

J.J. サクライ 『現代の量子力学(上)』

本稿は量子力学の教科書

J.J.Sakurai, 2017, 現代の量子力学 (上)(桜井明夫訳), 株式会社吉岡書店, 京都

を, 要点と途中計算の分離した見通しの良い自己完結的テキストへと再構成し, さらに補足・考察を加えたノートである. ただし本稿は教科書の内容をほぼ網羅しているものの, 章末問題をはじめとして内容を多少, 取捨選択してある. さらに本稿には筆者の誤りや勘違いが潜んでいるかもしれないことをあらかじめ断っておく. 言うまでもなく, 原著を当てるに越したことはない.

なお本稿の他にも理論物理の各種ノートを以下のページで公開している.

<http://everything-arises-from-the-principle-of-physics.com/>

## 目次

第 1 章 基礎概念	3
1.1 シュテルン・ゲルラッハの実験	3
1.2 ケット, ブラおよび演算子	7
1.3 基底ケットと行列表現	12
1.4 測定, 観測量および不確定原理	18
1.5 基底の変更	28
1.6 位置, 運動量および平行移動	31
1.7 位置空間および運動量空間における波動関数	42
第 2 章 量子ダイナミクス	51
2.1 時間的发展とシュレーディンガー方程式	51
2.2 シュレーディンガー表示とハイゼンベルク表示	61
2.3 調和振動子	67
2.4 シュレーディンガーの波動方程式	80
2.5 プロパゲーターとファインマンの経路積分	95
2.6 ポテンシャルとゲージ変換	102
第 3 章 角運動量の理論	118
3.1 回転および角運動量の交換関係	118
3.2 スピン $1/2$ の系と有限回転	121
3.3 $O(3)$ , $SU(2)$ およびオイラーの回転	130
3.4 密度演算子ならびに純粋アンサンブルと混合アンサンブル	135
3.5 角運動量の固有値と固有状態	142
3.6 軌道角運動量	151
3.7 角運動量の合成	162
3.8 角運動量を表 (わ) すシュウインガーの振動子モデル	174
3.9 スピン相関の測定とベルの不等式	180

3.10 テンソル演算子 . . . . .	184
付録 A 恒等演算子は Hermite 演算子	193
付録 B 可換な量 $A, B$ に対する指数法則 $e^A e^B = e^{A+B}$	194
付録 C 経路積分	196
C.1 準備 . . . . .	196
C.2 (拡大) 位相空間における経路積分 [17, pp.32–35] . . . . .	200
C.3 (拡大) 配位空間における経路積分 [17, pp.36–41] . . . . .	201
付録 D 水素原子	203
D.1 球対称な場に関する一般論 [1, pp.148–152] . . . . .	203
D.2 水素原子 [1, pp.160–165] . . . . .	204
D.3 球対称な場に関する一般論 (補足) . . . . .	206
D.4 水素原子 (補足) . . . . .	207

注意 本稿の付録は教科書のものとは別内容である。

参考：下巻の主な内容

- 第 4 章 量子力学における対称性
- 第 5 章 近似法
- 第 6 章 同一種類の粒子
- 第 7 章 散乱理論

## 第 1 章 基礎概念

我々は量子力学を歴史的順序に沿って説明する代わりに、「古典的概念を根底から覆 [え] す一例から始める」としよう。最初にショック療法を受けることによって、読者はいわゆる“量子力学的考え方”に早くから慣れていけるであろう」(p.1).

### 1.1 シュテルン・ゲルラッハの実験

シュテルン・ゲルラッハの実験は「古典力学の概念から根本的に離れなければならない必然性を、劇的に説明する。次の節ではいささか公理的に量子力学の基礎形式を示すが、いつも頭の隅にはシュテルン・ゲルラッハの実験例がある」(p.2).

#### 実験の説明

銀原子のビームを  $z$  方向の不均一磁場  $\mathbf{B}$  に通すと、原子線は  $\pm z$  方向の 2 つに分かれる (図 1 参照)。この結果の意味を説明しよう。まず銀原子の磁気モーメント  $\boldsymbol{\mu}$  は 47 番目の電子のスピン  $\mathbf{S}$  と、比例関係

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{m_e c} \mathbf{S}$$

にあるとして良い ( $e < 0$ , 図 2 参照)。原子は全体としては重いので、その軌跡を古典的に考えることが許される。ところで磁場と磁気モーメントの相互作用エネルギーは  $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$  だから、原子の受ける力の  $z$  成分は

$$F_z = \frac{\partial}{\partial z} (\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

である。よって原子線は  $\mu_z$  の、したがって  $S_z$  の値に応じて分裂することになる。実験結果によれば、電子スピンは 2 通りの値に量子化されていることになり、 $[\hbar$  を Planck 定数  $h$  の  $1/2\pi$  倍とすると (p.63)] 具体的な値は

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$$

である。

#### 一続きのシュテルン・ゲルラッハの実験

$\hat{z}$  方向の磁場を持つシュテルン・ゲルラッハの実験装置を  $SG_{\hat{z}}$  などと書き [ $\hat{z}$  は  $z$  方向の単位ベクトル], 図 3 に示すような一続きのシュテルン・ゲルラッハの実験を考える。すると第 1 の装置でスピン  $S_z = -\hbar/2$  を持つ成分 ( $S_z-$  ビームなどと呼ぼう) は除かれているにも関わらず、第 2 の装置  $SG_{\hat{x}}$  を通った  $S_x+$  成分を再び  $SG_{\hat{z}}$  に通すと、 $S_z-$  成分が現れる。

これは  $S_z+$  と  $S_x+$  の両成分を同時に決められないことを意味しており、第 2 の装置  $SG_{\hat{x}}$  で  $S_x+$  を選んだことにより、 $S_z$  に関する以前の情報は破壊されている。(このような制約は単なる実験家の力不足のせいではない。)

#### 光の偏光との類似性

このことは光の偏光に関する次の事情に似ている。まず偏光軸が  $x$  方向を向く偏光板  $P_x$  に光を通すと  $x$  方向の直線偏光 ( $x$  偏光) が得られ、その電場の振幅は  $E_0 \hat{x}$  と書ける。このとき電場の  $y$  成分は失われている

から、さらに偏光軸が  $y$  方向を向く 2 枚目の偏光板  $P_y$  に光を通すと、光は全く出てこない。次に図 4 のように 2 枚の偏光板の間に、偏光軸が  $x$  軸と  $\theta$  の傾きを成す  $x'$  軸方向を向いた偏光板  $P_{x'}$  を通す場合を考える。このとき  $P_{x'}$  の背後での電場の振幅は  $E_0 \cos \theta \hat{x}'$  であり、次いで  $P_y$  を通った光に関する電場の振幅は  $E_0 \sin \theta \cos \theta \hat{y}$  となる。このように  $P_x$  を通った光は電場の  $y$  成分を持たないにも関わらず、一般には最終的に  $P_y$  をゼロでない光が通る。

簡単のために  $\theta = 45^\circ$  とおこう。以上では  $x', y'$ -偏光が,  $x, y$ -偏光の線形結合

$$E_0 \cos(kz - \omega t) \hat{x}' = E_0 \cos(kz - \omega t) \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y} \right],$$

$$E_0 \cos(kz - \omega t) \hat{y}' = E_0 \cos(kz - \omega t) \left[ -\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y} \right]$$

で書けることが本質的である。そこで銀原子のスピンの状態もまた抽象的なベクトル  $|S_z; \pm\rangle$ , etc. で表され、

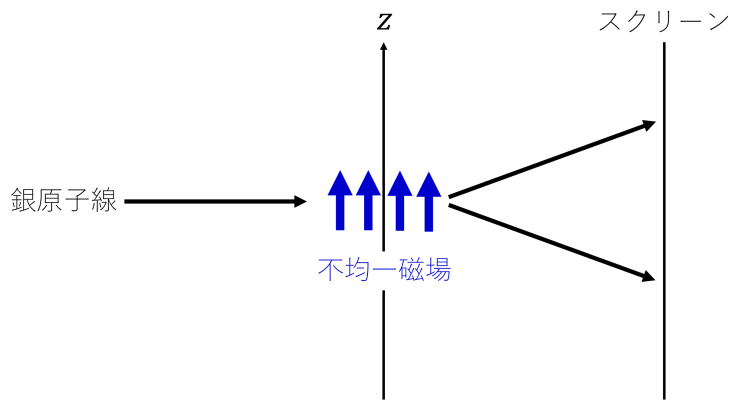


図 1 シュテルン・ゲルラッハの実験

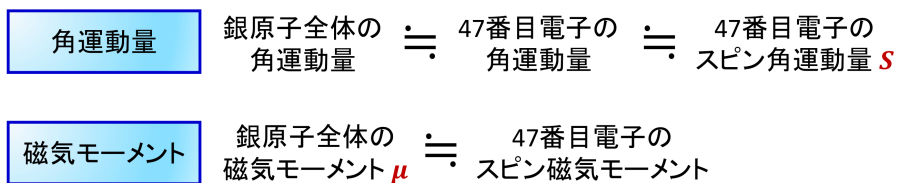


図 2 銀の原子の磁気モーメント  $\mu$  と, 電子のスピン  $S$  の比例関係

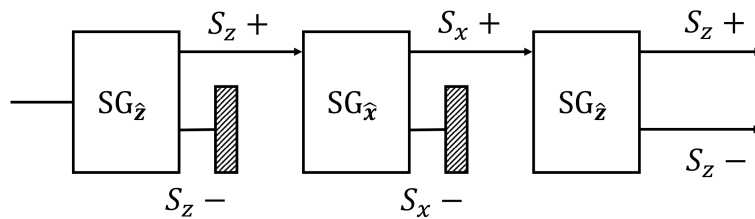


図 3 一続きのシュテルン・ゲルラッハの実験

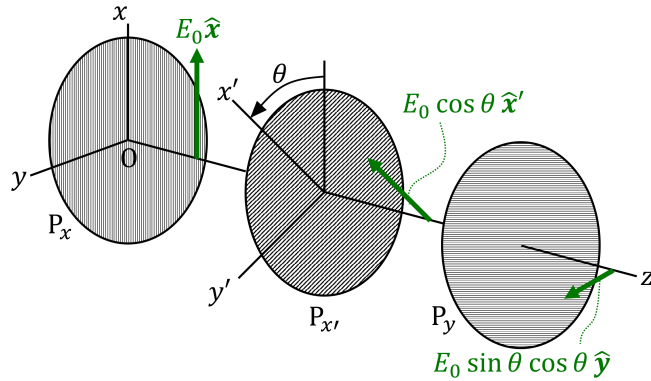


図4  $x$  偏光は偏光板  $P_{x'}$  を通すと  $y$  成分を持つ

$S_x$ ± 状態は  $S_z$ ± 状態の線形結合

$$|S_x; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; -\rangle,$$

$$|S_x; -\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}} |S_z; +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; -\rangle$$

与えられると仮定する。こうすれば  $S_x$ + 成分から  $S_z$ ± の 2 成分が得られることを説明できる。対称性より  $S_y$ ± 状態もまた  $S_z$ ± 状態の線形結合で表されなければならない。  $S_x$ ± 状態との違いを導入するには、複素係数を用いて、例えば

$$|S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; +\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}} |S_z; -\rangle$$

とすれば良い。

以上で我々は古典電磁場の偏光ベクトルとの類似性を手掛かりに、「量子力学的状態は抽象的複素ベクトル空間のベクトルによって記述されるという考えを導入」(p.12) したことになる。

## 1.1 について

■式 (1.1.1):  $\boldsymbol{\mu} \propto \mathbf{S}$  の説明 電磁場中の電子に対する Dirac 方程式は非相対論的極限で

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[ \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2 - \frac{e}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + e\Phi \right] \varphi$$

となることが示される (文字の説明は省略)。これは Pauli 方程式と呼ばれ、 $-\frac{e}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$  の項を除けば、電磁場中の荷電粒子に関する Schrödinger 方程式と同じである。付加的な項は磁気モーメント  $\boldsymbol{\mu}$  に付随するエネルギーの形  $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$  をしており、磁気モーメントの演算子は

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{e}{2m} \boldsymbol{\sigma} = \frac{e}{m} \hat{\mathbf{s}}$$

( $\hat{\mathbf{s}} = \boldsymbol{\sigma}/2$  は電子のスピン演算子) と同定される。これは電子が大きさ

$$\mu_B = \frac{e}{2m}$$

の固有磁気モーメントを持つことを意味している\*1 [1, pp.433–437]. 磁気能率の Dirac 値 ( $-e/2m$ ) からのずれ (異常磁気能率) は, 場の量子論に基づく “輻射補正” によって説明される [4, pp.211–215]. (詳しくは場の量子論のノートにまとめてある.)

■  $\partial B_z/\partial z < 0$  の不均一磁場 「図 1.1 の配置では  $\mu_z > 0 (S_z < 0)$  の原子は下向きの力を受け,  $\mu_z < 0 (S_z > 0)$  の原子は上向きの力を受ける」 (p.3 下 2 行, p.4 の 1 行目) では, 原子の受ける力の  $z$ -成分 (1.1.2) において  $\partial B_z/\partial z < 0$  となるような不均一磁場を考えていることになる.

■ 方向単位ベクトル  $\hat{x}$   $x$ -方向に振動する電場 (1.1.5):  $\mathbf{E} = E_0 \hat{x} \cos(kz - \omega t)$  における  $\hat{x}$  は  $x$  軸方向の単位ベクトルである. 以降も同様の表記が用いられる.

■ ベクトルの成分と基底の変換則 式 (1.1.8), (1.1.9a,b) について, ベクトル  $\mathbf{x} = x_i \mathbf{e}_i$  の基底  $\mathbf{e}_i$  と成分  $x_i$  は共通の係数  $a_{ij}$  を用いて

$$x'_i = \sum_j a_{ij} x_j, \quad \mathbf{e}'_i = \sum_j a_{ij} \mathbf{e}_j$$

と変換される. 実際,  $\mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_j \equiv a_{ij}$  に対して

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_i &= \sum_j (\mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_j) \mathbf{e}_j = \sum_j a_{ij} \mathbf{e}_j, \\ \mathbf{x} &= \sum_j x_j \mathbf{e}_j = \sum_{i,j} x_j (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}'_i) \mathbf{e}'_i, \quad \therefore x'_i = \sum_j (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}'_i) x_j = \sum_j a_{ij} x_j \end{aligned}$$

である.

■  $S_y \pm$  状態をどう表すか 「対称性の議論を使えば,  $x$ -方向に進む  $S_z \pm$  原子線を  $SG\hat{y}$  装置に通して観測するとき得られる様子は  $y$ -方向に進む  $S_z \pm$  原子線を  $SG\hat{x}$  装置に通す場合と, きわめて似通っている」 (p.10) について, これは図 5 に示した  $z$  軸周りの回転対称性から理解される. この対称性により,  $S_z \pm$  原子線が状態  $S_x \pm$  に移る確率が  $|\langle S_x; + | S_z; \pm \rangle|^2 = |\langle S_x; - | S_z; \pm \rangle|^2 = 1/2$  であるならば, 状態  $S_y \pm$  に移る確率もまた  $|\langle S_y; + | S_z; \pm \rangle|^2 = |\langle S_y; - | S_z; \pm \rangle|^2 = 1/2$  でなければならない.  $|S_x; \pm\rangle$  の式 (1.1.9) は  $|S_z; \pm\rangle$  について逆に解くと

$$|S_z; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S_x; +\rangle \mp |S_x; -\rangle)$$

であり,  $|S_y; \pm\rangle$  の式 (1.1.14) は  $|S_z; \pm\rangle$  について逆に解くと

$$|S_z; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S_y; +\rangle + |S_y; -\rangle), \quad |S_z; -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}i} (|S_y; +\rangle - |S_y; -\rangle)$$

だから, このことが満たされている.

■ 円偏光の式 (1.1.12) について 例えば文献 [2, pp.130–131] を参照.

■ 複素係数の導入について 基底ベクトル  $|S_z; \pm\rangle$  の線形結合

$$|\alpha\rangle = c_+ |S_z; +\rangle + c_- |S_z; -\rangle$$

はその定数倍  $c|\alpha\rangle$  と同じ状態と見なされるため (1.2 節), 状態  $|\alpha\rangle$  は係数  $c_{\pm}$  の比によってのみ区別されることになる. 比が複素数であれば 2 つの実数パラメーターが含まれるため, スピンが任意の方向を向いた状態を表すことができる (着想は文献 [3, pp.19–20] による, 具体的には式 (3.2.52) の箇所を参照).

\*1 普通の単位系では  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ . この量を Bohr 磁子と呼ぶ.

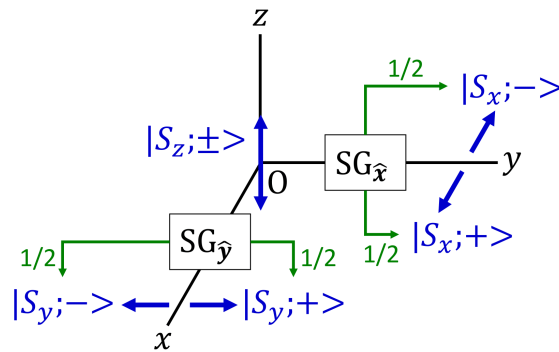


図5 z軸周りの回転対称性

■スピンの上向き，下向きのいずれかであること スピンを上向き（z軸正の向き）か下向き（z軸負の向き）かの2択で考えるのは，スピンのz軸方向を向く状態  $|S_z; \pm\rangle$  を基底にとることに対応している．スピンの上向きと下向き以外の向き，例えばx軸正の向きを向く状態は式(1.1.9a)：

$$|S_x; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; -\rangle$$

のように，上向きの状態と下向きの状態の重ね合わせによって表される．

## 1.2 ケット，ブラおよび演算子

本節(1.2節)と次節(1.3節)では，量子力学の定式化に用いられる数学的な基礎形式を，半ば公理的に導入する．

### ケット空間

物理的状態はケットと呼ばれる状態ベクトル  $|\alpha\rangle$  で表される． $|\alpha\rangle$  がベクトルであるとは

- 和  $|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + |\beta\rangle$
- 定数倍  $c|\alpha\rangle$  ( $c$ は複素数)

が定義されるという意味である．和  $|\gamma\rangle$  は状態  $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$  の重ね合わせを表す．また， $|\alpha\rangle$  とその定数倍  $c|\alpha\rangle$  は同じ状態を表す\*2．

観測量は状態  $|\alpha\rangle$  に作用する演算子  $A$  で表される．

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \tag{1}$$

を満たす  $|a'\rangle$  は演算子  $A$  の固有値  $a'$  に属する固有ケットと呼ばれ， $|a'\rangle$  で表される状態は固有状態と呼ばれる．

\*2 これにより同一の状態  $c_1|\alpha\rangle, c_2|\alpha\rangle$  の重ね合わせ  $(c_1 + c_2)|\alpha\rangle$  が，もとの状態と変わらないことが保証される [3, p.18].



## ブラ空間と内積

次にケット  $|\alpha\rangle$  の共役としてブラ  $\langle\alpha|$  を導入する。ただし

$$|\gamma\rangle = c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\gamma| = c_\alpha^* \langle\alpha| + c_\beta^* \langle\beta|$$

と約束する。さらにケット  $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$  の内積  $(\langle\beta| \cdot |\alpha\rangle) = \langle\beta|\alpha\rangle$  を定義し、以下を要請する。

- 内積は一般に複素数であり,  $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$ 
  - このとき  $\langle\alpha|\alpha\rangle$  は実数となる。
- $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$  (等号は零ケット  $|\alpha\rangle = 0$  に対してのみ成立)
  - $|\alpha\rangle (\neq 0)$  と同じ状態を表し,  $\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle = 1$  となるように規格化されたケット  $|\tilde{\alpha}\rangle \equiv \frac{1}{\langle\alpha|\alpha\rangle} |\alpha\rangle$  をとれる。

## 演算子

観測量に対応する演算子 ( $A, B, \dots$  で表す) に限らず, 一般の演算子  $X, Y, \dots$  を考える。

- 演算子が等しいこと  $X = Y$  の定義  $X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle$ . (任意の  $|\alpha\rangle$ )
- 零演算子  $X$  の定義  $X|\alpha\rangle = 0$ . (任意の  $|\alpha\rangle$ )
- 加法操作に関する交換則と結合則

$$\begin{aligned} X + Y &= Y + X, \\ X + (Y + Z) &= (X + Y) + Z. \end{aligned}$$

- 線形性 (例外は第 4 章の時間反転の演算子)

$$X(c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle) = c_\alpha X|\alpha\rangle + c_\beta X|\beta\rangle.$$

- 演算子  $X$  は  $\langle\alpha|X$  のように, ブラに右側から作用する。
- 演算子  $X$  の Hermite 共役  $X^\dagger$  の定義

$$|\beta\rangle = X|\alpha\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\beta| = \langle\alpha|X^\dagger.$$

- Hermite 演算子  $X$  の定義  $X = X^\dagger$

## 演算子の積

- 演算子の積は一般には交換できない:  $XY \neq YX$ .
- 結合則

$$\begin{aligned} X(YZ) &= (XY)Z = XYZ, \\ X(Y|\alpha\rangle) &= (XY)|\alpha\rangle = XY|\alpha\rangle, \\ (\langle\beta|X)Y &= \langle\beta|(XY) = \langle\beta|XY. \end{aligned}$$

- 積の Hermite 共役

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger. \tag{1.2.29}$$

[導出は本稿次節を参照.]

- 外積  $|\beta\rangle\langle\alpha|$  (すぐ後で説明)
- その他の“規則に合わない積”  $|\alpha\rangle X$ ,  $X\langle\alpha|$ ,  $|\alpha\rangle|\beta\rangle$ ,  $\langle\alpha|\langle\beta|$  は意味を成さない.
  - ただしこれは  $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$  が同じベクトル空間に属す限りである.  
異なるベクトル空間のケット, 例えば電子の位置固有状態  $|\mathbf{x}'\rangle$  とスピン状態  $|\pm\rangle$  を並べて

$$|\mathbf{x}', \pm\rangle = |\mathbf{x}'\rangle \otimes |\pm\rangle \quad (\text{あるいは単に } |\mathbf{x}'\rangle|\pm\rangle) \quad (3.7.1)$$

を定義することはできる.

### 結合の公理

掛け算の結合の公理: ケット, ブラおよび演算子間の“規則にあった”積は結合できる.

- 例 1

$|\beta\rangle\langle\alpha|$  という表現はケット  $|\beta\rangle$  とブラ  $\langle\alpha|$  の外積と呼ばれ, これは

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|) \cdot |\gamma\rangle = |\beta\rangle \cdot (\langle\alpha|\gamma\rangle) = |\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle$$

のように何らかのケット  $|\gamma\rangle$  に作用して  $|\beta\rangle$  に比例する別のケットを作る演算子である.

- 性質

$$X = |\beta\rangle\langle\alpha| \quad \Rightarrow \quad X^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|.$$

[導出は本稿次節を参照.]

- 例 2

$$(\langle\beta|) \cdot (X|\alpha\rangle) = (\langle\beta|X) \cdot (|\alpha\rangle) = \langle\beta|X|\alpha\rangle.$$

- 性質

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\alpha|X^\dagger|\beta\rangle^*. \quad (1.2.38)$$

[導出は本稿次節を参照. これは Hermite 共役な演算子 ( $\dagger$  で表す) の行列表現が, 共役転置行列 (同じく  $\dagger$  で表される) であることを意味する (1.3 節).]

## 1.2 について

■理論が状態ベクトル  $|\alpha\rangle$  という, 直接実験にかからない概念を含んで良いこと

- 「量子力学的状態は抽象的複素ベクトル空間のベクトルによって記述される」(p.12, 1.14,15)
- 状態  $|\alpha\rangle$  は複数の状態  $|\alpha'\rangle$  の重ね合せとして式 (1.3.7):  $|\alpha\rangle = \sum_{\alpha'} c_{\alpha'} |\alpha'\rangle$  のように表される

といった考えは抽象的で, 一見すると現実との対応が不明瞭な空想の産物に過ぎないという印象を受けるかもしれない. また, あるケットとブラが“対をなす”ことの明瞭な意味は与えられず, Hermite 共役の定義, ブラとケットの内積などの数学的な性質が与えられるにすぎない.

しかし Feynman が注意しているように「直接実験にかかる概念だけを使って, 完全に科学を追究できると考えるのは, 正しくない」のであり, 理論の正否はその予言の能力にかかっている [5, p.178]. そしてケット, ブラおよび演算子に関する数学的性質が種々の計算を実行するのに十分に与えられさえすれば, 系の状態が測

定によって「ある特別な状態  $|a'\rangle$  へ跳び移る確率は  $a'$  の確率  $= |\langle a'|\alpha\rangle|^2$  : (1.4.4) である」(p.31) という物理的な仮定の下で現象を確率的に予言できるのだから、物理的状态がケット  $|\alpha\rangle$  で表されるという概念を、現実的な意味を持つものとして受け容れることができる。

抽象的複素ベクトル 「抽象的複素ベクトル」という表現 (p.12, 1.14) は数ベクトルとの対比で用いられているものと考えられ、

$$\begin{aligned} \text{数ベクトル} &\leftrightarrow \text{抽象的複素ベクトル,} \\ \text{数ベクトルの成分} &\leftrightarrow \text{基底ケットの展開係数} \end{aligned}$$

と対応する。

状態ケット  $|\alpha\rangle$  において考慮される自由度 また、状態ケット  $|\alpha\rangle$  は「物理的状态の完全な情報を含んでいるものと仮定」(p.13, 1.11,12) されていたが、実際には

- スピン以外の量子力学的自由度を無視したケット  $|\pm\rangle$
- 空間的自由度 (位置や運動量) のみを考慮して、スピンのような内部自由度を無視したケット  $|\mathbf{x}'\rangle$

などが扱われる\*3. ケット  $|\pm\rangle, |\mathbf{x}'\rangle$  は、考えている自由度に応じた異なる次元のベクトル空間に属することになる。

■式 (1.2.29):  $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$  の証明 (1.2.30) について Hermite 共役を定義する式 (1.2.24), すなわち

$$\begin{aligned} |\beta\rangle \equiv Y|\alpha\rangle &\Rightarrow \langle\beta| = \langle\alpha|Y^\dagger, \\ |\gamma\rangle \equiv X|\beta\rangle &\Rightarrow \langle\gamma| = \langle\beta|X^\dagger \end{aligned}$$

の第1式を第2式に代入すると、

$$|\gamma\rangle = XY|\alpha\rangle \Rightarrow \langle\gamma| = \langle\alpha|Y^\dagger X^\dagger$$

が得られることを意味している。

別証を載せておこう [3, p.30]. 任意のケット  $|P\rangle, |Q\rangle$  に対して  $|A\rangle = X^\dagger|P\rangle, \langle B| = \langle Q|Y^\dagger$  を定義すると、

$$\langle Q|Y^\dagger X^\dagger|P\rangle = \langle B|A\rangle = \langle A|B\rangle^* = \langle P|XY|Q\rangle^* = \langle Q|(XY)^\dagger|P\rangle$$

とできる。ただし最後の等号では、すぐ後で示す式 (1.2.38) を用いた。これが任意の  $|P\rangle, |Q\rangle$  に対して成り立つことから、再び式 (1.2.29):  $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$  を得る。

■  $(|\beta\rangle\langle\alpha|)^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|$  の証明 「もし  $X = |\beta\rangle\langle\alpha|$  : (1.2.34) ならば  $X^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|$  : (1.2.35) であることが容易に分かる。これは演習問題として残しておこう。」(p.21) について、これは任意の  $|\gamma\rangle$  に対して

$$\begin{aligned} |A\rangle = |\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle &\Rightarrow \langle A| = \langle\alpha|\gamma\rangle^* \langle\beta| \\ &= (\langle\gamma|\alpha\rangle) \cdot \langle\beta| \quad (\because \text{式 (1.2.12)}) \\ &= \langle\gamma|\alpha\rangle \langle\beta| \quad (\text{掛け算の結合の公理}) \end{aligned}$$

となることから示される。(同様の証明が文献 [3, p.31] に見出される。)

\*3 空間的自由度と内部自由度を共に考慮することを論じた pp.276-277 を参照。

■  $\langle \beta | X | \alpha \rangle = \langle \alpha | X^\dagger | \beta \rangle^*$  の証明 (1.2.38) について  $\langle \beta | X | \alpha \rangle = \langle \alpha | X^\dagger | \beta \rangle^*$  の証明 (1.2.38):

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = \langle \beta | \cdot (X | \alpha \rangle) = \{ (\langle \alpha | X^\dagger) \cdot | \beta \rangle \}^* = \langle \alpha | X^\dagger | \beta \rangle^*$$

は,  $|\gamma\rangle \equiv X |\alpha\rangle$  とおくと見やすくなる. すなわち Hermite 共役を定義する式 (1.2.24):  $\langle \gamma | = \langle \alpha | X^\dagger$  と式 (1.2.12):  $\langle \beta | \gamma \rangle = \langle \gamma | \beta \rangle^*$  より

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = \langle \beta | \gamma \rangle = \langle \gamma | \beta \rangle^* = \langle \alpha | X^\dagger | \beta \rangle^* .$$

### ■波動関数を用いた定義

$\langle \beta | A | \alpha \rangle$  の定義 任意の演算子  $A$  に対して

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle \equiv \int \psi_\alpha^* A \psi_\beta dv \quad (2)$$

と定義されることがある [6, p.112]. これは  $A$  を対角型にするような基底  $\{|x'\rangle\}$  に対しては, すなわち  $\langle x'' | A | x' \rangle = x' \delta(x' - x'')$  となるような基底  $\{|x'\rangle\}$  に対しては正しいと考えられる. 実際, このとき

$$\begin{aligned} \langle \beta | A | \alpha \rangle &= \int dx' \int dx'' \psi_\beta^*(x') \langle x' | A | x'' \rangle \psi_\alpha(x'') : (1.7.10) \\ &= \int dx' \psi_\beta^*(x') A(x') \psi_\alpha(x') : (2) \end{aligned}$$

となる. 1つの例に式 (1.7.19):  $\langle \beta | A | \alpha \rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}) \psi_\alpha(x')$  がある.

式 (2) で  $A = 1$  とおいて得られる関係 (1.7.6):  $\langle \beta | \alpha \rangle = \int dx' \psi_\beta^* \psi_\alpha$  は要請 (1.2.12):  $\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle$  を満たしている.

Hermite 共役の定義 演算子  $X$  の Hermite 共役  $X^\dagger$  は式 (1.2.24):

$$X | \alpha \rangle \quad \underline{\text{DQ}} \quad \langle \alpha | X^\dagger$$

で定義され, 式 (1.2.38):

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = \langle \alpha | X^\dagger | \beta \rangle^*$$

を満たす.

式 (2) で  $\langle \beta | A | \alpha \rangle$  を定義した場合には, これは

$$\int \psi_\beta^* X \psi_\alpha dv = \left( \int \psi_\alpha^* X^\dagger \psi_\beta dv \right)^* \quad (3)$$

と書き換えられ, そしてこの式 (3) で Hermite 共役  $X^\dagger$  が定義される [6, p.112].

$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$  Hermite 共役を定義する式 (1.2.24):

$$X | \alpha \rangle \quad \underline{\text{DQ}} \quad \langle \alpha | X^\dagger$$

と結合の公理から性質 (1.2.29):  $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$  が導かれる.

これは式 (2), (3) をそれぞれ  $\langle \beta | A | \alpha \rangle, X^\dagger$  の定義と見た場合,

$$\text{式 (2), (3)} \quad \Rightarrow \quad \langle X \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle = \langle \psi_\alpha | X^\dagger | \psi_\beta \rangle$$

となることを用いて証明される [6, pp.112–113].

### 1.3 基底ケットと行列表現

#### 観測量の固有ケット

量子力学に出てくる重要な Hermite 演算子はたいてい、ある物理量を表す演算子になっている。1.4 節の内容を先取りしつつ、その理由を述べる。観測量  $A$  を測定すると、ある値  $a'$  が固有値として得られる。固有値  $a'$  は実数であることが期待される。さらに固有値  $a'$  が確実に得られる状態  $|a'\rangle$  において  $A$  の測定を行い、系を固有値の異なる固有状態  $|a''\rangle$  ( $a'' \neq a'$ ) に見出す確率、従ってその振幅  $\langle a''|a'\rangle$  はゼロとなることが要求される。これらは観測量を表す演算子  $A$  が Hermite であれば満たされる：

**定理** Hermite 演算子  $A$  の固有値は実数である。

また異なる固有値に属する  $A$  の固有ケットは、互いに直交する。(証明は下記)

そこで観測量  $A$  は Hermite であり、その固有ケット  $\{|a'\rangle\}$  は規格直交条件

$$\langle a''|a'\rangle = \delta_{a''a'} \quad (4)$$

を満たすものとする。

#### 基底ケットとしての固有ケット

固有ケット  $\{|a'\rangle\}$  の規格直交性の下で、任意のケット  $|\alpha\rangle$  が  $\{|a'\rangle\}$  を基底ケットに用いて

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (5)$$

と展開できることは

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = 1 \quad (6)$$

と等価であり、このとき展開係数は  $c_{a'} = \langle a'|\alpha\rangle$  と定まる(導出は下記、右辺の 1 は恒等演算子と見なされる)。式 (6) は完全性条件(完備関係式)と呼ばれる。ここで  $|a'\rangle \langle a'|$  は任意の状態  $|\alpha\rangle$  に作用して、 $|a'\rangle$  に“平行な”成分  $|a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle$  を選び出す射影演算子となっていることにも注意する。

#### 行列表現

与えられた基底ケット

$$\{|a'\rangle\} = \{|a^{(1)}\rangle, |a^{(2)}\rangle, \dots\}$$

に対して、任意の演算子  $X$  とケット  $|\alpha\rangle$ , ブラ  $\langle\alpha|$  の行列表現

$$X \rightarrow \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|X|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(1)}|X|a^{(2)}\rangle & \dots \\ \langle a^{(2)}|X|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(2)}|X|a^{(2)}\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad |\alpha\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha\rangle \\ \vdots \end{pmatrix},$$

$$\langle\alpha| \rightarrow (\langle\alpha|a^{(1)}\rangle \quad \langle\alpha|a^{(2)}\rangle \quad \dots) = (\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* \quad \langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* \quad \dots)$$

を定義する。このとき

- 式 (1.2.38) より  $X$  とその Hermite 共役な演算子  $X^\dagger$  は、

互いに転置複素共役な行列で表されることになる。

$$\langle a''|X|a' \rangle = \langle a'|X^\dagger|a'' \rangle.$$

– 特に Hermite 演算子は Hermite 行列で表される。

- 演算子  $X, Y$  の積  $XY$  は,  $X, Y$  の表現行列の積で表される :

$$\langle a''|XY|a' \rangle = \sum_{a'''} \langle a''|X|a''' \rangle \langle a'''|Y|a' \rangle.$$

[本稿次節で補足.]

- 演算子とケットの積  $X|\alpha\rangle$  は, 演算子  $X$  とケット  $|\alpha\rangle$  の表現行列の積で表される :

$$\langle a'| \cdot (X|\alpha\rangle) = \sum_{a''} \langle a'|X|a'' \rangle \langle a''|\alpha\rangle.$$

- ブラと演算子の積  $\langle\alpha|X$  は, ブラ  $\langle\alpha|$  と演算子  $X$  の表現行列の積で表される :

$$(\langle\alpha|X) \cdot |a'\rangle = \sum_{a''} \langle\alpha|a'' \rangle \langle a''|X|a'\rangle.$$

- 内積  $\langle\beta|\alpha\rangle$  は  $\langle\beta|$  と  $|\alpha\rangle$  の表現行列の積で表される :

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \sum_{a'} \langle\beta|a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle = (\langle a^{(1)}|\beta\rangle^* \quad \langle a^{(2)}|\beta\rangle^* \quad \dots) \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

最右辺は全体の複素共役 [したがって転置複素共役] をとると,  $\langle\alpha|\beta\rangle$  の計算になる。

$$\langle\alpha|\beta\rangle = (\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* \quad \langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* \quad \dots) \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\beta\rangle \\ \langle a^{(2)}|\beta\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

これは内積の性質  $\langle\beta|\alpha\rangle^* = \langle\alpha|\beta\rangle$  から期待される結果である。

- 外積  $|\beta\rangle\langle\alpha|$  の表現行列は

$$|\beta\rangle\langle\alpha| \rightarrow \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\beta\rangle \langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(1)}|\beta\rangle \langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \dots \\ \langle a^{(2)}|\beta\rangle \langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(2)}|\beta\rangle \langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.3.31)$$

である [本稿次節で理由を補足].

## スピン 1/2 の系

恒等式 (1.3.34):  $A = A(\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|) = \sum_{a'} a' |a'\rangle\langle a'|$  を適用すると, スピン演算子は

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \{(|+\rangle\langle +|) - (|-\rangle\langle -|)\}$$

と書ける (ただし  $|\pm\rangle \equiv |S_z; \pm\rangle$ ).  $|\pm\rangle$  を基底ケットとしたときの行列表現は

$$|+\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad S_z \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

となる。ただし行列要素は慣例に従い、角運動量成分の大きい順に並べてある\*4。

### 1.3 節、式の証明など

■ Hermite 演算子に関する定理の証明 Hermite 演算子  $A$  の固有値  $a', a'', \dots$  は実数であり、異なる固有値  $a', a''$  に属する  $A$  の固有ケット  $|a'\rangle, |a''\rangle$  は直交すること、すなわち  $\langle a'|a''\rangle = 0$  を示す。固有方程式 (1):

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle$$

の両辺 Hermite 共役をとり、 $A$  が Hermite であること  $A^\dagger = A$  を用いると

$$\langle a''|A = a''^* \langle a'| \tag{7}$$

となる。ここで

$$\begin{aligned} \langle a''|(式(1)): & \quad \langle a''|A|a'\rangle = a' \langle a''|a'\rangle \\ (式(7))|a'\rangle: & \quad \langle a''|A|a'\rangle = a''^* \langle a''|a'\rangle \end{aligned}$$

を辺々引いて

$$(a' - a''^*) \langle a''|a'\rangle = 0$$

を得る。今、 $a'$  と  $a''$  を等しくとると  $(a' - a''^*) \langle a''|a'\rangle = 0$  であり、固有ケット  $|a'\rangle \neq 0$  より  $\langle a''|a'\rangle > 0$  であることから  $a' = a''^*$  が結論される。これは固有値  $a'$  が実数であることを意味する。次に相異なる  $a', a''$  をとると上式において  $a' - a''^* = a' - a'' \neq 0$  なので、直交性  $\langle a''|a'\rangle = 0$  が示される。

■ 完全性条件 (6) の導出 任意のケット  $|\alpha\rangle$  が固有ケット  $\{|a'\rangle\}$  を用いて式 (5):

$$|\alpha\rangle = \sum_{a''} c_{a''} |a''\rangle$$

のように展開できるとする。このとき展開係数は

$$\begin{aligned} \langle a'|\alpha\rangle &= \sum_{a''} c_{a''} \delta_{a'a''} \quad (\because \text{規格直交性 (4): } \langle a'|a''\rangle = \delta_{a'a''}) \\ &= c_{a'} \end{aligned}$$

と定まる。これを上式に戻すと

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \tag{8}$$

であり、これが任意のケット  $|\alpha\rangle$  に対して成り立つことから完全性条件

$$\text{式 (6): } \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = 1$$

を得る。逆に完全性条件が成り立てば、任意のケット  $|\alpha\rangle$  を式 (8) のように展開することができる。実際、完全性条件は任意の状態が基底で展開できることを仮定して導かれたため、基底が完全系を成す条件となっている。

\*4 今の例では

$$|\alpha\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle +|\alpha\rangle \\ \langle -|\alpha\rangle \end{pmatrix}, \quad X \rightarrow \begin{pmatrix} \langle +|X|+\rangle & \langle +|X|-\rangle \\ \langle -|X|+\rangle & \langle -|X|-\rangle \end{pmatrix}$$

である。

### 1.3 について

■恒等式  $\langle a' | f(A) = \langle a' | f(a')$  Hermite 演算子  $A$  に対して式 (1.3.1):  $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$  の辺々 Hermite 共役をとると式 (1.3.2):  $\langle a' | A = a'^* \langle a' |$  を得る. Hermite 演算子の固有値は実数であることが証明された後には, 結局, 式 (1.3.2) は  $\langle a'' | A = a'' \langle a' |$  と書ける. このことは後の式 (1.4.28) において用いることになる.

より一般に  $f(A)$  が Hermite 演算子か否かに関わらず  $\langle a' | f(A) = \langle a' | f(a')$  である. 実際,

$$\langle a' | f(A) \stackrel{\text{DQ}}{\longleftarrow} f(A)^\dagger |a'\rangle = f(a')^* |a'\rangle \stackrel{\text{DQ}}{\longrightarrow} \langle a' | f(a')$$

が成り立つ. この証明は関係式  $\langle a' | f(A) = \langle a' | f(a')$  を  $f(A)^\dagger |a'\rangle = f(a')^* |a'\rangle$  のある種の鏡像と理解できることを意味している.

ここから例えば次の関係が理解できる.

- 式 (2.1.45) について  $\langle a' | \mathcal{U}^\dagger(t, 0) = \langle a' | e^{iE_{a'}t/\hbar}$
- 式 (2.6.55) について  $\langle \mathbf{x}' | e^{ie\Lambda(\mathbf{x})/\hbar c} = \langle \mathbf{x}' | e^{ie\Lambda(\mathbf{x}')/\hbar c}$
- 式 (3.2.6) について  $\langle - | e^{-iS_z\phi/\hbar} = \langle - | e^{i\phi/2}$
- 式 (3.5.50) について  $\langle j, m' | e^{-iJ_z\alpha/\hbar} = \langle j, m' | e^{-im'\alpha}$

■完備関係式 (1.3.11) 上で見たように, 完備関係式 (1.3.11) の導出過程

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (\{|a'\rangle\} \text{ の完備性}) \\ &= \sum_{a'} (\langle a' | \alpha \rangle) \cdot |a'\rangle \quad (\{|a'\rangle\} \text{ の規格直交性}) \\ &= \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \end{aligned}$$

では  $\{|a'\rangle\}$  の規格直交性を用いている. 一方, 完備関係式 (1.3.11):  $\sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | = 1$  が成り立ちさえすれば,  $\{|a'\rangle\}$  の規格直交性を仮定しなくても

$$|\alpha\rangle = \left( \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \right) \cdot |\alpha\rangle = \sum_{a'} (\langle a' | \alpha \rangle) \cdot |a'\rangle$$

と展開されるため,  $\{|a'\rangle\}$  は完全系を作ることになると考えられる.

■式 (1.3.12), (1.3.13)  $|\alpha\rangle$  が規格化されているならば式 (1.3.13):  $\sum_{a'} |c_{a'}|^2 = 1$  となることが

$$\sum_{a'} |c_{a'}|^2 = \sum_{a'} \langle a' | \alpha \rangle^* \langle a' | \alpha \rangle = \sum_{a'} \langle \alpha | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle = 1$$

と確かめられる. これは式 (1.3.12):  $\langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2$  の確認作業を含んでいる.

連続変数  $\xi'$  (例えば位置  $x'$ ) に対する議論 (1.6 節) と合わせると, 状態ケット  $|\alpha\rangle$  が規格化されていることを表す複数の式の間の関係は図 6 のようにまとめられる. すなわち状態ケット  $|\alpha\rangle$  が  $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$  と規格化されていることは全確率, すなわち測定によりいずれかの固有値  $\{a'\}, \{\xi'\}$  を見出す確率が 1 であることを意味す



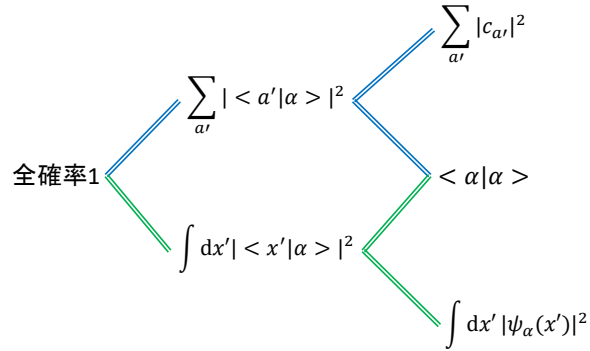


図6 状態ケット  $|\alpha\rangle$  が規格化されていることを表す複数の式の間の関係

る。このことは完全性条件を用いて

$$1 = \langle \alpha|\alpha \rangle = \begin{cases} \sum_{a'} \langle \alpha|a' \rangle \langle a'|\alpha \rangle = \sum_{a'} |\langle a'|\alpha \rangle|^2 \\ \int d\xi' \langle \alpha|\xi' \rangle \langle \xi'|\alpha \rangle = \int d\xi' |\langle \xi'|\alpha \rangle|^2 \end{cases}$$

と確かめられる。

■「行列の積についての通常の規則が適用できる」こと (p.26 下から 2 行目~p.27, l.6)  $a'', a'$  成分が  $\langle a''|X|a' \rangle$  となる行列  $\hat{X}$  を作って演算子  $X$  を表す行列と名付け、行列の積についての通常の規則に従って演算子  $X, Y$  を表す行列  $\hat{X}, \hat{Y}$  の積を計算すると、行列の積  $\hat{X}\hat{Y}$  は演算子  $Z = XY$  を表す行列となっている。これは自明ではなく、式 (1.3.23):

$$\langle a''|Z|a' \rangle = \langle a''|XY|a' \rangle = \sum_{a'''} \langle a''|X|a''' \rangle \langle a'''|Y|a' \rangle$$

から保証される。「行列の積についての通常の規則が適用できる」(p.26) とは、このことを述べている。

■ $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$  の行列表現  $X$  を表現する行列 (式 (1.3.19) 右辺) を  $\hat{X}$  とすると、式 (1.3.20) の複素共役をとった関係  $\langle a''|X|a' \rangle^* = \langle a'|X^\dagger|a'' \rangle$  は

$$({}^t \hat{X}^*)_{a'a''} = (\hat{X}^\dagger)_{a'a''} \quad (9)$$

と書き表される。さて、

$$Z = XY \Rightarrow \hat{Z} = \hat{X}\hat{Y}, \quad \therefore {}^t \hat{Z}^* = ({}^t \hat{Y}^*)({}^t \hat{X}^*)$$

なので上式 (9) とより

$$\widehat{Z}^\dagger = \widehat{Y}^\dagger \widehat{X}^\dagger, \quad \therefore Z^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$$

を得る。ここでは  $\dagger$  を初めから共役転置行列を表す記号として導入したのではなく、演算子の Hermite 共役を表す記号として導入したのだから、これは自明ではない。

■内積  $\langle \beta|\alpha \rangle$  の行列表現 (1.3.30) について これが「内積の基本的性質 (1.2.12) と合致する」(p.28) のは確かだが、その確認過程で式 (1.2.12):  $\langle \beta|\alpha \rangle = (\langle \alpha|\beta \rangle)^*$  そのものを用いている。これは循環論法と言うよりもむしろ整合性の現れである。

なお、この事情は行・列ベクトル表記にするか否かに依らない。そこで行・列ベクトル表記を用いずにこの点を見ると

$$\begin{aligned}\langle\beta|\alpha\rangle^* &= \left(\sum_{a'}\langle\beta|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle\right)^* = \left(\sum_{a'}\langle a'|\beta\rangle^*\langle a'|\alpha\rangle\right)^* \quad (\because \text{式 (1.2.12)}) \\ &= \sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^*\langle a'|\beta\rangle = \sum_{a'}\langle\alpha|a'\rangle\langle a'|\beta\rangle \quad (\because \text{式 (1.2.12)}) \\ &= \langle\alpha|\beta\rangle \Leftrightarrow \text{式 (1.2.12)}.\end{aligned}$$

■ $|\beta\rangle\langle\alpha|$ の行列表現 (1.3.31) について  $|\beta\rangle\langle\alpha|$ の行列表現が式 (1.3.31) で良いのは次のことから裏付けられる。すなわち式 (1.3.31) を仮定するとケットの行列表現 (1.3.26) の下、 $(|\beta\rangle\langle\alpha|)\cdot|\gamma\rangle$ の行列表現が $|\beta\rangle\cdot(\langle\alpha|\gamma\rangle)$ の列ベクトル表現に一致する：

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\beta\rangle\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(1)}|\beta\rangle\langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \cdots \\ \langle a^{(2)}|\beta\rangle\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(2)}|\beta\rangle\langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}_{\text{式 (1.3.31) 右辺}} \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\beta\rangle \\ \langle a^{(2)}|\beta\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \langle\alpha|\gamma\rangle.$$

さらにブラの行列表現 (1.3.29) の下、 $\langle\gamma|\cdot(|\beta\rangle\langle\alpha|)$ の行列表現が $(\langle\gamma|\beta\rangle)\cdot\langle\alpha|$ の行ベクトル表現に一致する：

$$\langle\gamma|a^{(1)}\rangle\langle\gamma|a^{(2)}\rangle\cdots \underbrace{\begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\beta\rangle\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(1)}|\beta\rangle\langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \cdots \\ \langle a^{(2)}|\beta\rangle\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(2)}|\beta\rangle\langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}_{\text{式 (1.3.31) 右辺}} = \langle\gamma|\beta\rangle(\langle a^{(1)}|\alpha\rangle\langle a^{(2)}|\alpha\rangle\cdots).$$

■式 (1.3.33): $\langle a''|A|a'\rangle = \langle a'|A|a'\rangle\delta_{a'a''} = a'\delta_{a'a''}$  について まず

$$\langle a''|A|a'\rangle = a'\langle a''|a'\rangle = a'\delta_{a'a''}$$

によって最右辺の表式が得られる。すなわち「正方行列 $\langle a''|A|a'\rangle$ は明らかに対角型」(式 (1.3.33)1行上)であることが分かる。次いで $a'\delta_{a'a''} = a'\langle a'|a'\rangle\delta_{a'a''} = \langle a'|A|a'\rangle\delta_{a'a''}$ により式 (1.3.33) 中央の表式が得られる。

■式 (1.3.34): $A = \sum_{a'} a'|a'\rangle\langle a'| = \sum_{a'} a'\Lambda_{a'}$ について これは式 (1.3.32) から出発しなくとも、完備関係式を用いて

$$A = \sum_{a'} A|a'\rangle\langle a'| = \sum_{a'} a' \underbrace{|a'\rangle\langle a'|}_{\Lambda_{a'}}$$

と導ける。

■式 (1.3.35),(1.3.36) 式 (1.3.35),(1.3.36) はそれぞれ

$$1 = (|+\rangle\langle +|) + (|-\rangle\langle -|), \quad S_z = \frac{\hbar}{2} [(|+\rangle\langle +|) - (|-\rangle\langle -|)]$$

を意味している。

$$1 = |+\rangle\langle +| + (|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|) \langle -|, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} |+\rangle\langle +| + (|+\rangle\langle -| - |-\rangle\langle +|) \langle -|$$

ではない。式 (3.2.1) では括弧が用いられているため、このような誤解の恐れはない。

■零ケット ⇔ 物理的状態がない 「……, 自動的に零ケットが得られる」 (p.30, 1.1) について, このように物理的状態がない場合には零ケットが得られる. 同様のことは調和振動子における個数演算子の固有ケット  $|n\rangle$  についても, 左から繰り返し消滅演算子をかけるといずれ零ケットが得られて「系列の終りは必ずくる」 (p.123, 1.11). 零ケットは単に 0 と書かれる (例えば式 (2.3.27):  $\langle x'|a|0\rangle = 0$  を見よ).

## 1.4 測定, 観測量および不確定原理

測定 (pp.30–33)

観測量  $A$  が  $a'$  であることが測定されるとき, 系は  $A$  の測定により状態  $|\alpha\rangle$  から固有状態  $|a'\rangle$  に跳び移る. そして状態  $|a'\rangle$  に跳び移る確率が

$$|\langle a'|\alpha\rangle|^2$$

であると解釈する (少なくとも  $|\langle a'|\alpha\rangle|^2$  は非負なので, 確率の資格がある). これは量子力学の基本的仮定の 1 つである\*5.  $\langle a'|\alpha\rangle$  は確率振幅と呼ばれる. [ただしここでは固有値  $a'$  が離散的な値をとる場合を考えている.]

固有値  $a'$  が確実に得られる状態  $|a'\rangle$  において  $A$  の測定を行い, 系を固有値の異なる固有状態  $|a''\rangle$  ( $a'' \neq a'$ ) に見出す確率, 従ってその振幅  $\langle a''|a'\rangle$  はゼロとなることが要求される. また固有状態  $|a'\rangle$  を得た直後に  $A$  を測定すると, 確率 1 で再び  $|a'\rangle$  が得られなければならない. そこで観測量  $A$  は Hermite であり, その固有ケット  $\{|a'\rangle\}$  は規格直交条件 (4):

$$\langle a''|a'\rangle = \delta_{a''a'}$$

を満たすものとすれば,  $|\langle a'|\alpha\rangle|^2$  は確率として望ましい性質を備えることになる.

状態  $|\alpha\rangle$  における  $A$  の期待値は

$$\langle A \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle \alpha|A|\alpha \rangle \Rightarrow \langle A \rangle = \sum_{a'} a' |\langle a'|\alpha\rangle|^2. \quad (1.4.5-6)$$

と表される [計算は下記].  $|\langle a'|\alpha\rangle|^2$  を  $a'$  の出現確率とする解釈の下で, 後ろの表式  $\sum_{a'} a' |\langle a'|\alpha\rangle|^2$  はまさに期待値と理解される量になっている. 固有値と違い, 例えばスピン  $S_z$  の期待値は  $\pm\hbar/2$  の間の値 ( $0.273\hbar$  など) も取り得る.

スピン 1/2 の系の再考 (p.29, pp.34–37)

$|\pm\rangle \equiv |S_z; \pm\rangle$  を基底として  $|S_x; \pm\rangle, |S_y; \pm\rangle$  を展開したときの展開係数を, 図 7 の確率推移図が満たされるように

$$|S_x; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle, \quad |S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}} |-\rangle \quad (1.4.17)$$

と定めることができる (式 (1.1.9), (1.1.14) の予想通り) [導出は下記, スピンの角運動量としての性質も考慮].

式 (1.3.34):  $A = \sum_{a'} a' |a'\rangle \langle a'|$ , すなわち

$$S_x = \frac{\hbar}{2} |S_x; +\rangle \langle S_x; +| + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) |S_x; -\rangle \langle S_x; -|, \quad \text{etc.}$$

\*5 このように量子力学的な予言は確率的に行うことができるに過ぎない. このことは自然の本性に含まれていると見なければならない.

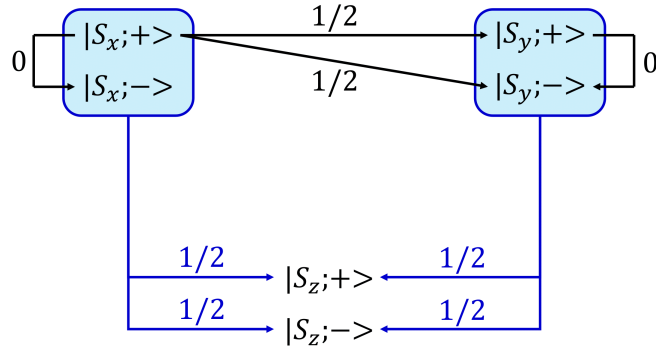


図7 確率推移図

により

$$\begin{aligned}
 S_x &= \frac{\hbar}{2} \{ (|+\rangle \langle -|) + (|- \rangle \langle +|) \}, \\
 S_y &= \frac{\hbar}{2} \{ -i(|+\rangle \langle -|) + i(|- \rangle \langle +|) \}, \\
 S_z &= \frac{\hbar}{2} \{ (|+\rangle \langle +|) - (|- \rangle \langle -|) \}
 \end{aligned}$$

が得られる.

$$S_{\pm} \equiv S_x \pm iS_y = \hbar |\pm\rangle \langle \mp|$$

を定義すると, これは (1.3 節 (p.29) で見たように) スピン成分を  $\hbar$  だけ増加・減少させる働きを持つ:

$$S_{\pm} |\mp\rangle = \hbar |\pm\rangle, \quad S_{\pm} |\pm\rangle = 0.$$

以上で求めたスピン演算子  $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$  は,

$$\text{交換関係 } [S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k, \quad (\text{角運動量一般に成立}) \quad (1.4.20)$$

$$\text{反交換関係 } \{S_i, S_j\} = \frac{1}{2} \hbar^2 \delta_{ij} \quad (\text{スピン } 1/2 \text{ の系に特別な性質}) \quad (1.4.21)$$

を満たしている [本稿次節で確認, 参考:  $[S_i] = [\hbar]$  より両辺の次元は一致している]. ここに演算子  $A, B$  の交換子と反交換子はそれぞれ

$$[A, B] \equiv AB - BA, \quad \{A, B\} \equiv AB + BA$$

で定義される. 角運動量の交換関係 (1.4.20) から,  $\mathbf{S}^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$  に対して

$$[\mathbf{S}^2, S_i] = 0$$

を導くことができる (第3章 [の式 (3.5.2) の箇所]). 今の場合, 特にスピン  $1/2$  の系に対しては, 式 (1.4.21) より

$$\mathbf{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$$

は恒等演算子となるので, 上式は自明である. [付言すると, 上式  $\mathbf{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$  は角運動量の一般論 (3.5 節) より, スピン  $s = 1/2$  の系が  $\mathbf{S}^2$  の固有値  $s(s+1)\hbar^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$  を持たなければならないことと整合している.]

両立できる観測量 (pp.38-42)

$$\begin{aligned} [A, B] = 0 &\Leftrightarrow \text{観測量 } A, B \text{ は両立できる,} \\ [A, B] \neq 0 &\Leftrightarrow \text{観測量 } A, B \text{ は両立できない} \end{aligned}$$

と定義する。以下ではこの術語の定義が理に適っていることを説明する。

手始めに重要な定理を述べる。

定理  $A$  と  $B$  が両立できる観測量であるとき、行列要素  $\langle a''|B|a' \rangle$  は対角型

$$\langle a''|B|a' \rangle = \delta_{a'a''} \langle a'|B|a' \rangle \quad (10)$$

である (証明は下記)\*6\*7.

ここから  $A$  の固有状態  $|a' \rangle$  は、 $B$  の固有方程式

$$B|a' \rangle = b'|a' \rangle, \quad b' \equiv \langle a'|B|a' \rangle \quad (11)$$

を満たし、それ故  $A, B$  の同時固有ケット  $|a', b' \rangle$  となることが導かれる (導出は下記)。このとき  $A$  の測定により固有値  $a'$  を (したがって固有状態  $|a', b' \rangle$  を) 得たとすると、次に  $B$  の測定を行っても最初の  $A$  の測定に関する情報は失われない。

$$|\alpha \rangle \xrightarrow[A \text{ の測定}]{} \begin{matrix} |a', b' \rangle \\ \text{固有値 } a' \end{matrix} \xrightarrow[B \text{ の測定}]{} \begin{matrix} |a', b' \rangle \\ \text{固有値 } b' \end{matrix} \xrightarrow[A \text{ の測定}]{} \begin{matrix} |a', b' \rangle \\ \text{固有値 } a' \end{matrix}.$$

このように  $[A, B] = 0$  を満たす観測量  $A, B$  の測定は互いに干渉せず、文字通り両立する。

■縮退のある場合 観測量  $A$  の固有値  $a'$  に複数の固有ケット  $|a'^{(i)} \rangle$  が属している、すなわち

$$A|a'^{(i)} \rangle = a'|a'^{(i)} \rangle, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

となる場合、固有値  $a'$  は ( $n$  重-) 縮退していると言われる。我々はこれまで、暗に縮退のない場合を仮定してきた。縮退のある場合には、 $A$  と交換する演算子  $B, C, \dots$  の固有値  $b', c', \dots$  を用いて、固有ケット  $\{|a'^{(i)} \rangle\}$  を分類することができる。 $A, B, C, \dots$  を互いに交換する観測量の最大の集合とすると、同時固有ケット

$$|K' \rangle = |a', b', c', \dots \rangle$$

によって状態を完全に指定することができ、規格直交関係と完全性条件はそれぞれ

$$\begin{aligned} \langle K''|K' \rangle &= \delta_{K'K''} = \delta_{a'a''} \delta_{b'b''} \delta_{c'c''} \dots, \\ \sum_{K'} |K' \rangle \langle K'| &= \sum_{a'} \sum_{b'} \sum_{c'} \dots |a', b', c', \dots \rangle \langle a', b', c', \dots| = 1 \end{aligned}$$

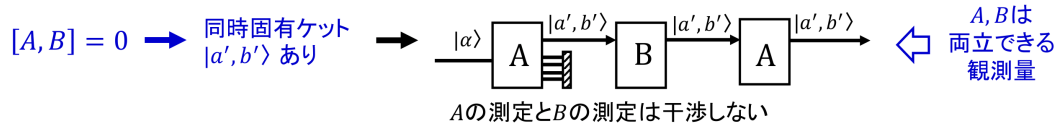
と一般化される。

縮退のある場合にも、 $[A, B] = 0$  を満たす観測量  $A, B$  の測定は互いに干渉しない。

$$|\alpha \rangle \xrightarrow[A \text{ の測定}]{} \sum_i c_{a'}^{(i)} |a', b^{(i)} \rangle \xrightarrow[B \text{ の測定}]{} \begin{matrix} |a', b^{(j)} \rangle \\ \text{固有値 } b^{(j)} \end{matrix} \xrightarrow[A \text{ の測定}]{} \begin{matrix} |a', b^{(j)} \rangle \\ \text{固有値 } a' \end{matrix}.$$

\*6 ただし  $A$  の固有値は縮退していないとする (縮退については後述)。

\*7 (基底ケット  $\{|a' \rangle\}$  に対して)  $A$  を表す行列は既に対角化されていることを思い出そう。



$[A, B] \neq 0 \rightarrow$  同時固有ケット  $|a', b'\rangle$  なし,

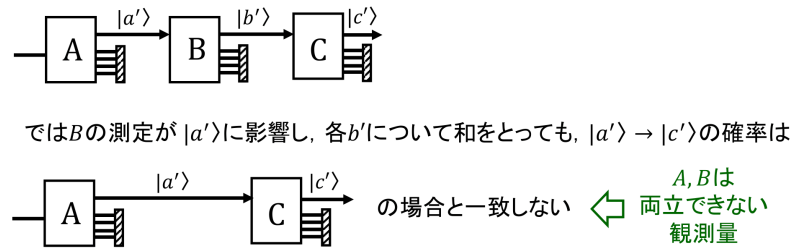


図8 両立できる観測量, 両立できない観測量・一続きの選択的測定

### 両立できない観測量 (pp.42-45)

$$[A, B] = 0 \Rightarrow \text{同時固有ケット } |a', b'\rangle \text{ が存在する}$$

の裏, すなわち

$$[A, B] \neq 0 \Rightarrow \text{同時固有ケット } |a', b'\rangle \text{ は存在しない}$$

も一般には正しい. このことは背理的に示すことができる (証明は下記).

■一続きの選択的測定 図8の一続きの選択的測定における, 遷移  $|a'\rangle \rightarrow |c'\rangle$  の確率を考える. 途中で  $B$  の測定を行う場合, 確率は可能な  $b'$  の値について和をとり,

$$\sum_{b'} |\langle c'|b'\rangle|^2 |\langle b'|a'\rangle|^2 = \sum_{b'} \langle c'|b'\rangle \langle b'|a'\rangle \langle a'|b'\rangle \langle b'|c'\rangle \quad (1.4.46)$$

と表される. 他方, 途中で  $B$  の測定を行わない場合の確率は

$$|\langle c'|a'\rangle|^2 = \left| \sum_{b'} \langle c'|b'\rangle \langle b'|a'\rangle \right|^2 = \sum_{b'} \sum_{b''} \langle c'|b'\rangle \langle b'|a'\rangle \langle a'|b''\rangle \langle b''|c'\rangle \quad (1.4.47)$$

であり, これは上式 (1.4.46) と一般には一致しない. 縮退がないとき,

$$[A, B] = 0, \quad \text{または} \quad [B, C] = 0 \quad (1.4.49)$$

は2式 (1.4.46), (1.4.47) が等しくなるための十分条件である [本稿次節を参照].

### 不確定関係 (pp.45-48)

最後に [両立できない観測量の意味付けとして,] 不確定関係の説明をする. 演算子  $\Delta A \equiv A - \langle A \rangle$  (ただし  $\langle \dots \rangle$  は与えられた状態に関する期待値) に対して  $A$  の分散

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

を定義すると、任意の状態に関して恒等的に不確定関係

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle\geq\frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2 \quad (12)$$

が成り立つ(証明は下記)．[これは観測量  $A, B$  が両立できないとき ( $[A, B] \neq 0$ )，それらを同時に正確に測定することはできないことを表している.]

#### 1.4 節, 式の導出など

■期待値の式 (1.4.6) について 連続スペクトルに対する議論 (1.6 節) と合わせてまとめておこう．系の状態が  $|\alpha\rangle$  にあるとき観測量  $A$  の期待値は  $\langle\alpha|A|\alpha\rangle$  で与えられる．実際，観測量  $A$  を離散的な固有値  $a'$  に見出す確率は  $|\langle a'|\alpha\rangle|^2$ ，連続的な固有値  $\xi'$  に見出す確率密度は  $|\langle\xi'|\alpha\rangle|^2$  なので， $A$  の期待値は

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \begin{cases} \sum_{a'} a' |\langle a'|\alpha\rangle|^2 \\ \int d\xi' |\langle\xi'|\alpha\rangle|^2 \end{cases} \\ &= \begin{cases} \sum_{a', a''} \langle a'|\alpha\rangle^* a'' \delta_{a' a''} \langle a''|\alpha\rangle \\ \int d\xi' d\xi'' \langle\xi'|\alpha\rangle^* \xi'' \delta(\xi' - \xi'') \langle\xi''|\alpha\rangle \end{cases} \\ &= \begin{cases} \sum_{a', a''} \langle\alpha|a'\rangle \langle a'|A|a''\rangle \langle a''|\alpha\rangle \\ \int d\xi' d\xi'' \langle\alpha|\xi'\rangle \langle\xi'|A|\xi''\rangle \langle\xi''|\alpha\rangle \end{cases} \\ &= \langle\alpha|A|\alpha\rangle \quad (\because \text{完全性条件}) \end{aligned}$$

となる．

■式 (1.4.17) の導出 遷移  $|S_x; +\rangle \rightarrow |\pm\rangle$  の確率がそれぞれ  $1/2$  となる条件

$$|\langle\pm|S_x; +\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (1.4.8)$$

より， $|S_x; +\rangle$  は全体の位相の任意性を除いて

$$|S_x; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} |-\rangle \quad (1.4.9)$$

と書ける ( $\delta_1$  は実数) [本稿次節で補足]． $|S_x; -\rangle$  についても同様の議論を適用でき，直交性  $\langle S_x; +|S_x; -\rangle = 0$  を考慮すると

$$|S_x; -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} |-\rangle \quad (1.4.10)$$

となる [本稿次節で補足]．

同様に

$$|S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_2} |-\rangle$$

とおける．ここで  $|\langle S_y; \pm|S_x; \pm\rangle| = 1/\sqrt{2}$  (複号任意) を要求すると

$$\frac{1}{2} |1 \pm e^{i(\delta_1 - \delta_2)}| = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \therefore \delta_2 - \delta_1 = \pm \frac{\pi}{2}$$

を得る.

さて,

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2} \{(|S_x; +\rangle \langle S_x; +|) - (|S_x; -\rangle \langle S_x; -|)\} \\ &= \frac{\hbar}{2} \{e^{-i\delta_1} (|+\rangle \langle -|) + e^{i\delta_1} (|-\rangle \langle +|)\} \end{aligned}$$

の最右辺は Hermite 的となっており, 適当な位相因子を吸収させて  $|\pm\rangle$  を再定義すれば,  $\delta_1 = 0$  とおくことができる. このとき  $\delta_2 = \pm \frac{\pi}{2}$  であり, この 2 通りの符号に応じて

$$\begin{aligned} S_y &= \frac{\hbar}{2} \{(|S_y; +\rangle \langle S_y; +|) - (|S_y; -\rangle \langle S_y; -|)\} \\ &= \pm \frac{i\hbar}{2} \{-(|+\rangle \langle -|) + (|-\rangle \langle +|)\} \end{aligned}$$

は, 全体の符号が逆となって得られる (この不定性は座標系の右手系と左手系の選択の余地に対応している). 後に「回転の生成子として角運動量を議論する」(p.36, 1.6) 箇所を踏まえれば, (右手系の座標系を用いた場合には)  $\delta_2 = \pi/2$  が正しい選択であることが示される [角運動量の交換関係  $[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k$  を満たす  $S_y$  の, したがって  $\delta_2$  の符号を選べば良い]. 以上より  $|S_x; \pm\rangle, |S_y; \pm\rangle$  の式 (1.4.17) を得る.

■両立できる観測量の行列要素  $\langle a''|B|a'\rangle$  に関する定理 (式 (10)) の証明 両立できる観測量の定義式  $[A, B] = 0$  より

$$0 = \langle a''|[A, B]|a'\rangle = (a'' - a') \langle a''|B|a'\rangle$$

より  $a'' \neq a'$  に対して  $\langle a''|B|a'\rangle = 0$  となる. これは行列要素  $\langle a''|B|a'\rangle$  が対角型であることを意味する.

■固有方程式 (11) の導出

$$\begin{aligned} B|a'\rangle &= \sum_{a''} |a''\rangle \langle a''|B|a'\rangle \\ &= \sum_{a''} |a''\rangle (\delta_{a'a''} \langle a'|B|a'\rangle) \quad (\because \text{式 (10)}) \\ &= (\langle a'|B|a'\rangle) |a'\rangle : (11). \end{aligned}$$

■一般に両立できない観測量の同時固有ケットは存在しないことの証明 両立できない観測量  $A, B$  の同時固有ケット  $|a', b'\rangle$  が存在すると仮定すると,

$$\begin{cases} AB|a', b'\rangle = Ab'|a', b'\rangle = a'b'|a', b'\rangle \\ BA|a', b'\rangle = Ba'|a', b'\rangle = a'b'|a', b'\rangle \end{cases} \\ \therefore AB|a', b'\rangle = BA|a', b'\rangle \quad (13)$$

より  $[A, B] = 0$  が成り立つ. これは仮定に反しているから, 一般に両立できない観測量に対し  $|a', b'\rangle$  は意味を持たない.

ただし例外として, 固有値が  $a' = b' = 0$  のときには上式 (13) の両辺は零ケットになる. 少なくともこのときには  $[A, B] = 0$  を引き出すことはできず, 上の議論は適用できない. これが「一般に」と断った理由である.



■不確定関係 (12) の証明 まず補助定理を 3 つ準備する.

補助定理 1 : Schwarz の不等式

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2. \quad (14)$$

参考 これは実 Euclid 空間のベクトル  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  に対する

通常の Schwarz の不等式  $|\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2 \geq |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}|^2$  と比較される.

証明 任意の複素数  $\lambda$  に対して

$$(\langle \alpha | + \lambda^* \langle \beta |) \cdot (|\alpha\rangle + \lambda |\beta\rangle) \geq 0$$

が成り立つ. ここで  $\lambda = -\langle \beta | \alpha \rangle / \langle \beta | \beta \rangle$  とおくと, Schwarz の不等式 (14) を得る.

補助定理 2 Hermite 演算子の期待値は実数である.

証明 [教科書を補足しつつ証明を行う.] 任意の状態  $|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle$  に関する Hermite 演算子  $B$  の期待値は

$$\langle \alpha | B | \alpha \rangle = \sum_{a', a''} c_{a''}^* c_{a'} \langle a'' | B | a' \rangle$$

と表される. ここで Hermite 演算子は Hermite 行列で表されること  $\langle a'' | B | a' \rangle^* = \langle a' | B | a'' \rangle$  を用いると, 右辺の複素共役は

$$\sum_{a', a''} c_{a''} c_{a'}^* \langle a' | B | a'' \rangle$$

となって, 元と変わらない. これは期待値  $\langle \alpha | B | \alpha \rangle$  が実数であることを意味する.

補助定理 3  $C = -C^\dagger$  で定義される Hermite 交代の [あるいは反 Hermiten な] 演算子の期待値は純虚数である.

証明 「この証明も自明である」 (p.47, 1.3) [詳しくは本稿次節を参照].

さて, Schwarz の不等式 (14) は  $|\alpha\rangle = \Delta A | \rangle, |\beta\rangle = \Delta B | \rangle$  とおくと ( $| \rangle$  は任意のケット),  $\Delta A, \Delta B$  の Hermite 性より

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq |\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 \quad (15)$$

となる ( $\langle \dots \rangle$  は状態  $| \rangle$  に関する期待値). 右辺の演算子積を対称部分と反対称部分に分けて

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2} [\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2} \{\Delta A, \Delta B\}$$

と書くと, 対称部分  $[\Delta A, \Delta B]/2 = [A, B]/2$  は Hermite 交代的である.

$$([A, B])^\dagger = (AB - BA)^\dagger = BA - AB = -[A, B].$$

他方, 反交換子  $\{\Delta A, \Delta B\}$  は Hermite 的なので, 補助定理 2,3 より

$$\langle \Delta A \Delta B \rangle = \frac{1}{2} \underbrace{\langle [\Delta A, \Delta B] \rangle}_{\text{純虚数}} + \frac{1}{2} \underbrace{\langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle}_{\text{実数}},$$

$$\therefore |\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle [\Delta A, \Delta B] \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle|^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [\Delta A, \Delta B] \rangle|^2 \quad (16)$$

が言える. 上式 (15), (16) を組合せると, 不確定関係 (12) が導かれる.

## 1.4 について

■完備関係式の過剰な挿入 式 (1.4.6) で挿入された  $\sum_{a''} |a''\rangle \langle a''|$  は恒等演算子に戻されており，はじめからこれを挿入せずに

$$\langle A \rangle = \sum_{a'} \langle \alpha | A | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle = \sum_{a'} a' | \langle a' | \alpha \rangle |^2$$

とすれば十分である．同様のことは式 (1.4.31)，式 (2.5.10) に対しても指摘できる．

■状態ケットの全体の位相 式 (1.4.9) の下 2 行「状態ケットの全体の位相 (……) は重要でないという事実」とは「物理的仮定の一つとして， $|\alpha\rangle$  と  $c|\alpha\rangle$  (ただし  $c \neq 0$ ) は同じ物理状態をあらすことに」したことを指す (p.13 下から 3,2 行目)．ここで  $|\alpha\rangle$  と  $c|\alpha\rangle$  は共に規格化されているため  $|c| = 1$  であり， $c$  は位相因子になる．

■式 (1.4.9) について

$$|S_x; +\rangle = |+\rangle \langle + | S_x; + \rangle + |-\rangle \langle - | S_x; + \rangle$$

における展開係数は，条件 (1.4.8) より

$$\langle \pm | S_x; + \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_{\pm}}$$

と書ける．この下でなお，全体の位相因子を調整する任意性が残されている．この自由度を利用して  $|+\rangle$  の係数を正の実数に選ぶと， $|S_x; +\rangle$  は式 (1.4.9) のように表される．

■ $|S_x; -\rangle$  の式 (1.4.10) について  $|S_x; -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_2} |-\rangle$  とおくと

$$0 = \langle S_x; + | S_x; - \rangle = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\delta_1} \langle - | \right) \cdot \left( \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_2} |-\rangle \right) = \frac{1}{2} (1 + e^{i(\delta_2 - \delta_1)})$$

なので  $e^{i\delta_2} = -e^{i\delta_1}$ ．このとき

$$S_x \doteq \begin{pmatrix} 0 & (\hbar/2)e^{-i\delta_1} \\ (\hbar/2)e^{i\delta_1} & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y \doteq \begin{pmatrix} 0 & (\hbar/2)e^{-i\delta_2} \\ (\hbar/2)e^{i\delta_2} & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z \doteq \underbrace{\begin{pmatrix} (\hbar/2) & 0 \\ 0 & -(\hbar/2) \end{pmatrix}}_{\text{対角型}}$$

となるため，「 $S_x$  と  $S_y$  の行列要素がすべて実数ではあり得ないということが分かる」 (p.35)．

■スピンの交換関係 (1.4.20)，反交換関係 (1.4.21) スピン  $S_i$  の表式 (1.3.36), (1.4.18) が角運動量の交換関係 (1.4.20):  $[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk} \hbar S_k$  を満たすことを確かめる． $(i, j) = (1, 2), (2, 3), (3, 1)$  の場合だけを調べれば十分である． $(i = j)$  の場合は交換関係 (1.4.20) は自明な式  $0 = 0$  を与える． $(i, j) = (1, 2)$  に対して交換関係

(1.4.20) が成り立てば  $(i, j) = (2, 1)$  に対しても成り立つ.)

$$\begin{aligned} S_x S_y &= i \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \{(|+\rangle\langle+|) - (|-\rangle\langle-|)\} = \frac{1}{2} i \hbar S_z, \\ S_y S_x &= i \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \{-(|+\rangle\langle+|) + (|-\rangle\langle-|)\} = -\frac{1}{2} i \hbar S_z, \\ S_y S_z &= i \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \{(|+\rangle\langle-|) + (|-\rangle\langle+|)\} = \frac{1}{2} i \hbar S_x, \\ S_z S_y &= i \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \{-(|+\rangle\langle-|) - (|-\rangle\langle+|)\} = -\frac{1}{2} i \hbar S_x, \\ S_z S_x &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \{(|+\rangle\langle-|) - (|-\rangle\langle+|)\} = \frac{1}{2} i \hbar S_y, \\ S_x S_z &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \{-(|+\rangle\langle-|) + (|-\rangle\langle+|)\} = -\frac{1}{2} i \hbar S_y \end{aligned}$$

により

$$[S_x, S_y] = i \hbar S_z, \quad [S_y, S_z] = i \hbar S_x, \quad [S_z, S_x] = i \hbar S_y$$

となる. これらはそれぞれ交換関係 (1.4.20) において  $(i, j) = (1, 2), (2, 3), (3, 1)$  としたものに他ならない.

また上式より

$$\{S_x, S_y\} = \{S_y, S_x\} = 0, \quad \{S_y, S_z\} = \{S_z, S_y\} = 0, \quad \{S_z, S_x\} = \{S_x, S_z\} = 0$$

となる. さらに

$$\begin{aligned} S_x^2 &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \{(|+\rangle\langle+|) + (|-\rangle\langle-|)\} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2, \\ S_y^2 &= \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^2 \{-(|+\rangle\langle+|) - (|-\rangle\langle-|)\} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2, \\ S_z^2 &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \{(|+\rangle\langle+|) + (|-\rangle\langle-|)\} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \end{aligned}$$

だから (完備関係式 (1.3.11):  $(|+\rangle\langle+|) + (|-\rangle\langle-|) = 1$  を用いた), 全ての添字の組  $(i, j)$  に対してスピンの反交換関係 (1.4.21):  $\{S_i, S_j\} = \frac{1}{2} \hbar^2 \delta_{ij}$  が満たされている.

■軌道角運動量 「軌道角運動量の状態を完全に特徴づけるには,  $l$  と  $m_l$  の両方を指定する必要がある」(p.40) ことについては, 3.5 節参照.

■p.42 の 1 番下の行~p.43, l.2 について 固有値がゼロだと式 (1.4.44):  $AB|a', b'\rangle = BA|a', b'\rangle$  の両辺が零ケットになるため  $[A, B] = 0$  を言えなくなる.

■式 (1.4.46), (1.4.47) の具体例 角運動量の満たす交換関係 (1.4.20):  $[S_i, S_j] = i \varepsilon_{ijk} \hbar S_k$  より異なるスピンは交換しないため, 両立できない観測量である. しかし例えば図 1.7(a)(p.43) に対応する図 9 の一続きのシユテ

ルン・ゲルラッハの実験を考えると

$$\begin{aligned} \text{式 (1.4.46)} &= \sum_{\text{複号}} |\langle S_z; + | S_y; \pm \rangle|^2 |\langle S_y; \pm | S_x; + \rangle|^2 \\ &= \sum_{\text{複号}} \left| \langle + | \cdot \left( \frac{1}{\sqrt{2}} | + \rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}} | - \rangle \right) \right|^2 \left| \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | \mp \frac{i}{\sqrt{2}} \langle - | \right) \cdot \left( \frac{1}{\sqrt{2}} | + \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} | - \rangle \right) \right|^2, \\ &= \sum_{\text{複号}} \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2} \mp \frac{i}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$\text{式 (1.4.47)} = |\langle S_z; + | S_x; + \rangle|^2 = \left| \langle + | \cdot \left( \frac{1}{\sqrt{2}} | + \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} | - \rangle \right) \right|^2 = \frac{1}{2}$$

となり、この場合には両者は一致する。

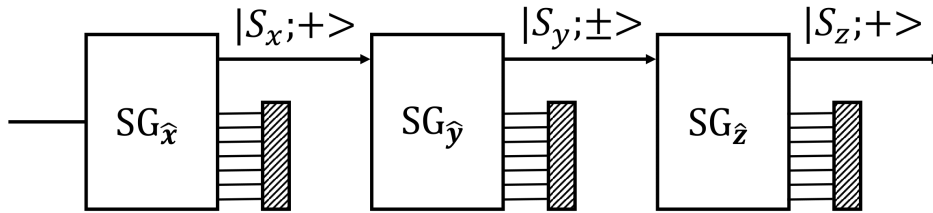


図9 図 1.7(a)(p.43) に対応する一続きのシュテルン・ゲルラッハの実験

■式 (1.4.46),(1.4.47) が一致する十分条件 (1.4.49) 式 (1.4.46),(1.4.47) が一致する十分条件は式 (1.4.49):

$$[A, B] = 0 \quad \text{または} \quad [B, C] = 0$$

である。「これを示すのは読者の演習に残しておく」(p.45, 1.3) について。  $[A, B] = 0$  のとき同時固有ケット  $|a', b'\rangle$  があり、縮退がない場合を考えているから  $|a', b'\rangle = |a'\rangle = |b'\rangle$  と書ける (同じ固有値  $a'$  を持つ複数のケット  $|a', b^{(i)}\rangle, i = 1, 2, \dots$  を書かなくて良いから)。そして式 (1.4.46),(1.4.47) の  $\{|b'\rangle\}, \{|b''\rangle\}$  の全要素のうち与えられた  $|a'\rangle$  に一致するものだけが  $\{|a'\rangle\}$  の直交性より残る:

$$\text{式 (1.4.46), (1.4.47)} = \langle c' | a' \rangle \langle a' | a' \rangle \langle a' | a' \rangle \langle a' | c' \rangle = |\langle c' | a' \rangle|^2.$$

$[B, C] = 0$  のときも同様である。

■  $S_x$  の分散 (1.4.52) と  $S_z$  の分散 (p.45) について 既に計算したように

$$S_x^2 = \left( \frac{\hbar}{2} \right)^2 \{ (| + \rangle \langle + |) + (| - \rangle \langle - |) \} = \left( \frac{\hbar}{2} \right)^2, \quad S_z^2 = \left( \frac{\hbar}{2} \right)^2 \{ (| + \rangle \langle + |) + (| - \rangle \langle - |) \} = \left( \frac{\hbar}{2} \right)^2$$

である。

■補助定理 3 の証明 (p.47) 「この証明も自明である」(p.47) について、これは式 (1.2.38) を用いて

$$\langle \alpha | C | \alpha \rangle = \langle \alpha | C^\dagger | \alpha \rangle^* = - \langle \alpha | C | \alpha \rangle^*$$

と証明できる。

■シュヴァルツの不等式 (1.4.59) について 例えば左辺の  $\langle(\Delta A)^2\rangle$  は  $(\langle|\Delta A^\dagger\rangle \cdot \langle\Delta A\rangle) = \langle(|\Delta A|^2)\rangle = \langle(\Delta A)^2\rangle$  として得られる.

■「ここで交換子  $[\Delta A, \Delta B]$  は  $[A, B]$  に等しく」(p.47) について これは後の交換子の性質 (1.6.50b,c,d) を用いて

$$\begin{aligned} [\Delta A, \Delta B] &= [A - \langle A \rangle, B - \langle B \rangle] \\ &= [A, B] - [A, \langle B \rangle] - [\langle A \rangle, B] + [\langle A \rangle, \langle B \rangle] = [A, B] \end{aligned}$$

と確認できる.

