Quantum Mechanics

1997 年 4 月　© 倉澤治樹

目 次

1　ブラ・ケットによる量子力学の定式化

ディラック	量子力学 (岩波書店) §6 ∼ §20
メシア	量子力学 (東京図書) 第 7, 8 章
J. J. Sakurai	現代の量子力学 (吉岡書店) 第 1 章

1.1　ブラベクトルとケットベクトル

量子力学の状態は, 複素ベクトル空間内のベクトルとして表現できる。その次元は考える物理系の性質で決まる。状態ベクトルを普通のベクトルと同様に $\boldsymbol{\alpha}$, $\vec{\alpha}$ などで表わしてもよい。しかし, 量子力学を定式化する場合, ディラックにより導入されたブラとケットの表記法を用いた方が, 簡潔で見通しのよい方法を与える。状態ベクトルを $|\alpha\rangle$ と書く。ただし, α は複数のベクトルを区別するための目印である。このベクトルを**ケットベクトル** (ket vector) という。ケットベクトルは物理状態の情報を完全に含んでいると仮定する。ケットベクトルからどのようにして物理情報を引き出すかは次第に明らかになる。ここでは, $|\alpha\rangle$ なる抽象的なもので量子力学の状態が記述できるということを認めればよい。

あるケットベクトル $|\beta\rangle$ が

$$|\beta\rangle = c_1|\alpha_1\rangle + c_2|\alpha_2\rangle + c_3|\alpha_3\rangle + \cdots, \quad (c_1, c_2, c_3, \cdots \text{ は複素数 })$$

のようにいくつかのケットの 1 次結合として表わせるとき, $|\beta\rangle$ は $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, |\alpha_3\rangle, \cdots$ に**従属している**という。また, 1 組のケットが**独立である**とは, そのうちのどの 1 つを取っても, それが他の 1 次結合で表わされない場合である。ここで次の仮定をする。

1. どんな物理状態も 1 つのケットベクトルに対応する。状態が他の幾つかの状態の重ね合わせである場合, その状態に対応するケットもそれらの幾つかの状態に対応するケットの 1 次結合として表わされ, そしてこの逆も成り立つ。
2. ある状態をそれ自身と重ね合わせても, もとの状態が再び現れるにすぎない。もとの状態を表わすケットを $|\alpha\rangle$ とすると, それ自身と重ね合わせた状態は

   $$c_1|\alpha\rangle + c_2|\alpha\rangle = (c_1 + c_2)|\alpha\rangle, \quad (c_1, c_2 \text{ は複素数 })$$

   である。したがって, ケットにゼロでない任意の複素数を掛けたケットは前と同じ状態を表わし, 物理状態はケットの大きさに依らずに方向だけで決まる。ケットにゼロをかけてできるケットを**零ケット**という。

ケットベクトル空間と対をなす別のベクトル空間が存在することを要請する。この空間のベクトルを**ブラベクトル** (bra vector) と呼ぶ。任意のケット $|\alpha\rangle$ に対して, $\langle\alpha|$ と書かれる 1 つのブラが対応する。この対応を**双対対応** (dual correspondence) といい

$$|\alpha\rangle \overset{\text{DC}}{\longleftrightarrow} \langle\alpha|, \quad |\alpha\rangle + |\beta\rangle \overset{\text{DC}}{\longleftrightarrow} \langle\alpha| + \langle\beta| \tag{1.1}$$

などで表わす。$c|\alpha\rangle$ に対応するブラベクトルは, $c\langle\alpha|$ ではなく $c^*\langle\alpha|$ とする:

$$c|\alpha\rangle \overset{\text{DC}}{\longleftrightarrow} c^*\langle\alpha| \tag{1.2}$$

ここで, c^* は c の共役複素数である。双対対応は列ベクトルと行ベクトル

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \Longleftrightarrow (\,\alpha_1^* \quad \alpha_2^* \quad \alpha_3^* \quad \cdots\,)$$

の関係に似ている。これはあくまで類似であり, ある場合には正しい。ブラとケットは別空間のベクトルであるから, $|\alpha\rangle + \langle\beta|$ などは無意味である。

内積をブラベクトルとケットベクトルから作られる複素数であると定義する。ブラベクトルが $\langle\alpha|$, ケットベクトルが $|\beta\rangle$ のとき, 内積を $\langle\alpha|\beta\rangle$ で表わす。上の行列との対応関係で言えば

$$(\,\alpha_1^* \quad \alpha_2^* \quad \alpha_3^* \quad \cdots\,)\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \alpha_1^*\beta_1 + \alpha_2^*\beta_2 + \alpha_3^*\beta_3 + \cdots$$

を考えることに相当する。内積の基本的性質として次のことを要請する。

1. $\langle\alpha|\Big(c\,|\beta\rangle + c'|\beta'\rangle\Big) = c\,\langle\alpha|\beta\rangle + c'\langle\alpha|\beta'\rangle\,, \quad \Big(c\,\langle\beta| + c'\langle\beta'|\Big)|\alpha\rangle = c\,\langle\beta|\alpha\rangle + c'\langle\beta'|\alpha\rangle$
2. $\langle\alpha|\alpha\rangle$ は実数で
$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0 \quad (\text{等号は}\ |\alpha\rangle\ \text{が零ケットのときのみ})$$
が成り立つとする。$\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$ を $|\alpha\rangle$ の**ノルム**という。
3. $|\beta\rangle = c|\alpha\rangle$ とすると $\langle\beta| = c^*\langle\alpha|$ であるから $\langle\beta|\alpha\rangle = c^*\langle\alpha|\alpha\rangle$ である。$\langle\alpha|\alpha\rangle$ は実数であるから
$$\langle\beta|\alpha\rangle^* = c\,\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle$$
となる。そこで, 一般に任意のベクトルに対して
$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^* \tag{1.3}$$
とする。これは通常の実ベクトルの内積 $\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$ と異なる点である。

$|\alpha\rangle$ が零ケットでないとき,

$$|\alpha'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}}\,|\alpha\rangle$$

とすると $\langle\alpha'|\alpha'\rangle = 1$ である。ノルムが 1 であるケットを**規格化** (normalization) されたケットという。物理状態はケットの方向だけで決まるから, 物理状態を表わすケットとして規格化されたケットを使う。$\langle\alpha|\beta\rangle = 0$ であるとき, 2 つのベクトルは**直交**しているという。

1.2　演算子

量子力学では, 粒子の位置や運動量などの力学変数は, ベクトルに作用し別のベクトルを作る**演算子** (operator) として表わされる。演算子 X はケットベクトルには**左側から**作用し

$$X|\alpha\rangle$$

その結果は $|\alpha\rangle$ と異なるケットになる。ブラベクトルには**右側から**作用し

$$\langle\alpha|X$$

別のブラになる。X が単なる数という場合以外, $|\alpha\rangle X$, $X\langle\alpha|$ は意味のないものである。演算子の基本的性質を以下に挙げる:

1. 演算子 X と Y が等しいとは, 任意のケット $|\alpha\rangle$ あるいはブラ $\langle\alpha|$ に対して

   $$X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle \quad \text{または} \quad \langle\alpha|X = \langle\alpha|Y$$

   が成り立つことである。
2. 時間反転の演算子を除くと, 演算子は線形である。つまり, c_α と c_β を複素数とするとき

   $$X\Big(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle\Big) = c_\alpha X|\alpha\rangle + c_\beta X|\beta\rangle\,, \qquad \Big(c_\alpha\langle\alpha| + c_\beta\langle\beta|\Big)X = c_\alpha\langle\alpha|X + c_\beta\langle\beta|X$$

   が成り立つ。時間反転の演算子 T に対しては

   $$T\Big(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle\Big) = c_\alpha^* T|\alpha\rangle + c_\beta^* T|\beta\rangle$$

   としなければならないが, この講義では扱わない。
3. 演算子の積もまた演算子である。

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

   で積 XY を定義する。この定義から, 上の式は括弧を取り除いて単に $XY|\alpha\rangle$ と表わせる。
4. ブラベクトル $\langle\alpha|$ とケットベクトル $X|\beta\rangle$ の内積は, ブラベクトル $\langle\alpha|X$ とケットベクトル $|\beta\rangle$ の内積に等しいとする:

   $$\langle\alpha|\,(X|\beta\rangle) = (\langle\alpha|X)\,|\beta\rangle$$

   したがって, 上の両辺は $\langle\alpha|X|\beta\rangle$ としてよい。
5. 一般に積の順序は交換できない。つまり

   $$XY \neq YX$$

   である。$XY = YX$ が成り立つ特別な場合, X と Y は**交換する** (commute) という。
6. 積の交換則を除く代数の法則は成り立つとする。

   $$X + Y = Y + X\,, \quad X + (Y + Z) = (X + Y) + Z\,, \quad X\,(YZ) = (XY)\,Z = XYZ$$

エルミート共役　ケット $X|\alpha\rangle$ に対応するブラは一般に $\langle\alpha|X$ ではない。ここで, 演算子 $X^\dagger$ を

$$X|\alpha\rangle \overset{\text{DC}}{\longleftrightarrow} \langle\alpha|X^\dagger \tag{1.4}$$

で定義する。$X^\dagger$ を X の**エルミート共役** (Hermitian conjugate) という。$X = X^\dagger$ であるとき, X は**エルミート** (Hermitian) であるという。エルミート共役は複素共役と似ている。演算子 X がただの数という特別な場合, (1.2) と (1.4) から $X^\dagger = X^*$ である。

1. 演算子の積のエルミート共役

$$(XY)\,|\alpha\rangle \stackrel{\mathrm{DC}}{\longleftrightarrow} \langle\alpha|\,(XY)^\dagger$$

及び

$$(XY)\,|\alpha\rangle = X\,(Y|\alpha\rangle) \stackrel{\mathrm{DC}}{\longleftrightarrow} \left(\langle\alpha|Y^\dagger\right)X^\dagger = \langle\alpha|Y^\dagger X^\dagger$$

から

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger \tag{1.5}$$

になる。これを n 個の演算子の積に拡張するのは簡単である。

2. $|\gamma\rangle = X|\beta\rangle$ とすると, $\langle\gamma| = \langle\beta|X^\dagger$ である。したがって, (1.3) から

$$\langle\beta|X^\dagger|\alpha\rangle = \langle\gamma|\alpha\rangle = \langle\alpha|\gamma\rangle^* = \langle\alpha|X|\beta\rangle^* \tag{1.6}$$

である。

3. (1.6) から

$$\langle\beta|\left(X^\dagger\right)^\dagger|\alpha\rangle = \langle\alpha|X^\dagger|\beta\rangle^* = \langle\beta|X|\alpha\rangle$$

つまり

$$\left(X^\dagger\right)^\dagger = X$$

である。

4. ブラとケットの積 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ を考える。ブラとケットに対する作用を

$$\Big(|\alpha\rangle\langle\beta|\Big)|\gamma\rangle = |\alpha\rangle\langle\beta|\gamma\rangle\,, \quad \langle\gamma|\Big(|\alpha\rangle\langle\beta|\Big) = \langle\gamma|\alpha\rangle\langle\beta|$$

で定義する。$|\alpha\rangle\langle\beta|$ はケット $|\gamma\rangle$ から $|\alpha\rangle$ に数 $\langle\beta|\gamma\rangle$ を掛けたケットを作る。ブラの場合も同様である。したがって, $|\alpha\rangle\langle\beta|$ は演算子である。この演算子のエルミート共役は

$$\Big(|\alpha\rangle\langle\beta|\Big)|\gamma\rangle = |\alpha\rangle\langle\beta|\gamma\rangle \stackrel{\mathrm{DC}}{\longleftrightarrow} \langle\beta|\gamma\rangle^*\,\langle\alpha| = \langle\gamma|\beta\rangle\langle\alpha| = \langle\gamma|\Big(|\beta\rangle\langle\alpha|\Big)$$

から

$$\Big(|\alpha\rangle\langle\beta|\Big)^\dagger = |\beta\rangle\langle\alpha|$$

となる。

1.3　固有値と固有ベクトル

演算子 A が与えられたとき次の方程式を考える:

$$A|a\rangle = a|a\rangle \tag{1.7}$$

ここで a は単なる数である。かってな $|\alpha\rangle$ に対して $A|\alpha\rangle$ が $|\alpha\rangle$ の定数倍になるわけではない。(1.7) はある特別な $|a\rangle$ について成り立つ。a を演算子 A あるいはそれに対応する力学変数の**固有値** (eigenvalue) といい, $|a\rangle$ を**固有ケット**という。また, 固有ケット $|a\rangle$ は固有値 a に**属する**という。(1.7) を満たす固有値 a と固有ケット $|a\rangle$ を求めることは量子力学の基本的な問題である。

量子力学では, 通常, 演算子としてエルミート演算子 ($A^\dagger = A$) を扱う。以下, エルミート演算子を考える。エルミート演算子の次の 2 つの性質は重要である。

1. エルミート演算子の固有値は実数である。
   (1.7) と $\langle a|$ との内積をとると $\langle a|A|a\rangle = a\langle a|a\rangle$ である。この両辺の複素共役をとり, (1.3) と $\langle a|a\rangle$ が実数であることを使うと
   $$a^*\langle a|a\rangle = \langle a|A|a\rangle^* = \langle a|A^\dagger|a\rangle = \langle a|A|a\rangle = a\langle a|a\rangle$$
   である。したがって, $a = a^*$ になるから, a は実数である。
2. エルミート演算子の異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する。
   A の 2 つの固有値を a, a' とする:
   $$A|a\rangle = a|a\rangle \tag{1.8}$$
   $$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \tag{1.9}$$
   $A^\dagger = A$ 及び a' が実数であることを使うと, 2 番目の式から
   $$\langle a'|A = a'\langle a'| \tag{1.10}$$
   (1.8) に $\langle a'|$ を掛けると $\langle a'|A|a\rangle = a\langle a'|a\rangle$ であり, (1.10) に $|a\rangle$ を掛けると $\langle a'|A|a\rangle = a'\langle a'|a\rangle$ である。この 2 式の差をとると
   $$(a - a')\langle a'|a\rangle = 0$$
   したがって, $a \neq a'$ ならば $\langle a'|a\rangle = 0$ であり, $|a\rangle$ と $|a'\rangle$ は直交する。クロネッカーのデルタ記号
   $$\delta_{a'\,a} = \begin{cases} 1\,, & a' = a \text{ のとき} \\ 0\,, & a' \neq a \text{ のとき} \end{cases}$$
   を用いれば, 直交性は
   $$\langle a'|a\rangle = \delta_{a'\,a}\langle a|a\rangle$$
   となる。固有ケットが $\langle a|a\rangle = 1$ と規格化されているならば
   $$\langle a'|a\rangle = \delta_{a'\,a} \tag{1.11}$$
   である。

物理系を数学的に表現するために, これまでいくつかの仮定を設けた。この様な理論形式が自然を記述するには, 観測結果と数学的形式を結び付ける必要がある。そこで, 以下のような仮定を更に設定する:

1. 力学変数 A を観測すると, 系の状態は A の様々な固有状態の中のある 1 つに跳び移る。このとき, その固有状態の固有値が A の観測値になる。どの固有状態になるかはあらかじめ分らないが, ある固有値 a を得る確率は
   $$|\langle a|\alpha\rangle|^2$$
   で与えられる。ここで, $|\alpha\rangle$ は観測前の系の状態ベクトルであり, $|a\rangle$, $|\alpha\rangle$ は規格化されているとする。
2. 観測値は常に実数であるから, 固有値は実数でなければならない。これは, 力学変数がエルミートであれば満たされる。そこで, 力学変数はエルミートであると仮定する。

3. 力学変数の固有ケットの組みは**完全系** (complete system) をなす, つまり, 任意のケットは固有ケットだけで展開できると仮定する。この仮定から, 系の状態ベクトル $|\alpha\rangle$ は

$$|\alpha\rangle = \sum_a c_a |a\rangle \tag{1.12}$$

と表わせる。(1.11) を使うと

$$\langle a|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} \langle a|a'\rangle = \sum_{a'} c_{a'} \delta_{a\,a'} = c_a \tag{1.13}$$

になるから, 観測値が a である確率は $|c_a|^2$ である。任意の固有状態へ跳び移れる可能性を保証するには, (1.12) の展開はすべての固有ケットを含まねばならない。このため, 固有ケットの組みが完全系をなすという仮定が必要になる。

2. と 3. の条件を満たす力学変数を特に**観測量**とか**オブザーバブル** (observable) とよぶ。

(1.13) を (1.12) に代入すると

$$|\alpha\rangle = \sum_a \langle a|\alpha\rangle |a\rangle = \left(\sum_a |a\rangle\langle a| \right) |\alpha\rangle$$

$|\alpha\rangle$ は任意のケットであるから

$$\sum_a |a\rangle\langle a| = 1 \tag{1.14}$$

である。これを**完備性** (completeness) といい, A の固有ケットの組みが完全系であることを表わす。完備性を使うと, すべての確率の和は

$$\sum_a |\langle a|\alpha\rangle|^2 = \sum_a \langle\alpha|a\rangle\langle a|\alpha\rangle = \langle\alpha| \left(\sum_a |a\rangle\langle a| \right) |\alpha\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle = 1$$

となる。また, $|\alpha\rangle$ における A の期待値 (平均値) $\langle A\rangle_\alpha$ は

$$\langle A\rangle_\alpha = \sum_a a|\langle a|\alpha\rangle|^2 = \sum_a a\langle\alpha|a\rangle\langle a|\alpha\rangle = \sum_a \langle\alpha|A|a\rangle\langle a|\alpha\rangle = \langle\alpha|A|\alpha\rangle \tag{1.15}$$

である。

(1.11) と (1.14) は固有ケットの組みが完全規格直交系であることを表わす。完全規格直交系をなすケットの組みは, ユークリッド空間における互いに直交する単位ベクトル $\boldsymbol{e}_i$ の組みと同じ役割をする。固有ケットの規格直交性 (1.11) は, 単位ベクトル $\boldsymbol{e}_i$ の規格直交性 $\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{e}_j = \delta_{ij}$ に対応する。任意のベクトル $\boldsymbol{A}$ は

$$\boldsymbol{A} = \sum_i A_i \boldsymbol{e}_i\,, \quad A_i = \boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{A}$$

と展開できるから

$$\boldsymbol{A} = \sum_i \boldsymbol{e}_i\,(\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{A})$$

となる。これに対応するのは

$$|\alpha\rangle = \sum_a |a\rangle\langle a|\alpha\rangle$$

である。完全規格直交系をなす固有ケットの組は, 複素ベクトル空間の基底ベクトルをなす。

問 1.1　2 つのケットベクトル $|1\rangle$, $|2\rangle$ が完全規格直交系をなす場合を考える。E_0, λ を実数の定数としたとき

$$H = E_0|1\rangle\langle 1| - E_0|2\rangle\langle 2| + \lambda\Big(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1| \Big)$$

とする。ただし $E_0 > 0$ である。

1. 演算子 H がエルミートであることを示せ。
2. $|1\rangle$, $|2\rangle$ は完全系をなすから, H の固有ケットは c_1, c_2 を定数として

$$c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$$

と表わすことができる。H の固有値と固有ケットを求めよ。

問 1.2　2 つのケットベクトル $|+\rangle$, $|-\rangle$ が完全規格直交系をなすとし

$$\sigma_1 = |-\rangle\langle +| + |+\rangle\langle -| \,, \quad \sigma_2 = i\Big(|-\rangle\langle +| - |+\rangle\langle -|\Big) \,, \quad \sigma_3 = |+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|$$

を考える。

1. $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ の固有値と固有ケットを求めよ。
2. 交換関係

$$[\,\sigma_1\,,\,\sigma_2\,] = 2i\sigma_3\,, \quad [\,\sigma_2\,,\,\sigma_3\,] = 2i\sigma_1\,, \quad [\,\sigma_3\,,\,\sigma_1\,] = 2i\sigma_2$$

及び反交換関係

$$\{\,\sigma_i\,,\,\sigma_j\,\} \equiv \sigma_i\,\sigma_j + \sigma_j\,\sigma_i = 2\delta_{ij}$$

が成りたつことを示せ。

1.4　行列表現

行列による表示法を明確にするため, この節だけ完全規格直交系の状態ベクトルを 1,2,$\cdots$ の番号で指定し

$$\alpha_i = \langle\, i|\alpha\rangle\,, \quad X_{ij} = \langle\, i|X|j\rangle\,, \quad i,\, j = 1,\, 2,\, 3,\, \cdots$$

などと記す。基底ケット $|\,i\rangle$ と基底ブラ $\langle\, i|$ を

$$|1\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |2\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \cdots$$

$$\langle 1| \Rightarrow (1 \;\; 0 \;\; 0 \;\; \cdots\,)\,, \quad \langle 2| \Rightarrow (0 \;\; 1 \;\; 0 \;\; \cdots\,)\,, \cdots$$

に対応させると, 一般のブラとケットは次のような行列表現に対応する:

$$|\alpha\rangle = \sum_i |\,i\rangle\,\alpha_i \;\Rightarrow \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv \boldsymbol{\alpha}\,, \qquad \langle\alpha| = \sum_i \langle\, i|\,\alpha_i^* \;\Rightarrow (\alpha_1^* \;\;\; \alpha_2^* \;\;\; \cdots\,) = \boldsymbol{\alpha}^\dagger$$

演算子は $\sum_i |\,i\rangle\langle i| = 1$ より

$$X = \sum_{ij} |\,i\rangle\langle i|X|j\rangle\langle j| = \sum_{ij} |\,i\rangle X_{ij}\langle j\,| \Rightarrow \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \cdots \\ X_{21} & X_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \equiv \boldsymbol{X}$$

これらの行列表現を使うと, 例えば

$$\langle\alpha|X|\beta\rangle = \sum_{ij}\langle\alpha|i\rangle\langle i|X|j\rangle\langle j|\beta\rangle = \boldsymbol{\alpha}^\dagger \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}$$

となる。また, $|\beta\rangle = X|\alpha\rangle$ は $\langle i|\beta\rangle = \langle i|X|\alpha\rangle = \sum_j \langle i|X|j\rangle\langle j|\alpha\rangle$ より

$$\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\alpha}$$

となる。ブラ, ケット, 演算子の代数関係は対応する行列表現で表わすことができる。

基底 $|\,i\rangle$ としてオブザーバブル A の固有ケット $A|\,i\rangle = a_i\,|\,i\rangle$ を考えると

$$A_{ij} = \langle\, i|A|\, j\rangle = a_i\,\delta_{ij}$$

であるから A は対角行列になる。A の固有値と固有ベクトルを求めることは, 行列の言葉でいえば, A に対応する行列を対角化することである。

問 1.3　演算子 X のエルミート共役 $X^\dagger$ の行列表現を $\boldsymbol{Y}$ とする。$\boldsymbol{Y}$ は $\boldsymbol{X}$ のエルミート共役, つまり $Y_{ij} = X^*_{ji}$ であることを示せ。

