

# 目次

0	この授業の目標	3
1	多自由度の系への拡張	5
1.1	多自由度の系	5
1.2	3次元のシュレーディンガー方程式	6
1.3	電磁場中の荷電粒子	7
1.4	運動の因子化	8
1.5	箱の中の粒子	10
1.6	二粒子系	11
2	中心力場の中の運動	14
2.1	極座標におけるシュレーディンガー方程式	14
2.2	動径方向と角方向の分離	16
2.3	エルミート性に関する注意	17
3	球面調和関数	19
3.1	角運動量	19
3.2	球面上の粒子	20
3.3	球面調和関数 ( $m = 0$ )	21
3.4	ルジャンドル多項式	25
3.5	平面上の調和関数	27
3.6	球面調和関数 ( $m \neq 0$ )	29
4	水素原子	35
4.1	エネルギー固有値	35
4.2	ラゲール多項式	38
4.3	輝線スペクトル	42
5	磁場中の原子	44
5.1	ナトリウムD線	44
5.2	正常ゼーマン効果	46
5.3	スピン	48
6	角運動量代数とスピン	50
6.1	角運動量代数	50
6.2	角運動量の行列表示	52
6.3	角運動量と回転対称性	55
6.4	スピン波動関数とテンソル	59
6.5	スピノル	61

<b>7</b>	<b>微細構造</b>	<b>63</b>
7.1	相対論的補正	63
7.2	スピン・軌道相互作用	64
7.3	超微細構造	67
7.4	角運動量の合成	71
7.5	クレブシュ・ゴルダン係数	74
7.6	異常ゼーマン効果	77
7.7	選択則	81
<b>8</b>	<b>散乱の古典論</b>	<b>83</b>
8.1	中心力場による散乱	83
8.2	散乱断面積	84
8.3	ラザフォード散乱	87
<b>9</b>	<b>ボルン展開</b>	<b>89</b>
9.1	ボルンの公式	89
9.2	ラザフォード散乱	93
9.3	散乱行列	95
<b>10</b>	<b>球面波と平面波</b>	<b>99</b>
10.1	球面波	99
10.2	球形井戸型ポテンシャル	104
10.3	平面波の展開	106
<b>11</b>	<b>部分波展開</b>	<b>108</b>
11.1	部分波	108
11.2	古典極限	110
11.3	低エネルギー散乱	112
11.4	剛体球による散乱	113

## 0 この授業の目標

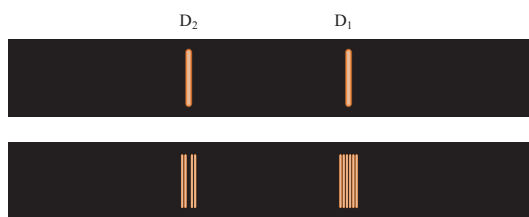
この授業では 3 次元空間での粒子の運動、特に球対称ポテンシャル中での運動を扱う。主要な目標として以下の 3 つを挙げておく。

- 球対称ポテンシャル中の束縛状態



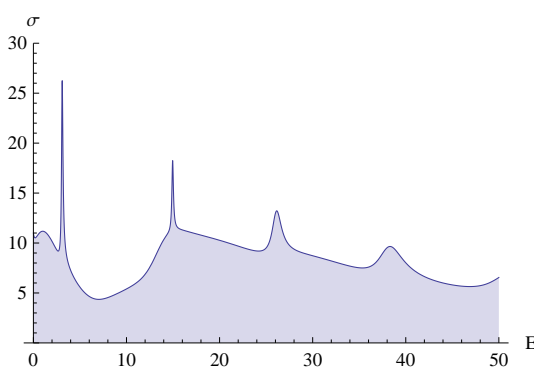
水素原子の輝線スペクトルがどうして現れるかを理解し、実際にその波長を計算できるようになる。

- 軌道角運動量とスピン



ナトリウム D 線のような微細構造がなぜ現れるのか、磁場の影響でそれがどのように変化するかを理解する。

- 球対称ポテンシャルによる散乱



球対称なポテンシャルに粒子を入射させたときにどのように散乱が起こるか、簡単な例について計算ができるようになる。

成績は中間試験と期末試験に基づいて決める。

## 物理定数

真空中の光速	$c = 2.99792458 \times 10^8 \text{ms}^{-1}$
プランク定数	$h = 6.626069 \times 10^{-34} \text{Js}$
ディラック定数	$\hbar = 1.054571726 \times 10^{-34} \text{Js}$
電気素量	$e = 1.60217646 \times 10^{-19} \text{C}$
真空の誘電率	$\epsilon_0 = 8.85418782 \times 10^{-12} \text{J}^{-1} \text{m}^{-1} \text{C}^2$ $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0^2} = 2.30708 \times 10^{-28} \text{Jm}$
電子質量	$m_e = 9.10938188 \times 10^{-31} \text{kg}$
陽子質量	$m_p = 1.67262158 \times 10^{-27} \text{kg}$
ボーア磁子	$\mu_B = \frac{\hbar e}{2m_e c} = 9.274 \times 10^{-24} \text{JT}^{-1} = 5.7883 \times 10^{-5} \text{eVT}^{-1}$
核磁子	$\mu_B = \frac{\hbar e}{2m_p c} = 5.051 \times 10^{-27} \text{JT}^{-1}$
電子の $g$ 因子	2.00231930436
陽子の $g$ 因子	5.5856947

## 単位換算

$$1\text{eV} = 1.60217646 \times 10^{-19} \text{J}$$

# 1 多自由度の系への拡張

## 1.1 多自由度の系

量子力学第1では、1次元の系のみを扱ってきた。1次元の系は、古典的には一つの座標変数  $x$  と、対応する速度  $\dot{x}$ 、あるいは運動量  $p$  によって状態を指定できるような系であり、ハミルトニアンはこれらの関数として与えられる。系の量子状態は、 $x$  と  $t$  に依存する波動関数

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle \quad (1)$$

によって与えられた。古典力学から量子力学への移行は次の置き換えによってなされた。(正準量子化)

$$x \rightarrow \hat{x} = x, \quad p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (2)$$

(ここでは、座標表示を仮定して話を進める。)

これを多自由度の系へ一般化することは簡単である。 $n$  自由度の系では、 $n$  個の座標変数  $q_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) と、それぞれに対応する運動量変数  $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$  の関数としてハミルトニアンが与えられる。座標変数が確定した状態

$$|q_i\rangle \equiv |q_1, q_2, \dots, q_n\rangle \quad (3)$$

は完全系を成し、波動関数は

$$\psi(q_i; t) = \langle q_i | \psi(t) \rangle \quad (4)$$

によって与えられる。正準量子化による量子力学への移行は、次の置き換えを行うことでなされる。

$$q_i \rightarrow \hat{q}_i = q_i, \quad p_i \rightarrow \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}. \quad (5)$$

時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$H(\hat{q}_i, \hat{p}_i)\psi(q_i, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(q_i, t) \quad (6)$$

にエネルギー  $E$  の定常状態の波動関数

$$\psi(q_i, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(q_i) \quad (7)$$

を代入することで時間に依存しないシュレーディンガー方程式

$$H(\hat{q}_i, \hat{p}_i)\psi(q_i) = E\psi(q_i) \quad (8)$$

が得られることも1自由度の系の場合と全く同様である。

## 1.2 3次元のシュレーディンガー方程式

$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$  を座標とする3次元空間上を運動する一つの質点を考えよう。質点がポテンシャル  $U(\mathbf{x})$  によって表される保存力を受けながら運動する場合、ハミルトニアン演算子は

$$H = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + U(\mathbf{x}) \quad (9)$$

である。ベクトルの運動量演算子  $\hat{\mathbf{p}}$  は次のように与えられる。

$$\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = (-i\hbar\partial_x, -i\hbar\partial_y, -i\hbar\partial_z) = -i\hbar\nabla \quad (10)$$

$\nabla$  は微分演算子  $\partial_x, \partial_y, \partial_z$  をまとめてベクトルとして表したものであり、ナブラ (“nabla”) と呼ばれる。

$$\nabla \equiv (\partial_x, \partial_y, \partial_z) \quad (11)$$

$\nabla$  のノルムとして定義される微分演算子  $\Delta$  はラプラス演算子またはラプラシアン (“Laplacian”) と呼ばれる。

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (12)$$

時間に依存するシュレーディンガー方程式はラプラシアンを用いて

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) \quad (13)$$

と書くことができる。粒子の存在確率密度  $\rho(\mathbf{x})$  は

$$\rho(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \quad (14)$$

によって与えられる。

3次元の系においても全確率は保存する。このことを表わす式を求めよう。確率密度の時間変化をシュレーディンガー方程式を用いて変形すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) &= \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \\ &= \psi^* \left( \frac{i\hbar}{2m} \Delta \psi \right) + \left( \frac{i\hbar}{2m} \Delta \psi \right)^* \psi \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot [-\psi^* (\nabla \psi) + (\nabla \psi^*) \psi] \end{aligned} \quad (15)$$

となる。従って確率の流れの密度

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} [-\psi^* (\nabla \psi) + (\nabla \psi^*) \psi] \quad (16)$$

を定義すれば、連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = -\nabla \cdot \mathbf{j} \quad (17)$$

が成り立つ。連続の式を、ある領域  $M$  で積分すると、

$$\frac{d}{dt} \int_M \rho dV = - \int_M \nabla \cdot \mathbf{j} dV = - \oint_{\partial M} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} \quad (18)$$

が得られる。(  $\partial M$  は  $M$  の表面を表わす。 ) 二つ目の等号ではガウスの定理を用いた。この式は領域  $M$  内の存在確率密度の減少分は表面  $\partial M$  を通り抜けて外部に流れ出した確率の量に等しいことを表わしている。

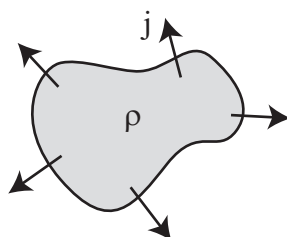


図 1: 確率の密度と流れ

### 1.3 電磁場中の荷電粒子

量子力学において扱われるポテンシャルは、現実の系においては多くの場合電磁気力によるポテンシャルである。そこで、一般の背景電磁場中の粒子に対するシュレーディンガー方程式を与えておこう。

古典力学における荷電粒子のハミルトニアンは次のように与えられる。(ここでは SI 単位系を用いる。)

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{2m}(\mathbf{p}^2 - q\mathbf{A}(\mathbf{x}, t))^2 + q\phi(\mathbf{x}, t) \quad (19)$$

この授業では時間に依存しないハミルトニアンを主に扱うが、もし背景電磁場が時間に依存すれば、ハミルトニアンも時間にあらわに依存する。(  $\phi, \mathbf{A}$  ) は背景電磁場のポテンシャルであり、場の強さと次のように関係している。

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi + \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (20)$$

形式的には、電磁場がない場合のハミルトニアンに対して

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}, \quad H \rightarrow H - q\phi \quad (21)$$

という置き換えを行えばよい。

問題 1.1 ハミルトニアン (19) から運動方程式を導出し、粒子に働く力を  $E$  と  $B$  を用いて表わせ。

量子力学への移行は、運動量を演算子  $\hat{p} = -i\hbar\nabla$  に置きかえることによって成される。ただし、 $p$  と  $A(x)$  の内積を含む項は  $p$  と  $x$  を同時に含んでいるので注意が必要である。例えば、 $A \propto x$  である場合、

$$p \cdot x \rightarrow \hat{p} \cdot \hat{x} \quad (22)$$

のようにとると、

$$(\hat{p} \cdot \hat{r})^\dagger = (\hat{r} \cdot \hat{p}) \neq (\hat{p} \cdot \hat{r}) \quad (23)$$

となり、エルミートではなくなってしまう。このような問題を避けるには次のように内積の順序に対して対称化したハミルトニアンを用いればよい。

$$(\hat{p} - qA(\hat{x}))^2 = \hat{p}^2 - q(\hat{p} \cdot A(\hat{x}) + A(\hat{x}) \cdot \hat{p}) + q^2 A(\hat{x})^2 \quad (24)$$

電磁場がある場合に限らず、このような問題は量子論への移行においてしばしば現れる。そのような場合に演算子のエルミート性が一つの判断基準となる。

シュレーディンガー方程式

$$\left[ \frac{1}{2m} (\hat{p} - qA)^2 + q\phi \right] \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (25)$$

は次のゲージ変換のもとで不変である。

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\lambda, \\ \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \partial_t\lambda, \\ \psi &\rightarrow \psi' = e^{iq\lambda/\hbar}\psi. \end{aligned} \quad (26)$$

ただし  $\lambda$  は  $(x, t)$  の任意の関数である。

問題 1.2 シュレーディンガー方程式がゲージ変換のもとで不変であることを確かめよ。

問題 1.3 電磁場背景中で確率の流れの密度  $j$  はどのように定義すべきか。またそれはゲージ変換のもとでどのように変換されるか。

## 1.4 運動の因子化

多自由度の系においては、シュレーディンガー方程式

$$\hat{H}(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{p}})\psi(\mathbf{q}) = E\psi(\mathbf{q}) \quad (27)$$



は偏微分方程式であり、一般には厳密に解くことは難しい。しかし、ハミルトニアンが

$$\hat{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{i=1}^n \hat{H}_i(q_i, p_i) \quad (28)$$

のように、それぞれの自由度に対するハミルトニアンの和として与えられている場合には問題を 1 次元の問題に帰着させることができる。

そのようなことが起こる例の一つは、ポテンシャル  $U(\mathbf{x})$  が次のようにそれぞれの座標の関数の和として書けている場合である。

$$U(\mathbf{x}) = U_x(x) + U_y(y) + U_z(z) \quad (29)$$

のように、それぞれの座標依存性が分離している場合である。このときハミルトニアン全体も、それぞれの座標に関するものに分離する。

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z, \quad \hat{H}_i = \frac{1}{2m} \hat{p}_i^2 + U_i(x_i), \quad (i = x, y, z). \quad (30)$$

このように、ハミルトニアンのそれぞれの項に二つ以上の変数が同時に現れないような状況は「変数が分離している」、「運動が因子化している」などと表現される。

このような因子化が起こっている場合、波動関数をそれぞれの座標変数の関数の積として

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z) \quad (31)$$

とおくことによりシュレーディンガー方程式を解くことができる。(31) をシュレーディンガー方程式 (27) に代入すると、

$$(\hat{H}_x \psi_x) \psi_y \psi_z + \psi_x (\hat{H}_y \psi_y) \psi_z + \psi_x \psi_y (\hat{H}_z \psi_z) = E \psi_x \psi_y \psi_z \quad (32)$$

となる。両辺を  $\psi_x \psi_y \psi_z$  で割ると、

$$\frac{\hat{H}_x \psi_x}{\psi_x} + \frac{\hat{H}_y \psi_y}{\psi_y} + \frac{\hat{H}_z \psi_z}{\psi_z} = E \quad (33)$$

左辺の項はそれぞれ  $x, y, z$  のみに依存する。それらの和が定数になるためには、それぞれの項が座標に依存しない定数でなければならない。左辺の 3 つの項をそれぞれ  $E_x, E_y, E_z$  とおくと

$$\hat{H}_x \psi_x = E_x \psi_x, \quad \hat{H}_y \psi_y = E_y \psi_y, \quad \hat{H}_z \psi_z = E_z \psi_z \quad (34)$$

が得られる。つまり、3 次元のシュレーディンガー方程式が 3 つの 1 次元シュレーディンガー方程式に分解された。系のエネルギーは、これら 3 つのシュレーディンガー方程式を解いて得られるエネルギー固有値の和

$$E = E_x + E_y + E_z \quad (35)$$

として得られる。

(31) のように因子化した波動関数の規格化を行う場合には、それぞれの方向に対して適切な条件を置けばよい。たとえば全ての方向に対する運動が有限領域に限られている場合には

$$\int |\psi_x(x)|^2 dx = \int |\psi_y(y)|^2 dy = \int |\psi_z(z)|^2 dz = 1 \quad (36)$$

とすればよい。このとき

$$\int |\psi(\mathbf{x})|^2 d^3V = 1 \quad (37)$$

が成り立つ。

規格化された波動関数は粒子の存在確率密度を与えるが、(31) のように因子化した波動関数においてはそれぞれの因子はそれぞれの座標軸の上での粒子の存在確率密度を与えていると解釈することができる。例えば、粒子が  $x$  から  $x + \delta x$  の間にある確率は

$$\begin{aligned} \int_x^{x+\delta x} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz |\psi(\mathbf{x})|^2 &= \int_x^{x+\delta x} |\psi_x(x)|^2 dx \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_y(y)|^2 dy \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_z(z)|^2 dz \\ &= |\psi_x(x)|^2 \delta x \end{aligned} \quad (38)$$

となり  $|\psi_x(x)|^2$  が  $x$  方向についての確率密度分布を与えていることがわかる。

問題 1.4 ポテンシャルが次のように与えられる系のエネルギー順位を求めよ。

$$U(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} k \mathbf{x}^2 \quad (39)$$

## 1.5 箱の中の粒子

運動が因子化していて簡単に解ける例として、辺の長さが  $L_x, L_y, L_z$  である箱の中に閉じ込められている粒子を考えよう。このような箱は、箱の外部で発散するようなポテンシャル

$$\begin{aligned} U(\mathbf{x}) &= 0 \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad 0 \leq z \leq L_z, \\ &= \infty \quad \text{outside} \end{aligned} \quad (40)$$

によって表すことができる。(ある点や面の上だけではなく)有限の領域でポテンシャルが発散している場合にそこで波動関数が 0 になるのは 1 次元系の場合と同様である。つまり、箱の外には粒子は存在せず、 $\psi(\mathbf{x}) = 0$  である。

箱の内部でのシュレーディンガー方程式は

$$\hat{H}\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (41)$$

であり、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \quad (42)$$

のように 3 つの方向に分解することができる。それぞれの部分は次のように与えられる。

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x_i} + V_i(x_i). \quad (43)$$

ただし、 $V_i(x_i)$  は  $0 \leq x_i \leq L_i$  では 0 で、その外側では  $+\infty$  であるような関数である。

(45) を解くために、波動関数を次のように置く。

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z) \quad (44)$$

解くべき方程式は

$$\hat{H}_i \psi_i(x_i) = E_i \psi_i(x_i), \quad (i = x, y, z) \quad (45)$$

である。箱の側面で 0 になるという境界条件を満足する波動関数は

$$\psi_{i,n_i} = \sqrt{\frac{2}{L_i}} \sin \frac{n_i \pi}{L_i} x_i, \quad n_i = 1, 2, 3, \dots \quad (46)$$

であり、ハミルトニアン  $\hat{H}_i$  に対する固有値は次のように与えられる。

$$E_{i,n_i} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n_i \pi}{L_i} \right)^2. \quad (47)$$

系全体のエネルギー固有値は

$$E = E_{x,n_x} + E_{y,n_y} + E_{z,n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right), \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (48)$$

$n_x, n_y, n_z$  は独立な正整数である。

問題 1.5 平行六面体の箱の中の粒子の波動関数を求めたい。斜行座標を用いることで簡単に解くことができるかどうか考えてみよ。

## 1.6 二粒子系

粒子が二つ存在する場合を考えよう。それぞれの位置を  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  とする。二つの演算子は互いに可換である。それらの同時固有状態を  $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$  と表すことにしよう。(座標表示における) 波動関数は

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \psi \rangle \quad (49)$$

である。二つの粒子に働く力が保存力であり、ポテンシャルを用いて表せると仮定すると、ハミルトニアンは次のようになる。

$$H = \frac{1}{2m_1} \mathbf{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2} \mathbf{p}_2^2 + U(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \quad (50)$$

一般にはポテンシャルは  $\mathbf{x}_1$  と  $\mathbf{x}_2$  の任意の関数でよいが、ここではそれらの差のみに依存すると仮定した。

この系を量子力学的に扱うためには、次の置き換えを行えばよい。

$$\mathbf{p}_1 \rightarrow \hat{\mathbf{p}}_1 = -i\hbar\nabla_1, \quad \mathbf{p}_2 \rightarrow \hat{\mathbf{p}}_2 = -i\hbar\nabla_2. \quad (51)$$

ただし、 $\nabla_i$  ( $i = 1, 2$ ) はそれぞれの粒子の座標に関する微分である。

$$\nabla_i = \left( \frac{\partial}{\partial x_i}, \frac{\partial}{\partial y_i}, \frac{\partial}{\partial z_i} \right) \quad (52)$$

古典力学においてはこのような形は重心座標と相対座標

$$\mathbf{X} = \frac{1}{M}(m_1\mathbf{x}_1 + m_2\mathbf{x}_2), \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \quad (53)$$

を用いて書くのが便利であった。ただし  $M = m_1 + m_2$  は全質量であり、 $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$  は換算質量である。全運動量  $\mathbf{P} = M\dot{\mathbf{X}}$  および相対運動量  $\mathbf{p} = \mu\dot{\mathbf{x}}$  を用いると、

$$H = \frac{1}{2M} \mathbf{P}^2 + \frac{1}{2\mu} \mathbf{p}^2 + U(\mathbf{x}) \quad (54)$$

となり、運動が因子化することがわかる。

古典的運動量の間関係

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= M\dot{\mathbf{X}} = m_1\dot{\mathbf{x}}_1 + m_2\dot{\mathbf{x}}_2 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \\ \mathbf{p} &= \mu\dot{\mathbf{x}} = \frac{m_1 m_2}{M}\dot{\mathbf{x}}_1 - \frac{m_1 m_2}{M}\dot{\mathbf{x}}_2 = \frac{m_2}{M}\mathbf{p}_1 - \frac{m_1}{M}\mathbf{p}_2 \end{aligned} \quad (55)$$

は運動量演算子

$$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{X}}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{x}} \quad (56)$$

に対しても成り立つ。

問題 1.6 このことを示せ。つまり、座標の関係 (53) を用いて微分演算子  $\nabla_{\mathbf{X}}$  と  $\nabla_{\mathbf{x}}$  を  $\nabla_1$  および  $\nabla_2$  によって表すと、運動量の関係式 (55) と同じになっていることを示せ。

従ってハミルトニアン演算子が

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{X}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{x}}^2 + U(\mathbf{x}) \quad (57)$$

と書ける。この中で  $\mathbf{X}$  を含む部分と  $\mathbf{x}$  を含む部分は分離しており、波動関数を

$$\psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = \psi_{\text{CM}}(\mathbf{X})\psi_{\text{rel}}(\mathbf{x}) \quad (58)$$

のように置くことができる。それぞれに対してシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\mathbf{X}}^2\psi_{\text{CM}}(\mathbf{X}) = E_{\text{CM}}\psi_{\text{CM}}(\mathbf{X}) \quad (59)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\mathbf{x}}^2 + U(\mathbf{x})\right]\psi_{\text{rel}}(\mathbf{x}) = E_{\text{rel}}\psi_{\text{rel}}(\mathbf{x}) \quad (60)$$

全エネルギーはそれぞれのエネルギー固有値の和として与えられる。

$$E = E_{\text{CM}} + E_{\text{rel}} \quad (61)$$

$\mathbf{X}$  に関する式は自由粒子のシュレーディンガー方程式であるから、すぐに解ける。

$$\psi_{\text{CM}}(\mathbf{X}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{X}) \quad (62)$$

$$E_{\text{CM}} = \frac{\hbar^2}{2M}\mathbf{k}^2 \quad (63)$$

従って後は  $\psi_{\text{rel}}$  に対するシュレーディンガー方程式 (60) が解ければ、二粒子系の問題が解けたことになる。

## 2 中心力場の中の運動

### 2.1 極座標におけるシュレーディンガー方程式

$U(\mathbf{x})$  が  $r = |\mathbf{x}|$  にのみ依存する (中心力) 場合を考えよう。この場合、極座標  $(r, \theta, \phi)$  を用いるのが自然である。直交座標系  $(x, y, z)$  との関係は以下の通り。

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta. \quad (64)$$

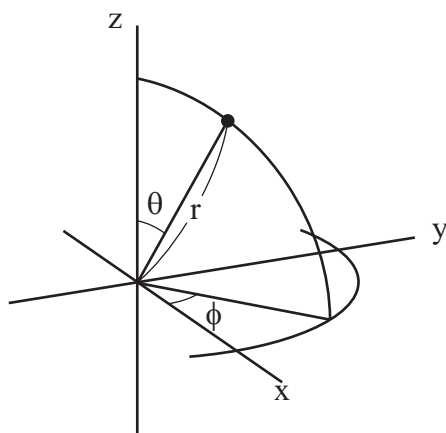


図 2: 極座標と直交座標の関係

まず、古典的ハミルトニアンを極座標で表すことを考えよう。古典的ラグランジアンを極座標で表したもの<sup>1</sup>

$$\mathcal{L} = \frac{\mu}{2} \left[ \dot{r}^2 + r^2(\dot{\theta}^2 + \sin^2 \theta \dot{\phi}^2) \right] - U(r) \quad (65)$$

から座標変数  $(r, \theta, \phi)$  に対する正準運動量を求めると、次のようになる。

$$p_r = \mu \dot{r}, \quad p_\theta = \mu r^2 \dot{\theta}, \quad p_\phi = \mu r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}. \quad (66)$$

従って、古典的ハミルトニアンは

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} = \frac{1}{2\mu} \left( p_r^2 + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} \right) + U(r). \quad (67)$$

ただし  $\mathbf{L}$  は角運動量ベクトルであり、その二乗は次のように与えられる。

$$\mathbf{L}^2 = (\mu v_\perp r)^2 = (\mu r^2)^2 (\dot{\theta}^2 + \sin^2 \theta \dot{\phi}^2) = p_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} p_\phi^2 \quad (68)$$

<sup>1</sup>角運動量の  $\mathbf{L}$  と紛らわしいので、ラグランジアンを  $\mathcal{L}$  で表わす。

( $v_{\perp}$  は角度方向の速さである。)  $L$  は  $p_{\theta}$  と  $p_{\phi}$  の関数であるが、保存量であるから定数とみなすと、(68) は次の有効ポテンシャルによって与えられる 1 次元問題とみなすことができる。

$$U_{\text{eff}}(r) = \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + U(r). \quad (69)$$

つまり、中心力中の運動の問題は、角度方向の運動を決めると、1 次元のポテンシャル問題になる。量子力学においても同様である。

このことを見るために、ハミルトニアン演算子

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + U(r) \quad (70)$$

を極座標を用いて表そう。ラプラシアン  $\Delta$  を極座標の微分を用いて書き換えるためには微分演算子  $\partial_x$  などに対する書き換えを与える必要がある。

連鎖則を用いれば、極座標による微分を直角座標による微分で書き換えるのは簡単である。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} &= \sin\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial x} + \sin\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial y} + \cos\theta \frac{\partial}{\partial z}, \\ \frac{\partial}{\partial \theta} &= r \cos\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial x} + r \cos\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial y} - r \sin\theta \frac{\partial}{\partial z}, \\ \frac{\partial}{\partial \phi} &= -r \sin\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial x} + r \sin\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial y} \end{aligned} \quad (71)$$

これらの式を  $\partial_x$ 、 $\partial_y$ 、 $\partial_z$  に対する連立方程式だと思って解くと、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \sin\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\sin\phi}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\cos\phi}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}. \end{aligned} \quad (72)$$

これらを用いると、ラプラシアンの極座標における表式

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{S^2} \quad (73)$$

が得られる。ただし

$$\Delta_{S^2} = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (74)$$

は角度変数のみを含む微分演算子であり、単位球面上のラプラシアンである。従って、ハミルトニアン演算子は次のように与えられる。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{S^2} \right] + U(r). \quad (75)$$

このハミルトニアンと古典的ハミルトニアンの関係を見ておこう。(75) に対して置き換え

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \rightarrow p_r, \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \rightarrow p_\theta, \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \rightarrow p_\phi \quad (76)$$

という置き換えを行ってみよう。すると古典的ハミルトニアン (67) が得られることがわかる。

ハミルトニアン演算子の中の  $\Delta_{S^2}$  を含む項と (68) を見比べると、次の関係が成り立つことがわかる。

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{S^2} \quad (77)$$

問題 2.1  $L^2$  と  $-\hbar^2 \Delta_{S^2}$  の次元が一致することを確認せよ。

(75) に与えた  $\hat{H}$  を用いると、シュレーディンガー方程式は

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{S^2} \right] + U(r) \right\} \psi = E\psi \quad (78)$$

となる。

## 2.2 動径方向と角方向の分離

極座標におけるシュレーディンガー方程式 (78) の両辺に  $2\mu r^2 / \hbar^2$  を掛けると

$$\left[ -\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 (U(r) - E) - \Delta_{S^2} \right] \psi = 0. \quad (79)$$

右辺の括弧の中は  $r$  のみを含む部分と  $(\theta, \phi)$  のみを含む部分に分かれているので、

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (80)$$

のように置くことで解くことができる。これを代入すれば、次の二つの方程式に分解される。

$$-\Delta_{S^2} Y(\theta, \phi) = \lambda Y(\theta, \phi), \quad (81)$$

$$\left[ -\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 (U(r) - E) + \lambda \right] R(r) = 0. \quad (82)$$

(81) は角度方向の運動を、(82) は動径方向の運動を決める方程式である。(77) より、定数  $\lambda$  は粒子の角運動量と

$$L^2 = \hbar^2 \lambda \quad (83)$$



の関係にあることがわかる。

$f(r) = rR(r)$  を定義すると、 $R(r)$  に対する微分方程式が次のように書き換えられる。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + U(r) + \frac{\hbar^2 \lambda}{2\mu r^2} \right] f(r) = Ef(r). \quad (84)$$

と書き換えられる。これは有効ポテンシャル (69) を持つ 1 次元のシュレーディンガー方程式に他ならない。

つまり、中心力場中の質点の運動を量子力学的に解くには、次の手順を踏めばよい。

- (81) を解くことにより角度方向の運動 (波動関数  $Y(\theta, \phi)$ ) を決める。同時に固有値  $\lambda$  を決める。
- 得られた固有値  $\lambda$  を (82) あるいは (84) に代入して解くことにより、動径方向の運動 (波動関数  $R(r)$  または  $f(r)$ ) を決める。同時に、エネルギー固有値  $E$  が得られる。

## 2.3 エルミート性に関する注意

(76) とは逆の置き換え、すなわち

$$p_r \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}, \quad p_\theta \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}, \quad p_\phi \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (85)$$

を (67) に対して行っても必ずしも (75) が得られるとは限らないことに注意しよう。単純に置き換えを行うと、次のハミルトニアン演算子を得る。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] + U(r) \quad (86)$$

残念ながら、こうして得られたハミルトニアン演算子は正しくない。その理由として、

- 回転対称性がない。
- エルミートでない。

などが挙げられる。回転対称性をチェックするのは計算が面倒なので、ここではエルミート性について確認しておこう。演算子  $\hat{H}$  がエルミートであるとする、任意の状態  $|\psi_1\rangle$  と  $|\psi_2\rangle$  に対して

$$\langle \psi_1 | \hat{H} \psi_2 \rangle = \langle \hat{H} \psi_1 | \psi_2 \rangle \quad (87)$$

が成り立つはずである。ただし  $\hat{H}|\psi_i\rangle$  のことを  $|\hat{H}\psi_i\rangle$  と表した。極座標においては、二つの状態の内積は波動関数の次の積分によって与えられる。

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int \psi_1^* \psi_2 d\mathbf{x} = \int \psi_1^* \psi_2 r^2 \sin^2 \theta dr d\theta d\phi \quad (88)$$

従って、 $\hat{H}$  がエルミートかどうかを確認するには

$$\int \psi_1^* (\hat{H}\psi_2) r^2 \sin^2 \theta dr d\theta d\phi \stackrel{?}{=} \int (\hat{H}\psi_1)^* \psi_2 r^2 \sin^2 \theta dr d\theta d\phi \quad (89)$$

が成り立つかどうかを見ればよい。問題を単純化するために、波動関数  $\psi_1$  と  $\psi_2$  はどちらも  $r$  だけの関数であり、角変数  $\theta$  と  $\phi$  に依存しないとしよう。そのとき (89) は次のように単純化される。

$$\int \psi_1^* \left( \frac{d^2}{dr^2} \psi_2 \right) r^2 dr \stackrel{?}{=} \int \left( \frac{d^2}{dr^2} \psi_1 \right)^* \psi_2 r^2 dr. \quad (90)$$

もし  $r^2$  という因子が無ければ、適当な境界条件のもとでこれら二つは等しくなる。(部分積分をすればよい。)しかし  $r^2$  因子のためにこの等号は成り立たない。すなわち、 $\hat{H}$  はエルミートではない。

一般に、正準量子化を行う前の古典的ハミルトニアンにおいては運動量変数と座標変数の順序の取り方には不定性があるため、異なる順序(古典的には等価)に対して異なる演算子が得られてしまう。この様な際には上で述べたように演算子のエルミート性などを手がかりに正しいハミルトニアン演算子を推定する。

問題 2.2 (86) のハミルトニアンを直交座標によって表すことで回転対称性を持たないことを確認せよ。

### 3 球面調和関数

#### 3.1 角運動量

このセクションの目標は角方向の微分方程式

$$-\Delta_{S^2} Y(\theta, \phi) = \lambda Y(\theta, \phi) \quad (91)$$

を解き、波動関数  $Y(\theta, \phi)$  と固有値  $\lambda$  を決定することである。この微分方程式の解は球面調和関数と呼ばれる。容易に想像できるように、角方向の運動は角運動量と密接に関連している。そこで、角運動量の演算子を定義することから始めよう。

古典的粒子の角運動量は次のように定義することができる。

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} \quad (92)$$

あるいは成分で表すと

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x. \quad (93)$$

よって角運動量演算子を

$$\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x) \quad (94)$$

のように定義することができる。 $\hat{L}_x, \hat{L}_y$  についても同様である。角運動量ベクトル演算子  $\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$  をまとめて

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar(\mathbf{x} \times \nabla) \quad (95)$$

と表わすこともできる。一般に、演算子の積はその順序に依存するが、 $\hat{\mathbf{L}}$  の定義の各項には交換しない演算子は現れないので、順序を気にする必要はない。

$\hat{\mathbf{L}}$  の成分同士の交換関係を計算してみると、次のようになる。

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \quad (96)$$

これらは角運動量代数と呼ばれる。 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  は同時測定可能ではなく、一つの成分だけを確定させることができる。

問題 3.1 (96) の交換関係を確認せよ。

問題 3.2 (96) は  $\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar\hat{\mathbf{L}}$  と書けることを確認せよ。

$\hat{L}^2$  を次のように定義する。

$$\hat{L}^2 = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (97)$$

$\hat{L}^2$  は  $\hat{L}$  のそれぞれの成分と可換である。

$$[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0. \quad (98)$$

従って、 $\hat{L}^2$  と  $\hat{L}_z$  を同時に確定させることができる。

極座標を用いて角運動量演算子を表すと次のようになる。

$$\begin{aligned} \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}, \\ \hat{L}_x &= -i\hbar \left( -\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left( \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \end{aligned} \quad (99)$$

