

量子力学

第1部 量子力学の基礎部分

はじめに	2
光量子 / 物質波	3
波動方程式の一般化 (シュレディンガー方程式)	4
量子力学の定式化	5
保存量	7
不確定性原理	8
ハイゼンベルクの運動方程式	9
マトリックスによる表現	11
ディラックのブラケット記法	14
中心力場	20
軌道角運動量	22
角運動量の一般的扱い	24
スピン	26
角運動量の合成	27
ボソンとフェルミオン	30
相対論的量子力学	31
相対論的共変性とスピノル	36

第2部 場の量子論

場の量子論	41
場の正準方程式	42
生成演算子と消滅演算子	46
場の量子化——いくつかの例	49
Noether の定理 (対称性と保存量)	55
対称性の自発的破れ (相互作用と対称性)	57
ゲージ場の理論	60
くりこみ理論	62

第3部 ゲージ場の理論

はじめに

微視世界では、光や電子などが「粒子」としての顔と「波」としての顔を併せもつ。量子力学は、1920年代半ばに築かれ、これまでの1つの物理状態を完全に予測できる古典力学とは異なる世界像をもたらした。粒子の状態は重ね合わせ（確定的ではなく重ね合わせた状態）、その様子が波として表される。ところが、粒子を観測したとたん重なりが消え、1つの状態に収束する——— そのような世界像である。

粒子として考えると、古典的な軌道をもった質点といったイメージは通用しなくなる。相互作用などで1個、2個と数えられるぐらいの粒子であり、その位置などに関しては、あいまいな確率論として議論することになる。一方、波動として考えると、観測によって一挙に波動が収束するという奇妙な世界をみることになる。哲学的にもさまざまな議論の対象となったが、言語学としてみれば、私たちはこれまで使ってきた言語（粒子とか波動とか）を使ってしかこの世界をみる以外なく、その言語体系の制約（私たちは、言語によって世界を分節している存在）のなかにいるということになるのだろうか。新しい言語=記号によって、もっとよい、完璧な解決法が見つかるにちがないという考え方（例えばアインシュタイン）もあるにはあるが、それを待ちつづけてもたぶん、かなた宇宙の未知生物がその言語体系によってアプローチするときのみなんらかのことが言えるにすぎないのであろう。

量子力学は、独自に組み立てられるのではなく、古典力学を必要とする。しかし、それらを駆使して組み立てられる量子力学は、古典力学を超える世界観（パラダイムチェンジ）を必要とする。

状態の収縮 https://www.kyoto-su.ac.jp/project/st/st04_04.html

1つの電子は同時にこの「上向きスピン」と「下向きスピン」の両方の状態を持つことができるのです。これを電子が「上向きスピン状態」と「下向きスピン状態」の重ね合わせた状態にあるとといいます。これが量子力学のいう重ね合わせの一例です。観測するまではどちらの状態にあるのかは分かりませんが、観測することで、重ね合わせ状態からどちらかの確定した状態へと変わります。この変化を「状態の収縮」と呼びます。

この重ね合わせの真の不思議さは2つの粒子の重ね合わせにおいて決定的になります。それが量子もつれ（量子エンタングルメント）という状態です。これは、先ほどの1粒子の重ね合わせが2つペアになった状態の特別な場合です。たとえば、ペアになった粒子Aと粒子Bのそれぞれのスピンの向きが「Aが上向き・Bが下向き」と「Aが下向き・Bが上向き」との重ね合わせ状態を形成している場合です。このような場合、一方の粒子を観測してその状態が分かれば、もう一方の粒子の状態は観測するまでもなく、決まってしまうのです。たとえば、Aが下向きだと観測されれば、その瞬間Bは上向き状態に決まります。これは状態の瞬間収縮により瞬時に起こります。

エンタングルメントの関係にある2つの粒子は、どんなに離れていても、この性質を示します。しかも、これは一瞬で起きるため、2つの粒子の間に何かの作用を伝達するような粒子がある、というわけでもありません。何光年と離れていても一瞬で伝わるのですから、もしも何らかの粒子が媒介しているのであれば、その粒子は光の速度を超えていることになり、現在の理論では説明ができません。この量子エンタングルメントによる粒子間の遠く離れた相関を予言する量子力学の性質のことを「量子力学の非局所性」といいます。

光量子仮説 (アインシュタインの関係式)

光は干渉や回折の現象を示し、電磁波の 1 種と考えられていたが、1905 年 アインシュタインは、光を受けた物質が電子を出す光電効果を、光を 1 粒、2 粒と数える光量子の考え方で説明した。振動数 ν の光をエネルギー $h\nu$ (h はプランク定数) の粒子とみなすのである。

光電効果

ある種の金属に振動数の大きな光 (たとえば青い光) を当てると、電子が飛び出すという現象のことである。振動数の小さな光 (たとえば赤い光) をいくら長時間当てても、電子は飛び出さない。ある一定の振動数以上の光を当てた時のみ、電子が飛び出す。

- 光の強度を強くする (明るい光を当てる) と飛び出す電子の数が増えるが、運動エネルギーは変わらない。
- ある振動数以下の光では電子が飛び出さない。
- 光の振動数を高くすると、飛び出す電子の運動エネルギーが大きくなる。ただし飛び出す電子の個数に変化はない。

この結果は光の波動説では説明できない。光を波と考えると、強い光の波を当てれば飛び出す電子のエネルギーは大きくならなければならないのに、強い光の波を当てても、電子の数は増えるが、電子のエネルギーは同じである。つまり、強い光であろうが、弱い光であろうが、振動数が同じなら、飛び出す電子のエネルギーは一定なのである。また、飛び出す電子のエネルギーを大きくするには、当てる光の振動数を大きくすればいいというのも説明できなかった。なぜなら、振動数は光の色を決めるもので、エネルギーとは関係がないと考えられていたからだ。

アインシュタインの仮説

ある振動数 ν をもつ光は、 $h\nu$ の整数倍のエネルギーしか持てない。つまり、振動数 ν の光は、1 つが $h\nu$ のエネルギーをもった粒子である。

$$E = h\nu \quad \text{光子のエネルギー}$$

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad \text{光子の運動量}$$

物質波 (ド・ブロイ仮説)

1924 年、ド・ブロイはド・ブロイ波の仮説を発表した。この仮説は光子だけではなく全ての物質が波動性を持つ (アインシュタインの光量子説でこれまで波と考えられてきた光が、「粒子」としても考えられるのであれば、逆に、今まで物質 (粒子) として考えられていた電子なども、波の性質を持っているのではないかとするもので、波長 λ と運動量 p を次の式で関係付けた。

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

これは、アインシュタインの関係式の一般化である。

ド・ブロイの式は 3 年後に電子について電子回折の観察をする実験によって検証された。

$$\begin{cases} \lambda = \frac{h}{p} \\ \nu = \frac{E}{h} \end{cases}$$

$$\psi(x, t) = a \exp\left\{2\pi i \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)\right\}$$

$$= a \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right\} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\psi(\mathbf{r}, t) = a \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right\}$$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi \\ \frac{\hbar}{i} \nabla \psi = \mathbf{p}\psi \quad \nabla = \text{grad} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) \end{cases}$$

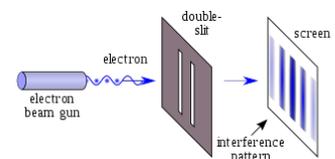
$$E = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad \text{より (非相対論)、}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(\mathbf{r})\psi \quad \Delta = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$= \hat{H}\psi$$

二重スリット実験

量子の波動性と粒子性の問題を典型的に示す二重スリット実験は、1961 年にテュービンゲン大学のクラウス・エノンソンによって複数の電子を用いて行われたのが最初であり、「一回に一個の電子」を用いる形での実験は 1974 年になってピエール・ジョルジョ・メルリらによってミラノ大学で行われた。重要なのは後者の実験で、1 個づつ電子を打ち込んでも干渉縞 (波動性) が現れたことである。



波動方程式の一般化 (シュレディンガー方程式)

$H = E$ (ハミルトン関数 $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$) で、

$\mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$ 、 $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ とおきかえ、 ψ に作用させると得られる。

ハミルトニアンは系全体のエネルギーを表す関数。

例えばポテンシャルエネルギーが U 、運動量 p 、質量 m の物体のハミルトニアンは、 $H = \frac{p^2}{2m} + U$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \text{時間を含むシュレディンガー方程式}$$

$\psi = \varphi(\mathbf{q}) T(t)$ において (変数分離の方法)、両辺を $\psi = \varphi T$ で割る。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi} \Delta \varphi + U = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{T} \frac{dT}{dt}$$

左辺は x, y, z だけの関数、右辺は t だけの関数なので、これらが等しいためには、両方とも定数でなければならない。これを E とおくと、次の2つの微分方程式が得られる。

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi + U \varphi = E \varphi & \dots\dots ① \\ \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E & \dots\dots ② \end{cases}$$

$$\text{②より、} T = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right)$$

$\psi(\mathbf{q}, t) = \varphi(\mathbf{q}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right)$ より改めて、

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi + U \varphi = E \varphi & \text{時間によらないシュレディンガー方程式。}\hat{H}\text{の固有関数が}\varphi\text{で、固有値}E \\ i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E \psi & \psi\text{が}\hat{E}\text{の固有関数で、固有値}E \end{cases}$$

時間を含まないシュレディンガー方程式を解くことは、ハミルトニアン \hat{H} の固有値と固有関数を求める固有値問題である。

ψ の意味

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi && \times \psi^* \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + U \psi^* && \times \psi \quad - \\ \hline i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \{ \psi^* \Delta \psi - (\Delta \psi^*) \psi \} \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \rho = \psi^* \psi \\ \mathbf{s} = -\frac{\hbar}{2mi} \{ \psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi \} \end{cases}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div } \mathbf{s} = -\nabla \cdot \mathbf{s}$$

ρ は確率密度、 \mathbf{s} は確率密度流と解釈される。

$$\iiint \frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz = -\iiint \text{div } \mathbf{s} dx dy dz = -\iint s_n dS$$

$$\int \psi^* \psi d\mathbf{q} = 1 \quad \text{規格化}$$

量子力学の定式化 (簡略に要点のみ —— マトリックス以降でも展開されるので)

力学量 A に対する演算子を \hat{A} とする。

$\hat{A}\psi = a\psi$ ψ は \hat{A} の固有関数、 a は固有値

状態 ψ のとき、力学量 A の観測値は、 a (実数) として得られる。 命題

重ね合わせの原理

ψ_1, ψ_2 がシュレディンガー方程式の解ならば、 $\psi = a\psi_1 + b\psi_2$ もシュレディンガー方程式の解であるが、ある物理量 A が ψ_1 のとき結果 1、 ψ_2 のとき結果 2 となるなら (確定値)、 $\psi = a\psi_1 + b\psi_2$ は、結果 1 か結果 2 のいずれかを与える状態であると考えられる。

その結論が、正しい実験結果を与えるということを根拠にして、理論は正当化される。

力学量 A に対する演算子 \hat{A} の固有関数列 $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ があり、任意の ψ を $\psi = \sum c_i \psi_i$ と展開できるとき、関数列 $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ を完備系であるといひ、 A はオブザーバブルであるという。

完備性 (厳密な定義)

任意の断片的に滑らかな関数 f を、関数系 $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots$ で表すのに、 n を十分に大きくするとき、

$\int (f - \sum c_i \varphi_i)^2$ が任意に小さい正数よりも小さくできるとき、 $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots$ を完備性をもつ関数系という。

直交性

異なる固有値の固有関数は直交する。

$$\int \psi_i^* \psi_j d\mathbf{q} = 0 \quad (i \neq j)$$

オブザーバブル A $\hat{A}\psi_i = a_i\psi_i \quad i = 1, 2, 3, \dots$

ある状態 $\psi = \sum c_i \psi_i$ に対して、物理量 A の測定を行うと、いろいろな固有値 a_i のうち一つが得られる。 ψ はもはや \hat{A} の固有関数ではなく、測定値として $a_i (i = 1, 2, 3, \dots)$ のいろいろな値のいずれかを得るが、どの値がどの程度の確率で得られるかは、係数 c_i の大きさによると考えられる。

測定値 a_i が得られる確率は、 $|c_i|^2 = c_i^* c_i$ に比例する。 命題

$|\psi|^2$ に確率密度という統計的解釈があたえられたことから、

A の期待値 (平均値) を $\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\mathbf{q} = (\psi, \hat{A} \psi)$ で定義することができる。

$$= |c_1|^2 a_1 + |c_2|^2 a_2 + |c_3|^2 a_3 + \dots$$

$$\text{規格化} \quad |c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 + \dots = 1$$

エーレンフェストの定理

$$\begin{cases} \frac{d\langle \mathbf{r} \rangle}{dt} = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m} \\ \frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = - \langle \nabla U \rangle \end{cases}$$

$$\text{古典力学} \quad \begin{cases} \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m} \\ \frac{d\mathbf{p}}{dt} = - \nabla U \end{cases}$$

任意の c_1, c_2, ψ_1, ψ_2 に対して、

$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2$ がなりたつとき、 \hat{A} は線形演算子であるという。

$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \equiv [\hat{A}, \hat{B}]$ \hat{A} と \hat{B} の交換子

これが 0 のとき、 \hat{A} と \hat{B} は交換可能という。

ちなみに、位置と運動量の場合は、 $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ となって 0 とはならない。 $\leftarrow [\hat{x}, \hat{p}_x]\psi = i\hbar\psi$ より

$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} = \hat{I}$ (単位演算子) のとき、 \hat{B} を \hat{A} のまたは \hat{A} を \hat{B} の逆演算子といい、 \hat{A}^{-1} または \hat{B}^{-1} と書く。
 $(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$

