量子力学 III 講義ノート

上田正仁

2026 年 11 月 11 日

本講義では、（１）電磁場中の荷電粒子の運動、（２）散乱問題、（３）同種粒子の統計性、（４）第二量子化、（５）多体問題について教授する。

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」　改定新版　(近代科学社 2026)
- 安藤恒也　岩波講座現代の物理学 18 「量子 Hall 効果」(岩波書店 1993)
- 砂川重信 「散乱の量子論」 (岩波全書 1983)
- A. L. Fetter and J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems (McGraw-Hill, 1971)
- ランダウ=リフシッツ 「量子力学 1,2」 (東京図書 1983)

目次

第 1 章　電磁場中の荷電粒子の運動 5
1.1　一様電場中の荷電粒子の運動: エアリー関数とストークス現象 5
1.2　一様磁場中の粒子 8
1.2.1　サイクロトロン運動 8
1.2.2　ランダウ準位 10
1.2.3　ランダウ準位の固有関数 11
1.2.4　量子ホール効果 14
1.3　アハラノフ–ボーム効果 16
1.4　アハラノフ–キャッシャー効果 20
1.5　ベリー位相 21
1.6　TKNN 公式 23
1.7　チャーン数の量子化 26

第 2 章　散乱問題 29
2.1　2 粒子系の衝突 30
2.2　散乱波に対する積分方程式 31
2.3　散乱振幅と微分断面積の関係 33
2.4　部分波展開 34
2.5　位相のずれの物理的意味と連続条件による決定法 38
2.6　剛体球ポテンシャルによる散乱 40
2.7　井戸型ポテンシャルによる散乱 42
2.8　リップマン–シュウィンガー方程式 46
2.8.1　リップマン–シュウィンガー方程式の導出 46
2.8.2　散乱振幅 47
2.8.3　T 行列 48
2.8.4　S 行列 48
2.8.5　代数的アプローチ 49
2.9　同種粒子の散乱 50

第 3 章　第二量子化 53

3.1 電磁場の量子化 53
3.1.1 マックスウェル方程式 53
3.1.2 ゲージ不変性 55
3.1.3 自由場の正準形式 57
3.1.4 電荷と磁束の不確定性関係 58
3.1.5 電磁場の第二量子化 60
3.2 生成・消滅演算子の性質 62
3.3 場の演算子 64

第 4 章 多体問題 67
4.1 ハートリー・フォック近似 67
4.2 電子ガス 69

索引 70

第 1 章

電磁場中の荷電粒子の運動

電場および磁場中の荷電粒子の運動は、重要な物理現象を生むだけでなく、物理数学の観点からも興味深い話題を提供する。ここでは、一様電場および一様磁場中の荷電粒子の運動を議論する。

1.1 一様電場中の荷電粒子の運動: エアリー関数とストークス現象

x 軸の正の方向に一様な電場がかかっている電荷が q の 1 次元運動を考える。電場によるポテンシャルのゼロ点が原点に来るように座標系を取ると、この粒子が電場から受けるポテンシャルは $V(x) = Fx$　(F は q と電場の積) なのでシュレーディンガー方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + Fx\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{1.1}$$

で与えられる。すなわち、

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2mF}{\hbar^2}\left(x - \frac{E}{F}\right)\psi = 0 \tag{1.2}$$

これを解くために、変数変換

$$y = \left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\left(x - \frac{E}{F}\right) \tag{1.3}$$

を行うと (1.2) は

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - y\psi = 0 \tag{1.4}$$

となる。これを解くために次の様な解を仮定する。

$$\psi = \int_C e^{yz} f(z) dz \tag{1.5}$$

ここで、右辺は一般に複素平面上の経路 C に沿った積分で、積分経路 C は積分が収束するようにとる。(1.5) から

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} = \int_C z^2 e^{yz} f(z) dz \tag{1.6}$$

$$y\psi = \int_C \left(\frac{d}{dz} e^{yz}\right) f(z) dz = \int_C \frac{d}{dz}\left(e^{yz} f(z)\right) dz - \int_C e^{yz} f'(z) dz \tag{1.7}$$

(1.7) の右辺の第一項の積分がゼロになるように積分路 C をとる（下記参照）と

$$z^2 f + f' = f \frac{d}{dz}\left(\frac{z^3}{3} + \ln f\right) = 0 \tag{1.8}$$

が得られる。これから $f \equiv 0$ 以外の非自明な解は

$$f = -\frac{i}{2\pi} \exp\left(-\frac{z^3}{3}\right) \tag{1.9}$$

と書けることがわかる。係数は本来は波動関数が 1 に規格化されるように決めるべきであるが、ここでは下記に導入される**エアリー関数**の定義と一致させるように便宜的に決めた。こうして

$$\psi(y) = -\frac{i}{2\pi} \int_C \exp\left(yz - \frac{z^3}{3}\right) dz \tag{1.10}$$

積分路 C は無限遠 $|z| \to \infty$ で積分が収束するように選ぶ。このためには、$z = |z|e^{i\phi}$ とすると $\cos(3\phi) > 0$ である必要がある。従って n を整数として

$$2n\pi - \frac{\pi}{2} < 3\phi < 2n\pi + \frac{\pi}{2} \tag{1.11}$$

でなければならない。よって積分が収束する ϕ の領域は

$$\left(-\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{6}\right), \quad \left(\frac{\pi}{2}, \frac{5\pi}{6}\right), \quad \left(\frac{7\pi}{6}, \frac{3\pi}{2}\right) \tag{1.12}$$

これから積分が収束する独立した解が 2 個存在することがわかる[*1]。このうち、領域 I と領域 III にまたがる積分路 C をとる。一般に、関数の値がある特定の方向（ここでは (1.12) の境界）を横切る時に急変する現象を**ストークス現象**という。実際、(1.10) で定義される関数は (1.12) の領域内では収束するが、それ以外の領域では発散する。以下で述べるエアリー関数はストークス現象を示す典型的な関数である。

C は両端で積分路が無限遠に遠ざかるという条件さえ満たせば、それぞれの領域内で任意に動かすことができるので $z = it$ とおいて積分路を虚軸にとると (1.10) は

$$\psi = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos\left(yt + \frac{t^3}{3}\right) dt := \mathrm{Ai}(y) \tag{1.13}$$

[*1] (1.12) の 3 つの領域のうち、ある領域の無限遠から出発して、別な領域の無限遠へと遠ざかる経路は 3 個とれるが、そのうちの任意の 1 つの経路は残りの 2 つの経路の和で書けるので、独立な経路は 2 個である。

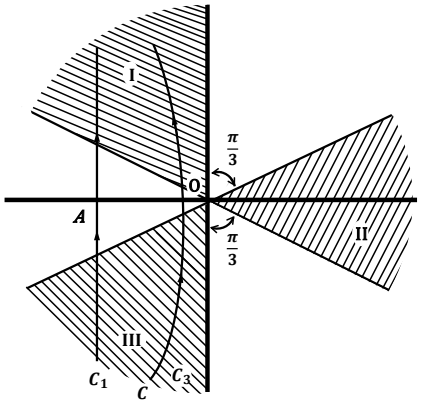


図 1.1　ストークス現象。関数 (1.10) は図の斜線の領域では $|z| \to \infty$ で収束する。積分路 C と積分路 C_1 は同じ積分値を与える。C_1 を虚軸に近づけることで (1.13) が得られる。

となる。$\mathrm{Ai}(y)$ はエアリー関数と呼ばれる。

y が大きいときのエアリー関数の漸近的な振る舞いは (1.10) を鞍点法で評価することで得られる。$y > 0$ のとき (1.10) の指数は $z = \pm\sqrt{y}$ で極値をとる。そこで $z = \pm\sqrt{y} + u$ とおいて (1.10) の指数を展開すると

$$yz - \frac{z^3}{3} = \pm\frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}} \mp \sqrt{y}u^2 + \mathcal{O}(u^3) \tag{1.14}$$

ポテンシャルが無限大になる $y \to \infty$ で波動関数が収束するためには $z = -\sqrt{y} + u$ を選択しなければならないことがわかる。このとき (1.10) は

$$\mathrm{Ai}(y) \approx -\frac{i}{2\pi}e^{-\frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}}}\int_C e^{\sqrt{y}u^2}du \tag{1.15}$$

右辺の積分が収束するためには積分路は $u = it$ ととればよい。このとき、ガウス積分を実行すると

$$\mathrm{Ai}(y) \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi}y^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}}} \tag{1.16}$$

が得られる。最後に (1.3) を用いて元の座標に戻し、また、波動関数が 1 になるように規格化すると一様電場中の荷電粒子の波動関数が得られる。(1.16) のように y に関して非整数冪に依存する非解析的な振る舞いをしていることがわかる。

1.2　一様磁場中の粒子

磁場中の電荷 q をもった、質量が m の荷電粒子のハミルトニアンはベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ を用いて

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\boldsymbol{A})^2 \tag{1.17}$$

で与えられる。

粒子の速度 $\boldsymbol{v}$ 演算子は粒子の位置ベクトル $\mathbf{r}$ の時間微分なので、ハイゼンベルクの運動方程式より

$$\mathbf{v} \coloneqq \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, \mathbf{r}] = \frac{1}{m}(\mathbf{p} - q\boldsymbol{A}) \tag{1.18}$$

が得られる。これは古典力学における速度 $\mathbf{v}$ と正準運動量 $\mathbf{p}$ の間の関係式と同じである。

(1.18) から速度演算子の成分間の交換関係を計算すると

$$[v_x, v_y] = i\frac{q\hbar}{m^2}B_z \tag{1.19}$$

$$[v_y, v_z] = i\frac{q\hbar}{m^2}B_x \tag{1.20}$$

$$[v_z, v_x] = i\frac{q\hbar}{m^2}B_y \tag{1.21}$$

が得られる。ここで、$\mathbf{B} = \mathrm{rot}\boldsymbol{A}$ は磁束密度である。このように、磁場中では荷電粒子の速度の 3 成分は互いに可換ではなく、同時に確定値を取ることはできない。

1.2.1　サイクロトロン運動

次に、一様磁場中の荷電粒子がどのような運動を行うのかを議論する。ここでは、電子を考え、$q = -e$ ($e > 0$ は素電荷）とする。このとき、ハミルトニアンは

$$H = \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} \tag{1.22}$$

ここで、

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + e\boldsymbol{A} \tag{1.23}$$

は力学的運動量である。[*2]

[*2] 正準運動量 p は一般化座標 q に共役な量であり、ラグランジアン L を一般化速度 $\dot{q}$ で微分することで得られる：$p = \partial L/\partial\dot{q}$。電磁場中のラグランジアン

$$L = \frac{m}{2}\boldsymbol{v}^2 - q\phi + q\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}$$

に対しては $\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v} + q\boldsymbol{A}$ となる。

以下では、磁場は z 軸方向を向いている場合 (すなわち、$\mathbf{B} = (0, 0, B)$) を考え、電子の xy 平面内の運動を議論する。$\boldsymbol{\pi}/m$ が速度演算子に相当していることに着目すると、(1.19)-(1.21) と同様にして

$$[\pi_x, \pi_y] = \frac{\hbar^2}{il^2} \tag{1.24}$$

が得られる。ここで、l は

$$l \coloneqq \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}}, \quad \omega_c \coloneqq \frac{eB}{m} \tag{1.25}$$

で定義される磁場中の回転運動（**サイクロトロン振動**）の特徴的な長さスケールであり、磁気長と呼ばれる。n 番目のランダウ準位においてサイクロトロン運動の広がりは $\sqrt{2n+1}l$ 程度になり、l はサイクロトロン半径を量子化した際の単位となる。また、ω_c はその周波数であり、**サイクロトロン周波数**と呼ばれる。

このことを具体的に調べるために、まず、ハミルトニアン (1.22) と交換関係 (1.24) を用いて π_x と π_y のハイゼンベルクの運動方程式を書き下すと

$$\frac{d}{dt}\pi_x = -\omega_c \pi_y \tag{1.26}$$

$$\frac{d}{dt}\pi_y = \omega_c \pi_x \tag{1.27}$$

これを解くと

$$\pi_x(t) = \pi_x(0)\cos\omega_c t - \pi_y(0)\sin\omega_c t \tag{1.28}$$

$$\pi_y(t) = \pi_y(0)\cos\omega_c t + \pi_x(0)\sin\omega_c t \tag{1.29}$$

が得られる。この結果 xy 平面内の速度ベクトル

$$(v_x, v_y) \coloneqq \frac{1}{m}(\pi_x, \pi_y) \tag{1.30}$$

がサイクロトロン運動に伴って円に沿って反時計回りに回転することを示している。

次に、同じ平面内の電子の座標 (x, y) の時間変化を考える。ハイゼンベルクの運動方程式より

$$\frac{d}{dt}x = \frac{i}{\hbar}[H, x] = \frac{\pi_x}{m} \tag{1.31}$$

$$\frac{d}{dt}y = \frac{i}{\hbar}[H, y] = \frac{\pi_y}{m} \tag{1.32}$$

が得られる。右辺に (1.28) と (1.29) を代入して積分すると

$$x(t) = x(0) + \frac{1}{m\omega_c}[\pi_x(0)\sin\omega_c t + \pi_y(0)(\cos\omega_c t - 1)] \coloneqq X + \xi(t) \tag{1.33}$$

$$y(t) = y(0) + \frac{1}{m\omega_c}[\pi_y(0)\sin\omega_c t - \pi_x(0)(\cos\omega_c t - 1)] \coloneqq Y + \eta(t) \tag{1.34}$$

最右辺で時間に依存しない項を X, Y、時間に依存する項を $\xi(t), \eta(t)$ と定義した。すなわち、

$$X := x(0) - \frac{\pi_y(0)}{m\omega_c} \tag{1.35}$$

$$Y := y(0) + \frac{\pi_x(0)}{m\omega_c} \tag{1.36}$$

$$\xi(t) := \frac{1}{m\omega_c}(\pi_x(0)\sin\omega_c t + \pi_y(0)\cos\omega_c t) = \frac{\pi_y(t)}{m\omega_c} = \frac{l^2}{\hbar}\pi_y(t) \tag{1.37}$$

$$\eta(t) := \frac{1}{m\omega_c}(\pi_y(0)\sin\omega_c t - \pi_x(0)\cos\omega_c t) = -\frac{\pi_x(t)}{m\omega_c} = -\frac{l^2}{\hbar}\pi_x(t) \tag{1.38}$$

(X, Y) はサイクロトロン運動の中心座標、(ξ, η) はその周りに回転する相対座標とみなすことができる。中心位置が電子の初期位置 $(x(0), y(0))$ からずれるのは、電子がサイクロトロン運動をしているからである。

(1.35) と (1.36) からわかるように、サイクロトロン運動の中心位置には運動量の成分が混ざる。その結果、$x(0)$ と $y(0)$ は交換しても、X と Y は交換しない。実際、交換関係 (1.24) や $[x, \pi_x] = i\hbar$ などを用いると、これらの間に次のような交換関係が成立することがわかる。

$$[\xi, \eta] = -il^2, \quad [X, Y] = il^2 \tag{1.39}$$

$$[\xi, X] = [\xi, Y] = [\eta, X] = [\eta, Y] = 0 \tag{1.40}$$

この結果、量子力学的サイクロトロン運動している電子は、中心位置 (X, Y) も相対位置 (ξ, η) も不確定性関係

$$\Delta X \Delta Y \geq \frac{1}{2}l^2, \quad \Delta\xi\Delta\eta \geq \frac{1}{2}l^2 \tag{1.41}$$

に従う。$l^2 \propto \omega_c^{-1} \propto B^{-1}$ より、不確定幅は弱磁場になるほど大きくなる。

1.2.2　ランダウ準位

(1.37) と (1.38) より[*3]

$$\pi_x = -m\omega_c\eta, \quad \pi_y = m\omega_c\xi \tag{1.42}$$

なので、これを (1.22) へ代入するとハミルトニアンは

$$H = \frac{m\omega_c^2}{2}(\xi^2 + \eta^2) = \frac{\hbar^2\omega_c}{2l^2}(\xi^2 + \eta^2) \tag{1.43}$$

となる。(1.40) より中心座標 (X, Y) はハミルトニアンと交換するので、運動の恒量である。

[*3] 本節と次の節は次の文献を参照した。安藤恒也　岩波講座現代の物理学 18 「量子 Hall 効果」(岩波書店 1993)。

次に、ハミルトニアン (1.43) の量子化されたエネルギー準位を求めるために、ξ と η の線形結合で定義される昇降演算子を導入しよう。

$$a \coloneqq -\frac{1}{\sqrt{2}l}(\eta + i\xi), \quad a^\dagger \coloneqq -\frac{1}{\sqrt{2}l}(\eta - i\xi) \tag{1.44}$$

(1.39) から a と $a^\dagger$ は正準交換関係

$$[a, a^\dagger] = 1 \tag{1.45}$$

を満足していることがわかる。(1.44) を逆に解いた式

$$\xi = i\frac{l}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger), \quad \eta = -\frac{l}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \tag{1.46}$$

を (1.43) へ代入すると

$$H = \hbar\omega_c \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \tag{1.47}$$

がえられる。これからエネルギー固有値は等間隔にならび

$$E_N = \hbar\omega_c \left(N + \frac{1}{2}\right), \quad N = 0, 1, 2, \cdots \tag{1.48}$$

で与えられることがわかる。これを**ランダウ準位**という。

1.2.3　ランダウ準位の固有関数

N 番目のランダウ準位の固有関数 ϕ_N を求めよう。まず、基底状態の波動関数は定義により消滅演算子を作用させると消えるので

$$a\phi_0 = 0 \tag{1.49}$$

a に（1.44) を代入して (1.37) と (1.38) を用いると

$$(\pi_x - i\pi_y)\phi_0 = 0 \tag{1.50}$$

$\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}$ であることに注意すると

$$(p_x + eA_x - ip_y - ieA_y)\phi_0 = 0 \tag{1.51}$$

となり波動関数がベクトルポテンシャルにあらわに依存する。このことは、波動関数がゲージの取り方に依存することを意味する。

z 軸方向に向いている一様磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ の場合、

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r} = \frac{B}{2}(-y, x, 0) \tag{1.52}$$

なる**対称ゲージ**や

$$\boldsymbol{A} = (0, Bx, 0) \tag{1.53}$$

なる**ランダウゲージ**がしばしば用いられる[*4]。いずれのゲージも条件 $\mathrm{div}\boldsymbol{A}=0$ を満足することに注意しよう。運動量とベクトルポテンシャルの交換関係は

$$[\mathbf{p},\boldsymbol{A}] \coloneqq \mathbf{p}\cdot\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}\cdot\mathbf{p}=-i\hbar\,\mathrm{div}\boldsymbol{A} \tag{1.54}$$

であたえられるので、$\mathrm{div}\boldsymbol{A}$=0 なるゲージを選ぶと、運動量とベクトルポテンシャルは交換する。

以下ではランダウゲージ $\boldsymbol{A}=(0,Bx,0)$ を選ぼう。このとき、(1.51) は

$$(p_x-ip_y-ieBx)\phi_0=0 \tag{1.55}$$

左辺で y 依存する項は p_y のみなので、波動関数の y 方向依存性は平面波 $\sim e^{ik_y y}$ である。従って、左辺の $-ip_y$ は $-i\hbar k_y$ に置き換えることができるので

$$\left[p_x-ieB\left(x+\frac{\hbar k_y}{eB}\right)\right]\phi_0=0 \tag{1.56}$$

ここで (1.35) より

$$X=x(0)-\frac{p_y+eA_y(0)}{m\omega_c}=x(0)-\frac{\hbar k_y+eBx(0)}{m\omega_c}=-\frac{\hbar k_y}{eB}=-l^2k_y \tag{1.57}$$

なので (1.56) は

$$\left[\frac{d}{dx}+\frac{eB}{\hbar}(x-X)\right]\phi_0=\left[\frac{d}{dx}+\frac{1}{l^2}(x-X)\right]\phi_0=0 \tag{1.58}$$

よって、基底状態の波動関数は

$$\phi_0(x,y)=\frac{1}{\sqrt{\pi^{\frac{1}{2}}l}}\exp\left[ik_y y-\frac{(x-X)^2}{2l^2}\right] \tag{1.59}$$

で与えられる。

励起状態は

$$\phi_N(x,y)=\frac{(-i)^N}{\sqrt{N!}}(a^\dagger)^N\phi_0 \tag{1.60}$$

ここで、右辺の因子 $(-i)^N$ は後の便宜のためにつけた（波動関数の全体にかかる位相は任意であることに注意しよう）。(1.44) に (1.37) と (1.38) を代入すると

$$\begin{aligned}a^\dagger&=\frac{l}{\sqrt{2}\hbar}(\pi_x+i\pi_y)=-\frac{-il}{\sqrt{2}}\left[\frac{\partial}{\partial x}-\frac{1}{l^2}(x-X)\right]\\&=\frac{-il}{\sqrt{2}}e^{\frac{(x-X)^2}{2l^2}}\frac{\partial}{\partial x}e^{-\frac{(x-X)^2}{2l^2}}\end{aligned} \tag{1.61}$$

[*4] ランダウゲージ (1.53) の波動関数に因子 $e^{-\frac{i}{2l^2}xy}$ を掛けるともう一つのランダウゲージ $\boldsymbol{A}=(-By,0,0)$ の波動関数が得られる

よって

$$(a^\dagger)^N = \frac{(-i)^N l^N}{\sqrt{2^N}} e^{\frac{(x-X)^2}{2l^2}} \frac{\partial^N}{\partial x^N} e^{-\frac{(x-X)^2}{2l^2}} \tag{1.62}$$

これを (1.60) に代入して、エルミート関数 $H_n(x)$ に関する**ロドリゲスの公式**

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \tag{1.63}$$

を用いるとランダウ準位の固有関数

$$\psi_N(x,y) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{\frac{1}{2}} 2^N N! l}} H_N\left(\frac{x-X}{l}\right) e^{ik_y y - \frac{(x-X)^2}{2l^2}} \tag{1.64}$$