これらを用いれば、(77) に与えた関係式  $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{S^2}$  を確認することができる。

問題 3.3  $\hat{L}_z$  の定義式 (94) および  $\hat{L}_x$ 、 $\hat{L}_y$  に対する同様の式に (72) を代入することで (99) が得られることを確認せよ。

## 3.2 球面上の粒子

中心からの距離  $r$  が固定された球面上を運動する質量  $\mu$  の質点の運動を考えよう。あるいは長さ  $r$  の棒の両端に固定された二つの質点の相対運動を考えていると思っても良い。後者の場合には  $\mu$  は二つの質点の換算質量である。角度方向には自由に運動することができる」とすると、ラグランジアンは

$$\mathcal{L} = \frac{\mu}{2} v^2 = \frac{\mu}{2} r^2 (\dot{\theta}^2 + \sin^2 \theta \dot{\phi}^2) \quad (100)$$

である。ポテンシャル項がないので、ラグランジアンとハミルトニアンは同じである。角運動量と速さ  $v$  は  $|L| = \mu r v$  によって関係しているから、次のように書き換えることができる。

$$H = \frac{1}{2\mu r^2} L^2. \quad (101)$$

従って、この系を量子化すれば、シュレーディンガー方程式は

$$\frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 \psi(\theta, \phi) = E \psi(\theta, \phi) \quad (102)$$

となる。これは (91) と同じ形をしている。すなわち、球面調和関数は球面上を運動する粒子の定常状態を表わす波動関数とみなすこともできる。

### 3.3 球面調和関数 ( $m = 0$ )

$\hbar$  を書く手間を省くために、次のものを定義しておく。

$$\hat{l} = \frac{1}{\hbar} \hat{L}. \quad (103)$$

これを用いれば、解きたい微分方程式 (91) は次のように表わされる。

$$\hat{l}^2 Y(\theta, \phi) = \lambda Y(\theta, \phi) \quad (104)$$

$\hat{l}^2$  と  $\hat{l}_z$  は可換なので (104) に加えて次の条件を課することができる。

$$\hat{l}_z Y(\theta, \phi) = m Y(\theta, \phi). \quad (105)$$

演算子はどちらもエルミートなので、固有値  $m$  と  $\lambda$  は実数である。 $Y(\theta, \phi)$  の規格化を次のように決めておく。

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi |Y(\theta, \phi)|^2 = 1. \quad (106)$$

角運動量演算子の具体形を代入すれば、次の二つの式が得られる。

$$-i \frac{\partial}{\partial \phi} Y(\theta, \phi) = m Y(\theta, \phi), \quad (107)$$

$$\left( -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) Y(\theta, \phi) = \lambda Y(\theta, \phi). \quad (108)$$

一つ目の式は  $\phi$  だけを含み、二つ目の式は  $\theta$  だけを含むので、関数  $Y(\theta, \phi)$  を次のように分解することができる。

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi). \quad (109)$$

それぞれの関数は次の常微分方程式を満たす。

$$-i \frac{d}{d\phi} \Phi(\phi) = m \Phi(\phi), \quad (110)$$

$$\left( -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = \lambda \Theta(\theta). \quad (111)$$

それぞれの関数の規格化は次のように決めておく。

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta |\Theta(\theta)|^2 = 1, \quad \int_0^{2\pi} d\phi |\Phi(\phi)|^2 = 1. \quad (112)$$

(110) は簡単に解くことができ、解は次のように与えられる。

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \quad (113)$$

(球面上の  $S^1$  は可縮であることから、)  $\Phi(\phi)$  は周期境界条件

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \quad (114)$$

を満足しなければならない。よって  $m$  は整数でなければならない。

$\Theta(\theta)$  に対する微分方程式を解くために、 $z = \cos \theta$  を導入し、

$$\Theta(\theta) = f(z) \quad (115)$$

と置くのが便利である。

$$\frac{d}{d\theta} = -\sin \theta \frac{d}{dz} \quad (116)$$

であるから、微分方程式 (111) は次のように書き換えることができる。

$$\left( \frac{d}{dz}(1-z^2) \frac{d}{dz} + \lambda - \frac{\lambda}{1-z^2} \right) f(z) = 0 \quad (117)$$

$z$  の範囲は

$$-1 \leq z \leq 1 \quad (118)$$

であり、この範囲で関数  $f(z)$  は発散してはならない。 $\Theta(\theta)$  に対する規格化条件 (112) は次のように書き換えられる。

$$\int_{-1}^1 |f(z)|^2 dz = 1. \quad (119)$$

はじめから一般の  $m$  に対して (111) を解くことは難しいので、まずは  $m = 0$  の場合を考えてみよう。

$$\left( \frac{d}{dz}(1-z^2) \frac{d}{dz} + \lambda \right) f(z) = 0. \quad (120)$$

これはルジャンドルの微分方程式である。

調和振動子の問題においてエルミート多項式を求めたのと類似の方法でこの微分方程式の解を求めることができる。まず、関数  $f(z)$  を次のようにテイラー展開する。

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n \quad (121)$$

これを微分方程式 (120) に代入すると、次の式が得られる。

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_n a_n [\{\lambda - n(n+1)\} z^n + n(n-1) z^{n-2}] \\ &= \sum_n [a_n \{\lambda - n(n+1)\} + a_{n+2} (n+2)(n+1)] z^n \end{aligned} \quad (122)$$

全ての項の係数が 0 であるということから漸化式

$$a_{n+2} = \frac{n(n+1) - \lambda}{(n+2)(n+1)} a_n \quad (123)$$

を得る。この漸化式の分母は 0 にならないので、 $a_0$ 、 $a_1$  を与えると全ての係数が決まる。

$n$  が大きいところでは、漸化式は

$$a_{n+2} \sim a_n \quad (124)$$

となり、係数は  $n$  が偶数と奇数それぞれである値に漸近する。そこで

$$a_{\text{even}} \rightarrow A, \quad a_{\text{odd}} \rightarrow B \quad (125)$$

と置いてみよう。このとき関数  $f(z)$  は

$$\begin{aligned} f(z) &= (A + Bz) \sum_{k=0}^{\infty} +n \text{ の小さいところの寄与} \\ &= \frac{A + Bz}{1 - z^2} + \text{有限} \end{aligned} \quad (126)$$

もし第 1 項が 0 でなければこの関数は  $z = \pm 1$  の少なくともどちらかで発散する。従って、 $A, B = 0$  でなければならない。これは、漸化式の係数がどこかで 0 になり、それ以降の  $a_n$  が全て 0 になることを意味する。すなわち  $f(z)$  は多項式である。

$n = l$  ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ) の時に漸化式 (123) の右辺が 0 になるとすると、 $\lambda$  は次のように量子化されている必要がある。

$$\lambda = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (127)$$

$l$  が偶数のときは ( $a_0 \neq 0, a_1 = 0$ )  $l$  が奇数のときは ( $a_0 = 0, a_1 \neq 0$ ) が許される。

ある  $\lambda = l(l+1)$  における微分方程式 (120) の解は  $l$  次の多項式である。それを  $P_l(1) = 1$  によって規格化したものはルジャンドル多項式 (Legendre polynomials) と呼ばれ、 $P_l(z)$  と書く。 $l = 0, 1, 2, 3$  について、 $P_l(z)$  の具体的な式とそのグラフを与えておく。

$$\begin{aligned} P_0(z) &= 1, \\ P_1(z) &= z, \\ P_2(z) &= \frac{1}{2}(-1 + 3z^2), \\ P_3(z) &= \frac{1}{2}(-3z + 5z^3). \end{aligned} \quad (128)$$

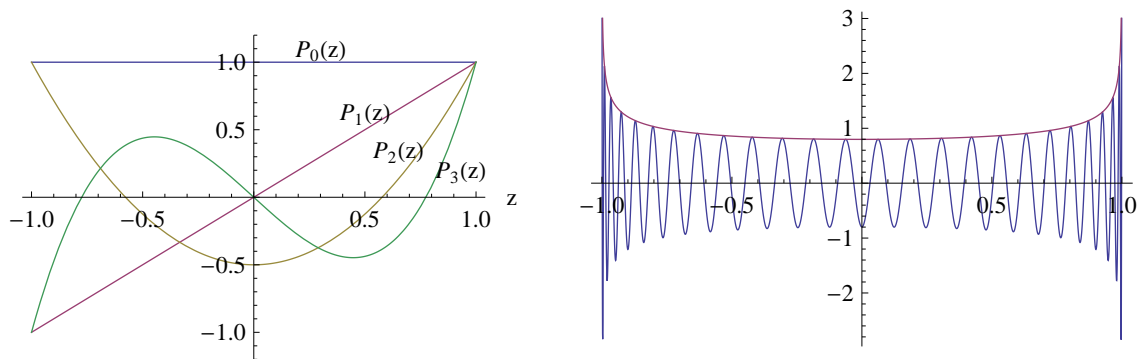


図 3: 左は  $l = 0, 1, 2, 3$  に対するルジャンドル多項式、右は  $l = 50$  に対するルジャンドル多項式とその包絡線。

ルジャンドルの微分方程式 (120) は次のように書くことができる。

$$\hat{h}f(z) = \lambda f(z), \quad \hat{h} = -\frac{d}{dz}(1-z^2)\frac{d}{dz}. \quad (129)$$

$-1 \leq z \leq 1$  において  $f$  と  $f'$  が発散しないと仮定すると、微分演算子  $\hat{h}$  は内積

$$(f, g) = \int_{-1}^1 (f(z))^* g(z) dz \quad (130)$$

のもとでエルミートであることを示すことができる。従って、 $\hat{h}$  の固有関数であるルジャンドル多項式はこの内積のもとで互いに直交する。

ルジャンドル多項式は次の性質を持つ。また、これらの性質から一意的にルジャンドル多項式を決定することができる。

- 直交性

$$\int_{-1}^1 P_l(z) P_{l'}(z) dz = C_l \delta_{ll'} \quad (131)$$

- 規格化条件

$$P_l(1) = 1. \quad (132)$$

- $P_l(z)$  は  $z$  の  $l$  次多項式

問題 3.4 (128) に与えた 4 つのルジャンドル多項式に対して直交性 (131) を確認せよ。

後で示すが、(131) の規格化係数は  $C_l = 2/(2l+1)$  である。つまり、次の式が成り立つ。

$$\int_{-1}^1 P_l(\zeta)^2 d\zeta = \frac{2}{2l+1} \quad (133)$$



従って、規格化条件 (119) を満足する関数  $f(z)$  は次のように与えられる。(量子数  $l$  に対する関数  $f(z)$  を  $f_l(z)$  と表すことにする。)

$$f_l(z) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(z). \quad (134)$$

量子数  $l$  と  $m$  によって指定される球面調和関数を  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  と表す。(113) と (134) を組み合わせることで、 $m = 0$  の場合の球面調和関数が次のようにもとまる。次のように与えられる。

$$Y_{l0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta). \quad (135)$$

問題 3.5 図 3 の左のグラフ ( $P_{50}(z)$ ) のように、 $l$  が大きいとき  $P_l(z)$  はある範囲で激しく振動する関数である。物理的な考察により  $l$  が非常に大きいときの  $P_l(z)$  の包絡線の関数形を推測せよ。

### 3.4 ルジャンドル多項式

ルジャンドル多項式は、次の微分方程式の解として定義される。

$$\left( \frac{d}{dz}(1-z^2) \frac{d}{dz} + l(l+1) \right) P_l(z) = 0. \quad (136)$$

ルジャンドル多項式を効率よく計算するには、以下のようにすればよい。 $\psi$  を 3 次元のラプラス方程式

$$\Delta \psi(r, \theta, \psi) = \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{S^2} \right) \psi(r, \theta, \phi) = 0 \quad (137)$$

の解とする。原点  $r = 0$  では  $\psi$  はなめらかであるとする、次のように展開することができる。

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum r^n f_n(\theta, \phi) \quad (138)$$

これを (137) に代入すれば、 $f_n$  は次の式を満たすことがわかる。

$$[\Delta_{S^2} + n(n+1)] f_n(\theta, \phi) = 0 \quad (139)$$

従って  $r^n$  の係数  $f_n(\theta, \phi)$  が  $l = n$  の球面調和関数を与える。特に、 $f_l(\theta, \phi)$  が  $\phi$  によらない場合には、

$$f_l(\theta) \propto Y_{l0}(\theta, \phi) \propto P_l(\cos \theta) \quad (140)$$

となるはずである。つまり、 $\phi$  に依存しない (137) の解を展開することでルジャンドル多項式を得ることができる。(139) を満足する関数は、 $\phi$  依存性が無いものに限ったとしても無数にあり、そのどれも展開係数は  $P_l(\cos \theta)$  に比例する。すなわ

ち関数  $\psi(r, \theta)$  は  $P_n(\cos \theta)$  の母関数になっている。(比例係数は  $\psi(r, \theta)$  の選び方による。) ここでは、 $\phi$  依存性を持たない (137) の解として次のものを採用する。

$$G(r, \cos \theta) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z-1)^2}} = \frac{1}{\sqrt{r^2 - 2r \cos \theta + 1}} = \frac{1}{\sqrt{r^2 - 2r\xi + 1}} \quad (141)$$

ただし  $\xi = \cos \theta$  を導入した。これは  $(x, y, z) = (0, 0, 1)$  のところにある電荷のつくるポテンシャルとみなすことができるから、ラプラス方程式を (電荷の位置以外で) 満たすのは明らかである。従って  $r < 1$  において次のように展開することができる。

$$G(r, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n r^n P_n(\xi) \quad (142)$$

係数  $c_n$  を決めるには、 $\xi = 1$  を代入してみればよい。(132) に与えた規格化条件  $P_n(1) = 1$  を用いれば

$$G(r, 1) = \frac{1}{1-r} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n r^n \quad (143)$$

となり、 $c_n = 1$  が得られる。つまり、次の式が成り立つ。

$$G(r, \xi) = \frac{1}{\sqrt{r^2 - 2r\xi + 1}} = \sum_{n=0}^{\infty} r^n P_n(\xi). \quad (144)$$

(144) からそれぞれの  $P_n(\xi)$  を抜き出すために  $G(r, \xi)$  を  $r$  で展開してみよう。テーラー展開の公式

$$\frac{1}{\sqrt{1-x}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{(2^k k!)^2} x^k \quad (145)$$

を用いれば、

$$G(r, \xi) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{(2^k k!)^2} r^k (2\xi - r)^k \quad (146)$$

ここから  $r^n$  の項を取り出そう。明らかに、そのような項は  $k \leq n$  の場合のみ存在する。 $r^k$  という因子があるから、 $(2\xi - r)^k$  からは  $r$  の  $n-k$  次の項を抜き出せばよい。これは  $k \geq n-k$  のとき、すなわち  $2k \geq n$  の場合のみ可能である。従って  $(n/2) \leq k \leq n$  の範囲のみ考えればよい。それぞれの  $k$  から  $r^n$  の項を抜き出したものは次のようになる。

$$\begin{aligned} P_n(\xi) &= \sum_k \frac{(2k)!}{(2^k k!)^2} C_{n-k} (2\xi)^{2k-n} (-1)^{n-k}. \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_k \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \frac{(2k)!}{(2k-n)!} \xi^{2k-n}. \end{aligned} \quad (147)$$

$k$  に対する和は上で述べた範囲で取る。さらに、微分を用いると次のように書き換えることができる。

$$\begin{aligned} P_n(\xi) &= \frac{1}{2^n} \sum_k \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \frac{d^n}{d\xi^n} \xi^{2k} \\ &= \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{d\xi^n} \sum_k \frac{n!}{k!(n-k)!} \xi^{2k} (-1)^{n-k}. \end{aligned} \quad (148)$$

$k$  に対する和は丁度二項展開の形になっており、最終的に次の式を得る。(ロドリゲスの公式)

$$P_n(\xi) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{d\xi^n} (\xi^2 - 1)^n. \quad (149)$$

$P_l$  のノルムを計算してみよう。ここでは直交性を仮定して

$$\int_{-1}^1 P_l(\zeta) P_{l'}(\zeta) d\zeta = C_l \delta_{ll'} \quad (150)$$

とおき、 $C_l$  を計算することにする。上の積分にロドリゲスの公式を代入して部分積分を繰り返しても簡単に計算できるが、ここでは母関数を用いた方法を紹介しておこう。(150) より、母関数を二乗したものの積分は次のように展開されるはずである。

$$\int_{-1}^1 G(r, \zeta)^2 d\zeta = \sum_{l=1}^{\infty} r^{2l} C_l \quad (151)$$

一方左辺の積分は簡単に実行できて

$$\int_{-1}^1 \frac{d\zeta}{r^2 - 2r\zeta + 1} = \left[ -\frac{1}{2r} \log(1 - 2r\zeta + r^2) \right]_{-1}^1 = \frac{1}{r} \log \frac{1+r}{1-r} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2}{2l+1} r^{2l} \quad (152)$$

よって、展開係数を比較することにより次の式が得られる。

$$C_l = \frac{2}{2l+1} \quad (153)$$

これは以前に与えた関係式 (133) が成り立つことを意味している。

### 3.5 平面上の調和関数

球面調和関数の  $m \neq 0$  の場合について考える前に、平面調和関数、すなわち平面上のラプラス演算子の固有関数を用いて経験を積んでおくことは有益である。平面上の極座標  $(r, \phi)$  において、ラプラシアンは次のように与えられる。

$$\Delta_{R^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (154)$$

これを用いて、質量  $\mu$  の自由粒子のシュレーディンガー方程式が次のように与えられる。

$$(\Delta_{R^2} + k^2)\psi(r, \phi) = 0, \quad (155)$$

ただし、 $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$  を定義した。球面上で  $\phi$  依存性を分離したのと同じやり方で、波動関数は次のように動径方向と角度方向を分離することができる。

$$\psi(r, \phi) = R_{km}(r)e^{im\phi} \quad (156)$$

これを (155) に代入することで、動径部分の波動関数に対する式

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2} + k^2\right) R_{km}(r) = 0. \quad (157)$$

を得る。さらに無次元化された座標  $z = kr$  を導入しよう。この座標で書いた微分方程式は  $k$  を含まないので、波動関数も  $R_{km}(r) = R_m(z)$  のように添え字  $k$  を持たないもので置き換える。

$$\left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} z \frac{d}{dz} - \frac{m^2}{z^2} + 1\right) R_m(z) = 0. \quad (158)$$

$m$  は任意の整数であり、正の値も負の値も許されるが、この方程式には  $m^2$  の形で含まれているので、 $m$  の符号は関数  $R_m(z)$  に影響しない。そこで以下では  $m \geq 0$  であることを仮定しておく。

球面調和関数に対して行ったように、まずは  $m = 0$  の場合を考えよう。このとき微分方程式は

$$\left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} z \frac{d}{dz} + 1\right) R_0(z) = 0 \quad (159)$$

である。この微分方程式は二つの線形独立な解をもつ。そのような解を知っているものと仮定しよう。(この微分方程式の解は初等関数にはならない。)

一旦  $R_0(z)$  が得られれば、そこから一般の  $m$  に対して  $R_m(z)$  を決定するのは簡単である。そのために

$$R_m(z) = z^m \chi_m(z) \quad (160)$$

によって関数  $\chi_m(z)$  を定義する。この関数を用いて (157) は次のように書き換えられる。

$$\chi_m'' + \frac{2m+1}{z} \chi_m' + \chi_m = 0. \quad (161)$$

この式を  $z$  で微分したうえでさらに  $z$  で割ってみる。

$$\left(\frac{1}{z} \chi_m'\right)'' + \frac{2m+3}{z} \left(\frac{1}{z} \chi_m'\right)' + \left(\frac{1}{z} \chi_m'\right) = 0. \quad (162)$$

(161) と (162) を見比べると、 $\chi_m'/z$  が  $\chi_{m+1}$  と同じ微分方程式を満足している。そこで、次のように置くことができる。

$$\chi_{m+1}(z) = \frac{1}{z} \chi_m'(z). \quad (163)$$

この関係式を繰り返し用いることで、任意の  $m$  に対する  $\chi_m(z)$  を  $\chi_0(z) = R_0(z)$  から構成することができる。その結果

$$R_m(z) = z^m \left( \frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^m R_0(z). \quad (164)$$

が得られる。

実は、二つの線形独立な関数  $R_0$  に対して得られる二つの関数の系列はベッセル関数として知られている。

$$J_m(z) = (-z)^m \left( \frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^m J_0(z), \quad Y_m(z) = (-z)^m \left( \frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^m Y_0(z). \quad (165)$$

$J_m(z)$  は第 1 種ベッセル関数、 $Y_m(z)$  は第 2 種ベッセル関数 と呼ばれる。 $m = 0, 1, 2, 3$  に対してこれらの関数の概形を図 4 に与える。この他にも、次のように定

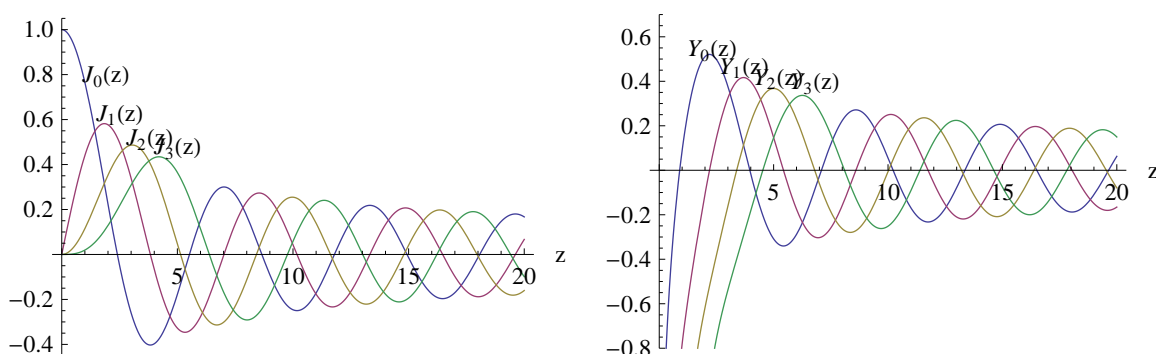


図 4: ベッセル関数

義される第 1 種ハンケル関数  $H_m^{(1)}$  および第 2 種ハンケル関数  $H_m^{(2)}$  もしばしば用いられる。

$$H_m^{(1)} = J_m(z) + iY_m(z), \quad H_m^{(2)} = J_m(z) - iY_m(z). \quad (166)$$

これら二つのハンケル関数は第 3 種ベッセル関数とも呼ばれる。

### 3.6 球面調和関数 ( $m \neq 0$ )

平面上の調和関数の経験を生かして  $m \neq 0$  の場合の球面調和関数を求めよう。 $\phi$  依存性はすでに知っている。つまり、球面調和関数は次のようにおくことができる。

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \Theta_{lm}(\theta) = \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} f_{lm}(\xi), \quad \xi = \cos \theta. \quad (167)$$

あとは  $\Theta_{lm}(\theta)$ 、または  $f_{lm}(\xi)$  の関数形を決めればよい。そのために解くべき微分方程式は

$$\left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + l(l+1) \right) \Theta_{lm}(\theta) = 0. \quad (168)$$

である。この方程式は  $m$  が正でも負でも変わらないので、ここでは  $m \geq 0$  と仮定しておく。規格化条件は

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta |\Theta_{lm}(\theta)|^2 = 1 \quad (169)$$

である。この微分方程式は (157) と類似している。これは単なる類似ではなく、 $\theta$  が小さい極限において適当な座標変換を行うことで (168) は (157) に一致する。従って、(157) に類似したやり方で解くことができると考えるのは自然なことである。

(157) と (168) を見比べると、(157) に対して次の置き換えを行えば (168) が得られることがわかる。

$$r \rightarrow \sin \theta, \quad \frac{d}{dr} \rightarrow \frac{d}{d\theta}, \quad k^2 \rightarrow l(l+1). \quad (170)$$

従って、(160) に倣って次のように  $g_m$  を定義する。

$$\Theta_{lm}(\theta) \propto (\sin \theta)^m g_m(\theta) \quad (171)$$

すると、 $g$  が満足する微分方程式が次のように得られる。

$$g'' + (2m+1) \frac{c}{s} g' + [l(l+1) - m(m+1)]g = 0. \quad (172)$$

ただし、 $s = \sin \theta$ 、 $c = \cos \theta$  である。これは平面の場合の (161) に対応する式である。平面の場合にならって、この式を  $\theta$  で微分したうえで  $\sin \theta$  で割ってみる。すると、次の式が得られる。

$$\left( \frac{1}{s} g' \right)'' + (2m+3) \frac{c}{s} \left( \frac{1}{s} g' \right)' + [l(l+1) - (m+1)(m+2)] \left( \frac{1}{s} g' \right) = 0. \quad (173)$$

この式は、 $g'_m / \sin \theta$  が  $g_{m+1}$  と同じ微分方程式を満足することを意味している。従って次のように置ける。

$$g_{m+1} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} g_m. \quad (174)$$

この関係式を繰り返し用いることで  $g_m$  を  $g_0$  によって表わすことができ、結局 (164) によく似た次の式を得る。

$$\Theta_{lm}(\theta) \propto \sin^m \theta \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \right)^m P_l(\cos \theta) \quad (175)$$

$\xi = \cos \theta$  の関数として定義した次の関数がしばしば用いられる。

$$P_l^m(\xi) = \sqrt{(1 - \xi^2)^m} \left( \frac{d}{d\xi} \right)^m P_l(\xi) \quad (176)$$

これはルジャンドル陪関数 ( associated Legendre functions ) と呼ばれる。ここまでは  $m \geq 0$  と仮定していたが、 $m < 0$  の場合は次のように定義する。

$$P_l^m(\xi) = P_l^{|m|}(\xi). \quad (177)$$

幾つかのルジャンドル陪関数のグラフを図5に与えておく。

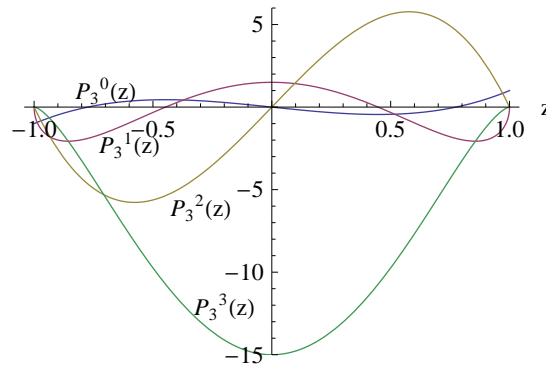


図5: ルジャンドル陪関数  $P_l^m(z)$  ( $l = 3$ )。Mathematica では LegendreP[ $l, m, z$ ] によって与えられる。

球面調和関数はこの関数を用いて  $Y_{l,m}(\theta, \phi) \propto P_l^m(\cos \theta)e^{im\phi}$  と与えられるが、比例係数を決定するためには  $P_l^m$  のノルムを知っておく必要がある。つまり、次の積分を計算したい。

$$\int_{-1}^1 |P_l^m(\xi)|^2 d\xi = \int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2)^m \left[ \frac{d^m}{d\xi^m} P_l(\xi) \right]^2 \quad (178)$$

ルジャンドル多項式に対するロドリゲスの公式 (149) を用いて部分積分を  $l + m$  回行くと

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 |P_l^m(\xi)|^2 d\xi &= \frac{1}{2^{2l} l!^2} \int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2)^m \left[ \frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}} (1 - \xi^2)^l \right]^2 \\ &= \frac{(-1)^{l+m}}{2^{2l} l!^2} \int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2)^l \frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}} (1 - \xi^2)^m \frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}} (1 - \xi^2)^l \end{aligned} \quad (179)$$

が得られる。(ここでも  $m \geq 0$  を仮定している。)  $l + m$  回の部分積分において表面項は現れない。 $2l + 2m$  個の微分が  $\xi$  の  $2l + 2m$  次多項式に作用している。0 に

ならずに残るのは  $\xi$  についての次数が最も高い部分のみである。従って、次のように計算できる。

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^1 |P_l^m(\xi)|^2 d\xi &= \frac{1}{2^{2l} l!^2} \int_{-1}^1 d\xi (1-\xi^2)^l \frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}} \xi^{2m} \frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}} \xi^{2l} \\
 &= \frac{1}{2^{2l} l!^2} \int_{-1}^1 d\xi (1-\xi^2)^l \frac{(l+m)!(2l)!}{(l-m)!} \\
 &= \frac{1}{2^{2l} l!^2} \frac{2^{l+1} l!}{(2l+1)!!} \frac{(l+m)!(2l)!}{(l-m)!} \\
 &= \frac{2}{(2l+1)} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \tag{180}
 \end{aligned}$$

$m = 0$  の場合にはルジャンドル多項式のノルム (153) を与える。この結果を用いれば、規格化された関数  $f_{lm}(\xi)$  は次のように決まる。

$$f_{lm}(\xi) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\xi). \tag{181}$$

この関数の絶対値の二乗は座標  $\xi = \cos \theta$  に対する粒子の存在確率密度を与える。例として  $l$  と  $m$  が大きい場合のグラフを図 6 に与えておく。

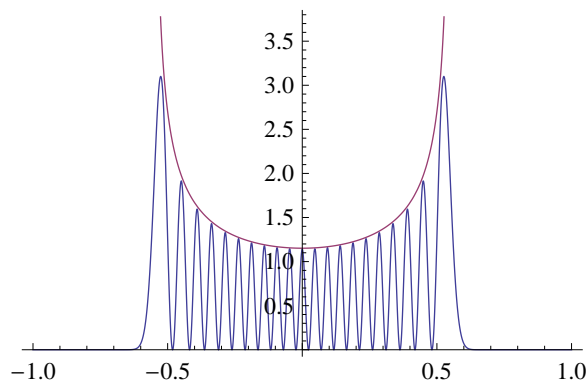


図 6:  $l = 120$ 、 $m = 100$  のときの  $f_{lm}^2(z)$  のグラフとその包絡線。

問題 3.6 物理的考察により、 $l$  と  $m$  がどちらも非常に大きい場合の  $f_{lm}^2(\theta)$  の包絡線の関数形を推測せよ。

以上の結果を用いると、規格化された球面調和関数が次のように与えられる。

$$Y_{lm} = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}. \tag{182}$$

$m$  が負である場合も考慮し、必要なところに絶対値記号を付けておいた。符号因子  $(-1)^{(m+|m|)/2}$  はあとで都合がいいように導入した。

こうして球面調和関数を全て求めることができた。重要な性質をまとめておこう。



- 球面調和関数は、次の二つの量子数によって指定される。

- $l$ : 方位量子数 ( $l = 0, 1, 2, \dots$ )
- $m$ : 磁気量子数 ( $m = -l, -l-1, \dots, l-1, l$ )

$l = 0, 1, 2, 3, \dots$  の代わりに  $s, p, d, f, \dots$  を用いることも多い。例えば  $l = 1$  の状態のことを  $p$  状態と呼ぶ。

- 正規直交関係

$$\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \sin\theta Y_{lm}^* Y_{l'm'} = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (183)$$

- 複素共役

$$Y_{lm}^* = (-1)^m Y_{l-m}. \quad (184)$$

- 球面上の任意の関数は  $Y_{lm}$  を用いて展開することができる。(完全性)

$$F(\theta, \phi) = \sum_{l,m} c_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (185)$$

$l = 0, 1, 2$  の球面調和関数の具体形を与えておこう。角度変数  $(\theta, \phi)$  を用いた表式の他に、単位ベクトルの成分

$$n_x = \sin\theta \cos\phi, \quad n_y = \sin\theta \sin\phi, \quad n_z = \cos\theta \quad (186)$$

を用いた表示も与えておく。

- $l = 0$

$$\sqrt{4\pi} Y_{0,0} = 1. \quad (187)$$

- $l = 1$

$$\sqrt{4\pi} Y_{1,+1} = -\sqrt{\frac{3}{2}} \sin\theta e^{i\phi} = -\sqrt{\frac{3}{2}}(n_x + in_y), \quad (188)$$

$$\sqrt{4\pi} Y_{1,0} = \sqrt{3} \cos\theta = \sqrt{3} n_z, \quad (189)$$

$$\sqrt{4\pi} Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{2}} \sin\theta e^{-i\phi} = \sqrt{\frac{3}{2}}(n_x - in_y). \quad (190)$$

•  $l = 2$

$$\sqrt{4\pi}Y_{2,+2} = \sqrt{\frac{15}{8}} \sin^2 \theta e^{2i\phi} = \sqrt{\frac{15}{8}}(n_x + in_y)^2, \quad (191)$$

$$\sqrt{4\pi}Y_{2,+1} = -\sqrt{\frac{15}{2}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi} = -\sqrt{\frac{15}{2}}n_z(n_x + in_y), \quad (192)$$

$$\sqrt{4\pi}Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{4}}(3 \cos^2 \theta - 1) = \sqrt{\frac{5}{4}}(2n_z^2 - n_x^2 - n_y^2), \quad (193)$$

$$\sqrt{4\pi}Y_{2,-1} = \sqrt{\frac{15}{2}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi} = \sqrt{\frac{15}{2}}n_z(n_x - in_y), \quad (194)$$

$$\sqrt{4\pi}Y_{2,-2} = \sqrt{\frac{15}{8}} \sin^2 \theta e^{-2i\phi} = \sqrt{\frac{15}{8}}(n_x - in_y)^2. \quad (195)$$

図7はこれらの関数を球面上に図示したものである。

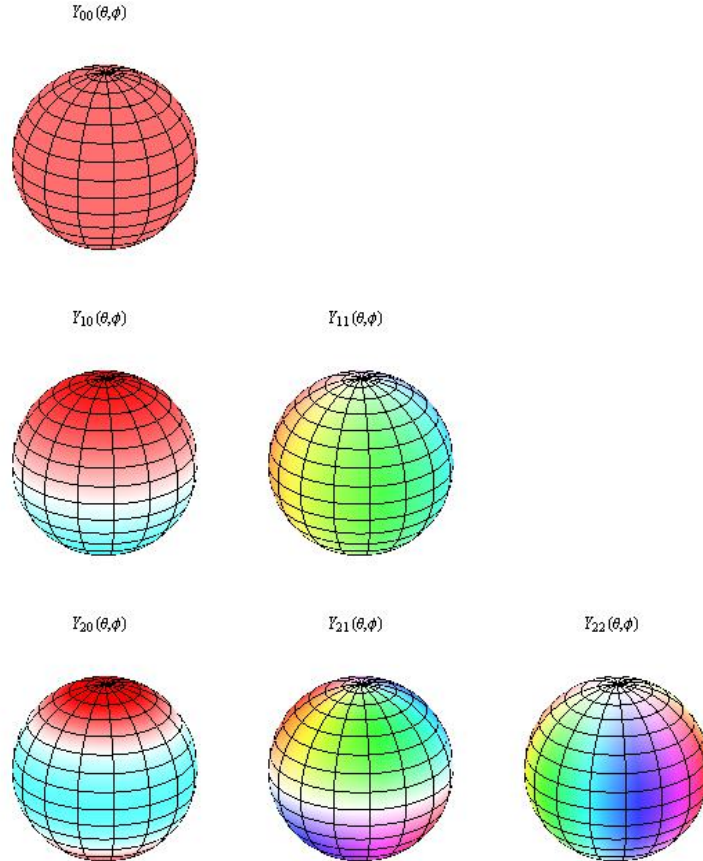


図7: 球面調和関数  $Y_{lm}$ 。色の濃さが絶対値を、色合いが位相を表している。

## 4 水素原子

### 4.1 エネルギー固有値

準備が整ったので、ようやく水素原子のエネルギー準位を計算することができる。解くべきシュレーディンガー方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + U(r)\right)\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (196)$$