定理

\hat{A} と \hat{B} が少なくとも一つの共有の固有関数をもっている $\iff \hat{A}$ と \hat{B} は交換可能

$\int \psi_i^* \psi_j d\mathbf{q} = \delta_{ij}$ これらの関数を規格直交系という。

直交するすべての関数を含むとき、完全直交系という。

任意の関数 ψ は、完全直交系によって、

$$\psi = \sum c_i \psi_i \text{ とあらわされる。}$$

$$c_i = \int \psi_i^* \psi d\mathbf{q} \quad (\psi_i \text{ が規格化されているとき})$$

$\int \psi^* \varphi d\mathbf{q} \equiv (\psi, \varphi)$ と書く (内積)。

任意の ψ, φ に対して、

$(\psi, \hat{A}\varphi) = (\hat{A}^* \psi, \varphi)$ の関係を満足するとき、 \hat{A} をエルミートであるという。

$$\int \psi^* \hat{A} \varphi d\mathbf{q} = \int (\hat{A}^* \psi)^* \varphi d\mathbf{q}$$

$(\psi, \hat{A}\varphi) = (\hat{A}^* \psi, \varphi)$ \hat{A}^* を \hat{A} の共役演算子という。

すなわち、 $\hat{A}^* = \hat{A}$ (自己共役演算子) のとき、エルミート演算子である。

$$(\hat{A}\hat{B})^* = \hat{B}^* \hat{A}^*$$

定理

エルミート演算子の固有値は、実数である。

エルミート演算子において固有値が異なるとき、これらの固有関数は直交する。

いろいろな物理量に対する演算子は、エルミート演算子である。(要請)

A を測定する実験をおこなえば、 a が得られる。 a は測定値であるから実数でなければならないが、上の定理から保証される。

$\hat{U}^* \hat{U} = \hat{I}$ のとき、すなわち $\hat{U}^* = \hat{U}^{-1}$ のとき \hat{U} をユニタリ演算子という。

$(\hat{U}\psi, \hat{U}\varphi) = (\psi, \varphi)$ ユニタリ演算子は、内積の値を変えない。

ユニタリ演算子は、3次元ユークリッド空間の直交変換のいわば一般化といえる。

つまり、1つの完全直交系から別の完全直交系への変換 (対称性を持たせる変換) の演算子が、ユニタリー演算子である。

$$\hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^{-1}$$

$$\psi' = \hat{U} \psi$$

空間並進の演算子や x 軸に対して対称移動させる演算子などは、ハミルトニアンを不変に保つユニタリー演算子である。

$$\hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1} = \hat{H} \quad (\hat{U} \hat{H} = \hat{H} \hat{U} \quad \text{ハミルトニアンと可換なユニタリー演算子})$$

ある状態がシュレーディンガー方程式を満たす解だとすると、それにハミルトニアンと可換なユニタリー演算子を作用させた状態もシュレーディンガー方程式の解となる。

保存量

交換関係 $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ (\hat{H} はハミルトニアン) のとき、 A の期待値は保存量となる。

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\mathbf{q}$$

\hat{A} は時間に依存しないとして時間で微分すると、

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi d\mathbf{q} + \int \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} d\mathbf{q}$$

シュレディンガー方程式 $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$ $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = (\hat{H} \psi)^*$ を代入すると、

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \int \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \psi)^* \hat{A} \psi d\mathbf{q} + \int \psi^* \hat{A} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi\right) d\mathbf{q}$$

ハミルトニアンはエルミートなので、 $\int \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \psi)^* \hat{A} \psi d\mathbf{q} = \int \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{H} \hat{A} \psi d\mathbf{q}$

$$\begin{aligned} \frac{d\langle A \rangle}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) \psi d\mathbf{q} \\ &= 0 \end{aligned}$$

これは、のちにみるハイゼンベルクの運動方程式 $\frac{d}{dt} \hat{F}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}(t)]$ からもあきらかである。

ハイゼンベルク描像では、演算子が時間発展し、状態ベクトルは時間に依存しないとする理論形式になる。

不確定性原理

不確定性原理は、物理量 A を観測したときの不確定性と、同じ系で別の物理量 B を観測したときの不確定性が適切な条件下では同時に 0 になる事はないというもの。特に重要なものとしては、位置と運動量の関係などがあげられる。(1927 年にハイゼンベルクが提唱。一つの粒子について、位置と運動量、時間とエネルギーのように互いに関係ある物理量 (演算子の交換関係が 0 とはならない物理量) を同時に正確に決めることは不可能である。このような同時に正確に決めることができない物理量の組み合わせを不確定性関係という。)

ばらつきの度合をあらわす量として、標準偏差 ΔA を次のように定義する。

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \\ &= \int \psi^* (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \psi \, d\mathbf{q} \\ &= \int \psi^* (\hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle A \rangle + \langle A \rangle^2) \psi \, d\mathbf{q} \quad \langle A \rangle \text{ は通常の実数として扱えるので,} \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \end{aligned}$$

\hat{A} 、 \hat{B} をエルミートとすると、

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 &= \int \psi^* (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \psi \, d\mathbf{q} \int \psi^* (\hat{B} - \langle B \rangle)^2 \psi \, d\mathbf{q} \\ &= \int |(\hat{A} - \langle A \rangle)\psi|^2 \, d\mathbf{q} \int |(\hat{B} - \langle B \rangle)\psi|^2 \, d\mathbf{q} \quad |z|^2 = z^*z \end{aligned}$$

$$\int |\lambda(\hat{A} - \langle A \rangle)\psi + i(\hat{B} - \langle B \rangle)\psi|^2 \, d\mathbf{q} \geq 0 \quad \lambda \text{ は任意の実数}$$

$$\int |(\hat{A} - \langle A \rangle)\psi|^2 \, d\mathbf{q} \lambda^2 + i \int \psi^* [\hat{A}, \hat{B}] \psi \, d\mathbf{q} \lambda + \int |(\hat{B} - \langle B \rangle)\psi|^2 \, d\mathbf{q} \geq 0$$

任意の λ に対して成り立つためには、

$$4 \int |(\hat{A} - \langle A \rangle)\psi|^2 \, d\mathbf{q} \int |(\hat{B} - \langle B \rangle)\psi|^2 \, d\mathbf{q} \geq - \left\{ \int \psi^* [\hat{A}, \hat{B}] \psi \, d\mathbf{q} \right\}^2$$

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq - \frac{1}{4} \left\{ \int \psi^* [\hat{A}, \hat{B}] \psi \, d\mathbf{q} \right\}^2$$

$$|\Delta A| |\Delta B| \geq \left| \int \psi^* \frac{i}{2} [\hat{A}, \hat{B}] \psi \, d\mathbf{q} \right|$$

つまり、 $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ のときは (共有の固有値をもたないときは)、同時に正確に決めることはできない。

具体例

$$|\Delta x| |\Delta p_x| \geq \left| \int \psi^* \frac{i}{2} [\hat{x}, \hat{p}_x] \psi \, d\mathbf{q} \right| = \left| \int \psi^* \frac{i}{2} \left[x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi \, d\mathbf{q} \right| = \frac{\hbar}{2}$$

$$|\Delta E| |\Delta t| \geq \frac{\hbar}{2}$$

補足

2003 年、日本の小沢正直がハイゼンベルクの式を修正した小沢の不等式を提唱し、2012 年にその修正した式が実験的に正しいことが明らかになっている。

ハイゼンベルクの運動方程式

シュレーディンガー表示とハイゼンベルク表示

注) ブラケット記法については、[page14](#) ~参照。

これまで、波動関数、あるいは状態ベクトル $|\psi\rangle$ が時間の関数として変化していて、ある物理量の値を求めたいと思ったら、 $\langle\psi|F|\psi\rangle$ を求めればそれが期待値になるとしてきた。時間変化の内容はすべて $|\psi\rangle$ に含まれているものとするのである(状態ベクトルが時間発展し、演算子は時間に依存しない)。これをシュレーディンガー描像と呼ぶ。

これに対して、ハイゼンベルク描像は量子力学を定式化するにあたり、演算子(可観測量やその他)が時間発展し、状態ベクトルは時間に依存しないとする理論形式のことをいう。シュレーディンガー描像とは等価の結果を与える。

$$\text{シュレーディンガー方程式} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

ハミルトニアン \hat{H} には時間は含まれていないとして、この微分方程式を解くと、

$$\psi(\mathbf{q}, t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \varphi(\mathbf{q})$$

$$\text{期待値 } \langle F \rangle = \int \psi(\mathbf{q}, t)^* \hat{F} \psi(\mathbf{q}, t) d\mathbf{q} = \int \varphi(\mathbf{q})^* e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{F} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \varphi(\mathbf{q}) d\mathbf{q}$$

$$\text{シュレーディンガー描像} \quad \langle F \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle$$

$$\begin{aligned} \text{ハイゼンベルク描像} \quad \langle F \rangle &= \langle \varphi | e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{F} e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \varphi \rangle & \hat{F}(t) &= e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{F} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \text{ とおくと、} \\ &= \langle \varphi | \hat{F}(t) | \varphi \rangle \end{aligned}$$

ハイゼンベルクの運動方程式

ハイゼンベルク表示では、演算子の側が時間変化するとしたが、この演算子あるいは行列としての $\hat{F}(t)$ の時間変化を調べることは重要になってくる。

$\hat{F}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{F} e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ を t で微分してみる。

指数関数はべき級数で展開し、演算子は一般には掛ける順序を逆にはできないことを考慮しながら計算すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{F}(t) &= \frac{i}{\hbar} \hat{H} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{F} e^{-i\hat{H}t/\hbar} - \frac{i}{\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{F} \hat{H} e^{-i\hat{H}t/\hbar} & \hat{H} \text{ と } e^{-i\hat{H}t/\hbar} \text{ は交換可能なので、} \\ &= \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{F}(t) - \hat{F}(t) \hat{H}) \end{aligned}$$

$$\text{すなわち、} \frac{d}{dt} \hat{F}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}(t)] \quad \text{ハイゼンベルクの運動方程式}$$

$$\hat{F} \text{ が時間によって形が変わる場合には、} \frac{d}{dt} \hat{F}(t) = \frac{\partial}{\partial t} \hat{F}(t) + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}(t)]$$

ところで、ハイゼンベルク表示における \hat{H} の時間変化はどうなるのであろうか。

$$\begin{aligned} \hat{H}(t) &= e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{H} e^{-i\hat{H}t/\hbar} & \hat{H} \text{ と } e^{-i\hat{H}t/\hbar} \text{ は交換可能なので、結局、} \\ &= \hat{H} \end{aligned}$$

演算子の時間微分について

量子力学における物理量の時間微分という概念は、古典力学と同じ意味には定義することができない。なぜなら、量子力学においては、ある時刻に確定値をとる量は、それに続く時刻には一般にいかなる確定値もとらないからである。

そこで、量子力学では、時間微分の概念は違ったやり方で定義されなければならない。

\hat{f} の平均値が、平均値 \bar{f} の時間微分に等しいような量として $\dot{\hat{f}}$ を定義する。

すなわち、 $\bar{f} \equiv \dot{f}$

\hat{f} に対応する量子力学的演算子 \hat{f} の表式は、次のようにして得られる。

$$\bar{f} \equiv \dot{f} = \frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{f} \psi dq = \int \psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \psi dq + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{f} \psi dq + \int \psi^* \hat{f} \frac{\partial \psi}{\partial t} dq$$

$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$ を代入すれば、

$$\begin{aligned} \text{上式} &= \int \psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \psi dq + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H}^* \psi^*) \hat{f} \psi dq - \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \hat{f} (\hat{H} \psi) dq \\ &= \int \psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \psi dq + \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \hat{H} \hat{f} \psi dq - \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \hat{f} (\hat{H} \psi) dq \quad \leftarrow \hat{H} \text{ のエルミート性より} \\ &= \int \psi^* \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{f} - \frac{i}{\hbar} \hat{f} \hat{H} \right) \psi dq \end{aligned}$$

一方、 $\bar{f} = \int \psi^* \dot{f} \psi dq$ であるから、

$$\hat{f} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{f} - \hat{f} \hat{H})$$

マトリックスによる表現

行列力学は、原子内の電子を記述する力学として、ハイゼンベルクが 1925 年に提唱したものの、のちにシュレーディンガーの波動力学と同等の内容であることが明らかにされた。

完全直交関数系 $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ 完全とは、任意の ψ が、 $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ の線形結合によってあらわすことができるという意味。

$$\psi = \sum c_i \psi_i$$

$$\hat{A} \psi \text{ を } \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \\ \vdots & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = A \mathbf{v} \text{ であらわす。} \quad a_{mn} = (\psi_m, \hat{A} \psi_n)$$

$$\text{Tr} A = a_{11} + a_{22} + a_{33} + \dots$$

$$\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$$

逆行列

A に対し、 $XA = I$ なる X が存在するとき、 A は正則であるといい、このとき、 $AX = I$ となる。

X を A の逆行列といい、 A^{-1} であらわす。

$$A \text{ が正則} \longrightarrow (A^{-1})^{-1} = A$$

$$A, B \text{ が正則} \longrightarrow (AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$$

直交行列

行と列を交換した行列を転置行列といい、 A^t と書く。

$$(AB)^t = B^t A^t$$

$T^t = T^{-1}$ となるとき、 T を直交行列という。

直交座標軸の間の変換をあらわす行列は、直交行列である。

$$\mathbf{v}' = T \mathbf{v}$$

$$A' = T A T^{-1}$$

$$A = T^{-1} A' T$$

2つのベクトルの内積は基底ベクトルの直交変換に対して不変である。

エルミート行列

$A^{t*} \equiv A^\dagger$ (a_{mn} を a_{nm}^* で置換したもの) を A の随伴行列という。

$A^\dagger = A$ のとき、すなわち $a_{nm}^* = a_{mn}$ (対角線に対して鏡像) の関係にあるとき、 A をエルミート行列という。

エルミート行列の対角要素は、実数となる。

固有ベクトル・固有値

エルミート演算子 A に対して、 $A \mathbf{v} = a \mathbf{v}$ を満たすベクトル \mathbf{v} が見出されたとき、 \mathbf{v} を A の固有ベクトル、 a をその固有値という。

