

固有値問題における 因数分解法の必要十分条件

佐賀大・理工・工化 竹山尚賢

(8月2日受理)

§ 1. はじめに

E. Nelson がいう Stochastic Mechanics⁽¹⁾ について考察を進めてきたが⁽²⁾、こと定常状態になると Nelson の解釈はいけない。例えば、水素原子の問題について彼のいうところは次の通り⁽³⁾。 $m = e^2 = \hbar = 1$ のクーロン単位で、その基底状態は波動関数 $\psi = \pi^{-1/2} \exp(-r)$ で与えられ、量子力学では系の状態の完全な記述を与える。確率論的力学では電子がマルコフ過程

$$dx(t) = -\{x(t)/|x(t)|\} dt + dw(t) \quad (N)$$

をなすこととなり、ここに $w(t)$ は拡散係数 $1/2$ のウィーナー過程である。(中略) その電子は極めて複雑な無秩序のトラジェクトリーをえがいて、局所的にはウィーナー過程のそれのように運動し、時間の向きにはかかわりなく原点に向っていくという一定の傾向を示すことになる。この場合、通常の拡散と驚くべき類似性がある。(以下略)

当然、定常状態のとらえ方、及び固有値問題の処方箋が問題とならなければならぬ。

ハミルトニアン

$$\hat{H} = \hat{p}^2 / 2m + U(\hat{q}), \quad (1)$$

$$[\hat{p}, \hat{q}] = -i\hbar$$

に対する波動方程式

$$i\hbar \partial\psi / \partial t = \hat{H}\psi \quad (2)$$

は

竹山尚賢

$$\begin{aligned}\psi &= \rho^{1/2} \exp(iS/\hbar) \\ &= \exp(R/\hbar) \exp(iS/\hbar)\end{aligned}\quad (3)$$

といて非線型連立偏微分方程式

$$\partial S/\partial t = -p^2/2m - U + \partial^2/2m + (\hbar/2m) \operatorname{div} \vec{\partial} \quad (4.a)$$

$$\partial R/\partial t = -(1/m)(\vec{p} \cdot \vec{\partial}) - (\hbar/2m) \operatorname{div} \vec{p} \quad (4.b)$$

がえられ、これらの両辺の grad をとったものが Nelson の Stochastic Mechanics の基礎式である。ただし

$$\vec{p} \equiv \nabla S ; \vec{\partial} \equiv \nabla R = (\hbar/2) \nabla \ln \rho \quad (5)$$

である。

既に示したように定常状態を次の2条件で特徴づける。 i) $S = -Et + \text{const.}$, ii) $\nabla S = \vec{p} = 0$ 。これらにより (4.a) のみが次の形で残される。

$$\begin{aligned}2mE &= 2mU - \partial^2 - \hbar \operatorname{div} \vec{\partial} \\ &\equiv \varepsilon\end{aligned}\quad (6)$$

ここで Schrödinger の定常波動関数 ψ を $\vec{\partial} = \hbar \nabla \ln |\psi|$ により導入すると、(6) は

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (6')$$

に他ならないことが容易に確かめられる。ところで (6) が単に (6') の書きかえに終るのであれば全くつまらない。それどころか対数による余計な発散をもちこむだけ有害でさえある。そこで (6') が解けるとか解けないとかということを考えてみると E の既約な整式 $f(E)$ に対する分解体

$$(E-E_1)(E-E_2) \cdots (E-E_n) = 0 \quad (7)$$

あるいは $\varepsilon = 2mE$ についての

$$(\varepsilon-\varepsilon_1)(\varepsilon-\varepsilon_2) \cdots (\varepsilon-\varepsilon_n) = 0 \quad (7')$$

が求まることである。(6') の2階偏微分方程式の固有値問題を $f(E \text{ or } \varepsilon)$

固有値問題における因数分解法の必要十分条件

$= 0$ の代数方程式の根 (E_1, E_2, \dots, E_n) の全体を求める問題にしておいて (6) が (7') の形になる必要十分条件を示そうというのがここでの問題である。

1930年代の大家達 Morse, Rosen, Teller, Pöschel らは解析関数による驚くべきポテンシャルを考案し、誠に真摯に固有値問題 (6') ととりくんでいる。結局は解が求まるようにポテンシャルを手加減したのかどうか、私には判らないが、とにかく念入りに解析的に解いていることは確かである。(6) を (6') にすりかえると、かつて行列力学の時代“超越代数”を駆使して代数的に解いたのとは違って全く“初等代数”により解けること、これが (6) の価値といっても過言ではない。

