

相対論的量子力学で考える散乱問題

数理科学グループ 平内李空

はじめに

私は、研究部での活動を通し、理論物理学に関して学んできた。具体的には、電磁気学、熱力学、量子力学、特殊相対性理論、相対論的量子力学などである。本稿は私がこの半年で学んだことをまとめ、考察などを追加したものである。今現在、研究というほどのことはしたことがないが、こういった学習を通して考えたことなどをまとめる。

目次

はじめに

本稿で用いる表記法等

第1章 量子力学に入る前に

第2章 量子力学の基本概念と枠組み

第3章 1粒子の量子論

第4章 特殊相対論について

第5章 量子力学と特殊相対性理論の両立

第6章 Dirac 方程式と射影演算子

第7章 負エネルギー解の解釈と離散対称性について

第8章 伝搬理論 非相対論的な場合

第9章 伝搬理論 相対論的な場合

第10章 クーロン散乱

第11章 コンプトン散乱

まとめと考察

今後やりたいこと

謝辞

参考文献

本稿で用いる表記法等

- ・ $\neq$: 等しくない ・ $\approx$: ほぼ等しい ・ $\sim$: オーダーが等しい ・ $\geq$: $>$ または $=$ ($\leq$ も同様)
- ・ $\gg$: ずっと大きい ・ $\equiv$: $\circ\circ$ と定義する ・ $\sum_a$: 離散変数 a について和を取る
- ・ $\sum_a \sum_b$ は $\sum_{a,b}$ など、0 から 3 までの取り得る全ての a の値の和は $\sum_{a=1}^3$ と書く。
- ・2重積分 $\iint f(x,y) dx dy$ を $\iint dx dy f(x,y)$ や $\int dx \int dy f(x,y)$ のように書く。

・本稿では積分は全て定積分であり、とくに積分範囲が明記されていないものはとりうるすべての値について足し合わせたものとする。

・区間については以下のように表すこともある。

$$(a, b) = \{x \mid a < x \leq b\}$$

$$[a, b) = \{x \mid a \leq x < b\}$$

・クロネッカーのデルタについては

$$\delta^{ij} = \delta^i_j = \delta_{ij} = \delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

と表記したりする。

第1章 量子力学に入る前に

20世紀に入ってから古典力学では説明できない現象やものがいくつも発見された。例えば原子である。原子は原子核と電子からなる。古典力学的には、原子核の周りを電子がまわっていると考えられていた。しかし、電磁気学などの計算をすると電子が電磁波を放射して原子核まで落ちて衝突してしまうことが分かる。これでは安定した状態で原子が存在することを説明できない。このように他のいくつかの現象(黒体放射など)も古典力学では説明できなかった。これらを説明しようとして生まれたのが量子力学である。次章からはこの量子力学について紹介する。

第2章 量子力学の基本概念と枠組み

前章では古典力学の問題点について話した。では、どのような理論がミクロな世界を記述するのであろうか。この章ではミクロな世界を記述する量子力学での基本概念と枠組みについて軽く説明する。また数学的な問題は適宜処理されているとする。また、この章で述べることは、清水明先生の『新物理学ライブラリ=別巻2 新版 量子論の基礎 その本質のやさしい理解のために』で学んだ事をまとめただけであり、自分の考察等はあまりできていない。

2.1 古典力学の枠組みと量子力学の枠組み

古典論では暗に次のことが仮定されていた。

1. すべての物理量はどの瞬間にも決まった値を持っている。
2. 測定はその時刻における物理量の値を知ることである。つまり物理量の測定値はその時刻における物理量の値である。
3. ある時刻における物理状態とは、その時刻におけるすべての物理量の一覧表である。
4. 系の時間発展は物理量の値が時々刻々と変化するすることである。

これは非常に直感的で当たり前に感じる。だが量子論ではこの古典論の基本的枠組みは適用できない。よって量子論の基本的枠組みが必要である。その基本的枠組みを述べるまえに言葉などの定義などをしておく。まず量子論においてはすべての物理量が確定値を持つよ

うな状態は存在しない。量子論においてはある物理量を同じ状態で測定しても測定値がばらつく。すなわち量子論で分かるのはどのような測定値が測定されるかの確率分布なのである。よって同じ状態、異なる状態を次のように定義する。

定義：量子論における同じ状態・異なる状態

2つの状態 ψ と ψ' が等しいとは、どんな物理量の測定値の確率分布も一致することである。一方、測定値の確率分布が異なるような物理量があれば異なる状態である。

このような考え方のもと量子論の基本的枠組みは次のようになる。

量子論の基本的枠組み

1. すべての物理量が各瞬間に定まった値を持つ事は一般にはない。
2. 物理量 A の測定とは観測者が測定値をひとつ得ることである。測定値は同じ物理状態でも測定の度にばらつく。だがその確率分布 $\{P(a)\}$ は状態と物理量から一意的に決まる。
3. 1よりすべての物理量の一覧表を作ることはできないので、任意の物理量の測定値の確率分布を与えるものを物理状態とする。つまり、物理状態とは各物理量 A に対して、それを測定したときの測定値の確率分布 $\{P(a)\}$ を与えるもので、物理量とは別のもの ψ で表す。そして ψ は物理量 A から $\{P(a)\}$ への写像である：

$$\psi: A \mapsto \{P(a)\}$$

物理状態の違いはこの写像の違いである。

4. 系が時間発展するとは測定を行った時刻で異なる確率分布が得られるということである。

この古典論と量子論の枠組みの違いを見るとおもしろいことが分かる。まず物理状態がそもそも古典論と量子論では異なるものとなっている。さらに古典論では物理量は書く瞬間に決まっていたが、量子論では一般には定まった値を持たない。つまり確率的である。よって量子論における物理的な予言とは測定値の確率分布 $\{P(a)\}$ に関する予言となる。また量子論では物理量のみが観測可能であり、状態は観測できない。よって測定値の確率分布 $\{P(a)\}$ さえ求まれば理論の中に抽象的な概念が入っていても問題ない。

量子論はこの基本的枠組みのもと次の5つの要請から構成される。

ここでは閉じた有限自由度系の要請を述べる。また本稿では、演算子形式を採用し、時間発展については特に断りが無い限り Schrödinger 描像を採用する。

有限自由度系の量子論の5つの要請

1. 量子系の原理的に許される最大限のところまで状態を指定し尽くした純粋状態はある複素ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ の、規格化された射線：

$$\{e^{i\theta}|\psi\rangle \mid \theta \in \mathbb{R}\}$$

で表される。規格化とは $|\psi\rangle$ のノルムが1になるように係数を調節することである。

2. 量子系の物理量、つまりどんな状態においても原理的にはいくらでも小さな誤差で計ることができる可観測量は $\mathcal{H}$ 上の自己共役演算子で表される。

3. 1 ボルンの確率規則 (物理量を表す演算子 $\hat{A}$ の固有値が離散固有値の場合)

状態 $|\psi\rangle$ について、物理量 A の誤差がない(無視できるほど小さい)測定を行ったとき、測定値 a_ψ は $\hat{A}$ の固有値のどれかに限られる。どの固有値になるかは、一般には測定ごとにランダムにばらつき、 a_ψ が $\hat{A}$ の離散固有値 a になる確率 $P(a)$ は、 a に属する固有空間への状態ベクトルの射影の長さの自乗

$$P(a) = \|\hat{\mathcal{P}}(a)|\psi\rangle\|^2$$

で与えられる。

3.2 ボルンの確率規則(物理量を表す演算子 $\hat{A}$ の固有値が連続固有値の場合)

状態 $|\psi\rangle$ について、物理量 A の誤差がない(無視できるほど小さい)測定を行ったとき、測定値 a_ψ は $\hat{A}$ の固有値のどれかに限られる。どの固有値になるかは一般には測定のたびにランダムにばらつき、測定値 a_ψ が区間 $(a - \Delta, a + \Delta]$ に入る確率 $P(a - \Delta, a + \Delta]$ は、この範囲の固有値に属する固有空間への状態ベクトルの射影の長さの自乗

$$P(a - \Delta, a + \Delta] = \|\hat{\mathcal{P}}(a - \Delta, a + \Delta)|\psi\rangle\|^2$$

で与えられる。

4. 閉じた量子系の時刻 t における状態ベクトルを $|\psi(t)\rangle$ と書く。このとき系の時間発展は次の Schrödinger 方程式で記述される：

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

ここで、 $\hat{H}$ は系のエネルギーを表す自己共役演算子で Hamiltonian と呼ばれる。

5. 測定直前に $|\psi\rangle$ なる状態ベクトルを持っていた系に物理量 $\hat{A}$ の理想測定を行い、測定値が $\hat{A}$ の離散固有値の1つ a であったとする。その場合、測定直後の状態ベクトル $|\psi_{\text{after}}\rangle$ は次の式で与えられる。

$$|\psi_{\text{after}}\rangle = \frac{1}{\|\hat{\mathcal{P}}(a)|\psi\rangle} \hat{\mathcal{P}}(a)|\psi\rangle$$

これを射影仮説という。

これらの要請について次節から詳しく述べる。ただし、射影仮説については本稿での計算には直接関わってこないので割愛する。

2.2 要請 1 について

まず複素ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ とは次の性質を満たす複素ベクトル空間である。

複素ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$

1. 任意のベクトル $|\psi\rangle, |\psi'\rangle$ に対して内積 $\langle\psi|\psi'\rangle$ が定義されていて次の性質を満たす。

1.1 $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ (等号は $|\psi\rangle$ が零ベクトルの時)

1.2 $\langle\psi'|\psi\rangle = \langle\psi|\psi'\rangle^*$ (*は複素共役を表す)

1.3 $\langle\psi|c_1\psi_1 + c_2\psi_2\rangle = c_1\langle\psi|\psi_1\rangle + c_2\langle\psi|\psi_2\rangle$ ($c_1, c_2 \in \mathbb{C}$)

2. $\mathcal{H}$ 内の任意のベクトル列 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$ で、もしそれが、

$$\lim_{n,m \rightarrow \infty} \||\psi_n\rangle - |\psi_m\rangle\| = 0$$

を満たすベクトル列ならば、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \| |\psi_n\rangle - |\psi\rangle \| = 0$$

を満たすベクトル $|\psi\rangle$ が $\mathcal{H}$ 内に存在する。ただしここで、 $\| |\psi\rangle \|$ は $|\psi\rangle$ のノルムを表し、

$$\| |\psi\rangle \| \equiv \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$$

とした。

例として次のようなものがある。

例 2.1 N 個の複素数を成分とする列ベクトル全体の集合

$$\mathbf{C}^N \equiv \left\{ \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_N \end{pmatrix} \middle| z_k \in \mathbb{C} \right\}$$

を考えよう。これの任意の 2 つのベクトル

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_N \end{pmatrix} \quad |\psi'\rangle = \begin{pmatrix} z'_1 \\ z'_2 \\ \vdots \\ z'_N \end{pmatrix}$$

に対して内積を

$$\langle \psi' | \psi \rangle = \sum_k z'_k{}^* z_k = (z'_1{}^* \ z'_2{}^* \ \dots \ z'_N{}^*) \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_N \end{pmatrix}$$

と定義すれば $\mathbf{C}^N$ は複素ヒルベルト空間を成す。

また $\| |\psi\rangle \| = 1$ のとき $|\psi\rangle$ は規格化されているという。ゼロベクトルでない任意のベクトルは必ず規格化できる。ベクトルを定数倍したベクトル $c|\psi\rangle$ を $|\psi\rangle$ とは長さが違うだけの平行なベクトルと見なすことにする。 θ が実数のとき $e^{i\theta}$ を $|\psi\rangle$ にかけた作った $e^{i\theta}|\psi\rangle$ を全ての θ について集めた集合

$$\{e^{i\theta}|\psi\rangle \mid \theta \in \mathbb{R}\} \quad (2.1)$$

を射線と呼ぶ。これはノルムが元のベクトルと同じで平行なベクトルの集合である。そして演算子形式の量子論ではこの射線(規格化した)に量子系の状態を対応させる。計算上では斜線の中から 1 つのベクトルを代表として選び、それを使い量子状態を表して、「量子系は $|\psi\rangle$ の状態にある」ということある。この $|\psi\rangle$ を状態ベクトルと呼ぶ。

2.3 要請 2 について

まずは演算子とは何かを説明する。量子論における演算子とは下記のものをいう。

量子論での演算子の定義

$\mathcal{H}$ から $\mathcal{H}$ への写像 $\hat{A}$ が線形写像であるすなわち任意の $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle (\in \mathcal{H})$ と $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ について

$$\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle \quad (2.2)$$

を満たすとき $\hat{A}$ を「 $\mathcal{H}$ 上の演算子」と呼ぶ。量子論では $\hat{}$ を付けて演算子であることを強調することがある。

行列は通常の行列のかけ算規則により列ベクトルに対する演算子になる。

例 2.1 の $\mathcal{C}^N$ において、 $\hat{A} = (A_{jk})$ ($j, k = 1, 2, \dots, N$)という行列を $|\psi'\rangle$ にかけて $|\psi\rangle$ と内積を取ると、

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{A}\psi'\rangle &= \sum_j z_j^* \left(\sum_k A_{jk} z'_k \right) \\ &= \sum_k \left(\sum_j (z_j^* A_{jk}) \right) z'_k = \sum_k \left(\sum_j A_{jk}^* z_j \right)^* z'_k\end{aligned}\quad (2.3)$$

この最後の式は $\hat{A}$ のエルミート共役

$$\hat{A}^\dagger \equiv (\hat{A}^*)^t \quad (2.4)$$

を用いて、 $\langle\hat{A}^\dagger\psi|\psi'\rangle$ と書ける。よって、任意の $|\psi\rangle, |\psi'\rangle$ について

$$\langle\psi|\hat{A}\psi'\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\psi'\rangle \quad (2.5)$$

が成立することが分かる。

今例 2.1 の $\mathcal{C}^N$ で考えたことを、より一般のヒルベルト空間に拡張しよう。ここでは次のように拡張する。

(2.5)が、任意の $|\psi\rangle, |\psi'\rangle \in \mathcal{H}$ について成立する演算子 $\hat{A}^\dagger$ を $\hat{A}$ の共役演算子と呼ぶ。またここでは詳しく触れないが以下の性質が成り立つ。

$$(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger \quad (2.6)$$

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi'\rangle^* = \langle\psi'|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle \quad (2.7)$$

$$(c\hat{A})^\dagger = c^* \hat{A}^\dagger \quad (\forall c \in \mathbb{C}) \quad (2.8)$$

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \quad (2.9)$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \quad (2.10)$$

先程考えた $\mathcal{C}^N$ では、 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ を満たす行列をエルミート行列と呼んだ。これを一般のヒルベルト空間にも拡張して

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad (2.11)$$

を満たす演算子 $\hat{A}$ を自己共役演算子と呼ぶことにする。演算子形式の量子論では量子系の物理量をこの自己共役演算子に対応させる。

2.4 要請 3 について

2.4.1 固有値と自己共役演算子について

固有値と固有ベクトルの定義

演算子 $\hat{A}$ に対し、ゼロベクトルでないベクトル $|a\rangle$ が

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad (a \in \mathbb{C}, \langle a|a\rangle \geq 0) \quad (2.12)$$

を満たすとき a を $\hat{A}$ の固有値と呼び、 $|a\rangle$ を固有値 a に属する $\hat{A}$ の固有ベクトルあるいは固有状

態と呼ぶ。また本稿では固有ベクトルは特に断りが無い限りいつも規格化しておくことにする。

ここで、自己共役演算子の固有値について考えてみよう。 $|a\rangle$ と $\hat{A}|a\rangle$ の内積を取ると、

$$a\langle a|a\rangle = \langle a|\hat{A}|a\rangle \quad (2.13)$$

となる。これの複素共役を取ると、

$$a^*\langle a|a\rangle = \langle a|\hat{A}^\dagger|a\rangle \quad (2.14)$$

$\langle a|a\rangle \neq 0$ なので、もし $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ ならば、

$$a = a^* \quad (2.15)$$

が成り立つ。よって**自己共役演算子の固有値は実数**であることがわかる。またこのことから、自己共役演算子 $\hat{A}$ の固有値全体は、さまざまな実数の値の集合をなす。これを $\hat{A}$ の固有値スペクトルと呼ぶ。そして固有値スペクトルの中に $\{1, -1\}$ の用に離散的な部分がある場合、その部分が離散スペクトルをなすという。一方 $[-1, +1]$ の間の全ての実数のように連続した実数よりなる部分は連続スペクトルを成すという。また離散スペクトルに属する固有値を離散固有値、連続スペクトルに属する固有値を連続固有値と呼ぶ。

$$a'\langle a|a'\rangle = \langle a|\hat{A}|a'\rangle \quad (2.16)$$

もし $\hat{A}$ が自己共役演算子ならば、

$$\langle a|\hat{A}|a'\rangle = a\langle a|a'\rangle \quad (2.17)$$

も同時になりたつ。よって、

$$(a - a')\langle a|a'\rangle = 0 \quad (2.18)$$

$a \neq a'$ ならば、

$$\langle a|a'\rangle = 0 \quad (2.19)$$

が成り立つ。よって自己共役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ことがわかる。

2.4.2 正規直交完全系と射影演算子 離散固有値の場合

自己共役演算子 $\hat{A}$ の1つの固有値 a に属する固有ベクトルが、線形独立なベクトルとして2つ以上存在するとき固有値 a には縮退があるといい $|a, 1\rangle, |a, 2\rangle, |a, 3\rangle, \dots, |a, m_a\rangle$ の用に固有ベクトルを表す。このとき m_a を縮退度という。ひとつの自己共役演算子の固有ベクトルを縮退しているものも含めてすべて集めてくれば、どんなベクトル $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ も同じヒルベルト空間内のベクトルたちの線形結合で表すことができる完全系をなす。すなわち、

自己共役演算子の固有ベクトル全体は完全系をなす。

よって自己共役演算子 $\hat{A}$ の固有ベクトル $|a, l\rangle$ とするとどんなベクトル $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ も、

$$|\psi\rangle = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \psi(a, l) |a, l\rangle \quad (2.20)$$

のように適当な係数 $\psi(a, l) \in \mathbb{C}$ を用いて展開できる。ただし、ここで a, l は離散的とした。自己共役演算子の異なる固有値に属する固有ベクトルは互いに直交する。すなわちそれらの内積が0になる。だが1つの固有値に属する縮退したベクトル同士がそうなる保証はない。

そして固有ベクトルの線形結合も固有ベクトルになるという性質を用いて、これらを適当な線形結合を用いて互いに直交するように選ぶことができる。よってこれから、この本稿では互いに直交するように選びなおしているとする。よってある自己共役演算子の固有ベクトル同士の内積は、

$$\langle a, l | a', l' \rangle = \delta_{a, a'} \delta_{l, l'} \quad (2.21)$$

となる。

(2.21)の用を選んで $|a, l\rangle$ の全体(a, l の可能なすべての値について $|a, l\rangle$ を集めたもの)を $\{|a, l\rangle\}$ と書くと、 $\{|a, l\rangle\}$ はすべてのベクトルのノルムが1かつ他のすべてのベクトルと直交する正規直交完全系を成す。これはものすごく便利である。ここで(2.20)と、

$$|\psi'\rangle = \sum_{a'} \sum_{l'=1}^{m_{a'}} \psi'(a', l') |a', l'\rangle \quad (2.22)$$

の内積をとると、

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi' \rangle &= \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \sum_{a'} \sum_{l'=1}^{m_{a'}} \psi^*(a, l) \psi'(a', l') \langle a, l | a', l' \rangle \\ &= \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \sum_{a'} \sum_{l'=1}^{m_{a'}} \psi^*(a, l) \psi'(a', l') \delta_{a, a'} \delta_{l, l'} \\ &= \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \psi^*(a, l) \psi'(a, l) \end{aligned} \quad (2.23)$$

となりすごく見やすくなる。以後式の見た目をすっきりさせたいので、 a, l をひとまとめに $\mathbf{a}$ と書く。こうすると先程の式は、

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{a}} \psi(\mathbf{a}) |\mathbf{a}\rangle \quad (2.24)$$

$$\langle \mathbf{a} | \mathbf{a}' \rangle = \delta_{\mathbf{a}, \mathbf{a}'} \quad (2.25)$$

$$\langle \psi | \psi' \rangle = \sum_{\mathbf{a}} \psi^*(\mathbf{a}) \psi'(\mathbf{a}) \quad (2.26)$$

(2.26)と要請1から、

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{\mathbf{a}} |\psi(\mathbf{a})|^2 = 1 \quad (2.27)$$

(2.24)と $|\mathbf{a}\rangle$ の内積をとると、

$$\psi(\mathbf{a}) = \langle \mathbf{a} | \psi \rangle \quad (2.28)$$

が成り立つ。この $\psi(\mathbf{a})$ は $\mathbf{a}$ を引数として値が複素数になる関数である。基底 $\{|\mathbf{a}\rangle\}$ が与えられたときに $\psi(\mathbf{a})$ と $|\psi\rangle$ は一対一に対応する。これを「 $|\psi\rangle$ を基底 $\{|\mathbf{a}\rangle\}$ で表示したものが $\psi(\mathbf{a})$ であ

る」という。特に量子論では $|\psi\rangle$ が状態ベクトルのとき $\psi(\mathbf{a})$ を基底 $\{|\mathbf{a}\rangle\}$ で表示した波動関数と呼ぶ。状態ベクトルと波動関数は基底をしていすると1対1対応する。つまり、一方から他方を求める事ができる。ただし基底を変えれば同じ状態の波動関数でも違った関数形となる。任意のベクトルが $\{|\mathbf{a}\rangle\}$ で展開できるのだからある自己共役演算子 $\hat{B}$ の固有ベクトル $|\mathbf{b}\rangle$ も、

$$|\mathbf{b}\rangle = \sum_{\mathbf{a}} \psi_{\mathbf{b}}(\mathbf{a}) |\mathbf{a}\rangle, \quad \psi_{\mathbf{b}}(\mathbf{a}) = \langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle \quad (2.29)$$

のように展開できる。このときの展開係数 $\psi_{\mathbf{b}}(\mathbf{a})$ は固有ベクトル $|\mathbf{b}\rangle$ と1対1に対応する。これを基底 $\{|\mathbf{a}\rangle\}$ で表示した、 $\hat{B}$ の固有関数と呼ぶ。

例 2.1 の $\mathcal{C}^N$ において、縦ベクトル

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_N \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

からそのエルミート共役である横ベクトルを

$$\langle \psi | \equiv (z_1^* \ z_2^* \dots \ z_N^*) \quad (2.31)$$

とすると、内積 $\langle \psi | \psi' \rangle$ は $\langle \psi |$ を $|\psi'\rangle$ に作用させて得られると考えることができる。これは $\langle \psi |$ が、 $\forall |\psi'\rangle \in \mathcal{H}$ に対し、作用すると複素数 $\langle \psi | \psi' \rangle$ を与えるものだと考えることができる。

よって、これを定義とすれば任意のヒルベルト空間上で $\langle \psi |$ を定義することができる。こうして定義された $\langle \psi |$ を $|\psi\rangle$ に共役なブラベクトルと呼ぶ。また $|\psi\rangle$ をケットベクトルと呼ぶ。

$\hat{A}|\psi\rangle = |\hat{A}\psi\rangle$ に共役なブラ $\langle \hat{A}\psi |$ を $\langle \psi |$ と $\hat{A}$ で表す方法を考えてみよう。

共役演算子の性質から、 $\forall |\psi'\rangle \in \mathcal{H}$ に対し、

$$\langle \hat{A}\psi | \psi' \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi' \rangle \quad (2.32)$$

が成り立つので、

$$\langle \hat{A}\psi | = \langle \psi | \hat{A}^\dagger \quad (2.33)$$

と分かる。(2.33)の意味を考えてみよう。(2.32)から分かるように、まず任意の $|\psi'\rangle \in \mathcal{H}$ に対し $\hat{A}^\dagger$ を作用させできたベクトルを $\langle \psi |$ に作用させるという風に考えることができる。だがこれよりも良い解釈ができる。それは、「演算子はケットには左から作用し、ブラには右から作用し、(2.33)は $\hat{A}^\dagger$ はブラ $\langle \psi |$ に右から作用すると $\langle \hat{A}\psi |$ になる」という解釈である。この解釈でも上式達とは矛盾しない。量子論では同じ内積になれば問題ないので、2つの解釈は等価である。上のように考えれば、演算子はブラにもケットにも作用させることができる。

突然だが次のような事を考えてみよう。2つのベクトル $|\mathbf{a}\rangle$ 、 $|\mathbf{b}\rangle$ があったとする。これを使って任意のベクトル $|\psi\rangle$ から、 $\langle \mathbf{a} | \psi \rangle |\mathbf{b}\rangle$ という別のベクトルを作る操作を考える。これはベクトルから別のベクトルを作る線形写像なので演算子として表すことができる。 $\langle \mathbf{a} | \psi \rangle$ はただの複素数なので、

$$\langle \mathbf{a} | \psi \rangle | \mathbf{b} \rangle = | \mathbf{b} \rangle \langle \mathbf{a} | \psi \rangle \quad (2.34)$$

である。これは「 $|\psi\rangle$ にブラ $\langle \mathbf{a} |$ を作用させ、その得られた内積を $|\mathbf{b}\rangle$ にかける」という操作であることがわかる。そしてこのような操作を表す演算子を $|\mathbf{b}\rangle\langle \mathbf{a} |$ と書くことにする。これからはケット、ブラの順番に背中合わせに並べると演算子と見なすと約束しておこう。

$$\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a}) \equiv | \mathbf{a} \rangle \langle \mathbf{a} | \quad (2.35)$$

とすると、これは任意のベクトル $|\psi\rangle$ から、

$$\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})|\psi\rangle = \langle \mathbf{a} | \psi \rangle | \mathbf{a} \rangle \quad (2.36)$$

という、 $|\mathbf{a}\rangle$ に平行な成分を取り出す演算子になる。 $\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})$ を $|\mathbf{a}\rangle$ への射影演算子と呼ぶ。

この演算子は以下のような性質をもっている。

$$\hat{A}\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})|\psi\rangle = a\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})|\psi\rangle \quad (2.37)$$

$$\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a}) \equiv \sum_{l=1}^{m_a} \hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a}) = \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle \langle a, l| \quad (2.38)$$

とすると、

$$\hat{A}\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})|\psi\rangle = a\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})|\psi\rangle \quad (2.39)$$

よって $\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})|\psi\rangle$ 、 $\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})|\psi\rangle$ も固有値 a に属する $\hat{A}$ の固有ベクトルである。

$$|\psi\rangle = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \psi(a, l) |a, l\rangle \quad (2.40)$$

に $\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})$ をかけると、

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})|\psi\rangle &= \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle \langle a, l| \sum_{a'} \sum_{l'=1}^{m_{a'}} \psi'(a', l') |a', l'\rangle \\ &= \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle \sum_{a'} \sum_{l'=1}^{m_{a'}} \psi'(a', l') \delta_{a, a'} \delta_{l, l'} \\ &= \sum_{l=1}^{m_a} \psi(a, l) |a, l\rangle \end{aligned} \quad (2.41)$$

となる。これを見ると $\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})$ をかけると、固有値 a に属する固有ベクトルに平行な成分だけ係数を全くかえず取り出すことができることがわかる。固有値 a に属する $\hat{A}$ の固有ベクトル全体はヒルベルト空間の部分集合であり、固有値 a に属する固有空間と呼ばれる。 $\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})$ は一般のベクトルから固有値 a に属する固有空間の成分を取り出す演算子である。縮退があるとき、 $\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})$ は固有ベクトル $|a, l\rangle$ の選び方に依存する。だが $\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})$ は $\mathcal{H}$, $\hat{A}$, a が決まれば一意的に定まる。ここではその証明は省略する。

$$|\psi\rangle = \sum_a \psi(\mathbf{a}) | \mathbf{a} \rangle \quad (2.42)$$

に $\psi(\mathbf{a}) = \langle \mathbf{a} | \psi \rangle$ を代入すると、

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{a}} \langle \mathbf{a} | \psi \rangle |\mathbf{a}\rangle = \left(\sum_{\mathbf{a}} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| \right) |\psi\rangle \quad (2.43)$$

これは任意の $|\psi\rangle$ について成り立つので、 $\{|\mathbf{a}\rangle\}$ を任意の正規直交完全系とすると、

$$\sum_{\mathbf{a}} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| = \hat{1} \quad (2.44)$$

とみなす事ができる。逆に $\{|\mathbf{a}\rangle\}$ があったとき、上式が成り立てば、

$$|\psi\rangle = \hat{1}|\psi\rangle = \left(\sum_{\mathbf{a}} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| \right) |\psi\rangle = \sum_{\mathbf{a}} \langle \mathbf{a} | \psi \rangle |\mathbf{a}\rangle \quad (2.45)$$

が成り立つので、任意のベクトルが $\{|\mathbf{a}\rangle\}$ で展開できることが分かる。よって $\{|\mathbf{a}\rangle\}$ が正規直交完全系ならば、

$$\sum_{\mathbf{a}} \hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{a}} \hat{\mathcal{P}}(a) = \hat{1} \quad (2.46)$$

が成り立つ。だがこれは至極当然のことである。なぜなら、上の式の主張は異なる向きへの射影をすべて集めたらもとにもどるということだからである。

ここで次のことを考えてみよう。さきほどブラとケットの組で射影演算子を作った。では任意の演算子をブラとケットの組で作ることはできるだろうか。まず天下りのだが任意の演算子 $\hat{B}$ を恒等演算子 $\hat{1}$ で挟んだものを考えてみよう。

$$\hat{B} = \hat{1}\hat{B}\hat{1} = \sum_{\mathbf{a}} \sum_{\mathbf{a}'} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| \hat{B} |\mathbf{a}'\rangle \langle \mathbf{a}'| = \sum_{\mathbf{a}} \sum_{\mathbf{a}'} \langle \mathbf{a} | \hat{B} | \mathbf{a}' \rangle |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}'| \quad (2.47)$$

上式は任意の演算子は正規直交完全系のブラとケットを背中合わせにした $|\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}'|$ の線形結合で表すことができることを示している。もし演算子 $\hat{A}$ が自己共役演算子ならば、固有ベクトルは完全系を成す。よって、自分自身の固有ブラと固有ケットで表すことができる。その場合、

$$\langle \mathbf{a} | \hat{A} | \mathbf{a}' \rangle = a' \delta_{\mathbf{a}, \mathbf{a}'} = a \delta_{\mathbf{a}, \mathbf{a}'} \quad (2.48)$$

が成り立つので、

$$\hat{A} = \sum_{\mathbf{a}} a |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| = \sum_{\mathbf{a}} a \hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a}) = \sum_a a \hat{\mathcal{P}}(a) \quad (2.49)$$

と綺麗な形となる。自己共役演算子をこのような形で表すことをスペクトル分解という。この意味は分かりやすい。まず射影演算子により $|\mathbf{a}\rangle$ に平行な成分だけ抜き出され、それは $\hat{A}$ の固有ベクトルなのでそれに固有値 a をかけることは $\hat{A}$ を演算することと等価である。

では今までに説明した概念を用いてボルンの確率規則(離散固有値 ver)について説明する。ここで改めて離散固有値 ver のボルンの確率規則を掲げておこう。

3.1 ボルンの確率規則(物理量を表す演算子 $\hat{A}$ の固有値が離散固有値の場合)

状態 $|\psi\rangle$ について、物理量 A の誤差がない(無視できるほど小さい)測定を行ったとき、測定値

a_ψ は $\hat{A}$ の固有値のどれかに限られる。どの固有値になるかは、一般には測定ごとにランダムにばらつき、 a_ψ が $\hat{A}$ の離散固有値 a になる確率 $P(a)$ は、 a に属する固有空間への状態ベクトルの射影の長さの自乗

$$P(a) = \|\hat{\mathcal{P}}(a)|\psi\rangle\|^2 \quad (2.50)$$

で与えられる。

$$P(a) = \|\hat{\mathcal{P}}(a)|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|\hat{\mathcal{P}}(a)|\psi\rangle = \sum_{l=1}^{m_a} |\langle a|\psi\rangle|^2 = \sum_{l=1}^{m_a} |\psi(a)|^2 \quad (2.51)$$

実用上は上式の最後の表式を用いるのがよい。もし固有値 a に属する固有ベクトル $|a\rangle$ に縮退がなければ、

$$P(a) = \|\hat{\mathcal{P}}(a)|\psi\rangle\|^2 = |\langle a|\psi\rangle|^2 = |\psi(a)|^2 \quad (2.52)$$

となり、すごくわかりやすい。この要請では測定値は固有値のどれかに限られるといっている。さらに要請 2 より A には自己共役演算子に対応しているので固有値は実数である。よって、測定値はどれも実数となる。また 1 つの測定における測定値はどれか 1 つの値に限られる。

要請 3 における確率とは全く同じ状態 $|\psi\rangle$ を用意し、そのたびに物理量 A の測定を行う実験を N 回行ったとき、

$$P(a) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N \text{ 回の内測定値 } a_\psi \text{ が } a \text{ であった回数}}{N} \quad (2.53)$$

で定義される。この $P(a)$ は次の性質を満たす。

$$P(a) \geq 0 \quad (2.54)$$

$$\sum_a P(a) = 1 \quad (2.55)$$

(2.50)の $P(a)$ は(2.54)、(2.55)を満たしている。全く同じ状態 $|\psi\rangle$ を用意し、そのたびに物理量 A の測定を行う実験を N 回行ったとき、 i 回目の実験での測定値を $a_\psi^{(i)}$ と書くことにしよう。これらの平均値は、

$$\langle A \rangle \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a_\psi^{(i)} \quad (2.56)$$