エルミート演算子の固有値はすべて実数である。

エルミート演算子の異なる固有値に対する固有ベクトルは互いに直交 (内積が 0) する。

証明

$$A \mathbf{v} = v \mathbf{v}, A \mathbf{w} = w \mathbf{w} \text{ とする。 (固有ベクトルと固有値)} \quad \textcircled{1}$$

$$A \text{ はエルミートなので、} (\mathbf{w}, A \mathbf{v}) = \mathbf{w}^\dagger (A \mathbf{v}) = (A^\dagger \mathbf{w})^\dagger \mathbf{v} = (A^\dagger \mathbf{w}, \mathbf{v}) = (A \mathbf{w}, \mathbf{v}) \quad \textcircled{2}$$

$$\textcircled{1} \text{ より、} (\mathbf{w}, A \mathbf{v}) = v (\mathbf{w}, \mathbf{v})$$

$$\text{また} \textcircled{2} \text{ より、} (\mathbf{w}, A \mathbf{v}) = (A \mathbf{w}, \mathbf{v}) = w^* (\mathbf{w}, \mathbf{v})$$

$$(v - w^*) (\mathbf{w}, \mathbf{v}) = 0$$

これより、 $v = w^*$ 実数がでてくる。(\mathbf{w} を \mathbf{v} にかえてやる)

つづいて、異なる固有値となるときは、 $(\mathbf{w}, \mathbf{v}) = 0$ 直交。

要請 観測にかかるような物理量はエルミート演算子になる。

ユニタリ行列

$U^\dagger = U^{-1}$ のとき、 U をユニタリ行列という。

1つの完全直交系からほかの完全直交系への変換は、ユニタリ行列によってなされる。

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ c_3' \\ \vdots \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{v}' = U\mathbf{v}$$

ユニタリ変換は内積の値を変えない。

$$(U\mathbf{v}, U\mathbf{w}) = (U\mathbf{v})^\dagger U\mathbf{w} = \mathbf{v}^\dagger U^\dagger U\mathbf{w} = \mathbf{v}^\dagger \mathbf{w} = (\mathbf{v}, \mathbf{w})$$

エルミート行列をユニタリ変換 ($A' = UAU^{-1}$) すると、やはりエルミート行列が得られる。

$$(UAU^{-1})^\dagger = (U^{-1})^\dagger A^\dagger U^\dagger = UAU^{-1}$$

演算子 \hat{A} に直交関数系 $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ を作用させたとき、 $\hat{A}\psi_i = a_i\psi_i$ となるとき、

この $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ を基底にとると、

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a_2 & 0 & \\ 0 & 0 & a_3 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \text{ のようになる。 対角行列}$$

エルミート行列 A は、ユニタリ行列 U によって、次のように対角化される。

$$UAU^{-1} = \bar{A}$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} a_{11} - x & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{21} & a_{22} - x & a_{23} & \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} - x & \\ \vdots & & & \ddots \end{vmatrix} = 0 \text{ を解く。 固有値が求まる。 } \bar{A} = \begin{pmatrix} x_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & x_2 & 0 & \\ 0 & 0 & x_3 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}$$

$A\mathbf{v}_i = x_i\mathbf{v}_i$ を解くと、固有ベクトル \mathbf{v}_i が求まる。

$$U = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \dots)$$

交換関係

エルミート行列 A と B について、

$$[A, B] \equiv AB - BA = 0 \text{ (交換可能)} \iff A \text{ と } B \text{ は同時対角化可能}$$

← の証明

対角行列どうしは交換可能なので、

$$(UAU^{-1})(UBU^{-1}) = (UBU^{-1})(UAU^{-1})$$

$$UABU^{-1} = UBAU^{-1}$$

$$\therefore AB = BA$$

→ の証明

A の固有値 a_1, a_2, a_3, \dots に対応する固有ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \dots$ を正規直交基底にとる。

$A\mathbf{a}_i = a_i\mathbf{a}_i$ 当然、 A は対角行列 (対角要素 a_i) となり、 \mathbf{a}_i のベクトル要素は δ_i となる ($\mathbf{a}_i = \delta_i$)。

この基底のもとで、 B の行列要素 ($\mathbf{a}_i, B\mathbf{a}_j$) も対角型となる。

証明

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}_i, [A, B]\mathbf{a}_j) &= 0 \\ &= \mathbf{a}_i^\dagger A B \mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i^\dagger B A \mathbf{a}_j \\ &= (A \mathbf{a}_i)^\dagger B \mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i^\dagger B A \mathbf{a}_j \quad A^\dagger = A \\ &= a_i \mathbf{a}_i^\dagger B \mathbf{a}_j - a_j \mathbf{a}_i^\dagger B \mathbf{a}_j \quad \text{エルミート行列の固有値は実数} \\ &= (a_i - a_j)(\mathbf{a}_i, B \mathbf{a}_j) = 0 \end{aligned}$$

したがって、 B の行列要素 ($\mathbf{a}_i, B\mathbf{a}_j$) は $a_i = a_j$ でないかぎりゼロとなる。

∴ B は対角行列 (対角要素 ($\mathbf{a}_i, B\mathbf{a}_i$)) となる。

すぐわかるように、 $B\mathbf{a}_i = (\mathbf{a}_i, B\mathbf{a}_i)\mathbf{a}_i$

($\mathbf{a}_i, B\mathbf{a}_i$) が B の固有値 (対角行列 B の対角要素)、対応する固有ベクトルは \mathbf{a}_i (ベクトル要素は δ_i)

つまり、固有ベクトルは A と B で共有している = 同時に対角化できた基底ベクトル \mathbf{a}_i そのもの。

エルミート行列 A と B が少なくとも一つの共有の固有ベクトルをもっている $\Leftrightarrow A$ と B は交換可能

→ の証明

$A\mathbf{v} = a\mathbf{v}, B\mathbf{v} = b\mathbf{v}$ とすると (A と B 共通の固有ベクトル \mathbf{v})、

$$(AB - BA)\mathbf{v} = A(B\mathbf{v}) - B(A\mathbf{v}) = (ba - ab)\mathbf{v} = 0$$

$$\therefore AB - BA = 0$$

← の証明

上の証明でみたように、同時に対角化できたその基底ベクトルそのものが共通の固有ベクトル。

2つの物理量をあらかず演算子が交換可能ならば、この2つの物理量を同時に観測して両方について確定値を得ることが可能である。

ディラックのブラケット記法

ここでは、新たにケット空間 $|\alpha\rangle$ 、ブラ空間 $\langle\alpha|$ を導入する。

前節の「マトリックスによる表現」で、状態ベクトルを $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$ であらわしてきたが、これに対応するもの

がケット $|\alpha\rangle$ 、

ケット $|\alpha\rangle$ と対をなすブラは、 $\langle\alpha|$ と表記して、この $\langle\alpha|$ に対応するものが $\mathbf{v}^\dagger = (c_1^*, c_2^*, c_3^*, \dots)$ と考えればわかりやすいだろう。

しかし、この対応関係はのちほど明らかになるものでもある。

$c|\alpha\rangle$ の対をなすブラは、 $c^*\langle\alpha|$

$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$ も新しいひとつのケット。

$|\alpha\rangle$ と $c|\alpha\rangle$ ($c \neq 0$) は同じ物理状態をあらわすとす。つまり、ベクトル空間で、方向だけが重要。

観測量は演算子によってあらわせる。

$A|\alpha\rangle$ は通常、別のケットになるが、 $A|a_1\rangle = a_1|a_1\rangle$, $A|a_2\rangle = a_2|a_2\rangle$, \dots となる特別なケットの集合 $|a_i\rangle$ を演算子 A の固有ケットと呼ぶ (a_i はその固有値)。

固有ケットに対応する物理状態を固有状態と呼ぶ。

任意のケット $|\alpha\rangle$ は、この固有ケットを用いて、 $|\alpha\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle$ と書くことができる (c_i は複素係数)。

内積 $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\beta| \cdot |\alpha\rangle$ この積は一般に複素数である。

$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$ 複素共役

$\langle\alpha|\alpha\rangle$ は実数。 $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$ 等号が成立するのは、 $|\alpha\rangle$ が零ケットのときのみ。

直交 $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$ のとき、互いに直交しているという。 $\langle\beta|\alpha\rangle = 0$ をも意味する。

規格化 $\frac{1}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}} |\alpha\rangle$ $\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$ は $|\alpha\rangle$ のノルムと呼ばれる。

$|\alpha\rangle$ と $c|\alpha\rangle$ は物理的に同じ状態をあらわすから、物理状態として用いるケットは規格化されていると要請してよい。

外積 $|\beta\rangle\langle\alpha|$ を $|\beta\rangle$ と $\langle\alpha|$ の外積とよぶ。この $|\beta\rangle\langle\alpha|$ は一つの演算子とみなされる。

$X = |\beta\rangle\langle\alpha|$ とすると、 $X^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|$

演算子

演算子は、ケットに左側から作用し、その結果はもととは異なるケットになる。

$X|\alpha\rangle$

また、演算子は、ブラに右側から作用し、その結果はもととは異なるブラになる。

$\langle\alpha|X$

一般に、 $X|\alpha\rangle$ と $\langle\alpha|X$ は、互いに対とはならない。

$X|\alpha\rangle$ と $\langle\alpha|X^\dagger$ が対になるとき、演算子 X^\dagger を X のエルミート共役と呼ぶ。

$X = X^\dagger$ なら、 X はエルミートであるという。

$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\beta| \cdot (X|\alpha\rangle) = \{(\langle\alpha|X^\dagger) \cdot |\beta\rangle\}^* \leftarrow \langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$, $X|\alpha\rangle \Leftrightarrow \langle\alpha|X^\dagger$ (対をなす)

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

X がエルミートのとき 上式 $= \langle\alpha|X|\beta\rangle^*$

一般に、 $XY \neq YX$

$X(YZ) = (XY)Z = XYZ$ 結合

$$X(Y|\alpha\rangle) = (XY)|\alpha\rangle = XY|\alpha\rangle$$

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$$

ここからは、物理量をあらわすエルミート演算子を扱う。

定理 エルミート演算子 A の固有値は実数である。

また、異なる固有値をとる固有ケットは、互いに直交する。

証明

$$A|a_1\rangle = a_1|a_1\rangle, A|a_2\rangle = a_2|a_2\rangle \text{ とする。 (固有ケットと固有値) } \quad \textcircled{1}$$

$$A \text{ はエルミートなので、} \langle a_2|A = a_2^*\langle a_2| \quad \textcircled{2} \quad A|a_2\rangle = a_2|a_2\rangle \Leftrightarrow \langle a_2|A = a_2^*\langle a_2| \text{ (対)}$$

$$\textcircled{1} \text{ より、} \langle a_2|A|a_1\rangle = a_1\langle a_2|a_1\rangle$$

$$\textcircled{2} \text{ より、} \langle a_2|A|a_1\rangle = a_2^*\langle a_2|a_1\rangle$$

$$(a_1 - a_2^*)\langle a_2|a_1\rangle = 0$$

これより、 $a_1 = a_2^*$ 実数がでてくる。 $(|a_2\rangle \text{ を } |a_1\rangle \text{ にかえてやる})$

つづいて、異なる固有値となるときは、 $\langle a_2|a_1\rangle = 0$ 直交。

要請 ケット空間全体は、 A の固有ケットで張られる。(完備性、完全性)

固有ケット $|a_i\rangle$ を規格化して、規格直交系 $\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$ を作っておくとよい。

任意のケット $|\alpha\rangle$ は、 $|\alpha\rangle = \sum_i c_i|a_i\rangle$ と展開できる。

$$c_i = \langle a_i|\alpha\rangle \text{ である。}$$

$$|\alpha\rangle = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle$$

$|\alpha\rangle$ は任意のケットだから、 $\sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = 1$ 恒等演算子 ← 完備関係式 / 閉包 (クロージャー)

$$\begin{aligned} \langle \alpha|\alpha\rangle &= \langle \alpha|(\sum_i |a_i\rangle \langle a_i|)|\alpha\rangle = \sum_i (\langle \alpha|a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle) = \sum_i |\langle a_i|\alpha\rangle|^2 \leftarrow \langle \beta|\alpha\rangle = \langle \alpha|\beta\rangle^* \\ &= \sum_i |c_i|^2 \quad \text{規格化されていると } \sum_i |c_i|^2 = 1 \text{ とならなければならないことを示している。} \end{aligned}$$

$|a_i\rangle \langle a_i|$ に着目すると、

$$(|a_i\rangle \langle a_i|) \cdot |\alpha\rangle = |a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle = c_i|a_i\rangle$$

つまり、 $|a_i\rangle \langle a_i|$ には、 $|\alpha\rangle$ から $|a_i\rangle$ 成分を引き出す働きがあることがわかる。

$|a_i\rangle \langle a_i|$ は、基底ケット $|a_i\rangle$ への射影演算子と呼ばれる。

$$\Lambda_{a_i} \equiv |a_i\rangle \langle a_i| \text{ であらわす。}$$

$$\sum_i \Lambda_{a_i} = 1$$

行列による演算子の表現

基底ケット $\{|a_1\rangle, |a_2\rangle, |a_3\rangle, \dots\}$ を指定した上で、演算子 X を行列であらわす方法

$$X = \sum_i \sum_j |a_i\rangle \langle a_i|X|a_j\rangle \langle a_j| \quad \leftarrow \sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = 1$$

$$X \doteq \begin{pmatrix} \langle a_1|X|a_1\rangle & \langle a_1|X|a_2\rangle & \dots \\ \langle a_2|X|a_1\rangle & \langle a_2|X|a_2\rangle & \dots \\ \langle a_3|X|a_1\rangle & \langle a_3|X|a_2\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad \doteq \text{「表現する」という意味} \quad |a_2\rangle \langle a_3| \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \text{等}$$

