

ブラウン運動論と量子力学 (VII)

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。

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

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

ただし、

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

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。

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

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。

$$\epsilon_1 \equiv 2mE_1 = 2mU - p_d^2 - \hbar \operatorname{div} \vec{p}_d \quad (2)$$

ハミルトニアンを次のように書き直す。

$$\hbar f \equiv 2m(H - E_1 + E_1)$$

竹山尚賢

$$\begin{aligned}
 &= \hat{p}^2 + p_d^2 + \hbar \operatorname{div} \vec{p}_d + \epsilon_1 \\
 &= (\hat{p} - i \vec{p}_d) (\hat{p} + i \vec{p}_d) + \epsilon_1,
 \end{aligned} \tag{3}$$

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

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,

$$\vec{p}_{d,n} = \hbar \nabla \ell_n \psi_n \tag{4}$$

を導入する。固有値問題

$$\hbar \gamma \psi_n = \epsilon_n \psi_n \tag{4 \cdot a}$$

は,

$$\epsilon_n = 2mU - p_{d,n}^2 - \hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,n} \tag{4 \cdot b}$$

と同等であり, (3) と同様, ハミルトニアンを

$$\begin{aligned}
 \hbar \gamma &= (\hbar \gamma - \epsilon_n) + \epsilon_n \\
 &= (\hat{p} - i \vec{p}_{d,n}) (\hat{p} + i \vec{p}_{d,n}) + \epsilon_n \\
 &= \Pi_n^* \Pi_n + \epsilon_n \equiv \hbar \gamma_n
 \end{aligned} \tag{5}$$

と書くことができる。従つて

$$\hbar \gamma \psi = \epsilon \psi \tag{6}$$

を解くことは (5) に対する

$$\begin{aligned}
 \hbar \gamma_n \psi &= \epsilon \psi \\
 &= (\Pi_n^* \Pi_n + \epsilon_n) \psi
 \end{aligned} \tag{7}$$

を解くことと同等である。ただし,

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

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

$$H_1 = \Pi_1^* \Pi_1 + \varepsilon_1 = H_1 \quad (9)$$

となつたとする。(7) から, $n=1$ に対し,

$$\psi^* \Pi_1^* \Pi_1 \psi = \varepsilon - \varepsilon_1 \geq 0 \quad (10)$$

従つて ε_1 は最低の固有値である。当然のことであるが,

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

となる。次に $n=2$ に対して (7) から

$$H_2 = \Pi_2^* \Pi_2 + \varepsilon_2 \quad (11)$$

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。

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

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,

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

に続いて

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

となるように構成することを考える。

$$\begin{aligned} (b) \text{ の左辺 } &= \psi^* \Pi_1^* (H_2 - \varepsilon_2) \Pi_1 \psi \\ &= \psi^* \Pi_1^* (H_2 \Pi_1 - \Pi_1 \varepsilon_2) \psi \end{aligned} \quad (b')$$

ここで

$$\begin{aligned} H_2 \Pi_1 &= \Pi_1 H_1 \\ &= \Pi_1 (\Pi_1^* \Pi_1 + \varepsilon_1) = (\Pi_1 \Pi_1^* + \varepsilon_1) \Pi_1 \end{aligned}$$

竹山尚賢

すなわち

$$H_2 = \Pi_1 \Pi_1^* + \epsilon_1 \quad (13)$$

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、 $\epsilon^n, \epsilon^{n-1}, \dots, 1$ の間の 1 次の関係を満す。)

(13) により、(b') は次のようになる。

$$\begin{aligned} (b') &= \psi^* \Pi_1^* \Pi_1 (H - \epsilon_2) \psi \\ &= \psi^* (H - \epsilon_1) (H - \epsilon_2) \psi \\ &= (\epsilon - \epsilon_1) (\epsilon - \epsilon_2) = (b) \end{aligned}$$