である。 $m_e$  は電子質量、 $U(r)$  は原子核-電子間のクーロンポテンシャル

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (197)$$

である。正確には電子質量  $m_e$  ではなく、電子-陽子系の換算質量  $\mu = m_e m_p / (m_p + m_e)$  を用いるべきであるが、 $m_p$  は  $m_e$  よりも非常に大きく（約 2000 倍） $m_e$  と  $\mu$  はほとんど変わらないので、ここでは  $m_e$  を用いる。

この方程式に含まれる定数は

$$\hbar = 1.1 \times 10^{-34} \text{Js}, \quad m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{kg}, \quad s = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 2.3 \times 10^{-28} \text{Jm} \quad (198)$$

である。シュレーディンガー方程式を解いて得られる量は全てこれらを用いて与えられる。典型的なエネルギーと長さのスケールは

$$E_0 = \frac{m_e s^2}{\hbar^2} = 4.4 \times 10^{-18} \text{J}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e s} = 5.3 \times 10^{-11} \text{m} \quad (199)$$

である。 $a_0$  はボーア半径と呼ばれ、水素原子のおおよその大きさを与える。 $E_0$  はしばしば  $E_h$  と書かれ、ハートリーエネルギーと呼ばれる。

シュレーディンガー方程式 (196) は非相対論的な力学に基づいている。計算を始める前に、相対論的な効果を見捨てることの妥当性を確認しておこう。相対論的な効果が無視できるかどうかの一つの目安は、運動エネルギーやポテンシャルエネルギーが質量エネルギー  $m_e c^2$  に比べて非常に小さいかどうかである。そこで、典型的なエネルギースケール  $E_0$  を質量エネルギーと比較してみよう。

$$\frac{E_0}{m_e c^2} = \frac{s^2}{\hbar^2 c^2} = \alpha^2. \quad (200)$$

$\alpha$  は微細構造定数と呼ばれ、電子の質量にはよらない普遍的な量である。その値は

$$\alpha = \frac{1}{137} \frac{e^2}{\hbar c 4\pi\epsilon_0} = \frac{1}{137}. \quad (201)$$

である。従って、 $E_0 / (m_e c^2) \sim 10^{-4}$  と小さく、相対論的な効果を見捨てることは良い近似であることがわかる。

波動関数を

$$\psi(\mathbf{x}) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (202)$$

とにおいてシュレーディンガー方程式に代入すると

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} + U_{\text{eff}}(r) \right] f(r) = E f(r) \quad (203)$$

が得られる。ただし  $U_{\text{eff}}(r)$  は遠心力ポテンシャルを含む有効ポテンシャルであり、次のように与えられる。

$$U_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (204)$$

このポテンシャルにはパラメータの値によらず必ず負の領域があるので、束縛状

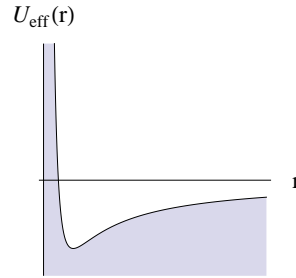


図 8: 水素原子の有効ポテンシャル

態の存在が期待される。ポテンシャルの底の位置を  $r_0$  とすれば、

$$r_0 = l(l+1)a_0, \quad U_{\text{eff}}(r_0) = -\frac{E_0}{2l(l+1)} \quad (205)$$

である。

式を見やすくするために次のような無次元化を行うのがよい。

$$\rho = \frac{r}{a_0}, \quad \frac{\kappa^2}{2} = -\frac{E}{E_0}. \quad (206)$$

ここでは束縛状態に注目しているので  $E < 0$  であり、 $\kappa$  は実数である。 $\kappa$  の符号は正に取ることにする。その結果、微分方程式 (203) は

$$\left( \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \kappa^2 \right) f(\rho) = 0. \quad (207)$$

となる。

この微分方程式をいきなり解くのは難しいので、まずは  $\rho$  が小さいところと大きいところでの解の様子を調べ、そのあとで  $\rho$  の全領域での解を求めることにしよう。

まず、 $\rho \rightarrow 0$  での  $f(\rho)$  の振る舞いを調べよう。 $\rho$  が小さいところでは (207) は近似的に次のようになる。

$$\left( \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) f(\rho) = 0. \quad (208)$$

この微分方程式は簡単に解くことができ、次の解を得る。

$$f(\rho) = c_1 \rho^{l+1} + \frac{c_2}{\rho^l}. \quad (209)$$

$c_1$  と  $c_2$  は積分定数である。原点で波動関数が発散しないためには  $c_2 = 0$  でなければならない。つまり、 $\rho \sim 0$  において  $f(\rho) \propto \rho^{l+1}$  である。

次に  $\rho \rightarrow \infty$  で寄与する項のみを残すと、微分方程式 (207) は

$$\left( \frac{d^2}{d\rho^2} - \kappa^2 \right) f(\rho) = 0 \quad (210)$$

となる。従って

$$f(\rho) \sim c'_1 e^{\kappa\rho} + c'_2 e^{-\kappa\rho} \quad (211)$$

が得られるが、遠方で発散してはならないから  $c'_2 = 0$  でなければならない。

これら二つを考慮して、 $f(\rho)$  を次のようにおく。

$$f(\rho) \propto \rho^{l+1} e^{-\kappa\rho} g(\rho) \quad (212)$$

これを (207) に代入すると、

$$g'' + \frac{2(l+1)}{\rho} g' - 2\kappa g' - \frac{2}{\rho} [\kappa(l+1) - 1] g = 0 \quad (213)$$

が得られる。

この方程式は  $g(\rho)$  をテイラー展開することによって解くことができる。

$$g(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k \quad (214)$$

を代入し、係数ごとに 0 におくと、漸化式

$$(k+1)[k+2l+2]c_{k+1} = 2[\kappa(k+l+1) - 1]c_k \quad (215)$$

が得られる。この漸化式により、全ての  $c_k$  を  $c_0$  から求めることができる。もし無限級数になってしまうと、 $\rho \rightarrow \infty$  での振る舞いが  $e^{+2\kappa\rho}$  となり、波動関数  $\psi(x)$  が発散する。よって  $\rho \rightarrow \infty$  で 0 となる波動関数を得るには、どこかで  $c_k = 0$  となる必要がある。 $c_k \neq 0$  である最大の  $k$  を  $k_{\max}$  とすれば

$$\kappa = \frac{1}{k_{\max} + l + 1} \quad (216)$$

でなければならない。  $k_{\max} = 0, 1, 2, \dots$  ごとに一つの解が求まるが、  $k_{\max}$  の代わりに

$$n = k_{\max} + l + 1 \quad (217)$$

によって定義される  $n$  を用いるのが便利である。  $k_{\max} = 0, 1, 2, \dots$  なので  $n$  は  $n \geq l + 1$  を満たす整数である。  $l$  と  $n$  を与えると関数  $g(\rho)$  が決まる。 そのような  $g(\rho)$  を  $g_{nl}(\rho)$  としよう。  $g_{nl}(\rho)$  は  $\rho$  の  $n - l - 1$  次の多項式である。 波動関数 (状態) は 3 つの量子数  $n, l, m$  を決めると一意的に決まる。  $n$  は主量子数、  $l$  は方位量子数、  $m$  は磁気量子数と呼ばれる。

これらの量子数は次の不等式を満足する整数である。

$$|m| \leq l < n. \quad (218)$$

これら 3 つの量子数によって指定される状態の波動関数は次のように与えられる。

$$\psi_{nlm}(\mathbf{x}) \propto \rho^l e^{-\kappa\rho} g_{nl}(\rho) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (219)$$

関数  $g_{nl}(\rho)$  の具体形を与えるのはあとにまわすことにして、エネルギー固有値について考えよう。  $\kappa = 1/n$  であるから、エネルギー固有値は

$$E = -\frac{E_0}{2n^2}, \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (220)$$

である。エネルギー固有値は  $n$  のみに依存し、  $l$  と  $m$  には依存しない。  $m$  に依存しないのは回転対称性のためであり、一般の中心力ポテンシャルに対して成り立つが、  $l$  に依存しないのはクーロンポテンシャルの特殊性である。

それぞれの  $n$  に対して許される  $l$  と  $m$  は

$$l = 0, 1, \dots, n - 1, \quad m = -l, -l + 1, \dots, +l. \quad (221)$$

であるから、  $n$  によって指定されるエネルギー準位の縮退度は

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2 \quad (222)$$

である。

## 4.2 ラゲール多項式

(219) に含まれる関数  $g_{nl}(\rho)$  を求めよう。満足する微分方程式は (213) に  $\kappa = 1/n$  を代入した

$$g_{nl}''(\rho) + \frac{2(l+1)}{\rho} g_{nl}'(\rho) - \frac{2}{n} g_{nl}'(\rho) - \frac{2}{\rho} \left[ \frac{1}{n} (l+1) - 1 \right] g_{nl}(\rho) = 0 \quad (223)$$

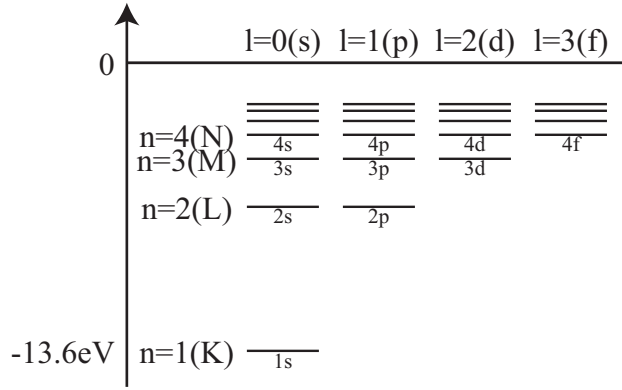


図 9: 水素原子のエネルギー準位 (準位間の間隔の比率は見やすくするために正確ではない)

である。変数変換  $\rho = nz/2$  を行い、 $g(\rho) = h(z)$  とすると、

$$z(h''_{nl} - h'_{nl}) + 2(l+1)h'_{nl} + (n-l-1)h_{nl} = 0 \quad (224)$$

が得られる。ただし  $h'_{nl} = dh_{nl}/dz$  である。この微分方程式は次のように解くことができる。まず、二つの演算子  $a_k$  と  $a^\dagger$  を定義する。

$$a_k = z \frac{d}{dz} - k, \quad a^\dagger = 1 - \frac{d}{dz}. \quad (225)$$

( $a^\dagger$  という記号は、この演算子が調和振動子の上昇演算子に類似した役割を果たすことを表わすものであり、何らかの演算子のエルミート共役であることを意味しているわけではない。) これらは調和振動子で用いた昇降演算子に類似した次の関係式を満足する。

$$a_k a^\dagger - a^\dagger a_{k+1} = 1. \quad (226)$$

調和振動子との違いは下降演算子  $a_k$  が整数  $k$  に依存することである。これらの演算子を用いると、(224) は次のように表わすことができる。

$$[a^\dagger a_{-2l-1} - (n+l)] h(z) = 0. \quad (227)$$

これは、調和振動子の第  $n+l$  励起状態が満足するシュレーディンガー方程式に類似している。従って、 $h_{nl}$  は「基底状態」を表わす関数  $\psi$  から

$$h_{nl} \propto (a^\dagger)^{n+l} \psi \quad (228)$$

によって与えることができる。関数  $\psi$  は下降演算子を作用させたとき 0 になる関数として定義することができるが、下降演算子は整数  $k$  に依存するので、その値をいくつに取るべきかを選ばなければならない。(226) のように、 $a^\dagger$  と入れ替わるたびに添え字が 1 ずつずれることを考慮すると、次のように取ればよいことがわかる。

$$a_{n-l-1} \psi(z) = 0. \quad (229)$$

この解は  $\psi = z^{n-l-1}$  である。従って関数  $h_{nl}$  は次のように与えることができる。

$$h_{nl} \propto (a^\dagger)^{n+l} z^{n-l-1} = \left(1 - \frac{d}{dz}\right)^{n+l} z^{n-l-1}. \quad (230)$$

しばしばこの関数はラゲール多項式  $L_n(z)$  を用いて表わされる。ラゲールの多項式はラゲールの微分方程式

$$z(L_n'' - L_n') + L_n' + nL_n = 0. \quad (231)$$

の解として定義され、その解は次のように与えられる。(ロドリゲスの公式)

$$L_n(z) = \frac{1}{n!} e^z \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^n) = \frac{1}{n!} \left(\frac{d}{dz} - 1\right)^n z^n. \quad (232)$$

(この解は、ラゲールの微分方程式が  $(a^\dagger a_0 - n)L_n = 0$  と表わされることを用いれば簡単に得られる。) また、次の式によってラゲール陪多項式を定義する。

$$L_k^m(z) = (-1)^m \frac{d^m}{dz^m} L_{k+m}(z). \quad (233)$$

これらを用いると、関数  $h_{nl}(z)$  は次のように与えられる。

$$h_{n,l}(z) \propto L_{n-l-1}^{2l+1}(z) \quad (234)$$

波動関数の動径部分は次のように与えられる。

$$R_{nl}(r) = N_{nl}^{-1/2} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \quad (235)$$

規格化条件

$$\int_0^\infty r^2 R_{nl}^2(r) dr = 1 \quad (236)$$

によって規格化定数  $N_{nl}$  は次のように決まる。

$$N_{nl} = \frac{n^4}{4} \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} a_0^3 \quad (237)$$



具体的な関数形を与えておこう。

$$\begin{aligned}
 R_{10}(\rho) &= \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\rho}, \\
 R_{20}(\rho) &= \frac{1}{2\sqrt{2a_0^3}} e^{-\rho/2} (2 - \rho), \\
 R_{21}(\rho) &= \frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}} e^{-\rho/2} \rho, \\
 R_{30}(\rho) &= \frac{2}{81\sqrt{3a_0^3}} e^{-\rho/3} (27 - 18\rho + 2\rho^2), \\
 R_{31}(\rho) &= \frac{1}{27} \sqrt{\frac{2}{3a_0^3}} e^{-\rho/3} \left( 4\rho - \frac{2}{3}\rho^2 \right), \\
 R_{32}(\rho) &= \frac{2}{81} \sqrt{\frac{2}{15a_0^3}} e^{-\rho/3} \rho^2.
 \end{aligned} \tag{238}$$

ラグールの多項式には規格化などの異なる幾つかの定義が存在する。ここでは

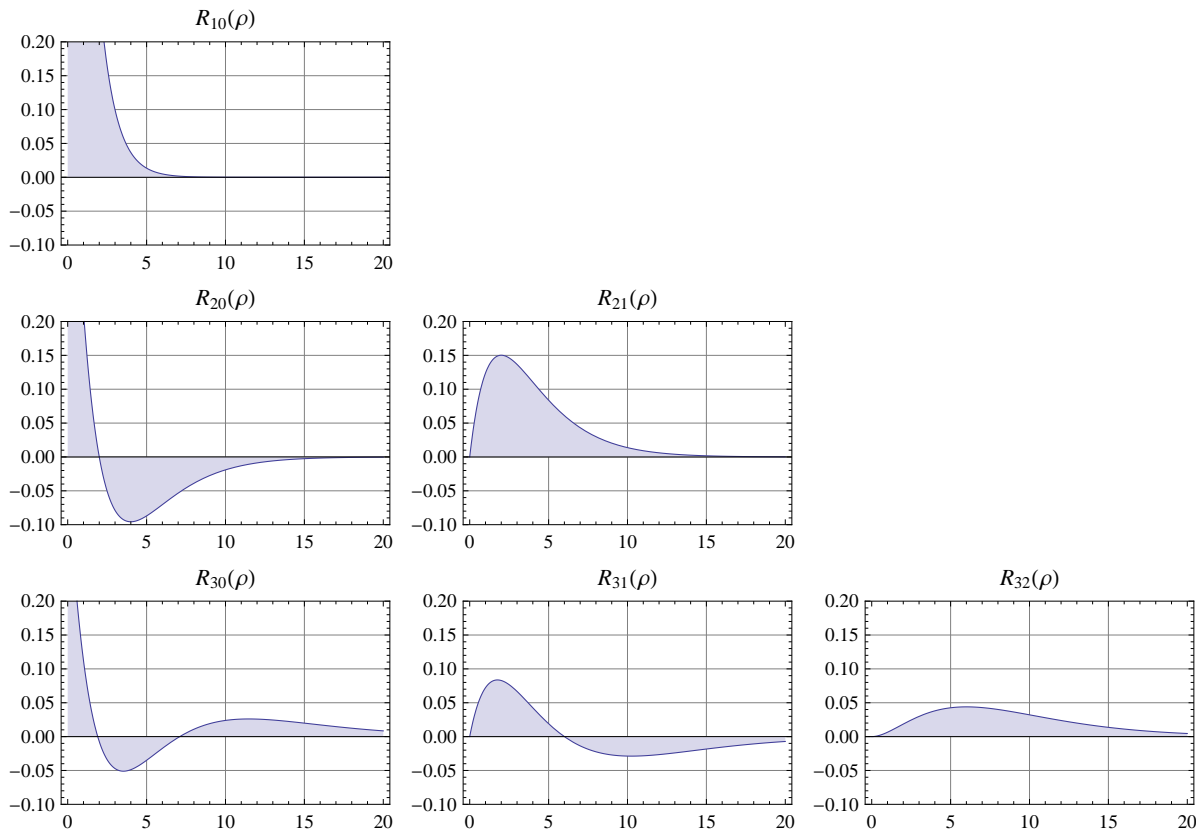


図 10:  $R_{nl}(\rho)$  のグラフ

Mathematica で採用されている定義に従った。

$$L_n(z) = \text{LaguerreL}[n, z], \quad L_n^m(z) = \text{LaguerreL}[n, m, z] \quad (239)$$

$$\langle X \rangle_{nl} = \int_0^\infty X r^2 R_{nl}^2(r) dr \quad (240)$$

という記号を導入すると、次の公式が成り立つ。

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{\rho^2} \right\rangle_{nl} &= \frac{2}{(2l+1)n^3}, \\ \left\langle \frac{1}{\rho} \right\rangle_{nl} &= \frac{1}{n^2}, \\ \langle 1 \rangle_{nl} &= 1, \\ \langle \rho \rangle_{nl} &= \frac{3n^2 - l(l+1)}{2}, \\ \langle \rho^2 \rangle_{nl} &= \frac{5n^4 - (3l^2 + 3l - 1)n^2}{2}. \end{aligned} \quad (241)$$

$\langle 1 \rangle = 1$  という式は規格化条件 (236) に他ならない。

問題 4.1 クーロンポテンシャル中の電子の定常状態に対して運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの期待値を求め、ビリアル定理が成り立っていることを確認せよ。

### 4.3 輝線スペクトル

水素原子に電磁波を当てると、電子のハミルトニアンに電磁波の影響を表わす項が新たに付け加わる。

$$H = H_0 + H' \quad (242)$$

ただし、 $H_0$  は電磁波を考慮しないハミルトニアンであり、 $H'$  は電磁波の影響を表わす項である。 $H_0$  のエネルギー固有状態  $|n, l, m\rangle$  とその固有値  $E_n$  は既に求めたが、電磁波を当てるとハミルトニアンが変化するため、 $|n, l, m\rangle$  は定常状態ではなくなる。その結果、状態  $|n, l, m\rangle$  にあった電子が電磁波の影響により  $|n', l', m'\rangle$  に移るということが起こり得る。このような場合にもエネルギー保存則は成り立つから、電子のエネルギーの変化分に対する電磁波（光子）を吸収、放出する。（このような仮定を正しく扱うには、電磁波も量子化する必要がある。）

電子の始状態を  $|n_1, l_1, m_1\rangle$ 、終状態を  $|n_2, l_2, m_2\rangle$  としよう。始状態より終状態のエネルギーが低いとすると、その差分

$$\Delta E = \frac{m}{2\hbar^2} \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (243)$$

が光子として放出されたはずである。対応する電磁波の波長は

$$\frac{1}{\lambda_{(n_1, n_2)}} = \frac{\Delta E}{hc} = R_\infty \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (244)$$

によって与えられる。ただし

$$R_\infty = \frac{me^4}{8h^3c\epsilon_0^2} = \frac{1}{hc} \frac{E_0}{2} \sim 1.1 \times 10^7 m^{-1} = \frac{1}{91nm}. \quad (245)$$

はリュードベリ定数と呼ばれる。この定数は、水素のイオン化エネルギー  $E_0/2 = 13.6eV$  のエネルギーを持つ光子の波長が  $91nm$  であることを表わしている。

(243) により、始状態と終状態を示す量子数  $n_1$  と  $n_2$  ( $n_1 < n_2$ ) それぞれに対して固有の波長  $\lambda_{(n_1, n_2)}$  が得られる。 $n_1 = 1, 2, 3, 4$  に対してそれぞれライマン系列、バルマー系列、パッシェン系列といった名称がついている。これらは実際に測定されるスペクトルとよく一致する。

- ライマン系列 (紫外領域)

$$L_\alpha : \lambda_{(1,2)} = 122nm, \quad L_\beta : \lambda_{(1,3)} = 103nm, \quad L_\gamma : \lambda_{(1,4)} = 97nm, \quad \dots \quad (246)$$

- バルマー系列 (可視光領域)

$$H_\alpha : \lambda_{(2,3)} = 656nm, \quad H_\beta : \lambda_{(2,4)} = 486nm, \quad H_\gamma : \lambda_{(2,5)} = 434nm, \quad \dots \quad (247)$$

- パッシェン系列 (赤外領域)

$$P_\alpha : \lambda_{(3,4)} = 1875nm, \quad P_\beta : \lambda_{(3,5)} = 1282nm, \quad P_\gamma : \lambda_{(3,6)} = 1094nm, \quad \dots \quad (248)$$



図 11: バルマー系列は可視光領域のため、目で直接観測できる。

原子核の電荷が  $e$  ではなく  $Ze$  である場合には、 $e^4 \rightarrow Z^2e^4$  という置き換えを行えばよい。その結果、エネルギーは  $Z^2$  倍になる。(ただし、これは原子核の周りを電子が一つだけ回っているような正イオンについてである。電子が複数個ある場合には電子同士の相互作用があるため、近似的にしか方程式を解くことはできない。)

## 5 磁場中の原子

### 5.1 ナトリウム D 線

水素原子以外の原子では、複数の電子が互いに相互作用しており、厳密にシュレーディンガー方程式を解くのは難しい。

もし仮に電子間の相互作用が無いとすると、それぞれの電子は独立に水素原子に対して求めた固有状態  $|n, l, m\rangle$  に属する。(ただし、原子番号を  $Z$  とすると、原子核の電荷は  $Ze$  となるので、エネルギーは水素原子の  $Z^2$  倍になる。) 複数の電子は完全に自由にどの状態にも入れるわけではなく、次の条件を満足しなければならないことが知られている。(パウリの排他律)

一つの軌道状態  $|n, l, m\rangle$  に対しては二個までの電子しか入ることはできない。

この規則については量子力学第3でより詳しく学ぶこととなる。ここでは単純にこれが成り立つものと仮定する。原子の基底状態においては、原子番号と同数の電子が、この条件を満たしつつエネルギーが最低になるような状態を取る。原子内の電子が占める状態は電子配置と呼ばれる。電子配置について議論する場合、それぞれの状態を主量子数  $n$  を表わす数と方位量子数  $l$  を表わすアルファベットの組み合わせで表わすのが便利である。たとえば  $n = 2, l = 1$  の状態は  $2p$  状態と呼ぶ。(  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$  はアルファベット  $s, p, d, f, \dots$  によって表わす。)

例として、ナトリウム(原子番号11)の電子配置が基底状態においてどうなるかを考えてみよう。まず、基底状態  $1s$  には二つの電子が入る。第一励起状態は(電子間の相互作用などを無視し、クーロンポテンシャルを用いた計算結果を用いれば)  $2s$  と  $2p$  が縮退している。 $2s$  には電子が二個、 $2p$  には(磁気量子数  $m = 0, \pm 1$  による縮退があるので)6個の電子が入ることができる。残る電子は1個だけであり、これは第二励起状態  $3s, 3p, 3d$  のうちのどれかに入ることになる。この電子の波動関数は11個の電子の中で最も広がりが大きいので最外殻電子と呼ばれ、化学反応などで重要な役割を果たす。

実際には電子間の相互作用(電子-原子核間の相互作用と同程度)によってそれぞれの電子のエネルギー準位は変化する。これらを取り入れた上でシュレーディンガー方程式を厳密に解くことはできないので、近似計算を行うことになる。よく用いられるのは、ある一つの電子に注目し、それ以外の電子の影響をポテンシャルの変化として取り入れるものである。上記のナトリウムの最外殻電子に対してこのような近似を行うと、他の電子によるポテンシャルの変化のために、 $3s, 3p, 3d$  の状態間の縮退が解け、エネルギーの大小は次のようになる。

$$E_{3s} < E_{3p} < E_{3d}. \quad (249)$$

(最外殻電子以外の電子の角運動量の総和が0であることが示されるのでポテンシャルの回転対称性は保たれ、磁気量子数による縮退は解けずに残る。)従って、

基底状態では最外殻電子は  $3s$  軌道に属し、ナトリウムの電子配置は次のようになる。



(べきはそれぞれの軌道に入る電子の個数を表わす。)

外部からナトリウム原子に対して刺激を与えると、最外殻電子は容易に励起される。その後再び基底状態に戻る際に、そのエネルギー差を光子として放出する。有名なのは  $3p$  軌道に励起した最外殻電子が  $3s$  軌道に落ちる際に放出する、波長約  $590\text{nm}$  (オレンジ色) の光でナトリウム D 線と呼ばれている。(ナトリウムの炎色反応やナトリウムランプの色である。)

この線を詳しく調べると、波長の近い二本の輝線が存在することが知られており、 $D_1$  および  $D_2$  と呼ばれている。(図 12)

$$D_1 : 588.9950\text{nm}, \quad D_2 : 589.5924\text{nm}. \quad (251)$$

このように、複数のスペクトル線が接近して存在する構造のことを微細構造と呼ぶ。

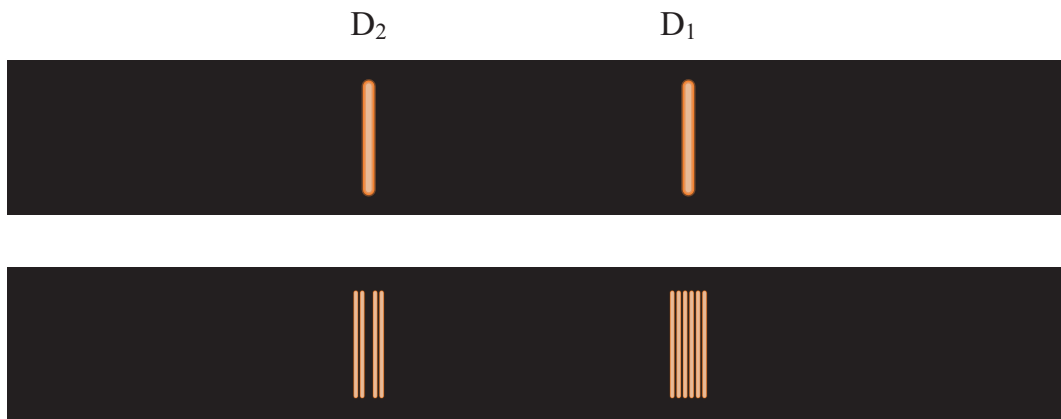


図 12: ナトリウム D 線の微細構造。上: ナトリウム D 線は詳しく調べると  $D_1$  および  $D_2$  と呼ばれる二本の線に分かれていることが知られている。下: ナトリウム原子に外部磁場をかけると、 $D_1$  と  $D_2$  はさらに特徴的な分裂を起こす。

また、ナトリウム原子に対して外部から磁場を加えると、図 12 下に与えたような特徴的なスペクトル線の分裂が起こる。

ここから幾つかのセクションの目的の一つは、微細構造および磁場によるスペクトル線の分裂に対して説明を与えることである。

## 5.2 正常ゼーマン効果

磁場中に原子をおくと、その原子中の電子のエネルギースペクトルが変化する。この現象をゼーマン効果という。これは荷電粒子が回転運動することによって生じる磁気モーメントと磁場の相互作用によるものであると解釈される。

まず、磁場と電子の相互作用を表わすハミルトニアン  $H_{\text{int}}$  を与えよう。以下では二通りの方法でこのハミルトニアンを導出する。

まずはローレンツ力の公式から出発して運動する荷電粒子の磁気モーメントを求める方法で  $H_{\text{int}}$  を導出する。荷電粒子は一樣な背景磁場  $B_{\text{ext}}$  中をある閉曲線  $C$  にそって運動しているとする。ローレンツ力は

$$\mathbf{F} = q\dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B}_{\text{ext}} \quad (252)$$

となるから、ある時刻において外部磁場から粒子が受ける力のモーメントは次のように与えられる。

$$\mathbf{M} = \mathbf{x} \times \mathbf{F} = q\mathbf{x} \times (\dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B}_{\text{ext}}) \quad (253)$$

これは一般には時間とともに変化するので一周期分を平均することにしよう。

$$\mathbf{M} = \frac{q}{T} \int \mathbf{x} \times (\dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B}_{\text{ext}}) dt = \frac{q}{2T} \oint_C (\mathbf{x} \times d\mathbf{x}) \times \mathbf{B}_{\text{ext}} \quad (254)$$

$T$  は周期であり、積分は一周期について行う。磁場  $B$  中に磁気モーメント  $\mu$  が存在するときの力のモーメントは

$$\mathbf{M} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} \quad (255)$$

と与えられる。(254) と (255) を比較すれば、運動する荷電粒子の磁気モーメントが次のように得られる。

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2T} \oint_C (\mathbf{x} \times d\mathbf{x}) = \frac{q}{2T} \int d\mathbf{S} \quad (256)$$

ただし、 $d\mathbf{S}$  は運動の軌道に囲まれた面の面積要素である。同様に角運動量の時間平均を計算したものは

$$\mathbf{L} = \frac{1}{T} \int_C m\mathbf{x} \times \dot{\mathbf{x}} dt = \frac{m}{T} \int_C \mathbf{x} \times d\mathbf{x} = \frac{m}{T} \int d\mathbf{S} \quad (257)$$

となる。よって磁気モーメントと角運動量の間に関係が成り立つ。

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2m} \mathbf{L} \quad (258)$$

この関係は、点粒子に限らず電荷分布と質量分布が比例する古典的物体については常に成り立つ。磁気モーメントと磁場の相互作用は、次のハミルトニアンによって与えられる。

$$H_{\text{int}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}} = -\frac{q}{2m} \mathbf{B}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{L}. \quad (259)$$

同様の結果は (19) のハミルトニアンから直接得ることもできる。磁場  $B_{\text{ext}}$  を与えるベクトルポテンシャルを  $A_{\text{ext}}$  としよう。これは次のように与えることができる。

$$A_{\text{ext}} = \frac{1}{2} B_{\text{ext}} \times \boldsymbol{x}. \quad (260)$$

(19) に与えたように、ベクトルポテンシャルが 0 でないとき、ハミルトニアンの中の運動項  $p^2/(2m)$  は次のものに置き換わる。

$$\frac{1}{2m} (\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}_{\text{ext}})^2 = \frac{1}{2m} p^2 - \frac{q}{m} \boldsymbol{A}_{\text{ext}} \cdot \boldsymbol{p} + \mathcal{O}(A_{\text{ext}}^2) \quad (261)$$

磁場が弱い場合を考えると、 $A_{\text{ext}}$  の二次の項は無視することになると、磁場の影響は次の相互作用ハミルトニアンによって与えられる。

$$H_{\text{int}} = -\frac{q}{m} \boldsymbol{A}_{\text{ext}} \cdot \boldsymbol{p} = -\frac{q}{2m} (\boldsymbol{B}_{\text{ext}} \times \boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{p} = -\frac{q}{2m} \boldsymbol{B}_{\text{ext}} \cdot \boldsymbol{L} \quad (262)$$

こうして再び (259) が得られた。

電荷  $-e$ 、質量  $m_e$  の電子の場合には磁気モーメントは

$$\boldsymbol{\mu} = -\mu_B \boldsymbol{l}, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5.8 \times 10^{-5} \text{eV/T} \quad (263)$$

と与えられる。この係数  $\mu_B$  はしばしばボーア磁子と呼ばれる。電荷が  $+e$ 、質量  $m_p$  の陽子の場合には

$$\boldsymbol{\mu}_p = \mu_N \boldsymbol{l}, \quad \mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 3.1 \times 10^{-8} \text{eV/T} \quad (264)$$

であり、係数  $\mu_N$  は核磁子と呼ばれる。ボーア磁子と比較すると、電子と陽子の質量の比 (約 1 : 2000) の分だけ小さい。ただし、ここで得られた結果は、

- 粒子の磁気モーメントが古典的回転によって生じている
- 粒子中の質量分布と電荷分布が比例する

を仮定することで得られたものである。実際にはこれらの仮定は成り立たず、磁気モーメントは上記の値からはずれる。このずれを表すために、 $g$  という因子 (ランダウの  $g$  因子) を導入する。

$$\boldsymbol{\mu}_e = -g\mu_B \boldsymbol{l}, \quad \boldsymbol{\mu}_p = g\mu_N \boldsymbol{l} \quad (265)$$

$g$  は粒子ごとに異なり、電子ではおよそ 2、陽子ではおよそ 5.6 である。

磁場によるナトリウム D 線の分裂がゼーマン効果によって説明できるかを考えてみよう。(  $g$  因子は無視する。 ) D 線は  $3p$  状態から  $3s$  状態への遷移によって現

れるから、それぞれの状態に対して外部磁場がどのような影響を与えるか調べればよい。磁場の向きを  $z$  方向に取ろう。

$$\hat{H}_{\text{int}} = \mu_B B_{\text{ext}} \hat{l}_z \quad (266)$$

であることを用いれば、簡単にエネルギー固有値が得られる。 $3s$  状態は  $\hat{l}_z$  の固有値は  $m = 0$  であるから磁場の影響を受けない。

