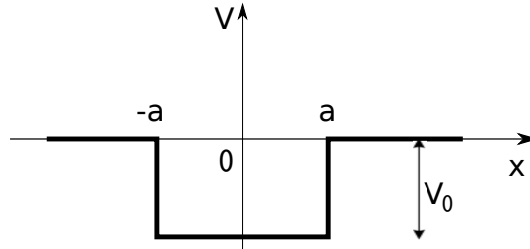
$$|u_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u\rangle - |u_P\rangle), \quad (4.57)$$

を定義することにより、任意のエネルギー固有状態をパリティ偶の状態 $|u_+\rangle$ とパリティ奇の状態 $|u_-\rangle$ の重ね合わせとして書き表すことができる。(実際に、 $|u_+\rangle$ ($|u_-\rangle$) がパリティ偶 (奇) であることを、各自、確認せよ。)

4.5 束縛状態: 井戸型ポテンシャル

この節で考えるポテンシャルは §.4.2 で考えた井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{for } x < -a, \\ -V_0, & \text{for } -a < x < a, \\ 0, & \text{for } a < x, \end{cases} \quad (4.58)$$



である。この節でも、これまでの節と同様に時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$E u(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) \quad (4.59)$$

の解を考えるが、§.4.2 で考えた $E > 0$ の散乱状態とは異なり、ここでは、井戸型ポテンシャルに束縛された $-V_0 < E < 0$ の状態を考える。

このとき、時間に依存しないシュレディンガー方程式の、 $x < -a$ の領域での解は、

$$e^{+\kappa x}$$

の形の解と

$$e^{-\kappa x}$$

の形の解の重ね合わせになる。ここで、 κ を

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (4.60)$$

と定義しておく。ただし、線形独立なふたつの解のうち、 $e^{-\kappa x}$ の解は $x \rightarrow -\infty$ で無限大になってしまい束縛状態の $x < -a$ 領域での解として不適当である。したがって、 $x < -a$ の領域での解は

$$u(x) = A e^{+\kappa x}, \quad \text{for } x < -a,$$

を採用する。同様の考察をすると、 $a < x$ の領域での解として

$$u(x) = B e^{-\kappa x}, \quad \text{for } a < x,$$

を得る。また、 $-a < x < a$ の領域での時間に依存しないシュレディンガー方程式の解は

$$u(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx}, \quad \text{for } -a < x < a,$$

$$k = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \quad (4.61)$$

で与えられることがわかる。

これまでの考察をまとめると、時間に依存しないシュレディンガー方程式の解として、それぞれの区間で

$$u(x) = \begin{cases} Ae^{+\kappa x}, & \text{for } x < -a, \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx}, & \text{for } -a < x < a, \\ Be^{-\kappa x}, & \text{for } a < x, \end{cases} \quad (4.62)$$

の形の解を採用すればよい。あとは、これまでの節の計算と同様に波動関数とその導関数が点 $x = -a$ と点 $x = a$ で連続であることを用いて、係数 A, B, C, D に関係をつけていく。

しかしながら、この計算を実際に遂行していくのは、未定パラメータの数が A, B, C, D と4つもあるため、いささか面倒である¹⁴。ここでは、このポテンシャル（ハミルトニアン）がパリティ対称性を持つことを用いて、比較的簡単な計算で結果を得る方法を紹介しよう¹⁵。§.4.4 で調べたように、パリティ対称性のあるハミルトニアンでのエネルギー固有状態は、パリティ偶か、パリティ奇かのどちらかに分類することができる。

偶パリティの場合

この場合、 $u_P(x) = u(-x) = u(x)$ 、つまり、波動関数は偶関数である。したがって、式 (4.62) において、 $A = B, C = D$ であり、波動関数が

$$u(x) = \begin{cases} Ae^{+\kappa x}, & \text{for } x < -a, \\ 2C \cos(kx), & \text{for } -a < x < a, \\ Ae^{-\kappa x}, & \text{for } a < x, \end{cases} \quad (4.63)$$

の形、つまり、未定パラメータの数が A, C のふたつだけになり、問題が著しく簡単になる。式 (4.63) で与えられる形の波動関数に対し、点 $x = a$ で波動関数が連続で滑らか（波動関数 u とその導関数が連続）であることを要請すると

$$2C \cos(ka) = Ae^{-\kappa a}, \quad 2Ck \sin(ka) = A\kappa e^{-\kappa a},$$

つまり

$$\begin{pmatrix} 2 \cos(ka) & -e^{-\kappa a} \\ 2k \sin(ka) & -\kappa e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.64)$$

を得る。式 (4.64) の自明な解は $C = A = 0$ であるが、それでは波動関数がゼロになってしまう。自明でない解が存在するためには、

$$\kappa = k \tan(ka) \quad (4.65)$$

を満たすようにエネルギー E を選ぶ必要がある。式 (4.65) を満たす E が存在するかどうか、存在するとして、いくつ存在するかについて次に考察しよう。式 (4.60) と式 (4.61) から

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0 - k^2}$$

が得られ、これを式 (4.65) に代入すると

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0 \frac{1}{k^2} - 1} = \tan(ka)$$

¹⁴ とは言っても、§.4.2 の計算と同程度の計算量である。

¹⁵ パリティに着目することで、§.4.2 の問題もより簡単な計算で結果を得ることができる。演習問題とこの講義ノート付録の S -行列の章（付録 C）を参照。

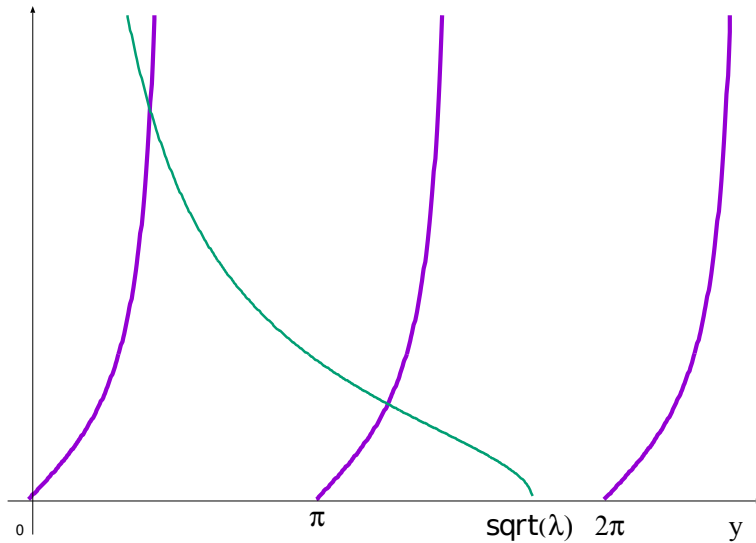
となる。さらに

$$y = ka, \quad \lambda = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 \quad (4.66)$$

で y と λ を定義してこの式を書き換えると

$$\sqrt{\frac{\lambda}{y^2} - 1} = \tan y \quad (4.67)$$

が得られる。 λ はポテンシャルの形を表すパラメータ (V_0 と a) のみの関数なのに対し、 y は k を通じて E の関数なので、式 (4.65) にいくつの E の解が存在するかを調べるには、式 (4.67) にいくつの y の解が存在するかがわかればよい。式 (4.67) の両辺を y についてプロットすると



となり、 N_1 を整数として $N_1\pi > \sqrt{\lambda} \geq (N_1 - 1)\pi$ のとき、 N_1 個の偶パリティ解が存在することがわかる。それぞれの解に対応するエネルギー固有値は

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} y^2 - V_0$$

と求められる。

奇パリティの場合

同様に、奇パリティの場合は、 $A = -B$, $C = -D$ である。このときの波動関数は

$$u(x) = \begin{cases} Ae^{+\kappa x}, & \text{for } x < -a, \\ 2iC \sin(kx), & \text{for } -a < x < a, \\ -Ae^{-\kappa x}, & \text{for } a < x, \end{cases} \quad (4.68)$$

の形になる。点 $x = a$ での解が連続で滑らかであるための条件としては

$$\begin{pmatrix} 2i \sin(ka) & e^{-\kappa a} \\ 2ik \cos(ka) & -\kappa e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.69)$$

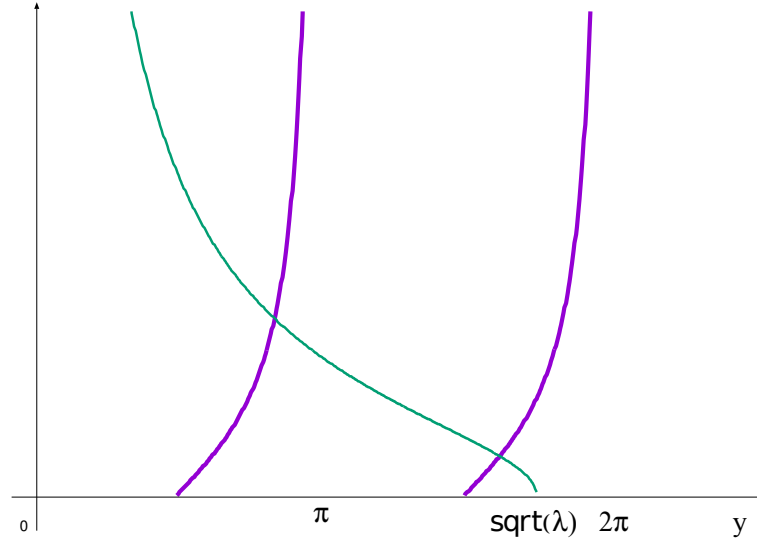
が得られる。式 (4.9) が非自明な解を持つための条件は

$$\kappa = -\frac{k}{\tan(ka)} \quad (4.70)$$

である。式 (4.66) の記号を用いて (4.70) を書き換えると

$$\sqrt{\frac{\lambda}{y^2} - 1} = -\frac{1}{\tan y} \quad (4.71)$$

となり、この式の両辺をプロットすると



が得られる。結局 $(N_2 + 1/2)\pi > \sqrt{\lambda} \geq (N_2 - 1/2)\pi$ のとき、 N_2 個の奇パリティ解が存在することがわかるのである。

以上の結果をまとめると以下のようなになる。

- 束縛状態 ($E < 0$ のときの解) は、式 (4.67) ないしは式 (4.71) を満たす場合のみに存在する。つまり、エネルギー固有値 E は離散的になる (量子化される)。
- ポテンシャルの深さ V_0 がとても浅く、 $\pi/2 > \sqrt{\lambda} \geq 0$ のときは、偶パリティ解がひとつだけ存在する。
- ポテンシャルが深くなっていく (λ が大きくなる) に従って、束縛状態解の数が増えていく。とくに、正の整数 N に対して λ が

$$N > \frac{2\sqrt{\lambda}}{\pi} \geq N - 1$$

の条件を満たすときには、パリティ偶奇をあわせて全部で N 個の束縛状態解が存在することがわかる。

- エネルギー固有値 E が小さいものから順にエネルギー固有状態を E_n ($n = 1, 2, 3, \dots$) とならべると、偶パリティ解 ($n = 1$)、奇パリティ解 ($n = 2$)、偶パリティ解 ($n = 3$)、 \dots の順に偶奇が交代であらわれる。 n 番目のエネルギー固有状態の固有値 E_n は

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \frac{n^2}{4} - V_0 > E_n \geq \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \frac{(n-1)^2}{4} - V_0$$

を満たす。(エネルギー準位、ポテンシャル、確率密度分布 $|u|^2$ の概形のグラフを入れる?)

これらの束縛状態についてイメージを得るため、ポテンシャルの深さが

$$V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$$

で与えられる場合について数値計算してみよう。対応する λ は

$$\frac{2\sqrt{\lambda}}{\pi} = 2\sqrt{2} \simeq 2.83$$

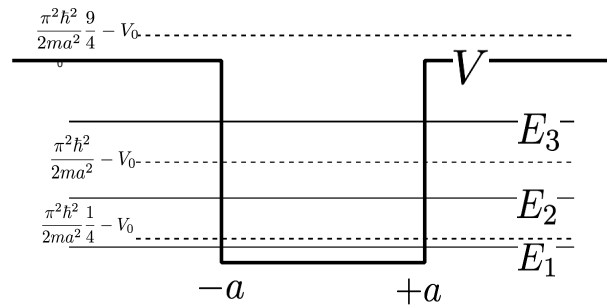
なので、2個の偶パリティ束縛状態と1個の奇パリティ束縛状態が存在することがわかる。これらの束縛状態のエネルギー固有値を小さい順に E_n ($n = 1, 2, 3$) と並べることとする。式 (4.67) を解いて得られる (偶パリティ束縛状態に対応する) 解は

$$y \simeq 1.279, \quad y \simeq 3.720,$$

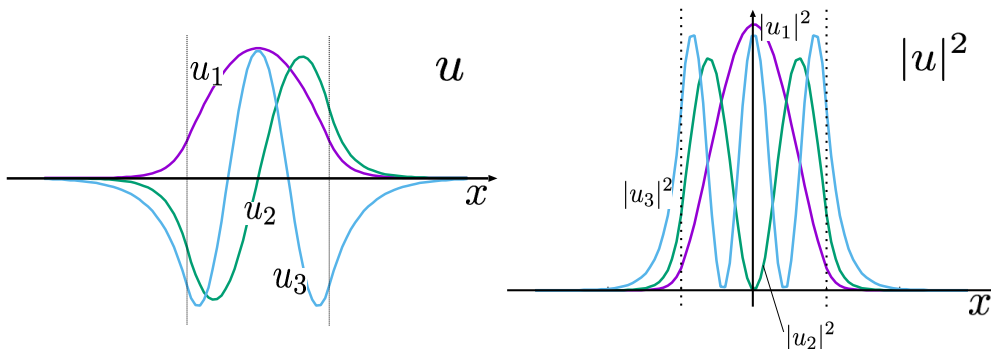
の二つであり、 $n = 1$ と $n = 3$ に対応する状態である。同様に、式 (4.71) を解いて得られる (奇パリティ束縛状態に対応する) 解は

$$y \simeq 2.535$$

と求められ、 $n = 2$ に対応する状態になっている。この井戸型ポテンシャル V の概形とともに、3つの束縛状態のエネルギー固有値 E_n ($n = 1, 2, 3$) を下図に示す。この図では、エネルギー固有値 E_n を実線で表すとともに、 $\frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} - V_0$ で与えられるエネルギーの値を点線で表示してある。



$n = 1, 2, 3$ の各束縛状態に対応する波動関数 u_n とその確率密度分布 $|u_n|^2$ のグラフは次のようになる。



これらの図において、縦の点線は井戸型ポテンシャルの範囲 ($x = \pm a$ の場所) を表しており、確率密度分布 $|u_n|^2$ が、井戸型ポテンシャルの範囲 $-a < x < +a$ から、 n の増加とともにみ出していくことが見て取れる。実際に $-a < x < +a$ の範囲に粒子を見出す確率の数値計算を行うと、 $n = 1$ のときは約 98% であることに対し、 $n = 2$ のときには約 93%、 $n = 3$ のときには約 80% と減少していくことがわかる。一般に、束縛エネルギーの絶対値が小さくなるに連れて、(つまり、束縛が浅くなるに連れて、) 確率密度分布の井戸の外へのはみ出しが大きくなっていく。

4.6 束縛状態: デルタ関数ポテンシャル

デルタ関数ポテンシャルによる引力に束縛された粒子の問題は、1次元量子力学においてもっとも取り扱いの容易な問題である。これは、前節で考えた井戸型ポテンシャルへの束縛状態の問題で、 $a \propto \epsilon$, $V_0 \propto 1/\epsilon$ と置いて $\epsilon \downarrow 0$ 極限を考えた場合に対応する¹⁶。

以下では、ポテンシャル

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 \lambda}{2ma} \delta(x) \quad (4.72)$$

を考える。このときの時間に依存しないシュレディンガー方程式は

$$E u(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) \quad (4.73)$$

を考えよう。前問と同様の考察により、束縛状態 ($E < 0$) の波動関数は、 $x < 0$, $0 < x$ の各々の領域で

$$u(x) = \begin{cases} A e^{+\kappa x}, & \text{for } x < 0, \\ B e^{-\kappa x}, & \text{for } 0 < x, \end{cases} \quad (4.74)$$

となる。ここで κ は

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (4.75)$$

で与えられる。

次に $x = 0$ での波動関数の接続を考えよう。 $x = 0$ に存在するデルタ関数は波動関数の接続にどのように影響するだろうか。式 (4.9) と同様に、時間に依存しないシュレディンガー方程式を $x = 0$ を含む微小な区間 $-\epsilon < x < +\epsilon$ での積分

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx E u(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} u \Big|_{x=+\epsilon} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} u \Big|_{x=-\epsilon} + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx V(x) u(x) \quad (4.76)$$

を考えてみる。今回は $V(x)$ にデルタ関数が存在するため

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx V(x) u(x) = -\frac{\hbar^2 \lambda}{2ma} u(0) \quad (4.77)$$

となることに注意しよう¹⁷。そのため、式 (4.76) の $\epsilon \downarrow 0$ 極限をとると

$$\lim_{x \downarrow 0} \frac{d}{dx} u - \lim_{x \uparrow 0} \frac{d}{dx} u = -\frac{\lambda}{a} u(0) \quad (4.78)$$

となる。つまり、ポテンシャルにデルタ関数が存在すると、波動関数の微分は不連続になり、そこで波動関数が滑らかでないことがわかる。波動関数の導関数が有限の値であることにより、 $x = 0$ での条件

$$\lim_{x \downarrow 0} u(x) = \lim_{x \uparrow 0} u(x) \quad (4.79)$$

を得る。

接続の条件式 (4.79) を、シュレディンガー方程式の解 (4.74) に適用すると、 $A = B$ であることがわかり、さらに式 (4.78) を適用すると、非自明な解が存在するための条件が

$$\kappa = \frac{\lambda}{2a} \quad (4.80)$$

¹⁶ 演習問題参照

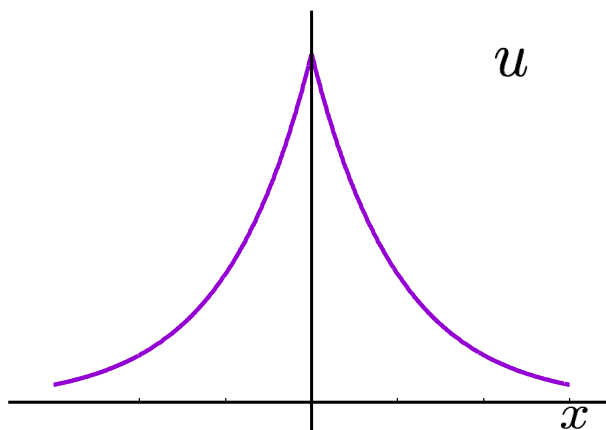
¹⁷ $u(x)$ が $x = 0$ で不連続な場合まで考慮するときは、式 (4.77) の右辺の $u(0)$ を $\lim_{\epsilon \downarrow 0} (u(+\epsilon) + u(-\epsilon))/2$ で置き換えねばならない。しかしながらこの問題では、式 (4.79) で示されるように波動関数 $u(x)$ 自体は $x = 0$ で連続であることがわかるので、式 (4.77) の表記で十分である。

であることがわかる。つまり、この場合の束縛状態の解がひとつだけ存在し、そのエネルギー固有値は

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2 = -\frac{\hbar^2\lambda^2}{8ma^2} \quad (4.81)$$

と計算できる。 $A = B$ であることから、この束縛状態のパリティが偶であることもわかる。

この束縛状態の波動関数の概形を以下に図示しておく。デルタ関数ポテンシャルの存在する場所 ($x = 0$) で波動関数の導関数が不連続であること、つまり、波動関数が $x = 0$ で尖っていることに注意してほしい。波動関数はまた、 $|x|$ が増大するにつれて指数関数で減少する関数になっている。



4.7 調和振動子

この章の最後に、1次元のバネ振動のハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x}), \quad V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (4.82)$$

を考えよう。ここで k はバネ定数である。このハミルトニアンは古典力学において角振動数 $\omega = \sqrt{k/m}$ の調和振動子を与える。そのため、バネ定数 k の代わりに角振動数 ω を用いて

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad (4.83)$$

と書くのが一般的である。

調和振動子の問題は、比較的簡単に解析的に解くことができるので、量子力学のさまざまな性質を理解するうえでの格好の素材である。複数の解法が知られており、それぞれが量子力学の性質の一面を反映したものとなっている。もっとも進んだ量子力学である場の量子論を理解するうえで、欠かせない素材となっていること、また、現実存在する多くの振動現象が近似的には調和振動子であると見なすことができることから実用性も高い。

この節では、直交多項式を用いて、調和振動子の時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$E u(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right] u(x) \quad (4.84)$$

を解く方法を紹介しよう。

この微分方程式を解くにあたって、座標変数 x を物理次元を持たない無次元の変数

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (4.85)$$

を使って

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \frac{2E}{\hbar\omega} \right] u = 0$$

と書き換えておくと便利である。さらに、エネルギー固有値 E の代わりに無次元の量

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (4.86)$$

を導入して

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \lambda \right] u = 0 \quad (4.87)$$

と書き換えておく。このようにすれば、微分方程式 (4.87) を次元のない量のみで書き下すことができ、計算途中の見通しを得やすい。

$\xi \gg \sqrt{|\lambda|}$ の微分方程式 (4.87) の解の振る舞いを考えよう。このとき、微分方程式のなかで、 ξ^2 に比例する第2項が λ に比例する第3項よりも大きな寄与を与えることは明らかである。したがって、微分方程式の第1項は、第2項をキャンセルするような大きさにならねばならない。そのためには、 $\xi \gg \sqrt{|\lambda|}$ でのおおよその解の振る舞いが

$$u \propto \xi^n \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \quad (4.88)$$

ないしは

$$u \propto \xi^n \exp\left(+\frac{1}{2}\xi^2\right) \quad (4.89)$$

でなければならない。このうち、式 (4.89) の可能性は、無限遠方の波動関数が無限大になってしまい、束縛状態の波動関数の確率解釈と矛盾する。したがって、式 (4.88) を採用することにする。

これで $\xi \gg \sqrt{|\lambda|}$ での波動関数のおおよその振る舞いがわかったので、次に $\xi \ll 1$ での振る舞いを考えることにする。この目的のため、

$$u = h(\xi) \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \quad (4.90)$$

と置いて、関数 $h(\xi)$ の振る舞いを考えたい。そのため、式 (4.90) を式 (4.87) に代入して、 $h(\xi)$ についての微分方程式

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d}{d\xi} + \lambda - 1 \right] h(\xi) = 0 \quad (4.91)$$

を得る。微分方程式 (4.91) は $\xi = 0$ において正則なので、

$$h(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n \quad (4.92)$$

とテイラー展開できる。式 (4.92) を微分方程式 (4.91) に代入して a_n についての漸化式を求めると

$$(n+1)(n+2)a_{n+2} = (2n+1-\lambda)a_n \quad (4.93)$$

が得られる。あとは、この漸化式を解いていけばよい。式 (4.91) が2階の線形微分方程式であることから、線形独立な解がふたつ存在する。それらは、 $a_0 \neq 0, a_1 = 0$ から出発して漸化式 (4.93) を用いて a_n が決定される解

$$a_2 = \frac{1-\lambda}{2}a_0, \quad a_3 = 0, \quad a_4 = \frac{5-\lambda}{12} \frac{1-\lambda}{2}a_0, \quad a_5 = 0, \dots$$

と、 $a_0 = 0, a_1 \neq 0$ から出発して得られる解

$$a_2 = 0, \quad a_3 = \frac{3-\lambda}{6}a_1, \quad a_4 = 0, \quad a_5 = \frac{7-\lambda}{20} \frac{3-\lambda}{6}a_1, \dots$$

のふたつである。

λ が正の奇数のとき、漸化式 (4.93) の右辺がゼロになる n が存在する。この場合、 $a_{n+2} = a_{n+4} = \dots = 0$ となり、テイラー展開 (4.92) が無限級数にならず、解が有限次数の多項式になる場合があることに注意。この場合以外は、十分に大きな n について

$$a_{n+2} \simeq \frac{1}{n/2}a_n$$

と近似できる。無限級数になる場合、無限級数の和をとると

$$h(\xi) \sim \exp(+\xi^2)$$

となり、式 (4.90) の $\xi \gg \sqrt{|\lambda|}$ での振る舞いが式 (4.89) の形になってしまうため、束縛状態の波動関数として採用することができない。

したがって、我々が h の解として採用できる解は、結局、 λ が正の奇数のときの $h(\xi)$ が有限次数の多項式になる場合のみである。

λ に関するこの条件

$$\lambda = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.94)$$

を、式 (4.86) を用いてエネルギー固有値 E の条件に書き直すと

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.95)$$

が得られる。

3.3 節で調べた箱に閉じ込められた粒子や 4.5 節で調べた井戸型ポテンシャルへの束縛状態のときと同様に、調和振動子の束縛状態のエネルギー固有値は、式 (4.95) のように量子化される（離散的な値をとる）ことに注意しよう。特に、調和振動子の場合、離散的なエネルギー固有値が等間隔になっていることが特徴的である¹⁸。調和振動子のエネルギー固有値の間隔 ($\hbar\omega$) をエネルギー量子と呼ぶ。

次に、各々の n の状態について、波動関数の具体的な形を調べていこう。

- $n = 0$ のとき。この状態はエネルギー固有値が最低値

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

をとるため基底状態と呼ばれる。基底状態の波動関数は

$$u = a_0 \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)$$

によって与えられる。基底状態はパリティ偶の状態である。

¹⁸ この性質によって、場の量子論において n を粒子数であると同定することが可能となる。とくに、調和振動子を量子光学に応用する際には、 n は光子数であると同定される。

- $n = 1$ のとき。この状態のエネルギー固有値は

$$E = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

であり、基底状態の次に小さいので第 1 励起状態と呼ばれる。第 1 励起状態の波動関数は

$$u = a_1\xi \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)$$

によって与えられる。第 1 励起状態はパリティ奇の状態である。

- $n = 2$ のとき。この状態はエネルギー固有値が

$$E = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

の第 2 励起状態である。その波動関数は、

$$u = a_0(-2\xi^2 + 1) \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)$$

によって与えられる。第 2 励起状態のパリティは偶である。

- $n = 3$ のとき。この状態はエネルギー固有値が

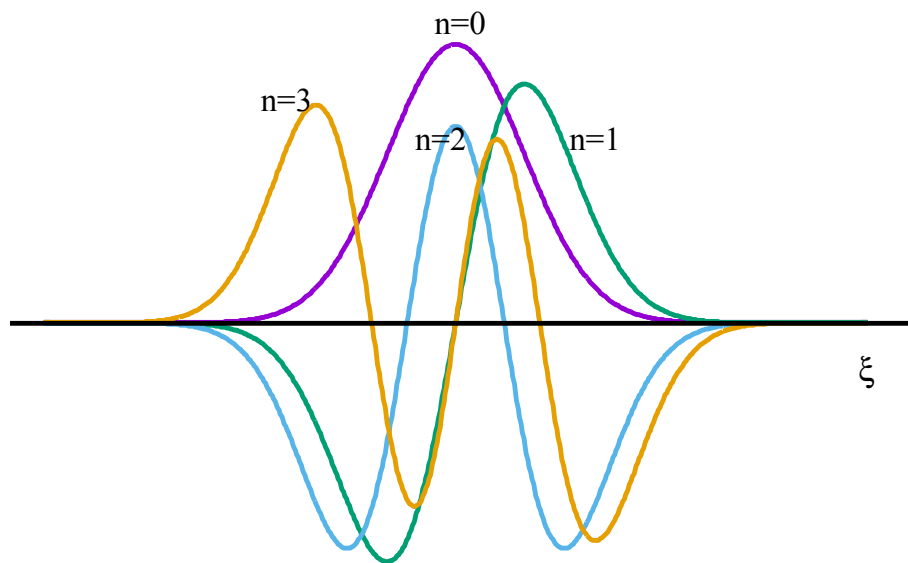
$$E = \frac{7}{2}\hbar\omega$$

の第 3 励起状態で、その波動関数は、

$$u = a_1\left(-\frac{2}{3}\xi^3 + \xi\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)$$

によって与えられる。

基底状態 ($n = 0$) から第 3 励起状態 ($n = 3$) までの波動関数の概形を下図に示す。



λ が量子化条件 (4.94) を満たすとき、微分方程式 (4.91) は

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d}{d\xi} + 2n \right] h(\xi) = 0 \quad (4.96)$$

と書き直すことができる。式 (4.96) はエルミートの微分方程式として知られている。その解の多項式は、エルミート多項式 $H_n(\xi)$ としてよく知られている。エルミート多項式 H_n を用いると、調和振動子の n 番目のエネルギー固有状態 $|u_n\rangle$ の波動関数を

$$u_n = A_n H_n(\xi) \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right), \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \quad (4.97)$$

と書き下すことができる。ここで、 A_n は規格化の定数である。エルミート多項式は直交多項式と呼ばれる一群の多項式の具体例となっている。エルミート多項式を含む直交多項式の性質については、付録 E を参照のこと。付録 E の式 (E.20) で示されているように、エルミート多項式は

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi H_{n'}(\xi) H_n(\xi) \exp(-\xi^2) = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nn'} \quad (4.98)$$

を満たし、式 (4.98) の左辺で定義される内積のもとで $n \neq n'$ のとき直交している¹⁹。このことから、波動関数 u_n と $u_{n'}$ は $n \neq n'$ であれば直交する。つまり

$$\delta_{nn'} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx u_{n'}^*(x) u_n(x) \quad (4.99)$$

とできることがわかる。ここで規格化の定数 A_n は、 $n = n'$ のときに式 (4.99) が成立するように、

$$|A_n|^2 = \frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$$

と与えられるものとする。

調和振動子のエネルギー固有状態 $|u_n\rangle$ とエネルギー固有値 E_n ($n = 0, 1, 2, \dots$) について、いくつかの性質を列挙しておく。

- エネルギー固有値は、

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

のように量子化されている。

- 基底状態 $|u_0\rangle$ においてもエネルギー固有値はゼロにならず、古典力学とは異なった結果を与える。これは、運動量演算子や位置演算子の二乗の期待値がゼロではない

$$\langle u_0 | \hat{p}^2 | u_0 \rangle \neq 0, \quad \langle u_0 | \hat{x}^2 | u_0 \rangle \neq 0$$

ことの反映である。運動量演算子や位置演算子そのものの期待値は

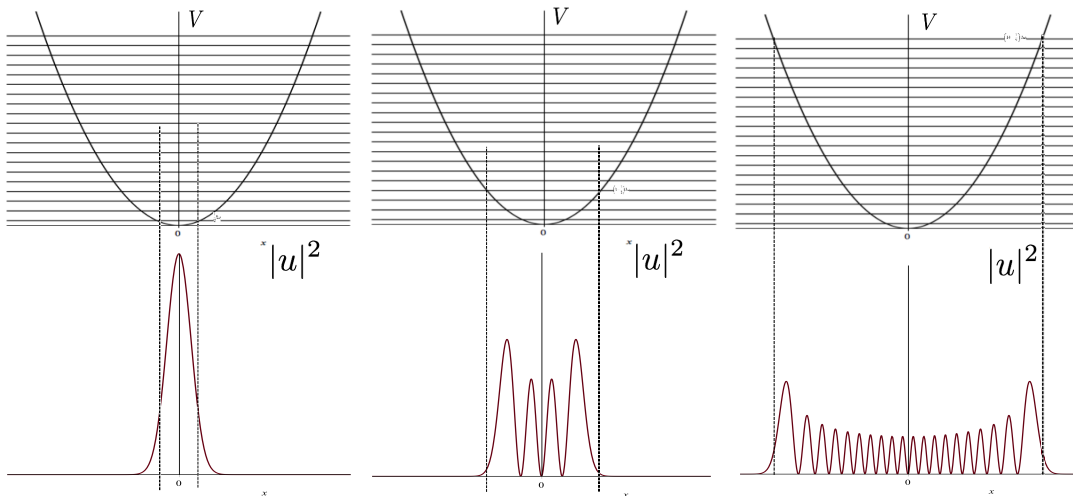
$$\langle u_0 | \hat{p} | u_0 \rangle = 0, \quad \langle u_0 | \hat{x} | u_0 \rangle = 0$$

でゼロになることから、不確定性関係の帰結であると言ってもよい。

¹⁹ このことが直交多項式と呼ばれるゆえんである。

- 固有状態の波動関数の節の数が n に対応しており、節の数が多いほどエネルギー固有値が大きい。
- n が偶数のときは $|u_n\rangle$ はパリティ偶の状態であり、 n が奇数のときは $|u_n\rangle$ はパリティ奇の状態になっている。つまり、エネルギー固有値 E_n が小さいものから順に固有状態をならべると、偶パリティ解、奇パリティ解、偶パリティ解、... の順に偶奇が交代であらわれる。

基底状態 ($n=0$)、第3励起状態 ($n=3$)、第19励起状態 ($n=19$) の各状態について、以下に、ポテンシャル V とエネルギー固有値 E_n のグラフ (上図) と、対応する確率密度分布 $|u_n|^2$ のグラフ (下図) を示す。これらのグラフから、確率密度分布が領域 $E_n > V$ を満たす x の領域に広がっていることを見て取ることができる。



5 ヒルベルト空間とエルミート演算子

微分積分学の知識を使って古典力学が理解できたように、あるいは、ベクトル解析の言葉を使って電磁気学の基礎方程式 (マクスウェル方程式) をコンパクトに書き表せたように、物理学の基礎方程式を書き下したり、それを使って具体的問題を解く上で、適切な数学の言葉を使うと、便利でより深い理解が可能になることが多い。

量子力学では、無限次元線形空間としてのヒルベルト空間、およびヒルベルト空間に作用するエルミート演算子に関係するいくつかの数学的知識がそれにあたる。この章では、そのような基礎的な数学的知識を紹介し、この言語を用いて、これまで学んできた量子力学の構造を復習する。さらに、ハイゼンベルグの不確定性関係や、古典力学 (解析力学) との対応がこの言語を用いて見通しよく理解できることを解説する。

5.1 波動関数とヒルベルト空間

量子力学での状態はさまざまな位置に粒子がいる状態の重ね合わせで表現される。

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \psi(x). \quad (5.1)$$

重ね合わせの係数 (複素関数) $\psi(x)$ を波動関数と呼ぶ。このノートでは、ディラックのブラケット記号法を採用し、状態をケット記号 ($|\psi\rangle$) を用いて表記する。

定義から明らかなように、ふたつの状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ が与えられると、その重ね合わせの状態

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle c_1 + |\psi_2\rangle c_2, \quad \psi(x) = c_1 \psi_1(x) + c_2 \psi_2(x) \quad (5.2)$$

を作ることができる。ここで c_1, c_2 は適当な複素数である。このように、適当な複素数の係数 c_1, c_2 を使って重ね合わせができる空間 (波動関数の集合) のことを**複素ベクトル空間**と呼ぶ。

状態の**内積**は、波動関数の積分を用いて

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^*(x) \psi_2(x) \quad (5.3)$$

で定義される。ここで ψ_1^* は ψ_1 の複素共軛である。ディラックの記号法では、 $\langle \psi |$ を**ブラ**と呼び

$$\langle \psi | = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi^*(x') \langle x | \quad (5.4)$$

で定義する。後述する内積の線形性を用いると、ディラックの記号法での状態の内積は

$$\langle x' | x \rangle = \delta(x - x') \quad (5.5)$$

としたときのブラとケットの積として理解できて便利である。定義 (5.3) より、内積の複素共軛の複素共軛をとると、ブラとケットの入れ替えを行うことになる、つまり、

$$(\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle)^* = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \quad (5.6)$$

であることは明らか。また、式 (5.2) で与えられる重ね合わせの状態と、状態 $|\psi_3\rangle$ の内積は

$$\langle \psi_3 | \psi \rangle = c_1 \langle \psi_3 | \psi_1 \rangle + c_2 \langle \psi_3 | \psi_2 \rangle, \quad \langle \psi | \psi_3 \rangle = c_1^* \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle + c_2^* \langle \psi_2 | \psi_3 \rangle \quad (5.7)$$

で与えられ、内積は線形性を保つことがわかる。

同じ状態同士の内積の平方根をその状態の**ノルム**と呼ぶ。内積の定義から明らかなようにノルムは必ず正 (またはゼロ) の値となる。

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 \geq 0. \quad (5.8)$$

波動関数 $\psi(x)$ と粒子の存在確率を関係づけるためには、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \psi(x) \quad (5.9)$$

