

量子力学

岡部 洋一

放送大学教授 (東京大学名誉教授)

2020 年 5 月 3 日

起草: 1975 年

Shrödinger 方程式と波動関数を用いた標準的な量子力学の導入は、スピンの概念の習得の際、大きなバリアを感じる人が多い。これを妨げるには、Dirac が導入し、Feynman が教育に普遍させた bracket 表示を使用するのが一番である。これにより、スピンのような離散量と波動関数のような連続量を統一的に扱うことができる。本書は Feynman 風の教育方を、やや電子工学に適した形でまとめたものである。

All Rights Reserved (c) Yoichi OKABE 1975-present.

個人の使用以外のコピーを禁じます。また、再コピーおよび再配布は禁止します。ただし、教育目的に限り、再コピー、再配布は原著者を明示するという条件でのみ許諾します。

[[HTML ファイル](#)] [[PDF ファイル](#)] [[量子力学の掲示板](#)]

[[岡部の Web に公開の文書](#)] [[岡部のトップページ](#)]

目次

第 1 章	干渉性と計数性	6
1.1	光は波動か粒子か	6
1.2	光の干渉性と計数性	11
1.3	確率振幅と確率で波動性と計数性を共に説明する	14
1.4	アインシュタイン-ド・ブロイの関係	16
第 2 章	量子状態と確率振幅	19
2.1	基底状態	20
2.2	基底展開と成分	26
2.3	基底の変換	30
2.4	オペレータ	33
2.5	共役オペレータ	37
2.6	基底状態の組の作り方	39
第 3 章	運動方程式	43
3.1	時間経過オペレータ	43
3.2	運動方程式	45
3.3	ハミルトニアン・オペレータ \hat{H}	47
3.4	運動方程式の解	50
3.5	固有状態の直交性	55
第 4 章	二状態系の運動	60
4.1	水素分子イオン	60
4.2	電子のスピン	67
4.3	磁界中でのスピンの回転	78

4.4	二状態系の例	84
4.5	時変系の運動方程式	87
第 5 章	格子上の粒子の運動	96
5.1	一次元格子上の粒子の運動方程式	96
5.2	運動方程式の解	99
5.3	運動量基底状態	102
5.4	格子上の粒子の運動	108
5.5	格子の運動量とエネルギー	113
第 6 章	シュレディンガー方程式	117
6.1	電子の位置基底状態と運動量基底状態	118
6.2	不確定性原理	125
6.3	自由粒子のシュレディンガー方程式	127
6.4	自由粒子のシュレディンガー方程式の解	131
6.5	ポテンシャル中の粒子の運動方程式	136
6.6	ポテンシャル中の粒子の定常状態	138
6.7	ポテンシャル中の粒子の運動	140
6.8	三次元空間内の粒子の運動	140
第 7 章	対称性と保存則	142
7.1	対称性と対称操作	142
7.2	運動方程式の対称性	145
7.3	並進対称性と運動量	147
第 8 章	角運動量	154
8.1	回転対称性と角運動量	154
8.2	スピン 1/2 粒子の合成	161
8.3	任意の角運動量の合成	167
第 9 章	多粒子系	168
9.1	ボーズ粒子	168
9.2	フェルミ粒子	171
9.3	多粒子系のハミルトニアン	174

9.4	ボーズ粒子系のハミルトニアン	176
9.5	フェルミ粒子系のハミルトニアン	177
9.6	多粒子系のハミルトニアンの一般的な取扱い	178

第 1 章

干渉性と計数性

20 世紀初め、光は干渉効果のような波動的振舞いをする一方で、エネルギー的には粒子的振舞いをするという奇妙な性質を持つことが発見された。量子力学は、このどちらとも言えない一見矛盾する性質を、そのままあるがままに受け入れようという立場から生まれた。

1.1 光は波動か粒子か

光は昔、粒子 (particle) の流れと考えられていた。例えばニュートン (Newton) は光の屈折現象を説明するのに、図 1.1 のように、光粒子が空気中からガラスへ突入するときに、境界でガラス方向への撃力を受け、進行方向が曲げられるからである、と理解した。

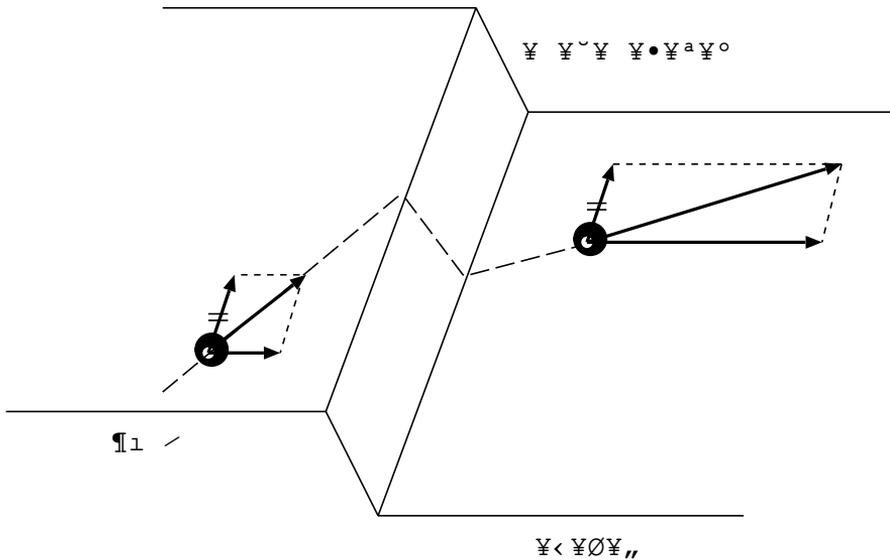


図 1.1 光の屈折の粒子的理解。境界で面垂直方向の力を受け加速される

問題 1.1 光を粒子として、屈折現象を説明せよ。運動量の境界面接線方向の成分 p_x とエネルギー E は、境界突入前後で保存されるが、運動量の法線方向の成分 p_y は、変化するものとする。なお、空気中では、 $E = cp$ (c は空気中での光速)、ガラス中では、 $E' = c'p'$ (c' はガラス中での光速、 $c' < c$) の関係が成立する。

答え

$$\sin \theta = \frac{p_x}{p} = \frac{cp_x}{E} = \frac{cp'_x}{E'} = \frac{cp'_x}{c'p'} = \frac{c}{c'} \sin \theta'$$

ところが、その後、光には「回折現象」や「干渉現象」の有ることがわかり、光を波動 (wave) と見なした方が良く、と考えられるようになった。屈折は、図 1.2 のように、ガラス中で光波の波長の短縮することから、理解された。この光の波動説は、マックスウェル (Maxwell) が電磁波を理論的に予言し、かつ、光が短波長の電磁波であることが判明してからは、さらに、ゆるぎのない地位を確立した。つまり、光は電磁波の電界と磁界の振動の伝播であるという、具体的な波動のイメージを、与えられたのである。

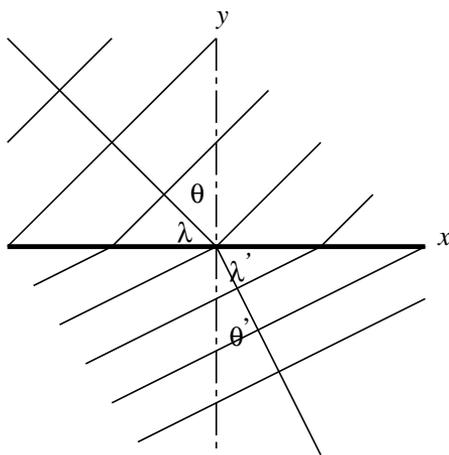


図 1.2 光の屈折の波動的理解。ガラスの中の波長が短いため波面の方向が変化する

問題 1.2 光を波動として、屈折現象を説明せよ。ガラス中での光の波長 λ' は、空気中での波長 λ に対し、 c'/c で短縮し、また、波の山のピークの位置は、境界面上で一致するとせよ。

答え

$$\frac{\lambda}{\sin \theta} = \frac{\lambda'}{\sin \theta'} \quad \text{より} \quad \sin \theta = \frac{\lambda}{\lambda'} \sin \theta' = \frac{c}{c'} \sin \theta'$$

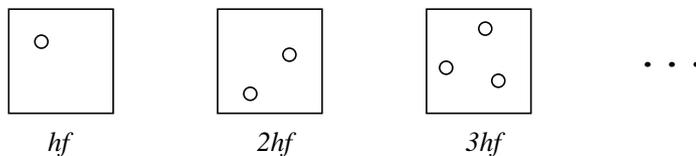


図 1.3 箱の中の光に対するプランクの仮説。周波数は波動としての共振周波数で決まるが、エネルギーは粒子のように数えられる。平均エネルギーはこれらの熱力学的平均値で与えられる。

これで一件落着のように思われたが、19 世紀末から 20 世紀へと入る時期に、再び「光は波動であるが、同時に、粒子のように振る舞う」と考えなければ理解のできない現

象が、次々と見いだされてきた。まずプランク (Planck) は、加熱された箱の中に閉じ込められた光の、エネルギーの周波数依存性を解析し、箱の中には、波動として共振するいくつかの周波数の光のみが存在するが、その周波数の波動の持ちうる全振動エネルギーは、図 1.3 のように、 $E = hf$ の整数倍しか取りえないことを示した。これを黒体放射 (blackbody radiation) と呼ぶ。ここで f は共振周波数であり、 h は、プランク定数 (Planck constant) と呼ばれるおよそ 6.63×10^{-34} Js の一定値である。つまり、箱の中には、 hf のエネルギーを持った光の塊、つまり粒子が、いくつか入っているように見え、光が「数え得る」という計数性を有する粒子 (particle) であることが示された。この意味で、光は光子 (photon) と呼ばれるようになった。

問題 1.3 温度 T の箱の中では、周波数 f の光は、色々な総エネルギー U の状態を取りうるが、その可能性は、 U の高くなるほど、 $\exp(-U/kT)$ に比例して、減少する (k はボルツマン定数 (Boltzmann constant))。このことを利用して、箱の中の光の平均エネルギー $\langle U \rangle$ を求めよ。 U が連続した値を取りうる場合と、 hf の整数倍の値しかとり得ない場合の、両方について計算せよ。

ヒント

$$\int dx \exp(-\alpha x) = \frac{1}{\alpha}, \quad \int dx x \exp(-\alpha x) = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int dx \exp(-\alpha x)$$

$$\sum_n \exp(-\alpha n) = \frac{1}{1 - \exp(-\alpha)}, \quad \sum_n n \exp(-\alpha n) = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \sum_n \exp(-\alpha n)$$

答え

$$\langle U \rangle = \int dU U \exp(-U/kT) / \int dU \exp(-U/kT) = kT$$

同様に次式が得られる。

$$\langle U \rangle = \frac{hf}{\exp(hf/kT) - 1} \quad (\text{プランクの法則 (Planck law)})$$

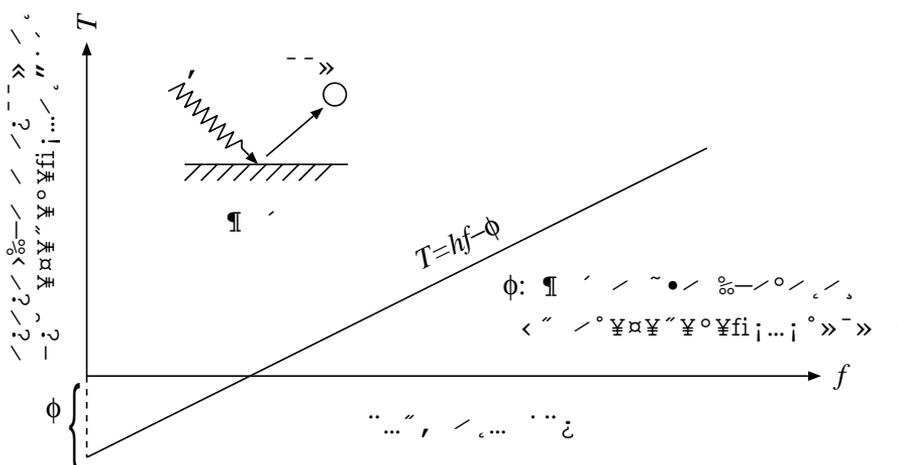


図 1.4 光電効果。アインシュタインは光が電子に与えることのできるエネルギーが hf であることを示した

続いてアインシュタイン (Einstein) は、光が金属から電子をたたき出す光電効果 (photo-voltaic effect) を解析した。その結果はプランクの結果と同じで、図 1.4 のように、光は、電子に一度に hf だけの決まった量のエネルギーを与えることしかできず、波動に見られるような、少しずつエネルギーを与えていくという振舞をしないことが判明した。ここでも、光は周波数に依存したエネルギーの塊、つまり粒子 (particle) であることが示されたのである。

では、光は波動なのか粒子なのかというと、現在の答えは両方であるということになる。つまり、干渉性 (coherency) もあれば同時に計数性 (countability) もあるからなのである。これら双方を両立させて、一つの概念にまとめあげたものが、20 世紀と共に成長した量子力学 (quantum mechanics) である。

問題 1.4 問 1.1 と問 1.2 の二つの解法は、 $p = h/\lambda$ の関係を利用すると、実は同じ形となることを示せ。

ヒント $\lambda_x = \lambda / \sin \theta$ 、 $\lambda_y = \lambda / \cos \theta$ 、 $p_x = h/\lambda_x$ など。

干渉性と計数性を併せ持つのは光だけかということ、電子 (electron) もそうである。電子は、素電荷 (elementary charge) と呼ばれる決まった大きさの電荷 ($e \cong 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$) を持ち、一個、二個と数えられることから、従来、粒子と考えられてきた。ところが、電子

流を結晶に当てると、X線回折に見られるような、きれいな干渉パターンの現れることが発見され、波動性を併せ持つことが判明した。干渉パターンから推定される電子の波長 λ は、電子ビームを構成している電子一個の持つ運動量 (momentum) p と、 $p = h/\lambda$ の関係で結ばれ、プランクの定数 h が、電子でも重要な役割を持つことが、明らかとなった。

「干渉性と計数性の両立」という重要な概念は、その後、光、電子のみならず陽子、中性子から、さらに原子、分子とあらゆるものに共通な概念であることが判明し、現在では、すべての物質、現象が干渉性と計数性の両面を持つ、量子力学に従って振る舞っていると考えられている。ただ、量子力学の奇妙さは原子、分子の程度の小さな寸法でしか顕著に現れないため、我々の目に見える程度の大きさの現象は、ほとんど古典力学で説明されるのである。

1.2 光の干渉性と計数性

光の検出器としては、フォトダイオードや光電管が用いられるが、これらはいずれも、光電効果を利用したもので、光により、たたき出された電子により流れる、電流を利用し、電気信号を得るものである。この信号を増幅し、メータに表示することにより、光の強度に応じた出力を、読むことができる。光の強度が極めて弱いとき、メータの針は面白い動きをする。図 1.5 に示すように、メータはパルス的に動く。各パルスは大きさが等しく、パルスの数によって、光の数を数えることができる。パルスの発生は、完全に不規則 (ランダム) である。光の強度を少し強めると、単位時間あたりの平均パルス数が増加する。さらに強度を強めると、パルスは重なり出し、メータは一定値に、揺らぎののったような形となる。この揺らぎは量子雑音と呼ばれ、強度の増加と共に少しずつ増えてはいくが、メータの振れの平均値に比べると、相対的に減少していく。従って、強い光に対し増幅度を落として、メータの振れを観測すると、強度に比例したほぼ一定値を示すようになる。

光電効果を利用していない写真を検出器として利用したらどうだろうか。写真を弱い光でとると、薄く感光し、強い光では濃く感光するので、写真は光の強度に対し、連続的な検出器となっていそうである。ところが、現像した写真を、顕微鏡で詳しく調べてみると、全体が薄く感光しているのではなく、図 1.6 のように、100% 感光したとみられる銀の微結晶が、ぽつぽつと、まばらに分布していることがわかる。光の強度を上げると、感光により発生する、銀の微結晶の大きさは変わらずに、単位面積当たりの個数のみが増加し、それにより写真が黒ずんできてくる。つまり、この場合にも、光の強度を、銀の微結晶の個数で、数えることができる。

さてこれらの光検出器を用いて、光の干渉実験をしてみよう。図 1.7 のように、一つの

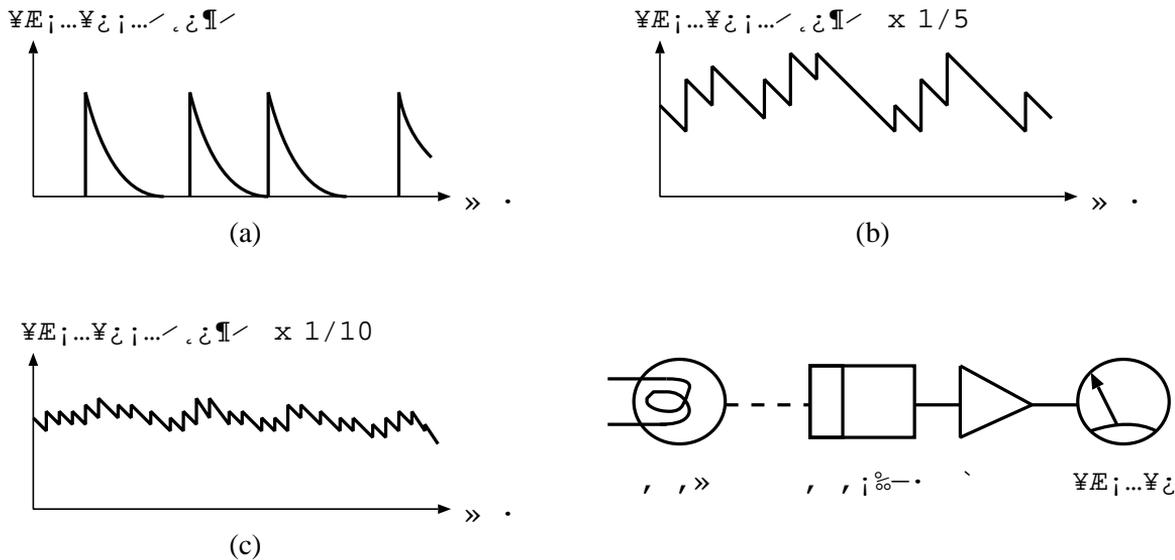


図 1.5 光検出器の出力の様子。(a) 光の弱い場合 (b) 光のやや強い場合 (c) 光のかなり強い場合

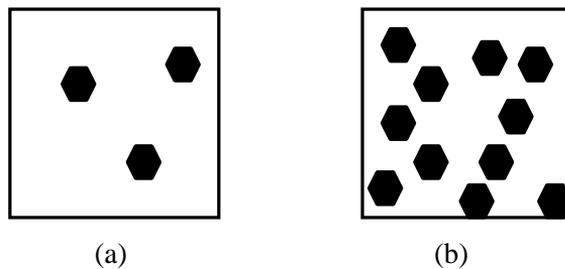


図 1.6 感光した写真の拡大図。(a) 光の弱い場合 (b) 光の強い場合

光源から出た光を、遮蔽板の上に開けられた、二つの小さな窓を通し、その後に置かれた、スクリーンに投影するような装置を考える。投影された光の強度は、スクリーンに沿って、光検出器を動かして、測定する。

光源の強度の強いときには、スクリーン上の像は、肉眼でも、見ることができる。まず、窓 2 を遮断し、窓 1 だけを開けてみると、スクリーンは、(a) に示すように、かなり一般的な明るさで、照射される。窓 2 だけでも、同様である。ところが、窓 1、2 を共に開けておくと、スクリーンには、(c) に示すような、いわゆる、干渉パターンと呼ばれる、明暗の縞模様が現れる。光検出器により、その出力の位置による変化を、正確に記録しても、(a)、(b)、(c) のような、パターンが測定される。(c) の最大強度は、(a)、(b) の強度の、

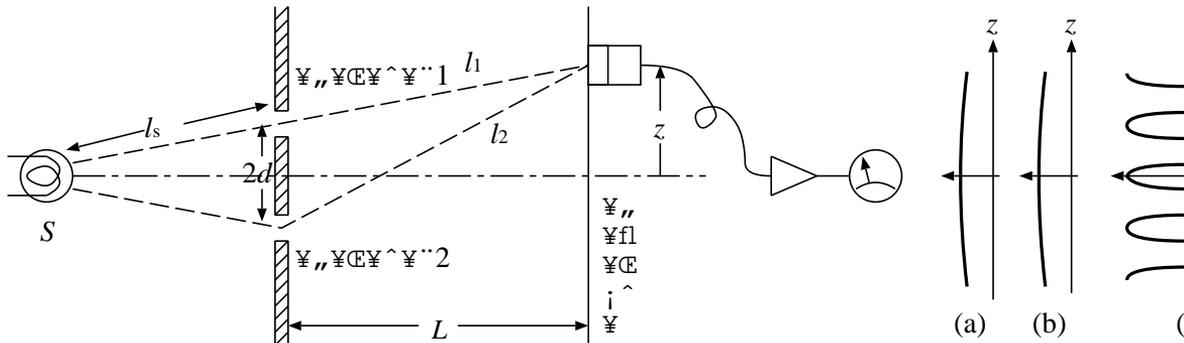


図 1.7 光の干渉実験。(a) 窓 1 のみ、(b) 窓 2 のみ、(c) 両窓の開いている場合の光検出器の出力

約 4 倍となっている。これらの結果は、光を波動と考えることにより、完全に理解される。強度の強くなる点では、窓 1 からきた波と、窓 2 からきた波が、同じ位相をとり、強め合うため、振幅がほぼ 2 倍となる。従って、強度は約 4 倍となる。一方、強度の弱くなる点では、位相が逆となり、二つの波が消し合うため、強度はほぼ 0 となる。

光源の強度を、極めて弱くして、光検出器の出力が、図 1.5 のように、かなり間隔の開いたパルスに、なるようにし、実験空間内に、光子が一個しかないようにする。このときには、光子は、窓 1 を通るか、窓 2 を通るかの、いずれかであろう。窓 1 のみを開けて、長時間、光子を計数し、計数率を測定すると、図 1.7(a) のような、到達確率の分布が、得られる。また窓 2 のみでは、(b) の分布が得られるから、両方の窓を開けた状態での、到達確率の分布は、(a) の分布と (b) の分布の和、つまり、それぞれの、約 2 倍程度の、ゆるやかな分布をとり、干渉パターンは、現れなくなることが期待される。ところが、実験結果は、どんなに弱い光に対しても、計数率に、(c) のような干渉パターンが現れる。すると、一つの光子は、半分ずつに分かれて、両方の窓を同時に通過し、干渉するのであろうか。答えは否である。というのは、光検出器を、片方の窓の位置に於いてみると、相変わらず、同じ大きさのパルスしか発生せず、半分の大きさのパルスは、決して、見いだされないからである。

光子は、両方の窓を、同時に、通過できないにもかかわらず、両方の窓を、通ったかのように干渉する。この、一見矛盾する事実を、そのまま受け入れるという立場を取ったのが、量子力学である。つまり「光子は、常に、一つの粒子として検出されるが、その検出確率には、波動としての干渉性がある」とするわけである。何故、干渉するかという問については、答えを持たず、干渉するという事実だけを取り入れる、という立場をとるわけ

である。

光子の運動には、もっと深淵な物理があつて、光子は、それに従って運動し、その結果、検出確率に、干渉性が現れるような、振舞をしているのかもしれない。そうかもしれないし、そうでないかもしれない。ただ、現在のところ、確率に干渉性があると考えただけで、十分であり、それ以上の、物理を要求するような、実験事実が、何一つ発見されていないという点で、量子力学は現在、物理学の基礎、と考えられているわけである。

1.3 確率振幅と確率で波動性と計数性を共に説明する

強い光の場合に現れる、光強度の干渉パターンは、実は、光源を出た光子が、スクリーン上で発見される検出確率に、干渉性のあることの反映であることが、分かった。確率 (probability) に、干渉性の現れるということは、確率にも、振幅のような概念があつて、その二乗で確率が与えられる、とすればよい。このような振幅の概念を、確率振幅 (probability amplitude) と呼ぶ。

例えば、光源 S を出た光子が、 r だけ離れた点にある検出器に捕まる確率を考える。その対応する確率振幅が、波動のように、 $\cos(kr)/r$ に比例する、と考えると、干渉実験の場合の干渉パターンを、正確に理解することができる。ここで k は、単位長当たりの波数 (wave number) $1/\lambda$ の 2π 倍である。単位時間当たりの波の数を周波数 (frequency) と呼び、その 2π 倍を、角周波数 (angular frequency) と呼ぶことから、今後、 k を角波数 (angular wave number) と呼ぶことにする。また、分母に r があるのは、光の強度、つまり、光の検出確率が、距離の二乗に反比例すること、を示している。ただ、この表現には、やや問題がある。角波数 k を持つ光子が、光源から r だけ離れた点で見つかる検出確率は、 r^2 に反比例するだけのはずなのに、上記の確率振幅の二乗は、空間に波長ごとの脈動を示すからである。これを避け、なおかつ干渉性を保つには、確率振幅を $\cos \dots$ の代わりに、次のようにし、検出確率を、その絶対値の二乗とすれば良い、ことが分かる。

$$\langle r \text{ にある検出器} \mid \text{光源 } S \rangle = A \frac{\exp(ikr)}{r}$$

$\exp(ikr)$ は、その絶対値が 1 となり、一定であるが、角波数 k の周期性を内在しているので、二つの波が合流すると、干渉性を示してくれるからである。左辺は、「光源を出た光子」が、「 r の位置にある検出器」で検出される確率振幅を、表す記号である。このように、確率振幅を複素数で表し、それに合わせて確率を、次のように与える。

$$\text{確率} = |\text{確率振幅}|^2$$

さて、図 1.7 の干渉実験を、式 1.3 の関係を用いて、説明してみよう。光源 S を出た光が、スクリーン上の z の位置で検出される確率振幅は、窓 1 を経由する場合の確率振幅と、窓 2 を経由する場合の、和になる。従って、 S から、窓 1、窓 2 までの距離を r_s 、窓 1 および窓 2 から、 z までの距離を r_1 、 r_2 とすれば、確率振幅は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \langle z|S \rangle &= \langle z|1 \rangle \langle 1|S \rangle + \langle z|2 \rangle \langle 2|S \rangle \\ &= A \frac{\exp(ikr_1)}{r_1} A \frac{\exp(ikr_s)}{r_s} + A \frac{\exp(ikr_2)}{r_2} A \frac{\exp(ikr_s)}{r_s} \end{aligned}$$

ここで、 $\langle \dots | \dots \rangle$ の中に、「光源 S 」などと書く替わりに、簡単に「 S 」などと略記した。 A の値は、窓 1 と窓 2 の大きさ、検出器の大きさにより、変わるはずであるが、両方の窓の大きさを等しいとして、同じ値とした。この確率振幅の、絶対値の二乗を求めると、光源 S を出た光が、スクリーン上の z の点で検出される確率、 $P(S \rightarrow z)$ が、近似的に、次のように変化することが、得られる。

$$P(S \rightarrow z) \propto 1 + \cos \frac{2kzd}{\sqrt{L^2 + d^2}}$$

つまり、 z に対して、図 1.7 (c) のような正弦波的变化をすることが、示される。

問題 1.5

図 1.7 の各量を用い、式 1.3 から式 1.3 を導け。

ヒント λ が r に対して十分小さいとき、つまり kr が十分大きいときは、 $\exp(ikr)$ は r の僅かな変動に対し、大きく変化するのに対し、 $1/r$ は、それほど変化しない。このことから、式 1.3 の分母 r_1 、 r_2 を、 $\sqrt{L^2 + d^2}$ に等しいと、近似する。

$$r_2 = \sqrt{L^2 + (d+z)^2} \cong \sqrt{(L^2 + d^2) + 2zd} \cong \sqrt{L^2 + d^2} + \frac{zd}{\sqrt{L^2 + d^2}}$$

また上式より、 $r_2 - r_1$ なる量が出てきたときは、これを $2zd/\sqrt{L^2 + d^2}$ と近似せよ。複素数の絶対値の二乗は、それ自身とその共役量との積で求められる。

問題 1.6 図 1.7 の干渉実験で、 $L = 1$ m、 $d = 0.1$ mm、光の波長を 500 nm (nm とは 10^{-9} m であり、可視光線の波長は数百 nm 位である) として、干渉縞の間隔を求めよ。

ヒント 式 1.3

答え 2.5 mm

1.4 アインシュタイン・ド・ブロイの関係

光と同様の干渉実験を、電子を用いて行ってみたらどうなるであろうか。その答えは、図 1.7 と同様の干渉パターンが、得られるのである。このように電子も干渉性をもつが、ではどのくらいの間隔の干渉パターンが、現れるのであろうか。それには電子の波長、 λ を知ることが必要になる。こうした場合に用いられるのが、アインシュタインの関係 (Einstein relation) とド・ブロイの関係 (DeBroglie relation) である。

$$E = \hbar\omega \quad (\text{アインシュタインの関係})$$

$$p = \hbar k \quad (\text{ド・ブロイの関係})$$

式 1.2 は、アインシュタインが、光電効果を説明する際、光の周波数 f と、その光の与えるエネルギー E との間に成立するとした関係 $E = hf$ を書き直したもので、 ω は f の 2π 倍の角周波数である。 \hbar は従って、 $h/2\pi$ なので次のようになる。

$$\hbar = 1.0546 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

一方、式 1.2 は、ド・ブロイが、電子の干渉性から、その波長 λ と、電子の持つ運動量 p の間に成立するとした関係、 $p = h/\lambda$ を書き直したもので、 k は単位長当たりの波数の 2π 倍である。

問題 1.7 100 V で加速された電子の波長を、求めよ。

ヒント V の電圧で加速された電子の運動エネルギーは、 eV となる。一方、電子の運動エネルギーは、 $p^2/2m$ で得られるから、 p が求まる。 $e = 1.6 \times 10^{-19}$ C、 $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg、 $h = 6.6 \times 10^{-34}$ Js。

答え 約 0.12 nm。きれいな干渉パターンを得るには、電子の波長をある程度揃える必要があり、そのためには、どうしても 100 V 程度の加速を必要とする。従って、電子線の波長は、普通 0.1 nm より短いものしか、得られない。

問題 1.8 $L = 1$ m、 $d = 0.1$ mm の干渉装置を用い、波長 0.1 nm の電子線の干渉実験を行ったとき、干渉縞の間隔はいくらか。また d として、結晶格子間隔ぐらいの 0.5 nm を用いると、干渉縞の間隔はどうなるか。

答え 500 nm、100 mm

問題 1.9 重さ 0.1 kg のボールを 30 m/s で投げ、壁に $2d = 10$ cm の間隔で開けられた、二つの穴を利用して、干渉実験を行った (これ以上、穴の間隔をつめると、穴と穴が、つながってしまう)。干渉縞の間隔は、どの位になるか。

答え 約 2×10^{-33} m 位で、グローブの大きさでは、とても、干渉パターンはわからない。

これらの問題の答えからわかるように、電子の干渉縞の観察は、可視光で用いる干渉装置では困難であるが、原子間隔ぐらいの窓間隔をとると、十分観測できることがわかる。現に、結晶に電子線を当てると、きれいな干渉パターンが見られる。しかし、電子のように軽いものでも、窓の間隔を原子間隔ぐらいにしないと、干渉パターンが細か過ぎて、観察しづらいことを認識して欲しい。

ボールの実験では、日常の経験から、ボールは、いつもどちらか片方の穴を通過して、光の干渉実験で述べたような、どちらの穴を通過しているのか良く分からない、などといった事態は発生しない、という反論がある。しかしこれは、光を当てて見ているから、わかるのである。光を当てて、どちらの穴を抜けたかを明確にしてしまうと、干渉パターンは消失し、図 1.7 の、 $P(S \rightarrow 1 \rightarrow z) + P(S \rightarrow 2 \rightarrow z)$ の確率が得られる。もし、光を消し、どんなにしても、どちらの穴を抜けたのか、知ることでできないような条件で、実験を行えば、極めて細かい干渉パターンが、発生するはずである。しかし、現実には余り細かすぎて、光のある場合との差は、弁別することが、できないであろう。

このように、量子力学の効果は、光とか電子と言った原子サイズでは、顕著に現れるが、ボールとか、象とか言った、身近なものに対しては、その効果を調べることは、不可能である。

ド・ブロイの関係が、波長を通して、空間的な干渉性に、深く係わったのに対し、アインシュタインの関係は、周波数を通して、時間的な干渉性に、深くかかわってくる。角波数 k の状態の光や電子が、平面波として伝わって行くとき、その進行方向に、 x だけ移動した位置で検出される確率振幅は、 $\exp(ikx)$ の形で、与えられる。したがって、波数の異なる波が、いくつか共存すると、空間的な干渉パターンが発生し、検出確率は空間的に変動する。一方、周波数の異なる波がいくつか共存して、時間方向の干渉パターンが発生する

と、同じ位置での粒子の検出確率が、時間と共に変動することとなる。従って、粒子の移動のような運動現象は、すべて、時間方向の干渉性と、深くかかわっていることが、推察される。

第1章のまとめ

- あらゆる現象が、計数性と干渉性の双方の性質を持っている。
 - 計数性: ψ の状態は、 χ の状態になるかならぬかの、いずれかであり、確率的である。
 - 干渉性: ψ の状態が χ の状態をとる確率振幅、 $\langle \chi | \psi \rangle$ の概念があり、重ね合わせの法則が成り立つ。

$$P(\psi \rightarrow \chi) = |\langle \chi | \psi \rangle|^2$$

2. アインシュタイン-ド・ブロイの関係

- 粒子として観測されるエネルギーや運動量と、干渉する際の周波数、波数には強い関係がある。

$$E = \hbar\omega$$

$$p = \hbar k$$

$$\hbar \cong 10^{-34} \text{Js}$$

第2章

量子状態と確率振幅

量子力学の世界では、ある一つの状態 (state) が、いろいろな状態として、観測される。古典力学でも、ある一つの状態が、時間と共にいろいろな状態に変化していく。しかし、古典力学では、時刻を固定すれば、いつも一つの状態しか観測されない、と考えている。

ボールを投げてから t 秒後のボールの位置は、初期状態 (初期条件) で決まるある一点だけと考える。だから、ボールの軌跡を $r(t)$ といった形で表現することができる。ところが、量子力学ではそうはいかない。状態 A の電子は、 t 秒後には状態 B にもなり得るし、状態 C にもなり得る。どの状態と観測されるかは、実験をやり直すたびに、変わり得る。そのため、「状態 B をとる確率」といった概念が必要となってくる。それどころか、状態 A にある電子を、0 秒後、つまり同時刻に観測しても、状態 B をある確率でとったり、状態 C を別の確率でとったりする。

例えば、光の干渉実験では、「 S を光源とする角波数 k の光子の状態」が、同時刻に「スクリーン上の z の位置にいる、光子の状態」になり得ることができる。この二つの状態は、明らかに異なるにもかかわらず、前章で求めた確率で、前者は後者の状態をとり得るのである。さらに、同時刻に別の「 z' の位置にいる光子の状態」も、前章で求めた確率の z の代わりに、 z' を代入した確率で、とり得るわけである。しかし、「スクリーン上の z の位置にいる、光子の状態」は、決して別の「 z' の位置にいる光子の状態」にはなり得ない。これらは、明らかに互いに異なる状態であるからである。

こうした状況を理解するためには、「状態」という概念を、正確に記述する方法が必要となってくる。本章では、基底状態 (base states) という概念を導入し、この状態を基礎にして、正確な議論をする方法について述べる。

2.1 基底状態

光の干渉実験で、「スクリーン上の z の位置にいる、光子の状態」は、決して別の「 z' の位置にいる、光子の状態」とはなり得ない。 z と z' の位置に、検出器をおいて観測を行う場合、 z の検出器が、光子を検出したのと同時に、 z' の検出器が、同じ光子を検出することは、あり得ない。無論、光源を強くして、大量の光子を用意すると、 z と z' の検出器が、殆ど同時に光子を検出することも出てくるが、光子を少なくすると、上の二つの状態は、明らかに独立であることがわかる。光の干渉実験では、このように、「互いに独立な状態」が無数に存在する。そこで、ここでは事態をもっと分かり易くするために、独立な状態が、二つしかない物理系を考えてみよう。

波長の定まった平面波状の光は、偏光 (polarization) と呼ばれる別の自由度を持つことが、知られている。このことは、偏光板 (polarizer) と呼ばれる一種のフィルタを用いると、容易に、確かめることができる。光は、伝搬方向と垂直な、いろいろな方向に振動する波であるが、偏光板を通ると、一方向の振動の波だけとなる。図 2.1 のように、 x 方向に振動する光のみを通す偏光板 (x 偏光板と略す) で、光の振動方向を決めると、この光は、 x 偏光板を素通りするが、垂直に置かれた y 偏光板を通ることはできない。また、 x 偏光した光を、 θ だけ回転した θ 偏光板に当てると、 $\cos^2 \theta$ 倍の光が通過してくる。この際、 θ 偏光板を抜けた光の偏光方向を、第三の偏光板を用いて調べると、偏光角 θ であることが知られる。このように、偏光板は透過量を制御するだけでなく、偏光角を偏光板の方向に合わせる機能も有している。

この実験を弱い光で行うと、計数性 (countability) が現れてくる。例えば、図 2.1 (c) の実験を行うと、 x 偏光板を抜けた光子は、 θ 偏光板の後に置かれた検出器により、検出されたり、されなかったりする。数多くの x 偏光した光子を θ 偏光板に当てて、抜けてきた光子の数を計数すると、その割合は、偏光板のないときの $\cos^2 \theta$ 倍になっている。

光の偏光には、計数性のみでなく、干渉性 (coherency) も現れる。干渉性を調べるには、光を偏光により、二つの道に分け、再合成してみるとよい。図 2.2 に示すように、光を、ガラス表面に適切な角度 (ブリュスター角 (Brewster angle) と呼ばれる) で当てると、 y 偏光の光は、ほとんど反射せずにガラスへ入射し、一方、 x 偏光の光は、ほぼ完全に反射される。これを利用して、 x 偏光と y 偏光を分波することができる。 x 偏光の道と y 偏光の道の長さが、光学的に等しくなるように、補正したものを「分波器 (analyzer)」として、その下に示すような箱で略記する。この分波器を逆にすると「合成器 (composer)」を作ることができる。原理から分かるように、分波した波の片方を吸収して抑えると、図

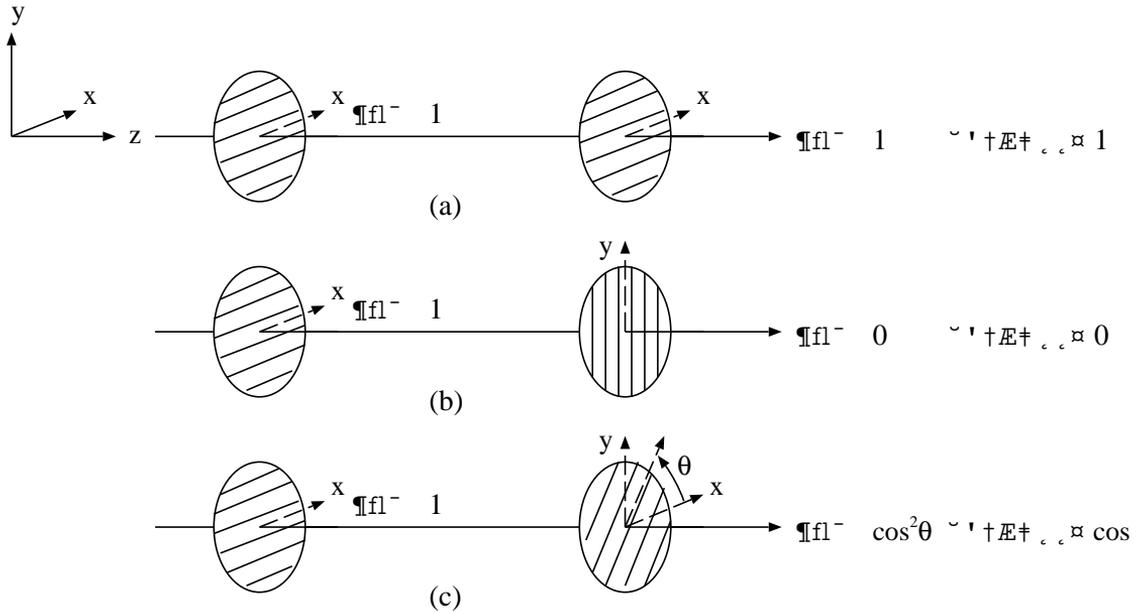


図 2.1 光の偏光実験。(a) 透過確率 1、(b) 透過確率 0、(c) 透過確率 $\cos^2 \theta$

2.3 のように、 x 偏光板や y 偏光板と、等価な役割をする。

この分波器や合成器を用いると、干渉性を確認する実験を行うことができるが、その前に、 x 偏光や y 偏光の間に成立する重要な性質を調べておこう。図 2.4 (a) のように、 x 偏光した光を分波器に入れると、光子は必ず x 分岐の方の出口に現れ、 y 分岐の方には現れない。つまり、 x 偏光した光の状態が、 x 偏光状態をとる確率 $P(x \rightarrow x)$ は 1 であり、 y 偏光状態をとる確率 $P(x \rightarrow y)$ は 0 となる。したがって、確率の平方根のような概念である確率振幅は、次のようになる。

$$\langle x|x \rangle = 1, \quad \langle y|x \rangle = 0$$

同様に、図 2.4 (b) の y 偏光の実験より、次の関係が得られる。

$$\langle x|y \rangle = 0, \quad \langle y|y \rangle = 1$$

(数学的に厳密に考えると、 $\langle x|x \rangle$ は絶対値 1 であればよく、 $\exp(i\delta)$ のような複素数の形が許される。事実 $\exp(i\delta)$ と考えても、矛盾のない体系を作ることができるが、複雑になるだけなので簡単のために 1 とする。)

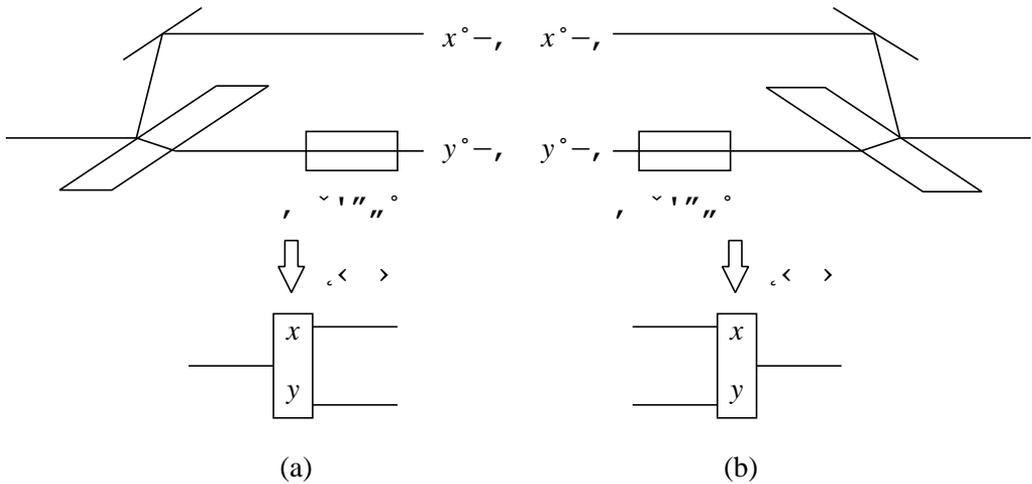


図 2.2 光の分波器と合成器。(a) 分波器、(b) 合成器

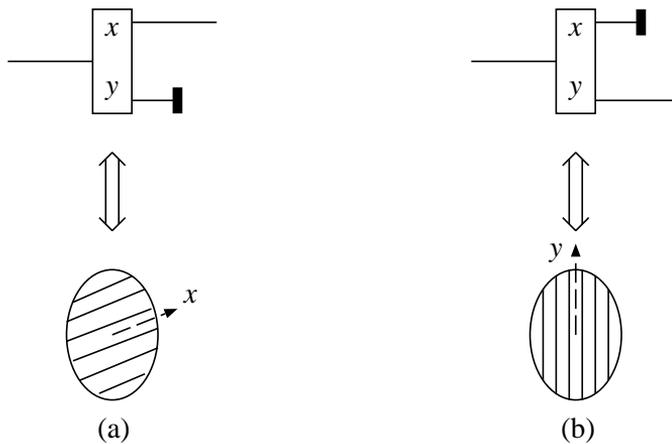


図 2.3 光の分波器を用いた偏光器。(a) x 偏光器、(b) y 偏光器

以上の四つの関係は、まとめて、次のように表すことができる。

$$\langle j | k \rangle = \delta_{jk}$$

j は、 x 偏光状態または y 偏光状態を代表している。また、 k も同様である。 δ_{jk} はクロネッカーのデルタ (Kronecker delta) であり、 i の状態と j の状態が等しいときのみ 1 で、その他のとき 0 となる量である。また、 i は、虚数単位の i 以外には使わないよう

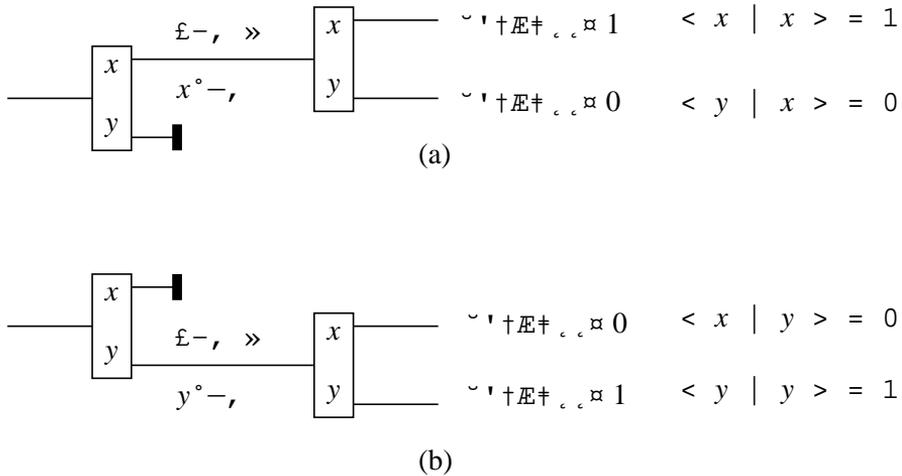


図 2.4 x 偏光、 y 偏光の正規直交性。(a) x 偏光、(b) y 偏光

にしている。この関係は、いま、考えている「状態の組」、 x 偏光状態と y 偏光状態が、互いに独立なことを示し、直交 (ortho) であるという。また、同じもの同士がとる確率振幅が 1 であることを、正規 (normality) であるといい、あわせて、式 2.1 を正規直交 (ortho-normal) であるという。

問題 2.1 θ 偏光が、 θ' 偏光板を通る確率は、 $\cos^2(\theta - \theta')$ である。 $\langle \theta | \theta' \rangle$ を求めよ。簡単のために、 $\langle \theta | \theta' \rangle$ は実数と考えてさしつかえない。

答え $\langle \theta | \theta' \rangle = \cos(\theta - \theta')$ である。負にしても良いが、通常、 $\langle \theta | \theta \rangle = 1$ となるように決める。

問題 2.2 θ 偏光状態が、 x 偏光状態をとる確率振幅、 $\langle x | \theta \rangle$ を求めよ。また、 y 偏光状態をとる確率振幅、 $\langle y | \theta \rangle$ を求めよ。

答え $\langle x | \theta \rangle = \cos \theta$, $\langle y | \theta \rangle = \sin \theta$

問題 2.3 θ 偏光の光子を、分波器に入れると、必ず、 x 偏光の出口か、 y 偏光の出口のどちらかに、現れることを示せ。

ヒント 確率の和が、1 になることを示せ。

任意の状態の光子を、図 2.5 のように、分波器により「一組の状態」に分け、再び合成

する実験を行うと、実は、何もしない直通の通路を通ってきたのと同じになってしまう。光子を、分波器によって分けると、必ずどちらかの出口に現れることから、それを再合成しても、光子は失われることなく、合成器の出口に必ず出てくることは、容易に想像される。しかし、その出力状態そのものまでが、分波器に入る前の状態に保持されてくるといえるのは、不思議といえば不思議である。とは言っても、これは実験事実なのだから、そのまま受け入れざるを得ない。直観的に理解するには、窓のようなものを考えるとよい。窓が一部閉まっていれば、つまり、二つの通路のうち、どちらかが閉鎖されていれば、窓のところで何かが起き得るが、窓が全部、完全に開いていれば、窓のところでは何も起きないはずである。さて図 2.5 の結果を式に表してみよう。分波して合成する過程は、ちょうど、第 1 章で扱った二スリットの干渉実験に似ており、重ね合わせの原理が成立する。そこで、入り口で ψ の状態が、出口で χ の状態をとる確率振幅は、二つの通路の確率振幅の和で与えられる。

$$\langle \chi | x \rangle \langle x | \psi \rangle + \langle \chi | y \rangle \langle y | \psi \rangle$$

これが、通路を直通にしたときの、 ψ が χ をとる確率振幅 $\langle \chi | \psi \rangle$ に等しいことから、次式が成立する。

$$\langle \chi | x \rangle \langle x | \psi \rangle + \langle \chi | y \rangle \langle y | \psi \rangle = \langle \chi | \psi \rangle$$

あるいは、 j を x 偏光状態、 y 偏光状態として、次のように書くことができる。

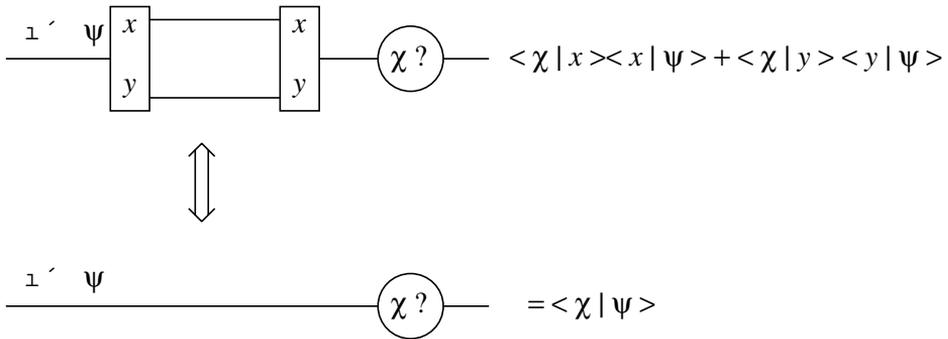
$$\sum_{\text{all } j} \langle \chi | j \rangle \langle j | \psi \rangle = \langle \chi | \psi \rangle$$

「一組の状態」、この場合は x 偏光状態と y 偏光状態が、この式を満たすことを、完備 (complete) であると呼ぶ。

さて、任意の状態 ψ の光子を、分波器で、 x 偏光状態と y 偏光状態に分けるだけの実験をしてみよう。この場合、光子は、問 2.3 の θ 偏光状態の光子の結果と同様、 x 偏光状態または y 偏光状態のいずれかの出口に観測され、その確率の和は 1 となる。つまり、

$$|\langle x | \psi \rangle|^2 + |\langle y | \psi \rangle|^2 = 1$$

あるいは、 i を x 偏光状態と y 偏光状態とすると、次式が成立する。

図 2.5 x 偏光、 y 偏光の完備性

$$\sum_{\text{all } j} |\langle j | \psi \rangle|^2 = 1$$

この式を、絶対値 (absolute value) の二乗が、それ自身とそれ自身の複素共役の積となる、つまり、 $|z|^2 = z^* z$ となることを利用して書き直そう。

$$\sum_{\text{all } j} \langle j | \psi \rangle^* \langle j | \psi \rangle = 1$$

一方、式 2.3 で、 χ を ψ とすると、右辺はある状態が、自身と同じ状態をとる確率振幅となり、1 となる。

$$\sum_{\text{all } j} \langle \psi | j \rangle \langle j | \psi \rangle = 1$$

これら二式は、互いに酷似していることがわかる。 $\langle \psi | j \rangle^* = \langle j | \psi \rangle$ ならば、両関係は完全に一致してしまう。

もしこの関係が一般的に成立すると、任意の二状態 ψ と χ の間にも、次式が成立することが示される。

$$\langle \psi | \chi \rangle^* = \langle \chi | \psi \rangle$$

この関係は共役性 (conjugate) と呼ばれるが、この関係を一般的に仮定しても、量子力学の体系には、少しも矛盾が生じない。それどころか、後述のように、線型代数との素晴らしい対応関係が得られる。偏光実験における、 x 偏光状態と y 偏光状態のような「一組

の状態」は、式 2.1 で示される直交性と、式 2.3 で示される完備性の、双方の性質を持っている。このような、特別な性質を完全 (perfect) であるといい、また完全な「一組の状態」のことを、対象としている物理系の「基底状態 (base states)」と呼ぶ。

問題 2.4 任意の状態 ψ に対して、 $\langle \psi | j \rangle^* = \langle j | \psi \rangle$ が、成立するものとして、式 2.3 を証明せよ。

ヒント 式 2.3、および状態 χ に対しても、同様な関係が成立する。

2.2 基底展開と成分

「任意の状態 ψ を、分波器で分解し、合成器で再び合成すると、再び ψ となる」ことを、前節では、次のように表した。

$$\langle \chi | \psi \rangle = \langle \chi | x \rangle \langle x | \psi \rangle + \langle \chi | y \rangle \langle y | \psi \rangle$$