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}})|3, 0, 0\rangle = E_{3s}|3, 0, 0\rangle \quad (267)$$

( $\hat{H}_0$  は磁場が印加される前のハミルトニアンである。) 一方  $3p$  状態では  $m = 0, \pm 1$  に対して

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}})|3, 1, +1\rangle &= (E_{3s} + \Delta E)|3, 1, +1\rangle, \\ (\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}})|3, 1, 0\rangle &= E_{3s}|3, 1, 0\rangle, \\ (\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}})|3, 1, -1\rangle &= (E_{3s} - \Delta E)|3, 1, -1\rangle. \end{aligned} \quad (268)$$

となり、3 つの異なるエネルギー準位に分裂する。ただし

$$\Delta E = \mu_B B_{\text{ext}} \quad (269)$$

を定義した。一般に、方位量子数が  $l$  である状態は、磁気量子数の違いによって  $2l + 1$  個 (奇数個) の状態に分裂する。(磁気量子数という名称はこのことに由来する。) 状態  $3s$  のエネルギーが不変に保たれ  $3p$  が 3 つの準位に分裂するという事は、その間の遷移によって放出される光子のエネルギースペクトルも 3 つに分裂するはずである。ここで考えたような、電荷の軌道運動による磁気モーメントと磁場の相互作用による準位の分裂は正常ゼーマン効果と呼ばれる。

ナトリウム D 線  $D_1$  と  $D_2$  は図 12 の下に与えたようにどちらも磁場によって偶数本に分裂し、残念ながら正常ゼーマン効果によって説明することはできない。(そしてそもそも  $D_1$  と  $D_2$  が存在すること自体まだ説明できていない。) しかし、実験で測定されるスペクトル線の分裂の間隔はここで求めた  $\Delta E$  と同程度であることが確かめられるので、磁場と角運動量の相互作用として分裂が起こるという予想はそれほど大きく間違っていないと期待される。

スペクトル線が偶数本に分裂する現象は異常ゼーマン効果と呼ばれるが、異常ゼーマン効果とスペクトル線の微細構造は電子の「自転」による角運動量の効果を考慮することで説明することができる。この「自転」はスピンと呼ばれ、古典的な自転とはいろいろな点で異なっている。

### 5.3 スピン

原子の磁気モーメントを調べる実験として有名なものにシュテルン・ゲルラッハの実験 (1922 年) がある。これは原子ビームを非一様な磁場中を通し、原子の磁気モーメントの向きの違いによるビームの分裂を見るものである。



原子はある磁気モーメントをもつと期待される。そこで原子を  $N$  極と  $S$  極を持つ棒磁石であるとみなそう。 $N$  極の磁荷を  $+q_m$ 、 $S$  極の磁荷を  $-q_m$  とし、 $S$  極から  $N$  極へ向かうベクトルを  $d$  とする。このとき磁気モーメントは

$$\boldsymbol{\mu} = q_m \boldsymbol{d} \quad (270)$$

と与えられる。原子が一様な磁場中に置かれた場合には、 $N$  極と  $S$  極が受ける力が互いに相殺するために原子全体としては力を受けない。しかし、磁場が非一様であると両極の受ける力のバランスが崩れる。磁場の向きを  $z$  軸方向とすると、原子が受ける力は次の式で与えられる。

$$F_z = q_m B(z_N) - q_m B(z_S) = q_m d_z \frac{dB}{dz} = \mu_z \frac{dB}{dz} \quad (271)$$

ただし  $z_N$  と  $z_S$  はそれぞれ  $N$  極と  $S$  極の  $z$  座標であり、 $\mu_z$  は磁気モーメントの  $z$  成分である。

もし原子が角運動量  $l$  を持てば、角運動量の  $z$  成分は  $m = +l$  から  $m = -l$  まで  $2l + 1$  個の値を取る。磁気モーメントが角運動量に比例するとすれば、 $\mu_z$  も同じく  $2l + 1$  個の値をとる。これらは非一様な磁場中では異なる力を受けるので、ビームは  $2l + 1$  本に分裂するはずである。

シュテルン・ゲルラッハの実験では銀の原子が用いられた。銀の原子（原子番号 47）の電子配置は次のようになる。

$$\text{Ag} : (1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^{10}(4s)^2(4p)^6(4d)^{10}(5s)^1 \quad (272)$$

べきはそれぞれの軌道に入る電子の数を表わしている。 $5s$  状態に属する一個の最外殻電子を持ち、それ以外の 46 個の電子に対する角運動量の総和は 0 である。最外殻電子も角運動量が 0 であるから、原子全体としても角運動量は 0 のはずである。従って磁場中を通して原子ビームが分裂することはないと期待される。

しかし、実際の実験では、原子ビームは二つに分裂するのが確認された。方位量子数  $l$  と縮退度  $2l + 1$  の関係をそのまま用いると、原子が角運動量  $l = 1/2$  を持つように思われる。この角運動量は電子の自転のようなものであると解釈され、スピンと名付けられた。（ハウシュミット・ウーレンベック、1925 年）

## 6 角運動量代数とスピン

### 6.1 角運動量代数

電子も含め、素粒子（および素粒子とみなせるような複合系）のなかには、その運動による角運動量のほかに、「自転」のような角運動量をもつものがある。この角運動量のことをスピン角運動量、あるいは単にスピンと呼ぶ。それに対して、粒子の軌道運動によって現れる角運動量を軌道角運動量と呼ぶ。古典的な自転とは異なり、電子のスピンは常に  $1/2$  であり、変化することはない。質量や電荷同様、スピンは素粒子の種類ごとに決まっている。

軌道角運動量演算子は  $\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p}$  によって与えられるから、回転を表わしているということがわかるが、スピンにはこのような定義はない。それでもスピンの角運動量の一種であるとみなすことができるのは、スピン演算子  $\hat{S} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$  が軌道角運動量と同じ、次の代数を満足するからである。

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z, \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x, \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y. \quad (273)$$

従って、スピンの性質は、「自転」のイメージに頼ることなく、この関係式から導かれなければならない。

スピンであるか軌道角運動量演算子であるかにかかわらず、角運動量代数を満足する演算子を  $\hat{J}$  とし、代数から導かれる性質について調べよう。式を簡単にするために、 $\hbar^{-1}\hat{J}$  を改めて  $\hat{J}$  と書くことにする。正しい次元を持つ角運動量に戻すには  $\hbar$  を掛ければよい。このように無次元化した角運動量演算子は次の交換関係を満足する。

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hat{J}_y. \quad (274)$$

$\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$  はいずれもエルミート演算子であるとする。

$$(\hat{J}_x)^\dagger = \hat{J}_x, \quad (\hat{J}_y)^\dagger = \hat{J}_y, \quad (\hat{J}_z)^\dagger = \hat{J}_z. \quad (275)$$

さらに、次のように  $J_\pm$  を定義しておくのが便利である。

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y. \quad (276)$$

これらはエルミート演算子ではなく、次の関係式が成り立つ。

$$(\hat{J}_+)^\dagger = \hat{J}_-, \quad (\hat{J}_-)^\dagger = \hat{J}_+. \quad (277)$$

交換関係 (274) を用いることで以下の関係式を示すことができる。

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0, \quad (278)$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0, \quad (279)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm, \quad (280)$$

$$\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm = \hat{J}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z \pm 1). \quad (281)$$

まず、(278) より  $\hat{J}^2$  と  $\hat{J}_z$  の同時固有状態が存在する。それを  $|\lambda, m\rangle$  とおく。

$$\hat{J}^2|\lambda\rangle = \lambda|\lambda, m\rangle, \quad \hat{J}_z|\lambda\rangle = m|\lambda, m\rangle. \quad (282)$$

(280) を用いると、 $\hat{J}_\pm|\lambda, m\rangle$  が 0 で無い場合にはそれもやはり  $\hat{J}^2$  と  $\hat{J}_z$  の同時固有状態であり、固有値がそれぞれ  $\lambda$  と  $m \pm 1$  であることがわかる。すなわち、新たな同時固有状態を次のように定義することができる。

$$|\lambda, m \pm 1\rangle \propto \hat{J}_\pm|\lambda, m\rangle. \quad (283)$$

ある 0 でない状態  $|\lambda, m\rangle$  で (281) の関係式を挟むと、

$$\langle\lambda, m|\hat{J}_\mp\hat{J}_\pm|\lambda, m\rangle = (\lambda - m(m \pm 1))\langle\lambda, m|\lambda, m\rangle \quad (284)$$

が得られる。この左辺は状態  $\hat{J}_\pm|\lambda, m\rangle$  のノルムであるから非負である。従って次の式が成り立たなければならない。

$$\lambda - m(m \pm 1) \geq 0. \quad (285)$$

等号が成り立つのは  $\hat{J}_\pm|\lambda, m\rangle = 0$  である場合である。(285) の不等式は、 $|m|$  が無制限に大きくなることはできないことを意味している。つまり、 $|\lambda, m\rangle$  に対して繰り返し  $\hat{J}_+$  または  $\hat{J}_-$  を作用させると、有限回で 0 になる。従って、 $m$  の最大値と最小値が存在する。それらを  $m_{\max}$  と  $m_{\min}$  としよう。 $\hat{J}_+|\lambda, m_{\max}\rangle = \hat{J}_-|\lambda, m_{\min}\rangle = 0$  であることから、(285) の等号が成立し、次の関係式が得られる。

$$\lambda = m_{\max}(m_{\max} + 1) = m_{\min}(m_{\min} - 1). \quad (286)$$

これより  $m_{\min}$  と  $m_{\max}$  の次の関係が得られる。

$$m_{\min} = -m_{\max}. \quad (287)$$

( $m_{\min} = m_{\max} + 1$  でも (286) は成り立つが、これは  $m_{\min} \leq m_{\max}$  を満足しない。)  $m_{\max}$  を改めて  $j$  とおく。

$$m_{\max} = j, \quad m_{\min} = -j, \quad \lambda = j(j + 1). \quad (288)$$

$|\lambda, m_{\min}\rangle$  も  $|\lambda, m_{\max}\rangle$  もどちらもある状態  $|\lambda, m\rangle$  に対して繰り返し  $J_\pm$  を作用させて得られるから、 $m$  と  $m_{\min}$ 、 $m_{\max}$  の差は整数でなければならない。特に  $2j = m_{\max} - m_{\min}$  は整数でなければならない。このことから  $j$  が半整数でなければならないことが従う。すなわち、量子数  $j$  と  $m$  の取り得る値は

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots, \\ m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j. \quad (289)$$

である。角運動量代数によって決めることができるのはここまでである。軌道角運動量の場合には波動関数  $\psi(r, \theta, \phi)$  が一価であることから従う  $\phi$  座標に対する周期性

$$\psi(r, \theta, \phi + 2\pi) = \psi(r, \theta, \phi) \quad (290)$$

によって  $m$  は整数値のみが許された。(このとき  $j$  も整数になる。)しかし、スピンはこのような波動関数では表わされないの、半整数の値を禁止する理由はなく、実際に電子は半整数のスピンをもっている。

## 6.2 角運動量の行列表示

§6.1 では演算子  $\hat{J}_\pm$  を用いて量子数  $m$  の異なる状態を結びつけることができることを述べた。このことは、角運動量演算子を行列表示することでより具体的に表される。 $\hat{J}$  と  $\hat{J}_z$  の同時固有状態を  $|j, m\rangle$  としよう。これは次の関係式を満足する。

$$\begin{aligned} \hat{J}^2|j, m\rangle &= j(j+1)|j, m\rangle, \\ \hat{J}_z|j, m\rangle &= m|j, m\rangle. \end{aligned} \quad (291)$$

§6.1 の結果より、 $j$  は負でない半整数、 $m$  は  $j - |m|$  が負でない整数となる値をとる。 $\hat{J}_+$  は  $\hat{J}_z$  の固有値  $m$  を一つ上昇させる演算子である。すなわち、次の関係式が成り立つ。

$$J_+|j, m\rangle = c_{j,m}|j, m+1\rangle \quad (292)$$

$c_{j,m}$  は状態の規格化によって定まる定数である。それぞれの状態の規格化を

$$\langle j, m|j, m\rangle = 1 \quad (293)$$

によって定める。位相はこの規格化条件では決まらないので、 $c_{j,m}$  が常に正の実数となるように状態の相対的な位相を定めることにする。

規格化の定数  $c_{m,j}$  を決めるために (292) の両辺のノルムを取ろう。

$$c_{j,m}^2 \langle j, m+1|j, m+1\rangle = \langle j, m|\hat{J}_-\hat{J}_+|j, m\rangle = (j-m)(j+m+1)\langle j, m|j, m\rangle \quad (294)$$

二つ目の等号では関係式 (281) を用いた。規格化条件 (293) が成り立つようにするには、 $c_{j,m}$  を次のようにとればよい。

$$c_{j,m} = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}. \quad (295)$$

従って、次の式が成り立つ。

$$\hat{J}_+|j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j, m+1\rangle \quad (296)$$

両辺に  $\langle j, m+1|$  を掛けて複素共役を取れば

$$\langle j, m|\hat{J}_-|j, m+1\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \quad (297)$$

となるが、これは次の式が成り立つことを意味する。

$$\hat{J}_-|j, m+1\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j, m\rangle. \quad (298)$$

ここまでで得られたいくつかの式をまとめておこう。

$$\begin{aligned} \hat{J}_z|j, m\rangle &= m|j, m\rangle, \\ \hat{J}_+|j, m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j, m+1\rangle, \\ \hat{J}_-|j, m\rangle &= \sqrt{(j-m+1)(j+m)}|j, m-1\rangle. \end{aligned} \quad (299)$$

これらの関係式は、角運動量演算子の行列表示を行った場合の 0 でない成分が次のように与えられることを意味している。

$$\begin{aligned} \langle j, m|\hat{J}_z|j, m\rangle &= m, \\ \langle j, m+1|\hat{J}_+|j, m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \\ \langle j, m-1|\hat{J}_-|j, m\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}. \end{aligned} \quad (300)$$

どれも  $j$  が異なる状態の間の成分は 0 であるから、 $j$  を一つの値に固定して考えることができる。その場合行列のサイズは  $(2j+1) \times (2j+1)$  となる。具体的には以下のように行列表示される。

$$\hat{J}_z = \begin{pmatrix} j & & & \\ & j-1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & -j \end{pmatrix} \quad (301)$$

$$\hat{J}_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1 \cdot 2j} & & & \\ & 0 & \sqrt{2 \cdot (2j-1)} & & \\ & & 0 & & \\ & & & \ddots & \sqrt{2j \cdot 1} \\ & & & & 0 \end{pmatrix} \quad (302)$$

$$\hat{J}_- = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ \sqrt{1 \cdot 2j} & 0 & & & \\ & \sqrt{2 \cdot (2j-1)} & 0 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \sqrt{2j \cdot 1} & 0 \end{pmatrix} \quad (303)$$

何も書いていない部分は全て 0 である。 $\hat{J}_x$  および  $\hat{J}_y$  も与えておこう。

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_x &= \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-) \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{1 \cdot 2j}}{2} & & & & \\ \frac{\sqrt{1 \cdot 2j}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2 \cdot (2j-1)}}{2} & & & \\ & \frac{\sqrt{2 \cdot (2j-1)}}{2} & 0 & & & \\ & & & \ddots & \frac{\sqrt{2j-1}}{2} & \\ & & & \frac{\sqrt{2j-1}}{2} & 0 & \end{pmatrix}, \\
 \hat{J}_y &= \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-) \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\sqrt{1 \cdot 2j}}{2} & & & & \\ i\frac{\sqrt{1 \cdot 2j}}{2} & 0 & -i\frac{\sqrt{2 \cdot (2j-1)}}{2} & & & \\ & i\frac{\sqrt{2 \cdot (2j-1)}}{2} & 0 & & & \\ & & & \ddots & -i\frac{\sqrt{2j-1}}{2} & \\ & & & i\frac{\sqrt{2j-1}}{2} & 0 & \end{pmatrix} \quad (304)
 \end{aligned}$$

問題 6.1 行列表示した角運動量演算子  $\hat{J}_i$  に対して交換関係 (274) が成り立つことを確認せよ。また、 $\hat{J}^2$  を計算してみよ。

ここまでの議論は、角運動量代数 (274) に基づいており、具体的にそれが何なのか (軌道角運動量なのか、スピンなのか) や、状態の具体的表示には依存しない。従って以前に与えた球面調和関数に対しても成り立つはずである。ここでは関係式 (299) が球面調和関数に対して成り立つことを見ておこう。軌道角運動量について考えるので、角運動量演算子を  $\hat{l}$  と表し、量子数として  $l$  と  $m$  を用いることにする。これらはどちらも整数である。状態  $|l, m\rangle$  を球面調和関数  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$  で置き換え、角運動量演算子を作用させてみよう。この場合、角運動量演算子を角度座標の微分演算子としてあらわしておく必要がある。(99) より、昇降演算子  $\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$  は次のように与えられる。

$$\hat{l}_{\pm} = e^{\pm i\phi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (305)$$

これを球面調和関数に対して作用させる。 $m$  の符号や  $\hat{l}_{\pm}$  のどちらを作用させるかによって場合分けをする必要があるが、ここでは  $m \geq 0$  である球面調和関数  $Y_{lm}$  に  $\hat{l}_+$  を作用させた場合についてのみ詳しく見ておくことにする。(182) より、 $m \geq 0$  のときの球面調和関数は次のように与えられる。

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (306)$$

これに (305) に与えた  $\hat{l}_+$  を作用させると、

$$\hat{l}_+ Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \left( \frac{d}{d\theta} - m \cot \theta \right) P_l^m(\cos \theta) e^{i(m+1)\phi}. \quad (307)$$

となる。ルジャンドル倍関数の定義 (176) が

$$P_l^m(\cos \theta) = \sin^m \theta \left( -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \right)^m P_l(\cos \theta) \quad (308)$$

と書けることから、

$$\begin{aligned} \left( \frac{d}{d\theta} - m \cot \theta \right) P_l^m(\cos \theta) &= \sin^m \theta \frac{d}{d\theta} \left( \frac{1}{\sin^m \theta} P_l^m(\cos \theta) \right) \\ &= -\sin^{m+1} \left( -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \right)^{m+1} P_l(\cos \theta) \\ &= -P_l^{m+1}(\cos \theta) \end{aligned} \quad (309)$$

である。従って

$$\begin{aligned} \hat{l}_+ Y_{lm}(\theta, \phi) &= (-1)^{m+1} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^{m+1}(\cos \theta) e^{i(m+1)\phi} \\ &= \sqrt{(l-m)(l+m+1)} Y_{l, m+1}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (310)$$

となり、確かに (299) の第二式が成り立っている。他の式についても同様に確認することができる。

実は、球面調和関数の定義 (182) の符号因子  $(-1)^{(m+|m|)/2}$  は、ここで用いた状態ベクトル  $|l, m\rangle$  の位相の定義 ( (292) の規格化因子  $c_{j,m}$  が正の実数になる ) に対応するように選んだものである。

### 6.3 角運動量と回転対称性

保存する物理量と系の対称性は互いに関係している。角運動量については、関係するのは回転対称性である。このことを確かめてみよう。まずは粒子がスピンを持たない場合について考える。

微小なベクトル  $\epsilon$  をパラメータとする次の無限小変換を考える。

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \left( 1 + \frac{1}{i\hbar} \epsilon \cdot \hat{\mathbf{L}} \right) |\psi\rangle \quad (311)$$

この変換がどのようなものであるかを見るために、 $|\psi\rangle = |x\rangle$  の場合を考えてみよう。ただし  $|x\rangle$  は  $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$  を満足する位置の固有状態である。変換後の状態は

$$|\psi'\rangle = \left( 1 + \frac{1}{i\hbar} \epsilon \cdot \hat{\mathbf{L}} \right) |x\rangle \quad (312)$$

と与えられる。この状態に位置演算子を作用させてみると、

$$\begin{aligned}
 \hat{x}|x'\rangle &= \hat{x} \left( 1 + \frac{1}{i\hbar} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right) |x\rangle \\
 &= \left( 1 + \frac{1}{i\hbar} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right) \hat{x}|x\rangle + \left[ \hat{x}, \left( 1 + \frac{1}{i\hbar} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right) \right] |x\rangle \\
 &= (\mathbf{x} + \boldsymbol{\epsilon} \times \mathbf{x})|x'\rangle
 \end{aligned} \tag{313}$$

となる。ただし、最後の等号では角運動量演算子と位置演算子の交換関係

$$[\hat{x}, \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{L}}] = i\hbar \boldsymbol{\epsilon} \times \hat{x} \tag{314}$$

を用いた。(313) は  $|\psi'\rangle$  もやはり位置の固有状態であることを示しており、その固有値は

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \boldsymbol{\epsilon} \times \mathbf{x} \tag{315}$$

である。変換のパラメータ  $\boldsymbol{\epsilon}$  と同じ向きの単位ベクトルを  $\mathbf{n}$ 、 $\boldsymbol{\epsilon}$  の長さを  $\epsilon$  とすると (つまり  $\boldsymbol{\epsilon} = \epsilon \mathbf{n}$  とすると)、 $\mathbf{n}$  を軸として  $\mathbf{x}$  を角  $\epsilon$  だけ回転させた点が  $\mathbf{x}'$  である。(図 13) 角運動量演算子による変換 (311) は微小空間回転を与える。

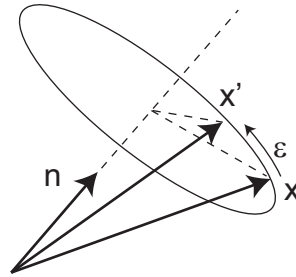


図 13: ベクトル  $\mathbf{x}$  の回転

一般の状態

$$|\psi\rangle = \int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \psi(\mathbf{x}) \tag{316}$$

に対しては、

$$|\psi'\rangle = (1 + \delta)|\psi\rangle = \int d\mathbf{x} |\mathbf{x} + \boldsymbol{\epsilon} \times \mathbf{x}\rangle \psi(\mathbf{x}) \tag{317}$$

となるが、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}' - \boldsymbol{\epsilon} \times \mathbf{x}'$  という変数変換を行い、積分変数  $\mathbf{x}'$  を改めて  $\mathbf{x}$  と書くと

$$|\psi'\rangle = \int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\epsilon} \times \mathbf{x}) \tag{318}$$

となる。すなわち、変換後の波動関数が次のように与えられる。

$$\psi'(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\epsilon} \times \mathbf{x}). \tag{319}$$



ここでは状態ベクトルの変化から波動関数の変化を導いたが、(312) を直接波動関数を用いて書き換えても同じ結果を得る。

$$\begin{aligned}
 \psi'(\mathbf{x}) &= \left(1 + \frac{1}{i\hbar} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right) \psi(\mathbf{x}) \\
 &= \psi(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\epsilon} \cdot (\mathbf{x} \times \nabla) \psi(\mathbf{x}) \\
 &= \psi(\mathbf{x}) - (\boldsymbol{\epsilon} \times \mathbf{x}) \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}) \\
 &= \psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\epsilon} \times \mathbf{x})
 \end{aligned} \tag{320}$$

変換が状態ではなく演算子に作用するとみなすこともできる。その場合、回転のもとでの演算子  $\hat{O}$  の変化は角運動量演算子を用いて次のように表すことができる。

$$\delta \hat{O} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}, \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{L}}] \tag{321}$$

例えば、位置ベクトル演算子  $\hat{O} = \hat{\mathbf{x}}$  の場合には(314) を用いれば

$$\delta \hat{\mathbf{x}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{L}}] = \boldsymbol{\epsilon} \times \hat{\mathbf{x}} \tag{322}$$

が得られる。この期待値を取れば、関係式(315) が得られる。この関係式は位置ベクトルの演算子に対してだけでなく、ベクトル量の演算子に対して一般に成り立つ。例えば、運動量、角運動量の演算子に対して

$$\begin{aligned}
 \delta \hat{\mathbf{p}} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{p}}, \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{L}}] = \boldsymbol{\epsilon} \times \hat{\mathbf{p}}, \\
 \delta \hat{\mathbf{L}} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{L}}, \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{L}}] = \boldsymbol{\epsilon} \times \hat{\mathbf{L}}
 \end{aligned} \tag{323}$$

である。二つ目の式は角運動量代数に他ならない。

ここまでは、回転の角度  $\epsilon$  が微小であり、 $O(\epsilon)$  の項が無視できるものとして計算を行ってきた。このような無限小変換を何度も繰り返すことにより、有限の角度  $\theta$  による変換を生成することができる。角度  $\theta$  の回転を実現するのに必要な微小変換の繰り返し回数を  $N = \theta/\epsilon$  としよう。すると、単位ベクトル  $\mathbf{n}$  を軸とする角度  $\theta$  の回転の演算子  $\hat{U}(\mathbf{n}, \theta)$  は次のように与えることができる。

$$\hat{U}(\mathbf{n}, \theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{\theta}{N} \frac{1}{i\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right)^N = \exp\left(\frac{\theta}{i\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right) \tag{324}$$

ただし、演算子の指数関数はテーラー展開

$$\exp \hat{A} = 1 + \hat{A} + \frac{1}{2!} \hat{A}^2 + \frac{1}{3!} \hat{A}^3 + \dots \tag{325}$$

によって定義される。 $\hat{A}$  が対角行列  $\hat{A} = \text{diag}\{a_i\}$  になるような基底を選べば、 $\exp \hat{A} = \text{diag}\{e^{a_i}\}$  である。状態に対する変換は

$$|\psi'\rangle = \hat{U}(\mathbf{n}, \theta) |\psi\rangle, \tag{326}$$

演算子に対する変換は

$$\hat{O}' = \hat{U}^{-1}(\mathbf{n}, \theta) \hat{O} \hat{U}(\mathbf{n}, \theta) \quad (327)$$

である。

問題 6.2 ポテンシャル  $U(\mathbf{x})$  中を運動する粒子のハミルトニアン  $\hat{H}$  に対して回転変換 (321) を行ったときに  $\delta\hat{H} = 0$  になるのはポテンシャルがどのような条件を満足するときか。

次に、スピン  $s$  を持つ粒子 (すなわち  $\hat{S}^2$  に対して固有値  $\hbar^2 s(s+1)$  を持つ粒子) の場合を考えてみよう。 $s$  は粒子の種類を定めれば決まってしまうから、粒子の状態を指定するには位置  $\mathbf{x}$  とスピンの  $z$  成分  $s_z$  を指定すればいい。

$$|\mathbf{x}, s_z\rangle, \quad s_z = -s, -s+1, \dots, s. \quad (328)$$

任意の状態の波動関数は次のように定義される。

$$\psi(\mathbf{x}, s_z) = \langle \mathbf{x}, s_z | \psi \rangle \quad (329)$$

波動関数の引数  $\mathbf{x}$  は連続的な値を、 $s_z$  は離散的な値をとる。離散的な値をとる引数はしばしば添え字として扱い、 $\psi_{s_z}(\mathbf{x})$  のように表現されることもある。 $s_z$  によってラベルされる成分を並べた  $2s+1$  成分の縦ベクトルとして表すこともある。

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_s(\mathbf{x}) \\ \psi_{s-1}(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \psi_{-s}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (330)$$

この波動関数に対する角運動量演算子の作用は以下の通りである。まず、軌道角運動量  $\hat{L}_i$  はそれぞれの  $s_z$  の成分に対して独立に作用する。

$$\hat{L}_i \psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \hat{L}_i \psi_s(\mathbf{x}) \\ \hat{L}_i \psi_{s-1}(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \hat{L}_i \psi_{-s}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (331)$$

一方、スピン演算子は  $s_z$  という添え字に行列として作用する。

$$\hat{S}_i \psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} (\hat{S}_i)_{s,s} & (\hat{S}_i)_{s,s-1} & \cdots & (\hat{S}_i)_{s,-s} \\ (\hat{S}_i)_{s-1,s} & (\hat{S}_i)_{s-1,s-1} & \cdots & (\hat{S}_i)_{s-1,-s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\hat{S}_i)_{-s,s} & (\hat{S}_i)_{-s,s-1} & \cdots & (\hat{S}_i)_{-s,-s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_s(\mathbf{x}) \\ \psi_{s-1}(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \psi_{-s}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (332)$$

これらは座標  $\mathbf{x}$  と添え字  $s_z$  に独立に作用するので、可換である。

$$[\hat{L}_i, \hat{S}_j] = 0. \quad (333)$$

このことと、 $\hat{L}_i$  と  $\hat{S}_i$  がそれぞれ独立に角運動量代数を満足することより、次の全角運動量もやはり角運動量代数を満足することがわかる。

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}. \quad (334)$$

スピンを持つ粒子に対する回転の演算子は、(324)において軌道角運動量演算子  $\hat{\mathbf{L}}$  を全角運動量  $\hat{\mathbf{J}}$  で置き換えたものである。

$$\hat{U}(\mathbf{n}, \theta) = \exp\left(\frac{\theta}{i\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right) = \hat{U}_{\text{orb}}(\mathbf{n}, \theta) \hat{U}_{\text{spin}}(\mathbf{n}, \theta) \quad (335)$$

ただし、

$$\hat{U}_{\text{orb}}(\mathbf{n}, \theta) = \exp\left(\frac{\theta}{i\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right), \quad \hat{U}_{\text{spin}}(\mathbf{n}, \theta) = \exp\left(\frac{\theta}{i\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{S}}\right) \quad (336)$$

はそれぞれ位置座標のみ、スピンのみに作用する回転の演算子である。

無限小変換に対しては次のように変換される。

$$\psi'(\mathbf{x}) = \left(1 + \frac{1}{i\hbar} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right) \psi(\mathbf{x}) = (1 + \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{R}^{(s)}) \psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\epsilon} \times \mathbf{x}) \quad (337)$$

ただしここではスピン  $s$  の粒子の波動関数を (330) のような縦ベクトルとして表わした。 $\mathbf{R}^{(s)} = (R_x^{(s)}, R_y^{(s)}, R_z^{(s)})$  は  $\hat{\mathbf{S}}/i\hbar$  を行列表示したもので  $s$  はスピンを表わす半整数である。 $R_x^{(s)}, R_y^{(s)}, R_z^{(s)}$  のそれぞれが  $(2s+1) \times (2s+1)$  行列である。たとえば、 $s=1$  の場合には次のように与えられる。

$$R_x^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{-i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}, \quad R_y^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}, \quad R_z^{(1)} = \begin{pmatrix} -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \end{pmatrix}. \quad (338)$$

## 6.4 スピン波動関数とテンソル

スピンの  $s=1$  の場合、波動関数  $\psi(\mathbf{x})$  は3つの成分を持ち、電磁気学で現れる電場  $\mathbf{E}(\mathbf{x})$  や磁場  $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ 、ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  といったベクトル関数と似ている。これは単なる類似ではなく、スピン1の粒子の波動関数は実はベクトル関数と等価である。このことを見るために、ベクトル関数

$$\mathbf{V}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} V_x(\mathbf{x}) \\ V_y(\mathbf{x}) \\ V_z(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (339)$$

が無限小回転のもとでどのように振舞うかを見てみよう。

ベクトル関数の回転を考える場合には座標が変化することによる効果とベクトルの向きが変化する効果を考慮しなければならない。座標が変化する効果は (319) に与えたスカラー関数の場合と同様であり、引数を  $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{x}$  に置き換えることで表される。さらにベクトルの向きの変化によって  $\boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{V}$  という項を新たに付け加わる。すなわち、

$$\begin{aligned} \boldsymbol{V}'(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{V}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{V}(\boldsymbol{x}) \\ &= (1 + \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{R}^{(\text{vec})})\boldsymbol{V}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{x}) \end{aligned} \quad (340)$$

ただし  $\boldsymbol{R}^{(\text{vec})}$  はベクトルに対する無限小回転を表わす 3 つの行列  $(R_k^{(\text{vec})})_{ij} = \epsilon_{ikj}$  をベクトルとして表したものである。それぞれの行列は次のような成分を持つ。

$$R_x^{(\text{vec})} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad R_y^{(\text{vec})} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad R_z^{(\text{vec})} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (341)$$

(340) の最後の表式をスピンの 1 の場合の (337) と比較してみると、行列  $\boldsymbol{R}^{(1)}$  が  $\boldsymbol{R}^{(\text{vec})}$  に置き換わったこと以外は同じ形をしている。さらに、これらの行列は互いに次のユニタリー変換によって書き換えが可能である。

$$\boldsymbol{R}^{(\text{vec})} = U^{-1}\boldsymbol{R}^{(1)}U \quad (342)$$

ただし  $U$  は次のユニタリー行列である。

$$U = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (343)$$

従って、ベクトル関数をユニタリー変換した  $U\boldsymbol{V}(\boldsymbol{x})$  は回転のもとでスピン 1 粒子の波動関数  $\psi^{(1)}(\boldsymbol{x})$  と全く同じように振舞う。また逆に波動関数のユニタリー変換  $U^{-1}\psi^{(1)}(\boldsymbol{x})$  はベクトル関数と全く同じように変換される。このことは、スピン 1 の粒子の波動関数は実はベクトル関数であることを意味している。通常のベクトル関数との見かけ上の違いは基底の取り方の違いによるもので、ユニタリー変換によって吸収することができる。

$$\text{スピン } 1 = \text{ベクトル (1 階のテンソル)} \quad (344)$$

このような意味で、粒子のスピンというのはそれ自身が何らかの回転（自転）を表わしているというよりも、回転のもとでの振舞い方を表わしているという方が適切である。ベクトル関数によって表される代表例は電磁場であるが、対応する粒子である光子のスピンはここで述べた理由により 1 である。

このような関係は他のスピンに対しても存在している。スピンの 0 の粒子に対してはスピン演算子は  $1 \times 1$  の行列として表され、しかもその成分は 0 である。

これは回転をしてもベクトルの向きの変化に対応する変化は起こらないことを意味しており、スピン 0 粒子の波動関数がスカラー関数であることを意味している。

$$\text{スピン } 0 = \text{スカラー (0 階のテンソル)} \quad (345)$$

ここでは詳しくは述べないが、スピンの 2 以上の整数値を取る粒子の波動関数はさまざまなテンソル関数によって表すことができる。

$$\text{スピン } 2 \text{ 以上} = \text{高階テンソル} \quad (346)$$

## 6.5 スピノル

スピンの整数の粒子のスピン波動関数は、スカラー、ベクトル、テンソル等で表すことができた。これらに対して、スピン 1/2 の粒子のスピン波動関数を表す二成分量をスピノルという。スピン 1/2 の粒子の状態は、粒子の位置  $\mathbf{x}$  とスピンの  $z$  成分  $s_z$  によって指定される。固有状態を  $|\mathbf{x}, s_z\rangle$  とすれば、状態  $|\psi\rangle$  の波動関数は

$$\psi_{s_z}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, s_z | \psi \rangle \quad (347)$$

