Training の解答

第 1 章

[1.1]

(1) 波長 1 mm の電磁波の振動数は

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3.0 \times 10^8 \mathrm{m/s}}{1.0 \times 10^{-3} \mathrm{m}} = 3.0 \times 10^{11} \mathrm{s}^{-1}$$

この光子のエネルギーは，

$$\begin{aligned} E = h\nu &= \left(6.6 \times 10^{-34} \mathrm{J \cdot s}\right)\left(3.0 \times 10^{11} \mathrm{s}^{-1}\right) \\ &= 19.8 \times 10^{-23} \mathrm{J} = 1.2 \times 10^{-3} \mathrm{eV} \end{aligned}$$

(2) 1 秒間に 3.0×10^{11} 回振動するので，1 周期の間に放出されるエネルギーは，

$$\frac{500 \times 10^3 \mathrm{W}}{3.0 \times 10^{11} \mathrm{s}^{-1}} = 1.67 \times 10^{-6} \mathrm{J}$$

このエネルギーを構成する光子の数は

$$\frac{1.67 \times 10^{-6} \mathrm{J}}{19.8 \times 10^{-23} \mathrm{J}} = 8.4 \times 10^{15} (\text{個})$$

こうした問題は，単純に数値を代入して計算するだけではなく，単位も含めて計算する習慣をつけておいてください（補足資料）．それぞれの数値を覚える必要は全くありませんが，大体どのくらいの大きさ（桁）になるのかといった，感覚を養うようにはしておいてください．

[1.3]

粒子のエネルギーが (1.12) で与えられている場合，その速度は

$$v = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{cp}{\sqrt{m^2c^2 + p^2}}$$

となります．両辺を 2 乗すると

$$v^2\left(m^2c^2 + p^2\right) = c^2p^2 \tag{1}$$

となり，これを p について解き直すと，

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \tag{2}$$

を得ます．

ところで，(2) を導く際に，$v \neq c$ を暗黙の仮定として用いているので，(2) に $v = c$ を代入することはできません．よって $v = c$ のときは，(1) に立ち戻ることで，

$$m^2c^2 + p^2 = p^2 \Rightarrow m = 0$$

となることがわかります．これを (1.12) のエネルギーの式に代入すると，

$$p = \frac{E}{c}$$

が導かれます．

第 3 章

[3.1]

行列 A の転置をとり，複素共役をとれば元に戻ることから，A はエルミート行列であることもわかります（エルミート行列の性質 $\mathsf{A}^\dagger = \mathsf{A}$ より）．また，

$$\mathsf{A}^\dagger\mathsf{A} = \mathsf{A}^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

となることから，A はユニタリ行列であることがわかります．なお，A は，第 6 章で出てくるパウリ行列 σ_y に相当しています．

[3.2]

固有値を W で表すと，固有方程式 $|\mathsf{A} - W| = 0$ は，

$$\begin{vmatrix} -W & -i \\ i & -W \end{vmatrix} = W^2 - 1 = 0$$

となるので，固有値は $W = \pm 1$ であることがわかります．

固有値 $W = \pm 1$ に対する固有ベクトルを $\boldsymbol{u}_\pm = (a_\pm, b_\pm)$ で表すと，

$$\begin{pmatrix} \mp 1 & -i \\ i & \mp 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_\pm \\ b_\pm \end{pmatrix} = 0$$

より，

$$\mp a_\pm - ib_\pm = 0 \quad \text{あるいは} \quad ia_\pm \mp b_\pm = 0$$

の関係が求まります．これより例えば，それぞれの固有ベクトルを

$$u_+ = (1, i), \quad u_- = (i, 1)$$

と選ぶことができます．これらの固有ベクトルを並べて

$$\mathsf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}$$

とできます．この行列は，

$$\mathsf{U}^\dagger\mathsf{U} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

となることから，ユニタリ行列であることがわかります．（係数の $1/\sqrt{2}$ は，U と $\mathsf{U}^\dagger$ の積が 1 になるようにつけたものです．）

さて，このユニタリ行列を用いて $\mathsf{U}^\dagger\mathsf{A}\mathsf{U}$ を計算してみましょう．

$$\begin{aligned}\mathsf{U}^{-1}\mathsf{A}\mathsf{U} &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

となり，確かに対角化され，その対角成分が固有値 $W = \pm 1$ と一致することがわかります．

第 4 章

[4.1]

ド・ブロイ波長 $\lambda = h/p$ の公式に実際に代入すれば，簡単に求めることができます．

(1)

$$\lambda = \frac{6.6 \times 10^{-34}\,\mathrm{Js}}{70\,\mathrm{kg} \times 1.0\mathrm{m/s}} = 9.4 \times 10^{-36}\,\mathrm{m}$$

(2)

$$\lambda = \frac{6.6 \times 10^{-34}\,\mathrm{Js}}{10^{-2}\,\mathrm{kg} \times 10^{3}\mathrm{m/s}} = 6.6 \times 10^{-35}\,\mathrm{m}$$

(3)

$$\lambda = \frac{6.6 \times 10^{-34}\,\mathrm{Js}}{9.1 \times 10^{-31}\mathrm{kg} \times 10^{6}\mathrm{m/s}} = 7.3 \times 10^{-10}\,\mathrm{m}$$

質量が小さければ，運動量が小さくなるので，ド・ブロイ波長が長くなります．上の結果から，人や弾丸のド・ブロイ波長は無視できるほど短いですが，電子になるともはやそれは（原子の大きさと比べて）無視できないものになっていることがわかります．（ボーア半径は $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ m です．）

[4.2]

方程式の形を明確に浮かび上がらせるためには，できるだけ余分な係数などが現れないようにすると便利です．(4.24) を見ると，第一項は空間の 2 階微分，第三項は空間の 2 次関数と

なっています．数学的に必要なのはこうした情報だけで，それを最も簡単な形で表したのが (4.26) です．そのような単純化した方程式の形を先に作っておき，後はそれぞれの項を見比べれば，係数の適切な形が自然に導かれます．これが単純化する際の基本方針です．しかし慣れていないと，意外に手こずることになるので，少し丁寧に式変形の際のキモチを述べておきましょう．

(4.24) と (4.26) を見比べると，第一項は $\frac{d^2}{dq^2} \to \frac{d^2}{dx^2}$ の対応がありますから，$q = x$ とおいてみたくなります．しかしそれでは第三項の対応がつかないことになります．第一，三項を両立させるには，いきなり対応関係を見つけるのではなく，少し遠回りに見えるかも知れませんが，まずは $q = ax$ とおいてみます．それを (4.24) に代入して

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2ma^2E}{\hbar^2} - \left(\frac{m\omega a^2 x}{\hbar}\right)^2 \psi = 0$$

となります．（途中，両辺に a^2 をかけました．）この段階でもう一度 (4.26) と見比べれば，

$$a^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$$

ととればよいことがわかります．つまり，

$$x^2 = \frac{m\omega}{\hbar} q^2$$

であることがわかります．最後に第二項を合わせるために，

$$\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}\frac{\hbar}{m\omega} = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

とすれば，(4.26) が導かれます．

[4.3]

まず 1 階微分を行うと，

$$\frac{d}{dx} e^{\pm x^2/2} = \pm x e^{\pm x^2/2}$$

となります．さらにもう 1 階微分を行うと，

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}\left(\pm x e^{\pm x^2/2}\right) &= \pm e^{\pm x^2/2} + (\pm x)\left(\pm x e^{\pm x^2/2}\right) \\ &= \left(x^2 \pm 1\right) e^{\pm x^2/2}\end{aligned}$$

となり，確かに (x の多項式) $\times\, e^{\pm x^2/2}$ となっていることがわかります．

第 5 章

[5.1]

この問題は，関数の積 $x\Psi$ を微分することに注意すれば，難しいものではありません．

(1) ∇ は括弧内の x と Ψ の双方に演算しますので，次のようになります．

$$\nabla(x\Psi) = (\nabla x)\Psi + x\,(\nabla\Psi) = \Psi + x\nabla\Psi$$

(2) 前問の結果を利用して，

$$\nabla^2(x\Psi) = \nabla\,(\Psi + x\nabla\Psi) = \nabla\Psi + (\nabla x)\Psi + x(\nabla^2\Psi) = \left(2\nabla + x\nabla^2\right)\Psi$$

となります．

[5.2]

不確定性原理 (5.32) を $p = mv$ の関係によって速度と位置の関係式に書き改めれば，$\Delta p = m\Delta v$ より，

$$\Delta v\Delta q \gtrsim \frac{h}{m}$$

となります．つまり，質量が小さくなればなるほど，不確定性が大きくなるのです．

(1) 微粒子の場合を具体的に計算すると，次のようになります：

$$\Delta v\Delta q \gtrsim \frac{6.6\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}}{1.0\times10^{-6}\,\mathrm{kg}} = 6.6\times10^{-28}\,\mathrm{m^2/s}$$

