量子力学II講義ノート

上田正仁

平成30年5月5日

はじめに

講義情報上田研の HP　→　lecture →　2018 年度　量子力学 II

本講義の目的は、量子力学 I に引き続いて量子力学の体系を教授することにある。従って、量子力学 I で学んだ基礎は（おおむね）既知とする。教科書については時の試練を耐えた教科書の中で自分に合ったものを一つ選んでそれを（つまみ読みではなく）通読することをお薦めする。ただし、これらの教科書は量子情報や量子制御を中心として最近 20 年間の進展を取り入れていないことに注意が必要である。また、演習をしっかりとやることも大切である。

この講義ノートを作成する際に次の書籍を参考にした。

- 上田正仁　「現代量子物理学 –基礎と応用–」 培風館 (2004)
- L. D. Landau and E. M. Lifshitz, “Quantum Mechanics” Pergamon Press (1991)
- Steven Weinberg　“Lectures on Quantum Mechanics” Cambridge University Press (2015)
- 沙川貴大、上田正仁　「量子測定と量子制御」数理科学 別冊（サイエンス社、2016）
- Asher Peres “Quantum Theory: Concepts and Methods” Kluwer Academich Publishers (2002)

目 次

第 1 章　量子力学の基礎概念 7
1.1 ヒルベルト空間 7
1.2 座標表示と運動量表示 9
1.3 量子力学の基本公理 10
1.3.1 状態 10
1.3.2 物理量（オブザーバブル） 10
1.3.3 時間発展 11
1.3.4 測定過程 12
1.3.5 グリーソンの定理 13
1.3.6 合成系 14
1.4 演算子の転置と行列要素の転置 14
1.5 密度演算子 15
1.5.1 還元密度演算子 18
1.5.2 密度演算子の時間発展 19
1.6 シュミット分解 19
1.6.1 特異値分解 20
1.7 エンタングルメント 21
1.7.1 非局所相関 22

第 2 章　エネルギー、運動量、不確定性関係 25
2.1 ハミルトニアン 25
2.2 演算子の時間微分 26
2.3 定常状態 27
2.4 エネルギー固有状態の直交性 28
2.5 交換する演算子と同時固有状態 28
2.6 Hellmann-Feynmann の定理 29
2.7 シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示 30
2.8 運動量 31
2.9 不確定性関係 31

第 3 章　シュレーディンガー方程式 33
3.1　アインシュタイン–ド・ブロイの関係式 33
3.2　量子化の規則 34
3.3　シュレーディンガー方程式 34
3.3.1　自由粒子 35
3.3.2　ガリレイ変換に対する波動関数の変換則 36
3.3.3　確率の保存と量子圧力 36
3.4　シュレーディンガー方程式の解の一般的性質 37
3.5　流れの密度 38
3.6　固有状態の一般的性質 40
3.7　1 次元系の一般的性質 41
3.7.1　固有状態の非縮退性 41
3.7.2　振動定理 41
3.8　時間反転 43

第 4 章　対称性と保存則 45
4.1　古典力学との対応 45
4.2　時間の並進対称性とエネルギー保存 45
4.3　空間の並進対称性と運動量保存 46
4.4　空間の等方性と軌道角運動量保存 48
4.5　離散対称性 49
4.5.1　パリティ 49
4.5.2　周期的対称性 50
4.6　非可換な保存量とエネルギーの縮退 51
4.7　ウィグナーの定理 52

第 5 章　角運動量 55
5.1　軌道角運動量 55
5.1.1　同時固有状態 55
5.1.2　行列要素 58
5.1.3　球面調和関数 59
5.2　スピン角運動量 65
5.3　角運動量の合成 68
5.3.1　クレプシュ–ゴルダン係数 71
5.4　パリティ 73
5.5　時間反転とクラマース縮退 74

第 6 章　調和振動子　77
6.1　1 次元調和振動子 77
6.1.1　エネルギー（フォック）基底での解 77
6.1.2　ハイゼンベルグ表示での時間発展 80
6.1.3　座標表示での解（波動関数） 81
6.1.4　完全性条件 82
6.1.5　コヒーレント状態 83
6.2　2 次元調和振動子 85
6.2.1　複素座標表示 87
6.3　3 次元調和振動子 89
6.4　補足：合流型超幾何級数 92

第 7 章　中心対称場での運動　95
7.1　2 体問題 95
7.2　球面波 97
7.3　水素原子 100
7.4　力学的対称性 103
7.5　進んだ話：隠れた対称性とリー代数 107

第 8 章　摂動論　111
8.1　時間に依存しない摂動論 111
8.1.1　0 次摂動 112
8.1.2　1 次摂動 113
8.1.3　2 次摂動 114
8.2　永年方程式 115
8.3　時間に依存する摂動論 118
8.4　ラビ振動 120
8.5　外部摂動をスイッチオンする場合 122
8.6　フェルミの黄金律 123
8.7　時間とエネルギーの不確定性関係 124

第 9 章　準古典近似　127
9.1　準古典近似の波動関数 127
9.1.1　第 0 次近似 127
9.1.2　第 1 次近似 129
9.2　準古典的波動関数の接続 129
9.3　ボーア・ゾンマーフェルトの量子化規則 131
9.4　トンネル効果 133

第 10 章 量子力学における実在論とベルの不等式 **137**
10.1 アインシュタイン・ポドルスキー・ローゼンのパラドックス 137
10.2 ベルの不等式 142

第1章　量子力学の基礎概念

1.1　ヒルベルト空間

物理現象を記述するためには物質の状態を記述する空間が必要である。ニュートン力学においてはいわゆる絶対時空がそれに当たり、特殊相対性理論ではミンコフスキー空間がその役割を果たす。量子力学ではヒルベルト空間がその役割を果たす。

ヒルベルト空間はユークリッド空間の概念を無限次元の関数空間へ拡張したものであり、波動関数など無限次元の物理量を扱う数学的な枠組みを与える。内積が定義され、2 乗可積分であり、コーシー列[1]が考えている空間内に収束するという完備性を備えた線形ベクトル空間と考えればよい。ここで線形ベクトル空間とは、交換可能な和とスカラー倍が定義され、かつ、それらの演算に関して閉じている集合である。集合の元を抽象的にベクトルと呼ぶ。

当然のことながらユークリッド空間の基本的な構造はヒルベルト空間へ受け継がれる。従って、ヒルベルト空間を導入する前にユークリッド空間におけるベクトル空間の性質を復習することから始めよう。3 次元ベクトル空間における任意の直交座標系の基底ベクトルを

$$\boldsymbol{e}_1 \equiv \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_3 \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \tag{1.1}$$

とおく。各ベクトルの転置ベクトルを $(\boldsymbol{e}_1)^t = (1, 0, 0)$、$(\boldsymbol{e}_2)^t = (0, 1, 0)$、$(\boldsymbol{e}_3)^t = (0, 0, 1)$ と書けば、内積は

$$(\boldsymbol{e}_i)^t \cdot \boldsymbol{e}_j = \delta_{ij} \tag{1.2}$$

であたえられ、また、

$$\sum_{i=1,2,3} \boldsymbol{e}_i (\boldsymbol{e}_i)^t = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \equiv \hat{I} \tag{1.3}$$

[1]無限数列 $\{x_n\}$ が $\lim\limits_{m,n \to \infty} |x_m - x_n| = 0$ を満足するとき、コーシー列であるという。距離空間において任意のコーシー列がその空間内に極限を持つとき、完備であるという。

であることがわかる。これは基底ベクトルの集合 $\{\boldsymbol{e}_i\}$ が完全系をなしていることを示している。この関係式を用いることで、基底ベクトル $\{\boldsymbol{e}_i\}$ での任意のベクトル $\boldsymbol{A}$ の表示

$$\boldsymbol{A} = \hat{I}\boldsymbol{A} = \sum_{i=1,2,3} \boldsymbol{e}_i(\boldsymbol{e}_i)^t\boldsymbol{A} = \sum_{i=1,2,3} A_i\boldsymbol{e}_i \tag{1.4}$$

を得られる。ここで $A_i := (\boldsymbol{e}_i)^t \cdot \boldsymbol{A}$ はこの基底でのベクトル $\boldsymbol{A}$ の座標 (の i 成分) である。

量子力学では列ベクトル $\boldsymbol{e}_i$ にはケットベクトル $|e_i\rangle$、行ベクトル $(\boldsymbol{e}_i)^t$ にはブラベクトル $\langle e_i|$ が対応する。内積 (1.2) には

$$\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij} \tag{1.5}$$

が対応し、また、完全性関係式 (1.3) に対応する関係式は

$$\sum_{i=1}^{d} |e_i\rangle\langle e_i| = \hat{I} \tag{1.6}$$

である。d は空間の次元である。これを完全性関係式という。連続空間の場合は和は積分に置き換わる。例えば、座標 x が連続値をとる場合は

$$\int dx\ |x\rangle\langle x| = \hat{I} \tag{1.7}$$

これは、基底ベクトルが連続値をとる場合の完全性条件である。

量子力学系は、数学的には**ヒルベルト空間**によって記述される。ヒルベルト空間は複素数体上の線形ベクトル空間であり、ベクトルはケットベクトル $|\psi\rangle$ とそれに双対のブラベクトル $\langle\psi|$、および、次の性質を満足する内積が定義されている。

- 正値性: $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$、等号は $|\psi\rangle = 0$ の場合に成立
- 線形性: $\langle\phi|(a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle) = a\langle\phi|\psi_1\rangle + b\langle\phi|\psi_2\rangle$
- 歪対称性: $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$

θ を実数の定数とすると、$|\psi\rangle$ と $e^{i\theta}|\psi\rangle$ は物理的に同じ状態を表している。これらを同一視した同値類は射線と呼ばれる。このように量子力学の状態は厳密にはベクトルではなく射線が対応するが、普通は状態ベクトルと呼ばれる。以下で状態ベクトルと呼ぶ場合は、同値類の代表元であると解釈すべきである。状態ベクトル $|\psi\rangle$ のノルムは $|||\psi\rangle|| := \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ で定義される。

基底ベクトルに対応する量は座標表示の場合は $\{|x\rangle\}$、運動量表示の場合は $\{|p\rangle\}$ と書かれる。これらはそれぞれ座標演算子と運動量演算子の固有状態の完全系を表している。波動関数 $\Psi(x,t)$ は、ベクトル $|\Psi\rangle$ の座標表示とみなすことができる。

1.2　座標表示と運動量表示

(1.4) とのアナロジーから、状態ベクトル $|\Psi\rangle$ は (1.7) を用いて

$$|\Psi\rangle = \hat{I}|\Psi\rangle = \int dx\ |x\rangle\langle x|\Psi\rangle \tag{1.8}$$

と積分形で書かれる。これは、座標演算子の固有状態 $\{|x\rangle\}$ を基底にとった場合の状態ベクトルの表現である。右辺に現れる $\langle x|\Psi\rangle$ は $\{|x\rangle\}$ を基底にとった場合のベクトル $|\Psi\rangle$ の座標の役割を果たす[2]。これが、座標表示の波動関数である。

$$\Psi(x) := \langle x|\Psi\rangle \tag{1.9}$$

同様に運動量演算子の固有状態 $\{|p\rangle\}$ を基底にとった場合の状態ベクトルの表現は

$$|\Psi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}|p\rangle\langle p|\Psi\rangle \tag{1.10}$$

と書かれる。$\langle p|\Psi\rangle$ が運動量表示の波動関数 $\tilde{\Psi}(p)$ である。

$$\tilde{\Psi}(p) := \langle p|\Psi\rangle \tag{1.11}$$

(1.10) の右辺の定数因子 $2\pi\hbar$ は便宜上導入した因子で、これに対応して完全系の式は

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar}|p\rangle\langle p| = \hat{I} \tag{1.12}$$

となる。

基底 $|p\rangle$ は定義により運動量演算子 $\hat{p} = (\hbar/i)d/dx$ の固有状態であるから、$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ が成立する。これと $\langle x|$ との内積を取ると

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle x|p\rangle = p\langle x|p\rangle \tag{1.13}$$

これから、

$$\langle x|p\rangle = (\langle p|x\rangle)^* = e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{1.14}$$

が得られる。$\langle x|p\rangle$ は**変換関数** (transformation function) と呼ばれる。

[2]ここでいう「座標」は、導入された座標軸の単位ベクトル $|x\rangle$ への状態ベクトル $|\Psi\rangle$ の射影 (内積) $\langle x|\Psi\rangle$ を意味するヒルベルト空間における抽象的な座標であり、実空間の座標と混同してはならない。

$|x\rangle$ の左側から完全系の式 (1.12) を作用させ (1.14) を代入すると

$$|x\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}|p\rangle\langle p|x\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}|p\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}px} \tag{1.15}$$

が得られる。このように、座標表示の基底と運動量表示の基底は互いにフーリエ変換で結ばれている。(1.15) に共役な式

$$\langle x| = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\langle p|e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{1.16}$$

と $|\Psi(t)\rangle$ との内積を取ると、

$$\Psi(x,t) = \langle x|\Psi(t)\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\langle p|\Psi(t)\rangle e^{\frac{i}{\hbar}px} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\tilde{\Psi}(p,t)e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{1.17}$$

が得られ、座標表示の波動関数と運動量表示の波動関数もまた互いにフーリエ変換で結ばれていることがわかる。ここで、$\tilde{\Psi}(p,t)$ と $\Psi(x,t)$ は関数形が異なっていることを明示するために記号~をつけている。

1.3 量子力学の基本公理

量子力学は系を記述する状態、物理量、ユニタリー時間発展、測定過程、合成系という 5 つの要素から構成される。

1.3.1 状態

物理系の状態はヒルベルト空間のベクトル（より正確には θ を任意の実定数とした位相因子 $e^{i\theta}$ だけ異なった状態を同一視する射線 (ray)）によって記述される。従って、$|\psi\rangle$ と $e^{i\theta}|\psi\rangle$ は同じ状態を表す。しかし、$a|\phi\rangle+b|\psi\rangle$ と $a|\phi\rangle + e^{i\theta}b|\psi\rangle$ は異なった干渉効果と確率分布を示すので、物理的に別な状態を表していることに注意しよう。

1.3.2 物理量（オブザーバブル）

量子力学における物理量は状態に作用するエルミート演算子である。ここで、演算子 $\hat{O}$ のエルミート共役な演算子 $\hat{O}^\dagger$ の行列要素は

$$\langle\phi|\hat{O}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{O}|\phi\rangle^* \tag{1.18}$$

で定義される（転置して複素共役をとる）。

演算子は $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$ を満足するときエルミート共役であるといわれる。このとき

$$\langle\phi|\hat{O}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{O}|\phi\rangle^* = \langle\phi|\hat{O}|\psi\rangle \tag{1.19}$$

となる。特に、対角要素 $\phi = \psi$ は実数になる。物理量は実数であるので、物理量に対応する演算子はエルミートである[3]。

数学的な注釈 : $\hat{O}$ の定義域 $D(\hat{O})$ と $\hat{O}^\dagger$ の定義域 $D(\hat{O}^\dagger)$ は、作用素が有界の場合は一致するが、非有界な場合は一般には一致しない。条件

$$\langle\hat{O}\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{O}\psi\rangle \tag{1.20}$$

を満足する演算子を対称演算子という。対称演算子のうち、$D(\hat{O}) = D(\hat{O}^\dagger)$ のものを自己共役（あるいは自己随伴）演算子という。作用素が有界な場合は、自己共役演算子とエルミート演算子は一致する。しかし、非有界の場合は、自己共役演算子はエルミート演算子であるが逆は真ではない。

エルミート演算子は対角化でき固有値は実数、とよく言われるが、実際には演算子が対角化（すなわち、スペクトル分解）できることを保証するのは自己共役性である。すなわち、演算子 $\hat{O}$ が自己共役であれば $\hat{O}$ は次のように対角表示で展開できる。

$$\hat{O} = \sum_n O_n P_n, \quad P_n = |n\rangle\langle n| \tag{1.21}$$

P_n は射影演算子と呼ばれ次の関係式を満足する。

$$P_m P_n = \delta_{mn} P_m \tag{1.22}$$

1.3.3 時間発展

量子力学的状態の時間発展はシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \tag{1.23}$$

に従う。あるいは、座標表示をとると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \hat{H}(t)\psi(x,t) \tag{1.24}$$

で与えられる。

[3]エルミート性は物理量の期待値が実数であるための十分条件であるが必要条件ではないことに注意しよう。例えば、時間反転とパリティ対称な非エルミートなハミルトニアンの固有値は実数となりうる。具体例は、2017 年度中間試験問題 5 を参照。

一般に非線形なニュートン方程式とは異なり、シュレーディンガー方程式は線形である。すなわち、ψ_1 と ψ_2 がシュレーディンガー方程式の解ならば、それらの任意の線形結合 $a\psi_1 + b\psi_2$ も解になる。このことは、（ゼロでない）任意の波動関数は実現可能な状態であることを意味している。これを重ね合わせの原理という。この線形性は量子論一般にあてはまる。線形性を破ると未知の量子状態をクローン出来、それを利用して光速より早く通信できるなど矛盾が生じる（no-cloning theorem）。

ハミルトニアンが時間に依存しない場合は (1.23) を形式的に解くことができて

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle,\ U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right) \tag{1.25}$$

が得られる。

ハミルトニアンが時間に陽に依存するときは、時間を無限小の時間間隔 Δt に分割して $t - t_0 = n\Delta t$ と置き、無限小ずつ積分を行うことによって

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_0+(n-1)\Delta t)\Delta t} \cdots e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_0+\Delta t)\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_0)\Delta t}|\psi(t_0)\rangle \tag{1.26}$$

これを形式的に

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle,\ U(t,t_0) = T\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}dt\right) \tag{1.27}$$

と書く。ここで、T は時間順序演算子である。時間発展演算子 $U(t,t')$ はユニタリー演算子である。

$$\hat{U}^\dagger(t,t_0) = \hat{U}^{-1}(t,t_0) \tag{1.28}$$

ただし、時間反転操作は反ユニタリー ($U\alpha|\psi\rangle = \alpha^* U|\psi\rangle$) となる。詳しくは 5.5 節参照。

1.3.4　測定過程

状態が $|\psi\rangle$ で与えられる系のオブザーバブル $\hat{O}$ を測定して固有値 O_n が得られる確率は

$$\mathrm{Prob}(O_n) = ||P_n|\psi\rangle||^2 = \langle\psi|P_n|\psi\rangle = |\langle n|\psi\rangle|^2 \tag{1.29}$$

ここで、$P_n = |n\rangle\langle n|$ は状態 $|n\rangle$ へ射影する射影演算子である。また、測定直後の状態は

$$|\psi_n\rangle = \frac{P_n|\psi\rangle}{||P_n|\psi\rangle||} \tag{1.30}$$

で与えられる。

各固有値（観測結果）O_n が確率 $\mathrm{Prob}(O_n)$ で得られるので、観測量の期待値は

$$\langle\hat{O}\rangle = \sum_n \mathrm{Prob}(O_n)O_n = \sum_n O_n\langle\psi|P_n|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle \tag{1.31}$$

で与えられる。ここで、$\hat{O} = \sum_n O_n P_n$ は自己共役演算子 $\hat{O}$ のスペクトル分解である。

測定に伴う状態変化 $|\psi\rangle \to |\psi_n\rangle$ は線形ではなく、非ユニタリーであることに注意しよう。これを波束の収縮という。状態変化が不連続であるという事実は、波動関数が物質の波を表すものでないことの表れである。また、測定の前後で物理量の確率分布が変化することは、測定に伴って情報が読みだされた結果、我々の知識が突然変化することに対応している。波動関数は複素確率振幅という情報（系に対して我々が持っている知識）を記述している。

量子系を特徴づけるためには、十分な精度で古典力学に従う物理系に頼る必要がある。こうして、量子力学は極限として古典力学を含んでいる一方で、観測過程を記述する上で「古典的測定器」を必要とする。

量子力学における測定過程は過去と未来に対して異なった役割を果たす。過去に対しては、与えられた状態から導かれる確率分布 (1.29) を確かめる役割を果たす。未来に対しては、測定直後に新しい状態 (1.30) を作り出す。そして、過去から未来への変化は一般に不連続である。この意味で、量子測定は本質的な不可逆性をもたらす。時間発展を記述するシュレーディンガー方程式は時間反転対称性を持っており、この点で古典力学と同じである。しかし、測定過程は過去と未来を峻別する。

1.3.5 グリーソンの定理

1957 年にグリーソンは 3 次元以上のヒルベルト空間に射影演算子を用いて導入可能な確率測度が $\mu(a) = \mathrm{Tr}(\rho P_a)$ の形であることを示した[4]。ここで、ρ は密度演算子 (1.5 節参照)、P_a は測定値 a に対応する射影演算子である。2 次元を含む一般的な場合についての証明は正作用素値測度を用いて 2003 年にブッシュによってなされた[5]。こうしてボルンの確率公理はヒルベルト空間の幾何学的構造の帰結 (定理）となった。(さらに進んだ人のための注釈：ヒルベルト空間が 3 次元以上の場合に成立する Bell-Kochen-Specker の定理はグリーソンの定理の系とみなすことができる。)

---

[4] A. M. Gleason, J. Math. Mech. **6**, 885 (1957)
[5] P. Bush, Phys. Rev. Lett. **91**, 120403 (2003)

1.3.6　合成系

系 A と B のヒルベルト空間をそれぞれ $\mathcal{H}_A,\ \mathcal{H}_B$ とすると、合成系 AB のヒルベルト空間はこれらのテンソル積 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ で与えられる。二つの系の状態ベクトルが $|\phi\rangle_A,\ |\psi\rangle_B$ の時、合成系の状態ベクトルは $|\phi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B$ あるいはテンソル積の記号を省略して $|\phi\rangle_A|\psi\rangle_B$ と書かれる。

演算子のテンソル積 $\hat{O}_A \otimes \hat{O}_B$ は、$\hat{O}_A$ が $\mathcal{H}_A$ に、$\hat{O}_B$ が $\mathcal{H}_B$ に作用するものと定義される。すなわち、

$$(\hat{O}_A \otimes \hat{O}_B)|\phi\rangle_A|\psi\rangle_B = (\hat{O}_A|\phi\rangle_A)(\hat{O}_B|\psi\rangle_B) \tag{1.32}$$

である。

1.4　演算子の転置と行列要素の転置

量子力学では演算子 $\hat{O}$ の行列要素が

$$O_{mn} = \int \psi_m^* \hat{O} \psi_n dx =: \langle \psi_m, \hat{O}\psi_n \rangle \tag{1.33}$$

で与えられる。ここで、$\hat{O}$ の左側の波動関数が複素共役であるために、いくつか注意が必要である。まず、行列要素の転置は

$$O_{mn}^t := O_{nm} = \int \psi_n^* \hat{O} \psi_m dx = \langle \psi_n, \hat{O}\psi_m \rangle \tag{1.34}$$

で定義される。エルミート共役 $\hat{O}^\dagger$ の行列要素は元の演算子の行列要素を転置して複素共役を取ったもので与えられるので

$$(\hat{O}^\dagger)_{mn} = O_{nm}^* = \int \psi_n \hat{O}^* \psi_m^* dx = \langle \psi_n, \hat{O}\psi_m \rangle^* \tag{1.35}$$

これを (1.33) と比較すると、行列の対角要素が実数であるためには $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$ であればよいことがわかる[6]。

さて、$\langle \psi, \phi \rangle = \langle \phi, \psi \rangle^*$ であることに注意すると、(1.35) より

$$(\hat{O}^\dagger)_{mn} = \langle \psi_n, \hat{O}\psi_m \rangle^* = \langle \hat{O}\psi_m, \psi_n \rangle \tag{1.36}$$

であるが、$(\hat{O}^\dagger)_{mn} = \langle \psi_m, \hat{O}^\dagger \psi_n \rangle$ なので

$$\langle \psi_m, \hat{O}^\dagger \psi_n \rangle = \langle \hat{O}\psi_m, \psi_n \rangle \tag{1.37}$$

[6]演算子がエルミートであることは、対角要素や固有値が実数であるための十分条件であるが必要条件ではない。例えば、パリティ(P) と時間 (T) の合成変換に対して不変なハミルトニアンの固有値は PT 対称性が破れていない領域で実数となる。

であることがわかる。

一般に演算子の転置は

$$\int \Psi \hat{O}^t \Phi dx = \int \Phi \hat{O} \Psi dx \tag{1.38}$$

で定義することができる。両辺の複素共役をとると

$$\int \Psi^* \hat{O}^{t*} \Phi^* dx = \int \Phi^* (\hat{O}\Psi)^* dx = \int (\hat{O}\Psi)^* \Phi^* dx \tag{1.39}$$

Φ^* を Φ と置くと

$$\int \Psi^* \hat{O}^{t*} \Phi dx = \int (\hat{O}\Psi)^* \Phi dx = \langle \hat{O}\Psi, \Phi \rangle \tag{1.40}$$

よって、(1.37) と同様に

$$\langle \Psi, \hat{O}^\dagger \Phi \rangle = \langle \hat{O}\Psi, \Phi \rangle \tag{1.41}$$

が得られる。

1.5　密度演算子

量子力学においては、系がより大きな形の部分系であるとき、全体系が波動関数で記述されても部分系の状態は一般には波動関数では記述されず、密度演算子と呼ばれる量で記述される。数学的にはヒルベルト空間上のトレースが 1 の自己随伴作用素である。

今、系と環境が全体として閉じていて（孤立系）、全系の波動関数が $\Psi(x,y)$ で与えられるものとしよう。ここで、x は系の座標、y は環境の座標とする。$\hat{O}_\mathrm{s}$ を座標 x のみに依存するオブザーバブルとする。この時、$\hat{O}$ の期待値は

$$\begin{aligned} \hat{O} &= \int\int \Psi^*(x,y)\hat{O}(x)\Psi(x,y)dxdy \\ &= \int dx \left[\hat{O}(x) \int dy \Psi^*(x',y)\Psi(x,y) \right]_{x'=x} \end{aligned} \tag{1.42}$$

ここで、$[\cdots]_{x'=x}$ は $\hat{O}(x)$ をその右側の項に演算した後で x' を x に等しく置くことを意味するものとする。これから、系の密度演算子を

$$\rho(x,x') := \int \Psi(x,y)\Psi^*(x',y)dy \tag{1.43}$$

を定義すると

$$\bar{O} = \int [\hat{O}(x)\rho(x,x')]_{x'=x} dx \tag{1.44}$$

と書ける。

$\Psi(x,y)=\langle x|\langle y|\Psi\rangle$ と書けることに注意すると

$$\rho(x,x') \;=\; \int \langle x|\langle y|\Psi\rangle\langle\Psi|y\rangle|x'\rangle dy \tag{1.45}$$

そこで

$$\rho(x,x') := \langle x|\hat{\rho}|x'\rangle \tag{1.46}$$

とおくと

$$\hat{\rho} = \int \langle y|\Psi\rangle\langle\Psi|y\rangle dy \tag{1.47}$$

が得られる。定義式 (1.43) から明らかなように $\rho(x,x')$ はエルミート行列である。

$$\rho(x,x') = \rho^*(x',x) \tag{1.48}$$

また、対角要素は (1.43) より

$$\rho(x,x) \;=\; \int |\Psi(x,y)|^2 dy \tag{1.49}$$

となり、系の座標 x に関する確率分布を与える。

量子力学において、考えている系に対する完全な情報は波動関数または状態ベクトル $|\Psi\rangle$ で与えられる。このとき系は**純粋状態** にあるといい、これに対応する密度演算子は

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{1.50}$$

と定義される。純粋状態の密度演算子は明らかに条件

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \tag{1.51}$$

を満足する。これを**冪等条件** という。逆に、冪等条件が満足されているとき、状態は純粋状態にある。

次に、我々が対象に関する完全な情報を持っておらず、互いに直交する状態 $\{|n\rangle\}$ のうちで、系が n 番目にある確率が p_n で与えられることを知っている場合を考える。このとき、密度行列は

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n|n\rangle\langle n| \tag{1.52}$$

で与えられる。この場合は

$$\hat{\rho}^2 = \sum_n p_n^2|n\rangle\langle n| \tag{1.53}$$

となるので、任意の状態 $|\psi\rangle$ に対して $\langle\psi|\rho^2|\psi\rangle < \langle\psi|\rho^2|\psi\rangle$ である。このとき系は**混合状態**にあるという。

逆に、密度演算子 $\hat{\rho}$ が与えられたとき、系が状態 $|n\rangle$ にある確率は (1.52) から

$$p_n = \langle n|\hat{\rho}|n\rangle \tag{1.54}$$

で与えられることがわかる。直交するすべての可能な状態の確率の和は 1 に等しくなければならないので

$$\sum_n p_n = \sum_n \langle n|\hat{\rho}|n\rangle \equiv \mathrm{Tr}\hat{\rho} = 1 \tag{1.55}$$

が得られる。ここで、Tr は**トレース**あるいは対角和と呼ばれる演算で、任意の演算子 $\hat{O}$ に対して、

$$\mathrm{Tr}\hat{O} \equiv \sum_n \langle n|\hat{O}|n\rangle \tag{1.56}$$

なる演算をするものとして定義される。右辺は任意の完全規格直交系 $\{|n\rangle\}$ に対して同じ値をとる。すなわち、トレースは基底の取り方によらない。

トレースの特徴は特定の基底 $\{|n\rangle\}$ によらない値を取ることである。密度演算子とトレースを用いると、様々な量を特定の基底によらない形で表現できる。例えば、一般のオブザーバブル $\hat{O}$ の期待値は

$$\langle\hat{O}\rangle \equiv \sum_n p_n \langle n|\hat{O}|n\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{O}) \tag{1.57}$$

と書ける。

一般に、すべての n に対して,

- 自己共役性　$\rho^\dagger = \rho$
- 正値性条件 $p_n \geq 0$
- トレース規格化条件 (1.55)

を満足する演算子を密度演算子という。これから密度演算子は正値エルミート演算子であることがわかる。従って、スペクトル分解定理により密度演算子は常に (1.52) のように対角表示できることがわかる。(1.52) に別な完全正規直交基底 $\{|\psi_k\rangle\}$ と $\{|\chi_k\rangle\}$ の完全系を挿入すると

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n (\sum_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|)|n\rangle\langle n|(\sum_l |\chi_l\rangle\langle\chi_l|) = \sum_{k,l} w_{kl}|\psi_k\rangle\langle\chi_l| \tag{1.58}$$

$$w_{kl} = \sum_n p_n \langle\psi_k|n\rangle\langle n|\chi_l\rangle = \sum_n \langle\psi_k|\hat{\rho}n\rangle\langle n|\chi_l\rangle = \langle\psi_k|\hat{\rho}|\chi_l\rangle \tag{1.59}$$

特に、$|\psi_k\rangle = |\chi_k\rangle$ でかつ、これらが $\hat{\rho}$ の固有状態になるように選ぶと w_{kl} は対角的となり ($w_{kl} = w_k\delta_{kl}$) となり $\hat{\rho}$ は対角化される。

$$\hat{\rho} = \sum_n w_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k| \tag{1.60}$$

しかし、この展開は一般に (1.52) とは異なる。このように、密度演算子を対角的に表示する方法は一意ではないことに注意する必要がある。にもかかわらず、それを用いて計算されるあらゆる期待値は対角化される表示にはよらず同じ値となる。

問題 規格直交基底 $\{|0\rangle,\ |1\rangle\}$ で張られる 2 次元のヒルベルト空間で定義された密度演算子

$$\hat{\rho} = p|0\rangle\langle 0| + (1-p)|1\rangle\langle 1|, \quad (0 \le p \le 1) \tag{1.61}$$

を考える。この $\hat{\rho}$ を対角表示する別の基底が存在するための条件を考えよ。

1.5.1　還元密度演算子

全系が A と B の二つの部分から成り立っている場合を考える。全系の密度演算子を $\hat{\rho}^{\mathrm{A+B}}$ と書こう。これが密度演算子であるための条件は正値性とトレース規格化条件である。まず、正値性から $\hat{\rho}^{\mathrm{A+B}}$ を対角化する表示が存在して、対角成分は非負である。すなわち、

$$\hat{\rho}^{\mathrm{A+B}} = \sum_n p_n|\psi_n\rangle_{\mathrm{A}\,\mathrm{A}}\langle\psi_n| \otimes |\chi_n\rangle_{\mathrm{B}\,\mathrm{B}}\langle\chi_n| \tag{1.62}$$

全系の状態を知る必要はなく、系 A の状態だけに関心がある場合を考えよう。このとき、系 B についてのみトレースをとることによって、部分系 A の密度演算子を得ることができる。公式

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(|\chi_n\rangle_{\mathrm{B}\,\mathrm{B}}\langle\chi_n|) &= \sum_m {}_{\mathrm{B}}\langle m|\chi_n\rangle_{\mathrm{B}\,\mathrm{B}}\langle\chi_n|m\rangle_{\mathrm{B}} \\ &= {}_{\mathrm{B}}\langle\chi_n|\sum_m |m\rangle_{\mathrm{B}}\langle m|\chi_n\rangle_{\mathrm{B}} \\ &= {}_{\mathrm{B}}\langle\chi_n|\chi_n\rangle_{\mathrm{B}} = 1 \end{aligned} \tag{1.63}$$

を用いると

$$\hat{\rho}^{\mathrm{A}} \equiv \mathrm{Tr}_{\mathrm{B}}(\hat{\rho}^{\mathrm{A+B}}) = \sum_n p_n|\psi_n\rangle_{\mathrm{A}\,\mathrm{A}}\langle\psi_n| \tag{1.64}$$

がえられる。ここで、Tr_{B} は系 B に対してのみトレースをとることを意味する。$\hat{\rho}^{\mathrm{A}}$ を系 A に対する**還元密度演算子**という。系 A だけに関係する物理量 $\hat{O}^{\mathrm{A}}$ を問題にする限り $\hat{\rho}^{\mathrm{A}}$ と $\hat{\rho}$ のいずれを用いて計算しても同じ結果が得られる。すなわち、

$$\mathrm{Tr}_{\mathrm{A}}\left(\hat{\rho}^{\mathrm{A}}\hat{O}^{\mathrm{A}}\right) = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{O}^{\mathrm{A}}\right) \tag{1.65}$$

1.5.2　密度演算子の時間発展

密度演算子 $\rho(x, x')$ は波動関数が完全系をなすことから次のように展開できる。

$$\begin{aligned} \rho(x, x'; t) &= \sum_{m,n} a_{mn}\psi_n^*(x', t)\psi_m(x, t) \\ &= \sum_{m,n} \psi_n^*(x')\psi_m(x)e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} \end{aligned} \tag{1.66}$$

1.6　シュミット分解

2 つの系 A, B の任意の状態ベクトル $|\Psi\rangle_{AB} \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ は、$\mathcal{H}_A$ と $\mathcal{H}_B$ の適当な規格直交基底 $|n\rangle_A$ と $|n\rangle_B$ を用いて

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_n \sqrt{p_n}|n\rangle_A \otimes |n\rangle_B, \quad p_n > 0 \tag{1.67}$$

と展開できる。これをシュミット分解という。

これを示すために、まず、$|\Psi\rangle_{AB}$ を

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_n |n\rangle_{AA}\langle n|\Psi\rangle_{AB} = \sum_n |n\rangle_A|\tilde{n}\rangle_B \tag{1.68}$$

と展開する。ここで

$$|\tilde{n}\rangle_B := {}_A\langle n|\Psi\rangle_{AB} \tag{1.69}$$

は一般に直交基底ではない。しかし、$\{|n\rangle_A\}$ として還元密度演算子 ρ_A を対角化する基底、すなわち、

$$\rho_A = \sum_n p_n|n\rangle_{AA}\langle n| \tag{1.70}$$

と同じ基底を取ると直交基底となる。実際、この対角基底を (1.68) の A の基底に選ぶと

$$\begin{aligned}\rho_A &= \mathrm{Tr}_B(|\Psi\rangle_{AB\,AB}\langle\Psi|)\\ &= \sum_{n,n'}|n\rangle_{AA}\langle n'|\mathrm{Tr}_B(|\bar{n}\rangle_{BB}\langle\bar{n}'|)\\ &= \sum_{n,n'}|n\rangle_{AA}\langle n'|_B\langle\bar{n}'|\bar{n}\rangle_B \end{aligned} \tag{1.71}$$

これを (1.70) と比較すると

$$_B\langle\bar{n}'|\bar{n}\rangle_B = p_n\delta_{nn'} \tag{1.72}$$

でなければならないことがわかる。そこで

$$|\bar{n}\rangle_B = \sqrt{p_n}|n\rangle_B \tag{1.73}$$

とおくことで (1.67) が成立する。

シュミット分解 (1.67) に現れる基底が状態 $|\Psi\rangle_{AB}$ の還元密度行列 ρ_A を対角化する基底であることから、異なった二つの純粋状態 $|\Psi\rangle_{AB}$ と $|\Phi\rangle_{AB}$ をシュミット分解する基底は一般に異なることがわかる（同じ基底で分解できない）。また、シュミット分解は 3 つ以上の合成系に対しては成立しない。

シュミット分解から

$$\rho_B = \mathrm{Tr}_A\rho_{AB} = \sum_n p_n|n\rangle_{BB}\langle n| \tag{1.74}$$

が得られる。したがって、ρ_A と ρ_B のゼロでない対角要素の数（これをシュミット数という）とその値が等しいという注目すべき結果が得られる。一般に、ゼロの対角要素の数は異なっている。

ゼロでない対角要素がすべて異なっている場合はシュミット分解は $|n\rangle_A \to e^{i\theta}|n\rangle_A$、$|n\rangle_B \to e^{-i\theta}|n\rangle_B$ という自由度を除き一意である。しかし、対角要素が同じものがあればその部分についてどの $|n\rangle_A$ がどの $|n'\rangle_B$ と対を作るかという任意性が残る。

1.6.1　特異値分解

今状態 $|\Psi\rangle_{AB}$ を系 A と B の任意の正規直交基底で展開しよう。

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{ab}\Psi_{ab}|a\rangle_A\otimes|b\rangle_B \tag{1.75}$$

ヒルベルト空間に属する任意の2つの基底は互いにユニタリ変換で結ばれているので

$$|n\rangle_A = \sum_a |a\rangle_A (U_A)_{an}, \quad |n\rangle_B = \sum_b |b\rangle_B (U_B)_{bn} \tag{1.76}$$