によって与えられる。 $s_z$  は二つの値、 $+1/2$  と  $-1/2$  を取るが、これらを  $\uparrow$  および  $\downarrow$  という記号で表し、スピンの上向き、下向きと表現する。粒子の波動関数は、次の二成分関数によって与えられる。

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (348)$$

この二成分量がスピノルである。

スピノルに対するスピン演算子の作用は次の  $2 \times 2$  行列によって与えられる。

$$\hat{J}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \quad (349)$$

ただし  $\sigma_i$  は次の  $2 \times 2$  行列であり、パウリ行列と呼ばれる。

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (350)$$

単位ベクトル  $\mathbf{n}$  を軸とした角度  $\theta$  の有限回転のもとでのスピノルの変換は次の行列によって与えられる。

$$\hat{U}(\mathbf{n}, \theta) = \exp\left(\frac{\theta}{i\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right) = \exp\left(-\frac{i\theta}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right) \quad (351)$$

関係式  $(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = \mathbf{1}_2$  を用いれば、これを次のように計算することができる。

$$\hat{U}(\mathbf{n}, \theta) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left( -\frac{i\theta}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right)^k = \mathbf{1}_2 \cos \frac{\theta}{2} - i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin \frac{\theta}{2}. \quad (352)$$

例えば、それぞれの軸の周りでの  $\theta$  回転は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \hat{U}(\mathbf{e}_x, \theta) &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \\ \hat{U}(\mathbf{e}_y, \theta) &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \\ \hat{U}(\mathbf{e}_z, \theta) &= \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\theta}{2}} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (353)$$

問題 6.3 粒子の軌道運動は無視し、スピンのみに注目する。この場合、波動関数  $\psi$  は  $x$  に依存しないスピノルである。 $\psi$  が  $\hat{S}_z$  の固有状態

$$\hat{S}_z \psi = +\frac{\hbar}{2} \psi, \quad \psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (354)$$

であるとき、これを  $y$  軸のまわりに  $\pi/2$  回転すると、 $\hat{S}_x$  の固有状態であることを確かめよ。

問題 6.4 あるスピノル  $\psi$  を任意の軸のまわりで  $2\pi$  回転させると符号が反転すること、すなわち

$$\hat{U}(\mathbf{n}, 2\pi) \psi = -\psi \quad (355)$$

が成り立つことを確認せよ。

## 7 微細構造

### 7.1 相対論的補正

クーロンポテンシャル中の電子の状態は、次の4つの量子数によって区別される。

- 主量子数  $n = 1, 2, 3, \dots$
- 方位量子数  $l = 0, 1, \dots, n - 1$
- 磁気量子数  $m = -l, -l + 1, \dots, l$
- スピン量子数  $s_z = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

非相対論的な極限においては、エネルギー固有値は主量子数  $n$  のみで決まる。

相対論的な効果を考えると、準位の縮退が部分的に解けることが知られている。この構造を微細構造という。微細構造を生じさせる原因として、つぎのような効果が挙げられる。

- 運動エネルギーに対する相対論的補正
- 電子のスピンとクーロンポテンシャルの相互作用
- 電子のスピンと核のスピンとの相互作用
- 量子電磁力学による輻射補正

最後の効果を扱うには電磁場の量子化を行う必要があり、この授業のレベルでは扱えない。そこで始めの3つについてこれから考えることにする。

まず、運動エネルギーに対する補正について見てみよう。相対性理論において、運動量  $p$  の粒子が持つエネルギーは次のように与えられる。

$$\sqrt{(mc^2)^2 + (cp)^2} = mc^2 + \frac{1}{2m}p^2 - \frac{1}{8m^3c^2}(p^2)^2 + \dots \quad (356)$$

従って、非相対論的な場合に比べて補正項

$$\Delta E = -\frac{1}{8m^3c^2}(p^2)^2 \quad (357)$$

が現れる。(さらに高次の項はここでは考えない。) 量子力学において、この補正がどれだけエネルギーを変化させるかを見るには、定常状態に対してこの量の期待値を計算すればよい。状態  $|n, j, m\rangle$  における期待値を  $\langle \dots \rangle$  のように表わすことにすれば、

$$\begin{aligned} \frac{1}{4m^2} \langle (\hat{p}^2)^2 \rangle &= \langle \hat{K}^2 \rangle = \langle (\hat{H} - \hat{U})^2 \rangle = E_0^2 \left( \frac{1}{4n^4} + \frac{1}{n^2} \left\langle \frac{1}{\rho} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{\rho^2} \right\rangle \right) \\ &= E_0^2 \left( \frac{1}{4n^4} - \frac{1}{n^4} + \frac{2}{n^3(2l+1)} \right) \\ &= E_0^2 \frac{1}{n^4} \left( \frac{2n}{2l+1} - \frac{3}{4} \right) \end{aligned} \quad (358)$$

$E_0$  は (199) において定義した典型的エネルギースケールであり、 $\rho = r/a_0$  のべきの期待値は (241) に与えた公式を用いて計算した。よって  $\Delta E$  に対して次の値を得る。

$$\Delta E = -\frac{\alpha^2}{n^4} \left( \frac{n}{2l+1} - \frac{3}{8} \right) E_0. \quad (359)$$

これは、補正を考慮する前のエネルギー固有値と異なり、主量子数  $l$  に依存する。つまり、異なる  $l$  を持つ状態間の縮退が解けて微細構造が現れる。この補正をもともとのエネルギーと比較すると、 $\alpha^2$  という因子が余計に現れている。すなわち  $\alpha$  というパラメータは微細構造がどれくらいの大きさを表わすパラメータであり、これが微細構造定数という名の由来である。

## 7.2 スピン・軌道相互作用

原子核は電荷を持つのでその周りには電場が存在しており、それが荷電粒子（電子）に対してはポテンシャルとして作用する。これに加え、電子が運動している場合には、電子の磁気モーメントがこの電場と相互作用する。この相互作用によるエネルギーの変化について考えよう。

磁気モーメントと電場の相互作用を求める一つの方法は、磁気モーメントをわずかに離れた二つの磁荷（微小な棒磁石）として扱うものである。棒磁石の両端の磁荷を  $\pm q_m$  とし、磁荷  $-q_m$  から磁荷  $+q_m$  へ向かうベクトルを  $d$  とすれば、この磁石の磁気モーメントは

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q_m}{\mu_0} \mathbf{d} \quad (360)$$

によって与えられる。この磁石が電場  $\mathbf{E} = \epsilon_0^{-1} \mathbf{D}$  の中を速度  $\mathbf{v}$  で運動しているとしよう。磁場  $\mathbf{B}$  中を電荷  $q$  が速度  $\mathbf{v}$  で運動した場合にローレンツ力  $\mathbf{f} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  が働くことはよく知られているが、磁荷  $q_m$  が存在したとしてそれが電場中を運動すると力

$$\mathbf{f} = -q_m \mathbf{v} \times \mathbf{D} \quad (361)$$

が働く。従って磁荷  $\pm q_m$  よりなる棒磁石に働く力のモーメントは

$$\mathbf{M} = \mathbf{d} \times \mathbf{f} = -\mathbf{d} \times (q_m \mathbf{v} \times \mathbf{D}) = -\mu_0 \boldsymbol{\mu} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{D}) \quad (362)$$

となる。ここで、水素原子の原子核のつくる電束密度  $\mathbf{D} = e/(4\pi r^3) \mathbf{x}$  を代入すると、

$$\mathbf{M} = -\frac{\mu_0 e}{4\pi r^3} \boldsymbol{\mu} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{x}) = \frac{\mu_0 e \hbar}{4\pi r^3 m_e} \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{l}_e \quad (363)$$

ただし、電子の角運動量が  $\hbar \mathbf{l}_e = m_e \mathbf{x} \times \mathbf{v}$  と与えられることを用いた。(363) はちょうど磁気モーメント  $\boldsymbol{\mu}$  が外部磁場

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0 e \hbar}{4\pi r^3 m_e} \mathbf{l}_e = \frac{\mu_0 \mu_B}{2\pi r^3} \mathbf{l}_e \quad (364)$$



中に置かれたときの力のモーメントである。  $\mu_B$  は以前に定義したボーア磁子

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (365)$$

である。

この結果を得るのに途中であまりなじみのない式 (361) を用いたが、電子を中心においた座標系で考えれば、同じ結果を (361) を用いずに導出することもできる。そのような座標系では、電子の周りを陽子が周回し、磁場が発生する。(図 14) 陽

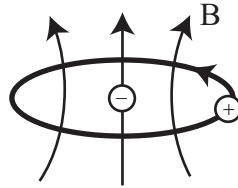


図 14: 電子を中心とした陽子の運動

子の軌道が半径  $r$  の円であるとしよう。角速度ベクトル  $\omega$  は電子の角運動量  $\hbar l_e$  を用いて

$$\omega = \frac{1}{m_e r^2} \hbar l_e \quad (366)$$

である。これによって生じる電流は

$$I = \frac{e|\omega|}{2\pi} = \frac{e\hbar}{2\pi m_e r^2} |l_e| \quad (367)$$

と与えられる。円電流が円の中心に作る磁場の公式  $B = \mu_0 I / (2r)$  を用いれば、中心における磁束密度が (364) によって与えられることがわかる。

以上の結果より、原子核まわりの電場と電子の磁気モーメントの相互作用は、背景に軌道角運動量に比例する磁場 (364) があるとするので取り入れることができる。

電子のスピンを  $\hbar s_e$  とすると、電子は次の磁気モーメントをもつ。

$$\mu_e = -g_e \mu_B s_e, \quad (368)$$

$g_e$  は古典的描像からのずれを表わす無次元量であり、ランダウの  $g$  因子と呼ばれる。実測値は  $g_e = 2.0023$  であり、相対論的量子力学 (ディラック方程式) から期待される値  $g_e = 2$  とよく一致している。(364) と (368) を組み合わせれば、相互作用によって生じるエネルギーが次のように与えられる。

$$E = -\mathbf{B} \cdot \mu_e = g_e \frac{\mu_0 \mu_B^2}{2\pi r^3} \mathbf{l}_e \cdot \mathbf{s}_e \quad (369)$$

このような、軌道角運動量とスピン角運動量の内積によって表わされる相互作用をスピン・軌道相互作用、あるいは LS 結合という。

ここまでは、水素原子を念頭において考えてきたが、一般の原子に対してもこのような相互作用が存在するはずである。実は、このLS結合がナトリウムD線の分裂の原因となっている。水素原子以外の原子の場合には電子間の相互作用が存在するために、LS結合の係数を(369)のように具体的に求めることは難しい。そこで、係数はよくわからない数  $c$  であるとし、相互作用

$$E = c \mathbf{l}_e \cdot \mathbf{s}_e \quad (370)$$

が存在するものとして、これがナトリウム原子の最外殻電子のエネルギーにどのように影響するかを見てみよう。

以前に述べたように、ナトリウムの最外殻電子は基底状態において  $3s$  軌道に属している。この電子を  $3p$  状態に励起させると、それが再び  $3s$  状態に戻る際に波長がおよそ  $589\text{nm}$  の光を発する。(ナトリウムD線)これは  $3p$  状態と  $3s$  状態のエネルギー差  $2.1\text{eV}$  に対応する。このD線に対してLS結合(370)がどのように影響するかを見るには、二つの状態  $3s$  と  $3p$  に対する(370)の影響を見積もればよい。ここでは話を簡単にするために、 $\mathbf{l}_e$  と  $\mathbf{s}_e$  を古典的なベクトルのように扱うことにする。電子のスピンは  $1/2$  であるから、 $\mathbf{s}_e$  は長さ  $1/2$  のベクトルであり、 $\mathbf{l}_e$  の長さは方位量子数  $l$  によって与えられるとする。まず  $3s$  状態についてであるが、方位量子数は  $l = 0$  である。従って角運動量ベクトルも  $\mathbf{l}_e = 0$  であり、エネルギーの補正(370)は  $0$  になる。一方  $3p$  状態では  $l = 1$  であるから、角運動量ベクトル  $\mathbf{l}_e$  は長さ  $1$  である。従って  $\mathbf{l}_e$  と  $\mathbf{s}_e$  が平行の時には  $E = +c/2$ 、反平行の時には  $E = -c/2$  となる。(図15)従って、エネルギーの異なる二種類の  $3p$  状態

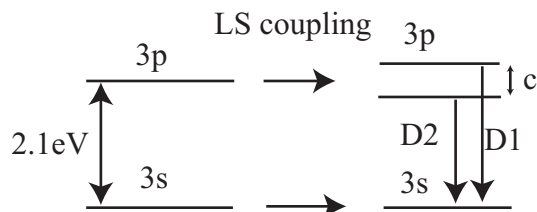


図 15: LS 結合による準位の分裂

が現れ、そのどちらから  $3s$  状態に遷移するかによって二つの異なるエネルギーを持った光子が放出され、D線の微小な分裂を引き起こすはずである。実際に起こるD線の分裂から二種類の  $3p$  状態のエネルギーの差を計算すると約  $0.002\text{eV}$  である。試しに(369)に数値を代入して係数を求めてみると、 $c = 10^{-4}\text{eV}$  になり、水素原子について得られた式を流用したにしては比較的实验とあっている。

### 7.3 超微細構造

電子同様、陽子や中性子もスピン  $1/2$  を持っており、スピンの比例する磁気モーメントも持つことが実験的にわかっている。陽子の磁気モーメントとスピンの関係は次のように与えられる。

$$\mu_p = g_p \mu_N s_p \quad (371)$$

ただし、 $\mu_N$  は核磁子と呼ばれる量で次のように定義される。

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} \quad (372)$$

陽子と電子の質量の比が  $m_p/m_e = 1836$  であるので、 $\mu_N = \mu_B/1836$  であり、電子の磁気モーメントよりもかなり小さい。そのため、原子核の磁気モーメントによるエネルギー準位の分裂は微細構造よりもさらに数桁小さく、超微細構造と呼ばれている。陽子に対するランデの  $g$  因子の値は

$$g_p = 5.5858 \quad (373)$$

である。電子の場合の  $g_e = 2$  は相対論的量子力学によって得られるが、陽子は複合粒子であるため、この値を理論的に求めることは難しい。

水素原子の基底状態 ( $1s$  状態) について、電子の磁気モーメントと原子核 (陽子) の磁気モーメントが互いに影響しあうことで生じるエネルギーの変化を見積もってみよう。このような相互作用はスピン・スピン相互作用と呼ばれる。 $1s$  状態では軌道角運動量は  $l = 0$  なので、電子と陽子の間のスピン・スピン相互作用のみが準位の分裂を引き起こす。(図 16)  $1s$  状態はエネルギーのわずかに異なる二

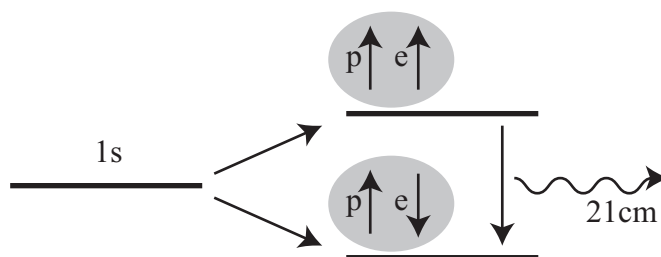


図 16: 水素の  $1s$  状態の分裂

つの準位に分かれ、その間の遷移によって放出される電磁波の波長はおよそ  $21\text{cm}$  である。これは  $21\text{cm}$  線と呼ばれ、星間物質の観測などに用いられる。この波長を計算によって求めるのが、ここでの目標である。

まず、陽子、電子のスピンも含めた状態をどのように表すかについてまとめておく。ある粒子のスピン状態を  $|s, s_z\rangle$  のように表そう。電子や陽子の場合には  $s = 1/2$  であり、 $s_z$  は二つの値  $s_z = \pm 1/2$  のみを取る。以下のような略記を用いる。

$$|\uparrow\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad |\downarrow\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (374)$$

$\uparrow$  をスピンの上向き状態、 $\downarrow$  をスピンの下向き状態という。

水素原子（重心系）の状態は、陽子-電子の相対座標  $\mathbf{x}$ 、陽子のスピンの  $z$  成分  $s_z^{(p)}$ 、電子のスピンの  $z$  成分  $s_z^{(e)}$  によって指定される。それぞれを表す状態ベクトルを

$$|\mathbf{x}\rangle, |s_z^{(p)}\rangle_p, |s_z^{(e)}\rangle_e \quad (375)$$

とすると、水素原子の状態は、それらの積（テンソル積）によって与えられる。たとえば、

$$|\mathbf{x}\rangle|\uparrow\rangle_p|\downarrow\rangle_e \quad (376)$$

は、陽子のスピンの上向き、電子のスピンの下向き状態を表す。同じ状態を

$$|\mathbf{x}, \uparrow\downarrow\rangle \quad (377)$$

とも表す。波動関数は次の 4 成分ベクトルとして表される。

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{x}, \uparrow\uparrow | \psi \rangle \\ \langle \mathbf{x}, \uparrow\downarrow | \psi \rangle \\ \langle \mathbf{x}, \downarrow\uparrow | \psi \rangle \\ \langle \mathbf{x}, \downarrow\downarrow | \psi \rangle \end{pmatrix} \quad (378)$$

スピン・スピン相互作用を考慮しないとき、ハミルトニアン

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (379)$$

は波動関数のそれぞれの成分に対して独立に作用する。従って、 $1s$  状態であれば

$$\hat{H}_0\psi_{s_z^{(p)}s_z^{(e)}}(\mathbf{x}) = E_{1s}\psi_{s_z^{(p)}s_z^{(e)}}(\mathbf{x}) \quad (380)$$

が成り立つ。従って、4 つの成分はどれも以前に求めた  $1s$  状態の波動関数

$$\psi_{1s}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (381)$$

に比例し、4 成分波動関数を次のように与えることができる。

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_{1s}(\mathbf{x})u, \quad u = \begin{pmatrix} u_{\uparrow\uparrow} \\ u_{\uparrow\downarrow} \\ u_{\downarrow\uparrow} \\ u_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \quad (382)$$

$\mathbf{x}$  に依存する関数  $\psi_{1s}(\mathbf{x})$  が軌道運動を表しており、 $u$  は陽子と電子のスピンの情報を担っている。スピン・スピン相互作用はこれら両方を変化させるはずであるが、以下では軌道運動への影響は小さいと仮定し、スピン・スピン相互作用の導

入後も波動関数は (382) の形を取るものとする。(382) の波動関数に対応する状態ベクトルは

$$|1s\rangle|s_z^{(p)}\rangle|s_z^{(e)}\rangle = |1s, s_z^{(p)} s_z^{(e)}\rangle \quad (383)$$

と表すことにする。以下では軌道運動は常に  $1s$  状態にあると仮定して話を進めるので、さらに省略して

$$|s_z^{(p)} s_z^{(e)}\rangle \quad (384)$$

とも表す。

スピン・スピン相互作用を表すハミルトニアン演算子  $\hat{H}_{SS}$  を求めよう。原点にある陽子の磁気モーメント  $\mu_p$  によって生じる磁場は次のように与えられる。

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [3(\mathbf{n} \cdot \mu_p)\mathbf{n} - \mu_p] + \frac{2\mu_0}{3} \mu_p \delta(\mathbf{x}) \quad (385)$$

$\mathbf{n} = \mathbf{x}/|\mathbf{x}|$  である。デルタ関数を含む第二項は  $\nabla \times \mathbf{B} = 0$  を成り立たせるためには必要である。 $\mathbf{x} \neq 0$  では 0 になるので省略されることもあるが、ここでは重要なので残しておく。この磁場中に磁気モーメント  $\mu_e$  を持つ電子があった場合に、磁場と磁気モーメントの相互作用によって生じるエネルギーは

$$H_{SS} = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B} = -\frac{\mu_0}{4\pi r^3} [3(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu}_p)(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu}_e) - (\boldsymbol{\mu}_p \cdot \boldsymbol{\mu}_e)] - \frac{2\mu_0}{3} (\boldsymbol{\mu}_p \cdot \boldsymbol{\mu}_e) \delta(\mathbf{x}) \quad (386)$$

である。磁気モーメントをスピン演算子によって書き換えれば、次のハミルトニアン演算子が得られる。

$$\hat{H}_{SS} = \mu_0 g_p \mu_N g_e \mu_B \hbar^2 \left[ \frac{1}{4\pi r^3} [3(\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{s}}_p)(\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{s}}_e) - (\hat{\mathbf{s}}_p \cdot \hat{\mathbf{s}}_e)] + \frac{2}{3} (\hat{\mathbf{s}}_p \cdot \hat{\mathbf{s}}_e) \delta(\mathbf{x}) \right] \quad (387)$$

これを、(382) の形をした二つの波動関数

$$\psi_1(\mathbf{x}) = \psi_{1s}(\mathbf{x})u_1, \quad \psi_2(\mathbf{x}) = \psi_{1s}(\mathbf{x})u_2 \quad (388)$$

で挟むことによって行列要素

$$\langle \psi_1 | \hat{H}_{SS} | \psi_2 \rangle = \int \psi_1^\dagger(\mathbf{x}) \hat{H}_{SS} \psi_2(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} \quad (389)$$

を計算してみよう。実は、(387) の中で  $r^{-3}$  に比例する項は、 $\mathbf{n}$  の向きについて平均をとると 0 になるため、球対称な関数  $|\psi_{1s}(\mathbf{x})|^2$  を掛けて  $\mathbf{x}$  積分を行うと消える。 $\delta(\mathbf{x})$  を含む項は積分を実行できて、次のものが残る。

$$\langle \psi_1 | \hat{H}_{SS} | \psi_2 \rangle = \zeta u_1^\dagger (\hat{\mathbf{s}}_p \cdot \hat{\mathbf{s}}_e) u_2 \quad (390)$$

ただし係数  $\zeta$  は次のように与えられる。

$$\begin{aligned}
 \zeta &= \mu_0 g_p \mu_N g_e \mu_B \hbar^2 |\psi_0(0)|^2 \frac{2\mu_0}{3} \\
 &= \frac{2g_p g_e m_e}{3} \frac{4\mu_0 \mu_B^2 \hbar^2}{4\pi a_0^3} \\
 &= \frac{2g_p g_e m_e}{3} \alpha^2 E_0 \\
 &= 4.32 \times 10^{-7} \frac{E_0}{2}
 \end{aligned} \tag{391}$$

(389) は、軌道運動の部分が  $1s$  状態にあるという仮定のもとでは、スピン波動関数  $u$  を波動関数とみなし、

$$\hat{H}_{SS} = \zeta(\hat{s}_p \cdot \hat{s}_e) \tag{392}$$

をハミルトニアンとみなすことができることを意味している。

このハミルトニアンの固有値を計算してみよう。古典的なイメージでは、 $\hat{s}_p$  も  $\hat{s}_e$  もどちらも長さ  $1/2$  のベクトルである。従って、スピンの平行なときは  $H_{SS} = \zeta/4$ 、スピンの反平行なときには  $H_{SS} = -\zeta/4$  が成り立つように思われる。つまり、

$$\hat{H}_{SS}|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\zeta}{4}|\uparrow\uparrow\rangle, \quad \hat{H}_{SS}|\uparrow\downarrow\rangle = -\frac{\zeta}{4}|\uparrow\downarrow\rangle, \quad \hat{H}_{SS}|\downarrow\uparrow\rangle = -\frac{\zeta}{4}|\downarrow\uparrow\rangle, \quad \hat{H}_{SS}|\downarrow\downarrow\rangle = \frac{\zeta}{4}|\downarrow\downarrow\rangle. \tag{393}$$

が成り立ちそうに思われる。しかしこれは正しくない。

正しく  $\hat{H}_{SS}$  の固有値を計算するために、スピン演算子が状態にどのように作用するかを見ておこう。スピンの  $1/2$  の場合の角運動量演算子の行列要素は

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \tag{394}$$

である。従って、スピン状態に対するスピン演算子の作用は次のように与えられる。

$$\begin{aligned}
 \hat{s}_x|\uparrow\rangle &= \frac{1}{2}|\downarrow\rangle, & \hat{s}_y|\uparrow\rangle &= \frac{i}{2}|\downarrow\rangle, & \hat{s}_z|\uparrow\rangle &= \frac{1}{2}|\uparrow\rangle, \\
 \hat{s}_x|\downarrow\rangle &= \frac{1}{2}|\uparrow\rangle, & \hat{s}_y|\downarrow\rangle &= -\frac{i}{2}|\uparrow\rangle, & \hat{s}_z|\downarrow\rangle &= -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle.
 \end{aligned} \tag{395}$$

水素原子の状態に対する作用を見るには、水素原子の状態を軌道部分、陽子のスピン部分、電子のスピン部分の積として表すのがよい。すると、陽子と電子のスピン演算子  $\hat{s}^{(p)}$  や  $\hat{s}^{(e)}$  はそれぞれ陽子のスピン部分、電子のスピン部分に作用する。例えば

$$\hat{s}_x^{(e)}|\mathbf{x}, \uparrow\downarrow\rangle = \hat{s}_x^{(e)}(|\mathbf{x}\rangle|\uparrow\rangle_p|\downarrow\rangle_e) = |\mathbf{x}\rangle|\uparrow\rangle_p(\hat{s}_x^{(e)}|\downarrow\rangle_e) = |\mathbf{x}\rangle|\uparrow\rangle_p\left(\frac{1}{2}|\uparrow\rangle_e\right) = \frac{1}{2}|\mathbf{x}, \uparrow\uparrow\rangle \tag{396}$$

である。以上を踏まえて  $\hat{H}_{SS}$  の作用を計算してみよう。状態  $|\uparrow\uparrow\rangle$  に対しては、

$$\hat{s}_x^{(p)}\hat{s}_x^{(e)}|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{1}{4}|\downarrow\downarrow\rangle, \quad \hat{s}_y^{(p)}\hat{s}_y^{(e)}|\uparrow\uparrow\rangle = -\frac{1}{4}|\downarrow\downarrow\rangle, \quad \hat{s}_z^{(p)}\hat{s}_z^{(e)}|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{1}{4}|\uparrow\uparrow\rangle \quad (397)$$

なので、

$$\hat{H}_{SS}|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\zeta}{4}|\uparrow\uparrow\rangle \quad (398)$$

である。同様にして

$$\begin{aligned} \hat{H}_{SS}|\uparrow\downarrow\rangle &= -\frac{\zeta}{4}|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{\zeta}{2}|\downarrow\uparrow\rangle, \\ \hat{H}_{SS}|\downarrow\uparrow\rangle &= -\frac{\zeta}{4}|\downarrow\uparrow\rangle + \frac{\zeta}{2}|\uparrow\downarrow\rangle \\ \hat{H}_{SS}|\downarrow\downarrow\rangle &= \frac{\zeta}{4}|\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (399)$$

$|\uparrow\uparrow\rangle$  と  $|\downarrow\downarrow\rangle$  は  $\hat{H}_{SS}$  の固有状態になっており、固有値は古典的なイメージから得られるものに等しい。しかしあと二つの状態は、固有状態になっていない。次のように和と差を考えると、固有状態になっていることがわかる。

$$\begin{aligned} \hat{H}_{SS} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} &= \frac{\zeta}{4} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \\ \hat{H}_{SS} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} &= -\frac{3\zeta}{4} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (400)$$

こうして、陽子と電子によって区別される 4 つの  $1s$  状態は  $H_{SS} = -3\zeta/4$  の一つの状態と、 $H_{SS} = \zeta/4$  の 3 つの状態に分かれることが示された。以下ではこれらをそれぞれ  $1s_0$  および  $1s_1$  のように表すことにする。

これら二つの準位のエネルギー差は  $\zeta$  である。従って、 $1s_1$  状態から  $1s_0$  状態への遷移において放出される電磁波の波長は、次のように与えられる。

$$\lambda = \frac{hc}{\zeta} = 21\text{cm}. \quad (401)$$

これは観測される水素の 21cm 線の波長に一致する。

## 7.4 角運動量の合成

$\hat{s}_z^{(p)}$  や  $\hat{s}_z^{(e)}$  の固有状態である  $|\uparrow\downarrow\rangle$  などがエネルギー固有状態になっていないのは、これらの演算子がハミルトニアン

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{SS} \quad (402)$$

のスピン・スピン結合の項  $\hat{H}_{SS}$  とは可換でないためである。実際に交換関係を計算してみると、

$$[\hat{s}_i^{(p)}, \hat{H}_{SS}] = -i\zeta(\hat{s}^{(p)} \times \hat{s}^{(e)})_i, \quad [\hat{s}_i^{(e)}, \hat{H}_{SS}] = i\zeta(\hat{s}^{(p)} \times \hat{s}^{(e)})_i \quad (403)$$

となり、確かに 0 にはならない。しかし、上の二つの交換関係の符号が逆であるから、全スピン演算子

$$\hat{s} = \hat{s}^{(p)} + \hat{s}^{(e)} \quad (404)$$

はハミルトニアンと可換になる。このことは、エネルギー固有状態を全スピン演算子の固有状態になるように取ることができることを意味している。(ここでは LS 結合を無視している。LS 結合がある場合には、全角運動量  $\hat{J} = \hat{l} + \hat{s}^{(p)} + \hat{s}^{(e)}$  がハミルトニアンと可換になる。話が面倒になるのでここでは軌道角運動量のことは考えない。)

スピン・スピン相互作用ハミルトニアンは全スピン演算子を用いて書き換えることができる。

$$\hat{H}_{SS} = \zeta(\mathbf{s}^{(p)} \cdot \mathbf{s}^{(e)}) = \frac{\zeta}{2}(\mathbf{s}^2 - \mathbf{s}^{(p)2} - \mathbf{s}^{(e)2}) = \frac{\zeta}{2}\left(\mathbf{s}^2 - \frac{3}{2}\right) \quad (405)$$

従って、全スピが決まれば、 $\hat{H}_{SS}$  の値も自動的に決まる。実は、先ほど得られた 4 つの  $\hat{H}_{SS}$  の固有状態

$$\begin{aligned} |1s_{1,1}\rangle &= |1s, \uparrow\uparrow\rangle, \\ |1s_{1,0}\rangle &= \frac{|1s, \uparrow\downarrow\rangle + |1s, \downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |1s_{1,-1}\rangle &= |1s, \downarrow\downarrow\rangle, \\ |1s_{0,0}\rangle &= \frac{|1s, \uparrow\downarrow\rangle - |1s, \downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (406)$$

はどれも  $\hat{s}^2$  および  $\hat{s}_z$  の固有状態であり、次の関係式を満足する。

$$\begin{aligned} \hat{s}^2|1s_{1,1}\rangle &= 2|1s_{1,1}\rangle, & \hat{s}_z|1s_{1,1}\rangle &= |1s_{1,1}\rangle, \\ \hat{s}^2|1s_{1,0}\rangle &= 2|1s_{1,0}\rangle, & \hat{s}_z|1s_{1,0}\rangle &= 0, \\ \hat{s}^2|1s_{1,-1}\rangle &= 2|1s_{1,-1}\rangle, & \hat{s}_z|1s_{1,-1}\rangle &= -|1s_{1,-1}\rangle, \\ \hat{s}^2|1s_{0,0}\rangle &= 0, & \hat{s}_z|1s_{0,0}\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (407)$$

これらの式を見ると、 $|1s_{1,m}\rangle$  という状態があたかもスピン 1 の固有状態  $|1, m\rangle$  ( $m = 0, \pm 1$ ) であり、 $|1s_{0,0}\rangle$  があたかもスピン 0 の固有状態  $|0, 0\rangle$  であるように見える。

このように、二つの角運動量  $s^{(p)}$  と  $s^{(e)}$  の固有状態から全スピン  $s$  の固有状態を作ること角運動量の合成という。(一般には、合成される角運動量はどちらもスピンである必要はなく、軌道角運動量であってもよい。)

角運動量が  $j$  の  $2j + 1$  個の状態をまとめて  $[j]$  と表すことにしよう。上で見た例では、スピン 1/2 の状態を二つ組み合わせることで全スピン 1 の 3 つの状態と全スピン 0 の一つの状態を構成した。これは次のように表すことができる。

$$\left[\frac{1}{2}\right] \times \left[\frac{1}{2}\right] = [1] + [0] \quad (408)$$



$[j]$  をそこに含まれる状態数  $2j + 1$  で置き換えれば、数式が成り立ち、状態数が一致することがわかる。

さらに一般の角運動量の合成について考えてみよう。つまり、角運動量  $j_1$  の状態と角運動量  $j_2$  の状態の積（テンソル積）から、どのような全運動量を持つ状態が現れるかを調べてみよう。つまり、

$$[j_1] \times [j_2] = [?] + [?] + \dots \quad (409)$$

の右辺を求めよう。 $[j_1]$  と  $[j_2]$  それぞれに作用する角運動量演算子を  $\hat{J}^{(1)}$  および  $\hat{J}^{(2)}$  とし、全角運動量を  $\hat{J} = \hat{J}^{(1)} + \hat{J}^{(2)}$  とする。

$[j_1] \times [j_2]$  には  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$  個の状態が含まれる。(409) の右辺を決めるには、全角運動量  $\hat{J}_z$  の固有値  $m = m_1 + m_2$  それぞれに対して何個の状態があるかを調べればよい。ここでは  $j_1 = 3$ 、 $j_2 = 2$  を例に取る。この場合、35 個の状態があるが、これらを  $m_1$ - $m_2$  平面上の点としてプロットすると、図 17 のようになる。この図から、それぞれの  $m = m_1 + m_2$  に対していくつ状態があるかを読み取る

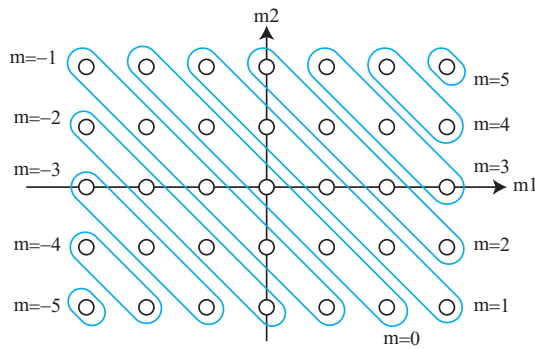


図 17: 角運動量  $j_1 = 3$  と  $j_2 = 2$  から得られる  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = 35$  個の状態のは簡単である。横軸に  $m$  を取り、それぞれの  $m$  に対する状態数を点の数として表すと図 18 になる。これを  $[j]$  の集まりとして表せば、(409) の右辺が決まる。

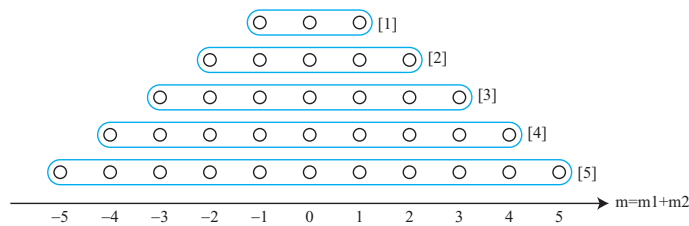


図 18: 35 個の状態の  $[j]$  による分解

$[j]$  が  $m = -j$  から  $m = +j$  までの  $2j + 1$  個の状態を一つずつ含むことを考慮すれば、この分解は一意的に決まる。例に挙げた  $[3] \times [2]$  の場合には、次の結果を得る。

$$[3] \times [2] = [5] + [4] + [3] + [2] + [1] \quad (410)$$

一般式を求めるのは簡単で、次の結果を得る。

$$[j_1] \times [j_2] = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} [j]. \quad (411)$$