これは例えば，微粒子の速度と位置がどちらも $\Delta v \simeq 10^{-14}\mathrm{m/s}$, $\Delta q \simeq 10^{-14}\mathrm{m}$ 程度の不確かさを持つことになります．後者はボーア半径のおよそ 1/1000 です．そのような不確かさは，日常生活では，無視しても全く差し支えないでしょう．

(2) 電子の場合は，次のようになります：

$$\Delta v\Delta q \gtrsim \frac{6.6\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}}{9.1\times10^{-31}\,\mathrm{kg}} = 7.3\times10^{-4}\,\mathrm{m^2/s}$$

(1) の微粒子より，不確定性が 24 桁も大きくなりました．電子が一つの原子の中にいるということは，$\Delta q \simeq 10^{-10}$ m ということですから，速度の不確かさは $\Delta v \simeq 10^6$ m/s 以上になります．これほど大きな不確かさがある場合には，原子内の電子の軌道を考えること自体に，ほとんど意味がないことは容易に理解できるでしょう．

第 7 章

[7.1]

$\mu = 1, 2, 3$ に対して

$$\alpha_\mu^2 = \begin{pmatrix}\sigma_\mu & 0\\ 0 & -\sigma_\mu\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sigma_\mu & 0\\ 0 & -\sigma_\mu\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\sigma_\mu^2 & 0\\ 0 & \sigma_\mu^2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mathsf{I} & 0\\ 0 & \mathsf{I}\end{pmatrix}$$

$$\alpha_1\alpha_2 = \begin{pmatrix}\sigma_1 & 0\\ 0 & -\sigma_1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sigma_2 & 0\\ 0 & -\sigma_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\sigma_1\sigma_2 & 0\\ 0 & \sigma_1\sigma_2\end{pmatrix}$$

$$\alpha_2\alpha_1 = \begin{pmatrix}\sigma_2 & 0\\ 0 & -\sigma_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sigma_1 & 0\\ 0 & -\sigma_1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\sigma_2\sigma_1 & 0\\ 0 & \sigma_2\sigma_1\end{pmatrix}$$

よって $\alpha_1\alpha_2 + \alpha_2\alpha_1 = 0$ となることがわかります．その他も同様に示せます（I は 2×2 の単位行列です）．

[7.2]

行列であってもベクトルの内積の定義は同じで，$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{X} = \sigma_x X_x + \sigma_y X_y + \sigma_z X_z$ です．したがって，

$$
\begin{aligned}
(\text{左辺}) &= (\sigma_x X_x + \sigma_y X_y + \sigma_z X_z)(\sigma_x Y_x + \sigma_y Y_y + \sigma_z Y_z) \\
&= \sigma_x^2 X_x Y_x + \sigma_y^2 X_y Y_y + \sigma_z^2 X_z Y_z \\
&+ \sigma_x\sigma_y X_x Y_y + \sigma_y\sigma_z X_y Y_z + \sigma_z\sigma_x X_z Y_x \\
&+ \sigma_y\sigma_x X_y Y_x + \sigma_z\sigma_y X_z Y_y + \sigma_x\sigma_z X_x Y_z
\end{aligned}
$$

ここでパウリ行列の性質 $\sigma_i^2 = 1$, $\sigma_i\sigma_j = -\sigma_j\sigma_i$, そして $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$ などを用いて整理すると，

$$
\begin{aligned}
(\text{左辺}) &= \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{Y} + \sigma_x\sigma_y (X_x Y_y - X_y Y_x) + \sigma_y\sigma_z (X_y Y_z - X_z Y_y) + \sigma_z\sigma_x (X_z Y_x - X_x Y_z) \\
&= \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{Y} + i\sigma_z (X_x Y_y - X_y Y_x) + i\sigma_x (X_y Y_z - X_z Y_y) + i\sigma_y (X_z Y_x - X_x Y_z) \\
&= \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{Y} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{X} \times \boldsymbol{Y})
\end{aligned}
$$

が示されます．

Practice の解答

第 1 章

[1.1]

振動数 ν は，光速度 c と波長 λ を用いて $\nu = c/\lambda$ と表されます．よって光量子のエネルギーは $E = h\nu = hc/\lambda$ で与えられます．例えば，$\lambda = 400$ nm の場合について実際に値を代入して計算すると，

$$E = \frac{(6.63 \times 10^{-34}\ \mathrm{Js})(3.00 \times 10^{8}\ \mathrm{m/s})}{4.00 \times 10^{-7}\ \mathrm{m}} = 4.97 \times 10^{-19}\ \mathrm{J}$$

となります．$\lambda = 800$ nm の場合も同様に計算できます．

なお，1 J は，ある物体を 1 N の力で 1 m 動かすのに必要な仕事です．また，1 cal = 4.181 J（あるいは 1 J = 0.239 cal）です． 光量子のエネルギーがいかに小さいか，ある程度感覚を伴って理解しておきましょう．

[1.2]

(1) 物理量の部分だけ単位を書き出すと

$$\frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}^2}\left(\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{J}}\right)^{3/2} = \frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}^2}\left(\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{kg\,m^2/s^2}}\right)^{3/2} = \frac{\mathrm{s}}{\mathrm{m}}$$

(2) $a = m/2k_BT$ とすれば，公式がそのまま使えます．実際に計算してみると，次のようになります．

$$\begin{aligned}\int_0^\infty f(v)dv &= 4\pi\left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2}\int_0^\infty v^2 e^{-\frac{m}{2k_BT}v^2}dv \\ &= 4\pi\left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2}\left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{-3/2}\sqrt{\pi} = 1\end{aligned}$$

(3) 係数を除いて微分すると，

$$f'(v) \propto 2v\left(1-\frac{m}{2k_BT}v^2\right)e^{-\frac{m}{2k_BT}v^2}$$

$f'(v_{\max})=0$ の条件より，ピークの位置は

$$v_{\max}=\sqrt{\frac{2k_BT}{m}}$$

であることがわかります．これより，温度が高くなればピークを与える v も大きくなることがわかります．図 1.2 で，$T=30$ K から 300 K まで，温度が 10 倍上がると，ピーク位置も $\sqrt{10}\sim 3.2$ 倍大きくなっていることが読み取れます．

[1.3]

衝突前の a の運動量を $\boldsymbol{p}_0$，衝突後の a, b それぞれの運動量を $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{P}$ とすると，運動量保存則 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}_0-\boldsymbol{p}$ より

$$\begin{aligned} P^2 &= p_0^2+p^2-2p_0p\cos\phi \\ M^2V^2 &= m^2\left(v_0^2+v^2-2v_0v\cos\phi\right) \end{aligned} \tag{3}$$

の関係が成り立ちます．一方，運動エネルギー保存則 $mv_0^2/2=mv^2/2+MV^2/2$ より，

$$M^2V^2=Mm\left(v_0^2-v^2\right) \tag{4}$$

(3) と (4) より，

$$(M+m)v^2-2mv_0v\cos\phi+(m-M)v_0^2=0$$

これを解いて，$M>0$, $v>0$ の場合，

$$v=\frac{v_0}{M+m}\left(m\cos\phi\pm\sqrt{M^2-m^2\sin^2\phi}\right)$$

となることがわかります．ただし，$M^2-m^2\sin^2\phi\geq 0$ に限定されます．

[1.4]

(1.20) より，各値を代入すると，

$$\begin{aligned} \lambda'-\lambda &= \frac{2\times(6.626\times10^{-34}\mathrm{m^2kg/s})}{(9.109\times10^{-31}\mathrm{kg})(2.998\times10^{8}\mathrm{m/s})}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 \\ &= 0.2426\times10^{-11}\mathrm{m}=0.002426\mathrm{nm} \end{aligned}$$

と求まります．

[1.5]

実験結果（図 1.9）から，電圧と振動数の比 V/ν が読み取れます．電圧をエネルギーに換算するためには，$E = eV$ の関係より，素電荷をかければよいことがわかります．$E = h\nu$ の関係から，

$$h = \frac{eV}{\nu} = \frac{(1.602 \times 10^{-19}\mathrm{C})(3.000\mathrm{V})}{(121.0 - 48.25) \times 10^{13}\mathrm{s}^{-1}} = 6.606 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$$

と見積もれます．（正確な素電荷の値を用いたので，ミリカンの見積もりよりさらに正確なプランク定数の値 $h = 6.626 \times 10^{-34}$ J s に近づいています．）クーロンとボルトをかけるとジュールになること J = CV を覚えておくと，次元解析に便利でしょう．