は有限の値にならねばならない。この条件は**二乗可積分条件**と呼ばれる。ふたつの波動関数 ψ_1, ψ_2 が二乗可積分であれば、その任意の重ね合わせの波動関数 (式 (5.2) の波動関数) も二乗可積分であることから、二乗可積分な波動関数の集合も複素ベクトル空間である。一般に正定値のノルム (の二乗) を持つ複素ベクトル空間を、**ヒルベルト空間**と呼ぶ。二乗可積分な複素関数を元とし、内積が式 (5.3) で定義されている複素ベクトル空間は、ヒルベルト空間の代表的な例になっている。量子力学での状態はヒルベルト空間の元に他ならず、量子力学は、数学上はヒルベルト空間²⁰の言葉を用いて定式化されている。

確率密度と波動関数の二乗を関係づけるためには、波動関数を次のように**規格化**しておくと便利である。

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1. \quad (5.10)$$

以下では、とくに断らない場合は、すべての波動関数が規格化されているものとする。

²⁰ 状態 $|x\rangle$ の内積は $\langle x' | x \rangle = \delta(x - x')$ で与えられる。したがって、 $\langle x' | x \rangle$ は $x = x'$ で無限大である。このことは状態 $|x\rangle$ が二乗可積分ではなく、ヒルベルト空間の元に含まれないことを意味する。このことを気にする数学者は、 $|x\rangle$ のような元まで含めるよう拡張された複素線形空間である Rigged Hilbert Space (Gelfand triple) を定義したうえで量子力学を定式化するらしい。この講義ではこのような数学的厳密さは追求しない。

5.2 エルミート演算子と観測可能量

粒子の位置、運動量、エネルギー、パリティなどの**観測可能量**には、それぞれ対応する演算子（作用素）が存在する。たとえば、位置演算子 \hat{x} 、運動量演算子 \hat{p} 、ハミルトニアン（エネルギー）演算子 \hat{H} 、パリティ演算子 \hat{P} のヒルベルト空間の元（状態 $|\psi(t)\rangle$ ）への作用は

$$\hat{x}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle x_{\text{op}}\psi(x), \quad x_{\text{op}} = x, \quad (5.11)$$

$$\hat{p}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle p_{\text{op}}\psi(x), \quad p_{\text{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad (5.12)$$

$$\hat{H}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle H_{\text{op}}\psi(x), \quad H_{\text{op}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad (5.13)$$

$$\hat{P}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\psi_P(x), \quad \psi_P(x) = \psi(-x) \quad (5.14)$$

で与えられる。ここで m は粒子の質量を、 $V(x)$ はポテンシャルを表す。 p_{op} や H_{op} は波動関数に作用する微分演算子である。

同じ状態 $|\psi\rangle$ に対し観測可能量 A の多数回の測定を行うときの平均値（期待値）は、対応する演算子 \hat{A} を用いて

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)A_{\text{op}}\psi(x) \quad (5.15)$$

で与えられる。観測可能量を測定して得られる値は実数であるため、観測可能量に対応する演算子は、任意の状態 $|\psi\rangle$ に対し

$$(\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle)^* = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \quad (5.16)$$

を満たさねばならない。この式の左辺の $*$ は複素共軛をとることを表している。この条件を満たす演算子は**エルミート演算子**と呼ばれる。つまり、観測可能量には必ずエルミート演算子に対応している。もちろん、位置演算子 \hat{x} 、運動量演算子 \hat{p} 、ハミルトニアン演算子 \hat{H} （ポテンシャルと質量が実数の場合）、パリティ演算子 \hat{P} は、すべてエルミート演算子である。

任意の演算子 \hat{A} が与えられたとき、任意の状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ に対して、

$$\langle\psi_1|\hat{A}^\dagger|\psi_2\rangle = (\langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle)^* \quad (5.17)$$

となる演算子 \hat{A}^\dagger を、 \hat{A} に対する**エルミート共軛な演算子**と呼ぶ。式 (5.17) において、ブラ $\langle\psi_2|$ に共軛なケットは $|\psi_2\rangle$ であり、ケット $\hat{A}|\psi_1\rangle$ に共軛なブラは $\langle\psi_1|\hat{A}^\dagger$ である。とくに、 \hat{A} がエルミート演算子の場合は、

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \quad (5.18)$$

となり、エルミート共軛のもとで自己共軛であることを示すことができる。²¹ 演算子のエルミート共軛を考える上で役に立つ基礎的な事実を列挙しておこう。

- 単位演算子 $\hat{1}$ (恒等演算子、なにもしない演算子) はエルミート演算子である。

$$\hat{1}^\dagger = \hat{1}. \quad (5.19)$$

証明: 式 (5.6) より、

$$\langle\psi_1|\hat{1}|\psi_2\rangle = (\langle\psi_2|\hat{1}|\psi_1\rangle)^*$$

となり、エルミート共軛の定義式 (5.17) から $\hat{1}^\dagger = \hat{1}$ になることは明らか。

²¹ このことを示すには、エルミート演算子の定義式 (5.16) で、 $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ とおけばよい。 $(\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_1\rangle)^* = \langle\psi_1|\hat{A}|\psi_1\rangle$ 、 $(\langle\psi_2|\hat{A}|\psi_2\rangle)^* = \langle\psi_2|\hat{A}|\psi_2\rangle$ 、さらに係数 c_1, c_2 が任意であることを用いると、任意の状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ について $(\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle)^* = \langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle$ であることが示される。つまり $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ であることがわかる。

- 任意の演算子 \hat{Q} について

$$(\hat{Q}^\dagger)^\dagger = \hat{Q}. \quad (5.20)$$

証明: エルミート共軛の定義式 (5.17) に立ち返ると、

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | (\hat{Q}^\dagger)^\dagger | \psi_2 \rangle &= (\langle \psi_2 | \hat{Q}^\dagger | \psi_1 \rangle)^* \\ &= ((\langle \psi_1 | \hat{Q} | \psi_2 \rangle)^*)^* = \langle \psi_1 | \hat{Q} | \psi_2 \rangle \end{aligned}$$

であることがわかる。これが任意の状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ について示されたので、式 (5.20) が証明された。

- 任意の演算子 \hat{Q} について

$$(i\hat{Q})^\dagger = -i\hat{Q}^\dagger. \quad (5.21)$$

証明: 同様に、エルミート共軛の定義式 (5.17) に立ち返って、

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | (i\hat{Q})^\dagger | \psi_2 \rangle &= (\langle \psi_2 | i\hat{Q} | \psi_1 \rangle)^* \\ &= -i(\langle \psi_2 | \hat{Q} | \psi_1 \rangle)^* = -i\langle \psi_1 | \hat{Q}^\dagger | \psi_2 \rangle \end{aligned}$$

を得る。

- 任意の演算子 \hat{A}, \hat{B} について

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger. \quad (5.22)$$

証明: エルミート共軛の定義式 (5.17) から

$$\langle \psi_1 | (\hat{A}\hat{B})^\dagger | \psi_2 \rangle = (\langle \psi_2 | \hat{A}\hat{B} | \psi_1 \rangle)^*.$$

ヒルベルト空間の元 $|B\psi_1\rangle, |A^\dagger\psi_2\rangle$ を

$$|B\psi_1\rangle \equiv \hat{B}|\psi_1\rangle, \quad |A^\dagger\psi_2\rangle \equiv \hat{A}^\dagger|\psi_2\rangle$$

と定義し、 $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$, $(\hat{B}^\dagger)^\dagger = \hat{B}$, そして内積の複素共軛の式 (5.6)、エルミート共軛の定義式 (5.17) を用いて、上の式をさらに変形していくと、

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | (\hat{A}\hat{B})^\dagger | \psi_2 \rangle &= (\langle \psi_2 | \hat{A} | B\psi_1 \rangle)^* = (\langle \psi_2 | (\hat{A}^\dagger)^\dagger | B\psi_1 \rangle)^* \\ &= \langle B\psi_1 | \hat{A}^\dagger | \psi_2 \rangle = \langle B\psi_1 | A^\dagger \psi_2 \rangle \\ &= ((A^\dagger \psi_2 | B\psi_1))^* = ((A^\dagger \psi_2 | \hat{B} | \psi_1))^* = ((A^\dagger \psi_2 | (\hat{B}^\dagger)^\dagger | \psi_1))^* \\ &= \langle \psi_1 | \hat{B}^\dagger | A^\dagger \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger | \psi_2 \rangle \end{aligned}$$

を得る。

次に、エルミート演算子 \hat{A} の固有値 a の固有状態 $|u\rangle$

$$\hat{A}|u\rangle = a|u\rangle \quad (5.23)$$

を考える。状態 $|u\rangle$ は規格化されているので

$$\langle u | \hat{A} | u \rangle = a \quad (5.24)$$

であるが、任意の状態についてエルミート演算子は式 (5.16) を満たすので、 a が実数である (複素数ではない) ことがすぐに分かる。

エルミート演算子 \hat{A} の固有値 a_1 の固有状態 $|u_1\rangle$ と固有値 a_2 の固有状態 $|u_2\rangle$ を考える。 $a_1 \neq a_2$ であれば、これらふたつの状態は直交している、つまり、

$$0 = \langle u_1 | u_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx u_1^*(x) u_2(x) \quad (5.25)$$

であることを示すことができる。これを示すには、

$$\langle u_1 | \hat{A} | u_2 \rangle \quad (5.26)$$

をふたとおりの方法で評価すればよい。最初に、 $|u_2\rangle$ が \hat{A} の固有状態であることから、

$$\langle u_1 | \hat{A} | u_2 \rangle = a_2 \langle u_1 | u_2 \rangle \quad (5.27)$$

を得る。もうひとつの方法として、 \hat{A} がエルミート演算子であることと、 $|u_1\rangle$ が \hat{A} の固有状態であることを用いて、

$$\langle u_1 | \hat{A} | u_2 \rangle = (\langle u_2 | \hat{A} | u_1 \rangle)^* = a_1^* (\langle u_2 | u_1 \rangle)^* = a_1 \langle u_1 | u_2 \rangle \quad (5.28)$$

を得る。式 (5.27) と (5.28) を比べると、 $a_1 \neq a_2$ のときに $|u_1\rangle$ と $|u_2\rangle$ の直交性 (5.25) は明らかである。さらに、エルミート演算子 \hat{A} に固有値 a_n を与える固有状態 $|u_n\rangle$ が規格化されていれば、

$$\langle u_{n'} | u_n \rangle = \delta_{n'n} \quad (5.29)$$

が得られる。ここで $\delta_{n'n}$ はクロネッカーのデルタであり

$$\delta_{n'n} = \begin{cases} 1 & \text{for } n = n' \\ 0 & \text{for } n \neq n' \end{cases} \quad (5.30)$$

と定義されている。一般に、ひとくみの状態 $|u_n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots$) が式 (5.29) を満たすとき、この状態のひとくみは**正規直交 (規格直交)** していると呼ばれる。

つぎに、状態 $|\psi\rangle$ が、 \hat{A} の固有状態

$$\hat{A} | u_n \rangle = a_n | u_n \rangle \quad (5.31)$$

の重ね合わせ

$$|\psi\rangle = \sum_n |u_n\rangle C_n \quad (5.32)$$

で表わすことができる場合を考える。ここで C_n は重ね合わせの係数である。この状態に対し、観測可能量 A の精度良い測定²²を行うと、一回一回の測定での測定値は、エルミート演算子 \hat{A} の固有値 (a_n) のうちどれかの値をとり、測定後の状態は対応する固有状態 $|u_n\rangle$ になる (射影仮説)。

例えば、エネルギーの測定値に対応するハミルトニアン演算子の固有値 E_n は、固有値方程式

$$E_n | u_n \rangle = \hat{H} | u_n \rangle \quad (5.33)$$

²² この講義では、測定器に由来する誤差がゼロであり、単純な射影仮説が成立する測定 (理想測定と呼ばれる) のみを取り扱う。現実の測定装置は必ずしも理想測定を行う装置ではないことに注意する必要がある。そのため、現代の量子測定理論では、理想的ではない測定が主な研究対象である。しかしながら、その際、量子力学を用いて測定装置自体を記述することが求められるので、量子力学を習熟しないまま量子測定理論の進展を理解するのは不可能である。この講義では、これ以上量子測定理論には立ち入らない。量子測定が気になる学生は、通常の量子力学の履修を終えた後に、倉本・江沢の教科書における解説と参考文献に目を通すと良いかもしれない。

を解いて求められる。 $|u_n\rangle$ のことをハミルトニアン演算子の固有状態（エネルギーの固有状態）と呼ぶ。状態 $|u_n\rangle$ を波動関数を用いて

$$|u_n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle u_n(x) \quad (5.34)$$

で表し、波動関数の言葉で固有値方程式 (5.33) を書き直すと

$$E_n u_n(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u_n(x) \quad (5.35)$$

が得られる。つまり、エネルギーの測定値を求める問題は、与えられた境界条件のもとで微分方程式 (5.35) を解く問題に帰着する。このときの波動関数 $u_n(x)$ をハミルトニアン演算子の固有関数と呼ぶ。

5.3 完全系と射影演算子

任意の状態 $|\psi\rangle$ を

$$|\psi\rangle = \sum_n |u_n\rangle C_n \quad (5.36)$$

のように展開できる状態 $|u_n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots$) のひとくみを考えよう。このような状態のひとくみを**完全系**と呼ぶ。縮退しない固有値をもつエルミート演算子（観測可能量） \hat{A} の固有値を a_n として、固有状態を $|u_n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots$) としよう。固有状態のひとくみ $|u_n\rangle$ は、完全系を作っていることに注意しよう。

この完全系が正規直交している、つまり、式 (5.29) を満たすとし、式 (5.36) に $\langle u_{n'}|$ をかけると

$$C_n = \langle u_n | \psi \rangle \quad (5.37)$$

が得られる。この結果をもとの展開式 (5.36) に代入すると、任意の状態 $|\psi\rangle$ について

$$|\psi\rangle = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n | \psi \rangle \quad (5.38)$$

が得られ、結局

$$\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = \hat{1} \quad (5.39)$$

であることがわかる。ここで右辺の $\hat{1}$ は単位演算子（恒等演算子、なにもしない演算子）を表す。式 (5.39) は**完全性関係**と呼ばれ、正規直交条件式 (5.29) と合わせ、**正規直交完全系**が満たすべき条件となっている。

ヒルベルト空間における正規直交完全系は、3次元ベクトル空間における基底ベクトル $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ と同等の役割を担っている。3次元ベクトル空間の基底ベクトルは正規直交している、つまり、

$$\vec{e}_{n'} \cdot \vec{e}_n = \delta_{n'n}, \quad (n, n' = x, y, z) \quad (5.40)$$

であるが、これらの式は正規直交条件の式 (5.29) に他ならない。また、3次元ベクトル空間の任意のベクトル \vec{V} は、座標 (V_x, V_y, V_z) を用いて基底ベクトルの重ね合わせ

$$\vec{V} = \sum_{n=x,y,z} \vec{e}_n V_n \quad (5.41)$$

で表されるが、これは式 (5.36) と同等の展開式である。さらに、ベクトルから座標を取り出す操作は、基底ベクトル方向の成分として

$$V_n = \vec{e}_n \cdot \vec{V}, \quad (n = x, y, z) \quad (5.42)$$

で与えられる。これは、ヒルベルト空間の場合の式 (5.37) に他ならない。つまり、ヒルベルト空間の元 (状態) の展開式 (5.36) における係数 C_n は、3次元ベクトル空間の場合の座標 (V_x, V_y, V_z) に対応する量なのである。

3次元ベクトル空間の場合は、ベクトル \vec{V} の基底ベクトル方向への**射影ベクトル**

$$\vec{e}_n (\vec{e}_n \cdot \vec{V}), \quad (n = x, y, z) \quad (5.43)$$

がしばしば有益であった。ヒルベルト空間の場合も同様の概念

$$\hat{P}_n \equiv |u_n\rangle\langle u_n| \quad (5.44)$$

を考えよう。ここで、 \hat{P}_n は**射影演算子**と呼ばれる演算子²³であり、もとの状態 $|\psi\rangle$ の $|u_n\rangle$ 方向への射影

$$\hat{P}_n |\psi\rangle = |u_n\rangle C_n \quad (5.45)$$

を与える演算子である。射影演算子 \hat{P}_n は以下の性質を満たす：

$$\hat{P}_{n'} \hat{P}_n = \delta_{n'n} \hat{P}_n, \quad (5.46)$$

$$\sum_n \hat{P}_n = \hat{1}. \quad (5.47)$$

観測可能量 \hat{A} にいくつか存在する固有値のうち、個々の理想測定でどの固有値が得られるかについては、その確率のみが求められる。たとえば、式 (5.36) の $|u_n\rangle$ をエルミート演算子 \hat{A} の固有状態だとすると、状態 $|\psi\rangle$ に対し測定を行い、固有値 a_n の値が得られる確率は、重ね合わせの係数 C_n を用いて、

$$|C_n|^2 \quad (5.48)$$

で与えられることになる。式 (5.37) を用いれば、

$$C_n = \langle u_n | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx u_n^*(x) \psi(x) \quad (5.49)$$

が得られる。つまり、1回の測定で固有値 a_n が得られる確率は

$$|\langle u_n | \psi \rangle|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx u_n^*(x) \psi(x) \right|^2 \quad (5.50)$$

と求められる²⁴。このとき、式 (5.44) で定義される射影演算子 \hat{P}_n が \hat{A} を測定する測定装置の役割を果たしていることに注意しておく。

最後に、量子力学 (ヒルベルト空間) における完全系の例をいくつか紹介しよう。3次元ベクトルを使った計算の際に、具体的な基底ベクトルとそれに付随する座標系を用いることが必須であったのと同様に、量子力学でも具体的な完全系を選ぶことが計算をする上で必要になる。3次元ベクトルを使った計算の際に、具体的に解きたい問題に応じて、もっとも適切な基底ベクトルを選ぶと計算が簡単になったのと同様に、量子力学においても完全系の選び方次第で計算が著しく簡単化できる場合がある。

²³ パリティ演算子 \hat{P} と良く似た記号が使われるが、無関係な演算子なので混乱しないよう注意すること。

²⁴ 同じ固有値 a_n を持つ状態が複数存在する場合 (縮退がある場合) は、それらの状態について和をとることで確率が求められる。

- ハミルトニアン演算子の固有状態を完全系に選ぶ場合

以下では説明の簡単化のため、エネルギー固有値が離散的な場合を考える。ハミルトニアン演算子 \hat{H} はエルミート演算子なので、固有値方程式

$$E_n|u_n\rangle = \hat{H}|u_n\rangle \quad (5.51)$$

を満たす固有状態 $|u_n\rangle$ を規格化しておけば、正規直交条件

$$\langle u_{n'}|u_n\rangle = \delta_{n'n} \quad (5.52)$$

を満たすことは、5.2章の議論から示すことができる。

また、同一のエネルギー固有値 E_n をもつ状態がひとつしかない（縮退がなければ）、 n を指定することで完全に状態を指定することができ、すべてのエネルギー固有状態のひとつくみを用意することで完全系を作ることが可能である。（縮退がある場合は、5.4章で説明したように、適当な同時観測可能量を使って状態を指定すれば良い。）

5.7章で議論したように、ハミルトニアンの固有状態を完全系に用いることによって、任意の状態の時間発展は

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |u_n\rangle C_n e^{-iE_n t/\hbar} \quad (5.53)$$

と与えられる。

- 位置演算子 \hat{x} の固有状態を完全系に選ぶ場合

固有値方程式

$$x|x\rangle = \hat{x}|x\rangle \quad (5.54)$$

を満たす位置演算子 \hat{x} の固有状態 $|x\rangle$ を考える。この場合、固有値 x は離散的ではなくて連続的な値をとるので、クロネッカーのデルタの代わりにディラックのデルタ関数を、和の記号 \sum の代わりに積分記号 \int が用いられることに注意すること。つまり、正規直交条件は

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x-x') \quad (5.55)$$

と書き表される。もともとの状態の定義式 (5.1) で明らかのように、 $|x\rangle$ のひとつくみは完全性関係

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x| = \hat{1} \quad (5.56)$$

を満たし、波動関数

$$\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle \quad (5.57)$$

が、ベクトルの成分表記に対応する式 (5.37) となっていることが分かる。

位置演算子 \hat{x} の固有状態を完全系に用いることによって、確率密度

$$P(x,t) = \psi^*(x,t)\psi(x,t) \quad (5.58)$$

や、確率流

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \quad (5.59)$$

が容易に求められる。

- 運動量演算子 \hat{p} の固有状態を完全系に選ぶ場合
運動量演算子の固有状態 $|p\rangle$ は

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle e^{ipx/\hbar} \quad (5.60)$$

で与えられ、正規直交関係

$$\langle p'|p\rangle = \delta(p-p') \quad (5.61)$$

および完全性関係

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p| = \hat{1} \quad (5.62)$$

を満たす。この場合におけるベクトルの成分表記に対応する式 (5.37) は

$$\langle p|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x,t) \quad (5.63)$$

であり、これは波動関数のフーリエ変換（運動量表示での波動関数）に他ならない。

5.4 演算子の交換関係と同時観測可能量

演算子 \hat{A} と \hat{B} について、

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (5.64)$$

を**交換関係**と呼ぶ。ふたつのエルミート演算子 \hat{A} 、 \hat{B} が交換する、つまり、

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad (5.65)$$

のときを考えよう。このときの演算子 \hat{A} の固有状態に、同じ固有値 a_n を持つ状態がひとつしか存在しない、つまり縮退のない場合は、その状態が同時に演算子 \hat{B} の固有状態であることを示すことができる。このことを示すには、式 (5.65) を用いて、

$$\hat{A}\hat{B}|u_n\rangle = \hat{B}\hat{A}|u_n\rangle \quad (5.66)$$

であることを使えばよい。ここで、 $|u_n\rangle$ はエルミート演算子 \hat{A} の固有状態であり、固有値方程式

$$\hat{A}|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle \quad (5.67)$$

を満たす状態である。式 (5.67) を式 (5.66) に代入すると

$$\hat{A}\hat{B}|u_n\rangle = a_n\hat{B}|u_n\rangle \quad (5.68)$$

が得られる。式 (5.68) は、 $\hat{B}|u_n\rangle$ がエルミート演算子 \hat{A} の固有値 a_n の固有状態であることを表しているが、ここでは縮退がないことが仮定されていたので、

$$\hat{B}|u_n\rangle \propto |u_n\rangle \quad (5.69)$$

とならざるを得ない。この比例係数を b とおけば、

$$\hat{B}|u_n\rangle = b|u_n\rangle \quad (5.70)$$

であるが、これは状態 $|u_n\rangle$ がエルミート演算子 \hat{B} の固有値 b の固有状態であることを示している。

縮退のある場合は、演算子 \hat{B} の対角化を行って、演算子 \hat{A} と演算子 \hat{B} の**同時固有状態**を得ることができる。²⁵

演算子 \hat{A} と演算子 \hat{B} の同時固有状態

$$\hat{A}|u_{nn'}\rangle = a_n|u_{nn'}\rangle, \quad \hat{B}|u_{nn'}\rangle = b_{n'}|u_{nn'}\rangle \quad (5.71)$$

の重ね合わせ

$$|\psi\rangle = \sum_{n,n'} |u_{nn'}\rangle C_{nn'} \quad (5.72)$$

で表すことができる状態 $|\psi\rangle$ を考える。この場合は、観測可能量 A と観測可能量 B を同時に精度よく測定することができ、そのような A と B は**同時観測可能量**と呼ばれる。とくに、エルミート演算子 \hat{A} の固有値に縮退があり、式 (5.32) の重ね合わせの係数 C_n だけでは状態を指定しきれない場合でも、同時観測可能量 \hat{B} の固有値を用いて式 (5.72) のように拡張すれば、係数 $C_{nn'}$ で状態を指定できること、つまり、状態 $|u_{nn'}\rangle$ が正規直交完全系になっていることが多い。

ふたつの同時観測可能量の演算子 \hat{A} , \hat{B} の固有値を用いても指定しきれない縮退が残る場合には、みつつめの同時観測可能量 \hat{C}

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{C}, \hat{A}] = 0 \quad (5.73)$$

を導入し、その固有値を用いて状態を指定して正規直交完全系を構成する。一般に、十分多くの数の同時観測可能量を使えば、その固有値で任意の状態を式 (5.32) や式 (5.72) のように指定して正規直交完全系を構成することが可能である。このことは、後に、角運動量を考慮して状態を分類する際に重要になる。

5.5 ハイゼンベルグの不確定性関係

次に、ふたつのエルミート演算子 \hat{A} , \hat{B} が交換しない、つまり

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \quad (5.74)$$

の場合を考えよう。位置演算子 \hat{x} と運動量演算子 \hat{p} の交換関係は

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (5.75)$$

なので、この場合の典型例になっている。

この場合は、 \hat{A} と \hat{B} は、一般には同時固有状態がとれないので、同時に精度よく測定することは不可能である。では、同一の状態 $|\psi\rangle$ に対して、観測可能量 \hat{A} と \hat{B} を多数回測定した場合に、

²⁵ エルミート演算子 \hat{A} に固有値 a_n の固有状態がふたつ ($|u_{n,1}\rangle, |u_{n,2}\rangle$ とする) 存在する場合を考察しよう。このとき、 $|u_{n,1}\rangle, |u_{n,2}\rangle$ は、固有値方程式 $\hat{A}|u_{n,1}\rangle = a_n|u_{n,1}\rangle, \hat{A}|u_{n,2}\rangle = a_n|u_{n,2}\rangle$ を満たす。この場合も式 (5.68) と同様に、状態 $\hat{B}|u_{n,1}\rangle, \hat{B}|u_{n,2}\rangle$ が \hat{A} の固有値 a_n の固有状態であることを示すことができる。今回は、しかし、 \hat{A} の固有値 a_n にはふたつの状態が縮退しているので、式 (5.69) は

$$\hat{B}|u_{n,1}\rangle = b_{1,1}|u_{n,1}\rangle + b_{2,1}|u_{n,2}\rangle, \quad \hat{B}|u_{n,2}\rangle = b_{1,2}|u_{n,1}\rangle + b_{2,2}|u_{n,2}\rangle$$

と変更を受ける。この式は、行列を使って、

$$(\hat{B}|u_{n,1}\rangle, \hat{B}|u_{n,2}\rangle) = (|u_{n,1}\rangle, |u_{n,2}\rangle)B, \quad B \equiv \begin{pmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \\ b_{2,1} & b_{2,2} \end{pmatrix}$$

と書き表すことができる。行列 B を対角化することで、エルミート演算子 \hat{A} と \hat{B} の同時固有状態を得ることは容易である。

どのくらいの不確定性（ゆらぎ）が生じるかを考えよう。類似の問題はすでに 2.4 節で論じたが、以降で述べる議論のほうがより精密でより一般的であることに注意。

多数回測定するときの観測可能量 A, B の期待値 \bar{A}, \bar{B} は

$$\bar{A} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle, \quad \bar{B} = \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle \quad (5.76)$$

で与えられる。

個々の測定で得られる値は期待値のまわりでゆらいでいることに注意する。便宜のため、エルミート演算子 $\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}$ を

$$\Delta\hat{A} \equiv \hat{A} - \bar{A}, \quad \Delta\hat{B} \equiv \hat{B} - \bar{B} \quad (5.77)$$

として定義する。 $\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}$ の期待値は

$$\langle \psi | \Delta\hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \Delta\hat{B} | \psi \rangle = 0 \quad (5.78)$$

であるが、個々の測定ではゆらぎがあるため、 $(\Delta\hat{A})^2, (\Delta\hat{B})^2$ の期待値は正の値となる。このことを用いて、観測可能量 A, B の不確定性（ゆらぎ）を

$$\Delta A \equiv \sqrt{\langle \psi | (\Delta\hat{A})^2 | \psi \rangle}, \quad \Delta B \equiv \sqrt{\langle \psi | (\Delta\hat{B})^2 | \psi \rangle} \quad (5.79)$$

として定義することにする。 $\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}$ がエルミート演算子である、つまり

$$(\Delta\hat{A})^\dagger = \Delta\hat{A}, \quad (\Delta\hat{B})^\dagger = \Delta\hat{B} \quad (5.80)$$

を満たすことに着目すると

$$\langle \psi | (\Delta\hat{A})^2 | \psi \rangle = \langle \psi | (\Delta\hat{A})^\dagger (\Delta\hat{A}) | \psi \rangle \geq 0 \quad (5.81)$$

となり、この式は状態 $\Delta\hat{A}|\psi\rangle$ のノルムの二乗だとみなすことができ、たしかに $(\Delta A)^2$ が正の値であることがわかる。

一方、ベクトル \vec{a}, \vec{b} の内積で良く知られている**シュワルツの不等式**

$$|\vec{a}|^2 |\vec{b}|^2 \geq |\vec{a} \cdot \vec{b}|^2 \quad (5.82)$$

と同様の不等式を、ヒルベルト空間でも示すことができる。まず、ヒルベルト空間におけるシュワルツの不等式

$$\langle a|a\rangle \langle b|b\rangle \geq \langle a|b\rangle \langle b|a\rangle \quad (5.83)$$

の証明を与えよう。ここで $|a\rangle, |b\rangle$ はヒルベルト空間のゼロでない任意の元（量子力学での状態）であるが、規格化はされている必要がない。証明には $\zeta|a\rangle + |b\rangle$ のノルムが正であること

$$\zeta^* \zeta \langle a|a\rangle + \zeta^* \langle a|b\rangle + \zeta \langle b|a\rangle + \langle b|b\rangle \geq 0 \quad (5.84)$$

であることを用いる。式 (5.84) で、 ζ は任意の複素数であり、この式の等号が成り立つのは $\zeta|a\rangle + |b\rangle = 0$ の場合である。式 (5.84) は任意の複素数 ζ で成り立つ不等式なので、ここでは ζ が実数 ξ を用いて

$$\zeta = \frac{\langle a|b\rangle}{|\langle a|b\rangle|} \xi \quad (5.85)$$

のように書ける場合を考えよう。このとき式 (5.84) は

$$\xi^2 \langle a|a\rangle + 2\xi |\langle a|b\rangle| + \langle b|b\rangle \geq 0 \quad (5.86)$$

となる。式 (5.86) の左辺を ξ に関する 2 次式と見てその判別式

$$D = 4|\langle a|b\rangle|^2 - 4\langle a|a\rangle\langle b|b\rangle \quad (5.87)$$

を考察する。 $|a\rangle$ と $|b\rangle$ が比例していない場合 ($\zeta|a\rangle + |b\rangle = 0$ を満たす ζ が存在しない場合)、この 2 次式がいつも正であることから、判別式 $D < 0$ が言える。一方で、 $|a\rangle$ と $|b\rangle$ が比例している場合は、この 2 次式がゼロになる ζ がひとつだけ存在しているので、判別式は $D = 0$ である。このふたつの場合をあわせると、結局、不等号

$$D \leq 0 \quad (5.88)$$

が証明できたことになる。 $|\langle a|b\rangle|^2 = \langle a|b\rangle\langle b|a\rangle$ を用いると、式 (5.88) は証明したかったシュワルツの不等式 (5.83) に他ならない。

話を、互いに交換しないエルミート演算子 \hat{A} , \hat{B} の期待値の不確定性の話題に戻そう。シュワルツの不等式 (5.83) において、ヒルベルト空間の元 $|a\rangle$, $|b\rangle$ が

$$|a\rangle = \Delta\hat{A}|\psi\rangle, \quad |b\rangle = \Delta\hat{B}|\psi\rangle \quad (5.89)$$

で与えられるものとする。このとき、式 (5.79) とシュワルツの不等式 (5.83) を用いて

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2(\Delta B)^2 &= \langle\psi|(\Delta\hat{A})^\dagger(\Delta\hat{A})|\psi\rangle\langle\psi|(\Delta\hat{B})^\dagger(\Delta\hat{B})|\psi\rangle \\ &\geq \langle\psi|(\Delta\hat{A})^\dagger(\Delta\hat{B})|\psi\rangle\langle\psi|(\Delta\hat{B})^\dagger(\Delta\hat{A})|\psi\rangle \end{aligned} \quad (5.90)$$

が得られる。エルミート演算子 \hat{C} , \hat{D} を

$$\hat{C} \equiv (\Delta\hat{A})(\Delta\hat{B}) + (\Delta\hat{B})(\Delta\hat{A}), \quad \hat{D} \equiv -i[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = -i[\hat{A}, \hat{B}] \quad (5.91)$$

と定義すると、

$$(\Delta\hat{A})^\dagger(\Delta\hat{B}) = (\Delta\hat{A})(\Delta\hat{B}) = \frac{1}{2}\hat{C} + \frac{i}{2}\hat{D}, \quad (5.92)$$

$$(\Delta\hat{B})^\dagger(\Delta\hat{A}) = (\Delta\hat{B})(\Delta\hat{A}) = \frac{1}{2}\hat{C} - \frac{i}{2}\hat{D}, \quad (5.93)$$

が得られ、式 (5.90) の右辺が

$$\langle\psi|(\Delta\hat{A})^\dagger(\Delta\hat{B})|\psi\rangle\langle\psi|(\Delta\hat{B})^\dagger(\Delta\hat{A})|\psi\rangle = \frac{1}{4}\left|\langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle\right|^2 + \frac{1}{4}\left|\langle\psi|\hat{D}|\psi\rangle\right|^2 \quad (5.94)$$

と変形できる。つまり、観測可能量 \hat{A} と \hat{B} の不確定性の積は、不等式

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle\psi|\hat{D}|\psi\rangle\right|, \quad \hat{D} = -i[\hat{A}, \hat{B}] \quad (5.95)$$

を満たさねばならないことが分かる。

とくに $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}$ のとき、

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (5.96)$$

より、不等式

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar \quad (5.97)$$

が得られる。これは**ハイゼンベルグの不確定性関係**と呼ばれる不等式である。

5.6 状態の無限小変換と演算子の交換関係、解析力学との対応

次式で与えられる状態の無限小変換を考察しよう。

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi_\epsilon\rangle = \left(\hat{1} + \frac{\epsilon}{i\hbar}\hat{X}\right)|\psi\rangle \quad (5.98)$$

ここで、 ϵ は実数の無限小量であり、 \hat{X} は適当な演算子である。式 (5.98) の共軛をとれば

$$\langle\psi| \rightarrow \langle\psi_\epsilon| = \langle\psi| \left(\hat{1} - \frac{\epsilon}{i\hbar}\hat{X}^\dagger\right) \quad (5.99)$$

が得られる。この無限小変換の前後で、状態のノルムが変化しない、つまり、

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi_\epsilon|\psi_\epsilon\rangle$$

であることを要求すると

$$\hat{X}^\dagger = \hat{X}$$

がわかる。つまり、無限小変換を表わす演算子 \hat{X} はエルミート演算子でなければならない。次に、観測可能量 \hat{A} の期待値がこの無限小変換によってどのように変化するかを考えよう。式 (5.98)、式 (5.99) を用いると

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \rightarrow \langle\psi_\epsilon|\hat{A}|\psi_\epsilon\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle + \frac{\epsilon}{i\hbar}\langle\psi|[\hat{A}, \hat{X}]|\psi\rangle \quad (5.100)$$

であることがすぐにわかる。ここで $[\hat{A}, \hat{X}]$ は、演算子 \hat{A} と演算子 \hat{X} の交換関係 $[\hat{A}, \hat{X}] = \hat{A}\hat{X} - \hat{X}\hat{A}$ である。式 (5.100) において、とくに、粒子の位置 \hat{x} と運動量 \hat{p} の期待値を考えると

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle \rightarrow \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle + \frac{\epsilon}{i\hbar}\langle\psi|[\hat{x}, \hat{X}]|\psi\rangle, \quad (5.101)$$

$$\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle \rightarrow \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle + \frac{\epsilon}{i\hbar}\langle\psi|[\hat{p}, \hat{X}]|\psi\rangle \quad (5.102)$$

となる。式 (5.101), (5.102) をよく見ると、解析力学での無限小正準変換の式

$$x \rightarrow x + \epsilon\{x, X\}_{\text{PB}}, \quad (5.103)$$

$$p \rightarrow p + \epsilon\{p, X\}_{\text{PB}} \quad (5.104)$$

とよく似ていることに気づく。ここで、 $X = X(x, p)$ は解析力学における無限小正準変換の生成子であり、 $\{A, B\}_{\text{PB}}$ はポアソン括弧

$$\{A, B\}_{\text{PB}} \equiv \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial B}{\partial x} \frac{\partial A}{\partial p} \quad (5.105)$$

である。

式 (5.101), (5.102) と式 (5.103), (5.104) を比較すると、量子力学での演算子の交換関係 $[\hat{A}, \hat{B}]$ が、解析力学ではポアソン括弧 $\{A, B\}_{\text{PB}}$ に対応していることが見て取れる。さらに、量子力学での演算子の交換関係の満たす性質

