

量子力学 III

辻直人

2024年12月17日

目次

第 0 章	はじめに	3
0.1	講義内容	3
0.2	参考書	4
0.3	成績評価方法	4
第 1 章	電磁場中の荷電粒子の量子力学	6
1.1	量子力学の復習	6
1.2	電磁場中の荷電粒子	8
1.3	一様磁場中の粒子	13
1.4	一様磁場と一様電場中の粒子	16
1.5	Aharonov-Bohm 効果	18
1.6	Berry 位相	21
1.7	スピンを持つ粒子	27
第 2 章	散乱問題	30
2.1	散乱断面積	30
2.2	散乱断面積の量子力学的な扱い	31
2.3	散乱状態の波動関数が満たす方程式	35
2.4	Born 近似	37
2.5	部分波展開	40
2.6	共鳴散乱	47
2.7	Coulomb 散乱	51
2.8	Lippmann-Schwinger 方程式	54

第 3 章 多粒子の量子力学	61
3.1 2 粒子の量子力学	61
3.2 N 粒子の場合	65
3.3 ヘリウム原子	68
3.4 多電子系	71
第 4 章 第二量子化	77
4.1 調和振動子の復習	77
4.2 多数の調和振動子	79
4.3 第二量子化の記法	82
付録 A S 行列の補足	86

第0章 はじめに

0.1 講義内容

この講義では、量子力学 I, II で学んだ内容をもとに、電磁場中の荷電粒子の運動や散乱問題、および同種粒子の量子力学的扱いや量子多体系の初歩について学びます。具体的に扱うテーマは以下の通りです。

- 電磁場中の粒子の量子力学
- 散乱問題 (ボルン近似、部分波展開、共鳴など)
- 同種粒子系 (ボース粒子、フェルミ粒子)
- 多体問題 (第二量子化、ハートリーフォック近似など)

講義日程は以下の予定を考えています (全 13 回, 全て火曜日)。

10/8, 10/15, 10/22: 電磁場中の荷電粒子の量子力学 (3 回)

10/29, 11/5, 11/19: 散乱問題 (3 回)

11/12: 休講

12/3, 12/10: 同種粒子の量子力学的扱い (2 回)

12/17, 12/24: 第二量子化 (2 回)

1/7, 1/14: 量子多体系の初歩 (2 回)

1/21: 期末試験

0.2 参考書

教科書は特に指定しませんが、以下の文献を参考書として挙げておきます。この講義を準備する際に実際に参考にしました。

- [1] 猪木慶治, 川合光: 量子力学 I, II (講談社サイエンティフィック)
- [2] J. J. Sakurai: 現代の量子力学 (上, 下) (吉岡書店)
- [3] J. J. Sakurai and Jim Napolitano, *Modern Quantum Mechanics (Third Edition)* (Cambridge University Press)
- [4] S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics (Second Edition)* (Cambridge University Press)
- [5] 中原幹夫: 理論物理学のための幾何学とトポロジー I, II (日本評論社)

また、物理数学 II で学んだ内容を頻繁に使いますので、よく復習するようにしてください。

本講義のノートはホームページで配布します。質問や要望などは UTOL(UTokyo LMS) のコメント欄またはメールで受け付けています。

辻直人 (tsuji@phys.s.u-tokyo.ac.jp)

TA: 松浦修大 (matsuura@dyn.phys.s.u-tokyo.ac.jp)

講義ホームページ: <http://dyn.phys.s.u-tokyo.ac.jp/home/index.php/quantmech3-2024/>

0.3 成績評価方法

レポートと期末試験によって評価します。評価比率は

$$(\text{レポート 1 回目}) : (\text{レポート 2 回目}) : (\text{期末試験}) = 1 : 1 : 2$$

とします。

レポート

レポートは2回に分けて出題します。1回目のレポートは電磁場中の荷電粒子から散乱問題までの範囲で、2回目は同種粒子から残り全部の範囲です。講義ノート中に出てくる問から一回のレポート当たり4問以上を目安に選択して解いてください。全ての問が10点満点です。全て解く必要はありません。各回のレポートの点数の上限は50点とします。提出先はUTOL、レポートには必ず氏名、学籍番号、選択した問題番号を明記してください。締め切りは1回目: 12/3(火)、2回目: 後ほどアナウンスします。

期末試験

期末試験は授業の最終回(1/21(火))に行う予定です。詳細は追って説明します。

第1章 電磁場中の荷電粒子の量子力学

この章では、電磁場中で運動する荷電粒子が従う量子力学について見ていく。古典力学との対応から荷電粒子が従う方程式を導出する。

1.1 量子力学の復習

まずはこれまで学んできた量子力学の復習をしながらこの講義で用いる記法を導入しよう。量子力学によると、物理系の状態は Hilbert 空間 \mathcal{H} 中の状態ベクトル $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ で表される。Dirac のブラケット記法を使うことにする。物理量は状態ベクトルに作用する自己共役 (エルミート) 演算子で表される¹。特に粒子の運動を議論するときには中心的な役割を果たすのはハミルトニアン \hat{H} である。ハミルトニアンは物理量としてのエネルギーに対応する演算子である。演算子にはハット (^) をつけることにする。

状態ベクトルの時間発展は Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1.1)$$

によって決定される。ここで \hbar はプランク定数を 2π で割った定数 ($\hbar = h/(2\pi)$) である。ハミルトニアンが時間に依存しないときは

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |\psi\rangle \quad (1.2)$$

¹この講義では量子力学の数学的に厳密な取り扱いを目指さない。Hilbert 空間が無次元の場合は自己共役性とエルミート性は明確に区別される概念であるが、ここでは有限次元の場合と同様だと思っておおらかに扱うことにする。気になる人は [6]などを参考にしてください。

とおくことで、時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (1.3)$$

に帰着する。 E はエネルギー固有値である。

ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ 上の 1 粒子の運動を考えると、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.4)$$

で与えられる。ここで m は粒子の質量、 $\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}$ はそれぞれ運動量と位置に対応する演算子である。位置演算子 $\hat{\mathbf{r}}$ に対する固有状態を $|\mathbf{r}\rangle$ と書くことにする。

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle \quad (1.5)$$

運動量 $\hat{\mathbf{p}}$ は並進操作の生成子なので、微小な並進 $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}$ について

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{p}} \cdot \Delta\mathbf{r}\right)|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}\rangle \quad (1.6)$$

が成り立つ。ここから

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}\rangle = i\hbar\nabla|\mathbf{r}\rangle \quad (1.7)$$

が読み取れる。また

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{p}} \cdot \Delta\mathbf{r}\right)\hat{\mathbf{r}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{p}} \cdot \Delta\mathbf{r}\right) = \hat{\mathbf{r}} + \Delta\mathbf{r} \quad (1.8)$$

より正準交換関係

$$[\hat{r}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk} \quad (j, k = 1, 2, 3) \quad (1.9)$$

が成り立つことがわかる。

位置の固有状態 $|\mathbf{r}\rangle$ を基底にとったとき、運動量演算子は

$$\langle\mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = -i\hbar\nabla\langle\mathbf{r}|\psi\rangle = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}) \quad (1.10)$$

と表される。ここで

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \quad (1.11)$$

は波動関数である。位置演算子については

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{r}} | \psi \rangle = \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) \quad (1.12)$$

となる。以上の関係を使うと、波動関数 $\psi(t, \mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle$ に対する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \psi(t, \mathbf{r}) \quad (1.13)$$

が得られる。

$V(\mathbf{r})$ を静電ポテンシャル $e\phi(\mathbf{r})$ (ただし $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\phi(\mathbf{r})$ 、 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ は電場、 e は電荷) だと思えば、(1.13) は静電場中の 1 粒子の運動を記述する方程式そのものである。それでは磁場中の 1 粒子の運動はどのように記述されるだろうか？

問 1.1. 量子力学において最も不思議だと思う点について、背景も含めて述べよ。

1.2 電磁場中の荷電粒子

荷電粒子が電磁場とどのように相互作用するかを思い出すために、古典力学を振り返ってみよう。電場 \mathbf{E} と磁場 \mathbf{B} があるときに 1 粒子の運動方程式は

$$m\ddot{\mathbf{r}} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (1.14)$$

で与えられる。 $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}}$ は速度、時間微分をドットで表すことにする。電場によるクーロン力のほか、磁場によるローレンツ力が働いている。

この運動方程式を与えるハミルトニアン (あるいはラグランジアン) を書き下すには、静

電ポテンシャル ϕ の他にベクトルポテンシャル A を導入する必要がある。

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A} \quad (1.15)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1.16)$$

古典力学では ϕ や A は電場や磁場を扱うための補助的な量であったが、量子力学では後で見るように本質的な役割を担う。

運動方程式 (1.14) を導くラグランジアンは以下のように与えられる。

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{r}}^2 - e\phi + e\dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A} \quad (1.17)$$

問 1.2. ラグランジアン (1.17) から運動方程式 (1.14) を導け。

ラグランジアンから正準運動量が定義される。

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}} + e\mathbf{A} \quad (1.18)$$

ここからハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) &= \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - L \\ &= \mathbf{p} \cdot \frac{1}{m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) - \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + e\phi - e\mathbf{A} \cdot \frac{1}{m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \\ &= \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + e\phi \end{aligned} \quad (1.19)$$

となる。自由粒子のハミルトニアン $H = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2$ と比べると、 \mathbf{p} が $\mathbf{p} - e\mathbf{A}$ に置き換わり、 $e\phi$ が付け加わった形になっている。

量子力学に移行するには、 r, p を演算子 \hat{r}, \hat{p} に置き換えることになる。 A は r の関数であるので、 $A(t, \hat{r})$ と \hat{p} は可換ではないことに注意する。演算子の順序について任意性が生じてしまうが、次に述べるゲージ不変性の観点から以下の形に選ぶのが自然である。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(t, \hat{\mathbf{r}})) \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(t, \hat{\mathbf{r}})) + e\phi(t, \hat{\mathbf{r}}) \quad (1.20)$$

位置表示をした Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - e\mathbf{A})^2 + e\phi \right) \psi(t, \mathbf{r}) \quad (1.21)$$

と書かれる。ここで \mathbf{A} と ∇ は交換しないので、 $(-i\hbar \nabla - e\mathbf{A})^2 \psi = (-\hbar^2 \nabla^2 + i\hbar e(\nabla \cdot \mathbf{A}) + 2i\hbar e\mathbf{A} \cdot \nabla + e^2 \mathbf{A}^2) \psi$ となることに注意する。

電磁場中であっても確率密度

$$\rho(t, \mathbf{r}) = |\psi(t, \mathbf{r})|^2 \quad (1.22)$$

が保存することを確認しておく。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(t, \mathbf{r}) &= \psi^*(t, \mathbf{r}) \frac{\partial \psi(t, \mathbf{r})}{\partial t} + \psi(t, \mathbf{r}) \frac{\partial \psi^*(t, \mathbf{r})}{\partial t} \\ &= \psi^*(t, \mathbf{r}) \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - e\mathbf{A})^2 + e\phi \right) \psi(t, \mathbf{r}) \\ &\quad - \psi(t, \mathbf{r}) \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{1}{2m} (i\hbar \nabla - e\mathbf{A})^2 + e\phi \right) \psi^*(t, \mathbf{r}) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot \left[\psi^*(t, \mathbf{r}) \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A} \right) \psi(t, \mathbf{r}) - \psi(t, \mathbf{r}) \left(\nabla + \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A} \right) \psi^*(t, \mathbf{r}) \right] \end{aligned} \quad (1.23)$$

よって確率密度流を

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi^*(t, \mathbf{r}) \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A} \right) \psi(t, \mathbf{r}) - \psi(t, \mathbf{r}) \left(\nabla + \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A} \right) \psi^*(t, \mathbf{r}) \right] \quad (1.24)$$

と定義すれば、連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (1.25)$$

が成り立ち、確率密度が保存する。

ゲージ不変性という言葉が出てきたが、古典電磁気学で出てきたゲージ変換を思い出す。

任意の時間と位置の関数 $\chi(t, \mathbf{r})$ を用いて、ゲージ変換を

$$\phi' = \phi - \frac{\partial}{\partial t} \chi \quad (1.26)$$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi \quad (1.27)$$

と定義する。このようにして静電ポテンシャルとベクトルポテンシャルを取り替えても電場 (1.15) と磁場 (1.16) は変わらないことが確認できる。

$$\mathbf{E}' = -\nabla\phi' - \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}' = \mathbf{E} \quad (1.28)$$

$$\mathbf{B}' = \nabla \times \mathbf{A}' = \mathbf{B} \quad (1.29)$$

同じ電場と磁場を静電ポテンシャルとベクトルポテンシャルで表す方法は無数にあるということになる。元々、静電ポテンシャルとベクトルポテンシャルは物理的な電場と磁場を表すために人為的に導入したものであることに注意しよう。人為的に導入した表し方に任意性 (冗長性) があるのだから、物理はそのような任意性には依存してはいけいはずである。よってゲージ変換に対して物理は不変であるべきである。

一見すると、これは物理系にある操作をしても変わらない性質を指す「対称性」の概念とよく似ている。文献によってはゲージ対称性という言葉が出てくることもあるが、現代的な視点からはゲージ不変性と対称性は区別した方がよい場合がある。なぜならゲージ変換は、物理的に実体のある何かを変換しているわけではなく、あくまでも人為的に導入した静電ポテンシャルとベクトルポテンシャルが変換しているだけだからである。当面の間はこの違いはあまり気にしなくてよいが、自発的対称性の破れや超伝導、場の量子論などの進んだ話題になると問題になることがある。

さて、位置表示した Schrödinger 方程式 (1.21) に立ち戻って、ゲージ変換に対してどのように振る舞うか見てみる。 $\mathbf{A} = \mathbf{A}' - \nabla\chi$, $\phi = \phi' + \partial_t\chi$ を代入すると、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t, \mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A}' + e\nabla\chi)^2 + e\phi' + e\partial_t\chi \right) \psi(t, \mathbf{r}) \quad (1.30)$$

となる。これでは方程式の形が変わったままであるが、ここで波動関数もゲージ変換に対して次のように変換されると仮定しよう。

$$\psi'(t, \mathbf{r}) = e^{\frac{ie}{\hbar}\chi(t, \mathbf{r})}\psi(t, \mathbf{r}) \quad (1.31)$$

波動関数の位相がゲージ変換によって回転することになる。このようにすると、

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(t, \mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial t}[e^{-\frac{ie}{\hbar}\chi}\psi'(t, \mathbf{r})] = e^{-\frac{ie}{\hbar}\chi}\frac{\partial}{\partial t}\psi'(t, \mathbf{r}) - \frac{ie}{\hbar}(\partial_t\chi)\psi'(t, \mathbf{r}) \quad (1.32)$$

$$\nabla\psi(t, \mathbf{r}) = \nabla[e^{-\frac{ie}{\hbar}\chi}\psi'(t, \mathbf{r})] = e^{-\frac{ie}{\hbar}\chi}\nabla\psi'(t, \mathbf{r}) - \frac{ie}{\hbar}(\nabla\chi)\psi'(t, \mathbf{r}) \quad (1.33)$$

と変換されるため、Schrödinger 方程式 (1.21) はゲージ変換に対して不変になっている。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'(t, \mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A}')^2 + e\phi'\right)\psi'(t, \mathbf{r}) \quad (1.34)$$

確率密度 ρ (1.22) や確率密度流 j (1.24) もゲージ不変であることが確認できる。こうして量子力学においてもゲージ不変性を保つことができることがわかった。古典電磁気学と同じように、考える状況に応じて使いやすいゲージを選んで問題を解いてよいことになる。

ここまでは位置基底で表示した Schrödinger 方程式でゲージ不変性を議論したが、特定の基底によることなく演算子のレベルで議論することもできる。その場合は、状態ベクトルはゲージ変換によってユニタリー変換されるとする。

$$|\psi'(t)\rangle = \hat{U}|\psi(t)\rangle \quad (1.35)$$

ここで \hat{U} はユニタリー演算子であり、 $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$ を満たす (\hat{I} は恒等演算子)。上の議論を参考にして、ユニタリー演算子として

$$\hat{U} = e^{\frac{ie}{\hbar}\chi(t, \hat{\mathbf{r}})} \quad (1.36)$$

と選ぼう。このとき、状態ベクトルの時間微分は

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t}[e^{-\frac{ie}{\hbar}\chi(t, \hat{\mathbf{r}})}|\psi'(t)\rangle] = e^{-\frac{ie}{\hbar}\chi(t, \hat{\mathbf{r}})}\frac{\partial}{\partial t}|\psi'(t)\rangle - e^{-\frac{ie}{\hbar}\chi(t, \hat{\mathbf{r}})}\frac{ie}{\hbar}\left(\frac{\partial}{\partial t}\chi(t, \hat{\mathbf{r}})\right)|\psi'(t)\rangle \quad (1.37)$$

と変換する。一方で、 $\hat{p}|\psi(t)\rangle$ の変換性については少し考える必要がある。

問 1.3. 交換関係 (1.9) を用いて、任意の解析的な関数 $f(\mathbf{r})$ に対して

$$[\hat{\mathbf{p}}, f(\hat{\mathbf{r}})] = -i\hbar\nabla f(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.38)$$

が成り立つことを示せ。同様に、 $[\hat{\mathbf{r}}, f(\hat{\mathbf{p}})]$ を求めよ。

(1.38) を使うと、

$$\hat{\mathbf{p}}|\psi(t)\rangle = \hat{\mathbf{p}}e^{-\frac{ie}{\hbar}\chi(t,\hat{\mathbf{r}})}|\psi'(t)\rangle = e^{-\frac{ie}{\hbar}\chi(t,\hat{\mathbf{r}})}\hat{\mathbf{p}}|\psi'(t)\rangle - e^{-\frac{ie}{\hbar}\chi(t,\hat{\mathbf{r}})}e\nabla\chi(t,\hat{\mathbf{r}})|\psi'(t)\rangle \quad (1.39)$$

となる。このことから

$$(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(t,\hat{\mathbf{r}}))|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{ie}{\hbar}\chi(t,\hat{\mathbf{r}})}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}'(t,\hat{\mathbf{r}}))|\psi'(t)\rangle \quad (1.40)$$

が成り立つことがわかる。よってハミルトニアンを (1.20) の形に選んだときの Schrödinger 方程式 (1.1) は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi'(t)\rangle = \left[\frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}'(t,\hat{\mathbf{r}})) \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}'(t,\hat{\mathbf{r}})) + e\phi'(t,\hat{\mathbf{r}}) \right] |\psi'(t)\rangle \quad (1.41)$$

となって、基底の取り方によらずにゲージ不変性を保つ。

1.3 一様磁場中の粒子

前節で電磁場中の 1 粒子の量子力学を見たので、具体例に適用してみよう。系に一様な磁場がかかっている場合を考える。磁場は z 軸に平行であるとして一般性を失わない。磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ の表し方は様々にあるが、ここでは Landau ゲージ

$$(A_x, A_y, A_z) = (0, Bx, 0) \quad (1.42)$$

$$\phi = 0 \quad (1.43)$$

をとってみよう。ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y - eB\hat{x})^2 + \hat{p}_z^2) \quad (1.44)$$

で与えられる。このハミルトニアンに対するエネルギー固有値を求める。

まず、 z 方向の運動量が保存する。すなわち $[\hat{H}, \hat{p}_z] = 0$ なので、 \hat{H} と \hat{p}_z は同時対角化可能である。 \hat{p}_z の固有値を p_z とおくと、

$$\hat{H} = \hat{H}' + \frac{p_z^2}{2m} \quad (1.45)$$

$$\hat{H}' = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y - eB\hat{x})^2) \quad (1.46)$$

である。さらに \hat{H}' は \hat{y} を含んでいないので、 y 方向の運動量も保存する ($[\hat{H}', \hat{p}_y] = 0$)。 \hat{p}_y の固有値を p_y とおくと、

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + (p_y - eB\hat{x})^2) \\ &= \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{m}\right)^2\left(\hat{x} - \frac{p_y}{eB}\right)^2 \end{aligned} \quad (1.47)$$

と書ける。これは中心の x 座標が $\frac{p_y}{eB}$ だけずれた 1 次元調和振動子のハミルトニアン ($\hat{H} = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$) と同じ形をしている。その角振動数を

$$\omega = \frac{eB}{m} \quad (1.48)$$

とおく。 ω はサイクロトロン振動数と呼ばれる。古典的には、 xy 方向に周波数 ω の円運動、 z 方向に等速直線運動をするようなサイクロトロン運動に対応する。

1 次元調和振動子のエネルギー固有値はすでに知っていて、

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.49)$$

である。各エネルギー準位 E_n は Landau 準位と呼ばれる。元のハミルトニアン \hat{H} の固有値は

$$E_{n,p_z} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m} \quad (1.50)$$