§ 2. 問題の提起

いま定常状態 j に対する (6) は次式。

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_j &= 2mU - \rho_j^2 - \hbar \operatorname{div} \vec{\rho}_j, \\ \vec{\rho}_j &= (\hbar/2) \nabla \ln \rho_j \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_j &= 2m\hat{H} - \epsilon_j + \epsilon_j \\ &= \hat{p}^2 + \rho_j^2 + \hbar \operatorname{div} \vec{\rho}_j + \epsilon_j \end{aligned} \quad (9)$$

(状態 j に対するハミルトニアンと呼ぶことにする) を考えると、交換関係 $[\hat{p}, \vec{\rho}_j] = -i\hbar \operatorname{div} \vec{\rho}_j$ にさえ注意すれば (9) は次のように表わせる。

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_j &= (\hat{p} - i\vec{\rho}_j)(\hat{p} + i\vec{\rho}_j) + \epsilon_j \\ &= \mathbf{P}_j^* \mathbf{P}_j + \epsilon_j \end{aligned} \quad (10)$$

ただし、(既報の \vec{p}_d は $\vec{\rho}$ に、 Π は \mathbf{P} に記号を変更させて頂きます)

$$\mathbf{P}_j = \hat{p} + i\vec{\rho}_j; \quad \mathbf{P}_j^* = \hat{p} - i\vec{\rho}_j \quad (11)$$

である。

ここで基底状態 $j=1$ に対して

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 = \mathbf{P}_1^* \mathbf{P}_1 + \epsilon_1 \quad (12 \cdot a)^*$$

が求まったとして

$$(\mathcal{H} - \epsilon) \Psi = 0 \quad (12 \cdot b)$$

の固有値問題を考える。

これが演算子 (11) により

$$\Psi^* \prod_{j=1}^n P_j^* \prod_{j'=n}^1 P_{j'} \Psi = \prod_{j=1}^n (\epsilon - \epsilon_j) \geq 0 \quad (13)$$

の形の分解体となる為の必要十分条件は次の漸化式が成立することである。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{j+1} &= P_{j+1}^* P_{j+1} + \epsilon_{j+1} \\ &= P_j P_j^* + \epsilon_j \end{aligned} \quad (14)$$

固有値の全体は (13) の最小分解体により求まる。

*) こうかくと、では (12・a) をどうかののかという問いがすぐ出そうであるが、それは量子力学的ハミルトニアンをにらんで、未定係数を含む未定関数 $g(\hat{q})$ により仮りの

$$\bar{P}_1 = \hat{p} + i g(\hat{q}), \quad \bar{P}_1^* = \hat{p} - i g(\hat{q})$$

をつくり

$$\begin{aligned} 2m\hat{H} &= \hat{p}^2 + 2mU(\hat{q}) \\ &= \bar{P}_1^* \bar{P}_1 + \epsilon_1 \end{aligned}$$

を比較する。これは

$$2mU(\hat{q}) = g^2(\hat{q}) + \hbar \operatorname{div} g(\hat{q}) + \epsilon_1$$

であるが、結局ポテンシャル ($\times 2m$) と等しくなるように未定関数を定めることとなり (未定係数まで含めて)、定数項が和の形で出てくるが、それが $\epsilon_1 = 2mE_1$ と釣り合い最低エネルギー固有値を与える。すなわち、

$$\begin{aligned} g^2 + \hbar \operatorname{div} g &= h(\hat{q}) + k, \\ h(\hat{q}) &= 2mU(\hat{q}), \end{aligned}$$

となって $h(\hat{q})$ が定まり、はね出された定数項 k が $k + \epsilon_1 = 0$, $\epsilon_1 = -k$ により ϵ_1 を与える。未定係数を含む未定関数といってもポテンシャルが初等解析関数 (及びその和) である限り、初等関数でことたりる。正しい $h(\hat{q})$ を与える関数 $g_0(\hat{q})$ が定まると、これにより正しい P_1 及び P_1^* が定まる。

