

§2 量子力学 (Quantum Mechanics = QM) の体系

'21 10/11

2.1 基本原理

<準備と記号> "固有値列・収束先" 等

\mathcal{H} : \mathbb{C} 上完備な「内積」空間 $\ni |\psi\rangle$ ket vector "「(+)」ベクトル"

\mathcal{H}^\dagger : \mathcal{H} の双対空間 $\ni \langle\psi|$ bra vector "「(-)」ベクトル"

内積: $\langle\psi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$
 bracket
 op. と略す
 complex conjugate

定義 2.1 $\hat{F} \in \mathcal{H}$ 上の線形 operator とする

$$\hat{F}|\varphi_\lambda\rangle = f_\lambda|\varphi_\lambda\rangle \quad (\lambda \in \Lambda) \quad \dots (*) \quad (\hat{A}\psi) := \hat{A}\psi$$

とみ反すとき, $f_\lambda \in \mathbb{R}$ の固有値, $|\varphi_\lambda\rangle \in \mathcal{H}$ の固有関数という. $\langle\hat{B}\psi| := (\hat{B}\psi)^\dagger$

定義 2.2 $\forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}, \langle\hat{B}\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle$

が成り立つとき, $\hat{B} \in \hat{A}^\dagger$ と書き \hat{A} のエルミート共役という.
 (hermitian conjugate = h.c.)

定義 2.3 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ のとき $\hat{A} \in \mathcal{H}$ のエルミート op. といふ
 (自己共役)

命題 2.4 エルミート op. \hat{F} の

- (i) 固有値 f_λ は実数
- (ii) 異なる固有値に属する固有関数は直交する $\xrightarrow{\text{正規化}} \langle\varphi_\lambda|\varphi_\lambda\rangle = \delta_{\lambda\lambda}$

定義 2.5 正規直交系 $\{|\varphi_\lambda\rangle\}_{\lambda \in \Lambda}$ が完全系

$$\stackrel{\text{def}}{\iff} \sum_\lambda |\varphi_\lambda\rangle\langle\varphi_\lambda| = \hat{1}_{\mathcal{H}} \quad (\because a \text{ と } \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \ni |\psi\rangle = \hat{1}_{\mathcal{H}}|\psi\rangle = \sum_\lambda |\varphi_\lambda\rangle \underbrace{\langle\varphi_\lambda|\psi\rangle}_{\text{展開係数}})$$

* λ の重複度 ≥ 2 の場合 \rightarrow 注 2.12 参照 "基底" とは $\{e_i\}$ 等

定義 2.6 \hat{F} が オブザーバブル

②

$$\stackrel{\text{def}}{\iff} \left\{ \begin{array}{l} \cdot \forall \text{固有値 } f_\lambda \in \mathbb{R} \\ \cdot \text{固有関数系 } \{|\varphi_\lambda\rangle\} \text{ が完全系} \end{array} \right.$$

<本題>

以上のオブザーバブル \hat{H} (ハミルトニアン) が定めるシステムを考える

法則 2.7 (量子力学の基本法則)

(I) システムの状態は \mathcal{H} の元 $|\psi\rangle$ で表される. このとき特に \mathcal{H} を状態空間.

$|\psi\rangle$ を状態ベクトルと呼ぶ. $|\psi\rangle$ と $c|\psi\rangle$ ($c \in \mathbb{C}$) は同じ状態とみなす.
 $c = \text{const} (\neq 0)$

(II) 物理量は \mathcal{H} 上のオブザーバブルで表される

(III) システムの時間発展はシュレディンガー (Schrödinger) 方程式で記述される:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad \begin{array}{l} i = \sqrt{-1} \\ \hbar: \text{プランク定数} \end{array}$$

(IV) 物理量 \hat{F} の期待値を以下のように定義し.

$$\langle \hat{F} \rangle := \frac{\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

状態 $|\psi\rangle$ に対して, 物理量 \hat{F} を観測したときの期待値と解釈する.

注 2.8 (IV) について (2.4 の設定の下)

宿題1 示す

$$|\psi\rangle = \sum_{\lambda} |\varphi_{\lambda}\rangle \underbrace{\langle \varphi_{\lambda} | \psi \rangle}_{c_{\lambda}} \quad \text{と表したとき} \quad \langle \hat{F} \rangle = \frac{\sum_{\lambda} f_{\lambda} |c_{\lambda}|^2}{\sum_{\lambda} |c_{\lambda}|^2} = \sum_{\lambda} f_{\lambda} \frac{|c_{\lambda}|^2}{\sum_{\lambda} |c_{\lambda}|^2}$$

$\langle \psi | \psi \rangle = 1$ なら

1回の観測で得られる測定値は $f_{\lambda} \in \mathbb{R}$ のどれか. そのときシステムの状態は

$|\psi\rangle$ から $|\varphi_{\lambda}\rangle$ に (確率 $|c_{\lambda}|^2$ で) (突如) 遷移する. \leadsto 観測問題

$\langle \psi | \psi \rangle = 1$ のとき

注 2.9 $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ のとき, (I) の定数, 不定性は $|\psi\rangle \sim e^{i\theta} |\psi\rangle$ ③
 $\langle \text{システムの時向発展の記述} \rangle$ ($\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ とする) $U(1)$ 因子の不定性 $\theta \in \mathbb{R}$ とする

{
 ・ Schrödinger picture (S): $|\psi(t)\rangle$ が時向発展 (\hat{F} は固定) \leftrightarrow Sch. eq.
 ・ Heisenberg picture (H): $\hat{F}(t)$ が時向発展 ($|\psi\rangle$ は固定) \leftrightarrow Heisenberg eq.
 (S) \rightarrow (H)

Sch. eq. $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$ より

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |\psi(0)\rangle \Rightarrow \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$$

↑
 2=タリ (\hat{H} : エルミート) 一定

オプガ-バブル \hat{F} の期待値

$$\begin{aligned} \langle \hat{F}(t) \rangle &= \langle \psi(t) | \hat{F} | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi | \underbrace{e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{F} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}}_{\hat{F}(t)} | \psi \rangle \end{aligned}$$

!! 時向発展の op. に
 対してける

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{F}(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} (\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H}) e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \leftarrow \text{宿題 2 } \hat{F}(t) \text{ の def による Heis. eq. と導ける} \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}(t), \hat{H}] : \text{Heisenberg eq.} \quad \text{交換子積} \end{aligned}$$

命題 2.10 $[\hat{F}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow \hat{F}$ は保存量 (i.e. $\frac{d\hat{F}}{dt} = 0$)

注 2.11 これは古典力学における Poisson 括弧 $\{, \}_{p.o.}$ と
 op. に対する交換子 $\frac{1}{i\hbar} [,]$ に大きかえらるもの

⊙ (注2.11)

④

古典力学 (解析力学)

<簡単に1次元? 議論> x : 物体の位置, p : 物体の運動量

$$H(x, p) := \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (\text{ハミルトニアン}) \text{ とし}$$

① ... 運動エネルギー - ポテンシャルエネルギー

(ハミルトニア) 正準方程式: $\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}$, $\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}$

Poisson 括弧:

$$\{f, g\}_{\text{P.B.}} := \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial x} \quad (p \text{ と } V \text{ の関係})$$

F と $H = F(x, p)$ に対し

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\}_{\text{P.B.}} = \frac{\partial F}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial F}{\partial p} \frac{dp}{dt}$$

が成り立つ。

F の全微分 $\frac{d}{dt}$

注2.12

命題2.4(ii) は λ の重複度が2以上でも成り立つ。(これはエルミート性の帰結)

$|\varphi_\lambda\rangle \rightsquigarrow |\varphi_{\lambda, k}\rangle$ と表すと. 2.4(ii), 2.5の式は以下のように変形 $\leftarrow 1$ から λ の重複度まで走るラベル

(正規直交性) $\langle \varphi_{\lambda, k} | \varphi_{\lambda', k'} \rangle = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{kk'}$

(完全性) $\sum_{\lambda, k} |\varphi_{\lambda, k}\rangle \langle \varphi_{\lambda, k}| = 1_N$

2.2 正準交換関係と不確定性原理

'21
10/18 [5]

定義 2.13 (x^i, p_i) と古典力学 i の粒子の正準変数 (位置, 運動量) とする。
 $\leftarrow i=1, 2, 3$ (x, y, z 成分)

これらと、以下をみたすように \mathbb{R} 上の ops. \hat{x}^i, \hat{p}_i におきかえり操作を正準量子化という。

$$[\hat{x}^i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}, [\hat{x}^i, \hat{x}^j] = 0, [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$$

正準交換関係 (Canonical Commutation Relation = CCR) と呼ぶ

(基本ポアソン括弧 $\{x^i, p_j\}_{P.B.} = 1$ 等において、 $\{, \}_{P.B.} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [,]$ と

以後 簡平のため実数 1次元で考える

おきかえたもの

例 2.14 (CCR の例)

「A 表示」 $\Leftrightarrow \hat{A}$ と対角化する表示

(i) $\hat{x} = x, \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ (x 表示) $\{ |x\rangle \}_{x \in \mathbb{R}}$ s.t. $\begin{cases} \hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \\ \hat{p}|x\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}|x\rangle \end{cases}$
 (Schrödinger 量子化) 完全系

(ii) $\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, \hat{p} = p$ (p 表示) $\{ |p\rangle \}_{p \in \mathbb{R}}$ s.t. $\begin{cases} \hat{x}|p\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}|p\rangle \\ \hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \end{cases}$

定義 2.15 $\Lambda = \mathbb{R}^n$ とす $\leftarrow |p\rangle \in |\lambda\rangle$ と書ける

• 正規直交系 $\Leftrightarrow \langle \lambda | \lambda' \rangle = \delta(\lambda - \lambda')$

• " 完全系 $\Leftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda |\lambda\rangle \langle \lambda| = 1_{\mathcal{H}}$

cf. Gelfand の 3 つ組

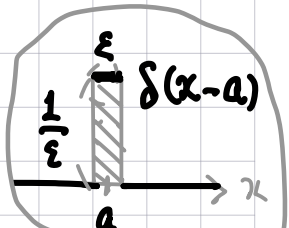
$$\begin{matrix} (\Omega, \mathcal{H}, \Omega') \\ \uparrow \quad \quad \downarrow \\ \mathcal{H} \text{ の基底 } |x\rangle \end{matrix}$$

定義 2.16 (Dirac の Dirac 関数)

以下をみたす関数 $\delta: f \mapsto f(a)$ と delta-fcn. と呼ぶ

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) dx = f(a) \quad (a \in \mathbb{R})$$

$\underbrace{\quad}_{\text{test fcn.}}$

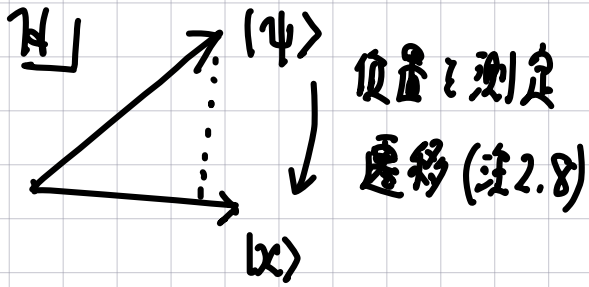


命題 2.17 $\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk$

ある物理層の... 表現

注 2.18 $\{|x\rangle\}$ 是 \mathbb{R}^1

6



(遷移確率) $|\psi\rangle = \sum C_x |x\rangle$

$|C_x|^2 = |\langle x | \psi \rangle|^2 = |\psi(x)|^2$

Born 確率解釈

$\langle \psi | \psi \rangle = \int dx \overline{\psi(x)} \psi(x) = \int dx \langle \psi | x \rangle \langle x | \psi \rangle$
標準的内積

$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle = \int dx' \langle x | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle$
↑ 完全系 $\delta(x-x')$ $\psi(x')$

注 2.19 $|x\rangle \rightarrow |p\rangle$ の基底変換

$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle = \int dp \langle x | p \rangle \langle p | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{ipx}{\hbar}} \psi(p)$
↑ p の完全系 $\psi(p)$ Fourier 変換!

一方 $\langle x | \hat{p} | p \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x | p \rangle$
↑ $p \langle x | p \rangle$ $p(x) = A e^{\frac{ipx}{\hbar}}$

U(1) 因子の不変性 $e^{i\theta}$ (注 2.9)
 $1 \cdot e^{i\theta} = 1 \in \mathbb{C}$

宿題 1

$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ と示せ

(答) $\langle p | p' \rangle = \delta(p-p')$
↑ x の完全系 $\delta(x) = \delta(-x) \cdot \hbar$ $2\pi\hbar |A|^2 \delta(p'-p)$ (2.17)
 $\int dx \underbrace{\langle p | x \rangle}_{\bar{A} e^{-\frac{ipx}{\hbar}}} \underbrace{\langle x | p' \rangle}_{A e^{\frac{ip'x}{\hbar}}} = |A|^2 \int dx e^{\frac{ix}{\hbar}(p'-p)} = |A|^2 \hbar \int dx e^{ix(p'-p)}$
 $x \mapsto x\hbar$

命题 2.20 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C} : \text{厄米算子 ops. 如 } [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \text{ ならば } \textcircled{7}$

$$\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle \geq \frac{\langle \hat{C} \rangle^2}{4} \quad (\text{Robertson 不等式}) \quad (\Delta\hat{F} := \hat{F} - \langle \hat{F} \rangle)$$

$\textcircled{8} I(\alpha) := \langle \psi | (\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})(\alpha\Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B}) | \psi \rangle = \langle (\alpha\Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B})\psi | (\alpha\Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B})\psi \rangle \geq 0$
 $(\alpha \in \mathbb{R})$ $(\Delta\hat{A})^2 \alpha^2 + i[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]\alpha + (\Delta\hat{B})^2$ 实数值

$$= \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle \alpha^2 - \langle \hat{C} \rangle \alpha + \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle$$

判别式 $\leq 0 \Rightarrow$ 不等式 $\textcircled{8}$

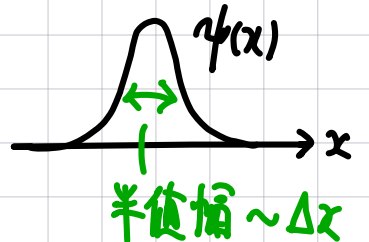
(等号成立 $\Rightarrow \alpha = \frac{\langle \hat{C} \rangle}{2\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle}$)

系 2.21 $\hat{A} = \hat{x}, \hat{B} = \hat{p}, \hat{C} = \hbar$

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\text{Heisenberg 不确定性原理}) \quad (\Delta F := \sqrt{\langle (\Delta\hat{F})^2 \rangle})$$

注 2.22 等号成立 \Leftrightarrow Gaussian (波束)

$(\langle \hat{x} \rangle = 0, \langle \hat{p} \rangle = 0 \text{ として } \psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2})$



$\textcircled{9} \Rightarrow a \text{ だけ考慮}$

$\langle \psi | \psi \rangle = 1$ として A が決まる \uparrow \downarrow

$$\alpha = \frac{\hbar}{2(\Delta x)^2} \text{ と } (\alpha\Delta\hat{x} + i\Delta\hat{p})|\psi\rangle = 0 \quad \dots \textcircled{1}$$

$\langle x | \rightarrow \downarrow$
 $\langle x | (\alpha\Delta\hat{x} + i\Delta\hat{p})|\psi\rangle \Rightarrow (\alpha x + \hbar \frac{\partial}{\partial x})\psi(x) = 0$