これらを (1.67) に代入すると

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{AB} &= \sum_n \sqrt{p_n} \sum_{ab} |a\rangle_A (U_A)_{an} \otimes |b\rangle_B (U_B)_{bn} \\ &= \sum_{ab} \sum_n (U_A)_{an} \sqrt{p_n} (U_B^T)_{nb} |a\rangle_A \otimes |b\rangle_B \end{aligned} \tag{1.77}$$

これを (1.75) と比較すると

$$\Psi_{ab} = \sum_n (U_A)_{an} \sqrt{p_n} (U_B^T)_{nb} \tag{1.78}$$

この結果は、任意の正方行列 (Ψ_{ab}) は左右からユニタリー行列をかけることによって対角行列に変換することができることを意味している。そして、対角化された行列の対角要素はシュミット分解 (1.67) の係数に一致する。(1.78) を特異値分解、$\sqrt{p_n}$ を特異値という。

1.7 エンタングルメント

系を構成するすべての部分の波動関数が決まると全体の状態はその直積として書ける。しかし、全系の波動関数が決まっても部分系の波動関数は必ずしも決まらない。これはエンタングルメントという量子力学に特有の性質のためである。

シュミット数（すなわち、シュミット分解に現れる項の数）が2以上の場合、状態 $|\Psi\rangle_{AB}$ はエンタングルしている、それ以外の場合は分離可能という。従って、セパラブルな状態は直積で書ける。

$$|\Psi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B \tag{1.79}$$

この時、各部分系も純粋状態である。すなわち、

$$\rho_A = |\phi\rangle_{AA}\langle\phi|, \quad \rho_B = |\psi\rangle_{BB}\langle\psi| \tag{1.80}$$

全系がエンタングルしている場合、部分系は混合状態である。シュミット数は各々の系に別々なユニタリー変換をかけても変化しない。すなわち、$U_A \otimes U_B |\Psi\rangle_{AB}$ は元の状態 $|\Psi\rangle_{AB}$ と同じシュミット数を持っている。シュミット数を変化させるためには、A と B にまたがったユニタリ変換 U_{AB} を作用させることが必要である。これを非局所操作という。

1.7.1　非局所相関

話を具体的にするために、スピン 0 の原子がスピン $\frac{\hbar}{2}$ を持った二つの原子 A、B に分裂する状況を考えよう。全系のスピンは保存するので、分裂した 2 原子のスピンの状態は原子 A のスピンが上向き (下向き) であれば原子 B のスピンは下向き (上向き) である。これらの相関はスピン角運動量保存則の帰結であり、古典論でも存在する。量子論に特有なことは、測定が行われるまでは原子の状態が決まっておらず、重ね合わせの状態にあるということにある。スピンの測定軸を z 軸にとり、上向きスピンの状態を $|\uparrow\rangle$、下向きスピンの状態を $|\downarrow\rangle$ で表すと、全系の状態は次のように表される。

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{\mathrm{A}}|\downarrow\rangle_{\mathrm{B}} - |\downarrow\rangle_{\mathrm{A}}|\uparrow\rangle_{\mathrm{B}}) \tag{1.81}$$

ここで、ケットベクトルの最初の引数は原子 A の状態を、2 番目の引数は原子 B の状態を表すものとする。右辺のマイナス符号はスピン $\frac{1}{2}$ を持った粒子はフェルミ統計に従い、全系の波動関数が粒子の交換に関して反対称（すなわち、符号を変る）でなければならないという要請から生じる (座標部分は対称であると仮定する)。

分裂後は時間がたつにつれて原子は互いに空間的に離れていくが、原子の状態が測定されるまでは、原子 A と B は (1.81) のような重ね合わせの状態にあり、原子 A の状態ベクトル $|\Psi_{\mathrm{A}}\rangle$ と原子 B の状態ベクトル $|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle$ の積の形 $|\Psi_{\mathrm{A}}\rangle|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle$ に書くことはできない。これを、状態の**非分離性** といい、このような状態は**もつれた状態** と呼ばれる。もつれた状態にある原子のスピンの向きは、観測するまでは確定していないが、原子 A の状態を測定した瞬間にそれとは空間的に離れた原子 B の状態が確定するという驚くべき性質を持っている。このような空間的に離れた場所の相関を**非局所的相関** または、それを最初に指摘した人々の名前にちなんで**アインシュタインーポドルスキィーローゼン相関**、略して、**EPR** と呼ばれる[7]。また、(1.81) で記述される状態にある粒子対は **EPR ペアー** (EPR pair) と呼ばれる。

しかし、これに対しては次のような反論が想定される。すなわち、原子 A と B の状態はそれらが局所的な相互作用を終えた時点、すなわち、原子が 2 つの原子に分裂した時点で確定しているのであるが、ただ、何らかの理由で確率的要素が加わってしまっているために測定結果が確率的に変化するだけである、という解釈である。これを局所的な**隠れた変数理論**と呼ばれ、「隠れた」変数が我々の関知できない確率的要素を持ち込む役割を果たす。

[7] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, Phys. Rev. **47** (1935) 777

非局所性を予言する量子論と、相関が局所的であることを主張する局所的隠れた変数理論[8]のどちらが正しいかを調べるために、スピンを測定する軸を x 軸にとり、測定結果が x 軸の正の向きの場合に対応する状態を $|+\rangle$、負の向きに対応する状態を $|-\rangle$ と記そう。これらは、A、B いずれの原子の場合も測定軸を z 軸にとった基底と次の関係で結ばれている。

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \tag{1.82}$$

これらを逆に解いた式

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle), \quad |\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) \tag{1.83}$$

(1.81) に代入すると

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle_{\mathrm{A}}|+\rangle_{\mathrm{B}} - |+\rangle_{\mathrm{A}}|-\rangle_{\mathrm{B}}) \tag{1.84}$$

が得られる。この結果は、原子 A のスピンが x 軸の負 (正) の方向を向いていると、原子 B のスピンは正 (負) の方向を向いているという完全な反相関が依然として成立していることを示している。もし、相互作用が終わった時点でスピンの向きが確定しているのならば、相互作用が終わった後に測定軸の向きを変えると測定結果にこのような完全な反相関は現れない。

このように、二つの系の間にひとたび量子相関ができると、一方の状態に操作を加えることによって空間的にはなれたもう一方の状態を変化させることができる。これが、EPR のパラドックスの本質である。また、相互作用が終了した後にスピンの測定軸を自由に選択しても（これを**遅延選択** という）、その軸に関する完全な反相関が保たれている。

以上の結果は、我々の直感と鋭く対立するが、実験によって正しいことが確かめられている。従って、局所的な隠れた変数理論は否定され、量子論の予言する非局所相関が確かめられた[9]。遅延選択の実験は、「測定が行われるまでは実在と言うものを考えてはいけない、確率振幅という情報のみが存在する」と主張するコペンハーゲン解釈の正当性を印象深く示している。実験結果の奇妙さ、不思議さを解き明かしてくれる明快な説明を我々はいまだ持たないが、非局所相関の存在は疑いようがない。

---

[8]これに対して、D. Bohm は相関の起源の非局所性を認める非局所的な隠れた変数理論を提案した (Phys. Rev. **85** (1952) 166, 180)。この理論は、量子力学と同じ観測結果を予言し、従って、実験結果と矛盾しない。

[9]現在では、これら非局所相関は数十キロ離れてなお存在することが実験的に確かめられている。例えば、W. Tittel, J. Brendel, B. Gisin, T. Herzog, H. Zbinden, and N. Gisin, Phys. Rev. A **57** (1998) 3230

興味深いことに EPR 相関や非局所性は、アインシュタイン等が量子論に内在する奇妙な性質として指摘し、それ故に量子論を最終理論として受け入れられない根拠としてあげたものである。しかし、現在ではこれらの性質は古典的には存在しない量子情報処理の最も重要なリソースとみなされている。

第2章　エネルギー、運動量、不確定性関係

2.1　ハミルトニアン

量子力学において波動関数は系の状態に関する完全な情報を有している。すなわち、波動関数は現在の系に関する全ての性質を記述する。未来が現在の帰結として生じると仮定すると、波動関数の時間微分 $\partial\Psi(t)/\partial t$ は $\Psi(t)$ だけで決まる。更に、重ね合わせの原理により両者の関係は線形でなければならない。そのようなもっとも一般的な形は

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \tag{2.1}$$

ここで、$\hat{H}$ は線形演算子であり、定数 $i\hbar$ は以下の議論の便宜上つけた（$\hat{H}$ の定義に吸収することもできる)。

非相対論では粒子の生成、消滅は起こらないので、確率密度を粒子が存在する領域で積分した量は時間的に一定でなければならない。すなわち

$$\frac{d}{dt}\int|\Psi|^2dx = \int\left(\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi + \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)dx = 0 \tag{2.2}$$

これに (2.1) を代入すると右辺は

$$\begin{aligned}\frac{i}{\hbar}\int\left((\hat{H}^*\Psi^*)\Psi - \Psi^*\hat{H}\Psi\right)dx &= \frac{i}{\hbar}\int\Psi^*(\hat{H}^{*t} - \hat{H})\Psi dx \\ &= \frac{i}{\hbar}\int\Psi^*(\hat{H}^\dagger - \hat{H})\Psi dx = 0\end{aligned} \tag{2.3}$$

となる。これが任意の Ψ に対して成立しなければばらないので $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ が成立する。すなわち、演算子 $\hat{H}$ はエルミートである。

演算子 $\hat{H}$ の意味を考えるために、波動関数の準古典極限の式

$$\Psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}S} \tag{2.4}$$

を (2.1) の左辺へ代入する。その際、準古典極限 $\hbar\to 0$ では位相因子 $(S/\hbar)$ に比べて振幅 A の変化はゆっくりであると考えて A の時間微分は無視すると

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\partial S}{\partial t}\Psi \tag{2.5}$$

が得られる。右辺に現れる量 $-\partial S/\partial t$ は解析力学におけるハミルトン関数である。従って $\hat{H}$ はそれに対応する量子力学的演算子であることがわかる。以後、$\hat{H}$ をハミルトニアンと呼ぶ。

2.2　演算子の時間微分

演算子の期待値の時間微分は次式で定義される。

$$
\begin{aligned}
\dot{\bar{\hat{f}}} &:= \frac{d}{dt}\int \Psi^* \hat{f}\Psi dx \\
&= \int \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\hat{f}\Psi + \Psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\Psi + \Psi^* \hat{f}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dx
\end{aligned} \tag{2.6}
$$

これに (2.1) を代入して $\hat{H}$ がエルミートであることを用いると

$$
\begin{aligned}
\text{右辺} &= \int \left(\frac{i}{\hbar}(\hat{H}^*\Psi^*)\hat{f}\Psi + \Psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\Psi - \frac{i}{\hbar}\Psi^* \hat{f}\hat{H}\Psi \right) dx \\
&= \int \Psi^* \left(\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H}) + \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right) \Psi dx \\
&= \int \Psi^* \left(\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{f}] + \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right) \Psi dx
\end{aligned} \tag{2.7}
$$

ここで、$[\hat{H}, \hat{f}] := \hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H}$ は交換子と呼ばれる量である。他方、演算子の時間微分の期待値 $\bar{\dot{\hat{f}}}$ は

$$
\bar{\dot{\hat{f}}} := \int \Psi^* \dot{\hat{f}} \Psi dx \tag{2.8}
$$

で定義される。演算子の時間微分の期待値 $\bar{\dot{\hat{f}}}$ を量子力学的期待値の時間微分 $\dot{\bar{\hat{f}}}$ に等しいことを要請すると、(2.7) と (2.8) を比較から

$$
\frac{d}{dt}\hat{f} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{f}] + \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \tag{2.9}
$$

であることがわかる。演算子 $\hat{f}$ が時間に陽に依存せず $(\partial \hat{f}/\partial t = 0)$、かつ、ハミルトニアンと交換する場合は $\dot{\hat{f}} = 0$、すなわち、$\hat{f}$ は時間的に変化せず、物理量は保存する。

2.3　定常状態

ハミルトニアンが時間に陽に依存しないとき $(\partial\hat{H}/\partial t = 0)$、(2.9) から

$$\frac{d}{dt}\hat{H} = 0 \tag{2.10}$$

すなわち、系のエネルギーは保存する。

系のエネルギーが一定に保たれる状態を定常状態という。一定に保たれるエネルギーを E_n、対応する波動関数を Ψ_n と書くと

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_n}{\partial t} = \hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n \tag{2.11}$$

これから

$$\Psi_n(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\psi_n(x) \tag{2.12}$$

一般に定常状態の波動関数 ψ はシュレーディンガー方程式

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{2.13}$$

の解として与えられる。特に、最低エネルギー状態に対応する波動関数を**基底状態**という。

初期状態 $\Psi(x)$ を定常状態の波動関数 $\psi_n(x)$ で展開すると

$$\Psi(x) = \sum_n a_n\psi_n(x) \tag{2.14}$$

この状態の時間発展は (2.12) より

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\Psi(x) = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\psi_n(x) \tag{2.15}$$

で与えられる。

定常状態の波動関数は縮退がなければ実数に取ることができる。実際、$\psi(\boldsymbol{r})$ をシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{2.16}$$

の解とすると、両辺の複素共役を取ることで $\psi^*(\boldsymbol{r})$ もまた同じ方程式の解であることがわかる。縮退がなければ $\psi(\boldsymbol{r})$ と $\psi^*(\boldsymbol{r})$ は位相因子を除いて一致しなければならないので定常状態の解が実数に取ることができることがわかる。

2.4 エネルギー固有状態の直交性

エネルギーが異なる固有状態は直交する。今、ハミルトニアン $\hat{H}$ の 2 つの固有状態 Ψ_m, Ψ_n をとる。

$$\hat{H}\Psi_m = E_m\Psi_m,\ \hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n \tag{2.17}$$

左辺からそれぞれ $\Psi_n^*,\ \Psi_m^*$ を掛けて積分すると

$$\int \Psi_n^* \hat{H}\Psi_m d\boldsymbol{r} \;=\; E_m \int \Psi_n^*\Psi_m d\boldsymbol{r} \tag{2.18}$$

$$\int \Psi_m^* \hat{H}\Psi_n d\boldsymbol{r} \;=\; E_n \int \Psi_m^*\Psi_n d\boldsymbol{r} \tag{2.19}$$

(2.18) に $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ を代入すると

$$\int \Psi_n^* \hat{H}^\dagger \Psi_m d\boldsymbol{r} \;=\; \int (\hat{H}\Psi_n)^*\Psi_m d\boldsymbol{r} = E_m \int \Psi_n^*\Psi_m d\boldsymbol{r} \tag{2.20}$$

両辺の複素共役をとると

$$\int \Psi_m^* \hat{H}\Psi_n d\boldsymbol{r} = E_m \int \Psi_m^*\Psi_n d\boldsymbol{r} \tag{2.21}$$

これから (2.19) を引くと

$$0 = (E_m - E_n)\int \Psi_m^*\Psi_n d\boldsymbol{r} \tag{2.22}$$

が得られる。したがって、$E_m \neq E_n$ の時は、

$$\int \Psi_m^*\Psi_n d\boldsymbol{r} = 0 \quad (E_m \neq E_n) \tag{2.23}$$

となり対応する固有状態は互いに直交する。

1 つの固有値に 2 つ以上の固有状態が対応するとき、状態は縮退しているという。この場合は、固有状態は一般には直交しないが、それらの適当な線形結合を作ることによって直交するように構成することができる。

2.5 交換する演算子と同時固有状態

2 個の演算子 $\hat{P}, \hat{Q}$ が交換する場合 ($[\hat{P}, \hat{Q}] = 0$)、これらに共通する固有状態を取ることができる。これを同時固有状態という。実際、$\hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P}$ の行列要素をとると

$$\sum_k P_{mk}Q_{kn} = \sum_k Q_{mk}\hat{P}_{kn} \tag{2.24}$$

いま (2.24) が演算子 $\hat{P}$ の固有関数 ψ_n に関する行列表示であるとすると、$P_{mk} = P_{mm}\delta_{mk}$ なので $P_{mm}Q_{mn} = Q_{mn}P_{nn}$ が得られる。したがって、

$$Q_{mn}(P_{mm} - P_{nn}) = 0 \tag{2.25}$$

もし、$m \neq n$ に対して $P_{mm} \neq P_{nn}$ ならば、$Q_{mn} = 0$ となり、ψ_n は $\hat{Q}$ も対角化する固有状態である。これを同時固有状態という。もし、$\hat{P}$ のある固有値が縮退しているとすると、対応する 2 つ（以上）の固有状態 ψ_m, ψ_n に対して $P_{mm} = P_{nn}$ が成立するので、一般には $Q_{mn} \neq 0$ である。しかし、この場合も ψ_m, ψ_n の適当な線形結合を作ることによって Q_{mn} を対角化することが常にできる。したがって、交換する演算子は同時対角化できる。

2.6 Hellmann-Feynmann の定理

ハミルトニアン $\hat{H}$ がパラメータ λ に依存するとき、次の関係式が成立する。

$$\left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\right)_{nn} = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda} \tag{2.26}$$

これを証明するために、$(\hat{H} - E_n)\psi_n = 0$ を λ で微分して、左辺から ψ_n^* を掛けると

$$\psi_n^*(\hat{H} - E_n)\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} = \psi_n^*\left(\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\right)\psi_n \tag{2.27}$$

両辺を積分すると

$$\int \psi_n^*(\hat{H} - E_n)\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}dx = \int \psi_n^*\left(\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\right)\psi_n dx \tag{2.28}$$

左辺は演算子の転置 (1.41) の定義およびエルミート演算子の場合は転置は複素共役を取ることに等しいことを思い出すと

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \int \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}(\hat{H}^t - E_n)\psi_n^* dx \\ &= \int \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}[(\hat{H} - E_n)\psi_n]^* dx = 0 \end{aligned} \tag{2.29}$$

よって右辺も 0 となり、(2.26) が得られる。(2.26) の両辺に状態 n が実現される確率 $|\psi_n|^2$ を掛けて n について和をとるとパラメターが λ の時のエネルギーの期待値

$$E(\lambda) = \sum_n E_n|\psi_n(\lambda)|^2 \tag{2.30}$$

およびハミルトニアンを λ で微分した量の期待値

$$\left\langle \psi(\lambda) \middle| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \middle| \psi(\lambda) \right\rangle = \sum_n \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right)_{nn} |\psi_n(\lambda)|^2 \tag{2.31}$$

を用いて

$$\left\langle \psi(\lambda) \middle| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \middle| \psi(\lambda) \right\rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} \tag{2.32}$$

が得られる。これを Hellmann-Feynmann の定理という。

2.7 シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示

演算子が時間に陽に依存しない場合は、演算子の期待値の時間依存性は波動関数の時間依存性によって与えられる。

$$\bar{O}(t) = \int \Psi^*(x,t)\hat{O}\Psi(x,t)dx \tag{2.33}$$

これをシュレーディンガー表示という。シュレーディンガー方程式 (2.1) を形式的に解くと

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\Psi(x,0) = \hat{U}\Psi(x,0),\ \hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{2.34}$$

ここで、$\hat{H}$ がエルミート演算子なので、$\hat{U}$ は次の性質を満足するユニタリー演算子である。

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \tag{2.35}$$

これを (2.33) の右辺に代入すると

$$\begin{aligned} \text{右辺} &= \int (\hat{U}^*\Psi^*(x,0))\hat{O}\hat{U}\Psi(x,0)dx \\ &= \int \Psi^*(x,0)\hat{U}^\dagger\hat{O}\hat{U}\Psi(x,0)dx \end{aligned} \tag{2.36}$$

そこで、

$$\hat{O}(t) := \hat{U}^\dagger(t)\hat{O}\hat{U}(t) \tag{2.37}$$

を定義すると、時間依存性を波動関数ではなく演算子に持たせることができる。この時、状態は時間変化せず一定である。これをハイゼンベルグ表示という。ハイゼンベルグ演算子の時間変化は方程式

$$\frac{d}{dt}\hat{O}(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{O}(t)] \tag{2.38}$$

によって与えられる。これをハイゼンベルグの運動方程式という。

2.8　運動量

空間が一様な場合、すなわち、並進対称性がある場合は系の運動量は保存する。数学的には運動量が保存する系のハミルトニアン $\hat{H}$ は、平行移動に対して不変となる。今、任意の波動関数 $\psi(x)$ を a だけ平行移動して得られる波動関数を $\psi(x+a)$ とすると、ハミルトニアンが平行移動に不変であるということは

$$\int \psi(x)^* \hat{H} \psi(x) dx = \int \psi(x+a)^* \hat{H} \psi(x+a) dx \tag{2.39}$$

であることを意味している。ここで、

$$\begin{aligned}
\psi(x+a) &= \psi(x) + a\frac{d}{dx}\psi(x) + \frac{a^2}{2!}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \cdots \\
&= \psi(x) + \frac{ia}{\hbar}\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x) + \frac{1}{2!}\left(\frac{ia}{\hbar}\right)^2\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2\psi(x) + \cdots \\
&= \psi(x) + \frac{ia}{\hbar}\hat{p}\psi(x) + \frac{1}{2!}\left(\frac{ia}{\hbar}\hat{p}\right)^2 + \psi(x) + \cdots \\
&= \left(1 + \frac{ia}{\hbar}\hat{p} + \frac{1}{2!}\left(\frac{ia}{\hbar}\hat{p}\right)^2 + \cdots\right)\psi(x) \\
&= \exp\left(\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right)\psi(x)
\end{aligned} \tag{2.40}$$

これから条件 (2.39) は次のように書ける。

$$e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}\hat{H}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a} = \hat{H} \tag{2.41}$$

両辺を a で微分すると右辺が a に依存しないことに注意すると

$$e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{p}]e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a} = 0 \tag{2.42}$$

すなわち、

$$[\hat{H}, \hat{p}] = 0 \tag{2.43}$$

となり、運動量が保存することがわかる。

2.9　不確定性関係

運動量演算子は位置座標と交換しない。実際、

$$(x\hat{p} - \hat{p}x)\psi = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = i\hbar\psi \tag{2.44}$$

これが任意の ψ に対して成立するので

$$[x, \hat{p}] = i\hbar \tag{2.45}$$

3 次元の場合は

$$[x_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{2.46}$$

が得られる。

(2.45) からシュワルツの不等式を用いて導かれる不等式

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{2.47}$$

はケナード－ロバートソンの不等式と呼ばれる。この不等式は測定過程とは無関係な波動関数の性質を表している。これは、ガンマ線顕微鏡を用いて電子を観測するという思考実験で導かれたハイゼンベルグの不確定性関係とは異なるものである。後者は、ガンマ線を用いて位置の精度を Δx で測定しようとすると、運動量に測定の反作用が及ぶ結果、位置測定の直後の運動量に $\Delta p \sim \hbar/\Delta x$ 程度の不確定性が生じるというものである。ハイゼンベルグの不確定性関係は測定器の詳細を指定しなければ議論できず、一般には (2.47) のような関係式は存在しない[1]。

不確定性関係により粒子の経路という概念が意味を失うために、量子力学では力学的な特徴づけができない。粒子の位置は十分な精度をもって測定できるが、ある時刻における粒子の速度という概念をうまく構成することができない。その理由は微小な時間間隔 Δt の間に粒子の位置を 2 度測定しなければならないからである。不確定性関係によるとそのようなことを任意の精度で行うことはできない。このように位置と速度を同時に指定して決まる粒子の軌道という概念は量子力学では存在できない。

[1]詳しくは、沙川貴大、上田正仁 「量子測定と量子制御」数理科学　別冊（サイエンス社 2016)

第3章　シュレーディンガー方程式

3.1　アインシュタイン–ド・ブロイの関係式

古典論では電子は粒子、光は波であり両者は異質なものである。しかし、量子論では「電子も光も粒子と波動の二重性を持っている」と言われる。これは一体何を意味するのだろうか。

自由粒子は、運動量 $\boldsymbol{p}$ とエネルギー E によって特徴づけられる。他方、自由な波である平面波は波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ と周波数 ω によって特徴づけられる。粒子ー波動の二重性とは粒子と波をそれぞれ特徴づける物理量の組 $(\boldsymbol{p}, E)$ と $(\boldsymbol{k}, \omega)$ が同じ情報を持つということを意味している。同じ情報を持つということは両者の間に 1 対 1 の対応関係があるということである。どのような対応関係があるかは理論的には任意であり、最終的には自然に問うしかない。実験事実は自然がそのような対応関係のうちで最も単純なもの、すなわち、比例関係にあることを示している。これは、両者が共通の普遍定数で結ばれていることを意味している。すなわち、

$$\boldsymbol{p} = \hbar \boldsymbol{k}, \quad E = \hbar\omega \tag{3.1}$$

これらの関係式は、**アインシュタイン–ド・ブロイの関係式**と呼ばれる。前者はド・ブロイ、後者はアインシュタインによって指摘された。(3.1) 式に現れる普遍定数

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.05 \times 10^{-34} \mathrm{J\ s} \tag{3.2}$$

は作用の次元をもち、**プランク定数** と呼ばれる[1]。

量子論は $(\boldsymbol{p}, E)$ の物理量の組で記述される粒子像と $(\boldsymbol{k}, \omega)$ の組で記述される波動像をアインシュタイン–ド・ブロイの関係式に基づいて統一する理論である。例えば、アインシュタインの関係式 $E = \hbar\omega$ は、周波数 ω をもった電磁波はエネルギー $\hbar\omega$ を単位とする粒子（これを**エネルギー量子**という）の集合として振舞うことを表している。また、$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ から

$$\lambda \equiv \frac{2\pi}{|\boldsymbol{k}|} = \frac{h}{|\boldsymbol{p}|} \tag{3.3}$$

[1]物理定数は異なった物理量を関連づける役割を果たしている。光速は時間と空間を関連づけ、ボルツマン定数は温度（熱）と力学的エネルギーを結びつける。プランク定数はアインシュタイン–ド・ブロイの関係式を通じて粒子性と波動性を統一する。

が導かれるが、これは、運動量 $\boldsymbol{p}$ を持った物質は波長 $\lambda = h/|\boldsymbol{p}|$ の波（これを**物質波**という）として振舞うことを意味している。λ はド・ブロイ波長と呼ばれる。逆に、波長が λ の量子（たとえば光子）は運動量 $|\boldsymbol{p}| = h/\lambda$ をもつといえる。(3.3) 式は **ド・ブロイの関係式** と呼ばれる。

3.2　量子化の規則

以下では簡単のために空間が 1 次元の場合を考える。3 次元の場合への拡張は容易である。自由な波である平面波は

$$\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)} \tag{3.4}$$

と表される。粒子の運動量とエネルギーは波の描像ではどのように記述されるかを考えよう。アインシュタインード・ブロイの関係式 (3.1) より

$$p\Psi = \hbar k\Psi = \hbar k e^{i(kx-\omega t)} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}e^{i(kx-\omega t)} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi \tag{3.5}$$

$$E\Psi = \hbar\omega\Psi = \hbar\omega e^{i(kx-\omega t)} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{i(kx-\omega t)} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi \tag{3.6}$$

これらの結果は、p、E といった粒子性を表す物理量を波動描像で記述しようとすると、物理量が関数 Ψ に作用する微分演算子として表されることを示している。これらを、古典力学における物理量と区別するために記号 $\hat{()}$ をつけて表そう。

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{3.7}$$

古典力学はこのような置き換えを行うことによって量子力学へと移行できる。これを**量子化の手続き**という。

3.3　シュレーディンガー方程式

シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi \tag{3.8}$$

はエネルギーの量子版であるハミルトニアン $\hat{H}$ によって支配されることを前章でのべた。ハミルトニアンの具体形は空間の一様性や等方性によって制約を受ける。空間的に一様な自由粒子の場合のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \tag{3.9}$$

で与えられる。量子化の規則

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\ \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\ \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \tag{3.10}$$

に従って (3.9) を書き換えると

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \tag{3.11}$$

となる。粒子が外部ポテンシャル $U(x, y, z)$ の中に存在するときはハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z) \tag{3.12}$$

となる。これを (3.8) へ代入すると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z)\right)\psi \tag{3.13}$$

定常状態の場合は

$$\psi(x, y, z, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_0(x, y, z) \tag{3.14}$$

を代入すると

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z)\right)\psi_0 = E\psi_0 \tag{3.15}$$

が得られる。

3.3.1　自由粒子

簡単な例として外部ポテンシャルが存在しない (i.e., $U = 0$) 自由粒子の場合を考えよう。この時、(3.15) の解は c を定数として

$$\psi_0(\boldsymbol{r}) = ce^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{3.16}$$

と書ける。ここで、$E = \boldsymbol{p}^2/(2m)$ である。したがって、

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = ce^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)} \tag{3.17}$$

こうして、自由粒子の解は波数が $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{p}/\hbar$、角周波数が $\omega = E/\hbar$ の平面波である。

3.3.2　ガリレイ変換に対する波動関数の変換則

この結果を利用して、ガリレイ変換に対する波動関数の変換則を求めよう。いま、座標系 K’ が座標系 K に対して速度 $\boldsymbol{v}$ で運動している状況を考えよう。この時、2 つの座標系の物理量は次の関係で結ばれている。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{r} &= \boldsymbol{r}' + \boldsymbol{v}t \\
\boldsymbol{p} &= \boldsymbol{p}' + m\boldsymbol{v} \\
E &= E' + \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{p}' + \frac{m}{2}v^2 \\
t &= t'
\end{aligned}
\tag{3.18}
$$

これらを (3.17) へ代入すると

$$
\begin{aligned}
\psi(\boldsymbol{r},t) &= c^{\frac{i}{\hbar}\left[(\boldsymbol{p}'+m\boldsymbol{v})(\boldsymbol{r}'+\boldsymbol{v}t)-\left(E'+\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{p}'+\frac{m}{2}v^2\right)t\right]} \\
&= ce^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'-E't)+\frac{i}{\hbar}\left(m\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{r}'+\frac{m}{2}v^2t\right)} \\
&= \psi(\boldsymbol{r}',t)e^{\frac{i}{\hbar}\left(m\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{r}'+\frac{m}{2}v^2t\right)} \\
&= \psi(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{v}t)e^{\frac{i}{\hbar}\left(m\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{r}-\frac{m}{2}v^2t\right)}
\end{aligned}
$$

こうして、ガリレイ変換によって波動関数は

$$
\psi(\boldsymbol{r},t) = \psi(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{v}t)e^{\frac{i}{\hbar}\left(m\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{r}-\frac{m}{2}v^2t\right)}
\tag{3.19}
$$

のように変化することがわかる。この公式には自由粒子（平面波）を特徴づけるパラメーターである運動量を含まないので、一般の場合のガリレオ変換に対して成立する。

3.3.3　確率の保存と量子圧力

シュレーディンガー方程式 (3.13) に準古典波動関数

$$
\psi = ae^{\frac{i}{\hbar}S}
\tag{3.20}
$$

を代入すると

$$
\begin{aligned}
-a\frac{\partial S}{\partial t} + i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} &= \frac{a}{2m}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}a\Delta S - \frac{i\hbar}{m}\nabla S\cdot\nabla a \\
&\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta a + Ua
\end{aligned}
\tag{3.21}
$$

a と S が実数であると仮定すると、(3.21) の実部と虚部をそれぞれ書き下すと

$$
-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U - \frac{\hbar^2}{2ma}\Delta a
\tag{3.22}
$$

$$
\frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{a}{2m}\Delta S - \frac{1}{m}\nabla S\cdot\nabla a
\tag{3.23}
$$

(3.22) と (3.23) を合わせたものはシュレーディンガー方程式と等価である。

準古典近似では $E = -\partial S/\partial t$、$\boldsymbol{p} = \nabla S$ なので、(3.22) は最後の項を除けば、解析力学におけるハミルトン–ヤコビ方程式と等価になる。右辺の最後の項はそれに対する $\hbar^2$ に比例する量子補正を与える。これを量子圧力項という。

次に、虚部 (3.23) の両辺に $2a$ を掛けると

$$\begin{aligned} \frac{\partial a^2}{\partial t} &= -\frac{a^2}{m}\Delta S - \frac{2a}{m}\nabla S \cdot \nabla a \\ &= -\nabla \left(a^2 \frac{\nabla S}{m} \right) \end{aligned} \tag{3.24}$$

a^2 は確率、$\nabla S/m = \boldsymbol{p}/m =: \boldsymbol{v}$ は速度なので、右辺はある微小な領域から外への確率の流れ、左辺はそれに伴う確率の変化を与えている。これは確率の保存を表す連続の方程式である。こうして、シュレーディンガー方程式の実部は量子補正を含むエネルギー保存則、虚部は確率の保存則を表していることがわかる。

3.4 シュレーディンガー方程式の解の一般的性質

シュレーディンガー方程式の解は、考えている系の具体的な詳細によらない一般的な性質を持っている。まず、波動関数は一価でかつ座標に関して連続でなければならない。このことは、ポテンシャル $U(x, y, z)$ が表面などで不連続になる場合にも当てはまる性質である。しかし、波動関数の空間微分はポテンシャルが無限大になる点で不連続になる（δ 関数ポテンシャルの例を思い出そう)。

ポテンシャルが無限遠でゼロになる（通常の）場合を考えよう。この時、エネルギーが負の状態は空間の有限の領域に閉じ込められた束縛状態である。実際、粒子が無限遠では $U = 0$ なので自由粒子であるが、$\boldsymbol{p}^2/2m = E < 0$ なので、運動量は純虚数になり波動関数は指数関数的に減衰する。更に、この場合は波動関数の一価性を満足するためにはエネルギー固有値は離散的でなければならないことが示される (Bohr-Sommerfeld の量子化条件を思い出そう)。逆に、エネルギー固有値が正 $E > 0$ の状態は無限遠まで存在でき、エネルギー固有値は連続的である。また、この場合、2 乗積分 $\int |\psi|^2 d\boldsymbol{r}$ は発散する。

古典力学では $E < U$ の領域に粒子は侵入できない。しかし、量子力学では、上に述べたように $E < U$ の領域では波動関数は指数関数的に減衰するが侵入が可能である。これが**量子トンネル効果**である。逆に、古典力学では $E > U$ の領域には確率 1 で侵入できるが、量子力学では波の反射が起こる。これを**量子反射**という。

次に、ポテンシャルが

$$U = -\frac{c}{r^s} \quad (c > 0) \tag{3.25}$$

で与えられる場合を考えよう。原点 $r=0$ から Δr 程度広がった波束の運動量の不確定性（広がり）は $\Delta p \sim \hbar/\Delta r$ 程度であるので、運動量の期待値は $(\Delta p)^2/2m \sim \hbar^2/2m(\Delta r)^2$ 程度である。一方、ポテンシャルエネルギーは $-c/(\Delta r)^s$ なので、全エネルギーは

$$E = \frac{\hbar^2}{2m(\Delta r)^2} - \frac{c}{(\Delta r)^s} \tag{3.26}$$

程度となる。$s > 2$ の場合は、波動関数に広がり Δr が小さいほどエネルギー E も下がるので、粒子はポテンシャルの中心 $r = 0$ へと落下する。他方、$s < 2$ の場合は、Δr が小さくなっていくと (3.26) の右辺の第一項が大きくなるので、波動関数はある広がりのところで束縛状態を持つ。この事実は、ポテンシャルが引力の場合は粒子が原点まで落下できる古典力学の場合と大きく異なる。このため、クーロン力 $(s=1)$ で電子が原子核に束縛されている原子は安定に存在できるのである。こうして原子の安定性の問題は量子力学（不確定性原理）によって解決された。

次に、土星の輪のように中心から r_0 のところに幅 Δr で分布している粒子が安定に存在できるかどうかを考えよう。この時、エネルギーは

$$E = \frac{\hbar^2}{2m(\Delta r)^2} - \frac{c}{r_0^s} \tag{3.27}$$

比 $\Delta r/r_0 =: k \ll 1$ を一定にしつつ r_0 を大きくしていくと、

$$E = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2k^2}\left(1 - ck^2 r_0^{2-s}\right) \tag{3.28}$$

となるので、$s < 2$ の場合は $r_0 > (1/(ck^2))^{1/(2-s)}$ のところで E が負になり、束縛状態が存在しうる。よって、土星の輪のように分布している定常状態が存在しうる。比 k を小さくすると r_0 は束縛状態の条件 $E < 0$ を満たしつついくらでも大きくなれるので、エネルギーがゼロの付近に無限個の束縛状態が存在しうることがわかる。逆に、$s > 2$ の場合は、$E < 0$ であるためには $k \to 0$ で $r_0 \to 0$ とならなければならないので、そのような定常状態の数は有限個になる。

3.5 流れの密度

速度演算子 $\hat{\boldsymbol{v}}$ は位置演算子の時間微分として定義される。演算子の時間微分は (2.9) より

$$\hat{\boldsymbol{v}} = \frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{r}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{r}}] \tag{3.29}$$

$\hat{H}$ に (3.12) の真ん中の式を代入すると

$$\hat{\boldsymbol{v}} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m} \tag{3.30}$$

同様にして加速度演算子は

$$\frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{v}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{v}}] = \frac{i}{m\hbar}[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{p}}] = \frac{i}{m\hbar}[U, \hat{\boldsymbol{p}}] = -\frac{1}{m}\nabla U \tag{3.31}$$

すなわち

$$m\frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{v}} = -\nabla U \tag{3.32}$$

これはニュートン方程式の演算子版である。

次に、ある領域 V に粒子がいる存在確率の時間変化を調べよう。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\int |\psi|^2 d\boldsymbol{r} &= \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t}\right) d\boldsymbol{r} \\ &= \frac{i}{\hbar}\int [(\hat{H}^*\psi^*)\psi - \psi^*\hat{H}\psi] d\boldsymbol{r} \end{aligned} \tag{3.33}$$

ここで

$$\hat{H} = \hat{H}^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U \tag{3.34}$$

を代入すると

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\int |\psi|^2 d\boldsymbol{r} &= -\frac{i\hbar}{2m}\int [(\Delta\psi^*)\psi - \psi^*\Delta\psi] d\boldsymbol{r} \\ &= -\frac{i\hbar}{2m}\int \nabla[(\nabla\psi^*)\psi - \psi^*\nabla\psi] d\boldsymbol{r} \end{aligned} \tag{3.35}$$