この方式の固有値問題の解法は H.S.Green が小冊子にまとめている“因数分解法”であり、⁽⁴⁾それによると E.Schrödinger (Proc. Roy. Irish Acad. A 46, 9(1940); 47, 53(1941)) の創意による由。不幸にも私は原報をみるてだてがない。どなたか御教え下さるか、文献のありかを御知らせ下さるとありがたい。このようなわけで (14) が必要十分であることが確立されているかどうか、知りません。Green はテクニックとして駆使しているようで、変形のいわれの詳細、使用する条件の吟味も明らかではありません。しかし問題が問題ですから少々考えてみることにします。

§ 3. 必要十分条件であること

漸化式 (14) が (13) の左辺から右辺に移るために必要であることは、比較的容易にわかる。まず、(14) の右から P_j を作用して、

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{j+1} P_j &= P_j (P_j^* P_j + \epsilon_j) \\ &= P_j \mathcal{M}_j \end{aligned} \tag{15}$$

の関係がえられる。これを漸化式として活用する。(13) の左辺は $j = n$ に対する (10) によって

$$\begin{aligned} &\Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* P_n^* P_n \prod_{j'=n-1}^1 P_{j'} \Psi \\ &= \Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* (\mathcal{M}_n - \epsilon_n) \prod_{j'=n-1}^1 P_{j'} \Psi \\ &= \Psi^* \prod_{j=1}^{n-2} P_j^* P_{n-1}^* (\mathcal{M}_n - \epsilon_n) P_{n-1} \prod_{j'=n-2}^1 P_{j'} \Psi \end{aligned} \tag{A}$$

となる。(15) で $j = n - 1$ とおいてえられる関係

$$\mathcal{M}_n P_{n-1} = P_{n-1} \mathcal{M}_{n-1} \tag{15'}$$

により、

$$(A) = \Psi^* \prod_{j=1}^{n-2} P_j^* P_{n-1}^* P_{n-1} (\mathcal{M}_{n-1} - \epsilon_n)$$

$$\times \prod_{j'=n-2}^1 P_{j'} \Psi$$

次に (15) で $j = n-2$ ととって $\mathcal{X}_{n-1} P_{n-2} = P_{n-2} \mathcal{X}_{n-2}$ により順次添字 j が下りながら入れ換えが進み、最後に

$$(A) = \Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* \prod_{j'=n-1}^1 P_{j'} (\mathcal{X}_1 - \epsilon_n) \Psi$$

となるが、(12·a & b) により、くり出されて

$$(A) = \left(\Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* \prod_{j'=n-1}^1 P_{j'} \Psi \right) (\epsilon - \epsilon_n)$$

全く同様にして

$$(A) = \left(\Psi^* \prod_{j=1}^{n-2} P_j^* \prod_{j'=n-2}^1 P_{j'} \Psi \right) (\epsilon - \epsilon_{n-1})$$

$$\times (\epsilon - \epsilon_n)$$

$$= \prod_{j=1}^n (\epsilon - \epsilon_j)$$

となり、(13) の右辺となる。

十分条件であることを示すのは少しばかり厄介であるが、(13) の右辺から出発して左辺に至るのに漸化式 (14) のみが働くことを示せばよいであろう。

$$\prod_{j=1}^n (\epsilon - \epsilon_j) = \{ \Psi^* (\mathcal{X} - \epsilon_1) \Psi \} \times \prod_{j=2}^n (\epsilon - \epsilon_j)$$

ここで (12·a) により、 $\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 = P_1^* P_1 + \epsilon_1$ であったから、これを使って

$$\prod_{j=1}^n (\epsilon - \epsilon_j) = (\Psi^* P_1^* P_1 \Psi) \prod_{j=2}^n (\epsilon - \epsilon_j)$$

$$= \{ \Psi^* P_1^* P_1 (\mathcal{X}_1 - \epsilon_2) \Psi \} \prod_{j=3}^n (\epsilon - \epsilon_j)$$

$$= \{ \Psi^* P_1^* P_1 (P_1^* P_1 + \epsilon_1 - \epsilon_2) \Psi \} \times \prod_{j=3}^n (\epsilon - \epsilon_j) \quad (B)$$

{ } の中で

$$\begin{aligned} P_1^* P_1 (P_1^* P_1 + \epsilon_1 - \epsilon_2) \\ = P_1^* (P_1 P_1^* + \epsilon_1 - \epsilon_2) P_1 \end{aligned}$$