問 1.4　**問 1.1** で

$$|1\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

としたとき, H に対応する行列を求めよ。また, H の固有ケットを基底としたときについても求めよ。

1.5　交換する観測量

2 つの観測量 A, B が交換する場合を考える。$AB - BA = 0$ であるから

$$\langle a'|AB - BA|a\rangle = (a' - a)\langle a'|B|a\rangle = 0$$

したがって,

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

である。両辺に $|a'\rangle$ を掛け a' について和をとると

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

(1.14) を使うと

$$B|a\rangle = |a\rangle\langle a|B|a\rangle$$

となる。したがって, $|a\rangle$ は A の固有ケットであると同時に, 固有値が $b = \langle a|B|a\rangle$ である B の固有ケットでもある。A と B の同時固有ケットであること明確にするために, $|a,b\rangle$ と書くことにする。

$$A|a,b\rangle = a|a,b\rangle\,, \quad B|a,b\rangle = b|a,b\rangle$$

である。

固有値 a に属する固有ケットが 1 つしかない場合, 固有ケットは $|a\rangle$ と書けば一意に指定できるから, $|a,b\rangle$ の b は必要ない。しかし, 1 次独立な 2 つ以上の固有ケットが同じ固有値 a に属する場合 (**縮退** (degeneracy) しているという), 縮退した各々の固有ケットの b は一般には異なるから, b を指定することで縮退した固有ケットを区別できる。a と b を指定すると $|a,b\rangle$ がただ一つに決まるとき, 規格直交性と完備性は

$$\langle a,b|a',b'\rangle = \delta_{a\,a'}\delta_{b\,b'}\,, \quad \sum_{a,b}|a,b\rangle\langle a,b| = 1$$

となる。これは, 3 つ以上の互いに交換する観測量がある場合にも一般化できる。交換する観測量の最大の集合が分かったとする。これらの演算子 A, B, C,$\cdots$ の各々の固有値は縮退していてもよいが, 1 つの組み合わせ a, b, c, $\cdots$ を指定すると, A, B, C,$\cdots$ の同時固有ケット $|a,b,c,\cdots\rangle$ がただ 1 つ決まるとする。このとき, 規格直交性と完備性は

$$\langle a,b,c,\cdots|a',b',c',\cdots\rangle = \delta_{a\,a'}\delta_{b\,b'}\delta_{c\,c'}\cdots\,, \quad \sum_{a,b,c,\cdots}|a,b,c,\cdots\rangle\langle a,b,c,\cdots| = 1$$

である。

1.6　ディラックのデルタ関数

次の条件を満たす “関数” $\delta(x)$ を**ディラックのデルタ関数**という:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases}\,, \qquad \int_a^b \delta(x)\,dx = 1 \quad (\,a < 0 < b\,)$$

連続関数 $f(x)$ に対して

$$\int f(x)\,\delta(x-a)\,dx = \int f(a)\,\delta(x-a)\,dx = f(a)\int \delta(x-a)\,dx = f(a)$$

が成り立つ。ただし, 積分範囲は $x = a$ を含む領域である。$x = a$ を含まなければ積分は 0 である。

- デルタ関数の基本的性質を幾つか示すと

$$\delta(x) = \delta(-x) \tag{1.16}$$

$$x\,\delta(x) = 0 \tag{1.17}$$

$$x\,\delta'(x) = -\,\delta(x) \tag{1.18}$$

$$\delta(cx) = \frac{1}{|c|}\,\delta(x)\,, \quad (\,c \neq 0\,) \tag{1.19}$$

$$\delta(x^2 - c^2) = \frac{1}{2|c|}\Big(\delta(x-c) + \delta(x+c)\Big)\,, \quad (\,c \neq 0\,) \tag{1.20}$$

$$\delta(g(x)) = \sum_n \frac{1}{|g'(x_n)|}\,\delta(x - x_n)\,, \quad (\,g(x_n) = 0\,,\ g'(x_n) \neq 0\,) \tag{1.21}$$

である。ここで $\delta'(x)$ は $\delta(x)$ の 1 階導関数である。これらの等式の意味することは, 両辺にかってな連続関数を掛け積分すると同じ結果を与えるということである。(1.21) では, $g(x)$ のすべての零点について和をとる。$g(x)$ と $g'(x)$ が同時に 0 になる場合, $\delta(g(x))$ は意味をもたない。(1.19), (1.20) は (1.21) の具体例である。
(1.16), (1.17) は明らかであろう。(1.18) を証明してみる。$a<0<b$ として, 部分積分を使うと

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)x\delta'(x)\,dx &= \Big[f(x)x\delta(x)\Big]_a^b - \int_a^b \Big(f(x)x\Big)'\delta(x)\,dx \\ &= -\int_a^b \Big(f'(x)x + f(x)\Big)\delta(x)\,dx \\ &= -f(0)\end{aligned}$$

となるから, (1.18) が成り立つ。

- デルタ関数は関数の極限の形で表わすことができる。1 例として $\varepsilon>0$ として

$$\begin{aligned}\delta_\varepsilon(x) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\exp(ikx-\varepsilon|k|\,) \\ &= \frac{1}{2\pi}\left(\left[\frac{\exp(ikx-\varepsilon k)}{ix-\varepsilon}\right]_0^\infty + \left[\frac{\exp(ikx+\varepsilon k)}{ix+\varepsilon}\right]_{-\infty}^0\right) \\ &= \frac{1}{\pi}\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}\end{aligned}$$

を考えると, $x\neq 0$ のとき $\delta_\varepsilon(x) \xrightarrow{\varepsilon\to 0} 0$ であり, $a<0<b$ に対して

$$\int_a^b dx\,\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{\pi}\left[\tan^{-1}\frac{x}{\varepsilon}\right]_a^b \xrightarrow{\varepsilon\to +0} \frac{1}{\pi}\big(\tan^{-1}(\infty)-\tan^{-1}(-\infty)\big) = 1$$

である。したがって, $\varepsilon\to +0$ の極限では $\delta_\varepsilon(x)$ はデルタ関数 $\delta(x)$ になる:

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to +0}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\exp(ikx-\varepsilon|k|\,) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,e^{ikx}$$

- ヘビサイド関数 (階段関数)

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x\geq 0 \\ 0 & x<0\end{cases}$$

の導関数 $\theta'(x)$ を考える。$x\neq 0$ のとき $\theta'(x)=0$ である。一方, $x=0$ のとき $\theta'(x)$ は通常の関数としては定義できない。しかし, $a<0<b$ とすると $\theta(a)=0$, $\theta(b)=1$ であるから

$$\begin{aligned}\int_a^b \theta'(x)\,f(x)\,dx &= \Big[\theta(x)\,f(x)\Big]_a^b - \int_a^b \theta(x)\,f'(x)\,dx \\ &= f(b) - \int_0^b f'(x)\,dx \\ &= f(b) - \Big(f(b)-f(0)\Big) = f(0)\end{aligned}$$

となる。したがって $\theta'(x)=\delta(x)$ である。

問 1.5　等式 (1.19)～(1.21) を証明せよ。

1.7 連続的固有値

これまで考えてきた観測量は, 固有値が離散的であると仮定してきた。しかし, 位置や運動量などは連続的固有値をとる。ここで, 離散的固有値で得られた結果を連続的な場合に拡張する。

連続的固有値をとる観測量を Q, 固有値を q とする。固有値方程式 (1.7) は

$$Q|q\rangle = q|q\rangle$$

である。ここで $f(q)$ と $g(q)$ を連続関数として

$$|\alpha\rangle = \int dq\, f(q)|q\rangle\,, \quad |\beta\rangle = \int dq\, g(q)|q\rangle \tag{1.22}$$

を考える。積分範囲は固有値 q が存在する領域である。内積は

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \int dq\, f^*(q)\int dq'\, g(q')\langle q|q'\rangle = \int dq\, f^*(q)G(q)\,, \quad G(q) = \int dq'\, g(q')\langle q|q'\rangle$$

となる。離散的固有値の場合と同様に, $q' = q$ を除いて $\langle q|q'\rangle = 0$ である。したがって, $\langle q|q\rangle$ が有限ならば $G(q) = 0$ になり, 常に $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$ となってしまう。$\langle\alpha|\beta\rangle$ がゼロ以外の値を取りうるためには, $\langle q|q\rangle$ は無限大であってしかも $G(q)$ を有限にする程度のものでなければならない。このため, 連続的固有値の場合の固有ケットの規格化は, (1.11) のクロネッカー記号の代わりにディラックのデルタ関数を使い

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q - q') \tag{1.23}$$

とする。すると $G(q) = g(q)$ であるから

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \int dq\, f^*(q)\, g(q)$$

となり, ゼロ以外の値になりうる。

$|q\rangle$ が完全系であるならば, 任意のケット $|\alpha\rangle$ は (1.22) の様に展開できる。このとき

$$\langle q|\alpha\rangle = \int dq'\, f(q')\langle q|q'\rangle = \int dq'\, f(q')\delta(q-q') = f(q)$$

これから

$$|\alpha\rangle = \int dq\, |q\rangle f(q) = \int dq\, |q\rangle\langle q|\alpha\rangle$$

つまり

$$\int dq\, |q\rangle\langle q| = 1 \tag{1.24}$$

となる。これが連続的固有値の場合の完備性である。

離散的固有値をもつ観測量 A を観測して固有値 a を得る確率は $|\langle a|\alpha\rangle|^2$ とした。ただし $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ である。連続的固有値の場合, Q を観測したとき観測値が q と $q + dq$ の微小区間に見い出される確率は

$$|\langle q|\alpha\rangle|^2 dq$$

で与えられるとする。完備性 (1.24) から全確率は

$$\int dq\, |\langle q|\alpha\rangle|^2 = \int dq\, \langle\alpha|q\rangle\langle q|\alpha\rangle = \langle\alpha|\left(\int dq\, |q\rangle\langle q|\right)|\alpha\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle = 1$$

である。Q の期待値 $\langle Q\rangle_\alpha$ は

$$\begin{aligned}\langle Q\rangle_\alpha &= \int dq\, q|\langle q|\alpha\rangle|^2 = \int dq\, q\langle\alpha|q\rangle\langle q|\alpha\rangle \\ &= \int dq\,\langle\alpha|Q|q\rangle\langle q|\alpha\rangle = \langle\alpha|Q\left(\int dq\,|q\rangle\langle q|\right)|\alpha\rangle \\ &= \langle\alpha|Q|\alpha\rangle\end{aligned}$$

となり, 離散的固有値の場合の結果 (1.15) に一致する。

1.8　位置と運動量

簡単のため 1 次元を考える。位置演算子を $\hat{x}$ とし, 運動量演算子を $\hat{p}$ で表わす。ここでは演算子と固有値を区別するため, 演算子にハット $\hat{}$ を付けた。$\hat{x}$ と $\hat{p}$ の交換関係は

$$[\hat{x},\hat{p}\,] \equiv \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar \tag{1.25}$$

である。位置演算子 $\hat{x}$ の固有ケット $|x\rangle$

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle\,, \quad \langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$$

は完全系を作ると仮定する。$\hat{x}$ は演算子であるが, x は固有値であり単なる数である。

(1.25) から

$$[\hat{x},\hat{p}^2\,] = \hat{p}\,[\hat{x},\hat{p}\,] + [\hat{x},\hat{p}\,]\hat{p} = 2i\hbar\,\hat{p}\,, \qquad [\hat{x},\hat{p}^3\,] = \hat{p}\,[\hat{x},\hat{p}^2\,] + [\hat{x},\hat{p}\,]\hat{p}^2 = 3i\hbar\,\hat{p}^2$$

同様に $[\hat{x},\hat{p}^n\,] = n\,i\hbar\,\hat{p}^{n-1}$ であるから, 一般に

$$[\hat{x},F(\hat{p})] = i\hbar F'(\hat{p})$$

である。ただし $F'(x)$ は $F(x)$ の導関数である。特に, $S(x) = e^{-i\alpha x/\hbar}$ とすると

$$[\hat{x},S(\hat{p})] = \alpha S(\hat{p})$$

これから

$$\Big(\hat{x}S(\hat{p}) - S(\hat{p})\hat{x}\Big)|x\rangle = \hat{x}F(\hat{p})|x\rangle - xS(\hat{p})|x\rangle = \alpha S(\hat{p})|x\rangle$$

したがって

$$\hat{x}S(\hat{p})|x\rangle = (x+\alpha)\,S(\hat{p})|x\rangle$$

$S(\hat{p})|x\rangle$ は $\hat{x}$ の固有ケットで固有値は $x+\alpha$ であるから

$$S(\hat{p})|x\rangle = |x+\alpha\rangle$$

になる。$\alpha\to 0$ のとき $S(\hat{p}) = 1 - i\alpha\hat{p}/\hbar$ であるから

$$\hat{p}\,|x\rangle = i\hbar\frac{|x+\alpha\rangle - |x\rangle}{\alpha} = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}|x\rangle$$

したがって

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x|x'\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x-x') = -\,i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x') \tag{1.26}$$

である。 $\partial_x = \dfrac{\partial}{\partial x}$ と略記すると

$$\begin{aligned}\langle x|\,\hat{p}^2\,|x'\rangle &= \int dy\,\langle x|\,\hat{p}\,|y\rangle\langle y|\,\hat{p}\,|x'\rangle = (-i\hbar)^2\int dy\Big(\partial_x\delta(x-y)\Big)\partial_y\delta(y-x') \\ &= (-i\hbar)^2\partial_x\int dy\,\delta(x-y)\partial_y\delta(y-x') \\ &= (-i\hbar\partial_x)^2\,\delta(x-x')\end{aligned}$$

同様にして

$$\langle x|\,\hat{p}^n\,|x'\rangle = (-i\hbar\partial_x)^n\,\delta(x-x')$$

となる。一般に演算子 $F(\hat{p})$ に対しては

$$\langle x|F(\hat{p})|x'\rangle = F\left(-i\hbar\partial_x\right)\delta(x-x') \tag{1.27}$$

である。また, 任意のケット $|\alpha\rangle$ に対しては

$$\begin{aligned}\langle x|F(\hat{p})|\alpha\rangle &= \int dx'\,\langle x|F(\hat{p})|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx'\,F\left(-i\hbar\partial_x\right)\delta(x-x')\langle x'|\alpha\rangle \\ &= F\left(-i\hbar\partial_x\right)\langle x|\alpha\rangle\end{aligned} \tag{1.28}$$

一方, $\hat{x}$ の関数 $F(\hat{x})$ は $\langle x|F(\hat{x}) = \langle x|F(x)$ であるから

$$\langle x|F(\hat{x})|x'\rangle = F(x)\langle x|x'\rangle = F(x)\delta(x-x')\,, \quad \langle x|F(\hat{x})|\alpha\rangle = F(x)\langle x|\alpha\rangle \tag{1.29}$$

となる。$F(\hat{x})$ は演算子であるが, $F(x)$ は演算子ではなく単なる数である。

なお

$$\langle x|\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}|x'\rangle = (x-x')\langle x|\,\hat{p}\,|x'\rangle = -i\hbar(x-x')\partial_x\delta(x-x')$$

デルタ関数の等式 (1.18)

$$(x-x')\,\partial_x\delta(x-x') = \,-\,\delta(x-x')$$

を使えば

$$\langle x|\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}|x'\rangle = i\hbar\delta(x-x') \tag{1.30}$$

これは交換関係 (1.25) に他ならない。

波動関数による量子力学の定式化は, 基底ケットとして位置の固有ケットを採用した 1 つの表現である。この表現では, 運動量演算子 $\hat{p}$ は $-i\hbar\partial_x$ で置き換わる。

1. $\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle$ とおくと, 粒子を x と $x+dx$ の間に見出す確率は

$$|\langle x|\alpha\rangle|^2 dx = |\psi_\alpha(x)|^2\,dx$$

である。規格化は

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \int dx\,\langle\alpha|x\rangle\langle x|\alpha\rangle = \int dx\,\,|\psi_\alpha(x)|^2 = 1$$

以上から分かるように $\psi_\alpha(x)$ は波動関数である。波動関数は状態 $|\alpha\rangle$ を位置の固有ケット $|x\rangle$ で展開したときの展開係数である。

2. 離散的固有値を持つ演算子 A の固有ケット $|a\rangle$ による展開

$$|\alpha\rangle = \sum_a |a\rangle\langle a|\alpha\rangle$$

を波動関数で表わすと

$$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle = \sum_a \langle x|a\rangle\langle a|\alpha\rangle = \sum_a c_a u_a(x)$$

ただし

$$c_a = \langle a|\alpha\rangle\,, \quad u_a(x) = \langle x|a\rangle$$

$u_a(x)$ は A の固有ケット $|a\rangle$ の波動関数であり, **固有関数** (eigenfunction) と呼ばれる。

3. $\langle\beta|A|\alpha\rangle$ は

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

である。波動関数により $\langle\beta|A|\alpha\rangle$ を求めるには, 一般に非局所的な 2 点 x と x' の関数 $\langle x|A|x'\rangle$ が必要である。しかし, A が $\hat{x}$ または $\hat{p}$ の関数の場合には, (1.28) と (1.29) から

$$\langle\beta|F(\hat{x})|\alpha\rangle = \int dx\langle\beta|x\rangle\langle x|F(\hat{x})|\alpha\rangle = \int dx\,\psi^*_\beta(x)F(x)\psi_\alpha(x)$$

$$\langle\beta|F(\hat{p})|\alpha\rangle = \int dx\langle\beta|x\rangle\langle x|F(\hat{p})|\alpha\rangle = \int dx\,\psi^*_\beta(x)F\left(-i\hbar\partial_x\right)\psi_\alpha(x)$$

と簡単になる。

4. 時刻 t におけるケットを $|\,t\rangle$ とすると, $|\,t\rangle$ の時間変化は

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right)|\,t\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\,t\rangle \tag{1.31}$$

から求まる。ここで, m は粒子の質量, V はポテンシャルである。この式と $\langle x|$ の内積をとると, (1.28) と (1.29) から

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)\,, \quad \psi(x,t) = \langle x|\,t\rangle$$

となる。これはシュレディンガーの波動方程式に他ならない。

5. 運動量 $\hat{p}$ の固有ケット $|\,p\rangle$

$$\hat{p}\,|\,p\rangle = p\,|\,p\rangle \tag{1.32}$$

の固有関数 $u_p(x) = \langle x|\,p\rangle$ を求める。(1.28) より $\langle x|\,\hat{p}\,|\,p\rangle = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}\langle x|\,p\rangle$ であるから, $u_p(x)$ は

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\,u_p(x) = p\,u_p(x)$$

の解である。したがって

$$u_p(x) = N_p\exp\left(ipx/\hbar\right)$$

となる。N_p は規格化定数であり $\langle\,p|\,p'\rangle = \delta(p-p')$ から決める。

$$\langle\,p|\,p'\rangle = \int dx\,\langle\,p|x\rangle\langle x|\,p'\rangle = N^*_p N_{p'}\int dx\,\exp\left(i(p'-p)x/\hbar\right) = |N_p|^2 2\pi\hbar\,\delta(p-p')$$

であるから, $N_p = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ ととればよい。結局

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(ipx/\hbar\right) \tag{1.33}$$

である。

以上の議論は 3 次元に容易に拡張できる。基底ケットとして位置 $\hat{\boldsymbol{r}}$ の固有ケット $|\boldsymbol{r}\rangle$

$$\hat{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{r}\rangle = \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}\rangle\,, \quad \hat{\boldsymbol{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})\,, \quad \boldsymbol{r} = (x, y, z)$$

を用いる。規格直交性と完備性は

$$\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\,, \quad \int d^3r\, |\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}| = 1$$

である。運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ は $|\boldsymbol{r}\rangle$ を基底にとる表現では $-i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ に置き換わる。ただし

$$\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z')\,, \quad \boldsymbol{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}\,, \frac{\partial}{\partial y}\,, \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

である。

問 1.6　運動量演算子 $\hat{p}$ は $|\,x\rangle$ を基底にとる表現では $-i\hbar\partial/\partial x$ に置き換わる。i は純虚数, x は実数であるから, $-i\hbar\partial/\partial x$ のエルミート共役は $+i\hbar\partial/\partial x$ になりそうである。これは運動量演算子がエルミートであることと矛盾する。どこがおかしいか。

問 1.7　運動量演算子 $\hat{p}$ の固有ケットを $|\,p\rangle$ とする。任意の状態 $|\alpha\rangle$ に対して

$$\langle\, p|\,\hat{x}\,|\alpha\rangle = i\hbar\frac{\partial\langle\, p|\alpha\rangle}{\partial p}$$

となることを (1.33) を用いて示せ。また, (1.31) は

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right)\psi(p, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(p, t)\,, \quad \psi(p, t) = \langle\, p|\, t\rangle$$

となることを示せ。

問 1.8　時刻 t における系の状態 $|\,t\rangle$ の時間変化は, ハミルトニアン演算子を H とすると

$$H\,|\,t\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\,t\rangle$$

である。t を含まない演算子 X の時刻 t での期待値 $\langle t|X|\,t\rangle$ は

$$\frac{d}{dt}\langle t|X|\,t\rangle = \frac{1}{i\hbar}\,\langle t|[\,X\,,\,H\,]|\,t\rangle$$

を満たすことを示せ。また, X が H と交換するならば, X の期待値は時間的に一定であることを示せ。これが量子力学における保存則である。

2　角運動量の量子力学

メシア	量子力学 (東京図書) 第 13 章
J. J. Sakurai	現代の量子力学 (吉岡書店) 第 3 章
ローズ	角運動量の基礎理論 (みすず書房)

2.1　角運動量の定義

ニュートン力学と同様に, 角運動量 $\hbar\boldsymbol{\ell}$ を

$$\hbar\boldsymbol{\ell} = \hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}} \tag{2.1}$$

で定義する。ここで $\hat{\boldsymbol{r}} = (\hat{x}_1,\, \hat{x}_2,\, \hat{x}_3)$ と $\hat{\boldsymbol{p}} = (\hat{p}_1,\, \hat{p}_2,\, \hat{p}_3)$ は粒子の位置と運動量の演算子であり, 交換関係

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{2.2}$$

を満たす。添字 $1, 2, 3$ はそれぞれ x, y, z 成分を表わす。この交換関係から

$$[\,\ell_1\,,\,\ell_2] = i\ell_3\,, \quad [\,\ell_2\,,\,\ell_3] = i\ell_1\,, \quad [\,\ell_3\,,\,\ell_1] = i\ell_2$$

を得る。この関係を一般化して, ベクトル演算子 $\boldsymbol{J}$ の各成分がオブザーバブルで交換関係

$$[J_1,\, J_2] = iJ_3\,, \quad [J_2,\, J_3] = iJ_1\,, \quad [J_3,\, J_1] = iJ_2 \tag{2.3}$$

を満たすとき $\boldsymbol{J}$ を**角運動量** (angular momentum) と定義する。角運動量 (2.1) を特に**軌道角運動量** (orbital angular momentum) という。

ε_{ijk} を完全に反対称なテンソル

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} \;\;\,0 & 2\text{ つの添字が等しいとき} \\ +1 & ijk\text{ が }123\text{ の偶置換であるとき} \\ -1 & ijk\text{ が }123\text{ の奇置換であるとき} \end{cases} \tag{2.4}$$

とすると, (2.3) は

$$[J_i, J_j] = i\,\varepsilon_{ijk}J_k \tag{2.5}$$

と書ける。ただし, テンソル演算の約束として, 2 度現れる添字については和をとる。上の例では k について 1 から 3 まで和をとる。

ε_{ijk} は便利な記号である。例えば, ベクトル積 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$ の k 成分は

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_k = \varepsilon_{ijk}A_iB_j$$

である。また

$$\varepsilon_{kij}\varepsilon_{kmn} = \delta_{im}\delta_{jn} - \delta_{in}\delta_{jm}$$