問題 7.1 (411) の両辺の状態数が一致することを確認せよ。

$j$  は次の範囲の値をとる。

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2. \quad (412)$$

これは三角不等式であるが、 $j_1, j_2, j$  が合成前後の角運動量の大きさを表していることを踏まえれば、(412) が成り立つことは自然である。

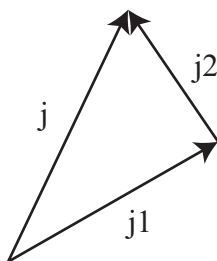


図 19: 角運動量の合成

## 7.5 クレプシュ・ゴルダン係数

式 (411) は単に状態数の勘定から得られたものであり、具体的な状態の対応を与えているわけではない。具体的な状態間の対応は次の形に書くことができる。

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle C_{j_1 m_1 j_2 m_2 j m} \quad (413)$$

展開係数  $C_{j_1 m_1 j_2 m_2 j m}$  はクレプシュ・ゴルダン係数と呼ばれる。

問題 7.2 (406) からクレプシュ・ゴルダン係数を読み取れ。

CG 係数は、それらの添え字が以下の条件を満足する場合のみ 0 ではない。

- 三角不等式

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2. \quad (414)$$

- 角運動量の  $z$  成分

$$m_1 + m_2 = m. \quad (415)$$

(413) の右辺の状態ベクトルの積は、二つの角運動量状態をまとめて表わす一つの状態ベクトルである。そこで、次のように表わすことにする。

$$|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad (416)$$

これを用いて (413) をもう一度書くと、

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle C_{j_1 m_1 j_2 m_2 j m}. \quad (417)$$

この両辺と (416) のエルミート共役  $\langle j_1, m_1; j_2, m_2|$  の内積を取ると、CG 係数は次のように表わすことができる。

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2 j m} = \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle. \quad (418)$$

CG 係数は様々な関係式を満足する。それらは公式集などを参照してもらうことにして、ここでは CG 係数を自分で計算するにはどのようにするかを  $[1] \times [\frac{1}{2}]$  の場合を例にとって説明する。一般公式 (411) または図 20 より、

$$[1] \times [\frac{1}{2}] = [\frac{3}{2}] + [\frac{1}{2}] \quad (419)$$

であることがわかる。図 20 の (1) の 6 個の点は二つの角運動量それぞれの固有状

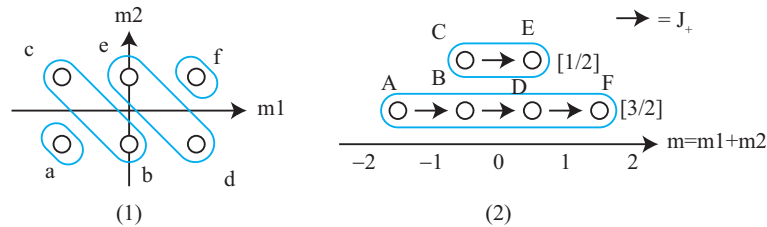


図 20:  $[1] \times [\frac{1}{2}] = [\frac{3}{2}] + [\frac{1}{2}]$

態の積であり、それぞれ次の状態を表している。

$$\begin{aligned} a &: |1, -1\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, \\ b &: |1, 0\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, \\ c &: |1, -1\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ d &: |1, 1\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, \\ e &: |1, 0\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ f &: |1, 1\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (420)$$

一方 (2) のそれぞれの点は全角運動量の固有状態であり、それぞれ次の状態を表している。

$$\begin{aligned}
 A &: \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\
 B &: \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
 C &: \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
 D &: \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\
 E &: \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\
 F &: \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle.
 \end{aligned} \tag{421}$$

やりたいことは、(421) のそれぞれの状態ベクトルを (420) の状態ベクトルの線形結合として表すことである。

まず、 $A$  から考えよう。 $A$  は  $m = m_1 + m_2$  が  $-3/2$  の状態である。そのような状態は (420) の中には一つしかない。従って、

$$A : \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = |1, -1\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \tag{422}$$

が成り立つはずである。

次に、 $m = -1/2$  の状態を見てみよう。そのような状態は (1) にも (2) にも二つ ( $b$  と  $c$  および  $B$  と  $C$ ) ある。従って、それらの関係を決めるには何か情報が必要である。そのために、角運動量固有状態  $|j, m\rangle$  に対して (296) に与えた関係式が成り立つことを用いる。

$$|j, m+1\rangle = \frac{\hat{J}_+}{\sqrt{(j-m)(j+m+1)}} |j, m\rangle \tag{423}$$

この関係を用いると、点  $A$  が表す状態 (422) から点  $B$  が表す状態を次のように構成することができる。

$$\begin{aligned}
 B : \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{J}_+ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{3}} (\hat{J}_+^{(1)} + \hat{J}_+^{(2)}) |1, -1\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left[ (\hat{J}_+^{(1)} |1, -1\rangle) \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + |1, -1\rangle (\hat{J}_+^{(2)} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle) \right] \\
 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left[ \sqrt{2} |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + |1, -1\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right] \\
 &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, -1\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle
 \end{aligned} \tag{424}$$

さらに繰り返し  $\hat{J}_+$  を作用させれば、点  $D$  と  $F$  に対応する状態が得られる。

$$\begin{aligned} D : |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{2}\hat{J}_+|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|1, 1\rangle|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 0\rangle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ F : |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{J}_+|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |1, 1\rangle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (425)$$

これらを (420) から取り除いた結果、 $m = 1/2$  と  $m = -1/2$  に一つずつ状態が残る。これらは  $C$  と  $E$  を与えるはずである。それらは取り除いた状態とは直交する。このことを用いると、 $C$  の状態が位相因子を除き次のように決まる。

$$C : |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|1, 0\rangle|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1, -1\rangle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \quad (426)$$

$C$  が決まれば、 $E$  はこの状態に  $\hat{J}_+$  を作用させて作ることができる。

$$E : |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \hat{J}_+|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 1\rangle|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|1, 0\rangle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \quad (427)$$

この状態は先ほど取り除いた  $D$  の状態  $|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$  とは直交していなければならないが、そうなっていることが確認できる。。以上で  $[1] \times [\frac{1}{2}] = [\frac{3}{2}] + [\frac{1}{2}]$  の右辺の全ての状態を (413) の形に表わすことができた。あとは係数を読み取れば CG 係数が得られる。

## 7.6 異常ゼーマン効果

ナトリウム D 線は電子の軌道角運動量とスピンの間の相互作用 (LS 結合) によって  $D_1$  と  $D_2$  の二本の輝線に分裂することを見た。ここでは角運動量の合成を用いておさらいしておく。

ナトリウム D 線はナトリウム原子の最外殻電子が  $3p$  状態から  $3s$  状態へ遷移することによって発生する。従って、D 線の波長  $\lambda_D$  は次の式によって与えられる。

$$\lambda_D = \frac{hc}{E_{3p} - E_{3s}} \quad (428)$$

実際に測定される値  $\lambda_D = 589\text{nm}$  を用いればエネルギー差

$$E_{3p} - E_{3s} = 2.10\text{eV} \quad (429)$$

が得られる。ここで、LS 結合項が

$$\hat{H}_{LS} = \xi(\hat{l} \cdot \hat{s}) \quad (430)$$

と与えられるとしよう。  $\xi$  は軌道運動の状態に依存するので、 $3p$  状態および  $3s$  状態に対してそれぞれ  $\xi_{3p}$ 、 $\xi_{3s}$  であるとする。

$3s$  状態に対しては、 $l = 0$  である。この場合、 $\hat{l} = 0$  であるから、LS 結合によるエネルギーの分裂はない。このことは、角運動量を合成したときに  $[0] \times [\frac{1}{2}] = [\frac{1}{2}]$  のように、全角運動量が  $j = 1/2$  の一つの多重項 ( $3s_{1/2}$  と表わす。) しか現れることからわかる。

$$E_{3s_{1/2}} = E_{3s}. \quad (431)$$

$3p$  状態に対しては、 $[1] \times [\frac{1}{2}] = [\frac{3}{2}] + [\frac{1}{2}]$  であるから、 $j = 3/2$  の状態  $3p_{3/2}$  と  $3p_{1/2}$  にわかれる。それぞれの多重項に対する LS 結合によるエネルギー変化は

$$\hat{H}_{LS} = \frac{\xi_{3p}}{2} (\hat{J}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2) = \frac{\xi_{3p}}{2} \left( j(j+1) - \frac{11}{4} \right) \quad (432)$$

によって与えられる。つまり、

$$E_{3p_{3/2}} = E_{3p} + \frac{\xi_{3p}}{2}, \quad E_{3p_{1/2}} = E_{3p} - \xi_{3p}. \quad (433)$$

従って、それぞれのエネルギーに対して現れる輝線の波長は

$$\lambda_{D_1} = \frac{hc}{E_{3p} - E_{3s} + \frac{1}{2}\xi_{3p}}, \quad \lambda_{D_2} = \frac{hc}{E_{3p} - E_{3s} - \xi_{3p}}. \quad (434)$$

$E_{3p} - E_{3s} \gg \xi_{3p}$  であると仮定すれば

$$\frac{\lambda_{D_2} - \lambda_{D_1}}{\lambda_D} = \frac{3}{2} \frac{\xi_{3p}}{E_{3p} - E_{3s}} \quad (435)$$

が得られる。実際に測定される波長を代入すると、この値はおよそ 0.001014 であり (429) を用いることで  $\xi_{3p}$  の値が次のように得られる。

$$\xi_{3p} = 0.00142\text{eV} \quad (436)$$

ナトリウム原子に外部磁場をかけると、 $D_1$  と  $D_2$  それぞれが数本の輝線に分裂することが知られている。外部磁場と電子の磁気モーメントの相互作用は次のハミルトニアンによって与えられる。

$$\hat{H}_B = -\mathbf{B} \cdot (\boldsymbol{\mu}_L + \boldsymbol{\mu}_S) = \mu_B \mathbf{B} \cdot (\hat{\mathbf{l}} + 2\hat{\mathbf{s}}) \quad (437)$$

ただし、 $\boldsymbol{\mu}_L$  と  $\boldsymbol{\mu}_S$  はそれぞれ軌道運動およびスピンによって生じる磁気モーメントである。電子に対するランダウの  $g$  因子を  $g_e = 2$  とすると、

$$\boldsymbol{\mu}_L = -\hat{\mu}_B \hat{\mathbf{l}}, \quad \boldsymbol{\mu}_S = -2\hat{\mu}_B \hat{\mathbf{s}}. \quad (438)$$

と与えられることを用いた。ここでは、磁場による輝線の分裂を、磁場の影響が LS 結合の影響よりも十分に小さい場合について考えてみよう。これは、外部磁場の大きさに対して次の条件が成り立つことを意味する。

$$|B| \ll \frac{\xi_{3p}}{\mu_B} \sim 24.5\text{T}. \quad (439)$$

この条件が成り立つ場合には、 $3s_{1/2}$ 、 $3p_{3/2}$ 、 $3p_{1/2}$  それぞれの多重項の準位の分裂を計算する場合にはその多重項に含まれる状態のみを考慮すればよい。(もし外部磁場の影響が LS 結合の影響と同程度か、それ以上になると、異なる多重項にある状態間の混合が起こるため、計算が面倒になる。)

ここでは磁場の向きを  $z$  方向に選ぶ。相互作用ハミルトニアンは

$$\hat{H}_B = \mu_B B \cdot (\hat{l}_z + 2\hat{s}_z) \quad (440)$$

である。

まず、多重項  $3p_{2/3}$  および  $3p_{1/2}$  について調べよう。これらは (421) に与えた 6 個の状態を含む。(421) において  $|j, m\rangle$  と表わした状態を  $|3p_{j,m}\rangle$  と表わすことにしよう。多重項  $3p_{\frac{3}{2}}$  に含まれる 4 つの状態は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} |3p_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}}\rangle &= |1, 1\rangle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ |3p_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}|1, 1\rangle|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 0\rangle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ |3p_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 0\rangle|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|1, -1\rangle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ |3p_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}\rangle &= |1, -1\rangle|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (441)$$

これらの状態に対して  $\hat{H}_B$  の行列要素を計算しよう。全部で  $4 \times 4 = 16$  個の成分があるが、0 でないのは以下の 4 つの対角成分のみである。

$$\begin{aligned} \langle 3p_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}}|\hat{H}_B|3p_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}}\rangle &= 2\mu_B B, \\ \langle 3p_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}}|\hat{H}_B|3p_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}}\rangle &= \frac{2}{3}\mu_B B, \\ \langle 3p_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}|\hat{H}_B|3p_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}\rangle &= -\frac{2}{3}\mu_B B, \\ \langle 3p_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}|\hat{H}_B|3p_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}\rangle &= -2\mu_B B. \end{aligned} \quad (442)$$

$3p_{\frac{1}{2}}$  に含まれる二つの状態

$$\begin{aligned} |3p_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 1\rangle|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|1, 0\rangle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ |3p_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}|1, 0\rangle|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1, -1\rangle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (443)$$

に対しても、行列要素のうち 0 で無いのは対角成分

$$\begin{aligned} \langle 3p_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}|\hat{H}_B|3p_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}\rangle &= \frac{1}{3}\mu_B B, \\ \langle 3p_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}|\hat{H}_B|3p_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}\rangle &= -\frac{1}{3}\mu_B B. \end{aligned} \quad (444)$$

である。

$3s_{1/2}$  状態では軌道角運動量が  $l = 0$  であるから、(440) のスピン項のみが寄与し、

$$\begin{aligned}\langle 3s_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} | \hat{H}_B | 3p_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \rangle &= \mu_B B, \\ \langle 3s_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} | \hat{H}_B | 3p_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \rangle &= -\mu_B B.\end{aligned}\quad (445)$$

が得られる。

以上の結果をまとめると、3つの多重項  $3p_{3/2}$ ,  $3p_{1/2}$ ,  $3s_{1/2}$  がそれぞれ図 21 のように分裂する。

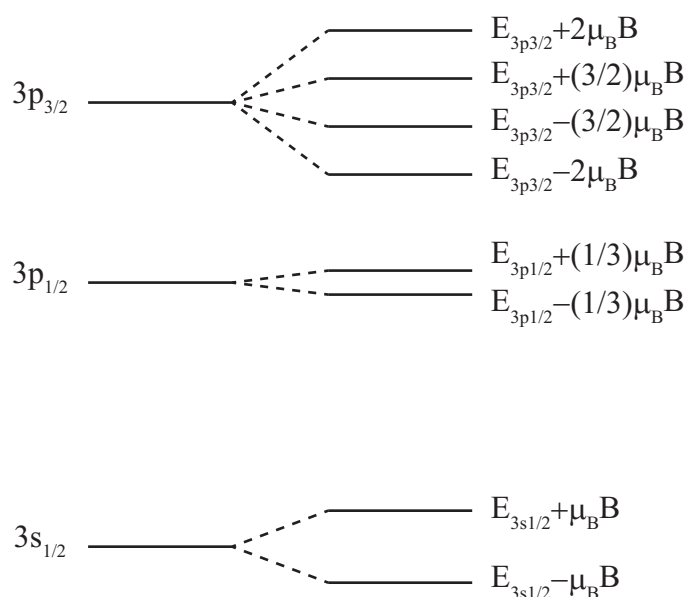


図 21: 磁場によるエネルギー準位の分裂

この分裂によって輝線にどのような変化が起こるかを考えてみる。まず、 $3p_{3/2} \rightarrow 3s_{1/2}$  の遷移によって発生する D1 線に対しては、始状態が 4 つに、終状態が 2 つに分裂するから、8 通りの遷移を考えることができる。しかし、それらのうち  $3p_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} \rightarrow 3s_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}$  および  $3p_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}} \rightarrow 3s_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}$  という遷移は後で述べる選択則によって禁止されている。残る 6 通りの遷移に対するエネルギーは次のように与えられる。

$$E_{3p_{3/2}} - E_{3s_{1/2}} + \Delta E, \quad \Delta E = \frac{5}{3}\mu_B B, \mu_B B, \frac{1}{3}\mu_B B, -\frac{1}{3}\mu_B B, -\mu_B B, -\frac{5}{3}\mu_B B.\quad (446)$$

従って D1 線は磁場によって等間隔な 6 本の輝線に分裂し、その間隔はエネルギー  $(2/3)\mu_B B$  に相当する。遷移  $3p_{1/2} \rightarrow 3s_{1/2}$  によって発生する D2 線に対しては始状態、終状態それぞれが二つに分裂するから、4 通りの遷移が考えられる。それらのエネルギーは次のように与えられる。

$$E_{3p_{1/2}} - E_{3s_{1/2}} + \Delta E, \quad \Delta E = \frac{4}{3}\mu_B B, \frac{2}{3}\mu_B B, -\frac{2}{3}\mu_B B, -\frac{4}{3}\mu_B B.\quad (447)$$



従って、D2線は磁場によって4本の輝線に分裂し、その間隔はエネルギー  $(2/3)\mu_B$ 、 $(4/3)\mu_B$ 、 $(2/3)\mu_B$  に相当する。

このように、スピンの効果を取り入れることで、磁場によって輝線が偶数本に分裂する現象（異常ゼーマン効果）を説明することができる。上で計算した輝線の間隔は実際に観測される輝線の分裂（図12）を再現している。

## 7.7 選択則

電子がエネルギー  $E_A$  のある状態  $|A\rangle$  からより低いエネルギー  $E_B$  の別の状態  $|B\rangle$  へ遷移してその差  $E_A - E_B$  のエネルギーを持つ光子を放出する現象は、任意の二つの状態に対して起こるわけではなく、二つの状態がある条件を満足する場合にのみ起こる。この条件のことを選択則と呼ぶ。

電磁波と原子中の電子の相互作用を量子力学的に調べることで、選択則を導こう。ここでは次の仮定を置く。

- 電子の速さは光速よりも十分に小さく、磁場の影響を無視することができる。
- 原子のサイズは電磁波の波長よりも十分小さく、電場を場所に依存しない定数であるとみなすことができる。（時間には依存する。）
- 電場は小さく、非線形効果（二次以上の項）を無視することができる。

このような仮定のもとで、電磁波は時間的に振動する電場

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \sin(\omega t) \quad (448)$$

として扱うことができる。ポテンシャルは

$$\phi(\mathbf{x}) = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{x} = -\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{x} \sin(\omega t) \quad (449)$$

と与えられる。従って電磁波と電子の相互作用を表わすハミルトニアンは

$$\hat{H}_I = -e\phi(\mathbf{x}) = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{x} = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{d} \quad (450)$$

である。ただし  $\mathbf{d} = q\mathbf{x}$  は電気双極子モーメント (electric dipole moment) である。

この相互作用による遷移 (electric dipole transition) 行列要素

$$\mathcal{M} = \langle B | \hat{H}_I | A \rangle \quad (451)$$

によって表され、これが0で無いときに限り状態  $|A\rangle$  から  $|B\rangle$  への遷移が起こる。単位時間当たりの遷移確率などがこの行列要素から計算できるが、ここでは単にこれが0かどうかのみに注目する。

まず分かることは、 $\hat{H}_I$  はスピン演算子を含まず、スピン状態に作用しないので、 $|A\rangle$  と  $|B\rangle$  が異なるスピン量子数  $s_z$  を持てば、 $\mathcal{M} = 0$  である。つまり、スピン

量子数の変化  $\Delta s_z$  が 0 でないような遷移は起こらない。(ナトリウム D 線の磁場による分裂を議論したときに  $3p_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} \rightarrow 3s_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}$  および  $3p_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}} \rightarrow 3s_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}$  が禁止されたのはこの理由による。)

$|A\rangle$  と  $|B\rangle$  のスピンは同じであると仮定し、軌道運動にのみ注目しよう。それぞれを軌道角運動量の固有状態

$$|A\rangle = |l_A, m_A\rangle, \quad |B\rangle = |l_B, m_B\rangle \quad (452)$$

とする。このとき  $\mathbf{n}$  を  $x$  方向の単位ベクトル、 $\boldsymbol{\epsilon}$  を電場の向きを表わす偏極ベクトルとすると、

$$\langle B | \hat{H}_I | A \rangle \propto \int Y_{l_B, m_B}^* (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{n}) Y_{l_A, m_A} d\Omega \quad (453)$$

が成り立つ。ただし、動径座標の積分は既に行なって残された角度方向のみに注目した。 $\int(\dots)d\Omega$  は球面上の積分である。

$$\int(\dots)d\Omega = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\pi d\phi \sin\theta(\dots). \quad (454)$$

内積  $\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{n}$  は  $\theta$  と  $\phi$  の関数であるが、球面調和関数を用いて次のように展開できる。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{n} &= \epsilon_z \cos\theta + \frac{1}{2}\epsilon_+ e^{-i\phi} \sin\theta + \frac{1}{2}\epsilon_- e^{i\phi} \sin\theta \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left[ \epsilon_3 Y_{10} - \frac{1}{\sqrt{2}}\epsilon_+ Y_{1-1} + \frac{1}{\sqrt{2}}\epsilon_- Y_{11} \right] \end{aligned} \quad (455)$$

ただし  $\epsilon_\pm = \epsilon_1 \pm i\epsilon_2$  である。従って、

$$\int Y_{l_B, m_B}^* Y_{1m} Y_{l_A, m_A} d\Omega \quad (456)$$

が  $m = 0, \pm 1$  全てに対して 0 であれば遷移が禁止される。これは、角運動量状態  $|1, m\rangle$  と  $|l_A, m_A\rangle$  を合成したときに  $|l_B, m_B\rangle$  が現れるか、というのと同じことであり、クレブシュ・ゴルダン係数が 0 であるかを定める条件 (414) および (415) によって判定できる。つまり、

$$|l_A - 1| \leq l_B \leq l_A + 1, \quad m_B = m_A + m, \quad (m = 0, \pm 1) \quad (457)$$

が成り立つ場合にのみ遷移が起こり得る。

まとめると、electric dipole transition に対する選択則は、量子数の始状態と終状態での差に対する条件として次のように表わされる。

$$\Delta l = 0, \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1, \quad \Delta s_z = 0. \quad (458)$$

## 8 散乱の古典論

### 8.1 中心力場による散乱

古典的な散乱問題の典型的な問題設定は、遠方から飛んできた粒子がポテンシャルによって向きを変えて再び遠方へ飛び去るというものであり、散乱角が衝突パラメータのどのような関数として与えられるかということが問題となる。ポテンシャルは通常遠方で 0 になると仮定される。それに加え、ここでは中心力ポテンシャルであることを仮定する。

衝突パラメータは、仮にポテンシャルが存在しなかったときに遠方から入射した粒子が中心からどれだけ離れたところを通過するかを表わす長さの次元を表わすパラメータであり、しばしば  $b$  によって表わされる。散乱角は始状態と終状態での粒子の向きの変化を表わす角度であり、粒子の向きが始状態と終状態で変化しなかったときに 0、完全に向きを反転させたときに  $\pi$  である。(図 22) ここで

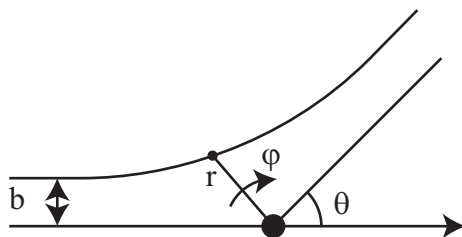


図 22: 散乱

は入射方向を  $\varphi = 0$  とする極座標  $(r, \varphi)$  を導入しよう。

この座標において、エネルギーと角運動量は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} E &= \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + U(r), \\ L &= mr^2\dot{\varphi}. \end{aligned} \quad (459)$$

中心力ポテンシャルの場合にはこれらは定数であり、衝突パラメータ  $b$  初速  $v_0$  を用いて次のように与えられる。

$$L = mbv_0, \quad E = \frac{m}{2}v_0^2. \quad (460)$$

第二式を用いて  $\dot{\varphi}$  を  $L$  で表わせば

$$\dot{\varphi} = \frac{L}{mr^2} \quad (461)$$

となる。これをエネルギーの式に代入することで、角変数  $\varphi$  を含まない微分方程式を得る。

$$E = \frac{m}{2} \left( \dot{r}^2 + \frac{L^2}{m^2 r^2} \right) + U(r) \quad (462)$$

これより

$$\dot{r} = \pm \sqrt{\frac{2}{m}(E - U(r)) - \frac{L^2}{m^2 r^2}} \quad (463)$$

が得られる。平方根の中身が 0 になるところで  $r$  方向の運動が反転する。その点を  $r = r_0$  とする。(もし (463) が 0 にならなければ、粒子は散乱されることなくポテンシャル中心に落ち込んでしまう。ここではそのようなことは起こらないと仮定する。) (461) と (463) の比をとれば、 $d\varphi/dr$  を  $r$  の関数として与えることができる。

$$\frac{d\varphi}{dr} = \frac{\dot{\varphi}}{\dot{r}} = \pm \frac{\frac{L}{mr^2}}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - U(r)) - \frac{L^2}{m^2 r^2}}} = \pm \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}}}. \quad (464)$$

最後の等号では (460) を用いた。これを  $r$  の最小値  $r_0$  から無限大まで積分することで、軌道の半分に対する中心角が得られる。従って、軌道全体の中心角  $\varphi_\infty$  はその倍であり、次のように与えられる。

$$\varphi_\infty = \pi \mp \theta = 2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{d\varphi}{dr} dr = 2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{b dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}}}. \quad (465)$$

複号は、斥力のときに上のものを、引力のときに下のものを選ぶ。(中心角が  $2\pi$  を超えないことを仮定した。)

## 8.2 散乱断面積

ポテンシャルが分かれば、一般公式 (465) を用いて散乱角  $\theta$  を衝突パラメータ  $b$  の関数として与えることができる。しかし、実際の散乱実験では、衝突パラメータを直接コントロールすることはできない。通常の散乱実験で行われることは、多数の粒子を含む標的 (金属の薄い膜など) に多数の粒子 (電子など) を入射させ、それぞれの向きにどれくらいの粒子が散乱されるかを測定することである。

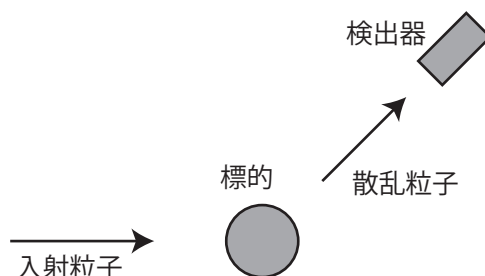


図 23: 散乱実験

以下の仮定を置く。

- 入射させる粒子は全て同じであり、標的を構成する粒子も一種類であるとする。
- 入射粒子は十分密度が小さく、互いに干渉しないとする。
- ターゲットをなす粒子も十分密度が小さく、入射粒子が二回以上衝突することはないと仮定する。
- 入射粒子はすべて同じ速度を持つと仮定する。

これらの仮定が成り立つ場合には、散乱は本質的に入射粒子一つと標的粒子一つの間で起こり、粒子が多数あることは単にそのような散乱実験を何度も行うことと等価である。個々の散乱と多数の粒子全体の散乱の関係をより定量的に定式化するために単純な例を考えることから始めよう。

入射粒子と標的がどちらも古典的な球である場合を考える。それぞれの半径を  $r_1$ 、 $r_2$  とし、互いに弾性衝突するものとする。標的球は質量が大きく、反跳を無視できるものとする。入射粒子と標的粒子の散乱が起こるのはそれらの中心間の距離が  $r_1 + r_2$  よりも小さくなる場合である。(つまり、衝突パラメータが  $b < r_1 + r_2$  を満足する場合。) 従って、入射粒子の半径を 0、標的粒子の半径を  $r_1 + r_2$  と見なしてもよい。(図 24) 入射ビームの方向から見ると、それぞれの標的粒子は半径

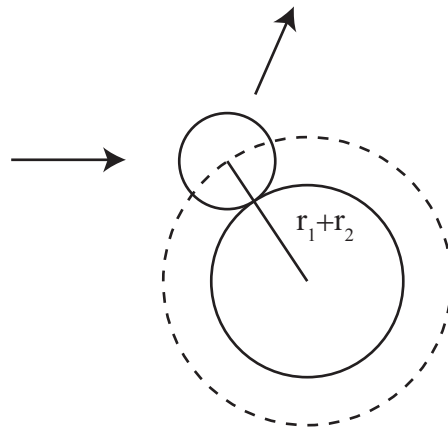


図 24: 剛体球の散乱

$r_1 + r_2$  の円である。この円の面積を  $\sigma$  とする。

$$\sigma = \pi(r_1 + r_2)^2 \quad (466)$$

入射ビーム方向から見た標的の単位面積あたりの標的粒子の個数を  $n$  とすると、単位面積あたりに標的粒子が占める面積は  $n\sigma$  である。(ここでは標的粒子の密度は十分小さく、 $n\sigma \ll 1$  が成り立つと仮定する。このとき標的粒子の重なりは無視することができる。) 従って、一つの入射粒子が散乱される確率は  $n\sigma$  である。この標的に多数の入射粒子を含むビームを当てよう。入射ビームの強度  $I$  は、単位

時間当たりのビームに含まれる粒子数によって表わされる。従って、散乱される粒子の数  $N$  は

$$N = In\sigma \quad (467)$$

によって表わされる。この式の右辺に含まれる 3 つの量のうち、 $I$  と  $n$  は我々が調節することができる量である。(  $n$  は標的の厚さを変えれば変化する。) それに対して  $\sigma$  は入射粒子と標的粒子の種類によって決まる量であり、散乱断面積あるいは単に断面積と呼ばれる。

ここまでは散乱されるかどうかだけに注目したが、実際の実験では散乱角ごとにどれだけの粒子が散乱されたかが測定される。散乱角  $\theta$  は衝突パラメータ  $b$  によって決定される。この関数形はポテンシャルが分かれば一般公式 (465) を用いて決めることができる。衝突パラメータ  $b$  と  $b + db$  に対する散乱角を  $\theta$  と  $\theta + d\theta$  としよう。粒子が  $\theta$  と  $\theta + d\theta$  の間に散乱されるためには、粒子の衝突パラメータが  $b$  と  $b + db$  の間にあればよい。標的粒子一個当たりのこの面積は

$$d\sigma = 2\pi b|db| \quad (468)$$

であり、この条件を満足して散乱される粒子の数は単位時間当たり

$$N(\theta)d\Omega = Ind\sigma \quad (469)$$

である。ただし  $d\Omega$  は  $\theta$  と  $\theta + d\theta$  で挟まれた微小立体角

$$d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta \quad (470)$$

であり、 $N(\theta)$  は散乱角  $\theta$  の方向に散乱される単位立体角あたりの粒子の数を表わす。単位立体角あたりの断面積

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| \quad (471)$$

は微分断面積と呼ばれる。

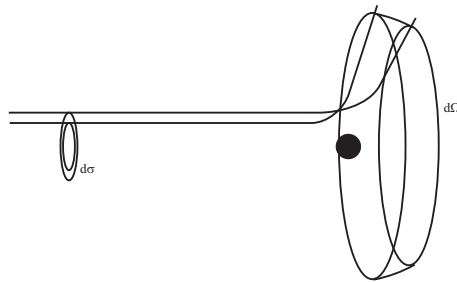


図 25: 微分断面積

剛体球の散乱に対して微分断面積を求めよう。図 24 より、衝突パラメータと散乱角の関係は、次のように与えられる。

$$b = R \cos \frac{\theta}{2} \quad (472)$$

ただし、 $R = r_1 + r_2$  である。

問題 8.1 一般公式 (465) を用いて剛体球による散乱角 (472) が得られることを確認せよ。

微分すると、

$$db = -\frac{R}{2} \sin \theta 2d\theta \quad (473)$$

であるから、微分断面積は次のように求まる。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{b}{\sin \theta} \frac{R}{2} \sin \frac{\theta}{2} = \frac{R^2 \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}}{2 \sin \theta} = \frac{R^2}{4}. \quad (474)$$

この場合、微分断面積が  $\theta$  によらないので、全ての方向に一様に散乱される。

微分断面積から全断面積を得るには、立体角について積分すればよい。

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{R^2}{4} \times 4\pi = \pi R^2. \quad (475)$$

これは以前に与えたものに一致する。

注意

どんなに弱くても粒子に力が働けば軌道が変化するので、散乱角は 0 からずれる。従って、ある程度以上離れたときにポテンシャルが完全に 0 にならない限り、古典的に計算した全断面積は発散する。

微分断面積については、 $\theta = 0$  に近いところ（前方散乱）に対して発散が現れる。 $\theta$  が 0 に近づく極限においては、散乱粒子と散乱されていない粒子の区別をつけることができないため、あまり物理的な意味はない。

### 8.3 ラザフォード散乱

クーロンポテンシャル

$$U(r) = \frac{qq' \frac{1}{4\pi\epsilon_0}}{r} \quad (476)$$

による散乱を古典的に調べてみよう。あとで量子論的に調べることを見越して、その際に便利なパラメータを用いることにする。入射粒子のエネルギーは波数  $k$  を用いて表そう。

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2. \quad (477)$$

$m$  は散乱粒子の質量である。標的粒子は十分重いと仮定する。長さの単位としては次のものを用いるのが便利である。

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m} \frac{4\pi\epsilon_0}{|qq'|} \quad (478)$$

$|qq'| = e^2$ 、 $m = m_e$  の場合にはこれはボーア半径である。

$$\frac{U(r)}{E} = \pm \frac{2}{a_0 k^2} \frac{1}{r} \quad (479)$$

である。複合は、斥力のとき上の符号を、引力のとき下の符号を取ることにする。これらを (465) に代入し、動径座標  $r$  から  $u = a_0/r$  に変数変換すれば

$$\frac{\varphi_\infty}{2} = \int_0^u \frac{du}{\sqrt{\left(\frac{a_0}{b}\right)^2 + \frac{1}{(b^2 k^2)^2} - \left(u \pm \frac{1}{b^2 k^2}\right)^2}} \quad (480)$$

が得られる。この積分は初等的であるから簡単に実行することができるが、図を書いて簡単に求めることもできる。(図 26) まず、直角をはさむ二辺の長さが  $AB = a_0/b$