で定義する。また、

$$\langle A \rangle = \sum_a a P(a) \quad (2.57)$$

が成り立つので、 $\langle A \rangle$ を期待値と呼ぶこともある。上式はスペクトル分解を用いると、

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (2.58)$$

と書くこともできる。これは計算上すごく便利である。

2.4.3 正規直交完全系と射影演算子 連続固有値の場合

自己共役演算子 $\hat{A}$ が連続固有値を持つ場合、離散固有値の場合と違い単純に Σ を使うわけにはいかない。そこで離散固有値の場合のクロネッカーのデルタに対応する次の超関数を導

入して考える。その関数を Dirac のデルタ関数といいそれは次のように定義される。

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x') \delta(x - x') dx' = f(x) \quad (2.59)$$

$f(x)$ がすべての x に対して 1 のとき、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') dx' = 1 \quad (2.60)$$

というクロネッカーのデルタの

$$\sum_{n'} \delta_{n,n'} = 1 \quad (2.61)$$

に対応したような式を得る。デルタ関数は荒く言うと、

$$\delta(x - x') = \begin{cases} 0 & \text{for } x' \neq x \\ \infty & \text{for } x' = x \end{cases} \quad (2.62)$$

を満たす。このように無限大が絡むのはあまりいい気がしないが、物理では基本デルタ関数は積分するので(2.59)の用に積分を定義しておけば物理的には問題ない。これを用いて連続固有値に属する固有ベクトルを(2.21)に似せて次のように規格化する。

$$\langle \mathbf{a} | \mathbf{a}' \rangle = \delta(\mathbf{a} - \mathbf{a}')$$

$$\equiv \begin{cases} \delta(a - a') \delta_{l,l'} & (a \text{ が連続, } l \text{ が離散の場合}) \\ \delta(a - a') \delta(l - l') & (a \text{ も } l \text{ も連続の場合}) \end{cases} \quad (2.63)$$

もし固有ベクトルがこれを満たさなければ、これを満たすようにする操作を行う。その操作についてここでは触れない。そうすると、すべての式が離散固有値の時と似た形になるので、離散固有値での結果に対し次のような置き換えをする。

$$\int d\mathbf{a} = \begin{cases} \int da \sum_{l=1}^{m_a} & (a \text{ が連続, } l \text{ が離散の場合}) \\ \int da \int dl & (a \text{ も } l \text{ も連続の場合}) \end{cases} \quad (2.64)$$

として、

$$\sum_{\mathbf{a}} \rightarrow \int d\mathbf{a} \quad (2.65)$$

$$\delta_{\mathbf{a},\mathbf{a}'} \rightarrow \delta(\mathbf{a} - \mathbf{a}') \quad (2.66)$$

この置き換えをすることによって、離散固有値での公式は、

$$|\psi\rangle = \int d\mathbf{a} \psi(\mathbf{a}) |\mathbf{a}\rangle \quad (2.67)$$

$$\langle \psi | \psi' \rangle = \int d\mathbf{a} \psi^*(\mathbf{a}) \psi'(\mathbf{a}) \quad (2.68)$$

$$\int da |a\rangle\langle a| = \hat{1} \quad (2.69)$$

$$\hat{\mathcal{P}}(a) = |a\rangle\langle a| \quad (2.70)$$

$$\hat{\mathcal{P}}(a) = \int dl |a\rangle\langle a| \quad \text{or} \quad \sum_{l=1}^{m_a} |a\rangle\langle a| \quad (2.71)$$

$$\hat{A} = \int a \hat{\mathcal{P}}(a) da = \int a \hat{\mathcal{P}}(a) da \quad (2.72)$$

これらを使って連続固有値の場合のボルンの確率規則について考えてみよう。だが、一般の連続変数の確率はある1つの値をとる確率がゼロになってしまう。よってぴったりの確率ではなく測定値が区間 $(a - \Delta, a + \Delta]$ の範囲内にある確率を考えるよう。

$$P(a - \Delta, a + \Delta] = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N \text{回の測定値が}(a - \Delta, a + \Delta] \text{の範囲内であった回数}}{N} \quad (2.73)$$

この定義は離散固有値でも使えるので、まず離散固有値について計算してみる。

$$P(a - \Delta, a + \Delta] = \sum_{a - \Delta < a' \leq a + \Delta} P(a') \quad (2.74)$$

となることがわかる。よって上の式の右辺に離散固有値での式(2.51)を代入すると、

$$P(a - \Delta, a + \Delta] = \langle \psi | \hat{\mathcal{P}}(a - \Delta, a + \Delta] | \psi \rangle = \|\hat{\mathcal{P}}(a - \Delta, a + \Delta] | \psi \rangle\|^2 \quad (2.75)$$

となる。ここで、

$$\hat{\mathcal{P}}(a - \Delta, a + \Delta] \equiv \sum_{a - \Delta < a' \leq a + \Delta} \hat{\mathcal{P}}(a') \quad (2.76)$$

自然界に本当に連続変数があるかわからないので、物理では連続変数の結果は離散変数での結果の極限だと考える。よって上式に先程の対応規則を当てはめた、

$$\hat{\mathcal{P}}(a - \Delta, a + \Delta] \equiv \int_{a - \Delta}^{a + \Delta} da' \hat{\mathcal{P}}(a') \quad (2.77)$$

とすべきである。

これらの式などを用い $P(a - \Delta, a + \Delta]$ について計算してみると、

$$\begin{aligned} P(a - \Delta, a + \Delta] &= \langle \psi | \hat{\mathcal{P}}(a - \Delta, a + \Delta] | \psi \rangle \\ &= \int_{a - \Delta}^{a + \Delta} da' \langle \psi | \hat{\mathcal{P}}(a') | \psi \rangle \\ &= \int_{a - \Delta}^{a + \Delta} da' \int dl' |\langle a', l' | \psi \rangle|^2 \quad \text{or} \quad \int_{a - \Delta}^{a + \Delta} da' \sum_{l'=1}^{m_{a'}} |\langle a', l' | \psi \rangle|^2 \end{aligned} \quad (2.78)$$

となる。

$$P(a - \Delta, a + \Delta] = \int_{a - \Delta}^{a + \Delta} da' p(a') \quad (2.79)$$

を満たすような $p(a)$ を確率密度と呼ぶ。すると、ただちに、

$$\begin{aligned}
p(a) &= \langle \psi | \hat{\mathcal{P}}(a) | \psi \rangle \\
&= \begin{cases} \int dl |\langle a, l | \psi \rangle|^2 = \int dl |\psi(a, l)|^2 & (l \text{ が連続変数の場合}) \\ \sum_{l=1}^{m_a} |\langle a, l | \psi \rangle|^2 = \sum_{l=1}^{m_a} |\psi(a, l)|^2 & (l \text{ も離散変数の場合}) \end{cases}
\end{aligned} \tag{2.80}$$

であることがわかる。もし縮退がなければ、

$$p(a) = |\langle a | \psi \rangle|^2 = |\psi(a)|^2 \tag{2.81}$$

となる。これらから波動関数の絶対値の自乗は離散スペクトルの場合は確率をあたえ、連続スペクトルの場合は、確率密度を与えることがわかる。期待値の計算上などでは、 $P(a - \Delta, a + \Delta)$ を直接求めず、波動関数などから直接求めた方が楽である。物理量 A の期待値は、連続スペクトルの場合、

$$\langle A \rangle = \int a p(a) da = \iint a |\psi(a, l)|^2 dl da \tag{2.82}$$

となる。あるいはスペクトル分解を用いて、

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \tag{2.83}$$

離散固有値と同じ式を得る。期待値計算はこれらを用いた方が楽である。

2.5 要請 4 について

2.5.1 要請 4 についての軽い補足

まず、

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} (|\psi(t + \Delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle) \tag{2.84}$$

とする。この要請による Schrödinger 方程式は初期条件を与えれば一意的に解が定まる。つまり $|\psi(0)\rangle$ が与えられれば系の時間発展は系が閉じている限り解くことができる。これは古典力学における、 $t = 0$ での位置と運動量が分かればその先の運動が予知できることに対応する。

2.5.2 閉じた系の時間発展について

Hamiltonian $\hat{H}$ の固有値をエネルギー固有値と呼び、固有ベクトルをエネルギー固有状態と呼ぶ。これらは量子論の時間発展において極めて重要な役割をはたす。ではこれらのエネルギー固有状態について具体的に考えてみよう。

固有エネルギー E_n とし、そのときのエネルギー固有状態を縮退がないものとして $|n\rangle$ とする。このとき、

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{2.85}$$

であるから、初期状態が $|\psi(0)\rangle = |n\rangle$ のようなエネルギー固有状態であるとき任意の時刻での状態は、

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \tag{2.86}$$

となる。縮退があるときは、同じエネルギー E_n をもつ固有状態 $|n, l\rangle$ の線形結合もエネルギー固有状態なので、 c_l が

$$\sum_{l=1}^{m_a} |c_l|^2 = 1 \quad (2.87)$$

を満たすような係数のとき、初期状態が

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{l=1}^{m_a} c_l |n, l\rangle \quad (2.88)$$

のときの Schrödinger 方程式の解は、

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} \sum_{l=1}^{m_a} c_l |n, l\rangle \quad (2.89)$$

である。

上記のどちら(2.86)と(2.89)も初期状態と任意の時刻での状態は位相因子しか違いがない。よって、系がエネルギー固有状態ならば、系が閉じている限り同じ状態を保ち続ける。このときの位相因子 $e^{-iE_n t/\hbar}$ は角周波数

$$\omega_n \equiv E_n/\hbar \quad (2.90)$$

で位相が回転する。この ω_n を固有振動数と呼んだりすることもある。

では、初期状態がエネルギー固有状態ではない状態での閉じた系での時間発展はどのようなになるだろうか。任意のベクトル $|\psi_j\rangle$ ($j \in \mathbb{N}$)について初期条件 $|\psi(0)\rangle = |\psi_j\rangle$ であるときの Schrödinger 方程式の解を $|\psi_j(t)\rangle$ とする。ここで初期条件が

$$|\psi(0)\rangle = \sum_j c_j |\psi_j\rangle \quad (\forall c_j \in \mathbb{C}) \quad (2.91)$$

のときの Schrödinger 方程式の解について考えてみよう。 $|\psi_j(t)\rangle$ は Schrödinger 方程式の解なので、

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_j(t)\rangle = \hat{H} |\psi_j(t)\rangle \quad (2.92)$$

を満たす。よってこの式に c_j をかけてすべての j について足し合わせると、

$$i\hbar \frac{d}{dt} \sum_j c_j |\psi_j(t)\rangle = \hat{H} \sum_j c_j |\psi_j(t)\rangle \quad (2.93)$$

となるので上の初期条件のときの解は、

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j |\psi_j(t)\rangle \quad (2.94)$$

となることがわかる。これは初期条件を満たしている。ここでさきほどの $|\psi_j\rangle$ に $|n, l\rangle$ を選んでもよい。自己共役演算子の固有ベクトル全体 $\{|n, l\rangle\}$ は完全系をなすので、任意の初期状態 $|\psi(0)\rangle$ をこれで展開することができ、

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n,l} \psi(n,l) |n,l\rangle \quad (2.95)$$

となる。これとさきほどの議論より、 $|\psi(t)\rangle$ は、

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,l} e^{-i\omega_n t} \psi(n,l) |n,l\rangle \quad (2.96)$$

となることがわかる。これらから次のようなことがわかる。まず固有エネルギーとエネルギー固有状態が全て求まれば一般の状態ベクトルの時間発展が求まる。これは実用上非常に重要である。実質的にエネルギー固有状態と固有エネルギーさえ分かればよいということである。ただし、単純ではない量子系についてエネルギー固有値やエネルギー固有状態を求める事は一般には非常に難しい。

2.5.3 確率の保存について

さきほどの(2.96)より、

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \sum_{n,l} |e^{-i\omega_n t} \psi(n,l)|^2 = \sum_{n,l} |\psi(n,l)|^2 = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle \quad (2.97)$$

となる。これをみると状態ベクトルのノルムが常に一定に保たれていることがわかる。

Schrödinger 方程式は t に関する線形 1 次微分方程式であるので $|\psi(t)\rangle$ 、 $|\psi(0)\rangle$ は線形かつ 1 対 1 に対応する。このようなノルムを変えずかつ線形かつ 1 対 1 対応のベクトル空間全体からベクトル空間全体への写像をユニタリー変換と呼ぶ。また状態ベクトルの時間発展は連続的なので閉じた系の状態ベクトルは連続的にユニタリー変換されていく。これをユニタリー発展と呼ぶ。ユニタリー発展ではノルムが保存されるので、時間がたっても確率の総和は 1 に保たれる。これを確率の保存と呼ぶ。

2.6 5 つの要請は論理的必然かどうか

ここまでの話を読んで、「では先程の 5 つの要請はどうやって出てくるのか？」と思う人もいるだろう。端的に述べると、それに対する答えは「そう考えると上手く実験事実を説明できるから」である。つまり、なにか論理的な必然性から先程の 5 つの要請ができる訳ではない。1 章で述べたことも古典力学と古典電磁気学だけではダメな証明にはなっても、量子論が唯一の答えという証明にはならない。ではなぜ量子論を先程までのように考えるのか。それは結局、今までの実験事実を最もよく説明できるからである。そして、今のところ量子論ほどミクロな世界の現象を広範囲に説明できる理論は知られていない。量子論はそういった意味では、なぜか分からないがものすごく上手くいっている理論体系なのである。

2.7 有限自由度の正準量子化について

ここからは先程までの話を具体的にし、演算子形式の量子論を構成する方法を述べる。具体的にどのようにヒルベルト空間や物理量を表す演算子を構成するかについて述べよう。

ここでは、古典論から量子論を推測する正準量子化を紹介する。これは量子論を一意的に決定することはできないが、簡単なのでよく用いられている。

2.7.1 1 自由度の正準量子化

考える物理系が古典的に一般化座標 q と一般化運動量 p の組である、正準変数で記述できているとする。このとき任意の物理量 A は q, p の関数 $A(q, p)$ として表すことができる。系の全エネルギーも q, p の関数として、 $H(q, p)$ と表すことができる。このエネルギーを表す関数を Hamiltonian という。このように古典論の知識が与えられたとき量子論を構成する方法は経験的に以下のようなものであることがわかっている。まず q, p を

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \quad (2.98)$$

という交換関係を満たす自己共役演算子に置き換える。さらに $A(q, p)$ の q, p を $\hat{q}, \hat{p}$ に置き換え、

$$\hat{A} \equiv A(\hat{q}, \hat{p}) \quad (2.99)$$

とする。ただし、これらの置き換えを行う際、得られる $\hat{A}$ が自己共役になるような順序に書き換えた後置き換える。この手続きには少なからず曖昧性があるが、異なる表現を用いて計算したとしても、計算結果は一致する。これに関しては詳しくはここでは触れないことにする。以上の操作を行うと任意の初期条件を与えたとき、任意の時刻での物理量の測定値の確率分布が一意的に定まる。

例 2.2 1 次元調和振動子

ここで先ほどの正準量子化を 1 次元調和振動子を例にとっておこなってみる。1 次元調和振動子の Hamiltonian は、

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}q^2 \quad (2.100)$$

である。 ω は角周波数である。これを正準量子化すると、

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2 \quad (2.101)$$

となる。よって、Schrödinger 方程式は、

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \left(\frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2 \right) |\psi(t)\rangle \quad (2.102)$$

となる。

多自由度系も同様の方法で正準量子化できる。ただし、本稿では基本的に多自由度系を扱わないのでここでは述べない。

2.7.2 1 自由度系での正準交換関係の Schrödinger 表現

正準量子化して得られた量子論について具体的なヒルベルト空間を作って計算する方法について述べる。ここでは最も広く使われている Schrödinger 表現を説明する。まず交換する物理量の完全集合というものについて説明する。

交換する物理量の完全集合の定義

ある量子系の物理量を表す演算子の組、 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ がどの2つをとっても交換し、かつこれらのすべてと交換する物理量を表す演算子が $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ の関数に限られるとする。ここで $\hat{A}$ の関数とは、スペクトル分解を用いて、

$$f(\hat{A}) \equiv \sum_a f(a) \hat{P}(a) \quad (2.103)$$

とする。さらに、 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ のうちどの物理量も残りの物理量だけの関数として表せないとする。このような物理量の組を交換する物理量の完全集合と呼ぶ。

交換する物理量の完全集合の演算子の数を有限個にできる系を有限自由度系、そうでない系を無限自由度系という。また、自己共役演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ どちらも固有状態になる固有ベクトルを同時固有ベクトルと呼ぶことにすると以下の性質が成り立つ。

ある量子系の物理量を表す演算子 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ が、どの2つを取っても交換するならば、これらの演算子の全ての固有ベクトルを同時固有ベクトルに選ぶことができる。これは対応する物理量 $A, B, C, \dots$ が定まっている状態を表しており、その全体は正規直交化を常にするという約束のもと、正規直交完全系をなす。

これらを用いて、有限自由度系のヒルベルト空間は、交換する物理量の完全集合の同時固有ベクトルの、ノルムが有限になるような線形結合全体からなる空間をとると上手く理論が作れることが経験的に知られている。ではこれを踏まえて Schrödinger 表現について説明しよう。

1 自由度系を正準量子化すると、任意の物理量は $A(\hat{q}, \hat{p})$ のように、 $\hat{q}, \hat{p}$ の関数として表される。よって交換する物理量の完全集合は $\hat{q}, \hat{p}$ からつくれば十分である。ただし、 $\hat{q}, \hat{p}$ は交換しないので、どちらか一方から構成する。ここではとりあえず $\hat{q}$ を選んでみよう。

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle \quad (2.104)$$

が成り立つ。だが、固有値は連続スペクトルなので、

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q - q') \quad (2.105)$$

と規格化する。このとき量子系を記述するヒルベルト空間は、

$$\mathcal{H} = \left\{ |\psi\rangle \mid |\psi\rangle = \int dq \psi(q) |q\rangle, \int dq |\psi(q)|^2 = \text{有限} \right\} \quad (2.106)$$

のように構成することができる。これは無限次元ヒルベルト空間に見える。だが、実際 $|q\rangle$ はヒルベルト空間の元になっていない。ただし、物理の計算では元であると見なしても基本的に大きな問題はない。これを見ると、

$$|\psi\rangle = \int dq \psi(q) |q\rangle \quad (2.107)$$

の用にベクトル $|\psi\rangle$ が基底 $|q\rangle$ を用いて関数 $\psi(q)$ により表示できている。このとき内積は、

$$\langle \psi | \psi' \rangle = \int dq \psi^*(q) \psi'(q) \quad (2.108)$$

となるので、 $|\psi\rangle$ と $\psi(q)$ が1対1に対応している。 $\mathcal{H}$ のどの元もノルムが有限なので、 $\psi(q)$ は絶対値の自乗が積分できそれが有限になる関数にかぎられる、つまり自乗可積分な関数でなければならないことがわかる。とくに $|\psi\rangle$ が状態ベクトルであるとき、 $\psi(q)$ は座標表示の波動関数にはかならない。Schrödinger 描像では状態ベクトルに時間発展を担わせるので、

$$|\psi(t)\rangle = \int dq \psi(q, t) |q\rangle \quad (2.109)$$

となる。このもとで演算子はどうなるだろうか。まず任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して、

$$\hat{q}|\psi\rangle = \int dq \psi(q) q |q\rangle \quad (2.110)$$

が成り立つ。つまり、ベクトル $\hat{q}|\psi\rangle$ は $q\psi(q)$ と表示されている。よって演算子 $\hat{q}$ を作用させることは単にベクトルを表示している $\psi(q)$ に q をかけることで表現できる。これと正準交換関係を満たすためには、運動量演算子 $\hat{p}$ は q がデカルト座標であるとき、

$$\hat{p}|\psi\rangle \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \psi(q) \quad (2.111)$$

と置き換えすればよい事がわかる。実際、

$$(\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q})|\psi\rangle \leftrightarrow q \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \psi(q) \right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \right) (q\psi(q)) = i\hbar \psi(q) \quad (2.112)$$

となり。確かに正準交換関係の右辺 $i\hbar$ を $|\psi\rangle$ に演算した $i\hbar|\psi\rangle$ が得られる。つまり、

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \leftrightarrow \left[q, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \right] = i\hbar \quad (2.113)$$

と対応している。またこのように表示された $\hat{p}$ は自己共役演算子である。以上のような方法論を Schrödinger 表現と呼ぶ。

以上のことを踏まえると結局 Schrödinger 表現では以下のように計算すればよいことがわかる。

$$\mathcal{H} = \left\{ \text{値が複素数で自乗可積分な関数} \psi(q) \text{の全体} \right\} \quad (2.114)$$

$$\langle \psi | \psi' \rangle = \int dq \psi^*(q) \psi'(q) \quad (2.115)$$

$$\text{波動関数} = \psi(q) \quad \left(\text{時刻} t \text{では} \psi(q, t) \right) \quad (2.116)$$

$$\hat{q} = q \quad (2.117)$$

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \quad (2.118)$$

$$\hat{A} = A \left(q, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \right) \quad (2.119)$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = A\left(q, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q) \quad (2.120)$$

とすると、期待値は、

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int dq \psi^*(q) A\left(q, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q) \quad (2.121)$$

という積分を計算すれば求められる。Schrödinger 方程式を Schrödinger 表現した、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q, t) = H\left(q, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q, t) \quad (2.122)$$

を初期条件 $\psi(q, 0)$ のもとで、解くと任意の時刻 t での $\psi(q, t)$ を求める事ができる。

例 2.3 1次元調和振動子の Schrödinger 表現

1次元調和振動子の Hamiltonian は、Schrödinger 表現すると、

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{m\omega^2}{2}q^2 \quad (2.123)$$

なので、Schrödinger 方程式は、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{m\omega^2}{2}q^2\right)\psi(q, t) \quad (2.124)$$

となる。これを用いて期待値を求める事などできる。

第3章 1粒子の量子論

ここからは第2章で述べたことを用いて1粒子の量子力学についてのべる。具体的には自由粒子について考えた後、量子力学のマクロな近似が Newton 力学と一致することをのべる。その後、1粒子にポテンシャルを加えてどう振る舞うか見てみる。そして、粒子の散乱について非相対論的量子力学での計算を試みる。

3.1 自由粒子のふるまい

では早速まず1次元自由粒子について考えてみよう。だがその前に少し一般論的なことを述べておく。まずポテンシャル $V(x)$ を受けた1次元粒子の Schrödinger 表現した Schrödinger 方程式は、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x, t) \quad (3.1)$$

である。以下 Schrödinger 表現した Schrödinger 方程式を何も言わずに Schrödinger 方程式と呼ぶことにする。2.5.2 で述べたように固有エネルギーとエネルギー固有値は非常に重要である。これらを求めるためには、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (3.2)$$

を満たすような実数 E と関数 $\varphi(x)$ を求めれば良い。このハミルトニアン固有値方程式のこ

とを時間に依存しない Schrödinger 方程式と呼んだりすることもある。この解は複数個ある可能性があるので、それらを区別するための添え字 $E_n, \varphi_{n,l}(x)$ を付けておこう。 l は縮退を区別するためのラベルである。これらを用いれば、Schrödinger 方程式の解は、初期状態が、

$$\psi(x, 0) = \varphi_{n,l}(x) \quad (3.3)$$

ならば、

$$\psi(x, t) = e^{-i\omega_n t} \varphi_{n,l}(x) \quad (3.4)$$

という定常状態である。初期条件を、

$$\psi(x, 0) = \sum_{n,l} \psi(n, l) \varphi_{n,l}(x) \quad (3.5)$$

と展開してやれば、任意の初期条件での解は、

$$\psi(x, t) = \sum_{n,l} e^{-i\omega_n t} \psi(n, l) \varphi_{n,l}(x) \quad (3.6)$$

である。

3.1.1 波動関数に対する条件について

Schrödinger 方程式は微分方程式なので、解を求めるには初期条件以外に条件が必要である。その条件は状況毎にことなる。だが、よく用いる条件を一応まとめておく。以下簡単のため 1 次元の場合をのべる。

(1) まず、

$$\int |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (3.7)$$

だが、物理の実際の計算では、自乗可積分とまでいかなくとも、

$$\int \psi_k^*(x, t) \psi_{k'}(x, t) dx = \delta(k - k') \quad (3.8)$$

のように状態を区別する適当な添え字 k についてデルタ関数による規格化を許すほうが楽である。なおこのように規格化したときの、 $|\psi_k(x, t)|^2$ は位置の測定をしたときの確率密度 $p(x, t)$ とは定数だけずれていると考えられるので、

$$p(x, t) \propto |\psi_k(x, t)|^2 \quad (3.9)$$

である。このずれた比例係数は x によらない。よって $|\psi_k(x, t)|^2 dx$ は位置の測定をしたときの確率の絶対値は与えないが、ある区間と他の区間の粒子を見つけ出す確率の比である、相対確率を与えていると考えられる。

(2) 次に、 $V(x)$ の値が有限なら $\psi(x, t)$ は x, t どちらについてもいたるところで連続である。

(3) $V(x)$ の値が有限なら $\psi(x, t)$ は x, t どちらについてもいたるところで微分可能

(4) もし $V(x)$ の値がある点で発散する場合、その点においては、 $\psi(x, t)$ もその微分も必ずしも連続でなくてもよい。物理的状況に応じてつなぎ方を決める。

(5) $V(x)$ が x の有限幅の区間内すべてで発散しているときはその区間内では常に $\psi(x, t) = 0$

でなければならない。

これらを考慮して、以下で1粒子について考えてみる。

3.1.2 1次元1自由粒子について

まず時間に依存しない Schrödinger 方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = E\varphi(x) \quad (3.10)$$

である。これは、

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) \quad (3.11)$$

なので、

$$\varphi_k(x) = Ne^{ikx} \quad (3.12)$$

とにおいて(3.12)に代入すると、

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (3.13)$$

であることがわかる。これを見ると E は k によるので、

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.14)$$

と書くことにする。これはエネルギー固有値を与える式である。 $|\varphi_k(x)|^2 = |N|^2$ なので、これを通常の意味での規格化をすることはできない。よって、 $\delta(k-k')$ を用いた規格化をする。すると、

$$\delta(k-k') = \frac{1}{2\pi} \int e^{i(k-k')x} dx \quad (3.15)$$

なので、

$$|N|^2 \int e^{i(k-k')x} dx = \frac{1}{2\pi} \int e^{i(k-k')x} dx \quad (3.16)$$

となるので、

$$|N|^2 = \frac{1}{2\pi} \quad (3.17)$$

$$N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (3.18)$$

である。よって、

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad (3.19)$$

となる。 k は $-\infty < k < \infty$ の任意の実数なので、 E_k は連続スペクトルとなる。 k の符号が反対の $-k$ のときの状態 $\varphi_{-k}(x)$ と $\varphi_k(x)$ は異なる関数であるが、エネルギー固有値は同じなので、 $k=0$ の時以外、すべて2重に縮退している。これで時間に依存しない Schrödinger 方程式

が解けたので、Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \quad (3.20)$$

の解はすぐに求めることができる。初期条件が、

$$\psi(x, 0) = \varphi_k(x) \quad (3.21)$$

のとき、一般解は、

$$\psi_k(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega_k t)} \quad (3.22)$$

である。ただし、 $\omega_k = E_k/\hbar$ とする。この状態について、粒子の位置を測定したとすると、

$$|\psi_k(x, t)|^2 = \frac{1}{2\pi} \quad (3.23)$$

なので、

$$P(a - \Delta, a + \Delta] \propto \frac{\Delta}{\pi} \quad (3.24)$$

となることが分かる。これは相対確率である。なぜ相対確率しか分からないかというと、計算のためデルタ関数で規格化したからである。右辺は x に依らないので、粒子を見出す確率はどこでも同じであることがわかる。これは後で述べる粒子の位置が完全に不確定な $\delta x \rightarrow \infty$ という状態であることを示している。

次に運動量演算子に対して $\varphi_k(x)$ がどう振る舞うか見てみよう。

$$\hat{p}\varphi_k(x) = -i\hbar \frac{d\varphi_k(x)}{dx} = k\hbar\varphi_k(x) \quad (3.25)$$

なので $\varphi_k(x)$ は運動量の固有状態で

$$p = k\hbar \quad (3.26)$$

という固有値を持つことがわかる。

ここで突然だが、全く同じ状態 $|\psi\rangle$ を用意して物理量 A を独立に N 回測定するということを考えよう。測定値の平均値を $\langle A \rangle$ として、

$$\Delta A \equiv A - \langle A \rangle \quad (3.27)$$

を考えよう。これは測定値を平均値だけシフトした量である。この量のばらつきを調べる。

この量自体の平均は、 $\langle \Delta A \rangle = 0$ なので、自乗の平均値、

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (3.28)$$

を考える。これはばらつきの大きさをあらわす最もわかりやすい量である。これを A の分散という。分散は自乗してから平均した量なので、実際のばらつきの大きさは、

$$\delta A \equiv \sqrt{\langle (\Delta A)^2 \rangle} \quad (3.29)$$

の程度である。これを標準偏差という。分散だと単位がずれるが、標準偏差だとずれない。

量子論では物理量の分散や標準偏差をゆらぎや不確定さと呼ぶ。この値を予言するには、

$$\langle(\Delta A)^2\rangle = \begin{cases} \int (a - \langle A \rangle)^2 p(a) da & (l \text{ が連続変数の場合}) \\ \sum_a (a - \langle A \rangle)^2 P(a) & (l \text{ も離散変数の場合}) \end{cases} \quad (3.30)$$

を用いたりする。これを変形すれば、

$$\Delta \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle A \rangle \hat{1} \quad (3.31)$$

として、

$$\langle(\Delta A)^2\rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | (\Delta \hat{A})^2 | \psi \rangle \quad (3.32)$$

$$\langle(\Delta A)^2\rangle = \langle \psi | (\hat{A})^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2 \quad (3.33)$$

などと書けることがわかる。ある状態における物理量 A の測定値が全くばらつかず常に同じ値のとき、物理量 A が確定している状態とよび、そうでない場合 A が揺らいでいる状態と呼ぶ。また、実は以下のことが成り立つ。

$|\psi\rangle$ が物理量 A を表す演算子 $\hat{A}$ の固有値の1つに属する固有状態ならば、 $|\psi\rangle$ は A がその値に確定している状態であり、逆に $|\psi\rangle$ で物理量 A が確定している状態ならば $|\psi\rangle$ は A を表す演算子 $\hat{A}$ の固有状態である。

つぎに先程のゆらぎに関する面白い性質を紹介する。それは、

自己共役演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ が $[\hat{A}, \hat{B}] = ik$ (k は実数の定数)を満たすとする、任意の状態 $|\psi\rangle$ について、

$$\delta A \delta B \geq \frac{|k|}{2} \quad (3.34)$$

が成り立つ。つまり、 $\Delta \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle A \rangle \hat{1}$, $\Delta \hat{B} \equiv \hat{B} - \langle B \rangle \hat{1}$ としたとき、

$$\langle \psi | (\Delta \hat{A})^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta \hat{B})^2 | \psi \rangle \geq \frac{k^2}{4} \quad (3.35)$$

が成り立つ。

位置を表す演算子 $\hat{x}$ と $\hat{p}$ は、

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (3.36)$$

が成り立つので、上の性質より、

$$\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.37)$$

という関係が成り立つことがわかる。これを見ると以下のようなことがわかる。

- (1) 位置と運動量の両方が確定した状態はありえない。
- (2) もし、位置が確定している、すなわち $\delta x = 0$ のとき、運動量が全く不確定になってしまう。これは古典力学とは相容れない。
- (3) 位置の不確定性は最低でも $\frac{\hbar}{2\delta p}$ はある。

これを不確定性原理などと呼んだりする。ただ、ここで注意しなければならないのは、この不確定性は測定誤差などではない。本質的に不確定であるというのが上の主張である。先程

の $\varphi_k(x)$ の話に戻ろう。 $\varphi_k(x)$ は運動量の固有状態であった。よって運動量が確定している。つまり、位置が全く不確定になっていたのだ、だから位置について相対確率しか考えることができなかったのである。また、

$$[\hat{H}, \hat{p}] = 0 \quad (3.38)$$

が成り立っているので、 $\varphi_k(x)$ はエネルギー、運動量両方の固有状態になっているのである。なお、先程までの関係式を用いると、

$$E_k = \frac{p^2}{2m} \quad (3.39)$$

であることがわかる。これは古典論の自由粒子と一致している。 $\varphi_k(x)$ の実部 $\cos(kx)/\sqrt{2\pi}$ も虚部 $\sin(kx)/\sqrt{2\pi}$ も波数が k で波長が、

$$\lambda = \frac{2\pi}{|k|} = \frac{h}{|p|} \quad (3.40)$$

の波の形をしている。つまり、運動量が p の粒子の状態の、Schrödinger 表示の波動関数は波数 $k = p/\hbar$ 、波長が $\lambda = h/p$ の波になっている。この λ をド・ブロイ波長と呼ぶ。

3.1.3 3次元1自由粒子について

先程までは、1次元の1粒子について考えてきたが、ここでは3次元の1粒子について考えてみる。3次元の自由粒子の古典的なHamiltonianは運動量を $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ とすると、

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (3.41)$$

であるので、量子力学でのHamiltonianは、

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (3.42)$$

であるので、時間に依存しないSchrödinger方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\mathbf{x}) = E \varphi(\mathbf{x}) \quad (3.43)$$

である。ただし、 $\mathbf{x} = (x, y, z)$ をまとめて書いた。

$\varphi(\mathbf{x}) = \varphi_x(x)\varphi_y(y)\varphi_z(z)$ とおいて上式()に代入すると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 \varphi_x}{dx^2} \varphi_y \varphi_z + \frac{d^2 \varphi_y}{dy^2} \varphi_x \varphi_z + \frac{d^2 \varphi_z}{dz^2} \varphi_x \varphi_y \right) = E \varphi_x \varphi_y \varphi_z \quad (3.44)$$

よって、

$$\frac{\frac{d^2 \varphi_x}{dx^2}}{\varphi_x} + \frac{\frac{d^2 \varphi_y}{dy^2}}{\varphi_y} + \frac{\frac{d^2 \varphi_z}{dz^2}}{\varphi_z} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \quad (3.45)$$