よって

$$\frac{d}{dt}\int_V |\psi|^2 d\boldsymbol{r} = -\int_V \mathrm{div}\boldsymbol{j} d\boldsymbol{r} \tag{3.36}$$

が得られる。ここで

$$\begin{aligned} \boldsymbol{j} : &= \frac{i\hbar}{2m}[(\nabla\psi^*)\psi - \psi^*\nabla\psi] \\ &= \frac{1}{2m}[(\hat{\boldsymbol{p}}\psi)^*\psi + \psi^*\hat{\boldsymbol{p}}\psi] \end{aligned} \tag{3.37}$$

は確率の流れの密度と解釈することができる。(3.36) は任意の体積 V に対して成立するので

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = -\mathrm{div}\boldsymbol{j} \tag{3.38}$$

が成立する。この意味を理解するために、(3.36) の右辺にガウスの定理を適用すると、V を取り囲む閉曲面を S として

$$\frac{d}{dt}\int_V |\psi|^2 d\boldsymbol{r} = -\int \boldsymbol{j}\cdot d\boldsymbol{S} \tag{3.39}$$

が得られる。これから $\boldsymbol{j}$ は確率密度の流れであることがわかる。

自由粒子の解は平面波であるが、単位時間単位断面積あたり1個の粒子が流れるような波動関数は

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)} \tag{3.40}$$

で与えられる。実際、これを (3.37) へ代入すると

$$\boldsymbol{j} = \frac{1}{mv}\boldsymbol{p} \tag{3.41}$$

が得られる。

3.6 固有状態の一般的性質

基底状態 ψ_0 はノードを持たない、すなわち、空間の全領域で同じ符号を持つ[2]。

実際、波動関数が $x = x_0$ でノードを持つとその付近では波動関数は

$$\psi(x) \simeq \psi(x_0) + c(x - x_0) \tag{3.42}$$

と展開できる。この時、運動エネルギーは

$$\psi^*(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi(x) = 0 \tag{3.43}$$

となる。他方、波動関数 $|\psi(x)|$ を考えて x_0 付近を滑らかにつなぐと曲率は正なので (3.43) は負となりよりエネルギーの低い状態を作ることができて矛盾する。よって基底状態の波動関数はノードを持たない。

更に、基底状態は縮退がない。実際、もし縮退があるとして、基底状態の波動関数が2個 $\psi_0,\ \psi'_0$ 存在するとすると、それらの適当な重ね合わせの状態 $c\psi_0 + c'\psi'_0$ も基底状態の波動関数であるが、係数 c, c' を適当に選ぶことによってこの波動関数にノードを持たせるができるので矛盾する。実際、$\psi(x) := c\psi_0(x) + c'\psi'_0(x)$ とおくと、$\psi(x_0) = 0$ となるためには $c'/c = -\psi_0(x_0)/\psi'_0(x_0)$ と選べばよい。

[2]証明は R. Courant and D. Hilbert, Methods of Mathematical Physics, Vol. I, Chap. VI, Sec.6 (Interscience, New York, 1953)。ただし、フェルミ粒子系は例外。

3.7 1次元系の一般的性質

外部ポテンシャル U が x だけに依存する場合や、$U = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z)$ のような和で書ける場合は、シュレーシンガー方程式は独立な1次元の方程式の和として書かれる。

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi = 0 \tag{3.44}$$

このような1次元シュレーディンガー方程式の一般的性質について議論しよう。

3.7.1 固有状態の非縮退性

まず、1次元の場合は、基底状態だけでなく、波動関数が無限遠でゼロとなる限り、どの固有状態にも縮退がない。実際、もし、1つの固有エネルギー E に2つの異なる固有状態 $\psi_1,\ \psi_2$ が対応すると仮定すると、(3.44) より

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{\psi_2''}{\psi_2} = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E) \tag{3.45}$$

これから $\psi_1''\psi_2 - \psi_1\psi_2'' = (\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2')' = 0$ が得られる。これを積分すると $\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' =$ 定数 となるが、無限遠では $\psi_1 = \psi_2 = 0$ なので、この定数はゼロとなる。よって

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2} \tag{3.46}$$

が得られる。両辺を積分すると $\psi_1 \propto \psi_2$ となるので、両者は本質的には同じである（同じ ray に属する）。こうして、任意のエネルギー固有状態に縮退はない。

3.7.2 振動定理

ポテンシャルが無限遠で有限に留まる1次元量子力学系の $(n+1)$ 番目の固有関数 $\psi_n(x)$ は n 個のノードを持つ。これを振動定理という。

証明は次のようになされる。エネルギー固有値を $E_1 < E_2 < E_3 < \cdots$ のように小さいものから並べ、n 番目と $n+1$ 番目の波動関数 $\psi_n,\ \psi_{n+1}$ を考える。

$$\psi_n'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_n - U)\psi_n = 0 \tag{3.47}$$

$$\psi_{n+1}'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_{n+1} - U)\psi_{n+1} = 0 \tag{3.48}$$

(3.47) に ψ_{n+1} を掛けたものから (3.48) に ψ_n を掛けたものを引き、ψ_n の相隣り合うゼロ点 α, β の区間で積分をすると

$$\psi_n'(\beta)\psi_{n+1}(\beta) - \psi_n'(\alpha)\psi_{n+1}(\alpha) = \frac{2m}{\hbar^2}(E_{n+1} - E_n)\int_\alpha^\beta \psi_n\psi_{n+1}dx \tag{3.49}$$

(α, β) で $\psi_n > 0$ とすると、$\psi_n'(\alpha) > 0,\ \psi_n'(\beta) < 0$ となる。もし、同じ区間で ψ_{n+1} の符号が一定であるとすると、左辺は ψ_{n+1} と異符号、右辺は同符号となり矛盾する。したがって、ψ_{n+1} は符号を変えなければならない。すなわち、ノードを 1 個余分に持つ。ノードを持たない基底状態から出発すると、第一励起状態はノードを 1 個もつことがわかる。同様にして第二励起状態は 2 個もつ。この作業を繰り返すことによって $(n+1)$ 番目の固有状態は n このノードを持つ。これを振動定理という。

（以下別な話）エネルギーの原点を $U(\infty) = 0$ ととろう。また、一般性を失うことなく $U(-\infty) = U_0 > 0$ とすることができる。この時、離散スペクトルのエネルギー E は負でなければならない。

$$E < 0 \tag{3.50}$$

また、ポテンシャルの最小値 $U_{\min}$ は $E > U_{\min}$ なので負でなければならない。これと $U(\infty) = 0,\ U(-\infty) > 0$ から、系が離散スペクトルを持つ場合はポテンシャルは少なくとも一つの極小値を持つことがわかる。

$\underline{0 < E < U_0}$ この場合、エネルギースペクトルは連続的であり、粒子は無限遠 $(x = +\infty)$ まで運動できる。しかし、エネルギーの縮退はない。実際、$x = -\infty$ で波動関数がゼロになるという条件を用いれば、上の証明で定数=0 なので、非縮退であることが示せる。$U = 0$ とみなせるくらい x が正の大きな値のところではシュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi =: \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{3.51}$$

となるので、この領域での解は

$$\psi = a\cos(kx + \delta) \tag{3.52}$$

と書ける。ここで、$a,\ \delta$ は定数である。他方、x が負の大きな値の時はシュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi =: \frac{d^2\psi}{dx^2} - \kappa^2\psi = 0,\ \kappa := \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \tag{3.53}$$

となる。よってこの領域での波動関数は

$$\psi = be^{\kappa x} \tag{3.54}$$

で与えられる。ここで、b は定数である。

$\underline{E > U_0}$ この時、スペクトルは連続的であり、運動は $x = \pm\infty$ にわたる。また、エネルギーは右向きに進む波と左向きに進む波が縮退している（2 重縮退）。

3.8　時間反転

波動関数 $\psi(x,t)$ がシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right)\psi(x,t) \tag{3.55}$$

の解とする。両辺の複素共役をとると

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right)\psi^*(x,t) \tag{3.56}$$

ここで、t を $-t$ で置き換えると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x,-t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right)\psi^*(x,-t) \tag{3.57}$$

こうして、$\psi(x,t)$ がシュレーディンガー方程式の解ならば、$\psi^*(x,-t)$ も同じ方程式の解であることがわかる。これを時間反転した波動関数という。

$$\psi^{\mathrm{rev}}(x,t) := \psi^*(x,-t) \tag{3.58}$$

$\psi(x,-t)$ は $\psi(x,0)$ にユニタリ演算子 $\hat{U} := e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ を作用させることによって得られる。

$$\psi(x,-t) = U\psi(x,0) \tag{3.59}$$

複素共役を取る演算子を K とすると時間反転演算子 Θ は

$$\Theta = KU \tag{3.60}$$

と書けることがわかる。このように Θ は K を含むために反線形演算子となる。

$$\Theta(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha^*\Theta\psi_1 + \beta^*\Theta\psi_2 \tag{3.61}$$

このため、時間反転演算子は反ユニタリ演算子と呼ばれる。

第4章　対称性と保存則

4.1　古典力学との対応

エネルギー、運動量、角運動量の保存則は、粒子数や相互作用の種類といった系の具体的性質には依らず、時間や空間の一様性、等方性という時空の対称性から導かれる。

解析力学ではこれはネターの定理として知られている。すなわち、系の作用がある連続変換に対して不変ならば、それに対応する保存量が存在する。古典力学の運動方程式は作用の変分から求められるので、運動方程式は作用を不変に保つ変換に対しては不変になる。この時、ネーターの定理により保存量が導かれる。作用が時間、座標の併進および回転に対して不変な場合には、それぞれエネルギー、運動量および角運動量が保存することを思い出そう。

量子力学においても時空の連続性に対応する保存則は波動関数を具体的に求めなくても、物理量の交換関係から一般的に導くことができる。この交換関係は解析力学におけるポアソンの括弧に対応している。

古典力学における物理量 O の運動方程式はポアソンの括弧

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial B}{\partial q}\frac{\partial A}{\partial p} \tag{4.1}$$

を用いて

$$\frac{dO}{dt} = \{O, H\} + \frac{\partial O}{\partial t} \tag{4.2}$$

と書けることを思い出そう。これは、2 章で導いた (2.9) 式に対応している。物理量 O が時間に陽に依存しない (すなわち、$\partial O/\partial t = 0$) 場合は、$O$ が保存することは、ハミルトニアンとのポアソン括弧 $\{O, H\}$ がゼロになることと等価である。以下でこれの量子力学版を導こう。

4.2　時間の並進対称性とエネルギー保存

ハミルトニアン $\hat{H}$ が時間に陽に依存しないときは

$$\frac{d}{dt}\hat{H} = 0 \tag{4.3}$$

であり、ハミルトニアンの期待値として定義されるエネルギーが保存される。実際、シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{4.4}$$

の解は $\hat{H}$ が時間に陽に依存しない場合は

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle \tag{4.5}$$

と書くことができる。ここで

$$\hat{U}(t) := e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{4.6}$$

は波動関数の時間を平行移動するユニタリー演算子であり、次の性質を満足する。

$$\hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}^{-1}(t) = \hat{U}(-t) \tag{4.7}$$

$\hat{H}$ は自分自身と交換するので $k = 1, 2, \cdots$ として

$$\langle\Psi(t)|\hat{H}^k|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(0)|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{H}^k e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|\hat{H}^k|\Psi(0)\rangle \tag{4.8}$$

が得られ、エネルギーやその任意の冪の期待値が保存することがわかる。

ハミルトニアンが時間に依存しないことは、時間の原点をずらしても系の性質が変化しないことを意味する。このとき、系は**時間の並進対称性**を持つという。エネルギーの保存則は時間の並進対称性の帰結である。

4.3 空間の並進対称性と運動量保存

波動関数 $\Psi(x)$ で記述される系全体を x 軸の正の方向へ a だけ平行移動することを考えよう。このとき平行移動された系の波動関数は $\Psi(x-a)$ で与えられる。これを x の周りにテイラー展開すると

$$\begin{aligned}\Psi(x-a) &= \left(1 + (-a)\frac{d}{dx} + \frac{(-a)^2}{2!}\frac{d^2}{dx^2} + \cdots\right)\Psi(x) \\ &= e^{-a\frac{d}{dx}}\Psi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\Psi(x) \end{aligned} \tag{4.9}$$

が得られる。ここで、$\hat{p} = -i\hbar d/dx$ は運動量演算子である。これから系全体を右へ a だけ平行移動する演算子が

$$\hat{T}(a) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a} \tag{4.10}$$

で与えられ、運動量演算子がその**生成子**であることがわかる。

平行移動した波動関数 $\Psi(x-a)$ を用いて計算したハミルトニアン $\hat{H}$ の期待値がもとの波動関数 $\Psi(x)$ から得られる期待値と一致するとき、系は**空間の並進対称性** を持つという。このとき、次の等式が成立する。

$$\int \Psi^*(x)\hat{H}\Psi(x)dx = \int \Psi^*(x-a)\hat{H}\Psi(x-a)dx \tag{4.11}$$

これに (4.9) を代入すると

$$\begin{aligned}\int \Psi^*(x)\hat{H}\Psi(x)dx &= \int (e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\Psi(x))^*\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\Psi(x)dx \\ &= \int (\hat{T}(a)\Psi(x))^*\hat{H}\hat{T}(a)\Psi(x)dx\end{aligned}$$

右辺にエルミート共役 $\hat{T}^\dagger$ の定義式をあてはめると

$$\begin{aligned}\int \Psi^*(x)\hat{H}\Psi(x)dx &= \int \Psi(x)^*\hat{T}^\dagger(a)\hat{H}\hat{T}(a)\Psi(x)dx \\ &= \int \Psi^*(x)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\Psi(x)dx \end{aligned} \tag{4.12}$$

が得られる。これが任意の波動関数 $\Psi(x)$ に対して成立するためには

$$\hat{H} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a} \tag{4.13}$$

でなければならない。a が微小量であると仮定して右辺を展開すると

$$\hat{H} = \hat{H} + \frac{i}{\hbar}[\hat{p},\hat{H}]a + O(a^2) \tag{4.14}$$

となる。ここで、$O(a^2)$ は a^2 と同程度かそれ以下の微小量を意味する。(4.14) が任意の微小量 a に対して成立するためには

$$[\hat{p},\hat{H}] = 0 \tag{4.15}$$

でなければならない。運動量演算子に対するハイゼンベルグの運動方程式が

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{p}] \tag{4.16}$$

で与えられることを思い出すと、(4.15) が運動量の保存則を表していることがわかる。このように、系が空間に関する並進対称性を持つときには運動量が保存する。

4.4　空間の等方性と軌道角運動量保存

系を空間的に回転させてもハミルトニアンの期待値が変化しないとき、系は**空間の回転対称性**を持つ、あるいは、単に**等方的** であるという。

系を z 軸の周りに角度 ϕ 回転させる前後の波動関数をそれぞれ $\Psi(x,y,z)$、$\Psi'(x,y,z)$ と書くと、両者は次の関係式で結ばれている。

$$\Psi'(x,y,z)=\Psi(x\cos\phi+y\sin\phi,y\cos\phi-x\sin\phi,z) \tag{4.17}$$

$|\phi|\ll 1$ を仮定して右辺を ϕ の 1 次まで展開すると

$$\begin{aligned}\Psi'(x,y,z) &= \Psi(x+y\phi,y-x\phi,z)\\ &= \left[1+\phi\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)\right]\Psi(x,y,z)\\ &= \left[1-\frac{i}{\hbar}\phi\left(x\hat{p}_y-y\hat{p}_x\right)\right]\Psi(x,y,z)\\ &= \left(1-\frac{i}{\hbar}\phi\hat{L}_z\right)\Psi(x,y,z)\end{aligned} \tag{4.18}$$

が得られる。これから、z 軸の周りの回転の生成子が**軌道角運動量**の z 成分

$$\hat{L}_z\equiv x\hat{p}_y-y\hat{p}_x \tag{4.19}$$

であることがわかる。

ϕ が大きい場合は角度を N 等分して微小回転を N 回行い、$N\to\infty$ なる極限をとると

$$\begin{aligned}\Psi'(x,y,z) &= \lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{i}{\hbar}\frac{\phi}{N}\hat{L}_z\right)^N\Psi(x,y,z)\\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\hat{L}_z}\Psi(x,y,z)\end{aligned} \tag{4.20}$$

が得られる。従って、系を z 軸の周りに角度 ϕ だけ回転させる演算子が

$$\hat{R}_z(\phi)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\phi} \tag{4.21}$$

で与えられることがわかる[1]。$\hat{L}_z$ は z 軸の周りの回転の生成子と呼ばれる。同様にして、x、y 軸の周りの回転の生成子はそれぞれ軌道角運動量の x、y 成分

$$\hat{L}_x\equiv y\hat{p}_z-z\hat{p}_y,\quad \hat{L}_y\equiv z\hat{p}_x-x\hat{p}_z \tag{4.22}$$

[1]系を回転させるのではなく座標系を回転させる場合の回転の演算子は $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\phi}$ となる。

で与えられ、それぞれの軸の周りに角度 ϕ 回転させる演算子が

$$\hat{R}_x(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_x\phi}, \quad \hat{R}_y(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_y\phi} \tag{4.23}$$

で与えられることがわかる。

運動量の場合と同様に、$\Psi(x,y,z)$ と $\Psi'(x,y,z)$ で計算したハミルトニアンの期待値が同じであるためには

$$\hat{H} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\phi}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\phi} \tag{4.24}$$

でなければならない。ϕ が微小量であると思って右辺を展開すると

$$\hat{H} = \hat{H} + \frac{i}{\hbar}[\hat{L}_z, \hat{H}]\phi + O(\phi^2) \tag{4.25}$$

となる。これが任意の ϕ に対して成立するためには

$$[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0 \tag{4.26}$$

が得られる。これを $\hat{L}_z$ に対するハイゼンベルグの運動方程式

$$\frac{d\hat{L}_z}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{L}_z] \tag{4.27}$$

と比較すると、(4.26) が軌道角運動量の z 成分が保存するための条件であることがわかる。他の成分についても同様である。このように、系が空間に関する回転対称性を持つときには、その回転軸の周りの軌道角運動量が保存する。

角運動量が保存しない定常状態における角運動量の期待値は、縮退がない場合はゼロになる。実際、角運動量の期待値は

$$\langle\hat{\boldsymbol{L}}\rangle = -i\hbar\int\psi^*(\boldsymbol{r}\times\nabla)\psi d\boldsymbol{r} \tag{4.28}$$

で与えられるが、2.3 節で述べたように縮退のない定常状態の波動関数は実に取れる。この時、(4.28) の右辺は純虚数になるが角運動量の期待値は実数なので $\langle\hat{\boldsymbol{L}}\rangle = 0$ でなければならないことがわかる。

4.5 離散対称性

4.5.1 パリティ

簡単のため空間の次元が 1 次元の場合を考える。ポテンシャルが偶関数

$$V(-x) = V(x) \tag{4.29}$$

の場合を考えよう。この時、シュレーディンガー方程式は座標の符号の反転 $(x \to -x)$ に対して不変である。したがって、もし $\psi(x)$ が解ならば $\psi(-x)$ も解である。束縛状態のように (1 次元系の束縛状態は縮退がないことを思い出そう）波動関数に縮退がない場合は、c を定数として $\psi(-x) = c\psi(x)$ とおける。この式で x を $-x$ とおくと

$$\psi(x) = c\psi(-x) = c^2\psi(x) \tag{4.30}$$

これから $c = \pm 1$。こうして、波動関数は偶 $(\psi(-x) = \psi(x))$ または奇 $(\psi(-x) = -\psi(x))$ であることがわかる。奇の波動関数は原点でゼロになる。特に、基底状態はノードを持たないので基底状態の波動関数は偶でなければならない。波動関数に縮退がある場合は、$\psi(x)$ は一般に偶でも奇でもないが、適当な線形結合を取ることによって偶または奇にすることができる。

4.5.2 周期的対称性

空間の並進対称性の特別な例として、イオンが周期的な結晶格子を組んでいる固体中での電子の運動を考えよう。この場合は、結晶全体を格子間隔 a の整数倍だけ平行移動した場合に限り系の状態は不変である。これは系が**離散的な対称性** を持つ例である。この場合、(4.13) は $x_0 = na$ (n は整数) の場合にのみ成り立つ。$\hat{T}(na) = (\hat{T}(a))^n$ なので

$$[\hat{H}, (\hat{T}(a))^n] = 0 \tag{4.31}$$

が成立する。これは、結晶中の電子の固有状態として、$\hat{H}$ と $(\hat{T}(a))^n$ の同時固有状態がとれることを意味している。$\hat{T}(a)$ はユニタリー演算子なので、$(\hat{T}(a))^n$ の固有値は一般に $e^{in\theta}$ と書ける[2]。ここで、便宜上 $\theta = ka$ とおいて同時固有関数を $\Psi_{k,E}(x)$ と書くと

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}na}\Psi_{k,E}(x) = e^{ikan}\Psi_{k,E}(x) \tag{4.32}$$

$$\hat{H}\Psi_{k,E}(x) = E\Psi_{k,E}(x) \tag{4.33}$$

となる。他方、(4.9) より

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}na}\Psi_{k,E}(x) = \Psi_{k,E}(x+na)$$

なので (4.32) は

$$\Psi_{k,E}(x+na) = e^{ikna}\Psi_{k,E}(x) \tag{4.34}$$

[2]任意のユニタリー演算子 $\hat{U}$ は適当なエルミート演算子 $\hat{O}$ を用いて $\hat{U} = e^{i\hat{O}}$ と書けることに注意しよう。エルミート演算子の固有値は実数なので、ユニタリー演算子の固有値は θ を実数として $e^{i\theta}$ と書ける

と書ける。(4.34) を満足する固有関数が平面波 e^{ikx} と周期が a の周期関数 $u_{k,E}(x)$ の積で書けることは容易に確かめることができる。

$$\Psi_{k,E}(x) = e^{ikx}u_{k,E}(x), \quad u_{k,E}(x+a) = u_{k,E}(x) \tag{4.35}$$

周期ポテンシャル中の粒子の波動関数が (4.35) の形に書けることを**ブロッホの定理** という。

4.6 非可換な保存量とエネルギーの縮退

ハミルトニアンと交換する二つの演算子が互いに交換しない場合は、系のエネルギーは縮退する。この証明は次のようになされる。ハミルトニアンを $\hat{H}$、これと交換する二つの保存量を $\hat{P}$、$\hat{Q}$ としよう。

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0 \tag{4.36}$$

$$[\hat{H}, \hat{Q}] = 0 \tag{4.37}$$

仮定により $\hat{P}$ と $\hat{Q}$ は互いに交換しないので

$$[\hat{P}, \hat{Q}] \neq 0 \tag{4.38}$$

である。(4.36) より $\hat{H}$ と $\hat{P}$ の同時固有状態の完全系 $\{|E_i, p_i\rangle\}$ が存在して

$$\hat{H}|E_i, p_i\rangle = E_i|E_i, p_i\rangle, \quad \hat{P}|E_1, p_i\rangle = p_i|E_i, p_i\rangle$$

を満足する。他方、(4.38) から、ある i(これを $i = 1$ とする) が存在して

$$\hat{Q}|E_1, p_1\rangle \neq c|E_1, p_1\rangle \tag{4.39}$$

である (c は定数)。なぜならば、もしすべての i に対して $\hat{Q}|E_i, p_i\rangle = c|E_i, p_i\rangle$ が成立すれば

$$\hat{P}\hat{Q}|E_i, p_i\rangle = c\hat{P}|E_i, p_i\rangle = cp_i|E_i, p_i\rangle$$
$$\hat{Q}\hat{P}|E_i, p_i\rangle = p_i\hat{Q}|E_i, p_i\rangle = cp_i|E_i, p_i\rangle$$

となり、$\hat{P}$ と $\hat{Q}$ が交換してしまうからである。他方、(4.37) より

$$\hat{H}\hat{Q}|E_1, p_1\rangle = \hat{Q}\hat{H}|E_1, p_1\rangle = E_1\hat{Q}|E_1, p_1\rangle$$

なので $|E_1, p_1\rangle$ と $\hat{Q}|E_1, p_1\rangle$ は同じエネルギー固有値 E_1 を持つ $\hat{H}$ の固有状態であり、かつ、(4.39) よりこれらは互いに異なっている。従って、この系のエネルギーは縮退している。

4.7　ウィグナーの定理

古典論では 2 つのベクトルの内積は座標系の取り方によらず保存される。二つのベクトルを同時に平行移動、回転、反転操作を行っても内積は不変に保たれる。実際、2 つのベクトル $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}$ にこれらの変換を行って得られるベクトルを $\boldsymbol{u}', \boldsymbol{v}'$ とすると、$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} = \boldsymbol{u}' \cdot \boldsymbol{v}'$ が成立する。これに対応する量子版は何か、それに対する答えを与えてくれるのがここで述べるウィグナーの定理である[3]。古典論との違いは、ヒルベルト空間のベクトルは複素数であり、かつ、波動関数全体に位相因子をかけたものは同じ量子状態を表すという点である。このことから、古典論の内積の保存に対応する量子力学的対称性は

$$|\langle\phi|\psi\rangle| = |\langle\phi'|\psi'\rangle| \tag{4.40}$$

と表される。ここで、$|\phi'\rangle,\ |\psi'\rangle$ はそれぞれ $|\phi\rangle,\ |\psi\rangle$ を変換して得られたヒルベルト空間のベクトルである。すなわち、

$$\hat{T}|\phi\rangle = |\phi'\rangle,\ \hat{T}|\psi\rangle = |\psi'\rangle \tag{4.41}$$

ウィグナーの定理によると、(4.40) が任意の状態 $|\phi\rangle,\ |\psi\rangle$ に対して成立する変換 $\hat{T}$ は、状態ベクトルの位相を適当に選ぶことによって次の 2 つのいずれかであることを示すことができる。

$$\hat{T}(\alpha|\phi\rangle + \beta|\psi\rangle) = \alpha|\phi'\rangle + \beta|\psi'\rangle \text{ かつ } \langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi|\psi\rangle \tag{4.42}$$

または

$$\hat{T}(\alpha|\phi\rangle + \beta|\psi\rangle) = \alpha^*|\phi'\rangle + \beta^*|\psi'\rangle \text{ かつ } \langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\phi\rangle \tag{4.43}$$

ここで、α, β は複素数である。前者の場合は写像 $\hat{T}$ は線形でかつユニタリー、後者の場合は反線形でかつ反ユニタリーと呼ばれる。

これを証明するために、完全規格直交基底 $\{|e_i\rangle\}$ $(i = 1, 2, \cdots)$ とそれを $\hat{T}$ で変換して得られる基底 $|e_i'\rangle := \hat{T}|e_i\rangle$ を考える。（規格化されていない）状態 $|f_j\rangle := |e_1\rangle + |e_j\rangle$ $(j = 2, 3, \cdots)$ を考えると、(4.40) より次式が成立する。

$$\begin{aligned} |\langle e_1'|f_j'\rangle| &= |\langle e_1|f_j\rangle| = 1 \quad (j = 2, 3, , \cdots) \\ |\langle e_j'|f_k'\rangle| &= |\langle e_j|f_k\rangle| = \delta_{jk} \quad (j = 2, 3, \cdots) \end{aligned}$$

これらから θ_j, δ_j を任意の実数として

$$|f_j'\rangle = e^{i\theta_j}|e_1'\rangle + e^{i\delta_j}|e_j'\rangle$$

[3]E. P. Wigner, *Group Theory*, Academic Press, New York (1959), p.233

と書けることがわかる。位相因子だけ異なる状態ベクトルは物理的には等価なので、位相因子を状態に吸収したものを改めて $|e'_1\rangle$, $|e'_j\rangle$ と書くと

$$\hat{T}(|e_1\rangle + |e_j\rangle) = |e'_1\rangle + |e'_j\rangle \tag{4.44}$$

が得られる。さて、任意のベクトル

$$|\phi\rangle = \sum_i a_i |e_i\rangle$$

の写像

$$|\phi'\rangle := \hat{T}|\phi\rangle = \sum_i a'_i |e'_i\rangle$$

を考えよう。仮定 (4.40) により

$$|a'_i| = |\langle e'_i|\phi'\rangle| = |\langle e_i|\phi\rangle| = |a_i| \tag{4.45}$$

さらに

$$(\langle e_1| + \langle e_j|)|\phi\rangle = a_1 + a_j,\ (\langle e'_1 + e'_j|)|\phi'\rangle = a'_1 + a'_j$$

なので、仮定 (4.40) より $|a_1 + a_j|^2 = |a'_1 + a'_j|^2$、よって

$$a_1^* a_j + a_1 a_j^* = a_1'^* a'_j + a'_1 a_j'^*$$

両辺を $(a_1 a_1^* a_j a_j^*)^{1/2} = (a'_1 a_1'^* a'_j a_j'^*)^{1/2}$ で割ると

$$\left(\frac{a_1^* a_j}{a_1 a_j^*}\right)^{\frac{1}{2}} + \text{c.c.} = \left(\frac{a_1'^* a'_j}{a'_1 a_j'^*}\right)^{\frac{1}{2}} + \text{c.c.}$$

が得られる。ここで、c.c. はそれに先立つ項の複素共役を示している。これから

$$e^{i\theta} + e^{-i\theta} = e^{i\theta'} + e^{-i\theta'}$$

この解は $\theta = \pm\theta'$ である。

　$\theta = \theta'$ の時は $a_1'^* a'_j/(a'_1 a_j'^*) = a_1^* a_j/(a_1 a_j^*)$ なので状態 $|\phi'\rangle$ 全体にかかる任意の位相を $a'_1 = a_1$ となるよう選ぶと、$a'_j/a_j'^* = a_j/a_j^*$ が得られる。従って、(4.45) より $a'_j = a_j$ が得られる。それゆえ

$$|\phi'\rangle = \sum_i a_i |e'_i\rangle \tag{4.46}$$

同様にして他の状態ベクトル $|\psi\rangle = \sum_i b_i|e_i\rangle$ に対しても $|\psi'\rangle := \hat{T}|\psi\rangle$ の位相を適当に選ぶことによって $|\psi'\rangle = \sum_i b_i|e'_i\rangle$ が言える。こうして、(4.42) が得られた。

次に $\theta = -\theta'$ の場合を考える。この時は $a'^*_1 a'_j/(a'_1 a^*_j) = a_1 a^*_j/(a^*_1 a_j)$ なので、$|\phi'\rangle$ の位相を $a'_1 = a^*_1$ になるように選ぶと $a'_j/a'^*_j = a^*_j/a_j$ となる。よって、(4.45) より $a'_j = a^*_j$ が得られる。それゆえ、

$$|\phi'\rangle = \sum_i a^*_i|e'_i\rangle \tag{4.47}$$

が得られる。同様にして他の状態ベクトル $|\psi\rangle = \sum_i b_i|e_i\rangle$ に対しても $|\psi'\rangle = \hat{T}|\psi\rangle$ の位相を適当に選ぶことによって $|\psi'\rangle = \sum_i b^*_i|e'_i\rangle$ が言える。こうして、(4.43) が得られた。

空間の並進や回転のように連続変換が可能なものはユニタリー変換のクラスに属する（波動関数の連続性より、無限小の変化に対して係数が複素共役へとジャンプすることはできない)。離散的な変換については、空間反転はユニタリー変換であるが時間反転は反ユニタリーである（3.8 節参照)。ウィグナーの定理は $\langle\phi|\psi\rangle = 0$ ならば $\langle\phi'|\psi'\rangle = 0$ でなければならないという (4.40) よりも弱い条件下で証明することもできる[4]。

[4] G. Emch and C. Piron, J. Math. Phys. **4**, 469 (1963); N. Gisin, Am. J. Phys. **61**, 86 (1993)

第5章　角運動量

5.1　軌道角運動量

5.1.1　同時固有状態

古典力学の場合とは異なり量子力学では角運動量の固有値は離散的な値を取る。これを見るために、まず (4.19)、(4.22) で定義される $\hat{L}_x$、$\hat{L}_x$、$\hat{L}_x$ が互いに交換せず、交換関係

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \tag{5.1}$$

を満足することに注意する。これは角運動量の各成分が全てゼロになる場合を除き、$\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ が同時に確定した状態（同時固有状態）が存在しないことを意味する。他方、各成分の自乗の和で定義される角運動量の大きさの自乗

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 := \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \tag{5.2}$$

は、各成分と交換する。

$$[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_x] = 0, \quad [\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_y] = 0, \quad [\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_z] = 0 \tag{5.3}$$

これを示すために次の公式を用いる。

$$\begin{aligned} [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} \\ &= \hat{A}(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})\hat{B} \\ &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \end{aligned} \tag{5.4}$$

これを用いると、(5.3) の最初の式は

$$\begin{aligned} [\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_x] &= [\hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x] \\ &= \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_z \\ &= i\hbar(-\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_z) = 0 \end{aligned}$$

となり、他の式も同様に証明できる。従って、$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ は角運動量のいずれか 1 つの成分と同時固有状態を持つことができる。

いま、$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ の同時固有状態を $|L,M\rangle$ と書こう。すると、固有方程式は

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2|L,M\rangle = \hbar^2 f(L)|L,M\rangle, \quad \hat{L}_z|L,M\rangle = \hbar M|L,M\rangle \tag{5.5}$$

となる。ここで、M は $\hat{L}_z$ の固有値である。また、$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ の固有値を $\hbar^2 f(L)$ と書いた理由は以下で明らかになる。また、以下の議論は $\hat{L}_z$ を $\hat{L}_x$ あるいは $\hat{L}_y$ に置き換えても同様に成立することは空間の等方性から明らかであろう。ただし、$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ と同時固有状態になれるのはこれらのうちの一つのみである。以下ではそれを z 軸方向に選ぶ。同時固有状態として選ばれた方向を量子化軸という。

固有値を求めるために、角運動量の昇降演算子 (raising and lowering operators) を定義する。

$$\hat{L}_+ \equiv \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \quad \hat{L}_- \equiv \hat{L}_x - i\hat{L}_y \tag{5.6}$$

(5.1) からこれらが交換関係

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_+] = \hbar\hat{L}_+, \ \ [\hat{L}_z, \hat{L}_-] = -\hbar\hat{L}_-, \ \ [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z \tag{5.7}$$

を満足することがわかる。$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ は昇降演算子を用いて

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z \tag{5.8}$$

$$= \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z \tag{5.9}$$

のように表すことができる。これらの関係式はしばしば有用である。

(5.7) の最初の関係式から

$$\hat{L}_z\hat{L}_+ = \hat{L}_+(\hat{L}_z + \hbar) \tag{5.10}$$

が得られるが、これを同時固有状態 $|L,M\rangle$ に作用させると

$$\hat{L}_z(\hat{L}_+|L,M\rangle) = \hat{L}_+(\hat{L}_z + \hbar)|L,M\rangle = \hbar(M+1)\hat{L}_+|L,M\rangle \tag{5.11}$$

であることがわかる。これから、状態 $\hat{L}_+|L,M\rangle$ が演算子 $\hat{L}_z$ の固有値が $M+1$ の固有状態であることがわかる。

$$\hat{L}_+|L,M\rangle \propto |L,M+1\rangle \tag{5.12}$$

同様にして、(5.7) の 2 番目の関係式から得られる

$$\hat{L}_z\hat{L}_- = \hat{L}_-(\hat{L}_z - \hbar) \tag{5.13}$$

を用いると、$\hat{L}_-$ が固有値 M を 1 だけ減少させることがわかる。すなわち、

$$\hat{L}_z(\hat{L}_-|L,M\rangle) = \hat{L}_+(\hat{L}_z - \hbar)|L,M\rangle = \hbar(M-1)\hat{L}_-|L,M\rangle \tag{5.14}$$

よって

$$\hat{L}_-|L,M\rangle \propto |L,M-1\rangle \tag{5.15}$$

他方、(5.5) の最初の関係式を用いると

$$\begin{aligned}\hbar^2(f(L)-M^2) &= \langle L,M|\hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2|L,M\rangle \\ &= \langle L,M|\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2|L,M\rangle \geq 0 \end{aligned} \tag{5.16}$$

なので、L が与えられたとき M には上限値 $M^{\max}$ と下限値 $M^{\min}$ が存在し

$$\hat{L}_+|L,M^{\max}\rangle = 0 \tag{5.17}$$
$$\hat{L}_-|L,M^{\min}\rangle = 0 \tag{5.18}$$

である。(5.17) の左から $\hat{L}_-$ を作用して (5.8) から得られる $\hat{L}_-\hat{L}_+ = \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z$ を使うと

$$f(L) = \hbar^2 M^{\max}(M^{\max}+1) \tag{5.19}$$

であることがわかる。同様に、(5.18) の左から $\hat{L}_+$ を作用させて (5.9) から得られる $\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z$ を使うと

$$f(L) = \hbar^2 M^{\min}(M^{\min}-1) \tag{5.20}$$

が得られる。(5.19) と (5.20) から $M^{\max} = -M^{\min}$ でなければならないことがわかる。そこで、$M^{\max} = L$ とおくと

$$f(L) = L(L+1) \tag{5.21}$$

が得られる。$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ の固有値が $\hbar^2 L^2$ でなく $\hbar^2 L(L+1)$ であることに注意しよう。この違いは、異なった角運動量成分が互いに非可換であることから生じている。

こうして、$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ の同時固有状態は

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2|L,M\rangle = \hbar^2 L(L+1)|L,M\rangle \tag{5.22}$$
$$\hat{L}_z|L,M\rangle = \hbar M|L,M\rangle, \quad (M = L, L-1, \cdots, -L) \tag{5.23}$$

を満足することがわかる。L と $-L$ の差は整数でなければならないので、L がとり得る値は

$$0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots \tag{5.24}$$

である。しかしながら、座標に依存する軌道角運動量の場合、系を 2π 回転させると波動関数は回転前のものに戻らなければならない。これを**波動関数の一価性** (single-valuedness of the wave function) という。従って、(4.20) で $\phi = 2\pi$ とおけばわかるように、L のとり得る値は整数に限定される。

$$L = 0, 1, 2, \cdots \tag{5.25}$$

角運動量が (5.24) のように量子化されるのは、2 つの成分の交換関係が残りの成分に比例するというリー代数 (5.1) の帰結であることに注意しよう。これに対して、交換関係が定数になる位置と運動量の場合は、リー代数だけからは量子化は結論されず無限に深いポテンシャル井戸のような境界条件が必要である。

