

永里 繁行 様

自然界の根源についても深い関心を持続し、難解な質問で
私を困惑させた松下昇さんを偲びつつ——〈遺稿〉の位相で

1999. 5. 12 山浦 元

授業科目：量子力学Ⅰ（科目区分G・必修・2単位）

担当者：山浦 元 月曜日 1時限

授業方針： 初めに、光やマイクロ粒子が粒子と波動の二重性をもつことを明らかにした実験事実と、これらに関連する前期量子論の様々な仮説を概観する。確率振幅という意味をもつ波動関数に力点を置いてマイクロ粒子の行動を追及する立場をシュレーディンガーの波動力学という。その運動法則を重ね合わせの原理とフーリエ変換をもとに設定し、粒子の位置座標・運動量・エネルギーと微分演算子の関係、および微分演算子の交換関係を調べる。運動法則と確率統計論から物理量の期待値や不確定性原理が導かれ、また古典力学との関連も明らかになる。具体的な応用として、自由粒子波束の拡散、ポテンシャルに束縛された粒子のエネルギー固有値問題、ポテンシャルによる散乱問題、調和振動子の固有値問題と波束の周期運動などを取り上げる。最後に、関数内積と線形自己共役演算子を導入して、波動力学の運動法則を量子力学の運動法則へ拡張する。時間があれば、量子力学理論体系の自己完結性に関わる観測問題と観測理論について解説する。
授業進度
1. 作用量子仮説（空洞放射理論、固体の比熱）、光量子仮説（光電効果、コンプトン効果、相対論的エネルギー）、有核原子模型（ラザフォード散乱）
2. 水素原子模型（ボーア・ゾンマーフェルトの量子条件、フランク・ヘルツの実験、シュテルン・ゲルラッハの実験）、物質波仮説（マイクロ粒子の波動性、ダビソン・ジャーマーの実験）
3. 波動力学の第一法則（自由粒子の運動、平面波、波束の構成、マクロ的波動の不確定性関係）
4. 波動力学の第二法則（シュレーディンガー方程式、重ね合わせの原理、フーリエ変換による定式化、位置座標・運動量・エネルギー演算子）
5. 波動力学の第三法則（波動関数の確率解釈、確率保存則、デルタ関数規格化） 位置座標と運動量の期待値（エーレンフェストの定理、力学量一般の期待値）
6. 不確定性原理の導出（極小波束、自由粒子波束の拡散、 γ 線顕微鏡思考実験）
7. 演算子の正準交換関係（位置座標と運動量、軌道角運動量の z 成分と方位角、交換子）
8. 粒子の定常状態（束縛状態、離散的エネルギー固有値、剛体壁ポテンシャル）
9. 井戸型ポテンシャル（束縛状態、パリティ）、箱型ポテンシャル（衝突問題、トンネル効果）
10. 時間・エネルギーの不確定性関係（定常状態間の遷移確率）
11. 調和振動子（エネルギー準位、エルミート多項式、漸化式、直交規格化、波束の周期運動）
12. 三次元の球対称ポテンシャル（角運動量の固有値問題、球面調和関数、球ベッセル関数）
13. 関数内積による量子力学の定式化（線形自己共役演算子、完備直交関数系、ヒルベルト空間）
教科書：（新版）量子力学上、シッフ（著）、井上（訳）、吉岡書店（& 講義プリント）
参考書：（新版）量子力学下、シッフ（著）、井上（訳）、吉岡書店 量子力学、ディラック（著）、朝永他（訳）、岩波書店 量子力学1～3、メシア（著）、小出他（訳）、東京図書
履修のポイント・留意事項： 量子力学は抽象的な概念が多く現われてくるので、その物理的意味を自ら深く考えることが大切である。数学的にも他の専門科目に比べて高度で複雑であるが、適宜演習問題～レポートを課して計算に習熟してもらう。
質問時間： 土曜日 1～2 時限（他の時間帯も可）、物理第4研究室

基礎物理定数*

重力定数	G	6.67259(85)	$10^{-11} \text{ N}\cdot\text{m}^2\cdot\text{kg}^{-2}$
真空中の光の速さ	c	2.99792458	$10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ (定義値)
真空の透磁率	μ_0	$4\pi=12.5663706$	$10^{-7} \text{ H}\cdot\text{m}^{-1}$
真空の誘電率	ϵ_0	8.85418782	$10^{-12} \text{ F}\cdot\text{m}^{-1}$
電気素量	e	1.60217733(49)	10^{-19} C
	e^*	4.8032068(15)	10^{-10} e.s.u.
プランク定数	h	6.6260755(40)	$10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
	\hbar	1.05457266(63)	$10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
電子の質量	m_e	9.1093897(54)	10^{-31} kg
		5.48579903(13)	10^{-4} u
陽子の質量	m_p	1.6726231(10)	10^{-27} kg
		1.007276470(12)	u
陽子と電子の質量比	m_p/m_e	1836.152701(37)	
中性子の質量	m_n	1.6749286(10)	10^{-27} kg
		1.008664904(14)	u
原子質量単位	$m_u=1\text{u}$	1.6605402(10)	10^{-27} kg
微細構造定数	α	7.29735308(33)	10^{-3}
	α^{-1}	137.0359895(61)	
リュードベリ定数	R_∞	1.0973731534(13)	10^7 m^{-1}
ボーア半径	a_0	5.29177249(24)	10^{-11} m
ボーア磁子	μ_B	9.2740154(31)	$10^{-24} \text{ J}\cdot\text{T}^{-1}$
核磁子	μ_N	5.0507866(17)	$10^{-27} \text{ J}\cdot\text{T}^{-1}$
電子の磁気モーメント	μ_e	9.2847701(31)	$10^{-24} \text{ J}\cdot\text{T}^{-1}$
陽子の磁気モーメント	μ_p	1.41060761(47)	$10^{-26} \text{ J}\cdot\text{T}^{-1}$
陽子の磁気回転比	γ_p	26752.2128(81)	$10^4 \text{ s}^{-1}\cdot\text{T}^{-1}$
アボガドロ定数	N_A	6.0221367(36)	10^{23} mol^{-1}
気体定数	R	8.314510(70)	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
理想気体のモル体積 (273.15 K, 101325 Pa)	V_m	22.41410(19)	$10^{-3} \text{ m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$
ボルツマン定数	k	1.380658(12)	$10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$
シュテファン-ボルツマン定数	σ	5.67051(19)	$10^{-8} \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-4}$
ファラデー定数	F	9.6485309(29)	$10^4 \text{ C}\cdot\text{mol}^{-1}$
0°Cの絶対温度	T_0	273.15	K
標準大気圧	P_0	1.01325	10^5 Pa
\AA^* と \AA との比 (\AA^* は $\text{K}\alpha_1$ 線の波長を 0.209100\AA^* と定義)	$\text{\AA}^*/\text{\AA}$	1.00001481(92)	

* 国際学術連合会議 (ICSU) の科学・技術データ委員会 (CODATA) による 1986 年調整値より。

《量子力学的粒子・量子力学的波動とは何か？》

S0 プロローグ prologue (はな)

- Y: 量子力学の勉強を始めたのですが、むずかしくて困っています。今日は量子力学のやさしい説明を聞くつもりでやってきました。よろしくお願いします。
- N: 感心だね。だけど、何だってまた量子力学の勉強をしようと思いついたのかね。
- Y: セメスター制になっても「量子力学I」は必修だからやむを得ないですよ。量子力学は相対性理論と並んで現代物理学の理論的支柱だそうですね。人間と宇宙を含む物質構造を解明するためには、分子・原子・原子核・素粒子などのマイクロ世界の基礎理論である量子力学は不可欠な学問なのでしょう？
- N: なるほど。「やむを得ず」か「学びたい」のかよく分らんが、一体何がむずかしいのかね。
- Y: 数学的にも確かにむずかしいです。でも、それは努力すれば何とかなるでしょう。量子力学の本当のむずかしさは数式計算のところにあってはならないように思います。数式的に分かったとしても何かピンとこないというか、なかなか「分かった」という気持ちになれません。量子力学に現われてくる様々な概念の解釈になると、大学の先生もあまり頼りにならないことが多いと聞きました。
- N: 無理ないね。私自身の経験でも量子力学は通り一遍の勉強で理解できるような学問ではなかった。いくつかの本や論文を読み、さらに実際に使う経験を重ねていって少しずつ分かってきたように思う。しかも長年量子力学に親しんでいるというのに、いまだに、いい加減な理解しかしていなかったと思知らされることがある。
- Y: 量子力学はそんなにむずかしい学問なのですか？
- N: 確かにむずかしい。けどね、それは私たちの頭の悪さや不勉強のためばかりではないのだよ。量子力学の理論体系自身にも不透明なところがあると思う。事実、原理的かつ基本的な問題をめぐって専門家の間でも独断や偏見や誤解が交錯しており、厳しい対立と論争があるのだ。
- Y: アインシュタインが量子力学について原理的な疑念をもち、ボーアと論争したという話がありますね。
A. Einstein 1879~1955 ドイツ
N. Bohr 1855~1962 デンマーク
そんなにむずかしいとすれば、ぼくのような凡人が量子力学を理解するのは到底無理でしょうか？
- N: そんなことはない。今の話をそう受け取ってもらっては困る。量子力学だってステップをふんで勉強していけば誰にでも理解できる学問体系だよ。私が言いたかったのは、量子力学の理論体系そのものが古典力学に比べて分かりにくい構造をもっているという話だ。
- Y: 先生が言われている「むずかしさ」は、どうやらかなり高級な話のようですね。ぼくはもっと初等的な段階で「むずかしい」と言っているのですが…。不確定性原理とか、粒子が二つの穴を同時に通るとか、粒子であって波動であるとか…。
- N: 簡単に分かる方がむしろ不思議だよ。高級も低級もない。「むずかしさ」の根は同じところにあると思う。
- Y: とにかく、やさしく説明して下さい。
- N: 承知した。しかし、やさしく説明することは、それほどやさしい仕事ではない。
- Y: ぼくは数学はあまり得意ではないのですが大丈夫でしょうか？
- N: 「微分方程式・ベクトル解析・フーリエ解析・複素関数論」すなわち物理数学I~IVがきちんと理解できていれば十分だよ。必要に応じて復習~補習してあげるから心配はいらない。
- Y: ありがとうございます（物理数学の授業をもう少しまじめに聞いておけばよかったなあ…と不安になる）。

Y: 量子力学の理論の核心は、やはり「ミクロ粒子の位置座標 x と運動量 p の測定値偏差 Δx と Δp の間に不確定性関係 $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ が存在する」という不確定性原理だと思いますが、平均値や偏差を問題にするからには、一つの粒子について位置や運動量の測定値を多数集積する場合を想定しているのでしょうか。

N: それは違う。量子力学的測定では、一つの力学系に対しては1回の測定しか行なわないのだ。したがって測定値は1個しかない。しかし、同じ状態にある力学系を多数用意して、各力学系において独立に1回の測定を実施すれば測定値は多数集積する。 Δx や Δp はその測定値集団の偏差だ。そもそも、量子力学は力学系集団に対する統計的な確率法則しか与えてくれない。

Y: そうすると、量子力学によって一つの力学系の行動を厳密に予測することは不可能なのですか？

N: 正確に表現しておこう。量子力学は、一つの力学系に対する1回の測定の結果については——特殊な場合を除いて——ニュートン力学ふうの厳密な因果律に基づいて教えてはくれない。しかしながら、量子力学は統計的・確率的な因果律に基づいて「それなりに厳密に」一つの力学系の行動を予測させてくれるのだ。

Y: それにしても、確率でしかものを言わない量子力学の自然認識はとてもアヤフヤなような気がします…。不確定性関係にしても、 $\Delta x \rightarrow 0$ とすれば（すなわち、位置を精密に測定しようとする） $\Delta p \rightarrow \infty$ になる（すなわち、運動量が不定になる）ということでしょう。粒子の位置や運動量が「…しようと思えば…になる」というのは実に不思議です。物理学は客観的自然の客観的法則を記述すべきものでしょう。これでは観測者である特定の人間の自由意思で自然現象とその認識が左右されることになりませんか？

N: そのような議論は量子力学建設直後から行なわれてきた。客観的自然法則に対抗する人間主観の復権のよ
うに受け取ったり、客観的自然の存在が否定されたと考える物理学者や哲学者もまだいるようだ。しかし、
この種の考え方は基本的に間違っていると私は思う。量子力学が確実なことを一切語らないというのは明らか
に間違いだ。また不確定性関係そのものは巨視的な波動現象にも普遍的に見られる性質であり、そこには
神秘的な解釈を許すような要素はまったくない。ただし、ミクロ粒子のもつ波動・粒子の二重性と、そこから生まれた波動関数の確率解釈は量子力学独特のものであり、古典的波動にはない。

Y: 量子力学的波動が「確率波」だとすると、波動関数そのものは直接観測にかかる物理量とは言えないかも知れませんね。古典的波動では、波動関数は観測可能な物理量自身だったでしょう？

N: その通りだよ。したがって、量子力学では観測・測定とはどのような過程であるかを問う「観測問題」が生まれた。不確定性原理をめぐる疑問も観測問題に受け継がれ、厳しい対立と論争が続いてきた。量子論の創始者の一人でもあったアインシュタインは、1935年、ポドルスキー、ローゼンと連名で有名な論文「Can
B. Podolsky N. Rosen
quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?」を書き、ボーアたち（物理的実在の量子力学的記述は完全と考えられるか？）の正統派に真っ向から挑戦した。アインシュタインには、量子力学の確率解釈を原理的法則として認めたくない気持ち、すなわち基本法則は決定論的でなければならないという信念があったのだろう。しかし、量子力学は理論的予言が実験と一致するという意味ではまったく正しい理論体系であり、実用的に不都合なところは何もない。観測問題も私が一応解決した。時間があれば、その観測理論を話してあげよう。

Y: すごいなあ…それを先に聞かせて下さい。これまでの観測理論の論文がすべて紙くずになったのですか？

N: あわててはいけません。まず、量子力学が成立する実験的基盤を概観してから運動法則を設定してみよう。

J. Fourier 1768~1830 フランス

★ 量子力学でもよく用いるフーリエ解析と複素関数論の定理と公式をまとめておく。(物理数学Ⅲ・Ⅳ)

① $f(x) = \frac{1}{2} a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(n\pi x/L) + b_n \sin(n\pi x/L)]$ (周期 $2L$ の関数 $f(x)$ のフーリエ級数展開) Fourier series
 $a_n = L^{-1} \int_{-L}^L f(x) \cos(n\pi x/L) dx$, $b_n = L^{-1} \int_{-L}^L f(x) \sin(n\pi x/L) dx$, $n=0, 1, 2, \dots$

$f(x)$ が連続または区分的に連続で $f'(x)$ が区分的に連続ならば、 $f(x)$ のフーリエ級数は、 $f(x)$ が連続な点 x では $f(x)$ に収束し、 $f(x)$ が不連続な点 x では $\frac{1}{2}[f(x+0) + f(x-0)]$ に収束する。

② $f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{in\pi x/L}$, $a_n = (2L)^{-1} \int_{-L}^L f(x) e^{-in\pi x/L} dx$ (①の複素数表示, 複素フーリエ級数)

③ $f(x) = (1/\pi) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(u) \cos \alpha(x-u) du d\alpha$ ($f(x)$ のフーリエ積分表示。 $\int f(x) dx =$ 有限確定) Fourier integral

④ ③を複素数化して $f(x) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(u) e^{i\alpha(x-u)} du d\alpha$ と書き, 積分を二つに分けると

$f(x) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} F(\alpha) e^{i\alpha x} d\alpha$, $F(\alpha) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} f(u) e^{-i\alpha u} du$ ($f(x)$ のフーリエ変換) Fourier transformation
 偶(奇)関数 $f(x) = (2/\pi)^{-1/2} \int_0^{\infty} F(\alpha) \cos \alpha x d\alpha$, $F(\alpha) = (2/\pi)^{-1/2} \int_0^{\infty} f(u) \cos \alpha u du$ (余弦(正弦)変換)

<ex> $f(x) = 1$ ($-1 \leq x \leq 1$), $= 0$ ($x < -1, x > 1$) のフーリエ変換は $F(\alpha) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-1}^1 e^{-i\alpha u} du$
 $= (2\pi)^{-1/2} [(-1/i\alpha) e^{-i\alpha u}]_{-1}^1 = (2\pi)^{-1/2} (-1/i\alpha) (e^{-i\alpha} - e^{i\alpha}) = (2/\pi)^{1/2} \sin \alpha / \alpha$ だから

$f(x) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} (2/\pi)^{1/2} (\sin \alpha / \alpha) e^{i\alpha x} d\alpha = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} (\sin \alpha / \alpha) e^{i\alpha x} d\alpha$ ここで $x=0$ とおくと

$f(0) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} (\sin \alpha / \alpha) d\alpha = 1$ よって $\int_{-\infty}^{\infty} (\sin x / x) dx = \pi$, $\int_0^{\infty} (\sin x / x) dx = \frac{1}{2} \pi$ (積分公式)

一般化すると, α を正の定数として $\int_{-\infty}^{\infty} (\sin \alpha x / x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\sin \alpha x / \alpha x) d(\alpha x) = \int_{-\infty}^{\infty} (\sin t / t) dt = \pi$

⑤ $\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} (\sin \alpha x / \pi x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} (2\pi)^{-1} \int_{-\alpha}^{\alpha} e^{ikx} dk$, $\int \delta(x) dx = 1$ (デルタ関数) delta function

⑥ 複素関数 $f(z) = f(x+iy) = u(x, y) + iv(x, y)$ が微分可能(正則)であるための必要十分条件は regular

$\partial u / \partial x = \partial v / \partial y$, $\partial u / \partial y = -\partial v / \partial x$ (コーシー・リーマンの方程式), $f'(z) = \partial u / \partial x + i \partial v / \partial x$
 A. Cauchy 1789~1857 フランス, G. Riemann 1826~1866 ドイツ

<ex> $f(z) = e^z = e^{x+iy} = e^x e^{iy} = e^x \cos y + i e^x \sin y = u(x, y) + iv(x, y)$ より

$f'(z) = \partial u / \partial x + i \partial v / \partial x = e^x \cos y + i e^x \sin y = e^x e^{iy} = e^z$ (指数関数, 周期 $2\pi i$)

$\sin z = (e^{iz} - e^{-iz}) / 2i$, $\cos z = (e^{iz} + e^{-iz}) / 2$, $(\sin z)' = \cos z$, $(\cos z)' = -\sin z$ (三角関数, 周期 2π)

$\log z = \log |z| + i(\theta + 2n\pi)$, $n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ $z = |z| e^{i\theta}$ ($0 \leq \theta < 2\pi$), $(\log z)' = 1/z$ (対数関数, 無限多価関数)

$z^a = \exp(\alpha \log z) = \exp[\alpha [\log |z| + i(\theta + 2n\pi)]]$, $n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (z^a)' = $a z^{a-1}$ (べき関数, 無限多価関数, ただし $a=m$ (整数)のときは単価関数で, $a=1/m$ のときは m 価関数)

⑦ $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} [f^{(n)}(a) / n!] (z-a)^n$ (テイラー展開, 正則点 a を中心とする展開), マクローリン展開は

$e^z = \sum_{n=0}^{\infty} z^n / n!$, $\sin z = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n z^{2n+1} / (2n+1)!$, $\cos z = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n z^{2n} / (2n)!$ (for all z)

$\log(1+z) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} z^n / n$, $(1+z)^a = \sum_{n=0}^{\infty} [\alpha(\alpha-1)\dots(\alpha-n+1) / n!] z^n$ ($|z| < 1$)

⑧ 関数 $f(z)$ が閉曲線 c 上と c で囲まれた領域で正則ならば $\int_c f(z) dz = 0$ が成り立つ。(コーシーの定理)

<ex> 図の閉曲線 $ABCDEF A$ を c とすれば $\int_c (e^{iz}/z) dz = 0$ より

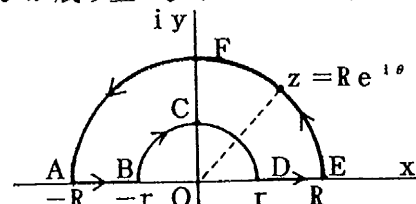
$\int_{-R}^{-r} (e^{ix}/x) dx + \int_r^R (e^{ix}/x) dx + \int_{BCD} (e^{iz}/z) dz + \int_{EFA} (e^{iz}/z) dz = 0$

第一項で $x \rightarrow -x$, 第三項で $z = r e^{i\theta}$, 第四項で $z = R e^{i\theta}$ とおくと

$\int_{-R}^{-r} [(e^{ix} - e^{-ix})/x] dx + \int_0^{\pi} [\exp(i r e^{i\theta}) / r e^{i\theta}] i r e^{i\theta} d\theta + \int_0^{\pi} [\exp(i R e^{i\theta}) / R e^{i\theta}] i R e^{i\theta} d\theta = 0$

$2i \int_r^R (\sin x / x) dx + i \int_0^{\pi} \frac{e^{-r \cos \theta} e^{-i r \sin \theta} d\theta}{1 - i \sin \theta} + i \int_0^{\pi} \frac{e^{-R \cos \theta} e^{-i R \sin \theta} d\theta}{1 - i \sin \theta} = 0$ ここで $r \rightarrow 0, R \rightarrow \infty$ とすれば

第三項は0に収束し($\therefore |e^{-R \cos \theta}| = 1, \sin \theta > 0$) $2i \int_0^{\pi} (\sin x / x) dx + i \int_0^{\pi} d\theta = 0 \therefore \int_0^{\pi} (\sin x / x) dx = \pi/2$



(ex) $A, 2R$ を二辺とする長方形を c として $\int \exp(-bz^2) dz = 0$ ($b > 0$)

各辺の積分は $\int_{-R}^R \exp(-bx^2) dx + \int_0^A \exp[-b(R+iy)^2] idy$
 $+ \int_R^{-R} \exp[-b(x+iy)^2] dx + \int_A^0 \exp[-b(-R+iy)^2] idy = 0$

各項の被積分関数を整理して $R \rightarrow \infty$ とすれば次のようになる。

(第一項) $\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-bx^2) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-t^2) b^{-1/2} dt = \pi^{1/2} b^{-1/2} = (\pi/b)^{1/2}$ 【 $b^{1/2} x = t, dx = b^{-1/2} dt$ 】

(第二項) $= i \int_{-R}^R \exp(-bR^2) \exp(-2ibRy) \exp(by^2) dy \rightarrow 0$ 【 $\because |\exp(-2ibRy)| = 1$ 】

(第三項) $= \int_R^{-R} \exp(-bx^2) \exp(-2ibAx) \exp(bA^2) dx \rightarrow \exp(bA^2) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-bx^2) \cos(2bAx) dx$

(第四項) $= i \int_{-R}^R \exp(-bR^2) \exp(2ibRy) \exp(by^2) dy \rightarrow 0$ 【 $\because |\exp(2ibRy)| = 1$ 】

$\therefore (\pi/b)^{1/2} + \exp(bA^2) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-bx^2) \cos(2bAx) dx = 0, bA = a$ とおくと $bA^2 = a^2/b$ となり

$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-bx^2) \cos(2ax) dx = (\pi/b)^{1/2} \exp(-a^2/b),$ ただし $b > 0$ (ラプラスの積分公式)

⑨ $f(z)$ が閉曲線 c 上と c で囲まれた領域で正則ならば、領域内の点 a または z に対して

$$f^{(n)}(a) = (n!/2\pi i) \int_c [f(z)/(z-a)^{n+1}] dz, \quad f^{(n)}(z) = (n!/2\pi i) \int_c [f(\zeta)/(\zeta-z)^{n+1}] d\zeta,$$

$n=0, 1, 2, \dots$ (コーシーの積分表示)

⑩ $f(z)$ が特異点 a を中心とする円 c の内部から a を除いた領域と c 上で正則ならば、領域内の点 z に対して

singular point

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n (z-a)^n, \quad b_n = (1/2\pi i) \int_c [f(z)/(z-a)^{n+1}] dz, \quad n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

(真性特異点 a を中心とするローラン展開, Laurent)

⑪ $f(z) = b_{-k}(z-a)^{-k} + \dots + b_{-2}(z-a)^{-2} + b_{-1}(z-a)^{-1} + b_0 + b_1(z-a) + b_2(z-a)^2 + \dots$

(特異点 a の k 位の極 a を中心とするローラン展開)

$b_{-1} = \text{Res}[f(z), a] = (1/2\pi i) \int_c f(z) dz = [1/(k-1)!] \lim_{z \rightarrow a} d^{k-1} [(z-a)^k f(z)] / dz^{k-1}$ (k 位の極 a における $f(z)$ の留数)

⑫ $f(z)$ が閉曲線 c の内部のすべての極 a_1, a_2, \dots, a_m を除いた領域と c 上で正則ならば

pole

$$\int_c f(z) dz = 2\pi i [\text{Res}[f(z), a_1] + \text{Res}[f(z), a_2] + \dots + \text{Res}[f(z), a_m]]$$

(留数定理) m residue theorem

⑬ $\int_0^\infty f(\sin \theta, \cos \theta) d\theta = \int_c f[(z-z^{-1})/2i, (z+z^{-1})/2] (1/iz) dz = \int_c F(z) dz = 2\pi i \sum_{\nu=1}^m \text{Res}[F(z), a_\nu]$

c (c は単位円 $z = e^{i\theta}$)

⑭ $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 2\pi i \sum_{\nu=1}^m \text{Res}[f(z), a_\nu], \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i\alpha x} dx = 2\pi i \sum_{\nu=1}^m \text{Res}[f(z) e^{i\alpha z}, a_\nu], \quad \alpha > 0$ (a_ν は複素平面上半面の極)

(ex) $\int_0^\infty [\cos 5x / (x^2+4)^2] dx = \pi i \text{Res}[e^{15x} / (z^2+4)^2, 2i]$ 【 $\because f(x) = 1/(x^2+4)^2$ は偶関数】

$$= \pi i [1/(2-1)!] \lim_{z \rightarrow 2i} d[(z-2i)^2 \times e^{15x} / (z-2i)^2 (z+2i)^2] / dz$$

【 $2i$ は上半面の 2 位の極】

$$= \pi i \lim_{z \rightarrow 2i} [(5i e^{15x} (z+2i)^2 - e^{15x} \times 2(z+2i)) / (z+2i)^4] = \pi i \lim_{z \rightarrow 2i} [(5i z - 12) e^{15x} / (z+2i)^3]$$

$$= \pi i (10i^2 - 12) e^{-10} / (4i)^3 = \pi i (-22) e^{-10} / (-64i) = 11\pi e^{-10} / 32$$

⑮ $F(z) = \mathcal{L} f(t) = \int_0^\infty f(t) e^{-zt} dt, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} f(t) e^{-\sigma t} = 0$ (実変数 t の関数 $f(t)$ のラプラス変換)

Laplace transformation

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1} F(z) = (1/2\pi i) \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} F(z) e^{zt} dz, \quad \lim_{|z| \rightarrow \infty} F(z) = 0, \quad \sigma > 0$$

(ラプラス逆変換)

⑯ $\mathcal{L} t^n = n! / z^{n+1} (n=0, 1, 2, \dots), \quad \mathcal{L}^{-1}(n! / z^{n+1}) = t^n, \quad \mathcal{L} e^{at} = 1/(z-a), \quad \mathcal{L}^{-1}[1/(z-a)] = e^{at}$

$\mathcal{L} \sin at = a / (z^2 + a^2), \quad \mathcal{L}^{-1}[a / (z^2 + a^2)] = \sin at, \quad \mathcal{L} \cos at = z / (z^2 + a^2), \quad \mathcal{L}^{-1}[z / (z^2 + a^2)] = \cos at$

$\mathcal{L}[f(t) e^{at}] = F(z-a), \quad \mathcal{L}(t^n e^{at}) = n! / (z-a)^{n+1}, \quad \mathcal{L}^{-1}[n! / (z-a)^{n+1}] = t^n e^{at}$ (etc.)

$\mathcal{L} f'(t) = -f(0) + \mathcal{L} f(t) = -f(0) + F(z), \quad \mathcal{L} f''(t) = -f'(0) - z f(0) + z^2 F(z)$ (etc.)

(ex) $f''(t) - 3f'(t) + 2f(t) = e^{2t}, f(0) = 0, f'(0) = 0$ の特別解 $f(t)$ (微分方程式の初期値問題)

方程式の両辺をラプラス変換すると $\mathcal{L} f''(t) - 3\mathcal{L} f'(t) + 2\mathcal{L} f(t) = \mathcal{L} e^{2t}, \quad \mathcal{L} f(t) = F(z)$ として

$[-f'(0) - z f(0) + z^2 F(z)] - 3[-f(0) + z F(z)] + 2F(z) = 1/(z-2)$ 初期条件から

$(z^2 - 3z + 2)F(z) = 1/(z-2) \therefore F(z) = 1/(z-1)(z-2)(z-2)$ 部分分数に分解して

$F(z) = [1/(z-2) - 1/(z-1)] [1/(z-2)] = 1/(z-2)^2 - 1/(z-2) + 1/(z-1)$ これを逆変換すれば

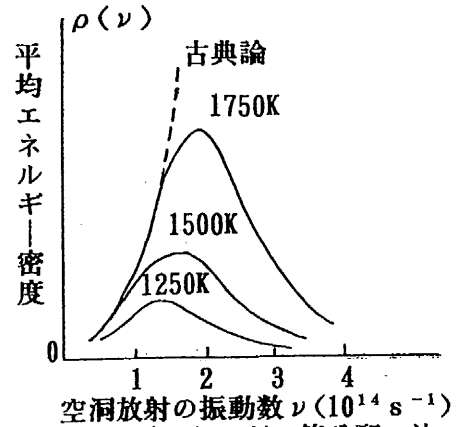
$f(t) = \mathcal{L}^{-1} F(z) = \mathcal{L}^{-1}[1/(z-2)^2 - 1/(z-2) + 1/(z-1)] = t e^{2t} - e^{2t} + e^t = (t-1)e^{2t} + e^t$

§1 プランクの作用量子仮説—空洞放射理論

M. Planck 1858~1947 ドイツ

★ 太陽や反射型ストーブなどの高温の物体は電磁波を放射してエネルギー

を送る。これを熱放射という。量子論は空洞放射の問題を解決するために
プランクが導入した作用量子仮説によって始まった(1900年)。空洞(溶鉱
炉のような高温の閉じた箱)の壁に開けた小窓から外部に漏れてくる熱放
射(電磁波)のエネルギー密度分布(右図)を当時の物理学ではどうして
も説明できなかつた。互いにエネルギーをやり取りしている空洞壁の原子



系と空洞内の電磁波系をそれぞれ無数の調和振動子(単振動子)の集団と
harmonic oscillator
見なし、熱平衡状態における振動子1個に配分される平均エネルギーを kT とすると(エネルギー等分配の法

則、 $k = 1.380 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ はボルツマン定数、 T は系の絶対温度)、空洞の全内部エネルギーは $kT \times$ [振
動子の全個数] だから明らかに発散してしまう。ニュートン力学によると、1個の調和振動子のエネルギーは

L. Boltzmann 1844~1906 オーストリア

ゼロから無限大までの値を連続的にとる。プランクはこれを廃して、1個の振動子が取り得るエネルギー単位
はその振動数に比例してゼロから等間隔で規則正しく並ぶ不連続とびとびの値 $E_n = n h \nu$ ($n = 0, 1, 2, \dots$)

であると仮定し、空洞放射のエネルギー分布の導出を試みた。比例定数 $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ をプランクの
定数または作用量子という。離散的なエネルギー単位がなぜ古典物理学の破綻を救ったのか? 温度 T の空洞
quantum of action
壁が電磁波振動子1個に供給する平均エネルギーが kT 程度であれば、振動数 ν が小さい領域では $h\nu < kT$

ゆえ振動子が高エネルギー単位に上がることは可能であり、ほぼ等分配の法則が成立するだろう。しかし、 ν
が大きい高振動数領域では間隔 $h\nu$ が kT よりも大きいため、空洞壁が kT 程度のエネルギーを与えても振
動子はそれをもって高いエネルギー状態に上がることはできないことになる。したがって高振動数領域では
エネルギーのやり取りが大きな制約を受けるから、空洞と熱平衡状態にある電磁波振動子集団の平均エネルギ
ーは振動数 ν の増加とともに急激に減少するだろう。等分配の法則に基づく古典論とはまったく異なる様相が
現われるわけである。プランクの仮説に基づいて空洞放射の平均エネルギー密度分布 $\rho(\nu)$ を求めてみよう。

★ [振動数が ν と $\nu + d\nu$ の間にある電磁波の単位体積当りの平均エネルギー $\rho(\nu)d\nu$]

$$= [\text{振動数が } \nu \text{ の電磁波の平均エネルギー } \langle E \rangle] \times [\text{振動数が } \nu \text{ と } \nu + d\nu \text{ の間にある単位体積当りの電磁波の個数 } dN] \dots \textcircled{1}$$

絶対温度 T で熱平衡状態にある振動子がエネルギー E_n の状態に見いだされる確率を P_n とすると

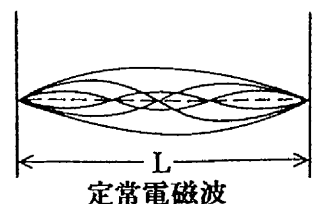
$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} E_n P_n = \sum_{n=0}^{\infty} E_n \left(\frac{e^{-E_n/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n/kT}} \right) \quad \left[e^{-E_n/kT} \text{ はボルツマン因子, 分母は状態和, } \sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1 \right] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} n h \nu \left(\frac{e^{-nh\nu/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu/kT}} \right) = h \nu \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-nh\nu/kT} / \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu/kT} \quad \left[e^{-h\nu/kT} = x \text{ とおくと} \right] \\ &= h \nu (x + 2x^2 + 3x^3 + \dots) / (1 + x + x^2 + \dots) \quad \left[\begin{aligned} \text{【(分子)} &= h \nu x (1 + 2x + 3x^2 + \dots) \\ &= h \nu x (1 + x + x^2 + x^3 + \dots)' \\ &= h \nu x [1/(1-x)]' = h \nu x / (1-x)^2 \end{aligned} \right] \\ &= h \nu x (1-x)^{-2} / (1-x)^{-1} = h \nu x / (1-x) \\ &= h \nu e^{-h\nu/kT} / (1 - e^{-h\nu/kT}) = h \nu / (e^{h\nu/kT} - 1) \dots \textcircled{2} \quad \text{これが振動子の平均エネルギーである。} \end{aligned}$$

次に dN を求める。一辺が L の立方体内に分布している定常電磁波の x 成分を

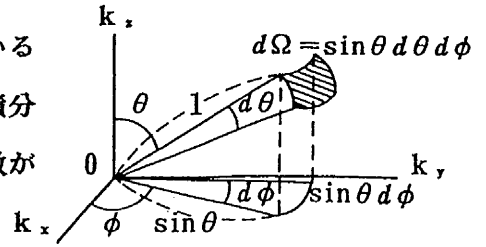
$$\psi(x, t) = T(t) \sin k_x x \text{ と書くと, } \psi(L, t) = 0 \text{ (境界条件) より}$$

$$k_x = n_x \pi / L \quad (n_x = 1, 2, 3, \dots), \quad k_y = n_y \pi / L, \quad k_z = n_z \pi / L \text{ も同様。}$$

電磁波の個数を表わす (n_x, n_y, n_z) 空間の体積要素は $n_x = L k_x / \pi, \dots$ より



$dn_x dn_y dn_z = (L/\pi)^3 dk_x dk_y dk_z = (L/\pi)^3 k^2 \sin\theta dk d\theta d\phi = (L/\pi)^3 k^2 dk d\Omega$ (k空間の極座標表示)。これは波数がkとk+dkの間であって立体角dΩの方向を向いている定常波の個数を表わしている。(物理数学I) $n_x, n_y, n_z > 0$ だから、Ωに関する積分領域は全立体角4πの1/8, さらに電磁波の二つの偏りを考慮すると、波数がkとk+dkの間にある定常電磁波の個数は次のようになる。



$$(L/\pi)^3 k^2 dk \times 4\pi \times (1/8) \times 2 = (L^3/\pi^2) k^2 dk = (L^3/\pi^2) (2\pi\nu/c)^2 d(2\pi\nu/c) = L^3 (8\pi\nu^2/c^3) d\nu$$

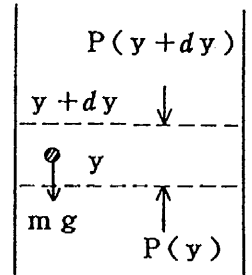
【 $k = 2\pi/\lambda = 2\pi/(c/\nu) = 2\pi\nu/c$ 】

L^3 は空洞の体積ゆえ、振動数がνとν+dνの間にある単位体積当りの定常電磁波の個数dNは

$$dN = (8\pi\nu^2/c^3) d\nu \quad \dots \textcircled{3} \quad \text{ということになる。} \quad c = 2.9979 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \text{は真空中の光の速さ。}$$

①, ②, ③より $\rho(\nu) d\nu = \langle E \rangle dN = [h\nu / (e^{h\nu/kT} - 1)] \times (8\pi\nu^2/c^3) d\nu$ したがって、平均エネルギー密度は $\rho(\nu) = (8\pi\nu^2/c^3) \times h\nu / (e^{h\nu/kT} - 1)$ これをプランクの放射公式という。プランクは定数hの値を適当に選ぶことによって、すべての振動数領域、全温度領域の実験結果を精密に再現したのである。もちろん全エネルギーが無限大になることはない。物理学にとって作用量子仮説はまさに革命の序説であった。

★ 一般に、絶対温度Tで熱平衡状態にある力学系がエネルギーEの状態に見いだされる確率は $e^{-E/kT}$ に比例する。たとえば、断面積Sの円筒容器に入っている理想気体を考える。高さがyとy+dyの間にある微小部分に働く圧力と気体分子に働く重力のつり合いの式は $[P(y) - P(y+dy)]S = mgn(y)Sdy$ ただし、 $P(y)$, m , g , $n(y)$ は、それぞれ気体の断面に働く圧力、気体分子の質量、重力加速度、単位体積当たりの分子数(圧力差)を表わす。(体積)



数を表わす。 $P(y+dy) - P(y) = [dP(y)/dy] dy$ だから、上式は $dP(y)/dy = -mgn(y)$ となる。

これに理想気体の状態方程式 $P(y) = k n(y) T$ を代入すると、 $kT dn(y)/dy = -mgn(y)$ (ボルツマン定数)

$$\int [1/n(y)] dn(y) = -\int (mg/kT) dy, \quad \log n(y) = -mgy/kT + C \quad \therefore n(y) = e^C e^{-mgy/kT}$$

$mgy = E$ は重力場における分子のポテンシャルエネルギーである。容器内の全分子から任意の分子を1個選んだとき、その分子の高さがyとy+dyの間にある確率は微小体積に含まれている分子数 $n(y)Sdy$ に比例するから、その分子がエネルギーEの状態に見いだされる確率はボルツマン因子 $e^{-E/kT}$ に比例することになる。

★ 空洞放射と同種の問題として固体の比熱という現象がある。温度上昇に対する内部エネルギーの増加の割合が比熱である。等分配の法則によれば、温度Tの固体の全内部エネルギーは [振動子1個当たりの平均エネルギー kT] \times [振動子の個数] に等しく、温度Tに比例するはずである。そのTの係数が古典論の与える比熱であり、温度に無関係で一定値 $3R$ になる (デュロン-プティの法則, $R = 8.314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ は気体定数)。

Dulong-Petit

これは高温領域で実験とよく一致するが、低温領域では比熱は温度の低下とともに急激に減少してゼロに近づく。ここでも古典論は破綻したのであった。アインシュタインは、固体の束縛原子をそれぞれの平均位置のまわりに振動数νで熱振動している三次元調和振動子と見なし、温度Tにおける1モル当たりのエネルギーの平均値を次式で表わした。 $\langle E \rangle = (3R h\nu/k) / (e^{h\nu/kT} - 1)$ これをTで微分すると定積モル比熱が得られる。

$C_v = d\langle E \rangle / dT = 3R (h\nu/kT)^2 e^{h\nu/kT} / (e^{h\nu/kT} - 1)^2$ $T \rightarrow \infty$ および $T \rightarrow 0$ でのふるまいから、高温では一定で $C_v \approx 3R$, 低温では C_v がゼロに近づくことが分かる。定量的一致は不十分であったが、空洞放射と同様にエネルギーの量子性を導入して、固体の比熱の定性的解釈を試みたのである。1907年のことであった。

§2 アインシュタインの光量子仮説—光電効果, コンプトン効果

★ 1905年, アインシュタインは光電効果を説明するためにプランクの仮説を「実体化」して光量子仮説を提案した。振動数 ν の光のビームはエネルギー $h\nu$ をもつ「粒子」の集団であるという主張であった。この粒子を

光量子という。光電効果は, 金属や半導体に光を照射すると内部の電子が光のエネルギーを吸収して放出され

現象である。放出電子を光電子という。実験事実の特徴は(1)光を当てると時間遅れなく電子が放出され

こと(2)いくら強い光を当てても, その振動数 ν が各金属に特有の値 ν_0 。以上でないとは電子は放出されない

こと(3)電子の最大運動エネルギー E_{max} は ν と比例関係にあり光の強さにはよらないこと, などであった。

これらは光を波動とする古典電磁気学では理解できなかった。電磁波動の吸収によって電子のエネルギーが高

くなるには, ある程度時間がかかるし, そのエネルギーの量には振動数よりも電磁波の振幅(強さ)が重要だ

からである。光量子仮説はまさにその点を解決した。振動数 ν の光量子を吸収すれば, 電子のエネルギーは瞬

間的に $h\nu$ だけ上がる。その量が金属内の電子の束縛を解くのに十分であれば電子は出てくるし, 不十分であ

れば出てこない。アインシュタインは $h\nu = E_{max} + h\nu_0$ と考えたのである。 $h\nu_0$ は金属表面から1個の

電子を追い出すのに必要な最小エネルギーで仕事関数という。光量子は電子などの荷電粒子に(分割されずに)

丸ごと吸収されるという意味で「粒子」なのであった。同じ年に発表された特殊相対性理論でも, 光はエーテ

ルなどの仮想的な媒質を伝わる電磁波ではなく, 光量子の形で空間を伝わりとアインシュタインは考えていた

のである。しかしながら, 回折・干渉という光の波動性も実験的事実であって否定できない。光量子仮説の成

功は, 光が波動と粒子の二重性をもつという新しい難問を生んだのである。光量子をこれからは光子と呼ぶこ

とにする。光子のエネルギーを光(電磁波)の角振動数 $\omega = 2\pi\nu$ で表わすと $E = h\nu = h \times \omega / 2\pi = \hbar\omega$,

$\hbar = h / 2\pi = 1.054 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ (プランクの定数)。相対論的エネルギーの公式 $E = (p^2 c^2 + m_0^2 c^4)^{1/2}$

で光子の静止質量(m_0)をゼロと考えると $E = pc = h\nu$ より光子の運動量の大きさは $p = h\nu / c$ と見

なせる。これを光の波数 $k = 2\pi / \lambda$ (λ は波長, 光速 $c = \lambda\nu$) で表わすと $p = h / \lambda = \hbar k / 2\pi = \hbar k$ で

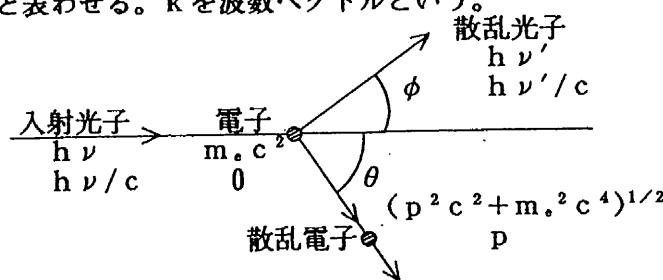
ある。したがって, 光子の運動量ベクトルは $p = \hbar k$ と表わせる。 k を波数ベクトルという。

★ アインシュタインの革命的発想は物理学者たちを困惑

させたが, 1923年, コンプトンは光が「粒子」のように

電子と弾性衝突することをX線の散乱実験によって確認

した。原子に弱く束縛されていて, ほとんど自由電子と



見なせる電子にX線を当てると散乱X線の波長が長くなる現象である。これをコンプトン効果という。運動量

保存則は 入射方向: $h\nu/c + 0 = (h\nu'/c)\cos\phi + p\cos\theta$ より $pc\cos\theta = h\nu - h\nu'\cos\phi$...①

垂直方向: $0 = (h\nu'/c)\sin\phi - p\sin\theta$ より $pc\sin\theta = h\nu'\sin\phi$...②

θ を消去する。①²+②²より $p^2c^2 = (h\nu)^2 - 2(h\nu)(h\nu')\cos\phi + (h\nu')^2$...③

エネルギー保存則は $h\nu + m_0c^2 = h\nu' + (p^2c^2 + m_0^2c^4)^{1/2}$ これから p^2c^2 を求めると

$p^2c^2 = (h\nu - h\nu' + m_0c^2)^2 - m_0^2c^4 = (h\nu)^2 - 2(h\nu)(h\nu') + (h\nu')^2 + 2m_0c^2(h\nu - h\nu')$

これを③の左辺に代入して $2m_0c^2(h\nu - h\nu') = 2(h\nu)(h\nu')(1 - \cos\phi)$ 両辺を $2m_0c h\nu\nu'$ で割ると

$c/\nu' - c/\nu = \lambda' - \lambda = (h/m_0c)(1 - \cos\phi)$ $h/m_0c = 2.4 \times 10^{-12} \text{ m}$ を電子のコンプトン波長という。

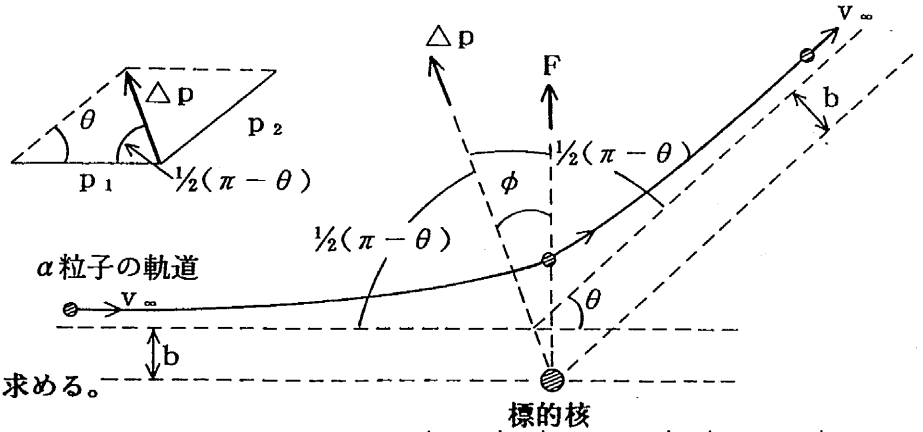
§3 有核原子模型—ラザフォード散乱

E. Rutherford 1871~1937 伊リス

★ 量子論の本格的な勝負場所は原子の内部構造であった。1911年、ラザフォード・グループはラジウムから出てくるα線（ヘリウム原子核のビーム）を金箔に当てて大角度散乱を観測し、原子核の存在を確認した。この原子構造の解明は直ちに古典物理学の破綻を意味した。古典電磁力学によれば、原子核から引力を受けて加速度運動をしている原子内電子は電磁波を放出してエネルギーを失い続け、原子核に向かって落ち込んでいくはずだから安定な原子は存在し得ないことになる。ラザフォードは次のような計算を行ない、実験と比較した。

★ 原子核（電荷 $Z e$ ）とα粒子（電荷 $2 e$ ）の間にはクーロン力 $F(r) = 2 Z e^2 / 4 \pi \epsilon_0 r^2 \dots \textcircled{1}$ が働く。

力が作用しなければα粒子が原子核に近づけるであろう最小距離 b を衝突パラメーター impact parameter という。粒子が近づく軌道の漸近線方向と飛び去る軌道の漸近線方向とがなす角 θ を散乱角という。 b と θ の関係を求める。



scattering angle
散乱前後のα粒子の運動量を p_1, p_2 とすれば、運動量の変化は $|\Delta p| = |p_2 - p_1| = |\int F dt| \dots \textcircled{2}$
(原子核がα粒子に与える力積)

原子核が重くて殆ど動かなければ遠方での運動エネルギーと運動量の大きさは一定に保たれ $p_1 = p_2 = m v_\infty$
(v_∞ は遠方での速さ)

正弦定理から $|\Delta p| / \sin \theta = m v_\infty / \sin(\pi/2 - \theta/2) \therefore |\Delta p| = m v_\infty \sin \theta / \cos(\theta/2) = 2 m v_\infty \sin(\theta/2) \dots \textcircled{3}$
【 $\because \sin \theta = 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2)$ 】

α粒子の軌道に沿ってとった F と Δp の間の各瞬間の角を ϕ とすると、 Δp と $\int F dt$ は同じ向きだから
 $|\int F dt| = \int F \cos \phi dt$ これと③から②は $2 m v_\infty \sin(\theta/2) = \int_0^{\infty} F \cos \phi dt = \int_{-(\pi-\theta)/2}^{(\pi-\theta)/2} F \cos \phi (dt/d\phi) d\phi \dots \textcircled{4}$
 $d\phi/dt$ は原子核のまわりのα粒子の角速度を表わす。 $F(r)$ は動径ベクトル r の方向に作用しているから (中心力)
角運動量は一定に保たれ、 $m r^2 d\phi/dt = m v_\infty b$ (右辺は遠方での角運動量) $\therefore dt/d\phi = r^2 / v_\infty b$ これと

①を④に代入して $2 m v_\infty \sin(\theta/2) = (Z e^2 / 2 \pi \epsilon_0 v_\infty b) \int_{-(\pi-\theta)/2}^{(\pi-\theta)/2} \cos \phi d\phi = (Z e^2 / 2 \pi \epsilon_0 v_\infty b) \times 2 \cos(\theta/2)$

よって θ と b の関係は $\tan(\theta/2) = Z e^2 / 2 \pi \epsilon_0 m v_\infty^2 b$ で与えられる。 b が小さいとき、即ちα粒子が原子核に近接して入射すれば大角度散乱が起こることになる。原子核を中心とする面積 πb^2 内のどこかに向かって入射したα粒子は θ またはそれ以上の角度で散乱される。 $\sigma = \pi b^2$ を相互作用に対する断面積という。α粒子は原子核のごく近くに到達する以前に散乱されるから原子核からの距離 b 内を必ずしも通過するわけではない。

★ 以上の結果をもう少し微視的に考察する。α粒子が単位面積当たり、単位時間に N 個入射するとする。原子核からの距離が b と $b + db$ の間にある部分の面積 $2 \pi b db$ をめがけて入射する粒子数は $2 \pi b db \times N$ である。

これらの粒子が散乱角 θ と $\theta + d\theta$ の間の方向の微小立体角 $d\Omega = 2 \pi \sin \theta d\theta$ 内に散乱されると考えられる。

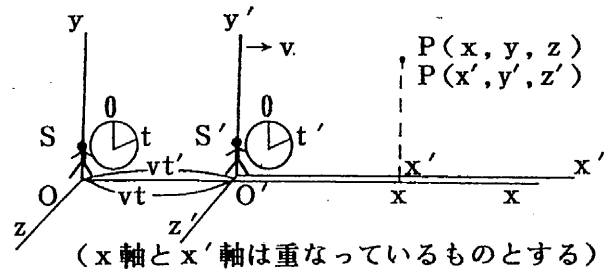
$Z e^2 / 2 \pi \epsilon_0 m v_\infty^2 = a$ とおくと b と θ の関係は $b^2(\theta) = a^2 \cot^2(\theta/2)$ と書ける。両辺を θ で微分して

$2 b db = - a^2 \cot(\theta/2) \operatorname{cosec}^2(\theta/2) d\theta = - \frac{1}{2} a^2 [\sin \theta / \sin^4(\theta/2)] d\theta$ したがって、 $d\Omega$ 内に単位時間に

散乱される粒子数は $2 \pi b db \times N = - \frac{1}{4} a^2 N \sin^{-4}(\theta/2) \times 2 \pi \sin \theta d\theta = - \frac{1}{4} a^2 N \sin^{-4}(\theta/2) d\Omega$ これを N で割った大きさを $\sigma(\theta) d\Omega$ と表わし、 $\sigma(\theta)$ を θ 方向の散乱の微分断面積という。

differential scattering cross section
 $\sigma(\theta) = \frac{1}{4} a^2 \sin^{-4}(\theta/2) = (Z e^2 / 4 \pi \epsilon_0 m v_\infty^2)^2 \sin^{-4}(\theta/2)$ これがラザフォードの散乱公式である。

★ 慣性の法則が成り立つ座標系(観測者)を慣性系という。
 inertial system
 慣性系 S に対して一定の速さ v で右へ進む慣性系 S' がある(右図)。両者がすれちがう瞬間に時間を測り始め、S、S' の時計でそれぞれ t, t' 後に図の位置にきたとする。このとき、空間の任意の点 P の座標を S, S' がそれぞれ