これを、もっと直接的に、次のように表してみよう。

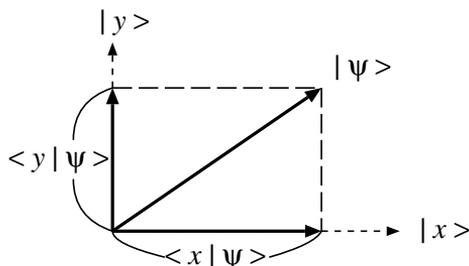
$$|\psi\rangle = |x\rangle \langle x | \psi \rangle + |y\rangle \langle y | \psi \rangle$$

この式は、上の式の両辺から、形式的に $\langle \chi |$ を落としただけの形になっているが、もう少し面白い解釈が可能である。状態 ψ を分波すると、 x 偏光状態を $\langle x | \psi \rangle$ の確率振幅で、 y 偏光状態を $\langle y | \psi \rangle$ の確率振幅でとる。さらに逆に、この二つの状態を合成すると、状態 ψ になる。

つまり「状態 ψ は「状態 x を確率振幅 $\langle x | \psi \rangle$ でとり、かつ y を $\langle y | \psi \rangle$ でとる状態」と、等価であると考えられる。

任意の状態は、このように、基底状態をとる確率振幅の組で表す、あるいは展開 (expansion) することができる。その様子は、ちょうど、任意のベクトル (vector) を直行展開して、成分の組で表すことと似ている。図 2.6 に示すように、 $|\psi\rangle$ を任意のベクトルに対応させ、 $|x\rangle$ 、 $|y\rangle$ を直行する二つの基底ベクトル (base vectors) に対応させると、 $|\psi\rangle$ は、 $|x\rangle$ 方向の長さ $\langle x | \psi \rangle$ のベクトルと、 $|y\rangle$ 方向の長さ $\langle y | \psi \rangle$ のベクトルの、和で与えられる。この意味で、状態 ψ は、ベクトル ψ とも呼ばれ、 $\langle x | \psi \rangle$ と $\langle y | \psi \rangle$ は ψ の成分

$$| \psi \rangle \iff \begin{cases} \langle x | \psi \rangle \\ \langle y | \psi \rangle \end{cases}$$



$$| \psi \rangle = | x \rangle \langle x | \psi \rangle + | y \rangle \langle y | \psi \rangle$$

図 2.6 状態 ψ の基底状態による展開

(component) とも呼ばれる。このように、量子力学の諸計算は、ベクトル空間の諸計算と完全に対応をとることができる。

問題 2.5 θ 偏光状態 $|\theta\rangle$ を、 x 偏光状態 $|x\rangle$ と y 偏光状態 $|y\rangle$ により、展開せよ。

ヒント 問 2.2

答え $|\theta\rangle = |x\rangle \cos \theta + |y\rangle \sin \theta$

問題 2.6 $|\theta + 90^\circ\rangle$ を、 $|x\rangle$ 、 $|y\rangle$ で展開せよ。

答え $|\theta + 90^\circ\rangle = -|x\rangle \sin \theta + |y\rangle \cos \theta$

問題 2.7

x 偏光と y 偏光を、位相を 90° ずらして重ね合わせると、円偏光 (circular polarization) と呼ばれる偏光が得られる。右旋円偏光は、 $|R\rangle = (|x\rangle + i|y\rangle)/\sqrt{2}$ で与えられることが知られているが $\langle x|R\rangle$ 、 $\langle y|R\rangle$ を求めよ。

ヒント 展開式の形が与えられているときに、それより成分を得るには、公式 2.2 と比較して、係数の比較をしてもよいが、展開式の左から両辺に、 $\langle x|$ または $\langle y|$ を掛け、直交性を利用するのが簡単である。

答え $\langle x|R\rangle = 1/\sqrt{2}$, $\langle y|R\rangle = i/\sqrt{2}$

$\langle \mid \rangle$ は、ディラック (Dirac) が導入した記号であるが、彼は、これをブラケット (bracket) と呼び、この記号を分解した $\langle \mid$ と $\mid \rangle$ を、それぞれウィットに富んだ呼び方で、ブラベクトル (bra vector) と、ケットベクトル (ket vector) と名付けた。このケットベクトルは、ベクトル空間のベクトル (縦ベクトル (column vector)) に対応し、ブラベクトルは、ベクトルの転置複素共役をとった、共役ベクトル (adjoint vector) (横ベクトル (row vector)) に対応する。例えば、二次元のベクトル空間で、任意のベクトル \mathbf{a} の x 成分と y 成分を、 a_x 、 a_y とすると、ベクトル \mathbf{a} を、 x 、 y 方向の単位ベクトル (unit vector) \mathbf{e}_x 、 \mathbf{e}_y で展開すると、次のように表すことができる。

$$\mathbf{a} = \mathbf{e}_x a_x + \mathbf{e}_y a_y$$

a_x 、 a_y が、 \mathbf{a} と \mathbf{e}_x 、 \mathbf{e}_y との内積 (inner product)、 $(\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{a})$ 、 $(\mathbf{e}_y \cdot \mathbf{a})$ で与えられることを考えると、次のようになるが、これは丁度、式 2.2 と対応する。

$$\mathbf{a} = \mathbf{e}_x (\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{a}) + \mathbf{e}_y (\mathbf{e}_y \cdot \mathbf{a})$$

無論、ここで、内積は $\langle \mid \rangle$ に対応すると考える。また、ベクトル \mathbf{b} と \mathbf{a} の内積は、 \mathbf{b} の共役ベクトルと \mathbf{a} の積で、与えられるから、次のように変形できる。

$$(\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}) = \mathbf{b}^\dagger \mathbf{a} = b_x^* a_x + b_y^* a_y$$

この式は、式 2.3 の $\langle \chi | x \rangle$ 、 $\langle \chi | y \rangle$ を、式 2.3 で $\langle x | \chi \rangle^*$ 、 $\langle y | \chi \rangle^*$ にした式と、対応する。

基底条件の直交性を示す式 2.1 は、単位ベクトルの正規直交性に対応する。また、式 2.3 は、前述のように、ベクトルの内積の定義と、展開可能性を示している。さらに、式 2.3 は、我々の扱う状態ベクトルが、長さ 1 のベクトルであることを示し、式 2.3 は、縦ベクトルと横ベクトルの、入れ替えに対応する複素共役性を示している。以上のように、今まで出てきた式はすべて、複素ベクトル空間に対する各式と、対応をとることができ、さらに、これから出てくる式も、すべて対応がとれることを、覚えておいて欲しい。

したがって、量子力学の理論は、ベクトルを扱う線型代数学 (linear algebra) と、完全に同一となり、数学的に美しい体系を形成する。しかし、その数学的美しさにのみ目を奪われることなく、物理の本質を見極めてほしい。とは言っても、量子力学の理論が、物理のすべてを解き明かしていると、過信してはならない。電子の存在確率が、時々刻々どの

ように変化していくか、の計算手段は与えても、何故、電子の存在が確率的になるのか、何故、干渉性が現れるか、については、何ら答えを用意していないのである。量子力学は、従って、計数性と干渉性の両立することを、前提として、その原因には立ち入らずに、築かれた理論であることを、改めて再認識してほしい。

ベクトル空間論では、行列という大事な概念がある。行列 (matrix) は、ベクトルに作用して、別のベクトルを作り出す (実は、線形な変換のみを行っているのであるが、線型という概念は、おいおい分かってくるので、ここでは特に触れない)。例えば、行列を A と表すと、 $A\mathbf{a}$ は、別のベクトルになる。一番簡単な行列は、単位行列と呼ばれ (行列の対角要素がすべて 1 で他は 0 の行列)、どんなベクトルに作用しても、そのベクトルと同じベクトルを、作り出す。行列に対応して、量子力学では、オペレータ (operator) という概念がある。一口で言うと、状態を、別の状態に変えるものである。一番簡単なものは、単位行列に対応する、単位オペレータ (unit operator) である。単位オペレータというと、大げさであるが、任意の状態に作用して、元と同じ状態にする、つまり何もしないオペレータである。

前節の、図 2.2 で、分波した光を再合成すると、何もしないのと同じになる、と言ったが、これが、まさに単位オペレータである。単位オペレータを、 \hat{I} と表す (identity、同じの意味)。“ $\hat{}$ ” は、ただの数と区別するために、つけたもので、ハット (hat) と呼ぶ。式 2.3 を見ると、分解して合成する作業は、 $|x\rangle\langle x| + |y\rangle\langle y|$ で、表されている。従って、次式が成立する。

$$|x\rangle\langle x| + |y\rangle\langle y| = \hat{I}$$

基底状態が、もっと数多くある場合は、 $|j\rangle$ をすべての基底状態として、次のように拡張できる。

$$\sum_{\text{all } j} |j\rangle\langle j| = \hat{I}$$

つまり、任意の状態を、あらゆる基底状態に分解し、再合成すると、もとの状態に戻り、何もしなかったことになることを示している。

式 2.7 の \hat{I} を、 $\langle x|\hat{I}|\psi\rangle = \langle x|\psi\rangle$ 、あるいは、 $\hat{I}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ へ代入すると、式 2.3 や、式 2.2 の一般形となる。つまりこの式は、基底状態の完備性を表す別の表現形、と言える。この表現は、極めて便利であり、例えば、状態と状態の内積の間に、 \hat{I} 、つまり $\sum |j\rangle\langle j|$ を、挿入すると、直ちに、成分と成分で表した内積の表現を得ることができる。

$$\langle \chi | \psi \rangle = \langle \chi | \hat{I} | \psi \rangle = \langle \chi | \left(\sum_{\text{all } i} |j\rangle \langle j| \right) | \psi \rangle = \sum_{\text{all } j} \langle \chi | j \rangle \langle j | \psi \rangle$$

2.3 基底の変換

いま、 $\{|j\rangle : j = 1, \dots, n\}$ が一組の基底状態 S_A を構成しているときには、次式が成立する。

$$\langle j | k \rangle = \delta_{jk}, \quad \sum_{\text{all } j} |j\rangle \langle j| = \hat{I} \quad (|j\rangle, |k\rangle \in S_A)$$

このとき、別のもう一組の状態、 $\{|J\rangle : J = 1, \dots, n\}$ が、基底状態 S_B を構成しているかどうかを、調べるには、次式が成立しているかを検証すれば良い。

$$\langle J | K \rangle = \delta_{JK}, \quad \sum_{\text{all } J} |J\rangle \langle J| = \hat{I} \quad (|J\rangle, |K\rangle \in S_B)$$

$\langle j | J \rangle$ がすべての j, J に対し分かっているとしよう。まず、正規直交性を示すべきこの式に、 $\sum |j\rangle \langle j| = \hat{I}$ を挿入すると、次式の成立が要求される。

$$\sum_{\text{all } j} \langle J | j \rangle \langle j | K \rangle = \delta_{JK}$$

また、完備性を示すべき後式の両側から $\langle j |$ と $|k\rangle$ を掛けると、次式の成立が要求される。

$$\sum_{\text{all } J} \langle j | J \rangle \langle J | k \rangle = \delta_{jk}$$

つまり、 $\langle j | J \rangle$ がこれら二式を満たせば、 $\{|J\rangle\}$ は別の完全な基底状態を組むことになる。

問題 2.8 x 偏光 $|x\rangle$ 、 y 偏光 $|y\rangle$ の代わりに、 $|\theta\rangle$ 、 $|\theta + 90^\circ\rangle$ が、基底状態として選べることを、証明せよ。

ヒント 問 2.5、問 2.6 の結果を用い、式 2.3、式 2.3 を証明せよ。

問題 2.9 右旋円偏波と左旋円偏波、 $|R\rangle = (|x\rangle + i|y\rangle)/\sqrt{2}$ 、 $|L\rangle = (-|x\rangle + i|y\rangle)/\sqrt{2}$ が、基底状態の組として選べることを示せ。

$\langle j|\psi\rangle$ が分かっているときに、 $\langle J|\psi\rangle$ を求める作業を基底の変換 (base transformation) と呼ぶ。これは $\langle J|j\rangle$ が分かっていると、次のように簡単に行なうことができる。

$$\langle J|\psi\rangle = \sum_{\text{all } j} \langle J|j\rangle \langle j|\psi\rangle$$

このあたりで、偏光が、量子力学的性質の一つである干渉性を有することを、説明する、簡単な実験について、述べてみよう。図 2.7 (a) に示すように、 x 偏光板を抜けた光子は、 y 偏光板を通ることができない。ところが、(b) のように、途中に 45° 偏光板を入れると、ある確率で通過できるようになる。偏光板を、光の一部しか通さない、フィルタのようなものと考え、フィルタを入れた方が光を良く通すという、この実験結果は、いかにも奇妙な、理解しがたいものとなる。しかし光の偏光にも、干渉性があるので、こういう結果が得られるのである。

(a)、(b) の実験を、総合してみると、(c) の形で表すことができる。 45° 偏光板は、「 45° 、 135° の分波器と合成器の組合せた装置」で 135° の方の通路を遮断したものと、等価になる。一方、(a) の実験は、「 45° 、 135° の分波器、合成器」の両方の通路を開けたものと、等価になる。従って、(a)、(b) の実験結果を、(c) の立場で見ると、二個の窓 (通路) を開けると光子は通過しないが、一個では通過するということになる。

これと同じような結果は先に図 1.7 に示した二スリットの光干渉実験でも、生じている。両方のスリットを開けておいたとき丁度干渉縞の暗くなるころへ、光検出器を置いておく。次に、片方のスリットを閉めると、検出器で光子をカウントできるようになる。つまり、偏光実験でも、一つの窓 (45° の偏光のみを通すことに対応) に対し、光子が観測されても、二つの窓に対しては、双方の窓からの干渉により、光子の検出確率が 0 になるのである。二スリットの干渉実験で、検出器を、スクリーン中央に置いた場合には、一つのスリットより、二つのスリットの方が、検出確率が高くなる。これと、同じように偏光実験でも、最後の偏光板を x 偏光とすると、(a) の実験の方が (b) の実験よりも、透過確率が高くなる。

量子力学の実験と言うと、何か非常に複雑な設備を必要とすると、思われるかも知れない。しかし、二スリットの干渉実験や、ここに述べた偏光実験のように、極めて簡単なものもある。特に、後者の実験は、わずか三枚の偏光板で、実に多くの、干渉性に関する知

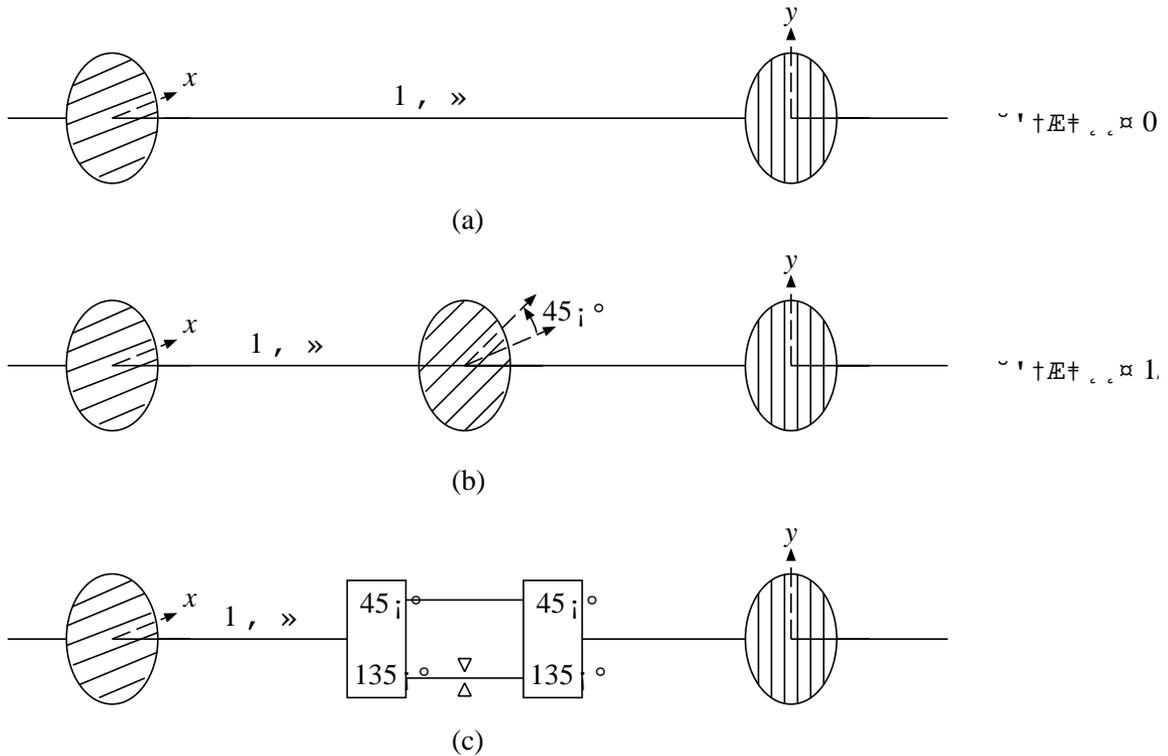


図 2.7 偏光の干渉性を確かめる実験。(a) x 偏光は y 偏光板を通らない、(b) 途中に 45° 偏光板を入れると何故か通る、(c) 下の通路が開いていれば (a) の実験、閉じていれば (b) の実験に対応する。両方の通路が開いていると光子の透過確率は干渉により 0 となる

見を得ることができるので、暇なときに、調べてみると良いだろう。計数性を調べるには、なだれ光ダイオードのような高感度検出器や、高利得増幅器が、必要となり、やや、大掛りな実験となるが、やはり個人でできないほどの実験ではない。

問題 2.10 図 2.7 の実験で、(a)、(b) の透過確率を求めよ。また最後の偏光板を、 x 偏光板にしたときは、どうなるか。

ヒント 例えば、(b) の場合、 $|\langle y | 45^\circ \rangle \langle 45^\circ | x \rangle|^2$

答え 透過確率は、(a) 0、(b) $1/4$ 。 x 偏光板のときは、(a) 1、(b) $1/4$ 。

2.4 オペレータ

ある状態の光を、偏光板に入れると、出てきた時には、別の状態になっている。このように、種々の状態を、別の状態に変換する機能を示すものとして、オペレータという概念が用いられる。 x 偏光板を例にしてみよう。状態 $|x\rangle$ の光を x 偏光板に入れると、状態 $|x\rangle$ のまま出てくる。また、 $|45^\circ\rangle$ を入れると、確率振幅 $1/\sqrt{2}$ で、やはり x 偏光の状態、つまり $(1/\sqrt{2})|x\rangle$ の状態が出てくる。これらを、次のように表現する。

$$(x \text{ 偏光板})|x\rangle = |x\rangle, \quad (x \text{ 偏光板})|45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|x\rangle$$

ケットベクトル $|x\rangle$ と $|45^\circ\rangle$ の前に書かれた、“ $(x \text{ 偏光板})$ ” が、 x 偏光板の行う変換を表すオペレータ (operator) である。

感の良い読者の中には、“ $(x \text{ 偏光板})$ ” は、ベクトル空間における、行列 (matrix) のようであると思う人も、いるかもしれない。事実、そのとおりで、オペレータは行列と完全に対応する。行列の場合は、 n 行 n 列に対し、 n^2 個の要素が与えられていて、具体的な変換の仕方が人目でわかる。しかし、オペレータの場合は、ただ、“ $(x \text{ 偏光板})$ ” と書かれていて、任意の状態を、どのように変換するのか、はっきりしないように見える。

実は、オペレータに対しても、基底状態を変換した状態が、各基底状態をとる確率振幅を知っていれば、任意の状態の変換の仕方を、具体的に計算することができる。つまり、ある基底状態 $|j\rangle$ を、オペレータ \hat{A} で変換してできた状態 $\hat{A}|j\rangle$ に対し、次式に示す基底状態 $|j\rangle$ をとる確率振幅を、知っていれば、 $\hat{A}|\psi\rangle$ を、いつでも計算できる (オペレータを、ただ A と書くと、ケットベクトルの A 倍と、勘違いされるので、誤解されやすい時は、前にも述べたように、“ $\hat{}$ ” 記号を付ける)。

$$\langle j|\hat{A}|k\rangle \quad (j,k \text{ はすべての基底状態})$$

図 2.8 で、ある状態 $|\psi\rangle$ が、オペレータ \hat{A} の作用を受け、状態を変換された後に $|\chi\rangle$ をとる確率は、 \hat{A} の前後に、分波器合成器のペアを入れても、変わらない。(b) の図を見てみると、入力から出力へ行くのに、四つの通路、 $x \rightarrow A \rightarrow x$ 、 $y \rightarrow A \rightarrow x$ 、 $x \rightarrow A \rightarrow y$ 、 $y \rightarrow A \rightarrow y$ のあることがわかる。それぞれの通路が一本のみ開いているときの確率振幅は、例えば、 $y \rightarrow A \rightarrow x$ の場合、次式のように、 $|\psi\rangle$ の成分と $|\chi\rangle$ の成分、および、 \hat{A} の成分がわかっているならば、計算できる。

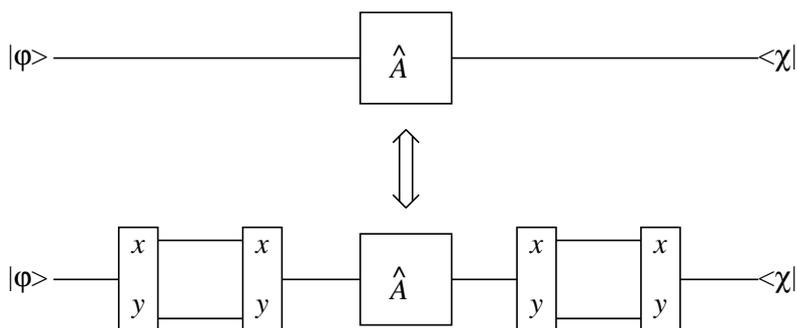


図 2.8 オペレータの成分展開 $\langle \chi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \chi | x \rangle \langle x | \hat{A} | \psi \rangle + \langle \chi | y \rangle \langle y | \hat{A} | \psi \rangle$

$$\langle \chi | x \rangle \langle x | \hat{A} | \psi \rangle$$

さて、入力から出力へ行くのに、四つの通路があり、かつ、どの通路も開いているときの確率振幅は、干渉実験などからもわかるように、各通路の確率振幅を、重ね合わせの原理により合成することで、計算できる。したがって、 $|j\rangle$ 、 $|k\rangle$ を基底状態とすると、次式が成立する。

$$\langle \chi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{j,k} \langle \chi | j \rangle \langle j | \hat{A} | k \rangle \langle k | \psi \rangle$$

この式は、左辺の $\langle \chi |$ と \hat{A} の間、および \hat{A} と $|\psi\rangle$ の間に、式 2.7 の分解再合成の式を挿入すれば、簡単に得られることに注意してほしい。

上式は、 $\langle \chi |$ が、どんな状態でも成立することから、両辺より、 $\langle \chi |$ を落とすことができる。

$$\hat{A} | \psi \rangle = \sum_{j,k} |j\rangle \langle j | \hat{A} | k \rangle \langle k | \psi \rangle$$

この式は、 \hat{A} を $|\psi\rangle$ に作用させてできた状態 $\hat{A} | \psi \rangle$ の、具体的な形を示している。

問題 2.11 x 偏光板の行う作用を表すオペレータを、 \hat{x} と略記するとして、 $\langle x | \hat{x} | x \rangle$ 、 $\langle x | \hat{x} | y \rangle$ 、 $\langle y | \hat{x} | x \rangle$ 、 $\langle y | \hat{x} | y \rangle$ を求めよ。

ヒント $|x\rangle$ を x 偏光板に入れるとそのまま抜け、 $|y\rangle$ を入れると、完全に遮断される。

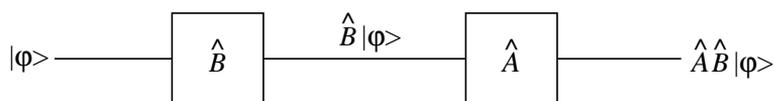


図 2.9 装置を二台通すとオペレータは積になる

答え それぞれ、1、0、0、0。

問題 2.12 $\hat{x}|\theta\rangle$ は、どんな状態になるか。

答え $|x\rangle\langle x|\theta\rangle$ 、つまり $|x\rangle$ を $\langle x|\theta\rangle$ の確率振幅でとる状態。

式 2.4 で、 $\langle x|$ として、基底状態の一つ、 $\langle m|$ を考えると、 $\langle m|j\rangle$ は、 $m = j$ のときだけ、1 となるから、次のようになる。

$$\langle m|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_k \langle m|\hat{A}|k\rangle \langle k|\psi\rangle$$

この式の m を再び j に書き直したものと、 A を行列、 ψ をベクトルとしたときの、 $A\psi$ の成分を与える次式を比較してみると、完全に対応している。

$$(A\psi)_j = \sum_k A_{jk}\psi_k$$

ここでも \hat{A} が、ベクトル空間の変換行列によく対応することがわかるであろう。この意味で、 $\langle j|\hat{A}|k\rangle$ を、オペレータの jk 成分と呼ぶ。

行列の積 (product of matrix) に対応し、オペレータの積 (product of operator) の概念がある。図 2.9 に示すように、与えられた状態を、まず \hat{B} で変換し、さらに、 \hat{A} で変換したものが、オペレータの積の概念、 $\hat{A}\hat{B}$ である。

問題 2.13 オペレータ \hat{B} と \hat{A} の、積の成分 $\langle j|\hat{A}\hat{B}|k\rangle$ を、 \hat{B} の成分、 \hat{A} の成分を用いて、書き表せ。

ヒント 図 2.9 で、入力を $|k\rangle$ としたとき、出力が $\langle j|$ となる確率振幅を考え、さらに、 A と B の間に、分波器合成器の組を入れてみよ。

答え

$$\langle j | \widehat{A}\widehat{B} | k \rangle = \sum_m \langle j | \widehat{A} | m \rangle \langle m | \widehat{B} | j \rangle$$

問 2.13 の結果よりわかるように、オペレータ \widehat{A} 、 \widehat{B} の積は、二つの行列の積と、完全に対応する。行列の、積の順序を入れ換えると、一般には、もとの積と異なる。同様に、オペレータの積も、交換すると、一般には異なる変換となる。従って、オペレータ $\widehat{A}\widehat{B}$ と、オペレータ $\widehat{B}\widehat{A}$ の差は、0 とならない。この差を、交換子 (commutator) と呼び、次のように表す。

$$[\widehat{A} \widehat{B}] = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}$$

オペレータ \widehat{A} 、 \widehat{B} の組合せによっては、たまたま、 $[\widehat{A} \widehat{B}] = 0$ になることがあるが (右辺は、厳密に言うと、全成分が 0 となるオペレータ)、このとき、 \widehat{A} と \widehat{B} は、交換可能 (commutable) と呼ばれる。

問題 2.14 45° 偏光板の行う変換、を表すオペレータ $\widehat{45^\circ}$ の、成分を求めよ。

ヒント $\widehat{45^\circ} |45^\circ\rangle = |45^\circ\rangle$ 、 $\widehat{45^\circ} |135^\circ\rangle = 0$ の二式に、問 2.5 の結果を用い、さらに、左から $\langle x|$ 、 $\langle y|$ をほどこす。

答え

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

問題 2.15 光を 45° 偏光板に通し、その結果を、さらに、 x 偏光板に通すという、二枚の偏光板の組の働きは、 $\widehat{x45^\circ}$ と表される。 $\widehat{x45^\circ}$ と、 $\widehat{45^\circ x}$ の、二つのオペレータの、積のオペレータ成分を求めよ。また、 \widehat{x} と $\widehat{45^\circ}$ の、交換子のオペレータ成分を求めよ。

答え $\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ -1/2 & 0 \end{pmatrix}$

問題 2.16 $\widehat{x45^\circ} |\psi\rangle$ は、 $|\psi\rangle$ によらず、常に x 偏光していることを示せ。同様に、 $\widehat{45^\circ x} |\psi\rangle$ は、常に、 45° 偏光していることを示せ。このように、積の順を入れ換えると、異なる出力が得られる。

問題 2.17 何もしないオペレータ \widehat{I} の、各成分を求めよ。

答え
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

問題 2.18 何もしないオペレータ \hat{I} は、どんなオペレータ \hat{A} とともに、交換可能であることを示せ。

答え
$$\hat{A}\hat{I} = \hat{I}\hat{A} = \hat{A}$$

2.5 共役オペレータ

オペレータ \hat{A} が、状態 $|\psi\rangle$ を変換して、状態 $|\phi\rangle$ にしたとする。この $|\phi\rangle$ が、さらに、別の状態 $|\chi\rangle$ をとる確率振幅は、次式で与えられる。

$$\langle\chi|\phi\rangle = \langle\chi|\hat{A}|\psi\rangle$$

この右辺は、オペレータを、二つの状態で、はさむ形になっている。では逆に、 $|\chi\rangle$ が $|\phi\rangle$ をとる確率振幅を、同じような形で表せないか、と考える。今度は、 $|\chi\rangle$ が右になるので、その形は、別のオペレータ \hat{A}^\dagger を用いて、次のようになることが、予想される。

$$\langle\phi|\chi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\chi\rangle$$

つまり、 $|\chi\rangle$ の方を変換して、 $\hat{A}^\dagger|\chi\rangle$ とし、この状態が、 $|\psi\rangle$ をとる確率振幅、という形で、表現するわけである。このような表現は、 \hat{A}^\dagger を適切に選びさえすれば、 $|\psi\rangle$ 、 $|\chi\rangle$ の状態によらず、常に可能となる。 \hat{A}^\dagger を、どのように選ぶべきかを、考えてみよう。まず、 $\langle\chi|\phi\rangle = \langle\phi|\chi\rangle^*$ であるから、次のように書けるはずである。

$$\langle\chi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\chi\rangle^*$$

オペレータの両側に、完備性の条件式 式 2.7 を入れ (分波器合成器の組を入れるのと等価)、上式を、基底状態で展開すると、まず、右辺は、次のようになる。

$$\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\chi\rangle^* = \left(\sum_{j,k} \langle\psi|j\rangle \langle j|\hat{A}^\dagger|k\rangle \langle k|\chi\rangle\right)^* = \sum_{j,k} \langle\chi|k\rangle \langle j|\hat{A}^\dagger|k\rangle^* \langle j|\psi\rangle$$

これと、左辺を展開したものと比較すると (比較しやすいように、左辺は、 k, j で展開する)、次の関係が、すべての j, k に対し成立すれば、式 2.5 の満たされることが、わかる (逆の証明は、式 2.5 の、 $\langle \chi|, |\psi\rangle$ を、 $\langle j|, |k\rangle$ とすることから得られる)。

$$\langle j|\hat{A}^\dagger|k\rangle = \langle k|\hat{A}|j\rangle^*$$

つまり、行列で言うと、 \hat{A}^\dagger の成分が、 \hat{A} の転置共役であれば、あらゆる $\langle \chi|, |\psi\rangle$ に対し、式 2.5 が成立する。このようにして選ばれた、 \hat{A}^\dagger のことを、 \hat{A} の共役オペレータ (adjoint operator) と呼ぶ。今後、単に \hat{A}^\dagger と書くときは、暗黙に、 \hat{A} の共役オペレータであると約束する。

式 2.5 と式 2.5 で、 $|\chi\rangle$ が、任意の状態でよいことを考えると、 \hat{A}^\dagger を \hat{A} の共役オペレータとして、形式的に次の関係が得られる。

$$|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \quad \text{ならば} \quad \langle\phi| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$$

この関係は、オペレータを含む、いくつかの演算に極めて有効である。例えば、粒子にある操作を施す (あるいは粒子をある装置に通す) ことに対応するオペレータを、 \hat{U} と表そう。この操作が、粒子を消滅させることのないような、無損失 (non-dissipative) のものだとすると、任意の $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ なる状態 $|\psi\rangle$ に対し、操作後の状態 $|\phi\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$ は、やはり、 $\langle\phi|\phi\rangle = 1$ の条件を満たす。式 2.5 の関係を用いると、 $\langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = 1$ が得られる。任意の $|\psi\rangle$ に対し、この関係が成立するためには、 $\hat{U}^\dagger\hat{U}$ が、何もしないオペレータ \hat{I} でなければ、ならない (厳密な証明は、ラグランジェの未定係数法を使って可能であるが、ここでは略す)。

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$$

この式を満たすオペレータは、ユニタリーオペレータ (unitary operator) と呼ばれる。

問題 2.19 $\hat{x}, \hat{45}^\circ, \hat{I}$ は、それぞれ無損失オペレータかどうか。

答え それぞれ損失、損失、無損失。

2.6 基底状態の組の作り方

偏光状態を記述するにはいつも、二つの状態の組、つまり、基底状態を必要とし、どんな状態も、この二つの状態をとる確率振幅をもって表現することができる。しかし、この基底状態の選び方には、かなりの任意性があり、例えば $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ 、 $\{|\theta\rangle, |\theta + 90^\circ\rangle\}$ 、 $\{|R\rangle, |L\rangle\}$ と、幾通りも選ぶことができた。一般に n 状態系でも、事情は同じであり、直交性と完備性を満たささえすれば、基底状態の組の選択の仕方には、かなりの自由度がある。

実は、まったく自由に、基底状態の組を構成することができるのである。その方法を、以下で示してみよう。まず、勝手な状態 $|\psi_1\rangle$ を考える。といっても、何も基盤がないのは考えづらいので、 $\{|x_i\rangle\}$ を基底として考え、 $\{\langle x_i | \psi_1 \rangle\}$ が勝手に与えられたと考える。 $|\psi_1\rangle$ が正規化されていれば、これを、これから作り出す基底状態の第一の状態 $|1\rangle$ とする。正規化されていなければ、正規化を行う。

$$|1\rangle = \frac{|\psi_1\rangle}{\sqrt{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle}}$$

さて次に、また別の勝手な状態 $|\psi_2\rangle$ を考える。 $|\psi_2\rangle$ のうちで $|1\rangle$ の成分を持つ要素があれば、それを取り去り $|\psi'_2\rangle$ とする。

$$|\psi'_2\rangle = |\psi_2\rangle - |1\rangle \langle 1 | \psi_2 \rangle$$

これを次のように正規化する。

$$|2\rangle = \frac{|\psi'_2\rangle}{\sqrt{\langle \psi'_2 | \psi'_2 \rangle}}$$

容易にわかるように、 $\langle 1 | 2 \rangle = 0$ となるから、 $|2\rangle$ は第二の基底状態とすることができる。 $|\psi'_2\rangle$ がたまたま 0 となってしまうときは、もう一度、別の勝手な状態を $|\psi_2\rangle$ として、 $|2\rangle$ を定める。

第三の基底状態は、同様にして、さらに別の勝手な状態 $|\psi_3\rangle$ から作り出すことができる。

$$|\psi'_3\rangle = |\psi_3\rangle - |1\rangle \langle 1 | \psi_3 \rangle - |2\rangle \langle 2 | \psi_3 \rangle$$

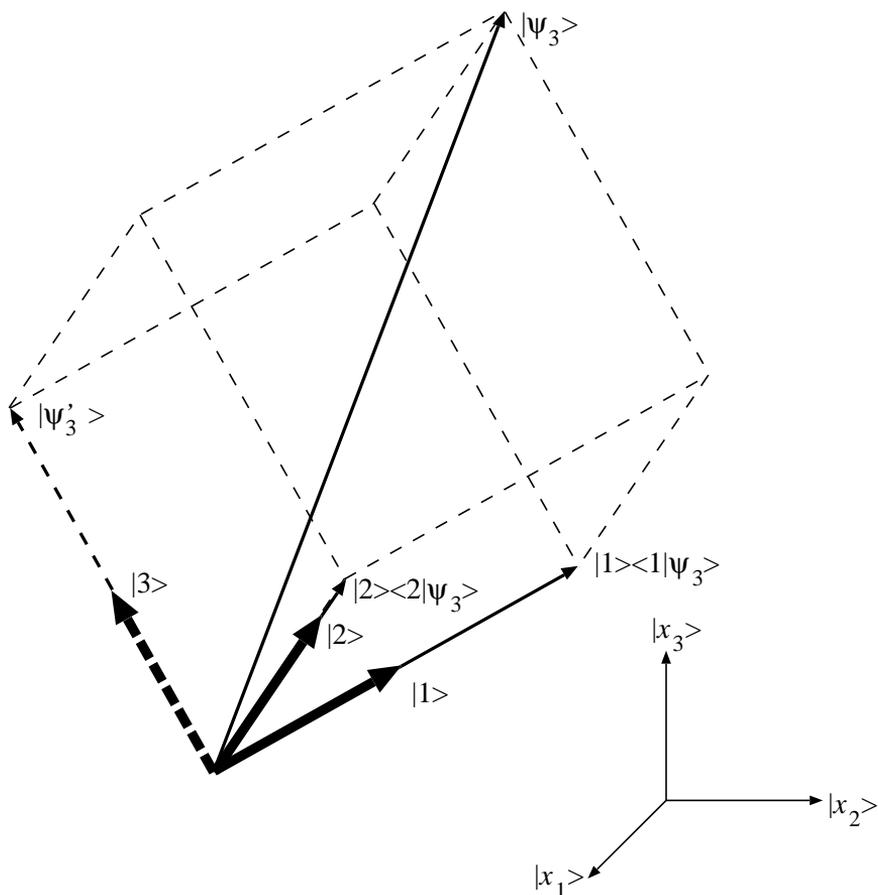


図 2.10 新しい基底状態の作り方 (シュミットの直交化法)。 $|\psi_3\rangle$ から $|3\rangle$ を作る

$$|3\rangle = \frac{|\psi'_3\rangle}{\sqrt{\langle\psi'_3|\psi'_3\rangle}}$$

この $|3\rangle$ も、 $|1\rangle$ と $|2\rangle$ の双方に直交し、かつ正規化されているので、第三の基底状態としての資格を有している。このようにして次々と、 n 個の基底状態を作り出すことができる。

ここに述べた基底状態の作り方は、シュミットの直交化法 (Schmidt orthogonalization method) と呼ばれ、実は、 n 次元ベクトル空間で正規直交する n 個の単位ベクトルを生成する方法と、まったく同じである。例えば $|1\rangle$ と $|2\rangle$ の基底状態ができているとき、 $|\psi_3\rangle$ から $|3\rangle$ を作り出す過程は、図 2.10 に示すようになっている。ただ、これは、あくまでも模式図であり、本当は、 n 次元複素数空間での作業となり、図示は困難となる。

問題 2.20 $n = 3$ とし、 $\langle x_i | \psi_I \rangle$ が次のように与えられているとき、これを利用して、基底状態の組を作り出せ。複素共役を、忘れないよう注意せよ。

$$(a) \quad |\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

$$(b) \quad |\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \quad |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$(c) \quad |\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 1 \end{pmatrix} \quad |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 2 \end{pmatrix} \quad |\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 2i \\ -1 \end{pmatrix}$$

答え

$$(a) \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$(b) \quad \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ -2/\sqrt{6} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$(c) \quad \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ i/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ i/\sqrt{6} \\ -2/\sqrt{6} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

第 2 章のまとめ

1. 基底状態の組 $\{|j\rangle : j = 1, \dots, n\}$

$$\langle j|k\rangle = \delta_{jk} \quad (\text{正規直交性}), \quad \sum_{\text{all } j} |j\rangle \langle j| = \hat{I} \quad (\text{完備性})$$

2. 共役性

$$\langle \psi|\chi\rangle = \langle \chi|\psi\rangle^*, \quad \langle \psi|\hat{A}^\dagger|\chi\rangle = \langle \chi|\hat{A}|\psi\rangle^*$$

$$\text{if } |\chi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle, \quad \text{then } \langle \chi| = \langle \psi|\hat{A}^\dagger$$

3. 基底展開

- ブラベクトルの後、ケットベクトルの前、オペレータの前後に、適宜、完備性の式を挿入して行う

$$\langle j|\psi\rangle : |\psi\rangle \text{ の } j \text{ 成分}, \quad \langle j|\hat{A}|k\rangle : A \text{ の } jk \text{ 成分}$$

- 別の状態の組 $\{|J\rangle : J = 1, \dots, n\}$ が基底状態であることの証明

$$\sum_{\text{all } j} \langle J|j\rangle \langle j|K\rangle = \delta_{JK} \quad (\text{正規直交性}), \quad \sum_{\text{all } J} \langle j|J\rangle \langle J|k\rangle = \delta_{jk} \quad (\text{完備性})$$

4. 無損失なオペレータ (ユニタリーオペレータ) \hat{U}

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}$$

5. 基底状態の組の作り方

- いくつかの勝手な状態を用意し、シュミットの方法で、基底状態を作り出していくことができる。

第3章

運動方程式

量子力学で、系の状態を表すには、まず、基底状態の組を用意し、その各基底状態をとる確率振幅によって、状態を表現する。これまでの各章で、電子の空間的状态やスピン状態を例にして、状態の概念について、説明を行った。しかし、これまでに述べたことは、古典力学に対応させてみれば、いわば「ボールの位置は x 、 y 、 z 座標で表される」といった、基本的な表現法を示したにすぎない。電子が、時間につれて、どのように動いていくのか、振子はどの位置で安定に静止できるのか、といった問題を解くには、古典力学で、ニュートンの運動方程式を必要としたように、量子力学でも、なんらかの運動方程式と呼ばれる形の方程式を必要とする。

ここでは、量子力学における運動方程式の形を示し、運動方程式の満たすべき条件、運動方程式の解、などについて述べる。

3.1 時間経過オペレータ

ある時刻、 $t = t_0$ のときの系の状態を、 $|\psi(t_0)\rangle$ と表そう。それから時間が経過して、 $t = t_1$ になったときの状態、 $|\psi(t_1)\rangle$ を、 $|\psi(t_0)\rangle$ から、予測することを考えよう。 t_0 から t_1 まで待つと、通常は、状態は変化していく。つまり、待つということ自体、状態を、別の状態へ変換させる機能を持つ。そこで、一種の装置を通すのと同じように、これをオペレータとして考えることができる。

$$|\psi(t_1)\rangle = \hat{U} |\psi(t_0)\rangle$$

オペレータならば、それぞれの基底状態が、時間経過後に、どのような状態に変換されるかを、すべての基底状態に対し調べておけば、一般の状態が、どんな状態に変換される

かを、求めることが出来る。ある基底状態 $|k\rangle$ が、 t_0 から t_1 までの時間経過後、変換され、基底状態 $|j\rangle$ をとる確率振幅を $\langle j|\hat{U}|k\rangle$ と表そう。むろん、 $|j\rangle$ も $|k\rangle$ も、同じ基底状態の組に属するものとする。上に述べたことは、式で、次のように表現することができる。

$$\langle j|\psi(t_1)\rangle = \sum \langle j|\hat{U}|k\rangle \langle k|\psi(t_0)\rangle$$

このオペレータ U (の各成分) は、 t_0 、 t_1 を決めれば、一義的に決定されるので、 $\hat{U}(t_1, t_0)$ とも表現され、時間経過オペレータ (time progress operator) と呼ばれる。

時間が経過しても、状態の正規性は保たれるので、次式が成立する。

$$\langle \psi(t_1)|\psi(t_1)\rangle = 1$$

これより、 \hat{U} に条件が課せられる。

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}$$

\hat{U} は、ユニタリーオペレータ (unitary operator)、つまり無損失な変換であることがわかる。

問題 3.1 式 3.1 から、 \hat{U} がユニタリーオペレータとなることを示せ。

ヒント 第2章の共役オペレータの節を参照

時間と共に変化するような、外的駆動力などが無い物理系、つまり、物理的環境が、時間的に変化しない時不変 (time independent) な系を、考えよう。こうした時不変な系では、 t_0 から Δt 待って、 $t_1 (= t_0 + \Delta t)$ になるまでの変換も、また、 t'_0 から同じ Δt 待って、 $t'_1 (= t'_0 + \Delta t)$ になるまでの変換も、等しくなり、ともに、 Δt だけに依存するはずである。したがって、これを、簡単に、 $\hat{U}(\Delta t)$ と表すと、次の条件が成立する。

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = \hat{U}(\Delta t) |\psi(t)\rangle$$

$\hat{U}(t_1, t_0)$ の具体的な形は、次節に述べる運動方程式と深い関係がある。古典力学においては、例えば、重力中の物体の一次元運動は、次の式で与えられる。

$$x = \frac{1}{2}g(t - t_0)^2 + v_0(t - t_0) + x_0, \quad v = g(t - t_0) + v_0$$

これから、次のような運動方程式が推定された。

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = g$$

また、逆に、運動方程式を解くと、質点の運動が計算できる。 $\hat{U}(t_1, t_0)$ は、いわば、 t_0 における x_0, v_0 から、 t における x, v を与える、質点の運動を表す式に対応する。この \hat{U} から、状態の変化を決める、微分方程式を求めることができれば、それが、量子力学における、運動方程式になるわけである。

3.2 運動方程式

古典力学におけるニュートンの運動方程式を、次のように変形してみよう。

$$dx = v dt, \quad dv = g dt$$

このように、運動方程式とは、 t における x, v の値が、それから僅かな時間、 dt 後に、どれだけ変化するかを示したものである。同じように、 $|\psi(t)\rangle$ が、 Δt 後にどれだけ変化するかを考えよう。 $|\psi(t + \Delta t)\rangle$ と $|\psi(t)\rangle$ の差は、次のようになる。

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t + \Delta t, t) |\psi(t)\rangle - |\psi(t)\rangle$$

$\hat{U}(t, t)$ は何も待たないことになり、状態を変換しないオペレータ \hat{I} に等しいから、 $\hat{U}(t + \Delta t, t)$ は $\Delta t = 0$ で \hat{I} になる。 Δt が増加するにつれ、 $\hat{U}(t + \Delta t, t)$ の各成分は、 \hat{I} からずれていく。従って、 $\hat{U}(t + \Delta t, t) - \hat{I}$ を Δt で割り、 $\Delta t \rightarrow 0$ とすれば、 \hat{U} の各成分を t で微分したオペレータが得られる。これを、慣習上、 $\hat{H}(t)/i\hbar$ と表す ($i\hbar$ は、後に示すように、物理的な量との対応をとるための、調整用に入れた量である)。

$$\hat{H}(t) = i\hbar \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\hat{U}(t + \Delta t, t) - \hat{I}}{\Delta t}$$

この \hat{H} をハミルトニアンオペレータ (Hamiltonian operator) と呼ぶ。この定義を用いると、式 3.2 の両辺を Δt で除し、 $\Delta t \rightarrow 0$ とすることにより、次の微分方程式を得る。

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

これが、量子力学における運動方程式 (equation of motion) である。

\hat{U} がユニタリーオペレータ (unitary operator) であると、その微係数の $i\hbar$ 倍である \hat{H} は、次の式を満たすことがわかる。

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$$

この関係を満たすオペレータを、一般に、エルミートオペレータ (Hermitian operator) と呼ぶ。

問題 3.2 $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}$ より、その微係数の $i\hbar$ 倍の \hat{H} が、エルミートオペレータとなることを示せ。

ヒント $\hat{U}(t + \Delta t, t) = \hat{I} + i\hbar \hat{H}(t) \Delta t + O(\Delta t^2)$ とし、与式へ代入し、 Δt の一乗の項を比較してみよ。

問題 3.3 運動方程式 3.2 を、成分に展開した形で表してみよ。

答え

$$i\hbar \frac{d\langle j|\psi(t)\rangle}{dt} = \sum_j \langle j|\hat{H}(t)|k\rangle \langle k|\psi(t)\rangle \quad (\text{for all } j)$$

あるいは、丁寧に書くと次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{d\langle 1|\psi(t)\rangle}{dt} &= \langle 1|\hat{H}(t)|1\rangle \langle 1|\psi(t)\rangle + \langle 1|\hat{H}(t)|2\rangle \langle 2|\psi(t)\rangle + \cdots \\ i\hbar \frac{d\langle 2|\psi(t)\rangle}{dt} &= \langle 2|\hat{H}(t)|1\rangle \langle 1|\psi(t)\rangle + \langle 2|\hat{H}(t)|2\rangle \langle 2|\psi(t)\rangle + \cdots \\ &\dots \end{aligned} \right\}$$

上式には、 $\langle 1|\psi(t)\rangle, \langle 2|\psi(t)\rangle, \dots, \langle n|\psi(t)\rangle$ という n 個の変数が含まれ、かつ、それぞれの一次の微分しか含まれていない n 元 1 階線型微分方程式となっている。

特に、 $\hat{U}(t + \Delta t, t)$ が、 t に依存せず、 Δt だけの関数 $\hat{U}(\Delta t)$ になるとき、つまり、時不変な系では、 $\hat{H}(t)$ は t に依存しない一定のオペレータとなり、式 3.3 または式 3.3 で、 $\langle i | \hat{H}(t) | j \rangle$ なる係数が、すべて、時間によらない一定値となる。このような時不変の系というと、何も運動がないように、勘違いしがちであるが、あくまでも、環境が時不変であるだけであって、質点は運動するものであることは、以下の各節で示される。

3.3 ハミルトニアン・オペレータ \hat{H}

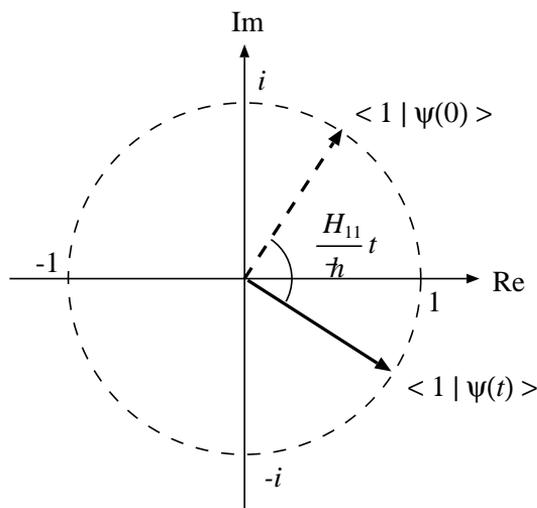
ハミルトニアン・オペレータ \hat{H} は、どのような物理的意味を持っているのだろうか。それを理解するために、簡単な運動方程式を解いてみよう。運動方程式 3.3 で、もっとも簡単な形というのは、基底状態が一つしかなく、かつ、時不変の場合である。このとき、任意の状態は、一個の基底で展開されるだけとなる。例えば、その基底を $|1\rangle$ とすると、 $|\psi(t)\rangle$ の成分は、 $\langle 1 | \psi(t) \rangle$ のみとなる。また、 \hat{H} の成分も、 $\langle 1 | \hat{H} | 1 \rangle$ のみとなる。これを、 H_{11} と表す。従って、運動方程式は簡単に表される。

$$i\hbar \frac{d\langle 1 | \psi(t) \rangle}{dt} = H_{11} \langle 1 | \psi(t) \rangle$$

まず、式 3.2 のエルミート性より、 $H_{11} = H_{11}^*$ となり、 H_{11} は実数である (実は、これが実数となるように、 \hat{H} の定義のさい、係数に、複素数を導入したのであるが、詳しくは、後に述べる)。さらに、時不変であるから、 H_{11} は時間によらない一定値となる。上式は、一元一階微分方程式であり、その解は、容易に求めることができる。微分方程式に限らず、差分方程式でも積分方程式でも、方程式が線型の場合は、 $\exp(\lambda t)$ といった、指数関数の形が、解になる。そこで、ここでも、次の形の解を、仮定してみよう。

$$\langle 1 | \psi(t) \rangle = \alpha \exp(\lambda t)$$

この形の解を、式 3.3 へ代入すると、 $d\exp(\lambda t/dt) = \lambda \exp(\lambda t)$ となることから、 $i\hbar \lambda \alpha \exp(\lambda t) = H_{11} \alpha \exp(\lambda t)$ となる。従って、 $i\hbar \lambda = H_{11}$ 、つまり、 $\lambda = -iH_{11}/\hbar$ であれば、式 3.3 は、式 3.3 の解となることがわかる。 α はどんな数であっても、この解は式 3.3 を満たすが、 $t = 0$ で、 $|\psi(t)\rangle$ が $|\psi(0)\rangle$ であるということを考慮すると、 $\alpha = \langle 1 | \psi(0) \rangle$ となる。これより次式が得られる。

図 3.1 $n = 1$ のときの運動方程式の解

$$\langle 1 | \psi(t) \rangle = \langle 1 | \psi(0) \rangle \exp \frac{-iH_{11}t}{\hbar}$$

この式から、 $\langle 1 | \psi(t) \rangle$ は、図 3.1 のように、複素平面を ω ($= H_{11}/\hbar$) の角周波数で、負方向に回転するベクトルになることが、わかる。基底状態が一個しかないことを考えると、 $|\langle 1 | \psi(0) \rangle|^2 = 1$ であるから、 $|\langle 1 | \psi(t) \rangle|^2$ も常に 1 となる。

ここで第 1 章で述べたアインシュタインの関係 (Einstein relation) を、思い起こしてもらいたい。「エネルギー E の量子状態、に対応する確率振幅は、 $\exp(-i\omega t)$ ^{*1} の形で時間変化し、 $E = \hbar\omega$ の関係がある。」このことと、式 3.3 を見比べてみると、 $E = H_{11}$ となり、状態 $|\psi(t)\rangle$ は、 H_{11} のエネルギーを持っていることになる。このように、 \hat{H} は、エネルギーと極めて密接な関係にある、オペレータである。もともと、ハミルトニアンという言葉は、古典力学で、系の全エネルギーを運動量と位置のみを変数として表したものに、付けられた名前であり、その概念を、量子力学に発展させたものが、ハミルトニアンオペレータである。 \hat{H} の定義の際、 $i\hbar$ という係数を導入したのは、 \hat{H} が、直接エネルギーに対応するように工夫した結果である。