が得られる。このゲージでは、波動関数において X の値が確定している表示になっており、そのため、Y の値は全く不確定になり、y 方向の波動関数が平面波となっている。

引き続き、xy 平面内の電子の運動を考える。系の大きさを $L_x \times L_y$ とし、y 方向には周期的境界条件を課すと、k_y の値は

$$k_y = \frac{2\pi}{L_y} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, ... \tag{1.65}$$

となる。このとき、X の値は (1.57) より

$$X = -l^2 k_y = -\frac{2\pi l^2}{L_y} n \tag{1.66}$$

となり $2\pi l^2/L_y$ の整数倍をとる。従って、X についての和は次のように積分に置き換えることができる。

$$\sum_X \cdots = \frac{L_y}{2\pi l^2} \int_0^{L_x} \cdots dX \tag{1.67}$$

各ランダウ準位は中心座標 (X, Y) の取れる配置の数 $L_x L_y/(2\pi l^2)$ だけ縮退していることがわかる。面積 $2\pi l^2$ につき 1 個の状態が存在すると言える。従って、状態密度 $D(E)$ は次のように与えられる。

$$D(E) = \frac{1}{L_x L_y} \sum_N \sum_X \delta(E - E_N) = \frac{1}{2\pi l^2} \sum_N \delta(E - E_N) \tag{1.68}$$

他方、ゼロ磁場での 2 次元電子系の状態密度は (スピン自由度は除く)

$$D(E) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\boldsymbol{k} \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \tag{1.69}$$

で与えられる。

一様磁場下では、図 1.2 のようにエネルギー幅 $\hbar\omega_c$ にある状態が一つのランダウ準位に束ねられる。従って、n 番目のランダウ準位まで電子が詰まっている場合の単位面積当たりの状態数は、

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} n\hbar\omega_c = \frac{n}{2\pi l^2} \tag{1.70}$$

となる。

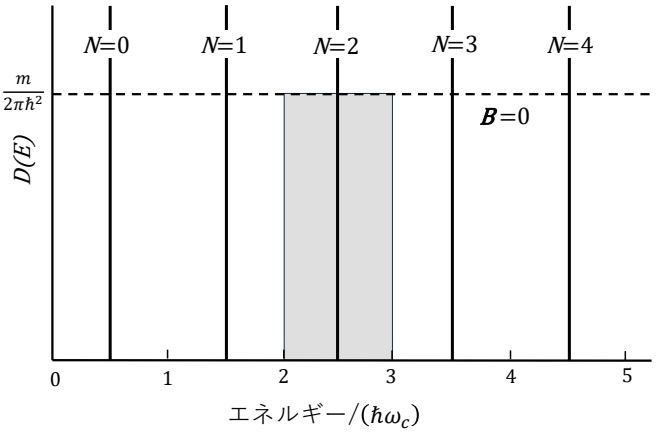


図 1.2　ランダウ準位。各ランダウ準位には (1.70) で与えられる状態が縮退している。

1.2.4　量子ホール効果

磁場によりサイクロトロン運動している系に外部ポテンシャル $V(x,y)$ を印加しよう。このとき、中心座標は

$$\frac{d}{dt}X = \frac{i}{\hbar}[H+V, X] = \frac{i}{\hbar}[V, X] \tag{1.71}$$

$$\frac{d}{dt}Y = \frac{i}{\hbar}[H+V, Y] = \frac{i}{\hbar}[V, Y] \tag{1.72}$$

これに (1.35) と (1.36) を代入すると

$$\frac{d}{dt}X = -\frac{1}{m\omega_c}\frac{i}{\hbar}[V, \pi_y] = -\frac{l^2}{\hbar}\frac{i}{\hbar}[V, p_y] = -i\frac{l^2}{\hbar^2}(i\hbar)\frac{\partial V}{\partial y} = \frac{l^2}{\hbar}\frac{\partial V}{\partial y} \tag{1.73}$$

$$\frac{d}{dt}Y = \frac{1}{m\omega_c}\frac{i}{\hbar}[V, \pi_x] = \frac{l^2}{\hbar}\frac{i}{\hbar}[V, p_x] = i\frac{l^2}{\hbar^2}(i\hbar)\frac{\partial V}{\partial x} = -\frac{l^2}{\hbar}\frac{\partial V}{\partial x} \tag{1.74}$$

このように、ポテンシャルにより外力が加わると、中心位置はそれと垂直方向に移動することがわかる。これを**ホール効果**という。

以下に述べるように、x 軸方向にかかる電圧 V_x と y 軸方向に流れる電流 I_y の比 I_y/V_x は e^2/h の整数倍に量子化される。これを**量子ホール効果**という。以下では、x 方向に電場 E がかかっている状況を考えよう。この時、$V = eEx$ なので、(1.74) よりサイクロトロンの中心座標は $-y$ 方向へ移動する[*5]。

[*5] サイクロトロンの中心座標 X は、$V = eEx$ をハミルトニアンに加えて x に関して平方完成することで、(1.57) に比べて x 方向へも $\delta X = -E/(\omega_c B)$ だけシフトすることがわかるが、これは定数なので以下の議論には影響しない。

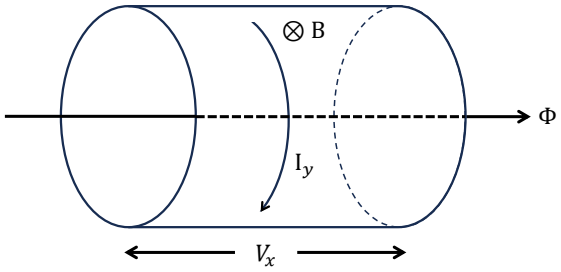


図 1.3　量子ホール効果の模型。2 次元電子系を y 軸方向に周期的なランダウゲージ $\boldsymbol{A} = (0, Bx, 0)$ をとり、$y = 0$ と $y = L_y$ の端を張り合わせたもの。円筒の内部を磁束 Φ が貫くものとする。また、$\otimes B$ は、元の 2 次元電子系に垂直方向にかけられた磁場 B である。

前節の議論と同様に、ランダウゲージ $\boldsymbol{A} = (0, Bx, 0)$ で y 軸方向に周期境界条件を課した波動関数を考える[*6]。周期境界条件から $y = 0$ と $y = L_y$ の波動関数は同じなので、図 1.3 のように、$y = 0$ と $y = L_y$ の境界を張り合わせた円筒を考える。この円筒の中心軸に沿って外部から磁束 Φ をゼロからゆっくりと（断熱的に）増加させる。このときのベクトルポテンシャルを円筒に沿って線積分した値 $A_y L_y$ は、ストークスの定理により Φ に等しいので $A_y = \Phi/L_y$ である。これを上記のランダウゲージのベクトルポテンシャルに加えると

$$\boldsymbol{A} = \left(0, Bx + \frac{\Phi}{L_y}, 0\right) \tag{1.75}$$

これに伴い、電子の波動関数の中心座標 X は (1.57) から

$$\delta X = -\frac{\Phi}{L_y B} \tag{1.76}$$

だけ移動する。今、シリンダーを貫く磁束を 0 から断熱的に磁束量子 $\Phi = h/e$ まで増加すると、中心座標は

$$\delta X = -\frac{h}{L_y e B} = -\frac{2\pi l^2}{L_y}, \quad l \coloneqq \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \tag{1.77}$$

だけ移動する。これに円筒の周長 L_y を掛けた面積 $2\pi l^2$ 分の電子が x 軸方向に沿って平行移動する。これに単位面積当たりの状態密度 (1.70) を掛けると、平行移動した電子の

[*6] 以下の議論は次の文献による。B. Laughling, Phys. Rev. B **23**, 5632(R) (1981)

数が n であることがわかる。その結果、円筒の左端には電荷 $-en$ が、右端には電荷 en が余分にたまる。x 方向には電場 E がかかっているので、両端には電位差 $V_x = -EL_x$ がかかっている。$\pm en$ の電荷が両端に蓄積されたことに伴うポテンシャルエネルギーの変化は

$$\delta E = neV_x \tag{1.78}$$

である。

円筒に沿って流れる電流 I_y が円筒内部に作る磁束 Φ' は、この円筒を、コイルとみなした際の自己インダクタンスを $\mathcal{L}$ として $\Phi' = \mathcal{L}I_y$ で与えられる。このときの磁束の持つエネルギー変化が、(1.78) で求めた電子のエネルギー変化 δE に等しいはずである。磁場の全エネルギーの変化は、

$$\frac{(\Phi' + \Phi)^2}{2\mathcal{L}} - \frac{\Phi'^2}{2\mathcal{L}} = \frac{\Phi'\Phi}{\mathcal{L}} + \frac{\Phi^2}{2\mathcal{L}} = I_y\Phi + \frac{\Phi^2}{2\mathcal{L}} \tag{1.79}$$

このうち、第二項は加えた磁場自体のエネルギーであり、第一項が δE に対応する。よって

$$I_y = \frac{\delta E}{\Phi} \tag{1.80}$$

これに (1.78) と $\Phi = h/e$ を代入すると

$$\frac{I_y}{V_x} = \frac{e^2}{h}n \tag{1.81}$$

となり、ホールコンダクタンスが量子化されることがわかる。

1.3　アハラノフ–ボーム効果

電磁ポテンシャル $\boldsymbol{A}$, ϕ はゲージ変換の任意性を持っているために, 古典電磁気学では電場と磁場がより基本的な物理量であり, 電磁ポテンシャルはそれらを与える便宜的な量と考えられてきた. しかし, この事情は量子論においては一変する. 電荷 q の電磁場中の運動を記述するハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - q\boldsymbol{A}(\mathbf{r},t)\right)^2 + V(\mathbf{r}) + q\phi(\mathbf{r},t) \tag{1.82}$$

で与えられ, シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\boldsymbol{A}(\mathbf{r},t)\right)^2 + V(\mathbf{r}) + q\phi(\mathbf{r},t)\right]\Psi(\mathbf{r},t) \tag{1.83}$$

は電磁ポテンシャルに陽に依存する. このように量子力学では電磁ポテンシャルが力学的ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ と同様にシュレーディンガー方程式に直接現れる. これに対して, 古

典力学の運動方程式はローレンツ力を通じて電場と磁場に直接依存していることを思い出そう.

与えられた電磁ポテンシャル $\boldsymbol{A}$, ϕ に対して, シュレーディンガー方程式 (1.83) の解 Ψ がわかっているとする. このとき, 電磁ポテンシャルのゲージ変換

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_0 + \mathrm{grad}\chi, \quad \phi = \phi_0 - \frac{\partial \chi}{\partial t} \tag{1.84}$$

に対してシュレーディンガー方程式 (1.83) が不変であるためには, 波動関数を同時に次のように変換する必要がある.

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r}, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} q\chi(\mathbf{r}, t)\right) \tag{1.85}$$

(1.85) は波動関数の位相がゲージ関数 χ に依存していることを示している. 量子力学では波動関数に定数の位相 ($e^{i\theta}$, θ は定数) を掛けても物理量は不変であるが, (1.85) のように位相因子が時間と空間に依存している場合は, 以下で示すように重要な物理的効果が生じる.

電磁ポテンシャルが時間に陽に依存しない定常状態を考えよう. このときシュレーディンガー方程式は

$$E\Psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\boldsymbol{A}(\mathbf{r})\right)^2 + V(\mathbf{r}) + q\phi(\mathbf{r})\right]\Psi(\mathbf{r}) \tag{1.86}$$

と書ける. (1.85) でゲージ関数として $\chi(\mathbf{r}) = \int^{\mathbf{r}} \boldsymbol{A}(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x}$ と選ぶと, 波動関数は

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} q \int^{\mathbf{r}} \boldsymbol{A}(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x}\right) \tag{1.87}$$

と変換される. この時, Ψ_0 の従うシュレーディンガー方程式は

$$E\Psi_0(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^2 + V(\mathbf{r}) + q\phi(\mathbf{r})\right]\Psi_0(\mathbf{r}) \tag{1.88}$$

となり, ベクトルポテンシャルは消去できるが, 波動関数は (1.87) のようにベクトルポテンシャルに陽に依存する. アハラノフとボームはこの依存性が観測にかかる効果を生むことを示した. いま, 図 4.1 のような 2 次元平面上に 1 次元のリングを考え, リングの中心を磁束 Φ が貫いている状況を考えよう. 磁束が存在する領域をリングの中心付近だけに局在させればリング上にある荷電粒子は磁束から直接力を受けることはない.

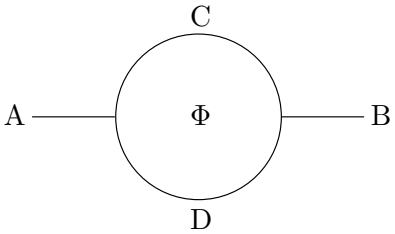


図 1.3 アハラノフ–ボーム効果. A から B へ流れる電流は, 磁束 Φ がリングの内側にしか存在しないにもかかわらず, Φ の関数として (1.91) のように振動する.

電流が A 点から B 点へ流れる状況を考えると, 経路 ACB をたどった電子の B 点での確率振幅は

$$\Psi_1 = \Psi_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar} q \int_{ACB} \boldsymbol{A}(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x}\right) \tag{1.89}$$

経路 ADB をたどった電子の B 点での確率振幅は

$$\Psi_2 = \Psi_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar} q \int_{ADB} \boldsymbol{A}(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x}\right) \tag{1.90}$$

ここで, リングは対称に作られているとして, $|\Psi_1| = |\Psi_2| =: |\Psi_0|$ とした. このとき, B 点で電子が見出される確率は次の量に比例する.

$$\begin{aligned} |\Psi_1 + \Psi_2|^2 &= |\Psi_0|^2 \left| \exp\left(\frac{i}{\hbar} q \int_{ACB} \boldsymbol{A}(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x}\right) \right. \\ &\qquad \left. + \exp\left(\frac{i}{\hbar} q \int_{ADB} \boldsymbol{A}(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x}\right) \right|^2 \\ &= |\Psi_0|^2 \left| 1 + \exp\left(\frac{i}{\hbar} q \oint_{\text{ring}} \boldsymbol{A}(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x}\right) \right|^2 \\ &= 2|\Psi_0|^2 \left(1 + \cos\left(\frac{q}{\hbar}\Phi\right)\right) \end{aligned} \tag{1.91}$$

ここで, Φ はベクトルポテンシャルをリングに沿って線積分した量

$$\Phi := \oint_{\text{ring}} \boldsymbol{A} \cdot d\mathbf{x} \tag{1.92}$$

で与えられる. ストークスの定理より Φ は

$$\Phi := \oint_{\text{ring}} \boldsymbol{A} \cdot d\mathbf{x} = \int_{\text{ring}} \operatorname{rot} \boldsymbol{A} \cdot d\mathbf{S} = \int_{\text{ring}} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} \tag{1.93}$$

のように磁場の面積分として書ける. ここで, $\oint_{\text{ring}} \cdots d\mathbf{r}$ はリングに沿った線積分, $\int_{\text{ring}} \cdots d\mathbf{S}$ はリングの内側の領域での面積分を表している. (1.93) から Φ は磁束密度の積分として表されるので, ゲージ不変な物理量である. このように, ベクトルポテンシャルそれ自体はゲージ変換で変化するが, 観測量である磁束はリングに沿ったベクトルポテンシャルの線積分として与えられるのでゲージ変換に対して不変である. (1.91) はリングを通過する電流がそれを貫く磁束の関数として振動することを示している. これを**アハラノフ–ボーム効果**という.

一般に, 量子系がパラメータ空間の閉じた経路を断熱的に（ゆっくりと）一周した時に獲得する位相を**幾何学的位相**, あるいは, **ベリー位相**と言う. さらに, 磁束を囲む限り積分路を連続的に変形してもベリー位相の値は不変である. この意味でアハラノフ–ボーム効果はトポロジカルな効果であると言える.

点 A から点 B に至る確率振幅が, (1.89) と (1.90) のように経路に依存する 2 種類の関数で記述されていることに注意しよう. これはシュレーディンガー方程式 (1.86) を積分して得られた波動関数の値が, 位置の関数として一意ではないことを意味している. その理由は, 図 6.1 のようにループの中に磁束が存在する場合は, ベクトルポテンシャルがループの内側で発散するためである. 実際, (1.92) の積分を半径 r の円周に沿って行うと,

$$\Phi = 2\pi r A(r) \longrightarrow A(r) = \frac{\Phi}{2\pi r} \tag{1.94}$$

となり, $\Phi \neq 0$ のときベクトルポテンシャルは $r = 0$ で発散する. このために空間が単連結ではなくなり, ベクトルポテンシャルの線積分で与えられる位相の値が発散する特異点のどちら側の経路をとるかに依存するようになるのである. その結果, 点 A から点 B へ移動する確率振幅は経路に依存する.

古典電磁気学では荷電粒子はローレンツ力

$$\mathbf{F} = q\left(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}\right) \tag{1.95}$$

により電荷が存在する場所における電場と磁場から直接力を受ける. ところが, 量子論では, 電荷が運動する領域に電場や磁場が存在しなくてもアハラノフ–ボーム効果によって波動関数の位相が (1.87) のように変化する. いま, 一周の長さが L の 1 次元リングを考え, リングの中心を磁束 Φ が貫いている状況を考えよう. ここでは (1.91) の場合と異なり, 電流は流れていないとする. 磁束が存在する領域をリングの中心付近だけに局在させればリング上にある荷電粒子は磁束から直接力を受けることはないが, アハラノフ–ボーム効果によって電荷はリングを一周すると位相が ϕ だけ変化する.

$$\Psi(x + L) = \Psi(x)e^{i\phi}, \quad \phi = \frac{q}{\hbar}\oint \boldsymbol{A} \cdot d\mathbf{x} = \frac{q}{\hbar}\Phi \tag{1.96}$$

波動関数の一価性より ϕ は 2π の整数倍でなければならない. すなわち, n を整数として

$$\frac{q}{\hbar}\Phi = 2\pi n \longrightarrow \Phi = \frac{h}{q}n \tag{1.97}$$

こうして, アハラノフ–ボーム効果の基本周期 h/q から, 系を構成する最小電荷 q を知ることができる. q は普通の金属では素電荷 e, 超伝導体では $2e$ であることが実験で確かめられている. 後者は, 超伝導体中で電子 2 個がクーパー対と呼ばれる基本単位を構成していることを示している[*7].

[*7] Yang が指摘したように (C. N. Yang, Phys. Rev. D **1**, 2360 (1970)), 異なった素粒子の電荷 q が互いに有理比でないとすると, アハラノフ–ボーム効果は周期的でなくなり, ゲージ群はコンパクトではなくなる. ゲージ群がコンパクトであるためには電荷が量子化されている必要がある.

1.4　アハラノフ–キャッシャー効果

アハラノフ–キャッシャー効果は, スピンなど磁気モーメントをもった中性粒子が帯電した細線をはさむ 2 つの経路を同時に通過する際に, 非自明な幾何学的位相（ベリー位相）を獲得する現象である. これは荷電粒子が磁束を取り囲む 2 つの経路を同時に通過する際に非自明な位相を獲得するアハラノフ–ボーム効果と双対な効果である

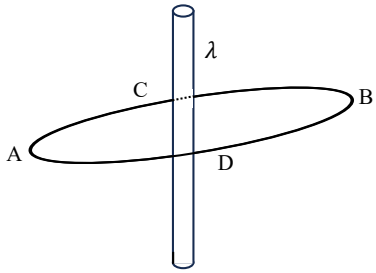


図 1.4 アハラノフ–キャッシャー効果. 磁気モーメントを持つ中性粒子が線電荷密度 λ で帯電した細線をはさむ 2 つの経路を同時に通過すると, 2 つの経路間に波動関数の位相差 (1.104) が生じ, 粒子の透過確率が λ の関数として振動する.

図 6.2 のように線電荷密度 λ で帯電した細線の周りを磁気モーメント μ を持った中性粒子が通過することを考えよう. 速度 $\mathbf{v}$ で電場 $\mathbf{E}$ 中を運動する粒子は相対論的効果により粒子の静止系において磁場

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{c^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E} \tag{1.98}$$

を受ける[*8] このとき粒子はゼーマン効果によるエネルギーが

$$\Delta E(\mathbf{r}) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{c^2}\boldsymbol{\mu} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{E}) = -\frac{1}{c^2}\mathbf{v} \cdot (\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{E}) \tag{1.99}$$

だけシフトする. このエネルギーシフトにより波動関数に位相因子

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int \Delta E dt\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar c^2}\int (\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{E}) \cdot d\mathbf{r}\right) \tag{1.100}$$

が生じる. アハラノフ–ボーム効果の場合 (1.91) と同様に細線の両側を通過した粒子の確率振幅を重ね合わせると, 粒子の透過確率が $1 + \cos\phi$ で振動することがわかる. ここで ϕ は

[*8] 厳密には、右辺にはローレンツ因子 $\gamma := 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ がかかる. ここでは、速度 v が光速 c に比べて十分小さいと仮定して、この項を 1 と置いている.

$$\phi = \frac{1}{\hbar c^2} \oint (\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{E}) \cdot d\mathbf{r} \tag{1.101}$$

で与えられる．積分路は細線を囲む閉曲線である．細線の方向を z 軸にとり, 磁気モーメントが z 軸の正方向を向いているとする ($\mu = \mu \mathbf{e}_z$, $\mathbf{e}_z$ は z 軸の正の方向の単位ベクトル)．　電場は細線の周りに放射線状に分布しているので、細線から粒子への動径方向の単位ベクトルを $\mathbf{e}_r$, $\mathbf{e}_z \times \mathbf{e}_r =: \mathbf{e}_\theta$ とすると $\mathbf{e}_\theta \cdot d\mathbf{r} = r d\theta$ (θ は方位角) なので,

$$\mathbf{E} = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_0 r} \mathbf{e}_r \tag{1.102}$$

を (1.101) へ代入すると

$$\phi = \frac{\mu\lambda}{2\pi\hbar c^2 \epsilon_0} \int_0^{2\pi} d\theta = \frac{\mu\lambda}{\hbar c^2 \epsilon_0} \tag{1.103}$$

$c^2 = 1/(\epsilon_0 \mu_0)$ を代入すると

$$\phi = \frac{\mu_0 \mu}{\hbar} \lambda \tag{1.104}$$

が得られる．こうして、粒子の透過確率は細線の線電荷密度の関数として振動する．これがアハラノフ–キャッシャー効果である．(1.102) からわかるように, 電場は細線のところで発散しており, このためアハラノフ–ボーム効果の時と同様に波動関数の値は積分経路に依存している．

磁場が無い場所でも電場が存在すれば, 磁気モーメントを持った中性粒子に位相変化が生じ, 透過確率が線密度の関数として振動する．この効果は, 細線を囲む閉曲線の大きさや形状に寄らないという意味でトポロジカルな性質を有している．アハラノフ–ボーム効果とアハラノフ–キャッシャー効果は, 前者が荷電粒子と磁場の効果であるのに対して後者は磁気双極子と電場の効果であり, 電場と磁場の役割が入れ替わった**双対性**を示している．また, 前者は電場が存在しない領域の閉ループで, 後者は磁場が存在しない領域の閉ループで波動関数の位相が変化するトポロジカルな効果である．両者の間には表 1.4 にまとめた電磁双対性がある．

1.5　ベリー位相

ハミルトニアンに含まれる磁場などのパラメータがゆっくりと（断熱的に）変化して最後に元の値へもどるサイクルを考える。このとき、パラメータ空間の幾何学的位相に起因する波動関数の位相を**ベリー位相**、あるいは、**パンチャラトナム–ベリー位相**という。

考えている系のハミルトニアン H の n 番目の固有状態 ψ_n を考える。ハミルトニアンに含まれる外部から操作できるパラメータを $\mathbf{R}(t)$（外部電場、外部磁場など）とし、こ

表 1.1　電磁双対性.