第 2 章

[2.2]

Ry の定義に含まれる基礎物理定数の値を代入すると，次の値を得ます．

$$1\mathrm{Ry} = \frac{2\pi^2(9.109 \times 10^{-31}\mathrm{kg})}{(6.626 \times 10^{-34}\mathrm{J\,s})^2}\left[\frac{(1.602 \times 10^{-19}\mathrm{C})^2}{4\pi(8.854 \times 10^{-12}\mathrm{F/m})}\right]^2 = 2.179 \times 10^{-18}\mathrm{J}$$

さらに電子ボルトは素電荷を持つ粒子が電位差 1 V で加速されるエネルギーなので，

$$1\mathrm{eV} = 1.602 \times 10^{-19}\mathrm{CV} = 1.602 \times 10^{-19}\mathrm{J}$$

よって

$$1\mathrm{Ry} = \frac{2.179 \times 10^{-18}}{1.602 \times 10^{-19}}\,\mathrm{eV} = 13.60\,\mathrm{eV}$$

となります．

[2.3]

バルマーの公式と合わせるため，リュードベリの式を波長に直すと，

$$\lambda = \frac{1}{R}\frac{(n_1 + \alpha_1)^2\,(n_2 + \alpha_2)^2}{(n_2 + \alpha_2)^2 - (n_1 + \alpha_1)^2}$$

となります．これとバルマーの公式を比較すると，$n_1 = 2$, $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = 0$ であることがわかります．さらに $n_2 = n$ とすると，

$$\lambda = \frac{4}{R}\frac{n^2}{n^2 - 4}$$

となるので，$B = 4/R$ であったことになります．

（数学的には，$\alpha_{1,2}$ を整数に選ぶ解もあるかも知れませんが，それは $n_{1,2}$ にくりこんで考えることができます．$\alpha_{1,2}$ は整数で表せない小数部分を考慮するための数だと考えてください．）

$n_1 = 2$ のスペクトル線をバルマー系列とよびます．この他，$n_1 = 1$ である紫外スペクトルのライマン系列 (1906)，$n_1 = 3$ である赤外のパッシェン系列 (1908) などが，リュードベリの発見以降に実際に観測されています．

[2.4]

古典力学によると，質量 m の質点に働く力が $-kq$ の場合，その角振動数は $\omega = \sqrt{k/m}$ でした．そのときにのポテンシャル（位置エネルギーは）q で積分して，$U = kq^2/2 = m\omega^2 q^2/2$ となります．運動エネルギーはよく知られた関係より $K = mv^2/2 = p^2/2m$ です．よってハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2$$

となります．

[2.5]

(1) 円軌道の半径を r，粒子の速度を v とすると，1 周に要する時間は $T = 2\pi r/v$ です．したがって振動数は

$$\nu = T^{-1} = \frac{v}{2\pi r}$$

と求まります．Exercise 2.4 より，

$$v = \sqrt{\frac{2|W|}{m_e}}, \quad \frac{1}{r} = 2\left(\frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\right)|W|$$

でしたから，これらを用いて

$$\nu_{\mathrm{cl}} = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{2}{m_e}}\left(\frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\right)|W|^{3/2}$$

と求まります．

(2) (2.46) に代入し，$1/N$ の寄与を無視すると

$$\begin{aligned}\nu_{N\to N-1} &= -\frac{Rc}{N^2} + \frac{Rc}{(N-1)^2} = Rc\frac{2N-1}{N^2(N-1)^2} = Rc\frac{2-\frac{1}{N}}{N^3\left(1-\frac{1}{N}\right)^2} \\ &\simeq \frac{2Rc}{N^3}\end{aligned}$$

とできます．さらにこの形は $|W_N| = Rch/N^2$ を用いると，

$$\nu_{\mathrm{q}} = \frac{2|W|^{3/2}}{\sqrt{Rch^3}}$$

と表せます．

(3) 対応原理では，$\nu_{\mathrm{q}} = \nu_{\mathrm{cl}}$ が成り立つと考えます．(1), (2) の結果と合わせれば，

$$\frac{2}{\sqrt{Rch^3}} = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{2}{m_e}}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}$$

が成り立つことになります．これを R について解けば，

$$R = \frac{2\pi^2 m_e}{ch^3}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2$$

を得ます．こうして得られた R がリュードベリの定数に一致することは Exercise 2.6 でみたとおりです．本文では量子化条件を用いて R を用いましたが，このように対応原理から R を正しく導くことができます．

第 3 章

[3.3]

問題で与えられたとおりのフーリエ級数を単純に掛け合わせます．

$$\begin{aligned} z_n(t) = x_n(t)y_n(t) &= \sum_{\beta,\gamma} X_\beta(n)Y_\gamma(n)e^{i[\omega(n,\beta)+\omega(n,\gamma)]t} \\ &= \sum_{\beta,\gamma} X_\beta(n)Y_\gamma(n)e^{i\omega(n,\beta+\gamma)t} \end{aligned}$$

ここで 2 つ目の等号では，古典的振動数の結合法則を用いました．$z_n(t)$ のフーリエ級数については，改めて $\gamma = \alpha - \beta$ と置き直せば，

$$z_n(t) = \sum_\alpha Z_\alpha(n)e^{i\omega(n,\alpha)t}$$

となります．ここで，フーリエ成分 $X_\beta(n)$, $Y_\gamma(n)$ と $Z_\alpha(n)$ の間には次の関係が成り立ちます：

$$Z_\alpha(n) = \sum_{\beta=-\infty}^{+\infty} X_\beta(n)Y_{\alpha-\beta}(n) \tag{5}$$

次に $y_n(t)x_n(t)$ を計算してみます．先ほどの計算で，$X \leftrightarrow Y$ と文字を入れ換えるだけです．（添え字は入れ換えません．）

$$y_n(t)x_n(t) = \sum_{\alpha,\beta} Y_\beta(n)X_{\alpha-\beta}(n)e^{i\omega(n,\alpha)t}$$

これは一見，(5) 式とは異なりますが，β については $-\infty \to +\infty$ の和をとるので，$\beta \to \alpha - \beta'$ のように変数変換できます．（β について原点を α だけずらして和をとる順番を逆にしたよう

なもの．上限も下限も無限大なので，原点をずらしても和全体は変わらない．）すると上式は

$$\sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty}\left[\sum_{\beta'=-\infty}^{+\infty} X_{\beta'}(n)Y_{\alpha-\beta'}(n)\right]e^{i\omega(n,\alpha)t}$$

となり，(5) 式と等しくなります．よって，古典的表式では $x(n)y(n)=y(n)x(n)$ が成り立ちます．

なお，上の結果は力学量が 3 つ，4 つと増えても同じことがいえます．つまり，状態 n についての力学量の積は，常にある単一の振動数 $\omega(n,\alpha)$ によってフーリエ展開できるのです．

[3.4]

(1) エルミート共役は，転置をとった上で複素共役をとるのでした．各行列を成分で表すと，

$$[(AB)^\dagger]_{ij}=[(AB)_{ji}]^*=A^*_{jk}B^*_{ki}=(A^\dagger)_{kj}](B^\dagger)_{ik}=(B^\dagger A^\dagger)_{ij}$$

となるので，$(AB)^\dagger=B^\dagger A^\dagger$ の成り立つことがわかります．

(2) 逆行列の定義より，

$$(AB)^{-1}(AB)=1$$

が成り立ちます．両辺において右から B^{-1}, 次に A^{-1} を順にかけると，

$$(AB)^{-1}(AB)B^{-1}A^{-1}=B^{-1}A^{-1}$$

となります．さらに $BB^{-1}=1$, $AA^{-1}=1$ ですから，

$$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}$$

の成り立つことがわかります．

[3.5]

(1) 題意より，$A^\dagger=A$, $B^\dagger=B$, が成り立っています．両者の積を取り，[3.4] の結果を用いると，

$$(AB)^\dagger=B^\dagger A^\dagger=BA$$

となります．積がエルミートであれば，$(AB)^\dagger=AB$ であるはずですので，一般には「エルミート行列の積はエルミートでない」といえます．ただし，A と B が交換する場合，すなわち $AB=BA$ の場合はエルミートになります．

(2) 2 つのユニタリ行列 U, V について考えます．ユニタリ行列の定義より，$U^\dagger=U^{-1}$, $V^\dagger=V^{-1}$ が成り立っています．両者の積のエルミート共役をとり，再び [3.4] の結果を用いると，

$$(UV)^\dagger=V^\dagger U^\dagger=V^{-1}U^{-1}=(UV)^{-1}$$

となりますので，UV はユニタリ行列であることがわかります．

[3.6]

