ブラウン運動論と量子力学（Ⅷ）

佐賀大・理工・化学　　竹　山　尚　賢

（3月17日受理）

量子力学は相互に同格で移行可能な2つの描像 — Schrödinger picture と Heisenberg picture — とによつて支えられている。

前者の波動方程式からの連立偏微分方程式から後者の“行列力学”[1)]に移行する路を“定常状態”について探り，固有値問題を考察する。

§1　いもづる方式の固有値問題

われわれの基礎式は，次の連立式である。

$$\partial S/\partial t = -p^2/2m - U + p_d^2/2m + (\hbar/2m)\,\mathrm{div}\,\vec{p}_d, \qquad (1\cdot a)$$

$$\partial R/\partial t = -(1/m)(\vec{p}\cdot\vec{p}_d) - (\hbar/2m)\,\mathrm{div}\,\vec{p} \qquad (1\cdot b)$$

ただし，

$$\vec{p} = \nabla S\ , \qquad \vec{p}_d = \nabla R\ .$$

考えている系の量子力学的ハミルトニアンは，次式である。

$$H = \hat{p}^2/2m + U \qquad (1\cdot c)$$

この系の最低の定常状態をn＝1とし，そのエネルギー値を E_1 とする。定常状態を a) $\vec{p}=\nabla S=0$（静止系），及び b) $S=-E_1 t$ の2条件で特性づける。これにより，(1・b)が消え，(1・a)のみが次の形で残される。

$$\varepsilon_1 \equiv 2mE_1 = 2mU - p_d^2 - \hbar\,\mathrm{div}\,\vec{p}_d \qquad (2)$$

ハミルトニアンを次のように書き直す。

$$\mathcal{H} \equiv 2m(H - E_1 + E_1)$$

$$= \hat{p}^2 + p_d^2 + \hbar \,\mathrm{div}\, \vec{p}_d + \varepsilon_1$$

$$= (\hat{p} - i\vec{p}_d)(\hat{p} + i\hat{p}_d) + \varepsilon_1, \qquad (3)$$

ただし，　$[\hat{p}, \vec{p}_d] = -\, i\hbar \,\mathrm{div}\, \vec{p}_d$.

状態 n に一般化する為に定常状態 n の規格化固有ベクトル ψ_n とし，定義から，

$$\vec{p}_{d,n} = \hbar \nabla \ln \psi_n \qquad (4)$$

を導入する。固有値問題

$$\mathcal{H} \psi_n = \varepsilon_n \psi_n \qquad (4\cdot a)$$

は，

$$\varepsilon_n = 2mU - p_{d,n}^2 - \hbar \,\mathrm{div}\, \vec{p}_{d,n} \qquad (4\cdot b)$$

と同等であり，(3) と同様，ハミルトニアンを

$$\mathcal{H} = (\mathcal{H} - \varepsilon_n) + \varepsilon_n$$

$$= (\hat{p} - i\vec{p}_{d,n})(\hat{p} + i\vec{p}_{d,n}) + \varepsilon_n$$

$$= \Pi_n^* \Pi_n + \varepsilon_n \equiv \mathcal{H}_n \qquad (5)$$

と書くことができる。従つて

$$\mathcal{H} \psi = \varepsilon \psi \qquad (6)$$

を解くことは (5) に対する

$$\mathcal{H}_n \psi = \varepsilon \psi$$

$$= (\Pi_n^* \Pi_n + \varepsilon_n) \psi \qquad (7)$$

を解くことと同等である。ただし，

$$\Pi_n = \hat{p} + i\vec{p}_{d,n} \qquad (8)$$

いもづる方式の論理は，次のように示される。

いま，n＝1に対して，ハミルトニアンが

$$\mathcal{H} = \Pi_1^* \Pi_1 + \varepsilon_1 = \mathcal{H}_1 \qquad (9)$$

となつたとする。（7）から，n＝1に対し，

$$\psi^* \Pi_1^* \Pi_1 \psi = \varepsilon - \varepsilon_1 \geqq 0 \qquad (10)$$

従つて ε_1 は最低の固有値である。当然のことであるが，

$$\varepsilon = \varepsilon_1 \text{ の場合} \qquad \psi^* \Pi_1^* \Pi_1 \psi = 0 \qquad (10\cdot a)$$