$\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle = \hat{x} - 0$
 $\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle = \hat{p} - 0$
 $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

(答) $\psi(p) = A' e^{-\frac{p^2}{4(\Delta p)^2}}$

$\textcircled{10} \langle p | \textcircled{1} \text{ と } \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$
 $\textcircled{11}$

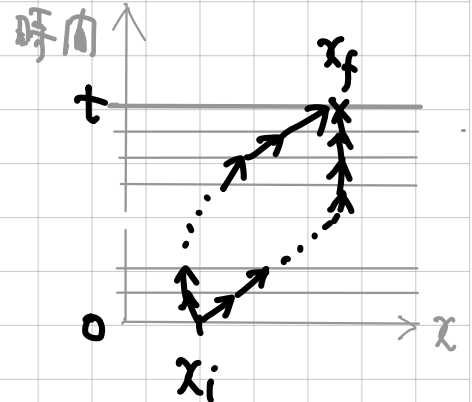
宿題 2 $\langle \hat{x} \rangle = 0, \langle \hat{p} \rangle = 0$ ならば $\psi(p)$ を求めよ

例 2.23 (経路積分)

'21
10/25

8

• $|x_i\rangle$ $\xrightarrow{\text{時間発展}}$ $|x_f\rangle$ とする確率区を求めたい。
 $t=0$ 時刻 t



$$Z = \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | x_i \rangle$$

$\parallel \Delta t = \frac{t}{N}$ (N等分) とする

$$\langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} \cdots e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_i \rangle$$

\uparrow x_{N-1} \uparrow x_{N-2} \uparrow x_1 の完全系

$$\int dx_1 \cdots dx_{N-1} \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_{N-2} \rangle \cdots \langle x_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_i \rangle$$

\uparrow P_{N-1} \uparrow P_{N-2} \cdots \uparrow P_0 の完全系

$$\int dx_1 \cdots dx_{N-1} dp_0 \cdots dp_{N-1} \underbrace{\langle x_f | P_{N-1} \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} P_{N-1} x_f}} \underbrace{\langle P_{N-1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_{N-1} \rangle}_{\langle P_{N-1} | x_{N-1} \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} H(x_{N-1}, P_{N-1}) \Delta t}} \cdots \underbrace{\langle x_1 | P_0 \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} P_0 x_1}} \underbrace{\langle P_0 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} | x_i \rangle}_{\langle P_0 | x_i \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} H(x_i, P_0) \Delta t}}$$

宿題1
 $N=3 \leq 1?$
 の式を
 導け

$$H(x, p) = \langle p | \hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) | x \rangle$$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int dx_1 \cdots dx_{N-1} dp_0 \cdots dp_{N-1} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \{ p_j (x_{j+1} - x_j) - H(x_j, p_j) \} \Delta t} \quad \begin{matrix} (x_0 := x_i) \\ (x_N := x_f) \end{matrix}$$

$\downarrow N \rightarrow \infty$ $L(x, \dot{x}) : \dot{x} = \dot{x} = \dot{x} = \dot{x} ?$ $S := \int_0^t L dt$ (作用積分)

$$\int \mathcal{D}x \mathcal{D}p e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t (p \dot{x} - H(x, p)) dt} = \int \mathcal{D}x \mathcal{D}p e^{\frac{i}{\hbar} S}$$

$\dot{x} =$ 時間微分 「経路積分」
 すべての経路の和

§3 シュレディンガー方程式の解法(空間1次元)

3.1 一般的事項

Sch. eq. $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) |\psi(t)\rangle$

$\langle q | \hat{q} = \langle q | q$
 $\langle q | \hat{p} = \langle q | \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}$

左から $\langle x |$ をかける $\frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \underbrace{V(\hat{x})}_{\text{ポテンシャル}} : \text{エリミートとする}$
 $\psi(x, t) := \langle x | \psi(t) \rangle$

x 表示での Sch. eq. $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}) \psi(x, t)$

変数分離を考慮する:

$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \underbrace{V(x)}_{\text{R値}} \right) \psi(x, t) \dots (*)$

$\psi(x, t) = f(t) \varphi(x)$

$(*) \Rightarrow \underbrace{\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df(t)}{dt}}_{t \text{のみ}} = \underbrace{\frac{H\varphi(x)}{\varphi(x)}}_{x \text{のみ}} = E \text{ (定数)}$

※ 物理に登場する関数は、断りがなければすべて複

$\therefore \begin{cases} f(t) = a e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi(x) = E \varphi(x) \end{cases}$ $\begin{matrix} \text{R} \\ \cup \\ \text{R} \end{matrix}$ ← この固有値問題を解きたい

a と $\psi(x, t)$ の関係 $|\psi(x, t)|^2 = |a|^2 |\varphi(x)|^2$: 時間変化しない (定常状態)

定義 3.1 $\varphi(x)$ が 2乗可積分のとき、システムは定常状態であるという。

“ 定常状態 ” “ 定常状態 ” “ 定常状態 ” “ 定常状態 ” “ 定常状態 ” “ 定常状態 ” “ 定常状態 ” “ 定常状態 ” “ 定常状態 ” “ 定常状態 ”

定義 3.2 $\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$ は平面波解 \Leftrightarrow k : 波数 ω : 角振動数 10

例 3.3 $V = V_0$ (定数) の場合

宿題 2 $f(x - vt)$ 形の関数は、 x の正方向に速度 v で進む波を表すことを説明せよ

x 微分 $\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi = 0$

(i) $E > V_0$ のとき $\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ $k := \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \dots ①$

(ii) $E < V_0$ のとき $\psi(x) = C e^{\rho x} + D e^{-\rho x}$ $\rho := \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \dots ②$

* (i) は $f(x)$ と合わせれば平面波

③ $E = \hbar\omega$ とし $\psi(x, t) = A' e^{i(kx - \omega t)} + B' e^{-i(kx + \omega t)}$
 x の正方向 x の正方向 負方向に進む波

また、 $p := \hbar k$ とし、 $V_0 = 0$ とすると、 $p \stackrel{①}{=} \sqrt{2mE} \Leftrightarrow E = \frac{p^2}{2m}$

命題 3.4 $\psi(x)$: 有界とする。 自由粒子の運動エネルギー

ポテンシャル $V(x)$ が " $x = a$ " で不連続かつその近傍で有界とする

$\psi(x)$ と $\psi'(x)$ は " $x = a$ " で連続

④ $\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} (E - V(x)) \psi(x) dx$

$\therefore \left| \frac{d\psi}{dx}(x=a+\varepsilon) - \frac{d\psi}{dx}(x=a-\varepsilon) \right| \leq \frac{2m}{\hbar^2} \sup_{x \in (a-\varepsilon, a+\varepsilon)} (|E - V_0| |\psi(x)|) \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx$
 $= 2\varepsilon \times (\text{有限}) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$

同様: $|\psi(a+\varepsilon) - \psi(a-\varepsilon)| \leq 2\varepsilon \sup |\psi(x)| \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$ ▣

命題 3.5 1次元システムの束縛状態 $\varphi(x)$ の零点が高々有限個であり、かつ $|\varphi(x)| \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$ とする。このとき

縮退がある \Leftrightarrow 同一固有値をもつ固有関数が2つ以上ある。

(i) エネルギー固有値 E に関して 縮退がない

(ii) $V(x) = V(-x)$ 偶 $\Rightarrow \varphi(-x) = \pm \varphi(x)$ 偶か奇

(iii) $\varphi(x)$ は実関数にとれる。

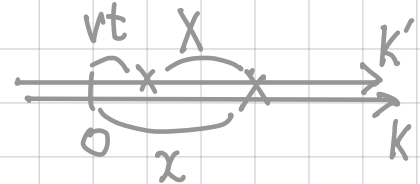
☺ レポートにします

宿題 2 解答例

$X := x - vt$ とおくと $f(x - vt) = f(X) \dots \textcircled{1}$

ここで座標変換 $(x, t) \mapsto (X, t)$ と考える。
 K 系 $\quad K'$ 系と呼ぶ

K' 系は K 系に対して速度 v で正方向に運動する座標系である。



一方、 $\textcircled{1}$ より K' 系で見ると関数形(波形)は時間変化しない。

以上により、 K 系から見た波形は x の正の向きに速度 v で進む波を表す。

3.2 ポテンシャル障壁による散乱問題

'21
11/1

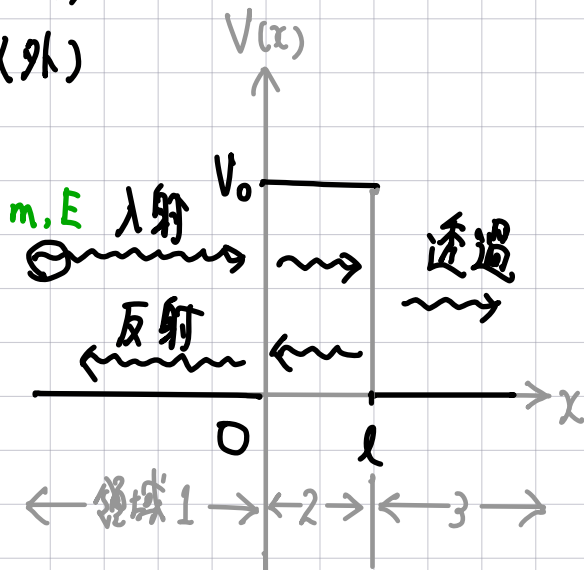
12

例 3.6 $V(x) = \begin{cases} V_0 (> 0) & (0 \leq x \leq l) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases}$

このポテンシャル障壁に $x = -\infty$ から

自由粒子 (m, E) が入射

質量 ↑ エネルギー (given) ↑



(i) $E > V_0$ のとき

例 3.3 のり

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ \psi_2(x) = F e^{i\alpha x} + G e^{-i\alpha x} \\ \psi_3(x) = C e^{ikx} \end{cases}$$

$$k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\alpha := \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

問題 1 $\frac{C}{A}$ の式を計算しなさい

問題 3.4 a b.c. (= boundary condition) のり

$$x=0: A + B = F + G, \quad ik(A - B) = i\alpha(F - G)$$

$$x=l: C e^{ikl} = F e^{i\alpha l} + G e^{-i\alpha l}, \quad ik C e^{ikl} = i\alpha(F e^{i\alpha l} - G e^{-i\alpha l})$$

$$\therefore \frac{B}{A} = \frac{(k^2 - \alpha^2)(1 - e^{2i\alpha l})}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 e^{2i\alpha l}}, \quad \frac{C}{A} = \frac{4k\alpha e^{i(\alpha - k)l}}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 e^{2i\alpha l}}$$

方程式の未知変数を

$$\therefore \begin{cases} \text{反射率} := \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left(1 + \frac{4(k\alpha)^2}{(k^2 - \alpha^2) \sin^2 \alpha l} \right)^{-1} \\ \text{透過率} := \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \left(1 + \frac{(k^2 - \alpha^2) \sin^2 \alpha l}{4(k\alpha)^2} \right)^{-1} \end{cases} \quad \text{和} = 1$$

* $\alpha l = n\pi$ ($n=1, 2, 3, \dots$)
 $\left| \frac{B}{A} \right|^2 = 0, \left| \frac{C}{A} \right|^2 = 1$
 (完全透過)

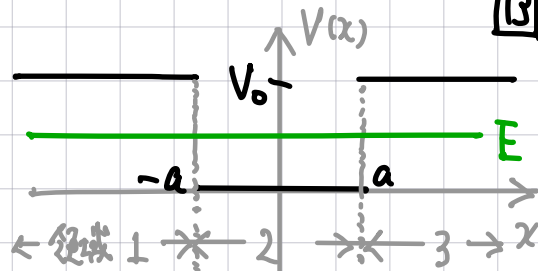
(ii) $E < V_0$ のとき

$$\beta := \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \text{ とする. } (*) \text{ の } \alpha \rightarrow i\beta \text{ とおけばよい (トンネル効果!) } \left(\left| \frac{C}{A} \right|^2 \neq 0 \right)$$

3.3 井戸型ポテンシャルによる束縛状態

⑬

例 3.7 $V(x) = \begin{cases} 0 & : |x| \leq a \\ V_0 (> 0) & : |x| > a \end{cases}$



エネルギー E ($0 < E < V_0$) の粒子は束縛されている。(固有値問題を解く)

$V(-x) = V(x)$ より、波動関数 $\varphi(x)$: 偶 or 奇 (3.5(ii))

(i) $\varphi(x)$ が 偶関数 のとき

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = B e^{\beta x} + B' e^{-\beta x} \\ \varphi_2(x) = A \cos \alpha x \\ \varphi_3(x) = B e^{-\beta x} + B' e^{\beta x} \end{cases}$$

不適 (⊖ 束縛 ⇔ 2乗可積分 ⇒ $|\varphi(x)| \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$)

$$\alpha := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \beta := \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$x = \pm a$ での b.c.:

$$B e^{-\beta a} = A \cos \alpha a, \quad B \beta e^{-\beta a} = -A \alpha \sin \alpha a$$

A, B と E !
式3つ, 未知変数3つ!