調和振動子に現れるのは p^2 と q^2 ですので，それぞれに (3.47) と (3.48) を代入し，行列計算を行うと次の結果を得ます：

$$\mathsf{p}^2 = -\frac{\hbar m\omega}{2}\begin{pmatrix} -1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & -3 & 0 & \sqrt{6} & \cdots \\ \sqrt{2} & 0 & -5 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & -7 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\mathsf{q}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{6} & \cdots \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 7 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

よって，

$$\mathsf{H} = \frac{\mathsf{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\mathsf{q}^2 = \frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 5 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 7 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

となり，確かにハミルトニアンは対角行列となっていることがわかります．各成分が $\hbar\omega(n+1/2)$ になっていることも，(3.41) と一致します．

[3.7]

はじめに (3.76) の行列 f が $\mathsf{f} = \mathsf{p}$ であったとします．第 1 式は $\partial\mathsf{p}/\partial\mathsf{q} = 0$ となり，第 2 式の右辺は正準交換関係の形になるので，$\partial\mathsf{p}/\partial\mathsf{p} = 1$ になります．$\mathsf{f} = \mathsf{q}$ だった場合も同様です．よって $\mathsf{f} = \mathsf{p}, \mathsf{q}$ のときは確かに (3.76) が成り立っています．

次に加法を考えてみましょう．(3.76) を満たす f_1 と f_2 があったとします．すると，$\mathsf{f} = \mathsf{f}_1 + \mathsf{f}_2$ も (3.76) を満たすことは，例えば，次の様に示せます：

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\mathsf{f}_1 + \mathsf{f}_2)}{\partial\mathsf{q}} &= \frac{\partial\mathsf{f}_1}{\partial\mathsf{q}} + \frac{\partial\mathsf{f}_2}{\partial\mathsf{q}} = \frac{i}{\hbar}\left[(\mathsf{p}\mathsf{f}_1 - \mathsf{f}_1\mathsf{p}) + (\mathsf{p}\mathsf{f}_2 - \mathsf{f}_2\mathsf{p})\right] \\ &= \frac{i}{\hbar}\left[\mathsf{p}(\mathsf{f}_1 + \mathsf{f}_2) - (\mathsf{f}_1 + \mathsf{f}_2)\mathsf{p}\right] \end{aligned}$$

今度は乗法 $\mathsf{f} = \mathsf{f}_1\mathsf{f}_2$ についても考えてみましょう．関数の積の微分を用いて，

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\mathsf{f}_1\mathsf{f}_2)}{\partial\mathsf{q}} &= \frac{\partial\mathsf{f}_1}{\partial\mathsf{q}}\mathsf{f}_2 + \mathsf{f}_1\frac{\partial\mathsf{f}_2}{\partial\mathsf{q}} = \frac{i}{\hbar}\left[(\mathsf{p}\mathsf{f}_1 - \mathsf{f}_1\mathsf{p})\mathsf{f}_2 + \mathsf{f}_1(\mathsf{p}\mathsf{f}_2 - \mathsf{f}_2\mathsf{p})\right] \\ &= \frac{i}{\hbar}\left(\mathsf{p}\mathsf{f}_1\mathsf{f}_2 - \mathsf{f}_1\mathsf{f}_2\mathsf{p}\right)\end{aligned}$$

となるので，やはり (3.76) が成り立つことになります．

以上より，(3.76) は f として p, q の場合に成立し，それらの和および積で与えられる関数についても成立することがわかります．よって，f が q と p から成る任意の多項式で与えられている場合に (3.76) が成り立つことになります．（なお，(3.17) は $\mathsf{f} = \mathsf{H}$ とすることで得られます．）

第 4 章

[4.3]

エルミート共役とは，行列の転置をとった上で複素共役をとったもののことでした．そこでまず付録の (A.25) の両辺の複素共役をとって，$n \leftrightarrow m$ を入れ替えます．

$$P^*_{mn} = \int \psi_m(q)\left(i\hbar\frac{d}{dq}\right)\psi^*_n(q)\,dq$$

次に，右辺を部分積分します．

$$P^*_{mn} = \left[i\hbar\psi_m(q)\psi^*_n(q)\right]_{-\infty}^{\infty} - \int\left[i\hbar\frac{d}{dq}\psi_m(q)\right]\psi^*_n(q)\,dq$$

$\psi_n(q)$ は $|q| \to \infty$ で 0 になるので，右辺第一項は 0 になります．結果，

$$P^*_{mn} = \int \psi^*_n(q)\left(-i\hbar\frac{d}{dq}\right)\psi_m(q)\,dq = P_{nm}$$

となります．これはまさしく P_{nm} がエルミート行列であることを意味します．

なお，Q_{nm} については複素共役をとって $n \leftrightarrow m$ とするだけで，そのままエルミート性が示せます．

[4.4]

付録の (A.23) の展開を逆に使います．

$$\sum_\ell Q_{nl}P_{lm} = \int \psi^*_n(q)q\left(\sum_\ell \psi_\ell(q)P_{\ell m}\right)dq = \int \psi^*_n(q)q\left(-i\hbar\frac{d}{dq}\right)\psi_m(q)dq$$

全く同様にして，

$$\sum_\ell P_{\ell m}Q_{\ell m} = \int \psi^*_n(q)\left(-i\hbar\frac{d}{dq}\right)q\psi_m(q)dq$$

両者の差をとると，

$$\sum_{\ell}(Q_{nl}P_{lm}-P_{\ell m}Q_{\ell m})=\int\psi_n^*(q)\left[q\left(-i\hbar\frac{d}{dq}\right)-\left(-i\hbar\frac{d}{dq}\right)q\right]\psi_m(q)dq$$
$$=i\hbar\int\psi_n^*(q)\psi_m(q)dq=i\hbar\delta_{nm}$$

が示せます．なお，途中で (4.50) の関係と $\psi_n(q)$ の正規直交性を用いました．

これを q_{nl}, p_{lm} の関係に焼き直すと，$e^{i(\omega_{nl}+\omega_{lm})}=e^{i\omega_{nm}}$ の因子がつきます．しかし $n=m$ と $n\neq m$ の場合を実際に計算すれば分かるように，$\delta_{nm}e^{i\omega_{nm}}=\delta_{nm}$ なので，結果として因子 $e^{i\omega_{nm}}$ は不要になります．以上より，$\sum_{\ell}(q_{nl}p_{lm}-p_{\ell m}q_{\ell m})=i\hbar\delta_{nm}$ が示されました．

[4.5]

関数 f と g を完全正規直交系 $\chi_n(q)$ を用いて

$$f(q)=\sum_n\xi_n\chi_n(q),\quad g(q)=\sum_n\eta_n\chi_n(q)$$

と表します．ここで ξ_n と η_n はそれぞれの展開係数です．これを (4.69) に代入すると，左辺は

$$\int f^*(q)Ag(q)dq=\int\left[\sum_n\xi_n^*\chi_n^*(q)\right]A\left[\sum_m\eta_m\chi_m(q)\right]dq$$
$$=\sum_{n,m}\xi_n^*\left[\int\chi_n^*(q)A\chi_m(q)dq\right]\eta_m=\sum_{n,m}\xi_n^*A_{nm}\eta_m$$

となります．同様に右辺は

$$\int[Af(q)]^*g(q)dq=\int A^*\left[\sum_n\xi_n^*\chi_n^*(q)\right]\left[\sum_n\eta_m\chi_m(q)\right]dq$$
$$=\sum_{n,m}\left[\int\chi_m^*(q)A\chi_n(q)dq\right]^*\xi_n^*\eta_m=A_{mn}^*\xi_n^*\eta_m$$

問題文より A_{nm} はエルミート行列なので，$A_{nm}=A_{mn}^*$ が成り立っています．よって左辺と右辺が等しくなり，(4.69) の関係が証明できたことになります．

なお，(4.69) の関係が成り立つ線形演算子 A を**エルミート演算子**とよびます．

さらに，A がエルミート演算子でない場合，A に対して

$$\int f^*(q)Ag(q)dq=\int[A^\dagger f(q)]^*g(q)dq \tag{6}$$

を満たす $A^\dagger$ を見つけることができ，この $A^\dagger$ を A に**エルミート共役**な演算子とよびます．よってエルミート演算子は，自身のエルミート共役な演算子に等しい，と定義することもできます．

[4.6]

[3.5] ではエルミート行列の積について調べました．ここでは，演算子の積のエルミート性について調べてみましょう．実際の計算では，演算子が単体で現れることはありません．そこで

$$\int f^*(AB)gdq$$

なる量を考えてみましょう．（$f(q)$, $g(q)$ の q 依存性は省略しました．）エルミート共役の定義 (6) より，

$$\int f^*A(Bg)dq = \int (A^\dagger f)^*(Bg)dq = \int [B^\dagger(A^\dagger f)]^* gdq$$