アハラノフ–ボーム効果	アハラノフ–キャッシャー効果
荷電粒子	磁気モーメントを持つ中性粒子
電場無しの運動	磁場無しの運動
磁場のベリー位相	電場のベリー位相

れが断熱サイクル C を行うとする。ここで、断熱とは系の状態の遷移が起こらないことを意味する。従って、系がはじめある固有状態 n にあったとすると、その状態にとどまり続けることを意味する[*9]。サイクルとは、終状態が始状態と同じ状態変化をいう。断熱過程では系の状態変化はパラメータ $\mathbf{R}(t)$ の時間変化を通じて起こる。以下に述べるベリー位相の時間変化もパラメータの時間依存性を通じて生じる。

パラメータ $\mathbf{R}$ に依存した固有状態 $\psi_n(\mathbf{r},\mathbf{R}(t))$ の固有エネルギーを $E_n(\mathbf{R}(t))$ とすると、これらはシュレーディンガー方程式

$$H(\mathbf{R}(t))\psi_n(\mathbf{r},\mathbf{R}(t)) = E_n(\mathbf{R}(t))\psi_n(\mathbf{r},\mathbf{R}(t)) \tag{1.105}$$

を満足する。時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = H(\mathbf{R}(t))\psi(\mathbf{r},t) \tag{1.106}$$

の解として次の形を仮定しよう。

$$\psi(\mathbf{r},t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(\mathbf{R}(t'))dt'\right)e^{i\gamma_n(t)}\psi_n(\mathbf{r},\mathbf{R}(t)) \tag{1.107}$$

(1.107) を (1.106) に代入して (1.105) を用いると

$$\left(\frac{d}{dt}\gamma_n(t)\right)\psi_n(\mathbf{r},\mathbf{R}(t)) = i\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(\mathbf{r},\mathbf{R}(t)) \tag{1.108}$$

両辺に $\psi_n^*(\mathbf{r},\mathbf{R}(t))$ を掛けて、$\mathbf{r}$ について積分すると

$$\frac{d}{dt}\gamma_n(t) = i\int d\mathbf{r}\psi_n^*(\mathbf{r},\mathbf{R}(t))\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(\mathbf{r},\mathbf{R}(t)) =: i\langle n,\mathbf{R}(t)|\frac{\partial}{\partial t}|n,\mathbf{R}\rangle \tag{1.109}$$

断熱サイクル C に沿って時間積分する。積分時間は $t=0$ から $t=T$ とし、$\gamma(C) \coloneqq \gamma(T)-\gamma(0)$ と定義すると、

$$\gamma_n(C) = i\oint_C dt\langle n,\mathbf{R}(t)|\frac{\partial}{\partial t}|n,\mathbf{R}\rangle \tag{1.110}$$

[*9] この時、各準位の占有数が変化しないのでエントロピーも不変になる。これが断熱と呼ばれるゆえんである。

右辺に

$$\frac{\partial}{\partial t} = \left(\frac{d\mathbf{R}}{dt}\right) \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \tag{1.111}$$

を代入すると

$$\gamma_n(C) = \oint_C d\mathbf{R} \cdot \boldsymbol{A}_n(\mathbf{R}) \tag{1.112}$$

が得られる。ここで

$$\boldsymbol{A}_n(\mathbf{R}) = i\langle n, \mathbf{R}(t)|\nabla_{\mathbf{R}}|n, \mathbf{R}(t)\rangle \tag{1.113}$$

は**ベリー接続**と呼ばれる量で、ベクトルポテンシャルと同様な役割を果たす。(1.112) にストークスの定理を適用すると

$$\gamma_n(C) = \iint_C \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S} \tag{1.114}$$

ここで、面積分は閉曲線 C の内側の領域で行う。また、

$$\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{R}) \coloneqq \nabla_{\mathbf{R}} \times \boldsymbol{A}(\mathbf{R}) \tag{1.115}$$

は**ベリー曲率**であり、パラメータ空間の曲率を表しており、磁場に相当している。磁場がゲージ不変であるのと同様にベリー曲率もゲージの取り方に依らない[*10]。

1.6 TKNN 公式

1.2.4 ではホール電導度の量子化は議論したが、ホール電流 I_y の値そのものは計算しなかった。本節ではそれを具体的に計算を可能にする公式 –TKNN 公式– を導こう[*11]。1.2.4 節では x 軸方向に電場 E をかけたが、それによる摂動は $V = -eEx$ で与えられる。これに対応する状態変化を 1 次摂動で求める。電場をかける前の非摂動状態の固有関数を $|n\rangle$ と書くと、摂動により、$|n\rangle$ は

$$|\tilde{n}\rangle = |n\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle m|(-eEx)|n\rangle}{E_n - E_m}|m\rangle \tag{1.116}$$

と変化する。これから電場に垂直方向に誘起されるホール電流は

$$I_y = \frac{1}{L_x L_y} \sum_n f_{\mathrm{F}}(E_n)\langle\tilde{n}| - ev_y|\tilde{n}\rangle \tag{1.117}$$

[*10] 実際、任意の微分可能なスカラー関数 ϕ に対してゲージ変換 $\boldsymbol{A}(\mathbf{R}) \to \boldsymbol{A}(\mathbf{R}) + \nabla\phi$ を行っても $\nabla_{\mathbf{R}} \times \phi = 0$ なので、ベリー曲率は不変である。

[*11] TKNN 公式は次の文献で得られた。TKNN はこの論文の著者の頭文字である。D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982)

ここで、$f_{\mathrm{F}}(E)$ はフェルミ分布関数である。右辺に (1.116) を代入して、摂動の 1 次まで残すと

$$I_y = \frac{e^2E}{L_xL_y}\sum_n f_{\mathrm{F}}(E_n)\sum_{m(\neq n)}\frac{\langle n|v_y|m\rangle\langle m|x|n\rangle + \langle n|x|m\rangle\langle m|v_y|n\rangle}{E_n - E_m} \tag{1.118}$$

ここで、ハイゼンベルクの運動方程式より

$$v_x = \frac{dx}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, x] \tag{1.119}$$

が成立する。両辺の行列要素をとると

$$\langle m|v_x|n\rangle = \frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)\langle m|x|n\rangle \to \langle m|x|n\rangle = \frac{i\hbar}{E_n - E_m}\langle m|v_x|n\rangle \tag{1.120}$$

これを (1.118) へ代入すると

$$\begin{aligned} I_y &= \frac{i\hbar e^2E}{L_xL_y}\sum_n f_{\mathrm{F}}(E_n)\sum_{m(\neq n)}\frac{\langle n|v_y|m\rangle\langle m|v_x|n\rangle - \langle n|v_x|m\rangle\langle m|v_y|n\rangle}{(E_n - E_m)^2} \\ &=: \sigma_{yx}E \end{aligned} \tag{1.121}$$

これから

$$\sigma_{yx} = \frac{i\hbar e^2}{L_xL_y}\sum_n f_{\mathrm{F}}(E_n)\sum_{m(\neq n)}\frac{\langle n|v_y|m\rangle\langle m|v_x|n\rangle - \langle n|v_x|m\rangle\langle m|v_y|n\rangle}{(E_n - E_m)^2} \tag{1.122}$$

が得られる。ここで

$$v_\mu = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial H}{\partial k_\mu} \quad (\mu = x, y) \tag{1.123}$$

であることを用いると

$$\langle m|v_\mu|n\rangle = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_m)\langle m|\partial_\mu|n\rangle, \quad \partial_\mu := \frac{\partial}{\partial k_\mu} \tag{1.124}$$

が得られる。これは次のように示すことができる。k_μ での偏微分を ∂_μ と略記すると、仮定により $m \neq n$ なので $\langle m|n\rangle = 0$ に注意すると、

$$\begin{aligned} \langle m|(\partial_\mu H)|n\rangle &= \partial_\mu\langle m|H|n\rangle - (\partial_\mu\langle m|)H|n\rangle - \langle m|H(\partial_\mu|n\rangle) \\ &= -E_n(\partial_\mu\langle m|)|n\rangle - E_m\langle m|(\partial_\mu|n\rangle) \\ &= -E_n\partial_\mu\langle m|n\rangle + (E_n - E_m)\langle m|\partial_\mu|n\rangle \\ &= (E_n - E_m)\langle m|\partial_\mu|n\rangle \end{aligned}$$

となり、(1.124) が得られる。(1.124) を (1.122) へ代入すると

$$\begin{aligned} \sigma_{yx} &= \frac{ie^2}{\hbar L_xL_y}\sum_n f_{\mathrm{F}}(E_n)\sum_{m(\neq n)}(-\langle n|\partial_y|m\rangle\langle m|\partial_x|n\rangle + \langle n|\partial_x|m\rangle\langle m|\partial_y|n\rangle) \\ &= \frac{ie^2}{\hbar L_xL_y}\sum_n f_{\mathrm{F}}(E_n)\sum_{m(\neq n)}[(\partial_y\langle n|)|m\rangle\langle m|\partial_x|n\rangle - (\partial_x\langle n|)|m\rangle\langle m|\partial_y|n\rangle] \\ &= \frac{ie^2}{\hbar L_xL_y}\sum_n f_{\mathrm{F}}(E_n)[(\partial_y\langle n|)\partial_x|n\rangle - (\partial_x\langle n|)\partial_y|n\rangle] \end{aligned}$$

が得られる。最後の等式を導く際に、m に関する完全系関係式 $\sum_m |n\rangle\langle m| = 1$ を用いた。m に関する和は $m \neq n$ であるが、$m = n$ の項はゼロなので、この項を加えても差し支えないことに注意しよう。こうして

$$\sigma_{yx} = \frac{ie^2}{\hbar L_x L_y} \sum_n f_{\mathrm{F}}(E_n)(\partial_y \langle n|\partial_x|n\rangle - \partial_x \langle n|\partial_y|n\rangle) \tag{1.125}$$

が得られる。ここで、**ベリー接続**

$$\boldsymbol{a}_n(\boldsymbol{k}) \coloneqq -i\langle n|\nabla_{\boldsymbol{k}}|n\rangle, \quad \nabla_{\boldsymbol{k}} \coloneqq \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} \tag{1.126}$$

を導入すると

$$\sigma_{yx} = -\frac{e^2}{\hbar L_x L_y} \sum_n f_{\mathrm{F}}(E_n)(\partial_y a_{nx} - \partial_x a_{ny}) = \frac{e^2}{\hbar L_x L_y} \sum_n f_{\mathrm{F}}(E_n)\Omega_{nz} \tag{1.127}$$

が得られる。ここで

$$\boldsymbol{\Omega}_n := \nabla_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{a}_n(\boldsymbol{k}) \tag{1.128}$$

は**ベリー曲率**と呼ばれ、磁場に相当する。

これまでの議論では、固有状態を n で区別してきたが、以下の議論ではエネルギーバンドのインデックスと波数を明示的に表記したほうが便利である。したがって、以下では状態を $(n, \boldsymbol{k})$ と表し、n はバンドインデックス、$\boldsymbol{k}$ は波数とする。フェルミ準位がエネルギーバンド内にある場合は、波数 $\boldsymbol{k}$ に関する和はブルルアンゾーン (BZ) 全体にわたるので

$$\frac{1}{L_x L_y} \sum_{\boldsymbol{k}} \to \int_{\mathrm{BZ}} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \tag{1.129}$$

と置き換えると

$$\sigma_{yx} = \nu \frac{e^2}{h}, \quad \nu = \sum_n \nu_n \tag{1.130}$$

となる。ここで

$$\nu_n \coloneqq \int_{\mathrm{BZ}} \frac{d^2k}{2\pi} \left(\frac{\partial a_{ny}}{\partial k_x} - \frac{\partial a_{nx}}{\partial k_y} \right) = \int_{\mathrm{BZ}} \frac{d^2k}{2\pi} (\nabla_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{a}_n(\boldsymbol{k}))_z = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathrm{BZ}} \Omega_{nz} \tag{1.131}$$

は各バンド n からの寄与で**第 1 チャーン数**と呼ばれる。(1.130) と (1.131) は **TKNN 公式**と呼ばれる。

(1.131) の右辺にストークスの定理を適用すると

$$\nu_n \coloneqq \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial \mathrm{BZ}} \boldsymbol{a}_n(\boldsymbol{k}) \cdot d\boldsymbol{k} \tag{1.132}$$

となる。ここで、∂BZ は**ブリルアンゾーン**の境界に沿って周回積分することを意味する。

1.2.4 節で扱った円筒 2 次元系においては、各ランダウ準位に対応する第 1 チャーン数は $\nu_n = 1$ となる。従って、N 番目のランダウ準位まで電子が詰まっている場合は、

$$\nu = \sum_n^N \nu_n = N, \qquad \sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h} = N \frac{e^2}{h} \tag{1.133}$$

となり、式 (1.81) が再現される。一般に、二次元系における第 1 チャーン数は整数値をとる。[*12]

TKNN 公式は量子ホール状態のトポロジカルな物理的起源（チャーン数）を明らかにした点で重要な意義を有し、トポロジカル絶縁体やトポロジカル超伝導[*13]などの物性物理学の重要な研究テーマの発展の契機となった。

1.7　チャーン数の量子化

最後に、チャーン数が整数に量子化されることを証明しよう。証明は、状態ベクトルの位相（ゲージ）が領域全体にわたって滑らかであると仮定するとチャーン数がゼロになってしまうことを示し、この矛盾を避けるためにブリルアンゾーンを 2 つの領域に分割してそれらの境界で波動関数が矛盾なく接続されることを要請することことでなされる。

波数が $\mathbf{k}$ の電子の波動関数を $|u(\mathbf{k})\rangle$ とする。このとき、ベリー接続 $\boldsymbol{a}(\mathbf{k}) = (a_x, a_y, 0)$ は (1.126) より

$$\boldsymbol{a}(\mathbf{k}) = -i\langle u(\mathbf{k})|\nabla_{\mathbf{k}}|u(\mathbf{k})\rangle \tag{1.134}$$

で与えられる。また、ベリー曲率の z 成分 $\Omega_z(\mathbf{k})$ は、(1.128) より

$$\Omega_z(\mathbf{k}) = [\nabla_{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{a}(\mathbf{k})]_z = \frac{\partial a_y}{\partial k_x} - \frac{\partial a_x}{\partial k_y} \tag{1.135}$$

となる。チャーン数 C は、(1.131) で定義される ν_n をバンド n について和をとった量である。

$$C = \sum_n \nu_n \tag{1.136}$$

電子が占有しているバンドが 1 つだけの場合はベリー曲率をブリルアンゾーン (BZ) 全体で積分し、 2π で割った量に等しくなる ((1.131) 式参照)。

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} \Omega_z(\mathbf{k})\, d^2k \tag{1.137}$$

簡単のため、以下ではこの場合を考える。また、2 次元系のブリルアンゾーンは周期境界条件が課せられていると仮定する。

さて、ブリルアンゾーンのすべての点 $\mathbf{k}$ において、$|u(\mathbf{k})\rangle$ の位相が完全に滑らか（微分可能）であり、ゲージが一意に定義できると仮定すると、ベリー接続 $\boldsymbol{a}(\mathbf{k})$ もまたブリルアンゾーン全域で特異点を持たない滑らかなベクトル場となる。ブリルアンゾーンを、 $k_x \in [0, 2\pi]$, $k_y \in [0, 2\pi]$ の正方形領域 D とし、その境界（外周）を ∂D とする（図 1.4(a) 参照)。

[*12] M. Kohmoto, Annals of Physics 160, 343 (1985).

[*13] 安藤陽一「トポロジカル絶縁体入門」(KS 物理専門書)、野村健太郎「トポロジカル絶縁体・超伝導体」(丸善出版、現代理論物理学シリーズ)

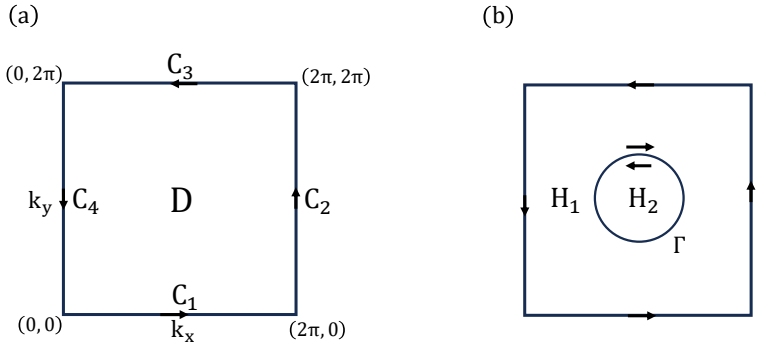


図 1.4　2 次元系のブリルアンゾーン (a) と、それを 2 つの領域 H_1 と H_2 に分割したもの (b)。Γ は 2 つの領域の境界。矢印はストークスの定理で線積分する方向。Γ に沿った線積分は、領域 H_1 は時計回り、領域 H_2 は反時計回りである。

$\boldsymbol{a}(\mathbf{k})$ が領域 D の全域で滑らかであると仮定すると、**ストークスの定理**を適用することができ

$$C = \frac{1}{2\pi}\int_D (\nabla_{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{a})\, d^2k = \frac{1}{2\pi}\oint_{\partial D} \boldsymbol{a}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} \tag{1.138}$$

が得られる。BZ の境界 ∂D に沿った周回積分は、4 つの辺（C_1, C_2, C_3, C_4）の線積分の和に分解できる。

$$\oint_{\partial D} \boldsymbol{a} \cdot d\mathbf{k} = \int_{C_1} \boldsymbol{a} \cdot d\mathbf{k} + \int_{C_2} \boldsymbol{a} \cdot d\mathbf{k} + \int_{C_3} \boldsymbol{a} \cdot d\mathbf{k} + \int_{C_4} \boldsymbol{a} \cdot d\mathbf{k} \tag{1.139}$$

ここで、仮定より $\boldsymbol{a}(\mathbf{k})$ は波数空間の周期性（2π の周期性）を満たすため、対向する辺同士で以下の関係式が成り立つ。

$$\boldsymbol{a}(k_x, 0) = \boldsymbol{a}(k_x, 2\pi) \tag{1.140}$$
$$\boldsymbol{a}(0, k_y) = \boldsymbol{a}(2\pi, k_y) \tag{1.141}$$

積分経路の向きが互いに逆であるため、底辺 C_1 と上辺 C_3、および右辺 C_2 と左辺 C_4 の積分はそれぞれ相殺し合う。従って、

$$C = \frac{1}{2\pi}\oint_{\partial D} \boldsymbol{a}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} = 0 \tag{1.142}$$

従って、ブリルアンゾーン全域で滑らかな単一のゲージが存在するならば、チャーン数は 0 になる。対偶をとると、チャーン数がゼロでない場合は全領域で滑らかな単一のゲージを定義することは不可能であり、必ずどこかで特異点（不連続性）が生じる。

ゼロでないチャーン数を持つ系においては、ブリルアンゾーン全体を覆う単一の滑らかな波動関数を定義しようとすると、その波動関数の振幅が 0 になる零点が空間内に存在し

なければならない。波動関数の振幅が 0 になる点では、その位相を定義することができず、ベリー接続 $\boldsymbol{a}(\boldsymbol{k})$ の特異点となる。この特異点を回避するためには、ブリルアンゾーン全体を 1 つの波動関数で記述するのではなく、図 1.4(b) のように 2 つの H_1 と領域 H_2 に分割し、それぞれの領域で滑らかかつゼロでない波動関数 $|u_1(\boldsymbol{k})\rangle$ と $|u_2(\boldsymbol{k})\rangle$ を導入する必要がある。

これら 2 つの波動関数は、2 つの領域の境界 Γ 上で同じ物理状態を表さなければならないので、互いに $U(1)$ ゲージ変換で結ばれる。

$$|u_1(\boldsymbol{k})\rangle = e^{i\phi(\boldsymbol{k})}|u_2(\boldsymbol{k})\rangle \quad (\boldsymbol{k} \in \Gamma) \tag{1.143}$$