5.1.2　行列要素

角運動量の固有状態の完全性関係式は

$$\sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^{L} |L, M\rangle\langle L, M| = \hat{I} \tag{5.26}$$

で与えられる。ここで、$\hat{I}$ は恒等演算子である。また、規格直交条件は

$$\langle L, M|L', M'\rangle = \delta_{L,L'}\delta_{M,M'} \tag{5.27}$$

である。

空間について等方的な系では角運動量は保存されるので、行列要素は L の値が同じ状態間の遷移を考えるだけで十分である。(5.8) から関係式 $\hat{L}_-\hat{L}_+ = \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z$ を使うと

$$\begin{aligned}\langle L, M|\hat{L}_-\hat{L}_+|L, M\rangle &= |\langle L, M+1|\hat{L}_+|L, M\rangle|^2 \\ &= \hbar^2(L-M)(L+M+1)\end{aligned} \tag{5.28}$$

が得られる。ここで、最初の等式は $\hat{L}_-$ と $\hat{L}_+$ の間に完全性関係式 (5.26) を代入して、(5.12) と (5.15) を用いることで得られる。

行列要素は一般性を失うことなく実数にとることができるので

$$\langle L, M+1|\hat{L}_+|L, M\rangle = \hbar\sqrt{(L-M)(L+M+1)} \tag{5.29}$$

が得られる。同様にして、$\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z$ を用いると

$$\begin{aligned}\langle L, M|\hat{L}_+\hat{L}_-|L, M\rangle &= |\langle L, M-1|\hat{L}_-|L, M\rangle|^2 \\ &= \hbar^2(L+M)(L-M+1)\end{aligned} \tag{5.30}$$

が得られる。従って、

$$\langle L, M-1|\hat{L}_-|L, M\rangle = \hbar\sqrt{(L+M)(L-M+1)} \tag{5.31}$$

が得られる。(5.29)、(5.31) を用いれば $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ の行列要素も求めることができる。すなわち、

$$\begin{aligned}\langle L, M|\hat{L}_x|L, M-1\rangle &= \langle L, M-1|\hat{L}_x|L, M\rangle \\ &= \frac{1}{2}\sqrt{(L+M)(L-M+1)} \qquad (5.32)\\ \langle L, M|\hat{L}_y|L, M-1\rangle &= -\langle L, M-1|\hat{L}_x|L, M\rangle \\ &= -\frac{i}{2}\sqrt{(L+M)(L-M+1)} \qquad (5.33)\end{aligned}$$

$\hat{L}_x, \hat{L}_y$ の行列要素の対角成分はゼロである。対角成分は期待値を与えるので、$\hat{L}_z$ の固有状態に対する軌道角運動量の x, y 成分の期待値はゼロであることがわかる。このことから軌道角運動量ベクトル $\hat{\boldsymbol{L}}$ の期待値は量子化軸（今の場合は z 軸）の方向を向いていることがわかる。

$\hat{L}_z$ の行列要素は定義により

$$\langle L, M|\hat{L}_z|L, M'\rangle = \delta_{M,M'}\hbar M \tag{5.34}$$

で与えられる。

5.1.3 球面調和関数

規格直交条件 (5.27) に角度方向の完全性関係式

$$\int d\Omega|\theta, \phi\rangle\langle\theta, \phi| = \hat{I},\ d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi\ (0 \le \theta \le \pi,\ 0 \le \phi < 2\pi) \tag{5.35}$$

を挿入する。ここで、θ、ϕ は極座標

$$x = r\sin\theta\cos\phi, \quad y = r\sin\theta\sin\phi, \quad z = r\cos\theta \tag{5.36}$$

の天頂角と方位角であり、$d\Omega$ は立体角要素である。すると

$$\begin{aligned}\int d\Omega\langle L, M|\theta, \phi\rangle\langle\theta, \phi|L', M'\rangle &= \int d\Omega Y_L^{M*}(\theta, \phi)Y_{L'}^{M'}(\theta, \phi) \\ &= \delta_{L,L'}\delta_{M,M'}\end{aligned} \tag{5.37}$$

が得られる。ここで、

$$Y_L^M(\theta,\phi) \equiv \langle \theta,\phi | L, M\rangle \tag{5.38}$$

は**球面調和関数** と呼ばれる。球面調和関数は固有方程式

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 Y_L^M(\theta,\phi) = \hbar^2 L(L+1) Y_L^M(\theta,\phi) \tag{5.39}$$

$$\hat{L}_z Y_L^M(\theta,\phi) = \hbar M Y_L^M(\theta,\phi) \quad (M = L, L-1, \cdots, -L) \tag{5.40}$$

を満足する固有関数である。M が $-L$ から L までの整数値をとることに対応して、各 L の値に対して、$2L+1$ 個の成分 $Y_L^M(\theta,\phi)$ が存在し、系を回転させるとこれらの成分間を互いに移り変わる。M が離散的な値を取るという事実は、角運動量の向きが量子力学によって離散化されたと解釈される。

$Y_L^M(\theta,\phi)$ の関数形を具体的に求めるために、(5.39) と (5.40) の左辺の演算子を極座標表示 (5.36) を使って書く。このため、まず座標 x, y, z に関する偏微分を極座標表示すると

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} &= \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \\
\frac{\partial}{\partial y} &= \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \\
\frac{\partial}{\partial z} &= \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned} \tag{5.41}$$

となる。これらを利用すると

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{5.42}$$

が得られる。これを (5.40) に代入すると球面調和関数の ϕ 依存性が

$$Y_L^M(\theta,\phi) \propto e^{iM\phi} \tag{5.43}$$

であることがわかる。M が整数値をとることから、系を z 軸の周りを一周する (すなわち、$\phi \to \phi + 2\pi$) と波動関数は元に戻り、波動関数の一価性が満足されていることがわかる。

同様にして $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ を極座標表示すると

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{5.44}$$

$$\hat{L}_y = i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{5.45}$$

これらを用いて $\hat{L}_\pm$ を極座標表示すると

$$L_+ = \hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{5.46}$$

$$L_- = -\hbar e^{-i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{5.47}$$

なのでこれらを (5.9) 式 $\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z$ に代入すると

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \tag{5.48}$$

が得られる。これは、ラプラシアンの極座標表示

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \tag{5.49}$$

の角度部分に定数を除き一致していることに注意しよう。

(5.48) を (5.39) に代入し、$Y_L^M(\theta,\phi) = A_L^M(\theta)e^{iM\phi}$ とおくと A_L^M の満足すべき方程式

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{M^2}{\sin^2\theta}\right]A_L^M = -L(L+1)A_L^M \tag{5.50}$$

が得られる。この方程式の解 A_L^M を求めよう。まず、$\langle\theta,\phi|\hat{L}_-|L,-L\rangle = 0$ から

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle\theta,\phi|L,-L\rangle = 0 \tag{5.51}$$

これに $\langle\theta,\phi|L,-L\rangle = A_L^{-L}e^{-iL\phi}$ を代入すると

$$\frac{dA_L^{-L}}{d\theta} - L\cot\theta A_L^{-L} = 0 \tag{5.52}$$

が得られる。この解は

$$A_L^{-L} = c(\sin\theta)^L \tag{5.53}$$

で与えられる。ここで定数 c は $|Y_L^{-L}|^2$ の立体角積分が 1 に規格化されるように決められる。すなわち、

$$\begin{aligned}\int d\Omega|Y_L^{-L}(\theta,\phi)|^2 &= \int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}d\theta\sin\theta|A_L^{-L}(\theta)|^2 \\ &= 2\pi c^2\int_0^{\pi}(\sin\theta)^{2L+1}d\theta \\ &= 4\pi c^2\frac{2^{2L}(L!)^2}{(2L+1)!} = 1\end{aligned} \tag{5.54}$$

これから

$$c = \frac{1}{2^L L!}\sqrt{\frac{(2L+1)!}{4\pi}} \tag{5.55}$$

が得られる。これを (5.53) に代入すると

$$A_L^{-L} = \frac{1}{2^L L!}\sqrt{\frac{(2L+1)!}{4\pi}}(\sin\theta)^L \tag{5.56}$$

次に、一般の A_L^M を求めるために漸化式をつくる。(5.29) より

$$|L, M\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{(L-M+1)(L+M)}}\hat{L}_+|L, M-1\rangle \tag{5.57}$$

が得られるが、この両辺の左側から $\langle\theta, \phi|$ を作用させて (5.46) を用いると

$$\begin{aligned} A_L^M(\theta)e^{iM\phi} &= \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{(L-M+1)(L+M)}} \\ &\quad \times\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)A_L^{M-1}(\theta)e^{i(M-1)\phi} \\ &= \frac{e^{iM\phi}}{\sqrt{(L-M+1)(L+M)}} \\ &\quad \times\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - (M-1)\cot\theta\right)A_L^{M-1}(\theta) \\ &= -\frac{e^{iM\phi}}{\sqrt{(L-M+1)(L+M)}}(\sin\theta)^M \\ &\quad \times\frac{d}{d(\cos\theta)}[(\sin\theta)^{-(M-1)}A_L^{M-1}(\theta)] \end{aligned} \tag{5.58}$$

そこで $y^M := (\sin\theta)^{-M}A_L^M$ とおくと y^M に関する漸化式

$$y^M = \frac{-1}{\sqrt{(L-M+1)(L+M)}}\frac{d}{d(\cos\theta)}y^{M-1} \tag{5.59}$$

が得られる。これを $L+M$ 回順次適用すると

$$y^M = (-1)^{L+M}\sqrt{\frac{(L-M)!}{(2L)!}\frac{1}{(L+M)!}}\frac{d^{L+M}}{d(\cos\theta)^{L+M}}y^{-L} \tag{5.60}$$

が得られる。よって

$$\begin{aligned} A_L^M &= (-1)^{L+M}\sqrt{\frac{(L-M)!}{(2L)!}\frac{1}{(L+M)!}} \\ &\quad \times\frac{d^{L+M}}{d(\cos\theta)^{L+M}}[(\sin\theta)^L A_L^{-L}] \end{aligned} \tag{5.61}$$

これに (5.56) を代入すると

$$
\begin{aligned}
A_L^M &= \frac{(-1)^{L+M}}{2^L L!}\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}\frac{(L-M)!}{(L+M)!}} \\
&\quad \times(\sin\theta)^M \frac{d^{L+M}}{d(\cos\theta)^{L+M}}[(\sin\theta)^{2L}]
\end{aligned} \tag{5.62}
$$

こうして角運動量の固有状態である球面調和関数の一般公式

$$
\begin{aligned}
Y_L^M(\theta,\phi) &= \langle\theta,\phi|L,M\rangle \\
&= \frac{(-1)^{L+M}}{2^L L!}\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}\frac{(L-M)!}{(L+M)!}} \\
&\quad \times e^{iM\phi}(\sin\theta)^M \frac{d^{L+M}}{d(\cos\theta)^{L+M}}(\sin\theta)^{2L}
\end{aligned} \tag{5.63}
$$

が得られる。 同様にして、$\langle\theta,\phi|\hat{L}_+|L,L\rangle = 0$ に (5.46) を代入して以上の計算を繰り返すと

$$
A_L^L = \frac{(-1)^L}{2^L L!}\sqrt{\frac{(2L+1)!}{4\pi}}(\sin\theta)^L \tag{5.64}
$$

が得られる。因子 $(-1)^L$ は以下の結果が (5.62) と一致するように選ばれた。(5.64) から始めて上と同様な計算を行うと

$$
\begin{aligned}
Y_L^M(\theta,\phi) &= \frac{(-1)^L}{2^L L!}\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}\frac{(L+M)!}{(L-M)!}} \\
&\quad \times e^{iM\phi}(\sin\theta)^{-M} \frac{d^{L-M}}{d(\cos\theta)^{L-M}}(\sin\theta)^{2L}
\end{aligned} \tag{5.65}
$$

が得られる。これは (5.63) とは一見異なるが同じであることが示せる。

A_L^M は本質的には陪ルジャントル多項式と呼ばれるものである。これを見るために、A_L^M の微分方程式 (5.50) で $x = \cos\theta$ とおくと次の微分方程式が得られる。

$$
\begin{aligned}
&(1-x^2)\frac{d^2 A_L^M}{dx^2} - 2x\frac{dA_L^M}{dx} + \left[L(L+1) - \frac{M^2}{1-x^2}\right]A_L^M = 0 \\
&(-1 \le x \le 1)
\end{aligned} \tag{5.66}
$$

この微分方程式は L と M が整数のとき、1 価の連続解を持つことが知られている。特に、$|M| \le L$ の場合は、陪ルジャンドル多項式と呼ばれる $-1 \le x \le 1$ で有界な解

$$
P_L^M(x) = \frac{(1-x^2)^{\frac{M}{2}}}{2^L L!}\frac{d^{L+M}}{dx^{L+M}}(x^2-1)^L \quad (-L \le M \le L) \tag{5.67}
$$

で与えられる。特に、$P_L^0(x)$ はルジャンドル多項式と呼ばれる。

$$P_L(x) = \frac{1}{2^L L!}\frac{d^L}{dx^L}(x^2-1)^L \tag{5.68}$$

こうして $A_L^M(\theta)$ は比例定数を除いて $P_L^M(\cos\theta)$ に等しいことがわかる。$P_L^M(x)$ は正規直交条件

$$\int_0^\infty e^{-x}x^M P_L^M(x)P_{L'}^M(x)dx = \frac{(L+M)!}{L!}\delta_{L,L'} \tag{5.69}$$

を満足する。Y_L^M の規格直交条件 (5.37) を満足するように係数を決めると

$$Y_L^M(\theta,\phi) = (-1)^{\frac{M+|M|}{2}}\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}\frac{(L-|M|)!}{(L+|M|)!}}P_L^{|M|}(\cos\theta)e^{iM\phi} \tag{5.70}$$

が得られる。これから Y_L^M が一般に次の関係式を満足することがわかる。

$$Y_L^{-M}(\theta,\phi) = (-1)^M[Y_L^M(\theta,\phi)]^* \tag{5.71}$$

特に、$M=0$ の場合は

$$Y_L^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}}P_L(\cos\theta) \tag{5.72}$$

また、球面調和関数の完全性条件は

$$\begin{aligned}\sum_{L=0}^{\infty}\sum_{M=-L}^{L}[Y_L^M(\theta,\phi)]^* Y_L^M(\theta',\phi') &= \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi') \\ &=: \delta(\Omega-\Omega')\end{aligned} \tag{5.73}$$

で与えられる。両辺を立体角で積分 $\int\cdots\sin\theta d\theta d\phi$ すると 1 に等しくなることに注意しよう。

以下に、いくつかの例を書き下しておく。

$$\begin{aligned}Y_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_1^{\pm1} &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \\ Y_2^{\pm2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}, \quad Y_2^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}, \\ Y_2^0 &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)\end{aligned} \tag{5.74}$$

5.2 スピン角運動量

多くの素粒子や複合粒子は静止系においてもスピンと呼ばれる角運動量 $\hbar S$ をもつことが実験的に知られている。静止系では軌道角運動量はゼロなのでスピン角運動量 (spin angular momentum) は粒子の実空間での運動ではなくその内部自由度に由来するものであると考えられる。軌道角運動量の古典極限は $\hbar L$ を一定に保ちつつ $\hbar \to 0$、$L \to \infty$ なる極限をとることにより得られる。これに対して、素粒子のスピンの値 S は粒子に固有の定数で有限なので[1]、古典極限をとるとゼロになる。このようにスピン角運動量は古典対応をもたない粒子に固有の量子数である。電子に固有の角運動量という概念は 1925 年に G. Uhlenbeck と S.Goudsmit により導入された。一般にスピンという概念は 1927 年に Pauli によって量子力学に導入された。

スピン角運動量 $\hbar S$ は、空間座標に依存する軌道角運動量とは異なり波動関数の一価性の制約は受けないので、整数と半整数の両方の値を取り得る。

$$S = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots \tag{5.75}$$

軌道角運動量の場合と同様に、スピンが $\hbar S$ の粒子は $2S+1$ 個の成分 $M = S, S-1, \cdots, -S$ を持っている。電子の場合は、磁場をかけるとエネルギー準位が 2 倍に分裂する（これをゼーマン効果という）ことから内部自由度が 2 であり、従って、電子のスピンは $\hbar/2$ であることがわかる。陽子や中性子のスピンも $\hbar/2$ であることが知られている。他方、光子のスピンは 1、重力子は 2、ヒグス粒子は 0 である。

スピン角運動量の各成分の交換関係は軌道角運動量の場合と同じで

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z, \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x, \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y \tag{5.76}$$

で与えられる。5.1 節で導かれた行列要素に関する公式 (5.29)、(5.31)、(5.34) は交換関係だけから導かれたので、スピンの場合も同様の公式

$$\langle S, M+1|\hat{S}_+|S, M\rangle = \hbar\sqrt{(S-M)(S+M+1)} \tag{5.77}$$

$$\langle S, M-1|\hat{S}_-|S, M\rangle = \hbar\sqrt{(S+M)(S-M+1)} \tag{5.78}$$

$$\langle S, M|\hat{S}_z|S, M\rangle = \hbar M \tag{5.79}$$

が成立する。これから

$$\langle S, M+1|\hat{S}_x|S, M\rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(S-M)(S+M+1)} \tag{5.80}$$

$$\langle S, M-1|\hat{S}_y|S, M\rangle = -i\frac{\hbar}{2}\sqrt{(S+M)(S-M+1)} \tag{5.81}$$

[1]粒子が同じでも軌道角運動量はいろいろな値をとりうるが、スピンは素粒子を識別する量子数なので、その値が異なる粒子は別な粒子であるとみなされる。

これらの関係式は波動関数のスピン成分の変換則を与える。スピンが S の波動関数は

$$\psi_S(M) := \langle S, M|\psi\rangle \tag{5.82}$$

で定義される。$i = x, y, z$ 成分のスピン演算子が作用すると、波動関数は次のように変換される。

$$\begin{aligned} \hat{S}_i\psi_S(M) &:= \langle S, M|\hat{S}_i|\psi\rangle \\ &= \sum_{M'} \langle S, M|\hat{S}_i|S, M'\rangle\langle S, M'|\psi\rangle \\ &= \sum_{M'} S_{i,MM'}\psi_S(M') \end{aligned} \tag{5.83}$$

ここで、行列要素 $S_{iMM'}$ は (5.77)-(5.81) で与えられる。

特別な場合として、スピンが 1/2 の場合は、スピン演算子を

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i, \quad (i = x, y, z) \tag{5.84}$$

と書き、$\hat{\sigma}_i$ を**パウリ行列** (Pauli matrices) という。パウリ行列は交換関係

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z, \quad [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x, \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y \tag{5.85}$$

を満足する。行列要素の公式 (5.77)-(5.79) を用いてパウリ行列を書き下すと

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{5.86}$$

となる。パウリ行列はエルミートでかつユニタリーであり

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{1} \tag{5.87}$$

を満足する。ここで、$\hat{1}$ は 2 行 2 列の単位行列

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{5.88}$$

である。パウリ行列は (5.85) の交換関係に加えて反交換関係 (anticommutation relation)

$$\{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\} = 0, \quad \{\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\} = 0, \quad \{\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x\} = 0 \tag{5.89}$$

を満足する。ここで、$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ である。(5.87) と (5.89) をまとめると

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = 2\delta_{ij} \tag{5.90}$$

が得られる。

パウリ行列 $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ と単位行列 $\hat{1}$ で任意の 2 行 2 列の行列を表現できる。特に、パウリ行列を掛け合わせた式はパウリ行列の線形和として書ける。たとえば、

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z,\quad \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_x,\quad \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_y \tag{5.91}$$

(5.87) と (5.91) をあわせると次の公式が得られる。

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = \hat{1}\delta_{i,j} + i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k \tag{5.92}$$

ここで、ϵ_{ijk} は (i,j,k) が (x,y,z) の偶置換の場合は 1、奇置換の場合は -1、その他の場合 (すなわち、i,j,k の 2 個以上が一致する場合) は 0 となる記号である。パウリ行列はこのほかにも多くの有用な性質を持っている。そのいくつかの例を挙げておく。

$\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ を任意の 3 次元ベクトルとすると次の関係式が成立する。

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{A})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{5.93}$$

ここで演算子とベクトルの内積は $\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{A} = \sigma_x A_x + \sigma_y A_y + \sigma_z A_z$ 等を意味するものとする。実際、(5.92) を用いると

$$\begin{aligned}
\text{左辺} &= \sum_{i,j=x,y,z}\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j A_i B_j = \sum_{i,j=x,y,z}(\hat{1}\delta_{i,j} + i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k)A_i B_j \\
&= \sum_{i=x,y,z} A_i B_i + i\sum_{k=x,y,z}\hat{\sigma}_k(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_k \\
&= \text{右辺}\quad\text{(証明終わり)}
\end{aligned}$$

次の関係式もしばしば有用である。

$$e^{-\frac{i}{2}\theta\hat{\sigma}_i} = \hat{1}\cos\frac{\theta}{2} - i\hat{\sigma}_i\sin\frac{\theta}{2},\quad (i = x,y,z) \tag{5.94}$$

これを示すために、指数関数を展開した式を偶数べきと奇数べきに分けて $\hat{\sigma}^2 = \hat{1}$ を使うと

$$\begin{aligned}
e^{-\frac{i}{2}\theta\hat{\sigma}_i} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(2n)!}\left(-\frac{i}{2}\theta\right)^{2n}\hat{\sigma}_i^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(2n+1)!}\left(-\frac{i}{2}\theta\right)^{2n+1}\hat{\sigma}_i^{2n+1} \\
&= \hat{1}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n)!}\left(\frac{\theta}{2}\right)^{2n} + (-i)\hat{\sigma}_i\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n+1)!}\left(\frac{\theta}{2}\right)^{2n+1} \\
&= \hat{1}\cos\frac{\theta}{2} - i\hat{\sigma}_i\sin\frac{\theta}{2}
\end{aligned}$$

(5.94) より波動関数のスピン部分 χ は任意の軸 $i = x, y, z$ の周りに 2π 回転させても元には戻らず

$$e^{-\frac{i}{2}(2\pi)\hat{\sigma}_i}\chi = -\chi \tag{5.95}$$

のように反対符号となることがわかる。このようにスピン 1/2 の系は、与えられた角度 θ に対して波動関数が $\pm e^{-\frac{i}{2}\theta\hat{\sigma}_i}\chi$ の二通り存在する。これを **2 価表現** (double valued) という。

スピンが半整数の波動関数を 2π 回転させると波動関数の符号が変わるという事実は、2 個のフェルミオンを交換すると波動関数の符号が変わるというフェルミーディラック統計と密接に関連している。実際、一方のフェルミオンの周りに他方のフェルミオンを 2π 回転させることは、2 個のフェルミオンを交換することとトポロジカルには同じ効果を生む。

5.3　角運動量の合成

2 つの独立な系の角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}_1$、$\hat{\boldsymbol{J}}_2$ の合成角運動量

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{J}}_1 + \hat{\boldsymbol{J}}_2 \tag{5.96}$$

を考える。$\hat{\boldsymbol{J}}_1$ と $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ は独立なので $\hat{\boldsymbol{J}}$ の各成分もまた同じ交換関係を満足する。

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{J}_y \tag{5.97}$$

$\hat{\boldsymbol{J}}_1^2 = \hbar^2 J_1(J_1+1), \hat{J}_{1z}, \hat{\boldsymbol{J}}_2^2 = \hbar^2 J_2(J_2+1), \hat{J}_{2z}$ が互いに交換するので量子状態はこれらの同時固有状態 $|J_1, M_1; J_2, M_2\rangle \equiv |M_1, M_2\rangle$ で記述できる。 ここで $\hbar M_1$、$\hbar M_2$ はそれぞれ $\hat{J}_{1z}$ と $\hat{J}_{2z}$ の固有値である。他方、$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hbar^2 J(J+1)$、$\hat{\boldsymbol{J}}_1^2, \hat{\boldsymbol{J}}_2^2$ および $\hat{\boldsymbol{J}}$ の z 成分

$$\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z} \tag{5.98}$$

は互いに交換するので、合成系の状態はこれらの同時固有状態 $|J, M; J_1, J_2\rangle \equiv |J, M\rangle$ で記述される。ここで $\hbar M$ は $\hat{J}_z$ の固有値である。

まず、(5.98) より

$$M = M_1 + M_2 \tag{5.99}$$

である。次に J の値を求めるために (5.96) の両辺を自乗すると

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{J}}^2 &= \hat{\boldsymbol{J}}_1^2 + \hat{\boldsymbol{J}}_2^2 + 2\hat{\boldsymbol{J}}_1\hat{\boldsymbol{J}}_2 \\
&= \hbar^2 J_1(J_1+1) + \hbar^2 J_2(J_2+1) + \hat{J}_{1+}\hat{J}_{2-} + \hat{J}_{1-}\hat{J}_{2+} \\
&\quad +2\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z}
\end{aligned} \tag{5.100}$$

が得られる。ここで、

$$\hat{J}_{i\pm} \equiv \hat{J}_{ix} \pm i\hat{J}_{iy}, \quad (i = 1, 2) \tag{5.101}$$

である。

(5.100) の両辺をそれぞれを状態 $|M_1 = J_1, M_2 = J_2\rangle$ に作用させると

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|J_1, J_2\rangle = \hbar^2(J_1 + J_2)(J_1 + J_2 + 1)|J_1, J_2\rangle \tag{5.102}$$

が得られるので状態 $|J_1, J_2\rangle$ の全角運動量は $J = J_1 + J_2$ であることがわかる。よって、

$$|J = J_1 + J_2, M = J_1 + J_2\rangle = |M_1 = J_1, M_2 = J_2\rangle \tag{5.103}$$

この両辺に $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ を作用させると

$$\sqrt{2(J_1 + J_2)}|J_1 + J_2, J_1 + J_2 - 1\rangle = \sqrt{2J_1}|J_1 - 1, J_2\rangle + \sqrt{2J_2}|J_1, J_2 - 1\rangle$$

これから

$$\begin{aligned} |J_1 + J_2, J_1 + J_2 - 1\rangle &= \sqrt{\frac{J_1}{J_1 + J_2}}|J_1 - 1, J_2\rangle \\ &\quad + \sqrt{\frac{J_2}{J_1 + J_2}}|J_1, J_2 - 1\rangle \end{aligned} \tag{5.104}$$

が得られる。(5.104) の両辺に再び $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ を作用させると全角運動量が $J_1 + J_2$ で磁気量子数が $J_1 + J_2 - 2$ の状態

$$\begin{aligned} &|J_1 + J_2, J_1 + J_2 - 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{(J_1 + J_2)(2J_1 + 2J_2 - 1)}} \\ &\times \left[\sqrt{J_1(2J_1 - 1)}|J_1 - 2, J_2\rangle + 2\sqrt{J_1 J_2}|J_1 - 1, J_2 - 1\rangle \right. \\ &\left. + \sqrt{J_2(2J_2 - 1)}|J_1, J_2 - 2\rangle \right] \end{aligned} \tag{5.105}$$

が得られる。同様の操作を繰り返すことにより、全角運動量が $J_1 + J_2$ のすべての状態が得られる。

全角運動量が $J_1 + J_2 - 1$ の状態のうち磁気量子数が最大の状態は、(5.104) に直交する状態である。

$$\begin{aligned} |J_1 + J_2 - 1, J_1 + J_2 - 1\rangle &= \sqrt{\frac{J_1}{J_1 + J_2}}|J_1, J_2 - 1\rangle \\ &\quad - \sqrt{\frac{J_2}{J_1 + J_2}}|J_1 - 1, J_2\rangle \end{aligned} \tag{5.106}$$

実際、右辺に (5.100) を作用させると全角運動量が J_1+J_2-1 となっていることがわかる。(5.106) の両辺に $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ を作用させると、

$$
\begin{aligned}
&|J_1+J_2-1, J_1+J_2-2\rangle = \frac{1}{\sqrt{(J_1+J_2)(2J_1+2J_2-3)}} \\
&\times \Big[\sqrt{J_1(2J_2-1)}|J_1, J_2-2\rangle + (J_1-J_2)|J_1-1, J_2-1\rangle \\
&-\sqrt{J_2(2J_1-1)}|J_1-2, J_2\rangle \Big]
\end{aligned}
\tag{5.107}
$$

が得られる。(5.107) の両辺に $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ を順次作用させることにより、全角運動量が J_1+J_2-1 のすべての状態が得られる。

全角運動量が J_1+J_2-2 で同じ磁気量子数を持つ状態は (5.105) と (5.107) の両方に直交する状態である。同様の操作を繰り返すことにより全角運動量が 1 ずつ小さい状態が構成できる。この操作は $J_2 > J_1$ の場合は全角運動量が J_2-J_1 となるまで、逆の場合は J_1-J_2 となるまで新しい状態が作り出される。こうして、全角運動量が

$$
J_1+J_2,\ J_1+J_2-1,\ \cdots, |J_1-J_2| \tag{5.108}
$$

なるすべての状態が構成される。直感的には (5.108) のそれぞれの状態は角運動量ベクトル $\hat{\boldsymbol{J}}_1$ と $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ が平行から反平行までの離散的な相対角度をとることに対応していると考えられる。

角運動量が J の状態は $2J+1$ 個の成分を持つので全部で

$$
\sum_{J=|J_1-J_2|}^{J_1+J_2} (2J+1) = (2J_1+1)(2J_2+1) \tag{5.109}
$$

個の状態が構成される。これは、合成されたもとの状態 $|J_1, M_1; J_2, M_2\rangle$ の状態数に一致している。

例題 スピン 1/2 の粒子が 2 個ある場合の合成系の状態をすべて求めよ。

解答 合成スピンの大きさは 1 または 0 であり、各状態は上記の方法に従って次のように与えられる。

$$
\begin{aligned}
|1,1\rangle &= |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\
|1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle\right) \\
|1,-1\rangle &= |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\
|0,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle\right)
\end{aligned}
$$

例題 スピン 1/2 の粒子が 3 個ある場合の合成系の状態をすべて求めよ。

解答合成スピンの大きさは 3/2 または 1/2 である。前者は次のように与えられる。

$$
\begin{aligned}
&|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle = |\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle \\
&|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle + |-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle\right) \\
&|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle + |-\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle + |-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle\right) \\
&|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\rangle = |-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle
\end{aligned}
$$

後者は $|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle$ に直交するように選ばれる。それを

$$
\alpha|\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle + \beta|\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle + \gamma|-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle \tag{5.110}
$$

と書くと、これが $|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle$ と直交することから $\alpha+\beta+\gamma=0$、さらに、規格化の条件より $\alpha^2+\beta^2+\gamma^2=1$ である (係数は実数に取る)。これからスピンが 1/2 の状態は 2 組存在して、それぞれに対する係数 (α,β,γ) の大きさは

$$
\begin{aligned}
&\left(\alpha, \frac{1}{2}[-\alpha+\sqrt{2-3\alpha^2}], -\frac{1}{2}[\alpha+\sqrt{2-3\alpha^2}]\right) \\
&\left(\alpha, -\frac{1}{2}[\alpha+\sqrt{2-3\alpha^2}], \frac{1}{2}[-\alpha+\sqrt{2-3\alpha^2}]\right)
\end{aligned}
$$

で与えられる。ここで、α は $|\alpha| \le \sqrt{2/3}$ を満足する任意の実数である。

5.3.1 クレプシューゴルダン係数

一般に、2 つの角運動量を合成してできた状態 $|J,M;J_1,J_2\rangle := |J,M\rangle$ に合成前の状態 $|J_1,M_1;J_2,M_2\rangle := |M_1,M_2\rangle$ の完全系

$$
\sum_{M_1=-J_1}^{J_1}\sum_{M_2=-J_2}^{J_2}|M_1;M_2\rangle\langle M_1;M_2| = \hat{I} \tag{5.111}
$$

を作用させると

$$
|J,M\rangle = \sum_{M_1=-J_1}^{J_1}\sum_{M_2=-J_2}^{J_2}|M_1;M_2\rangle\langle M_1;M_2|J,M\rangle \tag{5.112}
$$

この展開係数

$$C(J_1J_2J;M_1M_2M) := \langle J_1,M_1;J_2,M_2|J,M;J_1,J_2\rangle \tag{5.113}$$

をクレプシューゴルダン係数という。磁気量子数の和は保存されるので、(5.113) のうちでゼロでないものは

$$M = M_1 + M_2 \tag{5.114}$$

を満たすものに限られる。また、$\langle J,M|J',M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'}$ に完全系を挿入することで

$$\sum_{M_1,M_2} C(J_1J_2J;M_1M_2M)C(J_1J_2J';M_1M_2M) = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \tag{5.115}$$

が得られる。同様に、$\langle M_1,M_2|M_1',M_2'\rangle = \delta_{M_1M_1'}\delta_{M_2M_2'}$ に完全系を挿入することで

$$\sum_{J,M} C(J_1J_2J;M_1M_2M)C(J_1J_2J;M_1'M_2'M) = \delta_{M_1M_1'}\delta_{M_2M_2'} \tag{5.116}$$

が得られる。

重要な例として、2 つの角運動量を合成した結果、合成系の波動関数がスカラー (すなわち、$J = M = 0$) になる場合を考えよう。(5.108) から $J_1 = J_2 := j$ でなければならず、また、(5.114) より $M_1 = -M_2 := m$ でなければならないことがわかる。したがって、(5.112) は

$$|0,0\rangle = \sum_{m=-j}^{j} |m;-m\rangle\langle m;-m|0,0\rangle \tag{5.117}$$

両辺に昇演算子を作用させると

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{J}_+|0,0\rangle = \sum_{m=-j}^{j} (\hat{J}_{1+} + \hat{J}_{2+})|m;-m\rangle\langle m;-m|0,0\rangle \\ &= \sum_{m=-j}^{j} [\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|m+1;-m\rangle \\ &\quad +\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|m,-m+1\rangle] \\ &\quad \times\langle m;-m|0,0\rangle \end{aligned} \tag{5.118}$$

最後の項で m を $m+1$ に変数変換すると

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{m=-j}^{j} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \\ &\quad \times(\langle m;-m|0,0\rangle + \langle m+1,-m-1|0,0\rangle)|m+1,-m\rangle \end{aligned} \tag{5.119}$$

よって

$$C(jj0;m,-m,0) = -C(jj0;m+1,-m-1,0\rangle \tag{5.120}$$

これから $m=j$ の時を基準にして $C(jj0;m,-m,0)=(-1)^{j-m}c_j$ と書ける。これが条件 (5.115) を満足するように係数を決めると

$$C(jj0;m,-m,0) = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}} \tag{5.121}$$

が得られる。

5.4 パリティ

座標反転 $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$ で右手系と左手系は入れ替わる。空間反転に対してハミルトニアンが不変な場合 ($[\hat{H},\hat{P}]=0$)、古典力学では新しい保存則を導かないが、量子力学では保存則を導く。空間反転をパリティ変換という。パリティ変換に対して波動関数は次のように変換される。

$$\hat{P}\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r}) \tag{5.122}$$

パリティ演算子の固有値を P と書くと、固有方程式は $\hat{P}$ を二回作用させると波動関数は元に戻るので $P^2 =$、したがって

$$P = \pm 1 \tag{5.123}$$

$P=1$ に対応する状態を偶パリティ、$P=-1$ に対応する状態を奇パリティという。

角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$ は座標反転に対して不変である ($[\hat{P},\hat{\boldsymbol{L}}]=0$)。従って、系は L,M,P の同時固有状態を持つ。$\hat{P}$ は $\hat{L}_\pm$ とも交換するので、同じ L を持ち、異なった M を持つ状態は同じパリティを持つ。

パリティは可能な量子力学の遷移にも制約を与える。まず、スカラー関数を考える。パリティに対して符号を変えないスカラー関数を真スカラー、符号を変えるものを擬スカラーという。いま、パリティ変換に対して偶の波動関数を ψ_g、奇の関数を ψ_u と書こう。ここで、g,u は偶、奇を意味するドイツ語 gerade, ungerade の頭文字をとったものである。この時、スカラー関数 $\hat{f}$ の行列要素を考えると

$$f_{ug} = \int \psi_u^* \hat{f} \psi_g d\boldsymbol{r} \tag{5.124}$$

を考えると、右辺はパリティ変換に対して符号を変える。しかし、積分値は座標反転に対して一定なので $f_{ug} = -f_{ug} = 0$ でなければならない。同

様にして、スカラー関数のゼロでない行列要素（選択則）は次のように与えられる。

$$\begin{array}{ll} \text{真スカラー} & g \to g,\ u \to u \\ \text{擬スカラー} & g \to u,\ u \to g \end{array} \tag{5.125}$$

ベクトルの場合は、空間反転に対して符号を変えるものを極性ベクトル、変えないものを軸性ベクトルという。電場は前者、磁場は後者である。スカラーの場合と同様な考察によってベクトル量の行列要素の選択則は次のように与えられる。

$$\begin{array}{ll} \text{極性ベクトル} & g \to u,\ u \to g \\ \text{軸性ベクトル} & g \to g,\ u \to u \end{array} \tag{5.126}$$

高階のテンソル量に対しても同様な考察が適用できる。

最後に、角運動量 L を持った粒子の状態の角度部分の波動関数である球面調和関数 $Y_L^M(\theta,\phi) \propto P_L^M(\cos\theta)e^{im\phi}$ のパリティを考察しよう。空間反転に対応する極座標の変換は

$$r \to r,\ \theta \to \pi - \theta,\ \phi \to \phi + \pi \tag{5.127}$$

で与えられる。この変換に対して

$$\begin{aligned} e^{iM(\phi+\pi)} &= (-1)^M e^{iM\phi} \\ P_L^M(-\cos\theta) &= (-1)^{L+M} P_L^M(\cos\theta) \end{aligned} \tag{5.128}$$

と変換される ((5.67) 参照)。こうして、角運動量 l を持った粒子の波動関数のパリティは

$$P = (-1)^L \tag{5.129}$$

で与えられることがわかる。こうして、L が偶数の状態は偶パリティ、奇数の状態は奇パリティを持つことがわかる。このことから、ベクトル量の行列要素に関して次の選択則が成立することがわかる。

$$\begin{array}{ll} \text{極性ベクトル} & L \to L \pm 1 \\ \text{軸性ベクトル} & L \to L \end{array} \tag{5.130}$$