と並べかえて、(14) で $j=1$ とおいた関係

$$\mathcal{X}_2 = P_2^* P_2 + \epsilon_2 = P_1 P_1^* + \epsilon_1$$

を使って (B) は、次のようになる。

$$(B) = (\Psi^* P_1^* P_2^* P_2 P_1 \Psi) \prod_{j=3}^n (\epsilon - \epsilon_j)$$

全く同様にして (14) で $j=2, 3, \dots, (n-2)$ のように順次とって、従って漸化式 (14) を $(n-2)$ 回反覆使用して、次式が成立するであろう。

$$(B) = (\Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* \prod_{j'=n-1}^1 P_{j'} \Psi) (\epsilon - \epsilon_n)$$

次の $(n-1)$ 回目の際しての経過を示せば、一応帰納法の論理により (13) の左辺から右辺に帰納するとみなされる。このとき (14) のみの反覆使用を確認すれば、これが十分条件であることの証明となる。

そこで (B) を (12-a & b) により

$$\begin{aligned} (B) &= \Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* \prod_{j'=n-1}^2 P_{j'} P_1 (\mathcal{X}_1 - \epsilon_n) \Psi \\ &= \Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* \prod_{j'=n-1}^2 P_{j'} P_1 (P_1^* P_1 + \epsilon_1 - \epsilon_n) \Psi \\ &= \Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* \prod_{j'=n-1}^3 P_{j'} P_2 (P_1 P_1^* + \epsilon_1 - \epsilon_n) P_1 \Psi \end{aligned}$$

(14) で $j=1$ とした関係

$$P_1 P_1^* + \epsilon_1 = \mathcal{X}_2 = P_2^* P_2 + \epsilon_2$$

竹山尚賢

を使って上式に続いて

$$\begin{aligned}
 (B) &= \Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* \prod_{j'=n-1}^3 P_{j'} P_2 (P_2^* P_2 + \epsilon_2 - \epsilon_n) P_1 \Psi \\
 &= \Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* \prod_{j'=n-1}^4 P_{j'} P_3 (P_2 P_2^* + \epsilon_2 - \epsilon_n) P_2 P_1 \Psi \\
 &\dots\dots\dots \\
 &= \Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* P_{n-1} (P_{n-1}^* P_{n-1} + \epsilon_{n-1} - \epsilon_n) \prod_{j'=n-2}^1 P_{j'} \Psi \\
 &= \Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* (P_{n-1} P_{n-1}^* + \epsilon_{n-1} - \epsilon_n) \prod_{j'=n-1}^1 P_{j'} \Psi \\
 &= \Psi^* \prod_{j=1}^{n-1} P_j^* (P_n^* P_n) \prod_{j'=n-1}^1 P_{j'} \Psi \\
 &= (13) \text{ の左辺}
 \end{aligned}$$

ここに,

$$P_{n-1} P_{n-1}^* + \epsilon_{n-1} - \epsilon_n = P_n^* P_n$$

は (14) で $j = n - 1$ とおいてえられる関係に他ならず, 結局 (14) は (12・a&b) の固有値問題が (13) となり分解体をなす為に十分な条件であることをみた。

以上により, (6') に代り, (6) をとることにより固有値問題 (12・a&b) が設定され, これが解ける為の必要十分条件として漸化式 (14) が機能することを確かめることができた。(ただし解法の一意性を主張しているのではない。)

§ 4. 考 察

量子化の問題に関連してハミルトニアンの変位 (定常状態間の飛躍あるいは遷移ではなく, 自然な移行あるいはふくらみ) は

$$\mathcal{X}_{j+1} = P_j P_j^* + \epsilon_j$$

$$\begin{aligned}
&= \mathbf{P}_j^* \mathbf{P}_j + \epsilon_j + \mathbf{P}_j \mathbf{P}_j^* - \mathbf{P}_j^* \mathbf{P}_j \\
&= \mathcal{H}_j + [\mathbf{P}_j, \mathbf{P}_j^*]
\end{aligned} \tag{16}$$

であるから

$$\begin{aligned}
[\mathbf{P}_j, \mathbf{P}_j^*] &= -2\hbar(\nabla \cdot \vec{\mathcal{D}}_j) \\
&= -\hbar^2 \Delta \ln \rho_j
\end{aligned} \tag{17}$$