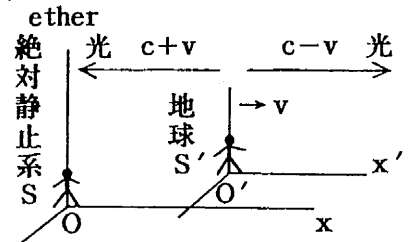


$P(x, y, z), P(x', y', z')$ と表現したとすれば、図から $x' = x - vt, y' = y, z' = z, t' = t$ が成り立つ。これをガリレイ変換という。この変換に関してニュートンの運動方程式は不変である(ガリレイの相対性原理)。

G. Galilei 1564~1642 イタリア

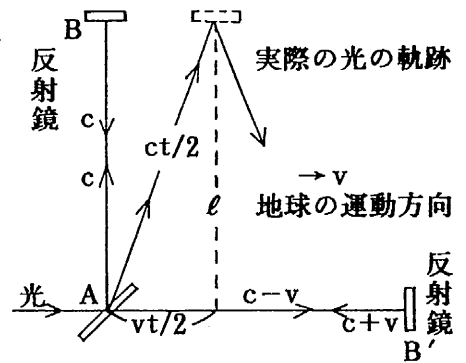
★ ニュートンは名著「プリンシピア」で「絶対的な、真の、そして数学的な時間は、おのずから、またそれ自身の本性から、他の何者にもかかわりなく一様に流れるもので、別の名では持続と呼ばれる。また、絶対的な空間は、その本性において、いかなる外的事物にも無関係に、常に同形、不動のものとして存続する。」と述べて、時間と空間の絶対性を強調した。その絶対空間全体に「光」という波動を伝える媒質エーテルが満ちているとする。

その中で静止している座標系(絶対静止系)を S とし、S に対して地球 S' が右方向に一定の速さ v で動いていると仮定する(右図)。エーテル中を右と左へ伝わる光の速さを c (S の測定値) とすれば、S' の測定値はそれぞれ $c - v, c + v$ になるはずである。それを確かめる実験が19世紀末にマイ



ケルソンとモーリーによって行なわれた。左方から入射する光をガラス板 A. Michelson (& E. Morley) 1852~1931 アメリカ

A で二つに分けて、等距離の $AB = AB' = \ell$ をそれぞれ往復する時間 t と t' のちがいを光の干渉を利用して調べる実験である。図から直ちに $(ct/2)^2 = (vt/2)^2 + \ell^2$ よって $t = 2\ell / (c^2 - v^2)^{1/2}$...① また $t' = \ell / (c - v) + \ell / (c + v) = 2c\ell / (c^2 - v^2)$...② ゆえ $t \neq t'$ しかし、測定結果は否定的で、有意の時間差は認められなかった。そこで

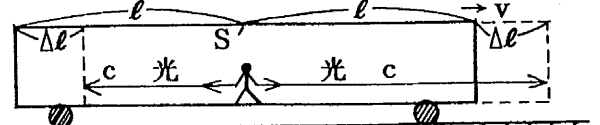


ローレンツやフィッツジェラルドは、エーテル中を運動する物体は運動方向に収縮するのではないかと考えた。H. Lorentz 1853~1928 オランダ, G. Fitzgerald 1851~1901 アイランド

②の ℓ を ℓ' と書いて①と等置すれば $2c\ell' / (c^2 - v^2) = 2\ell / (c^2 - v^2)^{1/2}$ より $\ell' = (1 - v^2/c^2)^{1/2} \ell$ この仮説をローレンツ収縮(短縮)という。光波を伝えるはずのエーテルの存在は否定できなかったのである。

Lorentz contraction

★ 1905年、アインシュタインはエーテルや絶対時空間概念を批判し「光は、あらゆる慣性系に対して真空中を同等の速さ c で伝わる」という光速不変の原理を提唱した。彼は、慣性系を基準にして時間や長さの新しい測定方法を決めてみようとしたのである。簡単な思考実験を想定する。図のように速さ v で動いている電車の中央にいる



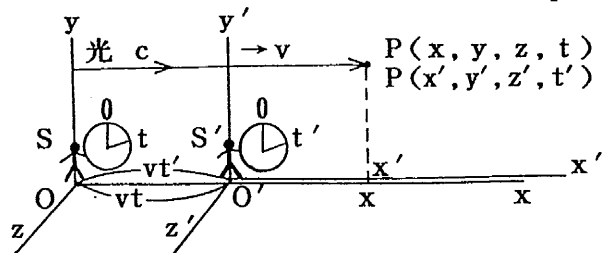
S' が地上で静止している S とすれちがう瞬間に、前方と後方へ同時に光を発射したとする。S' は、光は ℓ/c 秒後に電車の前面と後面に同時に到達すると観測するだろう。一方、S に対して電車は動いているから、光が到達する両面の位置は点線のところで、それぞれ異なった時刻 $(\ell + \Delta\ell)/c, (\ell - \Delta\ell)/c$ 秒後に到達すると測定するに違いない。これを「同時刻の相対性」という。すなわち、位置座標と同様に時刻や時間も測定する慣性系(観測者)に依存すると考えられるから、各慣性系固有の時刻を t, t' とし、時空点を $P(x, y, z, t), P(x', y', z', t')$ と表示しなければならない(四次元空間)。

four-dimensional space

★ そこで、光を利用して $t' \neq t$ となる変換を求める。

今度は、S と S' がすれちがう瞬間に右方へ光を発射し、

t, t' 後に P 点に到達したとする。図を一応信用すれば $x' = x - vt, x = x' + vt' \dots$ ③ 両式を辺々加えると $x' + x = x + x' - vt + vt' \therefore t' = t$ これはガリレイ変換にほかならない。新しい一次変換を探すために



③の両式の右辺をλ(定数)倍し $x' = \lambda(x - vt)$ …④ $x = \lambda(x' + vt')$ …⑤ — V'' —

と仮定してλを求める。光はS, S'に対してcで伝わるから光が進んだ距離はSから見ると $x = ct$, S'から見ると $x' = ct'$ と表わせる。これらを④, ⑤に代入して $ct' = \lambda(ct - vt)$, $ct = \lambda(ct' + vt')$ 辺々をかけると $c^2 t t' = \lambda^2 (c^2 - v^2) t t'$ より $\lambda^2 = c^2 / (c^2 - v^2) \therefore \lambda = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$ …⑥

t'とtの関係は ④×λ+⑤ から $\lambda x' + x = \lambda^2 x - \lambda^2 vt + \lambda x' + \lambda vt'$, $\lambda vt' = \lambda^2 vt + (1 - \lambda^2)x$ $t' = \lambda [t + (1 - \lambda^2)x / \lambda^2 v]$, ここで $(1 - \lambda^2) / \lambda^2 = 1 / \lambda^2 - 1 = -v^2/c^2 \therefore t' = \lambda (t - vx/c^2)$ …⑦

同様に④, ⑤からxを消去すると $t = \lambda (t' + vx'/c^2)$ …⑧ 【∵ ⑥】 ④~⑧をローレンツ変換という。

★ 長さの測定 : x軸上に静止している物体の長さを測定する。Sの

測定値 $l = x_2 - x_1$ とS'の測定値 $l' = x_2' - x_1'$ の関係は⑤から

$l = x_2 - x_1 = \lambda(x_2' + vt_2') - \lambda(x_1' + vt_1') = \lambda(x_2' - x_1') + \lambda v(t_2' - t_1')$ と書けるが, x_1' が物体の左端を通過する時刻 t_1' と x_2' が物体の右端を通過する時刻 t_2' を同時に測定しなければS'にとって長さは確定しないから $t_1' = t_2'$ でなければならない。よって $l = \lambda l' \therefore l' = l / \lambda = (1 - v^2/c^2)^{1/2} l$ すなわち, S'に対して運動している物体の長さは収縮して観測されることになる。これはローレンツの仮説と一致するが, エーテルの存在に起因するものではない。

★ 時間の測定 : S'がx軸上の2点 x_1, x_2 を通過する時刻をそれ

ぞれ t_1', t_2' とし, Sの測定値はそれぞれ t_1, t_2 であったとする。

⑦から $t_2' - t_1' = \lambda(t_2 - vx_2/c^2) - \lambda(t_1 - vx_1/c^2) = \lambda[(t_2 - t_1) - v(x_2 - x_1)/c^2]$ となるが, Sから見るとS'が通過していく距離は $x_2 - x_1 = v(t_2 - t_1)$ だから, $t_2' - t_1' = \lambda[(t_2 - t_1) - v^2(t_2 - t_1)/c^2] = \lambda(1 - v^2/c^2)(t_2 - t_1) = (1 - v^2/c^2)^{1/2}(t_2 - t_1)$ これを時間の収縮(遅延)という。

★ 質量の測定 : 長さや時間と同様に質量にも相対性がありうるのではないかとアインシュ

タインは思考実験を続ける。同じ静止質量 m_0 をもつ物体A, Bを考える。Sに対して速さ v

で左方から進んでくるAの質量をSは m と測定するとしよう。S'はAと同じ速度で動いてい

る慣性系。AがSに対して静止しているBとすれちがうとき, Bに対して鉛直方向に微小な衝

撃力を与えた結果, AはS'に対して上向きに速度成分 u , BはSに対して下向きに速さ u をそれぞれ得たとする(ただし $u \ll v$)。ところで, S'が測定する1秒はSから見ると $(1 - v^2/c^2)^{1/2}$ 秒だから, S'が測定する速度成分 u はSにとっては $u(1 - v^2/c^2)^{1/2}$ に相当するだろう。従ってSから見るとA, Bの運動量は $p_B = m_0 u$, $p_A = m u (1 - v^2/c^2)^{1/2}$ で, 運動量保存則 $p_A = p_B$ が成り立てば $m = (1 - v^2/c^2)^{-1/2} m_0 = \lambda m_0$ …⑨

よって相対論的運動方程式は $dp/dt = F$ …⑩ $p = mv = \lambda m_0 v$ …⑪

★ エネルギーの測定 : 静止質量 m_0 の物体に力 $F(x)$ が行なう仕事を求める。

$$W = \int_{x_1}^{x_2} F(x) dx = \int_{x_1}^{x_2} (dp/dt) dx = \int_{x_1}^{x_2} [d(\lambda m_0 v)/dt] dx = m_0 \int v d(\lambda v) = m_0 \int v (\lambda dv + v d\lambda)$$

$$\lambda = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}, \quad d\lambda/dv = -\frac{1}{2}(1 - v^2/c^2)^{-3/2}(-2v/c^2) = v\lambda^3/c^2, \quad dv = c^2 d\lambda / v\lambda^3 \text{ より}$$

$$W = m_0 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} (c^2/\lambda^2 + v^2) d\lambda = m_0 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} [c^2(1 - v^2/c^2) + v^2] d\lambda = m_0 c^2 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda = m_0 c^2 (\lambda_2 - \lambda_1)$$

$$= m_0 [(1 - v_2^2/c^2)^{-1/2} - (1 - v_1^2/c^2)^{-1/2}] = m_2 c^2 - m_1 c^2 \text{ よって 物体の全エネルギーは } E = mc^2 \text{ …⑫}$$

特に $v=0$ のときは $E_0 = m_0 c^2$ …⑬ (静止質量エネルギー)。【Eは E_0 と運動エネルギーの和を表わす。∵ $E = m_0 c^2 [1 + (-v^2/c^2)]^{-1/2} = m_0 c^2 \{ 1 + (-1/2)(-v^2/c^2) + [(-1/2)(-1/2-1)/2!](v^4/c^4) + \dots \}$ (2項展開, 物理数学1) $= m_0 c^2 + \frac{1}{2} m_0 v^2 + \frac{3}{8} m_0 v^4/c^2 + \dots$ 】

⑫のEをpで表わす。⑩, ⑪より $p^2 = m^2 v^2 = m_0^2 \lambda^2 v^2 = m_0^2 v^2 / (1 - v^2/c^2) = m_0^2 c^2 v^2 / (c^2 - v^2)$, $p^2 (c^2 - v^2) = m_0^2 c^2 v^2$, $p^2 c^2 = (p^2 + m_0^2 c^2) v^2 \therefore v^2 = p^2 c^2 / (p^2 + m_0^2 c^2)$ これを用いて

$$E^2 = m^2 c^4 = m_0^2 c^4 / (1 - v^2/c^2) = m_0^2 c^6 / (c^2 - v^2) = m_0^2 c^6 / [c^2 - p^2 c^2 / (p^2 + m_0^2 c^2)]$$

$$= m_0^2 c^6 (p^2 + m_0^2 c^2) / [c^2 (p^2 + m_0^2 c^2) - p^2 c^2] = c^2 (p^2 + m_0^2 c^2) = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$$

よって $E = (p^2 c^2 + m_0^2 c^4)^{1/2}$ …⑭ 【 $v \ll c$ のときは $\lambda \approx 1$ ゆえ, ④, ⑤はガリレイ変換と一致する。】

§4 ボーアの水素原子模型 — エネルギー単位とスペクトル系列 energy level

★ 原子が放出または吸収する光の波長分布を原子スペクトルという。ラザフォードが解明した原子構造によれば、原子内電子の連続的な軌道変化によって出る光の波長はやはり連続的な分布をするはずである。しかし、実際の原子スペクトルは不連続で、原子の種類によって規則性が異なり、古典物理学では説明できなかった。1913年、ボーアは次の仮説をおいて原子構造の問題に挑戦した。(1) 原子内電子は特定のエネルギーをもつ量子化された軌道にあるときだけ一応安定であって光を放射しない。これを定常状態という。(2) 電子は定常状態にあっても量子飛躍によって他の定常状態に飛び移るが、その際、遷移前後のエネルギー単位間隔に等しいエネルギーをもつ光子を放射または吸収する： $h\nu = |E_i - E_f|$, E_i, E_f はそれぞれ初期および終期の定常状態のエネルギー。(3) 定常状態は電子の角運動量の大きさが \hbar の整数倍になるという量子条件によって決定される(その整数値を量子数という)。理論的裏付けがなかったとは言え、まさに天才的洞察であった。

★ 水素原子の原子核の電荷量 $+e$, 電子の電荷量 $-e$, 質量 m , 軌道半径 r_n (円軌道を仮定), 速さ v_n として量子条件 (3) $m v_n r_n = n \hbar$ ($n=1, 2, 3, \dots$) ...① を満たすエネルギー単位を求める。原子核と電子の間に作用するクーロン力と電子の向心力の大きさは等しいから $m v_n^2 / r_n = e^2 / 4\pi \epsilon_0 r_n^2$...②

$\therefore r_n = 4\pi \epsilon_0 (m v_n r_n)^2 / m e^2 = 4\pi \epsilon_0 n^2 \hbar^2 / m e^2$ ($n=1, 2, 3, \dots$) ...③ 電子の全エネルギーは

$E_n = \frac{1}{2} m v_n^2 + (-e^2 / 4\pi \epsilon_0 r_n) = \frac{1}{2} \times e^2 / 4\pi \epsilon_0 r_n - e^2 / 4\pi \epsilon_0 r_n = -e^2 / 8\pi \epsilon_0 r_n$
 【②を代入】 (価エネルギー) 【③を代入】
 $= -(e^2 / 8\pi \epsilon_0) (m e^2 / 4\pi \epsilon_0 n^2 \hbar^2) = -(m e^4 / 32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2) (1/n^2)$ ($n=1, 2, 3, \dots$) ...④

$E_1 = -m e^4 / 32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 = -21.76 \times 10^{-19} \text{ J}$ を基底状態, $r_1 = 4\pi \epsilon_0 \hbar^2 / m e^2 = 5.291 \times 10^{-11} \text{ m}$ をボーア半径, E_2, E_3, E_4, \dots を励起状態という。 n は電子軌道のエネルギー単位を指定する量子数であった。

★ 離散的なエネルギー単位の存在は線スペクトルとの関連を暗示している。励起状態 E_i にある電子がより低い状態 E_f に落ちるとき振動数 ν_{if} の光子を一個放出するとすれば、仮説 (2) と④より

$h\nu_{if} = 2\pi \hbar \nu_{if} = E_i - E_f = -(m e^4 / 32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2) (1/n_i^2 - 1/n_f^2)$ 光子の波長 λ_{if} , 速さ c として
 $1/\lambda_{if} = \nu_{if} / c = (E_i - E_f) / 2\pi c \hbar = (m e^4 / 64\pi^3 \epsilon_0^2 c \hbar^3) (1/n_i^2 - 1/n_f^2) = R_\infty (1/n_i^2 - 1/n_f^2)$...⑤

$R_\infty = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ をリュードベリ定数という。したがって、励起された水素原子から放出される光の波長は離散的な特定の値をとることになる。電子が遷移するエネルギー単位 E_i の量子数 n_i で分類すると、⑤から

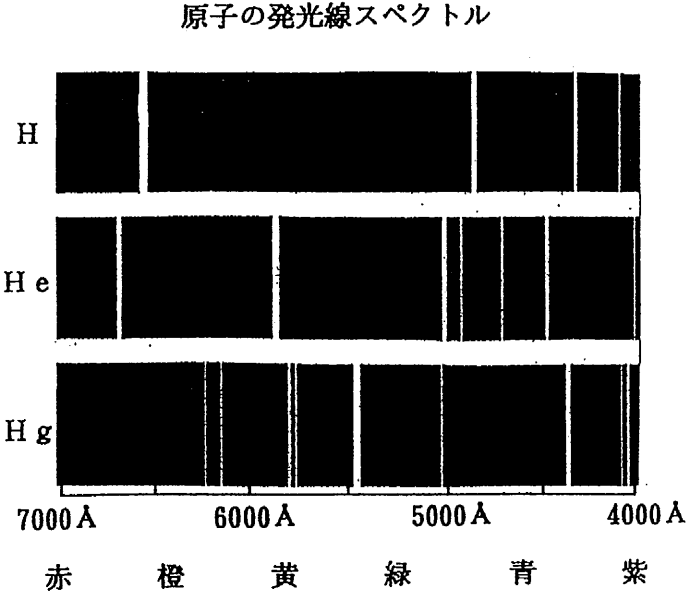
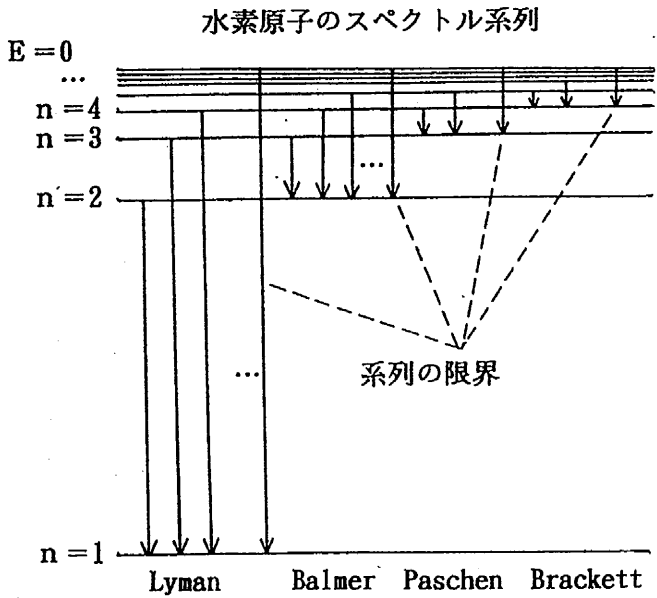
$n_i=1:$	$1/\lambda_{if} = R_\infty (1/1^2 - 1/n_f^2)$	$n_i=2, 3, 4, \dots$	ライマン (Lyman) 系列
$n_i=2:$	$1/\lambda_{if} = R_\infty (1/2^2 - 1/n_f^2)$	$n_i=3, 4, 5, \dots$	バルマー (Balmer) 系列
$n_i=3:$	$1/\lambda_{if} = R_\infty (1/3^2 - 1/n_f^2)$	$n_i=4, 5, 6, \dots$	パッシェン (Paschen) 系列
$n_i=4:$	$1/\lambda_{if} = R_\infty (1/4^2 - 1/n_f^2)$	$n_i=5, 6, 7, \dots$	ブラケット (Brackett) 系列
$n_i=5:$	$1/\lambda_{if} = R_\infty (1/5^2 - 1/n_f^2)$	$n_i=6, 7, 8, \dots$	フント (Pfund) 系列 (次ページ上図)

これらのスペクトル系列は19世紀後半に知られていたが古典電磁気学では理解できなかったものである。また三つのエネルギー単位 E_i, E_n, E_f ($E_i > E_n > E_f$) の間の遷移 $E_i \rightarrow E_f, E_i \rightarrow E_n, E_n \rightarrow E_f$ によって出て

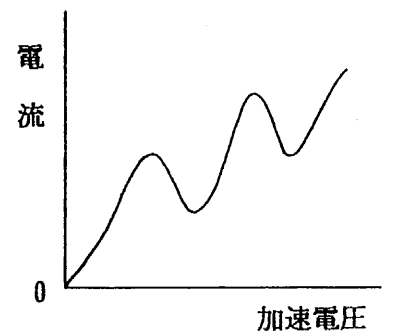
くる光の振動数を $\nu_{if}, \nu_{in}, \nu_{nf}$ とすれば, $h\nu_{if} = h\nu_{in} + h\nu_{nf}$ すなわち $\nu_{if} = \nu_{in} + \nu_{nf}$, あるいは $c = \nu \lambda$ より $1/\lambda_{if} = 1/\lambda_{in} + 1/\lambda_{nf}$ が成り立つはずである。この関係式も原子スペクトル線の分析から1908年に見いだされた経験法則で、リュードベリ-リッツの結合則という。ボーアの推論は見事であった。
 W. Ritz 1878~1909 スイス

★ 原子にエネルギー単位が存在することは 1914年にフランク-ヘルツの実験で直接確認された。彼らは電子の J. Franck, G. Hertz

加速電圧を連続的に増加させて種々の元素の蒸気に当ててみた。電子が蒸気中の原子と衝突したときに運動エネルギーの一部または全部を原子に与えれば原子を励起したことになり、そのときの電位差(臨界電位差)で電子流は減少するはずである。結果は予想通りで、特定の原子に対する一連の臨界電位差が得られた。非弾性



衝突によって励起された原子内電子は、光を放出して再び基底状態に戻る。フランクとヘルツは、電子で衝撃している間の蒸気の発光スペクトルを観測した。たとえば水銀蒸気の場合には、水銀の2536Åのスペクトル線を励起するのに最小 4.9 eV のエネルギーが必要であることが分かった。実際、このスペクトル線の光子はちょうど 4.9 eV のエネルギーをもっており、水銀原子の第一励起エネルギーに一致していた。



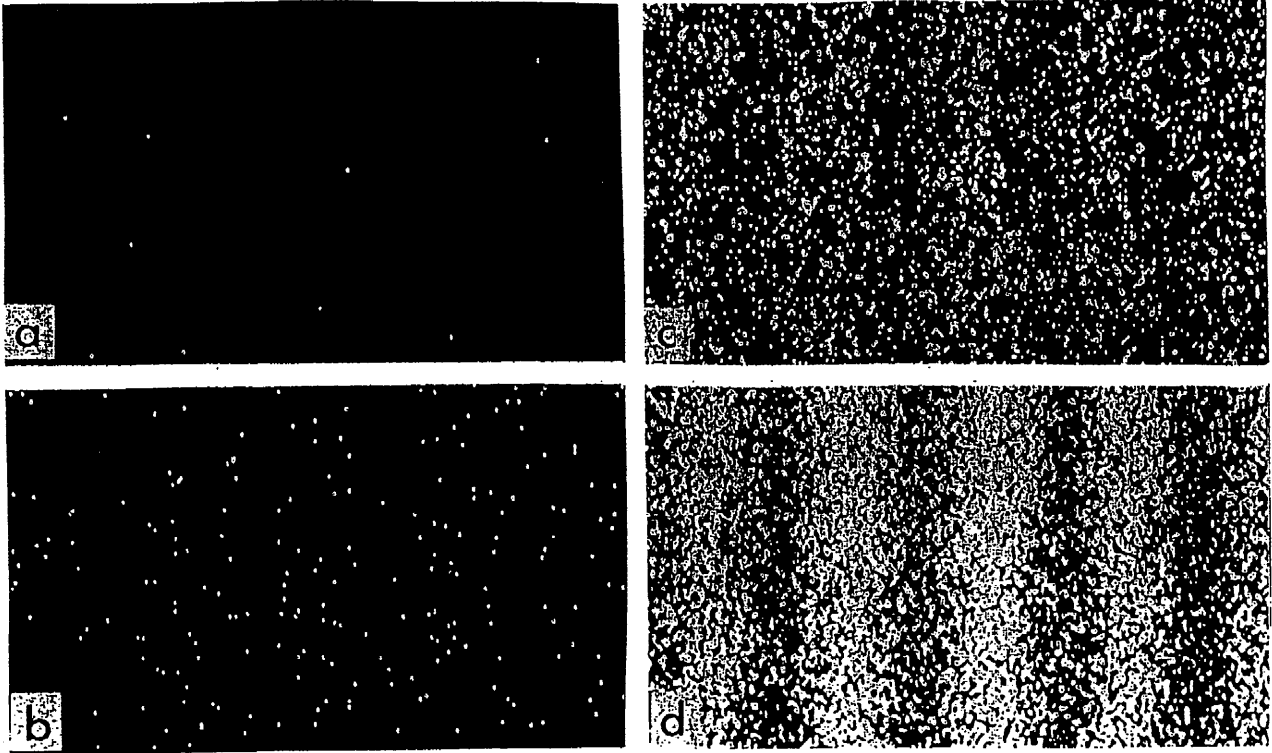
- ★ プランクの仮説（振動数 ν の調和振動子のエネルギー $E_n = n h \nu$ ）とボーアの仮説（3）（原子内電子の角運動量 $m v r_n = n \hbar$ ）はゾンマーフェルトによって、より一般化された量子条件の形に統合された。一次元調和振動子の全エネルギー $E = \frac{1}{2} m v^2 + \frac{1}{2} \kappa x^2 = \frac{p^2}{2m} + 2\pi^2 m \nu^2 q^2$ （=一定）を次のように表わす。
A. Sommerfeld 1868~1951 ドイツ
 $q^2 / [(E/2\pi^2 m \nu^2)^{1/2}]^2 + p^2 / [(2mE)^{1/2}]^2 = 1$ 【 \because 角振動数 $\omega = (\kappa/m)^{1/2}$, $\kappa = m\omega^2 = m(2\pi\nu)^2$, $q \equiv x$ 】すなわち、調和振動子の位置 q と運動量 p は q - p 平面（相空間）上の楕円で表わされる。 p を調和振動子の 1 周期の運動について積分したものは楕円が囲む面積に等しいから $\oint p dq = \pi (E/2\pi^2 m \nu^2)^{1/2} (2mE)^{1/2} = E/\nu = n h \nu / \nu = n h$ と書くことができる。同様に原子内電子の円運動を極座標の方位角 ϕ と軌道角運動量 $L = m v r$ で表わすと、 ϕ - L 平面（相空間）上の長方形になる。その面積は、やはり 1 周期についての積分 $\oint L d\phi = L \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi L = 2\pi n \hbar = n h$ となる。
- ★ 1922 年、ボーアの仮説（3）に関連するシュテルン-ゲルラッハの実験が行なわれた。真空中で銀の薄片を加熱して原子を蒸発させ、スリットに通して原子線をつくる。スリットの後ろに原子線と垂直な方向 (z 方向) に磁場 B をかけ、その後ろにガラス板をおくと銀の蒸着膜ができる。磁場がないときは 1 本の影しか見えないが、磁場をかけると 2 本の影が見えた。これは、原子がその角運動量に比例した磁気モーメントをもち、その z 成分 μ_z に比例した力 $\propto \mu_z \partial B / \partial z$ を受けるためだと考えられた。磁場の中で方向量子化が起こり、 μ_z が離散的な値しかとれないことが分かったのである。しかし、磁気モーメントが電子の軌道角運動量 L によるものとする、原子線は $2L+1$ 本に分裂するはずであり、原子線が 2 本に分裂するという事実を説明できない。実は、彼らは電子のスピン角運動量による磁気モーメントの大きさを見ていたのである。のちに同様の実験が水素原子についても行なわれ、原子線は磁場によってやはり 2 本に分裂し、スピンの存在が確認された。

§ 5 ド・ブロイの物質波仮説—物質粒子の波動性

L. de Broglie 1892~1987 フランス

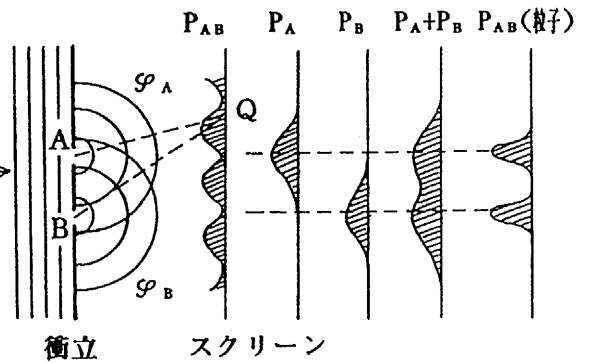
★ ボーアの前期量子論は電子が1個しかない原子のエネルギー準位の解明には成功したが、多数の電子をもつ原子の問題や衝突現象などの解明には全く無力であった。もう一段の突破口がどうしても必要だったのである。1923年、解決の糸口はド・ブロイの物質波仮説からきた。これは光の波動・粒子の二重性によって触発されたものである。古典的には波動であった光に粒子性があったのだから、古典論では粒子であると考えられていた電子や陽子などの物質粒子に波動性があっても不思議はない。むしろ、そうでなければ光子と電子の相互作用に矛盾が生じるだろう。ド・ブロイの着想はこうして生まれた。この仮説は、電子などの物質粒子は波動と粒子の二重性を持ち、振動数 ν ・波長 λ によって記述される波動像とエネルギー E ・運動量 p によって記述される粒子像の間にはド・ブロイの関係式 $E = h\nu$, $p = h/\lambda$ があると主張するものである。 λ をド・ブロイ波長という。この関係式は光に対しても成立する普遍的なものである。光の場合は $\lambda = c/\nu$ だから $p = h\nu/c$ となる。これはアインシュタインの仮説に一致する。原子内電子が波動として半径 r の円軌道に乗っているとすれば、定常状態では円周の長さは波長の整数倍でなければならない。 $2\pi r = n\lambda = nh/p$ よって電子の軌道角運動量は $rp = nh/2\pi = n\hbar$ となる。これはボーアの仮説(3)にほかならない。ド・ブロイは、全く根拠不明だったボーアの量子条件を(その根拠と由来を説明しながら)導出してみせたのである。物質波仮説は前期量子論の成果をすべて吸収し、次の段階(シュレーディンガーの波動力学)に進むことを可能にした画期的なものであった。電子の波動性はダビソン-ジャーマー(および菊池)の実験によって確認された。量子力学建設後のことであった。光の波長は可視光で 10^{-7} m程度だから、細い隙間をもつ衝立や規則正しく並べた細線群を人工的に作り(回折格子)干渉模様を観測できる。電子の場合、数千ボルトの電圧で加速されてエネルギー E をもつ電子のド・ブロイ波長 $\lambda = h/p = h/(2mE)^{1/2}$ は 10^{-10} m程度だから、人工の回折格子の間隔は大きすぎて使いものにならない。ダビソンたちの実験では、ド・ブロイ波長程度の格子間隔をもつ結晶にエネルギーが一定の電子ビームを当て、スクリーン上にきれいな干渉縞を観測した。しかし、古典的波動と量子力学的波動の原理的かつ本質的な相違は、粒子ビームを非常に弱くして電子1個ごとの到着分布を測定しなければ分からない。そのような精密な実験が可能になったのは最近のことである。図は電子線の干渉実験で得られた写真で、電子の波動・粒子の二重性を明瞭に示している。電子線の通過経路に直角の方向にある磁束の両側を分かれて通る(一つの電子の)二つの分波の進行方向が曲げられて、スクリーン上で位相差を生じ干渉が起こる。写真aはきわめて弱いビーム強度の電子線による短い時間内の少数の粒子到着を記録したものである。ここでは粒子性しか見えていない。観測時間を段階的に長くとり粒子到着点を増加させて、重ね焼きを実行した場合の画面の変化が $a \rightarrow b \rightarrow c \rightarrow d$ である。写真dでは干渉縞、すなわち波動性がはっきりと読みとれる。こうして波動・粒子の二重性は物質粒子の方からも現われたことになる。しかも、これは空洞放射に始まるすべての実験や仮説の総まとめともいえるべき実験事実であった。したがって、量子力学の実験的基盤として設定すべき「実験事実」は次のようにまとめることができる。すなわち

★ 電子などの物質粒子や光は粒子と波動の二重性をもつ。そして粒子像と波動像の間にはアインシュタイン-ド・ブロイの転換公式 $E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$ が成り立つ。 これだけを基盤にして量子力学が成立する。後は何もいらない。さて「量子力学的粒子・量子力学的波動」とは一体何ものか?



★ 電子の干渉実験に関連して、古典的(マクロ的)粒子・波動と量子力学的(ミクロ的)粒子・波動の相違点を明らか

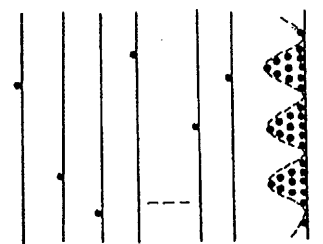
かにしておこう。図のように、小孔A、Bをもつ衝立の左方から平面波を入射させ、A、Bからの球面波 φ_A と φ_B の干渉を右側にあるスクリーン上で観測する。観測点をQとすると波の行路差 $BQ - AQ$ が波長の整数倍ならば φ_A と φ_B は強め合い、半整数倍ならば弱め合せて、干渉縞 P_{AB} をつくる。



小孔B(またはA)を閉じれば分布 P_A (または P_B)が現われる。干渉現象の本質は $P_{AB} \neq P_A + P_B$ というところにある。スクリーン上の強度分布は波動関数の絶対値二乗に比例するから

$P_A \propto |\varphi_A|^2$, $P_B \propto |\varphi_B|^2$, $P_{AB} \propto |\varphi_A + \varphi_B|^2 = (\varphi_A + \varphi_B)(\varphi_A + \varphi_B)^* = |\varphi_A|^2 + |\varphi_B|^2 + 2R.(\varphi_A^* \varphi_B)$ となる。干渉項 $2R.(\varphi_A^* \varphi_B)$ の存在が干渉縞の原因である。一方、粒子流を投入した場合、スクリーン上の粒子分布については $P_{AB}(\text{粒子}) = P_A(\text{粒子}) + P_B(\text{粒子})$ が成り立つ。すなわち、干渉縞の出現は粒子と波動を区別する決定的な現象である。ところで、水波や音波などのマクロ的波動は構成分子の集団運動として回折や干渉を引き起こす。量子力学的粒子・波動の干渉現象はまったく違う。入射粒子のビームを極端に弱くして、たとえば毎秒1個ずつ投入してスクリーン上に並べた粒子検出器(または写真)でそれぞれ検出すると各スクリーン上に干渉縞は現われず、ただ粒子の到着を報じた検出器の位置を示す点がポツンとあるだけである。これが量子力学的粒子の粒子性を直接的に語る実験事実である。ところが、その多数枚の画面を集めて重ね焼きすると干渉縞が現われるのである。これが量子力学的粒子の干渉現象である。粒子1個の画面からは粒子性しか読みとれないが、粒子は決して波動性を失ってはならず、重ね焼きによって干渉縞を還元しうる潜在的能力を残しているのである。まさにこの点において、量子力学的粒子は古典的粒子とも古典

的波動とも違う。多数個の粒子を含む強いビームによる干渉実験の場合も、多数の力学系に対する独立な実験とその実験結果の重ね焼きとが同時に実行されているわけである。量子力学的粒子と古典的粒子の違いをもう少し考えよう。粒子1個の干渉実験の場合、粒子は小孔A、Bを通過してスクリーンに到達する。古典的粒子ならば、A、Bのどちらか一方を通過したとすることができる。Aを通ればBを通らないし、Bを通ればAを通ることはない。しかし、量子力学的粒子に対しては、A、Bのどちらか一方を通過したということとはできない。もし何らかの実験手段によって、どちらか一方、たとえばAを通過したことを確かめたことと同等であり、衝立の右側にはAから出る球面波しか存在せず、干渉が起る原因は消失してしまう。したがって、粒子1個の画面を集めて重ね焼きしても、干渉縞分布 P_{AB} は得られず、 P_A が出てくるだけである。だから、干渉縞が(潜在的にも)存在するときは、粒子がA、Bのどちらを通過したかという設問はまったく意味を失なう。1個の粒子の分波 φ_A と φ_B がA、Bをそれぞれ通って互いに干渉し合ったということになる。古典的粒子像や古典的波動像に固執する限り、このような量子力学的粒子・波動のふるまいを理解することはむずかしい。まず古典的描像を忘れよう。そして、実験に即して基本的な「実験事実」を率直に受け入れるよう努力することが何よりも大切である。



S 6 量子力学的粒子・波動の運動の第一法則—自由粒子

★ $p = \hbar k$, $E = \hbar \omega$ を自由粒子のエネルギー $E = p^2/2m$ に代入すると $\hbar \omega = \hbar^2 k^2/2m$ となる。これを (波動性) (粒子性) 満たす波動方程式を求める。一次元の自由粒子の波動関数をマクロ的な進行波の形で表わすと (物理数学I)

$\psi(x, t) = C_1 \sin(kx - \omega t) + C_2 \cos(kx - \omega t)$ これを t で一階, x で二階微分し, それぞれに \hbar と $-\hbar^2/2m$ をかければ $\hbar \partial \psi / \partial t = \hbar \omega [-C_1 \cos(kx - \omega t) + C_2 \sin(kx - \omega t)] \dots \textcircled{1}$

$-(\hbar^2/2m) \partial^2 \psi / \partial x^2 = (\hbar^2 k^2/2m) [C_1 \sin(kx - \omega t) + C_2 \cos(kx - \omega t)] \dots \textcircled{2}$

①, ②の右辺を比較すると $-C_1 = C_2, C_2 = C_1 \therefore C_1 = C_2 = 0$ となり不可。そこで①の両辺を定数倍 (α 倍) して比較すると $-\alpha C_1 = C_2, \alpha C_2 = C_1$ 両辺の積から $-\alpha^2 C_1 C_2 = C_1 C_2 \therefore \alpha^2 = -1$

$\therefore \alpha = (-1)^{1/2} = i$ したがって波動方程式は $i \hbar \partial \psi / \partial t = -(\hbar^2/2m) \partial^2 \psi / \partial x^2$ このタイプの方程式をシュレーディンガー方程式という。虚数 i が必然的に現われてくるのがミクロ世界の特徴である。波動関数も E. Schrödinger 1887~1961 オーストリア

複素数的になり $\psi(x, t) = i C_2 \sin(kx - \omega t) + C_2 \cos(kx - \omega t) = C_2 e^{i(kx - \omega t)} = C_2 e^{i(px - Et)/\hbar}$ 【指数の \hbar' は \hbar を表わす】

★ 粒子・波動の二重性をもつ量子力学的粒子の行動は, 確率振幅という意味をもつ波動関数によって正しく記述される。したがって, 量子力学の運動法則は波動関数の行動を規定するものでなければならない。空間的波動に力点をおいて量子力学的粒子の行動を追究する立場を波動力学という。その運動法則を設定してみよう。

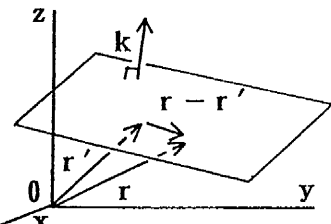
★ 第一法則 (自由粒子の運動) — 力の作用を受けない自由粒子が一定の運動量 p および一定のエネルギー E をもつとき, その運動状態は平面波 $\psi_p(r, t) = C e^{i(p \cdot r - Et)/\hbar} = C e^{i(k \cdot r - \omega t)}$ によって表わされ, その plane wave 時間的・空間的変動はシュレーディンガー方程式 $i \hbar \partial \psi_p(r, t) / \partial t = -(\hbar^2/2m) \nabla^2 \psi_p(r, t)$ に従う。

★ 波動関数 $\psi_p(r, t) = u_p(r) e^{-iEt/\hbar}$ とおくと, 空間点 $r = (x, y, z)$ の関数 $u_p(r) = C e^{i p \cdot r / \hbar}$ は運動量を表わす演算子 $\hat{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = i^{-1} \hbar \nabla = (i^{-1} \hbar \partial / \partial x, i^{-1} \hbar \partial / \partial y, i^{-1} \hbar \partial / \partial z)$ の固有値方程式 eigen equation $\hat{p} u_p(r) = p u_p(r)$ の解になっている。 p を演算子 \hat{p} の固有値, $u_p(r)$ を固有値 p に属する固有関数という。 eigen value eigen function 【 $\therefore \exp(i p \cdot r / \hbar) = \exp[i(p_x x + p_y y + p_z z) / \hbar]$ より $\hat{p}_x u_p = i^{-1} \hbar \partial u_p / \partial x = i^{-1} \hbar \cdot i \hbar^{-1} p_x u_p = p_x u_p$ 】 これを量子力学では「運動量という力学量は演算子 \hat{p} によって表わされ, 状態が $u_p(r)$ のとき運動量は値 p をとる」と解釈する。また, 運動エネルギーを表わす演算子 $\hat{H}_0 = \hat{p}^2 / 2m = (i^{-1} \hbar \nabla)^2 / 2m = -(\hbar^2/2m) \nabla^2$ を導入すると $i \hbar \partial \psi_p / \partial t = \hat{H}_0 \psi_p = E \psi_p, \hat{H}_0 u_p = (p^2/2m) u_p$ が成り立つ (ただし, $E = p^2/2m$)。

【 $\therefore i \hbar \partial \psi_p / \partial t = i \hbar (-i \hbar^{-1} E) \psi_p = E \psi_p$ (したがって $i \hbar \partial / \partial t$ もエネルギー演算子になっている) $\hat{H}_0 u_p = -(\hbar^2/2m) \nabla^2 u_p = -(\hbar^2/2m) [(i \hbar^{-1} p_x)^2 + (i \hbar^{-1} p_y)^2 + (i \hbar^{-1} p_z)^2] u_p = (p^2/2m) u_p$ 】 すなわち「自由粒子の運動エネルギーは演算子 \hat{H}_0 によって表わされ, 状態 $\psi_p(r, t)$ または $u_p(r)$ で運動エネルギーが値 $E = p^2/2m$ をとる」と言ってよい。このように量子力学では物理量が演算子で表わされるのが特徴である。

★ $\psi_p(r, t) = C e^{i(k \cdot r - \omega t)}$ は三次元空間を k (すなわち p) 方向に進む波動であるが, 時刻 t における位相関数 $\theta(r, t) = k \cdot r - \omega t$ の値は k 方向に垂直な平面 (波面) 上で一定値をとる。 【 $\therefore \theta(r, t) - \theta(r', t) = k \cdot r - k \cdot r' = k \cdot (r - r') = 0$, 右図】

定位相点 $\theta(r, t) = \text{一定}$ の進行速度 $v_{ph} = dr/dt = \omega/k$ を位相速度という。 phase velocity



【 \therefore 定位相点が dt 間に k 方向へ dr 進むと, $k \cdot dr - \omega dt = k dr - \omega dt = 0$ 】 しかし, $v_{ph} = \omega/k = \hbar \omega / \hbar k = E/p = p/2m$ は粒子速度ではない。粒子速度は $v = d\omega/dk = d(\hbar \omega) / d(\hbar k) = dE/dp = p/m$ で表わされる。 $E = (p^2 c^2 + m_0^2 c^4)^{1/2}$ に従う相対論的粒子の場合は $v_{ph} = E/p = c(1 + m_0^2 c^2/p^2)^{1/2} > c, v = dE/dp = c(1 + m_0^2 c^2/p^2)^{-1/2} < c$ (確かめよ)。なお, 相対論的自由粒子の波動方程式は $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$ で $E \rightarrow i \hbar \partial / \partial t, p \rightarrow i^{-1} \hbar \nabla$ として平面波 $\psi(r, t) = C e^{i(k \cdot r - \omega t)}$ に作用させれば $-\hbar^2 \partial^2 \psi / \partial t^2 = (-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m_0^2 c^4) \psi$ となる。あるいは $(\nabla^2 - c^{-2} \partial^2 / \partial t^2 - m_0^2 c^2 / \hbar^2) \psi = 0, \hbar \omega = (\hbar^2 k^2 c^2 + m_0^2 c^4)^{1/2}$ (Klein-Gordonの方程式という。)

§ 7 波束の構成—巨視的波動の不確定性関係

wave packet

uncertainty relation

★ 平面波は理念的・極限的な波動であり、現実の量子力学的粒子を表わす波は有限の空間領域を占有している波束である。波束の構成法および古典的波動現象一般に伴う不確定性関係を考察してみよう。

★ 波数 k の平面波 $\psi_k(x, t) = C \cos(kx - \omega t)$ に近い波束をつくる。角振動数は波数の関数で $\omega = \omega(k)$ 。

いま、 k に十分近い波数 $k_1 = k + \Delta k$, $k_2 = k - \Delta k$ をもつ二つの平面波を重ね合わせると

$$\psi_{12}(x, t) = \frac{1}{2}[\psi_{k_1}(x, t) + \psi_{k_2}(x, t)] = \frac{1}{2}C[\cos(k_1 x - \omega_1 t) + \cos(k_2 x - \omega_2 t)] \dots \textcircled{1}$$

$$\omega_1 = \omega(k_1) = \omega(k + \Delta k) = \omega(k) + \omega'(k)\Delta k + [\omega''(k)/2!](\Delta k)^2 + \dots \approx \omega(k) + \omega'(k)\Delta k$$

(テイラー展開 物理数学1)

【 $\because f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + [f''(a)/2!](x-a)^2 + \dots$ で $x-a = \Delta x$ とおくと
 $f(a + \Delta x) = f(a) + f'(a)\Delta x + [f''(a)/2!](\Delta x)^2 + \dots$, $f \rightarrow \omega$, $a \rightarrow k$, $\Delta x \rightarrow \Delta k$ 】
 $= \omega(k) + v_g \Delta k$ とおく。 $v_g = d\omega/dk$ を群速度という。同様にして

$$\omega_2 = \omega(k_2) = \omega(k - \Delta k) \approx \omega(k) - \omega'(k)\Delta k = \omega(k) - v_g \Delta k \quad \text{これらを}\textcircled{1}\text{に代入して}$$

$$\begin{aligned} \psi_{12}(x, t) &\approx \frac{1}{2}C[\cos[(k + \Delta k)x - (\omega + v_g \Delta k)t] + \cos[(k - \Delta k)x - (\omega - v_g \Delta k)t]] \\ &= \frac{1}{2}C[\cos(kx - \omega t) + (x - v_g t)\Delta k] + \cos(kx - \omega t) - (x - v_g t)\Delta k] \\ &= C \cos(kx - \omega t) \cos[(x - v_g t)\Delta k] = \psi_k(x, t) \cos[(x - v_g t)\Delta k] \end{aligned}$$

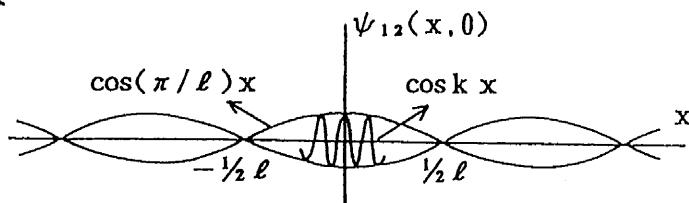
【 $\because \cos \alpha + \cos \beta = 2 \cos \frac{1}{2}(\alpha + \beta) \cos \frac{1}{2}(\alpha - \beta)$ 】

$t = 0$, $\psi_{12}(x, 0) = C \cos kx \cos(x \Delta k)$ の概形は

右のようになる。ただし、 $\Delta k = \pi/l$ とおいた。

次に、やはり k に十分近い波数 $k_3 = k + \Delta k'$,

$k_4 = k - \Delta k'$ をもつ二つの平面波を重ね合わせて



$\psi_{12}(x, t)$ と同形の $\psi_{34}(x, t) \approx \psi_k(x, t) \cos[(x - v_g t)\Delta k']$ をつくり、 $\psi_{12}(x, t)$ と重ね合わせると

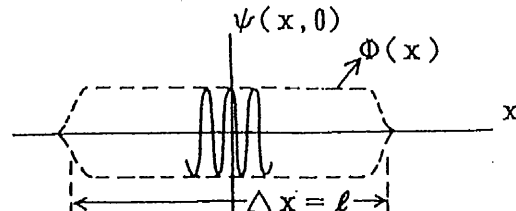
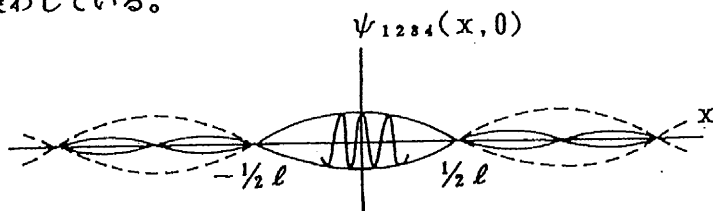
$$\begin{aligned} \psi_{1234}(x, t) &= \frac{1}{2}[\psi_{12}(x, t) + \psi_{34}(x, t)] = \frac{1}{2}\psi_k(x, t) [\cos[(x - v_g t)\Delta k] \\ &\quad + \cos[(x - v_g t)\Delta k']] \\ &= \psi_k(x, t) \cos[\frac{1}{2}(\Delta k + \Delta k')(x - v_g t)] \cos[\frac{1}{2}(\Delta k - \Delta k')(x - v_g t)] \end{aligned}$$

ここで $\frac{1}{2}(\Delta k + \Delta k') \approx \pi/l$ とおき、これより小さい $\frac{1}{2}(\Delta k - \Delta k')$ が $\pi/2l$ 程度になるように Δk

と $\Delta k'$ の値を選べば $\psi_{1234}(x, t) \approx \psi_k(x, t) \cos[(\pi/l)(x - v_g t)] \cos[(\pi/2l)(x - v_g t)]$

$\psi_{1234}(x, 0) \approx C \cos kx \cos(\pi/l)x \cos(\pi/2l)x$, グラフは下のようになり、 $-\ell/2 \leq x \leq \ell/2$ 以外の

振幅は減少した。この手続きをくり返していくと波束関数 $\psi(x, t) = \Phi(x - v_g t) \cos(kx - \omega t)$ が得られる。 $\Phi(x - v_g t)$ は波束の振幅に相当する包絡線関数で、波束全体が群速度 $v_g = d\omega/dk$ で進むことを表わしている。



★ このように重ね合わせた平面波の波数 $k_i (i=1, 2, 3, \dots)$ の k からの偏差 $k_i - k$ の範囲は、平均するとおよそ $\pm \frac{1}{2}(\Delta k + \Delta k') = \pm \pi/l$ の間隔 $2\pi/l$ と考えてよい。したがって、上の結果は「空間領域 $\Delta x \approx \ell$ 程度の広がりをもつ波束をつくるためには、 $\Delta k \approx 2\pi/l \approx 2\pi/\Delta x$ 程度の範囲の波数をもつ平面波を重ね合わせる必要がある」ことを示している。すなわち $\Delta x \Delta k \approx 2\pi$, これを位置座標と波数についての不確定性関係という。さらに、 $v_g = dx/dt \approx \Delta x/\Delta t$, $v_g = d\omega/dk \approx \Delta \omega/\Delta k$ より得られる $\Delta x \approx v_g \Delta t$, $\Delta k \approx \Delta \omega/v_g$ を代入すると時間と角振動数についての不確定性関係 $\Delta t \Delta \omega \approx 2\pi$ がでてくる。これは「長さ Δx の有限時間内だけ持続する時間的変動は、幅 $\Delta \omega \approx 2\pi/\Delta t$ にわたって分布する角振動数をもつ多数の正弦振動の重ね合わせとして表わすことができる」ことを意味している。

それぞれに $k = p/\hbar$, $\omega = E/\hbar$ を代入すると、量子力学的粒子・波動の不確定性関係 $\Delta x \Delta p \approx 2\pi \hbar$ と $\Delta t \Delta E \approx 2\pi \hbar$ が得られる。波束の群速度 v_g が量子力学的粒子の速度に対応していると考えられる。

§ 8 運動の第二法則——重ね合わせの原理とシュレーディンガー方程式
superposition principle & Schrödinger equation

★ 波動力学では、運動状態の変化はすべて波動関数を通して記述しなければならない。一つの力学系において波動関数 $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ で表わされる運動状態がすべて実現可能なとき、その力学系の状態は重ね合わせ波動関数 $\psi = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3 + \dots$ によって記述される。これを重ね合わせの原理という。

★ 粒子に力が作用すれば運動量に変化し、様々な運動量をもつ運動状態が実現可能になる。そのような状態を平面波の重ね合わせで表わすためにフーリエ変換を利用する。任意の関数 $f(x)$ のフーリエ積分表示の公式

$$f(x) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} f(u) e^{i\alpha(x-u)} du d\alpha \quad (\text{物理数学I})$$