となる。次にn＝2に対して（7）から

$$\mathcal{H}_2 = \Pi_2^* \Pi_2 + \varepsilon_2 \qquad (11)$$

であるが，問題は（9），（11）…… と個別的に解くというので全く意味がなく，この間に残される $\Pi_1\ \Pi_1^*$ の役割である。

一般に $[\Pi_n,\ \Pi_n^*] \neq 0$ であり，交換関係として次式が成立する。

$$[\Pi_n,\ \Pi_n^*] = -2\hbar\ \mathrm{div}\ \vec{p}_{d,n} \qquad (12)$$

ところでn＝2までを考えたとき，2次代数方程式

$$(\varepsilon - \varepsilon_1)(\varepsilon - \varepsilon_2) = 0$$

の根として固有値が求まる。従つて，

$$\psi^* \Pi_1^* \Pi_1 \psi = \varepsilon - \varepsilon_1 \qquad (a)$$

に続いて

$$\psi^* \Pi_1^* \Pi_2^* \Pi_2 \Pi_1 \psi = (\varepsilon - \varepsilon_1)(\varepsilon - \varepsilon_2) \geqq 0, \qquad (b)$$

となるように構成することを考える。

$$\begin{aligned}(b)\text{の左辺} &= \psi^* \Pi_1^* (\mathcal{H}_2 - \varepsilon_2) \Pi_1 \psi \\ &= \psi^* \Pi_1^* (\mathcal{H}_2 \Pi_1 - \Pi_1 \varepsilon_2) \psi \qquad (b')\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}&\mathcal{H}_2 \Pi_1 = \Pi_1 \mathcal{H} \\ &= \Pi_1 (\Pi_1^* \Pi_1 + \varepsilon_1) = (\Pi_1 \Pi_1^* + \varepsilon_1) \Pi_1\end{aligned}$$

すなわち

$$\mathcal{H}_2 = \Pi_1 \Pi_1^* + \varepsilon_1 \tag{13}$$

が成立することが，(b) となるために必要である。（代数的に閉じた体をなす為の条件であろうか？　十分かどうかはわからないが，固有値問題は，代数的には閉じた系におけるn次代数方程式の問題である。従つてその要素としての固有値 ε は，ε^n，ε^{n-1}，……，1の間の1次の関係を満す。）

(13) により，(b′) は次のようになる。

$$\begin{aligned}(\mathrm{b}') &= \psi^* \Pi_1^* \Pi_1 \,(\mathcal{H} - \varepsilon_2)\, \psi \\ &= \psi^* (\mathcal{H} - \varepsilon_1)(\mathcal{H} - \varepsilon_2)\, \psi \\ &= (\varepsilon - \varepsilon_1)(\varepsilon - \varepsilon_2) = (\mathrm{b})\end{aligned}$$

まとめると，

$$\left.\begin{aligned}\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 &= \Pi_1^* \Pi_1 + \varepsilon_1, \\ \mathcal{H}_2 &= \Pi_1 \Pi_1^* + \varepsilon_1 \\ &= \Pi_2^* \Pi_2 + \varepsilon_2\end{aligned}\right\} \tag{14}$$

となり，状態1から状態2への励起エネルギーが

$$\varepsilon_2 - \varepsilon_1 = \Pi_1 \Pi_1^* - \Pi_2^* \Pi_2 \tag{15}$$

で与えられることとなる。換言すると，ε_1 を基準として定常状態2の“ハミルトニアン” $\mathcal{H}_2$ が生じ，そこでは基準状態1と同様に因数分解が保証される。陽に示すと，

$$\varepsilon_1 = 2mU - p_{d,1}^2 - \hbar \,\mathrm{div}\, \vec{p}_{d,1} \;,$$

$$\Pi_1 \Pi_1^* = \hat{p}^2 + p_{d,1}^2 - \hbar \,\mathrm{div}\, \vec{p}_{d,1}$$

従つて演算子の関係として，

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_2 &= \hat{p}^2 + 2mU - 2\hbar \,\mathrm{div}\, \vec{p}_{d,1} \\ &= \mathcal{H}_1 + [\Pi_1, \Pi_1^*]\end{aligned} \tag{15·a}$$

$$= \hat{p}^2 + p_{d,1}^2 - \hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,1} + \varepsilon_1 \qquad (15\cdot b)$$

$$= \hat{p}^2 + p_{d,2}^2 + \hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,2} + \varepsilon_2 \qquad (15\cdot c)$$