5.5 時間反転とクラマース縮退

シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r},t) \tag{5.131}$$

において、時間 t を $-t$ で置き換え、両辺の複素共役をとると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\mathbf{r},-t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]\psi^*(\mathbf{r},-t) \tag{5.132}$$

が得られる。したがって、$\psi(\mathbf{r},t)$ がシュレーディンガー方程式の解ならば $\psi^*(\mathbf{r},-t)$ もまた解であることを意味している。時間反転演算子を Θ と書くと

$$\Theta\psi(\mathbf{r},t)=\psi^*(\mathbf{r},-t) \tag{5.133}$$

時間反転演算子は次の性質を満足していることがわかる。

$$(\Theta\psi,\Theta\phi)=(\phi,\psi)=(\psi,\phi)^* \tag{5.134}$$

$$\Theta(a\psi+b\phi)=a^*\Theta\psi+b^*\Theta\phi \tag{5.135}$$

これらをユニタリ演算子と比べると内積や係数が複素共役になっている点が異なっている。このような演算子は反ユニタリ演算子という。一般に、時間反転演算子は、ユニタリ演算子 U と複素共役を取る演算子 $*$ を用いて次のように書ける

$$\Theta=UK,\quad \Theta^{-1}=KU^{-1}=KU^\dagger \tag{5.136}$$

ここで、K はそれに続く量の複素共役をとる演算子である。

時間反転演算子の性質を考える。まず、空間座標は変化させない。

$$\Theta^{-1}\mathbf{r}\Theta=\mathbf{r} \tag{5.137}$$

運動量は符号を変える。

$$\Theta^{-1}\mathbf{p}\Theta=-\mathbf{p} \tag{5.138}$$

運動量演算子が $\mathbf{p}=-i\hbar\nabla$ のように虚数 i を含むことに注意すると、(5.137) と (5.138) は $\Theta=K$ とおけば満足されることが分かる ($U=1$)。

次に、スピン 1/2 演算子を考える。スピンは時間反転に対して符号を変えなければならない。

$$\Theta^{-1}\sigma_i\Theta=-\sigma_i\quad (i=x,y,z) \tag{5.139}$$

σ_y は成分が純虚数なので、やはり $\Theta=K$ とおくことで満足される。しかし、σ_x,σ_z は実数なので K では符号が反転しない。しかし、$\Theta=\sigma_y$ とおくことで符号が反転することが分かる。よって

$$\Theta=-i\sigma_yK,\quad \Theta^{-1}=-iK\sigma_y \tag{5.140}$$

とすればよいことが分かる ($\sigma_y^{-1} = \sigma_y$ であることに注意)。ここで、係数 $-i$ は便宜上つけた。この時、$K\sigma_y = -\sigma_y$ に注意すると

$$\Theta^2 = -\mathbf{1} \tag{5.141}$$

であることが分かる ($\mathbf{1}$ は 2 行 2 列の単位行列)。スピンが 1/2 の粒子に対して時間反転を 2 回すると符号が変わるのは、時間と空間を含めた 4 次元時空で考えた時に、時間軸を 2 回反転させることは空間に関して 2π 回転させることと同等だからである（x 軸を 2 回反転させると、2π 回転することと同じになることを時間軸と空間軸に当てはめてみよ)。

電子が n 個ある場合の時間反転演算子は

$$\Theta = (-i\sigma_y^{(1)}) \otimes \cdots \otimes (-i\sigma_y^{(n)})K \tag{5.142}$$

と書けるので、$\Theta^2 = (-1)^n$ である。従って、奇数個の電子が存在する系に対しては時間反転操作を二回行うと波動関数は符号を変える。この事実の帰結として次の定理が成立する。

Kramers の定理 奇数個の電子からなる時間反転対称な系の固有状態は少なくとも二重に縮退しており、互いに時間反転した状態は直交する。これをクラマース縮退という。

証明:　時間反転対称な系の場合、$|\psi\rangle$ が固有状態ならば、$\Theta|\psi\rangle$ も同じエネルギー固有値に属する固有状態である。もし縮退がなければ、$\Theta|\psi\rangle = c|\psi\rangle$ と書ける。両辺に Θ を作用させ、$\Theta c = c^*$ であることに注意すると、$\Theta^2|\psi\rangle = |c|^2|\psi\rangle$ となるが、電子数が奇数個の場合は $\Theta^2 = -1$ なので矛盾する。よって、固有状態は縮退している。そこで、互いに時間反転の関係にある 2 つに縮退した固有状態を $|\psi\rangle, |\Theta\psi\rangle$ とすると、時間反転演算子の反ユニタリー性より $\langle\Theta^2\psi|\Theta\psi\rangle = (\langle\Theta\psi|\psi\rangle)^* = \langle\psi|\Theta\psi\rangle$ となるが、$\Theta^2 = -1$ なので $-\langle\psi|\Theta\psi\rangle = \langle\psi|\Theta\psi\rangle = 0$ となり、$|\psi\rangle$ と $|\Theta\psi\rangle$ は直交する。(証明終わり)

第6章　調和振動子

調和振動子は、電磁場や音波などの様々な物理現象を理解するための基本的なモデルであるだけではなく、量子ホール効果など現代的なトピックスを理解する上でも重要である。ここでは、1、2、3次元のそれぞれの場合に、調和振動子のエネルギースペクトルと固有関数を求める。

6.1　1次元調和振動子

質量が m、周波数が ω で振動する1次元調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} \tag{6.1}$$

で与えられる。ここで、位置と運動量演算子は交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \tag{6.2}$$

を満たすものと仮定する。

後に示されるように調和振動子のエネルギーは $\hbar\omega$ を単位として量子化される。これに対応する運動量と位置の特長的な値は

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar\omega}{2} \quad \to \quad p_0 = \sqrt{m\hbar\omega} \tag{6.3}$$

$$\frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{\hbar\omega}{2} \quad \to \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{6.4}$$

6.1.1　エネルギー（フォック）基底での解

ハミルトニアン (6.1) のエネルギー固有値を代数的に求めるために、(6.3)、(6.4) で割って無次元化された次のような一組の演算子 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ を導入する。

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x} + i\hat{p}), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x} - i\hat{p}) \tag{6.5}$$

交換関係 (6.2) は、

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \tag{6.6}$$

が成立すれば満たされる。(6.5) を逆に解いた式

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \tag{6.7}$$

を (6.1) に代入し、交換関係 (6.6) を使って式変形すると次の結果が得られる。

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \tag{6.8}$$

$\hat{a}^\dagger$ は**生成演算子** (creation operator)、$\hat{a}$ は**消滅演算子** (annihilation operator) と呼ばれる。その理由は次のとおりである。$\hat{H}$ の固有エネルギー E_n に対する固有状態を $|n\rangle$ と書くと定義により

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{6.9}$$

両辺の左から $\hat{a}^\dagger$ をかけ、交換関係 (6.6) を使って変形すると

$$\begin{aligned}
\text{左辺} &= \hat{a}^\dagger\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\hat{a}^\dagger\Bigg(\overbrace{\hat{a}^\dagger\hat{a}}^{\hat{a}\hat{a}^\dagger-1} + \frac{1}{2}\Bigg)|n\rangle \\
&= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\ \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger + \frac{1}{2}\hat{a}^\dagger\right)|n\rangle = \hat{H}\hat{a}^\dagger|n\rangle - \hbar\omega\hat{a}^\dagger|n\rangle \\
\text{右辺} &= E_n\hat{a}^\dagger|n\rangle
\end{aligned}$$

となるので

$$\hat{H}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (E_n + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger|n\rangle \tag{6.10}$$

であることがわかる。従って、$\hat{a}^\dagger|n\rangle$ はエネルギー固有値が $E_n + \hbar\omega$ で与えられる $\hat{H}$ の固有状態であることがわかる。このように $\hat{a}^\dagger$ はエネルギー $\hbar\omega$ をもった量子を 1 個生成する役割をしている。 同様の計算を $\hat{a}$ について行うと

$$\hat{H}\hat{a}|n\rangle = (E_n - \hbar\omega)\hat{a}|n\rangle$$

が得られる。従って、$\hat{a}$ はエネルギー量子 $\hbar\omega$ を 1 個消滅させる役割を果たしていることがわかる。

系の最低エネルギー状態は**真空状態** と呼ばれる。それを、$|0\rangle$ と書くと、定義によりこれよりエネルギーが低い状態はないから

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \tag{6.11}$$

でなければばならない。従って、

$$\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle \tag{6.12}$$

これから、最低エネルギー状態のエネルギーが $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ であることがわかる。これを**零点エネルギー**という。

系の取りうる最低エネルギーが 0 にならない起源は交換関係 (6.6) $[\hat{a},\,\hat{a}^\dagger] = 1$ にあることに注意しよう。実際、系のエネルギー E はハミルトニアンの量子力学的期待値で与えられることに注意すると、

$$E \equiv \langle\hat{H}\rangle = \frac{\langle\hat{p}^2\rangle}{2m} + \frac{m\omega^2\langle\hat{x}^2\rangle}{2} \tag{6.13}$$

$\langle\hat{x}\rangle = 0, \langle\hat{p}\rangle = 0$ なので $\langle\hat{x}^2\rangle = \langle(\hat{x}-\langle\hat{x}\rangle)^2\rangle \equiv (\Delta x)^2$、$\langle\hat{p}^2\rangle = \langle(\hat{p}-\langle\hat{p}\rangle)^2\rangle \equiv (\Delta p)^2$ とおくと (6.13) は

$$E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\Delta x)^2}{2} \tag{6.14}$$

と書かれる。右辺で相加平均は相乗平均以上であることを使うと不等式

$$E \geq 2\sqrt{\frac{(\Delta p)^2}{2m}\frac{m\omega^2(\Delta x)^2}{2}} = \omega\Delta p\Delta x \tag{6.15}$$

が成立することがわかる。これに不確定性関係 $\Delta p\Delta x \geq \hbar/2$ を適用するとエネルギーの最小値が $\hbar\omega/2$ で与えられることがわかる。ここで使った不確定性関係は、交換関係 (6.2) から導かれたが、それは (6.6) と等価な関係式である。

(6.10) より状態に $\hat{a}^\dagger$ を作用させるごとに系のエネルギーは $\hbar\omega$ だけ増加するので、$|0\rangle$ に $\hat{a}^\dagger$ を n 回作用させてできる状態 $|n\rangle$ のエネルギー E_n は

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \qquad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{6.16}$$

で与えられる。このように量子化された調和振動子のエネルギーは、$\hbar\omega$ (エネルギー量子) を基本単位として等間隔に並ぶ。演算子

$$\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a} \tag{6.17}$$

を**数演算子** (number operator)、$|n\rangle$ は n **フォック状態** (Fock state) と呼ばれる。(6.16) から、数演算子は次の固有値方程式を満足していることがわかる。

$$\hat{n}|n\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle. \tag{6.18}$$

消滅演算子 $\hat{a}$ は量子を 1 つ消滅させる演算子だから $\hat{a}|n\rangle$ は $|n-1\rangle$ に比例する。

$$\hat{a}|n\rangle = c|n-1\rangle, \tag{6.19}$$

ここで、c は比例定数である。$\langle n|\hat{a}^\dagger = c^*\langle n-1|$ に注意して (6.19) のノルムを取ると

$$\underbrace{\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle}_{n\langle n|n\rangle=n} \;=\; |c|^2\langle n-1|n-1\rangle = |c|^2 \;\rightarrow\; c = \sqrt{n}e^{i\varphi} = \sqrt{n}$$

ここで、フォック状態が 1 に規格化されている ($\langle n|n\rangle = 1$) ことを使った。また、位相因子 φ は任意にとってよいので 0 とおいた。一方、生成演算子 $\hat{a}^\dagger$ は量子数を 1 個増加させる演算子だから $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ は $|n+1\rangle$ に比例する。

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle \;=\; \alpha|n+1\rangle \tag{6.20}$$

両辺のノルムを取ると

$$\begin{aligned}\underbrace{\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle}_{\downarrow} \;&=\; |\alpha|^2\langle n+1\mid n+1\rangle = |\alpha|^2 \quad\longrightarrow\quad \alpha = \sqrt{n+1}\\ \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger+1|n\rangle \;&=\; n+1\end{aligned}$$

よって、次の結果が得られる。

$$\hat{a}|n\rangle \;=\; \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{6.21}$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle \;=\; \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{6.22}$$

(6.22) を繰り返し適用することにより次の等式が成立する事がわかる。

$$|n\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \tag{6.23}$$

6.1.2　ハイゼンベルグ表示での時間発展

生成消滅演算子はハイゼンベルグ表示では、

$$\hat{a}(t) \;=\; e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}ae^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{6.24}$$

$$\hat{a}^\dagger(t) \;=\; e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}a^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{6.25}$$

で与えられる。ここでは、調和振動子のハミルトニアン

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \tag{6.26}$$

の場合について、$\hat{a}(t)$、$\hat{a}(t)$ を具体的に計算してみよう。ハイゼンベルグの運動方程式 (2.38) より

$$\frac{d}{dt}\hat{a}(t) = -i\omega\hat{a}(t), \quad \frac{d}{dt}\hat{a}^\dagger(t) = i\omega\hat{a}^\dagger(t) \tag{6.27}$$

よって、

$$\hat{a}(t) = \hat{a}e^{-i\omega t}, \quad \hat{a}^\dagger(t) = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t} \tag{6.28}$$

また、フォック状態 $|n\rangle$ の時間発展は

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|n\rangle = e^{-i(n+1/2)\omega t}|n\rangle \tag{6.29}$$

で与えられる。

6.1.3 座標表示での解（波動関数）

調和振動子の固有状態であるフォック状態 $|n\rangle$ に対応する波動関数 $\phi_n(x)$ を求めよう。固有値方程式 (6.9) にハミルトニアン (6.1) を代入すると

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}\right)|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{6.30}$$

両辺の左から $\langle x|$ を作用させ、

$$\langle x|\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle x| \tag{6.31}$$

および、$\phi_n(x) \equiv \langle x|n\rangle$ を代入すると、波動関数 $\phi_n(x)$ の満足すべきシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}\right)\phi_n(x) = E_n\phi_n(x) \tag{6.32}$$

が得られる。

$\phi_n(x)$ は次のようにして求めることができる。まず、$\phi_{n=0}(x)$ は、$\hat{a}|0\rangle = 0$ および $\hat{a} = (m\omega\hat{x} + i\hat{p})/\sqrt{2m\hbar\omega}$ より

$$\langle x|\hat{a}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega x + \hbar\frac{d}{dx})\langle x|0\rangle = 0 \tag{6.33}$$

これから、

$$\phi_0(x) \equiv \langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{6.34}$$

が得られる。ここで、係数は、規格化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^2(x)dx = 1$$

より決められた。フォック状態 $|n\rangle$ に対応する波動関数は、(6.23) と (6.5) より

$$\begin{aligned}\phi_n(x) &= \langle x|n\rangle = \langle x|\frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}(2m\hbar\omega)^{\frac{n}{2}}}(m\omega x - \hbar\frac{d}{dx})^n\phi_0(x) \qquad (6.35)\end{aligned}$$

ここで、

$$m\omega x - \hbar\frac{d}{dx} = -e^{\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\frac{d}{dx}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{6.36}$$

であることを使い、$\xi \equiv x\sqrt{m\omega/\hbar}$ とおくと (6.35) は次のように変形できる。

$$\begin{aligned}\phi_n(x) &= \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{\xi^2}{2}}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi) \qquad (6.37)\end{aligned}$$

ここで、

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2} \tag{6.38}$$

は**エルミート多項式** である。最初のいくつかを書き下すと

$$H_0(\xi) = 1,\quad H_1(\xi) = 2\xi,\quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2,\quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \tag{6.39}$$

6.1.4　完全性条件

調和振動子の固有関数 $\phi_n(x)$ が完全性条件を満足していることを証明しよう。$a \equiv \sqrt{\hbar/m\omega}$ とおくと、

$$\sum_{n=0}^{\infty}\phi_n(x)\phi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2}}e^{-\frac{x^2+y^2}{a^2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2^n n!}H_n(x/a)H_n(y/a) \tag{6.40}$$

ここで、公式

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{2^n n!}H_n(x)H_n(y)=\frac{1}{\sqrt{1-z^2}}\exp\left[\frac{2xyz-(x^2+y^2)z^2}{1-z^2}\right] \tag{6.41}$$

を用いると

$$\begin{aligned}&\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2^n n!}H_n(x/a)H_n(y/a)\\ =&\lim_{z\to 1}\frac{1}{\sqrt{1-z^2}}\exp\left[\frac{2xyz-(x^2+y^2)z^2}{(1-z^2)a^2}\right]\end{aligned} \tag{6.42}$$

が得られる。よって

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty}\phi_n(x)\phi_n(y) &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^2}}\lim_{z\to 1}\frac{1}{\sqrt{1-z^2}}\\ &\times\exp\left[-\frac{x^2+y^2}{2a^2}\frac{1+z^2}{1-z^2}+\frac{2xyz}{(1-z^2)a^2}\right]\end{aligned} \tag{6.43}$$

さらに、$z=1-\epsilon$ とおくと右辺は

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\sqrt{2\pi a^2\epsilon}}e^{-\frac{(x-y)^2}{2a^2\epsilon}}=\delta(x-y) \tag{6.44}$$

となる。よって

$$\sum_{n=0}^{\infty}\phi_n(x)\phi_n(y)=\delta(x-y) \tag{6.45}$$

（証明終わり）

6.1.5 コヒーレント状態

日常的になじみの深い電場や磁場は波として振舞うことを我々は知っている。このような古典的な波—電磁波—に最も近い量子状態が**コヒーレント状態** (coherent state) である。記述を簡単にするために、決まった波数 $\boldsymbol{k}$ と偏光 λ を持った電磁場モードを考え、その生成消滅演算子を添え字 $\boldsymbol{k}$、λ を省略して $\hat{a}^\dagger$、$\hat{a}$ と書こう。光のコヒーレント状態を定義するために次のような**変位演算子** (displacement operator) を導入する。

$$\hat{D}(\alpha)\equiv e^{\alpha\hat{a}^\dagger-\alpha^*\hat{a}} \tag{6.46}$$

変位演算子は消滅演算子（生成演算子）を α (α^*) だけ平行移動する役割を果たしている。

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) = \hat{a} + \alpha \tag{6.47}$$

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}^\dagger\hat{D}(\alpha) = \hat{a}^\dagger + \alpha^* \tag{6.48}$$

この証明は次のようにして行うことが出来る。α は複素数なので、α と α^* は独立変数とみなすことが出来る。(6.47) の左辺を α の関数とみなしてこれで微分すると

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}[\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha)] = \hat{D}^\dagger(\alpha)[\hat{a},\hat{a}^\dagger]\hat{D}(\alpha) = \hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{D}(\alpha) = 1 \tag{6.49}$$

この両辺を α について 0 から α まで積分すると (6.47) が得られる。(6.48) も同様にして証明できる。

コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ は変位演算子を用いて

$$|\alpha\rangle \equiv \hat{D}(\alpha)|0\rangle \tag{6.50}$$

と定義できる。コヒーレント状態に消滅演算子を作用させると

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)\hat{D}^\dagger(\alpha)\alpha\hat{D}(\alpha)|0\rangle = \hat{D}(\alpha)(\hat{a}+\alpha)|0\rangle = \alpha\hat{D}(\alpha)|0\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

すなわち

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{6.51}$$

が得られる。ここで、 $\hat{D}(\alpha)\hat{D}^\dagger(\alpha) = 1$ および $\hat{a}|0\rangle = 0$ を使った。このように、コヒーレント状態は消滅演算子の固有状態になっている。

ベーカー・ハウスドルフの公式

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} \tag{6.52}$$

を用いると、$\hat{D}(\alpha)$ は

$$\hat{D}(\alpha) = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}e^{\alpha\hat{a}^\dagger}e^{-\alpha^*\hat{a}} \tag{6.53}$$

と書けるので $e^{-\alpha^*\hat{a}}|0\rangle = |0\rangle$ に注意すると $|\alpha\rangle$ は光子数状態を用いて次のように展開できる。

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}e^{\alpha\hat{a}^\dagger}|0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{6.54}$$

従って、コヒーレント状態の光子数を測定して n 個の光子が観測される確率 $P(n)$ は

$$P(n) = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = e^{-\bar{n}}\frac{\bar{n}^n}{n!} \tag{6.55}$$

のようにポアソン分布で与えられる。ここで、$\bar{n} \equiv |\alpha|^2$ は測定される光子数の期待値である。ポアソン分布は個々の事象が互いに無相関に起こるときに現れる分布であり、コヒーレント状態の光子数分布はランダムであることがわかる。コヒーレント状態の光子数揺らぎの分散は

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle \equiv \bar{n^2} - \bar{n}^2 = \bar{n} \tag{6.56}$$

で与えられる。このように、コヒーレント状態では光子数の期待値と分散は等しい。

他方、コヒーレント状態の振幅を $\alpha = |\alpha| e^{i\phi}$ のように振幅と位相に分けて書くと、(6.54) は

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{P(n)} (e^{i\phi})^n |n\rangle \tag{6.57}$$

と書ける。右辺は、コヒーレント状態が、各々の光子数状態 $|n\rangle$ にポアソン分布に対応する振幅 $\sqrt{P(n)}$ と光子 1 個あたり $e^{i\phi}$ という同じ位相因子をつけて重ね合わせた状態であると解釈される。

6.2　2 次元調和振動子

2 次元調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega_x^2}{2} \hat{x}^2 \right) + \left(\frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega_y^2}{2} \hat{y}^2 \right) \tag{6.58}$$

で与えられる。ここで、

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \text{ 他の交換子は } 0 \tag{6.59}$$

である。これは独立な 2 個の 1 次元調和振動子の和であるので前節と同様な変換 (6.5) によって x 方向と y 方向について別々に対角化できる。すなわち、

$$\hat{a}_x = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega_x}} (m\omega_x \hat{x} + i\hat{p}_x), \quad \hat{a}_y = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega_y}} (m\omega_y \hat{y} + i\hat{p}_y) \tag{6.60}$$

$$[\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger] = [\hat{a}_y, \hat{a}_y^\dagger] = 1, \quad \text{他の交換関係は } 0 \tag{6.61}$$

この時、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hbar\omega_x \left(\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_y \left(\hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + \frac{1}{2} \right) \tag{6.62}$$

と対角化できる。

特に、$\omega_x = \omega_y =: \omega$ の時は、2 次元の放物型ポテンシャルは回転対称性を持つ。この時、角運動量

$$\hat{L}_z := \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \tag{6.63}$$

も保存する。実際、右辺を $\hat{a}_x, \hat{a}_y$ で表すと

$$\hat{L}_z = i\hbar(\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y) \tag{6.64}$$

となるが、これはハミルトニアンと交換する。

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0 \tag{6.65}$$

このことは直接交換関係を計算することで確かめることができる。もしくは、次のようにして明示的に示すこともできる。消滅演算子を次のように変換する。

$$\hat{a}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x - i\hat{a}_y), \quad \hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x + i\hat{a}_y) \tag{6.66}$$

$$\hat{a}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-), \quad \hat{a}_y = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}_+ - \hat{a}_-) \tag{6.67}$$

$\hat{a}_+$ は $\hat{a}_-, \hat{a}_-^\dagger$ と交換する。

$$[\hat{a}_+, \hat{a}_-] = [\hat{a}_+, \hat{a}_-^\dagger] = 0 \tag{6.68}$$

これらを用いてハミルトニアンと角運動量を書くと

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+^\dagger\hat{a}_+ + \hat{a}_-^\dagger\hat{a}_- + 1) \tag{6.69}$$

$$\hat{L}_z = \hbar(\hat{a}_+^\dagger\hat{a}_+ - \hat{a}_-^\dagger\hat{a}_-) \tag{6.70}$$

この表示では $\hat{H}$ と $\hat{L}_z$ の可換性は明らかである。

$\hat{a}_+^\dagger\hat{a}_+$ と $\hat{a}_-^\dagger\hat{a}_-$ の固有値をそれぞれ n_+、n_- と書き、$n := \min(n_+, n_-)$、$m := n_+ - n_-$ とおくとエネルギー固有値 E と角運動量の固有値 L_z は

$$E = \hbar\omega(n_+ + n_- + 1) = \hbar\omega(2n + |m| + 1) \tag{6.71}$$

$$L_z = n_+ - n_- = m \tag{6.72}$$

と書けることがわかる。これから m, n の取りうる値と縮重度を

$$N := \frac{E}{\hbar\omega} \tag{6.73}$$

の値ごとに示すと表 6.1 のようになる。

表 6.1: $N = E/\hbar\omega$ の値ごとに取りうる n, m の値と縮重度 g。

N	$2n+\|m\|$	n	m	g
1	0	0	0	1
2	1	0	± 1	2
3	2	0	± 2	3
		1	0	
4	3	0	± 3	4
		1	± 1	

6.2.1 複素座標表示

以下では演算子であることを示すハット記号を省略する。エネルギー固有値 (6.71) と角運動量 (6.72) に対応する同時固有状態ベクトルは

$$|n_+, n_-\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{n_+}}{\sqrt{n_+!}} \frac{(a_-^\dagger)^{n_-}}{\sqrt{n_-!}} |0, 0\rangle \tag{6.74}$$

で与えられるが、これに対応する極座標表示を求めよう。まず

$$\begin{aligned} a_+^\dagger &= \frac{1}{2}(a_x^\dagger + i a_y^\dagger) = \frac{1}{\sqrt{4m\hbar\omega}} [m\omega(x+iy) - i(p_x + ip_y)] \\ &= \frac{1}{2}\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(x+iy) - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right)\right] \end{aligned} \tag{6.75}$$

$$\begin{aligned} a_-^\dagger &= \frac{1}{2}(a_x^\dagger - i a_y^\dagger) = \frac{1}{\sqrt{4m\hbar\omega}} [m\omega(x-iy) + i(p_x - ip_y)] \\ &= \frac{1}{2}\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(x-iy) - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right)\right] \end{aligned} \tag{6.76}$$

そこで、長さを調和振動子の特徴的な長さ

$$\ell_{\mathrm{ho}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{6.77}$$

を単位として測ると

$$a_+^\dagger = \frac{1}{2}\left[(x+iy) - \left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right)\right] \tag{6.78}$$

$$a_-^\dagger = \frac{1}{2}\left[(x-iy) - \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right)\right] \tag{6.79}$$

この式を見ると、次のような複素数の座標を導入するのが便利なことが予想される。

$$z := x + iy,\ x = \frac{z+z^*}{2},\ y = \frac{z-z^*}{2i} \tag{6.80}$$

独立変数として x, y を用いる代わりに、z, z^* を用いる表示になっている。
z を用いると生成消滅演算子は次のように書ける。

$$\begin{aligned}
a_+ &= \frac{1}{2}\left(x - iy + \frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) = \frac{z^*}{2} + \frac{\partial}{\partial z} = e^{-\frac{|z|^2}{2}}\frac{\partial}{\partial z}e^{\frac{|z|^2}{2}} && (6.81)\\
a_+^\dagger &= \frac{1}{2}\left(x + iy - \frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) = \frac{z}{2} - \frac{\partial}{\partial z^*} = -e^{\frac{|z|^2}{2}}\frac{\partial}{\partial z^*}e^{-\frac{|z|^2}{2}} && (6.82)\\
a_- &= \frac{1}{2}\left(x + iy + \frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) = \frac{z}{2} + \frac{\partial}{\partial z^*} = e^{-\frac{|z|^2}{2}}\frac{\partial}{\partial z^*}e^{\frac{|z|^2}{2}} && (6.83)\\
a_-^\dagger &= \frac{1}{2}\left(x - iy - \frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) = \frac{z^*}{2} - \frac{\partial}{\partial z} = -e^{\frac{|z|^2}{2}}\frac{\partial}{\partial z}e^{-\frac{|z|^2}{2}} && (6.84)
\end{aligned}$$

基底状態の波動関数 ψ_0 は条件

$$a_+\phi_0 = a_-\phi_0 = 0 \tag{6.85}$$

を満足するように決めれらる。(6.81)、(6.83) より $\psi_0 = \mathrm{const.}e^{-\frac{|z|^2}{2}}$ であることがわかる。2 乗積分が 1 に規格化されるように定数を決めると

$$\psi_0(z, z^*) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-\frac{|z|^2}{2}}, \quad \int d^2z\ \psi_0(z, z^*) = 1, \quad d^2z := dxdy \tag{6.86}$$

(6.74) の複素座標表示の波動関数を

$$\psi_{n_+,n_-}(z, z^*) = \frac{1}{\sqrt{n_+!n_-!}}(a_+^\dagger)^{n_+}(a_-^\dagger)^{n_-}\psi_0(z, z^*) \tag{6.87}$$

右辺に (6.82)、(6.84) を代入すると

$$\begin{aligned}
\psi_{n_+,n_-}(z, z^*) &= \frac{(-1)^{n_++n_-}}{\sqrt{\pi n_+!n_-!}}e^{\frac{|z|^2}{2}}\left(\frac{\partial}{\partial z^*}\right)^{n_+}\left(\frac{\partial}{\partial z}\right)^{n_-}e^{-\frac{|z|^2}{2}}\psi_0(z, z^*)\\
&= \sqrt{\frac{n_+!n_-!}{\pi}}\sum_{k=0}^{\min(n_+,n_-)}\frac{(-1)^k}{k!(n_+-k)!(n_--k)!}z^{n_+-k}z^{*n_--k}e^{-\frac{|z|^2}{2}}\\
&= (-1)^k\sqrt{\frac{n!}{\pi(n+|m|)!}}\ |z|^{|m|}e^{-\frac{|z|^2}{2}}L_n^{(|m|)}(|z|^2)e^{im\phi} \qquad (6.88)
\end{aligned}$$

ここで、

$$L_n^{(m)}(x) = \sum_{k=0}^{n}(-1)^k\frac{(m+n)!}{k!(m+k)!(n-k)!}x^k \quad (m > -1) \tag{6.89}$$

はラゲールの陪多項式である。

$n = \min(n_+, n_-)$ は同径量子数、$m = n_+ - n_-$ は磁気量子数である。また、$r = |z|$、$\phi = \arg z$ と置くと

$$\begin{aligned}\psi_{n,m}(r,\phi) :&= \psi_{n_+,n_-}(z,z^*) \\ &= (-1)^n \sqrt{\frac{n!}{\pi(n+|m|)!}}\, r^{|m|} e^{-\frac{r^2}{2}} L_n^{(|m|)}(r^2) e^{im\phi} \quad (6.90)\end{aligned}$$

これが求めたい極座標表示での波動関数である。波動関数の規格直交性は次の公式を用いて示すことができる。

$$\int_0^\infty e^{-x} L_n^{(m)}(x) L_{n'}^{(m)}(x) dx = \delta_{nn'} \Gamma(m+1)_{m+n}C_n \qquad (6.91)$$

6.3　3 次元調和振動子

ハミルトニアンは

$$H = \sum_{\alpha=x,y,z} \left(\frac{p_\alpha^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q_\alpha^2 \right) \qquad (6.92)$$

ここで q_α, p_α は正準交換関係

$$[q_\alpha, p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta} \qquad (6.93)$$

を満足する。調和振動子に現れる量 $m, \omega, \hbar$ から構成される長さと運動量の単位がそれぞれ $\sqrt{\hbar/(m\omega)}, \sqrt{m\hbar\omega}$ であることに注意して、q_k, p_k をこれらの量で規格化する、すなわち、

$$q_\alpha \to \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} q_\alpha, \quad p_\alpha \to \sqrt{m\hbar\omega} p_\alpha \qquad (6.94)$$

と置きなおすとハミルトニアンと正準交換関係は次のように書ける。

$$H = \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{\hbar\omega}{2} \left(p_\alpha^2 + q_\alpha^2 \right) \qquad (6.95)$$

ここで q_α, p_α は正準交換関係

$$[q_\alpha, p_\alpha] = i\delta_{\alpha\beta} \qquad (6.96)$$

このハミルトニアンは等方的なので極座標表示を取るのが便利である。すなわち、

$$q_x = r\sin\theta\cos\phi, \ q_y = r\sin\theta\sin\phi, \ q_z = r\cos\theta \qquad (6.97)$$

この時、

$$
\begin{aligned}
\sum_{\alpha=x,y,z} q_\alpha^2 &= r^2 \quad (6.98)\\
\sum_{\alpha=x,y,z} p_\alpha^2 &= -\Delta \\
&= -\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \\
&= -\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \quad (6.99)
\end{aligned}
$$

ここで、$\hat{\boldsymbol{L}}$ は角運動量演算子である。3 次元調和振動子のシュレーディンガー方程式は次のように書ける。

$$
\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{\hbar^2 r^2} + r^2\right)\psi = \frac{2E}{\hbar\omega}\psi \quad (6.100)
$$

と書ける。$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ の固有関数が球面調和関数なので ((5.39) を見よ)、その固有値が $\hbar^2\ell(\ell+1)$ で与えられるとし、(6.100) の固有関数を

$$
\psi = \frac{1}{r}u_\ell(r)Y_\ell^m(\theta,\phi) \quad (6.101)
$$

とおき、これを (6.100) に代入すると

$$
\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - r^2 + \frac{2E}{\hbar\omega}\right]u_\ell(r) = 0 \quad (6.102)
$$

が得られる。ここで、

$$
u_\ell(r) = r^{\ell+1}e^{-\frac{r^2}{2}}v_\ell(r) \quad (6.103)
$$

とおくと

$$
\left[\frac{d^2}{dr^2} + 2\left(\frac{\ell+1}{r} - r\right)\frac{d}{dr} - \left(2\ell + 3 - \frac{2E}{\hbar\omega}\right)\right]v_\ell(r) = 0 \quad (6.104)
$$

となる。更に、変数変換 $\rho = r^2$ とおくと

$$
\left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(\ell + \frac{3}{2} - \rho\right)\frac{d}{d\rho} - \frac{1}{2}\left(\ell + \frac{3}{2} - \frac{2E}{\hbar\omega}\right)\right]v_\ell(r) = 0 \quad (6.105)
$$

この方程式の原点で有界となる解は、(6.115) と比較すると

$$
v_\ell(r) = {}_1F_1(a,b;\rho), \quad a = \frac{1}{2}\left(\ell + \frac{3}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right), \quad b = \ell + \frac{3}{2} \quad (6.106)
$$

であることがわかる。ここで、$c_{n\ell}$ は定数である。波動関数が規格化できるためには（無限遠で十分早く収束するためには）、a はゼロまたは負の整数 n でなければならないので、$a=-n$ とおくと

$$E=\hbar\omega\left(2n+\ell+\frac{3}{2}\right),\quad n,\ell=0,1,2,\cdots \tag{6.107}$$

また、対応する固有関数は

$$\begin{aligned}\psi_{nlm} &= c_{n\ell}r^{\ell}e^{-\frac{r^2}{2}}{}_1F_1(-n,\ell+3/2;r^2)Y_{\ell}^{m}(\theta,\phi)\\ m &= \ell,\ell-1,\cdots,-\ell\end{aligned} \tag{6.108}$$

で与えられることがわかる。(6.120) を用いると、陪ラゲール関数を用いて

$$\psi_{nlm}=c_{n\ell}r^{\ell}e^{-\frac{r^2}{2}}L_n^{(\ell+1/2)}(r^2)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{6.109}$$

となる。規格化条件

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty r^2dr\int_0^\pi\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}\phi\psi_{n\ell m}^*(r,\theta,\phi)\psi_{n'\ell'm''}(r,\theta,\phi)\\ =\ &\delta_{nn'}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\end{aligned} \tag{6.110}$$

を課すると、

$$\int_0^\infty dru_{n\ell}(r)u_{n'\ell}(r)=\delta_{\ell\ell'} \tag{6.111}$$

これから

$$u_{n\ell}(r)=(-1)^n\sqrt{\frac{2\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+\ell+3/2)}}r^{l+1}L_n^{(\ell+1/2)}(r^2)e^{-\frac{r^2}{2}} \tag{6.112}$$

(6.107) から固有エネルギーは $N=2n+\ell$ だけの関数なので、N が与えられた場合

$$\ell=N-2n,\quad n=0,1,2,\cdots,K=\begin{cases}N/2 & N:\text{偶数}\\ (N-1)/2 & N:\text{奇数}\end{cases} \tag{6.113}$$

これからエネルギー固有値が $\hbar\omega(N+3/2)$ の状態の縮退度 D_N は

$$D_N=\sum_{n=0}^{K}(2\ell+1)=\sum_{n=0}^{K}[2(N-2n)+1]=\frac{1}{2}(N+1)(N+2) \tag{6.114}$$

であることがわかる。3次元調和振動子は3つの1次元調和振動子の和であるから、縮重度は n_x,n_y,n_z を0以上の整数として $n_x+n_y+n_z=N$ を満足する組 (n_x,n_y,n_z) の数であるとみなせる。それは ${}_{N+2}C_2$ なので再び (6.110) が得られる。

6.4　補足：合流型超幾何級数

微分方程式

$$\left[z\frac{d^2}{dz^2}+(b-z)\frac{d}{dz}-a\right]w(z)=0 \tag{6.115}$$

を合流型超幾何微分方程式という。ここで、a は解が多項式であるためにはゼロまたは負の整数でなければならない。これを見るために、$z=0$ の近傍で

$$w(z)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n z^n \tag{6.116}$$

と展開すると

$$\begin{aligned}&\left[z\frac{d^2}{dz^2}+(b-z)\frac{d}{dz}-a\right]w(z)\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\left[n(n+1)c_{n+1}+b(n+1)c_{n+1}-(n+a)c_n\right]z^n=0\end{aligned} \tag{6.117}$$

よって

$$c_{n+1}=\frac{1}{n+1}\frac{a+n}{b+n}c_n=\frac{1}{(n+1)!}\frac{a(a+1)\cdots(a+n)}{b(b+1)\cdots(b+n)}c_0 \tag{6.118}$$

$c_0=1$ とおいた解

$$\begin{aligned}{}_1F_1(a,b;z)&=1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{a(a+1)\cdots(a+n-1)}{b(b+1)\cdots(b+n-1)}\frac{z^n}{n!}\\&=:1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(a)_n}{(b)_n}\frac{z^n}{n!}\end{aligned} \tag{6.119}$$