が与えている。

いま

$$\mathcal{H} = 2m\hat{H} = \hat{p}^2 + 2mU(\hat{q}) \tag{18}$$

に対して

$$\vec{\mathcal{D}}_1 = f_1(\hat{q}) + g_1(\hat{q}) \tag{18-1}$$

とおいて $\mathbf{P}_1 = \hat{p} + i\vec{\mathcal{D}}_1$ により

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}_1^* \mathbf{P}_1 &= \hat{p}^2 + \hbar \{ \nabla f_1(\hat{q}) + \nabla g_1(\hat{q}) \} \\
&\quad + 2f_1(\hat{q}) \cdot g_1(\hat{q}) + f_1^2(\hat{q}) + g_1^2(\hat{q}),
\end{aligned} \tag{18-2}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}_1 \mathbf{P}_1^* &= \hat{p}^2 - \hbar \{ \nabla f_1(\hat{q}) + \nabla g_1(\hat{q}) \} \\
&\quad + 2f_1(\hat{q}) \cdot g_1(\hat{q}) + f_1^2(\hat{q}) + g_1^2(\hat{q}),
\end{aligned} \tag{18-3}$$

$$[\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_1^*] = -2\hbar \{ \nabla f_1 + \nabla g_1 \} \tag{18-4}$$

と具体化しておいて

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 &= \mathbf{P}_1^* \mathbf{P}_1 + \epsilon_1 \\
&= \hat{p}^2 + \hbar \{ \nabla f_1 + \nabla g_1 \} + 2f_1 g_1 + f_1^2 + g_1^2 + \epsilon_1
\end{aligned}$$

竹山尚賢

$$= \hat{p}^2 + 2mU \quad (18.5)$$

を調べる。例えば水素様原子の場合

$$2mU = \ell(\ell+1)\hbar^2/r^2 - 2mZ e^2/r \quad (18.6)$$

であるから

$$f_1(\hat{q}) = a_1 ; g_1(\hat{q}) = b_1/r \quad (18.7)$$

(a_1, b_1 ともに未定係数)

ととり、従って(18.5)で $\nabla f_1 = 0$, $\nabla g_1 = -b_1/r^2$, $2f_1 g_1 = 2a_1 b_1/r$, $f_1^2 = a_1^2$, $g_1^2 = b_1^2/r^2$ となるから

$$\left. \begin{aligned} g_1^2 + \hbar \nabla g_1 &= b_1(b_1 - \hbar)/r^2 \\ &= \ell(\ell+1)\hbar^2/r^2, \\ 2f_1 g_1 &= 2a_1 b_1/r = -2mZ e^2/r \end{aligned} \right\} \quad (18.8)$$

の2式から、(18.4), $[P_1, P_1^*] = 2\hbar b_1/r^2$, を正とならしめるように a_1, b_1 を定めて

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= -mZ e^2/(\ell+1)\hbar, \\ b_1 &= (\ell+1)\hbar \end{aligned} \right\} \quad (18.9)$$

となる。(18.5)から

$$\begin{aligned} f_1^2 = a_1^2 &= -\epsilon_1 \\ &= m^2 Z^2 e^4 / (\ell+1)^2 \hbar^2 \end{aligned} \quad (18.10)$$

でなければならないこととなる。

また(16)から

$$\mathcal{H}_2 = \hat{p}^2 + 2mU + 2\hbar^2(\ell+1)/r^2$$

$$= \hat{p}^2 + (\ell+1)(\ell+2)\hbar^2/r^2 - 2mZe^2/r \quad (18.11)$$

が定常状態 2 に対するハミルトニアンとなり, \mathcal{H}_1 と同形であるから, 一般化して

$$\vec{\partial}_j = a_j + b_j/r$$

ととり,

$$a_j = -mZe^2/(\ell+j)\hbar,$$

$$b_j = (\ell+j)\hbar,$$

$$e_j = -a_j^2$$

(18.12)

の関係がひき出せる。

固有関数決定の 3 段階

1st Step: 定常状態 j に対し

$$P_j = \hat{p} + i \vec{\partial}_j,$$

$$\vec{\partial}_j = f_j(\hat{q}) + g_j(\hat{q})$$

が定まった場合, (17) から

$$\begin{aligned} [P_j, P_j^*] &= -2\hbar^2 \Delta \ln |\psi_j| \\ &= -2\hbar \{ \nabla f_j(\hat{q}) + \nabla g_j(\hat{q}) \} \end{aligned}$$