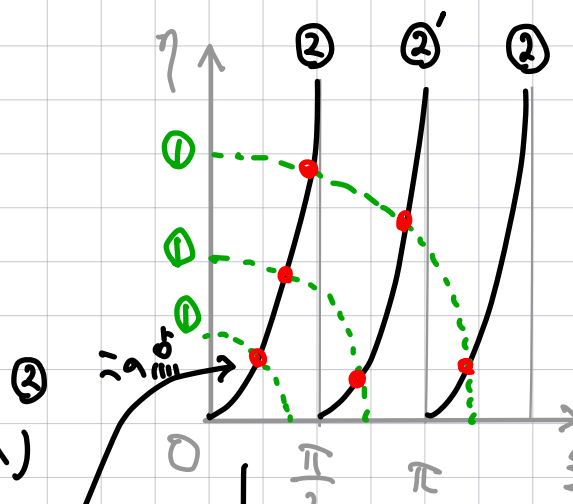
規格化条件: $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$

$\xi := \alpha a (> 0), \quad \eta := \beta a (> 0)$ とする

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \dots \textcircled{1}, \quad \eta = \xi \tan \xi \dots \textcircled{2}$$

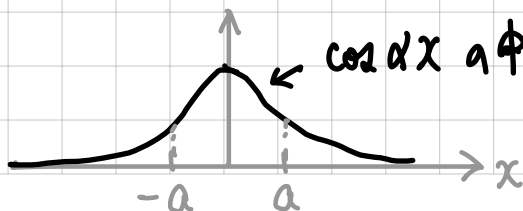
(ii) $\varphi(x)$ が 奇関数 のとき (詳しくはレポート)

同様に $\textcircled{1}$ & $\eta = -\xi \cot \xi \dots \textcircled{2}'$



交点の値から、 α, β (つまり E) が定まる。(離散的)
(交点なし ⇔ 解なし)

エネルギー固有値最小 ⇔ α が最小 (交点の ξ の値が最小)
このときの $\varphi(x)$ の概形:



$\cos \alpha x$ の中で α が最小の $x = \pm a$ での $\varphi(x)$ が指数関数に接続

3.4 調和振動子

Dirac の記法で代数的に解く (固有値問題と解き、エネルギー一律で求める) 固有値

$$\hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$$

また次の ops. を def: エルミート共役

$$\hat{a} := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right), \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad \hat{H} \text{ の固有値問題} \Leftrightarrow \hat{N} := \hat{a}^\dagger \hat{a} \text{ の固有値問題}$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \Rightarrow [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

$$\text{また, } [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad \dots \textcircled{1}$$

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \quad \dots \textcircled{2}$$

宿題2 二つを示せ

$$([\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}) \quad \text{を用いてよい}$$

\hat{N} の固有状態を $|n\rangle$, 固有値を λ_n とする: $\hat{N}|n\rangle = \lambda_n |n\rangle$

$$\text{よって, } \begin{cases} \hat{N} \hat{a}^\dagger |n\rangle \stackrel{\textcircled{1}}{=} (\hat{a}^\dagger \hat{N} + \hat{a}^\dagger) |n\rangle = (\lambda_n + 1) \hat{a}^\dagger |n\rangle \\ \hat{N} \hat{a} |n\rangle \stackrel{\textcircled{2}}{=} (\hat{a} \hat{N} - \hat{a}) |n\rangle = (\lambda_n - 1) \hat{a} |n\rangle \end{cases}$$

よって $\hat{a}^\dagger |n\rangle, \hat{a} |n\rangle \in \hat{N}$ の固有状態。

$$\text{一方, } \langle n | \hat{N} |n\rangle = \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = |\hat{a} |n\rangle|^2 \geq 0$$

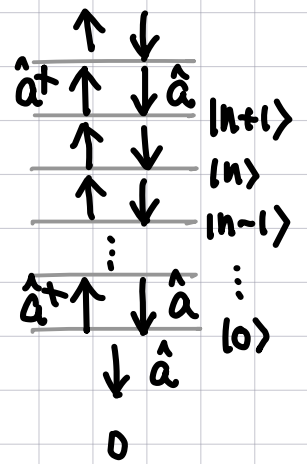
$$\lambda_n \langle n | n \rangle = 1 \quad (\text{規格化可能とする})$$

よってある n で $\hat{a} |n\rangle = 0$ としなければならない

\hat{N} : number op. \hat{a}^\dagger : creation op. \hat{a} : annihilation op. \leftarrow これは $|0\rangle$ と書ける。

$$\lambda_0 = \langle 0 | \hat{N} |0\rangle = \langle 0 | \hat{a}^\dagger \hat{a} |0\rangle = 0 \text{ より}$$

$$\lambda_n \in \{0, 1, 2, \dots\} \text{ と書ける. } \hat{N} |n\rangle = n |n\rangle$$



エネルギー固有値 $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$

$E_n \geq E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$: 零点エネルギー (最低エネルギー) (量子ゆらぎの反映)

(21) 11/8 (15)

次に $|n+1\rangle = c_n \hat{a}^\dagger |n\rangle$ a c_n, d_n

$|n-1\rangle = d_n \hat{a} |n\rangle$ と求める

$1 = \langle n+1 | n+1 \rangle = |c_n|^2 \langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger | n \rangle = (n+1) |c_n|^2 \therefore c_n = \frac{1}{\sqrt{n+1}}$

$1 = \langle n-1 | n-1 \rangle = |d_n|^2 \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle = n |d_n|^2 \therefore d_n = \frac{1}{\sqrt{n}}$

$\therefore \begin{cases} \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \end{cases} \therefore |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$ (不定性を無視)

波動関数 (x表示)

$\hat{a} |0\rangle = 0$ (基底状態をまず求める)

$\langle x | \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) |0\rangle = 0$

$\left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \underbrace{\langle x | 0 \rangle}_{\varphi_0(x) \text{ 波動関数}} = 0 \Rightarrow \varphi_0(x) = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$

規格因子 $\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}}$ $\langle 0 | 0 \rangle = 1$ (xの完全系)

(番号n番目の) 励起状態の波動関数 $\varphi_n(x)$ も同様に求める: Aを計算して

$\varphi_n(x) = \langle x | n \rangle = \langle x | \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n | 0 \rangle$

$= N_n \left[\xi - \frac{d}{d\xi} \right]^n e^{-\frac{\xi^2}{2}} = N_n H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

問題1 求める
 $\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \right)$
 を用いてよい

$\xi := \beta x, \beta := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, N_n := \sqrt{\frac{\beta}{\pi^{\frac{1}{2}} n! 2^n}}$

$H_n(\xi) := (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$
 エルミット多項式

§4 シュレディンガー方程式の解法 (空間3次元)

4.1 QM (3次元)

粒子の位置: $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3) \equiv (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$

運動量: $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3) \equiv (p_x, p_y, p_z)$

(CCR) $[\hat{x}_k, \hat{p}_l] = i\hbar \delta_{kl} \quad k, l \in \{1, 2, 3\}$

(x表示) $\hat{x}_k |x_k\rangle = x_k |x_k\rangle$

$\langle x_k | x'_l \rangle = \delta_{kl} \delta(x_k - x'_l)$

$\int dx_k |x_k\rangle \langle x_k| = \hat{1}_{\mathcal{H}_k}$

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3$
 $\hat{x}_1, \hat{p}_1 \quad \hat{x}_2, \hat{p}_2 \quad \hat{x}_3, \hat{p}_3$

(Sch. eq.) $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(\vec{r}, \vec{p}) |\psi(t)\rangle$

↓ 左から $\langle \vec{r} |$ をかける ($\langle \vec{r} | \psi(t) \rangle =: \psi(\vec{r}, t)$)
 $\langle x | \otimes \langle y | \otimes \langle z |$

r表示

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla) \psi(\vec{r}, t)$

$\psi(\vec{r}, t) = f(t) \varphi(\vec{r})$
 (変数分離)

$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$

$\nabla := \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$

$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} : \text{ラプラシアン}$

定常状態

$$\begin{cases} f(t) = a e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}), \quad E \in \mathbb{R} \\ |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |a|^2 |\varphi(\vec{r})|^2 \end{cases}$$

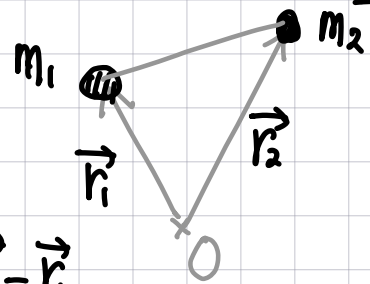
↑ エネルギー固有値

4.2 2体内題

$$\vec{p}_i := m_i \vec{v}_i \quad \leftarrow \text{呼内ビバン}$$

17

$$ハミルトニアン H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)$$



$$\text{重心座標 } \vec{R} := \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \text{相対座標 } \vec{r} := \vec{r}_2 - \vec{r}_1$$

$$\text{全質量 } M := m_1 + m_2, \quad \text{換算質量 } \mu := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \left(\Leftrightarrow \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)$$

$$\vec{P} := M \dot{\vec{R}}, \quad \vec{p} := \mu \dot{\vec{r}}, \quad r := |\vec{r}| \quad m_1 \gg m_2 \Rightarrow \mu \approx m_2$$

$$H = \frac{1}{2M} \vec{P}^2 + \frac{1}{2\mu} \vec{p}^2 + V(r) \quad \leftarrow \text{宿題2 = 4.5 示せ}$$

$$\text{量子化: } [\hat{x}_k^{(1)}, \hat{p}_l^{(1)}] = [\hat{x}_k^{(2)}, \hat{p}_l^{(2)}] = i\hbar \delta_{kl} \quad \left(\begin{array}{l} \text{重心} \\ \text{相対} \end{array} \Rightarrow [\hat{X}_k, \hat{P}_l] = [\hat{x}_k, \hat{p}_l] = i\hbar \delta_{kl} \right)$$

$$\text{Sch. eq. (位置表示)} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{R}, \vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + V(r) \right] \Psi(\vec{R}, \vec{r}, t)$$

$$\downarrow \Psi(\vec{R}, \vec{r}, t) = e^{i \frac{\vec{P} \cdot \vec{R}}{\hbar} - i \frac{\vec{p}^2}{2M\hbar} t} \psi(\vec{r}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + V(r) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad \text{1粒子の eq. に帰着}$$

4.3 角運動量と極座標系

$$\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1 \quad \text{他} = 0 \\ = -\epsilon_{132} = -\epsilon_{213} = -\epsilon_{321} = 1$$

定義 4.1 軌道角運動量 op. (スピン無し)

$$\hat{L} := \hat{r} \times \hat{p} \quad (\text{i.e. } \hat{L}_x = \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y, \dots) \quad \text{I 成分は 0, 完全反対称テンソル}$$

命題 4.2 (i) $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{L}_l$ (i.e. $[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = i\hbar \hat{L}_3, \dots$)

(ii) $[\hat{L}^2, \hat{L}_k] = 0 \quad \forall k$
 $\left(\begin{array}{l} \text{L} = \sum_{i=1}^3 \hat{L}_i^2 \text{ 和が } \sum_{i=1}^3 \hat{L}_i^2 \text{ である} \\ \text{[L}^2, \hat{L}_i] = 0 \text{ の規格} \end{array} \right)$

$$a_k b_k := \sum_k a_k b_k$$

命題 4.3 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + V(r)$ の極座標表示:

18

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

$$\begin{cases} x = r \sin\theta \cos\phi \\ y = r \sin\theta \sin\phi \\ z = r \cos\theta \end{cases}$$

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

☺ Lポット

∴ \vec{L}^2 の固有値方程式 \mathcal{L}

$$\vec{L}^2 Y(\theta, \phi) = \hbar^2 \lambda Y(\theta, \phi) \quad \dots \textcircled{1}$$

∴ 来々. $\psi(\vec{r}) = R(r) Y(\theta, \phi)$ と変数分離:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \lambda}{2\mu r^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r) \quad \dots \textcircled{2} \quad (u(r) := r R(r))$$

$$\text{規格化条件: } \int_0^\infty \frac{|R(r)|^2 r^2 dr}{|u(r)|^2} \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} |Y(\theta, \phi)|^2 d\phi = 1$$

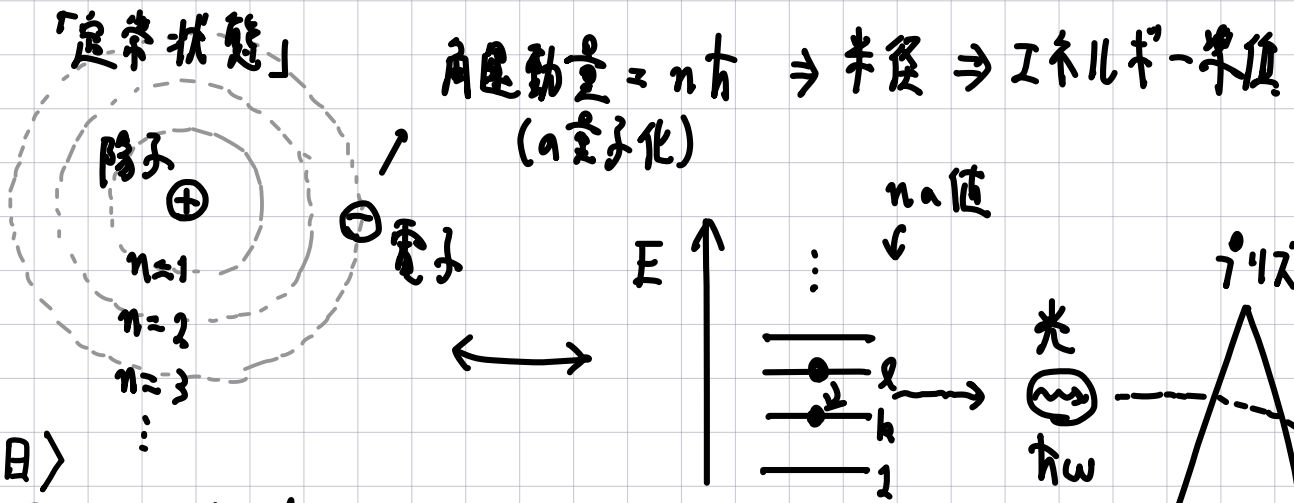
$$\text{b.c. } \begin{cases} u(r \rightarrow \infty) = 0 \\ u(0) = 0 \quad (V(r) \sim \frac{1}{r} \text{ など条件下}) \quad (\text{詳しくは Lポット}) \end{cases}$$

4.4 水素原子の束縛状態

'21
11/15

19

例4.4 水素原子の Bohr 模型 (1913年)



<今日>

水素原子の Schrödinger eq. の解

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad \leftarrow \text{これを求める}$$

$$E_n = -C \frac{1}{n^2} \quad \leftarrow \text{一致する? } 13.6 \text{ eV}$$

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

($1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$)
($m \approx \mu$) Bohr 半径

$$\epsilon := \frac{2m a_0^2}{\hbar^2} E, \quad \rho := \frac{r}{a_0} \text{ とおく. } \left(a_0 := 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{me^2} \right)$$

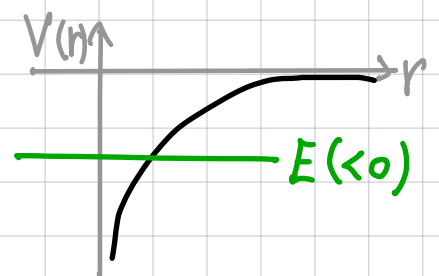
① の解 (来週) $\rightsquigarrow \lambda = l(l+1) \quad l \in \{0, 1, 2, \dots\}$

今日は ② の解。 $R(r) = R_\ell(r)$ と書き、 $u_\ell := \rho R_\ell$ とおく。

$$\text{(Sch eq.) } \left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} \right] u_\ell(\rho) = \epsilon u_\ell(\rho)$$

He

$\epsilon < 0$



宿題1 a_0 の値と単位
付与の有効数字
2ヶ所まで求めよ。
 m : 電子の質量
 e : " 電荷
 ϵ_0 : 真空の誘電率
 \hbar : プランク定数
(2π 割ったもの)

以後 [砂川] P120 に沿う

“昇降 ops.” を導入:

20

$$\begin{cases} b_{l+k} := \frac{1}{i} \frac{d}{dp} + i \left(\frac{l+k}{\rho} - \frac{1}{l+k} \right) \\ b_{l+k}^\dagger = \frac{1}{i} \frac{d}{dp} - i \left(\frac{l+k}{\rho} - \frac{1}{l+k} \right) \end{cases} \quad k \in \{1, 2, \dots\}$$

よって, $H^{(k)} := -\frac{d^2}{dp^2} + \frac{(l+k-1)(l+k)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho}$, $\varepsilon^{(l+k)} := -\frac{1}{(l+k)^2}$ とし

$$\begin{cases} b_{l+k}^\dagger b_{l+k} = H^{(k)} - \varepsilon^{(l+k)} \\ b_{l+k} b_{l+k}^\dagger = H^{(k+1)} - \varepsilon^{(l+k)} \end{cases} \quad \begin{matrix} \uparrow \\ H^{(1)} \equiv H_\ell \quad (\ell \leq \ell \leq \rho H) \end{matrix}$$

また $H^{(k)} b_{l+k}^\dagger = b_{l+k}^\dagger H^{(k+1)}$ が成り立つ。

$$\begin{aligned} \textcircled{\text{a}} \quad (左辺) &= (b_{l+k}^\dagger b_{l+k} + \varepsilon^{(l+k)}) b_{l+k}^\dagger = b_{l+k}^\dagger b_{l+k} b_{l+k}^\dagger + \varepsilon^{(l+k)} b_{l+k}^\dagger \\ &= b_{l+k}^\dagger (b_{l+k} b_{l+k}^\dagger + \varepsilon^{(l+k)}) = (右辺) \quad \square \end{aligned}$$