あるいは，固有値間の関係として

$$\varepsilon_2 - \varepsilon_1 = p_{d,1}^2 - p_{d,2}^2 - \hbar \operatorname{div}(\vec{p}_{d,1} + \vec{p}_{d,2})$$

$$= (\vec{p}_{d,1} - \vec{p}_{d,2} - \hbar \nabla)\cdot(\vec{p}_{d,1} + \vec{p}_{d,2}) \qquad (15\cdot d)$$

が成立し，いずれも問題の拡散項がリアルな役割を演ずることがわかる。*)

---

*)　（15・a）は量子力学的ハミルトニアン $\mathfrak{h}=2mH$ に基準状態１における状態密度の拡散的ひろがりの“ポテンシャル項”

$$[\Pi_1, \Pi_1^*] = -2\hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,1}$$

$$= -\hbar^2 \Delta \ln \rho_1$$

（エネルギーとしては（1／2m）倍，また $\rho_1 = |\psi_1|^2$）が附加されて，状態２に対するハミルトニアン $\mathfrak{h}_2$ となつていることを示す。（15・b）で言えば，$\mathfrak{h}_2$ は，

$$2mU^{(1)} \equiv \varepsilon_1 + p_{d,1}^2 - \hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,1}$$

で与えられる基準状態１からのポテンシャル上で運動する粒子であることを示している。また（15・b）は（15・c）と釣合つて（15・d）を与えているのであるが，エネルギー準位差の中味が拡散の運動エネルギー差と拡散のポテンシャルとであることを示している。

（14）の一般化として，次の演算子関係をとる。

$$\mathfrak{h}_n = \Pi_{n-1}\Pi_{n-1}^* + \varepsilon_{n-1}, \qquad (16\cdot a)$$
$$(n > 1)$$

$$\mathfrak{h}_n = \Pi_n^* \Pi_n + \varepsilon_n \qquad (16\cdot b)$$

また（16・a）の両辺に右から Π_{n-1} を作用して次式がえられる。

$$\mathscr{H}_n \Pi_{n-1} = \Pi_{n-1}(\Pi_{n-1}^{*} \Pi_{n-1} + \varepsilon_{n-1})$$
$$= \Pi_{n-1} \mathscr{H}_{n-1} \tag{16·c}$$

また（16·a）−（16·b）から

$$\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n = \Pi_n \Pi_n^{*} - \Pi_{n+1}^{*} \Pi_{n+1} \tag{16·d}$$

これらにより固有値問題が次の形に完結する。

$$\psi^{*} \Pi_1^{*} \Pi_2^{*} \cdots\cdots \Pi_n^{*} \Pi_n \cdots\cdots \Pi_2 \Pi_1 \psi$$
$$= \psi^{*} \Pi_1^{*} \Pi_2^{*} \cdots\cdots \Pi_{n-1}^{*} (\mathscr{H}_n - \varepsilon_n) \Pi_{n-1} \cdots\cdots \Pi_2 \Pi_1 \psi$$
$$= \psi^{*} \Pi_1^{*} \Pi_2^{*} \cdots\cdots \Pi_{n-1}^{*} \Pi_{n-1} (\mathscr{H}_{n-1} - \varepsilon_n) \Pi_{n-2} \cdots\cdots \Pi_2 \Pi_1 \psi$$
$$= \psi^{*} \Pi_1^{*} \Pi_2^{*} \cdots\cdots \Pi_{n-1}^{*} \Pi_{n-1} \cdots\cdots \Pi_2 \; \Pi_1 (\mathscr{H} - \varepsilon_n) \psi$$
$$= \psi^{*} \Pi_1^{*} \Pi_2^{*} \cdots\cdots \Pi_{n-1}^{*} \Pi_{n-1} \cdots\cdots \Pi_2 \Pi_1 \psi (\varepsilon - \varepsilon_n)$$

$$= (\varepsilon - \varepsilon_1)(\varepsilon - \varepsilon_2) \cdots\cdots (\varepsilon - \varepsilon_{n-1})(\varepsilon - \varepsilon_n) \geq 0 \tag{17}$$