が成り立つ。(2.5) に ε_{ijm} を乗じて $i,\ j$ について和をとると

$$\text{左辺} = \varepsilon_{ijm}\,(J_iJ_j - J_jJ_i) = \varepsilon_{ijm}J_iJ_j + \varepsilon_{jim}J_jJ_i = 2\varepsilon_{ijm}J_iJ_j = 2\,(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J})_m$$

$$\text{右辺} = i\,\varepsilon_{ijm}\varepsilon_{ijk}J_k = i\,(\delta_{jj}\delta_{mk} - \delta_{jk}\delta_{mj})\,J_k = i\,(3J_m - J_m) = 2iJ_m$$

すなわち

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J} = i\boldsymbol{J} \tag{2.6}$$

である。$\boldsymbol{J}$ の成分どうしが交換しないので $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=0$ にはならない。

$\boldsymbol{J}^2 = J_1^2+J_2^2+J_3^2 = J_jJ_j$ (j ついての和をとる) と各成分の交換関係は, $[A\,,BC\,] = [A\,,B\,]\,C + B\,[A\,,C\,]$ を使うと

$$\Big[J_i\,,J_jJ_j\Big] = [J_i,\,J_j]\,J_j + J_j\,[J_i\,,J_j] = i\varepsilon_{ijk}\,(J_kJ_j+J_jJ_k) = i\,(\varepsilon_{ijk}+\varepsilon_{ikj})\,J_kJ_j = 0$$

$\boldsymbol{J}^2$ と $\boldsymbol{J}$ の成分は交換する。2 つの互いにエルミート共役な演算子

$$J_\pm = J_1 \pm iJ_2$$

を導入する。(2.3) から

$$[J_3\,,J_\pm\,] = \,\pm\,J_\pm \tag{2.7}$$

$$[J_+\,,J_-\,] = 2J_3 \tag{2.8}$$

である。(2.8) と $\boldsymbol{J}^2 = (J_+J_- + J_-J_+)/2 + J_3^2$ から

$$J_-J_+ = \boldsymbol{J}^2 - J_3(J_3+1)\,, \quad J_+J_- = \boldsymbol{J}^2 - J_3(J_3-1) \tag{2.9}$$

となる。

2.2 角運動量の固有値

$\boldsymbol{J}$ の成分は互いに交換しないが $\boldsymbol{J}^2$ と $\boldsymbol{J}$ の各成分は交換するから, $\boldsymbol{J}$ の成分の 1 つと $\boldsymbol{J}^2$ の同時固有ケットが存在する。$\boldsymbol{J}$ の成分として J_3 を採用する。

$|\beta\rangle = J_k|\alpha\rangle$ とすると, J_k はエルミートであるから $\langle\alpha|J_k^2|\alpha\rangle = \langle\beta|\beta\rangle \geq 0$ である。したがって, 任意の $|\alpha\rangle$ に対して $\langle\alpha|\boldsymbol{J}^2|\alpha\rangle \geq 0$ となり, $\boldsymbol{J}^2$ の固有値は負ではない。この固有値を便宜上 $j(j+1)$ で表わす。ただし, j は $j\geq 0$ の実数である。$\boldsymbol{J}^2$ の固有値 $j(j+1)$ と J_3 の固有値 m の同時固有ケットを $|j\,m\rangle$ とする:

$$\boldsymbol{J}^2|j\,m\rangle = j(j+1)|j\,m\rangle\,, \quad J_3|j\,m\rangle = m|j\,m\rangle \tag{2.10}$$

$J_1^2+J_2^2 = \boldsymbol{J}^2 - J_3^2$ の固有値も負ではない。したがって

$$\big(\boldsymbol{J}^2 - J_3^2\big)\,|j\,m\rangle = \big(j(j+1)-m^2\big)\,|j\,m\rangle$$

より

$$-\sqrt{j(j+1)} \leq m \leq \sqrt{j(j+1)} \tag{2.11}$$

でなければならない。$\boldsymbol{J}^2$ と $J_\pm$ は交換するから

$$\boldsymbol{J}^2J_\pm|j\,m\rangle = J_\pm\boldsymbol{J}^2|j\,m\rangle = j(j+1)J_\pm|j\,m\rangle$$

また, (2.7) より $J_3J_\pm = J_\pm(J_3\pm 1)$ であるから

$$J_3J_\pm|j\,m\rangle = J_\pm(J_3\pm 1)|j\,m\rangle = (m\pm 1)\,J_\pm|j\,m\rangle$$

となる。$J_\pm|j\,m\rangle$ も $\boldsymbol{J}^2$ と J_3 の固有ケットであり, 固有値はそれぞれ $j(j+1)$, $m\pm1$ である。J_+ は J_3 の固有値を 1 だけ増加させるから, 条件 (2.11) を満たすには

$$J_+|j\,m_1\rangle = 0 \tag{2.12}$$

となる m の最大値 m_1 が存在しなければならない。同様に J_- は J_3 の固有値を 1 だけ減少させるから

$$J_-|j\,m_2\rangle = 0 \tag{2.13}$$

となる m の最小値 m_2 が存在する。(2.12) に J_- を作用させ (2.9) を使うと

$$\begin{aligned} J_-J_+|j\,m_1\rangle = \big(\boldsymbol{J}^2 - J_3(J_3+1)\big)\,|j\,m_1\rangle &= \Big(j(j+1) - m_1(m_1+1)\Big)|j\,m_1\rangle \\ &= (j-m_1)(j+m_1+1)|j\,m_1\rangle = 0 \end{aligned}$$

同様に, (2.13) と (2.9) から

$$J_+J_-|j\,m_2\rangle = \big(\boldsymbol{J}^2 - J_3(J_3-1)\big)\,|j\,m_2\rangle = (j+m_2)(j-m_2+1)|j\,m_2\rangle = 0$$

$m_1 \ge m_2$ であるから, $j \ge 0$ を考慮すると $m_1 = j$, $m_2 = -j$ になる。隣り合った m の値は 1 だけ異なるから $m_1 - m_2 = 2j$ は負でない整数である。したがって

$$j = 0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ 2,\ \cdots$$

j は整数か半整数である。与えられた j に対して許される m は

$$m = j,\ j-1,\ \cdots,\ -j+1,\ -j$$

の $2j+1$ 個になる。まとめると

$$\boldsymbol{J}^2|j\,m\rangle = j(j+1)|j\,m\rangle\,, \quad j = 0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ 2,\ \cdots \tag{2.14}$$

$$J_3|j\,m\rangle = m|j\,m\rangle\,, \quad m = j,\ j-1,\ \cdots,\ -j+1,\ -j \tag{2.15}$$

である。

$|j\,m\rangle$ はノルム 1 のケットを表わすとする。$m<j$ ならば $J_+|j\,m\rangle = c_m|j\,m{+}1\rangle$ とおける。この関係式をブラで表わすと $J_+^\dagger = J_-$ より $\langle j\,m|J_- = c_m^*\langle j\,m{+}1|$ になるから

$$\langle j\,m|J_-J_+|j\,m\rangle = |c_m|^2\langle j\,m{+}1|j\,m{+}1\rangle = |c_m|^2$$

(2.9) を使うと

$$\langle j\,m|J_-J_+|j\,m\rangle = \big(j(j+1) - m(m+1)\big)\,\langle j\,m|j\,m\rangle = (j-m)(j+m+1)$$

c_m の位相は任意に選べるが, 習慣として c_m を正の実数にとる。したがって

$$J_+|j\,m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,|j\,m{+}1\rangle \tag{2.16}$$

である。$J_-|j\,m\rangle$ についても同様にして

$$J_-|j\,m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,|j\,m{-}1\rangle \tag{2.17}$$

を得る。(2.16) と (2.17) を繰り返し適用すれば, 1 つのケット $|j\,m\rangle$ から出発して $2j+1$ 個の互いに直交する規格化されたケットを作れる。例えば

$$|j\,m\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!\,(j-m)!}}\,(J_-)^{j-m}\,|j\,j\rangle \tag{2.18}$$

である。このとき $|j\,j\rangle$ は

$$J_3|j\,j\rangle = j|j\,j\rangle\,, \quad J_+|j\,j\rangle = 0$$

で決定される。これは (2.10) と同値である。なぜなら (2.9) から

$$\boldsymbol{J}^2|j\,j\rangle = \Big(J_3(J_3+1) + J_-J_+\Big)|j\,j\rangle = j(j+1)|j\,j\rangle$$

問 2.1　(2.18) を導け。

2.3　軌道角運動量

$\boldsymbol{\ell}^2$ と ℓ_3 の同時固有ケット $|\,\ell\,m\,\rangle$

$$\boldsymbol{\ell}^2|\,\ell\,m\rangle = \ell(\ell+1)|\,\ell\,m\rangle\,, \quad \ell_3|\,\ell\,m\rangle = m|\,\ell\,m\rangle \tag{2.19}$$

の波動関数を求める。$\hat{\boldsymbol{r}}$ の固有ケットを $|\boldsymbol{r}\rangle$ とすると

$$\langle\boldsymbol{r}|\,\boldsymbol{\ell}\,|\,\ell\,m\rangle = -i\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla}\langle\boldsymbol{r}|\,\ell\,m\rangle$$

である。これを極座標 $(r,\,\theta,\,\phi)$

$$r = \sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}\,, \quad \cos\theta = \frac{x_3}{\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}}\,, \quad \tan\phi = \frac{x_2}{x_1}$$

で表わすと

$$\langle\boldsymbol{r}|\,\ell_\pm\,|\,\ell\,m\rangle = e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle\boldsymbol{r}|\,\ell\,m\rangle \tag{2.20}$$

$$\langle\boldsymbol{r}|\,\ell_3\,|\,\ell\,m\rangle = -i\frac{\partial}{\partial\phi}\langle\boldsymbol{r}|\,\ell\,m\rangle \tag{2.21}$$

になる。これらは r を含まないから角度依存部分のみを分離して

$$\langle\theta,\phi\,|\,\ell\,m\rangle = Y_{\ell\,m}(\theta,\phi)$$

とする。(2.19) の ℓ_3 の式に $\langle\theta,\phi|$ をかけると (2.21) より

$$-i\frac{\partial}{\partial\phi}Y_{\ell\,m}(\theta,\phi) = m\,Y_{\ell\,m}(\theta,\phi)$$

これから $Y_{\ell\,m}(\theta,\phi) = \Theta_{\ell\,m}(\theta)\,e^{im\phi}$ になる。波動関数は $\boldsymbol{r}$ について 1 価関数であるから, ϕ を $\phi+2\pi$ にしたとき $Y_{\ell\,m}(\theta,\phi)$ の値は変わってはならない。したがって $e^{2\pi mi}=1$, つまり m は整数である。m が整数ならば ℓ も整数でなければならない。軌道角運動量の場合, 半整数の ℓ は存在しない。次に $\langle\theta,\phi|\,\ell_+\,|\,\ell\,\ell\,\rangle = 0$ は (2.20) から

$$e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\Theta_{\ell\,\ell}(\theta)e^{i\ell\phi} = e^{i(\ell+1)\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - \ell\cot\theta\right)\Theta_{\ell\,\ell}(\theta) = 0$$

となる。これから $\Theta_{\ell\,\ell}(\theta) = c_\ell \sin^\ell \theta$ であり

$$Y_{\ell\,\ell}(\theta,\phi) = c_\ell \sin^\ell \theta\, e^{i\ell\phi} \tag{2.22}$$

を得る。c_ℓ は規格化条件

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta\, \sin\theta\, |Y_{\ell\,\ell}(\theta,\phi)|^2 = 1$$

から決まり

$$c_\ell = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell\, \ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}$$

である。ただし, 位相は慣例に従い $Y_{\ell\,0}(0,0)$ が正の実数になるようにした。一般の $Y_{\ell\,m}(\theta,\phi)$ は (2.18) を $Y_{\ell\,\ell}(\theta,\phi)$ に適用すれば求まる。$Y_{\ell\,m}(\theta,\phi)$ を**球面調和関数** (spherical harmonics) という。

空間反転 $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$, 極座標では $(r,\,\theta,\,\phi) \to (r,\,\pi-\theta,\,\pi+\phi)$ を行う変換を**パリティ** (parity) という。この変換を表わす演算子を P とすると, P は

$$P|\boldsymbol{r}\rangle = |-\boldsymbol{r}\rangle$$

で定義される。$|\boldsymbol{r}\rangle$ は完全系をなすから, これで P の作用は完全に決まる。$P^2|\boldsymbol{r}\rangle = |\boldsymbol{r}\rangle$ より $P^2 = 1$ であるから, P の固有値は ± 1 となる。また

$$\langle\boldsymbol{r}|P = \int d^3y\,\langle\boldsymbol{r}|P|\boldsymbol{y}\rangle\langle\boldsymbol{y}| = \int d^3y\,\langle\boldsymbol{r}|-\boldsymbol{y}\rangle\langle\boldsymbol{y}| = \int d^3y\,\delta(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{y})\langle\boldsymbol{y}| = \langle -\boldsymbol{r}|$$

であるから, (2.22) の具体形を使うと

$$\langle\boldsymbol{r}|P|\ell\,\ell\rangle = \langle -\boldsymbol{r}|\ell\,\ell\rangle = Y_{\ell\,\ell}(\pi-\theta,\pi+\phi) = (-1)^\ell\, Y_{\ell\,\ell}(\theta,\phi) = (-1)^\ell\langle\boldsymbol{r}|\ell\,\ell\rangle$$

つまり

$$P|\ell\,\ell\rangle = (-1)^\ell|\ell\,\ell\rangle$$

である。

$$\begin{aligned}
(P\hat{\boldsymbol{r}} + \hat{\boldsymbol{r}}P)\,|\boldsymbol{r}\rangle &= \boldsymbol{r}P|\boldsymbol{r}\rangle + \hat{\boldsymbol{r}}|-\boldsymbol{r}\rangle = \boldsymbol{r}|-\boldsymbol{r}\rangle - \boldsymbol{r}|-\boldsymbol{r}\rangle = 0 \\
(P\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{p}}P)\,|\boldsymbol{r}\rangle &= -i\hbar P\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{r}\rangle + \hat{\boldsymbol{p}}|-\boldsymbol{r}\rangle \\
&= -i\hbar\Big(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}P|\boldsymbol{r}\rangle + \boldsymbol{\nabla}_{-\boldsymbol{r}}|-\boldsymbol{r}\rangle\Big) \\
&= -i\hbar\Big(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}|-\boldsymbol{r}\rangle - \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}|-\boldsymbol{r}\rangle\Big) = 0
\end{aligned}$$

これは $P\hat{\boldsymbol{r}} + \hat{\boldsymbol{r}}P = 0$, $P\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{p}}P = 0$ を意味するから, $\hbar\boldsymbol{\ell} = \hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ は P と交換する。したがって

$$P\ell_-|\ell\,\ell\rangle = \ell_-P|\ell\,\ell\rangle = (-1)^\ell\ell_-|\ell\,\ell\rangle\,, \quad i.e.\quad P|\ell\,\ell{-}1\rangle = (-1)^\ell|\ell\,\ell{-}1\rangle$$

以下同様にして, $-\ell \le m \le \ell$ のすべての m について

$$P|\ell\,m\rangle = (-1)^\ell|\ell\,m\rangle\,, \quad \text{あるいは}\quad Y_{\ell\,m}(\pi-\theta,\pi+\phi) = (-1)^\ell\,Y_{\ell\,m}(\theta,\phi) \tag{2.23}$$

が成り立つ。軌道角運動量の固有ケット $|\ell\,m\rangle$ はパリティの固有ケットでもあり, その固有値 $(-1)^\ell$ は m に依らない。

問 2.2　(2.20), (2.21) を導け。

2.4 スピン

シュテルン・ゲルラッハの実験などから, 電子は軌道角運動量 $\boldsymbol{\ell}$ 以外に, 内部角運動量である**スピン** (spin) $\boldsymbol{s}$ をもち, その大きさは 1/2 であると仮定しないと実験を説明できないことが明らかになった。非相対論ではスピンは仮定より導入されるが, ディラックによる相対論的量子力学では自然に導ける。スピンは本質的に相対論的効果であり, ニュートン力学で対応する物理量はない。スピンは角運動量の一種であるから, $\boldsymbol{J}$ の議論で得られた結果はすべて成り立つ。ただし $j = 1/2$ という値だけ許される。

スピン 1/2 の粒子の状態ベクトル空間 $\mathcal{E}$ は, 軌道運動の状態を表わす空間 $\mathcal{E}_0$ とスピンの状態を表わす空間 $\mathcal{E}_s$ の直積 $\mathcal{E}_0 \otimes \mathcal{E}_s$ になる。$\mathcal{E}_0$ はスピンのない粒子の状態空間であり, 基底ケットとしては, 例えば, 位置ベクトルの固有ケット $|\boldsymbol{r}\rangle$ を使う。一方, スピン状態空間 $\mathcal{E}_s$ は $2s+1=2$ 個の $\boldsymbol{s}^2$ と s_3 の同時固有ケット

$$|+\rangle = |\,\tfrac{1}{2},\ m{=}\tfrac{1}{2}\,\rangle\,, \quad |-\rangle = |\,\tfrac{1}{2},\ m{=}\text{-}\tfrac{1}{2}\,\rangle \tag{2.24}$$

で張られる 2 次元空間である。$\mathcal{E}$ では $|\boldsymbol{r}\rangle$ と $|\pm\rangle$ の直積 $|\boldsymbol{r}\pm\rangle \equiv |\boldsymbol{r}\rangle|\pm\rangle$ が完全系をなす:

$$\int d^3r \Big(|\boldsymbol{r}+\rangle\langle \boldsymbol{r}+| + |\boldsymbol{r}-\rangle\langle\boldsymbol{r}-| \Big) = 1$$

これは

$$\underbrace{\int d^3r |\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|}_{\mathcal{E}_0}\ \underbrace{\Big(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|\Big)}_{\mathcal{E}_s} = 1$$

ということである。$\mathcal{E}_0$ と $\mathcal{E}_s$ は別空間であるから, $\langle\boldsymbol{r}|\pm\rangle$ などは意味がない。$\mathcal{E}$ 空間のケット $|\alpha\rangle$ の波動関数 $\langle\boldsymbol{r}|\alpha\rangle$ は, $\mathcal{E}_0$ では内積であるが $\mathcal{E}_s$ ではケットベクトルであり

$$\langle\boldsymbol{r}|\alpha\rangle = |+\rangle\langle\boldsymbol{r}+|\alpha\rangle + |-\rangle\langle\boldsymbol{r}-|\alpha\rangle = \varphi_+(\boldsymbol{r})|+\rangle + \varphi_-(\boldsymbol{r})|-\rangle \tag{2.25}$$

と展開できる。ただし $\varphi_\pm(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}\pm|\alpha\rangle$ とした。

$\boldsymbol{s}$ は角運動量の交換関係 $[s_i\,, s_j] = i\varepsilon_{ijk}s_k$ 以外にもいろいろな性質がある。これらは $\boldsymbol{s}$ で表わすよりも $\boldsymbol{\sigma} \equiv 2\boldsymbol{s}$ で表現した方が簡潔になる。上の交換関係は

$$[\sigma_i\,, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \tag{2.26}$$

である。$\mathcal{E}_s$ における 2 つの演算子 A, B が $A|\pm\rangle = B|\pm\rangle$ ならば, $\mathcal{E}_s$ 内の任意のケット $|\alpha\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle$ に対して $A|\alpha\rangle = B|\alpha\rangle$ となるから $A = B$ である。

$$\boldsymbol{\sigma}^2|\pm\rangle = 4\boldsymbol{s}^2|\pm\rangle = 4\,\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)|\pm\rangle = 3|\pm\rangle\,, \quad \text{すなわち} \quad \boldsymbol{\sigma}^2 = 3 \tag{2.27}$$

である。(2.16), (2.17) において $j = 1/2$, $m = \pm 1/2$ とすると, $\sigma_\pm = 2(s_1 \pm is_2)$ は

$$\sigma_+|+\rangle = 0\,, \quad \sigma_+|-\rangle = 2|+\rangle\,, \quad \sigma_-|+\rangle = 2|-\rangle\,, \quad \sigma_-|-\rangle = 0 \tag{2.28}$$

したがって

$$\sigma_+^2|+\rangle = 0\,, \quad \sigma_+^2|-\rangle = 2\sigma_+|+\rangle = 0 \quad \text{つまり} \quad \sigma_+^2 = 0$$

である。同様にして

$$\sigma_+^2 = \sigma_-^2 = \sigma_3\sigma_\pm + \sigma_\pm\sigma_3 = 0 \tag{2.29}$$

$\sigma_3^2|\pm\rangle = |\pm\rangle$ から $\sigma_3^2 = 1$ である。これと (2.9) より $\sigma_+\sigma_- + \sigma_-\sigma_+ = 2(\boldsymbol{\sigma}^2 - \sigma_3^2) = 4$ になるから

$$\sigma_1^2 = \left(\frac{\sigma_+ + \sigma_-}{2}\right)^2 = \frac{1}{4}\left(\sigma_+^2 + \sigma_-^2 + \sigma_+\sigma_- + \sigma_-\sigma_+\right) = 1$$

σ_2^2 についても同様にすると

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 1 \tag{2.30}$$

を得る。$\sigma_\pm = \sigma_1 \pm i\sigma_2$ から (2.29) は

$$\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_1 = \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_2 = \sigma_3\sigma_1 + \sigma_1\sigma_3 = 0 \tag{2.31}$$

となる。σ_i は互いに反交換する。(2.30) と (2.31) はまとめて

$$\{\sigma_i\,, \sigma_j\} \equiv \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{i\,j} \tag{2.32}$$

と書ける。この結果と (2.26) を加えれば

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{i\,j} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \tag{2.33}$$

になる。これが最も一般的な関係式である。

$\mathcal{E}_s$ は 2 次元であるから, 2×2 の行列表現を用いると便利である。基底ケットとブラを

$$|+\rangle \Rightarrow \chi_+ \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle \Rightarrow \chi_- \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2.34}$$

$$\langle +| \Rightarrow \chi_+^\dagger = (1\,,\ 0\,), \quad \langle -| \Rightarrow \chi_-^\dagger = (0\,,\ 1\,) \tag{2.35}$$

で表わす。(2.25) は

$$\langle \boldsymbol{r}|\alpha\rangle \Rightarrow \psi(\boldsymbol{r}) = \varphi_+(\boldsymbol{r})\chi_+ + \varphi_-(\boldsymbol{r})\chi_- = \begin{pmatrix} \varphi_+(\boldsymbol{r}) \\ \varphi_-(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix} \tag{2.36}$$

となる。ψ を **2 成分スピノール** (two component spinor) という。$|\alpha\rangle$ の規格化は

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \int d^3r \sum_{m=\pm} \langle\alpha|\boldsymbol{r}\, m\rangle\langle\boldsymbol{r}\, m|\alpha\rangle = \int d^3r \sum_{m=\pm} \varphi_m^*(\boldsymbol{r})\varphi_m(\boldsymbol{r}) = \int d^3r\, \psi^\dagger(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = 1$$

である。演算子 $\boldsymbol{\sigma}$ に対応する行列も $\boldsymbol{\sigma}$ で表わすことにする。(2.28) を行列で書くと

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} \langle +|\sigma_+|+\rangle & \langle +|\sigma_+|-\rangle \\ \langle -|\sigma_+|+\rangle & \langle -|\sigma_+|-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

となる。$\sigma_1 = (\sigma_+ + \sigma_-)/2,\ \sigma_2 = -i(\sigma_+ - \sigma_-)/2$ であるから