であるから

$$\Delta \ln |\psi_j| = \hbar^{-1} (\nabla f_j + \nabla g_j) \quad (19)$$

この右辺は固有値を求めて定まっており, 例えば水素原子の場合, $\nabla f_j = 0$, $\nabla g_j = -b_j/r^2 = -(\ell+j)\hbar/r^2$ であり, $\Delta \ln |\psi_j| = -(\ell+j)/r^2$ により, 積分定数 k_1, k_2 を含んで

$$\psi_j = k_1 r^{(\ell+j)} \exp(k_2 r)$$

竹山尚賢

と求まる。

2nd Step :

$$\vec{\partial}_j = \hbar \nabla \ln |\psi_j| = f_j(\hat{q}) + g_j(\hat{q}) \quad (20)$$

により、積分定数は1となる。水素原子の場合、 $k_2 = -mZ e^2 / (\ell+j)\hbar^2$ と定まり、 k_1 のみが未定のままに残される。

3rd Step :

$$(\mathcal{H}_j - \epsilon_j) \psi_j = \mathbf{P}_j^* \mathbf{P}_j \psi_j = 0 \quad (21)$$

を満す形に決定する。

水素原子の場合、 $r^{(\ell+j)-1}$ の部分が r^ℓ と $(j-1)$ 次の一般化ラゲール多項式との積の形に定まる。ただし、 $r^{(\ell+j)-1}$ の r^{-1} は動経 r に関する運動量演算子が $\hat{p} = -i\hbar(\nabla + r^{-1})$ であることによるもので、 $\hat{p}\phi = 0$ の解 $\phi = \text{const.}/r$ を補なうことから生じる。

また1st Stepはハミルトニアンに昇位を与える因子と固有関数との関係を明確にする意味がある。

一見厄介そうに見えるが、この方法の好例題として Teller - Pöschel ポテンシャル⁽⁵⁾ の場合を考察しよう。

$$i) \quad 2mU(x) = \hbar^2 \kappa^2 \{ \alpha(\alpha-1) \operatorname{cosec}^2 \kappa x + \beta(\beta-1) \sec^2 \kappa x \} \quad (22)$$

($\alpha, \beta > 1$)。

いま $\mathbf{P} = \hat{p} + i\vec{\partial}$ において

$$\left. \begin{aligned} \vec{\partial} &= f(x) + g(x), \\ f(x) &= a \cot \kappa x ; \quad g(x) = b \tan \kappa x \end{aligned} \right\} \quad (22-1)$$

ととる。 $\nabla f = -\kappa a \operatorname{cosec}^2 \kappa x$, $\nabla g = \kappa b \sec^2 \kappa x$ に留意する。

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^* \mathbf{P} &= \hat{p}^2 - \hbar \kappa a \operatorname{cosec}^2 \kappa x + \\ &\quad \hbar \kappa b \sec^2 \kappa x + a^2 \cot^2 \kappa x + b^2 \tan^2 \kappa x + 2ab \end{aligned}$$

$$= \hat{p}^2 + a(a - \hbar\kappa) \operatorname{cosec}^2 \kappa x + b(b + \hbar\kappa) \sec^2 \kappa x - (a-b)^2, \quad (22.2)$$

$$[P, P^*] = 2\hbar\kappa (a \operatorname{cosec}^2 \kappa x - b \sec^2 \kappa x) \quad (22.3)$$

$$\mathcal{H}_0 \equiv P^*P + \epsilon_0 = \mathcal{H} = \hat{p}^2 + 2mU(x), \quad (22.4)$$

ととり、(22)と(22.2)との比較から未定係数 a, b を定めて

$$a = \hbar\kappa\alpha; \quad b = -\hbar\kappa\beta \quad (22.5)$$

が求まる。(22.4)で最低エネルギー準位を ϵ_0 とし、 \mathcal{H}_0 と添字0を用いた理由は状態を区別する“量子数”が(22.5)に現われず、(22.2, 4&5)から

$$\begin{aligned} \epsilon_0 &= + (a-b)^2 \\ &= \hbar^2 \kappa^2 (\alpha + \beta)^2 \end{aligned} \quad (22.6)$$

と求まる固有エネルギーにも亦、“量子数”が登場しない零点振動の状態であるからである。 \mathcal{H}_0 から昇位させていく(22.3)は(22.5)を用いて次式となる。

$$[P, P^*] = 2\hbar^2 \kappa^2 (\operatorname{cosec}^2 \kappa x + \sec^2 \kappa x) \quad (22.3')$$