ここで新しいベクトル

$$\phi_n = \Pi_n \cdots\cdots \Pi_2 \Pi_1 \psi,$$
$$\phi_n^{*} = \psi^{*} \Pi_1^{*} \Pi_2^{*} \cdots\cdots \Pi_n^{*} \tag{18}$$

を導入する。（17）から

$$\phi_n^{*} \phi_n = \phi_{n-1}^{*} (\mathscr{H}_n - \varepsilon_n) \phi_{n-1}$$
$$= \phi_{n-1}^{*} \phi_{n-1} (\varepsilon - \varepsilon_n) \tag{18·a}$$

$\varepsilon = \varepsilon_n$ で $\phi_{n-1}^{*} \phi_{n-1} > 0$ であるが，

$$\phi_n^{*} \phi_n = \phi_{n-1}^{*} \Pi_n^{*} \Pi_n \phi_{n-1}$$
$$= (18·a) = 0$$

であるから，

∴
$$\Pi_n^* \Pi_n \phi_{n-1} = (\mathcal{H}_n - \varepsilon_n)\phi_{n-1}$$
$$= 0 \qquad (18\cdot b)$$

あるいは，$\mathcal{H}_n \phi_{n-1} = \varepsilon_n \phi_{n-1}$ $\qquad (18\cdot b')$

が成立している。また（17）から

$$(\mathcal{H} - \varepsilon_n)\psi = (\varepsilon - \varepsilon_n)\psi = 0$$

であるから，依然 ψ_n に対し

$$\mathcal{H}\psi_n = \varepsilon_n \psi_n \ , \qquad (18\cdot c)$$

（18・b'）と比較して，

$$\psi_n = \phi_{n-1} \ . \qquad (18\cdot d)$$

（18・b）から

$$\Pi_n \phi_{n-1} = \Pi_n \psi_n = 0 \ , \qquad (18\cdot e)$$

あるいは $(\hat{p} + i\vec{p}_{d,n})\psi_n = 0$

$$\therefore \vec{p}_{d,n} = \hbar \nabla \ln \psi_n \qquad (19)$$

でなければならない。われわれの出発点の定義式そのものである。これはこの方式の self-consistency を保証する。

この形式の固有値問題は，Schrödinger によつて提唱され，[2] Infeld 及び Hull によつて確立され，[3] Green によつて応用分野が拡げられた“因数分解法”[4] と同等であると思われる。

§2. 例　　題

a）調和振動子：

$$H = a^2 \hat{p}^2 + b^2 \hat{q}^2 \ , \qquad (20)$$
$$(a, b > 0)$$

$$\mathcal{H} = a^{-2} H = \hat{p}^2 + (b/a)^2 \hat{q}^2 . \qquad (20\cdot 1)$$

いま，1次元で考えることとし，

$$p_{\hat{q}} = -(b/a)\hat{q} \tag{20·2}$$

ととる。これは $\hat{q}\to\infty$, $\psi\to 0$ となる

$$\psi \propto \exp(-bq^2/2a\hbar)$$

を予想してのことであり，単に（20·1）の因数分解としたのでは決らない。

$$\left.\begin{array}{l} \Pi \;= \hat{p} - i(b/a)\hat{q} \\ \Pi^* = \hat{p} + i(b/a)\hat{q} \end{array}\right\} \tag{20.3}$$

から，

$$\left.\begin{array}{l} \Pi^*\Pi \;= \mathcal{H} - \hbar(b/a) \\ \Pi\,\Pi^* = \mathcal{H} + \hbar(b/a) \end{array}\right\} \tag{20·4}$$