右辺は定数で、左辺の各項は独立している。よって、仮に y, z を固定したときもこの式は成り立たなければならない。このとき、右辺は定数なので、左辺第一項も定数でなければならない。同様の考察より、右辺の全ての項が定数である。よって、適当な定数を用いて、

$$\frac{\frac{d^2\varphi_x}{dx^2}}{\varphi_x} = \kappa_x^2 \quad (3.46)$$

$$\frac{\frac{d^2\varphi_y}{dy^2}}{\varphi_y} = \kappa_y^2 \quad (3.47)$$

$$\frac{\frac{d^2\varphi_z}{dz^2}}{\varphi_z} = \kappa_z^2 \quad (3.48)$$

と置くことができる。これらは2階線形同次微分方程式なので、解くと、

$$\varphi_x(x) = Ae^{\kappa_x x} + Be^{-\kappa_x x} \quad (3.49)$$

$$\varphi_y(y) = Ce^{\kappa_y y} + De^{-\kappa_y y} \quad (3.50)$$

$$\varphi_z(z) = Fe^{\kappa_z z} + Ge^{-\kappa_z z} \quad (3.51)$$

のように、定数の不定性をのぞいて、一般解が求まる。あとは、考えたい系に応じた境界条件を課してやればよい。

3.1.4 3次元の箱に閉じ込められた自由粒子

3.1.3 で論じた一般論を適用して、3次元の箱の中に閉じ込められた自由粒子の波動関数がどうなるか、見てみよう。次のような状況を考える。原点 O から x 軸方向の長さが a 、 y 軸方向に長さ b 、 z 軸方向に長さ c の箱の中に自由粒子が閉じ込められているという条件を考えよう。このとき $\varphi(\mathbf{x})$ は次の境界条件を満たさなければならない。

$$\begin{cases} \varphi_x(0) = \varphi_x(a) = 0 \\ \varphi_y(0) = \varphi_y(b) = 0 \\ \varphi_z(0) = \varphi_z(c) = 0 \end{cases} \quad (3.52)$$

ここで x 軸方向について考えよう。先程の式、

$$\frac{\frac{d^2\varphi_x}{dx^2}}{\varphi_x} = \kappa_x^2 \quad (3.53)$$

の κ_x^2 が正の実数と仮定してみよう。このとき、一般解は、

$$\varphi_x(x) = Ae^{\kappa_x x} + Be^{-\kappa_x x} \quad (3.54)$$

であるが、境界条件より、

$$\varphi_x(x) = Ae^{\kappa_x x} - Ae^{-\kappa_x x} \quad (3.55)$$

となるが、これは $x=0$ のとき以外に0になることがないので $\varphi_x(a)=0$ を満たすことができない。よって除外する。定数が0のときは境界条件を満たそうとすると粒子が存在しないことになるのでこの場合も除外しよう。では、

$$\kappa_x^2 = -k_x^2 \quad (3.56)$$

のように定数が負である場合を考えようこのとき、

$$\frac{d^2\varphi_x}{dx^2} = -k_x^2\varphi_x \quad (3.57)$$

がなりたち、一般解は

$$\varphi_x(x) = A \sin(k_x x) + B \cos(k_x x) \quad (3.58)$$

$\varphi_x(0) = 0$ より、 $B = 0$ である。また $\varphi_x(a) = 0$ より、

$$k_x a = \pi n_x \quad (3.59)$$

$$k_x = \frac{\pi n_x}{a} \quad (3.60)$$

である。ただしここで、 n_x は適当な正の整数である。 A を決めるためには規格化条件、

$$\int \varphi(x) d\mathbf{x} = \int_0^a |\varphi_x(x)|^2 dx \int_0^b |\varphi_y(y)|^2 dy \int_0^c |\varphi_z(z)|^2 dz = 1 \quad (3.61)$$

を用いる。今考えている状況では、 x, y, z のどれか一方を特別扱いするのはおかしいので、それぞれの積分が1になると考えられる。よって、

$$\int_0^a |\varphi_x(x)|^2 dx = |A|^2 \int_0^a \sin^2(k_x x) dx = \frac{a}{2} |A|^2 = 1 \quad (3.62)$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (3.63)$$

なので、

$$\varphi_x(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n_x}{a} x\right) \quad (n_x = 1, 2, 3, \dots) \quad (3.64)$$

であることがわかる。 y, z 方向も同様なので、

$$\frac{d^2\varphi_y}{dy^2} = -k_y^2\varphi_y \quad (3.65)$$

$$\frac{d^2\varphi_z}{dz^2} = -k_z^2\varphi_z \quad (3.66)$$

が成り立ち、先程と同様に解くと、

$$C = \sqrt{\frac{2}{b}} \quad F = \sqrt{\frac{2}{c}} \quad (3.67)$$

$$\varphi_y(y) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{\pi n_y}{b} y\right) \quad (n_y = 1, 2, 3, \dots) \quad (3.68)$$

$$\varphi_z(z) = \sqrt{\frac{2}{c}} \sin\left(\frac{\pi n_z}{c} z\right) \quad (n_z = 1, 2, 3, \dots) \quad (3.69)$$

となる。よって、

$$\varphi(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{\pi n_x}{a} x\right) \sin\left(\frac{\pi n_y}{b} y\right) \sin\left(\frac{\pi n_z}{c} z\right) \quad (3.70)$$

これが求めるエネルギー固有関数である。エネルギー固有値は、

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left(\frac{\pi n_x}{a} \right)^2 + \left(\frac{\pi n_y}{b} \right)^2 + \left(\frac{\pi n_z}{c} \right)^2 \right) \quad (3.71)$$

である。 $\varphi(\mathbf{x})$ も E も (n_x, n_y, n_z) の組できまる。よって、 $\varphi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{x})$ 、 $E_{n_x n_y n_z}$ の用を書くことにする。ここまで計算したことによって色々面白いことがわかる。まずエネルギーが離散的である。これは古典力学ではあり得ない性質である。さらに、 $E_{n_x n_y n_z}$ が最小となるのは、

$$n_x = n_y = n_z = 1 \quad (3.72)$$

のときである。このとき、 $E_{n_x n_y n_z}$ は0ではない。これは驚くべき事である。古典論ではエネルギーがゼロになることがあり得る。だが、量子論になると必ずしもそうは言えないのである。許される定常状態の中でエネルギーが最低のものを基底状態という。今考えている粒子は自由粒子なのでポテンシャルを受けていない。よってこの最小のエネルギーは運動エネルギーに相当する。これは古典論的に言えば常に動き続けているということである。このような運動をゼロ点運動と呼んだりする。また、箱の長さの一部が同じ時エネルギーが縮退する。最小のエネルギーは小さな箱に閉じ込めるとより顕著にわかる。この最小エネルギーは質量が小さい粒子を狭い範囲に閉じ込めると大きくなることがわかる。方程式を変数分離した時点で予想はついていたが、やはり解(3.70)もそれぞれの方向に独立に振動していることが分かる。さらに狭い範囲に閉じ込めると波動関数の振幅が大きくなる。これは、狭い範囲に閉じ込めると位置がだんだん確定した状態になってゆき、運動量の不確定性が大きくなるからかもしれない。

3.1.5 筒の中の粒子

先程の箱から壁を取った、原点 O から y 軸方向に長さ b 、 z 軸方向に長さ c の筒の中に自由粒子が閉じ込められているという条件を考えよう。このとき境界条件は、

$$\begin{cases} \varphi_y(0) = \varphi_y(b) = 0 \\ \varphi_z(0) = \varphi_z(c) = 0 \end{cases} \quad (3.73)$$

3.1.4と同様に y 軸方向、 z 軸方向について解くと、

$$\varphi_y(y) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{\pi n_y}{b} y\right) \quad (3.74)$$

$$\varphi_z(z) = \sqrt{\frac{2}{c}} \sin\left(\frac{\pi n_z}{c} z\right) \quad (3.75)$$

となる。規格化は、

$$\int \varphi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_x(x)|^2 dx \int_0^b |\varphi_y(y)|^2 dy \int_0^c |\varphi_z(z)|^2 dz = \delta(k_x - k'_x) \quad (3.76)$$

のようにする。 x 軸方向は、

$$\frac{d^2 \varphi_x}{dx^2} = \kappa_x^2 \varphi_x \quad (3.77)$$

なので、このとき、一般解は、

$$\varphi_x(x) = Ae^{\kappa_x x} + Be^{-\kappa_x x} \quad (3.78)$$

$x > 0$ のとき、 $x \rightarrow +\infty$ とすると上式の第一項は発散してしまうので、

$$\varphi_x(x) = Be^{-\kappa_x x} \quad (3.79)$$

$x < 0$ のとき、 $x \rightarrow -\infty$ とすると上式の第二項が発散してしまうので、

$$\varphi_x(x) = Ae^{\kappa_x x} \quad (3.80)$$

$x = 0$ での値が一致してほしいので、

$$A = B \quad (3.81)$$

である。先程上で挙げたように、デルタ関数で規格化するためには、

$$\kappa_x = ik_x \quad (3.82)$$

のような形の定数でなければならないので、

$$\varphi_x(x) = \begin{cases} Ae^{-ik_x x} & (x \geq 0 \text{ のとき}) \\ Ae^{ik_x x} & (x \leq 0 \text{ のとき}) \end{cases} \quad (3.83)$$

となる。ただし k_x は実数である。規格化は、

$$\int |\varphi_x(x)|^2 dx = |A|^2 \int e^{-i(k_x - k'_x)x} dx = \delta(k_x - k'_x) \quad (3.84)$$

より、

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (3.85)$$

となる。よって、 x 方向の波動関数は、

$$\varphi_x(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ik_x x} & (x \geq 0 \text{ のとき}) \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_x x} & (x \leq 0 \text{ のとき}) \end{cases} \quad (3.86)$$

となる。よって、

$$\varphi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\pi bc}} e^{-ik_x x} \sin\left(\frac{\pi n_y}{b} y\right) \sin\left(\frac{\pi n_z}{c} z\right) & (x \geq 0 \text{ のとき}) \\ \sqrt{\frac{2}{\pi bc}} e^{ik_x x} \sin\left(\frac{\pi n_y}{b} y\right) \sin\left(\frac{\pi n_z}{c} z\right) & (x \leq 0 \text{ のとき}) \end{cases} \quad (3.87)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k_x^2 + \left(\frac{\pi n_y}{b}\right)^2 + \left(\frac{\pi n_z}{c}\right)^2 \right) \quad (3.88)$$

となることが分かる。(3.87)は(3.70)と違って、 x 軸方向の運動量の固有関数である。だが、他の方向については(3.70)と同様に運動量は確定していないことがわかる。これは考えてみれば当たり前のように感じる。なぜなら、(3.70)ではどの方向もある範囲内に粒子が存在するような状況だったのである。種位置については若干確定している。よって、運動量が確定していることはありえない。(3.87)では x 軸方向については位置が全く不確定なので、不確定性関係より運動量が確定していると考えられるからである。ここまでの考察より筒や箱の中の波動関数は、どれもそれぞれの方向に独立に振動したり、波になっていたりして、それらの積が波動関数となっている。こうしたことが成り立つのは、時間に依存しない Schrödinger 方程式が線形の微分方程式だったことにより、変数分離ができたからだと考える。もし、仮に時間に依存しない Schrödinger 方程式が非線形だったならこんなに綺麗に解くことはできなかっただろう。さらに、どちらもエネルギーが最小でも有限の値をもつことがわかる。

3.2 波束の運動

3.2.1 古典力学と量子力学の対応

ここからは古典力学と量子力学の対応について考えよう。広い空間における粒子が古典力学の法則に従うのは量子力学的にはどう説明されるのだろうか。ここからは波束状態と呼ばれる位置も運動量もどちらもある程度確定している状態について考える。また位置に関して巨視的な測定を行う場合を考えよう。この場合、 10^{-2} mm程度の誤差は許容される。これに対する運動量の誤差を見積もると、

$$\delta p \sim \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\delta x} \sim 1.05 \times 10^{-29} \text{ J} \cdot \text{s/m}$$

これは非常に小さいので無視して良いだろう。つまり、波束はほとんど広がらず進むと考えて良いだろう。今考えている状況では、粒子の位置は完全に確定していないので、粒子の位置の期待値について考えよう。期待値は、

$$\bar{\mathbf{r}} = \iiint \psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \quad (3.89)$$

である。ここで、 $d\mathbf{r} \equiv dx dy dz$ である。まず、

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \bar{x} &= \frac{d}{dt} \iiint \psi^* x \psi \, d\mathbf{r} \\
&= \iiint \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} x \psi + \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{3.90}$$

について考えてみよう。Schrödinger 方程式より、

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H\psi \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} H\psi^* \tag{3.91}$$

が成り立つので、

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \bar{x} &= \iiint \left(\left(-\frac{1}{i\hbar} H\psi^* \right) x \psi + \psi^* x \left(\frac{1}{i\hbar} H\psi \right) \right) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{i\hbar} \iiint (\psi^* x (H\psi) - (H\psi^*) x \psi) \, d\mathbf{r} \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \iiint (\psi^* x \nabla^2 \psi - (\nabla^2 \psi^*) x \psi) \, d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{3.92}$$

である。また、

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} (x\psi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = 2 \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \tag{3.93}$$

$$x \nabla^2 \psi = \nabla^2 (x\psi) - 2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \tag{3.94}$$

$$\psi^* x \nabla^2 \psi = \psi^* \nabla^2 (x\psi) - 2\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \tag{3.95}$$

が成り立つので、

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \bar{x} &= \frac{i\hbar}{2m} \iiint (\psi^* \nabla^2 (x\psi) - (\nabla^2 \psi^*) x \psi) \, d\mathbf{r} + \frac{1}{m} \iiint \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \, d\mathbf{r} \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \iiint \nabla \cdot (\psi^* \nabla (x\psi) - (\nabla \psi^*) x \psi) \, d\mathbf{r} + \frac{1}{m} \iiint \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \, d\mathbf{r} \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \iint (\psi^* \nabla (x\psi) - (\nabla \psi^*) x \psi) \, d\mathbf{S} + \iiint \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \, d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{m} \iiint \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \, d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{3.96}$$

である。上式の第 3 式の積分の第 1 項は積分領域が無限だが、波束はある程度局在しているので、0になる。よって、

$$m \frac{d}{dt} \bar{x} = \iiint \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \, d\mathbf{r} \tag{3.97}$$

が成り立つ。もう一度時間微分すると、

$$\begin{aligned}
m \frac{d^2}{dt^2} \bar{x} &= -i\hbar \iiint \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) d\mathbf{r} \\
&= \iiint \left((H\psi^*) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (H\psi) \right) d\mathbf{r} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \iiint \left((\nabla^2 \psi^*) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (\nabla^2 \psi) \right) d\mathbf{r} + \iiint \left((V\psi^*) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (V\psi) \right) d\mathbf{r} \\
&= \iiint \psi^* \left(-\frac{\partial V}{\partial x} \right) \psi d\mathbf{r}
\end{aligned}$$

が成り立つ。よって、

$$m \frac{d^2}{dt^2} \bar{x} = \iiint \psi^* \left(-\frac{\partial V}{\partial x} \right) \psi d\mathbf{r} \quad (3.98)$$

が成り立つ。 $-\frac{\partial V}{\partial x}$ は粒子に働く力の x 成分であるから、上式の右辺は力の x 成分の期待値である。もし力が巨視的な力で、ポテンシャルの変化が小さければ、ポテンシャルを一定と見なして良い。つまり、

$$-\frac{\partial V}{\partial x} = F_x(\mathbf{r}) \quad (3.99)$$

を積分の外に出してもよい。積分の外に出すと、

$$m \frac{d^2}{dt^2} \bar{x} = F_x(\mathbf{r}) \quad (3.100)$$

が成り立つ。他の方向成分も同様なので、まとめて書くと、

$$m \frac{d^2}{dt^2} \bar{\mathbf{r}} = \mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad (3.101)$$

が成り立つ。これは古典的な力を受けた粒子の運動方程式と同じである。よって、粒子の位置の測定で、ある程度の誤差を許容すれば、粒子の運動はその誤差程度の広がりを持った確率の波の波束で表され、その波束の重心(位置の期待値)は古典力学に従うことがわかる。

3.2.2 波束状態について

1次元自由粒子を表す波

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad (3.102)$$

の k がわずかに異なるような $\varphi_{k'}(x)$ を重ね合わせた

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{l^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(\left[-\frac{l^2}{2} (k' - k)^2 \right] \right) \varphi_{k'}(x) dk' \quad (3.103)$$

という波束を考える。 l は長さの次元を持つ定数である。上の式の積分を実行すると、

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{1}{\pi l^2} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left(ikx - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{l} \right)^2 \right) \quad (3.104)$$

となる。これをガウス波束と呼んだりする。このガウス波束は規格化されている。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = \frac{1}{\sqrt{\pi l^2}} \sqrt{\pi l^2} = 1 \quad (3.105)$$

この状態における運動量と位置の期待値を計算すると、

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi l^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar}{i} \left(ik - \frac{x}{l^2} \right) \exp \left(-\frac{x^2}{l^2} \right) dx \\ &= \frac{\hbar k}{\sqrt{\pi l^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-\frac{x^2}{l^2} \right) dx = \hbar k \end{aligned} \quad (3.106)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi l^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp \left(-\frac{x^2}{l^2} \right) dx = 0 \quad (3.107)$$

となる。ゆらぎを計算すると、

$$\begin{aligned} \langle (\Delta p)^2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi l^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-ikx - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{l} \right)^2 \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \hbar k \right)^2 \exp \left(ikx - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{l} \right)^2 \right) dx \\ &= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi l^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-ikx - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{l} \right)^2 \right) \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \hbar k \right) \exp \left(ikx - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{l} \right)^2 \right) \right) dx - \hbar^2 k^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi l^2}} \left(ik \int_{-\infty}^{+\infty} \left(ik - \frac{x}{l^2} \right) \exp \left(-\frac{x^2}{l^2} \right) dx \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{l^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-ikx - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{l} \right)^2 \right) \frac{\partial}{\partial x} \left(x \exp \left(ikx - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{l} \right)^2 \right) \right) dx \right) - \hbar^2 k^2 \\ &= \frac{1}{l^2} \frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi l^2}} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-\frac{x^2}{l^2} \right) dx \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-ikx - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{l} \right)^2 \right) x \left(ik - \frac{x}{l^2} \right) \exp \left(ikx - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{l} \right)^2 \right) dx \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{l^2} + \frac{1}{l^2} \frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi l^2}} \left(-\frac{1}{l^2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp \left(-\frac{x^2}{l^2} \right) dx \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2l^2} \end{aligned}$$

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2l^2} \quad (3.108)$$

より、

$$\delta p = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2l^2}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}l} \quad (3.109)$$

である。

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi l^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp\left(-\left(\frac{x}{l}\right)^2\right) dx = \frac{l^2}{2} \quad (3.110)$$

より、位置の揺らぎは、

$$\delta x = \sqrt{\frac{l^2}{2}} = \frac{l}{\sqrt{2}} \quad (3.111)$$

であることがわかる。このとき、 $\delta x \delta p = \frac{\hbar}{2}$ が成り立っているので、これは不確定性関係をギリギリ満たしている最小不確定状態であることが分かる。また、

$$\frac{1}{l} \ll |k| \quad (3.112)$$

つまり、

$$\frac{1}{|k|} \ll l \quad (3.113)$$

なので、

$$\frac{2\pi}{|k|} = \lambda \ll l \quad (3.114)$$

を満たすように l を選ぶと、 $\delta p \ll |p|$ となり相対的には、運動量の不確定さはすごく小さい。よって、これは運動量も位置もかなり確定しているような状態である。もし、波束状態に関して位置や運動量を測定するとき、測定誤差が、ゆらぎより大きいと古典粒子との違いが余り目立たなくなる。よって、やはり、波束が古典的な粒子に対応するものだと考えられる。

3.2.3 波束の時間発展

突然だが自由空間での平面波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$ について考えてみよう。Hamiltonian が、

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (3.115)$$

のとき、平面波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ は Hamiltonian の固有関数で、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.116)$$

$E = \hbar\omega$ なので、

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (3.117)$$

よって波の位相速度 v_p は、

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} \quad (3.118)$$

である。これは古典粒子の速度に一致しない。では古典粒子の速度と対応する量は何なのであろうか。実はそれは波の群速度である。波数 $k = k_m$ の時の波の群速度は、

$$v_g = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_m} \quad (3.119)$$

で表される。先程の平面波の群速度は、

$$v_g = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_m} = \frac{\hbar k_m}{m} = \frac{p_m}{m} \quad (3.120)$$

$p_m = \hbar k_m$ とした。これは古典粒子の速度と一致している。よって、量子力学における波束がやはり古典力学でいう粒子に対応していることがわかる。次に波束がどのように時間発展するか考えよう。いま、

$$f(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left(ik_0 x - \frac{\alpha}{2} x^2 \right) \quad (3.121)$$

という関数を考えよう。この関数のフーリエ変換は、

$$\begin{aligned} F(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-i(k - k_0)x - \frac{\alpha}{2} x^2 \right) dx \\ &= \left(\frac{1}{\pi\alpha} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left(-\frac{1}{2\alpha} (k - k_0)^2 \right) \end{aligned} \quad (3.122)$$

なので、

$$f(x) = \left(\frac{1}{4\pi^3\alpha} \right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-\frac{1}{2\alpha} (k - k_0)^2 \right) e^{ikx} dk \quad (3.123)$$

と書くことができる。また、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx = 1 \quad (3.124)$$

が成り立つ。今外力が働かない自由空間を考える。初期条件、

$$\psi(x, 0) = f(x) \quad (3.125)$$

のとき $\psi(x, t)$ はどのように振る舞うだろうか。

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k, t) e^{ikx} dk \quad (3.126)$$

において、Schrödinger 方程式に代入すると、

$$i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} C(k, t) e^{ikx} dk = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} C(k, t) k^2 e^{ikx} dk \quad (3.127)$$

となる。よって、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C(k, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} C(k, t) \quad (3.128)$$

がなりたち、

$$C(k, t) = C(k_0) \exp \left(-i \frac{\hbar k^2}{2m} t \right) \quad (3.129)$$

であることがわかる。 $t = 0$ のとき、

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k, t) e^{ikx} dk \quad (3.130)$$

と

$$f(x) = \left(\frac{1}{4\pi^3\alpha} \right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\alpha}(k - k_0)^2\right) e^{ikx} dk \quad (3.131)$$

が一致するので、

$$C(k_0) = \left(\frac{1}{4\pi^3\alpha} \right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{1}{2\alpha}(k - k_0)^2\right) \quad (3.132)$$

である。よって、

$$\psi(x, t) = \left(\frac{1}{4\pi^3\alpha} \right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\alpha}(k - k_0)^2\right) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (3.133)$$

であることがわかる。ここで、

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (3.134)$$

であり、波数 k の角振動数である。上式の積分を実行するために指数の中身を整理すると、

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2\alpha}(k - k_0)^2 + ikx - i\frac{\hbar t}{2m}k^2 \\ &= -\left(\frac{1}{2\alpha} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)k^2 + \left(\frac{k_0}{\alpha} + ix\right)k - \frac{k_0^2}{2\alpha} \\ &= -\left(\frac{1}{2\alpha} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)\left(k^2 - \left(\frac{k_0}{\alpha} + ix\right)/\left(\frac{1}{2\alpha} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)k\right) - \frac{k_0^2}{2\alpha} \\ &= -\left(\frac{1}{2\alpha} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)\left(k^2 - \frac{2mk_0}{m + i\alpha\hbar t}k\right) + ikx - \frac{k_0^2}{2\alpha} \\ &= -\left(\frac{1}{2\alpha} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)\left(k - \frac{mk_0}{m + i\alpha\hbar t}\right)^2 + ikx + \frac{1}{2\alpha}\frac{mk_0^2}{m + i\alpha\hbar t} - \frac{k_0^2}{2\alpha} \\ &= -\left(\frac{1}{2\alpha} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)\left(k - \frac{mk_0}{m + i\alpha\hbar t}\right)^2 + ikx - \frac{ik_0^2\hbar t}{2(m + i\alpha\hbar t)} \\ &= -\left(\frac{1}{2\alpha} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)\left(k - \frac{mk_0}{m + i\alpha\hbar t}\right)^2 + i\left(k - \frac{mk_0}{m + i\alpha\hbar t}\right)x + i\frac{2mk_0x - \hbar k_0^2t}{2(m + i\alpha\hbar t)} \\ &= -\left(\frac{1}{2\alpha} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)\kappa^2 + ix\kappa + i\frac{2mk_0x - \hbar k_0^2t}{2(m + i\alpha\hbar t)} \end{aligned} \quad (3.135)$$

となる。ただし、

$$\kappa = k - \frac{mk_0}{m + i\alpha\hbar t} \quad (3.136)$$

とした。これをもちいて積分を実行すると、

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\left(\frac{1}{2\alpha} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)\kappa^2 + ix\kappa + i\frac{2mk_0x - \hbar k_0^2 t}{2(m + i\alpha\hbar t)}\right) d\kappa \\
&= \left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{m + i\alpha\hbar t}{2\alpha m}\left(\kappa^2 - \frac{2iamx\kappa}{m + i\alpha\hbar t}\right) + i\frac{2mk_0x - \hbar k_0^2 t}{2(m + i\alpha\hbar t)}\right) d\kappa \\
&= \left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{m + i\alpha\hbar t}{2\alpha m}\left(\kappa - \frac{iamx}{m + i\alpha\hbar t}\right)^2 + \frac{-\alpha mx^2 + 2mik_0x - i\hbar k_0^2 t}{2(m + i\alpha\hbar t)}\right) d\kappa \\
&= \left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{m + i\alpha\hbar t}{2\alpha m}\left(\kappa - \frac{iamx}{m + i\alpha\hbar t}\right)^2 + \frac{-\frac{1}{2}\alpha mx^2 + ik_0x - i\frac{\hbar k_0^2}{2m}t}{1 + i\frac{\alpha\hbar}{m}t}\right) d\kappa \\
&= \left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{m + i\alpha\hbar t}{2\alpha m}}} \exp\left(\frac{-\frac{1}{2}\alpha mx^2 + ik_0x - i\frac{\hbar k_0^2}{2m}t}{1 + i\frac{\alpha\hbar}{m}t}\right) \\
&= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{1 + i\xi t}} \exp\left(\frac{-\frac{1}{2}\alpha mx^2 + ik_0x - i\frac{\hbar k_0^2}{2m}t}{1 + i\xi t}\right) \\
\psi(x, t) &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{1 + i\xi t}} \exp\left(\frac{-\frac{1}{2}\alpha x^2 + ik_0x - i\frac{\hbar k_0^2}{2m}t}{1 + i\xi t}\right) \tag{3.137}
\end{aligned}$$

となる。ただし、

$$\xi = \frac{\alpha\hbar}{m} \tag{3.138}$$

とした。 $|\psi(x, t)|^2$ を計算すると、

$$|\psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{\frac{\alpha}{\pi}}{1 + \xi^2 t^2}} \exp\left(\frac{-\alpha\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{1 + \xi^2 t^2}\right) \tag{3.139}$$

となり、これは

$$x = \frac{\hbar k_0}{m}t \tag{3.140}$$

で最大値を持つガウス関数である。そしてこの関数の値が最大値の e^{-1} 倍になる2つの x の間の幅は、

$$2\sqrt{\frac{1 + \xi^2 t^2}{\alpha}} = 2\sqrt{\frac{1 + \left(\frac{\alpha\hbar}{m}\right)^2 t^2}{\alpha}} \tag{3.141}$$

である。これは時間がたてば、増大する。よってこの波束は規格化されたまま、一定速度 $\frac{\hbar k_0}{m}$ で動き、幅が広がっていくものであることがわかる。また、 α が大きいほど幅が広がりやす

いことがわかる。 α を大きくとるとというのは最初の幅を小さくとるということに対応し、位置の不確定性を小さくとることなので、相対的に運動量の不確定性が増大する。そして、それはいろいろな位相速度の波を重ね合わせることに対応するので、時間がたつと波の足並みがそろわず波束が崩壊する。 $m \rightarrow \infty$ の極限を取ると、(3.137)は時間的に変化しなくなる。つまり、波の位相が時間に依らなくなる。よって、波束がある位置に止まっているようにみえる。また、このとき $|\psi(x, t)|^2$ は

$$|\psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \exp(-\alpha x^2) \quad (3.142)$$

となるので、波束は原点付近にいて、そこから離れると指数関数的に減少することがわかる。これは古典的な粒子がある位置に静止して存在しているようである。これらを踏まえると m は古典的な粒子の質量に対応していることがわかる。

3.3 井戸型ポテンシャル（有限の深さ）

今から次のようなポテンシャルを受けた1次元粒子について考えよう。

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & (x \leq -a) \\ 0 & (-a < x < a) \\ V_0 & (x \geq a) \end{cases} \quad (3.143)$$

これは有限の高さの井戸型のポテンシャルである。また粒子のエネルギーは、

$$0 < E < V_0 \quad (3.144)$$

を満たすとする。ここではエネルギー固有状態について考えよう。まず、 $-a < x < a$ の時のSchrödinger方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = E \varphi(x) \quad (3.145)$$

なので、

$$\varphi(x) = e^{ikx} \quad (3.146)$$

とおくと、

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.147)$$

であり、井戸の中での波動関数は、

$$\varphi_{in}(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (3.148)$$

である。

$|x| \geq a$ のとき、波動関数は、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right) \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (3.149)$$

なので、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = (E - V_0)\varphi(x) \quad (3.150)$$

がなりたち、よって、

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)\varphi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)\varphi(x) \quad (3.151)$$

であり、

$$\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) = \kappa^2 \quad (3.152)$$

とすると、一般解は、

$$\varphi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \quad (3.153)$$

であることがわかる。 $x \leq -a$ のとき $x \rightarrow -\infty$ に近づけると上式の右辺第2項は発散するので、

$$D = 0 \quad (3.154)$$

である。同様に $x \geq a$ のとき、

$$C = 0 \quad (3.155)$$

である。よって、井戸の外での波動関数 $\varphi_{out}(x)$ は、

$$\varphi_{out}(x) = \begin{cases} Ce^{\kappa x} & (x \leq -a) \\ De^{-\kappa x} & (x \geq a) \end{cases} \quad (3.156)$$

であることがわかる。あとは境界条件を課して、 A, B, C, D, k, κ を求めれば良い。境界条件は、

$$\begin{cases} \varphi_{in}(\pm a) = \varphi_{out}(\pm a) \\ \frac{d}{dx} \varphi_{in}(\pm a) = \frac{d}{dx} \varphi_{out}(\pm a) \end{cases} \quad (3.157)$$

である。 $\varphi_{in}(\pm a) = \varphi_{out}(\pm a)$ より、

$$A \sin(ka) + B \cos(ka) = De^{-\kappa a} \quad (3.158)$$

$$-A \sin(ka) + B \cos(ka) = Ce^{-\kappa a} \quad (3.159)$$

$\frac{d}{dx} \varphi_{in}(\pm a) = \frac{d}{dx} \varphi_{out}(\pm a)$ より、

$$Ak \cos(ka) - Bk \sin(ka) = -D\kappa e^{-\kappa a} \quad (3.160)$$

$$Ak \cos(ka) + Bk \sin(ka) = C\kappa e^{-\kappa a} \quad (3.161)$$

(3.158)と(3.159)を足し合わせると、

$$2B \cos(ka) = De^{-\kappa a} + Ce^{-\kappa a} \quad (3.162)$$

がなりたつ。 $B = 0 \Rightarrow C = -D$ と $A = 0 \Rightarrow C = D$ が成り立つので、自明解 $A = B = C = D = 0$ を除けば、 $C = -D$ と $C = D$ は両立しないので、先程の2つの場合で場合分けすればよい。まず $B = 0$ のとき、波動関数は、

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ce^{\kappa x} & (x \leq -a) \\ A \sin(kx) & (-a < x < a) \\ -Ce^{-\kappa x} & (x \geq a) \end{cases} \quad (3.163)$$

である。よって、境界条件は、

$$A \sin(ka) = -C e^{-\kappa a} \quad (3.164)$$

$$Ak \cos(ka) = C \kappa e^{-\kappa a} \quad (3.165)$$

となる。(3.164)を(3.165)で割ると、

$$\frac{1}{k} \tan(ka) = -\frac{1}{\kappa} \quad (3.166)$$

なので、

$$\tan(ka) = -\frac{k}{\kappa} \quad (3.167)$$

がなりたつ。また、

$$k^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (3.168)$$

もなりたち、

$$\alpha = ka \quad \beta = \kappa a \quad (3.169)$$

とすると、

$$\tan(\alpha) = -\frac{\alpha}{\beta} \quad \alpha^2 + \beta^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 \quad (3.170)$$

を満たすような α, β を求めればよい。だがこれは解析的に解くのが難しい。だが、 $\alpha\beta$ 平面内で上式たちを図示し、その交点の個数を考える、すなわち解の個数を議論することはできる。この方法を実践すると、

$$\frac{(2n-1)}{2} \pi \leq \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \leq \frac{(2n+1)}{2} \pi \quad (3.171)$$

のとき、解が n 個存在することがわかる。次に、 $A = 0$ のとき波動関数は、

$$\varphi(x) = \begin{cases} C e^{\kappa x} & (x \leq -a) \\ A \sin(kx) & (-a < x < a) \\ C e^{-\kappa x} & (x \geq a) \end{cases} \quad (3.172)$$

となり、境界条件は、

$$B \cos(ka) = C e^{-\kappa a} \quad (3.173)$$

$$Bk \sin(ka) = C \kappa e^{-\kappa a} \quad (3.174)$$

となる。(3.174)を(3.173)でわると、

$$k \tan(ka) = \kappa \quad (3.175)$$

がなりたつので、先程と同様に考えると、

$$\alpha \tan(\alpha) = \beta \quad \alpha^2 + \beta^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 \quad (3.176)$$