が導かれます． 1 つ目の等号では Bg を，2 つ目の等号では $A^\dagger f$ をそれぞれ一つの関数とみなして，(6) の関係を用いました．よって

$$\int f^*(AB)gdq = \int \left(B^\dagger A^\dagger f\right)^* gdq$$

の関係が成り立っていることがわかります．この関係とエルミート共役の定義 (6) を見比べると，$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ であることがわかります．

第 5 章

[5.1]

(1) $\psi^*(x) = \psi(x)$ の場合，運動量の期待値は

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi(x)dx = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\frac{d\psi(x)}{dx}dx$$

によって求められます．部分積分を用いると積分の部分は，

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\frac{d\psi(x)}{dx}dx = \left[\psi^2(x)\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\psi(x)}{dx}\psi(x)dx$$

となりますが，無限遠方の波動関数はゼロになっているはずですので，$[\cdots]$ の部分はゼロになります．残った部分は $-\langle p\rangle$ に相当しますので，結果として，

$$\langle p\rangle = -\langle p\rangle$$

となります．このことから $\langle p\rangle = 0$ であることがわかります．

$\psi^*(x) = \psi(x)$ という条件は，すなわち，波動関数が実数であるということです．つまり上の結果は，「波動関数が実数で与えられている場合は，運動量の期待値は常にゼロとなる」ということを意味します．それでは，運動量が期待値を持つのはどういうときなのでしょうか? それを次の問題で見てみましょう．

(2) 問題文で与えられた波動関数を用いて運動量の期待値を求めると

$$\begin{aligned}\langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)e^{-ikx}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\varphi(x)e^{ikx}dx\\ &= -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)e^{-ikx}\left[\frac{d\varphi(x)}{dx}e^{ikx}+\varphi(x)\frac{de^{ikx}}{dx}\right]dx\\ &= -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\left[\frac{d\varphi(x)}{dx}+ikx\varphi(x)\right]dx\end{aligned}$$

第 1 項は (1) の結果よりゼロとなります．よって

$$\langle p\rangle = \hbar k\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^2(x)dx = \hbar k$$

が求まります．ここで，$\varphi(x)$ が規格化されていることを用いました．

[5.2]

(1) 期待値の定義より，

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2/2a^2}e^{-ikx}xe^{-x^2/2a^2}e^{ikx}dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-x^2/a^2}e^{-ikx}dx\\ &= 0\end{aligned}$$

となります．最後の積分は，被積分関数が x について奇関数なのでゼロとなります．

同様にして，

$$\langle x^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-x^2/a^2}e^{-ikx}dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}a}\frac{\sqrt{\pi}}{2}a^3 = \frac{a^2}{2}$$

が得られます．

運動量の期待値は微分が入るので少し計算が異なります．

$$\begin{aligned}\langle p\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2/2a^2}e^{-ikx}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)e^{-x^2/2a^2}e^{ikx}dx\\ &= \frac{-i\hbar}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2/2a^2}e^{-ikx}\left(-\frac{x}{a^2}+ik\right)e^{-x^2/2a^2}e^{ikx}dx\\ &= \frac{\hbar k}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2/a^2}dx = \frac{\hbar k}{\sqrt{\pi}a}\sqrt{\pi}a = \hbar k\end{aligned}$$

途中，x について奇関数の部分はゼロとしました．

(2) 一般に，位置について次の関係が成り立ちます：

$$(\Delta x)^2 = \langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle = \langle x^2\rangle - 2\langle x\rangle^2 + \langle x\rangle^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$

(1) で求めた結果を用いれば，

$$(\Delta x)^2 = \frac{a^2}{2}$$

であることがわかります．

運動量は微分演算子を含むため，位置 x の場合とは少し異なります．

$$
\begin{aligned}
(\Delta p)^2 &= \langle (p-\langle p\rangle)^2\rangle = \langle (p-\hbar k)^2\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2a^2-ikx}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\hbar k\right)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\hbar k\right)e^{-x^2/2a^2+ikx}dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2a^2-ikx}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\hbar k\right)\left(i\hbar\frac{x}{a^2}\right)e^{-x^2/2a^2+ikx}dx \\
&= \frac{i\hbar}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2a^2-ikx}\left(-i\hbar\frac{1}{a^2}+i\hbar\frac{x^2}{a^4}+\frac{x}{a^2}\hbar k\right)e^{-x^2/2a^2+ikx}dx \\
&= \frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{ik}{a^2}x-\frac{x^2}{a^4}\right)e^{-x^2/a^2}dx \\
&= \frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi}a}\left[\left(\frac{1}{a^2}\sqrt{\pi}a-\frac{1}{a^4}\frac{\sqrt{\pi}}{2}a^3\right)\right] = \frac{\hbar^2}{2a^2}
\end{aligned}
$$

以上より，

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

よって，

$$\Delta x\cdot\Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

と求まります．

[5.3]

(1) 確率密度の定義から，

$$P(x) = |\psi(x)|^2 = A^2e^{-x^2/a^2}$$

となります．この関数の形から，いまの波動関数はおよそ $2a$ の幅に分布が集中していること（$\Delta x = 2a$）がわかります．

(2) $f(x)$ のフーリエ変換は一般に

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx}dx$$

で与えられます．いまの波動関数をフーリエ変換すると，

$$
\begin{aligned}
F(k) &= A\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2a^2}e^{-i(k-k_0)x}dx = A\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2a^2}\left[\cos(k-k_0)x - i\sin(k-k_0)x\right]dx \\
&= 2A\int_0^{\infty} e^{-x^2/2a^2}\cos(k-k_0)x\,dx
\end{aligned}
$$

となります．途中，$\sin(k-k_0)x$ の項は奇関数なので積分はゼロとなること，偶関数の積分は正の範囲のみに限れることを用いました．

問題文で与えられた公式を用いるために，$x' = x/\sqrt{2}a$ と変数変換します．すると，

$$\begin{aligned} F(k) &= 2A\sqrt{2}a \int_0^\infty e^{-x'^2} \cos\sqrt{2}a(k-k_0)x' dx' \\ &= \sqrt{2\pi}Aae^{-(a^2/2)(k-k_0)^2} \end{aligned}$$

を得ます．

(3) よって確率密度は k の関数として

$$P(k) = 2\pi A^2 a^2 e^{-a^2(k-k_0)^2}$$

となります．この関数の形から，波動関数は波数空間でおよそ $2/a$ の幅に分布が集中していること（$\Delta k = 2/a$）がわかります．

(4) これまでの結果より，

$$\Delta x = 2a, \quad \Delta k = \frac{2}{a}$$

であることがわかりました．ところで，運動量と波数は $p = \hbar k$ の対応がありますから，

$$\Delta x \cdot \Delta p = 4\hbar \sim h$$

となり，およそ不確定性関係を満たしていることがわかります．

[5.4]

W の式に $r = a$, $p = \hbar/a$ を代入して，

$$W = \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a}$$

となります．これは a の関数として，第一項が減少関数，第二項が増加関数となっていますので，あるところで極小値を持ちます．その極小値 a_0 は a について微分することで求まります：

$$-\frac{\hbar^2}{ma_0^3} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0^2} = 0$$

より，

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

が求まります．これはボーア半径と一致します．したがって，そのときのエネルギー

$$W_{\min} = -\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2$$

は，ボーア理論における水素原子の基底状態のエネルギーと一致します．そしてそれは 6 章で見るように，量子力学に則って（シュレーディンガー方程式を解いて）求めたものとも一致します．

[5.5]

問題文で与えられた関係は，次のように変形できます．

$$
\begin{aligned}
|i\alpha p'\psi + q'\psi|^2 &= (i\alpha p'\psi + q'\psi)^*(i\alpha p'\psi + q'\psi) \\
&= \alpha^2|p'\psi|^2 + |q'\psi|^2 + i\alpha\left[(q'\psi)^*(p'\psi) - (p'\psi)^*(q'\psi)\right] \\
&= \alpha^2|p'\psi|^2 + |q'\psi|^2\psi + i\alpha\psi^*(qp - pq)\psi
\end{aligned}
$$

ここで現れた $|p'\psi|^2$, $|q'\psi|^2$ は，期待値の定義より，

$$
\begin{aligned}
\langle q'^2\rangle &= \int \psi^* q'q'\psi\, dq = \int (q'\psi)^*(q'\psi)\, dq = \int |q'^2\psi|^2\, dq \\
\langle p'^2\rangle &= \int \psi^* p'p'\psi\, dq = \int (p'\psi)^*(p'\psi)\, dq = \int |p'^2\psi|^2\, dq
\end{aligned}
$$