この場合ハミルトニアンをもち上げる励起は

$$[\Pi, \Pi^*] = 2\hbar(b/a), \tag{20·5}$$

また，

$$(1/2)(\Pi^*\Pi + \Pi\,\Pi^*) = \mathcal{H} \tag{20·6}$$

であることがわかる。これから，容易に次の交換関係がえられる。

$$[\mathcal{H}, \Pi^*] = 2\hbar(b/a)\Pi^*, \tag{20·7·a}$$

$$[\mathcal{H}, \Pi\,] = -2\hbar(b/a)\Pi \tag{20·7·b}$$

（20·4）で $\Pi^*\Pi$ の規格化固有ベクトルを ψ とし，その最低固有値を零とする。

$$\Pi^*\Pi\psi_0 = \{\mathcal{H} - \hbar(b/a)\}\psi_0 = 0 \tag{20·8}$$

$\mathcal{H}$ でいえば，その最低固有値を $\hbar(b/a)$ とし，固有ベクトルを ψ_0 とする。また（20·7·a）から Π^* が素励起を与えていく演算子であることが知れるので，

$$[\mathcal{H}, \Pi^*]\psi_0 = 2\hbar(b/a)\Pi^*\psi_0, \tag{20·9}$$

$$\psi_1 = \Pi^*\psi_0 \tag{20·10}$$

とすると，(20・9)は

$$\mathcal{H}\,\psi_1 = \{2\hbar(b/a) + \hbar(b/a)\}\,\psi_1$$

$$= \varepsilon_1\,\psi_1\ , \qquad (20\cdot10\cdot a)$$

また $\psi_1^*\psi_1 = \psi_0^*\,\Pi\,\Pi^*\,\psi_0$

$$= \psi_0^*\,\{\mathcal{H} + \hbar(b/a)\}\,\psi_0$$

$$= 2\hbar(b/a),\quad \psi_0^*\psi_0 = 1\ , \qquad (20\cdot10\cdot b)$$

一般化して，

$$\psi_n = \Pi^*\,\psi_{n-1}\ , \qquad (20\cdot11\cdot a)$$

$$\mathcal{H}\,\psi_n = (2n+1)\,\hbar(b/a)\,\psi_n$$

$$= \varepsilon_n\,\psi_n \qquad (20\cdot11\cdot b)$$

から，

$$\varepsilon_n = (2n+1)\,\hbar(b/a), \qquad (20\cdot11\cdot c)$$

$$E_n = a^2\,\varepsilon_n = (2n+1)\,\hbar\,a\,b \qquad (20\cdot11\cdot d)$$

が固有エネルギー値である。

一方，$\psi_n^*\psi_n = 2n\hbar(b/a)\,\psi_{n-1}^*\,\psi_{n-1}$

$$= n!\,(2\hbar\,b/a)^n \qquad (20\cdot11\cdot e)$$

エネルギーHの固有ベクトルとしては，

$$\varphi_n^*\,\varphi_n = a^{2n}\,\psi_n^*\psi_n$$

$$= n!\,(2\hbar\,a\,b)^n \qquad (20\cdot11\cdot f)$$

と規格化定数が求まる。$n=0$の状態については

$$\Pi\,\psi_0 = (\hat{p} - i\,b\,q/a)\,\psi_0$$

$$= -i\,(\hbar\nabla + b\,q/a)\,\psi_0$$

$$= 0$$

から，

$$\psi_0 = (2\pi a \hbar / b)^{1/2} \exp(-bq^2 a \hbar) \tag{20·12}$$

となり，以下順次 $\psi_1,\ \psi_2,\ \cdots\cdots,\ \psi_r$ を求めていけばよい。結果はよく知られている。

$$\left.\begin{aligned} \psi_n &= (\Pi^*)^n \psi_0 , \\ \varphi_n &= a^n \psi_n . \end{aligned}\right\} \tag{20·13}$$