まとめると、

$$\left. \begin{aligned} H &= H_1 = \Pi_1^* \Pi_1 + \epsilon_1, \\ H_2 &= \Pi_1 \Pi_1^* + \epsilon_1 \\ &= \Pi_2^* \Pi_2 + \epsilon_2 \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

となり、状態 1 から状態 2 への励起エネルギーが

$$\epsilon_2 - \epsilon_1 = \Pi_1 \Pi_1^* - \Pi_2^* \Pi_2 \quad (15)$$

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” 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、

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= 2mU - p_{d,1}^2 - \hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,1}, \\ \Pi_1 \Pi_1^* &= \hat{p}^2 + p_{d,1}^2 - \hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,1} \end{aligned}$$

従つて演算子の関係として、

$$\begin{aligned} H_2 &= \hat{p}^2 + 2mU - 2\hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,1} \\ &= H_1 + [\Pi_1, \Pi_1^*] \end{aligned} \quad (15 \cdot a)$$

$$= \hat{p}^2 + p_{d,1}^2 - \hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,1} + \epsilon_1 \quad (15 \cdot b)$$

$$= \hat{p}^2 + p_{d,2}^2 + \hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,2} + \epsilon_2 \quad (15 \cdot c)$$

あるいは、固有値間の関係として

$$\begin{aligned} \epsilon_2 - \epsilon_1 &= p_{d,1}^2 - p_{d,2}^2 - \hbar \operatorname{div} (\vec{p}_{d,1} + \vec{p}_{d,2}) \\ &= (\vec{p}_{d,1} - \vec{p}_{d,2} - \hbar \nabla) \cdot (\vec{p}_{d,1} + \vec{p}_{d,2}) \quad (15 \cdot d) \end{aligned}$$

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 $\hbar \mathcal{H} = 2\pi H$ 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”

$$\begin{aligned} [\Pi_1, \Pi_1^*] &= -2\hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,1} \\ &= -\hbar^2 \Delta \ln \rho_1 \end{aligned}$$

(エネルギーとしては $(1/2\pi)$ 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 $\hbar \mathcal{H}_2$ となつてゐることを示す。(15・b) で言えば、 $\hbar \mathcal{H}_2$ は、

$$2\pi U^{(1)} \equiv \epsilon_1 + p_{d,1}^2 - \hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,1}$$

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。

$$\hbar \mathcal{H}_n = \Pi_{n-1} \Pi_{n-1}^* + \epsilon_{n-1}, \quad (n > 1) \quad (16 \cdot a)$$

$$\hbar \mathcal{H}_n = \Pi_n^* \Pi_n + \epsilon_n \quad (16 \cdot b)$$

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。

$$\begin{aligned} \eta_n \Pi_{n-1} &= \Pi_{n-1} (\Pi_{n-1}^* \Pi_{n-1} + \epsilon_{n-1}) \\ &= \Pi_{n-1} \eta_{n-1} \end{aligned} \quad (16 \cdot c)$$

また (16・a) - (16・b) から

$$\epsilon_{n+1} - \epsilon_n = \Pi_n \Pi_n^* - \Pi_{n+1}^* \Pi_{n+1} \quad (16 \cdot d)$$

これらにより固有値問題が次の形に完結する。

$$\begin{aligned} &\psi^* \Pi_1^* \Pi_2^* \cdots \Pi_n^* \Pi_n \cdots \Pi_2 \Pi_1 \psi \\ &= \psi^* \Pi_1^* \Pi_2^* \cdots \Pi_{n-1}^* (\eta_n - \epsilon_n) \Pi_{n-1} \cdots \Pi_2 \Pi_1 \psi \\ &= \psi^* \Pi_1^* \Pi_2^* \cdots \Pi_{n-1}^* \Pi_{n-1} (\eta_{n-1} - \epsilon_n) \Pi_{n-2} \cdots \Pi_2 \Pi_1 \psi \\ &= \psi^* \Pi_1^* \Pi_2^* \cdots \Pi_{n-1}^* \Pi_{n-1} \cdots \Pi_2 \Pi_1 (\eta - \epsilon_n) \psi \\ &= \psi^* \Pi_1^* \Pi_2^* \cdots \Pi_{n-1}^* \Pi_{n-1} \cdots \Pi_2 \Pi_1 \psi (\epsilon - \epsilon_n) \\ &\quad \text{-----} \\ &= (\epsilon - \epsilon_1) (\epsilon - \epsilon_2) \cdots (\epsilon - \epsilon_{n-1}) (\epsilon - \epsilon_n) \geq 0 \end{aligned} \quad (17)$$

