ブラウン運動論と量子力学（Ⅱ）*

佐賀大・理工・化学　　竹　山　尚　賢

（10月8日受理）

§1　自由粒子の併進運動

自由粒子の一次元併進運動の波動方程式

$$-i\hbar\ {}^{\partial\psi}/_{\partial t} = ({}^{\hbar^2}/_{2m})\ {}^{\partial^2\psi}/_{\partial x^2} \tag{1}$$

を，時間の原点を t＝0 にえらび，波群とする目的で

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\psi\, dx = 有限$$

を条件として解くと，パラメータ a＞0 を用いて次の形に規格化された厳密解が求まる。[1)]

$$\psi = ({}^{ma}/_{\pi\hbar})^{1/4}\ (t - ia)^{-1/2} \times \exp\{-({}^{m}/_{2i\hbar})\ {}^{x^2}/_{(t-ia)}\}. \tag{2}$$

この解は規格化因子を別にして

$$\psi = \exp\{-({}^{m}/_{2\hbar})\ {}^{ax^2}/_{(a^2+t^2)}\} \times \exp\{+i({}^{m}/_{2\hbar})\ {}^{x^2 t}/_{(a^2+t^2)}\}, \tag{3}$$

となり，これを前報の

$$\psi = \exp({}^{R}/_{\hbar})\ \exp({}^{iS}/_{\hbar}) \tag{4}$$

に合せると

$$R = -\frac{ma}{a^2+t^2}\left(\frac{x^2}{2}\right) \tag{4·a}$$

---

*）　物性研究 12，№6（1969）415～429 を（Ⅰ）とする。

$$S = \frac{mt}{a^2+t^2}\left(\frac{x^2}{2}\right) \tag{4・b}$$

のように等置される。そこで“純拡散速度”u_xと“全移動速度”v_xとを，それぞれ計算し次式がえられる。

$$u_x \equiv m^{-1}\,\partial R/\partial x$$
$$= -\,ax/(a^2+t^2) \tag{5・a}$$

$$v_x \equiv m^{-1}\,\partial S/\partial x$$
$$= tx/(a^2+t^2) \tag{5・b}$$

また，これらと前向きおよび後向きの拡散速度 $\vec{v}^{(f)}$ および $\vec{v}^{(b)}$ との関係

$$\left.\begin{aligned} 2\,u_x &= v_x^{(f)} - v_x^{(b)} \\ 2\,v_x &= v_x^{(f)} + v_x^{(b)} \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

により，

$$v_x^{(f)} = (t-a)\,x/(a^2+t^2) \tag{6・a}$$

$$v_x^{(b)} = (t+a)\,x/(a^2+t^2) \tag{6・b}$$

が求まる。従って，量子過程（1）は，確率過程として位置空間における（Einstein-Smoluchowski process）Brown 運動となり，前向き過程に対しては

$$dx(t) = \{(t-a)\,x/(a^2+t^2)\}\,dt + dX(t) \tag{7・a}$$

において $X(t)$ が拡散係数 $D=\hbar/2m$ を有する Wiener 過程となり，一方，後向き過程に対しては

$$dx(t) = \{(t+a)\,x/(a^2+t^2)\}\,dt + dX'(t) \tag{7・b}$$

において $X'(t)$ が拡散係数 $D=\hbar/2m$ を有する Wiener 過程となる（いや，対応論的に等価である）。従って，それぞれに対して前向き拡散方程式

$$\left.\begin{aligned}\partial\rho/\partial t &= -(\partial/\partial x)(v_{d,x}^{(f)}\rho)\\ v_{d,x}^{(f)} &= -(\hbar/2m)\,\partial\ell n\rho/\partial x + v_x^{(f)}\end{aligned}\right\}\quad(8\cdot a)$$

が $\rho=\exp(2R/\hbar)$ に対して成立し，一方，後向き拡散方程式

$$\left.\begin{aligned}\partial\rho/\partial t &= -(\partial/\partial x)(v_{d,x}^{(b)}\rho)\\ v_{d,x}^{(b)} &= (\hbar/2m)\,\partial\ell n\rho/\partial x + v_x^{(b)}\end{aligned}\right\}\quad(8\cdot b)$$

が成立することとなる。これらは，$\rho=\exp(2R/\hbar)$ によって容易に確められるように同じ拡散方程式

$$\partial\rho/\partial t = -\partial/\partial x\,(v_x\rho) \qquad (9)$$

を与え，(5・b) により，正しく連続の方程式

$$\partial\rho/\partial t = -\operatorname{div}\left(\frac{\nabla S}{m}\rho\right) \qquad (10)$$