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.37}$$

を得る。この行列を**パウリ行列** (Pauli matrix) という。パウリ行列は上で導いた演算子 $\boldsymbol{\sigma}$ の関係式をすべて満たす。ただし (2.30) の 1 などは単位行列と解釈する。また

$$\det\sigma_i = -1\,, \quad \mathrm{Tr}\,\sigma_i = 0$$

という性質もよく使う。

問 2.3　(2.33) を用いて

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$$

を示せ。$\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ は $\boldsymbol{\sigma}$ と交換するなら演算子でもよい。

問 2.4　$\boldsymbol{n}$ をある方向の単位ベクトルとし, $\sigma_n \equiv \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ を考える。前問の結果を使い $\sigma_n^2 = 1$ を示せ。さらに

$$\exp(i\theta\,\sigma_n) = \cos\theta + i\,\sigma_n \sin\theta$$

を示せ。

問 2.5　極座標で表わしたとき (θ, ϕ) 方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{n}$ とすると

$$\sigma_n = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \sigma_1 \sin\theta\cos\phi + \sigma_2 \sin\theta\sin\phi + \sigma_3\cos\theta$$

である。σ_n の固有値 ± 1 に属する固有ケット $|\pm\rangle_n$ は, σ_3 の固有ケット (2.24) を用いて

$$|\pm\rangle_n = a_\pm\,|+\rangle + b_\pm\,|-\rangle$$

と展開できる。係数 $a_\pm$, $b_\pm$ を θ, ϕ の関数として求めよ。

2.5　角運動量の合成

2 個以上の粒子系の全角運動量やスピンを持つ 1 粒子の軌道角運動量とスピンの和を扱うとき, 角運動量の合成が必要になる。2 つの角運動量の合成を考えよう。

別の系 A, B の角運動量を $\boldsymbol{J}_A$, $\boldsymbol{J}_B$ とする:

$$[\,J_{A\,i}\,, J_{A\,j}\,] = i\varepsilon_{ijk}J_{A\,k}\,, \quad [\,J_{B\,i}\,, J_{B\,j}\,] = i\varepsilon_{ijk}J_{B\,k}\,, \quad [\,J_{A\,i}\,, J_{B\,j}\,] = 0 \tag{2.38}$$

別の系とは異なる粒子でもよいし同一粒子の軌道角運動量とスピンでもよい。系 $A+B$ の全角運動量 $\boldsymbol{J}$ は

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_A + \boldsymbol{J}_B \tag{2.39}$$

である。ただし, 系 B の状態ベクトルに対しては, $\boldsymbol{J}_A$ は何もしない恒等演算子 $\mathbf{1}$ として作用する。$\boldsymbol{J}_B$ についても同様である。したがって, (2.39) は

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_A \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_A \otimes \boldsymbol{J}_B$$

と理解すべきものである。(2.38) から

$$[J_i\,, J_j] = [\,J_{A\,i}\,, J_{A\,j}\,] + [\,J_{B\,i}\,, J_{B\,j}\,] = i\varepsilon_{ijk}\Big(J_{A\,k} + J_{B\,k}\Big) = i\varepsilon_{ijk}J_k$$

となる。2 個の角運動量の和もまた角運動量である。

系 $A+B$ の基底ケットとして 2 つの組み合わせがある。

[1]　$\boldsymbol{J}_A^2$, $\boldsymbol{J}_B^2$, $J_{A\,3}$, $J_{B\,3}$ の同時固有ケット

$\boldsymbol{J}_A^2$, $J_{A\,3}$ の固有ケット $|j_A\,m_A\rangle$ と $\boldsymbol{J}_B^2$, $J_{B\,3}$ の固有ケット $|j_B\,m_B\rangle$ の直積

$$|j_A m_A\, j_B m_B\rangle \equiv |j_A\,m_A\rangle|j_B\,m_B\rangle \tag{2.40}$$

を系 $A+B$ の基底ケットとする。ただし

$$\boldsymbol{J}_A^2|j_A\,m_A\rangle = j_A(j_A+1)|j_A\,m_A\rangle\,,\quad J_{A\,3}|j_A\,m_A\rangle = m_A|j_A\,m_A\rangle$$

$$\boldsymbol{J}_B^2|j_B\,m_B\rangle = j_B(j_B+1)|j_A\,m_B\rangle\,,\quad J_{B\,3}|j_A\,m_B\rangle = m_B|j_A\,m_B\rangle$$

[2] $\boldsymbol{J}_A^2$, $\boldsymbol{J}_B^2$, $\boldsymbol{J}^2$, J_3 の同時固有ケット

$J_{A\,3}$, $J_{B\,3}$ は $\boldsymbol{J}_A^2$, $\boldsymbol{J}_B^2$ と交換する。しかし, $\boldsymbol{J}^2=\boldsymbol{J}_A^2+\boldsymbol{J}_B^2+2\boldsymbol{J}_A\!\cdot\!\boldsymbol{J}_B$ であるから

$$[\boldsymbol{J}^2, J_{A\,3}\,] = [2\boldsymbol{J}_A\!\cdot\!\boldsymbol{J}_B\,, J_{A\,3}\,] = 2[J_{A\,i}\,, J_{A\,3}\,]J_{B\,i} = 2i\varepsilon_{i3k}J_{A\,k}J_{B\,i} = 2i\,(\boldsymbol{J}_A\!\times\!\boldsymbol{J}_B)_3 \neq 0$$

$$[\boldsymbol{J}^2, J_{B\,3}\,] = 2i\,(\boldsymbol{J}_B\!\times\!\boldsymbol{J}_A)_3 \neq 0$$

となり, $J_{A\,3}$, $J_{B\,3}$ は $\boldsymbol{J}^2$ とは交換しない。交換する演算子の組みに $J_{A\,3}$, $J_{B\,3}$ と $\boldsymbol{J}^2$ を同時に加えることはできない。$\boldsymbol{J}_A^2$, $\boldsymbol{J}_B^2$, $\boldsymbol{J}^2$, J_3 の同時固有ケットを $|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle$ で表わす:

$$\boldsymbol{J}_A^2|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle = j_A(j_A+1)|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle$$

$$\boldsymbol{J}_B^2|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle = j_B(j_B+1)|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle$$

$$\boldsymbol{J}^2|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle = j(j+1)|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle$$

$$J_3|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle = m|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle$$

2 組の基底ケットの一方は他方で展開できる。j_A と j_B が与えられた状態ベクトルの部分空間では, $(2j_A+1)(2j_B+1)$ 個の基底ケット $|j_Am_A\,j_Bm_B\rangle$ は完全系をなす:

$$\sum_{m_A\,m_B}|j_Am_A\,j_Bm_B\rangle\langle j_Am_A\,j_Bm_B| = 1 \tag{2.41}$$

したがって, **[2]** の基底ケットは

$$|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle = \sum_{m_A\,m_B}|j_Am_A\,j_Bm_B\rangle\langle j_Am_A\,j_Bm_B|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle$$

となる。展開係数 $\langle j_Am_A\,j_Bm_B|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle$ は**クレプシュ・ゴルダン係数**（**CG 係数**）と呼ばれる。以降, CG 係数を $\langle j_A\,m_A\ j_B\,m_B|j\,m\rangle$ で表わす。

2.6　クレプシュ・ゴルダン係数の基本的性質

選択則　$m=m_A+m_B\,,\ |\,j_A-j_B|\leq j\leq j_A+j_B$

$J_3=J_{A\,3}+J_{B\,3}$ より

$$\Big(J_3-J_{A\,3}-J_{B\,3}\Big)|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle = \Big(m-J_{A\,3}-J_{B\,3}\Big)|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle = 0$$

これに **[1]** の基底ブラ $\langle j_Am_A\,j_Bm_B|$ をかけると

$$(m-m_A-m_B)\langle j_A\,m_A\ j_B\,m_B|j\,m\rangle = 0$$

したがって, $m\neq m_A+m_B$ ならば $\langle j_A\,m_A\ j_B\,m_B|j\,m\rangle=0$ であるから

$$m = m_A+m_B \tag{2.42}$$

のみが許される。

j_A と j_B が与えられたとき, j がとりうる値を求めよう。$m = m_A + m_B \le j_A + j_B$ と $m \le j$ より, j の最大値は $j_A + j_B$ になる。ある j に対して $2j+1$ 個のケット $|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle$ があるから, j の最小値を $j_{\min}$ とすると, 全体では

$$\sum_{j=j_{\min}}^{j_A+j_B}(2j+1) = \sum_{k=0}^{j_A+j_B-j_{\min}}(2k+2j_{\min}+1) = (j_A+j_B+1)^2 - j_{\min}^2$$

である。これは j_A と j_B が与えられたときの状態ベクトル空間の次元数である。一方, [**1**] の基底ケットで考えれば, この次元数は $(2j_A+1)(2j_B+1)$ である。したがって

$$(j_A+j_B+1)^2 - j_{\min}^2 = (2j_A+1)(2j_B+1)$$

であるから, $j_{\min} = |\,j_A - j_B|$ となる。j がとりうる値は

$$j = j_A + j_B,\ j_A + j_B - 1,\ \cdots,\ |\,j_A - j_B| + 1,\ |\,j_A - j_B| \tag{2.43}$$

である。j がこの範囲にないとき CG 係数 $\langle j_A\,m_A\ j_B\,m_B|j\,m\rangle$ はゼロである。

規格直交性

CG 係数はすべて実数にできる。この性質と完備性 (2.41) を使うと [**2**] の基底ケットの規格直交性

$$\langle (j_A\,j_B)\,j\,m|(j_A\,j_B)\,j'\,m'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

は CG 係数により

$$\sum_{m_A m_B}\langle j_A\,m_A\ j_B\,m_B|j\,m\rangle\langle j_A\,m_A\ j_B\,m_B|j'\,m'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{2.44}$$

と表わせる。同様にして [**1**] のケットの規格直交性

$$\langle j_A m_A\,j_B m_B|j_A m_A'\,j_B m_B'\rangle = \delta_{m_A m_A'}\delta_{m_B m_B'}$$

は [**2**] のケットの完備性から

$$\sum_{j\,m}\langle j_A\,m_A\ j_B\,m_B|j\,m\rangle\langle j_A\,m_A'\ j_B\,m_B'|j\,m\rangle = \delta_{m_A m_A'}\delta_{m_B m_B'} \tag{2.45}$$

である。

漸化式

$$J_\pm|(j_A\,j_B)\,j\,m\rangle = (J_{A\pm} + J_{B\pm})\sum_{m_A' m_B'}|j_A\,m_A'\ j_B\,m_B'\rangle\langle j_A\,m_A'\ j_B\,m_B'|j\,m\rangle$$

の両辺に (2.16) を適用し, $\langle j_A m_A\,j_B m_B|$ との内積をとると漸化式

$$\begin{aligned}
&\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\langle j_A\,m_A\ j_B\,m_B|j\,m{\pm}1\rangle \\
&= \sqrt{(j_A\mp m_A+1)(j_A\pm m_A)}\,\langle j_A\,m_A{\mp}1\ j_B\,m_B|j\,m\rangle \\
&+ \sqrt{(j_B\mp m_B+1)(j_B\pm m_B)}\,\langle j_A\,m_A\ j_B\,m_B{\mp}1|j\,m\rangle
\end{aligned} \tag{2.46}$$

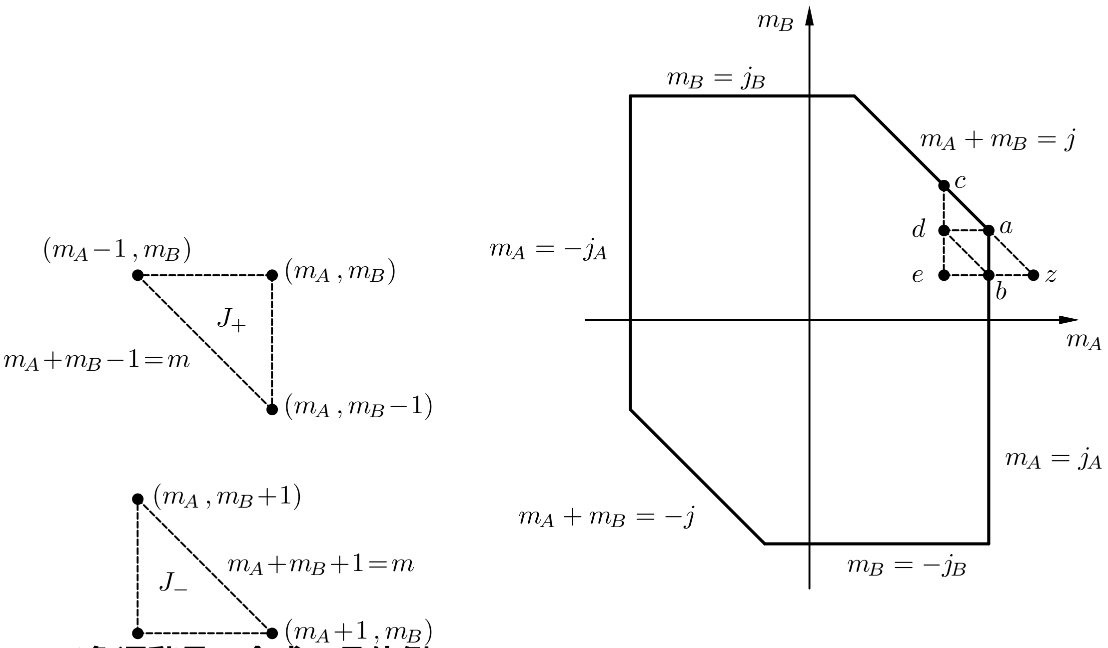
を得る。(2.46) の関係を m_A–m_B 平面上で図示すると図の左側の三角形になる。この三角形は $J_\pm$ の漸化式が (m_A, m_B), $(m_A \mp 1, m_B)$, $(m_A, m_B \mp 1)$ の係数を結び付けることを表わす。

CG 係数はある 1 つの係数によりすべて表わせる。j_A, j_B, j が与えられた場合, m_A と m_B の許される範囲は $|m_A| \le j_A$, $|m_B| \le j_B$, $|m| = |m_A + m_B| \le j$ である。これを m_A–m_B 平面上に描く

と, 図の右側の直線で囲まれた領域になる。出発点として $(m_A, m_B) = (j_A, j - j_A)$ である点 A をとる。ABZ の三角形は J_- で関連付けられるが, Z は許される範囲外にあるから, Z の CG 係数はゼロである。したがって, B の係数は A の係数で表わせる。次に, B の係数が決まれば J_+ の三角形 ABD から D の係数を A の係数で書ける。三角形 ACD から C が得られ, BDE から E が決まる。この様にして, すべての CG 係数を出発点 A の係数で表わせる。A の CG 係数 $\langle j_A\, j_A\ j_B\, j{-}j_A | j\, j\rangle$ は, その絶対値を (2.44) で $j' = j$, $m' = m$ とした規格化条件で決め, 位相は慣例として

$$\langle j_A\, j_A\ j_B\, j{-}j_A | j\, j\rangle \text{ は正の実数} \tag{2.47}$$

で決める。



2.7 角運動量の合成の具体例

2 つのスピンの合成

スピン 1/2 の粒子 A と B のスピンの合成を考える。全スピン $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_A + \boldsymbol{s}_B$ の大きさ S は (2.43) から $S = 0,\, 1$ の 2 つの値をとる。[1] の基底ケットは, (2.24) の表記方法で表わすと $|+\,+\rangle$, $|+\,-\rangle$, $|-\,+\rangle$, $|-\,-\rangle$ の 4 つである。このうち $m = m_A + m_B = 1$ になるケットは $|+\,+\rangle$ しかないから

$$|(\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2})\,11\rangle = |+\,+\rangle$$

である。(2.17) で $j = m = 1$ とすれば $S_-|(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})\,11\rangle = \sqrt{2}\,|(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})\,10\rangle$ になる。一方

$$S_-|+\,+\rangle = (s_{A\,-} + s_{B\,-})|+\,+\rangle = \Big(s_{A\,-}|+\rangle\Big)|+\rangle + |+\rangle\Big(s_{B\,-}|+\rangle\Big) = |-\,+\rangle + |+\,-\rangle$$

したがって

$$|(\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2})\,10\rangle = \frac{|+\,-\rangle + |-\,+\rangle}{\sqrt{2}}$$

を得る。もう一度 S_- を作用させれば $|(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})\,1\,{-1}\rangle = |-\,-\rangle$ になる。$m = 0$ である固有ケットは $S = 1$ と $S = 0$ の 2 つある。$S = 0$ の固有ケット $|(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})\,00\rangle$ は $|(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})\,10\rangle$ に直交するから, 全体の位相を除けば

$$|(\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2})\,00\rangle = \frac{|+\,-\rangle - |-\,+\rangle}{\sqrt{2}}$$

しかありえない。以上から

$$|(\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2})\,1m\rangle = \begin{cases} |++\rangle & m=1 \\ \dfrac{|+-\rangle+|-+\rangle}{\sqrt{2}} & m=0 \\ |--\rangle & m=-1 \end{cases}, \quad |(\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2})\,00\rangle = \frac{|+-\rangle-|-+\rangle}{\sqrt{2}} \tag{2.48}$$

である。$|(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})\,1m\rangle$ $(m=0,\pm1)$ を**スピン三重項** (spin triplet), $|(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})\,00\rangle$ を**スピン一重項** (spin singlet) と呼ぶ。

P_{AB} を A と B の状態を交換する演算子とする。A の状態を $|\alpha\rangle_A$, B の状態を $|\beta\rangle_B$ とすると

$$P_{AB}|\alpha\rangle_A|\beta\rangle_B = |\beta\rangle_A|\alpha\rangle_B$$

である。P_{AB} でスピンに作用する部分を P^σ_{AB} で表わす。一重項の状態を A と B を明記して書けば

$$|(\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2})\,00\rangle = \frac{|+\rangle_A|-\rangle_B-|-\rangle_A|+\rangle_B}{\sqrt{2}}$$

であるから

$$P^\sigma_{AB}\,|(\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2})\,00\rangle = \frac{|-\rangle_A|+\rangle_B-|+\rangle_A|-\rangle_B}{\sqrt{2}} = -|(\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2})\,00\rangle$$

となり, スピン一重項の状態は A と B の交換によって符号を変える, すなわち**反対称**である。一方, スピン三重項の状態は

$$P^\sigma_{AB}\,|(\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2})\,1m\rangle = |(\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2})\,1m\rangle$$

であり, A と B の交換に対して不変, つまり**対称**である。P^σ_{AB} はスピン一重項 $(S=0)$ に作用したとき -1, スピン三重項 $(S=1)$ に作用したとき $+1$ になるが, これは $\boldsymbol{S}^2-1=S(S+1)-1$ と同等である。$\boldsymbol{\sigma}^2=3$, $\boldsymbol{S}=(\boldsymbol{\sigma}_A+\boldsymbol{\sigma}_B)/2$ を使うと

$$P^\sigma_{AB} = \boldsymbol{S}^2-1 = \frac{1+\boldsymbol{\sigma}_A\cdot\boldsymbol{\sigma}_B}{2}$$

となる。

スピンと軌道角運動量の合成

次にスピン 1/2 の粒子の軌道角運動量 $\boldsymbol{\ell}$ とスピン $\boldsymbol{s}$ の合成を考える。この粒子の全角運動量 $\boldsymbol{j}$ は $\boldsymbol{j}=\boldsymbol{\ell}+\boldsymbol{s}$ である。(2.43) より可能な j の値は

$$j=\ell\pm1/2 \ \ (\ell\neq0)\,, \quad j=1/2 \ \ (\ell=0)$$

となる。$\ell=0,1,2,3,4,\cdots$ に対して $s,p,d,f,g,\cdots$ の記号を割り当て, 1 粒子の角運動量の状態を記号 $_j$ であらわす。例えば $\ell=2$ のとき $j=3/2,\,5/2$ である。これを $d_{3/2}$, $d_{5/2}$ と書く。

$|(\ell\,\frac{1}{2})\,j\,m\,\rangle$ は

$$|(\ell\,\tfrac{1}{2})\,j\,m\,\rangle = \sum_{m_\ell\,m_s} \langle \ell\,m_\ell\;\tfrac{1}{2}\,m_s|j\,m\rangle|\ell\,m_\ell\;\tfrac{1}{2}\,m_s\rangle$$

と展開できる。m を与えたとき, $m_\ell+m_s=m$ になる m_ℓ と m_s の組み合わせは $m_\ell=m\pm1/2$, $m_s=\mp1/2$ の 2 組しかないから

$$|(\ell\,\tfrac{1}{2})\,\ell{+}\tfrac{1}{2}\;\,m\,\rangle = a_m\,|\,\ell\;m{-}\tfrac{1}{2}\;\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\,\rangle + b_m\,|\,\ell\;m{+}\tfrac{1}{2}\;\,\tfrac{1}{2}\;{-}\tfrac{1}{2}\,\rangle \tag{2.49}$$

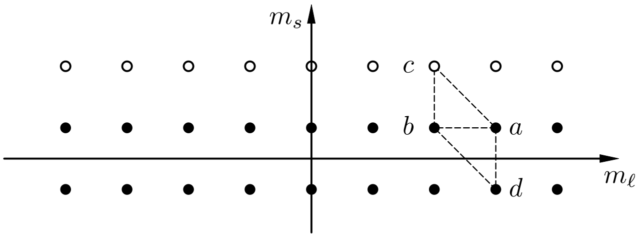
$$|(\ell\,\tfrac{1}{2})\,\ell{-}\tfrac{1}{2}\;\,m\,\rangle = c_m\,|\,\ell\;m{-}\tfrac{1}{2}\;\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\,\rangle + d_m\,|\,\ell\;m{+}\tfrac{1}{2}\;\,\tfrac{1}{2}\;{-}\tfrac{1}{2}\,\rangle \tag{2.50}$$

となる。ただし

$$a_m = \langle \ell\ m{-}\tfrac12\ \ \tfrac12\ \tfrac12\,|\,\ell{+}\tfrac12\ m\rangle\,, \quad b_m = \langle \ell\ m{+}\tfrac12\ \ \tfrac12\ {-}\tfrac12\,|\,\ell{+}\tfrac12\ m\rangle$$

$$c_m = \langle \ell\ m{-}\tfrac12\ \ \tfrac12\ \tfrac12\,|\,\ell{-}\tfrac12\ m\rangle\,, \quad d_m = \langle \ell\ m{+}\tfrac12\ \ \tfrac12\ {-}\tfrac12\,|\,\ell{-}\tfrac12\ m\rangle$$

である。



m_ℓ–m_s 平面を考えると, 許される点は $m_s = \pm 1/2$ の 2 列になる。ABC の三角形は J_- で結ばれるが, C の m_s は 1/2 を越えるから, この点の CG 係数はゼロである。したがって, B の係数は A の係数で書ける。これをくり返し適用すると, 上の列の CG 係数は一番右の係数 a_j で表わせる。次に, J_+ の三角形 ABD から D の係数は A と B の係数で書けるから, 結局すべての CG 係数を a_j で表わせる。

$j = \ell + 1/2$ の場合, J_- に対する (2.46) で

$$j = \ell + 1/2\,,\quad j_B = m_B = 1/2\,,\quad j_A = \ell\,,\quad m_A = m - 3/2$$

とおくと a_m の漸化式

$$\sqrt{(\ell+m+1/2)\,(\ell-m+3/2)}\,a_{m-1} = \sqrt{(\ell+m-1/2)\,(\ell-m+3/2)}\,a_m$$