では、 $n = 2$ 、つまり系が、二個の基底状態で表現できる場合を、考えてみよう。 $\langle j | \hat{H} | k \rangle$

^{*1} 工学系では振動を複素数で表わす時に $\exp(j\omega t)$ とする。また進行波は $\exp[j(\omega t - kx)]$ とする。つまり i の代わりに $-j$ を採用する。物理系と工学系の両方に出会う人は $j = -i$ と覚えておくとよいだろう

を H_{jk} と表すと、次の運動方程式になる。

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{d\langle 1|\psi(t)\rangle}{dt} &= H_{11}\langle 1|\psi(t)\rangle + H_{12}\langle 2|\psi(t)\rangle \\ i\hbar \frac{d\langle 2|\psi(t)\rangle}{dt} &= H_{21}\langle 1|\psi(t)\rangle + H_{22}\langle 2|\psi(t)\rangle \end{aligned} \right\}$$

\hat{H} のエルミート性、 $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ より、次式が得られる。

$$H_{11} = H_{11}^*, \quad H_{12} = H_{21}^*, \quad H_{22} = H_{22}^*$$

つまり、 H_{11} と H_{22} は実数、 H_{12} と H_{21} は、互いに複素共役となる。

まず、 $t=0$ で、 $\langle 1|\psi(0)\rangle$ がたまたま、0 であったとしてみよう。すると、式 3.3 の上式を積分することにより、 $\langle 1|\psi(t)\rangle \cong -iH_{12}\langle 2|\psi(t)\rangle t/\hbar$ が得られる。このように、 $\langle 2|\psi(t)\rangle$ の寄与により、 $\langle 1|\psi(t)\rangle$ は、徐々に 0 から増加していく。つまり、 H_{12} は、 $\langle 2|\psi(t)\rangle$ が、どのくらい $\langle 1|\psi(t)\rangle$ に影響を及ぼしているかの程度を、示している。逆に、 H_{21} は、 $\langle 1|\psi(t)\rangle$ が $\langle 2|\psi(t)\rangle$ に及ぼす影響の程度を、示している。従って、 $\langle 2|\psi(t)\rangle$ が小さく、 $\langle 1|\psi(t)\rangle$ が大きい場合には、 $\langle 2|\psi(t)\rangle$ は、 $\langle 1|\psi(t)\rangle$ の影響で、徐々に増加していくことになる。

$\langle 1|\psi(t)\rangle$ は、考えている系の状態が、 $|1\rangle$ という状態をとる確率振幅であり、同様に、 $\langle 2|\psi(t)\rangle$ は、 $|2\rangle$ 状態をとる確率振幅であるから、前式に述べた現象は、系が $|2\rangle$ の状態にいる可能性が減少し、 $|1\rangle$ の状態にいる可能性が増加することを、示している。このことを、状態 $|2\rangle$ から $|1\rangle$ への遷移 (transition)、と呼ぶ。このように、 H_{12} は、 $|2\rangle$ から $|1\rangle$ への遷移に強く関係し、 H_{21} は、 $|2\rangle$ から $|1\rangle$ への遷移に強く関係する量である。また、 $H_{12} = H_{21}^*$ より、これら両遷移の程度は等しくなる。

H_{11} と H_{22} は、式 3.3 で、 $H_{12} = H_{21} = 0$ としてみると、物理的意味が明らかになる。この場合、二つの式はそれぞれ独立となり、上の式からは、式 3.3 と同じ形の解が、得られる。つまり、 $\langle 1|\psi(t)\rangle$ は、 H_{11} のエネルギーを持ち、同様にして、 $\langle 2|\psi(t)\rangle$ は、 H_{22} のエネルギーを持つことが、示される。

以上をまとめると、ハミルトニアンオペレータ \hat{H} の非対角成分 H_{jk} は、ある状態 $|k\rangle$ から、別の状態 $|j\rangle$ への遷移の可能性を表しており、確率振幅の結合の程度を示している。また、対角成分 H_{jj} は、状態間の結合のない (H_{jk} がすべて 0 の) 場合の、各状態のエネルギーを表しているといえる。

3.4 運動方程式の解

具体的な物理系で、ハミルトニアンオペレータ \hat{H} の各成分が、どのような値となるかについては、次章に譲ることとして、ここでは、運動方程式を解く数学的手法について、述べてみよう。

n 状態系での運動方程式は、 $\langle j | \hat{H} | k \rangle = H_{jk}$ 、 $\langle j | \psi(t) \rangle = \psi_j(t)$ と表すと、次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{d\psi_1(t)}{dt} &= \sum_k H_{1k} \psi_k(t) \\ i\hbar \frac{d\psi_2(t)}{dt} &= \sum_k H_{2k} \psi_k(t) \\ \dots \\ i\hbar \frac{d\psi_n(t)}{dt} &= \sum_k H_{nk} \psi_k(t) \end{aligned} \right\}$$

この微分方程式は、 \hat{H} が時不変、つまり、 H_{jk} がすべて定数のときは、比較的簡単に、解くことができる。一状態系のときには、 $\psi_1(t) = \alpha \exp(\lambda t)$ という解を仮定したが、これと同じような解を仮定してみよう。

$$\left. \begin{aligned} \psi_1(t) &= \alpha_1 \exp \frac{-iEt}{\hbar} \\ \psi_2(t) &= \alpha_2 \exp \frac{-iEt}{\hbar} \\ \dots \\ \psi_n(t) &= \alpha_n \exp \frac{-iEt}{\hbar} \end{aligned} \right\}$$

λ の代わりに、後の説明の都合上、 $-iE/\hbar$ と表してある。この形を、式 3.4 へ代入してみると、 $i\hbar d(\exp(-iEt/\hbar))/dt = E \exp(-iEt/\hbar)$ を利用して、次式が得られる。

$$\left. \begin{aligned} E\alpha_1 &= \sum H_{1k} \alpha_k \\ E\alpha_2 &= \sum H_{2k} \alpha_k \\ \dots \\ E\alpha_n &= \sum H_{nk} \alpha_k \end{aligned} \right\}$$

ただし、両辺を $\exp(-iEt/\hbar)$ で除してある。したがって、これらの式を同時に満たす、 E と $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ が存在すれば、微分方程式は解けることになる。上式を、ブラケット表示でまとめておこう。

$$E|\alpha\rangle = \hat{H}|\alpha\rangle$$

問題 3.4 以上の議論を、式 3.2 のブラケット表示の運動方程式をもとに、ブラケット表示のまま進め、式 3.4 を求めよ。

式 3.4 の形の方程式を解くことをオペレータ \hat{H} の固有値問題 (eigen value problem) と呼ぶ。またその解 E を \hat{H} の固有値 (eigen value)、 $|\alpha\rangle$ を \hat{H} の固有状態 (eigen state) (固有ベクトル (eigen vector)) と呼ぶ。式 3.4 を移項しよう。

$$\left. \begin{aligned} (H_{11} - E)\alpha_1 + H_{12}\alpha_2 + \cdots + H_{1n}\alpha_n &= 0 \\ H_{21}\alpha_1 + (H_{22} - E)\alpha_2 + \cdots + H_{2n}\alpha_n &= 0 \\ \cdots & \\ H_{n1}\alpha_1 + H_{n2}\alpha_2 + \cdots + (H_{nn} - E)\alpha_n &= 0 \end{aligned} \right\}$$

あるいは、次のようになる。

$$(\hat{H} - E\hat{I})|\alpha\rangle = |0\rangle$$

このように、 $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ という、 n 個の変数の n 元連立方程式の右辺が、すべて 0 の場合は、 $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ がすべて 0 という、分かり切った解しか存在しない。ただし、一つだけ例外があり、次に示す各係数の作る行列式の値が 0 の場合は、すべてが 0 ではない解を、持ち得る。

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} - E & \cdots & H_{2n} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} - E \end{vmatrix} = 0$$

まとめると、次のようになる。

$$\det(\hat{H} - E\hat{I}) = 0$$

この行列式は、 E のいくつかの特定の値に対して、0 となる。具体的には、この行列式を展開し、 E の n 次の代数方程式とし、その n 個の根、 E_1, E_2, \dots, E_n を求めればよ

い。つまり、式 3.4 の行列式を 0 にするような E の値は、 n 個存在することになる。この n 個の根が、 \hat{H} の固有値である。

固有値が求まれば、各固有値に対する固有状態を、計算することができる。それには、得られた固有値の一つ E_J を、式 3.4 へ代入し、連立方程式を解けばよい。固有値に対しては、係数の作る行列式の値が、式 3.4 のように、0 であるから、すべてが 0 でない、 $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ の組を、求めることができる。具体的には、 $\alpha_1 = 1$ とおいて右辺へ移項し、 n 本の方程式のうち、一本を落とした $n - 1$ 本の方程式を解き、 $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ を求めれば良い。これがうまくいかない場合は、別の、例えば、 $\alpha_2 = 1$ として解けば良い。

このようにして得られた、一組の $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ 、あるいは、 $|\alpha\rangle$ を固有値 E_J の固有状態と呼び、特に $|E_J\rangle$ と書く場合が多い。この場合次式が成立する。

$$\hat{H}|E_J\rangle = E_J|E_J\rangle$$

また、固有状態は、正規化されている方が、先の計算に便利のため、 $\sum_j |\langle j|E_J\rangle|^2 = 1$ つまり、次式が成立するように、 $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ に、適当な定数を掛けておくことが多い。

$$\langle E_J|E_J\rangle = 1$$

今後、特に断らない限り、固有状態は、正規化するものとする。このようにして、すべての固有値に対し、正規化した固有状態 $|E_J\rangle$ を、求めることができる。

かなり長い計算となってしまったので、何を目的とした計算か、忘れてしまったかもしれないが、このようにして求められた、 E_J 、 $|E_J\rangle$ を、式 3.4 へ代入して得られる、

$$|\psi(t)\rangle = |E_J\rangle \exp \frac{-iE_J t}{\hbar}$$

この式が、運動方程式、 $i\hbar d|\psi(t)\rangle/dt = \hat{H}|\psi(t)\rangle$ の一つの解になることは、代入してみれば明らかであろう。さらに、式 3.4 の解をすべての E_J 、 $|E_J\rangle$ に対し、任意の係数を掛けて、加え合せたものも、運動方程式の解となる。

$$|\psi(t)\rangle = \sum_J |E_J\rangle \exp \frac{-iE_J t}{\hbar} c_J$$

c_J の値は、 $t = 0$ で、上式の右辺が $|\psi(0)\rangle$ に等しくならねばならないことから、決定することができる。具体的な計算の仕方は、もう少し学ばないといけないが、結果は、

$c_J = \langle E_J | \psi(0) \rangle$ となる。従って、初期条件まで考慮に入れた、運動方程式の解 (solution for equation of motion) が得られる。

$$|\psi(t)\rangle = \sum_J |E_J\rangle \exp \frac{-iE_J t}{\hbar} \langle E_J | \psi(0) \rangle$$

問題 3.5 式 3.4 が、運動方程式の解になることを、確かめよ。

問題 3.6 $\hat{H} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ に対し、次の各問に答えよ。

1. \hat{H} により、長さ 1 の種々の状態 $|\psi\rangle$ は、どのように変換されるであろうか。簡単のために、状態 $|\psi\rangle$ の二成分、 $\langle 1 | \psi \rangle$ 、 $\langle 2 | \psi \rangle$ は実数とし、かつ、二次元空間の単位円上の 8 分割点の x および y 座標を、代表値として代入し、それらが変換された状態を、おなじ二次元座標に、プロットしてみよ。
2. \hat{H} の固有値と固有状態 (固有ベクトル) を、1. により得られた図から、視察により求めよ (固有ベクトルの方向は、 \hat{H} で変換を受けても、変わらない)。また、前述の行列式による計算方法で、固有問題を解け。

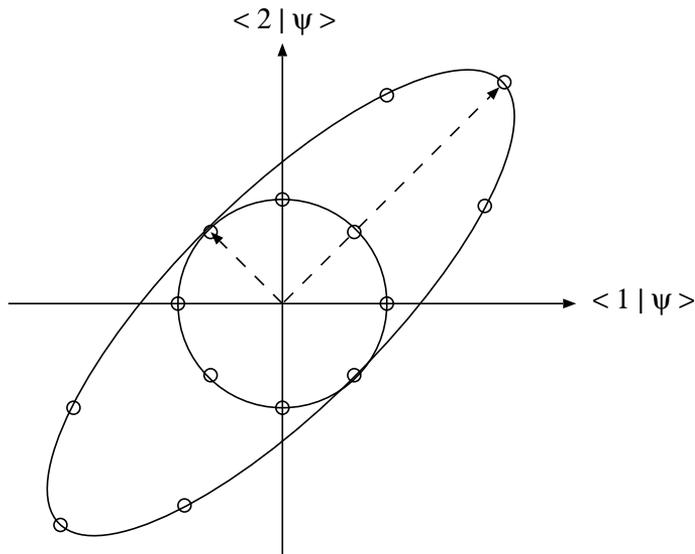
答え

1. 図 3.2
2. $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ 、または、 $\begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ の固有状態に対し、固有値 3、
 $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ 、または、 $\begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ の固有状態に対し、固有値 1。

問題 3.7 前問のハミルトニアンに対し、 $|\psi(0)\rangle$ が、 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ であるとして、運動方程式の解を求めよ。

答え

$$\begin{aligned} \langle 1 | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{2} \left[\exp \frac{-i3t}{\hbar} + \exp \frac{-it}{\hbar} \right] \\ \langle 2 | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{2} \left[\exp \frac{-i3t}{\hbar} - \exp \frac{-it}{\hbar} \right] \end{aligned}$$



$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

図 3.2 \hat{H} による変換

問題 3.8 前問の結果を用い、この系の時間経過演算子、 $\hat{U}(t, 0)$ を求めよ。また、この $\hat{U}(t, 0)$ が、ユニタリーオペレータであることを示せ。

ヒント $\langle 1|\psi(0)\rangle = A$ 、 $\langle 2|\psi(0)\rangle = B$ として、 $\langle 1|\psi(t)\rangle$ 、 $\langle 2|\psi(t)\rangle$ を求めよ。

答え

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \exp \frac{-i3t}{\hbar} + \exp \frac{-it}{\hbar} & \exp \frac{-i3t}{\hbar} - \exp \frac{-it}{\hbar} \\ \exp \frac{-i3t}{\hbar} - \exp \frac{-it}{\hbar} & \exp \frac{-i3t}{\hbar} + \exp \frac{-it}{\hbar} \end{pmatrix}$$

$\langle j|\hat{U}(t, 0)|k\rangle$ の具体的な形を計算しておくこと、どんな初期状態からスタートしても、 t 秒後の状態を簡単に求めることが出来る。この意味で微分方程式の重要な概念であり、特にグリーン関数 (Green function)、あるいはグリーン核 (Green kernel) とも呼ばれる。

3.5 固有状態の直交性

n 次オペレータの、固有値問題の答えは、全部で n 個存在するが、その n 個の固有状態は、互いに直交することが知られている。したがって、正規化された固有状態は、正規直交系を構成するため、一組の基底状態となることができる。本節では、このことを、一般的に示そうと思うが、やや、数学的過ぎるので、難解であるときは、とばして、あとから、読んでも差し支えない。

まず、互いに異なる固有値に対応する固有状態が、直交することを示そう。オペレータ \hat{A} の、固有値の一つ、 a_1 に対応する固有状態、 $|a_1\rangle$ を求めるには、前節にも述べたように、次の n 元連立方程式の解を、 $|a_1\rangle$ とすればよい。

$$(\hat{A} - \lambda \hat{I}) |a\rangle = 0$$

このケットベクトルの代わりに、同様な n 元連立方程式を解くことにより、ブラベクトルの固有状態、 $\langle a'_1|$ を求めることもできる。

$$\langle a| (\hat{A} - \lambda \hat{I}) = 0$$

ブラ固有状態 (bra eigen state) は、一般のオペレータの場合には、必ずしも、ケット固有状態 (ket eigen state) の転置複素共役とは限らないから、 $\langle a'_1|$ のように、' を付した。さて、 a_1 と異なる別の固有値を a_2 とし、それに対応するケット固有状態、ブラ固有状態を、 $|a_2\rangle$ 、 $\langle a'_2|$ としよう。

$$\langle a'_1| \hat{A} = \langle a'_1| a_1$$

$$\hat{A} |a_2\rangle = a_2 |a_2\rangle$$

式 3.5 の右より、 $|a_2\rangle$ を掛けたものと、式 3.5 の左より、 $\langle a'_1|$ を掛けたものの、差をとると、 $(a_1 - a_2) \langle a'_1| a_2\rangle = 0$ が得られる。 $a_1 \neq a_2$ であるから、次式のようになる。

$$\langle a'_1| a_2\rangle = 0$$

このようにして、 $\langle a'_1 |$ は、 $|a_1\rangle$ 以外のすべての $n-1$ 個の固有状態と、直交することが示される。したがって、もし \hat{A} が、 n 個の異なる固有値を持つ場合には、その n 個の固有状態は、すべて、互いに直交すると言える。

それでは、 n 個の固有値のうち、いくつかは、等しいときは、どうなるだろうか。 $|a\hat{I} - \hat{A}| = 0$ が、等しい固有値を n 個持つとき、つまり、 n 重根の場合、その固有値は、 n 重に縮退している、あるいは縮退度 n であると呼ぶ。一般のオペレータで、固有値が縮退しているときには、対応する固有状態が、縮退度の数だけ得られないこともある。しかし、量子力学で扱うオペレータは、ほとんど、エルミートオペレータかユニタリーオペレータであり、この二種類のオペレータについては、幸いにして、つねに、縮退度の数だけの固有状態が、得られることが知られている。詳しい説明は数学の専門書に譲るとして、 n 重根に対応する固有状態を求めると、 n 個の自由度を持った解が得られる。つまり、 n 個の、勝手に変えられる変数を含んだ、固有状態が得られる。従って、第2章に述べた、シュミットの直交化法を用いると、 n 個の互いに直交する固有状態が、得られる。

\hat{A} が、エルミートオペレータの場合には、固有値は実数になることが、証明できる。エルミートオペレータを \hat{H} と書くと、その固有値、固有状態を h 、 $|h\rangle$ として、次式が成立する。

$$\hat{H}|h\rangle = h|h\rangle$$

さて、この式の転置複素共役を、とってみよう。

$$\langle h|h^* = \langle h|\hat{H}^\dagger$$

$\langle h|$ は、 $|h\rangle$ の転置複素共役である。式 3.5 の左より、 $\langle h|$ を掛けたものと、式 3.5 の右より、 $|h\rangle$ を掛けたものとを、比較してみよう。 $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ であるから、左辺同士は当然等しくなる。したがって、 $(h - h^*)\langle h|h\rangle = 0$ 。 $\langle h|h\rangle$ は $|h\rangle$ の各成分の絶対値の二乗和となり 0 でないから次式が得られる。

$$h = h^*$$

つまり、固有値は実数となる。さらに、式 3.5 の h^* を、 h と書替えてみると、 $\langle h|$ は、 \hat{H} の h を固有値とするブラ固有状態となっていることがわかる。つまり、式 3.5 のように考えると、 $\langle h|$ は、実は $\langle h|$ であることがわかる。従って、式 3.5 は次式のようになる。

$$\langle h_j | h_k \rangle = 0 \quad (j \neq k)$$

さらに、 $\langle h_j | h_j \rangle = 1$ のように正規化を行えば、 $\{|h_j\rangle\}$ は正規直交系を組むようにできる。 n 次の物理系で、 n 個の正規直交系を組む状態は、一組の基底状態を形成することから、 $\{|h_j\rangle\}$ は、一組の基底状態となる。

同様なことは、任意のユニタリーオペレータ \hat{U} についても、言うことができる。

$$\hat{U} |u\rangle = u |u\rangle$$

この式に、その転置複素共役である、次式を辺々掛け合わせる。

$$\langle u | \hat{U}^\dagger = \langle u | u^*$$

さらに、 $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}$ を利用すると、 $\langle u | u \rangle = u^* u \langle u | u \rangle$ となり、次式が得られる。

$$|u|^2 = 1$$

つまり、固有値の絶対値は 1 となる。さらに、式 3.5 の右より、辺々に $\hat{U}u$ を掛け、 $opU^\dagger \hat{U} = \hat{I}$ 、 $u^* u = 1$ を利用すると、次式が得られる。

$$\langle u | u = \langle u | \hat{U}$$

つまり、 $\langle u |$ は、 \hat{U} のブラ固有状態となっていることがわかる。したがって、エルミートオペレータと同様の考察により、次式が得られ、として、 $\{|u_j\rangle\}$ が一組の基底状態となることが示される。

$$\langle u_j | u_k \rangle = \delta_{jk}$$

問題 3.9 次の三つのオペレータに対し、エルミートか、ユニタリーか、それ以外であるかを、確かめよ。さらに、それぞれの固有値問題を解き、固有値、ブラ固有状態、ケット固有状態を求めよ。縮退のあるときは縮退度を求め、可能な限り、固有状態が基底状態を構成するように、してみよ。また、上の各式を検討してみよ。

$$(1) \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & (i-1)/2 & (i+1)/2 \\ 0 & (i+1)/2 & (i-1)/2 \end{pmatrix} \quad (2) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3) \begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

答え

(1) ユニタリ。|固有値|=1。

i (二重): $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ と $\begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ 、またはその線型結合とそれらの転置共役。
 -1 : $\begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ とその転置共役。

(2) 以外。正規直交系は形成出来ない。

1 (二重): $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ 、 $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}^t$ 。
 -1 : $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} & -2/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} \end{pmatrix}$ 、 $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}^t$ 。

(3) エルミート。実数固有値。

2 (二重): $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ と $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & i/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ 、またはその線型結合とそれらの転置共役。
 0 : $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ とその転置共役。

第3章のまとめ

1. 運動方程式

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle, \quad \text{または} \quad i\hbar \frac{d\langle i|\psi(t)\rangle}{dt} = \sum \langle j|\hat{H}(t)|k\rangle \langle k|\psi(t)\rangle$$

- ハミルトニアン $\hat{H}(t)$ はエルミートオペレータ
- $\langle j|\hat{H}(t)|k\rangle$ ($j \neq k$) は、状態 $|k\rangle$ から状態 $|j\rangle$ への遷移の程度
- $\langle j|\hat{H}(t)|j\rangle$ は、遷移項を0としたときの、 $|j\rangle$ 状態のエネルギー

2. 運動方程式の解

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, 0) |\psi(0)\rangle$$

- 時不変 ($\hat{H}(t) = \hat{H}$) の場合

$$\hat{U}(t, 0) = \sum_J |E_J\rangle \exp \frac{-iE_J t}{\hbar} \langle E_J| \quad \left(\text{ただし、} E_J, |E_J\rangle \text{ は } \hat{H} \text{ の固有解} \right)$$

3. 固有値問題

- $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ を満たす固有解 (a : 固有値、 $|a\rangle$: 固有ケット状態)

- $\langle a' | \hat{A} = \langle a' | a$ を満たす固有解 (a : 固有値、 $\langle a' |$: 固有ブラ状態)
 - 固有値 a_i : $|a\hat{I} - \hat{A}| = 0$ の解として求まる
 n 個。 k 重根のとき、対応する固有状態は k 重の縮退があると言う
 - 固有ブラ状態 $|a_j\rangle$: $(\hat{A} - a_j\hat{I})|a_j\rangle = 0$ の解
 固有ケット状態 $\langle a'_j|$: $\langle a'_j|(\hat{A} - a_j\hat{I}) = 0$ の解
 - 縮退がなければ必ず $\langle a'_j | a_k \rangle = \delta_{jk}$ とできる
4. エルミートオペレータ \hat{H} の固有解: h_j 、 $|h_j\rangle$ 、 $\langle h'_j|$
- h_j : 実数
 - $\langle h'_j| = (|h_j\rangle)^\dagger = \langle h_j|$ (縮退があっても)
 - $\{|h_j\rangle\}$ は基底状態を組む
5. ユニタリーオペレータ \hat{U} の固有解: u_j 、 $|u_j\rangle$ 、 $\langle u'_j|$
- u_j : 絶対値 1
 - $\langle u'_j| = (|u_j\rangle)^\dagger = \langle u_j|$ (縮退があっても)
 - $\{|u_j\rangle\}$ は基底状態を組む

第4章

二状態系の運動

これまでの議論により、量子力学の基礎的概念の説明が、ほぼ完了した。まず、物理現象を表現するのに、質点がどの位置にある、と言うことの代わりに、いくつかの基底状態を、それぞれ、どれほどの確率振幅でとると言った表現が、必要であることを示した。さらに、物理現象の変化の様子を決定する方程式、つまり、古典論のニュートンの運動方程式に対応する量子力学の運動方程式について述べた。

次は、いよいよ、具体的な物理系に対する量子力学の適用である。というと、古典論からの延長として質点運動、例えば、電子の運動がどのようになるかを知りたい、と思っているだろう。しかし、質点の位置を議論するには、無数の基底状態が必要であり、数学的に、やや技術を要する。そこで、本章では、まず、数学的に容易な、二つの基底状態だけで記述できる物理系を扱い、運動の概念に慣れてもらおうと思う。

二状態系 (two state system) というと、非常に単純な系であるが、いくつかの重要な概念、例えば、電子のスピン (spin)、光の偏光 (polarization) などという物理が、この系で記述できる。さらにレーザー (laser)、メーザ (maser) といった、量子エレクトロニクスのも概念も、二状態で記述できる場合が多いので、まず二状態系の物理を、正確に把握してもらいたい。

4.1 水素分子イオン

水素分子イオン (hydrogen molecule ion)、 H_2^+ は、図 4.1 のように、陽子が二個空間中に a だけ離れて存在し、そこに電子が一個いる系である。電子は、クーロン力により、陽子に強く引かれるから、(a) のように左の陽子に拘束されている状態か、(b) のように右の陽子に拘束されている状態の、いずれかが安定であると思われる。厳密にいうと、後に

第6章で述べるように、電子は、不確定性原理のため、ボーアの原子半径 (Bohr atomic radius) 程度、ぼけて存在するので、図には、電子の位置をわざとぼかして記入してある。

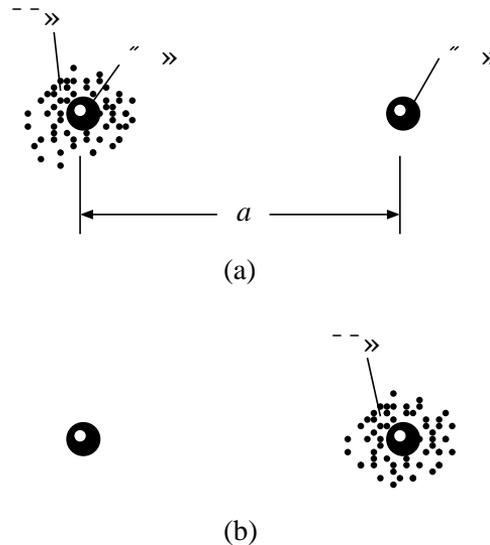


図 4.1 水素分子イオンの二つの状態、(a) 状態 $|左\rangle$ 、(b) 状態 $|右\rangle$

(a) のような状態を $|左\rangle$ 、(b) のような状態を $|右\rangle$ と表すこととすると、 $|左\rangle$ 状態のエネルギーと、 $|右\rangle$ 状態のエネルギーは、対称性から、互いに等しくなると推定される。このエネルギーを、 E_0 とすれば、第3章のまとめで示したように、ハミルトニアン の対角項は、 E_0 となることがわかる。こうして、次の運動方程式が得られる。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle 左 | \psi(t) \rangle \\ \langle 右 | \psi(t) \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 左 | \psi(t) \rangle \\ \langle 右 | \psi(t) \rangle \end{pmatrix}$$

陽子と陽子の間隔 a が、十分大きいときには、この式でよいが、間隔がつまってくると、左にいた電子が右に移動したり、逆に右から左へ移動する可能性が、僅かであるが、生じてくる。これは後に示すトンネル効果によるものであるが、本章では直観的に、 a が短くなれば、遷移 (transition) の可能性が増すとだけ、理解してほしい。さて、この遷移の程度、 $H_{左右}$ を、 A で表すと、ハミルトニアンは、エルミートオペレータであるから、 $H_{右左}$ は A^* となる。従って、 a の短い場合は、式 4.1 の代わりに、次式が運動方程式となる。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle \text{左} | \psi(t) \rangle \\ \langle \text{右} | \psi(t) \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & A \\ A^* & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \text{左} | \psi(t) \rangle \\ \langle \text{右} | \psi(t) \rangle \end{pmatrix}$$

遷移の程度を表す A , A^* は、一般には、複素数であるが、実数として扱っても、結論は変わらないので、計算の簡単化のため、実数としておこう。また、 E_0 は、言うまでもなく、実数である。

問題 4.1 ここに示したハミルトニアンがエルミート行列であることを確かめよ。また運動方程式 4.1 を解き、任意の初期条件からの一般解を示せ。

ヒント 第3章のまとめ

答え

まずハミルトニアンの固有値問題を解くと $E = E_0 + A$ ($= E_h$) と $E = E_0 - A$ ($= E_l$) を固有値とする。固有ベクトルはそれぞれ次式で与えられる。

$$\begin{pmatrix} \langle \text{左} | E_h \rangle \\ \langle \text{右} | E_h \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \langle \text{左} | E_l \rangle \\ \langle \text{右} | E_l \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

したがって、一般解は、次のようになる。

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} \langle \text{左} | \psi(t) \rangle \\ \langle \text{右} | \psi(t) \rangle \end{pmatrix} \\ &= \left[\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \exp \frac{-iE_h t}{\hbar} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \exp \frac{-iE_l t}{\hbar} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \langle \text{左} | \psi(0) \rangle \\ \langle \text{右} | \psi(0) \rangle \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \exp \frac{-iE_h t}{\hbar} + \exp \frac{-iE_l t}{\hbar} & \exp \frac{-iE_h t}{\hbar} - \exp \frac{-iE_l t}{\hbar} \\ \exp \frac{-iE_h t}{\hbar} - \exp \frac{-iE_l t}{\hbar} & \exp \frac{-iE_h t}{\hbar} + \exp \frac{-iE_l t}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \text{左} | \psi(0) \rangle \\ \langle \text{右} | \psi(0) \rangle \end{pmatrix} \\ &= \exp \frac{-iE_0 t}{\hbar} \begin{pmatrix} \cos \frac{At}{\hbar} & -i \sin \frac{At}{\hbar} \\ -i \sin \frac{At}{\hbar} & \cos \frac{At}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \text{左} | \psi(0) \rangle \\ \langle \text{右} | \psi(0) \rangle \end{pmatrix} \end{aligned}$$

問題 4.2 前問で時間経過オペレータ $\hat{U}(t, 0)$ を求めよ。またそのユニタリー性を確かめよ。

ヒント 第3章のまとめ

$t = 0$ で電子が左にいることが確定していたとしよう。〈左 | $\psi(0)$ 〉の絶対値は 1 としよう。当然 〈右 | $\psi(0)$ 〉 = 0 である。すると式 4.1 より次式のようになる。

$$\langle \text{左} | \psi(t) \rangle = \exp \frac{-iE_0 t}{\hbar} \cos \frac{At}{\hbar}, \quad \langle \text{右} | \psi(t) \rangle = -i \exp \frac{-iE_0 t}{\hbar} \sin \frac{At}{\hbar}$$

従って t 秒後に電子が左にいる確率と、右にいる確率は、上の式の絶対値の二乗より得られる。

$$P(\psi(t) \rightarrow \text{左}) = \cos^2 \frac{At}{\hbar}, \quad P(\psi(t) \rightarrow \text{右}) = \sin^2 \frac{At}{\hbar}$$

この結果を図 4.2 に示すが、電子が左にいる確率はだんだん下がっていき、 $t = \pi\hbar/2A$ では完全に |右〉の状態になってしまう。さらに時間がたつと、今後は右にいる確率が下がっていき、やがて |左〉の状態に戻る。というように、電子が振動的な運動をすることがわかる。振動的というと、電子は、左の位置から徐々に右の位置へ移動していくように、思われるかもしれないが、電子の位置を調べると、常に左の原子核付近にいるか、右の原子核付近にいるかのいずれかの状態しか発見されない。ただその発見する確率が時間と共に振動的に変化するのである。

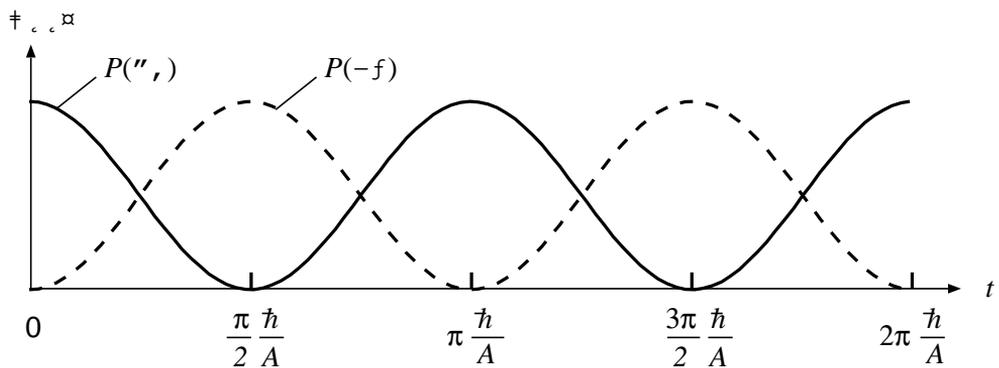


図 4.2 $t = 0$ で水素分子イオンの片側に局在していた電子は時間とともに両原子核を振動的に渡り歩く

問題 4.3 $t = t_0$ の時刻に電子の位置を調べたところ、左にいることがわかった。その後

$t = t_1$ で電子を右に発見する確率はどれほどか。

答え $t = t_0$ で電子は $|左\rangle$ の状態にある確率でとる。しかしその時点で電子が左にいることを確認してしまうと、電子の状態は 100% $|左\rangle$ となる。従って、その後の確率の変化は $t = t_0$ を原点として式 4.2 の形で変化する。

$$P = \sin^2 \frac{A(t_1 - t_0)}{\hbar}$$

問題 4.4 $t = 0$ で電子が右にいたことが確定していた場合、その後の $|左\rangle$ または $|右\rangle$ の状態をとる確率振幅と確率を求めよ。

答え $P(左) = \sin^2 \frac{At}{\hbar}, \quad P(右) = \cos^2 \frac{At}{\hbar}$

ここに述べた系が常に振動的な答となるかという点、必ずしもそうではない。例えば初期状態として $|左\rangle$ と $|右\rangle$ の状態が 50% ずつ混ざり合った状態を考えて見よう。

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|左\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|右\rangle (= |E_h\rangle)$$

式 4.1 より次式が得られる。

$$\left. \begin{aligned} \langle 左 | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \frac{-i(E_0 + A)t}{\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \frac{-iE_h t}{\hbar} \\ \langle 右 | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \frac{-i(E_0 + A)t}{\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \frac{-iE_h t}{\hbar} \end{aligned} \right\}$$

これらの式より直ちに、次の結果が得られる。

$$P(\psi(t) \rightarrow 左) = \frac{1}{2}, \quad P(\psi(t) \rightarrow 右) = \frac{1}{2}$$

電子を左に発見する確率も右に発見する確率も、共に時間に依らず 50% に保たれる。式 4.4 を見ると $|\psi(t)\rangle$ の状態は、角周波数 E_h/\hbar 、すなわち、エネルギー E_h の状態であることがわかる。この状態のエネルギーを測定すると、常に E_h となるのであるから、 $|\psi(t)\rangle = |E_h\rangle$ と書いてもよさそうである。事実、式 4.4 の上式に、左より $|左\rangle$ を掛け、下式に、左より $|右\rangle$ を掛けて加え合わせると、次式となる。

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|左\rangle + |右\rangle) \exp \frac{-iE_h t}{\hbar}$$

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\text{左}\rangle + |\text{右}\rangle) = |E_h\rangle$ であるから (次の問を見よ)、次式が誘導でき、予想と似た結果が得られる。

$$|\psi(t)\rangle = |E_h\rangle \exp \frac{-iE_h t}{\hbar}$$

しかし絶対値 1 のスカラー倍、 $\exp(-iE_h t/\hbar)$ 倍は、観測するとまったく無視できることから、 $|\psi(t)\rangle$ は、ずっと E_h の状態にあると言える。

問題 4.5 固有状態 $|E_h\rangle$ 、 $|E_l\rangle$ を一組の基底状態 $|\text{左}\rangle$ 、 $|\text{右}\rangle$ で表してみよ。

答え $|E_h\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\text{左}\rangle + |\text{右}\rangle)$, $|E_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\text{左}\rangle - |\text{右}\rangle)$

同様に $t = 0$ で $|\psi(0)\rangle = |E_l\rangle$ とすると次式が得られる。

$$|\psi(t)\rangle = |E_l\rangle \exp \frac{-iE_l t}{\hbar}$$

この場合も式 4.4 と同じく電子を左に発見する確率と右に発見する確率は共に時間によらず一定で 50% ずつとなる。

問題 4.6 式 4.5 を導け。

このように、 $t = 0$ で $|E_h\rangle$ (または $|E_l\rangle$) の場合は、その後ずっと $|E_h\rangle$ (または $|E_l\rangle$) の状態にあり、位相だけが観測されるエネルギー E_h (または E_l) に対応して、一定の割合で変化していく。このことから観測されるエネルギーは常に E_h (または E_l) であり、特にエネルギー確定状態 (energy-defined state) と呼ばれる。また、 $P(\psi(t) \rightarrow \text{左})$ や $P(\psi(t) \rightarrow \text{右})$ などが、時間とともに全然変化しないことから、定常状態ともよばれる。

エネルギー固有状態 $|E_h\rangle$ 、 $|E_l\rangle$ は、他にも面白い性質を持っている。式 4.1 の一般解の i を j に直してから、両辺の左辺より $\langle E_i |$ を掛けてみよう。 $\langle E_i | E_j \rangle = \delta_{ij}$ を利用すると、次式が得られる。

$$\langle E_i | \psi(t) \rangle = \exp \frac{-iE_i t}{\hbar} \langle E_i | \psi(0) \rangle$$

これから、 $\psi(t)$ がエネルギー E_i をとる確率を求める。

$$P(\psi(t) \rightarrow E_i) = P(\psi(0) \rightarrow E_i)$$

つまり、 $t = 0$ で勝手な状態にある系が、あるエネルギー E_i をとる確率は、時間が経過しても変化しないことがわかる。

以上で、水素分子イオンに関する量子力学的計算を終了するが、本節で得られた計算結果が、水素分子イオンを安定に存在させるのに、いかに役立っているかを示したい。 $|\psi(0)\rangle = |E_l\rangle$ を初期状態とする状態 $|\psi(t)\rangle$ は、式 4.5 のように変化し、そのエネルギーは E_l と一定である。 E_l は、 $E_0 - A$ であるが、これが、水素原子の間隔 a に対して、どのように変化するかを考えてみよう。まず、 E_0 であるが、これは電子が遷移を起こさないとしたときの、水素分子イオン全体のエネルギーであり、これには、原子核の持つエネルギー、電子自身のエネルギー、原子核と電子の間のクーロンエネルギー、原子核同志のエネルギー、といろいろなエネルギーが寄与してくる。このうちで、間隔 a とともに大きく変わるものは、電子と総合した原子核と、裸の原子核の間の、クーロンエネルギーである。電子は、ボーアの原子半径程度ひろがって、原子核の正電荷を遮断しているので、間隔 a が大きい時のクーロンエネルギーは、殆ど無視できる。しかし、原子間隔が原子半径位に近寄ってくると、クーロンエネルギーは急激に増加する。この様子を、図 4.3 の一点鎖線で示す。一方の跳び移り確率振幅 A も、原子間隔 a とともに、急速に減少する関数であるが、その程度が、図の破線に示すようにやや緩いことが知られている。このため、 $E_0 - A$ を描いてみると、適当な間隔で最小値を持つことがわかる。このとき、 $|E_l\rangle$ の状態は、最もエネルギーが低くなるため、水素分子イオンは、この間隔で安定に存在することとなる。一方、 $|E_h\rangle$ の状態のエネルギーは $E_0 + A$ であり、これは a に対し単調に減少する関数となる。従って、 $|E_h\rangle$ の状態は不安定であり、やがては、 $a \rightarrow \infty$ となり、イオンが分散してしまうこととなる。

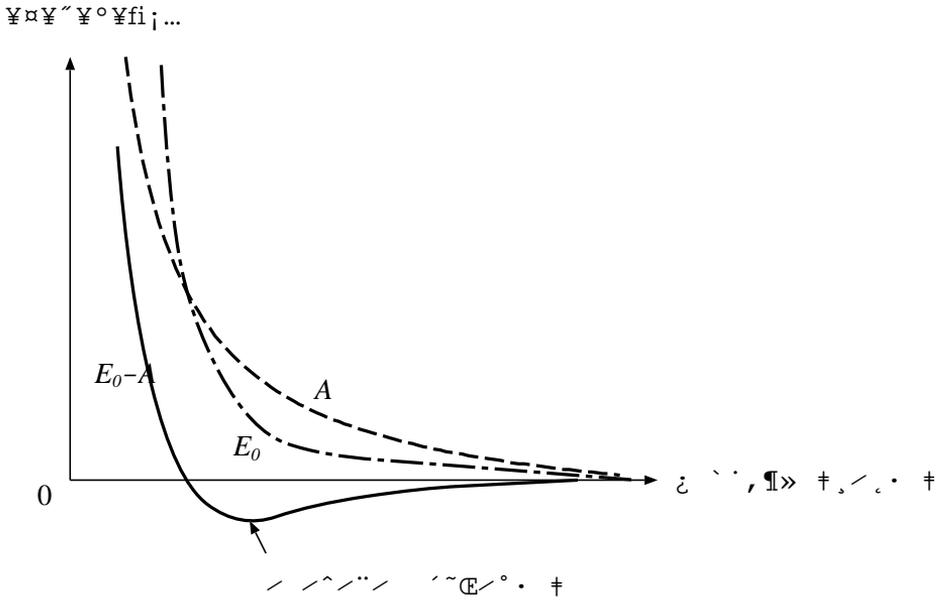


図 4.3 水素分子イオンのエネルギー

4.2 電子のスピン

二状態系の典型として電子 (electron) のスピンがある。電子は光と同じように空間中の波動として振舞う。この扱いについては後の章で示すが、電子はさらにスピン (spin) と呼ばれる内部状態を有する。スピンの生じる機構は、現在でも、完全には解明されていないが、角運動量 (angular momentum) を生じることから、恐らく、電子自身の自転のようなものではないか、と推定されている。有限の大きさの電荷が自転すると、ループ電流が流れ、磁気モーメントが生じるが、それと同じように、電子も、スピンに対応した磁気モーメントを持つ。従って、磁界中に電子を置くと、スピンの方向により、電子は異なるエネルギーを持つ。これを利用して、電子のスピン状態を測定することができる。このようにして調べると、電子のスピンは、光の偏光と同様に、二次元の基底状態で表すことができることがわかる。

この二つの状態の電子は、どんな電界中でもまったく同じように動き、どちらの状態にいるのかを見分けるのは殆ど不可能である。しかし、強い磁界の変動のあるところで、二つの状態の電子は、僅かに異なる運動をする。その運動を詳しく研究したところ、丁度、電荷を持った小さな磁石のように振る舞うことが、分かった。一つの状態の電子は、磁界

と平行な方向に磁化しており、もう一つの状態の電子は、磁界と反平行な方向に磁化している磁石に対応する。

単純な荷電粒子でも、磁界中を走ると、ローレンツ力が垂直に働くが、停まっているときには、力は働かないはずである。ところが、電子を、図 4.4 (a) に示すステルン・ゲルラッハ装置 (Stern-Gerlach apparatus) のような磁界勾配を中に入れると、一つの状態の電子は、下向きに力を受け、少しずつ上昇していく。もう一つの状態の電子は、下向きに力を受け、少しずつ下降する。これは、電子が単純な荷電粒子ではなく、磁石のような磁気モーメント (magnetic momentum) を持っていることを、示す。事実、これと同様なことは、(b) に示す小磁石を置いた場合にも起こる。図のような磁石の場合、小磁石の S 極が上へ引き上げられる力の方が、 N 極の受ける下向きの力よりも大きくなり、磁石は上向きの力を受けるからである。このようにして、電子は磁気モーメントを持つことがわかる。

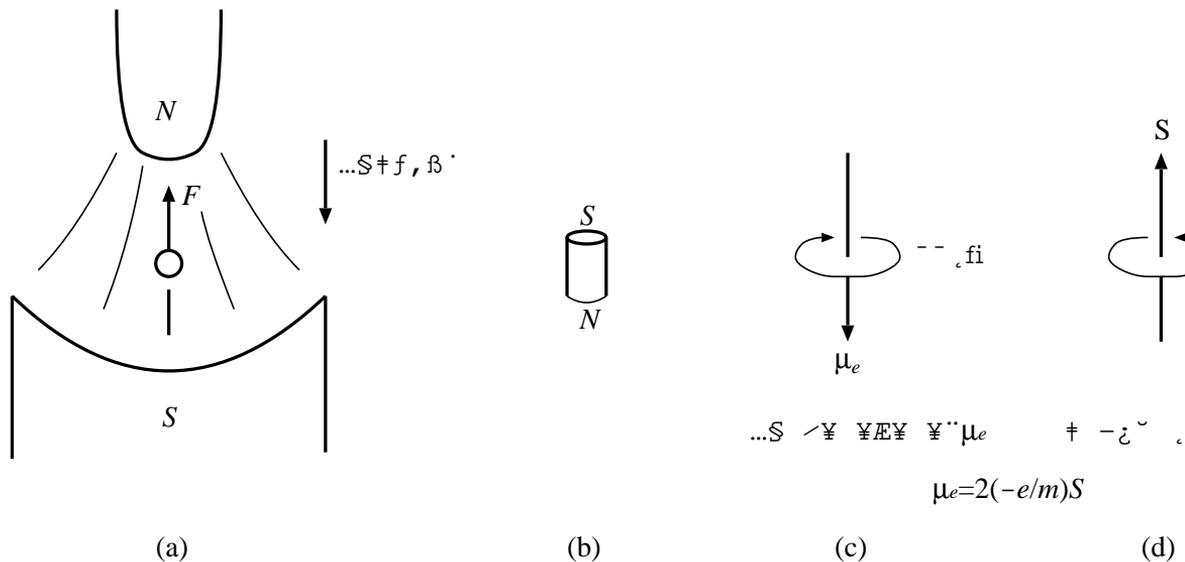


図 4.4 Stern-Gerlach の実験装置。(a) 電子の受ける力、(b) 対応する小磁石、(c) 対応する微小電流ループ、(d) 電子の自転か? $\mu_e = (-2e/m)S_z$

それでは、電子は、何故、磁気モーメントを持つのだろうか。磁気モーメントは、環状電流によって発生するので、電荷が、磁気モーメントの方向を軸とした、回転運動をしていると考えると、理解しやすい。幸いにして、電子は電荷を持っているので、これが、ある程度の領域に拡がっており、全体が自転している、というイメージがよさそうである。電荷がループ状に運動すると、ループ電流が流れ、磁界が発生するからである。電子の

持つ磁気モーメントは、磁界勾配中での電子の運動から、測定することができる。こうして測定された電子の磁気モーメントは、図に示した電子の状態に対し、ほぼ $-(e/m)\hbar$ [Am^2] (図中上向きを正とする)、逆向きの電子状態に対し、ほぼ $(e/m)\hbar$ となる。

電子は質量を持っているので、自転運動に対応した角運動量を持つことが期待される。この角運動量の大きさは、種々の方法で測ることができるが、例えば、原子と電子を反応させ、反応前後の原子の角運動量の変化などから、推定することができる。 $-(e/m)\hbar$ の磁気モーメントを持つ電子は、丁度 $(1/2)\hbar$ [Js] の角運動量を持ち、 $(e/m)\hbar$ の電子は、 $-(1/2)\hbar$ の角運動量を持つ。このような、自転運動にもとづく角運動量 (angular momentum) のことを、特にスピン (spin) と呼ぶ。

厳密に言うと、この考えには多少問題がある。全質量 m の電子が、空間的に拡がって、一定の角速度で回転しており、かつ、その各部の密度に比例した電荷密度が分布しており、その電荷密度の和が e であるようなモデルを考えると、磁気モーメントと角運動量の比は、丁度 $-e/m$ となる。ところが、実際の電子では、 $-(1/2)e/m$ になっている。電子に内部構造 (例えば密度と電荷密度が比例しないようなこと) を考えれば、この二つは一致しなくとも良いが、それにしても、丁度 (厳密には、ほんの少し異なるが) $1/2$ という係数の出てくるのは不思議である。このように、電子の具体的なモデルについては、まだ良く分かってない。係数 $1/2$ の逆数 2 のことを、**g 係数** (g factor) と呼び、磁性の研究では重要な量である。電子が、空間的にループ状に移動する (公転のような) 運動に対して、 g 係数を求めると丁度 1 となる。

通常観測される磁性 (magnetism) である常磁性や強磁性は、ほとんど、電子スピンの作る磁気モーメントの現れである。熱運動で、電子スピンの向きがバラバラな状態にあるところへ、強い磁界をかけると、磁界の方向にスピンの向きが整列するようになる過程を、常磁性 (paramagnetism) と呼ぶ。また、スピン同志に、互いに平行になろうとする力が働く場合があり、この力のため、スピン平行な領域の発生する現象を、強磁性 (ferromagnetism) と呼ぶ。磁性が、このように、角動量と強い関係にあることは、図 4.5 のような方法で確かめることができる。常磁性体を、図のように細い線をつるし、下向きの磁界 B をかけた状態で、静止させる。このとき、磁性に関与している電子のスピンの向きは、(a) のように上を向き、上面に S 、下面に N が発生して安定となる。さて、磁界の方向を急激に反転させると、磁石の磁化の方向は、逆の方が安定であるので、徐々にスピンの向きが反転し、最後には下向きのスピン状態に変わる。角運動量は、保存されねばならないから、スピン角運動量の変化した分だけ、磁性体中のスピン電子以外の部分が逆向きの角運動量変化を受け、回転を始めることとなる。磁性体の磁化から推定した磁気モーメントと、磁性体の回転速度から推定した角運動量の比は、多くの重要な磁性体の場

合、ほぼ $-(1/2)e/m$ となり、磁性が電子のスピンに起因していることを示す。

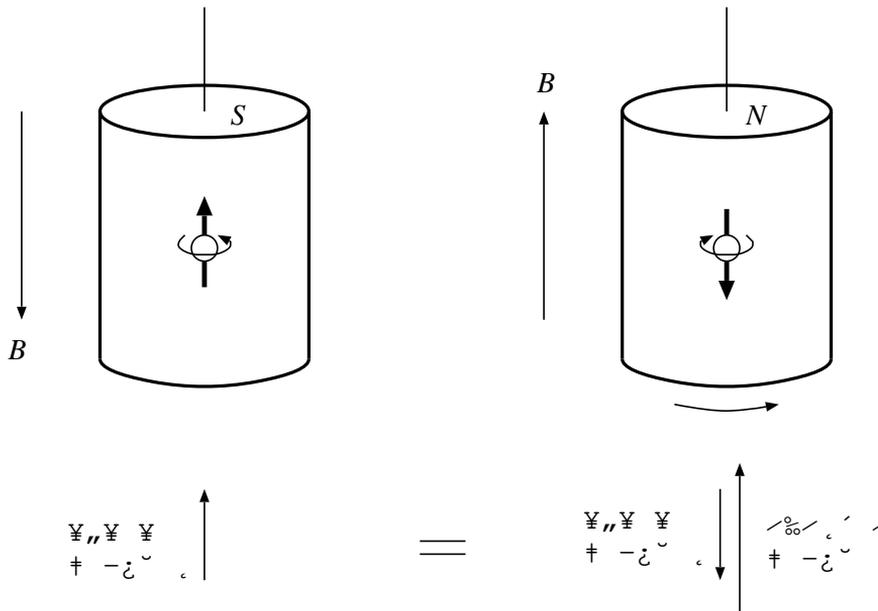


図 4.5 磁性体内の電子の持つスピン運動量。(a) 電子は上向きの角運動量を持っている、(b) 電子を下向きの角運動量に変えると、差の運動量が物体に与えられる

電子に限らず、陽子 (proton) や中性子 (neutron)、さらに大きな原子やさらに大きなコマといったあらゆる粒子や物体が、角運動量を持っている。適当な軸のまわりの角運動量を測ると、陽子や中性子は電子と同じように $(1/2)\hbar$ と $-(1/2)\hbar$ の二つの値しかとらないが、粒子や物体によっては、もっといくつかの値をとったりする。しかし、すべての角運動量に共通な性質がいくつかある。

1. 全角運動量 (total angular momentum)、 J と呼ばれる量があり、 $J = j\hbar$ と表すと、 j は正または 0 の、整数または半整数でなければならない。
2. 全角運動量 J の粒子が、空間上のある軸、例えば z 軸のまわりにとる角運動量の成分、 J_z の値を観測すると、 $J_z = m\hbar$ として $m = -j, -(j-1), \dots, (j-1), j$ の $(2j+1)$ 種類の、いずれかしか観測されない。