■ $A, B$  の固有値がゼロになる場合の不確定関係 pp.42-43 における軌道角運動量の例のように,  $A, B$  の固有値  $a', b'$  がゼロの状態では  $[A, B] \neq 0$  であっても, 同時固有状態  $|a', b'\rangle$  が可能である. 実際このとき  $[A, B] \neq 0$  であっても  $|\langle[A, B]\rangle|^2 = 0$  だから, このことは不確定関係  $\langle(\Delta A)^2\rangle \langle(\Delta B)^2\rangle \geq |\langle[A, B]\rangle|^2/4$  に抵触しない.

## 1.5 基底の変更

変換演算子, 変換行列 (pp.48-51)

規格直交性と完備性を満たす2つの基底  $\{|a^{(i)}\rangle\}, \{|b^{(i)}\rangle\}$  に対して

$$U \equiv \sum_n |b^{(n)}\rangle \langle a^{(n)}| \quad (1.5.4)$$

はユニタリー演算子 ( $U^\dagger U = U U^\dagger = 1$ ) であり,

$$\begin{aligned} \text{基底の変更} \quad & |b^{(i)}\rangle = U |a^{(i)}\rangle, \\ \text{展開係数} \quad & \langle b^{(i)}|\alpha\rangle = \sum_j \langle a^{(i)}|U^\dagger|a^{(j)}\rangle \langle a^{(j)}|\alpha\rangle, \end{aligned} \quad (1.5.10)$$

( $\leftrightarrow$  状態  $|\alpha\rangle$  を表す縦ベクトルに対して (新しい表示) = ( $U^\dagger$ )(元の表示))

$$\text{行列要素} \quad \langle b^{(i)}|X|b^{(j)}\rangle = \sum_{k,l} \langle a^{(i)}|U^\dagger|a^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}|X|a^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}|U|a^{(j)}\rangle, \quad (1.5.12)$$

( $\leftrightarrow$  行列代数の相似変換  $X' = U^\dagger X U$ )

$$\text{トレース} \quad \text{tr}(X) \equiv \sum_{a'} \langle a'|X|a'\rangle = \sum_{b'} \langle b'|X|b'\rangle. \quad (\text{表示に依らない}) \quad (1.5.15)$$

■対角化 (pp.52-53)

$$\sum_{a'} \langle a''|B|a'\rangle \langle a'|b'\rangle = b' \langle a''|b'\rangle$$

は行列  $(\langle a''|B|a'\rangle)$  に対する固有方程式になっており, 行列  $(\langle a''|B|a'\rangle)$  の固有値は  $b'$ , 固有ベクトルは

$$\begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|b'\rangle \\ \langle a^{(2)}|b'\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

であることを意味する. この固有ベクトルを並べて作られるユニタリー行列<sup>\*8</sup>を用いて,  $B$  を対角化することができる. (よく知られているように, Hermite 行列は適当なユニタリー行列を用いて対角化できる.)

\*8 基底を変換するユニタリー行列 (1.5.7):  $(\langle a^{(k)}|U|a^{(l)}\rangle) = (\langle a^{(k)}|b^{(l)}\rangle)$  に他ならない.

■ユニタリ的に同値な観測量 (pp.53-54)  $A$  の固有ケット  $\{a^{(l)}\}$ , およびこれとユニタリ変換

$$|b^{(l)}\rangle = U |a^{(l)}\rangle$$

で結び付けられた  $\{b^{(l)}\}$  を考える. このとき  $A$  とユニタリ的に同値な観測量  $UAU^{-1}$  に対する固有方程式は

$$(UAU^{-1}) |b^{(l)}\rangle = a^{(l)} |b^{(l)}\rangle \quad (1.5.25)$$

となる (導出は下記). このように  $UAU^{-1}$  は  $A$  と同じ固有値のスペクトルを持つことが, 「ユニタリ的に同値」と呼ばれる所以である.

上式 (1.5.25) を  $B$  の固有方程式  $B |b^{(l)}\rangle = b^{(l)} |b^{(l)}\rangle$  と比較すると,  $B$  と  $UAU^{-1}$  は同时对角化されることになる. たいていの物理的な問題では,  $UAU^{-1}$  は  $B$  そのものに一致する.

### 1.5 節, 式の導出など

■演算子 (1.5.4) のユニタリ性の確認

$$\begin{aligned} U^\dagger U &= \sum_{k,l} |a^{(l)}\rangle \langle b^{(l)}| b^{(k)} \rangle \langle a^{(k)}| = \sum_k |a^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}|, \\ UU^\dagger &= \sum_{k,l} |b^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}| a^{(k)} \rangle \langle b^{(k)}| = \sum_k |b^{(k)}\rangle \langle b^{(k)}|. \end{aligned} \quad (1.5.6)$$

■式 (1.5.10),(1.5.12),(1.5.15) の導出

$$\begin{aligned} \langle b^{(k)}|\alpha\rangle &= \sum_l \langle b^{(k)}|a^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}|\alpha\rangle \\ &= \sum_l \langle a^{(k)}|U^\dagger|a^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}|\alpha\rangle : (1.5.10), \\ \langle b^{(k)}|X|b^{(l)}\rangle &= \sum_{m,n} \langle b^{(k)}|a^{(m)}\rangle \langle a^{(m)}|X|a^{(n)}\rangle \langle a^{(n)}|b^{(l)}\rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle b^{(k)}|U^\dagger|a^{(m)}\rangle \langle a^{(m)}|X|a^{(n)}\rangle \langle a^{(n)}|U|a^{(l)}\rangle : (1.5.12), \\ \sum_{a'} \langle a'|X|a'\rangle &= \sum_{a',b',b''} \langle a'|b'\rangle \langle b'|X|b''\rangle \langle b''|a'\rangle \\ &= \sum_{b',b''} \langle b''|b'\rangle \langle b'|X|b''\rangle \\ &= \sum_{b'} \langle b'|X|b'\rangle : (1.5.15). \end{aligned}$$

[本稿次節を併せて参照.]

■固有方程式 (1.5.25) の導出

$$(UAU^{-1}) |b^{(l)}\rangle = UAU^{-1}U |a^{(l)}\rangle = UA |a^{(l)}\rangle = a^{(l)}U |a^{(l)}\rangle = a^{(l)} |b^{(l)}\rangle.$$

### 1.5 について

■ユニタリ変換 (1.5.1):  $|b^{(l)}\rangle = U |a^{(l)}\rangle$  について  $|a^{(l)}\rangle$  と  $|b^{(l)}\rangle$  の個数が一致することに注意する (p.38 参照).

■ユニタリー性 (1.5.6) について

$$\text{式 (1.2.34)} : X = |\beta\rangle \langle\alpha| \Rightarrow \text{式 (1.2.35)} : X^\dagger = |\alpha\rangle \langle\beta|$$

を用いる。「同様にして式 (1.5.3) が得られる」(p.49 下から 4,3 行目) について, 恒等演算子に対し  $\mathbf{1}^\dagger = \mathbf{1}$  (付録 A 参照) を用いれば, 式 (1.5.6):  $U^\dagger U = 1$  の両辺の Hermite 共役をとって得られると考えられる。

■基底を変更する回転ベクトル (1.5.8) について 本稿の「1.1『シュテルン・ゲルラッハの実験』について」で述べたように, 基底ベクトルの変換則は

$$\mathbf{e}_i' = a_{ij} \mathbf{e}_j, \quad a_{ij} \equiv \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j'$$

と表される。これは  $(a_{ij})$  の転置行列すなわち逆行列  $(a_{ij})^T = (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j') \equiv R$ : (1.5.8) を用いて

$$\mathbf{e}_i = \mathbf{e}_j R_{ji}, \quad \therefore (\hat{\mathbf{x}}', \hat{\mathbf{y}}', \hat{\mathbf{z}}') = (\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}) R$$

と書き換えられる。

3次元空間で基底ベクトル  $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}})$  の組を, 他の組  $(\hat{\mathbf{x}}', \hat{\mathbf{y}}', \hat{\mathbf{z}}')$  に変える回転行列はスカラー  $(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j')$  を成分に持つ。これに対応し,  $U$  の行列表現も基底に依らない:

$$\langle b^{(k)} | U | b^{(l)} \rangle = \sum_i \langle b^{(k)} | b^{(i)} \rangle \langle a^{(i)} | b^{(l)} \rangle = \langle a^{(k)} | b^{(l)} \rangle.$$

■式 (1.5.10), (1.5.12) について 次の結果を公式的に用いると良い:

$$\langle b^{(k)} | a^{(l)} \rangle = \langle a^{(l)} | b^{(k)} \rangle^* = \langle a^{(k)} | U^\dagger | a^{(l)} \rangle.$$

■トレースに対する公式 (1.5.16a-d) の確認

$$\begin{aligned} \text{tr}(XY) &= \sum_{a'} \langle a' | XY | a' \rangle = \sum_{a', a''} \langle a' | X | a'' \rangle \langle a'' | Y | a' \rangle \\ &= \sum_{a', a''} \langle a'' | Y | a' \rangle \langle a' | X | a'' \rangle = \sum_{a''} \langle a'' | YX | a'' \rangle = \text{tr}(YX) : (1.5.16a), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{tr}(U^\dagger XU) &= \text{tr}(XUU^\dagger) \quad (\because \text{式 (1.5.16a)}) \\ &= \text{tr}(X) : (1.5.16b), \end{aligned}$$

$$\text{tr}(|a'\rangle \langle a''|) = \sum_{a'''} \langle a''' | a' \rangle \langle a'' | a''' \rangle = \sum_{a'''} \delta_{a''', a'} \delta_{a'' a'''} = \delta_{a' a''} : (1.5.16c),$$

$$\text{tr}(|b'\rangle \langle a'|) = \sum_{a''} \langle a'' | b' \rangle \langle a' | a'' \rangle = \sum_{a''} \langle a'' | b' \rangle \delta_{a', a''} = \langle a' | b' \rangle : (1.5.16d).$$

■「 $B$  を対角化するユニタリー行列」(p.52, 1.3) について  $B$  の行列表現が Hermite 行列なので<sup>\*9</sup>, 適当なユニタリー行列で対角化できる。このユニタリー行列は  $B$  の行列表現の固有ベクトルを並べて作られるから, 「この問題は,  $B$  を対角化するユニタリー行列を見出すことと同値である」(p.52, 1.3,4)。なお, この注意書きは後の議論で用いない。

<sup>\*9</sup> Hermite 演算子  $B$  の行列表現は Hermite 行列であることが  $\langle a' | B | a'' \rangle = \langle a'' | B^\dagger | a' \rangle^* = \langle a'' | B | a' \rangle^*$  から分かる。

■ユニタリ的に同値な観測量に対する定理 (pp.53-54) について その具体例は, Schrödinger 表示と Heisenberg 表示とで固有値が変わらないことである (p.118, 1.1,2). すなわちユニタリ変換 (2.2.41):  $|a', t\rangle_{\text{H}} = \mathcal{U}^\dagger(t) |a'\rangle$  に対して, Schrödinger 表示の観測量  $A^{(\text{S})}$  とユニタリ的に同値な観測量は Heisenberg 表示の観測量  $A^{(\text{H})} = \mathcal{U}^\dagger(t) A^{(\text{S})} \mathcal{U}(t)$  であり,

$$A^{(\text{S})} |a'\rangle = a' |a'\rangle \quad \Rightarrow \quad A^{(\text{H})} |a'\rangle_{\text{H}} = a' |a'\rangle_{\text{H}}.$$

空間に固定された同一の点の座標が  $x'_i = a_{ij} x_j$  と変化するような, 直交座標系の中の座標変換において,

$$\begin{aligned} \text{基底の変更:} \quad & e_i' = a_{ij} e_j, \\ \text{2階テンソル } T_{ij} \text{の変換則:} \quad & T' = O T O^{-1}, \quad T \equiv (T_{ij}), \quad O \equiv (a_{ij}) \end{aligned}$$

である.

$$\begin{aligned} \text{基底の変更:} \quad & |b^{(l)}\rangle = U |a^{(l)}\rangle, \\ \text{ユニタリ変換:} \quad & A \rightarrow U A U^{-1} \end{aligned}$$

はこれと類似の関係である.

■「 $B$  と  $U A U^{-1}$  が同时对角化できる」(式 (1.5.26) の下 2 行) について  $B$  と  $U A U^{-1}$  は共通の固有ベクトルを持つ. したがって  $B$  と  $U A U^{-1}$  はいずれも, その共通の固有ベクトルを並べて得られる共通のユニタリ行列を用いて対角化される.

## 1.6 位置, 運動量および平行移動

連続スペクトル, 位置の固有ケットと位置の測定 (pp.54-58)

連続変数  $\xi'$  を固有値に持つ観測量に対しては, 固有ケット  $|\xi'\rangle$  の規格直交性と  $\{|\xi'\rangle\}$  による展開を

$$\begin{aligned} \langle a' | a'' \rangle = \delta_{a' a''} \quad & \rightarrow \quad \langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi''), \\ |\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad & \rightarrow \quad |\alpha\rangle = \int d\xi' c_{\xi'} |\xi'\rangle \end{aligned}$$

と再定義する. このとき展開係数は  $c_{\xi'} = \langle \xi' | \alpha \rangle$  と表され, 完全性条件は

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = 1 \quad \rightarrow \quad \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi'| = 1$$

と置き換わる.

固有値が連続変数  $\xi'$  となるような観測量  $\xi$  を考える場合には,  $|\langle \xi' | \alpha \rangle|^2$  は確率密度と解釈される. すなわち測定値が  $\xi'$  の周りの幅  $d\xi'$  の区間に得られる確率は  $|\langle \xi' | \alpha \rangle|^2 d\xi'$  で与えられる.

特に 1 粒子系を考えると, 位置演算子  $x$  の固有ケット  $|x'\rangle$  に対して  $|\langle x' | \alpha \rangle|^2 dx'$  は, 状態  $|\alpha\rangle$  において測定により, 粒子を位置  $x'$  の周りの幅  $dx'$  に見出す確率を与える. すなわち  $|\langle x' | \alpha \rangle|^2$  は確率密度であり,  $\psi_\alpha(x') \equiv \langle x' | \alpha \rangle$  は波動関数に他ならない (1.7 節の pp.69-70 を併せて参照)\*<sup>10</sup>.

\*<sup>10</sup> 「実際に検出器ができる最良のことは, 粒子の位置を  $x'$  の周りのある狭い範囲に限定すること」(p.57, 1.2,3) だから, このような記述で充分である.



空間が 3 次元の場合には、粒子が位置  $\mathbf{x}' = (x', y', z')$  に局在する状態は粒子の位置演算子  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  の同時固有ケット  $|\mathbf{x}'\rangle = |x', y', z'\rangle$  で表される。同時固有ケットを考えられる条件として、位置演算子の各成分は互いに交換するものと仮定して良い。

$$[x_i, x_j] = 0. \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (17)$$

平行移動 (pp.58–62)

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle$$

のように、物理系を  $d\mathbf{x}'$  だけ並進させる演算子  $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$  を導入する<sup>\*11</sup>。このとき  $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$  は以下の性質を満たすことが要請される<sup>\*12</sup>。

$$\text{確率保存} \quad \langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \alpha | \mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x}') \mathcal{T}(d\mathbf{x}') | \alpha \rangle$$

$$\leftrightarrow \text{ユニタリ-性} \quad \mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x}') \mathcal{T}(d\mathbf{x}') = 1, \quad (18)$$

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}'') \mathcal{T}(d\mathbf{x}') = \mathcal{T}(d\mathbf{x}' + d\mathbf{x}''), \quad (19)$$

$$\mathcal{T}(-d\mathbf{x}') = \mathcal{T}^{-1}(d\mathbf{x}'), \quad (20)$$

$$\lim_{d\mathbf{x}' \rightarrow 0} \mathcal{T}(d\mathbf{x}') = 1. \quad (21)$$

ここで最後の条件に加えて、 $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$  と恒等演算子との差が  $d\mathbf{x}'$  の 1 次であることも要求しよう。 $\mathbf{K}$  を Hermite 演算子として

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}') = 1 - i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}' \quad (22)$$

とおくと、これらの性質が満たされる (確認は下記)。

上式 (22) が  $\mathcal{T}(d\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle$  を満たす並進の適正な演算子であることを認めると、

$$[x_i, K_j] = i\delta_{ij} \quad (23)$$

が導かれる (導出は下記)。

有限のベクトル  $\mathbf{a}$  だけの平行移動に関する演算子は、 $N \gg 1$  に対して微小変位  $\Delta\mathbf{x}' = \mathbf{a}/N$  を  $N$  回合成して

$$\mathcal{T}(\mathbf{a}) = (1 - i\mathbf{K} \cdot \Delta\mathbf{x}')^N = \left(1 - i\frac{\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}}{N}\right)^N \rightarrow e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}} \quad (N \rightarrow \infty) \quad (24)$$

と求まる (p.64) [本稿次節で補足]。

平行移動生成演算子としての運動量 (pp.62–66)

ここで  $\mathbf{K} = \mathbf{p}/\hbar$  と書いて運動量演算子  $\mathbf{p}$  を導入する。量子力学では運動量はこのように定義される。その動機は主に次の点に求められる。

- 無限小平行移動の演算子 (22):

$$\mathcal{T}(\Delta\mathbf{x}') = 1 - i\frac{\mathbf{p} \cdot \Delta\mathbf{x}'}{\hbar} \quad \left(\mathbf{K} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \text{ と同定}\right)$$

<sup>\*11</sup> ここで考えているのは、空間に固定した座標系に対して物理系を並進させる、いわゆる能動の変換である。

<sup>\*12</sup>  $\mathcal{T}$  は translation の頭文字であると想像される。コマンド `\mathscr{T}` で出力される T の筆記体  $\mathcal{T}$  は、コマンド `\mathcalcal{T}` で出力される J の筆記体  $\mathcal{J}$  とよく似ている。

は、古典力学における正準変換  $\mathbf{x}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{X} = \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}', \mathbf{P} = \mathbf{p}$  の母関数

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{P}) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{p} \cdot \Delta\mathbf{x}'$$

と類似している (ここで第 1 項  $\mathbf{x} \cdot \mathbf{P}$  は恒等変換  $\mathbf{X} = \mathbf{x}, \mathbf{P} = \mathbf{p}$  の母関数であることに注意する)  
[本稿次節で補足].

- このとき式 (22):  $\mathcal{T}(d\mathbf{x}') = 1 - i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'$  における  $\mathbf{K}$  [の固有値] が  $1/(\text{長さ})$  の次元を持つことが保証される.

すると平行移動の演算子は

$$\mathcal{T}(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{a}/\hbar}$$

となる\*13. また交換関係 (23) は

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (25)$$

となる. 式 (12) よりこれは Heisenberg の唱えた位置と運動量の不確定関係

$$\langle(\Delta x)^2\rangle \langle(\Delta p_x)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}, \text{ etc.}$$

を含意する\*14.

平行移動の性質として, 系を  $\Delta\mathbf{r} = \Delta x\hat{\mathbf{x}} + \Delta y\hat{\mathbf{y}}$  を並進させるとき,  $x$  方向の変位  $\Delta x\hat{\mathbf{x}}$  と  $y$  方向の変位  $\Delta y\hat{\mathbf{y}}$  の順序を入れ替えても結果は変わらないことが要請される. そこで演算子の性質

$$\mathcal{T}(\Delta\mathbf{r}) = \mathcal{T}(\Delta y\hat{\mathbf{y}})\mathcal{T}(\Delta x\hat{\mathbf{x}}) = \mathcal{T}(\Delta x\hat{\mathbf{x}})\mathcal{T}(\Delta y\hat{\mathbf{y}}), \quad \therefore [\mathcal{T}(\Delta y\hat{\mathbf{y}}), \mathcal{T}(\Delta x\hat{\mathbf{x}})] = 0, \text{ etc.}$$

を要請すると,

$$[p_i, p_j] = 0 \quad (26)$$

が導かれる (導出は下記)\*15. よって  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$  の同時固有ケット  $|\mathbf{p}'\rangle$  の存在が保証される.

なお,  $|\mathbf{p}'\rangle$  は  $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$  の固有ケットでもある.

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}')|\mathbf{p}'\rangle = \left(1 - \frac{i\mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right)|\mathbf{p}'\rangle. \quad (\text{固有値は複素数})$$

同時固有ケットの存在は, 交換関係  $[p_i, \mathcal{T}(d\mathbf{x}')] = 0$  と整合している. また  $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$  は非 Hermite なので, 実数の固有値は期待できない.

正準交換関係 (pp.66–68)

式 (17), (25), (24):

$$[x_i, x_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

はまとめて正準交換関係と呼ばれる\*16. これらは正準変数に対する古典的な Poisson 括弧  $[ \quad , \quad ]_{\text{古典的}}$  の式

$$[x_i, p_j]_{\text{古典的}} = \delta_{ij}, \quad \text{etc.}$$

と類似している\*17.

\*13 このとき運動量  $\mathbf{p}$  は平行移動の生成演算子であると言われる.

\*14  $\sqrt{\langle(\Delta x)^2\rangle} \rightarrow \Delta x, \sqrt{\langle(\Delta p_x)^2\rangle} \rightarrow \Delta p_x$  と再定義すれば, これは  $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar}{4\pi}$  と書ける.

\*15 互いに交換する生成子を持つ変換に対応する群はアーベル型であると言われる. 3次元の平行移動群はアーベル型である.

\*16 正準交換関係は変数  $x_i, p_j$  の間の不確定関係を持ち込み, 理論を量子化する際の出発点となる.

\*17 古典的な関係式からの類推で適正な量子力学的関係式を得る (発見的・歴史的な) 手続きとして, Poisson 括弧を交換子に置き換える規則  $[ \quad , \quad ]_{\text{古典的}} \rightarrow [ \quad , \quad ]/i\hbar$  が見出されている (Dirac の規則). 因子  $i\hbar$  の必要性は

我々はこの類推を避け、

- 平行移動の性質
- 平行移動の生成演算子を、運動量を作用の次元を持つ普遍定数で割ったもの、と同一視したこと

を基礎として正準交換関係を導いた。この方法は観測量が古典的類推を持たない場合にも一般化できるという点で、より強力である (例えば第 3 章ではスピン角運動量の交換関係を、回転の生成子の性質として導く)。

#### ■交換子の性質

$$\begin{aligned}
 [A, A] &= 0, \\
 [A, B] &= -[B, A], \\
 [A, c] &= 0, \quad (c \text{ は単なる数}) \\
 [A + B, C] &= [A, C] + [B, C] \\
 [AB, C] &= A[B, C] + [A, C]B, \\
 [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] &= 0 \quad (\text{Jacobi の恒等式})
 \end{aligned} \tag{27}$$

が成立する [非自明な式 (27), (28) について、本稿次節で補足]. これらは古典力学における Poisson 括弧の満たす代数的性質と類似しており、そのことが古典論と量子論の対応付け  $[\ , \ ]_{\text{古典的}} \rightarrow [\ , \ ]/i\hbar$  を可能にしている。

#### 1.6 節, 式の導出など

■式 (22) の  $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$  が性質 (18)–(21) を満足することの確認 式 (22):  $\mathcal{T}(d\mathbf{x}') = 1 - i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'$  の Hermite 共役をとると

$$\mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x}') = 1 + i\mathbf{K}^\dagger \cdot d\mathbf{x}'$$

となるので、 $\mathbf{K}$  が Hermite であるとするれば、 $d\mathbf{x}'$  の 1 次までの近似でユニタリー性の条件 (18) が満たされる。

$$\begin{aligned}
 \mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x}')\mathcal{T}(d\mathbf{x}') &= (1 + i\mathbf{K}^\dagger \cdot d\mathbf{x}')(1 - i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}') \\
 &\simeq 1 - i(\mathbf{K} - \mathbf{K}^\dagger) \cdot d\mathbf{x}' \\
 &\simeq 1.
 \end{aligned}$$

また式 (19) は次のように確かめられる。

$$\begin{aligned}
 \mathcal{T}(d\mathbf{x}'')\mathcal{T}(d\mathbf{x}') &= (1 - i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'')(1 - i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}') \\
 &\simeq 1 - i\mathbf{K} \cdot (d\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'') \\
 &= \mathcal{T}(d\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'').
 \end{aligned}$$

[式 (20)(第 3 の特性) の確認は本稿次節を参照.] 式 (21):  $\lim_{d\mathbf{x}' \rightarrow 0} \mathcal{T}(d\mathbf{x}') = 1$  が満たされていることは明らかである。

---

● Poisson 括弧と交換子の次元の違い  
 ● Poisson 括弧が実であるのに対し、Hermite 演算子の交換子は反 Hermite であること (1.4 節) から理解できる。

■(正準) 交換関係 (23) の導出 本稿ではあらかじめ無限小平行移動の演算子 (22) を, 有限の変位  $\mathbf{a}$  に対する表式 (1.6.30):  $\mathcal{T}(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{a}}$  に直しておき, これと (正準) 交換関係 (23):  $[x_i, K_j] = i\delta_{ij}$  が等価であることを示す.  $\mathcal{T}(\mathbf{a})$  が平行移動演算子であることから

$$\begin{aligned} x_i \mathcal{T}(\mathbf{a}) |\mathbf{x}'\rangle &= x_i |\mathbf{x}' + \mathbf{a}\rangle = (x'_i + a_i) |\mathbf{x}' + \mathbf{a}\rangle, \\ \mathcal{T}(\mathbf{a}) x_i |\mathbf{x}'\rangle &= x'_i \mathcal{T}(\mathbf{a}) |\mathbf{x}'\rangle = x'_i |\mathbf{x}' + \mathbf{a}\rangle \end{aligned}$$

であり, これらを辺々引くと

$$[x_i, \mathcal{T}(\mathbf{a})] |\mathbf{x}\rangle = a_i |\mathbf{x}' + \mathbf{a}\rangle$$

となる. ここで平行移動演算子が  $\mathcal{T}(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{a}} = 1 - i\mathbf{K}\cdot\mathbf{a} + O(\mathbf{a}^2)$  と表されるとして両辺  $\mathbf{a}$  の 1 次の項を取り出すと

$$-ia_j [x_i, K_j] |\mathbf{x}'\rangle = a_i |\mathbf{x}'\rangle$$

となるので, 正準交換関係  $[x_i, K_j] = i\delta_{ij}$  を得る.

■交換関係 (26):  $[p_i, p_j] = 0$  の導出  $\Delta x'$  と  $\Delta y'$  の 2 次までの近似で

$$\begin{aligned} 0 &= [\mathcal{T}(\Delta y \hat{y}), \mathcal{T}(\Delta x \hat{x})] = [e^{-ip_y \Delta y / \hbar}, e^{-ip_x \Delta x / \hbar}] \\ &= \left[ \left( 1 - \frac{ip_y \Delta y}{\hbar} - \frac{p_y^2 (\Delta y')^2}{2\hbar^2} + \dots \right), \left( 1 - \frac{ip_x \Delta x}{\hbar} - \frac{p_x^2 (\Delta x')^2}{2\hbar^2} + \dots \right) \right] \\ &\simeq - \frac{(\Delta x')(\Delta y') [p_y, p_x]}{\hbar^2}, \quad (\text{自明な関係 } [p_x, p_x] = [p_y, p_y] = 0 \text{ に注意}) \\ &\therefore [p_x, p_y] = 0 \end{aligned}$$

を得る. 添字を巡回置換して得られる関係と  $[p_x, p_x] = 0$ , etc. を合わせると, 式 (26):  $[p_i, p_j] = 0$  のようにまとめられる.

## 1.6 について

### ■連続スペクトル

$$\text{規格直交性} \quad \langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi'') : (1.6.2a),$$

$$|\xi\rangle \text{ による展開} \quad |\alpha\rangle = \int d\xi' c_{\xi'} |\xi'\rangle$$

を連続的な固有値  $\xi'$  に対する定義として認めれば, 連続変数  $\xi'$  に対する式 (1.6.2a-f) の残りを導ける. 実際, 上の 2 式により展開係数  $c_{\xi'}$  は

$$\langle \xi' | \alpha \rangle = \int d\xi'' c_{\xi''} \langle \xi' | \xi'' \rangle = \int d\xi'' c_{\xi''} \delta(\xi' - \xi'') = c_{\xi'}$$

と定まるので

$$|\alpha\rangle = \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi' | \alpha \rangle : (1.6.2c), \quad \therefore \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi'| = 1 : (1.6.2b)$$

を得る. ここで得られた完全性条件 (1.6.2b) を用いて

$$1 = \langle \alpha | \alpha \rangle = \int d\xi' |\langle \xi' | \alpha \rangle|^2 : (1.6.2d),$$

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \int d\xi' \langle \beta | \xi' \rangle \langle \xi' | \alpha \rangle : (1.6.2e)$$

が導かれる。規格直交性 (1.6.2a):  $\langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi'')$  から直接, 式 (1.6.2f):  $\langle \xi'' | \xi | \xi' \rangle = \xi' \delta(\xi' - \xi'')$  が示される。

和を積分で置き換えること 固有ケットによる展開

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \rightarrow |\alpha\rangle = \int d\xi' c_{\xi'} |\xi'\rangle$$

について,  $\sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle$  は  $c_{a'} |a'\rangle$  についての和であるのに対し, 積分  $\int d\xi' c_{\xi'} |\xi'\rangle$  は  $d\xi' c_{\xi'} |\xi'\rangle$  の和であって,  $c_{\xi'} |\xi'\rangle$  の和ではない。

離散的な固有値  $a'$  に対する式と連続的な固有値  $\xi'$  に対する式

$$\sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2 = 1, \quad \int d\xi' |\langle \xi' | \alpha \rangle|^2 = 1$$

を比較すると, 和を積分で置き換えたことにより,  $|\langle a' | \alpha \rangle|^2$  は無次元であるのに対し  $|\langle \xi' | \alpha \rangle|^2$  は  $\xi'$  に関する確率密度の次元を持つ。

確率解釈  $|\langle x' | \alpha \rangle|^2$  を確率密度と見なすこと (p.57) は, 離散的な固有値に対する確率解釈 (1.4.4):

$$(a' \text{ の確率}) = |\langle a' | \alpha \rangle|^2$$

と同様, 物理的な仮定と考えられる。

■平行移動の演算子を定義する式 (1.6.12) 式 (1.6.12) で「任意にとれる位相因子は便宜上 1 にとった」(p.59, 1.1) ことについて, 任意に取れる位相因子  $c$  を 1 とせずに式 (1.6.12) に書き入れると

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}') |x'\rangle = c |x' + d\mathbf{x}'\rangle$$

となる。

■式 (1.6.14) について

$$\begin{aligned} \int d^3x' |x' + d\mathbf{x}'\rangle \langle x' | \alpha \rangle &= \int d^3x'' |x''\rangle \langle x'' - d\mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (x' + d\mathbf{x}' \equiv x'') \\ &= \int d^3x' |x'\rangle \langle x' - d\mathbf{x}' | \alpha \rangle \end{aligned}$$

の第 2 の等号で変数名を  $x'' \rightarrow x'$  と改めるとき,  $d\mathbf{x}'$  は与えられた定数なので変更を被らないことに注意する。式 (1.7.15) の 2 行目から 3 行目への変形においても, このことに注意する。

■平行移動演算子の Hermite 共役の表式 (p.60 下 2 行) p.60 下 2 行で用いられる, 平行移動演算子  $\mathcal{T}(d\mathbf{x}') = 1 - i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'$  の Hermite 共役  $\mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x}')$  の表式について,

$$i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}' = \underbrace{(idx')}_{\text{値}} K_x + \underbrace{(idy')}_{\text{値}} K_y + \underbrace{(idz')}_{\text{値}} K_z \quad \text{D.C.} \quad \underbrace{-(idx')}_{\text{値}} K_x + \underbrace{-(idy')}_{\text{値}} K_y + \underbrace{-(idz')}_{\text{値}} K_z = -i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'$$

である。さらに  $1^\dagger = 1$  だから (付録 A 参照),  $\mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x}') = 1 + i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'$  を得る。

■平行移動演算子の性質が満たされることの確認 「第3および第4の特性を, (1.6.20) は明らかに満たしている」 (p.61, 1.9) について, 非自明な第3の特性 (1.6.18) [本稿の式 (20)] : $\mathcal{T}(-d\mathbf{x}') = \mathcal{T}^{-1}(d\mathbf{x}')$  を考えよう. 逆の演算子  $\mathcal{T}^{-1}(d\mathbf{x}')$  は

$$\mathcal{T}^{-1}(d\mathbf{x}')\mathcal{T}(d\mathbf{x}') = \mathcal{T}(d\mathbf{x}')\mathcal{T}^{-1}(d\mathbf{x}') = 1$$

で定義されたと考える. これを Hermite 性 (18): $\mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x}')\mathcal{T}(d\mathbf{x}') = 1$  と比較すると,

$$\mathcal{T}^{-1}(d\mathbf{x}') = \mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x}') = 1 + i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}' = \mathcal{T}(-d\mathbf{x}')$$

と同定される. 実際, これはもう一方の関係

$$= \mathcal{T}(d\mathbf{x}')\mathcal{T}(-d\mathbf{x}') = 1 - (i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}')^2 \simeq 1$$

も満たしている.

有限の変位  $\mathbf{l}$  についての平行移動の演算子 (1.6.36): $\mathcal{T}(\mathbf{l}) = e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}/\hbar}$  に対しても, 演算子  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{l}$  は自分自身と交換するため, ユニタリー性

$$e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}/\hbar}e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}/\hbar} = e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}/\hbar}e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}/\hbar} = 1$$

が満たされることが分かる ( $A, B$  が交換すれば, 指数法則  $e^Ae^B = e^{A+B}$  が成り立つ, 付録 B 参照). この証明では生成子  $\mathbf{K} = \mathbf{p}/\hbar$  の Hermite 性により,  $\mathcal{T}^\dagger(\mathbf{l}) = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}/\hbar}$  となることが重要である. 同じことは Baker-Hausdorff の補助定理 (2.3.47) を用いても確かめられる.

■交換関係 (1.6.25): $[x, \mathcal{T}(d\mathbf{x}')] = d\mathbf{x}'$  について これを導くには, 式 (1.6.24): $[x, \mathcal{T}(d\mathbf{x}')]|x'\rangle \simeq d\mathbf{x}'|x'\rangle$  と「位置固有ケットは完全系を作る」(式 (1.6.25) の上2行) ことを用いて

$$[x, \mathcal{T}(d\mathbf{x}')]|x'\rangle = [x, \mathcal{T}(d\mathbf{x}')] \int d^3x' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle = \underbrace{d\mathbf{x}'}_{\text{定数}} \int d^3x' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle = d\mathbf{x}'|\alpha\rangle$$

とすれば良い ( $|\alpha\rangle$  は任意のケット).

■交換関係の第  $i$  成分 (1.6.27) 式 (1.6.26): $-i[x, \mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'] = d\mathbf{x}'$  は3つの式

$$-i \left[ x_i, \sum_k K_k dx'_k \right] = dx'_i, \quad i = 1, 2, 3$$

をまとめたものである. ここで  $d\mathbf{x}'$  を  $\hat{x}_j$  方向にとると, その第  $i$  成分は  $dx'_i = \delta_{ij}dx'_j$  だから ( $j$  について和をとらない),

$$\begin{aligned} -idx'_j[x_i, K_j] &= dx'_i dx'_j, & (j \text{ について和をとらない}) \\ \therefore [x_i, K_j] &= i\delta_{ij} : (1.6.27) \end{aligned}$$

を得る.

■運動量の定義について  $\mathbf{K} = \mathbf{p}/\hbar$  において運動量演算子  $\mathbf{p}$  を定義する動機付け (pp.62-63) はもちろん, 積極的な飛躍である. 量子力学は古典力学をその極限の場合として含み, またそれと同時にこの極限の場合をそれ自身の基礎づけのために必要とする [1, p.19, p.502]. とは言え, それはあくまで古典論からボトムアップ式により根源的な量子と論を探り当てる場合の話であり, 「古典力学は量子力学から導けるがその逆はできない」 (p.113).

さらに量子力学的な運動量の定義  $\mathbf{K} = \mathbf{p}/\hbar$  が適正であることの証拠を挙げることができる.

- 古典力学において、系の空間並進対称性に付随する保存量は運動量であり [1, p.66], 系の並進操作と運動量は密接な関係にある.
- 古典的な極限を考え、運動量の定義を正当化することもできる [1, pp.66–67]. すなわち古典的な極限  $\hbar \rightarrow 0$  では  $S$  を作用 (Hamilton 主関数) として、波動関数は  $\psi = \sqrt{\rho}e^{iS/\hbar}$  という形を持つ (2.4 節, p.139). しかるに波動関数  $\psi$  に対して運動量演算子は  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  という形をとるので (次節の式 (32)),  $\hbar \rightarrow 0$  のとき

$$\mathbf{p}\psi = -i\hbar\nabla\psi = -i\hbar\left\{(\nabla\sqrt{\rho})e^{iS/\hbar} + \sqrt{\rho}\frac{i}{\hbar}(\nabla S)e^{iS/\hbar}\right\} \simeq (\nabla S)\psi$$

となる. これは古典的な運動量が  $\mathbf{p} = \nabla S$  で与えられることと比較される結果となっている. このことから平行移動の演算子を  $\mathcal{T}(d\mathbf{x}') = 1 - \frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}$  と書いて、量子力学的な演算子としての運動量  $\mathbf{p}$  を定義したことが正当化される.

■母関数 (1.6.29) 「古典力学から借用したいのは、運動量が無限小平行移動の生成演算子 [母関数 (p.62 訳注)] であるという概念である」 (p.62) について、まず古典力学の母関数の復習をする [7, pp.181–183]. 正準変数  $q_i, p_i$  に対する Hamilton 方程式

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

は、位相空間における軌道に沿う作用積分に対する、最小作用の原理

$$\delta S = 0, \quad S = \int \left( \sum_i p_i dq_i - H dt \right)$$

から導かれる. ここで変数  $q = \{q_i\}, p = \{p_i\}$  から新変数  $Q_i = Q_i(p, q, t), P_i = P_i(p, q, t)$  への変換が正準変換である, すなわち何か新しい Hamilton 関数  $H'(P, Q)$  を用いて運動方程式が

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H'}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial H'}{\partial Q_i}$$

と表されるためには、新変数に対しても最小作用の原理

$$\delta S = 0, \quad S = \int \left( \sum_i P_i dQ_i - H' dt \right)$$

が成り立たなければならない. その条件は 2 つの作用の差が、変分をとると落ちる、座標、運動量および時間の任意関数  $W$  の全微分となることである. すなわち

$$\begin{aligned} \sum_i p_i dq_i - H dt &= \sum_i P_i dQ_i - H' dt + dW, \\ \therefore dF &\equiv d \left( W + \sum_i P_i Q_i \right) = \sum_i p_i dq_i + \sum_i Q_i dP_i + (H' - H) dt, \\ F(q, P, t) &\equiv W + \sum_i P_i Q_i : \text{母関数}, \quad P \equiv \{P_i\}. \end{aligned}$$

特に無限小パラメータ  $\varepsilon$  で特徴付けられる無限小変換の母関数は

$$F = \sum_i q_i P_i + \varepsilon G(q, P, t)$$

という形をとる。実際

$$\frac{\partial F}{\partial q_i} = P_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} = p_i + \delta p_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}, \quad \frac{\partial F}{\partial P_i} = q_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_i}$$

なので,

$$\delta p_i = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}, \quad \delta q_i = \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_i} \simeq \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} \quad (29)$$

とすれば母関数  $F$  に対する条件

$$p_i = \frac{\partial F}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial F}{\partial P_i}$$

が満たされる。  $G$  の引数  $P$  を  $p$  に置き換えて、代わりに関数  $G(q, p, t)$  を用いても構わない ( $\varepsilon$  の 1 次までの近似で式 (29) は保持されるから) [8, pp.536–538]。母関数  $F$  において、  $G$  は恒等変換からのズレを担っている。特に母関数を  $G = p_i$  ととれば、上式 (29) は空間並進

$$\delta q_k = \varepsilon \delta_{ki}, \quad \delta p_k = 0$$

を与える [8, p.560]。これは式 (1.6.29) が無限小平行移動の母関数であることを意味する。

やや 2 度手間ではあるが、改めて教科書の記号を用い、古典力学における無限小平行移動の母関数が式 (1.6.29) であることを直接的に確認しよう。記号  $\mathbf{x}$  は変数の微分に用いることにし、無限小平行移動を表す定ベクトルは (教科書と違って)  $\Delta \mathbf{x}$  で表して区別する。今考えている正準変換

$$\mathbf{x}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{X} = \mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, \mathbf{P} = \mathbf{p}$$

に対して,

$$\begin{aligned} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{x} &= \mathbf{P} \cdot d\mathbf{X} + dW, \\ dF(\mathbf{x}, \mathbf{P}) &= d(W + \mathbf{P} \cdot \mathbf{X}) = \mathbf{p} \cdot d\mathbf{x} + \mathbf{X} \cdot d\mathbf{P} \\ &= \mathbf{P} \cdot d\mathbf{x} + (\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}) \cdot d\mathbf{P} = d(\mathbf{x} \cdot \mathbf{P}) + \Delta \mathbf{x} \cdot d\mathbf{P}, \quad (\mathbf{x}, \mathbf{P} \text{ を独立変数として表した}) \\ F &= \mathbf{x} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \Delta \mathbf{x}. \quad \Leftrightarrow \quad \text{式 (1.6.29)} \end{aligned} \quad (30)$$

ここで  $dF$  を積分して母関数  $F$  を得る際、当然のことながら式 (30) を  $\mathbf{x}\mathbf{p}$  空間の経路で積分しても、  $\mathbf{P}, \mathbf{X}$  が  $\mathbf{x}, \mathbf{p}$  の変化に伴って動くため、  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{X} \cdot \mathbf{P}$  にはならない。

なお式 (1.6.29) の  $F$  が母関数であることを確かめるには、  $F$  が

$$\mathbf{p} = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}}, \quad \mathbf{X} = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{P}}$$

を満たしているのを確かめれば十分である。

■作用積分の次元 式 (1.6.30) では作用積分が (運動量)  $\times$  (長さ) の次元を持つことを用いた。作用積分の次元を持つ量について図 10 にまとめておく。

一般に指数関数の位相は無次元量でなければならない。ここで作用  $S$ 、運動量  $\mathbf{p}$ 、位置ベクトル  $\mathbf{r}$ 、エネルギー  $E$ 、時刻  $t$ 、角運動量  $\mathbf{J}$  に対して図 10 より

$$[\hbar] = [S] = [\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}] = [Et] = [\mathbf{J}]$$

なので、  $e^{iS/\hbar}$ ,  $e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar}$ ,  $e^{i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\phi}$  といった表現に現れる位相  $(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t$ ,  $S/\hbar$ ,  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\phi/\hbar$  が確かに無次元化されていることも分かる ( $\mathbf{k}$  は波数ベクトル、  $\omega$  は振動数、  $\mathbf{n}$  は単位ベクトル、  $\phi$  は角度を表す)。



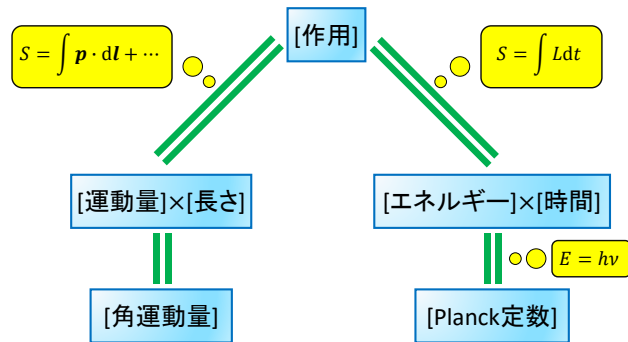


図 10 作用積分の次元を持つ量

■無限小平行移動の  $N$  回合成 (24) について  $X$  が値か演算子かに関わらず  $N \rightarrow \infty$  のとき

$$\left(1 + \frac{X}{N}\right)^N = \sum_{n=0}^N \frac{X^n}{n!} \frac{N!}{(N-n)!N^n} \rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \frac{X^n}{n!} \quad \left(\because \frac{N!}{(N-n)!N^n} = \frac{N}{N} \cdot \frac{N-1}{N} \cdots \frac{N-n+1}{N} \rightarrow 1\right)$$

となる。演算子  $X$  に対しても  $\exp(X)$  を級数展開 (1.6.37) で定義したことにより

$$\left(1 + \frac{X}{N}\right)^N \rightarrow e^X$$

である。  $X = 1$  とすると、これは  $e$  の定義式になる。直観的には

$$e^X = \left(e^{\frac{X}{N}}\right)^N \simeq \left(1 + \frac{X}{N}\right)^N \quad (N \gg 1)$$

である。

■交換関係 (1.6.41):  $[p_x, p_y] = 0$  の導出 平行移動の演算子  $\mathcal{T}(\Delta \mathbf{x}') = 1 - i\mathbf{p} \cdot \Delta \mathbf{x}' / \hbar$  に対して、平行移動の満たす性質 (1.6.38):

$$\mathcal{T}(\Delta \mathbf{x}') \mathcal{T}(\Delta \mathbf{y}') = \mathcal{T}(\Delta \mathbf{y}') \mathcal{T}(\Delta \mathbf{x}') = \mathcal{T}(\Delta \mathbf{x}' + \Delta \mathbf{y}'), \quad \Delta \mathbf{x}' \equiv \Delta x' \hat{x}, \quad \Delta \mathbf{y}' \equiv \Delta y' \hat{y}$$

は、 $\Delta \mathbf{x}, \Delta \mathbf{y}$  の 1 次までの近似で自動的に満たされたのに対し (式 (1.6.17):  $\mathcal{T}(d\mathbf{x}'') \mathcal{T}(d\mathbf{x}') = \mathcal{T}(d\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'')$ ),  $\Delta \mathbf{x}, \Delta \mathbf{y}$  の 2 次までの近似で成り立つことを要求すると、新たに交換関係 (1.6.41):  $[p_x, p_y] = 0$  が得られている。

■交換関係 (1.6.45) の確認

$$[\mathbf{p}, \mathcal{T}(d\mathbf{x}')] = \left[\mathbf{p}, 1 - \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}'\right] = [\mathbf{p}, 1] - \frac{i}{\hbar} [\mathbf{p}, \mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}'] = 0 : (1.6.45).$$

■正準交換関係 (1.6.46) の根拠 「交換関係を求めた方法の基礎になっているのは、専ら、(1) 平行移動の性質と、(2) 平行移動の生成演算子を、運動量を用作用の次元を持つ普遍定数で割ったもの、と同一視したことの 2 点にある」 (p.68) について、正準交換関係 (1.6.46):

$$[x_i, x_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

のうち  $[x_i, x_j] = 0$  は単に同時固有ケット  $|x', y', z'\rangle$  を考えることができるための条件として要請されている (式 (1.6.11)).

これらの交換関係の導出には, 波動関数に作用する運動量演算子の表式  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  を用いていない.

■古典的 Poisson 括弧の定義 (1.6.48) について 常に

$$\frac{1}{i\hbar}[x_i, p_j] = \delta_{ij} : (1.6.46), \quad \frac{dA^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A^{(H)}, H] : (2.2.19)$$

であり ( $A^{(H)}$  は時間に陽に依らない), これに右辺の符号まで対応する

$$[x_i, p_j]_{\text{古}} = \delta_{ij}, \quad \frac{dA}{dt} = [A, H]_{\text{古}}$$

( $A$  は時間に陽に依らない) が導かれるのは, 古典的 Poisson 括弧を式 (1.6.48):

$$[A, B]_{\text{古}} \equiv \sum_s \left( \frac{\partial A}{\partial q_s} \frac{\partial B}{\partial p_s} - \frac{\partial A}{\partial p_s} \frac{\partial B}{\partial q_s} \right)$$

で定義したときである. Poisson 括弧を

$$\{A, B\} \equiv \sum_s \left( \frac{\partial A}{\partial p_s} \frac{\partial B}{\partial q_s} - \frac{\partial A}{\partial q_s} \frac{\partial B}{\partial p_s} \right)$$

のように定義する場合もあり, この場合  $\{p_i, q_j\} = \delta_{ij}$ ,  $dA^{(H)}/dt = \{H, A\}$  となる [7, pp.171–172].

■交換子に対する恒等式 (1.6.50) について 公式 (1.6.50e) [本稿の式 (27)] と類似の公式に

$$[AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B. \quad (31)$$

がある [4, pp.65–66]. これらは

$$[AB, C] = ABC - CAB = \begin{cases} A(BC - CB) + (AC - CA)B = A\{B, C\} + \{A, C\}B : (27). \\ A(BC + CB) - (AC + CA)B = A\{B, C\} - \{C, A\}B : (31). \end{cases}$$

と確かめられる.

公式 (1.6.50e):

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

の覚え方として, 図 11 のように積  $BC$  のうち, 左にあるもの ( $B$ ) は交換子の左に, 右にあるもの ( $C$ ) は交換子の右に出せば良い.

Jacobi の恒等式 (1.6.50f) [本稿の式 (28)] について, 3 式

$$\begin{aligned} [A, [B, C]] &= ABC - ACB - BCA + CBA, \\ [B, [C, A]] &= BCA - BAC - CAB + ACB, \\ [C, [A, B]] &= CAB - CBA - ABC + BAC \end{aligned}$$

を辺々足すと確かにゼロになる. このように Poisson 括弧の場合とは対照的に, 交換子に対しては Jacobi の恒等式 (1.6.50f) を直接確認するのは比較的容易である.

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

図 11 交換子に対する恒等式

■Dirac の規則における因子  $i\hbar$  について  $x_i, p_j$  はいずれも Hermitian 演算子であり、「二つのエルミート演算子の交換子はエルミート交代的である」(p.68 式 (1.6.50f) の 4,5 行下). ここで演算子  $C$  がエルミート交代的とは,  $C = -C^\dagger$  が満たされることである (p.47 の補助定理 3). ところで「エルミート交代の演算子の期待値は, 純虚数である」(p.47 の補助定理 3) から, 交換子  $[x_i, p_j]$  の期待値は純虚数でなければならない. Poisson 括弧と異なり, 交換関係  $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$  には因子  $i\hbar$  が現れるおかげで

$$[A, B]|\rangle = \underbrace{i\hbar[A, B]_{\text{占}}|\rangle}_{\text{純虚数}}$$

となり, このことが満たされる. 「この差を考慮して因子  $i\hbar$  が (1.6.47) には入っている」(p.68 式 (1.6.50f) の 6 行下) とは, この事情を述べている.

■観測量が古典的類推を持たない場合 「この方法の方がより強力だと信ずる理由は, 観測量が古典的類推を持たない場合にも一般化できる」(p.68) について, 確かに「平行移動演算子を, 運動量を作用の次元を持つ普遍定数で割ったもの, と同一視した」(p.68 下から 7 行目) 際には古典的類推を用いた (pp.62–63). これに対して角運動量  $\mathbf{J}$  は, 古典的類推に頼らず, 単位ベクトル  $\mathbf{n}$  の周りの角度  $d\phi$  の回転の演算子を式 (3.1.15)  $\mathcal{D}(\mathbf{n}, d\phi) = 1 - i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}d\phi/\hbar$  で与えるような演算子として定義される. そして回転の性質から角運動量の交換関係 (3.1.20):  $[J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k$  が導かれる (3.1 節).

## 1.7 位置空間および運動量空間における波動関数

位置空間の波動関数 (pp.69–71)

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \int dx' \langle\beta|x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle = \underbrace{\int dx' \psi_\beta^* \psi_\alpha}_{\text{重なり積分の定義式}} \quad (\because \{|x'\rangle\} \text{ の完備性}),$$

$$\psi_\alpha(x') = \langle x'|\alpha\rangle = \sum_{a'} \underbrace{\langle a'|\alpha\rangle}_{c_{a'}} \underbrace{\langle x'|a'\rangle}_{u_{a'}(x')},$$

$$\langle\beta|A|\alpha\rangle = \int dx' dx'' \psi_\beta^*(x') \langle x'|A|x''\rangle \psi_\alpha(x''),$$

位置空間の波動関数 (pp.69–71), 位置基底での運動量演算子 (pp.72–73)

$$\langle x'|p|\alpha\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle, \quad (1.7.17)$$

$$\langle \beta|p|\alpha\rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \psi_\alpha(x'). \quad (1.7.19)$$

が成り立つ (導出は下記). 上式 (1.7.17) に関連した公式として,

$$\langle x'|p^n|\alpha\rangle = (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n} \langle x'|\alpha\rangle \quad (1.7.20)$$

も有用である [導出は本稿次節, これは波動方程式 (2.4.8) の導出に用いる].

[これはよく知られているように [1, p.67],  $p$  が状態に作用する演算子であるのに対し,  $\langle x'|p^n|\alpha\rangle = \hat{p}^n \langle x'|\alpha\rangle$  の関係により波動関数  $\psi = \langle x'|\alpha\rangle$  に作用する場合の運動量演算子  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}$  を定義できることを意味する\*18.]

運動量空間の波動関数 (pp.73–76)

- $\langle x'|p'\rangle$  は  $x$ -表示から  $p$ -表示への変換関数と呼ばれる.
  - 基底  $\{a^{(l)}\}$  から基底  $\{b^{(l)}\}$  への変換行列の要素は式 (1.5.7):  $\langle a^{(k)}|b^{(l)}\rangle$ .
- $\langle x'|p'\rangle$  は運動量固有状態  $|p'\rangle$  を表す波動関数 (運動量固有関数).
- $\langle x'|p'\rangle$  は平面波:

$$\langle x'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar} \quad (\langle x'|x''\rangle = \delta(x' - x'')) \text{ となるように規格化}. \quad (1.7.32)$$

- 平面波の表式を導くにあって,  $\langle x'|p'\rangle$  に対する微分方程式  $p' \langle x'|p'\rangle = \langle x'|p|p'\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|p'\rangle$  を作った (詳細は下記の導出過程を参照).

$\langle x'|p'\rangle$  が平面波  $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar}$  であることから, 位置空間の波動関数  $\psi_\alpha(x') \equiv \langle x'|\alpha\rangle$  と運動量空間の波動関数  $\phi_\alpha(p') \equiv \langle p'|\alpha\rangle$  が Fourier 変換で結ばれることが見出される:

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(x') = \langle x'|\alpha\rangle &= \int dp' \langle x'|p'\rangle \langle p'|\alpha\rangle = \int \frac{dp'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar} \phi_\alpha(p'), \\ \phi_\alpha(p') = \langle p'|\alpha\rangle &= \int dx' \langle p'|x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle = \int \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip'x'/\hbar} \psi_\alpha(x'). \end{aligned}$$

ガウスの波束 (pp.76–78)

Gauss の波束

$$\langle x'|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}} \exp\left(ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right) \quad (|x| \lesssim d \text{ に局在}) \quad (1.7.35)$$

\*18 直観的に視覚化すれば

$$|\alpha\rangle \rightarrow p^n |\alpha\rangle \quad \Rightarrow \quad \psi \rightarrow \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\right)^n \psi.$$

に対して

$$\langle x \rangle = 0, \quad \langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{d^2}{2}, \quad \langle p \rangle = \hbar k, \quad \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2},$$

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \rightarrow \text{最小不確定波束}$$

である ( $\langle x \rangle, \langle (\Delta x)^2 \rangle$  の式の導出は下記) [ $\langle p \rangle, \langle (\Delta p)^2 \rangle$  の式の導出は本稿次節]. 運動量空間の波動関数もまた [Gauss 型の波束]

$$\begin{aligned} \langle p' | \alpha \rangle &= \int \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip'x'/\hbar} \langle x' | \alpha \rangle \\ &= \frac{\sqrt{d}}{\sqrt{\hbar\pi^{1/4}}} \exp \left[ -\frac{(p' - \hbar k)^2 d^2}{2\hbar^2} \right] \end{aligned} \quad (1.7.42)$$

になる [導出は本稿次節].  $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$  を満たしながら,  $p$ -空間での幅  $\Delta p \sim \hbar/d$  が広まると,  $x$ -空間での幅  $\Delta x \sim d$  は狭まる.

### 3次元への一般化 (pp.78–80)

3次元への一般化は直接的である. 要約を省略する.

#### 1.6節, 1.7節

以上の1.6節, 1.7節の流れは以下のフローチャートのようにまとめられる.

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(\Delta \mathbf{x}') &= e^{i\mathbf{p} \cdot \Delta \mathbf{x}'} \leftrightarrow [x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \\ \rightarrow \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p} | \alpha \rangle &= -i\hbar \nabla' \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \\ \rightarrow \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}' \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}' / \hbar}. \end{aligned}$$

#### 1.7節, 式の導出など

■式(1.7.17), 式(1.7.19)の導出 3次元の場合を想定すると, 式(1.7.17)は

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{p} | \alpha \rangle = -i\hbar \nabla' \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (32)$$

と一般化される. これを導こう.

$$\begin{aligned} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{a} / \hbar} | \alpha \rangle &= \mathcal{T}(\mathbf{a}) | \alpha \rangle \\ &= \int d^3 x' \mathcal{T}(\mathbf{a}) | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \\ &= \int d^3 x' | \mathbf{x}' + \mathbf{a} \rangle \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \\ &= \int d^3 x'' | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' - \mathbf{a} | \alpha \rangle \quad (\mathbf{x}'' \equiv \mathbf{x}' + \mathbf{a}) \end{aligned}$$

であり, 最左辺と最右辺について  $\mathbf{a}$  の1次の項を取り出すと

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{a} | \alpha \rangle &= \int d^3 x'' | \mathbf{x}'' \rangle (-\mathbf{a} \cdot \nabla'') \langle \mathbf{x}'' | \alpha \rangle, \quad \left( \nabla'' \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}''} \right) \\ \therefore \mathbf{p} | \alpha \rangle &= \int d^3 x'' | \mathbf{x}'' \rangle (-i\hbar \nabla'') \langle \mathbf{x}'' | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (33)$$

となるので、式 (32):

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}' | \mathbf{p} | \alpha \rangle &= \int d^3 x'' \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x}'' \rangle (-i\hbar \nabla'') \langle \mathbf{x}'' | \alpha \rangle \\ &= -i\hbar \nabla' \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (\because \text{規格直交性 } \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x}'' \rangle = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}''))\end{aligned}$$

を得る.

上式 (33) より

$$\begin{aligned}\langle \beta | \mathbf{p} | \alpha \rangle &= \int d^3 x' \langle \beta | \mathbf{x}' \rangle (-i\hbar \nabla') \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \\ &= \int d^3 x' \psi_\beta^*(\mathbf{x}') (-i\hbar \nabla') \psi_\alpha(\mathbf{x}')\end{aligned}$$

が得られる. これは式 (1.7.19) の 3 次元への一般化 (式 (1.7.49)) にあたる.

■平面波状態 (1.7.32) の導出 空間が 3 次元の場合を想定して導出を行う. 運動量固有状態  $|\mathbf{p}'\rangle$  の波動関数  $\langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}' \rangle$  に対する微分方程式を作ると,

$$p'_i \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}' \rangle = \langle \mathbf{x}' | p_i | \mathbf{p}' \rangle = -i\hbar \partial'_i \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}' \rangle$$

となる. これは  $\langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}' \rangle = N e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}' / \hbar}$  とすると満たされ, さらに式 (1.7.17) の導出で用いた規格直交条件

$$\begin{aligned}\delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') &= \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x}'' \rangle \\ &= \int d^3 p' \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' | \mathbf{x}'' \rangle \\ &= \int d^3 p' (N e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}' / \hbar}) (N^* e^{-i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'' / \hbar}) \\ &= |N|^2 \int d^3 p' e^{i\mathbf{p}' \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') / \hbar} \\ &= |N|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'')\end{aligned}$$

から規格化定数  $N$  を定めると,

$$N = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad \therefore \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}' / \hbar}$$

を得る. これは式 (1.7.32) の 3 次元への一般化 (式 (1.7.50)) にあたる. ただし波動関数  $\langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}' \rangle$  の位相は確率密度  $|\langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}' \rangle|^2$  に影響しないため, 任意にとって良いことに注意して  $N > 0$  とした.

■Gauss の波束 (1.7.35) に対する  $\langle x \rangle, \langle (\Delta x)^2 \rangle$  の式の導出 位置演算子の関数  $f(x)$  に対して  $\langle x' | f(x) | x'' \rangle = f(x') \delta(x' - x'')$  なので, 式 (1.7.14):

$$\langle \beta | f(x) | \alpha \rangle = \int dx' dx'' \langle \beta | x' \rangle \langle x' | f(x) | x'' \rangle \langle x'' | \alpha \rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') f(x') \psi_\alpha(x')$$

が成り立つことを用いると,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' x' |\langle x' | \alpha \rangle|^2 = 0, \quad (1.7.36)$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 |\langle x' | \alpha \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}d} \int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 \exp\left(-\frac{x'^2}{d^2}\right) \\ &= \frac{d^2}{2}, \end{aligned} \quad (1.7.37)$$

$$\therefore \langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{d^2}{2}. \quad (1.7.38)$$

## 1.7 について

■式 (1.7.16):  $p|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle (-i\hbar\partial_{x'}) \langle x'|\alpha\rangle$  の導出 式 (1.7.15) 第4の等号について,

$$\langle x' - \Delta x' | \alpha \rangle = \langle x' | \alpha \rangle - \Delta x' \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle$$

は波動関数  $\langle x' | \alpha \rangle$  に対するべき展開である.

「両辺の比較により」(式 (1.7.15) 直後) というよりむしろ,

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(\Delta x') |\alpha\rangle &= |\alpha\rangle - \int dx' |x'\rangle \Delta x' \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle, \\ \left(1 - i\frac{p}{\hbar} \Delta x'\right) |\alpha\rangle &= |\alpha\rangle - i\frac{p}{\hbar} \Delta x' |\alpha\rangle \end{aligned}$$

を等置して  $O(\Delta x'^2)$  を無視し, 式 (1.7.16):  $p|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle (-i\hbar\partial_{x'}) \langle x'|\alpha\rangle$  を得る.

■ $x$ -表示の波動関数に対する運動量演算子  $p_x = -i\hbar\partial_x$  (式 (1.7.17) 参照) の Hermite 性 [1, pp.33–35, p.67] 任意の演算子  $f$  に対して複素共役な演算子  $f^*$  を定義できる (Hermite 共役ではない). 運動量演算子  $p_x = -i\hbar\partial_x$  に複素共役な演算子は

$$\hat{p}_x^* = i\hbar\partial_x$$

である. ここで  $f$  に共役な演算子  $f^\dagger$  の定義を,

$$\int \Phi^* (f^\dagger \Psi) dx = \int \Psi (f^* \Phi^*) dx$$

と書けることを思い出そう (式 (3) 参照) [6, p.112]. これを部分積分

$$\int \Phi \frac{\partial}{\partial x} \Psi dx = - \int \Psi \frac{\partial}{\partial x} \Phi dx$$

と比較すると,

$$\partial_x^\dagger = -\partial_x$$

が見出される. このように運動量演算子  $p_x = -i\hbar\partial_x$  は, 虚数単位  $i$  と微分演算子  $\partial_x$  の各々の反 Hermite 性により, 全体として Hermite となっている.

$$p_x = p_x^\dagger.$$

■式 (1.7.20),(1.7.21) の証明 式 (1.7.20):

$$\langle x'|p^n|\alpha\rangle = (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n} \langle x'|\alpha\rangle$$

を数学的帰納法 (M.I.) にて証明する. まず  $n = 1$  で式 (1.7.20) が成り立つ (式 (1.7.18)). そこである  $n$  で式 (1.7.20) が成り立つと仮定し,  $\partial' \equiv \partial/\partial x', \partial'' \equiv \partial/\partial x''$  とおくと

$$\begin{aligned} \langle x'|p|x''\rangle &= -i\hbar\partial'\delta(x' - x'') = +i\hbar\partial''\delta(x' - x'') \quad (\because \text{式 (1.7.18)}), \\ \langle x''|p^n|\alpha\rangle &= (-i\hbar)^n \partial''^n \langle x''|\alpha\rangle \quad (\text{M.I. の仮定}), \\ \therefore \langle x'|p^{n+1}|\alpha\rangle &= \int dx'' \langle x'|p|x''\rangle \langle x''|p^n|\alpha\rangle \\ &= \int dx'' \{i\hbar\partial''\delta(x' - x'')\} \{(-i\hbar)^n \partial''^n \langle x''|\alpha\rangle\} \\ &= -(-i\hbar)^{n+1} \left\{ [\delta(x' - x'')\partial''^n \langle x''|\alpha\rangle]_{x''=-\infty}^{x''=\infty} - \int dx'' \delta(x' - x'')\partial''^{n+1} \langle x''|\alpha\rangle \right\} \\ &= (-i\hbar)^{n+1} \partial'^{n+1} \langle x'|\alpha\rangle \end{aligned}$$

より  $n \rightarrow n + 1$  としても式 (1.7.20) は成り立つ.

式 (1.7.20) の両辺に左から  $\langle \beta|x'\rangle$  をかけ,  $x'$  で積分すると式 (1.7.21):

$$\langle \beta|p^n|\alpha\rangle = \int dx' \psi_\beta^* (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n} \psi_\alpha(x')$$

を得る. これは Gauss の波束に対する  $p^2$  の期待値 (1.7.39b) の計算で用いる.

3次元の場合には, 以上の計算で  $x' \rightarrow \mathbf{x}', dx \rightarrow d^3x'$  とし,  $p$  を任意の運動量成分  $p_i$  に置き換えた式が成り立つ. その結果, 式 (1.7.20) は

$$\langle \mathbf{x}'|p_i^n|\alpha\rangle = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'_i}\right)^n \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle$$

に置き換わり, 式 (1.7.21) は式 (1.7.49):

$$\langle \beta|\mathbf{p}|\alpha\rangle = \int d^3x' \psi_\beta^*(\mathbf{x}') (-i\hbar \nabla') \psi_\alpha(\mathbf{x}')$$

へと一般化される.

■運動量固有状態と不確定関係 運動量固有関数 (1.7.32),(1.7.50):  $\psi_{\mathbf{p}'} = \langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}'\rangle \sim e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'/\hbar}$  に対して  $|\psi_{\mathbf{p}'}|^2 = \text{const}$  (空間的に) なので, 運動量が確定した状態では粒子の位置はすべて同じ確率である. これは不確定関係と整合している ( $\sqrt{(\Delta x_i)^2} = \infty, \sqrt{(\Delta p_i)^2} = 0$ ) [1, pp.71-72].

■運動量空間の波動関数 位置空間・運動量空間の波動関数  $\psi_\alpha(x'), \phi_\alpha(p')$  に対する式 (1.7.34):

$$\psi_\alpha(x') = \int \frac{dp'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar} \phi_\alpha(p'), \quad \phi_\alpha(p') = \int \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip'x'/\hbar} \psi_\alpha(x')$$

のように, Fourier 変換・逆変換の式それぞれに因子  $1/\sqrt{2\pi\hbar}$  が充てがわれる. これは規格化条件  $\langle x'|x''\rangle = \delta(x' - x'')$  に由来している (p.75).



ここでデルタ関数の Fourier 展開  $\delta(x' - x'') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp' e^{ip'(x'-x'')/\hbar}$  の形 (1.7.31):

$$\delta(x' - x'') = |N|^2 \int dp' e^{ip'(x'-x'')/\hbar}$$

を「<sup>いままで</sup>今迄我々が展開して来た数学」(p.76, 1.6) が再現できる事実にも, 「<sup>いままで</sup>今迄我々が展開して来た数学は, 積分変換に関するフーリエの業績をどうやら “知っていた” かのようなのである」(p.76, 1.7) という事情を見て取ることができる.

なお  $\psi_\alpha(x'), \phi_\alpha(p')$  がそれぞれ規格化されているためには, 式 (1.7.34) のように Fourier 変換・逆変換の式それぞれに因子  $1/\sqrt{2\pi\hbar}$  を充てがえば良いことが次のように直接確かめられる [6, pp.79–82].

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(x') &= \int \frac{dp'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar} \phi_\alpha(p'), \\ \Rightarrow 1 &= \int dx' |\psi_\alpha(x')|^2 = \int dx' \left| \int \frac{dp'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar} \phi_\alpha(p') \right|^2 = \cdots = \int dp' |\phi_\alpha(p')|^2. \end{aligned}$$

表示の変更 (1.7.33a,b):

$$\langle x' | \alpha \rangle = \int dp' \langle x' | p' \rangle \langle p' | \alpha \rangle, \quad \langle p' | \alpha \rangle = \int dx' \langle p' | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle$$

は式 (1.5.10):

$$\langle b^{(k)} | \alpha \rangle = \sum_l \langle b^{(k)} | a^{(l)} \rangle \langle a^{(l)} | \alpha \rangle$$

に類似である.

Fourier(逆) 変換 (1.7.34a,b) は物質波  $\psi_\alpha(\mathbf{x}')$  の波数  $\mathbf{k}'$  が, 係数  $\hbar$  の違いを除いて運動量に一致すること

$$\mathbf{p}' = \hbar \mathbf{k}'$$

を意味している (de Broglie の関係式).

■不確定関係の再論 運動量表示の波動関数  $\phi_\alpha(\mathbf{p}')$  は波動関数  $\psi_\alpha(\mathbf{x}')$  の Fourier 成分なので, 文献 [2, pp.162–163](『場の古典論』 § 58) で学んだ波動一般の持つ不確定関係は, 位置と運動量の間の不確定関係

$$\Delta p_x \Delta x \sim \hbar, \quad \Delta p_y \Delta y \sim \hbar, \quad \Delta p_z \Delta z \sim \hbar$$

を意味する. ただしここでは  $\Delta x, \Delta p_x, \text{etc.}$  はそれぞれ, 粒子の座標と運動量の見出される範囲の大きさの程度を表す [1, pp.70–72]. これは正準交換関係の帰結としての不確定関係 (1.6.34) と整合している.

■Gauss の波束 (1.7.35) について ここでは波動関数の時間依存性を無視している.

■式 (1.7.36) について 最後の等号で対称性を利用する:

$$\left( \int_0^\infty dx' + \int_{-\infty}^0 dx' \right) x' |\langle x' | \alpha \rangle|^2 = \left( \int_0^\infty dx' - \int_0^\infty dx' \right) x' |\langle x' | \alpha \rangle|^2 = 0.$$

■期待値  $\langle p \rangle$  の式 (1.7.39a) の導出 (章末問題 32a)  $x$ -表示の波動関数 (1.7.35) を用いて式 (1.7.39a) を確認する.

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \langle \alpha | p | \alpha \rangle \\
 &= \int dx' \langle \alpha | x' \rangle \left( -i\hbar \frac{d}{dx'} \right) \langle x' | \alpha \rangle \quad (\because \text{式 (1.7.19)}) \\
 &= \frac{-i\hbar}{\sqrt{\pi d}} \int dx' \exp \left[ -ikx' - \frac{x'^2}{d^2} \right] \left( ik - \frac{x'}{d^2} \right) \exp \left[ ikx' - \frac{x'^2}{d^2} \right] \\
 &= \frac{\hbar k}{\sqrt{\pi d}} \int dx' \exp \left[ -\frac{x'^2}{d^2} \right] \quad \left( \because \int dx' x' \exp \left[ -\frac{x'^2}{d^2} \right] \right) \\
 &= \hbar k.
 \end{aligned}$$

■期待値  $\langle p^2 \rangle$  の式 (1.7.39b) の導出 (章末問題 32a)  $x$ -表示の波動関数 (1.7.35) を用いて式 (1.7.39b) を確認する.

$$\begin{aligned}
 \langle p^2 \rangle &= \langle \alpha | p^2 | \alpha \rangle \\
 &= \int dx' \langle \alpha | x' \rangle \left\{ (-i\hbar) 2 \frac{d^2}{dx'^2} \right\} \langle x' | \alpha \rangle \quad (\because \text{式 (1.7.21)}) \\
 &= \frac{(-i\hbar)^2}{\sqrt{\pi d}} \int dx' \exp \left[ -ikx' - \frac{x'^2}{d^2} \right] \left\{ -\frac{1}{d^2} + \left( -ik - \frac{x'}{d^2} \right)^2 \right\} \exp \left[ ikx' - \frac{x'^2}{d^2} \right] \\
 &= \frac{(-i\hbar)^2}{\sqrt{\pi d}} \left\{ \underbrace{\left( \frac{1}{d^2} + k^2 \right) \int dx' \exp \left[ -\frac{x'^2}{d^2} \right]}_{\sqrt{\pi d}} + \underbrace{\frac{1}{d^4} \int dx' x'^2 \exp \left[ -\frac{x'^2}{d^2} \right]}_{\sqrt{\pi d^3}/2} \right\} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2.
 \end{aligned}$$

(よって  $\langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \hbar^2/2d^2$ : (1.7.40). )

■運動量表示の波動関数 (1.7.42) の導出

$$\begin{aligned}
 \langle p' | \alpha \rangle &= \int \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip'x'/\hbar} \langle x' | \alpha \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\pi^{1/4}\sqrt{d}}} \int dx' \exp \left[ -\frac{x'^2}{2d^2} + i \left( k - \frac{p'}{\hbar} \right) x' \right] \\
 &\quad \left( \because \text{式 (1.7.35)} : \langle x' | \alpha \rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}} \exp \left[ ikx' - \frac{x'^2}{2d^2} \right] \right) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\pi^{1/4}\sqrt{d}}} \int dx' \exp \left[ -\frac{1}{2d^2} \left\{ x' - id^2 \left( k - \frac{p'}{\hbar} \right) \right\}^2 - \frac{d^2}{2} \left( k - \frac{p'}{\hbar} \right)^2 \right] \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\pi^{1/4}\sqrt{d}}} \times \sqrt{2\pi d} \exp \left[ -\frac{d^2}{2} \left( k - \frac{p'}{\hbar} \right)^2 \right]
 \end{aligned}$$

$$= \frac{\sqrt{d}}{\sqrt{\hbar\pi}^{1/4}} \exp\left[-\frac{(p' - \hbar k)^2 d^2}{2\hbar^2}\right] : (1.7.42).$$

■期待値  $\langle p \rangle$  の式 (1.7.39a) の導出 (章末問題 32b)  $p$ -表示の波動関数 (1.7.42) を用いて式 (1.7.39a) を確認する.

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int dp' p' |\langle p' | \alpha \rangle|^2 \\ &= \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \int dp' p' \exp\left[-\frac{(p' - \hbar k)^2 d^2}{\hbar^2}\right] \\ &= \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \int dp'' (p'' + \hbar k) \exp\left(-\frac{p''^2 d^2}{\hbar^2}\right) \quad (p'' = p' - \hbar k) \\ &= \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \times \hbar k \times \frac{\sqrt{\pi}\hbar}{d} \\ &= \hbar k. \end{aligned}$$

■期待値  $\langle p^2 \rangle$  の式 (1.7.39b) の導出 (章末問題 32b)  $p$ -表示の波動関数 (1.7.42) を用いて式 (1.7.39b) を確認する.

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \int dp' p'^2 |\langle p' | \alpha \rangle|^2 \\ &= \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \int dp' p'^2 \exp\left[-\frac{(p' - \hbar k)^2 d^2}{\hbar^2}\right] \\ &= \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \int dp'' (p'' + \hbar k)^2 \exp\left(-\frac{p''^2 d^2}{\hbar^2}\right) \quad (p'' = p' - \hbar k) \\ &= \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{d^2}{\hbar^2}\right)^{-3/2} + (\hbar k)^2 \sqrt{\pi} \frac{\hbar}{d} \right\} \\ &= \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \times \sqrt{\pi} \frac{\hbar^3}{d} \left(\frac{1}{2d^2} + k^2\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2. \end{aligned}$$

## 第2章 量子ダイナミクス

### 2.1 時間的发展とシュレーディンガー方程式

量子力学において、時間と空間はいささかも対称的に扱われていない：

- 空間座標 …… 観測量
- 時間 …… パラメータ

時間的发展の演算子 (pp.91-96)

時刻  $t_0$  に状態  $|\alpha, t_0\rangle$  にあった系の、時刻  $t$  における状態を

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle, \quad \mathcal{U}(t, t_0) : \text{時間的发展の演算子}$$

と表す。時間的发展の演算子に対して

- ユニタリー性

$$\mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{U}(t, t_0) \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) = 1$$

⇒ 確率保存

$$\langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \langle \alpha, t_0; t | \alpha, t_0; t \rangle = 1$$

$$\Leftrightarrow |\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t_0) |a'\rangle, \quad \text{全確率} \quad \sum_{a'} |c_{a'}(t)|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}(t_0)|^2. \quad [\text{本稿次節で補足}]$$

- 合成の性質

$$\mathcal{U}(t_2, t_0) = \mathcal{U}(t_2, t_1) \mathcal{U}(t_1, t_0). \quad (t_2 > t_1 > t_0)$$

- $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \mathcal{U}(t_0 + \Delta t, t_0) = 1.$

を要請する。  $\Omega$  を Hermite 演算子として  $\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\Omega dt$  とおくと、これらの性質が満たされる [証明は平行移動の演算子の場合 (1.6 節) と似たものになる]。

- $\Omega$  は時間の逆数の次元を持つこと
- 古典力学における、

Hamiltonian は時間的发展の生成演算子であるという考え [本稿次節で補足] との類推

から  $\Omega = H/\hbar$  とおき ( $H$  は Hamilton 演算子), 無限小の時間发展の演算子を

$$\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - iHdt/\hbar$$

とする。

シュレーディンガー方程式 (pp.96–98)

時間的发展の演算子  $\mathcal{U}(t, t_0)$  に対し,

$$\begin{aligned} \text{合成の性質} \quad \mathcal{U}(t + dt, t_0) &= \mathcal{U}(t + dt, t)\mathcal{U}(t, t_0) = (1 - iHdt/\hbar)\mathcal{U}(t, t_0) \\ &(t - t_0 \text{は必ずしも無限小である必要はない}) \end{aligned} \quad (34)$$

$$\Rightarrow \mathcal{U}(t, t_0) \text{ に対する Schrödinger 方程式} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = H\mathcal{U}(t, t_0) \quad (35)$$

$$\Rightarrow |\alpha, t_0; t\rangle \text{ に対する Schrödinger 方程式} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = H|\alpha, t_0; t\rangle. \quad (36)$$

[導出は下記.]

上式 (35) の形式的な解は次のように表される [導出は下記].

- Hamilton 演算子が時間に依存しない場合

例 時間的に一定な磁場と相互作用しているスピン磁気モーメントの Hamiltonian

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp[-iH(t - t_0)/\hbar]. \quad (37)$$

- Hamilton 演算子  $H$  が時間に依存し, 異なる時間の  $H$  が交換する場合

例 強さは時間変化するが, 方向は時間変化しない磁場中でのスピン磁気モーメントの Hamiltonian

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t')\right]. \quad (38)$$

- Hamilton 演算子  $H$  が時間に依存し, 異なる時間の  $H$  が交換しない場合

例 強さ・方向ともに時間変化する磁場中でのスピン磁気モーメントの Hamiltonian

$$\mathcal{U}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n). \quad (\text{Dyson 級数}) \quad (39)$$

「以下この章では  $H$  演算子は時間に依存しないとしよう」(p.98).

エネルギー固有ケット (pp.99–101)

観測量  $A$  が  $H$  と両立するとき ( $[A, H] = 0$ ),  $A$  の固有ケット  $|a', t_0\rangle$  はエネルギー固有ケット ( $A, H$  の固有値  $a', E_{a'}$  に属する同時固有状態) でもある. これは

$$|a', t\rangle = U(t, t_0) |a', t_0\rangle = |a', t_0\rangle \exp(-iE_{a'}(t - t_0)/\hbar) \quad (2.1.41)$$

のように位相だけが時間変化し<sup>\*19</sup>, 時間が経っても系は固有状態に留まる. 固有値  $a'$  は時間とともに変化しないため,  $H$  と両立する観測量  $A$  は運動の定数と呼ばれる.

展開係数

$$\begin{aligned} c_{a'}(t) &= \langle a', t_0 | \alpha, t_0; t \rangle = \langle a', t_0 | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \alpha, t_0 \rangle = e^{-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar} \langle a', t_0 | \alpha, t_0 \rangle \\ &= e^{-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar} c_{a'}(t_0) \end{aligned}$$

もまた, 位相だけが時間変化する.

\*19 教科書の記号を略記した.

### 期待値の時間依存性 (pp.101–102)

(上の設定で)  $A, H$  と必ずしも交換しない量  $B$  の期待値は Bohr 振動数<sup>\*20</sup>  $\omega_{a''a'} = (E_{a''} - E_{a'})/\hbar$  で振動する項から成る:

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0; t\rangle &= \sum_{a'} c_{a'}(t_0) \exp\left(\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right) |a'\rangle, \\ \langle B \rangle &= \left[ \sum_{a'} c_{a'}^*(t_0) \langle a' | \exp\left(\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right) \right] B \left[ \sum_{a''} c_{a''}(t_0) \exp\left(\frac{-iE_{a''}(t-t_0)}{\hbar}\right) |a''\rangle \right] \\ &= \sum_{a', a''} c_{a'}^*(t_0) c_{a''}(t_0) \langle a' | B | a'' \rangle \left( \frac{-i(E_{a'} - E_{a''})(t-t_0)}{\hbar} \right). \end{aligned} \quad (2.1.47)$$

特に初期状態がエネルギー固有状態  $|a'\rangle$  のとき  $\langle B \rangle$  は時間変化しない:

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0; t\rangle &= e^{-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar} |a'\rangle, \\ \langle B \rangle &= \langle a' | e^{iE_{a'}(t-t_0)/\hbar} B e^{-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar} |a'\rangle = \langle a' | B | a'\rangle : \text{一定.} \end{aligned}$$

### スピン歳差運動 (pp.102–105)

以上の簡単な例として,  $z$ -方向の静的な均一磁場  $\mathbf{B}$  中の 1 個のスピン 1/2 の系を考えると, Hamilton 演算子は

$$H = \omega S_z, \quad \omega \equiv \frac{|e|\hbar B}{m_e c}$$

で与えられる. 系はエネルギー  $E_{\mp} = \mp \omega \frac{\hbar}{2}$  の 2 準位を持ち,  $\omega$  は  $(E_+ - E_-)/\hbar$  で定義される Bohr 振動数となる. よってこの例では

- $H$  と交換する量  $A \rightarrow S_z$ ,
- $H, A$  と交換しない量  $B \rightarrow S_x, S_y$

となり,

- 固有状態の保持 (2.1.41):  $|a', t_0; t\rangle = |a'\rangle \exp(-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar)$
- ↔ スピン上向き状態  $|+\rangle$  は定常状態,
- $\langle B \rangle$  の Bohr 振動数での振動 (2.1.47)
- ↔  $|S_x; +\rangle$  (これはエネルギー固有状態  $|+\rangle, |-\rangle$  の重ね合せ) を初期状態とする系は, 期待値  $\langle \mathbf{S} \rangle$  が磁場の周りに角速度  $\omega$  で歳差運動 [導出は本稿次節]

となる (図 12 参照).

### 関連の強さおよびエネルギー-時間の不確定関係 (pp.105–107)

一般に初期ケットがエネルギー固有状態  $\{|a'\rangle\}$  の重ね合せで与えられる場合, 時間が経つと系の状態は変化する, もとの状態には留まらない. エネルギー固有値  $\{E_{a'}\}$  がある値  $E_0$  の周りの幅  $\Delta E$  に集中した, 準連続

<sup>\*20</sup> Bohr の振動数条件で決まる振動数を p.167 では単に Bohr 振動数と呼んでいる.