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}], \quad (5.106)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (5.107)$$

$$[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] + [[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] + [[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}] = 0 \quad (5.108)$$

$$\frac{1}{i\hbar}[x, p] = 1 \quad (5.109)$$

に対応して、解析力学でのポアソン括弧は、

$$\{A, B\}_{\text{PB}} = -\{B, A\}_{\text{PB}}, \quad (5.110)$$

$$\{A, BC\}_{\text{PB}} = \{A, B\}_{\text{PB}}C + B\{A, C\}_{\text{PB}} \quad (5.111)$$

$$\{\{A, B\}, C\}_{\text{PB}} + \{\{B, C\}, A\}_{\text{PB}} + \{\{C, A\}, B\}_{\text{PB}} = 0 \quad (5.112)$$

$$\{x, p\}_{\text{PB}} = 1 \quad (5.113)$$

の性質を持つことにも注意しよう。これらのことから、**量子力学でのエルミート演算子 \hat{A} , \hat{B} の交換関係**

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{B}] \quad (5.114)$$

の古典力学での対応物は物理量 A , B のポアソン括弧

$$\{A, B\}_{\text{PB}} \quad (5.115)$$

であることがわかる。実際、 \hat{x} , \hat{p} の多項式からなる任意のエルミート演算子 \hat{A} , \hat{B} について、その交換関係 (5.114) を計算すると、 $\hbar \rightarrow 0$ 極限においてポアソン括弧 (5.115) に一致することが確かめることができる。²⁶

話を状態の無限小変換に戻し、その具体例として、 \hat{X} を運動量演算子 \hat{p} ととった場合を考察しよう。

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \psi(x)$$

で与えられる状態 $|\psi\rangle$ に対して、運動量演算子 \hat{p} による無限小変換を施すと

$$\begin{aligned} |\psi_\epsilon\rangle &= \left(\hat{1} + \frac{\epsilon}{i\hbar}\hat{p}\right)|\psi\rangle \\ &= \int dx |x\rangle \left(\psi(x) - \epsilon \frac{d}{dx}\psi(x)\right) \\ &= \int dx |x\rangle \psi(x - \epsilon) \end{aligned}$$

が得られる。つまり、運動量演算子 \hat{p} による無限小変換は、波動関数を無限小量 ϵ だけ右方向に動かす無限小並進変換になっている。実際、変換後の状態 $|\psi_\epsilon\rangle$ について、 \hat{x} , \hat{p} の期待値を求めると

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle \rightarrow \langle\psi_\epsilon|\hat{x}|\psi_\epsilon\rangle = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle + \frac{\epsilon}{i\hbar}\langle\psi|[\hat{x}, \hat{p}]|\psi\rangle = \langle\psi|(\hat{x} + \epsilon)|\psi\rangle, \quad (5.116)$$

$$\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle \rightarrow \langle\psi_\epsilon|\hat{p}|\psi_\epsilon\rangle = \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle + \frac{\epsilon}{i\hbar}\langle\psi|[\hat{p}, \hat{p}]|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle, \quad (5.117)$$

が得られ、もとの状態 $|\psi_\epsilon\rangle$ での期待値に比べて、 \hat{x} の期待値が ϵ だけ増加していることがわかる。²⁷ ここで、解析力学 (古典力学) での無限小並進正準変換が、ポアソン括弧を用いて

$$x \rightarrow x + \epsilon\{x, p\}_{\text{PB}} = x + \epsilon, \quad p \rightarrow p + \epsilon\{p, p\}_{\text{PB}} = p \quad (5.118)$$

だったことを思い出そう。式 (5.118) は、解析力学において無限小並進変換の生成子が運動量 p であることを意味していた。式 (5.116) と式 (5.117) は、量子力学においても運動量演算子 \hat{p} が無限小並進変換の生成子としての意味を持つことを示している。

²⁶ 逆に、ポアソン括弧の結果のみをもちいて、演算子の交換関係を導く操作は、一般的には不可能である。 $\hbar = 0$ の物理からは、 $\hbar \neq 0$ の物理の結果は導くことができない。

²⁷ 無限小ではない有限のおおきさの並進変換については、付録 F.3 節を参照すること。

5.7 状態の時間発展とシュレディンガー方程式

2.3節ではいささか天下り式にシュレディンガー方程式を導入することで状態の時間発展を考え、その後の1次元量子力学での具体的な計算を行った。ここでは、解析力学での無限小時間発展の生成子を考察することで、なぜ、シュレディンガー方程式にハミルトニアン演算子が表れねばならないかをもう少し見通しよく再考察してみよう。

そこで、状態の時間発展を無限小時間推進変換

$$|\psi(t+\epsilon)\rangle = \left(\hat{1} + \frac{\epsilon}{i\hbar} \hat{X} \right) |\psi(t)\rangle \quad (5.119)$$

として表し、式(5.119)に表れるエルミート演算子 \hat{X} (無限小時間推進変換の生成子) が何者であるかを考えることにしよう。ここで、 $|\psi(t)\rangle$ は時刻 t での状態を表し、 $|\psi(t+\epsilon)\rangle$ は時刻 $t+\epsilon$ での状態を表す。量子力学での適当な (時間に陽には依存しない) 物理量 \hat{A} の期待値は、したがって、

$$\langle \psi(t+\epsilon) | \hat{A} | \psi(t+\epsilon) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{A}, \hat{X}] | \psi(t) \rangle \quad (5.120)$$

と時間変化し、

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{A}, \hat{X}] | \psi(t) \rangle \quad (5.121)$$

であることがわかる。式(5.121)に対応する解析力学での式は、ハミルトンの運動方程式

$$\frac{d}{dt} A = \{A, H\}_{\text{PB}} \quad (5.122)$$

に他ならない。ここで H は解析力学でのハミルトニアンである。前節で考察したポアソン括弧と交換関係の対応から、式(5.119)に表れる量子力学での無限小時間推進の生成子 \hat{X} がハミルトニアン演算子 \hat{H} であることは、もはや明らかであろう。つまり、ケット $|\psi(t)\rangle$ の時間発展は、ハミルトニアン演算子 \hat{H} を用いて

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (5.123)$$

で与えられる。ブラ $\langle \psi(t) |$ の時間発展は、シュレディンガー方程式(5.123)の複素共軛をとって

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | \hat{H} \quad (5.124)$$

となる。ここで \hat{H} がエルミート演算子であることに注意する。波動関数 $\psi(x, t)$ の言葉では、シュレディンガー方程式(5.123)は、偏微分方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t), \quad (5.125)$$

を使って書き表される。ここで、波動関数に作用する微分演算子がハミルトニアンであることに注意。

$$H_{\text{op}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (5.126)$$

時間 t に陽には依存しないエルミート演算子 \hat{A} の期待値の時間発展

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \quad (5.127)$$

をふたたび考えよう。シュレディンガー方程式(5.123)、(5.124)を用いると、

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi(t) \rangle \quad (5.128)$$

が得られる。ここで、 $[\hat{A}, \hat{H}]$ はエルミート演算子 \hat{A} とハミルトニアン演算子 \hat{H} の交換関係である。

式(5.128)からただちに次の事実が分かる。

- エルミート演算子 \hat{A} がハミルトニアン演算子 \hat{H} と交換するとき、期待値 $\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$ は時間 t で変化しない保存量となる。 \hat{A} としてハミルトニアン演算子 \hat{H} そのものを採用する場
合がその典型例であり、この場合の保存則はエネルギー保存則である。

- \hat{A} が位置演算子 \hat{x} の場合、

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{m} \hat{p} \quad (5.129)$$

を用いると、式 (5.128) は

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{m} \langle \psi(t) | \hat{p} | \psi(t) \rangle \quad (5.130)$$

を与える。同様に、 \hat{A} が運動量演算子 \hat{p} の場合、

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{p}, \hat{H}] = -V'(\hat{x}), \quad V'(x) \equiv \frac{d}{dx} V(x) \quad (5.131)$$

を用いると、式 (5.128) は

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{p} | \psi(t) \rangle = -\langle \psi(t) | V'(\hat{x}) | \psi(t) \rangle \quad (5.132)$$

を与える。式 (5.130) と式 (5.132) は、古典力学での運動方程式

$$\frac{d}{dt} x = \frac{1}{m} p, \quad \frac{d}{dt} p = -V'(x) \quad (5.133)$$

に対応するものであり、エーレンフェストの定理として知られている結果である。

シュレディンガー方程式 (5.123) は、

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}_t |\psi(0)\rangle, \quad \hat{U}_t \equiv \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} t\right) \quad (5.134)$$

のように「形式的」に解くことができる。ここで、演算子 \hat{U}_t (ハミルトニアン \hat{H} の指数関数) は、テイラー展開を用いて

$$\hat{U}_t = \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} t\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} t\right)^n \quad (5.135)$$

で定義される演算子である。この定義から、あきらかに演算子 \hat{U}_t は

$$\frac{d}{dt} \hat{U}_t = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \hat{U}_t \quad (5.136)$$

を満たす。したがって、式 (5.134) で与えられる状態 $|\psi(t)\rangle$ がシュレディンガー方程式 (5.123) をたしかに満たすことが見て取れる。ハミルトニアン演算子 \hat{H} がエルミート演算子なので、演算子 \hat{U}_t のエルミート共軛を計算すると

$$\hat{U}_t^\dagger = \exp\left(-\frac{1}{i\hbar} \hat{H} t\right) \quad (5.137)$$

であることがわかる。つまり、演算子 \hat{U}_t は

$$\hat{U}_t^\dagger \hat{U}_t = \hat{U}_t \hat{U}_t^\dagger = \hat{1} \quad (5.138)$$

を満たすユニタリー演算子になっていることに注意すること。時間発展がユニタリー性を持つこと (確率の保存) は、量子力学の満たすべき基本的な性質のひとつである。

先に、(5.134) の形のシュレディンガー方程式の解を「形式的」な解であると呼んだ。これは、演算子 \hat{U}_t を具体的に求めることが一般的にはそれほど簡単ではないからである。具体的に、シュレディンガー方程式 (5.123) を解いて状態の時間変化を求めるには、3.2 節で説明した手続き、つまり、ハミルトニアン演算子を対角化する手続きが必要になる。ハミルトニアン演算子を対角化することにより、その指数関数を計算する操作が容易になるからである。この節の最後に、3.2 節で説明した波動関数の時間発展を求めるための手続きを復習しよう。まず、初期状態 ($t = 0$) の波動関数を次のように展開する：

$$\psi(x, t = 0) = \sum_n C_n u_n(x). \quad (5.139)$$

ここで、 u_n はハミルトニアンの固有関数であり、エネルギー固有値 E_n を持つものとする。したがって、 u_n はハミルトニアンの固有値方程式

$$E_n u_n(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u_n(x). \quad (5.140)$$

を満たす。固有値方程式 (5.140) は、**時間に依存しないシュレディンガー方程式**と呼ばれる。固有関数 u_n が規格化されているものとし、エネルギー固有値に縮退がないと仮定すると、式 (5.139) の展開係数 C_n は

$$C_n = \langle u_n | \psi(t = 0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx u_n^*(x) \psi(x, t = 0) \quad (5.141)$$

で与えられる。初期条件 (5.139) のもとでシュレディンガー方程式 (5.125) を解くと、任意の時刻での波動関数が

$$\psi(x, t) = \sum_n C_n e^{-iE_n t/\hbar} u_n(x) \quad (5.142)$$

で与えられることが分かる。式 (5.142) を見ると、ハミルトニアン演算子が対角化されることで、シュレディンガー方程式の解が固有値 E_n を用いて表されていることを見て取ることができるであろう。

6 演算子法

この章では、ヒルベルト空間とそれに作用するエルミート演算子の言葉で量子力学を記述することにより調和振動子の量子力学が見通しよく理解できることを解説する。また、古典力学（解析力学）との対応がより明確に理解できる量子力学の記述法であるハイゼンベルグ表示について学ぶ。

6.1 調和振動子のエネルギー準位

調和振動子のハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \quad (6.1)$$

の固有値問題を解き状態のエネルギー準位を計算することを考える。第4章では、適当な境界条件を課して時間に依らないシュレディンガー方程式（微分方程式）を解くことでこの問題の答えを得たが、見通しのよい導出ではなかった。これは、ハミルトニアンの式 (6.1) のなかでは対称的に現れている演算子 \hat{x} と \hat{p} が、シュレディンガー方程式では非対称に取り扱われている（ \hat{p} のみを微分演算子として取り扱われている）ことに起因する。ここでは、 \hat{x} と \hat{p} をなるべく対称的に取り扱うことで、調和振動子のエネルギー準位の計算の見通しが良くなることを解説する。

まず最初に、ハミルトニアン (6.1) の与える古典力学での運動方程式が

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \{x, H\}_{\text{PB}} \\ \{p, H\}_{\text{PB}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1/m \\ -m\omega^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} \quad (6.2)$$

であることに着目する。運動方程式のなかで x と p が入り交じって不便である。古典力学でこの点を解消するには、 x と p の線形結合をとって

$$\frac{d}{dt} \left(x + i \frac{p}{m\omega} \right) = -i\omega \left(x + i \frac{p}{m\omega} \right), \quad \frac{d}{dt} \left(x - i \frac{p}{m\omega} \right) = i\omega \left(x - i \frac{p}{m\omega} \right) \quad (6.3)$$

とすればよい。このようにすれば、 $x + ip/(m\omega)$ の時間発展が $x + ip/(m\omega)$ だけで決められて、運動方程式が単なる 1 次微分方程式に帰着する。量子力学でも同様の考え方を適用し、演算子

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right), \quad \hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \quad (6.4)$$

を定義しよう。ここで \hat{a}^\dagger は、 \hat{a} のエルミート共軛である。交換関係

$$[\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0, \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (6.5)$$

を用いると、

$$[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1} \quad (6.6)$$

はすぐにわかる。また、 \hat{a} , \hat{a}^\dagger を用いて、ハミルトニアン演算子が

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (6.7)$$

と書き表せることから、

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega \hat{a}, \quad [\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega \hat{a}^\dagger \quad (6.8)$$

を導くのも容易である。

次に、任意の状態のエネルギー期待値 $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$ を考察しよう。状態 $\hat{a}|\psi\rangle$ のノルムが正またはゼロであることとハミルトニアンの表式 (6.7) から、不等式

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (6.9)$$

が得られることがわかる。つまり、このハミルトニアンの固有状態の固有値はかならず $\hbar\omega/2$ 以上であることがわかる。この結果を \hat{x}^2 と \hat{p}^2 の期待値の言葉で書き直すと

$$\langle \psi | \left(\frac{1}{m} \hat{p}^2 + m\omega^2 \hat{x}^2 \right) | \psi \rangle \geq \hbar\omega \quad (6.10)$$

である。式 (6.10) がハイゼンベルグの不確定性関係 (\hat{x}^2 の期待値と \hat{p}^2 の期待値を同時にゼロにすることはできないこと) と整合していることに注意しておく。

次に固有値方程式

$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle \quad (6.11)$$

を満たす状態 $|E\rangle$ (エネルギー E の固有値をもつ固有状態) を考える。この状態に演算子 \hat{a} を作用させ、状態 $\hat{a}|E\rangle$ を作る。さらにハミルトニアン演算子 \hat{H} を作用させると

$$\hat{H}\hat{a}|E\rangle = [\hat{H}, \hat{a}]|E\rangle + \hat{A}\hat{H}|E\rangle = -\hbar\omega\hat{a}|E\rangle + E\hat{a}|E\rangle = (E - \hbar\omega)\hat{a}|E\rangle \quad (6.12)$$

となり、状態 $\hat{a}|E\rangle$ は、もしゼロでなければ、エネルギー固有値 $E - \hbar\omega$ の固有状態であることが分かる。このことと、エネルギー固有値に下限があったことから、これ以上、エネルギー固有値を下げることはできない基底状態 $|0\rangle$ が存在²⁸ し、

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad (6.13)$$

を満たすことがわかる。基底状態のエネルギー固有値 E_0 は

$$\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) |0\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega |0\rangle \quad (6.14)$$

より、

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (6.15)$$

である。

基底状態 $|0\rangle$ に \hat{a}^\dagger を作用させた状態は

$$\hat{H}\hat{a}^\dagger|0\rangle = [\hat{H}, \hat{a}^\dagger]|0\rangle + \hat{a}^\dagger\hat{H}|0\rangle = \frac{3}{2}\hbar\omega\hat{a}^\dagger|0\rangle \quad (6.16)$$

を満たし、エネルギー固有値 $\frac{3}{2}\hbar\omega$ を持つ固有状態 $|1\rangle$ に比例している。

$$\langle 0|\hat{a}\hat{a}^\dagger|0\rangle = \langle 0|[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]|0\rangle + \langle 0|\hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle = 1 \quad (6.17)$$

に注意すると、規格化された状態 $|1\rangle$ は

$$|1\rangle = \hat{a}^\dagger|0\rangle \quad (6.18)$$

で与えられることが分かる。

同様に、基底状態 $|0\rangle$ に $(\hat{a}^\dagger)^n$ を作用させた状態は

$$\hat{H}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) (\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \quad (6.19)$$

を満たし、エネルギー固有値 $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ を持つ固有状態 $|n\rangle$ に比例している。状態 $|n\rangle$ を規格化すると

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \quad (6.20)$$

であることがわかる。²⁹

式 (6.20) からすぐわかるように

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^{n+1}|0\rangle \\ &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{aligned} \quad (6.21)$$

²⁸ ここで導入した $|0\rangle$ という記号は、エネルギー $E = 0$ の状態という意味ではないことに注意。

²⁹ 規格化の係数は $\langle 0|(\hat{a})^n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ を計算して決定される。この計算をするためには、交換関係 (6.6) に着目して $[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n] = n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}$ を最初に計算しておくことと便利である。この式から、漸化式 $\langle 0|(\hat{a})^n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle = n\langle 0|(\hat{a})^{n-1}(\hat{a}^\dagger)^{n-1}|0\rangle$ が得られ、最終的に

$$\langle 0|(\hat{a})^n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle = n!$$

が求まる。

である。これは、演算子 \hat{a}^\dagger がエネルギー $\hbar\omega(n+1/2)$ の状態 $|n\rangle$ に作用すると、エネルギー量子 $\hbar\omega$ がひとつ増え（生成し）た状態 $|n+1\rangle$ になることを表している。一方、演算子 \hat{a} が状態 $|n\rangle$ に作用すると

$$\begin{aligned}\hat{a}|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \\ &= \frac{n}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^{n-1}|0\rangle \\ &= \sqrt{n}|n-1\rangle\end{aligned}\tag{6.22}$$

となり、エネルギー量子 $\hbar\omega$ がひとつ減つ（消滅し）た状態 $|n-1\rangle$ になる。これは、調和振動子の量子力学を演算子法を用いて解析するうえで基本的な性質であり、演算子 \hat{a}^\dagger が生成演算子と呼ばれ、演算子 \hat{a} が消滅演算子と呼ばれる理由である。

6.2 調和振動子の波動関数

ここでは、前節で得た知識を使って、調和振動子の（時間に依存しない）シュレディンガー方程式

$$Eu(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] u(x)\tag{6.23}$$

の解法を見直してみる。

式 (6.4) での演算子 \hat{a} , \hat{a}^\dagger の定義に対応して、微分演算子

$$a_{\text{op}} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right), \quad a_{\text{op}}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right),\tag{6.24}$$

を定義する。この言葉を使うと、シュレディンガー方程式 (6.23) は

$$Eu(x) = \hbar\omega \left[a_{\text{op}}^\dagger a_{\text{op}} + \frac{1}{2} \right] u(x)\tag{6.25}$$

で与えられる。

基底状態の波動関数 $u_0(x)$ は、式 (6.13) に対応して、

$$\left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) u_0(x) = 0\tag{6.26}$$

を解くことによって求められる。実際、4.7章で求めた調和振動子の基底状態の波動関数

$$u_0(x) \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)\tag{6.27}$$

が微分方程式 (6.26) の解であることは明らかである。

励起状態の波動関数 u_n を求めるには、式 (6.20) に対応して

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_{\text{op}}^\dagger)^n u_0(x)\tag{6.28}$$

を計算すればよい。

6.3 シュレディンガー表示とハイゼンベルグ表示

これまで考えてきた量子力学の描像では、状態 $|\psi\rangle$ がシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (6.29)$$

に従って時間変化した。式 (6.29) で与えられる 5.7 節で示したように状態の時間変化は、形式的に

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}_t |\psi(0)\rangle \quad (6.30)$$

と解くことができる。ここで、演算子 \hat{U}_t は式 (5.135) で定義した演算子である。任意の演算子 \hat{B} の期待値の時間変化は、したがって、

$$\langle \psi(t) | \hat{B} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{U}_t^\dagger \hat{B} \hat{U}_t | \psi(0) \rangle \quad (6.31)$$

で与えられる。このような描像での量子力学は、**シュレディンガー表示** (あるいはシュレディンガー描像) での量子力学と呼ばれる。

これに対し、式 (6.31) と同じ期待値を与える描像として、状態 $|\psi(t)\rangle$ は時間変化せず、演算子 \hat{B} に時間依存性

$$\hat{B}(t) = \hat{U}_t^\dagger \hat{B} \hat{U}_t \quad (6.32)$$

を付与する場合がある。この描像での演算子 \hat{B} の期待値の時間変化は

$$\langle \psi(0) | \hat{B}(t) | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{U}_t^\dagger \hat{B} \hat{U}_t | \psi(0) \rangle \quad (6.33)$$

で与えられる。こちらの描像での量子力学は、**ハイゼンベルグ表示** (あるいはハイゼンベルグ描像) での量子力学と呼ばれる。

ハイゼンベルグ表示では、演算子は**ハイゼンベルグ方程式**

$$\frac{d}{dt} \hat{B}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{B}(t), \hat{H}] \quad (6.34)$$

に従って時間変化する。式 (6.34) のハイゼンベルグ方程式と古典力学でのハミルトンの運動方程式

$$\frac{d}{dt} B = \{B, H\}_{\text{PB}} \quad (6.35)$$

との類似性に注意せよ。

最後に、調和振動子ハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 \quad (6.36)$$

のハイゼンベルグ表示での演算子 \hat{x} , \hat{p} の時間発展を具体的に求めてみよう。 \hat{x} と \hat{p} の交換関係

$$[\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0, \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (6.37)$$

を用いると、 \hat{x} と \hat{p} のハイゼンベルグ方程式は

$$\frac{d}{dt} \hat{x} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{m} \hat{p}, \quad (6.38)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{p} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}, \hat{H}] = -m\omega^2 \hat{x} \quad (6.39)$$

で与えられる。 $t=0$ での初期条件 $x = x(0)$, $p = p(0)$ を使って得られる古典力学での運動方程式の解を思い出すと、ハイゼンベルグ方程式の解が

$$\hat{x}(t) = \hat{x}(0) \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} \hat{p}(0) \sin \omega t, \quad (6.40)$$

$$\hat{p}(t) = \hat{p}(0) \cos \omega t - m\omega \hat{x}(0) \sin \omega t \quad (6.41)$$

で与えられることは明らかである。

7 角運動量の量子化: 球面調和関数

現実の世界は空間3次元であり、粒子の位置は x, y, z の3つの変数で指定される。量子力学で3次元の粒子の運動を取り扱うには、位置ベクトル \vec{r} に対応する位置演算子 ($\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ の3つ) と、運動量ベクトル \vec{p} に対応する運動量演算子 ($\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ の3つ) を導入すればよい。

ポテンシャルが中心力の場合、つまり

$$V(\vec{r}) = V(r), \quad r \equiv |\vec{r}| \quad (7.1)$$

となり、動径方向座標のみにポテンシャルが依存する場合は、水素原子の問題など応用上たいへん重要である。この章では、3次元量子力学において中心力問題を解く上で鍵となる角運動量の量子力学的性質について学ぶ。角運動量はまた、その交換関係の性質を通じて、量子力学をもうひと段階深く理解するうえで役に立つ例題として重要である。

7.1 2次元の角運動量

ウォームアップとして2次元量子力学からスタートしよう。2次元古典力学での中心力問題のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2\mu}(p_x^2 + p_y^2) + V(r), \quad r^2 = x^2 + y^2 \quad (7.2)$$

で与えられることを思い出そう。ここで μ は考えている粒子の質量である。2次元量子力学のハミルトニアン演算子 \hat{H} を作るには式 (7.2) に現れる正準変数 x, p_x, y, p_y を対応するエルミート演算子に置き換えればよい。時間に依存しないシュレディンガー方程式 (ハミルトニアン演算子の固有値方程式) は

$$E|u\rangle = \hat{H}|u\rangle \quad (7.3)$$

である。ここで、中心力問題のときは角運動量 L

$$L = xp_y - yp_x \quad (7.4)$$

が保存していることを思い出そう。量子力学での角運動量の保存は、角運動量演算子

$$\hat{L} = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \quad (7.5)$$

がハミルトニアン演算子と交換する、つまり

$$[\hat{L}, \hat{H}] = 0 \quad (7.6)$$

であることで示される³⁰。式 (7.6) はまた、角運動量とエネルギーが同時観測可能量であることを示している。つまり、式 (7.3) のエネルギー固有値 E と、角運動量演算子の固有値方程式

$$\hbar m|u\rangle = \hat{L}|u\rangle \quad (7.7)$$

に現れる角運動量固有値 $\hbar m$ で状態を指定することができる。(m を無次元量にしておくと後々便利なので、ここでは m に \hbar をかけて固有値を定義した。)

³⁰ 演習問題で洞察するように、角運動量演算子は無限小回転変換の生成子である。式 (7.6) と書き直して $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$ とすると、これは、ハミルトニアン演算子 \hat{H} が回転変換のもとで不変であることを示す式に他ならない。このように、量子力学 (解析力学) では、保存量と対称性が密接に関係している。

デカルト座標系での波動関数 $u(x, y)$ を用いて状態 $|u\rangle$ を表示すると

$$|u\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy |\vec{x}\rangle u(x, y) \quad (7.8)$$

である。ここで状態 $|\vec{x}\rangle$ は \hat{x}, \hat{y} の同時固有状態であり

$$\hat{x}|\vec{x}\rangle = x|\vec{x}\rangle, \quad \hat{y}|\vec{x}\rangle = y|\vec{x}\rangle \quad (7.9)$$

を満たす。1次元量子力学のときと同様の置き換えを行うと、式(7.3)は

$$Eu = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r) \right] u, \quad r^2 = x^2 + y^2, \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (7.10)$$

に帰着する。

中心力問題を具体的に解くためには、式(7.10)に現れる2次元のラプラシアンを2次元極座標系 (r, θ)

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta \quad (7.11)$$

を用いて表示しておくとう便利である。付録Gで説明する方法でこれを計算すると

$$\Delta u = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} \quad (7.12)$$

が得られる。付録Hで求めるように、2次元の角運動量に対応する微分演算子は

$$L^{\text{op}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (7.13)$$

である。これを用いてラプラシアンを書き直すと

$$\Delta u = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} (L^{\text{op}})^2 u \quad (7.14)$$

であることに注意する。次に、波動関数 u が2次元極座標の動径座標 r の関数 R と角度座標 θ の関数 X の積に変数分離できる場合

$$u(x = r \cos \theta, y = r \sin \theta) = R(r) X(\theta) \quad (7.15)$$

を考えよう。このときの時間に依存しないシュレディンガー方程式(7.10)は

$$ER = -\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{d}{dr} R \right] + V_{\text{eff}}(r)R, \quad V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu r^2}, \quad (7.16)$$

$$\hbar m X(\theta) = L^{\text{op}} X(\theta) \quad (7.17)$$

と分解できることが分かる。つまり、2次元の中心力問題を解くには、まず式(7.17)で角運動量の固有値 m を求めた後に、動径方向のシュレディンガー方程式(7.16)を解けばよいのである。

最後に2次元量子力学での角運動量の固有値方程式(7.17)の解を与えよう。角運動量の微分演算子(7.13)の表式から、式(7.17)の解はあきらかに

$$X(\theta) = e^{im\theta} \quad (7.18)$$

である(規格化の定数は無視した)。角度 θ の周期性

$$X(\theta + 2\pi) = X(\theta) \quad (7.19)$$

から、固有値 m は整数でなければならないことがわかる。

7.2 3次元角運動量の交換関係

いよいよ、3次元量子力学の中心力問題の議論に移ろう。このときのハミルトニアン演算子は

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \hat{V} \quad (7.20)$$

で与えられ、ポテンシャル演算子 \hat{V} は

$$\hat{r}^2 \equiv \hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2 \quad (7.21)$$

の関数である。3次元の場合は、3つの角運動量演算子

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \quad (7.22)$$

が定義できることに注意する。これらの角運動量が保存することは

$$[\hat{L}_x, \hat{H}] = [\hat{L}_y, \hat{H}] = [\hat{L}_z, \hat{H}] = 0 \quad (7.23)$$

によって示すことができる。このことは、ハミルトニアンと角運動量が同時観測可能量であり、ハミルトニアンの固有値 E

$$E|u\rangle = \hat{H}|u\rangle \quad (7.24)$$

とともに角運動量演算子の固有値を与えることで状態が指定できることを示唆している。

しかしながら3次元角運動量の場合は、角運動量演算子どうしの中の交換関係が

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \quad (7.25)$$

となってこれらは同時観測可能ではない。³¹ したがってすべての角運動量の固有値を使って状態を指定することができず、工夫が必要である。

ここでは、状態を指定するための角運動量演算子として \hat{L}_z を採用する。³² また、角運動量の大きさの2乗を表す演算子

$$\hat{L}^2 \equiv \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (7.26)$$

が交換関係

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad (7.27)$$

を満たすことにも着目しよう。この式は、角運動量の2乗が、エネルギーと z 方向の角運動量に加えて同時観測可能な量であり、それらの固有値

$$E_n|n, l, m\rangle = \hat{H}|n, l, m\rangle, \quad (7.28)$$

$$\hbar^2 l(l+1)|n, l, m\rangle = \hat{L}^2|n, l, m\rangle, \quad (7.29)$$

$$\hbar m|n, l, m\rangle = \hat{L}_z|n, l, m\rangle \quad (7.30)$$

を用いて状態を $|n, l, m\rangle$ のように指定することができることを表している。³³ 量子数 l を角運動量子数、 m を磁気量子数と呼ぶことにする。角運動量演算子 \hat{L}_i ($i = x, y, z$) はエルミート演算子なので、 $\hat{L}_i^\dagger = \hat{L}_i$ である。任意の状態 $|\psi\rangle$ について、状態 $\hat{L}_i|\psi\rangle$ のノルムが正であることから、

$$\langle\psi|\hat{L}^2|\psi\rangle = \sum_i \langle\psi|\hat{L}_i\hat{L}_i|\psi\rangle = \sum_i \langle\psi|\hat{L}_i^\dagger\hat{L}_i|\psi\rangle \geq 0 \quad (7.31)$$

³¹ $[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$ を使って簡単に確かめることができる。交換関係 (7.25) はまた、角運動演算子が無限小回転変換のもとで3次元ベクトルとして変換することを表している。

³² もちろん、 \hat{L}_x や \hat{L}_y を採用することもできるが、結果は同じである。

³³ 後の便利のため、 \hat{L}^2 の固有値を $\hbar^2 l(l+1)$ と表記することにした。

であることがわかる。このことから、式 (7.29) の \hat{L}^2 の固有値は非負であることがわかり、非負の実数パラメータ l を用いて、固有値を $\hbar^2 l(l+1)$ と表記することが正当化できる。

7.3 球面調和関数

7.1 節での議論と同様に、3次元デカルト座標系での波動関数 $u(x, y, z)$ を用いて状態 $|u\rangle$ を表示すると

$$|u\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz |\vec{x}\rangle u(x, y, z) \quad (7.32)$$

である。ここで状態 $|\vec{x}\rangle$ は \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} の同時固有状態であり

$$\hat{x}|\vec{x}\rangle = x|\vec{x}\rangle, \quad \hat{y}|\vec{x}\rangle = y|\vec{x}\rangle, \quad \hat{z}|\vec{x}\rangle = z|\vec{x}\rangle \quad (7.33)$$

を満たす。時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$E|u\rangle = \hat{H}|u\rangle \quad (7.34)$$

を、3次元中心力問題のハミルトニアン (7.20) の場合に波動関数 u の言葉で表記すると

$$Eu = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r) \right] u, \quad r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (7.35)$$

である。ここではポテンシャルが動径座標のみに依存する中心力問題を考えるので、3次元極座標 (球座標) を用いて計算を進めるのが便利である。

球座標 (r, θ, φ) での体積要素 $d^3V = dx dy dz$ やラプラシアン Δ の導出については付録 G を参照のこと。これらは、それぞれ

$$\begin{aligned} d^3V &= dx dy dz \\ &= dr r d\theta r \sin \theta d\varphi = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi, \end{aligned} \quad (7.36)$$

$$\begin{aligned} \Delta u &= \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] u \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} u \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} u \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} u \end{aligned} \quad (7.37)$$

である。付録 H の結果から、角運動量演算子に対応する微分演算子が

$$\begin{aligned} L_x^{\text{op}} &= i\hbar \left[\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \\ L_y^{\text{op}} &= i\hbar \left[-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \varphi \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \\ L_z^{\text{op}} &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned} \quad (7.38)$$

であることがわかっている。また、付録 H.3 で調べるように、ラプラシアンは

$$\Delta u = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} u \right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} (\vec{L}^{\text{op}})^2 u \quad (7.39)$$

と書くことができる。ここで、 $(\vec{L}^{\text{op}})^2$ は

$$\begin{aligned} (\vec{L}^{\text{op}})^2 u &= ((L_x^{\text{op}})^2 + (L_y^{\text{op}})^2 + (L_z^{\text{op}})^2) u \\ &= -\frac{\hbar^2}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} u \right) - \frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} u \end{aligned} \quad (7.40)$$

で与えられる微分演算子である。

波動関数 u を

$$u = R(r) Y(\theta, \varphi) \quad (7.41)$$

と変数分離すると、シュレディンガー方程式 (7.35) は

$$ER = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R \right) + V_{\text{eff}}(r) R, \quad V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} l(l+1), \quad (7.42)$$

$$\begin{aligned} \hbar^2 l(l+1) Y &= (\vec{L}^{\text{op}})^2 Y \\ &= -\frac{\hbar^2}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y \right) - \frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} Y, \end{aligned} \quad (7.43)$$

$$\begin{aligned} \hbar m Y &= L_z^{\text{op}} Y \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y \end{aligned} \quad (7.44)$$

に分解できる。微分方程式 (7.42), (7.43), (7.44) は、それぞれ、(7.28), (7.29), (7.30) に対応していることに注意。

角運動量子数 l , 磁気量子数 m に対応する固有値方程式 (7.43) と (7.44) の解を球面調和関数と呼び、 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ と書くことにする。この表記を用いて、固有値方程式 (7.43), (7.44) を、それぞれ

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y_{lm}(\theta, \varphi) \right] + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} Y_{lm}(\theta, \varphi) + l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) = 0, \quad (7.45)$$

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\theta, \varphi) - im Y_{lm}(\theta, \varphi) = 0 \quad (7.46)$$

と書き直しておくことにする。以降では、球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ の具体形を求めよう。

まず、

$$X_m(\varphi) = e^{im\varphi} \quad (7.47)$$

が式 (7.46) と同じ形の微分方程式

$$\frac{d}{d\varphi} X_m(\varphi) - im X_m(\varphi) = 0 \quad (7.48)$$

の解であることに着目する。微分方程式 (7.48) は 1 階の線形微分方程式なので、その解は、 $X_m(\varphi)$ に φ には依存しない θ だけの任意関数 $F_{lm}(\theta)$ を掛けた

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = F_{lm}(\theta) X_m(\varphi) \quad (7.49)$$

の形で表すことができる。球面調和関数は、 φ について 2π の周期の周期関数であり、

$$Y_{lm}(\theta, \varphi + 2\pi) = Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

の周期的境界条件を満たさねばならない。このことから、磁気量子数 m は整数でなければならぬことがわかる³⁴。

次に、式 (7.49) を微分方程式 (7.45) に代入することで得られる F_{lm} についての微分方程式

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} F_{lm} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] F_{lm} = 0 \quad (7.50)$$

を解いていこう。微分方程式 (7.50) は

$$\zeta = \cos \theta, \quad (0 \leq \theta \leq \pi) \quad (7.51)$$

で定義される変数 ζ ($0 \leq \zeta \leq 1$) を用いて

$$\frac{d}{d\zeta} \left[(1 - \zeta^2) \frac{d}{d\zeta} F_{lm} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \zeta^2} \right] F_{lm} = 0 \quad (7.52)$$