と求まった。 \hat{p}_y も保存量だったことを思い出すと、 E_{n,p_z} (1.50) は p_y にはよらないので各エネルギー準位は無限に縮退していることになる。エネルギー固有状態の波動関数は、1次元調和振動子の波動関数 $\psi_n(x)$ を用いて

$$\psi_{n,p_y,p_z}(x,y,z) = \psi_n\left(x - \frac{p_y}{eB}\right) e^{\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)} \quad (1.51)$$

と表せる。 $\psi_n(x)$ は Gauss 関数と Hermite 多項式を組み合わせた形で表される。波動関数はゲージの取り方に依存していることに注意する。 $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ (磁気長) とおくと、 $\psi_n(x)$ は $\sqrt{2n+1}l_B$ 程度の広がりを持つ。

問 1.4. 一様磁場 $B = (0, 0, B)$ に対して、対称ゲージ $A = (-\frac{1}{2}By, \frac{1}{2}Bx, 0)$ を取った場合を考える。Schrödinger 方程式を解き、エネルギー固有値と固有波動関数を求めよ。

エネルギー準位がどれくらい縮退しているかを見るために、以下では z 方向の運動は考えないことにして、2次元面内だけの運動を考えることにしよう。縮退度が無限だと扱いくいので、有限の体積の系を考えて x 方向の長さを L_x 、 y 方向の長さを L_y とする。周期境界条件を課すことにすると、

$$\psi(x, y + L_y) = \psi(x, y) \quad (1.52)$$

より、 p_y は離散化された値をとる。

$$p_y = \frac{2\pi\hbar}{L_y} l \quad (l \in \mathbb{Z}) \quad (1.53)$$

x 方向の波動関数は中心 $\frac{p_y}{eB} = \frac{1}{eB} \frac{2\pi\hbar}{L_y} l$ に局在した形をしている。これが 0 と L_x の間に入るためには

$$0 \leq \frac{1}{eB} \frac{2\pi\hbar}{L_y} l \leq L_x \quad \Leftrightarrow \quad 0 \leq l \leq \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y \quad (1.54)$$

が満たされる必要がある。よって

$$(\text{単位面積あたりの縮退度}) = \frac{eB}{2\pi\hbar} \quad (1.55)$$

である。あるいは、磁束量子 $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{e} = \frac{h}{e}$ を用いると、全磁束 $\Phi = BL_xL_y$ に対して

$$(\text{縮退度}) = \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad (1.56)$$

となる。縮退度は Landau 準位 n によらないことに注意する。

ちなみに磁場がないときは、波動関数は x 方向も y 方向も平面波なので、運動量は $p_x = \frac{2\pi\hbar}{L_x}l_x, p_y = \frac{2\pi\hbar}{L_y}l_y$ ($l_x, l_y \in \mathbb{Z}$) と離散化されている。エネルギー固有値は $E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2)$ であり、エネルギー $0 \leq E \leq \mathcal{E}$ の範囲にあるエネルギー準位の数は

$$\#\{(l_x, l_y) \in \mathbb{Z}^2 \mid \frac{1}{2m\mathcal{E}}(\frac{2\pi\hbar}{L_x})^2 l_x^2 + \frac{1}{2m\mathcal{E}}(\frac{2\pi\hbar}{L_y})^2 l_y^2 \leq 1\} \simeq 2\pi m\mathcal{E} \frac{L_x}{2\pi\hbar} \frac{L_y}{2\pi\hbar} \quad (1.57)$$

である。単位エネルギーあたりの状態数は $2\pi m \frac{L_x}{2\pi\hbar} \frac{L_y}{2\pi\hbar}$ であり、エネルギーによらない。エネルギー $\hbar\omega n \leq E \leq \hbar\omega(n+1)$ の範囲にある状態数は $\hbar\omega 2\pi m \frac{L_x}{2\pi\hbar} \frac{L_y}{2\pi\hbar} = \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y$ となり、ちょうど Landau 準位の縮退度に一致する。

1.4 一様磁場と一様電場中の粒子

一様磁場と一様電場が存在するときの 2 次元面上の粒子の運動についても見ておこう。磁場は z 方向、電場は x 方向にかかっているとする。やはり Landau ゲージを選んで、 $\mathbf{A} = (0, Bx, 0), \phi = -Ex$ とおく。ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y - eB\hat{x})^2) - eE\hat{x} \quad (1.58)$$

で与えられる。 $[\hat{H}, \hat{p}_y] = 0$ なので \hat{H} と \hat{p}_y は同時対角化できて、 \hat{p}_y の固有値を p_y とおく。

このときハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x} - x_*)^2 - eEx_* + \frac{m}{2} \left(\frac{E}{B}\right)^2 \quad (1.59)$$

と書き直せる。ここで

$$x_* = \frac{p_y}{eB} + \frac{mE}{eB^2} \quad (1.60)$$

と定義した。一様磁場中と同様に、ハミルトニアンは中心座標 x_* の 1 次元調和振動子と同じ形をしている。エネルギー固有値は

$$E_{n,p_y} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - eEx_* + \frac{m}{2} \left(\frac{E}{B} \right)^2 \quad (1.61)$$

で与えられる。固有波動関数は

$$\psi_{n,p_y}(x, y) = \psi_n(x - x_*) e^{\frac{i}{\hbar} p_y y} \quad (1.62)$$

である。

古典的には、粒子は xy 面上をサイクロトロン運動をしながら電場と磁場に垂直な y 方向にドリフトしていく。ドリフトする速度は $v_y = -E/B$ である。量子力学において、速度演算子は

$$\hat{v} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}] \quad (1.63)$$

と定義するのが自然である。なぜなら、Heisenberg 描像で $\frac{d}{dt} \hat{r} = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{r}]$ となるからである。交換関係を評価すると、

$$\hat{v} = \frac{1}{m} (\hat{p} - e\mathbf{A}) \quad (1.64)$$

が得られる。これを用いて、エネルギー固有状態 $|\psi_{n,p_y}\rangle$ に対して y 方向の速度の期待値を求めてみよう。

$$\langle \psi_{n,p_y} | \hat{v}_y | \psi_{n,p_y} \rangle = \frac{1}{m} \langle \psi_{n,p_y} | \hat{p}_y - eB\hat{x} | \psi_{n,p_y} \rangle = \frac{1}{m} (p_y - eBx_*) = -\frac{E}{B} \quad (1.65)$$

となり、古典力学の結果を再現する。

物質中の電子に対しても磁場をかけた状態で電場を印加すると、電場と垂直方向に電子が動いて電流が流れる。これを Hall 効果という。 y 方向に流れる電流密度を j_y とすると、 $j_y = \sigma_{yx} E_x$ が成り立つ (σ_{yx} を Hall 伝導度という)。電子の密度を n_e とすれば、

$$\sigma_{yx} = -\frac{n_e e}{B} \quad (1.66)$$

となる。これは古典論からも期待される結果であるが、低温では Hall 伝導度が

$$\sigma_{yx} = \frac{ne^2}{h} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.67)$$

のように量子化する量子 Hall 効果が現れる。量子 Hall 効果は量子効果がマクロな物質で如実に現れる現象であり、またその後発展するトポロジカル物性のさきがけともなった現象である。

1.5 Aharonov-Bohm 効果

電磁場中の荷電粒子が従う Schrödinger 方程式 (1.21) を見ると、ベクトルポテンシャル A と静電ポテンシャル ϕ が顕に顔を出していることがわかる。一方で、古典論ではベクトルポテンシャルと静電ポテンシャルはあくまでも補助的な量であり、運動方程式 (1.14) には電場 E と磁場 B しか出てこない。量子力学においては E と B だけを使って物理法則を自然な形で書き下すことができず、 A と ϕ の方がより基本的な量であると考えられている。そのことを顕著な形で示すのが Aharonov-Bohm 効果である。

図のような二重スリット実験を考え、スリットの間影になる部分にソレノイドをスリットと平行に配置した場合を考えよう。ソレノイドの中を磁束 Φ が貫通しているとす。ソレノイドの外には磁場はもれていないとする。すなわちソレノイドの外では $B = 0$ であり、古典的な粒子の場合ソレノイドの外を通る限り磁場の影響を感知することはない。量子力学に従う粒子の場合はどうなるだろうか？

まず、 $\Phi = 0$ の場合を考える。スリット A だけが開いているときの波動関数を $\psi_0^A(\mathbf{r})$ 、スリット B だけが開いているときの波動関数を $\psi_0^B(\mathbf{r})$ とする。どちらの場合も、波束はスリットを通る経路 C_A, C_B の近傍に十分局在しているとする。スリットの両方が開いているときの波動関数は、両者の重ね合わせ $\psi_0(\mathbf{r}) = \psi_0^A(\mathbf{r}) + \psi_0^B(\mathbf{r})$ で表される。確率密度は $|\psi_0(\mathbf{r})|^2 = |\psi_0^A(\mathbf{r})|^2 + |\psi_0^B(\mathbf{r})|^2 + \psi_0^{A*}(\mathbf{r})\psi_0^B(\mathbf{r}) + \psi_0^{B*}(\mathbf{r})\psi_0^A(\mathbf{r})$ となるので、交差項から干渉効果が生じる。何度も実験を繰り返して粒子をスクリーンに衝突させると、衝突した

点の集まりが干渉縞を作る。これが通常の 2 重スリット実験である。

次に $\Phi \neq 0$ の場合を考える。ソレノイドの外では $B = 0$ であるが、ベクトルポテンシャルはソレノイドの外の領域全体で $A = 0$ とすることはできない。もしそのようなことができたとすると、ソレノイドを囲む経路 C に対して

$$\oint_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.68)$$

となるはずだが、Stokes の定理を使うと

$$\oint_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{S} \cdot \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \Phi \neq 0 \quad (1.69)$$

となるためである。ゆえにソレノイドの外で $A \neq 0$ となる領域が必ず存在することになる。

スリット A だけが開いているときの波動関数を $\psi_\Phi^A(\mathbf{r})$ とする。波束は C_A 近傍に十分局在しているとする。経路 C_A 上でゲージ変換をすることで、 C_A 上のベクトルポテンシャルを消すことができる。そのためには $\chi(\mathbf{r})$ を

$$\chi^A(\mathbf{r}) = - \int_{r_0, C_A}^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}') \quad (1.70)$$

と選べばよい。右辺の線積分は、経路 C_A に沿ってとっている。ゲージ変換後のベクトルポテンシャルは $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi^A = 0$ となることが確認できる。このように単連結な領域内で磁束がなければ、その領域内でゲージ変換によりベクトルポテンシャルを常に消すことができる。波動関数はゲージ変換によって磁束のないときのものに移り変わるので、

$$\psi_0^A(\mathbf{r}) = \exp\left(i\frac{e}{\hbar}\chi^A(\mathbf{r})\right) \psi_\Phi^A(\mathbf{r}) \quad (1.71)$$

が成り立つ。同様にして経路 C_B に対しても

$$\psi_0^B(\mathbf{r}) = \exp\left(i\frac{e}{\hbar}\chi^B(\mathbf{r})\right) \psi_\Phi^B(\mathbf{r}) \quad (1.72)$$

が成り立つ。

問 1.5. 磁場が $B = (0, 0, \Phi\delta(x)\delta(y))$ で与えられている場合を考える。ただし $\delta(x)$ は Dirac のデルタ関数である。このような B を与えるベクトルポテンシャル A の例を一つ挙げよ。

よって、スリット A と B を両方開いたときの波動関数は

$$\begin{aligned}\psi_{\Phi}^A(\mathbf{r}) + \psi_{\Phi}^B(\mathbf{r}) &= \exp\left(i\frac{e}{\hbar}\int_{\mathbf{r}_0,\gamma_A}^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}')\right) \psi_0^A(\mathbf{r}) + \exp\left(i\frac{e}{\hbar}\int_{\mathbf{r}_0,\gamma_B}^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}')\right) \psi_0^B(\mathbf{r}) \\ &= \exp\left(i\frac{e}{\hbar}\int_{\mathbf{r}_0,\gamma_A}^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}')\right) \left\{ \psi_0^A(\mathbf{r}) + \exp\left(i\frac{e}{\hbar}\oint_{\gamma_B-\gamma_A} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}')\right) \psi_0^B(\mathbf{r}) \right\} \\ &= \exp\left(i\frac{e}{\hbar}\int_{\mathbf{r}_0,\gamma_A}^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}')\right) \left\{ \psi_0^A(\mathbf{r}) + \exp\left(i\frac{e}{\hbar}\Phi\right) \psi_0^B(\mathbf{r}) \right\} \quad (1.73)\end{aligned}$$

となる。ここで注目すべきは、 A と B の波動関数の間に相対的な位相差 $\exp(i\frac{e}{\hbar}\oint d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}) = \exp(i\frac{e}{\hbar}\Phi)$ が現れたことである。全体にかかっている位相は物理的には効果がないが、この位相差は干渉効果に効いてくる。磁束 Φ を変化させることでスクリーン上の干渉縞がスライドするため、その効果を観測することができる。位相 $\exp(i\frac{e}{\hbar}\oint d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A})$ のことを Aharonov-Bohm (AB) 位相とよぶ。 A に依存しているように見えるが、磁束 Φ だけで決まるのでゲージ不変な量である。粒子は磁場 B のない領域を運動しているにも関わらず、量子力学的な効果によってベクトルポテンシャルからくる寄与をひっかけて観測量に影響を与える。

ちなみに、磁束が

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar}{e}n = \frac{h}{e}n \quad (n \in \mathbb{Z}) \quad (1.74)$$

を満たすときは $\exp(i\frac{e}{\hbar}\Phi) = 1$ となるので、磁束の影響は干渉効果に現れない。量子化単位 $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{e} = \frac{h}{e}$ は磁束量子と呼ばれる。

Aharonov-Bohm 効果には以下のような幾何学的な意味がある。ベクトルポテンシャル A は波動関数の位相が空間上でどのようにねじれるかを測る接続に対応する。磁場 $B = \nabla \times A$ はそのねじれに対応する曲率と解釈できる。空間上のある点から出発してループ状の経路

に沿って波動関数の位相をたどって元の点に戻ってきたときに、波動関数の位相がどれだけ元に戻らないかを測る量が AB 位相 $\exp(i\frac{e}{\hbar} \oint dr \cdot \mathbf{A}) = \exp(i\frac{e}{\hbar} \int dS \cdot \mathbf{B})$ である。元に戻らない度合いを定量化したものはホロノミーと呼ばれる。今の問題では、ループ状の経路を連続的に変形してもソレノイドをまたがない限りは AB 位相は変化しない。ループ状の経路がソレノイドに何回巻き付いたかを表す巻きつき数を N とおくと、AB 位相は

$$\exp\left(i\frac{e}{\hbar} \oint dr \cdot \mathbf{A}\right) = \exp\left(i\frac{e}{\hbar} \Phi N\right) \quad (1.75)$$

で与えられ、トポロジカルな量であることがわかる。

問 1.6. 半径 r の円上を粒子が自由に運動するとする。円の内部を磁束 Φ が貫いている。粒子がエネルギー固有状態にあるときに、エネルギー固有値はどのような値を取りうるか求めよ。

1.6 Berry 位相

Aharonov-Bohm 効果はベクトルポテンシャルによって引き起こされる幾何学的な効果であったが、ベクトルポテンシャルがなくても特定の状況下ではベクトルポテンシャルが「創発」して、様々な観測量にその影響が現れることが知られている。

その例として、ハミルトニアンが k 個のパラメーター $(R_1, R_2, \dots, R_k) = \mathbf{R}$ に依存している場合を考えよう。 \mathbf{R} は位置座標とは別ものであることに注意する。パラメーター \mathbf{R} を時間的にゆっくり変化させたときの状態ベクトルの変化に注目しよう。状態ベクトルの時間変化は、Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(\mathbf{R}(t)) |\psi(t)\rangle \quad (1.76)$$

に従って決まる。 $t \in [0, 1]$ とし、パラメーター $\mathbf{R}(t)$ は $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(1)$ を満たすとする。つまり \mathbf{R} は k 次元のパラメーター空間中のループ状の経路 C に沿って動くとする。

パラメーター R を固定したときのハミルトニアン $\hat{H}(\mathbf{R})$ の n 番目の固有値を $E_n(\mathbf{R})$ 、固有状態を $|n, \mathbf{R}\rangle$ で表す。

$$\hat{H}(\mathbf{R})|n, \mathbf{R}\rangle = E_n(\mathbf{R})|n, \mathbf{R}\rangle \quad (1.77)$$

系は $t = 0$ において、 n 番目の固有状態にあるとする ($|\psi(0)\rangle = |n, \mathbf{R}(0)\rangle$)。時間発展している間、状態は各時刻の $\hat{H}(\mathbf{R}(t))$ に対する n 番目の固有状態にとどまっていると仮定する。これは、時間発展の間 n 番目の固有状態が他の固有状態と準位交差することなく準位間の間隔が開いており、パラメーターが十分ゆっくり時間変化することで準位間の遷移が無視できる状況 (断熱近似) に対応する。

状態ベクトルの時間発展は

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\varphi(t)}|n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (1.78)$$

とおくことができる。これを Schrödinger 方程式に代入すると、

$$e^{i\varphi(t)}i\hbar\frac{d}{dt}|n, \mathbf{R}(t)\rangle - \hbar\varphi'(t)e^{i\varphi(t)}|n, \mathbf{R}(t)\rangle = e^{i\varphi(t)}E_n(\mathbf{R}(t))|n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (1.79)$$

となる。少し整理すると、

$$\varphi'(t) = -\frac{1}{\hbar}E_n(\mathbf{R}(t)) + i\langle n, \mathbf{R}(t)|\frac{d}{dt}|n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (1.80)$$

となる。 t について積分することで、 $t = 1$ において状態ベクトルが獲得する位相を求めることができる。

$$\begin{aligned} \varphi(1) &= -\frac{1}{\hbar}\int_0^1 ds E_n(\mathbf{R}(s)) + i\int_0^1 ds \langle n, \mathbf{R}(s)|\frac{d}{ds}|n, \mathbf{R}(s)\rangle \\ &= -\frac{1}{\hbar}\int_0^1 ds E_n(\mathbf{R}(s)) + i\oint_C d\mathbf{R} \cdot \langle n, \mathbf{R}|\nabla_{\mathbf{R}}|n, \mathbf{R}\rangle \end{aligned} \quad (1.81)$$

ここで $\nabla_{\mathbf{R}}$ はパラメーター空間上の微分であり、 $\oint_C d\mathbf{R}$ は k 次元パラメーター空間上の閉じた経路に沿った線積分を表す。右辺の第一項は粒子がエネルギー E_n を持つときの位相の変化に対応し、力学的位相と呼ばれる。第一項は自然に期待されるものだが、第二項は

そこからのずれを表し、非自明な形をしている。第二項のことを Berry 位相とよぶ。Berry 位相

$$\gamma_n(C) = i \oint_C d\mathbf{R} \cdot \langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle \quad (1.82)$$

は、経路 C と固有状態の番号 n のみによる。

AB 位相 $\exp(i \frac{e}{\hbar} \oint dr \cdot \mathbf{A})$ と比べるとよく似た形をしていることがわかる。そこで

$$\mathcal{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle \quad (1.83)$$

と定義しよう。 $\mathcal{A}_n(\mathbf{R})$ は Berry 接続と呼ばれる。あたかもパラメーター空間上でベクトルポテンシャルが創発したように見える。実際に $\mathcal{A}_n(\mathbf{R})$ を接続と解釈することができ、パラメーター空間上で状態ベクトルを移動させたときに位相がどれくらいねじれるかを測る量になっている。

固有状態 $|n, \mathbf{R}\rangle$ を (1.77) で定義するとき、固有状態の位相はどのように選んでもよいはずである。そこで

$$|\widetilde{n}, \mathbf{R}\rangle = e^{i\theta_n(\mathbf{R})} |n, \mathbf{R}\rangle \quad (1.84)$$

となるような別の固有状態 $|\widetilde{n}, \mathbf{R}\rangle$ を選んだとしよう。対応する Berry 接続は

$$\widetilde{\mathcal{A}}_n(\mathbf{R}) = i \langle \widetilde{n}, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | \widetilde{n}, \mathbf{R} \rangle = \mathcal{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_{\mathbf{R}} \theta_n(\mathbf{R}) \quad (1.85)$$

のようになる。これはベクトルポテンシャルのゲージ変換と同じ形をしていることがわかる。 $\mathcal{A}_n(\mathbf{R})$ はゲージの取り方に依存する量である。

ベクトルポテンシャルから磁場が $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ のように定義できたように、

$$\Omega_{n,\mu\nu}(\mathbf{R}) = \frac{\partial}{\partial R_\mu} \mathcal{A}_{n,\nu}(\mathbf{R}) - \frac{\partial}{\partial R_\nu} \mathcal{A}_{n,\mu}(\mathbf{R}) \quad (1.86)$$