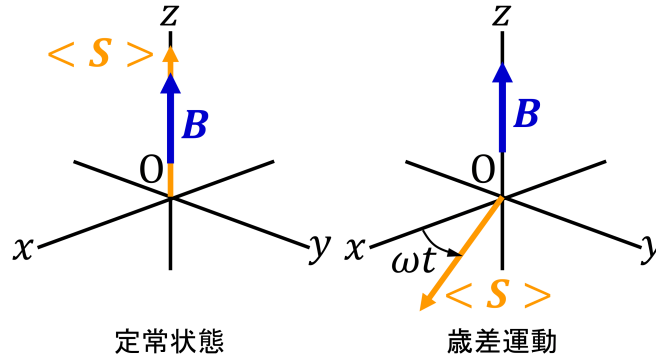


図 12 スピン歳差運動

的スペクトルを形成している場合、時間

$$\Delta t \gtrsim \frac{\hbar}{\Delta E}$$

が経過すると、系は初期状態から著しく変化していることを説明できる (下記において「相関の強さ」を定義して導出)。言い換えれば物理系の状態ケットが原形を保つことのできる時間は、せいぜい  $\hbar/\Delta E$  である。このことはしばしば、時間とエネルギーの不確定関係として言及される。両立できない観測量の間の不確定関係 (1.4 節) と異なり、この不確定関係において時間は観測量ではなくパラメータである。

## 2.1 節, 式の導出など

■Schrödinger 方程式 (35), (36) の導出 式 (36):

$$\mathcal{U}(t + \Delta t, t_0) = (1 - iH\Delta t/\hbar)\mathcal{U}(t, t_0)$$

を移行して整理すると、式 (35):

$$\frac{\partial \mathcal{U}(t, t_0)}{\partial t} \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathcal{U}(t + \Delta t, t_0) - \mathcal{U}(t, t_0)}{\Delta t} = -i(H/\hbar)\mathcal{U}(t, t_0), \quad \therefore i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = H\mathcal{U}(t, t_0) : (35)$$

を得る。これに両辺右から  $|\alpha, t_0\rangle$  をかけ、 $|\alpha, t_0\rangle$  が  $t$  に依らないことに注意すると [本稿次節で補足], 式 (36):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = H |\alpha, t_0; t\rangle$$

が得られる。

■Schrödinger 方程式の形式解 (37), (38), (39) の導出 式 (37), (38), (39) の各々が Schrödinger 方程式 (35) の解となっていることを個別に確認する。

まず一番簡単な場合として、 $H$  は時間に依存しないと仮定すると、式 (37):

$$\mathcal{U}(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{-iH(t-t_0)}{\hbar} \right)^n$$

は確かに

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = i\hbar \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \left( \frac{-iH(t-t_0)}{\hbar} \right)^{n-1} \left( \frac{-iH}{\hbar} \right) = i\hbar \left( \frac{-iH}{\hbar} \right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{-iH(t-t_0)}{\hbar} \right)^n = H\mathcal{U}(t, t_0)$$

より Schrödinger 方程式 (35) を満たし、また境界条件  $\lim_{t \rightarrow t_0} \mathcal{U}(t, t_0) = 1$  も満たしているので、Schrödinger 方程式 (35) の解となっている\*21。

次に  $H(t)$  は時間に依存するものの、異なる時刻の  $H(t)$  は互いに交換する場合に移ろう。このときも単に上式で

$$H(t - t_0) \rightarrow \int_{t_0}^t dt' H(t')$$

と置き換えさえすれば、式 (38):

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \right]$$

が Schrödinger 方程式 (35) の適切な解となっていることを確かめられる。

最後に Dyson 級数 (39) の導出については、下巻の第 5 章を参照する。[本稿次節に証明を載せておく。3 つの場合の解 (37), (38), (39) の関係についても、本稿次節で考察する。]

■スピン歳差運動の導出  $|\pm\rangle$  を基底ケットとして、初期時刻  $t = 0$  における状態を

$$|\alpha\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle$$

と展開する。これに時間的発展の演算子  $\mathcal{U}(t, 0) = e^{-i\omega S_x t/\hbar}$  を作用させると、時刻  $t$  での状態

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = c_+ e^{-i\omega t/2} |+\rangle + c_- e^{+i\omega t/2} |-\rangle \quad (2.1.56)$$

が得られる [本稿次節で補足]。

ここからは初期状態として  $S_x+$  の状態 (1.4.17a):  $|S_x; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle$  を想定し、 $c_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}$  とおく。すると時刻  $t$  に系を状態  $S_x\pm$  に見出す確率は

$$\begin{aligned} |\langle S_x; \pm | \alpha, 0; t \rangle|^2 &= \left| \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \langle - | \right) \cdot \left( \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t/2} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega t/2} |-\rangle \right) \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} \left( e^{-i\omega t/2} \pm e^{i\omega t/2} \right) \right|^2 \\ &= \begin{cases} \cos^2(\omega t/2) & (|S_x; +\rangle \text{ に対して}) \\ \sin^2(\omega t/2) & (|S_x; -\rangle \text{ に対して}) \end{cases} \end{aligned}$$

と計算される。これは初期に系が状態  $S_x+$  にあったとしても、時間が経つにつれて状態  $S_x-$  を見出す確率が有限になることを意味する。 $\mathcal{U}(t, 0)$  のユニタリー性から期待されるように、2 つの確率の和は常に 1 となっている。

時刻  $t$  での  $S_x$  の期待値

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos^2(\omega t/2) - \frac{\hbar}{2} \sin^2(\omega t/2) = \frac{\hbar}{2} \cos \omega t$$

\*21 あるいは 1.6 節で行ったように、 $N \gg 1$  に対して微小時間  $(t - t_0)/N$  の時間的発展の演算子を  $N$  回合成しても、式 (37) を得ることができる。

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ 1 - \left( \frac{iH}{\hbar} \right) \frac{t - t_0}{N} \right]^N = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}.$$



は振動数  $\omega \equiv (E_+ - E_-)/\hbar$  で振動する (一般式 (2.1.47) に整合). 同様に

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \omega t, \quad (2.1.62a)$$

$$\langle S_z \rangle = 0 \quad (2.1.62b)$$

を得る [本稿次節で確認].

以上よりスピンの期待値  $\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{\hbar}{2} (\cos \omega t, \sin \omega t, 0)$  は  $xy$  面内で歳差運動を行う.

■時間とエネルギーの不確定関係の導出 相関の強さ  $C(t) = \langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0; t \rangle$  を定義し (図 13 参照), 時刻  $t$  の状態と初期ケットの類似度の指標として, その絶対値  $|C(t)|$  を用いることができる. 特に初期状態が固有ケット  $|a'\rangle$  であれば, 系の状態は  $|a'\rangle$  から変化しない. この場合には

$$|C(t)| = |\langle a' | a', t_0; t \rangle| = |e^{-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar}| = 1$$

である.

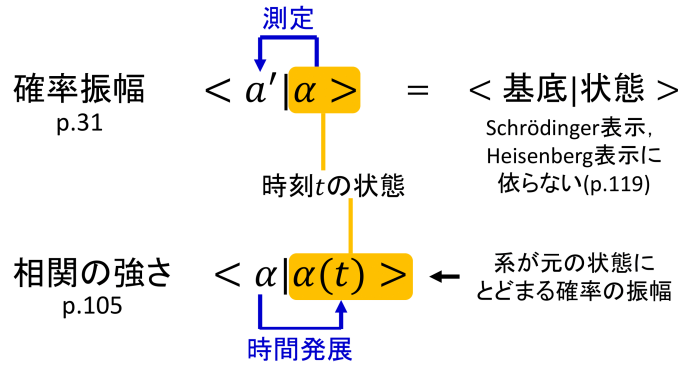


図 13 相関の強さ

さて, 簡単のために  $t_0 = 0$  とおき, 初期ケットを  $|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle$  と展開すると,

$$\begin{aligned} C(t) &= \left( \sum_{a'} c_{a'}^* \langle a' | \right) \cdot \left[ \sum_{a''} c_{a''} \exp\left(\frac{-iE_{a''}t}{\hbar}\right) |a''\rangle \right] \\ &= \sum_{a'} |c_{a'}|^2 \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \\ &\rightarrow \exp\left(\frac{-iE_0t}{\hbar}\right) \int dE \rho(E) |g(E)|^2 \exp\left(\frac{-i(E-E_0)t}{\hbar}\right), \\ &\quad \rho(E) : \text{エネルギー固有状態の密度}, \quad g(E_{a'}) = c_{a'}. \end{aligned}$$

ここで現実の物理的状態では  $\rho(E)|g(E)|^2$  が  $E = E_0$  のまわりで幅  $\Delta E$  のピークを持つ. 与えられた幅  $\Delta E$  が実質的な積分区間となる. 一方,  $E - E_0 \gtrsim \hbar/t$  のとき,  $E$  の変化に伴って  $\exp\left(\frac{-i(E-E_0)t}{\hbar}\right)$  は激しく振動し, 打ち消し合うから,  $C(t)$  への寄与は  $E - E_0 \lesssim \hbar/t$  から来る. この幅は時間とともに狭まり,  $\hbar/t \lesssim \Delta E$  となると積分区間  $\Delta E$  の中で打ち消し合いが起き (図 14 参照),  $C(t)$  が 1 からずれる. よって物理系の状態ケットが原形を保つ, すなわち  $C(t) \simeq 1$  を保つ時間  $\Delta t$  は

$$\Delta t \Delta E \simeq \hbar$$

与えられる (時間とエネルギーの不確定関係).

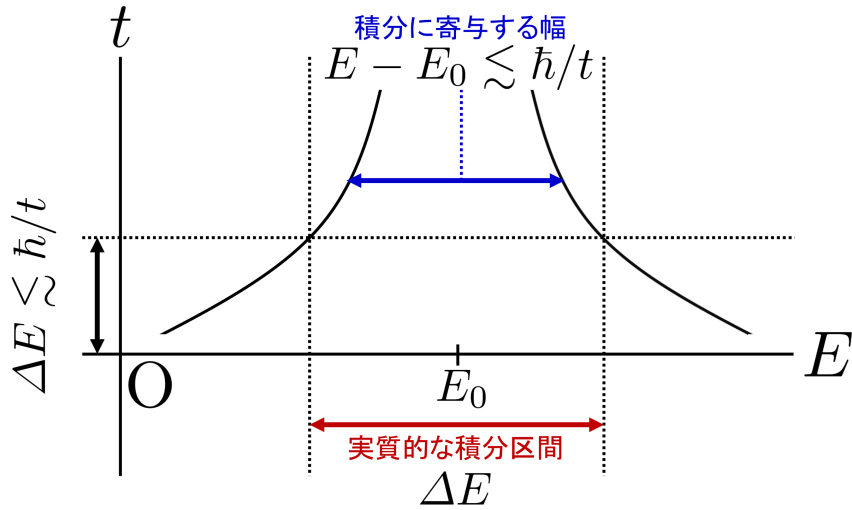


図 14 時間とエネルギーの不確定関係

## 2.1 について

■時間と空間の非対称性 (p.91) について 粒子に対しては

- 時刻  $t$ ..... パラメータ
- 粒子の位置  $\mathbf{x}$ ..... 観測量

なので、時間と空間は対称的に取扱われていないのに対し、場  $\phi(\mathbf{x}, t)$  に対しては

- 位置  $\mathbf{x}$ , 時刻  $t$ ..... パラメータ
- 場  $\phi(\mathbf{x}, t)$ ..... 観測量

のように、時間と空間は共にパラメータとして扱われる。

■確率保存の式 (2.1.9), (2.1.10) 確率保存の式 (2.1.9):

$$\sum_{a'} |c_{a'}(t_0)|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}(t)|^2$$

が条件 (2.1.10):

$$\langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \langle \alpha t_0; t | \alpha t_0; t \rangle = 1$$

と等価であることは、式 (1.3.12):

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \alpha | \left( \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| \right) = \sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}|^2$$

と同様に、各時刻  $t$  で  $\langle \alpha, t_0; t | \alpha, t_0; t \rangle = \sum_{a'} |c_{a'}(t)|^2$  が成り立つことから分かる。

■時間的发展の逆演算子  $\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0)$  を  $\mathcal{U}(dt)$  と略記する。無限小平行移動の演算子に対しては条件 (1.6.18):  $\mathcal{F}(-d\mathbf{x}') = \mathcal{F}^{-1}(d\mathbf{x}')$  が課せられているのに対し、時間的发展の演算子に対しては対応する条件

$\mathcal{U}(-dt) = \mathcal{U}^{-1}(dt)$  が課されていない (pp.93–94). これは物理系の時間発展が常に未来の状態への変化で,  $\mathcal{U}^{-1}(dt)$  が考えられないからだろう. これを強引に考えた場合,  $\mathcal{U}(dt) = 1 - i\Omega dt$ :(2.1.25) とおけば, やはり  $\mathcal{U}(-dt)\mathcal{U}(dt) = \mathcal{U}(dt)\mathcal{U}(-dt) \simeq 1$  すなわち  $\mathcal{U}(-dt) = \mathcal{U}^{-1}(dt)$  が満たされる.

■Hamilton 演算子の定義 (2.1.20): $\Omega = H/\hbar$  について 後の 2.4 節では古典的極限 ( $\hbar \rightarrow 0$ ) において, Schrödinger 方程式から Hamilton-Jacobi 方程式を導く (p.139). Hamiltonian  $H$  を具体的に指定せずと同様の議論をやり直せば, より簡単に

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \left( \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} e^{iS/\hbar} + \sqrt{\rho} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} e^{iS/\hbar} \right) \simeq -\frac{\partial S}{\partial t} \psi$$

となる ( $\hbar \rightarrow 0$  のとき). この極限で  $S$  を作用と見なせることを踏まえれば, これは古典的な Hamiltonian が  $H = -\frac{\partial S}{\partial t}$  で与えられることと比較される結果となっている. このことから時間的発展の演算子を  $\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{iH dt}{\hbar}$  と書いて, 量子力学的な演算子としての Hamiltonian  $H$  を定義したことが正当化される [1, p.52].

■Hamiltonian は時間的発展の母関数 (p.95) 「ハミルトニアンは時間的発展の生成演算子 (母関数, あるいは生成母関数) である」 (p.95) ことを復習する. 式 (1.6.29) の補足の際に求めた無限小変換の式 (29):

$$\delta p_i = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}, \quad \delta q_i = \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_i}$$

は,  $\varepsilon = dt$  とし, 母関数を  $G = H$  ととると

$$\delta q_i = \dot{q}_i dt, \quad \delta p_i = \dot{p}_i dt$$

を与える. すなわち時間間隔  $dt$  における系の運動は, Hamiltonian を母関数とする正準変換である [8, pp.553–554].

■演算子の微分 式 (2.1.25) では演算子の微分を

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathcal{U}(t + \Delta t, t_0) - \mathcal{U}(t, t_0)}{\Delta t} \equiv \frac{\partial \mathcal{U}(t, t_0)}{\partial t}$$

と定義したと見れば良い.

■状態ケットに対する Schrödinger 方程式 (2.1.27) 時間発展の演算子に対する Schrödinger 方程式 (2.1.25) [本稿の式 (35)] から状態ケットに対する Schrödinger 方程式 (2.1.27) [本稿の式 (36)] を得る際,  $|\alpha, t_0\rangle$  は  $t$  に依らないので

$$\{\partial_t \mathcal{U}(t, t_0)\} |\alpha, t_0\rangle = \partial_t \{\mathcal{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle\}$$

とできることに注意する.

■Dyson 級数 (39) の導出 [9, p.450] 時間的発展の演算子に対する Schrödinger 方程式 (35):

$$i \frac{d}{dt} \mathcal{U}(t, t_0) = H(t) \mathcal{U}(t, t_0)$$

は初期 (境界) 条件  $\mathcal{U}(t, t_0)|_{t=t_0} = 1$  を考慮すると

$$\mathcal{U}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \mathcal{U}(t', t_0)$$

と書き換えられる。逐次代入により

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) + \cdots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n)\end{aligned}$$

を得る。ここで最右辺における  $n=0$  の項は 1,  $n=1$  の項は  $-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1)$  と約束する。

■時間的発展の演算子の表式 (38) について 時間的発展の演算子の表式 (38):

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \right]$$

は,  $H, \mathcal{U}(t, t_0)$  が演算子であることを忘れて

$$\int \frac{d\mathcal{U}}{\mathcal{U}} = -\frac{i}{\hbar} \int H dt, \quad \therefore \mathcal{U}(t, t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \right], \quad H, \mathcal{U} : \text{通常の数}$$

とした結果に一致する。

明らかに式 (38) は  $H$  が時間に依らない場合, 式 (37):  $\mathcal{U}(t, t_0) = \exp[-iH(t-t_0)/\hbar]$  に帰着する。

また Dyson 級数 (39) は異なる時刻の  $H$  が交換する場合に限って式 (38) に一致する。このことは次のように確かめられる。

$$\begin{aligned}(\text{式 (38) 右辺}) &= \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \right] \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n)\end{aligned}$$

において,  $n$  に関する和の中身は  $(t_1, t_2, \dots, t_n)$  空間の領域  $t_0 \leq t_1, t_2, \dots, t_n \leq t$  にわたる積分であり, これは  $n!$  通りの置換

$$\pi = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & n \\ \pi(1) & \cdots & \pi(n) \end{pmatrix}$$

に対して  $t_0 \leq t_{\pi(n)} \leq t_{\pi(n-1)} \leq \cdots \leq t_{\pi(1)} \leq t$  で表される  $n!$  個の領域にわたる積分から成る:

$$(\text{式 (38) 右辺}) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \sum_{\pi} \int_{t_0}^t dt_{\pi(1)} \int_{t_0}^{t_{\pi(1)}} dt_{\pi(2)} \cdots \int_{t_0}^{t_{\pi(n-1)}} dt_{\pi(n)} H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n).$$

異なる時刻の Hamilton 演算子が互いに交換する場合には, 被積分関数を

$$H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n) = H(t_{\pi(1)}) H(t_{\pi(2)}) \cdots H(t_{\pi(n)})$$

と並び替えられるから, これは Dyson 級数

$$(\text{式 (39) 右辺}) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n)$$

に一致する。

なお文献 [4, p.108] (のノート) で見たように, Dyson 級数 (39) は指数関数 (37): $e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$  の展開とよく似た形

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_n T\{H(t_1) \cdots H(t_n)\} \equiv T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \right\}$$

に書き換えられる ( $n=0$  の項は 1). 通常の指数  $e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$  との違いは, 式全体に時間順序化  $T\{\cdots\}$  が施されている点だけであり, それ故このように書けば, 時間に陽によらない  $H$  に対して Dyson 級数が  $e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$  に戻ることは明白である.

■式 (2.1.36) について 式 (1.3.34): $A = \sum_{a'} a' |a'\rangle \langle a'|$  と同様に

$$\mathcal{U}(t, 0) = e^{-iHt/\hbar} = e^{-iHt/\hbar} \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = \sum_{a'} |a'\rangle e^{-iE_{a'}t/\hbar} \langle a'|$$

と導ける.

■式 (2.1.37),(2.1.38) 式 (2.1.37) 中央, 式 (2.1.38) 最右辺の  $|\alpha\rangle$  は  $|\alpha, t_0=0\rangle$  のことである.

■p.100 最終段落

$$\underbrace{\text{式 (2.1.42) 2 行目}}_{H \text{ と交換}} \Rightarrow \underbrace{\text{式 (2.1.42) 1 行目}}_{A, B, \dots \text{ が交換}} \Rightarrow H, A, B, \dots \text{ は同時固有ケット } |K\rangle \text{ を持つ.}$$

■磁場中のスピン磁気モーメントに対する Hamiltonian(2.1.49) p.3, 1.4,5 によれば一様な磁場中の電子のスピンとスピン磁気モーメントをそれぞれ  $\mathbf{S}, \boldsymbol{\mu}$  とすると

$$\boldsymbol{\mu} = (e/m_e c) \mathbf{S} \quad (40)$$

である. ここでスピン 1/2 の系では  $S = \hbar/2$  なので  $\boldsymbol{\mu} = e\hbar/2m_e c$  (式 (2.1.49) の上 2 行) を得る. また, 式 (40) を Gauss 単位系の表式  $H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$  に代入し  $H = -(e/m_e c) \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$ : (2.1.49) を得る. ただし  $H, \mathbf{S}$  を演算子と読み替える. 式 (2.1.51): $E_{\pm} = \mp e\hbar B/2m_e c$  をエネルギー固有値を持つ 2 準位系であり, スピン  $\mathbf{S}$  が磁場  $\mathbf{B}$  と平行な場合の方が, 反平行な場合よりもエネルギーが低い.

■式 (2.1.56) の計算について  $e^{-i\omega S_z t/\hbar}$  が演算子  $S_z$  の多項式であることを思い起こし,  $e^{-i\omega S_z t/\hbar} |\pm\rangle = e^{\mp i\omega t/2} |\pm\rangle$  のように  $S_z \rightarrow \pm\hbar/2$  の置き換えをすれば良い.

■ $\langle S_y \rangle, \langle S_z \rangle$  の式 (2.1.62a,b) の確認

$$|S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}} |-\rangle, \quad (1.4.17b)$$

$$\begin{aligned} |\langle S_y; \pm | \alpha, 0; t_0 \rangle|^2 &= \left| \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | \mp \frac{i}{\sqrt{2}} \langle - | \right) \cdot \left( \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t/2} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega t/2} |-\rangle \right) \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} \left( e^{-i\omega t/2} \mp i e^{i\omega t/2} \right) \right|^2 \\ &= \begin{cases} (1 + \sin \omega t)/2 & (|S_y; +\rangle \text{ に対して}) \\ (1 - \sin \omega t)/2 & (|S_y; -\rangle \text{ に対して}) \end{cases}, \\ \langle S_y \rangle &= \frac{\hbar}{2} \frac{1 + \sin \omega t}{2} - \frac{\hbar}{2} \frac{1 - \sin \omega t}{2} = \frac{\hbar}{2} \sin \omega t, \end{aligned} \quad (2.1.62a)$$

$$\begin{aligned}
|\langle S_z; \pm | \alpha, 0; t_0 \rangle|^2 &= \left| \langle \pm | \cdot \left( \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t/2} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega t/2} |-\rangle \right) \right|^2 = \frac{1}{2}, \\
\langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} \frac{1}{2} - \frac{\hbar}{2} \frac{1}{2} = 0.
\end{aligned} \tag{2.1.62b}$$

■エネルギー固有状態の密度  $\rho(E)$  式 (2.1.66) 中の固有状態の密度は、エネルギーが離散的なスペクトルを成すという描像では  $\rho(E) = \sum_{a'} \delta(E - E_{a'})$  と表される。実際これを式 (2.1.67) に代入すると

$$C(t) = \int dE \rho(E) |g(E)|^2 \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) = \sum_{a'} | \underbrace{c_{a'}}_{g(E)|_{E \approx E_{a'}}} |^2 \exp\left(-i\frac{E_{a'}}{\hbar}t\right)$$

となって、式 (2.1.65) に戻る。また、 $\rho(E) = \sum_{a'} \delta(E - E_{a'})$  とすると

$$\int dE \rho(E) |g(E)|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}|^2 = 1$$

なので、自動的に規格化の条件 (2.1.68) が満たされる。

## 2.2 シュレーディンガー表示とハイゼンベルク表示

■Schrödinger 表示 (描像) 2.1 節で導入した量子ダイナミクスへのアプローチは Schrödinger 描像と呼ばれる。これについての要点を改めてまとめておこう。Schrödinger 描像において時刻  $t$  での系の状態を  $|\alpha, t\rangle$  とすると、その時間発展は

$$|\alpha, t\rangle = \mathcal{U}(t) |\alpha, 0\rangle$$

と書ける。ここに系の Hamilton 演算子  $H$  に対して  $\mathcal{U}(t)$  は Schrödinger 方程式 (35):

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{U} = H \mathcal{U}$$

および  $\mathcal{U}(0) = 1$  (恒等演算子) を満たす時間発展の演算子である。これは状態ケット  $|\alpha, t\rangle$  が Schrödinger 方程式 (36):

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\alpha, t\rangle = H |\alpha, t\rangle$$

に従って時間発展することを意味する。これに対し観測量  $A$  の固有ケット  $\{|a'\rangle\}$  を基底ケットに用いると (ここでは固有値  $a'$  として、離散的な値をとるものも考えても連続的な値をとるものも考えても良い)、Schrödinger 描像において観測量  $A$  は時間変化しないので、基底ケット  $\{|a'\rangle\}$  も時間変化しない。以下、Hamiltonian が時間に陽に依らない場合を考える。このとき時間発展の演算子は

$$\mathcal{U}(t) = e^{-iHt/\hbar} : \tag{37}$$

と書ける。

■Heisenberg 表示 (描像) Heisenberg 描像において状態ケットは

$$|\alpha\rangle_{\text{H}} = |\alpha, 0\rangle$$

のように時間変化しない。また、Heisenberg 描像の観測量は Schrödinger 描像の観測量を  $A$  として

$$A^{\text{H}}(t) = \mathcal{U}^\dagger(t) A \mathcal{U}(t) \tag{41}$$

表 1 Schrödinger 描像, Heisenberg 描像

	Schrödinger 描像	Heisenberg 描像
状態ケット	$ \alpha, t\rangle$ Schrödinger 方程式 (36) に従う	$ \alpha\rangle_{\text{H}} = \mathcal{U}^\dagger(t)  \alpha, t\rangle =  \alpha, 0\rangle$ 時間変化しない
観測量	$A$ 時間変化しない	$A^{\text{H}}(t) = \mathcal{U}^\dagger(t) A \mathcal{U}(t)$ Heisenberg 方程式 (42) に従う
基底ケット	$ a'\rangle$ 時間変化しない	$ a', t\rangle_{\text{H}} = \mathcal{U}^\dagger(t)  a'\rangle$

で定義される. このとき観測量の期待値は Schrödinger 描像と Heisenberg 描像とで同じになる:

$$\langle \alpha, t | A | \alpha, t \rangle = \langle \alpha, 0 | \mathcal{U}^\dagger(t) A \mathcal{U}(t) | \alpha, 0 \rangle =_{\text{H}} \langle \alpha | A^{\text{H}}(t) | \alpha \rangle_{\text{H}}.$$

このように Schrödinger 描像では系の状態が時間変化するのに対し, Heisenberg 描像では観測量を表す演算子が時間変化する. そして時間的発展の演算子  $\mathcal{U}(t)$  が Schrödinger 方程式 (35) に従うことから, Heisenberg 描像の観測量 (41) は Heisenberg 方程式

$$\frac{dA^{\text{H}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A^{\text{H}}, H] \quad (42)$$

に従って時間変化することが導かれる (ただし右辺の  $H$  は Schrödinger 描像の Hamilton 演算子と同じである, 導出は下記)\*<sup>22</sup>. さらに Schrödinger 描像の観測量  $A$  に対する固有方程式

$$A |a'\rangle = a' |a'\rangle$$

は Heisenberg 描像の観測量  $A^{\text{H}}(t)$  に対する固有方程式

$$A^{\text{H}}(t) |a', t\rangle_{\text{H}} = a' |a', t\rangle_{\text{H}}, \quad (43)$$

$$|a', t\rangle_{\text{H}} = \mathcal{U}^\dagger(t) |a'\rangle, \quad \therefore {}_{\text{H}} \langle a', t | = \langle a' | \mathcal{U}(t) \quad (44)$$

になる (導出は下記). これは Heisenberg 描像の基底ケットが式 (44) の  $|a', t\rangle_{\text{H}}$  であることを意味する. Heisenberg 描像の基底ケット  $|a', t\rangle_{\text{H}} = \mathcal{U}^\dagger(t) |a'\rangle$  は Schrödinger 描像の状態ケット  $|\alpha, t\rangle = \mathcal{U}(t) |\alpha, 0\rangle$  といわば“逆向きに回転”する. このため状態ケットと基底ケットの内積に他ならない確率 (または確率密度) の振幅は Schrödinger 描像と Heisenberg 描像とで同じ値となることが保証される:

$$\langle a' | \alpha, t \rangle = \langle a' | \mathcal{U}(t) | \alpha, 0 \rangle =_{\text{H}} \langle a', t | \alpha \rangle_{\text{H}}.$$

以上の結果は表 1 のようにまとめられる.

#### 自由粒子, エーレンフェストの定理 (pp.113–116)

[直観的に言って, 粒子の古典的な運動は狭い範囲に局在した波動関数の波束で表されると考えられる. そこで波束の中心の運動を調べよう.] 古典論との対応を調べるには, Heisenberg 描像を用いるのが便利である.

\*<sup>22</sup> Heisenberg 方程式 (42) は時間に陽に依らない量  $A$  に対する古典的な時間発展方程式  $\frac{dA}{dt} = [A, H]_{\text{古典的}}$  に, Dirac の規則  $[, ]_{\text{古典的}} \rightarrow [, ]/i\hbar$  (1.6 節) を適用した形となっている.

Hamilton 演算子  $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$  で記述される, ポテンシャル  $V(\mathbf{x})$  の下での粒子に対し,

Heisenberg 方程式

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p_i, H] = -\frac{\partial}{\partial x_i}V(\mathbf{x}), \quad \frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[x_i, H] = \frac{p_i}{m}, \quad \frac{d^2x_i}{dt^2} = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{dx_i}{dt}, H\right] = \frac{1}{m}\frac{dp_i}{dt} \quad (45)$$

$$\rightarrow \text{演算子の関係} \quad m\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V(\mathbf{x})$$

$$\rightarrow \text{Ehrenfest の定理} \quad m\frac{d^2\langle\mathbf{x}\rangle}{dt^2} = \frac{d\langle\mathbf{p}\rangle}{dt} = -\langle\nabla V(\mathbf{x})\rangle$$

が成り立つ ( $\langle\cdots\rangle$  は Heisenberg 描像の状態ケット (時間変化しない) に関してとった期待値, 導出は下記). Ehrenfest の定理は, 波束の中心  $\langle\mathbf{x}\rangle$  が古典的な Newton の運動方程式に従って運動することを意味している. [よって特に波束が狭い範囲に局在している場合には, 波束は古典的粒子に対応付けられ, 古典力学の法則が再現されることになる\*23.]

## 2.2 節, 式の導出など

### ■Heisenberg 方程式 (42) の導出

$$\begin{aligned} \frac{dA^H}{dt} &= \frac{d\mathcal{U}^\dagger}{dt}A\mathcal{U} + \mathcal{U}^\dagger A\frac{d\mathcal{U}}{dt} \quad (\because \text{式 (41)}: A^H(t) = \mathcal{U}^\dagger(t)A\mathcal{U}(t)) \\ &= \left(-\frac{1}{i\hbar}\mathcal{U}^\dagger H\right)A\mathcal{U} + \mathcal{U}^\dagger A\left(\frac{1}{i\hbar}H\mathcal{U}\right) \quad \left(\because \text{式 (35)}: i\hbar\frac{d\mathcal{U}}{dt} = H\mathcal{U}, \quad -i\hbar\frac{d\mathcal{U}^\dagger}{dt} = \mathcal{U}^\dagger H\right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar}(\mathcal{U}^\dagger H\mathcal{U})(\mathcal{U}^\dagger A\mathcal{U}) + \frac{1}{i\hbar}(\mathcal{U}^\dagger A\mathcal{U})(\mathcal{U}^\dagger H\mathcal{U}) \quad (\because \mathcal{U}\mathcal{U}^\dagger = 1) \\ &= \frac{1}{i\hbar}[A^H, H^H]. \quad (\because \text{式 (41)}: A^H(t) = \mathcal{U}^\dagger(t)A\mathcal{U}(t)) \end{aligned}$$

ここで最右辺において  $H^H \equiv \mathcal{U}^\dagger H\mathcal{U}$  は Heisenberg 描像の Hamilton 演算子であり,  $H$  と  $\mathcal{U}(t) = e^{-iHt/\hbar}$ :(37) は交換するから, これは Schrödinger 描像の Hamilton 演算子  $H$  に等しい:

$$H^H \equiv \mathcal{U}^\dagger H\mathcal{U} = \mathcal{U}^\dagger\mathcal{U}H = H. \quad (\because \mathcal{U}^\dagger\mathcal{U} = 1)$$

よって上式は Heisenberg 方程式 (42):

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

に他ならない.

■Heisenberg 描像の観測量  $A^H(t)$  に対する固有方程式 (43) の導出 Schrödinger 描像の観測量  $A$  に対する固有方程式 (1):

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle$$

\*23 ただし一般に局在した波束も時間が経てば, 拡がっていくものである [3, p.150]. 例えば自由粒子 ( $V(\mathbf{x}) = 0$ ) に対しては

$$x_i(t) = x_i(0) + \frac{p_i(0)}{m}t, \quad \therefore [x_i(t), x_i(0)] = \left[\frac{p_i(0)}{m}t, x_i(0)\right] = -\frac{i\hbar t}{m}$$

となるため, 不確定関係

$$\langle(\Delta x_i(t))^2\rangle\langle(\Delta x_i(0))^2\rangle \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}$$

が成立する (以上,  $i$  で和をとらない). これは粒子がたとえ初期時刻  $t = 0$  で局在していたとしても, 時間が経つにつれて位置は不確定になることを意味している.



に両辺左から  $\mathcal{U}^\dagger(t)$  をかけ、 $\mathcal{U}\mathcal{U}^\dagger = 1$  に注意すると

$$\{\mathcal{U}^\dagger(t)A\mathcal{U}(t)\}\{\mathcal{U}^\dagger(t)|a'\rangle\} = a'\{\mathcal{U}^\dagger(t)|a'\rangle\}, \quad \therefore A^H(t)|a',t\rangle_H = a'|a',t\rangle_H : (43),$$

$$A^H(t) \equiv \mathcal{U}^\dagger(t)A\mathcal{U}(t) : (41), \quad |a',t\rangle_H \equiv \mathcal{U}^\dagger(t)|a'\rangle : (44)$$

が得られる.

■粒子の位置と運動量に対する Heisenberg 方程式 (45) の導出 [Heisenberg 描像の演算子  $x_i(t), p_i(t)$  もまた正準交換関係  $[x_i(t), p_j(t)] = i\hbar_{ij}$ , etc. を満たすことから (本稿次節で補足),]  $F(\mathbf{p})$  と  $G(\mathbf{x})$  をそれぞれ  $p_j$  と  $x_j$  の級数に展開できる関数として, 公式

$$[x_i, F(\mathbf{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_i}, \quad (2.2.23a)$$

$$[p_i, G(\mathbf{x})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_i} \quad (2.2.23b)$$

が導かれる [導出は本稿次節]. Hamiltonian  $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$  で記述される粒子を考えよう. 正準交換関係, あるいはその帰結としての公式 (2.2.23a) より,  $x_i$  に対する Heisenberg 方程式は

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[x_i, H] = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2m}[x_i, p_j^2] = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2m} \times 2i\hbar p_i = \frac{p_i}{m}$$

となる. 次に公式 (2.2.23b) を利用して  $p_i$  に対する Heisenberg 方程式を書き下すと,

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p_i, H] = \frac{1}{i\hbar}[p_i, V(\mathbf{x})] = -\frac{\partial}{\partial x_i} V(\mathbf{x}).$$

最後にこれら 2 式から

$$\frac{d^2x_i}{dt^2} = \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{dx_i}{dt}, H \right] = \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{p_i}{m}, H \right] = \frac{1}{m} \frac{dp_i}{dt}$$

が得られる.

## 2.2 について

■式 (2.2.7) について 最後の等号は

$$[\mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}', \mathbf{x}] = \sum_k dx'_k [p_k, \mathbf{x}] = \sum_k dx'_k (-i\hbar \hat{\mathbf{x}}_k) = -i\hbar d\mathbf{x}'$$

による.

$$\underbrace{[\mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}', \mathbf{x}]}_{3 \text{ 成分}} \neq \underbrace{d\mathbf{x}' \cdot [\mathbf{p}, \mathbf{x}]}_{1 \text{ 成分}}$$

に注意せよ.

■式 (2.2.8) 「どちらのアプローチをとっても  $\mathbf{x}$  の期待値に関しては同じ結論  $\langle \mathbf{x} \rangle \rightarrow \langle \mathbf{x} \rangle + \langle d\mathbf{x} \rangle$ : (2.2.8) が導けることを, 読者の演習問題として残しておく」(p.109) について, 第 2 のアプローチに対してこれが成り立

つことは式 (2.2.7) から明らかである。そこで第 1 のアプローチ (2.2.6):  $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle$  に対してこれを確認する。

$$\begin{aligned}\mathcal{T}(d\mathbf{x}')|\alpha\rangle &= \int d^3x' |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle \\ \stackrel{\text{DC}}{\iff} \langle\alpha|\mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x}') &= \int d^3x'' \langle\mathbf{x}''|\alpha\rangle^* \langle\mathbf{x}'' + d\mathbf{x}'|, \\ \therefore \langle\alpha|\mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x}')\mathcal{T}(d\mathbf{x}')|\alpha\rangle &= \int d^3x' \int d^3x'' \langle\alpha|\mathbf{x}''\rangle \underbrace{\langle\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'|}_{\text{固有値}} \langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle \underbrace{\langle\mathbf{x}'' + d\mathbf{x}'|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle}_{\delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'')} \\ &= \langle\alpha|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'|\alpha\rangle = \langle\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'|.\end{aligned}$$

■時間的発展の演算子の具体的な表式 「 $A^{(S)}$  はあからさまに時間に依存しないと仮定する」 (p.111, 1.8,9) について, 特に Hamilton 演算子もあからさまに時間に依存しないと仮定すると, 以降に現れる時間的発展の演算子  $\mathcal{U}(t, t_0)$  は式 (2.1.28):  $\mathcal{U}(t, t_0) = \exp[-iH(t - t_0)/\hbar]$  であることになる。

■Heisenberg 方程式の導出 (2.2.15) について 演算子の微分に対しても Leibniz ルールを適用している。

■交換関係の不変性 一般に状態  $|\Psi\rangle$  と演算子  $O$  のユニタリ変換

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle, \quad O \rightarrow O' = UOU^\dagger$$

は交換関係  $[A, B] = C$  と振幅  $\langle\Phi|\Psi\rangle$  を不変に留める [4, p.36].

$$[A', B'] = U[A, B]U^\dagger = UCU^\dagger = C', \quad \langle\Phi'|\Psi'\rangle \langle\Phi|U^\dagger U|\Psi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle.$$

(同じ理由で反交換関係も不変である。) このため例えば Heisenberg 描像の演算子  $x_i(t), p_i(t)$  もまた, Schrödinger 描像の演算子  $x_i, p_i$  と同様, 正準交換関係  $[x_i(t), p_j(t)] = i\hbar\delta_{ij}$ , etc. を満たすことになる。

■公式 (2.2.23a,b) について 公式 (2.2.23a,b) を思い出すには,

$$[x_i, F(\mathbf{p})]_{\text{古典的}} = \frac{\partial F(\mathbf{p})}{\partial p_i}, \quad [p_i, G(\mathbf{x})]_{\text{古典的}} = -\frac{\partial G(\mathbf{x})}{\partial x_i}$$

に Dirac の規則 (2.2.22):

$$[\quad, \quad]_{\text{古典的}} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[\quad, \quad]$$

を適用すれば良い。

公式 (2.2.23a,b) の証明に用いる物理的前提は正準交換関係だけである。証明では次の 2 点に注意する。

- $F(\mathbf{p})$  は第  $i$  成分  $p_i$  についてだけ展開すれば良い。
- 「(1.6.50e) をくりかえし適用する」 (p.114, 1.2) 計算は, 以下のように一般的な公式の形に述べられる。  
 $[A, B^n]$  から  $n - 1$  個の  $B$  を交換子の左右に出すと,  
 あらゆる  $B^{n-k-1}[A, B]B^k$  ( $k = 0, \dots, n - 1$ ) の和になる :

$$\begin{aligned}[A, B^n] &= B[A, B^{n-1}] + [A, B]B^{n-1} = B^2[A, B^{n-2}]B + B[A, B]B^{n-2} + [A, B]B^{n-1} = \dots \\ &= B^{n-1}[A, B] + B^{n-2}[A, B]B + \dots + B[A, B]B^{n-2} + [A, B]B^{n-1}.\end{aligned}\tag{46}$$

さて，公式 (2.2.23a,b) の証明に入る．以下， $i$  について和をとらない．

$$\begin{aligned}
 [x_i, F(\mathbf{p})] &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} [x_i, p_i^n (\partial^n / \partial p_i^n) F(p_i = 0)] \quad \leftarrow \quad n=0 \text{ の項は } [x_i, \text{const}] = 0 \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{p_i^n}{n!} \underbrace{[x_i, (\partial^n / \partial p_i^n) F(p_i = 0)]}_{=0} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} [x_i, p_i^n] (\partial^n / \partial p_i^n) F(p_i = 0). \quad (47)
 \end{aligned}$$

ここで公式 (46) より  $[x_i, p_i^n] = ni\hbar p_i^{n-1}$  であり，これを式 (47) に代入し

$$[x_i, F(\mathbf{p})] = i\hbar \sum_{n=1}^{\infty} p_i^{n-1} \frac{(\partial^n / \partial p_i^n) F(p_i = 0)}{(n-1)!} = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_i} \quad (2.2.23a)$$

を得る．

式 (2.2.23b) を示すには，式 (47) で  $\mathbf{x}$  と  $\mathbf{p}$  を入れ替え  $F \rightarrow G$  と置き換えた式が成り立つことに注意し，そこに公式 (46) より得られる  $[p_i, x_j^n] = -ni\hbar x_i^n$  を代入すれば良い．

■ Ehrenfest の定理 (2.2.36) の解釈 Ehrenfest の定理 (2.2.36) は波動関数が鋭い波束を成すという仮定を用いずに導かれている．よって「波束の中心は  $V(\mathbf{x})$  の下で当然，古典的粒子のように運動する」(p.116) ことは，波束が鋭くない場合にも成り立つものと考えられる．

これと同じ事情を別の角度から敷衍しよう．2.4 節では古典的な極限  $\hbar \rightarrow 0$  において，波動関数の位相の微分が古典的な運動量  $\nabla S = \mathbf{p}_{\text{古典}}$  となり，ある種の速度 “ $\mathbf{v}$ ” =  $\mathbf{p}/m$  を定義すると，確率の流れ (61):  $\mathbf{j} = \rho \nabla S / m$  は流れの密度としてもっともな式  $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$  で表せることが示される．これは確率の密度分布の (流体としての) 運動が，古典的な速度 “ $\mathbf{v}$ ” で行われることを意味する [1, p.129]．ただし古典力学の法則に従う軌道に沿った運動を得るには，さらに初期時刻の分布が空間的に局在した波束となっていることが必要である [1, pp.47–48]．

■ 式 (2.2.39) について

$$A^{(S)} |a'\rangle = a' |a'\rangle \Rightarrow A^{(H)}(0) |a'\rangle = a' |a'\rangle \Rightarrow \mathcal{U}^\dagger A^{(H)}(0) \underbrace{\mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger}_1 |a'\rangle = a' \mathcal{U}^\dagger |a'\rangle$$

とせずとも，つまり「2つの表示が一致する  $t=0$  で (2.2.37) を用いれば」(p.117) と断らなくても，式 (2.2.10) を用いて次のようにできると考えられる．すなわち  $A^{(S)} |a'\rangle = a' |a'\rangle$  の両辺に左から  $\mathcal{U}^\dagger$  をかけて

$$\mathcal{U}^\dagger A^{(S)} (\mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger) |a'\rangle = a' \mathcal{U}^\dagger |a'\rangle, \quad \therefore A^{(H)} \mathcal{U}^\dagger |a'\rangle = a' \mathcal{U}^\dagger |a'\rangle.$$

■ “符号の異なる Schrödinger 方程式” (2.2.42) 式 (2.2.42):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a', t\rangle_{\text{H}} = -H |a', t\rangle_{\text{H}}$$

は，時間的発展の演算子に対する Schrödinger 方程式 (2.1.25) の両辺 Hermite 共役をとった式

$$-i\hbar \frac{\partial \mathcal{U}^\dagger}{\partial t} = \mathcal{U}^\dagger H = H \mathcal{U}^\dagger$$

の両辺に右から  $|a'\rangle$  をかけると得られる．

■状態ケットと基底ケットのなす角の“コサイン” 「模式図的にいうならば状態ケットと基底ケットのなす角の“コサイン”は状態ケットを反時計廻りに回しても、基底ケットを時計廻りに回しても同じなのである」(p.118)について、ケットベクトルは矢印のような幾何学的意味を持たないのを承知で敢えてこの「模式図」を描くと図15のようになる。

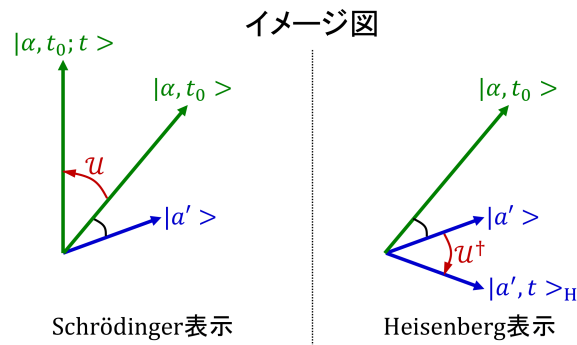


図15 状態ケットと基底ケットのなす角の“コサイン”

## 2.3 調和振動子

エネルギー固有ケットとエネルギー固有値 (pp.120–127)

Hamiltonian

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

によって記述される1次元調和振動子を考える\*24。量子論では一般化座標  $q$  と一般化運動量  $p$  を演算子として正準交換関係  $[q, p] = i\hbar$  が課せられる。これは新たに定義した演算子

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega q + ip), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega q - ip) \quad (48)$$

に対する交換関係

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (49)$$

を含意する(導出は下記)。これを調和振動子の交換関係と呼ぶ。

演算子  $a, a^\dagger$  に対して個数演算子  $N \equiv a^\dagger a$  を定義すると、Hamiltonian は

$$H = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right) \quad (50)$$

と書き直される(導出は下記)。よって  $N$  と  $H$  は交換するから、 $N$  の固有値  $n$  に属する、 $H$  との同時固有ケット  $|n\rangle$  が存在する。このとき  $a, a^\dagger$  は  $|n\rangle$  に作用して、それぞれ固有値を1だけ減少、増加させた  $N$  の固有ケットを作る：

$$a |n\rangle \propto |n-1\rangle, \quad a^\dagger |n\rangle \propto |n+1\rangle. \quad (51)$$

\*24 これが調和振動子の適正な Hamiltonian であることは、初等的によく知られている。実際これを Hamilton の正準方程式に代入すれば、運動量の定義式  $p = m\dot{q}$  と調和振動子に対する Newton の運動方程式  $\dot{p} = -m\omega^2 q$  が得られる。

このことから  $a$  は消滅演算子,  $a^\dagger$  は生成演算子と呼ばれる. さらに任意のケット  $|\alpha\rangle$  に対して  $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$  が成り立つという要請 (式 (1.2.13)) から, 固有値  $n$  はゼロ以上の整数であることが結論される. そして固有値  $n = 0$  に属する固有ケット  $|0\rangle$  に対して

$$a|0\rangle = 0$$

となる. (以上の導出は下記.)

$|0\rangle$  を  $\langle 0|0\rangle = 1$  と規格化された基底状態 (真空状態) として, これに  $a^\dagger$  を逐次作用させると, 規格化された  $N$  の一連の固有状態

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle \quad (52)$$

が得られる. 対応するエネルギー固有値は  $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$  である.

### ■行列要素

$$\begin{cases} a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1} \\ \langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} \end{cases}$$

$$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n'|(a + a^\dagger)|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}), \quad (2.3.25a)$$

$$\langle n'|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle n'|(-a + a^\dagger)|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}). \quad (2.3.25b)$$

### ■位置空間でのエネルギー固有関数 固有関数 $\langle x'|n\rangle$ に対する微分方程式

$$0 = \langle x'|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left\langle x' \left| x + \frac{ip}{m\omega} \right| 0 \right\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x' + x_0^2 \frac{d}{dx'} \right) \langle x'|0\rangle, \quad x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},$$

(式 (32) :  $\langle x'|p|\alpha\rangle = -i\hbar\partial_{x'} \langle x'|\alpha\rangle$  を用いた)

$$\langle x'|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0^n}} \left( x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right)^n \langle x'|0\rangle \quad (2.3.32)$$

を作ると [上式 (2.3.32) の確認は本稿次節]\*25, 固有関数

$$\langle x'|0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{x_0}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x'}{x_0} \right)^2 \right], \quad (2.3.30)$$

$$\langle x'|n\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n! x_0^{n+1/2}}} \left( x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right)^n \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x'}{x_0} \right)^2 \right]$$

が得られる.

### ■不確定関係

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \begin{cases} \hbar^2/4 & \text{(基底状態, 波動関数は Gauss 型)} \\ (n + \frac{1}{2})^2 \hbar^2 & \text{(励起状態 (} n \neq 0 \text{))} \end{cases} \quad (2.3.39)$$

$$(2.3.40)$$

基底状態の式 (2.3.39) の導出は下記, 励起状態の式 (2.3.40) の導出は本稿次節.

\*25 この手法は式 (1.7.27),(1.7.28) において  $\langle x'|p|p'\rangle$  を計算して  $\langle x'|p'\rangle$  についての微分方程式を作ったのに似ている.

振動子の時間的发展 (pp.127-131)

Heisenberg 描像に移ろう。

Heisenberg 方程式 :

$$\frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x, \quad \frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \quad (\text{式 (45)}) \quad (2.3.41)$$

$$\rightarrow a(t) = a(0)e^{-i\omega t}, \quad a^\dagger(t) = a^\dagger(0)e^{i\omega t} \quad (2.3.43)$$

$\rightarrow x(t), p(t)$  は “振動している” :

$$x(t) = x(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t, \quad p(t) = -m\omega x(0) \sin \omega t + p(0) \cos \omega t. \quad (2.3.45)$$

(上式 (2.3.43), (2.3.54) の導出は下記. )

同じ結論は任意の (Hermite) 演算子  $A, G$  と実パラメーター  $\lambda$  に対して, ベーカー・ハウズドルフの補助定理

$$e^{i\lambda G} A e^{-i\lambda G} = A + i\lambda [G, A] + \frac{(i\lambda)^2}{2!} [G, [G, A]] + \dots + \frac{(i\lambda)^n}{n!} [G, [G, \dots [G, A] \dots]] + \dots$$

が成り立つことを用い [導出は本稿次節],

$$\begin{aligned} x(t) &= e^{iHt/\hbar} x(0) e^{-iHt/\hbar} = x(0) + \frac{it}{\hbar} [H, x(0)] + \dots \\ &= x(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t \end{aligned} \quad (2.3.50)$$

としても得られる [本稿次節で計算を補足].

■コヒーレント状態 定常状態における観測量の期待値は時間変化しない (2.1 節). 実際, エネルギー固有状態  $|n\rangle$  に対して

$$\langle x(t) \rangle = \langle n|x(t)|n \rangle = 0, \quad \langle p(t) \rangle = \langle n|p(t)|n \rangle = 0$$

であり, 期待値  $\langle x(t) \rangle, \langle p(t) \rangle$  が振動する状態は少なくとも, エネルギー固有状態の重ね合せでなければならない. 実は古典的振動子に対応して, 波束が前後に振動して形が拡がらない状態は,  $a$  の固有状態として定義されるコヒーレント状態  $|\lambda\rangle$  で与えられる [この点に関して, 本稿次節で章末問題 18 を解く].

## 2.3 節, 式の導出など

■調和振動子の交換関係 (49) の導出 正準交換関係  $[q, p] = i\hbar$  より

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2\hbar m\omega} [m\omega q + ip, m\omega q - ip] = \frac{1}{2\hbar m\omega} (-im\omega [q, p] + im\omega [p, q]) = \frac{1}{2\hbar m\omega} \cdot 2 \cdot (-im\omega) [q, p] = 1 : (49).$$

■調和振動子に対する Hamiltonian の表式 (50) の導出 演算子  $a, a^\dagger$  の式 (48) を  $q, p$  について逆に解くと

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

なので, 調和振動子の Hamiltonian は

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 = \frac{1}{4} \hbar\omega \{ -(-a + a^\dagger)^2 + (a + a^\dagger)^2 \} = \frac{1}{2} \hbar\omega (aa^\dagger + a^\dagger a)$$

と計算される。交換関係 (49): を用いて最右辺において  $aa^\dagger = a^\dagger a + 1 =$  と書き換えると、式 (50):

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

を得る。

■交換関係 (49):  $[a, a^\dagger] = 1$  の帰結  $a, a^\dagger$  は交換関係 (49):  $[a, a^\dagger] = 1$  を課すと式 (51):

$$a|n\rangle \propto |n-1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle$$

を満たす消滅、生成演算子となることを示す。交換関係 (49) および恒等式 (27) を用いると

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a] a = -a \quad (53)$$

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger] a = a^\dagger \quad (54)$$

が導かれる。ここから

$$\begin{aligned} N(a|n\rangle) &= (aN + [N, a])|n\rangle = a(N-1)|n\rangle = (n-1)(a|n\rangle), \\ N(a^\dagger|n\rangle) &= (a^\dagger N + [N, a^\dagger])|n\rangle = a^\dagger(N+1)|n\rangle = (n+1)(a^\dagger|n\rangle) \end{aligned}$$

を得る。これらは  $a|n\rangle, a^\dagger|n\rangle$  がそれぞれ固有値  $n-1, n+1$  に属する  $N$  の固有ケットであることを意味する。よって  $c_\pm$  を数定数として

$$a|n\rangle = c_-|n-1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle = c_+|n+1\rangle$$

と書ける。これは式 (51) に他ならない。

次に固有値  $n$  がゼロ以上の整数に限られることを示す。まず上式の係数  $c_\pm$  を定めるに当たり、各固有値  $n$  に対する固有ケット  $|n\rangle$  が  $\langle n|n\rangle = 1$  と規格化されていることを要求しよう。すると

$$\begin{aligned} |c_-|^2 &= (\langle n-1|c_-^*) \cdot (c_-|n-1\rangle) = (\langle n|a^\dagger) \cdot (a|n\rangle) \\ &= n \langle n|n\rangle = n, \\ |c_+|^2 &= (\langle n+1|c_+^*) \cdot (c_+|n+1\rangle) = (\langle n|a) \cdot (a^\dagger|n\rangle) = \langle n|a^\dagger a + [a, a^\dagger]|n\rangle \\ &= \langle n|N+1|n\rangle = (n+1) \langle n|n\rangle = n+1 \end{aligned}$$

を得る。係数  $c_\pm$  の位相は物理的に意味がないから  $c_\pm$  を実の正数にとって良く、このとき  $c_- = \sqrt{n}, c_+ = \sqrt{n+1}$  なので

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (55)$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (56)$$

となる。式 (55) によれば、ある固有ケット  $|n\rangle$  から初めて  $N$  の固有ケットに消滅演算子  $a$  をかける操作を繰り返すと、固有ケット

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a|n-1\rangle = \sqrt{n-1}|n-2\rangle, \quad \dots$$

が得られることになる。ゼロの整数  $n$  から始めればいずれ

$$a|1\rangle = |0\rangle, \quad a|0\rangle = 0$$

が得られ、 $n = 0$  よりも小さい固有値  $n$  を持つ固有ケット  $|n\rangle$  が作られることはない。一方、非整数の  $n$  から始めれば、負の値をとるいくらでも小さい固有値  $n$  を持つ固有ケット  $|n\rangle$  が作られることになる。ところで任意のケット  $|\alpha\rangle$  に対して  $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$  が成り立つという要請 (式 (1.2.13)) から、固有値  $n$  は

$$0 \leq (\langle n|a^\dagger) \cdot (a|n\rangle) = \langle n|N|n\rangle = n$$

を満たさなければならない。以上より固有値  $n$  として許されるのはゼロ以上の整数のみである。なお固有ケット (52):  $|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{n!}|0\rangle$  が適正に規格化されていることは、上式 (56) から理解できる。

■基底状態の不確定関係 (2.3.39) の導出 (とその周辺) まず基底状態  $|0\rangle$  での  $x^2$  と  $p^2$  の期待値は

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle 0|(a^2 + a^{\dagger 2} + a^\dagger a + a a^\dagger)|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle 0|a^\dagger a|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{x_0^2}{2},$$

同様に  $\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}$

と計算される。これを運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの期待値として書けば

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{\hbar}{4} = \frac{\langle H \rangle}{2}, \quad \left\langle \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{4} = \frac{\langle H \rangle}{2} \quad (2.3.36)$$

であり、ビリアル定理から期待されるようにこれらは等しくなっている [本稿次節で補足]。また行列要素の式 (2.3.25a,b) より、任意の状態  $|n\rangle$  における  $x$  と  $p$  の期待値は

$$\langle x \rangle = 0, \quad \langle p \rangle = 0$$

となる。以上より

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad \langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}$$

となるので、不確定関係 (2.3.39):  $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \hbar^2/4$  を得る。基底状態の波動関数が Gauss 型であることから期待されるように、不確定さの積  $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle$  は最小となっている。

■Heisenberg 演算子の式 (2.3.43), (2.3.45) の導出 式 (2.3.41) より、 $a$  と  $a^\dagger$  に対する式

$$\frac{da}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \frac{p}{m} - i\omega x \right) = -i\omega a, \quad \frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger \quad (2.3.42)$$

を得る。この解は式 (2.3.43):  $a(t) = a(0)e^{-i\omega t}$ ,  $a^\dagger(t) = a^\dagger(0)e^{i\omega t}$  で与えられる。

式 (2.3.43) を  $x$  と  $p$  で表すと

$$\begin{aligned} x(t) + \frac{ip(t)}{m\omega} &= \left( x(0) + \frac{ip(0)}{m\omega} \right) e^{-i\omega t}, \\ x(t) - \frac{ip(t)}{m\omega} &= \left( x(0) - \frac{ip(0)}{m\omega} \right) e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (2.3.44)$$

となる。両辺の Hermite 的部分と反 Hermite 的部分をそれぞれ等置すると [本稿次節で補足]、 $x$  と  $p$  の式 (2.3.54) が得られる。

## 2.3 について

■調和振動子に対する次元解析 演算子の関係式についても、両辺の (固有値の) 次元が等しくなっていないなければならない。  $a, a^\dagger$  の定義式 (2.3.2), およびこれを  $x, p$  について解いた式 (2.3.24) を “次元解析” すると、図 16 のように次元の正しい式になっていることが分かる。



$$1 \rightarrow a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x + i \frac{p}{m\omega} \right) \quad (\text{長さ})$$

$$\frac{(\text{運動量})/(\text{長さ})}{(\text{運動量}) \cdot (\text{長さ})} = (\text{長さ})^{-2}$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger)$$

$$p = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-a + a^\dagger)$$

$$[(m\omega)\hbar] = \left( \frac{\text{運動量}}{\text{長さ}} \right) \cdot (\text{運動量} \cdot \text{長さ}) = (\text{運動量})^2$$

または

$$[m] \cdot (\text{エネルギー}) = \left[ m \cdot \frac{p^2}{2m} \right] = (\text{運動量})^2 (= [\sqrt{2mE}])$$

図 16 調和振動子に対する次元解析

■ 「 $N$  は  $H$  と同時に対角化できる」 (式 (2.3.6)1 行下)  $H = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right)$  は  $N$  の 1 次式なので  $[H, N] = 0$  だから,  $N$  と  $H$  の同時固有ケット  $|n\rangle$  を p.124 のように構成できると分かる. そして p.39 の定理より 「 $N$  は  $H$  と同時に対角化できる」 (式 (2.3.6)1 行下).

■ 「 $x$  と  $p$  は,  $N$  と交換しないのであるからこれは当然である」 (p.125, l.1,2) 命題の裏は真とは限らないものの, p.39 の定理により, 一般に  $[A, B] \neq 0$  のとき  $\langle a''|B|a' \rangle$  が対角型になることは期待できない. これを踏まえると,  $a, a^\dagger$  の  $n$  表示が対角型でないこと

$$\langle n'|a|n \rangle = \sqrt{n} \delta_{n',n-1}, \quad \langle n'|a^\dagger|n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} : (2.3.23)$$

は,  $a, a^\dagger$  が  $N$  と交換しないこと

$$[N, a] = -a : (2.3.10), \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger : (2.3.11)$$

と関係していることが分かる.

さらに「ここで用いている  $N$  表示では,  $x$  も  $p$  も対角型になっていないことに注意しよう.  $a$  や  $a^\dagger$  と同じように  $x$  と  $p$  は,  $N$  と交換しないのであるからこれは当然である」 (pp.124-125) について,  $x, p$  の  $N$  表示が対角型でないこと (2.3.25a,b) は,  $x, p$  が  $N$  と交換しないこと

$$[N, x] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( \underbrace{[N, a]}_{-a} + \underbrace{[N, a^\dagger]}_{a^\dagger} \right) \neq 0, \quad [N, p] = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left( -\underbrace{[N, a]}_{-a} + \underbrace{[N, a^\dagger]}_{a^\dagger} \right) \neq 0$$

と関係している.

■ 式 (2.3.13), (2.3.17) における規格化定数の決定 式 (2.3.14) は  $a|n\rangle = c|n-1\rangle$ : (2.3.13) に  $\langle n|a^\dagger = c^* \langle n-1|$  を左から辺々かけて得る. 同様に  $a^\dagger|n\rangle = c'|n+1\rangle$  に左から  $\langle n|a = \langle n+1|c'^*$  を辺々かけ,

$$\langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|a^\dagger a + [a, a^\dagger]|n\rangle = \langle n|N+1|n\rangle = n+1$$

を用いて式 (2.3.17):  $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$  を得る.

■式 (2.3.16), (2.3.17) について

$$\begin{cases} a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle : & a^\dagger \text{ は生成演算子} \\ a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle : & a \text{ は消滅演算子} \end{cases}$$

において、係数が  $\sqrt{n}$  か  $\sqrt{n+1}$  かは  $a|1\rangle = |0\rangle, a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$  から思い出せる。

■固有関数  $\langle x'|n\rangle$  の式 (2.3.32) 式 (2.3.32):

$$\langle x'|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0^n}} \left( x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right)^n \langle x'|0\rangle$$

を数学的帰納法にて証明する。まず、これは  $n=0$  に対して成立する (式 (2.3.30))。次にこれがある  $n$  に対して成り立つと仮定すると、

$$\begin{aligned} \langle x'|n+1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n+1}} \langle x'|a^\dagger|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \left\langle x' \left| \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left( x - i\frac{x_0^2}{\hbar} p \right) \right| n \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2(n+1)x_0}} \left\{ x' \langle x'|n\rangle - i\frac{x_0^2}{\hbar} \frac{d}{dx'} \langle x'|n\rangle \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2(n+1)x_0}} \left( x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right) \langle x'|n\rangle \\ &= (\text{上式右辺で } n \rightarrow n+1 \text{ としたもの}) \quad (\text{数学的帰納法の仮定}) \end{aligned}$$

となるから示された。

なお、式 (2.3.32) は

$$\langle x'|n\rangle = \left\langle x' \left| \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left( x - i\frac{x_0^2}{\hbar} p \right) \right| 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0^n}} \left\{ x - i\frac{x_0^2}{\hbar} \left( -i\hbar \frac{d}{dx'} \right) \right\} \langle x'|0\rangle$$

に書き換えられる。ただしこちらの書き換えられた表式を数学的帰納法にて証明するのは、かえって煩雑になる。

ここでエネルギー固有関数 (2.3.32) が波動方程式を解いて得られる解

$$\psi_E = (2^n n!)^{-1/2} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \quad (\text{A.4.3})$$

(p.346,  $H_n(\xi) \equiv (-1)^n e^{\xi^2} \left( \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2}$  は Hermite 多項式) に一致していることを確かめる。それには次式が有用である。

$$x_0^{2n} e^{x'^2/2x_0^2} \left( -\frac{d}{dx'} \right)^n e^{-x'^2/2x_0^2} = \left( x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right)^n. \quad (57)$$

これは演算子の関係であり、左辺の  $\left( -\frac{d}{dx'} \right)^n$  は  $e^{-x'^2/2x_0^2}$  の右隣に来る関数にも作用する。この点に注意しつつ、上式 (57) を数学的帰納法にて確かめる。まず式 (57) は  $n=0$  に対して成立している。次に式 (57) が

ある  $n$  に対して成り立つと仮定すると,

$$\begin{aligned}
 & x_0^{2(n+1)} e^{x'^2/2x_0^2} \left(-\frac{d}{dx'}\right)^{n+1} e^{-x'^2/2x_0^2} \\
 &= x_0^{2(n+1)} e^{x'^2/2x_0^2} \left(-\frac{d}{dx'}\right)^n \left(\frac{x'}{x_0^2} e^{-x'^2/2x_0^2} - e^{-x'^2/2x_0^2} \frac{d}{dx'}\right) \\
 &= x_0^2 \left(\frac{x'}{x_0^2} - \frac{d}{dx'}\right) \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'}\right)^n \quad (\text{数学的帰納法の仮定}) \\
 &= \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'}\right)^{n+1}
 \end{aligned}$$

より式 (57) で  $n \rightarrow n+1$  と置き換えてた式が成り立つ。以上で式 (57) が示された。

さて、式 (57) を用いると

$$\begin{aligned}
 ((2.3.32) \text{ 右辺}) &= \left(\frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}}\right) \left(\frac{1}{x_0^{n+1/2}}\right) x_0^{2n} e^{x'^2/2x_0^2} \left(-\frac{d}{dx'}\right)^n e^{-x'^2/2x_0^2} e^{-x'^2/2x_0^2} \quad (\because \text{式 (57)}) \\
 &= \left(\frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}}\right) x_0^{n-1/2} e^{\xi^2} e^{-\xi^2/2} (-1)^n \frac{1}{x_0^n} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2} \quad (\xi \equiv x/x_0) \\
 &= \left(\frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}}\right) x_0^{-1/2} e^{-\xi^2/2} \left\{(-1)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2}\right\} \\
 &= (\text{式 (A.4.3) 右辺}) : \quad \text{ロドリグ公式.}
 \end{aligned}$$

■基底状態に関する期待値 (2.3.36) 式 (2.3.36) 第 2 式の最後の等号では

$$\langle H \rangle = \hbar\omega \left\langle 0 \left| a^\dagger a + \frac{1}{2} \right| 0 \right\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

を用いる。

「ビリアル定理から期待される通りである」(p.126 下から 4 行目) について補足する。非相対論的力学において、以下の条件

- 系が空間の限られた領域のなかで、有限の速さで運動する。
- ポテンシャル・エネルギー  $U$  がすべての位置ベクトル  $\mathbf{r}_a$  の  $k$  次の同次関数である:

$$U(\{\lambda \mathbf{r}_a\}) = \lambda^k U(\{\mathbf{r}_a\}).$$

が満たされるとき、運動エネルギー  $T$  とポテンシャル・エネルギー  $U$  それぞれの時間平均  $\bar{T}, \bar{U}$  のあいだに

$$2\bar{T} = k\bar{U}$$

の関係が成り立つ (ビリアル定理) [7, pp.27–28]。調和振動子に対して  $k = 2$  である。

■励起状態  $n \neq 0$  での不確定関係 (2.3.40) まず,

$$\langle n|a|n \rangle = \sqrt{n} \langle n|n-1 \rangle = 0, \quad \langle n|a^\dagger|n \rangle = \sqrt{n+1} \langle n|n+1 \rangle = 0$$

より  $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$  が「励起状態に対しても成り立つ」(p.126 の 1 番下の行). 調和振動子は原点  $x = 0$  に関する対称性を持つことを考えると, これは自然な結果と言える. 次に

$$\begin{aligned}\langle n|a^2|n \rangle &\propto \langle n+2|n \rangle = 0, \\ \langle n|a^{\dagger 2}|n \rangle &\propto \langle n|n+2 \rangle = 0, \\ \langle n|aa^{\dagger}|n \rangle &= (\sqrt{n+1} \langle n+1|) \cdot (|n+1 \rangle \sqrt{n+1}) = n+1, \\ \langle n|a^{\dagger}a|n \rangle &= \langle n|N|n \rangle = n\end{aligned}$$

を用いて

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1), \quad \langle p^2 \rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1), \quad \therefore \langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2 : (2.3.40)$$

を得る.

■  $a$  に対する微分方程式 (2.3.42) について Heisenberg 描像の演算子  $a(t), a^{\dagger}(t)$  もまた調和振動子の交換関係 (49) を, 従って式 (53):  $[N, a] = -a$  を満たすことに注意して, 直接, Heisenberg 方程式を書き下し,

$$i\hbar \frac{da}{dt} = [a, H] = \hbar\omega[a, N] = \hbar\omega a, \quad \therefore \frac{da(t)}{dt} = -i\omega a(t) : (2.3.42)$$

と導くこともできる.

■  $x(t), p(t)$  の式 (2.3.45) 式 (2.3.44) の 2 式を順に (A),(B) とする.  $\frac{(A)+(B)}{2}$  を作ると式 (2.3.45a) が,  $\frac{(A)-(B)}{2i/m\omega}$  を作ると式 (2.3.45b) が得られる.

一方 (A)  $\Leftrightarrow$  (B) に注意して例えば (A) を考えると

$$\begin{aligned}((A) \text{ 右辺}) &= \underbrace{x(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t}_{\text{Hermite 的部分}} + i \underbrace{\left(-x(0) \sin \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \cos \omega t\right)}_{\text{Hermite 交代的部分}}, \\ ((A) \text{ 右辺}) &= \underbrace{x(t)}_{\text{Hermite 的部分}} + \underbrace{i \frac{p(t)}{m\omega}}_{\text{Hermite 交代的部分}}\end{aligned}$$

となるから「両辺のエルミートの部分, エルミート交代的部分をそれぞれ等しいと」(式 (2.3.44)1 行下) しても式 (2.3.45b) を得る. 式 (2.3.45) のように  $a(0), a^{\dagger}(0)$  ではなく  $x(0), p(0)$  を用いて  $x(t), p(t)$  を表すには, この方が容易である.

古典力学において調和振動子の時間発展が式 (2.3.45a):

$$x(t) = x(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t$$

で与えられることはよく知られており, ここから  $p(t) = m\dot{x}(t)$  として運動量の式 (2.3.45b) を得る.

■ ベーカー・ハウドルフの補助定理 「ベーカー・ハウドルフの補助定理として知られるこの公式の証明は, 演習問題に残しておく」(p.129, 1.9,10) について,  $e^{i\lambda G} = 1 + i\lambda G + \dots$  を  $Ae^{-i\lambda G} = A - i\lambda AG - \dots$

に左からかけたときに現れる項を以下に書き出す。

1	$i\lambda G$	$\dots$	$\frac{(i\lambda)^{N-k}}{(N-k)!} G^{N-k}$	$\dots$	$\dots$	$\frac{(i\lambda)^N}{N!} G^N$	$\dots$
$A$							
$-i\lambda AG$							
$\vdots$							
$\frac{(-i\lambda)^k}{k!} AG^k$							
$\vdots$							
$\vdots$							
$\frac{(-i\lambda)^N}{N!} AG^N$							
$\vdots$							

上の関式において青い項  $\frac{(i\lambda)^N}{N!} \sum_{k=0}^N {}_N C_k (-1)^k G^{N-k} AG^k$  が  $\frac{(i\lambda)^N}{N!} \underbrace{[G, [G, \dots, [G, A] \dots]]}_{N \text{ 個の } G}$  に一致すれば良い\*26。これを数学的帰納法にて示す。まずこれは  $N = 1$  に対して成り立つ。つぎにこれがある  $N$  に対して成り立つとすると

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{[G, [G, \dots, [G, A] \dots]]}_{N \text{ 個の } G} \\
 &= \left( G^{N+1} A + \sum_{k=1}^N {}_N C_k (-1)^k G^{N+1-k} AG^k \right) - \left( \sum_{k=0}^{N-1} {}_N C_k (-1)^k G^{N-k} AG^{k+1} + (-1)^N AG^{N+1} \right) \\
 &= G^{N+1} A + \sum_{k=1}^N \underbrace{({}_N C_k + {}_N C_{k-1})}_{{}_{N+1} C_k \text{ (Pascal の三角形)}} (-1)^k G^{N+1-k} AG^k + (-1)^{N+1} G^{N+1}
 \end{aligned}$$

より  $N \rightarrow N + 1$  と置き換えても成り立つ。以上よりベーカー・ハウドルフの補助定理 (2.3.47) が示された。

■式 (2.3.50) 帰納的に

$$\begin{aligned}
 \underbrace{[H, [H, \dots, [H, x_0] \dots]]}_{n \text{ 個の } H} &= (-1)^{n/2} (i\hbar)^n \omega^n x(0) \quad (n : \text{even}), \\
 \underbrace{[H, [H, \dots, [H, x_0] \dots]]}_{n \text{ 個の } H} &= (-1)^{(n+1)/2} (i\hbar)^n \omega^{n-1} \frac{p(0)}{m} \quad (n : \text{odd})
 \end{aligned}$$

となることから分かる。

■重ね合せ状態 (2.3.51) に対する期待値  $\langle x(t) \rangle$  「(2.3.51) に関してとった  $x(t)$  の期待値が振動することを、読者は容易に確かめられよう」(式 (2.3.51) の下 2 行) について、

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha | x(t) | \alpha \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (c_0^* \langle 0 | + c_1^* \langle 1 |) \cdot (a(0)e^{-i\omega t} + a^\dagger(0)e^{i\omega t}) \cdot (c_0 | 0 \rangle + c_1 | 1 \rangle) \\
 &\propto (c_0^* \langle 0 | + c_1^* \langle 1 |) \cdot (c_1 e^{-i\omega t} | 0 \rangle + c_0 e^{i\omega t} | 1 \rangle) + \sqrt{2} c_1 e^{i\omega t} | 2 \rangle) \\
 &= c_0^* c_1 e^{-i\omega t} + c_0 c_1^* e^{i\omega t}.
 \end{aligned}$$

\*26  $[G, [G, \dots, [G, A] \dots]]$  の右端の  $\dots$  は括弧の連なりを表し、 $A$  の右側に  $G$  は来ない。

(対応する一般論は式 (2.1.47). )

■章末問題 18 (コヒーレント状態) 消滅演算子  $a$  の固有状態としてコヒーレント状態  $|\lambda\rangle$  を定義する.

$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x + \frac{ip}{m\omega} \right)$  は非 Hermite なので, 固有方程式

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

における固有値  $\lambda$  は一般に複素数である.

a.  $|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger} |0\rangle$  が規格化されたコヒーレント状態であることの確認  $(a^\dagger)^n |0\rangle = \sqrt{n!} |n\rangle$  より, コヒーレント状態は

$$|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger} |0\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} |n\rangle$$

と書き直せる [4, p.26]. 2.3 節 (p.130) で予告されていたように, これはエネルギー固有状態の重ね合せである. 以下では最右辺の表式を用いよう.

$a|n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$  より, 固有方程式

$$\begin{aligned} a|\lambda\rangle &= e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} (a|n\rangle) \\ &= \lambda e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} |n-1\rangle \\ &= \lambda|\lambda\rangle \end{aligned}$$

が得られる. また

$$\langle\lambda|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2} \sum_{m,n} \frac{(\lambda^*)^m \lambda^n}{\sqrt{m!n!}} \langle m|n\rangle = e^{-|\lambda|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2m}}{m!} = 1$$

より  $|\lambda\rangle$  は規格化条件を満たしている.

別解 ベーカール・ハウドルフの補助定理 (2.3.47) はその導き方より,  $i\lambda$  を任意の複素数  $\lambda$  に置き換え, また  $G$  を Hermite とは限らない一般の演算子  $X$  に置き換えても成立する ( $A$  も Hermite である必要はない):

$$e^{\lambda X} A e^{-\lambda X} = A + \lambda[X, A] + \frac{\lambda^2}{2}[X, [X, A]] + \dots$$

これを利用すると

$$a e^{\lambda a^\dagger} = e^{\lambda a^\dagger} (e^{-\lambda a^\dagger} a e^{\lambda a^\dagger}) = e^{\lambda a^\dagger} (a - \lambda[a^\dagger, a]) = e^{\lambda a^\dagger} (a + \lambda)$$

となるので, 状態  $|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger} |0\rangle$  は固有方程式

$$a|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} (a e^{\lambda a^\dagger}) |0\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

を満たす. また

$$\begin{aligned} \langle\lambda|\lambda\rangle &= e^{-|\lambda|^2} \langle 0|e^{\lambda^* a} e^{\lambda a^\dagger}|0\rangle \\ &= e^{-|\lambda|^2} \sum_{m,n} \frac{(\lambda^*)^m \lambda^n}{m!n!} \langle 0|a^m (a^\dagger)^n |0\rangle \\ &= e^{-|\lambda|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2m}}{m!} \\ &= 1 \end{aligned}$$

より規格化条件も満たされている (第 3 の等号では  $m = n$  以外の項の真空期待値がゼロになること, および  $\langle 0|a^m (a^\dagger)^m |0\rangle = m! \langle m|m\rangle = m!$  に注意した).

b. コヒーレント状態  $|\lambda\rangle$  における最小不確定関係の証明 Heisenberg 演算子

$$x(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(ae^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t}),$$

$$p(t) = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-ae^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t})$$

( $a = a(0), a^\dagger = a^\dagger(0)$ ) の期待値を, 時間変化しない Heisenberg 描像の状態ケット  $|\lambda\rangle$  に関してとろう. 小問 a より

$$\langle\lambda|a|\lambda\rangle = \lambda \langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda, \quad \langle\lambda|a^\dagger|\lambda\rangle = \lambda^* \langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda^*$$

なので,

$$\langle x(t) \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\lambda e^{-i\omega t} + \lambda^* e^{i\omega t}) \left( = \sqrt{2}x_0|\lambda| \cos\{\omega t - \arg(\lambda)\} \right),$$

$$\langle p(t) \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-\lambda e^{-i\omega t} + \lambda^* e^{i\omega t}) \left( = -2\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}|\lambda| \sin\{\omega t - \arg(\lambda)\} \right)$$

となる ( $x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ ). これらはともに実数となっており, 古典的振動子と同様, 角振動数  $\omega$  で振動することが見て取れる.

次に  $aa^\dagger = a^\dagger a + 1$  より

$$x^2(t) = \frac{\hbar}{2m\omega}\{a^2 e^{-2i\omega t} + 2a^\dagger a + 1 + (a^\dagger)^2 e^{2i\omega t}\},$$

$$p^2(t) = -\frac{m\hbar\omega}{2}\{a^2 e^{-2i\omega t} - 2a^\dagger a - 1 + (a^\dagger)^2 e^{2i\omega t}\}$$

であり,

$$\langle\lambda|a^2|\lambda\rangle = \lambda^2, \quad \langle\lambda|a^\dagger a|\lambda\rangle = |\lambda|^2, \quad \langle\lambda|(a^\dagger)^2|\lambda\rangle = (\lambda^*)^2$$

に注意して期待値をとると

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\{\lambda^2 e^{-2i\omega t} + 2|\lambda|^2 + 1 + (\lambda^*)^2 e^{2i\omega t}\},$$

$$\langle p^2(t) \rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2}\{\lambda^2 e^{-2i\omega t} - 2|\lambda|^2 - 1 + (\lambda^*)^2 e^{2i\omega t}\}$$

を得る.

以上より分散は

$$\langle(\Delta x(t))^2\rangle = \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega},$$

$$\langle(\Delta p(t))^2\rangle = \langle p^2(t) \rangle - \langle p(t) \rangle^2 = \frac{m\hbar\omega}{2}$$

と計算され, 最小不確定関係

$$\langle(\Delta x(t))^2\rangle \langle(\Delta p(t))^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

が見出される.

c.  $|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n) |n\rangle$  における  $|f(n)|^2$  が  $n$  に関する Poisson 分布であることの確認

$$|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger} |0\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} (a^\dagger)^n |0\rangle \equiv \sum_{n=0}^{\infty} f(n) |n\rangle$$

と書くと,  $(a^\dagger)^n |0\rangle = \sqrt{n!} |n\rangle$  より

$$f(n) = e^{-|\lambda|^2/2} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}$$

と同定される. 固有値  $n$  の出現確率は展開係数の絶対値の自乗

$$|f(n)|^2 = e^{-|\lambda|^2} \frac{|\lambda|^{2n}}{n!}$$

で与えられる. これは  $n$  に関する Poisson 分布となっており, 期待値は  $\bar{n} = |\lambda|^2$  で与えられることが知られている. 以下, その証明にあたる計算を行う. まず

$$\bar{n} = \langle \lambda | N | \lambda \rangle = \sum_{m,n} f^*(m) f(n) \langle m | N | n \rangle = \sum_{m,n} f^*(m) f(n) (n \delta_{mn}) = \sum_{n=0}^{\infty} n |f(n)|^2$$

であり, これは一般論としてよく理解されているように (1.4 節, p.32), 確率  $|f(n)|^2$  を用いて平均値を計算できることを表している.  $f(n)$  の具体的表式を用いると, これは

$$\bar{n} = e^{-|\lambda|^2} |\lambda|^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2(n-1)}}{(n-1)!} = |\lambda|^2$$

と計算される.

参考: Poisson 分布の分散  $\langle (\Delta N)^2 \rangle$  の公式 やや技巧的であるが,  $\langle \lambda | N^2 | \lambda \rangle$  は次のように計算できる.

$$\begin{aligned} \langle \lambda | N^2 | \lambda \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} n^2 |f(n)|^2 = e^{-|\lambda|^2} \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} = e^{-|\lambda|^2} \sum_{n=1}^{\infty} \{n(n-1) + n\} \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} \\ &= e^{-|\lambda|^2} \left\{ |\lambda|^4 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2(n-2)}}{(n-2)!} + |\lambda|^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2(n-1)}}{(n-1)!} \right\} = |\lambda|^4 + |\lambda|^2. \end{aligned}$$

よって Poisson 分布の分散の公式

$$\langle (\Delta N)^2 \rangle = \langle \lambda | N^2 | \lambda \rangle - \bar{n}^2 = |\lambda|^2$$

を得る.

参考: 以上の結果の含意 場の理論に進むと, 例えば電磁場に対して固有値  $n$  は場を構成する光子数を表すことになる. その相対的揺らぎは

$$\frac{\sqrt{\langle (\Delta N)^2 \rangle}}{\bar{n}} = \bar{n}^{-1/2}$$

であり, これは  $\bar{n} \rightarrow \infty$  とするとゼロになる [4, p.11, pp.26-27].



d. コヒーレント状態は  $e^{-ipl/\hbar} |0\rangle$  の形にも表されることの証明  $[A, B] = c$  (定数) の場合には, 公式 (142):

$$e^A e^B = \exp\left(A + B + \frac{1}{2}c\right)$$

が成り立つ (付録 B 参照). これを適用すると

$$e^{\lambda a^\dagger} e^{-\lambda^* a} = e^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a} e^{|\lambda|^2/2}$$

となるので,

$$e^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a} |0\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger} e^{-\lambda^* a} |0\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger} |0\rangle = |\lambda\rangle$$

の関係が見出される (第 2 の等号は  $e^{-\lambda^* a} |0\rangle = (1 - \lambda^* a + \dots) |0\rangle = |0\rangle$  による). 上式の最左辺を有限平行移動  $e^{-ipl/\hbar}$  の施された基底状態

$$e^{-ipl/\hbar} |0\rangle = \exp\left[l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(-a + a^\dagger)\right] |0\rangle \quad \left(\because p = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(-a + a^\dagger)\right)$$

と比較すると, これは実数固有値  $\lambda = l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}$  を持つ固有状態  $|\lambda\rangle$  に対応付けられることが分かる.

## 2.4 シュレーディンガーの波動方程式

時間に依存する波動方程式

Hamilton 演算子を

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

ととると,

状態ケットに対する Schrödinger 方程式 (36):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = H |\alpha, t_0; t\rangle$$

⇒ 波動関数  $\psi(\mathbf{x}', t) \equiv \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle$  に対する方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \psi(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t) \quad (58)$$

となる (導出は下記). 上式 (58) は時間に依存する波動方程式と呼ばれ, いわゆる波動力学の出発点となる.