一般に、全角運動量と、角運動量の z 成分は、 J, J_z の記号で表されるが、粒子の自転運動に起因するスピン角運動量 (spin angular momentum) については、 S, S_z が、また、粒子の公転運動に起因する軌道角運動量 (orbit angular momentum) については、 L, L_z

の記号が用いられることが多い。図 4.6 (a) に示すような、 z 軸から θ ずれた軸のまわりに全角運動量 J を持って回転している粒子を考えよう。

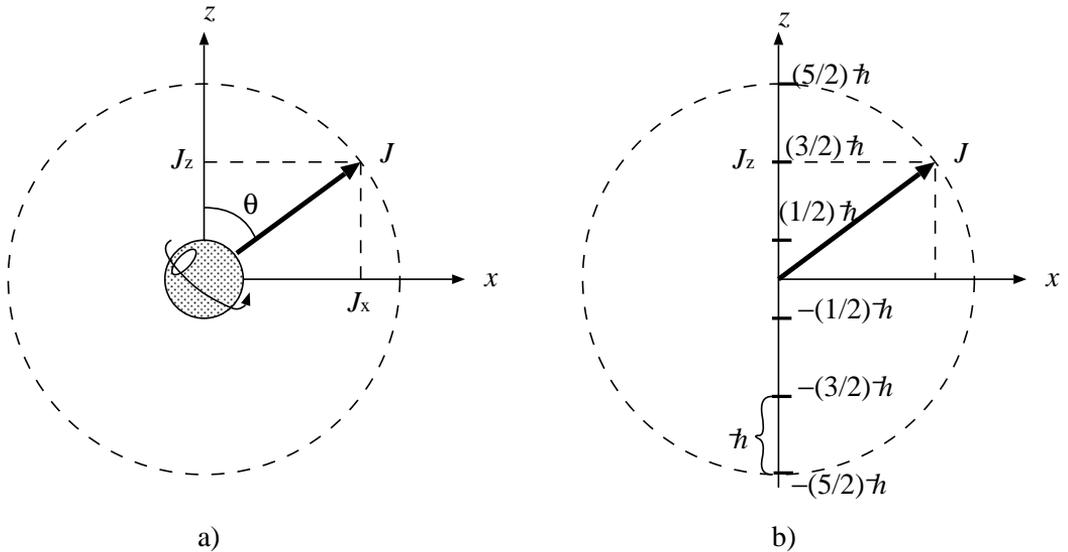


図 4.6 全角運動量と z のまわりの角運動量。(a) 古典力学における角運動量とその成分、(b) 量子力学における角運動量 ($J = (5/2)\hbar$) とその成分 (J_z) は \hbar おきのとびとびの値しか観測されない

z 軸のまわりの角運動量 J_z を測定すると、古典力学では、図 (a) のように $J_z = J \cos \theta$ となるのが、知られている (角運動量はベクトルであるから、 J_z は、 $-J$ から $+J$ までの任意の値を、連続的にとることができる)。ところが、量子力学では、図 (b) に示すように、まず J そのものに制限がつき、さらに J_z も、 \hbar おきの値しか観測されないという、奇妙なことが起こる。図 (b) では、 $J_z = (3/2)\hbar$ であり、 $J = (5/2)\hbar$ であるから、 $J_x = 2\hbar$ となってもよさそうである。ところが、どのような軸のまわりの角運動量も、前述の規則により、 \hbar おきの値しか観測されないので、 J_x を測ると $-(5/2)\hbar$ 、 $-(3/2)\hbar$ 、 $-(1/2)\hbar$ 、 $(1/2)\hbar$ 、 $(3/2)\hbar$ 、 $(5/2)\hbar$ の、いずれかが観測されてしまう。 J_x を何度か観測すると、 $(3/2)\hbar$ と $(5/2)\hbar$ の値が、比較的高頻度で観測されるような確率分布が得られることになる。

何故、このようになるかについては、後の章で学んでもらいたいが、もう少し概念的説明を続けよう。古典的な物体は、勢いをつけて回せば、いくらでも大きな角運動量を持つことができる。しかし、余り早いと、遠心力のために物体が破壊してしまう。量子力学でも同じようなことが起こるようで、粒子が安定に存在できるための最大の全角運動量があ

素粒子	速度	スピン s	とり得るスピン状態 S_z
電子, 陽子, 中性子, μ 中間子など	$< c$	1/2	$(1/2)\hbar, -(1/2)\hbar$
中性微子	c	1/2	$(1/2)\hbar, (反粒子: -(1/2)\hbar)$
π 中間子など	$< c$	1	$\hbar, 0, -\hbar$
光子	c	1	$\hbar, -\hbar$

表 4.1 素粒子とスピン

る。と言っても、素粒子 (elementary particle) の場合には、そんなにいくつもの値の全角運動量がとれるわけではなく、多くの場合、粒子に固有な一つの値しか許されていない。この、固有な全角運動量の値を、粒子のスピンと呼び、 S で表わす。表 4.1 に代表的な粒子のスピンを示す。ただし、慣例により $S = s\hbar$ の s を示した。従って、 $s = 1/2$ とは、全スピン $S = (1/2)\hbar$ のことである。

質量が有限で、光速以下の速度でしか走れない粒子は、前に示した規則により、 S_z は $-s\hbar$ から $s\hbar$ の、 $(2s + 1)$ 種類の状態をとり得る。しかし、質量 0 で、光速で走る素粒子である、中性微子や光子については、 $2s$ 種類の状態しかとり得ない。このような素粒子が、何故、固有なスピンを持つかについては、まだ余りわかっていない。

角運動量 s が整数の粒子はボーズ粒子 (boson) と呼ばれる。また、 s が半整数の粒子は、フェルミ粒子 (fermion) と呼ばれる。身近なものでは、光子がボーズ粒子であり、電子、陽子、中性子がフェルミ粒子である。ボーズ粒子とフェルミ粒子は、それぞれ粒子が一個しかないときには、何も差が見られないが、粒子が多くなると、両者には明確な差が現れてくる。図 4.7 のようにボーズ粒子は、いくつかの粒子が同一の状態をとることができるのに対し、フェルミ粒子は、一つの状態を一個の粒子しかとることができない。例えば、電子はフェルミ粒子であるので、一つの電子が場所 x にいて、上向きのスピン状態をとっていると、同じ場所には、下向きのスピン状態の電子しか入れなくなってしまう。従って、多粒子の関与する統計力学などでは、これら二種類の粒子は全く異なった振舞をする。



図 4.7 ボーズ粒子とフェルミ粒子。(a) ボーズ粒子 (スピン整数) は同じ状態をいくつもの粒子が同時にとることができる、(b) フェルミ粒子 (スピン半整数) は一つの状態を一つの粒子しかとれない

さて、電子は $s = 1/2$ であるから、 $2s + 1 = 2$ より、二つのスピン状態をとることができる。例えば、図 4.4 のような、 z 軸方向の不均質磁界により、スピン角運動量が、 z 軸正方向を向いている $|+z\rangle$ (または $|\uparrow\rangle$) と表す) の状態と、 z 軸負方向を向いている $|-z\rangle$ (または $|\downarrow\rangle$) の、二状態を分けることができる。したがって、空間的な状態の定まった電子 (たとえば $p = 0$ の電子) と言えども、さらにスピンに起因する自由度を持つこととなる。つまり、任意の状態 $|\psi\rangle$ の電子は $\langle x, y, z, s_z | \psi \rangle$ 、(ただし $s_z = \pm 1/2$) を与えれば、状態が完全に決定されることとなる。しかし、本章では、空間のことを忘れて、議論を進めよう。いま、勝手なスピン状態 $|\psi\rangle$ の電子の、 z 軸方向のスピン状態を測定すると、 $|\langle +z | \psi \rangle|^2$ の確率で $|+z\rangle$ 状態として観測されるか、 $|\langle -z | \psi \rangle|^2$ の確率で $|-z\rangle$ 状態として観測されるかのいずれかとなる。

何故、このように観測されるのだろうか。 $+z$ 方向、あるいは $-z$ 方向を向いた電子が、その方向に観測されるのは、理解できるが、中途半端な方向を向いた電子が、この二方向のいずれかにしか観測できないのは、いかにも理解しづらい。しかし、これは観測に基づく事実なのである。その事実をいかに説明するかが、量子力学に課せられた課題なのである。任意の偏光を x 偏光を y 偏光を分波する分析器を通すと、片方にしか発見されなかったのと同じなのである。あの場合も、それぞれの出口に、それぞれの確率で発見された。この場合も、この z 方向に方向付けされた測定器を使う限り、二つの状態のいずれにしか発見されず、それぞれの確率で発見されることになるのである。

問題 4.7 x 軸正方向を向いているスピン状態 $|+x\rangle$ は $|+z\rangle$ 状態にどれほどの確率で観測されるだろうか。また $|-z\rangle$ 状態をとる確率を求めよ。同様に $|-x\rangle$ が $|+z\rangle$ 、 $|-z\rangle$ をとる確率、 $|+y\rangle$ や $|-y\rangle$ が $|+z\rangle$ や $|-z\rangle$ をとる確率を求めよ。

答え x 軸正方向と z 軸負方向あるいは z 軸正方向のなす角度はいずれも 90° であり、完

全に対称の位置にある。したがって $|+x\rangle$ が $|+z\rangle$ をとる確率と $|+x\rangle$ が $|-z\rangle$ をとる確率は等しくならなければならない。つまり共に $1/2$ である。同様に他のすべての確率も $1/2$ となる。

それでは、三次元の極座標で表したとき、 θ 、 ϕ という勝手な方向を向いたスピン状態 $|\theta, \phi\rangle$ を考えよう。この状態も、 z 軸のまわりの角運動量を測定すると、 $|+z\rangle$ 、 $|-z\rangle$ を、それぞれ、ある確率で取るだろう。その確率振幅を求めてみよう。つまり、 $\langle +z|\theta, \phi\rangle$ 、 $\langle -z|\theta, \phi\rangle$ の、具体的な値を求めるという問題を、考える。まず、前問より、 $|\langle +z|x\rangle| = 1/\sqrt{2}$ 、 $|\langle -z|x\rangle| = 1/\sqrt{2}$ であるから次のように仮定してみよう。

$$\langle +z|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle -z|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

これらに、任意の位相項がつく可能性があるが、これらの位相を無視しても、以後の議論は、本質的には変わらない。 $|-x\rangle$ は、明らかに、 $|+x\rangle$ と異なる状態であり、 $\langle -x|x\rangle = 0$ である。かつ、前問より、 $|\langle +z|-x\rangle| = 1/\sqrt{2}$ 、 $|\langle -z|-x\rangle| = 1/\sqrt{2}$ であるから、例えば、次のように、選ばなければならない(振幅に、同じ位相項を掛け合わせてもよい)。

$$\langle +z|-x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle -z|-x\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

電子を、いろいろ回転することを、考えてみよう。電子を、 z 軸のまわりに右ねじ方向に ϕ 回転するオペレータを、 $\hat{R}_z(-\phi)$ としよう。このように対象を回転するオペレータを回転オペレータ (rotating operator) と呼ぶ。通常、 $\hat{R}_z(\phi)$ は、電子を固定して観測する座標系を正方向に ϕ 回転するオペレータと定義されているので、本書のように座標系を固定し、電子を ϕ 回す場合には $\hat{R}_z(-\phi)$ と表わすことになる。

$|+x\rangle$ の電子を、 π だけ回すと、 $|-x\rangle$ となるから、次式が成立する。

$$\hat{R}_z(-\pi)|+x\rangle = |-x\rangle$$

$|+x\rangle = (|+z\rangle + |-z\rangle)/\sqrt{2}$ であるから、さらに次のようになる。

$$\hat{R}_z(-\pi)|+x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\hat{R}_z(-\pi)|+z\rangle + \hat{R}_z(-\pi)|-z\rangle \right]$$

$|+z\rangle$ の電子を π 回しても $|+z\rangle$ であり、 $|-z\rangle$ の電子を π 回しても $|-z\rangle$ であるから次のようであるかという、そういうわけにはいかない。

$$\hat{R}_z(-\pi)|+z\rangle = |+z\rangle, \quad \hat{R}_z(-\pi)|-z\rangle = |-z\rangle \quad (\text{誤り})$$

もし、これらの式を、式 4.7 へ代入すると、右辺は $|+z\rangle$ のままになってしまい、式 4.7 と矛盾してしまう。

この矛盾を救うには、位相回転を導入すれば良いことが、わかる。

$$\hat{R}_z(-\phi)|+z\rangle = \exp(-i\alpha)|+z\rangle, \quad \hat{R}_z(-\phi)|-z\rangle = \exp(-i\beta)|-z\rangle$$

どのような位相を導入したらよいのだろうか。まず次にことに注目して欲しい。微小な角度 $\Delta\phi$ の回転に対し、 $-\Delta\alpha$ だけの位相変化があったとすると、 $2\Delta\phi$ の回転に対しては次のような式が成り立つ。

$$\hat{R}_z(-2\Delta\phi)|+z\rangle = \hat{R}_z(-\Delta\phi)\hat{R}_z(-\Delta\phi)|+z\rangle = \hat{R}_z(-\Delta\phi)\exp(-i\Delta\alpha)|+z\rangle = \exp(-2i\Delta\alpha)|+z\rangle$$

$\Delta\phi$ を 2 倍にすれば、 $-\Delta\alpha$ も 2 倍となるので、この結果から類推して、一般の角度 ϕ に対する位相変化 $-\alpha$ は角度に比例すると言える。同様に、 ϕ と $-\beta$ も比例する。さらに、 α と β の差だけが重要となるので、普通 $\beta = -\alpha$ に選ばれることが多い。結局、次のように置ける。

$$\hat{R}_z(-\phi)|+z\rangle = \exp(-im\phi)|+z\rangle, \quad \hat{R}_z(\phi)|-z\rangle = \exp(im\phi)|-z\rangle$$

このようにすると、式 4.7 は、次のように変形できる。

$$\hat{R}_z(-\pi)|+x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\exp(-im\pi)|+z\rangle + \exp(im\pi)|-z\rangle]$$

これが、 $|-x\rangle$ の状態となるには、 $|+z\rangle$ と $|-z\rangle$ の成分が、それぞれ $1 : -1$ の比になることが、必要となる。 $m = 1/2$ とすると、ちょうど、 $\exp(-i\pi/2) : \exp(i\pi/2) = 1 : -1$ となる。このようにして、次式が得られる。なお、 $m = -1/2$ としても、議論が可能であるが、確率計算をしてみると結果はまったく一致するので、慣習にしたがって $m = 1/2$ とした。

$$\hat{R}_z(-\phi)|+z\rangle = \exp\left(-\frac{i\phi}{2}\right)|+z\rangle, \quad \hat{R}_z(-\phi)|-z\rangle = \exp\left(\frac{i\phi}{2}\right)|-z\rangle$$

これより、 $\phi = \pi$ と置くことで、改めて $|-x\rangle$ を求めることができる。

$$|-x\rangle = \frac{-i}{\sqrt{2}}(|+z\rangle - |-z\rangle)$$

$-i$ は、一般性を損なわないので、式 4.7 のように省かれることもある。

x 軸のまわりに θ 回す回転オペレータ、 $\hat{R}_x(-\theta)$ については、どのような関係が得られるであろうか。この操作は、いままでの z 軸に関する操作を、 x 軸に対して行っていることになるので、式 4.7 から推察して、直ぐに、次の関係を得ることができる。

$$\hat{R}_x(-\theta)|+x\rangle = \exp\frac{-i\theta}{2}|+x\rangle, \quad \hat{R}_x(-\theta)|-x\rangle = \exp\frac{i\theta}{2}|-x\rangle$$

ここまで準備ができると、勝手な方向 θ, ϕ を向いたスピン状態、 $|\theta, \phi\rangle$ の、 $|+z\rangle$ 、 $|-z\rangle$ をとる確率振幅を、求めることができる。図 4.8 よりわかるように、 $|+z\rangle$ を x 軸のまわりに $-\theta$ 回し、次に、 z 軸のまわりに $-(\pi/2 - \phi)$ 回すと、 $|\theta, \phi\rangle$ の状態となる。

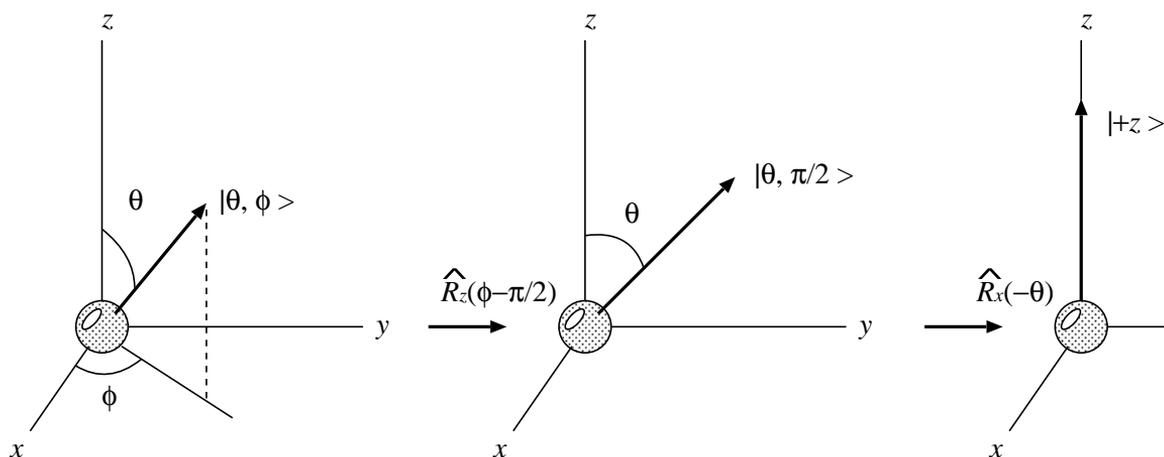


図 4.8 スピン状態 $|\theta, \phi\rangle$ を $|+z\rangle$ にする回転操作

つまり、次式が成立する。

$$|\theta, \phi\rangle = \hat{R}_z\left(\frac{\pi}{2} - \phi\right)\hat{R}_x(\theta)|+z\rangle$$

この式と、式 4.7、式 4.7 を用いると、 $|\theta, \phi\rangle$ を $|+z\rangle$ と $|-z\rangle$ で表わすことができる。

問題 4.8 $|\theta, \phi\rangle$ を $|+z\rangle$ と $|-z\rangle$ で表わせ。

ヒント $\hat{R}_x(\theta)|+z\rangle = \hat{R}_x(\theta)(|+x\rangle\langle+x|+z\rangle + |-x\rangle\langle-x|+z\rangle) = \cos\frac{\theta}{2}|+z\rangle + i\sin\frac{\theta}{2}|-z\rangle$

その結果は次のようになる。

$$|\theta, \phi\rangle = \exp\frac{i(\pi/2 - \phi)}{2} \cos\frac{\theta}{2}|+z\rangle + i \exp\frac{-i(\pi/2 - \phi)}{2} \sin\frac{\theta}{2}|-z\rangle$$

この式の右辺を長さ 1 の定数 $\exp(i\pi/4)$ で除しても一般性は失われないから、次式が得られる。

$$|\theta, \phi\rangle = \exp\frac{-i\phi}{2} \cos\frac{\theta}{2}|+z\rangle + \exp\frac{i\phi}{2} \sin\frac{\theta}{2}|-z\rangle$$

この式より、 $|+x\rangle$ 、 $|-x\rangle$ 、 $|+y\rangle$ 、 $|-y\rangle$ を、改めて求めることができる。

問題 4.9 式 4.8 より、 $|+x\rangle$ 、 $|-x\rangle$ 、 $|+y\rangle$ 、 $|-y\rangle$ の、各々の状態に対して、 $|+z\rangle$ 、 $|-z\rangle$ の成分を求めよ。ただし、各 $|+z\rangle$ 成分が、正実数になるよう、適当に位相調整をしてみよ。

$$\left. \begin{aligned} \langle+z|+x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & \langle-z|+x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \langle+z|-x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & \langle-z|-x\rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \langle+z|+y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & \langle-z|+y\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \langle+z|-y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & \langle-z|-y\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{2}} \end{aligned} \right\}$$

これらの結果をみると、 $\{|+x\rangle, |-x\rangle\}$ が一組の基底状態になるのと同様、 $\{|+y\rangle, |-y\rangle\}$ も、もう一組の基底状態となること、問 4.7 の各確率が $1/2$ となることなどがわかる。

以上、電子の $1/2$ スピン状態について述べたが、スピン 1 の粒子の振舞は、二つのス

ピン $1/2$ 粒子の合成で、考えることができるなど、ここに述べたことが、あらゆるスピンの角運動量の基礎となっている。

4.3 磁界中でのスピンの回転

前節ではやや複雑な式が現われたが、以下の議論では $\{|+z\rangle, |-z\rangle\}$ を基底状態としたときに、 $|+x\rangle, |-x\rangle, |+y\rangle, |-y\rangle$ がどう表されるかということだけである。

コマの運動を観察すると、図 4.9 のように軸が円を描くように回転する、いわゆるみそすり運動が観察される。これは、コマに作用する重力と、地面からの垂直抗力の作るコマを倒そうとする力の、モーメントによるものである。従って、ジャイロのような、コマに力のモーメントが働かない工夫すると、みそすり運動は起きず、コマの軸は一定方向に保たれる。

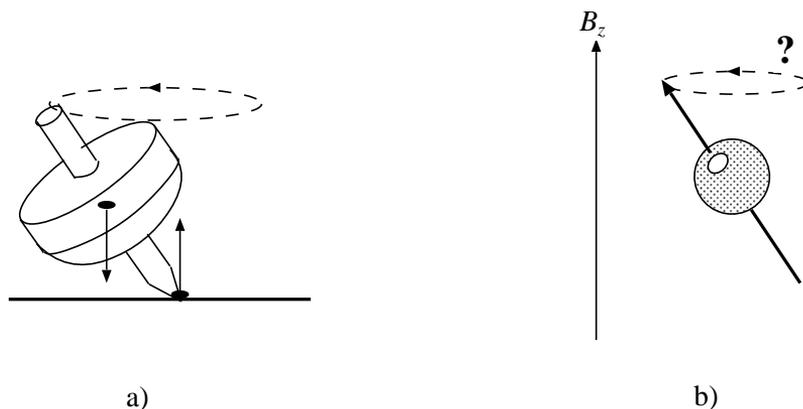


図 4.9 コマと電子スピンの味噌すり運動、(a) コマ、(b) 電子スピン

電子のスピンも、前節で述べたようにコマのようなものであり、それに力のモーメントをかけると、みそすり運動を起こす可能性がある。スピンの、力のモーメントを与える簡単な方法は、一様な静磁界をかけることである。 z 軸正方向に、磁束密度 B_z の磁界をかけてみよう。すると、前節に示したように、 z 軸正方向を向いた電子スピン状態 $|+z\rangle$ は、磁気モーメントが下を向くため、 μB_z の高いエネルギーを持つのに対し、負方向を向いたスピン状態 $|-z\rangle$ は、逆に、 $-\mu B_z$ の低いエネルギーを持つ。このことから、ハミルトニアンに対角項は、 μB_z と $-\mu B_z$ となることがわかる。つまり運動方程式は、次のようになる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \langle +z | \psi(t) \rangle \\ \langle -z | \psi(t) \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu B_z & 0 \\ 0 & -\mu B_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle +z | \psi(t) \rangle \\ \langle -z | \psi(t) \rangle \end{pmatrix}$$

非対角要素が 0 なのは、 z 軸方向の磁界中で $|+z\rangle$ は、いくらたっても $|+z\rangle$ の状態におり、同じように、 $| -z\rangle$ もその状態を保つことから、それぞれの遷移確率が 0 ということを示す。

この方程式は、 $\langle +z | \psi(t) \rangle$ に関する式と、 $\langle -z | \psi(t) \rangle$ に関する式が、始めから分離しているの、簡単に解くことができる。

$$\langle +z | \psi(t) \rangle = \exp \frac{-i\mu B_z t}{\hbar} \langle +z | \psi(0) \rangle, \quad \langle -z | \psi(t) \rangle = \exp \frac{i\mu B_z t}{\hbar} \langle -z | \psi(0) \rangle$$

あるいは、上式左より $|+z\rangle$ を掛け、下式に $| -z\rangle$ を掛け、辺々加えることにより、次のベクトル表示の解が得られる。

$$|\psi(t)\rangle = \left[|+z\rangle \exp \frac{-i\mu B_z t}{\hbar} \langle +z | + | -z\rangle \exp \frac{i\mu B_z t}{\hbar} \langle -z | \right] |\psi(0)\rangle$$

いうまでもなく、 $|\psi(0)\rangle = |+z\rangle$ ならば、次式が成立する。

$$|\psi(t)\rangle = |+z\rangle \exp \frac{-i\mu B_z t}{\hbar}$$

したがって、 $|\psi(t)\rangle$ は、永久に $|+z\rangle$ の状態を続ける (位相項は確率にはきかない)。また、同様に $|\psi(0)\rangle = | -z\rangle$ ならば、 $|\psi(t)\rangle$ は $| -z\rangle$ の状態を続ける。

それでは、 $t = 0$ で、このスピンの、 x 軸の方向を向いていたとしたら、どうであろうか。前節の式 4.7 の結果を利用すると、式 4.3 は、次のようになる。

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= |+z\rangle \exp \frac{-i\mu B_z t}{\hbar} \langle +z | +x \rangle + | -z\rangle \exp \frac{i\mu B_z t}{\hbar} \langle -z | +x \rangle \\ &= |+z\rangle \exp \frac{-i\mu B_z t}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2}} + | -z\rangle \exp \frac{i\mu B_z t}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

つまり、 $|\psi(t)\rangle$ が $|+z\rangle$ をとる確率は、恒に $1/2$ 、さらに $| -z\rangle$ をとる確率も、恒に $1/2$ となることがわかる。次に、この解が $|+x\rangle$ 、 $| -x\rangle$ 、 $|+y\rangle$ 、 $| -y\rangle$ をとる確率を計算してみよう。

問題 4.10 式 4.1 の解 $|\psi(t)\rangle$ が、 $|+x\rangle$ 、 $| -x\rangle$ 、 $|+y\rangle$ 、 $| -y\rangle$ をとる確率振幅をそれぞれ求めよ。

答え

$$\left. \begin{aligned} \langle +x | \psi(t) \rangle &= \cos \frac{\mu B_z t}{\hbar}, & \langle -x | \psi(t) \rangle &= -i \sin \frac{\mu B_z t}{\hbar} \\ \langle +y | \psi(t) \rangle &= -i \exp \frac{i\pi}{4} \sin \left(\frac{\mu B_z t}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right), & \langle -y | \psi(t) \rangle &= \exp \frac{i\pi}{4} \cos \left(\frac{\mu B_z t}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right) \end{aligned} \right\}$$

上問の結果より、それぞれの状態をとる確率は次のようになる。

$$\begin{aligned} P(\psi(t) \rightarrow +x) &= \cos^2 \frac{\mu B_z t}{\hbar}, & P(\psi(t) \rightarrow -x) &= \sin^2 \frac{\mu B_z t}{\hbar}, \\ P(\psi(t) \rightarrow +y) &= \sin^2 \left(\frac{\mu B_z t}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right), & P(\psi(t) \rightarrow -y) &= \cos^2 \left(\frac{\mu B_z t}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right) \end{aligned}$$

その結果を図示すると、図 4.10 のようになる。 $t = 0$ で、 $|+x\rangle$ の状態に確定していたスピン状態は、その後、時間の経過につれて、 $|+x\rangle$ の状態と $|-x\rangle$ の状態が混ざり、 $t = \pi\hbar/4\mu B_z$ では、丁度 1/2 ずつの確率で、二つの状態をとるようになる。この時、実は $P(\psi(t) \rightarrow +y)$ が 100% となる。つまり、 $|\psi(t)\rangle$ は、 $|+y\rangle$ 状態に確定する。以下順に、 $|-x\rangle$ 、 $|-y\rangle$ 、再び $|+x\rangle$ と状態を変えていく。まさに、電子が味噌すり運動を起こしているのがわかる。大きなコマの運動と唯一異なる点は、角運動量が連続的に観測できないことである。例えば角運動量の x 成分を観測すると、 $J_x = \hbar/2$ か $-\hbar/2$ のいずれしか観測されない (図 4.4)。前者が $|+x\rangle$ であり、後者が $|-x\rangle$ であり、同じ実験を何回か繰り返すと、 $P(\psi(t) \rightarrow +x)$ と $P(\psi(t) \rightarrow -y)$ だけが求まるということである。これに対し、コマの場合は角運動の x 成分は、連続的に観測することができる。しかし、これも現在の量子力学の立場から見れば、図 4.6 に示したように、 J_x は \hbar おきのとびとびの値しか観測されないはずで、ただ J_x の最大値に対し、 \hbar があまりにも小さいため、あたかも連続的に見えるだけと言える。

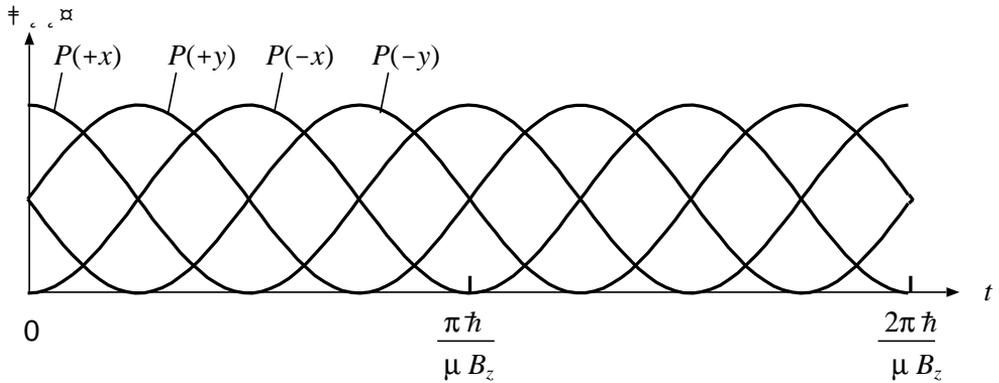


図 4.10 $t = 0$ で x 軸の方向を向いていたスピンの運動。コマの味噌すり運動に対応している

磁界の方向が、 z 軸に平行でない場合のハミルトニアンを、考えてみよう。例えば、磁界が x 正方向を向いており、その磁束密度が B_x であるとしよう。すると、 $|+x\rangle$ のスピン状態は、 μB_x のエネルギーを持ち、さらに時間とともに、その方向を変えないはずである。同様に、 $|-x\rangle$ のスピン状態は、 $-\mu B_x$ のエネルギーを持ち、やはりその方法を維持するはずである。つまり、次のような解を持つような、運動方程式を探せばよい。

$$|\psi(t)\rangle = |+x\rangle \exp \frac{-i\mu B_x t}{\hbar} \quad \text{や} \quad |\psi(t)\rangle = |-x\rangle \exp \frac{i\mu B_x t}{\hbar}$$

問題 4.11 ハミルトニアンの各成分を、 H_{11} 、 H_{12} 、 H_{21} 、 H_{22} とする。式 4.10 の各式が、それぞれ、運動方程式の解になることを利用して、これらの値を定めよ。

答え $H_{11} = 0$, $H_{12} = \mu B_x$, $H_{21} = \mu B_x$, $H_{22} = 0$.

上問のようにして、 \hat{H} を定めることもできるが、 \hat{H} をもっと簡単に求める方法がある。それは、 $|+x\rangle$ と $|-x\rangle$ が、互いに直交するエネルギー固有状態である、ことを利用する方法である。一般に \hat{H} の固有値を E_i 、固有状態を $|E_i\rangle$ とするとき、 \hat{H} は次のように表すことができる。

$$\hat{H} = \sum_{\text{all } i} |E_i\rangle E_i \langle E_i|$$

何故かと言うと、 $|E_i\rangle$ は、互いに直交しているので次式が成立する。

$$\hat{H} |E_i\rangle = \sum_{\text{all } j} |E_j\rangle E_j \langle E_i | E_i \rangle = \sum_{\text{all } j} |E_j\rangle E_j \delta_{ij} = E_i |E_i\rangle$$

つまり、確かに E_i 、 $|E_i\rangle$ が、 \hat{H} の固有解になっているからである。磁界 B_x 中のスピンのハミルトニアンは、次のように、簡単に表すことができる。

$$\hat{H} = |+x\rangle \mu B_x \langle +x| - |-x\rangle \mu B_x \langle -x|$$

問題 4.12 上式を用い、ハミルトニアンの各成分を求めよ。

答え 前問の結果と同じ

次に、 y 方向に磁界をかけてみよう。このときも同様にして、ハミルトニアンを求めることができる。

$$\hat{H} = |+y\rangle \mu B_y \langle +y| - |-y\rangle \mu B_y \langle -y|$$

問題 4.13 y 方向の磁界中のスピンの、ハミルトニアンの各成分を求めよ。

答え $H_{11} = 0$, $H_{12} = i\mu B_x$, $H_{21} = i\mu B_x$, $H_{22} = 0$ 。

最後に、任意の方向に磁界をかけた場合を考えてみよう。この場合、磁界の磁束密度は (B_x, B_y, B_z) の三成分を、すべてを有することになる。この場合のハミルトニアンは、一見複雑に思えるが、各成分の効果が加法的に入ってくるものとし、 B_z に対するハミルトニアン、 B_x 、 B_y に対するハミルトニアンのそれぞれの和の形を考えてみればよい。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mu B_z + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mu B_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \mu B_y$$

問題 4.14 上式のハミルトニアンに対する、運動方程式の解を求めよ。

答え $|B| = \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}$ として、次のようになる。

$$\frac{1}{\sqrt{2|B|(|B| + B_z)}} \begin{pmatrix} B_z + |B| \\ B_x + iB_y \end{pmatrix} \quad (\text{for } E = \mu|B|)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2|B|(|B| - B_z)}} \begin{pmatrix} B_z - |B| \\ B_x + iB_y \end{pmatrix} \quad (\text{for } E = -\mu|B|)$$

この解を見てみると、磁束密度の絶対値を $|B|$ とするとき、 $\mu|B|$ と $-\mu|B|$ がハミルトニアン固有値となっており、座標に平行な磁界を引加したときの固有値と同じ形をしている。平行な場合の結果から類推すると、 $\mu|B|$ に対する固有状態は、スピンの (B_x, B_y, B_z) の方向を向いており、 $-\mu|B|$ に対しては $(-B_x, -B_y, -B_z)$ 方向を、向いているはずである。極座標で、 (σ, ϕ) の方向を向く $1/2$ スピンの確率振幅は、前節で求めたあり、式 4.8 より、次式で与えられる。

$$\begin{pmatrix} \exp \frac{-i\phi}{2} \cos \frac{\theta}{2} \\ i \exp \frac{i\phi}{2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

従って、 $\pm\mu|B|$ に対する固有状態と、この式を比べてみれば、固有状態にあるスピンの方向が、わかるはずである。

問題 4.15 前問の、固有状態に対するスピンの方向を求めよ。量子力学での状態は、各成分のすべてを同じ位相だけずらしても、変化しないことに注意せよ。

ヒント 成分同志の比を等しくおけ。 $\tan \theta$ を $\tan(\theta/2)$ で表せ。

結果は、次のようになり、スピンの方向が、磁界の方向、および、逆の方向を向いていることがわかる。

$$\left. \begin{aligned} \phi = \arg(B_x + iB_y), \quad \tan \theta = \frac{\sqrt{B_x^2 + B_y^2}}{B_z} & \quad (\text{for } E = \mu|B|) \\ \phi = -\arg(B_x + iB_y) \quad \tan \theta = \frac{\sqrt{B_x^2 + B_y^2}}{B_z} & \quad (\text{for } E = -\mu|B|) \end{aligned} \right\}$$

式 4.13 に現れた、三種類のオペレータは、スピン 1/2 粒子を扱ううえで、重要なオペレータであり、特に、パウリのスピノペレータ (Pauli spin operator) と呼ばれている。

$$\hat{\sigma}_z : \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_x : \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y : \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

この表現を用いると、磁界中にあるスピンのハミルトニアンは、次のように書かれる。

$$\hat{H} = \hat{\sigma}_z \mu B_z + \hat{\sigma}_x \mu B_x + \hat{\sigma}_y \mu B_y = \mu(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{B}})$$

最後の式は、形式的な表現であるが、 σ_x 、 σ_y 、 σ_z を成分とするオペレータのベクトルを $\boldsymbol{\sigma}$ として、 $\boldsymbol{\sigma}$ と \mathbf{B} の内積の形で表したものである。

4.4 二状態系の例

対象とする物理系が、二つの状態の遷移だけで、記述される例は、ここに示した、水素分子イオンや、磁界中のスピンの例以外にも、いくつかあげられる。特に、前者の例のように、ハミルトニアンの対角項が等しいものは、 $|E_l\rangle$ が、もとのエネルギーの E_0 よりも、かなり低くなることから、化学結合などで多く見られる、重要なものである。

例えば、ベンゼン分子は、6 個の炭素原子が環状に結合しており、そのまわりに、6 個の水素原子の配列された、図 4.11 のような形を構成している。炭素原子は、4 本の結合の腕を持つことから、図 4.11 の $|I\rangle$ または $|II\rangle$ の、どちらかの構造を取りうる。この $|I\rangle$ と $|II\rangle$ のエネルギーは、当然等しく、ちょうど水素分子イオンの、 $|\text{左}\rangle$ と $|\text{右}\rangle$ のような関係にあることがわかる。二つの状態は、相互に、わずかな確率振幅 A で遷移できることから、この場合にも、もっとも安定なベンゼン分子の状態としては、 $|I\rangle$ と $|II\rangle$ の状態の混ざり合った $|E_l\rangle = (|I\rangle - |II\rangle)/2$ に、なっていることが、推察できる。 E_l は、もとのエネルギーより A だけ低いため、ベンゼンは、著しく安定な化合物となっている。このように、全く対称的な二つの状態の混ざり合っできる、安定状態 $\text{ket}E_l$ のことを、共鳴状態と呼ぶ。また、 A のことを、交換エネルギーと呼ぶ。

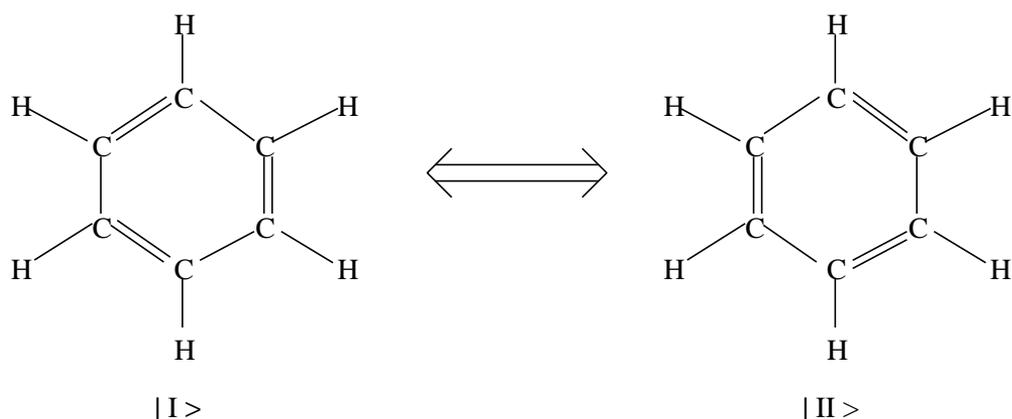


図 4.11 ベンゼン分子の共鳴状態

もう一つ例をあげよう。水素分子は、二つの水素原子核と、二つの電子からできている。電子は、それぞれの原子核付近に、一個ずつ結合している。さて、電子はスピンを持っているが、スピン $1/2$ 粒子の間には、パウリの禁止則という法則が、働いている。これは、スピン半整数の同一粒子間に、成立する法則であり「二つの粒子は、同じ状態になれない」と、いうものである。二つの電子は、別々の原子核に結合しており、別の状態には居るが、わずかに遷移の可能性があるため、できれば、別の状態をとろうとする。そこで、左の電子のスピンが上向きならば、右の電子のスピンは、下向きになろうとする。従って、図 4.12 に示したように、 $|\uparrow\downarrow\rangle$ となるか、逆の $|\downarrow\uparrow\rangle$ となるかの二つの状態が、水素分子のとりうる状態となる。この二つの状態は、対称性から、まったく同じエネルギーをとることから、安定状態としては、以下のようになることが、推定できる。

$$|E_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

このように、共鳴状態を利用した結合は、化学の分野で重要な役割を果たし、特に、共鳴結合と呼ばれる。

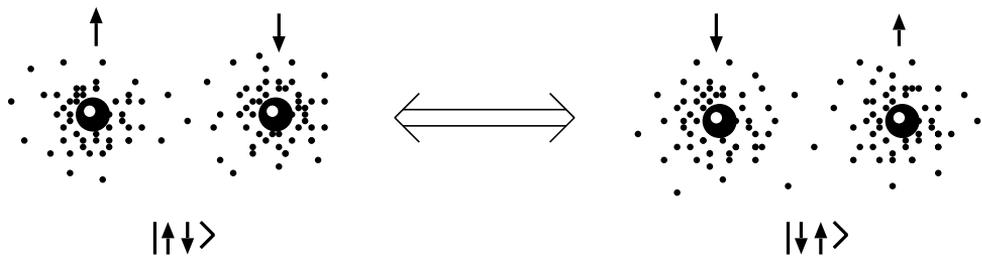


図 4.12 水素分子の共鳴状態

二状態のエネルギーが、もともと、異なっているとき、つまり、ハミルトニアンが次のような形で、表されるときにも、同様な現象が現れる。

$$\hat{H} : \begin{pmatrix} E_1 & A \\ A^* & E_2 \end{pmatrix}$$

問題 4.16 ハミルトニアンが、式 4.15 のように、基底状態に対し非対称な場合の、定常状態およびそのエネルギーを求めよ。 A は正実数とする。

答え

$$E_{h,l} = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_1 - E_2}{2}\right)^2 + A^2}$$

定常状態は \hat{H} の固有状態であるが、省略する。

この場合も、 E_h は、 E_1 、 E_2 より高くなり、 E_l は、 E_1 、 E_2 より低くなる。 $E_1 > E_2$ として、 E_l が E_2 より、どの程度低くなるかを、図 4.13 に示す。この図よりわかるように、もとのエネルギーの差、 $E_1 - E_2$ が大きくなると、 E_l は E_2 に対し、それほど低くなくなる。つまり、共鳴によるエネルギーの低下は、 $E_1 = E_2$ のとき、もっとも顕著になると言える。

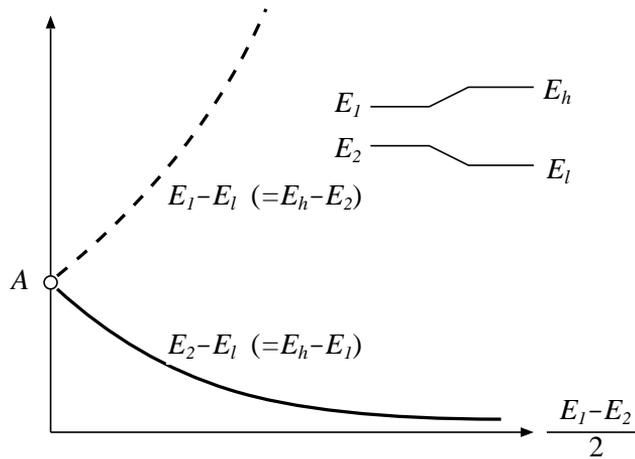


図 4.13 交換エネルギーの大きさ

4.5 時変系の運動方程式

前述の水素分子イオンに、図 4.14 に示すように、電界を加えてみよう。この電界で、二個の水素原子核のところに、 $V/2$ および $-V/2$ ボルトの電位ができるとすると、 $|\text{左}\rangle$ の状態のエネルギーは、 E_0 より $-eV/2$ だけ低くなる。何故なら、左の電子と陽子は、中和しているのに対し、右の陽子は e クーロンの電荷を持ち、かつ $-V/2$ ボルトの電位のところに置かれているからである。同様に、 $|\text{右}\rangle$ は $E_0 + eV/2$ のエネルギーとなる。このため、ハミルトニアンは式 4.1 の代わりに以下ようになる。

$$\hat{H} : \begin{pmatrix} E_0 - \frac{eV}{2} & A \\ A & E_0 + \frac{eV}{2} \end{pmatrix}$$

ただし、 A は正実数とした。この解は、前節で示した、 E_1 と E_2 の異なる場合の解と一致する。

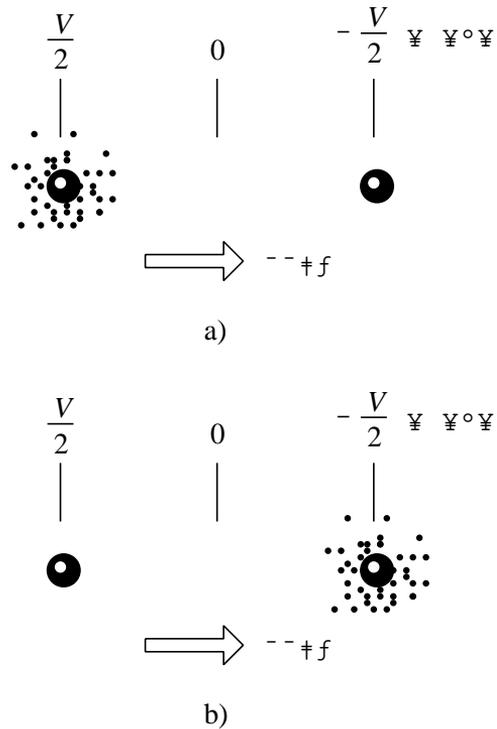


図 4.14 電界中の水素分子イオン

さて、ここで、電界を角周波数 ω で変化してみよう。ハミルトニアンは、次のようになる。

$$\hat{H} : \begin{pmatrix} E_0 - \frac{eV_0}{2} \cos \omega t & A \\ A & E_0 + \frac{eV_0}{2} \cos \omega t \end{pmatrix}$$

また、運動方程式は、以下のようなになる。

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \psi_{\text{左}}(t) &= \left(E_0 - \frac{eV_0}{2} \cos \omega t \right) \psi_{\text{左}}(t) + A \psi_{\text{右}}(t) \\ i\hbar \frac{d}{dt} \psi_{\text{右}}(t) &= A \psi_{\text{左}}(t) + \left(E_0 + \frac{eV_0}{2} \cos \omega t \right) \psi_{\text{右}}(t) \end{aligned} \right\}$$

これらの方程式は、係数が、時間とともに変化するため、これまでに示した、一般的な方法で、答えを見つけることができない。つまり、式 4.5 の固有値問題として、解くことができず、また、近似的解しか得られないことも、しばしば起こる。まず、 $V_0 = 0$ とお

くと、このときは、線型微分方程式となるから、式 4.1 より、以下の解が得られる。

$$\begin{pmatrix} \langle \text{左} | \psi(t) \rangle \\ \langle \text{右} | \psi(t) \rangle \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \exp \frac{-iE_h t}{\hbar} + \beta \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \exp \frac{-iE_l t}{\hbar}$$

α は、 $|\psi(t)\rangle$ が $|E_h\rangle$ をとる確率振幅、 β は $|\psi(t)\rangle$ が $|E_l\rangle$ をとる確率振幅である。上式は、当然 $V_0 \neq 0$ のときには、式 4.5 を満足しない。しかし、 V_0 が小さければ、かなり良い近似になっているはずである。そこで、 V_0 が大きいときには、 α や β を時間とともに、変化させて、この矛盾を吸収させようという、考え方がある。この方法は、定数変化法と呼ばれる。ともかく、 α と β を $\alpha(t)$ 、 $\beta(t)$ として、式 4.5 へ代入してみよう。 $E_h = E_0 + A$ 、 $E_l = E_0 - A$ の条件から、いくつかの項が消え、残った項をまとめると、次の式が得られる。

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\alpha}{dt} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \exp \frac{-iE_h t}{\hbar} + i\hbar \frac{d\beta}{dt} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \exp \frac{-iE_l t}{\hbar} \\ = -\frac{V_0 e}{2} \cos \omega t \left[\alpha \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \exp \frac{-iE_h t}{\hbar} + \beta \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \exp \frac{-iE_l t}{\hbar} \right] \end{aligned}$$

あるいは、右から $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ および $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ を掛けて、次式を得る。

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{d\alpha}{dt} &= -\frac{eV_0}{2} \beta \exp \frac{i(E_h - E_l)t}{\hbar} \cos \omega t \\ &= -\frac{eV_0}{4} (\exp[i(\omega + \omega_0)t] + \exp[-i(\omega - \omega_0)t]) \\ i\hbar \frac{d\beta}{dt} &= -\frac{V_0 e}{2} \alpha \exp \frac{-i(E_h - E_l)t}{\hbar} \cos \omega t \\ &= -\frac{eV_0}{4} \{ \exp[i(\omega - \omega_0)t] + \exp[-i(\omega + \omega_0)t] \} \end{aligned} \right\}$$

ただし $\omega_0 = (E_h - E_l)/\hbar$ とした。この方程式は、厳密には解けない。しかし、 α 、 β が $V_0 = 0$ で、定数であり、 $V_0 \neq 0$ でも、比較的ゆっくりとしか変動しないことを考慮すれば、近似的に解くことができる。実際、 ω が ω_0 に近い値をとるとき、この近似はよくなりつつ。 α 、 β がゆっくり変動すると、 $\exp[i(\omega + \omega_0)t]$ や $\exp[-i(\omega + \omega_0)t]$ のような速い変化をする項は無視でき、上式は次のように近似できる。

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{d\alpha}{dt} &= -\frac{eV_0}{4} \exp[-i(\omega - \omega_0)t] \beta \\ i\hbar \frac{d\beta}{dt} &= -\frac{eV_0}{4} \exp[i(\omega - \omega_0)t] \alpha \end{aligned} \right\}$$

ここまで近似すると、これらの方程式は、厳密に解くことができる。

まず、 $\omega = \omega_0$ の場合を考えてみよう。つまり、印加交流電界の周波数が、エネルギー差 $E_h - E_l$ に対応する周波数に一致する場合である。このような場合には、さらに簡単な形になる。

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{d\alpha}{dt} &= -\frac{eV_0}{4}\beta \\ i\hbar \frac{d\beta}{dt} &= -\frac{eV_0}{4}\alpha \end{aligned} \right\}$$

問題 4.17 式 4.5 を解いてみよ。ただし、 $t = t_0$ で、 $\alpha = \alpha(0)$ 、 $\beta = \beta(0)$ 、 $\alpha(0)^2 + \beta(0)^2 = 1$ とせよ。

この方程式の解は、次のように与えられる。

$$\left. \begin{aligned} \alpha(t) &= \alpha(0) \cos \frac{eV_0 t}{4\hbar} + i\beta(0) \sin \frac{eV_0 t}{4\hbar} \\ \beta(t) &= i\alpha(0) \sin \frac{eV_0 t}{4\hbar} + i\beta(0) \cos \frac{eV_0 t}{4\hbar} \end{aligned} \right\}$$

いま、 $t = 0$ で、 $|\psi(t)\rangle$ が $|E_h\rangle$ や $|E_l\rangle$ の状態である確率は、時間とともに、以下のように変化する。

$$\left. \begin{aligned} P(\psi(t) \rightarrow E_h) &= |\alpha(t)|^2 = \cos^2 \frac{eV_0 t}{4\hbar} \\ P(\psi(t) \rightarrow E_l) &= |\beta(t)|^2 = \sin^2 \frac{eV_0 t}{4\hbar} \end{aligned} \right\}$$

ただし、 $|\alpha(0)|^2$ は当然 1 であることを、利用した。この関係を図 4.15 に示す。時不変のハミルトニアンの場合、エネルギー確定状態をとる確率は、時間とともに変化しない、つまり、定常であるのに対し、交流電界のかかっているような時変の系では、エネルギー確定状態をとる確率は、時間とともに変化する。 $t = 0$ で、 $|\psi(t)\rangle = |E_h\rangle$ であったものが、 $t = 2\pi\hbar/eV_0$ では、 $|E_l\rangle$ になっていることがわかると思う。つまり、水素分子イオンは、 $E_h - E_l$ のエネルギーを、この間に失っている。このエネルギーは、電界を作り出している発振器が受け取ることになる。次の $1/4$ 周期では、逆に電界から $E_h - E_l$ のエネルギーをもらって、水素イオンは再び $|E_h\rangle$ の状態に戻ることになる。水素イオンを $E_h - E_l$ の状態にして、電磁界の入っている箱に入れ、ちょうど $2\pi\hbar/eV_0$ だけたつてか

ら取り出すと、箱の中の電磁界は $E_h - E_l$ だけのエネルギーを受け取ることになる。したがって、定期的に水素分子イオンを箱の中に入れてやれば、箱に多少の電磁界を損失させる機構があっても、電磁界の振動を継続させることができる。レーザーは、こうした原理を巧みに利用して、電磁界の発振をさせるものである。