ケットとブラの表現

$|\gamma\rangle = X|\alpha\rangle$ とする。

$$\langle a_i|\gamma\rangle = \langle a_i|X|\alpha\rangle \quad X|\alpha\rangle \text{ の } |a_i\rangle \text{ 成分抽出}$$

$$= \sum_k \langle a_i | X | a_k \rangle \langle a_k | \alpha \rangle$$

$$|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle a_1 | \alpha \rangle \\ \langle a_2 | \alpha \rangle \\ \langle a_3 | \alpha \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad |\gamma\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle a_1 | \gamma \rangle \\ \langle a_2 | \gamma \rangle \\ \langle a_3 | \gamma \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

同様に、 $\langle \gamma | = \langle \alpha | X$ を考える。

$$\langle \gamma | a_i \rangle = \langle \alpha | X | a_i \rangle = \sum_k \langle \alpha | a_k \rangle \langle a_k | X | a_i \rangle$$

$$\langle \alpha | \doteq (\langle \alpha | a_1 \rangle, \langle \alpha | a_2 \rangle, \langle \alpha | a_3 \rangle, \dots)$$

$$\langle \gamma | \doteq (\langle \gamma | a_1 \rangle, \langle \gamma | a_2 \rangle, \langle \gamma | a_3 \rangle, \dots)$$

$$\doteq (\langle a_1 | \gamma \rangle^*, \langle a_2 | \gamma \rangle^*, \langle a_3 | \gamma \rangle^*, \dots)$$

内積

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \sum_i \langle \beta | a_i \rangle \langle a_i | \alpha \rangle \doteq (\langle a_1 | \beta \rangle^*, \langle a_2 | \beta \rangle^*, \langle a_3 | \beta \rangle^*, \dots) \begin{pmatrix} \langle a_1 | \alpha \rangle \\ \langle a_2 | \alpha \rangle \\ \langle a_3 | \alpha \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

外積

$$|\beta\rangle\langle\alpha| \doteq \begin{pmatrix} \langle a_1 | \beta \rangle \langle a_1 | \alpha \rangle^* & \langle a_1 | \beta \rangle \langle a_2 | \alpha \rangle^* & \dots \\ \langle a_2 | \beta \rangle \langle a_1 | \alpha \rangle^* & \langle a_2 | \beta \rangle \langle a_2 | \alpha \rangle^* & \dots \\ \langle a_3 | \beta \rangle \langle a_1 | \alpha \rangle^* & \langle a_3 | \beta \rangle \langle a_2 | \alpha \rangle^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots \end{pmatrix}$$

観測量 A の行列表現は、 A の固有ケットを基底に選べば簡単になる。

$$A = \sum_j \sum_i |a_j\rangle \langle a_j | A | a_i \rangle \langle a_i | \quad A | a_i \rangle = a_i | a_i \rangle \text{ より、}$$

$$= \sum_i a_i | a_i \rangle \langle a_i |$$

$$= \sum_i a_i \Lambda_{a_i}$$

$$A \doteq \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a_2 & 0 & \\ 0 & 0 & a_3 & \dots \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \quad \Lambda_{a_3} = |a_3\rangle \langle a_3| \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \text{ 等}$$

測定・観測値

$$\text{状態 } |\alpha\rangle = \sum_i c_i | a_i \rangle = \sum_i | a_i \rangle \langle a_i | \alpha \rangle$$

観測がなされると、系は観測量 A の一つの固有状態、たとえば $|a_i\rangle$ に飛び移る。

このある固有状態 $|a_i\rangle$ に飛び移る確率は、

$$\text{観測値 } a_i \text{ の確率} = |\langle a_i | \alpha \rangle|^2 = |c_i|^2$$

であると仮定する。(量子力学の基本的仮定の一つ。証明はできない。)

期待値

状態が $|\alpha\rangle$ であるときの A の期待値を $\langle A_\alpha \rangle \equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle$ で定義する。

$$\langle A_\alpha \rangle = \sum_i \langle \alpha | A | a_i \rangle \langle a_i | \alpha \rangle \quad \langle \alpha | A | a_i \rangle = a_i \langle \alpha | a_i \rangle = a_i \langle a_i | \alpha \rangle^*$$

$$= \sum_i a_i |\langle a_i | \alpha \rangle|^2 = \sum_i a_i |c_i|^2$$

選択的測定 (濾過法)

$$\Lambda_{a_i} | \alpha \rangle = | a_i \rangle \langle a_i | \alpha \rangle = c_i | a_i \rangle \quad | \alpha \rangle \text{ から } | a_i \rangle \text{ 成分を引き出す。}$$

両立できる観測量・両立できない観測量

観測量 A, B

$$[A, B] = 0 \text{ のとき両立できる。} \quad [A, B] \equiv AB - BA$$

$$[A, B] \neq 0 \text{ のとき両立できないと定義される。}$$

定理

A と B が両立できる観測量であり、 A の固有値は縮退していないとする。 $A | a_i \rangle = a_i | a_i \rangle$
このとき、行列要素 $\langle a_k | B | a_i \rangle$ はすべて対角型である。

証明

$$\langle a_k | [A, B] | a_i \rangle = (a_k - a_i) \langle a_k | B | a_i \rangle = 0$$

したがって、 $\langle a_k | B | a_i \rangle$ は $a_k = a_i$ でないかぎりゼロとなる。

この定理を用いて B の行列要素を $\langle a_k | B | a_i \rangle = \delta_{ik} \langle a_i | B | a_i \rangle$ と書くことができる。
したがって、 A も B も同じ基底ケットの集合を用いて対角行列であらわせる。

基底ケット $\{ | a_1 \rangle, | a_2 \rangle, | a_3 \rangle, \dots \}$ を指定した上で、演算子 X を行列であらわす方法は、

$$X = \sum_i \sum_j | a_i \rangle \langle a_i | X | a_j \rangle \langle a_j |, \text{ 行列要素は、} \langle a_i | X | a_j \rangle \text{ であった。}$$

$$B = \sum_j \sum_i | a_j \rangle \langle a_j | B | a_i \rangle \langle a_i | \quad \langle a_k | B | a_i \rangle = \delta_{ik} \langle a_i | B | a_i \rangle \text{ より、}$$

$$= \sum_j | a_j \rangle \langle a_j | B | a_j \rangle \langle a_j |$$

$$B | a_i \rangle = \sum_j | a_j \rangle \langle a_j | B | a_j \rangle \langle a_j | a_i \rangle \quad \langle a_j | a_i \rangle = \delta_{ji}$$

$$= (\langle a_i | B | a_i \rangle) | a_i \rangle$$

したがって、 $| a_i \rangle$ は A と B の同時固有ケットであり、
そのときの B の固有値は $b_i \equiv \langle a_i | B | a_i \rangle$ に他ならない。

同時固有ケットであることを表すのに、 $| a_i, b_i \rangle$ を用いる。

以上で、両立できる観測量は、同時固有ケットを持つことがわかった。

$$A | a_i, b_i \rangle = a_i | a_i, b_i \rangle$$

$$B | a_i, b_i \rangle = b_i | a_i, b_i \rangle$$

以上は A の固有ケットに縮退がない場合であったが、この定理は n 重縮退があっても成立する。

この場合は、のちにみる対角化の方法により、演算子 B を対角化する縮退した $| a_{(i)} \rangle$ の適当な線形結合を作つてやればよい。($i=1 \sim n$, $A | a_{(i)} \rangle = a' | a_{(i)} \rangle$)

基底の変更とユニタリ演算子 (行列表現の対角化)

定理

規格直交性と完備性を満たす 2 組の基底ケット集合が与えられていると、

$$| b_1 \rangle = U | a_1 \rangle, | b_2 \rangle = U | a_2 \rangle, \dots, | b_n \rangle = U | a_n \rangle$$

とするユニタリ演算子 U が存在する。

ユニタリ演算子とは、条件 $U^\dagger U = U U^\dagger = 1$ を満たす演算子である。

証明

実際に U を作って証明する。

$$U = \sum_i |b_i\rangle\langle a_i|$$

とすれば、上の条件をすべて満たしてくれる。

●演算子 U の行列表現

基底 $\{|a_k\rangle\}$ から基底 $\{|b_k\rangle\}$ への変換行列

元の基底 $\{|a_k\rangle\}$ でみると、

$$\langle a_k|U|a_i\rangle = \langle a_k|b_i\rangle \quad \text{となって、}$$

つまり、の U 行列要素は、元の基底のブラと新しい基底のケットの内積で作られる。

$$\langle b_k|a_i\rangle = \langle a_k|U^\dagger|a_i\rangle \quad \leftarrow \langle \beta|\alpha\rangle = \langle \alpha|\beta\rangle^*, \quad \langle \beta|X|\alpha\rangle = \langle \alpha|X^\dagger|\beta\rangle^* \quad \text{page14}$$

●元の基底での展開係数 $\langle a_k|\alpha\rangle$ がわかっている任意のケット $|\alpha\rangle$ が与えられたとき、新しい基底での展開係数はどうなるか。

$$\langle b_k|\alpha\rangle = \sum_i \langle b_k|a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle$$

$$= \sum_i \langle a_k|U^\dagger|a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle \quad \text{つまり、} |\alpha\rangle \text{ の新しい基底での列ベクトル表現は、元の基底で}$$

の列ベクトルに U^\dagger (元の基底での表現) を掛けて得られる。

● X の行列要素の変換

$$\begin{aligned} \langle b_k|X|b_l\rangle &= \sum_m \sum_n \langle b_k|a_m\rangle \langle a_m|X|a_n\rangle \langle a_n|b_l\rangle \\ &= \sum_m \sum_n \langle a_k|U^\dagger|a_m\rangle \langle a_m|X|a_n\rangle \langle a_n|U|a_l\rangle \end{aligned}$$

これは、行列代数でいう相似変換である。

$$X' = U^\dagger X U$$

●演算子 X のトレース

トレースは対角成分の和として定義される。

$$\text{tr}(X) = \sum_i \langle a_i|X|a_i\rangle$$

$\text{tr}(X)$ は、表示によらない。

$$\begin{aligned} \sum_i \langle a_i|X|a_i\rangle &= \sum_i \sum_m \sum_n \langle a_i|b_m\rangle \langle b_m|X|b_n\rangle \langle b_n|a_i\rangle \\ &= \sum_m \sum_n \langle b_n|b_m\rangle \langle b_m|X|b_n\rangle \\ &= \sum_n \langle b_n|X|b_n\rangle \end{aligned}$$

$$\text{tr}(XY) = \text{tr}(YX)$$

$$\text{tr}(U^\dagger X U) = \text{tr}(X)$$

$$\text{tr}(|a_m\rangle\langle a_n|) = \sum_k \langle a_k|a_m\rangle \langle a_n|a_k\rangle = \delta_{mn} \quad \langle a_k|a_m\rangle = \delta_{km}$$

$$\text{tr}(|b_i\rangle\langle a_i|) = \sum_k \langle a_k|b_i\rangle \langle a_i|a_k\rangle = \langle a_i|b_i\rangle$$

●対角化

演算子 B の行列要素が元の基底 $\{|a_i\rangle\}$ でわかっているとき、 B の固有値と固有ベクトルをどのように見つけるか。この問題は、 B を対角化するユニタリ行列を見出すことと同値である。

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & \cdots \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} & \\ \vdots & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{(1)1} \\ c_{(1)2} \\ c_{(1)3} \\ \vdots \end{pmatrix} = b_l \begin{pmatrix} c_{(1)1} \\ c_{(1)2} \\ c_{(1)3} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

ただし、 $B_{ij} = \langle a_i | B | a_j \rangle$

$$c_{(1)k} = \langle a_k | b_l \rangle$$

i, j, k は、ケットの空間の次元である N までの整数値をとる。

線形代数でみるように、 $c_{(1)1} = c_{(1)2} = \cdots = c_{(1)N} = 0$ 以外の解は、

$$\det(B - \lambda I) = 0 \text{ が満たされる時のみ存在する。}$$

これは、 λ に対する N 次方程式であり、この N 個の根が、求めている固有値 b_l である。

b_l がわかれば、対応する $c_{(1)k}$ が求められる。

この $c_{(1)k}$ が $\langle a_k | b_l \rangle$ 、つまり、 $\{|a_k\rangle\}$ から $\{|b_l\rangle\}$ への基底の変換となるユニタリ行列の要素になっている。

対角化するためには、 B のエルミート性が重要である。非エルミート的な演算子の固有ケットは完全規格直交系を必ずしも作らないため、上のような方法を適用するわけにはいかない。

中心力場

中心力場では、ポテンシャルが定点 (原点) からの距離 r だけの関数 $U(r)$ となる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi + U(r)\psi = \varepsilon \psi \quad \Delta = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

この方程式を解くには、極座標 (r, θ, ϕ) を用いた方が便利である。

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\sin \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\cos \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda \quad \text{ただし、} \Lambda = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

以上より、シュレディンガー方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left\{ \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda \right) + U(r) \right\} \psi = \varepsilon \psi \quad \text{となる。}$$

ここで、 $\psi = R(r)Y(\theta, \phi)$ とおくと (変数分離の方法)、

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left\{ \left(\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} \right) Y + \frac{R}{r^2} \Lambda Y \right\} + U(r)RY = \varepsilon RY$$

変形して (両辺に $-\frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{r^2}{RY}$ を掛ける)、

$$\frac{r^2}{R} \left(\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} r^2 (\varepsilon - U(r)) = -\frac{\Lambda Y}{Y}$$

左辺は r だけの関数、右辺は θ, ϕ だけの関数なので、これらが等しいためには、両方とも定数でなければならない。

これを λ とおくと、次の2つの微分方程式が得られる。

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} - \frac{\lambda}{r^2} R \right) + U(r)R = \varepsilon R & \dots\dots ① \\ \Lambda Y(\theta, \phi) + \lambda Y(\theta, \phi) = 0 & \dots\dots ② \end{cases}$$