時間に依存しない波動方程式

$A$  を Hamilton 演算子  $H$  と交換する観測量とする.  $A$  と  $H$  の同時固有状態 (したがって定常状態) (2.1.41):  $|a', t\rangle = |a'\rangle e^{-iE_{a'}t/\hbar}$  を考えると, 波動関数は

$$\psi(\mathbf{x}', t) = \langle \mathbf{x}' | a' \rangle e^{-iE_{a'}t/\hbar}$$

と表されるので,

時間に依存する波動方程式 (58):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \psi(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t)$$

⇒ エネルギー固有関数  $u_E(\mathbf{x}') \equiv \langle \mathbf{x}' | a' \rangle$  (ただし  $E_{a'} \rightarrow E$ ) に対する波動方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 u_E(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x}') u_E(\mathbf{x}') = E u_E(\mathbf{x}') \quad (59)$$

となる。上式 (59) は時間に依存しない波動方程式と呼ばれる\*27。束縛状態に対する境界条件の下でこれを解くと、量子化されたエネルギー準位が得られる。

歴史的には波動力学は、光学と力学の類似性、および de Broglie の物質波の仮説を根源として、行列力学とは独立に定式化された。後に、波動力学と行列力学の同等性が示された。

以下のような、Schrödinger 方程式の基本的な解については扱わない。

- 自由空間での Gauss 型の波束の時間発展
- 長方形のポテンシャル障壁のある 1 次元の透過-反射問題
- 時間に依存しない波動方程式の簡単な解
  - 箱の中の粒子, 四角い井戸の中の粒子, 調和振動子, 水素原子など
- エネルギー固有関数と固有値の一般的性質
  - エネルギー準位のスペクトルは  $E < \lim_{|\mathbf{x}'| \rightarrow \infty} V(\mathbf{x}')$  が満たされるか否かで不連続か連続になること
  - 1 次元のエネルギー固有関数は  $E - V(\mathbf{x}')$  が正か負かに依って sine 関数か減衰関数になること

### 波動関数の解釈

1.7 節で [本稿では 1.6 節の箇所] で説明したように、 $\rho(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2$  は時刻  $t$  において粒子を位置  $\mathbf{x}$  に見出す確率密度を表す\*28。

時間に依存する波動方程式 (58) (ポテンシャル  $V$  は実数) :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi$$

$$\Rightarrow \text{連続の方程式 } \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (\text{確率保存}) \quad (60)$$

$$\rho \equiv |\psi|^2 : \text{確率密度}, \quad \mathbf{j} \equiv \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) : \text{確率の流れ}. \quad (61)$$

(上式 (60) の導出は下記。)

確率の流れ  $\mathbf{j}$  は運動量と

$$\int d^3x \mathbf{j} = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle_t}{m}, \quad \langle \mathbf{p} \rangle_t : \text{運動量演算子の時刻 } t \text{ での期待値} \quad (2.4.17)$$

のように関係している [本稿次節で導出]。

- Schrödinger……  $|\psi|^2$  を物質密度と解釈
  - 物質の連続分布は、電子の位置の測定により、空間的拡がりを持たない点状粒子に、突然縮んでしまうことになる
- Born……  $|\psi|^2$  を確率密度と解釈

\*27 波動方程式 (59) では観測量  $A$  を具体的に指定する必要がなくなっている。これは  $H$  と交換するどのような観測量  $A$  を選んでも、エネルギー固有状態に変わりはないという事情による。そのような観測量  $A$  として特に  $H$  自身を選べることに注意すれば、特定の  $A$  を指定する必要がないことは明らかである。

\*28 以降、本節では演算子ではなくパラメーターとしての位置を表すのに、 $\mathbf{x}'$  の代わりに  $\mathbf{x}$  を用いる。

波動関数の位相の空間変化が確率の流れを示す：

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}, t)} e^{iS(\mathbf{x}, t)/\hbar} \Rightarrow \mathbf{j} = \frac{\rho \nabla S}{m}. \quad (62)$$

(上式 (62) の導出は下記.)

平面波 (運動量固有関数)  $\psi \sim e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - Et)/\hbar}$  では  $\nabla S = \mathbf{p}$  なので, 確率の流れ (61) は  $\mathbf{j} = \rho \nabla S/m = \rho \mathbf{p}/m$  となる. これはある種の速度 “ $\mathbf{v}$ ” =  $\mathbf{p}/m$  を定義して,  $\mathbf{j}$  を流れの密度としてもっともな形  $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$  に表せることを意味している. しかしながら, 量子力学では位置と速度を同時に正確に測定することはできないため, 各位置で定義された速度 “ $\mathbf{v}$ ” を文字通りに解釈してはならない.

### 古典的極限

波動関数を

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}, t)} e^{iS(\mathbf{x}, t)/\hbar}$$

と書くと (任意の複素数は必ずこの形に書ける), 時間に依存する波動方程式 (58) は

$$\begin{aligned} & \sqrt{\rho} \left( \frac{1}{2m} |\nabla S|^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} \right) \\ & - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \sqrt{\rho} - \frac{i\hbar}{m} (\nabla \sqrt{\rho}) \cdot (\nabla S) - \frac{i\hbar}{2m} \sqrt{\rho} \nabla^2 S - i\hbar \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} = 0 \end{aligned} \quad (63)$$

となる (導出は下記). ここで  $\hbar$  を

$$\hbar |\nabla^2 S| \ll |\nabla S|^2 \quad (64)$$

などの意味で小さな量と見なせると仮定して,  $\hbar$  を含む項を落とすと

$$\frac{1}{2m} |\nabla S|^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (65)$$

を得る. これは  $S$  を Hamilton の主関数 [現実の軌道を積分路とし, その終点の座標と時刻の関数と見た作用] と見なせば, Hamilton-Jacobi の方程式 [本稿にて補足] である. [よって条件 (64)(等価的・形式的に  $\hbar \rightarrow 0$  と表せる) は準古典的な場合に対応し, この極限で波動関数の位相 (の  $\hbar$  倍)  $S$  は作用 (Hamilton 主関数) に一致すると考えることができる.]

また古典力学において運動量は  $\mathbf{p}_{\text{古典的}} = \nabla S$  と表されるため, 粒子は波面  $S = \text{const.}$  に垂直な方向に進むことになる. このことは, 波動光学の短波長極限にあたる幾何光学において, 光が波面に垂直な方向に進む光線を成すことに類似している.

### 半古典的 (WKB) 近似

1次元の空間においてエネルギー  $E$  (一定) の定常状態を考え, 波動関数  $\psi = \sqrt{\rho} e^{iS/\hbar}$  に対し,  $S$  を Hamilton 主関数とする：

$$\begin{aligned} S(x, t) &= W(x) - Et, \\ W(x) &= \pm \int^x p(x') dx' : \text{簡約された作用}, \\ p(x') &= \sqrt{2m(E - V(x'))} = \begin{cases} \sqrt{2m(E - V(x'))} & (E > V) \\ i\sqrt{2m(V(x') - E)} & (E < V) \end{cases} \end{aligned}$$

- このとき  $\hbar \rightarrow 0$  で成り立つ Hamilton-Jacobi 方程式 (65):

$$\frac{1}{2m} |\nabla S|^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

が満たされる ( $\frac{1}{2m} |\nabla S|^2 \rightarrow \frac{1}{2m} \left| \frac{\partial S}{\partial x} \right|^2 = E - V$ ,  $\frac{\partial S}{\partial t} = -E$ ).

- このとき

$$\sqrt{\rho} = \frac{\text{const}}{[E - V]^{1/4}} \quad (66)$$

となる. 実際,

$$\begin{aligned} \text{定常状態における連続の式} \quad 0 &= \frac{\partial j_x}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\rho \partial_x S}{m} \right), \\ \therefore \text{const} = \rho \partial_x S &= \rho \frac{dW}{dx} = \pm \sqrt{2m(E - V(x))} \end{aligned}$$

である (この結果の解釈は下記).

以上より WKB 解

$$E > V \quad \psi(x, t) \simeq \frac{\text{const}}{[E - V(x)]^{1/4}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( \pm \int^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' - Et \right) \right], \quad (67)$$

$$E < V \quad \psi(x, t) \simeq \frac{\text{const}}{[V(x) - E]^{1/4}} \exp \left[ \frac{1}{\hbar} \left( \pm \int^x \sqrt{2m(V(x') - E)} dx' - Et \right) \right] \quad (68)$$

を得る (指数関数の中身は同じものである).

Hamilton の主関数

$$S = \pm \int^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' - Et$$

に対して, Hamilton-Jacobi 方程式の導出に用いた条件 (64):  $\hbar |\nabla^2 S| \ll |\nabla S|^2$  は短波長の極限, すなわち

$$\lambda \left| \frac{dV}{dx} \right| \ll |E - V| \quad (\lambda \text{ は de Broglie 波長}) \quad (69)$$

$\Leftrightarrow$  1 波長進んだときのポテンシャルの変化  $\lambda \left| \frac{dV}{dx} \right|$  が ( $|E - V|$  に比べて) 小さい

$\Leftrightarrow$  ポテンシャルが緩やかに変化する間に de Broglie 波は幾度も振動する

を意味する (上式 (69) の導出は下記).

図 17 のようなポテンシャル  $V(x)$  において, 古典的転回点  $x = a, b$  の近くでは  $E \simeq V$  より  $|p(x)|$  が小さくなり, 短波長の条件が満たされない. そこで転回点を挟んで異なる領域の WKB 解を適切に接続する必要がある. 転回点付近でポテンシャル  $V(x)$  を 1 次関数で近似した場合の解を媒介する手法では, 波動関数の一価性の条件から

$$\int_a^b p(x) dx = \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi \hbar \quad (70)$$

が見出される ( $n$  は整数) [本稿次節で補足].

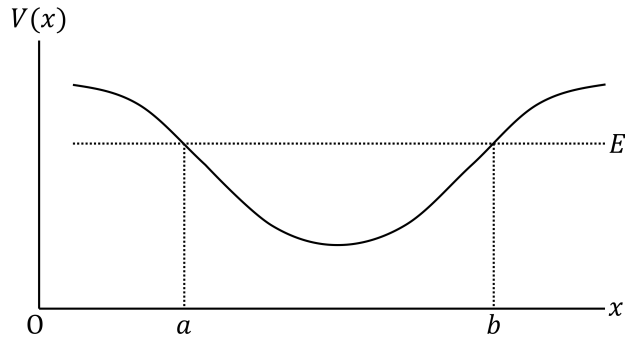


図 17 古典的転回点  $x = a, b$

■弾んでいるボール 固い床に当たって上下に弾んでいるボールを考える．鉛直上向きを  $x$  軸正，床を  $x = 0$  とするとポテンシャルは

$$V = \begin{cases} mgx, & x > 0 \\ \infty, & x < 0 \end{cases} \quad (2.4.45)$$

である．このポテンシャルに対しては  $x \leq x_1 \equiv 0$  で波動関数  $u(x)$  はゼロになるのに対し，WKB の波動関数は  $x \leq x_1$  に漏れ出すことが想定されている．そこで WKB 近似を用いるために，代わりにポテンシャル

$$V(x) = mg|x|, \quad (-\infty < x < \infty) \quad (2.4.47)$$

を考える．パリティ奇の解をとれば剛体の床  $x = 0$  での境界条件  $u(0) = 0$  が満たされる．このポテンシャル (2.4.47) に対し

$$\int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m(E - V(x))} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar$$

から定めた準位

$$E_n = \frac{1}{2} \left\{ 3 \left( n - \frac{1}{4} \right) \pi \right\}^{2/3} (mg^2 \hbar^2)^{1/3} \quad (2.4.51)$$

(導出は下記) は，元のポテンシャル (2.4.45) のポテンシャルに対する厳密な固有値

$$E_n = \frac{\lambda_n}{2^{1/3}} (mg^2 \hbar^2)^{1/3} \quad (2.4.53)$$

( $\lambda_n$  は Airy(エアリー) 関数のゼロ点) [本稿次節を参照] によく一致する．

式 (2.4.45) の形のポテンシャルはクォーク・反クォーク間の相互作用を記述する．[例えば文献 [10, pp.533-534] が参考になる.]

## 2.4 節，式の導出など

必要に応じて教科書を補足しつつ，式の導出を行う．

■時間に依存する波動方程式 (58) の導出 状態ケットに対する Schrödinger 方程式 (36):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = H |\alpha, t_0; t\rangle$$

の両辺に左から  $\langle \mathbf{x}' |$  をかけ、Schrödinger 描像の位置固有ブラ  $\langle \mathbf{x}' |$  は時間変化しないことに注意すると、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle = \langle \mathbf{x}' | H | \alpha, t_0; t \rangle = \langle \mathbf{x}' | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) | \alpha, t_0; t \rangle$$

を得る。最右辺において

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}' | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} | \alpha, t_0; t \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \quad (\because \text{式 (1.7.20)}) \\ \langle \mathbf{x}' | V(\mathbf{x}) &= \langle \mathbf{x}' | V(\mathbf{x}') \quad (V(\mathbf{x}) \text{ は演算子, } V(\mathbf{x}') \text{ は固有値}) \end{aligned}$$

とできるので、波動関数  $\psi(\mathbf{x}', t) \equiv \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle$  に対する方程式 (58):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \psi(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t)$$

が導かれる。

■連続の式 (60) の導出 Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi$$

を利用すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \\ &= \psi^* \left\{ \frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi \right\} + \psi \left\{ -\frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi^* \right\} \\ &= \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) \end{aligned}$$

を得る。また確率の流れの式 (61):

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

より

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*)$$

となる。これらを辺々足すと、連続の式 (60) が導かれる。

■確率の流れ (62) の導出  $\psi = \sqrt{\rho} e^{iS/\hbar}$  に対して

$$\nabla \psi = (\nabla \sqrt{\rho}) e^{iS/\hbar} + \sqrt{\rho} \frac{i\nabla S}{\hbar} e^{iS/\hbar}, \quad \therefore \psi^* \nabla \psi = \sqrt{\rho} \nabla \sqrt{\rho} + \frac{i}{\hbar} \rho \nabla S$$

なので、確率の流れの式 (61) は式 (62):

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) = \frac{\rho \nabla S}{m}$$

を与える。

■式 (63) の導出 波動関数は

$$\psi(\mathbf{x}', t) = \langle \mathbf{x}' | a' \rangle e^{-iE_{a'}t/\hbar}$$

である。

式 (63) を得るには,  $\sqrt{\rho}$  の微分を実行して

$$\partial_\mu \sqrt{\rho} = \frac{\partial_\mu \rho}{2\sqrt{\rho}}, \quad \mu = t, x, y, z$$

とする必要はない。

$\nabla^2 \psi$  について考える。微分公式

$$(uv)'' = u''v + 2u'v' + uv''$$

を  $u = \sqrt{\rho}, v = e^{iS/\hbar}$  として適用すると,

$$\partial_k^2 \psi = \left\{ \partial_k^2 \sqrt{\rho} + 2\frac{i}{\hbar}(\partial_k \sqrt{\rho})(\partial_k S) + \sqrt{\rho} \left( \frac{i}{\hbar} \partial_k S \right)^2 + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\rho} \partial_k^2 S \right\} e^{iS/\hbar}$$

が各成分  $k$  に対して成り立つ。そこで両辺  $k$  について和をとると (すなわち繰り返された添字  $k$  について和をとるものと見なすと),  $\nabla^2 \psi$  の式が得られる。

こうして  $\psi = \sqrt{\rho} e^{iS/\hbar}$  に対して Schrödinger 方程式

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

の各項を書き換えると,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \nabla^2 \sqrt{\rho} + \frac{2i}{\hbar} (\nabla \sqrt{\rho}) \cdot (\nabla S) - \frac{1}{\hbar^2} \sqrt{\rho} |\nabla S|^2 + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\rho} \nabla^2 S \right] + \sqrt{\rho} V = i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial t} \sqrt{\rho} + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\rho} \frac{\partial S}{\partial t} \right)$$

となるので, 式 (63) が得られる。

■式 (66) の解釈 これはある場所に粒子を見出す確率が速度  $v$  に逆比例することと整合している。古典論において, このことは次のように理解できる。同一のポテンシャルの中で独立に運動する複数の粒子が  $x$  軸上に定常流を作っているとすると, その粒子数密度を  $n$ , 流れの速度を  $v$  として, 粒子数の保存則は

$$\frac{\partial}{\partial x}(nv) = 0, \quad \therefore nv = \text{const}(\text{時間的, 空間的に})$$

(位置  $x$  に特定の粒子を見出す確率)  $\propto n \propto 1/v$

となる。

■短波長の条件式 (69) の導出 式 (64):  $\hbar|\nabla^2 S| \ll |\nabla S|^2$  は,  $S(x, t) = W(x) - Et$  および

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dW}{dx} = \pm \sqrt{2m(E-V)} \\ \frac{d^2W}{dx^2} = \pm \sqrt{2m} \frac{-V'}{2\sqrt{E-V}} \end{array} \right\}, \quad \therefore \left\{ \begin{array}{l} \left| \frac{dW}{dx} \right|^2 = 2m(E-V) \\ \left| \frac{d^2W}{dx^2} \right| = \sqrt{\frac{m}{2(E-V)}} |V'| \end{array} \right.$$

により,

$$\hbar \sqrt{\frac{m}{2(E-V)}} |V'| \ll 2m(E-V), \quad \therefore \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V)}} \ll \frac{2(E-V)}{|V'|}$$

と書き換えられる。ここで最後の式の左辺は

$$\lambda \equiv \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{|k|} = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V)}}$$

なので、式 (69) を得る。

■弾んでいるボールの WKB 近似による量子化エネルギー準位 (2.4.51) の導出 量子化条件 (70) は今の場合、

$$\int_{-E/mg}^{E/mg} dx \sqrt{2m(E - mg|x|)} = \left(n_{\text{odd}} + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar, \quad (n_{\text{odd}} = 1, 3, 5, \dots) \quad (2.4.49)$$

$$\therefore \int_0^{E/mg} dx \sqrt{2m(E - mgx)} = \left(n - \frac{1}{4}\right) \pi \hbar, \quad (n = 1, 2, 3, 4, \dots) \quad (2.4.50)$$

と書ける [本稿次節で補足]。上式 (2.4.50) 左辺の初等的な積分を実行すると [本稿次節参照]、エネルギー準位 (2.4.51) が得られる。

## 2.4 について

■局所的なポテンシャル 局所的なポテンシャル  $V(\mathbf{x}')$  に対する式 (2.4.3):

$$\langle \mathbf{x}'' | V(\mathbf{x}) | \mathbf{x}' \rangle = V(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'')$$

は時間に依存する Schrödinger 方程式 (2.4.8) の導出には用いられておらず、ポテンシャルが局所的であることの定義として述べられているものと考えられる。実際、「厳密な意味で  $V$  が局所的であるといわれるのは

$$\langle \mathbf{x}' | V(\mathbf{x}) | \mathbf{x}'' \rangle = V(\mathbf{x}') \delta^{(3)}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \quad (7.1.20)$$

と書けるときである」(p.528) という記述がある。

■時間に依存する波動方程式 (58) について これは平面波解  $\psi \sim e^{i(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}' - Et)/\hbar}$  が、適正な波数と振動数の関係 (エネルギーの関係)

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

を満たすことを保証する。初等的には逆にこのことから波動方程式 (58) が発見的に“導出”され、任意の Hamiltonian の下での一般的な状態  $\psi$  に対しても適用できるものと仮定される。

■確率の流れ (2.4.16) 確率の流れ (2.4.16):

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi] = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi)$$

は

$$\mathbf{j} = \text{Re} \left[ \psi^* \frac{\hbar}{im} \nabla \psi \right]$$

とも書ける。



■確率の流れ  $\mathbf{j}$  と運動量の関係 (2.4.17)

$$\frac{\langle \mathbf{p} \rangle_t}{m} = \frac{1}{m} \langle \alpha, t_0; t | \mathbf{p} | \alpha, t_0; t \rangle = \frac{-i\hbar}{m} \int d^3x \psi^* \nabla \psi, \quad (\because \text{式 (1.7.49)})$$

における積分を

$$\begin{aligned} \int d^3x \psi^* \nabla \psi &= - \int d^3x (\nabla \psi^*) \psi, \quad (\text{部分積分}) \\ \therefore \int d^3x \psi^* \nabla \psi &= \frac{1}{2} \int d^3x [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi] \end{aligned}$$

と書き換えると式 (2.4.17):

$$\int d^3x \mathbf{j} = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle_t}{m}, \quad \langle \mathbf{p} \rangle_t : \text{運動量演算子の時刻 } t \text{ での期待値}$$

を得る.

■平面波に対する確率の流れ (2.4.20) 平面波の例 (p.138) は  $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v} = \rho \mathbf{p}/m = \rho \nabla S/m$  として式 (2.4.20):  $\mathbf{j} = \rho \nabla S/m$  を思い出すのにも役立つ.

■Hamilton-Jacobi 理論 Hamilton-Jacobi 理論 (pp.139–140) について復習する [7, pp.175–177, pp.186–187]. 系の軌道  $q_i(t)$  の変分に伴う作用  $S$  の変化は

$$\delta S = \left[ \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i \right]_{t_0}^t + \int_{t_0}^t \sum_i \left( \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i dt$$

である. これ以降, 作用の積分路を系の実際の軌道に限定し, 作用を終点の時刻と座標の値  $(t, q)$  の関数と見なす ( $q = \{q_i\}$ ). すなわち積分の始点  $(t_0, q_0)$  は固定されており, 我々が終点  $(t, q)$  を指定すると, それに応じて始点  $(t_0, q_0)$  と終点  $(t, q)$  を結ぶ現実の運動に対応する軌道が積分路として定まる. 実際に起こる運動の軌道は Lagrange 方程式を満たすので, このとき上式右辺の積分は消え, 終点の座標の変化  $\delta q_i$  に伴う作用の変化の式  $\delta S = \sum_i p_i \delta q_i$  が得られる. この関係から, 座標についての作用の偏導関数は

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i$$

となる. さらに時間についての作用の偏導関数  $\partial S / \partial t$  が

$$\begin{aligned} L &= \frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_i p_i \dot{q}_i, \\ \therefore \frac{\partial S}{\partial t} &= L - \sum_i p_i \dot{q}_i = -H \end{aligned}$$

と求まる. こうして作用積分は

$$S = \int \left( \sum_i p_i dq_i - H dt \right)$$

の形に書ける.

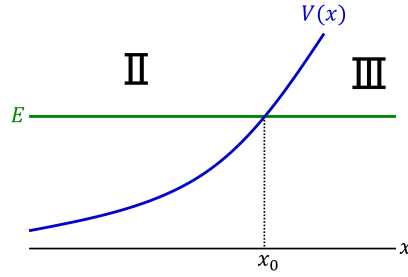


図 18  $V'_0 \equiv V'(x_0) > 0$  となる転回点  $x_0$

さらに  $\frac{\partial S}{\partial t} = -H(q, p, t)$  における運動量を  $p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}$  で置き換えると，関数  $S(q, t)$  に対する Hamilton-Jacobi 方程式

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(\{q_i\}, \left\{\frac{\partial S}{\partial q_i}\right\}, t\right) = 0$$

を得る．

■古典的転回点での WKB 解の接続 (pp.143-144)  $V'_0 \equiv V'(x_0) > 0$  となる転回点  $x_0$  について考える (図 18 参照,  $x < x_0$ : 領域 II,  $x > x_0$ : 領域 III).

$x - x_0$  で 1 次近似された  $V(x)$  に対する解  $x - x_0$  で 1 次近似された  $V(x)$  に対する Schrödinger 方程式

$$u''(x) = -\frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2}u(x) \simeq \frac{2mV'_0}{\hbar^2}(x - x_0)u(x)$$

は

$$-y \equiv \left(\frac{2mV'_0}{\hbar^2}\right)^{1/3}(x - x_0)$$

と書くと，弾んでいるボールの問題に対する式 (75) と同様

$$\frac{d^2u}{dy^2} - (-y)u = 0$$

となるから，解はエアリー関数

$$u(x) \propto A_i(-y) \propto \int_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3} + (-y)t\right) dt$$

で与えられる．これは  $\pm\frac{1}{3}$  次ベッセル関数，変形ベッセル関数で表され，その漸近形も知られている：

$$u(x) \propto \int_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3} + (-y)t\right) dt \rightarrow \begin{cases} \frac{\sqrt{\pi}}{y^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}y^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & (y \rightarrow \infty \Leftrightarrow \text{領域 II}, \because V'_0 > 0) \\ \frac{\sqrt{\pi}}{2|y|^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}|y|^{3/2}\right) & (y \rightarrow -\infty \Leftrightarrow \text{領域 III}, \because V'_0 > 0) \end{cases} \quad (71)$$

領域 II での WKB 解

$$u = u_+ + u_-, \quad u_{\pm}(x) \equiv \frac{A_{\pm}}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx'\right), \quad p(x) \equiv \sqrt{2m(E - V(x))}.$$

転回点  $x_0$  付近で

$$u = u_+ + u_-, \quad u_{\pm}(x) \simeq \frac{A_{\pm}}{(2m\hbar V'_0)^{1/6} y^{1/4}} \exp\left(\mp i \frac{2}{3} y^{3/2}\right). \quad (72)$$

領域 III での WKB 解

$$u = u_+ + u_-, \quad u_{\pm}(x) \equiv \frac{A'_{\pm}}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\pm \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'\right), \quad |p(x)| \equiv \sqrt{2m(V(x) - E)}.$$

転回点  $x_0$  付近で

$$u = u_+ + u_-, \quad u_{\pm}(x) \simeq \frac{A'_{\pm}}{(2m\hbar V'_0)^{1/6} |y|^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3} |y|^{3/2}\right). \quad (73)$$

式 (72) と式 (71), 式 (73) と式 (71) が一致するように  $A_{\pm}, A'_{\pm}$  をとると接続公式 (2.4.41) が得られる。計算の確認 式 (72) を確かめる。

$$\begin{aligned} p(x) &\simeq \sqrt{2mV'_0(x_0 - x)}, \\ \frac{1}{\sqrt{p(x)}} &= \frac{1}{[2mV'_0(x_0 - x)]^{1/4}} = \frac{1}{(2m\hbar V'_0)^{1/6}} \left(\frac{\hbar^2}{2mV'_0}\right)^{1/12} \frac{1}{(x_0 - x)^{1/4}} = \frac{1}{2m\hbar V'_0)^{1/6} y^{1/4}}, \\ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' &\simeq \sqrt{\frac{2mV'_0}{\hbar^2}} \int_{x_0}^x \sqrt{x_0 - x'} dx' = -\frac{2}{3} \sqrt{\frac{2mV'_0}{\hbar^2}} (x_0 - x)^{3/2} = -\frac{2}{3} y^{2/3}. \end{aligned}$$

次に式 (71) を確かめる。  $|p(x)| \simeq \sqrt{2mV'_0(x - x_0)}$  なので  $1/\sqrt{|p(x)|}$  の式は上記の  $1/\sqrt{p(x)}$  の式で  $x_0 - x \rightarrow x - x_0$ , したがって  $y \rightarrow |y|$  と置き換えたものである。また,

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx' \simeq \sqrt{\frac{2mV'_0}{\hbar^2}} \int_{x_0}^x \sqrt{x' - x_0} dx' = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2mV'_0}{\hbar^2}} (x - x_0)^{3/2} = \frac{2}{3} |y|^{2/3}.$$

解を接続するためには

$$A_{\pm} = \mp \sqrt{\pi} (2m\hbar V'_0)^{1/6} \frac{e^{\mp i\pi/4}}{2i}$$

ととれば良い。これは

$$\begin{aligned} \sqrt{\pi} \sin\left(\frac{2}{3} y^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) &= \left(-\frac{\sqrt{\pi}}{2i} e^{-i\pi/4}\right) \exp\left(-i \frac{2}{3} y^{3/2}\right) + \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2i} e^{i\pi/4}\right) \exp\left(i \frac{2}{3} y^{3/2}\right) \\ &\equiv \frac{A_+}{(2m\hbar V'_0)^{1/6}} \exp\left(-i \frac{2}{3} y^{3/2}\right) + \frac{A_-}{(2m\hbar V'_0)^{1/6}} \exp\left(i \frac{2}{3} y^{3/2}\right) \end{aligned}$$

から分かる。

$$A'_+ = 0, \quad A'_- = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (2m\hbar V'_0)^{1/6}$$

ととれば良いことは見易い。

以上で領域 II の解 (72) は

$$\begin{aligned}\frac{u(x)}{\sqrt{\pi(2m\hbar V'_0)^{1/6}}} &= \frac{1}{\sqrt{p(x)}2i} \left( e^{-i\pi/4} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx'\right) + e^{i\pi/4} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx'\right) \right) \\ &= \frac{-1}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \quad (\because -\sin\theta = \sin(-\theta)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \quad (\because \sin\theta = \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right))\end{aligned}$$

と定まり, 領域 III の解 (73) は

$$\frac{u(x)}{\sqrt{\pi(2m\hbar V'_0)^{1/6}}} = \frac{1}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'\right)$$

と定まる. これが接続公式 (2.4.42) の意味するところである.

■式 (2.4.43) 式 (2.4.43):

$$\int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m(E - V(x))} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar$$

は

$$\begin{aligned}n\pi &\equiv \{ \text{式 (2.4.41) のコサインの位相} \} - \{ \text{式 (2.4.42) のコサインの位相} \} \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx' \sqrt{2m(E - V(x'))} - \frac{\pi}{2}\end{aligned}$$

として得られる.

■Bohr-Sommerfeld の量子化の規則 式 (70):  $\int_a^b p(x) dx = (n + \frac{1}{2}) \pi \hbar$  と同様の結果をより乱暴に得るには, 領域  $a \leq x \leq b$  の波動関数 (67):

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p dx\right)$$

に対して, 転回点  $x = a, b$  でゼロになるという境界条件を課せば十分である [1, pp.132-135]. (ただし定常状態における波動関数の時間依存性  $e^{-iEt/\hbar}$  を省いた.  $x_0$  は適当な積分の下限であり,  $C_1, C_2$  は定数である.) この措置は, 古典的には粒子の侵入不可能な領域  $x < a, b < x$  において, 波動関数が式 (68) に従って急速に減衰することから正当化される. このとき波動関数は

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx\right) = \frac{C'}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx\right)$$

という形をとり, 上式 (70) は粗い結果

$$\int_a^b p dx = n\pi\hbar, \quad \therefore \oint p dx = 2\pi n\hbar (= nh) \quad (74)$$

に置き換わる (導出は下記). ただし第 1 式までは運動量を  $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \geq 0$  で定義してきたのに対し, 第 2 式では  $x$  が  $b$  から  $a$  まで減少するときの運動量を  $p \leq 0$  と見なす. 上式 (74) は前期量子論におけ

る Bohr-Sommerfeld の量子化の規則として知られている。例えば Bohr の水素原子模型に対して、左辺の積分  $\oint p dx$  は電子の運動量  $p$  の円軌道 (半径  $r$ ) に沿った線積分と解釈できるので、これはよく知られた Bohr の量子条件  $p \times 2\pi r = nh$  (または軌道角運動量  $pr = n\hbar$ ) を与える (de Broglie 波 (波長  $\lambda$ ) が円周上に定常波を作る条件  $2\pi r = n\lambda$  である)。

量子条件 (74) において、仮定により  $\hbar$  は小さな量と見なされるので、右辺の整数  $n$  は大きな量である。したがって上式 (70) との因子  $1/2$  の違いは重要でない。

なお波動関数が  $x = a$  から  $x = b$  までの区間でゼロになる回数は  $n - 1 \simeq n$  であり、これが量子数  $n$  の意味となる。隣り合う波動関数がゼロの点の間隔 ( $\sim (b - a)/n$ ) は de Broglie 波長の目安となるから、 $n$  が大きいことは波長が短い場合を考えていることと整合している。

Bohr-Sommerfeld の量子条件 (74) は次のように解釈できる [1, pp.137–138]。すなわち左辺の積分  $\oint p dx$  は位相空間 ( $xp$  平面) において、粒子の古典的な周期運動の軌道が囲む面積である。他方、量子数  $n$  は考えている位相軌道のエネルギーを超えないエネルギーを持つ量子状態の数である。よって準古典的な場合には、個々の量子状態は位相空間に面積  $h (= 2\pi\hbar)$  を占めると言うことができる。  $s$  個の自由度を持つ系の準古典的運動に対する、この結果の一般化は直接的である。すなわち各量子状態は位相空間に体積  $h^s$  を占める。

Bohr-Sommerfeld の量子条件 (74) の導出 領域  $a \leq x \leq b$  の波動関数 (67):

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p dx\right)$$

に対して境界条件

$$0 = \psi(a) = \frac{C_1}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^a p dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^a p dx\right)$$

を課すと、

$$C_1 = \frac{C}{2i} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^{x_0} p dx\right), \quad C_2 = -\frac{C}{2i} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^{x_0} p dx\right)$$

とおけるので、波動関数は

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx\right)$$

と表される。これは確かに境界条件  $\psi(a) = 0$  を満たしていることが明白である。同様に境界条件  $\psi(b) = 0$  を考慮すると

$$\psi(x) = \frac{C'}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx\right)$$

を得る。

これらが  $a$  と  $b$  の任意の  $x$  で一致する条件を丁寧に調べると、以下のようなになる。位相を  $\alpha(x) = \frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx, \beta(x) = \frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx$  と略記すると、波動関数の 2通りの表現が一致する条件は

$$\begin{aligned} 0 &= C \sin \alpha - C' \sin \beta \\ &= \frac{C + C'}{2} (\sin \alpha - \sin \beta) + \frac{C - C'}{2} (\sin \alpha + \sin \beta) \\ &= (C + C') \sin \frac{\alpha - \beta}{2} \cos \frac{\alpha + \beta}{2} + (C - C') \cos \frac{\alpha - \beta}{2} \sin \frac{\alpha + \beta}{2} \end{aligned}$$

と書き直される。ここで  $\alpha + \beta$  は  $x$  に依らない定数となるので、上式が任意の  $x$  で成り立つ条件は

$$\frac{\alpha + \beta}{2} = \frac{2n+1}{2} \pi \quad \text{かつ} \quad C - C' = 0, \quad \text{または} \quad \frac{\alpha + \beta}{2} = n\pi \quad \text{かつ} \quad C + C' = 0$$

である。これらは  $\alpha + \beta = n\pi$ : (74) かつ  $C = (-1)^{n+1} C'$  とまとめられる。

自由粒子系 理想気体の統計力学による取り扱いや、粒子の散乱の量子論では、特に自由粒子の量子状態に興味を持たれる。ところが十分大きな空間体積の中の自由運動は常に準古典的だから、微視的状态の位相空間に占める体積が  $h^3$  で与えられることはこの場合にも適用できる [1, pp.138–139].

自由粒子系に対してはこの結果を、改めて次のように導くこともできる。1 辺  $L$ 、体積  $V = L^3$  の立方体領域  $0 \leq x, y, z \leq L$  における 1 つの粒子を考えよう。この粒子の波動関数  $\psi(\mathbf{r})$  に周期境界条件

$$\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y+L, z) = \psi(x, y, z+L) = \psi(x, y, z)$$

を課す。このとき波動関数は周期境界条件の下で許容される波数  $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}\mathbf{n}$  (ただし  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$  は整数を成分に持つベクトル) を用いて、

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

と展開される。離散的な波数  $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}\mathbf{n}$  の 1 つ 1 つは波数空間に体積  $(2\pi/L)^3$  を占めるので、波数空間の体積要素  $\Delta^3 k$  に含まれる波数  $\mathbf{k}$  の数は  $\frac{\Delta^3 k}{(2\pi/L)^3}$  である。ところで波数  $\mathbf{k}$  は運動量の固有値  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  に対応するから、これは運動量空間の体積要素  $\Delta^3 p$  に含まれる固有振動の数が

$$\frac{\Delta^3 p}{(2\pi\hbar/L)^3} = \frac{V\Delta^3 p}{h^3}$$

であることを意味する\*29。これは各量子状態が位相空間に体積  $h^3$  を占めることと整合している。

粒子が  $N$  個ある場合への一般化は直接的である。  $3N$  次元の運動量空間の体積要素  $\Delta^{3N} p$  に含まれる状態数は

$$\frac{V^N \Delta^{3N} p}{h^{3N}}$$

で与えられる。

■式 (2.4.49) ここでポテンシャル (2.4.47):

$$V(x) = mg|x|, \quad (-\infty < x < \infty)$$

に対するパリティ奇の波動関数は 2 つのコサインが逆符号だから、 $n$  は奇数  $n_{\text{odd}}$  になる。このとき式 (2.4.49):

$$\int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m(E - V(x))} = \left(n_{\text{odd}} + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar$$

が得られる。

$$n_{\text{odd}} = 2n - 1, \quad (n = 1, 2, \dots)$$

と書くと

$$\frac{1}{2} \left(n_{\text{odd}} + \frac{1}{2}\right) = n - \frac{1}{4}$$

だから、式 (2.4.50) に書き換えられる。

\*29 なお、エネルギー固有値は

$$E = \frac{(\hbar\mathbf{k})^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \mathbf{n}^2$$

と表されるので、隣り合うエネルギー準位の差

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$$

は  $L \rightarrow \infty$  のとき  $\Delta E \rightarrow 0$  となる。すなわち大きな体積  $V$  を想定すれば、エネルギー準位は密集していると考えて良い。

■式 (2.4.50) 左辺の積分

$$\begin{aligned}
 & \text{(式 (2.4.50) 左辺の積分)} \\
 & = \sqrt{2mE} \int_0^{E/mg} dx \sqrt{1 - \frac{x}{E/mg}} \\
 & = \sqrt{2mE} \cdot \frac{E}{mg} \int_0^1 \sqrt{X} dX \quad \left( X \equiv \frac{x}{E/mg} \right) \\
 & = \sqrt{2mE} \cdot \frac{E}{mg} \cdot \frac{2}{3} \\
 & = \frac{2^{3/2}}{3} \frac{E^{3/2}}{m^{1/2}g}.
 \end{aligned}$$

■弾んでいるボールのポテンシャル (2.4.45) に対する厳密なエネルギー固有値 (2.4.53) の導出 元のポテンシャル (2.4.45):

$$V = \begin{cases} mgx, & x > 0 \\ \infty, & x < 0 \end{cases}$$

の固有値問題を厳密に解くことについて, Schrödinger 方程式

$$u''(x) = -\frac{2m(E - mgx)}{\hbar^2} u(x) = \frac{2m^2g}{\hbar^2} \left( x - \frac{E}{mg} \right) u(x)$$

は

$$X \equiv a \left( x - \frac{E}{mg} \right), \quad Y(X) \equiv u(x)$$

とおくと

$$a^2 Y''(X) = \frac{2m^2g}{\hbar^2} \cdot \frac{X}{a} \cdot Y(X)$$

となるから,  $a = (2m^2g/\hbar^2)^{1/3}$  と選べば

$$\begin{aligned}
 & Y'' - XY = 0, \tag{75} \\
 \therefore Y(X) = A_i(X) & \equiv \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3} + Xt\right) dt : \text{エアリー関数}
 \end{aligned}$$

となる.

エネルギー準位 (2.4.53) は境界条件

$$0 = u(0) = A_i(X)|_{x=0} = A_i\left(-\frac{aE}{mg}\right)$$

から

$$\frac{aE}{mg} = \lambda_n, \quad \therefore E = \lambda_n \frac{mg}{a} = \frac{\lambda_n}{2^{1/3}} (mg^2 \hbar^2)^{1/3}$$

として得られる.

## 2.5 プロパゲーターとファインマンの経路積分

波動力学でのプロパゲーター (pp.148–149), 遷移振幅としてのプロパゲーター (pp.154–156)

波動関数  $\psi(\mathbf{x}', t) = \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle$  の時間発展を

$$\psi(\mathbf{x}'', t) = \int d^3x' K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) \psi(\mathbf{x}', t_0)$$

と書いてプロパゲーター  $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$  を定義すると,

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \langle \mathbf{x}'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle \quad (76)$$

と表される [導出は本稿次節]. これは初期時刻  $t = t_0$  に粒子が位置  $\mathbf{x}'$  に局在していた系の状態  $e^{-iH(t-t_0)} |\mathbf{x}'\rangle$  における波動関数となっており, それ故  $\mathbf{x}'$  と  $t_0$  を固定し,  $\mathbf{x}''$  と  $t$  の関数と見たプロパゲーターは Schrödinger の波動方程式を満たす<sup>\*30</sup>.

我々は Schrödinger 描像においてプロパゲーター (76) を, 時刻  $t = t_0$  に位置  $\mathbf{x}'$  に局在していた粒子が時刻  $t$  に位置  $\mathbf{x}''$  に見出される確率 (密度の) 振幅と解釈した. もちろん Heisenberg 描像に移行しても, 同じ解釈へと導かれる. 実際 Heisenberg 描像の位置固有ケットは  $|\mathbf{x}', t\rangle = e^{+iH(t-t_0)/\hbar} |\mathbf{x}'\rangle$  と変化するため (ただし  $|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}', t_0\rangle$ , 2.2 節), プロパゲーターは

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = (\langle \mathbf{x}'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \cdot | \mathbf{x}' \rangle) = \langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$$

と書き直される. これはやはり粒子がある時空点  $(\mathbf{x}', t_0)$  から他の時空点  $(\mathbf{x}'', t)$  に移る遷移振幅と見なせる.  $\{|a'\rangle\}$  による展開を経由した説明  $\{|a'\rangle\}$  を  $H$  と交換する観測量とする.

$$\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle = \langle \mathbf{x}' | e^{-iH(t-t_0)} | \alpha, t_0 \rangle = \sum_{a'} \langle \mathbf{x}' | a' \rangle \langle a' | \alpha, t_0 \rangle e^{-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar},$$

$$c_{a'}(t_0) \equiv \langle a' | \alpha, t_0 \rangle = \int d^3x' \langle a' | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0 \rangle$$

は波動力学においてよく知られた関係

$$\psi(\mathbf{x}', t) = \sum_{a'} c_{a'}(t_0) u_{a'}(\mathbf{x}') e^{-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar}, \quad (2.5.3)$$

$$c_{a'}(t_0) = \int d^3x' u_{a'}^*(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t_0) \quad (2.5.6)$$

を与える. これらを合わせて

$$\psi(\mathbf{x}'', t) = \int d^3x' \underbrace{\sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | a' \rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle e^{-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar}}_{\text{プロパゲーター } K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0), \text{ Green 関数}} \psi(\mathbf{x}', t_0)$$

<sup>\*30</sup> ここから推察されるように, 実はプロパゲーターは時間に依存する波動方程式のグリーン関数となっている.



を得る. ここでプロパゲーターは

$$\begin{aligned}
& K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) \\
&= \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | a' \rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle e^{-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar} \\
&= \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | a' \rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle \\
&= \langle \mathbf{x}'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle \quad \Leftarrow \quad \text{初期に粒子が位置 } \mathbf{x}' \text{ にいる系の状態 } e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle \text{ の波動関数} \\
&= \langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle \quad \Leftarrow \quad \begin{cases} \text{遷移振幅} \\ \text{異なる時刻の Heisenberg 表示の基底ケット } |\mathbf{x}, t\rangle \text{ の変換関数 (1.5 節)} \end{cases}
\end{aligned}$$

である.

経路に関する和としての経路積分, ファインマンの理論 (pp.156–166)

ここからは簡単のために, 粒子の  $x$  軸に沿う 1 次元的な運動を考えよう. 各時刻における Heisenberg 表示の基底ケット  $\{|x', t\rangle\}$  の完備関係式を次々と挿入すると, 遷移振幅は

$$\begin{aligned}
& \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle \\
&= \int dx_{N-1} dx_{N-2} \cdots dx_2 \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_{N-2}, t_{N-2} \rangle \cdots \langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle \quad (77)
\end{aligned}$$

と表される (合成の性質). 右辺は時間間隔  $\Delta t = \frac{t_N - t_1}{N-1}$  おきに, 途中の時刻  $t_n = n\Delta t (n = 2, \dots, N-1)$  を十分密にとれば ( $N \gg 1$ ), 時空において始点  $(x_1, t_1)$  と終点  $(x_N, t_N)$  を結ぶあらゆる経路からの寄与 (粗く言えばある種の “和”) を表す (経路の 1 例を図 19 に示す).

このように量子力学では (不確定性原理に関係して), 粒子の軌道 (経路) を追跡することはできず, 仮に経路の概念を許容した場合, 粒子は可能な経路を確率的にとることになる [11, p.383]. これとは対照的に古典力学では, 粒子の軌道は最小作用原理により 1 つに定まる. そこで量子力学の, 古典的な最小作用原理への極限移行はどのように達成されるのかを問題にしよう. 我々は作用を  $S$  として, 準古典的な波動関数が  $\psi \sim e^{iS/\hbar}$  と表されることを既に知っている. これを踏まえて微小時間  $\Delta t = t_n - t_{n-1}$  に関する遷移振幅を

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \frac{1}{w(\Delta t)} e^{iS(n, n-1)/\hbar}, \quad \frac{1}{w(\Delta t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \quad (78)$$

と仮定する. ただし微小時間  $\Delta t$  における経路は線分と見なすことができ,  $S(n, n-1)$  はこの線分の経路に沿う作用積分である. また規格化因子  $w(\Delta t)$  はポテンシャル  $V(x)$  の具体形には依らないものと仮定し, 自由粒子に対して規格化条件

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle \rightarrow \delta(x_n - x_{n-1}) \quad (\Delta t \rightarrow 0 \text{ のとき})$$

が満たされるように定めた (詳細は下記). このとき粒子の遷移振幅 (77) は, Feynman の経路積分

$$\begin{aligned}
\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{w(\Delta t)^{(N-1)/2}} \int dx_{N-1} \cdots dx_2 e^{iS(N, 1)/\hbar} \\
&\equiv \int_{x_1}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)] e^{iS[x(t)]/\hbar} \quad (79)
\end{aligned}$$

で与えられる (ここに  $S(N, 1) \equiv \sum_{n=2}^N S(n, n-1)$  は図 19 の与えられた経路に沿う作用積分であり,  $N \rightarrow \infty$  で  $S(N, 1) \rightarrow S[x(t)]$  である). これは始点と終点を結ぶあらゆる経路が遷移振幅に対して  $e^{iS[x(t)]/\hbar}$  の寄与

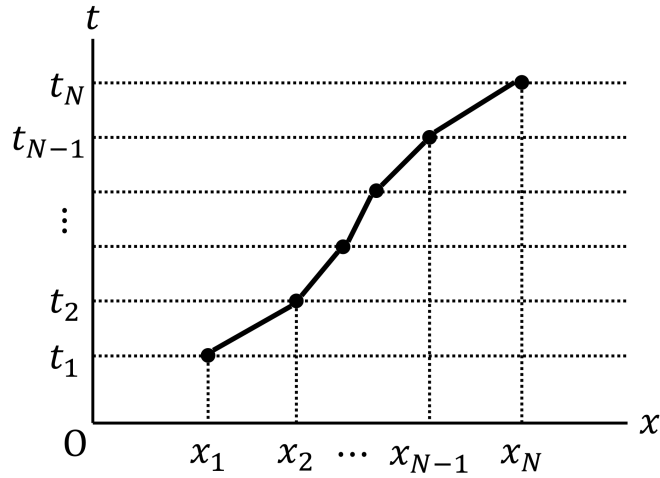


図 19 各時刻  $t_n = n\Delta t (n = 2, \dots, N-1)$  における粒子の位置  $x_n$  を指定して得られる, 始点  $(x_1, t_1)$  と終点  $(x_N, t_N)$  を結ぶ経路

することを意味する. ところが古典的極限  $\hbar \rightarrow 0$  では経路の変化に伴って位相が急激に変化するため, 異なる経路からの寄与が打消し合い, 例外的に作用  $S$  が停留値をとる (したがって経路の変化に伴ってゆっくりと変化する) 古典的経路の近傍からの寄与だけが残る. こうして古典論における最小作用原理が再現される.

Feynman の経路積分 (79) で表された遷移振幅  $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$  は終点  $(x_N, t_N) = (x, t)$  の関数と見なすと, その規格化の仕方により初期条件  $\lim_{t \rightarrow t_1} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle = \delta(x - x_1)$  を満たす. またこれは Schrödinger の時間に依存する波動方程式を満たすことが確かめられるので (確認は下記), プロパゲーター  $K(x, t; x_1, t_1) = \langle x, t | x_1, t_1 \rangle$  に一致することになる. 上式 (78) の仮定 (規格化定数の表式を含む) はこのことから正当化され, 経路積分による量子力学の定式化は Schrödinger の波動力学と等価であることが結論される. [付録 C では, 遷移振幅の経路積分による表現を, (時間的発展の演算子の表式から) 直接に導出する.]

## 2.5 節, 式の導出など

■微小時間の遷移振幅 (78) における規格化定数の決定 規格化因子  $w(\Delta t)$  はポテンシャル  $V(x)$  の具体形には依らないものと仮定すると, 自由粒子に対してその値を評価すれば充分である. 自由粒子の Lagrangian は運動エネルギー  $\frac{m}{2} \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} \right)^2$  で与えられるので, 微小時間の遷移振幅 (78) は

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \frac{1}{w(\Delta t)} \exp \left[ \frac{i m}{\hbar} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{2 \Delta t} \right]$$

と書ける. ここで Gauss 型の関数からデルタ関数が作られること

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left( \frac{i m \xi^2}{2 \hbar \Delta t} \right) \rightarrow \delta(\xi), \quad \Delta t \rightarrow 0 \quad (80)$$

を考えると, 規格化条件

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle \rightarrow \delta(x_n - x_{n-1}) \quad (\Delta t \rightarrow 0 \text{ のとき})$$

が満たされるには

$$\frac{1}{w(\Delta t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}$$

とおけば良いことが分かる。

■Feynman の経路積分 (79) が Schrödinger 方程式を満たすことの確認 Feynman の経路積分 (79), ないしその基となる仮定 (78) によれば, 遷移振幅は

$$\begin{aligned}\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_1, t_1 \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \left( \frac{x_N - x_{N-1}}{\Delta t} \right)^2 - V \right\} \Delta t \right] \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_1, t_1 \rangle\end{aligned}$$

と表される ( $\Delta t = t_N - t_{N-1}$  は無限小). ここで変数  $\xi = x_N - x_{N-1}$  を導入し,  $x_N \rightarrow x, t_N \rightarrow t + \Delta t$  と改めると

$$\langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp \left( \frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t} - \frac{iV\Delta t}{\hbar} \right) \langle x - \xi, t | x_1, t_1 \rangle$$

と書き換えられる. 両辺を  $\Delta t$  について展開し, また上式 (80) より  $\Delta t \rightarrow 0$  のとき積分への主要な寄与が  $\xi = 0$  の近くから来ることを踏まえて,  $\xi$  についても級数展開を行うと

$$\begin{aligned}&\langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp \left( \frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t} \right) \left( 1 - \frac{iV\Delta t}{\hbar} + \dots \right) \left[ \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \dots \right] \quad (81)\end{aligned}$$

を得る (右辺  $[\dots]$  内における  $\xi$  の 1 次の項はゼロになる奇関数の積分を与えるため, あらかじめ落とした). Fresnel 積分の公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp \left( \frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t} \right) = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\Delta t}{m}} \quad (82)$$

より  $\Delta t$  の 0 次の項は, 両辺ともに  $\langle x, t | x_1, t_1 \rangle$  である. 次に式 (82) と, これをパラメーター  $\Delta t$  で微分して得られる公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi^2 \exp \left( \frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t} \right) = \sqrt{2\pi} \left( \frac{i\hbar\Delta t}{m} \right)^{3/2}$$

を合わせて用い, 上式 (81) の両辺において  $\Delta t$  の 1 次の項を拾い上げると,

$$\begin{aligned}\Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp \left( \frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t} \right) \left( \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle - \frac{iV\Delta t}{\hbar} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \right) \\ &= \Delta t \left( \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle - \frac{i}{\hbar} V \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \right)\end{aligned}$$

となる. これは遷移振幅  $\langle x, t | x_1, t_1 \rangle$  に対する, 時間に依存する波動方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + V \langle x, t | x_1, t_1 \rangle$$

に他ならない.

## 2.5 について

■波動関数の時間発展は決定論的 「……波動関数の時間発展は，系が乱されずにいる限り……決定論的である」(p.149 下から 8~6 行) について，Schrödinger 方程式  $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$  は初期時刻での波動関数  $\psi$  の分布が与えられると，後の時刻での  $\psi$  の値が逐次的に定まることを意味している．またこれは線形の方程式なので，物理的な状態の重ね合せもまた物理的な状態であるという，重ね合せの原理が保証される [1, p.51]．このように波動関数 (の絶対値の 2 乗) は確率分布を表し，量子力学的な予言は確率的にしか行えないものの，波動関数自体の時間発展は決定論的である．観測が系を乱すため，これは我々の直接知ることのできる観測結果が確率的にしか予言できないことと矛盾しない．

■波動関数としてのプロパゲーター 「この二つの性質によって……プロパゲーター (2.5.8) は……波動関数となる」(式 (2.5.10) の上) のは，プロパゲーター  $K$  がそのような波動関数の満たす微分方程式と初期条件を満たしているからである．

■プロパゲーターの式 (2.5.10) [本稿の式 (76)] の導出

$$(\text{式 (2.5.8) 右辺}) = \sum_{a'} \left\langle \mathbf{x}'' \left| \exp \left[ \frac{-iH(t-t_0)}{\hbar} \right] \right| a' \right\rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle = (\text{式 (2.5.10) 右辺})$$

と戻せば良い．

あるいは初めから  $\{|a'\rangle\}$  による展開を経由せずに

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}'', t) &= \langle \mathbf{x}'' | \alpha, t_0; t \rangle \\ &= \langle \mathbf{x}'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \alpha, t_0 \rangle \\ &= \int d^3x' \langle \mathbf{x}'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0 \rangle \\ &= \int d^3x' K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) \psi(\mathbf{x}', t_0), \\ K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) &= \langle \mathbf{x}'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle : (\text{2.5.10}) \end{aligned}$$

とすれば，2 度手間にならない．

■式 (2.5.15) の導出 式 (2.5.8) を連続的固有値  $p'$  に対する表現

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \int dp' \langle \mathbf{x}'' | p' \rangle \langle p' | \mathbf{x}' \rangle e^{-iE_{p'}(t-t_0)/\hbar}$$

に置き換えた後，式 (1.7.32):  $\langle \mathbf{x}' | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar}$  を用いれば良い．

■調和振動子の波動関数 (2.5.17) の導出 式 (2.5.17) の左辺  $u_n(\mathbf{x}')e^{-iE_n t/\hbar}$  は式 (2.1.41) から得られる．これに  $u_n(\mathbf{x}')$  の式 (A.4.3) と  $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$  を代入して式 (2.5.17) 右辺を得る．

■調和振動子に対するプロパゲーター (2.5.18) の導出 プロパゲーターの式 (2.5.8) を

$$a' \rightarrow n, \quad K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \sum_n \left( u_n(\mathbf{x}'') e^{-iE_n t/\hbar} \right) \left( u_n(\mathbf{x}') e^{-iE_n t_0/\hbar} \right)^*$$

と見て波動関数の式 (2.5.17) を代入すると

$$K(x'', t; x', t_0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{-m\omega(x'^2 + x''^2)}{2\hbar}\right] e^{-i\omega(t-t_0)/2} \\ \times \sum_n \frac{1}{2^n n!} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x'\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x''\right) e^{-i\omega n(t-t_0)}$$

となる。そこで

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x' \equiv \xi, \quad \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x'' \equiv \eta, \quad e^{-i\omega(t-t_0)} \equiv \zeta$$

として公式 (2.5.19) を用い、

$$1 - \zeta^2 = 1 - e^{-2i\omega(t-t_0)} = e^{-i\omega(t-t_0)}(e^{i\omega(t-t_0)} - e^{-i\omega(t-t_0)}) \\ = 2i \sin[\omega(t-t_0)]e^{-i\omega(t-t_0)}$$

に注意すると

$$K(x'', t; x', t_0) \\ = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{-m\omega(x'^2 + x''^2)}{2\hbar}\right] e^{-i\omega(t-t_0)/2} \\ \times \exp\left[\frac{m\omega(x'^2 + x''^2)}{\hbar}\right] \frac{e^{i\omega(t-t_0)/2}}{\sqrt{2i \sin[\omega(t-t_0)]}} \\ \times \exp\left[\frac{e^{i\omega(t-t_0)}}{2i \sin[\omega(t-t_0)]} \left\{ -\frac{m\omega}{\hbar}(x'^2 + x''^2) + 2\frac{m\omega}{\hbar}x'x''e^{-i\omega(t-t_0)} \right\}\right] \\ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t-t_0)]}} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin[\omega(t-t_0)]} \left\{ -i \sin[\omega(t-t_0)](x'^2 + x''^2) + e^{i\omega(t-t_0)}(x'^2 + x''^2) - 2x'x'' \right\}\right] \\ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t-t_0)]}} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin[\omega(t-t_0)]} \left\{ (x'^2 + x''^2) \cos[\omega(t-t_0)] - 2x'x'' \right\}\right] : (2.5.18)$$

を得る。

■式 (2.5.20) について 最後の等号では  $\int d^3x' |\langle x'|a' \rangle|^2 = \langle a'|a' \rangle = 1$  を用いる。

■ $G(t)$  の Laplace 変換 (2.5.23) 式 (2.5.23) では以下のように  $G(t)$  の独立変数を  $-\beta$  と見る。

$$\tilde{G}(E) = \int_0^\infty e^{-E(-\beta)} G(t) d(-\beta) = -i \int_0^\infty G(t) \exp(iEt/\hbar)/\hbar dt$$

$E \rightarrow E + i\varepsilon$ : (2.5.24) とすると求める積分は

$$\tilde{G}(E) = \int_0^\infty e^{-\varepsilon t/\hbar} e^{i(E-E_{a'})t/\hbar} dt$$

となる。『フaynマン物理学 II』5-7 にならって、これを次のように求める [5, pp.57-58]。まず  $\varepsilon = 0$  であれば、これは複素平面における無限小の変位  $e^{i(E-E_{a'})t/\hbar} dt$  の和であり、変位を合計したベクトルの先端は円周上を運動する (図 20 参照)。円の半径を  $R$  とすると、中心は  $iR$  である半径  $R$  は次のように求まる。各無限小変位  $e^{i(E-E_{a'})t/\hbar} dt$  の長さは、対応する中心角を  $d\theta$  として  $Rd\theta = dt$  と表される。中心角  $d\theta$  は、無限小変位  $e^{i(E-E_{a'})t/\hbar} dt$  とこれに続く変位  $e^{i(E-E_{a'})(t+dt)/\hbar} dt$  の成す角  $(E-E_{a'})dt/\hbar$  に等しい。よって半径は

$$R = \hbar/(E - E_{a'})$$

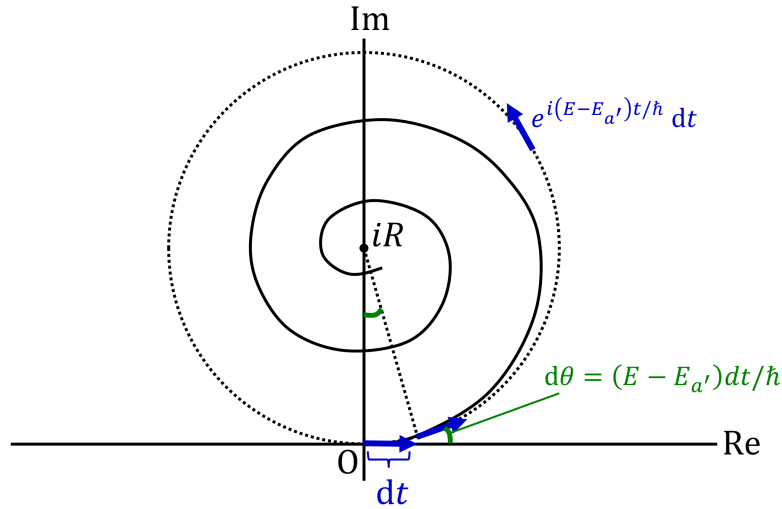


図 20 積分  $\tilde{G}(E)$  の図式解法

と定まる.

さて,  $\varepsilon \neq 0$  に対して因子  $e^{-\varepsilon t/\hbar}$  によりベクトルの先端は回転しながら円の中心  $iR$  に近づくから,

$$\int_0^\infty e^{-\varepsilon t/\hbar} e^{i(E-E_{a'})t/\hbar} dt = iR = i\hbar/(E - E_{a'})$$

となって式 (2.5.25) を得る. これは結果的に, 式 (2.5.23) の積分上限に由来する不定  $e^{i\infty}$  を 0 とおいた結果に一致する.

■式 (2.5.26):  $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$  式 (2.5.26) は次のように見た方が容易だろう. Heisenberg 表示の基底ケットは観測量と“逆向きに”変化するため

$$|\mathbf{x}'', t\rangle = e^{iH(t-t_0)/\hbar} |\mathbf{x}''\rangle \quad \overleftrightarrow{\text{DC}} \quad \langle \mathbf{x}'' | (e^{iH(t-t_0)/\hbar})^\dagger = \langle \mathbf{x}'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$$

だから  $\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle = \langle \mathbf{x}'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle$  であり, 式 (2.5.10) よりこれは  $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$  である.

また,  $e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle$  を Schrödinger 表示の状態ケットと見れば, これと基底  $\langle \mathbf{x}'' |$  の内積である  $\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle = \langle \mathbf{x}'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle$  は波動関数だから (式 (2.5.10) の下 3 行), 仮定 (2.5.40):

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle \propto e^{iS(n,n-1)/\hbar}$$

は p.139 で  $\psi$  の位相を作用  $S$  (を  $\hbar$  で割ったもの) と見たことに合致する. ただし  $\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$  の次元は

$$[\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle] = [\langle \mathbf{x}'', t_0 | \mathbf{x}', t_0 \rangle] = [\delta(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')] = L^{-3}$$

で波動関数の次元  $L^{-3/2}$  と一致しない (規格化の違い).

■経路積分と古典的極限 p.160, 1.10~p.161, 1.5 は次のように考えれば良いだろう. 現実には粒子はあらゆる経路を通っている. そのおのおのが遷移  $|x_1, t_1\rangle \rightarrow |x_N, t_N\rangle$  の確率振幅に寄与する (重ね合せ). ところで古典的極限  $\hbar \rightarrow 0$  では近似的に遷移振幅  $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$  が古典的経路からの寄与だけで決まることになる. よって古典的極限で粒子は古典的経路しか通っていない.

■「調和振動子に対して同様の比較」(式(2.5.42)の2行下)  $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$  の式(2.5.40)において、 $x^2 \simeq \left(\frac{x_{n-1} + x_n}{2}\right)^2$  ではなく  $x^2 \simeq \frac{x_{n-1}^2 + x_n^2}{2}$  と近似して

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \left[ \frac{1}{w(\Delta t)} \right] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \Delta t \frac{m}{2} \left\{ \left( \frac{x_n^2 - x_{n-1}^2}{\Delta t} \right)^2 - \omega^2 \frac{x_n^2 + x_{n-1}^2}{2} \right\} \right]$$

とする。一方、調和振動子に対するプロパゲーター(2.5.18)は、文字を置き換え  $\Delta t$  の1次までとると

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar \Delta t} \left\{ (x_n^2 + x_{n-1}^2) \left( 1 - \frac{(\omega \Delta t)^2}{2} \right) - 2x_{n-1}x_n \right\} \right]$$

となる。2式の指数部分は一致し、やはり  $w(\Delta t)$  の式(2.5.44)を得る。

### ■規格直交性(2.5.43)

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \langle \mathbf{x}'' | \exp \left[ \frac{-iH(t-t_0)}{\hbar} \right] | \mathbf{x}' \rangle$$

$$\rightarrow \lim_{t \rightarrow t_0} K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \langle \mathbf{x}'' | \mathbf{x}' \rangle = \delta^3(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}') : (2.5.9)$$

として確認済みである。

■規格化定数(2.5.44) 式(2.5.45a)はFresnel積分であり、 $\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left( \frac{im\xi^2}{2\hbar \Delta t} \right) \right\} d\xi = 1$  を意味する。しかしこれだけでは  $\{ \}$  内が  $\delta(\xi)$  であると結論できない。式(2.5.45b):

$$\frac{e^{-\alpha x^2}}{\sqrt{\pi/\alpha}} \rightarrow \delta(x), \quad \alpha = i\beta, \quad \beta \rightarrow \infty$$

によれば結果的に  $\delta(\xi)$  である。そして規格直交性(2.5.43)の十分条件(2.5.45b)だけから  $w(\Delta t)$  の値が式(2.5.44)で良いと分かる。

■重ね合せの原理 「(1)重ね合せの原理」(p.164, 1.1.2)が確率密度の振幅に対する重ね合せ(2.5.31)のことならば、それは「(2)遷移振幅の合成の性質」(p.164)と  $\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$  が遷移振幅であるという仮定の中に含まれていると言える。

■ $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$  に対する経路積分表式が Schrödinger 方程式を満たすこと (pp.164-166) Feynman の経路積分(2.5.49)は新しい仮定(2.5.40):  $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle \propto e^{iS(n, n-1)/\hbar}$  を含んでいるから、これが Schrödinger 方程式を満たすことは自明でない。逆にこれが Schrödinger 方程式を満たすことを確認でき、さらに  $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$  と  $\int_{x_1}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)] \exp \left( \frac{i}{\hbar} S(n, 1) \right)$  に対する(時間についての)初期条件が一致すれば、仮定(2.5.40)の正当性が示されたことになる。

## 2.6 ポテンシャルとゲージ変換

一定のポテンシャル (pp.166-169)

- 状態ケット  $|\alpha, t_0; t\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |\alpha\rangle$  はゲージ変換  $V(\mathbf{x}) \rightarrow V(\mathbf{x}) + V_0$  で  $e^{-iV_0(t-t_0)/\hbar}$  の位相変化を受ける。
- 観測の期待値に現れる Bohr 振動数(エネルギーの差で決まる)は  $V(\mathbf{x})$  を用いても  $V(\mathbf{x}) + V_0$  を用いても全く同じである。

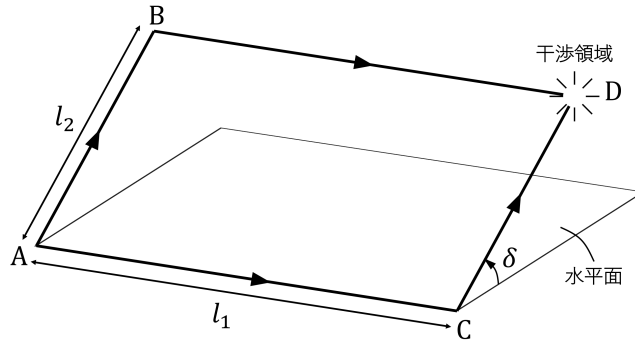


図 21 重力が引き起こす量子的干渉の実験 [ABDC は矩形]

- ポテンシャルが空間的に一様な領域では粒子に力が働かないにも関わらず、異なる一様なポテンシャル  $V_1, V_2$  を通った粒子は干渉する。

#### 量子力学に現(わ)れる重力 (pp.169–174)

古典力学では重力場中の物体の運動は質量によらない。一方、量子力学では

$$\text{Schrödinger 方程式} \quad \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + m\Phi_{\text{grav}} \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (\Phi_{\text{grav}} : \text{重力ポテンシャル})$$

$$\text{遷移振幅} \quad \langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left[ i \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \frac{(m\dot{x}^2/2) - mgz}{\hbar} \right] \quad (2.4 \text{ 節})$$

のいずれにも質量  $m$  が  $m/\hbar$  の組合せで入る。そこで  $\hbar$  が、したがって  $m$  があからさまに現れるような、重力の与える非凡な量子力学的効果を調べたい。微視的なスケールでは重力は非常に弱く、なかなか観測できないけれど、技巧を尽くした中性子干渉計により、重力が引き起こす量子的干渉を捉えることに成功した。実験では粒子線(熱中性子線)を、図 21 のように 2 つの経路 ABD と ACD に分けて D で干渉させる。装置のサイズに比べて波束は小さいので、古典的概念を用いることができる。BD は AC よりも重力ポテンシャルが  $m_n g l_2 \sin \delta$  だけ高いので ( $m_n$  は中性子の質量)、経路 ABD を通った波束は ACD を通った波束に比べて、相対的に

$$\exp \left[ \frac{-im_n g l_2 (\sin \delta) T}{\hbar} \right]$$

の位相変化を受ける。ここに  $T$  は波束が AC(または BD) を進む時間である。(AB, CD での位相変化は相対的な位相差に寄与しない。) ここから干渉領域 D の強度は角度  $\delta$  の変化に伴って、極大・極小を繰り返すことが予想される。実際、そのような結果が実験的に確かめられた。

#### 電磁気学におけるゲージ変換 (pp.174–183)

■電磁場のある場合の基礎方程式 (pp.174–177) 電磁場(時間に陽に依らないと仮定)と相互作用する荷電粒子(質量  $m$ , 電荷  $e$ )の系に対して、

- 古典的な Hamiltonian

$$H = \frac{(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2m} + e\phi$$



を演算子に置き換える際、 $H$  が Hermite 的になるように  $\mathbf{p}$  と  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  の順序を

$$\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 \rightarrow \mathbf{p}^2 - \frac{e}{c}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \left(\frac{e}{c}\right)^2 \mathbf{A}^2$$

とする [「自由粒子，エーレンフェストの定理」の節の第 1 段落 (p.113) を併せて参照].

- 正準交換関係を満たす平行移動演算子中の運動量は，  
粒子の力学的運動量  $\mathbf{\Pi} \equiv m \frac{d\mathbf{x}}{dt}$  でなく，正準運動量  $\mathbf{p} = \mathbf{\Pi} + (e/c)\mathbf{A}$  である\*31.  
 $\mathbf{p}$  と  $P_i$  が演算子として関係  $\mathbf{p} = \mathbf{\Pi} + (e/c)\mathbf{A}$  を満たすことは，Heisenberg 方程式

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{[x_i, H]}{i\hbar} = \frac{p_i - eA_i/c}{m} \quad (2.6.22)$$

による [本稿次節で補足].

- 正準運動量は交換するのに対し ( $[p_i, p_j] = 0$ )，力学的運動量の交換関係

$$[\Pi_i, \Pi_j] = \frac{i\hbar e}{c} \varepsilon_{ijk} B_k \quad (83)$$

はゼロにならない [上式の導出は本稿次節].

- 力学的運動量  $\mathbf{\Pi}$  を用い，Hamiltonian は  $H = \mathbf{\Pi}^2/2m + e\phi$  と書ける [古典論と同じ].
- Heisenberg 方程式

$$m \frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = \frac{d\mathbf{\Pi}}{dt} = e \left[ \mathbf{E} + \frac{1}{2c} \left( \frac{d\mathbf{x}}{dt} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \frac{d\mathbf{x}}{dt} \right) \right]. \quad (2.6.27)$$

[導出は本稿次節.] 期待値をとると，場の中の粒子に対する Eherenfest の定理になる.

- Schrödinger 方程式

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m} \left[ -i\hbar \nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \cdot \left[ -i\hbar \nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \\ & + e\phi(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \end{aligned} \quad (2.6.29)$$

$$\rightarrow \text{連続の式 } \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla' \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (2.6.30)$$

$$\text{確率の流れ } \mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla' \psi) - \frac{e}{mc} \mathbf{A} |\psi|^2 \quad (2.6.31)$$

$$\begin{aligned} & \left( \text{置き換え } \nabla' \rightarrow \nabla' - \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A} \text{ から予期される結果} \right) \\ & = \frac{\rho}{m} \left( \nabla' S - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right). \end{aligned} \quad (2.6.33)$$

(波動方程式 (2.6.29) の導出は下記.) [連続の式 (2.6.30) の導出は本稿次節\*32.]

\*31 このため，正準運動量に記号  $\mathbf{p}$  を使い続けるのが良い.

\*32  $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla'$  を用いれば

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \Leftrightarrow \nabla' \rightarrow \nabla' - \left( \frac{ie}{\hbar c} \right) \mathbf{A} : (2.6.32),$$

$$\mathbf{j} = \frac{\rho}{m} \left( \nabla S - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) : (2.6.33) \Leftrightarrow \mathbf{j} = \text{Re}[\psi^* (\mathbf{\Pi}/m) \psi].$$

- $\mathbf{j}$  の空間積分は (正準運動量  $\mathbf{p}$  ではなく) 力学的運動量  $\mathbf{\Pi}$  に関する :

$$\int d^3x' \mathbf{j} = \frac{\langle \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \rangle}{m} = \frac{\langle \mathbf{\Pi} \rangle}{m}.$$

[以上, 場をゼロと置くと自由粒子に対する正しい関係式に戻ることが見て取れる.]

### ■ゲージ変換 (pp.178-183)

- 古典電磁気学のゲージ関数  $\Lambda(\neq \Lambda(t))$  によるゲージ変換  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\Lambda, \phi \rightarrow \phi$  において, 正準運動量  $\mathbf{p}$  は変化するけれど, 力学的運動量  $\mathbf{\Pi}$  は変化しない.
- 量子力学でも場のゲージ変換に伴って状態がユニタリー変換

$$|\alpha\rangle \rightarrow e^{ie\Lambda(\mathbf{x})/\hbar c} |\alpha\rangle$$

を受けるとすると<sup>\*33\*34</sup>,  $\langle \mathbf{x} \rangle, \langle \mathbf{\Pi} \rangle, \mathbf{j}$  の不変性が満たされ (確認は下記), Schrödinger 方程式

$$\left[ \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m} + e\phi \right] |\alpha, t_0; t\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle \quad (2.6.51)$$

もゲージ不変に留まる [本稿次節で教科書を補足しつつ確認].

### アハラノフ・ボーム効果 (pp.183-188)

これは電磁場の影響を論じた pp.174-177 に関する.

Aharonov-Bohm(アハラノフ・ボーム) 効果は標準的な設定では次のような現象として現れる. すなわち荷電粒子は磁場 (磁束密度)  $\mathbf{B}$  のないソレノイドの外部を運動しているにも関わらず, ソレノイドの外部においてゼロにはならないベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  の影響を受けて<sup>\*35</sup>,

- 粒子の束縛状態におけるエネルギー・スペクトルが磁場のない場合と比べて変化する.
- またソレノイドの両脇を通る粒子の物質波は, 磁場の強度に応じた干渉効果を示す.

以下, もう少し詳しく述べよう.

■束縛状態に関する Aharonov-Bohm 効果 円筒殻  $\rho_a \leq \rho \leq \rho_b$  に閉じ込められた電子を考える (図 22 参照). 電子は円筒内  $\rho \leq \rho_a$  に入れず, したがって磁場は電子に Lorentz 力を及ぼさない. しかし円筒殻内の電子のエネルギー・スペクトルは, 円筒内  $\rho \leq \rho_a$  の磁場  $\mathbf{B} = B\hat{z}$  の存在により変化する. 式の上では, これは  $\rho_a \leq \rho \leq \rho_b$  におけるベクトルポテンシャル

$$\mathbf{A} = \frac{B\rho_a^2}{2\rho} \hat{\phi} \quad (2.6.62)$$

<sup>\*33</sup> 場とケットの変換を合わせてゲージ変換と呼ぶ.

<sup>\*34</sup> 波動関数の変換として書けば,

$$\psi(\mathbf{x}', t) \rightarrow e^{ie\Lambda(\mathbf{x}')/\hbar c} \psi(\mathbf{x}', t). \quad (2.6.55)$$

<sup>\*35</sup> 「このことからある人達は, 量子力学で基本的なのは  $\mathbf{B}$  ではなくて  $\mathbf{A}$  であると結論するようになった. しかし, [ここで取り上げる] 二つの例における観測可能な効果は, [磁束]  $\Phi_B$  のみに依存していて,  $\Phi_B$  は  $\mathbf{B}$  を用いて直接表されるということに注意しておきたい」 (p.188, 1.8-11).

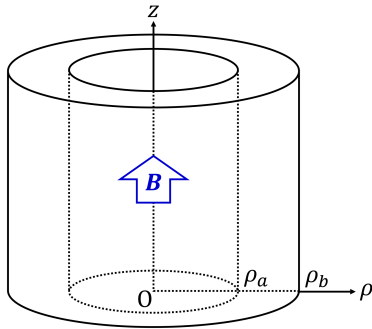


図 22 Aharonov-Bohm 効果 (束縛状態)

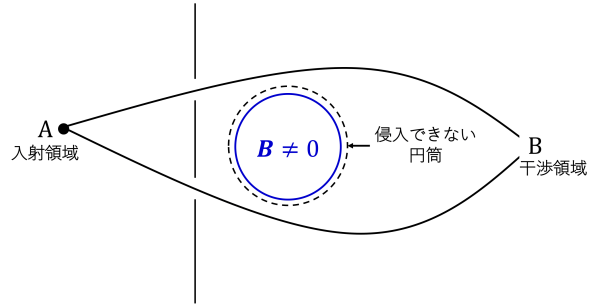


図 23 Aharonov-Bohm 効果 (もとの形)

[本稿次節で補足] に対して, Schrödinger 方程式において

$$\nabla \rightarrow \nabla - \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A}, \quad \therefore \frac{\partial}{\partial \phi} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{ie}{\hbar c} \cdot \frac{B\rho_a^2}{2\rho}$$

と置き換わることによる.

■(本来の)Aharonov-Bohm 効果 侵入できない円筒の内部に磁場  $\mathbf{B}$  (ポテンシャル  $\mathbf{A}$ , 磁束  $\Phi_B$ ) をかけたときの, その両側を通る電荷  $e$  の干渉を, Feynman の経路積分の観点から考える (図 23 参照). 磁場がある場合, 作用には  $\mathbf{B} = 0$  のときの値  $S^{(0)}[\mathbf{x}(t)]$  に対して付加的な項

$$\frac{e}{c} \int_A^B \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}$$

が現れるので, 遷移振幅は

$$\begin{aligned} & \int_{\text{上}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{iS^{(0)}[\mathbf{x}(t)]/\hbar} \exp \left[ \frac{ie}{\hbar c} \int_A^B \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right] \\ & + \int_{\text{下}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{iS^{(0)}[\mathbf{x}(t)]/\hbar} \exp \left[ \frac{ie}{\hbar c} \int_A^B \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right] \end{aligned} \quad (2.6.69)$$

と表される. ここで線積分  $\int_A^B \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}$  の値は円筒の「上方」(または「下方」)を通る全ての経路に対して共通であり, 「上側」と「下側」の経路とでの差

$$\int_{\text{上}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} - \int_{\text{下}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \Phi_B$$

は磁束を与えることに注意しよう [本稿次節で補足]. すると干渉領域 B に電荷が見つかる確率, すなわち全遷移振幅の絶対値の 2 乗は位相差

$$\frac{e}{\hbar c} \left( \int_{\text{上}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} - \int_{\text{下}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right) = \frac{e}{\hbar c} \Phi_B \quad (2.6.70)$$

に, したがって磁束  $\Phi_B$  に依存して変化する [本稿次節で補足].

### 磁気単極子 (pp.188–192)

これはゲージ変換を論じた pp.178–183 に関係する。

量子力学を用いると、もし磁気単極子が存在するならば、その磁荷  $e_M$  は量子化されていなければならないことが示される。その証明はゲージ変換を利用したものであり、以下のように要約できる。まず、磁気単極子の作る磁場

$$\mathbf{B} = \frac{e_M}{r^2} \hat{\mathbf{r}} \quad (2.6.74)$$

に関するベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  には必ず特異性がある。と言うのも、特異性がないと [恒等式として]

$$\int \mathbf{B} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = \int \boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}) d^3x = 0$$

が成り立つことになり、磁気単極子があるという仮定  $\mathbf{B} = \frac{e_M}{r^2} \hat{\mathbf{r}} = 4\pi e_M$  に反するからである (積分は  $e_M$  を取り囲む閉曲面にわたって行う)。実際、例えば磁場 (2.6.74) を導く 1 つのポテンシャル

$$\mathbf{A} = \frac{e_M(1 - \cos\theta)}{r \sin\theta} \hat{\boldsymbol{\phi}} \quad (2.6.75)$$

(導出は下記) は  $\theta = \pi$  で特異的である [ $\theta \rightarrow 0$  では  $A_\phi \sim \theta$  に従ってゼロに近づく]。そこで特異性のない領域だけで定義された複数のポテンシャル

$$\mathbf{A}^{(\text{I})} = \frac{e_M(1 - \cos\theta)}{r \sin\theta} \hat{\boldsymbol{\phi}}, \quad (\theta < \pi - \varepsilon) \quad [\text{上式 (2.6.75) と同じ}]$$

$$\mathbf{A}^{(\text{II})} = -\frac{e_M(1 + \cos\theta)}{r \sin\theta} \hat{\boldsymbol{\phi}} \quad (\theta > \varepsilon) \quad [\text{上式 (2.6.75) で } \theta \rightarrow \pi - \theta \text{ として得られる}]$$

を用いて、定義域が空間全体を覆うようにする (図 24 参照)。 $\mathbf{A}^{(\text{I})}$ ,  $\mathbf{A}^{(\text{II})}$  の両方が定義された領域 ( $\varepsilon < \theta < \pi - \varepsilon$ ) で、2 つのポテンシャルはゲージ関数

$$\Lambda = -2e_M\phi \quad (2.6.83)$$

を用いてゲージ変換  $\mathbf{A}^{(\text{II})} = \mathbf{A}^{(\text{I})} + \boldsymbol{\nabla}\Lambda$  によって結びついており (導出は下記)、したがって波動関数はゲージ変換

$$\psi^{(\text{II})} = e^{ie\Lambda/\hbar c} \psi^{(\text{I})} = \exp\left(\frac{-2iee_M\phi}{\hbar c}\right) \psi^{(\text{I})}$$

を受ける。ここから結論を引き出すために、波動関数が一価であることを要求しよう (位置固有ケットによる展開がユニークであるためには、その展開係数に他ならない波動関数は一価でなければならない)。 $r, \theta$  を固定し、 $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$  としたとき  $\psi^{(\text{I})}, \psi^{(\text{II})}$  の各々がもとの値に戻る条件として、

$$\frac{2ee_M}{\hbar c} = N, \quad \therefore e_M = \frac{\hbar c}{2|e|} N \quad (N = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

が見出される。すなわち磁荷  $e_M$  は  $\frac{\hbar c}{2|e|}$  を単位として量子化されていなければならない。

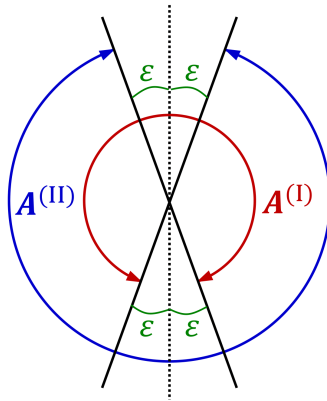


図 24 ポテンシャル  $A^{(I)}$  および  $A^{(II)}$  の有効領域

## 2.6 節, 式の導出など

■電磁場中の粒子に対する波動方程式 (2.6.29) の導出 Schrödinger 方程式  $H|\alpha, t_0; t\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t_0; t\rangle$  に両辺左から  $\langle \mathbf{x}' |$  をかけ,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}' | \left[ \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x})}{c} \right]^2 |\alpha, t_0; t\rangle &= \left[ -i\hbar\nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \langle \mathbf{x}' | \left[ \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x})}{c} \right] |\alpha, t_0; t\rangle \\ &= \left[ -i\hbar\nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \cdot \left[ -i\hbar\nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t\rangle \end{aligned} \quad (2.6.28)$$

を用いれば良い [上式 (2.6.28) について, 本稿次節で補足]. ここで最右辺の最初の  $\nabla'$  は, 後ろの  $\mathbf{A}(\mathbf{x}')$  と  $\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t\rangle$  の両方に作用することに注意する.

■期待値  $\langle \mathbf{x} \rangle, \langle \mathbf{\Pi} \rangle$  のゲージ不変性 ユニタリ演算子  $\mathcal{G} = e^{ie\Lambda(\mathbf{x})/\hbar c}$  によるゲージ変換  $|\alpha\rangle \rightarrow |\tilde{\alpha}\rangle = \mathcal{G}|\alpha\rangle$  に対して期待値

$$\langle \alpha | \mathbf{x} | \alpha \rangle, \quad \langle \alpha | \mathbf{\Pi} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} | \alpha \rangle$$

が不変になる条件は,

$$\mathcal{G}^\dagger \mathbf{x} \mathcal{G} = \mathbf{x}, \quad \mathcal{G}^\dagger \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\Lambda \right) \mathcal{G} = \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$$

である.  $\mathbf{x}$  は  $\mathbf{x}$  の任意の関数と交換するので, 第 1 式は成り立っている. 第 2 式もまた

$$\begin{aligned} e^{-ie\Lambda(\mathbf{x})/\hbar c} \mathbf{p} e^{ie\Lambda(\mathbf{x})/\hbar c} &= \mathbf{p} + e^{-ie\Lambda(\mathbf{x})/\hbar c} \left[ \mathbf{p}, e^{ie\Lambda(\mathbf{x})/\hbar c} \right] \\ &= \mathbf{p} - e^{-ie\Lambda(\mathbf{x})/\hbar c} i\hbar \nabla e^{ie\Lambda(\mathbf{x})/\hbar c} \quad (\because \text{式 (2.2.23b)} : [p_i, G(\mathbf{x})] = -i\hbar \partial_i G) \\ &= \mathbf{p} + \frac{e}{c}\nabla\Lambda \end{aligned} \quad (2.6.50)$$

により成り立っている.