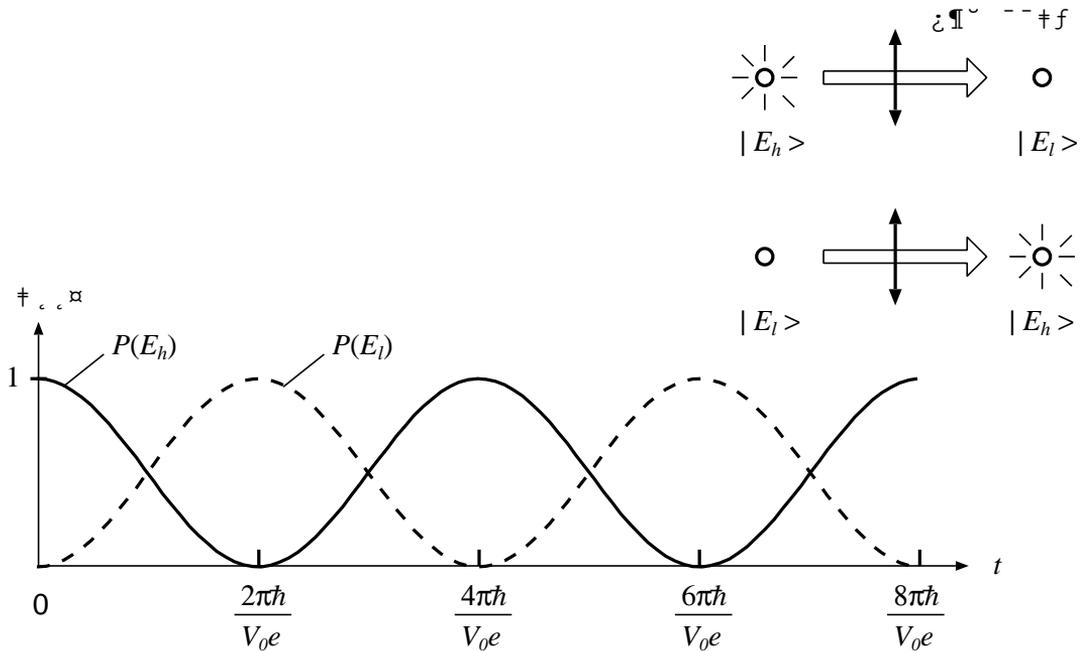


図 4.15 交流電界中でのエネルギー準位の遷移

$|E_l\rangle$ になったイオンを取り除くには、イオンをビーム状にして、箱の中を通過させ、その通過時間を $2\pi\hbar/eV_0$ としたり、あるいは三状態の系を利用し、 $|E_l\rangle$ をさらに第三の状態に変えてしまう、などの方法がとられる。このように電磁界とエネルギーをやり取りして、状態の変化することを、遷移という。また、遷移に関わるエネルギー確定状態を、特にエネルギー準位 (energy level) と呼ぶことが多い。

$\omega \neq \omega_0$ の場合も、式 4.5 は厳密に解くことができる。

問題 4.18 $\omega \neq \omega_0$ として、式 4.5 を解いてみよ。

ヒント $\alpha(t) = \alpha(0) \exp[i\gamma(t)]$ とおき、上式より $\beta(t)$ を求めよ。さらに、下式より、 γ の満たすべき条件を求めよ。

答え $\gamma(\gamma + \omega - \omega_0) = (eV_0 t / 4\hbar)^2$ より得られる以下の二つの γ に対する解を、合成したもの。

$$\gamma = -\frac{\omega - \omega_0}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega - \omega_0}{2}\right)^2 + \frac{eV_0 t^2}{4\hbar}}$$

しかし、厳密解は複雑なので、ここでは $t = 0$ 付近の近似解のみを検討してみよう。再び $t = 0$ で、 $|\psi(0)\rangle = |E_t\rangle$ であったとしてみよう。 $\alpha(0) = 1$ 、 $\beta(0) = 0$ を初期条件とするから、式 4.5 の上式より、 $\alpha(t)$ は、 t が余り大きくならないうちは、ほとんど変化せず、 $\alpha(t) \cong 1$ となる。一方、 $\beta(t)$ は、式 4.5 の下式より、かなり大きく変化する。

$$\beta(t) \cong -\frac{eV_0}{4i\hbar} \int_0^t \exp[i(\omega - \omega_0)t] dt = \frac{V_0}{4\hbar(\omega - \omega_0)} \{\exp[i(\omega - \omega_0)t] - 1\}$$

これより、確率の時間変動は次のようになる。

$$P(\psi(t) \rightarrow E_l) = |\beta(t)|^2 \cong \left[\frac{V_0}{4\hbar(\omega - \omega_0)} \right]^2 \left[\frac{\sin(\omega - \omega_0)t/2}{(\omega - \omega_0)t/2} \right]^2$$

この解を、 t に関して見てみると、図 4.16 のようになり、エネルギー準位から決まる ω_0 と、印加電界の角周波数 ω の差の角周波数で変化することがわかる。また、その振幅は $\omega - \omega_0$ に逆比例する。

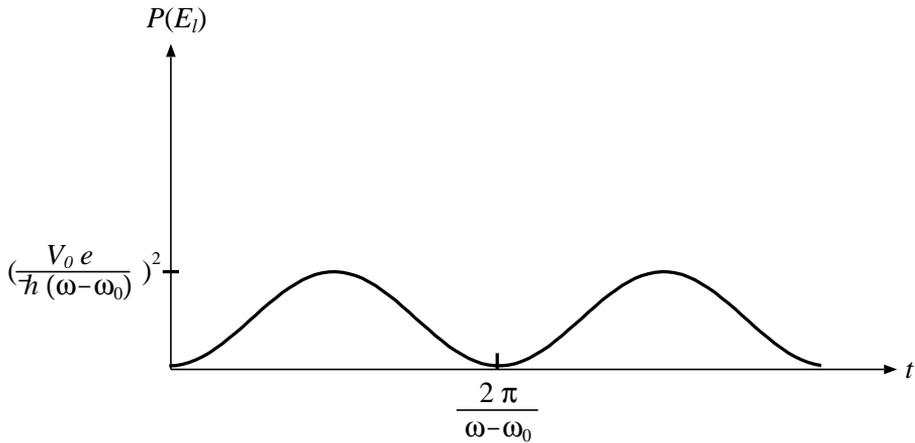


図 4.16 振動電界中で低いエネルギー状態をとる確率の時間変化

式 4.18 の t を固定し、印加電界の角周波数 ω を変えて見てみると、面白い。その関係を、図 4.17 に示す。 $\omega = \omega_0$ で、 $|E_h\rangle$ の状態が $|E_l\rangle$ の状態に遷移する確率が、もっとも高くなる。この確率は ω が ω_0 より $2\pi/t$ 程度ずれると、ほとんど 0 になってしまう。この現象は、ハイゼンベルグの不確定性原理 (Heisenberg uncertainty principle) の一つの表れである。電界が水素分子イオンと t 程度の短い時間やり取りすると、電界を構成している光子のエネルギー $\hbar\omega$ と、準位間のエネルギー差 $\hbar\omega_0$ が、少しぐらいずれていても、エネルギーをやり取りすることができる。 $\omega - \omega_0$ が $2\pi/t$ 程度までやり取りできるということは、 $\Delta E \cong 2\pi\hbar/t$ 、つまり、 $\Delta E \times (\text{やり取りの時間}) \cong h$ となり、ハイゼンベルグの不確定性原理と同じ関係が成立する。

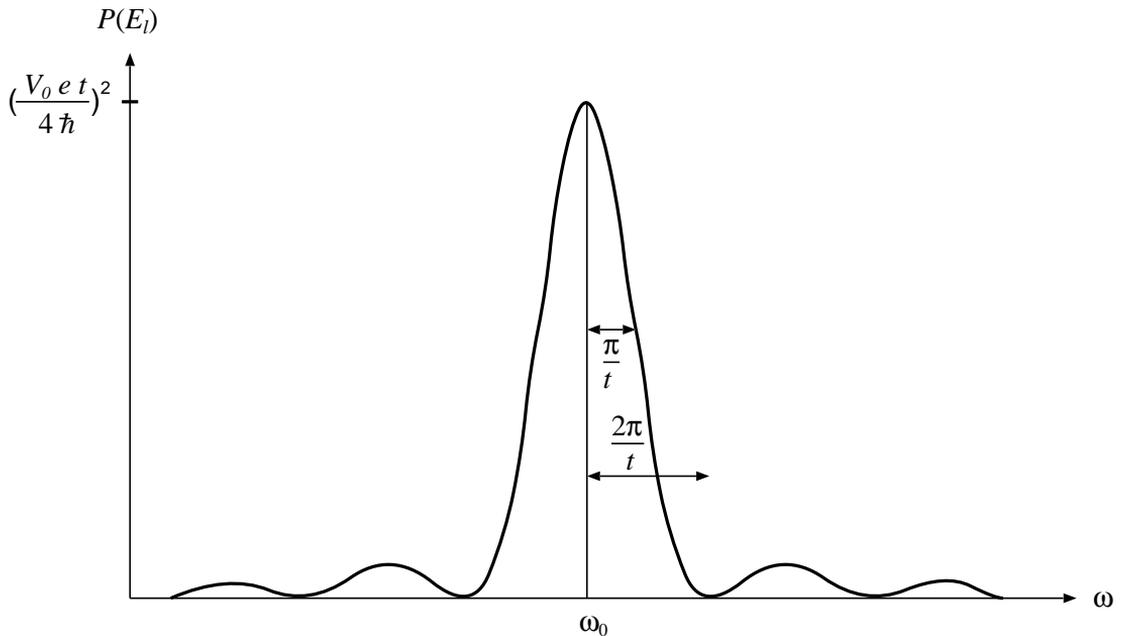


図 4.17 時間 t 後における遷移の ω 依存性

$\omega - \omega_0$ 、つまり、共振周波数 (resonant frequency) では、式 4.18 の [] 内が 1 となり、式 4.18 は $V_0 e t / 4 \hbar^2$ となる。この式は、式 4.17 下式の t が小さいときの値に一致している。

第4章のまとめ

1. 粒子のスピン $S = s \hbar$
 - ボーズ粒子 s は整数同じ状態をいくつもの粒子が取り得る。
 - フェルミ粒子 s は半整数同じ状態を一つの粒子しか取り得ない。
2. 一般の角運動量 $J = j \hbar$
 - J_z を測ると $m \hbar \{m = -j, -(j-1), \dots, (j-1), j\}$ のいずれかの値しか観測されない。
 - J_z の確定状態 $|j, m\rangle$ は $2j + 1$ 個の基底状態となる。
3. 電子スピン ($s = 1/2$)

$$|\theta, \phi\rangle = \exp \frac{-i\phi}{2} \cos \frac{\theta}{2} |+z\rangle + i \exp \frac{i\phi}{2} \sin \frac{\theta}{2} |-z\rangle$$

特に

$$\left(\begin{array}{ll} \left(\begin{array}{l} \langle +z | +x \rangle \\ \langle -z | +x \rangle \end{array} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{l} 1 \\ 1 \end{array} \right) & \left(\begin{array}{l} \langle +z | -x \rangle \\ \langle -z | -x \rangle \end{array} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{l} 1 \\ -1 \end{array} \right) \\ \left(\begin{array}{l} \langle +z | +y \rangle \\ \langle -z | +y \rangle \end{array} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{l} 1 \\ i \end{array} \right) & \left(\begin{array}{l} \langle +z | -y \rangle \\ \langle -z | -y \rangle \end{array} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{l} 1 \\ -i \end{array} \right) \end{array} \right)$$

4. 基底状態が二個しかない二準位系の運動方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle I | \psi(t) \rangle \\ \langle II | \psi(t) \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_I & A \\ A^* & E_{II} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle I | \psi(t) \rangle \\ \langle II | \psi(t) \rangle \end{pmatrix}$$

上式は、必ず、二つのエネルギー固有状態を持つ。

5. 二準位系で、まったく対称関係にある二つの状態の関わる例として、水素分子イオン、水素分子、ベンゼン環など、いくつかがある。これらは、共鳴状態と呼ばれる低エネルギー状態 $|E_I\rangle$ を、安定な状態としてとる。
6. スピン 1/2 の静止粒子も二準位系である。 $|+z\rangle$ 、 $|-z\rangle$ を基底状態とすると、磁界中のスピンのハミルトニアンは、以下のように表せる。

$$\hat{H} = \mu(\hat{\sigma}_x B_x + \hat{\sigma}_y B_y + \hat{\sigma}_z B_z)$$

ここで、 $\hat{\sigma}_x$ 、 $\hat{\sigma}_y$ 、 $\hat{\sigma}_z$ はスピン行列と呼ばれる。

$$\hat{\sigma}_x : \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y : \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z : \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

それぞれ、 $(|+x\rangle, |-x\rangle)$ 、 $(|+y\rangle, |-y\rangle)$ 、 $(|+z\rangle, |-z\rangle)$ を固有状態とする。

7. ハミルトニアンに ω で変化する成分が入ってくると、二準位間に遷移が起こる。 $\omega \neq \omega_0$ では、遷移の程度は、 t が小さいとき、次のように比例して起こる。

$$\frac{\sin(\omega - \omega_0)t/2^2}{(\omega - \omega_0)t/2}$$

t に対しては、 $\omega - \omega_0$ の角周波数で変化する現象であり、 ω に対しては、 ω_0 付近に $2\pi/t$ 程度の幅を持つ鋭い共振特性を示す。

第 5 章

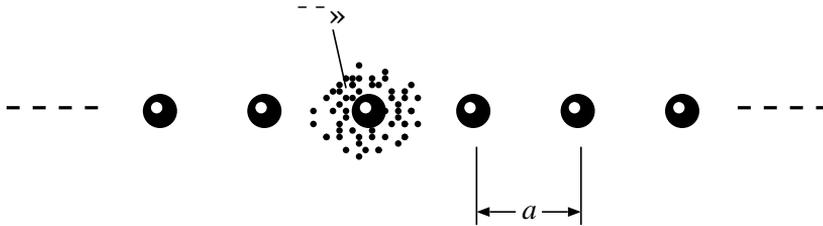
格子上的粒子の運動

前章では、二状態系の運動方程式について学んだが、もっと状態数が多くなった、多状態系の例を学ぼう。本章では、一次元格子上を動く、一個の粒子の運動を調べてみよう。状態数が多くなっても、運動方程式の形などは、ハミルトニアン次元が増えるだけである。基本的な考え方は、ほとんど変わらない。しかし多次元の行列を扱うため、実際の計算法、例えば固有値問題の解き方などは、工夫が必要となってくる。

また、連続的な空間は、格子間隔を無限に小さくし、状態数を無限に多くした極限として考えられる。そこで、本章で述べた結果は、直ちに、連続的な空間を運動する粒子の運動方程式と結びつく、重要な概念であると言える。

5.1 一次元格子上の粒子の運動方程式

一次元格子 (one dimensional lattice) として、図 5.1 のような n 個の格子点 (lattice point) からなる格子 (lattice) を考え、そこに、一個の粒子がいるような系を考える。 n はどんな正整数でもよいが、ここでは簡単のために奇数としておこう。粒子は、各格子点に強く束縛されるため、格子点と格子点の間にいるようなことは、考えないことにする。 j 番目の格子点にいる粒子の状態を、 $|x_j\rangle$ で表そう。具体的には、陽イオンが一次元格子状に並んでおり、一個の電子が、クーロン力によって、どこかの陽イオンに強く束縛されているようなものを考えればよい。

図 5.1 n 個の格子点からなる格子に電子が一個いる系

粒子が、 j 番目の格子点に束縛されている状態、 $|x_j\rangle$ の、エネルギーを E_0 としよう。この値は、各格子点が、全く同じものであれば、 i によらず一定になるはずである。水素分子イオンモデルと同じように、ある格子点にいる粒子は、僅かな確率振幅で、隣の格子点へ移動し得るものとする。例えば、 i 番目の格子点へは、 $j-1$ 番目と、 $j+1$ 番目の格子点から、移動できるものとする。すると、 j 番目の格子点の確率振幅、 $\langle x_j | \psi(t) \rangle$ の増加の様子は、次のように表わされる。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle x_j | \psi(t) \rangle = E_0 \langle x_j | \psi(t) \rangle - A \langle x_{j-1} | \psi(t) \rangle - A \langle x_{j+1} | \psi(t) \rangle$$

ここで、移動（あるいは遷移 (transition)）の程度を表す係数として、 $-A$ (A は正実数) としたのは、特に深い意味はなく、次章との説明のつながりのためである。

式 5.1 は、各格子点が対等であることから、すべての i に対し成立する。ただし、両端の二点に対しては、さらにその先がないため、成立しなくなる。両端では、片側からしか遷移がないので、左端の $min = -(n-1)/2$ と右端の $max = (n-1)/2$ では、次のように扱えばよい。^{*1}この条件は、開放型境界条件 (open boundary condition) と呼ばれる。

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle x_{min} | \psi(t) \rangle &= E_0 \langle x_{min} | \psi(t) \rangle - A \langle x_{min+1} | \psi(t) \rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} \langle x_{max} | \psi(t) \rangle &= E_0 \langle x_{max} | \psi(t) \rangle - A \langle x_{max-1} | \psi(t) \rangle \end{aligned} \right\}$$

この他に、周期型境界条件 (periodic boundary condition) というのも、しばしば用いられる。これは、左端のさらに左に右端と同じものが、接続されているものと、考えようというものである。あたかも、一次元格子が、ゆっくりと曲がって行って、図 5.2 のように、リングを構成しているようなものを、考えればよい。このときの境界条件は、次のよ

^{*1} 格子点の総数が偶数の場合には、左端を $min = -n/2 + 1$ 、右端を $max = n/2$ とすれば、同様に扱える。

うに表わされる。

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle x_{min} | \psi(t) \rangle &= E_0 \langle x_{min} | \psi(t) \rangle - A \langle x_{max} | \psi(t) \rangle - A \langle x_{min+1} | \psi(t) \rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} \langle x_{max} | \psi(t) \rangle &= E_0 \langle x_{max} | \psi(t) \rangle - A \langle x_{max-1} | \psi(t) \rangle - A \langle x_{min} | \psi(t) \rangle \end{aligned} \right\}$$

実は、 n が大きくなると、端の処理の仕方は、余り解に影響しなくなってくる。そこで、数学的に取扱が容易というだけの理由から、周期型境界条件が、しばしば採用される。一次元のときは、図 5.2 のような具体的なイメージを描き易いが、この方法は、具体的イメージの対応できない二次元、三次元でも、しばしば用いられる。我々も、周期型境界条件を採用しよう。

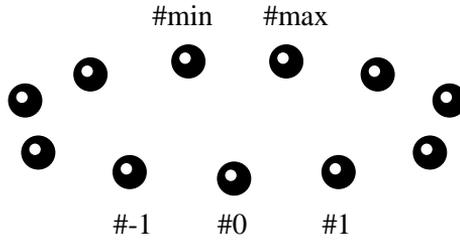


図 5.2 一次元格子の周期型境界条件とは格子の左と右が繋がっているようなもの

周期型境界条件を採用したときの、ハミルトニアン行列の形を求めておこう。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle x_j | \psi(t) \rangle = \sum_k \langle x_j | \hat{H} | x_k \rangle \langle x_k | \psi(t) \rangle$$

上式より、 $\langle x_j | \psi(t) \rangle$ の、時間微分を決定する式の右辺で、 $\langle x_k | \psi(t) \rangle$ にかかる係数が、 $\langle x_j | \hat{H} | x_k \rangle$ となる。式 5.1、式 5.1 より、次の行列が得られる。

$$\begin{pmatrix} E_0 & -A & 0 & \cdots & -A \\ -A & E_0 & -A & \cdots & 0 \\ 0 & -A & E_0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -A & 0 & 0 & \cdots & E_0 \end{pmatrix}$$

対角要素が、 E_0 、その両隣の要素が、 $-A$ であることは、第 4 章で述べた二準位系のハミルトニアン、単純な拡張になっていることが、わかるであろう。右上と左下の $-A$

は、周期型境界条件に基づくものであり、反対側の端からの影響を表している。

問題 5.1 開放型境界条件のとき、ハミルトニアン行列は、どんな形になるか。

答え 式 5.1 の、右上端と左下端の $-A$ が、 0 に置き替わる。

5.2 運動方程式の解

二準位系の運動方程式を解くには、二行二列のハミルトニアン行列の、固有値問題の解を、求めればよかった。それと同様に、格子上の粒子の運動も、式 5.1 の、ハミルトニアン行列の固有値問題を解くことに、帰着される。まず、定法に従って、定常状態の解を求める。定常状態は、次式のように、一定の角周波数 $-E/\hbar$ で変化する。

$$\langle x_j | \psi(t) \rangle = \langle x_j | E \rangle \exp \frac{-iEt}{\hbar}$$

これを、式 5.1 へ代入することにより、 \hat{H} の固有値問題になる。

$$E \langle x_j | E \rangle = \sum_k \langle x_j | \hat{H} | x_k \rangle \langle x_k | E \rangle$$

H のサイズが、 3×3 ぐらいまでであると、 $|\hat{H} - E\hat{I}| = 0$ の根 E を求める方法で、固有値問題を解くことができるが、式 5.1 のように、次数が高くなると、この方法は、絶望的になる。一般には、高次の固有値問題は、解析的には解けず、計算機による近似解しか得られないと考えてよい。しかし、この式のように、比較的規則正しい構造の行列に対しては、別のうまい方法が存在する。

式 5.1 のように、 j が変化しても、式の形が変わらないという、並進対称 (translational symmetry) 性を持つ場合には、 j に対して、 $\langle x_j | E \rangle$ が、等比級数 (geometric series) 的に変化する解のあることが期待される。

$$\langle x_j | E \rangle = c \exp(\beta j)$$

これを、式 5.1 へ、代入してみよう。

$$Ec \exp(\beta j) = E_0 c \exp(\beta j) - A c \exp[\beta(j-k)] - A c \exp[\beta(j+1)]$$

この式は、両辺を $c \exp(\beta j)$ で割ってみると、 j によらず、同じ形となる。

$$E = E_0 - A \exp(-\beta) - A \exp(\beta)$$

つまり、ある j について、この式が成立すると、他のすべての j に対し、この式が成立することとなる。

ただし、両端の、 $i = \min$ と \max については、境界条件と矛盾しないようになっている必要がある。式 5.1 に、式 5.2 の解形式を代入し、整理すると、以下のようなになる。

$$\left. \begin{aligned} E &= E_0 - A \exp[\beta(\max - \min)] - A \exp(\beta) \\ E &= E_0 - A \exp(-\beta) - A \exp[-\beta(\max - \min)] \end{aligned} \right\}$$

これらの式と、式 5.2 を比較すると、 $\exp[\beta(\max - \min)]$ は、 $\exp(-\beta)$ に等しくなければならないことが、わかる。 $\max - \min = n - 1$ であるから、結局、次の条件式が得られる。

$$\exp(\beta n) = 1$$

この式を満たす β は、0 だけのように、思われるかもしれないが、 β として、複素数まで考えると、複素数存在する。

$$\beta = i \frac{2\pi J}{n} \quad (J: \text{整数})$$

式 5.2 と 5.2 と組み合わせることにより、ハミルトニアン行列の、固有状態と固有値が、得られることとなる。

$$\langle x_j | E \rangle = c \exp \frac{i2\pi j J}{n}$$

$$E = E_0 - 2A \cos \frac{2\pi j J}{n}$$

この固有状態は、空間的にも変動している波動の形をしている。つまり、周波数だけでなく波数の概念も持っている。すでに周波数はアインシュタインの関係 (Einstein

relation) を利用してエネルギーと関係付けられおりそれが式 5.2 の E という形で表現されている。一方、式 5.2 の固有状態は、位置 $x_j = aj$ に対し、位相が連続的に変動していることがわかる。このような位相変動がある場合、ド・ブロイの関係 (DeBroglie relation) によって、運動量を持っている運動量確定状態 (momentum defined state) として観測されるはずである。したがって、上式は次の式のように書き直すことができるはずである。 p_J に対応するエネルギー固有値も E_J と記載している。

$$\langle x_j | p_J \rangle = c \exp \frac{i2\pi j J}{n} = c \exp \frac{ip_J x_j}{\hbar}$$

$$E_J = E_0 - 2A \cos \frac{p_J a}{\hbar}$$

前式と比較すると、 p_J と J を結び付ける式が得られる。

$$p_J = \frac{2\pi\hbar}{L} J \quad (\min \leq J \leq \max \quad \text{整数})$$

運動方程式の一般解の形は、上記 n 個の解に、 $\exp(-iE_J t/\hbar)$ で示される時間変化の項を掛けたものを、線型結合したものとなる。線型結合の際の結合係数は、第 3 章で示したように $\langle p_J | \psi(0) \rangle$ で与えられるから、一般解は以下ようになる。

$$\langle x_j | \psi(t) \rangle = \sum_J \langle x_j | p_J \rangle \exp \frac{-iE_J t}{\hbar} \langle p_J | \psi(0) \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_J \exp \frac{i(p_J x_j - E_J t)}{\hbar} \langle p_J | \psi(0) \rangle$$

初期状態が、 $|x_j\rangle$ をとる確率振幅で与えられているときには、さらに次のように表わすことができる。

$$\begin{aligned} \langle x_j | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{J,k} \exp \frac{i(p_J x_j - E_J t)}{\hbar} \langle p_J | x_k \rangle \langle x_k | \psi(0) \rangle \\ &= \frac{1}{n} \sum_{J,k} \exp \frac{i(p_J x_j - E_J t)}{\hbar} \exp \frac{-ip_J x_k}{\hbar} \langle x_k | \psi(0) \rangle \end{aligned}$$

ここで、 E_J は、無論、式 5.2 で与えられる。これらの式は初期状態、つまり $t=0$ で、 $|\psi(t)\rangle$ が空間的あるいは運動量空間的にどんな分布をとるかによって、時間の経過とともに複雑な変化をする。それについては、次節で学ぼう。

問題 5.2 開放型境界条件の場合の、ハミルトニアン行列について、固有値問題を解け。

ヒント 式 5.2 の形の解は、両端末の方程式を満たさない。こういう場合には、 $\langle x_j | E \rangle = C \exp(\beta j) + D \exp(-\beta j)$ と仮定する。さらに、式 5.2 と両端の式 5.1 と比較すると、 C 、 D 、 β が定まる。

答え

$$\beta = i \frac{\pi J}{n+1} \quad (J = 1, 2, \dots, n+1)$$

$$D = -C \exp(i\pi I) = -(-1)^I C$$

5.3 運動量基底状態

古典力学では、粒子の運動を決定する運動方程式 (いわゆるニュートンの運動方程式) の中に、「加速度」や「速度」といった量が入っているため、これらの概念は、極めて重要である。しかし、量子力学の世界では、 $\langle \underline{x} | \psi \rangle$ の時間変化という形で表され、運動方程式にも、速度や加速度といった概念は、現れてこない。むしろ、これらの量を定義したり、測定したりすることはできるが、あまり重要な量ではない。

これに対し、量子力学の世界で重要な役割を果たしているのは、「運動量 (momentum)」である。閉じた力学系 (外とかかわりを持たない系) では、運動量は、エネルギーと同じように、保存量であるし、なによりも、量子力学的波動の波数と、強い関係がある。すでに、我々はド・ブロイの関係 (DeBroglie relation) より、 x 方向に運動量 p を持つ電子が、波数 $k = p/\hbar$ で変化する確率振幅、つまり $\exp(ipx/\hbar)$ の形の確率振幅を持つことを知っている。前節の結果を利用して、このことをもう少し正確に表現してみよう。前節と同様に、全長 L を n 等分し、 Δx ごとの小区間に分割して考える。すると、「運動量 p の状態」の電子が、「場所 x_j にいる状態」をとる確率振幅 $\langle x_j | p \rangle$ は、次式で与えられる。

$$\langle x_j | p \rangle = c \exp \frac{ipx_j}{\hbar}$$

正規化定数 c は、正規化条件 $\langle p|p\rangle = 1$ より決定でき、位相項を無視すると $1/\sqrt{n}$ となる。

問題 5.3 式 5.3 の比例係数が、 $1/\sqrt{n}$ で与えられることを示せ。

ヒント $\langle p|p\rangle = \sum_j \langle p|x_j\rangle \langle x_j|p\rangle$

答え $\sum_j \langle p|x_j\rangle \langle x_j|p\rangle = \sum_j \left(c^* \exp \frac{-ipx_j}{\hbar} \right) \left(c \exp \frac{ipx_j}{\hbar} \right) = \sum_j |c|^2 = n|c|^2$ 。これが 1 でなければならないから、 $|c| = 1/\sqrt{n}$ となる。

問題 5.4 次の式を証明せよ。

$$\sum_{j=\min}^{\max} \exp(i\alpha j) = \frac{\exp[i(\max + 1)\alpha] - \exp(i\min\alpha)}{\exp(i\alpha) - 1} = \frac{\exp(i\alpha) - 1}{\exp(i\alpha) - 1} \exp(i\min\alpha)$$

(ただし、 $\alpha \neq 2\pi \times \text{整数}$)

ヒント 初項 $\exp(i\min\alpha)$ 、終項 $\exp(i\max\alpha)$ 、公比 $\exp(i\alpha)$ の n 項からなる等比級数。

問題 5.5 整数 j の関数、 $\exp(i2\pi Jj/n)$ は J を n の整数倍増減させても、元と同じ関数となることを示せ。

答え $\exp \frac{i2\pi(J \pm n)j}{n} = \exp \frac{i2\pi Jj}{n} \exp \frac{\pm i2\pi nj}{n} = \exp \frac{i2\pi Jj}{n}$

p の値を変えていくことより作られる、いくつかの運動量確定状態 (momentum defined state) $|p\rangle$ のうち、適当なものを選択すると、 $\{|x_j\rangle\}$ とは別の基底状態の組を作ることが、可能となりそうである。まず、直交性を検討してみよう。

$$\langle p|p'\rangle = \sum_i \langle p|x_j\rangle \langle x_j|p'\rangle = \sum_j \frac{1}{\sqrt{n}} \exp \frac{-ipx_j}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{n}} \exp \frac{ip'x_j}{\hbar} = \frac{1}{n} \sum_j \exp \frac{i(p' - p)x_j}{\hbar}$$

$p = p'$ では、この値は n/n 、つまり、1 となる。 $p \neq p'$ では (ただし $|p' - p| < 2\pi\hbar/\Delta x$ としておこう)、問 5.4 の結果より次の式が得られる。

$$\frac{1}{n} \frac{\exp[i(p' - p)L/\hbar] - 1}{\exp[i(p' - p)\Delta x/\hbar] - 1} \exp \frac{i(p' - p)x_{\min}}{\hbar}$$

ただし、 $n\Delta x = L$ とした。したがって、 $(p' - p)L/\hbar$ が 2π の整数倍であると、この結果は 0 となり、正規直交性を成立させることができる。

以上のことから、 p として、次のような飛び飛びの値をとって、 n 個の状態を用意すれば、基底状態を組めそうである。

$$p_J = \frac{2\pi\hbar}{L}J \quad (J \text{ は } \min \leq J \leq \max \text{ を満たす整数})$$

J を $\min \leq J \leq \max$ に限ったのは、問題 5.5 より、この範囲を越える J を用いても、同じ関数に帰着してしまうからである。上式で得られた範囲を満たす n 個の J に対応する運動量を図 5.3 に示す。図より、 $(2\pi\hbar/L)\max = \pi\hbar/\Delta x$ 、 $(2\pi\hbar/L)|\min| \leq \pi\hbar/\Delta x$ であるから、先に用いた $|p - p'| < 2\pi\hbar/\Delta x$ の条件は、自動的に満たされている。

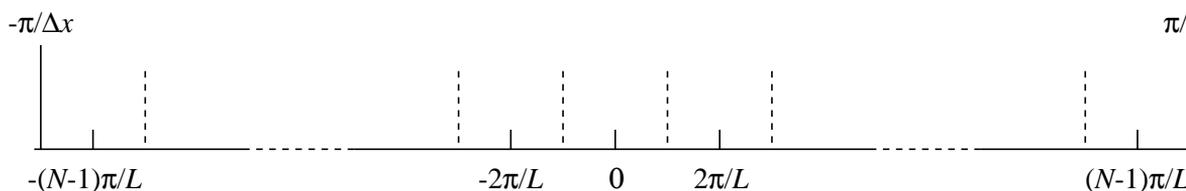


図 5.3 運動量のとりうる値

これら n 個の状態 $|p_J\rangle$ の組は、完備性も備えていることが、証明できる。

$$\sum_J |p_J\rangle \langle p_J| = \hat{I}$$

このように、次の $\{|p_J\rangle : J \text{ は } \min \leq J \leq \max \text{ を満たす整数}\}$ は基底状態を組むことがわかる。

$$\langle x_j | p_J \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \exp \frac{ip_J x_j}{\hbar} = \frac{1}{\sqrt{n}} \exp \frac{i2\pi J j}{n} \quad (p_J = \frac{2\pi\hbar}{L}J, x_j = j\Delta x)$$

つまり、勝手な状態 $|\psi\rangle$ を表現するのに、 $\langle x_j | \psi \rangle$ で表現しても、 $\langle p_J | \psi \rangle$ で表現してもよいことを示している。なお、 p_J の間隔は $\Delta p = 2\pi\hbar/L$ で与えられ、実空間の大きさが大きいほど、小さくなる。一方、運動量空間の大きさは $L_p = 2\pi\hbar/\Delta x$ で与えられ、実空間の区間間隔が小さいほど大きくなっている。

問題 5.6 式 5.5 を証明せよ。

ヒント $\sum_J \langle x_j | p_J \rangle \langle p_J | x_k \rangle$ に対し、問 5.6 の $p \rightarrow (x_j - x_k)$ 、 $x_j \rightarrow p_J$ とした式を用いてみよ。

答え

$$\begin{aligned} \sum_J |p_J\rangle \langle p_J| &= \sum_{j,J,k} |x_j\rangle \langle x_j| p_J \rangle \langle p_J | x_k \rangle \langle x_k| \\ &= \sum_{j,J,k} |x_j\rangle \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \exp \frac{ip_J x_j}{\hbar} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \exp \frac{-ip_J x_k}{\hbar} \right) \langle x_k| \\ &= \sum_{j,J,k} |x_j\rangle \frac{1}{n} \exp \frac{ip_J(x_j - x_k)}{\hbar} \langle x_k| = \sum_{j,k} |x_j\rangle \delta_{jk} \langle x_k| = \hat{I} \end{aligned}$$

問題 5.7 $\langle x_j | \psi \rangle$ が、すべての j に対してわかっているとして、 $\langle p_J | \psi \rangle$ を求めよ。また逆に、 $\langle p_J | \psi \rangle$ の組から、 $\langle x_j | \psi \rangle$ の値を求めよ。

答え

$$\begin{aligned} \langle p_J | \psi \rangle &= \sum_j \langle p_J | x_j \rangle \langle x_j | \psi \rangle = \sum_j \exp \frac{-ip_J x_j}{\hbar} \langle x_j | \psi \rangle \\ \langle x_j | \psi \rangle &= \sum_J \langle x_j | p_J \rangle \langle p_J | \psi \rangle = \sum_J \exp \frac{ip_J x_j}{\hbar} \langle p_J | \psi \rangle \end{aligned}$$

ここに示した状態が前節に示した運動量確定状態と同じものであることは容易に理解できよう。

問題 5.8 $\langle x_j | \psi \rangle$ が、次のように与えられている (図 5.4 参照)。

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad & \frac{\sqrt{3}}{3} \cos \frac{2\pi j}{9} & \text{(b)} \quad & \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (\text{for } J = -3, 0, 3) \\ \text{(c)} \quad & \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (\text{for } J = -2, 1, 4) & \text{(d)} \quad & 1 \quad (\text{for } J = 0) \\ \text{(e)} \quad & \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (\text{for } J = -1, 0, 1) & \text{(f)} \quad & \frac{1}{\sqrt{5}} \quad (\text{for } J = -2, -1, 0, 1, 2) \end{aligned}$$

これらの確率振幅の二乗を図から想像し、かつ計算により、正規化されていることを確かめよ。それぞれの $\langle p_J | \psi \rangle$ を求め、さらに図示してみよ。それらの確率振幅の二乗を図から想像し、かつ正規化されていることを確かめよ。

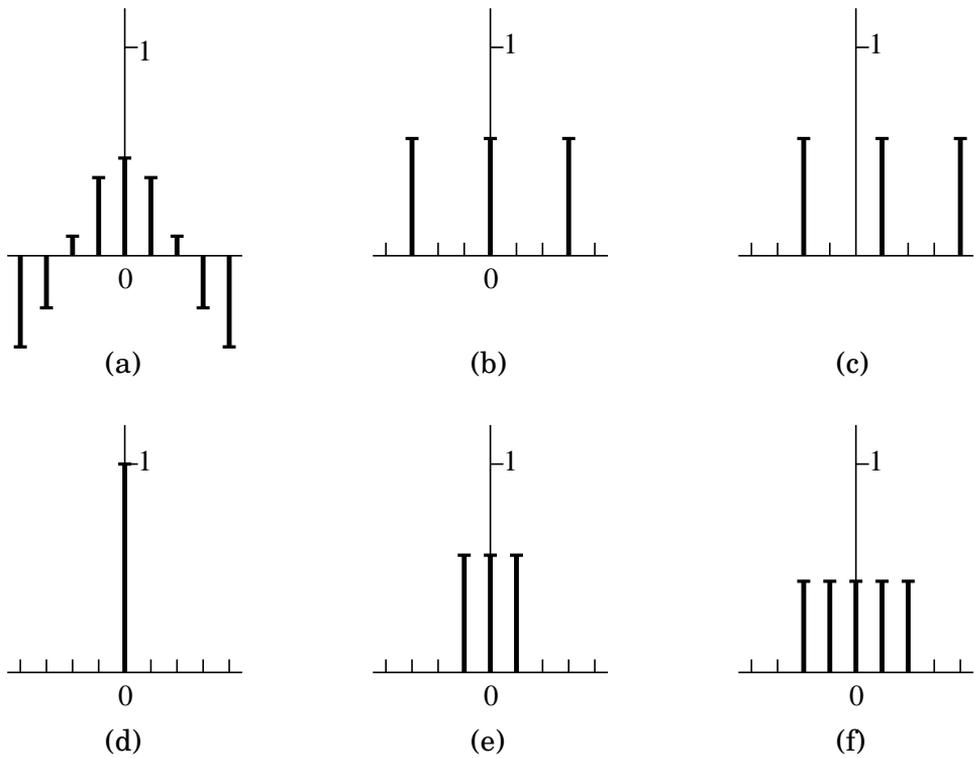


図 5.4 位置の確率振幅の分布

答え (図 5.5 参照)

$$\begin{aligned}
 \text{(a)} \quad \langle p_J | \psi \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (\text{for } J = \pm 1) & \text{(b)} \quad \frac{1}{3\sqrt{3}} \left(1 + 2 \cos \frac{2\pi J}{3} \right) \\
 \text{(c)} \quad \frac{1}{3\sqrt{3}} \left(1 + 2 \cos \frac{2\pi J}{3} \right) \exp \frac{-i2\pi J}{9} & \text{(d)} \quad \frac{1}{3} \quad (\text{for all } J) \\
 \text{(e)} \quad \frac{1}{3\sqrt{3}} \left(1 + 2 \cos \frac{2\pi J}{9} \right) & \text{(f)} \quad \frac{1}{3\sqrt{5}} \left(1 + 2 \cos \frac{2\pi J}{9} + 2 \cos \frac{4\pi J}{9} \right)
 \end{aligned}$$

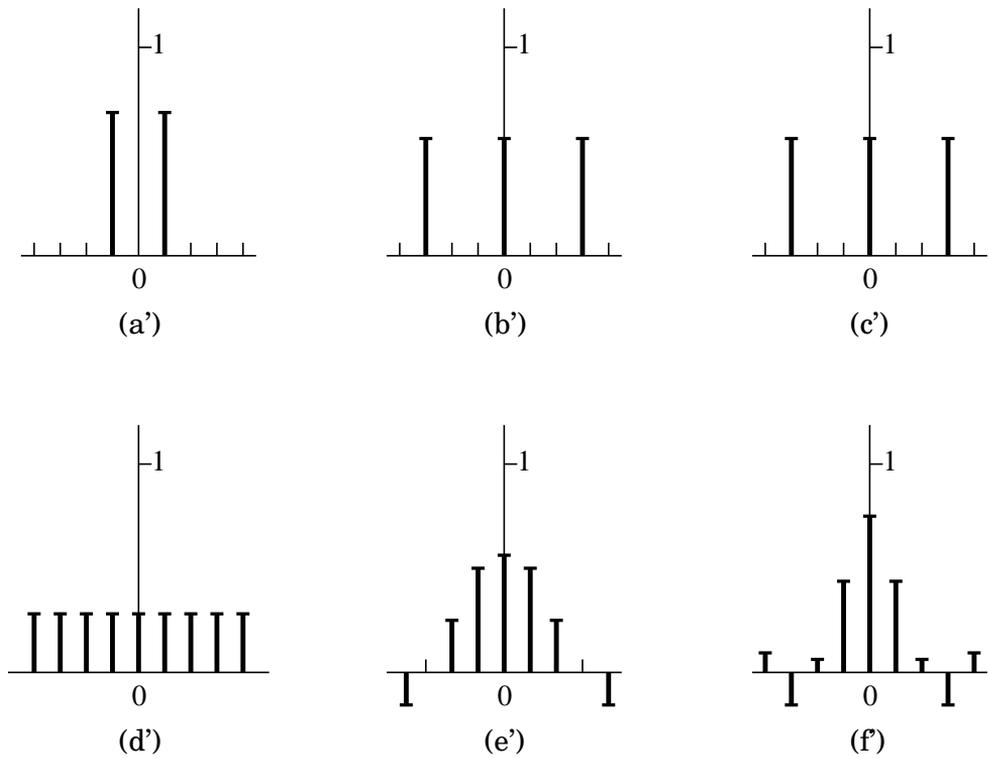


図 5.5 図 5.4 に対する運動量の確率の分布。(c') には実際には位相差がある

問題 5.6 の中で出てきた $\sum_J \frac{1}{n} e^{ip_J(x_j - x_k)/\hbar} = \delta_{jk}$ の式は、 j と k の間が n 以上開いていても、次のように n を周期としてきちんと定義できる。こうした周期的な δ 関数は、これから本章以降でもしばしば現れるので $\delta_{jk}^{(n)}$ という記号で定義しておこう。

$$\sum_J \frac{1}{n} \exp \frac{ip_J(x_j - x_k)}{\hbar} = \sum_J \frac{1}{n} \exp \frac{i2\pi I(j - k)}{n} = \delta_{(j-k) \bmod n, 0} \stackrel{\text{def}}{=} \delta_{j,k}^{(n)}$$

\bmod とは割算の余りのことなので、 $j - k$ が n で割り切れる、つまり、 j と k の間が n の整数倍であるときにのみ、1 になることを示している。

5.4 格子上的粒子の運動

前節で解いた運動方程式の解を、いろいろな場合について、示してみよう。まず、定常状態を求めてみよう。式 5.1 で $\langle p_J | \psi(0) \rangle$ が、ある特定の $J = J_0$ に対してのみ、1 で、他の J に対しては 0 であるときには、状態は常に $|p_{J_0}\rangle$ となり、明らかに定常状態となる。次の初期状態を考えよう。

$$\langle p_J | \psi(0) \rangle = \delta_{JJ_0}$$

この式を、式 5.2 へ代入すると、次のようになる。

$$\langle x_j | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \exp \frac{i(p_{J_0} x_j - E_{J_0} t)}{\hbar}$$

各格子点にいる、粒子の存在確率は次のようになる。

$$P(\psi(t) \rightarrow x_j) = \frac{1}{n}$$

これを、図 5.6 に示すが、時間によらず一定となる。この状態の運動量は、むしろ、時間によらず、 $(2\pi\hbar/L)J_0$ となる。

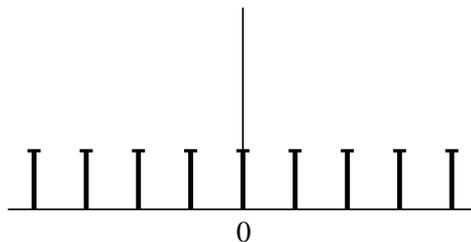


図 5.6 運動量確定状態は定常状態になる

運動量確定状態は、運動量を持っているにもかかわらず、粒子の空間上のパターンは、時間と共に変動しない。我々の知っている古典力学では、運動量 p を持った粒子の存在場所は、ある速度で移動していくはずである。しかし、この結果はそうになっていない。扱っているのが、一次元格子で、古典力学で扱う連続的な空間ではないからであろうか。いや、量子力学では、連続空間を一次元格子の極限として、理解しようとしているのだから、

一次元格子でうまくいかないことは、連続空間でもうまくいかない。じつは、古典力学の運動に対応する状態はあるのだが、ここで示した運動量確定状態ではないのである。

古典的な粒子は、質点と呼ばれるように、各時刻で、その存在位置は一点で与えられると考えられている。そこで、つぎに、 $t = 0$ で、粒子の存在場所が、ある一点に確定しているような状態を、考えてみよう。例えば、その一点を原点とすると、 $\langle x_j | \psi(0) \rangle = \delta_{j0}$ である。

$$\langle x_j | \psi(t) \rangle = \frac{1}{n} \sum_J \exp \frac{i(p_J x_j - E_J t)}{\hbar}$$

ただし、 $x_0 = 0$ とした。したがって、確率振幅の時間変動は次のようになる。

$$P(\psi(t) \rightarrow x_j) = \frac{1}{n^2} \sum_{JK} \exp \frac{i(p_J x_j - E_J t)}{\hbar} \exp \frac{-i(p_K x_j - E_K t)}{\hbar}$$

この結果は、あまり簡単ではなく、それから、存在確率を計算すると、さらに複雑な式となるが、図 5.7 に、計算機で計算した、確率の時間変化の様子を示す。かなりの時間、原点付近に、最も大きな存在確率が現れるが、時間とともに、そのピークは段々小さくなり、やがて、粒子の位置は、どこにあるのかははっきりしなくなる。このように、純粋に一点にだけ存在する質点のような粒子像は、運動を示さず、ただ、存在位置が段々ぼけていくという結果となってしまふ。こうした振舞は、不確定性原理に起因している。一点にいる粒子は、 x の拡がりかほとんどないので、逆に、 p の拡がり大きい。



図 5.7 $t = 0$ に原点にいた電子はだんだん拡がっていく

実際、式 5.4 にも示されているように、 $|\psi(0)\rangle$ が $|p_J\rangle$ をとる確率は、 J によらず、一定の $1/n$ である。そこで、粒子は、いろいろな運動量で、時間とともに拡がっていつてしまうのである。

このように、古典的な粒子像 (classical particle image) に対応する量子力学の状態は、純粋な運動量確定状態でもないし、純粋な位置確定状態でもないことがわかった。そこで、運動量の適当に混ざった状態を、考えてみよう。例えば、 $|p_{J_0}\rangle$ と $|p_{J_1}\rangle$ の状態を、 $1/2$ ずつの振幅で、組み合わせてみよう。ただし、 $E_{J_0} \neq E_{J_1}$ である。

$$\langle x_j | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2n} \left[\exp \frac{i(p_{J_0}x_j - E_{J_0}t)}{\hbar} + \exp \frac{i(p_{J_1}x_j - E_{J_1}t)}{\hbar} \right]$$

各点での存在確率は次のようになる。

$$P(\psi(t) \rightarrow x_j) = \frac{1}{n} \left[1 + \cos \frac{(p_{J_0} - p_{J_1})x_j - (E_{J_0} - E_{J_1})t}{\hbar} \right]$$

その形は、図 5.8 に示すように、時々刻々変化し、同じ正弦波状の形が、一定の速度で動いていく。その速度を計算するには、 x_i に対する確率が、何秒後に x_{j+1} に伝わるかを計算すればよい。つまり、上式の \cos の中が、 x_j, t に対する場合と、 $x_{j+1}, t + \Delta t$ に対する場合とで等しいと置き、得られた Δt から、 $(x_{j+1} - x_j)/\Delta t$ を求めればよい。

$$v = \frac{E_{J_1} - E_{J_0}}{p_{J_1} - p_{J_0}} = \frac{[E_0 - 2A \cos(\pi J_1/n)] - [E_0 - 2A \cos(\pi J_0/n)]}{p_{J_1} - p_{J_0}}$$

この状態は、粒子の発見する可能性が、あちこちに拡がっていたり、空間的な周期性をもっていたりしており、まだまだ、古典的な粒子像と一致しないかも知れないが、かなり近いものであるといえる。



図 5.8 混合状態の時間変化

p_{J_0} と p_{J_1} が、極めて近接した値であるときには、式 5.4 は、もっと簡単に、計算することができる。簡単のために、 p_{J_0} を p 、 p_{J_1} を $p + \Delta p$ と表そう。また、エネルギーと運動量の関係式で、 p_J のかわりに、 p を入れたときのエネルギーを $E(p)$ と表そう。

$$v = \frac{E(p + \Delta p) - E(p)}{(p + \Delta p) - p} = \frac{E(p + \Delta p) - E(p)}{\Delta p} \rightarrow \frac{dE}{dp}$$

つまり、エネルギーの運動量依存性を、微分すれば、速度を求めることができることがわらう。この速度を群速度 (group velocity) という。これに対し、それぞれの独立した波の速度 $\frac{\omega}{k}$ を、位相速度 (phase velocity) という。

もっと多くの運動量状態を、適切に混ぜると、図 5.9 に一例を示すように、空間的な拡がりのもう少し少ない、かつ、古典的な粒子のように動く状態を、作ることもできる。これは、ある運動量 p 付近の運動量を持つ状態を、いくつか集めたものであり、空間的にあまり広がっていないことから、波束 (wave packet) と呼ばれる。波束は、ほぼ一定の速度で移動していくが、その速度は、およそ式 5.4 で推定することができる。いま、いくつか集めた状態のうち、ある二つの状態だけに、着目してみると、その合成した状態の速度は、式 5.4 のような式で、計算される。ところが、どの状態も、運動量 p のごく近傍の状態だけであるから、(エネルギーの差)/(運動量の差) は、どの二つの状態に対しても、ほとんど同じになってしまう。つまり、ある運動量の付近で、運動量をわずかに変えたときの、エネルギーの変化の比を求めればよい。これは、先に述べた式 5.4 の計算での群速度となることを、示している。しかし、厳密には、いくつかの僅かに異なる速度が混ざっていることから、永い時間が経過すると、この波束の形は、図 5.9 のように、徐々にくずれていってしまう (図 5.8 の場合のように、二つの状態の混合だけでは、波形はくずれない)。

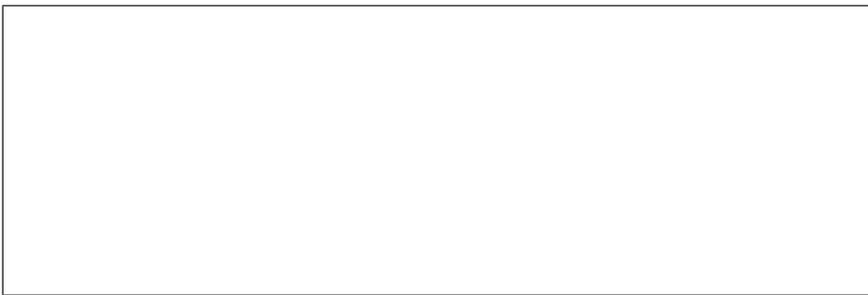


図 5.9 多くの状態の混合状態系

問題 5.9 初期状態として、 $|p_{J_0}\rangle$ と $|p_{J_0}\rangle$ の、二つの縮退した運動量状態が、 $1/2$ ずつ混ざっている場合の、存在確率の時間変化を求めよ。

答え 確率振幅は以下ようになる。

$$\langle x_j | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2n} \left(\exp \frac{ip_{J_0} x_j}{\hbar} + \exp \frac{ip_{J_1} x_j}{\hbar} \right) \exp \frac{-E_{J_0} t}{\hbar} \cos \frac{p_{J_0} x_j}{\hbar} \exp \frac{-E_{J_0} t}{\hbar}$$

また、各格子点にいる、粒子の存在確率は、次式で与えられる。

$$P(\psi(t) \rightarrow x_j) = \frac{1}{n} \cos^2 \frac{p_{J_0} x_j}{\hbar} = \frac{1}{n} \cos^2 \frac{2\pi J_0 j}{h}$$

これを図 5.10 に示す。この結果は、時間にはよらず一定である。このように、混合状態でも、エネルギーの等しい状態を混合すると定常状態となる。

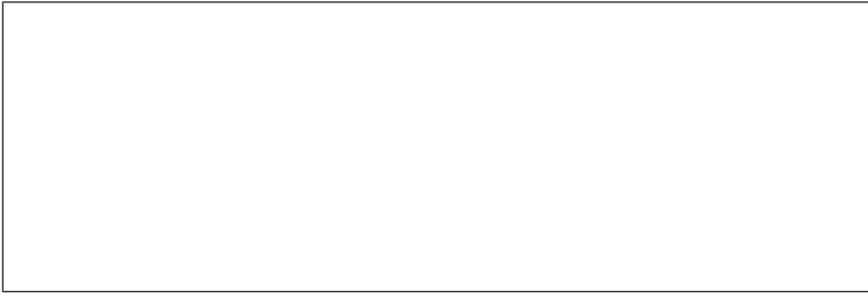


図 5.10 縮退した混合状態では時間変化はない

問題 5.10 勝手な初期状態 $|\psi(0)\rangle$ から時々刻々変化した状態 $|\psi(t)\rangle$ が、運動量確定状態 $|p_J\rangle$ をとる確率振幅を求め、確率を計算せよ。