よって, $b_{l+k} \varphi^{(l+k-1)} = 0 \dots (**)$ とみたす関数を考える。

これは $H^{(k)}$ の最低固有値 ε であり, ε の固有値は $\varepsilon^{(l+k)}$ 。

$$\textcircled{\text{b}} \quad H^{(k)} \varphi^{(l+k-1)} = (b_{l+k}^\dagger b_{l+k} + \varepsilon^{(l+k)}) \varphi^{(l+k-1)} = \varepsilon^{(l+k)} \varphi^{(l+k-1)}.$$

また, $H^{(k)}$ の $\varphi^{(l+k-1)}$ 以外の固有関数は $\chi^{(l+k-1)}$ (規格化済) と書くと

$$\int_0^\infty \chi^{\dagger(l+k-1)} H^{(k)} \chi^{(l+k-1)} dp = \int_0^\infty \underbrace{|b_{l+k} \chi|^2}_{\neq 0} dp + \varepsilon^{(l+k)} > \varepsilon^{(l+k)} \quad (1\text{-次元では規格化済}) \quad \square$$

$H^{(l)} \equiv H_x$ の固有関数を拾い出す

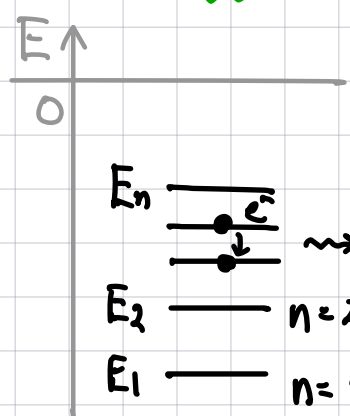
$k=1$ $u_{l+1} := \varphi^{(l)}$ は $H^{(l)}$ の固有値 $\varepsilon^{(l+1)}$ の解 $\odot H^{(l)} u_{l+1} = H^{(l)} \varphi^{(l)} = \varepsilon^{(l+1)} u_{l+1}$ [21]

$k=2$ $u_{l+2} := b_{l+1}^\dagger \varphi^{(l+1)}$ $\varepsilon^{(l+2)}$ $\odot H^{(l)} u_{l+2} = H^{(l)} b_{l+1}^\dagger \varphi^{(l+1)}$

\vdots
 k $u_{l+k} := b_{l+1}^\dagger b_{l+2}^\dagger \dots b_{l+k}^\dagger \varphi^{(l+k-1)}$ $\varepsilon^{(l+k)}$ $\approx b_{l+1}^\dagger H^{(2)} \varphi^{(l+1)} = \varepsilon^{(l+2)} \varphi^{(l+1)}$

\odot 宿題2 : ε を示せ

$\varepsilon^{(n)} = -\frac{1}{n^2}$ ($l \in \{0, 1, \dots, n-1\}$: 縮退)



$E_n = -\frac{h^2}{2m a_0^2} \frac{1}{n^2}$

13.6 eV (実験と一致!)

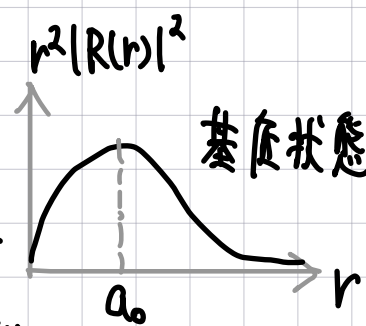
e^- が $E_n \rightarrow E_m$ ($n > m$) と遷移し、
 光子 $h\nu$ を放出

波動関数 ($k \in \mathbb{N}_{n-1}$) $n-l-1$

$u_l^{(n)} := u_{l+k} = b_{l+1}^\dagger \dots b_{n-1}^\dagger \varphi^{(n-1)}$

(林) $\Leftrightarrow b_n \varphi^{(n-1)} = \left[\frac{1}{i} \frac{d}{dp} + i \left(\frac{n}{p} - \frac{1}{n} \right) \right] \varphi^{(n-1)} = 0$

解: $\varphi^{(n-1)}(\rho) = C_n \rho^n e^{-\frac{\rho}{n}}$ (規格化因子)



$n=1$ ($l=0$ only) $u_0^{(1)} = \varphi^{(0)} = 2\rho e^{-\rho}$

$n=2$ ($l=0, 1$) $u_0^{(2)} = b_1^\dagger \varphi^{(1)}$ $\leftarrow b_1^\dagger u_1^{(2)} = \varphi^{(1)}$

$n=3$ ($l=0, 1, 2$) $u_0^{(3)} = b_1^\dagger b_2^\dagger \varphi^{(2)}$ $\leftarrow b_1^\dagger u_1^{(3)} = b_2^\dagger \varphi^{(2)} \leftarrow b_2^\dagger u_2^{(3)} = \varphi^{(2)}$

4.5 (一般)角運動量の固有値問題

定義 4.5 其上のエルミート ops. \hat{J}_k ($k \in \{1, 2, 3\}$) が以下をみたすとき.

(一般)角運動量 op. であるとする. (例)軌道角運動量 op. (P17)

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i \epsilon_{jkl} \hat{J}_l$$

$\hookrightarrow l = 2, 3, 1$ の和

命題 4.6 $\hat{J}^2 := \sum_{k=1}^3 \hat{J}_k^2$ とする. $[\hat{J}^2, \hat{J}_k] = 0$ ($\forall k$)

注 4.7 $[\hat{J}^2, \hat{J}_3] = 0 \Rightarrow \hat{J}^2 \text{ と } \hat{J}_3 \text{ の同時固有状態 } |\lambda, m\rangle \text{ が存在}$

$$\begin{cases} \hat{J}^2 |m\rangle = \lambda |m\rangle \dots \textcircled{3} \\ \hat{J}_3 |m\rangle = m |m\rangle \dots \textcircled{4} \end{cases}$$

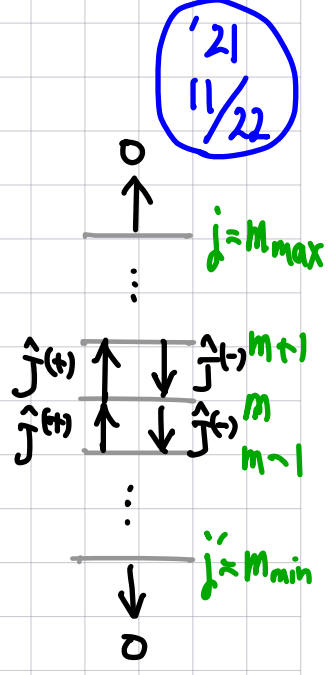
λ は省略 \leftarrow \hat{J}^2 の固有値 λ がバレル

③より $\lambda = \langle m | \hat{J}^2 |m\rangle = \sum_{k=1}^3 |\langle \hat{J}_k |m\rangle|^2 \geq 0$

昇降 ops. と def:

$$\hat{J}^{(\pm)} := \hat{J}_1 \pm i \hat{J}_2 \quad (\text{以後複号同順})$$

これを $\begin{cases} [\hat{J}^2, \hat{J}^{(\pm)}] = 0 \dots \textcircled{5} \\ \hat{J}_3 \hat{J}^{(\pm)} = \hat{J}^{(\pm)} (\hat{J}_3 \pm 1) \dots \textcircled{6} \\ \hat{J}^{(+)} \hat{J}^{(-)} = \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 \pm \hat{J}_3 \dots \textcircled{7} \end{cases}$



補題 4.8 $\hat{J}^{(\pm)} |m\rangle$ は \hat{J}_3 の固有ベクトルで固有値は $(m \pm 1)$

宿題!

① $\hat{J}_3 \hat{J}^{(\pm)} |m\rangle \stackrel{\textcircled{6}}{=} \hat{J}^{(\pm)} (\hat{J}_3 \pm 1) |m\rangle = (m \pm 1) \hat{J}^{(\pm)} |m\rangle$ \square

② を示す
複号のどちらか一方だけである

命題 4.9 \hat{J}_3 の固有値 m には最大値・最小値がある.

また $j := m_{\max}$ とすると $m = j, j-1, \dots, -j$ であり. $\lambda = j(j+1)$

$(2j+1) \square$

$$\odot (\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2) |m\rangle = (\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2) |m\rangle = (\lambda - m^2) |m\rangle \quad (23)$$

$$\therefore \langle m | (\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2) |m\rangle = \lambda - m^2 \geq 0 \quad \therefore m \text{ は最大・最小あり}$$

$$j := m_{\max}, j' := m_{\min} \text{ とす } \hat{J}^{(+)} |m=j\rangle = 0, \hat{J}^{(-)} |m=j'\rangle = 0$$

$$\therefore \hat{J}^{(-)} \hat{J}^{(+)} |m=j\rangle \stackrel{\textcircled{2}}{=} (\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hat{J}_3) |m=j\rangle = (\lambda - j^2 - j) |m=j\rangle = 0$$

$$\hat{J}^{(+)} \hat{J}^{(-)} |m=j'\rangle \stackrel{\textcircled{2}}{=} (\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 + \hat{J}_3) |m=j'\rangle = (\lambda - j'^2 + j') |m=j'\rangle = 0$$

$$\therefore \begin{cases} \lambda = j(j+1) \\ \lambda = j'(j'-1) \end{cases} \Rightarrow (j+j')(j-j'+1) = 0 \stackrel{>0 (\odot j \geq j')}{\Rightarrow} j' = -j \quad \square$$

系 4.10 $j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\}$ \odot 固有値の間の数 = $2j \in \mathbb{Z}$

(例) $j=0$ のとき $m=0, \lambda=0$

$j=\frac{1}{2}$ " $m \in \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}, \lambda = \frac{3}{4}$

$j=1$ " $m \in \{1, 0, -1\}, \lambda = 2$

← 位相因子 = 1 とした

補題 4.11 $\hat{J}^{(\pm)} |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle$

← $|m\rangle$ は m のみで表わす

\odot 補題 4.8 より, $\hat{J}^{(\pm)} |m\rangle = a_m^{(\pm)} |m \pm 1\rangle$ と書ける。

$$\langle m-1 | \hat{J}^{(-)} |m\rangle = a_m^{(-)} \langle m-1 | m-1\rangle = a_m^{(-)}$$

$$(\hat{J}^{(+)} |m-1\rangle)^\dagger |m\rangle = \overline{a_{m-1}^{(+)}} \langle m | m\rangle = \overline{a_{m-1}^{(+)}}$$

一方, $\langle m | \hat{J}^{(-)} \hat{J}^{(+)} |m\rangle = |\hat{J}^{(+)} |m\rangle|^2 = |a_m^{(+)}|^2$

$$\langle m | (\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hat{J}_3) |m\rangle = j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+m+1) \quad \square$$

4.6 軌道角運動量の固有値問題

4.3節に戻す。 $\vec{L} =: \hbar \vec{M}$ とすれば、 \vec{M} は一般角運動量 op. の一例。

$$\begin{cases} M_x = \frac{1}{i} \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ M_y = \frac{1}{i} \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ M_z = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad \dots \textcircled{7} \end{cases}$$

$\cot\chi := \frac{1}{\tan\chi}$

$\vec{M}^2 Y(\theta, \phi) = \lambda Y(\theta, \phi)$ と解く。 (λ, Y と求める)

$M^{(\pm)} := M_x \pm i M_y = e^{\pm i\phi} \left(\mp \sqrt{1-\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$
 $\xi := \cos\theta$
 $(0 \leq \theta \leq \pi) \quad (\sin\theta = \sqrt{1-\xi^2})$

$\vec{M}^2 = -\frac{\partial}{\partial \xi} (1-\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{1}{1-\xi^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

$Y_m(\theta, \phi) := \langle \xi, \phi | m \rangle$ とする。 (③, ④, ⑤, ⑥, ⑦)

$M^{(\pm)} Y_m = e^{\pm i\phi} \left(\mp \sqrt{1-\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{m\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} \right) Y_m$
 $= \mp e^{\pm i\phi} (\sqrt{1-\xi^2})^{\pm m+1} \frac{\partial}{\partial \xi} (\sqrt{1-\xi^2})^{\mp m} Y_m$

$j = m_{\max} \leq l$ と置く

$M^{(+)} Y_l = 0 \Rightarrow (\sqrt{1-\xi^2})^{-l} Y_l = \text{const.} \quad \dots \textcircled{8}$ (これは示す (e.g. 帰納法))

一方、 $n \in \mathbb{Z}_{>0}$ とする

$(M^{(-)})^n Y_m = e^{-in\phi} (\sqrt{1-\xi^2})^{-m+n} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} \left((\sqrt{1-\xi^2})^m Y_m \right) \quad \dots \textcircled{9}$

$\downarrow m=l, n=2l+1$

$(M^{(-)})^{2l+1} Y_l = e^{-i(2l+1)\phi} (\sqrt{1-\xi^2})^{l+1} \frac{\partial^{2l+1}}{\partial \xi^{2l+1}} \left((\sqrt{1-\xi^2})^l Y_l \right) = 0$

$$\therefore \frac{2^{2l+1}}{2\xi^{2l+1}} \left\{ \underbrace{(\sqrt{1-\xi^2})^l}_{\parallel} Y_l \right\} = 0$$

$\therefore \xi$ の $2l$ 次 の 多項式 ... ⑩

j と z , z
 $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ は z の
 \downarrow

$$\textcircled{10} \div \textcircled{8} \Rightarrow (1-\xi^2)^l = (\xi \text{ の } 2l \text{ 次 の 多項式}) \Rightarrow l \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$$

< 波動関数 >

$$\vec{M}^2 Y_m(\theta, \phi) = l(l+1) Y_m(\theta, \phi) \quad \leftarrow \textcircled{1}$$

$\downarrow F_m(\xi) e^{im\phi}$: 変数分離 (可能)

$$\left(\frac{d}{d\xi} (1-\xi^2) \frac{d}{d\xi} - \frac{m^2}{1-\xi^2} + l(l+1) \right) F_m(\xi) = 0 : \text{ルジャンドル 階微分方程式}$$

$$\textcircled{8} : Y_{l,l} = a_l (\sqrt{1-\xi^2})^l e^{il\phi} = a_l \sin^l \theta e^{il\phi} \quad \dots \textcircled{11}$$

$$\downarrow (M^{(-)})^{l-m} \quad \begin{matrix} \text{規格化 (P18)} \leftarrow \\ \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \int_{-1}^1 (1-\xi^2)^l d\xi \end{matrix}$$

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) \stackrel{\text{⑪}}{=} \frac{1}{\sqrt{(l+m+1)(l-m)}} M^{(-)} Y_{l,m+1} = \dots \frac{2^{2l+1} (l!)^2}{(2l+1)!}$$

$$= \frac{(l+m)!}{\sqrt{(l-m)! (2l)!}} (M^{(-)})^{l-m} Y_{l,l}$$

$$\textcircled{9} : n=l-m, m=l \quad \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(l+m)! (2l+1)}{4\pi (l-m)!}} \frac{e^{im\phi}}{(\sqrt{1-\xi^2})^m} \frac{d^{l-m}}{d\xi^{l-m}} (1-\xi^2)^l$$