b） 1電子原子（I）：

$$\mathcal{H} = 2mH = p_r^2 + \ell(\ell+1)\hbar^2/r^2 - 2mZe^2/r , \tag{21}$$

この系が球対称であることを考慮し，

$$\psi \sim r^\beta \exp(-\alpha r)$$

を想定して，

$$p_{d,j} = \hbar \nabla \ell n\, \psi_j = a_j + b_j / r, \tag{21·1}$$

ととる。

（21）の因数分解の方は当然のことである。

$$\Pi_j = p_r + i(a_j + b_j/r) \tag{21·2}$$

これによつて次の関係を作る。

$$\left.\begin{aligned} \Pi_j^* \Pi_j &= p_r^2 + a_j^2 + 2a_j b_j/r + b_j(b_j - \hbar)/r^2 \\ \Pi_j \Pi_j^* &= p_r^2 + a_j^2 + 2a_j b_j/r + b_j(b_j + \hbar)/r^2 \end{aligned}\right\} \tag{21·3}$$

$$[\Pi_j, \Pi_j^*] = 2\hbar b_j / r . \tag{21·4}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 &= \Pi_1^* \Pi_1 + \varepsilon_1 \\ &= p_r^2 + b_1(b_1 - \hbar)/r^2 + 2a_1 b_1/r + a_1^2 + \varepsilon_1 \end{aligned} \tag{21·5}$$

と書いて，（21）と比較し，未定の $a_1,\ b_1$ を決める。

$$\left.\begin{aligned} b_1(b_1 - \hbar) &= \ell(\ell+1)\hbar^2, \\ a_1 b_1 &= -mZe^2 \end{aligned}\right\} \tag{21·6}$$

とおいて，$a_1,\ b_1$ を定めると，（21·5）で

$$a_1^2 + \varepsilon_1 = 0 \tag{21·7}$$

でなければならぬ。(21·6) の解として，$b_1 = -\ell\hbar$，$(\ell+1)\hbar$ の２通りがでるが，ハミルトニアンに昇位を与える (21·4) が負となる解は不適。よつて，

$$b_1 = (\ell + 1)\hbar \tag{21·8·a}$$

を採用し，

$$a_1 = -mZe^2/(\ell+1)\hbar, \tag{21·8·b}$$

(21·7) から，

$$\varepsilon_1 = -m^2 Z^2 e^4/(\ell+1)^2 \hbar^2 \tag{21·9}$$

が求まる。$\mathcal{H}$ の最低固有値であることはいうまでもない。

ところで，状態 j → (j + 1) の励起エネルギーは (16·d) により，

$$\begin{aligned}\varepsilon_{j+1} - \varepsilon_j &= \Pi_j \Pi_j^* - \Pi_{j+1}^* \Pi_{j+1} \\ &= a_j^2 - a_{j+1}^2 + 2(a_j b_j - a_{j+1} b_{j+1})/r \\ &\quad + \{b_j(b_j+\hbar) - b_{j+1}(b_{j+1}-\hbar)\}/r^2\end{aligned} \tag{21·10}$$

この式の右辺第３項及び第４項は行列 $\mathcal{H}$ の対角化が成功した場合には本来消えるはずで，ここではそうなるように a，b を定めていく。

$$\left.\begin{aligned}a_j b_j &= a_{j+1} b_{j+1} \\ b_j(b_j+\hbar) &= b_{j+1}(b_{j+1}-\hbar)\end{aligned}\right\} \tag{21·11}$$

前者は (21·6) を考慮して

$$a_{j+1} b_{j+1} = a_j b_j = \cdots\cdots = a_1 b_1 = -mZe^2, \tag{21·12}$$

を意味する。

後者からは２通りの解が生じ，$b_{j+1} = -b_j$ からは，$a_{j+1} = -a_j$，従つて (21·10) が消えるので不適。そこで，$b_{j+1} = b_j + \hbar$ の場合をとる。

$$b_{j+1} = b_j + \hbar \tag{21·13}$$

は（21・8・a）を考慮すると，一般に

$$b_j = b_1 + (j-1)\hbar = (\ell + j)\hbar, \tag{21・14}$$

となる。結局，（21・10），（21・7）から

$$\varepsilon_{j+1} + a_{j+1}^2 = \varepsilon_j + a_j^2 = \cdots\cdots$$
$$= \varepsilon_1 + a_1^2 = 0 . \tag{21・15}$$