と書き直すと解きやすくなる。この式変形では、

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{d\zeta}{d\theta} \frac{d}{d\zeta} = -\sin \theta \frac{d}{d\zeta} \quad (7.53)$$

であることを用いた。

微分方程式 (7.52) は、 $\zeta = \pm 1$ に確定特異点を持つ微分方程式である。まずは、確定特異点 $\zeta = 1$ の近傍での解のふるまいを調べよう。そのためには、フロベニウスの方法にしたがって、

$$F_{lm} = (1 - \zeta)^s \sum_{n=0}^{\infty} a_n (1 - \zeta)^n \quad (7.54)$$

と展開する。式 (7.54) を微分方程式 (7.52) に代入し、 $(1 - \zeta)$ の最低次の冪の係数を比較することで得られる決定方程式を解けば、式 (7.54) の s が $s = \pm|m|/2$ と求まり、 $\zeta = 1$ の近傍において微分方程式の解の振る舞いが

$$F_{lm} \sim (1 - \zeta)^{\pm|m|/2} \quad (7.55)$$

であることがわかる。ふたつの解のうち、 $s = -|m|$ の解は $\zeta \rightarrow +1$ の極限で発散するため採用せず、以降では

$$F_{lm} \sim (1 - \zeta)^{|m|/2} \quad (7.56)$$

となる解を探すことにする。

$\zeta = -1$ の近傍でも同様の解析を行うことによって、 $\zeta = -1$ の特異点の近傍での解の振る舞いが

$$F_{lm} \sim (1 + \zeta)^{|m|/2} \quad (7.57)$$

であることを得る。

以上の結果から、 $\zeta = \pm 1$ において有限な関数 G_{lm} を使って

$$F_{lm} = (1 - \zeta^2)^{|m|/2} G_{lm}(\zeta) \quad (7.58)$$

と書き換えることにする。式 (7.58) を微分方程式 (7.50) に代入することによって、 G_{lm} の満たすべき微分方程式

$$\frac{d}{d\zeta} \left[(1 - \zeta^2) \frac{d}{d\zeta} G_{lm} \right] - 2|m|\zeta \frac{d}{d\zeta} G_{lm} + [l(l+1) - |m|(|m|+1)] G_{lm} = 0 \quad (7.59)$$

³⁴ 演算子法を用いた議論 (後に紹介する) では、磁気量子数 m が半整数 (半奇数) の場合も許される。半整数 (半奇数) の l, m は量子力学 II でスピンを考える際に重要になる。

が得られる。

微分方程式 (7.59) は、

$$\zeta \rightarrow \zeta' = -\zeta$$

と変数変換しても不変であることに着目しよう。このような場合、確定特異点 $\xi = 1$ あるいは $\xi = -1$ の近傍で解を級数展開するよりも、 $\xi \rightarrow -\xi$ の対称性をもつ $\xi = 0$ の近傍で

$$G_{lm}(\zeta) = \sum_n a_n \zeta^n \quad (7.60)$$

と展開するほうが見通しを得やすい。微分方程式 (7.59) から得られる a_n の漸化式は

$$a_{n+2} = \frac{(n + |m|)(n + |m| + 1) - l(l + 1)}{(n + 2)(n + 1)} a_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.61)$$

である。この漸化式によって級数 (7.60) が無限に続く場合は、級数 (7.60) が $\zeta \rightarrow \pm 1$ で収束せず採用できない。逆にいうと、我々が採用できる解は、漸化式 (7.61) によって G_{lm} が有限次数の多項式になる場合、つまり、 l が $|m|$ 以上の整数の場合に限られることがわかる。

m がゼロのときの微分方程式 (7.59) は、付録 E.2 で考察するルジャンドルの微分方程式

$$\frac{d}{d\zeta} \left[(1 - \zeta^2) \frac{d}{d\zeta} P_l \right] + l(l + 1) P_l = 0 \quad (7.62)$$

そのものになっている。また、ルジャンドルの微分方程式 (7.62) を ζ で $|m|$ 回微分することによって

$$\frac{d}{d\zeta} \left[(1 - \zeta^2) \frac{d}{d\zeta} \frac{d^{|m|} P_l}{d\zeta^{|m|}} \right] - 2|m|\zeta \frac{d}{d\zeta} \frac{d^{|m|} P_l}{d\zeta^{|m|}} + [l(l + 1) - |m|(|m| + 1)] \frac{d^{|m|} P_l}{d\zeta^{|m|}} = 0 \quad (7.63)$$

が得られる。式 (7.63) が、我々が解きたい微分方程式 (7.59) とほぼ同一の形になっていることに注意すると、ルジャンドル多項式 P_l を使って、 G_{lm} の多項式解が

$$G_{lm}(\zeta) = N_{lm} \frac{d^{|m|}}{d\zeta^{|m|}} P_l(\zeta) \quad (7.64)$$

と書き表すことができることがわかる。ここで、 N_{lm} は適当な定数。つまり、球面調和関数 Y_{lm} は、ルジャンドル陪関数

$$P_l^{|m|}(\zeta) = (1 - \zeta^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{d\zeta^{|m|}} P_l(\zeta) \quad (7.65)$$

を使って、

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = N_{lm} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (7.66)$$

と表すことができるのである。

次に球面調和関数 Y_{lm} の規格化条件について調べよう。 Y_{lm} がエルミート (微分) 演算子の固有関数であること、また、式 (7.36) に示されるように、 d^3V における角度積分が

$$d\theta \sin \theta d\varphi \quad (7.67)$$

の形であることから、 Y_{lm} は直交条件

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = 0, \quad \text{for } l \neq l', m \neq m' \quad (7.68)$$

を満たすことが分かる。この直交条件にあわせて規格化条件を選ぶのが便利であり、通常の設定では Y_{lm} は正規直交条件

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (7.69)$$

を満たすものとして規格化される。

では、この規格化条件 (7.69) を用いて、球面調和関数の規格化定数 N_{lm} の絶対値を求めよう。 $l = l', m = m'$ のとき、この規格化条件から

$$|N_{lm}|^2 = \frac{1}{2\pi \int_{-1}^1 d\zeta |P_l^{|m|}(\zeta)|^2} \quad (7.70)$$

が得られる。この式の右辺の積分は、ルジャンドル陪関数を式 (E.49) を用いてゲーゲンバウアー多項式に書き換え、さらにゲーゲンバウアー多項式の規格化の式 (E.53) を用いれば容易に計算でき、

$$|N_{lm}|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \quad (7.71)$$

が得られる。

上述の考察のみでは、規格化定数 N_{lm} の符号 (位相) は決定できないが、多くの文献において

$$N_{lm} = \begin{cases} (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2}, & \text{for } m \geq 0, \\ \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right]^{1/2}, & \text{for } m < 0, \end{cases} \quad (7.72)$$

のように与えられている。このとき、球面調和関数は

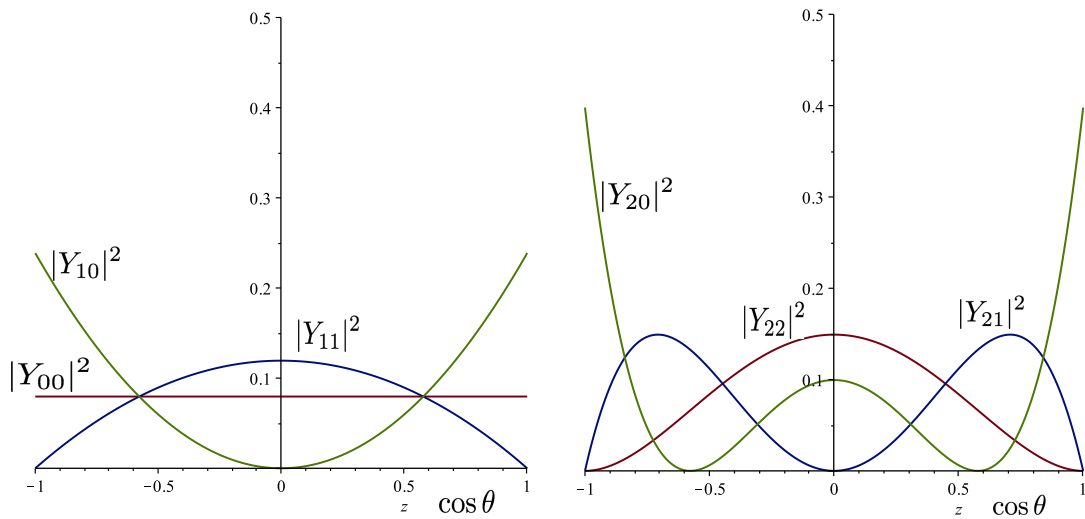
$$Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{lm}^* \quad (7.73)$$

との性質を持つ。なぜ、式 (7.72) のように符号 (位相) を決めておくと便利であるかについては、次章で説明することにする。

最後に、いくつかの場合について、球面調和関数の具体形を挙げておく。

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, & Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, & Y_{1,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin\theta, \\ Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2\theta - \frac{1}{2} \right), & Y_{2,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{5}{24\pi}} 3 \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\varphi}, & Y_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{5}{96\pi}} 3 \sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}, \\ Y_{3,0} &= \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \left(\frac{5}{2} \cos^3\theta - \frac{3}{2} \cos\theta \right), & Y_{3,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{7}{48\pi}} \left(\frac{15}{2} \sin\theta \cos^2\theta - \frac{3}{2} \sin\theta \right) e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{3,\pm 2} &= \sqrt{\frac{7}{480\pi}} 15 \sin^2\theta \cos\theta e^{\pm 2i\varphi}, & Y_{3,\pm 3} &= \mp \sqrt{\frac{7}{2880\pi}} 15 \sin^3\theta e^{\pm 3i\varphi}. \end{aligned}$$

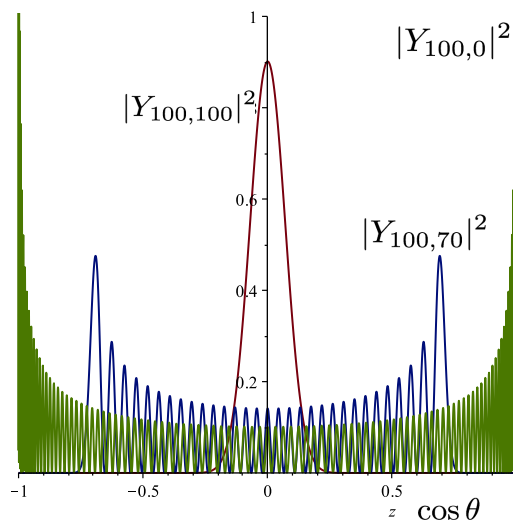
これらの球面調和関数について $|Y_{lm}|^2$ の $\cos\theta$ 依存性を下図に示す。



$|Y_{00}|^2, |Y_{11}|^2, |Y_{10}|^2$ の $\cos \theta$ 依存性

$|Y_{22}|^2, |Y_{21}|^2, |Y_{20}|^2$ の $\cos \theta$ 依存性

とくに l が非常に大きい場合は、下図に示すふるまいを示し、 $m = l$ の場合に確率が $\cos \theta = 0$ の近傍（赤道周辺）に局在し、 $m = 0$ の場合は $\cos \theta = \pm 1$ の近傍（北極、南極周辺）に集まる様子が見て取れる。



$|Y_{l=100,m=100}|^2, |Y_{l=100,m=70}|^2, |Y_{l=100,m=00}|^2$ の $\cos \theta$ 依存性

7.4 球面調和関数の完全性

球面上の座標 (θ, φ) , $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ で表される球面を考える。この球面で定義される区分的になめらかな関数 f は、球面調和関数を用いて

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (7.74)$$

と展開できる。これは、周期 2π の周期関数 $f(x)$ を関数 e^{inx} (n は整数) を用いて

$$f(x) = \sum_n f_n e^{inx} \quad (7.75)$$

と展開するフーリエ級数展開に類似する展開である。

展開式 (7.74) の両辺に $Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi)$ をかけ、球面調和関数の正規直交条件式 (5.29) を用いて積分を実行すると、

$$f_{lm} = \int_0^\pi d\theta' \sin \theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' Y_{lm}^*(\theta', \varphi') f(\theta', \varphi') \quad (7.76)$$

が得られる。式 (7.76) を式 (7.74) に代入すると

$$f(\theta, \varphi) = \int_0^\pi d\theta' \sin \theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta', \varphi') f(\theta', \varphi') \quad (7.77)$$

が得られる。この式は任意の $f(\theta, \varphi)$ について成り立つので、結局、完全性関係

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta', \varphi') = \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (7.78)$$

が成り立つことを表している。

8 角運動量の量子化: 3次元回転群の表現

前章では、3次元角運動量演算子の固有関数である球面調和関数の導出を通じて、角運動量量子数 l がゼロまたは正の整数に量子化され、磁気量子数 m が

$$-l \leq m \leq +l \quad (8.1)$$

を満たす整数に量子化されることを学んだ。この章では、演算子法を用いたより見通しのよい角運動量の量子化法を学ぶ。さらに、角運動量を状態に作用させることで、状態の無限小3次元回転が引き起こされ、いわゆる3次元回転群 $SO(3)$ の「表現」を作ることを学ぶ。

8.1 昇降演算子

この章では角運動量演算子の固有値に焦点をあてて解説し、エネルギーの固有値にはあまり着目しない。そこで状態を指定する上でエネルギー固有値 E_n のインデックス n を省略し

$$|l, m\rangle \quad (8.2)$$

と表記することにする。 l, m はそれぞれ角運動量量子数、磁気量子数を表す。状態 $|l, m\rangle$ は、エルミート演算子 \hat{L}^2 と \hat{L}_z の同時固有状態であり、固有値方程式

$$\hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle = \hat{L}^2 |l, m\rangle, \quad (8.3)$$

$$\hbar m |l, m\rangle = \hat{L}_z |l, m\rangle, \quad (8.4)$$

を満たす状態である。また、演算子 \hat{L}^2 と \hat{L}_z はエルミート演算子であることから、これらの状態が正規直交条件

$$\langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (8.5)$$

を満たすことが言える。

ここでは演算子法を用いて、角運動量量子数 l と磁気量子数 m の満たすべき性質を調べることにしよう。そのために、昇降演算子を

$$\hat{L}_{\pm} \equiv \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \quad (8.6)$$

で定義する。 \hat{L}_{\pm} が交換関係

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z, \quad (8.7)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm\hbar\hat{L}_{\pm} \quad (8.8)$$

を満たすことを示すことは容易である。角運動量の 2 乗 \hat{L}^2 は、角運動量 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ すべてと交換するので、昇降演算子 \hat{L}_{\pm} とも交換する。

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_{\pm}] = 0. \quad (8.9)$$

また、昇降演算子 \hat{L}_{\pm} を用いて、 \hat{L}^2 を

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= \frac{1}{2} (\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+) + \hat{L}_z^2 \\ &= \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \frac{1}{2}[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z \end{aligned} \quad (8.10)$$

$$= \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \frac{1}{2}[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z \quad (8.11)$$

と書けることに注意しておく。式 (8.10) と式 (8.11) の両辺を再配置すると

$$\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z, \quad (8.12)$$

$$\hat{L}_-\hat{L}_+ = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z, \quad (8.13)$$

が得られる。

状態

$$\hat{L}_+|l, m\rangle \quad (8.14)$$

を考察しよう。この状態に \hat{L}^2, \hat{L}_z を作用させると

$$\hat{L}^2\hat{L}_+|l, m\rangle = [\hat{L}^2, \hat{L}_+]|l, m\rangle + \hat{L}_+\hat{L}^2|l, m\rangle = \hbar^2l(l+1)\hat{L}_+|l, m\rangle, \quad (8.15)$$

$$\hat{L}_z\hat{L}_+|l, m\rangle = [\hat{L}_z, \hat{L}_+]|l, m\rangle + \hat{L}_+\hat{L}_z|l, m\rangle = \hbar(m+1)\hat{L}_+|l, m\rangle \quad (8.16)$$

となることがわかる。ここで、状態 $|l, m\rangle$ が式 (8.3) と式 (8.4) で示されるように演算子 \hat{L}^2, \hat{L}_z の固有状態であることと、交換関係 (8.8), (8.9) を用いた。式 (8.15) と式 (8.16) は、状態 $\hat{L}_+|l, m\rangle$ が \hat{L}^2 の固有値 $\hbar^2l(l+1)$, \hat{L}_z の固有値 $\hbar(m+1)$ の同時固有状態であることを表しており、規格化の定数 $C_+(l, m)$ を用いて

$$\hat{L}_+|l, m\rangle = C_+(l, m)|l, m+1\rangle \quad (8.17)$$

と書くことができそうである。同様に

$$\hat{L}^2\hat{L}_-|l, m\rangle = \hbar^2l(l+1)\hat{L}_-|l, m\rangle, \quad (8.18)$$

$$\hat{L}_z\hat{L}_-|l, m\rangle = \hbar(m-1)\hat{L}_-|l, m\rangle \quad (8.19)$$

から、

$$\hat{L}_-|l, m\rangle = C_-(l, m)|l, m-1\rangle \quad (8.20)$$

と書くことができそうである。このように、演算子 \hat{L}_\pm は \hat{L}^2 の固有値を変えずに、 z 方向の角運動量 \hat{L}_z の固有値 $\hbar m$ を昇降させる演算子であり、このことがこの演算子を昇降演算子と呼ぶゆえんとなっている。

さて、 \hat{L}_\pm によって正しく m が上げ下げされるためには、 $\hat{L}_\pm |l, m\rangle$ のノルム (の2乗) が正の値になることが必要である。この条件は、 \hat{L}_\pm のエルミート共軛が \hat{L}_\mp であることに注意すると

$$\langle l, m | L_+ L_- |l, m\rangle = |C_-(l, m)|^2 > 0, \quad (8.21)$$

$$\langle l, m | L_- L_+ |l, m\rangle = |C_+(l, m)|^2 > 0, \quad (8.22)$$

与えられる。式 (8.12), (8.13) を用いれば、式 (8.21), (8.22) の左辺の計算を行うことができる。結果は

$$\hbar^2 (l(l+1) - (-m)(-m+1)) = |C_-(l, m)|^2 > 0, \quad (8.23)$$

$$\hbar^2 (l(l+1) - m(m+1)) = |C_+(l, m)|^2 > 0, \quad (8.24)$$

であり、条件 $-m < l$ (つまり $-l < m$) が満たされれば

$$|l, m-1\rangle = \frac{1}{C_-(l, m)} \hat{L}_- |l, m\rangle \quad (8.25)$$

となり得ること、またそのときの規格化の定数が

$$C_-(l, m) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \quad (8.26)$$

となることがわかる。同様に、条件 $m < l$ が満たされれば、

$$|l, m+1\rangle = \frac{1}{C_+(l, m)} \hat{L}_+ |l, m\rangle \quad (8.27)$$

$$C_+(l, m) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \quad (8.28)$$

である³⁵。

この考察を進めていくと、矛盾のない状態を与える l, m に対して制限が得られることがわかる。なんの条件もつけずに l, m を選び、十分に大きな整数 n で状態

$$(\hat{L}_\pm)^n |l, m\rangle \quad (8.29)$$

を考えると、そのノルム (の2乗) が負になってしまって、矛盾がおきるからである。(ラフに言って、ノルムが $l^2 - m^2$ に比例していたことに注意。) この問題を避けるには、昇降演算子で上げ下げされる m に最大値 m_{\max} と最小値 m_{\min} があって、それ以上 m を上げ下げしようとしても新たな状態を作ることができず

$$\hat{L}_+ |l, m_{\max}\rangle = 0, \quad \hat{L}_- |l, m_{\min}\rangle = 0 \quad (8.30)$$

³⁵ 式 (8.23) や式 (8.24) からは規格化定数 C_- , C_+ の絶対値は求まるが、符号の不定性が残る。式 (8.26) と式 (8.28) で与えた C_- , C_+ の符号の選び方が互いに無矛盾であることは、式 (8.25) と式 (8.27) を用いて、状態の m の値を上げ下げした結果が元の状態の符号に戻ることに、つまり

$$\begin{aligned} |l, m\rangle &= \frac{1}{C_+(l, m-1)} \hat{L}_+ |l, m-1\rangle = \frac{1}{C_+(l, m-1)C_-(l, m)} \hat{L}_+ \hat{L}_- |l, m\rangle \\ &= \frac{\hbar^2 [l(l+1) - m(m-1)]}{C_+(l, m-1)C_-(l, m)} |l, m\rangle = |l, m\rangle \end{aligned}$$

であることから確認できる。

となるという条件をつけざるを得ない。この条件は、 $\hat{L}_+|l, m_{\max}\rangle, \hat{L}_-|l, m_{\min}\rangle$ のノルムがゼロになることを要求することで実現することができ、その結果は

$$m_{\max} = l, \quad m_{\min} = -l \quad (8.31)$$

である。昇降演算子によって、 m はひとつずつ上げ下げされることを思い出すと、 m として可能な値は、

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-1, l \quad (8.32)$$

となって量子化されていることがわかる。式 (8.32) はまた、 l も任意の数になることができず、 $l = 0, 1, 2, \dots$ などの整数か、あるいは、 $l = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ などの半整数 (半奇数) に量子化されることを示している。前章の球面調和関数の考察では、 l, m は整数に量子化され、半整数の値を取ることができなかったことに注意しておく。この章の演算子法での考察では、半整数の l, m が許容されるが、この事実は、単純な軌道角運動量 (球面調和関数) では記述できない角運動量の存在の可能性を示唆している。実際、量子力学 II において、そのような角運動量であるスピン角運動量について学ぶことになる。

8.2 N_{lm} の符号

前節で使用した昇降演算子の微分演算子版

$$\begin{aligned} L_+^{\text{op}} &= L_x^{\text{op}} + iL_y^{\text{op}} \\ &= \hbar e^{+i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \end{aligned} \quad (8.33)$$

$$\begin{aligned} L_-^{\text{op}} &= L_x^{\text{op}} - iL_y^{\text{op}} \\ &= \hbar e^{-i\varphi} \left[-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \end{aligned} \quad (8.34)$$

を導入しよう。実は、7.3 節で (7.72) のように定義した球面調和関数 Y_{lm} の規格化定数の符号 (位相) は、(8.25) 式、(8.27) 式に対応して、

$$Y_{l,m+1}(\theta, \varphi) = \frac{1}{C_+(l, m)} L_+^{\text{op}} Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (8.35)$$

$$Y_{l,m-1}(\theta, \varphi) = \frac{1}{C_-(l, m)} L_-^{\text{op}} Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (8.36)$$

となるようにして定められているのである。ここで、係数 C_+, C_- は式 (8.28) と式 (8.26) でそれぞれ与えられる係数である。実際、 $m \geq 0$ に対してルジャンドル陪関数 $P_l^m(\zeta)$ が

$$P_l^{m+1}(\zeta) = \sqrt{1-\zeta^2} \left[\frac{d}{d\zeta} + \frac{m\zeta}{1-\zeta^2} \right] P_l^m(\zeta) \quad (8.37)$$

を満たすことを用いれば、

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = N_{lm} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (8.38)$$

に対して、 L_{\pm}^{op} を具体的に作用させることで、

$$L_+^{\text{op}} Y_{lm}(\theta, \varphi) = -\hbar N_{lm} P_l^{|m|+1}(\cos \theta) e^{i(m+1)\varphi}, \quad (8.39)$$

$$L_-^{\text{op}} Y_{lm}(\theta, \varphi) = +\hbar N_{lm} P_l^{|m|+1}(\cos \theta) e^{i(m-1)\varphi}, \quad (8.40)$$

となることを示すのは容易である。式 (8.39), (8.40) を、それぞれ、式 (8.35), (8.36) の右辺に代入することで、

$$N_{l,m+1}P_l^{|m+1|}(\cos\theta)e^{i(m+1)\varphi} = \frac{-\hbar N_{lm}}{C_+(l,m)}P_l^{|m|+1}(\cos\theta)e^{i(m+1)\varphi}, \quad (8.41)$$

$$N_{l,m-1}P_l^{|m-1|}(\cos\theta)e^{i(m+1)\varphi} = \frac{+\hbar N_{lm}}{C_-(l,m)}P_l^{|m|+1}(\cos\theta)e^{i(m+1)\varphi}, \quad (8.42)$$

が得られる。 $m \geq 0$ に対して、式 (8.41) を用いて、 $N_{l,m+1}$ と N_{lm} の関係を読み取れば、

$$N_{l,m+1} = \frac{-N_{lm}}{\sqrt{(l-m)(l+m+1)}}, \quad \text{for } m \geq 0, \quad (8.43)$$

が得られる。同様に、式 (8.42) からは

$$N_{l,m-1} = \frac{N_{lm}}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}}, \quad \text{for } m \leq 0, \quad (8.44)$$

を読み取ることができる。結局のところ、 $m = 0$ での N_{lm} の符号 (位相) を正の実数にとっておくことを約束しておけば、 $m \neq 0$ についての N_{lm} の符号は、式 (7.72) のようにしておけば良いことがわかる。

ちなみに $m = l$ のときの球面調和関数の形は、非常に簡単に求めることができる。式 (8.31) より、 $m_{\max} = l$ であり、このとき、式 (8.30) から、

$$L_+^{\text{op}}Y_{l,m=l}(\theta, \varphi) = 0 \quad (8.45)$$

であることがわかる。式 (8.45) を $F_{ll,m=l}$ で書き直すと

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} - l \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \right) F_{ll}(\theta) = 0 \quad (8.46)$$

が得られ、単に 1 階の微分方程式を解く問題に帰着する。定数倍の不定性を除いて、これから解

$$F_{ll}(\theta) \propto (\sin \theta)^l \quad (8.47)$$

を得るのは容易である。結局、 $m = m_{\max} = l$ のときの球面調和関数は

$$Y_{ll} \propto (\sin \theta)^l e^{il\varphi} \quad (8.48)$$

と求められたことになる。 $m < m_{\max} = l$ のときの球面調和関数を求めるには、下降演算子の微分演算子版 L_-^{op} を $l - m$ 回、式 (8.48) に作用させて、

$$Y_{lm} \propto \left[e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right]^{l-m} (\sin \theta)^l e^{il\varphi} \quad (8.49)$$

を計算すればよい。

8.3 状態の回転変換

角運動量演算子 \hat{L}_z を生成子とする状態 $|\psi\rangle$ の無限小変換

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi_\epsilon\rangle = \left(\hat{1} + \frac{\epsilon}{i\hbar} \hat{L}_z \right) |\psi\rangle \quad (8.50)$$

を考察しよう。ここで、 ϵ は無限小の実数パラメータである。変換後の波動関数 $\psi_\epsilon(x, y, z)$ が

$$\begin{aligned}\psi_\epsilon(x, y, z) &= \psi(x, y, z) - \epsilon \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, y, z) \\ &= \psi(x + \epsilon y, y - \epsilon x, z)\end{aligned}\tag{8.51}$$

であることからわかるように、この無限小変換は z 軸周りの無限小角度 ϵ の回転変換になっていることがわかる。同様に \hat{L}_x, \hat{L}_y を生成子とする無限小変換は、それぞれ、 x 軸周り、 y 軸周りの無限小回転になっている。

有限角度の回転変換を得るには、無限小変換を何度もくり返せばよい。例えば、 z 軸周りの有限角度 θ の回転変換は、

$$\begin{aligned}|\psi\rangle \rightarrow |\psi_\theta\rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\hat{1} + \frac{1}{i\hbar} \frac{\theta}{N} \hat{L}_z \right)^N |\psi\rangle \\ &= \exp\left(\frac{\theta}{i\hbar} \hat{L}_z\right) |\psi\rangle\end{aligned}\tag{8.52}$$

で与えられる。ここで、演算子の指数関数は

$$\exp\left(\frac{\theta}{i\hbar} \hat{L}_z\right) \equiv \hat{1} + \frac{\theta}{i\hbar} \hat{L}_z + \frac{1}{2!} \left(\frac{\theta}{i\hbar} \hat{L}_z\right)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{\theta}{i\hbar} \hat{L}_z\right)^3 + \dots$$

のようにテイラー展開を用いて定義されている。

単位ベクトル \vec{n} を回転軸とする大きさ θ の回転を $\vec{\theta}$ 回転と呼ぶことにする ($\vec{\theta}$ は $\vec{\theta} = \theta \vec{n}$ で与えられるベクトル)。一般に、状態 $|\psi\rangle$ の $\vec{\theta}$ 回転変換は

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi_{\vec{\theta}}\rangle = \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \vec{\theta} \cdot \hat{\vec{L}}\right) |\psi\rangle\tag{8.53}$$

によって与えられる。

8.4 角運動量の行列表示と3次元回転群 $SO(3)$ の表現

\hat{L}_z と \hat{L}^2 の固有値は、それぞれ、 $\hbar m$ と $\hbar^2 l(l+1)$ に量子化される。ここで、 l は非負の整数であり、 m は $m_{\max} \geq m \geq m_{\min}$ を満たす整数である。また、 $m_{\max} = +l$, $m_{\min} = -l$ 。これらの固有値を用いて、考察する状態を

$$|m\rangle_l\tag{8.54}$$

のようにラベルすることにする。その重ね合わせの状態

$$\begin{aligned}|\vec{s}\rangle_l &= \sum_{m=-l}^l |m\rangle_l s_m \\ &= (|m_{\max}\rangle_l, |m_{\max}-1\rangle_l, \dots, |m_{\min}+1\rangle_l, |m_{\min}\rangle_l) \vec{s}\end{aligned}\tag{8.55}$$

を考えよう。この式の2行目の $2l+1$ 次元ベクトル \vec{s} は

$$\vec{s} = \begin{pmatrix} s_l \\ s_{l-1} \\ \vdots \\ s_{-l+1} \\ s_{-l} \end{pmatrix}\tag{8.56}$$

のように縦ベクトルとして定義されている。ここで、 s_m は重ね合わせの係数である。

この状態の3次元回転変換を考える。 \hat{L}^2 は3次元回転のもとで不変なので、 l は回転変換のもとで変化しない。したがって、状態 $|\vec{s}\rangle_l$ を回転変換させると l は変化せず $2l+1$ 次元ベクトル \vec{s} のみが増えた状態 $|\vec{s}'\rangle_l$ が得られるはずである。実際、状態 $|\vec{s}\rangle_l$ に角運動量演算子 \hat{L}_i を作用させると、

$$\begin{aligned}\hat{L}_i|\vec{s}\rangle_l &= (|m=l\rangle, |m=l-1\rangle, \dots, |-l+1\rangle, |m=-l\rangle) \rho_l(\hat{L}_i)\vec{s} \\ &= |\rho_l(\hat{L}_i)\vec{s}\rangle_l\end{aligned}\tag{8.57}$$

と書くことができる。ここで、 $\rho_l(\hat{L}_i)$ は $(2l+1) \times (2l+1)$ 行列である。この行列を角運動量の行列表示と呼ぶ。有限の大きさの回転変換

$$\hat{U}_{\vec{\theta}} \equiv \exp\left(\frac{1}{i\hbar}\vec{\theta} \cdot \hat{\vec{L}}\right)\tag{8.58}$$

を状態 $|\vec{s}\rangle_l$ に施すと

$$\hat{U}_{\vec{\theta}}|\vec{s}\rangle_l = |\vec{s}_{\vec{\theta}}\rangle_l, \quad \vec{s}_{\vec{\theta}} \equiv \rho_l(\hat{U}_{\vec{\theta}})\vec{s}, \quad \rho_l(\hat{U}_{\vec{\theta}}) = \exp\left(\frac{1}{i\hbar}\vec{\theta} \cdot \rho_l(\hat{\vec{L}})\right)\vec{s}\tag{8.59}$$

となることに注意。つまり、この表記では、行列 $\rho_l(\hat{U}_{\vec{\theta}})$ によって、状態の回転変換

$$|\vec{s}\rangle_l \rightarrow |\vec{s}_{\vec{\theta}}\rangle_l = |\rho_l(\hat{U}_{\vec{\theta}})\vec{s}\rangle_l\tag{8.60}$$

が表されている。

回転変換 $\hat{U}_{\vec{\theta}_1}$ を行った状態を、さらに $\hat{U}_{\vec{\theta}_2}$ によって回転変換させる操作は、 $\hat{U}_{\vec{\theta}_2}$ と $\hat{U}_{\vec{\theta}_1}$ の積の演算子

$$\hat{U}_{\vec{\theta}_2}\hat{U}_{\vec{\theta}_1}\tag{8.61}$$

によって表されることに着目しよう。回転変換全体の集合には、このようにして自然に「積」の概念が導入されることになる。一般に、要素の間に「積」の概念が導入された集合は、「群」³⁶ と呼ばれ、数学で詳しく研究されている。特に、3次元回転変換の集合のなす群は、3次元回転群 $SO(3)$ と呼ばれる。 $SO(3)$ の元の積は、一般には、

$$\hat{U}_{\vec{\theta}_2}\hat{U}_{\vec{\theta}_1} \neq \hat{U}_{\vec{\theta}_1}\hat{U}_{\vec{\theta}_2}\tag{8.62}$$

であることに注意。このように、順序の入れ替えで異なる結果を与える積をもつ群は、非可換群(非アーベル群) と呼ばれる。 $SO(3)$ は非可換群の例になっている。

次に、行列 $\rho_l(\hat{L}_z)$ の具体形を求めてみよう。 z 方向の角運動量演算子 \hat{L}_z の表現行列が

$$\frac{1}{\hbar}\rho_l(\hat{L}_z) = \begin{pmatrix} l & & & & \\ & l-1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -l+1 & \\ & & & & -l \end{pmatrix},\tag{8.63}$$

³⁶ 数学での「群」の公理には、単に「積」の演算の概念だけでなく、単位元や逆元の存在など、その演算が「積」として望ましい性質を持つことも要請される。回転変換に自然に導入される「積」の演算はこのような望ましい性質を持つ。

であること、つまり、 \hat{L}_z の固有値を並べた対角行列であることはすぐにわかる。演算子 \hat{L}_x, \hat{L}_y については、昇降演算子 $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm \hat{L}_y$ の表現行列が、(8.26) 式、(8.28) 式で与えられた係数 C_-, C_+ を用いて

$$\frac{1}{\hbar} \rho_l(\hat{L}_+) = \begin{pmatrix} 0 & C_+(l, m=l-1) & & & \\ & 0 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & C_+(l, m=-l) \\ & & & & 0 \end{pmatrix}, \quad (8.64)$$

$$\frac{1}{\hbar} \rho_l(\hat{L}_-) = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ C_-(l, m=l) & 0 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & 0 & \\ & & & C_-(l, m=-l+1) & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.65)$$

と表されることを用いる。行列 $\rho_l(\hat{L}_x), \rho_l(\hat{L}_y)$ は

$$\rho_l(\hat{L}_x) = \frac{1}{2} (\rho_l(\hat{L}_+) + \rho_l(\hat{L}_-)), \quad (8.66)$$

$$\rho_l(\hat{L}_y) = \frac{1}{2i} (\rho_l(\hat{L}_+) - \rho_l(\hat{L}_-)) \quad (8.67)$$

から計算でき、その答えは、

$$\frac{1}{\hbar} \rho_l(\hat{L}_x) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{2}l} & & & & & & & \\ \sqrt{\frac{1}{2}l} & 0 & \sqrt{1(l-\frac{1}{2})} & & & & & & \\ 0 & \sqrt{1(l-\frac{1}{2})} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}(l-1)} & & & & & \\ & & \sqrt{\frac{3}{2}(l-1)} & 0 & \ddots & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & & \sqrt{(l-\frac{1}{2})} & 1 & & & \\ & & & & \sqrt{(l-\frac{1}{2})} & 0 & \sqrt{l\frac{1}{2}} & & \\ & & & & & \sqrt{l\frac{1}{2}} & 0 & & \end{pmatrix}, \quad (8.68)$$

- $l = 1$ の場合。

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\hbar}\rho_1(\hat{L}_x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\
\frac{1}{\hbar}\rho_1(\hat{L}_y) &= \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\
\frac{1}{\hbar}\rho_1(\hat{L}_z) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{8.73}$$

これらがエルミート行列であること、交換関係

$$[\rho_1(\hat{L}_x), \rho_1(\hat{L}_y)] = i\hbar\rho_1(\hat{L}_z), \quad [\rho_1(\hat{L}_y), \rho_1(\hat{L}_z)] = i\hbar\rho_1(\hat{L}_x), \quad [\rho_1(\hat{L}_z), \rho_1(\hat{L}_x)] = i\hbar\rho_1(\hat{L}_y) \tag{8.74}$$