①を解くためには、 λ の値と $U(r)$ の具体的な形が必要となる。

まず②式より解く λ の値が得られる。

$$\Lambda Y(\theta, \phi) + \lambda Y(\theta, \phi) = 0 \quad (\theta, \phi \text{ のみに関する方程式。} U(r) \text{ は含まれない。})$$

計算が長くなるので、ここでは結果のみ。

$$\Lambda Y(\theta, \phi) + \lambda Y(\theta, \phi) = 0 \text{ の固有値は、} \lambda = l(l+1) \quad l = 0, 1, 2, \dots\dots$$

各 l に対する固有関数は、

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos \theta) \exp(im\phi) \quad P_l^m(\cos \theta) \text{ はルジャンドル関数}$$

$$m = -l, \dots\dots, -1, 0, 1, \dots\dots l$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} - \frac{\lambda}{r^2} R \right) + U(r)R = \varepsilon R \text{ については、}$$

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (\text{クーロン場: 原点に電荷 } Ze \text{ の核、運動する電子の電荷を } -e, \epsilon_0 \text{ は真空の誘電率) とすると、}$$

$$R_{n,l}(r) = -\sqrt{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\{(n+l)!\}^3}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right) L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) \quad L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) \text{ はラゲール関数}$$

$$\varepsilon_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \quad n \text{ は正の整数、} a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \quad (\text{ボーア半径})$$

まとめると、 $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \phi)$

$$\text{主量子数 } n \quad n = 1, 2, 3, \dots\dots$$

$$\text{方位量子数 } l \quad n \geq l+1$$

磁気量子数 m $l \geq |m|$

角運動量演算子 (詳しくは次節)

$$\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

$$\hat{\mathbf{l}}^2 Y_{l,m}(\theta, \phi) = l(l+1) \hbar^2 Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

$$\hat{l}_z Y_{l,m}(\theta, \phi) = m \hbar Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

$$\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{l}} = i \hbar \hat{\mathbf{l}}$$

$$[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_x] = [\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_y] = [\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_z] = 0$$

軌道角運動量

$$\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla$$

$$\hat{l}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$\hat{l}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\hat{l}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$$\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{l}} = i\hbar \hat{\mathbf{l}}$$

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar \hat{l}_x$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar \hat{l}_y$$

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z$$

$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$ で定義すると、

$$[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_x] = [\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_y] = [\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_z] = 0 \quad \text{交換可能}$$

極座標では、

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

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

$$\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = -i\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right\}$$

$\hat{l}_z, \hat{\mathbf{l}}^2$ は交換可能であるから、関数 $\psi(\theta, \phi)$ をその共通な固有関数であるとする。

\hat{l}_z の固有値を k として、

$$\hat{l}_z \psi = -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial\phi} = k\psi$$

$$\text{これはすぐ解けて、} \psi = F(\theta) \exp\left(\frac{i}{\hbar} k\phi\right)$$

$\psi(\theta, \phi) = \psi(\theta, \phi + 2\pi)$ でなければならないから、

$$k = m_l \hbar \quad (m_l \text{ は、} 0 \text{ または正負の整数}) \text{ を得る。} \quad \psi = F(\theta) e^{im_l\phi}$$

以下、 \hat{l}_z の固有値が $m_l \hbar$ である固有関数を ψ_{m_l} と表すことにする。

次に、演算子 $\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$ を定義する。

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{l}_{\pm}$$

$$\hat{l}_z \hat{l}_{\pm} \psi_{m_l} = \hat{l}_{\pm} (\hat{l}_z \pm \hbar) \psi_{m_l} = (m_l \pm 1) \hbar \hat{l}_{\pm} \psi_{m_l}$$

すなわち、 $\hat{l}_{\pm} \psi_{m_l}$ も \hat{l}_z の固有関数で、その固有値は $(m_l \pm 1) \hbar$ であることがわかる。

\hat{l}_{\pm} を次々に乗ずることにより、一般的に、

$$\hat{l}_z \hat{l}_{\pm}^s \psi_{m_l} = (m_l \pm s) \hbar \hat{l}_{\pm} \psi_{m_l} \quad \text{が成立する。ただし、} s \text{ は正の整数}$$

ここでもし、 $\hat{l}_+ \psi_l = 0$ および $\hat{l}_- \psi_{l'} = 0$ となるような m_l の上限 l 、下限 l' が存在すると、固有関数の数は限定されることになる。

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hbar \hat{l}_z + \hat{l}_z^2 \quad \text{より、}$$

$$\hat{\mathbf{l}}^2 \psi_l = \hat{l}_- \hat{l}_+ \psi_l + \hbar \hat{l}_z \psi_l + \hat{l}_z^2 \psi_l = l(l+1) \hbar \psi_l$$

$$\text{また、} \hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_+ \hat{l}_- - \hbar \hat{l}_z + \hat{l}_z^2 \quad \text{より、}$$

$$\hat{\mathbf{i}}^2 \psi_{l'} = -l'(-l' + 1)\hbar \psi_{l'}$$

$$[\hat{\mathbf{i}}^2, \hat{i}_{\pm}] = 0 \quad \text{より、}$$

$\hat{\mathbf{i}}^2 \psi_{m_i} = L \psi_{m_i}$ とすると、 $\hat{\mathbf{i}}^2 \hat{i}_{\pm} \psi_{m_i} = L \hat{i}_{\pm} \psi_{m_i}$ となり、すなわち ψ_{m_i} に \hat{i}_{\pm} を作用させても $\hat{\mathbf{i}}^2$ の固有値は変わらないことを意味している。

ψ_l に \hat{i}_- を次々と作用させて $\psi_{l'}$ にもってきてても、 $\hat{\mathbf{i}}^2$ の固有値は変わらない。

$$\therefore l(l+1) = -l'(-l'+1)$$

$$(l+l')(l-l'+1) = 0 \quad l-l'+1 > 0 \quad \text{だから、}$$

$$l = -l'$$

固有関数が、 $\hat{i}_+ \psi_l = 0$ 、 $\hat{i}_- \psi_{l'} = 0$ のような条件を満足せず、 \hat{i}_{\pm} を作用させることにより、無限に新しい関数が作られるものとする、 \hat{i}_z の固有値は限りなく大きくなり、従って \hat{i}_z^2 の固有値についても同様である。ところが、 $\hat{\mathbf{i}}^2$ の固有値は不変であるから $\hat{i}_x^2 + \hat{i}_y^2 = \hat{\mathbf{i}}^2 - \hat{i}_z^2$ の固有値はいずれ負になってしまう。ところが、 \hat{i}_x 、 \hat{i}_y はエルミート演算子であるから、 $\hat{i}_x^2 + \hat{i}_y^2$ の固有値は負になることはない。これは、 $\hat{i}_+ \psi_l = 0$ 、 $\hat{i}_- \psi_{l'} = 0$ の条件が必ず存在することを意味するものである。

$$\hat{i}_{\pm} = e^{\pm i\phi} \left(\pm \hbar \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \hat{i}_z \right) \quad \text{だから、}$$

$$\begin{aligned} \hat{i}_+ \psi_l &= e^{i\phi} \left(\hbar \frac{\partial \psi_l}{\partial \theta} - \cot \theta \hat{i}_z \psi_l \right) \\ &= e^{i\phi} \left(\hbar \frac{\partial \psi_l}{\partial \theta} - \cot \theta \cdot l \hbar \psi_l \right) = 0 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \psi_l}{\partial \theta} = \cot \theta \cdot l \psi_l$$

$$\frac{\partial \psi_l}{\psi_l} = l \cot \theta d\theta \quad \text{積分すると、}$$

$$\begin{aligned} \psi_l &= G(\phi) (\sin \theta)^l \\ &= c e^{i l \phi} (\sin \theta)^l \quad (\text{まえの } \psi = F(\theta) e^{i m_i \phi} \text{ より}) \end{aligned}$$

固有関数はこの ψ_l に \hat{i}_- を順次作用させて得ることができ、このときの \hat{i}_z の固有値は、

$$l\hbar, (l-1)\hbar, \dots, 0, \dots, (-l+1)\hbar, -l\hbar$$

$\hat{\mathbf{i}}^2$ の固有値は、 $l(l+1)\hbar$

角運動量の一般的扱い

3つの演算子 $\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z$ の交換関係を与えるだけで、いったいどれだけのことが言えるのか？ 驚くことにスピンを含まずすべての角運動量状態の記述が可能となります。量子力学がどのような原理・数学的基礎を土台に持つのか垣間見ることができます。(http://www.f-denshi.com/000okite/100ryosi/130angular-gen.html)

$\hat{\mathbf{j}} \times \hat{\mathbf{j}} = i\hbar \hat{\mathbf{j}}$ の関係があるとする。

$$[\hat{j}_y, \hat{j}_z] = i\hbar \hat{j}_x$$

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_x] = i\hbar \hat{j}_y$$

$$[\hat{j}_x, \hat{j}_y] = i\hbar \hat{j}_z$$

$\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2$ で定義すると、

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_x] = [\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_y] = [\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_z] = 0 \quad \text{を得る (交換可能)}。$$

$\hat{j}_z, \hat{\mathbf{j}}^2$ は交換可能であるから、共通な固有関数が存在し、

$$\hat{\mathbf{j}}^2 \psi_{J,m} = J\hbar^2 \psi_{J,m}$$

$$\hat{j}_z \psi_{J,m} = m\hbar \psi_{J,m} \quad \text{とする。}$$

$\hat{j}_\pm = \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y$ なる演算子を定義する。

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm \hbar \hat{j}_\pm$$

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_\pm] = 0$$

$$\hat{j}_z \hat{j}_\pm \psi_{J,m} = (m \pm 1)\hbar \hat{j}_\pm \psi_{J,m}$$

$$\hat{\mathbf{j}}^2 \hat{j}_\pm \psi_{J,m} = J\hbar^2 \hat{j}_\pm \psi_{J,m}$$

したがって、 $C_{J,m}$ を定数として、

$$\hat{j}_\pm \psi_{J,m} = C_{J,m} \psi_{J,m \pm 1} \quad \text{が成立する。}$$

\hat{j}_\pm を乗ずると、 \hat{j}_z の量子数 m は1つずつ増減するが、 $\hat{\mathbf{j}}^2$ の固有値は不変であるから、 m の値には上限と下限が存在しなければならない (前節の議論と同様)。

上限を j 、下限を j' とすると、 $(m$ のとりえる値は、 $j, j-1, \dots, j'+1, j' \leftarrow j-j'+1$ 個)

$$\hat{j}_+ \psi_{J,j} = 0$$

$$\hat{j}_- \psi_{J,j'} = 0$$

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{j}_- \hat{j}_+ + \hbar \hat{j}_z + \hat{j}_z^2$$

$$= \hat{j}_+ \hat{j}_- - \hbar \hat{j}_z + \hat{j}_z^2 \quad \text{より、}$$

$$\hat{\mathbf{j}}^2 \psi_{J,j} = j(j+1)\hbar \psi_{J,j}$$

$$\hat{\mathbf{j}}^2 \psi_{J,j'} = -j'(-j'+1)\hbar \psi_{J,j'}$$

$$\therefore j(j+1) = -j'(-j'+1)$$

$$(j+j')(j-j'+1) = 0$$

$$j = -j'$$

$j - j' = 2j$ が0または正整数であるから (j を1ずつ減らして $j' = -j$ にたどりつく)、

j のとりえる値は、 $0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$

また、1つの j が与えられたとき、 m のとりえる値は、 $j, j-1, \dots, -j+1, -j$

まとめると、

$$\hat{\mathbf{j}}^2 \psi_{j, m_j} = j(j+1) \hbar^2 \psi_{j, m_j} \quad j \text{ のとりえる値は、} 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$$

$$\hat{j}_z \psi_{j, m_j} = m_j \hbar \psi_{j, m_j} \quad m_j \text{ のとりえる値は、} j, j-1, \dots, -j+1, -j$$

$$\hat{j}_{\pm} \psi_{j, m_j} = \hbar \sqrt{(j \mp m_j)(j \pm m_j + 1)} \psi_{j, m_j \pm 1} \quad \text{昇降演算子}$$

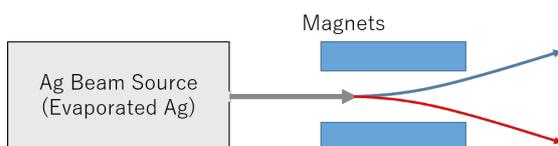
j が半整数であるときは、スピン角運動量を含み、特に 1 電子が持つスピンは、 $j = 1/2$ のときに対応する。

スピン

電子や原子核は電子スピンや核スピンと呼ばれる量子数で記述される量子状態を持つ。核の持つスピンは核を構成する陽子や中性子のスピンの合成されたものである。電子などの素粒子は大きさの概念を持たない点であると考えられており、慣性モーメントを持つ物質が回転して生ずる古典的な意味での角運動量は持てない。にもかかわらず、電子などの持つスピンは角運動量と大変よく似た性質を示す。これは、スピンも古典的角運動量も、群論で規定された空間の対称性に起因する同種の演算則に従うからであり、古典的な類推で電荷を持つ物体が回転しているというイメージは正確ではない。スピンはスピン量子状態で記述される電子の内在的性質と捕らえるべきである。

電子のスピンは半整数 $1/2$ の値を持つが、原子核は核種により 0 , $1/2$, 1 などのスピンを持つ。スピンは量子状態でありスピン波動関数で記述され、その固有値がスピン量子数となる。電子や原子核はスピンに応じた磁気モーメントを持っており磁場と相互作用する。磁場がない状態では電子や核子のエネルギーは、スピン量子数にかかわらず縮退しているが、外部磁場がかかるとスピン量子数に応じたエネルギー分裂が生じ縮退が取れる。

<http://theochem.kuchem.kyoto-u.ac.jp/tanimura/CS/CP2.pdf>



1922年に銀原子を使って行われたシュテルン・ゲルラッハの実験
(Ag原子のビームを磁場中に通すと、2つのビームに分かれる)