という量を定義しよう。 $\Omega_n(\mathbf{R})$ は曲率とみなすことができ、Berry 曲率と呼ばれる。

$$\Omega_{n,\mu\nu}(\mathbf{R}) = i \left(\frac{\partial}{\partial R_\mu} \langle n, \mathbf{R} | \right) \left(\frac{\partial}{\partial R_\nu} | n, \mathbf{R} \rangle \right) - i \left(\frac{\partial}{\partial R_\nu} \langle n, \mathbf{R} | \right) \left(\frac{\partial}{\partial R_\mu} | n, \mathbf{R} \rangle \right) \quad (1.87)$$

と表すこともできる。Berry 曲率はゲージ不変な量になっている。Stokes の定理により Berry 位相は

$$\gamma_n(C) = \int d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{R}) \quad (1.88)$$

と表すこともできる。ただし面積分は経路 C に囲まれた領域でとることにする。パラメータ空間上に $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{R})$ で定義される曲率が存在すると、ループ状の経路に沿って状態ベクトルを動かしたときに力学的位相から期待される状態ベクトルには戻らず、位相がねじれて戻ってくることになる。Berry 位相もホロノミーとして解釈することができる。このような効果はマクロな観測量に影響を与えることがあり、トポロジカル物性の文脈で盛んに研究されている。

例 1.1. $S = \frac{1}{2}$ のスピンの磁場がかかっている例を考えよう。Pauli 行列 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ を用いてハミルトニアンは以下のように表される。

$$\hat{H}(\mathbf{R}) = \mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} R_3 & R_1 - iR_2 \\ R_1 + iR_2 & -R_3 \end{pmatrix} \quad (1.89)$$

\mathbf{R} が磁場に対応する。ハミルトニアンの固有値は $E_{\pm} = \pm|\mathbf{R}|$ で与えられる。準位交差が起きないように (断熱近似が使えるように)、以下では $\mathbf{R} \neq 0$ を仮定する。

固有値 E_+ に対する $\hat{H}(\mathbf{R})$ の固有ベクトルは、例えば

$$|\mathbf{R}_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2R(R+R_3)}} \begin{pmatrix} R+R_3 \\ R_1+iR_2 \end{pmatrix} \quad (1.90)$$

のように与えられる。 $R = |\mathbf{R}|$ とおいた。少々煩雑な計算ののち、Berry 接続は

$$\mathcal{A}_+(\mathbf{R}) = i\langle \mathbf{R}_+ | \nabla_{\mathbf{R}} | \mathbf{R}_+ \rangle = \frac{1}{2R(R+R_3)} \begin{pmatrix} R_2 \\ -R_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.91)$$

となることがわかる。 $\mathcal{A}_+(\mathbf{R})$ は z 軸の負の部分 ($R_3 = -R$) で特異性を持つ。パラメータ空間全体 ($\mathbf{R} \neq 0$) で Berry 接続を定義するには別のゲージを選ぶ必要がある。

天下りではあるが、

$$\tan \theta(\mathbf{R}) = \frac{R_2}{R_1} \quad (1.92)$$

を満たす $\theta(\mathbf{R})$ を使って、次のようなゲージ変換をしよう。

$$\mathcal{A}'_+(\mathbf{R}) = \mathcal{A}_+(\mathbf{R}) + \nabla_{\mathbf{R}}\theta(\mathbf{R}) \quad (1.93)$$

このようなゲージを選ぶと

$$\mathcal{A}'_+(\mathbf{R}) = \frac{1}{2R(R-R_3)} \begin{pmatrix} -R_2 \\ R_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.94)$$

という表示が得られる。今度は z 軸の正の部分 ($R = R_3$) で特異性を持つことになる。実は後で示すように、どのようなゲージを選んでもパラメーター空間全体を特異性なく覆うことはできない。複数のゲージを使って Berry 接続を貼り合わせる必要がある。

Berry 曲率を計算すると、

$$\Omega_+(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathcal{A}_+(\mathbf{R}) = -\frac{1}{2R^3} \begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \end{pmatrix} = -\frac{\mathbf{R}}{2R^3} \quad (1.95)$$

となる。これはゲージの取り方によらない。 $\Omega_+(\mathbf{R})$ を磁場だと思えば、原点から放射状に磁力線がのびている。これは磁気モノポールが作る磁場と同じである。本当のモノポールは観測されたことはないが、パラメーター空間上では仮想的なモノポールが作る磁場が創発することがある。

なぜパラメーター空間全体を覆うような特異性のない Berry 接続が存在しないかは次のようにしてわかる。仮にそのような $\mathcal{A}_+(\mathbf{R})$ が存在したとする。Berry 曲率を単位球面 S^2 上で積分すると

$$\int_{S^2} d\mathbf{S} \cdot \Omega_+(\mathbf{R}) = -2\pi \quad (1.96)$$

となる。一方、球面を上半分 S_+^2 と下半分 S_-^2 に分けると左辺は

$$\int_{S^2} d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_+(\mathbf{R}) = \int_{S_+^2} d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_+(\mathbf{R}) + \int_{S_-^2} d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_+(\mathbf{R}) \quad (1.97)$$

となるが、Stokes の定理により半球面の境界 S^1 上の線積分に直すと向きに注意して

$$\int_{S^2} d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_+(\mathbf{R}) = \oint_{S^1} d\mathbf{S} \cdot \mathcal{A}_+(\mathbf{R}) - \int_{S^1} d\mathbf{S} \cdot \mathcal{A}_+(\mathbf{R}) = 0 \quad (1.98)$$

となり矛盾する。よって特異性のない Berry 接続でパラメーター空間全体を覆うことはできない。

単位球面 S^2 上にループの経路 C をとって \mathbf{R} を動かしたときに状態ベクトル $|\mathbf{R}_+\rangle$ が獲得する Berry 位相は、

$$\gamma_+(C) = \oint_C d\mathbf{R} \cdot \mathcal{A}_+(\mathbf{R}) = \int d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_+(\mathbf{R}) = -\frac{\Omega(C)}{2} \quad (1.99)$$

となる。ここで $\Omega(C)$ は経路 C が囲む立体角を表す。この例からも、Berry 位相が幾何学的な意味を持っていることがわかる。

問 1.7. 例 1.1 において、固有値 $E_- = -|\mathbf{R}|$ に対応する Berry 接続 $\mathcal{A}_-(\mathbf{R})$ 、Berry 曲率 $\boldsymbol{\Omega}_-(\mathbf{R})$ 、Berry 位相 $\gamma_-(C)$ を求めよ。

Berry 位相は様々な方法で観測することができる。例えば上の例で、初期状態として z 軸方向にスピンの偏極した状態を考えてみる。磁場は最初 x 軸方向を向いているとする ($\mathbf{R}(0) \parallel \mathbf{e}_x$)。初期状態は

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}|\mathbf{R}(0)_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\mathbf{R}(0)_-\rangle \quad (1.100)$$

のように展開できる。磁場 \mathbf{R} をループ状の経路 C に沿って動かす。 $|\mathbf{R}(0)_\pm\rangle$ が得る力学的位相を φ_\pm とおくと、終状態は

$$|\psi(1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\varphi_+ + i\gamma_+(C)}|\mathbf{R}(0)_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\varphi_- + i\gamma_-(C)}|\mathbf{R}(0)_-\rangle \quad (1.101)$$

と表される。終状態に対して z 方向の分極 $P_z = \sigma_3$ を観測するとその期待値は

$$\langle P_z \rangle = \langle \psi(1) | \sigma_3 | \psi(1) \rangle = \cos(\varphi_+ - \varphi_- + \gamma_+(C) - \gamma_-(C)) \quad (1.102)$$

となり、Berry 位相の寄与が現れる。

1.7 スピンを持つ粒子

前節でスピンの概念が出てきたが、改めてスピンを持つ粒子が電磁場中でどのように運動するかを見てみよう。

電子や陽子などのミクロな粒子はスピンを持つことがある。例えば電子は $S = \frac{1}{2}$ のスピンを持っている。粒子の持つスピンの大きさ S は粒子ごとに決まっている。角運動量の一般論で出てきたように S は離散値しかとれず、 $S = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ のように整数または半整数の値をとる。

スピンがあると磁気モーメントを伴う。磁気モーメントの大きさはスピン S に比例しており、その比例係数を μ と書こう。磁場中ではスピン磁気モーメントによってエネルギー変化 $\Delta E = -\mu \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$ が生じる (Zeeman エネルギーと呼ばれる)。このことからスピンを持つ粒子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(t, \hat{\mathbf{r}}))^2 + e\phi(t, \hat{\mathbf{r}}) - \mu \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}(t, \hat{\mathbf{r}}) \quad (1.103)$$

となる。 \hat{S} は角運動量 S の角運動量演算子である。 $S = \frac{1}{2}$ であれば Pauli 行列 σ を用いて $\hat{S} = \frac{1}{2}\sigma$ となる。スピンの自由度が加わることによって、状態ベクトルは $\hat{\mathbf{p}}$ や $\hat{\mathbf{r}}$ が作用する軌道成分と \hat{S} が作用するスピン成分の直積になる。すなわち $|\psi\rangle = |\text{軌道}\rangle \otimes |\text{スピン}\rangle$ のようになる。

状態ベクトルが従う Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(t, \hat{\mathbf{r}}))^2 + e\phi(t, \hat{\mathbf{r}}) - \mu \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}(t, \hat{\mathbf{r}}) \right] |\psi\rangle \quad (1.104)$$

となる。これは Pauli 方程式と呼ばれることもある。ゲージ不変な形になっている。波動関数は $(2S + 1)$ 個の成分を持つスピノルで表すことが多い。 $S = \frac{1}{2}$ の場合は 2 成分スピノル

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (1.105)$$

のように書かれる。 $\psi_1(\mathbf{r})$ がスピン \uparrow の成分、 $\psi_2(\mathbf{r})$ がスピン \downarrow の成分に対応する。位置基底で表示した Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \left[\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - e\mathbf{A}(t, \mathbf{r}))^2 + e\phi(t, \mathbf{r}) - \mu \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \cdot \mathbf{B}(t, \mathbf{r}) \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (1.106)$$

のようになる。

磁気モーメントの大きさ μ は粒子ごとに異なる。電子の場合は

$$\mu = g\mu_B \quad (1.107)$$

である。ここで

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \quad (1.108)$$

は Bohr 磁子、 g は g 因子と呼ばれ電子の場合 2 に近い値をとる ($g \approx 2.0023 \dots$)。非相対論的な Schrödinger 方程式の範囲では磁気モーメントがどのような値をとるかは決められないが、相対論的な Dirac 方程式から $g = 2$ であることが導ける。実際は電子のまわりで様々な粒子の生成・消滅が仮想的に起こっており、そのような量子電磁気学的な効果などから補正が加わり g の値は 2 から若干ずれる。磁気モーメントの大きさを精密に測定することは、素粒子物理において標準模型をテストする格好の題材になっている。電子の g 因子については、標準模型の予言と観測値の間に 10 桁程度 (!) の一致が見られる。

より高次の相対論的な効果の中には、スピンと軌道が相互作用するような効果も存在する。そのようなスピン軌道相互作用によるエネルギー変化は電子の場合に

$$\Delta E_{\text{SO}} = \frac{e\hbar}{2m^2 c^2} (\nabla \phi \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{S} \quad (1.109)$$

で与えられる。水素原子のような中心力のポテンシャル中に電子がいる場合を考えよう。

このとき $\nabla\phi = \frac{r}{r} \frac{d\phi}{dr}$ であるので、

$$\Delta E_{\text{SO}} = \frac{e\hbar}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (1.110)$$

という形になる。ここで $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ は軌道角運動量を表す。スピン軌道相互作用は $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ に比例している。

問 1.8. xy 平面上を自由に運動する電子に z 方向に磁場をかけたときに、Pauli 方程式を解いてエネルギー固有値を求めよ。

問 1.9. \hat{L}, \hat{S} をそれぞれ角運動量の大きさ L と S の角運動量演算子とする。演算子 $\hat{L} \cdot \hat{S}$ の固有値はどのような値を取りうるか求めよ。

第2章 散乱問題

この章では粒子を標的に入射したときにどのように散乱されるかを量子力学に基づいて議論する。散乱実験によって原子や原子核、素粒子などのミクロな構造や粒子間の相互作用を調べることができる。

2.1 散乱断面積

まずは、散乱実験によってどのような情報が得られるかを考えてみよう。等速度の粒子の集まりを標的にぶつけるとする。簡単のため、粒子は一定の割合で定常的に入射されており定常流を作っているとする。粒子は標的によって散乱されたり、そのまま透過したりする。散乱された粒子は標的から十分離れた後ある角度で直線的に放出されるので、どれくらいの数の粒子がやってくるかを角度ごとに観測する。

入射する粒子が単位時間に単位面積あたり通過する数（フラックス、流束）を j_{inc} とおく。単位時間に、微小立体角 $d\Omega$ に散乱される粒子の数を dN とする。散乱された粒子のフラックスを j_{sc} とおくと、

$$dN = j_{\text{sc}} r^2 d\Omega \quad (2.1)$$

となる。 r は標的と検出器の間の距離である。 dN は入射フラックス j_{inc} に比例しているはずなので、

$$dN = j_{\text{inc}} d\sigma \quad (2.2)$$

とおくことができる。 $d\sigma$ は面積の次元を持っている。式(2.2)は、単位時間あたり微小面積 $d\sigma$ を通過する粒子の数が微小立体角 $d\Omega$ 内に単位時間あたり検出される粒子の数に等

しいということを行っている。言い換えれば、入射される粒子が仮想的な断面積 $d\sigma$ に当たったときに $d\Omega$ へ散乱されるということである。散乱される度合いを仮想的な標的の断面積で表現したと思えばよい。散乱されやすければ、その断面積は大きくなる。

(2.1) と (2.2) より、

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{j_{sc}r^2}{j_{inc}} \quad (2.3)$$

が得られる。 $d\sigma/d\Omega$ を微分散乱断面積とよぶ。この式からもわかるように、

$$d\sigma = \frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = \frac{j_{sc}r^2d\Omega}{j_{inc}} = \frac{(\text{単位時間に } d\Omega \text{ 内に散乱される粒子の数})}{(\text{単位時間に単位面積に入射される粒子の数})} \quad (2.4)$$

という意味を持たせることもできる。散乱問題では、微分散面積 $d\sigma/d\Omega$ を求めることが主な目標になる。

単位時間に散乱される粒子の総数 N は、

$$\sigma_{tot} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (2.5)$$

を用いて $N = j_{inc}\sigma_{tot}$ と書ける。 σ_{tot} を全断面積とよぶ。

2.2 散乱断面積の量子力学的な扱い

散乱断面積を量子力学に従って評価することを考えよう。原理的には入射粒子の波束の波動関数を考えて時間依存 Schrödinger 方程式を解けば散乱される確率が得られるはずだが、それでは複雑なのでここでは別の方法をとる。

トンネル効果の解析でやったように、定常的に入射される粒子を平面波を用いて時間に依存しない Schrödinger 方程式の定常解で表現することを考える。標的から十分離れていれば入射粒子の波動関数 ψ_{inc} は自由粒子の Schrödinger 方程式に従うので、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{inc} = E\psi_{inc} \quad (2.6)$$

が成り立つ。入射粒子は負の z 軸方向から原点に向かって進むとする。平面波解を仮定すれば、

$$\psi_{\text{inc}} = e^{ikz} \quad (2.7)$$

となる。ただし $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$ である。散乱波 ψ_{sc} は、標的から十分離れたところでは一般に角度に依存した振幅を持ちながら原点から広がっていく球面波になる。確率密度 $|\psi|^2$ を半径 r の球面上で積分したときに一定になってほしいので、 ψ_{sc} の振幅は $\frac{1}{r}$ に比例しているはずである。よって

$$\psi_{\text{sc}} = f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.8)$$

とおくことができる。ここでは弾性散乱しか扱わないので、運動量の大きさ $\hbar k$ は散乱の前後で保存している。

問 2.1. r が十分大きいときに、 ψ_{sc} (2.8) は自由粒子の Schrödinger 方程式を満たすことを示せ。

以上の考察から、粒子の散乱を表す Schrödinger 方程式の定常解は、十分遠方で入射波と散乱波を重ね合わせて

$$\psi \simeq e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.9)$$

という形をしているべきである。このような境界条件を持つ Schrödinger 方程式の定常解を求めていくことになる。

この漸近形から散乱断面積はどのように評価できるだろうか。そのために確率密度流

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) \quad (2.10)$$

を思い出そう (式 (1.24) を参照のこと)。 ∇ の球座標表示は

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (2.11)$$

である。これを (2.9) に作用させると、

$$\nabla\psi \simeq \nabla \left(e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right) = \mathbf{e}_z ik e^{ikz} + \mathbf{e}_r f(\theta, \phi) ik \frac{e^{ikr}}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \quad (2.12)$$

となる。よって確率密度流は

$$\mathbf{j} \simeq \frac{\hbar k}{m} \left(\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_r |f(\theta, \phi)|^2 \frac{1}{r^2} + (\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_r) \operatorname{Re} \left(f(\theta, \phi) \frac{e^{ik(r-z)}}{r} \right) \right) \quad (2.13)$$

と評価される。第一項は入射波の流れを表し、そのフラックスは $j_{\text{inc}} = \frac{\hbar k}{m}$ である。第二項は散乱波の流れを表し、そのフラックスは

$$j_{\text{sc}} = \frac{\hbar k}{m} |f(\theta, \phi)|^2 \frac{1}{r^2} \quad (2.14)$$

となる。よって微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{j_{\text{sc}} r^2}{j_{\text{inc}}} = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (2.15)$$

と求まる。従って微分断面積を求めることは散乱振幅 $f(\theta, \phi)$ を求めることに帰着された。

ちなみに (2.13) の第三項は入射波と散乱波の間の干渉を表す。(2.9) では標的の後方でも平面波がそのまま残っているように見えるが、ある確率で散乱されると標的の後方ではフラックスは入射フラックスより減少しているはずである。その減少分は干渉項からくる。

粒子の出入りの収支が合っているかを見るために、(2.13) の各項を球面上で積分してフラックスの総数を評価する。第一項は平面波なので粒子の出入りが打ち消し合ってゼロになる。第二項は

$$\frac{\hbar k}{m} \int d\Omega |f(\theta, \phi)|^2 = \frac{\hbar k}{m} \sigma_{\text{tot}} \quad (2.16)$$

となる。第三項は

$$\frac{\hbar k}{m} \int d\Omega r^2 (1 + \cos\theta) \operatorname{Re} \left(f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr(1-\cos\theta)}}{r} \right) \quad (2.17)$$

であるが、 $d\Omega = d\cos\theta d\phi$ を代入して $\cos\theta$ について部分積分すると

$$= \frac{\hbar k}{m} r \operatorname{Re} \int d\phi \left\{ - (1 + \cos\theta) f(\theta, \phi) \frac{1}{ikr} e^{ikr(1-\cos\theta)} \Big|_{-1}^1 + \frac{1}{ikr} \int_{-1}^1 d\cos\theta \frac{d}{d\cos\theta} [(1 + \cos\theta) f(\theta, \phi)] e^{ikr(1-\cos\theta)} \right\} \quad (2.18)$$

と変形できる。第二項の積分は $e^{ikr(1-\cos\theta)}$ の因子のために r が大きいところで激しく振動し、打ち消し合いが起こる。 $f(\theta, \phi)$ が $\theta = 0$ で特異的でなければ積分は $O(\frac{1}{r})$ 程度になり無視できることがわかるので、第一項のみを残そう。すると

$$= -\frac{2\hbar}{m} \int d\phi \operatorname{Im} f(\theta = 0, \phi) = -\frac{4\pi\hbar}{m} \operatorname{Im} f(\theta = 0) \quad (2.19)$$

という結果が得られる。ここで $f(\theta = 0, \phi)$ は ϕ によらないことを使った。

以上より、粒子の出入りが釣り合うためには

$$\frac{\hbar k}{m} \sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi\hbar}{m} \operatorname{Im} f(\theta = 0) \quad (2.20)$$

が成り立たないといけないことがわかった。整理すると

$$\operatorname{Im} f(\theta = 0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}} \quad (2.21)$$

となる。この関係式は光学定理とよばれている。Schrödinger 方程式を正しく解けば、当然満たされるべき関係である。光学定理は確率の保存を反映している。

問 2.2. $f(\theta, \phi)$ が $\theta = 0$ で特異的でなければ (2.18) の第二項の積分が r が十分大きいときに $O(\frac{1}{r})$ となることを、鞍点法を使って説明せよ。

2.3 散乱状態の波動関数が満たす方程式

前節までの考察で、散乱問題を解くことは境界条件 (2.9) のもとで時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

を解けばよいということがわかった。ここで $V(\mathbf{r})$ は標的が作るポテンシャルとする。もう少し見やすい形にするために、(2.22) の両辺に $-\frac{2m}{\hbar^2}$ をかけて