となっていることがわかる。すなわち，

$$v_x^{(f)} \neq v_x^{(b)} \qquad (6\cdot a\&6\cdot b)$$

にもかかわらず，拡散速度として

$$v_{d,x}^{(f)} = v_{d,x}^{(b)} = m^{-1}\,\partial S/\partial x \qquad (11)$$

が成立し，“力学的速度”が回復しているわけである（∵自由粒子）。

§2　電磁場が存在する1粒子系

非相対論の範囲でスピンが問題となるパウリの電子に進む前に電磁場が存在する場合を考察する。まず，

$$\left.\begin{aligned}\mathbf{H} &= \operatorname{rot}\mathbf{A}\\ \mathbf{E} &= -\operatorname{grad}\phi - c^{-1}\,\partial\mathbf{A}/\partial t\end{aligned}\right\}\quad(12)$$

によりベクトルポテンシャル**A**を用いるとき衆知のように運動量 $\vec{p}$ は

$$\vec{p} = m\vec{v} + (e/c)\,\mathbf{A} \tag{13·a}$$

であり，この $\vec{p}$ がスカラー関数 S の grad

$$\mathrm{grad}\ S = \vec{p} \tag{13·b}$$

として導出されるものと考えるとゲージ変換に対する不変性を

$$\left.\begin{aligned} &\mathrm{rot}\ \vec{p} = \mathrm{rot\ grad}\ S = 0 \\ &\text{あるいは} \\ &\mathrm{rot}\ \vec{v} = -(e/mc)\ \mathrm{rot}\ \mathbf{A} \\ &\qquad = -(e/mc)\ \mathbf{H} \end{aligned}\right\} \tag{14}$$

ととることができる。

考察下の系の Schrödinger 方程式は次式で与えられる。

$$i\hbar\,\partial\phi/\partial t = H\,\phi, \tag{15·a}$$

$$\begin{aligned} H &= (1/2m)\,\{\vec{p} - (e/c)\,\mathbf{A}\}^2 \\ &\quad + e\phi + U \\ &= \vec{p}^{\,2}/2m - (e/mc)\,\mathbf{A}\cdot\vec{p} \\ &\quad + i\hbar\,(e/2mc)\ \mathrm{div}\ \mathbf{A} + (e^2/2mc^2)\,\mathbf{A}^2 \\ &\quad + e\phi + U \end{aligned} \tag{15·b}$$

ただし，非電磁気的ポテンシャル U，$\vec{p} = -i\hbar\nabla$，$[\vec{p}, \mathbf{A}] = -i\hbar\ \mathrm{div}\ \mathbf{A}$ である。

これに対して

$$\phi = \exp\,(R/\hbar)\ \exp\,(iS/\hbar) \tag{16}$$

ととると，実数部分と虚数部分とに分れ，それぞれから次の2式がえられる。

$$\begin{aligned} \partial S/\partial t &= -(1/2m)\,(\nabla S)^2 - e\phi - U \\ &\quad + (e/mc)\,\mathbf{A}\cdot\nabla S - (e^2/2mc^2)\,\mathbf{A}^2 \\ &\quad + (1/2m)\,(\nabla R)^2 + (\hbar/2m)\,\Delta R, \end{aligned} \tag{17·a}$$

$$\partial R/\partial t = -(\hbar/2m)\,\Delta S - (1/m)\,\nabla R\cdot\nabla S$$
$$+ (e/mc)\,\mathbf{A}\cdot\nabla R + (e\hbar/2mc)\,\mathrm{div}\,\mathbf{A}. \qquad (17\cdot b)$$

ここで

$$\nabla S = m\{\vec{V} + (e/mc)\,\mathbf{A}\} \qquad (13\cdot a\ \&\ b)$$

とともに，純拡散速度 $\vec{u}$ を

$$\nabla R = m\vec{u} \qquad (18)$$

により導入し，(17･a & b) を整理すると，次式となる。

$$\partial S/\partial t = -(m/2)\,V^2 - e\phi - U$$
$$+ (m/2)\,u^2 + (\hbar/2)\,\mathrm{div}\,\vec{u} \qquad (19\cdot a)$$

$$\partial R/\partial t = -(\hbar/2)\,\mathrm{div}\,\vec{V} - m\,\vec{V}\cdot\vec{u} \qquad (19\cdot b)$$

上式の両辺の grad をとり，

$$m\,\partial\vec{v}/\partial t = -(m/2)\,\mathrm{grad}\,V^2 - e\nabla\phi - \nabla U$$
$$+ (m/2)\,\mathrm{grad}\,u^2 + (\hbar/2)\,\mathrm{grad}\,\mathrm{div}\,\vec{u}$$
$$- (e/c)\,\partial\mathbf{A}/\partial t$$
$$= -m\,(\vec{V}\times\mathrm{rot}\,\vec{V}) - m\vec{V}\cdot\nabla\vec{V}$$
$$+ e\mathbf{E} - \nabla U + m\vec{u}\cdot\nabla\vec{u}$$
$$+ (\hbar/2)\,\mathrm{grad}\,\mathrm{div}\vec{u}$$
$$= -\nabla U + e\{\mathbf{E} + (\vec{V}\times\mathbf{H})/c\}$$
$$- m\vec{V}\cdot\nabla\vec{V} + m\vec{u}\cdot\nabla\vec{u} + (\hbar/2)\,\mathrm{grad}\,\mathrm{div}\,\vec{u}, \qquad (20\cdot a)$$