ヒント 式 5.2 を利用し、 $\langle p_J | \psi(t) \rangle$ を求める。

答え

$$\begin{aligned} \langle p_J | \psi(t) \rangle &= \sum_j \langle p_J | x_j \rangle \langle x_j | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{1}{n} \sum_{jK} \exp \frac{-ip_J x_j}{\hbar} \exp \frac{i(p_K x_j - E_K t)}{\hbar} \langle p_K | \psi(0) \rangle \\ &= \sum_K \delta_{JK} \exp \frac{-iE_K t}{\hbar} \langle p_K | \psi(0) \rangle = \exp \frac{-iE_J t}{\hbar} \langle p_J | \psi(0) \rangle \end{aligned}$$

したがって、以下の確率が得られる。

$$P(\psi(t) \rightarrow p_J) = P(\psi(0) \rightarrow p_J)$$

この式より分かるように、どんな初期状態から始まる粒子の運動でも、ある運動量状態をとる確率は、時間によらず一定となる。これは、運動量確定状態が、エネルギー確定状態つまり定常状態であるからである。

5.5 格子の運動量とエネルギー

運動量確定状態は、定常状態であるので、そのエネルギーも確定し、その値は、前節の式 5.2 で計算したが、それをもう一度ここに示そう。

$$E = E_0 - 2A \cos \frac{pa}{\hbar}, \quad p = \frac{2\pi\hbar}{L} J$$

これを、運動量に対しプロットした結果を図 5.11 に示す。粒子の取りうるエネルギーには、最小値と最大値があって、その間にかかなり近接して存在し、しかも、 n が増えると、殆ど連続的になることが、わかる。これを、エネルギーのバンド構造 (band structure) という。結晶のような、規則的な構造を持った固体中では、電子のエネルギーは、必ず、このようなバンド構造をとる。

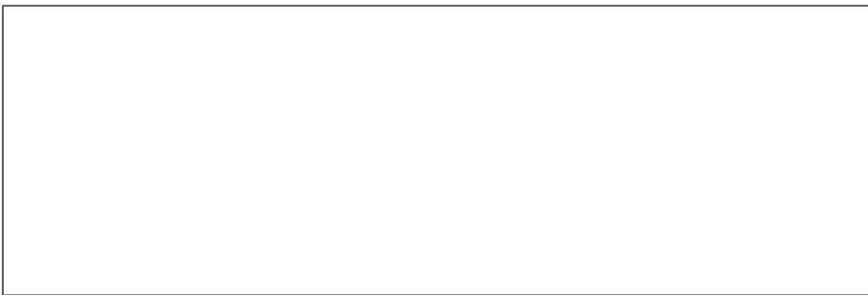


図 5.11 エネルギーの運動量依存性

実際の結晶では、必ずしも、最近接の格子点からの $-A$ の遷移確率振幅だけではなく、もっと遠方の格子点からの遷移確率振幅もあるし、まず第一に、三次元であるので、バンド構造は、もっと複雑な形となる。また、本章では、格子点間の遷移を無視したときの、各格子点での電子の状態を、 E_0 のエネルギー状態一つであるとして、解析したが、実際の結晶格子では、もともと、いくつかのエネルギー状態があり、それが、まわりの格子点

の色々なエネルギー状態と遷移しあうので、さらに、複雑になる。しかし、そのような場合でも、計算の原理は全く同じである。実際の結晶格子のバンド構造の計算にも、こうした手法が使われており、各エネルギー状態のエネルギーや、各遷移確率をパラメータとして、いろいろ調整し、その結果を、実測により得られるバンド構造の部分的な情報と、照合することにより、より正確なバンド構造の決定を行っている。

この、各パラメータ自身も、計算できないのだろうかという疑問を持つかもしれない。これは、原理的には可能である、と言える。その基本的な原理については、次章で述べるが、実際の結晶格子では、それを構成している各原子が、あまりにも多くの電子を持っているため、問題が著しく複雑になり、正確な解は、事実上得られないと思ってよい。このため、実際のバンド計算では、上記のようなパラメータを探す手法がとられている。

もう一度、一次元格子のバンド構造を示した図 5.11 に戻ろう。ここでは、 n とバンド構造の関係がはっきり見えるように、 $n = 9$ という短い長さの格子の例を示した。しかし、実際の結晶格子の n は、もっと天文学的に大きな数である。 n が大きくなっても、エネルギーと運動量の関係は、全然変わらず、ただ、その上に置かれる点の数 n が増えるだけである。このため、このバンド図は、点の集合というよりは、ほとんど連続的な、一本の曲線となる。こうした状況では、粒子の波束という概念はもっとすっきりしてくる。無論、不確定性原理は相変わらず効いているが、全体の格子の大きさが大きいので、ある程度広がった波束を考えることができ、運動量の拡がりの狭い状態、つまり、あまり色々な速度の混ざっていない、波形くずれの少ない波束状態を作ることができるからである。一例を、図 5.12 に示すが、このような波束に対しては、式 5.4 による速度の計算法が、一層、明確になるであろう。式 5.5 に対し、この微分計算を行ってみよう。

$$v = \frac{dE}{dp} = \frac{2Aa}{\hbar} \sin \frac{pa}{\hbar}$$

p のごく近傍の運動量を持つ状態を、いくつか集めて作った波束状態は、この速度で、格子中を動くわけである。速度が、運動量に対しどう変化するかを、図 5.13 に示した。



図 5.12 波束

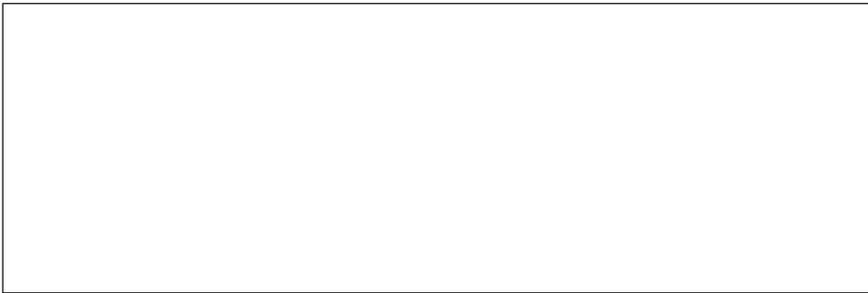


図 5.13 速度と運動量の関係

ところで、我々は、古典力学の結果から、自由空間を走る質点の速度と運動量の間を知っている。

$$v = \frac{p}{m}$$

図の結果と、この結果は似ているが、少し異なる。まず、図の結果は直線的でなく、 $p = 2\pi\hbar/a$ に近くなると、曲がってしまう。これは、明らかに格子間隔 a の影響である。格子間隔 a が、もっと無限に小さければ、もっと無限に大きな運動量まで、直線関係が成立するはずである。もう一つの差は、原点付近の勾配の違いである。自由空間の粒子の勾配は、 $1/m$ と電子の質量で決まっているのに、格子中の電子の勾配は、隣の格子点への遷移確率振幅で決まっている。これも、明らかに、格子の影響である。このように、両者は、微妙に異なっているが、それでも、かなりの相似性を持っている。そこで、次章では、この相似性を足掛りにして、逆に、自由空間中の電子の運動方程式を推定することを試みる。

問題 5.11 もし、格子中を動く電子の振舞を、自由空間中の電子と、ほとんど同じにしようとするれば、 A を、どのように、選べばよいか。

答え $\hbar/2ma$ 。

第5章のまとめ

1. 一次元格子中の電子の運動方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle x_j | \psi(t) \rangle = E_0 \langle x_j | \psi(t) \rangle - A \langle x_{j-1} | \psi(t) \rangle - A \langle x_{j+1} | \psi(t) \rangle$$

2. 周期型境界条件に対する解

$$\langle x_j | p_J \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \exp \frac{i2\pi j J}{n} = \frac{1}{\sqrt{n}} \exp \frac{ip_J x_j}{\hbar}$$

$$E_I = E_0 - 2A \cos \frac{p_J a}{\hbar}$$

$$\left\{ p_J : \text{間隔 } \frac{2\pi\hbar}{L}, \text{ スパン } \frac{2\pi\hbar}{a} \right\}$$

3. 波束の運動 波束: 近接したいくつかの運動量状態の混合状態
4. 波束の速度

$$v = \left. \frac{dE}{dp} \right|_{p=p_J} = \frac{2Aa}{\hbar} \sin \frac{p_J a}{\hbar}$$

5. 不確定性原理 各運動量の近接の程度が、弱いと、波束は段々広がってしまう。したがって、安定な状態は、不確定性原理から、ある程度、空間に広がっている。

第6章

シュレディンガー方程式

古典力学での基本は、質点の運動方程式、つまりニュートンの運動方程式である。量子力学の世界でも、質点のような粒子が、連続空間でどのような振舞をするか興味深い。我々はすでに前章で、粒子が格子のような離散的な空間で、どのような運動方程式で記述されるかを学んだ。この概念を拡張すれば、連続空間での粒子の運動を記述する運動方程式を導ける可能性がある。

また、別の見方もある。量子力学の運動方程式の、右辺に現れるハミルトニアンオペレータは、エネルギーと深い関係にある。そこで、古典力学における粒子のエネルギーの式を手掛りにして、ハミルトニアンを推定することもできる。このようにして得られた方程式が、シュレディンガー方程式 (Schrödinger equation) である。

シュレディンガー方程式は、シュレディンガーの純然たる推測により得られた方程式ではあるが、この方程式を、水素原子などに適用し、その電子状態のとりエネルギーを計算してみると、実験結果と、驚くほど良い一致が得られた。また、この方程式が提案される前に、仮定されてきた、いくつかの仮説は、この方程式の出現によって、やっと、確証が与えられたといっても、過言ではない。また、化学結合などの具体的な描像も、この方程式によって確立され、量子化学の基礎ともなっている。

この方程式の限界も、知っておく必要がある。シュレディンガー方程式は、内部状態を持たない粒子、あるいは、内部状態があっても、その効果の無視できる粒子の、しかも粒子一個の運動を、記述する方程式なのである。このため、磁界中の電子の運動のように、スピンのかかわる運動は、正確には取り扱うことができない。また、相対論的效果のきいてくる、光速に近い速度で動いている粒子も、扱うことができない。しかし、先にも述べたように、現在のほとんどの量子力学的な世界観は、この方程式に立脚しており、ちょうどニュートンの運動方程式が、相対性原理が見いだされてからも、色褪せることのないよ

うに、極めて、重要な意味を持っている。

6.1 電子の位置基底状態と運動量基底状態

量子力学の世界でのスターは、何といても電子であろう。原子と原子の間で動き回って、原子同志の間に力を発生し、化合物を形成するのも、電子の働きであるし、金属や半導体中で動き回って、導電現象を起こさせるのも、電子である。また、レーザーの多くも、電子状態の変化を利用したものが多く、磁石の磁性も、主として、電子の持つ磁性に起因している。

シュレディンガーの方程式は、主としてこの電子の運動を扱う運動方程式といっても過言ではない。第4章で述べたように、電子はスピンという内部状態を有しているが、たとえば電界しかないような環境での運動を論ずるときには、スピンの影響はなく、空間の移動運動だけを考えればよい。それでは、電子の空間における状態は、どのように表したらよいのであろうか。

第1節のド・ブロイの関係で述べたように、運動量 p の状態は、空間的には、角波数 p/\hbar の波の形の確率振幅をとる。空間は三次元であるので、もう少し厳密に言うと、 x 、 y 、 z 方向に、運動量成分 p_x 、 p_y 、 p_z をとる状態の電子は、 x 、 y 、 z 方向に、それぞれ、 p_x/\hbar 、 p_y/\hbar 、 p_z/\hbar の角波数で変化する波の形の確率振幅をとる。

$$\langle x, y, z | p_x, p_y, p_z \rangle \propto \exp \frac{i(p_x x + p_y y + p_z z)}{\hbar}$$

同じように、一般の電子状態 $|\psi\rangle$ も、各位置 (x, y, z) をとる確率振幅 $\langle x, y, z | \psi \rangle$ で、表すことができる。本章では、こうした考え方から、電子状態の基底状態として位置基底状態 (location base states) $\{|x, y, z\rangle\}$ を考えれば良いことを示す。さらに、 $\{|p_x, p_y, p_z\rangle\}$ も、運動量基底状態 (momentum base states) と呼ばれる別の基底状態となること、を説明する。

電子状態を考えるときに、いきなり三次元空間の状態を考えず、前章で行ったようにまず、仮想的な x 方向の一次元空間の状態を考えるものとする。一次元空間というと、現実性が乏しいように思われるかも知れないが、三次元空間の電子状態でも、 y 方向の状態、 z 方向の状態が、すべて確定している場合、例えば、 $p_y = p_z = 0$ とすると、電子は x 方向の状態だけで理解できるのである。電子の内部状態であるスピンについては、本章でも考えないこととする。

いま、ある位置 (location) x にいることが確定している状態の電子、つまり、確率 100%

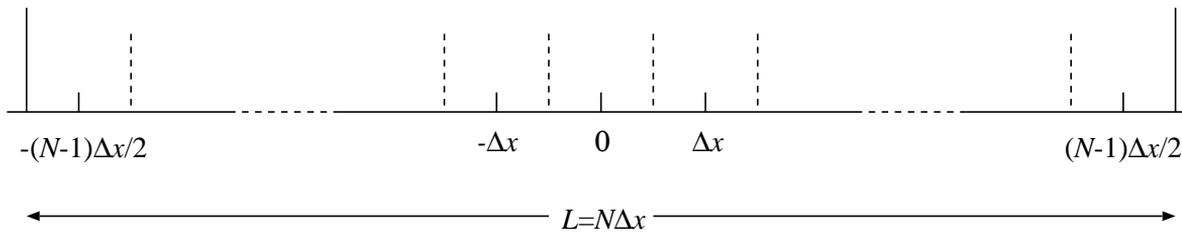


図 6.1 一次元空間の微小区間への分割

で x にいる電子は、明らかに位置 x にいて、他の位置 x' にはいないはずである。

$$\langle x' | x \rangle = \delta_{xx'}$$

つまり、状態の組 $\{|x\rangle\}$ には、式 2.1 で示したのと同様な、正規直交性が成立する。また、勝手な状態 $|\psi\rangle$ にある一個の電子が、一次元空間のどこにいるかを調べると、必ず、どこかにいるはずであり、各点で発見される確率の和は、1 となる。

$$\sum_x |\langle x | \psi \rangle|^2 = 1$$

この式は、式 2.3 に対応し、 $\{|x\rangle\}$ の完備性を表している。つまり、 $\{|x\rangle\}$ は、一組の基底状態を構成していることがわかる。

しかし、ある勝手な状態 $|\psi\rangle$ の電子が、一点 x に発見される確率は、一点というのが幅を持たないため、実は 0 になる。これを、厳密に定義するには、微積分で用いられる手法を、導入するとよい。つまり、一次元の空間を、 Δx ごとの微小区間 (incremental division) に分割する。さらに、図 6.1 に示すように、電子の存在し得る領域も、 $-\infty < x < \infty$ でなく、全長 L の領域に限定し、分割数 n を $L/\Delta x$ の有限の値としておく。

j を整数として、各区間の中心の座標 $x_j = i\Delta x$ とする。全領域をほぼ原点对称に配置するために、 n が奇数のときは、 $j = -(n-1)/2, \dots, (n-1)/2$ とする。 n が偶数のときは、やや非対称になるが、 $j = -(n/2) + 1, \dots, n/2$ とする。まとめて、今後は「 j は $\min < i \leq \max$ なる整数」と表現しよう。この一次元空間は、議論の最後で、 $\Delta x \rightarrow 0$ 、 $L \rightarrow \infty$ とすることにより、一次元無限長空間 (infinite space) を取り扱うことができる。なお、区間数が奇数であろうと、偶数であろうと、区間の総数は n であるが、 $\max - \min = n - 1$ である。

勝手な状態 ψ の電子が、図 6.1 の $x_j (= j\Delta x)$ を中心とする j 番目の区間に発見され

る確率、 $P(\psi \rightarrow x_j)$ に対応する確率振幅を、 $\langle x_j | \psi \rangle$ と表すことにしよう。

$\{|x_j\rangle : j \text{ は } \min < j \leq \max \text{ なる整数}\}$ に対し、式 6.1、式 6.1 に対応する正規直交性の式が得られる。

$$\langle x_j | x_k \rangle = \delta_{jk}$$

$$\sum_j |\langle x_j | \psi \rangle|^2 = 1$$

あるいは、式 6.1 は変形できて、式 2.7 の形の、完備性の式が得られる。

$$\sum_j |x_j\rangle \langle x_j| = \hat{I}$$

このような有限の大きさの区間に対する $\langle x_j | \psi \rangle$ は、有限の値を持ち、また、基底状態の総数 n も、有限であるから、第2章の議論がすべて利用できる。

ここで Δx を非常に小さくしてみよう。前述のように、ある勝手な状態 ψ の電子が、区間 $x_j \pm \Delta x/2$ に発見される確率、 $|\langle x_j | \psi \rangle|^2$ は、ほぼ、 Δx に比例して小さくなり、 $\Delta x \rightarrow 0$ で 0 になってしまう。このような場合、確率を Δx で割ってから、 $\Delta x \rightarrow 0$ とした確率密度 (probability density) の概念を用いると、これは、有限におさまるため、都合が良い。

$$PD(\psi \rightarrow x_j) = \frac{|\langle x_j | \psi \rangle|^2}{\Delta x}$$

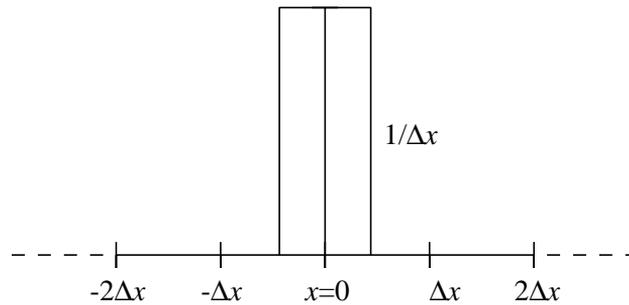
確率密度の概念に対応し、基底状態ベクトルを、次のように変えた概念が、よく用いられる。

$$|\underline{x}\rangle = \frac{|x_j\rangle}{\sqrt{\Delta x}} \quad (\text{ただし } x = x_j)$$

$\langle \underline{x} | \underline{x} \rangle = \Delta x$ となり、通常の状態ベクトルのように $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ とはならないことから、アンダーラインを付して区別した。この、 $|\underline{x}\rangle$ を用いると、確率密度は、以下のように簡単に表され、都合が良い。

$$PD(\psi \rightarrow x) = |\langle \underline{x} | \psi \rangle|^2$$

$\langle \underline{x} | \psi \rangle$ は、ある ψ という状態の電子が、空間の各点で、どのくらいの確率密度で発見

図 6.2 ディラックの δ 関数

されるか、に対応する確率密度振幅 (probability density amplitude) で、波動関数 (wave function) とも呼ばれる。多くの本では、スカラー量 $\langle \underline{x} | \psi \rangle$ を、 $\psi(x)$ と関数の形で表している。

$|\underline{x}\rangle$ は、直接、確率密度に対応し便利であるが、 $|x_j\rangle$ の、 $1/\sqrt{\Delta x}$ であるから、式 6.1 や式 6.1 のような形の、正規直交性と完備性の式を満たさない。 $|x_i\rangle = \sqrt{\Delta x} |\underline{x}\rangle$ の関係を用いると、式 6.1、式 6.1 より、次の関係が得られる。

$$\langle \underline{x} | \underline{x}' \rangle = \frac{\delta_{jk}}{\Delta x} \quad (\text{ただし } x = x_j, x' = x_k)$$

$$\sum_{\text{all } x} \Delta x |\langle x | \psi \rangle|^2 = 1$$

まず、前式右辺の $\delta_{jk}/\Delta x$ は、 Δx 有限のとき、 $x_j \neq x_k$ で 0、 $x_j = x_k$ のとき $1/\Delta x$ となる。これを、 $x_k - x_j (= x)$ を横軸として表したものを、図 6.2 に示す。 $\Delta x \rightarrow 0$ の極限で、この関数は、ディラックのデルタ関数 (Dirac delta function) と呼ばれ、 $\delta(x)$ と書かれる。

定義から明らかのように、次式が成立する。

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & (x \neq x') \\ \infty & (x = x') \end{cases}$$

無限大が発生するなど、数学的には、やや難解な概念であるが、分からなくなったときには、本来の定義 $\delta_{jk}/\Delta x$ に、立ち戻って考えるのがよい。 $\delta(x)$ の記号を用いると、 $\Delta x \rightarrow 0$ のとき、式 6.1 は、次のように表すことができる。

$$\langle \underline{x} | \underline{x}' \rangle = \delta(x - x') \quad (\text{連続系の正規直交性})$$

後式 6.1 の、左辺を良く眺めてみると、この形は、次に示す積分の定義の形になっている。

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sum_{\text{all } x} \Delta x f(x) \rightarrow \int dx f(x) \quad \left(\text{または} \int f(x) dx \right)$$

つまり、 $\Delta x \rightarrow 0$ で、式 6.1 は、次のように書替えられる。

$$\int dx |\langle \underline{x} | \psi \rangle|^2 = 1$$

あるいは、式 6.1 より次式のように変形できる。

$$\int dx |\underline{x}\rangle \langle \underline{x}| = \hat{I} \quad (\text{連続系の完備性})$$

本節は、式の変形に終始してしまっただが、要は、連続系 (continuous system) を表現するのに便利な、密度型の基底状態 $\{|\underline{x}\rangle\}$ の完全性の表現形式について、述べたものである。 $\{|\underline{x}\rangle\}$ が、基底状態であることから、どんな勝手な状態 ψ も、 $\langle \underline{x} | \psi \rangle$ を、すべての場所 x に対し与えることにより、一義的に表すことができる。量子力学では、電子の波動関数という言葉が、よく現れるが、それは、波動関数 $\langle \underline{x} | \psi \rangle (= \psi(x))$ を知ることにより、電子の状態 ψ を、正確にとらえることができるからである。

問題 6.1 ディラックの δ 関数に関する次の関係を証明せよ。

1. $\delta(-x) = \delta(x)$
2. $\int dx \delta(x - x') = 1$
3. $\int dx \delta(x - x') f(x) = f(x')$

ヒント $\delta(x)$ や $\int dx$ の定義に戻って、考えよ。

次に $L \rightarrow \infty$ としてみよう。量子力学で扱う電子状態の多くは、原子核の周りに局在し

ている。従って、考えている領域の大きさ L を拡げても、確率密度は有限の値をとるため、前述の議論は、何の影響も受けない。つまり、式 6.1 や式 6.1 で、 $L/2$ を、単純に ∞ の記号で置き換えるだけですんでしまう。しかし、空間全体にほぼ一様に広がっているような電子状態では、そうはいかない。つまり、 L の増大と共に、確率密度は、 $1/L$ で減ってしまうからである。このような場合は、前述の、 $\Delta x \rightarrow 0$ の議論のときと同様に、基底ベクトルを変形したものを、用いればよい。

$$|\bar{x}\rangle = \sqrt{L}|x_j\rangle$$

ただ、無限大の空間全体に、ほぼ一様に、広がってしまったような電子状態は、理論的には意味があっても、発見する確率密度が 0 となり、現実には意味をなさない。このため、上式のような基底ベクトルは、ほとんど用いられない。理論上、空間全体に広がった関数がどうしても必要な場合にも、次節で述べるように、全空間を十分大きな L に限ったまま、議論することが多い。

以上、一次元空間での電子状態を考えたが、以上の議論を、三次元に拡張してみよう。相変わらずスピン状態のことを考えないことにすれば、この作業は、一次元の場合の簡単な拡張であることができる。まず、一次元の場合、 $x_j \pm (\Delta x/2)$ の区間に電子の存在する確率や確率振幅を、考えたように、縦 L_x 、横 L_y 、高さ L_z の三次元空間を考える。それを、それぞれ n_x 、 n_y 、 n_z に、等分する。こうしてできた、図 6.3 に示す $\Delta x \Delta y \Delta z$ の微小直方体に、電子の存在する確率や確率振幅を考える。 ψ の状態の電子がこの直方体中にある確率振幅を $\langle x_i, y_j, z_k | \psi \rangle$ で表すと、確率 $|\langle x_i, y_j, z_k | \psi \rangle|^2$ はほぼ直方体の体積 $\Delta x \Delta y \Delta z$ に比例する。従って $\Delta x, \Delta y, \Delta z \rightarrow 0$ に対しては、一次元のときと同じように、確率密度を考える必要がある。三次元の場合には、次の確率密度振幅を基底状態としてを考えれば良いことがわかる。

$$|x, y, z\rangle = \frac{|x_j, y_k, z_m\rangle}{\sqrt{\Delta x \Delta y \Delta z}}$$

問題 6.2 $|x, y, z\rangle$ に対する正規直交性と完備性の式を求めよ。

答え

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

$$\int dx dy dz |x, y, z\rangle \langle x, y, z| = \hat{I}$$

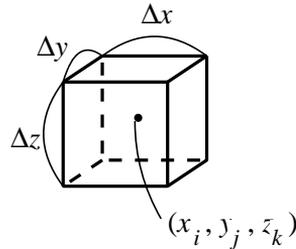


図 6.3 三次元空間での確率密度振幅 $|\underline{x}, \underline{y}, \underline{z}\rangle = |x_j, y_k, z_m\rangle / \sqrt{\Delta x \Delta y \Delta z}$

運動量確定状態は、 $\{|p_J\rangle : J \text{ は } \min \leq J \leq \max \text{ を満たす整数}\}$ と領域を限れば、前章でも示したように基底を構成する。つまり、正規直交性と完備性が成立する。

$$\langle p | p' \rangle = \delta_{pp'}$$

$$\sum_J |p_J\rangle \langle p_J| = \hat{I}$$

$L \rightarrow \infty$ としても、位置に対する確率密度振幅の定義は変えなくても、実用上差し支えないことを、前節の終わりに述べたが、運動量に対しては、少し工夫が必要なる。それは、次式で与えられる p_J と p_{J+1} の間隔が、 $L \rightarrow \infty$ で無限に小さくなっていってしまうからである。

$$\Delta p = \frac{2\pi\hbar}{L}$$

こうした場合の対策は、すでに $\Delta x \rightarrow 0$ のときに、経験済みである。同様にして、基底状態 $|p_J\rangle$ のかわりに、次のベクトルを、定義しよう。

$$|\underline{p}\rangle = \frac{|p_J\rangle}{\sqrt{\Delta p}} \quad (\text{ただし } p = p_J)$$

この概念を用いると、勝手な状態 $|\psi\rangle$ が、ある運動量をとる確率密度が、簡単に表される。

$$PD(\psi \rightarrow p) = |\langle \underline{p} | \psi \rangle|^2$$

また、空間の連続型基底状態と同様に、正規直交性や完備性も、次のようになる。

$$\begin{aligned} \langle \underline{p} | \underline{p}' \rangle &= \delta(p - p') \\ \int dp |\underline{p}\rangle \langle \underline{p}| &= \hat{I} \end{aligned}$$

なお、 $|\underline{p}\rangle$ を $|\underline{x}\rangle$ で表すと、次のようになる。

$$\langle \underline{x} | \underline{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \frac{ipx}{\hbar}$$

問題 6.3 式 6.2 を証明せよ。

ヒント 式 5.3 の両辺を $\Delta x \Delta p (= 2\pi\hbar/n)$ で割れ。

6.2 不確定性原理

$\langle x_j | \psi \rangle$ から $\langle p_j | \psi \rangle$ を求める変換を、フーリエ変換 (Fourier transformation)、逆を、フーリエ逆変換 (Fourier inverse transformation) と言う。一口で言うと、 $\langle p_j | \psi \rangle$ は、 $\langle x_j | \psi \rangle$ の中にどのくらい周期的な部分があるか、を示す指標となっている。例えば、図 5.4 (a) では、 x_j の変域にちょうど一波入っているので、 $\langle p_j | \psi \rangle$ には $J = \pm 1$ に成分が現れている。また (b) の場合は、三つの波があり、かつ平均値が 0 でないので、 $J = \pm 3$ と $J = 0$ に成分が現れる。(b) から (c) のように x 軸上でゆらぎの原点がずれると、 $\langle p_j | \psi \rangle$ の成分の位相がずれる。しかし、その確率には影響しないことがわかる。 $\langle x_j | \psi \rangle$ が急激に変化すると、短い波長、つまり波数の大きな成分が増える。例えば、(d) のように、原点にだけ局在するような $\langle x_j | \psi \rangle$ に対しては、あらゆる $\langle p_j | \psi \rangle$ 成分が存在する。(e)、(f) と、存在確率のある領域が増えていくと、 $\langle p_j | \psi \rangle$ は一箇所にかたまる傾向が出てくる。

このように、 x 空間での散らばり具合と、 p 空間での散らばり具合には、逆の相関がありそうである。観察で、この関係を求めてみよう。(d)、(e)、(f) で、 x の拡がり具合はそれぞれ Δx 、 $3\Delta x$ 、 $5\Delta x$ であるのに対し、 p の拡がり具合は $9\Delta p$ 、 $3\Delta p$ 、 $2\Delta p$ 程度で

あるから、 $(x \text{ の拡がり}) \times (p \text{ の拡がり}) = n\Delta x\Delta p = 2\pi\hbar$ が、ほぼ成立する。(a)、(b)、(c)を見ると、この積はもっと大きくなるようであり、一般に $(x \text{ の拡がり}) \times (k \text{ の拡がり}) > 2\pi\hbar$ の関係が成立しそうである。

この関係は、実は、量子力学にかかわらず、フーリエ変換で結ばれるあらゆる二つの変数の間に、厳密に成立する関係であるが、これを、量子力学の世界の用語で表してみよう。ある状態の電子の位置を観測すると、 x_2 と観測されたり、また改めて同じ状態を観測すると、 x_{-3} と観測されたりして、観測結果にはバラつきが生じる。 x_i を観測する確率が、 $|\langle x_j | \psi \rangle|^2$ で与えられることから、 $\langle x_j | \psi \rangle$ の x の拡がりとは、 x の観測結果のバラつきに対応していることがわかる。(ここで注意しておきたいのは、観測により、電子には多大の影響が与えられてしまうことである。例えば、 x_2 にいると観測された後の電子は、決して前の状態と同じ状態では有りえない。このことは偏光実験で、 y 偏光板で y 偏光と確認された光子が、前の状態と変わってしまっていることから推察される。同様にして、同じ状態の運動量を観測すると、その観測結果はバラつき、 $\langle p_j | \psi \rangle$ の p の拡がりに対応してくる。つまり、おおよそ次の式が成立する。

$$(x \text{ の観測値のバラつき}) \times (p \text{ の観測値のバラつき}) > 2\pi\hbar$$

この関係を、ハイゼンベルグの不確定性原理 (Heisenberg uncertainty principle)、あるいは単に不確定性原理 (uncertainty principle) と呼ぶ。 x の観測値の確定するような状態にある電子は、運動量のバラつきが極めて大きく、逆に p の観測値の確定するような状態にある電子は、位置のバラつきが、極めて大きいことを示している。古典力学では、質点の位置と運動量は、つねに同時に与えられており、また同時に観測も可能であるのに対し、大きな違いがある。

問題 6.4 野球のボールが、0.1 nm (ほぼ原子間隔ぐらい) のバラつき内で観測される状態にあるとして、運動量のバラつきは、ほぼどの程度となるか。また、質量 0.1 kg、速さ 30 m/s ぐらいとしたときの運動量に対し、このバラつきはどれほどとなるか。

答え 6.6×10^{-24} kgm/s、 2×10^{-24} 倍でありこのバラつきは検出不可能である。

普通の大きさを持つ物体では、不確定原理はこのように重要な意味を持たないが、原子分子の大きさになってくると、大きな意味を持つてくる。例えば、原子の大きさは、不確定原理からきまってくるのである。原子は原子核と電子から成り立っている。例えば、水

素原子の場合は、 $+e$ の電荷を有する陽子を原子核とし、 $-e$ の電荷を有する電子一個が、そのまわりを運動している。原子核は重いので、ほぼ停まっているが、電子は、原子核の作るクーロン力に引かれて、そのまわりを運動をする。その静電ポテンシャルエネルギーは、電子の運動する領域の半径を a 程度とすると、 $-e^2/4\pi\epsilon_0 a$ 程度となる。この値は、 a が小さい程小さくなるので、半径が小さい程安定であるように見える。一方、原子のエネルギーには、電子の運動エネルギー $mv^2/2 = p^2/2m$ も関与してくるため、 p も小さい程安定となる。しかし、量子力学の世界では不確定性原理が成立し、 a を小さくすると p は小さくできず、 a と p は競合関係になってしまう。従って、 $ap \cong 2\pi\hbar$ の条件で、運動エネルギーと位置のエネルギーの和が、最少となる付近で、原子の大きさがほぼ決まることとなる。

問題 6.5 水素原子の凡その半径を求めてみよ。

答え $a \cong 4\pi\epsilon_0/m(2\pi\hbar/e)^2 = 2 \text{ nm}$ 。 $4\pi\epsilon_0/m(\hbar/e)^2 = 0.053 \text{ nm}$ は、ボーアの原子半径 (Bohr atomic radius) と呼ばれ、原子半径の基準となっている。なお、nm は 10^{-9} m のこと。上述の考察は大変粗いもので、 2π とか $(2\pi)^2$ 程度のずれは入り得る。実際の水素原子の大きさは、ボーアの原子半径程度である。

6.3 自由粒子のシュレディンガー方程式

このような空間を、粒子はどのようにして運動するのだろうか。量子力学における運動は、ここでも、各区間に粒子のいる確率振幅の変化という形で、記述される。そこで、いつものように、まず、粒子がある状態にだけいる、つまり、ある区間において、他の区間への遷移が禁止されているときに、どれだけのエネルギーを持つかを考え、次に他の状態、つまり他の区間へ遷移する確率振幅を考える。空間を、一様とすれば、各区間にいるときのエネルギーは、区間によらず一定である。これを、 E_0 で表そう。また、他の区間への遷移は、簡単のために、すぐ隣の区間への遷移だけを考え、それを $-A$ としよう。負符号には、あまり深い意味はなく、ただ、後の説明とのつながりのためにいれている。また、 A も実数としておく。

この話は実は、前章の一次元格子の設定と全く同じである。ただ、格子間隔 (lattice constant) a が、ここでは、 Δx になっているだけである。そこで、ここで取り扱ってい



図 6.4 一次元格子の運動量とエネルギーの関係

る空間の、端の処理も、前章と同じようにしよう。つまり、空間の一番右端は、空間の一番左端にこっそりつながっているという、周期型境界条件を採用しよう。すると、前章の結果がすべて、利用できることとなる。

ここに、前章で示した運動方程式とその結果を、改めて示そう。ただし、 a は、 Δx に書き替えてある。まず、運動方程式は、次のようになる。

$$i\hbar \frac{d\langle x_j | \psi(t) \rangle}{dt} = E_0 \langle x_j | \psi(t) \rangle - A \langle x_{j-1} | \psi(t) \rangle - A \langle x_{j+1} | \psi(t) \rangle$$

また、この運動方程式の固有解は、次式で与えられる。

$$\langle x_j | p_J \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \exp \frac{ip_J x_j}{\hbar}$$

$$E_J = E_0 - 2A \cos \frac{p_J \Delta x}{\hbar}$$

また、式 6.3 の運動量とエネルギーの関係を、図 6.4 に、図示する。これらの結果を利用して、自由空間中の粒子の運動方程式を、推定してみよう。

作業を始める前に、古典的な自由粒子の、運動量とエネルギーの関係を、求めておこう。ポテンシャルエネルギーの変化しないときの、粒子のエネルギーは、運動エネルギーだけで与えられるから、粒子の質量を m として、次のようになる。

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

ここで、運動量 $p = mv$ の関係を利用した。この関係を、図 6.5 に示す。量子力学的な



図 6.5 自由粒子の運動量とエネルギーの関係

自由粒子 (free particle) の場合も、その状態が運動量確定状態であれば、そのエネルギーは、おそらく、同じ式で与えられるであろう。そこで、この二つの図 6.4 と 6.5 に示した、運動量とエネルギーの関係を、 $\Delta x \rightarrow 0$ の極限で、一致させることができれば、自由粒子に対する運動方程式を求められそうである。

まず、次の条件により、図 6.4 の曲線が、原点を通るようにする。

$$E_0 = 2A$$

次に、単純に、 $\Delta x \rightarrow 0$ としてみよう。運動量空間の間隔 Δp は $2\pi\hbar/L$ で一定であるが、大きさ L_p は $2\pi\hbar/\Delta x$ であるので、だんだん大きくなっていく。その結果、図 6.4 は、縦の大きさ $2A$ は一定のまま、ひたすら横方向に引き伸ばされることになる。これでは、とても、図 6.5 の関係と、一致させることは、不可能であろう。そこで、 $2A$ も大きくしていくと、うまく重ねることが、できるかもしれない。次式を利用するが、 $O(\theta^4)$ は θ^4 以上の高次の冪級数を示している。

$$\cos(\theta) = 1 - \frac{\theta^2}{2} + O(\theta^4)$$

式 6.3 の運動量とエネルギーの関係は、次のようになる。

$$E_J = E_0 - 2A \cos \frac{p_J \Delta x}{\hbar} = 2A - 2A \left(1 - \frac{(p_J \Delta x)^2}{2\hbar^2} + O(\Delta x^4) \right) = 2A \frac{(p_J \Delta x)^2}{2\hbar^2} - 2AO(\Delta x^4)$$

ここで、将来 Δx を変化していくため、 $O()$ の内部は簡略化して示した。次式のように、 $2A$ を Δx の二乗に反比例させて、大きくすることにする。

$$2A = \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2}$$

上式はさらに、次式のように変形される。

$$E_J = \frac{p_J^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} O(\Delta x^4)$$

第二項は $O(\Delta x^2)$ であるから、 $\Delta x \rightarrow 0$ に対し、第二項は無視できるようになるため、上式は完全に式 6.3 の自由粒子のエネルギーに一致することがわかる。つまり、図 6.4 で、底の形をなるべく合わせるようにして、運動量の範囲を、左右に限りなく拡げた極限を考えればよい。こうすることにより、余弦関数の上に凸な部分は、左右に散っていってしまい、中央の二乗的なところだけが、見えるようになり、図 6.5 に一致するわけである。

運動量とエネルギーの関係が一致するような、 A や E_0 の選び方が、見つかったので、次は、運動方程式が、 $\Delta x \rightarrow 0$ で、どのような形になるかを、検討しよう。その前に、基底状態 $|x_j\rangle$ を、連続的な基底状態に、変更しておこう。このプロセスは、前節で詳しく述べたが、要するに、以下のように $\langle x|\psi\rangle$ のような確率密度振幅 (波動関数 (wave function) ともいう) を定義し、その絶対値の二乗が、確率密度に対応するように、工夫することである。

$$|x\rangle = \frac{|x_j\rangle}{\sqrt{\Delta x}}$$

さて、運動方程式 6.3 の E_0 および A を、式 6.3、6.3 を用い書き替え、さらに全体を $\sqrt{\Delta x}$ で割って、確率密度振幅にしよう。

$$i\hbar \frac{d\langle x|\psi(t)\rangle}{dt} = \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} (2\langle x|\psi(t)\rangle - \langle x - \Delta x|\psi(t)\rangle - \langle x + \Delta x|\psi(t)\rangle)$$

ここで、 $x_j \rightarrow x$ 、 $x_{j+1} \rightarrow x + \Delta x$ 、 $x_{j-1} \rightarrow x - \Delta x$ と書き直している。さらに、確率密度振幅 $\langle x|\psi(t)\rangle$ などを、 t にも依存し、 x にも依存することをはっきりさせるために、 $\psi(x, t)$ などのように、関数形で表現する。

$$i\hbar \frac{d\psi(x, t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} [\psi(x + \Delta x, t) + \psi(x - \Delta x, t) - 2\psi(x, t)]$$

ただし、右辺の項の順番を意識的に変更してある。ところで、 $\Delta x \rightarrow 0$ とすると、この式の右辺の $[\]$ 内は、 $\psi(x, t)$ の x による二階微分になる。ここで、次の関係を利用した。

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} - \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} \right]$$

そこで、次式が得られる。

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

ここで、 t による微分と、 x による微分の、二種類の微分が現れたため、 d の代わりに ∂ を用いた (∂ は、他の変数を固定して、ある変数だけで微分することを意味している)。あるいは、もとの形で書くと、次のようになる。

$$i\hbar \frac{\partial \langle \underline{x} | \psi(t) \rangle}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \langle \underline{x} | \psi(t) \rangle}{\partial x^2}$$

これが、自由粒子 (free particle) のシュレディンガー方程式である。

ちなみに、この式の右辺の $|\psi(t)\rangle$ を $|\underline{x}'\rangle$ とおくと、連続系 (continuous system) のハミルトニアンが得られる。

$$\hat{H}_{xx'} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \langle \underline{x} | \underline{x}' \rangle}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \delta(x - x')}{\partial x^2}$$

6.4 自由粒子のシュレディンガー方程式の解

前節で得られた運動方程式が、本当に、正しいものかを、確かめるのは、それほど容易なことではない。実際、この方程式の正当性は、水素原子中の電子の振舞を解くことによって、初めて、確かめられたのであり、そのためには、力のある場合の、シュレディンガー方程式を導いてからとなる。これまでに学んだ知識だけからは、ほとんど何も言えないが、少なくとも、巨視的な極限で、古典的な粒子像と一致するかどうかだけは、確かめることができる。そのために、自由粒子のシュレディンガー方程式を、解いてみよう。

いつものように、定常状態から、開始する。

$$\langle \underline{x} | \psi(t) \rangle = f(x) \exp \frac{-iEt}{\hbar}$$

このようにおくと、シュレディンガー方程式は、次のようになる。

$$Ef(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2}$$

このように、 x 方向に一様な方程式は、 x の指数関数的な解が、期待できる。

$$f(x) = c \exp \frac{ipx}{\hbar}$$

なる解を仮定してみよう。この式を、上式へ代入する。

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

この式が満足されるような解が、運動方程式の一つの解となることがわかる。さらに、この解は、もう一つ、境界条件も満たさなければならない。周期型境界条件を考えているから、 $x = L/2$ と $-L/2$ の解は、一致しなければならない。

$$c \exp \frac{ipL}{2\hbar} = c \exp \frac{-ipL}{2\hbar}$$

つまり、次式が成立する。

$$\exp \frac{ipL}{\hbar} = 1$$

この結果、 pL/\hbar は、 2π の整数倍でなければならない。

$$p = \frac{2\pi\hbar}{L} I \quad (I \text{ は整数})$$

これが、運動量の満たすべき条件である。式 6.4 と 6.4 の関係を、図 6.6 に示す。固有状態の総数 n は、 I に制限がないことから、無限大である。これは、全長 L の領域を、無限に短い区間 Δx に分割した結果、 $n = L/\Delta x \rightarrow \infty$ になることから、当然の結果である。

式 6.4 の c を、決定しよう。 c は、 $|\psi(t)\rangle$ の正規条件から決定できる。

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} dx \langle \psi(t) | \underline{x} \rangle \langle \underline{x} | \psi(t) \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} dx |c|^2 = L|c|^2 \quad (= 1)$$

これより、 $c = 1/\sqrt{L}$ となる。つまり、固有状態は、次式で与えられる。

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp \frac{i(px - Et)}{\hbar}$$



図 6.6 周期型境界条件を満たす有限領域上で自由粒子のとり固有値

さて、式 6.4 から、粒子が、空間の各位置に存在する、確率密度を、求めてみよう。

$$p(\psi(t) \rightarrow x) = \frac{1}{L}$$

このように、場所によらず、一定となる。そこには、何の確率密度の変動も、運動も見られない。しかし、この状態の運動量を測ると、確かに、 p となり、また、その運動エネルギーは、確かに、 $p/2m$ となるのである。こうした、位置としての運動が見られないのに、運動量は持っているという、粒子の状態は、古典論では、経験することができず、理解に苦しむかも知れない。時間とともに、各位置に存在する確率密度が、変化するようにするには、前章でも示したが、異なるエネルギーを持つ複数の定常状態を、いくつか組み合わせさせた状態で、実現することができる。

例えば、運動量 p_1 と p_2 の二つの状態を、 $1/2$ ずつ組み合わせさせた状態を、考えてみよう。

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \exp \frac{i(p_0x - E_0t)}{\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2L}} \exp \frac{i(p_1x - E_1t)}{\hbar}$$

この状態が、各位置確定状態をとる確率、つまり、存在確率は、次のようになる。

$$p(\psi(t) \rightarrow x) = \frac{1}{L} \left[1 + \cos \frac{(p_1 - p_0)x - (E_1 - E_0)t}{\hbar} \right]$$

図 6.7 に示すようになる。その波形は、確かに、次の速度で動いていくことがわかる。

$$v = \frac{E_1 - E_0}{p_1 - p_0} = \frac{p_1^2/2m - p_0^2/2m}{p_1 - p_0}$$

このように、運動量が確定した状態は、一切、空間的運動を示さないのに対し、空間的運動を示す状態は、逆に、運動量確定状態が混ざってしまう。



図 6.7 混合状態は動く

これは、実は、ハイゼンベルグの不確定性原理 (Heisenberg uncertainty principle) と深い関係を持っている。運動量が確定していると、運動量の拡がりは、0 である。したがって、位置の拡がりは、無限大、つまり、空間内のどこにいるのかが、全く確定しなくなってしまうのである。また、運動量の拡がりが Δp ぐらいであると、粒子の空間的な拡がりは、もっとも小さいときで、 $2\pi\hbar/\Delta p$ ぐらいとなるが、これが、図 6.7 の波形の周期となっている。

なお、式 6.4 で、 p_0 を p と表し、 p_1 を $p + \Delta p$ と表してみよう。 Δp が非常に小さいときには、次のようになり、古典的な粒子の速度と一致する。

$$v = \frac{(p + \Delta p)^2/2m - p^2/2m}{\Delta p} \rightarrow \frac{d}{dp} \left(\frac{p^2}{2m} \right) = \frac{p}{m}$$

この意味で、粒子の速度は、エネルギーと運動量の関係から、計算することができ、しばしば、以下のように表されることは、前章でも述べた通りである。

$$v = \frac{dE}{dp}$$

さらに、古典的な粒子像に近い、空間的にもある程度まとまっていて、運動量もある程度まとまった状態を作るには、もっと沢山の、ある運動量付近の運動量確定状態を、集めてくればよい。集め方には、いろいろあるが、例えば、図 6.8 のように、各運動量をとる確率振幅がガウス分布 (Gauss distribution) で与えられるように、集めると、空間的にも、確率振幅がガウス分布となることが、知られている。また、このようなときに、位置の拡がりと、運動量の拡がりの積が、最も小さくなり、 $2\pi\hbar$ となる。この例に示したような、ある運動量付近の、いくつかの運動量確定状態の集まりで作られる状態が、空間に作

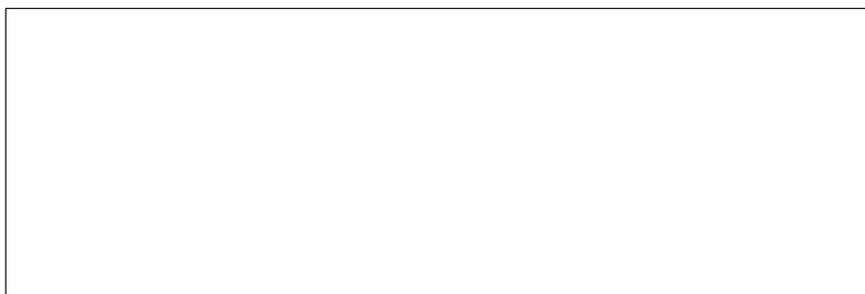


図 6.8 波束の運動量分布と空間分布

る波形は、およそ式 6.4 の速度で移動し、波束 (wave packet) と呼ばれる。

この波束の運動は前章の、格子空間の波束の運動とほとんど同じであり、時間とともに、ほぼ一定の速度で移動していく。その速度は、波束を構成しているいくつかの運動量確定状態のうち、任意の二つの作る合成波の速度、式 6.4 または 6.4 で推定できる。しかし、運動量の分布が小さいときには、どの二つの合成波も、ほぼ同じ値をとるから、結局、式 6.4 を中心の運動量付近で計算すればよいこととなる。中心の運動量を p とすれば、波束の速度は、 p/m となり、波束は古典的な速度で移動することになる。

永い時間が経過すれば、波束にはいくつかの僅かに異なる速度が混ざっているから、波束の形は、段々くずれていってしまう。しかし、野球のボールのような、身近な物体の場合には、後の問題でわかるように、波形のくずれるのに天文学的な時間がかかる。

以上のように、波束により、古典的粒子像にかなり近いものを作ることに成功したが、これ以上どんなに工夫しても、理想的な古典的粒子像の持つ性質である、空間的にも質点のようで、かつ運動量も確定している状態を作ることはできない。それは、前にも述べたように、不確定原理に背くことになるからである。しかし、身近な物体では、これらの現象は、ほとんど問題とならない。例えば、ボールをどんなにしっかりと握っても、その位置を、原子間隔の程度まで確定することは、不可能である。また、仮に、その程度まで位置を確定しても、第 1 章の問題 1.9 で計算したように、運動量のバラつきは、ボールの運動量に対し、観測不可能なくらい小さい。これらの現象は、いずれも、原子、電子のような極端に小さな粒子でしか問題とならないことを、思い起こしてほしい。

問題 6.6 問題 1.9 の結果によると、 0.1nm ぐらいの範囲で、位置のボケている、ほぼ静止している野球のボールは、 $6.6 \times 10^{-24} \text{ kgm/s}$ ぐらいの運動量のボケを持っている。質量 0.1kg として速度のボケを求め、最初の位置から、最大 1 mm ボケるまでの時間を求

めよ。

答え 1.5×10^{19} s. およそ、5000 億年。

6.5 ポテンシャル中の粒子の運動方程式

いままでは、自由粒子の運動を、調べてきた。それでは、力の働いているときの粒子の運動は、どのようになるだろうか。まず、力の働いているときの運動方程式を求めよう。古典力学で力の働く系を扱うには、力が入ったニュートンの運動方程式 $F = ma$ を用いるか、エネルギーの式にポテンシャルエネルギーの項を入れるかのいずれかの方法がとられる。後者は、粒子が、ポテンシャルエネルギーの高い方へ、移動しようとする、全エネルギーの保存則から、運動エネルギーが減少し、だんだん速度が落ちていく。これは、ポテンシャルエネルギーの高い方から、力が働いていることに対応するという考え方である。量子力学での運動方程式は、エネルギーに深い関係を持つハミルトニアンオペレータを用いて記述されるから、力は、ポテンシャルエネルギーの形で導入される。

再び、本章の最初に戻って、一次元格子上の粒子の運動方程式を見てみよう。

$$i\hbar \frac{d\langle x_j | \psi(t) \rangle}{dt} = E_0 \langle x_j | \psi(t) \rangle - A \langle x_{j-1} | \psi(t) \rangle - A \langle x_{j+1} | \psi(t) \rangle$$

ポテンシャルエネルギーを考えるとということは、 E_0 が、位置により変動するというこで導入できる。つまり、右隣の方が、エネルギー E_0 が高ければ、そちらの方への遷移が起こり難くなり、あたかも右から力を受けているような運動をするはずである。そこで、上式の E_0 のかわりに、 $E_0 + V(x_j)$ とおいて、ポテンシャルエネルギー $V(x_j)$ の効果を、導入してみよう。

$$i\hbar \frac{d\langle x_j | \psi(t) \rangle}{dt} = (E_0 + V(x_j)) \langle x_j | \psi(t) \rangle - A \langle x_{j-1} | \psi(t) \rangle - A \langle x_{j+1} | \psi(t) \rangle$$

この式からスタートして、前節と同じように、空間の連続化を行うと、結局、運動方程式の右辺に、 $V(x_j) \langle x_j | \psi(t) \rangle$ 、つまり、 $V(x)\psi(x, t)$ が現れるだけで、前節とほとんど同じ式が得られる。

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

または、同じ内容の、次式が得られる。

$$i\hbar \frac{\partial \langle \underline{x} | \psi(t) \rangle}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \langle \underline{x} | \psi(t) \rangle}{\partial x^2} + V(x) \langle \underline{x} | \psi(t) \rangle$$

これが、一般のシュレディンガー方程式である。

シュレディンガー自身は、もう少し直感的な方法で、この式を導いたようである。それは、対応原理と呼ばれるものである。古典力学のエネルギー保存則 (energy conservation law) は、よく知られた次式で与えられる。

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

ここで、 E や p は、量子力学では、どういった概念に対応しているかを、考えてみよう。まず E は、定常状態を求めるとき、 $i\hbar \frac{d}{dt}$ を、しばしば E に置き換えることから、この微分演算に対応していることが想像できる。もう少し厳密にいうと、エネルギーが E で運動量が p の状態に対する確率振幅は、次式で与えられるが、これから、 E を出すには、これを時間 t で微分し、 $i\hbar$ を掛ければよいことがわかる。

$$\exp \frac{i(px - Et)}{\hbar}$$

同様に、 p は上式を位置 x で微分し、 $-i\hbar$ を掛ければよい。そこで、ざっとした話、次のような対応が成立しそうである。

$$E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad p \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad V(x) \leftrightarrow V(x)$$