（21・12 & 14）から

$$a_j = -mZe^2/(\ell+j)\hbar \tag{21・16}$$

と定まり，（21・15）から

$$\varepsilon_j = -(m^2 Z^2 e^4/\hbar^2)(1/(\ell+j))^2, \tag{21・17}$$

あるいは

$$E_n = -(mZ^2 e^4/2\hbar^2)n^{-2}, \tag{21・18}$$

ただし，　$n = \ell + j$

（$\ell \geq 0$，$j > 0$ の整数），

が求まる。

（18・e）からの

$$0 = \Pi_j \psi_j = \{p_r + i(a_j + b_j/r)\}\psi_j$$
$$= [p_r + i\{-mZe^2/(\ell+j)\hbar + (\ell+j)\hbar/r\}]\psi_j \tag{21・19}$$

により，状態 $n = (\ell + j)$ の固有ベクトルとして

$$\psi_n \propto r^n \exp\{-(mZe^2/n\hbar^2)r\} \tag{21・20}$$

が求まる。

c）　1 電子原子（Ⅱ）：

b）のハミルトニアンでは角運動量は，量子化された場合

$$\mathbf{L}^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2$$

をとつていたが，ここでは単純に，

$$\mathcal{H}=\vec{p}^{\,2}-2k/r\,, \qquad (k=mZe^2) \tag{22}$$

として，逆に b) の結果を援用して進むことにする。$r=(\vec{q}^{\,2})^{1/2}$，$\vec{p}$ は $\vec{q}$ に関する運動量。角運動量 $\mathbf{L}=[\vec{q}\times\vec{p}]$ を導入して，容易に

$$\vec{p}^{\,2}=p_r^{\,2}+\mathbf{L}^2/r^2 \tag{22·1}$$

は示すことができる。前節の結果を用いて

$$\Pi_n=\vec{p}+i(n\hbar/r-k/n\hbar) \tag{22·2}$$

ととると，

$$\left.\begin{aligned}\Pi_n^*\Pi_n&=\mathcal{H}+k^2/n^2\hbar^2+n(n-1)\hbar^2/r^2\\ \Pi_n\Pi_n^*&=\mathcal{H}+k^2/n^2\hbar^2+n(n+1)\hbar^2/r^2\end{aligned}\right\} \tag{22·3}$$

$$[\Pi_n,\Pi_n^*]=2n\hbar^2/r^2 \tag{22·4}$$

従つて

$$\begin{aligned}\mathcal{H}&=\mathcal{H}_1=\Pi_1^*\Pi_1-k^2/\hbar^2=\Pi_1^*\Pi_1+\varepsilon_1\,,\\ \mathcal{H}_2&=\Pi_1\Pi_1^*+\varepsilon_1=\mathcal{H}_1+2\hbar^2/r^2\\ &=\Pi_2^*\Pi_2-k^2/2^2\hbar^2\\ &=\Pi_2^*\Pi_2+\varepsilon_2\,,\end{aligned}$$

－－－－－－－－－－－－－－－－－

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_n&=\Pi_{n-1}\Pi_{n-1}^*+\varepsilon_{n-1}\\ &=\mathcal{H}_{n-1}+2(n-1)\hbar^2/r^2\\ &=\Pi_n^*\Pi_n-k^2/n^2\hbar^2\\ &=\Pi_n^*\Pi_n+\varepsilon_n\end{aligned} \tag{22·5}$$

がチエツクされる。ハミルトニアンの昇位の系列

$$(\mathcal{H}=\mathcal{H}_1),\ \xrightarrow{2\hbar^2/r^2}\ \mathcal{H}_2,\ \xrightarrow{4\hbar^2/r^2}\ \mathcal{H}_3,\ \xrightarrow{6\hbar^2/r^2}\ \cdots\cdots,\ \mathcal{H}_{n-1},\ \xrightarrow{2(n-1)\hbar^2/r^2}\ \mathcal{H}_n \tag{22·6}$$