となります．２つ目の等号では，q, p がエルミート演算子であることから，[4.6] を用いています．さらに交換関係 $qp - pq = i\hbar$ を用いると，

$$
\int |i\alpha p'\psi + q'\psi|^2 dq = \alpha^2\langle p'^2\rangle + \langle q'^2\rangle - \alpha\hbar \geq 0
$$

となります．これは

$$
\langle q'^2\rangle \geq \alpha\hbar - \alpha^2\langle p'^2\rangle
$$

と書けます．この関係式は α がどのような値をとっても成り立たないといけません．その最も厳しい条件は，上の右辺が最大値を取るときで，それは

$$
\alpha_{\max} = \frac{\hbar}{2\langle p'^2\rangle}
$$

のときです（α についての２次関数だと考えて，その最大値を求めます）．

よって上の不等式は

$$
\langle q'^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4\langle p'^2\rangle}
$$

となります．$(\Delta q)^2 = \langle q'^2\rangle$, $(\Delta p)^2 = \langle p'^2\rangle$ の関係を用いて，最終的に次のケナードの不等式を得ます：

$$
\Delta q \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}
$$

以上の導出より，不確定性原理は交換関係と密接に結びついていることがわかります．

[5.6]

(1) ある点を通る時刻は，波動関数の不確定さが Δx である場合，

$$
\Delta t = \frac{\Delta x}{v}
$$

の不確かさを伴います．

(2) 運動量空間において Δp の不確かさを持つ場合，その不確かさは，エネルギーと運動量の間の比例係数を $\partial E/\partial p$ として，

$$\Delta E = \frac{\partial E}{\partial p}\Delta p$$

と書けます．ところで，エネルギーを運動量で微分したものは速度となりますから（※），上の関係は次の様に書き換えられます．

$$\Delta E = v\Delta p$$

（※ 運動エネルギーが $E = p^2/2m$ で与えられることを思い出せば，$v = p/m = \partial E/\partial p$ であることはすぐにわかります．）

(3) これまでの結果を合わせると，

$$\Delta t \cdot \Delta E = \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

であることがわかります．つまり，位置と運動量の間の不確定性原理と同じ関係が時間とエネルギーの間にも成り立っているのです．

第 6 章

[6.1]

(1) 球座標 r, θ, ϕ と直交座標 x, y, z との関係は，

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\phi \\ y = r\sin\theta\sin\phi \\ z = r\cos\theta \end{cases} \tag{7}$$

$$\begin{cases} r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \\ \tan^2\theta = \dfrac{x^2+y^2}{z^2} \\ \tan\phi = \dfrac{y}{x} \end{cases} \tag{8}$$

でした．式 (8) 一つ目の両辺を x で偏微分すると，

$$2r\frac{\partial r}{\partial x} = 2x$$

となりますから，

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\phi$$

が導けます．y, z についても同様にして，

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi, \quad \frac{\partial r}{\partial z} = \cos\theta$$

を得ます．

式 (8) 二つ目の両辺を x で偏微分すると，

$$\frac{\tan\theta}{\cos^2\theta}\frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{x}{z^2} = \frac{\sin\theta\cos\phi}{r\cos^2\theta}$$

となりますから，

$$\frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}$$

が導けます．y, z についても同様にして，

$$\frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}, \quad \frac{\partial\theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r}$$

式 (8) の両辺を x で偏微分すると，

$$\frac{1}{\cos^2\phi}\frac{\partial\phi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2} = -\frac{\sin\phi}{r\sin\theta\cos^2\phi}$$

よって

$$\frac{\partial\phi}{\partial x} = -\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}$$

y, z についても同様にして，

$$\frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}, \quad \frac{\partial\phi}{\partial z} = 0$$

を得ます．

(2) 直交座標の微分演算子は次の様に球座標の微分演算子に変換されます：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial x} = \dfrac{\partial r}{\partial x}\dfrac{\partial}{\partial r} + \dfrac{\partial\theta}{\partial x}\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{\partial\phi}{\partial x}\dfrac{\partial}{\partial\phi} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} = \dfrac{\partial r}{\partial y}\dfrac{\partial}{\partial r} + \dfrac{\partial\theta}{\partial y}\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{\partial\phi}{\partial y}\dfrac{\partial}{\partial\phi} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} = \dfrac{\partial r}{\partial z}\dfrac{\partial}{\partial r} + \dfrac{\partial\theta}{\partial z}\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{\partial\phi}{\partial z}\dfrac{\partial}{\partial\phi} \end{cases} \tag{9}$$

ここに 1. で求めた関係を代入すれば，

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial r} + \dfrac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \dfrac{1}{r}\dfrac{\sin\phi}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial r} + \dfrac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{1}{r}\dfrac{\cos\phi}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\dfrac{\partial}{\partial r} - \dfrac{1}{r}\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta} \end{cases} \tag{10}$$

と表されます．

(3) (2) で求めた 1 階微分を 2 乗します．ただし，$(a+b)^2 = a^2 + b^2 + 2ab$ のようにしては間違ってしまうので気をつけてください．演算子の順番は可換ではないこと，微分演算子の

右にある関数には微分を施さないといけないことに注意が必要です．$\partial^2/\partial z^2$ を例として取り上げて見ましょう．

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial z^2} &= \left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\\ &= \cos^2\theta\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\end{aligned}$$

ここで，$(\cdots)$ の中身は関数の積と考えなくてはいけません．$[f(x)g(x)]' = f'(x)g(x) + f(x)g'(x)$ の関係を用いて，

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial z^2} &= \cos^2\theta\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\sin\theta\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{r}\sin\theta\cos\theta\frac{\partial^2}{\partial r\partial\theta}\\ &\quad + \frac{1}{r}\sin^2\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\theta\cos\theta\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial r} + \frac{1}{r^2}\sin\theta\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2}\sin^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\\ &= \cos^2\theta\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\sin^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \frac{2}{r}\sin\theta\cos\theta\frac{\partial^2}{\partial r\partial\theta} + \frac{1}{r}\sin^2\theta\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r^2}\sin\theta\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\end{aligned}$$

途中，全ての項が r^{-2} の次元であるか確認するだけで，計算間違いを防ぐことができます．x, y の 2 階微分の計算も同様の点に気をつけるだけで実行できます．ただし 3 項 ×3 項の計算なので，より複雑となります．愚直に一つずつ計算するだけで良いのですが，計画性なく前から順に計算すると，式の整理が非常に大変になってしまいます．項数が増えれば計算間違いの機会も増えるので，うまく整理しながら計算する工夫が求められます．

はじめはとにかく手を動かしてやってみることです．手を動かしてみると，直ちに計算量の多さに呆然とするでしょう．そこで諦めずに「どうにかして計算量を減らせないか？」と考えることが，工夫の第一歩となるのです．はじめからエレガントな解法ができると思わない方が良いでしょう．様々な角度から工夫を検討し，何度も計算をやり直し，失敗を繰り返すうちに，効率の良い計算法を自然に編み出せるはずです．（例えば，微分演算子毎に整理することも工夫の一つです．）そうして最終的に正しい答えにたどり着いたときは，自分で自分を褒めてあげましょう．その成功体験こそが重要なのです．一つ成功の経験があれば「前も苦労の末できたのだから」と，必ず次の挑戦に繋がります．（反対に，途中で投げ出して成功体験を積まなければ，次なる問題に挑戦する気力が減ってしまうことになります．）

この計算は，大変ではありますが，成功体験や達成感を得るには丁度よい難易度です．是非一度は頑張って正解にたどり着いてください．正しい答えは以下の通りです．

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \sin^2\theta\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\cos^2\theta\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\sin^2\phi}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \\
&+ \frac{2}{r}\sin\theta\cos\theta\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial r\partial\theta} - \frac{2}{r^2}\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} - \frac{2}{r}\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial r} \\
&+ \frac{1}{r}\left(\cos^2\theta\cos^2\phi + \sin^2\phi\right)\frac{\partial}{\partial r} \\
&+ \frac{1}{r^2}\left(-\sin\theta\cos\theta\cos^2\phi - \sin\theta\cos\theta\cos^2\phi + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin^2\phi\right)\frac{\partial}{\partial\theta} \\
&+ \frac{1}{r^2}\left(\sin\phi\cos\phi + \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\sin\phi\cos\phi + \frac{\sin\phi\cos\phi}{\sin^2\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \sin^2\theta\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\cos^2\theta\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\cos^2\phi}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \\
&+ \frac{2}{r}\sin\theta\cos\theta\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial r\partial\theta} + \frac{2}{r^2}\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} + \frac{2}{r}\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial r} \\
&+ \frac{1}{r}\left(\cos^2\theta\cos^2\phi + \cos^2\phi\right)\frac{\partial}{\partial r} \\
&+ \frac{1}{r^2}\left(-\sin\theta\cos\theta\sin^2\phi - \sin\theta\cos\theta\sin^2\phi + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos^2\phi\right)\frac{\partial}{\partial\theta} \\
&+ \frac{1}{r^2}\left(-\sin\phi\cos\phi - \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\sin\phi\cos\phi - \frac{\sin\phi\cos\phi}{\sin^2\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned}
$$