ここで新しいベクトル

$$\begin{aligned} \phi_n &= \Pi_n \cdots \Pi_2 \Pi_1 \psi, \\ \phi_n^* &= \psi^* \Pi_1^* \Pi_2^* \cdots \Pi_n^* \end{aligned} \quad (18)$$

を導入する。(17) から

$$\begin{aligned} \phi_n^* \phi_n &= \phi_{n-1}^* (\eta_n - \epsilon_n) \phi_{n-1} \\ &= \phi_{n-1}^* \phi_{n-1} (\epsilon - \epsilon_n) \end{aligned} \quad (18 \cdot a)$$

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

$$\begin{aligned} \phi_n^* \phi_n &= \phi_{n-1}^* \Pi_n^* \Pi_n \phi_{n-1} \\ &= (18 \cdot a) = 0 \end{aligned}$$

であるから,

$$\begin{aligned} \Pi_n^* \Pi_n \phi_{n-1} &= (\hbar \gamma_n - \epsilon_n) \phi_{n-1} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (18 \cdot b)$$

$$\text{あるいは, } \hbar \gamma_n \phi_{n-1} = \epsilon_n \phi_{n-1} \quad (18 \cdot b')$$

が成立している。また (17) から

$$(\hbar \gamma - \epsilon_n) \psi = (\epsilon - \epsilon_n) \psi = 0$$

であるから、依然 ψ_n に対し

$$\hbar \gamma \psi_n = \epsilon_n \psi_n, \quad (18 \cdot c)$$

(18・b') と比較して、

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

(18・b) から

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

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

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

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、²⁾ Schrödinger によつて提唱され、³⁾ Infeld 及び Hull によつて確立され、⁴⁾ Green によつて応用分野が拓げられた“因数分解法”と同等であると思われる。

§ 2. 例 題

a) 調和振動子：

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

$$(a, b > 0)$$

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

いま、1次元で考えることとし、

竹山尚賢

$$p_a = - (b/a) \hat{q} \quad (20.2)$$

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

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

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。

$$\left. \begin{aligned} \Pi &= \hat{p} - i(b/a) \hat{q} \\ \Pi^* &= \hat{p} + i(b/a) \hat{q} \end{aligned} \right\} \quad (20.3)$$

から，

$$\left. \begin{aligned} \Pi^* \Pi &= \hbar^2 - \hbar(b/a) \\ \Pi \Pi^* &= \hbar^2 + \hbar(b/a) \end{aligned} \right\} \quad (20.4)$$

この場合ハミルトニアンをもち上げる励起は

$$[\Pi, \Pi^*] = 2\hbar(b/a), \quad (20.5)$$

また，

$$(1/2)(\Pi^* \Pi + \Pi \Pi^*) = \hbar^2 \quad (20.6)$$

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。

$$[\hbar^2, \Pi^*] = 2\hbar(b/a) \Pi^*, \quad (20.7.a)$$

$$[\hbar^2, \Pi] = -2\hbar(b/a) \Pi \quad (20.7.b)$$

(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。

$$\Pi^* \Pi \psi_0 = \{\hbar^2 - \hbar(b/a)\} \psi_0 = 0 \quad (20.8)$$

$\hbar^2$ 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，

$$[\hbar^2, \Pi^*] \psi_0 = 2\hbar(b/a) \Pi^* \psi_0, \quad (20.9)$$

$$\psi_1 = \Pi^* \psi_0 \quad (20.10)$$

とすると, (20.9) は

$$\begin{aligned} \hbar g \psi_1 &= \{ 2\hbar(b/a) + \hbar(b/a) \} \psi_1 \\ &= \epsilon_1 \psi_1, \end{aligned} \quad (20.10 \cdot a)$$