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (2.23)$$

と書いておく。ここで $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $U(\mathbf{r}) = \frac{2mV(\mathbf{r})}{\hbar^2}$ である。しばらくの間、ポテンシャルは短距離ポテンシャル、すなわち $V(\mathbf{r})$ は遠方で r について指数関数的に (あるいはそれより速く) 減衰すると仮定する。

微分方程式 (2.23) を一般的に解くことは簡単ではないが、右辺を $U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r})$ とおけば Helmholtz 方程式

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) \quad (2.24)$$

の形をしていることがわかる。これは非斉次型の方程式だから、解は (斉次方程式の一般解) + (非斉次方程式の特殊解) で求めることができる。斉次方程式の解 $\psi_0(\mathbf{r})$ で境界条件 (2.9) を満たすものとして $\psi_0(\mathbf{r}) = e^{ikz}$ を選ぶ。これは $U(\mathbf{r}) = 0$ のときに標的に散乱されずに通過する平面波解になっていて、整合している。次に (2.24) の特殊解を求めるために、

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r}) \quad (2.25)$$

を満たす Green 関数を導入する。この式を満たす Green 関数は境界条件 $G(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ ($r \rightarrow \infty$) のもとで二種類存在して、

$$G_{\pm}(\mathbf{r}) = -\frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r} \quad (2.26)$$

で与えられる。 $G_+(\mathbf{r})$ は外向きの球面波、 $G_-(\mathbf{r})$ は内向きの球面波を表す。境界条件 (2.9) と整合するのは $G_+(\mathbf{r})$ の方である。以下では $G_+(\mathbf{r})$ を $G(\mathbf{r})$ と書こう。

以上より (2.24) の解として

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + \int d^3\mathbf{r}' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') \quad (2.27)$$

が得られた。 $\rho(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$ を代入すると

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + \int d^3\mathbf{r}' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (2.28)$$

となる。 $U(\mathbf{r})$ が遠方で十分はやく減衰すれば (2.28) は境界条件 (2.9) を満たしている。

方程式 (2.28) は両辺に $\psi(\mathbf{r})$ が現れており、このままでは解けたことになっていないが、散乱状態の波動関数が満たす積分方程式になっている。境界条件と整合する形になっており、色々扱いやすくなっている。

散乱振幅 $f(\theta, \phi)$ がどのように表されるかを見ておこう。Green 関数 (2.26) を代入すると

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \int d^3\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (2.29)$$

となる。十分遠方では

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' + r'^2} \sim r \left(1 - \frac{\mathbf{r}}{r^2} \cdot \mathbf{r}'\right) \quad (2.30)$$

と近似できるので、

$$\psi(\mathbf{r}) \sim e^{ikz} - \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \int d^3\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (2.31)$$

となる。ここで $\mathbf{k} = k\mathbf{r}/r$ とおいた。散乱振幅は

$$f(\theta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (2.32)$$

と表せることがわかった。

2.4 Born 近似

散乱振幅 $f(\theta, \phi)$ を求めるためには、積分方程式 (2.28) を解く必要がある。一般的に解くことは難しいが、系統的に近似解を求める方法がある。

方程式 (2.9) は (平面波) + (散乱による補正項) とみなすことができる。ポテンシャル U が十分小さければ $\psi(\mathbf{r})$ は平面波に近いと考えられるので、(2.9) の右辺の $\psi(\mathbf{r})$ に平面波解を代入して、

$$\psi(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \int d^3\mathbf{r}' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} \quad (2.33)$$

という近似解が得られる。ここで $\mathbf{k}_i = k\mathbf{e}_z$ とおいた。この近似を Born 近似とよぶ。

近似の精度を上げるには (2.33) を (2.9) の右辺の $\psi(\mathbf{r})$ に代入すればよい。

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) \sim & e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \int d^3\mathbf{r}' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} \\ & + \int d^3\mathbf{r}' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \int d^3\mathbf{r}'' G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}''} \end{aligned} \quad (2.34)$$

このように逐次代入していくことで近似の精度をいくらでも上げることができる。これはポテンシャル U についての摂動展開、あるいは級数展開になっている。Born 近似は U についての1次の摂動展開に対応する。

Born 近似における散乱振幅は、(2.32) より

$$f(\theta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \quad (2.35)$$

となる。ここで $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_i$ は散乱によって粒子が受け取る運動量を表す。その大きさは

$$K = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad (2.36)$$

である。Born 近似における散乱振幅は、ちょうど $V(\mathbf{r})$ の Fourier 変換の形をしている。

微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int d^3\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \right|^2 \quad (2.37)$$

となる。

ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ が球対称なとき ($V(\mathbf{r}) = V(r)$) は表式が簡単になる。

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty dr' r'^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' e^{-iKr' \cos\theta'} V(r') \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2 K} \int_0^\infty dr' r' \sin Kr' V(r') \end{aligned} \quad (2.38)$$

f の θ 依存性と k 依存性は K を通してのみ現れる。微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2}{\hbar^4 K^2} \left| \int_0^\infty dr' r' \sin Kr' V(r') \right|^2 \quad (2.39)$$

である。

Born 近似の適用条件は、(2.28) において右辺第一項が第二項よりも十分大きいことである。特にポテンシャルが働く $r = 0$ 付近でその条件が満たされるべきなので、

$$1 \gg \left| \int d^3\mathbf{r}' G(-\mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \right| \quad (2.40)$$

となることが必要である。

例 2.1. 井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (r < a) \\ 0 & (r > a) \end{cases} \quad (2.41)$$

による散乱問題を考える (ただし $V_0 > 0$)。散乱振幅は Born 近似のもとで

$$f(\theta) = \frac{2m}{\hbar^2 K} \int_0^a dr' r' \sin Kr' V_0 = \frac{2mV_0}{\hbar^2 K^3} (\sin Ka - Ka \cos Ka) \quad (2.42)$$

となる。微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{4m^2 V_0^2}{\hbar^4 K^6} |\sin Ka - Ka \cos Ka|^2 \quad (2.43)$$

である。低エネルギーでは $ka \ll 1$ より

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \frac{m^2 V_0^2}{9\hbar^4} a^6 \quad (2.44)$$

となり角度によらない。全断面積は

$$\sigma_{\text{tot}} = 2\pi \int_{-1}^1 d \cos \theta \frac{4m^2 V_0^2}{\hbar^4 K^6} |\sin Ka - Ka \cos Ka|^2 \quad (2.45)$$

となる。低エネルギーでは

$$\sigma_{\text{tot}} \sim \frac{4\pi m^2 V_0^2}{9\hbar^4} a^6 \quad (2.46)$$

である。

Born 近似が適用できる条件は

$$\begin{aligned} 1 &\gg \left| \int_0^a dr' r'^2 \int_{-1}^1 d \cos \theta \frac{e^{ikr'}}{r'} \frac{mV_0}{\hbar^2} e^{ikr' \cos \theta} \right| \\ &= \frac{mV_0}{\hbar^2 k} \left| \int_0^a dr' (e^{2ikr'} - 1) \right| \\ &= \frac{mV_0}{2\hbar^2 k^2} |e^{2ika} - 1 - 2ika| \end{aligned} \quad (2.47)$$

である。低エネルギーでは $ka \ll 1$ より

$$1 \gg \frac{mV_0 a^2}{\hbar^2} \quad (2.48)$$

となり、ポテンシャルによる束縛状態が存在しない条件と等価になる。一方高エネルギーの場合は $ka \gg 1$ より

$$1 \gg \frac{m|V_0|a^2}{\hbar^2} \frac{1}{ka} \quad (2.49)$$

となり、これは ka が十分大きければ常に満たされる。

問 2.3. Yukawa ポテンシャル

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r} \quad (2.50)$$

による散乱問題を考える。Born 近似を使って散乱振幅、微分散乱断面積、全断面積を求めよ。

2.5 部分波展開

ここからは、時間に依存しない Schrödinger 方程式 (2.22) に立ち戻って、別の角度から散乱問題を眺めてみよう。

ポテンシャルが球対称なとき ($V(\mathbf{r}) = V(r)$)、系は回転対称性を持つ。対称性の情報をうまく活用することで見通しをよくすることができる。回転の生成子 \hat{L} は角運動量演算子であった。よって、 $[\hat{H}, \hat{L}_j] = 0$ が成り立つ。特に $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ は互いに交換するので、それらの同時固有状態をとることができる。 \hat{L}^2 の固有値を $\hbar^2 l(l+1)$ ($l = 0, 1, 2, \dots$)、 \hat{L}_z の固有値を $\hbar m$ ($m = -l, -l+1, \dots, l$) とおく。対応する固有状態を $|\psi_{l,m}\rangle$ と書くことにする。座標基底で表示すると、波動関数は変数分離形で表される。

$$\langle \mathbf{r} | \psi_{l,m} \rangle = \psi_{l,m}(\mathbf{r}) = R_l(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (2.51)$$

$Y_{l,m}(\theta, \phi)$ は球面調和関数である。一般解はこれらを重ね合わせたものになる。このように散乱状態の波動関数を量子数ごとに分解したものを部分波とよぶ。 $l = 0$ の部分波を s 波、 $l = 1$ の部分波を p 波などとよぶ。

動径部分 $R_l(r)$ はさらに

$$R_l(r) = \frac{\chi_l(r)}{r} \quad (2.52)$$

とおくと便利である。これを Schrödinger 方程式 (2.22) に代入すると、 $\chi_l(r)$ は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] \chi_l(r) = E \chi_l(r) \quad (2.53)$$

という方程式を満たす。原点で波動関数が発散しないためには $\chi_l(0) = 0$ という境界条件を満たす必要がある。式 (2.53) は 1 次元空間上で有効ポテンシャル

$$V_{\text{eff}}(r) = \begin{cases} V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} & r > 0 \\ \infty & r < 0 \end{cases} \quad (2.54)$$

のもとで運動する粒子の Schrödinger 方程式とみなせる。

境界条件 (2.9) を満たすためには $\chi_l(r)$ の $r \rightarrow \infty$ における漸近形を知っておく必要がある。十分遠方で $V(r) = 0$ となるとすると、 $R_l(r)$ は

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_l(r) = 0 \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.55)$$

という方程式を満たす。これは $x = kr$ とおけば、球 Bessel 関数 $j_l(x), y_l(x)$ が満たす微分方程式である。その解は

$$R_l(r) = \frac{\chi_l(r)}{r} = A j_l(kr) + B y_l(kr) \quad (2.56)$$

と書ける。球 Bessel 関数は Bessel 関数 $J_l(x), Y_l(x)$ を使って

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x) \quad (2.57)$$

$$y_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{l+\frac{1}{2}}(x) \quad (2.58)$$

と定義された。Bessel 関数の漸近形¹ を使うと、十分遠方で $R_l(r)$ は

$$R_l(r) \sim A \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} - B \frac{\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.59)$$

と振る舞う。三角関数の合成をすると

$$R_l(r) \sim C \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)}{kr} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.60)$$

とも表せる。ただし

$$\tan \delta_l = -\frac{B}{A} \quad (2.61)$$

である。 $C = k$ とおいて

$$\chi_l(r) \sim \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.62)$$

と規格化しておくると便利である。 δ_l を位相のずれとよぶ。 δ_l は実数でなければならないことが後の議論でわかる。

¹ $J_n(x) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi}{4}(2n+1)\right)$, $Y_n(x) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin\left(x - \frac{\pi}{4}(2n+1)\right)$ ($x \rightarrow \infty$).

ポテンシャルが $V(r) = 0$ のときは解 (2.56) が任意の $r \geq 0$ で成り立つ。関数 $y_l(r)$ は $r = 0$ で特異性を示すので、境界条件 $\chi_l(0) = 0$ を満たすためには $B = 0$ とならなければならない。よって、散乱の度合いが弱ければ B は A に比べて小さく、 B/A が散乱の度合いの指標になる。言い換えれば、位相のずれ δ_l の大きさが散乱の強さを表す。このように、標的から十分離れたところでは、散乱の波動関数に対する影響は位相の変化だけに現れる。

入射波 $e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$ は角度 ϕ によらないので、散乱波も ϕ によらない。よって量子数 $m = 0$ だけを考えればよい。一般の散乱波の解は

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) c_l \frac{\chi_l(r)}{kr} P_l(\cos \theta) \quad (2.63)$$

のように展開できる。ここで $Y_{l,0}(\theta, \phi) \propto P_l(\cos \theta)$ であり、 $P_l(x)$ は Legendre 多項式である。展開係数は後々便利ないように選んだ。このような展開を部分波展開という。境界条件 (2.9) を満たすためにはどうなっていればよいか考えよう。

問 2.4. 平面波 e^{ikz} の部分波展開が以下で与えられることを示せ。

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (2.64)$$

平面波の部分波展開 (2.64) を使うと、十分遠方での漸近形が

$$e^{ikz} \sim \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \left[\exp \left(i \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right) - \exp \left(-i \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right) \right] P_l(\cos \theta) \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.65)$$

となる。一方、散乱波 (2.63) の漸近形は (2.62) を使うと

$$\psi(r, \theta) \sim \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) c_l \left[\exp \left(i \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \right) - \exp \left(-i \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \right) \right] P_l(\cos \theta) \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.66)$$

と表せる。辺々を差し引くと

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta) - e^{ikz} \sim \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \left[(c_l e^{i\delta_l} - 1) \exp\left(i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\right) \right. \\ \left. - (c_l e^{-i\delta_l} - 1) \exp\left(-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\right) \right] P_l(\cos\theta) \quad (r \rightarrow \infty) \end{aligned} \quad (2.67)$$

となる。右辺が内向きの球面波 ($\propto e^{-ikr}$) を含まないためには

$$c_l = e^{i\delta_l} \quad (2.68)$$

である必要がある。これを (2.67) に代入すると、

$$\psi(r, \theta) - e^{ikz} \sim \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos\theta) \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.69)$$

が得られる。これと境界条件 (2.9) を見比べることで、散乱振幅が

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \quad (2.70)$$

で与えられることがわかった。位相のずれ δ_l が求まれば散乱振幅が決まる。

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos\theta) \quad (2.71)$$

と書いて部分波の散乱振幅 f_l を定義すると、

$$f_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l = \frac{1}{k \cot\delta_l - ik} \quad (2.72)$$

と表すことができる。

$$S_l = e^{2i\delta_l} \quad (2.73)$$

という量を定義することもある。 $S_l = 1 + 2ikf_l$ が成り立つ。十分遠方で波動関数は

$$\psi(r, \theta) \sim \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(S_l \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r} \right) P_l(\cos\theta) \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.74)$$

という形をしている。 S_l は散乱問題のより一般的な取り扱いで出てくる S 行列の行列要素とみなせる (Sec. 2.8、付録 A を参照のこと)。各部分波で外向きの球面波と内向きの球

面波の作るフラックスが釣り合うためには

$$|S_l| = 1 \quad (2.75)$$

である必要がある。これはユニタリー関係式とよばれる。 δ_l は実数である必要がある。

$$k f_l = \frac{i}{2} + \frac{1}{2} e^{-\frac{i\pi}{2} + 2i\delta_l} \quad (2.76)$$

より、 $k f_l$ は複素平面上で半径 $\frac{1}{2}$ の円 (ユニタリー円) 上を動く。 $\delta_l = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}$ のときに $|f_l|$ は最大値 $\frac{1}{k}$ をとる (ユニタリー極限)。

光学定理 (2.21) を満たしているかどうかを確認しておこう。微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \quad (2.77)$$

である。Legendre 多項式の直交関係

$$\int_{-1}^1 d \cos \theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'} \quad (2.78)$$

を使うと、全断面積は

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (2.79)$$

と表せる。一方、

$$\text{Im} f(\theta=0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (2.80)$$

であるので、確かに光学定理 (2.21) が成り立っていることがわかった。

全断面積は

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_l \sigma_l \quad (2.81)$$

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l = 4\pi (2l+1) |f_l|^2 \quad (2.82)$$

とも表せる。 σ_l には上限があり、その最大値は

$$\sigma_{l,\text{max}} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \quad (2.83)$$

で与えられる。最大となるのはユニタリー極限のときである。

例 2.2. 剛体球ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r < a \\ 0 & r > a \end{cases} \quad (2.84)$$

による散乱を考える。 $R_l(r)$ の満たす方程式は (2.53) と同じであり、その解は

$$R_l(r) = A j_l(kr) + B y_l(kr) \quad (2.85)$$

で与えられる。ただし境界条件は $R_l(a) = 0$ であるので、

$$\tan \delta_l = -\frac{B}{A} = \frac{j_l(ka)}{y_l(ka)} \quad (2.86)$$

となる。特に s 波の位相のずれは

$$\tan \delta_0 = \frac{j_0(ka)}{y_0(ka)} = \frac{\sin ka/ka}{-\cos ka/ka} = -\tan ka \quad (2.87)$$

より $\delta_0 = -ka$ である。 s 波による全断面積は

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 ka \quad (2.88)$$

である。特に低エネルギー ($ka \ll 1$) では $\sigma_{\text{tot}} = 4\pi a^2$ となる。これは幾何学的な断面積 πa^2 の 4 倍である。 s 波以外の部分波についても、低エネルギーで

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(ka)}{y_l(ka)} \sim \frac{(ka)^l / (2l+1)!!}{-(2l-1)!! / (ka)^{l+1}} \propto (ka)^{2l+1} \quad (2.89)$$

となる。すなわち $\delta_l \sim (ka)^{2l+1}$ となる。したがって十分低エネルギーにおいては s 波散乱が支配的になる。

問 2.5. 例 2.2 において高エネルギー ($ka \gg 1$) の場合に位相のずれ δ_l を求めよ。また、高エネルギーにおいて全断面積 σ_{tot} はおよそ πa^2 の何倍になるか。

低エネルギーにおいて s 波散乱が支配的になることは、ポテンシャルが十分弱ければポテンシャルの形によらずに一般的に成り立つ。そのことを見るために微分方程式 (2.53) に立ち戻って考える。

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right] \chi_l(r) = 0 \quad (2.90)$$

$\chi_l(r)$ は境界条件 $\chi_l(0) = 0$ を満たしているとする。ポテンシャル $U(r)$ が十分弱ければ $\chi_l(r)$ は $U(r) = 0$ のときの解 $\varphi_l(r) = kr j_l(kr)$ とわずかしが違わない。 $\varphi_l(r)$ も境界条件 $\varphi_l(0) = 0$ を満たしている。

$$U(r)\chi_l(r) = \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] \chi_l(r) \quad (2.91)$$

$$0 = \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] \varphi_l(r) \quad (2.92)$$

式 (2.91) に $\varphi_l(r)$ をかけて (2.92) に $\chi_l(r)$ をかけたものを引いて r について積分すると、

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty dr U(r)\chi_l(r)\varphi_l(r) \\ &= \int_0^\infty dr \left(\varphi_l(r) \frac{d^2}{dr^2} \chi_l(r) - \chi_l(r) \frac{d^2}{dr^2} \varphi_l(r) \right) \\ &= \left[\varphi_l(r) \frac{d}{dr} \chi_l(r) - \chi_l(r) \frac{d}{dr} \varphi_l(r) \right]_0^\infty \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} \left[\sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) k \cos \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) - \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) k \cos \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right] \\ &= -k \sin \delta_l \end{aligned} \quad (2.93)$$

となる。 $\varphi_l(r) = kr j_l(kr)$ を代入すると

$$\sin \delta_l = - \int_0^\infty dr U(r)\chi_l(r)r j_l(kr) \quad (2.94)$$

を得る。 $U(r)$ が十分弱ければ位相のずれ δ_l も小さくなり、 $\chi_l(r)$ も $\varphi_l(r)$ に近づく。よって

$$\delta_l \sim - \frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 j_l^2(kr) V(r) \quad (2.95)$$

という近似式が得られる。これは位相のずれに対する Born 近似である。 $kr \ll 1$ のとき $j_l(kr) \sim (kr)^l / (2l+1)!!$ なので、低エネルギーで

$$\delta_l \sim -\frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 \left[\frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} \right]^2 V(r) \propto k^{2l+1} \quad (2.96)$$

と振る舞うことがわかる。したがって、ポテンシャルの形状の詳細によらず低エネルギーで s 波散乱が支配的になる。

2.6 共鳴散乱

標的が引力ポテンシャルを持っており、そのポテンシャルによって束縛状態が生じているときは、ある特定のエネルギーや角運動量を持った部分波の散乱断面積が著しく増大することがある。このような現象を共鳴とよぶ。