である。これらを図示し、解の個数を考えると、

$$(n' - 1)\pi \leq \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \leq n'\pi \quad (3.177)$$

のとき、解は n' 個存在することがわかる。これらのことよりおもしろいことがわかる。まず、粒子のエネルギーがポテンシャルより小さいはずなのに壁を波動関数が染み出ている。これは波動関数の染みだしなどといって量子力学におけるおもしろい結果の一つである。また、井戸の幅に対応する a を小さくしていくと、 $\tan(\alpha) = -\frac{\alpha}{\beta}$ や $\alpha \tan(\alpha) = \beta$ と $\alpha^2 + \beta^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2$ の交点の数が減っていく。 $\alpha \tan(\alpha) = \beta$ の場合はどんなに a が小さくても最低でも一つは交点が存在する。 $V_0 \rightarrow \infty$ にした場合、波動関数の連続性より、染みだしが無くなることもわかる。

3.4 1次元調和振動子について

ここからは1次元調和振動子のエネルギー固有状態について考える。まず、古典論におけるHamiltonianは、

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (3.178)$$

である。 ω は古典的な振動の角周波数である。これを次のように変形してみよう。

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\ &= \frac{1}{2}m\omega^2 \left(x^2 + \frac{p^2}{\omega^2 m^2} \right) = \hbar\omega \frac{m\omega}{2\hbar} \left(x + \frac{i}{m\omega} p \right) \left(x - \frac{i}{m\omega} p \right) \end{aligned} \quad (3.179)$$

これを正準量子化するために、次の演算子を定義する。

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \quad (3.180)$$

$$\hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \quad (3.181)$$

この演算子は自己共役ではない。また、この演算子の交換関係は、

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (3.182)$$

である。これらを用いれば、

$$\hat{H} = \hbar\omega \hat{a} \hat{a}^\dagger \quad (3.183)$$

と書けるような気がする。だが、演算子は掛ける順番によって結果が変わってしまうのであらためて、 $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ を計算すると、

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{m\omega}{2\hbar} \left(\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{\omega^2 m^2} \right) - \frac{1}{2} \quad (3.184)$$

となることから、

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.185)$$

であることがわかる。また、

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad (3.186)$$

$$\hat{p} = -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (3.187)$$

と表せるので、この系のすべての物理量が $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ で表すことができる。この書き換えは自己共役演算子 $\hat{x}, \hat{p}$ を基本変数として表していた理論を、まったく等価な自己共役ではない演算子 $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ を基本変数として表すことである。

$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ として、 $\hat{N}$ の固有値を n 、固有ベクトルを $|n\rangle$ とする。すると、

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \quad (3.188)$$

が成り立つ。また、

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \quad (3.189)$$

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad (3.190)$$

が成り立つ。よって、 $\hat{N}$ は $\hat{x}, \hat{p}$ どちらとも交換せず、 $\hat{N}$ と交換するのは $\hat{N}$ の関数だけなので、交換する物理量の完全集合として、 $\hat{N}$ を採用することができる。よって、

$$\mathcal{H} = \left\{ |\psi\rangle \mid |\psi\rangle = \sum_n \psi(n)|n\rangle, \sum_n |\psi(n)|^2 = \text{有限} \right\} \quad (3.191)$$

のようにとればよい。次に、

$$n = \langle n | \hat{N} | n \rangle = \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle = \|\hat{a}|n\rangle\|^2 \geq 0 \quad (3.192)$$

なので、固有値 n は、

$$n \geq 0 \quad (3.193)$$

を満たすことがわかる。また、

$$\hat{N}(\hat{a}|n\rangle) = \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}|n\rangle = (\hat{a} \hat{a}^\dagger - 1)|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle \quad (3.194)$$

が成り立つので、 $\hat{a}|n\rangle$ が固有値 $n-1$ に属する固有ベクトル $|n-1\rangle$ であることがわかる。だが、定数倍の違いがあるかも知れないので、

$$\hat{a}|n\rangle = c_1 |n-1\rangle \quad (3.195)$$

のように置くと、

$$|c_1|^2 = n \quad (3.196)$$

より、

$$c_1 = \sqrt{n} \quad (3.197)$$

であることがわかるので、

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (3.198)$$

がなりたつ。これは $\hat{a}$ が n を1減らす演算子であることを示している。よって、 $\hat{a}$ は消滅演算子と呼ばれることもある。 $n \geq 0$ であるためには、 n は0以上の整数でなければならない。次に $\hat{a}^\dagger$ について考えてみよう。

$$\hat{N}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) = \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger|n\rangle = \hat{a}^\dagger(1 + \hat{a}^\dagger \hat{a})|n\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle \quad (3.199)$$

なので先程と同様の考察より、

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = c_2|n+1\rangle \quad (3.200)$$

とおくと、

$$|c_2|^2 = n+1 \quad (3.201)$$

なので、

$$c_2 = \sqrt{n+1} \quad (3.202)$$

であることがわかる。よって、

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (3.203)$$

が成り立つ。 $\hat{a}^\dagger$ は n を1増やすので、生成演算子と呼ばれる。以上のことから、 $\hat{N}$ の固有値は全ての0以上の整数であることがわかった。これらから、ただちにエネルギー固有状態は、 $|n\rangle$ であることがわかり、エネルギー固有値は、

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (3.204)$$

であり、等間隔で量子化されていることがわかる。特に面白いのはやはり基底状態 $|0\rangle$ である。このときのエネルギーは、

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (3.205)$$

である。つまり、最小のエネルギーは0ではない。

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad (3.206)$$

を座標表示してみよう。

$$\varphi_n(x) \equiv \langle x|n\rangle \quad (3.207)$$

とすると、

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_0(x) = 0 \quad (3.208)$$

と表すことができ、解は A を適当な定数として、

$$\varphi_0(x) = A \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (3.209)$$

であることがすぐに分かる。よって、任意の n での $\varphi_n(x)$ は、

$$\varphi_n(x) = \frac{A}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\right)^n \left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (3.210)$$

と表すことができる。よって、 $\varphi_0(x)$ さえ分かればその先の解も求めることができる。

3.5 粒子の散乱

ここからは粒子が無限遠方から飛んできて、何らかのポテンシャルを受けて散乱されるような運動について考える。

3.5.1 トンネル効果

まず次のようなポテンシャルの山に、粒子を入射したときどうなるか考える。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0, a < x) \\ V_0 & (0 \leq x \leq a) \end{cases} \quad (3.211)$$

これは幅 a 高さ V_0 の壁に粒子を打ち込むことに対応する。これを考える場合波束で計算するべきだが、このような散乱の実験を行う際、は粒子のエネルギーと運動方向は殆ど確定しているので、不確定性原理より位置の不確定性はかなり大きな値をもつ。よって、平面波だと見なして計算しても問題は無い。またこのような実験では、粒子を1つだけ送り込むということではなく、続けていくつも打ち込むので、1つの粒子が、 $-x$ 方向から登場し、 x 方向に飛んでいくのがずっと続いている定常状態だと考えてもよい。よって、

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = V_0 - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \quad (3.212)$$

として、Schrödinger 方程式は、

$$E\varphi(x) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} & (x < 0, a < x) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0\right)\varphi(x) & (0 \leq x \leq a) \end{cases} \quad (3.213)$$

となり、この微分方程式の解は、入射波の振幅を1だとして、

$$\varphi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx} & (x < 0) \\ Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} & (0 \leq x \leq a) \\ te^{ikx} & (x \geq a) \end{cases} \quad (3.214)$$

となることがわかる。ただし、 r, A, B, t は適当な定数である。また、 $x < 0$ のとき、入射波とポテンシャルに当たって反射された反射波の両方が存在するとし、 $x \geq a$ のときは透過した波だけを考えた。あとは境界条件を用いて定数を決めれば良い。境界条件は、

$$1 + r = A + B \quad (3.215)$$

$$Ae^{\kappa a} + Be^{-\kappa a} = te^{ika} \quad (3.216)$$

$$ik - ikr = \kappa(A - B) \quad (3.217)$$

$$\kappa(Ae^{\kappa a} - Be^{-\kappa a}) = i\kappa te^{ika} \quad (3.218)$$

なので、 $\beta = \frac{\kappa}{k}$ として、(3.215) + (3.217)、(3.216) - (3.218)より、

$$2 = (1 - \beta i)A + (1 + \beta i)B \quad (3.219)$$

$$0 = (1 + \beta i)Ae^{\kappa a} + (1 - \beta i)Be^{-\kappa a} \quad (3.220)$$

がなりたち、これらより、

$$B = -\frac{1+\beta i}{1-\beta i} A e^{2\kappa a} \quad (3.221)$$

である。よって、

$$A = \frac{-(1-\beta i)e^{-\kappa a}}{2\beta i \cosh(\kappa a) + (1-\beta^2) \sinh(\kappa a)} \quad (3.222)$$

$$B = \frac{(1+\beta i)e^{\kappa a}}{2\beta i \cosh(\kappa a) + (1-\beta^2) \sinh(\kappa a)} \quad (3.223)$$

であり、

$$\begin{aligned} r &= A + B - 1 \\ &= \frac{2\beta i \cosh(\kappa a) + 2\sinh(\kappa a)}{2\beta i \cosh(\kappa a) + (1-\beta^2) \sinh(\kappa a)} - 1 \\ &= \frac{2\sinh(\kappa a) - (1-\beta^2) \sinh(\kappa a)}{2\beta i \cosh(\kappa a) + (1-\beta^2) \sinh(\kappa a)} \\ &= \frac{(1+\beta^2) \sinh(\kappa a)}{2\beta i \cosh(\kappa a) + (1-\beta^2) \sinh(\kappa a)} \end{aligned}$$

より、

$$r = \frac{(1+\beta^2) \sinh(\kappa a)}{2\beta i \cosh(\kappa a) + (1-\beta^2) \sinh(\kappa a)} \quad (3.224)$$

$$t = \frac{2\beta i}{2\beta i \cosh(\kappa a) + (1-\beta^2) \sinh(\kappa a)} e^{-ikx} \quad (3.225)$$

であることがわかる。ここで突然だが、次のものを考える。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(x, t)|^2 &= \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^* \psi \\ &= \frac{1}{i\hbar} (\psi^* H \psi - (H \psi)^* \psi) \\ &= -\frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* \right) \psi \right) \\ &= -\frac{\hbar}{2im} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \psi \right) \end{aligned}$$

よって、

$$j(x, t) \equiv \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \psi \right) \quad \rho(x, t) \equiv |\psi(x, t)|^2 \quad (3.226)$$

とすると、

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0 \quad (3.227)$$

という電磁気学などでも見る連続の式を導くことができる。これを積分してみると、

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t) dx = j(x_2, t) - j(x_1, t) \quad (3.228)$$

となる。これを見ると単位時間当たりの確率の変化は $j(x, t)$ という確率の流れのようなものの差で表されることがわかる。そしてこれは局所的な確率の保存を表している。つまり、確率がどこからか突然現れたり、消えたりすることがないということである。3次元の場合は、

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi) \quad \rho(\mathbf{r}, t) \equiv |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (3.229)$$

とすれば、同様に

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (3.230)$$

が成り立つ。ここで先程の問題に戻ろう。入射波だけを見たときの確率の流れは、

$$j_{\text{in}} = \frac{\hbar k}{m} \quad (3.231)$$

であり、反射波だけを見たときの確率の流れは、

$$j_{\text{r}} = -|r|^2 \frac{\hbar k}{m} \quad (3.232)$$

である。そして、壁を透過した波だけを見たときの確率の流れは、

$$j_{\text{t}} = |t|^2 \frac{\hbar k}{m} \quad (3.233)$$

である。ここで、

$$\begin{aligned} T &= \frac{|j_{\text{t}}|}{|j_{\text{in}}|} = |t|^2 \\ &= \frac{4\beta^2}{(1+\beta^2)^2 \sinh^2(\kappa a) + 4\beta^2} = \frac{4k^2 \kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa a) + 4k^2 \kappa^2} \\ &= \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2(\kappa a) + 4E(V_0 - E)} \end{aligned} \quad (3.234)$$

とすると、これは粒子が透過する確率と解釈できる。また、同様に

$$\begin{aligned} R &= \frac{|j_{\text{r}}|}{|j_{\text{in}}|} = |r|^2 \\ &= \frac{(1+\beta^2)^2 \sinh^2(\kappa a)}{(1+\beta^2)^2 \sinh^2(\kappa a) + 4\beta^2} = \frac{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa a)}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa a) + 4k^2 \kappa^2} \\ &= \frac{V_0^2 \sinh^2(\kappa a)}{V_0^2 \sinh^2(\kappa a) + 4E(V_0 - E)} \end{aligned} \quad (3.235)$$

は粒子が反射する確率だと捉えることができる。当然反射する確率と透過する確率の和は、

$$T + R = 1$$

を満たしている。ここで面白いのは、粒子のエネルギーはポテンシャルより小さいはずなのに、壁をすり抜ける有限の確率があることである。このような現象をトンネル効果と呼んだりする。また、 $V_0 \rightarrow 0$ という壁の高さを0に近づけるような極限のもとで、透過確率 T は1になり、反射確率は0となる。これは当然の結果である。逆に V_0 をどんどん大きくしていくと透過確率が小さくなっていき、反射確率が大きくなっていく。また、壁のあつさを0に近づけるような極限 $a \rightarrow 0$ のもとでも透過確率は1になり、反射確率は0になった。逆に壁を厚くしていくと透過確率は小さくなっていく。

3.5.2 ボルン近似

次は3次元の問題を考えよう。今局所的に存在するポテンシャル $V(\mathbf{r})$ に $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ のエネルギーを持った波 $e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}$ を入射することを考える。解くべき方程式は先程と同様の理由で、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (3.236)$$

であるが、ポテンシャルの影響を受けた散乱波と入射波を、

$$\varphi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} + g(\mathbf{r}) \quad (3.237)$$

のように分けて考えよう。これを Schrödinger 方程式に代入すると、

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + k_0^2) - V(\mathbf{r}) \right) g(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \quad (3.238)$$

である。ここで、 $V(\mathbf{r})$ が小さく散乱波も小さいとする近似を行うと $V(\mathbf{r})g(\mathbf{r})$ の項は無視できて、

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + k_0^2) g(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \quad (3.239)$$

となる。この方程式を今からグリーン関数を用いて解くことにする。一般に線形演算子 $\hat{L}$ と既知の関数 $f(\mathbf{r})$ に対して、次の式が成り立つ $h(\mathbf{r})$ を求める問題を考える。

$$\hat{L}h(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \quad (3.240)$$

ここでもし、適切な境界条件のもと

$$\hat{L}G(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z) \quad (3.241)$$

を満たす関数 $G(\mathbf{r})$ が存在すれば、

$$h(\mathbf{r}) = \iiint f(\mathbf{r}') G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (3.242)$$

と解くことができる。これを(3.239)を解くことに応用する。 $|\mathbf{r}| = r$ として、

$$G(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik_0 r}}{r} \quad (3.243)$$

とするとこれは実は、

$$(\nabla^2 + k_0^2)G(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r}) \quad (3.244)$$

を満たす。今からこれを示す。まず $\mathbf{r} \neq \mathbf{0}$ に対して、

$$\nabla^2 \frac{e^{ik_0 r}}{r} = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \Lambda \right) \frac{e^{ik_0 r}}{r} = -k_0^2 \frac{e^{ik_0 r}}{r} \quad (3.245)$$

が成り立ち、よって、

$$(\nabla^2 + k_0^2)G(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.246)$$

である。ただし、

$$\Lambda = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos(\theta)}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (3.247)$$

とした。あとはこれを全空間積分して1になることを示せば良い。

$$\begin{aligned} \iiint_{\text{全空間}} (\nabla^2 + k_0^2)G(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= -\frac{1}{4\pi} \iiint_{\text{全空間}} (\nabla^2 + k_0^2) \frac{e^{ik_0 r}}{r} d\mathbf{r} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \iiint_V (\nabla^2 + k_0^2) \frac{e^{ik_0 r}}{r} d\mathbf{r} \end{aligned}$$

ここで、被積分関数は原点以外で0なので、微小な半径 R の球の中で積分し、その後半径を0

に近づければよい。 V は微小球の内部をあらわす。また、 $\frac{e^{ik_0 r}}{r}$ は r が微小なとき、

$$\begin{aligned} \frac{e^{ik_0 r}}{r} &= \frac{1}{r} \left(1 + ik_0 r + \frac{1}{2!} (ik_0)^2 r^2 + \frac{1}{3!} (ik_0)^3 r^3 + \dots \right) \\ &\approx \frac{1}{r} \end{aligned} \quad (3.248)$$

の用に近似することができる。つまり、

$$\frac{e^{ik_0 r}}{r} \approx \frac{1}{r} \quad (3.249)$$

とする。よって、

$$\begin{aligned} -\frac{1}{4\pi} \iiint_V (\nabla^2 + k_0^2) \frac{1}{r} d\mathbf{r} &= -\frac{1}{4\pi} \iiint_V \nabla \cdot \left(\nabla \frac{1}{r} \right) d\mathbf{r} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_S \left(\nabla \frac{1}{r} \right) \cdot \mathbf{n} dS \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_S -\frac{1}{r^2} dS \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{R^2} \cdot 4\pi R^2 = 1 \end{aligned}$$

が成り立ち、きちんと1になることが確認できた。ただし S は球面上を表す。以上より、

$$(\nabla^2 + k_0^2)G(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r}) \quad (3.250)$$

であることが確かめられた。よって、

$$g(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \iiint \frac{e^{ik_0 |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') e^{ik_0 \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \quad (3.251)$$

であることがわかる。今、散乱の中心は原点にあって $V(\mathbf{r}')$ が0でないのは $\mathbf{r}'$ その近くに限られている。よって、 $g(\mathbf{r})$ を観測する点 $\mathbf{r}$ が離れている、つまり、 $|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}'|$ とすると、

$$\begin{aligned} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| &= \sqrt{(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = r \sqrt{1 - \frac{2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2}} \\ &\approx r \sqrt{1 - \frac{2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2}} \approx r \left(1 - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} \right) \end{aligned} \quad (3.252)$$

なので、

$$\begin{aligned} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| &\approx r \left(1 - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} \right) \\ ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| &\approx ik_0 \left(r - \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \mathbf{r}' \right) \\ \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} &\approx \frac{1}{r} \end{aligned} \quad (3.253)$$

として、 $g(\mathbf{r})$ を書き換えると、

$$g(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \iiint \frac{e^{ik_0(r - \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \mathbf{r}')}}{r} V(\mathbf{r}') e^{ik_0 \mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \quad (3.254)$$

となり、

$$\mathbf{k}' = k_0 \frac{\mathbf{r}}{r} \quad \frac{\mathbf{r}}{r} = \mathbf{n} \quad (3.255)$$

とおくと、

$$g(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_0 r}}{r} \iiint e^{i(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (3.256)$$

となる。これをよく見ると r に依存する部分と、その方向、つまり3次元極座標における θ, ϕ に依存する部分に分離することができている。なので、

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \iiint e^{i(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (3.257)$$

とおくと、

$$g(\mathbf{r}) = g(r, \theta, \phi) = \frac{e^{ik_0 r}}{r} f(\theta, \phi) \quad (3.258)$$

となる。ここで θ は散乱角と呼ばれ、 $\mathbf{r}$ と $\mathbf{k}_0$ が成す角度である。 $\frac{e^{ik_0 r}}{r}$ は球の形で等方的に広がる球面波なので、微小な立体角 $d\Omega$ の方向だけみると平面波として近似し、 $f(\theta, \phi)$ を一定として扱ってよい。ここで、 r 方向の確率の流れは、

$$\begin{aligned}
j_r &= \frac{\hbar}{2im} \left(g^* \frac{\partial}{\partial r} g - \left(\frac{\partial}{\partial r} g^* \right) g \right) \\
&= \frac{\hbar}{2im} \left(\frac{e^{-ik_0 r}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{e^{ik_0 r}}{r} \right) - \left(\frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ik_0 r}}{r} \right) \frac{e^{ik_0 r}}{r} \right) |f(\theta, \phi)|^2 \\
&= \frac{\hbar k_0}{mr^2} |f(\theta, \phi)|^2 = \frac{j_{\text{in}}}{r^2} |f(\theta, \phi)|^2
\end{aligned} \tag{3.259}$$

である。これが、ある位置におかれた検出器で単位面積、単位時間あたりに粒子を検出する確率である。これを半径 r 上の球面 S で、面積分したものが、単位時間あたりの流量である。それは、

$$\begin{aligned}
I &= \int_S \mathbf{j}_r \cdot \mathbf{n} dS \\
&= \int_S j_r dS = \iint \frac{j_{\text{in}}}{r^2} |f(\theta, \phi)|^2 r^2 \sin(\theta) d\theta d\phi \\
&= j_{\text{in}} \iint |f(\theta, \phi)|^2 \sin(\theta) d\theta d\phi
\end{aligned} \tag{3.260}$$

j_{in} は単位時間、単位面積あたりの流量なので、

$$\iint |f(\theta, \phi)|^2 \sin(\theta) d\theta d\phi \tag{3.261}$$

は面積の次元を持っていて、散乱断面積と呼ばれる。

$$\sigma(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi)|^2 \tag{3.262}$$

とし、(3.261)を立体角で微分すると、

$$\sigma(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \iiint e^{i(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right|^2 \tag{3.263}$$

となり、これは微分断面積と呼ばれる。

3.5.3 ラザフォード散乱について

先程のボルン近似を用いて次の散乱を考えてみよう。原子核(質量 ∞ 電荷 Z)に電荷 e 質量 m の粒子を打ってそれはどのように散乱するだろうか。このような散乱をラザフォード散乱あるいはクーロン散乱と呼んだりする。原子核が作るポテンシャルは、

$$V(\mathbf{r}) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \tag{3.264}$$

のようなクーロンポテンシャルである。ただ、これをそのまま考えると発散してしまうので、次のような遮蔽されたクーロンポテンシャルと呼ばれるものを考え、

$$V(\mathbf{r}) = C \frac{e^{-\alpha r}}{r} \quad C = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \tag{3.265}$$

あとで $\alpha \rightarrow 0$ とすればよい。ただし α は適当な定数である。

$$I \equiv \iiint e^{i(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (3.266)$$

を計算するためには $\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'$ の方向を基準軸にとった3次元極座標を用いれば良い。

$$\begin{aligned} (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}' &= |\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'| r' \cos(\theta) \\ d\mathbf{r}' &= r'^2 dr' \sin(\theta) d\theta d\phi \end{aligned}$$

なので、

$$\begin{aligned} I &= 2\pi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dr' V(r') e^{i|\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'| r' \cos(\theta)} \sin(\theta) r'^2 \\ &= 2\pi \int_{-1}^1 d\beta \int_0^\infty dr' V(r') e^{i|\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'| r' \beta} r'^2 \\ &= \frac{2\pi}{i|\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'|} \int_0^\infty dr' V(r') r' (e^{i|\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'| r'} - e^{-i|\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'| r'}) \\ &= \frac{4\pi C}{|\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'|} \int_0^\infty dr' e^{-\alpha r'} \sin(|\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'| r') \\ &= \frac{4\pi C}{|\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'|} \frac{|\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'|}{\alpha^2 + |\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'|^2} = \frac{4\pi C}{\alpha^2 + |\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'|^2} \end{aligned}$$

よって、

$$I = \frac{4\pi C}{\alpha^2 + |\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'|^2} \quad (3.267)$$

であることがわかる。ゆえに、

$$f(\theta) = -\frac{2mC}{\hbar^2} \frac{1}{\alpha^2 + |\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'|^2} \quad (3.268)$$

である。また、

$$|\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'| = 2k_0 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (3.269)$$

であるので、 $\alpha \rightarrow 0$ とすれば、

$$f(\theta) = -\frac{2mC}{\hbar^2} \frac{1}{4k_0^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} = -\frac{C}{2mv_0^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (3.270)$$

である。ただし、

$$k_0 = \frac{mv_0}{\hbar}$$

とした。ここで、 v_0 は始め遠方から飛んでくるときの速さである。以上より微分断面積は、

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{C}{mv_0^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} = \frac{1}{4} \left(\frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 mv_0^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (3.271)$$

となることがわかる。これは実は古典力学に基づいて計算した結果と一致する。これは θ が

0から π に動くとき減少し、 $\theta = \pi$ で最小、 θ が π から 2π を動くとき増加していく。つまり、散乱角が小さいほど微分断面積は大きくなる。これは非常に直感とよく合う結果である。また、原子核の電荷が大きいほどよく散乱されることもわかる。

第4章 特殊相対論について

ここからは特殊相対性理論についての話をするにすることにする。特殊相対性理論は光速に近いような速度を持った物体などを扱う理論である。この理論は現代物理学の基礎となっている非常に重要な理論である。本稿では軽く触れる程度に止まるが、非常に興味深い話題が多い学問でもある。

4.1 相対論での基本原理

4.1.1 Newton 力学について

まず特殊相対性理論の話をする前に、Newton 力学がどういったものだったかについて軽く触れておく。まず、Newton 力学では空間は三次元ユークリッド空間を考え、時間は絶対時間を用いて考えていた。ここでユークリッド空間は曲率が0の空間であり、一様で等方的である。また、絶対時間は空間とは独立に一様に流れている時間である。Newton 力学ではNewton の運動の3法則と力に関する法則(万有引力の法則など)からなる。Newton の運動の法則は以下のものである。

- (1). すべての物体は物体に働く力がないとき、物体は等速直線運動を行う。
- (2). 物体に力が働くと、それに比例する加速度をもつ。物体に働く力は物体のもつ運動量の変化に等しい。

$$m\mathbf{a} = \mathbf{F}$$

- (3). 物体Aが物体Bに力を及ぼすとき、物体Aは物体Bから同じ大きさで反対向きの力を受ける。

物体が運動状態を保ち続けようとする性質を慣性と呼ぶ。運動の第一法則は慣性の法則とよばれ、慣性の法則が成り立つ系を慣性系とよぶ。このような慣性系は無数に存在している。この性質はNewton 力学では、ガリレイの相対性原理として理解されている。ある慣性系 K での物体の位置を $\mathbf{x} = (x, y, z)$ とし、系 K に対して一定の速度 $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$ で並進移動している系 K' での位置を $\mathbf{x}' = (x', y', z')$ とすると、ガリレイ変換は、

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} - \mathbf{u}t$$

となる。ここで t は時間を表す。Newton 力学では、点 (x, y, z) と点 $(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z)$ の距離は、直交座標を用いると、

$$\Delta s^2 = (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2$$

と与えられる。この距離はガリレイ変換や空間回転に対して不変である。

4.1.2 光速度不変の原理と特殊相対性原理について

始めに数多の実験により任意の慣性系での真空中の光速 c は一定であることが分かっている。

だが、これはガリレイ変換と相容れない結果である。つまり、この光速が一定であることと矛盾しない慣性系から慣性系への変換則が必要である。それについてこれから考える。

まず、特殊相対性理論では次の2つの原理を起点として考える。

【光速不変の原理】 任意の慣性系において真空中の光の速度 c は一定である

【特殊相対性原理】 あらゆる慣性系で同じ物理法則が成り立つ。

これらの原理を考える特殊相対論では時間や距離(世界間隔)の定義が変更される。そして、考えるのは4次元ミンコフスキー時空と呼ばれる4次元空間上である。そこでは、ガリレイ変換不変性は後に述べるローレンツ変換に対しての不変性にとってかわる。そして特殊相対論は物体の速さを v とすると、 $\beta \equiv v/c$ が0の極限で Newton 力学に帰着される。特殊相対論では時空内の任意の点は $x^\mu = (ct, x, y, z)$ で表される。ここで $\mu = 0, 1, 2, 3$ である。時空のある領域の点に x^μ を割り振ったものが座標系である。ここでは、 $\{x^\mu\}$ のように表す。4次元ミンコフスキー時空上での点 x^μ と $x^\mu + dx^\mu$ の間の世界間隔の2乗は次のように定義される。

$$ds^2 \equiv c^2 dt^2 - (dx^2 + dy^2 + dz^2)$$

$$= \sum_{\mu, \nu=0}^3 \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = dx^\mu dx_\mu \quad (4.1)$$

最後の式変形では「同じギリシャ文字の添え字が上下に現れたら和の記号を省略する」というアインシュタインの縮約記法に従って Σ を省略した。本稿では以後特に断り無く縮約記法を用いる。また、 $\eta_{\mu\nu}$ は計量テンソルと呼ばれる2階のテンソルであり、行列で表示すると、

$$\eta_{\mu\nu} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

となる。光速不変の原理と空間と時間の等方性より、任意の慣性系での世界間隔の2乗は

$$ds^2 = ds'^2 \quad (4.3)$$

のように同じとなる。よって、世界間隔の2乗が不変に保たれるような慣性系から慣性系への変換則を見つけない。そのような、変換はローレンツ変換と並進がある。ローレンツ変換にはローレンツブースト、空間回転、時空間の反転の種類がある。空間回転とローレンツブーストを合わせて本義ローレンツ変換とよぶ。ローレンツブーストとは互いに等速直線運動している座標系の変換である。具体的には

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu \quad (4.4)$$

のように書かれる線形変換で、

$$\eta_{\mu\nu} \Lambda^\mu{}_\alpha \Lambda^\nu{}_\beta = \eta_{\alpha\beta} \quad (4.5)$$

という関係式を満たす。(4.5)はローレンツ変換のもとで、 ds^2 が不変に保たれるという性質と等価であり光速不変の原理の数学的表現でもある。また、(4.4)において、無限小変換を逐次行うことによって得られる変換を本義ローレンツ変換とよぶ。また、4次元時空座標が

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu \quad (4.6)$$

のように変換されたとき、

$$(\Lambda^{-1})^\rho{}_\mu \Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\rho{}_\nu \quad (4.7)$$

となるような $\Lambda^\mu{}_\nu$ の逆変換 $(\Lambda^{-1})^\rho{}_\mu$ を定義する。そうすると、 ds^2 が不変であるという要請から、

$$x_\mu \rightarrow x'_\mu = x_\rho (\Lambda^{-1})^\rho{}_\mu \quad (4.8)$$

のように変換されるべきである。これらからならって、

$$A^\mu \rightarrow A'^\mu = (\Lambda^\mu{}_\nu) A^\nu \quad (4.9)$$

のように変換する量を反変ベクトルとよぶ。また、

$$B_\mu \rightarrow B'_\mu = B_\nu (\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu \quad (4.10)$$

のように変換する量を共変ベクトルと呼ぶ。また、微分演算子は、

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right) \quad (4.11)$$

$$\partial^\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x}, -\frac{\partial}{\partial y}, -\frac{\partial}{\partial z} \right) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right) \quad (4.12)$$

のようになっている。

ここで、本義ローレンツ変換に関する具体例を挙げておく。

(1) x 軸方向のローレンツブースト

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} \cosh(\omega) & -\sinh(\omega) & 0 & 0 \\ -\sinh(\omega) & \cosh(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

ここで、角 ω と座標間の相対速度の大きさ v には

$$\sinh(\omega) = \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad \cosh(\omega) = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad (4.14)$$

のような関係がある。よって、

$$t' = \frac{t - \frac{v}{c^2}x}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \quad x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \quad y' = y \quad z' = z \quad (4.15)$$

と表すことができる。ここで $c \rightarrow \infty$ とすると、ガリレイ変換と一致することが分かる。

(2) x 軸周りでの空間回転

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ 0 & 0 & \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

なお θ は回転角である。これによって、

$$t' = t \quad x' = x \quad y' = \cos(\theta)y - \sin(\theta)z \quad z' = \sin(\theta)y + \cos(\theta)z \quad (4.17)$$

と変換されることがわかる。

$V^\mu(x)$ と $W_\mu(x)$ のスカラー積は次のように定義される。

$$C(x) \equiv V^\mu(x)W_\mu(x) \quad (4.18)$$

反変ベクトル $V^\nu(x)$ に $\eta_{\mu\nu}$ を掛けることにより共変ベクトル

$$V_\mu(x) = \eta_{\mu\nu}V^\nu(x) \quad (4.19)$$

を得ることができる。逆に共変ベクトルに $\eta^{\mu\nu}$ を掛けると反変ベクトル

$$V^\mu(x) = \eta^{\mu\nu}V_\nu(x) \quad (4.20)$$

を得ることができる。 $A^\mu = (A^0, \mathbf{A})$ に対して、

$$A_\mu = (A^0, -\mathbf{A}) \quad (4.21)$$

である。これらのスカラー積は、

$$A^2 = \eta_{\mu\nu}A^\mu A^\nu = A^\mu A_\mu \quad (4.22)$$

でありローレンツ不変量である。 $A^2 > 0$ のとき、 A^μ は時間的ベクトル、 $A^2 < 0$ であるとき、 A^μ の空間的ベクトル、 $A^2 = 0$ のとき光的ベクトルと呼ばれている。

4.2 相対論的力学

ここからは特殊相対論を力学に適用し静止質量 m の物体の運動について考える。4元ベクトルとして変換する、運動量に対応する4元運動量を、

$$p^\mu \equiv m \frac{dx^\mu}{d\tau} \quad (4.23)$$

$$p_\mu \equiv m \frac{dx_\mu}{d\tau} \quad (4.24)$$

のように定義する。 τ は固有時と呼ばれるローレンツ不変なパラメータであり、

$$d\tau^2 \equiv \frac{ds^2}{c^2} \quad (4.25)$$

と定義されている。また、

$$d\tau = \frac{1}{c} \sqrt{dx^\mu dx_\mu} = \sqrt{1 - \left(\frac{\mathbf{v}}{c}\right)^2} dt = \sqrt{1 - \beta^2} dt \quad (4.26)$$

が成り立つ。ここで、

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} \quad (4.27)$$

であり、 $\mathbf{v}$ は3次元速度である。また、

$$\frac{dx^\mu}{d\tau} \quad (4.28)$$

は4元速度である。4元運動量の大きさの2乗は、

$$p^2 = p^\mu p_\mu = m^2 \frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx_\mu}{d\tau} = m^2 c^2 \quad (4.29)$$