において $f(x) \rightarrow \psi(x), u \rightarrow x', \alpha \rightarrow p/\hbar$ とおきかえれば

$$\psi(x) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') e^{i p(x-x')/\hbar} dx' d(p/\hbar) \quad \text{【指数の } h' \text{ は } \hbar \text{ を表わす。以下同様】}$$

$$= (2\pi \hbar)^{-1/2} \int [(2\pi \hbar)^{-1/2} \int \psi(x') e^{-i p x'/\hbar} dx'] e^{i p x/\hbar} dp, [\dots] = \tilde{\psi}(p), \text{積分変数 } x' \rightarrow x$$

$$\psi(x) = (2\pi \hbar)^{-1/2} \int \tilde{\psi}(p) e^{i p x/\hbar} dp, \tilde{\psi}(p) = (2\pi \hbar)^{-1/2} \int \psi(x) e^{-i p x/\hbar} dx \quad (\tilde{\psi} \text{ は } \psi \text{ のフーリエ変換})$$

★ **第二法則 (重ね合わせの原理とシュレーディンガー方程式)** —— 粒子が力の作用を受けるとき、運動状態の波動関数は平面波の重ね合わせで表わされ、その時間的・空間的変動はシュレーディンガー方程式に従う。

$$\psi(r, t) = (2\pi \hbar)^{-3/2} \int \int \int \tilde{\psi}(p, t) e^{i p \cdot r/\hbar} d^3 p, \tilde{\psi}(p, t) = (2\pi \hbar)^{-3/2} \int \int \int \psi(r, t) e^{-i p \cdot r/\hbar} d^3 r$$

$$i\hbar \partial \psi(r, t) / \partial t = [-(\hbar^2/2m) \nabla^2 + V(r)] \psi(r, t) \quad \text{全エネルギーを表わすハミルトニアン演算子 Hamiltonian operator}$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(r) = -\hat{p}^2/2m + V(r) = -(\hbar^2/2m) \nabla^2 + V(r) \text{ を用いて } i\hbar \partial \psi / \partial t = \hat{H} \psi \text{ と書く。}$$

$V(r)$ は、粒子に作用する力 $F(r) = -\nabla V(r) = (-\partial V/\partial x, -\partial V/\partial y, -\partial V/\partial z)$ のポテンシャル。

★ $\tilde{\psi}(p, t)$ は $\psi(r, t)$ のフーリエ変換で、 $\psi(r, t)$ のフーリエ展開における要素平面波 $e^{i p \cdot r/\hbar}$ の振幅を表わしているが、両者は数学的には全く同格であり、 $\psi(r, t)$ を座標表示の波動関数、 $\tilde{\psi}(p, t)$ を位置表示の波動関数という。

$$\int \int \int |\psi(r, t)|^2 d^3 r = \int \int \int |\tilde{\psi}(p, t)|^2 d^3 p \text{ が成り立つ。}$$

$$\begin{aligned} \text{【}\because \text{ (左辺)} &= \int \int \int \psi^* \psi d^3 r = \int \int \int [(2\pi \hbar)^{-3/2} \int \int \int \tilde{\psi}^* e^{-i p \cdot r/\hbar} d^3 p] \psi d^3 r \\ &= \int \int \int [(2\pi \hbar)^{-3/2} \int \int \int \psi e^{-i p \cdot r/\hbar} d^3 r] \tilde{\psi}^* d^3 p = \int \int \int \tilde{\psi}^* \tilde{\psi} d^3 p = \text{(右辺)} \end{aligned}$$

★ 座標表示の波動関数 $\psi(r, t)$ に対しては、運動量 p は演算子 $\hat{p} = i^{-1} \hbar \nabla$ で表わされ、次式が成り立つ。
($= i^{-1} \hbar \partial / \partial r$ と書く)

$$\hat{p} \psi(r, t) = (2\pi \hbar)^{-3/2} \int \int \int p \tilde{\psi}(p, t) e^{i p \cdot r/\hbar} d^3 p$$

$$\begin{aligned} \text{【}\because \hat{p}_x \psi(r, t) &= i^{-1} \hbar \partial / \partial x [(2\pi \hbar)^{-3/2} \int \int \int \tilde{\psi}(p, t) e^{i p \cdot r/\hbar} d^3 p] \\ &= i^{-1} \hbar (2\pi \hbar)^{-3/2} \int \int \int \tilde{\psi}(p, t) i \hbar^{-1} p_x e^{i p \cdot r/\hbar} d^3 p = (2\pi \hbar)^{-3/2} \int \int \int p_x \tilde{\psi}(p, t) e^{i p \cdot r/\hbar} d^3 p \end{aligned}$$

また、位置座標 r を $\psi(r, t)$ にかけると $r \psi(r, t)$ になるから、 r は座標表示の波動関数 $\psi(r, t)$ を別の波動関数に変換する演算子と見なすことができる。

★ 次に、位置座標演算子 $\hat{r} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = i\hbar \partial / \partial p = (i\hbar \partial / \partial p_x, i\hbar \partial / \partial p_y, i\hbar \partial / \partial p_z)$ を導入すると、 \hat{r} の固有値方程式 $\hat{r} v_r(p) = r v_r(p)$ の解は $v_r(p) = C e^{-i p \cdot r/\hbar}$ で与えられる。

$$\text{【}\because \hat{x} v_r(p) = i\hbar \partial / \partial p_x [C \exp[-i(p_x x + p_y y + p_z z)/\hbar]] = i\hbar (-i x/\hbar) v_r(p) = x v_r(p) \text{】}$$

$v_r(p)$ には、粒子が空間点 $r = (x, y, z)$ に存在する状態を運動量表示で表わすという役割が与えられる。

運動量表示の波動関数 $\tilde{\psi}(p, t)$ に対しては、位置座標 r は演算子 $\hat{r} = i\hbar \partial / \partial p$ で表わされ、次式が成り立つ。

$$\begin{aligned} \hat{r} \tilde{\psi}(p, t) &= (2\pi \hbar)^{-3/2} \int \int \int r \psi(r, t) e^{-i p \cdot r/\hbar} d^3 r \\ \text{【}\because \hat{x} \tilde{\psi}(p, t) &= i\hbar \partial / \partial p_x [(2\pi \hbar)^{-3/2} \int \int \int \psi(r, t) e^{-i p \cdot r/\hbar} d^3 r] \\ &= i\hbar (2\pi \hbar)^{-3/2} \int \int \int \psi(r, t) (-i \hbar^{-1} x) e^{-i p \cdot r/\hbar} d^3 r = (2\pi \hbar)^{-3/2} \int \int \int x \psi(r, t) e^{-i p \cdot r/\hbar} d^3 r \end{aligned}$$

この場合は、運動量 p は運動量表示の波動関数 $\tilde{\psi}(p, t)$ を $p \tilde{\psi}(p, t)$ に変換する演算子と見なせる。

§ 9 運動の第三法則—波動関数の確率解釈

★ 第二法則のシュレーディンガー方程式 $i\hbar\partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi$ を満たす波動関数 $\psi(r, t)$ とそのフーリエ変換 $\tilde{\psi}(p, t)$ は本質的に複素数であるが、量子力学では次のように確率振幅としての意味をそれぞれに与える。

★ 第三法則 (波動関数の確率解釈) — 時刻 t において、粒子が空間点 $r = (x, y, z)$ のまわりの微小領域 $d^3r = dx dy dz$ 内に見いだされる確率は $|\psi(r, t)|^2 d^3r$ に比例し、運動量空間点 $p = (p_x, p_y, p_z)$ のまわりの微小領域 $d^3p = dp_x dp_y dp_z$ 内の運動量をもって見いだされる確率は $|\tilde{\psi}(p, t)|^2 d^3p$ に比例する。

★ シュレーディンガー方程式の線形同次性由来する重ね合わせの原理によって、 $\psi(r, t)$ が解ならその任意定数倍 $C\psi(r, t)$ も解であるから $\int \int \int |C\psi(r, t)|^2 d^3r = 1$ になるように C を定めて、 $C\psi$ を改めて ψ と書くと $\int \int \int |\psi(r, t)|^2 d^3r = 1$ になる。このように定数因子 C を選ぶことを波動関数の規格化という。全空間のどこかに粒子が見いだされる確率は 1 という意味である。このとき $\tilde{\psi}(p, t)$ もパーセバルの等式から自動的に $\int \int \int |\tilde{\psi}(p, t)|^2 d^3p = 1$ に規格化される (全運動量空間のどこかに粒子が見いだされる確率は 1)。

★ 確率の保存則を考えよう。時刻 t において、閉曲面 S で囲まれた空間領域 Ω 内に粒子が見いだされる確率 $P_i(\Omega) = \int \int \int_{\Omega} |\psi(r, t)|^2 d^3r = \int \int \int_{\Omega} \psi^*(r, t)\psi(r, t) d^3r$ の時間的変化を求めると

$$dP_i(\Omega)/dt = \int \int \int_{\Omega} [(\partial\psi^*/\partial t)\psi + \psi^*\partial\psi/\partial t] d^3r = (i\hbar)^{-1} \int \int \int_{\Omega} [\psi^*\hat{H}\psi - (\hat{H}\psi^*)\psi] d^3r$$

【 $\because i\hbar\partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi, -i\hbar\partial\psi^*/\partial t = \hat{H}\psi^*$ 】

$$= (i\hbar)^{-1} \int \int \int_{\Omega} [\psi^*[-(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(r)]\psi - \psi[-(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(r)]\psi^*] d^3r$$

$$= -(\hbar/2im) \int \int \int_{\Omega} (\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*) d^3r = -(\hbar/2im) \int \int_S (\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \cdot n dS$$

【 \because グリーンの定理 $\int \int \int_{\Omega} (\psi\nabla^2\varphi - \varphi\nabla^2\psi) d^3r = \int \int_S (\psi\nabla\varphi - \varphi\nabla\psi) \cdot n dS$ で $\psi \rightarrow \psi^*, \varphi \rightarrow \psi$ 】

Green (微分学 I)

$$= -\int \int_S J(r, t) \cdot n dS$$

ただし、 $J(r, t) = (\hbar/2im)[\psi^*(r, t)\nabla\psi(r, t) - \psi(r, t)\nabla\psi^*(r, t)]$

この結果は、粒子が Ω 内に存在する確率の増加または減少する割合が、閉曲面 S を通って流入または流出する流れ $J(r, t)$ の総和に等しいことを意味している。 $J(r, t)$ を確率の流れの密度という。いま閉曲面 S を無限遠方に遠ざけて領域 Ω を全空間に広げると、無限遠方では波動関数がゼロだから (境界条件) $J(r, t) = 0$ したがって $P_i(\text{全空間}) = \text{一定}$ が成り立つ。すなわち、全空間のどこかに粒子が見いだされる確率は時間的に一定ということになる。これを確率保存則という。

★ グリーンの定理やガウスの発散定理は、量子力学でもよく用いられるので復習しておく。
C. Gauss 1777~1855 ドイツ

ベクトル関数 $a(x, y, z)$ で表わされるベクトル場内の任意の閉曲面 S で囲まれた空間領域を Ω とすると $\int \int \int_{\Omega} \nabla \cdot a d^3r = \int \int \int_{\Omega} \text{div} a d^3r = \int \int_S a \cdot n dS$...① (ガウスの発散定理) が成立した。 d^3r は Ω 内の体積要素、 n は S 上の面積要素 dS に垂直で S の内部から外部へ向かう法線単位ベクトル。たとえば 流体の速度ベクトル a に対して、 $\text{div} a = \partial a_x/\partial x + \partial a_y/\partial y + \partial a_z/\partial z$ は「単位体積・単位時間当たりの湧き出し量(発散量)」、 $a \cdot n = a_x n_x + a_y n_y + a_z n_z$ は「単位面積・単位時間当たりの流出量」であった。

二つのスカラー関数 $\psi(x, y, z), \varphi(x, y, z)$ で構成されるベクトル関数 $a = \psi\nabla\varphi$ を考えると ①は $\int \int \int_{\Omega} \nabla \cdot (\psi\nabla\varphi) d^3r = \int \int \int_{\Omega} (\nabla\psi \cdot \nabla\varphi + \psi\nabla^2\varphi) d^3r = \int \int_S (\psi\nabla\varphi) \cdot n dS$...② (グリーンの定理 I)

ψ と φ を入れかえると $\int \int \int_{\Omega} (\nabla\varphi \cdot \nabla\psi + \varphi\nabla^2\psi) d^3r = \int \int_S (\varphi\nabla\psi) \cdot n dS$...③

②-③より $\int \int \int_{\Omega} (\psi\nabla^2\varphi - \varphi\nabla^2\psi) d^3r = \int \int_S (\psi\nabla\varphi - \varphi\nabla\psi) \cdot n dS$...④ (グリーンの定理 II) 右辺はスカラー関数の方向微係数 $\partial\varphi/\partial n = (\nabla\varphi) \cdot n$ を用いて $\int \int_S (\psi\partial\varphi/\partial n - \varphi\partial\psi/\partial n) dS$ と表わすことも多い。

★ $x, y(x), y'(x) = dy/dx$ を変数とする関数 $f(x, y, y')$ の定積分

$$I = \int_a^b f(x, y, y') dx \quad \dots ①$$

を考える。関数 $y(x)$ の形を右図の点線の

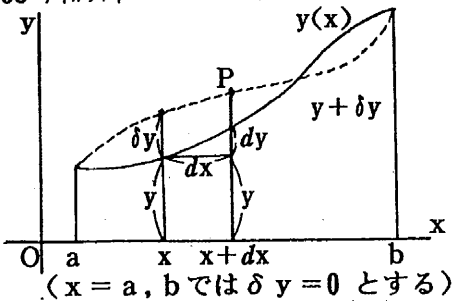
のように少し変えて $y \rightarrow y + \delta y, y' \rightarrow y' + \delta y'$ $\dots ②$ としても①

の値が変化しない条件を求める。 δy は x の関数で y の変分という。②

$$\text{による①の変化は } \delta I = \int_a^b [(\partial f / \partial y) \delta y + (\partial f / \partial y') \delta y'] dx \quad \dots ③$$

x の関数 $y(x)$ は $x \rightarrow x + dx$ によって $y + dy = y + (dy/dx) dx = y + y' dx$ になるから ②で定義した

x の関数 $y + \delta y$ は $x \rightarrow x + dx$ によって $(y + \delta y) + d(y + \delta y) = (y + \delta y) + (y' + \delta y') dx \dots ④$ になる。



これは図のP点の y 座標である。④より $d(y + \delta y) = (y' + \delta y') dx$ が成り立つが、 $dy = y' dx$

ゆえ $d(\delta y) = \delta y' dx \therefore \delta y' = \delta(dy/dx) = d(\delta y)/dx$ すなわち演算子 δ と d/dx は交換可能だから

$$\text{③は } \delta I = \int_a^b [(\partial f / \partial y) \delta y + \underbrace{(\partial f / \partial y') d(\delta y) / dx}_{\text{【部分積分】}}] dx = \int_a^b (\partial f / \partial y) \delta y dx + \underbrace{[(\partial f / \partial y') \delta y]}_{=0} \Big|_a^b - \int_a^b [d(\partial f / \partial y') / dx] \delta y dx = \int_a^b [\partial f / \partial y - d(\partial f / \partial y') / dx] \delta y dx \quad \text{となる。従って}$$

任意の δy に対して $\delta I = 0$ となるためには $d(\partial f / \partial y') / dx - \partial f / \partial y = 0 \dots ⑤$ が成り立たなければならない。

これをオイラーの微分方程式といい I が停留値をとる $y(x)$ の関数形を与える。 f が二つ以上の未知関数

$y(x), z(x), \dots$ を含むときも同様で $\delta I = \delta \int_a^b f(x, y, z, \dots, y', z', \dots) dx = 0$ となる $y(x), z(x), \dots$

を求めるには $d(\partial f / \partial y') / dx - \partial f / \partial y = 0, d(\partial f / \partial z') / dx - \partial f / \partial z = 0, \dots$ を解けばよい。【変分法】 calculus of variation

★ 力学系の運動エネルギーを K , 系に作用する力のポテンシャルを V として $L = K - V$ をラグランジュ関数

またはラグランジアンという。ハミルトンは「力学系が時刻 t_1 にとる位置 P_1 から時刻 t_2 にとる位置 P_2 に移

るとき、 P_1 と P_2 を結ぶ様々な経路のうち自然界で実際に起こる運動は $\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0 \dots ⑥$ を満たすものである」と考えた(ハミルトンの原理)。

力学系を f 個の独立変数 q_1, q_2, \dots, q_f (一般化座標) とそれらの時間微分 generalized coordinate

q_1', q_2', \dots, q_f' ($q_r' = dq_r / dt$) で表わすと⑥は $\delta \int_{t_1}^{t_2} L(t, q_1, \dots, q_f, q_1', \dots, q_f') dt = 0 \dots ⑦$ オイ

ラーの微分方程式は $d(\partial L / \partial q_r') / dt = \partial L / \partial q_r$ ($r = 1, 2, \dots, f$) $\dots ⑧$ ラグランジュの運動方程式という。

J. Lagrange 1736~1813 イリ7

<ex> 落体のラグランジアンを $L = K - V = \frac{1}{2} m y'^2 - m g y$ としてラグランジュの運動方程式⑧を書けば $d(\partial L / \partial y') / dt = \partial L / \partial y, d(m y') / dt = -m g \therefore m y'' = -m g$ (ニュートンの運動方程式)

<ex> 単振動は $L = \frac{1}{2} m x'^2 - \frac{1}{2} k x^2, d(\partial L / \partial x') / dt = \partial L / \partial x, d(m x') / dt = -k x \therefore m x'' = -k x$

★ ⑧で $p_r = \partial L / \partial q_r', r = 1, 2, \dots, f$ (一般化運動量) $\dots ⑨$ とおけば $dp_r / dt = \partial L / \partial q_r \dots ⑩$ となる。

ここで $H = \sum_{r=1}^f p_r q_r' - L(t, q_1, \dots, q_f, q_1', \dots, q_f')$ $\dots ⑪$ という関数を定義すると、⑨の変換によって

q_r' は $t, q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f$ の関数になるから $H = H(t, q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f) \dots ⑫$ と表わせる。

⑫の全微分をつくると $dH = (\partial H / \partial t) dt + \sum_{r=1}^f [(\partial H / \partial q_r) dq_r + (\partial H / \partial p_r) dp_r] \dots ⑬$ また、⑪の全微分は

$$dH = d \sum_{r=1}^f p_r q_r' - dL = \sum_{r=1}^f (p_r dq_r' + q_r' dp_r) - [(\partial L / \partial t) dt + \sum_{r=1}^f [(\partial L / \partial q_r) dq_r + (\partial L / \partial q_r') dq_r'] \dots ⑭$$

$= -(\partial L / \partial t) dt + \sum_{r=1}^f (q_r' dp_r - p_r' dq_r) \dots ⑭$ ⑬ \equiv ⑭ であるから、 dp_r と dq_r の係数を比較して

$dq_r / dt = \partial H / \partial p_r, dp_r / dt = -\partial H / \partial q_r$ ($r = 1, 2, \dots, f$) $\dots ⑮$ これをハミルトンの正準(運動)方程式、 canonical equation

q_r, p_r を互いに共役な正準変数、 H をハミルトン関数またはハミルトニアンという。 H が t を直接に(陽に) canonical variable

含んでいないときは $\partial H / \partial t = 0$ ゆえ、⑮から $dH / dt = \sum_{r=1}^f [(\partial H / \partial q_r) dq_r / dt + (\partial H / \partial p_r) dp_r / dt]$ f Hamiltonian

下線に⑮を代入して $dH / dt = \sum_{r=1}^f [(\partial H / \partial q_r) \partial H / \partial p_r + (\partial H / \partial p_r) (-\partial H / \partial q_r)] = 0 \dots ⑯$ が成り立つ。

★ Hと⑩の物理的意味を考える。力学量はtを直接には含まず、Vは q_1, \dots, q_f の関数とする。—XIII—
力学系の粒子の個数をnとし、その直交座標を (x_i, y_i, z_i) , $i=1, 2, \dots, n$ とする。 q_1, \dots, q_f で力学系
の配置を指定すれば $x_i = x_i(q_1, \dots, q_f)$, $y_i = y_i(q_1, \dots, q_f)$, $z_i = z_i(q_1, \dots, q_f)$ $i=1, 2, \dots, n$

$$t \text{ で微分すると } x_i' = \sum_{r=1}^f (\partial x_i / \partial q_r) q_r', \quad y_i' = \sum_{r=1}^f (\partial y_i / \partial q_r) q_r', \quad z_i' = \sum_{r=1}^f (\partial z_i / \partial q_r) q_r' \quad \text{これから}$$

力学系の運動エネルギー $K = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} m_i (x_i'^2 + y_i'^2 + z_i'^2)$ は q_1', q_2', \dots, q_f' の2次の同次式になる
ことが分かる。

$$p_r = \partial L / \partial q_r' = \partial (K - V) / \partial q_r' = \partial K / \partial q_r' \quad [\because \partial V / \partial q_r' = 0] \quad \text{より } \sum_{r=1}^f p_r q_r' = \sum_{r=1}^f (\partial K / \partial q_r') q_r' = 2K \quad \text{となる。}$$

【 \because 同次式の性質。たとえば、独立変数 x_1, x_2 の2次の同次式 $f(x_1, x_2) = ax_1^2 + bx_1x_2 + cx_2^2$ について
 $(\partial f / \partial x_1)x_1 + (\partial f / \partial x_2)x_2 = (2ax_1 + bx_2)x_1 + (bx_1 + 2cx_2)x_2 = 2(ax_1^2 + bx_1x_2 + cx_2^2) = 2f(x_1, x_2)$ 】

$$\therefore H = \sum_{r=1}^f p_r q_r' - L = 2K - (K - V) = K + V \quad \text{すなわち、ハミルトニアンHは力学的エネルギーを表わし、}$$

⑩は「力学系が保存力の作用を受けて、時間とともに変わらない束縛条件にしたがうように運動するときには
 $H = K + V$ は一定である」という力学的エネルギー保存の法則を意味する。変数 $q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f$ を直
交軸とするような $2f$ 次元の抽象空間を位相空間という。正準方程式⑨は、力学系のハミルトニアンを通じて
phase space

この空間の一点 $(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f)$ 即ち力学系の配置と運動量(運動状態)がきまることを示している。

★ 一つの粒子のハミルトニアンは $H = K + V = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) / 2m + V(x, y, z)$, $F = -\nabla V$,
 $K = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)$, $p_x = \partial K / \partial \dot{x} = m \dot{x}$, $p_y = \partial K / \partial \dot{y} = m \dot{y}$, $p_z = \partial K / \partial \dot{z} = m \dot{z}$ 【 \because ⑩】

★ ポテンシャルが原点からの距離 r だけの関数 $V(r)$ のときは極座標が実用的である。速度 $v = (\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$
 $= ((r \sin \theta \cos \phi)', (r \sin \theta \sin \phi)', (r \cos \theta)') = (r' \sin \theta \cos \phi + r \cos \theta \cos \phi \cdot \theta' - r \sin \theta \sin \phi \cdot \phi',$
 $r' \sin \theta \sin \phi + r \cos \theta \sin \phi \cdot \theta' + r \sin \theta \cos \phi \cdot \phi', r' \cos \theta - r \sin \theta \cdot \theta')$ と r, θ, ϕ 方向の単位ベクトル
 $e_r = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$, $e_\theta = (\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, -\sin \theta)$, $e_\phi = (-\sin \phi, \cos \phi, 0)$ との
内積から、 v の r, θ, ϕ 方向の成分は $v_r = v \cdot e_r = r'$, $v_\theta = v \cdot e_\theta = r \theta'$, $v_\phi = v \cdot e_\phi = r \sin \theta \cdot \phi'$
【 $\because v_r = v \cdot e_r = (r' \sin \theta \cos \phi + r \cos \theta \cos \phi \cdot \theta' - r \sin \theta \sin \phi \cdot \phi') \sin \theta \cos \phi + (r' \sin \theta \sin \phi$
 $+ r \cos \theta \sin \phi \cdot \theta' + r \sin \theta \cos \phi \cdot \phi') \sin \theta \sin \phi + (r' \cos \theta - r \sin \theta \cdot \theta') \cos \theta = r' \sin^2 \theta (\cos^2 \phi$
 $+ \sin^2 \phi) + r \sin \theta \cos \theta \cdot \theta' (\cos^2 \phi + \sin^2 \phi) + r' \cos^2 \theta - r \sin \theta \cos \theta \cdot \theta' = r'$ (etc.)】

$$\therefore K = K(r, \theta, \phi, r', \theta', \phi') = \frac{1}{2} m (v_r^2 + v_\theta^2 + v_\phi^2) = \frac{1}{2} m (r'^2 + r^2 \theta'^2 + r^2 \sin^2 \theta \cdot \phi'^2) \quad \text{よって}$$

$$L = K - V(r) \quad \text{から一般化運動量は } p_r = \partial L / \partial r' = \partial K / \partial r' = m r', \quad p_\theta = \partial L / \partial \theta' = \partial K / \partial \theta' = m r^2 \theta',$$

$$p_\phi = \partial L / \partial \phi' = \partial K / \partial \phi' = m r^2 \sin^2 \theta \cdot \phi' \quad \therefore r' = p_r / m, \quad \theta' = p_\theta / m r^2, \quad \phi' = p_\phi / m r^2 \sin^2 \theta \quad \text{これ$$

ら K に代入すると $H = H(r, \theta, \phi, p_r, p_\theta, p_\phi) = (1/2m)(p_r^2 + p_\theta^2 / r^2 + p_\phi^2 / r^2 \sin^2 \theta) + V(r)$
 $\theta = \pi/2$ とおけば二次元になり $K(r, \phi, p_r, p_\phi) = (1/2m)(p_r^2 + p_\phi^2 / r^2)$, $p_\phi = m r^2 \phi'$ は角運動量。

★ 相対論的粒子の場合は $L = m_0 c^2 [1 - (1 - v^2/c^2)^{1/2}] - V(x)$ として、⑩は $d(\partial L / \partial v) / dt = -\partial L / \partial x$
 $\partial L / \partial v = -\frac{1}{2} m_0 c^2 (1 - v^2/c^2)^{-1/2} (-2v/c^2) = \frac{m v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \therefore d(mv) / dt = -dV/dx$ また、 $p = mv$ より
 $L = m_0 c^2 [1 - (1 - v^2/c^2)^{1/2}] - V = m_0 c^2 - m c^2 (1 - p^2/m^2 c^2)^{1/2} - V = m_0 c^2 - m c^2 + p^2/m - V$ と書けば、⑩から $H = p x' - L = p v - L = p^2/m - L = m c^2 - m_0 c^2 + V + K + V$ となる。

★ L を適当に選べばハミルトンの原理は全ての自然現象に適用する。 $L = (1/8\pi)(E^2 - B^2) + c^{-1} A \cdot i - \rho \varphi$
として $\delta \iiint L dx dy dz dt = 0$ からマクスウェルの電磁場の方程式 $(c^{-2} \partial^2 / \partial t^2 - \nabla^2) A = (4\pi/c) i$,
 $(c^{-2} \partial^2 / \partial t^2 - \nabla^2) \varphi = 4\pi \rho$ が導かれる。 E, B, i, ρ は、それぞれ電場、磁束密度、電流密度、電荷密度で、
 A, φ は $E = -\nabla \varphi - c^{-1} \dot{A}$, $B = \nabla \times A$ で定義されるベクトルポテンシャルとスカラーポテンシャル。

★ ⑦式をHで表わすと⑩、⑪より $\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} [\sum_{r=1}^f p_r q_r' - H(t, q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f)] dt = 0 \dots$ ⑩
いま力学系のエネルギーを $E = H(t, q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f)$ とおき、時間 t をある媒介変数 τ の関数と考
えてみると、 t の関数 $q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f$ も τ の関数になるから、⑩は $\delta \int_{t_1}^{t_2} [\sum_{r=1}^f p_r (dq_r/dt) - E] dt$
 $= \delta \int_{\tau_1}^{\tau_2} [\sum_{r=1}^f p_r (dq_r/d\tau) (d\tau/dt) - E] dt = \delta \int_{\tau_1}^{\tau_2} [\sum_{r=1}^f p_r (dq_r/d\tau) + (-E) dt/d\tau] d\tau = 0$, 下線が同じ

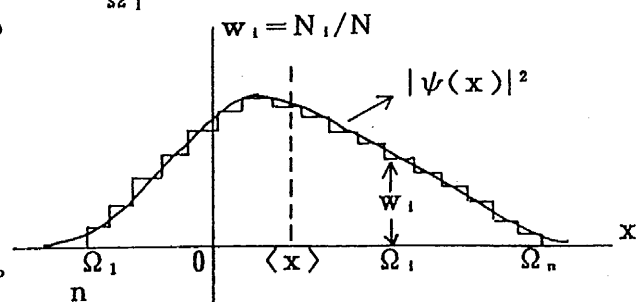
形になっていることに注目し、 $t = q_{f+1}$, $-E = p_{f+1}$ として t と $-E$ を正準変数の仲間に入れてしまうと、両
者は⑨の第二式 $dp_r/dt = -\partial H / \partial q_r$ を満足していることが分かる。【 \because 左辺 $= dp_{f+1}/dt = d(-E)/dt =$
 $-dE/dt$, 右辺 $= -\partial H / \partial q_{f+1} = -\partial H / \partial t \therefore dE/dt = \partial H / \partial t$, Hが t を直接に含まないときは $E = \text{一定}$ 】

★ 量子力学では $E(t) = H(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f)$ をエネルギー演算子 $\hat{E} = \hat{H}$ に置き換える。座標表示の場合
は q_1, \dots, q_f はそのまま掛けるという演算子と考え、 p_1, \dots, p_f を $i^{-1} \hbar \partial / \partial q_1, \dots, i^{-1} \hbar \partial / \partial q_f$ で置き換
えるとハミルトニアン演算子 \hat{H} が得られる。一つの粒子の場合は $H = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) / 2m + V(x, y, z)$
 $\rightarrow \hat{H} = [(i^{-1} \hbar \partial / \partial x)^2 + (i^{-1} \hbar \partial / \partial y)^2 + (i^{-1} \hbar \partial / \partial z)^2] / 2m + V(x, y, z) = -(\hbar^2 / 2m) \nabla^2 + V(x, y, z)$
同様にして、 $-E = p_{f+1}$ を $i^{-1} \hbar \partial / \partial q_{f+1} = i^{-1} \hbar \partial / \partial t$ で置き換えると $E \rightarrow \hat{E} = -i^{-1} \hbar \partial / \partial t = i \hbar \partial / \partial t$
 $\hat{E} = \hat{H}$ を量子力学系の状態を表わす波動関数 $\psi(x, y, z, t)$ に作用させて $\hat{E} \psi = \hat{H} \psi$ をつぐればシュレ
ディンガー方程式 $i \hbar \partial \psi / \partial t = [-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)] \psi$ が得られる。運動量表示の場合は p_1, \dots, p_f は
そのまま掛けるという演算子と考え、 q_1, \dots, q_f を $i \hbar \partial / \partial p_1, \dots, i \hbar \partial / \partial p_f$ で置き換えればよい。解析力学は
単なる形式論理のように見えるかも知れないが、決してそうではない。互いに共役な正準変数の間に存在する
不確定性関係 $\Delta x \Delta p \approx 2\pi \hbar$, $\Delta E \Delta t \approx 2\pi \hbar, \dots$ で $\hbar \approx 0$ と見なせば力学量の不確定性は消失し、量子力
学は古典力学に一致する。その意味でも解析力学は古典力学と量子力学を結ぶ不可欠な論理体系なのである。

§ 10 粒子の位置座標と運動量の期待値 (平均値)

expectation value

★ 第三法則の波動関数の確率解釈と実験による観測操作との関係を考える。干渉実験ではスクリーン上に多数の粒子検出器を並べて粒子の到着を観測するが、このような粒子検出器の配列に対応して、空間を互いに重ならない n 個の領域 $\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_n$ に分割する。また、干渉実験の場合の十分弱いビームによる実験のように、それぞれが同じ波動関数 ψ で記述される同じ粒子 1 個だけからなる独立な力学系を N 個用意する。 N は十分大きいとする。各力学系において同時に粒子の位置を測定した結果、領域 Ω_1 の中で粒子を見つけた力学系の数が N_1 であったとすると ($\sum_{i=1}^n N_i = N$)、 $N_1/N = w_1$ は粒子が Ω_1 内に見いだされる実験的確率である。第三法則はその値が波動力学によって理論的に求められる存在確率 $P(\Omega_1) = \iint_{\Omega_1} |\psi|^2 d^3 r$ に等しいと主張する。下図は



領域 $\Omega_1, \Omega_2, \dots$ を一次変数 x の区間に対応させたときの $w_1 = N_1/N$ のヒストグラムである。 N と n が十分大きく、 Ω_1 を十分小さくする極限で、ヒストグラムは $|\psi(x, t)|^2$ と同じ滑らかな曲線に近づかずである。これが第三法則の内容である。この測定結果から粒子の平均位置を求める。

Ω_1 の中心点の座標を x_1 とすれば、平均位置の x 座標は $\langle x \rangle = \sum_{i=1}^n x_i w_i$ である。 n 大、 Ω_1 小の極限では和は積分になり、 x_i は x で、 w_i は $|\psi|^2$ でおきかえてよい。すなわち $\langle x \rangle = \iint_{\Omega} x |\psi(r, t)|^2 d^3 r$ となる。

y 座標、 z 座標についても同様である。これを状態 ψ における位置座標の期待値という。運動量測定についても同様な手続きが可能であり、状態 ψ における運動量 x 成分の期待値は $\langle p_x \rangle = \iint \psi^* \hat{p}_x \psi d^3 p$

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \iint \psi^* \hat{p}_x \psi d^3 p = \iint \psi^* \hat{p}_x \psi d^3 p \\ &= \iint \psi^* [(2\pi\hbar)^{-3/2} \iint \psi(r, t) e^{i p \cdot r / \hbar} d^3 r] [(2\pi\hbar)^{-3/2} \iint \psi(r', t) e^{-i p \cdot r' / \hbar} d^3 r'] d^3 p \\ &= \iint \psi^*(r, t) [(2\pi\hbar)^{-3} \iint \hat{p}_x e^{i p \cdot (r-r') / \hbar} [\iint \psi(r', t) e^{-i p \cdot r' / \hbar} d^3 r'] d^3 p] d^3 r \\ &= \iint \psi^*(r, t) \hat{p}_x [(2\pi\hbar)^{-3} \iint \psi(r', t) e^{i p \cdot (r-r') / \hbar} d^3 r'] d^3 p d^3 r \\ &= \iint \psi^*(r, t) \hat{p}_x \psi(r, t) d^3 r \quad \left[\because \psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1} \iint \psi(x') e^{i p \cdot (x-x') / \hbar} dx' d p \right] \\ &= \iint \psi^*(r, t) (i^{-1} \hbar \partial / \partial x) \psi(r, t) d^3 r \quad \text{が得られる。同様の方法によって} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \iint \psi^*(p, t) \hat{x} \psi(p, t) d^3 p = \iint \psi^*(p, t) (i\hbar \partial / \partial p_x) \psi(p, t) d^3 p \quad \text{三次元で書くと} \\ \langle p \rangle &= \iint \psi^*(r, t) \hat{p} \psi(r, t) d^3 r = \iint \psi^*(r, t) i^{-1} \hbar \nabla \psi(r, t) d^3 r \\ \langle r \rangle &= \iint \psi^*(p, t) \hat{r} \psi(p, t) d^3 p = \iint \psi^*(p, t) (i\hbar \partial / \partial p) \psi(p, t) d^3 p \end{aligned}$$

★ $\psi(r, t)$ を用いて状態を表わす座標表示では、位置座標 r は変数 r を掛け算するという演算子であり、運動量 p はベクトル微分演算子 $\hat{p} = i^{-1} \hbar \nabla = i^{-1} \hbar \partial / \partial r$ になった。 $\psi(r, t)$ のフーリエ変換 $\psi(p, t)$ によって状態を記述する運動量表示では、運動量 p が変数 p を掛け算するという演算子であり、位置座標 r はベクトル微分演算子 $\hat{r} = i\hbar \partial / \partial p$ になった。したがって、一般の力学量 $F(r, p)$ を表わす演算子 \hat{F} をつくる最も自然な方法は、座標表示では p を $\hat{p} = i^{-1} \hbar \partial / \partial r$ でおきかえて演算子 $\hat{F} = F(r, i^{-1} \hbar \partial / \partial r)$ をつくることであり、運動量表示では r を $\hat{r} = i\hbar \partial / \partial p$ でおきかえて演算子 $\hat{F} = F(i\hbar \partial / \partial p, p)$ をつくることである。このとき状態 ψ における力学量 F の期待値は次のようになる。

$$\langle F \rangle = \iint \psi^*(r, t) F(r, i^{-1} \hbar \partial / \partial r) \psi(r, t) d^3 r = \iint \psi^*(p, t) F(i\hbar \partial / \partial p, p) \psi(p, t) d^3 p$$

§ 11 位置座標の固有関数, デルタ関数規格化
delta-function normalization

★ 粒子の位置座標 $r = (x, y, z)$ 自体を演算子と見なしたときの固有関数を求める。運動の第二法則から

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p, t) e^{ipx/\hbar} dp = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} [(2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x', t) e^{-ipx'/\hbar} dx'] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x', t) [(2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip(x-x')/\hbar} dp] dx' \quad p = \hbar k \text{ とおくと} \\ [\dots] &= (2\pi)^{-1} \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \int_{-\alpha}^{\alpha} e^{ik(x-x')} dk = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} (2\pi)^{-1} [i(x-x')]^{-1} [e^{i\alpha(x-x')} - e^{-i\alpha(x-x')}] \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow \infty} [2\pi i(x-x')]^{-1} [e^{i\alpha(x-x')} - e^{-i\alpha(x-x')}] = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} [2\pi i(x-x')]^{-1} 2i \sin \alpha(x-x') \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \sin \alpha(x'-x) / \pi(x'-x) = \delta(x'-x) = 0 \quad (x' \neq x), \text{ ただし } \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x'-x) dx' = 1 \end{aligned}$$

【∵ $\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \sin \alpha x / \pi x$, $\int_{-\infty}^{\infty} (\sin \alpha x / \pi x) dx = 1$, ディラックのデルタ関数, 物数学Ⅱ
P. Dirac 1902-1984 併読】

∴ $\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x', t) \delta(x'-x) dx'$, $\delta(x'-x)$ は複素平面波 $e^{ip(x-x')/\hbar}$ を運動量 p について
等しい振幅で重ね合わせた結果, 一点に凝縮された波束を表わしている。 $x' = x$ では無限大に発散しており,

$x' \neq x$ では平面波が打ち消し合ってゼロになっている。いま $x \delta(x-x')$, $x' \delta(x-x')$ について次の
積分を行なってみる。
 $\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) x \delta(x-x') dx = \psi(x', t) x'$, $\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) x' \delta(x-x') dx = \psi(x', t) x'$ したがって

$x \delta(x-x') = x' \delta(x-x')$, すなわち, 粒子の位置座標 x の固有値 x' に属する固有関数は $\delta(x-x')$
ということになる。
三次元の場合は $\delta(r-r') = (2\pi\hbar)^{-3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip \cdot (r-r')/\hbar} d^3 p = \delta(x-x') \delta(y-y') \delta(z-z')$,

$\psi(r, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(r', t) \delta(r-r') d^3 r'$, $r \delta(r-r') = r' \delta(r-r')$ が成り立つ。

★ デルタ関数を用いて運動量演算子 $\hat{p} = i^{-1} \hbar \nabla$ の固有関数 $u_p(r) \equiv u(r, p) = C e^{ip \cdot r/\hbar}$ を規格化する
ことができる。

いま既に規格化されている波動関数 $\varphi(x)$ を $u(x, p)$ で展開できたとする。 $\varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) u(x, p) dp$

$|c(p)|^2 = c^*(p) c(p)$ は運動量分布の確率密度を表わし $\int_{-\infty}^{\infty} c^*(p) c(p) dp = 1 \dots \textcircled{1}$ が成り立つとする。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) \varphi(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} [\int_{-\infty}^{\infty} c^*(p) u^*(x, p) dp \int_{-\infty}^{\infty} c(p') u(x, p') dp'] dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} c^*(p) [\int_{-\infty}^{\infty} c(p') [\int_{-\infty}^{\infty} u^*(x, p) u(x, p') dx] dp'] dp = 1 \dots \textcircled{2} \end{aligned}$$

①と②を比較すると $\int_{-\infty}^{\infty} u^*(x, p) u(x, p') dx = \delta(p'-p)$ という対応になっている。したがって

$$\begin{aligned} \text{(左辺)} &= \int_{-\infty}^{\infty} C^* e^{-ip'x/\hbar} C e^{ipx/\hbar} dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar} dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)X} d(\hbar X) \quad [x/\hbar = X] \\ &= \hbar |C|^2 \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \int_{-\alpha}^{\alpha} e^{i(p'-p)X} dX = 2\pi \hbar |C|^2 \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \sin \alpha(p'-p) / \pi(p'-p) \\ &= 2\pi \hbar |C|^2 \delta(p'-p) \equiv \text{(右辺)} = \delta(p'-p) \text{ より } 2\pi \hbar |C|^2 = 1 \quad \therefore |C| = (2\pi \hbar)^{-1/2} \end{aligned}$$

よって $u_p(x) = (2\pi \hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$ 【 $p/\hbar = k$ で規格化すると $u_k(x) = (2\pi)^{-1/2} e^{ikx/\hbar}$ (確かめよ)】

三次元の場合は $u_p(r) = (2\pi \hbar)^{-3/2} e^{ip \cdot r/\hbar}$ 【 $u_k(r) = (2\pi)^{-3/2} e^{ik \cdot r/\hbar}$ 】 以上の手法をデルタ関数
規格化という。

★ デルタ関数は数学の分野で超関数と呼ばれている極限関数の一種であるが, $\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \sin \alpha x / \pi x$ の
distribution, hyperfunction

ほかにも, 正規分布曲線の極限 $\delta(x) = \lim_{\sigma \rightarrow \infty} (2\pi \sigma^2)^{-1/2} \exp(-x^2/2\sigma^2)$ や $\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \alpha / \pi(x^2 + \alpha^2)$
normal distribution $\sigma \rightarrow \infty$

などが考えられる。 σ は標準偏差。デルタ関数の性質を列挙しておく (確かめよ)。

$$(1) \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) dx = f(a) \quad (2) x \delta(x) = 0 \quad (3) \delta(-x) = \delta(x) \quad (4) \delta'(-x) = -\delta'(x)$$

$$(5) \delta(ax) = \delta(x)/|a| \quad (6) \delta(x^2 - a^2) = [\delta(x-a) + \delta(x+a)]/2a \quad (a > 0)$$

★ $\psi(r, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(r', t) \delta(r-r') d^3 r'$ は粒子の位置座標 r に関する量子力学的状態 $\psi(r, t)$ を r の
固有値 r' に属する固有関数 $\delta(r-r')$ で展開した形であるから, 展開係数 $\psi(r', t)$ は粒子の位置測定を実行
したとき固有値 r' が得られる確率振幅を意味している。位置測定を実行して粒子の位置 r' が検出された瞬間,
粒子の量子力学的状態は $\psi(r, t) \rightarrow \delta(r-r')$ に急激に変化すると考えられる。これを「測定による波動関数
(波束)の収縮」という。しかし, 測定から収縮に到る具体的な物理的過程を明らかにすることは至難の業である。

§ 12 エーレンフェストの定理, 演算子の正準交換関係

P. Ehrenfest 1880~1933 オーストリア

canonical commutation relation

★ シュレーディンガー方程式とニュートン方程式との関係を考える。粒子の位置座標 $r = (x, y, z)$ の期待値

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \int \int \int \psi^*(r, t) r \psi(r, t) d^3 r \text{ の変化率を計算する。} \langle x \rangle = \int \int \int \psi^* x \psi d^3 r \text{ を } t \text{ で微分すると} \\ d\langle x \rangle / dt &= \int \int \int [(\partial \psi^* / \partial t) x \psi + \psi^* x \partial \psi / \partial t] d^3 r \quad [i\hbar \partial \psi / \partial t = \hat{H} \psi, -i\hbar \partial \psi^* / \partial t = \hat{H} \psi^* \text{ より}] \\ &= (i\hbar)^{-1} \int \int \int [\psi^* x [-(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(r)]\psi - x \psi [-(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(r)]\psi^*] d^3 r \\ &= (\hbar/2im) \int \int \int (x \psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* x \nabla^2 \psi) d^3 r \quad [\partial^2(x\psi)/\partial x^2 = \partial(\psi + x \partial \psi / \partial x) / \partial x \\ &= 2\partial \psi / \partial x + x \partial^2 \psi / \partial x^2 \text{ より}] \\ &= (\hbar/2im) \int \int \int [x \psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* [\nabla^2(x\psi) - 2\partial \psi / \partial x]] d^3 r \\ &= (\hbar/2im) \int \int \int [x \psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2(x\psi)] d^3 r + (\hbar/im) \int \int \int \psi^* \partial \psi / \partial x d^3 r \\ &= (\hbar/2im) \int \int \int [x \psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla(x\psi)] \cdot n dS + (\hbar/im) \int \int \int \psi^* \partial \psi / \partial x d^3 r \quad [:: \text{グリーンの定理}] \end{aligned}$$

境界条件より第一項はゼロとなり $md\langle x \rangle / dt = -i\hbar \int \int \int \psi^* \partial \psi / \partial x d^3 r \dots \textcircled{1}$ これを t で微分する。

$$\begin{aligned} md^2\langle x \rangle / dt^2 &= -i\hbar \int \int \int [(\partial \psi^* / \partial t) \partial \psi / \partial x + \psi^* \partial^2 \psi / \partial t \partial x] d^3 r \quad [-i\hbar \partial \psi^* / \partial t = \hat{H} \psi^*, i\hbar \partial \psi / \partial t = \hat{H} \psi \text{ より}] \\ &= \int \int \int [-(\hbar^2/2m)\nabla^2 \psi^* + V(r)\psi^*] \partial \psi / \partial x - \psi^* \partial [-(\hbar^2/2m)\nabla^2 \psi + V(r)\psi] / \partial x d^3 r \\ &= -(\hbar^2/2m) \int \int \int [(\nabla^2 \psi^*) \partial \psi / \partial x - \psi^* \partial (\nabla^2 \psi) / \partial x] d^3 r + \int \int \int [V \psi^* \partial \psi / \partial x - \psi^* \partial (V \psi) / \partial x] d^3 r \\ &= -(\hbar^2/2m) \int \int \int [(\partial \psi / \partial x) \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 (\partial \psi / \partial x)] d^3 r - \int \int \int \psi^* (\partial V / \partial x) \psi d^3 r \\ &= -(\hbar^2/2m) \int \int \int [(\partial \psi / \partial x) \nabla \psi^* - \psi^* \nabla (\partial \psi / \partial x)] \cdot n dS - \int \int \int \psi^* (\partial V / \partial x) \psi d^3 r \quad [:: \text{グリーンの定理}] \\ &= \int \int \int \psi^* [-\partial V(r) / \partial x] \psi d^3 r = \int \int \int \psi^* F_x(r) \psi d^3 r = \langle F_x(r) \rangle \text{ これは期待値に関するニュートンの} \end{aligned}$$

運動方程式である。波束の範囲内で $V(r)$ の変化が小さいときは

$$md^2\langle x \rangle / dt^2 \cong -\partial V(r) / \partial x \int \int \int \psi^* \psi d^3 r = -\partial V(r) / \partial x = F_x(r) \text{ すなわち, 粒子の存在確率を表わす}$$

波束の運動は古典力学の運動法則にほぼ従うことが分かる。これをエーレンフェストの定理という。

①を $md\langle x \rangle / dt = \int \int \int \psi^* (i^{-1}\hbar \partial / \partial x) \psi d^3 r$ と書くと, 両辺は $\langle p_x \rangle = \int \int \int \psi^* \hat{p}_x \psi d^3 r$ という対応になっている。これは § 10 で導いた関係式にほかならない。

★ ド・ブロイ仮説の定式化として導入されたフーリエ変換が粒子の位置と運動量の演算子性を規定し, それが量子力学の出発点を与えている。両辺の演算子の演算効果が等しい等式を演算子関係式という。

座標表示の波動関数 $\psi(r, t)$ に対して

$$\begin{aligned} x \hat{p}_x - \hat{p}_x x = y \hat{p}_y - \hat{p}_y y = z \hat{p}_z - \hat{p}_z z = i\hbar, \quad x \hat{p}_y - \hat{p}_y x = \dots = z \hat{p}_x - \hat{p}_x z = 0 \dots \textcircled{1} \text{ が成り立つ。} \\ [:: (x \hat{p}_x - \hat{p}_x x) \psi = x i^{-1} \hbar \partial \psi / \partial x - i^{-1} \hbar \partial (x \psi) / \partial x = x i^{-1} \hbar \partial \psi / \partial x - i^{-1} \hbar \psi - i^{-1} \hbar x \partial \psi / \partial x \\ = i\hbar \psi, \quad (x \hat{p}_y - \hat{p}_y x) \psi = x i^{-1} \hbar \partial \psi / \partial y - i^{-1} \hbar \partial (x \psi) / \partial y = 0] \end{aligned}$$

運動量表示の波動関数 $\tilde{\psi}(p, t)$ に対して

$$\begin{aligned} \hat{x} p_x - p_x \hat{x} = \hat{y} p_y - p_y \hat{y} = \hat{z} p_z - p_z \hat{z} = i\hbar, \quad \hat{x} p_y - p_y \hat{x} = \dots = \hat{z} p_x - p_x \hat{z} = 0 \dots \textcircled{2} \text{ が成り立つ。} \\ [:: (\hat{x} p_x - p_x \hat{x}) \tilde{\psi} = i\hbar \partial (\tilde{\psi}) / \partial p_x - p_x i\hbar \partial \tilde{\psi} / \partial p_x = i\hbar \tilde{\psi} + i\hbar p_x \partial \tilde{\psi} / \partial p_x - p_x i\hbar \partial \tilde{\psi} / \partial p_x \\ = i\hbar \tilde{\psi}, \quad (\hat{x} p_y - p_y \hat{x}) \tilde{\psi} = i\hbar \partial (\tilde{\psi}) / \partial p_x - p_y i\hbar \partial \tilde{\psi} / \partial p_x = 0] \end{aligned}$$

①, ② は同形であり, 演算子記号で表わすと $\hat{x} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{x} = i\hbar, \quad \hat{x} \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{x} = 0, \dots \dots \textcircled{3}$

また, 次の自明な関係式も成立している。 $\hat{x} \hat{y} - \hat{y} \hat{x} = 0, \dots \dots, \hat{p}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{p}_x = 0, \dots \dots \textcircled{4}$

関係式③, ④は量子力学の根源ともいふべきもので, ディラックはこれらを量子条件と呼んだ。③は位置を表わす演算子と運動量を表わす演算子が必ずしも交換可能ではないことを意味している。量子力学では交換不可能な演算子がしばしば現われてくるので $[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F} \hat{G} - \hat{G} \hat{F}$ という記号で表わし, 演算子 \hat{F}, \hat{G} の交換子といい, 交換子を含む関係式を交換関係という。 $(x, y, z) = (x_1, x_2, x_3), (p_x, p_y, p_z) = (p_1, p_2, p_3)$ と書けば, ③, ④は $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}, [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 (i, j=1, 2, 3) \dots \textcircled{5}$ となる。ただし, $i=j$ のとき $\delta_{ij}=1, i \neq j$ のとき $\delta_{ij}=0$ [クロネッカー(Kronecker)のデルタ記号]。関係式⑤は古典力学の正準力学変数 $x_i, p_i (i=1, 2, 3)$ に対するポアソン (Poisson) 括弧式 $\{x_i, p_j\} = \delta_{ij}, \{x_i, x_j\} = 0, \{p_i, p_j\} = 0, (i, j=1, 2, 3)$ によく似ている。そこで⑤を正準交換関係という。座標表示と運動量表示における位置と運動量の単純な形と完璧な役割交換は, それらが互いに正準共役であることの直接の結果である。 $\{F, G\} \rightarrow (i\hbar)^{-1} [\hat{F}, \hat{G}] \dots \textcircled{6}$ というおきかえによって古典力学が量子力学に変身することを暗示している。すなわち, 古典的力学量 F, G のポアソン括弧式を含む関係式は, おきかえ⑥によって量子力学的力学量 \hat{F}, \hat{G} の交換子を含む関係式に転換されるのである。その意味でおきかえ⑥は量子化の規則と考えることができる。

§ 13 不確定性原理の導出——不確定性関係の定式化, 正準交換関係の意味
uncertainty principle

★ これまでは Δx と Δp は単に波束の広がりや運動量分布の幅の目安や与える量というだけで、はっきりと定義していなかったため、不確定性関係も $\Delta x \Delta p \approx 2\pi \hbar$, $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ などの漠然とした形をとっていたが、第三法則によって粒子の存在確率密度や運動量確率分布が明確な形で与えられたので、波束の広がり Δx と運動量分布の幅 Δp (または波数分布の幅 $\Delta k = \hbar^{-1} \Delta p$) を確率統計論における標準偏差として定義することができる。
standard deviation (σ)
位置測定の例とその説明を思い出そう。 $w_i = N_i/N$ が粒子を領域 Ω_i (中心位置 x_i) 内に見いだす確率であり