■確率の流れ  $\mathbf{j}$  のゲージ不変性 波動関数のゲージ変換  $\psi(\mathbf{x}', t) \rightarrow e^{ie\Lambda(\mathbf{x}')/\hbar c} \psi(\mathbf{x}', t)$  に対して位相 (の  $\hbar$  倍) は

$$S \rightarrow S + \frac{e\Lambda}{c}$$

と変化するので、場のゲージ変換  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\Lambda$  と合わせると、確率の流れ (2.6.33):

$$\mathbf{j} = \frac{\rho}{m} \left( \nabla S - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)$$

は不変である.

■ポテンシャル (2.6.75):  $A_\phi = \frac{e_M(1-\cos\theta)}{r \sin\theta}$  が磁気単極子の作る場 (2.6.74) を与えることの確認 一般公式

$$\nabla \times \mathbf{A} = \left[ \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (A_\phi \sin\theta) - \frac{\partial A_\theta}{\partial\phi} \right] \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{r} \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial A_r}{\partial\phi} - \frac{\partial}{\partial r} (r A_\phi) \right] \hat{\boldsymbol{\theta}} + \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} (r A_\theta) - \frac{\partial A_r}{\partial\theta} \right] \hat{\boldsymbol{\phi}} \quad (2.6.76)$$

を適用すると,

$$\mathbf{B} = \left[ \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (A_\phi \sin\theta) \right] \hat{\mathbf{r}} - \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r A_\phi) \right] \hat{\boldsymbol{\theta}} = \frac{e_M}{r^2} \hat{\mathbf{r}} : (2.6.74)$$

を得る.

■ゲージ関数 (2.6.83) について 一般公式

$$\nabla\Lambda = \frac{\partial\Lambda}{\partial r} \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{r} \frac{\partial\Lambda}{\partial\theta} \hat{\boldsymbol{\theta}} + \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial\Lambda}{\partial\phi} \hat{\boldsymbol{\phi}}$$

により, ゲージ関数 (2.6.83):  $\Lambda = -2e_M\phi$  を用いたゲージ変換  $\mathbf{A}^{(\text{II})} = \mathbf{A}^{(\text{I})} + \nabla\Lambda$  は, ポテンシャルの間の正しい関係

$$\mathbf{A}^{(\text{II})} - \mathbf{A}^{(\text{I})} = -\frac{2e_M}{r \sin\theta} \hat{\boldsymbol{\phi}}$$

を再現することが分かる.

## 2.6 について

■状態ケットのゲージ変換に伴う変化 (2.6.7)  $V_0$  が「空間的には一様であるが, 時間依存性のある」とき, 「ハミルトニアン演算子  $H$  は時間に依存するが, 異なる時刻の  $H$  は互いに交換する」ならば, 時間的发展の演算子の式 (2.1.32) を用いて式 (2.6.7):

$$|\alpha, t_0; t\rangle \rightarrow \exp \left[ -i \int_{t_0}^t dt' \frac{V_0(t')}{\hbar} \right] |\alpha, t_0; t\rangle$$

を導ける.

■位相差の式 (2.6.9) について 式 (2.6.9) の積分範囲  $t_i \leq t \leq t_f$  にはスイッチ ON・OFF 前後の時間も含まれる. この間, ポテンシャルは  $0 \rightarrow V_0 \rightarrow 0$  と変化するから, 時間変化するポテンシャルに対する式 (2.6.7) を用いたものと考えられる.

■“Bohr 半径” (2.6.15) 引力を  $\alpha/r^2$  と書き記号  $\hbar$  を導入すると, Bohr 半径の表式は  $a_0 = \hbar^2/m\alpha$  と簡略化される.

“Bohr 半径” (2.6.15) の値を計算すると,

$$\frac{\hbar^2}{Gm_e^2 m_n} = \frac{(1.1 \times 10^{-34})^2 [(\text{J} \cdot \text{s})^2]}{(6.7 \times 10^{-11}) [\text{Nm}^2/\text{kg}^2] (9.1 \times 10^{-31}) [\text{kg}^2] (1.7 \times 10^{-27}) [\text{kg}]} \sim 10^{-34 \times 2 + 10 + 30 \times 2 + 27} [\text{m}] = 10^{31} [\text{cm}]$$

となる.

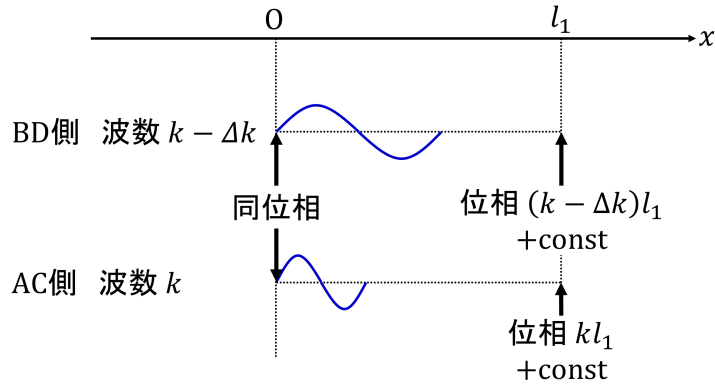


図 25 異なる重力ポテンシャル中を通過する波動

■式 (2.6.17) について  $v_{\text{波束}} = p/m_n, k = 1/\lambda$  より

$$T = \frac{l_1}{v_{\text{波束}}} = \frac{l_1}{p/m_n} = \frac{l_1}{\hbar k/m_n} = \frac{l_1}{\hbar/m_n \lambda}$$

となることから分かる. 相対的な位相の差 (2.6.16), (2.6.17) のいずれにも質量はやはり  $m_n/\hbar$  の組合せでのみ含まれている.

■式 (2.6.17) の波動力学的な考え方からの導出 「この波動力学的な考え方からも, (2.6.17) の結果が出てくることを示すのは, 読者の演習問題にしておこう」 (p.173) について, 任意の時刻で図 25 より

$$\phi_{\text{ABD}} - \phi_{\text{ACD}} = -\Delta k l_1 \quad (84)$$

となる. ( $m_n$  を単に  $m$  と書いた) エネルギー保存則 (2.6.18) に  $(p, z) = (\hbar k, 0), (\hbar(k - \Delta k), l_1 \sin \delta)$  を代入した式を辺々引き,  $\Delta k \ll k$  と考えて  $k^2 - (k - \Delta k)^2 = (2k - \Delta k)\Delta k \simeq 2k\Delta k$  と近似すると

$$\Delta k = m^2 g l_2 \sin \delta / k \hbar^2 = m^2 g l_2 \lambda \sin \delta / \hbar^2$$

を得る. これを式 (84) に戻して再び式 (2.6.17) を得る.

■時間に依らないポテンシャルを持つ電磁場を考えること (pp.174–175) について このとき時間に陽に依らない観測量に対する Heisenberg 方程式 (2.2.19) を適用できる.

■Heisenberg 方程式 (2.6.22) について 導出で用いるのは  $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}, [x_i, A_j(\mathbf{x})] = 0$  だけである. 結果的に

$$[x_i, p_j p_j] = 2i\hbar p_i, \quad [x_i, p_j A_j] + [x_i, A_j p_j] = 2i\hbar A_i, \quad [x_i, A_j A_j] = 0$$

となる. 以上,  $j$  について和をとる.

■力学的運動量の交換関係 (2.6.25) について これを示すのに  $p_i = -i\hbar \partial_i$  を仮定する必要はない. 代わりに公式 (2.2.23b):  $[p_i, G(\mathbf{x})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_i}$  を用いれば

$$(\text{式 (2.6.25) 左辺}) = -\frac{e}{c} ([p_i, A_j] + [A_i, p_j]) = \frac{i\hbar e}{c} (\partial_i A_j - \partial_j A_i)$$

となつて,

$$\text{(式 (2.6.25) 右辺)} = \frac{i\hbar e}{c} \varepsilon_{ijk} (\varepsilon_{krst} \partial_r A_s) \quad (\text{繰り返された添字について和をとる})$$

に一致する.

■荷電粒子に対する Ehrenfest の定理 (2.6.27) について 第2の等号では,  $d\Pi_i/dt = [\Pi_i, (\mathbf{\Pi}^2/2m) + e\phi]/i\hbar$  において

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \left[ \Pi_i, \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m} \right] &= \frac{1}{2mi\hbar} \Pi_j [\Pi_i, \Pi_j] + [\Pi_j, \Pi_i] \Pi_j \\ &= \frac{e}{2c} \left( \varepsilon_{ijk} \frac{dx_j}{dt} B_k + \varepsilon_{ijk} B_k \frac{dx_j}{dt} \right) = \frac{e}{2c} \left( \frac{d\mathbf{x}}{dt} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \frac{d\mathbf{x}}{dt} \right)_i \\ &\quad \left( \because \text{式 (2.6.25)}, \quad \varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{ikj}, \quad \mathbf{B} \text{ と } \frac{d\mathbf{x}}{dt} \text{ を交換してはいけない} \right), \\ \frac{1}{i\hbar} [\Pi_i, e\phi] &= \frac{e}{i\hbar} [p_i, \phi] = -e\partial_i\phi = eE_i \quad (\because \text{式 (2.2.23b)}) \end{aligned}$$

となることを用いる.

■式 (2.6.28) 式 (2.6.28) では安全な手続き (2.6.21):

$$\left( \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 \rightarrow \mathbf{p}^2 - \frac{e}{c} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \left( \frac{e}{c} \right)^2 \mathbf{A}^2$$

に従うと見通しが悪い.

$$\langle \mathbf{x}' | [\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{x})/c]^2 | \alpha, t_0; t \rangle = \langle \mathbf{x}' | [\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{x})/c] \cdot [\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{x})/c] | \alpha, t_0; t \rangle$$

において  $[\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{x})/c] | \alpha, t_0; t \rangle$  を状態ケットと見て式 (1.7.17) を用いれば良い.

■Schrödinger 方程式 (2.6.29) について 電磁場中の粒子の正しい波動方程式を古典物理学の観点からボトムアップ式に探り当てるような, 発見的な議論を行う. 質量  $m$ , 電荷  $e$  の粒子を古典的に考え, 粒子の速度を  $\mathbf{v}$ , 粒子を記述する Lagrangian を  $L$ , Hamiltonian を  $H$  と書く.  $\mathbf{p} \equiv \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}}$  は粒子の正準運動量である. 粒子の力学的運動量  $\mathbf{\Pi} \equiv \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-(v/c)^2}}$  とエネルギー  $E \equiv \sqrt{m^2c^4 + \mathbf{\Pi}^2c^2}$  は電磁場がある場合,

$$\begin{aligned} \mathbf{\Pi} = \mathbf{p} &\rightarrow \mathbf{\Pi} = \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}, \\ E = H &\rightarrow E = H - e\phi \end{aligned}$$

と置き換わる. 我々が考えているのは非相対論的な量子力学であるが, 以上は非相対論的極限に限らず正しい [2, pp.51-52].

これに対応して非相対論的量子力学では,  $\psi$  を波動関数とした自由粒子の Schrödinger 方程式

$$\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

において

$$-i\hbar\nabla \rightarrow -i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi$$



と置き換えると、電磁場中の粒子の正しい波動方程式 (2.6.29):

$$\frac{1}{2m} \left( -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \psi = \left( i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right) \psi \quad (85)$$

が得られる (ここでは場は時間に依存しても良い). この置き換えは極小置換と呼ばれ,

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu \equiv \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu$$

とまとめられる [10, p.401] [4, p.82].

■連続の方程式 (2.6.30) の導出

$$\begin{aligned} \partial_t \rho &= \psi^* \partial_t \psi + \psi \partial_t \psi^* = 2\text{Re}(\psi^* \partial_t \psi) \\ &= 2\text{Re} \left[ \frac{1}{i\hbar} \psi^* \frac{1}{2m} \left[ -i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] \cdot \left[ -i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] \psi \right] \end{aligned}$$

において1つ目の  $\nabla'$  が2つ目の  $\mathbf{A}$  と  $\psi$  の両方に作用することに注意し, また  $A_j \partial_j \psi = \mathbf{A} \cdot \nabla' \psi$  とせず  
これを  $(\partial_j \psi) A_j = (\nabla' \psi) \cdot \mathbf{A}$  と書くと

$$\begin{aligned} & \left[ -i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] \cdot \left[ -i\hbar\nabla' - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] \psi \\ &= (i\hbar)^2 \partial_{jj} \psi - \frac{e}{c} (-i\hbar) (\partial_j A_j) \psi - \frac{e}{c} (-i\hbar) A_j \partial_j \psi + \frac{e}{c} i\hbar A_j \partial_j \psi + \left( \frac{e}{c} \right)^2 A_j A_j \psi \\ &= (i\hbar)^2 \Delta' \psi + i\hbar \frac{e}{c} (\nabla' \cdot \mathbf{A}) \psi + 2i\hbar \frac{e}{c} (\nabla' \psi) \cdot \mathbf{A} + \left( \frac{e}{c} \right)^2 \mathbf{A}^2 \psi \end{aligned}$$

となる. これを上式に代入し

$$\partial_t \rho = \frac{1}{2m} \left\{ (i\hbar \psi^* \Delta' \psi - i\hbar \psi \Delta' \psi^*) + 2 \frac{e}{c} (\nabla' \cdot \mathbf{A}) \psi^* \psi + \left( 2 \frac{e}{c} \psi^* (\nabla' \psi) \cdot \mathbf{A} + 2 \frac{e}{c} \psi (\nabla' \psi^*) \cdot \mathbf{A} \right) \right\}$$

を得る. 一方

$$\begin{aligned} \nabla' \cdot \mathbf{j} &= \nabla' \cdot \left[ \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla' \psi) - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \psi^* \psi \right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \Delta' \psi - \psi \Delta' \psi^*) - \frac{e}{mc} (\nabla' \cdot \mathbf{A}) \psi^* \psi - \frac{e}{mc} ((\psi^* \nabla' \psi) \cdot \mathbf{A} + (\psi \nabla' \psi^*) \cdot \mathbf{A}) \end{aligned}$$

なので示された.

■ベクトル・ポテンシャル (2.6.40) について 一様な磁束密度  $\mathbf{B}$  を導くポテンシャルとして,  $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$  をとることができる. このことは

$$\left[ \nabla \times \left( \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \right) \right]_i = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \partial_j (\varepsilon_{klm} B_l x_m) = \frac{1}{2} (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) B_j \delta_{jm} = \frac{1}{2} (3B_i - B_i) = B_i$$

と確かめられる. 視覚的には図 26 のようにイメージできる (磁場の方向を  $z$  軸にとって描いた).

■「(2.6.41) を用いると  $p_x$  は運動の定数であるが, (2.6.41) を用いるとそうでない」(p.179, 1.9,10) について

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \left\{ \mathbf{p}^2 - \frac{e}{c} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \left( \frac{e}{c} \right)^2 \mathbf{A}^2 \right\} \\ &= \left\{ \frac{1}{2m} \left\{ \mathbf{p}^2 + \frac{e}{c} \cdot \frac{B}{2} (p_x y + p_y x + y p_x + x p_y) + \left( \frac{e}{c} \right)^2 \frac{B^2}{4} (x^2 + y^2) \right\} \right. \quad (\text{ポテンシャル (2.6.40) に対して}) \\ &\quad \left. \left\{ \frac{1}{2m} \left\{ \mathbf{p}^2 + \frac{e}{c} B (p_x y + y p_x) + \left( \frac{e}{c} \right)^2 B^2 y^2 \right\} \right\} \quad (\text{ポテンシャル (2.6.41) に対して}) \right. \end{aligned}$$

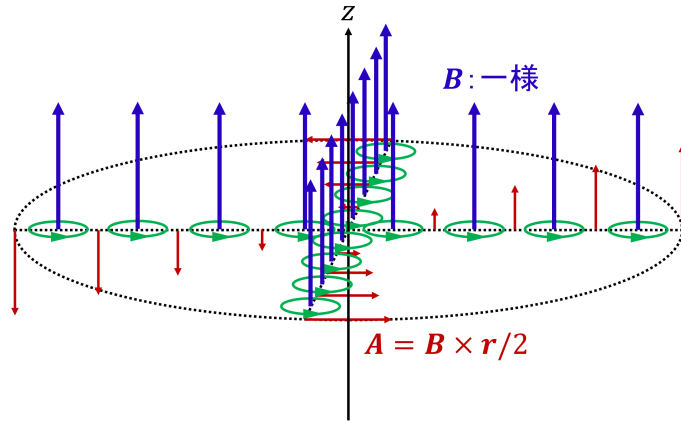


図 26 一様磁場  $B$  のベクトル・ポテンシャル  $A = B \times r/2$  の渦を緑色で表している。

なので、ポテンシャル (2.6.40) に対して

$$[p_x, H] = \frac{1}{2m} \left\{ \frac{e}{c} \cdot \frac{B}{2} [p_x, p_y x + x p_y] + \left( \frac{e}{c} \right)^2 \frac{B^2}{4} [p, x^2] \right\} = \frac{i\hbar}{m} \left\{ \frac{e}{c} \cdot \frac{B}{2} p_y + \left( \frac{e}{c} \right)^2 \frac{B^2}{4} x \right\} \neq 0$$

であるのに対し、ポテンシャル (2.6.41) に対しては  $[p_x, H] = 0$  である。  $p_x$  が力学的運動量ではなく正準運動量であることを踏まえれば、このようなゲージによる違いは受け容れられる。

■式 (2.6.47) の「 $\mathcal{G}$ 」について 筆記体の  $G$  である。「ゲージ変換」に因むと想像される。

■新しいケット (2.6.53) が Schrödinger 方程式 (2.6.51) を満たすこと  $|\alpha, t_0; t\rangle \equiv |\alpha(t)\rangle$  が Schrödinger 方程式 (2.6.51) を満たすとき、ゲージ変換後の新しいケット (2.6.53):  $|\overline{\alpha}(t)\rangle \equiv e^{ie\Lambda(x)/\hbar c} |\alpha(t)\rangle$  に対して

$$i\hbar \partial_t |\overline{\alpha}(t)\rangle = i\hbar e^{ie\Lambda/\hbar c} \partial_t |\alpha(t)\rangle = \frac{1}{2m} e^{ie\Lambda/\hbar c} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 |\alpha(t)\rangle + e\phi |\overline{\alpha}(t)\rangle$$

なので、新しいゲージでの Schrödinger 方程式 (2.6.52):

$$\left[ \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c - e\nabla\Lambda/c)^2}{2m} + e\phi \right] |\overline{\alpha}(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\overline{\alpha}(t)\rangle$$

が成り立つためには (青字部分)  $= (\mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A} - (e/c)\nabla\Lambda)^2 e^{ie\Lambda/\hbar c}$ , すなわち式 (2.6.54) が成り立てば良い。式 (2.6.54) は

$$\begin{aligned} e^{-ie\Lambda/\hbar c} \left( \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} - \frac{e\nabla\Lambda}{c} \right)^2 e^{ie\Lambda/\hbar c} &= \left( e^{-ie\Lambda/\hbar c} \left( \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} - \frac{e\nabla\Lambda}{c} \right) e^{ie\Lambda/\hbar c} \right)^2 \\ &= \left( e^{-ie\Lambda/\hbar c} \mathbf{p} e^{ie\Lambda/\hbar c} - \frac{e\mathbf{A}}{c} - \frac{e\nabla\Lambda}{c} \right)^2 \\ &= \left( \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 \quad (\because \text{式 (2.6.50)}) \end{aligned}$$

と示される。

■Schrödinger 方程式 (85) のゲージ不変性 [10, p.402,p.411] 教科書では場 (ポテンシャルやゲージ関数を含む) が時間に依らない場合だけを扱った. より一般に Schrödinger 方程式 (85) は, 電磁ポテンシャル  $A^\mu = (\phi, \mathbf{A})$  と波動関数  $\psi$  に同時にゲージ変換

$$A_\mu \rightarrow A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu \chi, \quad \psi \rightarrow \psi' = e^{ie\chi/\hbar c} \psi$$

を施すと不変に保たれる ( $\chi(\mathbf{x}, t)$  はゲージ関数). 実際に Schrödinger 方程式 (85) のゲージ不変性, すなわち変換後の場

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi, \quad \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \psi' = e^{ie\chi/\hbar c} \psi$$

が同じ形の式

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}' \right)^2 \psi' + e\phi' \psi' \quad (86)$$

を満たすことを確かめよう. ゲージパラメーター  $U = e^{ie\chi/\hbar c}$  と任意関数  $M$  に対して

$$-i\hbar \nabla (UM) = \frac{e}{c} (\nabla \chi) UM + U (-i\hbar \nabla) M$$

なので, 有用な公式

$$\left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} - \frac{e}{c} \nabla \chi \right) UM = U \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) M$$

が得られる. これを繰り返し用いると, 上式 (86) の右辺第 1 項について

$$\begin{aligned} \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}' \right)^2 \psi' &= \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} - \frac{e}{c} \nabla \chi \right)^2 (U\psi) \\ &= \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} - \frac{e}{c} \nabla \chi \right) U \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi \\ &= U \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi \end{aligned}$$

と計算できる. さらに式 (86) の左辺と, 右辺第 2 項はそれぞれ

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = i\hbar U \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{e}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} U \psi, \quad e\phi' \psi' = e \left( \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) U \psi$$

と書き換えられるので, 式 (86) は

$$i\hbar U \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} U \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi + eU\phi\psi$$

と等価である. これはもとの場に対する Schrödinger 方程式 (85) の両辺に (左から)  $U$  を掛けた関係式となっているから, 成立する.

■ゲージ不変性の名前の由来 p.182 下から 7 行目~p.183 下から 7 行目について, 1 次元で考える. 図 27 のように定まった位置  $x + dx$  では位置  $x$  より細かい目盛りを用いた結果, あらかじめ決まっている  $F$  の単位量についてその読みが  $1|_x \rightarrow [1 + \Sigma(x)dx]_{x+dx}$ : (2.6.58) となった状況を考える. このとき  $F(x + dx)$  の新しい読みは

$$\begin{aligned} F(x + dx)|_{\text{rescaled}} &= (F(x) + (\partial_x F)dx)(1 + \Sigma(x)dx) + O(dx^2) \\ &= F(x) + [(\partial_x + \Sigma)F]dx + O(dx^2) \quad \Leftrightarrow \quad \text{式 (2.6.59)} \end{aligned}$$

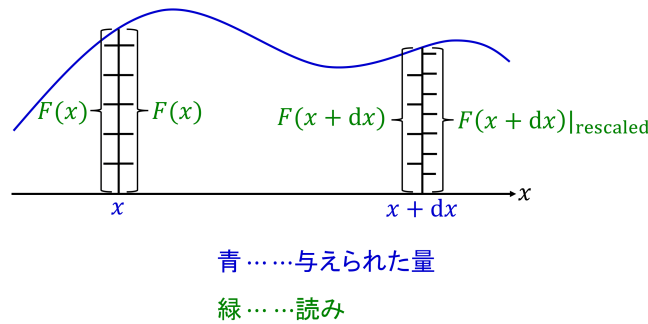


図 27 位置  $x$  から  $x + dx$  に移る際、位置の関数  $F(x)$  を測る尺度を変更する

となる。これは有限の距離  $\Delta x$  に対して

$$F(x + \Delta x) = \exp \left[ \int_x^{x+\Delta x} \Sigma(x) dx \right] F(x)$$

であれば満たされる。これは波動関数の変更 (2.6.55) に類似の式である。

■Aharonov-Bohm 効果について 円筒は粒子に影響すると考えられても、その中の磁場が粒子に影響するのは自明でない。

■ベクトルポテンシャル (2.6.62) について 式 (2.6.62) が「磁場  $\mathbf{B}(= B\hat{z})$  を作るのに必要なベクトルポテンシャル」なのではない。式 (2.6.62) は円筒殻内部すなわち  $\rho_a \leq \rho \leq \rho_b$  におけるベクトルポテンシャルであり、磁場をゼロにする。そして式 (2.6.62) は、 $0 \leq \rho \leq \rho_a$  における「磁場  $\mathbf{B}(= B\hat{z})$  を作るのに必要なベクトルポテンシャル」の 1 つ  $\mathbf{A} = (B\rho/2)\hat{\phi}$  と  $\rho = \rho_a$  で連続である。実際

$$B_z = \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial(\rho A_\phi)}{\partial \rho} - \frac{\partial A_\rho}{\partial \phi} \right\}, \quad \text{etc.}$$

により

$$\mathbf{A} = \begin{cases} \frac{B\rho}{2} \hat{\phi} & (0 \leq \rho \leq \rho_a) \\ \frac{B\rho_a^2}{2\rho} \hat{\phi} & (\rho_a \leq \rho \leq \rho_b) \end{cases} \Rightarrow \mathbf{B} = \begin{cases} B\hat{z} & (0 \leq \rho \leq \rho_a) \\ 0 & (\rho_a \leq \rho \leq \rho_b) \end{cases}$$

となる。

■「この問題は  $B$  のある場合とない場合のシュレーディンガー方程式の解を比較して攻略することもできる」(p.185 下 2 行) について 時間に依存しない電磁場 (とポテンシャル  $V$ ) を仮定すると、時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$\frac{1}{2m} \left( -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \psi + V\psi = E\psi \quad (87)$$

(狭義のポテンシャルは  $V = e\phi$ ) の解は

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi^{(0)}(\mathbf{x}) \exp \left[ \frac{ie}{\hbar c} \int^{\mathbf{x}} \mathbf{A}(\mathbf{x}') \cdot d\mathbf{x}' \right] \quad (88)$$

で与えられる．ただし  $\psi^{(0)}(\mathbf{x})$  は  $\mathbf{A} = 0$  の場合の Schrödinger 方程式の解であり ( $V$  はそのまま), 指数内の線積分の経路は  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = 0$  となる領域内で任意に選べる．

式 (88) が解になっていることの確認

$$\begin{aligned} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi &= \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\int^{\mathbf{x}}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}'\right)\left[\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi^{(0)} + \psi^{(0)}(-i\hbar)\frac{ie}{\hbar c}\mathbf{A}\right] \\ &= \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\int^{\mathbf{x}}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}'\right)(-i\hbar\nabla\psi^{(0)}), \\ \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi &= \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\left[\exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\int^{\mathbf{x}}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}'\right)(-i\hbar\nabla\psi^{(0)})\right] \\ &= \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\int^{\mathbf{x}}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}'\right)\left[\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)(-i\hbar\nabla\psi^{(0)}) + (-i\hbar\nabla\psi^{(0)})(-i\hbar)\frac{ie}{\hbar c}\mathbf{A}\right] \\ &= \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\int^{\mathbf{x}}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}'\right)(-i\hbar\nabla)^2\psi^{(0)} \end{aligned}$$

より, 式 (88) を式 (87) に代入して共通因子  $\exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\int^{\mathbf{x}}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}'\right)$  を落とすと,

$$\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)^2\psi^{(0)} + V\psi^{(0)} = E\psi^{(0)}$$

となる．仮定より, これは  $\psi^{(0)}$  の満たす Schrödinger 方程式だから, 成立する．

参考——ゲージ変換 波動関数の表式 (88) を見れば, 既に式 (2.6.55) で調べたように, 電磁場のゲージ変換  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\Lambda$  に伴って波動関数が

$$\psi(\mathbf{x}) \rightarrow \psi'(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) \exp\left[\frac{ie\Lambda(\mathbf{x})}{\hbar c}\right]$$

と変換することが明白である (式 (88) の線積分の下限に起因する定数位相因子の違いを除いて)．

式 (88) における指数の因子は経路積分によるアプローチにおいて, 磁場がある場合の  $e^{iS/\hbar}$  に対する新たな寄与として得られた項に正確に一致している．よって確率振幅の経路積分による表現 (2.6.69) の代わりに, 干渉領域  $\mathbf{x}$  における波動関数

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_1^{(0)}(\mathbf{x}) \exp\left[\frac{ie}{\hbar c}\int_{\text{上側の経路 1}}^{\mathbf{x}}\mathbf{A}(\mathbf{x}')\cdot d\mathbf{x}'\right] + \psi_2^{(0)}(\mathbf{x}) \exp\left[\frac{ie}{\hbar c}\int_{\text{上側の経路 2}}^{\mathbf{x}}\mathbf{A}(\mathbf{x}')\cdot d\mathbf{x}'\right]$$

を用いて, 同様に Aharonov-Bohm 効果を議論できる [12, pp.20–22]．

参考——磁束量子化 [12, p.23] 図 22 のリング  $\rho_a < \rho < \rho_b$  を超伝導材料とし, 超伝導リングにおける凝縮電子対を, 電荷  $2e$  の 1 体の “粒子” として扱う．すると式 (88) より波動関数は

$$\psi = \psi^{(0)} \exp\left[\frac{2ie}{\hbar c}\int^{\mathbf{x}}\mathbf{A}(\mathbf{x}')\cdot d\mathbf{x}'\right]$$

と表される．同じ位置における波動関数が 1 価であるためには,  $\rho < \rho_a$  の磁束を囲む周回積分は

$$\frac{2e}{\hbar c}\oint\mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}' = 2n\pi \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2)$$

を満たさなければならない．これは磁束が

$$\Phi = \oint\mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}' = \frac{\pi n\hbar c}{e}$$

と量子化されることを意味する (実際に磁束量子化は実験的に検証された)．なお我々は電磁場を古典的に扱っており, 磁束量子化は場の量子化とは全く関係ない．

■ 「線積分  $\int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}$  は経路によらない……」 (p.187, l.4,5), 式 (2.6.70):  $\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \Phi_B$  について Stokes の定理により, 閉曲線  $C$  を縁に持つ面  $S$  を貫く磁束  $\Phi_B$  は, ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  の周回積分で表されることを思い出そう.

$$\Phi_B = \int_S \mathbf{B} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}.$$

よって始点と終点を結ぶ2つの経路  $C_1, C_2$  の作る閉曲線を貫く磁束がゼロであれば,

$$\oint_{C_2-C_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = 0, \quad \therefore \int_{C_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \int_{C_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}.$$

■ 「……粒子を見出す確率は, ……位相の差に依存する」 (p.187, l.13,14) について 遷移振幅 (2.6.69) を  $K$  とする.  $\mathbf{A} = 0$  とおくと磁場がない場合の遷移振幅  $K^{(0)}$  になる.

$$\begin{aligned} |K|^2 &= \int_{\text{上}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{iS^{(0)}/\hbar} \int_{\text{上}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)]^* e^{-iS^{(0)}/\hbar} \\ &+ \int_{\text{上}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{iS^{(0)}/\hbar} \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{\text{上}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}\right) \int_{\text{下}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)]^* e^{-iS^{(0)}/\hbar} \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c} \int_{\text{下}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}\right) \\ &+ \int_{\text{下}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{iS^{(0)}/\hbar} \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{\text{下}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}\right) \int_{\text{上}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)]^* e^{-iS^{(0)}/\hbar} \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c} \int_{\text{上}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}\right) \\ &+ \int_{\text{下}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{iS^{(0)}/\hbar} \int_{\text{下}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)]^* e^{-iS^{(0)}/\hbar} \end{aligned}$$

において第2,3項の位相がそれぞれ  $|K^{(0)}|^2$  と  $\pm$ (式 (2.6.70)) だけ異なる.

### 第 3 章 角運動量の理論

#### 3.1 回転および角運動量の交換関係

有限回転と無限小回転 (pp.205–209)

よく知られているように、物体に 2 つの有限角の回転操作を施した結果は、回転の順序によって異なる (図 28 参照). このことを反映して、ベクトル  $\mathbf{V}$  を  $i = x, y, z$  軸の周りに角度  $\phi$  だけ回転したベクトルを  $\mathbf{V}' = R_i(\phi)\mathbf{V}$  と書いて回転行列  $R_i(\phi)$  を定義すると<sup>\*36</sup>, 一般に 2 つの回転行列は交換しない. 具体的には微小な回転角  $\varepsilon$  に対して,  $\varepsilon$  の 2 次まで考慮すると,

$$[R_x(\varepsilon), R_y(\varepsilon)] = R_z(\varepsilon^2) - R_{\text{任意}}(0) \quad (89)$$

が見出される ( $R_{\text{任意}}(0)$  は恒等演算子 1 に他ならない, 導出は下記). 右辺は  $\varepsilon$  の 2 次の量であり (導出過程を参照), この結果は  $\varepsilon$  の 1 次近似では,  $R_x(\varepsilon)$  と  $R_y(\varepsilon)$  が交換することを意味している<sup>\*37</sup>.

量子力学における無限小回転 (pp.209–213)

状態  $|\alpha\rangle$  にある系を単位ベクトル  $\mathbf{n}$  の周りに角度  $\phi$  だけ回転させたときの状態の変化を

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{D}(\mathbf{n}, \phi) |\alpha\rangle$$

と書いて回転の演算子  $\mathcal{D}(\mathbf{n}, \phi)$  を定義する<sup>\*38\*39</sup>. ここで角度  $d\phi$  の無限小回転の演算子を

$$\mathcal{D}(\mathbf{n}, d\phi) = 1 - i \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}}{\hbar} d\phi \quad (90)$$

と書こう. その動機は, 1.6 節における平行移動の演算子の場合と同様である. さて,

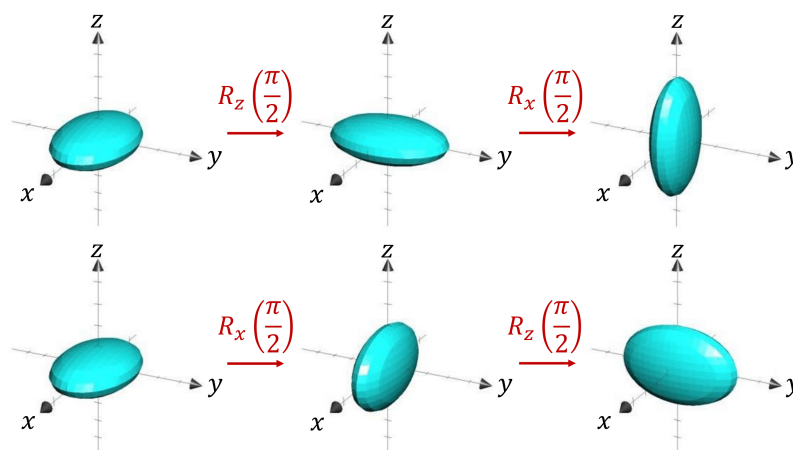


図 28 有限回転の非可換性の例解 ( $R_i(\pi/2)$  は第  $i$  軸周りの  $90^\circ$  回転を表す)

<sup>\*36</sup> 回転角  $\phi$  は第  $i$  軸の正の側から見て反時計回りを正とする. ここで考えている回転操作は能動的変換である.

<sup>\*37</sup> このように, 質点の微小時間  $\Delta t$  における, 角速度ベクトル  $\boldsymbol{\omega}_1, \boldsymbol{\omega}_2$  での回転では, 変位の合成する順序の違いによる差は  $O(\Delta t^2)$  となる. 角速度ベクトルの和  $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}_1 + \boldsymbol{\omega}_2$  が意味を持つのはこのためである.

<sup>\*38</sup> 教科書では方向単位ベクトルを  $\hat{\mathbf{n}}$  と書いているけれど, 以降, 本稿ではハットを省いて  $\mathbf{n}$  と書くことにする.

<sup>\*39</sup>  $\mathcal{D}(\mathbf{n}, \phi)$  の行列表現の次元は, 考えている個々のケット空間の次元に依存する.

- 上式 (90) において  $\mathbf{J}$  は角運動量の次元を持たなければならないこと
- 古典力学において、角運動量は回転の生成子であること [文献 [8, pp.560–562] を参照]

を踏まえ、無限小回転の演算子を上式 (90) で与えるような Hermite 演算子  $\mathbf{J}$  を角運動量演算子と定義する。

- これが量子力学における角運動量の定義である。
  - この定義は古典的対応物のないスピン角運動量にも適用できる。
  - 軌道角運動量  $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$  がこの定義 (あるいはその帰結としての交換関係 (92)) を満たしていることは、3.6 節で確認する。
- $\mathbf{J}$  の Hermite 性により  $\mathcal{D}(\mathbf{n}, d\phi)$  のユニタリー性が保証される。

有限の角度  $\phi$  に関する回転の演算子は、微小角度  $\phi/N (N \gg 1)$  の回転を  $N$  回合成して得られる：

$$\mathcal{D}(\mathbf{n}, \phi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ 1 - \frac{i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\phi/\hbar}{N} \right]^N = e^{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\phi/\hbar}. \quad (91)$$

通常のベクトル  $\mathbf{V}$  に作用する回転行列  $R$  は状態ベクトルに作用する回転の演算子  $\mathcal{D}$  に対応付けられるから、回転の演算子は回転行列の交換関係 (90) と類似の関係

$$[\mathcal{D}_x(\varepsilon), \mathcal{D}_y(\varepsilon)] = \mathcal{D}_z(\varepsilon^2) - 1, \quad \text{etc.}$$

(ただし  $\mathcal{D}_x(\varepsilon) \equiv \mathcal{D}(\hat{\mathbf{x}}, \varepsilon)$ , etc.) を満たさなければならないと考えるのが自然である\*40。ここから角運動量の基本的交換関係

$$[J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k \quad (92)$$

が導かれる (導出は下記) [両辺とも角運動量の 2 乗の次元を持っている]。結局、角運動量は交換関係 (92)(と Hermite 性) によって定義付けられると言って良い。

### 3.1 節, 式の導出など

■ 回転行列の交換関係 (89) の導出 回転行列

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

は、回転角  $\phi$  を無限小パラメーター  $\varepsilon$  として  $\varepsilon$  の 2 次まで残すと

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

となる。成分を適当に移動すると [本稿次節で補足]、同様に

$$R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{pmatrix}, \quad R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{pmatrix}$$

\*40 回転群のあらゆる表現が回転操作と同じ掛け算則を満たすことは、群の表現の定義に含まれている [13, p.3].



が得られる。直接の行列計算により、同じ近似で

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon \\ \varepsilon^2 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \varepsilon^2 \end{pmatrix},$$

$$R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & \varepsilon^2 & \varepsilon \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \varepsilon^2 \end{pmatrix},$$

$$\therefore R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R_z(\varepsilon^2) - R_{任意}(0) : (89)$$

となることを確かめられる。

■角運動量の基本的交換関係 (92) の導出 多少、教科書を補足しつつ導出を行う。回転行列の交換関係 (89) は微小な回転角  $\varepsilon$  の 2 次までを考慮して得られた。そこで回転の演算子の交換関係

$$[\mathcal{D}_x(\varepsilon), \mathcal{D}_y(\varepsilon)] = \mathcal{D}_z(\varepsilon^2) - 1$$

についても、表式 (91):  $\mathcal{D}(\mathbf{n}, \phi) = e^{-i\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}\phi/\hbar}$  を用いて  $\varepsilon$  の 2 次まで正確に書き下すと、

$$\left(1 - \frac{iJ_x\varepsilon}{\hbar} - \frac{J_x^2\varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) \left(1 - \frac{iJ_y\varepsilon}{\hbar} - \frac{J_y^2\varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) - \left(1 - \frac{iJ_y\varepsilon}{\hbar} - \frac{J_y^2\varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) \left(1 - \frac{iJ_x\varepsilon}{\hbar} - \frac{J_x^2\varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) = 1 - \frac{iJ_z\varepsilon^2}{\hbar} - 1,$$

$$\therefore [J_x, J_y] = i\hbar J_z \quad (93)$$

が得られる。

交換関係 (92):  $[J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k$  は  $(i, j) = (1, 2), (2, 3), (3, 1)$  とおくと、上式 (93) および添字を巡回置換した関係を再現する。また交換子は順序を入れ替えると、全体の符号が反転する。式 (92) はこの性質を満たしているから、 $(i, j) = (2, 1), (3, 2), (1, 3)$  に対しても正しい。最後に  $(i, j) = (1, 1), (2, 2), (3, 3)$  に対しては、式 (92) は自明な関係  $[J_i, J_i] = 0$  (ただし  $i$  について和をとらない) を与える。

### 3.1 について

■ $R_z(\varepsilon)$  の式 (3.1.4)  $\Rightarrow$   $R_x(\varepsilon)$  の式 (3.1.5) について 物体の  $z$  軸周りの回転は軸の名前をサイクリックに

$$x \rightarrow y, \quad y \rightarrow z, \quad z \rightarrow x$$

と置き替えれば、物体の  $x$  軸周りの回転になる。したがって  $R_x(\varepsilon)$  の表式 (3.1.5a) を得るには  $R_z(\varepsilon)$  の表式 (3.1.4) において

$$(x, x) \text{ 成分} \rightarrow (y, y) \text{ 成分}, \quad (x, y) \text{ 成分} \rightarrow (y, z) \text{ 成分}, \quad \text{etc.}$$

と成分を移動させれば良い。これは図 29 のように、行列の右端と左端、上端と下端とが周期境界条件によってつながっていると考え、全成分を“右下に”ずらせば良いことを意味している。

■ $\varepsilon$  の 2 次までとった式 (3.1.18) 回転行列の交換関係 (3.1.9) は回転角  $\varepsilon$  の 2 次までとって得られた。そこでこれと類似の関係

$$[\mathcal{D}_x(\varepsilon), \mathcal{D}_y(\varepsilon)] = \mathcal{D}_z(\varepsilon^2) - 1$$

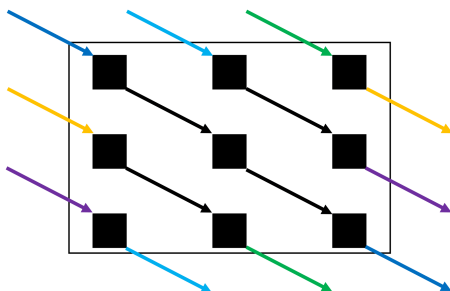


図 29  $3 \times 3$  の行列  $R_z(\varepsilon)$  の各成分を“右下に”ずらす様子

においても式 (3.1.18) のように両辺を  $\varepsilon$  の 2 次までの近似で評価するのが自然である．そのためには回転の演算子の表式として，回転角の 1 次までとった式 (3.1.15) ではなく，有限の回転角に対する式 (3.1.16) を用いる必要がある．

■角運動量  $\mathbf{J}$  は交換関係 (92) を満たす Hermite 演算子として定義される 角運動量の交換関係 (92) を満たす Hermite 演算子  $\mathbf{J}$  に対して， $\mathcal{D}(\mathbf{n}, \phi) = e^{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \phi / \hbar}$  が回転の演算子となることの証拠を挙げる事ができる．すなわち 3.2 節で説明されているように，状態が  $|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{D}(\mathbf{n}, \phi) |\alpha\rangle$  と変化すると，角運動量の期待値  $\langle \mathbf{J} \rangle \equiv \langle \alpha | \mathbf{J} | \alpha \rangle$  はベクトルの変換則

$$\langle J_k \rangle \rightarrow \sum_l R_{kl} \langle J_l \rangle$$

に従って回転することが導かれる ( $(R_{kl})$  は  $\mathbf{n}$  軸周りの角度  $\phi$  回転の回転行列)<sup>\*41</sup>．

### 3.2 スピン 1/2 の系と有限回転

スピン 1/2 に対する回転演算子 (pp.213–217)

スピン 1/2 の系のスピン演算子

$$\begin{cases} S_x = \frac{\hbar}{2} \{ (|+\rangle \langle -|) + (|-\rangle \langle +|) \} \\ S_y = \frac{i\hbar}{2} \{ -( |+\rangle \langle -| ) + ( |-\rangle \langle +| ) \} \\ S_z = \frac{\hbar}{2} \{ ( |+\rangle \langle +| ) - ( |-\rangle \langle -| ) \} \end{cases} \quad (3.2.1)$$

は角運動量の基本的交換関係を満たす (式 (1.4.20))．よって  $\mathcal{D}_z(\phi) = e^{-iS_z \phi / \hbar}$  は  $z$  軸周りの角度  $\phi$  の回転演算子である．実際，状態  $|\alpha\rangle$  における  $\mathbf{S}$  の期待値  $\langle \mathbf{S} \rangle \equiv \langle \alpha | \mathbf{S} | \alpha \rangle$  は，系の回転  $|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{D}_z(\phi) |\alpha\rangle$  に伴い，図 30 のように  $z$  軸周りに角度  $\phi$  だけ回転することを確かめられる (導出は下記)．証明は次の 2 通りの方法で行うことができる．

導出 1  $\mathbf{S}$  の具体的表式 (3.2.1) を用いる．

導出 2 角運動量の基本的交換関係だけを仮定し，ベーカー・ハウドルフの補助定理を用いる．

<sup>\*41</sup> 角運動量  $\mathbf{J}$  に限らず，任意のベクトル演算子  $\mathbf{V}$  の期待値が同様の変換則  $\langle V_k \rangle = \sum_l R_{kl} \langle V_l \rangle$  に従って変換しなければならないという事実はむしろ，ベクトル演算子  $\mathbf{V}$  を定義するのに利用される (3.10 節， pp.318–320)．

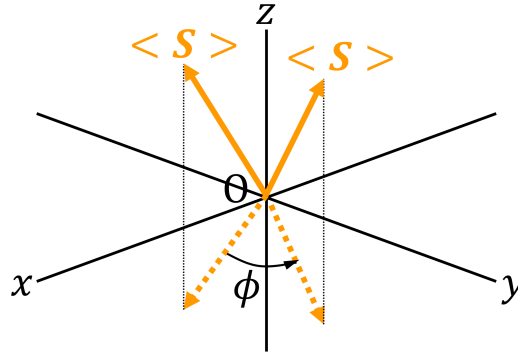


図 30 状態が  $|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{D}_z(\phi)|\alpha\rangle$  と変化すると、期待値  $\langle \mathbf{S} \rangle$  は  $z$  軸周りに角度  $\phi$  だけ回転する

第 2 の証明方法より  $1/2$  のスピンの限らず一般に、交換関係 (92) を満たす Hermite 演算子  $\mathbf{J}$  に対して  $\mathcal{D}(\mathbf{n}, \phi) = e^{-i\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}\phi/\hbar}$  は実際に、期待値  $\langle \mathbf{J} \rangle \equiv \langle \alpha | \mathbf{J} | \alpha \rangle$  をベクトルの変換則

$$\langle J_k \rangle \rightarrow \sum_l R_{kl} \langle J_l \rangle$$

に従って回転させることになる ( $R_{kl}$  は  $\mathbf{n}$  軸周りの角度  $\phi$  回転の回転行列).

スピン  $1/2$  の場合には、状態  $|\alpha\rangle$  にある系を  $z$  軸周りに 1 回転 (角度  $\phi = 2\pi$  だけ回転) させた後の状態は

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_z(\phi = 2\pi) |\alpha\rangle &= e^{-iS_z\phi/\hbar} \Big|_{\phi=2\pi} \{(|+\rangle\langle +|) + (|-\rangle\langle -|)\} \cdot |\alpha\rangle \\ &= \{(e^{-\pi i} |+\rangle\langle +|) + (e^{\pi i} |-\rangle\langle -|)\} \cdot |\alpha\rangle \\ &= -\{(|+\rangle\langle +|) + (|-\rangle\langle -|)\} \cdot |\alpha\rangle \\ &= -|\alpha\rangle \end{aligned}$$

と計算できる. 興味深いことに、これはもとの状態  $|\alpha\rangle$  と比べて符号が異なっている.

### スピン歳差運動 再考 (pp.217-218)

一様な磁場  $\mathbf{B} = B\hat{z}$  中のスピン  $1/2$  の系に対して、Hamiltonian は  $H \sim \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$  より

$$H = \omega S_z$$

という形をとる (電子に対して  $\omega = \frac{|e|\hbar B}{m_e c}$  (2.1 節)). よって時間的发展の演算子  $\mathcal{U}(t) = e^{-iHt/\hbar}$  は回転演算子  $e^{-iS_z\omega t/\hbar}$  に他ならない. このため既に 2.1 節で見たように、系の時間发展  $|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{U}(t)|\alpha\rangle$  に伴いスピンの期待値  $\langle \mathbf{S} \rangle = \langle \alpha | \mathbf{S} | \alpha \rangle$  は歳差運動をすることになる.

### $2\pi$ 回転を調べる中性子干渉法の実験 (pp.218-220)

$\mathcal{D}_z(2\pi)|\alpha\rangle = -|\alpha\rangle$  における非自明な負号の存在の正しさを確かめる、中性子干渉法の実験を紹介する [中性子はスピン  $1/2$  を持つ]. 図 31 のように 2 つの経路①, ②を通る熱中性子線を干渉させる. 経路②の磁場  $\mathbf{B} (\neq 0)$  の領域 (経路の長さ  $l$ ) を中性子が通過する時間を  $T$  とおくと、磁場を通過した中性子の振幅は、位相の変化

$$c_2 \rightarrow c_2 e^{\mp i\omega T/2}$$

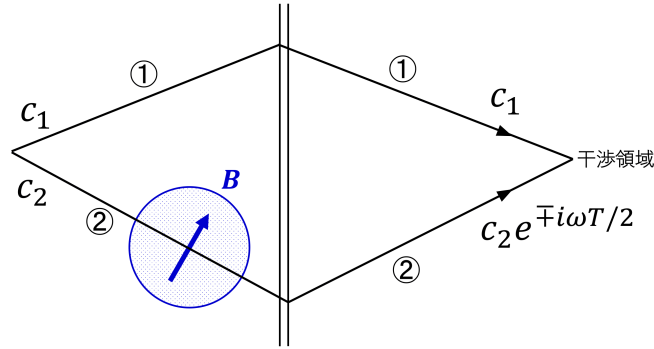


図 31  $2\pi$  回転を調べる中性子干渉法の実験 ( $c_1, c_2$  は中性子の振幅)

を受ける [これは角度  $\omega T = 2\pi$  の回転で状態 (したがって波動関数) の符号が反転するという, 我々の理論に基づいている]. ただし中性子に対しては

$$\omega = \frac{g_n e B}{m_p c} \quad (g_n \simeq -1.91)$$

である. よって ( $T$  を一定として) 磁場の強さ  $B$  を変化させると, 干渉領域で観測される強度は

$$\cos\left(\frac{\mp\omega T}{2} + \delta\right)$$

に従って,  $B$  の関数として正弦的に変化すると予想される ( $\delta$  は  $c_1$  と  $c_2$  の位相差). このとき正弦曲線の隣合う山に関する  $B$  の差は

$$\Delta B = \frac{4\pi\hbar c}{eg_n \lambda l} \quad (3.2.25)$$

と計算される [本稿次節を参照]. 実験結果は上式 (3.2.25) とよく合うことが確かめられた.

### パウリの 2 成分形式 (pp.220-223)

スピン 1/2 の系に対して

$$2 \text{ 成分スピノル } \chi = \begin{pmatrix} \langle +|\alpha \rangle \\ \langle -|\alpha \rangle \end{pmatrix}, \quad (\text{状態 } |\alpha\rangle \text{ の行列表現})$$

$$\text{Pauli 行列 } \sigma_k = \frac{1}{\hbar/2} \begin{pmatrix} \langle +|S_k|+ \rangle & \langle +|S_k|- \rangle \\ \langle -|S_k|+ \rangle & \langle -|S_k|- \rangle \end{pmatrix} \quad (\text{スピン演算子 } S_k \text{ の行列表現, } k = 1, 2, 3)$$

を定義する. これらを用いた行列表現に移行すると, 例えばスピンの期待値は

$$\begin{aligned} \langle S_k \rangle &\equiv \langle \alpha | S_k | \alpha \rangle = \sum_{a'=+, -} \sum_{a''=+, -} \langle \alpha | a' \rangle \langle a' | S_k | a'' \rangle \langle a'' | \alpha \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} \chi^\dagger \sigma_k \chi \end{aligned} \quad (3.2.31)$$

と表される. またスピン演算子の表式 (3.2.1) より, Pauli 行列を具体的に書くと

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (94)$$

となる。

以下, Pauli 行列の重要な性質をまとめよう. スピン演算子の反交換関係 (1.4.21):  $\{S_i, S_j\} = \frac{1}{2}\hbar^2\delta_{ij}$  と交換関係 (1.4.20):  $[S_i, S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k$  は, Pauli 行列の (反) 交換関係

$$\{\sigma_1, \sigma_2\} = 2\delta_{ij}, \quad (95)$$

$$[\sigma_1, \sigma_2] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \quad (96)$$

に置き換わる [本稿次節で補足]. 上式 (95), (96) を用いて積  $\sigma_i\sigma_j$  を対称部分と反対称部分に分けると,

$$\begin{aligned} \sigma_i\sigma_j &= \frac{1}{2}\{\sigma_i, \sigma_j\} + \frac{1}{2}[\sigma_i, \sigma_j] \\ &= \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \end{aligned} \quad (97)$$

を得る. これは具体的には

$$\sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1 = i\sigma_3, \quad \text{etc.}$$

を与える. また Pauli 行列の具体的な表式 (94) に直接見て取れるように,

$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i, \quad \det(\sigma_i) = -1, \quad \text{tr}(\sigma_i) = 0$$

が成立する. [第 1 式はスピン演算子  $S_i$  の Hermite 性を反映している.] ここで 3 つの Pauli 行列をベクトルの形にまとめた記法  $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$  を導入する. この表記は例えば  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \dots$  を任意の 3 次元ベクトルとして,

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \equiv a_k\sigma_k = \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix} \quad (\because \text{式 (94)})$$

のように用いる. 上式 (97) より有用な公式

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) &= (a_i\sigma_i)(a_j\sigma_j) = a_i a_j (\delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k) \\ &= \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \end{aligned}$$

が導かれる. 特例として, 実数ベクトル  $\mathbf{a}$  に対しては

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})^2 = |\mathbf{a}|^2 \quad (98)$$

が成り立つ.

## 2 成分形式での回転 (pp.223–226)

回転演算子  $\exp\left(\frac{-i\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}\phi}{\hbar}\right)$  の行列表現は

$$\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi}{2}\right) = \left( \left\langle a' \left| \exp\left(\frac{-i\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}\phi}{\hbar}\right) \right| a'' \right\rangle \right) \quad (99)$$

である [導出は本稿次節]. これは具体的には

$$\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi}{2}\right) = \mathbf{1} \cos \frac{\phi}{2} - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \sin \frac{\phi}{2} \quad (100)$$

$$= \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} - in_z \sin \frac{\phi}{2} & (-in_x - n_y) \sin \frac{\phi}{2} \\ (-in_x + n_y) \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} + in_z \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \quad (\because \text{式 (94)}) \quad (101)$$

と計算される (上式 (100) の導出は下記).

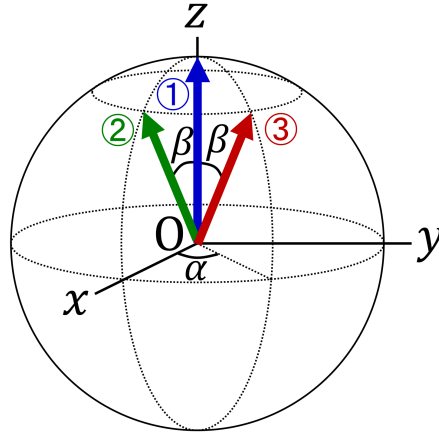


図 32  $\hat{z}$  向きのスピンを回転して  $\mathbf{n}$  向きのスピンを作る手順

状態が回転演算子により

$$|\alpha\rangle \rightarrow \exp\left(\frac{-i\mathbf{S}\cdot\mathbf{n}\phi}{\hbar}\right)|\alpha\rangle$$

と変化するとき，等価的に  $\chi$  は

$$\chi \rightarrow \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}\phi}{2}\right)\chi \quad (102)$$

と変化する [導出は本稿次節].

回転操作の下で  $\sigma_k$  は不変であるのに対し，[スピンの期待値 (3.2.31):  $\langle S_k \rangle = \frac{\hbar}{2}\chi^\dagger\sigma_k\chi$  に他ならない双スピノル]  $\chi^\dagger\sigma_k\chi$  はベクトルとして変換する [本稿次節で補足].

最後に，スピンの  $\mathbf{n}$  方向を向いた固有状態におけるスピノル  $\chi$  を求める問題を考える.  $\mathbf{n}$  の向きを方位角  $\alpha$  と天頂角  $\beta$  で表そう. すると  $\mathbf{n}$  向きのスピンは図 32 のように， $\hat{z}$  向きのスピン (①) を  $y$  軸周りに角度  $\beta$  だけ回転し (②)，次いで  $z$  軸周りに角度  $\alpha$  だけ回転すれば得られる (③). よってスピンの  $\hat{z}$  向きとなる固有状態におけるスピノル  $\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  に，対応する回転演算子の行列を掛けると，求める固有スピノル

$$\chi = \exp\left(\frac{-i\sigma_3\alpha}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\sigma_2\beta}{2}\right)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right)e^{-i\alpha/2} \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right)e^{+i\alpha/2} \end{pmatrix} \quad (3.2.52)$$

が得られる (計算の詳細は下記).

### 3.2 節，式の導出など

■期待値  $\langle S \rangle$  がベクトルとして回転することの証明 系の回転に伴って状態は  $|\alpha\rangle \rightarrow e^{-iS_z\phi/\hbar}|\alpha\rangle$  と変化するので，角運動量の期待値は

$$\langle S \rangle \equiv \langle \alpha | \mathbf{S} | \alpha \rangle \rightarrow \langle \alpha | e^{iS_z\phi/\hbar} \mathbf{J} e^{iS_z\phi/\hbar} | \alpha \rangle$$

と変化する.

導出 1 まずはスピン演算子の表式 (3.2.1) を用いた, スピン 1/2 の場合に限って有効な証明を与える. 例えば演算子積  $e^{iS_z\phi/\hbar} \mathbf{S} e^{iS_z\phi/\hbar}$  の  $x$  成分は,

$$\begin{aligned} e^{iS_z\phi/\hbar} S_x e^{iS_z\phi/\hbar} &= \frac{\hbar}{2} e^{iS_z\phi/\hbar} \{(|+\rangle\langle -|) + (|-\rangle\langle +|)\} e^{iS_z\phi/\hbar} \\ &= \frac{\hbar}{2} \{(e^{i\phi/2} |+\rangle\langle -| e^{i\phi/2}) + (e^{-i\phi/2} |-\rangle\langle +| e^{-i\phi/2})\} \\ &= \frac{\hbar}{2} \{(|+\rangle\langle -|) + (|-\rangle\langle +|)\} \cos \phi + i\{(|+\rangle\langle -|) - (|-\rangle\langle +|)\} \sin \phi \\ &= S_x \cos \phi - S_y \sin \phi. \end{aligned}$$

同様に

$$e^{iS_z\phi/\hbar} S_y e^{-iS_z\phi/\hbar} = S_x \sin \phi + S_y \cos \phi$$

が得られる. さらに  $S_z$  と  $e^{-iS_z\phi/\hbar}$  は交換するので,

$$e^{iS_z\phi/\hbar} S_z e^{-iS_z\phi/\hbar} = S_z e^{iS_z\phi/\hbar} e^{-iS_z\phi/\hbar} = S_z.$$

以上より期待値  $\langle \mathbf{S} \rangle$  は  $z$  軸周りの回転の行列により, ベクトルとしての変換則

$$\begin{pmatrix} \langle S_x \rangle \\ \langle S_y \rangle \\ \langle S_z \rangle \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle S_x \rangle \\ \langle S_y \rangle \\ \langle S_z \rangle \end{pmatrix}$$

に従って変換する.

導出 2 Baker-Hausdorff (ベーカー・ハウズドルフ) の補助定理を用いて,

$$\begin{aligned} e^{iS_z\phi/\hbar} S_x e^{-iS_z\phi/\hbar} &= S_x + \frac{i\phi}{\hbar} [S_z, S_x] + \frac{1}{2!} \left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)^2 [S_z, [S_z, S_x]] + \dots \\ &= S_x \left(1 - \frac{\phi^2}{2!} + \dots\right) - S_y \left(\phi - \frac{\phi^3}{3!} + \dots\right) \\ &= S_x \cos \phi - S_y \sin \phi \end{aligned} \tag{3.2.7}$$

と計算することもできる [本稿次節で補足].  $e^{iS_z\phi/\hbar} S_y e^{-iS_z\phi/\hbar}$  も同様に計算でき, 「導出 1」と同じ結果が得られる.

■  $e^{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi/\hbar}$  の式 (100) の導出 Pauli 行列の公式 (98) より

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})^m = \begin{cases} 1 & (m: \text{偶数}) \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} & (m: \text{奇数}) \end{cases}$$

となるので,

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi}{2}\right) &= \left[1 - \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})^2}{2!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^2 + \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})^4}{4!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^4 - \dots\right] \\ &\quad - i \left[ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \frac{\phi}{2} - \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})^3}{3!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^3 + \dots \right] \\ &= \mathbf{1} \cos \frac{\phi}{2} - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \sin \frac{\phi}{2} : (100) \end{aligned}$$

を得る.

■固有スピノル  $\chi$  の表式 (3.2.52) の導出  $e^{-i\sigma \cdot n\phi/\hbar}$  の式 (101) を用いて,

$$\begin{aligned}\chi &= \exp\left(\frac{-i\sigma_3\alpha}{2}\right) \exp\left(\frac{-i\sigma_2\beta}{2}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\alpha}{2} - i\sin\frac{\alpha}{2} & 0 \\ 0 & \cos\frac{\alpha}{2} + i\sin\frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) e^{-i\alpha/2} \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) e^{+i\alpha/2} \end{pmatrix} : (3.2.52)\end{aligned}$$

と計算できる.

### 3.2 について

■スピン角運動量の導入 教科書では既に具体例としてスピン 1/2 の系を繰り返し考えてきたけれど, ここで改めてスピン角運動量の導入を行っておこう [1, pp.195–196, pp.198–199]. 粒子の軌道角運動量  $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$  (3.6 節) は, 粒子の空間運動に伴う角運動量である. これに対して素粒子や複合粒子は, その空間運動に無関係な“固有の”角運動量  $\mathbf{S}$  を持ち, 粒子の全角運動量は和  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  で与えられる\*42.  $\mathbf{S}$  はスピン角運動量と呼ばれ,  $\hbar \rightarrow 0$  の極限で消失するような, 量子力学に特有の量である\*43. 角運動量の一般論 (3.5 節) より,

$$\begin{aligned}\mathbf{S}^2 \text{の固有値} & \quad s(s+1)\hbar^2, \quad \left(s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\right) \\ S_z \text{の固有値} & \quad m\hbar \quad (m = -s, -s+1, \dots, s-1, s)\end{aligned}$$

である. 各種の素粒子は決まった  $s$  の値を持ち, 「スピン  $s$  の粒子」として言及される. 経験的に大部分の素粒子はスピンの値が 1/2 であることが知られている.

■「角運動量の交換関係 (3.1.20) を実現する最小の次元数  $N$  は,  $N = 2$  である」(p.213) について スピン 1/2 の系は状態が  $N = 2$  個の固有ケット  $|+\rangle, |-\rangle$  によって張られるケット空間に属するという意味で, 次元数  $N = 2$  の系である. そしてこのような系では確かに, 角運動量の交換関係 (3.1.20) を満たす演算子 (3.2.1) を作る事ができる.

一方  $N = 1$  の系を, 状態が観測量  $A$  の唯一つの固有ケット  $|a'\rangle$  から成る系と考えると, 任意の演算子は  $|a'\rangle \langle a'|$  に比例するため, 角運動量の交換関係 (3.1.20) を満たさない. よって「角運動量の交換関係 (3.1.20) を実現する最小の次元数  $N$  は,  $N = 2$  である」.

■ベーカー・ハウドルフの定理を用いた計算 (3.2.7) について 式 (3.2.7) の計算は, 帰納的に予想される関係

$$\underbrace{[S_z, [S_z, \dots [S_z, S_x] \dots]]}_{2n \text{ 個の } S_z} = (i\hbar)^{2n} (-1)^n S_x, \quad (103)$$

$$\underbrace{[S_z, [S_z, \dots [S_z, S_x] \dots]]}_{2n+1 \text{ 個の } S_z} = (i\hbar)^{2n+1} (-1)^n S_y \quad (104)$$

\*42 ここでは和  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  の意味を直観的に理解して良い. 詳しくは角運動量の合成に関する議論 (3.7 節) を参照.

\*43 それ故しばしば行われるように, スピン  $\mathbf{S}$  を粒子の“自転”に関係付けて古典的に解釈することは最初から無意味である.



を用いて実行できる。実際、式 (103), 式 (104) は数学的帰納法にて証明できる。すなわち式 (103) は  $n = 0$  で成り立つ。ある  $n$  に対して式 (103) が成り立つとすると式 (104) が、したがって式 (103) で  $n \rightarrow n + 1$  とした式が成り立つ。

■式 (3.2.10) の説明 「 $S_z$  の期待値については、 $S_z$  と  $\mathcal{D}_z(\phi)$  が交換するので変化がない」 (p.215) ことを丁寧に書くと

$$\langle S_z \rangle = \langle \alpha | S_z | \alpha \rangle \rightarrow \langle \alpha | \mathcal{D}_z^\dagger(\phi) S_z \mathcal{D}_z(\phi) | \alpha \rangle = \langle \alpha | (\mathcal{D}_z^\dagger(\phi) \mathcal{D}_z(\phi)) S_z | \alpha \rangle = \langle S_z \rangle$$

となる。

■ $\Delta B$  の式 (3.2.25) の導出 磁場の変化  $B \rightarrow B + \Delta B$  に伴い経路 B [本稿の経路②] の中性子のスピン歳差運動角振動数が  $\omega \rightarrow \omega + \Delta\omega$  と変化して、干渉領域の強度の位相が山から山に移ったとすると、

$$2\pi = \frac{(\Delta\omega)T}{2} = \frac{1}{2} \frac{g_n e \Delta B}{m_p c} T, \quad \therefore \Delta B = 4\pi \frac{m_p c}{g_n e T}$$

となる。ここに

$$T = \frac{l}{p/m_p} = \frac{lm_p}{\hbar k} = \frac{l\lambda m_p}{\hbar}$$

を代入すれば良い。

■2成分スピノルの定義について 教科書では列ベクトル (3.2.28):  $\chi = \begin{pmatrix} \langle +|\alpha \rangle \\ \langle -|\alpha \rangle \end{pmatrix}$  を2成分スピノルと定義しているけれど、より正確にはスピノルは空間回転に際して3.3節の変換則 (102):

$$\chi \rightarrow \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi}{2}\right) \chi$$

に従い、ユニタリー・ユニモジュラー行列によって変換する量として定義される [1, p.205].

■Pauli 行列の (反) 交換関係 (95), (96) の導出 スピン演算子の反交換関係 (1.4.21):  $\{S_i, S_j\} = \frac{1}{2}\hbar^2\delta_{ij}$  より

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\hbar^2\delta_{ij} \langle a' | a'' \rangle &= \langle a' | \{S_i, S_j\} | a'' \rangle \\ &= \sum_{a'''} \langle a' | S_i | a''' \rangle \langle a''' | S_j | a'' \rangle + \sum_{a'''} \langle a' | S_j | a''' \rangle \langle a''' | S_i | a'' \rangle \end{aligned}$$

であり、これを  $(\hbar/2)^2$  で割ったものは反交換関係 (95):  $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$  の  $(a', a'')$  成分である。

Pauli 行列の交換関係 (3.2.35) は「角運動量の交換関係 (3.1.20) を  $2 \times 2$  の行列として具体的に表したものと見ることができる」(式 (3.2.35) の下2行) について、同様に、式 (3.1.20):  $[S_i, S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k$  [本稿の式 (92)] より

$$\begin{aligned} i\hbar\varepsilon_{ijk} \langle a' | S_k | a'' \rangle &= \langle a' | [S_i, S_j] | a'' \rangle \\ &= \sum_{a'''} \langle a' | S_i | a''' \rangle \langle a''' | S_j | a'' \rangle - \sum_{a'''} \langle a' | S_j | a''' \rangle \langle a''' | S_i | a'' \rangle \end{aligned}$$

であり、これを  $(\hbar/2)^2$  で割ったものは交換関係 (96):  $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$  の  $(a', a'')$  成分である。

同じ要領で演算子の関係 (3.2.6):

$$e^{iS_z\phi/\hbar} S_x e^{-iS_z\phi/\hbar} = S_x \cos\phi - S_y \sin\phi$$

から行列の関係 (3.2.48):

$$e^{i\sigma_3\phi/2}\sigma_1e^{-i\sigma_3\phi/2} = \sigma_1 \cos \phi - \sigma_2 \sin \phi$$

を得る.

■回転演算子の行列表現 (99) の導出 回転行列の  $(a', a'')$  成分が

$$\begin{aligned} \langle a' | \exp\left(\frac{-i\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right) | a'' \rangle &\equiv \langle a' | \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{-i\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right)^k | a'' \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{-i\phi}{\hbar}\right)^k (\langle a' | \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} | a'' \rangle)^k \\ &\equiv \exp\left(\frac{-i\phi}{\hbar} \langle a' | \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} | a'' \rangle\right) = \exp\left(\frac{-i\phi}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{\langle a' | S_i | a'' \rangle}{\hbar/2} \hat{n}_i\right) \\ &= \exp\left(\frac{-i\phi}{2} \sum_{i=1}^3 (\sigma_i)_{a'a''} \hat{n}_i\right) = \left(\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right)\right)_{a'a''} \end{aligned}$$

となることによる. 結果的に回転演算子を行列表現にするには,  $\mathbf{S}/\hbar \rightarrow \boldsymbol{\sigma}/2$  と置き換えれば良い.

■式 (102) の導出

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &\rightarrow e^{-i\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}\phi/\hbar} |\alpha\rangle, \\ \therefore \langle a' | \alpha \rangle &\rightarrow \langle a' | e^{-i\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}\phi/\hbar} |\alpha\rangle = \sum_{a''} \langle a' | e^{-i\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}\phi/\hbar} | a'' \rangle \langle a'' | \alpha \rangle. \end{aligned}$$

ここで  $\langle a' | \alpha \rangle$  は  $\chi$  の  $a'$  成分であり, また  $\langle a' | e^{-i\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}\phi/\hbar} | a'' \rangle$  は行列  $e^{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi/2}$  の  $(a', a'')$  成分なので (式 (102) 参照), これは式 (102):

$$\chi \rightarrow e^{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi/2} \chi$$

を意味する.

■ $\langle S \rangle$  がベクトル変換の性質に従うこと 「ベクトル変換の性質に従うのは,  $\boldsymbol{\sigma}$  でなく  $\chi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \chi$  である」 (p.224 下から 4 行目) のは, 式 (3.2.31):

$$\langle S_k \rangle = \frac{\hbar}{2} \chi^\dagger \sigma_k \chi$$

より  $\langle S \rangle$  がベクトル変換の性質に従うことを意味している:

$$\begin{aligned} \chi^\dagger \sigma_k \chi &\rightarrow \sum_l R_{kl} (\chi^\dagger \sigma_l \chi) : (3.2.47), \\ \Leftrightarrow \langle S_k \rangle &\rightarrow \sum_l R_{kl} \langle S_l \rangle : (3.2.11). \end{aligned}$$

そして式 (3.2.11) が  $z$  軸周りの回転に対して成り立つことを既に確かめた.

■状態  $|\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}; +\rangle$  スピンの  $\mathbf{n}$  方向成分  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}$  の期待値が  $\hbar/2$  である状態  $|\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}; +\rangle$  とは, この記号が表す通りスピンの  $\mathbf{n}$  と平行になる状態である. それゆえ式 (3.2.52) が対応する固有スピノルである.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \chi &= \chi : (3.2.50) \\ \Leftrightarrow \sum_{a''} \langle a' | \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} | a'' \rangle \langle a'' | \mathbf{S} \cdot \mathbf{n}; + \rangle &= \frac{\hbar}{2} \langle a' | \mathbf{S} \cdot \mathbf{n}; + \rangle \\ \Leftrightarrow \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} | \mathbf{S} \cdot \mathbf{n}; + \rangle &= \frac{\hbar}{2} | \mathbf{S} \cdot \mathbf{n}; + \rangle : (3.2.51). \end{aligned}$$

### 3.3 O(3), SU(2) およびオイラーの回転

#### 直交群 (pp.227–228)

ここで回転操作を群の観点から調べる。群とは任意の元  $a, b, \dots$  に対して、次の性質を持つ積  $ab$  の定義されている集合のことである [8, p.824].

1. 閉包性 元  $a, b$  の積  $ab$  もまた群の元である。
2. 結合法則  $a(bc) = (ab)c$  が成り立つ。
3. 単位元  $a = aI = Ia$  を満たす単位元  $I$  が存在する。
4. 逆元  $aa^{-1} = a^{-1}a = I$  を満たす  $a$  の逆元  $a^{-1}$  が存在する。

さて、[3次元空間内の原点周りの] 回転は  $3 \times 3$  の直交行列  $R$  で特徴付けることができる。直交行列  $R$  は行列積に関して  $O(3)$  と呼ばれる群を成す (「閉包性」が満たされていることの確認は下記)。 $O$  は直交 (orthogonal) を表し、 $3$  は次元を表す。

なお、[3次元空間内の原点周りの] 一般的な回転を特徴付けるには3つの実数が必要である。例えば

- 回転軸の向き  $\mathbf{n}$  を表す天頂角と方位角、および回転角  $\phi$
- 回転ベクトル  $\phi\mathbf{n}$  のデカルト座標系に関する3成分

を用いれば良い。回転を表す直交行列  $R$  の独立な成分の個数も確かに3である (証明は下記)。

#### ユニタリー・ユニモジュラー群 (pp.228–231)

行列  $e^{-i\sigma \cdot \mathbf{n}\phi/2}$  が、ユニタリー・ユニモジュラー行列であることを説明する。ここでユニタリー・ユニモジュラー行列とは、行列式が1であるユニタリー行列を意味する。行列  $e^{-i\sigma \cdot \mathbf{n}\phi/2}$  のユニタリー・ユニモジュラー性は具体的表式 (101) から直接確かめられるけれど、ここではユニタリー・ユニモジュラー行列の一般的な表現を考えてこのことを示そう。  $2 \times 2$  のユニタリー・ユニモジュラー行列は一般に、複素数  $a, b$  を用いて

$$U(a, b) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad (105)$$

と表すことができる [証明は本稿次節]。ただし  $a, b$  にはユニモジュラー条件

$$(\det U =) |a|^2 + |b|^2 = 1 \quad (106)$$

が課される。そこで上式 (105) を行列  $e^{-i\sigma \cdot \mathbf{n}\phi/2}$  の表式 (101) と比較すると、

$$\operatorname{Re}(a) = \cos \frac{\phi}{2}, \quad \operatorname{Im}(a) = -n_z \sin \frac{\phi}{2}, \quad \operatorname{Re}(b) = -n_y \sin \frac{\phi}{2}, \quad \operatorname{Im}(b) = -n_x \sin \frac{\phi}{2}$$

と同定される。これらはユニモジュラー条件 (106) も満たしている。よって回転を表す行列  $e^{-i\sigma \cdot \mathbf{n}\phi/2}$  は、ユニタリー・ユニモジュラー行列の最も一般的な表現となることが分かる。

行列 (105) は2つの複素数  $a, b$  で指定されるので、ユニモジュラー条件 (106) の下で3つの独立な実数パラメーターを持つ。これはユニタリー・ユニモジュラー行列が回転を表すことから期待されることである。

また同じ理由から期待されるように、ユニタリー・ユニモジュラー行列は行列の積に関して群を成す (証明は下記)。この群は  $SU(2)$  と呼ばれ、 $S$  は“特殊 (special)” [行列式が1]、 $U$  は“ユニタリー (unitary)”， $2$  は  $[S_{\pm}; \pm]$  の張るケット空間の] 次元を表す。

- SU(2) は U(2) の部分群であり，実は U(2) の元  $U$  の基も一般的な形は，式 (105) に位相因子を掛けた

$$U = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1, \quad \gamma^* = \gamma$$

という形をとる．

- SU(2) と O(3) はどちらも回転を表すものの，実は SU(2) の元と O(3) の元は 2 対 1 に対応付けられる．

### オイラーの回転 (pp.231–235)

空間回転は Euler 角  $\alpha, \beta, \gamma$  を用いて

$$R(\alpha, \beta, \gamma) \equiv R_{z'}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha) \quad (3.3.15)$$

(図 33 参照，第 2 の回転は  $x'$  軸ではなく  $y'$  軸の周りに行うことに注意) と表せる．これは剛体軸  $x', y', z'$  の周りの回転で書かれている．ここで幾何学的に

$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha), \quad (3.3.16)$$

$$R_{z'}(\gamma) = R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)R_{y'}^{-1}(\beta) \quad (3.3.17)$$

が成り立つことに気付くと [本稿次節の考察を参照]，上式 (3.3.15) は空間固定軸の周りの回転の合成として

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma) \quad (3.3.18)$$

と表せる (導出は下記)．よってこの回転の演算子は

$$\mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathcal{D}_z(\alpha)\mathcal{D}_y(\beta)\mathcal{D}_z(\gamma) \quad (3.3.20)$$

であり，その行列表現は

$$\begin{aligned} e^{-i\sigma_3\alpha/2}e^{-i\sigma_2\beta/2}e^{-i\sigma_3\gamma/2} &= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix} \quad (\because \text{式 (101)}) \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\beta/2) & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\beta/2) \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\beta/2) & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\beta/2) \end{pmatrix} \quad (3.3.21) \end{aligned}$$

となる．最右辺を式 (105)，(106) と見比べると，これは期待されるようにユニタリー・ユニモジュラー行列となっていることが分かる．

なお量子力学において慣習的に Euler 角を定義する第 2 の回転を，剛体系の ( $x'$  軸でなく) $y'$  軸の周りに行うのは， $e^{-i\sigma_3\alpha/2}, e^{-i\sigma_2\beta/2}, e^{-i\sigma_3\gamma/2}$  のうち唯一，非対角成分をもつ  $e^{-i\sigma_2\beta/2}$  の非対角成分を実数とするためである [本稿次節で補足]．

### 3.3 節，式の導出など

■直交行列  $R_1, R_2$  の積は直交行列であることの確認 直交行列の仮定  $R_1 R_1^T = 1, R_2 R_2^T = 1$  より，

$$(R_1 R_2)(R_1 R_2)^T = R_1 R_2 R_2^T R_1^T = 1.$$

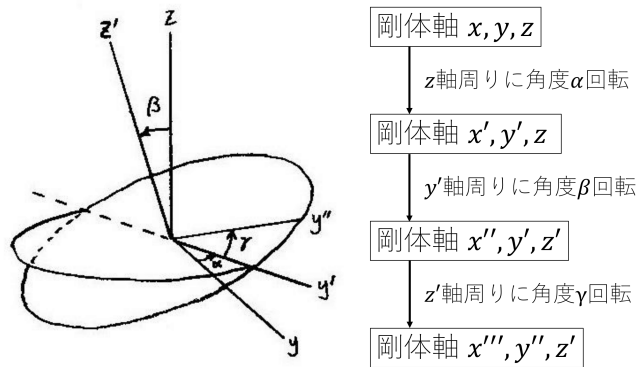


図 33 Euler の回転

■直交行列  $R$  の独立な成分の数は 3 であることの確認 直交行列の定義

$$RR^T = 1, \quad R^T R = 1$$

において、第 2 式は第 1 式を転置して得られるため、これらは等価である。そして第 1 式の条件

$$\delta_{ij} = R_{ik}(R^T)_{kj} = R_{ik}R_{jk}$$

は添字  $i, j$  に関して対称なので、実質 6 本の条件式となる。よって  $R$  の  $3 \times 3 = 9$  個の成分のうち、独立に選べるのは  $9 - 6 = 3$  個までである。

■ユニタリー・ユニモジュラー行列が群を成すことの確認 教科書を補足しつつまとめよう。

閉包性 ユニタリー・ユニモジュラー行列 (105):

$$U(a, b) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$$

に対して

$$U(a_1, b_1)U(a_2, b_2) = U(a_1a_2 - b_1b_2^*, a_1b_2 + a_2^*b_1)$$

と計算できる。右辺の行列はユニモジュラー条件

$$|a_1a_2 - b_1b_2^*|^2 + |a_1b_2 + a_2^*b_1|^2 = 1 \tag{3.3.12}$$

を満たしているので [本稿次節で補足]、ユニタリー・ユニモジュラー行列の積  $U(a_1, b_1)U(a_2, b_2)$  もユニタリー・ユニモジュラー行列である。

演算積の結合則 行列積の性質として自動的に満たされている。

単位元 行列の積の演算に関する単位元

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = U(1, 0)$$

はユニタリー・ユニモジュラー行列となっている。

逆元  $U(a, b)$  の逆行列は

$$U^{-1}(a, b) = U(a^*, -b) \tag{3.3.13}$$

である [本稿次節で補足]。

■空間固定軸の周りの回転の合成 (3.3.18) の導出 式 (3.3.15) に式 (3.3.16), 式 (3.3.17) を代入すると,

$$\begin{aligned} R(\alpha, \beta, \gamma) &= R_{z'}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha) \\ &= [R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)\cancel{R_{y'}^{-1}(\beta)}]\cancel{R_{y'}(\beta)}R_z(\alpha) \\ &= [R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha)]R_z(\gamma)R_z(\alpha) \\ &= R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma) : (3.3.18) \end{aligned}$$

を得る. ただし最後の等号では, 共通の軸周りの回転  $R_z(\gamma), R_z(\alpha)$  が交換することを用いた.

### 3.3 について

■ $-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi/2$  のユニタリー性 「明らかに, (3.2.45) はユニタリーである」(p.228 下から 5,4 行目) について, 式 (3.2.44):

$$U \equiv e^{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi/2} = \mathbf{1} \cos(\phi/2) - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \sin(\phi/2)$$

の表現に戻り, 式 (3.2.37a), すなわち Pauli 行列が Hermite 行列であることと, 性質 (3.2.43): $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})^2 = 1$  を用いると

$$U^\dagger U = \mathbf{1} \cos^2(\phi/2) - (i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})^2 \sin^2(\phi/2) = \mathbf{1}$$

となる. このため式 (3.3.6): $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$  が回転前後で満たされる:

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = \chi^\dagger \chi \rightarrow \chi^\dagger U^\dagger U \chi = \chi^\dagger \chi.$$

■ユニタリー・ユニモジュラー行列の一般的表式 (105) の導出

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

とおき, ユニモジュラー性  $\det U = 1$  を仮定すると

$$U^{-1} = \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$$

となる. さらにユニタリー性を要求して, これを

$$U^\dagger = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}$$

と等置すると  $d = a^*, c = -b^*$  が見出される.  $c, d$  を消去して式 (105):

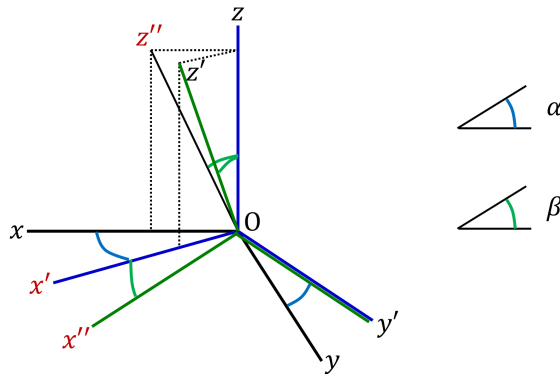
$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$$

を得る.