束縛状態ができるかできないかの境のところで何が起きるかを見てみよう。引力ポテンシャルを徐々に強くしていくと、ゼロエネルギーのところで束縛状態が生じる。そこで $E = 0$ で $l = 0$ の部分波に注目する。ポテンシャルは $r > R$ で $V(r) = 0$ となるとする。部分波の Schrödinger 方程式 (2.53) は

$$\frac{d^2}{dr^2} \chi_0(r) = 0 \quad (2.97)$$

となる。これを解くと

$$\chi_0(r) = \text{const.} \times (r - a) \quad (2.98)$$

が得られる。一方でこれは $E \rightarrow +0$ ($k \rightarrow 0$) としたときの散乱状態の波動関数と一致するはずである。(2.74) において部分波の波動関数 $\chi_0(r) \propto \frac{1}{k}(S_l e^{ikr} - e^{-ikr}) \propto \frac{1}{k} \sin(kr + \delta_0)$ に対して $\chi'_0(r)/\chi_0(r)$ の長波長極限 ($k \rightarrow 0$) をとると、

$$\frac{\chi'_0(r)}{\chi_0(r)} = k \cot(kr + \delta_0) \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{1}{r - a} \quad (2.99)$$

となるべきである。

$$k \cot(kr + \delta_0) \xrightarrow{k \rightarrow 0} k \frac{\cos \delta_0 - kr \sin \delta_0}{kr \cos \delta_0 + \sin \delta_0} \sim \frac{1}{r + \frac{1}{k} \tan \delta_0} \quad (2.100)$$

より、

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} \quad (2.101)$$

という関係が得られる。 a は長さの次元を持ち、散乱長とよばれる。 a を使うと $l = 0$ の部分波の全断面積は

$$\sigma_{l=0} = 4\pi \lim_{k \rightarrow 0} \left| \frac{1}{k \cot \delta_0 - ik} \right|^2 = 4\pi a^2 \quad (2.102)$$

となる。

散乱長 a は $r > R$ における波動関数 $\chi_l(r)$ を $r < R$ に延長したときの x 切片である。ポテンシャルが斥力 ($V(r) > 0$) のときは波動関数が押し出されるので $\delta_0 < 0$ となり、 a は R に近い値をとる。ポテンシャルが引力 ($V(r) < 0$) になると波動関数が引き込まれるので $\delta_0 > 0$ となり、 a は負の値をとる。引力ポテンシャルを深くしていくと、あるところで波動関数の x 切片が発散して a も発散する。 a が発散するところでは散乱断面積も発散する。さらに引力を強くすると a は正の値をとるようになり、またあるところで a は符号を変えて発散する。もっと引力を強くしていくと、この振る舞いが繰り返して起こる。

a が発散する点は、束縛状態の存在と関係している。 a が正で十分大きな値をとるとき、 $E \rightarrow +0$ に対する散乱状態の波動関数 $\chi_0(r) \propto \frac{1}{k} \sin(kr + \delta_0)$ は $r = R$ 付近でほとんど平らな形をしている。一方、束縛状態の波動関数は $r > R$ において

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \chi_0(r) = E \chi_0(r) \quad (2.103)$$

を満たす。 $-E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$ とおくと、解は $\chi_0(r) \propto e^{-\kappa r}$ のように指数関数的に減衰する。 $\kappa \rightarrow 0$ とすると、束縛状態の波動関数もほとんど平らな形になる。 $a \rightarrow +\infty, \kappa \rightarrow 0$ の場合に散乱状態の波動関数と束縛状態の波動関数を $E \rightarrow \pm 0$ で滑らかにつなげることができる。実

際、 $E \rightarrow +0$ としたときの散乱状態の解の $0 \leq r \leq R$ の部分と $e^{-\kappa r}$ ($r > R$)を接続して、束縛状態の解が作れる。よって a が発散していると $E = 0$ に束縛状態が存在するといえる。逆に a が発散していなければ解を接続することができず $E = 0$ に束縛状態は存在しない。

束縛状態の解が $E \rightarrow -0$ において $r = R$ 付近で(2.98)に一致するためには、 $\chi'_0(r)/\chi_0(r)$ を比較して

$$-\left. \frac{\kappa e^{-\kappa r}}{e^{-\kappa r}} \right|_{r=R} = \left. \frac{1}{r-a} \right|_{r=R} \quad (2.104)$$

が成り立つ必要がある。 $a \gg R$ のときを考えると、

$$\kappa \sim \frac{1}{a} \quad (2.105)$$

となる。 a が発散すれば $\kappa \rightarrow 0$ となり、束縛状態は空間的に広がっていく。束縛エネルギーは

$$-E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (2.106)$$

となる。 a が発散するとき、束縛エネルギーはゼロに漸近する。

エネルギー $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ が小さいがゼロではないとき、

$$k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_{\text{eff}} k^2 + O(k^3) \quad (2.107)$$

と展開される。 r_{eff} は有効距離とよばれる。斥力ポテンシャルのとき、 r_{eff} はポテンシャルの到達距離の目安を与える。部分波の散乱振幅は

$$f_0 = \frac{1}{k \cot \delta_0 - ik} = \frac{1}{-\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_{\text{eff}} k^2 - ik} \quad (2.108)$$

と表される。 k を固定して $k|a| \gg 1$ かつ $k|r_{\text{eff}}| \ll 1$ のとき、散乱振幅は $f_0 = -1/ik$ となり、散乱断面積が最大値 $\sigma_0 = 4\pi/k^2$ をとる(ユニタリー極限)。ユニタリー極限は、多数の原子をレーザー光によって真空中にトラップした冷却原子気体においてFeshbach共鳴を使って散乱長を人工的に制御することで実現している。

ポテンシャル $V(r)$ に障壁がある場合は、 $E > 0$ において一定時間ポテンシャルにトラップされる状態が現れることがある。束縛状態と違って無限の時間トラップされることはなく、トンネル効果によって徐々にポテンシャルの外にしみ出していく。このような有限の寿命を持った状態を共鳴状態とよぶ。共鳴状態も束縛状態と同様、ある決まった固有エネルギーを持つ。それと等しいエネルギーを持った粒子を入射させると、ポテンシャル内に有限の時間トラップされてから散乱していく。このとき散乱断面積は最大値 $\sigma_l = 4\pi(2l+1)/k^2$ をとることが期待される ((2.79) を参照せよ)。このとき $\sin^2 \delta_l = 1$ である。すなわち入射粒子のエネルギー E を変化させたとき、共鳴状態の固有エネルギー E_r を横切るときに位相のずれ δ_l は $\pi/2$ または $3\pi/2$ の値を通過する。

一般に E を増加させながら E_r を横切ると $\cot \delta_l$ は正の側からゼロを通過する。そこで

$$\cot \delta_l \sim \cot \delta_l \Big|_{E=E_r} - c(E - E_r) + O((E - E_r)^2) \quad (2.109)$$

とおくことができる。 $\cot \delta_l \Big|_{E=E_r} = 0$ である。部分波の散乱振幅 (2.72) に代入すると、

$$f_l(k) = \frac{1}{k} \frac{1}{\cot \delta_l - i} \sim \frac{1}{k} \frac{1}{-c(E - E_r) - i} = -\frac{1}{k} \frac{\frac{1}{c}}{E - E_r + \frac{i}{c}} \quad (2.110)$$

となる。 $\Gamma = 2/c$ と定義すると、

$$f_l(k) = -\frac{1}{k} \frac{\frac{\Gamma}{2}}{E - E_r + \frac{i\Gamma}{2}} \quad (2.111)$$

と表せる。部分波の全断面積は

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l = 4\pi(2l+1) |f_l(k)|^2 = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{(\frac{\Gamma}{2})^2}{(E - E_r)^2 + (\frac{\Gamma}{2})^2} \quad (2.112)$$

となる。これを Breit-Wigner の公式という。 Γ は共鳴の幅とよばれる。

問 2.6. 井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (r < R) \\ 0 & (r > R) \end{cases} \quad (2.113)$$

による散乱問題を考える ($V_0 > 0$)。十分低エネルギーで位相のずれと全断面積、散乱長を求めよ。共鳴が起こるのはどのようなときか。

問 2.7. デルタ殻ポテンシャル

$$V(r) = \frac{\hbar^2 \gamma}{2m} \delta(r - R) \quad (2.114)$$

による散乱問題を考える ($\gamma > 0$)。エネルギー $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ の s 波の位相のずれ δ_0 を求めよ。
 $\gamma \gg R^{-1}, k$ のときに共鳴状態が現れるエネルギーを $O(\frac{1}{\gamma})$ まで求めよ。

2.7 Coulomb 散乱

これまでは短距離ポテンシャルを仮定していた。例えば電荷 Ze と $Z'e$ を持つ二つの粒子が Coulomb 力で相互作用している場合、そのポテンシャル $V(r) = -\frac{ZZ'e^2}{r}$ は長距離にまで影響を及ぼす。このような長距離ポテンシャルに対しては、標的の十分遠方で散乱波が $\frac{e^{ikr}}{r}$ という形をしていなかったり、共鳴していないのに散乱断面積が発散したりすることがある。このように長距離にまで影響が及ぶことによって色々と特殊なことが起こるが、Coulomb 力による散乱は基本的な例なのでここで取り上げる。

標的は十分重い粒子だと思って、固定されたポテンシャル $V(r) = \frac{ZZ'e^2}{r}$ 中の散乱問題を考えよう。Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{ZZ'e^2}{r} \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.115)$$

である。ここで $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $ZZ'e^2 = \frac{\hbar^2 k}{m} \gamma$ とおくと、方程式は

$$(\nabla^2 + k^2 - \frac{2\gamma k}{r})\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.116)$$

と書き換えられる。この方程式は

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} f(r - z) \quad (2.117)$$

という形の解を持つことが知られている。そこで (2.117) を (2.116) に代入し、 $\xi = r - z$ とおくと、

$$\xi \frac{d^2 f}{d\xi^2} + (1 - ik\xi) \frac{df}{d\xi} - \gamma k f = 0 \quad (2.118)$$

という方程式が得られる。この方程式は $\xi = 0$ に確定特異点、 $\xi = \infty$ に不確定特異点を持つ。このような方程式として、合流型超幾何関数 $u = {}_1F_1(\alpha; \gamma; z)$ が満たす微分方程式というものがあつたのを思い出そう。

$$z \frac{d^2 u}{dz^2} + (\gamma - z) \frac{du}{dz} - \alpha u = 0 \quad (2.119)$$

これを見比べると、方程式の解は

$$f(\xi) = N \cdot {}_1F_1(-i\gamma; 1; ik\xi) \quad (2.120)$$

と表すことができる。 N は規格化定数である。よって波動関数は

$$\psi(\mathbf{r}) = N e^{ikz} {}_1F_1(-i\gamma; 1; ik(r - z)) \quad (2.121)$$

で与えられることがわかった。

波動関数の遠方での振る舞いを調べるには、合流型超幾何関数の漸近形を知っておく必要がある。ここでは結果を引用するだけでとどめておくが、[7]などを参照すると、 iz が負の実数でないときに $|z|$ が十分大きいところで

$${}_1F_1(\alpha; \gamma; z) \sim \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} (-z)^{-\alpha} + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha - \gamma} + O(z^{-1}) \quad (2.122)$$

となることが知られている。ここで $\Gamma(z) = \int_0^\infty dx x^{z-1} e^{-x}$ はガンマ関数である。

(2.122) を使うと、十分遠方で波動関数は

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) &\sim N e^{\frac{\pi\gamma}{2}} \left(\frac{(k(r-z))^{i\gamma}}{\Gamma(1+i\gamma)} e^{ikz} + \frac{(k(r-z))^{-i\gamma-1}}{i\Gamma(-i\gamma)} e^{ikr} \right) \\ &= \frac{N e^{\frac{\pi\gamma}{2}}}{\Gamma(1+i\gamma)} \left(e^{ikz+i\gamma \ln k(r-z)} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr-i\gamma \ln 2kr}}{r} \right)\end{aligned}\quad (2.123)$$

と振る舞うことがわかる。ここで

$$f_k(\theta) = \frac{\Gamma(1+i\gamma) e^{-i\gamma \ln \frac{1-\cos\theta}{2}}}{i\Gamma(-i\gamma) k(1-\cos\theta)} = \frac{\Gamma(1+i\gamma) e^{-i\gamma \ln \sin^2 \frac{\theta}{2}}}{\Gamma(1-i\gamma) 2ik \sin^2 \frac{\theta}{2}} \gamma \quad (2.124)$$

と定義した ($\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ など使った)。規格化は $\frac{N e^{\frac{\pi\gamma}{2}}}{\Gamma(1+i\gamma)} = 1$ とする。

十分遠方で波動関数は (2.9) と少し違う形をしていることがわかる。すなわち標的から十分離れていても対数的な補正が加わっている。これは遠距離ポテンシャルによる効果である。対数補正を考えなければ、(2.123) の第一項を入射波、第二項を散乱波と解釈することができる。

微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta)|^2 = \frac{(ZZ'e^2)^2}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (2.125)$$

と求まる。ここで $\left| \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \right| = 1$ であることを使った。これは古典力学で Coulomb 力による散乱問題を扱ったときの Rutherford の公式と一致している。量子力学で考えても Rutherford の公式は成り立つ。ちなみに全断面積 σ_{tot} は発散する。これも長距離ポテンシャルに起因する現象である。

問 2.8. ポテンシャル $V(r) = \frac{ZZ'e^2}{r}$ による散乱問題に対して、Born 近似を使って微分散乱断面積を求めよ。

2.8 Lippmann-Schwinger 方程式

これまでは散乱問題を座標基底の波動関数をもとに議論してきたが、基底によらない演算子形式で議論することもできる。少々形式論になるが、最後にそれを見ておこう。

散乱問題では、時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.126)$$

に関して $E > 0$ の散乱解を求めることが主眼であった。ここで

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (2.127)$$

はハミルトニアン¹の運動項であり、 \hat{V} はポテンシャル項である。ポテンシャル項がないときの散乱解を

$$\hat{H}_0|\psi_0\rangle = E|\psi_0\rangle \quad (2.128)$$

とおこう。どちらの場合もエネルギー固有値は連続スペクトルになる。ポテンシャルの強さをゼロに近づけると $|\psi\rangle \rightarrow |\psi_0\rangle$ となるはずである。

方程式 (2.126) の解は形式的に

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V}|\psi\rangle \quad (2.129)$$

という関係を満たすように見える。実際に両辺に左から $(E - \hat{H}_0)$ をかけることで、確かに成り立っているように見える。しかし、 $1/(E - \hat{H}_0)$ という演算子は特異性を持っており、このままではうまく定義されない。

そこで固有値 E に微小な虚部 $\pm i\varepsilon$ ($\varepsilon > 0$) を含めるという処方箋をとる。

$$|\psi_{\pm}\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} \hat{V}|\psi_{\pm}\rangle \quad (2.130)$$

符号をどちらにとるかで解の意味が変わってくる。式 (2.130) を Lippmann-Schwinger (LS) 方程式とよぶ。両辺に未知の解 $|\psi_{\pm}\rangle$ が含まれる陰的な方程式となっており、基底の選び方によらない形をしている。

方程式の意味を考えるため、座標基底でどのように表示されるかを見てみる。完全系 $\hat{1} = \int d^3\mathbf{r}' |\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|$ をはさむと

$$\langle\mathbf{r}|\psi_{\pm}\rangle = \langle\mathbf{r}|\psi_0\rangle + \int d^3\mathbf{r}' \langle\mathbf{r}|\frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\hat{V}|\psi_{\pm}\rangle \quad (2.131)$$

となる。ここで

$$G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\hbar^2}{2m} \langle\mathbf{r}|\frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}|\mathbf{r}'\rangle \quad (2.132)$$

とおく。実は $G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は Helmholtz 方程式の Green 関数になっている。

$$(\nabla^2 + k^2)G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.133)$$

ここで $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ である。具体的に $G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は

$$G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.134)$$

で与えられる。

問 2.9. (2.132) で定義された $G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ が (2.133), (2.134) を満たすことを示せ。

この結果から、 $G_{+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は外向きの球面波、 $G_{-}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は内向きの球面波を表していることがわかる。 $G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を (2.131) に代入して $\frac{2m}{\hbar^2}\hat{V} = \hat{U}$ とすると、

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int d^3\mathbf{r}' G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi_{\pm}(\mathbf{r}') \quad (2.135)$$

という関係を得る。これは方程式 (2.28) に他ならない。ということで LS 方程式 (2.130) は、散乱状態の波動関数が満たす積分方程式を基底の取り方によらない演算子形式で表したものであることがわかった。微小な虚部 $\pm i\varepsilon$ の符号の取り方は境界条件に対応していて、散乱問題では散乱波は外向きの球面波のため $+$ を選ぶ必要がある。

\hat{V} についての摂動展開も (2.130) の形だと見やすい。 $|\psi_{\pm}\rangle$ を逐次代入していくことで

$$|\psi_{\pm}\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}\hat{V}|\psi_0\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}\hat{V}\frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}\hat{V}|\psi_0\rangle + \dots \quad (2.136)$$

という展開が得られる。第二項までで展開を止めたものが Born 近似であった。

LS 方程式 (2.130) は状態ベクトルについての方程式であったが、演算子についての方程式に書き直すこともできる。散乱の T 行列というものを

$$T_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k}' | \hat{V} | \psi_{+, \mathbf{k}} \rangle \quad (2.137)$$

で定義する。ここで $|\psi_{\pm, \mathbf{k}}\rangle$ は $|\psi_0\rangle = |\mathbf{k}\rangle$ としたときの LS 方程式 (2.130) の解であり、

$$|\psi_{\pm, \mathbf{k}}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} \hat{V} |\psi_{\pm, \mathbf{k}}\rangle \quad (2.138)$$

を満たす。(2.138) を書き換えると、

$$|\psi_{\pm, \mathbf{k}}\rangle = \left(1 - \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} \hat{V} \right)^{-1} |\mathbf{k}\rangle \quad (2.139)$$

となる。ここで

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} \hat{V} \right) \left(1 + \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H} \pm i\varepsilon} \hat{V} \right) \\ &= 1 + \left(\frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H} \pm i\varepsilon} - \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} - \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} \hat{V} \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H} \pm i\varepsilon} \right) \hat{V} \\ &= 1 + \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} \left(E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon - (E_{\mathbf{k}} - \hat{H} \pm i\varepsilon) - \hat{V} \right) \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H} \pm i\varepsilon} \hat{V} \\ &= 1 \end{aligned} \quad (2.140)$$

が成り立つので、

$$\begin{aligned} |\psi_{\pm, \mathbf{k}}\rangle &= \left(1 + \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H} \pm i\varepsilon} \hat{V} \right) |\mathbf{k}\rangle \\ &= |\mathbf{k}\rangle + \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H} \pm i\varepsilon} \hat{V} |\mathbf{k}\rangle \end{aligned} \quad (2.141)$$

と書くこともできる。

$|\psi_{\pm, \mathbf{k}}\rangle$ の直交性を確認しておこう。

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{\pm, \mathbf{k}'} | \psi_{\pm, \mathbf{k}} \rangle &= \langle \psi_{\pm, \mathbf{k}'} | \mathbf{k} \rangle + \langle \psi_{\pm, \mathbf{k}'} | \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H} \pm i\varepsilon} \hat{V} | \mathbf{k} \rangle \\
&= \langle \psi_{\pm, \mathbf{k}'} | \mathbf{k} \rangle + \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'} \pm i\varepsilon} \langle \psi_{\pm, \mathbf{k}'} | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle \\
&= \langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle + \langle \psi_{\pm, \mathbf{k}'} | \hat{V} \frac{1}{E_{\mathbf{k}'} - \hat{H}_0 \mp i\varepsilon} | \mathbf{k} \rangle + \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'} \pm i\varepsilon} \langle \psi_{\pm, \mathbf{k}'} | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle \\
&= \langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle + \frac{1}{E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}} \mp i\varepsilon} \langle \psi_{\pm, \mathbf{k}'} | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle + \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'} \pm i\varepsilon} \langle \psi_{\pm, \mathbf{k}'} | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle \\
&= \langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \tag{2.142}
\end{aligned}$$

ここで一つ目の等式で (2.141) を使い、三つ目の等式で (2.138) を使った。エネルギー固有状態を全て集めると完全系を張ることができるが、 $\{|\psi_{\pm, \mathbf{k}}\rangle\}$ だけでは一般には完全系を張らない。なぜなら固有状態として散乱状態以外に束縛状態も存在する場合があるため。そこで束縛状態 $\{\psi_n\}$ も含めて完全系を定義することができる。

$$\int d^3\mathbf{k} |\psi_{\pm, \mathbf{k}}\rangle \langle \psi_{\pm, \mathbf{k}}| + \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \hat{1} \tag{2.143}$$

T 行列は次の関係式を満たす T 演算子

$$\hat{T}(E) = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{T}(E) \tag{2.144}$$

を使って

$$T_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} = \langle \mathbf{k}' | \hat{T}(E_{\mathbf{k}}) | \mathbf{k} \rangle \tag{2.145}$$