平均値は $\langle x \rangle = \sum_i x_i w_i$ であった。同様に、確率論的な標準偏差 Δx は次の公式で与えられる (物理II)。

$$(\Delta x)^2 = \sum_i (x_i - \langle x \rangle)^2 w_i = \sum_i x_i^2 w_i - 2\langle x \rangle \sum_i x_i w_i + \langle x \rangle^2 \sum_i w_i = \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle^2 + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

そこで、 n 大、 Ω 小の極限をとれば、 $\sum \rightarrow \int$, $x_i \rightarrow x$ (連続変数), $w_i \rightarrow |\psi(x, t)|^2$ になるから

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

$$= \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle^2 + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

同様に、 Δp は波動関数 $\tilde{\psi}(p, t)$ を用いて

$$(\Delta p)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (p - \langle p \rangle)^2 |\tilde{\psi}(p, t)|^2 dp = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$$

となるが、これを $\psi(x, t)$ で表わすと

$$(\Delta p)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) (\hat{p} - \langle p \rangle)^2 \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{p}^2 - 2\langle p \rangle \hat{p} + \langle p \rangle^2) \psi dx \quad [\hat{p} = i^{-1} \hbar \partial / \partial x \text{ より}]$$

$$= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* [\partial(\partial\psi/\partial x)/\partial x] dx - 2i^{-1} \hbar \langle p \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\partial\psi/\partial x) dx + \langle p \rangle^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx$$

【(下線) = $[\psi^* \partial\psi/\partial x] - \int_{-\infty}^{\infty} (\partial\psi^*/\partial x)(\partial\psi/\partial x) dx$ で $[\dots] \rightarrow 0$ (境界条件)】

$$= \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\partial\psi^*/\partial x)(\partial\psi/\partial x) dx - 2i^{-1} \hbar \langle p \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\partial\psi/\partial x) dx + \langle p \rangle^2 \dots \textcircled{1}$$

一方、次式を計算する。

$$\int_{-\infty}^{\infty} |(\hat{p} - \langle p \rangle) \psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{p}^* - \langle p \rangle) \psi^*(x, t) (\hat{p} - \langle p \rangle) \psi(x, t) dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (-i^{-1} \hbar \partial\psi^*/\partial x - \langle p \rangle) \psi^* (i^{-1} \hbar \partial\psi/\partial x - \langle p \rangle) \psi dx$$

$$= \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\partial\psi^*/\partial x)(\partial\psi/\partial x) dx + i^{-1} \hbar \langle p \rangle \int_{-\infty}^{\infty} [(\partial\psi^*/\partial x)\psi - \psi^*(\partial\psi/\partial x)] dx + \langle p \rangle^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx$$

(下線) = $[\psi^* \psi] - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\partial\psi/\partial x) dx$ で $[\dots] \rightarrow 0$ (境界条件) だから上式は $\textcircled{1}$ に等しい。よって境界条件下で

$$(\Delta p)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) (\hat{p} - \langle p \rangle)^2 \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |(\hat{p} - \langle p \rangle) \psi(x, t)|^2 dx \dots \textcircled{2}$$

が成り立つ。同様に

$$(\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p, t) (\hat{x} - \langle x \rangle)^2 \tilde{\psi}(p, t) dp = \int_{-\infty}^{\infty} |(\hat{x} - \langle x \rangle) \tilde{\psi}(p, t)|^2 dp \quad [\hat{x} = i \hbar \partial / \partial p]$$

いま、実数の変数 η の関数 $f(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} [(x - \langle x \rangle)\eta + i(\hat{p} - \langle p \rangle)] \psi(x, t) |^2 dx$ (≥ 0) を考える。

$$f(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} [(x - \langle x \rangle)\eta \psi^* - i(\hat{p}^* - \langle p \rangle) \psi^*][(x - \langle x \rangle)\eta \psi + i(\hat{p} - \langle p \rangle) \psi] dx$$

$$= \eta^2 \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2 |\psi|^2 dx + i\eta \int_{-\infty}^{\infty} [(x - \langle x \rangle) \psi^* (\hat{p} - \langle p \rangle) \psi - (x - \langle x \rangle) \psi (\hat{p}^* - \langle p \rangle) \psi^*] dx + \int_{-\infty}^{\infty} |(\hat{p} - \langle p \rangle) \psi|^2 dx$$

(第二項) = $i\eta \int_{-\infty}^{\infty} [x \psi^* \hat{p} \psi - \langle p \rangle x \psi^* \psi - \langle x \rangle \psi^* \hat{p} \psi + \langle x \rangle \langle p \rangle \psi^* \psi - (x \psi \hat{p}^* \psi^* - \langle p \rangle x \psi \psi^* - \langle x \rangle \psi \hat{p}^* \psi^* + \langle x \rangle \langle p \rangle \psi^* \psi)] dx$

$$= i\eta [\int_{-\infty}^{\infty} x \psi^* \hat{p} \psi dx - \int_{-\infty}^{\infty} x \psi \hat{p}^* \psi^* dx + \langle x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \psi \hat{p}^* \psi^* dx - \langle x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx] \quad [\because \hat{p}^* = -i^{-1} \hbar \partial / \partial x]$$

$$= i\eta [\int_{-\infty}^{\infty} x \psi^* \hat{p} \psi dx + i^{-1} \hbar \int_{-\infty}^{\infty} x \psi (\partial\psi^*/\partial x) dx - \langle x \rangle i^{-1} \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi (\partial\psi^*/\partial x) dx - \langle x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx]$$

$$= i\eta \{ \int_{-\infty}^{\infty} x \psi^* \hat{p} \psi dx + i^{-1} \hbar [\int_{-\infty}^{\infty} x \psi \psi^* dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\partial(x\psi)/\partial x) dx] - \langle x \rangle i^{-1} \hbar [\int_{-\infty}^{\infty} \psi \psi^* dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\partial\psi/\partial x) dx] - \langle x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx \}$$

$$= i\eta [\int_{-\infty}^{\infty} x \psi^* \hat{p} \psi dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} (x\psi) dx + \langle x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx - \langle x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx] \quad [\because i^{-1} \hbar \partial / \partial x = \hat{p}]$$

$$= i\eta \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (x \hat{p} - \hat{p} x) \psi dx = \eta \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* i[x, \hat{p}] \psi dx = \eta \langle i[x, \hat{p}] \rangle$$

また、 $\textcircled{2}$ より (第三項) = $(\Delta p)^2$
【 $\langle \dots \rangle, [\dots]$ は期待値と交換子記号】

以上から $f(\eta) = (\Delta x)^2 \eta^2 + \langle i[x, \hat{p}] \rangle \eta + (\Delta p)^2 \geq 0 \therefore \langle i[x, \hat{p}] \rangle^2 - 4(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 \leq 0$ よって $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} |\langle i[x, \hat{p}] \rangle| = \frac{1}{2} |\langle i(\hbar) \rangle| = \frac{1}{2} |\langle -\hbar \rangle| = \frac{1}{2} \hbar \dots \textcircled{3}$ この結果は、 x と \hat{p} が交換不可能なため $\Delta x = 0$ かつ $\Delta p = 0$ が成り立たないこと (x と p が同時に確定した値を取り得ないこと) を意味している。

§ 14 極小波束関数

★ 不確定性関係 $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ において等号が成立する場合、すなわち不確定性が極小になるときの波動関数

$\varphi(x)$ を極小波束という。それは明らかに $f(\eta) = 0$ の場合である。 $\Delta x \Delta p = \hbar/2$ と $f(\eta) = 0$ から Δp を消去すると $f(\eta) = (\Delta x)^2 \eta^2 - \hbar \eta + (\hbar/2\Delta x)^2 = (\eta \Delta x - \hbar/2\Delta x)^2 = 0 \therefore \eta = \hbar/2(\Delta x)^2$ これを $f(\eta)$ の被

積分関数に代入すると $[(x - \langle x \rangle)\hbar/2(\Delta x)^2 + i(\hat{p} - \langle p \rangle)]\varphi(x) = 0 \quad \hat{p} = i^{-1}\hbar d/dx$ より

$$d\varphi/dx + [(x - \langle x \rangle)/2(\Delta x)^2 - i\hbar^{-1}\langle p \rangle]\varphi = 0, \int \varphi^{-1}d\varphi = \int [i\hbar^{-1}\langle p \rangle - (x - \langle x \rangle)/2(\Delta x)^2]dx$$

(変数分離形 物理数学I)

$$\log|\varphi| = i\hbar^{-1}\langle p \rangle x - (x - \langle x \rangle)^2/4(\Delta x)^2 + B, \varphi(x) = \pm e^B \exp[i\hbar^{-1}\langle p \rangle x - (x - \langle x \rangle)^2/4(\Delta x)^2]$$

規格化定数 $\pm B = C$ を求める。

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = \int |C|^2 \exp[-(x - \langle x \rangle)^2/2(\Delta x)^2] dx \quad [(x - \langle x \rangle)/2(\Delta x)^2]^{-1/2} = \xi \text{ とおくと}$$

$dx = [2(\Delta x)^2]^{1/2} = d\xi$

$$= |C|^2 [2(\Delta x)^2]^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = |C|^2 [2(\Delta x)^2]^{1/2} \pi^{1/2} = 1 \therefore |C| = [2\pi(\Delta x)^2]^{-1/4}$$

(ガウスの標準積分 物理数学II)

$$\therefore \varphi(x) = [2\pi(\Delta x)^2]^{-1/4} \exp[i\hbar^{-1}\langle p \rangle x - (x - \langle x \rangle)^2/4(\Delta x)^2] \dots \textcircled{1}$$

$|\varphi(x)|^2 = [(2\pi)^{-1/2}/(\Delta x)] \exp[-(x - \langle x \rangle)^2/2(\Delta x)^2]$ は平均値 $\langle x \rangle$ のまわりに標準偏差 Δx で分布している正規分布関数(ガウス型関数)である。 $\varphi(x)$ をフーリエ変換すると運動量表示の極小波束関数を求めることができる。

$$\tilde{\varphi}(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \text{ に } \textcircled{1} \text{ を代入して}$$

$$\tilde{\varphi}(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} [2\pi(\Delta x)^2]^{-1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i\hbar^{-1}\langle p \rangle x - (x - \langle x \rangle)^2/4(\Delta x)^2] \exp(-ipx/\hbar) dx$$

$$= A \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-i\hbar^{-1}(p - \langle p \rangle)x] \exp[-(x - \langle x \rangle)^2/4(\Delta x)^2] dx \quad [A \equiv (2\pi\hbar)^{-1/2} [2\pi(\Delta x)^2]^{-1/4},$$

$x - \langle x \rangle = X, dx = dX, p - \langle p \rangle = P]$

$$= A \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-i\hbar^{-1}P(X + \langle x \rangle)] \exp[-X^2/4(\Delta x)^2] dX$$

$$= A \exp(-iP\langle x \rangle/\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-iPX/\hbar) \exp[-X^2/4(\Delta x)^2] dX$$

$$= A \exp(-iP\langle x \rangle/\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} [\cos(PX/\hbar) - i\sin(PX/\hbar)] \exp[-X^2/4(\Delta x)^2] dX$$

$$= A \exp(-iP\langle x \rangle/\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-X^2/4(\Delta x)^2] \cos(PX/\hbar) dX$$

$$\text{【積分公式 } \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-bx^2) \cos 2ax dx = (\pi/b)^{1/2} \exp(-a^2/b) \dots \textcircled{2} \text{ で } a = P/2\hbar, b = 1/4(\Delta x)^2]$$

(ラプラスの積分 物理数学IV)

$$= (2\pi\hbar)^{-1/2} [2\pi(\Delta x)^2]^{-1/4} \exp(-iP\langle x \rangle/\hbar) [\pi \times 4(\Delta x)^2]^{1/2} \exp[-(P/2\hbar)^2 \times 4(\Delta x)^2]$$

$$= [2(\Delta x)^2/\pi \hbar^2]^{1/4} \exp[-iP\langle x \rangle/\hbar - P^2(\Delta x)^2/\hbar^2] \quad [\Delta x = \hbar/2\Delta p, P = p - \langle p \rangle]$$

$$= [2\pi(\Delta p)^2]^{-1/4} \exp[-i(p - \langle p \rangle)\langle x \rangle/\hbar - (p - \langle p \rangle)^2/4(\Delta p)^2]$$

$|\tilde{\varphi}(p)|^2 = [(2\pi)^{-1/2}/\Delta p] \exp[-(p - \langle p \rangle)^2/2(\Delta p)^2]$ も、平均値 $\langle p \rangle$ のまわりに標準偏差 Δp で分布している正規分布関数である。 Δx と Δp は逆数関係 $\Delta x \Delta p = \hbar/2$ によって互いに規制し合っている。当然のことながら、 $\Delta x \rightarrow 0$ とすれば $\Delta p \rightarrow \infty$ であり、逆もしかりである。

★ 積分公式②は複素積分のコーシーの定理を利用して $\int_C \exp(-z^2) dz = 0$ (積分路 C はガウス平面上の長方形で囲まれた閉曲線) から求めることができるが (物理数学IV)、次のような方法でも導ける。

$I(a) = \int_0^{\infty} \exp(-bx^2) \cos 2ax dx$ とおいて両辺を a で微分すると (物理数学III)

$$dI(a)/da = -2 \int_0^{\infty} x \exp(-bx^2) \sin 2ax dx \quad [bx^2 = \eta, 2bx dx = d\eta, \int x \exp(-bx^2) dx = (2b)^{-1} \int e^{-\eta} d\eta = -(2b)^{-1} e^{-\eta} = -(2b)^{-1} \exp(-bx^2)]$$

$$= -2 [[-(2b)^{-1} \exp(-bx^2) \sin 2ax] - \int_0^{\infty} [-(2b)^{-1} \exp(-bx^2) 2a \cos 2ax] dx] = -(2a/b) I(a)$$

$$\therefore \int I^{-1} dI = - \int (2a/b) da, \log|I| = -a^2/b + B, I(a) = \pm e^B \exp(-a^2/b) = C \exp(-a^2/b)$$

$$I(0) = C = \int_0^{\infty} \exp(-bx^2) dx = b^{-1/2} \int_0^{\infty} \exp(-\eta^2) d\eta = b^{-1/2} \pi^{1/2}/2 = \frac{1}{2}(\pi/b)^{1/2} \quad [b^{1/2}x = \eta, b^{1/2}dx = d\eta]$$

$$\text{よって } I(a) = \frac{1}{2}(\pi/b)^{1/2} \exp(-a^2/b) \therefore \int \exp(-bx^2) \cos 2ax dx = (\pi/b)^{1/2} \exp(-a^2/b)$$

§ 15 自由粒子波束の拡散—不確定性の時間的変化

粒子の位置座標の不確定性の時間的変動を調べるため、自由粒子の波束の運動を分析しておく。

★ 第一法則によれば、一定の運動量 p および一定のエネルギー $E_p = p^2/2m$ をもつ自由粒子の運動状態（定常状態）は平面波 $\psi_p(r, t) = u_p(r) e^{-iE_p t/\hbar}$ によって表わされた。 $u_p(r) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{i p \cdot r/\hbar}$ は固有値方程式 $\hat{p} u_p(r) = p u_p(r)$ または $\hat{H}_0 u_p(r) = (p^2/2m) u_p(r)$ の解であった ($\hat{p} = i^{-1} \hbar \nabla$, $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$)。定常でない一般の運動状態を表わす波動関数 $\psi(r, t)$ は $\psi_p(r, t)$ の重ね合わせで表わすことができる。自由粒子のエネルギー固有値 E は連続的な値をとるから、 p による積分で展開する。

$\psi(r, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \psi_p(r, t) d^3 p = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) u_p(r) e^{-iE_p t/\hbar} d^3 p$ 展開係数 $c(p)$ の絶対値の2乗 $|c(p)|^2$ には「状態 $\psi(r, t)$ においてエネルギー測定をしたとき、値 $E_p = p^2/2m$ が得られる確率」という意味が与えられる。簡単のため、一次元運動を考える。

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \psi_p(x, t) dp = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) u_p(x) e^{-iE_p t/\hbar} dp, \quad u_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{i p x/\hbar}$$

$t=0$ の初期状態として極小波束をえらぶと、 $\psi(x, 0) = \varphi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{i p x/\hbar} dx$ より $c(p)$ は $\varphi(x)$ のフーリエ変換 $\tilde{\varphi}(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) e^{-i p x/\hbar} dx$ である。§14の結果を代入して

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} [2\pi(\Delta p)^2]^{-1/4} \exp[-i(p - \langle p \rangle)x/\hbar - (p - \langle p \rangle)^2/4(\Delta p)^2] \times (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(i p x/\hbar) \exp(-i E_p t/\hbar) dp$$

【 $p - \langle p \rangle = P$ とおくと $dp = dP$, $E_p = p^2/2m = (P + \langle p \rangle)^2/2m = (P^2 + 2\langle p \rangle P + \langle p \rangle^2)/2m$ 】

$$= (2\pi\hbar)^{-1/2} [2\pi(\Delta p)^2]^{-1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-i P x/\hbar - P^2/4(\Delta p)^2] \exp[i(P + \langle p \rangle)x/\hbar] \times \exp[-i(P^2 + 2\langle p \rangle P + \langle p \rangle^2)t/2m\hbar] dP$$

$$= (2\pi\hbar)^{-1/2} [2\pi(\Delta p)^2]^{-1/4} \exp[i(\langle p \rangle x - \langle p \rangle^2 t/2m)/\hbar] \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-[1/4(\Delta p)^2 + i t/2m\hbar] P^2] \exp[-i\hbar^{-1}(\langle x \rangle + \langle p \rangle t/m - x)P] dP$$

【積分公式 $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-b x^2) \cos 2 a x dx = (\pi/b)^{1/2} \exp(-a^2/b)$ で下線部分をそれぞれ $b, 2a$ に対応させて】

$$= (2\pi\hbar)^{-1/2} [2\pi(\Delta p)^2]^{-1/4} \exp[i(\langle p \rangle x - \langle p \rangle^2 t/2m)/\hbar] \{ \pi/[1/4(\Delta p)^2 + i t/2m\hbar] \}^{1/2} \times \exp[-[2^{-1}\hbar^{-1}(\langle x \rangle + \langle p \rangle t/m - x)]^2/[1/4(\Delta p)^2 + i t/2m\hbar]]$$

$$= [2(2\Delta x \Delta p)]^{-1/2} [2\pi(\Delta p)^2]^{-1/4} 2\Delta p [1 + 4(\Delta p)^2(i t/2m)(2\Delta x \Delta p)^{-1}]^{-1/2} \times \exp[i(\langle p \rangle x - \langle p \rangle^2 t/2m)/\hbar] \quad \text{【}\hbar = 2\Delta x \Delta p\text{】}$$

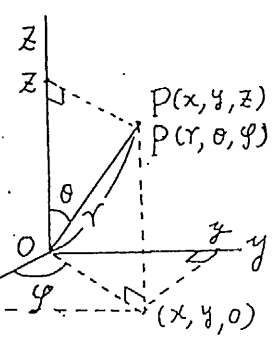
$$\times \exp[-(x - \langle x \rangle - \langle p \rangle t/m)^2/4(2\Delta x \Delta p)^2(2\Delta p)^{-2}[1 + 4(\Delta p)^2 i t/2m(2\Delta x \Delta p)]] \quad \text{【}\hbar = 2\Delta x \Delta p\text{】}$$

$$= [2\pi(\Delta x)^2]^{-1/4} (1 + i t \Delta p/m \Delta x)^{-1/2} \exp[i(\langle p \rangle x - \langle p \rangle^2 t/2m)/\hbar] \times \exp[-(x - \langle x \rangle - \langle p \rangle t/m)^2/[4(\Delta x)^2(1 + i t \Delta p/m \Delta x)]]$$

よって $|\psi(x, t)|^2 = (2\pi)^{-1/2} [(\Delta x)^2 + (\Delta p)^2 t^2/m^2]^{-1/2} \times \exp[-[x - (\langle x \rangle + \langle p \rangle t/m)]^2/2[(\Delta x)^2 + (\Delta p)^2 t^2/m^2]]$

すなわち、 $t=0$ で平均値 $\langle x \rangle$ のまわりに標準偏差 Δx で分布していた極小波束は、時間の経過とともにその中心が一定速度 $\langle p \rangle/m$ で移動しながら、標準偏差 $[(\Delta x)^2 + (\Delta p)^2 t^2/m^2]^{1/2}$ を次第に広げていくことが分かる。これを波束の拡散という。一方、運動量分布 $|\tilde{\psi}(p, t)|^2$ には時間的変動はなく初期の正規分布（ガウス分布） $\tilde{\varphi}(p)$ のままで、運動量分布の広がり幅に変化はない。これは自由粒子の特性である。

(66) 3次元の直角座標 (x, y, z) と 3次元の極座標 (r, θ, φ) の関係は、図から



$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad \text{----- ①}$$

(1) ① から $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \cos \theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad \tan \varphi = \frac{y}{x} \quad \text{----- ②}$ を導く。

(2) ①, ② から
$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial x} &= \frac{x}{r} = \sin \theta \cos \varphi, & \frac{\partial r}{\partial y} &= \frac{y}{r} = \sin \theta \sin \varphi, & \frac{\partial r}{\partial z} &= \frac{z}{r} = \cos \theta \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} &= -\frac{xz}{r^3} = -\frac{\cos \theta \cos \varphi}{r}, & \frac{\partial \theta}{\partial y} &= -\frac{yz}{r^3} = -\frac{\cos \theta \sin \varphi}{r}, & \frac{\partial \theta}{\partial z} &= -\frac{1}{r} = -\frac{\sin \theta}{r} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} &= -\frac{y}{x^2 + y^2} = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta}, & \frac{\partial \varphi}{\partial y} &= \frac{x}{x^2 + y^2} = \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta}, & \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad \text{----- ③}$$
 を導く。

ある関数 $f(r, \theta, \varphi)$ を x, y, z の合成関数 $f(r(x, y, z), \theta(x, y, z), \varphi(x, y, z))$ と見ると。

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial f}{\partial y} &= \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial f}{\partial z} &= \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + 0 \times \frac{\partial f}{\partial \varphi} \end{aligned} \right\} \quad \text{----- ④} \quad (\because ③)$$

④の各式を、それぞれ x, y, z で微分すると。

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial r} \left(\sin \theta \cos \varphi \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} &= \frac{\partial}{\partial r} \left(\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} &= \frac{\partial}{\partial r} \left(\cos \theta \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) \frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial z} \end{aligned} \right\} \quad \text{----- ⑤}$$

⑤の $\frac{\partial r}{\partial x} \sim \frac{\partial \varphi}{\partial z}$ に ③ を代入して、 $\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{\partial}{\partial \varphi}$ の微分を行なう、3式を加えると

$$\nabla^2 f = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) f = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) f \quad \text{----- ⑥}$$

が得られる。(確かめよ。計算が面倒をいさげれば、数時間かかるとは思われる)

(3) ⑥ は $\nabla^2 f = \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} f \quad \text{----- ⑦}$ と等価であることは証明せよ。

(解) ⑦の右辺)
$$\begin{aligned} &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \\ &= \frac{1}{r^2} \left(2r \frac{\partial f}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left(\cos \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} + \sin \theta \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \\ &= \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{\cos \theta}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} = \text{⑥の右辺)} \end{aligned}$$

<note> r を動径, θ を極角, φ を方位角という。

(解) (1) ①より $x^2 + y^2 + z^2 = r^2 (\sin^2 \theta \cos^2 \varphi + \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + \cos^2 \theta) = r^2 (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) = r^2$
 $\cos \theta = \frac{z}{r} = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad \frac{y}{x} = \frac{r \sin \theta \sin \varphi}{r \sin \theta \cos \varphi} = \frac{\sin \varphi}{\cos \varphi} = \tan \varphi, \quad \therefore r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ (自明)

(2) $\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \frac{\partial}{\partial x} (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}} \times 2x = \frac{x}{r} = \sin \theta \cos \varphi \quad (\because ①)$

同様にして $\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin \theta \sin \varphi, \quad \frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos \theta$

①より $\cos \theta = \frac{z}{r} = z (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}}$ 両辺を x で微分して
 $-\sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial x} = -\frac{1}{2} z (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{3}{2}} \times 2x = -z \frac{x}{r^3} = -\cos \theta \frac{x}{r^2} = -\frac{\cos \theta}{r^2} x$
 $= -\frac{\cos \theta}{r} \times \frac{x}{r} = -\frac{\cos \theta}{r} \times \sin \theta \cos \varphi \quad (\because ①) \quad \therefore \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r}$

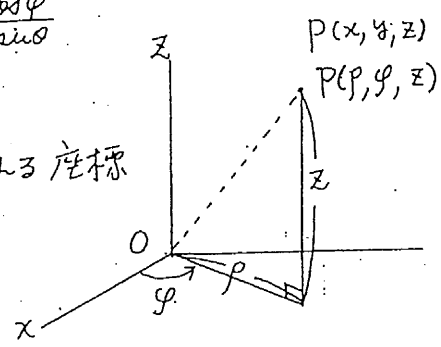
同様にして $\cos \theta = \frac{z}{r}$ を y で微分すると
 $-\sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial y} = -\frac{\cos \theta}{r} \times \frac{y}{r} = -\frac{\cos \theta}{r} \times \sin \theta \sin \varphi \quad (\because ①) \quad \therefore \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r}$ (右ページ上へ*)

① (左ページ下より) $\cos\theta = \frac{z}{r} = z(x^2+y^2+z^2)^{-\frac{1}{2}}$ を z で微分すると
 $-\sin\theta \frac{\partial\theta}{\partial z} = 1 \times \frac{1}{r} + z \left\{ -\frac{1}{2}(x^2+y^2+z^2)^{-\frac{3}{2}} \times 2z \right\} = \frac{1}{r} - \frac{z^2}{r^3} = \frac{1}{r} - \frac{(r\cos\theta)^2}{r^3} = \frac{\sin^2\theta}{r} \therefore \frac{\partial\theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r}$

② ①) $\tan\varphi = \frac{y}{x}$ 両辺を x で微分して
 $\sec^2\varphi \frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2} = -\frac{r\sin\theta\sin\varphi}{(r\sin\theta\cos\varphi)^2} = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta\cos^2\varphi} \therefore \frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \quad (\because \sec^2\varphi = \frac{1}{\cos^2\varphi})$

同様にして y で微分して $\sec^2\varphi \frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{1}{x} = \frac{1}{r\sin\theta\cos\varphi} \therefore \frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}$

z で微分すると $\sec^2\varphi \frac{\partial\varphi}{\partial z} = 0 \therefore \frac{\partial\varphi}{\partial z} = 0$



<note> 右図から $x = \rho \cos\varphi, y = \rho \sin\varphi, z = z$ で定義される座標

(ρ, φ, z) を, 点 P の円柱(円筒, 柱面)座標という。これは2次元の極座標と同じものであり, XXI ページ(32)で証明した公式(4)より

$\nabla^2 f = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)f = \frac{\partial^2 f}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$
 $= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial f}{\partial \rho}\right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$ と書ける。これも良く用いられる公式。

《⑥の言証明》

$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\sin\theta \cos\varphi \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\cos\theta \cos\varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \frac{\partial x}{\partial x}$
 $+ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \cos\varphi \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\cos\theta \cos\varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \frac{\partial \theta}{\partial x}$
 $+ \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\sin\theta \cos\varphi \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\cos\theta \cos\varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial x}$
 $= \left(\sin\theta \cos\varphi \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{\cos\theta \cos\varphi}{r^2} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\cos\theta \cos\varphi}{r} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial x} + \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi \partial x} \right) \sin\theta \cos\varphi$
 $+ \left(\cos\theta \cos\varphi \frac{\partial f}{\partial x} + \sin\theta \cos\varphi \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial x} - \frac{\sin\theta \cos\varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\cos\theta \cos\varphi}{r} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{\sin\varphi \cos\varphi}{r\sin^2\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial \varphi} \right)$
 $+ \left(-\sin\theta \sin\varphi \frac{\partial f}{\partial x} + \sin\theta \cos\varphi \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi \partial x} - \frac{\cos\theta \sin\varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\cos\theta \cos\varphi}{r} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial \varphi} - \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \right)$

$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\sin\theta \sin\varphi \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{\cos\theta \sin\varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \frac{\partial y}{\partial y}$
 $+ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \sin\varphi \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{\cos\theta \sin\varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \frac{\partial \theta}{\partial y}$
 $+ \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\sin\theta \sin\varphi \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{\cos\theta \sin\varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial y}$
 $= \left(\sin\theta \sin\varphi \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} - \frac{\cos\theta \sin\varphi}{r^2} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\cos\theta \sin\varphi}{r} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial y} - \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi \partial y} \right) \sin\theta \sin\varphi$
 $+ \left(\cos\theta \sin\varphi \frac{\partial f}{\partial y} + \sin\theta \sin\varphi \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial y} - \frac{\sin\theta \sin\varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\cos\theta \sin\varphi}{r} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} - \frac{\cos\varphi \cos\theta}{r\sin^2\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial \varphi} \right)$
 $+ \left(\sin\theta \cos\varphi \frac{\partial f}{\partial y} + \sin\theta \sin\varphi \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi \partial y} + \frac{\cos\theta \cos\varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\cos\theta \cos\varphi}{r} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial \varphi} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \right)$

$\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\cos\theta \frac{\partial f}{\partial z} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) \frac{\partial z}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\cos\theta \frac{\partial f}{\partial z} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\cos\theta \frac{\partial f}{\partial z} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial z}$
 $= \left(\cos\theta \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} + \frac{\sin\theta}{r^2} \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial z} \right) \cos\theta + \left(-\sin\theta \frac{\partial f}{\partial z} + \cos\theta \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial z} - \frac{\cos\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} \right)$

以上の3式を加えると各項の係数は次のようになる。

$\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} : \sin^2\theta \cos^2\varphi + \sin^2\theta \sin^2\varphi + \cos^2\theta = \sin^2\theta + \cos^2\theta = 1$
 $\frac{\partial f}{\partial r} : \frac{\cos^2\theta \cos^2\varphi}{r} + \frac{\sin^2\theta}{r} + \frac{\cos^2\theta \sin^2\varphi}{r} + \frac{\cos^2\theta}{r} + \frac{\sin^2\theta}{r} = \frac{\cos^2\theta (\cos^2\varphi + \sin^2\varphi) + 1 + \sin^2\theta}{r} = \frac{2}{r}$
 $\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} : \frac{\cos^2\theta \cos^2\varphi}{r^2} + \frac{\cos^2\theta \sin^2\varphi}{r^2} + \frac{\sin^2\theta}{r^2} = \frac{1}{r^2}$
 $\frac{\partial f}{\partial \theta} : -\frac{\sin\theta \cos\theta \cos^2\varphi}{r^2} - \frac{\sin\theta \cos\theta \sin^2\varphi}{r^2} + \frac{\cos\theta \sin^2\varphi}{r^2 \sin\theta} - \frac{\sin\theta \cos\theta \sin^2\varphi}{r^2} - \frac{\sin\theta \cos\theta \sin^2\varphi}{r^2}$
 $+ \frac{\cos\theta \cos^2\varphi}{r^2 \sin\theta} + \frac{\sin\theta \cos\theta}{r^2} + \frac{\sin\theta \cos\theta}{r^2} = \frac{\cos\theta (\sin^2\varphi + \cos^2\varphi)}{r^2 \sin\theta} = \frac{\cos\theta}{r^2 \sin\theta}$
 $\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} : \frac{\sin^2\varphi}{r^2 \sin^2\theta} + \frac{\cos^2\varphi}{r^2 \sin^2\theta} = \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}$ その他の項の係数はゼロとなる(右側がゆえ)。

< 復習 ~ 演習問題 >

1. 固体の定積モル比熱 $C_v = \frac{d\langle E \rangle}{dT} = \frac{3R \left(\frac{\hbar\nu}{kT}\right)^2 e^{\frac{\hbar\nu}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\nu}{kT}} - 1\right)^2}$ であり $\frac{\hbar\nu}{kT} = x$ とおくと
 $C_v(x) = \frac{3Rx^2 e^x}{(e^x - 1)^2}$ と書ける。 $\lim_{x \rightarrow 0} C_v(x) = 3R$, $\lim_{x \rightarrow \infty} C_v(x) = 0$ を証明せよ。

(解) $\lim_{x \rightarrow 0} C_v(x) = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{3Rx^2 e^x}{(e^x - 1)^2} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{3R(2xe^x + x^2 e^x)}{2(e^x - 1)e^x} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{3R(2x + x^2)}{2(e^x - 1)}$
 $= \lim_{x \rightarrow 0} \frac{3R(2 + 2x)}{2e^x} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{3R(1+x)}{e^x} = 3R$ 同様にして $\lim_{x \rightarrow \infty} C_v(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{3R(1+x)}{e^x} = 0$

2. $\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \iiint \tilde{\psi}(\vec{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} d^3\vec{p}$ であり $\tilde{\psi}(\vec{p}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \iiint \psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} d^3\vec{r}$ を代入して
 $\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \iiint \left[\frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \iiint \psi(\vec{r}', t) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}'} d^3\vec{r}' \right] e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} d^3\vec{p}$
 $= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iiint \iiint \psi(\vec{r}', t) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d^3\vec{r}' d^3\vec{p}$ (7-1) 式積分表示)
 この式と $\hat{p}_x e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} = p_x e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$ を用いて $\langle p_x \rangle = \iiint \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{p}_x \Psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r}$ を導け。

(解) $\langle p_x \rangle = \iiint p_x \tilde{\psi}^*(\vec{p}, t) \tilde{\psi}(\vec{p}, t) d^3\vec{p}$
 $= \iiint p_x \left[\frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \iiint \Psi^*(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} d^3\vec{r} \right] \left[\frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \iiint \Psi(\vec{r}', t) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}'} d^3\vec{r}' \right] d^3\vec{p}$
 $= \iiint \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{p}_x \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iiint \iiint \Psi(\vec{r}', t) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d^3\vec{r}' d^3\vec{p} \right] d^3\vec{r}$
 $= \iiint \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{p}_x \Psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = \iiint \Psi^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r}$

7-11 外 17 頁 参照。

3. $m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -i\hbar \iiint \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} d^3\vec{r}$ より $m \frac{d^2\langle x \rangle}{dt^2} = \iiint \Psi^* \left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right) \Psi d^3\vec{r} = \langle F_x \rangle$ を導け。

6. (1) $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z]$
 (解) $= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] - [y\hat{p}_z, x\hat{p}_z] - [z\hat{p}_y, z\hat{p}_x] + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z]$
 $= y \underbrace{[\hat{p}_z, z]}_{-i\hbar} \hat{p}_x + \hat{p}_y \underbrace{[z, \hat{p}_z]}_{i\hbar} x = i\hbar(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = i\hbar \hat{L}_z$

(2) $\hat{L} \times \hat{L} = (\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y, \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z, \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x)$
 $= ([\hat{L}_y, \hat{L}_z], [\hat{L}_z, \hat{L}_x], [\hat{L}_x, \hat{L}_y]) = (i\hbar \hat{L}_x, i\hbar \hat{L}_y, i\hbar \hat{L}_z) = i\hbar \hat{L}$

(3) $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x^2, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_z] + \underbrace{[\hat{L}_z^2, \hat{L}_z]}_0$
 $= \hat{L}_x^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y^2$
 $= \hat{L}_x (\hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x) + (\hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x) \hat{L}_x + \hat{L}_y (\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y) + (\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y) \hat{L}_y$
 $= \hat{L}_x [\hat{L}_x, \hat{L}_z] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z] \hat{L}_x + \hat{L}_y [\hat{L}_y, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y, \hat{L}_z] \hat{L}_y$
 $= \hat{L}_x (-i\hbar \hat{L}_y) + (-i\hbar \hat{L}_y) \hat{L}_x + \hat{L}_y (i\hbar \hat{L}_x) + (i\hbar \hat{L}_x) \hat{L}_y = 0$

4. デルタ関数には次のような性質があると考えられる。

$$(1) \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(a) \delta(x-a) dx = f(a) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) dx = f(a)$$

$$(2) \int_{-\infty}^{\infty} f(x) x \delta(x) dx = f(0) \times 0 = 0 \quad (3) \delta(-x) = \delta(x) \quad (4) \delta'(-x) = -\delta'(x)$$

$$(5) \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(ax) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{x}{a}\right) \delta(x) \frac{1}{a} dx = \frac{1}{a} f(0) \quad (ax = X, a > 0)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{\delta(x)}{a} dx = \frac{1}{a} f(0) \quad \therefore \delta(ax) = \frac{\delta(x)}{a}$$

$$(6) x^2 = X \text{ とおいて } \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x^2 - a^2) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \times \frac{\delta(x-a) + \delta(x+a)}{2a} dx \text{ を証明せよ。}$$

(a > 0)

(解) $x^2 = X, x = \pm\sqrt{X}, dx = \pm \frac{1}{2\sqrt{X}} dX$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x^2 - a^2) dx &= \int_0^{\infty} f(-\sqrt{X}) \delta(X - a^2) \left(-\frac{1}{2\sqrt{X}} dX\right) + \int_0^{\infty} f(\sqrt{X}) \delta(X - a^2) \frac{1}{2\sqrt{X}} dX \\ &= \int_0^{\infty} \frac{1}{2\sqrt{X}} f(-\sqrt{X}) \delta(X - a^2) dX + \int_0^{\infty} \frac{1}{2\sqrt{X}} f(\sqrt{X}) \delta(X - a^2) dX = \frac{1}{2\sqrt{a^2}} f(-\sqrt{a^2}) + \frac{1}{2\sqrt{a^2}} f(\sqrt{a^2}) \\ &= \frac{f(-a) + f(a)}{2a} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \times \frac{\delta(x-a) + \delta(x+a)}{2a} dx \end{aligned}$$

→ 自明であるから大抵。

5. ポアソンの極座標式 $\{u, v\} = \sum_{r=1}^3 \left(\frac{\partial u}{\partial r_i} \frac{\partial v}{\partial r_j} - \frac{\partial u}{\partial r_j} \frac{\partial v}{\partial r_i} \right)$ により $\{r_i, r_j\} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i=j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$ を示せ。

6.(4) $\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

(解)
$$\begin{aligned} &= \frac{\hbar}{i} \left[r \sin\theta \cos\phi \left(\sin\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta \sin\phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\phi}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right. \\ &\quad \left. - r \sin\theta \sin\phi \left(\sin\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta \cos\phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\phi}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right] \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(\cos^2\phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \sin^2\phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned}$$

6. 角運動量演算子 $\hat{L} = \vec{r} \times \hat{p} = (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ により

(1) $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$ を証明せよ。 $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$ も成り立つ。

(2) (1) より $\hat{L} \times \hat{L} = i\hbar \hat{L}$ であることを確かめよ。

(3) $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ により $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$ を示せ。 $[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0, [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0$ も成り立つ。

(4) 3次元極座標の公式 $x = r \sin\theta \cos\phi, y = r \sin\theta \sin\phi, z = r \cos\theta$, および

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta \cos\phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\phi}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad \frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta \sin\phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\phi}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

を用いて $\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$ と書けることを示せ。

(物数演習II)

(5) (4) より $[\hat{L}_z, \phi] = \frac{\hbar}{i}$ が成り立つことを証明せよ。

(解) $[\hat{L}_z, \phi] \psi(r, \theta, \phi) = (\hat{L}_z \phi - \phi \hat{L}_z) \psi$

$$\begin{aligned} &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} (\phi \psi) - \phi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} = \frac{\hbar}{i} (1 \times \psi + \phi \frac{\partial \psi}{\partial \phi}) - \frac{\hbar}{i} \phi \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \\ &= \frac{\hbar}{i} \psi \end{aligned}$$

§ 16 粒子の定常状態——束縛状態、離散的エネルギー固有値

stationary state bound state

★ ボーアの古典量子論では古典物理学の常識に反して定常状態の存在を仮定したが、定常状態は量子力学の中で特に重要な意味をもっている。iħ∂ψ/∂t = Ĥψ の特別解を ψ(r, t) = u(r)e^{-iEt/ħ} ...① とおくと iħ∂ψ/∂t = iħ(-iE/ħ)u(r)e^{-iEt/ħ} = E u(r)e^{-iEt/ħ}, Ĥψ = Ĥ u(r)e^{-iEt/ħ} より u(r) はハミルトニアン演算子 Ĥ = -(ħ²/2m)∇² + V(r) の固有値方程式 Ĥ u(r) = E u(r) ...② の解で、エネルギー固有値 E に属するエネルギー固有関数にほかならない。E の実数性を確かめるために、②の両辺に左から u*(r) をかけて、閉曲面 S で囲まれた空間領域 Ω 内の体積積分を行なうと

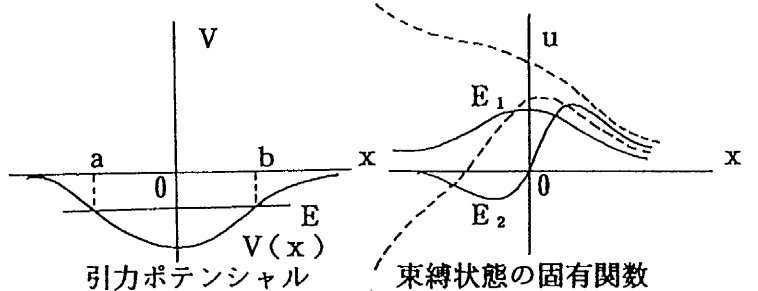
E ∫∫∫_Ω |u|² d³r = ∫∫∫_Ω u* [- (ħ²/2m)∇² + V] u d³r = - (ħ²/2m) ∫∫∫_Ω u* ∇² u d³r + ∫∫∫_Ω V |u|² d³r
【グリーンの定理 ∫∫∫_Ω (ψ∇²φ + ∇ψ·∇φ) d³r = ∫∫_S ψ∇φ·n dS で ψ→u*, φ→u として】
= - (ħ²/2m) (∫∫_S u* ∇u·n dS - ∫∫∫_Ω ∇u*·∇u d³r) + ∫∫∫_Ω V |u|² d³r, Ω を全空間に拡大すれば表面

積分はゼロになり E = [∫∫∫_Ω [(ħ²/2m)|∇u|² + V|u|²] d³r] / ∫∫∫_Ω |u|² d³r が成り立つ。V(r) が実数ならエネルギー固有値 E は実数で |ψ(r, t)|² = |u(r)e^{-iEt/ħ}|² = |u(r)|² となり、粒子の存在確率密度は時間的に一定であることになる。その意味で、①によって記述される運動状態を定常状態という。①のフーリエ変換は ψ̃(p, t) = (2πħ)^{-2/3} ∫∫∫_{-∞}[∞] ψ(r, t) e^{-i p·r/ħ} d³r = (2πħ)^{-2/3} ∫∫∫_{-∞}[∞] u(r) e^{-iEt/ħ} e^{-i p·r/ħ} d³r = [(2πħ)^{-2/3} ∫∫∫_{-∞}[∞] u(r) e^{-i p·r/ħ} d³r] e^{-iEt/ħ} = ũ(p) e^{-iEt/ħ} 【ũ(p) は u(r) のフーリエ変換】

したがって |ψ̃(p, t)|² = |ũ(p)|² だから運動量の確率分布も時間的に一定となる。第一法則で u_p(r) に与えた説明にならえば、定常状態を表わす②の解 u(r) には「粒子が一定のエネルギー E をもつ状態である」という物理的意味が与えられなければならない。ボーアの前期量子論では唐突な仮説であった定常状態が今度は自然な定義と推論によって登場してきたのである。ここに量子力学理論体系の合理性を見ることができ

る。一次元運動を考えよう。方程式は -(ħ²/2m)d²u(x)/dx² + V(x)u(x) = E u(x) ...③ 原子内電子のような束縛状態は引力によって

実現されるから、ポテンシャル V(x) としては下図のような形を考えればよい。古典力学では束縛状態のエネルギーは負であり、粒子は転回点 (E = V となる点) a と b の間を往復する周期運動を行なう。量子力学でも束縛状態のエネルギー E は負である。なぜならば、E > 0 に対しては、方程式③はポテンシャル V(x) がゼロとなる無限遠方で平面波



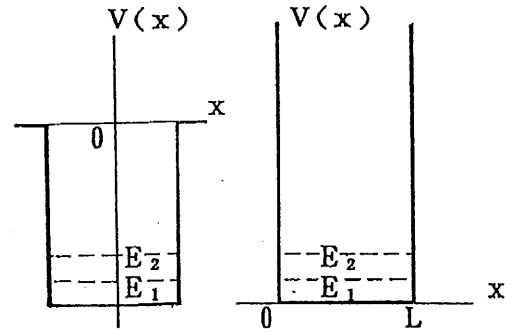
exp[±i(2mE/ħ²)^{1/2}x] を許すからである。これでは粒子は飛び去ってしまう。E < 0 ならば、E > V(x) の区間 a < x < b で振動型の解をもつが、E < V(x) となる区間 x < a および x > b では指数型関数を解としてもつ。束縛状態とは粒子がポテンシャルの周辺にとどまっている状態をいうのだから、波動関数は左右の遠方で指数型の減少関数になっていなければならない。すなわち、③の解 u(x) が束縛状態を表わすための境界条件は lim_{x→±∞} u(x) = 0 である。ところが、エネルギー E に任意の数値を許したままでは固有関数 u(x) は

——右方無限遠方をゼロで出発したとしても——図の破線のようになる場合がありうるから、必ずしもこの境界条件は満たされない。境界条件が満たされるのは、左右無限遠方で u(x) をゼロにすることができる特定の値 E₁, E₂, ... をとる場合に限定されるだろう。このように、エネルギー E が特定の値をとるときのみ束縛状態 (たとえば原子内電子の定常状態) が実現するわけである。これは「仮説」ではなく、あくまでも自然な推論の「結論」なのである。次に、具体的なポテンシャルを設定して粒子の定常状態を考察してみよう。

§ 17 剛体壁ポテンシャル—固有値と固有関数列, ゼロ点振動

★ 引力ポテンシャル $V(x)$ を右図のように単純化しよう。これは井戸型ポテンシャルと呼ばれるもので、しばしば用いられる。

粒子のエネルギー準位が井戸の底に近い場合にかぎれば、ポテンシャルはさらに単純化できて、無限大の剛体壁ポテンシャルで置きかえてよいだろう。これで束縛状態の話は、領域 $0 \leq x \leq L$ に粒子を閉じ込める問題になった。エネルギー E の原点をポテンシ



井戸型ポテンシャル 剛体壁ポテンシャル
 ールの底に、 x 軸の原点をポテンシャルの左下端にえらぶと 方程式③は弦の振動の方程式とまったく同形で
 (物理数学II)

$$d^2 u(x)/dx^2 = -(2mE/\hbar^2)u(x) \quad \text{一般解は } u(x) = A \sin(2mE/\hbar^2)^{1/2} x + B \cos(2mE/\hbar^2)^{1/2} x$$

境界条件 $u(0) = B = 0, u(L) = A \sin(2mE/\hbar^2)^{1/2} L = 0$ より $(2mE/\hbar^2)^{1/2} L = n\pi, n = 1, 2, 3, \dots$

$\therefore E_n = (\hbar^2/2m)(n\pi/L)^2, n = 1, 2, 3, \dots$ を量子数という。このように離散的なエネルギーの固有値が現

われる。これは、有限の大きさをもつ空間領域に波動を閉じ込めようとすれば特定の波数の振動しか許されな

いという波動現象の特性による。最低エネルギー $E_1 = (\hbar^2/2m)(\pi/L)^2$ をゼロ点エネルギーという。量子

力学では、最低エネルギー状態 (基底状態) でも必ず振動が存在する (ゼロ点振動)。これを不確定性原理で

解釈すると、箱の中に閉じ込められている粒子の位置の不確定さ Δx は箱の広さ L であるから、運動量の不確

定さは $\Delta p \geq \hbar/2\Delta x = \hbar/2L$ となり、これは $E = 0$ とは両立しない。古典力学的粒子の最低エネルギー状

態は粒子の静止位置 (=安定平衡点) と運動量 (=ゼロ) が精密に決まっているから不確定性原理に矛盾する

わけである。エネルギー固有値 E_n に属する固有関数は $u_n(x) = A \sin(n\pi x/L), n = 1, 2, 3, \dots$ 規格化

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u_n(x)|^2 dx = \int_0^L |A|^2 \sin^2(n\pi x/L) dx = |A|^2 \int_0^L \frac{1}{2} [1 - \cos(2n\pi x/L)] dx = \frac{1}{2} |A|^2 L = 1$$

$|A| = (2/L)^{1/2}$ 、したがって、規格化された波動関数は $u_n(x) = (2/L)^{1/2} \sin(n\pi x/L), n = 1, 2, 3, \dots$

$n = 1, 2, 3$ について $u_n(x)$ と粒子の存在確率密度 $|u_n(x)|^2$ を下図に示す。箱の中の特定の点での粒子の

存在確率は、各量子数に対して大きく異なっていることが分かる。

たとえば $|u_1|^2$ は $1/2L$ で最大値をとるが、そこでは $|u_2|^2 = 0$

である。すなわち $n = 1$ (基底状態) にある粒子は箱の中央に最も存在しやすいのに対して、次にエネルギーの高い状態 $n = 2$ に

ある粒子はそこには決して存在しえない。古典力学では 粒子は

箱の中のどこにでも同じ確率で存在しうることが予測される。

こうして定常状態の固有関数列 $\{u_n(r)\}$ が得られるが、定常

状態でない一般の運動状態を表わす波動関数 $\psi(r, t)$ は、重ね

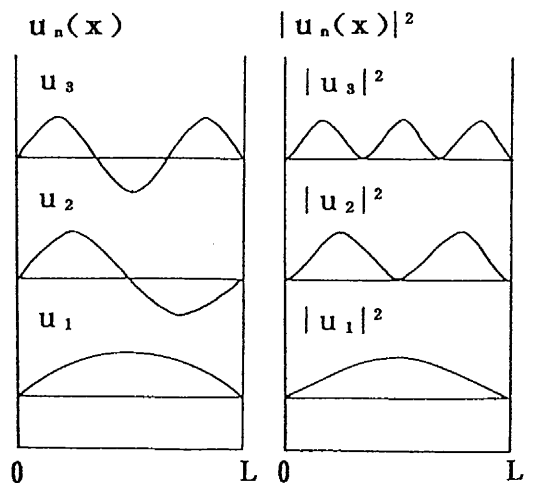
合わせの原理によって $\psi(r, t) = \sum_n c_n u_n(r) e^{-iE_n t/\hbar}$ と展開することができる。展開係数 $|c_n|^2$ には

やはり「状態 $\psi(r, t)$ においてエネルギー測定をしたとき、値 E_n が得られる確率」という意味が与えられる

(束縛状態の場合はエネルギー固有値は離散的な値をとるが、自由粒子波束の拡散のような散乱状態問題では

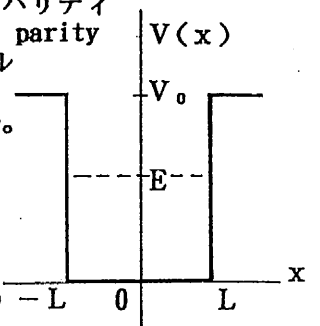
連続的なエネルギー固有値が現われるので、 $\psi(r, t)$ は 散乱状態の固有関数を被積分関数とする連続パラメ

ーターについての積分で展開することになる)。現実に近い、有限なポテンシャル壁の場合はどうなるか?