になる。これから

$$a_m = \sqrt{\frac{\ell+m+1/2}{\ell+m+1+1/2}}\,a_{m+1} = \sqrt{\frac{\ell+m+1/2}{\ell+m+2+1/2}}\,a_{m+2} = \cdots = \sqrt{\frac{\ell+m+1/2}{\ell+m+k+1/2}}\,a_{m+k}$$

$m + k = j = \ell + 1/2$ とおけば

$$a_m = \sqrt{\frac{\ell+m+1/2}{2\ell+1}}\,a_{\ell+1/2}$$

になる。$m = m_\ell + m_s = \ell + 1/2$ は $m_\ell = \ell$, $m_s = 1/2$ の組み合わせしかないから

$$|(\ell\,\tfrac12)\,\ell{+}\tfrac12\ \ell{+}\tfrac12\,\rangle = a_{\ell+1/2}\,|\,\ell\,\ell\ \tfrac12\ \tfrac12\,\rangle$$

規格化条件と位相に関する規約 (2.47) より $a_{\ell+1/2} = 1$ である。結局

$$a_m = \sqrt{\frac{\ell+m+1/2}{2\ell+1}} \tag{2.51}$$

を得る。次に, J_+ に対する (2.46) で

$$j = \ell + 1/2\,,\quad j_B = m_B = 1/2\,,\quad j_A = \ell\,,\quad m_A = m + 1/2$$

とおくと

$$\sqrt{(\ell-m+1/2)\,(\ell+m+3/2)}\,a_{m+1} = \sqrt{(\ell-m+1/2)\,(\ell+m+1/2)}\,a_m + b_m$$

である。(2.51) を代入すると

$$b_m = \sqrt{\frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}} \tag{2.52}$$

になる。

(2.49) と (2.50) が直交すること及び (2.50) の規格化から

$$a_m c_m + b_m d_m = 0\,, \quad c_m^2 + d_m^2 = 1$$

である。$a_m^2 + b_m^2 = 1$ を使うと $d_m = \pm a_m$, $c_m = \mp b_m$ を得る。符号は (2.47) に従って決める。

$$\langle \ell\ \ell\ \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\,|\ell-\tfrac{1}{2}\ \ell-\tfrac{1}{2}\rangle = d_{\ell-1/2}$$

を正の実数にとるから $d_{\ell-1/2} = a_{\ell-1/2}$ であり, $c_{\ell-1/2} = -b_{\ell-1/2}$ となる。

$$|(\ell\,\tfrac{1}{2})\,\ell-\tfrac{1}{2}\ \ell-\tfrac{1}{2}\,\rangle = c_{\ell-1/2}\,|\,\ell\,\ell-1\ \tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\,\rangle + d_{\ell-1/2}\,|\,\ell\,\ell\ \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\,\rangle$$

に J_- を作用させれば c_m, d_m が得られる。このとき (2.17) から c_m, d_m の符号は変わらない。したがって

$$c_m = -b_m = -\sqrt{\frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}}\,, \quad d_m = a_m = \sqrt{\frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}} \tag{2.53}$$

である。

以上から (2.49), (2.50) は

$$|(\ell\,\tfrac{1}{2})\,\ell\pm\tfrac{1}{2}\ m\,\rangle = \pm\sqrt{\frac{\ell \pm m + 1/2}{2\ell + 1}}\,|\,\ell\ m-\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\,\rangle + \sqrt{\frac{\ell \mp m + 1/2}{2\ell + 1}}\,|\,\ell\ m+\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ \text{-}\tfrac{1}{2}\,\rangle \tag{2.54}$$

となる。これを球面調和関数を用いてスピノールで表わすと

$$\begin{aligned}\mathcal{Y}_{\ell\,j=\ell\pm1/2\,m}(\theta\,,\phi) &\equiv \sum_{m_\ell\,m_s} \langle \ell\,m_\ell\ \tfrac{1}{2}\,m_s|\ell\pm\tfrac{1}{2}\,m\rangle Y_{\ell\,m_\ell}(\theta,\phi)\chi_{m_s} \\ &= \begin{pmatrix} \pm\sqrt{\dfrac{\ell \pm m + 1/2}{2\ell + 1}}\,Y_{\ell\ m-1/2}(\theta,\phi) \\ \sqrt{\dfrac{\ell \mp m + 1/2}{2\ell + 1}}\,Y_{\ell\ m+1/2}(\theta,\phi) \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{2.55}$$

である。

問 2.6　$\boldsymbol{j}^2 = (\boldsymbol{\ell} + \boldsymbol{s})^2 = \boldsymbol{\ell}^2 + \boldsymbol{s}^2 + 2\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{s}$ である。これから $|(\ell\,\tfrac{1}{2})\,j\,m\,\rangle$ が

$$\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,|(\ell\,\tfrac{1}{2})\,j\,m\,\rangle = \varDelta_{j\ell}\,|(\ell\,\tfrac{1}{2})\,j\,m\,\rangle\,, \quad \varDelta_{j\ell} = \begin{cases} \ell & j = \ell + 1/2 \text{ のとき} \\ -(\ell+1) & j = \ell - 1/2 \text{ のとき} \end{cases}$$

を満たすことを示せ。

2.8　回転と角運動量

回転を考えるとき

1. 物理系を回転させ, 座標軸は固定しておく

2. 物理系は固定しておき, 座標軸を回転させる

の 2 つがある。物理系を回転させることと座標軸を逆に回転させることは同じであるが, 両者を混同しないためはっきり区別する。ここでは 1. の立場で回転を扱う。

単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ で指定された直線を軸とした角 θ の回転を考える。ただし $\theta > 0$ の回転とは $\boldsymbol{n}$ の方向に右ネジが進む場合を指す。この回転によりベクトル $\boldsymbol{a}$ が $\boldsymbol{a}'$ になったとすると, $\theta = \varepsilon$ が無限小ならば

$$\boldsymbol{a}' = \boldsymbol{a} + \varepsilon\, \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{a} \tag{2.56}$$

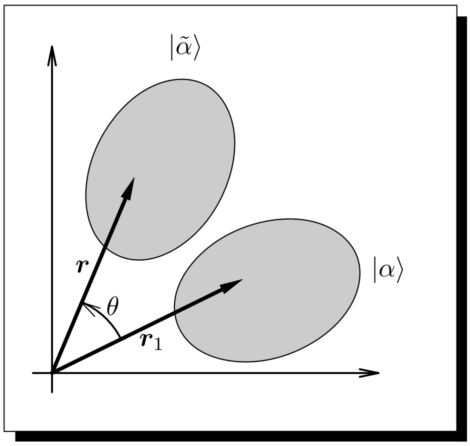
である。例えば, z 軸まわりの回転を考えると

$$a'_x = a_x \cos\varepsilon - a_y \sin\varepsilon = a_x - a_y\,\varepsilon\,, \quad a'_y = a_x \sin\varepsilon + a_y \cos\varepsilon = a_x\,\varepsilon + a_y\,, \quad a'_z = a_z$$

であるから

$$\boldsymbol{a}' = \boldsymbol{a} + \varepsilon\,(-a_y\,,\, a_x\,,\, 0) = \boldsymbol{a} + \varepsilon\,\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{a}\,, \quad \boldsymbol{n} = (0, 0, 1)$$

となる。



物理系を回転させれば, 回転後の系の状態 $|\tilde{\alpha}\rangle$ は回転前の状態 $|\alpha\rangle$ とは異なる。$|\alpha\rangle$ と $|\tilde{\alpha}\rangle$ を関係付ける演算子 R

$$|\tilde{\alpha}\rangle = R(\boldsymbol{n}, \theta)|\alpha\rangle$$

を求めよう。ここではスピン 0 粒子の場合を考え, その結果を一般化する。波動関数を

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r}|\alpha\rangle\,, \quad \tilde{\psi}(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r}|\tilde{\alpha}\rangle$$

とする。点 $\boldsymbol{r}$ における回転後の波動関数の値は, 回転すると $\boldsymbol{r}$ になる点 $\boldsymbol{r}_1$ における回転前の値に等しい:

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r}_1)$$

$\boldsymbol{r}_1$ は $\boldsymbol{r}$ を逆回転をして得られる点である。したがって, 無限小回転のとき (2.56) より $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r} - \varepsilon\,\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r}$ であるから

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r} - \varepsilon\,\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r}) - \varepsilon\;(\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r})$$

となる。$(\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla} = \boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla})$ を使うと

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{r}) = \Big(1 - \varepsilon\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla})\Big)\psi(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r}|\Big(1 - i\varepsilon\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\ell}\Big)|\alpha\rangle$$

ただし $\boldsymbol{\ell}$ は軌道角運動量である。無限小回転の場合, 回転演算子は

$$R(\boldsymbol{n}, \varepsilon) = 1 - i\varepsilon\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\ell}$$

で与えられる。これを一般化すれば, 系の全角運動量を $\boldsymbol{J}$ とするとき, 単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ まわりの無限小回転演算子は

$$R(\boldsymbol{n}, \varepsilon) = 1 - i\varepsilon\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J} \tag{2.57}$$

である。有限の回転は無限小回転の重ね合わせである。特に

$$R(\boldsymbol{n}, \theta + d\theta) = R(\boldsymbol{n}, d\theta)R(\boldsymbol{n}, \theta) = (1 - i\,d\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J})\,R(\boldsymbol{n}, \theta)$$

すなわち

$$\frac{dR(\boldsymbol{n},\theta)}{d\theta} = -i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}R(\boldsymbol{n},\theta)$$

である。したがって, $R(\boldsymbol{n},0)=1$ を考慮すると

$$R(\boldsymbol{n},\theta) = \exp\left(-i\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right) \tag{2.58}$$

を得る。この様に角運動量 $\boldsymbol{J}$ は回転の生成演算子である。

$R^\dagger(\boldsymbol{n},\theta) = \exp\left(+i\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right)$ であるから

$$RR^\dagger = R^\dagger R = 1 \tag{2.59}$$

R は**ユニタリー演算子** (unitary operator) であり

$$\langle\alpha'|\alpha'\rangle = \langle\alpha|R^\dagger R|\alpha\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle$$

状態ベクトルのノルムを保存する。

演算子を回転に対する変換性で分類する。基本的なものはスカラー演算子とベクトル演算子である。スカラー演算子とは回転により期待値が不変な演算子である。どんな回転でも無限小回転の積で表わせるから, 無限小回転に対する不変性を考えれば十分である。スカラー演算子を S とすると, 無限小回転に対する不変性は

$$\begin{aligned}\langle\alpha|S|\alpha\rangle = \langle\alpha'|S|\alpha'\rangle &= \langle\alpha|\left(1+i\varepsilon\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right)S\left(1-i\varepsilon\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right)|\alpha\rangle \\ &= \langle\alpha|\Big(S+i\varepsilon\left[\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\,,S\,\right]\Big)|\alpha\rangle\end{aligned}$$

したがって

$$[\,S\,,\boldsymbol{J}\,] = 0 \tag{2.60}$$

がスカラーの条件である。このとき S は**回転不変**であるという。

ベクトル演算子 $\boldsymbol{V}$ の場合, その期待値が普通のベクトルの変換に従うことを要請する。無限小変換では (2.56) と (2.57) から

$$\langle\alpha'|\boldsymbol{V}|\alpha'\rangle = \langle\alpha|\boldsymbol{V}|\alpha\rangle + \varepsilon\,\boldsymbol{n}\times\langle\alpha|\boldsymbol{V}|\alpha\rangle\,, \quad |\alpha'\rangle = \left(1-i\varepsilon\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right)|\alpha\rangle$$

つまり

$$\left(1+i\varepsilon\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right)\boldsymbol{V}\left(1-i\varepsilon\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right) = \boldsymbol{V} + \varepsilon\,\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}$$

である。整理すれば

$$[\,\boldsymbol{V}\,,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\,] = i\,\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}$$

あるいは $\boldsymbol{n}$ を j 軸方向の単位ベクトルにとり ($n_m = \delta_{jm}$), 直交成分で表わせば

$$[\,V_i\,,J_j\,] = i\left(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}\right)_i = i\,\varepsilon_{imk}n_mV_k = i\,\varepsilon_{ijk}V_k \tag{2.61}$$

である。$\boldsymbol{V}=\boldsymbol{J}$ とすると角運動量の交換関係 (2.5) を得る。古典的対応物がない系の場合, (2.57) を角運動量の定義式と見なしてよい。このときベクトル演算子の変換性から角運動量の交換関係が導出できる。

回転に限らないが, ある変換にたいする系の不変性と保存則及び状態の縮退の関連は重要である。系のハミルトニアン H が回転不変 $[H\,,\boldsymbol{J}\,]=0$ である場合を考える。時刻 t における系の状態を $|\,t\,\rangle$ とすると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\,t\,\rangle = H|\,t\,\rangle\,,\quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\,t\,| = \langle\,t\,|H$$

である。これから

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\,t\,|\boldsymbol{J}|\,t\,\rangle = i\hbar\frac{\partial\langle\,t\,|}{\partial t}\boldsymbol{J}|\,t\,\rangle + \langle\,t\,|\boldsymbol{J}\,i\hbar\frac{\partial|\,t\,\rangle}{\partial t} = \langle\,t\,|[\boldsymbol{J}\,,H\,]|\,t\,\rangle = 0$$

となり, 古典力学と同様に, 角運動量は保存する。

H が $\boldsymbol{J}$ と交換するとき H, $\boldsymbol{J}^2$, J_3 の同時固有ケットが存在する。これを $|n\,j\,m\rangle$ で表わし, そのエネルギー固有値を E_{njm} とする:

$$H|n\,j\,m\rangle = E_{njm}|n\,j\,m\rangle\,,\quad \boldsymbol{J}^2|n\,j\,m\rangle = j(j+1)|n\,j\,m\rangle\,,\quad J_3|n\,j\,m\rangle = m|n\,j\,m\rangle$$

n は状態を指定するのに必要な j, m 以外の量子数の組である。$[H\,,J_\pm\,]=0$ より

$$HJ_\pm|n\,j\,m\rangle = J_\pm H|n\,j\,m\rangle = E_{njm}J_\pm|n\,j\,m\rangle$$

つまり

$$H|n\,j\,m{\pm}1\rangle = E_{njm}|n\,j\,m{\pm}1\rangle$$

である。したがって $E_{njm\pm1}=E_{njm}$ となりエネルギー固有値は m によらない。j が与えられたとき回転不変な H の固有状態は $2j+1$ 重に縮退している。

問 2.7 (2.61) を使い, ベクトル演算子 $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$ の内積 $\boldsymbol{A}{\cdot}\boldsymbol{B}$ がスカラー演算子であることを示せ。

問 2.8 **問 2.5** で求めた $|\pm\rangle_n$ は, σ_3 の固有ケットである $|\pm\rangle$ を y 軸のまわりに角 θ だけ回し, 次に z 軸のまわりに角 ϕ 回せば得られる。この様にして得られた $|\pm\rangle_n$ が, **問 2.5** の結果と同等であることを示せ。ただし, $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{\sigma}/2$ である。

問 2.9 行列要素が $(s_k)_{mn} = -\,i\,\varepsilon_{kmn}$ である 3 つの 3×3 行列 s_1, s_2, s_3 を直交成分とするベクトル $\boldsymbol{s}$ を考える。ただし, ε_{kmn} は (2.4) で定義された反対称テンソルである。

1. ベクトル場 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ を $\boldsymbol{n}$ 軸のまわりに微小回転 ε したとき, 回転後のベクトル場を $\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r})$ とする。回転すると $\boldsymbol{r}$ になる点を $\boldsymbol{r}_1$ で表わすと, 点 $\boldsymbol{r}$ における $\boldsymbol{A}'$ は, $\boldsymbol{r}_1$ における $\boldsymbol{A}$ に回転を施せばよいから

$$\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_1) + \varepsilon\,\boldsymbol{n}{\times}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_1)\,,\quad \boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r} - \varepsilon\,\boldsymbol{n}{\times}\boldsymbol{r}$$

である。これは

$$\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r}) = \Big(1 - i\,\varepsilon\,\boldsymbol{n}{\cdot}(\boldsymbol{\ell}+\boldsymbol{s})\Big)\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\,,\quad \boldsymbol{\ell} = -\,i\boldsymbol{r}{\times}\boldsymbol{\nabla}$$

と書けることを示せ。ただし, $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix}$ で表わす。

2. s_1, s_2, s_3 は角運動量の交換関係を満たし, $\boldsymbol{s}^2 = 2$ となることを示せ。したがって, ベクトル場は $s = 1$ であるスピンを持つ。
3. s_1, s_2, s_3 を具体的に 3×3 行列で表わせ。これを使い, s_1, s_2, s_3 の固有値が 0, ±1 になることを確かめよ。

2.9 球面テンソル演算子

$2k+1$ 個の演算子 T_{kq} ($q = -k, -k+1, \cdots, k$) が系の全角運動量 $\boldsymbol{J}$ と交換関係

$$[\,J_\pm\,,\,T_{kq}\,] = \sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}\,T_{k\,q\pm1}\,, \quad [\,J_3\,,\,T_{kq}\,] = q\,T_{k\,q} \tag{2.62}$$

を満たすとき, T_{kq} を k **階球面テンソル演算子** (spherical tensor operator of rank k) という。(2.62) は角運動量の固有ケットの関係式 (2.16),(2.17) と類似したものである。

ベクトル演算子 $\boldsymbol{V}$ の直交成分から

$$V_{1\,1} = -\frac{V_1 + iV_2}{\sqrt{2}}\,, \quad V_{1\,0} = V_3\,, \quad V_{1\,-1} = \frac{V_1 - iV_2}{\sqrt{2}} \tag{2.63}$$

を定義し, 交換関係 (2.61) を $V_{1\,q}$ で書き換えると, (2.62) で $k=1$, $T_{1\,q} = V_{1\,q}$ としたものになる。したがって, ベクトル演算子は 1 階の球面テンソル演算子である。スカラー演算子は $\boldsymbol{J}$ と交換するから 0 階の球面テンソル演算子である。

任意の関数 $F = F(\theta, \phi)$ に対して

$$\ell_+ Y_{kq} F = \Big(\ell_+ Y_{kq}\Big) F + Y_{kq}\ell_+ F = \sqrt{(k-q)(k+q+1)}\,Y_{k\,q+1}F + Y_{kq}\ell_+ F$$

であるから, Y_{kq} を演算子と見なせば

$$[\,\ell_+\,,\,Y_{kq}\,] = \sqrt{(k-q)(k+q+1)}\,Y_{k\,q+1}$$

である。同様にして

$$[\,\ell_\pm\,,\,Y_{kq}\,] = \sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}\,Y_{k\,q\pm1}\,, \quad [\,\ell_3\,,\,Y_{kq}\,] = q\,Y_{k\,q}$$

である。したがって, Y_{kq} は k 階の球面テンソル演算子である。

球面テンソル演算子の主な性質は, 次の**ウィグナー・エッカルトの定理**で与えられる。$\boldsymbol{J}^2$, J_3 の同時固有ケットを $|\alpha\,j\,m\rangle$ とすると

$$\langle\alpha'\,j'\,m'|T_{kq}|\alpha\,j\,m\rangle = \langle j\,m\;k\,q|j'\,m'\rangle\,\frac{\langle\alpha'\,j'\,\|\,T_k\,\|\,\alpha\,j\,\rangle}{\sqrt{2j+1}} \tag{2.64}$$

である。α はケットを指定するために必要な j, m 以外の量子数の集合を表わす。この定理の重要な点は, 行列要素の m, m', q 依存性が CG 係数だけに現れることにある。$\langle\alpha'\,j'\,\|\,T_k\,\|\,\alpha\,j\,\rangle$ を**縮小行列要素** (reduced matrix element) という。因子 $\sqrt{2j+1}$ で割ってあるのは便宜上であり, この方が便利になることが多いからである。

[証明] (2.62) から

$$\begin{aligned} J_+\,T_{kq}|jm\rangle &= [\,J_+\,,\,T_{kq}\,]\,|jm\rangle + T_{kq}\,J_+|jm\rangle \\ &= \sqrt{(k-q)(k+q+1)}\,T_{k\,q+1}|jm\rangle + \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,T_{kq}|j\,m{+}1\rangle \end{aligned}$$

である。したがって

$$|(jk)j'\,m'\rangle \equiv \sum_{m\,q} T_{kq}|j\,m\rangle\langle j\,m\;k\,q|j'\,m'\rangle$$

とすると

$$\begin{aligned}
J_+\,|(jk)j'\,m'\rangle &= \sum_{m\,q}\langle j\,m\;k\,q|j'\,m'\rangle\Big(\sqrt{(k-q)(k+q+1)}\,T_{k\,q+1}|jm\rangle \\
&\qquad + \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,T_{kq}|j\,m{+}1\rangle\Big) \\
&= \sum_{m\,q} T_{k\,q}|jm\rangle\Big(\langle j\,m\;k\,q{-}1|j'\,m'\rangle\sqrt{(k-q+1)(k+q)} \\
&\qquad + \langle j\,m{-}1\;k\,q|j'\,m'\rangle\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\Big)
\end{aligned}$$

CG 係数の漸化式 (2.46) を使うと

$$\begin{aligned}
J_+\,|(jk)j'\,m'\rangle &= \sqrt{(j'-m')(j'+m'+1)}\,\sum_{m\,q} T_{k\,q}|jm\rangle\langle j\,m\;k\,q|j'\,m'{+}1\rangle \\
&= \sqrt{(j'-m')(j'+m'+1)}\,|(jk)j'\,m'{+}1\rangle
\end{aligned}$$

を得る。同様にして

$$\begin{aligned}
J_\pm\,|(jk)j'\,m'\rangle &= \sqrt{(j'\mp m')(j'\pm m'+1)}\,|(jk)j'\,m'\pm 1\rangle \\
J_3\,|(jk)j'\,m'\rangle &= m'\,|(jk)j'\,m'\rangle
\end{aligned} \tag{2.65}$$

である。これは角運動量の固有ケットが満たす関係式 (2.16),(2.17) と同じであるから

$$\langle j'\,m'|(jk)j''\,m''\rangle = \delta_{j'j''}\delta_{m'm''}\langle j'\,m'|(jk)j'\,m'\rangle$$

である。CG 係数の直交性 (2.45) より

$$\begin{aligned}
\sum_{j'\,m'}|(jk)j'\,m'\rangle\langle j\,m\;k\,q|j'\,m'\rangle &= \sum_{j'\,m'}\sum_{m''\,q''} T_{kq''}|j\,m''\rangle\langle j\,m''\;k\,q''|j'\,m'\rangle\langle j\,m\;k\,q|j'\,m'\rangle \\
&= \sum_{m''\,q''} T_{kq''}|j\,m''\rangle\,\delta_{mm''}\delta_{qq''} \\
&= T_{kq}|j\,m\rangle
\end{aligned}$$

となるから

$$\langle j'\,m'|T_{kq}|j\,m\rangle = \sum_{j''\,m''}\langle j'\,m'|(jk)j''\,m''\rangle\langle j\,m\;k\,q|j''\,m''\rangle = \langle j\,m\;k\,q|j'\,m'\rangle C_{m'}$$

である。ただし $C_{m'} = \langle j'\,m'|(jk)j'\,m'\rangle$ とした。後は $C_{m'}$ が m' によらないことを示せばよい。

$$\begin{aligned}
\langle j'\,m'|J_-J_+|(jk)j'\,m'\rangle &= \langle j'\,m'|\boldsymbol{J}^2 - J_3(J_3+1)|(jk)j'\,m'\rangle \\
&= \left(j'(j'+1) - m'(m'+1)\right)C_{m'}
\end{aligned}$$