である。運動方程式に基づいて、

$$\frac{dp^\mu}{d\tau} = f^\mu \quad (4.30)$$

が成り立つとする。 $f^\mu = (f^0, \mathbf{f})$ は4元力である。 p^μ と f^μ には、

$$\frac{d}{d\tau}(p^\mu p_\mu) = 2f^\mu p_\mu = 0 \quad (4.31)$$

が成り立つ。(4.26)と(4.30)より、 $\mathbf{p}$ を三次元の運動量だとすると、

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{d\mathbf{p}}{d\tau} \frac{d\tau}{dt} = \mathbf{f} \sqrt{1 - \beta^2} \quad (4.32)$$

が成り立つので、 $\mathbf{F}$ を Newton 力学における力だとすると、

$$\mathbf{F} = \mathbf{f} \sqrt{1 - \beta^2} \quad (4.33)$$

と対応することが分かる。(4.31)より、

$$f^\mu \frac{dx_\mu}{d\tau} = 0 \quad (4.34)$$

が成り立つので、

$$f^0 \frac{dx_0}{d\tau} = \mathbf{f} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{d\tau} \quad (4.35)$$

であり、

$$f^0 \frac{dx_0}{d\tau} \frac{d\tau}{dt} = \mathbf{f} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{d\tau} \frac{d\tau}{dt} \quad (4.36)$$

である。よって、

$$f^0 c = \mathbf{F} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{d\tau} \quad (4.37)$$

なので、積分すると、

$$p^0 c = \int f^0 c d\tau = \int \mathbf{F} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{d\tau} d\tau = \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{x} \quad (4.38)$$

が導かれる。よって、エネルギーを E とすると、

$$E = p^0 c \quad (4.39)$$

であることがわかる。よって、4元運動量

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p} \right) \quad (4.40)$$

に対して、

$$p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2 \quad (4.41)$$

が成り立つので、

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (4.42)$$

が成り立つ。これを本稿では4元運動量の関係式と呼ぶことにする。この式は量子力学に相対論を適用するとき重要である。エネルギーを v, c を用いて書くと、

$$E = p^0 c = m \frac{dx^0}{d\tau} c = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}} = mc^2 + \frac{1}{2}mv^2 + \frac{3}{8}m\frac{v^4}{c^2} + O(\beta^6) \quad (4.43)$$

これからもし v が c に比べて小さいとき、

$$E = mc^2 \quad (4.44)$$

という非常に有名な式が導出される。また、

$$\mathbf{p} = m \frac{d\mathbf{x}}{d\tau} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad (4.45)$$

が成り立つ。これも非相対論的極限 $\beta \rightarrow 0$ のもとで Newton 力学での結果と一致する。また、自由粒子に関する運動方程式は、

$$m \frac{dp^\mu}{d\tau} = m \frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} = 0 \quad \frac{d}{dt} \mathbf{p} = \frac{d}{dt} \left(\frac{m \frac{d\mathbf{x}}{dt}}{\sqrt{1-\beta^2}} \right) \quad (4.46)$$

である。

4.3 電磁気学について

電磁気学を司る基礎方程式 Maxwell 方程式は、

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (4.47)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad (4.48)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (4.49)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{j} \quad (4.50)$$

という4本の式からなる。これとローレンツ力の式を合わせた5つの方程式で電磁気現象のすべてを記述している。これらはローレンツ変換のもとでどうなるのだろうか。実は Maxwell 方程式はローレンツ変換に対する不変性を持っている。これをいまから示してみる。ここで、 $\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)$, $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$, $\mathbf{D}$, $\mathbf{H}$, ρ , $\mathbf{j}$ はそれぞれ、電場、磁束密度、電束密度、磁場、電荷密度、電流密度である。(4.49)と(4.50)より、

$$\nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (4.51)$$

という電荷保存を表す連続の式が導出できる。ここで、 $j^\mu \equiv (c\rho, \mathbf{j})$ とすると、 j^μ は4元電流密度と呼ばれるベクトルで、連続の式は、

$$\frac{\partial j^\mu}{\partial x^\mu} = 0 \quad (4.52)$$

のように書き換えることができる。真空中では、

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (4.53)$$

と書くことができる。 ε_0 は真空の誘電率、 μ_0 は真空の透磁率である。

$$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \quad (4.54)$$

という関係もなりたつ。(4.47)より、

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (4.55)$$

と書き換えることができる。 $\mathbf{A}$ はベクトルポテンシャルである。(4.48)から、スカラーポテンシャル ϕ を用いて、

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \quad (4.56)$$

と表すことができる。(4.49)に(4.56)を代入すると、

$$-\nabla^2 \phi - \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{A}) = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (4.57)$$

両辺を c で割ると、

$$-\nabla^2 \frac{\phi}{c} - \frac{\partial}{\partial(ct)} (\nabla \cdot \mathbf{A}) = \frac{\rho}{\varepsilon_0 c} \quad (4.58)$$

であり、左辺に $\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$ を加えて変形すると、

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \left(\frac{\phi}{c} \right) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{\phi}{c} \right) - \frac{\partial}{\partial(ct)} (\nabla \cdot \mathbf{A}) = \frac{\rho}{\varepsilon_0 c} \quad (4.59)$$

が成り立ち、

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \left(\frac{\phi}{c} \right) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi}{c} \right) - \nabla \cdot \mathbf{A} \right) = \mu_0 c \rho \quad (4.60)$$

となる。(4.50)に(4.55)と(4.56)を代入すると、

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \right) = \mathbf{j} \quad (4.61)$$

なので、

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{A} - \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \right) = \mathbf{j} \quad (4.62)$$

となり、先程と同様の操作を行うと、

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A} + \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \phi) = \mu_0 \mathbf{j} \quad (4.63)$$

となるので、

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A} + \nabla \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi}{c} \right) + \nabla \cdot \mathbf{A} \right) = \mu_0 \mathbf{j} \quad (4.64)$$

が成り立つ。ここで、

$$A^\mu \equiv \left(\frac{\phi}{c}, \mathbf{A} \right) \quad A_\mu \equiv \left(\frac{\phi}{c}, -\mathbf{A} \right) \quad (4.65)$$

とすると、

$$\partial^\mu \partial_\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \quad (4.66)$$

なので、(4.60)と(4.64)は、

$$\partial^\kappa \partial_\kappa A^\mu - \partial^\mu \partial_\nu A^\nu = \mu_0 j^\mu \quad (4.67)$$

のようにまとめることができる。これを変形すると、

$$\partial_\mu (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) = \mu_0 j^\nu \quad (4.68)$$

となり、

$$F^{\mu\nu} \equiv \begin{pmatrix} 0 & -E_x/c & -E_y/c & -E_z/c \\ E_x/c & 0 & -B_z & B_y \\ E_y/c & B_z & 0 & -B_x \\ E_z/c & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \quad (4.69)$$

とすると、

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu \quad (4.70)$$

のように非常に美しくまとめることができる。この式は明らかにローレンツ変換のもとで共変な形の方方程式である。 $F^{\mu\nu}$ は場の強さと呼ばれることがある。また、ローレンツ変換のもとで、

$$F'^{\mu\nu}(x') = \Lambda^\mu{}_\alpha \Lambda^\nu{}_\beta F^{\alpha\beta}(x) \quad (4.71)$$

のように2階の反変テンソルとして変換する。

第5章 量子力学と特殊相対性理論の両立

第4章で特殊相対性理論について述べた。そこでは、力学や電磁気学について述べたが、量子力学については述べなかった。ここからは、特殊相対論を量子力学に適用することを考える。ここから先の内容は、ほとんど川村嘉春先生の『量子力学選書 相対論的量子力学』で学んだことをまとめそれに自分の考察などを追加したものである。

5.1 Dirac 方程式の導出

5.1.1 相対論的な波動方程式への要請

まず、Schrödinger 方程式はローレンツ変換に対して共変ではない。よって特殊相対論を適用するためにはローレンツ変換に対して共変な基礎方程式が必要である。そこでその式(相対論的な波動方程式)を考えるためにいくつかの要請を課す。

1. 特殊相対性原理に従う
2. 自由粒子は下の4元運動量の関係式に従う。

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (5.1)$$

3. 非負の確率密度を与える

4. 非相対論的極限のもとで、Pauli 方程式に帰着される

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\nabla + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{e\hbar}{2m_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - e\phi \right] \varphi(\mathbf{x}, t) \quad (5.2)$$

ここで、

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3) \quad (5.3)$$

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

である。パウリ方程式は、非相対論的な世界で、電子が電磁相互作用を受けているときになりたつ方程式である。ここで、 m_e は電子の質量、 $-e$ は電子の電荷である。また $\frac{e\hbar}{2m_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$ はパウリ項と呼ばれ、電子のスピンとよばれる物理量を記述している。スピンは角運動量の1種で、量子力学的な物理量である。正確ではないが、スピン角運動量は古典力学における自転のようなものだといわれることもある。パウリ方程式の問題点はこのスピンがどこから出てきたかが理論的には分からないというところにある。さらに相対論的な不変性を持っていない。電磁相互作用を受けた電荷 q の粒子を表す Hamiltonian は自由粒子の Hamiltonian である H に対して、

$$H \rightarrow H - q\phi \quad \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A} \quad (5.5)$$

という置き換えをした、

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi \quad (5.6)$$

という形になる。(5.5)の置き換えより、量子論の演算子は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\phi \quad -i\hbar \nabla \rightarrow -i\hbar \nabla - q\mathbf{A} = -i\hbar \left(\nabla - i \frac{q}{\hbar} \mathbf{A} \right) \quad (5.7)$$

のように変更される。ただし、ここで ϕ はスカラーポテンシャル、 $\mathbf{A}$ はベクトルポテンシャルである。

5.1.2 Klein-Gordon 方程式

相対論における、4元運動量に対応する演算子は座標表示において、

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p} \right) \rightarrow \hat{p}^\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial(ct)}, -i\hbar \nabla \right) \quad (5.8)$$

$$p_\mu = \left(\frac{E}{c}, -\mathbf{p} \right) \rightarrow \hat{p}_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial(ct)}, i\hbar \nabla \right) \quad (5.9)$$

となるので、 $p^\mu p_\mu$ に対応する演算子は、

$$p^2 = p^\mu p_\mu \rightarrow -\hbar^2 \partial^\mu \partial_\mu = -\hbar^2 \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \quad (5.10)$$

となる。相対論において、

$$p^2 - m^2 c^2 = 0 \quad (5.11)$$

という関係が成り立っていたので、相対論に共変な方程式の候補として、

$$(-\hbar^2 \partial^\mu \partial_\mu - m^2 c^2) \phi(x) = 0 \quad (5.12)$$

がある。これを変形した、

$$\left(\partial^\mu \partial_\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \phi(x) = 0 \quad (5.13)$$

はローレンツ変換のもとで不変であり、相対論的な波動方程式となっている。ここで、 x^μ を x と省略して書いた。以後この記法を特に断り無く用いる。そして、この方程式のことを Klein-Gordon 方程式と呼ぶ。ここでは詳しく触れないが、この方程式には以下のような問題点がある。まず、要請3が成り立たない。つまり確率解釈を行うことができない。さらに、この方程式からは負のエネルギー解が出てきてしまう。これは非常に厄介な問題で、後に出てくる Dirac 方程式も同様の問題を抱えている (Dirac 方程式の場合それは一応解決される)。また、方程式が時間と位置を対等に扱っていないのであまり美しいとは言えない。これらの問題点から別の相対論的な波動方程式を考える必要がある。

5.1.3 Dirac 方程式

先程のことを踏まえた上で考えてみよう。まず、最終的には確率解釈がなりたって欲しい。つまり、方程式を変形すると非相対論的な量子力学で導出したような連続の式がでてきて欲しい。よって、方程式は時間について1階の微分を含んだ形がよいと思われる。そこで、方程式が、次のような形であると予想して考える。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi \quad (5.14)$$

ここで相対論は時間と空間を対等に扱うので、空間についても1階の微分を含んでいて欲しい。よって、Hamiltonian H を次のような形だとしてみる。

$$H = -i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta m_e c^2 \quad (5.15)$$

α^i や β は定数である。よって、エネルギー固有値を E だとすると、

$$E\psi = (\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta m_e c^2) \psi \quad (5.16)$$

となり、もう一度作用させると、

$$E^2 \psi = (\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta m_e c^2)(\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta m_e c^2) \psi \quad (5.17)$$

である。ここで、

$$\begin{aligned} & (\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta m_e c^2)(\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta m_e c^2) \\ &= \sum_{i=1}^3 (\alpha^i)^2 (p^i)^2 c^2 + \beta^2 m_e^2 c^4 + \sum_{i < j} (\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i) p^i p^j c^2 + \sum_{i=1}^3 (\alpha^i \beta + \beta \alpha^i) p^i m_e c^3 \end{aligned} \quad (5.18)$$

であり、これが、要請2より $\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$ に一致して欲しいので、

$$(\alpha^i)^2 = \beta^2 = 1 \quad (5.19)$$

$$\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = 0 \quad (i \neq j) \quad (5.20)$$

$$\alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0 \quad (5.21)$$

の3つがなりたたなければならない。(5.19)と(5.20)は、

$$\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = 2\delta^{ij} \quad (5.22)$$

とまとめることもできる。だが、これらは通常の複素数では満たすことができない。だが、他成分に拡張された波動関数に作用する行列だと考えることができる。これによって先程述べていたスピンの自由度が自然に導入される。上の条件を満たすようなものは、

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

である。 I は 2×2 の単位行列である。これらの行列はエルミート行列である。(5.23)はディラック表示と呼ばれている。これらの行列は 4×4 の行列なので、波動関数は、

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{pmatrix} \quad (5.24)$$

のように4つの成分を持った量である。4つの成分を持った量といっても、4次元ベクトルとは性質の全く異なる量であり、ディラックスピノルと呼んだりする。このようにして導かれた方程式、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = (-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta m_e c^2) \psi(x) \quad (5.25)$$

を Dirac 方程式と呼ぶ。ディラック表示では

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \begin{pmatrix} m_e c^2 & -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \\ -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla & -m_e c^2 \end{pmatrix} \psi(x) \quad (5.26)$$

とも書く。この Dirac 方程式の確率解釈について考えてみる。そのために、(5.25)に左から $\psi^\dagger$ を掛けて、そこから(5.25)のエルミート共役に右から ψ を掛けた量を引くと、

$$i\hbar \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi = -i\hbar c \sum_{k=1}^3 (\psi^\dagger \alpha^k \partial_k \psi + \partial_k \psi^\dagger \alpha^k \psi) \quad (5.27)$$

となり、変形すると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) + i\hbar c \sum_{k=1}^3 \partial_k (\psi^\dagger \alpha^k \psi) = 0 \quad (5.28)$$

の用になる。ここで、

$$\rho = \psi^\dagger \psi \quad (5.29)$$

$$\mathbf{j} = c \psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi \quad (5.30)$$

とすると、(5.28)は確率の保存を表す連続の式と見なすことができる。(5.29)と(5.30)を用いて、4元確率のながれ j^μ は、

$$j^\mu = (c\rho, c\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi) \quad (5.31)$$

と作ることができる。この量がローレンツ変換のもとでどうなるかについては後で説明する。

5.1.3 要請 4 と Dirac 方程式

先程までの話で Dirac 方程式が要請 2, 3 を満たしていることが分かった。では要請 4 についてはどうだろうか。それを考える前に静止した自由な電子について考える。これを記述する Dirac 方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \beta m_e c^2 \psi \quad (5.32)$$

であり、その解は、

$$\begin{aligned} \psi^1 &= e^{-\frac{i}{\hbar} m_e c^2 t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \psi^2 &= e^{-\frac{i}{\hbar} m_e c^2 t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \psi^3 &= e^{\frac{i}{\hbar} m_e c^2 t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \psi^4 &= e^{\frac{i}{\hbar} m_e c^2 t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.33)$$

の4つがあり、上2つの解は正のエネルギーの解、下2つの解は負のエネルギーの解である。量子論において負のエネルギーを持った解が存在するのは非常に危険である。なぜなら、電子は電磁波を放出するためいくらかでも小さなエネルギーを持った状態をとることができてしまい、それは物理の安定性を脅かすからである。だが、これについては後に扱うことにして、ここでは正エネルギー解のみに着目して考えてみる。電磁相互作用を受けた電子を記述する Dirac 方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \left(-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right) + \beta m_e c^2 - e\phi \right) \psi(x) \quad (5.34)$$

である。 $\psi(x)$ が

$$\psi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} m_e c^2 t} \begin{pmatrix} \varphi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} \quad (5.35)$$

のように静止エネルギーが分離された形だとして、(5.35)を(5.34)に代入して整理すると、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} = -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right) \begin{pmatrix} \chi(x) \\ \varphi(x) \end{pmatrix} - e\phi \begin{pmatrix} \varphi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} - 2m_e c^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi(x) \end{pmatrix} \quad (5.36)$$

となる。これより、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x) = -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right) \chi(x) - e\phi \varphi(x) \quad (5.37)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(x) = -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right) \varphi(x) - 2m_e c^2 \chi(x) - e\phi \chi(x) \quad (5.38)$$

という 2 つの方程式が成り立つ。 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(x)$ は静止エネルギーを差し引いたエネルギーを表すので、非相対論的な極限のもとで静止エネルギー $-2m_e c^2 \chi(x)$ の項よりはるかに小さくなるので無視し、 $e\phi \chi(x)$ も $2m_e c^2 \chi(x)$ より遙かに小さいとすると、(5.38)は、

$$0 = -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right) \varphi(x) - 2m_e c^2 \chi(x) \quad (5.39)$$

の用書き換えることができるので、

$$\chi(x) = -\frac{i\hbar}{2m_e c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right) \varphi(x) \quad (5.40)$$

である。これを(5.37)に代入して、

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})I + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (5.41)$$

という公式を用いて整理すると、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right) \right] \left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right) \right] \varphi(x) - e\phi \varphi(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\boldsymbol{\nabla} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right)^2 \varphi(x) - \frac{i\hbar^2}{2m_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right) \times \left(\boldsymbol{\nabla} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right) \varphi(x) - e\phi \varphi(x) \end{aligned}$$

なので、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\boldsymbol{\nabla} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right)^2 + \frac{e\hbar}{2m_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - e\phi \right] \varphi(x) \quad (5.42)$$

が成り立つ。ここで、 $\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}$ である。これはPauli 方程式であるので、要請 4 が満たされたことがわかる。またこのことから Dirac 方程式がスピンの自由度を自然に内蔵していることがわかる。

5.2 Dirac 方程式とローレンツ変換

先程までで Dirac 方程式の基本的な性質は述べた。ここからは方程式がローレンツ変換のもとでどのようなになるかを考える。さらにディラックスピノルの変換性についても議論する。

5.2.1 Dirac 方程式とガンマ行列

Dirac 方程式を次のように変形してみる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) + i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} \psi(x) - \beta m_e c^2 \psi(x) = 0 \quad (5.43)$$

両辺に β を掛けると、

$$i\hbar \beta \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) + i\hbar c \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} \psi(x) - m_e c^2 \psi(x) = 0 \quad (5.44)$$

となり、さらに両辺を c で割ると、

$$i\hbar \beta \frac{\partial}{\partial(ct)} \psi(x) + i\hbar \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} \psi(x) - m_e c \psi(x) = 0 \quad (5.45)$$

となるので、

$$\gamma^0 \equiv \beta \quad \gamma^i \equiv \beta \alpha^i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.46)$$

として、

$$\gamma^\mu \quad (\mu = 0, 1, 2, 3) \quad (5.47)$$

と表すと、(5.45)は、

$$\left(i\hbar \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - m_e c \right) \psi(x) = 0 \quad (5.48)$$

$$(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - m_e c) \psi(x) = 0 \quad (5.49)$$

のように書き換えることができる。ここで導入した γ^μ はガンマ行列と呼ばれ、

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu} I \quad (5.50)$$

$$(\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i \quad (5.51)$$

という性質を満たす。(5.51)より γ^i は反エルミート行列だと分かる。ここで、

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\mu\} \equiv \gamma^\mu \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^\mu \quad (5.52)$$

である。電磁相互作用があるとき、エネルギーや運動量の演算子は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} - q A_\mu(x) \quad (5.53)$$

のように書き換えればよい。よって、電子を記述する Dirac 方程式は

$$\left(i\hbar \gamma^\mu \left(\partial_\mu - i \frac{e}{\hbar} A_\mu(x) \right) - m_e c \right) \psi(x) = 0 \quad (5.54)$$

となる。

5.2.2 Dirac 方程式のローレンツ変換性

(5.48)や(5.49)に基づいて Dirac 方程式のローレンツ共変性について考える。(5.48)や(5.49)は明らかに相対論に共変な形をしているように見えるが、 γ^μ はただの定数行列であって、これ自体がローレンツ変換で変化するわけではない。よって方程式がどのような形で書けるかは $\psi(x)$ がどのように変化するにかかっている。そこで、

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu \quad (5.55)$$

とある系 K から K' へローレンツ変換されるとき、

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x')$$

の変換が、

$$\psi'(x') = S(\Lambda) \psi(x) \quad (5.56)$$

のような線形な形で変換されたい。ただし、簡単のため

$$\Lambda^\mu{}_\nu \rightarrow \Lambda$$

と表示した。 $S(\Lambda)$ の逆変換は $S(\Lambda)$ の逆行列 $S^{-1}(\Lambda)$ で表され、

$$\psi(x) = S^{-1}(\Lambda) \psi'(x') = S^{-1}(\Lambda) \psi'(\Lambda x) \quad (5.57)$$

がなりたつ。また、(5.55)の逆変換

$$x^\mu = (\Lambda^{-1})^\mu{}_\nu x'^\nu \quad (5.58)$$

を用いて、

$$\psi(x) = S(\Lambda^{-1}) \psi'(\Lambda x) \quad (5.59)$$

が成り立つので、

$$S^{-1}(\Lambda) = S(\Lambda^{-1}) \quad (5.60)$$

であることがわかる。Dirac 方程式がローレンツ共変であることを示すため $S(\Lambda)$ の具体形を求め存在を示せばよい。まずは、それが満たすべき条件を求めよう。(5.49)に左から γ^μ をかけると、

$$[i\hbar S\gamma^\mu S^{-1} \partial_\mu - m_e c] S\psi(x) = 0 \quad (5.61)$$

が成り立つ。この式を、

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial}{\partial x'^\nu} \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} = \Lambda^\nu{}_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} \quad (5.62)$$

を用いて、 x' で(5.61)を表すと、

$$[i\hbar \Lambda^\nu{}_\mu S\gamma^\mu S^{-1} \partial'_\nu - m_e c] \psi'(x') = 0 \quad (5.63)$$

となる。ただし、

$$\partial'_\nu = \frac{\partial}{\partial x'^\nu} \quad (5.64)$$

とした。よって、(5.63)が、 K' 系での Dirac 方程式

$$[i\hbar \gamma^\nu \partial'_\nu - m_e c] \psi'(x') = 0 \quad (5.65)$$

と一致すれば良い。そのための条件は、

$$\Lambda^\nu{}_\mu S\gamma^\mu S^{-1} = \gamma^\nu \quad (5.66)$$

である。後々のためこれを変形して、

$$\Lambda^\nu{}_\mu \gamma^\mu = S^{-1} \gamma^\nu S \quad (5.67)$$

としておく。(5.67)を満たす $S(\Lambda)$ を求めてみよう。任意の本義ローレンツ変換は無限小変換をくり返しくり返し行うことで得られるので、無限小ローレンツ変換

$$\Lambda^\nu{}_\mu = \delta^\nu{}_\mu + \Delta\omega^\nu{}_\mu \quad (5.68)$$

を考える。 $\Delta\omega^\nu{}_\mu$ は無限小のパラメータで、

$$\Delta\omega^{\nu\mu} = \eta^{\mu\lambda} \Delta\omega^\nu{}_\lambda = -\Delta\omega^{\mu\nu} \quad (5.69)$$

を満たす。 $S(\Lambda)$ は $\Delta\omega^{\mu\nu}$ のべきで展開されと考えられるので、 $\Delta\omega^{\mu\nu}$ の1次の項まで考えると

$$S(\Lambda) = I - \frac{i}{4} \Delta\omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \quad S^{-1}(\Lambda) = I + \frac{i}{4} \Delta\omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \quad (5.70)$$

である。ここで、

$$\Lambda^\nu{}_\mu \gamma^\mu = \gamma^\nu + \Delta\omega^\nu{}_\mu \gamma^\mu \quad (5.71)$$

$$\begin{aligned} S^{-1} \gamma^\nu S &= \left(I + \frac{i}{4} \Delta\omega^{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta} \right) \gamma^\nu \left(I - \frac{i}{4} \Delta\omega^{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta} \right) \\ &= \gamma^\nu - \frac{i}{4} \gamma^\nu \Delta\omega^{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta} + \frac{i}{4} \Delta\omega^{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta} \gamma^\nu \end{aligned} \quad (5.72)$$

なので、

$$\Delta\omega^\nu{}_\mu \gamma^\mu = \frac{i}{4} \Delta\omega^{\alpha\beta} [\sigma_{\alpha\beta}, \gamma^\nu] \quad (5.73)$$

が成り立つ。(5.73)を満たすような $\sigma_{\alpha\beta}$ として、

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{i}{2}[\gamma_\alpha, \gamma_\beta] = \frac{i}{2}(\gamma_\alpha\gamma_\beta - \gamma_\beta\gamma_\alpha) = i(\gamma_\alpha\gamma_\beta - \eta_{\alpha\beta}I) \quad (5.74)$$

が存在する。実際これを(5.73)の右辺に代入すると左辺と同じものが得られる。これらの無限小変換をくり返し行くと、本義ローレンツ変換の式が得られる。 x^μ にたいしては、

$$\begin{aligned} x'^\mu &= \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu \\ \Lambda^\mu{}_\nu &= \lim_{N \rightarrow \infty} (\delta^\mu{}_{\mu_1} + \Delta\omega^\mu{}_{\mu_1})(\delta^{\mu_1}{}_{\mu_2} + \Delta\omega^{\mu_1}{}_{\mu_2}) \cdots (\delta^{\mu_{N-1}}{}_\nu + \Delta\omega^{\mu_{N-1}}{}_\nu) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\left(I + \frac{\omega}{N} \right)^N \right]^\mu{}_\nu = (e^\omega)^\mu{}_\nu = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{n!} \omega^n \right)^\mu{}_\nu \end{aligned} \quad (5.75)$$

が得られる。ただし、 $\omega^\mu{}_\nu = N\Delta\omega^\mu{}_\nu$ とした。波動関数 $\psi(x)$ に対しては、

$$\begin{aligned} \psi'(x') &= S(\Lambda)\psi(x) \\ S(\Lambda) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i}{4} \Delta\omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \right)^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i}{4} \frac{\omega^{\mu\nu}}{N} \sigma_{\mu\nu} \right)^N \\ &= \exp \left(-\frac{i}{4} \omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{4} \omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \right)^n \end{aligned} \quad (5.76)$$

が得られる。ただし、 $\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$ である。逆変換は、

$$S^{-1}(\Lambda) = \exp \left(\frac{i}{4} \omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \right) = S(\Lambda^{-1}) \quad (5.77)$$

である。

5.2.3 ローレンツ変換の具体例1

$\Delta\omega^{01} = -\Delta\omega^{10} = \Delta\beta_1$ 以外の $\Delta\omega^{\mu\nu}$ が0の場合を考えよう。 $\Delta\beta_1 = \frac{\omega}{N}$ ($N \gg 1$)とする。ただし ω は実数である。このとき、 $\Delta\omega^\mu{}_\nu$ は、

$$\Delta\omega^\mu{}_\nu = \frac{\omega}{N} (I_L)^\mu{}_\nu \quad (I_L)^\mu{}_\nu \equiv \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.78)$$

と行列表示することができる。 $(I_L)^\mu{}_\nu$ のべき乗は、

$$(I_L)^\mu{}_\nu = (I_L^{2k+1})^\mu{}_\nu \quad (I_L^{2k+2})^\mu{}_\nu = (I_L^2)^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.79)$$

である。ここで $k = 1, 2, 3, \dots$ である。よって、

$$\begin{aligned} \Lambda^\mu{}_\nu &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\delta^\mu{}_{\mu_1} + \frac{\omega}{N} (I_L)^\mu{}_{\mu_1} \right) \left(\delta^{\mu_1}{}_{\mu_2} + \frac{\omega}{N} (I_L)^{\mu_1}{}_{\mu_2} \right) \cdots \left(\delta^{\mu_{N-1}}{}_\nu + \frac{\omega}{N} (I_L)^{\mu_{N-1}}{}_\nu \right) \\ &= (e^{\omega I_L})^\mu{}_\nu = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\omega^n}{n!} (I_L^n)^\mu{}_\nu \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \delta^\mu{}_\nu - (I_L^2)^\mu{}_\nu + (I_L^2)^\mu{}_\nu \cosh(\omega) + (I_L)^\mu{}_\nu \sinh(\omega) \\
&= \begin{pmatrix} \cosh(\omega) & -\sinh(\omega) & 0 & 0 \\ -\sinh(\omega) & \cosh(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} & -\frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} & 0 & 0 \\ -\frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} & \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{5.80}$$

が導出される。最後の式変形で、

$$\tanh(\omega) = \beta \quad \sinh(\omega) = \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad \cosh(\omega) = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{5.81}$$

を用いた。(5.80)は x 軸方向のローレンツブーストを表している。(5.76)より、

$$S(\Lambda) = \exp\left(-\frac{i}{2}\omega\sigma_{01}\right) \equiv S(\Lambda)_l \tag{5.81}$$

が成り立つ。また、ディラック表示において、

$$\sigma_{0i} = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^i \\ -i\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \tag{5.82}$$

であり、

$$S(\Lambda)_l^\dagger = \exp\left(\frac{i}{2}\omega\sigma_{01}^\dagger\right) = \exp\left(-\frac{i}{2}\omega\sigma_{01}\right) = S(\Lambda)_l \tag{5.83}$$

が成り立つので、 $S(\Lambda)_l$ はエルミート行列である。

5.2.3 ローレンツ変換の具体例2

$\Delta\omega^{12} = -\Delta\omega^{21} = -\Delta\varphi_3$ 以外の $\Delta\omega^{\mu\nu}$ が0の場合を考えよう。 $\Delta\varphi_3 = \frac{\varphi}{N}$ ($N \gg 1, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$)とする。ただし ω は実数である。このとき、 $\Delta\omega^\mu{}_\nu$ は、

$$\Delta\omega^\mu{}_\nu = \frac{\varphi}{N}(I_R)^\mu{}_\nu \quad (I_R)^\mu{}_\nu \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.84}$$

の用に行列表示できる。 $(I_R)^\mu{}_\nu$ のべき乗は、

$$\begin{aligned}
(I_R^{4k+1})^\mu{}_\nu &= (I_R)^\mu{}_\nu & (I_R^{4k+2})^\mu{}_\nu &= (I_R^2)^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
(I_R^{4k+3})^\mu{}_\nu &= -(I_R)^\mu{}_\nu & (I_R^{4k+4})^\mu{}_\nu &= (I_R^2)^\mu{}_\nu
\end{aligned} \tag{5.85}$$

よって、

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\delta^\mu{}_{\mu_1} + \frac{\varphi}{N}(I_R)^\mu{}_{\mu_1} \right) \left(\delta^{\mu_1}{}_{\mu_2} + \frac{\varphi}{N}(I_R)^{\mu_1}{}_{\mu_2} \right) \cdots \left(\delta^{\mu_{N-1}}{}_\nu + \frac{\varphi}{N}(I_R)^{\mu_{N-1}}{}_\nu \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi^n}{n!} (I_R^n)^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + (I_R^2)^\mu{}_\nu - (I_R^2)^\mu{}_\nu \cos(\varphi) + (I_R)^\mu{}_\nu \sin(\varphi) \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varphi) & \sin(\varphi) & 0 \\ 0 & -\sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{5.86}$$

が導かれる。これはz軸まわりの角度 φ の空間回転を表し、(5.76)より

$$S(\Lambda) = \exp\left(\frac{i}{2} \omega \sigma_{12}\right) \equiv S(\varphi)_R \tag{5.87}$$

であり、ディラック表示を使うと、

$$\sigma_{12} = \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & \sigma^3 \end{pmatrix} \equiv \Sigma^3 \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{5.88}$$

とできる。(5.87)より、

$$S(0)_R = I \quad S(2\pi)_R = -I \tag{5.89}$$

であるので、波動関数は

$$\psi'(\phi + 2\pi) = S(2\pi)_R \psi(\phi) = -\psi(\phi) \tag{5.90}$$

のように変化する。 ϕ は極座標での方位角である。(5.90)より、ディラックスピノルは、 2π 回転のもとで符号を変え、 4π 回転でもとにもどることがわかる。これは非常に興味深い性質である。空間回転における変換行列、

$$\Sigma = (\Sigma^1, \Sigma^2, \Sigma^3) \quad \Sigma^i = \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix} \tag{5.91}$$

を用いて、

$$S(\varphi)_R = \exp\left(\frac{i}{2} \varphi \cdot \Sigma\right) = \exp\left(i \varphi \cdot \frac{\Sigma}{2}\right) = \exp\left(i \varphi \mathbf{s} \cdot \frac{\Sigma}{2}\right) \tag{5.92}$$

とすると、これは $\mathbf{s}$ 方向を軸とする角度 φ の回転を引き起こすことがわかる。ただし、 $\varphi = \varphi \mathbf{s}$ 、 $|\mathbf{s}| = 1$ とした。

$$S(\varphi)_R^\dagger = \exp\left(-i \varphi \mathbf{s} \cdot \frac{\Sigma^\dagger}{2}\right) = \exp\left(-i \varphi \mathbf{s} \cdot \frac{\Sigma}{2}\right) = S^{-1}(\varphi)_R \tag{5.93}$$