& ⑪

球面調和関数 (= $e^{im\phi}$ を除けば
 ルジャンドル階関数)
 (SO(3) の 既約表現 の basis)

<水素原子の波函数>

束縛状態 $\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = R_n(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$

$\langle \vec{r} | n, l, m \rangle$

n: 主量子数 (エネルギー準位のラベル) $\in \{1, 2, \dots\}$

l: 方位 " $\in \{0, 1, \dots, n-1\}$ n \square

m: 磁気 " $\in \{-l, \dots, l\}$ (2l+1) \square

n-th 励起状態に属する電子数 = $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \times 2 = 2n^2$

電子の $\uparrow\downarrow$ の自由度 (スピン)

- ↓
- 2 K殻
- 8 L殻
- 18 M殻
- ⋮

(cf. 魔法数)

4.7 スピン角運動量

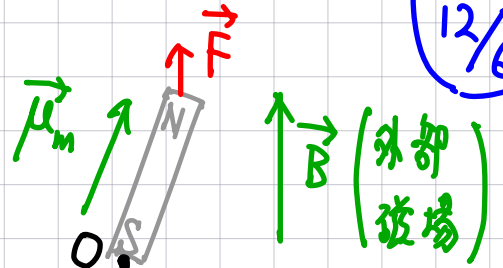
スピン自由度 = 粒子の「自転」に相当する粒子固有の自由度

21
12/6

of. 磁石の磁気モーメント $\vec{\mu}_m$

ポテンシャルエネルギー

$$V_m = -\vec{\mu}_m \cdot \vec{B}$$



Pauli: $\vec{\mu}_m \propto \hbar \vec{J} =: \vec{S}$ と考えた. (磁性の起源)

一般角運動量 ($j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ も含む)

電子では $\vec{\mu}_m = \frac{e}{2m} (\vec{L} + g\vec{S})$ $g \approx 2$ (g因子) ← 起源は相対論的考察が必要

→ 磁場中の電子のふるまいの説明 (Zeeman効果など)

状態空間は拡張される:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 \otimes \hat{H}_S$$

\hat{H}_0 : (これまで) (状態空間)
 \hat{H}_S : (スピノp.) (作用する空間)
 これだけに着目すれば有限次元 (これを調べよう)

$$|n, l, m\rangle \otimes |j, m\rangle$$

速うエム ($m' \in \{-l, -l+1, \dots, l\}$)

<4.5節のまとめ>

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] \stackrel{4.5}{=} i \epsilon_{jkl} \hat{J}_l, \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_k] \stackrel{4.6}{=} 0,$$

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle \stackrel{4.9}{=} j(j+1) |j, m\rangle, \quad \hat{J}_3 |j, m\rangle \stackrel{4.9}{=} m |j, m\rangle,$$

$$\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle \stackrel{4.11}{=} \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle \quad m \in \underbrace{\{-j, -j+1, \dots, j\}}_{(2j+1)}$$

以下すべて符号同順

例 4.12 $S^z \sim \frac{1}{2} (j = \frac{1}{2}) \hat{S}^z = \hbar \hat{J}^z$

28

$m = -\frac{1}{2}$ or $\frac{1}{2}$ (2準値系) $\Rightarrow | \pm \rangle := | j = \frac{1}{2}, m = \pm \frac{1}{2} \rangle$

\Rightarrow a 基底による \hat{J} の行列表示:

$$(\hat{J}_z | + \rangle, \hat{J}_z | - \rangle) = (| + \rangle, | - \rangle) \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}}$$

$$J_z = \begin{pmatrix} \langle + | \hat{J}_z | + \rangle & \langle + | \hat{J}_z | - \rangle \\ \langle - | \hat{J}_z | + \rangle & \langle - | \hat{J}_z | - \rangle \end{pmatrix} \quad J_z \text{ (スピン表示)}$$

同様に $\hat{J}_x = (1/2)(\hat{J}^{(+)} + \hat{J}^{(-)})$ 等より

$$J_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

宿題! \hat{J}_y のスピン表示を求めよ。
($\hat{J}^{(+)}$, $\hat{J}^{(-)}$ の関係を求めよ)

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

$$J^{(+)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (| + \rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, | - \rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix})$$

定義 4.13 以下を Pauli (a スピン) 行列と云う

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

命題 4.14

(i) $\sigma_k^2 = 1 \quad (\forall k)$

(ii) $\sigma_j \sigma_k = i \epsilon_{jkl} \sigma_l \Rightarrow [\sigma_j, \sigma_k] = 2i \epsilon_{jkl} \sigma_l$

(iii) $\sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j = 0 \quad (\forall k \neq j)$

法則 1 より、
連比 $[C_+, C_-]$ が

$S^2 \sim \frac{3}{4} \hbar^2$
 $\sim \frac{3}{4} \hbar^2$
 $\sim \frac{3}{4} \hbar^2$

注 4.15 \mathcal{H}_S の元 $|\psi_s\rangle = | + \rangle \langle + | \psi_s \rangle + | - \rangle \langle - | \psi_s \rangle$ 状態を定める

スピン軌道相互作用

29

水素原子内の電子の (スピンを考慮した) ハミルトニアン:

$$H = H_0 + f(r) \vec{L} \cdot \vec{S} \dots (12)$$

相対論的考察から決まる

正確には $H_0 \otimes 1_s \quad \sum_k L_k \otimes S_k$ $\vec{S} \propto \vec{\mu}_m, \vec{L} \propto \vec{B}$ 電子から見ると陽子が \vec{L} を持ち \vec{B} を生じよ

命題 4.16 (12) に対し, $\vec{L} + \vec{S}$ は保存量

(\vec{L}, \vec{S} それぞれは保存しない)

⊙ $\vec{L} + \vec{S} = \vec{L} \otimes 1_s + 1_0 \otimes \vec{S}$ に注意. * $L_k \otimes S_k \cdot L_1 \otimes 1_s$

$[H_0, \vec{L}] = 0, [H_0, \vec{S}] = 0$ は OK. 一方 $= L_k L_k \otimes S_k 1_s$

$[f(r) \vec{L} \cdot \vec{S}, \vec{L}] = f(r) [\vec{L} \cdot \vec{S}, \vec{L}] = +i\hbar f(r) \vec{L} \times \vec{S} \neq 0$

$[f(r) \vec{L} \cdot \vec{S}, \vec{S}] = f(r) [\vec{L} \cdot \vec{S}, \vec{S}] = -i\hbar f(r) \vec{L} \times \vec{S} \neq 0$

$\therefore [f(r) \vec{L} \cdot \vec{S}, \vec{L} + \vec{S}] = 0 \Rightarrow [H, \vec{L} + \vec{S}] = 0$

($[\quad , \vec{L} \text{ or } \vec{S}] \neq 0 \Rightarrow [H, \vec{L} \text{ or } \vec{S}] \neq 0$) □

(12) に対する Sch. eq. (位置・スピン表示)

命題 2 により示す (テンソル積を)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi(\vec{r}, +) \\ \psi(\vec{r}, -) \end{pmatrix} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_c(r) \right) \begin{pmatrix} \psi(\vec{r}, +) \\ \psi(\vec{r}, -) \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} f(r) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} L_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} L_y + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} L_z \begin{pmatrix} \psi(\vec{r}, +) \\ \psi(\vec{r}, -) \end{pmatrix}$$

素直に正確に計算 1 の成分だけよい

微細構造分裂の説明: $l \neq 0$ \rightarrow エネルギー準位の分裂

4.8 水素原子の $SO(4)$ 対称性

Pauli による解法 (1926年) (詳しくは Lポ-ト)

4.4節の議論に戻る ($E < 0$):

$$H = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V(r), \quad V(r) = -\frac{\kappa}{r} \quad (\kappa := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0})$$

以下の op. を導入:

$$\vec{A} := \frac{1}{2m} (\vec{L} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{L}) + \kappa \frac{\vec{r}}{r}$$

\vec{A} は保存量 ($[H, \vec{A}] = 0$) であり, Runge-Lenz-Pauli 変換と見做す

$$\vec{A}^2 = \frac{2}{m} (\vec{L}^2 + \hbar^2) H + \kappa^2 = \frac{2E}{m} (\vec{L}^2 + \hbar^2) + \kappa^2 \dots \textcircled{13}$$

命題 4.17 $\vec{K} := \sqrt{\frac{m}{2|E|}} \vec{A}$ とすると \uparrow 固有状態に作用していると思!!
 $\hat{H} \rightarrow E$ とした (以下同様)

以下の交換関係式が得られる:

$$[L_j, L_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} L_l, \quad [K_j, K_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} L_l$$

$$[L_j, K_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} K_l \quad (\underbrace{\{L_j, K_k\}}_{\text{60}} \text{は } SO(4) \text{ の Lie 環の生成子と見做す})$$

命題 4.18 $S^\pm := \frac{1}{2} (\vec{L} \pm \vec{K})$ とすると

$$[S_j^\pm, S_k^\pm] = i\hbar \epsilon_{jkl} S_l^\pm, \quad [S_j^+, S_k^-] = 0 \quad \leftarrow \begin{pmatrix} \mathfrak{so}(4) \simeq \\ \mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{su}(2) \end{pmatrix}$$

2つの一般角運動量 ops.!

$$(S^\pm)^2 = \frac{1}{4} (\vec{L}^2 + \vec{K}^2) \text{ より, } \pm \text{ の場合も固有値は } S(S+1)\hbar^2$$

$$\begin{matrix} \text{"} \\ S(S+1)\hbar^2 \end{matrix} \quad \textcircled{13} \quad \frac{1}{4} \left(-\hbar^2 + \frac{m\kappa^2}{2|E|} \right) \quad \therefore E = -\frac{m\kappa^2}{2\hbar^2 n^2} \quad (n := 2S+1 \in \{1, 2, \dots\})$$

5.5 ボゾンとフェルミオン

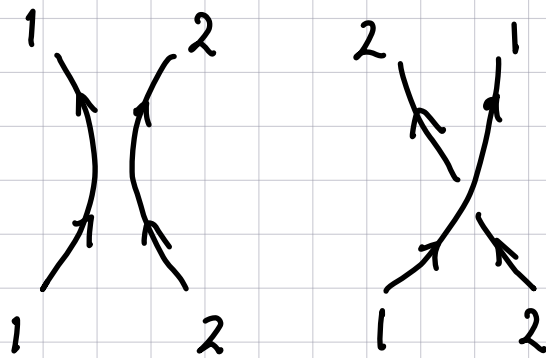
'21
12/13

311

5.1 同種粒子

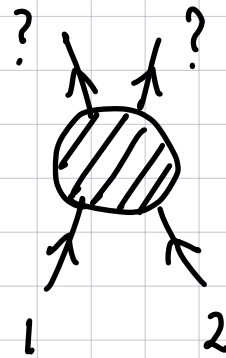
定義 5.1 2個の粒子が同種粒子である $\stackrel{\text{def}}{\iff}$ それらの質量・スピン・電荷などの粒子固有の物理量が同じである

仮説 5.2 量子論では同種粒子は識別できない



古典論

(それぞれの軌道と足跡可能)



量子論

(確率解釈 \rightarrow 足跡不可能)

N個の同種粒子からなるシステムを考える:

$$\psi(g_1, g_2, \dots, g_N; t)$$

$$g_k := (\vec{p}_k, m_k) \quad \begin{array}{l} \text{スピンの成分} \\ \text{(+ or - \(\frac{1}{2}\))} \\ \text{位置・スピンの表示} \end{array}$$

2粒子の交換 op. (H と可換)

$$P_{kl} \psi(\dots g_k \dots g_l \dots; t) := \psi(\dots g_l \dots g_k \dots; t)$$

定数 \rightarrow

$$C_{kl} \psi(\dots g_k \dots g_l \dots; t)$$

|| 5.2

$$P_{kl}^2 = \text{id} \Rightarrow C_{kl}^2 = 1 \Rightarrow C_{kl} = \pm 1$$

定義 5.3 $\forall k, l$ に対 (?). $C_{kl} = +1$ (対称) \Rightarrow Bose 粒子 (ボゾン) _{と ii j}
 $= -1$ (反対称) \Rightarrow Fermi 粒子 (フェルミオン)

注5.4 実は

ボゾン \Leftrightarrow スピン 0 or 1 or 2 (整数)

フェルミオン \Leftrightarrow " $\frac{1}{2}$ or $\frac{3}{2}$ (半奇数)

例5.5 素粒子

(B) スピン 0 : Higgs 粒子

(F) スピン $\frac{1}{2}$: $\begin{matrix} \text{クォーク} & \text{反クォーク} & \text{レプトン (電子 } e^-, \text{ ミューオン, ニュートリノ, ...)} \\ u, d, \dots & \bar{u}, \bar{d}, \dots & \text{反レプトン (陽電子 } e^+, \dots) \end{matrix}$

(B) $\begin{cases} \text{スピン 1 : 光子, W, Z ボゾン, グルーオン} \\ \text{スピン 2 : 重力子} \end{cases}$

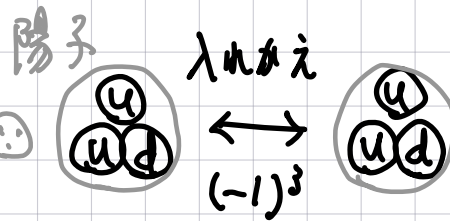
例5.6 複合粒子

陽子 $p = uud$: (F)

中性子 $n = udd$: (F)

${}^4\text{He} = \overbrace{ppnn}^{4\text{コ}} + 2e^-$: (B)

${}^3\text{He} = \overbrace{ppn}^{3\text{コ}} + 2e^-$: (F)



電荷
u: アップクォーク $(+\frac{2}{3})$
d: ダウンクォーク $(-\frac{1}{3})$

宿題1 重水素原子 ${}^2\text{H}$ は $u\bar{d}$ パイ中間子 π は

命題5.7 N個のボゾン, フェルミオンの

波動関数は以下のようにそれぞれ

ボゾンかフェルミオンか?
(構成要素を記載すること)

対称関数, 反対称関数を記述せよ:

$\psi_B(r_1, \dots, r_N; t) = \frac{C_B}{N!} \sum_{\sigma \in S_N} \psi(r_{\sigma(1)}, \dots, r_{\sigma(N)}; t)$

Sch. eq. a 解

☺ レポート?