§ 18 井戸型ポテンシャル—束縛状態のエネルギー準位, パリティ square well potential parity

★ $-(\hbar^2/2m)d^2u(x)/dx^2 + V(x)u(x) = Eu(x)$ について井戸型ポテンシャル



の束縛状態 ($E < V_0$) を考える。エネルギーの原点をポテンシャルの底にとる (図)。

$u(x)$, $du(x)/dx$ は連続で (連続条件), $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} u(x) = 0$ (境界条件) とする。

$$d^2u(x)/dx^2 = -(2m/\hbar^2)Eu(x) \equiv -\alpha^2u(x) \quad (-L \leq x \leq L) \quad \dots \textcircled{1}$$

$$d^2u(x)/dx^2 = -(2m/\hbar^2)(E - V_0)u(x) \equiv \beta^2u(x) \quad (x \leq -L, x \geq L) \quad \dots \textcircled{2}$$

①の解は $u(x) = A \sin \alpha x + B \cos \alpha x$, $u'(x) = \alpha A \cos \alpha x - \alpha B \sin \alpha x$, $\alpha = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$

②の解は $x \leq -L$ で $u(x) = C e^{\beta x}$, $u'(x) = \beta C e^{\beta x}$, $\beta = [(2m/\hbar^2)(V_0 - E)]^{1/2}$

$x \geq L$ では $u(x) = D e^{-\beta x}$, $u'(x) = -\beta D e^{-\beta x}$ $x = -L, L$ における連続条件より

$$u(-L) = -A \sin \alpha L + B \cos \alpha L = C e^{-\beta L} \quad \dots \textcircled{3} \quad u'(-L) = \alpha A \cos \alpha L + \alpha B \sin \alpha L = \beta C e^{-\beta L} \quad \dots \textcircled{4}$$

$$u(L) = A \sin \alpha L + B \cos \alpha L = D e^{-\beta L} \quad \dots \textcircled{5} \quad u'(L) = \alpha A \cos \alpha L - \alpha B \sin \alpha L = -\beta D e^{-\beta L} \quad \dots \textcircled{6}$$

④ - ③ $\times \beta$ から $(\alpha \cos \alpha L + \beta \sin \alpha L)A + (\alpha \sin \alpha L - \beta \cos \alpha L)B = 0 \quad \dots \textcircled{7}$

⑥ + ⑤ $\times \beta$ から $(\alpha \cos \alpha L + \beta \sin \alpha L)A - (\alpha \sin \alpha L - \beta \cos \alpha L)B = 0 \quad \dots \textcircled{8}$

⑦ \pm ⑧ より $2(\alpha \cos \alpha L + \beta \sin \alpha L)A = 0$, $2(\alpha \sin \alpha L - \beta \cos \alpha L)B = 0$

$A \neq 0$ なら $\alpha \cos \alpha L + \beta \sin \alpha L = 0 \therefore \tan \alpha L = -\alpha/\beta$, このとき $\alpha \sin \alpha L - \beta \cos \alpha L \neq 0$ ゆえ $B = 0$

③, ⑤より $C = -D \therefore u(x) = A \sin \alpha x \quad (-L \leq x \leq L)$, $C e^{\beta x} \quad (x \leq -L)$, $-C e^{-\beta x} \quad (x \geq L) \quad \dots \textcircled{9}$

$B \neq 0$ なら $\alpha \sin \alpha L - \beta \cos \alpha L = 0 \therefore \tan \alpha L = \beta/\alpha$, このとき $\alpha \cos \alpha L + \beta \sin \alpha L \neq 0$ ゆえ $A = 0$

③, ⑤より $C = D \therefore u(x) = B \cos \alpha x \quad (-L \leq x \leq L)$, $C e^{\beta x} \quad (x \leq -L)$, $C e^{-\beta x} \quad (x \geq L) \quad \dots \textcircled{10}$

よって, $\tan \alpha L = -\alpha/\beta$ および $\tan \alpha L = \beta/\alpha$, すなわち, $\tan(2mE/\hbar^2)^{1/2}L = -[E/(V_0 - E)]^{1/2}$ と $\tan(2mE/\hbar^2)^{1/2}L = [(V_0 - E)/E]^{1/2}$ から数値的にエネルギー準位を求めることができる。いま, 前者を $\beta L \tan \alpha L = -\alpha L$, 後者を $\alpha L \tan \alpha L = \beta L$ とし, $\alpha L = X (> 0)$, $\beta L = Y (> 0)$ とおくと, それぞれ $Y = -X \cot X$, $Y = X \tan X \quad \dots \textcircled{I}$ ただし, $X^2 + Y^2 = (\alpha^2 + \beta^2)L^2 = 2mV_0L^2/\hbar^2 \quad \dots \textcircled{II}$ 与えられた m, V_0, L に対して, 曲線 (I), (II) のグラフを描いて交点 (X_n, Y_n) を調べれば, 束縛状態の離散的エネルギー固有値 $E = E_n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) の個数と, その近似値を知ることができる (Schiff 参照)。

たとえば, $2mV_0L^2/\hbar^2 = 12$ の場合は束縛状態が三つ存在し, E_n と固有関数 $u_n(x)$ は次のようになる。

(i) $Y = X \tan X$ と $X^2 + Y^2 = 12$ の $0 < X < \pi/2$ における交点 $(X_1, Y_1) \approx (1.21, 3.24)$ と ⑩より

$E_1 = X_1^2 \hbar^2/2mL^2 \approx 1.21^2 \hbar^2/2mL^2 \approx 1.46 \hbar^2/2mL^2$ 【 $\therefore \alpha_n L = (2mE_n/\hbar^2)^{1/2}L = X_n$ 】
 $u_1(x) = B_1 \cos \alpha_1 x = B_1 \cos(X_1/L)x \approx B_1 \cos(1.21x/L) \quad (-L \leq x \leq L)$, および
 $C_1 e^{\beta_1 x} = C_1 e^{(Y_1/L)x} \approx C_1 e^{3.24x/L} \quad (x \leq -L)$, $C_1 e^{-\beta_1 x} \approx C_1 e^{-3.24x/L} \quad (x \geq L)$ 【 $\therefore \beta_n L = Y_n$ 】

(ii) $Y = -X \cot X$ と $X^2 + Y^2 = 12$ の $\pi/2 < X < \pi$ における交点 $(X_2, Y_2) \approx (2.38, 2.51)$ と ⑩より

$E_2 = X_2^2 \hbar^2/2mL^2 \approx 2.38^2 \hbar^2/2mL^2 \approx 5.66 \hbar^2/2mL^2$
 $u_2(x) = A_2 \sin \alpha_2 x = A_2 \sin(X_2/L)x \approx A_2 \sin(2.38x/L) \quad (-L \leq x \leq L)$, および
 $C_2 e^{\beta_2 x} = C_2 e^{(Y_2/L)x} \approx C_2 e^{2.51x/L} \quad (x \leq -L)$, $-C_2 e^{-\beta_2 x} \approx -C_2 e^{-2.51x/L} \quad (x \geq L)$

(iii) $Y = X \tan X$ と $X^2 + Y^2 = 12$ の $\pi < X < 3\pi/2$ における交点 $(X_3, Y_3) \approx (3.37, 0.79)$ と ⑩より

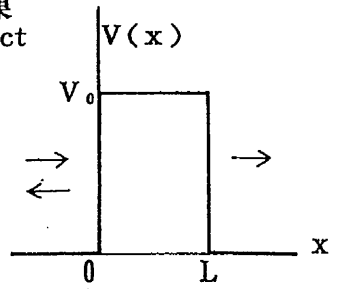
$E_3 = X_3^2 \hbar^2/2mL^2 \approx 3.37^2 \hbar^2/2mL^2 \approx 11.36 \hbar^2/2mL^2$
 $u_3(x) = B_3 \cos \alpha_3 x = B_3 \cos(X_3/L)x \approx B_3 \cos(3.37x/L) \quad (-L \leq x \leq L)$, および
 $C_3 e^{\beta_3 x} = C_3 e^{(Y_3/L)x} \approx C_3 e^{0.79x/L} \quad (x \leq -L)$, $C_3 e^{-\beta_3 x} \approx C_3 e^{-0.79x/L} \quad (x \geq L)$

$x = -L, L$ での連続条件より A_n, B_n は C_n で表わせるから, 規格化条件を用いて C_n を決めればよい。

★ 解⑨は $u(-x) = -u(x)$, 解⑩は $u(-x) = u(x)$ だから, それぞれ奇関数と偶関数の性質をもっている。これはポテンシャル $V(x)$ が偶関数 $V(-x) = V(x)$ であることの結果である。固有値方程式で $x \rightarrow -x$ と置きかえると $-(\hbar^2/2m)d^2u(-x)/dx^2 + V(x)u(-x) = Eu(-x)$ ゆえ, $u(x)$ と $u(-x)$ は同じ固有値 E に属する固有関数になっている。しかし, 井戸型ポテンシャルの例のように, 同じエネルギー準位に属する一次独立な固有関数一つしかない場合は, 両者は互いに一次従属でなければならない。したがって, $u(-x) = \varepsilon u(x) \quad \dots \textcircled{11}$ が成り立つ。 ε は定数。 x の符号を変えると $u(x) = \varepsilon u(-x) \quad \dots \textcircled{12}$ ⑪, ⑫より $u(-x)u(x) = \varepsilon^2 u(x)u(-x) \therefore \varepsilon^2 = 1 \therefore \varepsilon = \pm 1 \therefore u(-x) = \pm u(x)$ このような波動関数はパリティ(偶奇性)が偶 (even) または奇 (odd) であるという。同じ固有値に属する二つ以上の一次独立な固有関数 $u(x), u(-x), \dots$ があるときは, それらは必ずしも一定のパリティをもっているとは限らないが, 次のように, それぞれの固有関数をパリティをもつ偶関数と奇関数の一次結合で表わすことができる。
 $u(x) = u_{\text{even}}(x) + u_{\text{odd}}(x) = \frac{1}{2}[u(x) + u(-x)] + \frac{1}{2}[u(x) - u(-x)]$

§ 19 箱型ポテンシャル—衝突・散乱問題, トンネル効果 tunnel effect

★ 粒子と箱型ポテンシャル $V(x)=0$ ($x < 0, x > L$), V_0 ($0 \leq x \leq L$) との衝突を考える。運動量 $p = \hbar k$ (速さ $v = p/m$), エネルギー $E = \hbar^2 k^2/2m$ の粒子を左方から入射させる。 $E > V_0$ とする。 $V(x)=0$ の領域の波動方程式は



$d^2 u/dx^2 = -(2m/\hbar^2)E u \equiv -k^2 u \dots ①$ $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ は波数。解は

$u(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ ($x \leq 0$), $u(x) = C e^{ikx}$ ($x \geq L$), $V(x) = V_0$ の領域の波動方程式は

$d^2 u/dx^2 = -(2m/\hbar^2)(E - V_0)u \equiv -\alpha^2 u \dots ②$ $\alpha = [2m(E - V_0)/\hbar^2]^{1/2}$ は波数。②の解は

$u(x) = F e^{i\alpha x} + G e^{-i\alpha x}$ ($0 \leq x \leq L$) で与えられる。 $x = 0, L$ における $u(x), u'(x)$ の連続条件より

$u(0) = A + B = F + G, u'(0) = ik(A - B) = i\alpha(F - G), u(L) = F e^{i\alpha L} + G e^{-i\alpha L} = C e^{ikL},$

$u'(L) = i\alpha(F e^{i\alpha L} - G e^{-i\alpha L}) = ik C e^{ikL}$, これらから F, G を消去すると次式が得られる(確かめよ)。

$B/A = (k^2 - \alpha^2)(1 - e^{2i\alpha L}) / [(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 e^{2i\alpha L}], C/A = 4k\alpha e^{i(\alpha - k)L} / [\dots]$ したがって

$$\begin{aligned} \text{反射係数 } |B/A|^2 &= (k^2 - \alpha^2)^2 [(1 - \cos 2\alpha L)^2 + \sin^2 2\alpha L] / \{ [(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 \cos 2\alpha L]^2 \\ &\quad + (k - \alpha)^4 \sin^2 2\alpha L \} \\ &= 2(k^2 - \alpha^2)^2 (1 - \cos 2\alpha L) / \{ [(k + \alpha)^4 - 2(k + \alpha)^2 (k - \alpha)^2 \cos 2\alpha L + (k - \alpha)^4] \\ &\quad \text{【} = 2\sin^2 \alpha L \text{】} \} \text{【} = 1 - 2\sin^2 \alpha L \text{】} \\ &= 4(k^2 - \alpha^2)^2 \sin^2 \alpha L / \{ [(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2]^2 + 4(k^2 - \alpha^2)^2 \sin^2 \alpha L \} \\ &= \frac{\text{【} = 16k^2 \alpha^2 \text{】}}{[1 + 4k^2 \alpha^2 / (k^2 - \alpha^2)^2 \sin^2 \alpha L]^{-1}} = [1 + 4E(E - V_0) / V_0^2 \sin^2 \alpha L]^{-1} \end{aligned}$$

透過係数 $|C/A|^2 = [1 + (k^2 - \alpha^2)^2 \sin^2 \alpha L / 4k^2 \alpha^2]^{-1} = [1 + V_0^2 \sin^2 \alpha L / 4E(E - V_0)]^{-1}$

$|B/A|^2 + |C/A|^2 = 1$ が成り立つ。係数 A, B, C の物理的な意味は確率の流れの密度 $J(x)$ に関連している。

$$\begin{aligned} J(x) &= (\hbar/2im)(u^* du/dx - u du^*/dx) = (\hbar/2im)[(A e^{ikx} + B e^{-ikx})^* d(A e^{ikx} + B e^{-ikx})/dx \\ &\quad - (A e^{ikx} + B e^{-ikx}) d(A e^{ikx} + B e^{-ikx})^*/dx] \\ &= (\hbar k/m)(|A|^2 - |B|^2) \quad (x < 0), \quad \text{同様に } x > L \text{ では } J(x) = (\hbar k/m)|C|^2 \end{aligned}$$

これらは各領域における右方向への正味の流束量を表わしている。 $\hbar k/m = v$ は粒子の速さであるから、入射粒子の波動関数 $u_A = A e^{ikx}$ が単位流束になるように $|A| = v^{1/2}$ と規格化しておく都合がよい。

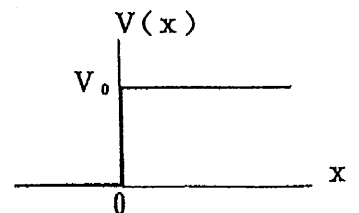
$E < V_0$ の場合は、②は $d^2 u/dx^2 = (2m/\hbar^2)(V_0 - E)u \equiv \beta^2 u, \beta = [2m(V_0 - E)/\hbar^2]^{1/2}$ であるから上の結果で α を $i\beta$ で置きかえればよい。 $\sin x = (e^{ix} - e^{-ix})/2i, \sinh x = (e^x - e^{-x})/2$ を利用すると

$\sin^2(i\beta L) = [(e^{i(i\beta L)} - e^{-i(i\beta L)})/2i]^2 = -[(e^{-\beta L} - e^{\beta L})/2]^2 = -\sinh^2 \beta L$ だから、散乱係数は

$|B/A|^2 = [1 + 4E(V_0 - E)/V_0^2 \sinh^2 \beta L]^{-1}, |C/A|^2 = [1 + V_0^2 \sinh^2 \beta L / 4E(V_0 - E)]^{-1}$ となる。

したがって $E < V_0$ でも透過係数はゼロではないことになる。これをポテンシャルの障壁に対する貫通現象 tunneling あるいはトンネル効果という。量子力学特有の現象である。

★ 右図のような階段型ポテンシャル $V(x)=0$ ($x < 0$), V_0 ($x \geq 0$) の場合は $E > V_0$ のとき、①, ②の解はやはり $u(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ ($x < 0$),



$u(x) = C e^{i\alpha x}$ ($x \geq 0$) で与えられる。連続条件より $u(0) = A + B = C,$

$u'(0) = ikA - ikB = i\alpha C$, これから $(k - \alpha)A = (k + \alpha)B, 2kA = (k + \alpha)C$, 反射係数は

$$\begin{aligned} |B/A|^2 &= (k - \alpha)^2 / (k + \alpha)^2, \text{ 透過係数 } = 1 - |B/A|^2 = 4\alpha k / (k + \alpha)^2 = (\alpha/k) |C/A|^2 \\ E < V_0 \text{ なら } x > 0 \text{ の透過波は } d^2 u/dx^2 &= (2m/\hbar^2)(V_0 - E)u \equiv \beta^2 u, \beta = [2m(V_0 - E)/\hbar^2]^{1/2} \\ \text{の解で } u(x) &= D e^{-\beta x} \text{ (} e^{\beta x} \text{ は } x \rightarrow \infty \text{ で発散するから不適)。連続条件より } u(0) = A + B = D, \\ u'(0) &= ikA - ikB = -\beta D, \text{ これから } (\beta + ik)A = (-\beta + ik)B, 2ikA = (-\beta + ik)D, \text{ よって} \\ \text{反射係数 } |B/A|^2 &= |(\beta + ik)/(-\beta + ik)|^2 = 1, \text{ したがって 透過係数 } = 0 \text{ ということになる。} \end{aligned}$$

§ 20 時間・エネルギーの不確定性関係 — 一定常状態間の遷移確率

transition probability

★ 位置・運動量の不確定性関係 $\Delta x \Delta p \approx 2\pi \hbar$ と、時間・エネルギーの不確定性関係 $\Delta t \Delta E \approx 2\pi \hbar$ が

—波動現象としては—まったく同根であることは §7 で述べた。しかし、波動現象として同じであっても量子力学の立場からの吟味が必要である。エネルギーは位置や運動量と同様に演算子で表わせる力学量でありその測定値の分布から平均値と偏差を決めることができる。したがって、§13 の方式を拡張して $(\Delta E)^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$ のようにエネルギー E の不確定性を定義することができる。一方、 Δt は波束の通過時間という意味をもっていたが、「時間演算子」などというものはないから（力学量として時間演算子を構成しようとする試みはあるが、いろいろ困難な問題がある）、時間 t の不確定性をこの方式で与えることはできない。古典的波動の場合、独立変数 r と t は空間点と時刻を指定するパラメーターであり、それ以上の何ものでもなかった。ところが量子力学の場合、変数 r は粒子の位置という力学量と（ひいては運動量と）第三法則の意味で直接的な関係をもっているのに対して、時間変数 t はあくまでもパラメーターのままである。したがって、力学量の期待値や偏差に対する公式が時間に対して使えないのは当然なのである。ここに、位置・運動量の不確定性関係と時間・エネルギーの不確定性関係との本質的な相違がある。時間幅 Δt という量は、量子力学的状態の実質的な時間変動を特徴づけるパラメーターとして導入すべきものである。一般的な運動状態の波動関数は、

エネルギー固有関数を用いて $\psi(r, t) = \sum_n c_n u_n(r) e^{-iE_n t/\hbar}$ と書くことができた。簡単のため、エネルギー準位が E_1 と E_2 の 2 個だけしかない場合を想定しよう ($E_1 \neq E_2$)。そのとき、粒子の存在確率密度は

$$\begin{aligned} |\psi(r, t)|^2 &= |c_1 u_1(r) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 u_2(r) e^{-iE_2 t/\hbar}|^2 = \psi^*(r, t) \psi(r, t) \\ &= [c_1^* u_1^*(r) e^{iE_1 t/\hbar} + c_2^* u_2^*(r) e^{iE_2 t/\hbar}] [c_1 u_1(r) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 u_2(r) e^{-iE_2 t/\hbar}] \\ &= |c_1 u_1|^2 + |c_2 u_2|^2 + \frac{c_1^* u_1^*(r) c_2 u_2(r) e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} + c_2^* u_2^*(r) c_1 u_1(r) e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar}}{2} \end{aligned}$$

【ここで $c_1 u_1(r) = |c_1 u_1| \exp(i\theta_1)$, $c_2 u_2(r) = |c_2 u_2| \exp(i\theta_2)$ とおくと

$$(下線) = |c_1 u_1| |c_2 u_2| e^{i[(E_1 - E_2)t/\hbar - \theta_1 + \theta_2]} + |c_2 u_2| |c_1 u_1| e^{-i[(E_1 - E_2)t/\hbar - \theta_1 + \theta_2]}$$

$$= |c_1 u_1(r)|^2 + |c_2 u_2(r)|^2 + 2|c_1 u_1(r)| |c_2 u_2(r)| \cos[(E_1 - E_2)t/\hbar - \theta_1(r) + \theta_2(r)]$$

★ すなわち、存在確率密度 $|\psi(r, t)|^2$ の時間依存性はもっぱら最後の項からくる。 $c_1 = 0$ または $c_2 = 0$ ならば時間依存性は完全に消えてしまうが、これは純粹の定常状態に戻るのだから当然である。したがって、力学系にとっての実質的時間変動は、相異なるエネルギー固有値をもつ複数のエネルギー固有状態の重ね合わせにその本質的な根源がある。さらに上式は、時間的変動を特徴づけるパラメーターが余弦関数内の t の係数 $|E_1 - E_2|/\hbar$ であることを示している。いま、エネルギー幅ということで $\Delta E = |E_1 - E_2|$ とおけば、確率 $|\psi(r, t)|^2$ の時間的変化がはっきり分かるようになる時間 Δt は $\Delta t \approx \hbar/\Delta E$ または $\Delta t \Delta E \approx \hbar$ によって与えられる。これが時間・エネルギーの不確定性関係の意味である。エネルギー準位が 3 個以上あるときは、 $|\psi(r, t)|^2$ の時間的変動に実質的に参加しているエネルギー準位の範囲を示す目安的なエネルギー幅 ΔE が、時間的変動を特徴づける時間幅 $\Delta t \approx \hbar/\Delta E$ を与えてくれる。 $|c_n|^2$ がエネルギー準位 E_n 実現の確率であるから ΔE としては $(\Delta E)^2 = \sum (E_n - \langle H \rangle)^2 |c_n|^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$ を採用すればよい。ただし $\langle H \rangle = \sum E_n |c_n|^2$, $\langle H^2 \rangle = \sum E_n^2 |c_n|^2$, $\sum |c_n|^2 = 1$ 。要するに、緩慢な時間的変動はごく狭い幅のエネルギー固有値をもつエネルギー固有状態だけによって起こることであり、急激な時間的変動はかなり広範囲のエネルギー固有値をもつエネルギー固有状態の参加によって起こることである。この性質はエネルギー固有状態の観測にとって、きわめて重要な意味をもっている。いま、ある力学系のエネルギー準位を精度 ΔE 程度で測定することを考えよう。この場合 $\Delta t \Delta E \approx \hbar$ は、その力学系が一つのエネルギー固有状態（定常状態）にあることを判定するには、少なくとも $\Delta t \approx \hbar/\Delta E$ 程度の時間をかけて $|\psi(r, t)|^2$ に時間的変動が起こらないことを確認する必要があると主張するものである。量子力学的測定では、同じ状態にある独立な力学系を多数用意する必要があったが、 ψ が定常状態であるとすれば、測定開始前に $\Delta t \approx \hbar/\Delta E$ より長い時間をかけて $|\psi(r, t)|^2$ に時間的変動のないものだけを集めなければならない。古典力学系では—私たちが知っているか否かにかかわらず—エネルギーが一定の状態にあると考えられるのだが、量子力学系ではそうはいかない。精度 ΔE をもってエネルギーが一定と言える状態は $\Delta t \approx \hbar/\Delta E$ より長い時間をかけて用意するのである。たとえば、素粒子や原子核の実験で、運動量が（ほとんど）一定の粒子ビーム（自由粒子の定常状態）を用意する場合、磁場を通すなどミクロ的には非常に長い時間をかけなければならないのである。

★ 時間・エネルギーの不確定性関係に関連する量子力学的遷移現象を考える。ある力学系のハミルトニアン演算子を \hat{H} とすると、固有値方程式 $\hat{H} u_n = E_n u_n$ の解 u_n がエネルギー E_n をもつ定常状態を表わす。固有関数 u_1, u_2, \dots は互いに直交し、規格化されているとする。力学系が孤立していれば、定常状態の時間的変動は $u_n e^{-iE_n t/\hbar}$ であり、定常状態間の遷移などは起こらない。外界との相互作用のハミルトニアン演算子を \hat{H}' とすれば、力学系の波動関数 $\psi(t)$ は シュレーディンガー方程式 $i\hbar \partial \psi(t) / \partial t = (\hat{H} + \hat{H}') \psi(t) \dots \textcircled{1}$ に従って時間的に変動し、 \hat{H} の定常状態間にも遷移が起こる。 \hat{H}' の影響が十分弱いものとして、初期定常状態 $u_i = \psi(0)$ から定常状態 u_r への遷移確率を求める。 $\psi(t) = \sum_n c_n(t) u_n e^{-iE_n t/\hbar} \dots \textcircled{2}$ と展開すると、 $|c_n(t)|^2$ は時刻 t のときの状態 $\psi(t)$ において力学系が状態 u_n にある確率を表わす。したがって遷移確率 $P_{ri}(t) = |c_r(t)|^2$ を求めればよい。②を①に代入して、左から u_r^* をかけて位置座標で積分すると、

$$i\hbar \partial / \partial t [\sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \int \int \int u_r^* u_n d^3 r] = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} (\int \int \int u_r^* \hat{H} u_n d^3 r + \int \int \int u_r^* \hat{H}' u_n d^3 r)$$

$$\therefore i\hbar d/dt [c_r(t) e^{-iE_r t/\hbar}] = E_r c_r(t) e^{-iE_r t/\hbar} + \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \int \int \int u_r^* \hat{H}' u_n d^3 r$$

(左辺) $= i\hbar [dc_r(t)/dt + c_r(t)(-iE_r/\hbar)] e^{-iE_r t/\hbar}$ であるから、 $c_r(t)$ の微分方程式は

$$i\hbar dc_r(t)/dt = \sum_n c_n(t) H_{rn} e^{i(E_r - E_n)t/\hbar} \dots \textcircled{3} \quad \text{ただし、} H_{rn} \equiv \int \int \int u_r^* \hat{H}' u_n d^3 r \text{ とおいた。}$$

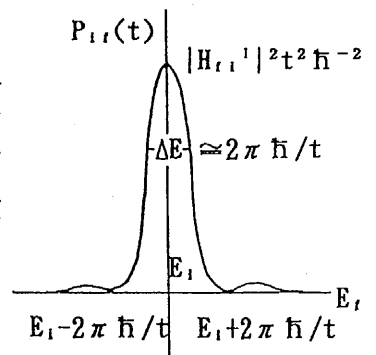
初期条件 $c_i(0) = 1, c_n(0) = 0 (n \neq i)$ の下で解く。すなわち、定常状態 u_i にあった力学系に $t = 0$ の瞬間に相互作用 \hat{H}' のスイッチを入れて、その後の変動を追跡するという問題である。相互作用が十分弱い場合はあまり大きな変動は起こらないから、確率保存則 $|c_i(t)|^2 + \sum_{n \neq i} |c_n(t)|^2 = 1$ で $c_i(t) \approx 1$ と近似すれば $n \neq i$ の項は無視してよい。したがって、③は $dc_r(t)/dt \approx (i\hbar)^{-1} H_{ri} e^{i(E_r - E_i)t/\hbar}$ 積分して

$$c_r(t) \approx (i\hbar)^{-1} H_{ri} [\hbar/i(E_r - E_i)] e^{i(E_r - E_i)t/\hbar} + B, \quad c_r(0) \approx -H_{ri} (E_r - E_i)^{-1} + B = 0 \text{ より}$$

$$B = H_{ri} (E_r - E_i)^{-1} \therefore c_r(t) \approx H_{ri} (E_r - E_i)^{-1} [1 - e^{i(E_r - E_i)t/\hbar}] \quad \text{よって、遷移確率は}$$

$$P_{ri}(t) = |c_r(t)|^2 \approx 4 |H_{ri}|^2 (E_r - E_i)^{-2} \sin^2[(E_r - E_i)t/2\hbar] \dots \textcircled{4} \quad \left[\because |1 - e^{i\theta}|^2 = (1 - \cos \theta)^2 + \sin^2 \theta = 2(1 - \cos \theta) = 4\sin^2(\theta/2) \right]$$

$P_{ri}(t)$ の E_r 依存性は、初期エネルギー E_i のまわりに高さ $|H_{ri}|^2 t^2 / \hbar^2$ 、幅 $|E_r - E_i| \approx 2\pi \hbar / t$ のピークをもち、このピークは時間の経過とともに、一層鋭く高くなってゆく。すなわち、時間があまり経過しない間はエネルギー E_i をもつ状態への遷移が可能であることを意味する。これが時間・エネルギーの不確定性関係の内容である。量子力学は遷移の確率を与えるだけで、100% 確実に遷移先を決めたり、遷移の瞬間をはっきり予言するものでもない。私たちは、力学系が時刻 $t = 0$ 以前には状態 u_i にあること、時刻 t 以後では状態 u_r にあることを確認しているだけである。この事情を背景に時間幅を $\Delta t = t$ とすれば、遷移確率 $P_{ri}(t)$ が大きな値をとる E_r の範囲が $\Delta E = |E_r - E_i| \approx 2\pi \hbar / \Delta t$ であることを④は語っている。それが不確定性関係 $\Delta t \Delta E \approx 2\pi \hbar$ にほかならない。



★ 原子の異なったエネルギー準位間の遷移に伴う光の放出を考えよう。光子のエネルギーを $\hbar \omega$ とすると、 $E_i^{(atom)} = E_r^{(atom)} + \hbar \omega_{ri}$ (エネルギー保存則)。 \hat{H}' は原子と電磁場との相互作用を表わす。波束の項で説明したように振動数一定の波は現実にはない。十分狭いが有限の幅にわたって振動数が分布している。したがって、④を $\hbar \omega = \varepsilon$ について積分する必要がある。一方、直接観測するのは遷移確率そのものではなく、単位時間当たりの遷移確率 $w_{ri} = \lim_{t \rightarrow \infty} (1/t) \int P_{ri}(t) \rho(\varepsilon) d\varepsilon$ である。

ただし、 $\rho(\varepsilon)$ は単位エネルギー間隔の光子の状態数で、光子の状態密度という。積分すると公式が得られる。

$$w_{ri} \approx \lim_{t \rightarrow \infty} (1/t) \int 4 |H_{ri}|^2 (\varepsilon - \varepsilon_{ri})^{-2} \sin^2[(\varepsilon - \varepsilon_{ri})t/2\hbar] \rho(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\varepsilon_{ri} = \hbar \omega_{ri})$$

$$= \lim_{t \rightarrow \infty} (1/t) \int 4 |H_{ri}|^2 (t^2/4\hbar^2) [(\varepsilon - \varepsilon_{ri})t/2\hbar]^{-2} \sin^2[(\varepsilon - \varepsilon_{ri})t/2\hbar] \rho(\varepsilon) \times 2\hbar/t d[(\varepsilon - \varepsilon_{ri})t/2\hbar]$$

$$= (2\pi/\hbar) |H_{ri}|^2 (\omega - \omega_{ri}) \rho(\varepsilon_{ri}) \quad \left[\because \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2 x / x^2 dx = \pi \text{ (物理数学)}, \text{ デルタ関数と同じ性質をもつ} \right]$$

§ 21 ハイゼンベルクの「γ線顕微鏡」思考実験

W. Heisenberg 1901~1976 ドイツ

— $\Delta y \Delta p_y \approx h, \Delta \phi \Delta L \approx h$

★ 第三法則をもとに定式化された不確定性原理 $\Delta x \Delta p \geq h/2$ は、波束を狭い領域に閉じ込めようとすれば

($\Delta x \rightarrow$ 小) 波数分布の幅を拡大しなければならないし($\Delta k \rightarrow$ 大)、波数一定の平面波に近づけようとすれば

($\Delta k \rightarrow$ 小) 波束が空間的に広がってしまう($\Delta x \rightarrow$ 大)という波動の本姓から出てきたものである。しかし

粒子力学的な立場でみると、粒子の軌道と速度変化を精密に追跡することが原理的に不可能だというのは、量子力学発足当初、やはり非常な驚きであった。ハイゼンベルクやボーアは様々な思考実験を工夫し、内容的に

理解しようと努めた。§ 2のコンプトン効果の実験について考察する。図のように、左上方の光源から出た光

ビームで電子を照射し、電子からの散乱光を右側においた

顕微鏡カメラで捕らえる。顕微鏡の管軸をx軸とし、光ビ

ームとx軸との交点を原点Oに選ぶ。この装置で顕微鏡カ

メラが粒子の映像をとれば、粒子が原点に位置していたこ

とが分かる。はじめ電子は静止していたとする(すなわち

初期運動量はゼロ)。コンプトン散乱によって、光はエネ

ルギー $h\nu'$ と運動量 $h\nu'/c$ をもって顕微鏡に向かい、電子は反跳を受けて運動量 p をもつ。角度 α, ϵ, θ

は、それぞれ、入射光、散乱光、反跳電子の運動方向を表わし、 δ は顕微鏡の対物レンズが原点に対して張る

角度である。エネルギー保存則と運動量保存則は、 $h\nu + m_0c^2 = h\nu' + (p^2c^2 + m_0^2c^4)^{1/2}$ より

$p^2c^2 = (h\nu - h\nu' + m_0c^2)^2 - m_0^2c^4 = (h\nu)^2 - 2(h\nu)(h\nu') + (h\nu')^2 + 2m_0c^2(h\nu - h\nu')$...①

x方向: $(h\nu/c)\cos\alpha = (h\nu'/c)\cos\epsilon - p\sin\theta$ より $pc\sin\theta = h\nu'\cos\epsilon - h\nu\cos\alpha$...②

y方向: $-(h\nu/c)\sin\alpha = (h\nu'/c)\sin\epsilon - p\cos\theta$ より $pc\cos\theta = h\nu'\sin\epsilon + h\nu\sin\alpha$...③

ν と α は実験装置を組み立てた段階で分かっている。また、 $\delta \geq \epsilon$ であることも分かっている。完全な未知

数は ν', p, θ であるが、方程式が3個あるから、すべて ν, α, ϵ で表わすことができる。②²+③²より

$p^2c^2 = (h\nu')^2 - 2(h\nu')(h\nu)\cos(\alpha + \epsilon) + (h\nu)^2$...④ 【 $\cos\alpha\cos\epsilon - \sin\alpha\sin\epsilon = \cos(\alpha + \epsilon)$ 】

①=④より $2m_0c^2(h\nu - h\nu') = 2(h\nu)(h\nu')[1 - \cos(\alpha + \epsilon)]$ 両辺を $2m_0c^2h\nu\nu'$ で割ると

$c/\nu' - c/\nu = \lambda' - \lambda = (h/m_0c)[1 - \cos(\alpha + \epsilon)]$ 電子のコンプトン波長 $h/m_0c = \lambda_c$ とおくと

$\lambda' = \lambda [1 + (\lambda_c/\lambda)[1 - \cos(\alpha + \epsilon)]]$...⑤ また、③より $p_y = p\cos\theta = (h/\lambda)\sin\alpha + (h/\lambda')\sin\epsilon$...⑥

$\lambda_c \approx 2.4 \times 10^{-12} \text{m}$, 可視光線の波長は $\lambda \approx 10^{-7} \text{m}$ の程度だから、 $(\lambda_c/\lambda) \ll 1$ であり、 $\lambda' \approx \lambda$ または

$\nu' \approx \nu$ と考えてよい。したがって、通常の場合、散乱によって光の波長(つまり、色)が変わることはない。

⑤の (λ_c/λ) の項が重要になり実質的に波長が変わる場合は、もっと短い波長の光、すなわちX線やγ線を

照射したときである。これだけ準備しておけば、電子の位置測定を行なう思考実験について語る事ができる。

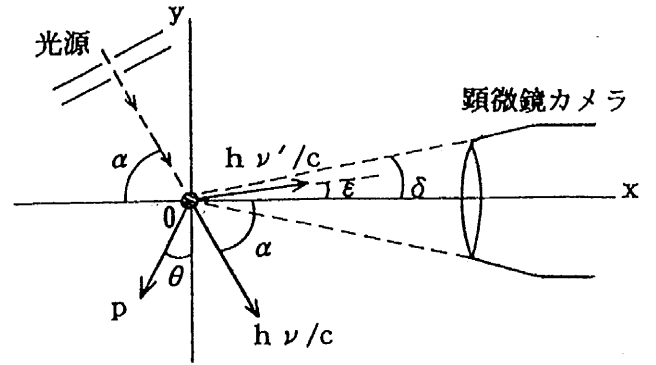
★ 顕微鏡に入ってゆく波長 λ' の光は、ともかく「波」であるから、波動光学の法則に従っているはずである。

波動光学によれば、顕微鏡の管軸に垂直な方向(すなわち、y方向)に関する分解能は $\Delta y \approx \lambda'/\sin\delta$...⑦

で与えられることが分かっている。これは、波長 λ の光を使うかぎり(⑤より λ' は λ の関数)、電子位置のy

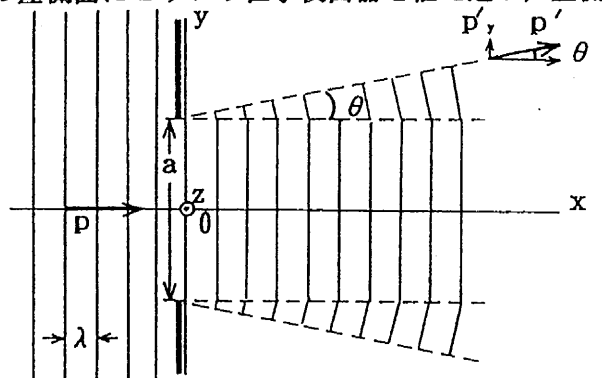
座標が⑦の精度以上には正確に測定できないという事実を示している。照射光の波長を短くしていくと、 Δy

も小さくなる。可視光線を使えば $\Delta y \approx 10^{-7} \text{m}$ 程度の分解能しか得られないが、波長 10^{-10}m 程度のX線や、



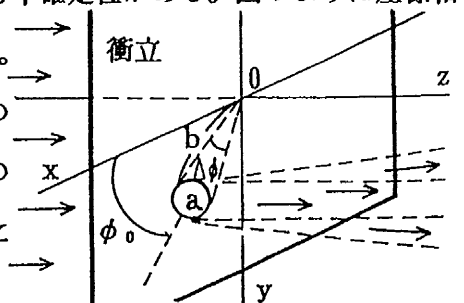
より波長の短い γ 線を使えば分解能は大幅に改善される。そのため「 γ 線顕微鏡の思考実験」という名前がついた。しかし、そんなに短い波長の γ 線を集束するレンズは実際には存在しないから、あくまでも思考実験における理想化であり、原理的な可能性の想定だと考えてよい。ともかく、そのようにして位置測定の精度を上げようとする、電子の反跳運動量の不確定性が增大してしまう。理由は⑥式を見れば分かる。 p_y が反跳運動量の y 成分であるが、第2項 $(h/\lambda')\sin \epsilon$ がその不確定部分である。なぜならば、反射光がレンズに入ったとしても、 ϵ は $\delta \geq \epsilon$ の範囲にあるというだけで、はっきり決められないからである。したがって、⑦の精度 $\Delta y \cong \lambda'/\sin \delta$ の位置測定によって生じた電子の運動量の不確定性は $\Delta p_y \cong (h/\lambda')\sin \delta$ であるといえる。このようにして、 γ 線顕微鏡による電子の位置測定は——思考実験ではあるが——不確定性関係が物理的過程としては、ごく自然なものだということを明らかにしたのであった。

★ 光などを使わないで、電子の位置測定を行なう思考実験を考えることもできる。たとえば、Xページのような小孔をもつ衝立による位置測定を想定しよう(図)。衝立の左側面にピッタリ粒子検出器を植え込み、左側遠方においた射出器から運動量 $p = (p, 0, 0)$ をもつ粒子を1個ずつ投入する。粒子射出後、到着予定時刻を過ぎて、衝立上の検出器すべてが粒子を検出しなかったとすれば、その粒子は直径 a の小孔を通り抜けて右側の空間に出ていったことになる。すなわち、到達予定時刻の直後では、粒子は y 座標について平均値 $\langle y \rangle = 0$ 、幅 $\Delta y = a$ の分布をもつことになる。



これは、一種の位置測定と考えてよい。ところで、入射粒子が波動性をもつならば、波動特有の回折現象を起こすはずである。一般に、入射平面波の波長 λ が小孔の直径 a に比べて十分小さい場合($\lambda \ll a$)、回折角 θ は小さく、おおよそ $\sin \theta \cong \lambda/a$ …⑧が成り立つことが分かっている。したがって、小孔の通過によって粒子の波動の偏角は⑧の程度回折し、波数または運動量について $\Delta p_y \cong p \sin \theta \cong p \lambda/a = h/\Delta y$ 程度の不確定さが生じる。これは不確定性関係 $\Delta y \Delta p_y \cong h$ にほかならない。位置測定の精度を上げようとして小孔の直径 a を小さく絞れば、波動性のために回折角が大きくなり、運動量の不確定性が增大するのである。

★ 授業で導いたように、互いに正準共役な変数である軌道角運動量の z 成分 L_z と方位角 ϕ の間には、交換関係 $[\hat{L}_z, \phi] = \hbar/i$ が成立していた。当然予測されることだが、 L_z と ϕ にも不確定性がある。図のように座標軸を設定し、 $O-z$ 軸についての L_z と $O-z$ 軸のまわりの ϕ について調べる。粒子が右側の空間に出ていったとき、その粒子は平均方位角 $\langle \phi \rangle \cong \phi_0$ のまわりに、幅 $\Delta \phi \cong a/b$ の分布をもつだろう。 b は原点から小孔までの距離である。これで一応方位角測定が完成する。ところが、上記のように



直径 a の通過によって、粒子の横方向運動量は $\Delta p \cong \hbar/a$ の程度不確定になる。したがって、 L_z は $\Delta L_z \cong b \Delta p \cong b \hbar/a = \hbar(b/a) \cong \hbar/\Delta \phi$ の程度不確定になる。よって $\Delta \phi \Delta L_z \cong \hbar$ が成り立つ。この不確定性関係は、位置・運動量の不確定性関係に由来しているわけである。

★ 波動力学の運動法則を設定した後では、不確定性原理はその論理的帰結のひとつに過ぎない。その内容は量子力学の出発点である粒子・波動の二重性と密接に結びついており、量子力学的干渉現象もこの原理によって支えられている。前述の如く、不確定性原理は物理的過程としてはごく自然なものであり、客観的自然の存在を否定したり、時空外に神秘的な何かの存在を肯定したりするものでは決してないことを特に強調しておきたい。

§ 22 調和振動子 — エネルギー単位, エルミート多項式, 波束の周期運動
harmonic oscillator Hermite polynomial

★ 一次元調和振動子の方程式 $md^2x/dt^2 = -\kappa x$ の解は $x(t) = C_1 \sin \omega t + C_2 \cos \omega t$, $\omega = (\kappa/m)^{1/2}$ (物理数学I)

であった。ポテンシャルは $V(x) = \frac{1}{2} \kappa x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ であるから, 固有値方程式 $\hat{H}u(x) = Eu(x)$ は $[-(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2]u(x) = Eu(x)$ 両辺に $(-2/\hbar\omega)$ をかけて

$(\hbar/m\omega)d^2u/dx^2 - (m\omega/\hbar)x^2u = -(2E/\hbar\omega)u$ $(m\omega/\hbar)^{1/2}x = \eta$, $2E/\hbar\omega = \alpha$ とおくと

$d^2u/d\eta^2 + (\alpha - \eta^2)u = 0 \dots \textcircled{1}$ $\lim_{\eta \rightarrow \pm\infty} u(\eta) = 0$ (境界条件) を満たす解を求める。 $\eta^2 \gg \alpha$ のとき, $\textcircled{1}$ は $d^2u/d\eta^2 \cong \eta^2 u$ である。これを満たす漸近解は $u(\eta) \cong e^{-\eta^2/2}$ 【 $\because d^2u/d\eta^2 = d(-\eta e^{-\eta^2/2})/d\eta = -e^{-\eta^2/2} + \eta^2 e^{-\eta^2/2} \rightarrow \eta^2 u$ 】

そこで, $\textcircled{1}$ の解を $u(\eta) = H(\eta)e^{-\eta^2/2}$ とおくと $d^2H/d\eta^2 - 2\eta dH/d\eta + (\alpha - 1)H = 0 \dots \textcircled{2}$

【 $\because u'' = [(H' - H\eta)e^{-\eta^2/2}]' = (H'' - H'\eta - H)e^{-\eta^2/2} + (H' - H\eta)(-\eta e^{-\eta^2/2}) = [H'' - 2\eta H' + (\eta^2 - 1)H]e^{-\eta^2/2}$ 】
②の級数解を求める。

$H(\eta) = a_0 + a_1\eta + a_2\eta^2 + a_3\eta^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \eta^n$, $H'(\eta) = a_1 + 2a_2\eta + 3a_3\eta^2 + \dots = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n \eta^{n-1}$

ゆえに $\eta H'(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} n a_n \eta^n$, $H''(\eta) = 2a_2 + 2 \times 3 a_3 \eta + 3 \times 4 a_4 \eta^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) a_{n+2} \eta^n$ これらを②へ代入して

$\sum_{n=0}^{\infty} [(n+1)(n+2) a_{n+2} - (2n+1-\alpha) a_n] \eta^n = 0$ (for all η) より, 次の漸化式が成り立つ。

$a_{n+2} = [(2n+1-\alpha)/(n+1)(n+2)] a_n$, $n=0, 1, 2, \dots$ これから a_2, a_4, \dots は a_0 で, a_3, a_5, \dots は a_1

でそれぞれ表わされ, a_0 と a_1 を任意定数とする一般解 $H(\eta)$ が決まる。しかし $\lim_{\eta \rightarrow \pm\infty} u(\eta) = 0$ ゆえ, 十分

大きい $|\eta|$ に対して $H(\eta) = u(\eta)e^{\eta^2/2} < e^{\eta^2/2}$ が成り立つ必要がある。両辺の漸近的な性質を比較する。

$e^{\eta^2/2} = 1 + \eta^2/2 + (\eta^2/2)^2/2! + (\eta^2/2)^3/3! + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} [1/[2^{n/2}(n/2)!]] \eta^n = \sum b_n \eta^n$ より

【 $\because e^x = 1 + x + x^2/2! + x^3/3! + \dots$ 】 $n=0, 2, 4, \dots$ $b_{n+2}/b_n = [2^{n/2}(n/2)!]/[2^{(n+2)/2}[(n+2)/2]!] = 1/[2(n/2+1)] = 1/(n+2)$ (for large n) 一方,

$a_{n+2}/a_n = (2n+1-\alpha)/(n+1)(n+2) = [2-(1+\alpha)/(n+1)]/(n+2) \cong 2/(n+2)$ (for large n)

すなわち, $H(\eta)$ のべき級数の隣り合う係数が減少する割合は $e^{\eta^2/2}$ のそれよりも小さいから $H(\eta) < e^{\eta^2/2}$ に矛盾する。したがって $H(\eta)$ は有限級数でなければならない。漸化式で $\alpha \equiv \alpha_n = 2n+1$ ととれば, n 次の有限級数 $H_n(\eta)$ が得られる。 n が偶数のときは, $a_1 = 0$ として $H_n(\eta) = a_0 + a_2\eta^2 + a_4\eta^4 + \dots + a_n\eta^n$

【 $\because a_{n+2} = 0$ 】 n が奇数のときは, $a_0 = 0$ として $H_n(\eta) = a_1\eta + a_3\eta^3 + a_5\eta^5 + \dots + a_n\eta^n$ を解にする。調和振動子の

エネルギー固有値は $\alpha_n = 2E_n/\hbar\omega = 2n+1$ より $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, $n=0, 1, 2, \dots$ である (下図)。

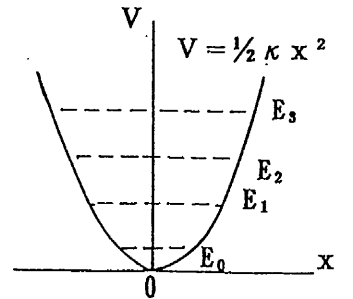
E_n の固有関数 $u_n(\eta)$ を求める。 $H_n(\eta)$ の最高べき η^n の係数 a_n を 2^n にえらぶと

すべての項が整数係数になり便利である。 $H_0(\eta) = a_0 = a_0 \eta^0 = 2^0 = 1$ として

最低エネルギー $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$ の固有関数は $u_0(\eta) = H_0(\eta)e^{-\eta^2/2} = e^{-\eta^2/2}$ (ゼロエネルギー)

$H_1(\eta) = a_1 \eta = 2^1 \eta$, $u_1(\eta) = H_1(\eta)e^{-\eta^2/2} = 2\eta e^{-\eta^2/2}$ が $E_1 = (3/2)\hbar\omega$

に属する固有関数である。 $E_2 = (5/2)\hbar\omega$ に対しては



$H_2(\eta) = a_0 + a_2 \eta^2 = a_0 + [(1-\alpha_2)/2] a_0 \eta^2 = a_0 + [(1-5)/2] a_0 \eta^2 = a_0 - 2a_0 \eta^2 = -2 - 2(-2)\eta^2 = -2 + 2^2 \eta^2$, $u_2(\eta) = H_2(\eta)e^{-\eta^2/2} = (4\eta^2 - 2)e^{-\eta^2/2}$ 同様にして

$H_3(\eta) = a_1 \eta + a_3 \eta^3 = a_1 \eta + [(3-\alpha_3)/2 \times 3] a_1 \eta^3 = a_1 \eta + [(3-7)/2 \times 3] a_1 \eta^3 = a_1 \eta - (2/3) a_1 \eta^3 = -12\eta - (2/3)(-12)\eta^3 = -12\eta + 2^3 \eta^3$, $u_3(\eta) = H_3(\eta)e^{-\eta^2/2} = (8\eta^3 - 12\eta)e^{-\eta^2/2}$

$H_4(\eta) = 16\eta^4 - 48\eta^2 + 12$, $u_4(\eta) = H_4(\eta)e^{-\eta^2/2} = (16\eta^4 - 48\eta^2 + 12)e^{-\eta^2/2}$

$H_5(\eta) = 32\eta^5 - 160\eta^3 + 120\eta$, $H_6(\eta) = 64\eta^6 - 480\eta^4 + 720\eta^2 - 120, \dots$ が得られる。

★ $H_n(\eta)$ をエルミート多項式といい, $H_n(\eta) = (-1)^n e^{\eta^2} d^n(e^{-\eta^2})/d\eta^n$, $n=0, 1, 2, \dots$ で表わせる。
【 $\because H_0(\eta) = e^{\eta^2} d^0(e^{-\eta^2})/d\eta^0 = 1$, $H_1(\eta) = -e^{\eta^2} d(e^{-\eta^2})/d\eta = -e^{\eta^2}(-2\eta e^{-\eta^2}) = 2\eta$,
 $H_2(\eta) = e^{\eta^2} d^2(e^{-\eta^2})/d\eta^2 = e^{\eta^2} d(-2\eta e^{-\eta^2})/d\eta = e^{\eta^2}(-2e^{-\eta^2} + 4\eta^2 e^{-\eta^2}) = 4\eta^2 - 2, \dots$ 】

★ $S(\eta, s) \equiv e^{\eta^2 - (s-\eta)^2} = e^{-s^2 + 2s\eta} = \sum_{n=0}^{\infty} [(\partial^n S / \partial s^n)_{s=0} / n!] s^n = \sum_{n=0}^{\infty} [H_n(\eta) / n!] s^n$ が成り立つ。
 (母関数, generating function) $\sum_{n=0}^{\infty} [(\partial^n S / \partial s^n)_{s=0} / n!] s^n$ (マクローリン展開) $\sum_{n=0}^{\infty} [H_n(\eta) / n!] s^n$
 $[\because (\partial^n S / \partial s^n)_{s=0} = e^{\eta^2} [\partial^n [e^{-(s-\eta)^2}] / \partial s^n]_{s=0} = e^{\eta^2} [d^n [e^{-(s-\eta)^2}] / d(s-\eta)^n]_{s=0}$
 $= e^{\eta^2} d^n (e^{-\eta^2}) / d(-\eta)^n = (-1)^n e^{\eta^2} d^n (e^{-\eta^2}) / d\eta^n = H_n(\eta)]$ 固有関数
 $u_n(x) = C_n H_n(\eta) e^{-\eta^2/2} = C_n H_n(\beta x) e^{-(\beta x)^2/2}$ を規格化する。 $\eta = \beta x$, ただし $\beta = (m\omega/\hbar)^{1/2}$
 $\int_{-\infty}^{\infty} |u_n(x)|^2 dx = |C_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\beta x) e^{-(\beta x)^2} dx = (|C_n|^2 / \beta) \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\eta) e^{-\eta^2} d\eta = 1 \dots \textcircled{1}$
 $e^{-s^2 + 2s\eta} = \sum_{n=0}^{\infty} [H_n(\eta) / n!] s^n$ と $e^{-t^2 + 2t\eta} = \sum_{m=0}^{\infty} [H_m(\eta) / m!] t^m$ の積をつくり、 $e^{-\eta^2}$ をかけて積分すると
 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-s^2 + 2s\eta} e^{-t^2 + 2t\eta} e^{-\eta^2} d\eta = \sum_{n,m=0}^{\infty} (s^n t^m / n! m!) \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\eta) H_m(\eta) e^{-\eta^2} d\eta$
 (左辺) $= e^{2st} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\eta-s-t)^2} d\eta = e^{2st} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\eta-s-t)^2} d(\eta-s-t) = e^{2st} \pi^{1/2} = \pi^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} (2st)^n / n!$
 これを右辺と比較すると $s^n t^m$ ($n \neq m$) の係数部分の $\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\eta) H_m(\eta) e^{-\eta^2} d\eta = 0$ ($n \neq m$)
 また $s^n t^n$ ($n=m$) の係数から $\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\eta) e^{-\eta^2} d\eta = \pi^{1/2} 2^n n!$ よって $\textcircled{1}$ より $|C_n| = (\beta / \pi^{1/2} 2^n n!)^{1/2}$
 したがって $u_n(x) = [(m\omega / \pi \hbar)^{1/2} / 2^n n!]^{1/2} H_n[(m\omega / \hbar)^{1/2} x] \exp[-(m\omega / 2\hbar) x^2]$, $n=0, 1, 2, \dots$
 は規格化された直交関数系である。すなわち、 $\int_{-\infty}^{\infty} u_n(x) u_m(x) dx = \delta_{nm}$ [$=0$ ($n \neq m$), $=1$ ($n=m$)]
 $u_0(x) = C_0 H_0(\beta x) e^{-(\beta x)^2/2} = (\beta^2 / \pi)^{1/4} e^{-(\beta x)^2/2}$, etc.