スピン演算子

$$\hat{\mathbf{s}} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$$

$$\hat{\mathbf{s}} \times \hat{\mathbf{s}} = i\hbar \hat{\mathbf{s}}$$

$$[\hat{s}^2, \hat{s}_x] = [\hat{s}^2, \hat{s}_y] = [\hat{s}^2, \hat{s}_z] = 0$$

スピン関数 χ

$$\hat{s}_z \chi_{1/2} = \frac{\hbar}{2} \chi_{1/2}$$

$$\hat{s}_z \chi_{-1/2} = -\frac{\hbar}{2} \chi_{-1/2}$$

基底に $\chi_{1/2}$ 、 $\chi_{-1/2}$ をとると、

$$S_z = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} \quad S_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\hbar}{2} \\ i\frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

パウリのマトリックス $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ を導入すると、

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$$

$$\hat{\mathbf{s}}^2 \text{の固有値} \quad \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 \quad \text{スピン量子数 } s = \frac{1}{2}$$

$$\hat{s}_z \text{の固有値} \quad \pm \frac{1}{2} \hbar \quad \text{スピン磁気量子数 } m_s = \pm \frac{1}{2}$$

スピンは、後に見る相対論的量子力学において自動的に導かれる。

角運動量の合成

多電子系の場合、そのもつ全軌道角運動量 \mathbf{L} および全スピン角運動量 \mathbf{S} は、

$$\hat{\mathbf{L}} = \sum_i \hat{\mathbf{l}}_i$$

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_i \hat{\mathbf{s}}_i$$

によって定義される。

$$\text{全角運動量 } \hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$$

前節でみたように、

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar \hat{l}_x \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar \hat{l}_y \quad [\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z$$

$$[\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hbar \hat{s}_x \quad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hbar \hat{s}_y \quad [\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar \hat{s}_z$$

ただし、このようになって交換しないのは、同じ番号の電子についてだけであって、異なる番号 i のものは交換する。つまり、べつべつの電子の演算子はたがいに可換であり、また、軌道角運動量とスピン角運動量は可換であるから、次の交換関係をみたすことになる。

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

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_x] = [\hat{J}^2, \hat{J}_y] = [\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$$

軌道角運動量 $\hat{\mathbf{l}}$ とスピン角運動量 $\hat{\mathbf{s}}$ の合成

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$$

$$\hat{\mathbf{j}}^2 \psi = J \psi$$

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{\mathbf{l}}^2 + \hat{\mathbf{s}}^2 + 2(\hat{\mathbf{l}}, \hat{\mathbf{s}}) \text{ より、}$$

$$\{\hat{\mathbf{l}}^2 + \hat{\mathbf{s}}^2 + 2(\hat{l}_x \hat{s}_x + \hat{l}_y \hat{s}_y + \hat{l}_z \hat{s}_z)\} \psi = J \psi$$

$$s_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad s_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad s_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$s^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\psi = \psi_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \text{ とすると、}$$

$$\begin{cases} (\hat{\mathbf{l}}^2 + \frac{3\hbar^2}{4} + \hbar \hat{l}_z) \psi_1 + \hbar \hat{l}_- \psi_2 = J \psi_1 & \hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i \hat{l}_y \\ (\hat{\mathbf{l}}^2 + \frac{3\hbar^2}{4} - \hbar \hat{l}_z) \psi_2 + \hbar \hat{l}_+ \psi_1 = J \psi_2 \end{cases}$$

$\psi_1 = a Y_{l, m_l}(\theta, \phi)$, $\psi_2 = b Y_{l, m_l+1}(\theta, \phi)$ とおくと、上式は、

$$\begin{cases} \{l(l+1) + 3/4 + m_l - J/\hbar^2\} a + \sqrt{(l-m_l)(l+m_l+1)} b = 0 \\ \{l(l+1) - 1/4 - m_l - J/\hbar^2\} b + \sqrt{(l-m_l)(l+m_l+1)} a = 0 \end{cases}$$

となり、 a, b が 0 でない解をもつためには、係数の行列式が 0 でなければならない。

$$\text{これから、} J/\hbar^2 = (l + 1/2)^2 \pm (l + 1/2)$$

すなわち、

$$J = \begin{cases} \hbar^2(l + 1/2)(l + 3/2) & \rightarrow \psi_1 = \sqrt{\frac{l+m_l+1}{2l+1}} Y_{l, m_l}, \quad \psi_2 = \sqrt{\frac{l-m_l}{2l+1}} Y_{l, m_l+1} \\ \hbar^2(l - 1/2)(l + 1/2) & \rightarrow \psi_1 = \sqrt{\frac{l-m_l}{2l+1}} Y_{l, m_l}, \quad \psi_2 = \sqrt{\frac{l+m_l+1}{2l+1}} Y_{l, m_l+1} \end{cases}$$

$\hat{\mathbf{j}}^2 \psi = J \psi = j(j+1)\hbar^2 \psi$ のような形に書くと、

$j = l \pm 1/2$ これを内量子数という。

$$\hat{j}_z \psi = (\hat{l}_z + \hat{s}_z) \psi = (m_l + 1/2)\hbar \psi$$

$m_j = m_l + 1/2$ は内磁気量子数 1つの j に対して、 $-j, -j+1, \dots, j-1, j$ をとる。

2 粒子の軌道角運動量の合成

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{l}}_1 + \hat{\mathbf{l}}_2$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{L,M} = L(L+1) \hbar \psi_{L,M}$$

$$\hat{L}_z \psi_{L,M} = M \hbar \psi_{L,M} \quad M = L, L-1, \dots, -L+1, -L$$

角運動量 z 成分の合成則はあきらかであり、 $M = m_1 + m_2$

物理量の完全系として $\hat{\mathbf{l}}_1^2, \hat{\mathbf{l}}_2^2, \hat{l}_{1z}, \hat{l}_{2z}$ を選ぶと (この他にも 4 個とあわせて完全系となる量があるが、これは以下の議論には響いてこないので省く)、各状態は、 l_1, l_2, m_1, m_2 の値によって指定される。 l_1, l_2 の定まった値に対して m_1, m_2 はそれぞれ $2l_1+1$ 個、 $2l_2+1$ 個の値をとり、したがって、 $(2l_1+1)(2l_2+1)$ 個の異なる状態が存在する。これを $\varphi_{l_1, l_2, m_1, m_2}$ と書こう。

一方、 $\hat{\mathbf{l}}_1^2, \hat{\mathbf{l}}_2^2, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z$ を完全系として選ぶことができる。各状態は、 l_1, l_2, L, M の値によって指定され、これを $\psi_{l_1, l_2, L, M}$ と書こう。 l_1, l_2 を与えれば、上と同様 $(2l_1+1)(2l_2+1)$ 個の異なる状態があるはずである。すなわち、 l_1, l_2 が与えられれば、 L, M の対は $(2l_1+1)(2l_2+1)$ 個の異なる値の対をとることができる。

$$\hat{L}_z \psi_{l_1, l_2, m_1, m_2} = (m_1 + m_2) \hbar \psi_{l_1, l_2, m_1, m_2}$$

$\psi_{l_1, l_2, L, M}$ は、 $\varphi_{l_1, l_2, m_1, m_2}$ の 1 次結合であらわせるから、 l_1, l_2 を与えたとき、ある M を得る状態は、

$$\psi_{l_1, l_2, L, M} = \sum_{m_1+m_2=M} C_{l_1, l_2, m_1, m_2} \varphi_{l_1, l_2, m_1, m_2}$$

$$\uparrow Y_{l_1, m_1} Y_{l_2, m_2}$$

$M = l_1 + l_2$ (最大値) のとき、

$$\psi_{l_1, l_2, L, l_1+l_2} = \varphi_{l_1, l_2, l_1, l_2} \quad \varphi_{l_1, l_2, l_1+l_2, l_1+l_2} \text{ が対応する } (L = l_1 + l_2 \text{ が対応する}).$$

$M = l_1 + l_2 - 1$ のとき、

$$\psi_{l_1, l_2, L, l_1+l_2-1} = \varphi_{l_1, l_2, l_1-1, l_2} \text{ と } \varphi_{l_1, l_2, l_1, l_2-1} \text{ の 2 種からなるから、} \psi \text{ も 2 種類が対応するはずである。}$$

$$L = l_1 + l_2 \text{ と } l_1 + l_2 - 1 \text{ が対応する。}$$

$M = l_1 + l_2 - 2$ のとき、

$$\psi_{l_1, l_2, L, l_1+l_2-2} = \varphi_{l_1, l_2, l_1-2, l_2} \text{ と } \varphi_{l_1, l_2, l_1-1, l_2-1} \text{ と } \varphi_{l_1, l_2, l_1, l_2-2} \text{ の 3 種からなる。}$$

$$L = l_1 + l_2 \text{ と } l_1 + l_2 - 1 \text{ と } l_1 + l_2 - 2 \text{ が対応する。}$$

.....
.....

$M = |l_1 - l_2|$ のとき、

$$L = l_1 + l_2, \dots, |l_1 - l_2| \text{ が対応する。}$$

ここでストップ。 M をこれ以上減らしても、状態の数は増加しない。

すなわち、 L のとり得る値は、 $l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|$ である。

1 つの L に対して M は $L, L-1, \dots, -L$ の $2L+1$ 個の値をとるから、

$$\psi_{l_1, l_2, L, M} \text{ の状態の数は、} \sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} (2L+1) = (2l_1+1)(2l_2+1)$$

スピンの合成

2 電子系の場合を考えてみる。各電子のスピン座標を σ_1, σ_2 であらわすと、2 電子系のスピン関数は、

$$\chi_{1/2}(\sigma_1)\chi_{1/2}(\sigma_2), \chi_{1/2}(\sigma_1)\chi_{-1/2}(\sigma_2), \chi_{-1/2}(\sigma_1)\chi_{1/2}(\sigma_2), \chi_{-1/2}(\sigma_1)\chi_{-1/2}(\sigma_2)$$

の 4 つの関数の 1 次結合で与えられると考えられる。

$$\hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{s}}^2 &= \hat{\mathbf{s}}_1^2 + \hat{\mathbf{s}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2 \\ &= \hat{\mathbf{s}}_1^2 + \hat{\mathbf{s}}_2^2 + \hat{s}_{1+}\hat{s}_{2-} + \hat{s}_{1-}\hat{s}_{2+} + 2\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z} \end{aligned} \quad \text{ただし、} \hat{s}_{\pm} = \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y$$

		$\hat{\mathbf{s}}^2$ の固有値		\hat{s}_z の固有値
対称	$\chi_{1/2}(\sigma_1)\chi_{1/2}(\sigma_2)$	$2\hbar^2$	$s = 1$	\hbar
	$\chi_{-1/2}(\sigma_1)\chi_{-1/2}(\sigma_2)$	$2\hbar^2$		$-\hbar$
	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1/2}(\sigma_1)\chi_{-1/2}(\sigma_2) + \chi_{-1/2}(\sigma_1)\chi_{1/2}(\sigma_2))$	$2\hbar^2$		0
反対称	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1/2}(\sigma_1)\chi_{-1/2}(\sigma_2) - \chi_{-1/2}(\sigma_1)\chi_{1/2}(\sigma_2))$	0	$s = 0$	0

$$s(s + 1)\hbar^2$$

$$s = 1 \quad \text{スピンを平行に合成したもの} \quad s = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}$$

$$s = 0 \quad \text{スピンを反平行に合成したもの} \quad s = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}$$

ボソンとフェルミオン

多粒子系の場合、各粒子が完全に独立しており、相互作用をしなければ、ハミルトニアンは次のように各粒子に対するハミルトニアンの和の形に書かれる。

$$\hat{H} = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + U_i(\mathbf{r}_i) \right)$$

このような場合には、シュレディンガー方程式の解は、積の形に書くことができる。

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, t) = \psi_1(\mathbf{r}_1, t) \psi_2(\mathbf{r}_2, t) \dots$$

ところが、まったく同じ粒子からなる系では事情が異なってくる。量子力学では、粒子の運動の追跡ができないから (軌道というものがなく、つぎの時刻にはどこにあらわれるかわからない)、同種粒子を区別しておくことはできない。すなわち、1と2を交換しても確率密度は同じとならなければならない。

上式に従うとすると、 $|\psi_1(1)\psi_2(2)| = |\psi_1(2)\psi_2(1)|$ が成立しなければならないが、これは一般には成り立たない。 $\psi_1(1)\psi_2(2)$ で系の状態を記述するのは、同一粒子の場合、不適格である。

しかし、確率密度が粒子の交換に対して不変であるような波動関数として、次のようなものをつくることができる。

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_1(2)\psi_2(1))$$

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_1(2)\psi_2(1))$$

粒子の交換に対して、 ψ_S は符号は変わらないが、 ψ_A は符号を変える。

ψ_S を対称的であるといい、 ψ_A を反対称的であるという。

電子、中性子などスピンの半奇数の粒子は反対称粒子 (フェルミ粒子)、
 フォトン、 α 粒子などのようにスピンの0または整数の粒子は対称粒子 (ボース粒子) となる。
 ————— 相対論的量子力学による。

パウリの排他原理

$$\text{反対称粒子の場合、} \psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \dots & \psi_1(N) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \dots & \psi_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(1) & \psi_N(2) & \dots & \psi_N(N) \end{vmatrix}$$

この式において同じ状態であるなら、たとえば、 $\psi_1 = \psi_2$ となるなら、 $\psi_A = 0$ となってしまう。
 すなわち、反対称粒子の場合、粒子はまったく同じ状態を占めることは許されないのである。

////////////////////////////////////

$$\text{反対称粒子の場合、} \psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \dots & \psi_1(N) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \dots & \psi_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(1) & \psi_N(2) & \dots & \psi_N(N) \end{vmatrix} \quad \text{という組み合わせだけであることがスレーター}$$