を満たすことを確認するのは容易である。

$$V = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{8.75}$$

で与えられるユニタリー行列 V を用いて

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\hbar}\tilde{\rho}_1(\hat{L}_x) &= \frac{1}{\hbar}V\rho_1(\hat{L}_x)V^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & +i & 0 \end{pmatrix}, \\
\frac{1}{\hbar}\tilde{\rho}_1(\hat{L}_y) &= \frac{1}{\hbar}V\rho_1(\hat{L}_y)V^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & +i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
\frac{1}{\hbar}\tilde{\rho}_1(\hat{L}_z) &= \frac{1}{\hbar}V\rho_1(\hat{L}_z)V^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ +i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{8.76}$$

が得られることにも注意。一般に、ユニタリー行列 V を用いて $\tilde{\rho} = V\rho V^\dagger$ の関係にあるふたつの表現 ρ と $\tilde{\rho}$ はユニタリー同値であると呼ばれる。表現 $\tilde{\rho}_1$ は表現 ρ_1 とユニタリー同値である。表現 $\tilde{\rho}_1$ は、通常の3次元ベクトルの回転変換を与えており、たとえば、 z 軸まわりの角度 θ の回転変換は

$$\begin{aligned}
\exp\left(\frac{\theta}{i\hbar}\tilde{\rho}_1(\hat{L}_z)\right) &= \exp\begin{pmatrix} 0 & -\theta & 0 \\ +\theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{8.77}$$

と変換する。したがって、状態 $|\vec{s}\rangle_{l=1}$ に z 軸まわりの角度 θ の回転変換を施すと、

$$\begin{aligned}
\exp\left(\frac{\theta}{i\hbar}\hat{L}_z\right)|\vec{s}\rangle_{l=1} &= \exp\left(\frac{\theta}{i\hbar}\hat{L}_z\right)(|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle) \begin{pmatrix} s_{+1} \\ s_0 \\ s_{-1} \end{pmatrix} \\
&= (|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle) \exp\left(\frac{\theta}{i\hbar}\rho_1(\hat{L}_z)\right) \begin{pmatrix} s_{+1} \\ s_0 \\ s_{-1} \end{pmatrix} \\
&= (|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle) V^\dagger \exp\left(\frac{\theta}{i\hbar}\tilde{\rho}_1(\hat{L}_z)\right) V \begin{pmatrix} s_{+1} \\ s_0 \\ s_{-1} \end{pmatrix} \\
&= (|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle) V^\dagger \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} V \begin{pmatrix} s_{+1} \\ s_0 \\ s_{-1} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{8.78}$$

が得られ、回転変換のもとで重ね合わせの係数 s_{+1} , s_0 , s_{-1} がどのように変化していくかを具体的に計算できるようになる。特に、 $|\vec{\theta}| = 2\pi$ のときに回転変換後の状態がもとの状態に一致することにも注意しておく。

$l=1$ の表現は、3次元回転群 $SO(3)$ の3次元表現、あるいは、随伴表現と呼ばれる。

9 3次元量子力学の中心力問題

前章までで調べたように、中心力ポテンシャルのもとで運動する質量 μ の粒子のシュレディンガー方程式

$$Eu = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(r) \right] u \tag{9.1}$$

を球座標表示し、動径方向波動関数 $R(r)$ と球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$u = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{9.2}$$

に変数分離すると、動径方向波動関数のシュレディンガー方程式（動径方程式）

$$ER = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R \right) + V_{\text{eff}}(r)R, \quad V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} l(l+1) \tag{9.3}$$

を得ることができる。この章では、 $V(r)$ として $1/r$ ポテンシャルを考え、動径方程式 (9.3) の解を考えよう。

9.1 水素類似原子

中心力ポテンシャルとして

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{9.4}$$

を採用して、このポテンシャルに束縛された状態を表す解を探そう。この中心力ポテンシャルの場合の3次元量子力学は、電荷 Ze をもつ原子核のまわりを運動する1電子（水素類似原子）のモデルとなっている。電子の質量を m_e 、原子核の質量を M とすると、ハミルトニアンに現れる質量 μ は、換算質量

$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M} \quad (9.5)$$

に他ならない (r は原子核と電子の間の相対距離)。

シュレディンガー方程式 (9.3) を解くうえで、なるべく方程式の形を見やすくしておくのが便利である。そこで動径距離 r のかわりに、無次元量 ρ を

$$\rho \equiv \sqrt{\frac{-8\mu E}{\hbar^2}} r, \quad (9.6)$$

と定義し、ポテンシャルの係数 Ze^2 のかわりに、ポテンシャルの強さを表す無次元の定数 λ を

$$\lambda \equiv \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{-2E}} \quad (9.7)$$

と定義しておく。ここで、我々は束縛状態を考えているので、エネルギー固有値 E は負であることに注意しておく。

動径座標変数として ρ ($\rho \geq 0$)、ポテンシャルの強さを表す無次元定数 λ を用いると、動径方程式は

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right) \right] R = 0 \quad (9.8)$$

と変形できる。

9.2 エネルギー準位

式 (9.8) を解く作業にとりかかろう。そのためにはまず $\rho \gg 1$ での解のふるまいに着目する。この極限での式 (9.8) の主要項は

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R = 0 \quad (9.9)$$

であり、その解は

$$R \sim e^{+\rho/2} \quad (9.10)$$

あるいは

$$R \sim e^{-\rho/2} \quad (9.11)$$

である。このふたつの解のうち式 (9.10) は、あきらかに二乗可積分ではないため許されない。したがって、我々の採用できる $\rho \gg 1$ でのふるまいは式 (9.11) である。そこで

$$R(\rho) = e^{-\rho/2} G(\rho) \quad (9.12)$$

と置き換えて、 R に関する微分方程式 (9.8) を G に関する微分方程式

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \left(1 - \frac{2}{\rho} \right) \frac{d}{d\rho} + \frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] G = 0 \quad (9.13)$$

に変形しよう。微分方程式 (9.13) は、 $\rho = 0$ に確定特異点をもつ微分方程式である。そこで、フロベニウスの方法にしたがって、 $\rho = 0$ まわりでの級数展開

$$G(\rho) = \rho^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (9.14)$$

として解を求めて行くことにしよう。

まずは s を求めることを考える。これを計算するには、冪展開の式 (9.14) を微分方程式 (9.13) に代入し、 ρ の最低次数の項 (この問題の場合は ρ^{s-2} に比例する項) の係数を比較すればよい。最低次数の項の係数の比較によって決定方程式

$$s(s-1) + 2s - l(l+1) = 0 \quad (9.15)$$

が得られ、その結果

$$s = l, -l-1 \quad (9.16)$$

と求められる。このふたつの解のうち、 $s = -l-1$ の解は、 $l \geq 1$ の場合は、積分 $\int_0^{\infty} dr r^2 |R|^2$ が $r = 0$ 近辺で発散して二乗可積分条件を満たさない。 $l = 0$ の場合も $r = 0$ でのシュレディンガー方程式を満たさないことを示すことができる³⁸。そこで我々は $s = l$ の解を採用し³⁹、

$$G(\rho) = \rho^l L(\rho), \quad L = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (9.17)$$

と展開することにする。関数 $L(\rho)$ の満たすべき微分方程式は

$$\rho \frac{d^2 L}{d\rho^2} + (2l+2-\rho) \frac{dL}{d\rho} + (\lambda-1-l)L = 0 \quad (9.18)$$

であり、数列 a_k の満たすべき漸化式は

$$a_{k+1} = \frac{k+l+1-\lambda}{(k+2l+2)(k+1)} a_k \quad (9.19)$$

と求められる。十分大きい k について、もし $a_k \neq 0$ であれば、

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{1}{k} \quad (9.20)$$

であることに注意しよう。このことは、もしずっと無限級数が続くのであれば、

$$a_{k+1} \propto \frac{1}{k!} \quad (9.21)$$

となり、ひいては

$$L \propto e^\rho \quad (9.22)$$

となってしまうことを表している。式 (9.22) を式 (9.17)、式 (9.12) と組み合わせると、結局 $R(\rho)$ の解が二乗可積分条件を満たすことができない形 (9.10) に戻ってしまうことを示しており、無限級数が続く解は、物理的に意味のある解として採用できない。

³⁸ $l = 0$ のときの $r = 0$ 近傍での発散解は、 $1/r$ に比例するクーロンポテンシャルに加えて $\delta^{(3)}(\vec{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z)$ に比例するデルタ関数ポテンシャルが存在する場合の解である。

³⁹ たとえばガシオロウイツの教科書では説明なしに $s = l$ の解を採用しているが、ほんとうは上記の考察が必要であるので注意すること。猪木・川合の教科書には $s = l$ の解を採用する理由が説明してある。

結局、二乗可積分条件を満たす解として採用可能なのは、級数展開 (9.17) において L が有限の多項式に留まる場合、つまり、 $n_r = \lambda - l - 1$ がゼロまたは正の整数になって、式 (9.19) の漸化式で与えられる数列が次数 n_r 以上でゼロになってしまう場合のみに限られる。つまり、 λ はとびとびの値しかとることができず、量子化されることが分かる。 n_r は動径量子数と呼ばれ

$$n \equiv \lambda = n_r + l + 1 \quad (9.23)$$

は主量子数と呼ばれる。明らかに

1. 主量子数 n は $n \geq l + 1$ の整数
2. エネルギー固有値は、式 (9.7) から、

$$E = -\frac{\mu}{2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2} \quad (9.24)$$

と得られる。

3. 同一の主量子数 n には、いくつかの異なる状態が縮退している。たとえば、 $n = 3$ の状態には、 $l = 0$ の状態、 $l = 1$ の状態が3つ ($m = -1, 0, 1$)、 $l = 2$ の状態が5つ ($m = -2, -1, 0, 1, 2$) と、合計で9つの状態が縮退している。一般に、主量子数 n の状態には

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (9.25)$$

の縮退がある。おなじ l に属して m のみが異なる状態のエネルギー準位の縮退は3次元回転対称性の議論で説明できるが、水素原子でおきるような異なる l の状態のエネルギー準位の縮退を説明するのは容易ではない。このような対称性では予言できないような縮退をアクシデンタルな縮退と呼ぶ。⁴⁰

λ が整数 $n \geq l + 1$ のときの微分方程式 (9.18) は

$$\rho \frac{d^2 L}{d\rho^2} + (2l + 2 - \rho) \frac{dL}{d\rho} + (n - 1 - l)L = 0 \quad (9.26)$$

となる。これはラゲールの微分方程式と呼ばれ、その解はラゲールの陪多項式

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n-l-1} (-1)^{k+2l+1} \frac{[(n+l)!]^2 \rho^k}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!k!} \quad (9.27)$$

で与えられる。ラゲールの陪多項式の例をいくつか挙げておく。

$$\begin{aligned} L_1^1(\rho) &= -1, \\ L_2^1(\rho) &= -4 + 2\rho, \\ L_3^3(\rho) &= -6, \\ L_3^1(\rho) &= -18 + 18\rho - 3\rho^2, \\ L_4^3(\rho) &= -96 + 24\rho, \\ L_5^5(\rho) &= -120. \end{aligned}$$

⁴⁰ 実は、 $1/r$ の中心力ポテンシャル問題には、回転対称性 $SO(3)$ を拡張した $SO(4)$ 対称性があることが知られており、この一見アクシデンタルな縮退はその帰結である。この縮退はまた、因子化法 (ハミルトニアンを因数分解) の手法を用いても説明することができる。超対称性を持つ量子力学のハミルトニアンは、超荷の積に因数分解できるので、水素類似原子のこの縮退も超対称性と関連付けて議論される場合もある。 $SO(4)$ 対称性を含む力学的対称性 (ポテンシャルの動径方向の関数型に起因するハミルトニアンの対称性) の量子力学への帰結については、シッフの教科書に詳しい解説がある。(古典力学の場合にはゴールドスタインの教科書に Bertrand の定理として詳しく説明されている。) 倉本・江沢の量子力学の教科書では、 $SO(4)$ 対称性と超対称性の双方の見方で水素類似原子の縮退が論じられている。

ラゲール多項式、ラゲールの陪多項式の詳細は付録 E を参照のこと。

主量子数 n で軌道角運動量量子数 l の規格化された動径波動関数を表す表式を（証明抜きで）まとめしておく：

$$R_{nl}(r) = - \left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{1/2} \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^{3/2} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad (9.28)$$

ここで ρ は

$$\rho = \frac{2Z}{na_0} r \quad (9.29)$$

であり、 a_0 はボーア半径

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 \mu} \simeq 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (9.30)$$

を表す。

基底状態、第一励起状態、第二励起状態の動径波動関数 R_{nl} の具体形は

$$R_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}, \quad (9.31)$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/2a_0} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{Z}{a_0} r \right), \quad (9.32)$$

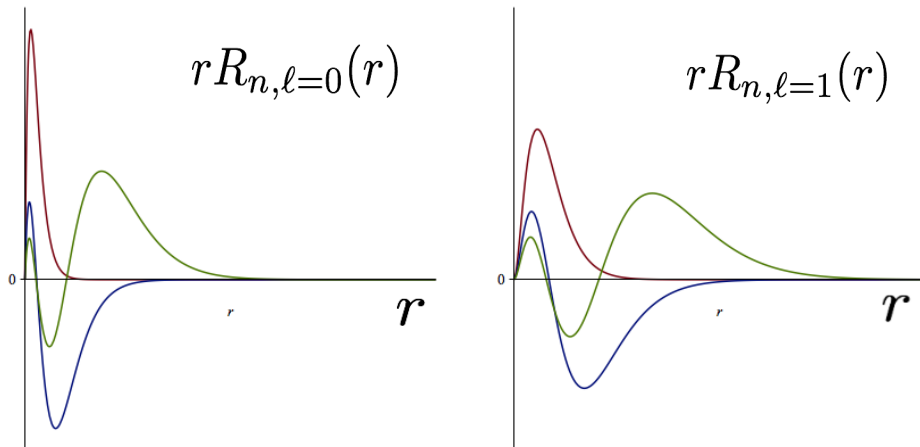
$$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0}, \quad (9.33)$$

$$R_{30} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2Z}{3a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/3a_0} \left(1 - \frac{2Z}{3a_0} r + \frac{1}{6} \left(\frac{2Z}{3a_0} r \right)^2 \right), \quad (9.34)$$

$$R_{31} = \frac{1}{3} \left(\frac{2Z}{3a_0} \right)^{5/2} r e^{-Zr/3a_0} \left(1 - \frac{1}{4} \frac{2Z}{3a_0} r \right), \quad (9.35)$$

$$R_{32} = \frac{1}{12\sqrt{5}} \left(\frac{2Z}{3a_0} \right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} \quad (9.36)$$

と得られる。この式から明らかなように、ボーア半径 a_0 は原子の拡がりのスケールを表している。 $l = 0, 1, 2$ の各場合について、動径関数 R_{nl} に r を掛けた関数の振る舞いを以下の図に示す。

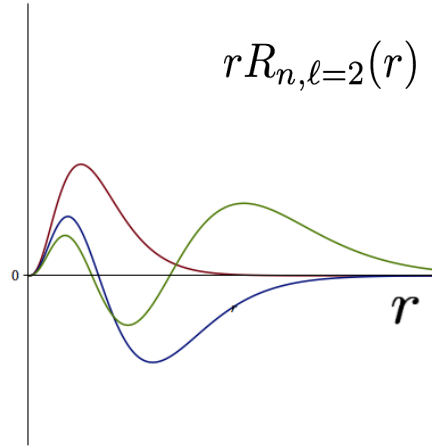


$l = 0, n = 0, 1, 2$ の場合の $rR_{nl}(r)$

$l = 1, n = 1, 2, 3$ の場合の $rR_{nl}(r)$

l	0	1	2	3	4	5	6
ラベル	s	p	d	f	g	h	i

表 1: 軌道角運動量子数のアルファベットによるラベル



$l = 2, n = 2, 3, 4$ の場合の $rR_{nl}(r)$

これらの結果について、注意すべき点を列挙する。

- 原点近傍での動径波動関数は r^l に比例しており、軌道角運動量が大きくなるほど原点付近での電子の存在確率が小さくなる。これは、軌道角運動量が大きいときに遠心力による有効斥力が生じていることとコンシステントである。
- 動径波動関数には $n_r = n - l - 1$ 個のノードが存在する。
- 基底状態における r の拡がりのスケールは

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty dr r^3 |R_{10}|^2$$

を計算すれば求まる。結果は

$$\langle r \rangle = \frac{3a_0}{2Z}$$

となり、 $Z = 1$ のときはほぼボーア半径のスケールである。

- 基底状態の束縛エネルギーと電子の相対論的静止エネルギー $m_e c^2$ との比較を行うと、

$$\frac{|E|}{m_e c^2} = \frac{1}{2} Z^2 \alpha^2, \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \quad (9.37)$$

が得られる。 α は微細構造定数と呼ばれる無次元量で、その大きさはおよそ

$$\frac{1}{\alpha} \simeq 137.04 \quad (9.38)$$

の量である。つまり、 Z があまり大きくなければ、束縛エネルギーは電子の静止エネルギーよりも十分小さいことがわかり、非相対論的量子力学の計算で良い結果が求まることが保証される。逆に Z が 100 程度の大きさの場合には、相対論的な効果が無視できなくなる。

軌道角運動量子数 $l = 0, 1, 2, \dots$ は、分光学での歴史的経緯から、それぞれ固有のアルファベットで、表 1 のようにラベルされることが多い。ここで、 s は “sharp”, p は “principal”, d は “diffuse”, f は “fundamental” の頭文字とのこと。 f 以降は単にアルファベットの順に並べられている。主量子数 $n = 1$ で $l = 0$ の軌道は $1s$ 軌道、主量子数 $n = 2$ で $l = 0$ の軌道は $2s$ 軌道、主量子数 $n = 2$ で $l = 1$ の軌道は $2p$ 軌道などと呼ばれる。

A 複素ベクトル空間と内積

内積

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij} \quad (\text{A.1})$$

によって規格直交化された N 個のベクトルの組

$$|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_N\rangle \quad (\text{A.2})$$

を考える。このベクトルの組と N 個の複素数 (ベクトルの成分)

$$v_1, v_2, \dots, v_N \quad (\text{A.3})$$

を用いて

$$\begin{aligned} |v\rangle &= |e_1\rangle v_1 + |e_2\rangle v_2 + \dots + |e_N\rangle v_N \\ &= \sum_{i=1}^N |e_i\rangle v_i \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

で与えられるベクトル $|v\rangle$ の集合 V は、ベクトルの和

$$|v\rangle + |w\rangle = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle (v_i + w_i) \quad (\text{A.5})$$

や複素数倍

$$c|v\rangle = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle (cv_i) \quad (\text{A.6})$$

の下で閉じており、(N 次元) 複素ベクトル空間となっている。

またふたつのベクトル $|v\rangle, |w\rangle$ の組に対し、 $\langle v|w\rangle$ を

$$\langle v|w\rangle = \sum_{i=1}^N v_i^* w_i \quad (\text{A.7})$$

と定義すれば、

(性質 1) 対称性

$$\langle v|w\rangle = (\langle w|v\rangle)^*$$

(性質 2) 正定値性

$$\langle v|v\rangle \geq 0.$$

ただし、 $\langle v|v\rangle = 0$ となるのは、 $|v\rangle = 0$ の場合のみ。

(性質 3) 線型性

$$\langle v|(a|w\rangle + b|z\rangle) = a\langle v|w\rangle + b\langle v|z\rangle$$

が成り立ち、 $\langle v|w\rangle$ は内積としての性質を持つことがわかる。内積構造を持つベクトル空間を内積空間と呼ぶ。

自乗可積分な関数 $v(\cdot)$ の集合（ヒルベルト空間）も和や複素数倍の下で閉じており、複素ベクトル空間になっていることがわかる。ヒルベルト空間における $\langle v|w \rangle$ を、式 (A.7) にならって

$$\langle v|w \rangle = \int dx v^*(x) w(x) \quad (\text{A.8})$$

と定義しよう。この内積が性質 (1~3) を満たすことは明らかであろう。つまり、ヒルベルト空間も内積空間である。式 (A.7) と式 (A.8) を比較すると、 N 次元ベクトル空間におけるベクトル $|v\rangle$ の i 番目成分 v_i には、ヒルベルト空間のベクトル $|v\rangle$ では、対応する関数 $v(\cdot)$ の座標点 x における関数値 $v(x)$ が対応することが分かる。

B エルミート行列の性質

量子力学での観測可能量に対応するエルミート演算子は、エルミート行列とよく似た性質を持っている。ここでは、2行2列のエルミート行列について、その性質をまとめることにする。一般次元の場合について拡張することは容易であろう。

B.1 行列の成分表示

2行2列の行列 A

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

を考えよう。 A_{ij} ($i, j = 1, 2$) を行列 A の成分表示と呼ぶ。成分表示を用いると、行列 A のトレースは

$$\text{tr}[A] = \sum_i A_{ii} \quad (\text{B.2})$$

と書き表すことができる。つまり、行列のトレースを取るには、その成分表示での左足と右足を揃えて和をとればよい。

次に、行列 A と同様に

$$B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

で与えられる行列 B を導入する。行列 A と行列 B の積の行列の成分表示は

$$(AB)_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj} \quad (\text{B.4})$$

である。行列 A の成分表示の右足と行列 B の左足を揃えて和をとることによって行列の積が得られることがわかる。

以上の事実から、

$$\text{tr}[AB] = \sum_{i,j} A_{ij} B_{ji} \quad (\text{B.5})$$

が得られる。このことからトレースに関する公式

$$\text{tr}[AB] = \text{tr}[BA] \quad (\text{B.6})$$

を得るのは容易であろう。

B.2 転置・複素共軛・エルミート共軛

式 (B.1) で与えられる行列 A の転置をとったものを

$${}^t A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} \\ A_{12} & A_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{B.7})$$

と書くことにする。行列 ${}^t A$ の成分表示は

$$({}^t A)_{ij} = A_{ji} \quad (\text{B.8})$$

で与えられる。

式 (B.1) で与えられる行列 A の各成分について複素共軛をとったものを

$$A^* = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{12}^* \\ A_{21}^* & A_{22}^* \end{pmatrix} \quad (\text{B.9})$$

と表すことにする。その成分表示は

$$(A^*)_{ij} = A_{ji}^* \quad (\text{B.10})$$

で与えられる。

次に、転置と複素共軛の両方を行うことを考える。

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* \end{pmatrix}. \quad (\text{B.11})$$

行列 A^\dagger を、行列 A のエルミート共軛とよぶ。その成分表示は

$$(A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^* \quad (\text{B.12})$$

で与えられる。

B.3 エルミート行列

行列 A のエルミート共軛 A^\dagger がもとの行列に一致する場合、つまり、

$$A = A^\dagger \quad (\text{B.13})$$

のとき、行列 A はエルミート行列と呼ばれる。行列 A がエルミート行列の場合、行列 A の成分表示は

$$A_{ij} = A_{ji}^* \quad (\text{B.14})$$

の性質を満たす。

以下では、エルミート行列 A の固有値 a_n ($n = 1, 2$) と固有ベクトル

$$\vec{v}_n = \begin{pmatrix} v_{1n} \\ v_{2n} \end{pmatrix}, \quad (n = 1, 2) \quad (\text{B.15})$$

の満たす性質を考察しよう。固有ベクトル \vec{v}_n は

$$1 = \sum_i v_{in}^* v_{in} \quad (\text{B.16})$$

として規格化されているものとする。

まず最初に、固有値方程式

$$A\vec{v}_n = a_n\vec{v}_n \quad (\text{B.17})$$

を成分表示で書き下してみる。

$$\sum_j A_{ij}v_{jn} = a_nv_{in}. \quad (\text{B.18})$$

式 (B.18) の両辺に v_{in}^* をかけ、 i で和をとると

$$\sum_{i,j} A_{ij}v_{in}^*v_{jn} = a_n \sum_i v_{in}^*v_{in}. \quad (\text{B.19})$$

となり、

$$a_n = \sum_{i,j} A_{ij}v_{in}^*v_{jn} \quad (\text{B.20})$$

が得られる。ここで規格化の条件 (B.16) を用いた。式 (B.20) から、行列 A がエルミート行列のとき

$$a_n^* = a_n \quad (\text{B.21})$$

であること、つまり、固有値が実数であることを示すことは容易である。

次に、(B.18) の複素共軛をとって

$$\sum_j A_{ij}^*v_{jn}^* = a_nv_{in}^*. \quad (\text{B.22})$$

としてみよう。ここで、固有値 a_n が実数であることを用いて、 $a_n^* = a_n$ とした。式 (B.22) において、 A がエルミート行列であることを用いると

$$\sum_j v_{jn}^*A_{ji} = v_{in}^*a_n \quad (\text{B.23})$$

が得られることに注意しておく。

式 (B.18) と式 (B.23) を用いると

$$\sum_{i,j} v_{in'}^*A_{ij}v_{jn} \quad (\text{B.24})$$

をふた通りの方法で計算することができる。

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} v_{in'}^*A_{ij}v_{jn} &= a_n \sum_i v_{in'}^*v_{in} \\ &= a_{n'} \sum_i v_{in'}^*v_{in}. \end{aligned}$$

つまり、固有値 a_n と $a_{n'}$ が等しくないとき、固有ベクトル \vec{v}_n と $\vec{v}_{n'}$ は直交しているのである。固有ベクトルの規格化まで含めてこの事情を式で表すと、

$$\sum_i v_{in'}^*v_{in} = \delta_{nn'} \quad (\text{B.25})$$

となる。この事情は、量子力学において、エルミート演算子の固有状態が正規直交していることに対応している。

次のように、固有ベクトル \vec{v}_n を並べた行列 V

$$V = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{B.26})$$

を考えよう。行列 V のエルミート共軛は

$$V^\dagger = \begin{pmatrix} v_{11}^* & v_{21}^* \\ v_{12}^* & v_{22}^* \end{pmatrix} \quad (\text{B.27})$$

であり、固有ベクトルの正規直交性 (B.25) を用いると、

$$V^\dagger V = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.28})$$

であることは明らかである。つまり、行列 V の逆行列は V^\dagger で与えられることがわかる。このように逆行列がもとの行列のエルミート共軛で与えられる行列をユニタリ行列と呼ぶ。

行列 V を用いれば、固有値方程式 (B.18) を

$$AV = V \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.29})$$

のように書き直すことも可能である。この式の両辺に右から V^\dagger をかけることによって

$$A = V \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix} V^\dagger \quad (\text{B.30})$$

が得られることがわかる。つまり、エルミート行列 A はユニタリ行列を使って対角化できる。

最後に、 V^\dagger が V の逆行列であることのもうひとつの帰結

$$VV^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.31})$$

を考察しよう。成分表示を用いて式 (B.31) を書き直すと

$$\sum_n v_{in} v_{jn}^* = \delta_{ij} \quad (\text{B.32})$$

が得られる。これは、量子力学においては、状態の完全性関係の式に他ならない。

B.4 量子力学との類似

以下では、エルミート行列と量子力学におけるエルミート演算子の類似点について、その固有値、固有ベクトル、固有状態に着目してまとめておく。

固有値と固有ベクトル、固有値と固有状態

$$\sum_j A_{ij} v_{jn} = a_n v_{in} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{A}|u_n\rangle = a_n |u_n\rangle, \quad (\text{B.33})$$

$$\sum_i v_{in}^* A_{ij} = a_n v_{jn} \quad \Leftrightarrow \quad \langle u_n | \hat{A} = \langle u_n | a_n. \quad (\text{B.34})$$

固有ベクトルと固有状態の正規直交性

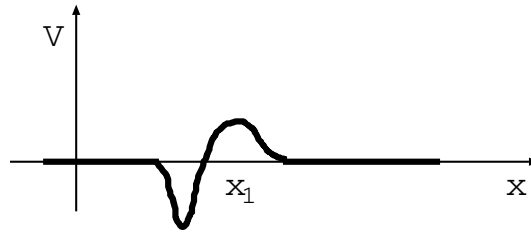
$$\sum_i v_{in}^* v_{in} = \delta_{nn'} \quad \Leftrightarrow \quad \langle u_{n'} | u_n \rangle = \delta_{nn'}. \quad (\text{B.35})$$

固有ベクトルと固有状態の完全性

$$\sum_n v_{in} v_{jn}^* = \delta_{ij} \quad \Leftrightarrow \quad \sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = \hat{1}. \quad (\text{B.36})$$

C 散乱行列 (S -行列) と転送行列 (M -行列)

1次元量子力学での散乱について、散乱行列 (S -行列) と転送行列 (M -行列) を用いた計算手法を紹介しよう。



上図のように $x = x_1$ の近傍に局在するポテンシャル V_1 を考える。つまり x_1 より十分左側あるいは十分右側の領域では、このポテンシャルは $V_1 = 0$ となっている。1次元量子力学の時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$Eu = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u \quad (\text{C.1})$$

を解いて、このように局在したポテンシャル $V = V_1$ による1次元量子力学での粒子散乱を考察してみよう。

点 $x = x_1$ より十分左側の領域ではポテンシャルは $V = 0$ であり、シュレディンガー方程式の解を

$$u = A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (\text{C.2})$$

と書くことができる。同様に点 $x = x_1$ より十分右側の領域でも

$$u = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad (\text{C.3})$$

である。

$x = x_1$ 近傍のシュレディンガー方程式を解くことができれば、式 (C.2) の解に表れる係数 A_0, B_0 と、式 (C.3) の係数 A_1, B_1 との間に線形の関係

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{C.4})$$

をつけることができる。この式に表れる行列 M_1 を転送行列と呼ぶ。

式 (C.4) はまた、

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.5})$$

の形に書き換えることができる。式 (C.5) において、右辺に表れる係数 A_0, B_1 は点 $x = x_1$ に向かって進行する波の係数であり、左辺に表れる A_1, B_0 は点 $x = x_1$ から外向きに拡がっていく波の係数であることに注意しよう。したがって、式 (C.5) で定義される行列 S は、 $x = x_1$ 近傍のポテンシャルによって引き起こされる散乱を記述する行列であり、散乱行列 (S -行列) と呼ばれる。

転送行列 M_1 が計算できたとき、具体的に S -行列を求めるには、

$$M_1 = \begin{pmatrix} M_{AA} & M_{AB} \\ M_{BA} & M_{BB} \end{pmatrix} \quad (\text{C.6})$$

と成分表記しておくことと便利である。この表記を用いて式 (C.4) の A_1, B_0 を、 A_0 と B_1 について解き直すと、 S -行列が

$$S = \frac{1}{M_{AA}} \begin{pmatrix} 1 & -M_{AB} \\ M_{BA} & M_{AA}M_{BB} - M_{BA}M_{AB} \end{pmatrix} \quad (\text{C.7})$$

の形で与えられることがわかる。

次に透過率や反射率と S -行列の関係を考える。 S 行列を次のように成分表記すると

$$S = \begin{pmatrix} S_{AA} & S_{AB} \\ S_{BA} & S_{BB} \end{pmatrix} \quad (\text{C.8})$$

$x = x_1$ の左側から右側へ透過する粒子の透過率 $T_{l \rightarrow r}$ や、左側から入射した粒子が左側に跳ね返る反射率 $R_{l \rightarrow l}$ 、さらには右側からの透過率 $T_{r \rightarrow l}$ と反射率 $R_{r \rightarrow r}$ は、 S -行列要素を用いて

$$T_{l \rightarrow r} = |S_{AA}|^2, \quad R_{l \rightarrow l} = |S_{BA}|^2, \quad T_{r \rightarrow l} = |S_{BB}|^2, \quad R_{r \rightarrow r} = |S_{AB}|^2 \quad (\text{C.9})$$

と求められることがわかる。

さらに、散乱の前後での確率の保存

$$|A_1|^2 + |B_0|^2 = |A_0|^2 + |B_1|^2 \quad (\text{C.10})$$

から、 S -行列はユニタリー行列

$$S^\dagger S = S S^\dagger = 1 \quad (\text{C.11})$$

であることが示される。このことより、 S -行列の固有値の絶対値が 1 であることがわかり、したがって、適当なユニタリー行列 U を用いて S -行列を対角化して

$$S = U^\dagger \begin{pmatrix} e^{2i\delta_0} & 0 \\ 0 & e^{2i\delta_1} \end{pmatrix} U \quad (\text{C.12})$$

と表すことができる。ここで、 δ_0, δ_1 は、この散乱の「位相のずれ」と呼ばれる実数パラメータである。

特にポテンシャル V が原点 $x = 0$ を中心とするパリティ対称性 $V(x) = V(-x)$ を持つ場合は、 U は

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{C.13})$$

の形で与えられ、 δ_0, δ_1 はそれぞれ、偶パリティ、奇パリティ散乱の「位相のずれ」となる。このときの S 行列は

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{2i\delta_0} + e^{2i\delta_1} & e^{2i\delta_0} - e^{2i\delta_1} \\ e^{2i\delta_0} - e^{2i\delta_1} & e^{2i\delta_0} + e^{2i\delta_1} \end{pmatrix} \\ &= e^{i(\delta_0 + \delta_1)} \begin{pmatrix} \cos(\delta_0 - \delta_1) & i \sin(\delta_0 - \delta_1) \\ i \sin(\delta_0 - \delta_1) & \cos(\delta_0 - \delta_1) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

の形になり、対応する M_1 は

$$M_1 = \frac{1}{\cos(\delta_0 - \delta_1)} \begin{pmatrix} e^{i(\delta_0 + \delta_1)} & -i \sin(\delta_0 - \delta_1) \\ i \sin(\delta_0 - \delta_1) & e^{-i(\delta_0 + \delta_1)} \end{pmatrix}$$

の形になる。したがって透過率と反射率は、

$$T_{l \rightarrow r} = T_{r \rightarrow l} = \cos^2(\delta_0 - \delta_1), \quad R_{l \rightarrow l} = R_{r \rightarrow r} = \sin^2(\delta_0 - \delta_1)$$

と位相のずれを用いて計算できることがわかる。

次に、ポテンシャルが形を変えずに a だけ位置を右に移動した場合

$$V(x) = V_1(x - a) \tag{C.14}$$

に、転送行列 M_{a1} がもとの M_1 からどのように変化するか考察しよう。そのためには、変数 $x_a = x - a$ を用いてシュレディンガー方程式を書き下すと、もとのポテンシャル $V_1(x)$ で変数を x としたときのシュレディンガー方程式と同一であることに着目すればよい。つまり、左側領域での波動関数を

$$u = A_{a0} e^{ikx_a} + B_{a0} e^{-ikx_a} \tag{C.15}$$

とし、右側領域での波動関数を

$$u = A_{a1} e^{ikx_a} + B_{a1} e^{-ikx_a} \tag{C.16}$$

とすると、係数間の関係は

$$\begin{pmatrix} A_{a0} \\ B_{a0} \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_{a1} \\ B_{a1} \end{pmatrix} \tag{C.17}$$

で与えられる。一方、 $x_a = x - a$ を用いて、解の形 (C.15) を、もともとの解の形と比較すると

$$A_{a0} = A_0 e^{ika}, \quad B_{a0} = B_0 e^{-ika} \tag{C.18}$$

であることがわかる。同様に

$$A_{a1} = A_1 e^{ika}, \quad B_{a1} = B_1 e^{-ika} \tag{C.19}$$

である。したがって、

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} M_1 \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \tag{C.20}$$

となり、ポテンシャルが a だけ右に移動した場合の転送行列 M_{a1} は、もとの転送行列 M_1 を用いて

$$M_{\Delta 1} = \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} M_1 \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \tag{C.21}$$

で与えられることが分かる。

最後に、ポテンシャル V が $x = x_1$ と $x = x_2$ の2箇所 ($x_1 < x_2$) にわかれて局在している場合を考察しよう。 x_1 近傍でのポテンシャルによる転送行列を M_1 とし、 x_2 近傍でのポテンシャルによる転送行列を M_2 とすると、この系全体の転送行列 M が

$$M = M_1 M_2 \tag{C.22}$$

で与えられることは明らかであろう。とくに同一の形の局在ポテンシャルが $x=0$ と $x=a>0$ に存在する場合、つまり、 a だけの距離をおいて局在ポテンシャルが繰り返される場合は

$$M = M_1 \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} M_1 \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \quad (\text{C.23})$$

となる。

D ブロツホの定理

周期 a の周期的ポテンシャル

$$V(x+a) = V(x) \quad (\text{D.1})$$

のもとでの 1 次元量子力学を考える。時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$Eu(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) \quad (\text{D.2})$$