★ $H_n(\eta)$ の漸化式を導く。 $e^{\eta^2 - (s-\eta)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} [H_n(\eta) / n!] s^n \dots \textcircled{2}$ 両辺を s で微分すると
 recurrence formula $\sum_{n=0}^{\infty} [H_n(\eta) / n!] s^n$
 $-2(s-\eta) e^{\eta^2 - (s-\eta)^2} = \sum_{n=1}^{\infty} [H_n(\eta) / (n-1)!] s^{n-1}$ (左辺) $= -2(s-\eta) \sum_{n=0}^{\infty} [H_n(\eta) / n!] s^n$ ゆえ
 $\sum_{n=0}^{\infty} [H_n(\eta) / n!] (-2s^{n+1}) + \sum_{n=0}^{\infty} [H_n(\eta) / n!] 2\eta s^n = \sum_{n=0}^{\infty} [H_{n+1}(\eta) / n!] s^n$ s^n の係数を比較して
 $-2H_{n-1} / (n-1)! + 2\eta H_n / n! = H_{n+1} / n!$ $\therefore H_{n+1}(\eta) - 2\eta H_n(\eta) + 2n H_{n-1}(\eta) = 0$
 $\textcircled{2}$ を η で微分して $[2\eta + 2(s-\eta)] e^{\eta^2 - (s-\eta)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} [H_n'(\eta) / n!] s^n$ (下線) $= \sum_{n=0}^{\infty} [H_n(\eta) / n!] s^n$ ゆえ
 $\sum_{n=0}^{\infty} 2[H_n(\eta) / n!] s^{n+1} = \sum_{n=0}^{\infty} [H_n'(\eta) / n!] s^n$ s^n の係数を比較して $2H_{n-1}(\eta) / (n-1)! = H_n'(\eta) / n!$
 $\therefore H_n'(\eta) = 2n H_{n-1}(\eta) \therefore H_n''(\eta) = 2n H_{n-1}'(\eta) = 2n [2(n-1) H_{n-2}(\eta)] = 4n(n-1) H_{n-2}(\eta)$

★ $i\hbar \partial \psi(x, t) / \partial t = [(-\hbar^2 / 2m) \partial^2 / \partial x^2 + \frac{1}{2} \kappa x^2] \psi(x, t)$ の解を定常状態の解 $u_n(x)$ で展開する。
 $\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n u_n(x) e^{-i E_n t / \hbar} = e^{-i \omega t / 2} \sum_{n=0}^{\infty} A_n u_n(x) e^{-i n \omega t}$ $[E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega]$ 原点から L だけ離れた基底状態の固有関数を初期条件にする。 $\psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n u_n(x) = u_0(x-L) = (\beta^2 / \pi)^{1/4} e^{-\beta^2 (x-L)^2 / 2}$
 $A_n = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) \psi(x, 0) dx$ $[\because \text{(右辺)} = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) u_n(x) dx = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \delta_{nm} = A_m]$
 $= \int_{-\infty}^{\infty} C_n^* H_n(\beta x) e^{-(\beta x)^2/2} (\beta^2 / \pi)^{1/4} e^{-\beta^2 (x-L)^2 / 2} dx$ $[\beta x = \eta, dx = d\eta / \beta, \beta L = \eta_0]$
 $= [C_n^* / (\beta^2 \pi)^{1/4}] \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\eta) e^{-\eta^2/2} e^{-(\eta-\eta_0)^2/2} d\eta = [C_n^* / (\beta^2 \pi)^{1/4}] \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\eta) e^{-(\eta^2 - \eta\eta_0 + \eta_0^2/2)} d\eta$
 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\eta^2 + 2\eta\eta_0} e^{-(\eta^2 - \eta\eta_0 + \eta_0^2/2)} d\eta = \sum_{n=0}^{\infty} (s^n / n!) \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\eta) e^{-(\eta^2 - \eta\eta_0 + \eta_0^2/2)} d\eta$
 (左辺) $= e^{-\eta_0^2/4 + \eta_0^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\eta-\eta_0/2)^2} d(\eta-s-\eta_0/2) = e^{-\eta_0^2/4 + \eta_0^2} \pi^{1/2} = \pi^{1/2} e^{-\eta_0^2/4} \sum_{n=0}^{\infty} (s \eta_0)^n / n!$
 より (下線) $= \pi^{1/2} e^{-\eta_0^2/4} \eta_0^n \therefore A_n = [[\beta / \pi^{1/2} 2^n n!]^{1/2} / (\beta^2 \pi)^{1/4}] \pi^{1/2} e^{-\eta_0^2/4} \eta_0^n$
 $= \eta_0^n e^{-\eta_0^2/4} / (2^n n!)^{1/2}$
 $\therefore \psi(x, t) = e^{-i \omega t / 2} \sum_{n=0}^{\infty} [\eta_0^n e^{-\eta_0^2/4} / (2^n n!)^{1/2}] (\beta / \pi^{1/2} 2^n n!)^{1/2} H_n(\eta) e^{-\eta^2/2} e^{-i n \omega t}$
 $= (\beta / \pi^{1/2})^{1/2} e^{-\eta_0^2/2 - \eta_0^2/4 - i \omega t / 2} \sum_{n=0}^{\infty} [H_n(\eta) / n!] (\frac{1}{2} \eta_0 e^{-i \omega t})^n$
 (下線) $= S(\eta, \frac{1}{2} \eta_0 e^{-i \omega t}) = \exp[-(\frac{1}{2} \eta_0 e^{-i \omega t})^2 + 2(\frac{1}{2} \eta_0 e^{-i \omega t}) \eta] = \exp(-\frac{1}{4} \eta_0^2 e^{-2i \omega t} + \eta \eta_0 e^{-i \omega t})$
 $\therefore \psi(x, t) = (\beta / \pi^{1/2})^{1/2} \exp(-\frac{1}{2} \eta^2 - \frac{1}{4} \eta_0^2 e^{-2i \omega t} - \frac{1}{2} i \omega t \eta - \frac{1}{4} \eta_0^2 e^{-2i \omega t} + \eta \eta_0 e^{-i \omega t})$
 $= (\beta / \pi^{1/2})^{1/2} \exp[-\frac{1}{2} (\eta - \eta_0 \cos \omega t)^2 - i(\frac{1}{2} \omega t \eta + \eta \eta_0 \sin \omega t - \frac{1}{4} \eta_0^2 \sin 2\omega t)]$
 $\therefore |\psi(x, t)|^2 = (\beta / \pi^{1/2}) \exp[-(\eta - \eta_0 \cos \omega t)^2] = (\beta / \pi^{1/2}) \exp[-\beta^2 (x - L \cos \omega t)^2]$
 したがって $\psi(x, t)$ は、角振動数 ω , 振幅 L で振動する波束であることが分かる (Schiff 参照)。

§ 23 三次元の球対称ポテンシャル—中心力場, 角運動量の固有値問題
spherically symmetric potential central field

★ § 16で導いた $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(r)$ の固有値方程式 $\hat{H}u(r) = Eu(r) \dots ①$ で $V(r) = V(r)$ (球対称ポテンシャル)

の場合を考える。三次元の極座標 $x = r \sin\theta \cos\phi, y = r \sin\theta \sin\phi, z = r \cos\theta$ で ∇^2 を表わすと①は (物理数学演習II)
 $-(\hbar^2/2m)[(1/r^2)\partial(r^2\partial/\partial r)/\partial r + (1/r^2\sin\theta)\partial(\sin\theta\partial/\partial\theta)/\partial\theta + (1/r^2\sin^2\theta)\partial^2/\partial\phi^2]u + V(r)u = Eu \dots ②$
 $u(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ とおき, 両辺を RY で割って変数分離すると ②は

$$(1/R)d(r^2 dR/dr)/dr + (2m r^2/\hbar^2)[E - V(r)] = -(1/Y)[(1/\sin\theta)\partial(\sin\theta\partial Y/\partial\theta)/\partial\theta + (1/\sin^2\theta)\partial^2 Y/\partial\phi^2] \equiv \lambda \text{ (定数) より}$$
$$(1/r^2)d(r^2 dR/dr)/dr + [(2m/\hbar^2)[E - V(r)] - \lambda/r^2]R = 0 \dots ③ \text{ (動径部分の波動方程式)}$$

$$(1/\sin\theta)\partial(\sin\theta\partial Y/\partial\theta)/\partial\theta + (1/\sin^2\theta)\partial^2 Y/\partial\phi^2 + \lambda Y = 0 \dots ④ \text{ (角部分の波動方程式)}$$

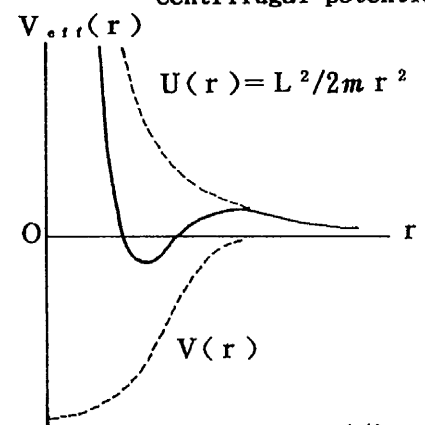
ラプラスの方程式 $\nabla^2 u = 0$ の特別解の考察から分離定数 λ の形は $\lambda = \ell(\ell+1), \ell = 0, 1, 2, \dots$ であった。 (物理数学I)
P. Laplace 1749~1827 フランス

③で $R(r) = \chi(r)/r$ とおくと 第一項 $= (1/r^2)[r^2(\chi/r)']' = (1/r^2)[r^2(\chi' r - \chi)/r^2]' = (1/r^2)(\chi'' r + \chi' - \chi'/r) = \chi''/r$ より
 $(1/r)d^2\chi/dr^2 + [(2m/\hbar^2)[E - V(r)] - \lambda/r^2]\chi/r = 0, \lambda = \ell(\ell+1)$ を代入して変形すると

$$-(\hbar^2/2m)d^2\chi/dr^2 + [V(r) + \ell(\ell+1)\hbar^2/2m r^2]\chi = E\chi \dots ⑤ \text{ これは一次元のシュレーディンガー}$$

方程式と同形であり, $V_{eff}(r) \equiv V(r) + \ell(\ell+1)\hbar^2/2m r^2 \dots ⑥$ は古典力学の有効ポテンシャルに相当 effective potential
する。粒子の角運動量の大きさは $L = m r^2 \omega$ (ω は原点Oの回りの角速度) ゆえ, 粒子に作用する遠心力は
 $f(r) = m r \omega^2 = m r (L/m r^2)^2 = L^2/m r^3$ と書ける。これはポテンシャル $U(r) = L^2/2m r^2$ から導
ける。 $-dU(r)/dr = -(-2r^{-3}L^2/2m) = L^2/m r^3 = f(r)$ すなわち, ⑥の第二項は遠心力ポテンシャル centrifugal potential
を表わし $L = [\ell(\ell+1)]^{1/2}\hbar$ という対応になっている。 ℓ を方位

(または軌道角運動量) 量子数という。 $V_{eff}(r)$ の概形を右図に示す。
azimuthal (orbital angular momentum) quantum number
次に④で $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$ とおき, 両辺を $\Theta\Phi$ で割って変数



$$\text{分離すると } (\sin\theta/\Theta)d(\sin\theta d\Theta/d\theta)/d\theta + \lambda \sin^2\theta = -(1/\Phi)d^2\Phi/d\phi^2 \equiv \nu \text{ (定数) より } d^2\Phi/d\phi^2 + \nu\Phi = 0 \dots ⑦$$

$$(1/\sin\theta)d(\sin\theta d\Theta/d\theta)/d\theta + (\lambda - \nu/\sin^2\theta)\Theta = 0 \dots ⑧$$

$\nu = m^2$ とおき, ⑦の物理的に意味のある解 $\Phi(\phi)$ として周期 2π の関数

$$\Phi_m(\phi) = (2\pi)^{-1/2} e^{im\phi} \text{ (} m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell \text{)} \dots ⑨$$
 を選ぶ。 m を磁気量子数という。 $(2\pi)^{-1/2}$ は規
格化定数で $\int_0^{2\pi} |\Phi_m|^2 d\phi = 1/2\pi \int_0^{2\pi} d\phi = 1$ (慣習で記号 m を用いるが, 質量 m と混同しないようにする)。
magnetic quantum number

⑧で $\lambda = \ell(\ell+1), \nu = m^2, \cos\theta = w, \Theta(\theta) = P(w)$ とおくと, $dw = -\sin\theta d\theta, \sin^2\theta = 1 - \cos^2\theta = 1 - w^2$ より
 $d[(1-w^2)dP/dw]/dw + [\ell(\ell+1) - m^2/(1-w^2)]P = 0 \text{ (} -1 \leq w \leq 1 \text{)} \dots ⑩$ これは物理数学IIIで学んだ

ルジャンドルの陪微分方程式 $[(1-x^2)v'' - 2xv' + [n(n+1) - m^2/(1-x^2)]v] = 0$ であり, その解のうち
associated Legendre differential equation
第一種のルジャンドルの陪関数 $P_\ell^m(w) = (1-w^2)^{|m|/2} d^{|m|} P_\ell(w)/dw^{|m|} \text{ (} m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell \text{)} \dots ⑪$

associated Legendre function
が用いられる。 $P_\ell(w) = (1/2^\ell \ell!) d^\ell (w^2-1)^\ell / dw^\ell \text{ (} \ell = 0, 1, 2, 3, \dots \text{)} \dots ⑫$ はルジャンドルの多項式で,
(ロドリゲスの公式, Rodrigues' formula) Legendre polynomial

⑩で $m=0$ の場合のルジャンドルの微分方程式 $d[(1-w^2)dP/dw]/dw + \ell(\ell+1)P = 0 \dots ⑬$ の解であった。
 $[(1-x^2)y'' - 2xy' + n(n+1)y = 0]$

$$\text{直交関係式 } \int_{-1}^1 P_\ell^m(w) P_{\ell'}^m(w) dw = 0 \text{ (} \ell \neq \ell' \text{)}, = [2/(2\ell+1)](\ell+|m|)!/(\ell-|m|)! \text{ (} \ell = \ell' \text{)} \text{ より}$$

規格化すると $\Theta(\theta) = [[(2\ell+1)/2](\ell-|m|)!/(\ell+|m|)!]^{1/2} P_\ell^m(\cos\theta) \dots ⑭$ 以上から④の特別解 Y
を次のように構成しておけば, 量子力学的には必要にして十分である (球面調和関数, spherical harmonics)。
 $Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} [[(2\ell+1)/4\pi](\ell-|m|)!/(\ell+|m|)!]^{1/2} P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\phi} \dots ⑮$

★ 角運動量演算子 $\hat{L} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z) = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} = (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, x\hat{p}_y - y\hat{p}_x)$ の固有値問題を考える。 \hat{L} の成分を三次元の極座標に変換する。 $\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z$ を (r, θ, ϕ) で表わして (物理数学II)

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar(y\partial/\partial z - z\partial/\partial y) = -i\hbar[r\sin\theta\sin\phi[\cos\theta\partial/\partial r - (\sin\theta/r)\partial/\partial\theta] \\ &\quad - r\cos\theta[\sin\theta\sin\phi\partial/\partial r + (\cos\theta\sin\phi/r)\partial/\partial\theta + (\cos\phi/r\sin\theta)\partial/\partial\phi]] \\ &= i\hbar[(\sin^2\theta + \cos^2\theta)\sin\phi\partial/\partial\theta + (\cos\theta\cos\phi/\sin\theta)\partial/\partial\phi] = i\hbar(\sin\phi\partial/\partial\theta + \cot\theta\cos\phi\partial/\partial\phi) \end{aligned} \quad \dots ①$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_x^2 &= -\hbar^2(\sin\phi\partial/\partial\theta + \cot\theta\cos\phi\partial/\partial\phi)(\sin\phi\partial/\partial\theta + \cot\theta\cos\phi\partial/\partial\phi) \\ &= -\hbar^2(\sin^2\phi\partial^2/\partial\theta^2 - \operatorname{cosec}^2\theta\sin\phi\cos\phi\partial/\partial\phi + \cot\theta\sin\phi\cos\phi\partial^2/\partial\theta\partial\phi + \cot\theta\cos^2\phi\partial/\partial\theta \\ &\quad + \cot\theta\sin\phi\cos\phi\partial^2/\partial\theta\partial\phi - \cot^2\theta\sin\phi\cos\phi\partial/\partial\phi + \cot^2\theta\cos^2\phi\partial^2/\partial\phi^2) \dots ② \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar(z\partial/\partial x - x\partial/\partial z) = -i\hbar[r\cos\theta[\sin\theta\cos\phi\partial/\partial r + (\cos\theta\cos\phi/r)\partial/\partial\theta \\ &\quad - (\sin\phi/r\sin\theta)\partial/\partial\phi] - r\sin\theta\cos\phi[\cos\theta\partial/\partial r - (\sin\theta/r)\partial/\partial\theta]] \\ &= -i\hbar[(\cos^2\theta + \sin^2\theta)\cos\phi\partial/\partial\theta - (\cos\theta\sin\phi/\sin\theta)\partial/\partial\phi] = i\hbar(-\cos\phi\partial/\partial\theta + \cot\theta\sin\phi\partial/\partial\phi) \end{aligned} \quad \dots ③$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_y^2 &= -\hbar^2(\cos\phi\partial/\partial\theta - \cot\theta\sin\phi\partial/\partial\phi)(\cos\phi\partial/\partial\theta - \cot\theta\sin\phi\partial/\partial\phi) \\ &= -\hbar^2(\cos^2\phi\partial^2/\partial\theta^2 + \operatorname{cosec}^2\theta\sin\phi\cos\phi\partial/\partial\phi - \cot\theta\sin\phi\cos\phi\partial^2/\partial\theta\partial\phi + \cot\theta\sin^2\phi\partial/\partial\theta \\ &\quad - \cot\theta\sin\phi\cos\phi\partial^2/\partial\theta\partial\phi + \cot^2\theta\sin\phi\cos\phi\partial/\partial\phi + \cot^2\theta\sin^2\phi\partial^2/\partial\phi^2) \dots ④ \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x) \\ &= -i\hbar\{r\sin\theta\cos\phi[\sin\theta\sin\phi\partial/\partial r + (\cos\theta\sin\phi/r)\partial/\partial\theta + (\cos\phi/r\sin\theta)\partial/\partial\phi] \\ &\quad - r\sin\theta\sin\phi[\sin\theta\cos\phi\partial/\partial r + (\cos\theta\cos\phi/r)\partial/\partial\theta - (\sin\phi/r\sin\theta)\partial/\partial\phi]\} \\ &= -i\hbar[(\cos^2\phi + \sin^2\phi)\partial/\partial\phi] = -i\hbar\partial/\partial\phi \dots ⑤ \quad \therefore \hat{L}_z^2 = -\hbar^2\partial^2/\partial\phi^2 \dots ⑥ \end{aligned} \quad \text{②, ④, ⑥より}$$

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2[(\sin^2\phi + \cos^2\phi)(\partial^2/\partial\theta^2 + \cot\theta\partial/\partial\theta + \cot^2\theta\partial^2/\partial\phi^2) + \partial^2/\partial\phi^2] \\ &= -\hbar^2[\partial^2/\partial\theta^2 + (\cos\theta/\sin\theta)\partial/\partial\theta + (1/\sin^2\theta)\partial^2/\partial\phi^2] \quad [\because 1 + \cot^2\theta = \operatorname{cosec}^2\theta = 1/\sin^2\theta] \\ &= -\hbar^2[(1/\sin\theta)\partial(\sin\theta\partial/\partial\theta)/\partial\theta + (1/\sin^2\theta)\partial^2/\partial\phi^2] \equiv -\hbar^2\Lambda \dots ⑦ \end{aligned} \quad \text{となる。よって前ページの}$$

④式を $\Lambda Y = -\lambda Y$ と書けば, \hat{L}^2 の固有値方程式の形は $\hat{L}^2 Y \equiv -\hbar^2 \Lambda Y = -\hbar^2(-\lambda Y) = \lambda \hbar^2 Y$
 $\therefore \hat{L}^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (\ell=0, 1, 2, \dots) \dots ⑧$ したがって, 角運動量の2乗の固有

関数は球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ で, その固有値は $\ell(\ell+1)\hbar^2$ である。また, ⑤と前ページの⑥から

$$\hat{L}_z \Phi_m(\phi) = -i\hbar\partial\Phi_m/\partial\phi = -i\hbar(im)\Phi_m = m\hbar\Phi_m(\phi) \dots ⑩ \quad \therefore \hat{L}_z Y_{\ell m}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{\ell m}(\theta, \phi) \dots ⑩$$

よって \hat{L}_z の固有関数は $\Phi_m(\phi)$ と $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ で, 固有値は $m\hbar$ であることが分かる。 $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$ ゆえ, 一つの ℓ の値に対して m は $2\ell+1$ 個の値を取りうる。これを「 \hat{L}^2 の固有値 $\ell(\ell+1)\hbar^2$, すなわち角運動量の大きさ $|L| = [\ell(\ell+1)]^{1/2}\hbar$ は $2\ell+1$ 重に縮退している」という。たとえば $\ell=2$ に対して degeneracy \hat{L}^2 の固有値は $2(2+1)\hbar^2 = 6\hbar^2$, $|L| = 6^{1/2}\hbar$ で, L の z 成分は $L_z = m\hbar = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar$ のどれかである (5重に縮退)。

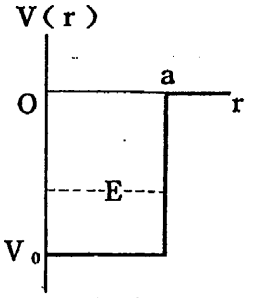
これは角運動量ベクトル L が特定の方向しか取りえないことを意味し, 方向量子化という。

★ 角運動量演算子の交換関係を調べる。 $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y, \dots ⑪$
 $\therefore [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] = [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] - [y\hat{p}_z, x\hat{p}_z] - [z\hat{p}_y, z\hat{p}_x] + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z]$

$$\begin{aligned} &= y[\hat{p}_z, z]\hat{p}_x + \hat{p}_z[z, \hat{p}_x]x = y(-i\hbar)\hat{p}_x + \hat{p}_z(i\hbar)x = i\hbar(x\hat{p}_z - y\hat{p}_x) = i\hbar\hat{L}_z \quad (\text{etc.}) \\ \hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad \text{と} \quad \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z \quad \text{は交換可能である。} \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \dots ⑫ \\ \therefore [\hat{L}^2, \hat{L}_x] &= [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_x^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = \hat{L}_x^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_x^2 \\ &= \hat{L}_x(\hat{L}_x\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_x) + (\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x)\hat{L}_x + \hat{L}_y(\hat{L}_y\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_y) + (\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z)\hat{L}_z \\ &= \hat{L}_x[\hat{L}_x, \hat{L}_x] + [\hat{L}_x, \hat{L}_y]\hat{L}_x + \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_z \\ &= \hat{L}_x(-i\hbar\hat{L}_y) + (-i\hbar\hat{L}_y)\hat{L}_x + \hat{L}_y(i\hbar\hat{L}_x) + (i\hbar\hat{L}_z)\hat{L}_z = 0 \quad \therefore [\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0 \quad (\text{etc.}) \end{aligned}$$

★ 二つの力学量 F, G の演算子を \hat{F}, \hat{G} とする。§13で x と p の不確定性関係 $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}|i[\hat{x}, \hat{p}]| = \frac{1}{2}\hbar$ を導いた方式にならって, 状態 ψ における F, G の期待値と標準偏差を $\langle F \rangle = (\psi, \hat{F}\psi), \langle G \rangle = (\psi, \hat{G}\psi), (\Delta F)^2 = \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2, (\Delta G)^2 = \langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2$ で与え, $\varphi = \{(\hat{F} - \langle F \rangle)\eta + i(\hat{G} - \langle G \rangle)\}\psi$ から実数 η の関数 $f(\eta) = (\varphi, \varphi) = (\Delta F)^2\eta^2 + \langle i[\hat{F}, \hat{G}] \rangle \eta + \langle \Delta G \rangle^2 \geq 0$ を作れば $\langle i[\hat{F}, \hat{G}] \rangle^2 - 4(\Delta F)^2(\Delta G)^2 \leq 0$ より関係式 $\Delta F \Delta G \geq \frac{1}{2}|\langle i[\hat{F}, \hat{G}] \rangle|$ が得られる。 $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$, すなわち \hat{F} と \hat{G} が可換なら $\Delta F \Delta G \geq 0$ が成り立ち, $\Delta F = 0$ かつ $\Delta G = 0$ を与える状態が存在するから \hat{F} と \hat{G} の固有値の同時精密測定が可能になる。

★ 球対称ポテンシャルの例として三次元の井戸型ポテンシャル $V(r) = -V_0$ ($r < a$), $V(r) = 0$ ($r > a$) を考える。原子核を構成している陽子と中性子を核子といい、核子間に作用する力を核力という。一つの核子が他の核子から受ける核力の総和はこのようなポテンシャルで近似することができる。a は原子核の半径に相当する。動径部分の方程式



(1/r²)d(r²dR/dr)/dr + [(2m/ħ²)[E - V(r)] - ℓ(ℓ+1)/r²]R = 0 は $d^2R/dr^2 + (2/r)dR/dr + [2m(V_0 - |E|)/ħ^2 - ℓ(ℓ+1)/r^2]R = 0$ ($r < a$) ...① および

$d^2R/dr^2 + (2/r)dR/dr - [2m|E|/ħ^2 + ℓ(ℓ+1)/r^2]R = 0$ ($r > a$) ...② $α^2 = 2m(V_0 - |E|)/ħ^2$ ($α > 0$ とする)

として①の両辺を $α^2$ で割り、 $ρ = αr$ とおくと $d^2R/dρ^2 + (2/ρ)dR/dρ + [1 - ℓ(ℓ+1)/ρ^2]R = 0$...③

この形の方程式の独立な二つの特別解 $R(ρ)$ として球ベッセル関数 $j_ℓ(ρ)$ と球ノイマン関数 $n_ℓ(ρ)$ があつた。spherical Bessel (& Neumann) function (物理数学Ⅰ)

$j_ℓ(ρ) = (π/2ρ)^{1/2} J_{ℓ+1/2}(ρ) = (-1)^ℓ d^ℓ(\sin ρ/ρ)/dρ^ℓ$...④, $J_{ℓ+1/2}(ρ)$ はベッセル関数。具体形は Bessel function

$j_0(ρ) = \sin ρ/ρ$, $j_1(ρ) = \sin ρ/ρ^2 - \cos ρ/ρ$, $j_2(ρ) = (3/ρ^3 - 1/ρ)\sin ρ - 3\cos ρ/ρ^2$, ...で、次の近似式と漸近式 $j_ℓ(ρ) \rightarrow [2^ℓ ℓ! / (2ℓ+1)!] ρ^ℓ$...⑤ $j_ℓ(ρ) \rightarrow (1/ρ)\sin(ρ - ℓπ/2)$...⑥ が成り立つ。

$n_ℓ(ρ) = (π/2ρ)^{1/2} N_{ℓ+1/2}(ρ) = (-1)^{ℓ+1} d^ℓ(\cos ρ/ρ)/dρ^ℓ$...⑤, $N_{ℓ+1/2}(ρ)$ はノイマン関数。具体形は Neumann function

$n_0(ρ) = -\cos ρ/ρ$, $n_1(ρ) = -\cos ρ/ρ^2 - \sin ρ/ρ$, $n_2(ρ) = (1/ρ - 3/ρ^3)\cos ρ - 3\sin ρ/ρ^2$, ...で

近似式と漸近式 $n_ℓ(ρ) \rightarrow (2ℓ)! / 2^ℓ ℓ! ρ^{ℓ+1}$...⑦, $n_ℓ(ρ) \rightarrow -(1/ρ)\cos(ρ - ℓπ/2)$...⑧ が成り立つ。

ただし、 $\lim_{r \rightarrow 0} R(r)$ が収束する必要があるから $r < a$ での解は $R(r) = A j_ℓ(αr)$ ($ℓ = 0, 1, 2, \dots$) ...⑨

②の両辺を $β^2 = 2m|E|/ħ^2$ で割ると $(1/β^2)d^2R/dr^2 + (2/β^2r)dR/dr - [1 + ℓ(ℓ+1)/β^2r^2]R = 0$ ($β > 0$ とする)

$ρ = iβr$ とおくと、 $β^2r^2 = -ρ^2$ より $d^2R/dρ^2 + (2/ρ)dR/dρ + [1 - ℓ(ℓ+1)/ρ^2]R = 0$...⑩ これは

③と同形であるが、 $r > a$ の特別解として第一種の球ハンケル関数 $h_ℓ(ρ) = j_ℓ(ρ) + in_ℓ(ρ)$...⑪ が用いられる。具体形は、 $h_0(ρ) = j_0(ρ) + in_0(ρ) = \sin ρ/ρ - i\cos ρ/ρ = (\cos ρ + i\sin ρ)/iρ = e^{iρ}/iρ$

より $h_0(iβr) = e^{i(iβr)}/i(iβr) = -e^{-βr}/βr$, 同様にして $h_1(iβr) = i(1/βr + 1/β^2r^2)e^{-βr}$, $h_2(iβr) = (1/βr + 3/β^2r^2 + 3/β^3r^3)e^{-βr}$, ...。これらは境界条件 $\lim_{r \rightarrow \infty} R(r) = 0$ を満たしている。

$h_ℓ(ρ)$ の漸近式は、⑥, ⑧から $h_ℓ(ρ) \rightarrow (1/ρ)[\sin(ρ - ℓπ/2) - i\cos(ρ - ℓπ/2)] = e^{i(ρ - ℓπ/2)}/iρ$

$= -ie^{-iℓπ/2}e^{iρ}/ρ = -ie^{-iℓπ/2}e^{iρ}/ρ = (-i)^{ℓ+1}e^{iρ}/ρ$...⑫ 【 $\because e^{-iℓπ/2} = \cos \frac{1}{2}ℓπ - i\sin \frac{1}{2}ℓπ = -i$ 】

したがって、 $r > a$ での解は $R(r) = B h_ℓ(iβr) = B [j_ℓ(iβr) + in_ℓ(iβr)]$ ($ℓ = 0, 1, 2, \dots$) ...⑬

★ $ℓ = 0$ のとき、波動関数 $R(r)$ と $R'(r)$ は⑨, ⑬より $R(r) = A j_0(αr) = A \sin αr / αr$ ($r < a$) ...⑭

$R'(r) = A[(α \cos αr)αr - (\sin αr)α] / α^2 r^2 = A(αr \cos αr - \sin αr) / αr^2$ ($r < a$) ...⑮

$R(r) = B h_0(iβr) = -B e^{-βr} / βr$ ($r > a$) ...⑯, $R'(r) = -B[(-β e^{-βr})βr - e^{-βr}β] / β^2 r^2 = B(βr + 1)e^{-βr} / βr^2$...⑰

$r = a$ における連続条件より $R(a) = A \sin αa / αa = -B e^{-βa} / βa \therefore A β \sin αa = -B α e^{-βa}$...⑱

また $R'(a) = A(αa \cos αa - \sin αa) / αa^2 = B(βa + 1)e^{-βa} / βa^2 \therefore A β(αa \cos αa - \sin αa) = B α(βa + 1)e^{-βa}$...⑲

⑱ ÷ ⑲ から $(αa \cos αa - \sin αa) / \sin αa = -(βa + 1)$, $αa \cot αa = -βa \therefore \tan αa = -α/β$...⑳

この結果は §18 (一次元の井戸型ポテンシャル) で得られたものと同じであり、 $βa \tan αa = -αa$ として $X = αa (> 0)$, $Y = βa (> 0)$ とおき、 $Y = -\cot X$ と $X^2 + Y^2 = (α^2 + β^2)a^2 = 2mV_0 a^2 / ħ^2$ (円)との交点 (X_n, Y_n) から束縛状態のエネルギー準位 $|E_n|$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) の個数とその近似値を求めることができる。

斥力としての遠心力が作用する $ℓ = 1, 2, 3, \dots$ に対しても同様の方法で調べることができる (Schiff 参照)。

★ 量子力学でもよく用いるルジャンドルとベッセル関数の諸公式をまとめておく。記号はSchiffに準ずる。

① $\frac{d[(1-x^2)dP_\ell/dx]/dx + \ell(\ell+1)P_\ell = 0, \ell = 0, 1, 2, \dots$ (ルジャンドルの微分方程式) の解は $\frac{d[(1-x^2)dP_\ell/dx]/dx + \ell(\ell+1)P_\ell = 0$

② $P_\ell(x) = (1/2^\ell \ell!) d^\ell (x^2-1)^\ell / dx^\ell, -1 \leq x = \cos \theta \leq 1$ (ルジャンドルの多項式)

$P_0(x) = 1, P_1(x) = x = \cos \theta, P_2(x) = (3x^2-1)/2 = (3\cos 2\theta + 1)/4, P_3(x) = (5x^3-3x)/2 = (5\cos 3\theta + 3\cos \theta)/8, P_4(x) = (35x^4-30x^2+3)/8 = (35\cos 4\theta + 20\cos 2\theta + 9)/64, \dots$

③ $\frac{d[(1-x^2)dP_\ell^m/dx]/dx + [\ell(\ell+1) - m^2/(1-x^2)]P_\ell^m = 0, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$ (ルジャンドルの陪微分方程式) の解は $\frac{d[(1-x^2)dP_\ell^m/dx]/dx + [\ell(\ell+1) - m^2/(1-x^2)]P_\ell^m = 0$

④ $P_\ell^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2} d^{|m|} P_\ell(x) / dx^{|m|}$ (ルジャンドルの陪関数) ただし, $P_\ell^0(x) = P_\ell(x)$

$P_1^{-1}(x) = (1-x^2)^{1/2}, P_2^{-1}(x) = 3x(1-x^2)^{1/2}, P_2^2(x) = 3(1-x^2),$

$P_3^{-1}(x) = 3(1-x^2)^{1/2}(5x^2-1)/2, P_3^2(x) = 15x(1-x^2), P_3^3(x) = 15(1-x^2)^{3/2}, \dots$

⑤ $\int_{-1}^1 P_\ell^m(x) P_{\ell'}^n(x) dx = [2/(2\ell+1)] (\ell+|m|)! / (\ell-|m|)! \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} = 0 (\ell \neq \ell'), = 1 (\ell = \ell')$ (直交関係式)

⑥ $\frac{1}{\sin \theta} \partial(\sin \theta \partial Y_{\ell m} / \partial \theta) / \partial \theta + (1/\sin^2 \theta) \partial^2 Y_{\ell m} / \partial \phi^2 + \ell(\ell+1) Y_{\ell m} = 0$ (角部分の波動方程式) の解は $\frac{1}{\sin \theta} \partial(\sin \theta \partial Y_{\ell m} / \partial \theta) / \partial \theta + (1/\sin^2 \theta) \partial^2 Y_{\ell m} / \partial \phi^2 + \ell(\ell+1) Y_{\ell m} = 0$

⑦ $Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^{m+|m|} / 2^{1/2} [(2\ell+1)/4\pi] (\ell-|m|)! / (\ell+|m|)! P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi}$ (球面調和関数)

$Y_{0,0} = (4\pi)^{-1/2}, Y_{1,0} = (3/4\pi)^{1/2} \cos \theta, Y_{1,\pm 1} = \mp (3/8\pi)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}, Y_{2,0} = (5/16\pi)^{1/2} \times (3\cos^2 \theta - 1), Y_{2,\pm 1} = \mp (15/8\pi)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}, Y_{2,\pm 2} = (15/32\pi)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi},$

$Y_{3,0} = (7/16\pi)^{1/2} (5\cos^3 \theta - 3\cos \theta), Y_{3,\pm 1} = \mp (21/64\pi)^{1/2} (5\cos^2 \theta - 1) \sin \theta e^{\pm i\phi},$

$Y_{3,\pm 2} = (105/32\pi)^{1/2} \cos \theta \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}, Y_{3,\pm 3} = \mp (35/64\pi)^{1/2} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi}, \dots$

⑧ $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell' m'}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} Y_{\ell m}^* Y_{\ell' m'} d(\cos \theta) d\phi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}, \ell = \ell' \text{ かつ } m = m'$ のときだけ 1 (直交規格化関係式)

⑨ $d^2 Z / d\rho^2 + (1/\rho) dZ / d\rho + (1 - \nu^2 / \rho^2) Z = 0, \nu \geq 0$ (ベッセルの微分方程式) の特別解 $Z_\nu(\rho)$ として互いに一次独立な ν 次のベッセル関数 $J_\nu(\rho)$ とノイマン関数 $N_\nu(\rho)$ を用いる。

⑩ $J_\nu(\rho) = \sum_{m=0}^\infty [(-1)^m / (m! \Gamma(\nu + m + 1))] (\rho/2)^{\nu+2m}, N_\nu(\rho) = [J_\nu(\rho) \cos \nu \pi - J_{-\nu}(\rho)] / \sin \nu \pi$

$\Gamma(\nu + m + 1)$ はガンマ関数で $\Gamma(s) = \int_0^\infty e^{-x} x^{s-1} dx (s > 0), \Gamma(s+1) = s \Gamma(s) (s \text{ は任意})$

⑪ $d^2 R / d\rho^2 + (2/\rho) dR / d\rho + [1 - \ell(\ell+1) / \rho^2] R = 0$ の解は次数 $\nu = \ell + 1/2$ の $J_\nu(\rho), N_\nu(\rho)$ を用いて

⑫ $j_\ell(\rho) = (\pi/2\rho)^{1/2} J_{\ell+1/2}(\rho) = (-1)^\ell d^\ell (\sin \rho / \rho) / d\rho^\ell, \ell = 0, 1, 2, \dots$ (球ベッセル関数)

$j_0(\rho) = \sin \rho / \rho, j_1(\rho) = \sin \rho / \rho^2 - \cos \rho / \rho, j_2(\rho) = (3/\rho^3 - 1/\rho) \sin \rho - 3\cos \rho / \rho^2, \dots$

$j_\ell(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} [2^\ell \ell! / (2\ell+1)!] \rho^\ell$ (近似式), $j_\ell(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} (1/\rho) \sin(\rho - \ell\pi/2)$ (漸近式)

⑬ $n_\ell(\rho) = (\pi/2\rho)^{1/2} N_{\ell+1/2}(\rho) = (-1)^{\ell+1} d^\ell (\cos \rho / \rho) / d\rho^\ell$ (球ノイマン関数)

$n_0(\rho) = -\cos \rho / \rho, n_1(\rho) = -\cos \rho / \rho^2 - \sin \rho / \rho, n_2(\rho) = (1/\rho - 3/\rho^3) \cos \rho - 3\sin \rho / \rho^2, \dots$

$n_\ell(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} (2\ell)! / 2^\ell \ell! \rho^{\ell+1}$ (近似式), $n_\ell(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} -(1/\rho) \cos(\rho - \ell\pi/2)$ (漸近式)

また, $j_\ell(\rho)$ と $n_\ell(\rho)$ を正弦関数と余弦関数に対応させて Euler の公式で定義した次の関数も ⑪ の解である。

⑭ $h_\ell^{(1)}(\rho) = j_\ell(\rho) + i n_\ell(\rho)$ (第一種の球ハンケル関数)

$h_0^{(1)}(\rho) = j_0(\rho) + i n_0(\rho) = -i e^{i\rho} / \rho, h_1^{(1)}(\rho) = j_1(\rho) + i n_1(\rho) = -(i/\rho^2 + 1/\rho) e^{i\rho},$

$h_2^{(1)}(\rho) = j_2(\rho) + i n_2(\rho) = [i(1/\rho - 3/\rho^3) - 3/\rho^2] e^{i\rho}, \dots$

⑮ $h_\ell^{(2)}(\rho) = j_\ell(\rho) - i n_\ell(\rho)$ (第二種の球ハンケル関数) 具体形は上式の i を $-i$ でおきかえる。

⑯ $h_\ell^{(1)}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} (-i)^{\ell+1} e^{i\rho} / \rho, h_\ell^{(2)}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} i^{\ell+1} e^{-i\rho} / \rho$ (漸近式)

(以上)

§ 23 波動力学から量子力学へ — 運動法則の拡張

★ 波動力学では、その法則自身が位置座標または運動量に密着した表現形式をとっていた。この足かせを取り外し、力学量一般を扱うのに便利な理論体系を構成してみよう。波動力学から量子力学への前進である。

二つの関数 $\psi(r), \varphi(r)$ のフーリエ変換をそれぞれ $\tilde{\psi}(p), \tilde{\varphi}(p)$ として、次の関数内積を導入する。
(物理学Ⅰ)

$$(\varphi, \psi) = \int \int \varphi^*(r) \psi(r) d^3 r, \quad (\tilde{\varphi}, \tilde{\psi}) = \int \int \tilde{\varphi}^*(p) \tilde{\psi}(p) d^3 p$$

$$(\varphi, \psi)^* = (\psi, \varphi) \text{ が成り立つ。【}\because (\text{左辺}) = (\int \int \varphi^* \psi d^3 r)^* = \int \int \varphi \psi^* d^3 r = \int \int \tilde{\psi}^* \tilde{\varphi} d^3 p = (\text{右辺})\text{】}$$

また、パーセバルの等式の一般化 $(\varphi, \psi) = (\tilde{\varphi}, \tilde{\psi})$ が成り立つ。

$$\text{【}\because \psi(r) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \int \tilde{\psi}(p) e^{i p \cdot r / \hbar} d^3 p, \quad \tilde{\varphi}(p) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \int \varphi(r) e^{-i p \cdot r / \hbar} d^3 r \text{ より}$$

$$(\tilde{\varphi}, \tilde{\psi}) = \int \int \tilde{\varphi}^*(p) \tilde{\psi}(p) d^3 p = \int \int [(2\pi\hbar)^{-3/2} \int \int \varphi^*(r) e^{-i p \cdot r / \hbar} d^3 r] \tilde{\psi}(p) d^3 p$$

$$= \int \int \varphi^*(r) [(2\pi\hbar)^{-3/2} \int \int \tilde{\psi}(p) e^{i p \cdot r / \hbar} d^3 p] d^3 r = \int \int \varphi^*(r) \psi(r) d^3 r = (\varphi, \psi)\text{】}$$

$(\varphi, \psi) = 0$ であれば、 φ と ψ は直交するという。規格化条件は $(\psi, \psi) = \int \int \psi^* \psi d^3 r = \int \int |\psi|^2 d^3 r = 1$

★ 内積記法を用いると、座標表示の波動関数と運動量表示の波動関数は、それぞれ次のように表わせる。

$$\psi(r, t) = (v_r, \tilde{\psi}), \quad v_r(p) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{-i p \cdot r / \hbar} \text{ は 位置座標演算子 } \hat{r} = i\hbar \partial / \partial p \text{ の固有関数。}$$

$$\tilde{\psi}(p, t) = (u_p, \psi), \quad u_p(r) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i p \cdot r / \hbar} \text{ は 運動量演算子 } \hat{p} = i^{-1}\hbar \nabla \text{ の固有関数。}$$

$$\text{【}\because (v_r, \tilde{\psi}) = \int \int v_r^*(p) \tilde{\psi}(p, t) d^3 p = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \int \tilde{\psi}(p, t) e^{i p \cdot r / \hbar} d^3 p = \psi(r, t)\text{】}$$

$$(u_p, \psi) = \int \int u_p^*(r) \psi(r, t) d^3 r = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \int \psi(r, t) e^{-i p \cdot r / \hbar} d^3 r = \tilde{\psi}(p, t)\text{】}$$

従って第三法則を内積で表わすと $|\psi(r, t)|^2 d^3 r = |(v_r, \tilde{\psi})|^2 d^3 r, |\tilde{\psi}(p, t)|^2 d^3 p = |(u_p, \psi)|^2 d^3 p$

この表式を眺め、固有関数 v_r と u_p に与えた物理的解釈を思い出せば、前者は「 $\tilde{\psi}(p, t)$ によって表わされる状態において、 $v_r(p)$ によって表わされる状態を見いだす確率は $|(v_r, \tilde{\psi})|^2$ に比例する」、そして後者は「 $\psi(r, t)$ によって表わされる状態において、 $u_p(r)$ によって表わされる状態を見いだす確率は $|(u_p, \psi)|^2$ に比例する」と読める。そこで量子力学では第三法則を拡張して、次のように一般的な確率規定を設定する。

★ 「 ψ によって表わされる状態において、 φ によって表わされる状態を見いだす確率は $|\langle \varphi, \psi \rangle|^2$ に比例する」

この確率規定と重ね合わせの原理が、粒子の運動状態を記述する波動関数に対する量子力学の基本的な設定である。内積表現 (φ, ψ) は「実験装置(自然界)で準備された状態 ψ において、実験(観測)によって状態 φ が検出される確率振幅」を表わしている。実験(観測)の検出対象である状態 φ を固有状態というが、物理的に意味のある固有状態を抽出するために、力学量演算子一般に対して次のような基本的設定を行なう。

★ 「力学量は、波動関数に作用する線形自己共役演算子によって表わされる」

線形性と自己共役性については後述する。力学量 F を表わす演算子 \hat{F} が与えられたとすれば、 \hat{F} は必ず固有値問題 $\hat{F} u_i = \lambda_i u_i$ をもつ。 λ_i は i 番目固有値、 u_i は λ_i に属する固有関数である。量子力学はこの数学的状況を「固有関数 u_i によって表わされる状態(固有状態)では、演算子 \hat{F} が表わす力学量 F は確定して値 λ_i をとる」と読む。固有関数に対するこの説明と上記の確率規定を組み合わせれば「状態 ψ において力学量 F が値 λ_i をとる確率は $|\langle u_i, \psi \rangle|^2$ に比例する」という結論が出てくる。これで第三法則の一般化が完成した。

★ 量子力学では、関数内積 (φ, ψ) をディラックが用いた $\langle \varphi | \psi \rangle$ という記号で表わすことが多い。 $\langle \varphi |$ をブラ(ベクトル)、 $| \psi \rangle$ をケット(ベクトル)という。合わせてブラケット $\langle \rangle$ (括弧) というシャレである。
bra-vector ket-vector bracket

★ 力学量演算子 \hat{F} に対して要求した線形性と自己共役性の定義とその物理的背景は次のようなものである。

(1) 演算子の線形性：関数 ψ, φ に対して $\hat{F}(a\psi + b\varphi) = a\hat{F}\psi + b\hat{F}\varphi$ が成り立つとき、演算子 \hat{F} は線形であるという (a, b は定数)。たとえば $\hat{r} = i\hbar \partial/\partial p, \hat{p} = i^{-1}\hbar \nabla, \hat{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(r)$ は明らかに線形演算子である。線形性の必要性は重ね合わせの原理から出ている。

linear operator

(2) 演算子の自己共役性：演算子 \hat{F} と関数 ψ, φ に対して $(\psi, \hat{F}\varphi)^* = (\hat{F}\varphi, \psi) = (\varphi, \hat{F}\psi)$ が成り立つとき、 \hat{F} を自己共役演算子 (または自己随伴演算子, またはエルミート演算子) という。

self-conjugate operator (self-adjoint operator, Hermite operator)

たとえば、 \hat{F} として運動量演算子 $\hat{p} = i^{-1}\hbar \nabla = i^{-1}\hbar \partial/\partial r$ を考えると

$$(\hat{p}_x \varphi, \psi) - (\varphi, \hat{p}_x \psi) = \int \int \int_{\Omega} (\hat{p}_x^* \varphi^*) \psi d^3 r - \int \int \int_{\Omega} \varphi^* \hat{p}_x \psi d^3 r = i\hbar \int \int \int_{\Omega} (\psi \partial \varphi^* / \partial x + \varphi^* \partial \psi / \partial x) dx dy dz$$

$$= i\hbar \int \int_{\Omega} [\psi \varphi^* - \int (\partial \psi / \partial x) \varphi^* dx] dy dz + i\hbar \int \int_{\Omega} \varphi^* (\partial \psi / \partial x) dx dy dz = i\hbar \int \int_{S_x} \psi \varphi^* dy dz = i\hbar \int \int_{S_x} \psi \varphi^* dS_x$$

より $(\hat{p}_x \varphi, \psi) - (\varphi, \hat{p}_x \psi) = i\hbar \int \int_{S_x} \psi \varphi^* n dS$ となるが、 S を全空間領域 Ω を包む無限遠閉曲面とすれば右辺の面積分はゼロ (境界条件) ゆえ $(\hat{p}_x \varphi, \psi) = (\varphi, \hat{p}_x \psi)$ 、 $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(r)$ も同様にして

$$(\hat{H} \varphi, \psi) - (\varphi, \hat{H} \psi) = \int \int \int_{\Omega} [-(\hbar^2/2m)\nabla^2 \varphi^* + V(r)\varphi^*] \psi d^3 r - \int \int \int_{\Omega} \varphi^* [-(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(r)] \psi d^3 r$$

$$= -(\hbar^2/2m) \int \int \int_{\Omega} (\psi \nabla^2 \varphi^* - \varphi^* \nabla^2 \psi) d^3 r = -(\hbar^2/2m) \int \int_{S_x} (\psi \nabla \varphi^* - \varphi^* \nabla \psi) \cdot n dS = 0$$

【グリーンの定理】したがって、右辺をゼロにする境界条件の下では、 \hat{p} も \hat{H} も自己共役演算子になることが分かる。これらの境界条件は波束関数や束縛状態関数に対しては、いつも成立しているものである。

★ 自己共役演算子 \hat{F} の特性は固有値の実数性と固有関数の直交性にある。再び \hat{F} の固有値問題 $\hat{F} u_i = \lambda_i u_i$ を考えよう。ただし、固有関数 u_i はすべて $(u_i, u_i) = 1$ に規格化されているものとする。

\hat{F} の自己共役性から $(\hat{F} u_i, u_i) = (u_i, \hat{F} u_i)$ が成り立つ。(左辺) $= (\lambda_i u_i, u_i) = \lambda_i^* (u_i, u_i) = \lambda_i^*$ 、(右辺) $= (u_i, \lambda_i u_i) = \lambda_i (u_i, u_i) = \lambda_i \therefore \lambda_i = \lambda_i^*$ 、すなわち自己共役演算子の固有値は実数である。

また、 λ_i とは異なる固有値 λ_j に属する固有関数を u_j とすると $(\hat{F} u_i, u_j) = (u_i, \hat{F} u_j)$ が成り立つ。(左辺) $-(右辺) = (\lambda_i u_i, u_j) - (u_i, \lambda_j u_j) = (\lambda_i - \lambda_j)(u_i, u_j) = 0, \lambda_i \neq \lambda_j$ ゆえ $(u_i, u_j) = 0$

したがって、相異なる固有値に属する固有関数は互いに直交していることが分かる。これは状態 u_i において状態 u_i を見いだす確率 $|(u_i, u_i)|^2$ はゼロ、すなわち「力学量 F が値 λ_j をとれば同時に λ_i をとることはない」ことを意味している。規格化と一緒にして書くと $(u_i, u_j) = \delta_{ij} = 1$ (for $i=j$), $= 0$ (for $i \neq j$)
このような固有関数列 $\{u_1, u_2, u_3, \dots\} = \{u_i\}$ を直交規格化関数系という。

orthonormal function system (物理学I)

★ 力学量演算子には線形性と自己共役性のほかに、もう一つ固有関数の完備性という重要な性質が必要である。

(3) 任意の関数 ψ を $\psi = \sum_i c_i u_i$ のように展開できるとき、固有関数列 $\{u_i\}$ は完備系をなす (または完全系である) とい

いい、完備系を固有関数としてもつ力学量はオブザーバブル (観測可能な量) であるという。

observable

この展開式を重ね合わせの原理の眼で見れば、「 ψ で表わされる力学系では固有状態 u_1, u_2, \dots のすべてが実現可能であること」を意味しているのは明らかだろう。したがって、完備直交規格化関数系において力学量 F の測定を行なえば、固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ のどれか一つが測定値として必ず得られるはずである。これが完備性を要求する物理的背景である。もちろん「任意の関数」を上記のように展開できるか否かの判定には数学上の困難さがつきまとう。しかし、実際の物理の問題に現われてくる関数系については展開が成り立つものと考えてよい場合が多い。次に、オブザーバブルな力学量 F の期待値と、その時間的変化を調べてみよう。