(4) 前問で得た $\partial^2/\partial x^2$, $\partial^2/\partial y^2$, $\partial^2/\partial z^2$ をたし合わせるだけですが，大変複雑です．例えば，微分記号毎に分類してたし合わせるなどの工夫をして，計算間違いを未然に防いでください．

$$
\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)
$$

よって球座標における（時間に依存しない）シュレーディンガー方程式は

$$
\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\right] + V\right\}\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})
$$

と書き換えられます．

[6.2]

軌道角運動量の定義 (6.23) に，[6.1] で求めた x, y, z および $\frac{\partial}{\partial x}$，$\frac{\partial}{\partial y}$，$\frac{\partial}{\partial z}$ の球座標表示を代入すれば，次が求まります：

$$
\begin{aligned}
L_x &= i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
L_y &= i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned}
$$

ここからさらに

$$
\boldsymbol{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]
$$

と求まります．（ただし微分演算子を含む多項式の 2 乗には気をつけること．）得られた $\boldsymbol{L}^2$ の結果は，[6.1] の θ, ϕ 部分に一致します．

[6.3]

2s 状態は次で与えられました：

$$
P_{2s}(r) \propto \left(r - \frac{r^2}{2a_B}\right)^2 e^{-2r/a_B}
$$

極大点を求めるには，これを微分すればよいのです．

$$
\frac{dP_{2s}(r)}{dr} \propto \frac{1}{4}r\left(2 - \frac{r}{a_B}\right)\left(\frac{r^2}{a_B^2} - 6\frac{r}{a_B} + 4\right)e^{-r/a_B}
$$

よって $r = (3 \pm \sqrt{5})a_B$ で極大，$r = 2a_B$ で極小となることがわかります．

[6.4]

電流の大きさは，単位時間に流れる電気量で与えられます．いまの場合，円状のある一点において，単位時間に粒子は $v/2\pi r$ 回通過することになるので，$I = qv/2\pi r$ となります．これに円の面積をかければ，磁気モーメントの大きさが次のように求まります．

$$
|\boldsymbol{\mu}| = \frac{qv}{2\pi r}\pi r^2 = \frac{qvr}{2}
$$

ところで，古典力学で角運動量は $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ でしたから，いまの場合，$|\boldsymbol{L}| = rmv$ です．よって $|\boldsymbol{\mu}| = (q/2m)(rmv) = (q/2m)|\boldsymbol{L}|$ と表せます．さらに，磁気モーメントの向きと角運動量の向きは定義により平行であることを考慮すれば，

$$
\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2m}\boldsymbol{L}
$$

の関係が成り立ちます．

[6.5]

スピン軌道相互作用の固有値を求める前に，その準備として，全角運動量 $\boldsymbol{J}$ の性質を見ることにします．軌道角運動量 $\boldsymbol{L}$ とスピン角運動量 $\boldsymbol{S}$ はそれぞれ独立した固有関数を持ちます．（前者は $Y_l^m(r,\theta,\phi)$，後者は $\phi(S_z)$）よって両者は交換します．つまり，

$$\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{S}=0$$

の関係が成り立ちます．（成分毎に書けば，外積が交換関係に対応していることはすぐにわかります）さらに軌道角運動量とスピン角運動量が共存する状態での全角運動量 $\boldsymbol{J}$ は

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$$

で与えられますが，その交換関係は

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}&=(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S})\times(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S})=\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{S}+\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{S}\\&=i\hbar(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S})\end{aligned}$$

となりますので，結果として

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=i\hbar\boldsymbol{J}$$

が成り立ちます．つまり，全角運動量 $\boldsymbol{J}$ も $\boldsymbol{L}$ や $\boldsymbol{S}$ と同じ形の交換関係を持っていることがわかります．

$$\boldsymbol{L}^2\text{の固有値}=l(l+1)\hbar^2,\quad \boldsymbol{S}^2\text{の固有値}=s(s+1)\hbar^2$$

であったことから，

$$\boldsymbol{J}^2\text{の固有値}=j(j+1)\hbar^2$$

であることもわかります．ここまでが計算の準備です．

ヒントにあるように，

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{L}^2-\boldsymbol{S}^2\right)$$

ですので，

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\text{ の固有値}=\frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right]$$

となります．ところで $\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{S}$ が同じ向きの場合 $\boldsymbol{J}$ は最大値，逆向きの場合最小値をとることから，j の最大値は $l+s$, 最小値は $|l-s|$ となります．その結果として，j は

$$|l-s|\le j\le l+s$$

を満たす整数あるいは半整数値のみをとることになります．（古典力学の場合 $|L-S|\le|\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}|\le L+S$ なのは明らかで，量子力学でもこの関係が成り立っています．ただし，古典力学ではこの間の全ての値をとることができますが，量子力学では整数あるいは半整数値しかとれません．ここで $L=|\boldsymbol{L}|$, $S=|\boldsymbol{S}|$ としました．）

いまの場合，$s=\frac{1}{2}$ ですから，結局 j は

$$j=l+\frac{1}{2},\quad j=l-\frac{1}{2}$$

の 2 価しか取り得ません．このことから，
$j=l+\frac{1}{2}$ のとき，

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\text{ の固有値}=\frac{\hbar^2}{2}\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]=\frac{\hbar^2}{2}l$$

$j=l-\frac{1}{2}$ のとき，

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\text{ の固有値}=\frac{\hbar^2}{2}\left[\left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]=-\frac{\hbar^2}{2}(l+1)$$

となることがわかります．結果として，スピン軌道相互作用の固有値は次の二つの値をとります：

$$H_{\mathrm{so}}\text{の固有値}=\zeta\frac{\hbar^2}{2}l,\quad -\zeta\frac{\hbar^2}{2}(l+1)$$

つまり，スピン軌道相互作用があることで縮退していたエネルギーは 2 つの値に分離し，そのエネルギー差は

$$\text{スピン軌道相互作用によるエネルギー分裂幅}=\zeta\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)$$

になることがわかります．このことから，スピン軌道相互作用によるエネルギー分裂を測定すれば，方位量子数 l と係数 ζ を決定できるのです．なお，p 準位（$l=1$）のとき，$j=3/2$ と $j=1/2$ となりますから，それぞれ区別して $p_{3/2}$，$p_{1/2}$ のように表します．$j=3/2$ のときは，$J_z/\hbar=+3/2,+1/2,-1/2,-3/2$ の 4 重縮退しており，$j=1/2$ のときは $J_z/\hbar=+1/2,-1/2$ の 2 重縮退しています．

第 7 章

[7.1]

エネルギーと運動量をそれぞれ二乗します．

$$E^2=\frac{m^2c^4}{1-\frac{v^2}{c^2}},\quad p^2=\frac{m^2v^2}{1-\frac{v^2}{c^2}}$$

運動量に c^2 をかけてエネルギーから差し引くと，

$$E^2-c^2p^2=\frac{m^2c^4-m^2c^2v^2}{1-\frac{v^2}{c^2}}=\frac{m^2c^2(c^2-v^2)}{\frac{1}{c^2}(c^2-v^2)}=m^2c^4$$

となります．よって

$$E^2=c^2p^2+m^2c^4$$

が示されました．

[7.2]

クライン–ゴルドン方程式では，x, t が微分の形で現れます．よって微分演算子のローレンツ変換を求める必要があります．微分演算子は次の形で変数変換できます：

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial x'}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial t'}{\partial x}\frac{\partial}{\partial t'}, \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial x'}{\partial t}\frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial t'}{\partial t}\frac{\partial}{\partial t'}$$

ここで，x', t' は互いに x, t に依存しているので，両者が交差する項も現れることに注意してください．

上の変数変換の x', t' に問題文で与えられたローレンツ変換を代入すると，次の形が得られます．

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}}\left(\frac{\partial}{\partial x'} - \frac{u}{c^2}\frac{\partial}{\partial t'}\right), \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}}\left(\frac{\partial}{\partial t'} - u\frac{\partial}{\partial x'}\right)$$