$$\begin{aligned} \text{また } \psi_1^* \psi_1 &= \psi_0^* \Pi \Pi^* \psi_0 \\ &= \psi_0^* \{ \hbar g + \hbar(b/a) \} \psi_0 \\ &= 2\hbar(b/a), \quad \psi_0^* \psi_0 = 1, \end{aligned} \quad (20.10 \cdot b)$$

一般化して,

$$\psi_n = \Pi^* \psi_{n-1}, \quad (20.11 \cdot a)$$

$$\begin{aligned} \hbar g \psi_n &= (2n+1)\hbar(b/a) \psi_n \\ &= \epsilon_n \psi_n \end{aligned} \quad (20.11 \cdot b)$$

から,

$$\epsilon_n = (2n+1)\hbar(b/a), \quad (20.11 \cdot c)$$

$$E_n = a^2 \epsilon_n = (2n+1)\hbar a b \quad (20.11 \cdot d)$$

が固有エネルギー値である。

$$\begin{aligned} \text{一方, } \psi_n^* \psi_n &= 2n\hbar(b/a) \psi_{n-1}^* \psi_{n-1} \\ &= n! (2\hbar b/a)^n \end{aligned} \quad (20.11 \cdot e)$$

エネルギー-Hの固有ベクトルとしては,

$$\begin{aligned} \varphi_n^* \varphi_n &= a^{2n} \psi_n^* \psi_n \\ &= n! (2\hbar a b)^n \end{aligned} \quad (20.11 \cdot f)$$

と規格化定数が求まる。n=0の状態については

$$\begin{aligned} \Pi \psi_0 &= (\hat{p} - i b q/a) \psi_0 \\ &= -i(\hbar \nabla + b q/a) \psi_0 \\ &= 0 \end{aligned}$$

から,

竹山尚賢

$$\psi_0 = (2\pi a\hbar/b)^{1/2} \exp(-bq^2 a\hbar) \quad (20.12)$$

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

$$\left. \begin{aligned} \psi_n &= (\Pi^*)^n \psi_0, \\ \varphi_n &= a^n \psi_n. \end{aligned} \right\} \quad (20.13)$$

b) 1電子原子(I) :

$$\mathcal{H} = 2\pi H = p_r^2 + \ell(\ell+1)\hbar^2/r^2 - 2\pi Z e^2/r, \quad (21)$$

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、

$$p_{d,j} = \hbar \nabla \ln \psi_j = a_j + b_j/r, \quad (21.1)$$

ととる。

(21) の因数分解の方は当然のことである。

$$\Pi_j = p_r + i(a_j + b_j/r) \quad (21.2)$$

これによつて次の関係を作る。

$$\left. \begin{aligned} \Pi_j^* \Pi_j &= p_r^2 + a_j^2 + 2a_j b_j/r + b_j(b_j - \hbar)/r^2 \\ \Pi_j \Pi_j^* &= p_r^2 + a_j^2 + 2a_j b_j/r + b_j(b_j + \hbar)/r^2 \end{aligned} \right\} \quad (21.3)$$

$$[\Pi_j, \Pi_j^*] = 2\hbar b_j/r. \quad (21.4)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_1 = \Pi_1^* \Pi_1 + \epsilon_1 \\ &= p_r^2 + b_1(b_1 - \hbar)/r^2 + 2a_1 b_1/r + a_1^2 + \epsilon_1 \end{aligned} \quad (21.5)$$