★ $\psi = \sum_i c_i u_i$ における展開係数 c_i の物理的意味を考える。特定の固有関数 u_i と両辺との内積をつくると
 $(u_i, \psi) = (u_i, \sum_j c_j u_j) = \sum_j c_j (u_i, u_j) = \sum_j c_j \delta_{ij} = c_i \therefore c_i = (u_i, \psi)$ すなわち確率規定によれば
 $|c_i|^2 = |(u_i, \psi)|^2$ は「状態 ψ において力学量 F を測定したとき、値 λ_i が得られる確率」に等しい。 c_i は
 $\sum_i |c_i|^2 = \sum_i c_i^* c_i = \sum_i (u_i, \psi)^* c_i = \sum_i (\psi, u_i) c_i = (\psi, \sum_i c_i u_i) = (\psi, \psi) = 1$ に規格化しておく。
 $|c_i|^2$ に確率という意味がついたので、状態 ψ における力学量 F の測定値 $\{\lambda_i\}$ の確率論的平均値(期待値)は

$$\langle F \rangle = \sum_i \lambda_i |c_i|^2 = \sum_i \lambda_i c_i^* c_i = \sum_i \lambda_i (u_i, \psi)^* c_i = \sum_i \lambda_i (\psi, u_i) c_i = \sum_i (\psi, \lambda_i u_i) c_i$$

$$= \sum_i (\psi, \hat{F} u_i) c_i = (\psi, \hat{F} \sum_i c_i u_i) = (\psi, \hat{F} \psi)$$

粒子の位置 r と運動量 p の期待値の自然な拡張になっている。力学系の時間的发展を与える動力学的法則は、
 もちろん $i\hbar \partial \psi / \partial t = \hat{H} \psi$ である。これを用いて一般の力学量 F の期待値 $\langle F \rangle$ の時間的な変動を求めると
 $d\langle F \rangle / dt = (\partial \psi / \partial t, \hat{F} \psi) + (\psi, \hat{F} \partial \psi / \partial t) = (i^{-1} \hbar^{-1} \hat{H} \psi, \hat{F} \psi) + (\psi, \hat{F} i^{-1} \hbar^{-1} \hat{H} \psi)$

$$= -i^{-1} \hbar^{-1} (\psi, \hat{H} \hat{F} \psi) + i^{-1} \hbar^{-1} (\psi, \hat{F} \hat{H} \psi) \quad \text{【第一項には } \hat{H} \text{ の自己共役性を用いた】}$$

$$= i^{-1} \hbar^{-1} \{ (\psi, \hat{F} \hat{H} \psi) - (\psi, \hat{H} \hat{F} \psi) \} = i^{-1} \hbar^{-1} (\psi, [\hat{F}, \hat{H}] \psi), \text{ ただし } [\hat{F}, \hat{H}] \equiv \hat{F} \hat{H} - \hat{H} \hat{F}$$

\hat{F} と \hat{H} が交換可能(可換)なら $[\hat{F}, \hat{H}] = 0, d\langle F \rangle / dt = 0, \langle F \rangle = \text{一定}$ であり、力学量 F を保存量という。

★ 状態と力学量についての基本的設定は以上の通りである。これに既に設定した力学量の演算子性を規定する正準交換関係(量子条件) $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}, [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 (i, j = 1, 2, 3)$ をつけ加えれば量子力学の理論体系は大筋において完成したことになる。また、任意の力学量間の不確定性関係も議論できる。

★ 展開式 $\psi = \sum_i c_i u_i$ の係数 $c_i = (u_i, \psi)$ 全体は ψ と 1対1対応で決められるので $(\psi) = (c_1, c_2, \dots)$ は波動関数の一種の表示であり、量子力学的粒子の運動状態を表わす多次元ベクトルとして扱うことができる。すなわち、量子力学的状態は複素数上につくられた無限次元のベクトル空間の中のベクトルによって表現される。この空間をヒルベルト空間(無限次元のユークリッド空間)という。

Hilbert space

★ いま、 \hat{F} とは別の力学量演算子 \hat{G} をとって関数 $\varphi_i = \hat{G} u_i$ をつくり、これを関数列 $\{u_i\}$ で展開すると
 $\hat{G} u_i = \sum_j G_{ij} u_j$, 展開係数 $G_{ij} = (u_i, \hat{G} u_j)$ である。 G_{ij} を行列要素とする行列 (G_{ij}) を演算子 \hat{G} の $\{u_i\}$ による行列表現という。線形演算子 \hat{G}, \hat{H}, \dots の和や差 $\hat{G} \pm \hat{H}$ および積 $\hat{G} \hat{H}$ などは、すべて通常の計算規則による行列 $(G), (H), \dots$ の和や差および積に置き換えられる。自己共役性は行列のエルミート性になる($G_{ij}^* = G_{ji}$)。正準交換関係(量子条件)は、位置座標行列 (x) と運動量行列 (p) の交換不可能性を表わす交換関係 $(x)(p) - (p)(x) = i\hbar(1)$ に変わる。(1)は単位行列を表わす。【1925年、ハイゼンベルクは、(授業で述べた)リッツの結合則 $\nu_{ij} = \nu_{in} + \nu_{nj}$ に直結するボーアの仮説 $\hbar \nu_{ij} = |E_i - E_j|$ を忠実に再現するには、位置座標や運動量などの力学量が——通常の数ではなく——積の演算が一般に交換不可能な「行列」でなければならないという結論に到達していたのであるが、その理論体系を行列力学という。】

可換でない演算子 $([\hat{F}, \hat{G}] \neq 0)$ の行列表現は、やはり可換にはならない $[(F)(G) \neq (G)(F)]$ 。さらに $\hat{F} u_i = \lambda_i u_i, (u_i, u_j) = \delta_{ij}$ より、 $F_{ij} = (u_i, \hat{F} u_j) = (u_i, \lambda_j u_j) = \lambda_j (u_i, u_j) = \lambda_j \delta_{ij}$ となるから、 \hat{F} の関数列による \hat{F} 自身の行列表現は対角行列 $(F) = (\lambda_i \delta_{ij})$ を与える。したがって、たとえば固有値方程式 $\hat{F} u_i = \lambda_i u_i$ または $\hat{H} u = E u$ を解くことは、行列 (F) または (H) の対角化問題と同等である。このようにして、「波動力学」と「行列力学」は、より一般的な「量子力学」へと統合されていった。

wave mechanics matrix mechanics quantum mechanics

★ 以上が波動力学～行列力学～量子力学の「起承」であり、あらすじである。その「転結」については、「厳しさの中に優しさを、優しさの中に厳しさを」をモットーにしている豊田先生が分かりやすく素晴らしい講義を展開して下さるはずだから期待してほしい。最後に、アインシュタインたちの問題提起に答えておこう。

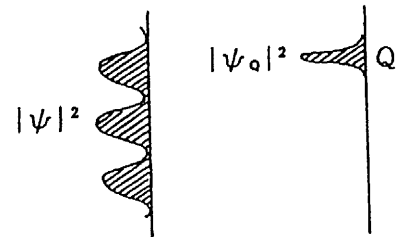
§ … エピローグ—量子力学における観測問題

epilogue (おわり)

Y: 量子力学の論理構成はすごいですね! そろそろ、観測問題と先生の観測理論について教えてください。

N: まず、これまでの話をまとめておこう。波動関数 ψ の絶対値二乗 $|\psi|^2$ が粒子の存在確率密度であるという解釈に従えば、量子力学的粒子の干渉実験を無理なく説明することができる。Xページの衝立の右側には小孔A, Bから出た φ_A と φ_B の重ね合わせ $\psi = \varphi_A + \varphi_B$ があり、スクリーンに向かって広がっていくが、これは粒子自身が広がることを意味しない。確率分布 $|\psi|^2$ が広がり、粒子がどこにいるか分からなくなるだけだ。粒子1個の干渉実験では、私たちは粒子がスクリーン上のどこにくるか、前もって知らない。だが、干渉実験を多数回実施すれば、存在確率の大きいところ、すなわち $|\psi|^2$ 分布の山の位置に粒子が到着する回数は多く、谷の位置にやってくる粒子の数は少ない。したがって、その画面を集めて重ね焼きすれば干渉縞が現われるのは当然だ。重ね焼きした画面の粒子分布 $P_{A,B}$ が $|\psi|^2$ に比例することも理解できるだろう。分布 $P_{A,B}$ は前もって分かっているものだ。一見矛盾するような粒子と波動の二重性という量子力学的粒子の基本的性質は、確率振幅という意味をもつ波動関数によって正しく記述されることが分かった。これが「量子力学的粒子・波動とは何ものであるか」という設問に対する解答であり、結論だ。

Y: 分かりました。ところで、粒子1個の干渉実験について理解し難いことがあります。粒子の到着を検出してしまえば、もはや粒子は到着点Q以外のところにはいません。とすれば、粒子の存在確率密度もQ点以外ではゼロになっているはずですが。したがって、粒子の到着検出という測定操作は波動関数に対して $\psi \rightarrow \psi_Q$ という急激な変化を与えることになりませんか。粒子の運動状態を表わす波動関数が、測定操作によってこのように大きな変化を受けるとするのは驚きです。理由は分かっているのですか?



N: その変化を「測定による波動関数の収縮」という。これは非因果的かつ確率的变化であり、しかも排他的な確率事象だ。初期分布 $\psi(x, 0)$ が決まっても、スクリーン上のどの点で検出されるかは前もって分からず、Q点で見つかれば他の点Q'で見つかることはない。これに対して波動現象は通常因果的で、波の初期分布を与えれば、その後の変動はすべて決まっています。予測可能である。量子力学的波動の波動関数もシュレディンガー方程式に従って変動するが、やはり因果的な変動を行なう。

Y: 面倒な話になってきましたね。それでは、測定過程は量子力学の適用対象ではないということでしょうか?

N: 本来的には、やはり適用対象であるというべきだろう。しかし厄介な問題だ。測定過程が量子力学の適用対象であるとするれば、測定による波動関数の収縮をどのように説明したらよいか? まさに、この問題をめぐって60年以上もの間、厳しい論争が続けられてきた。この種の問題を量子力学における「観測問題」という。観測問題に解答を与えようとするものが「観測理論」だ。

theory of measurement

Y: 観測問題とはそういうものだったのですか。しかし、測定過程が量子力学によって説明できないとすれば量子力学の理論体系には自己完結性がないという重大な事態が生じますね。それでは困るでしょう。

N: 困るよ。だから、観測理論は量子力学の理論体系の自己完結性を保証しようとする努力でもある。その問題意識は多種多様だ。観測・測定過程の物理的分析から、自然認識の哲学的検討にまで及んでいる。しかし何よりもまず、測定による波動関数の収縮の機構を解明する問題を取り上げなければならない。

Y: 観測は様々な測定器を使うわけですから、測定器が関与する効果として波動関数の収縮が実現するような気がします。量子力学の総本家だったボーアやハイゼンベルクはどう考えていたのでしょうか。

N: 彼らはマクロ系とミクロ系は全く別物だと考える。測定器や観測者である人間は古典物理学によって記述されるマクロ物体であり、観測対象であるミクロ系は量子力学によって支配されている。したがって、両者の間には制御不可能な相互作用が働き、それによって波動関数の収縮が起こるといふ。

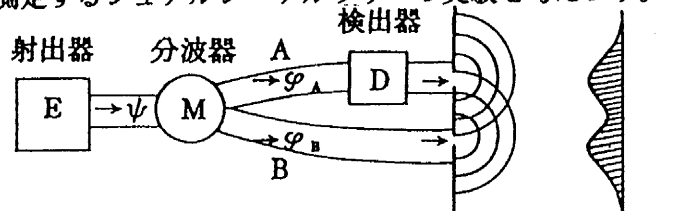
Y: それでは説明になりませんか。マクロ物体だって物質構造をもち、ミクロ粒子から構成されています。測定過程も現実の物理的過程でしょう。厳密には、いずれも量子力学の適用対象だとほくも思いますけど…。

N: 君のいう通りだ。だから、ボーアたちの考えに不満をもち、対象系と測定器系の全体に量子力学を適用して波動関数の収縮を導出しようとする数多くの試みが生まれた。しかし、これは容易な仕事ではなかった。ノイマンやウィグナーは、量子力学の枠内では絶対に不可能で量子力学は不完全な理論体系だと主張する。J. Neumann 1903~1957 ドイツ, E. Wigner 1902~ アメリカ
波動関数の収縮を招来するには、理論体系そのものを改造するか、あるいは、最終的な観測者である人間の「抽象的自我」や「意識」の作用が必要だといふ。量子力学の創始者の一人シュレーディンガーは、有名な「猫のパラドックス」を発表して、人間を特別扱いするその種の形而上的思考に痛烈な批判を加えた。またノイマン-ウィグナーの見解に反対して、波動関数の収縮の原因をカウンター内放電のような熱的不可逆過程に求めようとする多数の研究者がいる。この人たちとウィグナー派の研究者とは長年にわたって厳しい論争を続けてきたが、結着はついていない。その他にも、測定が行なわれるたびに対象粒子がそれぞれ異なる世界へ移行するという多世界理論、対象粒子と測定器のまわりの環境が波動関数の収縮をもたらすとする環境理論などの説があるが、いずれも主観的・観念的要素が強く、物理的な測定理論とはとても言えない。

Y: むずかしそうだけど面白そうな話ですね。波動関数の収縮の機構は、ついに解明されないのでしょうか？

N: 私はそうは思わない。量子力学的観測問題の核心は、ミクロ系とマクロ系の絡み合いにある。波動関数の収縮は測定器のマクロ的性格を直接の原因として実現することを示すことができる。たとえば、スピン $\frac{1}{2}$ の

粒子射出器Eからスピン状態不定の粒子のきわめて弱いビームを放出する。各粒子の波動関数 ψ は \uparrow の成分と \downarrow の成分との重ね合わせであるが、分波器M



の磁場によって通路AとBを走る波 $\varphi_A(\uparrow)$ と $\varphi_B(\downarrow)$ にそれぞれ分けられる。「通路Aに設置した検出器Dが信号を出せば測定値 \uparrow が得られ、この測定によって波動関数の収縮 $\psi \rightarrow \varphi_A$ が起こり、分波 φ_B は消える。

もし検出器Dが信号を出さなければ測定値 \downarrow が確定して(否定型測定といふ)、波動関数の収縮 $\psi \rightarrow \varphi_B$ が起こり分波 φ_A は消える。これが測定による波動関数の収縮である」とする説明をコペンハーゲン解釈といふ。

さて、この解釈は本当に正しいのだろうか？ 量子力学の確率的・統計的法則性を超越して、1個のミクロ粒子に対する一回の測定結果について決定的なことを言い過ぎているのではないか？ 否定型測定の場合、検出器Dとの相互作用なしに波動関数の収縮が実現していることになるが、それでいいのか？ 分波器Mで分けられて、通路A, Bの相当箇所まで進んでいた波 φ_A, φ_B の一方が、測定が完了したとき時間に逆行して突然消えてしまうというのはおかしくないか？ 実は、二つの分波はいつまでも健在なのではないのか？

Y: コペンハーゲン解釈が成立しないとすれば、測定過程ではどんな物理現象が起きているのでしょうか？

N: 「測定による波動関数の収縮」の本質は、分波間の位相相関の喪失にあるのだ。検出器がないときは、1個の粒子の二つの分波 φ_A と φ_B は同位相の関係にある。通路Aに検出器Dを置けば、それとの相互作用の結果 φ_A の位相が変化して φ_B との間に相対位相が生じる。次々と投入される粒子の分波 φ_A が検出器からランダムな位相のズレをもらおうとすれば、 φ_A と φ_B が同位相に近い相対位相の場合の頻度と、両者が逆位相に近い場合の頻度は等しくなるはずだ。したがって、右方のスクリーン上で記録した多数の粒子の到着点を集めて重ね焼きすれば、干渉項 $2R \cdot (\varphi_A^* \varphi_B)$ は正の部分と負の部分が相殺し合って消えてしまう。その結果、重ね焼き分布は干渉項のない分布になる。このように相対位相がランダムになることを位相相関の喪失という。分波間の位相相関の喪失は、検出器（測定器）が巨大な数の構成粒子からなるマクロ系の場合に実現される。検出器というマクロ系は、温度や物質密度のようなマクロ的状態変数が一定に保たれていても、内部運動のため、ミクロ的には時々刻々変化している。したがって、次々に投入される観測対象粒子は、粒子ごとに、マクロ的には同じでもミクロ的には違う状態にある物質系と相互作用して、それぞれ違った値の位相のズレが生じる。このようなメカニズムによって作られた粒子ごとに違う位相のズレがランダムになる場合に限って、位相相関が失なわれるのである。さらに言えば、観測対象のミクロ粒子は検出器の物質系全体ではなく、その部分である局所系と相互作用するのだ。マクロ系である検出器は、ミクロ粒子から見れば余りにも大きく、とても全体と一遍に相互作用できるものではない。このように考えれば、ミクロ粒子が出会う検出器の局所系が粒子ごとに違うという事情は、もっと理解しやすいだろう。局所系といっても、なおマクロ系であり、各ミクロ粒子がもらう位相のズレがランダムになる可能性は十分存在する。ところで、巨大な数の構成粒子を含むマクロ系を通過すれば、必ずランダムな位相のズレが得られるだろうか？ 実は必ずしもそうはならない。いま、測定器のところに空箱を置き、その中に少しずつ物質（たとえば1原子、2原子…）を注入してゆく場合を考える。初めは何もないのだから位相のズレはなく、スクリーン上には綺麗な干渉模様ができる。物質を入れていっても初めのうち干渉縞は多少崩れるが、まだ残っている。そのうち、①干渉縞が見えなくなる場合（完全測定）と、②干渉模様がある程度残っている場合（不完全測定）とがある。いずれの場合が実現するかは、装置と観測対象粒子との相互作用を具体的かつ綿密に調べていけば分かる。完全測定の場合、結果的にはコペンハーゲン解釈と同じところに到達したように見えるが、内容は全く違う。コペンハーゲン解釈では、分波の一方が一回の測定ごとに消えるものとして波動関数の収縮を定式化した。そこには測定器の影は全く見えない。これに対して上の議論では、測定による波動関数の収縮の根源は、分波と検出器との相互作用が二つの分波間の位相相関を喪失させたところにあるとした。そこでは位相のズレを通して検出器が表面に登場した。波動関数の収縮が実現しても、一方の分波が消えることはない。ただ、二つの分波の位相相関が消えるだけである。どうやらシュレーディンガーの波動関数は「波」としては、かなりリアルな存在なのだ。以上の解釈は決して独断と偏見ではなく、中性子を利用した干渉実験や、ミクロ現象とマクロ現象の境界に位置するメソスコピック現象などを通じて実証されつつある。今回は定性的な説明に終始したが、量子力学の学習が進んだら、次の機会に定量的なくわしい話をしてあげよう。

Y: 量子力学の考え方と奥の深さが一層よく理解できました。これからも着実に勉強することにします。(了)

S... プレミウム シミュレータ インターフェイス ガー方程式の数値解析

premium(β#)

★ 実際の束縛状態や衝突問題に現われてくる力のポテンシャルは井戸型や箱型より遥かに複雑であり、一般には複素数ポテンシャルを含むように示す。ラザフォード散乱のように、散乱粒子の角度分布の性質が理論的に再現する問題の解析例を参考に入射粒子と標的核の相互作用のポテンシャル(すなわち、力の)の性質が明らかになることにも、両者の内部構造に関する精密な知見が得られる。詳細は「散乱の量子論」の講義を聴講していただきたい。なお、DWBAは「Distorted Wave Born Approximation (歪曲波ボルン近似)」の略称で、近似法のひとつ。

図形部プログラム等編纂後
東京北多摩郡田無町
東京大学原子核研究所編纂部内

このコードは核研究開発専門委員会の決議に従い当機関が所有、管理するものであつて、使用者に対する一切の責任は当機関が負うものである。

このコードを使用する際に使用者は次の規定を守らなければならない。

- 1° このコードは、核研共同利用有資格者が純粋な学術研究のためにのみ使用することを許される。
- 2° 使用上及び使用結果に関する一切の責任は使用者が負う。
- 3° 使用結果を印刷公表する際には必ずコード名及び製作者名を明示する。口頭発表に際しても適宜これに準ずる。
- 4° このコードを当機関の許可なく一部でも改変してはならない。
プログラムの誤りを発見した場合には直ちに当機関に報告する。
- 5° 使用経緯を当機関に報告する。
- 6° Binary card の製作、郵送等の費用(特に定めるもの)を除き使用にかゝる一切の費用は使用者が負担する。

このコードを実際に使用するには別紙の手続きをとればよい。

PT-8
(MANUAL 1)

「ELASTIC SCAT」 & 「DWBA1」

—理論と計算の手引き—

第一版

宇田川 猛 吉 田 弘
久 保 謙 一 山 浦 元

東京都北多摩郡田無町2970
東京大学原子核研究所

目 次

はじめに	1
第1章 光学模型とDWBA の理論 — 計算の概略 —	3
§ 1 記号	3
1-1) m, M, z, Z, E_{lab} とそれらに関係する物理量	3
1-2) 光学ポテンシャルのパラメーター	4
1-3) $f(\theta), g(\theta)$	4
1-4) $\epsilon_{AA}, \epsilon_{BB}, \epsilon_{BX}, \epsilon_{XA}$ について	4
§ 2 「ELASTIC SCAT」による計算の概略	5
2-1) 「ELASTIC SCAT」の光学ポテンシャル	5
2-2) 部分波 (J, L) に対する Schrödinger Equation	6
2-3) 断面積, 偏極	6
2-4) χ^2 -value	7
2-5) 「ELASTIC SCAT」のBLOCK DIAGRAM	8
§ 3 「DWBA 1」による計算の概略	9
3-1) DWBA の断面積	10
3-2) 「DWBA 1」の Form Factor : $F_L(k)$	10
3-3) 「DWBA 1」の光学ポテンシャル	12
3-4) 「DWBA 1」のBLOCK DIAGRAM	13
第2章 「ELASTIC SCAT」の使い方	14
§ 1 入力する量と応用例	14
§ 2 結果 (output) の読み方	14
§ 3 注意事項	16
第3章 「DWBA 1」の使い方	18
§ 1 必要な入力カード	18
1-1) 標準型の入力カード	18
1-2) 同時に2つ以上のデーターについて計算を行なう際の入力カード	18
1-3) 同時に2つ以上のデーターについて計算を行なう際に, 角度の同じ組がある場合	18
1-4) 同時に2つ以上のデーターについて計算を行なう際に, 光学ポテンシャルパラメーターのみを変えた組がある場合	19
§ 2 入力カードの複製	19
§ 3 出力印刷の見方	19
§ 4 例題	21
4-1) 非弾性散乱	21
4-2) (d, p) 反応	22
§ 5 注意事項	23
Appendix	24
□ FORMAT (読み込み形式) について	24
□ Δ_{max}, R_{max} が十分か否かの判定	24
□ Coulomb Function	25
□ 1 核子変換反応の $F_L(k)$ について	28
□ DWBA の断面積	29
§ 1 非弾性散乱の Δ_L	30
§ 2 一核子変換反応の Δ_L	33
□ 計算を断して, binary card, 入力データーカード以外に必要なカードについて	35

はじめに

このノートは、次の二つのプログラムを使用する際の手引きである。

1) 「ELASTIC SCAT」

原子核により弾性散乱された粒子の微分断面積、反応断面積及び偏極を、光学模型で計算する。但し入射粒子のスピンは0又は $\frac{1}{2}$ に限られ、その他の粒子に対してはスピンを無視する。このプログラムの性能のテストは、上記三つの量に対して、 $\text{Cu}^{64}(p, p)\text{Cu}^{64}$ (入射陽子のエネルギー 9.75 MeV) について為され、M. A. Melkanoff et al.* の計算と比較された。

2) 「DWBA 1」

原子核による粒子の非弾性散乱と、1粒子のストリップング及びピック・アップの反応を、zero-range 歪曲波ボロン近似 (DWBA) で数値解析するプログラムである。但し、入射粒子及び放出粒子のスピンは全て無視する。

このプログラムの性能のテストは、次の反応に対して行なわれた。

反 応	入射粒子のエネルギー (MeV)	比較された計算
$\text{Ni}^{58}(\alpha, \alpha')\text{Ni}^{58}(1st\ 2^+)$	285, 43, 444	G.R. Satchler et al; P.R., 128, 6 (1962) 2693
$\text{Ni}^{60}(\alpha, \alpha')\text{Ni}^{60}(1st\ 2^+)$	285	P.L. 5 (1963) 347 E. Rost, P.R. 128, 6 (1962) 2708
$\text{Mg}^{24}(\alpha, \alpha')\text{Mg}^{24}(1st\ 2^+)$	280, 340, 410	
$\text{Ca}^{40}(d, p)\text{Ca}^{41}(\text{grnd})$	1095	G.R. Satchler; Distorted wave calculations and spectroscopic factors (preprint, 1964)

なお「DWBA 1」では、入射及び放出粒子の弾性散乱の角分布も計算出来るが、上記テストでは、(d, p) 反応の exit channel 以外の弾性散乱は全てテストされ、exit channel についても「ELASTIC SCAT」の結果と一致する事が確かめられている。

以下この手引きの内容は、

第1章: 「ELASTIC SCAT」及び「DWBA 1」では、どのような計算が可能かということの理解を得るに必要な計算諸式の概説と、プログラムの概要。

第2章及び第3章: 夫々「ELASTIC SCAT」と「DWBA 1」を用いて計算する際の、入力カードの作り方、印刷されて出て来た計算結果の読み方、注意事項及び参考事項のまとめ、となつている。

* M. A. Melkanoff et al, A FORTRAN program for elastic scattering analyses with the nuclear optical model (University of California publications in automatic computation, 1, 1962)

第1章 光学模型とDWBAの理論

— 計算の概略 —

本章では、光学模型とDWBAの理論の概要を与えながら、「ELASTIC SCAT」と「DWBA 1」を使うと、どの様な計算が出来るかを述べる。従つて、ここに述べる理論の概略は、プログラムの内容を説明するのに必要最少限に止め、且つ、それを簡潔にまとめるという事を主眼にする。

これらの理論についての、より詳細な内容については、例えば、光学模型に関しては前述の Melkanoff et al の著書を、又DWBAについては

G.R. Satchler; The distorted-wave theory of direct nuclear reactions with spin-orbit effects, N.P. 55, 1 (1964) 1

W. Tobocman; Theory of direct nuclear reactions (Oxford U.P., N.Y. 1961)

M. Austern; Fast neutron physics, vol. II. (Edited by J.B. Marion and J.L. Fowler, John Wiley & Sons, New York-London, 1963)

等を参照して頂きたい。

又、具体的な数値解析の手続きに関しては、光学模型については同じく Melkanoff et al の著書あるいは

B. Buck et al; Computer programmes for the optical model analysis of nuclear scattering (ref. 52/60, Nuclear physics computing group, Clarendon laboratory, University of Oxford),

DWBAに関しては

G.R. Satchler et al; The distorted wave theory of direct nuclear reactions (ONRL-3240, Oak Ridge National Laboratory, 1962)

に詳しい。

§1 記号

光学模型とDWBA理論の概略を述べる前にこの手引き全般を通じて、よく出て来る物理量とその定義式及び記号をまとめて書いておく。但し、ここで問題となる核反応は、

$A(a, b)B$ と略記する事にして、以下出て来るいろいろな量にA, B, a, b, という suffix をつけたら、それらは、標的核、残留核、入射粒子、放出粒子に関係した量を示すものであると約束しておく。又、この手引きでは、物理量の数値も問題となるので、予め、その単位を統一しておく事が必要であろう。質量に対してはamu, 長さには 10^{-12} cm, 電荷はe, エネルギーはMeVを単位にとることとする。

1-1) m, M, z, Z, E_{lab} とそれらに関係する物理量

m, z は a, b の, M, Z は A, B の質量と電荷をそれぞれ表わし、 E_{lab} は a, b の実験室でのエネルギーを表わすものとする。これらの量から次のような物理量が定義さ

れる。

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \quad (1)$$

$$E = \frac{M}{m+M} E_{lab} \quad (2)$$

$$k = \sqrt{2\mu E / \hbar^2} \quad (3)$$

$$\eta = \mu \pi Z e^2 / \hbar^2 k \quad (4)$$

μ , E , k , η は説明するまでもないが、夫々、換算質量、重心系でのエネルギー、波数、クーロンパラメーターを表す。

1-2) 光学ポテンシャルのパラメーター

基本的なパラメーターは、 V , W , V_S , W_S , r_0 , r_0 , r_c , a_R , a_I , b , α の 11個である。 V , W は中心力ポテンシャルの実部及び虚部の強さ、 V_S , W_S は、スピン軌道力ポテンシャルの実部及び虚部の強さを表す。 a_R , a_I は実部と虚部の拡がりを与え、 r_0 は核半径パラメーターである。 r_0 , b は、中心力ポテンシャルの虚部を Gauss 型に選んだ時の半径と拡がりを与え、 α は、虚部として、Woods-Saxon 型と Gauss 型の混合型をとる場合の混合比率を与える ($0 \leq \alpha \leq 1$, $\alpha = 1$ は純 Gauss 型)。又、 r_c はクーロンポテンシャルの半径を与えるパラメーターである。

r_0 , r_c , r_0 に関連してよく出て来る量は

$$\left. \begin{aligned} R_N &= r_0 M^{1/2} \\ R_C &= r_c M^{1/2} \\ R_0 &= r_0 M^{1/2} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

$$\left. \begin{aligned} \rho_N &= k R_N \\ \rho_C &= k R_C \\ \rho_0 &= k R_0 \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

1-3) $f(x)$, $g(x)$

光学ポテンシャルの形状因子として広く使われている Woods-Saxon 型と Gauss 型を夫々 $f(x)$, $g(x)$ で表わす事にする。即ち

$$f_0(x) = (1 + e^x)^{-1}, \quad x = (r - R_N)/a \quad (7a)$$

$$f_1(x) = \frac{d}{dx} f_0(x), \quad (7b)$$

$$f_2(x) = \frac{d^2}{dx^2} f_0(x), \quad (7c)$$

$$g(x) = e^{-x^2}, \quad x = (r - R_0)/b \quad (8)$$

1-4) r_{aA} , r_{bB} , r_{bx} , r_{xA} について

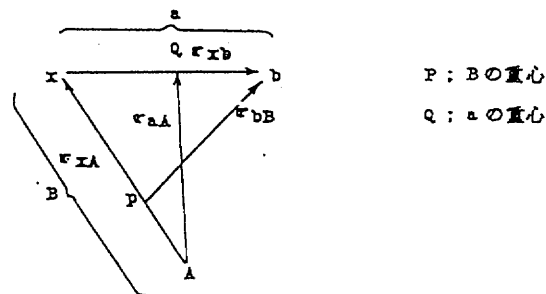
Suffix k についての説明はこの節の最初に述べられているが、ここでは上の四つについて説明しておく。

r_{aA} : 入射 Channel での粒子 a と標的核 A の相対座標

r_{bB} : 放出 Channel での粒子 b と残留核 B の相対座標

r_{bx} , r_{xA} : 一核子変換反応の公式に出てくる座標であるが、 r_{bx} は a が b , x から形成されているとしたときの b , x の相対座標。又 r_{xA} は x が標的核 A に束縛されているときの x , A の相対座標。

この四つの座標の間の関係を次図に示しておく。



§ 2 「ELASTIC SCAT」による計算の概略

光学ポテンシャル $V_T(r)$ を、中心力部分とスピン軌道力部分の和

$$V_T(r) = V_1(r) + V_2(r) \cdot (\vec{L} \cdot \vec{S}) \quad (9)$$

で与えられているとすれば、エネルギー E の入射粒子に対する Schrödinger 方程式は、一般に k 次の様に書ける。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V_T(r) \right] \Psi = E\Psi \quad (10)$$

然しこの方程式を数値的に計算して解き、断面積を求める為には、 $V_T(r)$ の具体的な形を定める必要がある。数値計算の為のプログラムの能力は、この $V_T(r)$ として、どの様なものが採用出来るかにかかっている。この節ではまず、「ELASTIC SCAT」の $V_T(r)$ の一般的制約をまとめて述べておくことにする。

2-1) 「ELASTIC SCAT」の光学ポテンシャル

(I) 中心力部分 $V_1(r)$ は、核ポテンシャル $V_N(r)$ とクーロンポテンシャル $V_C(r)$ の和

$$V_1(r) = V_N(r) + V_C(r) \quad (11)$$

で与えられる。

(II) 核ポテンシャル $V_N(r)$ の実部の形 f_N^R は常に Woods-Saxon 型であり、虚部の形 f_N^I に対しては、① Woods-Saxon ② Gauss ③ 両者に適当な重みをかけて加えたもの ④ Woods-Saxon の微分形、のいずれかが採用出来る。

(III) スピン軌道力 $V_2(r) \cdot (\vec{L} \cdot \vec{S})$ は、スピン $\frac{1}{2}$ を持つ粒子に対してだけしか考慮出来ない。

M 従つて、その他のスピンを持つ粒子に対しては、 $V_2(r) \cdot (\vec{L} \cdot \vec{S})$ を 0 とセツトして、スピンを無視する計算しか出来ない。

N $V_2(r) \cdot (\vec{L} \cdot \vec{S})$ の実部と虚部の形は共に、次の00式で与えられる、いわゆるトーマス型を採用している。

2-2) 部分波 (l, m) に対する Schrödinger equation

00式の数値積分は実際には Ψ を部分波展開し、各部分波 $\Psi_{l\pm}$ は全角運動量 $\vec{J} = \vec{L} \pm 1$ に対する動径部分の波動函数、又 \vec{L} は軌道角運動量である) に対して行なり。勿論、スピン-軌道力 $V_2(r) \cdot (\vec{L} \cdot \vec{S}) = 0$ の場合には $\Psi_{l+} = \Psi_{l-}$ となる。

00式から $\Psi_{l\pm}$ に対する方程式を導くと、

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + U_1 - U_2^{\pm} + 1 \right\} \Psi_{l\pm}(\rho) = 0 \quad (\rho = kr) \quad 00$$

U_1, U_2^{\pm} は 2-1) で述べた事から

$$U_1 = U_N(\rho) - U_C(\rho) \quad 01$$

$$U_N(\rho) = \frac{1}{E} V_N(r) = \frac{1}{E} (V f_N^R + i W f_N^I) \quad 04$$

$$U_C(\rho) = \frac{1}{E} V_C(\rho) = \begin{cases} \frac{Z}{\rho_C} \left(3 - \frac{\rho^2}{\rho_C^2} \right) & \rho \leq \rho_C \\ \frac{2Z}{\rho} & \rho > \rho_C \end{cases} \quad 05$$

$$U_2^{\pm} = 2 \left(\frac{\hbar k}{m\alpha c} \right)^2 \frac{V_S + i W_S}{E} \left(-\frac{1}{\rho} \frac{df_N^R}{d\rho} \right) \left\{ \frac{l}{-(l+1)} \right\} \quad 06$$

但し

$$f_N^R(\rho) = f_0 \left(\frac{\rho - \rho_N}{ka_R} \right) = \left[1 + \exp \left(\frac{\rho - \rho_N}{ka_R} \right) \right]^{-1} \quad 07$$

$$f_1 \left(\frac{\rho - \rho_N}{ka_I} \right) = \left[1 + \exp \left(\frac{\rho - \rho_N}{ka_I} \right) \right]^{-1} \quad (18a)$$

$$f_N^I(\rho) = -4ka_I f_1 \left(\frac{\rho - \rho_N}{ka_I} \right) \quad (18b)$$

$$f \left(\frac{\rho - \rho_0}{kb} \right) = \exp \left[-\left(\frac{\rho - \rho_0}{kb} \right)^2 \right] \quad (18c)$$

$$\left((1-\alpha) f_0 \left(\frac{\rho - \rho_N}{ka_I} \right) + \alpha f \left(\frac{\rho - \rho_0}{kb} \right) \right) \quad (18d)$$

2-3) 断面積、偏極

各部分波の phase shift $\delta_{l\pm}$ は光学ポテンシャルが点電荷のクーロンポテンシャルだけに帰着出来るような、核から充分離れた領域 ($r \geq R_{max}$) で $\Psi_{l\pm}(\rho)$ が満足しなければならぬ次の境界条件

$$\Psi_{l\pm}(\rho) = \left[F_l(\rho) + C_{l\pm} (G_l(\rho) + i F_l(\rho)) \right] e^{i\sigma_l}, \quad \rho = \rho_{max} = kR_{max} \quad 08$$

から $C_{l\pm}$ を求めると

$$e^{i2\delta_{l\pm}} = 1 + 2i C_{l\pm} \quad 09$$

として与えられる。 $\Psi_{l\pm}(\rho)$ は08を原点附近で適当な初期値を与えて外側へ数値積分を行なつ

ていつて求めるが、実際の数値解析で得られるものは、一般に余分の数係数 $M_{l\pm}$ だけ $\Psi_{l\pm}(\rho)$ と異なっている。これを $\chi_{l\pm}$ とすると

$$\Psi_{l\pm}(\rho) = M_{l\pm} \chi_{l\pm}(\rho) \quad 00$$

$C_{l\pm}$ は、境界条件08が成り立つ領域の点 ρ_{max} (matching point) における logarithmic derivative から定まり次の様になる。

$$C_{l\pm} = \frac{\chi_{l\pm}' F_l' - \chi_{l\pm} F_l''}{\chi_{l\pm} G_l' - \chi_{l\pm} G_l'' + i(\chi_{l\pm}' F_l' - \chi_{l\pm} F_l'')} \quad (\rho = \rho_{max}) \quad 01$$

但し F_l, G_l は Coulomb function でこれについては、Appendix III を参照して頂きたい。

$C_{l\pm}$ が求まれば

$$M_{l\pm} = \left[F_l + C_{l\pm} (G_l + i F_l) \right] e^{i\sigma_l} / \chi_{l\pm} \quad (\rho = \rho_{max}) \quad 02$$

$\delta_{l\pm}$ の代りに $C_{l\pm}$ を使うと、微分断面積 $\sigma(\theta)$ 、弾性断面積 σ_R 、偏極 $\bar{P}(\theta)$ は次の様に書ける。

$$A(\theta) \equiv f_c(\theta) + \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} e^{2i\sigma_l} [(l+1) C_{l+} + l C_{l-}] P_l(\cos \theta) \quad 03$$

$$B(\theta) \equiv -\frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} e^{2i\sigma_l} [C_{l+} - C_{l-}] P_l'(\cos \theta) \quad 04$$

$$\sigma(\theta) = |A(\theta)|^2 + |B(\theta)|^2 \quad 05$$

$$\sigma_R = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ (l+1) [I_m(C_{l+}) - [I_m(C_{l+})]^2 - [R_0(C_{l+})]^2] + l [I_m(C_{l-}) - [I_m(C_{l-})]^2 - [R_0(C_{l-})]^2] \right\} \quad 06$$

$$\bar{P}(\theta) = P(\theta) \bar{n} = \frac{A^*(\theta) B(\theta) + A(\theta) B^*(\theta)}{|A(\theta)|^2 + |B(\theta)|^2} \bar{n} \quad 07$$

$$\bar{n} = (\vec{k}_b \times \vec{k}_a) / |\vec{k}_b \times \vec{k}_a|$$

但し \vec{k}_a, \vec{k}_b は夫々入射及び放出粒子の波数ベクトルで、又03式の $f_c(\theta)$ はクーロン散乱の散乱振幅

$$f_c(\theta) = -\frac{\gamma}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} e^{-i\gamma \ln(\sin^2 \frac{\theta}{2}) + 2i\sigma_0} \quad 08$$

$$\sigma_0 = \arg \Gamma(1+i\gamma)$$

である。ELASTIC SCAT は計算結果として上記与えられた量のうち $\sigma(\theta), P(\theta), C_{l\pm}$ の実数、虚数の各部分の他、 $\sigma(\theta)$ と Rutherford scattering の cross section $\sigma_{Ruth}(\theta)$ の比

$$\sigma_{ratio}(\theta) = \sigma(\theta) / \sigma_{Ruth}(\theta) \quad 09$$

も印刷させて出せる様になつている。

2-4) χ^2 -value

ELASTIC SCAT は、実験値を入力として入れると、計算結果と実験値との一致の程度を目安を与える次の χ^2 -value を計算することが出来てその結果が印刷される。

$$X_0^{\pm}(\theta_1) = \left(\frac{\sigma_{th}(\theta_1) - \sigma_{exp}(\theta_1)}{d\sigma_{exp}(\theta_1)} \right)^2 \quad (31)$$

$$X_P^{\pm}(\theta_1) = \left(\frac{P_{th}(\theta_1) - P_{exp}(\theta_1)}{dP_{exp}(\theta_1)} \right)^2 \quad (32)$$

$$X_{OT}^{\pm} = \sum_1 X_0^{\pm}(\theta_1) \quad (33)$$

$$X_{PT}^{\pm} = \sum_1 X_P^{\pm}(\theta_1) \quad (34)$$

$$X_{\pm}^{\pm} = X_{OT}^{\pm} + X_{PT}^{\pm} \quad (35)$$

2-5) 「ELASTIC SCAT」のBLOCK DIAGRAM

Fig. 1 はELASTIC SCAT がどのような順序で、全体の計算を進めて行くかを示したBLOCK DIAGRAMで、計算はこの図の矢印に従って進行する。各BLOCKは1つのまとまった単位の計算を行ない、プログラムの上では一個の subroutine に対応している。

全ての計算はMAIN routine から出発し、すぐCTRL subroutineに入る。CTRL という subroutine はINPUT からOUTPUT迄の subroutine を呼び出しながら、全部の計算を進行させて行く、いわば制御室の様なものである。以下、CTRL subroutine の中で呼び出される各 routineの計算の内容を簡単に説明しておく。

INPT ; MAIN routine の中で読み込まれるいくつかのinputを除いた全てのinputを読み込む。

POTCH ; (22)式で C_{\pm}^{\pm} を求める点 P_{max} は光学ポテンシャルが点電荷のクーロンポテンシャルだけになるような、核から充分離れた距離にとらねばならない。この P_{max} と、部分波 l の上限 l_{max} はあらかじめ与えておく必要がある。これらの値はinput dataとしてINPT routineで読み込まれるが、読み込まれた値が本当に条件を満たしているかどうかを判定し、もし満たしていないければ、適当にそれをふやしてやる為の subroutine である。

POP1 ; (24),(25)式の中に現われる $P_1(\cos\theta)$, $P_2(\cos\theta)$ を計算する。

SIGZRO ; クーロンの phase shift の $l=0$ の値 σ_0 ((29)式参照)を計算する。

FSUBC ; (29)式で与えられているRutherfordの散乱振幅 $f_C(\theta)$ を計算する。

EXSGML ; $l=0$ から l_{max} 迄のクーロンの phase shift σ_l の値を計算する。但し結果は $Re\sigma_l^{1q}$, $Im\sigma_l^{1q}$ の形で計算機に記憶される。この値は(24),(25)を使って $A(\theta)$, $B(\theta)$ の値を計算する際に必要となる。

COULPM ; $\rho = P_{max}$ の点でのクーロンの波動函数の値 $F_1(\rho)$, $G_1(\rho)$ と、その微分 $F_1'(\rho)$, $G_1'(\rho)$ を計算する。

INTCTR ; 原点の近くで必要な初期値を先ず求めて、部分波 $F_{\pm}^{\pm}(\rho)$ に対する微分方程式(12)を数値的に解いて $\rho = P_{max}$ の点での値と微分を計算する。計算された値は(21),(22),(23)式の $Z_{\pm}^{\pm}(\rho)$, $X_{\pm}^{\pm}(\rho)$ に対応する。

PGEN ; 微分方程式(12)を解いて行く際にポテンシャルの形状因子 $F_N^{\pm}(\rho)$, $F_N^{\pm}(\rho)$, $\frac{df_C^R}{d\rho}$ 等の値が必要である。この subroutine はそれらの値を計算する。

CSUEL ; (22)式を用いて C_{\pm}^{\pm} を計算する。

AB ; (24),(25)式に従って $A(\theta)$, $B(\theta)$ を計算する。

SBSGCP ; (26),(28),(30)式で与えられている $\sigma(\theta)$, $P(\theta)$, $\sigma_{ratio}(\theta)$ を計算する。

SIGMAR ; (27)式で与えられている σ_R を計算する。

CHISQ ; (31)~(35)式の χ^2 -valueを計算する。

OUTPT ; 必要な計算結果をMagnetic tapeにかき込む。一たびMagnetic tapeにかき込まれた結果は再度off lineの機械(1401電子計算機)にかけられて印刷され、これが利用者の手もとに届けられることになる。

SKIP ; これはoutputのpageのheadingや一枚の紙に印刷される行の数を揃える調整を行なったりする。

以上の一連の計算が終つてoutputがすむとCTRL subroutineは

- I) 光学ポテンシャルのパラメータ $V, W, a_R, a_I, V_S, W_S, b, \alpha$ の値のみを適当に変えてINTCTR subroutineに戻つて、又計算を行なうか(これはDo Loopで行なわれる)
- II) INPT subroutineに戻つて全部のinput dataを読み直して以下の計算を再び始めるかのいずれかになる機指示する。勿論、I)が無限にくり返されることはなく、II)の過程は必ず起る。もしI)に従つて、INPT subroutineに戻つても、もはや一枚も読み込むべきinput dataのcardが無いと、そこで「ELASTIC SCAT」の計算は自動的に停止する。

§ 3 「DWBA 1」による計算の概要

DWBA 1が行なう計算は歪曲波ボルン近似という近似の他に更

- (I) zero-range interaction
- (II) distorting potentialにスピン-軌道力は入れない
- (III) angular momentum transferは軌道角運動量のそれだけで、しかもその値はuniqueであるという制限をつけている。この様な近似の下ではcross sectionが非常にcompactな形で書けてreaction processの違いは結局、Form Factor $F_{\pm}(\rho)$ の相違として現われることになる。

この節では先ず、3-1)でcross sectionの式を与え、3-2)でDWBA 1がとり得る $F_{\pm}(\rho)$ を与えておく。従つてこの章を見れば、DWBA 1がどのようなprocessを計算することが出来るかを知ることが出来る。3-3)ではdistorting potentialとしてとれる形を、又3-4)でDWBA 1の計算の概略をBLOCK DIAGRAMを眺めながら簡単に述べしておく。

3-1) DWBA の断面積

angular momentum transfer を L とすると, DWBA 1 で計算する cross section

$\sigma_L(\theta)$ は

$$\sigma_L(\theta) = \frac{M_B^4 \mu_a \mu_b}{M_A^4} \frac{9.268}{K_a K_b^2} \frac{1}{M-L} |\beta^{LM}(\theta)|^2 \quad (36)$$

$$\beta^{LM}(\theta) = \sum_{l_b} \bar{\beta}_{l_b}^M P_{l_b}^M(\cos\theta) (-)^{M-l_b} \beta^{L-M}(\theta) \quad M \geq 0 \quad (37)$$

$$\bar{\beta}_{l_b}^M = \sum_{l_a} \Gamma_{l_b l_a}^{LM} f_{l_b}^L f_{l_a}^L \quad M \geq 0 \quad (38)$$

$$\Gamma_{l_b l_a}^{LM} = (-)^{l_a - l_b - L} D_{l_b l_a}^{LM} D_{l_b l_a}^{L0} \quad (39)$$

$$D_{l_b l_a}^{LM} = \sqrt{2l_b + 1} \sqrt{\frac{(l_b - M)!}{(l_b + M)!}} \langle l_b M l_a - M | L 0 \rangle \quad (40)$$

$$f_{l_b l_a}^L = \frac{M_A}{M_B} \frac{K_b}{K_a} \int \psi_{l_b} \left(\frac{M_A}{M_B} K_b r \right) F_L(r) \psi_{l_a} (K_a r) dr \quad (41)$$

こゝに ψ_{l_a}, ψ_{l_b} は前節の $\psi_{l \pm}(r)$ と (スピン $1/2$ の粒子に対しても光学ポテンシャルの中にスピン-軌道力を入れないという事を除いて) 同じもので, 夫々入射, 放出粒子の歪曲波の動径部分の波動函数 (軌道角運動量 l_a, l_b の部分波) である。又 (41) 式の $F_L(r)$ は Form Factor で, 本質的に反応をひき起す相互作用を記述する。即ち, 非弾性散乱, ストリッピング等の反応のメカニズムや核構造を記述するモデルの相違に対する cross section 依存性は, 全てこの $F_L(r)$ の中にましまされている。本当の DWBA の cross section を得るには, (36) に spectroscopic factor その他の数係数をかける必要があるが, (36) は (d,p) 反応で, spectroscopic factor が 1 であれば, そのまゝ DWBA の cross section の本当の値と一致する様にとられている。この事については Appendix (V) を参照されたい。

3-2) 「DWBA 1」の Form Factor $F_L(r)$

DWBA 1 で計算出来る反応過程は以下の記述から分る様に, 本質的には集団励起状態 (振動状態及び回転状態) への非弾性散乱と one-nucleon の stripping, pick-up である。DWBA 1 が取り得る $F_L(r)$ には必ずしも上記の process にあてはまらないものも含まれているが, 以下物理的な内容に従って便宜上二つに分類して与えておく。

A) 集団励起状態への非弾性散乱の Form Factor

先ず DWBA 1 でとり得る $F_L(r)$ を列挙してみよう。

$$I) F(r) = \frac{r}{R_0} f_1(r) - \frac{b_L}{r^{L+1}} \quad (42)$$

$$II) F(r) = f_1(r) - \frac{b_L}{r^{L+1}} \quad (43)$$

$$III) F(r) = f_1(r) \quad (44)$$

$$N) F(r) = f_2(r) \quad (45)$$

$$V) F(r) = \left(\frac{r}{R_0}\right)^2 f_2(r) + \frac{a}{R_0^2} r f_1(r) \quad (46)$$

$$VI) F(r) = v_0 f_2(r) \quad (47)$$

$$VII) F(r) = v_0 f(r) \quad (48)$$

$$\text{但し, } b_L = \begin{cases} -\frac{432}{2L+1} \cdot \frac{Z_a Z_A a_1}{V_0 R_0} R_0^L, & R_{0E} < r, R_{0E} = r_0 M_A^{1/2} \\ 0, & R_{0E} \geq r, R_0 = r_0 M_A^{1/2} \\ R_0 = r, M_A^{1/2} \end{cases} \quad (49a)$$

$$\left. \begin{aligned} f_1(r) &= (1 + aX)^{-1} \\ f_2(r) &= \frac{d}{dX} f_1(r) \\ f_3(r) &= \frac{d}{dX} f_1(r) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} X &= \frac{r-R_0}{a} \\ a &= \begin{cases} a_I, R_0 \geq r \\ a_E, R_0 < r \end{cases} \end{aligned} \quad (49b)$$

$$f(r) = e^{-X^2}, \quad X = \frac{r-R_0}{b}, \quad R_0 = r_0 M_A^{1/2} \quad (49c)$$

I) ~ V) は Woods-Saxon 函数の一階及び二階の微分形で, 一階微分は振動及び回転の第一励起状態への励起をひき起す相互作用に対応する Form Factor で, 二階微分は, 振動の 2-phonon 状態への直接遷移をひき起す相互作用に対する Form Factor である。これらの Form Factor はいずれも, 非弾性散乱を引き起す相互作用が歪んだ光学ポテンシャルと球形の光学ポテンシャルとの差で記述され, しかもその差が余り大きくないという立場に立つてとられたものである。

II), III), N) は歪んだ光学ポテンシャルの半径が $R(\theta, \varphi) = R_0 \left(1 + \sum_{Lm} a_{Lm} Y_{Lm}(\theta, \varphi)\right)$ となることから得られ, 又, I), V) には歪む前後の等ポテンシャル面が囲む体積は一定であるという仮定が含まれている。更け I), II) には, 一定の range R_{0E} の外側で, ターロン励起が起るといふ効果もとり入れられるようになってる。

VI), VII) は例えば (p,n) 反応での quasi elastic scattering に用いることが出来る。

B) one nucleon stripping 及び pick up 反応の $F_L(r)$

stripping 反応をひき起す相互作用の強さは zero-range の仮定の下では, transfer される核子の入射粒子の中で binding energy に置きかえられ, 又, 相互作用領域を表わす Form Factor は残留核に trap された核子の, 残留核内における動径方向の分布で表わされる。更け, trap された核子は, 残留核で shell model の一軌道を運動すると思われるので, Form Factor は結局 trap される核子の shell model の一軌道の波動函数の動径部分で表わされることとなる。pick up は stripping の逆過程で表わされるという点を考えれば, その Form Factor は明らかで, pick-up

される核子の標的核内の一体の波動函数の動径部分となる。然し, rearrangement collision では, cross section が

I) Q -value に強く依存する。

II) reaction は核表面の近傍及びその外側で強く起る。

という事情が知られているので Form Factor として用いられる一体の波動函数には

I) Q -value つまり, capture 又は pick-up される核子の, 核内での binding energy と

II) 波動函数の tail の部分の特徴

を充分考慮する必要がある。そのため, 一体の波動函数として, その便利さのゆえに, 最も良く用いられる Harmonic Oscillator Wave Function (H.O.W.F.) は, そのまゝ用いたのでは, 良い近似ではなくなる。DWBA 1 では, 上記の I), II), の効果を取り入れて, しかも H.O.W.F. の便利さも利用した次の形のものを採用する。

$$I) F_L(r) = u_{N,L}^I(r) \propto r^{L_0} e^{-\beta r^2} \cdot F\left(\frac{L-N}{2}; L+\frac{3}{2}; \beta r^2\right), \quad r \leq R_{NB} \quad (50)$$

$$u_{N,L}^E(r) \propto r^{-1} W(-\gamma; L+\frac{1}{2}; 2k_N r), \quad r > R_{NB} \quad (51)$$