■式 (3.3.12), 式 (3.3.13) の確認

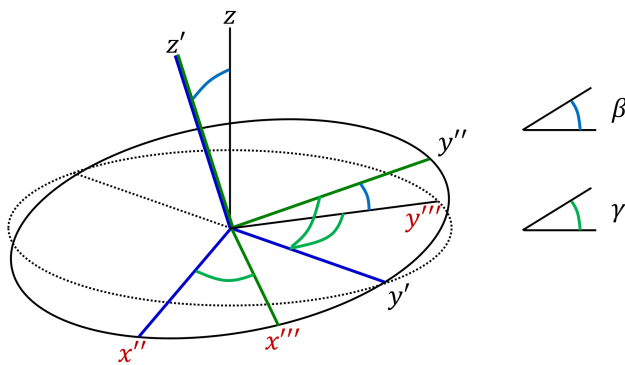
式 (3.3.12) について:  $|a_1 a_2 - b_1 b_2^*|^2 + |a_1 b_2 + a_2^* b_1|^2 = (|a_1|^2 + |b_1|^2)(|a_2|^2 + |b_2|^2) = 1,$

式 (3.3.13) について:  $U(a, b)U(a^*, -b) = U(a^*, -b)U(a, b) = \begin{pmatrix} |a|^2 + |b|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 + |a|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$



$$\begin{array}{l}
 y' \longleftarrow y' \quad y' \longleftarrow y \longleftarrow y \longleftarrow y' \\
 R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha) \quad (3.3.16) \\
 z' \longleftarrow z \quad z' \longleftarrow z'' \longleftarrow z \longleftarrow z
 \end{array}$$

図 34 式 (3.3.16) の幾何学的意味



$$\begin{array}{l}
 z' \longleftarrow z' \quad z' \longleftarrow z \longleftarrow z \longleftarrow z' \\
 R_{z'}(\gamma) = R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)R_{y'}^{-1}(\beta) \quad (3.3.17) \\
 y'' \longleftarrow y \quad y'' \longleftarrow y''' \longleftarrow y' \longleftarrow y'
 \end{array}$$

図 35 式 (3.3.17) の幾何学的意味

■  $R_{y'}(\beta)$  の式 (3.3.16),  $R_{z'}(\gamma)$  の式 (3.3.17) の確認 式 (3.3.16) の両辺が表す変換で図 34 のように回転前の剛体系の 2 軸  $y', z'$  (青色) が回転後に同じ軸  $y', z'$  (緑色) に移されるから剛体全体が同じ配置に移されることになる。ただし図 34 では図 3.4 で定義されていない軸の名前を赤い字で示しており、また式 (3.3.16) に各行列が表す変換前後での軸の名前を書き添えてある。

図 34 において

$$y \rightarrow z, \quad y' \rightarrow z', \quad z \rightarrow y', \quad z' \rightarrow y'', \quad z'' \rightarrow y''', \quad \alpha \rightarrow \beta, \quad \beta \rightarrow \gamma$$

と置き換えると図 35 のようになる (剛体系の  $x$  軸は無視する)。そこで式 (3.3.16) に対しても同じ置き換えを施すと式 (3.3.17) を得る。剛体系の  $x$  軸を指定するのは式 (3.3.16)  $\Rightarrow$  式 (3.3.17) を言うのに必要ない。

■第2の回転を剛体系の  $x$ -軸のまわりに選んだ場合 力学の慣習に従い回転角  $\beta$  の第2の回転を剛体系の  $x$  軸の周りに行い、剛体系の座標軸の名前が  $(x, y, z) \rightarrow (x', y', z) \rightarrow (x', y'', z') \rightarrow (x'', y''', z')$  と変わったとすると結果的に式 (3.3.16-18) で  $y \rightarrow x, y' \rightarrow x'$  と置き換えた関係が成り立つことが確かめられる。よってこの場合、回転演算子の行列表現は

$$\mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma) \doteq \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -i \sin(\beta/2) \\ -i \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix}$$

となり、右辺中央の行列の非対角成分は ( $\beta \neq 2n\pi$  に対して) 純虚数である。

p.234 の脚注は  $e^{-i\sigma_3\alpha/2}e^{-i\sigma_2\beta/2}e^{-i\sigma_3\gamma/2}$  の式 (3.3.21) の導出に必要な  $e^{-i\sigma \cdot n\phi/2}$  の式 (3.2.45) の導出で、 $\sigma_2$  の表式として式 (3.2.32):

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

を用いたことを言っている。

■ $e^{-i\sigma_3\alpha/2}e^{-i\sigma_2\beta/2}e^{-i\sigma_3\gamma/2}$  の式 (3.3.21) 異なる Pauli 行列は交換しないため (式 (3.2.35)), 式 (3.3.21) の行列の積  $e^{-i\sigma_3\alpha/2}e^{-i\sigma_2\beta/2}e^{-i\sigma_3\gamma/2}$  を指数法則で  $\exp(-i(\sigma_3\alpha + \sigma_2\beta + \sigma_3\gamma)/2)$  とまとめることはできない (付録 B 参照)。

### 3.4 密度演算子ならびに純粋アンサンブルと混合アンサンブル

偏極原子線と偏極していない原子線/アンサンブル平均と密度演算子 (冒頭)(pp.235-238)

純粋アンサンブルとその混合である混合アンサンブル	
純粋アンサンブル	混合アンサンブル
$\sum_i c_i  a^{(i)}\rangle$	$\sum_i w_i  \alpha^{(i)}\rangle$
$\{ a^{(i)}\rangle\}$ は直交系	一般に $\{ \alpha^{(i)}\rangle\}$ は直交系でない
展開係数 $c_i \in \mathbf{C}$	分布の割合 $w_i \in \mathbf{R}$
コヒーレントな混合	インコヒーレントな混合
例) 偏極している銀原子線	例) 部分的に偏極している銀原子線
$ S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}  S_z; +\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}  S_z; -\rangle$	$0.4  S_z; +\rangle + 0.3  S_x; +\rangle + 0.3  S_y; -\rangle$
(項数) = (ケット空間の次元)	一般に (項数) $\neq$ (ケット空間の次元)

アンサンブル平均と密度演算子 (pp.238-244)

- 混合アンサンブル  $\sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle$  の中に構成要素  $|\alpha^{(i)}\rangle$  を見出す確率は  $w_i$  であり、状態  $|\alpha^{(i)}\rangle$  における観測量の期待値は  $\langle \alpha^{(i)} | A | \alpha^{(i)} \rangle$  だから、アンサンブル平均は

$$[A] = \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | A | \alpha^{(i)} \rangle$$

と表される。



- 密度演算子  $\rho \equiv \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle \langle \alpha^{(i)}|$  を用いて, これは

$$[A] = \text{tr}(\rho A) = \sum_{b'} \langle b' | \rho A | b' \rangle \quad (3.4.10)$$

と書き換えらる [導出は本稿次節]. これは基底  $\{|b'\rangle\}$  に依らない [1.5 節].

- 規格化条件

$$\sum_i w_i = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \text{tr}(\rho) = 1. \quad (3.4.11)$$

(導出は下記. )

- 純粋アンサンブルに対して  $\text{tr}(\rho^2)$  は最大値 1 をとる (証明は下記).

#### アンサンブルの時間的发展 (pp.245–246)

状態  $|\alpha^{(i)}, t\rangle$  に対する Schrödinger 方程式から, Schrödinger 表示の密度演算子  $\rho = \sum_i w_i |\alpha^{(i)}, t\rangle \langle \alpha^{(i)}, t|$  に対する時間发展方程式

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -[\rho, H] \quad (3.4.29)$$

が導かれる (導出は下記, Heisenberg 方程式とは右辺の符号が逆であることに注意). この結果は古典論と

$$\begin{aligned} \rho &\leftrightarrow \rho_{\text{古典}} : \text{位相空間内の代表点の密度,} \\ \text{上式 (3.4.29)} &\leftrightarrow \text{Liouville の定理 } \frac{\partial \rho_{\text{古典}}}{\partial t} = -[\rho_{\text{古典}}, H]_{\text{古典}} \quad [\text{本稿次節で補足}] \end{aligned}$$

のように対応付けられる (このことから  $\rho$  を密度演算子と呼ぶのは理に合っている).

#### 連続的な場合への一般化 (pp.246–247)

$$[A] = \sum_{b'} \langle b' | \rho A | b' \rangle \quad \rightarrow \quad [A] = \int d\xi' \langle \xi' | \rho A | \xi' \rangle.$$

#### 量子統計力学 (pp.247–253)

$\rho$  を対角化する基底でエントロピーを

$$S \equiv k\sigma, \quad \sigma \equiv - \sum_{\text{対角要素 } \rho_{kk}} \rho_{kk} \ln \rho_{kk}$$

と定義すると ( $k$  は Boltzmann 定数),

- 純粋なアンサンブル (唯一つの  $k$  に対し  $\rho_{kk} = 1$ , その他の  $\rho_{kk} = 0$ )  $\rightarrow \sigma = 0$
- 完全にランダムなアンサンブル (各  $\rho_{kk} = 1/N$ )  $\rightarrow \sigma = \ln N$  ( $N$  はケット空間の次元)

となる. 熱平衡では

$$0 = i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -[\rho, H]$$

より  $\rho$  と  $H$  の同時固有ケットの存在が保証され,

- 規格化条件  $\text{tr}(\rho) = \sum_k \rho_{kk} = 1$

- $[H] = (\text{構成要素あたりの内部エネルギー } U) = \text{const}$  の条件

の下で  $\sigma$  が最大値をとることを要求すると, [統計力学で学んだように] カノニカル分布

$$\rho_{kk} = \frac{\exp(-\beta E_k)}{\sum_l^N \exp(-\beta E_l)} \quad (3.4.48)$$

が導かれる (導出は下記). ここから

- アンサンブルは高温の極限  $\beta \rightarrow 0$  で完全にランダムなアンサンブルになること
- 低温の極限  $\beta \rightarrow \infty$  で基底状態のみが占められる純粋アンサンブルになること
- $U = \sum_k E_k \rho_{kk}, Z = \sum_k e^{-\beta E_k}$  に対し

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Z)$$

となること

が分かる. [以上で真新しいのは, 状態  $k$  の出現確率が密度行列の要素  $\rho_{kk}$  で与えられている点だけである.]

### 3.4 節, 式の導出など

#### ■規格化条件 (3.4.11) の導出

$$\text{tr}(\rho) = \sum_i \sum_{b'} w_i \langle b' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle = \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(i)} \rangle = 1.$$

■純粋アンサンブルに対して  $\text{tr}(\rho^2)$  は最大値 1 をとることの証明 本稿次節「密度行列の対角化」にて考察するように, 一般に  $\text{tr}(\rho^2) \leq 1$  が成り立つ (p.242). ここでは純粋アンサンブルに対して等号が成立することを示そう. 純粋アンサンブルに対して密度演算子は  $\rho = |\alpha^{(n)}\rangle \langle \alpha^{(n)}|$  という形をとるので,

$$\rho^2 = \rho, \quad \therefore \text{tr}(\rho^2) = \text{tr}(\rho) = 1.$$

■密度演算子の時間発展方程式 (3.4.29) の導出 Schrödinger 方程式  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha^{(i)}; t\rangle = H |\alpha^{(i)}; t\rangle$  より, 密度演算子  $\rho = \sum_i w_i |\alpha^{(i)}; t\rangle \langle \alpha^{(i)}; t|$  は

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \sum_i w_i \left( H |\alpha^{(i)}; t\rangle \langle \alpha^{(i)}; t| - |\alpha^{(i)}; t\rangle \langle \alpha^{(i)}; t| H \right) \\ &= -[\rho, H] : (3.4.29) \end{aligned}$$

を満たす.

#### ■カノニカル分布 (3.4.48) の導出 拘束条件

$$0 = \delta[H] = \sum_k E_k \delta\rho_{kk}, \quad 0 = \delta(\text{tr}\rho) = \sum_k \delta\rho_{kk}$$

の下で  $\sigma$  の最大性

$$0 = \delta\sigma = -\sum_k (\ln \rho_{kk} + 1) \delta\rho_{kk}$$

を要求すると, Lagrange の未定乗数法により

$$\sum_k [(\ln \rho_{kk} + 1) + \beta E_k + \gamma] \delta \rho_{kk} = 0, \quad \therefore \rho_{kk} = \exp(-\beta E_k - \gamma - 1)$$

を得る ( $\beta, \gamma$  は未定乗数). 規格化条件  $\text{tr}(\rho) = \sum_k \rho_{kk} = 1$  から  $\gamma$  を定めると, カノニカル分布 (3.4.48) を得る.

### 3.4 について

■「実際, 第一章で…… $\sin^2(\beta/2)$  となる」(p.237 下から 9~7 行目) について 偏極の方向すなわち原子スピンの方向  $\mathbf{n}$  は与えられていて SG 装置を回転すると磁場が  $\mathbf{n}$  となす角  $\beta$  を変えられる. 磁場の方向に  $z$  軸をとると第 1 章問題 9 または式 (3.2.52) より  $|\mathbf{n}\rangle = \cos(\beta/2)e^{-i\alpha/2}|+\rangle + \sin(\beta/2)e^{-i\alpha/2}|-\rangle$  なので, SG 装置が観測する磁場に沿った 2 方向の相対強度  $|\langle +|\mathbf{n}\rangle|^2, |\langle -|\mathbf{n}\rangle|^2$  はそれぞれ  $\cos^2(\beta/2), \sin^2(\beta/2)$  である.

■式 (3.4.10):  $[A] = \text{tr}(\rho A)$  の導出 式 (3.4.7) において  $\sum_{b'} |b'\rangle \langle b'| = 1$  を挿入せずとも,

$$[A] = \sum_{b''} \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | A | b'' \rangle \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle = \sum_{b''} \langle b'' | \left( \sum_i w_i | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | \right) A | b'' \rangle = \text{tr}(\rho A)$$

のように式 (3.4.10) を得られる.

■「トレースは表示に依らない」(式 (3.4.10) の 1 行下) こと 式 (1.5.15) を見よ.

■式 (3.4.11) について 計算で用いたのは各  $|\alpha^i\rangle$  が規格化されていることであり,  $\{|\alpha^i\rangle\}$  の直交性は仮定していない.

■スピン 1/2 の系では  $[S_x], [S_y], [S_z]$  だけで密度演算子を表せること (p.240 下 5 行から p.241, l.1) 密度行列はどのような基底で表示しようとも, ケット空間の次元が 2 なので  $2 \times 2$  の行列でなければならない. Hermiticity と規格化条件を満足する  $2 \times 2$  の行列は  $a, b, c$  を実数として

$$M \equiv \begin{pmatrix} a & b + ic \\ b - ic & 1 - a \end{pmatrix}$$

の形をとる. 特に  $\{|S_z; \pm\rangle\}$  を基底にとると Pauli 行列の表式 (3.2.32) を用いることができ,  $M$  を密度演算子  $\rho$  の行列表現として

$$[S_x] = \frac{\hbar}{2} \text{tr}(M\sigma_1) = \hbar b, \quad [S_y] = \frac{\hbar}{2} \text{tr}(M\sigma_2) = -\hbar c, \quad [S_z] = \frac{\hbar}{2} \text{tr}(M\sigma_3) = \hbar \left( a - \frac{1}{2} \right)$$

と書ける. ここから  $a, b, c$  が定まり,

$$\rho \doteq M = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{[S_z]}{\hbar} & \frac{[S_x] - i[S_y]}{\hbar} \\ \frac{[S_x] + i[S_y]}{\hbar} & \frac{1}{2} - \frac{[S_z]}{\hbar} \end{pmatrix}$$

を得る.

■密度行列が同じアンサンブルは区別しない 「スピン 1/2 の系では, 問題にするアンサンブルを 3 個の実数が完全に特徴づける」(p.241, l.3,4) について, これはアンサンブルを, アンサンブル平均  $[A] = \text{tr}(\rho A)$  だけで, したがって与えられた基底での密度演算子の行列表示だけで特徴付けられるものと見なしているからであ

ると考えられる。逆にアンサンブルを表すケットが一致しないものも同じ密度行列を持ちさえすれば同じアンサンブルと見て良い。例えば p.243 例 3 で扱われる偏極していないビーム

$$0.5 |S_x; +\rangle + 0.5 |S_x; -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \quad (\because |S_x; \pm\rangle \text{ の式 (1.4.17a)})$$

は  $0.5 |+\rangle + 0.5 |-\rangle$  に一致しないが、これらは共通の密度行列 (3.4.20) を持つ。

なお、 $|S_y; \pm\rangle$  の式 (1.4.17b) より  $S_y$  に完全に偏極したビームの密度行列は

$$\rho \doteq \begin{pmatrix} 1/2 & \mp i/2 \\ \pm i/2 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (107)$$

なので、期待されるようにアンサンブル  $0.5 |S_y; +\rangle + 0.5 |S_y; -\rangle$  も密度行列 (3.4.20) を持つ。

■「この点を説明する問題」(p.241, 1.6) 「これは……分解できることを強く示唆している」(p.241, 1.4~1.6) について、しかしながら章末 (p.244 下 2 行) にある「この点を説明する問題」(p.241, 1.6) では  $\{|S_x; \pm\rangle\}, \{|S_y; \pm\rangle\}, \{|S_z; \pm\rangle\}$  だけで分解する方法は、以下に示すように一意的である。

分布の割合  $w(S_z)$  を  $z_{\pm}$  などと略記し式 (107) に注意すると、分解できる条件は

$$\begin{pmatrix} 7/8 & 1/8 \\ 1/8 & 1/8 \end{pmatrix} = x_+ \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} + x_- \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix} + y_+ \begin{pmatrix} 1/2 & -i/2 \\ i/2 & 1/2 \end{pmatrix} + y_- \begin{pmatrix} 1/2 & i/2 \\ -i/2 & 1/2 \end{pmatrix} \\ + z_+ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + z_- \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

であり、これは 6 つの係数  $x_{\pm}, y_{\pm}, z_{\pm}$  に対する 4 つの条件

$$\begin{cases} x_+ + x_- + y_+ + y_- + 2z_+ = 7/4 \\ x_+ - x_- - i(y_+ - y_-) = 1/4 \\ x_+ - x_- + i(y_+ - y_-) = 1/4 \\ x_+ + x_- + y_+ + y_- + 2z_- = 1/4 \end{cases}$$

を与える。第 1 式と第 4 式を辺々足すと、これが規格化条件

$$x_+ + x_- + y_+ + y_- + z_+ + z_- = 1$$

を含んでいることが分かる。これらは

$$x_+ - x_- = 1/4, \quad y_+ = y_-, \quad z_+ - z_- = 3/4, \quad x_+ + y_+ + z_+ = 1$$

と同値である。 $x_-, z_-$  が非負だから  $x_+ \geq 1/4, z_+ \geq 3/4$  なので、4 番目の式とより

$$x_+ = 1/4, \quad y_+ = 0, \quad z_+ = 3/4$$

しかありえない。

そこで次に、 $z_x$  面内で天頂角  $\beta$  の方向  $\mathbf{n}$  にスピンの向く状態を純粋アンサンブルに用いて  $z_+ |+\rangle + z_- |-\rangle + w |\mathbf{n}\rangle$  と分解することを考える。式 (3.2.52) より  $|\mathbf{n}\rangle = \cos(\beta/2) |+\rangle + \sin(\beta/2) |-\rangle$  であり、適当に選んだ  $\beta$  に対して

$$z_+ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + z_- \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + w \begin{pmatrix} \cos^2(\beta/2) & \sin(\beta/2) \cos(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) \cos(\beta/2) & \sin^2(\beta/2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7/8 & 1/8 \\ 1/8 & 1/8 \end{pmatrix}$$

が成り立てば良い。これは3つの係数  $z_{\pm}, w$  に対する3つの条件

$$\begin{cases} \frac{w}{2} \sin \beta = \frac{1}{8} \\ z_+ + w \frac{1 + \cos \beta}{2} = \frac{7}{8} \\ z_- + w \frac{1 - \cos \beta}{2} = \frac{1}{8} \end{cases}$$

を与える。第2式と第3式を辺々足すと、これが規格化条件

$$z_+ + z_- + w = 1$$

を含んでいることが分かる。例えば  $\beta = \pi/3$  としてこれを解くと

$$w = \frac{1}{2\sqrt{3}} (\geq 0), \quad z_+ = \frac{7 - \sqrt{3}}{8} (\geq 0), \quad z_- = \frac{1}{8} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}}\right) (\geq 0)$$

となる。こうして異なる分解を得る。

■密度行列の対角化  $\rho$  は Hermite なので

$$\rho \doteq \begin{pmatrix} w(S_{n+}) & 0 \\ 0 & w(S_{n-}) \end{pmatrix}$$

と対角化できる。すなわちある基底  $\{|S \cdot n; \pm\rangle\}$  を用いて

$$\rho = w(S_{n+}) |S \cdot n; +\rangle \langle S \cdot n; +| + w(S_{n-}) |S \cdot n; -\rangle \langle S \cdot n; -|$$

と表される。これは

$$w(S_{x+}) |S_x; +\rangle + w(S_{y-}) |S_y; -\rangle$$

のような混合アンサンブルも

$$w(S_{n+}) |S \cdot n; +\rangle + w(S_{n-}) |S \cdot n; -\rangle$$

のように分解し直せることを意味する。よって

- $\rho$  を対角化する基底では純粋アンサンブルに対して、式 (3.4.16) のように対角成分に固有値 1 は 1 つだけしか現れないことが分かる。
- また確かに「このように選ぶと  $\rho_{kk}$  は、……分布の割合を表」し (p.249, 1.14,15), 分布の割合に他ならない「各要素  $\rho_{kk}^{(\text{対角的})}$  は 0 から 1 までの実数」(p.248, 1.2) である。
- さらに混合アンサンブルに対して  $\rho$  の対角成分を  $\rho'$  とすると、このこと ( $\rho' \geq 0$ ) から

$$\text{tr}(\rho^2) = \sum_{\rho'} \rho'^2 \leq \sum_{\rho'} \rho'^2 + 2 \sum_{\rho' > \rho''} \rho' \rho'' = \left( \sum_{\rho'} \rho' \right)^2 = (\text{tr}(\rho))^2 = 1$$

が成り立ち、「アンサンブルが純粋のときに  $\text{tr}(\rho^2)$  は最大……1 より小さい正の数である」(式 (3.4.16) 下3行) ことが言える。

■Liouville の定理 (3.4.30) について 式 (3.4.30):  $\frac{\partial \rho_{\text{古典}}}{\partial t} = -[\rho_{\text{古典}}, H]_{\text{古典}}$  が Liouville の定理を表していることは、これを

$$\frac{d\rho_{\text{古典}}}{dt} = \frac{\partial \rho_{\text{古典}}}{\partial t} + [\rho_{\text{古典}}, H]_{\text{古典}} = 0$$

と書き換えれば分かる。ここで  $\frac{\partial \rho_{\text{古典}}}{\partial t}$  では  $(q, p)$  が固定されていて位相空間の与えられた点での  $\rho_{\text{古典}}$  の時間変化率を表しているのに対し、 $\frac{d\rho_{\text{古典}}}{dt}$  は運動する代表点の位置での  $\rho_{\text{古典}}$  の時間変化率を表している\*44。よってこれは代表点に固定した領域で密度が不変であることを意味し、領域の定義よりその中の代表点の数は変わらないから、領域の体積が変わらないという Liouville の定理と同等である。

■古典的なアンサンブル平均の式 (3.4.31) について  $A(q, p) \sim A(q + d^f q, p + d^f p)$  の値を観測する確率は、位相体積  $d\Gamma_{q,p} = d^f q d^f p$  中の代表点の数に比例し  $\text{const} \times \rho_{\text{古典}} d\Gamma_{q,p}$  と書ける。よって期待値は

$$A_{\text{平均}} = \int A(q, p) \times (\text{const} \times \rho_{\text{古典}} d\Gamma_{q,p})$$

と書ける。規格化定数  $\text{const}$  を規格化条件

$$1 = \text{const} \times \int \rho_{\text{古典}} d\Gamma_{q,p}$$

から定めると、式 (3.4.31):

$$A_{\text{平均}} = \frac{\int \rho_{\text{古典}} A(q, p) d\Gamma_{q,p}}{\int \rho_{\text{古典}} d\Gamma_{q,p}}$$

を得る。

■座標表示の行列要素 (3.4.33) について 式 (3.4.33):

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}'' | \rho | \mathbf{x}' \rangle &= \langle \mathbf{x}'' | \left( \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle \langle \alpha^{(i)}| \right) | \mathbf{x}' \rangle \\ &= \sum_i w_i \psi_i(\mathbf{x}') \psi_i^*(\mathbf{x}'') \end{aligned}$$

は粒子が位置  $\mathbf{x}'$  から  $\mathbf{x}''$  に移る確率と解釈される [14, p.266]。最右辺を正直に解釈すれば、これは2つの位置  $\mathbf{x}, \mathbf{x}'$  における波動関数の重なり  $\psi_i(\mathbf{x}') \psi_i^*(\mathbf{x}'')$  を、各構成要素  $i$  の重みを考慮して  $(\mathbf{x}, \mathbf{x}'')$  の関数として表した量となっている。

■純粋アンサンブルに対して  $\sigma = 0$ : (3.4.38) となることの確認  $\lim_{x \rightarrow 0} x \ln x = 0$  なので、 $\rho_{kk} = 0, 1$  のいずれに対しても

$$\rho_{kk} \ln \rho_{kk} = 0$$

となる。よって  $\sigma = \sum_k \rho_{kk} \ln \rho_{kk} = 0$ 。

■エントロピーの最大値 「実際、後で示すように…… $\sigma$  の取りうる最大値が  $\ln N$  である」 (p.248 下から5~3行) ことは、 $\sigma$  を最大にする条件 (3.4.49):  $\rho_{kk} = 1/N$  を式 (3.4.36):

$$\sigma = - \sum_k \rho_{kk}^{(\text{対角的})} \ln \rho_{kk}^{(\text{対角的})}$$

に代入して示される。

\*44 つまり流体力学の言葉で言えば  $\frac{\partial \rho_{\text{古典}}}{\partial t}$  は Euler 微分、 $\frac{d\rho_{\text{古典}}}{dt}$  は Lagrange 微分・物質微分である。

■式 (3.4.53) 第 2 の等号は

$$\text{tr}(e^{-\beta H} A) = \sum_{k,l} \langle \rho_k | e^{-\beta H} | \rho_l \rangle \langle \rho_l | A | \rho_k \rangle = \sum_{k,l} e^{-\beta E_l} \delta_{kl} \langle \rho_l | A | \rho_k \rangle = \sum_k e^{-\beta E_k} \langle \rho_k | A | \rho_k \rangle$$

による。

■「こう同定できることを、……演習問題に残しておく」(p.252, 1.2~1.5) について 式 (3.4.54) から調和振動子の内部エネルギー  $[H]$  を計算すると

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[ -\beta \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \right] = \frac{e^{\beta \hbar \omega / 2}}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}, \quad [H] = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \right) \hbar \omega$$

となる。古典的な極限が  $\hbar \rightarrow 0$  で得られることを思い起こせば

$$[H] = \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \right) \hbar \omega \rightarrow \frac{1}{\beta}$$

を得る。これを  $kT$  と等置すると  $\beta = 1/kT$ : (3.4.55) と同定される。

■ $[S_i]$  の式 (3.4.58)  $S_x$  の式 (1.4.18a),  $S_y$  の式 (1.4.18b) より, アンサンブル平均の式 (3.4.53) における  $\langle A \rangle_k$  は  $A = S_x, S_y$  に対して

$$\langle \pm | S_x | \pm \rangle = 0, \quad \langle \pm | S_y | \pm \rangle = 0, \quad (\text{複号同順})$$

となるので,

$$[S_x] = 0, \quad [S_y] = 0$$

である。また,

$$[S_z] = \frac{\hbar}{2} \times \frac{e^{-\beta \hbar \omega / 2}}{Z} + \left( -\frac{\hbar}{2} \right) \times \frac{e^{\beta \hbar \omega / 2}}{Z} = -\frac{\hbar}{2} \tanh \left( \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right)$$

となる。

### 3.5 角運動量の固有値と固有状態

これから展開する角運動量の一般論はすべて, 角運動量の交換関係 (92) から導かれる。

交換関係とはしご演算子 (pp.253–256)

角運動量の自乗の演算子  $\mathbf{J}^2 \equiv J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$  を定義すると, 角運動量の交換関係 (92) から

$$[\mathbf{J}^2, J_k] = 0 \quad (k = 1, 2, 3) \quad (108)$$

が導かれる [導出は本稿次節]. ところが  $J_x, J_y, J_z$  は互いに交換しない. そこで  $\mathbf{J}^2$  (固有値  $a$ ) と 1 つの角運動量成分  $J_z$  (固有値  $b$ ) の同時固有ケット  $|a, b\rangle$  を考える。

はしご演算子  $J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y$  を定義すると, 再び角運動量の交換関係 (92) により, これは

$$J_{\pm} |a, b\rangle = c_{\pm} |a, b \pm \hbar\rangle \quad (109)$$

のように  $\mathbf{J}^2$  の固有値を不変に保ち,  $J_z$  の固有値を  $\hbar$  だけ増加・減少させることが導かれる ( $c_{\pm}$  は比例定数, 導出は下記).

### $\mathbf{J}^2$ および $J_z$ の固有値 (pp.256–259)

[古典的なベクトル  $\mathbf{J}$  に対し  $\mathbf{J}^2 \geq J_z^2$  が成り立つのと同様に,] 演算子  $\mathbf{J}^2, J_z$  の固有値  $a, b$  は

$$a \geq b^2 \quad (110)$$

を満たす (証明は下記). このため  $b$  は最大値  $b_{\max}$  と最小値  $b_{\min}$  を持つ. 次いで基本的交換関係 (92), およびその帰結としてのはしご演算子の性質 (109) を用いると,  $n$  を [ゼロ以上の] 整数として, 固有値のとり得る値は

$$a = \hbar^2 j(j+1), \quad j = \frac{n}{2} : \text{整数または半整数} \quad (111)$$

$$b = m\hbar \quad m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (112)$$

となることが示される (導出は下記) [粗く言えば固有値  $j$  は, 角運動量の (古典的なベクトルとしての) 大きさ  $|\mathbf{J}|/\hbar$  に対応する]. そこで  $\mathbf{J}^2$  と  $J_z$  の同時固有ケットを  $|a, b\rangle$  と書く代わりに,  $|j, m\rangle$  と書くのが便利である.

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \\ J_z |j, m\rangle &= m\hbar |j, m\rangle. \end{aligned} \quad (113)$$

### 角運動量演算子の行列要素 (pp.259–260)

各固有ケット  $|j, m\rangle$  が規格化されているとすると, 式 (113) より  $\mathbf{J}^2, J_z$  の行列要素は

$$\langle j', m' | \mathbf{J}^2 | j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2 \delta_{j'j} \delta_{m'm}, \quad \langle j', m' | J_z | j, m \rangle = m\hbar \delta_{j'j} \delta_{m'm}$$

となる.

式 (109):  $J_{\pm} |j, m\rangle = c_{jm}^{\pm} |j, m \pm 1\rangle$  [係数  $c_{jm}^{\pm}$  の  $j, m$  依存性について本稿次節で補足], および  $|j, m\rangle, |j, m \pm 1\rangle$  が規格化されていることから

$$J_{\pm} |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar |j, m \pm 1\rangle \quad (114)$$

が導かれ (導出は下記),  $J_{\pm}$  の行列要素は

$$\langle j', m' | J_{\pm} | j, m \rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar \delta_{j'j} \delta_{m', m \pm 1} \quad (3.5.41)$$

と表される.

### 回転演算子の表現 (pp.261–265)

$$\begin{aligned} \text{ウィグナー関数 } \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) &\equiv \left\langle j, m' \left| \exp\left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\phi}{\hbar}\right) \right| j, m \right\rangle \\ &= (\text{始めの状態 } |j, m\rangle \text{ の回転後の状態を } |j, m'\rangle \text{ に見出す振幅}). \end{aligned}$$

ここで  $|j, m\rangle$  にある系の回転は  $j$  の値を変えないため<sup>\*45</sup>,  $j' \neq j$  の要素  $\langle j', m' | \exp\left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\phi}{\hbar}\right) | j, m \rangle$  はゼロになるから考えなくて良い.

<sup>\*45</sup> 実際, 式 (108) より  $\mathbf{J}^2(e^{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\phi/\hbar} |j, m\rangle) = j(j+1)\hbar^2(e^{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\phi/\hbar} |j, m\rangle)$ .



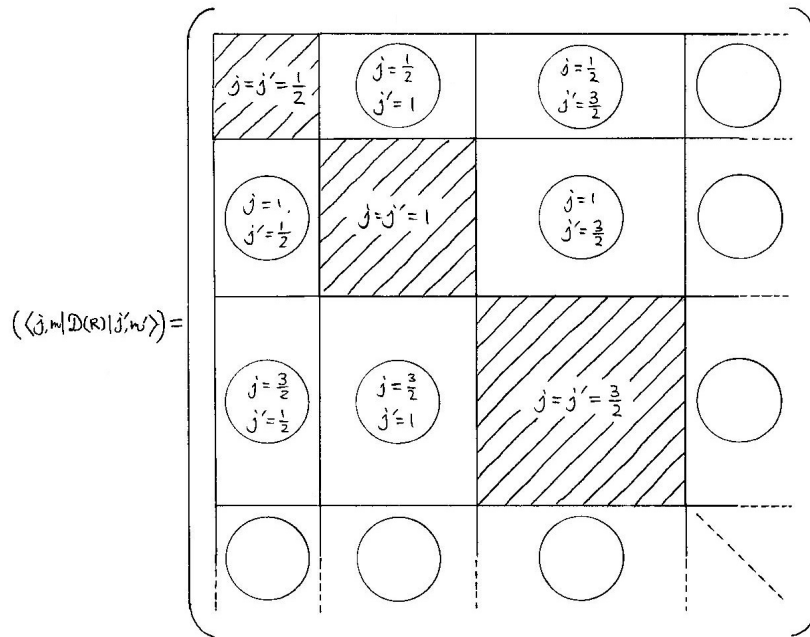


図 36 行列  $(\langle j, m | \mathcal{D}(R) | j', m' \rangle)$ . 各行列要素は  $j, m, j', m'$  によって指定される.

- $(2j+1) \times (2j+1)$  行列  $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$  は回転演算子  $\mathcal{D}(R)$  の  $(2j+1)$  次元の既約表現であると言われる。それは、必ずしも単一の  $j$  で特徴づけられないケット空間での任意の回転演算子に対応する行列が、基底を適当に選ぶと、対角線に沿って正方行列の並ぶ形 (3.5.44)(前頁) [本稿の図 36] に変形できるからである。(3.5.44) で斜線をつけた四角は、 $(2j+1) \times (2j+1)$  の正方行列で、ある決 [ま] った  $j$  の値を持つ  $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}$  によって形づくられる。そしてそれぞれの方行列自身は、どんな基底を選んででもっと小さな正方行列に区分けすることができない (p.262 より)

[以上を本稿次節で補足する.]

- 回転行列  $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$  は群を作る。
  1. 単位元  $\dots\dots$  回転角  $\phi = 0$  の回転行列  $((2j+1) \times (2j+1))$  の恒等行列
  2. 逆行列  $\dots\dots$  逆回転 ( $\phi \rightarrow -\phi$ ) の回転行列
  3. 任意の 2 つの元の積もまた元であること [本稿次節で補足]

$$\sum_{m'} \mathcal{D}_{m''m'}^{(j)}(R_1) \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R_2) = \mathcal{D}_{m''m}^{(j)}(R_1 R_2). \quad (3.5.46)$$

★ ユニタリー性 [本稿次節で補足,  $j$  を省略]

$$\mathcal{D}_{m'm}(R^{-1}) = \mathcal{D}_{mm'}^*(R). \quad (3.5.47)$$

回転  $R$  の Euler 角  $\alpha, \beta, \gamma$  を用いた表式

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) = \langle j, m' | e^{-iJ_z \alpha / \hbar} e^{-iJ_y \beta / \hbar} e^{-iJ_z \gamma / \hbar} | j, m \rangle = e^{-(m'\alpha + m\gamma)} d_{m'm}^{(j)}(\beta)$$

(式 (3.3.20) を参照) における非自明な部分は

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) \equiv \left\langle j, m' \left| \exp \left( \frac{-iJ_y \beta}{\hbar} \right) \right| j, m \right\rangle$$

である。

- $j = 1/2$

式 (3.3.21) より [本稿次節で補足],

$$d^{(1/2)}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \quad (3.5.52)$$

- $d = 1$

$J_y = \frac{1}{2i}(J_+ + J_-)$  に着目すると

$$d^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{pmatrix} \quad (3.5.57)$$

と評価できる (導出は下記)。しかしこの方法は大きな  $j$  に対しては煩雑である。より賢い方法が 3.8 節で説明される。

### 3.5 節, 式の導出

■ はしご演算子  $J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y$  の性質 (109) の導出 角運動量の交換関係 (92) より

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= -i[J_x, J_y] + i[J_y, J_x] \\ &= -2i \cdot i\hbar J_z \\ &= 2\hbar J_z, \end{aligned} \quad (115)$$

$$\begin{aligned} [J_z, J_{\pm}] &= [J_z, J_x] \pm i[J_z, J_y] \\ &= i\hbar J_y \pm i(-i\hbar J_x) \\ &= \pm \hbar J_x + i\hbar J_y \\ &= \pm \hbar (J_x \pm iJ_y) \\ &= \pm \hbar J_{\pm} \quad (\text{複号同順}) \end{aligned} \quad (116)$$

が導かれる。また式 (108):  $[\mathbf{J}^2, J_k] = 0$  より直ちに

$$[\mathbf{J}^2, J_{\pm}] = 0 \quad (117)$$

が分かる。以上を踏まえ、状態  $J_{\pm} |a, b\rangle$  における  $J_z$  と  $\mathbf{J}^2$  の固有値を調べると、

$$\begin{aligned} J_z(J_{\pm} |a, b\rangle) &= ([J_z, J_{\pm}] + J_{\pm} J_z) |a, b\rangle \\ &= (b \pm \hbar)(J_{\pm} |a, b\rangle), \quad (\because \text{式 (116)}) \\ \mathbf{J}^2(J_{\pm} |a, b\rangle) &= J_{\pm} \mathbf{J}^2 |a, b\rangle \quad (\because \text{式 (117)}) \\ &= a \mathbf{J}^2(J_{\pm} |a, b\rangle) \end{aligned}$$

を得る。すなわち  $J_{\pm} |a, b\rangle$  は  $J_z$  と  $\mathbf{J}^2$  の固有値  $b \pm \hbar, a$  に属する同時固有状態である (式 (109))。[以上では式 (115) を用いていない.]

参考——理論構造の類似性

$$\begin{aligned}
 \text{式 (116): } [J_z, J_{\pm}] &= \pm \hbar J_{\pm} \rightarrow J_{\pm} \text{ は } J_z \text{ の固有値を } \pm \hbar \text{ 変化させる,} \\
 [x_i, \mathcal{T}(\mathbf{a})] &= a_i \mathcal{T}(\mathbf{a}) \rightarrow \mathcal{T}(\mathbf{a}) \text{ は } x_i \text{ の固有値を } a_i \text{ 変化させる,} \\
 & \quad \text{[本稿次節で交換関係について補足]} \\
 [N, a^{\dagger}] &= a^{\dagger} \rightarrow a^{\dagger} \text{ は } N \text{ の固有値を } +1 \text{ 変化させる,} \\
 [N, a] &= -a \rightarrow a \text{ は } N \text{ の固有値を } -1 \text{ 変化させる.}
 \end{aligned}$$

■式 (110):  $a \geq b^2$  の導出

$$\mathbf{J}^2 - J_z^2 = J_x^2 + J_y^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) = \frac{1}{2}(J_+ J_+^{\dagger} + J_+^{\dagger} J_+)$$

より,

$$\begin{aligned}
 a - b^2 &= \langle a, b | \mathbf{J}^2 - J_z^2 | a, b \rangle \\
 &= \frac{1}{2}(\langle a, b | J_+ \rangle \cdot \langle J_+^{\dagger} | a, b \rangle) + \frac{1}{2}(\langle a, b | J_+^{\dagger} \rangle \cdot \langle J_+ | a, b \rangle) \geq 0. \quad (\text{要請 } \langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0 \text{ (1.2 節)})
 \end{aligned}$$

■固有値  $a, b$  のとり得る値 (111), (112) の導出 固有値  $b$  が  $b_{\max}$  を超えた状態や,  $b_{\min}$  を下回った状態を作ることはできないので,

$$J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0, \quad J_- |a, b_{\min}\rangle = 0$$

でなければならない。ここで

$$\begin{aligned}
 J_{\mp} J_{\pm} &= (J_x \mp iJ_y)(J_x \pm iJ_y) \\
 &= (J_x^2 + J_y^2) \pm i[J_x, J_y] \\
 &= \mathbf{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z
 \end{aligned} \tag{118}$$

の関係に着目すると,

$$\begin{aligned}
 0 &= J_- \underbrace{J_+ |a, b_{\max}\rangle}_{\text{零ケット}} = (a - \hbar b_{\max} - b_{\max}^2) \underbrace{|a, b_{\max}\rangle}_{\text{零ケットでない}}, \\
 0 &= J_+ \underbrace{J_- |a, b_{\min}\rangle}_{\text{零ケット}} = (a + \hbar b_{\min} - b_{\min}^2) \underbrace{|a, b_{\min}\rangle}_{\text{零ケットでない}}
 \end{aligned}$$

を得る。最右辺における固有値がゼロでなければならないから,

$$\begin{aligned}
 a &= b_{\max}(b_{\max} + \hbar) = b_{\min}(b_{\min} - \hbar), \\
 \therefore (b_{\max} + b_{\min})(b_{\max} - b_{\min} + \hbar) &= 0, \quad \therefore b_{\max} = -b_{\min}
 \end{aligned} \tag{119}$$

である。他方  $|a, b_{\min}\rangle$  に  $J_+$  を有限回作用させると  $|a, b_{\max}\rangle$  に到達する。[さもなくば条件  $J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$  によって状態が消失することがなく,  $b$  が最大値を持つという我々の得た結論に反して, いくらでも大きな固有値  $b (> b_{\max})$  を持つ状態を作ることができる。] このため,  $n$  を整数として

$$b_{\max} = b_{\min} + n\hbar$$

と書けることと考え合わせると, 固有値  $b$  は式 (112):

$$b = -j\hbar, \dots, m\hbar, \dots, j\hbar \quad \left(j = \frac{n}{2}\right)$$

のように量子化されることになる。これを上式 (119) に戻して, 式 (111):  $a = \hbar^2 j(j+1)$  を得る。

■式 (114) の導出 式 (118):

$$J_+^\dagger J_+ = \mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z$$

および式 (109):

$$J_+ |j, m\rangle = c_{jm}^+ |j, m+1\rangle$$

を用いると, 規格化されたケット  $|j, m\rangle, |j, m+1\rangle$  に対して

$$\begin{aligned} |c_{jm}^+|^2 &= \langle j, m+1 | (c_{jm}^+)^* (c_{jm}^+) |j, m+1\rangle \\ &= \langle j, m | J_+^\dagger J_+ |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | \mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z |j, m\rangle \\ &= \hbar^2 (j(j+1) - m^2 - m) \\ &= \hbar^2 (j-m)(j+m+1) \end{aligned}$$

が得られる.  $c_{jm}^+$  の位相は任意に選べるから,  $c_{jm}^+$  を正の実数を選んで

$$J_+ |j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)\hbar} |j, m+1\rangle$$

として良い (式 (114) の上側の複号を選んだ関係). 式 (114) の下側の複号に対する関係

$$J_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)\hbar} |j, m-1\rangle \quad (3.5.40)$$

も同様に示せる [本稿次節を参照].

■ $d^{(1)}(\beta)$  の式 (3.5.57) の導出  $J_y = \frac{J_+ - J_-}{2i}$  および  $J_\pm$  の行列要素の式 (3.5.41) より

$$J_y^{(j=1)} = \frac{\hbar}{2} \begin{matrix} m=1 & m=0 & m=-1 \\ \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2}i & 0 \\ \sqrt{2}i & 0 & -\sqrt{2}i \\ 0 & \sqrt{2}i & 0 \end{pmatrix} & \begin{matrix} m'=1 \\ m'=0 \\ m'=-1 \end{matrix} \end{matrix} \quad (3.5.54)$$

を得る [本稿次節で補足]. すると ( $j=1$  に特有の事情として)

$$\left( \frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar} \right)^3 = \frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar} \quad (3.5.55)$$

が成り立つので,

$$\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) \rightarrow 1 - \left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2 (1 - \cos\beta) - i\frac{J_y}{\hbar} \sin\beta \quad (3.5.56)$$

と置き換えることができ, 右辺の行列表現として式 (3.5.57) を得る [本稿次節で計算を補足].

### 3.5 について

■式 (108):  $[\mathbf{J}^2, J_k] = 0$  の確認 「 $k$  が 1 や 2 の場合の証明には……巡回的に置換すればよい」 ((3.5.3) 下 2 行) について, 式 (3.5.3):

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}^2, J_z] &= J_x[J_x, J_z] + [J_x, J_z]J_x + J_y[J_y, J_z] + [J_y, J_z]J_y \\ &= i\hbar(\varepsilon_{132}J_xJ_y + \varepsilon_{132}J_yJ_x + \varepsilon_{231}J_yJ_x + \varepsilon_{231}J_xJ_y) = 0 \end{aligned}$$

から

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}^2, J_x] &= J_y[J_y, J_x] + [J_y, J_x]J_y + J_z[J_z, J_x] + [J_z, J_x]J_z \\ &= i\hbar(\varepsilon_{231}J_yJ_z + \varepsilon_{231}J_yJ_z + \varepsilon_{312}J_zJ_y + \varepsilon_{312}J_yJ_z) = 0 \end{aligned}$$

を得るには、最右辺で Levi-Civita 記号の添字も巡回置換しなければならないことに注意する。

あるいは最初から  $k = 1, 2, 3$  の場合をまとめて、次のように計算できる。すなわち角運動量の交換関係 (92) より

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}^2, J_k] &= J_i[J_i, J_k] + [J_i, J_k]J_i \\ &= i\hbar\varepsilon_{ikl}(J_iJ_l + J_lJ_i) \end{aligned}$$

であり、最右辺はダミー添字  $i, l$  に関して  $\varepsilon_{ikl}$  が反対称、 $(J_iJ_l + J_lJ_i)$  が対称なのでゼロになる。

■有限の  $\mathbf{l}$  に対する交換関係 (3.5.9):  $[x_i, \mathcal{T}(\mathbf{l})] = l_i \mathcal{T}(\mathbf{l})$  について 「平行移動の演算子  $\mathcal{T}(\mathbf{l})$  を議論したときには  $[x_i, \mathcal{T}(\mathbf{l})] = l_i \mathcal{T}(\mathbf{l})$ : (3.5.9) であった」 (p.255, 1.13~1.16) とあるが、有限の  $\mathbf{l}$  に対する交換関係 (3.5.9) はここで初めて導くことになる。式 (2.2.23a) を用いて、これは

$$[x_i, \mathcal{T}(\mathbf{l})] = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}/\hbar} = i\hbar \left( -i \frac{l_i}{\hbar} \right) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}/\hbar} = l_i \mathcal{T}(\mathbf{l})$$

と示される。特に  $\mathbf{l} = d\mathbf{x}'$  としてその 1 次までとれば  $[\mathbf{x}, \mathcal{T}(d\mathbf{x}')] = d\mathbf{x}'$ : (1.6.25) になる。

■規格化定数  $c_{\pm}$  の  $a, b(j, m)$  依存性 式 (3.5.12):  $J_{\pm}|a, b\rangle = c_{\pm}|a, b \pm \hbar\rangle$  [本稿の式 (109)] における規格化定数  $c_+$  は式 (3.5.37):  $J_+|j, m\rangle = c_{+,jm}^+|j, m+1\rangle$  の  $c_{+,jm}^+$  に対応し、その表式 (3.5.38) から裏付けられるように一般に状態  $|a, b\rangle$  ごとに異なる。

■式 (3.5.14) で  $J_k$  を Hermite 演算子としていること 「 $J_k$  をエルミートのとると無限小回転演算子はユニタリ的であることが保証され」 (p.210 下から 5~2 行目) するため仮定されている。

■式 (3.5.40) の導出 「同様にして……(3.5.40) を導くことができる」 (p.260 下から 5~3 行) について、 $J_-|j, m\rangle = c_{-,jm}^-|j, m-1\rangle$  とおくと

$$\begin{aligned} |c_{-,jm}^-|^2 &= \langle j, m-1 | (c_{-,jm}^-)^* (c_{-,jm}^-) | j, m-1 \rangle \\ &= \langle j, m | J_-^\dagger J_- | j, m \rangle \\ &= \langle j, m | \mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z | j, m \rangle \\ &= \hbar^2(j(j+1) - m^2 + m) \\ &= \hbar^2(j+m)(j-m+1) \end{aligned}$$

となる。

■異なる  $j$  の値を持つ状態間の  $\mathcal{D}(R)$  の行列要素 式 (3.5.43) は  $\exp\left(\frac{-i\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}\phi}{\hbar}\right)|j, m\rangle = \text{const}|j, m'\rangle$  を意味するから

$$\left\langle j'(\neq j), m'' \left| \exp\left(\frac{-i\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}\phi}{\hbar}\right) \right| j, m \right\rangle = \text{const} \langle j'(\neq j), m'' | j, m \rangle = 0$$

となり、「異なる  $j$  の値を持つ状態間の  $\mathcal{D}(R)$  の行列要素はすべて消える」 (p.261, 1.7,8).

後の式 (3.6.49):

$$\langle l, m' | \mathbf{n} \rangle = \sum_m \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \langle l, m | \hat{z} \rangle$$

も同様に理解できる。

■行列 (3.5.44) と既約表現  $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$  について 回転の演算子  $\mathcal{D}(R)$  の  $\{|j, m\rangle\}$  を基底とした行列が式 (3.5.44) であり,  $\circ$  で示された部分は異なる  $j$  の値を持つ状態間の  $\mathcal{D}(R)$  の行列要素から成るため, ゼロが並んでいる (図 36 参照).

各既約表現  $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$  を簡単のために  $D_i$  と書く. ブロック対角な表現行列の既約な各ブロック  $D_i$  は, 基底の変更 (相似変換) によりさらに細かいブロックに分割することはできない. もしできたとすると, 部分表現  $D_i$  が作用するベクトル  $\mathbf{v}_i$  はその中に不変部分空間を持つことになり, 定義より可約となるからである [13, pp.5-6]. (ただし逆に可約な (すなわち不変部分空間を持つ) 行列が, 常にブロック対角な形にできる (完全可約である) とは限らないことに注意する.)

■「ある決まった  $j$  で特徴づけられる回転行列は, 群を作る」(p.262) ことについて

与えられた  $j$  に対する  $(2j+1) \times (2j+1)$  の行列  $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$  (成分は  $m$  と  $m'$  で指定される) が群の性質を満たすことについて, 例えば性質 (3.5.46) は次のように確かめられる. すなわち回転  $R_1$  の軸と回転角をそれぞれ  $\mathbf{n}_1, \phi_1$ , 回転  $R_2$  の軸と回転角をそれぞれ  $\mathbf{n}_2, \phi_2$  とすると

$$\begin{aligned} & \sum_{m''} \mathcal{D}_{m''m'}^{(j)}(R_1) \mathcal{D}_{m''m}^{(j)}(R_2) \\ &= \langle j, m'' | \exp\left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_1 \phi_1}{\hbar}\right) \left( \sum_{m'} |j, m'\rangle \langle j, m' | \right) \exp\left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_2 \phi_2}{\hbar}\right) |j, m\rangle \\ &= \langle j, m'' | \exp\left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_1 \phi_1}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_2 \phi_2}{\hbar}\right) |j, m\rangle \\ &= \mathcal{D}_{m''m}^{(j)}(R_1 R_2) : (3.5.46). \end{aligned}$$

■ユニタリー性 (3.5.47) について 一般にユニタリー演算子  $U$  の行列表現がユニタリー行列であることが次のようにして分かる. まず  $U^\dagger$  の行列表現が  $U$  の行列表現の逆行列であること ( $\langle a' | U | a'' \rangle^{-1} = \langle a' | U^\dagger | a'' \rangle$ ) が

$$\delta_{a'a''} = \langle a' | a'' \rangle = \langle a' | U U^\dagger | a'' \rangle = \sum_{a'''} \langle a' | U | a''' \rangle \langle a''' | U^\dagger | a'' \rangle$$

から分かる. ここで式 (1.2.38) より ( $\langle a' | U | a'' \rangle^{-1} = \langle a'' | U | a' \rangle^*$ ) なので ( $\langle a' | U | a'' \rangle$ ) はユニタリー行列である.

■回転後の状態の展開 (3.5.49) について 「ここで完備性の関係式を用いる際に,  $\mathcal{D}(R)$  が同じ  $j$  の状態のみを結びつけることを利用した」(式 (3.5.49) の下 2 行) について, 仮に完備性の関係式が

$$\sum_{j', m'} |j', m'\rangle \langle j', m'| = 1$$

であると考えたととしても,  $j' \neq j$  に対して  $\langle j', m' | \mathcal{D}(R) | j, m \rangle = 0$  となるから式 (3.5.49):

$$\mathcal{D}(R) |j, m\rangle = \sum_{m'} |j, m'\rangle \langle j, m' | \mathcal{D}(R) |j, m\rangle$$

が得られる。これはあらかじめ完備性の関係式を

$$\sum_{m'} |j, m'\rangle \langle j, m'| = 1$$

と考えた場合に得られる結果と変わらない。

「回転前の始めの状態が  $|j, m\rangle$  で与えられたときに、回転後の状態が  $|j, m'\rangle$  に見出される振幅」(式 (3.5.49) の 2,3 行下) が  $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$  であることは、式 (3.5.49) のように展開しなくても

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) = \underbrace{\langle j, m' |}_{\text{基底ブラ}} \cdot \underbrace{(\mathcal{D}(R) |j, m\rangle)}_{\text{回転後の状態}}$$

であることから理解できる。

なお物理系の (あるいは代わりに座標軸の) 回転によって、異なる  $m$  に対応する  $2j + 1$  個の波動関数  $\psi_{j,m} = \langle \mathbf{x}' | j, m \rangle$  は、定まった法則に従って互いに変換される [1, p.91, p.195]。具体的には式 (3.5.49) に左から  $\langle \mathbf{x}' |$  を掛けると、

$$\psi_{j,m} \rightarrow \sum_{m'} \langle \mathbf{x}' | j, m' \rangle \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) = \sum_{m'} \psi_{j,m'} \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$$

が見出される。

■  $d^{(1/2)}$  の式 (3.5.52) について ( $j = 1/2$  のウィグナー関数 (3.3.22) への帰着) ウィグナー関数

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) = \left\langle j, m' \left| \exp \left( \frac{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\phi}{\hbar} \right) \right| j, m \right\rangle : (3.5.42)$$

において、特に  $j = 1/2$  (従って  $m, m' = \pm 1/2$ , 以下の記号で  $a', a'' = \pm$ ) とし、 $\exp \left( \frac{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\phi}{\hbar} \right)$  を Euler 角で表すと式 (3.3.22):

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma) = \left\langle j = \frac{1}{2}, m' \left| \exp \left( \frac{-iJ_z\alpha}{\hbar} \right) \exp \left( \frac{-iJ_y\beta}{\hbar} \right) \exp \left( \frac{-iJ_z\gamma}{\hbar} \right) \right| j = \frac{1}{2}, m \right\rangle$$

となる。さらに

$$\left\langle a' \left| \exp \left( \frac{-i\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}\phi}{\hbar} \right) \right| a'' \right\rangle = \exp \left( \frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi}{2} \right)_{a', a''}$$

を思い出すと (3.2 節のノート参照), これは  $j = 1/2$  既約表現 (3.3.21) の行列要素であることが分かる。

■  $J_y^{(j=1)}$  の式 (3.5.54) について 式 (3.5.54) は次のように考えれば良い。  $J_+$  の行列要素の  $m' = m + 1$  となる成分は  $(m', m) = (1, 0), (0, -1)$  成分であり, 式 (3.5.41) よりそれ以外の成分はゼロである。  $J_-$  の行列要素の  $m' = m - 1$  となる成分は  $(m', m) = (0, 1), (-1, 0)$  成分であり, 式 (3.5.41) よりそれ以外の成分はゼロである。そこで残りの成分だけ計算すると

$$J_y^{(j=1)} \doteq \frac{1}{2i} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\hbar \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}\hbar & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \end{pmatrix} \right\} = (\text{式 (3.5.54) 右辺}).$$

■式 (3.5.56) の周辺 「 $j = 1/2$  の場合と違い,  $[J_y^{(j=1)}]^2$  は 1 と  $J_y^{(j=1)}$  とでは表すことができない」 (p.264 下から 6,5 行) について,  $j = 1/2$  の場合の  $\exp(-iJ_y\beta/\hbar)$  のテイラー展開は (3.2.44) を見れば良い.

また, 式 (3.5.55):

$$\left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}\right)^3 = \frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}$$

について, 行列 (3.5.54) を用いた直接の計算により

$$\begin{aligned} \frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar} &= \left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}\right)^3 = \left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}\right)^5 = \dots = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2}i & 0 \\ \sqrt{2}i & 0 & -\sqrt{2}i \\ 0 & \sqrt{2}i & 0 \end{pmatrix}, \\ \left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}\right)^2 &= \left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}\right)^4 = \left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}\right)^6 = \dots = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

であり, ここから式 (3.5.56), 式 (3.5.57) が得られる.

### 3.6 軌道角運動量

回転の生成演算子としての軌道角運動量 (pp.265–269)

- スピン角運動量を無視したときの 1 粒子の角運動量は, 軌道角運動量  $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$  である.

$$\text{正準交換関係 } [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \text{ etc.}$$

⇒  $\mathbf{L}$  は角運動量の基本的交換関係

$$[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k \quad (120)$$

を満たす [確認は本稿次節].

- 運動量が平行移動の生成演算子であることから

$$\langle \mathbf{x}' | L_z | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle, \quad \text{etc.} \quad (121)$$

と表せて,

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle = -\hbar^2 r^2 \underbrace{\left[ \frac{1}{r^2} \left( \frac{1}{\sin\theta} \partial_\theta (\sin\theta \partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2\theta} \partial_\phi^2 \right) \right]}_{\nabla'^2 \text{の角度部分}} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (122)$$

となる ( $\partial_\theta \equiv \partial/\partial\theta$ , etc, 導出は下記)<sup>\*46</sup>. 一方, 同じ量を

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle = \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} | \alpha \rangle \quad (123)$$

<sup>\*46</sup> Laplacian  $\Delta = \nabla'^2$  の球座標系での表式

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cot\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

を思い出そう. ここで任意関数  $f(\mathbf{x}')$  に対して,

– Laplacian の動径部分

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) f(\mathbf{x}') = \begin{cases} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial f(\mathbf{x}')}{\partial r} \right) \\ \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r f(\mathbf{x}')) \end{cases}$$



$$= -r^2 \hbar^2 \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + \hbar^2 r^2 \underbrace{\left[ \partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r \right]}_{\nabla'^2 \text{の動径部分}} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (124)$$

と計算することもできる (導出は下記).

これは上式 (122) の結果に合致する ( $\nabla'^2$  からその動径部分を除くと角度部分が残るから).

### 球面調和関数 (pp.270–274)

球対称なポテンシャルの下での 1 粒子を考えよう (スピンの自由度は無視する). 古典力学では系の回転対称性から角運動量保存則が導かれたことを踏まえると, 軌道角運動量  $\mathbf{L}$  の“大きさ”と“射影”  $L_z$  の固有値  $l, m$  が確定した定常状態  $|l, m\rangle$  が可能であると期待される<sup>\*47</sup>. 固有値  $l, m$  だけを与えても, 式 (121), 式 (122) から作られる  $L_z, \mathbf{L}^2$  の固有方程式

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \mathbf{x}' | l, m \rangle = m\hbar \langle \mathbf{x}' | l, m \rangle, \quad (125)$$

$$\left[ \left( \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \right) + l(l+1) \right] \langle \mathbf{x}' | l, m \rangle = 0 \quad (126)$$

は, 波動関数  $\langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$  の角度  $\theta, \phi$  依存性しか定めない. このため波動関数には  $r$  の任意関数を掛ける不定性が残り, 定常状態  $|l, m\rangle$  の波動関数 (エネルギー固有関数) は

$$\langle \mathbf{x}' | l, m \rangle = R(r) Y_l^m(\theta, \phi), \quad Y_l^m(\theta, \phi) = \langle \mathbf{n} | l, m \rangle$$

と分離される ( $\mathbf{n}$  は  $\theta, \phi$  で指定される方向の単位ベクトル)<sup>\*48</sup>. 状態  $|l, m\rangle$  において粒子を  $\mathbf{n}$  方向の立体角  $d\Omega$  に見出す確率は  $|Y_l^m(\theta, \phi)|^2 d\Omega$  で与えられる [1, p.83, p.149].

上式 (125), 式 (126) は  $[\mathbf{x}'$  を方向単位ベクトル  $\mathbf{n} = \mathbf{x}'/|\mathbf{x}'|$  に置き換えても成り立つから,] 角度部分  $Y_l^m(\theta, \phi)$  に対する微分方程式となっている. これと規格化条件

$$\begin{aligned} \delta_{l'l'} \delta_{m'm'} &= \langle l', m' | l, m \rangle \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) Y_{l'}^{m'*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) \\ &\quad \left( \because \text{完備関係式 } \int d\Omega |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| = 1, d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi \text{ は } \mathbf{n} \text{ 方向の立体角} \right) \end{aligned} \quad (127)$$

–  $\theta$  微分の項

$$\left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cot \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) f(\mathbf{x}') = \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial f(\mathbf{x}')}{\partial \theta} \right)$$

とまとめられる.

<sup>\*47</sup> 量子力学における対称性として, 回転による Hamiltonian の不変性

$$H = e^{i\mathbf{L} \cdot \mathbf{n} \phi / \hbar} H e^{-i\mathbf{L} \cdot \mathbf{n} \phi / \hbar} \simeq H + \frac{i\phi}{\hbar} \mathbf{n} \cdot [\mathbf{L}, H] \quad (\text{微小角 } \phi \text{ に対して})$$

を要求すると  $[\mathbf{L}, H] = 0$  となるので,  $H, \mathbf{L}^2, L_z$  の同時固有状態が可能である. Heisenberg 描像に移ると Heisenberg 方程式  $\frac{d\mathbf{L}}{dt} = [\mathbf{L}, H]$  より, 交換関係  $[\mathbf{L}, H] = 0$  は  $\mathbf{L}$  が運動の定数であることを意味する [9, pp.342–343].

<sup>\*48</sup> 結果論として詳しく述べると,  $l, m$  と異なる適当な量子数  $n$  を用いて定常状態は  $|n, l, m\rangle$  と表され, 波動関数は  $\langle \mathbf{x}' | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$  という形をとる. 付録 D における水素原子の例を参照.

を満たす  $Y_l^m(\theta, \phi)$  は,  $m \geq 0$  として

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l}, \quad (128)$$

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \phi)]^* \quad (129)$$

で定義される球面調和関数である\*49. 下記においてこのことを, 角運動量の理論の数学構造を経由する形で証明する.

■  $l$  は半整数値をとらないこと [  $Y_l^m$  が球面調和関数であることの証明 (下記 [および本稿次節]) では,  $l$  が半整数ではなく整数であることを仮定した. 実際には  $l$  が半整数をとってはならないとする次のような議論を提示できる. すなわち  $l$  が半整数をとると

- 半整数の  $m$  が可能となり, このとき波動関数 ( $\sim e^{im\phi}$ ) は  $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$  とすると符号が入れ替わる. これは位置固有関数による展開が一意的であり, それ故, 展開係数に他ならない波動関数は一価でなければならないという要請に反する.
- また

$$\text{式 (136)} \quad \rightarrow \quad Y_{1/2}^{-1/2} = \left\langle \mathbf{n} \left| L_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle = -i\hbar e^{-i\phi} \left( -i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_{1/2}^{1/2},$$

$$\text{式 (135)} \quad \rightarrow \quad Y_{1/2}^{1/2} \propto e^{i\phi/2} \sin^{1/2} \theta$$

から求めた

$$Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \phi) = -c_{1/2} e^{-i\phi/2} \cot \theta \sqrt{\sin \theta}$$

は  $\theta = 0, \pi$  で発散し, しかも微分方程式

$$\left\langle \mathbf{n} \left| L_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle = -i\hbar e^{-i\phi} \left( -i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_{1/2}^{-1/2} = 0 \quad (130)$$

から求めた

$$Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \phi) = c'_{1/2} e^{-i\phi/2} \sqrt{\sin \theta} \quad (131)$$

と一致しない [上式 (130), (131) について, 本稿次節で補足].

- 完全性

さらに, 微分方程式に関するシュトルム, リューヴィユの理論を用いれば, (3.6.28) [本稿の式 (126)] の解は  $l$  が整数のとき完全系を作ることが知られている.  $\theta$  と  $\phi$  の任意の関数は, 整数  $l$  および  $m$  のみを用いて展開できる. (p.274 より)

よって, 半整数の  $l$  を考えるのは無益である.

回転行列としての球面調和関数 (pp.274–276)

$Y_l^{m'*}(\mathbf{n}) = \langle l, m' | \mathbf{n} \rangle$  において  $|\mathbf{n}\rangle = \mathcal{D}(R) |\hat{z}\rangle$  と見ることで,  $\mathcal{D}(R)$  の行列表現

$$\mathcal{D}_{m'0}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma = 0) = \langle l, m' | \mathcal{D}(R) | l, 0 \rangle$$

\*49 ひるがえって式 (126) は, 球面調和関数が Laplacian の角度部分の固有値  $-l(l+1)/r^2$  に属する固有関数であることを意味する.

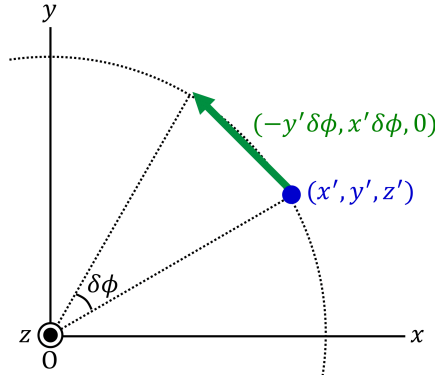


図 37 z 軸周りの無限小回転

が球面調和関数であること

$$\mathcal{D}_{m0}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma = 0) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^{m*}(\theta, \phi) \Big|_{\theta=\beta, \phi=\alpha} \quad (3.6.52)$$

が結論される (導出は下記).

### 3.6 節, 式の導出など

■  $\langle \mathbf{x}' | L_z | \alpha \rangle$  などの式 (121) の導出 運動量が平行移動の生成演算子であること  $e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}} |\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + \mathbf{a}\rangle$  より,

$$\begin{aligned} \left[ 1 - i \frac{\delta\phi}{\hbar} L_z \right] |x', y', z'\rangle &= \left[ 1 - i \frac{p_y}{\hbar} (\delta\phi x') + i \frac{p_x}{\hbar} (\delta\phi y') \right] |x', y', z'\rangle \\ &= |x' - y' \delta\phi, y' + x' \delta\phi, z'\rangle \end{aligned} \quad (3.6.5)$$

を得る [ $L_z = xp_y - yp_x = p_y x - p_x y$  と交換して,  $x, y$  を運動量演算子より先に  $|x', y', z'\rangle$  に作用させれば良い]. これは期待されるように, 演算子  $\left[ 1 - i \frac{\delta\phi}{\hbar} L_z \right]$  が  $z$  軸周りの角度  $\delta\phi$  の無限小回転を引き起こすことを表している (図 37 参照).

デカルト座標  $(x', y', z')$  に対応する球座標を  $(r, \theta, \phi)$  と書こう (したがって  $|x', y', z'\rangle = |r, \theta, \phi\rangle$ ). すると上式より

$$\langle r, \theta, \phi | \left[ 1 - i \frac{\delta\phi}{\hbar} L_z \right] | \alpha \rangle = \langle r, \theta, \phi - \delta\phi | \alpha \rangle = \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle - \delta\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle$$

であり, 最右辺を

$$\left\langle \mathbf{x}' \left| 1 - i \frac{\delta\phi}{\hbar} L_z \right| \alpha \right\rangle = \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle - i \frac{\delta\phi}{\hbar} \langle \mathbf{x}' | L_z | \alpha \rangle$$

の右辺と等置して式 (121):

$$\langle \mathbf{x}' | L_z | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$$

を得る.

同様の関係として

$$\langle \mathbf{x}' | L_x | \alpha \rangle = -i\hbar \left( -\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle, \quad (132)$$

$$\langle \mathbf{x}' | L_y | \alpha \rangle = -i\hbar \left( \cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (133)$$

が成立する [導出は本稿次節].

■  $\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle$  の式 (122) の導出 式 (132), (133) よりはしご演算子  $L_{\pm} \equiv L_x \pm iL_y$  に対して

$$\langle \mathbf{x}' | L_{\pm} | \alpha \rangle = -i\hbar e^{\pm i\phi} \left( \pm i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (134)$$

となる. そこで

$$\mathbf{L}^2 = L_z^2 + \frac{1}{2}(L_+L_- + L_-L_+)$$

と書いておき,  $\langle \mathbf{x}' | L_z | \alpha \rangle$  の表式 (121) と上式 (134) を用いると, 式 (122):

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle = -\hbar^2 r^2 \left[ \frac{1}{r^2} \left( \frac{1}{\sin \theta} \partial_{\theta} (\sin \theta \partial_{\theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_{\phi}^2 \right) \right] \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$$

を得る.

■ 式 (123) の導出 演算子の関係として, 恒等的に

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= \varepsilon_{ijk} x_i p_j \varepsilon_{lmk} x_l p_m \\ &= (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) x_i p_j x_l p_m \\ &= \delta_{il} \delta_{jm} x_i (x_l p_j - i\hbar \delta_{jl}) p_m - \delta_{im} \delta_{jl} x_i p_j (p_m x_l + i\hbar \delta_{lm}) \\ &= \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 - i\hbar \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} - \delta_{im} \delta_{jl} \{ x_i p_m (x_l p_j - i\hbar \delta_{jl}) + i\hbar \delta_{lm} x_i p_j \} \\ &= \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} \end{aligned}$$

が成り立つ.

■  $\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle$  の式 (124) の導出 式 (1.7.17), 式 (1.7.20) を用いて  $\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle$  の式 (123):

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle = \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 | \alpha \rangle - \langle \mathbf{x}' | (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 | \alpha \rangle + i\hbar \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} | \alpha \rangle$$

の各項を評価すると,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 | \alpha \rangle &= r^2 \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}^2 | \alpha \rangle \\ &= -r^2 \hbar^2 \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle, \\ \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} | \alpha \rangle &= \mathbf{x}' \cdot (-i\hbar \nabla' \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle) \\ &= -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle, \quad \left[ \frac{\mathbf{x}'}{r} \cdot \nabla' \text{ は動径方向の方向微分 } \frac{\partial}{\partial r} \text{ である} \right] \\ \langle \mathbf{x}' | (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 | \alpha \rangle &= -\hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \right) \\ &= -\hbar^2 \left( r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \right) \end{aligned}$$

となるので, 式 (124):

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle = r^2 \hbar^2 \left[ -\nabla'^2 + \left( \partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r \right) \right] \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$$

を得る.

■波動関数の角度依存部分が球面調和関数 (128), (129) で与えられることの証明 式 (125):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi)$$

より角度部分  $Y_l^m$  の  $\phi$  依存性は

$$Y_l^m(\theta, \phi) \sim e^{im\phi}$$

と定まる.

$Y_l^m$  を完全に求めるために,  $m = l$  の場合から始めよう.  $L_+ |l, l\rangle = 0$  および  $\langle \mathbf{x}' | L_+ | \alpha \rangle$  の表式 (134) より

$$0 = \langle \mathbf{n} | L_+ | l, l \rangle = -i\hbar e^{i\phi} \left( i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_l^l(\theta, \phi)$$

が得られる. ここで  $\phi$  依存性  $Y_l^l(\theta, \phi) \sim e^{il\phi}$  を考えると, 上式は

$$Y_l^l(\theta, \phi) = c_l e^{il\phi} \sin^l \theta \quad (135)$$

とすれば満たされることが分かる. 規格化条件 (127) より定数  $c_l$  は

$$c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}} \quad (3.6.35)$$

と定まる [本稿次節で確認].

さらに式 (114) および  $\langle \mathbf{x}' | L_- | \alpha \rangle$  の表式 (134) より

$$\begin{aligned} Y_l^{m-1}(\theta, \phi) &= \langle \mathbf{n} | l, m-1 \rangle = \frac{\langle \mathbf{n} | L_- | l, m \rangle}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)\hbar}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_l^m(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (136)$$

となることを用いると,  $m$  の値を 1 ずつ減らし, 帰納的にすべての可能な値  $m = -l, \dots, l$  に対する  $Y_l^m$  の式 (128), (129) を得ることができる [計算は本稿次節].

■式 (3.6.52) の導出  $\hat{z}$  を適当に回転すると  $\mathbf{n}$  が得られることに対応して  $|\mathbf{n}\rangle = \mathcal{D}(\mathbf{n}) |\hat{z}\rangle$  と書くと,

$$\begin{aligned} \langle l, m' | \mathbf{n} \rangle &= \sum_{l', m} \langle l, m' | \mathcal{D}(R) | l', m \rangle \langle l', m | \hat{z} \rangle \\ &= \sum_m \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(R) \langle l, m | \hat{z} \rangle. \end{aligned}$$

最右辺の  $\langle l, m | \hat{z} \rangle = Y_l^{m*}(\theta = 0, \phi = \text{不定}) \delta_{m0}$  は  $m \neq 0$  に対してゼロになる. これは  $|\hat{z}\rangle$  が  $L_z$  の固有値ゼロの固有ケットであることから理解できる [本稿次節で補足]. よって

$$\langle l, m | \hat{z} \rangle = Y_l^{m*}(\theta = 0, \phi = \text{不定}) \delta_{m0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \Big|_{\cos \theta = 1} \delta_{m0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0} \quad (3.6.50)$$

であり [  $P_l(\cos \theta = 0)$  について本稿次節で補足 ], これを上式に戻して

$$Y_l^{m'*}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \mathcal{D}_{m'0}^{(l)}(R), \quad (3.6.51)$$

すなわち式 (3.6.52) を得る.

なお今考えている,  $\hat{z}$  を  $\mathbf{n}$  に一致させる回転  $R$  は Euler 角

$$\alpha = \phi, \quad \beta = \theta, \quad \gamma = 0$$

を持つ. すると特に  $m = 0$  の場合, 上式 (3.6.50), (3.6.51) より

$$d_{00}^{(l)}(\beta)|_{\beta=\theta} = P_l(\cos \theta)$$

となる.

### 3.6 について

#### ■軌道角運動量 $L = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ の Hermite 性の確認

$$L_i^\dagger = \varepsilon_{ijk}(x_j p_k)^\dagger = \varepsilon_{ijk} p_k x_j = \varepsilon_{ijk}(x_j p_k + [p_k, x_j]) = \varepsilon_{ijk}(x_j p_k - i\hbar \delta_{jk}) = \varepsilon_{ijk} x_j p_k = L_i.$$

■軌道角運動量の交換関係 (120) の導出  $[L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk}\hbar L_k$ : (3.6.2) は  $i = j$  のとき明らかに成り立ち,  $(i, j) = (1, 2), (2, 3), (3, 1)$  で成り立てば  $(i, j) = (2, 1), (3, 2), (1, 3)$  で成り立つから, 式 (3.6.3) のように具体的な 3 通りの成分  $(i, j) = (1, 2), (2, 3), (3, 1)$  に対して証明すれば十分である. そこで教科書では具体的に, 成分計算 (3.6.3):

$$[L_x, L_y] = \dots = i\hbar L_z$$

を行っている. 式 (3.6.3) において,  $A, B, C, D$  のどの 2 つをとっても交換するなら明らかに  $[AB, CD] = 0$  だから

$$[y p_z, x p_z] = 0, \quad [z p_y, z p_x] = 0$$

である.

あるいは次のようにまとめて計算を行うこともできる. まず

$$\begin{aligned} [L_i, x_j] &= \varepsilon_{ikl} x_k [p_l, x_j] = -i\hbar \varepsilon_{ikl} \delta_{lj} x_k = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k, \\ [L_i, p_j] &= \varepsilon_{ikl} [x_k p_l, p_j] = \varepsilon_{ikl} [x_k, p_j] p_l = i\hbar \varepsilon_{ijl} p_l \end{aligned}$$

であり, これらを用いると

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= \varepsilon_{jkl} [L_i, x_k p_l] \\ &= \varepsilon_{jkl} ([L_i, x_k] p_l + x_k [L_i, p_l]) \\ &= i\hbar \varepsilon_{jkl} (\varepsilon_{ikm} x_m p_l + \varepsilon_{jlm} x_k p_m) \\ &= i\hbar (\delta_{ji} \delta_{lm} - \delta_{jm} \delta_{li}) x_m p_l - i\hbar (\delta_{ji} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{ki}) x_k p_m \\ &= i\hbar (x_i p_j - x_j p_i) \\ &= i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k : (120) \end{aligned}$$

を得る.

■式 (3.6.11), 式 (3.6.12) [本稿の式 (132), (133)] の確認 まず, 一般に  $1 - i(\delta\phi/\hbar)L_i$  は  $\langle \mathbf{x}' |$  に作用して固有値  $\mathbf{x}'$  を第  $i$  軸の周りに  $-\delta\phi$  回転させることを確かめる.

$$\langle \mathbf{x}' | \left( 1 - i \frac{\delta\phi}{\hbar} L_i \right) = \langle \mathbf{x}' | \left( 1 - i \frac{p_k}{\hbar} (\delta\phi \varepsilon_{ijk} x_j') \right) \stackrel{\text{DC}}{\rightleftharpoons} \left( 1 - i \frac{p_k}{\hbar} (-\delta\phi) \varepsilon_{ijk} x_j' \right) | \mathbf{x}' \rangle$$

なので, 位置ケットの (したがって位置ブラの) 固有値は

$$x_k' \rightarrow x_k' + (-\delta\phi) \varepsilon_{ijk} x_j' = x_k' + (-\delta\phi) \varepsilon_{kij} x_j'$$

と変化する. この付加的な項は第  $i$  軸の方向単位ベクトルを  $\mathbf{n}$  (その第  $i'$  成分  $n_{i'}$  は  $\delta_{ii'}$ ) とすると  $(-\delta\phi) \mathbf{n} \times \mathbf{x}'$  の第  $i$  成分  $\varepsilon_{kij} (-\delta\phi n_{i'}) x_j$  だから示された.

さて,  $x$  軸周りの  $-\delta\phi_x$  回転で  $\mathbf{x}'$  の変位は

$$\begin{pmatrix} -\delta\phi_x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \delta\phi_x z' \\ -\delta\phi_x y' \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} 0 \\ \cos\theta \delta\phi_x \\ -\sin\theta \sin\phi \delta\phi_x \end{pmatrix}$$

である. これが  $\theta \rightarrow \theta + \delta\theta, \phi \rightarrow \phi + \delta\phi$  としたときの  $\delta\theta, \delta\phi$  の 1 次の範囲での  $\mathbf{x}'$  の変化

$$r \begin{pmatrix} -\delta\phi \sin\theta \sin\phi + \delta\theta \cos\theta \cos\phi \\ \delta\phi \sin\theta \cos\phi + \delta\theta \cos\theta \sin\phi \\ -\delta\theta \sin\theta \end{pmatrix} \quad (137)$$

に一致するような  $\delta\theta, \delta\phi$  は  $\delta\theta = \sin\phi \delta\phi_x, \delta\phi = \cot\theta \cos\phi \delta\phi_x$  であり, この  $\delta\theta, \delta\phi$  に対して

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{x}' \left| 1 - i \left( \frac{\delta\phi_x}{\hbar} L_x \right) \right| \alpha \right\rangle &= \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle - i \frac{\delta\phi_x}{\hbar} \langle \mathbf{x}' | L_x | \alpha \rangle, \\ \left\langle \mathbf{x}' \left| 1 - i \left( \frac{\delta\phi_x}{\hbar} L_x \right) \right| \alpha \right\rangle &= \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + \left( \delta\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \delta\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \end{aligned}$$

を等置して式 (132):

$$\langle \mathbf{x}' | L_x | \alpha \rangle = -i\hbar \left( -\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$$

を得る.

一方,  $y$  軸周りの  $-\delta\phi_y$  回転で  $\mathbf{x}'$  の変位は  $r(-\cos\theta \delta\phi_y, 0, \sin\theta \cos\phi \delta\phi_y)$  であり, これが式 (137) に一致するような  $\delta\theta, \delta\phi$  は  $\delta\theta = -\cos\phi \delta\phi_y, \delta\phi = \cot\theta \sin\phi \delta\phi_y$  なので, 同様に式 (133):

$$\langle \mathbf{x}' | L_y | \alpha \rangle = -i\hbar \left( \cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$$

を得る.

■p.269, 1.2 最後の項を

$$i\hbar \delta_{lm} x_j p_j \rightarrow i\hbar \delta_{lm} x_i p_j$$

と訂正する (本稿では訂正済み).

■「ハミルトニアンが球対称であると,  $H$  は  $L_z$  や  $L^2$  と交換」する (p.270, 1.9) について 本稿の要約の脚注における, 量子力学における対称性 (下巻 pp.342-343) を援用した議論を参照. なお  $[\mathbf{J}, H] = 0$  のとき

$$[\mathbf{J}^2, H] = J_k [J_k, H] + [J_k, H] J_k = 0, \quad [\mathcal{D}(R), H] = 0$$

である.