であるが, (2.16), (2.65) を使えば

$$\langle j'\,m'|J_-J_+|(jk)j'\,m'\rangle = (j'-m')(j'+m'+1)C_{m'+1}$$

となる。したがって, $C_{m'+1} = C_{m'}$ であり, $C_{m'}$ は m' に依らない。そこで

$$\langle j'\,m'|(jk)j'\,m'\rangle = \frac{\langle j' \parallel T_k \parallel j\,\rangle}{\sqrt{2j+1}}$$

とおけば

$$\langle j'\,m'|T_{kq}|j\,m\rangle = \langle j\,m\;k\,q|j'\,m'\rangle\,\frac{\langle j' \parallel T_k \parallel j\,\rangle}{\sqrt{2j+1}}$$

となる。以上で (2.64) が証明された。

- ウィグナー・エッカルトの定理には CG 係数 $\langle j\,m\;k\,q|j'\,m'\rangle$ が含まれている。この CG 係数の性質から, 行列要素 $\langle \alpha'\,j'\,m'|T_{kq}|\alpha\,j\,m\rangle$ が 0 でないためには

$$m+q=m'\,,\quad |j-k| \le j' \le j+k$$

を同時に満たすことが必要である。

- 具体的な例として, 0 階のテンソル, つまり, スカラー演算子 $T_{00}=S$ の行列要素は

$$\langle \alpha'\,j'\,m'|\,S\,|\alpha\,j\,m\rangle = \langle j\,m\;0\,0|j'\,m'\rangle\,\frac{\langle \alpha'\,j' \parallel S \parallel \alpha\,j\,\rangle}{\sqrt{2j+1}} = \delta_{jj'}\delta_{mm'}\frac{\langle \alpha'\,j \parallel S \parallel \alpha\,j\,\rangle}{\sqrt{2j+1}}$$

である。スカラー演算子は j や m の値を変えることはできない。また, 行列要素は m に依らない。ベクトル演算子は $k=1$ であるから

$$j' = \begin{cases} j-1,\, j,\, j+1 & j \ge 1\ \text{のとき} \\ 1-j,\, j,\, j+1 & 0 \le j < 1\ \text{のとき} \end{cases}$$

となる。したがって $j=0 \to j'=0$ の遷移はできない。また, $j=0$ 状態でのベクトル演算子の期待値は 0 である。

- ベクトル演算子で $j'=j$ の場合

$$\langle \alpha'\,j\,m'|\boldsymbol{V}|\alpha\,j\,m\rangle = \frac{\langle \alpha'\,j\,m|\,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V}\,|\alpha\,j\,m\rangle}{j(j+1)}\,\langle j\,m'|\boldsymbol{J}|j\,m\rangle \tag{2.66}$$

が成り立つ。これを**射影定理** (projection theorem) という。古典力学的には, $\boldsymbol{V}$ を $\boldsymbol{J}$ 方向成分 $\boldsymbol{V}_J$ とこれに垂直な成分に分解すると, $\boldsymbol{J}$ 方向の単位ベクトル $\boldsymbol{e}_J$ は $\boldsymbol{e}_J = \boldsymbol{J}/|\boldsymbol{J}|$ であるから

$$\boldsymbol{V}_J = \boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{e}_J\,\boldsymbol{e}_J = \frac{\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{J}}{\boldsymbol{J}^2}\boldsymbol{J}$$

となる。したがって, (2.66) では $\boldsymbol{V}$ の $\boldsymbol{J}$ 方向に射影した成分だけが寄与をする。このため射影定理と呼ばれる。

[証明]　内積 $\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{J}$ はベクトルの球面テンソル 表現 (2.63) を使うと

$$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V} = \sum_q (-1)^q J_{1\,q} V_{1\,-q}$$

と書けるから, ウィグナー・エッカルトの定理を使うと

$$\begin{aligned}
\langle \alpha'\,j\,m|\,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V}\,|\alpha\,j\,m\rangle &= m\,\langle \alpha'\,j\,m|\,V_{1\,0}\,|\alpha\,j\,m\rangle \\
&\quad + \sqrt{(j+m)(j-m+1)/2}\,\langle \alpha'\,j\,m{-}1|\,V_{1\,-1}\,|\alpha\,j\,m\rangle \\
&\quad - \sqrt{(j-m)(j+m+1)/2}\,\langle \alpha'\,j\,m{+}1|\,V_{1\,1}\,|\alpha\,j\,m\rangle \\
&= C_j\,\frac{\langle \alpha'\,j \parallel V \parallel \alpha\,j\,\rangle}{\sqrt{2j+1}}
\end{aligned} \tag{2.67}$$

となる。ただし

$$C_j = m\,\langle j\,m\;1\,0|j\,m\rangle + \sqrt{(j+m)(j-m+1)/2}\,\langle j\,m\;1\;{-1}|j\,m{-}1\rangle$$
$$- \sqrt{(j-m)(j+m+1)/2}\,\langle j\,m\;1\,1|j\,m{+}1\rangle$$

である。スカラー演算子 $\boldsymbol{J}{\cdot}\boldsymbol{V}$ の行列要素は m に依存しないから, C_j も m に依らない。ウィグナー・エッカルトの定理と (2.67) より

$$\begin{aligned}\langle \alpha'\,j\,m'|V_{1\,q}|\alpha\,j\,m\rangle &= \langle j\,m\;1\,q|j'\,m'\rangle\,\frac{\langle \alpha'\,j\parallel V\parallel \alpha\,j\,\rangle}{\sqrt{2j+1}} \\ &= \frac{\langle j\,m\;1\,q|j'\,m'\rangle}{C_j}\,\langle \alpha'\,j\,m|\,\boldsymbol{J}{\cdot}\boldsymbol{V}\,|\alpha\,j\,m\rangle \end{aligned} \tag{2.68}$$

となる。ここで $V_{1\,q} = J_{1\,q}$ とすると

$$\langle j\,m'|J_{1\,q}|j\,m\rangle = \frac{\langle j\,m\;1\,q|j'\,m'\rangle}{C_j}\,\langle j\,m|\,\boldsymbol{J}^2\,|j\,m\rangle = \frac{\langle j\,m\;1\,q|j'\,m'\rangle}{C_j}\,j(j+1) \tag{2.69}$$

である。したがって, (2.68) と (2.69) から

$$\langle \alpha'\,j\,m'|V_{1\,q}|\alpha\,j\,m\rangle = \frac{\langle \alpha'\,j\,m|\,\boldsymbol{j}{\cdot}\boldsymbol{V}\,|\alpha\,j\,m\rangle}{j(j+1)}\,\langle j\,m'|J_{1\,q}|j\,m\rangle$$

を得る。

問 2.10 2 つの球面テンソル演算子 $T_{k_1\,q_1}$, $T_{k_2\,q_2}$ から

$$(T_{k_1}T_{k_2})_{kq} \equiv \sum_{q_1\,q_2} \langle k_1\,q_1\;\;k_2\,q_2|k\,q\rangle\,T_{k_1\,q_1}T_{k_2\,q_2}$$

を定義する。$(T_{k_1}T_{k_2})_{kq}$ が k 階の球面テンソル演算子であることを示せ。

3　時間反転

3.1　反線形演算子

c_1, c_2 を定数とするとき

$$T\Big(c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle\Big) = c_1^*\Big(T|a_1\rangle\Big) + c_2^*\Big(T|a_2\rangle\Big)$$

を満たす演算子 T を反線形演算子という。

反線形演算子 T の注意すべき性質

1. 内積 $[\langle a|(T|b\rangle)]^*$ は $|b\rangle$ について線形である。つまり $f(|b\rangle) = [\langle a|(T|b\rangle)]^*$ とすると

$$f(c_1|b_1\rangle + c_2|b_2\rangle) = c_1 f(|b_1\rangle) + c_2 f(|b_2\rangle)$$

である。したがって

$$[\langle a|(T|b\rangle)\,]^* = \langle a'|b\rangle$$

とおける。このブラ $\langle a'|$ を

$$\langle a'| = \langle a|T$$

と定義する。この定義により

$$[\langle a|(T|b\rangle)\,]^* = (\langle a|T)|b\rangle \tag{3.1}$$

である。内積を表す式では, T がブラに作用するかケットに作用するかを明示する必要がある。

2. $\langle a| = c_1\langle a_1| + c_2\langle a_2|$ とすると

$$[\langle a|(T|b\rangle)\,]^* = \Big[c_1\langle a_1|(T|b\rangle) + c_2\langle a_2|(T|b\rangle)\Big]^* = c_1^*\,(\langle a_1|T)|b\rangle + c_2^*\,(\langle a_2|T)|b\rangle$$

これと $[\langle a|(T|b\rangle)\,]^* = (\langle a|T)|b\rangle$ より

$$\Big(c_1\langle a_1| + c_2\langle a_2|\Big)T = c_1^*\Big(\langle a_1|T\Big) + c_2^*\Big(\langle a_2|T\Big)$$

である。ブラに対しても T は反線形である。

3. c を定数とすると

$$Tc = c^*T$$

である。実数でない定数は反線形演算子 T と交換しない。

4. 2 つの反線形演算子 T_1, T_2 の積 T_1T_2 を

$$(T_1T_2)|a\rangle = T_1(T_2|a\rangle)$$

で定義する。反線形演算子の積 T_1T_2 は線形演算子である。

$$\begin{aligned}
\langle a|(T_1T_2)|b\rangle &= \langle a|(T_1T_2|b\rangle) && T_1T_2\text{ は線形演算子} \\
&= \langle a|\Big(T_1(T_2|b\rangle)\Big) && \text{積の定義} \\
&= [(\langle a|T_1)(T_2|b\rangle)]^* && (3.1) \\
&= \Big((\langle a|T_1)T_2\Big)|b\rangle && \text{再び (3.1)} \\
&= (\langle a|T_1T_2)|b\rangle && \text{積の定義}
\end{aligned}$$

となる。$\langle a|(T_1T_2)|b\rangle$ における括弧は省略できない。

エルミート共役 線形演算子と同様に $|\beta\rangle = T|\alpha\rangle$ であるとき

$$\langle\beta| = \langle\alpha|T^\dagger$$

でエルミート共役 $T^\dagger$ を定義する。$T^\dagger$ も反線形演算子である。また

$$\langle\gamma|(T|\alpha\rangle) = \langle\gamma|\beta\rangle = \langle\beta|\gamma\rangle^* = (\langle\alpha|T^\dagger)|\gamma\rangle^* = \langle\alpha|(T^\dagger|\gamma\rangle) \tag{3.2}$$

となる。これは線形演算子 F に対する関係式

$$\langle\gamma|F|\alpha\rangle = \langle\alpha|F^\dagger|\gamma\rangle^*$$

とは異なる。

反ユニタリ演算子 T が反線形演算子で

$$TT^\dagger = T^\dagger T = 1$$

であるとき, T を反ユニタリ演算子という。反ユニタリ演算子 T により, 1 つの反ユニタリ変換

$$|\,\overline{a}\,\rangle = T|a\rangle\,, \quad \langle\,\overline{a}\,| = \langle a|T^\dagger\,, \quad \overline{F} = TFT^\dagger$$

が定まる。ただし, F は線形演算子である。

1. 内積はその共役複素数に変換される:

$$\langle\,\overline{a}_1\,|\,\overline{F}\,|\,\overline{a}_2\,\rangle = \langle a_1|F|a_2\rangle^* \tag{3.3}$$

   なぜなら

$$\begin{aligned}
\langle\,\overline{a}_1\,|\,\overline{F}\,|\,\overline{a}_2\,\rangle &= \Big(\langle a_1|T^\dagger\Big)\Big(TFT^\dagger\Big)\Big(T|a_2\rangle\Big) \\
&= \Big(\langle a_1|T^\dagger\Big)\Big(TFT^\dagger T|a_2\rangle\Big) && TFT^\dagger \text{ は線形演算子} \\
&= \Big(\langle a_1|T^\dagger\Big)\Big(TF|a_2\rangle\Big) && T^\dagger T = 1 \\
&= \Big[\langle a_1|\Big(T^\dagger(TF|a_2\rangle)\Big)\Big]^* && (3.1) \\
&= \big[\langle a_1|(T^\dagger TF|a_2\rangle)\big]^* && \text{演算子の積の定義} \\
&= \langle a_1|F|a_2\rangle^* && T^\dagger T = 1
\end{aligned}$$

2. 定数 c も共役複素数になる。

$$TcT^\dagger = c^*$$

3. 反ユニタリ変換により, ブラ・ケット及び演算子の間の関係式は, 初めの関係式で係数を共役複素数に置き換えた関係式を満たす。例えば

$$[\,x\,,\,p\,] = i\hbar$$

   は

$$[\,\overline{x}\,,\,\overline{p}\,] = -i\hbar$$

   となる。

3.2　反線形演算子の表現

$\{\,|a\rangle\,\}$ を完全規格直交系とする。K_A を

$$K_\mathrm{A}|a\rangle = |a\rangle \tag{3.4}$$

を満たす反線形演算子とする。これで K_A の作用は完全に決まる。例えば, 任意のケット $|\alpha\rangle$ に対しては

$$K_\mathrm{A}|\alpha\rangle = K_\mathrm{A}\sum_a |a\rangle\langle a|\alpha\rangle = \sum_a \langle a|\alpha\rangle^* K_\mathrm{A}|a\rangle = \sum_a \langle a|\alpha\rangle^*\,|a\rangle \tag{3.5}$$

である。

- もし K_A が線形ならば

$$K_\mathrm{A} = K_\mathrm{A}\Big(\sum_a |a\rangle\langle a|\Big) = \sum_a \Big(K_\mathrm{A}|a\rangle\Big)\langle a| = \sum_a |a\rangle\langle a| = 1$$

であるが, 反線形の場合には 2 番目 = 3 番目 は成り立たないから $K_\mathrm{A}=1$ ではない。しかし, K_A^2 は線形演算子であるから

$$K_\mathrm{A}^2 = K_\mathrm{A}^2\Big(\sum_a |a\rangle\langle a|\Big) = \sum_a \Big(K_\mathrm{A}^2|a\rangle\Big)\langle a| = \sum_a |a\rangle\langle a| = 1 \tag{3.6}$$

である。また, 任意の状態 $|\alpha\rangle$ に対して

$$K_\mathrm{A}^\dagger|\alpha\rangle = \sum_a |a\rangle\langle a|(K_\mathrm{A}^\dagger|\alpha\rangle) = \sum_a |a\rangle\,\Big[(\langle a|K_\mathrm{A}^\dagger)|\alpha\rangle\Big]^* = \sum_a |a\rangle\langle a|\alpha\rangle^* = K_\mathrm{A}|\alpha\rangle$$

となるから

$$K_\mathrm{A}^\dagger = K_\mathrm{A} \tag{3.7}$$

(3.6) と (3.7) より $K_\mathrm{A}^\dagger K_\mathrm{A} = K_\mathrm{A}K_\mathrm{A}^\dagger = K_\mathrm{A}^2 = 1$, つまり K_A は反ユニタリである。

- 表現 $\{|a\rangle\}$ における状態 $|\overline{\alpha}\rangle = K_\mathrm{A}|\alpha\rangle$ の波動関数 $\psi_{\overline{\alpha}}(a) \equiv \langle a|\Big(K_\mathrm{A}|\alpha\rangle\Big)$ は (3.5) より

$$\psi_{\overline{\alpha}}(a) = \langle a|\alpha\rangle^* = \psi_\alpha^*(a)\,,\quad \psi_\alpha(a) = \langle a|\alpha\rangle$$

である。また, 線形演算子 $\overline{F} = K_\mathrm{A}FK_\mathrm{A}^\dagger$ の行列要素は, $|\overline{a}\rangle = K_A|a\rangle = |a\rangle$ と (3.3) から

$$\langle a|\,\overline{F}\,|a'\rangle = \langle\overline{a}|\,\overline{F}\,|\overline{a'}\rangle = \langle a|\,F\,|a'\rangle^*$$

となる。したがって, 表現 $\{|a\rangle\}$ における K_A の作用は, 単に複素共役を取ることと同等である。全ての a, a' に対して $\langle a|\,F\,|a'\rangle$ が実数か純虚数の場合, F の反ユニタリ変換は

$$KFK^\dagger = \begin{cases} F\,, & \langle a|\,F\,|a'\rangle \text{ が実数} \\ -F\,, & \langle a|\,F\,|a'\rangle \text{ が純虚数} \end{cases} \tag{3.8}$$

となる。

- 任意の反線形演算子は線形演算子と K_A の積で表わせる。反線形演算子を T とすると

$$T = TK_\mathrm{A}^2 = FK_\mathrm{A}\,,\quad F = TK_\mathrm{A}$$

T と K_A は反線形であるから F は線形である。

- $\{\,|a\rangle\,\}$ とは別の完全規格直交系を $\{\,|b\rangle\,\}$ とする。K_A と同様に K_B を
$$K_\mathrm{B}|b\rangle = |b\rangle$$
を満たす反線形演算子とする。任意の状態 $|\alpha\rangle$ に対して
$$K_\mathrm{B}|\alpha\rangle = K_\mathrm{B}\sum_b |b\rangle\langle b|\alpha\rangle = \sum_b |b\rangle\langle b|\alpha\rangle^* = \sum_{ba} |b\rangle\langle b|a\rangle^*\langle a|\alpha\rangle^*$$
$\langle a|b\rangle$ がすべての a, b について実数ならば
$$K_\mathrm{B}|\alpha\rangle = \sum_{ba} |b\rangle\langle b|a\rangle\langle a|\alpha\rangle^* = \sum_a |a\rangle\langle a|\alpha\rangle^*$$
となるから, $K_\mathrm{B}|\alpha\rangle = K_\mathrm{A}|\alpha\rangle$, つまり $K_\mathrm{B} = K_\mathrm{A}$ である。しかし, $\langle a|b\rangle$ が実数でないならば $K_\mathrm{B} \neq K_\mathrm{A}$ であり $K_\mathrm{B}|a\rangle = |a\rangle$ ではない。

3.3 時間反転：スピン 0 の場合

ニュートン方程式
$$\frac{d\boldsymbol{p}(t)}{dt} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}(t))\,, \quad \boldsymbol{p}(t) = m\frac{d\boldsymbol{r}(t)}{dt}$$
を考える。
$$\overline{\boldsymbol{r}}(t) = \boldsymbol{r}(-t) \tag{3.9}$$
とすると ($s = -t$)
$$\overline{\boldsymbol{p}}(t) = m\frac{d\overline{\boldsymbol{r}}(t)}{dt} = m\frac{ds}{dt}\frac{d\boldsymbol{r}(s)}{ds} = -\boldsymbol{p}(s) = -\boldsymbol{p}(-t) \tag{3.10}$$
$$\frac{d\overline{\boldsymbol{p}}(t)}{dt} = -\frac{d\boldsymbol{p}(s)}{dt} = \frac{d\boldsymbol{p}(s)}{ds} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}(s)) = \boldsymbol{F}(\overline{\boldsymbol{r}}(t))$$
したがって, 保存力が作用する場合, 時間を反転した運動 $\overline{\boldsymbol{r}}(t)$ もニュートン方程式の解である。これがニュートン力学での時間反転不変性である。

波動関数の時間変化はシュレディンガー方程式
$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r},t)$$
で決まる。ここで
$$\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t) \equiv \psi^*(\boldsymbol{r},-t)$$
とすると
$$i\hbar\frac{\partial\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = i\hbar\frac{ds}{dt}\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},s)}{\partial s} = -i\hbar\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},s)}{\partial s} = \left[i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},s)}{\partial s}\right]^*$$
であるから
$$i\hbar\frac{\partial\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r},s)\right]^* = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\boldsymbol{r})\right)\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)$$
となる。$\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t) = \psi^*(\boldsymbol{r},-t)$ もシュレディンガー方程式の解である。

位置と運動量に期待値を考える。
$$\boldsymbol{r}_\mathrm{av}(t) = \int d^3r\,\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)\,, \quad \overline{\boldsymbol{r}}_\mathrm{av}(t) = \int d^3r\,\boldsymbol{r}\overline{\psi}^*(\boldsymbol{r},t)\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)$$

$$\boldsymbol{p}_{\rm av}(t) = -i\hbar\int d^3r\,\psi^*(\boldsymbol{r},t)\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r},t)\,,\quad \overline{\boldsymbol{p}}_{\rm av}(t) = -i\hbar\int d^3r\,\overline{\psi}^*(\boldsymbol{r},t)\boldsymbol{\nabla}\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)$$

とすると $\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)$ の定義から

$$\overline{\boldsymbol{r}}_{\rm av}(t) = \boldsymbol{r}_{\rm av}(-t) \tag{3.11}$$

である。また, 部分積分を使うと

$$\overline{\boldsymbol{p}}_{\rm av}(t) = i\hbar\int d^3r\,\psi^*(\boldsymbol{r},-t)\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r},-t) = -\boldsymbol{p}_{\rm av}(-t) \tag{3.12}$$

である。(3.11) と (3.12) はそれぞれニュートン力学における (3.9) と (3.10) に対応する。したがって, 波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ の時間反転した状態は $\psi^*(\boldsymbol{r},-t)$ で記述される。

時間反転を行う演算子 K は波動関数を複素共役に変換する必要があるから, K として反線形演算子を採用すればよい。位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ の固有ケット $|\boldsymbol{r}\rangle$

$$\hat{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{r}\rangle = \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}\rangle$$

に対して

$$K|\boldsymbol{r}\rangle = |\boldsymbol{r}\rangle\,,\quad KK^\dagger = K^\dagger K = 1$$

を満たす反線形演算子を考える。位置と運動量の演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$, $\hat{\boldsymbol{p}}$ は

$$\langle\boldsymbol{r}|\,\hat{\boldsymbol{r}}\,|\boldsymbol{r}'\rangle = \boldsymbol{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \text{実数}$$

$$\langle\boldsymbol{r}|\,\hat{\boldsymbol{p}}\,|\boldsymbol{r}'\rangle = -i\hbar\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}{\partial\boldsymbol{r}} = \text{純虚数}$$

であるから, (3.8) より

$$K\hat{\boldsymbol{r}}K^\dagger = \hat{\boldsymbol{r}}\,,\quad K\hat{\boldsymbol{p}}K^\dagger = -\hat{\boldsymbol{p}} \tag{3.13}$$

これはニュートン力学のと対応関係から成り立つべき関係式である。

ハミルトニアン H が

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

である場合, (3.13) から

$$KHK^\dagger = H\,,\quad \text{つまり}\ \ [\,H\,,K\,] = 0$$

を満たす。H は時間反転に関して不変である。シュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle = H|t\rangle$$

に反線形演算子 K を作用させると, $Ki = -iK$, $KH = HK$ であるから

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K|t\rangle = HK|t\rangle$$

したがって

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K|-t\rangle = HK|-t\rangle$$

$|\,t\,\rangle$ がシュレディンガー方程式の解ならば $|\,\bar{t}\,\rangle \equiv K|-t\rangle$ も解である。波動関数で書けば

$$\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t) \equiv \langle\boldsymbol{r}|\Big(K|-t\rangle\Big) = \Big[\Big(\langle\boldsymbol{r}|K\Big)|-t\rangle\Big]^* = \langle\boldsymbol{r}|-t\,\rangle^* = \psi^*(\boldsymbol{r},-t)$$