但し, $\int_0^\infty F_L(r) r^2 dr = 1$

R_{NB} より内部は H.O.W.F., R_{NB} より外部は正しい Binding energy を持つクーロン波動函数で, k_N は問題の核子の核内での Binding energy B と, reduced mass μ_c で定まり

$$k_N = \sqrt{\frac{2\mu_c B}{\hbar^2}} \quad (52)$$

内部の H.O.W.F. の oscillator strength を表すパラメーター β は, $u_{N,L}^I(r)$ と $u_{N,L}^E(r)$ が与えられた matching point でなめらかにつながる様にとり, 全体は 1 に規格化される。I) については, Appendix 例) を参照されたい。 $F_L(r)$ として, I) の外に, 上に述べた様な事情を無視して, H.O.W.F. を使つて計算することも出来るように,

DWBA 1 では,

$$II) F_L(r) = \frac{1}{N_L} r^{L_0} e^{-\beta r^2} \cdot F\left(\frac{L-N}{2}; L+\frac{3}{2}; \beta r^2\right) \quad (53)$$

もとれるようになる。

3-3) 「DWBA 1」の光学ポテンシャル

2-2) で $\theta = 0$ とおく以外に, $f_N^I(\theta)$ として (18a), (18d) のみとる事が出来る。即ち

$$f_N^I(\theta) = \begin{cases} f_0 \left(\frac{\rho - \rho_N}{ka_I} \right) & (53a) \\ (1-\alpha) f_0 \left(\frac{\rho - \rho_N}{ka_I} \right) + \alpha f \left(\frac{\rho - \rho_N}{kb} \right) & (53b) \end{cases}$$

なお, 核ポテンシャルの実数部 $f_N^R(\theta)$ は (17) と同じである。

3-4) 「DWBA 1」の BLOCK DIAGRAM

「ELASTIC SCAT」の Fig. 1 に対応する DWBA 1 の BLOCK DIAGRAM は Fig. 2 のようになる。Fig. 2 の MAIN routine は Fig. 1 の MAIN と CTRL を一掃にしたようなものである。又, MAIN で呼び出される INPT 1 から COULFN までと, POEN 1 及び CHISQ 以下の subroutine の機能は (subroutine name の最後 $'1'$ のついているものがある) 夫々, 対応する「ELASTIC SCAT」の subroutine と全く同じである。従つてここでは, 「ELASTIC SCAT」にはなかつた subroutine の機能についてのみ説明しておく。

FGEN 1; (42) ~ (48) 式と, (50) ~ (53) 式で与えられている $F_L(r)$ を計算する。

INTE 1; (10) 式の数値積分を行なつて, 入射粒子, 放出粒子に対する $\chi_L(\theta)$ を求めながら, 同時に (41) の overlap integral をも計算する。積分は ρ_{max} 迄行なうが, この点は, 外側の解とつなぐ点であると同時に (41) の積分の上限ともなる。

然し, overlap integral の計算は, 完全に (41) 式には対応せず, (41) を得るには, normalization constant の積 $M_{L_a} \times M_{L_b}$ をあとで掛けておかねばならない。

FNSG 1; 外側の解とつないで, C_L , M_L を求め, INTE 1 で求めた overlap integral $K M_{L_a} \times M_{L_b}$ をかけ, 更に入射及び放出チャンネルに対する弾性散乱の角度分布を, (24), (25), (26) 式を用いて計算する。又 (27) 式の σ_R も計算される。

BETA 1; (37) ~ (40) 式を用いて $\beta^{LM}(\theta)$ を計算する。

SGMA 1; $\sigma_L(\theta)$ を求める。

V) DWBA の断面積

DWBA で計算された微分断面積を絶対値まで含めて実験値と比較すると, 関係する核単位の詳細に関する知識が得られる。以下にその種の解析に必要な公式を整理しておく。以下に述べるのは「DWBA 1」に組入れられている form factor K に対応するもので, 粒子の spin は考えない。より一般の場合については第 1 章前書きの最後の参考文献を参照されたい ("Sally", Satchler et al)。

DWBA による微分断面積の式は次の如く与えられる。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\mu_a \mu_b}{(2\pi \hbar^2)^2} \frac{k_b}{k_a} \frac{\Sigma_{M_A M_B} |T|^2}{2J_A + 1} \quad (A40)$$

$$T = \langle J_B M_B, k_b | V | J_A M_A, k_a \rangle - \int \int \phi_{aA}^{(-)*} (k_b, r_{bB}) \langle J_B M_B | V | J_A M_A \rangle \phi_{aA}^{(+)} (k_a, r_{aA}) dr_{aA} dr_{bB} \quad (A41)$$

但し ϕ_{aA} , ϕ_{bB} は入射, 放出 channel での distorted waves, J は変換の Jacobian である。

$$J = \frac{2(r_{aA}, r_{bB}, \xi)}{2(r_1, \dots, r_A)} \quad (A42)$$

ここで ϵ は r_{aA} , r_{bB} と直交するそれ以外の座標を示す。 $J < V >$ を交換される角運動量 ℓ について球面展開すると

$$\ell = J_B - J_A, \quad m = M_B - M_A \quad (A43)$$

$$J < V > = \sum_j (J_A \ell M_A m | J_B M_B) i^{-\ell} A_\ell(B_b, A_a) f_{\ell m}(r_{bB}, r_{aA}) \quad (A44)$$

ここで A_ℓ は関係する単位の種類によつて異なる量で以下にそれに関して詳しく述べる。 $f_{\ell m}$ は DWBA 1 で使っている zero-range の近似では

$$f_{\ell m} = F_\ell Y_{\ell m}^* \left(\frac{\hat{A}}{r_{aA}} \right) \delta \left(r_{bB} - \frac{M_A}{M_B} r_{aA} \right) \quad (A45)$$

のように近似される。この F_ℓ が本文(41)式で述べた Form Factor である。

(A40) ~ (A45) 及び (36) ~ (41) を用いると

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2J_B + 1}{2J_A + 1} \sum_j \frac{|A_j|^2}{5.093 \times 10^4} \sigma_j(\theta) \quad (\text{mb}/\text{st}) \quad (A46)$$

$\sigma_j(\theta)$ は (36) 式で与えられ、DWBA 1 で計算されるものである。

§ 1 非弾性散乱の A_ℓ

非弾性散乱を引き起す相互作用として通常の local force をとり spin dependence を無視すると、 V を次のように ℓ について球面展開することが出来る。

$$V = V(r, \epsilon) = \sum_\ell (-1)^{\ell-m} i^\ell V_{\ell m}(r, \epsilon) Y_{\ell, -m}(\hat{\epsilon}) \quad (A47)$$

(ϵ は A の内部座標である。)

故にこの場合の (A44) 式は次の如くなる：

$$J < J_B M_B | V | J_A M_A > = \sum_\ell (J_A \ell M_A m | J_B M_B) i^{-\ell} Y_{\ell m}^* \left(\frac{\hat{A}}{r_{aA}} \right) \times < J_B || V_\ell(r, \epsilon) || J_A > \quad (A48)$$

1-1) 集団回転運動の励起

標的核が球形からずれていて半径が核に固定した系 (body-fixed 系) でみたとき、 $\Omega' = (\theta', \varphi')$ の方向で次の式で与えられるとする：

$$R(\Omega') = R_0 \left[1 + \sum_{kq} a_{kq} Y_{kq}(\Omega') \right] \equiv R_0 + \delta R \quad (A49)$$

この変形にもなつて V が

$$V(r, \Omega') = -V_0 \left(1 + \exp \frac{r - R(\Omega')}{a} \right) \quad (A50)$$

であるとし、 V を $R = R_0$ のまわりで Taylor 展開すると

$$V = V(r - R_0) - \delta R \frac{d}{dr} V(r - R_0) + \frac{1}{2} \delta R^2 \frac{d^2}{dr^2} V(r - R_0) - \dots \\ = V^{(0)} + V^{(1)} + V^{(2)} + \dots \quad (A51)$$

($V(r - R_0) = -V_0 \left(1 + \exp \frac{r - R_0}{a} \right)$)

次に (A47) 式を用いると

$$V_{\ell m}(r, \epsilon) = i^\ell \int V Y_{\ell m}(\Omega') d\Omega' \quad (A52)$$

(A55) を space fixed 系 (Ω) で計算するために $\Omega' \rightarrow \Omega$ の変換 R を行なうとまず

$$Y_{\ell m}(\Omega') = \sum_m D_{mQ}^\ell(R^{-1}) Y_{\ell m}(\Omega) \quad (A53)$$

より (51) 式の 1 次、 2 次の項に対する $V_{\ell m}^{(1)}$, $V_{\ell m}^{(2)}$ は次のようになる。

$$V_{\ell m}^{(1)}(r, \epsilon) = -i^\ell \frac{d}{dr} V(r - R_0) \sum_q a_{kq} Y_{kq}^*(\hat{\epsilon}) D_{qm}^\ell(R) \quad (A54)$$

$$V_{\ell m}^{(2)}(r, \epsilon) = \frac{i^\ell R_0^2}{4\sqrt{\pi}} \frac{d^2}{dr^2} V(r - R_0) \sum_\mu D_{\mu m}^\ell(R) \\ \times \left\{ \sum_{k'k''} a_{k'q} a_{k''q} Y_{k''\mu}^*(\hat{\epsilon}) \left(k'k''q\mu \begin{matrix} \ell \\ \ell \mu \end{matrix} \right) (k'k''00 | \ell 0) \sqrt{\frac{(2k'+1)(2k''+1)}{2\ell+1}} \right\} \quad (A55)$$

$$\text{但し } a_{kq}^* = (-)^q a_{k-q}, \quad D_{mm}^J(R^{-1}) = (-)^{m-m'} D_{-m'-m}^J(R) \quad (A56)$$

一般に変形核の回転状態を起す波動面数は

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_{\alpha J M} = \sum_K C_K^\alpha \psi_{K J M} \\ \psi_{K J M} = \sqrt{\frac{2J+1}{16\pi^2(1+\delta_{K0})}} \{ D_{KM}^J(R) + (-)^J D_{-KM}^J(R) \} \end{array} \right. \quad (A57)$$

のように書けるが、今、quadrupole deformation をした偶核の ground state から 2^+ , 4^+ の回転状態への励起 ρ を考えると、

$$\left\{ \begin{array}{l} J_A = K_A = M_A = 0, \quad K_B = 0 \\ J_B = \ell, \quad \ell = 2, 4 \\ C_K^\alpha = C_K^\beta = \delta_{K0} \end{array} \right. \quad (A58)$$

であるから、(A48) 式の $< J_B || V_\ell(r, \epsilon) || J_A >$ は

$$< J_B || V_\ell^{(i)} || J_A > \equiv A_\ell^{(i)} F_\ell^{(i)}(r) \quad (i=1, 2) \quad (A59)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} F_\ell^{(1)}(r) = a \frac{d}{dr} \left(1 + \exp \frac{r - R_0}{a} \right)^{-1} = -f_1(r) \quad ((44) \text{式}) \\ F_\ell^{(2)}(r) = a^2 \frac{d^2}{dr^2} \left(1 + \exp \frac{r - R_0}{a} \right)^{-1} = -f_2(r) \quad ((45) \text{式}) \end{array} \right. \quad (A60)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A_2^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{5}} \left(\frac{\beta R_0 V_0}{a} \right) \quad (\beta \text{ は (A49) 式に於ける } a_{2,0} \text{ の値}) \\ A_2^{(2)} = \frac{1}{14\sqrt{\pi}} \left(\frac{\beta^2 R_0^2 V_0}{a^2} \right) \end{array} \right. \quad (A62)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A_4^{(1)} = 0 \\ A_4^{(2)} = -\frac{1}{14\sqrt{\pi}} \left(\frac{\beta^2 R_0^2 V_0}{a^2} \right) \end{array} \right. \quad (A63)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A_4^{(1)} = 0 \\ A_4^{(2)} = -\frac{1}{14\sqrt{\pi}} \left(\frac{\beta^2 R_0^2 V_0}{a^2} \right) \end{array} \right. \quad (A64)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A_4^{(1)} = 0 \\ A_4^{(2)} = -\frac{1}{14\sqrt{\pi}} \left(\frac{\beta^2 R_0^2 V_0}{a^2} \right) \end{array} \right. \quad (A65)$$

1-2) 集団振動運動の励起

集団振動の励起 K における $< J_B M_B | V | J_A M_A >$ は (A49) 式の a_{kq} を phonon 生成

消滅演算子とみなすことにより計算される。

即ち

$$\begin{cases} a_{kq} - \alpha_{kq} \\ \alpha_{kq} = \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2C_k}} [b_{kq} + (-)^q b_{k-q}^*] - (-)^q \alpha_{k-q}^* \end{cases} \quad (A66)$$

V の展開 (A51) 式の一次、二次の項に対する V_{lm} は

$$V_{lm}^{(1)} = -1^l R_0 \frac{d}{dr} V(r-R_0) \alpha_{lm}^* \quad (A67)$$

$$V_{lm}^{(2)} = \frac{1^l R_0^2}{4\sqrt{\pi}} \frac{d^2}{dr^2} V(r-R_0) \{ \sum_{k'k''q} (\alpha_{kq} \alpha_{k'm-q})^* \times (kk'qm-q|lm)(kk'00|l0) \sqrt{\frac{(2k+1)(2k'+1)}{2l+1}} \} \quad (A68)$$

Z^l -pole phonon 1個の励起をひきかこす場合の (A48) 式の $\langle J_B || V_l || J_A \rangle$ は

$$\langle J_B = l || V_l^{(1)} || J_A = 0 \rangle = A_l^{(1)} F_l^{(1)}(r) \quad (A69)$$

$$\begin{cases} F_l^{(1)}(r) = r_l(r) \quad ((44) \text{式}) \\ A_l^{(1)} = -1^l \sqrt{\frac{\hbar\omega_l}{2C_l}} \cdot \frac{R_0 V_0}{a} \end{cases} \quad (A70) \quad (A71)$$

2個の Z^k -pole phonon 励起は2次の項 $V_{lm}^{(2)}$ によつてひきかこされ

$$\begin{cases} F_l^{(2)}(r) = r_l(r) \quad ((45) \text{式}) \\ A_l^{(2)} = \frac{1^l R_0^2}{4\sqrt{\pi}} \frac{V_0}{a^2} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} (2k+1)(kk00|l0) \end{cases} \quad (A72)$$

$$\langle 2, l || \alpha_k^* || 1, k \rangle \langle 1, k || \alpha_k^* || 0, 0 \rangle \quad (A73)$$

$k=2$ phonon に対しては (A73) 式は

$$A_l^{(2)} = -\sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{V_0 R_0^2}{a^2} \frac{\hbar\omega_2}{2C_2} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{2}} & ; \quad l=0 \\ \sqrt{\frac{1}{7}} & ; \quad l=2,4 \end{cases} \quad (A74) \quad (A75)$$

1-3) Coulomb 励起

非相対論の近似で Coulomb 相互作用は

$$V^{(c)} = Z_a e \sum_{i=1}^{Z_A} \frac{e_1}{r-r_1} = 4\pi Z_a e \sum_{l,m} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} \frac{1}{2l+1} Y_{lm}(\hat{r}_1) Y_{lm}^*(\hat{r}_1) \quad (A76)$$

こゝに Z_a は入射粒子中の Proton の数, e_1 は標的核の i 番目の電荷を示す。今 $r < r_1$ に於ける Coulomb 相互作用を無視出来るものとすれば (A76) 式の (l,m) 成分は (A52) 式を用いて次のようになる。

$$\begin{cases} V_{lm}^{(c)} = \frac{1^l 4\pi Z_a e}{(2l+1)r^{l+1}} m_0(l,m) \\ m_0(l,m) = \sum_{i=1}^{Z_A} e_1 r_1^l Y_{lm}(\hat{r}_1) \end{cases} \quad (A77)$$

Vとして、先の集団励起の相互作用 $V_{lm}^{(M)}$ と (A77) の $V_{lm}^{(c)}$ との和を用いるとして

$$\begin{cases} \langle J_B || V_l^{(M)} + V_l^{(c)} || J_A \rangle = A_l^{(M)} [F_l^{(M)} - \frac{b_l}{r^{l+1}}] \\ b_l = \frac{1}{A_l^{(M)}} \frac{-1^l 4\pi Z_a e}{2l+1} \langle J_B || m_0(l) || J_A \rangle \end{cases} \quad (A78) \quad (A79)$$

この $A_l^{(M)}$ は (1-1), (1-2) で求められる $A_l^{(1)}, A_l^{(2)}$ である。こゝで Bohr et al に従つて*) (A66) 式の α_{lm} , (同時に (A49) 式 a_{kq}) が mass-moment に等しいと仮定すると

$$\alpha_{lm} = \frac{4\pi}{3A} \sum_{i=1}^{Z_A} \left(\frac{r_i}{R_c}\right)^l Y_{lm}(\hat{r}_i)^* \quad (A80)$$

故に

$$m_0(l,m) = \frac{3Z_A^l}{4\pi} R_c^l \alpha_{lm}^* \quad (A81)$$

(Z_A : 標的核の proton 数, R_c : Coulomb 相互作用の半径)

(A79) ~ (A81) より b_l を求め得るが、今、1次の相互作用 $V_{lm}^{(1)}$ による $0^+ \rightarrow l^+$ 励起にともなう b_l を求めてみると、

$$\langle J_B || V_l^{(c)} || J_A \rangle = \frac{1^l 4\pi Z_a e}{(2l+1)r^{l+1}} \cdot \frac{3Z_A^l e}{4\pi} R_c^l \langle 1, l || \alpha_l^* || 0, 0 \rangle \quad (A82)$$

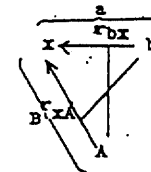
となる故 (A79) 式より

$$b_l = -\frac{3}{2l+1} Z_a Z_A e^2 \frac{a R_c^l}{V_0 R_0} \quad (A83)$$

DWBA 1ではこの b_l を用いて、(A78) 式の [] 内を form factor と呼び (A4) 式は、これを示してある。

§ 2 一粒子変換反応の A_l

こゝでは $A(a,b)B$ ($a=b+x$), ($B=A+x$) の場合の、(A46) 式の A_l についてまとめておくことにする。



(A41) の T-matrix 中の $J \langle J_B M_B | V | J_A M_A \rangle$ は

$$\begin{aligned} J \langle J_B M_B | V | J_A M_A \rangle &= \int \psi_{J_B M_B}^*(\xi, r_{bx}) V(r_{bx}) \psi_{J_A M_A}(\xi) \phi_a(r_{ax}) d\xi \\ &= \sum_l \langle J_B M_B || J_l || J_A M_A \rangle i^{-l} J_{BA}(l) u_l(r_{ax}) \\ &\quad \times Y_{lm}^*(\hat{r}_{ax}) V(r_{bx}) \phi_a(r_{bx}) \end{aligned} \quad (A84)$$

*) A. Bohr and B. Mottelson; Dan Mat. Fys. Medd. 27 16 ('53)

ここに $\phi_a(r_{bx})$ は a の bound state を示し、又 $J_{BA}(L)$, $u_j(r_{xA})$ は次の式で定義される:

$$\int \phi_{J_B M_B}^*(\epsilon, r_{xA}) \phi_{J_A M_A}(\epsilon) d\epsilon - \sum_{\ell} \langle J_A M_A m | J_B M_B \rangle J_{BA}(L) u_j(r_{xA}) (i^\ell Y_{\ell m}(\hat{r}_{xA})) \quad (A85)$$

残留核の同じ L -軌道 x と同じ粒子が n 個存在する場合には

$$S(\theta) = n [J_{BA}(\theta)]^2 \quad (A86)$$

を spectroscopic factor と呼び、 $\sqrt{S(\theta)}$ を spectroscopic amplitude と呼んでいる。

(A84) を用いて T-matrix を計算する際に、zero-range 近似を行なうと

$$V(r_{bx}) \phi_a(r_{bx}) = D_0 \delta(r_{bx}) \quad (A87)$$

$$\delta(r_{bx}) = \left(\frac{m_x(m_A+m_A)}{m_A m_B} \right)^2 \delta(r_{bB} - \frac{m_A}{m_B} r_{xA}) \quad (A88)$$

(A88) 式の右辺の m は質量を示し、 $()^{-2}$ は丁度 Jacobian J の逆数となっている。次に D_0 は $\phi_a(r_{bx})$ の満たす Schrödinger eq. を用いることが出来て以下に deuteron に対して D_0 の値を示しておく。

ϕ_a として Yukawa 型を用いた場合

$$\phi_a(r_{bx}) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \frac{e^{-\alpha r}}{r}, \quad \alpha = \frac{k^2 \mu}{2} \approx 223 \text{ MeV} \quad (A89)$$

$$D_0^2 = 8\pi \alpha^2 \approx 1018 \times 10^4 \text{ MeV}^2 \cdot \text{fm}^2 \quad (A90)$$

Hulthen 型を用いると

$$\phi_a(r_{bx}) = \sqrt{\frac{\alpha\beta(\alpha+\beta)}{2\pi(\alpha-\beta)^2}} \frac{e^{-\alpha r} - e^{-\beta r}}{r} \quad (A91)$$

$$D_0^2 = \frac{8\pi\alpha^2}{\alpha^4} \left(\frac{\alpha+\beta}{\beta} \right)^2 \approx 15 \times 10^4 \text{ MeV}^2 \cdot \text{fm}^2 \quad (A92)$$

(A44), (A45), (A84) 式を比較し、form factor $F_f(x)$ として $u_f(r_{xA})$

$(\int u_f(r_{xA})^2 r_{xA}^2 dr_{xA} = 1)$ を用いると A_f は次のようになる。

$$A_f = J_{BA}(\theta) D_0 \quad (A93)$$

(A86) 式の上で述べた如く、 $n \geq 2$ の場合は上式を \sqrt{n} 倍したものが A_f である。

これより

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2J_B+1}{2J_A+1} \sum_f S_f(\theta) \frac{D_0^2}{5.093 \times 10^4} \sigma_f(\theta) \text{ (mb/st)} \quad (A94)$$

D_0 として (A90) を用いると

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2J_B+1}{2J_A+1} \sum_f S_f(\theta) 2 \sigma_f(\theta) \text{ (mb/st)} \quad (A95)$$

又 (A92) を用いた場合は上式の右辺を 15 倍してあげれば良い。

(V) 計算に際して binary card, 入力データーカード以外に必要なカードについて

第 2 章, 第 3 章の要領で: 「ELASTIC SCAT」又は「DWBA 1」の入力カードが出来たら、次の順にカードを重ねて計算センターに提出する。

1) IDENTIFICATION CARD (ID カード)

このカードには、他の人の計算プログラムと混同しない様に、計算する人の氏名や、プログラムの名称等をさん孔する (Table II の page 4, ①の要領でつくる。冒頭の数値は、計算センターと契約する際に定められる作業番号である)。

2) XEQ カード

完成されたプログラム (binary card) を使って実際に計算することを計算機に指示するためのものである。(Table II (a) の page 4, ③)。

3) Binary card

核研に保管されている「ELASTIC SCAT」又は「DWBA 1」の card deck である。

4) DATA カード

Table II (a), Table VI, Table VII の冒頭にあるカード番号 0 のカードで、以下のカードは、入力データーカードであることを指示するものである。

5) 入力データーカード

Fig. 1 [ELASTIC SCAT] BLOCK DIAGRAM

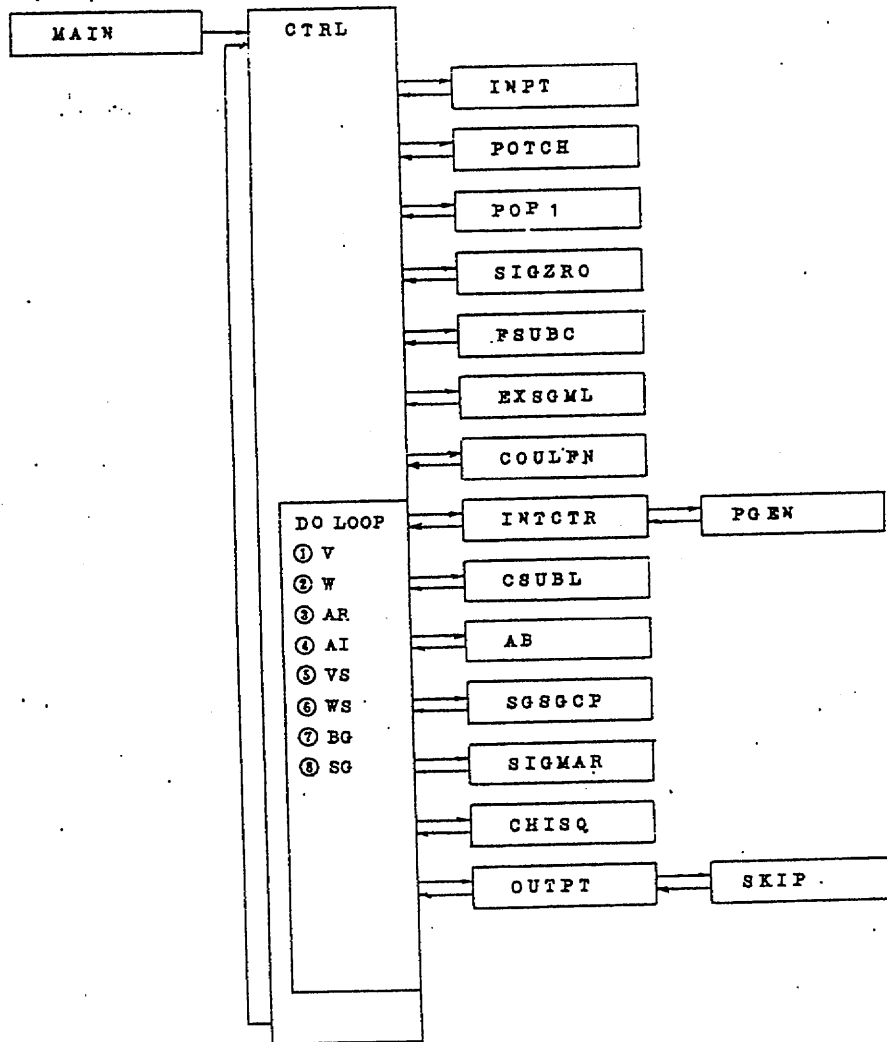
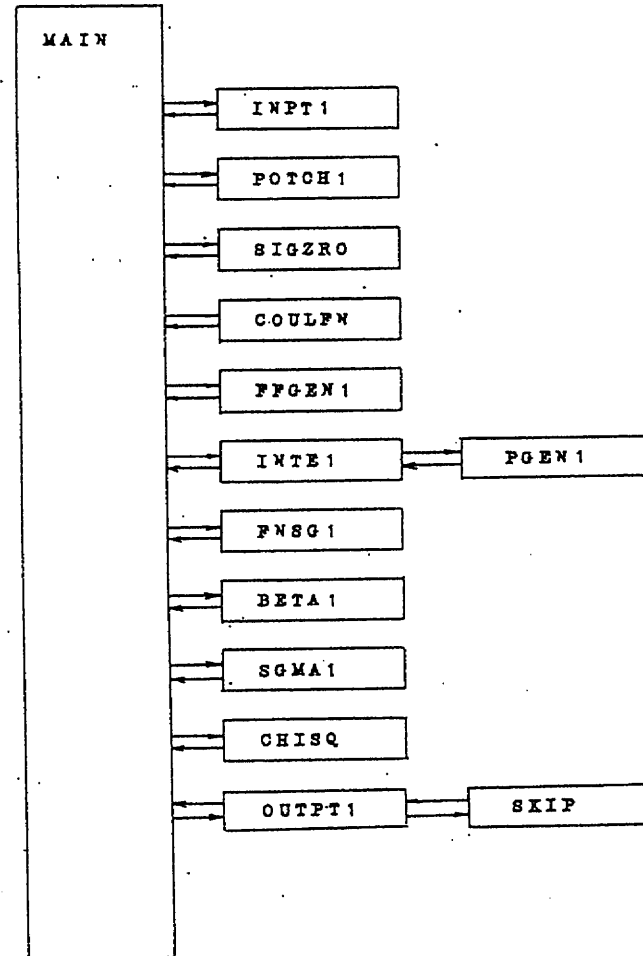


Fig. 2 DWBA 1 BLOCK DIAGRAM



実験室系で p_1 と p_2 の間の角を θ_1 , 重心系で k' と k との間の角を θ_1^* とすると

$$\tan \theta_1 = \frac{1}{(E_1 + m_1 c^2)/E} \cdot \frac{\sin \theta_1^*}{\cos \theta_1^* + (v^*/v_1^*)}$$

ここで, v_1^* は重心系における粒子 1 の速度で $v^* = k'c^2/E_1^*$

(2) 二体崩壊: 質量 m の粒子が 2 つの粒子 m_1, m_2 に崩壊する場合:

m の静止系における 2 つの粒子のエネルギーは

$$E_1^* = \frac{(m^2 + m_1^2 - m_2^2)c^2}{2m}$$

$$E_2^* = \frac{(m^2 + m_2^2 - m_1^2)c^2}{2m}$$

粒子 1, 2 の運動量 k は, 大きさが等しく方向が反対で $ck = (E_1^{*2} - m_1^2 c^4)^{1/2} = (E_2^{*2} - m_2^2 c^4)^{1/2}$

7 量子力学

7.1 光の粒子性

光電効果 $\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W$

(W : 仕事関数, $E = h\nu$: 光子のエネルギー, h : プランク定数)

コンプトン効果 (自由電子による光の散乱)

$$\Delta\lambda = \lambda_1 - \lambda_0 = \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta)$$

$$= \frac{2h}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

($h\nu/c = h/\lambda$: 光子の運動量, θ : 散乱角, λ_1 : 散乱光の波長, λ_0 : 入射光の波長)

コンプトン波長 $\lambda_c = \frac{h}{mc}$

7.2 水素原子スペクトルとボーアの理論

リュードベリの公式

水素原子について

$$\frac{1}{\lambda} = R_\infty \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (m < n)$$

リュードベリ定数 $R_\infty = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

($m=1$: ライマン系列, $m=2$: バルマー系列,

$m=3$: パッシュェン系列, $m=4$: ブラケット系列)

ボーアの理論

$$\begin{cases} L = mvr = n\hbar \\ E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \end{cases}$$

エネルギー準位

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (n=1, 2, \dots)$$

ボーア半径

$$a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$$

ボーア速度

$$v_0 = 2.18 \times 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

7.3 波動力学

シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right\} \psi$$

$\psi = u(r) \exp(-i(E/\hbar)t)$ として

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right\} u(r) = Eu(r)$$

不確定性原理

位置 x と運動量 p の不確定性

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$$

時間 t とエネルギー E の不確定性

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar$$

運動量演算子 $p = -i\hbar \nabla$

角運動量演算子 $L = (r \times p)$

7.4 確率と規格化

$|\psi|^2$ は時刻 t で位置 r に粒子を見いだす確率規格化条件

$$\int |\psi(r, t)|^2 dV = 1$$

確率密度

$$P = |\psi(r, t)|^2$$

確率流密度

$$S = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \text{grad} \psi - \psi \text{grad} \psi^*)$$

確率の保存

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \text{div} S = 0$$

7.5 角運動量, スピン, 磁気モーメント

原子内電子の角運動量 L

$$L = |L| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

$$(l=0, 1, \dots, n-1)$$

$$L_z = m_l \hbar \quad (-l \leq m_l \leq l)$$

(l : 方位量子数, m_l : 磁気量子数)

軌道磁気モーメント

$$\mu_l = \frac{\mu_0 e \hbar}{2m} \cdot \frac{L_z}{\hbar} = \mu_B m_l$$

$$\left(\mu_B = \frac{\mu_0 e \hbar}{2m} : \text{ボーア磁子} \right)$$

電子のスピン角運動量 S

$$S = |S| = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad (s=1/2)$$

$$S_z = m_s \hbar \quad (m_s = -1/2, 1/2)$$

(s : スピン量子数, m_s : スピン磁気量子数)

スピン磁気モーメント

$$\mu_s = 2\mu_B m_s$$

パウリのスピン行列

$$S = \frac{1}{2} \sigma \quad (S_x, S_y \text{ を対角化する表示で})$$

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

7.6 一次元調和振動子の例

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

$n=0$ のとき

$$E_0 = \hbar\omega \times \frac{1}{2} \quad (\text{ゼロ点振動})$$

固有関数

$$u_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2} H_n(\alpha x) \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2\right)$$

(ここに $\alpha = (m\omega/\hbar)^{1/2}$, $H_n(\alpha x)$ はエルミート関数)

7.7 水素原子の例

$$\psi = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$R_{10}(r) = a_0^{-3/2} 2 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

$$R_{20}(r) = (2a_0)^{-3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$$

$$R_{21}(r) = (2a_0)^{-3/2} \left(\frac{r}{\sqrt{3} a_0} \right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$$

7.8 摂動論

時間を含まない場合 (縮退していない場合)

$$E_k = E_k^0 + \langle k | H_1 | k \rangle + \sum_{n \neq k} \frac{\langle n | H_1 | k \rangle \langle k | H_1 | n \rangle}{E_k^0 - E_n^0} + \dots$$

$$\psi_k = \psi_k^0 + \sum_{n \neq k} \frac{\langle n | H_1 | k \rangle}{E_k^0 - E_n^0} \psi_n^0 + \dots$$

(H_1 : 摂動ハミルトニアン)

時間を含む場合

$$\psi_k^0 \rightarrow \psi_k^0 \text{ への遷移確率 } W_{k-l}$$

$$W_{k-l} = |C_l(T)|^2$$

$$\text{ここで, } C_l(T) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^T dt \langle \psi_l^0 | H_1(t) | \psi_k^0 \rangle \times e^{i(E_l^0 - E_k^0)t/\hbar}$$

7.9 散乱問題

散乱振幅

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

(δ_l : 位相のずれ)

部分断面積

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

全断面積

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

ボルン近似

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi} \int d^3 r e^{i(k-k_0) \cdot r} V(r)$$

(k_0 と k_1 はそれぞれ入射, 散乱の波数ベクトル)

クーロン場による散乱

$$f(\theta) = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 m v^2} \text{cosec}^2 \frac{1}{2} \theta$$

表 1 国際単位系 (Système International d'Unités, 略称 SI; 英語 International System of Units)

A. SI 基本単位 (unité SI de base, 英語 SI base unit)

物理量	単位の名称	単位記号	定 義
長 さ	メートル	m	光が (1/299 792 458) s の時間に真空中を伝わる行程の長さ ¹⁾
質 量	キログラム	kg	国際キログラム原器の質量
時 間	秒	s	¹³³ Cs の原子の基底状態の 2 つの超微細準位の間の遷移に対応する放射の 9 192 631 770 周期の継続時間
電 流	アンペア	A	真空中に 1 m の間隔で平行に置かれた無限に小さい円形断面積を有する無限に長い 2 本の直線状導体のそれぞれを流れ、これらの導体の長さ 1 m ごとに 2×10^{-7} N の力を及ぼし合う一定の電流
熱力学温度	ケルビン	K	水の三重点の熱力学温度の 1/273.16
物質質量	モ ル	mol	0.012 kg の ¹² C の中に存在する原子の数と等しい数の要素粒子 ²⁾ を含む系の物質質量
光 度	カンデラ	cd	周波数 540×10^{12} Hz の単色放射を放出し、所定の方向での放射強度が (1/683) W/sr であるような光源の、その方向での光度

1) 1983年の新定義。それ以前の定義は、⁸⁶Krの原子の準位 2p_{1/2} と 5d_{5/2} との間の遷移に対応する放射の、真空中での波長の 1 650 763.73 倍に等しい長さ。” 2) entité élémentaire の訳。

B. SI 補助単位 (unité SI supplémentaire, 英語 SI supplementary unit)

物理量	単位の名称	単位記号	定 義
平面角	ラジアン	rad	円の周上でその半径に等しい長さの弧を切りとる 2 本の半径の間に含まれる平面角
立体角	ステラジアン	sr	球の中心を頂点とし、その球の半径を 1 辺とする正方形の面積に等しい面積をその球の表面上で切りとる立体角

C. SI 組立単位 (unité SI dérivée, 英語 SI derived unit) のうち固有の名称をもつもの

物理量	単位の名称	単位記号	基本単位、補助単位の乗べきの積で表した場合の乗べきの数値									他の SI 単位での表現(例)		
			m	kg	s	A	K	mol	cd	rad	sr			
周波数	ヘルツ	Hz			-1									
力	ニュートン	N	1	1	-2									
圧力、応力	パスカル	Pa	-1	1	-2									N·m ⁻²
エネルギー、仕事、熱量	ジュール	J	2	1	-2									N·m
仕事率 ¹⁾ 、放射束	ワット	W	2	1	-3									J·s ⁻¹
電気量、電荷	クーロン	C			1	1								
電圧、電位(差)、起電力	ボルト	V	2	1	-3	-1								W·A ⁻¹
電気容量 ²⁾	ファラド	F	-2	-1	4	2								C·V ⁻¹
電気抵抗	オーム	Ω	2	1	-3	-2								V·A ⁻¹
(電気)コンダクタンス	ジーメンズ	S	-2	-1	3	2								A·V ⁻¹
磁束	ウェーバ	Wb	2	1	-2	-1								V·s
磁束密度	テスラ	T		1	-2	-1								Wb·m ⁻²
インダクタンス	ヘンリー	H	2	1	-2	-2								Wb·A ⁻¹
セルシウス温度	セルシウス度	°C						1						
光 束	ルーメン	lm									1		1	
照 度	ルクス	lx	-2								1		1	lm·m ⁻²
(放射性核種)の放射能	ベクレル	Bq			-1									
吸収線量、質量エネルギー分与、カーマ ³⁾ 、吸収線量指標	グレイ	Gy	2		-2									J·kg ⁻¹
線量当量、線量当量指標	シーベルト	Sv	2		-2									J·kg ⁻¹

D. SI 接頭語 (préfix SI, 英語 SI prefix)

接頭語	記号	倍数
エクサ	E	10 ¹⁸
ペタ	P	10 ¹⁵
テラ	T	10 ¹²
ギガ	G	10 ⁹
メガ	M	10 ⁶
キロ	k	10 ³
ヘクト	h	10 ²
デカ	da	10
		1
デシ	d	10 ⁻¹
センチ	c	10 ⁻²
ミリ	m	10 ⁻³
マイクロ	μ	10 ⁻⁶
ナノ	n	10 ⁻⁹
ピコ	p	10 ⁻¹²
フェムト	f	10 ⁻¹⁵
アト	a	10 ⁻¹⁸
(追加予定)		
ヨタ	Y	10 ²⁴
ゼタ	Z	10 ²¹
ゼプト	z	10 ⁻²¹
ヨクト	y	10 ⁻²⁴

人の健康保護のために認められた固有の名称をもつ組立単位

1) 工率ともいう。 2) 静電容量ともいう。 3) ケルマともいう。

表 2 国際単位系 (SI) 以外の諸単位およびそれらと SI の単位との関係 (1)

太字は SI と併用される単位, 下線付は暫定的に SI との併用を許される単位. その他は, SI の立場からは推奨しがたい単位. = : 定義または協約として正確に等しい, ≈ : 近似的に等しい.

A. 空間・時間

メートル系 (ただし SI 以外)			ヤード・ポンド系			尺貫系			
量	単位(記号)	SI での値	量	単位(記号)	相互関係 SI での値	量	単位	相互関係 SI での値	
長	フェルミ	= 1 fm	長	ミル mil	= 10 ⁻³ in = 25.4 μm	長さ	厘	= 0.1 分 ≈ 0.303 mm	
	X線単位	≈ 100.2 fm		インチ in	= (1/12) ft = 25.4 mm		分(ぶ)	= 0.1 寸 ≈ 3.030 mm	
	オングスト	= 0.1 nm		フート ft	= 30.48 cm		寸	= 0.1 尺 ≈ 30.303 mm	
	ローム Å	= 0.1 nm		ヤード yd	= 3 ft = 91.44 cm		尺	= (10/33)m ≈ 30.303 cm	
	ミクロン μ	= 1 μm		ファゾム	= 6 ft ≈ 1.829 m		間	= 6 尺 ≈ 1.818 m	
	海里 M, nm,	= 1.852 km		チェーン	= 22 yd ≈ 20.117 m		丈	= 10 尺 ≈ 3.030 m	
	天文単位 AU	= 149.597 870 Gm		マイル mile	= 1760 yd ≈ 1.609 km		町	= 60 間 ≈ 109.09 m	
	光年 l.y.	≈ 9.461 Pm		面積	エーカー acre		= 4 840 yd ² ≈ 4.047 m ²	里	= 36 町 ≈ 3.927 km
	パーセク pc	≈ 30.857 Pm			体積		英・液用オンス oz fl	≈ 28.413 cm ³	鯨尺厘
	バーン b	= 10 ² fm ²		英パイント pt			≈ 568.26 cm ³	鯨尺分	= 0.1 鯨尺寸 ≈ 3.788 mm
アール a	= 10 ² m ²	英クオート qt	≈ 1.137 dm ³	鯨尺寸		= 0.1 鯨尺尺 ≈ 37.879 mm			
ヘクタール ha	= 10 ⁴ m ²	英ガロン gal	≈ 4.546 dm ³	鯨尺尺		= (5/4) 尺 ≈ 37.879 cm			
λ	= 10 ⁻⁹ m ³	米・液用オンス oz fl	≈ 29.57 cm ³	合		= 0.1 坪 ≈ 0.331 m ²			
リットル l, L	= 1 dm ³	米・液用パイント liq pt	≈ 473.18 cm ³	坪		= 1 間 ² ≈ 3.306 m ²			
ステール st	= 1 m ³	米・穀用パイント dry pt	≈ 550.61 cm ³	歩(ぶ)		= " ≈ "			
分(ふん) min	= 60 s	米・液用クオート liq qt	≈ 0.946 dm ³	畝(せ)		= 30 歩 ≈ 0.992 dam ²			
時 h	= 3 600 s	米・穀用クオート dry qt	≈ 1.101 dm ³	反		= 10 畝 ≈ 9.917 a			
日 d	= 86 400 s	米ガロン gal	≈ 3.785 dm ³	町		= 10 反 ≈ 0.992 hm ²			
角	秒 " = (π/648 000) rad	≈ 4.848 μrad	米ブッシュェル bu	≈ 35.239 dm ³	体積	石	= 10 立方尺 ≈ 0.278 m ³		
	分 ' = (π/10 800) rad	≈ 0.291 mrad	米・液用バレル bbl	≈ 119.24 dm ³		立坪	= (6 尺) ³ ≈ 6.011 m ³		
	度 ° = (π/180) rad	≈ 17.453 mrad	米・石油バレル bbl	≈ 158.99 dm ³		勺	= 0.1 合 ≈ 18.039 cm ³		
	点 pt = (π/16) rad	≈ 0.196 rad	米・穀用バレル bbl	≈ 115.63 dm ³		合	= 0.1 升 ≈ 180.39 cm ³		
	直角 ⊥ = (π/2) rad	≈ 1.571 rad	ガロン [計量法]	≈ 3.785 43 dm ³		升	= 64 827 分 ³ ≈ 1.803 9 dm ³		
グレード * ゴン gon	$\frac{\pi}{200}$ rad ≈ 15.71 mrad			斗	= 10 升 ≈ 18.039 dm ³				
				石	= 10 斗 ≈ 180.39 dm ³				

B. 運動

メートル系 (ただし, SI 以外)			ヤード・ポンド系		
量	単位(記号)	SI での値	量	単位(記号)	SI での値
速度	メートル毎分 m/min	≈ 1.666 7 cm/s	速度	フート毎秒 ft/s	= 0.304 8 m/s
	メートル毎時 m/h	≈ 0.277 8 mm/s		フート毎分 ft/min	= 5.08 mm/s
	キロメートル毎時 km/h	≈ 0.277 8 m/s		マイル毎時 mile/h	≈ 0.447 0 m/s
	ノット = 1 海里毎時 = 1.852 km/h	≈ 0.514 4 m/s		加速度	フート毎秒毎秒 ft/s ²
角速度	秒毎秒 "/s	≈ 4.848 μrad/s	体積流	立方フート毎秒 ft ³ /s	≈ 28.317 dm ³ /s
	分毎秒 '/s	≈ 0.291 mrad/s		立方フート毎分 ft ³ /min	≈ 0.472 dm ³ /s
	度毎秒 °/s	≈ 17.453 mrad/s		立方フート毎時 ft ³ /h	≈ 7.866 cm ³ /s
加速度	ガル Gal	= 0.01 m/s ²		英ガロン毎秒 gal/s	≈ 4.546 dm ³ /s
	ミリガル mGal	= 0.01 mm/s ²		英ガロン毎分 gal/min	≈ 75.768 cm ³ /s
角加速度	秒毎秒毎秒 "/s ²	≈ 4.848 μrad/s ²		英ガロン毎時 gal/h	≈ 1.263 cm ³ /s
	分毎秒毎秒 '/s ²	≈ 0.291 mrad/s ²		米ガロン毎秒 gal/s	≈ 3.785 dm ³ /s
	度毎秒毎秒 °/s ²	≈ 17.453 mrad/s ²		米ガロン毎分 gal/min	≈ 63.090 cm ³ /s
周波数	サイクル毎秒 c/s, c, ~	= 1 Hz		米ガロン毎時 gal/h	≈ 1.052 cm ³ /s
体積流	立方メートル毎分 m ³ /min	≈ 16.667 dm ³ /s		ガロン毎秒 [計量法]	= 3.785 43 dm ³ /s
	立方メートル毎時 m ³ /h	≈ 0.278 dm ³ /s	米・石油用バレル毎秒	≈ 158.99 dm ³ /s	
	リットル毎秒 l/s, L/s	= 1 dm ³ /s	米・石油用バレル毎分	≈ 2.650 dm ³ /s	
	リットル毎分 l/min, L/min	≈ 16.667 cm ³ /s	米・石油用バレル毎時	≈ 44.163 cm ³ /s	
	リットル毎時 l/h, L/h	≈ 0.278 cm ³ /s			

注) 英, 米を区別する記号 UK, US は省略する.

表 2 国際単位系 (SI) 以外の諸単位およびそれらと SI の単位との関係 (2)

C. 質量・密度

メートル系 (ただし SI 以外)			ヤード・ポンド系			尺貫系		
量	単 位(記号)	SIでの値	量	単 位(記号)	SIでの値	量	単 位	SIでの値
質 量	グラム ¹⁾ g	= 10 ⁻³ kg	質 量	グレイン gr	≈ 64.799 mg	質 量	厘	= 0.1 分 = 37.5 mg
	ト ン t	= 10 ³ kg		(常用)オンス oz	≈ 28.350 g		分(ぶ)	= 0.1 匁 = 37.5 mg
	(統一)原子質量単位 ²⁾ u	≈ 1.660 57 × 10 ⁻²⁷ kg		薬用オンス oz ap	≈ 31.104 g		匁 ⁴⁾	= 10 ⁻³ 貫 = 3.75 g
	カラット ³⁾ car, ct	= 200 mg		(常用)ポンド lb	≈ 0.453 6 kg		斤	= 160 匁 = 600 g
グラム毎立方センチメートル g/cm ³	= 1 Mg·m ⁻³	薬用ポンド lb ap	≈ 0.373 kg	貫	= (15/4) kg = 3.75 kg			
密 度	グラム毎立方センチメートル	= 1 Mg·m ⁻³	密 度	ポンド[計量法] lb	= 0.453 592 43 kg	1) SI 単位の 10 の整数乗倍の 1 つ。 2) 値は実験で定められる。ここに示すのは 1981 年文書の値。 3) メートル系カラット。 4) 記号 mon で表すことがある。		
	キログラム毎リットル kg/l	= 1 Mg·m ⁻³		英トン	≈ 1.016 Mg			
	トン毎立方メートル t/m ³	= 1 Mg·m ⁻³		米トン	≈ 0.907 Mg			
				(常用)ポンド毎立方フット lb·ft ⁻³	≈ 16.02 kg·m ⁻³			

D. 力 学

量	絶対系 (ただし SI 以外)		重力(工学)系			
	単 位(記号)	SIでの値	メートル系		ヤード・ポンド系	
			単 位(記号)	SIでの値	単 位(記号)	SIでの値
力	ダイン dyn	= 10 ⁻⁵ N	重量キログラム kgf, kgw	= 9.806 65 N	重量ポンド lbf	≈ 4.448 N
	メガダイン Mdyn	= 10 N	重量グラム gf, gw	= 9.806 65 mN	パウンドル pdl	= 1 ft·lb·s ⁻² ≈ 0.138 25 N
	ステーナ sn	= 1 kN	重量トン tf, tw	= 9.806 65 kN		
圧 力	バール bar, b	= 0.1 MPa	重量キログラム毎平方メートル kgf·m ⁻²	= 9.806 65 Pa	重量ポンド毎平方インチ lbf·in ⁻² , psi	≈ 6.895 kPa
	ミリバール mb	= 1 hPa	重量キログラム毎平方センチメートル kgf·cm ⁻²	= 98.066 5 kPa	水銀柱フット ftHg	≈ 40.64 kPa
	水銀柱ミリメートル ¹⁾ mmHg	≈ 133.3 Pa	工学気圧 at	= 98.066 5 kPa	水銀柱インチ inHg	≈ 3.386 kPa
	トル ¹⁾ Torr, torr	≈ 133.3 Pa			水柱フット ftH ₂ O	≈ 2.989 kPa
	水銀柱メートル mHg	≈ 133.3 kPa			水柱インチ inH ₂ O	≈ 0.249 kPa
	水柱ミリメートル mmH ₂ O	≈ 9.807 Pa	1) mmHg と Torr とは事実上では等しいが、密度 ρ = 13 595.1 kg/m ³ , 重力加速度 g = 9.806 65 m/s ² , 高さ h = 1 mm の液柱の圧力 ρgh = 133.322 387 4 kPa, 一方, 1 atm = 101.325 kPa の 1/760 = 133.322 368 4 kPa。			
	水柱メートル mH ₂ O	≈ 9.807 kPa				
気圧 atm	= 101.325 kPa					
仕 事 率	電子ボルト ²⁾ eV	≈ 1.602 18 × 10 ⁻¹⁹ J	重量キログラムメートル kgf·m	= 9.806 65 J	フット重量ポンド ft·lbf	≈ 1.355 8 J
	ワット時 Wh	= 3.6 kJ	重量キログラムメートル毎秒 kgf·m·s ⁻¹	= 9.806 65 W	フット重量ポンド毎秒 ft·lbf·s ⁻¹	≈ 1.355 8 W
	キロワット時	= 3.6 MJ	仏馬力 PS = 75 kgf·m·s ⁻¹	≈ 735.5 W	英馬力 hp, HP = 550 ft·lbf·s ⁻¹	≈ 745.7 W
	エルグ	= 10 ⁻⁷ J	[計量法]	= 735.5 W	[計量法]	= 746 W
粘 度	ポアズ P	= 0.1 Pa·s	重量キログラム秒毎平方メートル kgf·s·m ⁻²	= 9.806 65 Pa·s	重量ポンド秒毎平方インチ lbf·s·in ⁻²	≈ 6.895 kPa·s
	センチポアズ cP	= 1 mPa·s				
動 粘 度	ストークス St	= 10 ⁻⁴ m ² ·s ⁻¹	2) 値は実験で定められる。ここに示すのは 1981 年文書の値。 3) 工率ともいう。			
	センチストークス cSt	= 10 ⁻⁶ m ² ·s ⁻¹				

E. 熱

量	メートル系		ヤード・ポンド系	
	単 位(記号)	SIでの値	単 位(記号)	SIでの値
温 度	セルシウス度	ケルビン	(カ氏温度 t _c - 32) × (5/9)	
	また 度	K	= セルシウス温度 t (°C)	
熱 量	カロリー ¹⁾ cal	≈ 4.185 5 J	英熱量 BTU, Btu	≈ 1.055 kJ
	カロリー毎キログラム毎度 cal/(kg·°C)	≈ 4.186 J/(kg·K)	英熱量毎ポンド毎ランキン度 BTU/(lb·°R)	≈ 4.187 mJ/(kg·K)
熱 伝 導 率	カロリー毎時毎メートル毎度 cal/(h·m·°C)	≈ 1.163 mW/(m·K)	英熱量毎時毎フット毎カ氏度 BTU/(h·ft·°F)	≈ 1.731 W/(m·K)

1) さまざまな定義がある。これは、いわゆる 15°C カロリーの値。

F. 電磁気 (付録の表 16 を見よ)

G. 測 光

量	単 位(記号)	SIでの値
照 度	フォト ph	= 10 ⁴ lx
	ニト nt	= 1 cd·m ⁻²
輝 度	スチルブ sb	= 10 ⁴ cd·m ⁻²
	アポストルブ asb	= (1/π) cd·m ⁻²

H. 電離性放射線

量	単 位(記号)	SIでの値
放 射 能	キュリー Ci	≈ 3.7 × 10 ¹⁰ Bq
照 射 線 量	レントゲン R	≈ 2.58 × 10 ⁻⁴ C·kg ⁻¹
吸 収 線 量	ラド rad, rd	= 10 ⁻² Gy
線 量 当 量	レム rem	= 10 ⁻² Sv