この位相因子 $\phi(\boldsymbol{k})$ の導入に伴い、(1.134) からベリー接続は境界上で次の変換則に従うことがわかる。

$$\boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{a}_2(\boldsymbol{k}) - \nabla_{\boldsymbol{k}}\phi(\boldsymbol{k}) \tag{1.144}$$

領域を H_1 と H_2 に分割したことで、全体の積分はそれぞれの領域の積分の和となり、ストークスの定理を適用すると共通の境界 Γ 上の線積分へと帰着される。

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\pi}\int_{BZ}\Omega_z d^2k &= \frac{1}{2\pi}\left[\int_{H_1}(\nabla\times\boldsymbol{a}_1)_z d^2k + \int_{H_2}(\nabla\times\boldsymbol{a}_2)_z d^2k\right] \\ &= \frac{1}{2\pi}\oint_{\Gamma}(\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2)\cdot d\boldsymbol{k}\end{aligned} \tag{1.145}$$

ここに式 (1.144) のゲージ変換を代入すると、ベリー接続の項は相殺され、位相因子の勾配の積分のみが残る。

$$\frac{1}{2\pi}\int_{BZ}\Omega_z d^2k = -\frac{1}{2\pi}\oint_{\Gamma}\nabla_{\boldsymbol{k}}\phi(\boldsymbol{k})\cdot d\boldsymbol{k} \tag{1.146}$$

波動関数が境界 Γ を 1 周して元に戻った際に一価性を満たす（物理的に同じ状態に帰着する）ためには、この位相の線績分は 2π の整数倍でなければならない。

$$\oint_{\Gamma}\nabla_{\boldsymbol{k}}\phi(\boldsymbol{k})\cdot d\boldsymbol{k} = 2\pi n \quad (n\in\mathbb{Z}) \tag{1.147}$$

これより、ホール伝導度が

$$\sigma_{xy} = n\frac{e^2}{h} \quad (n = 0, \pm1, \pm2, \dots) \tag{1.148}$$

で与えられることがわかる。この整数 n が、第一チャーン数である。この結果は、チャーン数の量子化が境界 Γ における波動関数の位相のねじれ（ゲージ変換の位相 ϕ だけねじれていると考える）に由来していることを示している[*14]。この幾何学的定式化は、現代のトポロジカル絶縁体やトポロジカル物質の研究の契機となった。

[*14] 数学的注釈：周期的境界条件が課せられてブリルアンゾーンはトーラス T^2 で記述される。トーラス上に、波動関数の位相の自由度である $U(1)$ ファイバーが乗った $U(1)$ 主ファイバー束（$U(1)$ principal fiber bundle) があると解釈できる。そして、それを分類する指標が第一チャーン類で与えられる。これは、ディラック・モノポールにおける磁荷の量子化と同じ幾何学的構造を持っており、チャーン数は $U(1)$ 主ファイバー束の位相的不変量となっている。

第 2 章

散乱問題

量子力学における散乱問題は、一般に、量子状態間の遷移確率振幅を求めることを目的としている。具体的には、電子や原子などが、空間内のポテンシャルに散乱されたり、他の粒子と相互作用することによって進行方向（運動量）やエネルギーを変えることに着目し、そのような散乱のデータから未知のポテンシャルや粒子間の相互作用を研究するための標準的な手法となっている。本講義では、非相対論の枠内で散乱問題を取り扱う。

古典力学における 2 粒子の衝突は、相対速度と衝突パラメータ（相互作用がないときにすれ違う距離）で記述されるが、量子力学では軌道という概念が存在しないので、衝突パラメータの概念も本来の意味を失い、部分波展開がそれにとって代わる[*1]。この場合、散乱によって入射方向に対してどれくらい異なった角度方向へ散乱されたかが重要になる。

今、ある入射軸に垂直な単位面積に単位時間当たり入射した N 個の粒子が標的に散乱されて、入射軸から角度 θ の方向の立体角 $d\Omega$ へ散乱される粒子数を ΔN とする。ΔN は N と $d\Omega$ に比例するので

$$\Delta N = \sigma(\theta) N d\Omega \tag{2.1}$$

と書ける。$\sigma(\theta)$ を**微分断面積**、この量を全立体角で積分した量

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = \int \sigma(\theta) d\Omega \tag{2.2}$$

を**全断面積**という。この量は、物理的には入射粒子が単位時間当たりに散乱される割合（確率）を示している。名前の由来は、そのような割合が標的の断面積に比例すると考えられることによる。断面積は面積の次元を持っている。以下では、これらの量の具体的な計算法について述べる。

[*1] ただし、入射粒子のエネルギーが高く、ド・ブロイ波長がターゲットのサイズに比べて十分に小さくなる領域では、準古典的近似（アイコナール近似）が適用でき衝突パラメータが意味を持つ。詳しくは (2.77) 式の下のパラグラフを参照。

2.1　2 粒子系の衝突

質量が m_1 と m_2 の 2 粒子の散乱を考える。系のラグラジアンは

$$L = \frac{m_1}{2}\dot{\mathbf{r}}_1^2 + \frac{m_2}{2}\dot{\mathbf{r}}_2^2 - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \tag{2.3}$$

重心座標 $\mathbf{R}$ と相対座標 $\mathbf{r}$ を導入する。

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \qquad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \tag{2.4}$$

これらを逆に解いて得られる

$$\mathbf{r}_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\mathbf{r} + \mathbf{R}, \qquad \mathbf{r}_2 = -\frac{m_1}{m_1 + m_2}\mathbf{r} + \mathbf{R} \tag{2.5}$$

を (2.3) に代入すると

$$\begin{aligned} L &= \frac{m_1}{2}\left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\dot{\mathbf{r}} + \dot{\mathbf{R}}\right)^2 + \frac{m_2}{2}\left(-\frac{m_1}{m_1 + m_2}\dot{\mathbf{r}} + \dot{\mathbf{R}}\right)^2 - V(\mathbf{r}) \\ &= \frac{M}{2}\dot{\mathbf{R}}^{\,2} + \frac{m}{2}\dot{\mathbf{r}}^{\,2} - V(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{2.6}$$

$$M \equiv m_1 + m_2, \qquad m \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \text{（換算質量）} \tag{2.7}$$

が得られる。

$\mathbf{R}, \mathbf{r}$ に対する正準運動量 $\mathbf{P}, \mathbf{p}$ は

$$\mathbf{P} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{R}}} = M\dot{\mathbf{R}}, \qquad \mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}} \tag{2.8}$$

系のハミルトニアン H は、

$$H = \dot{\mathbf{R}}\cdot\mathbf{P} + \dot{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{p} - L = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \tag{2.9}$$

対応するシュレディンガー方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}; t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r})\right)\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}; t) \tag{2.10}$$

で与えられる。

相互作用は相対座標 $\mathbf{r}$ だけに依存するので、重心座標 $\mathbf{R}$ に依存する部分は変数分離できる。実際、

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}; t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\mathbf{P}^2}{2M} + E\right)t} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) \tag{2.11}$$

とおくと、相対座標に関する 1 粒子のシュレディンガー方程式に帰着する。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \tag{2.12}$$

ここで、$\Delta := \Delta_{\mathbf{r}}$ である。

2.2 散乱波に対する積分方程式

(2.12) で波数 $\mathbf{k}$ の散乱波に注目して

$$E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \qquad V(\mathbf{r}) \equiv \frac{\hbar^2}{2m} U(\mathbf{r}), \qquad \psi(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{2.13}$$

とおくと

$$(\Delta + k^2)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{2.14}$$

となる。(2.14) の解は、斉次部分であるヘルムホルツ方程式

$$(\Delta + k^2)\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0 \tag{2.15}$$

の一般解 $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ と、非斉次な微分方程式

$$(\Delta + k^2)\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{2.16}$$

の特殊解 $\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ の和

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{2.17}$$

で与えられる。

$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は、平面波

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{2.18}$$

であり、$\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は、

$$(\Delta + k^2)G(\mathbf{r}) = -\delta^3(\mathbf{r}) \tag{2.19}$$

の解で与えられるグリーン関数 $G(\mathbf{r})$ を用いて

$$\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\int d\mathbf{r}'\, G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \tag{2.20}$$

と表される。$G(\mathbf{r})$ を求めるために

$$G(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \widetilde{G}(\mathbf{k}'), \qquad \delta^3(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \tag{2.21}$$

を (2.19) に代入すると

$$\widetilde{G}(\mathbf{k}') = \frac{1}{k'^2 - k^2} \tag{2.22}$$

が得られるので、これを (2.21) の最初の式に代入すると

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &= \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}}{k'^2 - k^2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk' \frac{k'^2}{k'^2 - k^2} \int_0^\pi d\theta \sin\theta\, e^{ik'r\cos\theta} \\ &= \frac{1}{4\pi^2 ir} \int_0^\infty dk' \frac{k'}{k'^2 - k^2} (e^{ik'r} - e^{-ik'r}) \\ &= \frac{1}{4\pi^2 ir} \int_{-\infty}^\infty dk' \frac{k' e^{ik'r}}{k'^2 - k^2}. \end{aligned} \tag{2.23}$$

被積分関数に含まれる因子 $e^{ik'r}$ のために、積分路は複素上半平面を回らなければならない。また、$k' = \pm k$ での発散を避けるために、k に無限小の虚部をもたせる。

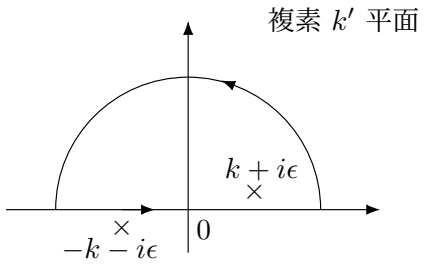


図 2.1 (2.24) の積分路。被積分関数の因子 $e^{ik'r}$ が発散しないように、実軸と上半平面を反時計回りに回る積分路をとる。この時、積分には極 $k'=k+i\epsilon$ における留数が寄与する。

まず、極が $k'=\pm(k+i\epsilon)$ の場合を考える。ここで、ϵ は無限小の正の数である。この場合、積分路内の極は $k+i\epsilon$ だけなので、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk' \frac{k'e^{ik'r}}{k'^2-(k+i\epsilon)^2} = 2\pi i \lim_{k'\to k+i\epsilon}(k'-k-i\epsilon)\frac{k'e^{ik'r}}{k'^2-(k+i\epsilon)^2} = \pi i e^{ikr}. \quad (2.24)$$

したがって、解は外向きに広がる外向波である。

$$\therefore \quad G^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi r}e^{ikr} \qquad (\text{外向波}) \quad (2.25)$$

同様に、極が $k'=\pm(k-i\epsilon)$ の場合は、積分路内の極は $-k+i\epsilon$ だけなので (2.24) と同様に

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk' \frac{k'e^{ik'r}}{k'^2-(k-i\epsilon)^2} = 2\pi i \lim_{k'\to -k+i\epsilon}(k'+k-i\epsilon)\frac{k'e^{ik'r}}{k'^2-(k-i\epsilon)^2} = \pi i e^{-ikr}.$$

となり、解は内向きの内向波となる。

$$G^{(-)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi r}e^{-ikr} \qquad (\text{内向波}) \quad (2.26)$$

このように、無限小の虚部を導入することは、微分方程式 (2.19) の解を一意に決めるための境界条件を与えることに他ならない。虚部の符号は外向波か内向波かを決めるので、時間反転対称を破ることに注意しよう。

外向き、内向きの散乱波をそれぞれ $\psi^{(+)}$、$\psi^{(-)}$ と書くと、(2.16)、(2.17)、(2.20) より

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}'\, G^{(\pm)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}') \quad (2.27)$$

これに (2.18) と (2.25)、(2.26) を代入すると

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi}\int d\mathbf{r}'\, \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}U(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}') \quad (2.28)$$

これが、散乱波に対する積分方程式を与える。散乱がない場合（すなわち、$U=0$ の場合）は、右辺の第 1 項のみが残るので、この項は入射波の寄与と考えられる。

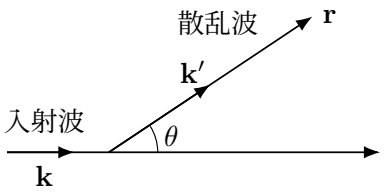


図 2.2 波数が $\mathbf{k}$ の入射波は、入射方向に対して角度 θ をなす方向へ散乱される。$\mathbf{k}'$ は散乱波の波数である。

$r \to \infty$ では (2.28) の右辺に現れる因子は次のように展開できる（図 2.2 参照）。

$$
\begin{aligned}
&|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'} \simeq r - \frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r}, \\
&e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \simeq e^{ikr} e^{-ik\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r}} = e^{ikr} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}, \qquad \mathbf{k}' := k\frac{\mathbf{r}}{r}, \\
&|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1} \simeq r^{-1}\left(1 + \frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2}\right)^{-1} \simeq r^{-1}.
\end{aligned}
$$

これらを (2.28) に代入すると

$$
\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r\to\infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{\pm ikr}}{r}\left(-\frac{1}{4\pi}\int d\mathbf{r}'\, e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}')\right) \tag{2.29}
$$

波数 $\mathbf{k}$ の入射波が波数 $\mathbf{k}'$ 方向へと散乱される**散乱振幅** $f(\theta)$ は、

$$
\psi^{(+)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r\to\infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \tag{2.30}
$$

で定義される。ここで、θ は $\mathbf{k}$ と $\mathbf{k}'$ のなす角度である（図 2.2 参照）。(2.30) を (2.29) と比較すると次の結果が得られる。

$$
f(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\int d\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \tag{2.31}
$$

(2.13)、(2.18) を使って (2.31) を書き換えると次の結果が得られる。

$$
\boxed{
\begin{aligned}
f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\mathbf{r}\, \phi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \\
&=: -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle \phi_{\mathbf{k}'} | V | \psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle
\end{aligned}
} \tag{2.32}
$$

2.3　散乱振幅と微分断面積の関係

入射粒子の流速密度—単位時間、単位断面積当たりに入射する粒子数—は、

$$
\mathbf{j}^{\text{in}} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\phi_{\mathbf{k}}^*\nabla\phi_{\mathbf{k}} - \phi_{\mathbf{k}}\nabla\phi_{\mathbf{k}}^*\right) = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} = \mathbf{v} \tag{2.33}
$$

他方、入射方向と角度 θ $(\neq 0)$ をなす方向に散乱される流速密度 $j(\theta)$ は

$$
\chi_\theta \equiv \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \tag{2.34}
$$

$$j(\theta) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\chi_\theta^* \frac{\partial \chi_\theta}{\partial r} - \chi_\theta \frac{\partial \chi_\theta^*}{\partial r}\right) = \frac{v}{r^2}|f(\theta)|^2, \qquad v \equiv \frac{\hbar k}{m} \tag{2.35}$$

角度 θ のまわりの立体角 $d\Omega$ をなす面積 $r^2 d\Omega$ 内に単位時間当たりに散乱される粒子数は

$$j(\theta) r^2 d\Omega = v|f(\theta)|^2 d\Omega.$$

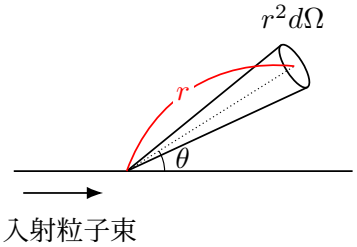


図 2.3 入射粒子束のうち、入射方向に対して角度 θ をなす方向の微小立体角 $d\Omega$ へ散乱される確率は、$\sigma(\theta)d\Omega$ で与えられる。

単位時間当たりの入射粒子数は (2.33) から $j^{\text{in}} = v$ だから、両者の比

$$\boxed{\sigma(\theta)d\Omega \equiv \frac{j(\theta) r^2 d\Omega}{j^{\text{in}}} = |f(\theta)|^2 d\Omega} \tag{2.36}$$

は、入射粒子が、立体角 $d\Omega$ 内へと散乱される確率を与える。$\sigma(\theta)$ は微分断面積と呼ばれる。

(2.36) を全立体角にわたって積分した量

$$\sigma^{\text{tot}} = \int |f(\theta)|^2 d\Omega \tag{2.37}$$

は、入射粒子が、$\theta = 0$ 以外の方向へ散乱される確率を与える。σ^{tot} は、**散乱断面積**と呼ばれる。

2.4　部分波展開

部分波展開は、軌道角運動量ごとの成分に分解して散乱波を解析する手法である。特に、中心力場のようにポテンシャルが球対称な場合は、角運動量が保存されるので、散乱波を角運動量の固有状態で分類することができる。素粒子や原子核の反応分析に広く用いられ、低エネルギー散乱の計算や共鳴状態の発見に不可欠なアプローチである。

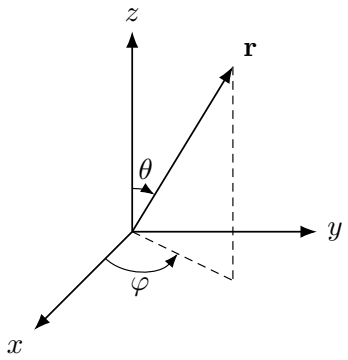


図 2.4 極座標表示。θ は極角、φ は方位角、r は動径である。

部分波展開は、図 2.4 で示した極座標表示でなされる。

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \tag{2.38}$$

ここで θ、φ、r はそれぞれ**極角**、**方位角**、**動径**である。このとき、(2.12) のハミルトニアンは次のように書ける。

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] + V(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{2.39}$$

角運動量演算子の球座標表示は

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ L_y &= zp_x - xp_z = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ L_z &= xp_y - yp_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned} \tag{2.40}$$

で与えられる。これらから角運動量の**昇演算子**と**降演算子**の極座標表示が得られる。

$$\begin{aligned} L_+ &:= L_x + iL_y = \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ L_- &:= L_x - iL_y = \hbar e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \end{aligned} \tag{2.41}$$

角運動量ベクトル $\mathbf{L}$ の自乗は

$$\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{2.42}$$

で与えられる。これを (2.39) と比較すると、ハミルトニアンは次のように書ける。

$$\boxed{H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(\mathbf{r})} \tag{2.43}$$

右辺の第二項は、古典論では遠心力ポテンシャル

$$\frac{L^2}{2mr^2} = \frac{m\omega^2 r^2}{2}, \qquad \omega \equiv \frac{L}{mr^2} \tag{2.44}$$

を表している。

$\mathbf{L}^2$ は L_z と交換する ($[\mathbf{L}^2, L_z] = 0$) ので、$\mathbf{L}^2$ と L_z を同時に対角化できる。それらの同時固有関数は、**球面調和関数** $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ と呼ばれ、**方位量子数** l と**磁気量子数** m によって特徴づけられる。

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta,\varphi), \qquad l = 0, 1, 2, \dots \\ L_z Y_l^m(\theta,\varphi) &= \hbar m Y_l^m(\theta,\varphi), \qquad m = l, l-1, \dots, -l \end{aligned} \tag{2.45}$$

$\mathbf{L}^2$ の固有値は m には依存しないので、m の異なる状態はエネルギー的に縮退している [(2.43) 参照]。

$V(\mathbf{r})$ が球対称で、散乱波が φ に依らない場合の角度依存性はルジャンドル関数 P_l を用いて

$$Y_l^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta)$$

と展開できる。**レイリーの公式**

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \tag{2.46}$$

において、$j_l(x)$ の漸近公式 $j_l(x) \xrightarrow{x\to\infty} \sin(x - l\pi/2)/x$ を代入して得られる結果

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &\xrightarrow{kr\to\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} i^l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos\theta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ikr} \left[e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}\right] P_l(\cos\theta) \end{aligned} \tag{2.47}$$

および、$f(\theta)$ を完全系 $P_l(\cos\theta)$ で展開した結果

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} [\eta_l(k) - 1] P_l(\cos\theta) \tag{2.48}$$

を散乱波の漸近形 (2.30) に代入すると、次のような部分波展開の公式が得られる。

$$\boxed{\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ikr} \left[\eta_l(k) e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}\right] P_l(\cos\theta)} \tag{2.49}$$

右辺の括弧内の第一項は外向波、第二項は内向波を表している。球対称ポテンシャルでは、各 l ごとに粒子の流れが保存されるので、確率の流れの保存則によって、両者の振幅の大きさは等しい。従って、

$$|\eta_l| = 1 \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\eta_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}} \tag{2.50}$$

ここで、$\delta_l(k)$ は**位相のずれ**と呼ばれる。(2.50) を (2.48) に代入すると

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l(k)} \sin\delta_l(k) P_l(\cos\theta) \tag{2.51}$$

が得られる。これを (2.36) に代入すると

$$\sigma(\theta) \overset{(2.36)}{=} \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin\delta_l(k) P_l(\cos\theta) \right|^2$$

これを (2.37) に代入し、P_l の直交性関係式

$$\int_0^{\pi} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \tag{2.52}$$

を使って、角度積分を実行すると、散乱断面積に関する次の公式が得られる。

$$\boxed{\sigma^{\mathrm{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2\delta_l(k)} \tag{2.53}$$

このように、散乱問題は、各部分波の位相のずれ δ_l を決定する問題に帰着される。

$P_l(1) = 1$ であることを用いると、(2.51) から

$$\mathrm{Im} f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2\delta_l(k)$$

となることがわかる。これを (2.53) と比較すると

$$\mathrm{Im} f(0) = \frac{k}{4\pi} \sigma^{\mathrm{tot}} \tag{2.54}$$

が得られる。この結果は、前方散乱 ($\theta = 0$) での散乱振幅の虚部が全散乱断面積に比例することを示している。これを**光学定理**という。入射波が $\theta = 0$ 以外の方向に散乱されると、その分だけ入射方向のまま散乱される（すなわち、前方散乱される）確率が減少することを示している。これは確率の保存であり、散乱過程がユニタリであることの帰結である[*2]。

各 l に対する断面積の最大値 $\sigma_l^{\max}$ は**共鳴散乱**の条件

$$\delta_l = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi, \qquad n = 0, \pm1, \pm2, \ldots \tag{2.55}$$