が成り立つので、 $S(\varphi)_R$ はユニタリ行列である。ここまでの考察より、 $\Delta\omega^{\mu\nu}$ が $\Delta\omega^{0i} (= -\Delta\omega^{i0})$ 以外の成分が0のとき、 $\Lambda^\mu{}_\nu$ は何らかの方向のローレンツブーストを表していて、 $\Delta\omega^{ij} (= -\Delta\omega^{ji})$ 以外の成分が0のとき $\Lambda^\mu{}_\nu$ は空間回転を表していると考えられる。ただし、 $i, j = 1, 2, 3$ とした。

5.2.4 4元確率の流れの変換性

まず、次のものを定義する。

$$\bar{\psi}(x) \equiv \psi^\dagger(x) \gamma_0 \tag{5.94}$$

これをディラック共役と呼ぶ。これは、

$$\gamma_0 S(\Lambda)^\dagger \gamma_0 = S^{-1}(\Lambda) \quad (5.95)$$

が成り立つので、

$$\bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x) S^{-1}(\Lambda) \quad (5.96)$$

のように変換する。

$$\bar{\psi}'(x') \psi'(x') = \bar{\psi}(x) S^{-1}(\Lambda) S(\Lambda) \psi(x) = \bar{\psi}(x) \psi(x) \quad (5.97)$$

と変換するので $\bar{\psi}(x) \psi(x)$ はスカラー量である。次に、

$$\bar{\psi}'(x') \gamma^\mu \psi'(x') = \bar{\psi}(x) S^{-1}(\Lambda) \gamma^\mu S(\Lambda) \psi(x) = \bar{\psi}(x) \Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu \psi(x) = \Lambda^\mu{}_\nu \bar{\psi}(x) \gamma^\nu \psi(x)$$

が成り立つので、

$$\bar{\psi}'(x') \gamma^\mu \psi'(x') = \Lambda^\mu{}_\nu \bar{\psi}(x) \gamma^\nu \psi(x) \quad (5.98)$$

である。よって、 $\bar{\psi}(x) \gamma^\mu \psi(x)$ はベクトル量である。

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(x) \gamma^\mu \psi(x) &= (\psi^\dagger(x) \gamma_0 \gamma^\mu \psi(x), \psi^\dagger(x) \gamma_0 \gamma^i \psi(x)) \\ &= (\psi^\dagger(x) \psi(x), \psi^\dagger(x) \alpha^i \psi(x)) \end{aligned} \quad (5.99)$$

となるので、(5.31)と見比べて、

$$j^\mu(x) = c \bar{\psi}(x) \gamma^\mu \psi(x) \quad (5.100)$$

が導かれる。これにより、4元確率の流れはベクトルとして振る舞うことがわかる。

第6章 Dirac 方程式と射影演算子

ここからは Dirac 方程式の解に成り立つ性質や特定のエネルギーやスピンの状態を取り出す射影演算子について考えてみる。

6.1 ローレンツブーストを用いた Dirac 方程式の導出

6.1.1 Dirac 方程式とローレンツブーストの関係

まず、静止した自由粒子を考える。静止質量を m 、スピン $\frac{1}{2}$ の自由粒子を考えよう。このとき、粒子は $E = mc^2$ のエネルギーをもち、

$$u^r(0) e^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} \quad (6.1)$$

で記述することができる。ただし、 $r = 1, 2$ であり、

$$u^1(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u^2(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.2)$$

$u^r(0)$ は (6.2) のような2成分の波動関数である。今、それぞれスピンの z 成分 $S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$ の固有

状態で固有値は、 $\frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}$ である。ここに負エネルギー解を追加すると、4つの状態

$$\psi^s(x) = w^s(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_s mc^2 t} \quad (s = 1, 2, 3, 4) \quad (6.3)$$

を作ることができる。ここで ε_s は、

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1 \quad \varepsilon_3 = \varepsilon_4 = -1 \quad (6.4)$$

である。また $w^s(0)$ は、4成分の波動関数

$$w^1(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad w^2(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad w^3(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad w^4(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

である。 $s = 3, 4$ は負エネルギー解である。また $w^s(0)$ は

$$\gamma_0 w^s(0) = \varepsilon_s w^s(0) \quad (6.6)$$

に従う。ここで、

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

である。この章ではディラック表示を用いる。粒子が静止しているように見える慣性系 K_0 (その座標を x_0^μ とする)に対して、速度 $-\mathbf{v}$ で等速直線運動している慣性系 K (その座標を x^μ とする)を用いて考えよう。慣性系 K からみると、粒子は速度 $\mathbf{v}$ で等速直線運動している。ローレンツブーストにより(6.3)は、

$$\psi^s(x) = w^s(\mathbf{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_s p_\mu x^\mu} \quad (s = 1, 2, 3, 4) \quad (6.8)$$

にうつる。ここで、

$$w^s(\mathbf{p}) = S(\Lambda) w^s(0) \quad (6.9)$$

である。 $S(\Lambda)$ はスピノルに対する変換行列で、変換は粒子の速度と関係があるので、 p_μ の関数である。この $\psi^s(x)$ に対する方程式を求めてみよう。(6.6)より、

$$S(\Lambda) \gamma_0 S^{-1}(\Lambda) S(\Lambda) w^s(0) = \varepsilon_s S(\Lambda) w^s(0) \quad (6.10)$$

が成り立ち、

$$Y(p_\mu) \equiv S(\Lambda) \gamma_0 S^{-1}(\Lambda) \quad (6.11)$$

とすると、

$$(Y(p_\mu) - \varepsilon_s) w^s(\mathbf{p}) = 0 \quad (6.12)$$

となる。 $\hat{p}_\mu = i\hbar \partial_\mu$ なので、

$$(Y(\varepsilon_s i\hbar \partial_\mu) - \varepsilon_s) \psi^s(x) = 0 \quad (6.13)$$

である。よって、 $Y(p_\mu)$ の具体形を求めれば良い。波動関数のローレンツ変換を引き起こす行列 $S(\Lambda)$ は $\boldsymbol{\omega} = \omega \mathbf{n} = (\omega^{01}, \omega^{02}, \omega^{03})$ と

$$\sigma_{0i} = i\alpha_i = -i\alpha^i$$

を用いると、

$$S(\Lambda) = \exp\left(-\frac{i}{4} \omega^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu}\right) = \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \omega^{0i} \alpha^i\right) = e^{-\frac{1}{2} \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\alpha}} = e^{-\frac{\omega}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\alpha}} \quad (6.14)$$

である。 ω と β には、

$$\tanh(\omega) = -\beta \quad \sinh(\omega) = \frac{-\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad \cosh(\omega) = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad (6.15)$$

という関係が成り立っているので、

$$\begin{aligned} S(\Lambda) &= e^{-\frac{\omega}{2}\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\alpha}} = \cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) - \mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\alpha}\sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) \\ &= \begin{pmatrix} \cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) & -\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) \\ -\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) & \cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) \end{pmatrix} \\ &= \cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) \begin{pmatrix} I & -\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\tanh\left(\frac{\omega}{2}\right) \\ -\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\tanh\left(\frac{\omega}{2}\right) & I \end{pmatrix} \\ &= \sqrt{\frac{E+mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} I & \frac{c\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{E+mc^2} \\ \frac{c\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{E+mc^2} & I \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.16)$$

となる。 $\mathbf{p} = p\mathbf{n}$ である。また、 E を正だとして、

$$\tanh\left(\frac{\omega}{2}\right) = \frac{\sinh(\omega)}{\cosh(\omega)+1} = \frac{\frac{-\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}}{\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}+1} = \frac{-pc}{E+mc^2} \quad (6.17)$$

$$\cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{1-\tanh^2\left(\frac{\omega}{2}\right)}} = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2mc^2}} \quad (6.18)$$

という公式を用いた。

$$S^{-1}(\Lambda) = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} I & \frac{-c\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{E+mc^2} \\ \frac{-c\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{E+mc^2} & I \end{pmatrix} \quad (6.19)$$

よって、 $Y(p_\mu)$ は、

$$\begin{aligned} S(\Lambda)\gamma_0 S^{-1}(\Lambda) &= \frac{E+mc^2}{2mc^2} \begin{pmatrix} I & \frac{c\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{E+mc^2} \\ \frac{c\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{E+mc^2} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & \frac{-c\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{E+mc^2} \\ \frac{-c\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{E+mc^2} & I \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{mc} \gamma^\mu p_\mu \end{aligned}$$

であり、(6.12)は、

$$(\gamma^\mu p_\mu - \varepsilon_s mc)w^s(\mathbf{p}) = 0 \quad (\varepsilon_s \gamma^\mu p_\mu - mc)w^s(\mathbf{p}) = 0 \quad (6.20)$$

と書き換えることができる。波動関数 $\psi^s(x) = w^s(\mathbf{p})e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_s p_\mu x^\mu}$ は、

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi^s(x) = 0 \quad (6.21)$$

を満たすことが分かる。これは自由粒子に関する Dirac 方程式そのものである。ここまでの考察により、静止した自由粒子の解に対して、ローレンツブーストを行うことにより、自由粒子に関する Dirac 方程式を得ることができることがわかる。

6.1.2 自由粒子解の性質について

$w^s(\mathbf{p})$, $w^{s\dagger}(\mathbf{p})$, $\bar{w}^s(\mathbf{p}) \equiv w^{s\dagger}(\mathbf{p})\gamma_0$ には以下の性質がなりたつ。

(1) 運動量空間での Dirac 方程式

$$(\gamma^\mu p_\mu - \varepsilon_s mc)w^s(\mathbf{p}) = 0 \quad \bar{w}^s(\mathbf{p})(\gamma^\mu p_\mu - \varepsilon_s mc) = 0 \quad (6.22)$$

(2) 直交性と規格化条件

$$\bar{w}^s(\mathbf{p})w^{s'}(\mathbf{p}) = \varepsilon_s \delta_{ss'} \quad (6.23)$$

(3) 完全性

$$\sum_{s=1}^4 \varepsilon_s w_\alpha^s(\mathbf{p}) \bar{w}_\beta^s(\mathbf{p}) = \delta_{\alpha\beta} \quad (6.24)$$

(4) 確率密度の関係式

$$w^{s\dagger}(\varepsilon_s \mathbf{p}) w^{s'}(\varepsilon_{s'} \mathbf{p}) = \frac{E}{mc^2} \delta_{ss'} \quad (6.25)$$

ここで、 $\tilde{p}^\mu \equiv (p^0, \varepsilon_s \mathbf{p})$, $\tilde{p}'^\mu \equiv (p^0, \varepsilon_{s'} \mathbf{p})$ とした。これらの性質は粒子の散乱の計算などでも用いられる。

6.1.3 スピン状態について

ここで、少しスピンについて考えよう。静止系ではスピンの向きが $\mathbf{s}$ の方向を向いた状態 w は、

$$(\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\Sigma})w = w \quad (6.26)$$

と定義されている。運動量 $\mathbf{p}^\mu$ とスピン状態 s^μ を持った正エネルギー解のディラックスピノルを $u(\mathbf{p}, s)$ とすると、

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)u(\mathbf{p}, s) = 0 \quad (6.27)$$

を満たす。静止系ではスピン状態は、

$$(\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\Sigma})u(p_0, s_0) = u(p_0, s_0) \quad (6.28)$$

で指定される。このとき、 $p_0^\mu = (mc, \mathbf{0})$ であり、スピン状態は $s_0^\mu = (\mathbf{0}, \mathbf{s})$ である。また、 u の変数の p_0^μ と s_0^μ の添え字を省略した。任意の慣性系は静止系とローレンツ変換で結ばれている。よって、

$$p^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu p_0^\nu \quad (6.29)$$

$$s^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu s_0^\nu \quad (6.30)$$

が成り立っていて、

$$p^\mu p_\mu = p_0^\mu p_{0\mu} = m^2 c^2 \quad (6.31)$$

$$s^\mu s_\mu = s_0^\mu s_{0\mu} = -1 \quad (6.32)$$

$$p^\mu s_\mu = p_0^\mu s_{0\mu} = 0 \quad (6.33)$$

が成り立つ。先程と同様に負エネルギー解を $v(p, s)$ とすると、

$$(\gamma^\mu p_\mu + mc)v(p, s) = 0 \quad (6.34)$$

を満たし、スピン状態は、

$$(\mathbf{s} \cdot \mathbf{\Sigma})v(p_0, s_0) = -v(p_0, s_0) \quad (6.35)$$

と指定する。これらの事から、

$$\begin{aligned} w^1(\mathbf{p}) &= u(p, u_z) & w^2(\mathbf{p}) &= u(p, -u_z) \\ w^3(\mathbf{p}) &= v(p, -u_z) & w^4(\mathbf{p}) &= v(p, u_z) \end{aligned} \quad (6.36)$$

という関係が成り立つ事がわかる。ただし、 u_z^μ を略記して u_z とした。静止系での

$$u_{0z}^\mu = (0, \mathbf{u}_{0z}) = (0, 0, 0, 1) \quad (6.37)$$

と u_z^μ には

$$u_z^\mu = \Lambda^\mu_{\nu} u_{0z}^\nu \quad (6.38)$$

というつながりがある。 $u(p, -s)$ は $u(p, s)$ とスピンが逆向きの状態を表すディラックスピノルである。これらのことから自由粒子に関する状態は、4元運動量とスピン状態で指定されることがわかる。

6.2 スピンとエネルギーについての射影演算子

さきほどの節で、自由粒子の状態はスピンと運動量によって指定されることが分かった。もし、任意の状態から特定の状態を取り出すことができる演算子があれば、計算などが楽になりそうな気がする。よって、こんなことができる演算子 $P_s(\mathbf{p}) = P_s(p, u_z, \varepsilon)$ を求めよう。 $P_s(\mathbf{p})$ は射影演算子なので、

$$P_s(\mathbf{p})w^{s'}(\mathbf{p}) = \delta_{ss'}w^{s'}(\mathbf{p}) \quad (6.39)$$

$$P_s(\mathbf{p})P_{s'}(\mathbf{p}) = \delta_{ss'}P_s(\mathbf{p}) \quad (6.40)$$

が成り立つ。 $w^s(\mathbf{p})$ は、

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)w^s(\mathbf{p}) = 0 \quad (s = 1, 2) \quad (6.41)$$

$$(\gamma^\mu p_\mu + mc)w^s(\mathbf{p}) = 0 \quad (s = 3, 4) \quad (6.42)$$

が成り立つので

$$\frac{\gamma^\mu p_\mu + mc}{2mc}w^s(\mathbf{p}) = w^s(\mathbf{p}) \quad (s = 1, 2) \quad (6.43)$$

$$\frac{-\gamma^\mu p_\mu + mc}{2mc}w^s(\mathbf{p}) = w^s(\mathbf{p}) \quad (s = 3, 4) \quad (6.44)$$

が成り立つ。よって、正あるいは負のエネルギー解を取り出す演算子は、

$$\Lambda_\pm(p) = \frac{\pm\gamma^\mu p_\mu + mc}{2mc} \quad (6.45)$$

であると考えられる。(6.45)は、当然、

$$\Lambda_+(p) + \Lambda_-(p) = I \quad (6.46)$$

が成り立っている。次にスピン状態を取り出す演算子について考えよう。今、スピンの方向を z 軸に選ぼう。すると、スピン上向き、下向きを取り出す演算子 P_+ , P_- は、

$$P_+ = \frac{1 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}_{0z}}{2} \quad P_- = \frac{1 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}_{0z}}{2} \quad (6.47)$$

で与えられる。ただし、 $\mathbf{u}_{0z} = (0,0,1)$ だがこれはローレンツ共変な形ではない。よってローレンツ共変な形に書き換えなければならない。次の関係式に着目しよう。

$$\gamma_5 \gamma_3 \gamma_0 = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} = \sigma_z \otimes I \quad (6.48)$$

ここで、 $\gamma_5 \equiv i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ である。この式は、 $u_{0z}^\mu = (0,0,0,1)$ を用いると、

$$\gamma_5 \gamma_3 \gamma_0 = \gamma_5 \gamma_\mu u_{0z}^\mu \gamma_0 \quad (6.49)$$

と書くことができる。これを用いてローレンツ共変な演算子の候補は、

$$\Sigma(u_z) \equiv \frac{1 + \gamma_5 \gamma_\mu u_{0z}^\mu}{2} \quad (6.50)$$

ここで $u_z^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu u_{0z}^\nu$ である。また γ_0 はあらかじめディラックスピノルに作用していると考えた。よって、 $p^\mu s_\mu = 0$ を満たす。一般的なスピン状態 s_μ に関する演算子は、

$$\Sigma(s) \equiv \frac{1 + \gamma_5 \gamma_\mu s^\mu}{2} \quad (6.51)$$

と定義される。静止系においては、

$$\Sigma(u_{0z})w^1(0) = w^1(0) \quad (6.52)$$

$$\Sigma(-u_{0z})w^2(0) = w^2(0) \quad (6.53)$$

$$\Sigma(-u_{0z})w^3(0) = w^3(0) \quad (6.54)$$

$$\Sigma(u_{0z})w^4(0) = w^4(0) \quad (6.55)$$

が成り立つ。ディラックスピノル u あるいは v を用いると、

$$\Sigma(\pm u_z)u(p, \pm u_z) = u(p, \pm u_z) \quad \Sigma(\pm u_z)v(p, \pm u_z) = v(p, \pm u_z) \quad (6.56)$$

$$\Sigma(\mp u_z)u(p, \pm u_z) = 0 \quad \Sigma(\mp u_z)v(p, \pm u_z) = 0 \quad (6.57)$$

が成り立ち、一般のスピン状態でも、

$$\Sigma(\pm s)u(p, \pm s) = u(p, \pm s) \quad \Sigma(\pm s)v(p, \pm s) = v(p, \pm s) \quad (6.58)$$

$$\Sigma(\mp s)u(p, \pm s) = 0 \quad \Sigma(\mp s)v(p, \pm s) = 0 \quad (6.59)$$

が成立している。以上より射影演算子 $P_s(\mathbf{p})$ は $\Lambda_\pm(\mathbf{p})$ と $\Sigma(\pm u_z)$ を組み合わせることによって下のようになれる。

$$\begin{aligned} P_1(\mathbf{p}) &= \Lambda_+(\mathbf{p})\Sigma(u_z) & P_2(\mathbf{p}) &= \Lambda_+(\mathbf{p})\Sigma(-u_z) \\ P_3(\mathbf{p}) &= \Lambda_-(\mathbf{p})\Sigma(-u_z) & P_4(\mathbf{p}) &= \Lambda_-(\mathbf{p})\Sigma(u_z) \end{aligned} \quad (6.60)$$

$P_1(\mathbf{p})$ は正エネルギーを持ったスピン上向きの状態を取り出し、 $P_3(\mathbf{p})$ は負のエネルギーをもちスピン下向きの状態を取り出す演算子である。

第7章 負エネルギー解の解釈と離散対称性について

Dirac 方程式には負のエネルギー解が存在した。ここからは、負エネルギー解の解釈とその周辺について考える。さらに Dirac 方程式の離散対称性(空間反転対称性や時間反転対称性)についても考察する。

7.1 負エネルギー解の解釈 ディラックの場合

電子は電磁場と相互作用することで、電磁波を放出しながら、負エネルギー状態に遷移することがありえる。もし負エネルギー状態へ遷移すれば、原子の安定性が脅かされてしまう。では、古典力学などもよくやるように物理的にありえないとして、負のエネルギー解を無視すれば良いと思うかも知れない。しかし、実はそうすると不都合が発生することが知られている。具体的には、ここでは計算しないが Dirac 方程式に従う粒子の波束をある程度に局在化させるためには正エネルギー解と同じ程度の大きさを持った負のエネルギー解が必要となっていることがわかっている。他にも Klein-Gordon 方程式に従う粒子に関してだが、負エネルギー解を勝手に取り除くと相対論的な意味での因果律が崩れてしまう。このような事実から好き勝手に負のエネルギー解を無視することはできない。そこで、この負エネルギーの問題に対してディラックは空孔理論とよばれる考え方を提唱した。その理論によれば、真空は負エネルギーの電子が完全に埋まっている状態として定義されている。負エネルギー状態が無数の電子で埋め尽くされた状態をディラックの海と呼ばれている。真空状態に一つの電子を入れた場合、その電子は正エネルギー状態に配置される。よって原子の安定性は保証される。光を通して真空にエネルギーを与えると、負エネルギー状態の電子が、ディラックの海から飛び出し正エネルギー状態に遷移すると考えられる。この場合、負エネルギー状態の電子が欠如するので、ディラックの海には孔が生じる。この孔は正孔と呼ばれ、これは電子の質量と同じ質量をもち、符号のことなる電荷を持った粒子で陽電子と呼び、 e^+ と表す。一般に同じ質量を持ち、大きさの同じ異符号の電荷をもった粒子は反粒子と呼ばれる。真空に正孔が存在する場合、正エネルギー状態にある電子が、負エネルギー状態に遷移することで、正孔が埋まることがある。これは電子と陽電子の対消滅と解釈される。こうして、空孔理論により、陽電子の存在、電子や陽電子の対生成や対消滅が予言された。しかしこの理論にはいくつか問題点がある。まず、1体問題のはずだった、一つの電子に関する物理が、多体問題になってしまっている。これでは問題が複雑になっただけのように感じる。さらに負のエネルギーを持った電子が埋まっていると考えるとそれらの重力なども考慮しないといけない可能性が高い。さらに素粒子の生成や消滅を扱うのには粒子的な描像ではすこし無理があるような気もする。よって、このようなことを考えるためには相対論的場の量子論が必要であることがわかる。

7.2 荷電共役変換について

ここからは電子と陽電子の関係を考えよう。電子を記述する Dirac 方程式は、

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu + e\gamma^\mu A_\mu - m_e c)\psi = 0 \quad (7.1)$$

である。陽電子の電荷は $e > 0$ なので陽電子の波動関数 ψ^c が従う方程式は、

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - e\gamma^\mu A_\mu - m_e c)\psi^c = 0 \quad (7.2)$$

であると考えられる。空孔理論によると、陽電子は負のエネルギーをもった電子の欠如と考えられるので、(7.1)と(7.2)の解には 1 対 1 の対応があると思われる。この予想に基づいて(7.1)と(7.2)の方程式を考えよう。(7.1)の複素共役をとると、

$$(-i\hbar\gamma^{\mu*}\partial_\mu + e\gamma^{\mu*}A_\mu - m_e c)\psi^* = 0 \quad (7.3)$$

となるので、

$$(i\hbar\gamma^{\mu*}\partial_\mu - e\gamma^{\mu*}A_\mu + m_e c)\psi^* = 0 \quad (7.4)$$

がなりたつ。

$$\psi^c = D\psi^* \quad (7.5)$$

のような関係が成り立っていると仮定しよう。ここで D は 4 行 4 列の行列である。このとき、 D は、

$$D\gamma^{\mu*}D^{-1} = -\gamma^\mu \quad (7.6)$$

を満たすべきである。これを満たすような D を見つければ良い。 D が、

$$D = C\gamma^0 \quad (7.7)$$

という形だとする。(7.6)を満たす C としては、

$$C = i\gamma^2\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.8)$$

を選ぶことができる。ただし位相因子の不確定性はある。(7.8)より、

$$C = -C^{-1} = -C^\dagger = -C^T = C^* \quad C^2 = -I \quad (7.9)$$

であることがわかる。 ψ^c のディラック共役は、

$$\bar{\psi}^c = -\psi^T C^{-1} \quad (7.10)$$

こうして、

$$\psi^c = C\gamma^0\psi^* = C\bar{\psi}^T \quad (7.11)$$

という関係があることが分かる。静止している電子に関するスピン上向き $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ の負エネルギー解

$$\psi^3 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}m_e c^2 t} \quad (7.12)$$

の ψ^c を計算すると、

$$(\psi^3)^c = C\gamma^0(\psi^3)^* = i\gamma^2(\psi^3)^*$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}m_e c^2 t} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}m_e c^2 t}
\end{aligned}$$

であることが分かる。電子の波動関数を ψ_{e-} 、陽電子の波動関数を ψ_{e+} とすると

$$(\psi_{e-}^3)^c = \psi_{e+}^2$$

である。つまり、静止している電子に関するスピンの上向きの負エネルギー解の欠如は、静止している陽電子に関するスピン下向きの正エネルギー解の存在と等価である。実は、一般的な自由粒子に対して、

$$C\gamma^0 \left(\frac{\varepsilon\gamma^\mu p_\mu + m_e c}{2m_e c} \right)^* \left(\frac{1 + \gamma_5 \gamma_\nu s^\nu}{2} \right)^* \psi^* = \left(\frac{-\varepsilon\gamma^\mu p_\mu + m_e c}{2m_e c} \right) \left(\frac{1 + \gamma_5 \gamma_\nu s^\nu}{2} \right) \psi^c \quad (7.13)$$

が成り立っている。よって、スピン状態 s^ν を持った電子の負エネルギー解と同じスピン状態を持った陽電子の正エネルギー解は対応していることが分かる。(7.11)と(7.13)から変換

$$\psi \rightarrow \psi^c$$

に対してスピンの向きは変化するが、スピン状態 s^ν は変化しないことがわかる。このスピン状態の不変性はスピン状態を取り出す射影演算子の構造から理解することができる。 γ_0 があらかじめスピノルに作用していると考えたことによって正エネルギー解のスピノルと負エネルギー解のスピノルの符号が反転したのである。これによって s^ν が変化しなかったのである。(7.1)に対して、(7.11)を施すと同時に電磁ポテンシャルの符号を変えると、陽電子に関する Dirac 方程式を得ることができる。よって、Dirac 方程式は次のような変換に対して対称性を持っていることがわかる。

$$\psi \rightarrow \psi^c = C\gamma^0\psi^* = C\bar{\psi}^T \quad A_\mu \rightarrow -A_\mu \quad (7.14)$$

このような変換を荷電共役変換と呼ぶ。Dirac 方程式は荷電共役変換のもとで対称性をもっている。この荷電共役変換に対しての対称性より、質量 m 、電荷 q を持つディラック方程式に従う粒子があれば、必ず質量 m 、電荷 $-q$ をもつ粒子が存在していることがわかる。これらは互いに粒子・反粒子の関係である。この話題でもやはりおもしろいのは対称性である。物理学ではある変換に対しての対称性があるというのは非常に大きな価値があるのがここでもわかる。連続的な変換に対しては保存則が対応している。

7.3 空間反転と時間反転

空間反転とは、次のような離散的な変換である。

$$\mathbf{x}' = -\mathbf{x} \quad t' = t \quad (7.15)$$

これはローレンツ変換の1種で、

$$x'^{\mu} = (\Lambda_P)^{\mu}_{\nu} x^{\nu} \quad (\Lambda_P)^{\mu}_{\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.16)$$

で与えられる。本義ローレンツ変換のときと同様に $\psi(x)$ の変換性を

$$\psi'(x') = P\psi(x) \quad (7.17)$$

だとする。ある慣性系での Dirac 方程式に対して、左から P を施すと、

$$[i\hbar P\gamma^{\mu}P^{-1}(\Lambda_P)^{\nu}_{\mu}\partial'_{\nu} - m_e c]\psi'(x') = 0 \quad (7.18)$$

が成り立つので、これが空間反転した系での Dirac 方程式と一致するためには、

$$P\gamma^{\mu}P^{-1}(\Lambda_P)^{\mu}_{\nu} = \gamma^{\nu} \quad (7.19)$$

が成り立たなければならない。つまり、

$$(\Lambda_P)^{\nu}_{\mu}\gamma^{\mu} = P^{-1}\gamma^{\nu}P \quad (7.20)$$

が成り立っていれば良い。これを満たす P は

$$P = \eta_P \gamma_0 \quad (7.21)$$

である。 η_P は位相因子であり、 P はユニタリ行列である。(5.33)より、静止した解は、 $P = \pm\eta_P$ の固有状態であり、正エネルギー解と負エネルギー解では固有値の符号が異なっている。 P の固有値を固有パリティとよぶ。空間反転を2回行くと元の状態に戻って欲しいので、

$$P^2 = I \quad (7.22)$$

を要請すると固有パリティは -1 あるいは 1 である。 $\bar{\psi}(x)$ は空間反転のもとで、

$$\bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x)P^{-1} \quad (7.23)$$

と変換する。 $\bar{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x)$ は空間反転のもとで、

$$\bar{\psi}'(x')\gamma^{\mu}\psi'(x') = (\Lambda_P)^{\mu}_{\nu}\bar{\psi}(x)\gamma^{\nu}\psi(x) \quad (7.24)$$

と変換される。これにより、Dirac 方程式が本義ローレンツ変換および空間反転のもとで不変であることが分かった。よって、5章で述べた4つの要請全てを Dirac 方程式が満たしている。この空間反転のもとで、 $\psi'(x')$ は空間反転された Dirac 方程式の解と考えられる。さらに電磁ポテンシャルは、

$$A'_0(-\mathbf{x}, t) = A_0(\mathbf{x}, t) \quad \mathbf{A}'(-\mathbf{x}, t) = -\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \quad (7.25)$$

のように変換する。これにより Dirac 方程式には空間反転対称性があることがわかる。よって、Dirac 方程式にしたがう世界は鏡の中の世界と区別できないことがわかる。

次は時間反転について考える。時間反転もローレンツ変換の1種で、

$$t' = -t \quad \mathbf{x}' = \mathbf{x} \quad x'^{\mu} = (\Lambda_T)^{\mu}_{\nu} x^{\nu} \quad (\Lambda_T)^{\mu}_{\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.26)$$

で与えられる。ここでも $\psi(x)$ が時間反転のもとで、

$$\psi'(x') = \mathcal{T}\psi(x) \quad (7.27)$$

と変換するとする。ある慣性系で成立する Dirac 方程式

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \left(\partial_\mu - i\frac{e}{\hbar}A_\mu(x) \right) - m_e c \right) \psi(x) = 0 \quad (7.28)$$

に対して、 $\mathcal{T}$ を作用させると、

$$\left[\mathcal{T}\gamma^\mu \left(i\hbar(\Lambda_T)^\nu{}_\mu \partial'_\nu - (\Lambda_T)^\nu{}_\mu eA'_\nu(x') \right) \mathcal{T}^{-1} - m_e c \right] \psi'(x') = 0 \quad (7.29)$$

が成り立つ。ただし、電磁ポテンシャルが、

$$A'_0(\mathbf{x}, -t) = A_0(\mathbf{x}, t) \quad \mathbf{A}'(\mathbf{x}, -t) = -\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \quad (7.30)$$

と変換するというのをを用いた。時間反転した系での Dirac 方程式は、

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \left(\partial'_\mu - i\frac{e}{\hbar}A'_\mu(x') \right) - m_e c \right) \psi'(x') = 0 \quad (7.31)$$

である。(7.29)と(7.31)が一致するための条件を考えよう。(7.28)と(7.31)を見比べると $\mathcal{T}$ は複素共役をとった後に4行4列の行列 T を作用するという演算だと考えられる。よって、

$$T\gamma^\mu{}^*T^{-1}(\Lambda_T)^\nu{}_\mu = -\gamma^\mu \quad (7.32)$$

が成り立つ。これを満たす T は、

$$T = i\gamma^1\gamma^3 \quad (7.33)$$

である。ここで、 i は不定な位相因子である。 T はユニタリ行列である。(7.27)のような変換をウィグナーの時間反転などと呼んだりする。この変換のもとで Dirac 方程式は不変に保たれる。以上より Dirac 方程式は P 変換(空間反転)、C 変換(荷電共役変換)、T 変換(時間反転)といった離散的な変換に対して不変であることがわかった。電子の波動関数 $\psi(x)$ に対して、先程の変換の積変換 CPT 変換をおこなうと、

$$\psi_{\text{CPT}}(x') \equiv PC\gamma_0(\mathcal{T}\psi(x))^* = i\eta_P\gamma_5\psi(x) \quad (7.34)$$

がなりたつ。ただし、 $x'_\mu = -x_\mu$ である。この変換により、電子の波動関数に $i\eta_P\gamma_5$ をかけると時間内を逆に進む陽電子の波動関数が得られることが分かった。さらに、自由粒子に対しては、

$$i\eta_P\gamma_5 \left(\frac{-\gamma^\mu p_\mu + m_e c}{2m_e c} \right) \left(\frac{1 + \gamma_5 \gamma_\nu s^\nu}{2} \right) \psi(x) = \left(\frac{\gamma^\mu p_\mu + m_e c}{2m_e c} \right) \left(\frac{1 - \gamma_5 \gamma_\nu s^\nu}{2} \right) \psi_{\text{CPT}}(x') \quad (7.35)$$

が導かれる。これによって次の考えに達する。時間に巡行して伝播する正エネルギーの陽電子は時間に逆行して伝播する負エネルギーの電子と等価である。これはシュテュッケルベルク・ファインマンの解釈と呼ばれる。実際、負エネルギーの電子を記述する Dirac 方程式

$$[c\boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(x)) + \beta m_e c^2 - e\phi(x)]\psi(x) = -|E|\psi(x) \quad (7.36)$$

に CPT 変換をおこなうと、

$$[c\boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\hbar\nabla' - e\mathbf{A}'(x')) + \beta m_e c^2 + e\phi'(x')]\psi_{\text{CPT}}(x') = |E|\psi_{\text{CPT}}(x') \quad (7.37)$$

が成り立つ。ここで、 $A'_\mu(x') = A_\mu(x)$, $x'_\mu = -x_\mu$ である。この解釈は後に述べる散乱過程の考察では非常に重要なものとなってくる。

第8章 伝搬理論 非相対論的な場合

ここからは、電子に関する散乱過程を考察していきたい。だが、実際はこういった散乱過程（電子と陽電子の対生成、対消滅など）は相対論的な場の量子論を用いる方が適切である。だが、私は現在相対論的な場の量子論を学習し始めた段階でそれらを用いて考えることができないので、ここではファインマンの提唱した伝搬理論と呼ばれる理論を用いて計算することにする。その準備段階としてまずは、非相対論的な電子に関して伝搬理論を考察する。