$\psi_F(\dots) = \frac{C_F}{N!} \sum_{\sigma \in S_N} \text{sgn}(\sigma) \psi(r_{\sigma(1)}, \dots, r_{\sigma(N)}; t)$

5.2 独立粒子近似

N粒子間の相互作用を無視する近似で定常状態を考える。

$$H\varphi = \sum_{k=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_k + V(\mathbf{r}_i) \right) \varphi = E\varphi \quad \dots (*)$$

共通 $H_k (= 1 \otimes \dots \otimes H_k \otimes \dots \otimes 1)$ k番目

それぞれa粒子:

$$H_k \varphi_{n_k}(\mathbf{r}_k) = E_{n_k} \varphi_{n_k}(\mathbf{r}_k) \quad k \in \{1, \dots, N\}$$

↓ \hat{r}_k, \hat{p}_k 量子数と1種類のラベルで表記 正確には \otimes \hat{r}_1, \hat{p}_1 \hat{r}_N, \hat{p}_N

(*)の解 $\varphi_{n_1, \dots, n_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \varphi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \cdot \varphi_{n_2}(\mathbf{r}_2) \dots \varphi_{n_N}(\mathbf{r}_N)$

$E = E_{n_1} + \dots + E_{n_N}$ 宿題2 $N=3$ の場合の $\varphi^{(B)}$ を書き下し、 $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$ の入れかえで

命題 5.8 以上の設定にて

$\text{Sym}_N(H)$: 対称代数 不変であることを確認せよ

$$\varphi_{n_1, \dots, n_N}^{(B)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{C_B}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \varphi_{n_1}(\mathbf{r}_{\sigma(1)}) \dots \varphi_{n_N}(\mathbf{r}_{\sigma(N)})$$

$$\varphi_{n_1, \dots, n_N}^{(F)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{C_F}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \varphi_{n_1}(\mathbf{r}_{\sigma(1)}) \dots \varphi_{n_N}(\mathbf{r}_{\sigma(N)})$$

☺ レポート

規格化 $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ $\begin{vmatrix} \varphi_{n_1}(\mathbf{r}_1) & \varphi_{n_1}(\mathbf{r}_2) & \dots & \varphi_{n_1}(\mathbf{r}_N) \\ \varphi_{n_2}(\mathbf{r}_1) & \varphi_{n_2}(\mathbf{r}_2) & \dots & \varphi_{n_2}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_{n_N}(\mathbf{r}_1) & \varphi_{n_N}(\mathbf{r}_2) & \dots & \varphi_{n_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}$: Slater 行列式

注 5.9

(i) フェルミオンは同一状態に2個以上入れない (Pauliの排他律) 行列式

(ii) ボソンは " いくつでも入れる

of ボーズ・アインシュタイン凝縮 (BEC) \rightarrow 超伝導など低濃物理の理解の鍵 (e.g. π -cond)

§6 特殊相対性理論

21
12/20

34

この section は再び古典論 (力学 & 電磁気学)

6.1 電磁場の古典論

4次元時空 (t, \vec{x}) と考える
時間 空間

法則 6.1 (「真空中の」マクスウェルの方程式) [ガウス単位系]
← 電荷・電流の源以外、物質がない (真空)

電場 $\vec{E}(t, \vec{x})$ と 磁場 $\vec{B}(t, \vec{x})$ に関する基本法則

「磁束密度」 in [SI単位系]

$$(M) \begin{cases} \nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho & \dots ① \\ \nabla \cdot \vec{B} = 0 & \dots ② \\ \nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} & \dots ③ \\ \nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} & \dots ④ \end{cases}$$

$\rho(t, \vec{x})$: 電荷密度
 $\vec{j}(t, \vec{x})$: 電流密度
 $c \equiv 3.0 \times 10^{10} \text{ m/s}$ (光速度)
" $\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$

注 6.2 . 物質中ではもう少し複雑 . \vec{E} と \vec{B} は対称的 $\begin{pmatrix} \vec{E} \rightarrow -\vec{B} \\ \vec{B} \rightarrow \vec{E} \end{pmatrix}$ (ただし $\rho=0, \vec{j} \times 0$)
単位系を変えると係数・呼び名が変わる ([SI単位系] など)

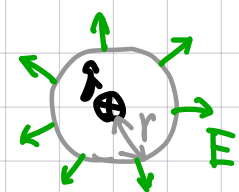
命題 6.3 $\begin{cases} ② : \nabla \cdot \vec{B} = 0 \Rightarrow \exists \vec{A}(t, \vec{x}) \text{ s.t. } \vec{B} = \nabla \times \vec{A} \\ ③ : \nabla \times \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = \vec{0} \Rightarrow \exists \phi(t, \vec{x}) \text{ s.t. } \vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \end{cases}$

☺ 求ポテンシャルの補題 (ただし領域の単連結性は仮定) ☺

注 6.4 (物理的意味)

①: ガウスの法則 $E = k \frac{q}{r^2}$

②: モノポール (N極 or S極のみ) の非存在

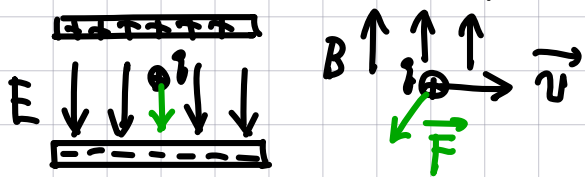


③: ファラデーの電磁誘起の法則 etc.

④: ヒュンツェル-ワイルの法則 etc.

法則 6.5 (荷電粒子 q が背景電磁場から受ける力)

$$\vec{F} = q \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B} \right) \dots \textcircled{5} \quad \text{ローレンツ力}$$



6.2 方程式の対称性 (方程式と不変に保つ座標変換)

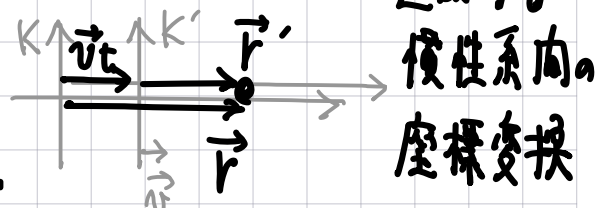
(N) ニュートンの運動方程式 $m \ddot{\vec{r}} = \vec{F}$ ← t ビュー

Galilei Boost (G.B.)

定義 6.6 (ガリレイ変換) := (3次元回転) + (ガリレイブースト) + (平行移動)

$$\vec{r}' = R(\theta) \vec{r} \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{r}' = \vec{r} - \vec{v}t \\ t' = t \text{ (絶対時間)} \end{array} \right. \quad \vec{r}' = \vec{r} + \vec{a}$$

広義には (3次元直交変換) \uparrow
 ③ 回転 & 折り返し



定理 6.7 ガリレイ変換の下、 m が不変。

\vec{F} が ⑦・⑧ が不変 & ⑥ が \vec{r} と同じ変換性をもつ \Rightarrow (N) は不変

③ G.B.: $\ddot{\vec{r}}' = \ddot{\vec{r}}$, ③ 回転: $m \ddot{\vec{r}}' - \vec{F}' = R(\theta) (m \ddot{\vec{r}} - \vec{F}) = \vec{0}$

命題 6.8 ガリレイ変換全体は群をなす (ガリレイ変換群)

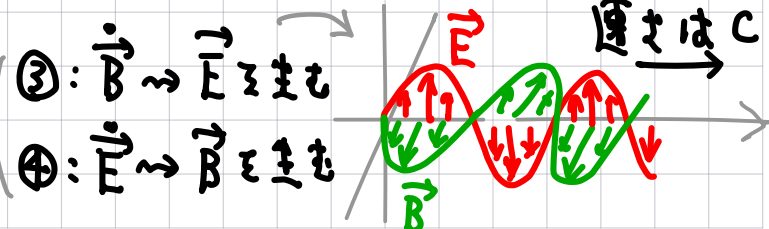
(M) マクスウェルの方程式 (少し特別な状況で考察)

命題 6.9 $\rho = 0, \vec{j} = \vec{0}$ のとき、 \vec{E} と \vec{B} は波動方程式をみたす

(W) $(-\partial_0^2 + \partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2) \vec{E} = \vec{0}$ この解は電磁波 (光) という

$\partial_\mu := \frac{\partial}{\partial x^\mu}$

$x^0 := ct, \mu \in \{0, 1, 2, 3\}$



☺ 宿題1 これを示せ (\vec{E} or \vec{B} どちらか) $\nabla \times (\nabla \times \vec{v}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{v}) - \Delta \vec{v}$ [36]
 簡単のため空間1次元で考える $= \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ (用いよう)

命題 6.10 1次元波動 eq. $(\partial_0^2 - \partial_1^2) f(x^0, x^1) = 0$ は以下の変換の下で不変

$$\begin{pmatrix} x'^0 \\ x'^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{ch}\theta & \text{sh}\theta \\ \text{sh}\theta & \text{ch}\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \end{pmatrix} \quad \text{ch} = \cosh \quad \text{sh} = \sinh$$
 ☺ $\text{ch}^2\theta - \text{sh}^2\theta = 1$ と連鎖律

of. 1次元ラプラス eq. $(\partial_0^2 + \partial_1^2) f(x^0, x^1) = 0$ は以下の変換の下で不変

$$\begin{pmatrix} x'^0 \\ x'^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \end{pmatrix} \quad \text{☺} \quad \cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$$

定義 6.11 (D-レンツ変換) = (3次元回転) + (D-レンツブースト) Lorentz Boost (L.B.)

(L.B.)
$$\begin{pmatrix} x'^0 \\ x'^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma \\ -\beta\gamma & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \end{pmatrix}$$
 ↑ 広義には (3次元直交変換)
 $\beta := \frac{v}{c}, \quad \gamma := \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$

注 6.12 $\begin{pmatrix} \text{ch}\xi & -\text{sh}\xi \\ -\text{sh}\xi & \text{ch}\xi \end{pmatrix}$ と書ける ($\text{ch}\xi = \gamma, \text{sh}\xi = \beta\gamma, \tanh\xi = \beta$)

• $\beta = \frac{v}{c} \rightarrow 0$ なら (L.B.) \rightarrow (G.B.) 宿題2 双曲線関数

定理 6.13 (M) は D-レンツ変換の下で不変
 $\text{ch}\theta := \frac{e^\theta + e^{-\theta}}{2}, \quad \text{sh}\theta := \frac{e^\theta - e^{-\theta}}{2}$
 以下を証明せよ:

☺ レポート & 後日

- $\text{ch}^2\theta - \text{sh}^2\theta = 1$
- $\text{sh}(i\theta) = i \sin\theta$

命題 6.14 D-レンツ変換全体は群となる

注 6.15

- (W) は ガリレイ変換の形が変化する
- (N) は D-レンツ変換

まとめ	古典力学	電磁気学
ガリレイ変換	(不変)	×
D-レンツ変換	×	(不変)

6.3 特殊相対性理論

'21
12/27

37

基本原理 6.16 (アインシュタイン, 1905)

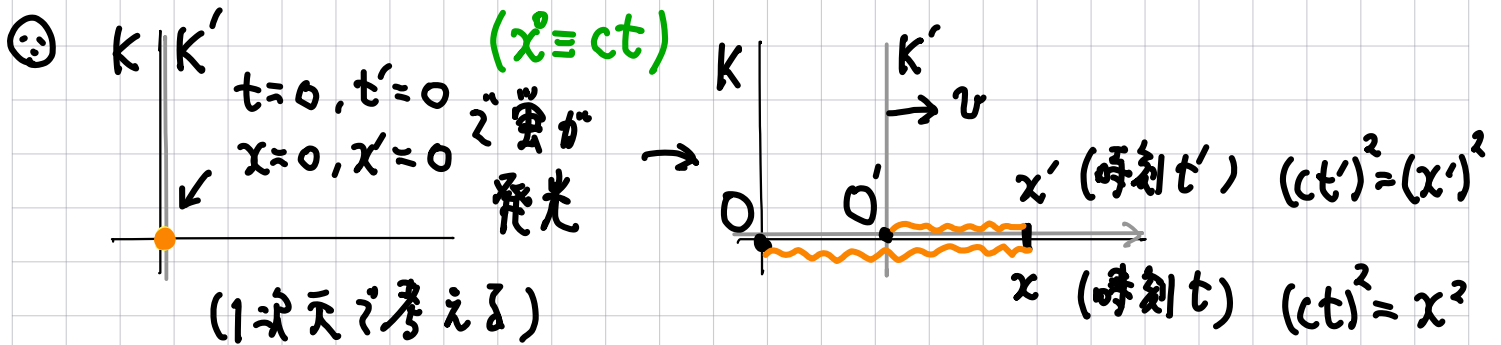
- (I) 物理法則はどの慣性系においても同一である (特殊相対性原理)
- (II) 光速はどの慣性系においても一定の値 c をとる (光速不変の原理)

定義 6.17 6.16 に基づく理論を特殊相対論 or 相対論的理論という

注 6.18 (II) の根拠: (M) & マイケルソン・モーレーの実験 (1887)

- ・ 慣性系同士の座標変換はガリレイ変換ではなくローレンツ変換
- (N) は 6.16 とみたすように修正される = 相対論的力学

命題 6.19 $S^2 := -(x^0)^2 + (x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2$ は慣性系によらない不変量



命題 6.20 (速度の合成則: 1次元) $-(ct')^2 + x'^2 = -(ct)^2 + x^2 (=0)$

$\Lambda(v)$: (L.B.) とする. (cf. 6.11)

$$\Lambda(v_1) \Lambda(v_2) = \Lambda(V), \text{ ただし } V = \frac{v_1 + v_2}{1 + \frac{v_1 v_2}{c^2}}$$

$(0 < v_1, v_2 < c)$ **宿題!**
 $(a \text{ と } V < c)$ \leftarrow これを示せ

① LHS = $\begin{pmatrix} \cosh \xi_1 & -\sinh \xi_1 \\ -\sinh \xi_1 & \cosh \xi_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cosh \xi_2 & -\sinh \xi_2 \\ -\sinh \xi_2 & \cosh \xi_2 \end{pmatrix} \stackrel{\text{加法定理}}{=} \begin{pmatrix} \cosh(\xi_1 + \xi_2) & -\sinh(\xi_1 + \xi_2) \\ -\sinh(\xi_1 + \xi_2) & \cosh(\xi_1 + \xi_2) \end{pmatrix}$

$$\tanh(\xi_1 + \xi_2) = \frac{\tanh \xi_1 + \tanh \xi_2}{1 + \tanh \xi_1 \tanh \xi_2} = \frac{\frac{v_1}{c} + \frac{v_2}{c}}{1 + \frac{v_1 v_2}{c^2}} = \frac{V}{c}$$

合成速度 \square
 $(\tanh \xi_i = \frac{v_i}{c})$

宿題2 加法定理 $\text{ch}(\theta_1 + \theta_2) = \text{ch}\theta_1 \text{ch}\theta_2 + \text{sh}\theta_1 \text{sh}\theta_2$ を示せ (ch, sh の定義 [38] 又は P36 宿題2 と同じ)

・ミンコフスキー・ダイヤグラムによる図示 (1次元)

$$(L.B.) \begin{pmatrix} x'^0 \\ x'^1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma \\ -\beta\gamma & \gamma \end{pmatrix}}_{\Lambda} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \end{pmatrix} \dots (*)$$