と書いて、(21) と比較し、未定の a_1, b_1 を決める。

$$\left. \begin{aligned} b_1(b_1 - \hbar) &= \ell(\ell+1)\hbar^2, \\ a_1 b_1 &= -m Z e^2 \end{aligned} \right\} \quad (21.6)$$

とにおいて、 a_1, b_1 を定めると、(21.5) で

$$a_1^2 + \varepsilon_1 = 0 \quad (21.7)$$

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,

$$b_1 = (\ell+1)\hbar \quad (21.8 \cdot a)$$

を採用し,

$$a_1 = -\pi Z e^2 / (\ell+1)\hbar, \quad (21.8 \cdot b)$$

(21.7) から,

$$\varepsilon_1 = -\pi^2 Z^2 e^4 / (\ell+1)^2 \hbar^2 \quad (21.9)$$

が求まる。 $\mathcal{H}_j$ 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 $j \rightarrow (j+1)$ の励起エネルギーは (16.4) により,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{j+1} - \varepsilon_j &= \Pi_j \Pi_j^* - \Pi_{j+1}^* \Pi_{j+1} \\ &= a_j^2 - a_{j+1}^2 + 2(a_j b_j - a_{j+1} b_{j+1})/r \\ &\quad + \{b_j(b_j + \hbar) - b_{j+1}(b_{j+1} - \hbar)\}/r^2 \end{aligned} \quad (21.10)$$

この式の右辺第 3 項及び第 4 項は行列 $\mathcal{H}_j$ 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。

$$\left. \begin{aligned} a_j b_j &= a_{j+1} b_{j+1} \\ b_j(b_j + \hbar) &= b_{j+1}(b_{j+1} - \hbar) \end{aligned} \right\} \quad (21.11)$$

前者は (21.6) を考慮して

$$a_{j+1} b_{j+1} = a_j b_j = \dots = a_1 b_1 = -\pi Z e^2, \quad (21.12)$$

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。

$$b_{j+1} = b_j + \hbar \quad (21.13)$$

竹山尚賢

は (21.8.a) を考慮すると, 一般に

$$b_j = b_1 + (j-1) \hbar = (\ell+j) \hbar, \quad (21.14)$$

となる。結局, (21.10), (21.7) から

$$\begin{aligned} \epsilon_{j+1} + a_{j+1}^2 &= \epsilon_j + a_j^2 = \dots \\ &= \epsilon_1 + a_1^2 = 0. \end{aligned} \quad (21.15)$$

(21.12 & 14) から

$$a_j = -m Z e^2 / (\ell+j) \hbar \quad (21.16)$$

と定まり, (21.15) から

$$\epsilon_j = - (m^2 Z^2 e^4 / \hbar^2) (1 / (\ell+j))^2, \quad (21.17)$$

あるいは

$$E_n = - (m Z^2 e^4 / 2 \hbar^2) n^{-2}, \quad (21.18)$$

ただし, $n = \ell + j$

($\ell \geq 0, j > 0$ の整数),

が求まる。

(18.e) からの

$$\begin{aligned} 0 &= \Pi_j \psi_j = \{ p_r + i (a_j + b_j / r) \} \psi_j \\ &= \{ p_r + i \{ -m Z e^2 / (\ell+j) \hbar + (\ell+j) \hbar / r \} \} \psi_j \end{aligned} \quad (21.19)$$

により, 状態 $n = (\ell+j)$ の固有ベクトルとして

$$\psi_n \propto r^n \exp \{ - (m Z e^2 / n \hbar^2) r \} \quad (21.20)$$

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

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

をとつていたが, ここでは単純に,

$$\begin{aligned} \hbar^2 &= \vec{p}^2 - 2k/r, \\ (k &= mZe^2) \end{aligned} \quad (22)$$