が成立するときに得られ、

$$\sigma_l^{\max} = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1) \tag{2.56}$$

(2.56) は、**ユニタリー極限**と呼ばれる。ユニタリー極限と呼ばれる理由は、量子力学で確率の保存（ユニタリー性）から導かれる弾性散乱断面積の上限に達しているからである。

[*2] 光学定理は、非弾性散乱や吸収チャンネルが存在する場合も成立する。この場合は弾性散乱断面積と非弾性散乱断面積の合計が前方散乱振幅の虚部に比例する。

2.5　位相のずれの物理的意味と連続条件による決定法

(2.49) に (2.50) を代入すると

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ikr} i^l e^{i\delta_l} \left(e^{i\delta_l} i^{-l} e^{ikr} - e^{-i\delta_l} i^l e^{-ikr} \right) P_l(\cos\theta)$$
$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} i^l e^{i\delta_l} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) P_l(\cos\theta) \tag{2.57}$$

これを、入射波の $r \to \infty$ における漸近形 (2.47)

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xrightarrow{r\to\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} i^l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) P_l(\cos\theta) \tag{2.58}$$

と比較すると、各部分波の位相がポテンシャルによる散乱のため δ_l ずつシフトしていることがわかる。

まず、$\delta_l < 0$ の場合を考える。散乱波 (2.57) が入射波の漸近形 (2.58) と同じだけ位相が進むためには、より長い距離 r を伝播する必要がある。図 2.5 からわかるように、これは、散乱体が斥力を及ぼした結果と同じである。逆に、$\delta_l > 0$ の場合は引力となる。すなわち、

$$\boxed{\begin{array}{lcl} \delta_l < 0 & \longleftrightarrow & \text{斥力} \\ \delta_l > 0 & \longleftrightarrow & \text{引力} \end{array}} \tag{2.59}$$

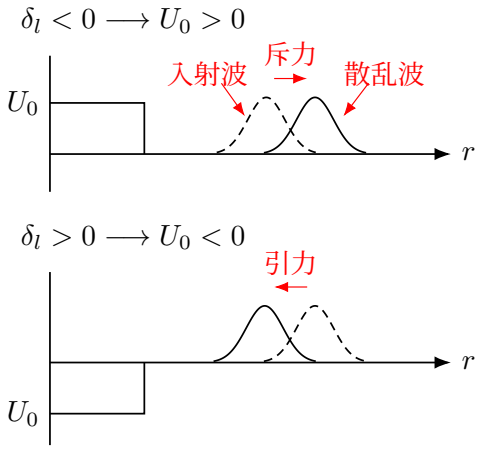


図 2.5 散乱の位相シフト δ_l が負（正）の場合は、粒子間相互作用は斥力（引力）になる。

次に、連続の条件から位相のずれを決める方法を述べる。この方法は、ポテンシャル $V(r)$ がある半径 a の内側だけに存在し、その外側では 0 となっている場合に有効であ

る。以下では、そのような場合を考える。球対称なポテンシャルの場合、散乱状態は磁気量子数 m には依存せず、次のように展開できる。

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l R_l^{(+)}(r) P_l(\cos\theta) \tag{2.60}$$

これをシュレディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r)\right]\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = E_k\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \tag{2.61}$$

に代入して、$\mathbf{L}^2 P_l = \hbar^2 l(l+1)P_l$ および P_l の直交性を使うと、

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right] R_l^{(+)}(r) = 0, \quad k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}E_k \tag{2.62}$$

が得られる。$r > a$ では $V(r) = 0$ とすると、(2.62) の独立な 2 つの解は、球ベッセル関数 $j_l(kr)$ と球ノイマン関数 $n_l(kr)$、あるいは、両者の線形結合で作られる第 1 種および第 2 種の球ハンケル関数 $h_l^{(1)}(x)$、$h_l^{(2)}(x)$

$$h_l^{(1)}(x) \equiv j_l(x) + in_l(x), \qquad h_l^{(2)}(x) \equiv j_l(x) - in_l(x) \tag{2.63}$$

で与えられる。従って、$r > a$ における散乱波は一般に次のように展開される。

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\left[A_l h_l^{(1)}(kr) + B_l h_l^{(2)}(kr)\right] P_l(\cos\theta) \tag{2.64}$$

係数 A_l、B_l は、$r \to \infty$ における漸近形を (2.57) と比較することで決められる。すなわち、$x \to \infty$ で

$$\begin{aligned} j_l(x) &\longrightarrow \frac{\sin(x - l\pi/2)}{x}, \qquad & n_l(x) &\longrightarrow -\frac{\cos(x - l\pi/2)}{x} \\ h_l^{(1)}(x) &\longrightarrow (-i)^{l+1}\frac{e^{ix}}{x}, \qquad & h_l^{(2)}(x) &\longrightarrow i^{l+1}\frac{e^{-ix}}{x} \end{aligned} \tag{2.65}$$

これらを (2.64) に代入すると

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{kr}\left[(-i)^{l+1}A_l e^{ikr} + i^{l+1}B_l e^{-ikr}\right] P_l(\cos\theta)$$

これを (2.57) と比較すると

$$A_l = \frac{2l+1}{2i}i^{l+1}e^{2i\delta_l}, \qquad B_l = \frac{2l+1}{2i}i^{l+1}.$$

これらを (2.64) に代入すると、$r > a$ における厳密解が得られる。

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{2}i^l\left[e^{2i\delta_l(k)}h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr)\right] P_l(\cos\theta) \tag{2.66}$$

さて、微分方程式 (2.62) の $r < a$、$r > a$ での解をそれぞれ $R_l^{\rm in}$、$R_l^{\rm out}$ と書くと、$r = a$ における対数微分の連続性から

$$\frac{\frac{d}{da}R_l^{\rm in}(a)}{R_l^{\rm in}(a)} = \frac{\frac{d}{da}R_l^{\rm out}(a)}{R_l^{\rm out}(a)} \tag{2.67}$$

$r > a$ では (2.66) から

$$R_l^{\rm out}(r) \propto e^{2i\delta_l(k)} h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr).$$

$r < a$ での $R_l^{\rm in}$ が知られているものとして

$$f_l^{\rm in} \equiv \frac{1}{k}\frac{\frac{d}{da}R_l^{\rm in}(a)}{R_l^{\rm in}(a)} \tag{2.68}$$

とおくと

$$f_l^{\rm in} = \frac{e^{2i\delta_l} h_l^{(1)\prime}(ka) + h_l^{(2)\prime}(ka)}{e^{2i\delta_l} h_l^{(1)}(ka) + h_l^{(2)}(ka)}$$

が得られる。ここで

$$h_l^{(1)\prime}(ka) := \left.\frac{d}{dx}h_l^{(1)}(x)\right|_{x=ka}$$

である。これを $e^{2i\delta_l}$ について解くと次の結果が得られる。

$$e^{2i\delta_l(k)} = -\frac{f_l^{\rm in} h_l^{(2)}(ka) - h_l^{(2)\prime}(ka)}{f_l^{\rm in} h_l^{(1)}(ka) - h_l^{(1)\prime}(ka)} \tag{2.69}$$

これから

$$\tan\delta_l(k) \equiv \frac{f_l^{\rm in} j_l(ka) - j_l'(ka)}{f_l^{\rm in} n_l(ka) - n_l'(ka)} \tag{2.70}$$

が得られる。ここで、

$$j_l'(ka) := \left.\frac{d}{dx}j_l(x)\right|_{x=ka}$$

である。

2.6　剛体球ポテンシャルによる散乱

ポテンシャルが剛体球

$$V(r) = \begin{cases} 0 & (r > a) \\ \infty & (r < a) \end{cases} \tag{2.71}$$

の場合を考えよう。入射波の振幅は $r = a$ のところでゼロでない値からゼロになるので、$R_l^{\rm in}(a) = 0$、$|\frac{d}{da}R_l^{\rm in}(a)| = \infty$ となり、$|f_l^{\rm in}| = \infty$ である。故に、(2.70) から

$$\tan\delta_l(k) = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)} \tag{2.72}$$

が得られる。

まず、入射エネルギーが低く、条件 $ka \ll 1$ が成立するような低エネルギー散乱を考える。このとき、

$$j_l(ka) \simeq \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!}, \qquad n_l(ka) \simeq -\frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}} \tag{2.73}$$

を (2.72) へ代入すると

$$\tan\delta_l \simeq -\frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \tag{2.74}$$

が得られ、l の増加とともに位相のずれは急速に小さくなる[*3]。特に、低エネルギー極限 $ka \to 0$ では、S 波（$l=0$）散乱のみが重要になる[*4]。S 波の寄与は、

$$\boxed{\begin{aligned} &\delta_0 = -ka, \\ &f(\theta) = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin\delta_0 \simeq -a, \\ &\sigma^{\mathrm{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2\delta_0 \simeq 4\pi a^2. \end{aligned}} \tag{2.75}$$

S 波は球対称なので、全断面積は剛体球の表面積に等しい [*5]。

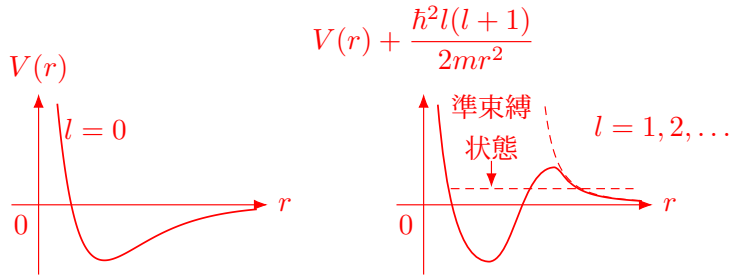


図 2.6 原子間相互作用ポテンシャル $V(r)$ の例。相対運動が角運動量 $\hbar l$ を持つ場合は、$V(r)$ に加えて遠心力ポテンシャルも作用する。

次に、入射エネルギーが高く、条件 $ka \gg 1$ が成立する場合を考える。このとき、

$$\begin{aligned} &j_l(ka) \simeq \frac{\sin(ka - l\pi/2)}{ka}, \qquad n_l(ka) \simeq -\frac{\cos(ka - l\pi/2)}{ka}, \\ &\tan\delta_l \simeq -\tan(ka - l\pi/2) \quad \longrightarrow \quad \delta_l = -ka + \frac{l\pi}{2}. \end{aligned} \tag{2.76}$$

[*3] $\delta_l(k) \propto k^{2l+1}$ のときには (2.53) より $\sigma_l^{\mathrm{tot}}(k) \propto k^{4l}$（$k \to 0$）となるが、この結果は中心力ポテンシャル $V \propto r^{-n}$ の場合は、$n > 2l+3$ という条件が満たされれば成立する。たとえば、ファンデルワールスポテンシャル（$n=6$）の場合は、S 波（$l=0$）と P 波（$l=1$）に対しては正しい。

[*4] $l \geq 1$ の場合、原子間には、原子間相互作用 $V(r)$ に加えて、遠心力ポテンシャル $\hbar^2 l(l+1)/(2mr^2)$ が働くので、入射エネルギーが低いと、原子は遠心力ポテンシャルに反射されてポテンシャル $V(r)$ を感じなくなる。但し、遠心力障壁と $r=0$ 付近のハードコアの間に図 2.6 のような**準束縛状態**ができる場合は、入射エネルギーが共鳴すると $l \neq 0$ の部分波の寄与が増大する。これを**形状共鳴**という。

[*5] この議論は 3 次元の場合は正しいが、一般の d 次元の場合は、微分散乱断面積が波数 k に依存するために同様な議論（すなわち、散乱断面積が d 次元球の表面積に等しいという議論）は成立しない。詳しくは次の記事を参照されたい。https://note.com/landau_fun/n/nd53388de06f2

$$\sigma^{\rm tot} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{l_{\max}}(2l+1)\sin^2\left(ka-\frac{l\pi}{2}\right), \qquad l_{\max}=ka \tag{2.77}$$

ここで、$l_{\max}$ は、入射エネルギーが与えられた場合の散乱波の方位量子数の最大値である。衝突係数 b は $\hbar kb=\hbar l$ より $b=l/k$。散乱が起こるためには $b\le a$ でなければならないので $l/k\le a$、よって $l_{\max}=ka$ である。(2.77) は、

$$\begin{aligned}\sigma^{\rm tot} &= \frac{4\pi}{k^2}\left[\sin^2 ka+3\sin^2\left(ka-\frac{\pi}{2}\right)+5\sin^2(ka-\pi)+7\sin^2\left(ka-\frac{3\pi}{2}\right)+\cdots\right]\\ &= \frac{4\pi}{k^2}\left[\left(\sin^2 ka+\sin^2\left(ka-\frac{\pi}{2}\right)\right)+2\left(\sin^2\left(ka-\frac{\pi}{2}\right)+\sin^2(ka-\pi)\right)\right.\\ &\qquad \left.+3\left(\sin^2(ka-\pi)+\sin^2\left(ka-\frac{3\pi}{2}\right)\right)+\cdots\right]\\ &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=1}^{l_{\max}} l = \frac{4\pi}{k^2}\frac{1}{2}l_{\max}(l_{\max}+1) = \frac{2\pi}{k}a(ka+1)\simeq 2\pi a^2.\end{aligned} \tag{2.78}$$

高エネルギー散乱の場合、全断面積は球の前面による散乱の寄与 πa^2 と球の裏面からの**影散乱**の寄与 πa^2 の和となる。影散乱は入射波が剛体球の裏側へと回折され、この回折やそれに伴う干渉が散乱として観測される。

2.7　井戸型ポテンシャルによる散乱

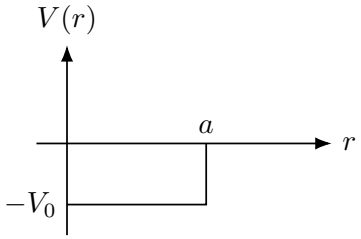


図 2.7 井戸型ポテンシャル。

井戸型ポテンシャル

$$V(r)=\begin{cases}0 & (r>a)\\ -V_0 & (r<a)\end{cases} \tag{2.79}$$

の場合、ポテンシャルの外側での散乱波は (2.66) で与えられる。ポテンシャル内では、$V(r)=-V_0$ なので、(2.62) から

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\kappa^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l^{\rm in}(r)=0, \qquad \kappa=\sqrt{k^2+\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \tag{2.80}$$

解は原点で正則でなければならないので

$$R_l^{\rm in}(r)=Aj_l(\kappa r), \qquad R_0^{\rm in}(r)=A\frac{\sin\kappa r}{\kappa r} \tag{2.81}$$

以下では、S 波散乱（$l=0$）のみを考える。このとき、(2.68) の $f_0^{\rm in}$ は、

$$f_0^{\rm in}=\frac{\frac{1}{k}\frac{d}{da}R_0^{\rm in}(a)}{R_0^{\rm in}(a)}=\frac{1}{k\frac{\sin\kappa a}{\kappa a}}\left(\frac{\cos\kappa a}{a}-\frac{\sin\kappa a}{\kappa a^2}\right)=\frac{\kappa a\cot\kappa a-1}{ka}.$$

これを $r=a$ での波動関数の接続条件 (2.70) に代入して

$$j_0(x)=\frac{\sin x}{x},\quad n_0(x)=-\frac{\cos x}{x}$$

を用いると

$$\tan\delta_0(k)=\frac{-\kappa\cot\kappa a\sin ka+k\cos ka}{\kappa\cot\kappa a\cos ka+k\sin ka}\tag{2.82}$$

が得られる。(2.82) は $ka\to 0$ で

$$\tan\delta_0(k)\simeq -ka\left(1-\frac{\tan\kappa a}{\kappa a}\right)\tag{2.83}$$

となる。$ka\to 0$ では δ_0 も微小量であることに注意すると、$\tan\delta_0\simeq\delta_0$ と近似できるので

$$\delta_0(k)\simeq -ka\left(1-\frac{\tan\kappa a}{\kappa a}\right)\tag{2.84}$$

であることがわかる。これから

$$\sigma_0^{\rm tot}=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=4\pi a^2\left(1-\frac{1}{F_0}\right)^2\tag{2.85}$$

$$F_0\equiv\frac{\kappa a}{\tan\kappa a},\qquad \kappa=\sqrt{k^2+\frac{2mV_0}{\hbar^2}}\tag{2.86}$$

F_0 は、ポテンシャルの深さ V_0 に応じて、$-\infty$ から ∞ までの任意の値をとる。特に、$F_0=1$ の場合は、散乱は起きない。この例のように、低エネルギー散乱では、運動エネルギーが特定の値をとるときに散乱断面積が著し小さくなる現象を、**ラムザウアー–タウンゼント 効果**という。

ポテンシャルの外側（$r>a$）での S 波の散乱波は (2.66) で $l=0$ とおいて

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})=\frac{1}{2}\left[e^{2i\delta_0(k)}h_0^{(1)}(kr)+h_0^{(2)}(kr)\right]\tag{2.87}$$

で与えられる。これに $h_0^{(1)}(kr)=-ie^{ikr}/(kr)$、$h_0^{(2)}(kr)=ie^{-ikr}/(kr)$ を代入すると

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})=\frac{e^{i\delta_0(k)}}{kr}\sin k\left(r+\frac{\delta_0(k)}{k}\right)\tag{2.88}$$

が得られる。ここで、S 波散乱長 $\alpha_{\rm S}$ を

$$\alpha_{\rm S}\equiv-\lim_{k\to 0}\frac{\tan\delta_0(k)}{k}\tag{2.89}$$

で定義すると、低エネルギー極限（$k\to 0$）の S 波の散乱波は次のように書ける。

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})=\frac{r-\alpha_{\rm S}}{r}\tag{2.90}$$

(2.83) を (2.89) に代入すると（$\kappa_0 \equiv \sqrt{2mV_0}/\hbar$）

$$\frac{\alpha_{\rm S}}{a} = 1 - \frac{\tan \kappa_0 a}{\kappa_0 a} \tag{2.91}$$

これは、ポテンシャルの広がり a と S 波散乱長 $\alpha_{\rm S}$ の関係を与える。

$\alpha_{\rm S} > 0$ の場合、(2.89) から $\delta_0 < 0$ なので、(2.59) からポテンシャルは斥力である。実際、この場合の散乱波の波動関数は、ポテンシャルが存在する原点近傍で振幅が減少している（図 2.8 参照）。

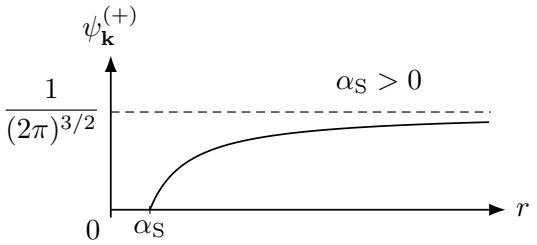


図 2.8 S 波散乱長が正の場合の散乱波。

斥力相互作用の場合は、$\kappa = ik_0$（$k_0 \equiv \sqrt{2m|V_0|}/\hbar$）であるから、これを (2.91) に代入すると、

$$\frac{\alpha_{\rm S}}{a} = 1 - \frac{\tanh k_0 a}{k_0 a}. \tag{2.92}$$

これを図示したものが下図である。

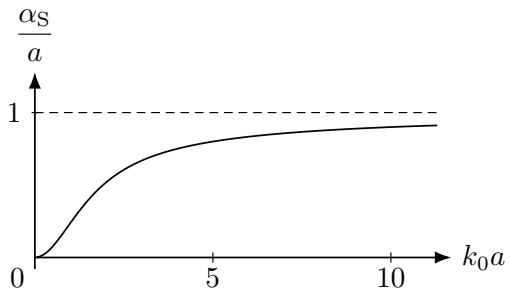


図 2.9 斥力相互作用の場合の S 波散乱長。

ポテンシャルの高さが十分高く条件 $k_0 a \gg 1$ が成立する場合は、S 波散乱長 $\alpha_{\rm S}$ は剛体球の場合のように a に等しくなる。

3 次元デルタ関数ポテンシャルは、$g = V_0 a^3$ を一定に保ちながら、$V_0 \to \infty$、$a \to 0$ なる極限をとることに対応する。斥力の場合は、$\alpha_{\rm S} < a$ なので、$\alpha_{\rm S} \to 0$ となる。すなわち、3 次元のデルタ関数ポテンシャルは波を散乱しない。

逆に、$\alpha_{\rm S} < 0$ の場合は、ポテンシャルは引力である（図 2.10 参照）。(2.83) を (2.89) に代入すると（$V(r) = -V_0$ ととっていることに注意）

$$\alpha_{\rm S} \simeq a \left(1 - \frac{\tan\left(\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} a\right)}{\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} a} \right).$$

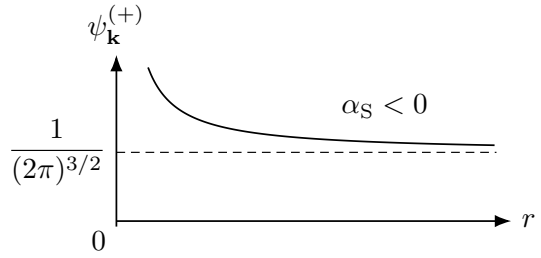


図 2.10 引力相互作用の場合の S 波散乱長。

ポテンシャルが浅く、条件 $\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a \ll 1$ が成立する場合は、$\tan x = x + x^3/3 + \cdots$ と展開すると

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathrm{S}} &\simeq -\frac{2mV_0}{3\hbar^2}a^3, \\ \delta_0 &\simeq -k\alpha_{\mathrm{S}}, \\ \sigma^{\mathrm{tot}} &\simeq 4\pi\alpha_{\mathrm{S}}^2. \end{aligned} \tag{2.93}$$

ポテンシャルが深くなると、条件

$$\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a = \frac{\pi}{2}(2n+1), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.94}$$