の遠方で発散しない解 $u(x)$ は

$$u(x+a) = e^{iKa} u(x) \quad (\text{D.3})$$

の形で表される周期性を持つことが知られている (ブロツホの定理)。ここで K は x に依らない実数である。

この定理を証明するには、波動関数を a だけ移動させる演算子

$$\begin{aligned} \hat{D} &= \exp\left(i\frac{a}{\hbar}\hat{p}\right) \\ &= 1 + i\frac{a}{\hbar}\hat{p} - \frac{1}{2!}\left(\frac{a}{\hbar}\right)^2\hat{p}^2 + \dots \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

の状態

$$|u\rangle = \int dx |x\rangle u(x) \quad (\text{D.5})$$

への作用を考察すればよい。実際に演算子 \hat{D} が波動関数を a だけ移動させることは

$$\begin{aligned} \hat{D}|u\rangle &= \int dx |x\rangle \left(1 + a\frac{d}{dx} + \frac{1}{2!}a^2\frac{d^2}{dx^2} + \dots\right) u(x) \\ &= \int dx |x\rangle \left(u(x) + au'(x) + \frac{1}{2!}a^2u''(x) + \frac{1}{3!}a^3u'''(x) + \dots\right) \\ &= \int dx |x\rangle u(x+a) \end{aligned}$$

により示される。一方、ポテンシャル $V(x)$ が周期 a の周期関数であることから、

$$[\hat{D}, \hat{H}] = 0 \quad (\text{D.6})$$

であることがわかり、エネルギー固有状態 $|u\rangle$ は演算子 \hat{D} の固有状態でもあることが示される。

状態 $|u\rangle$ における \hat{D} の固有値を κ とおくと

$$\hat{D}|u\rangle = \kappa|u\rangle. \quad (\text{D.7})$$

つまり、

$$u(x+a) = \kappa u(x), \quad u(x-a) = \kappa^{-1}u(x) \quad (\text{D.8})$$

が示される。このことから \hat{D} をかける操作を n 回繰り返すと

$$u(x+na) = \kappa^n u(x), \quad u(x-na) = \kappa^{-n}u(x) \quad (\text{D.9})$$

となることがわかり、 $|\kappa| \neq 1$ の場合には、 x の無限遠方で波動関数が発散してしまう。逆にいえば、 κ の絶対値が 1 であること、つまり x に依らない実数 K を用いて

$$u(x+a) = e^{iKa}u(x) \quad (\text{D.10})$$

と書けることが証明できるのである。

ブロッホの定理の応用として、周期的デルタ関数ポテンシャル

$$V(x) = \sum_n \frac{\hbar^2 \lambda}{2ma} \delta(x+na) \quad (\text{D.11})$$

のもとでの質量 m の粒子の 1 次元量子力学を考えよう。ここで \sum_n はすべての整数 n についての和を表す。この周期的デルタ関数ポテンシャルはクローニツヒ・ペニー模型として知られており、この模型を研究することで、周期的な結晶構造中の電子状態の定性的な振る舞いを理解することができる。

波数 k を

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (\text{D.12})$$

とすると、このポテンシャルの下での領域 $-a < x < 0$ でのシュレディンガー方程式の解は、一般に

$$u(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx}, \quad \text{for } -a < x < 0 \quad (\text{D.13})$$

与えられる。一方、ブロッホの定理より、領域 $0 < x < a$ での解は

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{iKa}u(x-a) \\ &= Ae^{i(K-k)a}e^{+ikx} + Be^{i(K+k)a}e^{-ikx}, \quad \text{for } 0 < x < a \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

とならねばならない。

ブロッホの定理に表れる実数パラメータ K は、一般にエネルギー E に依存して決定されるパラメータである。周期的なポテンシャルは、結晶中で典型的に生じるため K は結晶波数と呼ばれる。次に、どのように結晶波数 K が決定されるかを考えよう。いまのポテンシャルの場合は、波数 k に応じてエネルギー E が決まるので、波数 k と結晶波数 K に関係をつければよい。そのために、点 $x=0$ における（デルタ関数ポテンシャルの存在の下での）波動関数の接続条件

$$\lim_{x \downarrow 0} u = \lim_{x \uparrow 0} u, \quad \lim_{x \downarrow 0} u' = \lim_{x \uparrow 0} u' + \frac{\lambda}{a}u(0)$$

を考える。解 (D.13) と (D.14) を上式に代入すると、

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} e^{i(K-k)a} & 0 \\ 0 & e^{i(K+k)a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (\text{D.15})$$

が得られる。ここで、行列 M は

$$M \equiv \begin{pmatrix} 1 + i\alpha & i\alpha \\ -i\alpha & 1 - i\alpha \end{pmatrix}, \quad \alpha \equiv \frac{\lambda}{2ka} \quad (\text{D.16})$$

で定義される行列である。式 (D.15) で、係数 A, B が非自明な解を持つためには、行列

$$M \begin{pmatrix} e^{i(K-k)a} & 0 \\ 0 & e^{i(K+k)a} \end{pmatrix} - 1 = \begin{pmatrix} (1 + i\alpha)e^{i(K-k)a} - 1 & i\alpha e^{i(K+k)a} \\ -i\alpha e^{i(K-k)a} & (1 - i\alpha)e^{i(K+k)a} - 1 \end{pmatrix}$$

の行列式

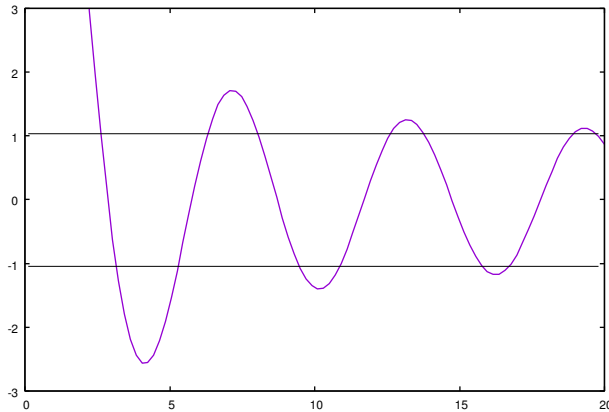
$$2e^{iKa} [\cos Ka - \cos ka - \alpha \sin ka]$$

がゼロでならねばならない。この条件から

$$\cos(Ka) = \cos(ka) + \frac{\lambda}{2ka} \sin(ka) \quad (\text{D.17})$$

が得られ、実数パラメータ K が波数 k に応じて決定されることが見て取れる。

式 (D.17) を吟味すると、波数 k の値によっては、対応する結晶波数 K が存在しない場合があることがわかる。実際、 $\lambda = 20$ のときに式 (D.17) の右辺を $z = ka$ についてプロットすると次ページに示すようなグラフが得られる。式 (D.17) の左辺が $-1 < \cos(Ka) < 1$ の範囲に制限されることより、このグラフの縦軸の値が 1 を超える領域や -1 よりも小さくなる領域では、波数 k に対応する結晶波数が存在せず、結果として、可能なエネルギー E にエネルギーギャップを生じる。これは、周期的なポテンシャルをもつ結晶中の電子状態にしばしば生じる現象である。



E 直交多項式

量子力学の具体的問題を計算するためには、ハミルトニアン演算子の固有値問題（時間に依存しないシュレディンガー方程式）を解くことが必要である。これらの固有状態はお互いに直交することから、波動関数がなんらかの直交多項式で表されることが多い。また、波動関数の言葉では、ハミルトニアン演算子が 2 階微分演算子であることから、これらの直交多項式を微分方程式の解として表現しておくことが必要である。最後に、これらの直交多項式を生成する母関数（生成関数）を知っていると、具体的な計算が著しく簡単になることが多い。

ここでは、調和振動子の計算で現れるエルミート多項式、角運動量の量子化で重要なルジャンドル多項式（およびその拡張としてのゲーゲンbauer多項式）、水素原子の動径方程式の解を記述するラゲール多項式について、その母関数はなにか、それらの具体的な形、満たすべき微分方程式、直交性の性質をまとめておく。

E.1 エルミート多項式

まず最初に、1次元調和振動子の量子力学で現れる直交多項式であるエルミート多項式について、少し詳しくその性質を調べよう。

エルミート多項式 $H_n(x)$ はその母関数

$$S(x, s) = e^{x^2} e^{-(x-s)^2} = e^{2xs-s^2} \quad (\text{E.1})$$

を用いて

$$H_n(x) = \left. \frac{\partial^n}{\partial s^n} S(x, s) \right|_{s=0} \quad (\text{E.2})$$

として定義される n 次多項式である。たとえば、 $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ の場合のエルミート多項式は

$$H_0 = 1, \quad (\text{E.3})$$

$$H_1 = 2x, \quad (\text{E.4})$$

$$H_2 = 4x^2 - 2, \quad (\text{E.5})$$

$$H_3 = 8x^3 - 12x, \quad (\text{E.6})$$

$$H_4 = 16x^4 - 48x^2 + 12, \quad (\text{E.7})$$

$$H_5 = 32x^5 - 160x^3 + 120x \quad (\text{E.8})$$

で与えられる。エルミート多項式 $H_n(x)$ を用いて母関数を表示すると

$$S(x, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(x) s^n \quad (\text{E.9})$$

となることに注意しておく。

次にエルミート多項式の満たすべき微分方程式（エルミートの微分方程式）を考察しよう。母関数 S を x で微分すると

$$\frac{\partial}{\partial x} S(x, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H'_n(x) s^n \quad (\text{E.10})$$

となる。母関数の定義式 (E.1) より

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} S(x, s) &= 2sS(x, s) \\ &= 2s \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(x) s^n \end{aligned}$$

であるが、この式を式 (E.10) の左辺に代入し、 s の各次数で比較すると

$$H'_n = \begin{cases} 2nH_{n-1} & \text{for } n \geq 1 \\ 0 & \text{for } n = 0 \end{cases} \quad (\text{E.11})$$

が得られる。同様に、母関数 S の s 微分から

$$2(x-s) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} s^n H_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} s^{n-1} H_n(x)$$

が得られ、この式の両辺を s の各次数で比較することで、エルミート多項式の漸化式

$$H_{n+1} = \begin{cases} 2xH_n - 2nH_{n-1} & \text{for } n \geq 1 \\ 2xH_0 & \text{for } n = 0 \end{cases} \quad (\text{E.12})$$

が得られる。多項式 H_0 と H_1 が求まると、上記の漸化式を適用することで任意の次数 (n) のエルミート多項式 H_n を構成できることに注意しておく。

式 (E.11) を用いると、 $n \geq 1$ なる n について、

$$H_n = \frac{1}{2(n+1)} H'_{n+1}, \quad H_{n-1} = \frac{1}{4n(n+1)} H''_{n+1},$$

を示すことができる。これらの式を式 (E.12) の $n \geq 1$ の場合の右辺に代入すると

$$H''_{n+1} - 2xH_{n+1} + 2(n+1)H_{n+1} = 0$$

を得る。このようにして $n \geq 2$ の場合についてエルミートの微分方程式

$$H''_n - 2xH'_n + 2nH_n = 0 \quad (\text{E.13})$$

が得られる。一方、 H_1 と H_0 については、式 (E.3) と式 (E.4) でその具体的な形が分かっているが、これらも微分方程式 (E.13) を満たしている。つまり、すべての $n \geq 0$ について、エルミート多項式がエルミートの微分方程式 (E.13) を満たすことが分かる。

次に積分

$$I_{nn'} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_{n'}(x) \quad (\text{E.14})$$

を考察しよう。 $n \neq n'$ のとき、この積分がゼロになること (エルミート多項式の直交性) は、以下のようにして容易に証明できる。まず最初に、部分積分のテクニックを使って、任意の多項式 $f(x)$, $g(x)$ について、等式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} f(x) \left[\frac{d}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} \right] g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} g(x) \left[\frac{d}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} \right] f(x) \quad (\text{E.15})$$

を証明する。次にエルミートの微分方程式 (E.13) とさっき証明した等式 (E.15) を使って

$$\begin{aligned} 2n'I_{nn'} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n \left[\frac{d}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} \right] H_{n'} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_{n'} \left[\frac{d}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} \right] H_n \\ &= 2nI_{nn'} \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

を得る。 $n \neq n'$ のときに $I_{nn'} = 0$ であることはもはや明らかであろう。

$n = n'$ のときの値まで含めて積分 $I_{nn'}$ を評価するには、母関数の積分

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} S(x, t) S(x, s) \quad (\text{E.17})$$

を計算するのが便利である。母関数 S のエルミート多項式を使った展開式 (E.9) を用いると

$$I = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{s^n t^{n'}}{n! n'} I_{nn'} \quad (\text{E.18})$$

であることが示される。一方で、ガウス積分の公式を用いて積分 (E.17) を評価して

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2 + 2xs - s^2 + 2xt - t^2} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-(x-s-t)^2 + 2st} = \sqrt{\pi} e^{2st} \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!} \end{aligned} \quad (\text{E.19})$$

を得る。式 (E.18) と式 (E.19) で s, t の各次数を比較して、

$$I_{nn'} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_{n'}(x) = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nn'} \quad (\text{E.20})$$

と求められた。

最後に、エルミート多項式的具体形を求めるのに便利な公式

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (\text{E.21})$$

を紹介しよう。この公式を証明するには、

$$\frac{\partial^n}{\partial s^n} S(x, s) = e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(s-x)^2} = (-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-(x-s)^2}$$

とエルミート多項式の定義式 (E.2) を用いればよい。

E.2 ルジャンドル多項式

球面調和関数 Y_{lm} において $m = 0$ の結果を与えるルジャンドル多項式 $P_l(z)$ について駆け足で紹介しよう。ここで z は、球面調和関数 Y_{lm} において、球座標表示での $\cos \theta$ に対応する変数である。

ルジャンドル多項式 $P_l(z)$ の母関数は、

$$T(z, s) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2sz + s^2}} \quad (\text{E.22})$$

で与えられ、この母関数を s で冪展開することによって

$$T(z, s) = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(z) s^l \quad (\text{E.23})$$

としてルジャンドル多項式 P_l を求めることができる。この多項式が l 次の多項式になることは、この構成方法から明らか。たとえば、 $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ の場合のルジャンドル多項式は

$$P_0(z) = 1, \quad (\text{E.24})$$

$$P_1(z) = z, \quad (\text{E.25})$$

$$P_2(z) = \frac{1}{2}(3z^2 - 1), \quad (\text{E.26})$$

$$P_3(z) = \frac{1}{2}(5z^3 - 3z), \quad (\text{E.27})$$

$$P_4(z) = \frac{1}{8}(35z^4 - 30z^2 + 3), \quad (\text{E.28})$$

$$P_5(z) = \frac{1}{8}(63z^5 - 70z^3 + 15z) \quad (\text{E.29})$$

で与えられる。とくに、 $z = 1$ でのルジャンドル多項式の値が必ず

$$P_l(z = 1) = 1 \quad (\text{E.30})$$

となることに注意しておく。

この母関数 $T(z, s)$ を用いると、ルジャンドル陪関数

$$P_l^m(z) = (1 - z^2)^{m/2} \frac{d^m}{dz^m} P_l(z) \quad (\text{E.31})$$

が

$$\sum_{l=m}^{\infty} P_l^m(z) s^l = (1-z^2)^{m/2} \frac{\partial^m}{\partial z^m} T(z, s) \quad (\text{E.32})$$

と計算できることは明らかであろう。

エルミート多項式のときの式 (E.11) に対応して、ルジャンドル多項式では

$$(1-z^2)P_l' = \begin{cases} -lzP_l + lP_{l-1} & \text{for } l \geq 1 \\ 0 & \text{for } l = 0 \end{cases} \quad (\text{E.33})$$

が成り立つことが示される。同様に、エルミート多項式の場合の式 (E.12) に対応して、漸化式

$$(l+1)P_{l+1} = \begin{cases} (2l+1)zP_l - lP_{l-1}, & \text{for } l \geq 1 \\ zP_0 & \text{for } l = 0 \end{cases} \quad (\text{E.34})$$

が得られる。

母関数 $T(z, s)$ が偏微分方程式

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[(1-z^2) \frac{\partial}{\partial z} T \right] + \left[s^2 \frac{\partial^2}{\partial s^2} + 2s \frac{\partial}{\partial s} \right] T = 0$$

を満たすことを示すことができる。この式を s について冪展開し、各次数の係数を比較することで、ルジャンドル多項式の満たす微分方程式

$$\frac{d}{dz} \left[(1-z^2) \frac{dP_l}{dz} \right] + l(l+1)P_l = 0 \quad (\text{E.35})$$

を得ることができる。微分方程式 (E.35) はルジャンドルの微分方程式と呼ばれる微分方程式である。この微分方程式は、磁気量子数がゼロ ($m=0$) の場合に角運動量演算子 $(\vec{L}^{\text{op}})^2$ の固有値問題を与える微分方程式

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y \right] = l(l+1)Y \quad (\text{E.36})$$

に対応するものとなっている。このことは、変数変換 $z = \cos \theta$ から得られる関係

$$\frac{d}{dz} = \frac{d\theta}{dz} \frac{d}{d\theta} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta}, \quad (\text{E.37})$$

を用いて、式 (E.35) に現れる微分演算子を

$$\frac{d}{dz} \left[(1-z^2) \frac{d}{dz} f \right] = \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left[\sin \theta \frac{d}{d\theta} f \right] \quad (\text{E.38})$$

と書き直してやれば示すことができる。

エルミート多項式のときと同様に、 l の異なるルジャンドル多項式はある種の直交性を示す。部分積分を 2 回使うことで

$$\int_{-1}^{+1} dz P_{l'}(z) \frac{d}{dz} \left[(1-z^2) \frac{d}{dz} P_l(z) \right] = \int_{-1}^{+1} dz P_l(z) \frac{d}{dz} \left[(1-z^2) \frac{d}{dz} P_{l'}(z) \right]$$

であることを示すのは容易であろう。この式とルジャンドルの微分方程式 (E.35) を用いれば、直交性の式

$$\int_{-1}^{+1} dz P_l(z) P_{l'}(z) = 0, \quad \text{for } l \neq l' \quad (\text{E.39})$$

は簡単に示される。ルジャンドル多項式の母関数の式 (E.22), (E.23) と、ルジャンドル多項式の直交性 (E.39) を用いると

$$\int_{-1}^{+1} dz \frac{1}{1-2zs+s^2} = \sum_{l=0}^{\infty} \int_{-1}^{+1} dz |P_l(z)|^2 s^{2l}$$

が得られる。この式の左辺の積分は簡単に実行できて

$$\frac{1}{s} \ln \frac{1+s}{1-s} = \sum_{l=0}^{\infty} \int_{-1}^{+1} dz |P_l(z)|^2 s^{2l}$$

であることがわかり、左辺を s について冪展開することで

$$\int_{-1}^{+1} dz |P_l(z)|^2 = \frac{2}{2l+1}$$

が得られる。この結果をルジャンドル多項式の直交性 (E.39) とまとめて、規格直交関係の式として

$$\int_{-1}^{+1} dz P_l(z) P_{l'}(z) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (\text{E.40})$$

を得る。

最後に、ルジャンドル多項式を求めるのに便利なロドリゲスの公式

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2 - 1)^l \quad (\text{E.41})$$

を (証明なしで) 紹介しておく。

E.3 ゲーゲンバウアー多項式

ルジャンドル多項式の母関数 (E.22) を一般化した母関数

$$T^{(\nu)}(z, s) = \frac{1}{(1-2sz+s^2)^\nu} \quad (\text{E.42})$$

を冪展開し、

$$T^{(\nu)}(z, s) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(\nu)}(z) s^n \quad (\text{E.43})$$

によって定義される $C_n^{(\nu)}(z)$ を考えよう。たとえば、 $n = 0, 1, 2, 3$ の場合は

$$C_0^{(\nu)} = 1, \quad (\text{E.44})$$

$$C_1^{(\nu)} = 2\nu z, \quad (\text{E.45})$$

$$C_2^{(\nu)} = 2\nu(\nu+1)z^2 - \nu \quad (\text{E.46})$$

$$C_3^{(\nu)} = \frac{4}{3}\nu(\nu+1)(\nu+2)z^3 - 2\nu(\nu+1)z \quad (\text{E.47})$$

で与えられる。

この多項式 $C_n^{(\nu)}(z)$ はゲーゲンバウアー多項式、あるいは超球多項式 (ultraspherical polynomials) と呼ばれ、 $\nu = 1/2$, $n = l$ の場合は

$$P_l(z) = C_{n=l}^{(\nu=1/2)}(z) \quad (\text{E.48})$$

となり、ルジャンドル多項式 $P_l(z)$ と一致する。式 (E.32) で与えられるルジャンドル陪関数もゲーゲンバウアー多項式を用いて

$$P_l^m(z) = \frac{(2m)!}{2^m m!} (1-z^2)^{m/2} C_{n=l-m}^{(\nu=m+1/2)}(z) \quad (\text{E.49})$$

と表示することができる。

エルミート多項式やルジャンドル多項式の場合と同様のやり方で、ゲーゲンバウアー多項式の漸化式が得られ、

$$(n+1)C_{n+1}^{(\nu)} = \begin{cases} 2(n+\nu)zC_n^{(\nu)}(z) - (n-1+2\nu)C_{n-1}^{(\nu)}(z) & \text{for } n \geq 1 \\ 2\nu z C_0^{(\nu)}(z) & \text{for } n = 0 \end{cases} \quad (\text{E.50})$$

であることがわかる。ゲーゲンバウアー多項式の微分が

$$\frac{d^m}{dz^m} C_n^{(\nu)}(z) = 2^m \nu(\nu+1) \cdots (\nu+m-1) C_{n-m}^{(\nu+m)}(z) \quad (\text{E.51})$$

であることを示すことも容易であろう。

ゲーゲンバウアー多項式 $C_n^{(\nu)}(z)$ は微分方程式

$$(1-z^2)^{-\nu+1/2} \frac{d}{dz} \left[(1-z^2)^{\nu+1/2} \frac{d}{dz} C_n^{(\nu)} \right] + n(n+2\nu)C_n^{(\nu)} = 0 \quad (\text{E.52})$$

を満たす。式 (E.52) はゲーゲンバウアーの微分方程式と呼ばれる微分方程式である。

直交性と規格化は

$$\int_{-1}^{+1} dz (1-z^2)^{\nu-1/2} C_n^{(\nu)}(z) C_{n'}^{(\nu)}(z) = \frac{\pi \Gamma(n+2\nu)}{2^{2\nu-1} (n+\nu) n! [\Gamma(\nu)]^2} \delta_{nn'} \quad (\text{E.53})$$

で与えられる。ここで Γ はガンマ関数

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} d\xi \xi^{x-1} e^{-\xi}, \quad \text{for } x > 0 \quad (\text{E.54})$$

である。 Γ は

$$\begin{aligned} \Gamma(x+1) &= \int_0^{\infty} d\xi \xi^x e^{-\xi} = - \int_0^{\infty} d\xi \xi^x \frac{d}{d\xi} e^{-\xi} \\ &= - \xi^x e^{-\xi} \Big|_{\xi=0}^{\infty} + x \int_0^{\infty} d\xi \xi^{x-1} e^{-\xi} = x\Gamma(x) \end{aligned}$$

と計算すればわかるように

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \quad (\text{E.55})$$

との性質をもつ。さらに

$$\Gamma(1) = \int_0^{\infty} d\xi e^{-\xi} = 1$$

なので、その値は非負の整数 n について、階乗の記号を用いて

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (\text{E.56})$$

と計算される。また $x = 1/2$ のときの Γ の値として、積分変数を $\xi = \sqrt{X}$ と変数変換することで

$$\Gamma(1/2) = 2 \int_0^{\infty} dX e^{-X^2} = \sqrt{\pi}$$

が得られるので、 x 半整数の場合の Γ の値は

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma(3/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad \Gamma(5/2) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}, \quad \dots \quad (\text{E.57})$$

と求められる。これらの式を用いれば、ゲーゲンバウアー多項式の直交性・規格化の式 (E.53) が、 $\nu = 1/2$ の場合にルジャンドル多項式の直交性・規格化の式 (E.40) に帰着することを確認するのはたやすい。

ゲーゲンバウアー多項式を求めるためのロドリゲスの公式は以下のとおり。

$$C_n^{(\nu)}(z) = \frac{(-2)^n \Gamma(n+\nu)\Gamma(n+2\nu)}{n! \Gamma(\nu)\Gamma(2n+2\nu)} (1-z^2)^{-\nu+1/2} \frac{d^n}{dz^n} \left[(1-z^2)^{n+\nu-1/2} \right]. \quad (\text{E.58})$$

E.4 ラゲール多項式

水素原子の動径波動関数は、ラゲールの陪多項式を用いて表される。ラゲールの陪多項式の説明をする前に、そのもととなるラゲール多項式について解説しよう。

エルミート多項式、ルジャンドル多項式の場合と同様に、ラゲール多項式についても、母関数

$$U(\rho, s) = \frac{\exp\left(-\rho \frac{s}{1-s}\right)}{1-s} \quad (\text{E.59})$$

を用いた母関数表示

$$U(\rho, s) = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{1}{q!} L_q(\rho) s^q \quad (\text{E.60})$$

が知られている。愚直に計算していけば、いろいろな q についてラゲール多項式を求めるのは容易である。たとえば

$$L_0 = 1, \quad (\text{E.61})$$

$$L_1 = 1 - \rho, \quad (\text{E.62})$$

$$L_2 = 2 - 4\rho + \rho^2, \quad (\text{E.63})$$

$$L_3 = 6 - 18\rho + 9\rho^2 - \rho^3, \quad (\text{E.64})$$

$$L_4 = 24 - 96\rho + 72\rho^2 - 16\rho^3 + \rho^4, \quad (\text{E.65})$$

$$L_5 = 120 - 600\rho + 600\rho^2 - 200\rho^3 + 25\rho^4 - \rho^5. \quad (\text{E.66})$$

エルミート多項式の場合の式 (E.11)、式 (E.12) に対応して、ラゲール多項式では

$$L'_q - qL'_{q-1} = -qL_{q-1} \quad \text{for } q \geq 1 \quad (\text{E.67})$$

$$L'_0 = 0 \quad \text{for } q = 0 \quad (\text{E.68})$$

および

$$L_{q+1} = \begin{cases} (2q+1-\rho)L_q - q^2L_{q-1} & \text{for } q \geq 1 \\ (1-\rho)L_0 & \text{for } q = 0 \end{cases} \quad (\text{E.69})$$

が得られ、これらの結果から、ラゲール多項式が微分方程式

$$\rho L''_q + (1-\rho)L'_q + qL_q = 0 \quad (\text{E.70})$$

を満たすことを示すことができる。微分方程式 (E.70) はラゲールの微分方程式とよばれる。\$q \neq q'\$ のときの直交性は

$$\int_0^\infty d\rho e^{-\rho} L_q(\rho) L_{q'}(\rho) = (q!)^2 \delta_{qq'} \quad (\text{E.71})$$

と表される。計算に便利なロドリゲスの公式

$$L_q(\rho) = e^\rho \frac{d^q}{d\rho^q} (e^{-\rho} \rho^q) \quad (\text{E.72})$$

もよく知られている。

次にラゲールの陪多項式

$$L_q^p(\rho) = \frac{d^p}{d\rho^p} L_q(\rho) \quad (\text{E.73})$$

に話題を移そう。ラゲール多項式は \$L_q\$ は \$q\$ 次多項式なので、その陪多項式 \$L_q^p\$ は \$(q-p)\$ 次多項式であることに注意。ラゲールの微分方程式 (E.70) を \$p\$ 階微分することで、ラゲールの陪多項式の従う微分方程式

$$\rho(L_q^p)'' + (1+p-\rho)(L_q^p)' + (q-p)L_q^p = 0 \quad (\text{E.74})$$

が得られる。式 (E.74) もまたラゲールの微分方程式と呼ばれる。この式で \$p = 2l + 1\$, \$q = n + l\$ ととれば、水素類似原子の動径方程式と同じ微分方程式になることに注意してほしい。

ラゲールの陪多項式の母関数も式 (E.59) を \$\rho\$ で \$p\$ 階微分して得られる。

$$U_p(\rho, s) = \frac{(-s)^p \exp\left(-\rho \frac{s}{1-s}\right)}{(1-s)^{p+1}}, \quad (\text{E.75})$$

$$U_p(\rho, s) = \sum_{q=p}^{\infty} \frac{1}{q!} L_q^p(\rho) s^q. \quad (\text{E.76})$$

ラゲールの陪多項式も一種の直交多項式であり、\$q \neq q'\$ の場合、次の積分がゼロになることを示すことができる。

$$\int_0^\infty d\rho e^{-\rho} \rho^p L_q^p(\rho) L_{q'}^p(\rho) = \frac{(q!)^3}{(q-p)!} \delta_{qq'} \quad (\text{E.77})$$

F コヒーレント状態

F.1 調和振動子の復習

ハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \quad (\text{F.1})$$

で与えられる 1次元量子力学の問題は、エネルギー量子 \$\hbar\omega\$ の生成演算子 \$\hat{a}^\dagger\$ と消滅演算子 \$\hat{a}\$ を用いて見通しよく解くことができる。ここで、

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right), \quad \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right), \quad (\text{F.2})$$

であり、それらの交換関係は、\$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\$ を用いて

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (\text{F.3})$$

と求められる。さらに、ハミルトニアンが

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{F.4})$$

となることに注意しておく。

演算子法による解法では、エネルギー固有値が最小となる基底状態 $|0\rangle$ は、条件

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad (\text{F.5})$$

を満たす状態として与えられ、 n 番目の励起状態 $|n\rangle$ は

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (\text{F.6})$$

と求められる。これらエネルギー固有状態のエネルギー固有値は

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (\text{F.7})$$

である。式 (F.6) からは、生成・消滅演算子を用いてエネルギー準位を上げ下げするときの規格化定数が

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (\text{F.8})$$

で与えられることも見て取れる。

F.2 量子ゆらぎ Δx と Δp

次に、調和振動子のこれらエネルギー固有状態での、位置と運動量の不確定性を評価する。生成・消滅演算子の定義式 (F.2) より、位置演算子 \hat{x} と運動量演算子 \hat{p} が

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (\text{F.9})$$

と書けることに注意しておく。

エネルギー固有状態 $|n\rangle$ における位置と運動量の期待値が

$$\langle n|\hat{x}|n\rangle = \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0 \quad (\text{F.10})$$

となることは、状態の直交性

$$\langle n_1|n_2\rangle = \delta_{n_1 n_2} \quad (\text{F.11})$$

より明らかであろう。

したがって、状態 $|n\rangle$ における位置の不確定性（量子ゆらぎ） Δx_n を求めるには、

$$\begin{aligned} (\Delta x_n)^2 &= \langle n|\hat{x}^2|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger)|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (2n + 1) \end{aligned} \quad (\text{F.12})$$

と計算すればよい。ここで、2行目から3行目の式変形では状態の直交性を用い、3行目から4行目への変形には式(F.8)を用いた。運動量の不確定性(量子ゆらぎ)も同様に

$$\begin{aligned}
 (\Delta p_n)^2 &= \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle \\
 &= \frac{\hbar m \omega}{2} \langle n | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 | n \rangle \\
 &= \frac{\hbar m \omega}{2} \langle n | (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) | n \rangle \\
 &= \frac{\hbar m \omega}{2} (2n + 1)
 \end{aligned} \tag{F.13}$$

と求められ、その積が

$$(\Delta x_n)^2 (\Delta p_n)^2 = \frac{\hbar^2}{4} (2n + 1)^2 \tag{F.14}$$

と計算できる。

式(F.14)の結果は、エネルギー固有状態のうち、基底状態 $|0\rangle$ のみがハイゼンベルグの不確定性関係

$$\Delta x \Delta y \geq \frac{1}{2} \hbar \tag{F.15}$$

の下限を与える最小不確定性状態であり、励起準位 n が大きいほど不確定性が増していくことを示している。

一般に、最小不確定性状態の波動関数 u は、

$$u(x) = C \exp\left(-\frac{1}{2} \kappa (x - \xi)^2\right) \tag{F.16}$$

の形のガウス分布関数で与えられることが知られている。ここで、 C は規格化の定数。 κ は正の実定数であり、 ξ は複素数パラメータである。

前節の結果は、基底状態の波動関数 $u_0(x)$ のみが

$$u_0(x) = A_0 \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) \tag{F.17}$$

となってガウス分布関数の形をしており、励起状態の波動関数 $u_n(x)$ ($n \geq 1$)がガウス分布関数ではなかった事実と整合している。以降の節では、基底状態以外の最小不確定性状態を演算子法を用いて具体的に構成し、その性質を調べていこう。

F.3 コヒーレント状態

波動関数をガウス分布関数に保ったまま基底状態を変形できれば、基底状態以外の最小不確定性状態を構成できる。ひとつの例として、 \bar{x} を実数パラメータとし、

$$\hat{T}(\bar{x}) = \exp\left(\frac{\bar{x}}{i\hbar} \hat{p}\right) \tag{F.18}$$

で与えられる並進変換を考えてみよう。式(F.18)で与えられる演算子が並進変換であることは、任意の状態

$$|u\rangle = \int dx |x\rangle u(x)$$

に対して

$$\begin{aligned}
\hat{T}(\bar{x})|u\rangle &= \int dx|x\rangle \exp\left(-\bar{x}\frac{d}{dx}\right)u(x) \\
&= \int dx|x\rangle \left[1 - \bar{x}\frac{d}{dx} + \frac{1}{2}\bar{x}^2\left(\frac{d}{dx}\right)^2 - \frac{1}{3!}\bar{x}^3\left(\frac{d}{dx}\right)^3 + \dots\right]u(x) \\
&= \int dx|x\rangle \left[u(x) - \bar{x}u'(x) + \frac{1}{2}\bar{x}^2u''(x) - \frac{1}{3!}\bar{x}^3u'''(x) + \dots\right] \\
&= \int dx|x\rangle u(x - \bar{x})
\end{aligned}$$

と作用することから理解できるであろう。したがって、状態

$$\hat{T}(\bar{x})|0\rangle$$

の波動関数を、式 (F.17) で与えられた基底状態波動関数 u_0 を用いて

$$u(x) = u_0(x - \bar{x}) = C_0 \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}(x - \bar{x})^2\right) \quad (\text{F.19})$$

と書き下すことができることがわかる。この状態は明らかに最小不確定性状態の例を与えている。演算子 $\hat{T}(\bar{x})$ がユニタリー

$$(\hat{T}(\bar{x}))^\dagger \hat{T}(\bar{x}) = \hat{T}(\bar{x})(\hat{T}(\bar{x}))^\dagger = 1$$

であることにも注意しよう。このことから、 $\hat{T}(\bar{x})|0\rangle$ の規格化も自動的にであることがわかる。生成・消滅演算子を用いると、並進変換の演算子が

$$\hat{T}(\bar{x}) = \exp\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\bar{x}\hat{a}^\dagger - \bar{x}\hat{a})\right) \quad (\text{F.20})$$

と表されることにも注意しておく。

最小不確定性状態を表す波動関数 (F.16) でのパラメータ ξ は任意の複素数でよかったことに対し、基底状態を並進変換 $\hat{T}(\bar{x})$ で変換して作られる状態の波動関数 (F.19) では、対応するパラメータ \bar{x} の取りうる値は実数に限られてしまう。単純に式 (F.18) に表れるパラメータ \bar{x} を複素数にするとユニタリー性を満たさなくなってしまうので、式 (F.18) を参考にして、複素パラメータ η をもつ演算子 (変位演算子)

$$\hat{T}_\eta \equiv \exp(\eta\hat{a}^\dagger - \eta^\dagger\hat{a}) \quad (\text{F.21})$$

を定義してみよう。変位演算子は、 η を実数にとると並進変換 $\hat{T}(\bar{x} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\eta)$ に帰着することに注意。

変位演算子 \hat{T}_η を基底状態 $|0\rangle$ に作用させることによって複素パラメータ ξ に中心をもつガウス分布関数型の波動関数をもつ状態

$$|\eta\rangle \equiv \hat{T}_\eta|0\rangle \quad (\text{F.22})$$

が構成できる。このことを示すには、変位演算子によって消滅演算子 \hat{a} が

$$\begin{aligned}
\hat{T}_\eta\hat{a}\hat{T}_\eta^\dagger &= \hat{a} + [(\eta\hat{a}^\dagger - \eta^\dagger\hat{a}), \hat{a}] + \frac{1}{2}[(\eta\hat{a}^\dagger - \eta^\dagger\hat{a}), [(\eta\hat{a}^\dagger - \eta^\dagger\hat{a}), \hat{a}]] + \dots \\
&= \hat{a} - \eta
\end{aligned} \quad (\text{F.23})$$