と表すことができる。すなわち T 行列は T 演算子の行列要素になっている。これを示すために、(2.144) の両辺を $|\mathbf{k}\rangle$ に作用させると

$$\hat{T}(E_{\mathbf{k}}) |\mathbf{k}\rangle = \hat{V} |\mathbf{k}\rangle + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{T}(E_{\mathbf{k}}) |\mathbf{k}\rangle \tag{2.146}$$

となる。一方、LS 方程式 (2.130) に左から \hat{V} を作用させると

$$\hat{V} |\psi_{+, \mathbf{k}}\rangle = \hat{V} |\mathbf{k}\rangle + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} |\psi_{+, \mathbf{k}}\rangle \tag{2.147}$$

であるので、両辺を比較して

$$\hat{V}|\psi_{+,k}\rangle = \hat{T}(E_k)|\mathbf{k}\rangle \quad (2.148)$$

が成り立つことがわかる。これを T 行列に定義 (2.137) に代入すると (2.145) が得られる。

T 行列は散乱振幅と関係している。波数 k から k' への散乱に対する散乱振幅 $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ は (2.32) より

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3 \int d^3\mathbf{r}' \langle \mathbf{k}'|\mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}'|\hat{V}|\psi_{+,k}\rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3 T_{\mathbf{k}',k} \quad (2.149)$$

という関係がある²。 T 行列が求まれば散乱振幅も求まる。

さらに S 行列というものを定義しよう。そのために $|\psi_{-,k}\rangle$ の意味を考えてみる。 $|\psi_{-,k}\rangle$ は内向きの球面波と平面波が入ってきて平面波が出ていく散乱状態を表す。少しイメージしにくいのが、散乱状態 (エネルギー固有状態) の中でも散乱が終わった後に平面波に漸近していくようなものに対応する。このように散乱が起こる十分前もしくは起こってから十分後に平面波に漸近していく散乱状態 (エネルギー固有状態) の間の遷移行列要素として、 S 行列は

$$S_{\mathbf{k}',k} = \langle \psi_{-,k'}|\psi_{+,k}\rangle \quad (2.150)$$

と定義される。波数 k の平面波が入ってきて、波数 k' の平面波として出ていく散乱状態間の遷移振幅という意味を持つ。

S 行列は T 行列と関係する。これを見るために

$$|\psi_{+,k}\rangle = |\psi_{-,k}\rangle + \left(\frac{1}{E_k - \hat{H} + i\varepsilon} - \frac{1}{E_k - \hat{H} - i\varepsilon} \right) \hat{V}|\mathbf{k}\rangle \quad (2.151)$$

と書き直す。両辺に左から $\langle \psi_{-,k'}|$ をかけて散乱状態の直交性 (2.142) を使うと、

$$\langle \psi_{-,k'}|\psi_{+,k}\rangle = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \langle \psi_{-,k'}| \left(\frac{1}{E_k - E_{k'} + i\varepsilon} - \frac{1}{E_k - E_{k'} - i\varepsilon} \right) \hat{V}|\mathbf{k}\rangle \quad (2.152)$$

²運動量の固有状態の波動関数は $\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle \propto e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ であるが、規格化条件 $\langle \mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ より $\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = (2\pi)^{-3/2}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ である。また、散乱状態の入射波は e^{ikz} で定義されたので、追加で $(2\pi)^{3/2}$ の因子がかかり (2.149) において $(2\pi)^3$ が出てくる。

となる。さらに関係式

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P}\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad (2.153)$$

を用いると

$$S_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - 2\pi i\delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'})\langle\psi_{-,\mathbf{k}'}|\hat{V}|\mathbf{k}\rangle \quad (2.154)$$

となる。右辺第二項は

$$\begin{aligned} \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'})\langle\psi_{-,\mathbf{k}'}|\hat{V}|\mathbf{k}\rangle &= \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'})\langle\mathbf{k}'|\left(1 + \hat{V}\frac{1}{E_{\mathbf{k}'} - \hat{H} + i\varepsilon}\right)\hat{V}|\mathbf{k}\rangle \\ &= \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'})\langle\mathbf{k}'|\hat{V}\left(1 + \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H} + i\varepsilon}\hat{V}\right)|\mathbf{k}\rangle \\ &= \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'})\langle\mathbf{k}'|\hat{V}|\psi_{+,\mathbf{k}}\rangle \\ &= \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'})T_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (2.155)$$

と表すことができるので、結局

$$S_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - 2\pi i\delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'})T_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \quad (2.156)$$

となることがわかった。

S 行列はユニタリー性

$$S^\dagger S = S S^\dagger = 1 \quad (2.157)$$

を満たす。左辺は

$$\int d^3\mathbf{k}' (S^\dagger)_{\mathbf{k}'',\mathbf{k}'} S_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \int d^3\mathbf{k}' S_{\mathbf{k}',\mathbf{k}''}^* S_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \int d^3\mathbf{k}' \langle\psi_{+,\mathbf{k}''}|\psi_{-,\mathbf{k}'}\rangle \langle\psi_{-,\mathbf{k}'}|\psi_{+,\mathbf{k}}\rangle \quad (2.158)$$

となり、完全系の関係式 (2.143) を使うと

$$= \langle\psi_{+,\mathbf{k}''}|\left(\hat{1} - \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\right)|\psi_{+,\mathbf{k}}\rangle \quad (2.159)$$

となるが、束縛状態 $|\psi_n\rangle$ と散乱状態 $|\psi_{+,k}\rangle$ は直交するので³

$$= \langle \psi_{+,k''} | \psi_{+,k} \rangle = \delta^3(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}) \quad (2.160)$$

となり、ユニタリー性が示された。 S 行列のユニタリー性は確率の保存と関係している。 S 行列を部分波展開するとその行列要素は $S_{l'm',lm} = e^{2i\delta_l} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$ のように位相のずれで表すことができる。付録 A を参照のこと。

問 2.10. S 行列のユニタリー性から光学定理 (2.21) を示せ。

³束縛状態のエネルギー固有値は負 ($E < 0$) で、散乱状態のエネルギー固有値は正 ($E > 0$) であり、異なるエネルギー固有値を持つ固有状態は直交する。

第3章 多粒子の量子力学

ここまでは1粒子の量子力学について議論してきた。この章では2粒子以上の多粒子が存在する場合の量子力学的な扱いについて見ていく。

3.1 2粒子の量子力学

まず手始めに2個の粒子が存在する場合について考えてみよう。古典的にはマクロな2個の粒子はどんなに見た目が似ていたとしても、ミクロには細かな違いがあるため区別することができるはずである。量子力学では、電子のように原理的にどのような手段を使っても互いに区別できない粒子というものが出てくる。

2粒子が区別できる場合、粒子1の状態が $|\psi_1\rangle$ で粒子2の状態が $|\psi_2\rangle$ であるとき2個の粒子の複合系の状態 $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \quad (3.1)$$

のように状態ベクトルのテンソル積で表される。いちいち \otimes を書くのは煩雑なので

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle \quad (3.2)$$

のように省略して書くことがある。複合系の状態がこのようなテンソル積で与えられるというのは量子力学の公理として扱われることもあるが、他の公理から導かれるという立場もあるようだ¹。一般には2粒子の状態ベクトルは(3.2)の線形結合の形で与えられる。

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |\psi_i\rangle |\psi_j\rangle \quad (c_{ij} \in \mathbb{C}) \quad (3.3)$$

¹G. Carcassi L. Maccone, and C. A. Aidala, Phys. Rev. Lett. **126**, 110402 (2021)などを参照。

2粒子の状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対して波動関数は

$$(\langle \mathbf{r}_1 | \otimes \langle \mathbf{r}_2 |) |\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3.4)$$

のように表される。これは粒子1が位置 \mathbf{r}_1 にいて、粒子2が位置 \mathbf{r}_2 にいる確率振幅という意味を持つ。粒子がスピンを持つ場合は

$$(\langle \mathbf{r}_1 | \langle \sigma_1 | \otimes \langle \mathbf{r}_2 | \langle \sigma_2 |) |\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) \quad (\sigma_1, \sigma_2 = \uparrow, \downarrow) \quad (3.5)$$

のようにスピンも座標に加えることで波動関数は表示される。

状態 $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ を交換して

$$|\psi_2\rangle |\psi_1\rangle \quad (3.6)$$

と書くと、粒子1の状態が $|\psi_2\rangle$ で粒子2の状態が $|\psi_1\rangle$ であることを表している。 $|\psi_1\rangle \neq e^{i\alpha} |\psi_2\rangle$ ($\alpha \in \mathbb{R}$) ならば、状態(3.2)と(3.6)は区別される。

例 3.1. $S = \frac{1}{2}$ のスピンの状態は $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ の線形結合で与えられる。 $S = \frac{1}{2}$ のスピンの2個あると、その状態は $|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle, |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle, |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle$ の線形結合で与えられる。

それでは2つの粒子が原理的に区別できなかったとしよう。2つの粒子を仮にラベル付けて1と2と呼ぶことにしたとき、どちらの状態が $|\psi_1\rangle$ で、もう片方の状態が $|\psi_2\rangle$ であるかを言うことはできない。つまり、2粒子の複合系の状態が(3.2)であるか(3.6)であるかを定めることはできなくなってしまう。あるいはそれらの線形結合をとって

$$c_1 |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle + c_2 |\psi_2\rangle |\psi_1\rangle \quad (c_1, c_2 \in \mathbb{C}) \quad (3.7)$$

と表すこともできるかもしれない。どれを状態ベクトルとして採用すべきかを定める指針が必要である。

そこで、複合系の持つ対称性に注目してみる。粒子1と2の状態を入れ換える操作に対応する演算子 \hat{P}_{12} を導入する。

$$\hat{P}_{12} |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle = |\psi_2\rangle |\psi_1\rangle \quad (3.8)$$

この演算子を2回作用させると状態は元に戻るので

$$\hat{P}_{12}^2 = \hat{1} \quad (3.9)$$

である。特に $\hat{P}_{12}^{-1} = \hat{P}_{12}$ である。2粒子に作用する演算子 $\hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2$ について

$$\begin{aligned} \hat{P}_{12}(\hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2)\hat{P}_{12}^{-1}|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle &= \hat{P}_{12}(\hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2)|\psi_2\rangle|\psi_1\rangle \\ &= \hat{P}_{12}(\hat{O}_1|\psi_2\rangle \otimes \hat{O}_2|\psi_1\rangle) \\ &= \hat{O}_2|\psi_1\rangle \otimes \hat{O}_1|\psi_2\rangle \end{aligned} \quad (3.10)$$

が任意の $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ で成り立つので、

$$\hat{P}_{12}(\hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2)\hat{P}_{12}^{-1} = \hat{O}_2 \otimes \hat{O}_1 \quad (3.11)$$

である。すなわち \hat{P}_{12} で演算子を挟むと、粒子1と粒子2に働く演算子が入れ換わる。区別できない2つの粒子に対してハミルトニアンは粒子の入れ換えで不変になっているはずである。

$$\hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}^{-1} = \hat{H} \quad (3.12)$$

さもなくば、粒子を区別できることになってしまう。

例 3.2. Coulomb 相互作用する2電子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2) + \frac{e^2}{|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|} \quad (3.13)$$

で与えられる。ここで $\hat{p}_1 = \hat{p} \otimes \hat{1}$, $\hat{p}_2 = \hat{1} \otimes \hat{p}$, $\hat{r}_1 = \hat{r} \otimes \hat{1}$, $\hat{r}_2 = \hat{1} \otimes \hat{r}$ である。確かに $\hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}^{-1} = \hat{H}$ が成り立っている。

式(3.12)より \hat{H} と \hat{P}_{12} は可換になり ($[\hat{H}, \hat{P}_{12}] = 0$)、同時対角化可能である。それぞれの固有値を E, p_{12} とすると、

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (3.14)$$

$$\hat{P}_{12}|\psi\rangle = p_{12}|\psi\rangle \quad (3.15)$$

となる。(3.9)より

$$|\psi\rangle = \hat{P}_{12}^2|\psi\rangle = p_{12}^2|\psi\rangle \quad (3.16)$$

が成り立つので $p_{12}^2 = 1$ 、すなわち $p_{12} = \pm 1$ である。 $p_{12} = 1$ の場合、粒子1と2を入れ換えても状態ベクトルの符号は変わらない。このような粒子をボース粒子(ボソン)という。一方、 $p_{12} = -1$ の場合は粒子1と2を入れ換えると状態ベクトルの符号が変わる。このような粒子をフェルミ粒子(フェルミオン)という。全ての粒子はボソンとフェルミオンに大別される。ボソンは整数スピン ($S = 0, 1, 2, \dots$) を持ち、フェルミオンは半奇整数のスピン ($S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$) を持つことが知られている。この事実は相対論的な場の量子論の枠組みで説明される。

例 3.3. 電子、陽子、中性子はフェルミオンである。光子はボソンである。

問 3.1. 空間が2次元の場合は、粒子の入れ換えに対してボソンやフェルミオンとは別の振る舞いをするエニオンというものも存在することが知られている。エニオンとは何か、調べて説明せよ。

区別できない2粒子のうち片方の粒子の状態が $|\psi_1\rangle$ で表され、もう片方の粒子の状態が $|\psi_2\rangle$ であるとする。次のように対称化(反対称化)された複合系の状態

$$|\psi_B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle) \quad (3.17)$$

$$|\psi_F\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle - |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle) \quad (3.18)$$

を考えると、

$$\hat{P}_{12}|\psi_B\rangle = +|\psi_B\rangle \quad (3.19)$$

$$\hat{P}_{12}|\psi_F\rangle = -|\psi_F\rangle \quad (3.20)$$

を満たす。 $|\psi_B\rangle$ はボース粒子の状態、 $|\psi_F\rangle$ はフェルミ粒子の状態に対応する。 $|\psi_1\rangle = e^{i\alpha}|\psi_2\rangle$ ならば $|\psi_F\rangle = 0$ である。すなわち2個のフェルミ粒子は同じ状態になることはできない。後で見るように、一般の N 粒子の場合も同様のことが言える。これを Pauli の排他律という。一方、ボース粒子の場合は複数の粒子が同じ状態を取ることができる。

2粒子のハミルトニアンが

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}_2^2 + V(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \quad (3.21)$$

の形で与えられるとき、Schrödinger 方程式は座標表示で

$$\left(-\frac{\hbar^2\nabla_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2\nabla_2^2}{2m} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\right)\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3.22)$$

のように書かれる。ボース粒子かフェルミ粒子かに応じて波動関数に対称性

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \pm\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3.23)$$

を課して微分方程式 (3.22) を解くことになる。スピンを考慮する場合は、空間座標とスピンの両方を入れ換えたときに (反) 対称になっている必要がある。

$$\psi(\mathbf{r}_2, \sigma_2; \mathbf{r}_1, \sigma_1) = \pm\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) \quad (3.24)$$

3.2 N 粒子の場合

2粒子の場合に見てきたことは、そのまま一般の N 粒子に拡張することができる。 i 番目の粒子の状態が $|\psi_i\rangle$ のとき ($i = 1, 2, \dots, N$)、 N 粒子の複合系の状態 $|\psi\rangle$ は N 重のテンソル積

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle \in \mathcal{H}^{\otimes N} \quad (3.25)$$

で表される。一般には N 粒子の状態はこれらの線形結合で表される。

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N} c_{i_1, \dots, i_N} |\psi_{i_1}\rangle \otimes |\psi_{i_2}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{i_N}\rangle \quad (c_{i_1, \dots, i_N} \in \mathbb{C}) \quad (3.26)$$

対応する N 粒子の波動関数は

$$(\langle \mathbf{r}_1 | \otimes \langle \mathbf{r}_2 | \otimes \cdots \langle \mathbf{r}_N |) |\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (3.27)$$

となる。

N 粒子の場合もボソンとフェルミオンで粒子の入れ換えに関する対称性が異なる。 i 番目の粒子の状態と j 番目の粒子の状態を入れ換える演算子を \hat{P}_{ij} とする。

$$\begin{aligned} & \hat{P}_{ij} |\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_i\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_j\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle \\ &= |\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_j\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_i\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle \end{aligned} \quad (3.28)$$

ボソンの場合は任意の1組の粒子を入れ換えても状態は変わらない。

$$\hat{P}_{ij} |\psi_B\rangle = +|\psi_B\rangle \quad (i \neq j) \quad (3.29)$$

一方、フェルミオンの場合は粒子を入れ換えるとマイナス符号がつく。

$$\hat{P}_{ij} |\psi_F\rangle = -|\psi_F\rangle \quad (i \neq j) \quad (3.30)$$

複数の粒子が結合してできた複合粒子の場合、その内部構造が見えないような低エネルギー領域において複合粒子全体を一つの粒子とみなすことができる。 N_B 個のボソンと N_F 個のフェルミオンからなる複合粒子同士を入れ換えると、状態ベクトルは $(+1)^{N_B} (-1)^{N_F} = (-1)^{N_F}$ という符号がつくことになる。フェルミオン2個からなる複合粒子はボソンである。フェルミオン1個とボソン1個からなる複合粒子はフェルミオンである。ボソン1個とボソン1個からなる複合粒子はボソンである。一般にフェルミオンが奇数個含まれる複合粒子はフェルミオン、それ以外はボソンになる。

例 3.4. 水素原子、 ^4He 原子はボソンである。 ^3He 原子はフェルミオンである。

2粒子の場合に見たように、状態ベクトルを対称化(反対称化)することでボソン(フェルミオン)の状態ベクトルを構成することができる。 S_N を $\{1, 2, \dots, N\}$ の置換全体の集

合、 $\text{sgn}(\sigma)$ を置換 σ の符号とすると、

$$|\psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} |\psi_{i_{\sigma(1)}}\rangle |\psi_{i_{\sigma(2)}}\rangle \cdots |\psi_{i_{\sigma(N)}}\rangle \quad (3.31)$$

$$|\psi_{F,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \text{sgn}(\sigma) |\psi_{i_{\sigma(1)}}\rangle |\psi_{i_{\sigma(2)}}\rangle \cdots |\psi_{i_{\sigma(N)}}\rangle \quad (3.32)$$

で定義された状態は、

$$\hat{P}_{mn} |\psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle = + |\psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle \quad (m \neq n) \quad (3.33)$$

$$\hat{P}_{mn} |\psi_{F,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle = - |\psi_{F,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle \quad (m \neq n) \quad (3.34)$$

を満たす。すなわち $|\psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle, |\psi_{F,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle$ はそれぞれ N 個のボソン、 N 個のフェルミオンの状態に対応する。 $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ の因子は規格化定数である²。

一般にはこれらの線形結合によって状態を表すことができる。

$$|\psi_B\rangle = \sum_{i_1,i_2,\dots,i_N} c_{i_1,i_2,\dots,i_N} |\psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle \quad (3.35)$$

$$|\psi_F\rangle = \sum_{i_1,i_2,\dots,i_N} c_{i_1,i_2,\dots,i_N} |\psi_{F,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle \quad (3.36)$$

2 粒子のときと同様、 $i_m = i_n$ のときに $|\psi_{F,i_1,\dots,i_m,\dots,i_n,\dots,i_N}\rangle = 0$ となるのでフェルミオン同士は同じ状態をとることができない (Pauli の排他律)。ボソンは何個でも同じ状態をとることができる。マクロな数のボソンが基底状態を占有するとボース・アインシュタイン凝縮という相転移が起きる。

問 3.2. 式 (3.33), (3.34) が成り立つことを示せ。

²ボソンについては i_1, i_2, \dots, i_N が全て異なる場合は $\langle \psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N} | \psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N} \rangle = 1$ となるが、同じものが重複して存在する場合は $\langle \psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N} | \psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N} \rangle \neq 1$ となることに注意する。

フェルミオンの場合、反対称化された状態ベクトルを波動関数として表すと

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{r}_1 | \langle \mathbf{r}_2 | \cdots \langle \mathbf{r}_N | \rangle \psi_{F, i_1, i_2, \dots, i_N} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \text{sgn}(\sigma) \psi_{i_{\sigma(1)}}(\mathbf{r}_1) \psi_{i_{\sigma(2)}}(\mathbf{r}_2) \cdots \psi_{i_{\sigma(N)}}(\mathbf{r}_N) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{i_1}(\mathbf{r}_1) & \psi_{i_1}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{i_1}(\mathbf{r}_N) \\ \psi_{i_2}(\mathbf{r}_1) & \psi_{i_2}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{i_2}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_{i_N}(\mathbf{r}_1) & \psi_{i_N}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{i_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\psi_{i_j}(\mathbf{r}_k)) \tag{3.37}
 \end{aligned}$$

のように行列式で表すことができる。このように N 個のフェルミオンの波動関数を行列式の形で表したものを Slater 行列式という。 $i_m = i_n$ ならば m 行目と n 行目の要素が等しくなるので行列式はゼロになり、確かに Pauli の排他律が成り立っている。