が満足される点で共鳴散乱が起こり、S 波散乱長が発散する。これを零エネルギー共鳴という。

下図は、ポテンシャルが引力の場合の α_{S}/a と k_0a の関係 (2.91) を図示したものである。ポテンシャルが浅く、$k_0a < \pi/2$ の場合は、$\alpha_{\mathrm{S}} < 0$ である。

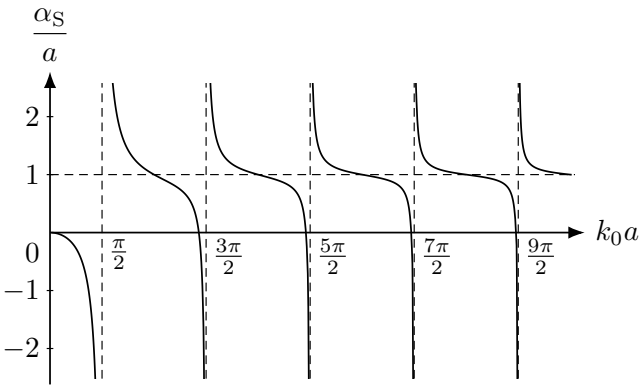


図 2.11 S 波散乱長 a_{S} とポテンシャルの幅 a との関係。

α_{S} は条件 (2.94) [$k_0a = \frac{\pi}{2}(2n+1)$] が満足されるごとに発散し、新たな束縛状態が生じる。これに比べて、ポテンシャルがほんの少し浅く束縛状態が生じる直前では、α_{S} は負の大きな値をとる。逆に、ポテンシャルがほんの少し深く、新たな束縛状態が生じた直後は α_{S} は正の大きな値をとる。

ポテンシャルが十分に深くなると、α_{S} の値は a 付近に局在し（上図参照）、引力であるにもかかわらず、斥力の剛体球のように振舞う。

2.8　リップマン–シュウィンガー方程式

リップマン–シュウィンガー方程式は、量子力学における散乱理論を取り扱う基礎方程式である。散乱過程を量子力学における状態遷移と捉え、シュレーディンガー方程式を散乱の境界条件を含む積分方程式に書き換えることで導出される。

2.8.1　リップマン–シュウィンガー方程式の導出

全ハミルトニアンを、自由粒子のハミルトニアン H_0 と相互作用 V に分けると、定常状態のシュレーディンガー方程式は

$$(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{2.95}$$

あるいは、

$$(E - H_0)|\psi\rangle = V|\psi\rangle \tag{2.96}$$

と書かれる。入射波の状態 $|\phi\rangle$ は、$V = 0$ と置いた方程式

$$(E - H_0)|\phi\rangle = 0 \tag{2.97}$$

を満足する。このことに注意して、(2.96) の両辺の左側から $(E - H_0)$ の逆演算子 $(E - H_0)^{-1}$ を作用させると

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + (E - H_0)^{-1}V|\psi\rangle \tag{2.98}$$

が得られるが、この解は E が H_0 の固有値の時に発散する。これを避けるため、無限小の正の実数 $\epsilon \to 0^+$ を用いて次のように解を構成する。

$$|\psi^{\pm}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}V|\psi^{\pm}\rangle \tag{2.99}$$

ここで、$|\psi^{\pm}\rangle$ は右辺の分母の $\pm i\epsilon$ に対応する解である。(2.99) を**リップマン–シュウィンガー方程式**という。

(2.99) で、$+i\epsilon$ は外に向かう散乱波、$-i\epsilon$ は内に向かう散乱波を記述している。これを見るために、(2.99) 式の両辺の左側から $\langle \boldsymbol{r}|$ を作用させ、完全性関係式 $\int d^3\mathbf{r}'|\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}'| = I$ を挿入すると

$$\psi^{\pm}(\boldsymbol{r}) = \phi(\boldsymbol{r}) + \int d^3\mathbf{r}' \left\langle \boldsymbol{r} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| \boldsymbol{r}' \right\rangle V(\boldsymbol{r}')\psi^{\pm}(\boldsymbol{r}') \tag{2.100}$$

が得られる。ここで、$\psi^{\pm}(\boldsymbol{r}) := \langle \boldsymbol{r}|\psi^{\pm}\rangle$、$\phi(\boldsymbol{r}) := \langle \boldsymbol{r}|\phi\rangle$、また、自由粒子の**グリーン関数** $G_0^{(\pm)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ を次式で定義する。

$$G_0^{(\pm)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') := \left\langle \boldsymbol{r} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| \boldsymbol{r}' \right\rangle \tag{2.101}$$

以下ではプラス符号 $(+i\epsilon)$ の場合を考える。運動量固有状態の完全系を挿入し、自由粒子のハミルトニアンの固有値（エネルギー $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$）を代入して変形すると

$$G_0^{(+)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{i\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')/\hbar}}{k^2 - (p/\hbar)^2 + i\epsilon} \tag{2.102}$$

が得られる。ここで、$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{p}/\hbar$, $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'$ と置き、3 次元の極座標積分および留数定理を適用すると、極 $q = +k + i\epsilon'$ のみがゼロでない寄与を与え、次の結果を得る。

$$G_0^{(+)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} \tag{2.103}$$

これを元の式に戻すことで、実空間表示のリップマン–シュウィンガー方程式が得られる。

$$\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}) = \phi(\boldsymbol{r}) - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{4\pi|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} V(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}') \tag{2.104}$$

第 2 項の $+i\epsilon$ を選択したことが、外側へ向かって湧き出す球面波（外向きの散乱波）を正しく表現している[*6]。このように無限小の因子 $i\epsilon$ は入射波が散乱されると、散乱波は外向きに広がるという因果律を記述している。

2.8.2　散乱振幅

全ハミルトニアンを $H = H_0 + V$ （H_0 は自由粒子の運動エネルギー演算子、V は散乱ポテンシャル）とする。 エネルギーが $E = \frac{k^2}{2m}$ で与えられるシュレディンガー方程式 $(E - H_0)|\psi\rangle = V|\psi\rangle$ の一般解は、リップマン–シュウィンガー方程式 (2.99) から

$$|\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}\rangle = |\mathbf{k}_i\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V|\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}\rangle \quad (\epsilon \to 0^+) \tag{2.105}$$

で与えられる。ここで、$|\mathbf{k}_i\rangle$ は波数が $\mathbf{k}_i$ の平面波を記述する状態ベクトルである。左から $\langle\mathbf{r}|$ を作用し、自由粒子のグリーン関数 (2.103) を代入すると、

$$\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}') \tag{2.106}$$

が得られる。

ここで、観測点 $\mathbf{r}$ が散乱体から十分に離れた位置にあり、条件 $r = |\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}'|$ が成立すると仮定して、次のような展開を行う。

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \hat{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{r}' \qquad (\hat{\mathbf{x}} := \mathbf{r}/r) \tag{2.107}$$

$$ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx ikr - \mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}' \quad (\mathbf{k}_f := k\hat{\mathbf{x}}) \tag{2.108}$$

これらを (2.106) に代入すると、

$$\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r\to\infty} e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} + \left[-\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}')\right] \frac{e^{ikr}}{r} \tag{2.109}$$

[*6] マイナス符号 $-i\epsilon$ の場合を計算すると、内向きの散乱波が得られる。

が得られる。**散乱振幅** $f(\mathbf{k}_i \to \mathbf{k}_f)$ は、(2.109) の右辺第 2 項の遠方での球面散乱波 $\frac{e^{ikr}}{r}$ の係数として与えられる。すなわち、

$$f(\mathbf{k}_i \to \mathbf{k}_f) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}')\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}') \tag{2.110}$$

2.8.3　T 行列

散乱波 $|\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}\rangle$ にポテンシャル V を掛けた状態を、平面波の入射状態 $|\mathbf{k}_i\rangle$ からの遷移として与える行列を **T 行列**という。T 行列の T は遷移行列 –transition matrix–の T である。従って、T 行列演算子 $\hat{T}$ は次式を満足する。

$$\hat{T}|\mathbf{k}_i\rangle := V|\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}\rangle \tag{2.111}$$

T 行列の行列要素は

$$T_{fi} := \langle \mathbf{k}_f \mid \hat{T} \mid \mathbf{k}_i\rangle = \langle \mathbf{k}_f \mid V \mid \psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}\rangle = \int d^3\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}')\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}') \tag{2.112}$$

これを式 (2.110) と比較すると

$$f(\mathbf{k}_i \to \mathbf{k}_f) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle \mathbf{k}_f \mid \hat{T} \mid \mathbf{k}_i\rangle \tag{2.113}$$

であることがわかる。このように T 行列は散乱振幅を与える。T 行列を用いるとリップマン–シュウィンガー方程式 (2.105) は

$$|\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}\rangle = |\mathbf{k}_i\rangle + \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon}\hat{T}|\mathbf{k}_i\rangle \tag{2.114}$$

と書かれる。

2.8.4　S 行列

S 行列は散乱行列–scattering matrix–の略称であり、その行列要素 S_{fi} は次式で定義される。

$$S_{fi} := \langle \mathbf{k}_f \mid \psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}\rangle \tag{2.115}$$

これに、リップマン–シュウィンガー方程式 (2.114) を代入すると

$$S_{fi} = \langle \mathbf{k}_f \mid \mathbf{k}_i\rangle + \langle \mathbf{k}_f \mid \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon}\hat{T} \mid \mathbf{k}_i\rangle$$

右辺の第 2 項において、左側のブラ状態 $\langle \mathbf{k}_f|$ に対する自由ハミルトニアン H_0 の固有値は $E_f = \frac{k_f^2}{2m}$ であるため、演算子部分を固有値に置き換えることができる。

$$S_{fi} = \langle \mathbf{k}_f \mid \mathbf{k}_i\rangle + \frac{1}{E_i - E_f + i\epsilon}\langle \mathbf{k}_f \mid \hat{T} \mid \mathbf{k}_i\rangle \tag{2.116}$$

ここで、公式 $\frac{1}{x+i\epsilon} = \mathcal{P}\frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$ （$\mathcal{P}$ は主値）を用いる。エネルギー保存 $E_i = E_f$ が成り立つオン・シェル（on-shell）の弾性散乱を考えると、デルタ関数の部分のみが寄与して次式が成立する。

$$S_{fi} = \langle \mathbf{k}_f \mid \mathbf{k}_i \rangle - i\pi\delta(E_i - E_f)\langle \mathbf{k}_f \mid \hat{T} \mid \mathbf{k}_i \rangle$$

右辺に $\langle \mathbf{k}_f \mid \mathbf{k}_i \rangle = (2\pi)^3\delta^3(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f)$ を代入すると、次の関係式が得られる。

$$S_{fi} = (2\pi)^3\delta^3(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) - \pi i\delta(E_i - E_f)T_{fi} \tag{2.117}$$

右辺に (2.113) を代入すると

$$S_{fi} = (2\pi)^3\delta^3(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) + i\frac{2\pi^2\hbar^2}{m}\delta(E_i - E_f)f(\mathbf{k}_i \to \mathbf{k}_f) \tag{2.118}$$

粒子が散乱途中で消えないという確率保存の要請から S 行列はユニタリ行列

$$S^\dagger S = I \tag{2.119}$$

となる。(2.117) から、T 行列は S 行列から散乱されずに素通りした成分（恒等写像 I）を差し引き、純粋に散乱によって変化した成分だけを抜き出した行列であることがわかる。

$$S = I - \frac{i}{2}T \tag{2.120}$$

実験で測定する散乱振幅 $f(\theta)$ や散乱断面積は、この T 行列の行列要素に対応している。

(2.120) 式を S 行列のユニタリ性を表す (2.119) 式に代入すると

$$\frac{i}{2}(T - T^\dagger) = T^\dagger T \tag{2.121}$$

この式の左辺は T 行列の虚数部（前方散乱振幅の虚部）に対応し、右辺 $T^\dagger T$ はあらゆる状態へ散乱される確率の総和（全断面積）に対応する。これは、光学定理 (2.54) に他ならない。このように光学定理は S 行列のユニタリ性の帰結である。

2.8.5　代数的アプローチ

(2.99) で、

$$G_0(E) := \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} \tag{2.122}$$

は**グリーン関数**と呼ばれる。これを用いて (2.99) を書き、右辺の $|\psi^\pm\rangle$ に右辺全体を代入するという操作を逐次的に繰り返すと

$$\begin{aligned} |\psi^+\rangle &= |\phi\rangle + G_0V|\psi^+\rangle \\ &= [1 + G_0V + (G_0V)^2 + \cdots]|\phi\rangle \\ &= (1 - G_0V)^{-1}|\phi\rangle \end{aligned} \tag{2.123}$$

が得られる。ここで、T 行列の定義 (2.111) から

$$T|\phi\rangle := V|\psi^+\rangle \tag{2.124}$$

これを (2.123) と比較すると

$$T = V(1 - G_0V)^{-1} \tag{2.125}$$

が得られる。右辺を展開すると

$$\begin{aligned} T &= V[1 + G_0V + (G_0V)^2 + \cdots] \\ &= V + VG_0V[1 + G_0V + (G_0V)^2 + \cdots] \\ &= V + VG_0(1 - G_0V)^{-1} \end{aligned}$$

これから

$$T = V + VG_0T \tag{2.126}$$

が得られる。演算子の逆行列に関する公式

$$A^{-1}B^{-1} = (BA)^{-1} \tag{2.127}$$

を (2.125) へ適用すると

$$T = [(1 - G_0V)V^{-1}]^{-1} = [V^{-1}(1 - VG_0)]^{-1} = (1 - VG_0)^{-1}V \tag{2.128}$$

と書けることがわかる。(2.128) より

$$G_0T = G_0(1 - VG_0)^{-1}V = [(1 - VG_0)G_0^{-1}]^{-1}V = (G_0^{-1} - V)^{-1}V \tag{2.129}$$

ここで相互作用のあるグリーン関数

$$G := \frac{1}{E - (H_0 + V) + i\epsilon} \tag{2.130}$$

を導入すると

$$G_0T = GV \tag{2.131}$$

が得られる。これを (2.126) へ代入すると T 行列と相互作用を含んだグリーン関数の関係式

$$T = V + VGV \tag{2.132}$$

が得られる。

2.9　同種粒子の散乱

N 粒子系の波動関数を $\psi(x_1, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_N)$ と書こう。原理的に区別がつかない**同種粒子**の場合、任意の 2 粒子を入れ替えても状態は不変なので、i 番目の粒子と j 番目の粒子を入れ替えると

$$\psi(x_1, \cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots, x_N) = \alpha\psi(x_1, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_N) \tag{2.133}$$

である。ここで、α は絶対値が 1 に等しい定数である。もう一度入れ替えると

$$\psi(x_1, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_N) = \alpha^2\psi(x_1, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_N) \tag{2.134}$$

よって、$\alpha^2 = 1$、すなわち、$\alpha = \pm 1$ であることがわかる。$\alpha = 1$ は、粒子の入れ替えに対して波動関数が対称であり、そのような粒子を**ボース粒子**という。$\alpha = -1$ は、粒子の入れ替えに対して波動関数が反対称であり、そのような粒子を**フェルミ粒子**という。このように、同種粒子系の波動関数は、粒子の変換に対して対称か反対称のいずれかである。

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \epsilon \Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1), \qquad \epsilon = \begin{cases} +1 & (\text{ボソン}), \\ -1 & (\text{フェルミオン}). \end{cases} \tag{2.135}$$

ボース統計とフェルミ統計の違いは散乱過程に大きな影響を与える。

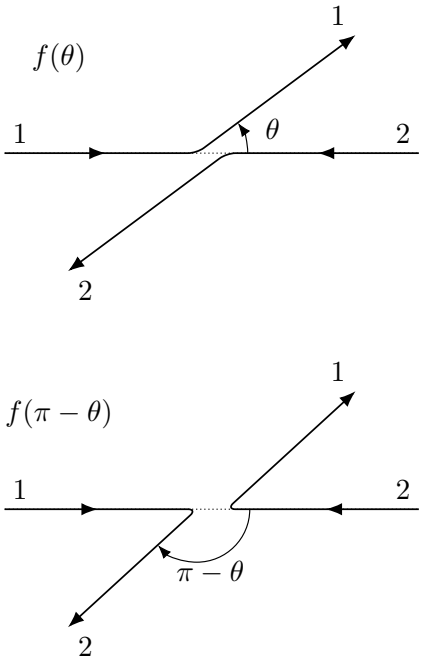


図 2.12 同種粒子の散乱。散乱角が θ の場合（上図）と、$\pi - \theta$ の場合（下図）は同種粒子の場合は原理的に区別がつかないので、散乱振幅は (2.136) 式のような対称化（ボソンの場合）、あるいは、反対称化（フェルミオンの場合）される。

$r \to \infty$ における散乱状態 (2.30) は次のように対称化（$\epsilon = 1$）あるいは反対称化（$\epsilon = -1$）される。

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \epsilon e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2}} + \frac{f(\theta) + \epsilon f(\pi-\theta)}{\sqrt{2}} \frac{e^{ikr}}{r} \tag{2.136}$$

これに伴い微分断面積 (2.36) および全断面積も次のように（反）対称化される。

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{2}|f(\theta) + \epsilon f(\pi-\theta)|^2, \qquad 0 \le \theta \le \pi \tag{2.137}$$

$$\sigma^{\text{tot}} = \frac{1}{2}\int d\Omega\, |f(\theta) + \epsilon f(\pi-\theta)|^2, \qquad 0 \le \theta \le \pi \tag{2.138}$$

部分波 l は遠心力ポテンシャル $\hbar^2 l(l+1)/(2mr^2)$ の影響を受けるので、相互作用が短距離の場合、低エネルギー極限（$k \to 0$）では S 波散乱（$l = 0$）の寄与のみが重要にな

る[*7]。S 波の散乱振幅は θ によらず一定なので、(2.137)、(2.138) より、

$$\boxed{\sigma^{\rm tot} = \begin{cases} 8\pi f^2 & (\text{ボソン}), \\ 0 & (\text{フェルミオン}). \end{cases}} \tag{2.139}$$

特に、半径 a の剛体球ポテンシャルの場合は、$f = -a$ である［(2.75) 式参照］。互いに識別できる古典粒子と比べて、ボソンの散乱断面積は 2 倍になり、また、フェルミオンは散乱しない。

注. (2.137)、(2.138) では、θ は $0 \le \theta \le \pi$ の範囲の値をとる。同種粒子の場合は、散乱角が θ と $\pi - \theta$ の散乱過程は互いに区別がつかないので、(2.137)、(2.138) の右辺の値を 2 倍にし、θ のとりうる範囲を $0 \le \theta \le \pi/2$ とする記法もしばしば用いられる。すなわち、

$$\sigma(\theta) = |f(\theta) + \epsilon f(\pi - \theta)|^2, \qquad 0 \le \theta \le \frac{\pi}{2} \tag{2.140}$$

$$\sigma^{\rm tot} = \int d\Omega\, \sigma(\theta), \qquad 0 \le \theta \le \frac{\pi}{2} \tag{2.141}$$

ルジャンドル関数の性質 $P_l(-x) = (-1)^l P_l(x)$ と (2.48) から

$$f(\theta) + \epsilon f(\pi - \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} \left(e^{2i\delta_l(k)} - 1 \right) \left[1 + \epsilon(-1)^l \right] P_l(\cos\theta) \tag{2.142}$$

従って、ボソン（$\epsilon = 1$）の場合は偶数の l、フェルミオン（$\epsilon = -1$）の場合は奇数の l のみが残る。(2.142) を (2.138) へ代入し、直交性 (2.52) を用いると

$$\begin{aligned} \sigma^{\rm tot} &= \frac{1}{2} \cdot 2^2 \cdot 2\pi \sum_{l,l' = \text{even (odd)}} \frac{(2l+1)(2l'+1)}{4k^2} (e^{2i\delta_l} - 1)(e^{-2i\delta_{l'}} - 1) \overbrace{\int_0^\pi d\theta \sin\theta P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta)}^{\frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}} \\ &= 8\pi \sum_{l = \text{even (odd)}} \frac{2l+1}{k^2} \sin^2\delta_l. \end{aligned}$$

が得られる。従って、

$$\boxed{\sigma^{\rm tot}(k) = \begin{cases} \dfrac{8\pi}{k^2} \displaystyle\sum_{l=0,2,4,\ldots} (2l+1) \sin^2\delta_l(k) & (\text{ボソン}), \\ \dfrac{8\pi}{k^2} \displaystyle\sum_{l=1,3,5,\ldots} (2l+1) \sin^2\delta_l(k) & (\text{フェルミオン}). \end{cases}} \tag{2.143}$$

波動関数の（反）対称化の要請から、ボース（フェルミ）粒子の散乱断面積には l が偶（奇）数の部分波のみが寄与をする。

[*7] 高次波 ($l \ge 1$) の場合、相互作用が起こる領域に近づく前に、遠心力ポテンシャルによって跳ね返されてしまい相互作用できない。

第 3 章

第二量子化

N 粒子系の波動関数は N 個の座標の関数として $\psi(x_1, \cdots, x_N)$ と書ける。しかし、この表示では、粒子数が変化する状況をうまく記述することができない。さらに、以下で述べるように同種粒子の波動関数はボース粒子の場合は対称化、フェルミ粒子の場合は反対称化する必要がある。そうすると、粒子のあらゆる交換に対応して $N!$ 通りの波動関数をまとめて扱う必要があり、理論が非常に煩雑になる。第二量子化は（1）そのような煩雑さがなく、（2）粒子の生成・消滅が記述でき、さらに、（3）ボース（フェルミ）統計性を演算子に（反）交換関係を課すことにより自動的に考慮することができるという著しい形式上の利点がある。