と変換されることに着目すればよい。同様に、生成演算子 \hat{a}^\dagger は

$$\hat{T}_\eta\hat{a}^\dagger\hat{T}_\eta^\dagger = \hat{a}^\dagger - \eta^\dagger \quad (\text{F.24})$$

と変換されることにも注意しておく。 $0 = \hat{a}|0\rangle$ の両辺に \hat{T}_η を作用させれば、

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{T}_\eta \hat{a}|0\rangle = \hat{T}_\eta \hat{a} \hat{T}_\eta^\dagger \hat{T}_\eta |0\rangle \\ &= (\hat{a} - \eta) \hat{T}_\eta |0\rangle \\ &= (\hat{a} - \eta)|\eta\rangle \end{aligned}$$

となり

$$0 = (\hat{a} - \eta)|\eta\rangle \quad (\text{F.25})$$

が得られる。状態 $|\eta\rangle$ の波動関数を $u_\eta(x)$ とすれば、式 (F.25) は

$$0 = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) - \eta \right] u_\eta(x) \quad (\text{F.26})$$

となる。このように見ていけば、波動関数 $u_\eta(x)$ が

$$u_\eta(x) = A \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} (x - \xi)^2\right), \quad \xi = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \eta \quad (\text{F.27})$$

と決定されることは明らかであろう。ここで、 \hat{T}_η はユニタリー演算子なので、状態 $|\eta\rangle$ は自動的に規格化されることに注意。規格化の定数 A は $\langle 0|\eta\rangle = e^{-|\eta|^2/2}$ を用いることで求められ

$$A = A_0 \exp\left[\frac{1}{2}(\eta^2 - |\eta|^2)\right] \quad (\text{F.28})$$

と決定される。ここで、 A_0 は式 (F.17) で基底状態波動関数 u_0 を規格化したときに用いられた定数と同一である。

式 (F.22) で定義される調和振動子量子力学の状態はコヒーレント状態として知られている状態である。調和振動子の量子力学は量子光学などの場の量子論において活用される。これらの重要な応用において、コヒーレント状態でレーザー光が記述されるなど、大きな役割を果たす。

F.4 コヒーレント状態の性質

この節ではコヒーレント状態の性質を列挙していく。

- コヒーレント状態 $|\eta\rangle$ は、エネルギー固有状態 $|n\rangle$ の重ね合わせの状態として

$$|\eta\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\eta|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \eta^n |n\rangle \quad (\text{F.29})$$

の形で展開できる。

このことを示すには、次節で示すベーカー・キャンベル・ハウズドルフの公式を用いて

$$\hat{T}_\eta = \exp\left(-\frac{1}{2}|\eta|^2\right) \exp(\eta \hat{a}^\dagger) \exp(-\eta^* \hat{a})$$

を示し、

$$\begin{aligned}
 |\eta\rangle &= \hat{T}_\eta|0\rangle \\
 &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\eta|^2\right) \exp(\eta\hat{a}^\dagger)|0\rangle \\
 &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\eta|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \eta^n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \\
 &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\eta|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \eta^n |n\rangle
 \end{aligned}$$

と計算すればよい。

- コヒーレント状態 $|\eta\rangle$ は、消滅演算子 \hat{a} の固有値 η の固有状態

$$\hat{a}|\eta\rangle = \eta|a\rangle \quad (\text{F.30})$$

である。

この性質は式 (F.25) からすでに明らかであろう。あるいは、展開式 (F.29) と $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ を用いても示すことができる。

- コヒーレント状態 $|\eta\rangle$ は、生成演算子 \hat{a}^\dagger の固有状態ではない。

この性質は、 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \neq 0$ から、 \hat{a} と \hat{a}^\dagger が同時固有状態を持たないことから明らかである。あるいは、展開式 (F.29) を見て、 $|\eta\rangle$ には基底状態 $|0\rangle$ が含まれるのに対し、 $\hat{a}|\eta\rangle$ は基底状態 $|0\rangle$ を含まないことから示すことができる。

- コヒーレント状態での、生成・消滅演算子の期待値は、

$$\langle\eta|\hat{a}|\eta\rangle = \eta, \quad \langle\eta|\hat{a}^\dagger|\eta\rangle = \eta^* \quad (\text{F.31})$$

で与えられる。

この性質は、 $|\eta\rangle$ が \hat{a} の固有状態であり

$$\hat{a}|\eta\rangle = \eta|\eta\rangle, \quad \langle\eta|\hat{a}^\dagger = \eta^*\langle\eta|$$

となることから明らかである。

- コヒーレント状態 $|\eta\rangle$ における位置と運動量の不確定性は

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad (\Delta p)^2 = \frac{\hbar m\omega}{2} \quad (\text{F.32})$$

で与えられ、たしかに最小不確定性状態

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

になっている。

この事実は波動関数の形から明らかである。演算子法を用いて示すには、不確定性の定義に基づき

$$(\Delta x)^2 = \langle\eta|\hat{x}^2|\eta\rangle - (\langle\eta|\hat{x}|\eta\rangle)^2, \quad (\Delta p)^2 = \langle\eta|\hat{p}^2|\eta\rangle - (\langle\eta|\hat{p}|\eta\rangle)^2,$$

を計算すればよい。その際、

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}),$$

$$\hat{a}|\eta\rangle = \eta|\eta\rangle, \quad \langle\eta|\hat{a}^\dagger = \langle\eta|\eta^*$$

を用いれば、計算を簡単に済ますことができる。

- ふたつのコヒーレント状態 $|\eta_1\rangle$ と $|\eta_2\rangle$ は直交せず、その内積は

$$\langle\eta_1|\eta_2\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\eta_1|^2 - \frac{1}{2}|\eta_2|^2 + \eta_1^*\eta_2\right) \quad (\text{F.33})$$

で与えられる。

この性質は、展開式 (F.29) を用いて

$$\begin{aligned} \langle\eta_1|\eta_2\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\eta_1|^2} e^{-\frac{1}{2}|\eta_2|^2} \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!}} (\eta_1^*)^{n_1} \eta_2^{n_2} \langle n_1|n_2\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\eta_1|^2} e^{-\frac{1}{2}|\eta_2|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\eta_1^*\eta_2)^n \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\eta_1|^2 - \frac{1}{2}|\eta_2|^2 + \eta_1^*\eta_2\right) \end{aligned}$$

と計算することで示される。

- コヒーレント状態 $|\eta\rangle$ におけるエネルギー量子数 n を測定する場合、 n 個のエネルギー量子が測定される確率はポアソン分布

$$P_n = \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} \quad (\text{F.34})$$

で与えられる。ここで、 $\bar{n} = |\eta|^2$ はポアソン分布における量子数 n の期待値である。

(説明) これはレーザー中に n 光子状態が存在する確率がポアソン分布で与えられることを示している。このことを示すには、 $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ はエネルギー量子の個数演算子であり、

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

であること、また、コヒーレント状態 $|\eta\rangle$ が消滅演算子 \hat{a} の固有状態であり

$$\langle\eta|\hat{N}|\eta\rangle = \langle\eta|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\eta\rangle = |\eta|^2$$

であることを用いればよい。これらを用いて、エネルギー量子数期待値 \bar{n} が

$$\bar{n} = |\eta|^2$$

と求められる。エネルギー量子数が n である確率は

$$\begin{aligned} P_n &= |\langle n|\eta\rangle|^2 = \frac{1}{n!} |\eta|^{2n} e^{-|\eta|^2} \\ &= \frac{1}{n!} \bar{n}^n e^{-\bar{n}} \end{aligned}$$

と求められる。

- コヒーレント状態の完全性

$$1 = \frac{1}{\pi} \int d^2\eta |\eta\rangle\langle\eta| \quad (\text{F.35})$$

ここで $d^2\eta$ は複素平面上の積分である。

この性質を示すには、式 (F.35) の両辺を $|n_1\rangle, |n_2\rangle$ で挟んだ

$$\delta_{n_1 n_2} = \frac{1}{\pi} \int d^2\eta \langle n_1 | \eta \rangle \langle \eta | n_2 \rangle$$

を導くことができれば良い。

$$\eta = r e^{i\theta}$$

で与えられる変数 r, θ を用い、

$$d^2\eta = dr r d\theta$$

として右辺に表れる複素平面上の積分を実行すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int d^2\eta \langle n_1 | \eta \rangle \langle \eta | n_2 \rangle &= \int_0^\infty dr \frac{2r^{n_1+n_2+1} e^{-r^2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i(n_1-n_2)\theta} \\ &= \delta_{n_1 n_2} \int_0^\infty dr^2 \frac{r^{2n_1} e^{-r^2}}{n_1!} \\ &= \delta_{n_1 n_2} \end{aligned}$$

が得られる。

- コヒーレント状態の時間発展を計算すると

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\eta\rangle = e^{-\frac{i}{2}\omega t} |\eta(t)\rangle, \quad \eta(t) = e^{-i\omega t} \eta(t=0) \quad (\text{F.36})$$

となる。つまり、パラメータ η は時間とともに角振動数 ω で振動している。

この事実は、

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{a} e^{+i\hat{H}t/\hbar} = e^{+i\omega t} \hat{a}, \quad e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{a}^\dagger e^{+i\hat{H}t/\hbar} = e^{-i\omega t} \hat{a}^\dagger$$

を用いて

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\eta\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{T}_\eta e^{i\hat{H}t/\hbar} e^{-\frac{i}{2}\omega t} |0\rangle$$

を計算すれば明らかであろう。

このような状態のパラメータの単振動の描像は、古典力学での調和振動子の単振動の描像に符合するものとなっている。そのため、コヒーレント状態は「もともと古典的な状態」とよばれることがある。

F.5 ベーカー・キャンベル・ハウズドルフの公式

交換しない演算子 \hat{X}, \hat{Y} の指数関数の積を

$$e^{\hat{X}} e^{\hat{Y}} = e^{\hat{W}} \quad (\text{F.37})$$

のように単一の指数関数にまとめるとき、演算子 \hat{W} を

$$\hat{W} = \hat{X} + \hat{Y} + \frac{1}{2}[\hat{X}, \hat{Y}] + \frac{1}{12}[\hat{X} - \hat{Y}, [\hat{X}, \hat{Y}]] + \dots \quad (\text{F.38})$$

のように演算子 \hat{X}, \hat{Y} とそれらの交換関係を使った項による展開で書き下すことができる。特に

$$[\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]] = [\hat{Y}, [\hat{X}, \hat{Y}]] = 0$$

の場合は、

$$\hat{W} = \hat{X} + \hat{Y} + \frac{1}{2}[\hat{X}, \hat{Y}] \quad (\text{F.39})$$

となる。これをベーカー・キャンベル・ハウスドルフの公式と呼ぶ。この公式は、具体的な問題を解く上で役に立つことがしばしばあり、知っておいて損のない公式である。

公式 (F.38) を証明するには、実数パラメータ t を導入し

$$e^{\hat{W}} = e^{t\hat{X}} e^{t\hat{Y}} \quad (\text{F.40})$$

で定義される演算子 \hat{W} のテイラー展開

$$\hat{W} = \hat{W}_0 + t\hat{W}_1 + \frac{1}{2!}t^2\hat{W}_2 + \frac{1}{3!}t^3\hat{W}_3 + \dots \quad (\text{F.41})$$

を求めればよい。 \hat{W} は $t=1$ のときの演算子

$$\hat{W} = \hat{W}_0 + \hat{W}_1 + \frac{1}{2!}\hat{W}_2 + \frac{1}{3!}\hat{W}_3 + \dots \quad (\text{F.42})$$

となる。

定義 (F.40) より、 $\hat{W}_0 = 0$ は明らかであろう。 $\hat{W}_1, \hat{W}_2, \dots$ を求めるには、式 (F.40) の両辺を微分した

$$\left[\frac{d}{dt} e^{\hat{W}} \right] e^{-\hat{W}} = \left[\frac{d}{dt} (e^{t\hat{X}} e^{t\hat{Y}}) \right] e^{-t\hat{Y}} e^{-t\hat{X}} \quad (\text{F.43})$$

を考えると便利である。この式の左辺は

$$\hat{W}' = \hat{W}_1 + t\hat{W}_2 + \frac{1}{2!}t^2\hat{W}_2 + \dots \quad (\text{F.44})$$

を用いて

$$\hat{W}' + \frac{1}{2}[\hat{W}, \hat{W}'] + \frac{1}{3!}[\hat{W}, [\hat{W}, \hat{W}']] + \dots$$

と展開でき、この式に (F.41), (F.44), $\hat{W}_0 = 0$ を代入することで、

$$\left[\frac{d}{dt} e^{\hat{W}} \right] e^{-\hat{W}} = \hat{W}_1 + t\hat{W}_2 + \frac{1}{2}t^2 \left(\hat{W}_3 + \frac{1}{2}[\hat{W}_1, \hat{W}_2] \right) + \dots \quad (\text{F.45})$$

が得られる。一方、右辺は

$$\begin{aligned} \left[\frac{d}{dt} (e^{t\hat{X}} e^{t\hat{Y}}) \right] e^{-t\hat{Y}} e^{-t\hat{X}} &= \hat{X} e^{t\hat{X}} e^{t\hat{Y}} e^{-t\hat{Y}} e^{-t\hat{X}} + e^{t\hat{X}} \hat{Y} e^{t\hat{Y}} e^{-t\hat{Y}} e^{-t\hat{X}} \\ &= \hat{X} + e^{t\hat{X}} \hat{Y} e^{-t\hat{X}} \\ &= \hat{X} + \hat{Y} + t[\hat{X}, \hat{Y}] + \frac{t^2}{2!}[\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]] + \dots \end{aligned} \quad (\text{F.46})$$

と評価できる。式 (F.45) と式 (F.46) の t の各次数を比較することで、

$$\hat{W}_1 = \hat{X} + \hat{Y}, \quad (\text{F.47})$$

$$\hat{W}_2 = [\hat{X}, \hat{Y}], \quad (\text{F.48})$$

$$\hat{W}_3 = \frac{1}{2}[\hat{X} - \hat{Y}, [\hat{X}, \hat{Y}]], \quad (\text{F.49})$$

が得られることはもはや明らかであろう。

式 (F.45) も式 (F.46) も、各項が演算子 \hat{X}, \hat{Y} とそれらの交換関係で表されることに注意しよう。そのため、 \hat{W}_n の項は $n-1$ 次の交換関係を含むことがわかる。このことから、2 次以上の交換関係がゼロになる場合、つまり

$$[\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]] = [\hat{Y}, [\hat{X}, \hat{Y}]] = 0$$

となつて、 $[\hat{X}, \hat{Y}]$ が \hat{X} と \hat{Y} とともに交換する場合には、 \hat{W}_3 以降の項は出現せず、式 (F.39) が導かれることがわかる。

F.6 そのほかの最小不確定性状態

コヒーレント状態以外にも最小不確定性状態を構成することができる。たとえば、

$$\hat{D}(\rho) = \exp\left(-\frac{i}{2\hbar}\rho(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})\right) \quad (\text{F.50})$$

で与えられるパラメータ ρ によるスケール変換で基底状態を変形させた状態がそれである。この演算子がスケール変換を与えることは、状態

$$|u\rangle = \int dx |x\rangle u(x)$$

に作用すると

$$\hat{D}(\rho)|u\rangle = \int dx |x\rangle e^{-\frac{i}{2}\rho} u(e^{-\rho}x)$$

なる状態を与えることから理解できる。調和振動子の基底状態 $|0\rangle$ の波動関数はガウス分布関数なので、 $|0\rangle$ をスケール変換した $\hat{D}(\rho)|0\rangle$ の波動関数もガウス分布関数にとどまる。したがって、 $\hat{D}(\rho)|0\rangle$ は最小不確定性状態になることがわかる。

$$\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} = i\hbar [(\hat{a}^\dagger)^2 - (\hat{a})^2]$$

であることに注意しよう。コヒーレント状態の場合にならって、以降では、複素数パラメータ ζ を導入し

$$|\zeta\rangle = \hat{D}_\zeta|0\rangle, \quad \hat{D}_\zeta = \exp(\zeta(\hat{a}^\dagger)^2 - \zeta^*(\hat{a})^2) \quad (\text{F.51})$$

で与えられる状態の性質を考えてみよう。

- 状態 $|\zeta\rangle$ の時間発展を計算すると

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\zeta\rangle = e^{-\frac{i}{2}\omega t}|\zeta(t)\rangle, \quad \zeta(t) = e^{-2i\omega t}\zeta(t=0) \quad (\text{F.52})$$

となる。つまり、パラメータ ζ は時間とともに角振動数 2ω で振動している。

- この状態では、位置と運動量の期待値は $\langle\zeta|\hat{x}|\zeta\rangle = \langle\zeta|\hat{p}|\zeta\rangle = 0$ であり、それらの不確定性は $(\Delta x)^2 = \langle\zeta|\hat{x}^2|\zeta\rangle$, $(\Delta p)^2 = \langle\zeta|\hat{p}^2|\zeta\rangle$ と計算できる。

$$\langle\zeta|\hat{x}^2|\zeta\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\cosh^2(2|\zeta|) + \sinh^2(2|\zeta|) + 2\frac{\text{Re}\zeta}{|\zeta|} \cosh(2|\zeta|) \sinh(2|\zeta|) \right], \quad (\text{F.53})$$

$$\langle\zeta|\hat{p}^2|\zeta\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \left[\cosh^2(2|\zeta|) + \sinh^2(2|\zeta|) - 2\frac{\text{Re}\zeta}{|\zeta|} \cosh(2|\zeta|) \sinh(2|\zeta|) \right]. \quad (\text{F.54})$$

$(\Delta x)^2$ と $(\Delta p)^2$ は角振動数 2ω で振動しているが、エネルギー期待値は

$$\langle \zeta | \hat{H} | \zeta \rangle = \frac{1}{2m} \langle \zeta | \hat{p}^2 | \zeta \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \zeta | \hat{x}^2 | \zeta \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega (\cosh^2(2|\zeta|) + \sinh^2(2|\zeta|)) \quad (\text{F.55})$$

となり、時間とともに変化しないことに注意。また、最小不確定性状態を与えるのは、変換パラメータ ζ が実数の場合に限られることがわかる。

G 球座標・円筒座標系でのラプラシアン

この付録では、ブラケット記法を用いることによって3次元極座標系（球座標）や円筒座標系でのラプラシアン Δ が、簡単に導出できることを学ぶ。

G.1 デカルト座標系

最初にデカルト座標系の復習をするとともに記号の整理をしておく。3次元デカルト座標 (x, y, z) では、座標点 (x, y, z) と $(x + dx, y + dy, z + dz)$ の間の距離（線素）は

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (\text{G.1})$$

で与えられる。3次元積分の無限小体積要素は

$$d^3V = dx dy dz \quad (\text{G.2})$$

である。

スカラー関数 f の勾配 (gradient) は

$$\vec{\nabla} f = \left(\frac{\partial}{\partial x} f \right) \vec{e}_x + \left(\frac{\partial}{\partial y} f \right) \vec{e}_y + \left(\frac{\partial}{\partial z} f \right) \vec{e}_z \quad (\text{G.3})$$

で与えられる。 $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ は、それぞれ x 方向, y 方向, z 方向への単位ベクトルである。3次元運動量演算子 \hat{p} は

$$|f\rangle = \int d^3V |\vec{x}\rangle f(\vec{x})$$

で与えられる状態 $|f\rangle$ に

$$\hat{p}|f\rangle = \int d^3V |\vec{x}\rangle (-i\hbar \vec{\nabla} f(\vec{x})) \quad (\text{G.4})$$

と作用する。

次の量を考える。

$$I \equiv \langle f_1 | \hat{p} \cdot \hat{p} | f_2 \rangle \quad (\text{G.5})$$

この量がラプラシアン

$$\begin{aligned} \Delta &= \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (\text{G.6})$$

を用いて

$$I = -\hbar^2 \int d^3V f_1^* \Delta f_2 \quad (\text{G.7})$$

と計算できることは明らかであろう。

通常の量子力学での仮定にしたがって、状態 $|f_1\rangle, |f_2\rangle$ を与える波動関数 $f_1(\vec{x}), f_2(\vec{x})$ は二乗可積分であり無限遠方で十分に早くゼロになるとする。このとき、式 (G.5) で与えられる量が、状態 $\hat{p}|f_1\rangle$ と状態 $\hat{p}|f_2\rangle$ の内積であることは明らかである。

G.2 円筒座標系

次に円筒座標系 (r, θ, z) を考える。前節で考察したデカルト座標系との間の関係は

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta, \quad z = z \quad (\text{G.8})$$

で与えられる。円筒座標系での線素は

$$ds^2 = dr^2 + (rd\theta)^2 + dz^2 \quad (\text{G.9})$$

で与えられる。3次元積分の無限小体積要素は

$$d^3V = dr r d\theta dz = r dr d\theta dz \quad (\text{G.10})$$

である。

スカラー関数 f の勾配は

$$\vec{\nabla} f = \left(\frac{\partial}{\partial r} f \right) \vec{e}_r + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} f \right) \vec{e}_\theta + \left(\frac{\partial}{\partial z} f \right) \vec{e}_z \quad (\text{G.11})$$

で与えられる。ここで \vec{e}_θ の係数に現れる $1/r$ の係数は、 θ 方向の線素が $r d\theta$ であったことに起因している。デカルト座標の場合と同様に、状態

$$\hat{p}|f_1\rangle = \int d^3V |\vec{x}\rangle \left(-i\hbar \vec{\nabla} f_1(\vec{x}) \right)$$

と、状態

$$\hat{p}|f_2\rangle = \int d^3V |\vec{x}\rangle \left(-i\hbar \vec{\nabla} f_2(\vec{x}) \right)$$

との内積

$$\begin{aligned} I &\equiv \langle f_1 | \hat{p} \cdot \hat{p} | f_2 \rangle \\ &= -\hbar^2 \int d^3V f_1^* \Delta f_2 \end{aligned}$$

を考える。次のように部分積分をしてみよう。

$$\begin{aligned} I &= -\hbar^2 \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-\infty}^\infty dz \left[f_1^* \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f_2}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} f_1^* \left(\frac{\partial^2 f_2}{\partial \theta^2} \right) + r f_1^* \left(\frac{\partial^2 f_2}{\partial z^2} \right) \right] \\ &= -\hbar^2 \int d^3V f_1^* \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f_2}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2 f_2}{\partial \theta^2} \right) + \left(\frac{\partial^2 f_2}{\partial z^2} \right) \right]. \end{aligned}$$

この式をラプラシアンを用いた表式

$$I = -\hbar^2 \int d^3V f_1^* \Delta f_2$$

と比較して、円筒座標系でのラプラシアン

$$\Delta f = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \quad (\text{G.12})$$

が求められる。

G.3 球座標系

最後に3次元極座標系（球座標系） (r, θ, φ) を考察する。デカルト座標系との関係は

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad (\text{G.13})$$

であり、線素および無限小体積要素は

$$ds^2 = dr^2 + (rd\theta)^2 + (r \sin \theta d\varphi)^2, \quad (\text{G.14})$$

$$d^3V = dr r d\theta r \sin \theta d\varphi = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \quad (\text{G.15})$$

で与えられる。スカラー関数 f の勾配は、したがって

$$\vec{\nabla} f = \left(\frac{\partial}{\partial r} f \right) \vec{e}_r + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} f \right) \vec{e}_\theta + \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} f \right) \vec{e}_\varphi \quad (\text{G.16})$$

と求められる。デカルト座標の場合と同様に積分

$$\begin{aligned} I &\equiv \hbar^2 \int d^3V (\vec{\nabla} f_1^*) \cdot (\vec{\nabla} f_2) \\ &= \hbar^2 \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi r^2 \sin \theta \left[\left(\frac{\partial f_1^*}{\partial r} \right) \left(\frac{\partial f_2}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial f_1^*}{\partial \theta} \right) \left(\frac{\partial f_2}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} + \left(\frac{\partial f_1^*}{\partial \varphi} \right) \left(\frac{\partial f_2}{\partial \varphi} \right) \right] \end{aligned}$$

を考え、部分積分をすることでラプラシアンを導出しよう。部分積分の結果は

$$I = -\hbar^2 \int d^3V f_1^* \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} f_2 \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} f_2 \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} f_2 \right]$$

であり、これをラプラシアンを使った表式

$$I = -\hbar^2 \int d^3V f_1^* \Delta f_2$$

と比較することで、球座標系でのラプラシアンが

$$\Delta f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} f \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} f \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} f \quad (\text{G.17})$$

と求められる。

H 球座標における角運動量の微分演算子

H.1 2次元極座標

2次元極座標 (r, θ)

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta \quad (\text{H.1})$$

において、角運動量に対応する微分演算子

$$L^{\text{op}} = xp_y^{\text{op}} - yp_x^{\text{op}} = -i\hbar \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right] \quad (\text{H.2})$$

を求めよう。ここで

$$p_x^{\text{op}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y^{\text{op}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad (\text{H.3})$$

である。微分のチェーン則

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial r} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial y}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial y}, \quad (\text{H.4})$$

と極座標の定義式 (H.1) より

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (\text{H.5})$$

はすぐにわかる。これから

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{pmatrix} \quad (\text{H.6})$$

を得るのも容易である。2次元極座標の定義式 (H.1) と式 (H.6) を角運動量に対応する微分演算子の式 (H.2) に代入すると

$$L^{\text{op}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (\text{H.7})$$

を得る。

H.2 3次元極座標 (球座標)

次に、3次元極座標系 (球座標系) (r, θ, φ)

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad (\text{H.8})$$

における角運動量に対応する微分演算子

$$L_x^{\text{op}} = y p_z^{\text{op}} - z p_y^{\text{op}}, \quad L_y^{\text{op}} = z p_x^{\text{op}} - x p_z^{\text{op}}, \quad L_z^{\text{op}} = x p_y^{\text{op}} - y p_x^{\text{op}} \quad (\text{H.9})$$

を求めよう。ここで、運動量に対応する微分演算子は

$$p_x^{\text{op}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y^{\text{op}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z^{\text{op}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (\text{H.10})$$

である。2次元極座標での計算と同様に、微分のチェーン則と球座標の定義 (H.8) を用いると

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi & \sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \\ \cos \theta \cos \varphi & \cos \theta \sin \varphi & -\sin \theta \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{H.11})$$

と計算できる。式 (H.11) において、行列 U は直交行列であることに注意。従って、その逆行列は

$$U^{-1} = U^\dagger = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi & \cos \theta \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \sin \varphi & \cos \varphi \\ \cos \theta & -\sin \theta & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{H.12})$$

で与えられ、

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = U^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \quad (\text{H.13})$$

と求まる。3次元運動量の微分演算子の式 (H.10) に式 (H.13) を代入し、さらに3次元角運動量の式 (H.9) に、式 (H.8), と (H.10) を代入することで

$$\begin{aligned} L_x^{\text{op}} &= i\hbar \left[\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \\ L_y^{\text{op}} &= i\hbar \left[-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \varphi \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \\ L_z^{\text{op}} &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned} \quad (\text{H.14})$$

が得られる。

H.3 $(\vec{L}^{\text{op}})^2$ の具体形

付録 §. H.2 において、球面調和関数の定義に現れる微分演算子 L_z^{op} の具体形はすでに求まっている。ここでは、球面調和関数を定義するのに用いられるもう一つの微分演算子である $(\vec{L}^{\text{op}})^2$ の具体形を求めよう。

計算の方法はいくつかあるが、ここではふたつのやり方を紹介しよう。

最初の方法は、式 (H.14) の結果を愚直に使う

$$-\frac{1}{\hbar^2} (\vec{L}^{\text{op}})^2 = \left[s_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + c_\varphi \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \left[s_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + c_\varphi \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] + \left[-c_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + s_\varphi \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \left[-c_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + s_\varphi \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

を計算するやり方である。ここでは、表記のスペースの節約のため、

$$s_\theta = \sin \theta, \quad c_\theta = \cos \theta, \quad s_\varphi = \sin \varphi, \quad c_\varphi = \cos \varphi$$

で定義される記号 $s_{\theta,\varphi}, c_{\theta,\varphi}$ を用いた。微分演算子 $\partial/\partial\theta$ や $\partial/\partial\varphi$ が、 $s_{\theta,\varphi}$ や $c_{\theta,\varphi}$ にも作用する

ことに注意し、この式を次のように計算して $(\vec{L}^{\text{op}})^2$ の具体形を得ることができる。

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{\hbar^2}(\vec{L}^{\text{op}})^2 \\
&= \left[s_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + c_\varphi \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \left[s_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + c_\varphi \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] + \left[-c_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + s_\varphi \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \left[-c_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + s_\varphi \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \\
&= s_\varphi^2 \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + s_\varphi c_\varphi \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + s_\varphi c_\varphi \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \frac{c_\theta}{s_\theta} \right] \frac{\partial}{\partial \varphi} \\
&\quad + s_\varphi c_\varphi \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + c_\varphi^2 \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + c_\varphi^2 \frac{c_\theta^2}{s_\theta^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - s_\varphi c_\varphi \frac{c_\theta^2}{s_\theta^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\
&\quad + c_\varphi^2 \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - s_\varphi c_\varphi \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - s_\varphi c_\varphi \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \frac{c_\theta}{s_\theta} \right] \frac{\partial}{\partial \varphi} \\
&\quad - s_\varphi c_\varphi \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + s_\varphi^2 \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + s_\varphi^2 \frac{c_\theta^2}{s_\theta^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + s_\varphi c_\varphi \frac{c_\theta^2}{s_\theta^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \\
&= \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \\
&= \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}. \tag{H.15}
\end{aligned}$$

もうひとつの方法は、スケール変換（ディラレーション変換）に対応する演算子

$$\hat{D} = \hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z$$

とそのエルミート共軛

$$\hat{D}^\dagger = \hat{p}_x\hat{x} + \hat{p}_y\hat{y} + \hat{p}_z\hat{z}$$

を用いる方法である。この演算子を用いれば、

$$\hat{L}^2 = (\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2)(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) - \hat{D}^\dagger \hat{D} - 2i\hbar \hat{D} \tag{H.16}$$

であることを示すことができるので、 \hat{D} や \hat{D}^\dagger に対応する微分演算子さえ求めることができれば、 $(\vec{L}^{\text{op}})^2$ をラプラシアン $(-\hat{p}_x^2 - \hat{p}_y^2 - \hat{p}_z^2)/\hbar^2$ に対応する微分演算子) と関係づけることができる。

式 (H.10) と (H.13) を用いれば、 \hat{D} に対応する微分演算子は

$$\begin{aligned}
D_{\text{op}} &= -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} - i\hbar y \frac{\partial}{\partial y} - i\hbar z \frac{\partial}{\partial z} \\
&= -i\hbar r \sin \theta \cos \varphi \left(\sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \cos \theta \cos \varphi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
&\quad - i\hbar r \sin \theta \sin \varphi \left(\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \cos \theta \sin \varphi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
&\quad - i\hbar r \cos \theta \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \sin \theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\
&= -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} \tag{H.17}
\end{aligned}$$

のように計算できる。エルミート共軛な演算子 \hat{D}^\dagger は、

$$\begin{aligned}
\langle \psi_1 | \hat{D}^\dagger | \psi_2 \rangle &= (\langle \psi_2 | \hat{D} | \psi_1 \rangle)^* = \left(-i\hbar \int dr r^2 d\theta \sin \theta d\varphi \psi_2^* r \frac{\partial}{\partial r} \psi_1 \right)^* \\
&= i\hbar \int dr r^2 d\theta \sin \theta d\varphi \left(r \frac{\partial}{\partial r} \psi_1^* \right) \psi_2 \\
&= -i\hbar \int dr r^2 d\theta \sin \theta d\varphi \psi_1^* \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^3 \right) \psi_2 \tag{H.18}
\end{aligned}$$

であることに注意すれば、

$$D_{\text{op}}^\dagger = -i\hbar \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^3 \quad (\text{H.19})$$

であることがわかる。式 (H.18) の 2 行目から 3 行目への変形には部分積分を用いた。

これで準備が整ったので、いよいよ (H.16) を用いた $(\vec{L}^{\text{op}})^2$ の計算にはいろう。

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\hbar^2} (\vec{L}^{\text{op}})^2 &= r^2 \Delta + \frac{2i}{\hbar} D_{\text{op}} + \frac{1}{\hbar^2} D_{\text{op}}^\dagger D_{\text{op}} \\ &= r^2 \Delta + 2r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^4 \frac{\partial}{\partial r} \\ &= r^2 \Delta - \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \end{aligned} \quad (\text{H.20})$$

と式 (G.17) で与えられる球座標表示でのラプラシアンの結果を用いると

$$-\frac{1}{\hbar^2} (\vec{L}^{\text{op}})^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (\text{H.21})$$

が得られる。もちろん、この結果は式 (H.15) で愚直に計算した結果と同一のものである。

I 超球面調和関数と $SO(4)$ 対称性

I.1 超球面調和関数

仮に、 x, y, z の 3 方向以外にも空間次元が存在する場合、角運動量演算子や球面調和関数の議論はどのように拡張せねばならないだろうか。

この節ではそのような世界として、 x, y, z に加えて 4 番目の独立な空間方向 w が存在する仮想世界を考察してみよう。このような洞察を行うことで、通常の 3 次元空間の角運動量演算子や球面調和関数の性質についてのより深い理解が可能になる。

通常の 3 次元空間の世界では位置ベクトル \vec{x} と運動量ベクトル \vec{p} の両者と垂直な方向をもつ (軸性) ベクトル量として角運動量が定義される。しかし、4 次元空間の仮想世界では、 \vec{x} にも \vec{p} にも垂直な方向が複数存在する。したがって (軸性) ベクトル量としての角運動量の定義は不可能である。そこでふたつの添字をもつ 2 階反対称テンソル量として角運動量演算子を

$$\hat{L}_{ij} = \hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i, \quad i, j = x, y, z, w \quad (\text{I.1})$$

と定義することにしよう。4 次元空間での 2 階反対称テンソルの自由度 $4 \times (4-1)/2 = 6$ に対応して、4 次元空間の角運動量の成分は 6 つあることに注意しよう。

愚直に計算すれば、角運動量演算子と位置演算子あるいは運動量演算子との交換関係は

$$[\hat{L}_{ij}, \hat{x}_k] = i\hbar (\delta_{ik} \hat{x}_j - \delta_{jk} \hat{x}_i), \quad (\text{I.2})$$

$$[\hat{L}_{ij}, \hat{p}_k] = i\hbar (\delta_{ik} \hat{p}_j - \delta_{jk} \hat{p}_i), \quad (\text{I.3})$$

であることがわかる。従って、角運動量演算子どうしの交換関係は

$$[\hat{L}_{ij}, \hat{L}_{kl}] = i\hbar (\delta_{ik} \hat{L}_{jl} + \delta_{il} \hat{L}_{kj} - \delta_{jk} \hat{L}_{il} - \delta_{jl} \hat{L}_{ki}) \quad (\text{I.4})$$

と求められる。角運動量演算子は、このように非自明な交換関係をもつため、たとえば \hat{L}_{xy} と \hat{L}_{yz} の同時固有状態は一般には存在しない。量子力学での状態の量子数を指定するためには、互いに交換するひとくみの演算子の固有値を用いる必要がある。

そのような、互いに交換するひとくみの演算子として、ここでは

$$\hat{L}_{xy}, \quad \hat{\mathbf{L}}_{(3)}^2, \quad \hat{\mathbf{L}}_{(4)}^2 \quad (\text{I.5})$$

を採用する。ここで、 $\hat{\mathbf{L}}_{(3)}^2$ は xyz 3次元部分空間内の角運動量の大きさ (の二乗)

$$\hat{\mathbf{L}}_{(3)}^2 = \hat{L}_{xy}^2 + \hat{L}_{yz}^2 + \hat{L}_{zx}^2$$

であり、 $\hat{\mathbf{L}}_{(4)}^2$ は 4次元空間全体の角運動量の大きさ (の二乗)

$$\hat{\mathbf{L}}_{(4)}^2 = \hat{L}_{xy}^2 + \hat{L}_{yz}^2 + \hat{L}_{zx}^2 + \hat{L}_{xw}^2 + \hat{L}_{yw}^2 + \hat{L}_{zw}^2$$

である。 $[\hat{L}_{xy}, \hat{\mathbf{L}}_{(3)}^2] = 0$ は 3次元での角運動量の解析経験から明らかであろう。また、 $\hat{\mathbf{L}}_{(4)}^2$ がすべての \hat{L}_{ij} と交換すること ($[\hat{L}_{ij}, \hat{\mathbf{L}}_{(4)}^2] = 0$) をすぐに示すことができ、これから $[\hat{L}_{xy}, \hat{\mathbf{L}}_{(4)}^2] = 0$ 、 $[\hat{\mathbf{L}}_{(3)}^2, \hat{\mathbf{L}}_{(4)}^2] = 0$ が得られる。