によって示された。この関数のことをスレーター行列式とよぶ。

また、対称粒子は、このスレーター行列式の負号をすべてプラスに変えたもので与えられることが証明される。

相対論的量子力学

相対論的波動方程式は波動力学の基礎を築いたエルヴィン・シュレーディンガーによって、最初に考察されていたが、水素原子のスペクトル構造を正しく与えることができず、1926年に非相対論的なシュレーディンガー方程式を提出するに至った。

非相対論的なシュレーディンガー方程式による量子力学の定式化が成功を収めて間もなく、シュレーディンガー方程式の相対論的な方程式への拡張として、クライン-ゴールドン方程式がオスカル・クラインとヴァルター・ゴールドンによって提案された。また、同時期にウラジミール・フォック、J. Kudar、テオドール・ド・ドンデルらも同様な提案を行った。

しかしながら、当初、クライン-ゴールドン方程式が記述する $\psi(\mathbf{r}, t)$ は波動関数として解釈されたため、いくつかの問題を抱えていた。 $\psi(\mathbf{r}, t)$ を波動関数と見なした場合、クライン-ゴールドン方程式は時間について二階の微分方程式であり、確率密度が負の値を取りうるため、量子力学における確率解釈が困難であった。また、正のエネルギーの解に加えて、負のエネルギーの解が現れるため、粒子が安定な状態をとれない問題を抱えていた。こうした問題から、クライン-ゴールドン方程式は一旦、理論から放棄されることとなった。

1928年にポール・ディラックは、この確率解釈の困難を解消すべく、クライン-ゴールドン方程式に代わる基礎方程式として、時間について一階の微分方程式であるディラック方程式を導いた。ディラック方程式にも負のエネルギーが現れるものの、これは波動関数ではなく、正負の電荷をもつスピン 1/2 のフェルミ粒子の場（ディラック場）を記述する方程式と理解され、相対論的量子力学の基礎方程式と位置付けられるようになった。

ディラック方程式のみならず、クライン-ゴールドン方程式が、相対論的な場を満たす正しい方程式であることは、1934年にウォルフガング・パウリとヴィクター・ワイスコップによって示された。パウリとワイスコップは、正準量子化したスピン 0 のボース粒子の場を満たす方程式がクライン-ゴールドン方程式であることを明らかにした。後に、クライン-ゴールドン方程式を満たすスカラー場の理論は、パイ中間子の理論の発展に寄与することとなった。(https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%AF%E3%83%A9%E3%82%A4%E3%83%B3%E2%80%93%E3%82%B4%E3%83%AB%E3%83%89%E3%83%B3%E6%96%B9%E7%A8%8B%E5%BC%8F)

これまでの議論の基礎になっていたのはシュレディンガー方程式であるが、これはローレンツ変換に対する不変性を満たしていない。したがって、粒子の速度が光速にくらべてずっと小さいときしか適用できない。

ここでは、相対論に対応させた方程式として、クライン-ゴールドン方程式とディラック方程式をとりあげる。

クライン-ゴールドンの方程式

ローレンツ変換に対して不変な波動方程式を見つけなくてはならないわけだが、相対性理論でみたように、ローレンツ変換に対する不変量として、

$(\epsilon/c)^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 = (mc)^2$ がある。ただし、 ϵ は粒子のエネルギー、 m は粒子の静止質量

ここで、 $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$ 、 $\epsilon \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ とおきかえ、 ψ に作用させてみる。

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \nabla^2 \psi - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi$$

あるいは、 $(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2})\psi = 0$ $\square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2$ ダランベルシアン

これはローレンツ変換に対して不変であり、クライン-ゴールドンの方程式と呼ばれるものである。

しかし、この式は、時間について 2 階の微分係数を含むものであり、1 粒子の確率波が従うべき方程式としては不適切と考えられた。

シュレディンガー方程式の場合から類推して (page4)、確率のカレントの保存則 $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div } \mathbf{s}$ を考える。

$\mathbf{s} = i \{ (\nabla \psi^*) \psi - \psi^* \nabla \psi \}$ 確率密度のカレント

$\rho = -\frac{i}{c^2} \int \psi^* \hat{A} \psi d\mathbf{q}$ 確率密度

シュレディンガー方程式の場合と比較すると、 \mathbf{s} は同じ形になるが、 ρ は大きく異なっている（相対論を取り入れたことで ρ と \mathbf{s} が対象の形になった）。これをみると、 ρ はもはや正定値形式ではないので確率密度という解釈が成り立たなくなる。そして、このような困難は場の量子論を導入しない限り解決できないのである。

ディラックの方程式

シュレディンガー方程式は時間微分について 1 階で、空間微分について 2 階の微分方程式であった。クライン-ゴールドン方程式は、相対論の関係式を微分演算子の間関係にとらえ、時間についても 2 階の微分方程式にすることで、相対論的共変性を実現したものであった。これに対して、微分を 1 階にしようとするのが、ディラックの立場である。

ここでは、ディラックがつくりあげた相対論の要求を満たす波動方程式を取り上げるが、これによると、スピンの自動的に導かれ、また陽電子の存在も明らかとなる。

微分を 1 階にするためには、 $(\epsilon/c)^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + (mc)^2$ より、

$$\varepsilon/c = \sqrt{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + (mc)^2} = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta mc \quad \text{とおいてみる。}$$

ただし、この $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta$ がただの数ではないことは明らかである。

$\varepsilon/c = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta mc$ を2乗したとき、 $(\varepsilon/c)^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + (mc)^2$ となるようにするには、 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta$ は、少なくとも4行4列の行列でなければならないことをディラックはつきとめた。

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ここで要請されたのは、

$$\alpha_k \text{ と } \beta \text{ はエルミート行列であること} \quad \alpha_k^\dagger = \alpha_k \quad \beta^\dagger = \beta$$

$$\text{また、} \alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \beta^2 = 1$$

$$\text{さらに、} \alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1 = 0, \dots, \alpha_1 \beta + \beta \alpha_1 = 0, \dots \quad \text{反交換関係}$$

$$\text{まとめて、} \alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k = 2\delta_{kl}, \alpha_k \beta + \beta \alpha_k = 0, \beta^2 = 1$$

これらをディラックの行列というが、この行列の表し方には他にも無数にある。

$$\text{パウリの行列 (page26)} \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{を使うと、}$$

$$\text{上の行列は、} \alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad \text{とあらわせる。}$$

$$\varepsilon/c = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta mc = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc$$

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla, \quad \varepsilon \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{とおきかえ、} \psi \text{ に作用させてみる。}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \psi + \beta mc^2 \psi = \hat{H} \psi \quad \hat{H} = -i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2 \quad \text{ハミルトニアン 演算子}$$

これを、ディラックの方程式という。

ただし、これが4行4列の行列を含むということは、 ψ も次の形となる。

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \psi + \beta mc^2 \psi$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} = i\hbar c \nabla \psi^\dagger \cdot \boldsymbol{\alpha} + mc^2 \psi^\dagger \beta$$

$$\begin{cases} \rho = \psi^\dagger \psi = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2 & \text{確率密度} \\ \mathbf{s} = c \psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi & \text{確率密度のカレント} \end{cases}$$

スピン

シュレディンガーの非相対論的な場合は、角運動量 $\hat{\mathbf{l}}$ とハミルトニアン \hat{H} は可換であるが、次にみるように、ディラックの相対論的な場合は可換ではない。つまり、 $\hat{\mathbf{l}}$ は保存量ではない (page7)。

$$\text{角運動量 } \hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla$$

ディラックのハミルトニアン $\hat{H} = -ic\hbar\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + \beta mc^2$

$$[\hat{H}, \hat{l}_x] = -c\hbar^2(\alpha_2\frac{\partial}{\partial z} - \alpha_3\frac{\partial}{\partial y})$$

$$[\hat{H}, \hat{l}_y] = -c\hbar^2(\alpha_3\frac{\partial}{\partial x} - \alpha_1\frac{\partial}{\partial z})$$

$$[\hat{H}, \hat{l}_z] = -c\hbar^2(\alpha_1\frac{\partial}{\partial y} - \alpha_2\frac{\partial}{\partial x})$$

ここで、パウリの行列を拡張して、 $\sigma_x = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_1 \end{bmatrix}$ $\sigma_y = \begin{bmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{bmatrix}$ $\sigma_z = \begin{bmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{bmatrix}$ をつくと、

$$[\hat{H}, \sigma_x] = 2c\hbar(\alpha_2\frac{\partial}{\partial z} - \alpha_3\frac{\partial}{\partial y})$$

$$[\hat{H}, \sigma_y] = 2c\hbar(\alpha_3\frac{\partial}{\partial x} - \alpha_1\frac{\partial}{\partial z})$$

$$[\hat{H}, \sigma_z] = 2c\hbar(\alpha_1\frac{\partial}{\partial y} - \alpha_2\frac{\partial}{\partial x})$$

以上から、 $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ が \hat{H} と可換となることがわかる。 $\hat{\mathbf{j}}$ は軌道角運動量にスピン角運動量を加えた全角運動量とみなせる。

$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$ であるから、 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ の固有値は ± 1 である。

したがって、スピン角運動量の成分は、 $\pm \frac{\hbar}{2}$ の値をもつ。このように、電子が $\frac{1}{2}$ のスピンをもつことが自然にみちびかれる。

$$s_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hbar/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \quad \text{であるから、}\psi\text{の4成分のうち、}\psi_1\text{と}\psi_3\text{は}s_z\text{の固有値}\hbar/2\text{、}\psi_2\text{と}\psi_4$$

は s_z の固有値 $-\hbar/2$ に対応するものであることがわかる。それぞれ、[page26](#) でみた2成分のスピン関数 χ をあらかずものとなっている。

電子と陽電子

ディラックの方程式 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -ic\hbar\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\psi + \beta mc^2\psi$ を書き下すと、

$$i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = mc^2\psi_1 - ic\hbar\frac{\partial\psi_3}{\partial z} - ic\hbar(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y})\psi_4$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = mc^2\psi_2 + ic\hbar\frac{\partial\psi_4}{\partial z} - ic\hbar(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y})\psi_3$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_3}{\partial t} = -mc^2\psi_3 - ic\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial z} - ic\hbar(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y})\psi_2$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_4}{\partial t} = -mc^2\psi_4 + ic\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial z} - ic\hbar(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y})\psi_1$$

波動関数が平面波で与えられる場合を考えよう。

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)} \quad \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} : \text{4成分スピノル (ディラック・スピノル)}$$

$$(E - mc^2)A_1 - c(p_x - ip_y)A_4 - cp_zA_3 = 0$$

$$(E - mc^2)A_2 - c(p_x - ip_y)A_3 + cp_zA_4 = 0$$

$$(E + mc^2)A_3 - c(p_x - ip_y)A_2 - cp_zA_1 = 0$$

$$(E + m c^2)A_4 - c(p_x - i p_y)A_1 + c p_z A_2 = 0$$

A_i が 0 でない解をもつためには、 A_i の係数からなる行列式が 0 でなければならない。

$$\therefore E^2 - c^2 p^2 - m^2 c^4 = 0$$

$$\text{したがって、} E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} = \pm E_p$$

$E = +E_p$ のとき

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c p_z}{m c^2 + E_p} \\ \frac{c(p_x + i p_y)}{m c^2 + E_p} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - E_p t)} \quad \text{または、} \quad \psi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_x - i p_y)}{m c^2 + E_p} \\ \frac{-c p_z}{m c^2 + E_p} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - E_p t)}$$

$E = -E_p$ のとき

$$\psi = \begin{pmatrix} \frac{-c p_z}{m c^2 + E_p} \\ \frac{-c(p_x - i p_y)}{m c^2 + E_p} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} + E_p t)} \quad \text{または、} \quad \psi = \begin{pmatrix} \frac{-c(p_x + i p_y)}{m c^2 + E_p} \\ \frac{c p_z}{m c^2 + E_p} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} + E_p t)}$$

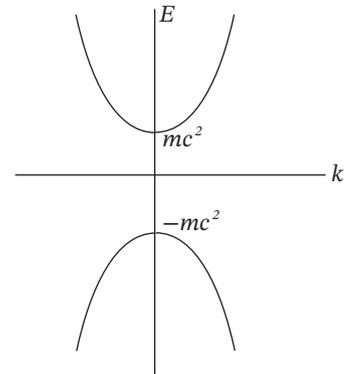
規格化因子 $\sqrt{\frac{m c^2 + E_p}{2 E_p}}$ 各 ψ にこれをかけておく。

$|\mathbf{p}| \ll mc$ の場合 (非相対論的)、 $E = +E_p$ のとき A_3, A_4 、 $E = -E_p$ のとき A_1, A_2 は無視できるから、 ψ は 2 成分となり、 σ_z の固有値が ± 1 となる (スピン)。

電子のエネルギー $E = \pm E_p$ について

電子はフェルミ粒子なので、空席がなければ正エネルギー状態から負エネルギー状態へ落ち込むことは許されない。ディラックは、負エネルギー状態は、すべて電子によって占められていると考えた。電子として観測されるのは正エネルギー状態にいるものだけであって、正エネルギーの電子が存在しない状態は、真空なのである。

負のエネルギー状態に空席ができるのは、 $2 m c^2$ 以上のエネルギーが与えられる場合で、このときは負のエネルギー状態に空孔ができ、正エネルギー状態には電子があらわれる。この現象は、対生成と呼ばれている。生じた空孔は、電子と同じ質量をもち、電荷 $+e$ をもった粒子のようにふるまうことが知られている。これが陽電子である (陽電子は、1932 年に宇宙線を調べていて発見される)。陽電子が電子と遭遇すると、電子は負エネルギー帯に落ち込み、電子、陽電子はともに消滅する。これは対消滅と呼ばれ、この際、正負状態間のエネルギーが γ 線として放出される。



電磁場中の電子

電磁場の中にある電子のエネルギーは、 $E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4$ のかわりに

$$(E + e\phi)^2 = c^2 \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2 + m^2 c^4 \quad \text{で与えられる。}$$