■角度依存性の分離 式 (3.6.23):  $\langle \mathbf{n} | l, m \rangle = Y_l^m(\theta, \phi)$  は

$$\langle \mathbf{x}' | n, l, m \rangle = (\langle r | \otimes \langle \mathbf{n} |) \cdot |n, l, m\rangle = \langle r | n, l, m \rangle \otimes \langle \mathbf{n} | l, m; n \rangle$$

と書いて、最右辺を式 (3.6.22) の  $R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi)$  に対応させたものと見ることができる。

■式 (3.6.25) について 式 (3.6.9):

$$\langle \mathbf{x}' | L_z | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$$

は  $r = |\mathbf{x}'|$  に単位長さをとった式 (3.6.25):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \mathbf{n} | l, m \rangle = \langle \mathbf{n} | L_z | l, m \rangle = m\hbar \langle \mathbf{n} | l, m \rangle$$

を含んでいる。

■規格化定数 (3.6.35) を求める計算について 規格化条件 (127) に  $l', m, m' = l$  と式 (135) を代入すると

$$1 = 2\pi |c_l|^2 \int_{-1}^1 d(\cos \theta) (1 - \cos^2 \theta)^l$$

となる。ここに現れた積分  $I_l \equiv \int_{-1}^1 d(\cos \theta) (1 - \cos^2 \theta)^l$  は部分積分により

$$\begin{aligned} I_l &= \left[ \cos \theta (1 - \cos^2 \theta)^{l-1} \right]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \cos \theta \times l(1 - \cos^2 \theta)^{l-1} \times (-2) \cos \theta d(\cos \theta) \\ &= 2l \int_{-1}^1 \{1 - (1 - \cos^2 \theta)\} (1 - \cos^2 \theta)^{l-1} d(\cos \theta) \\ &= 2l(I_{l-1} - I_l) \end{aligned}$$

となるので、 $I_0 = 2$  とより

$$I_l = 2 \times \frac{(2l)!!}{(2l+1)!!} = 2 \times \frac{(2^l l!)^2}{(2l+1)!!}$$

を得る。よって  $c_l > 0$  とすれば

$$c_l = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}}$$

となり、これは式 (3.6.35) と位相因子  $(-1)^l$  を除けば等しい。

ここで整数の  $l$  を考えて  $(2l)! = 2^l l!$  としたことは、球面調和関数が半整数の  $l$  に対して定義されず p.273, 1.7 以降で見ると半整数の  $l$  を考えることは不条理であることから正当化される。

■ $Y_l^m(\theta, \phi)$  の式 (3.6.37), (3.6.38) [本稿の式 (128), (129)] の導出  $m \geq 0$  に対する  $Y_l^m$  の式 (128) が正しいことは数学的帰納法にて確認できる。ある  $m \geq 1$  で式 (128) が成り立つと仮定すると、漸化式 (136) を用いて

$$Y_l^{m-1}(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+(m-1))!}{4\pi(l-(m-1))!}} e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left\{ e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \right\}$$



とできる。ここで青字部分において

$$i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \left\{ e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \right\} = -m \cot \theta \left\{ e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \right\},$$

および  $e^{im\phi} \left( -\frac{d}{d\theta} \frac{1}{\sin^m \theta} \right) \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} = m \cot \theta \left\{ e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \right\}$

が相殺するため、

$$-e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d}{d\theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} = e^{im\phi} \frac{1}{\sin^{m-1} \theta} \frac{d^{l-m+1}}{d(\cos \theta)^{l-m+1}} (\sin \theta)^{2l}$$

が生き残る。よって  $m \rightarrow m-1$  としても式 (128) は成り立つ。

以上より式 (128) が  $m = 0, \dots, l$  に対して成り立つことが示された。このため式 (129):

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \phi)]^* \\ = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{-im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \quad (m \geq 0) \quad (138)$$

についても、 $m=0$  で成り立つことになる。漸化式 (136) 自体は各  $m$  で成立しているため、再びこれを用いれば、上式 (138) が  $m=0, \dots, l$  で成り立つことを帰納的に証明できると期待できる。しかしながら実際的には、改めて  $Y_l^{-l}$  から始めて、同様に  $m$  の値を 1 ずつ増やしてゆく方が見通しが良い。

まず上式 (138) から得られる

$$Y_l^{-l}(\theta, \phi) = (-1)^l Y_l^{l*}(\theta, \phi) = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}} e^{-il\phi} \sin^l \theta$$

は、 $Y_l^{-l}$  に対する微分方程式

$$0 = \langle \mathbf{n} | L_- | l, -l \rangle = i\hbar e^{-i\phi} \left( i \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_l^{-l}(\theta, \phi)$$

を満たしている。また  $Y_l^l$  が規格化されていることから、 $Y_l^{-l}$  の規格化も保証されている：

$$\int d\Omega Y_l^{-l*} Y_l^{-l} = \int d\Omega Y_l^l Y_l^{l*} = 1.$$

よって式 (138) は  $m=l$  に対して正しい。そこで  $1 \leq m \leq l$  を満たすある  $m$  に対して式 (138) が成り立つと仮定して、今度は  $m$  を増やす漸化式

$$Y_l^{m+1}(\theta, \phi) = \langle \mathbf{n} | l, m+1 \rangle = \frac{\langle \mathbf{n} | L_+ | l, m \rangle}{\sqrt{(l-m)(l+m-1)\hbar}} \\ = \frac{-i}{\sqrt{(l-m)(l+m-1)}} e^{i\phi} \left( i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_l^m(\theta, \phi)$$

を、 $m \rightarrow -m$  とおいて用いると、

$$Y_l^{-m+1}(\theta, \phi) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+(m-1))!}{4\pi(l-(m-1))!}} (-i) e^{-i\phi} \left( i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left\{ e^{-im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \right\}$$

となる。ここで青字部分において

$$-\cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \left\{ e^{-im\phi} \frac{1}{\sin^m\theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}} (\sin\theta)^{2l} \right\} = im \cot\theta \left\{ e^{-im\phi} \frac{1}{\sin^m\theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}} (\sin\theta)^{2l} \right\},$$

$$\text{および } e^{-im\phi} \left( i \frac{d}{d\theta} \frac{1}{\sin^m\theta} \right) \frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}} (\sin\theta)^{2l} = -im \cot\theta \left\{ e^{-im\phi} \frac{1}{\sin^m\theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}} (\sin\theta)^{2l} \right\}$$

が相殺するため、

$$ie^{-im\phi} \frac{1}{\sin^m\theta} \frac{d}{d\theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}} (\sin\theta)^{2l} = -ie^{-im\phi} \frac{1}{\sin^{m-1}\theta} \frac{d^{l-m+1}}{d(\cos\theta)^{l-m+1}} (\sin\theta)^{2l}$$

が生き残る。よって  $m \rightarrow m-1$  としても式 (138) は成り立つから、式 (138) は  $m=0, \dots, l$  に対して正しい。

■球面調和関数の定義に関する流儀について 式 (3.6.37) [本稿の式 (128)] の  $Y_l^m(\theta, \phi)$  ではなく、これを用いて式 (3.6.38) [本稿の式 (129)] で定義される  $Y_l^{-m}(\theta, \phi) (m \geq 0)$  が p.347 の式 (A.5.7) で定義される  $Y_l^m(\theta, \phi) (m \geq 0)$  に一致する。また、p.347 式 (A.5.7) の  $Y_l^m(\theta, \phi) (m \geq 0)$  は文献 [15, p.93, p.102] の式 (5.108), 式 (5.141) に一致する。

もともと式 (128), 式 (129) に基づいて、 $l=0, 1, 2$  に対する球面調和関数を計算すると

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (\sin\theta) e^{\pm i\phi},$$

$$Y_2^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1), \quad Y_2^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} (\sin\theta \cos\theta) e^{\pm i\phi}, \quad Y_2^{\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (\sin^2\theta) e^{\pm 2i\phi}$$

となり、式 (A.5.7) のそれに一致する。

■「(3.6.34) に従って」(p.274, l.1) について 式 (3.6.34) は  $l$  が半整数でないことを用いずに導かれた。

■式 (3.6.44), 式 (3.6.45) [本稿の式 (130), 式 (131)] について

- 式 (130) の最後の等号は式 (3.5.23):  $J_- |a, b_{\min}\rangle = 0$  から分かる。
- 式 (130) に  $Y_{1/2}^{-1/2} = \langle \mathbf{n} | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = e^{-i\phi/2} f(\theta)$  を代入すると、 $f(\theta) = \text{const} \sqrt{\sin\theta}$  と定まることから式 (131) を得る。

■「一方  $\theta=0$  で……直接に分かる」(p.275 下から 5~7 行目) について  $\langle \hat{z} | L_z = \langle \hat{z} | (xp_y - yp_x) = 0$  を  $|l, m\rangle$  に左からかけると

$$0 = \langle \hat{z} | L_z |l, m\rangle = m\hbar \langle \hat{z} |l, m\rangle = m\hbar Y_l^m(\theta=0, \forall\phi)$$

となるから、 $m \neq 0$  のとき  $Y_l^m(\theta=0, \forall\phi) = 0$  である。

■式 (3.6.50) における  $P_n(\cos\theta=1)$  Legendre 多項式  $P_n(x)$  は

$$\frac{1}{\sqrt{1-2tx+t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n \quad (|t| < 1)$$

を満たす [15, p.78]. これに  $x = 1$  を代入すると

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(1)t^n = \frac{1}{\sqrt{1-2tx+t^2}} \Big|_{x=1} = 1+t+t^2+\dots \quad (|t| < 1)$$

となるので  $P_n(1) = 1$  である.

### 3.7 角運動量の合成

角運動量の合成の簡単な例 (pp.276–281)

- 軌道角運動量とスピン角運動量の合成

- $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$

- 基底の 1 例:  $|\mathbf{x}', \pm\rangle$

- スピン  $1/2$  を持つ 2 粒子の, スピン角運動量の合成

- $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$

- 基底

- \*  $S_{1z}$  と  $S_{2z}$  の固有ケットに基づく  $\{m_1, m_2\}$  表示 ( $[S_{1z}, S_{2z}] = 0$ ):

$$\left| m_1 = \pm\frac{1}{2}, m_2 = \pm\frac{1}{2} \right\rangle = |\pm\pm\rangle \quad (\text{複号任意})$$

- \*  $\mathbf{S}^2$  と  $S_z$  の固有値に基づく,  $\{s, m\}$  表示:

$$|s = 1, m = \pm 1, 0\rangle, \quad \text{スピン 3 重項という}$$

$$|s = 0, m = 0\rangle \quad \text{スピン 1 重項という}$$

(3.7.14)

[ $s, m$  のとり得る値について, 本稿次節で補足.]

– 2 組の基底ケットの関係 [導出は下記]

$$|s = 1, m = 1\rangle = |++\rangle, \quad (3.7.15a)$$

$$|s = 1, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle), \quad (3.7.15b)$$

$$|s = 1, m = -1\rangle = |--\rangle, \quad (3.7.15c)$$

$$|s = 0, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle). \quad (3.7.15d)$$

角運動量合成の形式論 (pp.281–286)

異なる部分空間にある 2 つの角運動量演算子  $\mathbf{J}_{(1)}, \mathbf{J}_{(2)}$  (例えば粒子 1, 2 に対する角運動量) が交換関係

$$[J_{(a)i}, J_{(b)j}] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_{(a)k}\delta_{ab}$$

を満たすとすると<sup>\*50</sup>, 全角運動量  $\mathbf{J} = \mathbf{J}_{(1)} + \mathbf{J}_{(2)}$  は角運動量の基本的交換関係

$$[J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k$$

<sup>\*50</sup> 座標成分との混同を避けるため, 本稿では適宜, 添字  $a, b$  に括弧を付ける表記を併用している.

を満たすから、その名の通り角運動量となる。このとき系全体の回転演算子は

$$\exp\left(\frac{-i\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}\phi}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{J}_{(1)}\cdot\mathbf{n}\phi}{\hbar}\right) \otimes \exp\left(\frac{-i\mathbf{J}_{(2)}\cdot\mathbf{n}\phi}{\hbar}\right)$$

である [ $\mathbf{J}_{(1)}, \mathbf{J}_{(2)}$  が交換することを考慮した (付録 B 参照)].

さて、基底には

- $\mathbf{J}_{(1)}^2, \mathbf{J}_{(2)}^2, J_{(1)z}, J_{(2)z}$  の同時固有ケット  $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$
- $\mathbf{J}_{(1)}^2, \mathbf{J}_{(2)}^2, \mathbf{J}^2, J_z$  の同時固有ケット  $|j_1 j_2; jm\rangle$

の 2 通りを用いることができる。[同時固有ケットを作ることができる条件として、第 2 の選択における演算子が交換することの確認は本稿次節 (第 1 の選択に対しては明らか).] これらは

$$|j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle \quad (3.7.33)$$

によって関係付けられており、係数  $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle$  を Clebsch-Gordan (クレプシュ・ゴルダン) 係数と呼ぶ<sup>\*51</sup>。Clebsch-Gordan 係数は基底の変換行列の要素になっている [式 (1.5.7) を参照]。

Clebsch-Gordan 係数は

$$m = m_1 + m_2, \quad (3.7.35)$$

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (3.7.38)$$

のとき以外 0 になる (導出は下記)。第 2 式 (3.7.38) は角運動量合成のベクトルモデルから期待される関係 [角運動量  $\mathbf{J}$  を矢印で表される幾何学的な対象と見なし、さらに  $\mathbf{J}^2$  の固有値  $j$  がその大きさに対応すると考えたときに期待される“三角不等式”] である。

Clebsch-Gordan 係数はユニタリー行列を形成することを、基底の規格直交性から証明できる。したがって各 Clebsch-Gordan 係数を実数にとると、直交行列を形成する。すなわち

$$\sum_j \sum_m \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle \langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; jm\rangle = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}, \quad (3.7.41)$$

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j'm'\rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}. \quad (3.7.42)$$

また規格化条件

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} |\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle|^2 = 1 \quad (3.7.43)$$

が成立する。[以上の式 (3.7.41–43) の導出については本稿次節を参照.]

<sup>\*51</sup> スピン 1/2 の系に対して具体例を式 (3.7.15) で見たように、これは全角運動量  $\mathbf{J}$  について  $\mathbf{J}^2, J_z$  の固有値が定まった状態  $|j_1 j_2; jm\rangle$  を、合成前の角運動量  $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$  について  $\mathbf{J}_1^2, J_{1z}, \mathbf{J}_2^2, J_{2z}$  の固有値が定まった状態  $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$  に分解するときの展開係数である。ここから

- タイトルが「角運動量の合成」であること
- 「二つの角運動量をたし合わせて一つの角運動量固有状態を作りあげる仕方」(p.326, 1.7,8) という表現
- $\langle jk; mq | jk; j'm'\rangle$  が「 $j$  と  $k$  を加えて  $j'$  とする、クレプシュ・ゴルダン係数」(p.327 一番下~p.328, 1.1) であることが理解できる。

クレプシュ・ゴルダン係数に対する漸化式 (pp.287-294)

$$\begin{aligned}
 & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j_1 j_2; j, m \pm 1\rangle \\
 &= J_{\pm} |j_1 j_2; jm\rangle \\
 &= (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \left( \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2| \right) |j_1 j_2; jm\rangle \\
 &= \sum_{m_1} \sum_{m_2} \left( \sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} |j_1 j_2; m_1 \pm 1, m_2\rangle \right. \\
 & \quad \left. + \sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)} |j_1 j_2; m_1, m_2 \pm 1\rangle \right) \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle
 \end{aligned} \tag{3.7.46}$$

より Clebsch-Gordan 係数に対する漸化式

$$\begin{aligned}
 & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j, m \pm 1\rangle \\
 &= \sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} \langle j_1 j_2; m_1 \pm 1, m_2 | j_1 j_2; jm\rangle \\
 & \quad + \sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)} \langle j_1 j_2; m_1, m_2 \pm 1 | j_1 j_2; jm\rangle
 \end{aligned} \tag{3.7.49}$$

が得られる [本稿次節で補足]. これは  $J_{\pm}$  の複号に応じた 2 つの漸化式である.

漸化式 (3.7.49) を用いると, 適当な Clebsch-Gordan 係数から始めて,  $(m_1, m_2)$  で指定される全ての Clebsch-Gordan 係数  $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle$  を求めることができる. その一般的な手順は次のようにまとめられる. 与えられた  $j_1, j_2, j$  に対して興味のある Clebsch-Gordan 係数は,  $m_1 m_2$ -平面上の領域

$$|m_1| \leq j_1, \quad |m_2| \leq j_2, \quad -j \leq m_1 + m_2 \leq j$$

にある格子点の座標  $(m_1, m_2)$  を持つ (図 38 参照). 図 38 において,

- 赤い三角形は  $J_+$  の漸化式によって関係付けられる 3 つの Clebsch-Gordan 係数の格子点を表す.
- 青い三角形は  $J_-$  の漸化式によって関係付けられる 3 つの Clebsch-Gordan 係数の格子点を表す.

そこでまず, 領域の右上の隅の点 A に対応付けられる Clebsch-Gordan 係数から出発して  $J_-$  の漸化式を繰り返し用いると, A の真下の点における係数が逐次求まる. その際, 白丸で示した  $m_1 = j + 1$  上の禁止される領域の点は漸化式に寄与を持たない [係数がゼロ, 本稿次節で補足] ことに注意する. 次に  $J_+$  の漸化式を用いると, 左隣の (すなわち  $m_1 = j - 1$  上の) 点の係数が得られる. (ただし一番上と下の点 B, C における係数を求めるには, 続いて  $J_-$  の漸化式を用いる.) 以下同様にして, 図 38 のようにすべての Clebsch-Gordan 係数を A の係数で表すことができる. 全体の規格化には条件 (3.7.43) を用いれば良い. なお残る全体の符号の任意性 [A の係数に対する符号の任意性に対応, Clebsch-Gordan 係数を実数に選んだことを思い出す] は慣習に従って決める.

■軌道角運動量とスピン (1/2) の合成 スピン 1/2 の 1 粒子の軌道角運動量とスピン角運動量の合成という, 興味ある例に対して以上の手法を適用しよう. まず  $j = l + \frac{1}{2}$  に対して,  $(m_l, m_s)$  平面上の右上の点 (図 39 参照) に対応する Clebsch-Gordan 係数

$$\left\langle l, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle = 1 \tag{3.7.58}$$

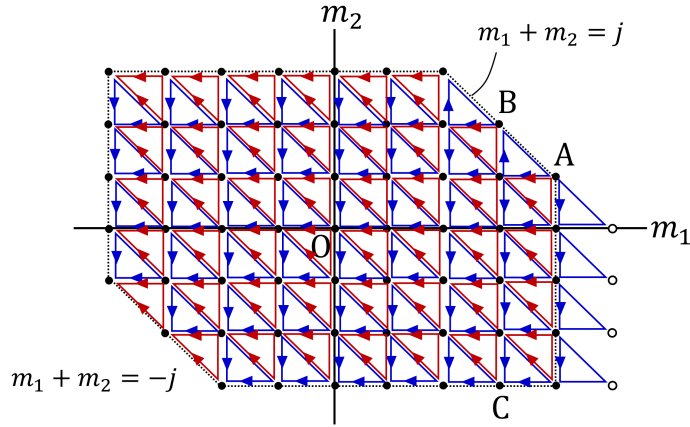


図 38 Clebsch-Gordan 係数を求めるための漸化式の用法

から始めて, 上の列に並ぶ点 ( $m_s = 1/2$  を持つ) に対応する Clebsch-Gordan 係数

$$\left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle = \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \quad (3.7.59)$$

を得る. 次にこれが下の列に並ぶ点 ( $m_s = -1/2$  を持つ), および  $j = l - \frac{1}{2}$  に対する上下の列に並ぶ点 ( $m_s = \pm 1/2$  を持つ) の Clebsch-Gordan 係数と合わせると直交行列を作ることから, 全 Clebsch-Gordan 係数

$$\begin{pmatrix} \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle & \left\langle m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle \\ \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l - \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle & \left\langle m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| l - \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} & \sqrt{\frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \\ -\sqrt{\frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} & \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \end{pmatrix} \quad (3.7.63)$$

が得られる (以上の導出過程の詳細は下記).

なお

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_l^{j=l\pm 1/2, m} &= \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} Y_l^{m - \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \chi_+ + \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} Y_l^{m + \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \chi_- \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l + 1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l \pm m + \frac{1}{2}} Y_l^{m - 1/2}(\theta, \phi) \\ \sqrt{l \mp m + \frac{1}{2}} Y_l^{m + 1/2}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.7.64)$$

によって定義されるスピン-角関数について, 本稿次節で補足しつつ要約する.

#### クレプシュ・ゴルダン係数 [級数] と回転行列 (pp.294-297)

- Clebsch-Gordan 級数

$$\begin{aligned} &\mathcal{D}_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(R) \mathcal{D}_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(R) \\ &= \sum_{j=|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} \sum_m \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; jm' \rangle \mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(R). \end{aligned} \quad (3.7.69)$$

(導出は下記. )

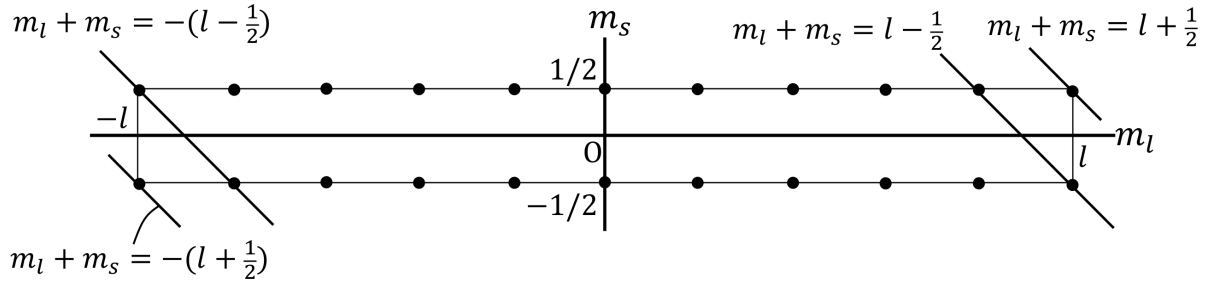


図 39 許容される点  $(m_l, m_s)$

- 式 (3.6.52) と式 (3.7.69) から, 3 つの球面調和関数を含む重要な積分公式

$$\int d\Omega Y_l^{m_s*}(\theta, \phi) Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} \langle l_1 l_2; 00 | l_1 l_2; l0 \rangle \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; lm \rangle \quad (3.7.73)$$

が導かれる (導出は下記).

- 右辺の  $\langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; lm \rangle$  は  $l_1$  と  $l_2$  を合成して  $l$  を作る Clebsch-Gordan 係数である. 残りの因子は  $m_1, m_2$  に依らない.
- 上式 (3.7.37) は Wigner-Eckart の定理 (3.10 節) の特別な場合である.

### 3.7 節, 式の導出など

■2 つの基底  $\{|s, m\rangle\}$  と  $\{|m_1, m_2\rangle\}$  の関係 (3.7.15) の導出 最初の式 (3.7.15a):  $|s=1, m=1\rangle = |++\rangle$  は 2 個のスピンのともに上向きの状態として, 直観的に納得がいく. [この式が実際に正しいことについては, 本稿次節における式 (3.7.14) の補足を参照.] 次に式 (3.7.15a) にはしご演算子  $S_- \equiv S_{1-} + S_{2-}$  を辺々掛ける:

$$S_- |s=1, m=1\rangle = (S_{1-} + S_{2-}) |++\rangle. \quad (3.7.17)$$

ここで例えば電子 1 の演算子  $S_{1\pm}$  は  $|m_1, m_2\rangle$  における成分  $m_1$  にのみ作用することに注意すると,

$$\begin{aligned} & \sqrt{(1+1)(1-1+1)} |s=1, m=0\rangle \\ &= \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} |-\rangle + \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} |+-\rangle \end{aligned} \quad (3.7.18)$$

となるので [本稿次節で補足], 式 (3.7.15b) を得る. 式 (3.7.15b) に再びはしご演算子 (3.7.17) を掛けると,  $|s=1, m=-1\rangle$  の式 (3.7.15c) が導かれる. 最後にスピン 1 重項 (3.7.15d) は, スピン 3 重項 (3.7.15a-c), 特に式 (3.7.15b) と直交することを要請して得られる.

■Clebsch-Gordan 係数がゼロにならない条件 (3.7.35), (3.7.38) の導出  $J_z = J_{1z} + J_{2z}$  より

$$0 = \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | (J_z - J_{1z} - J_{2z}) | j_1 j_2; jm \rangle = (m - m_1 - m_2) \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle$$

なので, ゼロでない Clebsch-Gordan 係数  $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle$  に対して式 (3.7.35):  $m = m_1 + m_2$  が成立する.

表3 与えられた  $j_1, j_2$  と各  $m = -(j_1 + j_2), \dots, j_1 + j_2$  に対し,  $|m_1| \leq j_1, |m_2| \leq j_2, m_1 + m_2 = m$  を満たす組  $(m_1, m_2)$

$m$	$j_1 + j_2$	$j_1 + j_2 - 1$	$\dots$	$j_1 - j_2 + 1$	$j_1 - j_2$	$\dots$	$j_2 - j_1$	$j_2 - j_1 - 1$	$\dots$	$-j_1 - j_2 + 1$	$-j_1 - j_2$
$(m_1, m_2)$	$(j_1, j_2)$	$(j_1 - 1, j_2)$		$(j_1 - 2j_2 + 1, j_2)$	$(j_1 - 2j_2, j_2)$		$(-j_1, j_2)$				
		$(j_1, j_2 - 1)$		$(j_1 - 2j_2 + 2, j_2 - 1)$	$(j_1 - 2j_2 + 1, j_2 - 1)$		$(-j_1 + 1, j_2 - 1)$	$(-j_1, j_2 - 1)$			
				$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$			
				$(j_1, -j_2 + 1)$	$(j_1 - 1, -j_2 + 1)$		$(2j_2 - j_1 - 1, -j_2 + 1)$	$(2j_2 - j_1, -j_2 + 1)$		$(-j_1, -j_2 + 1)$	
					$(j_1, -j_2)$		$(2j_2 - j_1, -j_2)$	$(2j_2 - j_1 - 1, -j_2)$		$(-j_1 + 1, -j_2)$	$(-j_1, -j_2)$

式 (3.7.38):  $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$  の完全な証明は教科書の付録 B にある. 以下, それをアレンジしつつまとめよう. 一般性を失うことなく,  $j_1 \geq j_2$  を仮定することができる. しばらくはこの仮定の下で考察を行う. 与えられた  $j_1, j_2$  に対して  $|m_1| \leq j_1, |m_2| \leq j_2$  より,  $m = m_1 + m_2$  の最大値は  $m_{\max} = j_1 + j_2$  である. 固有値  $m_{\max}$  にはただ 1 つの状態

$$|j_1 j_2; m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle \sim |j_1 j_2; j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle$$

が対応する. 次に  $m$  の値を  $m_{\max}$  から減らすと,  $\{m_1, m_2\}$  表示では表 3 のように, 各  $m$  に対して

$$|m_1| \leq j_1, \quad |m_2| \leq j_2, \quad m_1 + m_2 = m$$

を満たす組  $(m_1, m_2)$  で特徴付けられる縮退した状態が得られる. 縮退は最大で  $(2j_2 + 1)$  重であることが見て取れる ( $m = -(j_1 - j_2), \dots, (j_1 - j_2)$  に対しては  $m_2 = -j_2, \dots, j_2$  が全て可能となっている).  $(2j_2 + 1)$  重に縮退した  $m$  に対して,  $\{j, m\}$  表示では異なる  $(2j_2 + 1)$  個の値  $j$  を持つ状態  $|j, m\rangle$  が対応しなければならない. ところが今着目している  $m$  の値 ( $m = -(j_1 - j_2), \dots, (j_1 - j_2)$  のいずれか) は  $|m| \leq j_1 - j_2$  を満たすので,  $(2j_2 + 1)$  個の  $j$  の値

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, j_1 - j_2$$

に対して  $|m| \leq j$  を満たす可能な値となる. よってこれらの  $j$  が縮退している状態を特徴付ける  $j$  の値である. 上式は  $j_1 - j_2 \leq j \leq j_1 + j_2$  を意味しており, 最後に  $j_1 \geq j_2$  の制約を外すと, 式 (3.7.38):  $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$  が得られる.

■Clebsch-Gordan 係数 (3.7.63) までの導出過程 軌道角運動量  $j_1 = l$ : 整数,  $m_1 = m_l$  とスピン角運動量  $j_2 = s = \frac{1}{2}, m_2 = m_s = \pm \frac{1}{2}$  を合成する場合, 許される  $j$  の値は

$$j = l \pm \frac{1}{2}, \quad l > 0; \quad j = \frac{1}{2}, \quad l = 0 \quad (3.7.53)$$

で与えられる [本稿次節で補足].  $m_1 m_2$ -平面 ( $m_l m_s$ -平面) において許容される点は, 図 39 のように 2 つの列を作る [本稿次節で補足].

特に  $j = l + \frac{1}{2}$  の場合を調べよう. 上の列  $m_s = 1/2$  に沿って  $J_-$  の三角形を適用すると,  $m_l$  の値を 1 ずつ変えた係数を求めることができる. すなわち漸化式 (3.7.49) を下側の符号に対して, ( $m$  を  $m + 1$  で置き換



えて)用いると,

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

を得る. ただし Clebsch-Gordan 係数の指標  $j_1 = l, j_2 = \frac{1}{2}$  は省略しており, ここでは

$$m_1 = m_l = m - \frac{1}{2}, \quad m_2 = m_s = \frac{1}{2} \quad (3.7.55)$$

[本稿次節で補足]を用いた. これを  $m_l$  が可能な最大値  $l$  に達するまで繰り返し用いると

$$\begin{aligned} \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle &= \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{l + m + \frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{l + m + \frac{3}{2}}{l + m + \frac{5}{2}}} \left\langle m + \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m + 2 \right. \right\rangle \\ &= \dots \\ &= \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left\langle l, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right. \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.7.57)$$

ここで  $m_l$  と  $m_s$  がともに最大の状態  $|m_l = l, m_s = \frac{1}{2}\rangle$  を考えると, 合成した角運動量は  $m = m_l + m_s = l + \frac{1}{2}$  であり, これは  $j = l + \frac{1}{2}$  のときのみ可能である ( $j = l - \frac{1}{2}$  は不適). よってこれは位相因子の違いを除いて  $|j = l + \frac{1}{2}, m = l + \frac{1}{2}\rangle$  に等しくなければならない. 慣例に従い, この位相因子を  $\langle l, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \rangle = 1$  (3.7.58) と選ぶと, 上式 (3.7.57) は式 (3.7.59):

$$\left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle = \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}$$

になる.

ここまでで Clebsch-Gordan 係数の作る変換行列

$$\begin{pmatrix} \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle & \left\langle m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle \\ \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l - \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle & \left\langle m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| l - \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle \end{pmatrix}$$

のうち, 左上の係数が求まったことになる. 残りの係数は, 上の行列が直交行列

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (3.7.61)$$

を作ることを要求して定めれば良い [本稿次節で補足]. まず式 (3.7.58) より

$$\sin^2 \alpha = 1 - \frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1} = \frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}$$

と同定できる. ここで  $J_-$  の行列要素を慣習的に正と約束すると,  $\sin \alpha$  は正でなければならないので [本稿次節で補足], 式 (3.7.63):

$$\begin{pmatrix} \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle & \left\langle m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle \\ \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l - \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle & \left\langle m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| l - \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} & \sqrt{\frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \\ -\sqrt{\frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} & \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \end{pmatrix}$$

を得る.

■ Clebsch-Gordan 級数 (3.7.69) の導出

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \mathcal{D} | j_1 j_2; m_1' m_2' \rangle &= \langle j_1 m_1 | \mathcal{D} | j_1 m_1' \rangle \langle j_2 m_2 | \mathcal{D} | j_2 m_2' \rangle \\ &(\because |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle, \text{ etc.}) \\ &= \mathcal{D}_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(R) \mathcal{D}_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(R) \end{aligned}$$

の最右辺を

$$\begin{aligned} &\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \mathcal{D} | j_1 j_2; m_1' m_2' \rangle \\ &= \sum_j \sum_m \sum_{j'} \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; j m | \mathcal{D} | j_1 j_2; j' m' \rangle \langle j_1 j_2; j' m' | \mathcal{D} | j_1 j_2; m_1' m_2' \rangle \\ &(\because \text{完備関係式}) \\ &= \sum_j \sum_m \sum_{j'} \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \mathcal{D}_{m m'}^{(j)}(R) \delta_{j j'} \langle j_1 j_2; j' m' | \mathcal{D} | j_1 j_2; m_1' m_2' \rangle \\ &= \sum_j \sum_m \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; j m' | \mathcal{D} | j_1 j_2; m_1' m_2' \rangle \mathcal{D}_{m m'}^{(j)}(R) \end{aligned}$$

の最右辺と等置して, Clebsch-Gordan 級数 (3.7.69) を得る.

■ 式 (3.7.73) の導出 式 (3.6.52) と Clebsch-Gordan 級数 (3.7.69) から

$$\begin{aligned} Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi) &= \frac{\sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)}}{4\pi} \sum_{l'} \sum_{m'} \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; l' m' \rangle \\ &\times \langle l_1 l_2; 0 0 | l_1 l_2; l', 0 \rangle \sqrt{\frac{4\pi}{2l'+1}} Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (3.7.72)$$

が得られる [本稿次節で補足]. 両辺に  $Y_l^{m*}(\theta, \phi)$  をかけて全立体角にわたって積分し, 次いで右辺において球面調和関数の直交性を用いて和を実行すると, 公式 (3.7.73) に到達する.

### 3.7 について

■  $\{s, m\}$  表示のとり得る値 (3.7.14)  $S_z = S_{1z} + S_{2z}$  なので両辺を状態ケットに作用させて得られる固有値について

$$m = m_1 + m_2 = 0, \pm 1 \quad (139)$$

である. 交換関係 (3.7.11) より  $\mathbf{S}$  が実際に角運動量となるから  $\mathbf{S}^2$  の固有値は  $s(s+1)\hbar^2$  の形 (p.278 一番下) になり, この  $s$  を用いて

$$m = -s, \dots, s \quad (140)$$

である. 式 (139) より  $m$  は整数だから, 式 (140) における  $s$  もまた整数である. 後の式 (3.7.38):

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

は今の場合  $0 \leq s \leq 1$  となり, これを満たす整数  $s$  は  $s = 0, 1$  に限られる. 例えば状態  $|++\rangle$  では式 (139) より  $m = 1$  なので式 (140) において  $s = 1$  でなければならず, 式 (3.7.15a):

$$|s = 1, m = 1\rangle = |++\rangle$$

を得る. このように  $\{s, m\}$  表示のとりうる値 (3.7.14) が分かる.

■  $|s=1, m=0\rangle$  の式 (3.7.15b) の導出 (3.7.18) 式 (3.7.18) について詳しく述べる. 式 (3.5.40) [本稿の式 (114)] で

$$j \rightarrow s=1, \quad m=1$$

と置くことにより, 式 (3.7.17) の左辺は

$$S_- |s=1, m=1\rangle = \sqrt{2\hbar} |s=1, m=0\rangle$$

となる. 一方, 式 (3.5.40) で

$$j \rightarrow s_1, s_2 = 1/2, \quad m \rightarrow m_1, m_2 = 1/2 \rightarrow +$$

と置くことにより, 式 (3.7.17) の右辺は

$$S_{1-} |+\rangle \otimes |+\rangle + |+\rangle \otimes S_{2-} |+\rangle = \hbar(|-\rangle \otimes |+\rangle + |+\rangle \otimes |-\rangle) = \hbar(|-+\rangle + |+-\rangle)$$

となる. これらを等置して式 (3.7.18), 式 (3.7.15b) を得る.

■ 「(3.7.15) の右辺に現 (わ) れる係数は, ……」で始まる段落 (p.280)  $S^2$  の  $\{|m_1, m_2\rangle\}$  を基底に用いた行列表示  $X$  は対角的でないのに対し,  $\{|s, m\rangle\}$  を基底に用いた行列表示  $X'$  は行列要素が  $\langle s'm' | S^2 | sm \rangle = s(s+1)\hbar^2 \delta_{ss'} \delta_{mm'}$  ゆえ対角的である. ここで式 (1.5.13):  $X' = U^\dagger X U$  における  $X$  と  $X'$  を結ぶユニタリー行列  $U$  の行列要素は式 (1.5.7) より  $\langle m_1 m_2 | sm \rangle$  (これは p.284 の Clebsch-Gordan 係数の表記にならえば  $\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2}; m_1 m_2 | \frac{1}{2} \frac{1}{2}; sm \rangle$ ) である. よって変換係数を求めるには  $X$  の全成分を明らかにし, これを対角化する  $U$  を具体的に求めれば良い.

■ 「この組の演算子は互いに交換する」 (p.283, 1.4.5) について  $J^2$  が  $J_z, J_1^2, J_2^2$  と交換するのを言えば十分である. このうち  $J_z$  と交換することは, 全角運動量  $\mathbf{J}$  が交換関係 (3.7.26) を満たすためその名の通り角運動量なので  $[J^2, J_k] = 0$ : (3.5.2) が成り立つことから分かる.  $J_1^2, J_2^2$  と交換することは,

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} \quad (3.7.29)$$

および  $[J_{1k}, J_1^2] = 0$  を用い

$$[J^2, J_1^2] = 2J_{2z}[J_{1z}, J_1^2] + [J_{1+}, J_1^2]J_{2-} + [J_{1-}, J_1^2]J_{2+} = 0$$

と示される.  $J^2$  の式 (3.7.29) 自体は  $J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} = 2(J_{1x}J_{2x} + J_{1y}J_{2y})$  から理解される.

■ 式 (3.7.32) の第 1 式  $[J^2, J_{1z}] \neq 0$  について  $J^2$  の式 (3.7.29) を用いると

$$[J^2, J_{1z}] = [J_{1+}, J_{1z}]J_{2-} + [J_{1-}, J_{1z}]J_{2+}$$

であり, これは

$$-\hbar(J_{1+}J_{2-} - J_{1-}J_{2+}), \quad \text{または} \quad 2i\hbar(-J_{2x}J_{1y} + J_{1x}J_{2y})$$

と表される.

■ Clebsch-Gordan 係数は直交行列を作ること 式 (3.7.41) は次のように導ける.

$$\begin{aligned}\delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'} &= \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; m_1' m_2' \rangle \quad (\because \{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\} \text{ の規格直交性}) \\ &= \sum_{j, m} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; m_1' m_2' \rangle \\ &= \sum_{j, m} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; j m \rangle \quad (\because \langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; m_1' m_2' \rangle \in \mathbf{R}).\end{aligned}$$

以上で Clebsch-Gordan 係数が直交行列を作ること を証明したことになる. 実際,  $(m_1, m_2) \rightarrow a, (j, m) \rightarrow b$ , 与えられた  $j_1, j_2$  に対する Clebsch-Gordan 係数を  $C_{ab}$ , これが作る行列を  $C$  として式 (3.7.41) を書き改めると

$$\left( \sum_b C_{ab} (C^T)_{ba'} \right) = \sum_b C_{ab} C_{a'b} = \delta_{aa'}$$

となって, これが  $C^{-1} = C^T$  を意味していることが見やすくなる ( $C^T$  は  $C$  の転置行列).

式 (3.7.42) も同様に

$$\begin{aligned}\delta_{j j'} \delta_{m m'} &= \langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; j' m' \rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j' m' \rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j' m' \rangle\end{aligned}$$

と導ける. 上の記法でこれは

$$\sum_a (C^T)_{ba} C_{ab'} = \sum_a C_{ab} C_{ab'} = \delta_{bb'}$$

であり,  $C^{-1} = C^T$  のもう一通りの表現になっていることが分かる.

■ 式 (3.7.42)  $\Rightarrow$  規格化条件 (3.7.43)

$$\begin{aligned}\text{式 (3.7.42) の根拠 } \delta_{j j'} \delta_{m m'} &= \langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; j' m' \rangle \\ \Rightarrow \text{規格化条件 } 1 &= \langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; j m \rangle\end{aligned}$$

と見ることができる. なお,

$$\begin{aligned}\text{式 (3.7.41) の根拠 } \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'} &= \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; m_1' m_2' \rangle \\ \Rightarrow \text{規格化条件 } 1 &= \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle\end{aligned}$$

も言える.

■ 漸化式 (3.7.49) の導出  $k = 1, 2$  に対して  $\sqrt{(j_k \mp m_k')(j_k \pm m_k' + 1)}$  に  $m_k' = m_k \mp 1$  を代入すると

$$\sqrt{\{j_k \mp (m_k \mp 1)\} \{j_k \pm (m_k \mp 1) + 1\}} = \sqrt{(j_k \mp m_k + 1)(j_k \pm m_k)}$$

となるので, 式 (3.7.46) 右辺において左から  $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 |$  をかけたときにゼロでない寄与をする項を具体的に書くと

$$\begin{aligned}&\sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \\ &+ \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j_1 j_2; j m \rangle\end{aligned}$$

となる. (Clebsch-Gordan 係数を実数に選んだので,  $\langle j_1 j_2; j m | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle = \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle$  である (p.286). )

■禁止される点  $(m_1, m_2)$  「 $(m_1+1, m_2)$  に対応する点は  $m_1 \leq j_1$  により禁止されるので、漸化式はここで A を B のみに関係づける」(p.289) について、漸化式 (3.7.49) における禁止される点に対応する Clebsch-Gordan 係数は

$$\langle j_1 j_2; m_1 + 1, m_2 | = 0$$

により消えると考えられる。

■ $j$  の値 (3.7.53) 整数  $l$  に対して  $m_l = -l, \dots, l$  は整数であり、 $m_s = \pm 1/2$  なので  $m = m_l + m_s$  は半整数となる。よって  $m = -j, \dots, j$  における  $j$  は半整数でなければならない。

これを踏まえて “三角不等式” (3.7.38):

$$\left| l - \frac{1}{2} \right| \leq j \leq l + \frac{1}{2}$$

を考える。  $l > 0$  のとき、これは  $l - \frac{1}{2} \leq j \leq l + \frac{1}{2}$  となり、これを満たす半整数  $j$  は

$$j = l \pm \frac{1}{2}$$

に限られる。  $l = 0$  のとき、これは  $j = \frac{1}{2}$  (半整数) になる。

■ $(m_l, m_s)$  平面 式 (3.7.51):

$$|m_l| \leq j_1, \quad |m_s| \leq j_2, \quad -j \leq m_l + m_s \leq j$$

で表される領域に含まれる点は、図 39 のように  $j = l + \frac{1}{2}$  に対しては

$$(m_l, m_s) = \left( -l, \pm \frac{1}{2} \right), \dots, \left( l, \pm \frac{1}{2} \right)$$

の  $2(2l+1)$  個あり、 $j = l - \frac{1}{2}$  に対しては右上の点  $(l, \frac{1}{2})$  と左下の点  $(-l, -\frac{1}{2})$  が除かれる。よって後で言及されているように、「 $m_l$  と  $m_s$  が共に最大値…… $j = l + \frac{1}{2}$  のときに限る」(p.292)。

■式 (3.7.55)  $m_l + m_s = m$  において  $m_s = 1/2$  を考えているので、

$$m_l = m - \frac{1}{2}$$

である。

■直交行列 (3.7.61) Clebsch-Gordan 係数が直交行列を作ることについては、既に p.286 で論じられている。

■式 (3.7.60) 第 1 式右辺第 2 項の係数  $\sin \alpha$  が正であること 「すべての  $j = l + \frac{1}{2}$  状態は……正でなければならないといえる」(p.293) について、

$$\left\langle m_l = m + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} \right| = \langle \dots |$$

と略記する。慣習に従って  $J_-$  の行列要素を正と決めると、各  $m$  の値

$$m = m_k = l + \frac{1}{2} - k, \quad (k = 1, 2, \dots)$$

に対して

$$\left\langle \dots \left| j = l + \frac{1}{2}, m_k \right. \right\rangle = \left\langle \dots \left| J_- \left| j = l + \frac{1}{2}, m_{k-1} \right. \right. \right\rangle \geq 0$$

となる。

■スピン角関数 (3.7.64) これは式 (3.7.60):

$$\left| j = l \pm \frac{1}{2}, m \right\rangle = \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left| m_l = m - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left| m_l = m + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle$$

において

$$\begin{aligned} \left| m_l = m \mp \frac{1}{2} \right\rangle &\rightarrow \left\langle \theta, \phi \left| m_l = m \mp \frac{1}{2} \right\rangle = Y_l^{m \mp 1/2}(\theta, \phi), \\ \left| m_s = \pm \frac{1}{2} \right\rangle &\rightarrow \begin{pmatrix} \langle m_s = \frac{1}{2} | m_s = \pm \frac{1}{2} \rangle \\ \langle m_s = -\frac{1}{2} | m_s = \pm \frac{1}{2} \rangle \end{pmatrix} = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \chi_+ & (m_s = 1/2 \text{ に対して}) \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_- & (m_s = -1/2 \text{ に対して}) \end{cases} \end{aligned}$$

と置き換えたものであり,

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 \text{の固有値} & l(l+1)\hbar^2, \\ \mathbf{S}^2 \text{の固有値} & \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 = \frac{3}{4} \hbar^2, \\ \mathbf{J}^2 \text{の固有値} & j(j+1)\hbar^2, \\ J_z \text{の固有値} & (m_l + m_s)\hbar = \left\{ \left( m \mp \frac{1}{2} \right) \pm \frac{1}{2} \right\} \hbar = m\hbar \end{aligned}$$

に属する固有関数である。ここから式 (3.7.65) の  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  の固有値が式 (3.7.66):

$$\frac{\hbar^2}{2} \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] = \begin{cases} \frac{l\hbar^2}{2} & \left( j = l + \frac{1}{2} \right) \\ -\frac{(l+1)\hbar^2}{2} & \left( j = l - \frac{1}{2} \right) \end{cases}$$

のように計算できることが分かる。

■式 (3.7.72) の導出 Clebsch-Gordan 級数 (3.7.69) において

$$j_1 \rightarrow l_1, \quad j_2 \rightarrow l_2, \quad m_1' \rightarrow 0, \quad m_2' \rightarrow 0, \quad (\text{したがって } m' \rightarrow 0)$$

とすると

$$\mathcal{D}_{m_1 0}^{(l_1)}(R) \mathcal{D}_{m_2 0}^{(l_2)}(R) = \sum_{l, m} \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; l m \rangle \langle l_1 l_2; 0 0 | l_1 l_2; l 0 \rangle \mathcal{D}_{m 0}^{(l)}(R)$$

となる。ここに  $\mathcal{D}_{m 0}^{(l)}$  と  $Y_l^{m*}$  の関係 (3.6.52) を代入し、和をとられる添字を  $l \rightarrow l', m \rightarrow m'$  と改めると

$$\sqrt{\frac{4\pi}{2l_1+1}} \sqrt{\frac{4\pi}{2l_2+1}} Y_{l_1}^{m_1*}(\theta, \phi) Y_{l_2}^{m_2*}(\theta, \phi) = \sum_{l', m'} \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; l' m' \rangle \langle l_1 l_2; 0 0 | l_1 l_2; l' 0 \rangle \sqrt{\frac{4\pi}{2l'+1}} Y_{l'}^{m'*}(\theta, \phi)$$

を得る。各 Clebsch-Gordan 係数が実数であること (p.286) に注意して両辺の複素共役をとると式 (3.7.72) を得る。

■式 (3.7.73) の導出 式 (3.7.72) の右辺に  $Y_l^{m*}(\theta, \phi)$  をかけて全立体角で積分すると

$$\sum_{l', m'} \sqrt{\frac{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)}{4\pi(2l' + 1)}} \langle l_1 l_2; 00 | l_1 l_2; l' 0 \rangle \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; l' m' \rangle \int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi)$$

となる。ここで球面調和関数の直交性 (3.6.70):

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

を用いて  $l', m'$  に関する和をとると式 (3.7.73) 右辺を得る。

### 3.8 角運動量を表 (わ) すシュウィンガーの振動子モデル

結合していない振動子と角運動量 (pp.297-303)

Schwinger の振動子モデルについて述べる。2つの調和振動子を考え、それぞれをプラス型とマイナス型と呼ぶ。すなわち各々の振動子に対して

$$\text{消滅演算子 } a_{\pm}, \quad \text{生成演算子 } a_{\pm}^{\dagger}, \quad \text{個数演算子 } N_{\pm} = a_{\pm}^{\dagger} a_{\pm}$$

が定義され、これは調和振動子の交換関係

$$[a_{\pm}, a_{\pm}^{\dagger}] = 1$$

を満たす (複号同順, 以下同じ)。また、2つの振動子は結合していないものとし、異なる型の振動子に関する演算子は交換すると仮定する。このとき  $N_+$  と  $N_-$  は交換し、その同時固有ケット

$$|n_+, n_-\rangle = \frac{(a_+^{\dagger})^{n_+} (a_-^{\dagger})^{n_-}}{\sqrt{n_+! n_-!}} |0, 0\rangle \quad (3.8.7)$$

が作られる (導出は下記)。

ここで

$$J_{\pm} \equiv \hbar a_{\pm}^{\dagger} a_{\mp}, \quad J_z \equiv \frac{\hbar}{2} (N_+ - N_-)$$

を定義する。すると

$$J_z |n_+, n_-\rangle = \frac{\hbar}{2} (n_+ - n_-) |n_+, n_-\rangle$$

より

- 上向きスピンを持つスピン 1/2 の粒子の個数を  $n_+$
- 下向きスピンを持つスピン 1/2 の粒子の個数を  $n_-$

と解釈できる。また、

$$J_{\pm} |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_{\mp}(n_{\pm} + 1)} \hbar |n_+ \pm 1, n_{\mp} \mp 1\rangle \quad (3.8.13a,b)$$

(導出は下記) より  $J_{\pm}$  はスピン 1/2 の下向き (上向き) 粒子を 1 個壊し、スピン 1/2 の上向き (下向き) 粒子を 1 個作る。

このような描像は、実際に  $J_{\pm}, J_z$  が角運動量の交換関係

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}, \quad [J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (3.8.9)$$

を満たすことから正当化される [導出は本稿次節].

詳しく述べると, 角運動量の状態が  $j$  と  $m$  で表される任意の対象は, 回転における変換の性質に関する限り,

- $n_+ = j + m$  個のスピン  $1/2$  の上向き粒子
- $n_- = j - m$  個のスピン  $1/2$  の下向き粒子

の複合系と見なして良い. その証拠として, 上式 (3.8.13a,b) は  $n_{\pm} \rightarrow j \pm m$  とおくと, はしご演算子の式 (114) を完全に再現する [本稿次節で補足]. また  $N \equiv N_+ + N_-$  を定義すると

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 &\equiv J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) \\ &= \frac{\hbar^2}{2}N \left( \frac{N}{2} + 1 \right) \end{aligned} \quad (3.8.12)$$

であり [導出は本稿次節], その固有値は同じ置き換えで

$$\frac{\hbar^2}{2}(n_+ + n_-) \left[ \frac{(n_+ + n_-)}{2} + 1 \right] \rightarrow \hbar^2 j(j+1)$$

となる [角運動量の自乗の固有値 (3.5.31) に一致].

なお, 固有状態 (3.8.7) はこの置き換え  $j \equiv \frac{n_+ + n_-}{2}, m \equiv \frac{n_+ - n_-}{2}$  により

$$|j, m\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{j+m} (a_-^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} |0\rangle \quad (3.8.18)$$

と書き換えられる ( $|0\rangle \equiv |0, 0\rangle$ ).

- 角運動量の合成の場合とは異なり Schwinger の振動子モデルでは,  $n_+ + n_- = 2j$  個の単純なスピン  $1/2$  から作られる複合系の状態は, たった 1 つの角運動量の値  $j$  を持つ.
- アイソスピンの形式論との対応

$$\begin{aligned} J_+ &\leftrightarrow \text{アイソスピンのはしご演算子 } T_+, \\ J_z &\leftrightarrow \text{核内の陽子と中性子の数の差を数え上げる } T_z. \end{aligned}$$

回転行列に関する具体的な公式 (pp.303–306)

Euler 角の記法で非自明な,  $y$  軸周りの角度  $\beta$  の回転 [3.6 節参照] を考える ( $\mathcal{D}(R) = e^{-iJ_y\beta/\hbar}$ ). 振動子の演算子から構成した  $J_{\pm}$  (したがって  $J_y$ ) を用いて回転後の状態  $\mathcal{D}(R) |j, m\rangle$  を計算すると

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(R) |j, m\rangle &= \sum_k \sum_l \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}{(j+m-k)!k!(j-m-l)!} \\ &\times \left( a_+^\dagger \cos \frac{\beta}{2} \right)^{j+m-k} \left( a_-^\dagger \sin \frac{\beta}{2} \right)^k \left( -a_+^\dagger \sin \frac{\beta}{2} \right)^{j-m-l} \left( a_-^\dagger \cos \frac{\beta}{2} \right)^l |0\rangle \end{aligned} \quad (3.8.29)$$

となる (導出は下記). これが

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(R) |j, m\rangle &= \sum_{m'} |j, m'\rangle d_{m'm}^{(j)}(\beta) \quad (\because \text{式 (3.5.49), 式 (3.5.51)}) \\ &= \sum_{m'} d_{m'm}^{(j)}(\beta) \frac{(a_+^\dagger)^{j+m'} (a_-^\dagger)^{j-m'}}{\sqrt{(j+m')!(j-m')!}} |0\rangle \quad (\because \text{式 (3.8.18)}) \end{aligned} \quad (3.8.30)$$



に一致することを要求して, Wigner の公式

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = \sum_k (-1)^{k-m+m'} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j+m-k)!k!(j-k-m')!(k-m+m')!} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{2k-m+m'} \quad (3.8.33)$$

を得る [本稿次節で補足]. 上式で  $k$  についての和は, 分母中の階乗の変数が 1 つも負にならない範囲でとる.

### 3.8 節, 式の導出など

■式 (3.8.7), 式 (3.8.13a,b) の導出 いずれも調和振動子の性質

$$\begin{aligned} a_+^\dagger |n_+, n_-\rangle &= \sqrt{n_+ + 1} |n_+ + 1, n_-\rangle, \\ a_-^\dagger |n_+, n_-\rangle &= \sqrt{n_- + 1} |n_+, n_- + 1\rangle, \\ a_+ |n_+, n_-\rangle &= \sqrt{n_+} |n_+ - 1, n_-\rangle, \\ a_- |n_+, n_-\rangle &= \sqrt{n_-} |n_+, n_- - 1\rangle \end{aligned}$$

による.

■式 (3.8.29) の導出 式 (3.8.18) の状態  $|j, m\rangle$  に回転演算子  $\mathcal{D}(R) = e^{-iJ_y\beta/\hbar}$  を作用させると,

$$\mathcal{D}(R) |j, m\rangle = \frac{[\mathcal{D}(R)a_+^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R)]^{j+m} [\mathcal{D}(R)a_-^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R)]^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} \mathcal{D}(R) |0\rangle \quad (3.8.21)$$

となる [本稿次節で補足]. ベーカー・ハウズドルフの補助定理を用いて右辺の因子を評価すると,

$$\mathcal{D}(R)a_+^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R) = a_+^\dagger \cos \frac{\beta}{2} + a_-^\dagger \sin \frac{\beta}{2}, \quad (3.8.25)$$

$$\mathcal{D}(R)a_-^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R) = a_-^\dagger \cos \frac{\beta}{2} - a_+^\dagger \sin \frac{\beta}{2} \quad (3.8.26)$$

を得る [本稿次節で補足].

結果の吟味 このとき特に

$$a_+^\dagger |0\rangle \rightarrow \cos \left(\frac{\beta}{2}\right) a_+^\dagger |0\rangle + \sin \left(\frac{\beta}{2}\right) a_-^\dagger |0\rangle \quad (3.8.27)$$

となる. これは基本となるスピン上向き状態  $a_+^\dagger |0\rangle$  の  $y$  軸周りの回転として自然な結果である [本稿次節で補足].

上式 (3.8.25), (3.8.26) を式 (3.8.21) に戻して二項定理

$$(x+y)^N = \sum_k \frac{N!x^{N-k}y^k}{(N-k)!k!} \quad (3.8.28)$$

を用いると, 式 (3.8.29):

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(R) |j, m\rangle &= \sum_k \sum_l \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}{(j+m-k)!k!(j-m-l)!l!} \\ &\times \left(a_+^\dagger \cos \frac{\beta}{2}\right)^{j+m-k} \left(a_-^\dagger \sin \frac{\beta}{2}\right)^k \left(-a_+^\dagger \sin \frac{\beta}{2}\right)^{j-m-l} \left(a_-^\dagger \cos \frac{\beta}{2}\right)^l |0\rangle \end{aligned}$$

が得られる [本稿次節で補足].

### 3.8 について

■異なる型の振動子に関する演算子の交換関係 (3.8.3) 式 (3.8.3) の他に

$$[a_+, a_-] = 0, \quad [a_+^\dagger, a_-^\dagger] = 0$$

も仮定されているものと見て良い。このときはじめて

$$\begin{aligned} [N_+, N_-] &= a_+^\dagger a_-^\dagger [a_+, a_-] + a_+^\dagger [a_+, a_-^\dagger] a_- + a_-^\dagger [a_+, a_-^\dagger] a_+ + [a_+^\dagger, a_-^\dagger] a_- a_+ \\ &= 0 \end{aligned}$$

となり、 $N_+$  と  $N_-$  は交換すること (p.298) などが言える。

■交換関係 (3.8.9) の確認

$$\begin{aligned} [J_z, J_+] &= \frac{\hbar^2}{2} ([N_+, a_+^\dagger a_-] - [N_-, a_+^\dagger a_-]) \\ &= \frac{\hbar^2}{2} (a_+^\dagger [N_+, a_-] + [N_+, a_+^\dagger] a_- - a_+^\dagger [N_-, a_-] - [N_-, a_+^\dagger] a_-) \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \{0 + a_+^\dagger a_- - a_+^\dagger (-a_-) - 0\} \\ &= \hbar^2 a_+^\dagger a_- \\ &= \hbar J_+, \\ [J_z, J_-] &= \frac{\hbar^2}{2} ([N_+, a_-^\dagger a_+] - [N_-, a_-^\dagger a_+]) \\ &= \frac{\hbar^2}{2} (a_-^\dagger [N_+, a_+] + [N_+, a_-^\dagger] a_+ - a_-^\dagger [N_-, a_+] - [N_-, a_-^\dagger] a_+) \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \{a_-^\dagger (-a_+) + 0 - 0 - a_-^\dagger a_+\} \\ &= -\hbar^2 a_-^\dagger a_+ \\ &= -\hbar J_-, \\ [J_+, J_-] &= \hbar^2 [a_+^\dagger a_-, a_-^\dagger a_+] \\ &= \hbar^2 (a_+^\dagger [a_-, a_-^\dagger] a_+ + a_-^\dagger [a_+^\dagger, a_+] a_-) \\ &= \hbar^2 (a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-) \\ &= J_z. \end{aligned}$$

- 式 (3.8.9a):  $[J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm$  は角運動量の交換関係 (3.5.6b)
- 式 (3.8.9b):  $[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$  は角運動量の交換関係 (3.5.6a)

である。

■ $J^2$  の式 (3.8.12) の確認  $N_+$  と  $N_-$  が交換するため

$$(N_+ \pm N_-)^2 = N_+^2 \pm 2N_+N_- + N_-^2$$

であることに注意すると

$$J_z^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (N^2 - 4N_+N_-) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{N^2}{2} - 2a_+^\dagger a_+ a_-^\dagger a_-\right)$$

となる。また

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}J_+J_- &= \frac{\hbar^2}{2}a_+^\dagger a_- a_+^\dagger a_+ = \frac{\hbar^2}{2}a_+^\dagger a_+ a_- a_+^\dagger = \frac{\hbar^2}{2}a_+^\dagger a_+ (a_-^\dagger a_- + 1), \\ \frac{1}{2}J_-J_+ &= \frac{\hbar^2}{2}a_-^\dagger a_+ a_+^\dagger a_- = \frac{\hbar^2}{2}a_+ a_+^\dagger a_-^\dagger a_- = \frac{\hbar^2}{2}(a_+^\dagger a_+ + 1)a_-^\dagger a_-\end{aligned}$$

なので

$$\mathbf{J}^2 \equiv J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{N^2}{2} + a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_- \right) = \frac{\hbar^2}{2} N \left( \frac{N}{2} + 1 \right) : (3.8.12)$$

を得る。

■ 「(3.8.13a), ……は, …… $J_\pm, J_z$  に対するよく知られた表式に変形されること」 (p.300) について 式 (3.8.13a,b) において平方根の因子を書き換え式 (3.8.15):

$$\sqrt{n_\mp(n_\pm + 1)} \rightarrow \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}$$

に加えて, 式 (3.8.14): $n_\pm \rightarrow j \pm m$  を  $j, m$  について逆に解いた式 (3.8.17):

$$j \equiv \frac{n_+ + n_-}{2}, \quad m \equiv \frac{n_+ - n_-}{2}$$

に注意して

$$|n_+, n_-\rangle \rightarrow |j, m\rangle, \quad |n_+ \pm 1, n_- \mp 1\rangle \rightarrow |j, m \pm 1\rangle$$

と書き換えると, 完全に式 (3.5.39), 式 (3.5.40):

$$J_\pm |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar |j, m \pm 1\rangle$$

に一致する。

■ 「振動子の行列要素と角運動量の行列要素との関連をみること」 (p.301) について この後で行う Wigner の公式 (3.8.33) の導出 (pp.303-306) がこれに当たると考えられる。

■ 「自明ではないただ一つの回転は  $y$  軸の回りの第 2 の回転である」 (p.303) について 式 (3.5.50):

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-(m'\alpha + m\gamma)} \left\langle j, m' \left| \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) \right| j, m \right\rangle$$

を見よ。

■  $J_y$  の定義 式 (3.8.20) における  $J_y$  は

$$J_y = \frac{J_+ - J_-}{2i} = \frac{\hbar}{2i}(a_+^\dagger a_- - a_-^\dagger a_+)$$

によって定義されているものと見る。このとき

- $J_y$  は Hermite となっており, ここから回転演算子のユニタリー性

$$\mathcal{D}^{-1}(R) = e^{+iJ_y\beta/\hbar}$$

が保証される。

- 式 (3.8.24) にあるように  $J_y$  と  $a_\pm^\dagger$  は交換しないため, 式 (3.8.21), 式 (3.8.22) において

$$\mathcal{D}(R)a_\pm^\dagger\mathcal{D}^{-1}(R) \neq a_\pm^\dagger$$

である。

■式 (3.8.21) の確認

$$[\mathcal{D}(R)a_+^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R)]^{j+m} = \mathcal{D}(R)(a_+^\dagger)^{j+m} \mathcal{D}^{-1}(R), \quad [\mathcal{D}(R)a_-^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R)]^{j-m} = \mathcal{D}(R)(a_-^\dagger)^{j-m} \mathcal{D}^{-1}(R)$$

なので,

$$\begin{aligned} \text{(式 (3.8.21) 右辺)} &= \frac{[\mathcal{D}(R)(a_+^\dagger)^{j+m} \mathcal{D}^{-1}(R)] [\mathcal{D}(R)(a_-^\dagger)^{j-m} \mathcal{D}^{-1}(R)]}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} \mathcal{D}(R)|0\rangle \\ &= \mathcal{D}(R) \frac{(a_+^\dagger)^{j+m} (a_-^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} |0\rangle \\ &= \mathcal{D}(R) |j, m\rangle. \end{aligned}$$

■式 (3.8.25) の導出 ベーカー・ハウドルフの補助定理 (2.3.47) において

$$\left[ \frac{-J_y}{\hbar}, a_\pm^\dagger \right] = \frac{1}{2i} [a_-^\dagger a_+ - a_+^\dagger a_-, a_\pm^\dagger] = \pm \frac{1}{2i} a_\mp^\dagger [a_\pm, a_\pm^\dagger] = \pm \frac{1}{2i} a_\mp^\dagger$$

を繰り返し用いると

$$\begin{aligned} &e^{-iJ_y\beta/\hbar} a_+^\dagger e^{iJ_y\beta/\hbar} \\ &= a_+^\dagger + i\beta \left( \frac{1}{2i} a_-^\dagger \right) + \frac{(i\beta)^2}{2!} \left\{ - \left( \frac{1}{2i} \right)^2 a_+^\dagger \right\} + \frac{(i\beta)^3}{3!} \left\{ - \left( \frac{1}{2i} \right)^3 a_-^\dagger \right\} + \frac{(i\beta)^4}{4!} \left( \frac{1}{2i} \right)^4 a_+^\dagger + \dots \\ &= a_+^\dagger \left\{ 1 - \frac{1}{2!} \left( \frac{\beta}{2} \right)^2 + \frac{1}{4!} \left( \frac{\beta}{2} \right)^4 - \dots \right\} + a_-^\dagger \left\{ \frac{\beta}{2} - \frac{1}{3!} \left( \frac{\beta}{2} \right)^3 + \dots \right\} \\ &= a_+^\dagger \cos \frac{\beta}{2} + a_-^\dagger \sin \frac{\beta}{2} : (3.8.25) \end{aligned}$$

を得る. 式 (3.8.26) も同様に得られる.

■上向きスピンを  $y$  軸周りに回転した状態 (3.8.27) 式 (3.5.49):

$$\mathcal{D}(R) |j, m\rangle = \sum_{m'} |j, m'\rangle \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$$

に注意すると, 式 (3.8.27) における係数  $\cos \frac{\beta}{2}, \sin \frac{\beta}{2}$  は,  $d^{(1/2)}(\beta)$  の式 (3.5.52) の 1 列目の成分として理解できる.

■式 (3.8.29) 導出の最後のステップについて 二項定理 (3.8.28) は  $x$  と  $y$  が交換するとき成り立つ関係である. 式 (3.8.29) では  $a_+^\dagger$  と  $a_-^\dagger$  が交換することに注意してこれを適用し,

$$\begin{aligned} (\mathcal{D}(R)a_+^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R))^{j+m} &= \left( a_+^\dagger \cos \frac{\beta}{2} + a_-^\dagger \sin \frac{\beta}{2} \right)^{j+m} = \sum_k \frac{(j+m)! \left( a_+^\dagger \cos \frac{\beta}{2} \right)^{j+m-k} \left( a_-^\dagger \sin \frac{\beta}{2} \right)^k}{(j+m-k)!k!}, \\ (\mathcal{D}(R)a_-^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R))^{j-m} &= \left( a_-^\dagger \cos \frac{\beta}{2} - a_+^\dagger \sin \frac{\beta}{2} \right)^{j-m} = \sum_l \frac{(j-m)! \left( a_-^\dagger \cos \frac{\beta}{2} \right)^{j-m-l} \left( -a_+^\dagger \sin \frac{\beta}{2} \right)^l}{(j-m-l)!l!} \end{aligned}$$

としている.

■Wigner の公式 (3.8.33) の導出について 式 (3.8.29) における  $l$  についての和を, 式 (3.8.31):  $l = j - k - m'$  を満たす  $m'$  に関する和に制限すると

$$\sum_k \sum_{m'} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}{(j+m-k)!k!(k-m+m')!(j-k-m')!} (a_+^\dagger)^{j+m'} (a_-^\dagger)^{j-m'} \\ \times (-1)^{k-m+m'} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{2k-m+m'} |0\rangle$$

となる. ここに現れた  $\cos \frac{\beta}{2}, \sin \frac{\beta}{2}, -1$  のベキが式 (3.8.32a-c) に他ならない. これを式 (3.8.30) の最右辺

$$\sum_{m'} d_{m'm}^{(j)}(\beta) \frac{(a_+^\dagger)^{j+m'} (a_-^\dagger)^{j-m'}}{\sqrt{(j+m')!(j-m')!}} |0\rangle$$

と等置して,  $d_{m'm}^{(j)}(\beta)$  に対する Wigner の公式 (3.8.33):

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = \sum_k (-1)^{k-m+m'} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j+m-k)!k!(j-k-m')!(k-m+m')!} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{2k-m+m'}$$

を得る.

### 3.9 スピン相関の測定とベルの不等式

スピン 1 重項状態での相関 (pp.306-310)

低い運動エネルギーでの陽子-陽子散乱において 2 粒子は, 軌道角運動量が 0 であり,

$$|\text{スピン 1 重項}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{z}+; \hat{z}-\rangle - |\hat{z}-; \hat{z}+\rangle)$$

(式 (3.7.15) を参照) となっていなければならない (第 6 章の Pauli の原理による). ここで観測者 A が粒子 1 の  $S_z$  を観測したとすると  $|\hat{z}+; \hat{z}-\rangle$  が選び出されるから, 遠方で粒子 2 の  $S_z$  を測定する観測者 B は必ず  $S_z-$  を得る. ここで A は粒子 1 だけを測定しているように見えるが, 2 粒子の系全体を測定していると考えなければならない.

$$|\text{スピン 1 重項}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{x}-; \hat{x}+\rangle - |\hat{x}+; \hat{x}-\rangle)$$

とも書けるので\*52, [スピン 1 重項状態での等方性から期待されるように,] A, B が  $S_x$  を観測しても同じことが言える. そして A が  $S_x+$  を得た場合, B が  $S_z\pm$  を得る確率は  $1/2$  ずつとなる. よって系を  $S_z+$  と  $S_z-$  が 1 つずつ入っている壺のように考えることは, 単純に過ぎる.

アインシュタインの局所原理とベルの不等式/量子力学とベルの不等式 (pp.310-317)

■要旨 粒子の遠隔相互作用を仮定せず局所性の保証されたモデルを用いると, 2 粒子のスピンをある組合せに見出す確率に対する Bell の不等式へと導かれる (後述). 一方, 量子力学の予言は Bell の不等式と両立しな

\*52 書き換えには

$$|\hat{x}\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{z}+\rangle \pm |\hat{z}-\rangle), \quad |\hat{z}\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{x}+\rangle \pm |\hat{x}-\rangle)$$

を用いる.

いことが示される (後述). 実験結果は Bell の不等式を破っており, 非局所性を容認する量子力学を支持するものである.

ただし 2 粒子の相関を利用して, 光速度を超えて送ることができるのはランダムな情報だけであり, 意味のあるメッセージを送ることはできない.

■局所原理と Bell の不等式 (pp.310–314) 粒子の遠隔相互作用を仮定せず局所性の保証されたモデルに E.P.Wigner のモデルがあり, これは以下のように Bell の不等式へと導く. このモデルでは 3 つの単位ベクトル  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$  の方向に関するスピン  $\mathbf{S}$  の成分を測定すると必ず決まった符号, 例えば

$$S_a \equiv \mathbf{S} \cdot \hat{a} > 0, \quad S_b \equiv \mathbf{S} \cdot \hat{b} < 0, \quad S_c \equiv \mathbf{S} \cdot \hat{c} > 0$$

が得られるような粒子を考える. そしてこのような粒子を  $(a+, b-, c+)$  型と呼ぶ. このとき全角運動量はゼロなので, もう 1 つの粒子は  $(\hat{a}-, \hat{b}+, \hat{c}-)$  型に属する. 粒子 1 の測定によらず粒子 2 の  $\mathbf{S} \cdot \hat{a}$  はあらかじめ決まっているから Einstein の局所原理は満たされている. ただしこのモデルにおいてもスピンの各方向成分の値を同時に確定できるとは考えておらず, あくまで測定するのは  $S_a, S_b, S_c$  のうちの 1 成分のみである. また, 各方向  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$  が互いに直交している必要はない.

さて, 粒子 1 のスピンの第  $i$  成分  $S^1_i$  の測定結果から, 粒子 2 のスピンの第  $i$  成分  $S^2_i$  の符号が

$$\begin{aligned} S^1_i > 0 \text{ を測定} &\rightarrow S^2_i < 0, \\ S^1_i < 0 \text{ を測定} &\rightarrow S^2_i > 0 \end{aligned}$$

と決まることをこのモデルで再現するためには, 粒子 1 と粒子 2 の種類が表 4 に挙げた組合せのいずれかにならなければならない. 各組合せの粒子対が全粒子対に占める割合を表 4 のように  $P_1, P_2, \dots$  とする. このとき

- 粒子 1 のスピンの  $\hat{a}$  方向成分を  $S^1_a > 0$  に見出し,  
かつ粒子 2 のスピンの  $\hat{b}$  方向成分を  $S^2_b > 0$  に見出す確率は  $P(a+; b+) = P_3 + P_4$
- 粒子 1 のスピンの  $\hat{a}$  方向成分を  $S^1_a > 0$  に見出し,  
かつ粒子 2 のスピンの  $\hat{c}$  方向成分を  $S^2_c > 0$  に見出す確率は  $P(a+; c+) = P_2 + P_4$
- 粒子 1 のスピンの  $\hat{c}$  方向成分を  $S^1_c > 0$  に見出し,  
かつ粒子 2 のスピンの  $\hat{b}$  方向成分を  $S^2_b > 0$  に見出す確率は  $P(c+; b+) = P_3 + P_7$

となるので,  $P_i \geq 0$  から導かれる自明な不等式

$$P_3 + P_4 \leq (P_2 + P_4) + (P_3 + P_7)$$

は Bell の不等式と呼ばれる次の関係

$$P(a+; b+) \leq P(a+; c+) + P(c+; b+) \tag{141}$$

を与える.

■量子力学と Bell の不等式 (pp.314–317) 量子力学を用いて Bell の不等式 (141) の各項を評価しよう.  $\hat{a}$  と  $\hat{b}$ ,  $\hat{b}$  と  $\hat{c}$ ,  $\hat{c}$  と  $\hat{a}$  の成す角をそれぞれ  $\theta_{ab}, \theta_{bc}, \theta_{ca}$  とおくと

$$P(a+, b+) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_{ab}}{2}, \quad P(a+, c+) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_{ca}}{2}, \quad P(c+, b+) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_{bc}}{2}$$

表4 「量子力学に代わる理論」でのスピン成分の組合せ

粒子 1	粒子 2	粒子対の割合
$(a+, b+, c+)$	$(a-, b-, c-)$	$P_1$
$(a+, b+, c-)$	$(a-, b-, c+)$	$P_2$
$(a+, b-, c+)$	$(a-, b+, c-)$	$P_3$
$(a+, b-, c-)$	$(a-, b+, c+)$	$P_4$
$(a-, b+, c+)$	$(a+, b-, c-)$	$P_5$
$(a-, b+, c-)$	$(a+, b-, c+)$	$P_6$
$(a-, b-, c+)$	$(a+, b+, c-)$	$P_7$
$(a-, b-, c-)$	$(a+, b+, c+)$	$P_8$

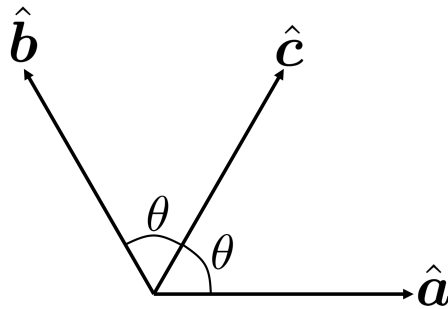


図40 角  $\theta_{ab}$  を  $\hat{c}$  が2等分するように  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$  を同一面内にとる

となるので [本稿次節における式 (3.9.10) の補足を参照], Bell の不等式 (141) は幾何学的な条件

$$\sin^2 \frac{\theta_{ab}}{2} \leq \sin^2 \frac{\theta_{ca}}{2} + \sin^2 \frac{\theta_{bc}}{2}$$

を与える. ところがこれは常には成り立たない. 実際, 図40のように  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$  を同一面内に

$$\theta_{bc} = \theta_{ca} \equiv \theta, \quad \theta_{ab} = 2\theta, \quad 0 < \theta < \frac{\pi}{2}$$

となるようにとった場合, これは

$$\sin^2 \theta \leq 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \Leftrightarrow \cos \frac{\theta}{2} \leq \frac{1}{\sqrt{2}}$$

となり, この結果は  $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$  に反している.

### 3.9 について

■B が  $S_x$  土を得る確率 「もし A が粒子 1 の  $S_z$  を正と決めたなら, 明らかに B が  $S_x+$  か  $S_x-$  かを得る割合は 50 対 50 である」 (p.308 一番下~p.309, 1.1) ことを計算で見るには次のようにすれば良い. A が測定に

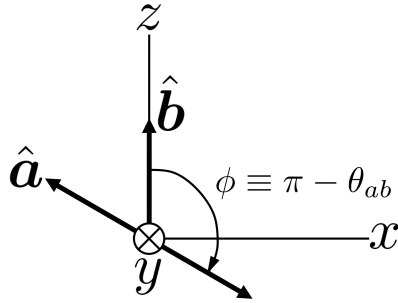


図 41 方向単位ベクトル  $\hat{a}, \hat{b}$  と  $xyz$  直交座標系

より選び出す状態は

$$|\hat{z}+; \hat{z}-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{x}+\rangle + |\hat{x}-\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{x}+\rangle - |\hat{x}-\rangle)$$

である。B が粒子 2 を測定して  $S_{x+}$  と  $S_{x-}$  を得る確率の振幅は、 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{x}+\rangle - |\hat{x}-\rangle)$  に左から  $\langle \hat{x}+|, \langle \hat{x}-|$  をかけることによりそれぞれ  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  である。

■  $|\hat{a}-\rangle \rightarrow |\hat{b}+\rangle$  と遷移する確率 (3.9.10)  $P(a+, b+)$  について、粒子 1 のスピンの  $\hat{a}$  方向成分  $S_a^1$  を測定したとき  $S_a^1 > 0$  を得る確率は  $1/2$  であり、このとき粒子 2 のスピンの  $-\hat{a}$  方向を向く状態  $|\alpha'\rangle$  が選び出される。さらに粒子 2 のスピンの  $\hat{b}$  方向成分  $S_b^2$  を測定して  $S_b^2 > 0$  を得る確率を求めよう。

まず図 41 のように、2 つのベクトル  $\hat{a}, \hat{b}$  が  $zx$  面内に含まれ  $\hat{b}$  が  $z$  軸正の向きを向くように座標軸を設定する。粒子 2 のスピンの  $\hat{b}$  方向を向く状態  $|\alpha\rangle$  にある系を  $y$  軸周りに角度  $\phi \equiv \pi - \theta_{ab}$  だけ回転すると状態  $|\alpha'\rangle$  が得られることに注目する。状態  $|\alpha\rangle$  に対応する 2 成分スピノルは

$$\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

である。今考えている方向単位ベクトル  $\mathbf{n} = \hat{y}$  周りの回転に対して、行列  $e^{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi/2}$  の式 (3.2.45) は

$$\exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & -\sin \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}$$

であり (これは回転角  $\phi$  ではなく回転角  $\phi/2$  の回転行列である)、これを用いて状態  $|\alpha'\rangle$  に対応する 2 成分スピノルは式 (3.2.46):

$$\chi' = \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\phi}{2}\right) \chi = \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}$$

と表される。この第 1 成分  $\cos \frac{\phi}{2}$  が確率振幅  $\langle \alpha|\alpha'\rangle$  なので、求める確率は

$$\cos^2 \frac{\phi}{2} = \cos^2 \left(\frac{\pi - \theta_{ab}}{2}\right) = \sin^2 \frac{\theta_{ab}}{2} : (3.9.10)$$

である。



### 3.10 テンソル演算子

ベクトル演算子 (pp.318–320)

ベクトル演算子  $\mathbf{V}$  を, その任意の状態  $|\alpha\rangle$  に関する期待値  $\langle V_i \rangle = \langle \alpha | V_i | \alpha \rangle$  が古典的ベクトルの定義と同じ変換則に従うものとして定義する. すなわち,

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R) |\alpha\rangle \Rightarrow \langle V_i \rangle \rightarrow \sum_j R_{ij} \langle V_j \rangle, \quad (3.10.2)$$

あるいはこれが無限小回転に対して成り立つための条件

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R) |\alpha\rangle \Rightarrow [V_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} V_k \quad (3.10.8)$$

(導出は下記) でベクトル演算子  $\mathbf{V}$  を定義する.

- $\mathbf{x}, \mathbf{p}$  がベクトル演算子であること

$$[x_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k, \quad [p_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} p_k$$

は, 正準交換関係により満たされている [本稿次節で確認].

- $\mathbf{J}$  がベクトル演算子であること

$$[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k$$

は, 角運動量の基本的交換関係により満たされている.

直交テンソルと既約テンソル (pp.320–323)

以上の議論をテンソルに対して一般化しよう.

- 直交テンソル  $T_{ijk\dots}$  (変換則  $T_{ijk\dots} \rightarrow \sum_{i',j',k',\dots} R_{ii'} R_{jj'} R_{kk'} \dots T_{i'j'k'\dots}$  で定義)  
 → 回転の際, 異なる変換をする部分に分解することができる (可約)  
 (例) 2つのベクトル  $U_i, V_i$  に対して

$$\underbrace{U_i V_j}_{2 \text{ 階テンソル}} = \underbrace{\frac{\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}}{3} \delta_{ij}}_{\text{スカラー}} + \underbrace{\frac{U_i V_j - U_j V_i}{2}}_{\text{反対称テンソル } \varepsilon_{ijk} (\mathbf{U} \times \mathbf{V})_k} + \underbrace{\left( \frac{U_i V_j + U_j V_i}{2} - \frac{\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}}{3} \delta_{ij} \right)}_{\text{対称トレースレステンソル}}. \quad (3.10.13)$$

[本稿次節で補足.]

- 球面テンソル (球面調和関数  $Y_l^m(\mathbf{n})$  のように変換するテンソル)  
 → 回転の際, 異なる変換をする部分に分解することができない (既約)

そこで球面テンソルを考える.  $|\mathbf{n}\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R) |\mathbf{n}\rangle$  において球面調和関数のように振舞う演算子  $Y_l^m(\mathbf{n})$  の変換則

$$Y_l^m(\mathbf{n}) \rightarrow \mathcal{D}^\dagger(R) Y_l^m(\mathbf{n}) \mathcal{D}(R) = \sum_{m'} \mathcal{D}_{mm'}^{(l)*}(R) Y_l^{m'} \quad (3.10.21)$$

(導出は下記) と同じ変換則

$$\mathcal{D}^\dagger(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}(R) = \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{qq'}^{(k)*}(R) T_{q'}^{(k)} \quad (3.10.22a)$$

あるいは  $(k, q$  がそれぞれ  $\mathbf{J}^2, J_z$  の固有値という条件の下で) ここから要求される交換関係

$$[J_z, T_q^{(k)}] = \hbar q T_q^{(k)}, \quad (3.10.25a)$$

$$[J_{\pm}, T_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q \pm 1}^{(k)} \quad (3.10.25b)$$

(導出は下記) で球面テンソル演算子  $T_q^{(k)}$  が定義される.

テンソル積 (pp.324–326)

定理 既約球面テンソル  $X_{q_1}^{(k_1)}, Z_{q_2}^{(k_2)}$  から球面 (既約) テンソル

$$T_q^{(k)} = \sum_{q_1, q_2} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k q \rangle X_{q_1}^{(k_1)} Z_{q_2}^{(k_2)} \quad (3.10.27)$$

が作られる.

(上式 (3.10.27) の  $T_q^{(k)}$  が球面テンソルとなっていることの証明は下記にて行う.) 2つのテンソルからテンソル積を作り上げる仕方は, 置き換え  $k_{1,2} \rightarrow j_{1,2}, q_{1,2} \rightarrow m_{1,2}$  を念頭に置くと角運動量の合成と完全に類似している. [式 (3.7.33):  $|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1, j_2; j, m\rangle$  と比較すればよい.]

テンソル演算子の行列要素: ウィグナー・エッカルトの定理 (pp.326–331)

テンソル演算子  $T_q^{(k)}$  の角運動量固有状態に関する行列要素  $\langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle$  は

$$\langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle = \langle j k; m q | j k; j' m' \rangle \frac{\langle \alpha' j' || T^{(k)} || \alpha j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \quad (3.10.31)$$

という形をとる (Wigner-Eckart の定理, 証明は下記).

- $\langle j k; m q | j k; j' m' \rangle$  は Clebsch-Gordan 係数であり,  $m$  や  $m', q$  (幾何学的関係) のみに依り, テンソル演算子  $T_q^{(k)}$  の固有の性質には依らない.
  - Clebsch-Gordan 係数に対する  $m$ -選択則と三角関係式  $|j - k| \leq j' \leq j + k$ 
    - テンソル演算子の行列要素に対する  $m$ -選択則

$$\langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle = 0, \quad (m' \neq q + m)$$

と三角関係式  $|j - k| \leq j' \leq j + k$ .

- 二重線の行列要素  $\langle \alpha' j' || T^{(k)} || \alpha j \rangle$  は  $m$  や  $m', q$  (幾何学的関係) に依らず, ダイナミクスに依存する.

1つの応用例として, 特に  $T_q^{(k)}$  がベクトル演算子 ( $k = 1, q = 0, \pm 1$ ) の場合を考えると, 選択則

$$\Delta m \equiv m' - m = 0, \pm 1, \quad \Delta j \equiv j' - j = 0, \pm 1 \quad (3.10.39)$$

が得られる. さらに  $0 \rightarrow 0$  の遷移 [ $j = 0 \rightarrow j' = 0$  のこと [4, p.15]] は禁止される [導出は本稿次節].

■参考——射影定理  $j = j'$  の場合の Wigner-Eckart の定理は, ベクトル演算子  $V_q$  と角運動量  $J_q$  に対する射影定理

$$\langle \alpha', j m' | V_q | \alpha, j m \rangle = \frac{\langle \alpha', j m | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha, j m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j m' | J_q | j m \rangle, \quad (q = 0, \pm 1) \quad (3.10.40)$$

を含んでいる. ここに

$$V_{\pm} \equiv \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (V_x \pm V_y), \quad V_0 \equiv V_z.$$

### 3.10 節, 式の導出など

■ベクトル演算子を定義する交換関係 (3.10.8) の導出 期待値  $\langle \mathbf{V} \rangle = \langle \alpha | \mathbf{V} | \alpha \rangle$  に対するベクトルの変換則 (3.10.2):

$$\langle \alpha | V_i | \alpha \rangle \rightarrow \sum_j R_{ij} \langle \alpha | V_j | \alpha \rangle \quad (|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R) |\alpha\rangle \text{ のとき})$$

が任意の状態  $|\alpha\rangle$  に対して成り立つ条件は, 演算子の関係式

$$\mathcal{D}^\dagger(R) V_i \mathcal{D}(R) = \sum_j R_{ij} V_j$$

で与えられる.  $\mathbf{n}$  軸周りの無限小角  $\varepsilon$  の回転を想定して,  $\varepsilon$  の 1 次近似で  $\mathcal{D}(R) = 1 - \frac{i\varepsilon \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}}{\hbar}$  と書くと, これは

$$V_i + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_i, \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}] = \sum_j R_{ij}(\mathbf{n}; \varepsilon) V_j$$

となる. 例えば回転軸方向を  $\mathbf{n} = \hat{z}$  ととると

$$R(\hat{z}; \varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

なので,

$$\begin{aligned} i = 1; \quad V_x + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_x, J_z] &= V_x - \varepsilon V_y, \\ i = 2; \quad V_y + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_y, J_z] &= \varepsilon V_x + V_y, \\ i = 3; \quad V_z + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_z, J_z] &= V_z \end{aligned}$$

が得られる. これは式 (3.10.8) の代表的な交換関係

$$[V_x, J_z] = -i\hbar V_y, \quad [V_y, J_z] = i\hbar V_x, \quad [V_z, J_z] = 0$$

を意味する.

■演算子  $Y_l^m(\mathbf{n})$  の変換則 (3.10.21) の導出 回転操作  $|\mathbf{n}\rangle \rightarrow |\mathbf{n}'\rangle \equiv \mathcal{D}(R) |\mathbf{n}\rangle$  に対して球面調和関数は

$$\begin{aligned} Y_l^m(\mathbf{n}) = \langle \mathbf{n} | l, m \rangle &\rightarrow \langle \mathbf{n} | \mathcal{D}(R^{-1}) | l, m \rangle = \langle \mathbf{n} | \cdot \left( \sum_{m'} |l, m'\rangle \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(R^{-1}) \right) \\ &= \sum_{m'} Y_l^{m'}(\mathbf{n}) \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(R^{-1}) \\ &= \sum_{m'} Y_l^{m'}(\mathbf{n}) \mathcal{D}_{mm'}^{(l)*}(R) \quad (\text{回転演算子のユニタリー性 (3.5.47)}) \end{aligned}$$

と変化する. よって [期待値が] 球面調和関数のように振舞う演算子  $Y_l^m$  は, 変換則 (3.10.21) に従わなければならない. [これはベクトル演算子の期待値の変換則  $\langle V_i \rangle \rightarrow \sum_j R_{ij} \langle V_j \rangle$  から演算子の等式 (3.10.3):  $\mathcal{D}^\dagger(R) V_i \mathcal{D}(R) = \sum_j R_{ij} V_j$  が導かれたのと同様である.]