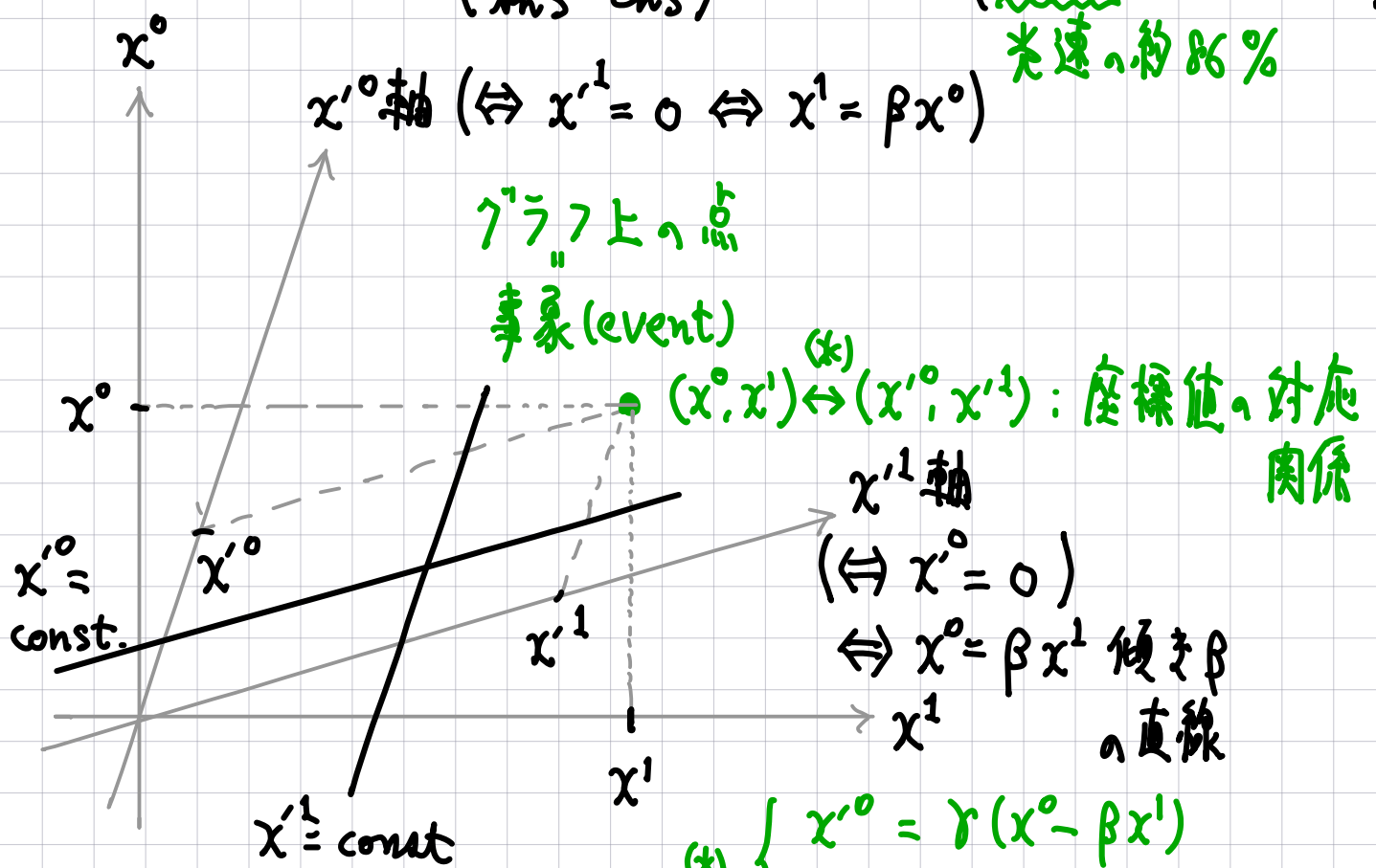
$$\Lambda = \begin{pmatrix} \text{ch}\xi & -\text{sh}\xi \\ -\text{sh}\xi & \text{ch}\xi \end{pmatrix}$$

$$\beta = \frac{v}{c}, \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

$$\tanh \xi := \frac{\text{sh}\xi}{\text{ch}\xi} = \beta$$

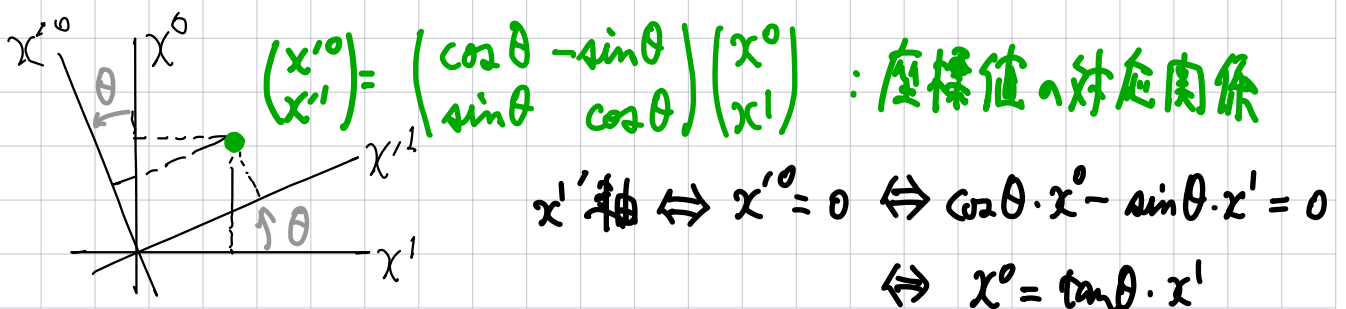
$$\left(\beta = \frac{\sqrt{3}}{2} \text{ とき } \gamma = 2 \right)$$

光速の約 86%



$$(*) \begin{cases} x'^0 = \gamma(x^0 - \beta x^1) \\ x'^1 = \gamma(-\beta x^0 + x^1) \end{cases}$$

cf. 2-73, 2次元の角度 θ の回転



<簡単な帰結>

(i) 時間の遅延

$x' = 0$ に時計があり、
↓ 時刻 t' を指している

$$\begin{cases} x'^0 = \gamma(x^0 - \beta x^1) \\ x'^1 = \gamma(-\beta x^0 + x^1) \end{cases} \quad (*)$$

K'系: $\begin{pmatrix} x'^0 \\ x'^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct' \\ 0 \end{pmatrix}$ とする

これを K系から見ると $\Lambda \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \end{pmatrix}$ より

$$\begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \end{pmatrix} = \Lambda^{-1} \begin{pmatrix} ct' \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma ct' \\ \beta \gamma ct' \end{pmatrix}$$

($\gamma + \beta\gamma$ / $+\beta\gamma \quad \gamma$)

$\therefore t = \gamma t' = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} t'$ ← 1より大!

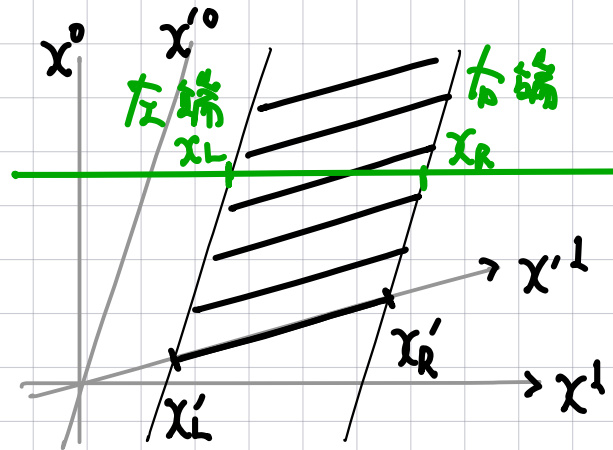
例えば $\beta = \frac{\sqrt{3}}{2}$ のとき $t' = 1 \leftrightarrow t = 2$

K'の"1時"は Kの"2時"

(KからK'の時計を見ると、ゆ、くり進んでいる!)

(ii) 長さの「短縮」

長さ l の棒が K系に対して等速運動 (左図)



長さ l の棒 $x'_R - x'_L = l$

→ x^0
→ x^1

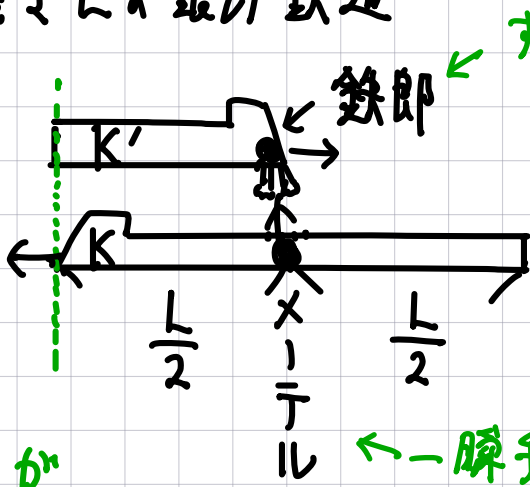
④ 棒の長さとは 同じ時刻における両端の座標値の差 棒が「縮んだ」

K系での棒の長さとは K系における同じ時刻での両端の座標値の差 ↓ 1より小

$$\begin{aligned} x'_R &= \gamma(-\beta x^0_R + x^1_R) \\ x'_L &= \gamma(-\beta x^0_L + x^1_L) \end{aligned} \quad \left| \begin{array}{l} \text{同じ時刻} \\ \text{引く} \end{array} \right. \rightarrow x'_R - x'_L = \gamma(x^1_R - x^1_L) \therefore x^1_R - x^1_L = \frac{1}{\gamma} l$$

“パラドックス” 6.2 | (正月の暇つぶし)

同じ長さLの銀河鉄道



ずと手を出している

相対速度 $v = \frac{\sqrt{3}}{2} c$

(ローレンツ短縮により
長さは半分)

Kの先頭が

メートル ← 瞬手渡し

Kの尾に一致した瞬間にメートルからイソジンを手渡す作戦 (回りの位置がOK!)

と.こ.ろ.が. K'から見るとKの方が縮んでいる (受けとれない??)

6.4 物理法則の相対論的定式化

22
1/17

座標変換 $x' = \Lambda x \dots$ (*) が良いふるまいをする量と def した

定義 6.22 (*) の下 v について和 x^μ は同じ変換性

$v'^\mu = \Lambda^\mu_\nu v^\nu$ と変換する量と反変 vector

$v'_\mu = (\Lambda^{-1})^\nu_\mu v_\nu$ " 共変 vector

$(= v_\nu (\Lambda^{-1})^\nu_\mu)$

行列 Λ の上向き (反変成分) 下向き (共変成分)

例 6.23 $\begin{cases} dx^\mu : \text{反変 vector} \\ \partial_\mu := \frac{\partial}{\partial x^\mu} : \text{共変 vector} \end{cases}$

$\begin{cases} V \ni \text{接 vector} = X = X^\mu \partial_\mu \\ V^\dagger \ni \text{余接 vector} = \omega = \omega_\mu dx^\mu \end{cases}$ 双対

X, ω が座標のとり方によらない $\Leftrightarrow \begin{cases} X^\mu : \text{反変} \\ \omega_\mu : \text{共変} \end{cases}$

$\odot (\text{共変})_\mu (\text{反変})^\mu \xrightarrow{(*)} (\text{共変})_\nu (\Lambda^{-1})^\nu_\mu \Lambda^\mu_\rho (\text{反変})^\rho = (\text{共変})_\mu (\text{反変})^\mu$

$\langle V \text{ と } V^\dagger \text{ の関係と } V \text{ の内積を用いた議論} \rangle \delta^\nu_\rho$

まず $V = (\mathbb{R}^n, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ とする

ω $x = e_i x^i$ 標準内積 (\Leftrightarrow ユークリッド空間)

基底成分 $(\dots) \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$

$g_{ij} := \langle e_i | e_j \rangle$ と計量 (metric) と呼ぶ (対称 $g_{ij} = g_{ji}$)

• 双対空間 $V^t \ni V^t := \text{Hom}(V, \mathbb{R})$ として構成 [42]

V^t の基底 $f^i \ni f^i(e_k) = \delta^i_k$ と定めた V 上の n -次形式 (線形写像 $V \rightarrow \mathbb{R}$)

$$f^i(e_k) := \langle (g^{-1})^i_j e_j | e_k \rangle = (g^{-1})^i_j \overbrace{\langle e_j | e_k \rangle}^{g_{jk}} = \delta^i_k \text{ と OK}$$

Fact $V^t = \langle \underbrace{f^1, \dots, f^n}_{\text{双対基底}} \rangle_{\mathbb{R}}, (V^t)^t \simeq V$

$$\langle f^i | f^j \rangle := \langle (g^{-1})^i_k e_k | (g^{-1})^j_l e_l \rangle = (g^{-1})^i_k (g^{-1})^j_l \overbrace{g_{kl}}^{\delta^i_k} = (g^{-1})^j_i$$

V^t の内積

※ 以後 $g^{ij} := (g^{-1})^i_j$ と略記 ($g^{ik} g_{kj} = \delta^i_j$)

• V の基底変換を考慮する

$$e'_i = e_j (R^{-1})^j_i \quad (= \underline{({}^t R^{-1})_i}^j e_j)$$

$$x = e'_i x'^i = e_j (R^{-1})^j_i x'^i = e_j x^j \quad \therefore x'^i = \underline{R^i_j} x^j$$

$$V^t \text{ での } f'^i = g'^i_j e'_j = R^i_k R^j_l g^{kl} e_m (R^{-1})^m_j = \underline{R^i_k} \overbrace{g^{kl}}^{\delta^m_k} e_l = \underline{R^i_k} g^{kl} e_l$$

宿題1 の式を用いてこの等式を証明せよ (和の添字が重複しないよう注意する)

$$g'^i_j = \langle e'_i | e'_j \rangle = g_{kl} (R^{-1})^k_i (R^{-1})^l_j \quad (\text{両辺の(浮いた)添字が等しくなるよ})$$

$$x^t = x_i f^i \text{ と表したとき } x'_i = x_i (R^{-1})^j_i = \underline{({}^t R^{-1})_i}^j x_j$$

• 内積を不変に保つ変換を考慮する. (i.e. $\underline{g'^i_j} = g_{ij}$)

上の(**)式より. $\underline{({}^t R)_i}^k g_{kl} \underline{R^l_j} = g_{ij} \Leftrightarrow {}^t R g R = g$

※ 1/17版の1-1は不変な形式にしたいので差し替えた。(音声解説は対応しません)

e_i : 正規直交基底 $\Rightarrow g_{ij} = \delta_{ij}$ (2-7/1, 10/1)

$\Rightarrow {}^t R R = 1$ (R : 直交行列) 連2-7/1, 2-7/2 では ${}^t R = R^{-1}$ より "共変 = 反変"

• 二から $V = (\mathbb{R}^{1,3}, \langle | \rangle)$ に戻す $(x^0 \equiv ct)$ [43]

$S^2 = -(x^0)^2 + (x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2$: $O(1,3)$ 不変 (命題 6.19)

$= {}^t x \eta x \xrightarrow{(*)} {}^t x \underbrace{{}^t \Lambda \eta \Lambda}_{\eta} x$ $\eta := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ -1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$ 正定値性なし

$\eta \leftarrow$ これをみたす Λ 全体 = 広義 $O(1,3)$ 群

定義 6.24 座標変換が広義 $O(1,3)$ 群に従い、計量 $\eta = (\eta_{\mu\nu})$ を持つ 4次元空間とミンコフスキー空間を \uparrow ミンコフスキー計量

注 6.25 $x_\mu = \eta_{\mu\nu} x^\nu = (-x_0, x_1, x_2, x_3)$
 添字の上げ下げ \sim 時間成分の上げ下げの符号が出る

定義 6.26 (tensor)

座標変換 $x^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$ に以下のように変換する量 $T^{\mu_1 \dots \mu_p}_{\nu_1 \dots \nu_q}$ \uparrow tensor 積

p 階反変 q 階共変 ((p, q) 型) tensor とし。

$T'^{\mu_1 \dots \mu_p}_{\nu_1 \dots \nu_q} = \Lambda^{\mu_1}_{\rho_1} \dots \Lambda^{\mu_p}_{\rho_p} ({}^t \Lambda^{-1})_{\nu_1}^{\sigma_1} \dots ({}^t \Lambda^{-1})_{\nu_q}^{\sigma_q} T^{\rho_1 \dots \rho_p}_{\sigma_1 \dots \sigma_q}$