(∵ (12), (14)) および

$$m\,\partial\vec{u}/\partial t = -(\hbar/2)\,\mathrm{grad}\,\mathrm{div}\,\vec{V}$$
$$- m\nabla(\vec{V}\cdot\vec{U}) \qquad (20\cdot b)$$

がえられる。$\vec{V}$は（14）により回転性であり，$\vec{u}$はそうでない点に留意すればよい。（20・a）は力のバランスの式に他ならず，“加速度”$\vec{a}$による運動方程式としては

$$m\vec{a} = m\,(d\vec{V}/dt)$$
$$= -\nabla U + e\left\{\mathbf{E} + \left(\frac{\vec{V}}{c}\times\mathbf{H}\right)\right\} \qquad (20\cdot c)$$

が成立することを示し，右辺第2項は“Lorentz力”に他ならない。当然のことながら，量子過程（15・a & b）は，依然

$$\partial\vec{V}/\partial t = \vec{a} - \vec{V}\cdot\nabla\vec{V} + \vec{u}\cdot\nabla\vec{u} + (\hbar/2m)\,\Delta\vec{u}$$
$$\partial\vec{u}/\partial t = -\nabla\,(\vec{V}\cdot\vec{u}) - (\hbar/2m)\ \mathrm{grad\ div}\,\vec{V} \qquad (21)$$

の組と同等である。

§3　Pauli Electron の系

ここでは非相対論のわく内で“spin”を登場させて考察することにする。電子の第4の自由度の発現にふれることはできないが，全く意味がないということにはなるまい。

スピンの方向を示す単位ベクトルを$\vec{s}$として“Pauli電子”の Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\ \partial\phi/\partial t = H\phi,$$
$$H = (1/2m)\{\vec{p} - (e/c)\,\mathbf{A}\}^2 + e\phi$$
$$- (e\hbar/2mc)\,(\vec{s}\cdot\mathbf{H}) \qquad (22')$$

で与えられる。これに

$$\phi = \exp\,(R/\hbar)\ \exp\,(iS/\hbar)$$

を用いたのではスピンの意味は殆んどなく，前節の結果に新しい外力が現われ，

$$m\vec{a} = e\{\mathbf{E} + c^{-1}(\vec{V}\times\mathbf{H})\} + (e\hbar/2mc)\times\nabla(\vec{s}\cdot\mathbf{H})$$

となるだけである。そこで$\vec{s}$に代り，Pauli のスピン行列σをとり，

$$H = (1/2m)\{\vec{p} - (e/c)\mathbf{A}\}^2 + e\phi - (e\hbar/2mc)(\sigma \mathbf{H}) \qquad (22)$$

とすることにしよう。この場合の波動方程式の解は，空間の回転に対してスピノルとして振舞い，これ迄のϕと異なり，2成分を必要とする。そこで

$$\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_1\\ a_2\end{pmatrix} \exp(R/\hbar)\exp(iS/\hbar), \qquad (23)$$

$$\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos(\theta/2)\cdot\exp(-i\varphi/2 - i\gamma/2)\\ \sin(\theta/2)\cdot\exp(+i\varphi/2 - i\gamma/2)\end{pmatrix}$$

ととることにする。ただし（θ，φ，γ）は Euler 角でθ，φが"spin"の方向を与えγが spin 軸のまわりの回転角にあたる。(23)を，ハミルトニアン（22）に対する波動方程式に代入すると，次式がえられる。

$$\begin{aligned} i\hbar\, a_1^{-1}\partial a_1/\partial t + i\,\partial R/\partial t - \partial S/\partial t &= -(\hbar/2m)\triangle(R+iS) - (1/2m)\{\nabla(R+iS)\}^2 \\ &+ i(e/mc)\mathbf{A}\cdot\nabla(R+iS) \\ &+ i\hbar(e/2mc)\,\mathrm{div}\,\mathbf{A} + (e^2/2mc^2)\mathbf{A}^2 \\ &+ e\phi - (e\hbar/2mc)\,a_1^{-1}\{a_1 H_z + a_2(H_x - iH_y)\}, \end{aligned} \qquad (24\cdot a)$$

$$\begin{aligned} i\hbar\, a_2^{-1}\partial a_2/\partial t + i\,\partial R/\partial t - \partial S/\partial t &= (\text{上式の第6項までと等しい部分}) \\ &- (e\hbar/2mc)\,a_2^{-1}\{a_1(H_x + iH_y) - a_2 H_z\}. \end{aligned} \qquad (24\cdot b)$$

(24・a & b) の右辺第6項迄は互いに等しく，かつ前節で既に処理した項だけである。

また，スピノルの成分に関する項は，R，S とは別個に両辺の対応する項を等置することにする。その際，(24) のままではスピンと磁場との相互作用に由来する力の項は脱落してしまうことが明らかである（このことは，W.K.B.