3.3 ヘリウム原子

多粒子の量子力学について見たので、ヘリウム原子 ${}^4\text{He}$ に応用してみよう。ヘリウム原子は水素原子の次に簡単な 2 電子原子の例の一つになっている。ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \left(\frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}_1^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 |\hat{\mathbf{r}}_1|} \right) + \left(\frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}_2^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 |\hat{\mathbf{r}}_2|} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|} \tag{3.38}$$

で与えられる。最後の項を $\hat{V}_{12} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|}$ と書くことにする。この項は電子間の相互作用を表す。ここでは簡単のため、原子核は電子より十分重くして原子核は動かないものとする。このような扱いを Born-Oppenheimer 近似という。一般にこの 2 電子のハミルトニアンに対する Schrödinger 方程式を解析的に解くことは難しい。そこで何らかに近似を使うことが肝要になる。

まず \hat{V}_{12} を無視する近似を考えよう。この場合は 2 個の電子は互いに独立しているので、1 電子問題に帰着させることができる。ただし電子はスピン $S = \frac{1}{2}$ を持っているので、そ

れを考慮する必要がある。ハミルトニアンはスピンの依存しないので、軌道部分とスピン部分を分けて考えることができる。

軌道部分については、2電子の状態のうち最もエネルギーが低い基底状態は1電子の基底状態(1s軌道) $|\psi_0\rangle$ のテンソル積 $|\psi_0\rangle|\psi_0\rangle$ で与えられる。1電子の基底状態のエネルギーを E_0 とすると、

$$\left[\left(\frac{1}{2m} \hat{p}_1^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0|\hat{r}_1|} \right) + \left(\frac{1}{2m} \hat{p}_2^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0|\hat{r}_2|} \right) \right] |\psi_0\rangle|\psi_0\rangle = 2E_0|\psi_0\rangle|\psi_0\rangle \quad (3.39)$$

となる。軌道部分は2電子の入れ換えに関して対称になっている。スピン部分については、 $S = \frac{1}{2}$ のスピン2個の角運動量の合成をすると

$$|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle), \quad |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle \quad (S_{\text{tot}} = 1) \quad (3.40)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle) \quad (S_{\text{tot}} = 0) \quad (3.41)$$

という分解が得られる。ここで S_{tot} は全スピン角運動量である。2電子の入れ換えに関してスピンシングレット ($S_{\text{tot}} = 0$) は反対称、トリプレット ($S_{\text{tot}} = 1$) は対称になっている。電子はフェルミオンのため軌道とスピンを合わせた全体で粒子の入れ換えについて反対称になる必要があるので、基底状態は

$$|\psi_0\rangle|\psi_0\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle) \quad (3.42)$$

で与えられる。波動関数で書けば、

$$\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) = \psi_0(\mathbf{r}_1)\psi_0(\mathbf{r}_2) \frac{1}{\sqrt{2}}(\delta_{\sigma_1, \uparrow}\delta_{\sigma_2, \downarrow} - \delta_{\sigma_1, \downarrow}\delta_{\sigma_2, \uparrow}) \quad (3.43)$$

となる。ここで $\psi_0(r)$ は水素原子の波動関数と同様で

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{2r}{a_0}} \quad (3.44)$$

である。 $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$ は Bohr 半径である。基底エネルギーは

$$2E_0 = 2 \times \left(-\frac{4}{2a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) = (-13.6 \text{ eV}) \times 8 = -108.8 \text{ eV} \quad (3.45)$$

である。 $\frac{1}{2a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 13.6 \text{ eV}$ はエネルギーの単位として用いられることがあり、1 Ry (リュードベリ) という。

次に \hat{V}_{12} を 1 次摂動の範囲で考慮する。1 次摂動によるエネルギー補正は

$$\Delta E = \langle \hat{V}_{12} \rangle_0 \quad (3.46)$$

である。ここで $\langle \dots \rangle_0$ は基底状態に関する期待値を表す。波動関数を使って書き直すと

$$\begin{aligned} \Delta E &= \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \psi^*(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) \\ &= \frac{e^2}{\pi^2} \left(\frac{2}{a_0} \right)^6 \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 e^{-\frac{4}{a_0}(r_1+r_2)} \frac{1}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \end{aligned} \quad (3.47)$$

となる。この積分を実行すると

$$\Delta E = \frac{5}{2} \frac{1}{2a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 34.0 \text{ eV} \quad (3.48)$$

が得られる。よって基底状態のエネルギーは 1 次摂動の範囲で

$$2E_0 + \Delta E = -74.8 \text{ eV} \quad (3.49)$$

となる。実験値は -79.0 eV なので、比較的よい値が得られたといえる。

問 3.3. 式 (3.47) の積分を計算せよ。

問 3.4. \hat{V}_{12} を無視する近似をしたときに、ヘリウム原子の第一励起状態として可能なものを列挙せよ。

問 3.5. \hat{V}_{12} を 1 次摂動で扱ったときに、問 3.4 の各状態のエネルギー固有値はどのように表されるか。また、その中で最もエネルギーが低い状態はどれか。

3.4 多電子系

前節ではヘリウム原子について見たが、電子の数がより多くなると問題はさらに複雑になる。ここではそのような多電子系の扱いについて考えてみる。

N 個の電子からなる多電子系を考える。 N 個の電子の波動関数が満たす Schrödinger 方程式は

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + V_1(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{i < j} V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right) \psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \dots; \mathbf{r}_N, \sigma_N) \\ & = E\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \dots; \mathbf{r}_N, \sigma_N) \end{aligned} \quad (3.50)$$

のように書かれるとしよう。ここで $V_1(\mathbf{r}_i)$ は 1 体のポテンシャル、 $V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ は電子間相互作用を表す。これは $3N$ 変数 (+ スピン) の偏微分方程式である。電子はフェルミオンなので、波動関数に反対称性を課す。

$$\begin{aligned} & \psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \dots; \mathbf{r}_i, \sigma_i; \dots; \mathbf{r}_j, \sigma_j; \dots; \mathbf{r}_N, \sigma_N) \\ & = -\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \dots; \mathbf{r}_j, \sigma_j; \dots; \mathbf{r}_i, \sigma_i; \dots; \mathbf{r}_N, \sigma_N) \quad (i \neq j) \end{aligned} \quad (3.51)$$

多変数の偏微分方程式をいきなり解くのは難しいので、何らかの近似をすることを考える。電子間相互作用が十分弱ければ各電子はほぼ独立に運動するだろう。そのとき N 電子の波動関数は 1 電子の波動関数をかけ合わせたもので近似できると考えて、以下のような変数分離形を仮定する。

$$\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2; \dots; \mathbf{r}_N, \sigma_N) = \psi_1(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \psi_2(\mathbf{r}_2, \sigma_2) \cdots \psi_N(\mathbf{r}_N, \sigma_N) \quad (3.52)$$

これは一般に反対称性を満たさないが、とりあえずこのまま進めることにする。

V_2 の項を無視すると各電子は完全に独立なので、1 粒子の Schrödinger 方程式に帰着する。

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + V_1(\mathbf{r}_i)\right) \psi_i(\mathbf{r}_i, \sigma_i) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}_i, \sigma_i), \quad E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \quad (3.53)$$

電子間相互作用を考慮するために、 i 番目の電子が他の電子との相互作用によって感じる平均的なポテンシャルの大きさを見積もってみる。 $j (\neq i)$ 番目の電子が位置 \mathbf{r}_j にいる確率は $|\psi_j(\mathbf{r}_j)|^2$ なので、その重みで V_2 項を平均化したポテンシャルが i 番目の粒子に働くと考えられる。

$$\overline{V}_2(\mathbf{r}_i) = \sum_{j \neq i} \sum_{\sigma_j} \int d^3 \mathbf{r}_j V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) |\psi_j(\mathbf{r}_j, \sigma_j)|^2 \quad (3.54)$$

この平均化されたポテンシャル中を i 番目の粒子が運動すると考えて、以下のような補正された Schrödinger 方程式が成り立つとする。

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + V_1(\mathbf{r}_i) + \overline{V}_2(\mathbf{r}_i)\right) \psi_i(\mathbf{r}_i, \sigma_i) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}_i, \sigma_i) \quad (3.55)$$

このようにして電子間相互作用を取り入れた有効的な 1 電子問題が得られた。このような近似を Hartree 近似という。これは平均場近似の一種である。1 電子の Schrödinger 方程式の形をしているが、 \overline{V}_2 の項に $\psi_j(\mathbf{r}_j, \sigma_j)$ が含まれるため、非線形な連立微分方程式になっている。

実際に解くときには、適当な初期解 $\{\psi_i(\mathbf{r}_i, \sigma_i)\}$ から始めて $\overline{V}_2(\mathbf{r}_i)$ を (3.54) から求め、1 粒子の Schrödinger 方程式 (3.55) を解く。簡単な場合は方程式 (3.55) は各 i で同じになり、一度だけ方程式を解けばよいことになる。得られた解を再び (3.54) に代入して $\overline{V}_2(\mathbf{r}_i)$ を求め、1 粒子の Schrödinger 方程式 (3.55) を解く。この過程を、解が収束して変わらなくなるまで繰り返す。このような方法を自己無撞着に方程式を解くという。平均場近似で得られる方程式を解くための常套手段である。

全エネルギーはハミルトニアンの期待値で与えられ、

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma_i} \int d^3\mathbf{r}_i \bar{V}_2(\mathbf{r}_i) |\psi_i(\mathbf{r}_i, \sigma_i)|^2 \quad (3.56)$$

となる。 $\sum_{i=1}^N \varepsilon_i$ の中で電子間相互作用を重複して足しているため、その分を引いておく必要がある。

Hartree 近似では波動関数が反対称性を満たしていないという問題があった。この問題を回避するために、(3.52) の代わりに Slater 行列式 (3.37) の形を仮定することにする。

$$\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \dots; \mathbf{r}_N, \sigma_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1, \sigma_1) & \psi_1(\mathbf{r}_2, \sigma_2) & \cdots & \psi_1(\mathbf{r}_N, \sigma_N) \\ \psi_2(\mathbf{r}_1, \sigma_1) & \psi_2(\mathbf{r}_2, \sigma_2) & \cdots & \psi_2(\mathbf{r}_N, \sigma_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1, \sigma_1) & \psi_N(\mathbf{r}_2, \sigma_2) & \cdots & \psi_N(\mathbf{r}_N, \sigma_N) \end{vmatrix} \quad (3.57)$$

この形を選べば自動的に反対称性を満たすことになる。ただし複雑な形をしているために、これを Schrödinger 方程式に代入しても素朴には解くことができない。

そこで変分原理を利用する。変分原理は、試行状態ベクトル $|\tilde{\psi}\rangle$ を用意してエネルギー期待値を評価すると、必ず基底状態のエネルギー E_0 以上になることを保証する。

$$E[|\tilde{\psi}\rangle] = \frac{\langle \tilde{\psi} | \hat{H} | \tilde{\psi} \rangle}{\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle} \geq E_0 \quad (3.58)$$

ここで $E[|\tilde{\psi}\rangle]$ は $|\tilde{\psi}\rangle$ についての汎関数である。これは次のように示すことができる。 \hat{H} の固有値を E_i 、規格化された固有状態を $|\psi_i\rangle$ とする ($i = 0, 1, 2, \dots$)。 $|\psi_0\rangle$ が基底状態である。 $|\psi_i\rangle$ は互いに直交するとする。 $|\tilde{\psi}\rangle$ は固有状態で展開することができる。

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} c_i |\psi_i\rangle \quad (3.59)$$

これを用いると、

$$E[|\tilde{\psi}\rangle] = \frac{\sum_{i=0}^{\infty} |c_i|^2 E_i}{\sum_{i=0}^{\infty} |c_i|^2} = \frac{\sum_{i=0}^{\infty} |c_i|^2 (E_i - E_0)}{\sum_{i=0}^{\infty} |c_i|^2} + E_0 \quad (3.60)$$

となる。 $E_i - E_0 \geq 0$ なので(右辺) $\geq E_0$ である。等号が成立するのは $E_i > E_0$ となる全ての i について $c_i = 0$ となるときである。すなわち $|\tilde{\psi}\rangle$ が基底状態(の一つ)であるときのみである。

不等式(3.58)から次のことが言える。ある試行状態ベクトル $|\tilde{\psi}\rangle$ に対してエネルギー期待値を計算して \tilde{E} という値を得たとすると、真の基底状態のエネルギーは $E_0 \leq \tilde{E}$ を満たす。よって基底エネルギーの上限を得たことになる。さらに $|\tilde{\psi}\rangle = |\psi_0\rangle + |\delta\psi\rangle$ とすると

$$E[|\tilde{\psi}\rangle] = E_0 + \frac{\langle \delta\psi | \hat{H} - E_0 | \delta\psi \rangle}{\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle} = E_0 + O(\|\delta\psi\|^2) \quad (3.61)$$

であるので汎関数 $E[|\tilde{\psi}\rangle]$ は $|\tilde{\psi}\rangle = |\psi_0\rangle$ で停留点を持つことがわかる。

$$\left. \frac{\delta E[|\tilde{\psi}\rangle]}{\delta |\tilde{\psi}\rangle} \right|_{|\tilde{\psi}\rangle = |\psi_0\rangle} = 0 \quad (3.62)$$

変分原理を実際に応用するときは、次のようにすることが多い。まず、物理的な直観などに基づいていくつかのパラメーター x_1, \dots, x_n (変分パラメーター)を含んだ試行状態ベクトル $|\tilde{\psi}\rangle = |\tilde{\psi}(x_1, \dots, x_n)\rangle$ を用意する。そしてエネルギー汎関数 $E[|\tilde{\psi}\rangle]$ を計算し、変分パラメーター x_1, \dots, x_n について変分して停留点を求める。その停留点が、試行状態ベクトルが動ける範囲内でエネルギーが最小になる状態であると期待し、基底状態の近似解を得る。この方法は最初に選んだ試行状態ベクトルの形に決定的に依存しており、近似の質を決めることになる。近似の質はエネルギーの期待値で判別できる。エネルギーの期待値が低いほど基底状態に近い解が得られていると考えることができる。変分原理がうまくいく場合というのは、物理的な直観が働き基底状態に近い試行状態ベクトルがうまく選べるときである。また、変分原理は状態ベクトルの代わりに波動関数に関して変分をとることが多い。

それでは早速、変分原理を多電子系の問題に応用してみよう。試行波動関数としてSlater行列式(3.57)をとる(右辺を $\tilde{\psi}(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N, \sigma_N)$ とおく)。この場合、変分パラメーターは1体の波動関数 $\psi_1(\mathbf{r}_1, \sigma_1), \dots, \psi_N(\mathbf{r}_N, \sigma_N)$ である。各波動関数は互いに直交している

とする。ハミルトニアンの期待値は

$$\begin{aligned}
 E[\tilde{\psi}] &= \sum_i \sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{r} \psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_1(\mathbf{r}) \right) \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\psi_i(\mathbf{r}, \sigma)|^2 |\psi_j(\mathbf{r}', \sigma')|^2 \\
 &- \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \psi_i(\mathbf{r}', \sigma) \psi_j^*(\mathbf{r}', \sigma) \psi_j(\mathbf{r}, \sigma) \quad (3.63)
 \end{aligned}$$

となる。右辺第一項は 1 体のエネルギー、第二項は Hartree 近似で現れた有効 1 体ポテンシャル (Hartree 項)、第三項は交換項 (交換積分) と呼ばれる粒子の交換プロセスによって現れる項である。第三項は各波動関数についてスピンの揃っていることに注意する。

問 3.6. 式 (3.63) を導け。

エネルギー汎関数 $E[\tilde{\psi}]$ (3.63) を $\psi_i(\mathbf{r}, \sigma)$ ($i = 1, 2, \dots, N$) について変分をとることで停留点を求めよう。その際に規格化条件 $\sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{r} |\psi_i(\mathbf{r}, \sigma)|^2 = 1$ を課すので、Lagrange の未定乗数 ε_i を導入して

$$\tilde{E}[\tilde{\psi}] = E[\tilde{\psi}] - \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \left(\sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{r} |\psi_i(\mathbf{r}, \sigma)|^2 - 1 \right) \quad (3.64)$$

の停留点を求めることを考える。変分すると

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta \tilde{E}[\tilde{\psi}]}{\delta \psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma)} &= \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_1(\mathbf{r}) \right) \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) \\
 &+ \sum_{j \neq i} \sum_{\sigma'} \int d^3\mathbf{r}' V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\psi_j(\mathbf{r}', \sigma')|^2 \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) \\
 &- \sum_{j \neq i} \int d^3\mathbf{r}' V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_i(\mathbf{r}', \sigma) \psi_j^*(\mathbf{r}', \sigma) \psi_j(\mathbf{r}, \sigma) \\
 &- \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) \quad (3.65)
 \end{aligned}$$

となる。よって停留条件から

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_1(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) \right) \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) - \sum_{j \neq i} \int d^3 \mathbf{r}' V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_j^*(\mathbf{r}', \sigma) \psi_i(\mathbf{r}', \sigma) \psi_j(\mathbf{r}, \sigma) \\ & = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) \end{aligned} \quad (3.66)$$

という方程式が得られる。これを Hartree-Fock 方程式という。ここで

$$V_H(\mathbf{r}) = \sum_{j \neq i} \sum_{\sigma'} \int d^3 \mathbf{r}' V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\psi_j(\mathbf{r}', \sigma')|^2 \quad (3.67)$$

は Hartree ポテンシャルである。(3.66) は Hartree 近似と違って交換積分を含むので $\psi_i(\mathbf{r}, \sigma)$ についての微分積分方程式になっている。非線形な方程式なので、実際は適当な初期解からはじめて解が収束するまで代入を繰り返して自己無撞着に解くことになる。

全エネルギー E は、Hartree-Fock 方程式の解 $\{\psi_i(\mathbf{r}, \sigma)\}$ から作られる Slater 行列式を使って N 電子系の波動関数を構成し、その波動関数についてハミルトニアン の期待値を計算することで得られる。一般に $E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i$ とはならないことに注意する。 N 電子系の全エネルギーを E_N 、 N 電子系から軌道 $\psi_i(\mathbf{r}, \sigma)$ に入っている電子を 1 個抜き取った $N-1$ 電子系の全エネルギーを E_{N-1} とおくと、 $E_N - E_{N-1} = \varepsilon_i$ が成り立つ (Koopmans の定理)。すなわち ε_i はイオン化エネルギーの意味をもつ。ただし、電子を 1 個抜き取ったことにより他の電子の波動関数は変わらないことを仮定している。

Hartree-Fock の方法では多電子の波動関数が 1 つの Slater 行列式で書けると仮定しており、これはあくまでも近似である。Hartree 項や交換項に含まれていない効果 (電子相関の効果) を無視している。これを克服するためにさらに近似を改良していくことも可能である。また、多電子系の Schrödinger 方程式を解く別のアプローチとして密度汎関数理論などもある。

第4章 第二量子化

前章で多粒子の量子力学について見てきたが、粒子数が増えると Schrödinger 方程式は超多変数の偏微分方程式になり扱いが複雑になる。また、粒子が生成・消滅する過程を扱うことができないという問題もある。ここでは多粒子系を見通しよく扱うことのできる第二量子化の方法を見ていく。第二量子化は場の量子論を記述するための言語でもある。第二量子化は“量子化を2回する”という意味ではないことに注意する。あくまでも多粒子系を扱うための記述方法であり、量子力学の体系としてはこれまで見てきたものの範疇に入っている。

4.1 調和振動子の復習

前章で扱った多粒子系の記述方法(第一量子化ともいう)は粒子目線の方法であり、各粒子がどの状態にあるかを指定していた。一方で状態目線の扱いも可能であり、各状態にある粒子が何個いるかで多粒子系の状態を指定することもできる。この状態目線の扱いが第二量子化の記法につながる。そのような見方は、実は調和振動子の例で出てきた。まずは調和振動子の復習をしよう。

1次元の調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\omega^2\hat{q}^2 \quad (\omega > 0) \quad (4.1)$$

で与えられた。簡単のため質量は $m = 1$ とおいた。 \hat{q} と \hat{p} は交換関係 $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ を満たす。調和振動子の問題を演算子形式で解くときに導入したのが生成・消滅演算子であった。生

成演算子を \hat{a}^\dagger 、消滅演算子を \hat{a} と書いて、

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left(\hat{q} + \frac{i}{\omega} \hat{p} \right) \quad (4.2)$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left(\hat{q} - \frac{i}{\omega} \hat{p} \right) \quad (4.3)$$