特に $p = q = 0$ のとき T は scalar とし、 $T' = T$

< tensor の演算 > (詳しくは [線形] 5章) (1.1) \rightarrow (0.2)

(i) 添字の上げ下げ (共変 \leftrightarrow 反変) 例 $\eta_{\mu\nu} A^\nu_\rho = A_{\mu\rho}$

(ii) 添字の縮約 例 $A^{\mu\nu}{}_\nu = B^\mu, A^\mu B_\mu = C$ $\leftarrow \uparrow V^t, V$ 内積 \uparrow Tr \leftarrow B^k と δ^k がある

(iii) tensor の微分 例 $\partial_\mu A(x) = B_\mu(x)$ $\uparrow V^t \otimes V \simeq \text{Hom}(V, V)$
 $(\partial^\mu := \eta^{\mu\nu} \partial_\nu : \text{反変})$ \uparrow 特. [機密]

例 6.27 (Lorentz scalar)

物体と時計に動く時計を示す時間 44

(i) $S^2 = x_\mu x^\mu = -(ct)^2 + \vec{x}^2$ $(cdt)^2 = -dx_\mu dx^\mu = c^2(dt)^2 - (d\vec{x})^2$

(ii) 無限小固有時間間隔 $d\tau := \frac{1}{c} \sqrt{dx_\mu dx^\mu} = dt \sqrt{1-\beta^2} = \frac{1}{\gamma} dt$

(iii) $d^4x = dx^0 dx^1 dx^2 dx^3$ ($|\det \Lambda| = 1$)

(iv) $\square := \eta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu = -\partial_0^2 + \nabla^2$ (cf. P35 (W)) $v = |\vec{v}| = \left| \frac{d\vec{x}}{dt} \right|$

例 6.28 (Lorentz vector)

ラビラシオン 時間成分 空間成分 $\beta := \frac{v}{c}$

(i) 4元速度 $u^\mu := \frac{dx^\mu}{d\tau} = \gamma \frac{dx^\mu}{dt} (= \gamma(c, \vec{v})) \dots \textcircled{1}$ $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$

$u_\mu u^\mu = -\gamma^2(c^2 - v^2) = -c^2$ (一定) ... ②

(ii) 4元運動量 $p^\mu := m u^\mu \stackrel{\textcircled{1}}{=} \left(\underbrace{m\gamma c}_{p^0}, \underbrace{m\gamma \vec{v}}_{\vec{p}} \right) =: \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right) \dots \textcircled{3}$

$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \stackrel{\beta=0}{=} mc^2 + \frac{1}{2}mv^2 + \mathcal{O}(\beta^2)$ ← 宿題2 により示せ
|β| < 1 静止エネルギー 非相対論的運動エネルギー

② × m² & ③: $p_\mu p^\mu \stackrel{\textcircled{1}}{=} -\frac{E^2}{c^2} + \vec{p}^2 \stackrel{\textcircled{2} \times m^2}{=} -m^2 c^2 \dots \textcircled{4}$

$\therefore E^2 = (c\vec{p})^2 + (mc^2)^2 \dots \textcircled{5}$ (← m=0 のときも実は正しく)

定理 6.29 (Lorentz tensor) = 0 の式はローレンツ不変

$E = c|\vec{p}|$

⑤ $T^{\dots} \xrightarrow{(k)} T'^{\dots} = \Lambda \Lambda \dots \Lambda^{\dots} T^{\dots} = 0$ * 光子の波長と波数

$E = \hbar\omega = h\nu$ & $c = \lambda\nu$ より
 $|\vec{p}| = \hbar|\vec{k}| = \frac{h}{\lambda}$ 従って

例 6.30

Maxwell eq. : 4ポ-ト8 & form は大域的 $\Rightarrow F_{\mu\nu}, A_\mu, j_\mu$: tensor

$$\begin{cases} \partial^\mu F_{\mu\nu} = -j_\nu & \leftarrow \text{運動方程式} \\ \partial_\mu F_{\nu\rho} + \partial_\nu F_{\rho\mu} + \partial_\rho F_{\mu\nu} = 0 & \leftarrow \text{ビアンキの恒等式} \end{cases} \quad j_\mu := (-c\rho, \vec{j}), \quad A_\mu := (-\phi, \vec{A})$$

$$F_{\mu\nu} := \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu = \begin{pmatrix} 0 & -E_1 & -E_2 & -E_3 \\ E_1 & 0 & B_3 & -B_2 \\ E_2 & -B_3 & 0 & B_1 \\ E_3 & B_2 & -B_1 & 0 \end{pmatrix}$$

相対論的運動方程式 (ミンコフスキ-eg.) $\leftarrow 0$ 成分: $\frac{dE}{dt} = \vec{f} \cdot \vec{v}$ (仕事率)

$$\frac{dp^\mu}{d\tau} = K^\mu := \left(\frac{\gamma}{c} \vec{v} \cdot \vec{f}, \gamma \vec{f} \right) \xrightarrow{\beta=0?} \frac{d}{dt} (m\vec{v}) = \vec{f} : \text{Newtonの運動方程式}$$

4元力 cf. [山本, 中村] 258頁, [米谷]

宿題2 「テイラー展開せよ」と言われたら「テイラー展開」してはいけません!

\Leftrightarrow テイラーの公式を用いて展開

(2次方程式をいっぞも解の公式を用いずるのと同等です)

(解答例) $\frac{1}{1-\beta^2} \stackrel{\text{公比}\beta^2}{=} 1 + \beta^2 + \beta^4 + (\text{高次})$ より \leftarrow (有限テイラー展開と思えば) いっぞもOK. 今は $|\beta| < 1$ だと問題なし

$\left(\frac{1}{1-\beta^2} \right)^{\frac{1}{2}} = 1 + a\beta^2 + (\text{高次})$ の a を目算で求めろ $a = \frac{1}{2}$ \square

$1 + \beta^2 + (\text{高次}) = \frac{1}{1-\beta^2} = (1 + a\beta^2 + \dots)(1 + a\beta^2 + \dots)$

(別解) $\left(\frac{1}{1-\beta^2} \right)^{\frac{1}{2}} = 1 + b\beta^2 + (\text{高次})$ とおくと、両辺を乗して

$(1-\beta^2)(1+b\beta^2+\dots)(1+b\beta^2+\dots) = 1 \quad \therefore b = \frac{1}{2} \quad \square$ i, j の添字は \checkmark

類題 $\log(1+x)$ (30秒で答えよ. ヒント: 微分) $g_{ij} = g_{kl} (R^{-1})^k_i (R^{-1})^l_j$
($x=0$ あたり)

宿題1 両辺に行列をかける操作を添え付まつ行う \rightarrow $g'_{ij} R^i_m = g_{kl} (R^{-1})^k_i (R^{-1})^l_j R^i_m \dots$
 \downarrow 両辺に右から R をかける
添え付 j と縮約

§7 相対論的量子力学

[坂本, 西島, 坂井]

22
1/24

46

7.1 クライン・ゴールドン方程式

$(E = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V \xrightarrow{\text{量子化}} \text{非相対論的量子力学 (Sch. eq.)})$

$E^2 = (c\vec{p})^2 + (mc^2)^2 \xrightarrow{\text{P44 ⑤式}} \text{相対論的量子力学}$

$\left\{ E \mapsto i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, p_k \mapsto \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^k} \right.$ $\phi(x^0, x^1, x^2, x^3): \text{Lorentz scalar とする}$

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t})^2 \phi(x) = \left((\frac{\hbar c}{i} \frac{\partial}{\partial x^k})^2 + (mc^2) \right) \phi(x) \dots \textcircled{1}$$

$\Leftrightarrow (\square - m^2) \phi = 0$ Klein-Gordon (KG) eq. ($\hbar=c=1$ とした. 以後同様)

(次元解析より \hbar, c は復元可能: $(\square - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}) \phi = 0$)

注7.1 · KG eq. は $O(4)$ -不変

$(\text{長さ})^{-2} = (\text{長さ})^{-2} \text{ の次元}$

· ϕ は スピン0 の粒子 を記述 (cf. P32 例5.5)

7.2 ディラック方程式

KG eq は 2階の微分 eq. \rightsquigarrow 1階の方が本質的?: $N \times N$ エルミート行列 $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \mathcal{H} \psi(x) \dots \textcircled{2} \quad \mathcal{H} = \left(\frac{1}{i} \alpha^i \frac{\partial}{\partial x^i} + \beta m \right)$$

α 形 γ^i 以下 をみたすものを考える:

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t})^2 \psi(x) = \mathcal{H}^2 \psi(x) \quad \text{KG の元と一致 (cf. ① の右辺)}$$

$$\Rightarrow \textcircled{3} \begin{cases} \alpha^i \alpha^k + \alpha^k \alpha^i = 2\delta^{ik} \\ \alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0 \\ \beta^2 = 1 \end{cases} \quad \leftarrow \text{③ と 導出} \quad \Leftrightarrow \begin{cases} \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = -2\eta^{\mu\nu} \\ (\text{ただし } \gamma^0 = \beta, \gamma^k = \beta \alpha^k) \end{cases} \textcircled{4}$$

例題 7.2 ③ は $N=2, 3$ の解なし. $N=4$ のみ存在: [47]

e.g. $\alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix}$ (パウリ行列), $\beta = \begin{pmatrix} 1_2 & 0 \\ 0 & -1_2 \end{pmatrix}$ ($\Leftrightarrow \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix}$)

$N=4$
 ② $\Leftrightarrow (i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0$: Dirac eq. (1928) 宿題 2

注 7.3 . Dirac eq は $O(1,3)$ 不変 [坂本] (i) h.c と明記 L >

ψ は Dirac spinor と呼ばれる. $\lambda \in \mathbb{C}$ の $\frac{1}{2}$ の複素数と記述 (例 5.5)

例 7.4 (簡単な解)

$\psi_n(x) = u_n(p) e^{i(-Et + \vec{p} \cdot \vec{x})}$ ($E^2 = \vec{p}^2 + m^2$)

↓ 定常状態と \mathbf{H} と対角化して固有値問題と解く

$E = +\sqrt{p^2 + m^2} \rightsquigarrow$ 2つの固有ベクトル

$E = -\sqrt{p^2 + m^2} \rightsquigarrow$ 2つの固有ベクトル

[西島 P28]

単位も
 つけ?

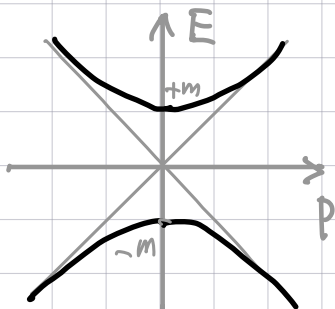
← 負のエネルギー準位!

Dirac eq. と求む

(ii) G. h.c から長さの次元を揃え、量を作り、有効数字1個まで

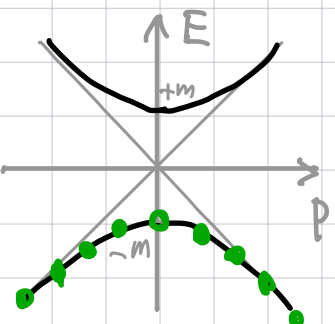
その数値を求めよ.
 (電子質量の典型的スケールを表す)

真空の不安定性の問題:

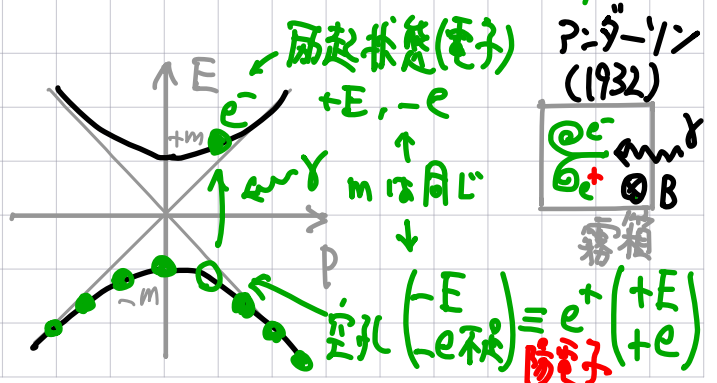
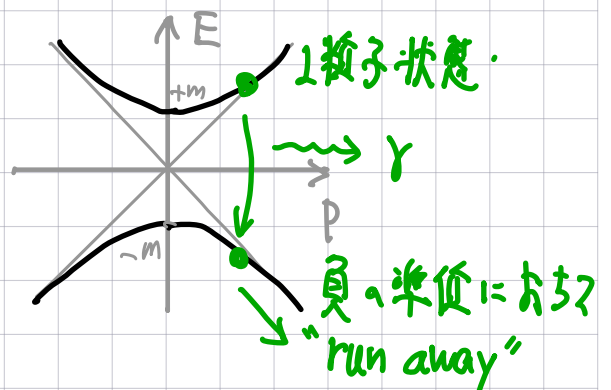


もしも、
 「真空 = 正負の準位とも電子が全くない状態」ならば

Dirac の解釈 (1930)



真空 = 負の準位に
 ぎっしり電子が詰まった状態



§8 ゲージ原理

命題 8.1 $A_\mu := (-\phi, \vec{A})$ としたとき Maxwell eq. は以下の変換の下不変:

$$A_\mu \mapsto A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu \lambda, \dots (*) \quad \lambda(x): \text{任意の実関数}$$

これと(電磁場に対する)ゲージ変換と呼ぶ $\odot F' = dA' = d(A + d\lambda) = dA = F$

注 8.2 . ゲージ変換はローレンツ変換とは独立で(時空ではなく)「内部空間」

. 古典電磁気学では \vec{E}, \vec{B} が主役 (A_μ は「補助的な」場) の対称性を表す

. 量子論では A_μ も重要な役割を果たす (e.g. アハラフ・ボーム効果)

原理 8.2 (Weyl, 1929年)

電磁場と波動関数 ϕ が相互作用するシステムは以下のように実現される:

• 微分 ∂_μ を共変微分 $D_\mu := \partial_\mu + ieA_\mu$ に置きかえる

• ϕ のゲージ変換を (*) と合わせ以下のように定義する:

$$\phi \mapsto \phi' \mapsto e^{i\theta} \phi, \dots (**) \quad \theta(x) := e\lambda(x)$$

このとき $D_\mu \phi \mapsto e^{i\theta} D_\mu \phi$ と共变的に変換する.

$$\odot D_\mu \phi \mapsto (\partial_\mu + ieA'_\mu) \phi' = (\partial_\mu + ieA_\mu - ie\partial_\mu \lambda) e^{i\theta} \phi = e^{i\theta} D_\mu \phi \quad \square$$

$i\partial_\mu \theta$ (ファジー)

例 8.3 電磁場と相互作用する (⇨ 電荷を持った粒子の) Dirac eq.: (P27)

$$(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi = 0$$

[坂本 799] ↓ 非相対論的極限 & $\psi = e^{-imt} \begin{pmatrix} \xi \\ \chi \end{pmatrix}$

↑成分 各2成分 ↓成分

スピンの ($\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$) と磁場 \vec{B} との相互作用項が自然に現れる! スピン表示の波動関数!

$$i\frac{\partial}{\partial t} \xi(x) = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{1}{i}\nabla + e\vec{A} \right)^2 I_2 + \frac{e}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} - e\phi I_2 \right] \xi(x)$$

↑成分 ↓成分

↑ パウリ項 (電磁気) スカラーポテンシャル

パウリ方程式