を合流型超幾何関数という。右辺が項数が有限個の多項式であるためには a はゼロまたは負の整数でないければならないことがわかる。

いくつかの特殊関数は合流型超幾何関数を用いて表すことができる。陪ラゲール関数とは

$$L_n^{(m)}(z)={}_{m+n}C_n\ {}_1F_1(-n,m+1:z) \tag{6.120}$$

ベッセル関数とは

$$J_m(z)=\frac{z^m}{2^m\Gamma(m+1)}e^{-iz}{}_1F_1(m+1/2,2m+1;2iz) \tag{6.121}$$

なる関係で結ばれている。

(6.120) で与えられた陪ラゲール関数は微分方程式 (6.115) において $a = -n, b = m+1$ とおいたもの、すなわち

$$\left[z\frac{d^2}{dz^2} + (m+1-z)\frac{d}{dz} + n \right] L_n^{(m)}(z) = 0 \tag{6.122}$$

を満足していることに注意しよう。この定義は Wikipedia や Wilhelm Magnus "Formulas and theorems for the special functions of mathematical physics" (Springer-Verlag, New York 1966) p.242 に従っている。一方、猪木一河合「量子力学 I」（講談社）p.150, (5.107) 式では (6.122) の n を $n-m$ に置き換えたものを $L_n^{(m)}$ が従う微分方程式としていることに注意しよう。これに従うと、この講義ノートの $L_n^{(m)}$ は $L_{n+m}^{(m)}$ と置き換えなければならない。Landau-Lifshitz の教科書もその流儀を取っている。この場合、後に議論される水素原子の波動関数の動径成分 $L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}$ は $L_{n+\ell}^{(2\ell+1)}$ となることに注意しよう。

第7章　中心対称場での運動

7.1　2体問題

質量が m_1 と m_2 の 2 粒子がポテンシャル $U(r)$ で相互作用している系を考えよう。ここで、$r := |\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|$ は 2 粒子の距離である。全系のハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + U(r) \tag{7.1}$$

ここで、相対座標 $\boldsymbol{r}$ と重心座標 $\boldsymbol{R}$ を導入する。

$$\boldsymbol{r} := \boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1, \quad \boldsymbol{R} := \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1 + m_2} \tag{7.2}$$

するとハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \tag{7.3}$$

となる。ここで、Δ_R と Δ はそれぞれ重心座標と相対座標に関するラプラシアンである。また、

$$m := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{7.4}$$

は還元質量である。こうして、全波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ は重心運動を記述する波動関数 $\phi(\boldsymbol{R})$ と相対運動を記述する波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ の積となる。前者は自由粒子の波動関数である。後者はシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{7.5}$$

に従う。ラプラシアンが角運動量演算子を用いて

$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \tag{7.6}$$

で与えられることに注意すると、シュレーディンガー方程式は次のように書ける。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{2mr^2} + U(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{7.7}$$

中心対称な系では角運動量 ℓ と磁気量子数 m が保存する。そこで、波動関数を

$$\psi = R(r)Y_l^m(\theta, \phi) \tag{7.8}$$

とおくと、$\hat{\boldsymbol{L}}^2 Y_l^m = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_l^m$ が成立するので、シュレーディンガー方程式は次のように書ける。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + U(\boldsymbol{r})\right]R(r) = ER(r) \tag{7.9}$$

ここで

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} \tag{7.10}$$

とおくと

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]\chi = 0 \tag{7.11}$$

こうして球対称な中心力ポテンシャルの問題は、遠心力ポテンシャルエネルギー

$$\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \tag{7.12}$$

を持つ 1 次元問題に帰着する。波動関数が原点で有限であることを要請すると

$$\chi(0) = 0 \tag{7.13}$$

でなければならいことがわかる。

3.7.2 節で述べたように、片側が束縛された 1 次元運動のエネルギーには縮退がない。したがって、シュレーディンガー方程式 (7.11) はエネルギーの縮退はなく、エネルギーを与えると一意に決まる[1]。他方、波動関数の角度依存性は $Y_l^m(\theta, \phi)$ で与えられるので、結局、中心対称場の波動関数は E, l, m の組によって完全に決まる。そこで、ℓ の値を固定して、エネルギーの一番低い状態を $n = 0$ として、$n = 0, 1, 2, \cdots$ とラベル化すると、振動定理により n は $r = 0$ 以外の有限の r の波動関数のノードの数を与える。他方、$\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 \cdots$ の値に対する軌道にはそれぞれ $s, p, d, f, g, h, i, k, \cdots$ という名前がついている。

[1] この議論では ℓ は方程式に表れるパラメータとして固定されていることに注意せよ。ℓ の値が異なると別な方程式になるので、異なった ℓ に対してエネルギーが縮退しているかどうかはここでの議論からは結論できない。

ポテンシャル $U(r)$ が条件

$$\lim_{r\to 0} r^2 U(r) = 0 \tag{7.14}$$

を満足しているという条件で、波動関数の原点近傍での振る舞いを調べよう。原点近傍で $R(r) \propto r^s$ と置いて (7.9) に代入すると (7.13)、(7.14) より $s = \ell$ であることがわかる。すなわち

$$R(r) \propto r^\ell \tag{7.15}$$

7.2 球面波

空間の併進対称性がある系では運動量 $\boldsymbol{p}$ とエネルギー $E = p^2/2m$ が保存し、波動関数は平面波 $\psi \propto e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}$ となる。球対称な系ではエネルギーに加えて角運動量 ℓ と磁気量子数 m が保存する。このような自由な（すなわち、$U(r) = 0$) 波動関数を考えよう。以下ではエネルギー E の代わりに波数 $k := \sqrt{2mE}/\hbar$ を考える。前節の議論と同様に波動関数は

$$\psi_{k\ell m} = R_{k\ell}(r) Y_\ell^m(\theta, \phi) \tag{7.16}$$

と書ける。波動関数に関する規格直交条件は

$$\int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \psi^*_{k'\ell'm'} \psi_{k\ell m} = 2\pi\delta(k-k')\delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{7.17}$$

角度方向の積分は球面調和関数の直交性を利用して実行できるので

$$\int_0^\infty r^2 dr R_{k'\ell} R_{kl} = 2\pi\delta(k-k') \tag{7.18}$$

この時、動径方向の波動関数は

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR_{k\ell}) + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right] R_{k\ell} = 0 \tag{7.19}$$

を満足する。

$\ell = 0$ の場合は、境界条件 (7.13) を満足する (7.19) の解は

$$R_{k0}(r) = 2\frac{\sin kr}{r} \tag{7.20}$$

で与えられる。$\ell \neq 0$ の場合は

$$R_{k\ell}(r) = r^\ell \chi_{k\ell} \tag{7.21}$$

とおくと

$$\frac{d^2\chi_{k\ell}}{dr^2} + 2\frac{\ell+1}{r}\frac{d\chi_{k\ell}}{dr} + k^2\chi_{k\ell} = 0 \tag{7.22}$$

両辺を r で微分すると

$$\frac{d^3\chi_{k\ell}}{dr^3} + 2\frac{\ell+1}{r}\frac{d^2\chi_{k\ell}}{dr^2} + \left(k^2 - 2\frac{\ell+1}{r^2}\right)\frac{d\chi_{k\ell}}{dr} = 0 \tag{7.23}$$

これを変形すると次のように書けることがわかる。

$$\frac{d^2}{dr^2}\left(\frac{1}{r}\frac{d\chi_{k\ell}}{dr}\right) + 2\frac{\ell+2}{r}\frac{d}{dr}\left(\frac{1}{r}\frac{d\chi_{k\ell}}{dr}\right) + k^2\frac{1}{r}\frac{d\chi_{k\ell}}{dr} = 0 \tag{7.24}$$

これを (7.22) と比較すると

$$\chi_{k\ell+1} = \frac{1}{r}\frac{d\chi_{k\ell}}{dr} \tag{7.25}$$

であることがわかる。この漸化式を繰り返し用いることにより

$$\chi_{k\ell} = \left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^{\ell}\chi_{k0} \tag{7.26}$$

が得られる。これに (7.20) を代入すると

$$R_{k\ell} = 2(-1)^{\ell}\frac{r^{\ell}}{k^{\ell}}\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^{\ell}\frac{\sin kr}{r} \tag{7.27}$$

が得られる。ここで、因子 $(-1)^{\ell}$ は便宜上導入した。因子 $k^{-\ell}$ は規格化条件を満たすように決められた。

動径方向の微分方程式 (7.19) は $x = kr$、$y = R_{k\ell}$ とおくと

$$\frac{1}{x}\frac{d^2}{dr^2}(xy) + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\right]y = 0 \tag{7.28}$$

となる。これは 2 階の斉次微分方程式なので 2 つの独立な解を持つ。そのうち、原点で正則な解が球ベッセル関数 $j_{\ell}(x)$、正則でない解は球ノイマン関数 $n_{\ell}(x)$ である。

$$j_{\ell}(x) = (-x)^{\ell}\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^{\ell}\frac{\sin x}{x} = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}J_{\ell+\frac{1}{2}}(x) \tag{7.29}$$

$$n_{\ell}(x) = -(-x)^{\ell}\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^{\ell}\frac{\cos x}{x} = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}N_{\ell+\frac{1}{2}}(x) \tag{7.30}$$

(7.29) は上で議論したように原点で正則である。これと比較して (7.30) は正弦関数が余弦関数に置き換わっていることからわかるように j_{ℓ} とは独

立であり、原点で特異性を持つ。球ベッセル関数を用いると (7.27) は次のように書ける。

$$R_{k\ell} = 2kj_\ell(kr) = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(kr) \tag{7.31}$$

$r \to \infty$ の漸近形は、$1/r^n$ $(n \geq 2)$ の項を無視すると

$$R_{k\ell} \to 2\frac{\sin(kr - \ell\pi/2)}{r} \tag{7.32}$$

と書ける。逆に原点近傍での振る舞いは (7.27) の $\sin kr$ を展開して、微分した後で r の最低次の冪が主要項になることに注意すると、$r \to 0$ で

$$\begin{aligned}\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^\ell \frac{\sin kr}{r} &\simeq (-1)^\ell \left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^\ell \frac{k^{2\ell+1}r^{2\ell}}{(2\ell+1)!} \\ &= (-1)^\ell \frac{k^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!!}\end{aligned} \tag{7.33}$$

これから

$$R_{k\ell} = \frac{2k^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!} r^\ell \tag{7.34}$$

となり、(7.15) と一致している。

散乱問題ではしばしば定常状態が問題になる。外部から粒子が次々と入射して、それが他の粒子にあたって散乱されるような状況である。そのような場合は、波動関数は原点（すなわち、他の粒子の位置）でゼロになる必要はないので、(7.29) と (7.30) の線形結合が解になる。両者を線形結合してできた特殊関数は次に定義される球ハンケル関数である。

$$\begin{aligned}h_n^{(1)}(x) &:= j_n(x) + in_n(x) = -i(-x)^n \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^n \frac{e^{ix}}{x} \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} H^{(1)}_{n+\frac{1}{2}}\end{aligned} \tag{7.35}$$

$$\begin{aligned}h_n^{(2)}(x) &:= j_n(x) - in_n(x) = i(-x)^n \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^n \frac{e^{-ix}}{x} \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} H^{(2)}_{n+\frac{1}{2}}\end{aligned} \tag{7.36}$$

これら定義式からわかるように $h_n^{(1)}$ は中心から外向きの波、$h_n^{(2)}$ は内向きの波を記述している。これから $\ell = 0$ の波は

$$R_{k0}^{\pm} = \frac{A}{r} e^{\pm ikr} \tag{7.37}$$

一般の ℓ の場合は

$$\begin{aligned} R_{k\ell}^{\pm} &:= (-1)^{\ell} A \frac{r^{\ell}}{k^{\ell}} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^{\ell} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \\ &= \pm i A \sqrt{\frac{\pi k}{2r}} H_{\ell+\frac{1}{2}}^{(1,2)}(kr) \end{aligned} \tag{7.38}$$

定在波の時と同様に $r \to \infty$ での漸近形は

$$R_{k\ell}^{\pm} \to A \frac{e^{\pm i(kr - \ell\pi/2)}}{r} \tag{7.39}$$

であり、原点近傍での振る舞いは

$$R_{k\ell}^{\pm} \to A \frac{(2\ell-1)!!}{k^{\ell}} r^{-\ell-1} \tag{7.40}$$

で与えられる。

もし単位時間当たり 1 個の粒子が流れ出ている状況を考えよう。流れの密度は粒子の速度を $v = \hbar k/m$ として $j = v|\psi|^2$ で与えられるので、原点を中心とする半径 r 球面にわたる積分をしたものが 1 になる。すなわち、立体角要素を $d\Omega$ として

$$\int r^2 d\Omega j = r^2 v |R_{k0}^{+}|^2 = A^2 v = 1 \to A = \frac{1}{\sqrt{v}} \tag{7.41}$$

原点から十分に離れた場所では、原子間相互作用や $1/r^2$ に比例する遠心力ポテンシャル（(7.19) の最後の項）は無視することができる。したがって動径方向の波動関数は

$$\frac{1}{r} \frac{d^2(rR_{k\ell})}{dr^2} + k^2 R_{k\ell} = 0 \tag{7.42}$$

に従う。この方程式に一般解は

$$R_{k\ell} = \frac{2}{r} \sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_{\ell}(k)) \tag{7.43}$$

で与えられる。ここで $\delta_{\ell}(k)$ は ℓ 波の位相シフトと呼ばれ、相互作用の漸近波への効果を表している。

7.3　水素原子

本節ではクーロン型ポテンシャル

$$U = -\frac{\alpha}{r} \quad (\alpha > 0) \tag{7.44}$$

中の運動を考える。これを (7.9) へ代入すると

$$\frac{1}{r}\frac{d^2(rR)}{dr^2}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{\alpha}{r}\right)R=0 \tag{7.45}$$

クーロン場では質量、長さ、時間をそれぞれ $m,\hbar^2/(m\alpha),\hbar^3/(m\alpha^2)$ を単位として測ると便利である。これをクーロン単位系という。このとき、エネルギーの単位は

$$m\left(\frac{\text{長さ}}{\text{時間}}\right)^2=\frac{m\alpha^2}{\hbar^2} \tag{7.46}$$

である。これらの単位で測ると、(7.45) は次のようになる。

$$\frac{1}{r}\frac{d^2(rR)}{dr^2}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R+2\left(E+\frac{1}{r}\right)R=0 \tag{7.47}$$

ここで、さらに変数変換

$$n=\frac{1}{\sqrt{-2E}},\quad \rho=\frac{2r}{n} \tag{7.48}$$

を行うと (7.47) は次のように書ける。

$$\frac{1}{\rho}\frac{d^2(\rho R)}{d\rho^2}+\left[-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}\right]R=0 \tag{7.49}$$

この式から短距離での振る舞いは $R\sim\rho^\ell$ であることがわかる。また、$\rho\to\infty$ では (7.49) は

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}-\frac{1}{4}R=0 \tag{7.50}$$

となるので、$R\sim e^{-\frac{1}{2}\rho}$ であることがわかる。したがって、

$$R=\rho^\ell e^{-\frac{1}{2}\rho}w(\rho) \tag{7.51}$$

とおくと、$w(\rho)$ についての方程式

$$\left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2}+(2\ell+2-\rho)\frac{d}{d\rho}-(\ell+1-n)\right]w=0 \tag{7.52}$$

これを (6.115) と比較すると解は合流型超幾何関数

$$\begin{aligned} w(\rho) &= {}_1F_1(\ell+1-n,2\ell+2;\rho) \\ &= \frac{1}{{}_{n+\ell}C_{2\ell+1}}L^{(2\ell+1)}_{n-\ell-1}(\rho) \end{aligned} \tag{7.53}$$

で与えられることがわかる。最後の等式を導く際に (6.120) を用いた。また、教科書の流儀によっては $L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}$ は $L_{n+\ell}^{(2\ell+1)}$ と書かれていることに注意しよう (6.4 節の最後の注を参照)。6.4 節で述べたように、解が規格化できるためには $\ell+1-n$ がゼロまたは負の整数でなければならない。したがって、n は $\ell+1$ 以上の整数であることがわかる。

$$n \geq \ell+1, \quad n\ \text{は整数} \tag{7.54}$$

この時、動径成分の波動関数は

$$R_{n\ell} = \text{const.}\rho^{\ell} e^{-\frac{\rho}{2}} {}_1F_1(\ell+1-n, 2\ell+2; \rho) \tag{7.55}$$

ここで、比例定数は規格化条件

$$\int_0^{\infty} R_{n\ell}^2 r^2 dr = 1 \tag{7.56}$$

を課すことで決まり、

$$\begin{aligned} R_{n\ell} \quad &= \quad \frac{2}{n^{l+2}(2\ell+1)!}\sqrt{\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}}(2r)^{\ell} e^{-\frac{r}{n}} \\ & \quad\quad \times {}_1F_1(\ell+1-n, 2\ell+2; \rho) \end{aligned} \tag{7.57}$$

となる。

定義 (7.48) より

$$E = -\frac{1}{2n^2}, \quad n = 1, 2, \cdots \tag{7.58}$$

あるいは、エネルギーの単位 $m\alpha^2/\hbar^2$ をつけて

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, \cdots \tag{7.59}$$

で与えられる。$n = 1, 2, \cdots$ は主量子数と呼ばれる。各 n に対して、角運動量が取りうる値は

$$\ell = 0, 1, \cdots, n-1 \tag{7.60}$$

である。エネルギーの表式 (7.56) には ℓ が現れないので磁気量子数 m に対してだけではなく、ℓ に対してもエネルギーは縮退している。一般に中心対称場のエネルギーは m に対して $2\ell+1$ 重に縮退しているが、ℓ に対しても縮退しているのはクーロン場の特徴である。したがって、n 番目のエネルギー準位の縮退度は

$$\sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = n^2 \tag{7.61}$$

である。ℓ に関する縮退は偶然縮退と呼ばれることがあるが、次の節で述べるようにその物理的起源は隠れた力学的対称性にある。

7.4 力学的対称性

水素原子のハミルトニアン

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{7.62}$$

は実空間の回転に対して不変であるので、実空間回転の生成子である軌道角運動量演算子 L_i $(i = 1, 2, 3)$ は H と可換である。しかし、異なった L_i は互いに交換しないので、ハミルトニアン H と固有状態は一般に縮退している（4.6 で述べてたように、ハミルトニアンと交換する演算子が互いに交換しないとき、エネルギーは縮退することを思い出そう）。今の例では、L_3 の固有値 m に対してエネルギーが縮退している。ところが、水素原子の場合は、それに加えて、前節でしめしたように与えられた n に対して、異なる全軌道角運動量 $l = 0, 1, \cdots, l_{\max} = n-1$ (n は主量子数) の状態のエネルギーが縮退している。各 l ごとに縮退度はゼロ磁場では $2l+1$ なので、主量子数が n の状態の縮退度は

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2 \tag{7.63}$$

である。

この縮退はしばしば偶然縮退 (accidental degeneracy) と呼ばれてきたが、実はその物理的起源は系が有する SO(4) 対称性対称性にある。磁場をかけると磁気量子数 m に関する縮退は解け、固有エネルギーは n と m に依存するようになる。しかし、l に関する縮退は依然として解けない。実は、l に関する縮退は、次のラプラスールンゲーレンツベクトル $\mathbf{R}$ いう保存量が存在することに起因している。

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{L}\times\mathbf{p} - \mathbf{p}\times\mathbf{L}}{2m} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\mathbf{r}. \tag{7.64}$$

この保存則は、以下で明らかにされるようにクーロンポテンシャルが $1/r$ に比例するという力の法則に起源があるので、力学的対称性 (dynamical symmetry) と呼ばれる。

ラプラス-ルンゲーレンツベクトルを成分で書くと次のようになる。

$$R_i = \frac{1}{2m}\epsilon_{ijk}(L_j p_k - p_j L_k) + k\frac{x_i}{r}, \quad k \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \tag{7.65}$$

ここで、ϵ_{ijk} は i, j, k の値がそれぞれ 1,2,3 またはその偶置換の場合は 1、奇置換の場合は-1、それ以外の場合は 0 をとる Eddington のイプシロン、あるいは、Levi-Civita テンソルと呼ばれる量である。ラプラスールンゲー

レンツベクトルが保存することは、R_i が H と交換することを意味している。これは次の交換関係を用いて示せる。

$$[L_i, x_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}x_k \tag{7.66}$$

$$[L_i, p_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}p_k \tag{7.67}$$

$$\left[L_i, \frac{1}{r}\right] = 0 \tag{7.68}$$

$$\left[\frac{1}{r}, p_i\right] = i\hbar\frac{x_i}{r^3} \tag{7.69}$$

これらを用いると

$$\begin{aligned}
\left[\frac{1}{r}, R_i\right] &= \frac{1}{2m}\epsilon_{ijk}\left[\frac{1}{r}, L_j p_k - p_j L_k\right] \\
&= \frac{1}{2m}\epsilon_{ijk}\left(L_j\left[\frac{1}{r}, p_k\right] - \left[\frac{1}{r}, p_j\right]L_k\right) \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\epsilon_{ijk}\left(L_j\frac{x_k}{r^3} - \frac{x_j}{r^3}L_k\right) \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\epsilon_{ijk}\left(\epsilon_{jlm}x_l p_m\frac{x_k}{r^3} - \frac{x_j}{r^3}\epsilon_{klm}x_l p_m\right) \\
&= -\frac{i\hbar}{2m}\left[\left(p_i\frac{1}{r} + \frac{1}{r}p_i\right) - \frac{1}{r^3}(p_k x_k x_i + x_i x_k p_k)\right]
\end{aligned} \tag{7.70}$$

$$\left[p_l^2, R_i\right] = -i\hbar k\left[\left(p_i\frac{1}{r} + \frac{1}{r}p_i\right) - \frac{1}{r^3}(p_k x_k x_i + x_i x_k p_k)\right] \tag{7.71}$$

が示せる。これらから

$$[H, R_i] = 0 \tag{7.72}$$

であることが分かる。こうして、ラプラスールンゲーレンツベクトル $\mathbf{R}$ が保存されることが示された。古典力学において $\boldsymbol{R}$ の保存は、重力ポテンシャル $1/r$ 中を運動するケプラー問題に現れ、近日点が動かないという物理的効果を生む。

次に、R_i によって生成される群の性質を調べよう。生成子の交換関係は

$$[R_i, R_j] = -\frac{2i\hbar}{m}\epsilon_{ijk}L_k H \tag{7.73}$$

$$[L_i, R_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}R_k \tag{7.74}$$

で与えられる。ハミルトニアンと交換する 2 つの演算子が互いに交換しない場合は、系のエネルギーが縮退することを思い出そう（(4.6 節参照)。

今の例では、角運動量の大きさの自乗 $\boldsymbol{L}^2$ とラプラスールンゲーレンツベクトル (R_x, R_y, R_z) はともにハミルトニアンと交換する保存量である。しかし、どの R_i も $\boldsymbol{L}^2$ とは交換しない。こうして、異なった ℓ を持った状態が縮退する。これが「偶然縮退」の起源である。

後の議論のために $\boldsymbol{R}^2$ を計算しておこう。まず、

$$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}=2i\hbar\boldsymbol{p} \tag{7.75}$$

を用いると

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R} &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}-c(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-i\hbar\boldsymbol{p})\right]\\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}+c(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}-i\hbar\boldsymbol{p})\right]\end{aligned} \tag{7.76}$$

ここで、$c=4\pi\epsilon_0/(me^2)$ である。これから

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}^2(mc)^2 &= \left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}+c(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}-i\hbar\boldsymbol{p})\right]\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}-c(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-i\hbar\boldsymbol{p})\right]\\ &= 1-c\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-i\hbar\boldsymbol{p})-(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}-i\hbar\boldsymbol{p})\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]\\ &\quad +c^2\left[-(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})+i\hbar(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}+i\hbar\boldsymbol{p}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})+\hbar^2p^2\right]\\ &= 1-2c\frac{1}{r}(\boldsymbol{L}^2+\hbar^2)+c^2p^2(\boldsymbol{L}^2+\hbar^2)\\ &= 1+c^2\left(p^2-\frac{2}{c}\frac{1}{r}\right)(\boldsymbol{L}^2+\hbar^2)\\ &= 1+2mc^2H(\boldsymbol{L}^2+\hbar^2)\end{aligned} \tag{7.77}$$

よって

$$\boldsymbol{R}^2=\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2+\frac{2}{m}H(\boldsymbol{L}^2+\hbar^2) \tag{7.78}$$

「偶然縮退」の起源は、エネルギーが一定の 4 次元球面の中の回転対称性（これを SO(4) 対称性という）の帰結とみなすこともできる (V. A. Fock, 1935)。このことを理解するために、H が L_i および R_i と可換なので同時対角化可能であることに注意して、以下の議論ではエネルギー固有値 E を固定して考える。さらに、$E<0$ の場合、すなわち、束縛状態の場合を考える。このとき、

$$A_i:=\sqrt{-\frac{m}{2E}}R_i \tag{7.79}$$

を定義すると、(7.73)、(7.74) より

$$[A_i,A_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}L_k,\quad [L_i,A_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}A_k \tag{7.80}$$

が得られる。これらと角運動量演算子の交換関係

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{7.81}$$

を合わせると、角運動量演算子 L_i と (7.79) で規格化されたラプラスールンゲーレンツベクトルの演算子 A_i が閉じた交換関係（リー代数）を構成していることがわかる。ここで、L_x, L_y, L_z はそれぞれ yz, zx, xy 平面内の回転の生成子である。一方、w を 4 次元ユークリッド空間の第 4 の軸とすると、A_x, A_y, A_z はそれぞれ wx, wy, wz 平面内の回転の生成子であることがわかる。実際、A_x, A_y がそれぞれ xw, yw 面内の回転であるとすると、これらは

$$A_x = xp_w - wp_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial w} - w\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{7.82}$$

$$A_y = yp_w - wp_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial w} - w\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{7.83}$$

と書ける。これから A_x, A_y の交換関係を計算すると

$$\begin{aligned}[A_x, A_y] &= -\hbar^2\left(\left[x\frac{\partial}{\partial w}, -w\frac{\partial}{\partial y}\right] - \left[w\frac{\partial}{\partial x}, y\frac{\partial}{\partial w}\right]\right) \\ &= \hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \\ &= i\hbar L_z \end{aligned} \tag{7.84}$$

となり、(7.80) が再現されることがわかる。こうして、L_i, A_j は 4 次元ユークリッド空間内の回転の生成子を構成していることがわかる。このようにクーロン場や重力場のようなポテンシャルが $1/r$ 型の問題では系の持つ対称性が通常の 3 次元回転対称性から 4 次元回転対称性へと増加する。

4 次元空間の回転の生成子の交換関係 (7.80) を用いると、水素原子のエネルギースペクトルを微分方程式を解くことなく代数的に解くことができる (W. Pauli, 1926)。

$$M_i := \frac{L_i + A_i}{2},\ N_i := \frac{L_i - A_i}{2} \tag{7.85}$$

を導入すると (7.80) は次のように書き換えられる。

$$[M_i, M_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}M_k,\ [N_i, N_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}N_k,\ [M_i, N_j] = 0 \tag{7.86}$$

これは、$\{M_1, M_2, M_3\}$ と $\{N_1, N_2, N_3\}$ はそれぞれ独立した角運動量演算子の代数を構成していることを示している。これから $\boldsymbol{M}^2, \boldsymbol{N}^2$ の固有値はそれぞれ $M(M+1), N(N+1)$ $(M, N = 0, 1/2, 1, 3/2, \cdots)$ であることがわかる。

さて、(7.86) より、$\mathbf{M}^2, M_3, \mathbf{N}^2, N_3$ の固有値は直ちに分かる。

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^2 &= \hbar^2 a(a+1)\ (a=0,1/2,1,3/2,\cdots) \\ M_3 &= \hbar\mu\ (\mu=a,a-1,\cdots,-a) \end{aligned} \tag{7.87}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{N}^2 &= \hbar^2 b(b+1)\ (b=0,1/2,1,3/2,\cdots) \\ N_3 &= \hbar\nu\ (\nu=b,b-1,\cdots,-b) \end{aligned} \tag{7.88}$$

ここで $\boldsymbol{R}$ の定義より $\boldsymbol{L}$ は $\boldsymbol{R}$ と直交する。

$$\mathbf{R}\cdot\mathbf{L}=\mathbf{L}\cdot\mathbf{R}=0 \tag{7.89}$$

従って

$$\mathbf{M}^2=\mathbf{N}^2=\frac{1}{4}(\mathbf{L}^2+\mathbf{A}^2) \tag{7.90}$$

が示せる。これから、固有状態の量子数は $a=b$ でなければならない。また、(7.78) より

$$\mathbf{A}^2=-\frac{m}{2E}\mathbf{R}^2=-(\mathbf{L}^2+\hbar^2)-\frac{m}{2E}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \tag{7.91}$$

なので

$$\frac{1}{4}(\mathbf{L}^2+\mathbf{A}^2)=-\frac{1}{4}\left[\hbar^2+\frac{m}{2E}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right]=\hbar^2 a(a+1) \tag{7.92}$$

が示せる ((7.90) 参照)。これからエネルギー固有値は

$$E=-\frac{m}{2\hbar^2 n^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \tag{7.93}$$

と決まる。ここで、$n:=2a+1=1,2,\cdots$ は主量子数である。

7.5　進んだ話：隠れた対称性とリー代数

この節で書かれていることは、進んだ学生への補足である。具体的な内容は物理数学 III で学ぶ（はず）なので、今は読み飛ばしてよい。

(7.86) からわかるように、水素原子の各エネルギー固有状態は SU(2)×SU(2) の変換に対して不変である。SU(2)×SU(2) は SO(4) に局所同型であり[2]、

[2] リー代数のレベルでは $\mathfrak{so}(4)=\mathfrak{so}(3)+\mathfrak{so}(3)$ である。

空間の回転群 SO(3) はその部分群である。実際、SO(4) の 6 個の生成子を次のように定義することができる。

$$L^{ij} = \frac{1}{\hbar}\epsilon_{ijk}L_k \ (i,j,k=1,2,3) \tag{7.94}$$

$$L^{4i} = \frac{1}{\hbar}A_i \ (i=1,2,3) \tag{7.95}$$

リー代数の言葉でいうと、水素原子の主量子数を決める a は (7.85) からわかるように SU(2)×SU(2) の既約表現の最高ウエイトであり、表現の次元は $(2a+1)^2 = n^2$ である。

一方、軌道角運動量は

$$L_i = M_i + N_i \tag{7.96}$$

なので、$\mathbf{L}$ は 2 つの SU(2)"角運動量" $\mathbf{M}$ と $\mathbf{N}$ の合成角運動量であることが分かる。従って、l のとりうる値は $|a-b| \leq l \leq a+b$ であり、かつ、$a=b$ なので $l = 0, 1, \cdots, 2a = n-1$ である。

ベクトル量 $\mathbf{N} = (N_x, N_y, N_z)$ に対応する球テンソル演算子

$$N_1^{\pm 1} = \mp\frac{N_x \pm iN_y}{\sqrt{2}}, \ N_1^0 = N_z. \tag{7.97}$$

を導入しよう。N_1^1 は H と交換する ($[H, N_1^1] = 0$) ので、N_1^1 を状態 $|n,l,l\rangle$ に作用させると、同じエネルギーを持つ別の状態が生じる。球テンソル N_1^1 は角運動量と磁気量子数をそれぞれ 1 個ずつ増加させる役割を果たすので、

$$N_1^1|n,l,l\rangle = c|n,l+1,l+1\rangle \tag{7.98}$$

が得られる。こうして、N_1^1 を次々と作用させていくことで、同じ n を持つ異なった l の最高ウエイトを持った状態 $|n,l+k,l+k\rangle$ を得ることができ、この状態に今度は L_- を作用させることによって、与えられた l に対して異なったウエイト m を持った状態が得られる。与えられた n に対して、そのようにして得られる状態の総数は

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2 \tag{7.99}$$

である。

一般に $1/r$ 型の相互作用をする粒子の束縛状態は、SO(4) 対称性を持つ。上で導かれた 2 つのベクトル $\mathbf{M}$ と $\mathbf{N}$ は 4 次元空間における ${}_4\mathrm{C}_2$=6 個の回転の生成子になっている。力学的には、この問題は束縛運動をするケプラー問題と等価である。エネルギーが正の状態は束縛されておらず、

SO(3,1) 対称性を持っていることが示せる[3]。 これは、ローレンツ群と同じ対称性を持っている。

[3]詳しくは次の文献を参照。M. Bander and C. Itzykson, Rev. Mod. Phys. **38**, 330 (1966); Rev. Mod. Phys. **38**, 346 (1966)

第8章　摂動論

8.1　時間に依存しない摂動論

物理学は現実のすべての詳細な記述を目指すというよりは、むしろ、その背後の法則や現象の本質的な側面を捉えることを目的とする場合が多い。そのために、本質抽出をおこない、それをモデル化する。しかし、モデル化されたハミルトニアンですら厳密に解ける場合はほとんどなく、それをどう近似的に解くかという段階において研究者の手腕が問われる場合が多い。そこで、ハミルトニアン H の中に含まれる厳密に解ける部分を H_0 とし、残りの部分 V を近似的に解くことを考える。これを摂動論という。この方針に沿ってハミルトニアンを

$$H = H_0 + V \tag{8.1}$$

と分解したとき、H_0 を非摂動ハミルトニアン、V を摂動項という。ここでは、ハミルトニアンが時間に依存しない場合に、シュレーディンガー方程式

$$(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{8.2}$$

を解くことを考える。更に、エネルギースペクトルは離散的で縮退がない場合を考える。

非摂動ハミルトニアンの固有関数 $|m\rangle$ とそれに対応する固有エネルギー E_{0m} がわかっているとする。

$$H_0|m\rangle = E_{0m}|m\rangle \tag{8.3}$$

固有関数形 $\{|m\rangle\}$ は完全系をなしているので $|\psi\rangle$ をそれで展開する。

$$|\psi\rangle = \sum_n c_m|m\rangle \tag{8.4}$$

これを (8.2) へ代入して (8.3) を用いると

$$\sum_m c_m(E_{0m} + V)|m\rangle = E\sum_m c_m|m\rangle \tag{8.5}$$

両辺の左側から $\langle k|$ を掛けて内積をとり、$|m\rangle$ の規格直交性 ($\langle k|m\rangle = \delta_{km}$) を用いると

$$\sum_m V_{km} c_m = (E - E_{0k}) c_k \tag{8.6}$$

ここで

$$V_{km} := \langle k|V|m\rangle = \iint \psi_k^{(0)*} V \psi_m^{(0)} dx, \quad \psi_m^{(0)}(x) := \langle x|m\rangle \tag{8.7}$$

である。また、dx は空間の次元が n 次元の場合は $d^n x$ と解釈するものとする。

以下では、$\hat{V}$ が $\hat{H}_0$ に比べて小さい場合に、(8.6) を逐次的に解くことで、全ハミルトニアン H の n 番目の固有値 E_n と固有関数 $|\psi_n\rangle$ を求めよう。エネルギーと係数 c_n を

$$\begin{aligned} E &= E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \cdots && (8.8) \\ c_m &= c_n^{(0)} \delta_{mn} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \cdots && (8.9) \end{aligned}$$

と展開する。仮定により第ゼロ次近似では $|\psi_n\rangle = |n\rangle$ なので、(8.9) の右辺の第一項には δ_{mn} がついている。更に、$E^{(k)}, c_m^{(k)}$ は V の k 次オーダーの量 $O(V^k)$ であると仮定する。これらを (8.6) に代入すると

$$\begin{aligned} \sum_m V_{km}(c_n^{(0)}\delta_{mn} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \cdots) &= (E^{(0)} - E_{0k} + E^{(1)} + E^{(2)} + \cdots) \\ &\quad \times (c_n^{(0)}\delta_{kn} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)} + \cdots) \quad (8.10) \end{aligned}$$

両辺の V の各次数ごとに等しいとおく。

8.1.1　0 次摂動

(8.10) の両辺の V の 0 次の項を比較すると

$$0 = (E^{(0)} - E_{0k}) c_n^{(0)} \delta_{kn} \tag{8.11}$$

$k = n$ の場合を考えると

$$E^{(0)} = E_{0n} \tag{8.12}$$

であることがわかる。状態ベクトルの規格化条件から

$$c_n^{(0)} = 1 \tag{8.13}$$

が得られる。よって、0 次摂動の固有関数は

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = |n\rangle \tag{8.14}$$

である。

8.1.2 1 次摂動

次に、1 次の項を比較する。

$$V_{kn}c_n^{(0)} = (E^{(0)} - E_{0k})c_k^{(1)} + E^{(1)}c_n^{(0)}\delta_{kn} \tag{8.15}$$

(8.12) と (8.13) を代入すると、$k = n$ の時

$$E^{(1)} = V_{nn} \tag{8.16}$$

が得られる。こうしてエネルギー $E_n^{(0)}$ に対する 1 次摂動の補正は非摂動の固有状態 $|n\rangle$ に対する V の期待値で与えられることがわかる。

$k \neq n$ の時は

$$c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_{0n} - E_{0k}} \quad (k \neq n) \tag{8.17}$$

が得られる。こうして、全系の状態ベクトルは

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = (1 + c_n^{(1)})|n\rangle + \sum_k{}' c_k^{(1)}|k\rangle \tag{8.18}$$

で与えられる。ここで、$'$ は $k = n$ を除外するという意味である。$c_n^{(1)}$ は全状態ベクトルが V の 1 次の精度で 1 に規格化されているという条件から決められる。$c_k^{(1)} = O(V)$ であることに注意すると

$$\langle\psi_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle = |1 + c_n^{(1)}|^2 + O(V^2) \tag{8.19}$$

これが $O(V)$ の精度で 1 に等しくなければならないので $c_n^{(1)} = 0$ が得られる[1]。こうして、1 次摂動に対する固有エネルギーと固有状態は次のように与えられる。

$$E = E_{0n} + V_{nn} \tag{8.20}$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = |n\rangle + \sum_k{}' \frac{V_{kn}}{E_{0n} - E_{0k}}|k\rangle \tag{8.21}$$