と定義する。これらの演算子を用いるとハミルトニアンは、

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \quad (4.4)$$

と表せる。ここで

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (4.5)$$

はすぐ後で説明するように個数演算子という意味がある。 \hat{a} と \hat{a}^\dagger の交換関係は

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (4.6)$$

となる。また、 \hat{n} との交換関係は

$$[\hat{n}, \hat{a}] = -\hat{a} \quad (4.7)$$

$$[\hat{n}, \hat{a}^\dagger] = +\hat{a}^\dagger \quad (4.8)$$

である。

状態 $|0\rangle$ を

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad (4.9)$$

を満たすものとして定義する¹。 $\hat{H}|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}|0\rangle$ を満たす。 $|0\rangle$ はエネルギーの最も低い固有状態、すなわち基底状態に対応する。さらに

$$|n\rangle = c_n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (4.10)$$

¹仮にこのような状態が存在しないとすると、 \hat{a} をかけていくことでいくらでもエネルギーの低い固有状態が作れてしまう。

とおくと (c_n は規格化定数)、 $|n\rangle$ は個数演算子 \hat{n} の固有状態になっている。

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (4.11)$$

問 4.1. $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$, $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$ が成り立つことを示せ。また (4.10) の規格化定数 c_n を求めよ。

$|n\rangle$ はエネルギー固有状態でもある。

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \quad (4.12)$$

\hat{a}^\dagger はエネルギーを $\hbar\omega$ だけ上げる演算子になっている。同様にして \hat{a} はエネルギーを $\hbar\omega$ だけ下げる演算子になっている。実はエネルギー固有状態は $\{|n\rangle\}$ で尽きている。

エネルギー固有値が等間隔で分布していることに着目すると、 $|n\rangle$ はエネルギー $\hbar\omega$ を持っている状態の粒子が n 個いるということもできる (元々は1粒子の調和振動子のハミルトニアンから出発したが、ここで粒子数の意味を読み替えていることに注意)。そう考えると \hat{n} が個数演算子という意味を持つこともわかる。 \hat{a}^\dagger はエネルギー $\hbar\omega$ を持つ粒子を1個生成する演算子、 \hat{a} はエネルギー $\hbar\omega$ を持つ粒子を1個消滅させる演算子と解釈することができる。ここではすでに状態目線の考え方が現れている。 $|n\rangle$ と書いたときにどの粒子がどの状態にいるかは言及せずに、エネルギー $\hbar\omega$ を持つ状態の粒子が何個いるかだけを指定している。 n には上限がないので、ボース粒子の振る舞いと対応している。

4.2 多数の調和振動子

前節ではエネルギー $\hbar\omega$ を持つ状態の粒子が n 個いるような状況を表現する形式を考えていた。これだと「エネルギー $\hbar\omega$ を持つ状態」という1種類の状態 (1モード) しか表せないので、複数のモードが存在する場合に拡張しよう。そのためには多数の独立した調和

振動子の系を考えればよい。 M 個の調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^M \left(\frac{1}{2} \hat{p}_i^2 + \frac{1}{2} \omega_i^2 \hat{q}_i^2 \right) \quad (4.13)$$

と書ける。 i 番目の調和振動子は振動数 $\omega_i (> 0)$ を持っているとする。各 i について生成・消滅演算子を定義することができる。

$$\hat{a}_i = \sqrt{\frac{\omega_i}{2\hbar}} \left(\hat{q}_i + \frac{i}{\omega_i} \hat{p}_i \right) \quad (4.14)$$

$$\hat{a}_i^\dagger = \sqrt{\frac{\omega_i}{2\hbar}} \left(\hat{q}_i - \frac{i}{\omega_i} \hat{p}_i \right) \quad (4.15)$$

これらの演算子の間の交換関係は

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (4.16)$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0 \quad (4.17)$$

で与えられる。また、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^M \hbar \omega_i \left(\hat{n}_i + \frac{1}{2} \right) \quad (4.18)$$

となる。 $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ は i 番目のモードについての個数演算子である。

基底状態 $|0\rangle$ を

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, M) \quad (4.19)$$

で定義する。これは全てのモードの粒子数が0である状態と解釈することができる。このような状態を真空状態 (Fock 真空) という。真空状態に生成演算子 \hat{a}_i^\dagger を作用させていくことで、各モードに粒子を占有させることができる。 i 番目のモードに n_i 個の粒子を占有させた状態を

$$|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle \propto (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{a}_M^\dagger)^{n_M} |0\rangle \quad (4.20)$$

と表すことにする。 $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$ は規格化されているとする。このような状態の表し方を占有数表示という。ここでも状態目線の扱いをしており、どの粒子がどの状態にいる

かには言及せずに、各状態にいる粒子の個数だけを指定している。

$$\hat{n}_i |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle \quad (4.21)$$

が確かに成り立っている。このように真空状態に生成演算子を作用させて作った状態を Fock 状態といい、Fock 状態の線形結合で張られる状態空間を Fock 空間という。

$$\mathcal{H}_{\text{Fock}} = \text{Span}\{|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle \mid n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}\} \quad (4.22)$$

Fock 空間は、全粒子数を N に固定した Fock 空間

$$\mathcal{H}_{\text{Fock}}^N = \text{Span}\{|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle \mid n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}, \sum_{i=1}^M n_i = N\} \quad (4.23)$$

の直和になっている。

$$\mathcal{H}_{\text{Fock}} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_{\text{Fock}}^N \quad (4.24)$$

全粒子数を N に固定した Fock 空間 $\mathcal{H}_{\text{Fock}}^N$ と、前章で定義した N 粒子のボソンの状態空間

$$\mathcal{H}_B^N = \text{Span}\{|\psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle \mid 1 \leq i_1 \leq i_2 \leq \dots \leq i_N \leq M\} \quad (4.25)$$

の間には一対一の対応をつけることができる (状態の重複を避けるためラベル i_1, i_2, \dots, i_N に順序を指定した)。そのために、各空間に属する状態の間に

$$\hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2}^\dagger \dots \hat{a}_{i_N}^\dagger |0\rangle \quad \leftrightarrow \quad |\psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle \quad (4.26)$$

という対応 ρ を考える。 ρ は $\mathcal{H}_{\text{Fock}}^N$ から \mathcal{H}_B^N への (またはその逆への) 線形写像である。 $\hat{a}_{i_1}^\dagger, \dots, \hat{a}_{i_N}^\dagger$ は互いに可換なのでちょうどボソンの状態ベクトルが粒子の入れ替えで対称になる性質を満たしている。第一量子化の記法では粒子にラベル付けをして完全対称化する必要があったが、第二量子化の記法ではそのような必要はなく、生成消滅演算子が満たす交換関係によって自然にボソンの対称性を表現できている。 $\mathcal{H}_{\text{Fock}}^N$ の基底ベクトル

$\{|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle\}$ は互いに直交している。 \mathcal{H}_B^N の基底ベクトル $\{|\psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N}\rangle\}$ も互いに直交している。特に、各状態空間の次元は

$$\dim \mathcal{H}_{\text{Fock}}^N = \frac{(N+M-1)!}{N!(M-1)!} \quad (4.27)$$

$$\dim \mathcal{H}_B^N = \frac{(M-1+N)!}{(M-1)!N!} \quad (4.28)$$

であり、 $\dim \mathcal{H}_{\text{Fock}}^N = \dim \mathcal{H}_B^N$ が成り立っている。 $\mathcal{H}_{\text{Fock}}^N$ と \mathcal{H}_B^N の間の対応 ρ は内積を保つこともわかる。つまり、 $\mathcal{H}_{\text{Fock}}^N$ と \mathcal{H}_B^N はベクトル空間として同型だけでなく、内積空間として同型である。要は $\mathcal{H}_{\text{Fock}}^N$ と \mathcal{H}_B^N を同一視してよいということである。

問 4.2. (4.27), (4.28) が成り立つことを示せ。

問 4.3. $(\langle 0|\hat{a}_{i_N} \cdots \hat{a}_{i_2} \hat{a}_{i_1}\rangle)(\hat{a}_{j_1}^\dagger \hat{a}_{j_2}^\dagger \cdots \hat{a}_{j_N}^\dagger |0\rangle) = \langle \psi_{B,i_1,i_2,\dots,i_N} | \psi_{B,j_1,j_2,\dots,j_N} \rangle$ ($1 \leq i_1, i_2, \dots, i_N \leq M, 1 \leq j_1, j_2, \dots, j_N \leq M$) が成り立つことを示せ。

4.3 第二量子化の記法

第二量子化は $\mathcal{H}_{\text{Fock}}$ をもとにして多粒子系の量子力学を展開する形式であり、状態や演算子を生成消滅演算子を使って表現していく。第一量子化と違って粒子をラベル付けする必要がない。第二量子化では粒子数を固定する必要がないため、粒子数が変化するような遷移も扱える。

各 1 粒子状態 (モード) i のエネルギーが ε_i であれば、調和振動子と同様にハミルトニアンは $\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i = \sum_i \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ で与えられる。さらにモード i から $j (\neq i)$ への遷移過程が

あれば、その遷移振幅を t_{ij} としてハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \quad (4.29)$$

となる。このハミルトニアンは、互いに相互作用しない自由ボース粒子の運動を記述する。

問 4.4. ハミルトニアン (4.29) で記述される系を考える。 $N = 2, M = 2$ として ε_i, t_{ij} は i や j によらないとする。ハミルトニアン (4.29) を占有数表示した基底ベクトル $|2, 0\rangle, |1, 1\rangle, |0, 2\rangle$ で行列表示せよ。

一般に 1 粒子にだけ働く 1 体の演算子を $\hat{O}^{(1)}$ としよう。 $\hat{O}^{(1)}$ は 1 粒子の状態に働いたときの行列要素を $O_{ij}^{(1)}$ とすると次のように表される。

$$\begin{aligned} \hat{O}^{(1)} &= \left(\sum_{ij} O_{ij}^{(1)} |i\rangle\langle j| \right) \otimes \hat{1} \otimes \cdots \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \left(\sum_{ij} O_{ij}^{(1)} |i\rangle\langle j| \right) \otimes \hat{1} \cdots \otimes \hat{1} \\ &\quad + \cdots + \hat{1} \otimes \cdots \otimes \hat{1} \otimes \left(\sum_{ij} O_{ij}^{(1)} |i\rangle\langle j| \right) \\ &= \sum_{ij} O_{ij}^{(1)} \hat{X}_{ij} \end{aligned} \quad (4.30)$$

ここで \hat{X}_{ij} は、1 粒子の状態を $|j\rangle$ から $|i\rangle$ に変化させる演算子

$$\hat{X}_{ij} = |i\rangle\langle j| \otimes \hat{1} \otimes \cdots \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes |i\rangle\langle j| \otimes \hat{1} \otimes \cdots \otimes \hat{1} + \cdots + \hat{1} \otimes \cdots \otimes \hat{1} \otimes |i\rangle\langle j| \quad (4.31)$$

である。 \hat{X}_{ij} を状態 $|\psi_{B, i_1, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{n_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{n_j}, \dots, i_N}\rangle$ に作用させると、 n_j 個あるモード j の粒子のうちのどれか一つがモード i に変化するので

$$\hat{X}_{ij} |\psi_{B, i_1, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{n_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{n_j}, \dots, i_N}\rangle = n_j |\psi_{B, i_1, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{n_i+1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{n_j-1}, \dots, i_N}\rangle \quad (4.32)$$

となる。一方、 $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$ を状態 $\hat{a}_{i_1}^\dagger \cdots (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i} \cdots (\hat{a}_j^\dagger)^{n_j} \cdots \hat{a}_{i_N}^\dagger |0\rangle$ ($i \neq j$) に作用させると、

$$\begin{aligned} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j) \hat{a}_{i_1}^\dagger \cdots (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i} \cdots (\hat{a}_j^\dagger)^{n_j} \cdots \hat{a}_{i_N}^\dagger |0\rangle &= \hat{a}_{i_1}^\dagger \cdots (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i+1} \cdots \hat{a}_j (\hat{a}_j^\dagger)^{n_j} \cdots \hat{a}_{i_N}^\dagger |0\rangle \\ &= n_j \hat{a}_{i_1}^\dagger \cdots (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i+1} \cdots (\hat{a}_j^\dagger)^{n_j-1} \cdots \hat{a}_{i_N}^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (4.33)$$

となる。ここで $[\hat{a}_j, (\hat{a}_j^\dagger)^{n_j}] = n_j(\hat{a}_j^\dagger)^{n_j-1}$ より $\hat{a}_j(\hat{a}_j^\dagger)^{n_j}|0\rangle = n_j(\hat{a}_j^\dagger)^{n_j-1}|0\rangle + (\hat{a}_j^\dagger)^{n_j}\hat{a}_j|0\rangle = n_j(\hat{a}_j^\dagger)^{n_j-1}|0\rangle$ であることを使った。第一量子化と第二量子化の記法の対応

$$|\psi_{B,i_1,\dots,i_{n_i},\dots,j_{n_j},\dots,i_N}\rangle \xleftrightarrow{\rho} \hat{a}_{i_1}^\dagger \cdots (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i} \cdots (\hat{a}_j^\dagger)^{n_j} \cdots \hat{a}_{i_N}^\dagger |0\rangle \quad (4.34)$$

を使うと、演算子の間の対応

$$\hat{X}_{ij} \xleftrightarrow{\rho} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \quad (4.35)$$

が得られる。演算子 $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$ は状態 j の粒子を消滅させて状態 i の粒子を生成するので、1 粒子の状態を j から i にまさに変化させている。以上より 1 体の演算子は第二量子化の記法で

$$\hat{O}^{(1)} = \sum_{ij} O_{ij}^{(1)} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \quad (4.36)$$

と表されることがわかった。すなわち 1 体の演算子は生成消滅演算子の双 1 次な形で書ける。

このことは 2 体以上の演算子についても同様に成り立つ。2 粒子に働く演算子を $\hat{O}^{(2)}$ とする。 $\hat{O}^{(2)}$ は第一量子化の記法で

$$\begin{aligned} \hat{O}^{(2)} = & \sum_{ijkl} O_{ij,kl}^{(2)} |i\rangle\langle k| \otimes |j\rangle\langle l| \otimes \hat{1} \otimes \cdots \otimes \hat{1} + \sum_{ijkl} O_{ij,kl}^{(2)} |i\rangle\langle k| \otimes \hat{1} \otimes |j\rangle\langle l| \otimes \hat{1} \otimes \cdots \otimes \hat{1} \\ & + \cdots + \hat{1} \otimes \cdots \otimes \hat{1} \otimes \sum_{ijkl} O_{ij,kl}^{(2)} |i\rangle\langle k| \otimes |j\rangle\langle l| \end{aligned} \quad (4.37)$$

と表せる。これを第二量子化の記法で書くと

$$\hat{O}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} O_{ij,kl}^{(2)} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l \quad (4.38)$$

となる。2 体の演算子は生成消滅演算子の双 2 次な形で書ける。2 粒子間の相互作用は 2 体の演算子で書けるので第二量子化ではこの形になる。

問 4.5. (4.38) が成り立つことを示せ。

例 4.1. 2 つのボース粒子が同じモード i を占有したときに相互作用エネルギー U を感じるとする。モード i にいる粒子数を n_i とすると、 n_i 個の粒子の中で 2 粒子の組み合わせは $\frac{1}{2}n_i(n_i - 1)$ 通りあるので、合計で相互作用エネルギーは $\frac{U}{2}n_i(n_i - 1)$ となる。1 体の運動項 (4.29) に加えてこのような相互作用を持つボース粒子系は

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \quad (4.39)$$

というハミルトニアンで記述される。ある結晶格子上をボース粒子が運動するとして、1 粒子の状態 i を i 番目の格子点を占有する状態とみなせば、ハミルトニアン (4.39) で記述される系は Bose-Hubbard 模型とよばれる。これは真空中でレーザー光を使って原子の集合をトラップして極低温まで冷却した冷却原子系によって実験的に実現されている。超流動-Mott 絶縁体転移という相転移を示すモデルとして知られている。

問 4.6. ハミルトニアン (4.39) で記述される系を考える。 $N = 2, M = 2$ として ε_i, t_{ij} は i や j によらないとする。ハミルトニアンを対角化して固有エネルギーを求めよ。

ヒント: 対称性に着目する。

付録 A S 行列の補足

ここでは S 行列と位相のずれの関係について示す。 S 行列と T 行列の関係は

$$S_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - 2\pi i \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) T_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \quad (\text{A.1})$$

となっていた (式 (2.156))。 T 行列と散乱振幅の関係 (2.149) を代入すると

$$S_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + 2\pi i \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) \frac{2\pi \hbar^2}{m} \frac{1}{(2\pi)^3} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (\text{A.2})$$

となる。さらに散乱振幅の部分波展開 (2.70) を代入して

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} &= \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + 2\pi i \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) \frac{2\pi \hbar^2}{m} \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') \\ &= \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \frac{1}{4\pi k^2} \delta(k - k') \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

と表せることがわかる。ここで $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$, $\hat{\mathbf{k}}' = \mathbf{k}'/k'$ は長さ 1 のベクトルであり、球面上を動く。

球面上の関数は球面調和関数を使って展開することができる。球面調和関数は正規直交完全系をなすため、そこで S 行列を球面調和関数を基底に取って行列表示しよう。 S 行列の行列要素を

$$\int d\Omega d\Omega' Y_{l',m'}^*(\hat{\mathbf{k}}') S_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} Y_{l,m}(\hat{\mathbf{k}}) = \frac{1}{k^2} \delta(k - k') S_{l'm',lm} \quad (\text{A.4})$$

で定義する。ここで $\frac{1}{k^2} \delta(k - k')$ はデルタ関数を球座標表示したときの動径方向の成分である。

$$\delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{k^2 \sin \theta} \delta(k - k') \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi') \quad (\text{A.5})$$

この表示から、デルタ関数の行列要素が

$$\begin{aligned}
 & \int d\Omega d\Omega' Y_{l',m'}^*(\hat{\mathbf{k}}') \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') Y_{l,m}(\hat{\mathbf{k}}) \\
 &= \int d\Omega d\Omega' Y_{l',m'}^*(\hat{\mathbf{k}}') \frac{1}{k^2 \sin \theta} \delta(k - k') \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi') Y_{l,m}(\hat{\mathbf{k}}) \\
 &= \frac{1}{k^2} \delta(k - k') \int d\Omega Y_{l',m'}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{l,m}(\hat{\mathbf{k}}) \\
 &= \frac{1}{k^2} \delta(k - k') \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

と求まる。一方で (A.3) の Legendre 多項式については、球面調和関数の加法定理

$$P_l(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}') Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}) \tag{A.7}$$

を用いると、行列要素は

$$\begin{aligned}
 & \int d\Omega d\Omega' Y_{l',m'}^*(\hat{\mathbf{k}}') P_{l''}(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') Y_{l,m}(\hat{\mathbf{k}}) \\
 &= \sum_{m''=-l''}^{l''} \int d\Omega d\Omega' Y_{l',m'}^*(\hat{\mathbf{k}}') \frac{4\pi}{2l''+1} Y_{l''m''}(\hat{\mathbf{k}}') Y_{l''m''}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{l,m}(\hat{\mathbf{k}}) \\
 &= \sum_{m''=-l''}^{l''} \frac{4\pi}{2l''+1} \delta_{l',l''} \delta_{m',m''} \delta_{l,l''} \delta_{m,m''} = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{l,l'} \delta_{l',l''} \delta_{m,m'}
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

となる。よって球面調和関数を基底に取ったときの S 行列の行列要素は

$$\begin{aligned}
 & \int d\Omega d\Omega' Y_{l',m'}^*(\hat{\mathbf{k}}') S_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} Y_{l,m}(\hat{\mathbf{k}}) \\
 &= \frac{1}{k^2} \delta(k - k') \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} + \frac{1}{4\pi k^2} \delta(k - k') \sum_{l''} (2l''+1) (e^{2i\delta_{l''}} - 1) \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{l,l''} \delta_{l',l''} \delta_{m,m'} \\
 &= \frac{1}{k^2} \delta(k - k') \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} + \frac{1}{k^2} \delta(k - k') (e^{2i\delta_l} - 1) \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \\
 &= \frac{1}{k^2} \delta(k - k') e^{2i\delta_l} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}
 \end{aligned} \tag{A.9}$$

である。動径方向のデルタ関数を除くと行列要素は

$$S_{l'm',lm} = e^{2i\delta_l} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \tag{A.10}$$

と表される。

参考文献

- [1] 猪木慶治, 川合光: 量子力学 I, II (講談社サイエンティフィック)
- [2] J. J. サクライ: 現代の量子力学 (上, 下) (吉岡書店)
- [3] J. J. Sakurai and Jim Napolitano, *Modern Quantum Mechanics (Third Edition)* (Cambridge University Press)
- [4] S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics (Second Edition)* (Cambridge University Press)
- [5] 中原幹夫: 理論物理学のための幾何学とトポロジー I, II (日本評論社)
- [6] 新井朝雄, 江沢洋: 量子力学の数学的構造 I, II (朝倉書店)
- [7] 森口繁一, 宇多川久, 一松 信: 岩波数学公式 III 特殊函数 (岩波書店)