法適用に際して古くから指摘されている)。この欠陥を回避する為にハミルトニアン(22′)と(22)とを折中する。

すなわち，全く形式的に

$$H = (1/2m)\{\vec{p} - (e/c)\mathbf{A}\}^2 + e\phi - (e\hbar/2mc)(\vec{s}\cdot\mathbf{H}) + \underbrace{(e\hbar/2mc)(\vec{s}\cdot\mathbf{H})}_{} - \underbrace{(e\hbar/2mc)(\sigma\mathbf{H})}_{} \tag{25}$$

ととり，下に波線を付した部分を，スピノル成分の関与する部分として取扱っていけばよい。(24·a & b)に，この点を考慮してえられる式を次に示す。

$$m\,\partial\vec{V}/\partial t = m\vec{a} - m\vec{V}\cdot\nabla\vec{V} + m\vec{u}\cdot\nabla\vec{u} + (\hbar/2)\,\Delta\vec{u}, \tag{26·a}$$

$$m\,\partial\vec{u}/\partial t = -m\nabla(\vec{v}\cdot\vec{u}) - (\hbar/2)\,\mathrm{grad\,div}\,\vec{V}, \tag{26·b}$$

ただし，

$$\vec{a} = (e/m)\{\mathbf{E} + c^{-1}(\vec{V}\times\mathbf{H})\} + (e\hbar/2m^2c)\nabla(\vec{s}\cdot\mathbf{H}), \tag{26·a′}$$

これらと同時に，

$$i\,\partial a_1/\partial t = -(e\hbar/2mc)\{a_1H_z + a_2(H_x - iH_y)\} + (e\hbar/2mc)\,a_1(\vec{s}\cdot\mathbf{H}), \tag{26·c·1}$$

$$i\,\partial a_2/\partial t = -(e\hbar/2mc)\{a_1(H_x + iH_y) - a_2H_z\} + (e\hbar/2mc)\,a_2(\vec{s}\cdot\mathbf{H}) \tag{26·c·2}$$

の連立式がスピンの存在に対応して成立することになる。(26·c·1 & 2)は，すでに山崎氏が示しておられるように,[2] これらとして一応の物理的意義があり(ハミルトニアン(25)の人為的細工にもかかわらず)，

$$d(\hbar\vec{s}/2)/dt = -(e\hbar/2mc)(\vec{s}\times\mathbf{H}) \tag{27}$$

と正確に対応する

$$d\theta/dt = (e/mc)\,H_\varphi$$
$$d\varphi/dt = -(e/mc)\,H_\theta\,\mathrm{cosec}\,\theta \qquad (27')$$

に加えて，

$$d\gamma/dt = -(d\varphi/dt)\cos\theta$$
$$= (e/mc)\,H_\theta\cot\theta \qquad (27'')$$

を与え，最後の式は“spin”が決して古典的 spinning に当るものではないことを示すものである（$\because d\gamma = -d\varphi\cos\theta$）。

ただし，

$$H_\varphi = |\mathbf{H}|\ \sin\theta_0\ \sin(\varphi_0-\varphi),$$
$$H_\theta = |\mathbf{H}|\ \{-\cos\theta_0\ \sin\theta + \sin\theta_0\ \cos\theta\ \cos(\varphi_0-\varphi)\},$$

であり，$\mathbf{H}$の方向に関する Euler 角を（θ_0, φ_0）とした。

要するに Pauli 電子に対しては，

$$\psi = (\mathrm{spinor}) \times \exp(R/\hbar)\,\exp(iS/\hbar)$$

と２成分の波動関数をとることにより，spin を分離してとらえつつ，依然（26·a′）が自然に導かれ，それを外力と釣合う加速度として（26·a & b）が成立することがいえよう。ただし，非相対論のわく内では，ブラウン運動論的描像はスピンに対して全く無力である。

今回は後向きの姿勢を覚悟して，“力”の問題をめぐって当然ふれるべきことにふれた積りである。

参考文献

1） 坂井卓三，量子力学序論，裳華房（昭１９）１０１頁
2） 山崎久一，九大生産研報告，２２号（昭３２，１９５７）５５頁