3.1 電磁場の量子化

3.1.1 マックスウェル方程式

電荷密度と電流密度がそれぞれ ρ、$\mathbf{j}$ で与えられる真空中の電場 $\mathbf{E}$ と磁場 $\mathbf{B}$ は次のマックスウェル方程式に従う。

$$\mathrm{rot}\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \qquad (\text{Faraday の電磁誘導の法則}) \tag{3.1}$$

$$\frac{1}{\mu_0}\mathrm{rot}\mathbf{B} = \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{j} \qquad (\text{Ampère} - \text{Maxwell の法則}) \tag{3.2}$$

$$\epsilon_0 \mathrm{div}\mathbf{E} = \rho \qquad (\text{電場に関する Gauss の法則}) \tag{3.3}$$

$$\mathrm{div}\mathbf{B} = 0 \qquad (\text{磁場に関する Gauss の法則}) \tag{3.4}$$

ここで、$\epsilon_0 = 10^7/(4\pi c^2) = 8.85 \times 10^{-12}\mathrm{F/m}$, $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\mathrm{H/m}$ はそれぞれ真空の誘電率と透磁率を表す (c は光速)。(3.3) 式と比較して (3.4) 式の右辺が 0 なのは、電子に相当する磁気単極子が自然界に存在しないという経験事実を表している。電荷は正負いずれも単独で存在できるが、磁荷は N 極と S 極が必ず対で現れる。これに対応して (3.1) 式の右辺には (3.2) 式の電流密度 $\mathbf{j}$ に相当する磁荷密度の流れの項が存在しない。

(3.4) 式をベクトル解析の公式

$$\mathrm{divrot}\ \boldsymbol{a} = 0 \tag{3.5}$$

と比較すると $\mathbf{B}$ があるベクトル関数 $\boldsymbol{a}$ を用いて

$$\mathbf{B} = \mathrm{rot}\boldsymbol{a} \tag{3.6}$$

と書けることがわかる。$\boldsymbol{a}$ はベクトルポテンシャルと呼ばれる。これを (3.1) に代入すると

$$\mathrm{rot}\left(\mathbf{E} + \frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial t}\right) = 0$$

が得られる。これをベクトル解析の公式

$$\mathrm{rotgrad}\ \phi = 0 \tag{3.7}$$

と比較すると、$\mathbf{E}$ が

$$\mathbf{E} = -\mathrm{grad}\phi - \frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial t} \tag{3.8}$$

のように書けることがわかる。ϕ はスカラーポテンシャルと呼ばれる。従って $\mathbf{E}$ と $\mathbf{B}$ は ϕ と $\boldsymbol{a}$ を与えれば決まる。

ϕ と $\boldsymbol{a}$ を決定する方程式は (3.6) 式と (3.8) 式をマックスウェル方程式の残りの式 (3.2) と (3.3) に代入することで得られる。まず、(3.2) 式から

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\mu_0}\underbrace{\mathrm{rot}\ \mathrm{rot}\boldsymbol{a}}_{\mathrm{grad}\ \mathrm{div}\boldsymbol{a}-\Delta\boldsymbol{a}} = -\epsilon_0\frac{\partial}{\partial t}\left(\mathrm{grad}\phi + \frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial t}\right) + \mathbf{j} \\
&\to \mathrm{grad}\ \mathrm{div}\boldsymbol{a} - \Delta\boldsymbol{a} + \underbrace{\epsilon_0\mu_0}_{c^{-2}}\left(\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{grad}\phi + \frac{\partial^2 \boldsymbol{a}}{\partial t^2}\right) = \mu_0\mathbf{j}
\end{aligned}$$

すなわち

$$\mathrm{grad}\ \mathrm{div}\boldsymbol{a} - \Delta\boldsymbol{a} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{a}}{\partial t^2} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{grad}\phi = \mu_0\mathbf{j} \tag{3.9}$$

ここで、$c := \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}$ は光速度である。他方、(3.8) 式を (3.3) 式に代入すると

$$-\epsilon_0\Delta\phi - \epsilon_0\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{div}\boldsymbol{a} = \rho \tag{3.10}$$

(3.9) 式と (3.10) 式が $\boldsymbol{a}$ と ϕ を決める方程式である。これらから $\mathbf{j}$ と ρ は独立ではなく、次の方程式を満たすことがわかる。

$$\mathrm{div}\mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \tag{3.11}$$

この方程式は、連続の方程式 (equation of continuity) とよばれ、電荷の局所保存則を表している。(3.11) 式は (3.9) と (3.10) を用いて示すこともできるが、(3.2) 式から直接示すこともできる。すなわち、

$$\mathrm{div}\mathbf{j} = \mathrm{div}\left(\frac{1}{\mu_0}\mathrm{rot}\mathbf{B} - \epsilon_0\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\right) = -\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{(\epsilon_0\mathrm{div}\mathbf{E})}_{\overset{(3.3)}{=}\rho} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}$$

3.1.2 ゲージ不変性

電流密度 $\mathbf{j}$ と電荷密度 ρ を与えても、(3.9) 式と (3.10) 式だけからでは $\boldsymbol{a}$ と ϕ は一意に定まらない。実際、ある $\boldsymbol{a}_0$ と ϕ_0 が (3.9) 式と (3.10) 式の解であるとすると、時間と空間の任意の関数 χ に対して

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a}_0 + \mathrm{grad}\chi, \quad \phi = \phi_0 - \frac{\partial \chi}{\partial t} \tag{3.12}$$

もまた解となっていることがわかる。(3.12) 式で与えられる変換をゲージ変換 (gauge transformation) という。(3.6) 式と (3.8) 式で与えられる $\mathbf{B}$ と $\mathbf{E}$ はゲージ変換に対して不変である。

ゲージ変換の自由度を利用すれば、電磁ポテンシャルを決定する方程式 (3.9)、(3.10) を簡単化することができる。任意のベクトルポテンシャル $\boldsymbol{a}_0(\mathbf{r})$ に対してゲージ関数 $\chi(\mathbf{r})$ を

$$\chi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi}\int \frac{\mathrm{div}\boldsymbol{a}_0(\mathbf{r}')}{\mid \mathbf{r}-\mathbf{r}' \mid} d\mathbf{r}'$$

と選ぶ。公式

$$\Delta \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = -4\pi\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

を用いると

$$\Delta\chi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi}\int \overbrace{\left(\Delta \frac{1}{\mid \mathbf{r}-\mathbf{r}' \mid}\right)}^{-4\pi\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \mathrm{div}\boldsymbol{a}_0(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = -\mathrm{div}\boldsymbol{a}_0(\mathbf{r})$$

が成立することがわかる。このとき、ゲージ変換 (3.12) された $\boldsymbol{a}$ は次の条件を満足する。

$$\mathrm{div}\boldsymbol{a} = \mathrm{div}\boldsymbol{a}_0 + \overbrace{\mathrm{div}\ \mathrm{grad}\chi}^{\Delta\chi=-\mathrm{div}\boldsymbol{a}_0} = 0 \qquad (\text{クーロンゲージ}) \tag{3.13}$$

ベクトルポテンシャルが条件 (3.13) を満足するゲージをクーロンゲージ (Coulomb gauge) と呼ぶ。条件 (3.13) は $\boldsymbol{a}$ が横波であることを示している。実際、

$$\boldsymbol{a}(\mathbf{r},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\boldsymbol{a}_{\mathbf{k}}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

とフーリエ展開すると

$$\mathrm{div}\boldsymbol{a}(\mathbf{r},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{a}_{\mathbf{k}}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 0$$

これが任意の $\mathbf{r}$ に対して成立するためには $\mathbf{k}\perp\boldsymbol{a}_{\mathbf{k}}$ が成り立つ必要がある。従って、ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{a}$ は、そのフーリエ成分が波数ベクトルに垂直な横波であることがわかる。同様に、(3.4) 式から $\mathbf{B}$ も横波であることがわかる。

(3.13) 式を (3.9) 式と (3.10) 式に代入すると

$$-\Delta \boldsymbol{a} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{a}}{\partial t^2} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{grad}\phi = \mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{r},t) \tag{3.14}$$

$$-\epsilon_0 \Delta\phi = \rho \tag{3.15}$$

ポアッソン方程式 (Poisson equation) (3.15) は直ちに積分できて

$$\phi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int \frac{\rho(\mathbf{r}',t)}{\mid \mathbf{r}-\mathbf{r}' \mid} d\mathbf{r}' \tag{3.16}$$

が得られる。

(3.14) 式の解 $\boldsymbol{a}$ を求めるために次の事実に注目する。まず、左辺の第一項と第二項はクーロンゲージでは横波成分しか持たない。他方、第三項は縦波成分だけを含む。これは、$\phi(\mathbf{r},t)$ をフーリエ変換することにより理解できる。

$$\phi(\mathbf{r},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\phi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \rightarrow \mathrm{grad}\phi = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \underbrace{i\mathbf{k}\phi_{\mathbf{k}}}_{\text{縦波}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{3.17}$$

従って、$\mathbf{j}$ を波数 $\mathbf{k}$ に平行な縦波 (Longitudinal wave) 成分 $\mathbf{j}_{\mathrm{L}}$ と垂直な横波 (Transverse wave, 横波) 成分 $\mathbf{j}_{\mathrm{T}}$ に分解し、前者を (3.14) 式の左辺の最初の 2 つの項に、後者を第 3 項にそれぞれ等しいとおくことができる。すなわち、

$$\begin{aligned}\mathbf{j}(\mathbf{r},t) &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\mathbf{j}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left[\frac{(\mathbf{j}_{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{k})}{k^2}\mathbf{k} + \left(\mathbf{j}_{\mathbf{k}} - \frac{(\mathbf{j}_{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{k})}{k^2}\mathbf{k}\right)\right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ &= \mathbf{j}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r},t) + \mathbf{j}_{\mathrm{T}}(\mathbf{r},t)\end{aligned} \tag{3.18}$$

ここで、

$$\mathbf{j}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{(\mathbf{j}_{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{k})}{k^2}\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \mathbf{j}_{\mathrm{T}}(\mathbf{r},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left(\mathbf{j}_{\mathbf{k}} - \frac{(\mathbf{j}_{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{k})}{k^2}\mathbf{k}\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

と分解すると、

$$-\Delta \boldsymbol{a} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{a}}{\partial t^2} = \mu_0 \mathbf{j}_{\mathrm{T}}(\mathbf{r}) \qquad (\text{横波成分}) \tag{3.19}$$

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{grad}\phi = \mu_0 \mathbf{j}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r},t) \ \text{ or } \ \mathbf{j}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r},t) = \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t}\mathrm{grad}\phi(\mathbf{r},t) \qquad (\text{縦波成分}) \tag{3.20}$$

が得られる。(3.19) 式の解は、次のように与えられる。

$$\boldsymbol{a}(\mathbf{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int \frac{\mathbf{j}_{\mathrm{T}}(\mathbf{r}',t')}{\mid \mathbf{r}-\mathbf{r}' \mid} d\mathbf{r}', \quad t' = t - \frac{\mid \mathbf{r}-\mathbf{r}' \mid}{c} \tag{3.21}$$

(3.21) が (3.19) の解になっていることは t' が時間だけでなく空間座標にも依存していることに注意することで示すことができる。

電場も同様に $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\mathrm{L}} + \mathbf{E}_{\mathrm{T}}$ のように縦波成分 $\mathbf{E}_{\mathrm{L}}$ と横波成分 $\mathbf{E}_{\mathrm{T}}$ に分解すると (3.8) 式で $\mathrm{grad}\phi$ が縦波 [(3.17) 式を見よ]、$\boldsymbol{a}$ が横波だから

$$\mathbf{E}_{\mathrm{L}} = -\mathrm{grad}\phi, \quad \mathbf{E}_{\mathrm{T}} = -\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial t} \tag{3.22}$$

が得られる。最初の式を (3.20) 式に代入すると

$$\mathbf{j}_{\mathrm{L}} = \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathrm{grad}\phi = -\epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}_{\mathrm{L}}}{\partial t} \tag{3.23}$$

が得られる。右辺は変位電流であり、これが電流の縦波成分を与えていることがわかる。ρ から (3.16) 式を通じて ϕ が求まり、$\mathbf{j}_{\mathrm{T}}$ から (3.21) 式を通じて $\boldsymbol{a}$ が求まる。$\mathbf{j}_{\mathrm{L}}$ は (3.23) より ϕ がわかれば求まる。(3.23) 式の両辺に div を作用させると、$\mathrm{div}\mathbf{j}_{\mathrm{L}} = \mathrm{div}\mathbf{j}$ および (3.15) 式から、連続の方程式 (3.11) が再び得られる。

以上の結果をまとめると、クーロンゲージでは、電磁場の縦波成分は電荷密度に関係した物理量の組 $(\mathbf{E}_{\mathrm{L}},\ \mathbf{j}_{\mathrm{L}},\ \rho)$ を記述し、スカラーポテンシャル ϕ で表される。他方、電磁場の横波成分は電磁波に関係した物理量の組 $(\mathbf{E}_{\mathrm{T}},\ \mathbf{j}_{\mathrm{T}},\ \mathbf{B})$ を記述し、ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{a}$ で表される。

3.1.3 自由場の正準形式

自由場とは電流や電荷が存在しない電磁場をいう。クーロンゲージでは (3.16) より $\phi = 0$ であり、電流も 0 となる。このとき (3.19) 式より $\boldsymbol{a}$ は方程式

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\boldsymbol{a}(\mathbf{r}, t) = 0 \tag{3.24}$$

を満たす。これは、光子の質量がゼロであることを表している。実際、質量が m の粒子のエネルギー E と運動量 p の関係は

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4$$

で与えられるので、これに量子化の手続き $(p \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\ E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t})$ を施すと

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)A_\mu = \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 A_\mu \tag{3.25}$$

が得られ、これを (3.24) 式と比較すると $m = 0$ であることがわかる。このように、ゲージ不変な場に対応する量子（今の場合は光子）の質量はゼロとなる。クーロンゲージでは $\mathrm{div}\mathbf{A}=0$ なので、電磁場の自由度は横波の 2 成分のみとなる。物理的にはこれらの自由度は、偏光の自由度が 2 個あることに対応している。

(3.24) の解は次式で与えられる。

$$\boldsymbol{a}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \left[\boldsymbol{a}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}}t)} + \boldsymbol{a}^*_{\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}}t)}\right],\ \omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|,\ \boldsymbol{a}^*_{\mathbf{k}} = \boldsymbol{a}_{-\mathbf{k}} \tag{3.26}$$

これから、電場と磁場は次のように求められる。

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial t} = \sum_{\mathbf{k}} i\omega_{\mathbf{k}} \left[\boldsymbol{a}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}}t)} - \boldsymbol{a}^*_{\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}}t)}\right] \tag{3.27}$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathrm{rot}\boldsymbol{a} = \sum_{\mathbf{k}} i\mathbf{k} \times \left[\boldsymbol{a}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}}t)} - \boldsymbol{a}^*_{\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}}t)}\right] \tag{3.28}$$

電磁場の全エネルギー E は

$$E = \frac{1}{2}\int \left(\epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \frac{1}{\mu_0}\mathbf{B}^2\right) d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}} 2\epsilon_0 V \omega_{\mathbf{k}}^2 \boldsymbol{a}_{\mathbf{k}}^* \boldsymbol{a}_{\mathbf{k}} \tag{3.29}$$

と計算される。ここで V は電磁場が存在する領域の体積である。複素量 $\boldsymbol{a}_{\mathbf{k}}$ の実部と虚部をそれぞれ一般化された位置 $Q_{\mathbf{k}\lambda}$ と運動量 $P_{\mathbf{k}\lambda}$ とみなそう。

$$\boldsymbol{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{4\epsilon_0 V \omega_{\mathbf{k}}^2}} \sum_{\lambda=1,2} \left(\omega_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}\lambda} + i P_{\mathbf{k}\lambda}\right) \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}, \tag{3.30}$$

ここで、$\lambda = 1, 2$ は光子の偏光を指定する量子数である。また、偏光ベクトル $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$ は波数ベクトルが $\mathbf{k}$、偏光が λ の電磁場成分の偏光方向を表す単位ベクトルであり、λ の値が異なる偏光ベクトルは直交する。(3.30) を (3.29) に代入すると、電磁場のエネルギーは

$$E = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\lambda} \left(P_{\mathbf{k}\lambda}^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2 Q_{\mathbf{k}\lambda}^2\right) \tag{3.31}$$

となり、調和振動子の集合体と数学的に同等であることがわかる。

3.1.4　電荷と磁束の不確定性関係

電磁場は、試験電荷と呼ばれる電荷をもった粒子に作用する力を通じて測定できる。ハイゼンベルクは、試験電荷の位置と運動量の間に不確定性関係が成立するために、これによって測定される電場と磁場の間にも同様な不確定性関係が成立しなければならないことを指摘した。このことを次の例で示そう。

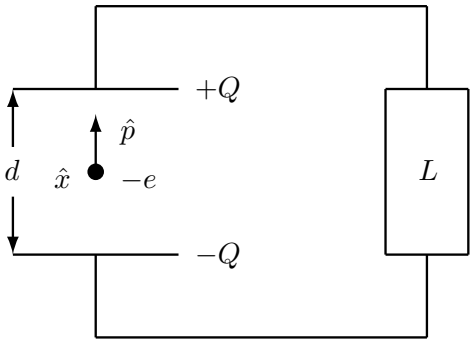


図 4.2 LC 回路とキャパシタンスの二つの電極間を運動する電子

インダクタンスが L のコイルとキャパシタンスが C の平行金属板からなる LC 回路を考える。図 4.2 のように電子が 2 つの金属板に垂直に運動している状況を考え、運動方向

の電子の位置と運動量をそれぞれ $\hat{x}$, $\hat{p}$ とする。また、キャパシタンスに蓄えられた電荷を Q、コイルを貫く磁束を Φ とする。電子は金属板間の電場 $E=V/d$ （d は 2 つの金属板の距離）によって加速されるので方程式

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = e\frac{V}{d} = -\frac{e}{d}\frac{d\Phi}{dt}$$

が成立する。ここで、2 番目の等式を導く際にファラデーの電磁誘導の法則 $V = -d\Phi/dt$ を使った。これを積分すると

$$\Phi = -\frac{d}{e}\hat{p} + \text{定数} \tag{3.32}$$

が得られる。他方、電子が dx だけ移動すると金属板には $-\frac{e}{d}dx$ なる鏡像電荷が誘起されるので関係式

$$dQ = -\frac{e}{d}\,d\hat{x}$$

が成立し、これを積分することにより

$$Q = -\frac{e}{d}\hat{x} + \text{定数} \tag{3.33}$$

が得られる。(3.32) 式と (3.33) 式から、位置と運動量が演算子としての性質を持つならば、それらと結合する電荷と磁束もまた演算子として振舞うことがわかる。そこで、これらを $\hat{Q}$、$\hat{\Phi}$ と書くと

$$[\hat{Q}, \hat{\Phi}] = [\hat{x}, \hat{p}] \tag{3.34}$$

が成立することがわかる。これに電子の位置と運動量の交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を代入すれば、$\hat{Q}$ と $\hat{\Phi}$ の間の交換関係

$$[\hat{Q}, \hat{\Phi}] = i\hbar \tag{3.35}$$

が得られる。交換関係 (3.35) は、磁束と電荷の値は同時に確定することができず、不確定性関係

$$\Delta\Phi\Delta Q \geq \frac{\hbar}{2} \tag{3.36}$$

を満足することを意味している。

LC 回路のハミルトニアン $\hat{H}$ は、コイルに蓄えられた磁場のエネルギー $\hat{\Phi}^2/2L$ とキャパシタンスの静電エネルギー $\hat{Q}^2/2C$ の和で与えられる。

$$\hat{H} = \frac{\hat{\Phi}^2}{2L} + \frac{\hat{Q}^2}{2C} \tag{3.37}$$

これは調和振動子のハミルトニアンと同じなので、交換関係 (3.35) を課すことによって LC 回路は量子化され、固有エネルギーは

$$E_n = \hbar\omega_{\mathrm{LC}}(n + 1/2), \quad \omega_{\mathrm{LC}} = (LC)^{-1/2} \tag{3.38}$$

で与えられる。3.1.3 節で示されたように、電荷が存在しない自由な電磁場は調和振動子の集合体とみなすことができ、同様な手続きにより量子化される。

LC 回路のコンデンサーに蓄えられた電荷 Q が量子力学的にどれくらい揺らぐかを評価してみよう。量子化されたエネルギーの最小値は零点エネルギー $\frac{1}{2}\hbar\omega_{\rm LC}$ である。基底状態においては電荷のエネルギーと磁場のエネルギーの期待値は等しいので

$$\left\langle \frac{\hat{Q}^2}{2C} \right\rangle = \frac{\hbar\omega_{\rm LC}}{4} \tag{3.39}$$

電荷の期待値をゼロとするとこれから電荷の揺らぎとして次の結果が得られる。

$$\Delta Q \equiv \sqrt{\langle \hat{Q}^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\rm LC} C}{2}} = \frac{e}{2}\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\rm LC}}{e^2/2C}} \tag{3.40}$$

このように、量子化エネルギー $\hbar\omega_{\rm LC}$ とキャパシタンスに蓄えられた電子 1 個の帯電エネルギー $e^2/2C$ の比が電荷の量子揺らぎの大きさを決める。

不確定性関係 (3.36) および電荷の揺らぎ (3.40) は、メゾスコピック領域において実際に観測することができ、極微小なデバイスの動作性能に原理的な限界を与える要因となっている[*1]。また、超伝導を用いた量子コンピュータデバイスにおいてもこのような電気回路の量子力学は重要な役割を果たす[*2]。

3.1.5　電磁場の第二量子化

古典電磁場は波動方程式に従うので、数学的には（波動方程式である）シュレーディンガー方程式と同じレベルにあるとみなすこともできる。このことから、電磁場を量子化することは第二量子化と呼ばれる。電磁場の第二量子化は電磁場のエネルギーの表式 (3.31) に現れる一般化された位置と運動量が調和振動子と同じ交換関係を満足することを要請することでなされる。具体的には、一般化された位置と運動量の間に次の正準交換関係を仮定する。

$$\left[\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda}, \hat{P}_{\mathbf{k}'\lambda'}\right] = i\hbar\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'}, \quad \left[\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda}, \hat{Q}_{\mathbf{k}'\lambda'}\right] = 0, \quad \left[\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}, \hat{P}_{\mathbf{k}'\lambda'}\right] = 0. \tag{3.41}$$

ここで、$\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ は $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ のとき 1、$\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ のとき 0 をとるクロネッカーのデルタ記号である ($\delta_{\lambda,\lambda'}$ も同様)。このとき、電磁場のエネルギーの表式 (3.31) は量子力学的ハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\lambda}(\hat{P}^2_{\mathbf{k}\lambda} + \omega^2_{\mathbf{k}\lambda}\hat{Q}^2_{\mathbf{k}\lambda}) \tag{3.42}$$

[*1] 単一電子デバイスの物理と動作限界については、例えば、上田正仁：応用物理 **62-9**, pp. 889-897 (1993); 日本物理学会誌 **49**, pp. 751-757 (1994).