これが、対応原理 (correspondence principle) と呼ばれるものである。

この対応原理を、エネルギー保存則の式 6.5 に、形式的に適用すると、となるが、これは、微分演算だけが、独り歩きしているので、適当な関数 $\psi(x, t)$ を付けると、シュレディンガーの方程式 6.5 が得られる。

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

このように、対応原理を用いた手法は、かなり形式的であり、物理的描画像とは結び難いが、量子力学の概念がまだ良く分からなかった時代には、大変有力な手法であった。また、我々も、古典力学の概念、たとえば角運動量などが、量子力学ではどんな概念に対応するのかを、推定する際にも、便利な手法である。

シュレディンガー方程式は、対応原理からも分かるように、エネルギーの保存則と深い関係を持っている。ところが、古典力学でエネルギーが保存される場合、つまり、力がポテンシャルエネルギーで与えられるようなものは、保存力と呼ばれる力に対するものだけである。シュレディンガー方程式は、このような保存力場 (conservative force field) の中の粒子の運動しか扱えない。それでは、摩擦力のような非保存力場 (dissipative force field) に対する運動方程式は、どのような形で与えられるのであろうか。実は、量子力学では、非保存力場に対する運動方程式は、用意されていない。摩擦 (friction) のような現象も、ミクロな立場で見ると、物体の運動エネルギーが、その物体の滑った板を作っている原子の振動エネルギーに移っただけである。つまり、運動に関与しているすべての物体のエネルギーを合計すれば、あらゆる運動は保存的であると言える。このような立場から、量子力学では、通常、保存的な運動方程式だけを用い、摩擦のような現象を扱いたい場合は、多粒子の問題として取り扱う。なお、保存的な系という言葉と、ハミルトニアンがエルミートオペレータであるということは、実は、等価である。

6.6 ポテンシャル中の粒子の定常状態

ポテンシャル中の粒子の運動方程式を、解いてみよう。まず、本節では、定常状態の解を求める。いつものように、以下のように置く。

$$\psi(x, t) = f(x) \exp \frac{-iEt}{\hbar}$$

その結果、シュレディンガー方程式は次のようになる。

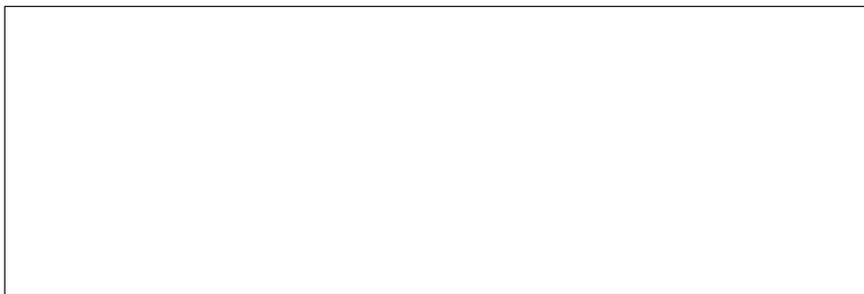
$$Ef(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + V(x)f(x)$$

t に関する微分が消えたので、変微分記号 ∂ は常微分記号 d に置き換えている。

この方程式は、 $V(x)$ が特定な形の場合は、解析的に解くことができる。しかし、 $V(x)$ の形が、具体的に与えられていても、必ずしも、いつも解析的に解けるとは限らない。そこで、ここでは勝手な形の $V(x)$ に対し、視察により直観的に、概略の解を求める方法を示そう。

まず、上式を変形する。

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)f(x)$$

図 6.9 $f(x)$ の曲がり具合

この式の意味することは、 $V(x)$ と E と $f(x)$ が与えられれば、その位置での $f(x)$ の二次の微係数が、計算できるということである。 $V(x) - E > 0$ であると、二次微係数の符号は、 $f(x)$ の符号と同じになる。つまり、図 6.9 のように、 $f(x) > 0$ のときは、上向きに曲がり、 $f(x) < 0$ のときは、下向きに曲がり、常に、 x 軸から離れる方向に曲がる。この曲がり方は、 $f(x)$ が 0 に近づくほど減ってくるので、場合によっては、横軸に指数関数的 (exponential) に漸近する形が得られる。一方、 $V(x) - E < 0$ であると、二次微係数の符号は、 $f(x)$ の符号と逆になる。(a) のように、 $f(x) > 0$ のときは、下向きに曲がり、 $f(x) < 0$ のときは、上向きに曲がるようになる。そこで、 $f(x)$ は正弦波的 (sinusoidal) に、振動することとなる。

以上の点を考慮して、 $V(x)$ が図 6.10 のように与えられているときの、 $f(x)$ の変化を求めてみよう。当然 E の値によって、変化の様子は異なるが、まず、 E が $V(x)$ の底よりも低い場合を、考えてみよう。 $V(x) - E$ は、 x によらず常に正となるので、 $f(x)$ は、全領域で横軸から離れる方向へ、曲がっていくこととなる。このような解は、非常に始末に悪い。と言うのは、このような解の絶対値の二乗を全空間で積分すると、その結果は、どう工夫しても、無限大となってしまふからである。つまり、粒子を各位置に発見する確率密度の和を、1 とすることが、どうしても出来ないこととなる。このことから、エネルギー固有値 E は、必ず $V(x)$ の底よりも、大きくなければならないことが、わかる。

エネルギー E が $V(x)$ の底よりも、ある程度大きくなると、 $f(x)$ の変化には、指数関数的な変化と正弦波的な変化の両方が、混じってくる。 $f(x)$ の絶対値の二乗の積分が 1 にならねばならないから、少なくとも、 $f(x)$ の左の裾は、左にいくほど、指数関数的に横軸に漸近していなければならない。

図 6.10 井戸型ポテンシャル中での $f(x)$ の曲がり具合

6.7 ポテンシャル中の粒子の運動

ポテンシャル $V(x)$ が簡単な形の場合には、前節の計算をより厳密に行なうことができる。例えば方形井戸型ポテンシャル (rectangle potential well) の場合には波動関数を解析的に計算することができる。これは、 $L/2 < x < L/2$ の区間でだけ $V(x) = -V$ 、それ以外の $x \leq -L/2$ 、 $L/2 \leq x$ で $V(x) = 0$ といった井戸のような形のポテンシャルを指す。

トンネル効果

6.8 三次元空間内の粒子の運動

第6章のまとめ

空間表現の量子状態

1. 連続型空間基底状態

$$\left\{ |x\rangle = \frac{|x_j\rangle}{\sqrt{\Delta x}} : x_j \text{ は、全長 } L \text{ の一次元空間を } n \text{ 等分した幅 } \Delta x \text{ の区間} \right\}$$

$$PD(\psi \rightarrow x) = |\langle x | \psi \rangle|^2$$

$$\text{正規直交性 : } \langle x | x' \rangle = \frac{\delta_{xx'}}{\Delta x} \rightarrow \delta(x - x') \quad (\text{Dirac-}\delta)$$

$$\text{完備性 : } \sum_x \Delta x |x\rangle \langle x| = \hat{I} \rightarrow \int dx |x\rangle \langle x| = \hat{I}$$

2. 運動量確定状態

$\left\{ |p\rangle = \frac{|p_J\rangle}{\sqrt{\Delta p}} : p_J \text{ は、全長 } L_p = \frac{2\pi\hbar}{\Delta x} \text{ の運動量空間を } n \text{ 等分した幅 } \Delta p = \frac{2\pi\hbar}{L} \text{ の区間} \right\}$

$$\langle x_j | p_J \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \exp \frac{ip_J x_j}{\hbar} \quad \rightarrow \quad \langle \underline{x} | \underline{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \frac{ipx}{\hbar}$$

正規直交性：
$$\langle \underline{p} | \underline{p}' \rangle = \frac{\delta_{pp'}}{\Delta p} \quad \rightarrow \quad \delta(p - p') \quad (\text{Dirac-}\delta)$$

完備性：
$$\sum \Delta p \langle \underline{p} | \underline{p} \rangle = \hat{I} \quad \rightarrow \quad \int dp |\underline{p}\rangle \langle \underline{p}| = \hat{I}$$

3. 不確定性原理 $\{|x_j\rangle\}$ と $\{|p_J\rangle\}$ 、 $\{|\underline{x}\rangle\}$ と $\{|\underline{p}\rangle\}$ はフーリエ変換で互いに結びつけられるので、次の関係式が成立する。

$$(x \text{ の観測値のバラつき}) \times (p \text{ の観測値のバラつき}) > 2\pi\hbar$$

第7章

対称性と保存則

7.1 対称性と対称操作

左右対称 (bilaterally symmetry) であるとか、上下対称 (diphycercal symmetry) であるとか、点対称 (point symmetry) であるという言葉がある。これらの対称 (symmetry) 性は、量子力学的にはどういう意味であろうか。左右対称とは、ある垂直面に対して右と左を入れ換えても変わらないことを示す。右と左を入れ換える対称操作 (symmetrical operation) を示す対称操作オペレータ (symmetrical operator) を \hat{T} としよう。例えばある状態 $|\psi\rangle$ が左右対称であるとは、次のように記述できる。

$$\hat{T}|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle$$

α は同じ状態であっても位相が動き得ることを示している。つまり、 $|\alpha| = 1$ である。

上下対称とは、ある水平面に対して上と下を入れ換えても変わらないことを示す。また、点対称とは、ある点に対し、例えば右上の点と左下の点を入れ換えるなど、対応する点をすべて入れ換えても変わらないことを示す。こうした対称操作は二回繰り返すと元へ戻ってしまう性質があるので、以下が成立する。

$$\hat{T}\hat{T} = \hat{T}^2 = \hat{I}$$

この式から、 \hat{T} の固有値が ± 1 の値しかとり得ないことを証明することができる。

問題 7.1 二回繰り返すと元に戻る対称操作 \hat{T} の固有値問題を $\hat{T}|t\rangle = t|t\rangle$ と書くことに

して、 t が ± 1 であることを示せ。

答え 前式 7.1 の右から $|t\rangle$ を掛けた式に対し、順番に固有値化していくと、 $t^2 |t\rangle = |t\rangle$ が得られる。これから $t^2 = 1$ 。

二回対称操作の固有値のことを、特にパリティ (parity) という。また、パリティ 1 を偶パリティ (even parity)、 -1 を奇パリティ (odd parity) ともいう。さて任意の対称状態 $|\psi\rangle$ の満たす式 7.1 を眺めて見ると、この式が \hat{T} の固有値問題の式と同じ形になっていることに気付くであろう。固有値が α で固有状態が $|\psi\rangle$ ということになる。したがって、二回で元に戻る対称操作に対しては、 $|\psi\rangle$ は \hat{T} の固有状態であり、かつその固有値は ± 1 のいずれかであることがいえる。固有値が 1 の状態を偶パリティ状態、固有値が -1 の状態を奇パリティ状態という。

先に第 4 章の水素イオン分子モデルで示した各状態について左右対称性を調べて見よう。まず、 $|\text{左}\rangle$ と $|\text{右}\rangle$ の各々の状態は明らかに対称状態ではない。しかし、対称操作 \hat{T} によって、交互に入れ替わることができる。

$$\hat{T}|\text{左}\rangle = |\text{右}\rangle, \quad \hat{T}|\text{右}\rangle = |\text{左}\rangle$$

ここで、各変換に対し、任意位相が入り得るのであるが、とりあえずは無視して議論を進めよう。これを $|\text{左}\rangle$ 、 $|\text{右}\rangle$ を基底とした行列形式で書き表しておこう。

$$T: \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

この固有値問題の解答は次のようになる。

$$\text{固有値 } 1: \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |E_h\rangle, \quad \text{固有値 } -1: \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = |E_l\rangle$$

つまり、 $|E_h\rangle$ は偶パリティの対称状態、 $|E_l\rangle$ は奇パリティの対称状態であることが判明する。確かに両状態とも左右に $1/2$ ずつの確率で存在する状態であり、納得できる結果であろう。

問題 7.2 上記の対称操作行列の固有値問題を解け。

もう一つ、第4章のスピンで示した各種の状態について、対称性を調べて見よう。例えば xy 面に対する対称操作 \hat{T} であるが、明らかに次式が成立する。

$$\hat{T}|+z\rangle = |-z\rangle, \quad \hat{T}|-z\rangle = |+z\rangle$$

ここでも任意の位相ずれが入り得るが、とりあえず位相ずれは無視しておこう。これを $|+z\rangle$ 、 $|-z\rangle$ を基底とした行列形式で書き表すと、次のようになる。

$$T: \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

先と同様にこの固有値問題を解いて見ると次の固有解が得られる。

$$\text{固有値 } 1: \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |+x\rangle, \quad \text{固有値 } -1: \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = |-x\rangle$$

つまり、 $|+x\rangle$ は偶パリティの対称状態、 $|-x\rangle$ は奇パリティの対称状態であることが判明する。

これら両状態とも確かに xy 面に対し対称である。しかし、スピンの面内にある状態はすべて対称状態のはずである。例えば、 $|+y\rangle$ に \hat{T} を掛けてみると、その結果は $|+y\rangle$ のスカラー倍とはならない。 $|-y\rangle$ についても同様である。それでは何故、これらは対称状態にはならないのであろうか。この問題の答えは対称操作オペレータの変換時の位相項にありそうである。そこで、複素数 $\exp(i\alpha)$ を導入し、以下のようにしてみよう。

$$T: \begin{pmatrix} 0 & \exp(i\alpha) \\ \exp(-i\alpha) & 0 \end{pmatrix}$$

左下の項は、(固有値)² = (非対角項) の積 の関係と、(固有値) = ± 1 の関係から決定されている。固有状態は次のようになる。

$$\text{固有値 } 1: \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \exp(-i\alpha) \end{pmatrix}, \quad \text{固有値 } -1: \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\exp(-i\alpha) \end{pmatrix}$$

ここで $\alpha = -\pi/2$ とすると、偶パリティの固有状態は $|+y\rangle$ 、奇パリティの固有状態は $|-y\rangle$ となる。つまり、対称操作オペレータの選び方によって、どの状態が対称になるのが変わってしまうことに注意して欲しい。さらに、 $\alpha = \pi$ とすると、偶パリティの状態が $|-x\rangle$ 、奇パリティの状態が $|+x\rangle$ と、先程と逆の結果となってしまう。このように、対称操作オペレータを決めるときには位相の変化に注意する必要がある。

システムをある軸を中心に 120° 回すような操作 \hat{T} を考えよう。このような対称操作は三回繰り返すと何もしないことと同じになる。

$$\hat{T}^3 = \hat{I}$$

このような対称操作オペレータでは、固有値³ = 1 が成立する。つまり、固有値は 1、 $\exp(i2\pi/3)$ 、または $\exp(-i2\pi/3)$ のいずれかになる。同様に、 n 回繰り返すと元になる対称操作の場合、そのオペレータの固有値 n 乗は 1 になる。つまり固有値は I を任意の整数として、 $\exp(i2\pi I/n)$ となる。また、状態そのものが n 回対称であるとは、その状態が、適切な \hat{T} の固有状態になることを意味する。

問題 7.3 n 回対称操作 \hat{T} の固有値問題を $\hat{T}|t\rangle = t|t\rangle$ と書くことにして、 $t^n = 1$ であることを示せ。

答え $\hat{T}^n = \hat{I}$ の右から $|t\rangle$ を掛けた式に対し、順番に固有値化していくと、 $t^n|t\rangle = |t\rangle$ が得られる。これから $t^n = 1$ 。

7.2 運動方程式の対称性

運動方程式に対称性があるという言葉がしばしば用いられる。例えば、古典力学で、重力中を自由落下する質点の運動を、縦に置かれた鏡で左右反転して写した像の運動は、やはり同じ運動方程式を満たす。こうした場合、運動方程式には左右対称性があるという。しかし、水平に置かれた鏡で上下反転した像の運動は、もとの質点の運動方程式では記述できない。 $g \rightarrow -g$ なる変換が必要となる。したがって、重力中の質点の運動方程式には上下対称性はないことになる。

量子力学でも同様である。いま、与えられた運動方程式の任意の解、 $|\psi(t)\rangle$ を考え、それに何らかの対称操作を施した状態の時間変化 $\hat{T}|\psi(t)\rangle$ を考える。この解が元の運動方程式を満たすとき、運動方程式にはこの対称操作に対応する対称性があるという。ここでは、こうした運動方程式の対称性 (symmetry of equation of motion) について述べよう。

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

この式が成立するときに、ある対称操作 \hat{T} に対し、次式が成立するとき、この運動方程式は \hat{T} に関する対称性があるという。

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

この式の左辺と右辺を置き換え、前式を用いて変形すると、次式が得られる。

$$\hat{H}\hat{T}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d\hat{T}|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{T} \left(i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} \right) = \hat{T}\hat{H}|\psi(t)\rangle$$

$|\psi(t)\rangle$ の任意性を考慮すると、次の交換関係が得られる。

$$\hat{H}\hat{T} - \hat{T}\hat{H} = [\hat{H}, \hat{T}] = 0$$

また逆に、この交換関係が成立するとき、運動方程式は \hat{T} に関する対称性を有する。

下に示すように、交換可能な二つのオペレータは、縮退のない場合共通の固有状態を持つので、 \hat{T} の固有状態は \hat{H} の固有状態になる。つまり、最初に \hat{T} の一つの固有状態にいと、ずっとその状態にいる。また、最初に \hat{T} の混合状態にいと、その混合比を保ったまま、つまり \hat{T} の期待値を変えないで推移する。こうした量を保存量 (conserved quantum) という。この意味で、対称性と保存則 (conservation law) は極めて密接な関係を持つことが理解できよう。縮退がある場合でも、適切な状態の対応がとれ、 \hat{T} の固有値が保存されることがわかる。

問題 7.4 交換する二つのオペレータ \hat{A} と \hat{B} が、縮退のない場合、共通の固有状態を持つことを示せ。

答え \hat{A} の固有値 a に対する固有状態を $|a\rangle$ とすると、 $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ が成立する。この式の両辺に左から \hat{B} を掛ける。左辺の $\hat{B}\hat{A}$ を $\hat{A}\hat{B}$ にして適当に括弧を入れると、 $\hat{A}(\hat{B}|a\rangle) = a(\hat{B}|a\rangle)$ と書けるが、これは $\hat{B}|a\rangle$ が \hat{A} の a を固有値とする固有状態であることを示している。つまり b を適当なスカラー量として、 $\hat{B}|a\rangle = b|a\rangle$ と書くことができる。この式を見直すと、 $|a\rangle$ が \hat{B} の固有状態であることを示している。つまり、 $|a\rangle$ は \hat{A} の固有状態であると同時に \hat{B} の固有状態にもなっている。同様に、 \hat{B} の固有状態が、同時に \hat{A} の固有状態になっていることを示すことができる。

例えば、先に用いた第4章の水素イオン分子モデルの運動方程式の場合、次式のようにあるので、式7.1と交換する。したがって、パリティは保存量となる。

$$H : \begin{pmatrix} E_0 & A \\ A & E_0 \end{pmatrix}$$

また、磁界中のスピンの運動方程式のハミルトニアンは、次のように書けるが、この三個のスピン行列のうち二番目だけが、式7.1の形の対称操作オペレータと交換する。つまり、 \hat{T} のパリティは、 $B_z = B_y = 0$ のときにのみ保存される。

$$H : \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mu B_z + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mu B_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \mu B_y$$

ちょっと変わった対称操作として粒子の交換 (particle exchange) がある。いままではすべて一粒子の量子力学を扱ってきたが、将来、多粒子の量子力学を扱う。その場合、同一粒子が沢山入っていると、量子力学の固有な現象が生じてくる。それは任意の同一粒子二つを入れ換えても、同じ運動方程式を満たすという対称性があることである。この結果、粒子の交換操作に伴うパリティが保存されるという現象が生じる。今はこれ以上詳しくは説明しないが、対称性はこんなところにも顔を出す現象であることを認識しておいて欲しい。

7.3 並進対称性と運動量

対称性の中には、鏡面对称や回転対称以外にもいくつかの対称性がある。その一つが並進対称 (translational symmetry) と呼ばれるものである。例えば、第5章で示した周期型格子の上で電子状態をすべて一格子左に動かすようなシフト操作を並進対称操作という。格子上の運動方程式を満たす電子状態を一格子並進してみても、初期状態が一つずれているだけで、当然、元の運動方程式を満たす。つまり、格子上の電子の運動方程式は並進対称性を持っている。この並進対称操作を \hat{T} とすると、次の式で定義される。

$$\hat{T} |x_k\rangle = \begin{cases} |x_{k-1}\rangle & (\text{for } k \neq \text{min}) \\ |x_{\text{max}}\rangle & (\text{for } k = \text{min}) \end{cases}$$

変換時の位相は無視してある。また、次の式の誘導のために、添字を k とした。この式から一般に、 \hat{T} の任意の成分は以下のように書ける。

$$\langle x_j | \hat{T} |x_k\rangle = \begin{cases} \delta_{j,k-1} & (\text{for } k \neq \text{min}) \\ \delta_{j,\text{max}} = \delta_{j,k-1+n} & (\text{for } k = \text{min}) \end{cases} = \delta_{j,k-1}^{(n)}$$

このように j と $k-1$ が n だけ離れていても 1 となるような周期性のある δ を $\delta_{i,j-1}^{(n)}$ と書いた。念のために、 \hat{T} を $|x_i\rangle$ を基底とした行列で表現すると、次のようになる。

$$\hat{T} : \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

対角と一つずれた位置、および左下に 1 が入っている。さらに、周期型 δ 関数を用いると \hat{T} は次のように表現できる。

$$\hat{T}|x_j\rangle = \sum_{jk} |x_j\rangle \delta_{j,k-1}^{(n)} \langle x_k|$$

\hat{H} との交換関係を調べておこう。まず、上で導入した周期性のある δ 関数を用いると、 $\langle x_i|\hat{H}|x_j\rangle$ は次のように書ける。

$$\langle x_j|\hat{H}|x_k\rangle = E_0\delta_{jk} - A\delta_{j,k-1}^{(n)} - A\delta_{j,k+1}^{(n)}$$

これから、前式の \hat{T} と同様に \hat{H} が得られる。これらを用いて、 $\hat{H}\hat{T}$ が計算できる。

$$\begin{aligned} \hat{H}\hat{T} &= \sum_{jmok} |x_j\rangle (E_0\delta_{jm} - A\delta_{j,m-1}^{(n)} - A\delta_{j,m+1}^{(n)}) \langle x_m|x_o\rangle \delta_{o,k-1}^{(n)} \langle x_k| \\ &= \sum_{jk} |x_j\rangle (E_0\delta_{j,k-1} - A\delta_{j,k-2}^{(n)} - A\delta_{j,k}^{(n)}) \langle x_k| \end{aligned}$$

同様に、 $\hat{T}\hat{H}$ が計算でき、両者は確かに一致する。

$$\begin{aligned} \hat{T}\hat{H} &= \sum_{jmok} |x_j\rangle \delta_{j,m-1}^{(n)} \langle x_m|x_o\rangle (E_0\delta_{ok} - A\delta_{o,k-1}^{(n)} - A\delta_{o,k+1}^{(n)}) \langle x_k| \\ &= \sum_{jok} |x_j\rangle \delta_{j,o-1}^{(n)} (E_0\delta_{ok} - A\delta_{o,k-1}^{(n)} - A\delta_{o,k+1}^{(n)}) \langle x_k| \\ &= \sum_{jk} |x_j\rangle (E_0\delta_{j+1,k} - A\delta_{j+1,k-1}^{(n)} - A\delta_{j+1,k+1}^{(n)}) \langle x_k| \\ &= \sum_{jk} |x_j\rangle (E_0\delta_{j,k-1} - A\delta_{j,k-2}^{(n)} - A\delta_{j,k}^{(n)}) \langle x_k| \end{aligned}$$

一格子並進操作を n 回繰り返すと元に戻るので、 $\widehat{T}^n = \widehat{I}$ が成立する。したがって、 \widehat{T} の固有値は J を整数として、 $\exp(i2\pi J/n)$ となる。また、対応する固有状態を $|t\rangle = (t_1, t_2, t_3, \dots, t_n)^t$ とすると、固有値問題は次のように書かれる。

$$\sum_k \langle x_j | \widehat{T} | x_k \rangle \langle x_k | t \rangle = \langle x_j | t \rangle$$

これより、次式が導かれる。

$$\sum_k \delta_{j,k-1}^{(n)} t_k = \exp \frac{i2\pi J}{n} t_j$$

これより直ちに $t_{j+1} = \exp(i2\pi J/n) t_j$ の関係と $t_{min} = \exp(i2\pi J/n) t_{max}$ が得られる。これらの関係から固有状態の成分が決定できる。

$$\langle x_j | t \rangle = c \exp \frac{i2\pi j J}{n} \quad \left(J: \text{整数}, -\frac{n}{2} < J \leq \frac{n}{2} \right)$$

この固有状態は、第5章の式5.2に示した \widehat{H} の固有状態とまったく一致している。さらに、第5章の式5.2で示した運動量基底状態 $|p\rangle$ とまったく同じものであることがわかる。ここで、並進対称操作の保存量と運動量が関連していそうであることに気付くかも知れない。

以下に定義されるオペレータ \widehat{p} を考えよう。

$$\widehat{p} = -i \frac{\hbar}{2\Delta x} (\widehat{T} - \widehat{T}^{-1})$$

ここで、 \widehat{T}^{-1} は、逆方向への並進操作に対応するオペレータである。上式で得られたオペレータ \widehat{p} は \widehat{T} と同じ固有状態を持ち、かつその固有値 p は次式で与えられる。

$$p = -i \frac{\hbar}{2\Delta x} \left(\exp \frac{i2\pi J}{n} - \exp \frac{-i2\pi J}{n} \right) = \frac{\hbar}{\Delta x} \sin \frac{2\pi J}{n}$$

念のために、 \widehat{p} を行列表現しておこう。

$$\widehat{p}: \quad -i \frac{\hbar}{2\Delta x} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & -1 \\ -1 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

この議論を連続化してみよう。それには $\Delta x \rightarrow 0$ または $n \rightarrow \infty$ なる操作を行えばよい。まず、一格子並進操作 \hat{T} を $\hat{T}(\Delta x)$ と書き換えておこう。そうすると、上の各式は次のように変形される。

$$\hat{p} = -i \frac{\hbar}{2\Delta x} \left(\hat{T}(\Delta x) - \hat{T}(-\Delta x) \right) \rightarrow -i\hbar \left. \frac{d\hat{T}(x)}{dx} \right|_{x=0}$$

$$p \rightarrow \frac{2\pi\hbar J}{n\Delta x} = p_J$$

この際、 $2\pi\hbar J/L = p_J$ の関係を用いた。この後式の結果から、 \hat{p} を、特に運動量オペレータと呼ぶ。

再び格子システムに戻って議論を続けよう。 \hat{p} は固有状態が $|p_J\rangle$ であり、固有値が上に述べたような値であることから以下のように表すこともできる。

$$\hat{p} = \sum_J |p_J\rangle \frac{\hbar}{\Delta x} \sin \frac{2\pi J}{n} \langle p_J|$$

そこで、同様な表現で、以下に示す位置オペレータ \hat{x} を定義しよう。

$$\hat{x} = \sum_j |x_j\rangle \frac{\hbar}{\Delta p} \sin \frac{2\pi j}{n} \langle x_j|$$

この固有値も $n \rightarrow \infty$ で次式のようにになる。

$$\frac{\hbar}{\Delta p} \sin \frac{2\pi j}{n} \rightarrow \frac{2\pi\hbar j}{n\Delta p} = x_j$$

ここで、 $\Delta p = 2\pi\hbar/L$ なる関係を用い、また、 $\Delta x j$ を x_j とした。

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i \frac{\hbar n}{2\pi} \sin \frac{\pi}{n} \left(\cos \frac{(2j-1)\pi}{n} \delta_{j,k-1} + \cos \frac{(2j+1)\pi}{n} \delta_{j,k+1} \right)$$

この式の右辺は $\Delta x \rightarrow 0$ に対し、限りなく $i\hbar I$ 関数になっていく。さて、一般に次の式が成立する。

$$\langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)^2 \rangle \langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \rangle \geq \frac{\langle [\hat{p}, \hat{x}] \rangle^2}{4}$$

このことから、 $\Delta x \rightarrow 0$ では次式が成立する。

$$\langle(\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle)^2\rangle\langle(\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

つまり p の標準偏差と x の標準偏差の積は $\hbar/2$ より大きくなる。これがハイゼンベルグの不確定性原理 (Heisenberg uncertainty principle) の厳密な証明である。

なお、式 7.3 は、 $|\chi\rangle = [i(\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle) - (\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)s]|\psi\rangle$ として、 $\langle\chi|\chi\rangle$ は常に非負となるが、この式を s の二次式として、根と係数の関係を求めると上式の不等式が得られる。

等号が成り立つには $|\chi\rangle = 0$ が成立する必要がある。このことから、 $[i(\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle) - (\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)s]|\psi\rangle = 0$ を満す解を求めればよい。ちなみに、連続系の場合には、 $[(\hbar d/dx - i\langle\hat{p}\rangle) - (x - \langle\hat{x}\rangle)s]\psi(x) = 0$ を解けばよい。移項すると、 $\hbar d\psi(x)/dx = i[\langle\hat{p}\rangle - (x - \langle\hat{x}\rangle)s]\psi(x)$ となるが、 $\langle\hat{p}\rangle$ や $\langle\hat{x}\rangle$ が定数であることに留意すると、この微分方程式は直ちに解けて、次のガウス誤差関数 (Gauss error function) が得られる。

$$\psi(x) = C \exp \left[- \left(\frac{x - \langle\hat{x}\rangle}{2\sigma} \right)^2 + \frac{i\langle\hat{p}\rangle x}{\hbar} \right]$$

ただし、 $s/2\hbar$ を $1/(2\sigma)^2$ とした。存在確率の空間的分布は、この式を二乗すれば得られる。

$$|\psi(x)|^2 = |C|^2 \exp \left(- \frac{(x - \langle\hat{x}\rangle)^2}{2\sigma^2} \right)$$

これもガウス誤差関数 (Gauss error function) であるが、標準偏差がちょうど σ となっている。つまり、こうなるように s を定めたのである。 $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-x^2/2\sigma^2) = \sqrt{2\pi}\sigma$ であることを利用すると、確率の空間積分が 1 であることから、 $|C|^2 = 1/\sqrt{2\pi}\sigma$ となり、 $C = 1/(2\pi)^{1/4}\sqrt{\sigma}$ が得られる。

一般に波束 (wave packet) というと、この形を指すことが多い。ここで注意したいのは、この解はある時間でのワンショットであることである。この解は複数のエネルギー状態の混ざったものであるなので、時間と共に変化していく。この変化の様子は、これを運動量空間に直し、各運動量確定状態に時間変化項を付けて再合成すれば得られる。そこで、 $\psi(x)$ を運動量空間へ変換しよう。

$$\langle p | \psi \rangle = \int dx \frac{1}{(2\pi)^{1/4}\sqrt{\sigma}} \exp \left[i \frac{\langle\hat{p}\rangle x}{\hbar} - \left(\frac{x - \langle\hat{x}\rangle}{2\sigma} \right)^2 \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \frac{-ipx}{\hbar}$$

$$= \frac{\sqrt{2\sigma}}{(2\pi)^{1/4}\sqrt{\hbar}} \exp \left[-i \frac{(p - \langle \hat{p} \rangle) \langle \hat{x} \rangle}{\hbar} - \left(\frac{\sigma(p - \langle \hat{p} \rangle)}{\hbar} \right)^2 \right]$$

問題 7.5 この式の誘導を試みてみよ。

ヒント まず、 \exp をまとめる。次に \exp の引数に表われる x^2 と x の項を $(ax+b)^2$ の形で表現し、残った定数をまとめよ。 $(ax+b)^2$ の項は誤差関数の定積分で、定数になる。

式 7.3 の絶対値の二乗から運動量の標準偏差を求めると、 $\hbar/2\sigma$ である。空間方向の標準偏差 σ との積を求めると $\hbar/2$ となり、最小値となっていることが確認できる。

この各運動量確定状態はエネルギー確定状態でもあるので、 $\exp(Et/i\hbar) = \exp(p^2t/2im\hbar)$ なる因子を掛けて、合計すればよい。これを再び位置空間へ変換すると、次のようになる。なお、 $2m\sigma^2/\hbar$ を τ としてある。

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int dp \frac{\sqrt{2\sigma}}{(2\pi)^{1/4}\sqrt{\hbar}} \exp \left[-i \frac{(p - \langle \hat{p} \rangle) \langle \hat{x} \rangle}{\hbar} - \left(\frac{\sigma(p - \langle \hat{p} \rangle)}{\hbar} \right)^2 \right] \exp \frac{-ip^2t}{2m\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \frac{ipx}{\hbar} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{1/4}\sqrt{\sigma}\sqrt{1+i(t/\tau)}} \\ &\quad \exp \frac{-\left(\frac{(x - \langle \hat{x} \rangle)}{2\sigma} - \frac{t}{\tau} \frac{\sigma \langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \right)^2 + i \left[+ \frac{\langle \hat{p} \rangle x}{\hbar} + \frac{t}{\tau} \left(\frac{(x - \langle \hat{x} \rangle)}{2\sigma} \right)^2 - \frac{t}{\tau} \frac{\sigma^2 \langle \hat{p} \rangle^2}{\hbar^2} + \left(\frac{t}{\tau} \right)^2 \frac{\langle \hat{p} \rangle \langle \hat{x} \rangle}{\hbar} \right]}{1 + (t/\tau)^2} \end{aligned}$$

問題 7.6 この式の誘導を試みてみよ。

ヒント 前問のヒントと同様の作業を x の替りに p に着目して行なえ。さらに、定積分実行後、残った \exp の引数内の分母を実数化し、実部と虚部に分類せよ。結構、力のいる計算。

この絶対値の二乗より、確率の空間的な分布の変化が得られる。

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}\sqrt{1+(t/\tau)^2}} \exp \frac{-\left(x - \langle \hat{x} \rangle - \frac{t}{\tau} \frac{2\sigma^2 \langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \right)^2}{2\sigma^2[1+(t/\tau)^2]}$$

この式もガウス誤差関数 (Gauss error function) となっている。 $t = 0$ では明かに最初の式 7.3 と同じである。時間が経過すると、平均が $\langle \hat{x} \rangle + (t/\tau)(2\sigma^2 \langle \hat{p} \rangle / \hbar) = \langle \hat{x} \rangle + \langle \hat{p} \rangle t / m$ 、標準偏差が $\sigma \sqrt{1 + (t/\tau)^2}$ で推移する。つまり、中心は古典的な速度で移動し、標準偏差は最初のころは σ であるが、時間が経つと、徐々にほぼ時間に比例して広がっていく。これが移動している粒子の古典的描像に対応する。

運動量の標準偏差は $\hbar/2\sigma$ と一定のままであるが、この空間分布の標準偏差は $\sigma \sqrt{1 + (t/\tau)^2}$ と時間につれ徐々に広がっていくので、これらの積も $(\hbar/2) \sqrt{1 + (t/\tau)^2}$ とハイゼンベルグの不確定性原理の最小値から徐々に増えていくことになる。

第 8 章

角運動量

8.1 回転対称性と角運動量

ある軸に対し、対象を回転するという対称操作に関連して、角運動量が定義される。例えば、各角運動量の z, x, y 成分は、それぞれ z, x, y 各軸に対する回転対称操作から次のように定義される。

$$\hat{R}_z(\Delta\phi) = \hat{I} - \frac{\hat{J}_z}{i\hbar} \Delta\phi + O^2(\Delta\phi) \quad \hat{R}_y(\Delta\phi) = \hat{I} - \frac{\hat{J}_y}{i\hbar} \Delta\phi + O^2(\Delta\phi) \quad \hat{R}_x(\Delta\phi) = \hat{I} - \frac{\hat{J}_x}{i\hbar} \Delta\phi + O^2(\Delta\phi)$$

したがって、これら操作に対する対称性が成立する物理系では、対応する角運動量は保存される。例えば z 軸を中心とする円筒対称なポテンシャル中の粒子運動については z 軸周りの回転対称性があるから、 \hat{J}_z は保存量となる。また、原点を中心とする球対称な物理系では、上記のどの軸に関しても回転対称性があるので、いずれの角運動量も保存される。

しかし、並進操作とは異なり、 \hat{R}_x 、 \hat{R}_y 、 \hat{R}_z は互いに交換しない。例えば、図 8.1 に示すように、 $\hat{R}_x(90^\circ)\hat{R}_y(90^\circ)$ と $\hat{R}_y(90^\circ)\hat{R}_x(90^\circ)$ は明らかに異なる結果を与える。このことから、微小回転から定義される角運動量 \hat{J}_x と \hat{J}_y も、互いに交換しなくなる。

例えば、 $\hat{R}_x(\theta)$ によって空間上の任意の点 (x, y, z) は次のように位置を移動する。

$$\hat{R}_x(\theta) : (x, y, z) \rightarrow (x, y \cos \theta + z \sin \theta, z \cos \theta - y \sin \theta)$$

続けて、 $\hat{R}_y(\phi)$ によって回転を与えると、最終的な位置は次のようになる。



図 8.1 空間回転の非対称性

$$\begin{aligned} \widehat{R}_y(\phi)\widehat{R}_x(\theta) : (x, y, z) \rightarrow \\ (x \cos \phi - z \cos \theta \sin \phi + y \sin \theta \sin \phi, y \cos \theta + z \sin \theta, z \cos \theta \cos \phi - y \sin \theta \cos \phi + x \sin \phi) \end{aligned}$$

一方、逆の順で回転操作を与えると、まず次のように変換される。

$$\widehat{R}_y(\phi) : (x, y, z) \rightarrow (x \cos \phi - z \sin \phi, y, z \cos \phi + x \sin \phi)$$

続けて、次のように変換される。

$$\begin{aligned} \widehat{R}_x(\theta)\widehat{R}_y(\phi) : (x, y, z) \rightarrow \\ (x \cos \phi - z \sin \phi, y \cos \theta + z \cos \phi \sin \theta + x \sin \phi \sin \theta, z \cos \phi \cos \theta + x \sin \phi \cos \theta - y \sin \theta) \end{aligned}$$

したがって、この二つの操作の差の結果は、 θ, ϕ が十分小さいとき、次式のようになる。

$$\begin{aligned} \widehat{R}_x(\theta)\widehat{R}_y(\phi) - \widehat{R}_y(\phi)\widehat{R}_x(\theta) : (x, y, z) \rightarrow \\ (-z(1 - \cos \theta) \sin \phi - y \sin \theta \sin \phi, -z(1 - \cos \phi) \sin \theta + x \sin \theta \sin \phi, \\ -x \sin \phi(1 - \cos \theta) - y \sin \theta(1 - \cos \phi)) = (-y\theta\phi, x\theta\phi, 0) + O^3 \end{aligned}$$

たったこれだけのこと、つまり軸の異なる二つの回転オペレータには交換が成立しないという事実だけから、じつに驚く程多くの運動量に関する法則が誘導されるのである。

回転オペレータに対し、次のような微小操作のオペレータを考えてみよう。

$$\begin{aligned} \widehat{I} - \widehat{R}_z(\theta\phi) : (x, y, z) \rightarrow \\ (x, y, z) - (x \cos \theta\phi + y \sin \theta\phi, y \cos \theta\phi - x \sin \theta\phi, z) = (-y\theta\phi, x\theta\phi, 0) + O^3 \end{aligned}$$

これらのことから、空間回転については、次式が成立することがわかる。

$$[\widehat{R}_x(\theta), \widehat{R}_y(\phi)] = \widehat{I} - \widehat{R}_z(\theta\phi) + O^3$$

さて、回転操作を角運動量に変換しよう。上式は以下のようなになる。

$$[\widehat{I} - \widehat{J}_x\theta/i\hbar + O^2, \widehat{I} - \widehat{J}_y\phi/i\hbar + O^2] = \widehat{J}_z\theta\phi/i\hbar + O^3$$

角度の二次の項までを比較すると、 \widehat{J}_x と \widehat{J}_y の交換関係を得ることができる。まったく同様にして、次の三式が得られる。

$$\left. \begin{aligned} [\widehat{J}_x, \widehat{J}_y] &= i\hbar\widehat{J}_z \\ [\widehat{J}_y, \widehat{J}_z] &= i\hbar\widehat{J}_x \\ [\widehat{J}_z, \widehat{J}_x] &= i\hbar\widehat{J}_y \end{aligned} \right\}$$

これらの交換関係は、導出の仕方からも明らかなように、対象とする物理系が空間の任意の軸に対する回転対称性を有する限り必ず成立する。別に物理系が細長かろうと変形したものであろうと、空間に固定された特定の軸を持たない限り、恒に成立する関係である。これらの交換関係を認めると、以下のように驚くべき結論がいくつか導かれる。その導出法はかなり技巧的であるが、今後、あちこちで利用される手法であるので、少しずつ慣れて欲しい。まず、 \widehat{J}_x 、 \widehat{J}_y の代わりに、次のような新しいオペレータを導入する。

$$\begin{aligned} \widehat{J}_+ &= \widehat{J}_x + i\widehat{J}_y \\ \widehat{J}_- &= \widehat{J}_x - i\widehat{J}_y \end{aligned}$$

さて、次の関係が成立する。

$$\widehat{J}_+^\dagger = \widehat{J}_-, \quad \widehat{J}_-^\dagger = \widehat{J}_+$$

これらを用いて \widehat{J}_x 、 \widehat{J}_y を書き換えると、以下の式が、得られる。

$$\begin{aligned} [\widehat{J}_+, \widehat{J}_-] &= -2\hbar\widehat{J}_z \\ [\widehat{J}_+, \widehat{J}_z] &= -\hbar\widehat{J}_+ \\ [\widehat{J}_-, \widehat{J}_z] &= \hbar\widehat{J}_- \end{aligned}$$

問題 8.1 上記式 8.3～式 8.5 を導出せよ。

ヒント 第二式と第三式は、上の第二式と第三式を複素数的に組み合わせたものから誘導する。

ここで、 \hat{J}^2 を次のように定義しよう。

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$$

この \hat{J}^2 も、 \hat{J}_+ 、 \hat{J}_- を用いて、書き換えることができる。

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hbar \hat{J}_z + \hat{J}_z^2 = \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hbar \hat{J}_z + \hat{J}_z^2$$

これらの式から、 \hat{J}^2 は \hat{J}_z と交換することが示される。

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$$

問題 8.2 式 8.1 を示せ。

答え

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \hat{J}_+ \hat{J}_- + i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] + \hat{J}_z^2 = \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hbar \hat{J}_z + \hat{J}_z^2$$

他も同様。

問題 8.3 式 8.1 を示せ。

答え

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- \hat{J}_z = \hat{J}_+ (\hat{J}_z \hat{J}_- + \hbar \hat{J}_-) = \hat{J}_+ \hat{J}_z \hat{J}_- + \hbar \hat{J}_+ \hat{J}_- = (\hat{J}_z \hat{J}_+ - \hbar \hat{J}_+) \hat{J}_- + i\hbar \hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{J}_z \hat{J}_+ \hat{J}_-$$

他の項は \hat{J}_z と明らかに交換する。

交換するという事は、二つのオペレータ \hat{J}^2 、 \hat{J}_z が共通の固有状態を持つことを意味する。その固有値をそれぞれ $\lambda\hbar^2$ 、 $m\hbar$ としよう。また、共通の固有状態を $|\lambda, m\rangle$ と書いておこう。もし、この固有状態がいずれのオペレータに対しても縮退していなければ、 λ と m にはある関係が成立し、片方だけで表現してもよいはずである。もし、 m だけが縮退していれば、同じ λ に対し、いくつかの異なる m が対応する (実際はこうなっている)。定義から明らかなように、次式が成立する。

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 |\lambda, m\rangle &= \lambda\hbar^2 |\lambda, m\rangle \\ \hat{J}_z |\lambda, m\rangle &= m\hbar |\lambda, m\rangle\end{aligned}$$

まず、式 8.4 の両辺右から $|\lambda, m\rangle$ を掛けてみよう。

$$\hat{J}_+ \hat{J}_z |\lambda, m\rangle - \hat{J}_z \hat{J}_+ |\lambda, m\rangle = -\hbar \hat{J}_+ |\lambda, m\rangle$$

これから、式 8.7 を利用すると、次式が、導かれる。

$$\hat{J}_z (\hat{J}_+ |\lambda, m\rangle) = (m+1)\hbar (\hat{J}_+ |\lambda, m\rangle)$$

この式をじっと見てみると、 \hat{J}_z の固有値問題の形になっている。固有値はもちろん $(m+1)\hbar$ であるし、固有状態は $\hat{J}_+ |\lambda, m\rangle$ である。 $(m+1)\hbar$ を固有値に持つ状態は $|\lambda, m\rangle$ と書けるはずである。したがって、 α_m を適切な定数として、以下のように書けるはずである。

$$\hat{J}_+ |\lambda, m\rangle = \alpha_m \hbar |\lambda, m+1\rangle$$

このように \hat{J}_+ は、 $|\lambda, m\rangle$ から m の一つ増えた別の固有状態を作り出すオペレータになっていることがわかる。この意味で \hat{J}_+ は、昇階演算子 (ascending operator) と呼ばれる。まったく同様にして、 \hat{J}_- は $|\lambda, m\rangle$ から、 m の一つ減った状態を作り出し、降階演算子 (descending operator) と呼ばれる。

$$\hat{J}_- |\lambda, m\rangle = \beta_m \hbar |\lambda, m-1\rangle$$

式 8.1 から分かるように、昇階演算子と降階演算子の間には深い関係がある。式 8.3 の共役をとってみよう。

$$\langle \lambda, m | \hat{J}_+^\dagger = \alpha_m^* \hbar \langle \lambda, m + 1 |$$

これに右から $|\lambda, m + 1\rangle$ を掛け、式 8.1 の関係を利用する。

$$\langle \lambda, m | \hat{J}_- |\lambda, m + 1\rangle = \alpha_m^* \hbar \langle \lambda, m + 1 | \lambda, m + 1\rangle$$

これに、さらに式 8.3 を代入する。

$$\beta_{m+1} = \alpha_m^*$$

ただし、 $|\lambda, m\rangle$ などは正規化されているとした。すると、式 8.3 の代わりに、次式が得られる。

$$\hat{J}_- |\lambda, m\rangle = \alpha_{m-1}^* \hbar |\lambda, m - 1\rangle$$

次に、 $\hat{J}^2 |\lambda, m\rangle$ を計算してみよう。式 8.1 の後半の式の右から $|\lambda, m\rangle$ を掛ける。

$$\hat{J}^2 |\lambda, m\rangle = (\hat{J}_- \hat{J}_+ + \hbar \hat{J}_z + \hat{J}_z^2) |\lambda, m\rangle$$

$\hat{J}^2 |\lambda, m\rangle = \lambda \hbar^2 |\lambda, m\rangle$ 、 $\hat{J}_- \hat{J}_+ |\lambda, m\rangle = \alpha_m \hbar \hat{J}_- |\lambda, m + 1\rangle = |\alpha_m \hbar|^2 |\lambda, m\rangle$ 、 $\hat{J}_z |\lambda, m\rangle = m \hbar |\lambda, m\rangle$ などを利用すると、次の関係が得られる。

$$\lambda = \alpha_m^2 + m + m^2$$

α_m は実数と考えると、以下の議論には支障がないので、次式が得られる。

$$\alpha_m = \sqrt{\lambda - m(m + 1)}$$

\hat{J}_+ は次から次へと m の大きな状態を作ってくれるが、あまり大きな m になると、式 8.3 の平方根の中身が負になってしまい、矛盾を起こしてしまう。この矛盾を回避するには、ある m で式 8.3 の右辺が 0 になればよい。その m の値を j としておこう。すると、式 8.3 によって、次から次に m の大きな状態が生成されるが、 $m = j$ になったところで、 \hat{J}_+ の右辺が 0 になるため、そこから上の状態は生成されなくなる。したがって、次のように表すことができる。

$$\lambda = j(j + 1)$$

逆に、 \hat{J}_- は次から次へと m の小さな状態を作ってくれるが、あまり小さな m になると、式 8.3 の平方根の中身が負になってしまい、矛盾を起こしてしまう。 m の最小値を $-j'$ とすると、次の条件が成立するとき、そこで式 8.3 の右辺が 0 となり、それ以下の m の状態の生成は停止し、矛盾は回避される。

$$\lambda = j'(j' - 1)$$

これらの式を比較すると、当然、 $j' = j + 1$ でなければならない。 m は 1 ずつしか変化しないから、 $j - (-j')$ は整数でなければならない。つまり、 m の取り得る数の範囲 $2j + 1$ は、整数となる。これから、 j は整数あるいは半整数であることが導かれる。

$|\lambda, m\rangle$ の代わりに $|j, m\rangle$ と書いて、以上をまとめておこう。 $j\hbar$ は全角運動量と呼ばれる。また、 $m\hbar$ は z 軸の周りの角運動量と呼ばれる。

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 |j, m\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle & (j = \text{は整数、半整数}) \\ \hat{J}_z |j, m\rangle &= m\hbar |j, m\rangle & (m = -j, \dots, j) \\ \hat{J}_+ |j, m\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar |j, m+1\rangle \\ \hat{J}_- |j, m\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar |j, m-1\rangle\end{aligned}$$

また、この最後の二式より、 \hat{J}_x 、 \hat{J}_y も計算できる。

$$\begin{aligned}\hat{J}_x |j, m\rangle &= \frac{1}{2} \left[\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar |j, m+1\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar |j, m-1\rangle \right] \\ \hat{J}_y |j, m\rangle &= -\frac{i}{2} \left[\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar |j, m+1\rangle \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar |j, m-1\rangle \right]\end{aligned}$$

ここで思い出して欲しいのは、上記の性質がすべて、回転対称操作の持つ空間的性質から導かれたものであるということである。したがって、対象とする物理システムによらず、その全角運動量の二乗は j を整数か半整数として $j(j+1)\hbar^2$ の値をとる。また、全角運動量 $j\hbar$ 状態の、ある特定の軸の周りの角運動量を測定すると、必ず、最小値 $-j\hbar$ から最大値 $j\hbar$ の \hbar ごとの飛び飛びの値のいずれかが観測されることを示している。 j としてどんな値を取るかは、対象とする物理系によって決まる。例えば、電子の自転運動に起因する角運動量では、 $j = \hbar/2$ となるが、その理由はまだ判然とはしていない。また、原子核の周りをまわる電子の公転運動に起因する角運動量では、 j は整数となる。

8.2 スピン 1/2 粒子の合成

以上述べた議論を、スピン 1/2 粒子に対して確かめてみよう。第 4 章の式 4.7 を再掲しよう。

$$\hat{R}_z(\phi) | +z \rangle = \exp(i\phi/2) | +z \rangle, \quad \hat{R}_z(\phi) | -z \rangle = \exp(-i\phi/2) | -z \rangle$$

これを行列で表すと、以下ようになる。

$$\hat{R}_z(\phi) : \begin{pmatrix} \exp(i\phi/2) & 0 \\ 0 & \exp(-i\phi/2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\phi/2 + O^2 & 0 \\ 0 & 1 - i\phi/2 + O^2 \end{pmatrix}$$

これと、次の関係式を組み合わせてみる。

$$\hat{R}_z(\Delta\phi) = \hat{I} - \frac{\hat{J}_z}{i\hbar} \Delta\phi + O^2(\Delta\phi)$$

その結果は次のようになる。

$$\hat{J}_z : \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

この式に現れる行列は第 4 章の章末で述べたスピン行列の z 成分になっている。同様にして、次の関係が得られる。

$$\hat{J}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z, \quad \hat{J}_x = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x, \quad \hat{J}_y = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_y$$

これらの式から、直ちに式 8.1 の三式が証明できる。また次式も得られる。

$$\left. \begin{aligned} \hat{J}_+ &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{J}_- &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \right\}$$

さらに、次式も得られ、 \hat{J}^2 はすべてのオペレータと交換することが示される。

$$\hat{J}^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \hat{I}$$

\hat{J}_z の固有解は固有値 $\hbar/2$ に対して $\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^\dagger$ と、 $-\hbar/2$ に対して $\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}^\dagger$ であるが、これらは当然 \hat{J}^2 の (縮退した) 固有状態にもなっており、固有値は共に $3\hbar^2/4$ となる。したがって $\lambda = 3/4$ である。したがって、 $j = 1/2$ である。 $|j, m\rangle$ という表現をすると、 $|+\rangle: \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^\dagger$ は $|1/2, 1/2\rangle$ であり、 $|-\rangle: \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}^\dagger$ は $|1/2, -1/2\rangle$ に対応する。これらの式を前節最後の四式に代入すると、すべて成立することが理解できよう。

次にスピン 1 の粒子の具体的な形を求めてみよう。スピン 1 の粒子はスピン 1/2 の粒子が二つ結合したもので考える。古典力学的に考えると、二つのスピンの同方向を向けば、スピン 1 の粒子として観測されそうであるし、反対向きに結合すればスピン 0 の粒子として観測されそうである。この二つの結合状態が区別できるような物理系を考えれば、スピン 1/2 粒子二個の結合系として、スピン 0 やスピン 1 の粒子像を理解することができそうである。例えば平行なときには二つの粒子の結合エネルギーが高いが、反平行であると低いといったように異なる場合には、二つの新しいスピン状態を区別することができる。