を考えてみよう。（22・3）から直ちにいえることであるが，次の関係が成立する。

$$\mathcal{H}_n = \mathcal{H} + n(n-1)\hbar^2/r^2 \qquad (22\cdot7)$$

$[\mathcal{H}, L^2] = 0$ であるから，$\mathcal{H}$ の固有ベクトルは L^2 のそれでもあり，

$$\mathcal{H}_n \psi_n = \{\mathcal{H} + n(n-1)\hbar^2/r^2\}\psi_n$$
$$= \varepsilon_n \psi_n$$

の中に，$L^2 \psi_n = \lambda^{(n)} \psi_n$ の固有値

$$\lambda^{(n)} = n(n-1)\hbar^2 , \qquad (22\cdot8\cdot a)$$
$$(n = 1,\ 2,\ \cdots\cdots)$$

が出ているわけで，

$$\ell = n - 1 , \qquad (\ell = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots\cdots)$$

と量子数をとりかえて，

$$\lambda^{(n)} = \ell(\ell+1)\hbar^2 \qquad (22\cdot8\cdot b)$$

となる。（22・6）のハミルトニアンの昇位の系列は，1電子原子の場合，ℓ の飛びがもたらしていることになる。当然のことであろう。この昇位を与えている関係は，

$$[\Pi_n, \Pi_n^*] = 2n\hbar^2/r^2$$
$$= -2\hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,n} \qquad (\because (12))$$
$$= -2\hbar \triangle \ln \psi_n$$

であるから，

$$\triangle \ \ln \psi_n = -n\hbar/r^2 \qquad (22\cdot9)$$

これはポテンシャル $\ln \psi_n$ を決める Poisson の式とみられよう。いう迄もなく，これもまた，

$$\ln \psi_n = n \ln r - \mathrm{const}\cdot r$$

$$\therefore \psi_n \sim r^n \exp(-\mathrm{const}\cdot r)$$

を意味している。

§3 考　察

今回は，Schrödinger の波動方程式から導かれ，“Brown 運動論的”描像がよつてたつ基礎式（1・a & b）を起点として“定常状態”に移り，行列力学との関連を求めて，固有値問題を考えた。とり扱つた例題は初歩的なものだけであるが，それは今回の目的にもよつている。ここにもまた，先達がいて“Faktorisierungsverfahren”と同等であることがわかつた。従つて，固有値問題として新方式であることはいえない。しかしながら，相互連関性は，かなり明瞭にできたと思う。すなわち行列力学における因数分解法の意義は“拡散の運動量”の具像化にあり，そのことを意識しないと，成功はおぼつかない。（4）の導入による（4・b）は，

$$\vec{p}_d = \hbar \nabla \ln \psi \ ,$$

$$2mE = 2mU - p_d^2 - \hbar\, \mathrm{div}\, \vec{p}_d$$

は，　$\mathrm{div}\, \vec{p}_d = \hbar(\triangle\psi/\psi) - \hbar(\nabla \ln \psi)^2$

であるから，Schrödinger 方程式

$$-(\hbar^2/2m)\triangle\psi + U\psi = E\psi$$

そのものである。この点 Bohm の量子ポテンシヤルによつたのでは，どうどうめぐりにおち込む。それを回避できて各状態のエネルギー準位がでてきたのは，（16・a），（16・b）の漸化式によつて，この行列代数系が閉じた為である。原理的には，閉じていることは当然のことであるが，（16・a）がそれを保証したことになつている。主役は，（12）がになつている。

References

1) M.Born und P.Jordan, Elementare Quantenmechanik, (Verlag von J.Springer, Berlin, 1930).

2) E.Schrödinger, Proc. Roy. Irish Acad., A 46, 9, 183 (1940) ; ibid., A 47, 53 (1941).

3) L.Infeld and T.E.Hull, Rev. Mod. Phys., 23, 21 (1951).

4) H.S.Green, Phys. Rev., 90, 270 (1953) ; Nuclear Phys., 54, 565 (1964) ; and also see "Quantenmechanik in algebraischer Darstellung," by H.S.Green, translated from English by W.Schmidt, (Springer-Verlag, Berlin, 1966).