である。これは前に導いた結果である。$\hat{\boldsymbol{r}}$, $\hat{\boldsymbol{p}}$ がエルミート演算子であることと (3.13) を使うと

$$\langle\,\bar{t}\,|\,\hat{\boldsymbol{r}}\,|\,\bar{t}\,\rangle = \Big[\langle -t|\Big(K^\dagger\hat{\boldsymbol{r}}K|-t\rangle\Big)\Big]^* = \langle -t|\hat{\boldsymbol{r}}|-t\rangle^* = \langle -t|\,\hat{\boldsymbol{r}}\,|-t\rangle\,,$$

同様にして

$$\langle\,\bar{t}\,|\,\hat{\boldsymbol{p}}\,|\,\bar{t}\,\rangle = -\langle -t|\,\hat{\boldsymbol{p}}\,|-t\rangle$$

である。これらは (3.11), (3.12) である。

3.4　時間反転：スピンが 0 でない場合

時間反転をスピン $\boldsymbol{s}$ を持つ粒子に拡張する。軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ は

$$K\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}K^\dagger = -\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$$

である。スピンも角運動量の一種であるから軌道角運動量と同じ変換をしなければならない。したがって

$$K\hat{\boldsymbol{r}}K^\dagger = \hat{\boldsymbol{r}}\,,\quad K\hat{\boldsymbol{p}}K^\dagger = -\hat{\boldsymbol{p}}\,,\quad K\boldsymbol{s}K^\dagger = -\boldsymbol{s} \tag{3.14}$$

を満たす反線形演算子 K を求める必要がある。

$\hat{\boldsymbol{r}}$, $\boldsymbol{s}^2$, s_z の同時固有ケットを $|\boldsymbol{r},\,m\rangle$ とする:

$$\hat{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{r},\,m\rangle = \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r},\,m\rangle\,,\quad \boldsymbol{s}^2|\boldsymbol{r},\,m\rangle = s(s+1)|\boldsymbol{r},\,m\rangle\,,\quad s_z|\boldsymbol{r},\,m\rangle = m|\boldsymbol{r},\,m\rangle$$

反線形演算子 K_0 を

$$K_0|\boldsymbol{r},\,m\rangle = |\boldsymbol{r},\,m\rangle$$

で定義する。(3.8) から

$$K_0FK_0^\dagger = \begin{cases} F\,, & \langle\boldsymbol{r},\,m|F|\boldsymbol{r}',\,m'\rangle \text{ が実数} \\ -F\,, & \langle\boldsymbol{r},\,m|F|\boldsymbol{r}',\,m'\rangle \text{ が純虚数} \end{cases} \tag{3.15}$$

$s_\pm \equiv s_x \pm is_y$ とすると

$$\langle m|s_+|m'\rangle = \delta_{m\,m'+1}\sqrt{s(s+1)-m'(m'+1)}$$
$$\langle m|s_-|m'\rangle = \delta_{m\,m'-1}\sqrt{s(s+1)-m'(m'-1)}$$

であるから, 行列要素 $\langle m|\boldsymbol{s}|m'\rangle$ は s_z と $s_x=(s_++s_-)/2$ の場合は実数, $s_y=(s_+-s_-)/(2i)$ は純虚数になる。これから

$$K_0\hat{\boldsymbol{r}}K_0^\dagger = \hat{\boldsymbol{r}}\,,\quad K_0\hat{\boldsymbol{p}}K_0^\dagger = -\hat{\boldsymbol{p}}$$
$$K_0s_xK_0^\dagger = s_x\,,\quad K_0s_yK_0^\dagger = -s_y\,,\quad K_0s_zK_0^\dagger = s_z$$

である。スピンを持つ粒子に対しては複素共役演算子 K_0 だけでは時間反転 (3.14) を満たさない。ところで, 一般に, 反線形演算子 K は線形演算子 F を用いて

$$K = FK_0$$

と表せるから, (3.14) が成り立つように F を定めよう。$K_0^2=1$ より $F=KK_0$, $F^\dagger=K_0^\dagger K^\dagger$ である。したがって, 上の K_0 による変換と (3.14) より

$$F\hat{\boldsymbol{r}}F^\dagger=\hat{\boldsymbol{r}}\,,\quad F\hat{\boldsymbol{p}}F^\dagger=\hat{\boldsymbol{p}}$$

$$Fs_xF^\dagger=-s_x\,,\quad Fs_yF^\dagger=s_y\,,\quad Fs_zF^\dagger=-s_z$$

F は s_x と s_z の向きだけを変えるから, スピンについて y 軸のまわりに π 回転させる演算子をとればよい。したがって

$$F=c\,e^{-i\pi s_y}\,,\quad c=\text{位相因子}$$

c は物理的意味を持たないから, ここでは $c=1$ とする。以上から, スピンを持つ粒子に対する時間反転演算子は

$$K=e^{-i\pi s_y}K_0 \tag{3.16}$$

である。

- $K_0is_yK_0=is_y$ に右側から K_0 をかけ $K_0^2=1$ を使うと

$$K_0is_y=is_yK_0$$

  K_0 と is_y は交換する。したがって

$$K=e^{-i\pi s_y}K_0=K_0e^{-i\pi s_y}$$

- スピン 1/2 の場合

$$e^{-i\pi s_y}=e^{-i\pi\sigma_y/2}=\cos(\pi/2)-i\sigma_y\sin(\pi/2)=-i\sigma_y$$

  であるから

$$K=-i\sigma_yK_0$$

- N 粒子系の場合は, 粒子 k の s_y を $(s_y)_k$ で表せば

$$K=e^{-i\pi S_y}K_0=K_0e^{-i\pi S_y}\,,\quad S_y=\sum_{k=1}^{N}(s_y)_k$$

  である。K は $K^\dagger K=KK^\dagger=1$ を満たす反ユニタリ演算子であるが

$$K^2=e^{-i\pi S_y}K_0^2e^{-i\pi S_y}=e^{-i\pi S_y}e^{-i\pi S_y}=e^{-i2\pi S_y}$$

  は 1 とは限らない。スピン 1/2 の場合 $e^{-i2\pi s_y}=-1$ であるから, スピン 1/2 の N 粒子系では $K^2=(-1)^N$ である。N が奇数のとき, $K^2=-1$, $KK^\dagger=1$ より $K^\dagger=-K$。したがって, エルミート共役の性質 (3.2) から, 任意の状態 $|\alpha\rangle$ に対して

$$\langle\alpha|\Big(K|\alpha\rangle\Big)=\langle\alpha|\Big(K^\dagger|\alpha\rangle\Big)=-\langle\alpha|\Big(K|\alpha\rangle\Big)=0$$

  $|\alpha\rangle$ と $K|\alpha\rangle$ は直交する。

- $|\alpha\rangle$ をハミルトニアン H の固有値 E_α に属する固有ケット

$$H|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$$

とする。H が時間反転に対して不変ならば, H と K は交換する。また, E_α も実数である K と交換する。したがって, 両辺に時間反転演算子 K を作用すると

$$H\Big(K|\alpha\rangle\Big) = E_\alpha\Big(K|\alpha\rangle\Big)$$

となる。奇数個のスピン 1/2 系では $|\alpha\rangle$ と $K|\alpha\rangle$ は直交し別の状態であるから, H の各固有値は少なくとも 2 重に縮退している。これをクラマースの縮退という。

4　密度演算子とカレント密度演算子

4.1　定義

$$\text{密度演算子}\qquad \hat\rho(\boldsymbol{r}) = \delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})$$

$$\text{カレント密度演算子}\quad \hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2m}\Big(\hat{\boldsymbol{p}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}) + \delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\,\hat{\boldsymbol{p}}\Big)$$

$\boldsymbol{r}$ は 3 つの実数 x, y, z からなるベクトル, $\hat{\boldsymbol{r}}$ は粒子の位置演算子, $\hat{\boldsymbol{p}}$ は運動量演算子であり, 交換関係

$$[\,\hat r_i\,,\,\hat p_j\,] = i\hbar\delta_{ij}\,,\quad i,j = x,y,z$$

を満たす。$\boldsymbol{r}$ は 3 つの実数の組であり演算子ではないから $\hat{\boldsymbol{p}}$ と交換する。

- $\hat{\boldsymbol{r}}$ の固有ケット $|\boldsymbol{r}\rangle$

  $$\hat{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{r}\rangle = \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}\rangle$$

  を基底ケットにとれば, $\hat{\boldsymbol{p}}$ は

  $$\langle\boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\frac{\partial\langle\boldsymbol{r}|}{\partial\boldsymbol{r}}\,,\qquad \frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}} \equiv \boldsymbol{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}\,,\frac{\partial}{\partial y}\,,\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

  となり $\boldsymbol{r}$ の微分で表せる。これは $|\boldsymbol{r}\rangle$ を基底ケットにとった場合の話であり, 別の基底をとれば変わってくる。例えば, $\hat{\boldsymbol{p}}$ 自体の固有ケット

  $$\hat{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{p}\rangle = \boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}\rangle$$

  を基底にとれば, $\hat{\boldsymbol{p}}$ は普通のベクトル $\boldsymbol{p}$ で置き換えられる。なお, $\hat{\boldsymbol{p}}$ を基底にとる表示では, 逆に, $\hat{\boldsymbol{r}}$ が $\boldsymbol{p}$ の微分で表せる。

- $\delta(\boldsymbol{r})$ は略式的表現で

  $$\delta(\boldsymbol{r}) \equiv \delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z)\,,\qquad \boldsymbol{r} = (x,y,z)$$

  を意味する。

  $$\int\! d^3r\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}) = 1\,,\qquad F(\boldsymbol{r})\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}) = F(\boldsymbol{a})\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a})$$

  が成り立つ。この等式は $\boldsymbol{a}$ が演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ でもよい。

  $$\int\! d^3r\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}) = 1\,,\qquad F(\boldsymbol{r})\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}) = F(\hat{\boldsymbol{r}})\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{4.1}$$

  2 番目の等式は次のようにして示せる。$|\boldsymbol{x}\rangle$ を $\hat{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{x}\rangle = \boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}\rangle$ である $\hat{\boldsymbol{r}}$ の固有ケットとすると

  $$F(\hat{\boldsymbol{r}})\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\boldsymbol{x}\rangle = F(\boldsymbol{x})\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})|\boldsymbol{x}\rangle$$

  $F(\boldsymbol{x})$ は $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})$ が掛かっているから $F(\boldsymbol{r})$ で置き換えてよい。また

  $$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})|\boldsymbol{x}\rangle = \delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\boldsymbol{x}\rangle$$

  を使い δ 関数の中の $\boldsymbol{x}$ を演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ に戻せば

  $$F(\hat{\boldsymbol{r}})\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\boldsymbol{x}\rangle = F(\boldsymbol{r})\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\boldsymbol{x}\rangle$$

  になる。この両辺に $\langle\boldsymbol{x}|$ を右側から作用させ, 完備性

  $$\int\! d^3x|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}| = 1 \tag{4.2}$$

  を使えば (4.1) の 2 番目の式を得る。1 番目の式も同様にすれば求まる。

期待値　状態 $|\alpha\rangle$ における $\hat{\rho}$ の期待値は

$$\langle\alpha|\hat{\rho}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle = \int d^3x\,\langle\alpha|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|\hat{\rho}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle$$

である。$\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})$ は演算子であるから $\langle\boldsymbol{x}|$ の左側には置けないが, $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})$ はどちらに置いてもよいから

$$\langle\boldsymbol{x}|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}) = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})\langle\boldsymbol{x}|$$

となる。したがって

$$\langle\alpha|\hat{\rho}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle = \int d^3x\,\langle\alpha|\boldsymbol{x}\rangle\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})\langle\boldsymbol{x}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\alpha\rangle = \psi^*_\alpha(\boldsymbol{r})\,\psi_\alpha(\boldsymbol{r})$$

$\psi_\alpha(\boldsymbol{r}) \equiv \langle\boldsymbol{r}|\alpha\rangle$ は波動関数である。密度演算子の期待値は確率分布であり, これは古典的な密度分布である。

カレント密度演算子の期待値は

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle &= \frac{1}{2m}\int d^3x\,\Big(\langle\alpha|\hat{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\alpha\rangle + \langle\alpha|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|\hat{\boldsymbol{p}}|\alpha\rangle\Big)\\ &= \frac{1}{2m}\Big(\langle\alpha|\hat{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\alpha\rangle + \langle\alpha|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{p}}|\alpha\rangle\Big)\end{aligned}$$

ここで

$$\langle\boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\frac{\partial\langle\boldsymbol{r}|}{\partial\boldsymbol{r}}\,,\quad \hat{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{r}\rangle = +i\hbar\frac{\partial|\boldsymbol{r}\rangle}{\partial\boldsymbol{r}}$$

を使うと

$$\langle\boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{p}}|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{\partial\langle\boldsymbol{r}|\alpha\rangle}{\partial\boldsymbol{r}} = -i\hbar\frac{\partial\psi_\alpha(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\,,\quad \langle\alpha|\hat{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{r}\rangle = i\hbar\frac{\partial\langle\alpha|\boldsymbol{r}\rangle}{\partial\boldsymbol{r}} = i\hbar\frac{\partial\psi^*_\alpha(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}$$

したがって

$$\langle\alpha|\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_\alpha(\boldsymbol{r})\frac{\partial\psi^*_\alpha(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}} - \psi^*_\alpha(\boldsymbol{r})\frac{\partial\psi_\alpha(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\right) = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left[\psi^*_\alpha(\boldsymbol{r})\frac{\partial\psi_\alpha(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\right]$$

となる。波動関数が実数関数 $\phi(\boldsymbol{r})$ を用いて $\psi_\alpha(\boldsymbol{r}) = e^{i\theta}\phi(\boldsymbol{r})$ と表せる場合, カレント密度は 0 になる。

4.2　交換関係

$[\,\hat{x}\,,\,\hat{p}_x\,] = i\hbar$ である。$[\,\hat{x}^n\,,\,\hat{p}_x\,] = i\hbar n\hat{x}^{n-1}$ と仮定すると

$$[\,\hat{x}^{n+1}\,,\,\hat{p}_x\,] = \hat{x}^n\,[\,\hat{x}\,,\,\hat{p}_x\,] + [\,\hat{x}^n\,,\,\hat{p}_x\,]\,\hat{x} = i\hbar\,\hat{x}^n + i\hbar n\hat{x}^{n-1}\,\hat{x} = i\hbar(n+1)\,\hat{x}^n$$

数学的帰納法から $[\,\hat{x}^n\,,\,\hat{p}_x\,] = i\hbar\,n\hat{x}^{n-1}$ は任意の $n = 1, 2, \cdots$ について成り立つ。$(x^n)' = nx^{n-1}$ であるから, 任意の関数 $F(x)$ に対しては

$$[\,F(\hat{x})\,,\,\hat{p}_x\,] = i\hbar F'(\hat{x})$$

である。更に, 3 次元の場合には

$$[\,F(\hat{\boldsymbol{r}})\,,\,\hat{\boldsymbol{p}}\,] = i\hbar\frac{\partial F(\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\hat{\boldsymbol{r}}} \tag{4.3}$$

が成り立つ。ここで, 例えば $\partial F(\hat{\boldsymbol{r}})/\partial\hat{x}$ は “$F(\boldsymbol{r})$ を x で微分した関数 $\partial F(\boldsymbol{r})/\partial x$ の $\boldsymbol{r}$ を演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ で置き換えたもの” である。$F(\hat{\boldsymbol{r}})=\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})$ とすると

$$[\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\,,\,\hat{\boldsymbol{p}}\,]=i\hbar\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\hat{\boldsymbol{r}}}\;=\;-\,i\hbar\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{r}} \tag{4.4}$$

を得る。最後の等式を示すには (4.1) を証明したのと同様にすればよい。

$$\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\hat{\boldsymbol{r}}}|\boldsymbol{x}\rangle=\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}}|\boldsymbol{x}\rangle$$

$\partial\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})/\partial\boldsymbol{x}$ は演算子を含まない関数であるから

$$\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}}=-\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{r}}$$

である。これから

$$\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\hat{\boldsymbol{r}}}|\boldsymbol{x}\rangle=-\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{x}\rangle=-\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{x}\rangle$$

更に, 右側から $\langle\boldsymbol{x}|$ をかけ完備性 (4.2) を使えば

$$\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\hat{\boldsymbol{r}}}=-\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{r}}$$

が求まる。

(4.4) より, $\hat{\rho}$ と $\hat{\boldsymbol{j}}$ の交換関係は

$$\begin{aligned}
[\,\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\,,\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})\,]&=\frac{1}{2m}\Big([\,\delta(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{r}})\,,\,\hat{\boldsymbol{p}}]\delta(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{r}})+\delta(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{r}})\,[\,\delta(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{r}})\,,\,\hat{\boldsymbol{p}}\,]\Big)\\
&=\;-\;\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial\delta(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{x}}\,\delta(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{r}})+\delta(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{r}})\,\frac{\partial\delta(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{x}}\right)\\
&=\;-\;\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial\delta(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{x}}\,\delta(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{r}}) &(4.5)\\
&=\;-\;\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}{\partial\boldsymbol{x}}\,\delta(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{r}}) &(4.6)\\
&=\;-\;\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial\delta(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{x}}\,\delta(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}) &(4.7)
\end{aligned}$$

となる。(4.6),(4.7) では (4.5) の 2 つある $\hat{\boldsymbol{r}}$ のうち 1 つを (4.1) を用いで置き換えた。(4.5) でもよいのだが, できるだけ演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ を消去した方が取り扱いが容易になる。

- $\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})$ を $\boldsymbol{y}$ について積分すると, $\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})$ の定義より

$$\int d^3y\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})=\frac{1}{m}\,\hat{\boldsymbol{p}}$$

である。したがって, (4.7) を $\boldsymbol{y}$ について積分すると

$$\begin{aligned}
[\,\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\,,\,\frac{1}{m}\hat{\boldsymbol{p}}\,]&=\;-\;\frac{i\hbar}{m}\int d^3y\,\frac{\partial\delta(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{x}}\,\delta(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x})\\
&=\;-\;\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial\delta(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{x}}\;\int d^3y\,\delta(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x})\\
&=\;-\;\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial\delta(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{x}}
\end{aligned}$$

これは (4.4) に他ならない。

- (4.4) から

$$
\begin{aligned}
[\,\hat\rho(\boldsymbol{r})\,,\,\hat{\boldsymbol{p}}^2\,] &= \hat{\boldsymbol{p}}\cdot[\,\hat\rho(\boldsymbol{r})\,,\,\hat{\boldsymbol{p}}\,]+[\,\hat\rho(\boldsymbol{r})\,,\,\hat{\boldsymbol{p}}\,]\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\
&= -\,i\hbar\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{r}}-i\hbar\frac{\partial\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\
&= -\,i\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\cdot\Big(\hat{\boldsymbol{p}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})+\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{p}}\Big)\\
&= -\,i\hbar\,2m\boldsymbol{\nabla}\cdot\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})
\end{aligned}
$$

したがって

$$
\frac{1}{i\hbar}[\,\hat\rho(\boldsymbol{r})\,,\,\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}\,]=\,-\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}) \tag{4.8}
$$

系のハミルトニアン H が

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

であるとき, $V(\hat{\boldsymbol{r}})$ と $\hat\rho$ は交換するから

$$
\frac{1}{i\hbar}[\,\hat\rho(\boldsymbol{r})\,,\,H\,]=\,-\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}) \tag{4.9}
$$

となる。これはカレント保存則である。時刻 t における状態を $|\,t\,\rangle$ とすると

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\,t\,\rangle=H|\,t\,\rangle\,,\quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\,t\,|=\langle\,t\,|H
$$

である。これから時刻 t での密度演算子の期待値 $\rho(\boldsymbol{r},t)=\langle\,t\,|\hat\rho(\boldsymbol{r})|\,t\,\rangle$ は

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} &= \frac{\partial\langle\,t\,|}{\partial t}\hat\rho(\boldsymbol{r})|\,t\,\rangle+\langle\,t\,|\hat\rho(\boldsymbol{r})\frac{\partial|\,t\,\rangle}{\partial t}\\
&= \frac{1}{i\hbar}\langle\,t\,|[\hat\rho(\boldsymbol{r})\,,H\,]|\,t\,\rangle\\
&= -\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\langle\,t\,|\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})|\,t\,\rangle
\end{aligned}
$$

したがって, $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=\langle\,t\,|\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})|\,t\,\rangle$ とおくと

$$
\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=0
$$

を得る。これはカレント保存則である。

- 演算子 $F(\hat{\boldsymbol{r}})$ は

$$
F(\hat{\boldsymbol{r}})=\int d^3x\,F(\boldsymbol{x})\,\delta(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{r}})=\int d^3x\,F(\boldsymbol{x})\,\hat\rho(\boldsymbol{x})
$$

と表せる。$F(\hat{\boldsymbol{r}})$ は演算子であるから $\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})$ と交換しないが, $F(\boldsymbol{x})$ は単なる実数の関数であるから $\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})$ と交換するに注意すると, (4.6) より

$$
\begin{aligned}
[\,F(\hat{\boldsymbol{r}})\,,\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})\,] &= \int d^3x\,F(\boldsymbol{x})\,[\,\hat\rho(\boldsymbol{x})\,,\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})\,]\\
&= -\,\frac{i\hbar}{m}\,\delta(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{r}})\int d^3x\,F(\boldsymbol{x})\,\frac{\partial\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}{\partial\boldsymbol{x}}
\end{aligned}
$$

部分積分すると

$$
\begin{aligned}
[\,F(\hat{\boldsymbol{r}})\,,\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})\,] &= \frac{i\hbar}{m}\,\delta(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{r}})\int d^3x\,\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\frac{\partial F(\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}}\\
&= \frac{i\hbar}{m}\,\delta(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{r}})\frac{\partial F(\boldsymbol{y})}{\partial\boldsymbol{y}}
\end{aligned} \tag{4.10}
$$

となる。

- (4.10) を $\boldsymbol{y}$ について積分すると

$$[\,F(\hat{\boldsymbol{r}})\,,\,\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\,] = \frac{i\hbar}{m}\frac{\partial F(\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial \hat{\boldsymbol{r}}}$$

となり, (4.3) が求まる。

4.3　多体系の場合

多体系の密度演算子 $\hat{\rho}(\boldsymbol{r})$ とカレント密度演算子 $\hat{\boldsymbol{j}}$ は

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) = \sum_i \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i) \tag{4.11}$$

$$\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2m}\sum_i \Big(\boldsymbol{p}_i\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i) + \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{p}_i\Big) \tag{4.12}$$

ここで, $\boldsymbol{r}_i$ は粒子 i の位置演算子, $\boldsymbol{p}_i$ は運動量演算子である。演算子であることは ˆ を付けなくても区別できるので付けない。異なる粒子間の演算子は別な自由度であるから交換する。したがって

$$\begin{aligned}
[\,\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\,,\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})\,] &= \frac{1}{2m}\sum_i\Big([\,\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i)\,,\,\boldsymbol{p}_i\,]\delta(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{r}_i) + \delta(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{r}_i)\,[\,\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i)\,,\,\boldsymbol{p}_i\,]\Big) \\
&= -\,\frac{i\hbar}{m}\sum_i \frac{\partial\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}{\partial\boldsymbol{x}}\,\delta(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{r}_i) \\
&= -\,\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}{\partial\boldsymbol{x}}\,\hat{\rho}(\boldsymbol{y})
\end{aligned} \tag{4.13}$$

$\hat{F} = \sum_i F(\boldsymbol{r}_i)$ は

$$\hat{F} = \sum_i \int d^3x\, F(\boldsymbol{x})\,\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i) = \int d^3x\, F(\boldsymbol{x})\,\hat{\rho}(\boldsymbol{x}) \tag{4.14}$$