8.1 伝播関数について

8.1.1 散乱を扱うための基本原理について

ここからは始状態（遠い過去）には、ある決まった運動量を持っていた自由粒子がある有限な時間、ポテンシャルを受け運動の状態が変化し、終状態（遠い未来）ではある決まった運動量を持った自由粒子として観測されるという散乱過程を考える。このような状態変化を考えるために次の原理を採用する。

【ホイヘンスの原理】

進行波は、その波面上に各点で素元波（2次元的な波）を発生させ、それらが重なり合うことで新しい波が構成される。

この原理より、時刻 t で波動関数 $\psi(x)$ が与えられていたとき、 t' での波動関数 $\psi(x')$ は、

$$\theta(t' - t)\psi(x') = i \int d^3x G(x'; x)\psi(x) \quad (8.1)$$

であたえられる。 $\theta(t' - t)$ は

$$\theta(t' - t) \equiv \begin{cases} 1 & (t' > t) \\ 0 & (t' < t) \end{cases} \quad (8.2)$$

であり、波が過去から未来に進むとするために導入した階段関数と呼ばれる関数である。これは積分表示で、

$$\theta(\tau) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega\tau}}{\omega + i\varepsilon} d\omega \quad (8.3)$$

である。微分すると、

$$\frac{d\theta(\tau)}{d\tau} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} d\omega = \delta(\tau) \quad (8.4)$$

となりデルタ関数である。 $G(x'; x)$ は伝播関数と呼ばれる関数である。数学的にはこれはグリーン関数である。 $\psi(x)$ が、

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (8.5)$$

を満たすとき、 $G(x'; x)$ は、

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H'\right) G(x'; x) = \hbar \delta(t' - t) \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \quad (8.6)$$

を満たす。

8.1.2 伝播関数の解

散乱過程を考えるためには、 $\psi(x')$ を求めなければならないが、これは伝播関数を求める事と同じである。具体的には、

$$G(x'; x) = 0 \quad (t' < t) \quad (8.7)$$

という境界条件を満たすような(8.6)の解を求めれば良い。自由粒子を記述する波動関数を $\varphi(x)$, Hamiltonian を H_0 , 伝播関数を $G_0(x'; x)$ とすると、

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(x)}{\partial t} = H_0 \varphi(x) \quad (8.8)$$

$$\theta(t' - t) \varphi(x') = i \int d^3x G_0(x'; x) \varphi(x) \quad (8.9)$$

がなりたつ。これらを踏まえて、摂動論によって $G(x'; x)$ を求める。時刻 t_1 と $t_1 + \Delta t_1$ の間にポテンシャル $V(x_1)(= V(\mathbf{x}_1, t_1))$ が加わったとしよう。このときの Schrödinger 方程式は、

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - H_0\right) \psi(x_1) = V(x_1) \psi(x_1) \quad (8.10)$$

であり、これを形式的に解くと、

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}_1, t_1 + \Delta t_1) &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(H_0 + V(x_1))\Delta t_1\right] \varphi(\mathbf{x}_1, t_1) \\ &\approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0\Delta t_1\right) \varphi(\mathbf{x}_1, t_1) - \frac{i}{\hbar}V(\mathbf{x}_1, t_1)\varphi(\mathbf{x}_1, t_1)\Delta t_1 \\ &= \varphi(\mathbf{x}_1, t_1 + \Delta t_1) - \frac{i}{\hbar}V(\mathbf{x}_1, t_1)\varphi(\mathbf{x}_1, t_1)\Delta t_1 \end{aligned} \quad (8.11)$$

を得ることができる。ここで、 $V(x_1)$ と Δt_1 が十分小さいとして、 Δt_1 に関する2次以上の量がかった項は無視した。これにより、ポテンシャルによる波動関数の微小な変化は、

$$\begin{aligned} \Delta\psi(x_1) &\equiv \psi(\mathbf{x}_1, t_1 + \Delta t_1) - \varphi(\mathbf{x}_1, t_1 + \Delta t_1) \\ &= -\frac{i}{\hbar}V(\mathbf{x}_1, t_1)\varphi(\mathbf{x}_1, t_1)\Delta t_1 \end{aligned} \quad (8.12)$$

であることがわかる。 $t_1 + \Delta t_1$ 以後ポテンシャルの寄与がないとすると、 $\Delta\psi(x_1)$ の時間発展は、

$$\begin{aligned} \theta(t' - t_1) \Delta\psi(x') &= i \int d^3x_1 G_0(x'; x_1) \Delta\psi(x_1) \\ &= \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 G_0(x'; x_1) V(x_1) \varphi(x_1) \Delta t_1 \end{aligned} \quad (8.13)$$

である。よって、 $\psi(x)$ の時間発展は、

$$\begin{aligned}
\theta(t' - t)\psi(x') &= \theta(t' - t)\varphi(x') + \theta(t' - t_1)\theta(t_1 - t)\Delta\psi(x') \\
&= i \int d^3x \left[G_0(x'; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 \Delta t_1 G_0(x'; x_1) V(x_1) G_0(x_1; x) \right] \varphi(x)
\end{aligned} \tag{8.14}$$

である。(8.1)と(8.14)を見比べると、

$$G(x'; x) = G_0(x'; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 \Delta t_1 G_0(x'; x_1) V(x_1) G_0(x_1; x) \tag{8.15}$$

であることが分かる。 t_i と $t_i + \Delta t_i$ の間に同様の散乱が複数回起こったとすると、

$$G(x'; x) = G_0(x'; x) + \frac{1}{\hbar} \sum_i \int d^3x_i \Delta t_i G_0(x'; x_i) V(x_i) G_0(x_i; x) \tag{8.16}$$

である。複数回散乱が起こったとすると、

$$\begin{aligned}
G(x'; x) &= G_0(x'; x) + \frac{1}{\hbar} \sum_i \int d^3x_i \Delta t_i G_0(x'; x_i) V(x_i) G_0(x_i; x) \\
&\quad + \left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 \sum_{i>j} \int d^3x_i \Delta t_i \int d^3x_j \Delta t_j G_0(x'; x_i) V(x_i) G_0(x_i; x_j) V(x_j) G_0(x_j; x) \\
&\quad + \dots
\end{aligned} \tag{8.17}$$

のように拡張される。先程までは離散的な時間間隔でポテンシャルを受けていると考えたが、連続的な時間に関しては、

$$\begin{aligned}
G(x'; x) &= G_0(x'; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 dt_1 G_0(x'; x_1) V(x_1) G_0(x_1; x) \\
&\quad + \left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 \int d^3x_1 dt_1 \int d^3x_2 dt_2 G_0(x'; x_2) V(x_2) G_0(x_2; x_1) V(x_1) G_0(x_1; x) \\
&\quad + \dots \\
&= G_0(x'; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 dt_1 G_0(x'; x_1) V(x_1) \\
&\quad \times \left[G_0(x_1; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_2 dt_2 G_0(x_1; x_2) V(x_2) G_0(x_2; x) + \dots \right] \\
&= G_0(x'; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 dt_1 G_0(x'; x_1) V(x_1) G(x_1; x)
\end{aligned} \tag{8.18}$$

(8.18)はリップマンシュウィンガー方程式とよばれる。これにより、 $G(x'; x)$ は x から x' へ移るときの中間状態で、ポテンシャルの影響を受け散乱され、それによってたどる様々な経路の和で求められる。(8.18)に適宜代入することにより近似的に求める事ができる。 $G_0(x'; x)$ に関してはここでは具体形は求めないが、フーリエ解析などを用いると解くことができる。また、 $G(x'; x)$ は単位ポテンシャルの変化あたりの波の変化の重みのようなものだと考えることができる。そう考えると、様々な経路に関する寄与の和で $G(x'; x)$ が表されるのは当然

だと考えられる。

8.2 S 行列要素について

ここからは、始状態ではある決まった運動量を有する自由粒子が、ある有限な時間に有限な領域でポテンシャルの影響を受けることにより、状態が変化し、終状態にある決まった運動量を持った自由粒子として観測されるような過程の遷移確率振幅について考える。まず、

$$\begin{aligned}
 \psi(x') &= \lim_{t \rightarrow -\infty} i \int d^3x G(x'; x) \varphi(x) \\
 &= \lim_{t \rightarrow -\infty} i \int d^3x \left[G_0(x'; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 dt_1 G_0(x'; x_1) V(x_1) G(x_1; x) \right] \varphi(x) \\
 &= \varphi(x') + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 dt_1 G_0(x'; x_1) V(x_1) \psi(x_1)
 \end{aligned} \tag{8.19}$$

である。始状態が $\varphi_i(x)$ のときの(8.19)の解を $\tilde{\psi}_i(x')$ とし、終状態 ($t' \rightarrow +\infty$) において、

$$\varphi_f(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{x} - E_f t)} \quad E_f = \frac{\mathbf{p}_f^2}{2m} \tag{8.20}$$

という自由ル有矢の状態に移ったとき遷移確率振幅 S_{fi} は、

$$\begin{aligned}
 S_{fi} &\equiv \lim_{t' \rightarrow +\infty} \int d^3x' \varphi_f^*(x') \tilde{\psi}_i(x') \\
 &= \lim_{t' \rightarrow +\infty} \int d^3x' \varphi_f^*(x') \left[\varphi_i(x') + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 dt_1 G_0(x'; x_1) V(x_1) \tilde{\psi}_i(x_1) \right] \\
 &= \delta_{fi} + \lim_{t' \rightarrow +\infty} \frac{1}{\hbar} \int d^3x' \int d^3x_1 dt_1 \varphi_f^*(x') G_0(x'; x_1) V(x_1) \tilde{\psi}_i(x_1)
 \end{aligned} \tag{8.20}$$

で与えられる。これは S 行列要素あるいは S 行列と呼ばれる。ここまでで $t' \rightarrow +\infty$ や $t \rightarrow -\infty$ を用いてきたが、これは無限の過去や無限の未来を表すと言うより、物理的にポテンシャルの影響がない有限の未来や過去を表している。さらに、無限大の空間を相互作用がおさまるような十分大きな有限の体積 V を有する空間に置き換え、その中の自由粒子

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)} \quad E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{8.21}$$

を用いて、

$$\delta^3(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i) \rightarrow \delta_{fi} = \begin{cases} 1 & (\mathbf{p}_f = \mathbf{p}_i) \\ 0 & (\mathbf{p}_f \neq \mathbf{p}_i) \end{cases} \tag{8.22}$$

という風に置き換えた。また S_{fi} は、

$$S_{fi} = \lim_{t' \rightarrow +\infty} \lim_{t \rightarrow -\infty} i \int d^3x' \int d^3x \varphi_f^*(x') G(x'; x) \varphi_i(x) \tag{8.23}$$

のように表すこともできる。ポテンシャルの影響が十分小さいと見なせる場合、通常1次あるいは2次までの近似で十分である。次の章ではこの話を相対論に適した形に拡張する。

第9章 伝搬理論 相対論的な場合

ここからは相対論的な電子に関する伝搬理論を考える。先程の章で分かったように、伝播関数とは粒子が x から x' に移るときの確率振幅を表していて、さまざまな経路で散乱されたものの寄与を加えることで得られた。このような描像はむしろ相対論にこそふさわしいような気がする。なぜなら、伝搬理論では時間と空間を同時にあつかうので、相対論との相性がよい。この予想のもと非相対論での場合の類推から相対論的な伝搬理論を求めてみよう。方針として、時間発展はDirac方程式に従い、電子と陽電子の性質はファインマンの解釈と両立するようにつくる。

9.1 電子の伝搬関数

9.1.1 自由電子の伝搬関数

電磁相互作用の影響を受けて x から x' へ移る過程に関する伝搬関数を $S'_F(x'; x)$ とすると、時間発展がDirac方程式に従うという要請から、

$$\sum_{\gamma=1}^4 [\gamma_\mu \{i\hbar \partial'^\mu + eA^\mu(x')\} - m_e c]_{\alpha\gamma} S'_{F\gamma\beta}(x'; x) = \hbar \delta_{\alpha\beta} \delta^4(x' - x) \quad (9.1)$$

が成り立たなければならない。ここで $\delta^4(x' - x) = \delta(x'_0 - x_0) \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$ とした。ディラックスピノルの添え字を省略して書くと、

$$[i\hbar \gamma_\mu \partial'^\mu + e\gamma_\mu A^\mu(x') - m_e c] S'_F(x'; x) = \hbar \delta^4(x' - x) \quad (9.2)$$

となる。このような $S'_F(x'; x)$ を求めるためには、まず自由な電子に関する伝搬関数 $S_F(x'; x)$ を求めなければならない。 $S_F(x'; x)$ は、

$$(i\hbar \gamma_\mu \partial'^\mu - m_e c) S_F(x'; x) = \hbar \delta^4(x' - x) \quad (9.3)$$

に従う。 $S_F(x'; x)$ のフーリエ変換を、

$$S_F(x'; x) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi\hbar)^4} e^{-\frac{i}{\hbar} p(x' - x)} \tilde{S}_F(p) \quad (9.4)$$

とする。ただし $d^4 p = dp_0 d^3 p$, $p(x' - x) \equiv p_0 c(t' - t) - \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x})$ とした。(9.4)を(9.3)に代入すると、

$$\int \frac{d^4 p}{(2\pi\hbar)^4} e^{-\frac{i}{\hbar} p(x' - x)} (\gamma_\mu p^\mu - m_e c) \tilde{S}_F(p) = \hbar \int \frac{d^4 p}{(2\pi\hbar)^4} e^{-\frac{i}{\hbar} p(x' - x)} \quad (9.5)$$

が成り立つので、 $p^2 \neq m_e^2 c^2$ として、

$$\tilde{S}_F(p) = \frac{\hbar}{\gamma_\mu p^\mu - m_e c} = \hbar \frac{\gamma_\mu p^\mu + m_e c}{p^2 - m_e^2 c^2} \quad (9.6)$$

である。これにより、伝搬関数で記述される状態は4元運動量の関係式を満たさないことが

わかる。このような状態を質量殻外と呼んだりする。これは直接観測されることのない中間状態である。 $S_F(x'; x)$ を実際に求めるためには積分を行う必要があり、ファインマンの解釈と両立する積分経路を選ばなければならない。それを上手く選ぶために、

$$p^2 - m_e^2 c^2 \rightarrow p^2 - m_e^2 c^2 + i\epsilon \quad (9.7)$$

という置き換えを行う。 ϵ は正の微小量で最終的に0に近づける。このとき、

$$\begin{aligned} p^2 - m_e^2 c^2 + i\epsilon &= (p_0 - \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_e^2 c^2} + i\epsilon)(p_0 + \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_e^2 c^2} - i\epsilon) + O(\epsilon^2) \\ &= (\gamma_\mu p^\mu - m_e c + i\epsilon)(\gamma_\mu p^\mu + m_e c - i\epsilon) + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (9.8)$$

のように因数分解される。これらを踏まえると、

$$\tilde{S}_F(p) = \frac{\hbar}{\gamma_\mu p^\mu - m_e c + i\epsilon} = \hbar \frac{\gamma_\mu p^\mu + m_e c}{p^2 - m_e^2 c^2 + i\epsilon} \quad (9.10)$$

のように変更される。(9.10)は $p_0 = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_e^2 c^2} - i\epsilon$ と $p_0 = -\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_e^2 c^2} + i\epsilon$ を極にもつので、これらを拾い、正エネルギーの粒子は時間に巡行し、負エネルギーの粒子は時間に逆行するというのを満たす積分経路 C で積分すれば良い。こうして、

$$S_F(x'; x) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi\hbar)^4} e^{-\frac{i}{\hbar} p(x'-x)} \hbar \frac{\gamma_\mu p^\mu + m_e c}{p^2 - m_e^2 c^2 + i\epsilon} \quad (9.11)$$

であることがわかり、実際に計算すると、

$$\begin{aligned} S_F(x'; x) &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x})} \int_C \frac{dp_0}{(2\pi\hbar)} e^{-\frac{i}{\hbar} p_0 c(t' - t)} \hbar \frac{\gamma_\mu p^\mu + m_e c}{p^2 - m_e^2 c^2 + i\epsilon} \\ &= i \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x})} \left[\theta(t' - t) \text{Res} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} p_0 c(t' - t)} \frac{\gamma_\mu p^\mu + m_e c}{p^2 - m_e^2 c^2 + i\epsilon}, \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_e^2 c^2} - i\epsilon \right) \right. \\ &\quad \left. + \theta(t - t') \text{Res} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} p_0 c(t' - t)} \frac{\gamma_\mu p^\mu + m_e c}{p^2 - m_e^2 c^2 + i\epsilon}, -\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_e^2 c^2} + i\epsilon \right) \right] \\ &= -i \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \left[\theta(t' - t) e^{\frac{i}{\hbar} [\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) - E(t' - t)]} \left(\frac{E\gamma_0 - \mathbf{c}\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\gamma} + m_e c^2}{2E} \right) \right. \\ &\quad \left. + \theta(t - t') e^{\frac{i}{\hbar} [-\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) + E(t' - t)]} \left(\frac{-E\gamma_0 + \mathbf{c}\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\gamma} + m_e c^2}{2E} \right) \right] \end{aligned} \quad (9.12)$$

となる。ただし、最後の変形において右辺第二項で $\mathbf{p}$ から $-\mathbf{p}$ に変え、微小量を0に近づけた。これは射影演算子を用いると、

$$S_F(x'; x) = -i \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{m_e c^2}{E} \left[\Lambda_+(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x})} \theta(t' - t) + \Lambda_-(p) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x})} \theta(t - t') \right] \quad (9.13)$$

とすることができる。ただし、 $p_0 = \frac{E}{c} > 0$ とした。もしくは、規格化された平面波、

$$\psi_p^r(x) = \sqrt{\frac{m_e c^2}{E}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} w^r(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_r p_\mu x^\mu} \quad (9.14)$$

を用いて、

$$S_F(x'; x) = -i\theta(t' - t) \int d^3p \sum_{r=1,2} \psi_p^r(x') \bar{\psi}_p^r(x) + i\theta(t - t') \int d^3p \sum_{r=3,4} \psi_p^r(x') \bar{\psi}_p^r(x) \quad (9.15)$$

の用に表すこともできる。ここで、

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1 \quad \varepsilon_3 = \varepsilon_4 = -1 \quad (9.16)$$

である。(6.25)を用いて、(9.15)より、

$$\theta(t' - t)\psi^{(+)}(x') = i \int d^3x S_F(x'; x) \gamma_0 \psi^{(+)}(x) \quad (9.17)$$

$$\theta(t - t')\psi^{(-)}(x') = -i \int d^3x S_F(x'; x) \gamma_0 \psi^{(-)}(x) \quad (9.18)$$

であることがわかる。ここからも正エネルギー解は時間に巡行し、負エネルギー解は時間に逆行することが分かる。一般には、

$$\psi^{(+)}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\frac{m_e c^2}{E}} \sum_{r=1,2} a_r(p) w^r(p) e^{-\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu} \quad (9.19)$$

$$\psi^{(-)}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\frac{m_e c^2}{E}} \sum_{r=3,4} a_r(p) w^r(p) e^{+\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu} \quad (9.20)$$

で与えられる。(9.17)および(9.18)はホイヘンスの原理を表している。以上のような性質をもつ伝搬関数 $S_F(x'; x)$ はファインマンの伝搬関数と呼ばれている。

9.1.2 摂動論に基づいた相対論的電子の伝搬関数

第8章と同様に摂動論に基づいて自由な電子に関する伝搬関数 $S_F(x'; x)$ から電磁相互作用を受けた伝搬関数 $S'_F(x'; x)$ を構成しよう。 $S'_F(x'; x)$ は

$$\left(i\hbar\gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x'_\mu} - m_e c \right) S'_F(x'; x) = \int d^4y \delta^4(x' - y) [\hbar\delta^4(y - x) - e\gamma^\mu A_\mu(y) S'_F(y; x)] \quad (9.21)$$

を満たしている。ここで、 $d^4y = dy_0 d^3y$ である。(9.21)より、

$$S'_F(x'; x) = S_F(x'; x) - \frac{e}{\hbar} \int d^4y S_F(x'; y) \gamma^\mu A_\mu(y) S'_F(y; x) \quad (9.22)$$

を得ることができる。よって電磁相互作用を受けた電子を記述する Dirac 方程式の解 $\Psi(x)$ は、

$$\Psi(x) = \psi(x) - \frac{e}{\hbar} \int d^4y S_F(x; y) \gamma^\mu A_\mu(y) \Psi(y) \quad (9.23)$$

で与えられる。ここで突然だが、

$$\Psi(x) - \psi(x) = -\frac{e}{\hbar} \int d^4y S_F(x; y) \gamma^\mu A_\mu(y) \Psi(y) \quad (9.24)$$

というものを考える。これは、 $t \rightarrow +\infty$ のとき、(9.15)のとき、

$$\int d^3p \sum_{r=1,2} \psi_p^r(x) \left[i \frac{e}{\hbar} \int d^4y \bar{\psi}_p^r(y) \gamma^\mu A_\mu(y) \Psi(y) \right] \quad (9.25)$$

となり、 $t \rightarrow -\infty$ のとき、

$$\int d^3p \sum_{r=3,4} \psi_p^r(x) \left[-i \frac{e}{\hbar} \int d^4y \bar{\psi}_p^r(y) \gamma^\mu A_\mu(y) \Psi(y) \right] \quad (9.26)$$

となる。(9.25)をみると、 $A_\mu(y)$ によって散乱されたあとは時間に巡行する正エネルギーの電子が関わっている。一方、(9.26)をみると、 $A_\mu(y)$ で散乱された後、時間に逆行する負エネルギーの電子が関わっている。(9.25)と(9.26)より係数をS行列要素と見なすと、

$$S_{fi} = \delta_{fi} + i \frac{e}{\hbar} \varepsilon_f \int d^4y \bar{\psi}_f(y) \gamma^\mu A_\mu(y) \Psi_i(y) \quad (9.27)$$

を得ることができる。ここで、 $\bar{\psi}_f(y)$ は終状態の自由粒子解で、正エネルギーの場合は $\varepsilon_f = 1$ であり、負エネルギーの場合は $\varepsilon_f = -1$ である。また $\Psi_i(y)$ は $y_0 \rightarrow -\infty$ で正エネルギーの自由粒子解 $\psi_i^{(+)}$ 、 $y_0 \rightarrow +\infty$ で負エネルギーの自由粒子解 $\psi_i^{(-)}$ になるような始状態を表す。

第10章 クーロン散乱

10.1 クーロン散乱のS行列要素について

3章で、考えたクーロン散乱を先程の伝搬理論を使って考えよう。静止した電荷 Ze が作る電磁ポテンシャルは、

$$A_0(x) = \frac{\phi(x)}{c} = \frac{k_0 Ze}{c |\mathbf{x}|} \quad \mathbf{A}(x) = \mathbf{0} \quad (10.1)$$

である。S行列要素は、(9.27)より、

$$S_{fi} = i \frac{e}{\hbar} \varepsilon_f \int d^4x \bar{\psi}_f(x) \gamma_\mu A^\mu(x) \Psi_i(x) \quad (10.2)$$

で与えられる。ここでは始状態と終状態が異なるものとした。 $\Psi_i(x)$ は電磁相互作用を受けたディラック方程式にしたがう粒子を記述している。今、摂動の最低次を考察しているので $\Psi_i(x)$ は平面波、

$$\psi_i(x) = \sqrt{\frac{m_e c^2}{E_i V}} u(p_i, s_i) e^{-\frac{i}{\hbar} p_i x} \quad (10.3)$$

に置き換える事ができる。これは運動量 p_i スピン s_i を持った平面波である。ここで、

$$p x = p_\mu x^\mu$$

と略記した。また、体積 V の中に電子が一つ存在するという規格化条件を採用した。実際、

$$\int_V |\psi_i(x)|^2 d^3x = 1 \quad (10.4)$$

が成り立つ。また、終状態は、

$$\bar{\psi}_f(x) = \sqrt{\frac{m_e c^2}{E_f V}} \bar{u}(p_f, s_f) e^{\frac{i}{\hbar} p_f x} \quad (10.5)$$

である。(10.2)に(10.1), (10.3), (10.5)を代入して計算すると、

$$\begin{aligned} S_{fi} &= i \frac{k_0 Z e^2}{c \hbar} \frac{1}{V} \frac{m_e c^2}{\sqrt{E_f E_i}} \bar{u}(p_f, s_f) \gamma^0 u(p_i, s_i) \int d^4 x \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (p_f - p_i) x}}{|x|} \\ &= i \frac{k_0 Z e^2}{c \hbar} \frac{1}{V} \frac{m_e c^2}{\sqrt{E_f E_i}} \bar{u}(p_f, s_f) \gamma^0 u(p_i, s_i) \int_{-\infty}^{+\infty} c dt e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 x \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (p_f - p_i) \cdot x}}{|x|} \end{aligned} \quad (10.6)$$

である。だが空間に関する積分は普通にはできないので、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d^3 x \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (p_f - p_i) \cdot x - \frac{|x|}{a}}}{|x|} = \frac{4\pi \hbar^2}{|\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i|^2 + \frac{\hbar^2}{a^2}} \quad (10.7)$$

を用いる。ここで、クーロンポテンシャルでは $a \rightarrow \infty$ と考えられる。よって、

$$S_{fi} = i \frac{k_0 Z e^2}{\hbar} \frac{1}{V} \frac{m_e c^2}{\sqrt{E_f E_i}} 4\pi \hbar^2 \frac{\bar{u}(p_f, s_f) \gamma^0 u(p_i, s_i)}{|\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i|^2} 2\pi \hbar \delta(E_f - E_i) \quad (10.8)$$

である。 $\alpha \equiv \frac{k_0 e^2}{c \hbar}$, $\mathbf{q} \equiv \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i$ とし、入射された電子ごとに、(10.5)の状態に遷移する確率は、

$$\begin{aligned} P_{fi} &= |S_{fi}|^2 \frac{V d^3 p_f}{(2\pi \hbar)^3} \\ &= \frac{Z^2 \alpha^2 m_e^2 c^6}{E_i V^2} (4\pi \hbar^2)^2 \frac{|\bar{u}(p_f, s_f) \gamma^0 u(p_i, s_i)|^2}{|\mathbf{q}|^4} \frac{V d^3 p_f}{(2\pi \hbar)^3 E_f} \left(2\pi \hbar \delta(E_f - E_i)\right)^2 \end{aligned} \quad (10.9)$$

である。ここで、

$$2\pi \hbar \delta(E_f - E_i) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t} dt \quad (10.10)$$

が成り立つので、 T が十分に大きいとして、

$$2\pi \hbar \delta(E_f - E_i) \rightarrow \int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t} dt \quad (10.11)$$

という置き換えをすると、

$$\left(2\pi \hbar \delta(E_f - E_i)\right)^2 \rightarrow 2\pi \hbar \delta(E_f - E_i) \int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t} dt \rightarrow 2\pi \hbar \delta(E_f - E_i) T \quad (10.12)$$

と置き換えられる。ここで $\delta(E_f - E_i)$ がかかっているので $e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t}$ を1として積分した。よっ

て、単位時間あたりに遷移する確率は、

$$R_{fi} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{P_{fi}}{T} = 4 \frac{\hbar^2 Z^2 \alpha^2 m_e^2 c^6}{E_i V} \frac{|\bar{u}(p_f, s_f) \gamma^0 u(p_i, s_i)|^2}{|\mathbf{q}|^4} \frac{d^3 p_f}{E_f} \delta(E_f - E_i) \quad (10.13)$$

である。

10.2 散乱断面積について

散乱断面積は単位面積を単位時間あたりに入射する粒子の数のうち単位時間あたりに散乱される粒子の数なので、

$$\frac{R_{fi}}{|\mathbf{J}_i|} = \frac{R_{fi}}{\frac{|\mathbf{v}_i|}{V}} \quad (10.14)$$

である。単位面積を単位時間あたりに入射する粒子数を、

$$|\mathbf{J}_i| = \frac{|\mathbf{v}_i|}{V} \quad (10.15)$$

とした。上式において V の中に粒子が1個存在するという規格化をした。(10.13)と(10.14)と

$d^3 p_f = |\mathbf{p}_f|^2 d|\mathbf{p}_f| d\Omega$ を用いて、微分断面積 $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ は、

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4 \frac{\hbar^2 Z^2 \alpha^2 m_e^2 c^6}{E_i |\mathbf{v}_i|} \frac{|\bar{u}(p_f, s_f) \gamma^0 u(p_i, s_i)|^2}{|\mathbf{q}|^4} \frac{|\mathbf{p}_f|^2 d|\mathbf{p}_f|}{E_f} \delta(E_f - E_i) \quad (10.16)$$

である。ここで $|\mathbf{p}_f|$ に関する積分は積分記号を明記していないが暗黙の内に実行されると考えることにする。相対論的な関係式を用いると、

$$\frac{c^4}{E_i |\mathbf{v}_i|} \frac{|\mathbf{p}_f|^2 d|\mathbf{p}_f|}{E_f} \delta(E_f - E_i) \rightarrow 1 \quad (10.17)$$

が導かれるので、

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4 \frac{\hbar^2 Z^2 \alpha^2 m_e^2 c^2}{|\mathbf{q}|^4} |\bar{u}(p_f, s_f) \gamma^0 u(p_i, s_i)|^2 \quad (10.18)$$

であることが分かる。

10.3 微分断面積について

(10.18)を簡単にして計算するため、スピンについて観測をしないような場合を考える。このとき、始状態のスピン状態は未知であるとし平均を取り、終状態に関してはあらゆる可能性を考慮に入れて和を取る。そうすると、微分断面積は

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega} = 4 \frac{\hbar^2 Z^2 \alpha^2 m_e^2 c^2}{|\mathbf{q}|^4} \frac{1}{2} \sum_{\pm s_f, \pm s_i} |\bar{u}(p_f, s_f) \gamma^0 u(p_i, s_i)|^2 \quad (10.19)$$

である。まずスピノルの部分を計算しよう。

$$\begin{aligned}
& \sum_{\pm s_f, \pm s_i} |\bar{u}(p_f, s_f) \gamma^0 u(p_i, s_i)|^2 \\
&= \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\gamma, \delta} \sum_{\pm s_f, \pm s_i} \bar{u}_\alpha(p_f, s_f) \gamma_{\alpha\beta}^0 u_\beta(p_i, s_i) \cdot \bar{u}_\gamma(p_i, s_i) \gamma_{\gamma\delta}^0 u_\delta(p_f, s_f) \\
&= \sum_{\alpha, \delta} \sum_{\pm s_f} \bar{u}_\alpha(p_f, s_f) \left(\gamma^0 \frac{\gamma_\mu p_i^\mu + m_e c}{2m_e c} \gamma^0 \right)_{\alpha\delta} u_\delta(p_f, s_f) \\
&= \sum_{\alpha, \delta} \left(\gamma^0 \frac{\gamma_\mu p_i^\mu + m_e c}{2m_e c} \gamma^0 \right)_{\alpha\delta} \left(\frac{\gamma_\nu p_f^\nu + m_e c}{2m_e c} \right)_{\delta\alpha} \\
&= \text{Tr} \left(\gamma^0 \frac{\gamma_\mu p_i^\mu + m_e c}{2m_e c} \gamma^0 \frac{\gamma_\nu p_f^\nu + m_e c}{2m_e c} \right)
\end{aligned} \tag{10.20}$$

である。上の計算で、

$$|\bar{u}(p_f, s_f) \gamma^\mu u(p_i, s_i)|^2 = [\bar{u}(p_f, s_f) \gamma^\mu u(p_i, s_i)] [\bar{u}(p_i, s_i) \gamma^\mu u(p_f, s_f)] \tag{10.21}$$

$$\sum_{\pm s_i} u_\beta(p_i, s_i) \bar{u}_\gamma(p_i, s_i) = \left(\frac{\gamma_\mu p_i^\mu + m_e c}{2m_e c} \right)_{\beta\gamma} \tag{10.22}$$

$$\sum_{\pm s_f} u_\delta(p_f, s_f) \bar{u}_\alpha(p_f, s_f) = \left(\frac{\gamma_\mu p_f^\mu + m_e c}{2m_e c} \right)_{\delta\alpha} \tag{10.23}$$

という公式を用いた。 $E \equiv E_i = E_f$ と $|\mathbf{p}| \equiv |\mathbf{p}_f| = |\mathbf{p}_i|$ と $\beta \equiv \frac{c|\mathbf{p}|}{E}$ をもちいて、トレースを計算すると、

$$\text{Tr} \left(\gamma^0 \frac{\gamma_\mu p_i^\mu + m_e c}{2m_e c} \gamma^0 \frac{\gamma_\nu p_f^\nu + m_e c}{2m_e c} \right) = \frac{2E^2}{m_e^2 c^4} \left(1 - \beta^2 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right) \tag{10.24}$$

となる。(10.24)を(10.19)に代入すると、

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega} &= 4 \frac{\hbar^2 Z^2 \alpha^2 m_e^2 c^2}{|\mathbf{q}|^4} \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\gamma^0 \frac{\gamma_\mu p_i^\mu + m_e c}{2m_e c} \gamma^0 \frac{\gamma_\nu p_f^\nu + m_e c}{2m_e c} \right) \\
&= 4 \frac{\hbar^2 Z^2 \alpha^2}{|\mathbf{q}|^4 c^2} E^2 \left(1 - \beta^2 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right)
\end{aligned} \tag{10.25}$$

がなりたつ。ここで θ は $\mathbf{p}_f$ と $\mathbf{p}_i$ の成す角である。これを

$$|\mathbf{q}|^2 = 4 \frac{\beta E}{c} |\mathbf{p}| \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \tag{10.26}$$

を用いて変形すると、

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega} = \frac{1}{4} \frac{\hbar^2 Z^2 \alpha^2}{|\mathbf{p}|^2 \beta^2 \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right)} \left(1 - \beta^2 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right) \tag{10.27}$$