[*2] 電気回路の量子力学的性質に着目した研究領域を回路量子電気力学 (circuit quantum electrodynamics) と呼ぶ。最近のレビュー記事としては、A. Blais, A. Grimso, S. M. Girvin, and A. Wallraff, Rev. Mod. Phys. **93**, 025005 (2021) を参照

となる。

交換関係 (3.41) とハミルトニアン (3.42) で記述される量子化された電磁場の性質を理解するために、次のような演算子を導入しよう。

$$\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}}\left(\omega_{\mathbf{k}}\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda} - i\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}\right), \quad \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}}\left(\omega_{\mathbf{k}}\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda} + i\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}\right) \tag{3.43}$$

ここで、$\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}$ と $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$ はそれぞれ生成演算子と消滅演算子と呼ばれ、次の交換関係を満足する。

$$\left[\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda},\ \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}'\lambda'}\right] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'}, \quad \left[\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda},\ \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}\right] = 0, \quad \left[\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda},\ \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}'\lambda'}\right] = 0 \tag{3.44}$$

最初の交換関係は次のようにして示すことができる。

$$\begin{aligned}\left[\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda},\ \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}'\lambda'}\right] &= \frac{1}{2\hbar\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}'}}}\left[\omega_{\mathbf{k}}\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda} + i\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda},\ \ \omega_{\mathbf{k}'}\hat{Q}_{\mathbf{k}'\lambda'} - i\hat{P}_{\mathbf{k}'\lambda'}\right] \\ &= \frac{1}{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \times \hbar\omega_{\mathbf{k}}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'} \times 2 = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'}\end{aligned}$$

他の交換関係も同様に示すことができる。(3.43) を $\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda}$, $\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}$ について解くと、

$$\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}}\left(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\right), \qquad \hat{P}_{\mathbf{k}\lambda} = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}}\left(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} - \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\right) \tag{3.45}$$

これらを (3.42) に代入して (3.44) を用いると

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\lambda}\hbar\omega_{\mathbf{k}}\left(\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2}\right) \tag{3.46}$$

が得られる。このように、量子化された自由電磁場は、互いに独立な量子化された調和振動子の集合と等価であることがわかる。

電磁場を生成消滅演算子を使って表す操作は場の量子化の例となっている。(3.30) 式の $\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda}, \hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}$ に (3.45) 式を代入したものを $\hat{\mathbf{A}}^{(+)}_{\mathbf{k}}$ と書くと、

$$\hat{\mathbf{A}}^{(+)}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{4\epsilon_0\omega_{\mathbf{k}}^2 V}}(\omega_{\mathbf{k}}\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda} + i\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda})\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda} \tag{3.47}$$

$$\overset{(3.45)}{=} \frac{1}{\sqrt{4\epsilon_0\omega_{\mathbf{k}}^2 V}}\left[\omega_{\mathbf{k}}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}}\left(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\right) + i(-i)\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}}\left(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} - \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\right)\right]\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_{\mathbf{k}}V}}\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} \tag{3.48}$$

右辺の消滅演算子 $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$ の時間依存性はハイゼンベルク表示では $e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}$ で与えられる。これを正の振動数成分とよび、左辺のようにプラス記号 $(+)$ をつけて表す。同様にして負の振動数成分は

$$\boldsymbol{a}^*_{\mathbf{k}} \to \hat{\mathbf{A}}^{(-)}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_{\mathbf{k}}V}}\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} \tag{3.49}$$

と量子化される。ここで $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$ $(\lambda = 1, 2)$ は波数 $\mathbf{k}$ をもったフーリエ成分の偏光ベクトルであり、$\mathbf{k}$ に垂直な二つの単位ベクトルで表される。これらの置き換えを (3.26)-(3.28) 式に代入すると次の結果が得られる。

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_{\mathbf{k}} V}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda} \left[\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}\ e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} + \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\ e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right] \tag{3.50}$$

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} i \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_0 V}}\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda} \quad \left[\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}\ e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} - \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\ e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right] \tag{3.51}$$

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} i \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_{\mathbf{k}} V}} \mathbf{k} \times \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda} \left[\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}\ e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} - \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\ e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right] \tag{3.52}$$

右辺で $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$, $\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}$ は電磁場の振幅が量子化されたもので光の粒子性を表している。これは、$\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} = \hat{n}_{\mathbf{k}\lambda}$ の固有値が離散的な値 $(0, 1, 2, \cdots)$ しかとらないからである。他方、$e^{\pm i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)}$ は波動性を表している。このように第二量子化すると粒子性と波動性が同じ表式の中にあらわな形で表現されるというメリットがある。

(3.51) 式で $\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_0 V}}$ は 1 光子当たりの電場の大きさを、$\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_{\mathbf{k}} V}} k = \frac{1}{c}\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_0 V}}$ は磁場の強さを表している。このように、1 光子あたりの電場や磁場の強さは、電磁場を微小な体積 V に閉じ込めることにより増強することができる。そのような**微小共振器中** (microcavity) では光子 1 個といえども原子と強く相互作用をする。

3.2　生成・消滅演算子の性質

ここで、第二量子化に現れる生成・消滅演算子の性質を調べよう。$\hat{a}^\dagger$ は**生成演算子**，$\hat{a}$ は**消滅演算子**とよばれる．その理由をボース粒子の場合について考える。ボース粒子の場合、生成・消滅演算子は交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \tag{3.53}$$

を満足する。調和振動子のハミルトニアンは生成・消滅演算子を用いて

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \tag{3.54}$$

で与えられる。$\hat{H}$ 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，

$$\hat{H}|n\rangle = E_n |n\rangle \tag{3.55}$$

両辺の左から $\hat{a}^\dagger$ を掛けると，

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

となるので，

$$\hat{H}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (E_n + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger|n\rangle \tag{3.56}$$

であることがわかる．したがって，$\hat{a}^\dagger|n\rangle$ 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．したがって，$\hat{a}$ 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．系の最低エネルギー状態は**真空状態**とよばれる．それを $|0\rangle$ と書くと，これよりエネルギーの低い状態は存在しないから

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \tag{3.57}$$

でなければならない．したがって，

$$\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle \tag{3.58}$$

これから，調和振動子系のとりうる最低エネルギーが 0 ではなく，$E_0 = \hbar\omega/2$ であることがわかる．これを**零点エネルギー**という．最低エネルギーが 0 にならない理由は，(3.54) を導出する過程からわかるように，交換関係，$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ にある．$|0\rangle$ 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，

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{3.59}$$

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．

$$\hat{n} := \hat{a}^\dagger\hat{a} \tag{3.60}$$

を**数演算子**，$|n\rangle$ は **フォック状態**, または, 数状態と呼ばれる．(3.59) 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．

$$\hat{n}|n\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle \tag{3.61}$$

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．

$$\hat{a}|n\rangle = c|n-1\rangle \tag{3.62}$$

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 (3.62) のノルムの 2 乗をとると，

$$\underbrace{\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle}_{n\langle n|n\rangle = n} = |c|^2\langle n-1|n-1\rangle = |c|^2 \;\longrightarrow\; c = \sqrt{n}e^{i\varphi} = \sqrt{n}$$

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 φ は任意にとってよいので 0 とおいた．他方，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．

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \alpha|n+1\rangle \tag{3.63}$$

両辺のノルムをとると，

$$\underbrace{\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle}_{\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}+1|n\rangle = n+1} = |\alpha|^2\langle n+1 \mid n+1\rangle = |\alpha|^2 \quad \longrightarrow \quad \alpha = \sqrt{n+1}$$

よって，次の結果が得られる．

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{3.64}$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{3.65}$$

(3.65) をくり返し適用することにより，次の等式が成立することがわかる．

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \tag{3.66}$$

生成消滅演算子はハイゼンベルク表示では，

$$\hat{a}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{3.67}$$

$$\hat{a}^\dagger(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{3.68}$$

で与えられる．ここでは，調和振動子のハミルトニアン (3.54) の場合について，$\hat{a}(t)$, $\hat{a}^\dagger(t)$ を具体的に計算してみよう．ハイゼンベルクの運動方程式より

$$\frac{d}{dt}\hat{a}(t) = -i\omega\hat{a}(t), \quad \frac{d}{dt}\hat{a}^\dagger(t) = i\omega\hat{a}^\dagger(t) \tag{3.69}$$

これらを解くと，

$$\hat{a}(t) = \hat{a}e^{-i\omega t}, \quad \hat{a}^\dagger(t) = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t} \tag{3.70}$$

が得られる．

3.3　場の演算子

電磁場はボース粒子の集合であるが、フェルミ粒子も含めて第二量子化するためには場の演算子という量を導入するのが便利である。本節では、簡単のため波数のみを考え、消滅演算子は $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ と書こう。また、離散和ではなく連続変数の場合を考え、和ではなく積分の形で取り扱う。$\hat{a}_{\mathbf{k}}$ に対応するモード関数は波数が $\mathbf{k}$ の平面波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ であるので、すべての波数について和をとった量

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) \coloneqq \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\hat{a}_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{3.71}$$

を考えよう。これを場の演算子という。$\hat{a}_{\mathbf{k}}$ がボソンの交換関係

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}'}] = (2\pi)^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'), \quad [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}] = [\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}}, \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}'}] = 0 \tag{3.72}$$

を満足するとき、場の演算子は次の交換関係を満足する。

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad [\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r}')] = [\hat{\Psi}(\mathbf{r})^\dagger, \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0 \tag{3.73}$$

フェルミ粒子の場合は、(3.72) の交換関係が反交換関係に変わる。

$$\{\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}'}\} = (2\pi)^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'), \quad \{\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}\} = \{\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}}, \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}'}\} = 0 \tag{3.74}$$

これに伴い、場の演算子も次の反交換関係を満足する。

$$\{\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')\} = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad \{\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r}')\} = \{\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')\} = 0 \tag{3.75}$$

以下の議論は、ボース粒子、フェルミ粒子のいずれにも当てはまる。まず、自由粒子のハミルトニアンを考える。

$$h(\mathbf{r}) = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \tag{3.76}$$

第二量子化したハミルトニアンは

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r}\hat{\Psi}(\mathbf{r})^\dagger h(\mathbf{r})\hat{\Psi}(\mathbf{r}) \tag{3.77}$$

これに (3.71) を代入すると

$$\hat{H} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}} \tag{3.78}$$

この結果は、各モード（波数）$\mathbf{k}$ に粒子が何個入っているか与える個数演算子 $\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}}$ に対応する 1 粒子エネルギー $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2k^2/(2m)$ を掛けたものを積分した量が相互作用のない場合のハミルトニアン演算子を与えることを示している。

演算子が作用する状態は、粒子が何もない状態が真空 $|\mathrm{vac}\rangle$ である。これは次の条件を満足する状態として定義される。

$$\hat{a}_{\mathbf{k}}|\mathrm{vac}\rangle = 0 \quad (\forall\mathbf{k}) \tag{3.79}$$

真空状態から出発して、波数 $\mathbf{k}$ を持った状態に粒子が n 個存在する状態を次のように定義する。

$$|n_{\mathbf{k}}\rangle \coloneqq \frac{(\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}})^n}{\sqrt{n!}}|\mathrm{vac}\rangle \tag{3.80}$$

全系の状態は波数 $\mathbf{k}_1$ に $n_{\mathbf{k}_1}$ 個、波数 $\mathbf{k}_2$ に $n_{\mathbf{k}_2}$ 個、... とすべての状態とそこに存在する粒子数を指定することで決まる。

$$|n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, \cdots\rangle \coloneqq \frac{(\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_1})^{n_{\mathbf{k}_1}}(\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_2})^{n_{\mathbf{k}_2}}\cdots}{\sqrt{n_{\mathbf{k}_1}!n_{\mathbf{k}_2}!\cdots}}|\mathrm{vac}\rangle \tag{3.81}$$

これを**フォック状態**という。

次に粒子間に相互作用 $v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ がある場合を考える。この時、第二量子化された相互作用ハミルトニアンは次式で与えられる。

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \tag{3.82}$$

ここで、生成演算子が消滅演算子の左側におかれていることに注意しよう。これは**ノーマルオーダー**といい、真空状態に作用したときにゼロをあたえる、すなわち、真空状態をエネルギーの原点にとった表示である。

第 4 章

多体問題

第二量子化した形式は、多体問題の取り扱いへ応用される。多体問題とは、粒子間の相互作用の影響を解析・記述する問題であり、様々な近似方法が開発されている。ここでは、最も基本的なハートリー・フォック近似について学ぶ。

4.1 ハートリー・フォック近似

ハートリー・フォック近似は、２体相互作用を平均場近似によって、１体の有効ポテンシャルに置き換え、多体系のハミルトニアンを独立粒子模型に置き換える近似である。具体的には、演算子の積 $\hat{A}\hat{B}$ を各演算子の期待値とその周りの揺らぎの和に書くことで展開しよう。

$$\hat{A} = \langle \hat{A} \rangle + \delta\hat{A}, \quad \hat{B} = \langle \hat{B} \rangle + \delta\hat{B} \tag{4.1}$$

と置くと、演算子の積は

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B} &= (\langle \hat{A} \rangle + \delta\hat{A})(\langle \hat{B} \rangle + \delta\hat{B}) \\ &= \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \delta\hat{B} + \delta\hat{A} \langle \hat{B} \rangle + \delta\hat{A}\delta\hat{B} \end{aligned} \tag{4.2}$$

が得られるが、最後の高次の微小量 $\delta\hat{A}\delta\hat{B}$ を無視する。このような近似は、揺らぎがあまり大きくない場合に有効である。これを多体系のハミルトニアンに適用しよう。

多電子系のハミルトニアン $\hat{H}$ は、第二量子化表記で次のように書ける。

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}(\mathbf{r})^\dagger h(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \tag{4.3}$$

ここで、$h(\mathbf{r})$ は一体のハミルトニアン

$$h(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}\nabla^2 + u(\mathbf{r}) \tag{4.4}$$

であり、$v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ は２粒子の相互作用ハミルトニアンであり、２粒子の位置ベクトルの差 $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ の関数であると仮定しよう。場の演算子を（平面波とは限らない）モード関数 $\phi_p(\mathbf{r})$ で展開しよう。

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_p \hat{c}_p \phi_p(\mathbf{r}) \tag{4.5}$$

モード関数が平面波の場合は $\phi_p(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}/\sqrt{V}$ と取ればよい。この時、第二量子化されたハミルトニアン $\hat{H}$ は次のようになる。

$$\hat{H} = \sum_{p,q} h_{pq}\hat{c}_p^\dagger \hat{c}_q + \frac{1}{2}\sum_{p,q,r,s} v_{pqrs}\hat{c}_p^\dagger \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_s \hat{c}_r \tag{4.6}$$

ここで、

$$h_{pq} = \int \phi_p^*(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \phi_q(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \tag{4.7}$$

は 1 体部分の行列要素、

$$v_{pqrs} = \iint \phi_p^*(\mathbf{r}_1)\phi_q^*(\mathbf{r}_2) v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\phi_r(\mathbf{r}_1)\phi_s(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \tag{4.8}$$

は 2 体部分の行列要素である。

ここで、 ハートリー・フォック近似（平均場近似）を行う。この近似では、4 つの演算子の積である 2 電子項 $\hat{c}_p^\dagger \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_s \hat{c}_r$ を、「2 つの演算子の積」と「その期待値（平均値）」の組み合わせに分解することである。物理的に意味のある組み合わせ（縮約）は、次の 2 種類である。

- 直接項（ハートリー相互作用）：$\hat{c}_p^\dagger$ と $\hat{c}_r$ がペア、 $\hat{c}_q^\dagger$ と $\hat{c}_s$ がペア
- 交換項（フォック（交換）相互作用）：$\hat{c}_p^\dagger$ と $\hat{c}_s$ がペア、 $\hat{c}_q^\dagger$ と $\hat{c}_r$ がペア

演算子の積を、期待値 $\langle \ldots \rangle$ との揺らぎ（平均からのズレ）に展開し、揺らぎの 2 次以上の項を無視すると、4 つの演算子は以下のように近似（平均場近似）される。

$$\hat{c}_p^\dagger \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_s \hat{c}_r \approx \langle \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_r \rangle \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_s + \langle \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_s \rangle \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_r - \langle \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_s \rangle \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_r - \langle \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_r \rangle \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_s - (\text{定数項}) \tag{4.9}$$

ここで、第 3 項と第 4 項のマイナス符号はフェルミオンの反交換関係による。以下ではフェルミオンの場合を考える。ボソンの場合はマイナス符号がプラス符号になる。

ここで、基底状態における密度行列

$$D_{ri} = \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_r \rangle \tag{4.10}$$

を導入する。この密度行列を用いて上の近似式 (4.9) を整理し、元のハミルトニアンに代入すると、4 次だった演算子がすべて 2 次式の形に統一される。定数項を除いた、近似後の有効ハミルトニアン $\hat{H}_{\mathrm{HF}}$ は以下のようになる。

$$\hat{H}_{\mathrm{HF}} = \sum_{p,q} h_{pq}\hat{c}_p^\dagger \hat{c}_q + \sum_{p,q}\sum_{i\in \mathrm{occ}} \Big(v_{piqi} - v_{piiq} \Big) \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_q \tag{4.11}$$

(4.11) を共通因数である $\hat{c}_p^\dagger \hat{c}_q$ で括り出すと

$$\hat{H}_{\mathrm{HF}} = \sum_{p,q} \left[h_{pq} + \sum_{i\in \mathrm{occ}} \Big(v_{piqi} - v_{piiq} \Big) \right] \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_q \tag{4.12}$$

右辺のカッコの中身は、1 電子が受ける平均場を含んだ有効なエネルギー行列であり、フォック行列と呼ばれる。これを F_{pq} と記す。

$$F_{pq} = h_{pq} + \sum_{i \in \mathrm{occ}} \Big(v_{piqi} - v_{piiq} \Big) \tag{4.13}$$

ここで、h_{pq} は 1 粒子エネルギー、v_{piqi} は直接項であり、電子系の場合は クーロン斥力、$-v_{piiq}$ は交換相互作用（交換項）を表している。このフォック行列を対角化することで、ハートリー・フォック方程式が導かれる。

$$\sum_{q} F_{pq} C_{qi} = \epsilon_i C_{pi} \tag{4.14}$$

第一量子化のような複雑な行列式の積分展開を使わず、演算子の並び替え（交換関係）だけで自動的に交換項のマイナス符号まで導出できる点が、第二量子化を用いる利点である。

4.2 電子ガス

索引

アハラノフ–キャッシャー効果 Aharonov-Casher effect, 20
アハラノフ–ボーム効果 Aharonov-Bohm effect, 18

位相のずれ phase shift, 37

エアリー関数 Airy function, 6
S-行列 S-matrix, 48
エネルギー量子 energy quantum, 63

影散乱 shadow scattering, 42
数状態 number state, 63

幾何学的位相 geometrical phase, 19
球面調和関数 spherical harmonic function, 36
共鳴散乱 resonance scattering, 37
極角 polar angle, 35

グリーン関数 Green's function, 46, 49

形状共鳴 shape resonance, 41

降演算子 lowering operator, 35
光学定理 optical theorem, 37

サイクロトロン周波数 cyclotron frequency, 9
サイクロトロン振動 cyclotron oscillation, 9
散乱振幅 scattering amplitude, 48
散乱断面積 scattering cross section, 34

磁気量子数 magnetic quantum number, 36
準束縛状態 quasi-bound state, 41
昇演算子 raising operator, 35
消滅演算子 annihilation operator, 62
真空状態 vacuum state, 63

数演算子 number operator, 63
ストークス現象 Stokes phenomenon, 6

生成演算子 creation operator, 62
零点エネルギー zero-point energy, 63
全断面積 total cross section, 29

双対性 duality, 21

第 1 チャーン数 first Chern number, 25
対称ゲージ symmetric gauge, 11

T 行列 T-matrix, 48
TKNN 公式 TKNN formula, 25

動径 radial coordinate, 35
同種粒子 identical particle, 50

ノーマルオーダー normal order, 66

パンチャラトナム–ベリー位相 Pancharatnam-Berry phase, 21

微分断面積 differential cross section, 29

フェルミ粒子 Fermi particle, fermion, 51
フォック状態 Fock state, 63
フォック状態 Fock state, 66
ブリルアンゾーン Brillouin zone, 25

ベリー位相 Berry phase, 21
ベリー曲率 Berry curvature, 23, 25
ベリー接続 Berry connection, 23
ベリー位相 Berry phase, 19
ベリー接続 Berry connection, 25

方位角 azimuthal angle, 35
方位量子数 azimuthal quantum number, 36
ボース粒子 Bose particle, boson, 51
ホール効果 Hall effect, 14

ユニタリー極限 unitary limit, 37

ラムザウアー–タウンゼント効果 Ramsauer–Townsend effect, 43
ランダウゲージ Landau gauge, 12
ランダウ準位 Landau level, 11
散乱振幅 scattering amplitude, 33

リップマン–シュウィンガー方程式 Lippmann-Schwinger equation, 46
量子ホール効果 quantum Hall effect, 14

レイリーの公式 Rayleigh's formula, 36

ロドリゲスの公式 Rodrigues' formula, 13