と表せるから, (4.10) を導いたのと同様にすると

$$\begin{aligned}
[\,\hat{F}\,,\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})\,] &= \int d^3x\, F(\boldsymbol{x})\,[\,\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\,,\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})\,] \\
&= -\,\frac{i\hbar}{m}\int d^3x\, F(\boldsymbol{x})\,\frac{\partial\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}{\partial\boldsymbol{x}}\,\hat{\rho}(\boldsymbol{y}) \\
&= \frac{i\hbar}{m}\,\hat{\rho}(\boldsymbol{y})\frac{\partial F(\boldsymbol{y})}{\partial\boldsymbol{y}}
\end{aligned} \tag{4.15}$$

エルミート共役をとれば

$$[\,\hat{F}^\dagger\,,\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{y})\,] = \frac{i\hbar}{m}\,\hat{\rho}(\boldsymbol{y})\frac{\partial F^*(\boldsymbol{y})}{\partial\boldsymbol{y}} \tag{4.16}$$

となる。

多体系の状態 $|\alpha\rangle$ が時間反転に対して不変であるとする:

$$K|\alpha\rangle = e^{i\theta}|\alpha\rangle$$

ここで K は反線形の時間反転演算子である。ある演算子 O に対して

$$\langle\alpha|O\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle = \Big(\langle\alpha|K^\dagger\Big)O\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})\Big(K|\alpha\rangle\Big) = \Big[\langle\alpha|\Big(K^\dagger O\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})K|\alpha\rangle\Big)\Big]^*$$

ところで

$$K^\dagger \boldsymbol{r}_i K = \boldsymbol{r}_i\,, \quad K^\dagger \boldsymbol{p}_i K = -\boldsymbol{p}_i$$

より, カレント密度演算子 (4.12) は

$$K^\dagger \hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}) K = -\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})$$

であるから, 条件

$$\left(K^\dagger O K\right)^\dagger = O \tag{4.17}$$

を満たす演算子 O ならば

$$K^\dagger O\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}) K = (K^\dagger O K)\,(K^\dagger \hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}) K) = -\,(K^\dagger O K)\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}) = -\,O^\dagger\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})$$

となる。したがって

$$\langle\alpha|O\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle = -\,\langle\alpha|O^\dagger\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle^* = -\,\langle\alpha|\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})\,O|\alpha\rangle = \frac{1}{2}\,\langle\alpha|[\,O\,,\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})\,]|\alpha\rangle \tag{4.18}$$

である。$O = 1$ は (4.17) を満たすから

$$\langle\alpha|\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle = \frac{1}{2}\,\langle\alpha|[\,1\,,\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})\,]|\alpha\rangle = 0$$

時間反転に関して不変な状態におけるカレント密度は 0 である。1 粒子系の場合 $K|\alpha\rangle = e^{i\theta}|\alpha\rangle$ は波動関数が実数関数 ϕ を用いて $\psi(\boldsymbol{r}) = e^{-i\theta/2}\phi(\boldsymbol{r})$ と表せることである。この場合カレント密度が 0 になることは既に示してある。

4.4 Energy–weighted sum rule

$$\left(K^\dagger F(\boldsymbol{r})\hat{\rho}(\boldsymbol{r})K\right)^\dagger = (F^*(\boldsymbol{r})\hat{\rho}(\boldsymbol{r}))^\dagger = F(\boldsymbol{r})\hat{\rho}(\boldsymbol{r})$$

であるから (4.14) の $\hat{F}$ 及びそのエルミート共役 $\hat{F}^\dagger$ は (4.17) を満たす。したがって, (4.16) より

$$\langle\alpha|\hat{F}^\dagger\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle = \frac{1}{2}\langle\alpha|[\,\hat{F}^\dagger\,,\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})\,]|\alpha\rangle = \frac{i\hbar}{2m}\rho_\alpha(\boldsymbol{r})\,\frac{\partial F^*(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}}$$

ただし

$$\rho_\alpha(\boldsymbol{r}) \equiv \langle\alpha|\hat{\rho}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle$$

である。多体系のハミルトニアンを H とし, 1 粒子の場合と同様にカレント保存則

$$\frac{1}{i\hbar}[\,H\,,\,\hat{\rho}(\boldsymbol{r})\,] = +\boldsymbol{\nabla}\cdot\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})$$

が成り立つとすると

$$\langle\alpha|\hat{F}^\dagger\,[\,H\,,\,\hat{\rho}(\boldsymbol{r})\,]|\alpha\rangle = i\hbar\,\langle\alpha|\hat{F}^\dagger\,\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle = i\hbar\,\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\cdot\langle\alpha|\hat{F}^\dagger\,\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle$$

であるから

$$\langle\alpha|\hat{F}^\dagger\,[\,H\,,\,\hat{\rho}(\boldsymbol{r})\,]|\alpha\rangle = -\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\cdot\rho_\alpha(\boldsymbol{r})\,\frac{\partial F^*(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}$$

したがって

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\hat{F}^\dagger\,[\,H\,,\,\hat{F}\,]|\alpha\rangle &= \int d^3r\,F(\boldsymbol{r})\,\langle\alpha|\hat{F}^\dagger\,[\,H\,,\,\hat{\rho}(\boldsymbol{r})\,]|\alpha\rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\,F(\boldsymbol{r})\,\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\cdot\rho_\alpha(\boldsymbol{r})\,\frac{\partial F^*(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\,\rho_\alpha(\boldsymbol{r})\,\frac{\partial F^*(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\cdot\frac{\partial F(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\end{aligned} \tag{4.19}$$

となる。$\boldsymbol{r}\to\infty$ では $\rho_\alpha(\boldsymbol{r})\to 0$ であるから部分積分を行えば最後の結果を得る。

$|\alpha\rangle$ を H の固有状態とする:

$$H|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$$

完備性を使うと (4.19) の左辺は

$$\langle\alpha|\hat{F}^\dagger\,[\,H\,,\,\hat{F}\,]|\alpha\rangle = \sum_{\alpha'}\langle\alpha|\hat{F}^\dagger|\alpha'\rangle\langle\alpha'|[\,H\,,\,\hat{F}\,]|\alpha\rangle$$

ところで

$$\langle\alpha'|[\,H\,,\,\hat{F}\,]|\alpha\rangle = \langle\alpha'|(H\,\hat{F}-\hat{F}\,H)|\alpha\rangle = (E_{\alpha'}-E_\alpha)\langle\alpha'|\hat{F}|\alpha\rangle$$

であるから

$$\langle\alpha|\hat{F}^\dagger\,[\,H\,,\,\hat{F}\,]|\alpha\rangle = \sum_{\alpha'}(E_{\alpha'}-E_\alpha)\langle\alpha|\hat{F}^\dagger|\alpha'\rangle\langle\alpha'|\hat{F}|\alpha\rangle = \sum_{\alpha'}(E_{\alpha'}-E_\alpha)\left|\langle\alpha'|\hat{F}|\alpha\rangle\right|^2$$

したがって

$$\sum_{\alpha'}(E_{\alpha'}-E_\alpha)\left|\langle\alpha'|\hat{F}|\alpha\rangle\right|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\,\rho_\alpha(\boldsymbol{r})\,\frac{\partial F^*(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\cdot\frac{\partial F(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}$$

これを Energy–weighted sum rule という。左辺の個々の値を求めるには H の固有値と固有状態をすべて知らなければならない。しかし, これらの和は単に密度 $\rho_\alpha(\boldsymbol{r})$ が分かれば求まる。この結果はカレント保存則及び状態 $|\alpha\rangle$ が時間反転に関して不変 (偶-偶核の基底状態はこれを満たす) というかなり一般的な仮定が成り立てばよい。

簡単な例として, $F(\boldsymbol{r})=z$ の場合

$$\frac{\partial F^*(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\cdot\frac{\partial F(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}} = (0,0,1)\cdot(0,0,1) = 1$$

であるから

$$\sum_{\alpha'}(E_{\alpha'}-E_\alpha)\Big|\langle\alpha'|\sum_{i=1}^N z_i\,|\alpha\rangle\Big|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\,\rho_\alpha(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar^2}{2m}N$$

5　時間に依存する摂動

5.1　いろいろな表示

ある時刻 t_0 での状態 $|\,t_0\,\rangle$ が分かっているとき, 任意の時刻 t における状態を $|\,t\,\rangle$ を求める。

$$|\,t\,\rangle = U(t,t_0)\,|\,t_0\,\rangle$$

とおく。ハミルトニアンを $H(t)$ とする。H は時間 t に依存してもよい。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\,t\,\rangle = H(t)\,|\,t\,\rangle$$

である。これは $|\,t\,\rangle$ が満たすべき方程式であり, $|\,t\,\rangle$ は勝手な任意の状態ではないことを意味する。最初の式を代入すると

$$i\hbar\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t}\,|\,t_0\,\rangle = H(t)\,U(t,t_0)\,|\,t_0\,\rangle$$

初期状態としては任意の状態を取ることができるから

$$i\hbar\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t} = H(t)\,U(t,t_0) \tag{5.1}$$

となる。初期条件から

$$U(t_0,t_0) = 1 \tag{5.2}$$

である。(5.1), (5.2) を満たす $U(t,t_0)$ を求める。H が時間に依存しない場合, 解は形式的には

$$U(t,t_0) = \exp(-i(t-t_0)H/\hbar) \tag{5.3}$$

になる。(5.1), (5.2) に代入してみればこれらの式が成り立つことは容易に確かめられる。H が時間に依存する場合 (5.3) は成り立たない。

形式的性質

- $U(t,t_1)\,U(t_1,t_0)|\,t_0\,\rangle = U(t,t_1)|\,t_1\,\rangle = |\,t\,\rangle$ であるから

$$U(t,t_0) = U(t,t_1)\,U(t_1,t_0)$$

  である。

- $\delta t \to 0$ のとき (5.1) より

$$i\hbar\frac{U(t_0+\delta t,t_0)-U(t_0,t_0)}{\delta t} = H(t_0+\delta t)\,U(t_0+\delta t,t_0)$$

  したがって, δt の 1 次まで考えると

$$U(t_0+\delta t,t_0) = 1 - \frac{1}{i\hbar}H(t_0)\,\delta t$$

  H はエルミートであるから

$$U^\dagger(t_0+\delta t,t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar}H(t_0)\,\delta t$$

  となる。これから δt の 2 次以上を無視すると

$$U(t_0+\delta t,t_0)\,U^\dagger(t_0+\delta t,t_0) = U^\dagger(t_0+\delta t,t_0)\,U(t_0+\delta t,t_0) = 1 + \frac{1}{\hbar^2}H^2\,\delta t^2 = 1$$

になるから $U(t_0+\delta t, t_0)$ はユニタリである。一般の $U(t,t_0)$ は無限小変換の積で表せるから $U(t,t_0)$ もユニタリである。この性質から $|\,t\,\rangle$ のノルムは

$$\langle\, t\,|\,t\,\rangle = \langle\, t_0\,|U^\dagger U|\,t_0\,\rangle = \langle\, t_0\,|\,t_0\,\rangle$$

となり保存する。

- $U(t_0,t)\,U(t,t_0) = U(t_0,t_0) = 1$ であるから

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

が成り立つ。

シュレディンガー表示　時刻 t における状態を $|\alpha(t)\rangle$, $|\beta(t)\rangle$ とすると, 演算子 $\hat{A}$ の行列要素の時間的変化は

$$A(t) = \langle\alpha(t)|\hat{A}|\beta(t)\rangle$$

で与えられる。この場合, 時間依存性はすべて状態が担う。これをシュレディンガー表示という。

ハイゼンベルク表示　$\langle\alpha(t)| = \langle\alpha(t_0)|U^\dagger(t,t_0)$, $|\beta(t)\rangle = U(t,t_0)|\beta(t_0)\rangle$ を代入すると $A(t)$ は

$$A(t) = \langle\alpha(t_0)|\hat{A}_{\rm H}(t)|\beta(t_0)\rangle\,, \qquad \hat{A}_{\rm H}(t) \equiv U^\dagger(t,t_0)\hat{A}U(t,t_0) \tag{5.4}$$

と表せる。この表示では, 状態はある時刻 t_0 のままで時間的に変化しない。時間的変化は演算子 $\hat{A}_{\rm H}(t)$ がもたらす。この表示をハイゼンベルク表示という。演算子の時間的変化は (5.4) で記述されるが, これを微分方程式で表わすと (ただし, $\hat{A}$ は時間に依存しないとする)

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial \hat{A}_{\rm H}}{\partial t} &= i\hbar\frac{\partial U^\dagger(t,t_0)}{\partial t}\hat{A}U(t,t_0) + U^\dagger(t,t_0)\hat{A}\, i\hbar\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t} \\ &= -U^\dagger(t,t_0)H\hat{A}U(t,t_0) + U^\dagger(t,t_0)\hat{A}HU(t,t_0) \end{aligned}$$

$\hat{A}$ と H の間に $1 = UU^\dagger$ を挿入すると

$$i\hbar\frac{\partial \hat{A}_{\rm H}}{\partial t} = [\,\hat{A}_{\rm H}\,,\,H_{\rm H}\,]\,, \qquad H_{\rm H}(t) \equiv U^\dagger(t,t_0)H(t)U(t,t_0) \tag{5.5}$$

となる。

H が時間に依存しない場合, U は (5.3) である。これは H と交換するから $H_{\rm H}(t) = H$ になる。更に, $[\,\hat{A}\,,\,H\,] = 0$ ならば $\hat{A}$ も U と交換するから

$$\hat{A}_{\rm H}(t) = U^\dagger\hat{A}U = \hat{A}U^\dagger U = \hat{A}$$

となり, $\hat{A}$ の行列要素は時間に依存しない。これが量子力学における保存則である。

相互作用表示　ハミルトニアン H が

$$H(t) = H_0(t) + V(t)$$

で与えられ, H_0 に対する方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_0(t,t_0) = H_0(t)U_0(t,t_0)\,, \quad U_0(t_0,t_0) = 1$$

を満たす $U_0(t,t_0)$ が既知として $U(t,t_0)$ を求める。

$$U(t,t_0) = U_0(t,t_0)\,U_{\mathrm{I}}(t,t_0)$$

とおくと

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t} &= i\hbar\frac{\partial U_0(t,t_0)}{\partial t}\,U_{\mathrm{I}}(t,t_0) + i\hbar U_0(t,t_0)\frac{\partial U_{\mathrm{I}}(t,t_0)}{\partial t} \\
&= H_0(t)U_0(t,t_0)\,U_{\mathrm{I}}(t,t_0) + i\hbar U_0(t,t_0)\frac{\partial U_{\mathrm{I}}(t,t_0)}{\partial t}
\end{aligned}$$

である。一方, (5.1) は

$$i\hbar\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t} = H(t)\,U(t,t_0) = \Big(H_0(t) + V(t)\Big)U_0(t,t_0)\,U_{\mathrm{I}}(t,t_0)$$

となるから

$$i\hbar U_0(t,t_0)\frac{\partial U_{\mathrm{I}}(t,t_0)}{\partial t} = V(t)U_0(t,t_0)\,U_{\mathrm{I}}(t,t_0)$$

左側から $U_0^\dagger$ を掛け $U_0^\dagger U_0 = 1$ を使うと

$$i\hbar\frac{\partial U_{\mathrm{I}}(t,t_0)}{\partial t} = V_{\mathrm{I}}(t)\,U_{\mathrm{I}}(t,t_0) \tag{5.6}$$

となる。ただし

$$V_{\mathrm{I}}(t) \equiv U_0^\dagger(t,t_0)V(t)U_0(t,t_0) \tag{5.7}$$

である。

行列要素は

$$A(t) = \langle\alpha(t_0)|U_{\mathrm{I}}^\dagger(t,t_0)U_0^\dagger(t,t_0)\hat{A}U_0(t,t_0)\,U_{\mathrm{I}}(t,t_0)|\beta(t_0)\rangle$$

であるが

$$\hat{A}_{\mathrm{I}}(t) \equiv U_0^\dagger(t,t_0)\hat{A}U_0(t,t_0)\,, \qquad |\alpha(t)\rangle_{\mathrm{I}} \equiv U_{\mathrm{I}}(t,t_0)\,|\alpha(t_0)\rangle$$

とすれば

$$A(t) = {}_{\mathrm{I}}\langle\alpha(t)|\hat{A}_{\mathrm{I}}(t)|\beta(t)\rangle_{\mathrm{I}}$$

この表示を相互作用表示といい, 演算子と状態ともに時間的に変化する。演算子の時間変化は, (5.5) を導いたのと同様にすると

$$i\hbar\frac{\partial\hat{A}_{\mathrm{I}}}{\partial t} = [\,\hat{A}_{\mathrm{I}}\,,\,H_{0\mathrm{I}}\,]\,, \quad H_{0\mathrm{I}}(t) \equiv U_0^\dagger(t,t_0)H_0(t)U_0(t,t_0)$$

である。演算子 $\hat{A}_{\mathrm{I}}$ の時間変化は H_0 がもたらす。一方, 状態 $|\alpha(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ は (5.6) を使うと

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha(t)\rangle_{\mathrm{I}} = i\hbar\frac{\partial U_{\mathrm{I}}(t,t_0)}{\partial t}\,|\alpha(t_0)\rangle = V_{\mathrm{I}}(t)\,U_{\mathrm{I}}(t,t_0)\,|\alpha(t_0)\rangle = V_{\mathrm{I}}(t)\,|\alpha(t)\rangle_{\mathrm{I}}$$

であり, 状態の時間的変化は V による。

5.2　摂動展開

(5.6) は, $U_{\rm I}(t_0,t_0)=1$ を考慮すると積分形式で表せば

$$U_{\rm I}(t,t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, V_{\rm I}(t_1)\, U_{\rm I}(t_1,t_0)$$

である。$t=t_1$ とすると

$$U_{\rm I}(t_1,t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t_1} dt_2\, V_{\rm I}(t_2)\, U_{\rm I}(t_2,t_0)$$

これを最初の式に代入すると

$$U_{\rm I}(t,t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, V_{\rm I}(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, V_{\rm I}(t_1)\, V_{\rm I}(t_2)\, U_{\rm I}(t_2,t_0)$$

となる。以下同じことを繰り返すと, 展開

$$U_{\rm I}(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, V_{\rm I}(t_1)\, V_{\rm I}(t_2) \cdots V_{\rm I}(t_n)$$

を得る。(5.7) を代入し $U_0^\dagger(t,t') = U_0(t',t)$, $U_0(t_k,t_0)\, U_0(t_0,t_{k+1}) = U_0(t_k,t_{k+1})$ を使うと

$$V_{\rm I}(t_k)\, V_{\rm I}(t_{k+1}) = U_0(t_0,t_k)V(t_k)U_0(t_k,t_{k+1})V(t_{k+1})U_0(t_{k+1},t_0)$$

である。したがって, $U(t,t_0) = U_0(t,t_0)\, U_{\rm I}(t,t_0)$ は

$$\begin{aligned} U(t,t_0) = U_0(t,t_0) &+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \\ &U_0(t,t_1)V(t_1)U_0(t_1,t_2)V(t_2) \cdots U_0(t_{n-1},t_n)V(t_n)U_0(t_n,t_0) \end{aligned} \tag{5.8}$$

となる。(5.8) は V の冪級数による展開である。$H=H_0+V$ による時間発展が正確に求められない場合でも, この展開式を使えば必要な精度までの近似式が得られる。

(5.8) から, 系の時間発展は $t_0 \le t \le t_n$ の間 V の影響を受けずに H_0 にしたがって進み, $t=t_n$ で V が系に効果を及ぼす。その後また $t=t_{n-1}$ まで H_0 にしたがって時間発展するというプロセスを繰り返す。

以下では, H_0 は時間に依存しないとする。この場合

$$U_0(t,t') = \exp(-iH_0(t-t')/\hbar)$$

である。また, 時刻 t_0 で状態は H_0 のある固有状態 $|a\rangle$

$$H_0|a\rangle = E_a|a\rangle$$

とする。V について 1 次で近似すると

$$U(t,t_0) \approx U_0(t,t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, U_0(t,t_1)V(t_1)U_0(t_1,t_0)$$

$U_0(t,t')|a\rangle = e^{-iE_a(t-t')/\hbar}|a\rangle$ であるから, 時刻 t における状態 $U(t,t_0)|a\rangle$ は

$$U(t,t_0)|a\rangle \approx e^{-iE_a(t-t_0)/\hbar}\left[1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, e^{-i(H_0-E_a)(t-t_1)/\hbar}V(t_1)\right]|a\rangle \tag{5.9}$$

となる。

- $V(t) = \left(Fe^{-i\omega t} + F^\dagger e^{i\omega t}\right) e^{\varepsilon t}$, ($\varepsilon \to +0$) の場合。ただし、計算の最後で $\varepsilon \to +0$ の極限をとる。$e^{\varepsilon t}$ は t が有限なところでは 1, $t \to -\infty$ では 0 になる。この因子を断熱因子 (adiabatic factor) という。これは $t \to -\infty$ で V がなくなる様にするため導入した。

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, e^{-i(H_0-E_a)(t-t_1)/\hbar} V(t_1) \\
&= \frac{1}{i\hbar} e^{-i(H_0-E_a)t/\hbar} \int_{t_0}^{t} dt_1 \left(e^{i(H_0-E_a-\hbar\omega)t_1/\hbar} F + e^{i(H_0-E_a+\hbar\omega)t_1/\hbar} F^\dagger \right) e^{\varepsilon t_1} \\
&= e^{-i(H_0-E_a)t/\hbar} \left[\frac{e^{i(H_0-E_a-\hbar\omega)t_1/\hbar+\varepsilon t_1}}{\hbar\omega-(H_0-E_a)+i\varepsilon} F - \frac{e^{i(H_0-E_a+\hbar\omega)t_1/\hbar+\varepsilon t_1}}{\hbar\omega+H_0-E_a-i\varepsilon} F^\dagger \right]_{t_1=t_0}^{t_1=t}
\end{aligned}
$$

$t_0 \to -\infty$ とすると, $t_1 = t_0$ の寄与は $e^{\varepsilon t_1} \to 0$ により 0 になるから

$$
\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt_1\, e^{-i(H_0-E_a)(t-t_1)/\hbar} V(t_1) = \frac{e^{-i\omega t}}{\hbar\omega-(H_0-E_a)+i\varepsilon} F - \frac{e^{i\omega t}}{\hbar\omega+H_0-E_a-i\varepsilon} F^\dagger
$$

したがって

$$
U(t,-\infty)|a\rangle \approx e^{-iE_a t/\hbar} \left[1 + \left(\frac{e^{-i\omega t}}{\hbar\omega-(H_0-E_a)+i\varepsilon} F - \frac{e^{i\omega t}}{\hbar\omega+H_0-E_a-i\varepsilon} F^\dagger \right) \right] |a\rangle
$$

物理的に意味のない位相 $e^{-iE_a t_0/\hbar}$ は無視した。

- $V(t) = F\,\delta(t)$ の場合, $t_0 < 0 < t$ 以外では時間積分 (5.9) は 0 になるからこの場合を考えると, 積分には $t_1 = 0$ だけが寄与をし

$$
U(t,t_0)|a\rangle \approx e^{-iE_a(t-t_0)/\hbar} \left[1 + \frac{1}{i\hbar} e^{-i(H_0-E_a)t/\hbar} F \right] |a\rangle
$$

となる。