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

$$\vec{p}^2 = p_r^2 + \mathbf{L}^2/r^2 \quad (22.1)$$

は示すことができる。前節の結果を用いて

$$\Pi_n = \vec{p} + i(n\hbar/r - k/n\hbar) \quad (22.2)$$

ととると、

$$\left. \begin{aligned} \Pi_n^* \Pi_n &= \hbar^2 + k^2/n^2\hbar^2 + n(n-1)\hbar^2/r^2 \\ \Pi_n \Pi_n^* &= \hbar^2 + k^2/n^2\hbar^2 + n(n+1)\hbar^2/r^2 \end{aligned} \right\} \quad (22.3)$$

$$[\Pi_n, \Pi_n^*] = 2n\hbar^2/r^2 \quad (22.4)$$

従つて

$$\begin{aligned} \hbar^2 &= \hbar^2_1 = \Pi_1^* \Pi_1 - k^2/\hbar^2 = \Pi_1^* \Pi_1 + \epsilon_1, \\ \hbar^2_2 &= \Pi_1 \Pi_1^* + \epsilon_1 = \hbar^2_1 + 2\hbar^2/r^2 \\ &= \Pi_2^* \Pi_2 - k^2/2^2\hbar^2 \\ &= \Pi_2^* \Pi_2 + \epsilon_2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hbar^2_n &= \Pi_{n-1} \Pi_{n-1}^* + \epsilon_{n-1} \\ &= \hbar^2_{n-1} + 2(n-1)\hbar^2/r^2 \\ &= \Pi_n^* \Pi_n - k^2/n^2\hbar^2 \\ &= \Pi_n^* \Pi_n + \epsilon_n \end{aligned} \quad (22.5)$$

がチェックされる。ハミルトニアンの上位の系列

$$\begin{aligned} (\hbar^2_1 = \hbar^2_1), \quad \hbar^2_2, \quad \hbar^2_3, \quad \dots, \quad \hbar^2_{n-1}, \quad \hbar^2_n \end{aligned} \quad (22.6)$$

$\xrightarrow{2\hbar^2/r^2} \xrightarrow{4\hbar^2/r^2} \xrightarrow{6\hbar^2/r^2} \xrightarrow{2(n-1)\hbar^2/r^2}$

竹山尚賢

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。

$$h^2 n = h^2 + n(n-1) \hbar^2 / r^2 \quad (22.7)$$

$[h^2, L^2] = 0$ であるから、 h^2 の固有ベクトルは L^2 のそれでもあり、

$$\begin{aligned} h^2 n \psi_n &= \{ h^2 + n(n-1) \hbar^2 / r^2 \} \psi_n \\ &= \epsilon_n \psi_n \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \lambda^{(n)} &= n(n-1) \hbar^2, \\ (n &= 1, 2, \dots) \end{aligned} \quad (22.8.a)$$

が出ているわけで、

$$\ell = n - 1, \quad (\ell = 0, 1, 2, \dots)$$

と量子数をとりにかえて、

$$\lambda^{(n)} = \ell(\ell+1) \hbar^2 \quad (22.8.b)$$

となる。(22.6) のハミルトニアン H 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、

$$\begin{aligned} [H_n, H_r^*] &= 2n \hbar^2 / r^2 \\ &= -2 \hbar \operatorname{div} \vec{p}_{d,n} \quad (\because (12)) \\ &= -2 \hbar \Delta \ell_n \psi_n \end{aligned}$$

であるから、

$$\Delta \ell_n \psi_n = -n \hbar / r^2 \quad (22.9)$$

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

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

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

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、

$$\begin{aligned} \vec{p}_d &= \hbar \nabla \ell_n \psi, \\ 2mE &= 2mU - p_d^2 - \hbar \operatorname{div} \vec{p}_d \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{は、} \quad \operatorname{div} \vec{p}_d &= \hbar (\Delta \psi / \psi) \\ &\quad - \hbar (\nabla \ell_n \psi)^2 \end{aligned}$$

であるから、Schrödinger 方程式

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

そのものである。この点 Bohm の量子ポテンシャルによつたのでは、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).