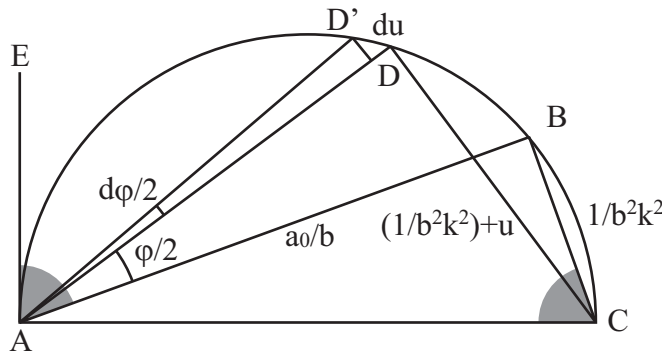


図 26:

と  $BC = 1/(b^2 k^2)$  である直角三角形  $ABC$  を描く。そして、斜辺を共有する直角三角形  $ADC$  を  $DC = 1/(b^2 k^2) + u$  になるように描く。(ここでは斥力であることを仮定する。)このとき、 $AD$  の長さは被積分関数の分母になっている。点  $D$  をわずかに  $D'$  まで動かすと、そのときの  $CD$  の長さの変化は  $du$  であり、角  $DAD'$  が丁度  $d\varphi/2$  になる。積分は、 $u = 0$  から、被積分関数の分母、すなわち  $AD$  の長さが 0 になる  $u$  の値まで行う。従ってその結果得られる  $\varphi_\infty/2$  は角  $EAB$  に一致する。これは角  $ACB$  とも等しい。

$$\frac{\varphi_\infty}{2} = \tan^{-1} \frac{a_0/b}{1/(b^2 k^2)} = \tan^{-1}(a_0 b k^2) \quad (481)$$

従って、散乱角は次のように決まる。

$$\theta = \pi - \varphi_\infty = 2 \tan^{-1} \frac{1}{a_0 b k^2} \quad (482)$$

ここでは斥力であることを仮定してこの式を導出したが、引力である場合にも同じ結果が得られる。



(482) を次のように書き換えておく。

$$\tan \frac{\theta}{2} = \frac{1}{a_0 b k^2} \quad (483)$$

両辺を微分すれば

$$\frac{d\theta}{2} \frac{1}{\cos^2 \frac{\theta}{2}} = -\frac{db}{a_0 b^2 k^2} \quad (484)$$

であるから、微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{b}{\sin \theta} \frac{a_0 b^2 k^2}{2 \cos^2 \frac{\theta}{2}} = \frac{1/a_0^2 k^4}{2 \sin \theta \cos^2 \frac{\theta}{2}} \left( \frac{1}{\tan \frac{\theta}{2}} \right)^3 = \frac{1}{4a_0^2 k^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (485)$$

これはラザフォードの散乱公式と呼ばれる。

## 9 ボルン展開

### 9.1 ボルンの公式

ポテンシャル  $U(\boldsymbol{x})$  による散乱を調べよう。(ここでは  $U(\boldsymbol{x})$  を中心力であると仮定しなくても良い。) シュレーディンガー方程式は

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\boldsymbol{x}) \right) \psi(\boldsymbol{x}) = E\psi(\boldsymbol{x}) \quad (486)$$

である。エネルギーを、波数  $k$  を用いて

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (487)$$

とおく。ポテンシャル  $U(\boldsymbol{x})$  が小さいという近似を行ってこのシュレーディンガー方程式を解くことを考えよう。ポテンシャルを完全に無視すると、

$$\psi = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \quad (488)$$

が解になる。ただし  $\boldsymbol{k}$  は入射波の波数ベクトルであり、 $k = |\boldsymbol{k}|$  である。ポテンシャルの効果を取り入れると、散乱によってこの波動関数が変化する。その変化分を  $g(\boldsymbol{x})$  という関数によって表そう。

$$\psi(\boldsymbol{x}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + g(\boldsymbol{x}) \quad (489)$$

$g(\boldsymbol{x})$  はポテンシャルと同程度の微小量である。

これを (486) に代入すると、

$$\left( -\nabla^2 + \frac{2m}{\hbar^2} U(\boldsymbol{x}) \right) (e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + g(\boldsymbol{x})) = k^2 (e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + g(\boldsymbol{x})) \quad (490)$$

となる。ポテンシャル  $U(\mathbf{x})$  と  $g(\mathbf{x})$  を 1 次の微小量であるとする。  $U = g = 0$  と置いたものは解であるから、微小量でない部分は自動的に成り立っている。2 次以上の微小量を見捨てて 1 次の微小量のみを残す近似（ボルン近似）を行うと、次の関係式を得る。

$$(\nabla^2 + k^2)g(\mathbf{x}) = \frac{2m}{\hbar^2}U(\mathbf{x})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}. \quad (491)$$

これを解いて関数  $g(\mathbf{x})$  を求めたい。この関数は散乱によって生じた、原点付近から広がる波を表しているから、大まかには  $\sim e^{ikr}/r$  のような形をしていると期待できる。ために、

$$(\nabla^2 + k^2)\left(\frac{1}{r}e^{ikr}\right) \quad (492)$$

を計算してみよう。  $r$  の関数に対して

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \quad (493)$$

を用いると、  $r > 0$  において

$$(\nabla^2 + k^2)\left(\frac{1}{r}e^{ikr}\right) = 0 \quad (494)$$

となることがわかる。問題は  $r = 0$  の部分である。この部分を極座標で直接扱うことはできないので、微小な半径  $r$  の球を考え、その内部で積分してみる。ガウスの公式を用いれば、直接  $r = 0$  の点を扱うことなくこの積分を計算できる。

$$\int dV(\nabla^2 + k^2)\left(\frac{1}{r}e^{ikr}\right) = \oint d\mathbf{S} \cdot \nabla\left(\frac{1}{r}e^{ikr}\right) = 4\pi r^2 \left(\frac{ik}{r}e^{ikr} - \frac{1}{r^2}e^{ikr}\right) \quad (495)$$

この積分は  $r \rightarrow 0$  の極限で  $-4\pi$  になる。このことは、(492) が原点において  $\delta$  関数的な発散を持ち、その係数が  $-4\pi$  であることを意味している。つまり、

$$G(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi r}e^{ikr} \quad (496)$$

を定義すると、

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}). \quad (497)$$

が成り立つ。何らかの微分演算子を作用させたときに  $\delta$  関数を与えるこのような関数はグリーン関数と呼ばれる。グリーン関数を用いれば、任意関数  $f(\mathbf{x})$  に対して

$$(\nabla^2 + k^2)g(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) \quad (498)$$

の解は

$$g(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x}' G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') f(\mathbf{x}') \quad (499)$$

と与えられる。実際、確認のために代入してみると、

$$(\nabla^2 + k^2) \int d\mathbf{x}' G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') f(\mathbf{x}') = \int d\mathbf{x}' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') f(\mathbf{x}') = f(\mathbf{x}) \quad (500)$$

が得られる。よって (491) の解は

$$g(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x}' G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{x}') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'} = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{x}' \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} U(\mathbf{x}') \quad (501)$$

この式はホイヘンスの原理を表している。

実際に散乱実験の時に測定を行うのは、散乱の中心から十分離れたところでの散乱波についてである。つまり、 $r \equiv |\mathbf{x}|$  は非常に大きいとみなしてよい。一方  $U(\mathbf{x}')$  は  $r' \equiv |\mathbf{x}'|$  が大きいところでは 0 であるから、 $\mathbf{x} \gg \mathbf{x}'$  であるとみなすことができる。このような仮定の下で次の近似式が成り立つ。

$$|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = r - r' \cos \theta. \quad (502)$$

ただし  $\theta$  はベクトル  $\mathbf{x}$  と  $\mathbf{x}'$  のなす角である。(図 27) これを (501) に代入する。

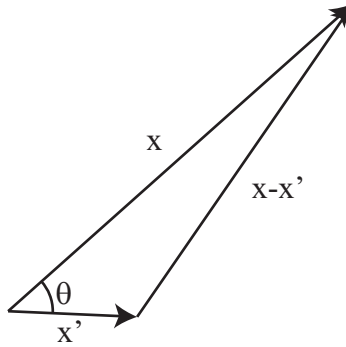


図 27:  $\mathbf{x}$  と  $\mathbf{x}'$

$$g(\mathbf{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d\mathbf{x}' e^{-ikr' \cos \theta} U(\mathbf{x}') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'} \quad (503)$$

$\mathbf{x}$  と同じ向きで長さ  $k$  のベクトルを  $\mathbf{k}'$  としよう。これは散乱波の波数ベクトルである。(503) は次のように書き換えることができる。

$$g(\mathbf{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d\mathbf{x}' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d\mathbf{x}' U(\mathbf{x}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}'} \quad (504)$$

つまり、 $U(\mathbf{x})$  のフーリエ変換

$$\tilde{U}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{x} U(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (505)$$

を用いて

$$g(\mathbf{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \tilde{U}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \quad (506)$$

と与えられる。(ボルンの公式)

ある微小立体角  $d\Omega$  の方向の  $r$  と  $r + dr$  にはさまれた部分に存在する散乱粒子の数は

$$|g(\mathbf{x})|^2 r^2 d\Omega dr \quad (507)$$

である。

入射ビームの規格化は、入射ビームの断面  $d\sigma$ 、長さ  $dr$  あたりの粒子数が  $d\sigma dr$  になるように規格化していたので、比を取ることで次の微分断面積が得られる。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r^2 |g(\mathbf{x})|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\tilde{U}(\mathbf{k}' - \mathbf{k})|^2 \quad (508)$$

ここで用いた近似はポテンシャルについて 1 次の項までを残した。より高次の項を取り入れるには、以下のようにすればよい。まず、波動関数を次のように展開する。

$$\psi(\mathbf{x}) = g_0(\mathbf{x}) + g_1(\mathbf{x}) + g_2(\mathbf{x}) + g_3(\mathbf{x}) + \cdots \quad (509)$$

$g_0(\mathbf{x})$  は入射波を表わしている。すなわち

$$g_0(\mathbf{x}) = e^{ik \cdot \mathbf{x}}. \quad (510)$$

$g_1(\mathbf{x})$  はポテンシャル  $U(\mathbf{x})$  について 1 次の項であり、先ほど求めた  $g(\mathbf{x})$  と同じものである。 $g_n(\mathbf{x})$  ( $n = 2, 3, 4, \dots$ ) はさらに近似を進めたときに現れる、ポテンシャルについて  $n$  次の項である。

(509) をシュレーディンガー方程式 (486) に代入して、 $U(\mathbf{x})$  に対する次数によって分解すると次の式を得る。

$$(\nabla^2 + k^2)g_{n+1}(\mathbf{x}) = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{x})g_n(\mathbf{x}) \quad (511)$$

$n = 0$  の場合には (491) に一致する。一般の  $n$  に対してはこの式を解くことによって  $g_n(\mathbf{x})$  から  $g_{n+1}(\mathbf{x})$  を得ることができる。解き方は (491) と同じであり、解はグリーン関数を用いて次のように与えられる。

$$g_{n+1}(\mathbf{x}) = \frac{2m}{\hbar^2} \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') U(\mathbf{x}') g_n(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'. \quad (512)$$

これを繰り返し用いれば、次の式を得る。

$$g_n(\mathbf{x}) = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^n \int d\mathbf{x}_n \cdots d\mathbf{x}_1 G(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) U(\mathbf{x}_n) G(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}) \cdots G(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) U(\mathbf{x}_1) e^{ik \cdot \mathbf{x}} \quad (513)$$

これは、 $n$  回ポテンシャルによって散乱された粒子の波動関数を表わすと解釈することができる。(図 28)

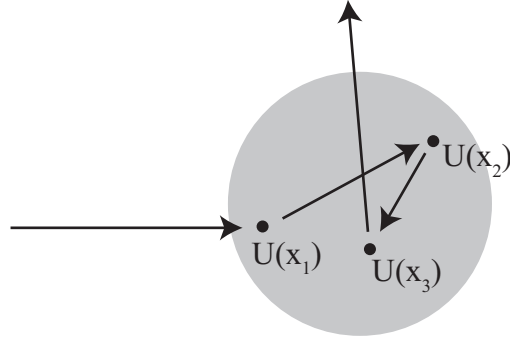


図 28: ボルン展開

## 9.2 ラザフォード散乱

ボルンの公式を用いて、クーロンポテンシャル

$$U(\mathbf{x}) = \frac{a}{r} \quad (514)$$

による散乱波を計算しよう。実はもう少し一般化した湯川ポテンシャル

$$U(\mathbf{x}) = \frac{a}{r} e^{-br} \quad (515)$$

を調べるほうが簡単なので、これによる散乱をまず計算し、その後で  $b \rightarrow 0$  とすることにする。ボルンの公式を用いて散乱波を得るには、ポテンシャル (515) のフーリエ変換を行う必要がある。つまり、次の積分を計算しなければならない。

$$\tilde{U}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{x} \frac{a}{r} e^{-br} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (516)$$

回転対称性より、この積分がベクトル  $\mathbf{k}$  の向きに依存しないことは明らかである。そこで、極座標を用い、 $\mathbf{k}$  が北極方向を向いたベクトルであるとしよう。すると、 $\phi$  積分と  $r$  積分は簡単に実行できる。

$$\begin{aligned} \tilde{U}(\mathbf{k}) &= \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{a}{r} e^{-br} e^{-ikr \cos \theta} \\ &= 2\pi a \int_0^\infty dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta r e^{-(b+ik \cos \theta)r} \\ &= 2\pi a \int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta}{(b+ik \cos \theta)^2} \end{aligned} \quad (517)$$

( $b = 0$  の時は  $r$  積分がうまく収束しない。余計なパラメータ  $b$  を導入したのは、この積分の収束を良くするためである。)  $t = \cos \theta$  という変数変換を行えば、最後の積分も実行できて次の結果を得る。

$$\tilde{U}(\mathbf{k}) = 2\pi a \int_{-1}^1 \frac{dt}{(b+ikt)^2} = \frac{4\pi a}{b^2 + k^2} \quad (518)$$

実は、これは (515) が次の式を満足することを用いれば簡単に導出できる。

$$(\nabla^2 - b^2)U(\mathbf{x}) = -4\pi a\delta(\mathbf{x}) \quad (519)$$

この関係は (497) に対して  $k = ib$  を代入すれば簡単に得られる。ここに、フーリエ逆変換の式

$$U(\mathbf{x}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tilde{U}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad \delta(\mathbf{x}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (520)$$

を代入すると、

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= (\nabla^2 - b^2) \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tilde{U}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tilde{U}(\mathbf{k}) (-k^2 - b^2) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \\ \text{右辺} &= -4\pi a \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \end{aligned} \quad (521)$$

となるので、両辺の比較より直ちに (518) が得られる。

こうして、 $\tilde{U}(\mathbf{k})$  が得られた。もともと欲しかったのはクーロン力の場合であるから、 $b = 0$  を代入して (506) および (508) を用いれば、次の散乱波および微分断面面積を得る。

$$\begin{aligned} g(\mathbf{x}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \frac{4\pi a}{|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|^2}, \\ \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \frac{4\pi a}{|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|^2} \right|^2 \end{aligned} \quad (522)$$

クーロン力の場合のパラメータ  $a$  の値

$$a = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \quad (523)$$

を代入し、さらにベクトル  $\mathbf{k}$  と  $\mathbf{k}'$  のなす角が散乱角  $\theta$  であることから従う式

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad (524)$$

を用いれば、次のように変形することができる。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{mq_1q_2}{8\pi\hbar^2k^2\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left( \frac{q_1q_2}{8\pi m v^2 \epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (525)$$

これは以前に求めたラザフォード散乱公式に一致する。古典的な散乱断面面積と、ボルン近似を用いて量子論的に求めた散乱断面面積が一致するのは、クーロンポテンシャルに特有な現象である。実はボルン近似を用いずに厳密にシュレーディンガー方程式を解いて微分断面面積を求めることもできる。その場合にもやはり同じ結果が得られる。

### 9.3 散乱行列

一般の向きの入射波を用いた散乱を考える。ただしエネルギーは固定し、対応する波数を  $k$  とする。入射波の波数ベクトル  $\mathbf{k}$  と、散乱波の測定位置  $\mathbf{x}$  を次のように置く。

$$\mathbf{k} = k\mathbf{n}, \quad \mathbf{x} = r\mathbf{n}'. \quad (526)$$

このとき、波動関数の漸近形は次のように表すことができる。

$$\psi(r\mathbf{n}') = e^{ikr\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'} + \frac{1}{r}f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')e^{ikr} \quad (527)$$

ボルン近似の場合の式 (508) と同様に、微分断面積は次のように与えられる。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega'} = |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2. \quad (528)$$

( $d\Omega'$  はベクトル  $\mathbf{n}'$  の向きに対する立体角である。) 平面波は一つの方向のみから入射する波であるが、平面波の重ね合わせとして表わされる任意の入射波を表すために、この式の両辺に関数  $F_{\text{in}}(\mathbf{n})$  をかけて入射波の方向  $\mathbf{n}$  について積分する。

$$\psi(r\mathbf{n}') = \int d\Omega F_{\text{in}}(\mathbf{n})e^{ikr\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'} + \frac{e^{ikr}}{r} \int d\Omega F_{\text{in}}(\mathbf{n})f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \quad (529)$$

$F_{\text{in}}$  はそれぞれの向きの波数ベクトルを持つ入射波の重みを与えており、入射波の波動関数の表示の一種であるとみなすことができる。これは  $r$  が十分大きいところでの漸近形を与えているが、そのような場合、一つ目の被積分関数は  $\mathbf{n} \neq \pm\mathbf{n}'$  において激しく振動し、積分に寄与しない。積分に寄与するのは  $\mathbf{n}'$  と  $\pm\mathbf{n}$  の成す角が

$$\theta < \frac{1}{\sqrt{kr}} \quad (530)$$

を満足する領域である。この微小な領域内では関数  $F_{\text{in}}(\mathbf{n})$  はほとんど変化しないと仮定しよう。(これは、波数ベクトルが垂直方向に少なくとも  $\sqrt{k/r}$  程度の不確定性を持つことを意味する。) 積分に寄与するのは  $\mathbf{n} = \pm\mathbf{n}'$  の二点の近傍のみであり、次のように変形することができる。

$$\begin{aligned} \int d\Omega F_{\text{in}}(\mathbf{n})e^{ikr\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'} &= F_{\text{in}}(\mathbf{n}') \int_{\mathbf{n}\sim\mathbf{n}'} d\Omega e^{ikr\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'} + F_{\text{in}}(-\mathbf{n}') \int_{\mathbf{n}\sim-\mathbf{n}'} d\Omega e^{ikr\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'} \\ &= F_{\text{in}}(\mathbf{n}') \int_{\mathbf{n}\sim\mathbf{n}'} d\Omega e^{ikr\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'} + F_{\text{in}}(-\mathbf{n}') \int_{\mathbf{n}\sim\mathbf{n}'} d\Omega e^{-ikr\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'} \end{aligned} \quad (531)$$

積分は  $\mathbf{n} \sim \mathbf{n}'$  は積分を  $\mathbf{n} = \mathbf{n}'$  の近傍でのみ行うことを意味する。二行目第2項は積分変数  $\mathbf{n}$  の符号を反転した。この積分は

$$2\pi \int_0^1 \sin\theta d\theta e^{ikr} \cos\theta = 2\pi \int^1 dz e^{ikrz} = \frac{2\pi}{ikr} e^{ikr} \quad (532)$$

(積分の下限の寄与は適当な減衰因子の導入で 0 にできる。) のように計算できる。この積分の結果、次の波動関数が得られる。

$$\psi(r\mathbf{n}') = \frac{2\pi}{ikr} e^{ikr} F_{\text{in}}(\mathbf{n}') - \frac{2\pi}{ikr} e^{-ikr} F_{\text{in}}(-\mathbf{n}') + \frac{e^{ikr}}{r} \int d\Omega F_{\text{in}}(\mathbf{n}) f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \quad (533)$$

はじめ二項が平面波からの寄与である。第 1 項は散乱されずに標的を通過した波であり、第 2 項は標的へ向けて進行中の入射波である。第 3 項が散乱されて進行方向が変化した波を表わしている。この波動関数を外向き部分  $\psi_{\text{out}}$  と内向き部分

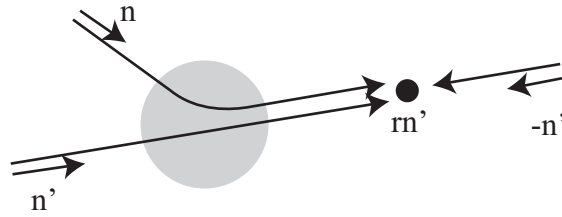


図 29:

$\psi_{\text{in}}$  に分ける。

$$\begin{aligned} \psi_{\text{in}}(r\mathbf{n}') &= -\frac{2\pi}{ikr} e^{-ikr} F_{\text{in}}(-\mathbf{n}'), \\ \psi_{\text{out}}(r\mathbf{n}') &= \frac{2\pi}{ikr} e^{ikr} \left[ F_{\text{in}}(\mathbf{n}') + 2ik \int \frac{d\Omega}{4\pi} F_{\text{in}}(\mathbf{n}) f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \right] \end{aligned} \quad (534)$$

$\psi_{\text{in}}(r\mathbf{n}')$  の形は、以前も述べたように  $F_{\text{in}}(\mathbf{n}')$  が波数ベクトルのそれぞれの向きの入射波の重みを表わす波動関数であることを示している。 $F_{\text{in}}(\mathbf{n}')$  に類似した関数を  $\psi_{\text{out}}$  に対しても次のように定義することができる。

$$F_{\text{out}}(\mathbf{n}') = F_{\text{in}}(\mathbf{n}') + 2ik \int \frac{d\Omega}{4\pi} F_{\text{in}}(\mathbf{n}) f(\mathbf{n}, \mathbf{n}'). \quad (535)$$

これは波数ベクトル  $k\mathbf{n}'$  を持ち遠ざかっていく波の重みを表わしており、終状態の波動関数と見なすことができる。 $F_{\text{in}}$  と  $F_{\text{out}}$  の関係を簡潔に表わすために、 $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$  を積分殻とする、 $\mathbf{n}$  の関数に作用する演算子  $\hat{f}$  を次のように定義する。

$$\hat{f} F_{\text{in}}(\mathbf{n}') = \int \frac{d\Omega}{4\pi} F_{\text{in}}(\mathbf{n}) f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \quad (536)$$

すると、(535) は次のように書き換えることができる。

$$F_{\text{out}}(\mathbf{n}') = \hat{S} F_{\text{in}}(\mathbf{n}') = (1 + 2ik\hat{f}) F_{\text{in}}(\mathbf{n}'). \quad (537)$$

演算子  $\hat{S} = 1 + 2ik\hat{f}$  は散乱演算子、または散乱行列と呼ばれる。確率の保存より、 $\hat{S}$  はユニタリーでなければならない。

$$\hat{S}^\dagger \hat{S} = 1. \quad (538)$$



これを  $\hat{f}$  で書き換えると、

$$\hat{f} - \hat{f}^\dagger = 2ik\hat{f}^\dagger\hat{f} \quad (539)$$

が得られる。積分殻を用いて書き換えると、

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') - f^*(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = 2ik \int \frac{d\Omega''}{4\pi} f^*(\mathbf{n}', \mathbf{n}'') f(\mathbf{n}, \mathbf{n}'') \quad (540)$$

となる。 $\mathbf{n} = \mathbf{n}'$  の場合には

$$\text{Im} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}) = \frac{k}{4\pi} \int d\Omega'' |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}'')|^2 \quad (541)$$

が得られる。(528) より、この右辺の積分は全断面積に他ならない。

$$\sigma = \int d\Omega'' |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}'')|^2 \quad (542)$$

よって次の関係式が得られる。

$$\text{Im} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}) = \frac{k}{4\pi} \sigma \quad (543)$$

これは前方散乱振幅  $f(\mathbf{n}, \mathbf{n})$  と全断面積を関係づける関係式で、光学定理と呼ばれる。

ユニタリー性以外にも  $\hat{S}$  は幾つかの関係式を満足する。

シュレーディンガー方程式が実であることから、ある波動関数  $\psi$  が解であれば、 $\psi^*$  もやはり解である。すなわち (533) の波動関数

$$\psi(r\mathbf{n}') = -\frac{2\pi}{ikr} e^{-ikr} F_{\text{in}}(-\mathbf{n}') + \frac{2\pi}{ikr} e^{ikr} \hat{S} F_{\text{in}}(\mathbf{n}') \quad (544)$$

が解であれば

$$\psi'(r\mathbf{n}') = \psi^*(r\mathbf{n}') = -\frac{2\pi}{ikr} e^{-ikr} (\hat{S} F_{\text{in}}(\mathbf{n}'))^* + \frac{2\pi}{ikr} e^{ikr} F_{\text{in}}^*(-\mathbf{n}') \quad (545)$$

もやはり解である。この波動関数に

$$F_{\text{in}}(\mathbf{n}') = \hat{S}^\dagger G^*(\mathbf{n}') \quad (546)$$

を代入してみると、

$$\psi'(r\mathbf{n}') = -\frac{2\pi}{ikr} e^{-ikr} G(\mathbf{n}') + \frac{2\pi}{ikr} e^{ikr} \hat{P} \hat{S}^T G(\mathbf{n}') \quad (547)$$

を得る。ただし  $\hat{P}$  は

$$\hat{P} G(\mathbf{n}') = G(-\mathbf{n}') \quad (548)$$

を満足する鏡映演算子である。適当に  $G(\mathbf{n}')$  を選んで入射波の波動関数が (533) と一致するように選べば全体が (533) と一致するはずである。比較してみると、

$$G(\mathbf{n}') = F_{\text{in}}(-\mathbf{n}') = \hat{P}F_{\text{in}}(\mathbf{n}') \quad (549)$$

とすればよいことがわかる。このとき、もう一方の項の比較より

$$\hat{P}\hat{S}^T\hat{P} = \hat{S} \quad (550)$$

が得られる。 $\hat{S} = 1 + 2ik\hat{f}$  を代入すると、 $\hat{f}$  に対しても同様な式が成り立つことが分かる。

$$\hat{P}\hat{f}^T\hat{P} = \hat{f}. \quad (551)$$

積分核に対してこれらは

$$S(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = S(-\mathbf{n}', -\mathbf{n}), \quad f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = f(-\mathbf{n}', -\mathbf{n}) \quad (552)$$

であることを意味している。この関係は相反定理と呼ばれる。(一次元ポテンシャル問題における  $S_{12} = S_{21}$  に対応する。) 中心力場に対しては、 $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$  は  $\mathbf{n}$  と  $\mathbf{n}'$  のなす角  $\theta$  のみに依存するから、相反定理は恒等式であり、新たな条件を与えない。



図 30: これら二つの散乱の振幅は同じである。(相反定理)

ボルン近似におけるラザフォード散乱に対して散乱行列を計算してみよう。(489) と (527) を比較すれば、

$$g(r\mathbf{n}') = \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \quad (553)$$

の関係が得られる。(522) に与えられた  $g(\mathbf{x})$  を用いれば

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{4\pi a}{k^2|\mathbf{n}' - \mathbf{n}|^2}. \quad (554)$$

が得られる。相反定理は明らかに満たしているが、光学定理は満たしていないように見える。(従って  $\hat{S}$  のユニタリー性も満足しない。) これは、ボルン近似を用いたためである。近似をせずに厳密な散乱行列を求めれば、 $\hat{S}$  は常にユニタリーである。

## 10 球面波と平面波

### 10.1 球面波

散乱を量子論的に扱う場合、入射粒子と散乱粒子はそれぞれ平面波および球面波として表される。そこでこれらの性質を調べておこう。

散乱が実際に起こる場所 ( $r = 0$  付近) から十分はなれたところでは、ポテンシャルは 0 であるとみなすことができる。そこでも一般の中心力ポテンシャルの場合と同様に、波動関数を

$$\psi_{klm}(r, \theta, \phi) = R_{kl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (555)$$

のように動径部分と角度部分に分けて考えることができる。 $U(r) = 0$  であるから、エネルギー固有値は常に正である。波数  $k$  を用いて次のように表す。

$$\frac{2m}{\hbar^2} E = k^2. \quad (556)$$

動径方向のシュレーディンガー方程式は

$$\left[ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{kl}(r) = k^2 R_{kl}(r) \quad (557)$$

となる。 $z = kr$  を導入して無次元化しておく、 $k$  依存性を吸収することができるので、波動関数は (座標  $z$  のほかに)  $l$  のみに依存する関数となる。 $R_{kl}(r) \propto R_l(z)$  と置くと、 $R_l(z)$  が満足する方程式は

$$\left[ \frac{1}{z^2} \frac{d}{dz} z^2 \frac{d}{dz} - \frac{l(l+1)}{z^2} + 1 \right] R_l(z) = 0. \quad (558)$$

である。この微分方程式を解くには、次のように置くのがよい。

$$R_l(z) = z^l \chi_l(z). \quad (559)$$

$\chi_l(z)$  が満足すべき微分方程式は

$$\chi_l''(z) + \frac{2(l+1)}{z} \chi_l'(z) + \chi_l(z) = 0. \quad (560)$$

である。まず、 $l = 0$  の場合を考えよう。このときシュレーディンガー方程式は、

$$0 = z\chi_0''(z) + 2\chi_0'(z) + z\chi_0(z) = (z\chi_0(z))'' + z\chi_0(z) \quad (561)$$

と書き換えることができる。二つの独立な解は

$$\chi_0(z) \propto \frac{e^{\pm iz}}{z}. \quad (562)$$

である。

$l \geq 1$  の場合の解は  $\chi_0$  から帰納的に構成することができる。まず、 $\chi_l$  に対する微分方程式 (560) を  $z$  で微分した上で  $z$  で割ると、次の微分方程式を得る。

$$\left(\frac{1}{z}\chi_l'(z)\right)'' + \frac{2(l+2)}{z}\left(\frac{1}{z}\chi_l'(z)\right)' + \left(\frac{1}{z}\chi_l'(z)\right) = 0. \quad (563)$$

これを (560) と比較してみると、 $(1/z)\chi_l'(z)$  が  $\chi_{l+1}(z)$  と同じ微分方程式を満足することがわかる。よって次のように置くことができる。

$$\chi_{l+1}(z) \propto \frac{1}{z}\chi_l(z). \quad (564)$$

この関係式を繰り返し用いることで、任意の  $l$  に対して  $\chi_l$  を得ることができる。

$$R_l(z) = z^l \chi_l(z) \propto z^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^l \chi_0 \propto z^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^l \frac{e^{\pm iz}}{z}. \quad (565)$$

ここまではあえて規格化を定めずにおいたが、関数  $R_l^\pm(z)$  を規格化まで含めて次のように定義することにしよう。

$$R_l^\pm(z) = z^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^l \frac{e^{\pm iz}}{z}. \quad (566)$$

中心力ポテンシャル上の球面波の漸近形としてこの関数を用いる場合に特に重要なのは  $z$  が大きいところでの振る舞いである。(566)において、微分が因子  $1/z$  に作用するとさらに因子  $1/z$  が現れ、そのような項は  $z$  が大きいところでは無視できる。従って、 $z$  の大きいところでの漸近形は全ての微分が  $e^{\pm iz}$  に作用したものととして次のように得ることができる。

$$R_l^\pm(z) \stackrel{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{z} \left(\frac{d}{dz}\right)^l e^{\pm iz} = \frac{(\pm i)^l}{z} e^{\pm iz}. \quad (567)$$

$R_l^+(z)$  は外向きの波、 $R_l^-(z)$  は内向きの波を表している。振幅が  $1/z$  に比例するのは  $z$  を半径とする球の表面積が  $z^2$  に比例し、粒子の流れの密度が  $1/z^2$  に比例することとつじつまが合っている。 $R_l^\pm(z)$  は  $U(r) = 0$  であることを仮定して求めた解であるから、 $U(r) \neq 0$  であるような  $z$  の小さいところの解として採用することはできない。しかし、 $U(r) \neq 0$  である影響が波動関数にどのように現れるのかを知る上で  $z$  の全領域で  $U(r) = 0$  の場合の波動関数を知っておくことは重要である。

波動関数  $R_l^\pm(z)$  において、 $z = 0$  近傍では発散する  $1/z$  の因子に較べて  $e^{\pm iz}$  という因子は無視することができる。従って、 $z = 0$  近傍での振舞いは次のように与えられる。

$$R_l^\pm(z) \stackrel{z \rightarrow 0}{\sim} z^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^l \frac{1}{z} = (-1)^l (2l-1)!! \frac{1}{z^{l+1}}. \quad (568)$$

つまり、 $R_l^\pm(z)$  はどちらも  $z = 0$  において発散し、展開の始めの項は一致する。 $z = 0$  において発散しない波動関数を得るには、発散部分が相殺するように  $R_l^\pm(z)$  の差を取ればよい。

$$\frac{1}{2i} (R_l^+(z) - R_l^-(z)) = z^l \left( \frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\sin z}{z}. \quad (569)$$

右辺に現れる関数  $(1/z) \sin z$  は原点において滑らかな偶関数であり、 $(1/z)d/dz$  を何度作用させても発散項は現れない。 $(1/z)d/dz$  を一回作用させるごとに  $z$  の次数は 2 下がるから、 $l$  回の作用の後に残る項で  $z$  のべきが最も低いのは、微分を作用させる前の  $(1/z) \sin z$  の中の  $2l$  次項である。

$$\frac{1}{2i} (R_l^+(z) - R_l^-(z)) \stackrel{z \rightarrow 0}{\sim} z^l \left( \frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{(-1)^l}{(2l+1)!} z^{2l} = \frac{(-1)^l}{(2l+1)!!} z^l. \quad (570)$$

原点近傍での振る舞いを議論する場合には、原点で収束する (570) と、それと直交する関数  $R_l^+(z) + R_l^-(z)$  を用いるのが便利である。よく用いられるのは、次のように定義された二つの球面ベッセル関数である。

- 第 1 種球面ベッセル関数

$$j_l(z) = \frac{(-1)^l}{2i} (R_l^+(z) - R_l^-(z)) = (-1)^l z^l \left( \frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\sin z}{z}. \quad (571)$$

- 第 2 種球面ベッセル関数

$$y_l(z) = \frac{(-1)^{l+1}}{2} (R_l^+(z) + R_l^-(z)) = (-1)^{l+1} z^l \left( \frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\cos z}{z}. \quad (572)$$