4次元仮想世界での球面調和関数対応物 (超球面調和関数) を具体的に構成するにあたって、4次元空間を動径座標 r と角度座標 ω, θ, φ を用いて

$$w = r \cos \omega, \quad z = r \sin \omega \cos \theta, \quad x = r \sin \omega \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \omega \sin \theta \sin \varphi \quad (\text{I.6})$$

と極座標表示してみよう。極座標表示では、線素は

$$ds^2 = dr^2 + (r d\omega)^2 + (r \sin \omega d\theta)^2 + (r \sin \omega \sin \theta d\varphi)^2 \quad (\text{I.7})$$

で与えられ、4次元体積要素 $dx dy dz dw$ は

$$dx dy dz dw = dr r^3 d\omega \sin^2 \omega d\theta \sin \theta d\varphi, \quad (\text{I.8})$$

スカラー関数 f の微分は

$$\vec{\nabla} f = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} f + \vec{e}_\omega \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \omega} f + \vec{e}_\theta \frac{1}{r \sin \omega} \frac{\partial}{\partial \theta} f + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \omega \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} f \quad (\text{I.9})$$

で与えられる。付録 G で説明した計算テクニックを使えば、この座標でのラプラシアンが

$$\begin{aligned} \Delta f &= \frac{1}{r^3} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^3 \frac{\partial}{\partial r} f \right) \\ &+ \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin^2 \omega} \frac{\partial}{\partial \omega} \left(\sin^2 \omega \frac{\partial}{\partial \omega} f \right) + \frac{1}{\sin^2 \omega \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} f \right) + \frac{1}{\sin^2 \omega \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} f \right) \end{aligned} \quad (\text{I.10})$$

となることを示すのは簡単である。さらに付録 H.3 節で説明した方法を用いて、 $\hat{\mathbf{L}}_{(4)}^2$ に対応する微分演算子 $(\mathbf{L}_{(4)}^{\text{op}})^2$ を式 (I.10) のラプラシアンから抽出することができる。その結果は、式 (I.10) の 2 行目に r^2 をかけた

$$-\frac{1}{\hbar^2} (\mathbf{L}_{(4)}^{\text{op}})^2 = \frac{1}{\sin^2 \omega} \frac{\partial}{\partial \omega} \sin^2 \omega \frac{\partial}{\partial \omega} + \frac{1}{\sin^2 \omega \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \omega \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (\text{I.11})$$

である。超球面調和関数を求めるには、このほか、 $\hat{\mathbf{L}}_{(3)}^2$ に対応する微分演算子 $(\mathbf{L}_{(3)}^{\text{op}})^2$ と \hat{L}_{xy} に対応する微分演算子 L_{xy}^{op} の情報も必要になるが、それらは 3次元角運動量での $(\vec{L}^{\text{op}})^2$ や L_z^{op} の結果をそのまま流用すればよい。すなわち

$$-\frac{1}{\hbar^2} (\mathbf{L}_{(3)}^{\text{op}})^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \quad (\text{I.12})$$

$$L_{xy}^{\text{op}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (\text{I.13})$$

である。

ここまでで概ね準備が整ったので、いよいよ超球面調和関数 $Z_{klm}(\omega, \theta, \varphi)$ を考えよう。超球面調和関数は、微分演算子 $(\mathbf{L}_{(4)}^{\text{op}})^2$, $(\mathbf{L}_{(3)}^{\text{op}})^2$, L_{xy}^{op} の固有関数であり、

$$\frac{1}{\hbar^2} (\mathbf{L}_{(4)}^{\text{op}})^2 Z_{klm}(\omega, \theta, \varphi) = k(k+2) Z_{klm}(\omega, \theta, \varphi), \quad (\text{I.14})$$

$$\frac{1}{\hbar^2} (\mathbf{L}_{(3)}^{\text{op}})^2 Z_{klm}(\omega, \theta, \varphi) = l(l+1) Z_{klm}(\omega, \theta, \varphi), \quad (\text{I.15})$$

$$\frac{1}{\hbar} L_{xy}^{\text{op}} Z_{klm}(\omega, \theta, \varphi) = m Z_{klm}(\omega, \theta, \varphi) \quad (\text{I.16})$$

を満たす。ここで、 $\hbar^2 k(k+2)$, $\hbar^2 l(l+1)$, $\hbar m$ はそれぞれ、 $\hat{\mathbf{L}}_{(4)}^2$, $\hat{\mathbf{L}}_{(3)}^2$, \hat{L}_{xy} の固有値である。 $\hat{\mathbf{L}}_{(3)}^2$ と \hat{L}_{xy} については、通常の3次元空間の球面調和関数の議論が流用でき、量子数 l が非負の整数（ゼロまたは正の整数）に量子化されること、量子数 m は $-l, -l+1, \dots, l-1, l$ のいずれかの値をとる整数に量子化されることがわかる。以降では、超球面調和関数 Z_{klm} の量子数 k も非負の整数に量子化されること、 l のとりうる値の上限が k になることを学ぶ。

このことを見るためには、通常の球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ を使って、

$$Z_{klm}(\omega, \theta, \varphi) = G_{kl}(\omega) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (\text{I.17})$$

と変数分離すればよい。式 (I.17) が (I.15) と (I.16) を満たすことは、 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ が球面調和関数であることから明らかである。一方、(I.14) からは

$$\frac{1}{\sin^2 \omega} \frac{d}{d\omega} \sin^2 \omega \frac{d}{d\omega} G_{kl} + \left[k(k+2) - \frac{l(l+1)}{\sin^2 \omega} \right] G_{kl} = 0 \quad (\text{I.18})$$

が得られ、さらに式 (I.18) を変数 $\zeta = \cos \omega$ を導入して書き直すと

$$\frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}} \frac{d}{d\zeta} \left[(1-\zeta^2)^{3/2} \frac{d}{d\zeta} G_{kl} \right] + \left[k(k+2) - \frac{l(l+1)}{1-\zeta^2} \right] G_{kl} = 0 \quad (\text{I.19})$$

が得られる。このように、 k の量子化の問題は、微分方程式 (I.19) を解く問題に最終的に帰着する。

$l=0$ の場合の微分方程式 (I.19) が、 $\nu=1$, $n=k$ の場合のゲーゲンバウアー微分方程式 (E.52) に一致することに注意しよう。一般の l について微分方程式 (E.52) を解くにあたって、ゲーゲンバウアー微分方程式 (E.52) の知識が使えるようである。そこで、微分方程式 (I.19) に含まれる $l(l+1)$ に比例する項を処理するよう

$$G_{kl} = (1-\zeta^2)^{l/2} \tilde{G}_{kl} \quad (\text{I.20})$$

と置いてみる。実際、式 (I.19) に (I.20) を代入して変形すると

$$\frac{1}{(1-\zeta^2)^{l+1/2}} \frac{d}{d\zeta} \left[(1-\zeta^2)^{l+3/2} \frac{d}{d\zeta} \tilde{G}_{kl} \right] + [k(k+2) - l(l+2)] \tilde{G}_{kl} = 0 \quad (\text{I.21})$$

が得られ、解くべき微分方程式 (I.21) が、ゲーゲンバウアー微分方程式 (E.52) の $\nu=l+1$, $n=k-l$ の場合に帰着できる。

ゲーゲンバウアー微分方程式 (E.52) は $\zeta = \pm 1$ で確定特異点を持つ微分方程式であり、フロベニウスを用いて解くことができる。 $\zeta = \pm 1$ で有限に留まる解が存在することを要求すると、

$n = k - l$ が非負の整数であることがわかる。したがって、超球面調和関数 Z_{klm} では、 k が非負の整数に量子化され、各 k に対して量子数 l は

$$l = 0, 1, 2, \dots, k$$

の値のいずれかである。また、各 l について、量子数 m は

$$m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$$

の $2l + 1$ とおりの可能性があることになる。 k をひとつ固定した場合、とりうる l, m の場合の数は

$$(k + 1)^2 = \sum_{l=0}^k (2l + 1) \quad (I.22)$$

であることがわかる。

超球面調和関数 $Z_{klm}(\omega, \theta, \varphi)$ の具体形は結局、 $n = k - l$ が非負の整数の場合の微分方程式 (I.19) の解が付録 (E.3) で学んだゲーゲンバウアー多項式 (超球多項式) $C_{n=k-l}^{(\nu=l+1)}$ を使って

$$G_{kl} = N_{kl}(1 - \zeta^2)^{l/2} C_{n=k-l}^{(\nu=l+1)}(\zeta) \quad (I.23)$$

となることを用いて、

$$Z_{klm}(\omega, \theta, \varphi) = N_{kl}(1 - \zeta^2)^{\ell/2} C_{n=k-l}^{(\nu=l+1)}(\zeta) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \zeta = \cos \omega \quad (I.24)$$

である。ここで N_{kl} は規格化の定数。

最後に、 Z_{klm} の規格化

$$\int_0^\pi d\omega \sin^2 \omega \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Z_{klm}^* Z_{k'l'm'} = \delta_{kk'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (I.25)$$

を考える。 Y_{lm} がすでに規格化されていることに注意し、ゲーゲンバウアー多項式 $C_n^{(\nu)}$ の直交性の式 (E.53) を用いると、規格化定数 N_{kl} は

$$N_{kl} = \frac{1}{2^\ell \ell!} \left[\frac{2}{\pi} (k + 1) \frac{(k - l)!}{(k + l + 1)!} \right]^{1/2} \quad (I.26)$$

と求められる。

I.2 4次元空間角運動量の量子化 (演算子法)

前節の超球面調和関数を用いた4次元角運動量の議論で、演算子 $\hat{\mathbf{L}}_{(4)}^2$ の固有値が $\hbar^2 k(k + 2)$ に量子化 (k は非負の整数) されることが導かれた。また、 k をひとつの値に固定すると、独立な角運動量の状態数 (l, m の場合の数) が $(k + 1)^2$ であることもわかった (式 (I.22))。この節では演算子法を用いて、これらの結果を再現してみよう。

そのためには、4次元空間の6つの角運動量演算子 \hat{L}_{ij} を直接取り扱うのではなく、線形結合を取り直して

$$\hat{A}_1 \equiv \frac{1}{2} (\hat{L}_{yz} + \hat{L}_{wx}), \quad \hat{A}_2 \equiv \frac{1}{2} (\hat{L}_{zx} + \hat{L}_{wy}), \quad \hat{A}_3 \equiv \frac{1}{2} (\hat{L}_{xy} + \hat{L}_{wz}), \quad (I.27)$$

$$\hat{B}_1 \equiv \frac{1}{2} (\hat{L}_{yz} - \hat{L}_{wx}), \quad \hat{B}_2 \equiv \frac{1}{2} (\hat{L}_{zx} - \hat{L}_{wy}), \quad \hat{B}_3 \equiv \frac{1}{2} (\hat{L}_{xy} - \hat{L}_{wz}) \quad (I.28)$$

で定義される演算子 \hat{A}_i と \hat{B}_i ($i = 1, 2, 3$) を用いて考えるとよい。このようにすると、角運動量演算子 \hat{A}_i, \hat{B}_i の交換関係が

$$[\hat{A}_i, \hat{B}_j] = 0 \quad (\text{I.29})$$

となり、演算子 \hat{A}_i と演算子 \hat{B}_i がそれぞれで閉じた交換関係を持つからである。さらに、 \hat{A}_i どの交換関係と、 \hat{B}_i どの交換関係が

$$[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = i\hbar\hat{A}_3, \quad [\hat{A}_2, \hat{A}_3] = i\hbar\hat{A}_1, \quad [\hat{A}_3, \hat{A}_1] = i\hbar\hat{A}_2, \quad (\text{I.30})$$

$$[\hat{B}_1, \hat{B}_2] = i\hbar\hat{B}_3, \quad [\hat{B}_2, \hat{B}_3] = i\hbar\hat{B}_1, \quad [\hat{B}_3, \hat{B}_1] = i\hbar\hat{B}_2, \quad (\text{I.31})$$

となり、それぞれが3次元角運動量の交換関係 (7.25) と同型であることもわかる。したがって、角運動量 \hat{A}_i, \hat{B}_i の量子化には、本文 7.2 節と 8.1 節で説明した3次元角運動量の演算子法による量子化の方法がそのまま適用できる。つまり、演算子 $\hat{\mathbf{A}}^2$ と $\hat{\mathbf{B}}^2$ を

$$\hat{\mathbf{A}}^2 \equiv \sum_{i=1,2,3} \hat{A}_i^2, \quad \hat{\mathbf{B}}^2 \equiv \sum_{i=1,2,3} \hat{B}_i^2 \quad (\text{I.32})$$

と定義し、それらの固有値を

$$\hbar^2\ell_A(\ell_A + 1), \quad \hbar^2\ell_B(\ell_B + 1), \quad (\text{I.33})$$

とすると、 ℓ_A, ℓ_B は、 $0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ に量子化される。また、 \hat{A}_3, \hat{B}_3 の固有値を m_A, m_B とするとそれらの取りうる値は

$$m_A = -\ell_A, -\ell_A + 1, \dots, \ell_A - 1, \ell_A, \quad (\text{I.34})$$

$$m_B = -\ell_B, -\ell_B + 1, \dots, \ell_B - 1, \ell_B, \quad (\text{I.35})$$

であることがわかる。

定義に基づいて $\hat{\mathbf{A}}^2, \hat{\mathbf{B}}^2$ を具体的に計算すると

$$\hat{\mathbf{A}}^2 = \hat{\mathbf{B}}^2 = \frac{1}{4}\hat{\mathbf{L}}_{(4)}^2 \quad (\text{I.36})$$

が得られることに注意しよう。したがって、 $\hat{\mathbf{L}}_{(4)}^2$ の固有値を $\hbar^2k(k+2)$ とすると

$$\ell_A(\ell_A + 1) = \ell_B(\ell_B + 1) = \frac{1}{4}k(k+2) \quad (\text{I.37})$$

となり

$$\ell_A = \ell_B = \frac{1}{2}k \quad (\text{I.38})$$

が得られ、 $k = 2\ell_A = 2\ell_B$ が非負の整数に量子化されることが見て取れる。また、 k を固定したときの独立な状態の数は

$$(2\ell_A + 1)(2\ell_B + 1) = (k + 1)^2 \quad (\text{I.39})$$

と計算され、前節の結果とたしかに一致している。

J 球ベッセル関数と3次元井戸型ポテンシャル

J.1 3次元自由粒子波動関数の球座標表示

3次元自由粒子

$$V = 0 \quad (\text{J.1})$$

の波動関数を球座標を用いて考察しよう。このときの動径方程式は

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E \right] R(r) = 0 \quad (\text{J.2})$$

である。エネルギーを

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2 \quad (\text{J.3})$$

とし、動径座標を無次元量

$$\rho \equiv kr \quad (\text{J.4})$$

に取り直して動径方程式を書き直すと

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + 1 \right] R = 0 \quad (\text{J.5})$$

が得られる。この節では、微分方程式 (J.5) の解について考察しよう。

ここでは、 $\rho \rightarrow \infty$ ($r \rightarrow \infty$) の領域を考えよう。このとき主要項だけをとって動径方程式を考察すると

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + 1 \right] R \simeq 0 \quad (\text{J.6})$$

となって、解

$$R \sim e^{\pm i\rho} = e^{\pm ikr} \quad (\text{J.7})$$

が得られることがわかる。⁴¹ つまり、十分遠方では、波動関数は平面波と同様の振動解としてふるまっている。このような球対称な自由粒子の解を球面波と呼ぶ。

J.2 球ベッセル関数

ここでは、3次元自由粒子の波動関数の球座標表示をもう少し精密に行おう。

まず、この微分方程式 (J.5) の解の $\rho \ll 1$ の領域を級数展開で調べる。この微分方程式は、 $\rho = 0$ で確定特異点を持つので

$$R_\ell(\rho) = \rho^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (\text{J.8})$$

と展開可能である。フロベニウスの方法での決定方程式を解くことで冪 s は求められ、その結果は

$$s = \ell, -\ell - 1 \quad (\text{J.9})$$

である。つまり、 $\rho = 0$ ($r = 0$) 近傍で、

$$R_\ell \sim \rho^\ell, \quad (\text{J.10})$$

⁴¹ もう少し近似の精度をあげると、実際は $R \sim e^{\pm ikr}/r$ であることもわかる。 $1/r$ の項は確率流の保存に由来する。

と

$$R_\ell \sim \frac{1}{\rho^{\ell+1}} \quad (\text{J.11})$$

の2種の解が存在している。式 (J.10) の解を原点で正則な解、式 (J.11) の解を正則でない解と呼ぶ。平面波の場合と同様、自由粒子を取り扱う場合は、(系を適当な有限領域に限って定義しないかぎり) 波動関数の二乗可積分条件を課することができないことに注意しておく。

動径波動関数 R_ℓ のふるまいをより精密に決定するためには、級数展開 (J.8) での係数 a_k の漸化式を解けばよい。微分方程式 (J.5) は、 $\rho = 0$ の確定特異点を除いて ρ の有限領域には特異点が存在していない。このような場合の2階微分方程式の解は、合流型超幾何関数の理論を使って記述できることが知られている。ただ、球面波の微分方程式 (J.5) の場合は、初等関数の知識だけを使って解を得ることも可能である。この節では、超幾何関数や合流型超幾何関数の議論は省略し、初等関数の知識だけを使った解の導出方法を紹介する。

そのために

$$R_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell \chi_\ell(\rho) \quad (\text{J.12})$$

なる関数 χ_ℓ を導入する。動径方程式 (J.5) を χ_ℓ について書き直すと

$$D_\ell \chi_\ell = 0, \quad D_\ell \equiv \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2(\ell+1)}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 \quad (\text{J.13})$$

が得られる。 ρ の任意の関数 f に対し、微分演算子 D_ℓ は

$$D_\ell \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} f = \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} D_{\ell-1} f \quad (\text{J.14})$$

なる性質をもつことに注意。式 (J.14) をよく見ると、いったん $D_{\ell-1} \chi_{\ell-1} = 0$ の解 $\chi_{\ell-1}$ が得られれば、 $D_\ell \chi_\ell = 0$ の解 χ_ℓ が

$$\chi_\ell = \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \chi_{\ell-1} \quad (\text{J.15})$$

の形で自動的に求めることができる構造になっていることがわかる。

量子力学での対応物はないが、 $\ell = -1$ のとき微分方程式はとても単純な形

$$D_{-1} \chi_{-1} = 0, \quad D_{-1} = \frac{d^2}{d\rho^2} + 1 \quad (\text{J.16})$$

をしており、その解は

$$\chi_{-1} = -C_1 \cos \rho - C_2 \sin \rho \quad (\text{J.17})$$

である。ここで C_1 と C_2 は任意定数。これを式 (J.15) を適用すれば、 $\ell = 0$ のときの解 χ_0 が

$$\chi_0 = \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \chi_{-1} = \frac{C_1}{\rho} \sin \rho - \frac{C_2}{\rho} \cos \rho \quad (\text{J.18})$$

であることがわかる。さらに任意の整数 $\ell \geq 0$ のときの解 χ_ℓ が

$$\chi_\ell = \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \chi_{\ell-1} = C_1 \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right) - C_2 \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \left(\frac{\cos \rho}{\rho} \right) \quad (\text{J.19})$$

であることを示すことも容易である。

以上の結果をまとめると、微分方程式 (J.5) の解が

$$R_\ell = C_j^{(\ell)} j_\ell(\rho) + C_n^{(\ell)} n_\ell(\rho) \quad (\text{J.20})$$

で与えられることがわかる。ここで、 $C_j^{(\ell)}$, $C_n^{(\ell)}$ は定数であり、関数 $j_\ell(\rho)$ と $n_\ell(\rho)$ は

$$j_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right), \quad (\text{J.21})$$

$$n_\ell(\rho) = -(-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \left(\frac{\cos \rho}{\rho} \right) \quad (\text{J.22})$$

で定義されている。 $j_\ell(\rho)$ は $\rho = 0$ で正則であるが、 $j_\ell(\rho)$ は $\rho = 0$ で正則でないことに注意。球面状に外向きに進行する球面波を表す解と内向きに進行する波を表す解は j_ℓ と n_ℓ の重ね合わせで記述され、それぞれ

$$h_\ell^{(1)} = j_\ell(\rho) + in_\ell(\rho), \quad (\text{J.23})$$

$$h_\ell^{(2)} = j_\ell(\rho) - in_\ell(\rho), \quad (\text{J.24})$$

である。

関数 j_ℓ , n_ℓ , $h_\ell^{(1)}$, $h_\ell^{(2)}$ を総称して球ベッセル関数と呼ぶ⁴²。関数 j_ℓ を (狭い意味の) 球ベッセル関数、 n_ℓ を球ノイマン関数、 $h_\ell^{(1)}$, $h_\ell^{(2)}$ を球ハンケル関数と呼ぶ。

以下に、 $\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ の場合について、球ベッセル関数 $j_\ell(\rho)$ と球ノイマン関数 $n_\ell(\rho)$ の具体形を示す。

$$\begin{aligned} j_0(\rho) &= \frac{1}{\rho} \sin \rho, \\ n_0(\rho) &= -\frac{1}{\rho} \cos \rho, \\ j_1(\rho) &= \frac{1}{\rho^2} \sin \rho - \frac{1}{\rho} \cos \rho, \\ n_1(\rho) &= -\frac{1}{\rho^2} \cos \rho - \frac{1}{\rho} \sin \rho, \\ j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho, \\ n_2(\rho) &= -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho, \\ j_3(\rho) &= \left(\frac{15}{\rho^4} - \frac{6}{\rho^2} \right) \sin \rho - \left(\frac{15}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho, \\ n_3(\rho) &= -\left(\frac{15}{\rho^4} - \frac{6}{\rho^2} \right) \cos \rho - \left(\frac{15}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho, \\ j_4(\rho) &= \left(\frac{105}{\rho^5} - \frac{45}{\rho^3} + \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \left(\frac{105}{\rho^4} - \frac{10}{\rho^2} \right) \cos \rho, \\ n_4(\rho) &= -\left(\frac{105}{\rho^5} - \frac{45}{\rho^3} + \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \left(\frac{105}{\rho^4} - \frac{10}{\rho^2} \right) \sin \rho. \end{aligned}$$

⁴² このように、球ベッセル関数は3次元量子力学の自由粒子の波動関数を球座標表示するときにあられる関数である。同様に、3次元量子力学の自由粒子の波動関数の円筒座標表示にはベッセル関数 (円筒関数) があられる。

球ハンケル関数 $h^{(1)}, h^{(2)}$ の具体形は、 ρ の代わりに $\rho = i\tilde{\rho}$ で定義される $\tilde{\rho}$ で表すと見やすくなる。

$$\begin{aligned} h_0^{(1)}(i\tilde{\rho}) &= -\frac{1}{\tilde{\rho}}e^{-\tilde{\rho}}, \\ h_0^{(2)}(i\tilde{\rho}) &= \frac{1}{\tilde{\rho}}e^{+\tilde{\rho}}, \\ h_1^{(1)}(i\tilde{\rho}) &= i\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2}\right)e^{-\tilde{\rho}}, \\ h_1^{(2)}(i\tilde{\rho}) &= i\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} - \frac{1}{\tilde{\rho}^2}\right)e^{+\tilde{\rho}}, \\ h_2^{(1)}(i\tilde{\rho}) &= \left(\frac{1}{\tilde{\rho}} + \frac{3}{\tilde{\rho}^2} + \frac{3}{\tilde{\rho}^3}\right)e^{-\tilde{\rho}}, \\ h_2^{(2)}(i\tilde{\rho}) &= -\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} - \frac{3}{\tilde{\rho}^2} + \frac{3}{\tilde{\rho}^3}\right)e^{+\tilde{\rho}}, \\ h_3^{(1)}(i\tilde{\rho}) &= -i\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} + \frac{6}{\tilde{\rho}^2} + \frac{15}{\tilde{\rho}^3} + \frac{15}{\tilde{\rho}^4}\right)e^{-\tilde{\rho}}, \\ h_3^{(2)}(i\tilde{\rho}) &= -i\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} - \frac{6}{\tilde{\rho}^2} + \frac{15}{\tilde{\rho}^3} - \frac{15}{\tilde{\rho}^4}\right)e^{+\tilde{\rho}}, \\ h_4^{(1)}(i\tilde{\rho}) &= -\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} + \frac{10}{\tilde{\rho}^2} + \frac{45}{\tilde{\rho}^3} + \frac{105}{\tilde{\rho}^4} + \frac{105}{\tilde{\rho}^5}\right)e^{-\tilde{\rho}}, \\ h_4^{(2)}(i\tilde{\rho}) &= \left(\frac{1}{\tilde{\rho}} - \frac{10}{\tilde{\rho}^2} + \frac{45}{\tilde{\rho}^3} - \frac{105}{\tilde{\rho}^4} + \frac{105}{\tilde{\rho}^5}\right)e^{+\tilde{\rho}}. \end{aligned}$$

$\tilde{\rho} \rightarrow \infty$ の極限で、 $h^{(1)}(i\tilde{\rho})$ はゼロになり、 $h^{(2)}(i\tilde{\rho})$ は無限大になることに注意しておく。

最後に、球ベッセル関数の $\rho \ll 1$ と $\rho \gg \ell$ での性質を（証明抜きで）まとめておく。証明は比較的簡単なので、各自で確かめておくとよい。

- $\rho \ll 1$ での球ベッセル関数のふるまい

$$j_\ell(\rho) \simeq +\frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!}, \quad (\text{J.25})$$

$$n_\ell(\rho) \simeq -\frac{(2\ell-1)!!}{\rho^{\ell+1}}. \quad (\text{J.26})$$

ここで $n!!$ は自然数 n の二重階乗を意味し、 n が奇数であれば 1 から n までのすべての奇数の積を、 n が偶数であれば 1 から n までのすべての偶数の積を表す。

$$1!! = 1, \quad 2!! = 2, \quad 3!! = 3 \cdot 1, \quad 4!! = 4 \cdot 2, \quad 5!! = 5 \cdot 3 \cdot 1, \quad \dots$$

- $\rho \gg \ell$ での球ベッセル関数のふるまい

$$j_\ell(\rho) \simeq \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right), \quad (\text{J.27})$$

$$n_\ell(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right). \quad (\text{J.28})$$

つまり、原点で正則な解 $R_\ell = j_\ell(kr)$ は、 $r \gg \ell/k$ では

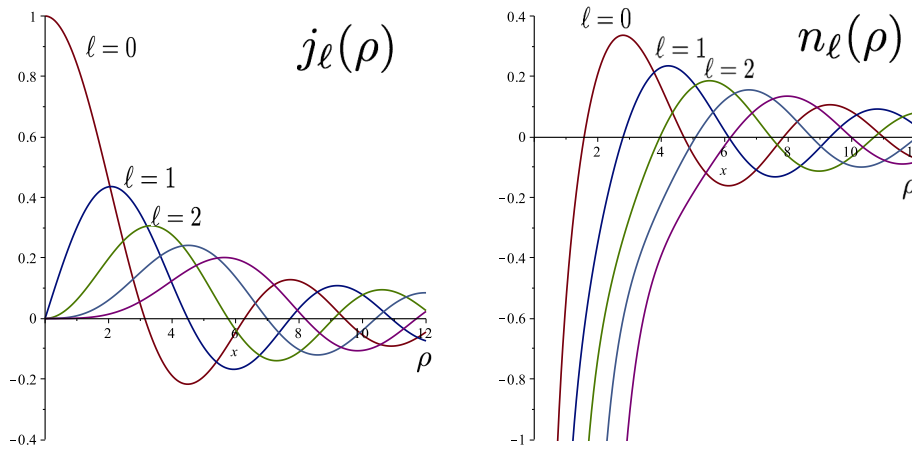
$$R_\ell(r) \simeq -\frac{1}{2ikr} \left[e^{-i(kr-\ell\pi/2)} - e^{i(kr-\ell\pi/2)} \right]$$

と近似できる。この式の初項は原点に向かって落ち込んで行く球面波を、第 2 項は原点から外向きに出て行く球面波を表している。原点で正則な解 $R_\ell = j_\ell(kr)$ において、この両者の大きさは等しい。

	$\ell = 0$	1	2	3	4	5	6	7	8
$n = 1$	3.14	4.49	5.76	6.99	8.18	9.36	10.51	11.66	12.79
2	6.28	7.73	9.10	10.42	11.70	12.97	14.21	15.43	16.64
3	9.42	10.90	12.32	13.70	15.04	16.35	17.65	18.92	20.18
4	12.57	14.07	15.51	16.92	18.30	19.65	20.98	22.30	23.59
5	15.71	17.22	18.69	20.12	21.53	22.90	24.27	25.60	26.93
6	18.85	20.37	21.85	23.30	24.73	26.13	27.51	28.87	30.22

表 2: 球ベッセル関数 $j_\ell(x)$ の n 番目のゼロ点 $x_{\ell,n}$ の値

$\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ について、球ベッセル関数 $j_\ell(\rho)$ と球ノイマン関数 $n_\ell(\rho)$ の振る舞いを下図に示す。



$\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ の場合の球ベッセル関数 $j_\ell(\rho)$

$\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ の場合の球ノイマン関数 $n_\ell(\rho)$

付録 J.2 で示されるように、微分方程式 (J.6) の一般解は、球ベッセル関数 $j_\ell(\rho)$ と球ノイマン関数 $n_\ell(\rho)$ を用いて、

$$R(\rho) = C_j j_\ell(\rho) + C_n n_\ell(\rho) \quad (\text{J.29})$$

で与えられる。球ベッセル関数 $j_\ell(\rho)$ は $\rho = 0$ で正則であり、球ノイマン関数 $n_\ell(\rho)$ は正則ではないことに注意。

具体的な計算を行ううえで、球ベッセル関数 $j_\ell(x)$ のゼロ点 $x_{\ell,n}$ の値 ($j_\ell(x_{\ell,n}) = 0$ の解) が必要になることがある。ゼロ点 $x_{\ell,n}$ の値を小数点以下の有効数字 2 ケタで表 2 にまとめておく。十分に大きな n では、球ベッセル関数の漸近形の式 (J.27) で期待されるように

$$x_{\ell,n} = \left(n + \frac{1}{2}\ell \right) \pi \quad (\text{J.30})$$

で $x_{\ell,n}$ が近似できることに注意すること。

J.3 球の内部に閉じ込められた粒子

半径 a の球の内部に閉じ込められた質量 μ の粒子のエネルギー準位と波動関数を考えよう。そのために無限に深い球対称井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{for } r \leq a \\ \infty & \text{for } r > a \end{cases} \quad (\text{J.31})$$

を導入し、このポテンシャルに束縛された質量 μ の粒子の量子力学を考える。ここで r は球座標系での動径座標である。考えている粒子のエネルギーを E とし、

$$k \equiv \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} \quad (\text{J.32})$$

で k を定義すると、半径 a のこの球の内部では、前節で求めた自由粒子の球対称解をそのまま使うことがわかる。ただし前節とは違って、この節での状況設定では二乗可積分条件が使えること、また、 $r = a$ での波動関数がゼロにならねばならないことに注意する。

- 二乗可積分であること、原点でのシュレディンガー方程式を満たさねばならないことから、動径波動関数の線形独立なふたつの解 j_ℓ と n_ℓ のうち、正則でないほうの解 n_ℓ を捨てることができる。したがって、動径波動関数が(規格化の定数 C を除いて)ほぼ完全に決定でき、球ベッセル関数を使って

$$R_\ell = C j_\ell(kr) \quad (\text{J.33})$$

と表すことができる。規格化の定数を求めるには、

$$1 = |C|^2 \int_0^a dr r^2 |j_\ell(kr)|^2 \quad (\text{J.34})$$

を計算すれば良い。

- $r = a$ で波動関数がゼロになることから

$$j_\ell(kr) = 0 \quad (\text{J.35})$$

が要求される。したがって k は、球ベッセル関数 j_ℓ の n 番目のゼロ点 $x_{\ell,n}$ を使って、

$$k = \frac{x_{\ell,n}}{a} \quad (\text{J.36})$$

と量子化される。エネルギーの量子化は

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{x_{\ell,n}}{a} \right)^2 \quad (\text{J.37})$$

である。

軌道角運動量量子数 ℓ については *spdfg*... のアルファベット表記を採用し、動径方向の量子数 n (E の量子化の式 (J.37) で、 n 番目のゼロ点の場合) を用いて、 $1s, 2s, 2p, \dots$ のようにハミルトニアン固有状態をラベルすることにする。

これらの状態をエネルギー固有値の低い順番にリストすると

$$1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 1h, \dots$$

となる。水素原子のときに存在したようなアクシデンタルな縮退は存在しないことに注意すること。また、この結果は、表 2 から容易に読み取れるので各自確かめておくこと。

J.4 3次元球対称井戸型ポテンシャル

この付録では、質量 μ の粒子の3次元球対称井戸型ポテンシャル

$$V(\vec{x}) = V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{for } r < a, \\ 0, & \text{for } r > a, \end{cases} \quad r \equiv \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (\text{J.38})$$

への束縛状態を考える⁴³。ここで、 $a > 0$ は長さの次元をもつ定数（井戸の半径）であり、 $-V_0 < 0$ は井戸の深さを表す。

時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$Eu = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{x}) \right] u \quad (\text{J.39})$$

を球座標を用いて書き直し、波動関数 u を

$$u = R_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (\text{J.40})$$

と変数分離することで、動径方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] R_\ell(r) = 0 \quad (\text{J.41})$$

を得る。 $k > 0$ と $\kappa > 0$ を

$$E + V_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2, \quad E = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \kappa^2 \quad (\text{J.42})$$

で定義する。動径方程式 (J.41) を解くことによって、動径関数 $R_\ell(r)$ が、球ベッセル関数を用いて

$$R_\ell(r) = \begin{cases} A_\ell j_\ell(kr) + B_\ell n_\ell(kr), & \text{for } r < a, \\ C_\ell h_\ell^{(1)}(i\kappa r) + D_\ell h_\ell^{(2)}(i\kappa r), & \text{for } r > a, \end{cases} \quad (\text{J.43})$$

と表せることがわかる。ここで、 $j_\ell, n_\ell, h_\ell^{(1)}, h_\ell^{(2)}$ の定義は付録 J.2 を参照のこと。また、 $A_\ell, B_\ell, C_\ell, D_\ell$ は定数である。 $r = 0$ で波動関数が正則であることと、 $\lim_{r \rightarrow \infty} R_\ell(r) = 0$ より、 $B_\ell = D_\ell = 0$ でなければならない。さらに、 $r = a$ における接続条件から、

$$A_\ell j_\ell(ka) = C_\ell h_\ell^{(1)}(i\kappa a), \quad A_\ell k j_\ell'(ka) = C_\ell i\kappa h_\ell^{(1)'}(i\kappa a) \quad (\text{J.44})$$

が得られる。ここで、 $j_\ell', h_\ell^{(1)'}$ はそれぞれ球ベッセル関数の導関数である。式 (J.44) が非自明な解をもつためには、

$$\det \begin{pmatrix} j_\ell(ka) & -h_\ell^{(1)}(\kappa a) \\ k j_\ell'(ka) & -i\kappa h_\ell^{(1)' }(\kappa a) \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{J.45})$$

を満たされねばならない。

以下では、角運動量がゼロ ($\ell = 0$) のときについて条件 (J.45) を少し詳しく調べてみよう。このとき、条件 (J.45) から

$$\kappa = -\frac{k}{\tan ka} \quad (\text{J.46})$$

が得られる。これは1次元量子力学での井戸型ポテンシャルの奇パリティ解の存在条件式 (4.70) とまったく同一の条件である。つまり、3次元量子力学の球対称井戸型ポテンシャルに対し、 $\ell = 0$ の束縛状態が存在するためには、ポテンシャルの深さ V_0 は

$$V_0 a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu} \quad (\text{J.47})$$

⁴³ 3次元球対称井戸型ポテンシャルが引き起こす粒子散乱の散乱断面積計算は、量子力学3で学ぶ。

の条件を満たさねばならない。同様に、 $l = 1$ の束縛状態が存在するためには、ポテンシャルの深さは

$$V_0 a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu} \quad (\text{J.48})$$

を満たさねばならないことがわかる。

1次元量子力学では、どんなにポテンシャルが浅くても、引力でありさえすれば束縛状態が存在したことを思い起こそう。この性質は、実は、1次元の場合に特有のものであって2次元以上の量子力学では成立しない性質である。2次元以上の場合、ポテンシャルが非常に浅い場合は粒子を束縛することが不可能になる。