であることが分かる。上式は非相対論的極限

$$|\mathbf{p}| \rightarrow mv_0 \quad \beta \rightarrow \frac{v_0}{c} \quad 1 - \beta^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \rightarrow 1 \quad (10.28)$$

のもとで非相対論的なときの結果と一致する。相対論的量子力学に基づいた結果と古典力学に基づいた(非相対論的量子力学でボルン近似を用いて計算した)結果の微分断面積を比較してみよう。そのために次の量を導入する。

$$R = \frac{\text{古典力学での微分断面積}}{\text{相対論的量子力学での微分断面積}} = \frac{c^2 |\mathbf{p}|^2 \beta^2}{m^2 v_0^4 \left(1 - \beta^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right)} \quad (10.29)$$

簡単のため $\theta = \pi$ かつ有効数字3桁で、 R を計算すると下の表のようになる。

v_0	0.10c	0.20c	0.30c	0.40c	0.50c	0.60c	0.70c	0.80c	0.90c
R	1.00	1.08	1.20	1.41	1.77	2.44	3.84	7.63	27.4

これを見ると入射速度が光速の30%ぐらいまでは、非相対論的な結果とかなり近い。しかし、入射速度が光速の50%を超えると、非相対論的な効果はかなり顕著に現れている。さらに R が1より大きいことから、非相対論的な結果の方が、相対論的な結果よりも大きいことがわかる。ここでおもしろいのは、最低次の摂動近似での計算だと**量子論の効果が現れていない**ということだ。おそらく量子論の効果を実感するためにはより高次の摂動を考慮する必要があるそうである。

第 11 章 コンプトン散乱

最後に、コンプトン散乱と電子・陽電子散乱について考察する。

11.1 コンプトン散乱について

11.1.1 コンプトン散乱の S 行列要素

まずコンプトン散乱とは光子と電子の散乱で、電子に光子がぶつかって弾き飛ばされる現象である。ここからは光子の散乱角を θ とする。この散乱は散乱が2回起きるので、S 行列要素は2次が最低次のオーダーである。さらにコンプトン散乱には区別できない過程が2つあるので、S 行列要素は、

$$S_{fi} = -i \left(\frac{e}{\hbar}\right)^2 \int d^4x \int d^4y \bar{\psi}_f(y) [\gamma_\mu A^\mu(y; q') S_F(y; x) \gamma_\nu A^\nu(x; q) + \gamma_\mu A^\mu(y; q) S_F(y; x) \gamma_\nu A^\nu(x; q')] \psi_i(x) \quad (11.1)$$

で与えられる。始状態は運動量 $\mathbf{p}_i$ スピン s_i を持った平面波

$$\psi_i(x) = \sqrt{\frac{m_e c^2}{E_i V}} u(p_i, s_i) e^{-\frac{i}{\hbar} p_i x} \quad (11.2)$$

であり、同様に終状態は、

$$\bar{\psi}_f(x) = \sqrt{\frac{m_e c^2}{E_f V}} \bar{u}(p_f, s_f) e^{\frac{i}{\hbar} p_f x} \quad (11.3)$$

で与えられる。 $A^\mu(x; q)$ は運動量 q^μ , 偏極ベクトル ε^μ をもつ光子を表す平面波

$$A^\mu(x; q) = \frac{\hbar \varepsilon^\mu}{\sqrt{2 E V \varepsilon_0}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} q x} + e^{\frac{i}{\hbar} q x} \right) \quad E = q^0 c \quad (11.4)$$

である。(11.4)が、ローレンスゲージ

$$\partial_\mu A^\mu = 0 \quad (11.5)$$

の元での Maxwell 方程式の解であるとする、

$$q_\mu q^\mu = 0 \quad q_\mu \varepsilon^\mu = 0 \quad (11.6)$$

を満たす。 $A^\mu(y; q')$ も同様である。(11.1)に(9.11), (11.2), (11.3), (11.4)を代入すると、

$$\begin{aligned} S_{fi} &= -i \left(\frac{e}{\hbar} \right)^2 \frac{\hbar^2}{c \varepsilon_0} \int d^4 x \int d^4 y \frac{m_e c^2}{V^2} \frac{1}{\sqrt{E_f E_i}} \frac{1}{\sqrt{2 q'^0 2 q^0}} \bar{u}(p_f, s_f) \gamma_\mu \varepsilon'^\mu \\ &\quad \times \int \frac{d^4 p}{(2\pi\hbar)^4} \frac{\hbar}{\gamma_\nu p^\nu - m_e c} e^{-\frac{i}{\hbar} p(y-x)} \gamma_\alpha \varepsilon^\alpha u(p_i, s_i) \\ &\quad \times e^{\frac{i}{\hbar} p_f x} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} q' y} + e^{\frac{i}{\hbar} q' y} \right) \left(e^{-\frac{i}{\hbar} q x} + e^{\frac{i}{\hbar} q x} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} p_i x} \\ &\quad - i \left(\frac{e}{\hbar} \right)^2 \frac{\hbar^2}{c \varepsilon_0} \int d^4 x \int d^4 y \frac{m_e c^2}{V^2} \frac{1}{\sqrt{E_f E_i}} \frac{1}{\sqrt{2 q'^0 2 q^0}} \bar{u}(p_f, s_f) \gamma_\mu \varepsilon^\mu \\ &\quad \times \int \frac{d^4 p}{(2\pi\hbar)^4} \frac{\hbar}{\gamma_\nu p^\nu - m_e c} e^{-\frac{i}{\hbar} p(y-x)} \gamma_\alpha \varepsilon'^\alpha u(p_i, s_i) \\ &\quad \times e^{\frac{i}{\hbar} p_f x} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} q y} + e^{\frac{i}{\hbar} q y} \right) \left(e^{-\frac{i}{\hbar} q' x} + e^{\frac{i}{\hbar} q' x} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} p_i x} \\ &= -i \left(\frac{e}{\hbar} \right)^2 \frac{\hbar^2}{c \varepsilon_0} \frac{m_e c^2}{V^2} \frac{1}{\sqrt{E_f E_i}} \frac{1}{\sqrt{2 q'^0 2 q^0}} \bar{u}(p_f, s_f) \gamma_\mu \varepsilon'^\mu \\ &\quad \times \int d^4 p (2\pi\hbar)^4 \frac{\hbar}{\gamma_\nu p^\nu - m_e c} \gamma_\alpha \varepsilon^\alpha u(p_i, s_i) \delta^4(p - (p_f + q')) \delta^4(p - (p_i + q)) \\ &\quad - i \left(\frac{e}{\hbar} \right)^2 \frac{\hbar^2}{c \varepsilon_0} \frac{m_e c^2}{V^2} \frac{1}{\sqrt{E_f E_i}} \frac{1}{\sqrt{2 q'^0 2 q^0}} \bar{u}(p_f, s_f) \gamma_\mu \varepsilon^\mu \\ &\quad \times \int d^4 p (2\pi\hbar)^4 \frac{\hbar}{\gamma_\nu p^\nu - m_e c} \gamma_\alpha \varepsilon'^\alpha u(p_i, s_i) \delta^4(p - (p_f - q)) \delta^4(p - (p_i - q')) \\ &= \left(\frac{e}{\hbar} \right)^2 \frac{\hbar^2}{c \varepsilon_0} \frac{m_e c^2}{V^2} \frac{1}{\sqrt{E_f E_i}} \frac{1}{\sqrt{2 q'^0 2 q^0}} (2\pi\hbar)^4 \delta^4(p_f + q' - (p_i + q)) \end{aligned}$$

$$\times \bar{u}(p_f, s_f) \left[(-i\gamma_\mu \varepsilon'^\mu) \frac{i\hbar}{\gamma_\nu p_i^\nu + \gamma_\nu q^\nu - m_e c} (-i\gamma_\alpha \varepsilon^\alpha) \right. \\ \left. + (-i\gamma_\mu \varepsilon^\mu) \frac{i\hbar}{\gamma_\nu p_i^\nu - \gamma_\nu q'^\nu - m_e c} (-i\gamma_\alpha \varepsilon'^\alpha) \right] u(p_i, s_i)$$

であるので、

$$S_{fi} = \left(\frac{e}{\hbar} \right)^2 \frac{\hbar^2}{c\varepsilon_0} \frac{m_e c^2}{V^2} \frac{1}{\sqrt{E_f E_i}} \frac{1}{\sqrt{2q'^0 2q^0}} (2\pi\hbar)^4 \delta^4(p_f + q' - (p_i + q)) \\ \times \bar{u}(p_f, s_f) \left[(-i\gamma_\mu \varepsilon'^\mu) \frac{i\hbar}{\gamma_\nu p_i^\nu + \gamma_\nu q^\nu - m_e c} (-i\gamma_\alpha \varepsilon^\alpha) + (-i\gamma_\mu \varepsilon^\mu) \frac{i\hbar}{\gamma_\nu p_i^\nu - \gamma_\nu q'^\nu - m_e c} (-i\gamma_\alpha \varepsilon'^\alpha) \right] u(p_i, s_i) \quad (11.7)$$

となる。なお $i\varepsilon$ は省略した。(11.7)より、コンプトン散乱のS行列要素は、以下の対称性を以下の対称性を持っていることがわかる。

1. 交差対称性：光子の入れ替え $q^\mu, \varepsilon^\mu \leftrightarrow -q'^\mu, \varepsilon'^\mu$ の元で不変である。
2. ゲージ対称性：運動量空間でのゲージ変換にたいして不変である。

次は散乱断面積などを考えよう。

11.1.2 コンプトン散乱の散乱断面積と微分断面積

散乱断面積は運動量を変数に含み、それらを全て積分することで全断面積を得ることができる。積分(運動量にたいして)が行われるまえの散乱断面積を $d\sigma$ のように表記する。このとき、

$$d\sigma = \frac{|S_{fi}|^2}{\frac{|\mathbf{v}_i|}{V}} \frac{V d^3 p_f}{(2\pi\hbar)^3} \frac{V d^3 q'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{T} \\ = \frac{e^4}{(c\varepsilon_0)^2 V^4} \frac{m_e^2 c^4}{E_f E_i} \frac{1}{2q'^0 2q^0} \left[(2\pi\hbar)^4 \delta^4(p_f + q' - (p_i + q)) \right]^2 \frac{V}{|\mathbf{v}_i|} |M_{fi}|^2 \frac{V d^3 p_f}{(2\pi\hbar)^3} \frac{V d^3 q'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{T} \\ = \frac{e^4 m_e^2 c^5}{(c\varepsilon_0)^2 (2\pi\hbar)^4 q^0 |\mathbf{v}_i| E_i} \delta^4(p_f + q' - (p_i + q)) |M_{fi}|^2 \frac{d^3 p_f}{2E_f} \frac{d^3 q'}{2q'^0} \quad (11.8)$$

である。ここで、

$$M_{fi} = \bar{u}(p_f, s_f) \left[(-i\gamma_\mu \varepsilon'^\mu) \frac{i\hbar}{\gamma_\nu p_i^\nu + \gamma_\nu q^\nu - m_e c} (-i\gamma_\alpha \varepsilon^\alpha) \right. \\ \left. + (-i\gamma_\mu \varepsilon^\mu) \frac{i\hbar}{\gamma_\nu p_i^\nu - \gamma_\nu q'^\nu - m_e c} (-i\gamma_\alpha \varepsilon'^\alpha) \right] u(p_i, s_i) \quad (11.9)$$

とした。この M_{fi} は不変振幅と呼ばれる量である。また、 T と V が十分大きいとして、

$$\left[(2\pi\hbar)^4 \delta^4(p_f + q' - (p_i + q)) \right]^2$$

$$\begin{aligned} &\rightarrow (2\pi\hbar)^4 \delta^4(p_f + q' - (p_i + q)) \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \int_V d^4x \\ &= (2\pi\hbar)^4 \delta^4(p_f + q' - (p_i + q)) cTV \end{aligned}$$

のような置き換えを行った。実験室系では始状態の電子が固定されているので、 $E_i = m_e c^2$ である。これをもちいて、 q' に関する立体角をのぞく運動量についての積分をすると、

$$d\Omega_{q'} \int_0^\infty \frac{|q'|^2 d|q'|}{2q'^0} \int_{-\infty}^\infty \frac{cd^3p_f}{2E_f} \delta^4(p_f + q' - (p_i + q)) = \frac{|q'|^2}{4m_e c |q|} d\Omega_{q'} \quad (11.10)$$

であることがわかる。ただし、 $q_0 = |q|$, $q'^0 = |q'|$, $\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' = |q||q'| \cos(\theta)$ とした。また、

$$|q'| = \frac{|q|}{1 + \frac{|q|}{m_e c} (1 - \cos(\theta))} = \frac{|q|}{1 + \frac{2|q|}{m_e c} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (11.11)$$

という関係が成り立つ。こうして、電子のスピン状態 s_i と光子の偏極状態 ε^μ から、スピン状態 s_f と偏極状態 ε'^μ への遷移過程での微分断面積は、

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{q'}} = \alpha^2 \left(\frac{|q'|}{|q|} \right)^2 |M_{fi}|^2 \quad (11.12)$$

である。

11.1.3 クライン-仁科の公式

実験室系から見て光子が横波成分に偏極しているようなゲージ

$$\varepsilon^\mu = (0, \boldsymbol{\varepsilon}) \quad \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{q} = 0 \quad \varepsilon'^\mu = (0, \boldsymbol{\varepsilon}') \quad \boldsymbol{\varepsilon}' \cdot \mathbf{q}' = 0 \quad (11.13)$$

を選ぶ。このとき、 $\varepsilon^\mu p_{i\mu} = 0$ $\varepsilon'^\mu p_{i\mu} = 0$ が成り立つ。始状態での電子のスピン状態は未知として平均をとり、終状態ではすべての状態を考慮して和を取ると、

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{q'}} &= \frac{1}{2} \sum_{\pm s_f, \pm s_i} \frac{d\sigma}{d\Omega_{q'}} \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{4m_e^2 c^2} \left(\frac{|q'|}{|q|} \right)^2 \left[\frac{|q'|}{|q|} + \frac{|q|}{|q'|} + 4(\boldsymbol{\varepsilon}' \cdot \boldsymbol{\varepsilon})^2 - 2 \right] \end{aligned} \quad (11.14)$$

を得ることができる。これはクライン-仁科の公式と呼ばれ、陽電子発見以前はディラックの理論の実験的検証であった。 $\mathbf{q} \rightarrow 0$ のような低エネルギーの極限では、(11.14)は

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{q'}} = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m_e^2 c^2} (\boldsymbol{\varepsilon}' \cdot \boldsymbol{\varepsilon})^2 \quad (11.15)$$

となる。これはトムソンの断面積に一致する。

11.1.4 コンプトン散乱の全断面積

始状態の光子の偏極状態が未知だとし、平均をとり、終状態ではあらゆる可能性を足し合わせた場合について考えてみよう。このとき、光子の偏極状態に依存しない項は、

$$(\text{依存していない項}) \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{a=1,2} \sum_{a'=1,2} (\text{依存しない項}) = 2(\text{依存しない項}) \quad (11.16)$$

となる。 $(\varepsilon' \varepsilon)^2$ は、

$$\frac{1}{2} \sum_{a=1,2} \sum_{a'=1,2} (\varepsilon' \varepsilon)^2 = \frac{1}{2} (1 + \cos^2(\theta)) \quad (11.17)$$

となる。光子の偏極ベクトルに関しては、

$$\varepsilon^{\mu (a)} = (0, \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)}) \quad \varepsilon'^{\mu (a)} = (0, \boldsymbol{\varepsilon}'^{(a)}) \quad (11.18)$$

のように選んだ。ただしここで $a = 1, 2$ とする。 $\mathbf{q}$ と $\boldsymbol{\varepsilon}^{(a)}$, $\mathbf{q}'$ と $\boldsymbol{\varepsilon}'^{(a)}$ はそれぞれ直交するので、偏極ベクトルを下のように選んだ。

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}'^{(1)} = \cos(\theta) \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{(2)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}'^{(2)} = 1 \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}'^{(2)} = 0 \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{(2)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}'^{(1)} = 0 \quad (11.19)$$

(11.14)に(11.16)と(11.17)を適用すると、

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{q'}} &= 2 \times \frac{\hbar^2 \alpha^2}{4m_e^2 c^2} \left(\frac{|\mathbf{q}'|}{|\mathbf{q}|} \right)^2 \left[\frac{|\mathbf{q}'|}{|\mathbf{q}|} + \frac{|\mathbf{q}|}{|\mathbf{q}'|} + 4(\varepsilon' \varepsilon)^2 - 2 \right] \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m_e^2 c^2} \left(\frac{|\mathbf{q}'|}{|\mathbf{q}|} \right)^2 \left[\frac{|\mathbf{q}'|}{|\mathbf{q}|} + \frac{|\mathbf{q}|}{|\mathbf{q}'|} - \sin^2(\theta) \right] \end{aligned} \quad (11.20)$$

を得る。さらに、

$$\frac{|\mathbf{q}'|}{|\mathbf{q}|} = \frac{1}{1 + \frac{|\mathbf{q}|}{m_e c} (1 - \cos(\theta))} \quad (11.21)$$

と、 $z = \cos(\theta)$ としたとき、 $d\Omega_{q'} = -2\pi dz$ であることを用いて、コンプトン散乱の全断面積は、

$$\bar{\sigma} = \frac{\pi \hbar^2 \alpha^2}{m_e^2 c^2} \int_{-1}^1 dz \left(\frac{1}{1 + \frac{|\mathbf{q}|}{m_e c} (1 - z)^3} + \frac{1}{1 + \frac{|\mathbf{q}|}{m_e c} (1 - z)} - \frac{1 - z^2}{\left(1 + \frac{|\mathbf{q}|}{m_e c} (1 - z)\right)^2} \right) \quad (11.22)$$

とまとめることができる。この結果を吟味してみよう。まず、低エネルギー極限 $\frac{|\mathbf{q}|}{m_e c} \rightarrow 0$ のもとで、

$$\bar{\sigma} \rightarrow \frac{8\pi \hbar^2 \alpha^2}{3 m_e^2 c^2} \quad (11.23)$$

となる。これは定数なので、低エネルギーの場合、全断面積はほとんど一定であることがわかる。つぎに、 $\frac{|\mathbf{q}|}{m_e c} \gg 1$ のような高エネルギー極限を考えよう。(11.22)の積分の3つの項を吟味してみよう。まず、

$$\int_{-1}^1 dz \frac{1}{1 + \frac{|q|}{m_e c} (1-z)^3} = \frac{m_e c}{2|q|} \left[1 - \frac{1}{2 \left(1 + 2 \frac{|q|}{m_e c} \right)^2} \right] \approx \frac{m_e c}{|q|} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{16 \left(\frac{|q|}{m_e c} \right)^2} \right] \quad (11.24)$$

であり、次に、

$$\int_{-1}^1 dz \frac{1}{1 + \frac{|q|}{m_e c} (1-z)} = \frac{m_e c}{|q|} \ln \left(1 + 2 \frac{|q|}{m_e c} \right) \sim \frac{m_e c}{|q|} \ln \left(2 \frac{|q|}{m_e c} \right) \quad (11.25)$$

である。右辺第3項は積分を実行すると $\frac{|q|}{m_e c}$ のオーダーが1次ことなるので無視しよう。そう

すると、全断面積はだいたい、

$$\bar{\sigma} \approx \frac{\pi \hbar^2 \alpha^2}{|q| m_e c} \left[\ln \left(2 \frac{|q|}{m_e c} \right) + \frac{1}{2} + O \left(\frac{m_e c}{|q|} \ln \left(\frac{|q|}{m_e c} \right) \right) \right] \quad (11.26)$$

となる。これは $\ln \left(2 \frac{|q|}{m_e c} \right)$ が含まれているので、 $|q|$ が大きくなればなるほど、全断面積は大きくなると考えられるが、ある程度まであがると大きくなる割合が小さくなっていくことがわかる。つまり、ある程度あがると、ほぼ一定になる。

11.2 電子と陽電子の対消滅

突然だが、陽電子と電子の対消滅に関する S 行列要素は、

$$\begin{aligned} S_{fi} = & - \left(\frac{e}{\hbar} \right)^2 \frac{\hbar^2}{c \epsilon_0} \frac{m_e c^2}{V^2} \frac{1}{\sqrt{E_+ E_-}} \frac{1}{\sqrt{2 q_2^0 2 q_1^0}} (2\pi \hbar)^4 \delta^4(-p_+ + q_2 - p_- + q_1) \\ & \times \bar{v}(p_+, s_+) \left[(-i \gamma_\mu \epsilon_2^\mu) \frac{i \hbar}{\gamma_\nu p_-^\nu - \gamma_\nu q_1^\nu - m_e c} (-i \gamma_\alpha \epsilon_1^\alpha) \right. \\ & \left. + (-i \gamma_\mu \epsilon_1^\mu) \frac{i \hbar}{\gamma_\nu p_-^\nu - \gamma_\nu q_2^\nu - m_e c} (-i \gamma_\alpha \epsilon_2^\alpha) \right] u(p_-, s_-) \end{aligned} \quad (11.27)$$

のように与えられる。ここで E_+ は陽電子のエネルギー、 E_- は電子のエネルギー、 p_+ は陽電子の4元運動量、 s_+ は陽電子のスピン状態、 s_- は電子のスピン状態である。また、 q_1 と q_2 は散乱にかかわる二つの光子の4元運動量を表す。微分断面積は電子、陽電子ともにスピン状態が未知であるとし、平均をとって求めると、

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{q'}} = \frac{\hbar^2 \alpha^2 c (m_e c^2 + E_+)}{8 |\mathbf{p}_+| (m_e c^2 + E_+ - c |\mathbf{p}_+| \cos(\theta))^2} \left[\frac{|q_2|}{|q_1|} + \frac{|q_1|}{|q_2|} - 4(\epsilon_1 \epsilon_2)^2 + 2 \right] \quad (11.28)$$

となる。ただし、 $|q_1| = q_1^0$ 、 $|q_2| = q_2^0$ とし、

$$|q_1| = \frac{m_e c (m_e c^2 + E_+)}{m_e c^2 + E_+ - c |\mathbf{p}_+| \cos(\theta)} \quad (11.29)$$

$$|q_2| = \frac{E_+ - c|\mathbf{p}_+| \cos(\theta)}{m_e c^2} |q_1| \quad (11.30)$$

が成り立っている。ここでは電子が静止している系を採用し、光子が横波であるゲージを採用した。 θ は陽電子の入射方向と q_1 を有する光子の放射方向の成す角である。ここでおもしろいことに気づく。まず、電子と陽電子の対消滅に関する S 行列要素(11.27)とコンプトン散乱に関する S 行列要素(11.7)がかなり似た形をしている。さらに、微分断面積が両者すごく似ている。これはなぜだろうか。実は電子と陽電子の対消滅はファインマンダイアグラムとよばれる素粒子の反応を表すような図がコンプトン散乱のものを反時計回りに90度回転させたものと同じである。さらに、両者は、

$$\begin{aligned} q^\mu, \varepsilon^\mu &\leftrightarrow \varepsilon_1^\mu & -q_1^\mu, \varepsilon'^\mu, q'^\mu &\leftrightarrow \varepsilon_2^\mu, q_2^\mu \\ p_i^\mu, s_i^\mu &\leftrightarrow p_-^\mu & s_-^\mu, p_f^\mu, s_f^\mu &\leftrightarrow -p_+^\mu, s_+^\mu \end{aligned}$$

というおきかえにより関係している。このようなことから、両者の S 行列要素や微分断面積が似た形になっていたのである。

まとめと考察

ここからは先程までに述べたことを章ごとに振りかえって考えてみる。まず、第2章では量子力学での基本原理を述べた。この基本原理は何かから導出されるものというよりは、自然現象をうまく説明できるから用いられている原理であった。具体的には、複素ヒルベルト空間上の射線で状態ベクトルを表し、物理量を演算子に対応させ、物理量の値を得る確率はボルンの確率規則を用い、時間発展には Schrödinger 方程式を使った。さらに、計算をするために正準量子化を行い、よく見る形の Schrödinger 方程式などを導出した。第3章では第2章で与えられた原理などを用いて具体的な問題について考えた。自由粒子や調和振動子、波束、散乱などを扱った。自由粒子や調和振動子の考察からわかったのは量子論では、エネルギーなどが飛び飛びの値をとることがあり、最小のエネルギーが必ずしも0ではなく、最低でもある有限の値を取ることがあると分かった。三次元自由粒子の考察では、時間に依存しない Schrödinger 方程式が線形だったこともあって変数分離ができ、結果、波動関数はそれぞれの方向に独立して振動していてその積が波動関数全体であり、箱に粒子を閉じ込める場合、より狭い空間に閉じ込めた方が粒子が激しく振動することが分かった。また、その理由の候補として、狭い空間に閉じ込めるということは位置の不確定性が小さくなるので、相対的に不確定性原理より運動量が不確定になったからというものを考えた。さらに、箱の一部を取り除いて筒にしてそのなかに粒子を閉じ込めるような状況を考えると、自由に動ける方向の運動量が確定した状態となり、その他の方向は箱の中と同様に運動量は不確定になることがわかった。古典力学での粒子は量子力学での波束であることがわかった。波束は運動量と位置ともにある程度確定していて、測定誤差がゆらぎよりも大きいような場合は古典論での粒子と区別できない。波束の時間変化について考えると、波束は時間と共に規格化されたまま、一定速度で動き崩壊することがわかった。さらに始めに波束の幅を狭くとり

ことで、運動量の不確定性が増大し、さまざまな位相速度を持った波について足し合わせることになるので波束がすぐに崩壊した。また、(3.137)において $m \rightarrow \infty$ にすると、波束が時間的に変化しなくなり、決まった形で場に止まることがわかった。これは古典的な粒子が静止していることに対応すると考えられる。有限の高さの井戸型ポテンシャルでは、粒子のエネルギーがポテンシャルより小さいはずなのに、ポテンシャルの壁を少し染み出ることがわかった。これは非常に興味深い性質であり、真に量子論的な効果だと思われる。また、井戸の幅を狭くしていくと、エネルギー固有値の解が少なくなっていく。ポテンシャルの高さが無限大だと考えたときには、波動関数の染みだしも無くなった。一次元調和振動子を考えた際には、生成・消滅演算子を用いて、解を求めた。これらは、電磁場を量子化したりするときにも用いられる重要な概念らしい。調和振動子の興味深い特徴として、エネルギーが等間隔に量子化されている点にあった。最小でも $\frac{\hbar\omega}{2}$ だけはエネルギーがあった。これは直観的に述べれば、ゆらゆらと振動している状態にあたる。さらに、基底状態では、波動関数が、

$$\varphi_0(x) = A \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

と波束のような形をしていた。これはまるで古典論における調和振動子が束縛されているかのようなものである。トンネル効果の計算では、ポテンシャルの壁を粒子が有限の確率で透過することがわかった。ポテンシャルの壁が高いほど粒子が透過する確率が小さくなり、逆に低いほど、大きくなった。あるいは壁を薄くしていくと粒子が透過する確率がどんどん大きくなり、壁を太くすれば反射する確率が大きくなった。またここでおもしろいのは、今回考えたようなモデルでは反射か透過しかないということである。つまり、壁の中に粒子が居続けるようなことは起こりえない。最後にボルン近似という近似を用いて、クーロン散乱について考察した。これによって、散乱角が小さいほど微分断面積が大きい、つまり散乱されやすいことがわかった。また、クーロン散乱の微分断面積は量子力学を用いた結果と古典力学での結果が一致していることも知った。第4章では天下りのだが、特殊相対性理論を導入した。ここでは、Newton 力学でのガリレイ変換はローレンツ変換に置き換わり、力学などはローレンツ変換を受けてそれに適した形に変更された。また、真空中の Maxwell 方程式が非常に綺麗な形に変形され、Maxwell 方程式はローレンツ変換に対して不変であることを知った。第5章では先程の特殊相対性理論を量子力学に適応することを考えた。そのために必要な物理的な要請をかし、Dirac 方程式を導出した。さらに Dirac 方程式はスピンという量子力学での概念を極めて自然に導出し、Dirac 方程式の解はベクトルでもなく、テンソルでもないディラックスピノルと呼ばれる他成分のもので記述されることをみた。さらに Dirac 方程式のローレンツ変換性についても議論し、ディラックスピノルがどのようにローレンツ変換のもとで変換されるかをみた。そして、ディラックスピノルは空間回転のもとで2周すると元に戻るという変わったように感じる変換性を有していた。第6章では静止した電子を記述するものからローレンツブーストを用いてある種 Dirac 方程式を最導出した。さら

にディラックスピノルが満たす性質を求め、自由粒子の状態は運動量とスピン状態で決まることを知った。その後特定の運動量状態やスピン状態を取り出す射影演算子について考えた。第 7 章では負エネルギー解についてのディラックの解釈とファインマンの解釈を紹介した。そこで、ある種相対論的量子力学の限界を感じた。特にディラックの海という概念はかなり無理があると個人的には感じた。それでも、陽電子の存在を予言し、スピンを自然に記述した相対論的量子力学は非常に興味深いものだと感じた。さらに Dirac 方程式が荷電共役変換に対して不変であることを知った。この荷電共役変換に対しての対称性より、質量 m 、電荷 q を持つディラック方程式に従う粒子があれば、必ず質量 m 、電荷 $-q$ をもつ粒子が存在していることがわかった。この荷電共役変換の考察により、静止している電子に関するスピンが上向きの負エネルギー解の欠如は、静止している陽電子に関するスピン下向きの正エネルギー解の存在と等価であることなどがわかった。さらに Dirac 方程式は空間反転や時間反転のもとでも不変であることが分かった。よって、Dirac 方程式が記述する世界は鏡の中の世界と区別することができない。こうした考察からやはり感じるのは、物理学において対称性は非常に大きな武器であるということである。連続的な変換に対する対称性には保存則が対応するというおもしろい性質があったように、この荷電共役変換への対称性は反粒子を予言することがある。荷電共役変換と空間反転と時間反転の積変換である CPT 変換を電子の波動関数に行うことにより、時間に巡行して伝播する正エネルギーの陽電子は時間に逆行して伝播する負エネルギーの電子と等価であるという興味深い解釈ができることが分かった。第 8 章では、非相対論的な電子の伝搬理論について考えた。そこでは、散乱について計算するための概念などを導出した。伝搬関数はポテンシャルの影響を受け波がどれほど変化するかの重みのようなものだと思うと、あらゆる経路で散乱されたものを足し合わせて求めるというのが極めて自然に感じることを考えた。第 9 章では第 8 章の内容を相対論的なものにファインマンの解釈などを用いて書き換えた。第 10 章では第 9 章の内容を用いてクーロン散乱について再考した。そこでは、最低次の摂動で計算したために、微分断面積に相対論の効果は反映されたが、量子論の効果がしっかりと反映されなかった。量子論の効果を実感するためにはおそらくより高次の摂動を考慮して計算する必要があると考えられる。さらに、相対論を考慮しない微分断面積のほうが、大きく見積もられることもわかった。光速の90%ほどの速度で入射した場合、もはや相対論を考慮しない結果は使い物にならないこともわかった。第 11 章ではコンプトン散乱と電子と陽電子の対消滅について考えた。コンプトン散乱の S 行列要素は光子の入れ替えに対して対称であり運動量空間でのゲージ不変性を持っていた。さらに、電子と陽電子の対消滅に関する S 行列要素はコンプトン散乱のそれとそっくりであり、いくつかの量を入れ替えただけのものであり、微分断面積も非常に似た形になった。これは実はコンプトン散乱のファインマンダイアグラムを反時計回りに90度回転させると電子と陽電子の対消滅の図になるからかもしれないと考えた。

今後やりたいこと

今後は、第 10 章や第 11 章の内容をより高次の摂動で考えたりしてみたい。自分は 1 粒子についてしか考えなかったので、多粒子系などについても学んでみたい。さらに、相対論的量子力学の限界も感じたので、より高度な場の量子論などについても学習しこれらのことを再考したい。あとは、自分が知っている量子力学では Hamilton 形式を用いていたので Lagrange 形式の量子論などが作れないか考えてみたい。これまではミクロな物理学を学んできたので、マクロな系なども考えてみたい。いずれは素粒子論や物性物理などについても学び考えてみたいと考えている。

謝辞

研究部のアドバイザーの山下さんと事務局の方にはいろいろお世話になりました。また、有用なアドバイスをくれた全ての方にこの場を借りてお礼申し上げます。

参考文献

- 橋爪洋一郎. (2022). 『物理学レクチャーコース 物理数学』. 裳華房
- 近藤 慶一. (2022). 『物理数学講義—複素関数とその応用—』. 共立出版
- 村上 雅人. (2021). 『なるほどグリーン関数』. 海鳴社
- 小出昭一郎. (2022). 『基礎物理学選書 量子力学 〈1〉 (新装版)』. 裳華房
- エリ・デ・ランダウ(著). イェ・エム・リフシッツ(著). 恒藤 敏彦(訳). 広重 徹(訳). (2022). 『場の古典論 (原書第 6 版) (ランダウ=リフシッツ理論物理学教程)』. 東京図書
- 江沢 洋. (2008). 『基礎物理学選書 27 相対性理論』. 裳華房
- 清水 明. (2004). 『新物理学ライブラリ=別巻 2 新版 量子論の基礎 その本質のやさしい理解のために』. サイエンス社
- 川村嘉春. (2012). 『量子力学選書 相対論的量子力学』. 裳華房
- 日笠健一. (2014). 『ディラック方程式 相対論的量子力学と量子場理論』. サイエンス社
- J. J. サクライ(著). 樺沢 宇紀(訳). (2010). 『サクライ上級量子力学〈第 1 巻〉輻射と粒子』. 丸善プラネット
- J. J. サクライ(著). 樺沢 宇紀(訳). (2010). 『サクライ上級量子力学〈第 2 巻〉共変な摂動論』. 丸善プラネット
- 坂本眞人. (2014). 『量子力学選書 場の量子論—不変性と自由場を中心にして—』. 裳華房