そこで

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= \mathcal{H}_0 + 2\hbar^2 \kappa^2 (\operatorname{cosec}^2 \kappa x + \sec^2 \kappa x) \\ &= P_1^* P_1 + \epsilon_1 \end{aligned}$$

となるような $P_1 = \hat{p} + i\vec{\mathcal{D}}_1$ を求めると、

$$\vec{\mathcal{D}}_1 = a_1 \cot \kappa x + b_1 \tan \kappa x$$

とおいて

$$a_1 = \hbar\kappa(\alpha + 1); \quad b_1 = -\hbar\kappa(\beta + 1)$$

となり、

$$\epsilon_1 = (a_1 - b_1)^2 = \hbar^2 \kappa^2 (\alpha + \beta + 2)^2$$

となる。一般化は容易で

竹山尚賢

$$\begin{aligned} a_n &= \hbar \kappa (\alpha + n) ; b_n = -\hbar \kappa (\beta + n), \\ \epsilon_n &= \hbar^2 \kappa^2 (\alpha + \beta + 2n)^2 \end{aligned} \quad (22.7)$$

である。ただし、 $n=0, 1, 2, \dots$ である。

$$\begin{aligned} \text{ii) } 2mU(x) &= \hbar^2 \kappa^2 \{ \nu(\nu-1) \operatorname{cosech}^2 \kappa x \\ &\quad - \mu(\mu+1) \operatorname{sech}^2 \kappa x \} \end{aligned} \quad (23)$$

($\nu > 1, \mu > 0$)。 x はポテンシャル極小位からの変位とする。
この場合も i) が双曲線関数になっただけの違いであるから

$$P_n = \hat{p} + i \vec{\rho}_n$$

において

$$\vec{\rho}_n = a_n \coth \kappa x + b_n \tanh \kappa x$$

ととり、未定係数 a_n, b_n を $n=0, 1, 2, \dots$ の定常状態について定めることは容易で

$$\begin{aligned} a_n &= \hbar \kappa (\nu + n), \\ b_n &= \hbar \kappa (-\mu + n), \end{aligned}$$

となり、これらにより

$$\begin{aligned} \epsilon_n &= -(a_n + b_n)^2 \\ &= -\hbar^2 \kappa^2 (\nu - \mu + 2n)^2 \end{aligned}$$

と求まる。

§ 5. 結 び

以上、要約すると量子化の起源は

$$\begin{aligned} [\hat{p}, \vec{\rho}_j] &= -i \hbar \operatorname{div} \vec{\rho}_j \\ &= -i (\hbar^2 / 2) \Delta \ln \rho_j \end{aligned}$$

にあるが、 \hat{p} と $\vec{\partial}_j$ の結合複素演算子

$$P_j = \hat{p} + i \vec{\partial}_j$$

とその複素共役量 P_j^* による交換関係

$$[P_j, P_j^*] = -\hbar^2 \Delta \ln \rho_j$$

が定常状態 j から $(j+1)$ へハミルトニアンを昇位させ、(ポテンシャルをふくらましていく) 量子化が行なわれる。と同時に

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{j+1} &= \mathcal{H}_j + [P_j, P_j^*] \\ &= P_j P_j^* + \epsilon_j \end{aligned}$$

と任意の j に対する

$$\mathcal{H}_j = P_j^* P_j + \epsilon_j$$

とが、本来、代数的に閉じていて一次式の積に因数分解されるべき固有値問題が、実際そうなる為の必要十分条件を形成する。

この代数化された体系は、Stochastic Mechanics の定常状態に対する理論体系とみたときに、相互連関性が明らかとなり、単なる解法技術をこえる意義がある。

文 献

- 1) E.Nelson ; Dynamical Theory of Brownian Motion, (Princeton Univ, Press, 1967)
- 2) 竹山尚賢, 物性研究 12, 415(1969); 13, 67(1969); 13, 76(1969); 13, 131(1969); 13, 323(1970); 13, 330(1970); 13, 460(1970); 14, 24(1970); 14, 298(1970).
- 3) 文献 1) の 137 ~ 138 頁から。

竹山尚賢

4) H.S.Green; Quantenmechanik in algebraischer Darstellung (Springer Verlag, 1966).

5) 戸田盛和; 振動論 (培風館, 1968) 98 ~ 102 頁