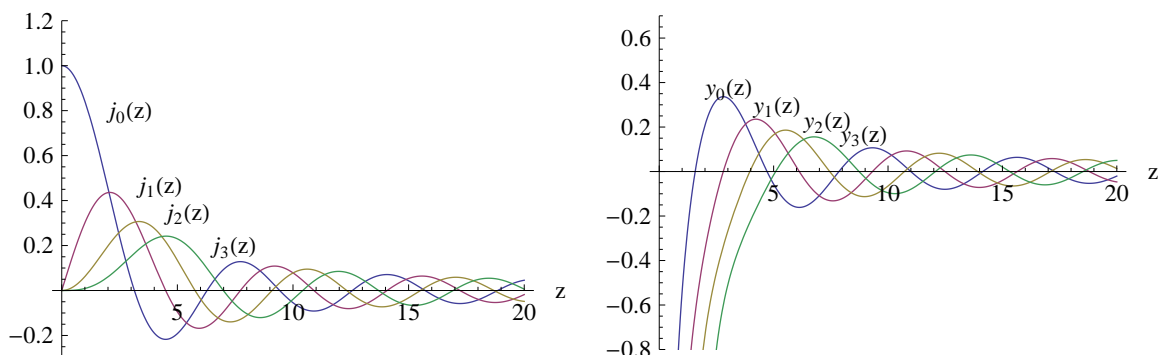


図 31: 球面ベッセル関数  $j_l(z)$  と  $y_l(z)$

それぞれの関数の  $z = 0, z = \infty$  における漸近形は以下のようになる。

$$j_l(z) \stackrel{z \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{(2l+1)!!} z^l, \quad j_l(z) \stackrel{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{z} \sin\left(z - \frac{l\pi}{2}\right). \quad (573)$$

$$y_l(z) \stackrel{z \rightarrow 0}{\sim} -(2l-1)!! \frac{1}{z^{l+1}}, \quad y_l(z) \stackrel{z \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{z} \cos\left(z - \frac{l\pi}{2}\right). \quad (574)$$

散乱の問題を解く際には、遠方での漸近形が  $e^{\pm iz}$  の因子を含む波動関数が必要になる。しばしば次のように定義された球面ハンケル関数がいられる。

- 第1種球面ハンケル関数

$$h_l^{(1)}(z) = j_l(z) + iy_l(z) = -i(-1)^l z^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^l \frac{e^{iz}}{z}. \quad (575)$$

- 第2種球面ハンケル関数

$$h_l^{(2)}(z) = j_l(z) - iy_l(z) = i(-1)^l z^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^l \frac{e^{-iz}}{z}. \quad (576)$$

これら二つの球面ハンケル関数は第3種球面ベッセル関数とも呼ばれる。これらの関数についても、 $z = 0$  および  $z = \infty$  での漸近形を与えておこう。

$$h_l^{(1)}(z) \stackrel{z \rightarrow 0}{\sim} -(2l-1)!! \frac{1}{z^{l+1}}, \quad h_l^{(1)}(z) \stackrel{z \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{i}{z} \exp\left(iz - \frac{l\pi i}{2}\right). \quad (577)$$

$$h_l^{(2)}(z) \stackrel{z \rightarrow 0}{\sim} -(2l-1)!! \frac{1}{z^{l+1}}, \quad h_l^{(2)}(z) \stackrel{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{i}{z} \exp\left(-iz + \frac{l\pi i}{2}\right). \quad (578)$$

これらの球面ベッセル関数はベッセル関数と次の関係にある。

$$\begin{aligned} j_l(z) &= \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{l+\frac{1}{2}}(z), & y_l(z) &= \sqrt{\frac{\pi}{2z}} Y_{l+\frac{1}{2}}(z), \\ h_l^{(1)}(z) &= \sqrt{\frac{\pi}{2z}} H_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}(z), & h_l^{(2)}(z) &= \sqrt{\frac{\pi}{2z}} H_{l+\frac{1}{2}}^{(2)}(z). \end{aligned} \quad (579)$$

$U(r) = 0$  である場合には、原点で発散しない球面ベッセル関数  $j_l(z)$  によって、全領域における波動関数が与えられる。これは遠心力ポテンシャル  $U_{\text{eff}} \propto r^{-2}$  による、粒子の反射を表す波動関数とみなすことができる。実際、 $l$  が非常に大きく、半古典近似が良い場合には有効ポテンシャル上の粒子の古典回帰点  $z \sim l$  の内側の領域で波動関数はほとんど 0 になることがわかる。

無次元化する前の波動関数は次のように与えられる。

$$R_{kl}(r) = 2kj_l(kr) \stackrel{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2}{r} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) = \frac{i}{r} e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} - \frac{i}{r} e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})}. \quad (580)$$

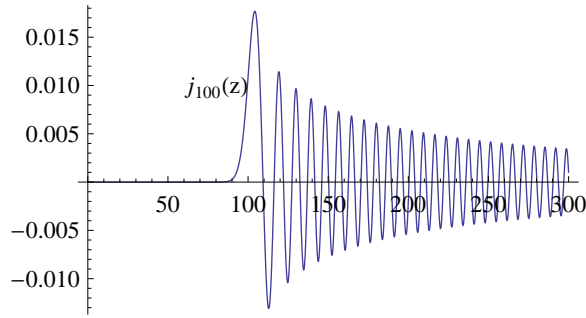


図 32: 球面ベッセル関数  $j_{100}(z)$

係数は、入射波と反射波それぞれに対する動径方向の密度  $r^2|R_{kl}(r)|^2$  が漸近領域において 1 になるように決めた。

この漸近形は WKB 近似を用いることでも得ることができる。遠心力ポテンシャル

$$U_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (581)$$

に対してエネルギー

$$aE = \frac{\hbar^2}{2m} k_{\infty}^2 \quad (582)$$

の粒子を入射させたとき、ある点  $r$  における波数  $k$  は

$$k = \pm \sqrt{k_{\infty}^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}} \quad (583)$$

によって与えられる。古典回帰点は

$$r_* = \frac{l + \frac{1}{2}}{k_{\infty}} \quad (584)$$

である。(  $l$  は大きいと仮定して近似  $\sqrt{l(l+1)} \sim l + \frac{1}{2}$  を用いた。) 従って、WKB 近似を用いて波動関数の位相差は次のように計算できる。

$$\Delta\phi(r_1, r_2) = \int_{r_1}^{r_2} k dr = k_{\infty} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{r^2 - r_*^2} \frac{dr}{r} \quad (585)$$

この積分は

$$r^2 = t^2 + r_*^2 \quad (586)$$

と変数変換することで簡単に積分できる。

$$\Delta\phi(r_1, r_2) = k_{\infty} \int_{t_1}^{t_2} \frac{t^2 dt}{t^2 + r_*^2} = \left[ kt - \left( l + \frac{1}{2} \right) \tan^{-1} \frac{t}{r_*} \right]_{t_1}^{t_2} \quad (587)$$

積分範囲の下限を  $r_1 = r_*$ 、すなわち  $t_1 = 0$  にとり、上限を  $r$  が非常に大きいところにとろう。ここでは  $t_2 \sim r_2$  であることを用いると、

$$\Delta\phi(r_*, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} kr - \frac{(l + \frac{1}{2})\pi}{2} \quad (588)$$

従って、古典回帰点  $r = r_*$  での位相のずれ  $\pi/4$  を考慮すると、波動関数は

$$\psi(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{(l + 1/2)\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \quad (589)$$

となり、(580) を再現している。

中心付近で 0 でない中心力ポテンシャルの存在は、位相のずれとして波動関数の漸近形に影響する。角運動量  $l$  の球面波に対する位相のずれを  $\delta_l$  とすれば、波動関数の漸近形は次のように与えられる。

$$R_{kl}(r) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{2}{r} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (590)$$

## 10.2 球形井戸型ポテンシャル

散乱の話からは少し離れるが、球面ベッセル関数を用いて解くことができる問題として、次のポテンシャル中の粒子の定常状態のエネルギーを求める問題を考えよう。

$$U(r) = 0 \quad (r \leq a), \quad U(r) = +\infty \quad (r \geq a). \quad (591)$$

ポテンシャル井戸内部でのシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E\psi \quad (592)$$

である。極座標を用いよう。波動関数を次のようにおく。

$$\psi(\mathbf{x}) = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (593)$$

エネルギーと  $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$  の関係にある波数  $z = kr$  を導入すると、動径部分の波動関数は第 1 種ベッセル関数を用いて与えられる。つまり、

$$R_{kl}(r) \propto j_l(kr). \quad (594)$$

である。  $r = a$  における境界条件  $\psi(\mathbf{x})_{r=a} = 0$  が課されるから

$$j_l(ka) = 0 \quad (595)$$

でなければならない。この条件によって、 $k$  にはとびとびの値のみが許される。



表 1: 第 1 種球面ベッセル関数  $j_l(z)$  の  $n$  番目の 0 点

$z_{l,n}$	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$	$l = 6$
$n = 1$	3.14159	4.49341	5.76346	6.98793	8.18256	9.35581	10.5128
$n = 2$	6.28319	7.72525	9.09501	10.4171	11.7049	12.9665	14.2074
$n = 3$	9.42478	10.9041	12.3229	13.6980	15.0397	16.3547	17.6480
$n = 4$	12.5664	14.0662	15.5146	16.9236	18.3013	19.6532	20.9835
$n = 5$	15.7080	17.2208	18.6890	20.1218	21.5254	22.9046	24.2628

$l = 0$  のときには  $j_0(z) = (1/z) \sin z$  であるから、 $ka = n\pi$  を得る。 $(n = 1, 2, 3, \dots)$  一般の  $l$  に対しては、初等的な形に書くことはできないが、数値的には簡単に求めることができる。 $j_l(z)$  の  $n$  番目の 0 点の値を  $z_{l,n}$  とおく。 $l$  と  $n$  が小さい場合の数値を表 1 に与える。<sup>2</sup> この値を用いれば、 $j_l(ka) = 0$  の下から  $n$  番目の解は  $k = z_{l,n}/a$  であり、エネルギーは

$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} z_{l,n}^2 \quad (596)$$

である。エネルギーを計算するときに便利なように  $z_{l,n}^2/2$  の表も与えておく。

表 2: 球形井戸型ポテンシャルの規格化されたエネルギー固有値  $(ma^2/\hbar^2)E$  の値

$z_{l,n}^2/2$	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$	$l = 6$
$n = 1$	4.93480	10.0954	16.6087	24.4156	33.4772	43.7656	55.2599
$n = 2$	19.7392	29.8398	41.3596	54.2582	68.5024	84.0655	100.925
$n = 3$	44.4132	59.4499	75.9274	93.8179	113.096	133.738	155.726
$n = 4$	78.9568	98.9289	120.351	143.204	167.468	193.123	220.153
$n = 5$	123.370	148.277	174.640	202.444	231.672	262.309	294.341

次に、深さが有限の場合を考えてみよう。ポテンシャルを次のようにおく。

$$U(r) = 0 \quad (r \leq a), \quad U(r) = U_0 \quad (r \geq a). \quad (597)$$

固有状態のエネルギーを  $0 < E < U_0$  とする。 $k$  と  $b$  を

$$\frac{\hbar^2}{2m} k^2 = E, \quad \frac{\hbar^2}{2m} b^2 = U_0 - E \quad (598)$$

<sup>2</sup>Mathematica では `BesselJZero[l + 1/2, n]` によって計算することができる。

によって定義する。これらのパラメータは次の関係式を満足する。

$$k^2 + b^2 = \frac{2m}{\hbar^2} U_0^2. \quad (599)$$

内側での波動関数は、原点で発散しない球面ベッセル関数を用いて

$$R_{kl} \propto j_l(kr) \quad (600)$$

と与えられる。外側では、 $k$  の代わりに  $ib$  を代入すればよい。束縛状態であれば、波動関数は遠方で 0 にならなければならない。その条件を満足するのは次の関数である。

$$R_{kl} \propto -i^l h_l^{(1)}(ibr) \quad (601)$$

1 次元の井戸型ポテンシャルと同様に、境界  $r = a$  において波動関数とその微分が連続になるように係数を決めなければならない。

ここでは特に球面ベッセル関数の形が簡単な  $l = 0$  の場合について考えよう。内側と外側の波動関数は次のように与えられる。

$$\psi_{\text{内}} \propto \frac{1}{r} \sin(kr), \quad \psi_{\text{外}} \propto \frac{1}{r} \exp(-br). \quad (602)$$

これらが境界で滑らかにつながるためには、 $\psi'/\psi$  が境界において一致しなければならない。従って、関係式

$$k \cot(ka) - \frac{1}{a} = -b - \frac{1}{a} \quad (603)$$

を得る。つまり、次の式が成り立つ。

$$b = -k \cot(kr) \quad (604)$$

あとは、 $k$ - $b$  平面に (599) と (604) のグラフを描き、それらの交点を求めることで束縛状態に対するパラメータ  $k$  が得られる。例として、 $(ma^2/\hbar^2)U_0 = 50$  の場合の全ての束縛状態に対するエネルギーを数値的に求めた結果を表 3 に与えておく。

### 10.3 平面波の展開

エネルギーが

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (605)$$

によって与えられる平面波

$$\psi = e^{ikz} \quad (606)$$

について考える。これは同じエネルギーをもつ球面波によって展開することができる。

表 3: 球形井戸型ポテンシャルの束縛状態の規格化されたエネルギー固有値  $(ma^2/\hbar^2)E$  の値。 ( $(ma^2/\hbar^2)U_0 = 50$  の場合)

	$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$	$l=4$	$l=5$	$l=6$
$n=1$	4.06793	8.30281	13.6231	19.9648	27.2763	35.5084	44.6047
$n=2$	16.1267	24.2128	33.2637	43.0912	-	-	-
$n=3$	35.4752	46.3112	-	-	-	-	-

$z$  軸方向を極座標の北極にとれば、 $\psi$  は  $\phi$  によらないから、 $m=0$  の球面波を用いて展開できるはずである。すなわち

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \psi_{kl0} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l R_{kl}(r) Y_{l0}(\theta) \quad (607)$$

と展開することができるはずである。係数  $a_l$  を決定するには、この式の両辺を  $r$  と  $\cos\theta$  の関数であるとみなし、それらのべきごとに係数を比較するのがよい。左辺は  $kz = kr \cos\theta$  であるから、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} r^n \cos^n \theta \quad (608)$$

と展開することができる。そこで、右辺に対して  $r^n \cos^n \theta$  の係数を決定しよう。右辺は  $R_{kl}(r) = 2kj_l(kr)$  を通して  $r$  に依存しているが、球面ベッセル関数  $j_l$  の  $r=0$  付近での振る舞い (573) より、

$$R_{kl}(r) = \frac{2k^{l+1}}{(2l+1)!!} r^l + \mathcal{O}(r^{l+1}) \quad (609)$$

であることがわかる。従って  $l \leq n$  の項だけが  $r^n$  項を含む。一方  $Y_{l0}(\theta)$  はルジャンドル多項式に対するロドリゲスの公式を用いて

$$Y_{l0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{(2l-1)!!}{l!} \cos^l \theta + \dots \quad (610)$$

と展開できる。... は  $\cos\theta$  に対しての次数が  $l$  未満の項である。これより  $\cos^n \theta$  を含むのは  $l \geq n$  の項であることがわかる。従って、 $r^n \cos^n \theta$  を含むのは  $l=n$  の項だけであり、(607) の右辺は

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{\sqrt{\pi(2n+1)}} \frac{k^{n+1}}{n!} r^n \cos^n \theta \quad (611)$$

となるはずである。(608) と (611) を次数ごとに比較することで、係数が次のように決定される。

$$a_n = \frac{i^n}{k} \sqrt{\pi(2n+1)} \quad (612)$$

つまり、次の式が成り立つ。

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{i^l}{k} \sqrt{\pi(2l+1)} R_{kl}(r) Y_{l0}(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2k} i^l R_{kl}(r) P_l(\cos\theta) \quad (613)$$

$n$  が大きい領域において、係数  $a_l$  は幾何学的に解釈することができる。球面波  $\psi_{klm}$  は、動径方向を内向きおよび外向きに運動する粒子それぞれについて、動径方向の密度が 1 になるように規格化されている。つまり、動径座標が  $r$  と  $r + dr$  にいる粒子の数は  $dr$  である。粒子の速さを  $v$  とすれば、球面を単位時間あたりに外から内、あるいは内から外へ通過する粒子の数がそれぞれ  $v$  であるといってもよい。従って、展開 (607) は、単位時間あたりに球面を通過する角運動量  $l = n$  の粒子数が  $v|a_n|^2$  であることを意味している。

平面波に対してそのような粒子数を古典的に計算してみよう。衝突パラメータが  $b$ 、速さが  $v$  である粒子の角運動量は  $L = mbv$  である。従って角運動量子数が  $l = n$  の粒子、すなわち角運動量が  $n\hbar$  と  $(n+1)\hbar$  の間の粒子の数は衝突パラメータが

$$\frac{\hbar}{mv} n \leq b \leq \frac{\hbar}{mv} (n+1) \quad (614)$$

の範囲にある粒子の数に一致する。この領域の面積は

$$2\pi \left( \frac{\hbar}{mv} \right)^2 n = \frac{2\pi n}{p} \quad (615)$$

であり、この領域を単位時間あたりに通過する粒子の数はこれに  $v$  を掛けたものである。運動の間に角運動量は変化しないから、粒子の軌道と交差する適当な球面を定めたとすると、その球面を通過する角運動量  $l$  の粒子も同じ数である。これが  $v|a_n|^2$  に等しいことから

$$|a_n|^2 = \frac{2\pi n}{k^2} \quad (616)$$

であるはずである。これは  $n$  が非常に大きい古典的領域において (612) に一致する。

## 11 部分波展開

### 11.1 部分波

散乱波は球面状に広がっていくので、球面波を用いて展開するのが自然である。波動関数

$$\psi(\mathbf{x}) = e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \quad (617)$$

を球面波によって展開してみよう。散乱波については

$$f(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta) \quad (618)$$

と展開するのが便利である。一方、入射波は、平面波の展開公式 (613) を用いて

$$e^{ikz} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \theta) \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (619)$$

と展開される。合わせると、 $r$  が大きいところで

$$\psi \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2l+1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} \left[ \frac{i^l}{k} \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) + f_l e^{ikr} \right] P_l(\cos \theta) \quad (620)$$

となる。それぞれの  $l$  に対する項は部分波と呼ばれ、 $f_l$  は部分散乱振幅と呼ばれる。部分波展開とは、波動関数を部分波に展開し、角運動量ごとの散乱の様子を調べる手法である。

展開 (620) のある一つの部分波に注目しよう。[...] 中の関数は

$$\begin{aligned} [\dots] &= \frac{i^l}{k} \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) + f_l e^{ikr} \\ &= \frac{i^l}{2ik} \left( e^{ikr - \frac{l\pi}{2}i} - e^{-ikr + \frac{l\pi}{2}i} \right) + f_l e^{ikr} \\ &= \frac{1 + 2ikf_l}{2ik} e^{ikr} - \frac{1}{2ik} (-1)^l e^{-ikr} \end{aligned} \quad (621)$$

と書き換えることができる。ここで考えている中心力場においては角運動量が保存されるから、それぞれの角運動量について独立に流入と流出は一致しなければならない。従って

$$|1 + 2ikf_l| = 1 \quad (622)$$

が成り立つはずである。この式の左辺の絶対値の中身を

$$1 + 2ikf_l = S_l = e^{2i\delta_l} \quad (623)$$

とおくことで  $S_l$  と  $\delta_l$  を定義する。

$S_l$  は以前に導入した散乱演算子  $\hat{S}$  の行列要素である。つまり、

$$F_{\text{in}} = Y_{l,m}, \quad F_{\text{out}} = Y_{l',m'} \quad (624)$$

であるとき、

$$\int d\Omega F_{\text{out}}^* \hat{S} F_{\text{in}} = S_l \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (625)$$

が成り立つ。 $f_l$  と  $\hat{f}$  の関係も同様である。

$\delta_l$  を用いると、(621) は次のように表わされる。

$$[\dots] = \frac{e^{2i\delta_l}}{2ik} e^{ikr} - \frac{1}{2ik} (-1)^l e^{-ikr} = \frac{i^l e^{i\delta_l}}{k} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (626)$$

つまり、 $\delta_l$  は角運動量  $l$  の部分波に対する位相のずれである。次の関係式が成り立つ。

$$f_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_l}}{k} \sin \delta_l. \quad (627)$$

全面積は

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega |f(\theta)|^2 = 2\pi \int d\cos\theta \left| \sum_l (2l+1) f_l P_l(\cos\theta) \right|^2 \quad (628)$$

によって与えられる。ルジャンドル多項式の直交関係

$$\int d\cos\theta P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (629)$$

を用いることで、積分を実行し次の公式を得ることができる。

$$\sigma_{\text{tot}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |f_l|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (630)$$

それぞれの角運動量  $l$  からの寄与は部分断面積と呼ばれる。

$$\sigma_l = 4\pi(2l+1) |f_l|^2 = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (631)$$

この値を平面波の展開式と比較すれば、散乱波に含まれる角運動量  $l$  の粒子の数は入射束における同じ  $l$  を持つ粒子の 4 倍にまでなり得ることがわかる。(  $2\delta_l = \pi \pmod{2\pi}$  のとき。) 角運動量が保存されるにも関わらず入射波と散乱波に含まれる粒子の数が異なるのは、ここで散乱波と呼んでいるものは透過平面波の分を含んでいないためである。等価平面波と散乱波をあわせて粒子数を計算すれば必ず入射粒子の数に一致する。

## 11.2 古典極限

ポテンシャルの典型的なスケールよりも波動関数の波長が十分短い場合には、WKB 近似を用いることで古典的散乱角の公式 (465) を再現することができる。ここでは話を簡単にするためにポテンシャルは十分早く遠方で 0 になるものと仮定する。(この仮定は以下で考える積分の収束を良くする。)

部分波展開の式

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} (2l+1) P_l(\cos\theta) \quad (632)$$

から出発しよう。分数の分子  $e^{2i\delta_l} - 1$  の二つの項のうち、 $-1$  は透過平面波を取り除くことを表している。実際この項の寄与は  $\theta = 0$  にのみ現れる。ここでは透過平面波と散乱波を区別せず、全体の波動関数で考えることにしよう。そこで、 $-1$  の項を取り除く。

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{2i\delta_l} \quad (633)$$

ルジャンドル多項式の漸近形（これは WKB 近似を用いて求めることができる。）

$$P_l(\cos \theta) \stackrel{l \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2 \sin[(l + \frac{1}{2})\theta + \frac{\pi}{4}]}{\sqrt{2\pi l \sin \theta}} \quad (634)$$

を用いると、次のように書き換えることができる。

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{\frac{l}{2\pi \sin \theta}} \left( \exp \left\{ i \left[ 2\delta_l - \left( l + \frac{1}{2} \right) \theta - \frac{\pi}{4} \right] \right\} - \exp \left\{ i \left[ 2\delta_l + \left( l + \frac{1}{2} \right) \theta + \frac{\pi}{4} \right] \right\} \right) \quad (635)$$

$\exp$  を含む二つの項があるが、それぞれにの  $l$  に対する和が大きな寄与を与えるのは、 $l$  の変化に対してその位相があまり変化しないときである。これは  $\theta$  に対する次の条件を与える。

$$2 \frac{d\delta_l}{dl} \pm \theta = 0. \quad (636)$$

$\delta_l$  の  $l$  依存性を求めるには、WKB 近似を用いる。WKB 近似を用いると、波動関数の準古典的な位相は

$$\frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar} \int_{r_0}^r \sqrt{2m[E - U(r)] - \frac{\hbar^2(l+1/2)^2}{r^2}} dr \quad (637)$$

となる。反射による位相のずれ  $\pi/4$  も考慮した。ここから自由球面波の位相

$$kr - \frac{\pi l}{2} \quad (638)$$

を引くことによって位相のずれを得ることができる。

$$\delta_l = \frac{1}{\hbar} \int_{r_0}^r \sqrt{2m[E - U(r)] - \frac{\hbar^2(l+1/2)^2}{r^2}} dr + \left( l + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{2} - kr \quad (639)$$

求めたいのは位相のずれそのものではなく  $\delta_l/\delta l$  であるから、 $l$  で微分しよう。 $(l + \frac{1}{2})\hbar = mbv$  を用いれば

$$\begin{aligned} \frac{d\delta_l}{dl} &= - \int_{r_0}^r \frac{\frac{(l+\frac{1}{2})\hbar}{r^2}}{\sqrt{2m[E - U(r)] - \frac{\hbar^2(l+1/2)^2}{r^2}}} dr + \frac{\pi}{2} \\ &= - \int_{r_0}^{\infty} \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}}} dr + \frac{\pi}{2} \end{aligned} \quad (640)$$

を得る。最後に  $r$  を無限大に持っていった。従って、 $\theta$  を決めるための条件は

$$\int_{r_0}^{\infty} \frac{bdr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}}} = \frac{\pi \mp \theta}{2} \quad (641)$$

であり、古典的な散乱角 (465) が再現された。

### 11.3 低エネルギー散乱

低エネルギー極限での散乱断面積を計算しよう。ここではポテンシャルが遠方で十分速く 0 になると仮定しよう。特に、遠心力ポテンシャル  $\propto r^{-2}$  よりも早く 0 になるとする。この場合、 $l \geq 1$  であれば、エネルギーが非常に低い場合には遠心力ポテンシャルのために粒子は  $U(r) \neq 0$  の領域にまで到達することはできず、位相のずれは発生しない。従って  $l \geq 1$  に対する部分散乱振幅は 0 である。そこで  $l = 0$  のモードに注目する。シュレーディンガー方程式には遠心力ポテンシャルは現れない。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U(r) \right] \psi(r) = E\psi(r). \quad (642)$$

ポテンシャルが 0 の領域ではエネルギーが 0 であるときの解は一次関数であり、次のように置くことができる。

$$\psi(r) = a(r - r_{\text{eff}}). \quad (643)$$

$a$  は規格化の定数である。 $r_{\text{eff}}$  は中心付近での境界条件を用いることで決まる長さで散乱半径と呼ばれる。これは正にも負にもなり得る。これは  $r \rightarrow \infty$  で発散しているが、エネルギーがわずかながら 0 で無い状況を考えれば、次のような関数の極限として与えられる。

$$\psi(r) = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{a}{k} \sin[k(r - r_{\text{eff}})] \quad (644)$$

これを  $\sin(kr + \delta_0)$  と比較することにより、 $r$  が小さいところでの位相のずれは散乱半径を用いて次のように与えられる。

$$\delta_0 = -kr_{\text{eff}}. \quad (645)$$

$l = 0$  に対する部分断面積は

$$\sigma = \sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = 4\pi r_{\text{eff}}^2 \quad (646)$$

となる。



## 11.4 剛体球による散乱

半径  $r_0$  の剛体球による散乱を考える。動径座標  $r$ , エネルギー  $E$ , 動径方向の運動量  $p$  の代わりに次の無次元化された量を用いる。

$$\rho = r/r_0, \quad \mathcal{E} = E \left/ \frac{\hbar^2}{mr_0^2}, \quad k = p \left/ \frac{\hbar}{a_0}. \quad (647)$$

以下では  $\rho$  を改めて  $r$  と書く。これは  $r_0 = m = \hbar = 1$  の単位系を用いることと同じである。部分波展開を行い角運動量  $l$  のモードに注目すると、動径部分の波動関数は球面ベッセル関数  $j_l$  と  $y_l$  を用いて次のように与えることができる。

$$R_{kl} \propto c_1 j_l(kr) + c_2 y_l(kr). \quad (648)$$

定数係数  $c_1$  と  $c_2$  の関係は、剛体球表面における境界条件

$$c_1 j_l(kr_0) + c_2 y_l(kr_0) = 0 \quad (649)$$

によって決まる。これにより  $c_1$  と  $c_2$  の比が決まると、漸近形から位相のずれ  $\delta_l$  が決まる。

$$\begin{aligned} c_1 j_l(kr) + c_2 y_l(kr) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{kr} \left[ c_1 \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) - c_2 \cos \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right] \\ &= \frac{c}{kr} \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \end{aligned} \quad (650)$$

ただし、 $c = \sqrt{c_1^2 + c_2^2}$  であり、位相のずれ  $\delta_l$  は次の関係式から決める。

$$\frac{c_1}{c} = \cos \delta_l, \quad \frac{c_2}{c} = -\sin \delta_l \quad (651)$$

位相のずれが分かれば、部分散乱振幅は

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (652)$$

によって直ちに求まる。 $l = 50$  の場合に部分散乱振幅を  $k$  の関数として計算したものを図 33 に与えた。(“exact” の方のグラフ)

この振る舞いを理解するために、WKB 近似を用いて同じものを計算してみよう。 $k$  と  $l$  の関係によって二つに場合分けする必要がある。剛体表面での遠心力ポテンシャルは  $l(l+1)/2 \sim (l+1/2)^2/2$  によって与えられる。これがエネルギー  $\mathcal{E} = k^2/2$  よりも大きい場合、すなわち  $l+1/2 > k$  の場合には、粒子は遠心力ポテンシャルによって跳ね返され、剛体球の影響を受けない。従ってこの場合には  $\delta_l = 0$  である。 $l+1/2 < k$  の場合には粒子は剛体球表面 ( $r = r_0$ ) において跳ね返される。この場合の位相のずれは、WKB 近似を用いると

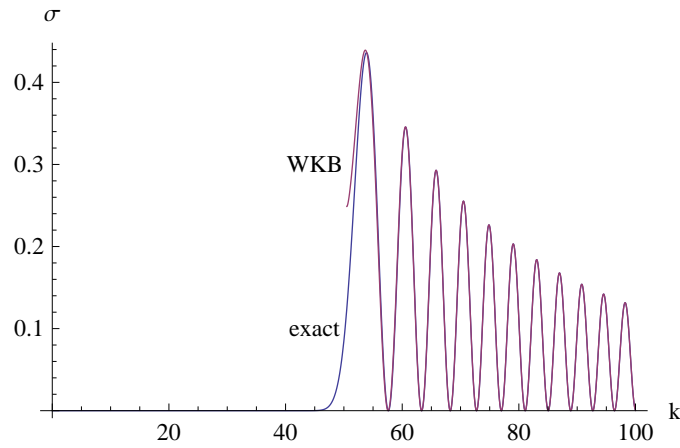


図 33: 剛体球の部分散乱振幅  $\sigma_{50}$

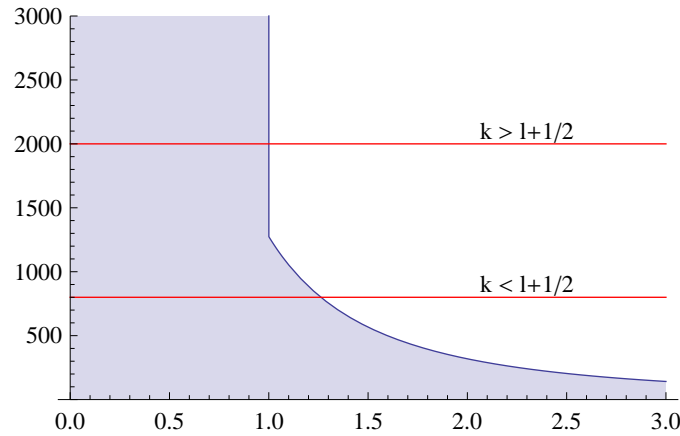


図 34: 剛体球の有効ポテンシャル

$$\begin{aligned}
 \delta_l &= \Delta(r_0, r) - \left[ \Delta(r_*, r) + \frac{\pi}{4} \right] \\
 &= -\Delta(r_*, r_0) - \frac{\pi}{4} \\
 &= \hat{l} \cos^{-1} \frac{\hat{l}}{kr_0} - \sqrt{kr_0^2 - \hat{l}^2} - \frac{\pi}{4} \quad (653)
 \end{aligned}$$

と与えられる。ただし  $\hat{l} = l + 1/2$  である。比較のために、この  $\delta_l$  を用いて計算した部分断面積のグラフも図 33 に与えた。(“WKB” と記したほう)  $\hat{l} = k$  近傍以外ではほぼ一致していることがわかる。

$\delta_l$  を全て足し上げれば全断面積が得られる。その結果を図 35 に示す。それぞれの  $l$  に対して、 $\sigma_l = 0$  になるエネルギーは井戸型ポテンシャルのエネルギー準位に一致している。これは、そのエネルギーでは  $r = r_0$  において、球内部の波動関数と球外部の波動関数を位相のずれなしで滑らかに接続することができるからである。

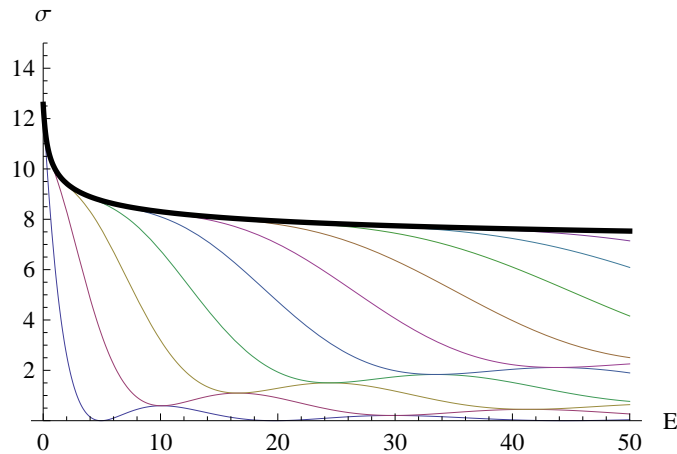


図 35: 剛体球の散乱断面積。下から  $n$  番目の線は  $l < n$  の部分散乱振幅の和を表わしている。

低エネルギー極限  $k \rightarrow 0$  では、 $l \geq 1$  の部分波の散乱振幅は 0 になる。有効半径は 1 であるから、 $l = 0$  の部分波の散乱振幅は  $4\pi = 12.5664$  になる。

エネルギーが非常に高い極限における断面積を計算してみよう。 $k > l$  のとき、 $\sin^2 \delta_l$  は激しく振動する関数であるので大雑把に  $\sin^2 \delta = 1/2$  と置いて計算すると、

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_{l=0}^k \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{1}{2} \sim 2\pi \quad (654)$$

が得られる。(和は積分に置き換えて計算する。) これは古典的断面積  $\pi$  の二倍であるが、これは以下のように解釈される。

散乱波の定義は、波動関数から入射波の平面波  $e^{ikz}$  を取り除いたものである。この定義によれば、散乱波は剛体に衝突して跳ね返された波だけではなく、剛体の前方に現れる陰の部分に現れる  $-e^{ikz}$  という波も含む。跳ね返された波に対応

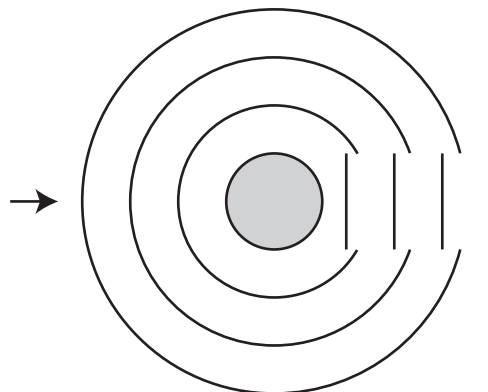


図 36: 剛体球による散乱波

する断面積は  $\pi$  である。そして裏側の陰の領域に現れる波についてもやはり断面

積  $\pi$  であり、上で計算された全断面積はこの二つの寄与を含んでいるため、古典的に計算したものの二倍になる。