この結果から摂動論が適用できるためには、V の行列要素が対応する非摂動エネルギーの差よりも十分に小さいという条件 $|V_{kn}| \ll |E_{0n} - E_{0k}|$ が満たされている必要があることがわかる。

1 次摂動で求めた状態ベクトルを用いて任意の物理量 O の行列要素を計算しよう。

$$O_{mn} := \langle\psi_m^{(1)}|O|\psi_n^{(1)}\rangle \tag{8.22}$$

[1] 一般には v を V と同じオーダーの任意の実数として、$c_n^{(1)} = iv_n$ と書けることに注意しよう。この場合、$|1 + c_n^{(1)}|^2 = 1 + v_n^2$ は V の 1 次の精度で 1 に等しい。以下では、係数が実数の場合について議論する。

右辺に (8.19) を代入して $O(V)$ の項までを残すと

$$O_{mn} = O_{mn}^{(0)} + \sum_k \left[(1-\delta_{km}) \frac{V_{km}^* O_{kn}^{(0)}}{E_{0m} - E_{0k}} + (1-\delta_{kn}) \frac{V_{kn} O_{mk}^{(0)}}{E_{0n} - E_{0k}} \right] \tag{8.23}$$

8.1.3 2 次摂動

次に、2次のオーダーの項を比較する。$c_n^{(0)} = 1, c_n^{(1)} = 0, E^{(0)} = E_{0n}, E^{(1)} = V_{nn}$ などに注意すると

$$\sum_m{}' V_{km} c_m^{(1)} = (E_{0n} - E_{0k}) c_k^{(2)} + V_{nn} c_k^{(1)} + E^{(2)} \delta_{kn} \tag{8.24}$$

ここで、左辺の $'$ は $m = n$ を和から除外することを意味している。$k = n$ の場合を考えると

$$E^{(2)} = \sum_m{}' V_{nm} c_m^{(1)} - V_{nn} c_n^{(1)} = \sum_m{}' V_{nm} c_m^{(1)} \tag{8.25}$$

これに (8.17) を代入すると

$$E^{(2)} = \sum_m{}' \frac{|V_{nm}|^2}{E_{0n} - E_{0m}} \tag{8.26}$$

これから、基底状態 $(n = 0)$ のエネルギーに対する 2 次摂動の補正は $E_{00}^{(2)} < E_{0m}^{(2)}$ $(m > 0)$ なので常に負であることがわかる。

$k \neq n$ の場合は

$$\sum_m{}' V_{km} c_m^{(1)} = (E_{0n} - E_{0k}) c_k^{(2)} + V_{nn} c_k^{(1)} \tag{8.27}$$

これから

$$\begin{aligned} c_k^{(2)} &= \frac{1-\delta_{kn}}{E_{0n} - E_{0k}} \left(\sum_m{}' V_{km} c_m^{(1)} - V_{nn} c_k^{(1)} \right) \\ &= \frac{1-\delta_{kn}}{E_{0n} - E_{0k}} \left(\sum_m{}' \frac{V_{km} V_{mn}}{E_{0n} - E_{0m}} - \frac{V_{nn} V_{kn}}{E_{0n} - E_{0k}} \right) \end{aligned} \tag{8.28}$$

こうして、状態ベクトルは

$$|\psi\rangle = (1 + c_n^{(2)})|n\rangle + \sum_k{}' c_k^{(1)} |k\rangle + \sum_k{}' c_k^{(2)} |k\rangle \tag{8.29}$$

と書ける。ここで、$c_n^{(2)}$ は状態ベクトルのノルムが $O(V^2)$ の精度で 1 に規格化されているという要請から決められる。(8.29) から

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 + 2\mathrm{Re} c_n^{(2)} + \sum_k{}' \frac{|V_{kn}|^2}{(E_{0n} - E_{0k})^2} = 1 \tag{8.30}$$

この条件は

$$c_n^{(2)} = -\frac{1}{2}\sum_k{}' \frac{|V_{kn}|^2}{(E_{0n}-E_{0k})^2} \tag{8.31}$$

と置くことで満たされる。こうして、2 次摂動で得られる状態ベクトルは

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \left(1-\frac{1}{2}\sum_k{}'\frac{|V_{kn}|^2}{(E_{0n}-E_{0k})^2}\right)|n\rangle + \sum_k{}'\frac{V_{kn}}{E_{0n}-E_{0k}}|k\rangle \\ &\quad + \sum_k{}'\frac{1}{E_{0n}-E_{0k}}\left(\sum_m{}'\frac{V_{km}V_{mn}}{E_{0n}-E_{0m}} - \frac{V_{nn}V_{kn}}{E_{0n}-E_{0k}}\right)|k\rangle \end{aligned} \tag{8.32}$$

であることがわかる。

8.2 永年方程式

次に、非摂動ハミルトニアン H_0 の固有エネルギーが s 重に縮退している場合を考える。縮退している固有エネルギーを E_{0n} とし、固有状態を $|n_i\rangle$ $(i=1,2,\cdots,s)$ とする。シュレーディンガー方程式

$$(H_0+V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{8.33}$$

に縮退した状態を適当に重ね合わせたもの

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{s} c_{n_j}^{(0)}|n_j\rangle \tag{8.34}$$

を代入し、$E = E_{0n} + E^{(1)}$ とおくと

$$\sum_{j=1}^{s} c_{n_j}(E_{0n}+V)|n_j\rangle = (E_{0n}+E^{(1)})\sum_{j=1}^{s} c_{n_j}|n_j\rangle \tag{8.35}$$

E_{0n} の項はキャンセルするので

$$\sum_{j=1}^{s} c_{n_j}V|n_j\rangle = E^{(1)}\sum_{j=1}^{s} c_{n_j}|n_j\rangle \tag{8.36}$$

左から $\langle n_i|$ を掛けると

$$\sum_{j=1}^{s}(V_{n_in_j} - E^{(1)}\delta_{n_jn_j})c_{n_j} = 0 \tag{8.37}$$

ここで、$V_{n_in_j} := \langle n_i|V|n_j\rangle$ である。この方程式が非自明な解をもつためには係数行列の行列式がゼロ、すなわち、

$$\det(V_{n_in_j} - E^{(1)}\delta_{n_jn_j}) = 0 \tag{8.38}$$

を満たす必要がある。これを永年方程式という。

簡単な例として、$s = 2$ の場合を考えると、(8.38) の解は

$$\begin{aligned} E_{\pm}^{(1)} &= \frac{1}{2}(V_{11} + V_{22} \pm \hbar\omega) \qquad (8.39) \\ \omega &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2} \qquad (8.40) \end{aligned}$$

であることがわかる。この解を (8.37) に代入して状態ベクトル $|\psi_{\pm}\rangle = c_{1\pm}^{(0)}|n_1\rangle + c_{2\pm}^{(0)}|n_2\rangle$ の係数を求めると

$$\begin{aligned} c_{1\pm}^{(0)} &= \sqrt{\frac{V_{12}}{2|V_{12}|}\left(1 \pm \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar\omega}\right)} \qquad (8.41) \\ c_{2\pm}^{(0)} &= \pm\sqrt{\frac{V_{21}}{2|V_{12}|}\left(1 \mp \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar\omega}\right)} \qquad (8.42) \end{aligned}$$

が得られる。

$|\psi_{\pm}\rangle$ と $|n_{1,2}\rangle$ の関係を行列で表すと

$$\begin{pmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{1+}^{(0)} & c_{2+}^{(0)} \\ c_{1-}^{(0)} & c_{2-}^{(0)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |n_1\rangle \\ |n_2\rangle \end{pmatrix} =: M \begin{pmatrix} |n_1\rangle \\ |n_2\rangle \end{pmatrix} \tag{8.43}$$

ここで、行列を M と置いた。これを逆に解くと

$$\begin{pmatrix} |n_1\rangle \\ |n_2\rangle \end{pmatrix} =: M^{-1} \begin{pmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{pmatrix} \tag{8.44}$$

$|\psi_{\pm}\rangle$ の固有エネルギーは $E_{\pm} := E_{0n} + E_{\pm}^{(1)}$ なので、時刻 $t = 0$ で $|n_1\rangle, |n_2\rangle$ の状態が時間発展した状態を $|n_1(t)\rangle, |n_2(t)\rangle$ と書くと

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} |n_1(t)\rangle \\ |n_2(t)\rangle \end{pmatrix} &= M^{-1} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t}|\psi_+\rangle \\ e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t}|\psi_-\rangle \end{pmatrix} \\ &= M^{-1} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{pmatrix} \\ &= M^{-1} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t} \end{pmatrix} M \begin{pmatrix} |n_1\rangle \\ |n_2\rangle \end{pmatrix} \qquad (8.45) \end{aligned}$$

これに M を代入して計算すると $|n_1(t)\rangle, |n_2(t)\rangle$ が得られる。この結果を用いると、時刻 $t=0$ で状態 $|n_1\rangle$ にあった系が、時刻 t で状態 $|n_2\rangle$ に見いだされる遷移確率振幅は次のように与えられる。

$$\langle n_2|n_1(t)\rangle = \frac{(e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t})c_{2+}^{(0)}c_{2-}^{(0)}}{c_{1+}^{(0)}c_{2-}^{(0)} - c_{1-}^{(0)}c_{2+}^{(0)}} \tag{8.46}$$

これに (8.39)、(8.40)、(8.41)、(8.42) を代入すると遷移確率

$$w_{21} = |\langle n_2|n_1(t)\rangle|^2 = 2\frac{|V_{12}|^2}{(\hbar\omega)^2}(1-\cos\omega t) \tag{8.47}$$

が得られる。このように遷移確率はエネルギー差 $E_+^{(1)} - E_-^{(2)} = \hbar\omega$ に対応する振動数 ω で振動する。

エネルギー固有値が縮退している場合、しばしば縮退している固有状態間の行列要素が極めて小さいかゼロである場合がある。そのような場合は、縮退している状態とそれ以外の状態 $|m\rangle$ との行列要素 V_{n_im} を考慮に入れる必要が生じる。このとき状態ベクトルは

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{s} c_{n_j}^{(0)}|n_j\rangle + \sum_m c_m^{(1)}|m\rangle \tag{8.48}$$

のように展開できる。これを (8.33) へ代入すると

$$\begin{aligned} &\sum_{j=1}^{s} c_{n_j}^{(0)}V|n_j\rangle + \sum_m c_m^{(1)}(E_{0m}+V)|m\rangle \\ =\ & E^{(1)}\sum_{j=1}^{s} c_{n_j}^{(0)}|n_j\rangle + (E_{0n}+E^{(1)})\sum_m c_m^{(1)}|m\rangle \end{aligned} \tag{8.49}$$

左から $\langle n_i|$ を掛け、$\langle n_i|m\rangle = 0$ に注意すると

$$\sum_{j=1}^{s} c_{n_j}^{(0)}V_{n_in_j} + \sum_m c_m^{(1)}V_{n_im} = E^{(1)}c_{n_i}^{(0)} \tag{8.50}$$

が得られる。次に、(8.49) の左から $\langle m|$ を掛け、$V_{mm'}$ を含む項を無視

$$c_m^{(1)}E_{0m} = (E_{-n}+E^{(1)})c_m^{(1)} \tag{8.51}$$

よって

$$c_m^{(1)} = \frac{\sum_j V_{mn_j}c_{n_j}^{(0)}}{E_{0n}-E_{0m}} \tag{8.52}$$

これを (8.50) に代入すると

$$\sum_j \left(V_{n_j n_j} + \sum_m \frac{V_{n_j m} V_{m n_j}}{E_{0n} - E_{0m}} - E^{(1)} \delta_{n_j n_j} \right) c_{n_j}^{(0)} = 0 \tag{8.53}$$

エネルギー固有値は左辺の括弧内の行列式が 0 であるという条件から得られる。

8.3　時間に依存する摂動論

次に、摂動項が時間に依存する場合を考えよう。

$$H = H_0 + V(t) \tag{8.54}$$

この時、時間に関する併進対称性が破れるので系のエネルギーは保存しない。このような状況下で、シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = (H_0 + V(t)) |\psi(t)\rangle \tag{8.55}$$

を解くことを考える。まず、非摂動ハミルトニアンのシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_0(t)\rangle = H_0 |\psi_0(t)\rangle \tag{8.56}$$

の定常解

$$|\psi_{0n}(t)\rangle = |n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{0n} t} \tag{8.57}$$

を考えよう。ここで

$$H_0 |n\rangle = E_{0n} |n\rangle \tag{8.58}$$

である。H_0 はエルミートなので $\{|\psi_{0k}(t)\rangle\}$ は各時刻 t で完全系をなす。この完全系を用いて (8.55) の解を次のように展開しよう。

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\psi_{0n}(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{0n} t} \tag{8.59}$$

これを (8.55) へ代入して (8.58) に注意すると

$$i\hbar \sum_n \frac{da_n}{dt} |n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{0n} t} = \sum_n V(t) a_n(t) |n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{0n} t} \tag{8.60}$$

左側から $\langle m|$ を掛けて $\{|n\rangle\}$ の規格直交性を用いると

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{da_m(t)}{dt} &= \sum_n \langle m|V(t)|n\rangle a_n(t) e^{\frac{i}{\hbar}(E_{0m}-E_{0n})t} \\
&= \sum_n \langle m|V(t)|n\rangle a_n(t) e^{i\omega_{mn}t}
\end{aligned}
\tag{8.61}
$$

ここで

$$
\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}(E_{0m} - E_{0n}) \tag{8.62}
$$

は非摂動準位 m と n の間の共鳴周波数と呼ばれる。

以下では、初期時刻 $t = 0$ で非摂動準位 n にあった系のその後の時間発展を求めよう。時刻 t での非摂動準位 m の確率振幅は仮定により

$$
a_m(t) = \delta_{mn} + a_{mn}^{(1)}(t), \quad a_{mn}^{(1)}(0) = 0 \tag{8.63}
$$

と書ける。ここで、$a_{mn}^{(1)}(t)$ の n は準位 n から出発したことを示している。これを (8.61) に代入して、$a_{mn}^{(1)} \sim O(V)$ であることに注意して、V の 2 次以上の項を無視すると

$$
i\hbar\frac{da_{mn}^{(1)}(t)}{dt} = \langle m|V(t)|n\rangle e^{i\omega_{mn}t} + O(V^2) \tag{8.64}
$$

両辺を時間について積分して $a_{mn}^{(1)}(0) = 0$ を使うと

$$
a_{mn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \langle m|V(t')|n\rangle e^{i\omega_{mn}t'} \tag{8.65}
$$

が得られる。ここで、摂動として周期的な外場

$$
V(t) = Ve^{-i\omega t} + V^\dagger e^{i\omega t} \tag{8.66}
$$

を考えよう。これを (8.65) へ代入すると

$$
\begin{aligned}
a_{mn}^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \left[\langle m|V|n\rangle e^{i(\omega_{mn}-\omega)t'} + \langle m|V^\dagger|n\rangle e^{i(\omega_{mn}+\omega)t'}\right] \\
&= -V_{mn}\frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} - 1}{\hbar(\omega_{mn}-\omega)} - V_{nm}^*\frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t} - 1}{\hbar(\omega_{mn}+\omega)}
\end{aligned}
\tag{8.67}
$$

このような展開ができるためには $\omega_{mn} \neq \pm\omega$ でなければならない。こうして得られた $a_{mn}^{(1)}$ を (8.59) に代入することで、$|n\rangle$ から出発した状態の時間発展を V の 1 次の精度で求めることができる。

$$
|\psi_n(t)\rangle = |n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_{0m}t} + \sum_m a_{mn}^{(1)}(t)|m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_{0n}t} \tag{8.68}
$$

この結果を用いて物理量 O の行列要素を V の 1 次まで求めよう。(8.68) を用いると

$$
\begin{aligned}
O_{mn}(t) &= \langle\psi_m(t)|O|\psi_n(t)\rangle \\
&= \left(\langle m|e^{\frac{i}{\hbar}E_{0m}t} + \sum_k a_{km}^{(1)*}\langle k|e^{\frac{i}{\hbar}E_{0k}t}\right) O \left(|n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_{0n}t} + \sum_k a_{kn}^{(1)} e^{-\frac{i}{\hbar}E_{0k}t}|k\rangle\right) \\
&= O_{mn}^{(0)} e^{i\omega_{mn}t} + O_{mn}^{(1)}(t) \qquad (8.69)
\end{aligned}
$$

が得られる。ここで、

$$
O_{mn}^{(0)} = \langle m|O|n\rangle \qquad (8.70)
$$

また

$$
O_{mn}^{(1)} = \sum_k \left(a_{km}^{(1)}(t)^* O_{kn}^{(0)} e^{i\omega_{kn}t} + a_{kn}^{(1)}(t) O_{mk}^{(0)} e^{i\omega_{mk}t}\right) \qquad (8.71)
$$

これに (8.67) を代入すると

$$
\begin{aligned}
O_{mn}^{(1)}(t) &= -\sum_k \left\{ \left[V_{km}^* \frac{e^{-i(\omega_{km}-\omega)t}-1}{\hbar(\omega_{km}-\omega)} + V_{mk}\frac{e^{-i(\omega_{km}+\omega)t}-1}{\hbar(\omega_{km}+\omega)} \right] O_{kn}^{(0)} e^{i\omega_{kn}t} \right. \\
&\quad \left. + \left[V_{kn}\frac{e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}-1}{\hbar(\omega_{kn}-\omega)} + V_{nk}^*\frac{e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}-1}{\hbar(\omega_{kn}+\omega)} \right] O_{mk}^{(0)} e^{i\omega_{mk}t} \right\} \\
&= -e^{i\omega_{mn}t}\sum_k \left\{ \left[O_{mk}^{(0)} V_{kn}\frac{1-e^{i(\omega-\omega_{kn})t}}{\hbar(\omega_{kn}-\omega)} + O_{kn}^{(0)} V_{mk}\frac{1-e^{i(\omega+\omega_{km})t}}{\hbar(\omega_{km}+\omega)} \right] e^{-i\omega t} \right. \\
&\quad \left. + \left[O_{mk}^{(0)} V_{nk}^*\frac{1-e^{i(\omega+\omega_{kn})t}}{\hbar(\omega_{kn}+\omega)} + O_{kn}^{(0)} V_{km}^*\frac{1-e^{i(\omega-\omega_{km})t}}{\hbar(\omega_{km}-\omega)} \right] e^{i\omega t} \right\} \qquad (8.72)
\end{aligned}
$$

が得られる。この公式も右辺の分母が小さくないときに成立する。

8.4　ラビ振動

周期的外場 (8.66) の振動数 ω が特定の 2 準位（m と n としよう）の共鳴エネルギー $E_{0m} - E_{0n}$ に非常に近い場合を考えよう。すなわち、

$$
E_{0m} - E_{0n} = \hbar(\omega + \epsilon),\ |\epsilon/\omega| \ll 1 \qquad (8.73)
$$

ϵ は離調と呼ばれる。この時、(8.67) の右辺第一項の分母は小さくなるので通常の摂動論を用いることはできず、(8.61) をより正確に解く必要が生

じる。条件 (8.73) が成立するときは m, n 以外のエネルギー準位を無視してよいので、(8.61) で m, n 以外の準位を無視すると

$$i\hbar\frac{da_m}{dt} \simeq \langle m|V(t)|n\rangle a_n e^{i\omega_{mn}t} \simeq V_{mn}e^{i\epsilon t}a_n \tag{8.74}$$
$$i\hbar\frac{da_n}{dt} \simeq \langle n|V(t)|m\rangle a_m e^{-i\omega_{mn}t} \simeq V_{mn}^* e^{-i\epsilon t}a_m \tag{8.75}$$

いずれも右辺の最後の項を導く際に、(8.66) を代入して速く振動する項を落とした。$v := V_{mn}/\hbar$ とおくと

$$\frac{da_m}{dt} = -ive^{i\epsilon t}a_n \tag{8.76}$$
$$\frac{da_n}{dt} = -iv^* e^{-i\omega_{mn}t}a_m \tag{8.77}$$

これらから

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} - i\epsilon\frac{d}{dt} + |v|^2\right)a_m = 0 \tag{8.78}$$
$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + i\epsilon\frac{d}{dt} + |v|^2\right)a_n = 0 \tag{8.79}$$

まず、(8.78) を解くために $a_m = e^{i\chi t}$ とおくと

$$\chi^2 - \epsilon\chi - |v|^2 = 0 \tag{8.80}$$

これから

$$\chi = \frac{\epsilon}{2} \pm \Omega, \quad \Omega := \frac{1}{2}\sqrt{\epsilon^2 + 4|v|^2} \tag{8.81}$$

$t = 0$ で $a_m(0) = 1,\ a_n(0) = 0$ なる初期条件を課すと

$$a_m(t) = e^{\frac{i}{2}\epsilon t}(\cos\Omega t + A\sin\Omega t) \tag{8.82}$$

これが (8.76) で $t = 0$ と置いた初期条件

$$\left.\frac{da_m}{dt}\right|_{t=0} = \frac{i}{2}\epsilon + \Omega A = 0 \tag{8.83}$$

を満足しなければならないので、$A = -i\epsilon/(2\Omega)$ が得られる。こうして

$$a_m(t) = e^{\frac{i}{2}\epsilon t}\left(\cos\Omega t - i\frac{\epsilon}{2\Omega}\sin\Omega t\right) \tag{8.84}$$

が得られる。これを (8.76) に代入すると

$$a_n(t) = -i\frac{v^*}{\Omega}e^{-\frac{i}{2}\epsilon t}\sin\Omega t \tag{8.85}$$

が得られる。これらを用いると、状態の時間発展は

$$|\psi(t)\rangle = a_m(t)|m\rangle + a_n(t)|n\rangle \tag{8.86}$$

で与えられることがわかる。特に、時刻 t に系が状態 n にある確率は

$$w_{nm}(t) = |\langle n|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{|v|^2}{2\Omega^2}(1-\cos 2\Omega t) \tag{8.87}$$

となり、振動数 2Ω で振動することがわかる。また、確率は振幅 $|v/\Omega|^2 \leq 1$ で振動する。これをラビ振動という。特に、厳密に共鳴する場合 $(\epsilon = 0)$ は

$$w_{nm}(t) = \frac{1}{2}(1-\cos|v|t) \tag{8.88}$$

のように振幅1で振動することがわかる。この場合、系は状態 m と n の間を周期 $T = 2\pi/|v|$ で振動する。

8.5 外部摂動をスイッチオンする場合

ハミルトニアン H_0 で記述される系が $t=-\infty$ で状態 $|i\rangle$ にあったとする。その後、摂動 $V(t)$ をスイッチオンしたときの状態遷移を考える。時刻 t における系の状態は、様々な状態 $|f\rangle$ の重ね合わせ状態にあると考えられるので

$$|\psi(t)\rangle = \sum_f a_{fi}(t)|f\rangle \tag{8.89}$$

今の問題設定では (8.65) で積分の下限が $-\infty$ であることに注意すると

$$a_{fi}(t) = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \langle f|V(t')|i\rangle e^{i\omega_{fi}t'} \tag{8.90}$$

摂動が有限の時間だけ働き、$t=\infty$ でゼロになる場合は、系が始状態とは別な状態に遷移する確率は

$$w_{fi} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} dt \langle f|V(t)|i\rangle e^{i\omega_{fi}t}\right|^2 \tag{8.91}$$

で与えられる。

次に、摂動がスイッチオンした後、ずっとオンのままの場合を考えよう。この時、時刻 t において初期状態とは異なった状態 $(f \neq i)$ に遷移する確率は (8.90) より

$$\begin{aligned} a_{fi}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \langle f|V(t')|i\rangle e^{i\omega_{fi}t'} \\ &= -\frac{\langle f|V(t')|i\rangle}{\hbar\omega_{fi}} e^{ii\omega_{fi}t'}\Big|_{-\infty}^{t} + \int_{-\infty}^{t} dt' \frac{\partial\langle f|V(t')|i\rangle}{\partial t'}\frac{e^{i\omega_{fi}t'}}{\hbar\omega_{fi}} \end{aligned} \tag{8.92}$$

ここで右辺の第一項は t が十分に大きくなると、仮定により $V(t')$ が一定になるので時間に依存しない摂動項による確率振幅の変化 (8.21) とみなすことができる。従って、$V(t')$ が時間変化することによる状態遷移に関心がある場合は無視することができる。こうして、時間変化する摂動項による遷移確率は

$$w_{fi} = \frac{1}{(\hbar\omega_{fi})^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\partial\langle f|V(t)|i\rangle}{\partial t} e^{i\omega_{fi}t}\right|^2 \tag{8.93}$$

で与えられる。特に、$V(t)$ の時間変化が ω_{fi} に比べて十分にゆっくりの場合（断熱極限）の場合は、$w_{fi} \to 0$ となる。すなわち、系は同じ状態（始状態）にいとどまる。

逆に、摂動 $V = H - H_0$ が突然 (すなわち、ω_{fi} に比べて十分に早く) 印可される場合を考える。非摂動の始状態を $|i\rangle$、H の固有状態を $|\psi_f\rangle$ とすると

$$H_0|i\rangle = E_i^{(0)}|i\rangle, \quad H|\psi_f\rangle = E_f|\psi_f\rangle \tag{8.94}$$

これから

$$(E_f - E_i^{(0)})\langle\psi_f|i\rangle = \langle\psi_f|H - H_0|i\rangle = \langle\psi_f|V|i\rangle \tag{8.95}$$

摂動が小さい時には E_f は $E_f^{(0)}$ に、$|\psi_f\rangle$ は $|f\rangle$ に置き換えることができるので

$$\langle\psi_f|i\rangle = \frac{1}{\hbar\omega_{fi}}\langle f|V|i\rangle \tag{8.96}$$

こうして、摂動が突然印可された場合の遷移確率は

$$w_{fi} = |\langle\psi_f|i\rangle|^2 = \frac{1}{(\hbar\omega)^2}|\langle f|V|i\rangle|^2 \tag{8.97}$$

で与えられる。これは (8.93) で摂動が一瞬だけ加わったと考えて因子 $e^{i\omega_{fi}t}$ を積分の外にくくりだして積分したものに等しい。

8.6 フェルミの黄金律

系のエネルギースペクトルが、$E < E_{\min}$ で離散的、$E > E_{\min}$ で連続的に分布している場合を考え、時刻 $t = 0$ で系のエネルギーが離散的なエネルギー固有状態の一つ E_{0i} にあったと仮定する。この系に周期的な摂動

$$V(t) = Ve^{-i\omega t} + V^\dagger e^{i\omega t}, \quad \hbar\omega > E_{\min} - E_{0i} \tag{8.98}$$

を印可し、系が連続スペクトル中のエネルギーが E_{0f} の終状態に遷移する確率振幅 a_{fi} を考えよう。$\hbar\omega \simeq E_{0f} - E_{0i}$ の時、(8.67) の右辺の第一項に比べて第二項は無視できるので

$$a_{fi} = -V_{fi} \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{\hbar(\omega_{fi} - \omega)} \tag{8.99}$$

これから遷移の確率は

$$|a_{fi}|^2 = 4|V_{fi}|^2 \frac{\sin^2 \frac{(\omega_{fi}-\omega)t}{2}}{\hbar^2(\omega_{fi} - \omega)^2} \tag{8.100}$$

ここで公式

$$\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{t\alpha^2} = \pi\delta(\alpha) \tag{8.101}$$

に注意すると[2]

$$\begin{aligned} w_{fi} &= \lim_{t\to\infty} \frac{|a_{fi}|^2}{t} \\ &= 2\pi|V_{fi}|^2\delta(\omega_{fi} - \omega) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2\delta(E_{0f} - E_{0i} - \hbar\omega) \end{aligned} \tag{8.102}$$

これは単位時間当たりの遷移確率レートであると解釈できる。公式 (8.102) はフェルミの黄金律と呼ばれる。特に、外部摂動が時間に依存しない場合は $\omega = 0$ なので、始状態と終状態は同じエネルギー $E_{0i} = E_{0f}$ であることがわかる。

8.7　時間とエネルギーの不確定性関係

量子化の規則によるとエネルギーは時間の微分 ($\hat{E} = i\hbar\partial/\partial t$) と書けるので、交換関係 $[\hat{E}, t] = i\hbar$ が成立する。これから不等式

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2 \tag{8.103}$$

が導かれるように（一見）思われる。実は、不等式 (8.103) は成立するのだが、その解釈は位置と運動量の不確定性関係とは全く異なる。その理由

[2] これは次のようにして示すことができる。まず、$\alpha \neq 0$ の時は、左辺の分子は最大 1 なので左辺は $t \to \infty$ でゼロとなる。一方、$t > 0$ の時は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{t\alpha^2} d\alpha = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi$$

が得られる。よって被積分関数は $t \to \infty$ で $\pi\delta(\alpha)$ となる。

は、古典力学と同様に量子力学においても時間は状態の変化を記述するためのパラメターに過ぎず、任意の精度で指定できることが前提とされているからである。実際、波動関数 $\Psi(x,t)$ は各時刻ごとに与えられるので時刻の揺らぎ $\Delta t = \sqrt{\langle t^2\rangle - \langle t\rangle^2}$ はゼロである。ケナード・ロバートソンの不確定性関係 $\Delta x\Delta p \geq \hbar/2$ が位置と運動量が同時に確定した値を取りえないことを主張しているのに対して、(8.103) は、系のエネルギーは各時刻において正確に測定できるが、時間が Δt だけ離れた 2 回の測定によってそれぞれ正確に測定されたエネルギー E と E' の差が $\hbar/(2\Delta t)$ 程度違いうることを意味している。従って、エネルギーの保存は Δt だけ時刻が異なる 2 回の測定によって $\hbar/(2\Delta t)$ 程度の精度でしか確かめることができない。これがエネルギーと時間の不確定性関係の物理的意味である。

(8.103) を導くために系とそのエネルギーを測定する測定器を考え、それらを記述するハミルトニアンをそれぞれ $\hat{H}^{\text{系}}$、$\hat{H}^{\text{測定器}}$ と書こう。時刻 $t=0$ 以前では両者は相互作用しておらず、時刻 $t=0$ に系のエネルギーを測定するために相互作用 $\hat{V}$ をスイッチオンし、時刻 $t=t_0(>0)$ において相互作用を終えるとしよう。この間、全系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}^{\text{系}} + \hat{H}^{\text{測定器}} + \hat{V} \equiv \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{8.104}$$

で与えられる。全系の状態はシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = (\hat{H}_0 + \hat{V})\Psi(x,t) \tag{8.105}$$

に従って時間発展する。ここで相互作用表示に移って

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\Psi_{\mathrm{I}}(x,t) \tag{8.106}$$

とおくと (8.105) は次のように変換される。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\mathrm{I}}(x,t) = \hat{V}_{\mathrm{I}}(t)\Psi_{\mathrm{I}}(x,t), \quad \hat{V}_{\mathrm{I}}(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \tag{8.107}$$

系に対する測定の反作用をできるだけ抑えるために、相互作用が小さいと仮定して (8.107) を最低次の近似で解くと

$$\Psi_{\mathrm{I}}(x,t) = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^{t_0} V_{\mathrm{I}}(t)dt\right)\Psi_{\mathrm{I}}(x,0) \tag{8.108}$$

ここで、$\Psi_{\mathrm{I}}(x,0) = \Psi(x,0) \equiv \Psi_{\mathrm{i}}(x)$ に注意すると、全系の波動関数がエネルギーが 初期状態 Ψ_{i} から終状態 Ψ_{f} へと遷移する確率振幅 a_{fi} は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} a_{\mathrm{fi}} &= \int \Psi_{\mathrm{f}}^*(x)\Psi_{\mathrm{I}}(x,t)dx \\ &\simeq \int \Psi_{\mathrm{f}}^*(x)\Psi_{\mathrm{i}}(x)dx - \frac{i}{\hbar}\int dx\int_0^{t_0} dt\Psi_{\mathrm{f}}^*\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)\Psi_{\mathrm{i}} \end{aligned} \tag{8.109}$$

ここで、右辺の第一項は相互作用（すなわち、測定）が関与しない項の寄与であるので無視できる。始状態と終状態がそれぞれエネルギーが E_{i}、E_{f} の $\hat{H}_0$ の固有状態であるとすると

$$\begin{aligned}\int dx \Psi_{\mathrm{f}}^* \hat{V}_{\mathrm{I}}(t) \Psi_{\mathrm{i}} &= \int dx \Psi_{\mathrm{f}}^* e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \Psi_{\mathrm{i}} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\mathrm{f}}-E_{\mathrm{i}})t} \int dx \Psi_{\mathrm{f}}^* \hat{V} \Psi_{\mathrm{i}} \equiv e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\mathrm{f}}-E_{\mathrm{i}})t} \langle \mathrm{f}|\hat{V}|\mathrm{i}\rangle\end{aligned}$$

となるので

$$\begin{aligned}|a_{\mathrm{fi}}|^2 &\simeq \frac{1}{\hbar^2}\Big|\langle \mathrm{f}|\hat{V}|\mathrm{i}\rangle \int_0^{t_0} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\mathrm{f}}-E_{\mathrm{i}})t}\Big|^2 \\ &= 4|\langle \mathrm{f}|\hat{V}|\mathrm{i}\rangle|^2 \frac{\sin^2 \frac{(E_{\mathrm{f}}-E_{\mathrm{i}})t_0}{2\hbar}}{(E_{\mathrm{f}}-E_{\mathrm{i}})^2} \qquad (8.110)\end{aligned}$$

この結果は、始状態と終状態のエネルギーの差 $E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}}$ が (8.110) に従って分布していることを意味しており、その差の最も確からしい値は相互作用が働く時間を t_0 とすると $|E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}}| \sim \hbar/t_0$ で与えられる。測定器の $E_{\mathrm{f(i)}}$ は始（終）状態における系と測定器を合わせた全系のエネルギーであるから、測定器のエネルギーが正確に知れても系のエネルギーは $\hbar/t_0$ 程度の精度でしか知ることはできない。この結果は、系と測定器の間の相互作用の強さに依らず成立することに注意しよう。特に、相互作用時間が無限大の極限では公式

$$\delta(\alpha) = \lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t} \qquad (8.111)$$

を使うと系が状態 i から f へと単位時間あたりに遷移する確率 w_{fi}

$$w_{\mathrm{fi}} \equiv \lim_{t\to\infty} \frac{|a_{\mathrm{fi}}|^2}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathrm{f}|\hat{V}|\mathrm{i}\rangle|^2 \delta(E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}}) \qquad (8.112)$$

が得られる。(8.112) は前節で述べたフェルミの黄金律である。

第9章　準古典近似

9.1　準古典近似の波動関数

シュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\psi = E\psi \tag{9.1}$$

に

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}S} \tag{9.2}$$

を代入すると

$$\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\Delta S = E - U \tag{9.3}$$

が得られる。ここまでは、シュレーディンガー方程式を等価変形したに過ぎない。(9.3) を解けばシュレーシンガー方程式 (9.1) の解が得られる。

準古典近似は作用 S をプランク定数を 2π で割った $\hbar$ の冪で展開する。

$$S = S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \cdots \tag{9.4}$$

これを (9.3) に代入して、$S_0, S_1, \cdots$ と逐次解いていく近似である。Wentzel, Kramers, Brillouin の頭文字をとって WKB 近似とも呼ばれる。

9.1.1　第 0 次近似

まず、1 次元の場合を考える。この時、(9.3) は

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{dS}{dx}\right)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2S}{dx^2} = E - U(x) \tag{9.5}$$

となる。第 0 次近似として、$S = S_0$ とおき、$\hbar$ を含む項を無視すると

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2 = E - U(x) \tag{9.6}$$

これは直ちに積分でき

$$\begin{aligned} S_0 &= \pm\int\sqrt{2m([E-U(x)]}dx \\ &= \pm\int p(x)dx, \quad p(x)=\sqrt{2m[E-U(x)]} \end{aligned} \tag{9.7}$$

が得られる。

上記の近似では (9.5) の左辺の第一項に比べて第二項を無視したが、この近似が正当化される条件は

$$\left|\hbar\frac{S''}{S'^2}\right| = \left|\hbar\frac{d}{dx}\frac{1}{S'}\right| = \left|\hbar\frac{d}{dx}\frac{1}{p(x)}\right| \ll 1 \tag{9.8}$$

ここで、粒子のドブロイ波長

$$\lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p(x)} \tag{9.9}$$

を導入すると、(9.8) は

$$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1 \tag{9.10}$$

と書ける。こうして、準古典近似が正当化される条件はドブロイ波長の変化が緩やか（波長程度の距離ではほとんど変化しないこと) であることがわかる。条件 (9.8) は次のように解釈することもできる。まず、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}\frac{1}{p} &= -\frac{1}{p^2}\frac{dp}{dx} = -\frac{1}{p^2}\frac{d}{dx}\sqrt{2m(E-U)} \\ &= \frac{m}{p^3}\frac{dU}{dx} = -\frac{mF}{p^3} \end{aligned} \tag{9.11}$$

ここで、$F=-dU/dx$ は粒子にかかる力である。これから条件 (9.8) は

$$\frac{m\hbar|F|}{p^3} \ll 1 \tag{9.12}$$

と書ける。これから、準古典近似は粒子の運動量が小さくなりすぎると成立しないことがわかる。特に、$p(x)=0$、すなわち、$E=U(x)$ となる転回点でドブロイ波長が発散し、準古典近似は破綻する[1]。

[1] この問題を回避する方法としては、例えば次の文献を参照。T. Houguchi, et al., Phys. Rev. Lett. **88** 170404 (2002)

9.1.2 第 1 次近似

次の近似として、展開 (9.4) において、$\hbar$ の 1 次までとる。これを (9.5) に代入して (9.6) を用いると、

$$2S_0'S_1' + S_0'' = 0 \to S_1' = -\frac{1}{2}\frac{S_0''}{S_0'} = -\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\ln S_0' \tag{9.13}$$

これから

$$S_1 = -\frac{1}{2}\ln p \tag{9.14}$$

であることがわかる。これと (9.7) より 1 近似における準古典の波動関数は次のように書けることがわかる。

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left(c_1 e^{\frac{i}{\hbar}\int p dx} + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar}\int p dx}\right) \tag{9.15}$$