つまり、各スピンをベクトルで表したときに、その二つのベクトルの内積に比例して全体のエネルギーが変わるようなシステムを解析すればよい。そこでまず、スピン 1/2 粒子の各 x, y, z 成分を探してみよう。磁界を (θ, ϕ) 方向に与えたときに、そちら方向にスピンの向いている状態の $|+z\rangle, |-z\rangle$ 成分は、第 4 章のまとめから、次のように書けるから、これらの成分をうまく組み合わせれば、ベクトルの三成分が得られそうである。

$$\langle +z | \theta, \phi \rangle = \exp(-i\phi/2) \cos \frac{\theta}{2}, \quad \langle -z | \theta, \phi \rangle = i \exp(i\phi/2) \sin \frac{\theta}{2}$$

やや天下りではあるが、第 4 章に出てきたスピンオペレータを思い起こしてみよう。

$$\hat{\sigma}_x: \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y: \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z: \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

これらは、ベクトルの三成分に何か関係がありそうである。例えば、 $\hat{\sigma}_x$ を $\langle \theta, \phi |$ と $| \theta, \phi \rangle$ で挟んでみよう。

$$\langle \theta, \phi | \hat{\sigma}_x | \theta, \phi \rangle = \begin{pmatrix} \exp(-i\phi/2) \cos \frac{\theta}{2} \\ i \exp(i\phi/2) \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(-i\phi/2) \cos \frac{\theta}{2} \\ i \exp(i\phi/2) \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \cos \theta \cos \phi$$

うまい具合にスピンベクトルを長さ 1 としたときの x 成分となっている。同様に、上記の各スピンオペレータの期待値を求めたものをまとめてみる。

$$\langle \theta, \phi | \hat{\sigma}_x | \theta, \phi \rangle = \cos \theta \cos \phi, \quad \langle \theta, \phi | \hat{\sigma}_y | \theta, \phi \rangle = \cos \theta \sin \phi, \quad \langle \theta, \phi | \hat{\sigma}_z | \theta, \phi \rangle = \sin \theta$$

これらはスピンベクトルの各 x, y, z 成分となっている。

そこで二つの粒子のスピン状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ の平行度をスピンベクトルの内積、つまりそれぞれの成分の積和で表すと次のようになる。ここで、1 番目の粒子のスピン状態 $|\theta, \phi\rangle$ を簡単に $|\psi_1\rangle$ などと表記した。

$$\langle \psi_1 | \hat{\sigma}_x | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \hat{\sigma}_x | \psi_2 \rangle + \langle \psi_1 | \hat{\sigma}_y | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \hat{\sigma}_y | \psi_2 \rangle + \langle \psi_1 | \hat{\sigma}_z | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \hat{\sigma}_z | \psi_2 \rangle$$

あるいは、同じことであるが、複合粒子の状態を $|\psi_1, \psi_2\rangle$ などと表現し、1 番目の粒子にだけ影響するスピンオペレータを $\hat{\sigma}_1 = i\hat{\sigma}_{x,1} + j\hat{\sigma}_{y,1} + k\hat{\sigma}_{z,1}$ と記載すると、以下のよう書くこともできる。

$$\langle \psi_1 | \hat{\sigma}_1 | \psi_1 \rangle \cdot \langle \psi_2 | \hat{\sigma}_2 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1, \psi_2 | \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 | \psi_1, \psi_2 \rangle$$

以上のような準備に基づいて、次のようなハミルトニアンを持つ系を考えよう。

$$\hat{H} = \langle \psi_1, \psi_2 | \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 | \psi_1, \psi_2 \rangle$$

本当は、これにエネルギーの単位を持つ何らかの比例係数 A が入り、さらに結合の無いときのエネルギー E_0 の傘上げがあるのであるが、簡単化のために省略する。

各粒子が $+z$ と $-z$ を向いた、つごう四つの $|\psi_1, \psi_2\rangle$ の状態、 $\{|+1+2\rangle, |+1-2\rangle, |-1+2\rangle, |-1-2\rangle\}$ に対して、ハミルトニアンの成分を求めておこう。例えば以下のように、全ての要素が計算できる。

$$\begin{aligned} \langle +1-2 | \hat{H} | -1+2 \rangle &= \langle +1 | \hat{\sigma}_x | -1 \rangle \langle -2 | \hat{\sigma}_x | +2 \rangle + \langle +1 | \hat{\sigma}_y | -1 \rangle \langle -2 | \hat{\sigma}_y | +2 \rangle + \langle +1 | \hat{\sigma}_z | -1 \rangle \langle -2 | \hat{\sigma}_z | +2 \rangle \\ &= 1 \cdot 1 + (-i)i + 0 \cdot 0 = 2 \end{aligned}$$

結果を行列でまとめると、次のようになる。

$$\hat{H} : \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

この固有値問題を解いてみよう。このくらい簡単な行列だと、標準的な解法で解くことができる。

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1-\lambda & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

これより、 $\lambda = 1$ (三重根), -3 が得られる。さらに、それぞれの固有状態は次のようになる。

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

前の三つが三重根に対する固有状態であるが、縮退しているのでこれら三状態を線形結合して得られる直行する別の三状態を持ってきても、全く問題が無い。最後の状態だけが異なる低いエネルギーを持つ。実は、すぐ後でわかるように、前の三状態がスピン 1 の複合粒子状態に対応し、最後の一状態がスピン 0 の複合粒子状態に対応するのである。

これを確かめるために、全体に磁界をかけてみよう。簡単のために、二粒子は μ_1, μ_2 の磁気モーメントを持つものとしよう。磁気モーメントが全くないと、角運動量の有無を確認するために、他の磁気モーメントを持つ粒子と衝突をさせ、その粒子の磁気量の変化を通じて理解することになり、やや話が複雑になるからである。磁界がかかっているときのスピン 1/2 の粒子の持つエネルギーは第 4 章から分る。ただし、電荷が正を基準として符号を反転した。

$$\hat{H} = -\mu\hat{\sigma}B$$

このことから、全体のハミルトニアンは次のように書けることが推察できる。

$$\hat{H} = A\sigma_1 \cdot \sigma_2 - (\mu_1\hat{\sigma}_1 - \mu_2\hat{\sigma}_2) \cdot B$$

磁界 B が z 方向を向いているものとして、まず、後二項のハミルトニアンの成分を考えてみよう。すると後二項は $-(\mu_1\hat{\sigma}_z, 1 + \mu_2\hat{\sigma}_z, 2)B_z$ となるので、例えば、次のような計算が実行できる。

$$-(\mu_1\hat{\sigma}_z, 1 + \mu_2\hat{\sigma}_z, 2)B_z | +_1 -_2 \rangle = -(\mu_1\hat{\sigma}_z, 1 + \mu_2\hat{\sigma}_z, 2)B_z | +_1 \rangle | -_2 \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= -\mu_1 B_z \hat{\sigma}_{z,1} | +_1 \rangle | -_2 \rangle - | +_1 \rangle \mu_2 B_z \hat{\sigma}_{z,2} | -_2 \rangle = -\mu_1 B_z | +_1 \rangle | -_2 \rangle + \mu_2 B_z | +_1 \rangle | -_2 \rangle \\
&= -(\mu_1 - \mu_2) B_z | +_1 \rangle | -_2 \rangle = -(\mu_1 - \mu_2) B_z | +_1 -_2 \rangle
\end{aligned}$$

つまり、同じ状態に $-(\mu_1 - \mu_2)B_z$ をかけたものになる。他の複合状態についても、同様に同じ状態に係数をかけたものが得られ、 $| +_1 +_2 \rangle$ については $-(\mu_1 + \mu_2)B_z$ 、 $| -_1 +_2 \rangle$ については $(\mu_1 - \mu_2)B_z$ 、 $| -_1 -_2 \rangle$ については $(\mu_1 + \mu_2)B_z$ が係数となる。したがって、行列形式で表すと、対角行列となる。

$$\hat{H} : \begin{pmatrix} -(\mu_1 + \mu_2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(\mu_1 - \mu_2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\mu_1 - \mu_2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (\mu_1 + \mu_2) \end{pmatrix} B_z$$

以上のことから、三項とも含めた全ハミルトニアンを行列表示すると、以下のようになる。

$$\hat{H} : \begin{pmatrix} A - (\mu_1 + \mu_2)B_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A - (\mu_1 - \mu_2)B_z & 2A & 0 \\ 0 & 2A & -A + (\mu_1 - \mu_2)B_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A + (\mu_1 + \mu_2)B_z \end{pmatrix}$$

この A に関する部分は、当然であるが、式 8.2 に示したハミルトニアン行列と同じ形をしている。

このハミルトニアンの固有値問題を解いてみよう。固有値は $A + (\mu_1 + \mu_2)B_z$ 、 $-A + \sqrt{4A^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2 B_z^2}$ 、 $A - (\mu_1 + \mu_2)B_z$ 、 $-A - \sqrt{4A^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2 B_z^2}$ の四つである。また、それぞれの固有状態は次のようになる。

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

このうち、第 2、第 3 番目の固有状態は、厳密には $B_z = 0$ のときのものである。 B_z が与えられると、少しずつずれていくが、余り議論の本質に関わらないので、その効果は無視する。

すべての定数が正としてみよう。すると、前の三つが、ほぼ A のエネルギーをとり、後の一つが、ほぼ $-A$ のエネルギーをとる。このエネルギーの差は、二つのスピンの結合の差からくることは明らかであり、前三つがスピン平行 (エネルギーが高い)、後一つがスピ

ン反平行 (エネルギーが低い) に対応する。つまり、前者が $j = 1$ 状態、後者が $j = 0$ 状態である。

B_z を与えると、エネルギーが少しずつずれてきて、エネルギーの乖離が起る。高い方のエネルギーは三つに乖離する。もっとも高いエネルギーをとる状態は、合成スピンの磁界と反対向き、つまり下向きであろう。つまり $|_{-1-2}\rangle$ は $|1, -1\rangle$ 、また、次の $(|_{+1-2}\rangle + |_{-1+2}\rangle)/\sqrt{2}$ は $|1, 0\rangle$ 、乖離状態の最低エネルギー状態 $|_{+1+2}\rangle$ は $|1, 1\rangle$ に対応する。ここで、 $|1, -1\rangle$ などは $j = 1, m = -1$ などを示す。

念のために、この四つの状態の角運動量の z 成分を求めてみよう。それは二つの粒子の角運動量成分の合計で与えられるから、次のようにして計算できる。

$$\begin{aligned}
 (J_{1z} + J_{2z}) |1, 1\rangle &= \frac{\hbar}{2} (\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) |_{+1+2}\rangle = \frac{\hbar}{2} |_{+1+2}\rangle + \frac{\hbar}{2} |_{+1+2}\rangle \\
 &= \hbar |_{+1+2}\rangle = \hbar |1, 1\rangle \\
 (J_{1z} + J_{2z}) |1, 0\rangle &= \frac{\hbar}{2} (\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|_{+1-2}\rangle + |_{-1+2}\rangle) \\
 &= \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} (|_{+1-2}\rangle - |_{-1+2}\rangle - |_{+1-2}\rangle + |_{-1+2}\rangle) = 0 \\
 (J_{1z} + J_{2z}) |1, -1\rangle &= \frac{\hbar}{2} (\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) |_{-1-2}\rangle = -\frac{\hbar}{2} |_{-1-2}\rangle - \frac{\hbar}{2} |_{-1-2}\rangle \\
 &= -\hbar |_{-1-2}\rangle = -\hbar |1, -1\rangle \\
 (J_{1z} + J_{2z}) |0, 0\rangle &= \frac{\hbar}{2} (\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|_{+1-2}\rangle - |_{-1+2}\rangle) \\
 &= \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} (|_{+1-2}\rangle + |_{-1+2}\rangle - |_{+1-2}\rangle - |_{-1+2}\rangle) = 0
 \end{aligned}$$

つまり、 \hat{J}_z を $(|1, 1\rangle \ |1, 0\rangle \ |1, -1\rangle \ |0, 0\rangle)^t$ を基底として表現すると次のようになる。

$$\hat{J}_z : \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

同様に $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}^2$ の行列表現を求めると以下のようなになる。

$$\hat{J}_x : \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{J}_y : \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & i/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{J}^2 : \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

最後の式は対角要素が $j(j+1)$ であることから、上三つの状態が $j=1$ 、下一つが $j=0$ であることを示し、これと \hat{J}_z の対角要素から、この結果からも、すでに述べた角運動量状態であることが理解できる。

問題 8.4 \hat{J}_x 、 \hat{J}_y の行列表現を誘導してみよ。 \hat{J}^2 については、前二者の行列要素から計算せよ。

ヒント 例えば、

$$(J_{1x} + J_{2x}) |1, 1\rangle = \frac{\hbar}{2} (\sigma_{1x} + \sigma_{2x}) |_{+1+2}\rangle = \frac{\hbar}{2} |_{-1+2}\rangle + \frac{\hbar}{2} |_{+1-2}\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} |1, 0\rangle$$

など。

8.3 任意の角運動量の合成

クレプシュゴルダン係数

第 9 章

多粒子系

9.1 ボーズ粒子

互いに区別できる粒子二個が共存する状態 $|\Psi\rangle$ を考えよう。例えば陽子一個と、電子一個で成るシステムなどを考えよう。状態 $|\Psi\rangle$ として、粒子 X が状態 ψ_1 にあって、粒子 Y が状態 ψ_2 にある場合を考えるのは、二つの粒子が明白に区別できることから、極めて容易である。この状態 $|\Psi\rangle$ を次のように書こう。

$$|\Psi\rangle = |\psi_1, \psi_2\rangle$$

右辺の第一項のケットに粒子 X の状態を、第二項に粒子 Y の状態を書いている。

二粒子状態 $|X\rangle = |\chi_1, \chi_2\rangle$ が、別の二粒子状態 $|\Psi\rangle = |\psi_1, \psi_2\rangle$ をとる確率振幅は

$$\langle \Psi | X \rangle = \langle \psi_1, \psi_2 | \chi_1, \chi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \chi_1 \rangle \langle \psi_2 | \chi_2 \rangle$$

と、それぞれの粒子の確率振幅の積で与えられる。これは二事象の同時に起きる確率が、各事象の起きる確率の積で与えられることに対応している。

$$P(\Psi \leftarrow X) = P(\psi_1 \leftarrow \chi_1)P(\psi_2 \leftarrow \chi_2)$$

つまり、最初のブラは最初のケットとのみ関係し、次のブラは次のケットとのみ関係することがわかる。

異なる二粒子系の基底状態は、粒子 X の基底状態 $\{|X_i\rangle : i = 1, \dots\}$ と、粒子 Y の基底状態 $\{|Y_i\rangle : i = 1, \dots\}$ を用いて、 $|X_i, Y_j\rangle$ のように書ける。当然のことながら、次の

関係が成立する。

$$\langle X_i, Y_j | X_{i'}, Y_{j'} \rangle = \langle X_i | X_{i'} \rangle \langle Y_j | Y_{j'} \rangle = \delta_{X_i X_{i'}} \delta_{Y_j Y_{j'}}$$

次に、同一の二粒子からなる系の状態を考えよう。例えば、電子二個からなるような系である。この場合も異なる二粒子系の状態と同様である、と言いたいところであるが、一つだけ問題がある。二粒子が同一であることから、粒子 X が状態 $|\psi_1\rangle$ にあって、粒子 Y が状態 $|\psi_2\rangle$ にあっても、逆に、粒子 X が状態 $|\psi_2\rangle$ にあって、粒子 Y が状態 $|\psi_1\rangle$ にあっても、区別がつかないことである。つまり、「同一の二粒子が、状態 $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ にいる」という状態 $|\Psi\rangle$ は、これら二つの混合状態である可能性がある。

$$|\Psi\rangle = c|\psi_1, \psi_2\rangle + d|\psi_2, \psi_1\rangle$$

状態 $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ が正規化されており、かつ直交しているとしよう。状態 $|\Psi\rangle$ も長さ 1 であるから、

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= (c^* \langle \psi_1, \psi_2 | + d^* \langle \psi_2, \psi_1 |) (c |\psi_1, \psi_2\rangle + d |\psi_2, \psi_1\rangle) \\ &= c^* c \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle + c^* d \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle \\ &\quad + d^* c \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + d^* d \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \\ &= |c|^2 + |d|^2 = 1 \end{aligned}$$

が成立する。

さらに、この交ざり具合には、7章で述べた粒子交換時のパリティ保存の規則が成立する必要がある。ヘリウム原子核のようなボーズ粒子は、パリティ 1 でなければならないし、電子のようなフェルミ粒子は、パリティ -1 でなければならない。パリティ 1 とは二粒子を入れ換えても、状態の符号反転しないことを意味し、パリティ -1 ということは、符号が反転することを意味する。

本節では、まず同一のボーズ粒子二個を考えよう。この場合、符号反転しないから、 \hat{P} を粒子の入れ換え操作とすると、ボーズ粒子二個の作る任意の状態 $|\Psi\rangle$ に対し

$$\hat{P}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$$

が成立しなければならない。 $\hat{P}|\psi_1, \psi_2\rangle = |\psi_2, \psi_1\rangle$ などを考慮すると、 $d = c$ が導かれる。したがって正規化の条件と組み合わせると、 $c = d = 1/\sqrt{2}$ が得られる。簡単のために、位相項は無視した。

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1, \psi_2\rangle + |\psi_2, \psi_1\rangle)$$

次に、同一の二ボーズ粒子からなる系の、多粒子系基底状態を考えよう。一粒子の基底状態を $\{|S_i\rangle : i = 1, \dots, n\}$ としよう。従来のように、 $|i\rangle$ としないで S_i としたのは、後から述べる数表示と紛らわしくないようにしたものである。この基底状態は、同一の粒子であるから、両粒子について共通である。基底状態は言うまでもなく正規直交系を組むことから、上記の議論はそのまま適用でき、「同一の二ボーズ粒子が、状態 $|S_1\rangle$ と $|S_2\rangle$ にいる」という多粒子系基底状態の一つ $|\Psi\rangle$ は、

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_1, S_2\rangle + |S_2, S_1\rangle)$$

と表すことができる。この状態を、 $|S_1\rangle$ に粒子が一個あり、 $|S_2\rangle$ に粒子が一個あることから、 $|1, 1, 0, \dots, 0\rangle$ と表す。第一項が状態 $|S_1\rangle$ の粒子数、第二項が状態 $|S_2\rangle$ の粒子数、と以下 $|S_n\rangle$ までの粒子数を示している。特に、差し支えないときには、後ろの 0 ばかりの表示は示さないこともある。このように、各状態の数を示す表現法を、数表示 (number representation) と呼ぶ。つまり、

$$|1, 1, 0, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_1, S_2\rangle + |S_2, S_1\rangle)$$

である。

もう少し複雑な数表示を検討してみよう。 $|1, 1, 0, 1\rangle$ は、 $|S_1\rangle$ と $|S_2\rangle$ と $|S_4\rangle$ の各状態に、各々一個ずつの粒子の存在する状態であるが、どの二つの粒子状態を差し替えても、符号反転せず、同じ形を保つためには、次のように、粒子状態を入れ換えた $3! = 6$ 個の組み合わせの項すべてが現れる必要がある。

$$\begin{aligned} |1, 1, 0, 1\rangle = & c(|S_1, S_2, S_4\rangle + |S_1, S_4, S_2\rangle \\ & + |S_2, S_1, S_4\rangle + |S_2, S_4, S_1\rangle \\ & + |S_4, S_1, S_2\rangle + |S_4, S_2, S_1\rangle) \end{aligned}$$

言うまでもなく、各項の最初のケットが第一粒子、第二のケットが第二粒子、第三のケットが第三粒子に対応する。今後、特に混乱のないときには、粒子を区別する指標は省略する。 c を求めてみよう。この状態自身のブラ状態を、左から掛けてみると、全部で 36 項の積が生じるが、各項で、同一粒子のブラ状態とケット状態が等しいということが三粒子全部に対し成立しないと、その項は直交性から 0 となる。したがって、6 項しか生き残らない。各項は正規性から 1 となるから、右辺は $6|c|^2$ となる。これが 1 であることから、 $c = 1/\sqrt{6}$ となる。一般に粒子数 N 個の場合、 $c = 1/\sqrt{N!}$ となる。

ある粒子状態に、複数の粒子が入っている場合には、上に述べたことに若干の補正が必要となる。例えば、 $|1, 2\rangle$ と、総粒子数は三個であるが、 $|S_2\rangle$ 状態に二個の粒子が入って

いる場合を考えよう。この場合も形式的に、6項すべてを書いてみると、上式右辺の4をすべて2に置き換えるだけでよいから、

$$|1, 2\rangle = c(|S_1, S_2, S_2\rangle + |S_1, S_2, S_2\rangle + |S_2, S_1, S_2\rangle + |S_2, S_2, S_1\rangle + |S_2, S_1, S_2\rangle + |S_2, S_2, S_1\rangle)$$

が得られる。明らかに同じ形の項が二項ずつ現れている。この重複は、粒子数2の入れ換え、2!だけあるので、純粋に独立な項は、一般に、 $N!/(N_1!N_2!\cdots N_n!)$ 個となるが、ここではあえて上記の形のままとしておこう。さて、 c を求めてみよう。先と同様に、上記状態のブラを左から掛けると、今度は同じ項が2倍あるので、 6×2 個の1が発生する。このことから、 c は $1/\sqrt{12}$ 、一般には、 $1/\sqrt{N!N_1!N_2!\cdots N_n!N!}$ となる。

もっと沢山のボーズ粒子のある系について一般的に考えよう。各粒子の取り得る基底状態 $|S_1\rangle, |S_2\rangle, \dots, |S_n\rangle$ とし、それぞれの状態に N_1, N_2, \dots, N_n 個のボーズ粒子があるとしよう。上の式からの類推で、数表示の状態は次のように表現できる。

$$|N_1, N_2, \dots, N_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!N_1!N_2!\cdots N_n!N!}} \times \sum_{\alpha} \hat{P}_{\alpha} \underbrace{(|S_1, S_1, \dots, S_1, S_2, \dots, S_2, \dots, S_n, \dots, S_n\rangle)}_N$$

ここで、 \hat{P}_{α} は、右の各ケットの中身の基底状態を、互いに入れ換えることを示し、 \sum_{α} により、あらゆる入れ換えに対する合計を行うことを示している。ここで示した数表示の N_1, N_2, \dots, N_n をいろいろに変化させたものが、ボーズ粒子の多粒子系基底状態である。

問題 9.1

$$\langle N_1, \dots, N_n | N'_1, \dots, N'_n \rangle = \delta_{N_1 N'_1} \cdots \delta_{N_n N'_n}$$

を証明せよ。

9.2 フェルミ粒子

電子系のような同一のフェルミ粒子からなる系でも、ボーズ粒子系と同じような定式化が可能である。唯一異なるのは、フェルミ粒子系の場合、粒子交換に関するパリティが

-1 であることである。パリティ -1 ということは二つの粒子を入れ換えると、符号反転することを意味する。二つのフェルミ粒子の片方が、状態 S_1 にあり、もう片方が、状態 S_2 にある場合の二粒子状態 $|\Psi\rangle$ は、ボーズ粒子の場合のように、

$$|\Psi\rangle = c|S_1, S_2\rangle + d|S_2, S_1\rangle$$

と表現できる。ただし、 $|c|^2 + |d|^2 = 1$ である。フェルミ粒子の場合、 \hat{P} を粒子の入れ換え操作とすると、

$$\hat{P}|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle$$

が成立しなければならない。 $\hat{P}|S_1, S_2\rangle = -|S_2, S_1\rangle$ などを考慮すると、 $d = -c$ が導かれる。簡単のために普通、 $c = -d = 1/\sqrt{2}$ とする。

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_1, S_2\rangle - |S_2, S_1\rangle)$$

あるいは、数表示すると、

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_1, S_2\rangle - |S_2, S_1\rangle)$$

である。

もう少し、複雑な場合として $|1, 1, 0, 1\rangle$ なる多粒子状態を考えよう。どの二つの粒子状態を差し替えても、同じ形で符号反転だけをするようにするためには、次のように、粒子状態を入れ換えた $3! = 6$ 個の組み合わせの項すべてが現れる必要がある。

$$\begin{aligned} |1, 1, 0, 1\rangle = & c(|S_1, S_2, S_4\rangle - |S_1, S_4, S_2\rangle \\ & - |S_2, S_1, S_4\rangle + |S_2, S_4, S_1\rangle \\ & + |S_4, S_1, S_2\rangle - |S_4, S_2, S_1\rangle) \end{aligned}$$

ただし、ボーズ粒子と異なり、適宜、負符号が入る必要がある。最初の項のいずれか二粒子の状態を入れ換えて作られる項には負符号を付してある。その他の正符号を持つ項は、最初の項から二粒子交換を二回行わないと作られない性質を持っている。一般に、二粒子交換を奇数回行うことを奇置換、偶数回行うことを偶置換と呼び、最初の項から奇置換で生成される項には負符号を、偶置換で生成される項には正符号を付ける。こうした符号の付け方は、行列式の計算の際にも使われ、上式を行列式表示した Slater 行列式で議論することも少なくない。正規化定数 c は、ボーズ粒子と同様、 $1/\sqrt{N!}$ となる。

フェルミ粒子の場合、同じ状態に二つの粒子が入っている場合には、例えば、

$$|1, 2\rangle = c(|S_1, S_2, S_2\rangle - |S_1, S_2, S_2\rangle - |S_2, S_1, S_2\rangle \\ + |S_2, S_2, S_1\rangle + |S_2, S_1, S_2\rangle - |S_2, S_2, S_1\rangle) = 0$$

のように、0 となってしまふ。つまり、電子は同じ状態に二個以上入ることはできない。これは、パウリの排他原理 (Pauli exclusion principle) と呼ばれ、あらゆるフェルミ粒子に対し成立する規則である。

もっと沢山の粒子のあるシステムを考えよう。状態 $|S_1\rangle, |S_2\rangle, \dots, |S_n\rangle$ に、それぞれ N_1, N_2, \dots, N_n 個のフェルミ粒子があるとしよう。この場合も、ボーズ粒子とほぼ同様な表現ができる。

$$|N_1, N_2, \dots, N_n\rangle = (N!)^{-1/2} \\ \times \sum_{\alpha} (-1)^{P_{\alpha}} \hat{P}_{\alpha} \underbrace{|S_1, S_1, \dots, S_1\rangle}_{N_1} \underbrace{|S_2, \dots, S_2\rangle}_{N_2} \dots \underbrace{|S_n, \dots, S_n\rangle}_{N_n}$$

$\underbrace{\hspace{15em}}_N$

ここで、各記号の意味は、ボーズ粒子の場合とほぼ同様である。つまり \hat{P}_{α} は、右のケットの中身の各フェルミ粒子の状態を入れ換えることを示す。また、 \sum_{α} はあらゆる入れ換えを合計することを示す。フェルミ粒子の固有な点は、まず、右のケットの前に、適宜、負符号のつくことである。ケット内の任意に並んだ状態の序列は、先にも述べたように、基本の序列に対し任意の二粒子を入れ換える作業を何回か繰り返すことで、実行できるが、その置換数 P_{α} が奇数回の場合は負符号を付けるため、 $(-1)^{P_{\alpha}}$ を付けている。

また、 N_1, N_2 などは、原理的にはどんな数でもよいが、フェルミ粒子の場合には、それらが 2 以上であると、右辺に必ず、同じ形の符号反転した項が現れて、キャンセルするため、結果として 0 となる。つまり、 N_1, N_2 などは、すべて 0、1 のいずれかとなる。これはパウリの禁止律の一般的な表現である。なお、ボーズ粒子については、パウリの禁止律のようなものではなく、一つの状態にいくつの粒子が入ってもかまわない。また正規化定数についてであるが、 $0!$ も $1!$ も 1 であるから項の総数は $N!$ となり、正規化定数はボーズ粒子の場合に対し、きわめて簡単な $1/\sqrt{N!}$ となっている。ここで示した数表示の N_1, N_2, \dots, N_n をいろいろに変化させたものが、フェルミ粒子の多粒子系基底状態である。

問題 9.2

$$\langle N_1, \dots, N_n | N'_1, \dots, N'_n \rangle = \delta_{N_1 N'_1} \dots \delta_{N_n N'_n}$$

を証明せよ。

9.3 多粒子系のハミルトニアン

多粒子系の運動を議論するには、多粒子系のハミルトニアンがわからないといけない。簡単なシステムを例に多粒子系のハミルトニアンを求めてみよう。ここで議論の対象とするのは、格子点が二個で、かつ粒子も二個しかない系である。粒子が一個の場合は、基底状態として $|S_1\rangle$ 、 $|S_2\rangle$ の二状態がある。 S_1 とは粒子が第一番目の格子点にいる状態、 S_2 とは第二番目の格子点にいる状態である。このシステムのハミルトニアン \hat{H} をこれら二状態を基底にして展開した成分は、4章で議論したように、

$$\begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$$

で与えられる。つまり

$$\begin{aligned} \hat{H} |S_1\rangle &= E_0 |S_1\rangle - A |S_2\rangle \\ \hat{H} |S_2\rangle &= -A |S_1\rangle + E_0 |S_2\rangle \end{aligned}$$

が成立する。

次に、同じハミルトニアンを持つ区別できる二粒子 X 、 Y が、二格子点のシステムに存在する場合を考えてみよう。この場合、考え得る基底状態は $|S_1, S_1\rangle$ 、 $|S_1, S_2\rangle$ 、 $|S_2, S_1\rangle$ 、 $|S_2, S_2\rangle$ の四つがある。これらを基底状態にしてハミルトニアンの各成分を計算してみよう。ハミルトニアンには粒子 X の \hat{H}_X と粒子 Y の \hat{H}_Y があるが、エネルギーの加法性を考慮して、全体のハミルトニアン \hat{H} を $\hat{H}_X + \hat{H}_Y$ としてみよう。 \hat{H}_X は粒子 X にだけ関係し、粒子 Y にはまったく関係しないものとする。例えば

$$\hat{H}_X |S_1, S_2\rangle = E_0 |S_1, S_2\rangle - A |S_2, S_2\rangle$$

のように変形される。 \hat{H}_Y は逆である。例えば

$$\hat{H}_Y |S_1, S_2\rangle = -A |S_1, S_1\rangle + E_0 |S_1, S_2\rangle$$

のように変形される。

さらに二粒子間に力が働いている場合、例えばクーロン相互作用などがあると、これに \hat{V}_{XY} のようなポテンシャル項が加わる。こうした相互作用のポテンシャルもハミルトニアンの中に入れ、 $H = \hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY}$ としよう。ここでは二粒子が

隣の格子にいるときだけ $-B$ になるものとしよう。これはどういうことかというところ
 $\langle S_1, S_2 | \hat{V}_{XY} | S_1, S_2 \rangle_Y = -B$ のように左右に異なる粒子が同じ場所の状態がきたときだけ
 意味がある。つまり $\hat{V}_{XY} | S_1, S_2 \rangle = -B | S_1, S_2 \rangle$ と置き換えてよいことを示している。
 ともに同じ場所にいるときには 0 となる。

さてハミルトニアンの成分のうち代表的な項の計算をしてみよう。

$$(\hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY}) | S_1, S_1 \rangle = E_0 | S_1, S_1 \rangle - A | S_2, S_1 \rangle + E_0 | S_1, S_1 \rangle - A | S_1, S_2 \rangle$$

であるから、

$$\begin{aligned} \langle S_1, S_1 | (\hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY}) | S_1, S_1 \rangle &= 2E_0 \\ \langle S_1, S_2 | (\hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY}) | S_1, S_1 \rangle &= -A \\ \langle S_2, S_1 | (\hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY}) | S_1, S_1 \rangle &= -A \\ \langle S_2, S_2 | (\hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY}) | S_1, S_1 \rangle &= 0 \end{aligned}$$

が得られる。さらに

$$\begin{aligned} (\hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY}) | S_1, S_2 \rangle &= E_0 | S_1, S_2 \rangle - A | S_2, S_2 \rangle + E_0 | S_1, S_2 \rangle - A | S_1, S_1 \rangle - B | S_1, S_2 \rangle \\ (\hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY}) | S_2, S_1 \rangle &= E_0 | S_2, S_1 \rangle - A | S_1, S_1 \rangle + E_0 | S_2, S_1 \rangle - A | S_2, S_2 \rangle - B | S_2, S_1 \rangle \\ (\hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY}) | S_2, S_2 \rangle &= E_0 | S_2, S_2 \rangle - A | S_1, S_2 \rangle + E_0 | S_2, S_2 \rangle - A | S_2, S_1 \rangle \end{aligned}$$

などから、次の行列が得られる。

$$\begin{pmatrix} 2E_0 & -A & -A & 0 \\ -A & 2E_0 - B & 0 & -A \\ -A & 0 & 2E_0 - B & -A \\ 0 & -A & -A & 2E_0 \end{pmatrix}$$

元の一粒子ハミルトニアンは隣への移動の確率振幅はあるが、これらの結果を見ると、
 一粒子だけが移動する遷移には値が存在するが、二粒子が同時に移動するような遷移には
 値が存在していない。

この行列から、固有値問題を解いてみると、以下の解が得られる。

$$\begin{aligned} E = 2E_0 : \quad & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, & E = 2E_0 - 4Ab : \quad & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ E = 2E_0 - 2A(b \pm \sqrt{1+b^2}) : \quad & \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ b \pm \sqrt{1+b^2} \\ b \pm \sqrt{1+b^2} \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\text{ただし } b = B/4A, \quad \alpha = 2\sqrt{1+b^2} \pm b\sqrt{1+b^2}$$

粒子間の相互作用 B が無いときには、エネルギー固有値は $2E_0 - 2A$ 、 $2E_0$ (二個)、 $2E_0 + 2A$ の四つであるが、単一粒子がそれぞれ $E_0 - A$ 、 $E_0 + A$ の固有値を持つことを考えれば、よく理解できる答えである。

9.4 ボーズ粒子系のハミルトニアン

次に、同一のボーズ粒子系のハミルトニアンを求めてみよう。ここでも、前節と同様に二つのボーズ粒子が二格子上にある場合を考えよう。その他の条件は前節とまったく同じであるとしよう。この場合、基底状態としては各格子点にいくつの粒子が入っているかを記述した数表現で与えられ、

$$\begin{aligned} |2, 0\rangle &= |S_1, S_1\rangle \\ |1, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_1, S_2\rangle + |S_2, S_1\rangle) \\ |0, 2\rangle &= |S_2, S_2\rangle \end{aligned}$$

と、それぞれ、二つの粒子とも左端の格子に存在する状態、左端と右端の一つずつ入っている状態、右端の格子に二つともいる状態になる。

まず、これらの ket 状態に \hat{H} を掛けたものを求めよう。

$$\begin{aligned} \hat{H}|2, 0\rangle &= (\hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY})|S_1, S_1\rangle \\ &= E_0|S_1, S_1\rangle - A|S_2, S_1\rangle + E_0|S_1, S_1\rangle - A|S_1, S_2\rangle = 2E_0|2, 0\rangle - \sqrt{2}A|1, 1\rangle \end{aligned}$$

同様に

$$\begin{aligned} \hat{H}|1, 1\rangle &= (\hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY})\frac{1}{\sqrt{2}}(|S_1, S_2\rangle + |S_2, S_1\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(E_0|S_1, S_2\rangle - A|S_2, S_2\rangle + E_0|S_2, S_1\rangle - A|S_1, S_1\rangle + E_0|S_1, S_2\rangle - A|S_1, S_1\rangle \\ &\quad + E_0|S_2, S_1\rangle - A|S_2, S_2\rangle - B|S_1, S_2\rangle - B|S_2, S_1\rangle) \\ &= -\sqrt{2}A|2, 0\rangle + (2E_0 - B)|1, 1\rangle - \sqrt{2}A|0, 2\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}|0, 2\rangle &= (\hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY})|S_1, S_1\rangle \\ &= E_0|S_1, S_1\rangle - A|S_2, S_1\rangle + E_0|S_1, S_1\rangle - A|S_1, S_2\rangle = -\sqrt{2}A|1, 1\rangle + 2E_0|0, 2\rangle \end{aligned}$$

が得られる。これらの結果より、 \hat{H} の成分は

$$\begin{pmatrix} 2E_0 & -\sqrt{2}A & 0 \\ -\sqrt{2}A & 2E_0 - B & -\sqrt{2}A \\ 0 & -\sqrt{2}A & 2E_0 \end{pmatrix}$$

のようになる。この結果は先に求めた同一でない二粒子のハミルトニアンの第1、4行はそのままにして第2、3行を $1/\sqrt{2}$ 倍ずつして加え合わせ、さらに第1、4列をそのままにして第2、3列をやはり $1/\sqrt{2}$ 倍ずつして加え合わせた結果になっている。この場合も、 A は一粒子だけが移動する遷移項にだけ現れている。

この固有値問題を解くと

$$E = 2E_0 : \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix},$$

$$E = 2E_0 - 2A(b \pm \sqrt{1+b^2}) : \quad \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}(b \pm \sqrt{1+b^2}) \\ 1 \end{pmatrix}$$

ただし $b = B/4A$, $\alpha = 2\sqrt{1+b^2 \pm b\sqrt{1+b^2}}$

となっており、同一でない二粒子のハミルトニアンの固有値問題と深い繋がりを感じさせる。

9.5 フェルミ粒子系のハミルトニアン

同一のフェルミ粒子系のハミルトニアンを求めてみよう。ここでも、前節と同様に二つのフェルミ粒子が二格子点にある場合を考えよう。その他の条件は前節とまったく同じであるとしよう。この場合も、基底状態としては各格子点にいくつの粒子が入っているかを記述した数表現を考える。

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_1, S_2\rangle - |S_2, S_1\rangle)$$

と、今度は同一の場所に二粒子が入るような状態はそもそも無くなる。唯一存在する状態は左端と右端に一つずつ入っている状態である。

この ket 状態に \hat{H} を掛けたものを求めよう。

$$\begin{aligned} \hat{H}|1, 1\rangle &= (\hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{V}_{XY}) \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_1, S_2\rangle - |S_2, S_1\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(E_0|S_1, S_2\rangle - A|S_2, S_2\rangle - E_0|S_2, S_1\rangle + A|S_1, S_1\rangle + E_0|S_1, S_2\rangle - A|S_1, S_1\rangle \\ &\quad - E_0|S_2, S_1\rangle + A|S_2, S_2\rangle - B|S_1, S_2\rangle + B|S_2, S_1\rangle) \\ &= (2E_0 - B)|1, 1\rangle \end{aligned}$$

これより直ちに \hat{H} の一行一列の成分が求められる。

$$(2E_0 - B)$$



図 9.1

この結果は先に求めた同一でない二粒子のハミルトニアン第 1、4 行を捨て、第 2、3 行を $1/\sqrt{2}$ 倍ずつして差をとり、さらに第 1、4 列を捨て、第 2、3 列をやはり $1/\sqrt{2}$ 倍ずつして差をとった結果になっている。

この固有値問題を解くと

$$E = 2E_0 - B: \quad (1)$$

となっており、ここでも同一でない二粒子のハミルトニアンの固有値問題との深い繋がりを感じさせる。

実際、同一でない二粒子とボーズ二粒子、フェルミ二粒子のエネルギー固有値が B を増やしていくとどう変化するかを図示すると 図 9.1 のように、同一でない二粒子系の四つの固有値のうち三つがボーズ粒子系の固有値に、一つがフェルミ粒子系の固有値になっている。この様子は、第 8 章で述べた二つのスピン $1/2$ 粒子の結合系の答えと酷似している。確かに、スピン交換と粒子交換には高い相関があるので、当り前の結果ともいえよう。事実、半整数スピン粒子がフェルミ粒子となり、整数スピン粒子がボーズ粒子になる秘密はこの辺にあるのである。

9.6 多粒子系のハミルトニアンの一般的な取扱い

これまでの三つの節で述べてきた多粒子系のハミルトニアンを、もう少し多数の粒子系について計算しようとする、その手間は莫大なものとなる。これを統一的にもっと簡単にする方法を示すのが、本節の目的である。それには、角運動量の議論で用いた昇階オペレータや降階オペレータの概念を導入すると、便利である。どのように便利であるかは後にわかるが、まず、導入を試みよう。

最初に互いに区別できるが、同じハミルトニアンを持つ多粒子系を考えよう。多粒子系

の基底状態を記述するのにそれぞれの粒子の基底状態を順に書いていった

$$|s_1, s_2, \dots\rangle$$

の形を考える。 s_1 や s_2 などは $\{S_i : i = 1, 2, \dots\}$ の基底状態のいずれかをとる。

一番目の粒子にかかわる一粒子ハミルトニアン \hat{H}_1 について

$$\hat{H}_1 |s'_1, s'_2, \dots\rangle = \sum_{s_1} H_{s_1 s'_1} |s_1, s'_2, \dots\rangle$$

が成立するので、多粒子系の一粒子ハミルトニアンについても次のように変形できる。

$$\begin{aligned} \hat{H} |s'_1, s'_2, \dots\rangle &= (\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots) |s'_1, s'_2, \dots\rangle \\ &= \sum_{s_1} H_{s_1 s'_1} |s_1, s'_2, \dots\rangle + \sum_{s_2} H_{s_2 s'_2} |s'_1, s_2, \dots\rangle + \dots \end{aligned}$$

これより、

$$\begin{aligned} \langle s_1, s_2, \dots | \hat{H} |s'_1, s'_2, \dots\rangle &= \langle s_1, s_2, \dots | \sum_{s''_1} H_{s''_1 s'_1} |s''_1, s'_2, \dots\rangle + \langle s_1, s_2, \dots | \sum_{s''_2} H_{s''_2 s'_2} |s'_1, s''_2, \dots\rangle + \dots \\ &= \sum_{s''_1} H_{s''_1 s'_1} \langle s_1, s_2, \dots | s''_1, s'_2, \dots\rangle + \sum_{s''_2} H_{s''_2 s'_2} \langle s_1, s_2, \dots | s'_1, s''_2, \dots\rangle + \dots \\ &= \sum_{s''_1} H_{s''_1 s'_1} \delta_{s_1, s''_1} \delta_{s_2, s'_2} \dots + \sum_{s''_2} H_{s''_2 s'_2} \delta_{s_1, s'_1} \delta_{s_2, s''_2} \dots + \dots \\ &= H_{s_1 s'_1} \delta_{s_2, s'_2} \dots + H_{s_2 s'_2} \delta_{s_1, s'_1} \dots + \dots \end{aligned}$$

これは、先に異なる二粒子系のハミルトニアンとして導いた結果と同じであるが、さらに降階、昇階オペレータを導入すると美しい形とすることができる。まず、降階オペレータとして s_i の状態にある i 番目の粒子を取り去るオペレータ \hat{a}_{i, s_i} を考える。また、 \hat{J}_- に対し、共役オペレータ \hat{J}_+ があったように、 \hat{a}_i の共役オペレータ \hat{a}_{i, s_i}^\dagger を昇階オペレータとし、 i 番目の粒子を新たに生成して s_i の状態にするオペレータとしよう。

$$\begin{aligned} \hat{a}_{i, s_i} |s_1, \dots, s_i, \dots, s_n\rangle &= \alpha_{i, s_i} |s_1, \dots, -, \dots, s_n\rangle \\ \hat{a}_{i, s_i}^\dagger |s_1, \dots, -, \dots, s_n\rangle &= \beta_{i, s_i} |s_1, \dots, s_i, \dots, s_n\rangle \end{aligned}$$

i 番目の状態が $-$ と書いてあるのは、その粒子が無いことを示す。 \hat{a}_{i, s_i}^\dagger と \hat{a}_{i, s_i} は、生成オペレータ (creation operator)、消滅オペレータ (annihilation operator) とも呼ばれる。角運動量の場合のように、 $\beta_{i, s_i} = \alpha_{i, s_i}^*$ が成立する。ここでは共に 1 としておこう。

こうしたオペレータを利用すると、定義から直ちに分かるように、任意の粒子の状態を変えることができる。

$$\hat{a}_{i,s_i}^\dagger \hat{a}_{i,s'_i} |s'_1, \dots, s'_i, \dots, s'_n\rangle = |s'_1, \dots, s_i, \dots, s'_n\rangle$$

このことから、

$$\langle s_1, s_2, \dots | \hat{a}_{1,s_1}^\dagger \hat{a}_{1,s'_1} |s'_1, s'_2, \dots\rangle = \langle s_1, s_2, \dots | s_1, s'_2, \dots\rangle = \delta_{s_2, s'_2} \dots$$

などの式が導かれる。これらの式を用いると、

$$\begin{aligned} & \langle s_1, s_2, \dots | \hat{H} |s'_1, s'_2, \dots\rangle \\ &= H_{s_1 s'_1} \langle s_1, s_2, \dots | \hat{a}_{1,s_1}^\dagger \hat{a}_{1,s'_1} |s'_1, s'_2, \dots\rangle + H_{s_2 s'_2} \langle s_1, s_2, \dots | \hat{a}_{2,s_2}^\dagger \hat{a}_{2,s'_2} |s'_1, s'_2, \dots\rangle + \dots \\ &= \langle s_1, s_2, \dots | \sum_i \hat{a}_{i,s_i}^\dagger H_{s_i s'_i} \hat{a}_{i,s'_i} |s'_1, s'_2, \dots\rangle \end{aligned}$$

と変形できる。結論として

$$\hat{H} = \sum_i \hat{a}_{i,s_i}^\dagger H_{s_i s'_i} \hat{a}_{i,s'_i}$$

と表すことができる。

ボーズ粒子も同様に扱うことができる。ただし、基底状態が数表示になるので、それを粒子表示に変えてから計算をする。

$$\begin{aligned} \hat{H} |N'_1, N'_2, \dots\rangle &= \hat{H} \frac{1}{\sqrt{N'_1! N'_2! \dots N'_n! N'_n!}} \sum_\alpha \hat{P}_\alpha \underbrace{|S'_1, S'_1, \dots, S'_1\rangle}_{N'_1} \underbrace{|S'_2, \dots, S'_2\rangle}_{N'_2} \dots \underbrace{|S'_n, \dots, S'_n\rangle}_{N'_n} \\ &= \hat{H} |s'_1, s'_2, \dots\rangle \\ &= (\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots) |s'_1, s'_2, \dots\rangle \\ &= \sum_{s_1} H_{s_1 s'_1} |s_1, s'_2, \dots\rangle + \sum_{s_2} H_{s_2 s'_2} |s'_1, s_2, \dots\rangle + \dots \end{aligned}$$

降階オペレータとして、 i 番目の状態 $|S_i\rangle$ にある粒子数 N_i を減らすオペレータ \hat{a}_i を考える。 \hat{J}_- に対し、共役オペレータ \hat{J}_+ があったように、の関係が、互いに共役であったように、 \hat{a}_i の共役オペレータ \hat{a}_i^\dagger を昇階オペレータとし、状態 $|S_i\rangle$ にある粒子数 N_i を増やすオペレータとしよう。

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger |N_1, \dots, N_i, \dots, N_n\rangle &= \alpha_{N_i} |N_1, \dots, N_i + 1, \dots, N_n\rangle \\ \hat{a}_i |N_1, \dots, N_i, \dots, N_n\rangle &= \beta_{N_i} |N_1, \dots, N_i - 1, \dots, N_n\rangle \end{aligned}$$

\hat{a}_i^\dagger と \hat{a}_i は、生成オペレータ (creation operator)、消滅オペレータ (annihilation operator) とも呼ばれる。角運動量の場合のように、 $\beta_{N_i+1} = \alpha_{N_i}^*$ が成立する。

この係数 α であるが、角運動量の場合は $\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$ であった。この形は m が $-j-1$ と j でちょうど 0 となるため、 $-j$ から j 以外への昇階、降階を停めるのに有効であった。ボーズ粒子の個数の場合は N_i は、0 から ∞ までを許されている。このため、 $N_i = -1$ で 0 となるよう、 $\alpha_{N_i} = \sqrt{N_i+1}$ であると都合が良い。つまり、

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger |N_1, \dots, N_i, \dots, N_n\rangle &= \sqrt{N_i+1} |N_1, \dots, N_i+1, \dots, N_n\rangle \\ \hat{a}_i |N_1, \dots, N_i, \dots, N_n\rangle &= \sqrt{N_i} |N_1, \dots, N_i-1, \dots, N_n\rangle\end{aligned}$$

である。昇階のときは、いくらでも上がれるが、降階のときは $N_i = 0$ になると、それから下の状態は生成できないことが明らかであろう。

ここで定義した昇階、降階オペレータについては、次の各式の成立することが、簡単に示される。

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |N_1, \dots, N_i, \dots, N_n\rangle &= N_i |N_1, \dots, N_i, \dots, N_n\rangle \\ \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger |N_1, \dots, N_i, \dots, N_n\rangle &= (N_i+1) |N_1, \dots, N_i, \dots, N_n\rangle \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] &= 1 \\ [\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_i^\dagger] &= 0 \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_i] &= 0\end{aligned}$$

また、いうまでもないが、他の状態の昇階、降階オペレータ $\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_j$ とは関係がない。つまり、すべて互いに交換可能である。

さて、ハミルトニアンが一粒子ハミルトニアンと二粒子ハミルトニアンの和で与えられるとしよう。多粒子ハミルトニアン、多粒子系基底状態に対する成分を求めてみよう。

面倒なのは、多粒子系基底状態がいくつかの状態の混合状態で与えられることである。例えば、三粒子系で、一粒子ハミルトニアンを $|1, 2\rangle$ にほどこすと、

$$\begin{aligned}(\hat{T}_X + \hat{T}_Y + \hat{T}_Z) |1, 2\rangle \\ = (\hat{T}_X + \hat{T}_Y + \hat{T}_Z)(2 |S_1, S_2\rangle_Y |S_2\rangle_Z + 2 |S_2, S_1\rangle_Y |S_2\rangle_Z + 2 |S_2, S_2\rangle_Y |S_1\rangle_Z) / \sqrt{6 \times 2} \\ = (\hat{T} |S_1, S_2\rangle_Y + |S_1\rangle_X \hat{T} |S_2\rangle_Y + \hat{T} |S_2, S_1\rangle_Y + |S_2\rangle_X \hat{T} |S_1\rangle_Y) / \sqrt{2}\end{aligned}$$

ここで、 $\hat{T}_X |S_1\rangle_X$ などは $\hat{T} |S_1\rangle_X$ などと略記した。このことから、例えば、 $\langle 2, 0 | (\hat{T}_X + \hat{T}_Y) |1, 1\rangle$ は

$$\begin{aligned}\langle 2, 0 | (\hat{T}_X + \hat{T}_Y) |1, 1\rangle \\ = (\langle S_1 | \langle S_1 |) (\hat{T} |S_1, S_2\rangle_Y + \hat{T} |S_2, S_1\rangle_Y + |S_1\rangle_X \hat{T} |S_2\rangle_Y + |S_2\rangle_X \hat{T} |S_1\rangle_Y) / \sqrt{2} \\ = (\langle 1 | \hat{T} |S_1\rangle_X \langle 1 | 2_Y + \langle 1 | \hat{T} |S_2\rangle_X \langle 1 | 1_Y + \langle 1 | |S_1\rangle_X \langle 1 | \hat{T} |S_2\rangle_Y + \langle 1 | |S_2\rangle_X \langle 1 | \hat{T} |S_1\rangle_Y) / \sqrt{2}\end{aligned}$$

$$= \sqrt{2} \langle 1 | \hat{T} | S_2 \rangle$$

となる。ここで、 $\langle S_1 | \hat{T}_X | S_1 \rangle_X$ などは $\langle 1 | \hat{T} | S_1 \rangle_X$ などと略記した。さらに、 $\langle 1 | \hat{T} | S_2 \rangle_X$ も $\langle 1 | \hat{T} | S_2 \rangle_Y$ も、粒子が同じであるから、互いに等しくなることを利用している。

こうした作業を、もっと組織的にやってみよう。まず、 $\sum_I \hat{T}_I | N'_1, \dots, N'_n \rangle$ を求めよう。ここで、 I は粒子番号を走査する変数である。

$$\sum_I \hat{T}_I | N'_1, \dots, N'_n \rangle =$$

一般に、 $\langle N_1, \dots, N_n | \sum_i \hat{T}_i | N'_1, \dots, N'_n \rangle$ を求めることを考える。 $\langle \dots |$ も $|\dots \rangle$ も粒子状態に展開すると極めて多数の項により構成されているから、この計算は一見大変に見える。しかし、生き残る項は意外と少ない。というのは、 \hat{T}_i は、第 i 番目だけの粒子に関係し、その他の粒子の状態はすべて、ブラ側もケット側も等しくなければならないからである。特に、 $\langle \psi_i | \hat{T} | \psi_j \rangle$ なる項に着目し、その係数を求めてみよう。この場合、 N_i と N_j 以外の粒子数は、ブラ側もケット側もすべて等しくなければならない。さらに、各粒子状態に展開したときの、ブラ側の粒子状態の並びとケット側の粒子状態の並びも、すべて等しくなければならない。

$$\langle N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots | \sum_i \hat{T}_i | N_1, \dots, N'_i, \dots, N'_j, \dots \rangle =$$

一方、

例えば、格子の左端に二つの粒子とも存在すると $|2, 0\rangle$ となるし、左端と右端の一つずつ入っているときには $|1, 1\rangle$ となる。前者の形式の基底状態が N 個、後者の形式の基底状態が ${}_n C_2 = n(n-1)/2$ 個あるから、全部で $n(n+1)/2$ 個の基底状態があることになる。このすべての組合せに対して、ハミルトニアン要素を求める必要がある。ハミルトニアン \hat{H} は、粒子 X に関するものと粒子 Y に関するものの総和としておこう。先にも述べたように、二粒子に係わる項は無視する。