■球面テンソル演算子を定義する交換関係 (3.10.25) の導出 式 (3.10.22a) を無限小回転に対して適用すると,

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\varepsilon}{\hbar}\right) T_q^{(k)} \left(1 - \frac{i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\varepsilon}{\hbar}\right) &= \sum_{q'=-k}^k T_{q'}^{(k)} \langle kq' | 1 + \frac{i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\varepsilon}{\hbar} | kq \rangle, \\ \therefore [\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}, T_q^{(k)}] &= \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} \langle kq' | \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} | kq \rangle \end{aligned} \quad (3.10.24)$$

を得る. ここで  $\mathbf{n} = \hat{z}$  とおくと式 (3.10.25a) が,  $\mathbf{n}$  を “ $(\hat{x} \pm i\hat{y})$  方向にとる” と [本稿次節で補足], 式 (3.10.25b) が導かれる.

■テンソル積 (3.10.27) が球面テンソルであることの証明 式 (3.10.27) の  $T_q^{(k)}$  が変換則 (3.10.22) に従うことを示せば良い.

$$\begin{aligned} &\mathcal{D}^\dagger(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}(R) \\ &= \sum_{q_1} \sum_{q_2} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; kq \rangle \mathcal{D}^\dagger(R) X_{q_1}^{(k_1)} \mathcal{D}(R) \mathcal{D}^\dagger(R) Z_{q_2}^{(k_2)} \mathcal{D}(R) \\ &= \sum_{q_1} \sum_{q_2} \sum_{q_1'} \sum_{q_2'} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; kq \rangle X_{q_1'}^{(k_1)} \mathcal{D}_{q_1' q_1}^{(k_1)}(R^{-1}) Z_{q_2'}^{(k_2)} \mathcal{D}_{q_2' q_2}^{(k_2)}(R^{-1}) \\ &\quad (\text{球面テンソル } X_{q_1}^{(k_1)}, Z_{q_2}^{(k_2)} \text{ は変換則 (3.10.22) [むしろ等価的に } Y_l^m \text{ の変換則 (3.10.21)] に従うから}) \\ &= \sum_{k''} \sum_{q_1} \sum_{q_2} \sum_{q_1'} \sum_{q_2'} \sum_{q''} \sum_{q'} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; kq \rangle \\ &\quad \times \langle k_1 k_2; q_1' q_2' | k_1 k_2; k'' q'' \rangle \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k'' q'' \rangle \mathcal{D}_{q_1' q''}^{(k'')}(R^{-1}) X_{q_1'}^{(k_1)} Z_{q_2'}^{(k_2)} \\ &\quad (\text{Clebsch-Gordan 級数の公式 (3.7.69) を用いた [本稿次節で補足]}) \\ &= \sum_{k''} \sum_{q_1'} \sum_{q_2'} \sum_{q''} \sum_{q'} \delta_{kk''} \delta_{qq''} \langle k_1 k_2; q_1' q_2' | k_1 k_2; k'' q'' \rangle \mathcal{D}_{q_1' q''}^{(k'')}(R^{-1}) X_{q_1'}^{(k_1)} Z_{q_2'}^{(k_2)} \\ &\quad (\text{Clebsch-Gordan 級数の直交性 (3.7.42) を用いた [本稿次節で補足]}) \\ &= \sum_{q'} \left( \sum_{q_1'} \sum_{q_2'} \langle k_1 k_2; q_1' q_2' | k_1 k_2; kq \rangle X_{q_1'}^{(k_1)} Z_{q_2'}^{(k_2)} \right) \mathcal{D}_{q' q}^{(k)}(R^{-1}) \\ &= \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} \mathcal{D}_{q' q}^{(k)}(R^{-1}) \\ &= \sum_{q'} \mathcal{D}_{qq'}^{(k)*}(R) T_{q'}^{(k)} \end{aligned}$$

より示された.

■Wigner-Eckart の定理 式 (3.10.25b) より

$$\langle \alpha', j' m' | [J_\pm, T_q^{(k)}] | \alpha, j m \rangle = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha', j' m' | T_{q\pm 1}^{(k)} | \alpha, j m \rangle \quad (3.10.33)$$

であり, さらに式 (3.5.39), (3.5.40) [本稿の式 (114)] を用いると

$$\begin{aligned} &\sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle \alpha', j', m' \mp 1 | T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle \\ &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle \alpha', j', m' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \pm 1 \rangle + \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha', j', m' | T_{q\pm 1}^{(k)} | \alpha, j m \rangle \end{aligned} \quad (3.10.34)$$

となる [本稿次節で補足].

次に上式 (3.10.34) と Clebsch-Gordan の漸化式 (3.7.49):

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j, m \pm 1 \rangle \\ = & \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle j_1 j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j_1 j_2; jm \rangle + \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle j_1 j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j_1 j_2; jm \rangle \end{aligned}$$

の類似性に注目しよう. 以下, 教科書の議論を明確化しつつまとめる. 式 (3.10.34) を書き換える代わりに, Clebsch-Gordan の漸化式 (3.7.49) において

$$j \rightarrow j', \quad m \rightarrow m', \quad j_1 \rightarrow j, \quad m_1 \rightarrow m, \quad j_2 \rightarrow k, \quad m_2 \rightarrow q$$

と置き換え, さらに複号 ± の順番を入れ替えると

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle jk; mq | jk; j', m' \mp 1 \rangle \\ = & \sqrt{(j \pm m + 1)(j \mp m)} \langle jk; m \pm 1, q | jk; j' m' \rangle + \sqrt{(k \pm q + 1)(k \mp q)} \langle jk; m, q \pm 1 | jk; j' m' \rangle \end{aligned}$$

となる. これは式 (3.10.34) と共通の係数を持つことが見て取れる. ところで係数  $a_{ij}$  の等しい 1 階線形同時方程式の解は

$$\sum_j a_{ij} x_j = 0, \quad \sum_j a_{ij} y_j = 0 \quad \Rightarrow \quad x_j = c y_j$$

のように比例関係にあるから,

$$\langle \alpha', j' m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, jm \rangle = (m, q, m' \text{ に独立な共通比例定数}) \langle jk; m, q \pm 1 | jk; j' m' \rangle$$

と書ける. これは Wigner-Eckart の定理 (3.10.31) に他ならない.

### 3.10 について

■  $\mathbf{x}, \mathbf{p}$  がベクトル演算子であること 「 $[y, L_z] = i\hbar x, \dots, [p_y, L_z] = i\hbar p_x$ 」 (p.320, 1.6,7) は正準交換関係を用い

$$[x_i, L_j] = \varepsilon_{jkl} x_k [x_i, p_l] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k, \quad [p_i, L_j] = \varepsilon_{jkl} [p_i, x_k] p_l = i\hbar \varepsilon_{ijl} p_l$$

と確かめられる.

■ 直交テンソルの定義式 (3.10.11) 式 (3.10.11) では共変成分・反変成分が区別されていない. これは直交座標系の変換に関する限り, 変換行列は直交行列になり, 共変成分と反変成分を区別する必要がなくなるからである. 実際, 直交変換

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_i &= \sum_j (\mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_j) \mathbf{e}_j = \sum_j a_{ij} \mathbf{e}_j, \\ \mathbf{x} &= \sum_j x_j \mathbf{e}_j = \sum_{i,j} x_j (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}'_i) \mathbf{e}'_i, \quad \therefore x'_i = \sum_j (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}'_i) x_j = \sum_j a_{ij} x_j \end{aligned}$$

において

$$\mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_k = a_{ik} = \sum_j a_{ij} \delta_{jk} = \frac{\partial x'_i}{\partial x_k}, \quad \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}'_j = \frac{\partial x_i}{\partial x'_j}$$

なので

$$\frac{\partial x'_j}{\partial x_i} = \mathbf{e}'_j \cdot \mathbf{e}_i = \frac{\partial x_i}{\partial x'_j}$$

となる. これは

- 変換係数  $a_{ij}$  が作る行列

$$O \equiv (a_{ij}) = \left( \frac{\partial x'_i}{\partial x_j} \right)$$

が直交行列であること

$$(O^T)_{ij} = (O^{-1})_{ij}$$

- 反変ベクトル成分の変換則が、共変ベクトル成分の変換則に一致すること

$$x'_i = \sum_j \frac{\partial x'_i}{\partial x_j} x_j = \sum_j \frac{\partial x_j}{\partial x'_i} x_j$$

を意味している。

■式 (3.10.13) について 式 (3.10.13):

$$\underbrace{U_i V_j}_{2 \text{ 階テンソル}} = \underbrace{\frac{U \cdot V}{3} \delta_{ij}}_{\text{スカラー}} + \underbrace{\frac{U_i V_j - U_j V_i}{2}}_{\text{反対称テンソル } \varepsilon_{ijk} (\mathbf{U} \times \mathbf{V})_k / 2} + \underbrace{\left( \frac{U_i V_j + U_j V_i}{2} - \frac{U \cdot V}{3} \delta_{ij} \right)}_{\text{対称トレースレステンソル}}$$

において、テンソルの一般論より

- ベクトル成分の積  $U_i V_i$  は 2 階テンソルの変換則に従うこと
- 内積  $\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}$  はスカラーの変換則に従う (不変量になる) こと

は証明済みである。ところで  $\delta_{ij}$  は 2 階テンソルの変換則に従うものの、新しい座標系においても成分の値は変わらない特別なテンソルである。このため第 1 項  $\frac{\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}}{3} \delta_{ij}$  をスカラーと見なせると同時に、第 3 項を 2 階テンソルと見なすことが可能となる。またテンソル  $\varepsilon_{ijk}$  も成分の値が全ての座標系で共通となるから、第 2 項  $\varepsilon_{ijk} (\mathbf{U} \times \mathbf{V})_k / 2$  はベクトル成分の変換則に従うということもできる。これは反対称テンソルとその対偶テンソルに一般的な事情である。

「最後は [式 (3.10.13) 右辺の第 3 項は] 5 個 (= 6 - 1 個, 1 はトレースレスの条件に由来) の独立成分を持つ,  $3 \times 3$  対称トレースレス・テンソルである」(p.321, l.3,4) について、全成分を  $3 \times 3$  対称行列の形を借りて書いたとき上三角の 6 成分が決まれば全成分が決まる。また、トレースレスであるとは  $i, j$  についての縮約が消えること

$$\frac{U_k V_k + U_k V_k}{2} - \frac{\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}}{3} \delta_{kk} = \frac{2 \times \mathbf{U} \cdot \mathbf{V}}{2} - \frac{\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}}{3} \times 3 = 0$$

を意味する。

なお式 (3.10.13) のように、一般に 2 つの添字  $i, j (= 1, \dots, n)$  を持つ量  $R_{ij}$  は対称部分  $S_{ij} = (R_{ij} + R_{ji})/2$  と反対称部分  $A_{ij} = (R_{ij} - R_{ji})/2$  に分けた上で、さらに  $S_{ij}$  をトレースレスの対称部分  $\hat{S}_{ij} = S_{ij} - S' \delta_{ij}$  (ただし  $S' = \text{tr}(S_{ij})/n$ ) と単位行列に比例する部分  $S' \delta_{ij}$  に分解できることを意味する [16, p.286].

$$R_{ij} = S_{ij} + A_{ij} = \hat{S}_{ij} + A_{ij} + S' \delta_{ij}.$$

■式 (3.10.21) の訂正 式 (3.10.21) における  $\mathcal{D}_{m'm}^{(l)*}(R)$  はユニタリー性 (3.5.47) を用いると、正しくは  $\mathcal{D}_{mm'}^{(l)*}(R)$  である (本稿では訂正済み)。式 (3.10.22a) ではそうになっている。

■式 (3.10.22b) 式 (3.10.22a) において  $R$  を  $R^{-1}$  に置き換えて、 $\mathcal{D}(R)$  のユニタリー性 (その行列表現がユニタリーになること (3.5.47)) を用いて得られる。

■式 (3.10.24) における「 $\hat{n}$  を……( $\hat{x} \pm i\hat{y}$ ) 方向にとったりして」(p.323 下から 8 行目) これは ( $\hat{n} = \hat{x}$  とした式) +  $i(\hat{n} = \hat{y}$  とした式) を作ることを考えれば良い. 結果的に式 (3.10.24) に  $\hat{n} = \hat{x} \pm i\hat{y}$  を代入した

$$[J_{\pm}, T_q^{(k)}] = \sum_{q'=-k}^k \langle k, q' | J_{\pm} | k, q \rangle T_{q'}^{(k)}$$

が成り立つことから式 (3.10.25b) を得る.

■テンソル演算子の交換関係 (3.10.25) がベクトル演算子の交換関係 (3.10.8) を再現することの確認 階数  $k = 1$  の球面テンソル  $T_q^{(1)}$  (以降,  $k$  の値を表す上付き添字の 1 を省く) はベクトルの直交座標成分  $V_i$  と式 (3.10.46):

$$T_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(V_x + iV_y), \quad T_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_x - iV_y), \quad T_0 = V_z$$

のように関係付けられる (p.324 を併せて参照). ベクトル成分  $V_i$  について逆に解けば

$$V_x = -\frac{1}{\sqrt{2}}(T_{+1} - T_{-1}), \quad V_y = \frac{i}{\sqrt{2}}(T_{+1} - T_{-1}), \quad V_z = T_0$$

である. ここではこの関係を用い, テンソル演算子の交換関係 (3.10.25) がベクトル演算子の交換関係 (3.10.8):

$$[V_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}V_k, \quad \therefore [J_i, V_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}V_k$$

を再現することを確認する.

まず式 (3.10.25a):

$$[J_z, T_{\pm 1}] = \pm\hbar T_{\pm 1}, \quad [J_z, T_0] = 0$$

はベクトル成分  $V_i$  との交換関係

$$[J_z, V_x] = i\hbar V_y, \quad [J_z, V_y] = -i\hbar V_x, \quad [J_z, V_z] = 0$$

に書き換えられる. これはベクトル演算子の交換関係 (3.10.8) と整合している.

次に式 (3.10.25b):

$$[J_{\pm}, T_q] = \hbar\sqrt{(1 \mp q)(1 \pm q + 1)}T_{q \pm 1}$$

を考える. これは  $q = \pm 1, 0$  に応じた 3 組の交換関係

$$\begin{cases} [J_+, T_{+1}] = 0 \\ [J_-, T_{+1}] = \sqrt{2}\hbar T_0 \end{cases} \quad \begin{cases} [J_+, T_{-1}] = \sqrt{2}\hbar T_0 \\ [J_-, T_{-1}] = 0 \end{cases} \quad [J_{\pm}, T_0] = \sqrt{2}\hbar T_{\pm 1}$$

を意味する. ここで  $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$  を  $J_x, J_y$  について逆に解くと

$$J_x = \frac{J_+ + J_-}{2}, \quad J_y = \frac{J_+ - J_-}{2i}$$

となるので, これらは

$$\begin{cases} [J_x, T_{+1}] = \frac{1}{\sqrt{2}}\hbar T_0 \\ [J_y, T_{+1}] = \frac{i}{\sqrt{2}}\hbar T_0 \end{cases} \quad \begin{cases} [J_x, T_{-1}] = \frac{1}{\sqrt{2}}\hbar T_0 \\ [J_y, T_{-1}] = -\frac{i}{\sqrt{2}}\hbar T_0 \end{cases} \quad \begin{cases} [J_x, T_0] = \frac{1}{\sqrt{2}}\hbar(T_{+1} + T_{-1}) \\ [J_y, T_0] = \frac{i}{\sqrt{2}}\hbar(T_{+1} - T_{-1}) \end{cases}$$

と書き換えられる. これらの線形結合を作ると, はじめの 2 組の交換関係は

$$[J_x, V_x] = 0, \quad [J_x, V_y] = i\hbar V_z, \quad [J_y, V_x] = -i\hbar V_z, \quad [J_y, V_y] = 0$$

と等価であることが分かる。また 3 組目の交換関係は

$$[J_x, V_z] = -i\hbar V_y, \quad [J_y, V_z] = i\hbar V_x$$

となっている。

以上でベクトル演算子の交換関係 (3.10.8) の全てが出揃った。

■式 (3.10.27) の  $T_q^{(k)}$  が球面テンソルとなっていることの証明の補足

「ここでクレプシュ・ゴルダン級数の公式 (3.7.69) を用いた」(p.325 下から 4 行目) 具体的には, 式 (3.7.69):

$$\mathcal{D}_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(R) \mathcal{D}_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(R) = \sum_j \sum_m \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; j m' \rangle \mathcal{D}_{m m'}^{(j)}(R)$$

において

$$\begin{aligned} \text{生きた添字: } & j_{1,2} \rightarrow k_{1,2}, \quad m_{1,2} \rightarrow q'_{1,2}, \quad m'_{1,2} \rightarrow q_{1,2}, \\ \text{ダミー添字: } & j \rightarrow k'', \quad m \rightarrow q', \quad m' \rightarrow q'' \end{aligned}$$

および  $R \rightarrow R^{-1}$  の置き換えて, 証明の第 2 の等号における変形をしたことを指す。

「(3.7.41) を用いると」(p.325 下から 3 行目) 正しくは式 (3.7.42):

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j' m' \rangle = \delta_{j j'} \delta_{m m'}$$

より

$$\sum_{q_1 q_2} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k q \rangle \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k'' q'' \rangle = \delta_{k k''} \delta_{q q''}$$

となることを用いている。

■式 (3.10.30) 式 (3.10.29) 右辺において

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_q^{(k)} \mathcal{D}^\dagger &= \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{q'q}^{(k)} = \sum_{q'=-k}^k \langle k q' | e^{-iJ_z \phi / \hbar} | k q \rangle T_q^{(k)} = e^{-iq\phi} T_q^{(k)}, \\ \mathcal{D} |\alpha, j m \rangle &= e^{-iJ_z \phi / \hbar} |\alpha, j m \rangle = e^{-im\phi} |\alpha, j m \rangle \end{aligned}$$

であることから得られる。

■「これは  $|\alpha', j' m'\rangle$  と  $q + m = m'$  の場合を除いて直交する」(式 (3.10.30)1 行下) やや分かりにくい表現だが, 式 (3.10.30) の両辺に左から  $\langle \alpha', j' m' |$  をかけると

$$\begin{aligned} e^{-im'\phi} \langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} |\alpha, j m \rangle &= e^{-i(q+m)\phi} \langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} |\alpha, j m \rangle, \\ \therefore (e^{-i\{m'-(q+m)\}\phi} - 1) \langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} |\alpha, j m \rangle &= 0 \end{aligned}$$

となるから  $m$ -選択則が示される。

■式 (3.10.34) の導出  $J_\pm^\dagger = J_\mp$  に注意して式 (3.5.39), 式 (3.5.40) を用いると

$$\begin{aligned} & \langle \alpha', j' m' | [J_\pm, T_q^{(k)}] |\alpha, j m \rangle \\ &= \sqrt{(j \pm m')(j \mp m' + 1)\hbar} \langle \alpha', j', m' \mp 1 | T_q^{(k)} |\alpha, j m \rangle - \sqrt{(j \mp m')(j \pm m' + 1)\hbar} \langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} |\alpha, j, m \pm 1 \rangle \end{aligned}$$

を得る。この右辺を式 (3.10.33) 右辺と等置すれば良い。



■ベクトル演算子の行列要素に対する選択則 (3.10.39) の導出 Wigner-Eckart の定理の帰結

$$m' = m + q, \quad |j - k| \leq j' \leq j + k$$

を考えれば充分である。ベクトル演算子  $k = 1$  に対して  $q = 0, \pm 1$  なので、第 1 式の  $m$ -選択則は

$$\Delta m \equiv m' - m = q = 0, \pm 1$$

を意味する。第 2 式の“三角不等式”は

$$|j - 1| \leq j' \leq j + 1$$

となる。 $j \geq 1$  であれば絶対値をそのまま外せて、 $-1 \leq j' - j \leq 1$ 、すなわち

$$\Delta j \equiv j' - j = 0, \pm 1$$

となる。他方、不等式で  $j = 0$  とすると  $j' = 1$  となるので、

- この場合も含めて上式  $\Delta j \equiv j' - j = 0, \pm 1$  は正しい。
- $j = 0 \rightarrow j' = 0$  の遷移は禁止される。

## 付録 A 恒等演算子は Hermite 演算子

複素数の値  $a + bi$  に恒等演算子  $\mathbf{1}$  をかけて演算子  $(a + bi)\mathbf{1}$  にすると, その Hermite 共役を考えることができる. 要請 (1.2.10) より

$$(a + bi)\mathbf{1} | \rangle \stackrel{\text{DC}}{\longleftarrow} \langle | (a - bi)\mathbf{1}^\dagger$$

である. ここで恒等演算子は  $\mathbf{1}^\dagger = \mathbf{1}$  なる Hermite 演算子であると考え (恒等演算子の定義  $\mathbf{1} | \rangle = | \rangle$ ) より恒等演算子は実数の固有値 1 を持つので, この仮定は p.22 の定理に抵触しない. 以上より

$$((a + bi)\mathbf{1})^\dagger = (a - bi)\mathbf{1}.$$

## 付録 B 可換な量 $A, B$ に対する指数法則 $e^A e^B = e^{A+B}$

演算子  $A$  の指数関数を  $e^A \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n$  で定義する. このとき  $A, B$  が演算子であるか否かに関わらず交換する量であれば, 指数法則  $e^A e^B = e^{A+B}$  が成り立つ.

■理由 まず,

$$e^A e^B = \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n \right) \left( \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} B^m \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{m!} A^n B^m$$

の最右辺において和をとられる項  $\frac{1}{n!} \frac{1}{m!} A^n B^m$  をいくつか書き出すと以下のようになる.

	1	$B$	$\frac{1}{2} B^2$	$\frac{1}{3!} B^3$	$\frac{1}{N!} B^N$
1	1	$B$	$\frac{1}{2} B^2$	$\frac{1}{3!} B^3$	$\frac{1}{N!} B^N$
$A$	$A$	$AB$	$\frac{1}{2} AB^2$	$\frac{1}{(N-1)!} AB^{N-1}$	
$\frac{1}{2} A^2$	$\frac{1}{2} A^2$	$\frac{1}{2} A^2 B$	$\dots$		
$\frac{1}{3!} A^3$	$\frac{1}{3!} A^3$	$\frac{1}{(N-1)!} A^{N-1} B$			
$\frac{1}{N!} A^N$	$\frac{1}{N!} A^N$				

$n + m = N$  となる項の和  $\sum_{n=0}^N \frac{1}{n!(N-n)!} A^n B^{N-n}$  は上の図式で 1 列に並ぶ青い字で示した項の和であることに注意すると,

$$e^A e^B = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!(N-n)!} A^n B^{N-n} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{n=0}^N \frac{N!}{n!(N-n)!} A^n B^{N-n}$$

となることが分かる (ただし上の図式は  $N = 4$  として書いている). 上式の最右辺は  $A, B$  が交換すれば

$$\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} (A+B)^N = e^{A+B}$$

に等しいから指数法則  $e^A e^B = e^{A+B}$  が成り立つ.

特に  $[A, B] = c$ : 定数のとき

この場合には公式

$$e^A e^B = \exp \left( A + B + \frac{1}{2} c \right) \quad (142)$$

が成り立つ. ( $c = 0$  とおくと, “指数法則” が再現される.)

■証明 [17, pp.304–305]  $f(\lambda) \equiv e^{\lambda A} e^{\lambda B}$  とおくと, 求める量は  $f(1)$  である.  $f(\lambda)$  に対する微分方程式を作ろう.

$$\begin{aligned} f'(\lambda) &= A e^{\lambda A} e^{\lambda B} + e^{\lambda A} B e^{\lambda B} \\ &= A e^{\lambda A} e^{\lambda B} + \{ B e^{\lambda A} + [e^{\lambda A}, B] \} e^{\lambda B} \end{aligned}$$

の最右辺における交換子  $[e^{\lambda A}, B]$  は, 公式 (46) より  $[A^n, B] = n c A^{n-1}$  となることを用いると

$$[e^{\lambda A}, B] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} [A^n, B] = \lambda c \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} A^{n-1} = \lambda c e^{\lambda A}$$

と評価できる。これを上式に代入すると

$$f'(\lambda) = (A + B + \lambda c)f(\lambda)$$

を得る。  $f(0) = 1$  を満たす解は

$$f(\lambda) = \exp \left[ \lambda(A + B) + \frac{1}{2}c\lambda^2 \right]$$

であり、  $\lambda = 1$  とおくと式 (142) が得られる。

## 付録 C 経路積分

2.5 節のノートでは、粒子の遷移振幅の経路積分による表現が<sup>3</sup>、Schrödinger 方程式と適切な初期条件を満たすことから、微小時間の遷移振幅が

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle \sim e^{iS(n, n-1)/\hbar}$$

と表されるという仮定を正当化した。ここでは遷移振幅の経路積分による表現を、(時間的发展の演算子の表式から) 直接に導出する。その際、位相空間における経路積分を経由し、次いで運動量変数に関する積分を実行して、配位空間における経路積分を得ることになる。なお、以下では  $\hbar = 1$  とおく。また演算子にはハットを付けて固有値と区別する。

### C.1 準備

#### C.1.1 Weyl 順序にあるハミルトニアンに対する公式

一般座標  $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_N)$  を持つ系を考える。Hamilton 演算子  $H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t)$  (以下、ハミルトニアン) の Weyl 変換を

$$H_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \equiv \int \left( \prod_i dv_i \right) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}} \langle \mathbf{q} - \mathbf{v}/2 | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{q} + \mathbf{v}/2 \rangle \quad (143)$$

で定義すると、

$$\langle \mathbf{q}_B | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{q}_A \rangle = \int \left( \prod_i \frac{dp_i}{2\pi} \right) e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{q}_B - \mathbf{q}_A)} H_W(\bar{\mathbf{q}}, \mathbf{p}, t), \quad \bar{\mathbf{q}} \equiv \frac{\mathbf{q}_A + \mathbf{q}_B}{2} \quad (144)$$

が満たされる (C.1.2 節参照) [17, pp.22–23].

次に  $H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t)$  における  $\hat{q}_i, \hat{p}_i$  の並べ方の一つとして、Weyl 順序を導入する。  $k$  個の  $\hat{q}$  と  $l$  個の  $\hat{p}$  を並べる方法は全部で  $\frac{n!}{k!l!}$  通りあり ( $n \equiv k + l$ )、 $\hat{q}, \hat{p}$  の単項式  $\hat{q}^k \hat{p}^l$  に対する Weyl 順序  $\{\hat{q}^k \hat{p}^l\}_W$  を、その全ての並べ方の相加平均

$$\{\hat{q}^k \hat{p}^l\}_W \equiv \frac{\hat{q}^k \hat{p}^l + \hat{q}^{k-1} \hat{p}^l \hat{q} + \dots + \hat{p}^l \hat{q}^k}{n!/k!l!}$$

で定義すると、Weyl 順序にあるハミルトニアン

$$H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) = \sum_{\{n_i\}, \{m_i\}} H(\{n_i\}, \{m_i\}) \{\hat{q}_1^{n_1} \hat{p}_1^{m_1}\}_W \dots \{\hat{q}_N^{n_N} \hat{p}_N^{m_N}\}_W$$

は Weyl 変換によって形を変えないこと、すなわち  $H_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  が示される (C.1.2 節参照) [17, pp.26–27].

よってあらかじめ Weyl 順序にあるハミルトニアンを考えれば、式 (144) 右辺で  $H_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  とした

$$\langle \mathbf{q}_B | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{q}_A \rangle = \int \left( \prod_i \frac{dp_i}{2\pi} \right) e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{q}_B - \mathbf{q}_A)} H(\bar{\mathbf{q}}, \mathbf{p}, t), \quad \bar{\mathbf{q}} \equiv \frac{\mathbf{q}_A + \mathbf{q}_B}{2} \quad (145)$$

が成立する。

C.1.2 Weyl 順序にあるハミルトニアンに対する公式 (補足)

■ハミルトニアンの Weyl 変換に対する式 (144) の証明 C.1.1 節で述べたように, ハミルトニアンの Weyl 変換に対して

$$\text{式 (144)} : \langle \mathbf{q}_B | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{q}_A \rangle = \int \left( \prod_i \frac{dp_i}{2\pi} \right) e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{q}_B - \mathbf{q}_A)} H_W(\bar{\mathbf{q}}, \mathbf{p}, t), \quad \bar{\mathbf{q}} \equiv \frac{\mathbf{q}_A + \mathbf{q}_B}{2}$$

が成り立つことを示す [17, p.23]. Weyl 変換の定義式 (143) は積分変数を  $\mathbf{v}' \equiv -\mathbf{v}$  に変換すると

$$H_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \int \left( \prod_i dv'_i \right) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}'} \langle \mathbf{q} + \mathbf{v}'/2 | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{q} - \mathbf{v}'/2 \rangle$$

なので

$$\begin{aligned} & \int \left( \prod_i \frac{dp_i}{2\pi} \right) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}} H_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \\ &= \int \left( \prod_i dv'_i \right) \langle \mathbf{q} + \mathbf{v}'/2 | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{q} - \mathbf{v}'/2 \rangle \int \left( \prod_j \frac{dp_j}{2\pi} \right) e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}')} \\ &= \int \left( \prod_i dv'_i \right) \langle \mathbf{q} + \mathbf{v}'/2 | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{q} - \mathbf{v}'/2 \rangle \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}') \\ &= \langle \mathbf{q} + \mathbf{v}/2 | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{q} - \mathbf{v}/2 \rangle \end{aligned}$$

となる. よって

$$\begin{cases} \mathbf{q}_A \equiv \mathbf{q} - \mathbf{v}/2 \\ \mathbf{q}_B \equiv \mathbf{q} + \mathbf{v}/2 \end{cases} \quad \therefore \begin{cases} \mathbf{q} = (\mathbf{q}_A + \mathbf{q}_B)/2 \equiv \bar{\mathbf{q}} \\ \mathbf{v} = \mathbf{q}_B - \mathbf{q}_A \end{cases}$$

と書けば式 (144) を得る.

■準備 C.1.1 節で述べたように, Weyl 順序にあるハミルトニアンは Weyl 変換に対して不変である. ここではその証明の準備として次のことを確認しておく.

- $[\hat{q}, \hat{p}] = i$  のとき,

$$e^{\alpha \hat{q}} e^{\beta \hat{p}} = e^{i\alpha\beta/2} \exp(\alpha \hat{q} + \beta \hat{p}). \quad (146)$$

- Weyl 変換の定義式 (143) は

$$H_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \int \left( \prod_i du_i \right) e^{i\mathbf{u} \cdot \mathbf{q}} \langle \mathbf{p} + \mathbf{u}/2 | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{p} - \mathbf{u}/2 \rangle \quad (147)$$

と書き換えられる.

まず式 (146) は, 付録 B の式 (142) で,  $A = \alpha \hat{q}, B = \beta \hat{p}$  とおくと直ちに得られる [17, pp.304-305]. ( $A, B$  はハットを付けていないけれど, 演算子であることに注意する.)

また, Weyl 変換の定義の別表現 (147) は次のように確かめられる [17, p.22]. Weyl 変換の定義式 (143) は

$$\begin{aligned}
H_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) &= \int \left( \prod_i dp_{1i} dp_{2i} \right) \langle \mathbf{q} - \mathbf{v}/2 | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{p}_2 \rangle \langle \mathbf{p}_2 | \mathbf{q} + \mathbf{v}/2 \rangle \\
&= \int \left( \prod_i dp_{1i} dp_{2i} \right) \left\{ \left( \prod_j \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right) e^{i\mathbf{p}_1 \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{v}/2)} \right\} \langle \mathbf{p}_1 | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{p}_2 \rangle \left\{ \left( \prod_k \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right) e^{-i\mathbf{p}_2 \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{v}/2)} \right\} \\
&\quad (\because j, k \text{ は } \mathbf{q} \text{ の全成分を動く}) \\
&= \int \left( \prod_i dp_{1i} dp_{2i} \right) \langle \mathbf{p}_1 | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{p}_2 \rangle e^{i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{q}} \int \left( \prod_j \frac{dv_j}{2\pi} \right) \exp \left\{ i \left( \mathbf{p} - \frac{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2}{2} \right) \cdot \mathbf{v} \right\} \\
&= \int \left( \prod_i dp_{1i} dp_{2i} \right) \langle \mathbf{p}_1 | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{p}_2 \rangle e^{i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{q}} \delta \left( \mathbf{p} - \frac{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2}{2} \right) \quad (148)
\end{aligned}$$

と変形できる ( $p_{1i}, p_{2i}$  はそれぞれ  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$  の第  $i$  成分を表す). ここで

$$\begin{cases} \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 \equiv \mathbf{p}' \\ (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)/2 \equiv \mathbf{P} \end{cases} \quad \therefore \begin{cases} \mathbf{p}_1 = \mathbf{P} + \mathbf{p}'/2 \\ \mathbf{p}_2 = \mathbf{P} - \mathbf{p}'/2 \end{cases}$$

と変数変換する.  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}', \mathbf{P}$  の第  $i$  成分をそれぞれ  $p_1, p_2, p', P$  と書くと (添字  $i$  を省いた)

$$\frac{\partial(p_1, p_2)}{\partial(p', P)} = \begin{vmatrix} 1/2 & -1/2 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 1$$

である. これは図 42 より変数  $p', P$  が  $dp', dP$  変化したときに点  $(p_1, p_2)$  が  $(p_1, p_2)$  平面を動いてできる領域の面積が  $dp'dP$  であることから直接理解できる. さらに図 42 より変数  $p', P$  がそれぞれ実数全体を動けば点  $(p_1, p_2)$  は  $(p_1, p_2)$  平面全体を動くから, Weyl 変換の式 (148) をさらに

$$\begin{aligned}
H_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) &= \int \left( \prod_i dp'_i dP_i \right) \langle \mathbf{P} + \mathbf{p}'/2 | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{P} - \mathbf{p}'/2 \rangle e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{q}} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}) \\
&= \int \left( \prod_i dp'_i \right) \langle \mathbf{p} + \mathbf{p}'/2 | H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) | \mathbf{p} - \mathbf{p}'/2 \rangle e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{q}} : (147)
\end{aligned}$$

と書き換えられる.

■Weyl 順序にあるハミルトニアンは Weyl 変換に対して不変であることの証明 さて, C.1.1 節で述べたように, Weyl 順序にあるハミルトニアンは Weyl 変換に対して不変であることを示そう [17, pp.26–28]. C.1.1 節で定義した Weyl 順序  $\{\hat{q}^k \hat{p}^l\}_W$  に対して

$$\begin{aligned}
\exp(\alpha \hat{q} + \beta \hat{p}) &= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} (\alpha \hat{q} + \beta \hat{p})^N = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!(N-n)!} \alpha^n \beta^{N-n} \{\hat{q}^n, \hat{p}^{N-n}\}_W, \\
\therefore \{\hat{q}^k, \hat{p}^l\}_W &= \left( \frac{\partial^k}{\partial \alpha^k} \frac{\partial^l}{\partial \beta^l} \exp(\alpha \hat{q} + \beta \hat{p}) \right) \Big|_{\alpha, \beta=0} \quad (149)
\end{aligned}$$

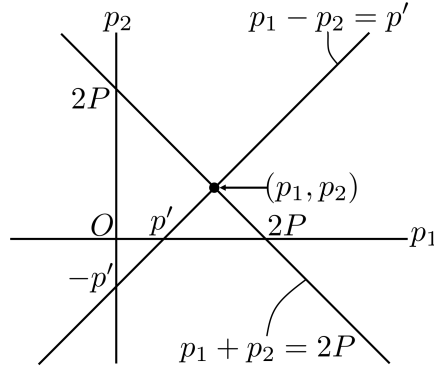


図 42 変数  $p' = p_1 - p_2$ ,  $P = (p_1 + p_2)/2$  と  $p_1, p_2$  の関係

である。ところで  $\exp(\alpha\hat{q} + \beta\hat{p})$  の Weyl 変換は

$$\begin{aligned}
W[\exp(\alpha\hat{q} + \beta\hat{p})] &= W[e^{-i\alpha\beta/2} e^{\alpha\hat{q}} e^{\beta\hat{p}}] \quad (\because \text{式 (146)}) \\
&= e^{-i\alpha\beta/2} \int du e^{iuq} \langle p + u/2 | e^{\alpha\hat{q}} e^{\beta\hat{p}} | p - u/2 \rangle \quad \text{式 } (\because \text{式 (147)}) \\
&= e^{-i\alpha\beta/2} \int dudq' e^{iuq} \langle p + u/2 | e^{\alpha\hat{q}} | q' \rangle \langle q' | e^{\beta\hat{p}} | p - u/2 \rangle \\
&= e^{-i\alpha\beta/2} \int dudq' e^{iuq} \frac{e^{-i(p+u/2)q'}}{\sqrt{2\pi}} e^{\alpha q'} \frac{e^{i(p-u/2)q'}}{\sqrt{2\pi}} e^{\beta(p-u/2)} \\
&= e^{-i\alpha\beta/2} e^{\beta p} \int dq' e^{\alpha q'} (e^{-ipq'} e^{ipq'}) \int \frac{du}{2\pi} e^{iu(q-2 \times \frac{q'}{2} + i\frac{\beta}{2})} \\
&= e^{-i\alpha\beta/2} e^{\beta p} \int dq' e^{\alpha q'} \delta\left(q' - \left(q + i\frac{\beta}{2}\right)\right) \\
&= e^{-i\alpha\beta/2} e^{\beta p} e^{\alpha(q+i\beta/2)} \\
&= \exp(\alpha q + \beta p)
\end{aligned}$$

となって形を変えない。よって Weyl 順序単項式  $\{\hat{q}^k \hat{p}^l\}_W$  を Weyl 変換すると

$$\begin{aligned}
W[\{\hat{q}^k, \hat{p}^l\}_W] &= \left( \frac{\partial^k}{\partial \alpha^k} \frac{\partial^l}{\partial \beta^l} W[\exp(\alpha\hat{q} + \beta\hat{p})] \right) \Big|_{\alpha, \beta=0} \quad (\because \text{式 (149)}) \\
&= \left( \frac{\partial^k}{\partial \alpha^k} \frac{\partial^l}{\partial \beta^l} \exp(\alpha q + \beta p) \right) \Big|_{\alpha, \beta=0} = q^k p^l \\
&= \{q^k p^l\}_W \quad (\hat{q}, \hat{p} \text{ と違い, } q, p \text{ は可換})
\end{aligned}$$

となって形を変えない。従って Weyl 順序にあるハミルトニアン

$$H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) = \sum_{\{n_i\}, \{m_i\}} H(\{n_i\}, \{m_i\}) \{\hat{q}_1^{n_1} \hat{p}_1^{m_1}\}_W \cdots \{\hat{q}_N^{n_N} \hat{p}_N^{m_N}\}$$

も Weyl 変換すると

$$\begin{aligned}
H_W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) &\equiv W[H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t)] \\
&= \sum_{\{n_i\}, \{m_i\}} H(\{n_i\}, \{m_i\}) \{q_1^{n_1} p_1^{m_1}\}_W \cdots \{q_N^{n_N} p_N^{m_N}\} = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)
\end{aligned}$$

となって形を変えない。



## C.2 (拡大) 位相空間における経路積分 [17, pp.32–35]

与えられた始状態  $|\mathbf{q}_I, t_I\rangle$  から終状態  $|\mathbf{q}_F, t_F\rangle$  への遷移振幅  $\langle \mathbf{q}_F, t_F | \mathbf{q}_I, t_I \rangle$  を考える.  $t_I (\equiv t_0)$  から  $t_F (\equiv t_R)$  までの有限の時間を  $R$  個の微小区間に分割すると,

$$\langle \mathbf{q}_F, t_F | \mathbf{q}_I, t_I \rangle = \int d^N q_1 \cdots d^N q_{R-1} \langle \mathbf{q}_F, t_F | \mathbf{q}_{R-1}, t_{R-1} \rangle \cdots \langle \mathbf{q}_1, t_1 | \mathbf{q}_I, t_I \rangle \quad (150)$$

となる. ここで初期時刻  $t_0$  における変数  $\mathbf{q}_0$  を導入して

$$\langle \mathbf{q}_1, t_1 | \mathbf{q}_I, t_I \rangle = \int d^N q_0 \langle \mathbf{q}_1, t_1 | \mathbf{q}_0, t_0 \rangle \delta(\mathbf{q}_0 - \mathbf{q}_I)$$

とすると,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q}_F, t_F | \mathbf{q}_I, t_I \rangle &= \int d^N q_0 \cdots d^N q_{R-1} \langle \mathbf{q}_F, t_F | \mathbf{q}_{R-1}, t_{R-1} \rangle \cdots \langle \mathbf{q}_1, t_1 | \mathbf{q}_0, t_0 \rangle \delta(\mathbf{q}_0 - \mathbf{q}_I) \\ &= \int \left( \prod_{r=0}^{R-1} d^N q_r \langle \mathbf{q}_{r+1}, t_{r+1} | \mathbf{q}_r, t_r \rangle \right) \delta(\mathbf{q}_0 - \mathbf{q}_I) \quad (\mathbf{q}_R \equiv \mathbf{q}_F) \end{aligned} \quad (151)$$

と書き換えられる<sup>\*53</sup>.

次に微小時間  $\varepsilon_r \equiv t_{r+1} - t_r$  における遷移振幅  $\langle \mathbf{q}_{r+1}, t_{r+1} | \mathbf{q}_r, t_r \rangle$  を評価する. Schrödinger 描像での状態の発展  $|\mathbf{q}_{r+1}, t_{r+1}\rangle = \hat{U}(t_{r+1}, t_r) |\mathbf{q}_r, t_r\rangle$  における時間的発展の演算子は,  $\varepsilon_r$  の 1 次までの近似では

$$\hat{U}(t_{r+1}, t_r) \simeq 1 + i\varepsilon_r \hat{H}(t_r)$$

と表されるので ( $\hat{H}(t) \equiv H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t)$ ),

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q}_{r+1}, t_{r+1} | \mathbf{q}_r, t_r \rangle &= \langle \mathbf{q}_{r+1}, t_r | \hat{U}(t_{r+1}, t_r)^\dagger | \mathbf{q}_r, t_r \rangle \\ &\simeq \langle \mathbf{q}_{r+1}, t_r | \{1 - i\varepsilon_r \hat{H}(t_r)\} | \mathbf{q}_r, t_r \rangle \\ &= \delta(\mathbf{q}_{r+1} - \mathbf{q}_r) - i\varepsilon_r \langle \mathbf{q}_{r+1}, t_r | \hat{H}(t_r) | \mathbf{q}_r, t_r \rangle \end{aligned}$$

と書ける. ここで  $\hat{H}(t)$  が Weyl 順序にあると仮定し, 公式 (144):

$$\langle \mathbf{q}_{r+1}, t_r | \hat{H}(t_r) | \mathbf{q}_r, t_r \rangle = \int \frac{d^N p_r}{(2\pi)^N} e^{i\mathbf{p}_r \cdot (\mathbf{q}_{r+1} - \mathbf{q}_r)} H(\bar{\mathbf{q}}_r, \mathbf{p}_r, t), \quad \bar{\mathbf{q}}_r \equiv \frac{\mathbf{q}_{r+1} + \mathbf{q}_r}{2}$$

を適用すると,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q}_{r+1}, t_{r+1} | \mathbf{q}_r, t_r \rangle &= \int \frac{d^N p_r}{(2\pi)^N} e^{i\mathbf{p}_r \cdot (\mathbf{q}_{r+1} - \mathbf{q}_r)} \{1 - i\varepsilon_r H(\bar{\mathbf{q}}_r, \mathbf{p}_r, t)\} \\ &\simeq \int \frac{d^N p_r}{(2\pi)^N} e^{i\mathbf{p}_r \cdot (\mathbf{q}_{r+1} - \mathbf{q}_r)} e^{-i\varepsilon_r H(\bar{\mathbf{q}}_r, \mathbf{p}_r, t)} \\ &= \int \frac{d^N p_r}{(2\pi)^N} e^{i\varepsilon_r \tilde{L}_r} \end{aligned} \quad (152)$$

が得られる. ここに

$$\tilde{L}_r \equiv \mathbf{p}_r \cdot \dot{\mathbf{q}}_r - H(\bar{\mathbf{q}}_r, \mathbf{p}_r, t) \quad \left( \dot{\mathbf{q}}_r \equiv \frac{\mathbf{q}_{r+1} - \mathbf{q}_r}{\varepsilon_r} \right)$$

<sup>\*53</sup> この措置には最終的に得られる位相空間の積分 (153) において, 一般座標と運動量の積分変数の個数を揃える意味がある.

はラグランジアンを,  $\mathbf{q}, \mathbf{p}$  を変数として表したものである. これを式 (151) に代入すると,

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{q}_F, t_F | \mathbf{q}_I, t_I \rangle &= \int \left( \prod_{r=0}^{R-1} \frac{d^N q_r d^N p_r}{(2\pi)^N} e^{i\varepsilon_r \tilde{L}_r} \right) \delta(\mathbf{q}_0 - \mathbf{q}_I) \\ &= \int \left( \prod_{r=0}^{R-1} \frac{d^N q_r d^N p_r}{(2\pi)^N} \right) \exp \left( i \sum_{r=0}^{R-1} \varepsilon_r \tilde{L}_r \right) \delta(\mathbf{q}_0 - \mathbf{q}_I)\end{aligned}\quad (153)$$

となる. 最後に適当に  $R \rightarrow 0$  とすることで  $\varepsilon_r \rightarrow 0$  の極限をとると, 系の遷移振幅は (拡大) 位相空間の経路積分

$$\langle \mathbf{q}_F, t_F | \mathbf{q}_I, t_I \rangle = \int \mathcal{D}\mathbf{q} \mathcal{D}\mathbf{p} e^{i\tilde{S}[\mathbf{q}, \mathbf{p}]}$$

で表されることが分かる. ただし  $\tilde{S}[\mathbf{q}, \mathbf{p}] \equiv \lim_{\varepsilon_r \rightarrow 0} \sum_{r=0}^{R-1} \varepsilon_r \tilde{L}_r$  は作用を,  $\mathbf{q}, \mathbf{p}$  の関数として表したものである.

### C.3 (拡大) 配位空間における経路積分 [17, pp.36–41]

特にハミルトニアン

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

で記述される 1 粒子系を考えると, 位相空間の積分 (153) における運動量変数に関する積分は “Gauss 積分型” となって実行でき, (拡大) 配位空間における経路積分が得られる. 以下, この点を確認する.

$$\begin{aligned}\tilde{L}_r &= \mathbf{p}_r \cdot \dot{\mathbf{x}}_r - \frac{\mathbf{p}_r^2}{2m} - V_r \quad (V_r \equiv V(\bar{\mathbf{x}}_r, t_r)) \\ &= -\frac{1}{2m} (\mathbf{p}_r - m\dot{\mathbf{x}}_r)^2 + L_r, \\ L_r &\equiv \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}_r^2 + V_r : \text{ラグランジアン}\end{aligned}$$

と平方完成すると, 微小時間における遷移振幅 (152) は

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}_{r+1}, t_{r+1} | \mathbf{x}_r, t_r \rangle &= \int \frac{d^3 p_r}{(2\pi)^3} e^{i\varepsilon_r \tilde{L}_r} \\ &= e^{i\varepsilon_r L_r} \int \frac{d^3 p_r}{(2\pi)^3} \exp \left\{ -i\varepsilon_r \frac{(\mathbf{p}_r - m\dot{\mathbf{x}}_r)^2}{2m} \right\} \\ &= e^{i\varepsilon_r L_r} \left[ \int \frac{dp}{2\pi} \exp \left\{ -i\varepsilon_r \frac{(p - m\dot{x})^2}{2m} \right\} \right]^3 \\ &= \left( \frac{m}{2\pi i \varepsilon_r} \right)^{3/2} e^{i\varepsilon_r L_r}\end{aligned}$$

と計算される. これを式 (150) に代入し, 再び  $\varepsilon_r \rightarrow 0$  の極限をとると, (拡大) 配位空間における経路積分

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}_F, t_F | \mathbf{x}_I, t_I \rangle &= \lim_{\varepsilon_r \rightarrow 0} \int \left( \prod_{r=1}^{R-1} d^3 q_r \right) \left( \frac{m}{2\pi i \varepsilon_r} \right)^{3R/2} \exp \left( i \sum_{r=0}^{R-1} \varepsilon_r L_r \right) \\ &= \int \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{iS[\mathbf{x}(t)]}, \quad S[\mathbf{x}(t)] \equiv \lim_{\varepsilon_r \rightarrow 0} \sum_{r=0}^{R-1} \varepsilon_r L_r : \text{作用}\end{aligned}$$

を得る<sup>\*54</sup>。規格化定数の定義は J.J. サクライ『現代の量子力学 (上)』2.5 節のものと正確に一致している。

---

<sup>\*54</sup> ただし  $r = 0$  の項については、

$$L_0 \equiv \frac{1}{2}m \left( \frac{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_I}{\varepsilon_1} \right)^2 - V \left( \frac{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_I}{2} \right)$$

と定義した。

## 付録 D 水素原子

ここで量子力学の定番の題材の1つとして、水素原子の問題を取り上げよう。

### D.1 球対称な場に関する一般論 [1, pp.148–152]

3.6節では球対称なポテンシャル  $V(r)$  の下での定常状態の波動関数 (エネルギー固有関数) が,  $Y_l^m(\theta, \phi)$  を球面調和関数として

$$\psi(\mathbf{x}') = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$$

の形に変数分離されることを学んだ。そこで次に、与えられた  $V(r)$  に対して“動径関数”  $R(r)$  を求める問題に移ろう。  $Y_l^m(\theta, \phi)$  が Laplacian の角度部分の固有関数であること (式 (59)) より、時間に依存しない波動方程式 (59):

$$\begin{aligned} E\psi &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta' + V \right) \psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right\} \right] + V\psi \end{aligned}$$

は  $R(r)$  に対する方程式

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) R = 0 \quad (154)$$

になる\*55。

上式 (154) から、場の中心付近  $r \rightarrow 0$  における  $R(r)$  の漸近形を引き出すことができる。ただし  $V(r)$  は  $r \rightarrow 0$  で  $-\infty$  になる引力ポテンシャルであったとしても、  $1/r^2$  よりはずっと  $-\infty$  になる場合

$$r^2 V(r) \rightarrow 0 \quad (r \rightarrow 0 \text{ のとき}) \quad (155)$$

を仮定する。このとき  $R$  は原点付近で、与えられた  $l$  に対して

$$R \simeq \text{const} \cdot r^l \quad (156)$$

という形を持つことが示される (導出は D.3 節)。

■条件 (155) の物理的意味 古典的には上式 (155) が満たされなければ、保存する角運動量の適当な値に対して、粒子は場の中心  $r = 0$  に到達 (落下) することが可能となる [7, p.40]。このとき量子力学的には、“基底”状態は  $r = 0$  に見出される粒子に対応することになると考えられる。式 (155) はこのような場合を除外する条件となっている (詳細は D.3 節を参照) [1, p.108]。我々がこれから考える Coulomb ポテンシャル  $V(r) \sim 1/r$  はこの条件 (155) を満たしている。

\*55 式 (154) における  $\frac{l(l+1)}{r^2} R$  の項は、もとの Schrödinger 方程式から現れる遠心力ポテンシャルの項  $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \psi$  に由来している (D.3 節における古典力学の復習を参照)。

## D.2 水素原子 [1, pp.160–165]

水素型イオンにおける，原点に固定された電荷  $+Ze$  を持つ核の作る場の中の電子（質量  $m$ ，電荷  $-e$ ）を考えよう．相互作用  $V(r)$  は球対称な Coulomb ポテンシャル

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

で与えられる．水素原子に対しては  $Z = 1$  である．以下では束縛状態に対応した， $E < 0$  のエネルギー固有値を仮定する．

簡単のために，長さの尺度  $a \equiv \frac{\hbar^2}{me^2}$  とエネルギーの尺度  $\frac{me^4}{\hbar^2}$  を用いて，変数を

$$\frac{r}{a} \rightarrow r, \quad a^{3/2}R \rightarrow R, \quad \frac{E}{me^4/\hbar^2} \rightarrow E$$

と無次元化して再定義する．

**原子単位** この措置は原子単位を採用することに相当する．原子単位では質量，長さ，時間の単位をそれぞれ

$$m, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad \frac{\hbar^3}{me^4}$$

に選ぶ．このときエネルギーを測る単位は

$$m \left( \frac{\hbar^2}{me^2} \right)^2 \left( \frac{\hbar^3}{me^4} \right)^{-2} = \frac{me^4}{\hbar^2} (\equiv 2\text{Ry})$$

となる．ここに  $a$  は Bohr 半径，Ry は Rydberg と呼ばれる．原子単位に移行するには，単に式の中で  $e = 1, m = 1, \hbar = 1$  とおけば良い．

さて，Coulomb ポテンシャル  $V(r)$  に対して  $R$  の満たす方程式 (154) を適用すると， $n \geq l + 1$  を満たす整数  $n$  を用いてエネルギーは

$$E = E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \quad \left( \text{もとの単位で } E = -\frac{Z^2 me^4}{2\hbar^2 n^2} \right) \quad (157)$$

と離散化されることが示される（導出は D.4 節）． $E_1 \geq E < 0$  の範囲に無数のエネルギー準位が存在しており， $E = 0$  に近づくにつれて準位が密になり準連続的なスペクトルに移行する<sup>\*56</sup>．

また対応する（すなわち与えられた  $n, l$  の値に対する）動径関数は，

$$L_\nu^k(x) \equiv \sum_{s=0}^{\nu-k} (-1)^{s+k} \frac{(\nu!)^2}{s!(s+k)!(\nu-s-k)!} x^s \quad (k = 0, 1, \dots, \nu) \quad (158)$$

で定義される Laguerre 陪多項式を用いて

$$R(\rho) = R_{nl}(\rho) = \text{const} \cdot \rho^l e^{-\rho/2} L_{n-l}^{2l+1}(\rho) \quad (159)$$

<sup>\*56</sup> ここで一般に無限遠でゼロになるポテンシャルに対して， $E < 0$  のスペクトルは離散的であるのに対し， $E > 0$  のスペクトルは連続的であることを思い出す [1, pp.108–110]．

(ただし  $\rho \equiv \frac{2rZ}{n}$ ) と表されることが示される (導出は D.4 節). 規格化定数を条件

$$1 = \int |\psi|^2 r^2 dr d\Omega = \int_0^\infty |R|^2 r^2 dr \int |Y_l^m|^2 d\Omega = \int_0^\infty |R|^2 r^2 dr \quad (160)$$

から定めると (この式は原子単位ともとの単位とで変わらない),

$$R(\rho) = \frac{2Z^{3/2}}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \cdot \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad (161)$$

を得る (導出は D.4 節, 教科書の付録 p.352 も参照) [15, p.93]. 上式 (160) に見て取れるように, 粒子 (電子) を動径方向の距離  $r$  に見出す確率の密度は  $|rR|^2$  で与えられることにも注意しよう [1, p.152].

ここで量子数について説明する. 球対称な場の問題に対して  $l$  は方位量子数,  $m$  は磁気量子数と呼ばれる. 慣習的に  $l = 0, 1, 2, \dots$  の状態は, アルファベット s, p, d,  $\dots$  で表される.  $n$  は主量子数と呼ばれ, その値のとり得る範囲  $n \geq l + 1$  は  $l$  で決まる.  $l = 0, 1, 2, \dots$  なので  $n = 1, 2, \dots$  が可能である. よって  $n$  と  $l$  の値に応じて, 例えば次のような状態が得られる.

$$\begin{aligned} s &\leftrightarrow l = 0 \Rightarrow n = 1, 2, 3, 4, \dots \rightarrow 1s, 2s, 3s, 4s, \dots \\ p &\leftrightarrow l = 1 \Rightarrow n = 2, 3, 4, \dots \rightarrow 2p, 3p, 4p, \dots \\ d &\leftrightarrow l = 2 \Rightarrow n = 3, 4, \dots \rightarrow 3d, 4d, \dots \end{aligned}$$

なお  $n$  の代わりに, 最低準位に対して  $n_r = 0$  となる動径量子数  $n_r = n - l - 1$  を用いることができる [1, p.151].

逆にあらかじめ  $n$  を指定すると,  $l$  は  $n$  個の値

$$l = 0, 1, \dots, n - 1$$

をとり得る. しかるにエネルギー固有値 (157) は量子数  $n$  だけで決まっているので, 各エネルギー準位は  $l$  について縮退していることになる (これは Coulomb 場に特有の事情である). さらに軌道角運動量の一般論より,  $l$  で指定される各状態は  $m$  について  $(2l + 1)$  重に縮退している. こうして  $n$  番目のエネルギー準位の縮退度は

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$$

となる.

最後に  $n = 1$  (したがって  $l = 0, m = 0$ ) の基底状態に限って, 一般式 (161) が具体的にどのような結果を意味するかを見てみよう. 議論を確定するために, 水素原子 ( $Z = 1$ ) を考える. このとき  $L_1^1(\rho) = -1, \rho = 2r$  より, 波動関数  $\psi$  は

$$R_{10} = -2e^{-r}, \quad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad \psi = R_{10}Y_0^0 = -\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}$$

と求まる. すなわち基底状態では波動関数自身も球対称であり, 波動関数は  $r = 1$  (Bohr 半径) 程度の広がりを持つ. 動径方向の確率分布は

$$f(r) \equiv |rR|^2 = 4r^2 e^{-2r}$$

であり (今の場合  $\psi$  の球対称性より, これは  $f = 4\pi r^2 |\psi|^2$  としても得られる), これは Bohr 半径  $r = 1$  で極大となる (図 43 参照).  $f(r)$  による平均値

$$\langle r \rangle \equiv \int_0^\infty r f(r) dr = \frac{3}{2} \quad (162)$$

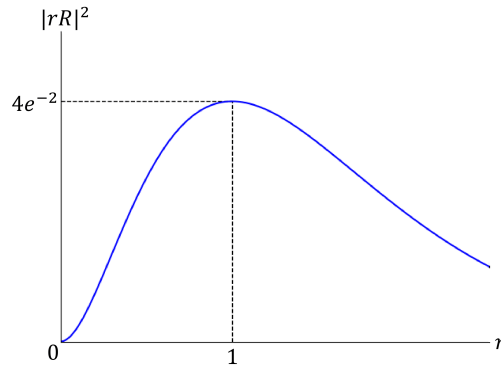


図 43 基底状態の水素原子における，電子の動径方向の存在確率分布

は Bohr 半径の 3/2 倍である (導出は D.4 節，教科書の付録 (pp.352-353) も参照)。

### D.3 球対称な場に関する一般論 (補足)

■遠心力ポテンシャルと，条件 (155) の補足説明 古典力学を復習しよう [7, pp.36-40]．中心力の場における 1 体の運動を考える．

$$\text{ポテンシャル } V(r) \Rightarrow \mathbf{F} = -\frac{dV}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r} : \text{中心力.}$$

中心力の場において (軌道) 角運動量  $\mathbf{L}$  が保存

⇒ 運動は  $\mathbf{L}$  に垂直な一平面内，平面内に極座標  $r, \phi$  を導入 (力の中心を原点とする)。

$$\begin{cases} \text{エネルギー保存則} & E = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) + V(r) \\ \text{角運動量保存則} & L = mr^2\dot{\phi} \end{cases}$$

$$\Rightarrow E = \frac{m\dot{r}^2}{2} + V_{\text{有効}}(r), \quad V_{\text{有効}}(r) \equiv V(r) + \frac{L^2}{2mr^2}, \quad \frac{L^2}{2mr^2} : \text{遠心力ポテンシャル.}$$

$L^2/2mr^2$  が遠心力のポテンシャル・エネルギーと呼ばれるのは次の事情による．粒子の速度と加速度を動径方向 (方向単位ベクトル  $\mathbf{e}_r$ ) と角度方向 (方向単位ベクトル  $\mathbf{e}_\phi$ ) に分解すると

$$\dot{\mathbf{r}} = \dot{r}\mathbf{e}_r + r\dot{\phi}\mathbf{e}_\phi, \quad \ddot{\mathbf{r}} = (\ddot{r} - r\dot{\phi}^2)\mathbf{e}_r + (2\dot{r}\dot{\phi} + r\ddot{\phi})\mathbf{e}_\phi$$

となるので，一般に  $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\phi$  を基底とする座標系における運動方程式について， $\mathbf{e}_r$  成分は

$$m\ddot{r} = F_r + mr\dot{\phi}^2, \quad mr\dot{\phi}^2 : \text{遠心力}$$

と書ける．中心力の場では角運動量は  $mr^2\dot{\phi} = L$  (一定) なので，遠心力は  $mr\dot{\phi}^2 = \frac{L^2}{mr^3}$  と表される．これは遠心力ポテンシャル  $\frac{L^2}{2mr^2}$  から導かれる．

引力の場においても，ポテンシャル・エネルギーが  $r \rightarrow 0$  で十分に速く  $-\infty$  に近づかなければ，遠心力ポテンシャルのため粒子は場の中心に到達できない．粒子が場の中心に到達できる条件は

$$0 < \frac{m\dot{r}^2}{2} = E - V(r) - \frac{L^2}{2mr^2}, \quad \therefore \lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) < -\frac{L^2}{2m}$$

で与えられる．

■動径関数  $R(r)$  の  $r \rightarrow 0$  における漸近形 (156) の導出  $R$  に対する方程式 (154):

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) R = 0$$

に  $r^2$  を掛けて  $r \rightarrow 0$  とし, 条件 (155):  $r^2 V(r) \rightarrow 0$  を考慮すると

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - l(l+1) R = 0$$

を得る.  $r \rightarrow 0$  での動径関数を  $R = \text{const} \cdot r^s$  の形に仮定し, これを上式に代入すると

$$\begin{aligned} \text{const} \cdot \{s(s+1) - l(l+1)\} r^s &= 0, \\ \therefore 0 = s(s+1) - l(l+1) &= (s-l)(s+l+1) \end{aligned}$$

となる.  $s = -l - 1$  に対して  $R$  は  $r = 0$  で発散する. これは粒子が場の中心  $r = 0$  に“落下”しない条件 (155) の下で, 確率密度  $|\psi|^2$  が  $r = 0$  を含む空間全体で有限でなければならないことに反する. よって適正な解は式 (156):  $R = \text{const} \cdot r^l$  に限られる.

#### D.4 水素原子 (補足)

■水素原子のエネルギー固有値 (157) と動径関数 (159) の導出 Coulomb ポテンシャル  $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$  に対して  $R$  の満たす方程式 (154) は

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} \right) R = 0 \quad (163)$$

となる. さて, 原子単位を採用して変数を

$$r \rightarrow r' = \frac{r}{a}, \quad R \rightarrow R' = a^{3/2} R, \quad E \rightarrow E' = \frac{E}{me^4/\hbar^2}$$

(ただし  $a = \hbar^2/me^2$  は Bohr 半径) と無次元化しよう. 上式 (163) は両辺に  $a^2 \cdot a^{3/2}$  を掛けると

$$\frac{d^2 R'}{dr'^2} + \frac{2}{r'} \frac{dR'}{dr'} - \frac{l(l+1)}{r'^2} R' + 2a^2 \frac{m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} \right) R' = 0$$

と書き換えられる. さらに  $a = \hbar^2/me^2$  より

$$a^2 \frac{m}{\hbar^2} E = \frac{E}{me^4/\hbar^2} = E', \quad a^2 \frac{m}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{r} = \left( a \frac{m}{\hbar^2} Ze^2 \right) \frac{a}{r} = \frac{Z}{r'}$$

となることに注意すると,

$$\frac{d^2 R'}{dr'^2} + \frac{2}{r'} \frac{dR'}{dr'} - \frac{l(l+1)}{r'^2} R' + 2 \left( E + \frac{Z}{r'} \right) R' = 0 \quad (164)$$

が得られる. ただし無次元化を表すプライムは煩わしいので省いた. もちろん D.2 節で説明したように, 原子単位での式 (164) はもとの式 (163) で  $e, m, \hbar$  を 1 とおけば直ちに導かれる.

次に  $E$  と  $r$  の代わりとなる量

$$n = \frac{Z}{\sqrt{-2E}}, \quad \rho = \frac{2rZ}{n} \quad (165)$$



を導入する。  $E < 0$  なので、現段階では  $n$  は正の実数を取り得るものと想定されている。これらを用いて上式 (164) を書き換えよう。式 (164) の両辺に  $\left(\frac{n}{2Z}\right)^2$  を掛けると

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R + 2 \left(\frac{n}{2Z}\right)^2 \left(E + \frac{Z}{r}\right) R = 0$$

が得られ、さらに  $2 \left(\frac{n}{2Z}\right)^2 E = -\frac{1}{4}$ ,  $2 \left(\frac{n}{2Z}\right)^2 \frac{Z}{r} = \frac{n}{\rho}$  と書き換えられるので

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} R = 0 \quad (166)$$

を得る (プライムは  $\rho$  による微分)。

計算を進める方針の洞察を得るために、式 (166) を満たす  $R$  の  $\rho$  の大きいところでの漸近的振舞いを調べよう。式 (166) において  $\rho \rightarrow \infty$  を想定し、 $1/\rho$  や  $1/\rho^2$  に比例する項を無視すると

$$R'' = \frac{R}{4}, \quad \therefore R \sim e^{\pm\rho/2}$$

が見出される。束縛状態の波動関数は無限遠でゼロになることが期待されるので、 $R \sim e^{-\rho/2}$  が物理的に適切な選択である。他方、 $\rho \rightarrow 0$  では動径関数は式 (156):  $R \sim \rho^l$  の形を持つ。

以上の考察より、

$$R = \rho^l e^{-\rho/2} w(\rho) \quad (167)$$

という置換を行うことが動機付けられる。そこで上式 (166) を  $w$  に対する微分方程式に焼き直そう。

$$\begin{aligned} R &= \rho^l e^{-\rho/2} w, \\ \therefore R' &= \left\{ \left( \frac{l}{\rho} - \frac{1}{2} \right) w + w' \right\} \rho^l e^{-\rho/2}, \\ \therefore R'' &= \left[ \left\{ \left( \frac{l}{\rho} - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{l}{\rho^2} \right\} w + 2 \left( \frac{l}{\rho} - \frac{1}{2} \right) w' + w'' \right] \rho^l e^{-\rho/2} \end{aligned}$$

を式 (166) に代入して整理すると

$$\rho w'' + (2l + 2 - \rho) w' + (n - l - 1) w = 0 \quad (168)$$

が得られる。この解を級数

$$w(\rho) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \rho^s \quad (169)$$

の形に求める。

$$w' = \sum_{s=1}^{\infty} s a_s \rho^{s-1}, \quad w'' = \sum_{s=2}^{\infty} s(s-1) a_s \rho^{s-2}$$

および

$$\rho w'' = \sum_{s=1}^{\infty} s(s-1) a_s \rho^{s-1}, \quad \rho w' = \sum_{s=0}^{\infty} s a_s \rho^s$$

(それぞれ  $s = 1, 0$  の項を和に含めて良いことに注意) を式 (168) に代入すると,

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{s=1}^{\infty} \{a_s s(s-1) + (2l+2)a_s s\} \rho^{s-1} + \sum_{s=0}^{\infty} \{-a_s s + a_s(n-l-1)\} \rho^s \\ &= \sum_{s=1}^{\infty} a_s s(s+2l+1) \rho^{s-1} + \sum_{s=0}^{\infty} a_s(n-l-1-s) \rho^s \\ &= \sum_{s=0}^{\infty} \{a_{s+1}(s+1)(s+2l+2) + a_s(n-l-1-s)\} \rho^s. \end{aligned}$$

展開係数がゼロになることを要求すると, 再帰公式

$$a_{s+1} = -a_s \frac{n-l-1-s}{(s+1)(s+2l+2)} \quad (170)$$

を得る. ここで級数展開 (169) は,  $\rho = 0$  で  $w$  が, したがって  $R$  が有限であることを保証している. 他方  $R$  の式 (167) を見ると,  $\rho \rightarrow \infty$  では  $w$  が  $\rho$  の有限のべきよりもはやく発散してはならないことが要求される. そのためには, ある  $s(=0, 1, \dots)$  に対し  $n = l+1+s$  であれば良い. と言うのも, このとき上式 (170) より  $a_{s+1} = 0$  となり, 級数は有限の項で打ち切られる.

こうして  $n$  は

$$n \geq l+1$$

を満たす整数と決まった.  $n$  の定義式 (165) に戻ると, これはエネルギーの可能な値が離散スペクトル (157):

$$E = -\frac{Z^2}{2n^2} \quad (n = 1, 2, \dots)$$

で与えられることを意味する. また動径関数はまとめると

$$\text{式 (167)} : R = \rho^l e^{-\rho/2} w(\rho), \quad \text{式 (169)} : w(\rho) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \rho^s, \quad \text{式 (170)} : a_{s+1} = -a_s \frac{n-l-1-s}{(s+1)(s+2l+2)}$$

で定まる.  $s = n-l-1$  に対して  $a_{s+1} = 0$  なので

$$a_{n-l} = a_{n-l+1} = a_{n-l+2} = \dots = 0$$

であり, ゼロにならない (可能性のある) 係数  $a_0, a_1, \dots, a_{n-l-1}$  は最初の係数  $a_0$  で決まる ( $a_0$  の不定性は規格化条件で取り除かれる). これを Laguerre 陪多項式 (158):

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{s=0}^{n-l-1} (-1)^{s+2l+1} \frac{[(n+l)!]^2}{s!(s+2l+1)!(n-l-1-s)!} \rho^s \quad (n \geq l+1)$$

と比較すると, 全体に掛かる定数係数の違いを除いて  $w(\rho)$  は  $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$  に一致することが見て取れる ( $w(\rho) = \text{const} \cdot L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ ). よって式 (159):

$$R(\rho) = \text{const} \cdot \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

に到達する.

■動径関数 (161) における規格化定数の導出 [15, pp.88–93] 原子単位において動径関数 (159):

$$R(\rho) = C \cdot \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

に対し, 規格化条件 (160) は

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = \left(\frac{n}{2Z}\right)^3 \int_0^\infty |R|^2 \rho^2 d\rho \quad \left(\because \rho = \frac{2rZ}{n}\right) \\ &= |C|^2 \left(\frac{n}{2Z}\right)^3 \int_0^\infty [L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2 \rho^{2l+2} e^{-\rho} d\rho \end{aligned}$$

となる. ここで Laguerre 陪多項式に関する積分公式

$$\int_0^\infty [L_\nu^k(x)]^2 x^{k+1} e^{-x} dx = (2\nu + 1 - k) \frac{(\nu!)^3}{(\nu - k)!} \quad (171)$$

(すぐ後で証明) を  $k = 2l + 1, \nu = n + l$  として適用すると,

$$|C|^2 \left(\frac{n}{2Z}\right)^3 \times 2n \frac{[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} = 1$$

を得る. 動径関数の位相の任意性より  $C$  を正の実数に選ぶと,

$$C = \frac{2Z^{3/2}}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}$$

と定まる.

完全を期して, 上で用いた数学公式 (171) の証明を行う. その手順は次のようにまとめられる.

1. 級数展開 (158):

$$L_\nu^k(x) \equiv \sum_{s=0}^{\nu-k} (-1)^{s+k} \frac{(\nu!)^2}{s!(s+k)!(\nu-s-k)!} x^s \quad (k = 0, 1, \dots, \nu)$$

で定義される Laguerre 陪多項式は, 等価的に

$$g(t, x) \equiv \frac{(-1)^k}{(1-t)^{k+1}} \exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{\nu=k}^{\infty} L_\nu^k(x) \frac{t^{\nu-k}}{\nu!} \quad (172)$$

と書いて, “母関数”  $g(t, x)$  の展開係数として定義できることを示す.

2. 母関数 (172) を利用して, Laguerre 陪多項式の漸化式

$$\left(1 - \frac{k}{\nu+1}\right) L_{\nu+1}^k(x) + (x+k-2\nu-1) L_\nu^k(x) + \nu^2 L_{\nu-1}^k(x) = 0 \quad (173)$$

を導く.

3. 母関数 (172) を利用して, Laguerre 陪多項式の直交性

$$\int_0^\infty L_\mu^k(x) L_\nu^k(x) x^k e^{-x} dx = \frac{(\nu!)^3}{(\nu-k)!} \delta_{\mu\nu} \quad (174)$$

を導く.

4. 漸化式 (173) と直交性 (174) を用いて, 積分公式 (171) を導く.

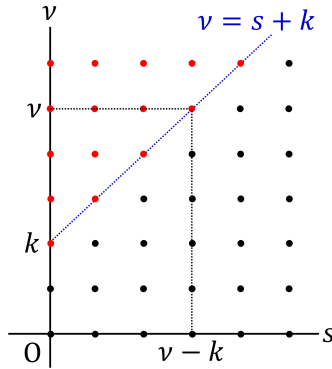


図 44 和をとられる添字の組  $(s, \nu)$  を赤い格子点で示した

母関数の式 (172) の導出 母関数 (172) は

$$g(t, x) \equiv \frac{(-1)^k}{(1-t)^{k+1}} \exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{s=0}^{\infty} (-1)^{s+k} \frac{x^s}{s!} \frac{t^s}{(1-t)^{s+k+1}}$$

と展開できる. さらに最右辺において

$$\begin{aligned} \frac{t^s}{(1-t)^{s+k+1}} &= t^s \left\{ 1 + (s+k+1)t + \frac{(s+k+1)(s+k+2)}{2!} t^2 + \dots \right\} \\ &= t^2 \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(s+k+1)!}{(s+k)! p!} t^p \\ &= \sum_{\nu=s+k}^{\infty} \frac{\nu!}{(s+k)! (\nu-k-s)!} t^{\nu-k} \quad (\nu = s+k+p) \end{aligned}$$

とできるので,

$$g(t, x) = \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{\nu=s+k}^{\infty} (-1)^{s+k} \frac{x^s}{s!} \frac{\nu!}{(s+k)! (\nu-k-s)!} t^{\nu-k}$$

を得る. 和の順序を

$$\sum_{s=0}^{\infty} \sum_{\nu=s+k}^{\infty} \rightarrow \sum_{\nu=k}^{\infty} \sum_{s=0}^{\nu-k}$$

と入れ替え (和の範囲は図 44 から判断できる),  $g(x, t)$  を

$$\sum_{\nu=k}^{\infty} L_{\nu}^k(x) \frac{t^{\nu-k}}{\nu!}$$

と等置すると, 展開係数は

$$L_{\nu}^k(x) \equiv \sum_{s=0}^{\nu-k} (-1)^{s+k} \frac{(\nu!)^2}{s!(s+k)! (\nu-s-k)!} x^s$$

と同等される. これは級数展開 (158) で定義した Laguerre 陪多項式に他ならないから, 母関数の式 (172) を改めて Laguerre 陪多項式の定義と見なしても良いことになる.

漸化式 (173) の導出 母関数の式 (172) の対数をとって  $t$  で微分すると,

$$\begin{aligned} \ln g &= \ln \frac{(-1)^k}{(1-t)^{k+1}} - \frac{xt}{1-t}, \\ \therefore \frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial t} &= \frac{k+1}{1-t} - \frac{x}{1-t} - \frac{xt}{(1-t)^2} = \frac{k+1}{1-t} - \frac{x}{(1-t)^2} \end{aligned}$$

となる。よって

$$\begin{aligned}
0 &= (1-t)^2 \frac{\partial g}{\partial t} - (k+1)(1-t)g - xg \\
&= \sum_{\nu=k}^{\infty} \frac{L_{\nu}^k(x)}{\nu!} \left\{ (\nu-k)(t^{\nu-k-1} - 2t^{\nu-k} + t^{\nu-k+1}) - (k+1)(t^{\nu-k} - t^{\nu-k+1}) + xt^{\nu-k} \right\} \\
&= \sum_{\nu=k}^{\infty} \frac{L_{\nu}^k(x)}{\nu!} \left\{ (\nu-k)t^{\nu-k-1} + (x+k-2\nu-1)t^{\nu-k} + (\nu+1)t^{\nu-k+1} \right\} \\
&= \sum_{\nu=k-1}^{\infty} \frac{L_{\nu+1}^k(x)}{(\nu+1)!} (\nu+1-k)t^{\nu-k} + \sum_{\nu=k}^{\infty} \frac{L_{\nu}^k(x)}{\nu!} (x+k-2\nu-1)t^{\nu-k} + \sum_{\nu=k+1}^{\infty} \frac{L_{\nu-1}^k(x)}{(\nu-1)!} \nu t^{\nu-k} \\
&= \sum_{\nu=k+1}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \left[ \left(1 - \frac{k}{\nu+1}\right) L_{\nu+1}^k(x) + (x+k-2\nu-1)L_{\nu}^k(x) + \nu^2 L_{\nu-1}^k(x) \right] t^{\nu-k} + (t^0 \text{ と } t^{-1} \text{ の項})
\end{aligned}$$

であり、これが任意の  $t$  で成り立つことを要求して和の中で  $t^{\nu-k}$  の係数  $[\dots]$  をゼロと置くと、漸化式 (173) が導かれる。この導出方法から理解されるように、漸化式 (173) は Laguerre 陪多項式が定義される添字の範囲  $\nu = k+1, k+2, \dots$  で常に成立する。

直交性 (174) の導出 式 (172) の母関数  $g(t, x)$  に対して

$$\int_0^{\infty} g(t, x)g(s, x)x^k e^{-x} dx = \sum_{\nu=k}^{\infty} \sum_{\mu=k}^{\infty} \frac{t^{\nu-k} s^{\mu-k}}{\nu! \mu!} \int_0^{\infty} L_{\nu}^k(x)L_{\mu}^k(x)x^k e^{-x} dx \quad (175)$$

である。上式 (175) の左辺

$$\frac{1}{(1-t)^{k+1}(1-s)^{k+1}} \int_0^{\infty} x^k \exp\left(-x - \frac{xt}{1-t} - \frac{xs}{1-s}\right) dx \equiv \frac{1}{(1-t)^{k+1}(1-s)^{k+1}} I_k$$

における積分

$$I_k \equiv \int_0^{\infty} x^k e^{-\alpha x} dx, \quad \alpha \equiv 1 + \frac{t}{1-t} + \frac{s}{1-s} = \frac{1-st}{(1-t)(1-s)}$$

は、部分積分により

$$I_k = \frac{k}{\alpha} I_{k-1} = \dots = \frac{k!}{\alpha^k} I_0 = \frac{k!}{\alpha^{k+1}}$$

と計算できる。よって

$$\begin{aligned}
(\text{式 (175) 左辺}) &= \frac{k!}{(1-t)^{k+1}(1-s)^{k+1}} \times \frac{(1-t)^{k+1}(1-s)^{k+1}}{(1-st)^{k+1}} = \frac{k!}{(1-st)^{k+1}} \\
&= k! \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(k+p)!}{k!} \frac{(st)^p}{p!} \quad (\text{Taylor 展開}) \\
&= \sum_{\nu=k}^{\infty} \frac{\nu! (st)^{\nu-k}}{(\nu-k)!} \quad (p = \nu - k)
\end{aligned}$$

であり、これを式 (175) の右辺と比較すると、直交性 (174):

$$\int_0^{\infty} L_{\mu}^k(x)L_{\nu}^k(x)x^k e^{-x} dx = \frac{(\nu!)^3}{(\nu-k)!} \delta_{\mu\nu}$$

が見出される。

積分公式 (171) の導出 漸化式 (173):

$$xL_{\nu}^k(x) = (2\nu+1-k)L_{\nu}^k(x) - \left(1 - \frac{k}{\nu+1}\right)L_{\nu+1}^k(x) + \nu^2 L_{\nu-1}^k(x)$$

および直交性 (174):

$$\int_0^{\infty} L_{\mu}^k(x)L_{\nu}^k(x)x^k e^{-x} dx = \frac{(\nu!)^3}{(\nu-k)!} \delta_{\mu\nu}$$

を用いると,

$$\begin{aligned} \int_0^\infty [L_\nu^k(x)]^2 x^{k+1} e^{-x} dx &= (2\nu + 1 - k) \int_0^\infty [L_\nu^k(x)]^2 x^k e^{-x} dx + \dots \\ &= (2\nu + 1 - k) \frac{(\nu!)^3}{(\nu - k)!} : (171). \end{aligned}$$

ただし「…」は直交性 (174) によりゼロになる項を表す.

■基底状態における半径の期待値 (162) の導出 動径方向の確率分布  $f(r) = 4r^2 e^{-2r}$  を用いて

$$\langle r^k \rangle \equiv \int_0^\infty r^k f(r) dr = 4 \int_0^\infty r^{k+2} e^{-2r} dr$$

を定義すると, 部分積分により

$$\langle r^k \rangle = \frac{k+2}{2} \langle r^{k-1} \rangle = \dots = \frac{(k+2)!}{2^{k+2}} \langle r^{-2} \rangle = \frac{(k+2)!}{2^{k+1}}$$

と計算できる. ここから改めて規格化条件

$$\int_0^\infty f(r) dr = \langle r^0 \rangle = 1$$

が満たされていることが確かめられる. また式 (162):  $\langle r \rangle = 3/2$  が得られる. (以上, 長さは Bohr 半径を単位として無次元化されていることに再度, 注意を促しておく.)

## 参考文献

- [1] L.D. ランダウ, E.M. リフシッツ, 2019, 量子力学 ランダウ=リフシッツ物理学小教程 (好村滋洋, 井上健男訳), 株式会社筑摩書房, 東京.
- [2] エリ・デ・ランダウ, イェ・エム・リフシッツ, 2015, ランダウ=リフシッツ理論物理学教程 場の古典論 (原書第 6 版)(恒藤敏彦, 広重徹訳), 東京図書株式会社, 東京.
- [3] ディラック, 2020, 量子力学 (朝永振一郎ほか訳), 株式会社岩波書店, 東京.
- [4] F. マンドル, G. ショー, 2011, 場の量子論 第 1 巻 量子電磁力学 (樺沢宇紀訳), 丸善プラネット株式会社, 東京.
- [5] ファインマンほか, 2012, ファインマン物理学 II (富山小太郎訳), 株式会社岩波書店, 東京.
- [6] 阿部龍蔵, 2011, 量子力学入門 物理テキストシリーズ 6, 株式会社岩波書店, 東京.
- [7] エリ・デ・ランダウ, イェ・エム・リフシッツ, 2013, ランダウ=リフシッツ理論物理学教程 力学 (増訂第 3 版)(広重徹, 水戸巖訳), 東京図書株式会社, 東京.
- [8] ゴールドスタインほか, 2009, 古典力学 (下) 原著第 3 版 (矢野忠ほか訳), 株式会社吉岡書店, 京都.
- [9] J.J.Sakurai, 2014, 現代の量子力学 (下)(桜井明夫訳), 株式会社吉岡書店, 京都.
- [10] B. ツヴィーバツハ, 2018, 初級講座 弦理論《発展編》(樺沢宇紀訳), 丸善プラネット株式会社, 東京.
- [11] 山本義隆, 中村孔一, 2012, 朝倉物理学大系 2 解析力学 II, 株式会社朝倉書店, 東京.
- [12] J.J. サクライ, 2013, 上級量子力学 第 I 巻 輻射と粒子 (樺沢宇紀訳), 丸善プラネット株式会社, 東京.
- [13] H. ジョージエイ, 2010, 物理学におけるリー代数——アイソスピンから統一理論へ—— (原著第 2 版) (九後汰一郎訳), 株式会社吉岡書店, 京都.
- [14] W. グライナー他, 2002, 熱力学・統計力学 (伊藤伸泰, 青木圭子訳), シュプリンガー・フェアラーク東京株式会社, 東京.
- [15] 小野寺嘉孝, 2014, 物理のための応用数学, 株式会社裳華房, 東京.
- [16] B. ツヴィーバツハ, 2013, 初級講座 弦理論《基礎編》(樺沢宇紀訳), 丸善プラネット株式会社, 東京.
- [17] 杉田勝実ほか, 2005, 経路積分と量子電磁力学 [POD 版], 森北出版株式会社, 東京.