さらにこれを繰り返し，2 階微分の形を作り，(7.4) の形に合わせるため，両者の差をとります：

$$\begin{aligned}
\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \frac{1}{1-\frac{u^2}{c^2}}\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial}{\partial t'} - u\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2 - \left(\frac{\partial}{\partial x'} - \frac{u}{c^2}\frac{\partial}{\partial t'}\right)^2\right] \\
&= \frac{1}{1-\frac{u^2}{c^2}}\left[\frac{1}{c^2}\left(1-\frac{u^2}{c^2}\right)\frac{\partial^2}{\partial t'^2} - \left(1-\frac{u^2}{c^2}\right)\frac{\partial^2}{\partial x'^2}\right] \\
&= \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t'^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2}
\end{aligned}$$

よって (7.4) は，問題文で与えられたローレンツ変換に対して不変であることがわかります．

[7.3]

この関係式はベクトルの式になっていますので，3 つの成分を持ちます．そこで z 成分について具体的に見てみましょう．

$$\begin{aligned}
(\text{左辺}) &= (-i\hbar\nabla_x + eA_y)(-i\hbar\nabla_y + eA_x) - (-i\hbar\nabla_y + eA_x)(-i\hbar\nabla_x + eA_y) \\
&= -\hbar^2\nabla_x\nabla_y - ie\hbar(\nabla_x A_y + A_x\nabla_y) + e^2 A_x A_y \\
&\quad - \left[-\hbar^2\nabla_y\nabla_x - ie\hbar(\nabla_y A_x + A_y\nabla_x) + e^2 A_y A_x\right] \\
&= -ie\hbar(\nabla_x A_y - \nabla_y A_x + A_x\nabla_y - A_y\nabla_x)
\end{aligned}$$

最後の等号では，$\nabla_x\nabla_y = \nabla_y\nabla_x$ を用いて整理しました．

さて，ここからは少し要注意ゾーンです．このまま計算を進めると，間違ってしまう可能性があります．6.4 節でも見たように，シュレーディンガー方程式では，常に波動関数がかかっていることを意識しておかないといけないのでした．特に注意を要するのは，$\nabla_x A_y$ のように，微分演算子の右に関数がある項です．この項は実際には，

$$\nabla_x A_y\psi = (\nabla_x A_y)\psi + A_y(\nabla_x\psi)$$

のように 2 項に展開されます．よって，

$$
\begin{aligned}
&-ie\hbar\left[(\nabla_x A_y)+A_y\nabla_x-(\nabla_y A_x)-A_x\nabla_y+A_x\nabla_y-A_y\nabla_x\right]\psi \\
&=-ie\hbar\left[(\nabla_x A_y)-(\nabla_y A_x)\right]\psi=-ie\hbar B_z\psi
\end{aligned}
$$

が示されます．最後の等号では，$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}$ を用いました．他の成分も同様に示すことができます．

なお，この関係式は左辺が演算子なのですが，右辺は演算子を含まない形になっているので，一見おかしな式に思えます．しかし上で見たように，$\boldsymbol{p}$ に含まれる微分演算を波動関数に施したものはちょうど打ち消し合い，$\boldsymbol{A}$ に施したものだけが $\boldsymbol{B}$ となって非演算子化されたことでこのような恒等変換が可能となりました．量子力学では演算子を含んだ計算は大変気をつけて行う必要があるのですが，このような関係式を用いて演算子を含まない形にできると，一気に計算がしやすくなります．

[7.4]

この計算ではじめに注意しておくべき点は，E' はエネルギーなのでただの数値ですが，V はポテンシャルなので，一般に座標に依存するということです．したがって，$\boldsymbol{p}$ と E' は交換可能ですが，$\boldsymbol{p}$ と V は順番を勝手に変えることはできません．

このことに注意して，(7.45) の左辺を部分に分けて詳しく見ていきましょう．はじめに $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})$ の項です．これについては Training 7.2 の関係から，

$$
(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})=p^2+i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p}=p^2
$$

となります．例えば $\nabla_x\nabla_y-\nabla_y\nabla_x=0$ のようになるので，$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p}=0$ です．間に V が挟まった場合は，$\boldsymbol{p}V\psi=(\boldsymbol{p}V)\psi+V\boldsymbol{p}\psi$ であることに注意して，

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})V(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})&=[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}V)](\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) \\
&=(\boldsymbol{p}V)\cdot\boldsymbol{p}+i\boldsymbol{\sigma}\cdot[(\boldsymbol{p}V)\times\boldsymbol{p}]+p^2 \\
&=p^2-\hbar^2(\boldsymbol{\nabla}V)\cdot\boldsymbol{\nabla}+\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot[(\boldsymbol{\nabla}V)\times\boldsymbol{p}]
\end{aligned}
$$

これで演算の済んでいない微分演算子は全て右端に集まりました．

(7.45) に上の結果を代入して整理すると，

$$
E'\psi_+=\left\{\left(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\right)\frac{p^2}{2m}+V-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\nabla}V)\cdot\boldsymbol{\nabla}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot[(\boldsymbol{\nabla}V)\times\boldsymbol{p}]\right\}\psi_+
$$

となり，(7.46) の形が導けます．本文で見たとおり，最後の項がスピン軌道相互作用に相当します．

[7.5]

(1) ハイゼンベルクの運動方程式から，

$$
i\hbar\frac{d\boldsymbol{L}}{dt}=\boldsymbol{L}H-H\boldsymbol{L}
$$

を計算します．ハミルトニアンに含まれる項のうち，βmc^2 は明らかに $\boldsymbol{L}$ と交換可能ですし，V も中心ポテンシャルであれ交換可能です．よって考えるべきは $c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}$ の項のみとなります．例えば L_x については，

$$i\hbar\frac{dL_x}{dt} = L_xH - HL_x = c\boldsymbol{\alpha}\cdot[(yp_z - zp_y)\,\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}\,(yp_z - zp_y)]$$

となるので，まず $[\cdots]$ 内，x 成分を見てみましょう：

$$(yp_z - zp_y)p_x - p_x(yp_z - zp_y) = yp_zp_x - yp_xp_z + zp_xp_y - zp_yp_x = 0$$

ここで，p_x と y, z が交換することを用いています．

次に y 成分を見てみましょう：

$$(yp_z - zp_y)p_y - p_y(yp_z - zp_y) = yp_zp_y - p_yyp_z = [y, p_y]p_z = i\hbar p_z$$

やはり p_y と z，p_z と y は交換可能なので，$[y, p_y] = i\hbar$ だけが残ります．z 成分についても同様です．

結局，

$$i\hbar\frac{dL_x}{dt} = -i\hbar c(\alpha_zp_y - \alpha_yp_z)$$

であることがわかります．つまり，予想に反して，$\boldsymbol{L}$ と H は交換可能ではなく，$\boldsymbol{L}$ は運動の恒量ではないことがわかります．

(2) 問題文で定義された $\boldsymbol{\sigma}'$ についても，運動方程式

$$i\hbar\frac{d\boldsymbol{\sigma}'_x}{dt} = \boldsymbol{\sigma}'_xH - H\boldsymbol{\sigma}'_x$$

を調べてみます．(7.56) の右辺で $\boldsymbol{\sigma}'$ と関係があるのは，$\boldsymbol{\sigma}$ を含んでいる $\boldsymbol{\alpha}$ のみです．そこで，$\boldsymbol{\sigma}'$ と $\boldsymbol{\alpha}$ の交換関係を調べてみます．

$$\begin{aligned}\sigma'_x\alpha_y - \alpha_y\sigma'_x &= \begin{pmatrix}\sigma_x & 0\\ 0 & \sigma_x\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \sigma_y\\ \sigma_y & 0\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0 & \sigma_y\\ \sigma_y & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sigma_x & 0\\ 0 & \sigma_x\end{pmatrix}\\ &= \begin{pmatrix}0 & i\sigma_z\\ i\sigma_z & 0\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0 & -i\sigma_z\\ -i\sigma_z & 0\end{pmatrix} = 2i\alpha_z\end{aligned}$$

このことから，例えば σ'_x については，

$$i\hbar\frac{d\sigma'_x}{dt} = \sigma'_xH - H\sigma'_x = 2ic(\alpha_zp_y - \alpha_yp_z)$$

となります．

(3) 上の問題から，$\boldsymbol{L} + \hbar\boldsymbol{\sigma}'/2$ が H と交換することは明らかです．そこで，

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}'$$

と定義すれば，

$$i\hbar\frac{d\boldsymbol{J}}{dt} = \boldsymbol{J}H - H\boldsymbol{J} = 0$$

となり，これが運動の恒量となっています．したがって，この $\boldsymbol{J}$ を全角運動量と見なすことができ，そこから

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}' = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}$$

を（中心力ポテンシャル中の）ディラック粒子のスピン角運動量と見なすことができるようになるのです．