右辺の分母の因子は、粒子が区間 $(x, x+dx)$ に見いだされる確率が、古典的な粒子がその領域を通過する時間 $mdx/p(x)$ に比例すると解釈することができる。また、転回点においてはこの因子はゼロになり、波動関数は発散してしまうので準古典近似は破綻する。

9.2 準古典的波動関数の接続

$x = a$ を転回点とし、ポテンシャルが $x < a$ で $U(x) < E$、$x > a$ で $U(x) > E$ であるとする。この時、左側から入射した波は古典的には侵入できない $x > a$ なる領域で減衰するものと想像できる。実際、$U(x) > E$ の場合は、(9.7) で定義された $p(x)$ は純虚数になるために (9.15) の一方は指数関数的に増大し、他方は減衰する。このうち、$x > a$ の領域に侵入するにつれて指数関数的に減衰する解は

$$\psi(x) = \frac{c}{2\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p(y)dy\right|\right) \tag{9.16}$$

で与えられる。他方、$x < a$ では、右向きの入射波と転回点で反射された左向きの反射波が存在するはずである。

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(y)dy\right) + \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(y)dy\right) \tag{9.17}$$

(9.16) と (9.17) の係数の関係を決めるためには、両者を $x = a$ 付近で滑らかに接続する必要があるが、まさにその領域で WKB 近似は破綻するの

で注意深い取り扱いが必要である。転回点では $E = U(a)$ なので、その近傍 $L > |x-a|$(L はポテンシャルが線形近似できるスケール) では

$$E - U(x) = F_0(x-a) + O((x-a)^2), \quad F_0 := -\left.\frac{dU}{dx}\right|_{x=a} < 0 \tag{9.18}$$

と展開できる。ポテンシャルが (9.18) のように線形な場合は、シュレーディンガー方程式は厳密に解ける（解はエアリー関数で与えられる）ので、それを使って転回点の両側の波動関数を接続することができる。しかし、ここでは準古典近似の範囲内で接続する方法について議論する。結果はエアリー関数を使った結果と一致する。

まず、準古典近似が使える条件 (9.12) は、ポテンシャルが (9.18) と展開できる領域では、$p = \sqrt{2m|F_0||x-a|}$ を代入することによって

$$|x-a|^{\frac{3}{2}} \gg \frac{\hbar}{m|F_0|} \tag{9.19}$$

と書けることに注意しよう。これからポテンシャルが線形近似できる長さスケール L が条件

$$L^{\frac{3}{2}} \gg \frac{\hbar}{m|F_0|} \tag{9.20}$$

を満足する場合は、領域

$$L \gg |x-a| \gg \left(\frac{\hbar}{m|F_0|}\right)^{\frac{2}{3}} \tag{9.21}$$

では準古典近似とポテンシャルの線形近似が両立することがわかる。この時、準古典近似の波動関数に現れる運動量の積分は

$$\int_a^x p(y)dy = \frac{2}{3}\sqrt{2m|F_0|}(x-a)^{\frac{3}{2}} \tag{9.22}$$

で与えられる。これから $x > a$ における準古典近似の波動関数 (9.16) は

$$\psi(x) = \frac{c}{2[2m|F_0|(x-a)]^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{2}{3\hbar}\sqrt{2m|F_0|}(x-a)^{\frac{3}{2}}\right) \tag{9.23}$$

となる。ここで、x を複素変数とみなして転回点の右側から条件 (9.21) を満足しつつ転回点の周りを複素平面に沿って迂回することを考えよう。

$$x - a = re^{i\phi} \tag{9.24}$$

これが準古典近似と線形近似が両立する条件 (9.21) を満足するように半径 r を選ぶのである。まず最初に、ϕ を 0 から π まで増加させると、$\phi = \pi$

において (9.23) は

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{ce^{-i\frac{\pi}{4}}}{2[2m|F_0|(a-x)]^{\frac{1}{4}}}\exp\left(i\frac{2}{3\hbar}\sqrt{2m|F_0|}(a-x)^{\frac{3}{2}}\right)\\ &= \frac{ce^{-i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{p(x)}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(y)dy\right)\quad x<a \qquad (9.25)\end{aligned}$$

となる。これを (9.17) と比較すると

$$c_2 = \frac{1}{2}e^{-i\frac{\pi}{4}} \tag{9.26}$$

が得られる。同様にして、(9.24) で ϕ を 0 から $-\pi$ まで減少させると

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{ce^{i\frac{\pi}{4}}}{2[2m|F_0|(a-x)]^{\frac{1}{4}}}\exp\left(-i\frac{2}{3\hbar}\sqrt{2m|F_0|}(a-x)^{\frac{3}{2}}\right)\\ &= \frac{ce^{i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{p(x)}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(y)dy\right)\quad x<a \qquad (9.27)\end{aligned}$$

となる。こうして

$$c_2 = \frac{1}{2}e^{i\frac{\pi}{4}} \tag{9.28}$$

が得られる。(9.26) と (9.28) を (9.17) へ代入すると

$$\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(y)dy + \frac{\pi}{4}\right) \tag{9.29}$$

が得られる。こうして、$x>a$ で減衰する準古典波動関数 (9.16) から転回点の反対側 $x<a$ の波動関数 (9.29) が得られることが分かった。以上の導出から一般に、転回点の古典的には侵入できない領域 $E<U(x)$ で減衰する波動関数から反対側 $E>U(x)$ の波動関数は次の規則によって与えられることがわかる。

$$\frac{c}{2\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p(y)dy\right|\right) \to \frac{c}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p(y)dy\right| - \frac{\pi}{4}\right) \tag{9.30}$$

9.3 ボーア・ゾンマーフェルトの量子化規則

本節では準古典的な波動関数を使ってエネルギー準位の量子化がどのように導かれるかを調べよう。具体的には、2 つの転回点 $x=a,b$ の両側が古典的に侵入不可能な領域、$a<x<b$ が古典的に運動できる領域としよ

う。前節で導いた対応規則 (9.30) によると、$x < a$ で減衰する波動関数は $x > a$ で

$$\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(y)dy - \frac{\pi}{4}\right) \tag{9.31}$$

で与えられる。同様に、$x > b$ で減衰する波動関数は $x < b$ で

$$\psi(x) = \frac{c'}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p(y)dy - \frac{\pi}{4}\right) \tag{9.32}$$

となる。これら 2 つの波動関数は $a < x < b$ で一致しなければならない。そのためには n を整数として

$$\frac{1}{\hbar}\int_x^b p(y)dy - \frac{\pi}{4} = -\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(y)dy - \frac{\pi}{4}\right) + n\pi,\ c = (-1)^n c' \tag{9.33}$$

でなければならないことがわかる。これから

$$\frac{1}{\pi\hbar}\int_a^b p dx = n + \frac{1}{2} \tag{9.34}$$

古典的に許される軌道を一周する積分を $\oint := 2\int_a^b$ と書くと

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\oint p dx = n + \frac{1}{2} \quad (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{9.35}$$

が得られる。これは準古典近似で定常状態が満足すべき条件である、ボーア・ゾンマーフェルトの量子化規則と呼ばれる。波動関数の形 (9.31) から、n が波動関数のゼロ点の数を与えていることがわかる。

(9.35) の左辺に現れる量

$$I := \oint p dx \tag{9.36}$$

は解析力学において断熱不変量と呼ばれる量であり、この量は外部パラメーターをゆっくりと動かしても不変に保たれる。(9.35) はそのような量が量子力学における定常状態に対応しており、それがプランク定数を単位に量子化されると解釈できる。断熱不変量を用いると、ボーア・ゾンマーフェルトの量子化条件は

$$I = h\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{9.37}$$

と書ける。I は位相空間での軌道に囲まれた面積である。ボーア・ゾンマーフェルト量子化条件は位相空間がプランク定数 h を単位として量子化され

ていると解釈することもできる。この事実は量子統計力学において重要である。

量子数 n が大きい領域で波動関数 (9.31) の規格化定数 c を決定しよう。古典的に侵入不可能な領域では波動関数は指数関数的に減衰するのでその部分のウエイトを無視すると

$$\begin{aligned}\int_a^b |\psi|^2 dx &= |c|^2 \int_a^b \frac{1}{p(x)} \cos^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p dx - \frac{\pi}{4}\right) dx \\ &= |c|^2 \int_a^b \frac{1}{2p(x)} \left[1 + \cos 2\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p dx - \frac{\pi}{4}\right)\right] dx\end{aligned}$$

量子数 n が大きい領域では、被積分関数のコサイン項は激しく振動するのでその積分はゼロとみなしてよい（リーマン・ルベックの補題)。残りの積分は、古典的に許された領域を粒子が一周する時間を T、それを用いて振動数 $\omega := 2\pi/T$ を定義すると

$$\int_a^b |\psi|^2 dx = \frac{|c|^2}{2}\int_a^b \frac{1}{p(x)} dx = \frac{|c|^2}{4m}T = \frac{\pi|c|^2}{2m\omega} = 1$$

これから $|c| = \sqrt{2m\omega/\pi}$ が得られるので、規格化された準古典的波動関数は

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2\omega}{\pi v}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(y) dy - \frac{\pi}{4}\right) \tag{9.38}$$

で与えられる。

9.4 トンネル効果

前節で学んだ波動関数の接続はトンネル障壁を通過する問題においてその威力を発揮する。転回点 $x = a$ の左側から入射したエネルギーが E の粒子が $a < x < b$ に存在するポテンシャル障壁（すなわち、$U(x) > E$）をトンネルして転回点 $x = b$ の右側に透過する状況を考えよう。仮定により領域 $x > b$ での波動関数は透過波のみであるから、それを

$$\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_b^x p(y) dy + i\frac{\pi}{4}\right) \tag{9.39}$$

とおこう。$x < b$ での波動関数を求めるために、9.2 節と同様に転回点の付近で

$$E - U(x) \simeq F_0(x - b), \quad F_0 > 0 \tag{9.40}$$

と展開すると (9.40) は

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{c}{[2mF_0(x-b)]^{\frac{1}{4}}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mF_0}\int_b^x (y-b)^{\frac{1}{2}}dy + \frac{i}{4}\pi\right) \\ &= \frac{c}{[2mF_0(x-b)]^{\frac{1}{4}}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mF_0}\frac{2}{3}(x-b)^{\frac{3}{2}} + \frac{i}{4}\pi\right) \qquad (9.41)\end{aligned}$$

となる。ここで

$$x - b = re^{i\phi} \qquad (9.42)$$

とおいて ϕ を 0 から π まで増加させる。$x - b = (b-x)e^{i\pi}$ であることに注意して、また、(9.41) の積分が $(x-b)^{\frac{3}{2}} = (b-x)^{\frac{3}{2}}e^{i\frac{3}{2}\pi}$ であることに注意すると

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{c}{[2mF_0(b-x)]^{\frac{1}{4}}e^{i\frac{\pi}{4}}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}i^3\sqrt{2mF_0}\frac{2}{3}(b-x)^{\frac{3}{2}} + \frac{i}{4}\pi\right) \\ &= \frac{c}{[2mF_0(b-x)]^{\frac{1}{4}}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mF_0}\int_b^x (b-y)^{\frac{1}{2}}dy\right) \\ &= \frac{c}{[2mF_0(b-x)]^{\frac{1}{4}}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mF_0}\int_x^b (b-y)^{\frac{1}{2}}dy\right) \\ &= \frac{c}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_b^x p(y)dy\right|\right) \qquad (9.43)\end{aligned}$$

こうして $x > b$ から $x < b$ への次の接続公式が得られた。

$$\frac{c}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_b^x p(y)dy + \frac{i}{4}\pi\right) \to \frac{c}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_b^x p(y)dy\right|\right) \qquad (9.44)$$

以上の結果を用いて、$x < a$ から入射した波が $x > b$ へ透過する確率振幅を計算しよう。$x > b$ における透過波を

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{D}{v}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_b^x p(y)dy + \frac{i}{4}\pi\right) \qquad (9.45)$$

とおくと、トンネル障壁の領域 $a < x < b$ における波動関数は (9.44) から

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \sqrt{\frac{D}{|v|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_x^b p(y)dy\right|\right) \\ &= \sqrt{\frac{D}{|v|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^b p(y)dy\right| - \frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p(y)dy\right|\right) \qquad (9.46)\end{aligned}$$

これに (9.30) を適用すると、$x < a$ での波動関数は

$$\psi(x) = 2\sqrt{\frac{D}{|v|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^b p(y)dy\right|\right)\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p(y)dy - \frac{\pi}{4}\right) \qquad (9.47)$$

ここで

$$D = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p(y)|dy\right) \tag{9.48}$$

とおくと $x < a$ での波動関数は次のように書ける。

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{2}{\sqrt{v}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(y)dy + \frac{\pi}{4}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{v}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(y)dy + \frac{i}{4}\pi\right) \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{v}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(y)dy - \frac{i}{4}\pi\right) \end{aligned} \tag{9.49}$$

$v(x) = \sqrt{2(E - U(x))/m}$ なので、$x < a$ の時は絶対値を取ってよいことに注意しよう。右辺の第一項は入射波、第二項は反射波である。入射波の流束は単位時間当たり一粒子であるので、(9.48) の D が透過確率を与えている。

第10章　量子力学における実在論とベルの不等式

以上学んできたことを使って、量子力学の本質的な側面に関する考察をしよう。ここではその最適な題材の一つとして、アインシュタイン・ポドルスキー・ローゼンのパラドックスおよびベルの不等式について考察する。

10.1　アインシュタイン・ポドルスキー・ローゼンのパラドックス

アインシュタイン、ポドルスキー、ローゼン（以下 EPR と省略) は 1935 年に「物理的実在に関する量子力学的記述は完全か？」(Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?) という論文を書いた[1]。

この論文の中で、EPR はまず物理学の理論の成功を判断する上で次の 2 つの基準を導入した。

- 正しさ (correctness) – これは理論の予言と実験の一致度で測られる。
- 完全さ (completeness)　– あらゆる「物理的実在の要素」の対応物が理論の中に含まれていること。

EPR がこの論文で議論したのは 2 番目の点である。これを議論するために EPR は「物理的実在の要素」(element of physical reality) という概念を導入した。

> If, without in any way disturbing a system, we can predict with certainty (i.e., with probability equal to unity) the value of a physical quantity, then there exists an element of physical reality corresponding to this physical quantity.
>
> 系を乱すことなく物理量の値を確実に予言することができるとき、測定量に対応する物理的実在が存在する。

[1] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, Phys. Rev. **47**, 777 (1935)

量子力学は状態を記述する波動関数 ψ と観測される物理量を記述する演算子（オブザーバブル）$\hat{A}$ から構成される。いま、ψ が $\hat{A}$ の固有値 a に対応する固有関数であるとすると

$$\hat{A}\psi = a\Psi \tag{10.1}$$

が成立する。この時、波動関数 ψ で記述される状態は物理量 $\hat{A}$ に対応する物理的実在の要素をもつといえる。具体例として波動関数

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x} \tag{10.2}$$

と運動量演算子

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \tag{10.3}$$

を考えよう。この時、

$$\hat{p}\psi(x) = p_0\psi(x) \tag{10.4}$$

が成立する。従って、波動関数 (10.3) で記述される状態 ψ において運動量は物理的実在の要素である。しかし、同じことは位置演算子については言えない。実際、

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) \neq x_0\psi(x) \tag{10.5}$$

ここで、$x\psi(x)$ の x は変数なので、それを特定の固有値 x_0 に置き換えることはできないことに注意しよう。こうして、(10.2) で記述される状態に対しては粒子の位置は物理的実在の要素ではない。実際、$|\psi(x)|^2$ は一定値をとるので粒子はどの位置にいるのかは全く不確定である。この状態に対して、位置を測定すると、状態が乱されて状態は変化してしまう。従って、運動量が知られている状態 (10.2) に対しては、位置は物理的実在とは言えない。これは数学的には位置演算子と運動量演算子が互いに交換しないことによる。同様に、一般に、2 つの物理量に対応する演算子が互いに交換しない場合は、一方を正確に知ると他方はわからなくなる。

以上のことから、EPR は次の 1 または 2 が成立すると結論づけた。すなわち、

1. 波動関数で記述される実在の量子力学的記述は完全ではない。
2. 交換しない演算子に対応する 2 つの物理量は同時には実在できない。

量子力学では、波動関数は考えている系に関する完全な情報を与えると仮定されていることを思い出そう。固有関数系が完全系をなすのはその帰結

である。EPA は交換しない 2 つの物理量（具体的には位置と運動量）が同時に物理的実在を持つ例を提示することによって 2 が正しくなく、従って、 1 が正しいと主張した。

EPR が考えた状況は次のとおりである。2 つの系 I と II を考え、$t < 0$ における系の状態は知られているものとする。I と II は時間 $t = 0$ から $t = T$ の間だけシュレーディンガー方程式に従って相互作用し、ある時刻 $t(> T)$ における波動関数 $\Psi(x_1, x_2)$ が得られたものとする。以下ではこの波動関数について考える。系 I のオブザーバブル $\hat{A}$ の固有値を a_n $(n = 1, 2, \cdots)$、対応する固有関数を $u_n(x_1)$ とする。固有関数形 $\{u_n\}$ は規格直交完全系をなしているので、それを用いて Ψ を次のように展開することができる。

$$\Psi(x_1, x_2) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x_2) u_n(x_1) \tag{10.6}$$

ここで、ψ_n は展開係数である。ここで、系 I のオブザーバブル $\hat{A}$ を測定して測定値 a_k が得られたとする。この時、測定直後の系 I の状態は $u_k(x_1)$、系 II の状態は $\psi_k(x_2)$ であることがわかる。測定行為によって量子状態が (10.6) から $\psi_k(x_2)u_k(x_1)$ へ不連続に変化する。これが波束の収縮である。波束の収縮による状態変化はユニタリではない（すなわち非ユニタリである）ことに注意しよう。

次に、$\hat{A}$ の代わりに別なオブザーバブル $\hat{B}$ を測定することを考える。$\hat{B}$ の固有値を b_n $(n = 1, 2, \cdots)$、それに対応する固有関数を $v_n(x_1)$ とすると $\Psi(x_1, x_2)$ は次のように展開できる。

$$\Psi(x_1, x_2) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x_2) v_n(x_1) \tag{10.7}$$

この状態に対して $\hat{B}$ を測定して測定値 b_r を得たとすると、測定直後の状態は $\varphi_r(x_2)v_r(x_1)$ へと不連続に変化する。

このように、系 I に 2 種類の測定を行うことに対応して系 II の状態も対応した 2 つの状態をとる。しかし、仮定により測定時には I と II は物理的な相互作用をしていない。それゆえ、

> No real change can take place in the second system in consequence of anytihing that may be done to the first system. Thus, it is possible to assign two different wave functions (in our example ψ_k and φ_r) to the same reality (the second system after the interaction with the first.

であると EPR は主張した。この主張は一見もっともらしいが、実際に正しいかどうかは実験で確かめる必要があることに注意しよう。

話をより具体的にするために EPR は $\hat{A}$ として運動量 $\hat{p}$、$\hat{B}$ として位置 $\hat{x}$ を考え、Ψ として次のような波動関数を考えた。

$$\Psi(x_1, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(x_1 - x_2 + x_0)p} dp = 2\pi\hbar\delta(x_1 - x_2 + x_0) \tag{10.8}$$

ここで、x_0 は定数である。この状態に対して系 I の運動量を測り、測定値 p が得られたとすると測定直後の系 I の状態は

$$u_p(x_1) = e^{\frac{i}{\hbar}px_1} \tag{10.9}$$

であり、系 II の状態は

$$\psi_p(x_2) = e^{-\frac{i}{\hbar}(x_2 - x_0)p} \tag{10.10}$$

である。この波動関数は、系 II の運動量演算子

$$\hat{P} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_2} \tag{10.11}$$

の固有値が $-p$ の固有状態であることがわかる。他方、もし、系 I に対して位置を測定して固有値 x が得られたとすると、測定直後の系 II の状態は

$$\varphi_x(x_2) = 2\pi\hbar\delta(x - x_2 + x_0) \tag{10.12}$$

である。これは (10.8) が

$$\Psi(x_1, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} 2\pi\hbar\delta(x - x_2 + x_0)\delta(x_1 - x)dx \tag{10.13}$$

と書けることからわかる。(10.12) は系 II の位置演算子 $\hat{Q}$ の固有値が $x+x_0$ の固有関数であることを示している。このように測定直後の系 II の状態は、互いに交換しない位置演算子と運動量演算子の固有関数となっている。

> Thus, by measuring either A or B we are in a position to predict with certainty, and without in any way disturbing the second system, either the value of the quantity P (that is p_k) or the value of the quantity Q (that is q_r). In accordance with our criterion of reality, in the first case we must consider the quantit P as being an element of reality, in the second case the quantity Q is an element of reality. But, as we have seen, both wave functions belong to the same reality.

つまり、系 II の交換しない 2 つのオブザーバブルが同時に決まった値を持ってしまう。このことから、EPR は波動関数による物理的実在の記述

は完全ではないと結論づけた。これがEPRのパラドックスと呼ばれているものの内容である。

しかし、そもそも系Iの位置と運動量を同時に測定できないので、系IIの位置と運動量が同時に決まっているかどうかをいうことができないという反論もあり得る。EPRもそのことは意識していて、そのことに対して次のように反論している。

> This makes the reality of P and Q depend upon the process of measurement carried out on the first system, which does not disturb the second system in any way (もはや両者は相互作用をしていないので). No reasonable definition of reality could be expected to permit this.

これに対して、ボーアは全く同じタイトルの論文でEPRの仕事の批判をした[2]。ボーアはEPRと同様に粒子1の測定によって粒子2に力学的な擾乱が加わらないことは認めつつも、「系の未来の振る舞いに関して、どのようなタイプの予言が可能かを決める条件への (測定の）影響についての本質的な疑問が存在する」と指摘した。

> But even at this stage there is essentially the question of an influence on the very conditions which define the possible types of predictions regarding the future behavior of the system. Since these conditions constitute an inherent element of the description of any phenomenon to which the term "physical reality" can be properly attached, we see that the argumentation of the mentioned autors does not justify their conclusion that quantum-mechanical description is essentially incomplete.

これがボーアのいう「相補性の原理」である。これは、あるタイプの予言と別なタイプの予言は互いに両立しないという主張である。EPRの状況に当てはめると、粒子1に対してどんな測定を行うかという選択が、粒子2に対してなされる測定の結果に関する予言の可能性を決定するというものである。従って、粒子1の位置を測定するという状況と運動量を測定するという状況は「相補的」であり互いに両立しない、というのがボーアの主張である。

以上がEPRのパラドックスに関するEPRとBohrの論争の骨子である。実は、後にアインシュタインが指摘したように、EPRパラドックスの本質は、次の2つの可能性の二者択一の問題に帰着する。

[2]N. Bohr, Phys. Rev. **48**, 696 (1935)

- 波動関数を用いた記述は完全である。
- 空間的に離れた現実の状態は互いに独立である。

このうちどちらが正しいかは論理だけで結論することはできない。アインシュタインは後者を支持した。これを「局所実在論」という。どちらが正しいかを実験的に検証可能な形にしたのが次に述べるベルの不等式である。

10.2　ベルの不等式

空間的に離れた原子 A と B を考えよう。同時刻では、A と B は相対論的な意味でスペースライクな関係にあるので[3]、一方の原子になされる測定行為は他方の原子に影響を与えないと (一見すると) 思われる。これを、**アインシュタインの局所原理** という。しかしながら、A と B がもつれた状態にあると、両者がたとえ空間的にどんなに離れていても一方に対する測定は他方に影響を与える。量子力学が内包するこのような「遠隔作用」を避けるためにいわゆる**隠れた変数理論** が考え出された。理論に現れない隠れた変数が量子力学の確率的な側面を支配しているという理論である。ところが、ベルはそのような局所理論が満足しなければならない不等式—**ベルの不等式** —が存在し、それが量子論の予言と一致しないことを見出した。[4]

いま y 軸上に離れて存在するスピン 1/2 の原子 A と B を考え、それぞれの原子のスピンを 2 つの異なる方向（例えば、x 軸と z 軸方向）で測定し、正の方向を向いていれば +1、負の方向を向いていれば -1 なる測定値を取るものと約束する。そして、原子 A に対する 2 つの方向の測定値を Q、R、原子 B に対する測定値を S、T とする。EPR ペアーごとに原子 A に対しては Q または R、原子 B についてはS または T の測定が行われるので、多数の EPR ペアーの測定から相関関数 QS や RS などの期待値を求めることができる。

局所理論によれば、観測値 Q, R, S, T の確率分布は、EPR ペアーが生成される局所的な相互作用とその際に紛れ込むランダムな要素 —隠れた変数— によって決まり、その後の観測行為の影響を受けない。確率分布が局

[3]時空の 2 点 $(\vec{r}_1, t_1)$ と $(\vec{r}_2, t_2)$ が $s^2 \equiv (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 - c^2(t_1 - t_2)^2 > 0$ (c は光速) なる関係にある時、これらの 2 点は**スペースライク** (space-like)、$s^2 < 0$ のとき**タイムライク** (time-like) という。特に、同時刻の場合は空間的に離れた 2 点は常にスペースライクな関係にある。物理的な事象は光速よりも速く伝播できないので、スペースライクな時空点の間で信号のやり取りを行うことはできない。

[4]J. S. Bell, Physics **1**, 195 (1964); *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, 1987); J. F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony, and R. A. Holt, Phys. Rev. Lett. **49**, 1804 (1969)

所的な事象によって決まり、しかも、(離れた場所の) 観測行為とは独立に存在するという仮定を**局所実在論** という。このとき、観測値 Q, R, S, T の確率分布 $P(Q, R, S, T)$ が存在する。ベルの不等式では、$QS{+}RS{+}RT{-}QT$ という形の相関関数に着目する。この相関関数の期待値は確率分布を用いて

$$\langle QS + RS + RT - QT \rangle = \sum_{Q,R,S,T=\pm 1} P(Q, R; S, T)(QS + RS + RT - QT)$$

と書ける。ここで、Q, R, S, T の取り得るあらゆる組み合わせについて $QS + RS + RT - QT$ を具体的に計算すると次の表のようになる。

Q	R	S	T	QS+RS+RT-QT
1	1	1	1	2
1	1	1	-1	2
1	1	-1	1	-2
1	-1	1	1	-2
1	1	-1	-1	-2
1	-1	1	-1	2
1	-1	-1	1	-2
1	-1	-1	-1	2
-1	1	1	1	2
-1	1	1	-1	-2
-1	1	-1	1	2
-1	-1	1	1	-2
-1	1	-1	-1	-2
-1	-1	1	-1	-2
- 1	-1	-1	1	2
- 1	-1	-1	-1	2

従って

$$QS + RS + RT - QT = \pm 2 \tag{10.14}$$

観測値 Q, R, S, T の確率分布 $P(Q, R; S, T)$ は、確率変数が異なった値を取る事象が互いに独立な背反事象であると仮定すると

$$\sum_{Q,R,S,T=\pm 1} P(Q, R; S, T) = 1 \tag{10.15}$$

を満足しなければならない。従って、不等式

$$-2 \leq \langle QS + RS + RT - QT \rangle \leq 2 \tag{10.16}$$

が成立し、相関関数の絶対値の上限が 2 で与えられることがわかる。これをベルの不等式という。

次に、(10.16) に現れる相関関数を量子力学で計算してみよう。A 原子のスピンの測定軸方向の単位ベクトルを $\vec{q}$、$\vec{r}$、B 原子の測定軸方向の単位ベクトルを $\vec{s}$、$\vec{t}$ とする。対応するスピンの演算子は、パウリ行列を成分とするベクトル $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ を用いて

$$\hat{Q} = \vec{q} \cdot \hat{\sigma}^{\mathrm{A}}, \quad \hat{R} = \vec{r} \cdot \hat{\sigma}^{\mathrm{A}}, \quad \hat{S} = \vec{s} \cdot \hat{\sigma}^{\mathrm{B}}, \quad \hat{T} = \vec{t} \cdot \hat{\sigma}^{\mathrm{B}} \tag{10.17}$$

のように与えられる。ここで、上付きの添字 A、B はそれぞれ原子 A、B に対するスピン演算子を示している。この時、次の関係式が成立する。

$$\begin{aligned} &(\hat{Q} \otimes \hat{S} + \hat{R} \otimes \hat{S} + \hat{R} \otimes \hat{T} - \hat{Q} \otimes \hat{T})^2 \\ = \;& 4\, \hat{I}^{\mathrm{A}} \otimes \hat{I}^{\mathrm{B}} - 4[(\vec{q} \times \vec{r}) \cdot \hat{\sigma}^{\mathrm{A}}][(\vec{s} \times \vec{t}) \cdot \hat{\sigma}^{\mathrm{B}}] \end{aligned} \tag{10.18}$$

ここで $\hat{I}^{\mathrm{A}}$、$\hat{I}^{\mathrm{B}}$ はそれぞれ A、B 原子のスピンに作用する恒等演算子である。実際、 (10.18) の左辺を成分ごとに書き下すと

$$\sum_{i,j,k,l} [q_i(s_j - t_j) + r_i(s_j + t_j)][q_k(s_l - t_l) + r_k(s_l + t_l)](\hat{\sigma}_i^{\mathrm{A}} \hat{\sigma}_k^{\mathrm{A}})(\hat{\sigma}_j^{\mathrm{B}} \hat{\sigma}_l^{\mathrm{B}}) \tag{10.19}$$

ここでパウリ行列の性質

$$\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k = \delta_{j,k} + i\epsilon_{jkl} \hat{\sigma}_l \tag{10.20}$$

を用いると (ϵ_{jkl} は、j, k, l が 1,2,3 およびその偶置換の場合は +1、奇置換の場合は -1、それ以外は 0 をとる記号である)、

$$(\hat{\sigma}_i^{\mathrm{A}} \hat{\sigma}_k^{\mathrm{A}})(\hat{\sigma}_j^{\mathrm{B}} \hat{\sigma}_l^{\mathrm{B}}) = \delta_{i,k}\delta_{j,l} + i\delta_{i,k}\epsilon_{jln}\hat{\sigma}_n + i\delta_{j,l}\epsilon_{ikm}\hat{\sigma}_m - \epsilon_{ikm}\hat{\sigma}_m\epsilon_{jln}\hat{\sigma}_n \tag{10.21}$$

を得る。これを (10.19) に代入して計算すると (10.21) の右辺の第一項に対応する項は $4\, \hat{I}^{\mathrm{A}} \otimes \hat{I}^{\mathrm{B}}$ を与え、第二項、第三項はゼロとなる。第四項を計算すると

$$-4\epsilon_{ikm} q_i r_k \hat{\sigma}_m^{\mathrm{A}} \epsilon_{jln} s_j t_l \hat{\sigma}_n^{\mathrm{B}} = -4[(\vec{q} \times \vec{r}) \cdot \hat{\sigma}^{\mathrm{A}}][(\vec{s} \times \vec{t}) \cdot \hat{\sigma}^{\mathrm{B}}]$$

が得られる。（証明終わり）

さて、任意の演算子 $\hat{A}$ に対して $\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \geq 0$ が成り立つので、

$$\begin{aligned} &|\langle \hat{Q} \otimes \hat{S} + \hat{R} \otimes \hat{S} + \hat{R} \otimes \hat{T} - \hat{Q} \otimes \hat{T} \rangle| \\ \leq \;& 2\sqrt{\langle \hat{I}^{\mathrm{A}} \otimes \hat{I}^{\mathrm{B}} - [(\vec{q} \times \vec{r}) \cdot \hat{\sigma}^{\mathrm{A}}][(\vec{s} \times \vec{t}) \cdot \hat{\sigma}^{\mathrm{B}}] \rangle} \end{aligned} \tag{10.22}$$

が成立する。ここで、任意の状態に対して

$$\langle \hat{I}^{\mathrm{A}} \otimes \hat{I}^{\mathrm{B}} \rangle = 1$$

また、パウリ行列の期待値は 1 以下であるから

$$-1 \le \langle [(\vec{q} \times \vec{r}) \cdot \hat{\sigma}^{\mathrm{A}}][(\vec{s} \times \vec{t}) \cdot \hat{\sigma}^{\mathrm{B}}] \rangle \le 1 \tag{10.23}$$

これを (10.22) に代入すると

$$|\langle \hat{Q} \otimes \hat{S} + \hat{R} \otimes \hat{S} + \hat{R} \otimes \hat{T} - \hat{Q} \otimes \hat{T} \rangle| \le 2\sqrt{2} \tag{10.24}$$

が得られる。これをベルの不等式 (10.16) と比較すると相関関数の絶対値の上限が 2 から $2\sqrt{2}$ へと大きくなっていることがわかる。従って、実験結果が 2 よりも大きくなりベルの不等式が破れていれば、局所的な隠れた変数理論が否定されることになる。実際、実験結果はベルの不等式が破れていることを示しており、[5] 量子力学が予言する非局所相関が実証された。

ベルの不等式の破れが最大になるのは (10.23) の不等式の下限値 (-1) が実現される場合である。これは、$\vec{q}$ と $\vec{r}$ および $\vec{s}$ と $\vec{t}$ がそれぞれ互いに直交している場合である。このことを見るために、直交している例

$$\hat{Q} = \hat{\sigma}_z^{\mathrm{A}}, \quad \hat{R} = \hat{\sigma}_x^{\mathrm{A}}, \quad \hat{S} = -\frac{\hat{\sigma}_x^{\mathrm{B}} + \hat{\sigma}_z^{\mathrm{B}}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{T} = -\frac{\hat{\sigma}_x^{\mathrm{B}} - \hat{\sigma}_z^{\mathrm{B}}}{\sqrt{2}} \tag{10.25}$$

を考える。これらに対するベルの不等式が EPR ペアー

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{\mathrm{A}}|\downarrow\rangle_{\mathrm{B}} - |\downarrow\rangle_{\mathrm{A}}|\uparrow\rangle_{\mathrm{B}}) \tag{10.26}$$

に対して最大限に破れている、すなわち

$$\langle \hat{Q} \otimes \hat{S} + \hat{R} \otimes \hat{S} + \hat{R} \otimes \hat{T} - \hat{Q} \otimes \hat{T} \rangle = 2\sqrt{2} \tag{10.27}$$

ことを示そう。

まず、(10.26) が $\hat{\sigma}_x$ の固有状態 $|\pm\rangle$ を用いて

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle_{\mathrm{A}}|+\rangle_{\mathrm{B}} - |+\rangle_{\mathrm{A}}|-\rangle_{\mathrm{B}}) \tag{10.28}$$

と書き換えることができることに注意しよう。状態 $|\uparrow\rangle$、$|\downarrow\rangle$ が $\hat{\sigma}_z$ の固有値 ± 1 の固有状態であり、また、状態 $|\pm\rangle$ が $\hat{\sigma}_x$ の固有値 ± 1 の固有状態であることを使うと、

$$\langle \hat{Q}\hat{S} \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \langle \hat{\sigma}_z^{\mathrm{A}} \hat{\sigma}_z^{\mathrm{B}} + \hat{\sigma}_z^{\mathrm{A}} \hat{\sigma}_x^{\mathrm{B}} \rangle$$

[5] A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger, Phys. Rev. Lett. **47**, 460 (1981); **49**, 91 (1982)

ここで (10.26) に対する期待値を取ると

$$\langle \hat{\sigma}_z^{\rm A} \hat{\sigma}_z^{\rm B} \rangle = -1$$

(10.28) を使うと

$$\hat{\sigma}_x^{\rm B} |\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle_{\rm A}|+\rangle_{\rm B} + |+\rangle_{\rm A}|-\rangle_{\rm B}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{\rm A}|\uparrow\rangle_{\rm B} - |\downarrow\rangle_{\rm B}|\downarrow\rangle_{\rm B})$$

となるので

$$\hat{\sigma}_z^{\rm A} \hat{\sigma}_x^{\rm B} |\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{\rm A}|\uparrow\rangle_{\rm B} + |\downarrow\rangle_{\rm B}|\downarrow\rangle_{\rm B})$$

が得られる。この状態は $|\Psi\rangle$ と直交するので

$$\langle \hat{\sigma}_z^{\rm A} \hat{\sigma}_x^{\rm B} \rangle = 0$$

よって、

$$\langle \hat{Q}\hat{S} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

他の相関関数も同様に計算できる。結果は、

$$\langle \hat{R}\hat{S} \rangle = \langle \hat{R}\hat{T} \rangle = -\langle \hat{Q}\hat{T} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

が得られる。これらを (10.27) の左辺に代入すれば右辺が得られる。（証明終わり）

非局所相関はスペースライクな関係にある 2 点間にも存在し、一方の点での測定結果が他方の点のそれに影響を与える。しかし、これは相対性理論とは矛盾しない。相対性理論が要請していることは、信号が伝播する速さが光速を超えないということであり、スペースライクな時空点の状態の間に量子相関が存在することを否定してはいない。上記の原子の例で言うと、EPR ペアーの一方の原子 A のスピンの状態をある軸に沿って測定すると、その瞬間に他方の原子 B のスピンはその軸方向の固有状態になるが、B の測定者は A の測定者から測定軸に関する情報を（光速以下のスピードで）伝達されない限りこれを知る事はできず、B の測定者にとって測定結果は全くランダムに見え、それ故に光速を超えた通信をすることはできない。これを示すために、EPR ペアー (10.26) に対する密度演算子

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= |\Phi\rangle\langle\Phi| \\ &= \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle_{\rm A}|\downarrow\rangle_{\rm B} - |\downarrow\rangle_{\rm A}|\uparrow\rangle_{\rm B})({}_{\rm A}\langle\uparrow|{}_{\rm B}\langle\downarrow| - {}_{\rm A}\langle\downarrow|{}_{\rm B}\langle\uparrow|) \end{aligned} \tag{10.29}$$

を考えよう。A の測定に関する情報を知らない B の観測者の還元密度演算子 $\hat{\rho}^{\mathrm{B}}$ は、(10.29) を A についてトレースをとることにより得られる。

$$\hat{\rho}^{\mathrm{B}} = \mathrm{Tr}_{\mathrm{A}}\hat{\rho} = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle_{\mathrm{A}\,\mathrm{A}}\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle_{\mathrm{A}\,\mathrm{A}}\langle\downarrow|) = \frac{1}{2}\hat{I} \tag{10.30}$$

これは観測者にとって原子 B のスピンの測定結果が全くランダムであることを示している。