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\phi)\psi = c\boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A})\psi + \beta m c^2 \psi$$

電子が中心場の中で運動しているときは、 $\mathbf{A} = 0$ で ϕ が中心からの距離だけの関数である。

$-e\phi = U(r)$ とおけば、ハミルトニアン演算子は、 $\hat{H} = -i c \hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta m c^2 + U(r)$ となる。

γ 行列の導入

ディラック方程式が相対論の要請である共変性 (ローレンツ変換に対して方程式が不変であること) を持っているのかなどを調べる時、行列 α_k, β の代わりに、次のようなガンマ行列 γ^μ を考えた方が相対論的な変換性が見やすくなる。

$\gamma^0 = \beta \quad \gamma^k = \beta \alpha_k$ 相対論的な 4 次元ベクトルの扱いに備えて添え字を上付きに変えておく。

$$\text{ディラック・パウリ表現を用いると、} \gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix}$$

時間成分 γ^0 はエルミートだが、空間成分 γ^k は反エルミートとなる。

$$\gamma^{0\dagger} = \gamma^0 \quad \gamma^{k\dagger} = -\gamma^k$$

また、その間の交換関係は、

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \quad \text{となる。} \quad g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{ミンコフスキー計量}$$

これらの γ 行列を用いると、ディラックの方程式 $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -ic\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \psi + \beta mc^2 \psi$ は、

$$\left(\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} + i \frac{mc}{\hbar} \right) \psi = 0 \quad \text{とあらわせる。} \quad \text{ここでは、} x^0 = ct$$

これらを使って、ディラック方程式がローレンツ変換に対して共変性を持っていることの証明は、以下に詳しい。

<http://www.geocities.jp/nososnd/qu/cova.pdf>

http://www.th.phys.titech.ac.jp/~muto/lectures/INP02/INP02_chap07.pdf

<http://lab.twcu.ac.jp/sakai/rqm80128.pdf>

相対論的共変性とスピノル

方程式が共変的であるとは、ローレンツ変換をしても同じ形が成り立つことをいう。ローレンツ変換とは、時空座標系の実1次変換 $x^i \rightarrow x'^i = \Lambda^i_j x^j$ であって、どんな x^i に対しても $g_{ij} dx^i dx^j = g_{ij} dx'^i dx'^j$ の条件を満たすものをいう。(相対性理論参照)

$$\text{反変ベクトル } A'^i = \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} A^j = \Lambda^i_j A^j$$

$$\text{共変ベクトル } A'_i = \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} A_j$$

$$N \text{ 階のテンソル } T'^{abc\dots imn\dots} = \frac{\partial x'^a}{\partial x^d} \frac{\partial x'^b}{\partial x^e} \frac{\partial x'^c}{\partial x^f} \dots \frac{\partial x^i}{\partial x'^l} \frac{\partial x^j}{\partial x'^m} \frac{\partial x^k}{\partial x'^n} \dots T^{def\dots ijk\dots}$$

ディラック方程式を共变的にするには、 ψ をどのように変換すればよいか —— これを調べると、 ψ は反変ベクトルや共変ベクトルのように変換されず、別種の変換をなす量であることがわかった。ここからスピノルという概念が形づくられることになる。それまでは相対論的な式は、すべてテンソルを用いて書けると考えられていたが、網目をもれていたものとしてスピノルが出現したのである。

スピノル (共変スピノル)

$$X = \begin{pmatrix} ct+z & x-iy \\ x+iy & ct-z \end{pmatrix} = x^\mu \sigma_\mu \quad \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{とおくと、} \det X = g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu = \text{不変} \quad g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$X' = A^\dagger X A \quad \det A = 1$ (ユニモジュラ性) \iff 固有ローレンツ変換 (時間、空間反転なし) が証明される。このとき、 $A^\dagger \sigma_\mu A = \Lambda^\nu_\mu \sigma_\nu$ となる。

この $A^\dagger = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$ でもって、次のように変換される ξ_μ を共変スピノルという。

$$\begin{pmatrix} \xi'_1 \\ \xi'_2 \end{pmatrix} = A^\dagger \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}$$

計算準備 //////////////////////////////////////

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} \alpha^* & \gamma^* \\ \beta^* & \delta^* \end{pmatrix}, \quad {}^t A = \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ \gamma^* & \delta^* \end{pmatrix}, \quad |A| = |A^\dagger| = |{}^t A| = 1$$

$$\det A^\dagger = 1 \quad (\alpha\delta - \beta\gamma = 1) \text{ より、} A^* i\sigma_2 A^\dagger = i\sigma_2 \text{ となることがわかる。} \quad i\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

ここからさらに、

$$\begin{aligned} \sigma_2 A^* \sigma_2 &= (A^\dagger)^{-1} \quad \leftarrow (i\sigma_2)^{-1} = -i\sigma_2 \\ &= A \quad (A \text{ がユニタリ } A^\dagger A = I \text{ のとき}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_2 A^\dagger \sigma_2 &= (A^*)^{-1} \quad \text{上の転置} \\ &= {}^t A \quad (A \text{ がユニタリ のとき}) \end{aligned}$$

が導ける。

同様に、 $\alpha^* \delta^* - \beta^* \gamma^* = 1$ より、 ${}^t A i\sigma_2 A = i\sigma_2$

ここからさらに、

$$\begin{aligned} \sigma_2 {}^t A \sigma_2 &= \sigma_2 A^\dagger \sigma_2 = A^{-1} \quad \leftarrow A^\dagger = {}^t A, \quad (i\sigma_2)^{-1} = -i\sigma_2 \\ &= A^\dagger \quad (A \text{ がユニタリ のとき}) \end{aligned}$$

$$\sigma_2 A \sigma_2 = (A^{-1})^t = ({}^t A)^{-1} \quad \text{上の転置}$$

$$= A^* \quad (A \text{ がユニタリ のとき})$$

が導ける。

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \delta^* & -\gamma^* \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix}, \quad |A^{-1}| = 1$$

////////////////////////////////////

点つき共変スピノル

$\begin{pmatrix} \xi_1^* \\ \xi_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ \gamma^* & \delta^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}$ $\left| \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ \gamma^* & \delta^* \end{pmatrix} \right| = 1$ だから、 $\begin{pmatrix} \xi_1^* \\ \xi_2^* \end{pmatrix}$ もスピノルであるが、
 $\begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ \gamma^* & \delta^* \end{pmatrix}$ によって変換する量を、添字の上に点をつけて前者との特別な関係をあらわすことにする。

$$\begin{pmatrix} \eta_1' \\ \eta_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ \gamma^* & \delta^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ \gamma^* & \delta^* \end{pmatrix} = A^{\dagger*} = {}^t A$$

反変スピノル

$\begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix} = i\sigma_2 \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}$ を定義すると、 $\xi^\mu \eta_\mu = \text{不変}$ (※ 参照)。

ξ^μ を反変スピノルと呼ぶ。

$$\begin{pmatrix} \xi^{1'} \\ \xi^{2'} \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix} \quad \text{とすると、} B = (i\sigma_2)A^\dagger(i\sigma_2)^{-1} = \sigma_2 A^\dagger \sigma_2 = (A^*)^{-1} \quad \leftarrow (i\sigma_2)^{-1} = -i\sigma_2$$

$$\text{※ } \xi'^\mu \eta'_\mu = (\sigma_2 A^\dagger \sigma_2 \xi^\mu)^\dagger A^\dagger \eta_\mu = ((A^*)^{-1} \xi^\mu)^\dagger A^\dagger \eta_\mu = {}^t \xi^\mu (A^\dagger)^{-1} A^\dagger \eta_\mu = {}^t \xi^\mu \eta_\mu = \xi^\mu \eta_\mu \quad \text{不変}$$

$i\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ はスピノルにおける $g^{\mu\nu}$ のようなもの (共変スピノルを反変スピノルに切り替える)。

点つき反変スピノルの変換

$$\text{点つき反変スピノル } \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix} = i\sigma_2 \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \eta^{1'} \\ \eta^{2'} \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix} \quad \text{とすると、}$$

$$\begin{aligned} C &= (i\sigma_2)A^{\dagger*}(i\sigma_2)^{-1} = \sigma_2 A^{\dagger*} \sigma_2 = A^{-1} & \leftarrow (i\sigma_2)^{-1} &= -i\sigma_2 \\ &= A^\dagger & \text{(回転、ユニタリ } A^\dagger A &= I \text{ のとき)} \\ &= A^{\dagger(-v)} & \text{(} v \text{ で動く座標系)} & \quad A^{-1(-v)} = A^{\dagger(-v)} \end{aligned}$$

いま、 $X^{\text{R}} = \begin{pmatrix} x^0+x^3 & x^1-ix^2 \\ x^1+ix^2 & x^0-x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 & \xi_2 \end{pmatrix}$ とおくと (右辺は 4 個の実数成分をもつから可能)、右辺

の変換によって、左辺に固有ローレンツ変換 ($X^{\text{R}'} = A^\dagger X^{\text{R}} A$) がひきおこされることがわかる。

$$\therefore \begin{pmatrix} \xi_1' \\ \xi_2' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1' & \xi_2' \end{pmatrix} = A^\dagger \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 & \xi_2 \end{pmatrix} A$$

$$X_{\text{R}} = \begin{pmatrix} x_0+x_3 & x_1-ix_2 \\ x_1+ix_2 & x_0-x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^1 & \xi^2 \end{pmatrix}$$

右辺の変換によって、左辺に固有ローレンツ変換 ($X_{\text{R}'} = A^{-1} X_{\text{R}} (A^\dagger)^{-1}$ ※ 参照) がひきおこされる。

$$\therefore \begin{pmatrix} \xi^{1'} \\ \xi^{2'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^{1'} & \xi^{2'} \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^1 & \xi^2 \end{pmatrix} (A^\dagger)^{-1}$$

$$\ast \quad x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu \text{ より、} X_{\#} X^{\#} = \begin{pmatrix} x^\mu x_\mu & 0 \\ 0 & x^\mu x_\mu \end{pmatrix} = x^\mu x_\mu I \rightarrow X^{\#} = x^\mu x_\mu (X_{\#})^{-1}$$

$$x^\mu x_\mu \text{ は不変だから、} X^{\#'} = A^\dagger X^{\#} A \text{ より } X_{\#}' = A^{-1} X_{\#} (A^\dagger)^{-1}$$

● Weyl の方程式 (Weyl スピノル)

$\sigma_\mu \partial^\mu$ は、 $X = x^\mu \sigma_\mu$ の x^μ を変換性の同じ ∂^μ で置きかえたものであるから、これにより固有ローレンツ変換に対して、

$$\sigma_\mu \partial^\mu \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix} = \kappa \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$$

のローレンツ共変なことがわかる。 ← 全体に ' をとった $A^\dagger \sigma_\mu \partial^\mu A A^{-1} \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix} = \kappa A^\dagger \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$ は上式に帰着する。

とくに、 $\kappa = 0$ ととつたものを Weyl の方程式とよぶ。

● 空間反転

$$\begin{pmatrix} x^0+x^3 & x^1-ix^2 \\ x^1+ix^2 & x^0-x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 & \xi_2 \end{pmatrix} \text{ と } \begin{pmatrix} x_0+x_3 & x_1-ix_2 \\ x_1+ix_2 & x_0-x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^1 & \xi^2 \end{pmatrix} \text{ をくらべると、}$$

$\xi_a \iff \xi^a \quad \xi_a \iff \xi^a$ の入れ替えによって、空間反転が表現されていることがわかる。

上の Weyl の方程式は、空間反転に対して共変ではない。空間反転に関して共変な方程式の例として、次の連立方程式があげられる。

$$\begin{cases} (\sigma_0 \partial^0 + \sigma_k \partial^k) \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix} = \kappa \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \\ (\sigma_0 \partial^0 - \sigma_k \partial^k) \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \kappa \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix} \end{cases}$$

すなわち、空間反転

$$\begin{cases} x^0 \longrightarrow x^0, \quad x^k \longrightarrow -x^k \\ \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix} \iff \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \end{cases}$$

を行っても同じである。

$\kappa^2 = -\frac{m^2 c^2}{\hbar^2}$ のとき、クライン - ゴルドン型の

$$(\sigma_\mu \partial^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}) \psi = 0 \text{ になる。}$$

※ 上の連立方程式の片方の転置をとり、もう一方に左からかけてみる。

$$\sigma_0^2 = \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = I, \quad \sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_1 = 0, \dots \dots (1 \sim 3) \text{ より、}$$

$$(\sigma_0 \partial^0 + \sigma_k \partial^k)(\sigma_0 \partial^0 - \sigma_k \partial^k) = \partial_\mu \partial^\mu I$$

● 時間反転

時間の反転は、同様に次の操作によって行われる。

$$\begin{cases} x^0 \longrightarrow -x^0, \quad x^k \longrightarrow x^k \\ \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix} \longrightarrow -\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix} \end{cases}$$

前の連立方程式も時間反転に対して共変となるが、別の場との相互作用があるときはなりたない。

● ディラックの方程式

$$(\gamma^\mu \partial_\mu + i \frac{mc}{\hbar}) \psi = 0 \quad \gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix}$$

実は、この Dirac の方程式は、先にとりあげた連立方程式と同じものである。ただし、波動関数の成分は、次のようなものとなる。

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1 + \varphi^1 \\ \chi_2 + \varphi^2 \\ \chi_1 - \varphi^1 \\ \chi_2 - \varphi^2 \end{pmatrix} \quad \text{Dirac スピノル}$$

Dirac 表現というのは、Lorentz 群の表現として可約で、既約表現である二種類の Weyl スピノルを合成した表現といえる。

固有ローレンツ変換（時間、空間反転なし）にともなう Dirac スピノルの変換は、

$$\psi'(x') = L \psi(x) \quad L = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} A^\dagger + C & A^\dagger - C \\ A^\dagger - C & A^\dagger + C \end{pmatrix}$$