

# 教科書

東京工業大学理学部物理学科

平山晃大

2015年8月8日

## 目次

1	古典力学	3
1.1	ラグランジアン	3
2	角運動量	3
2.1	軌道角運動量	3
2.1.1	軌道角運動量演算子の基本的性質	3
2.1.2	軌道角運動量の座標表示	6
2.1.3	角運動量の同時固有状態 $ l, m\rangle$	7
2.2	一般角運動量	7
2.3	スピン	14
2.4	角運動量の合成	14
2.5	極座標のラプラシアン	14
3	水素原子	14
3.1	2体問題、重心運動の分離	14
3.2	極座標におけるハミルトニアン	16
3.3	Laguerre 陪多項式 $L_n^k(x)$	16
4	ヘリウム原子	16
4.1	ヘリウム原子のハミルトニアン	16
5	原子核物理学	17
5.1	Nuclear Stability	17
5.1.1	ベータ ± 崩壊 ( $\beta^-$ and $\beta^+$ decays)	17
5.1.2	電子捕獲 ( <i>Electron capture</i> )	17
5.1.3	$\alpha$ 崩壊 ( $\alpha$ decay)	17
5.1.4	( <i>Light fragment emission</i> )	17
5.1.5	( <i>Fission</i> )	17

6	統計力学	18
6.1	熱力学関数 . . . . .	18
6.2	カノニカル分布 . . . . .	19
6.2.1	いろいろな公式 . . . . .	19
6.3	グランドカノニカル分布 . . . . .	20
6.3.1	いろいろな公式 . . . . .	21
7	電磁気学	23

# 1 古典力学

## 1.1 ラグランジアン

運動エネルギー、ポテンシャルをそれぞれ  $T, V$  とおく。このときラグランジアン  $L$  を次のように定義する。

$$L \stackrel{\text{def}}{=} T - V \quad (1)$$

作用積分

$$S[\mathbf{q}] = \int_{t_0}^{t_1} dt L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) \quad (2)$$

について最小作用の原理によりこの積分が最小になるように運動する。作用の停留条件  $\delta S[\mathbf{q}] = 0$  により次のオイラー＝ラグランジュ方程式が得られる:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (3)$$

また、一般化運動量はラグランジアンの一般化速度による微分によって定義される:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (4)$$

これを用いるとオイラー＝ラグランジュ方程式は次のように書くことができる:

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (5)$$

極座標のラグランジアンの例

$$L = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}^2) - V \quad (6)$$

により  $p_r, p_\theta, p_\varphi$  は次のよう:

$$p_r = m\dot{r}, p_\theta = mr^2\dot{\theta}, p_\varphi = mr^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi} \quad (7)$$

## 2 角運動量

### 2.1 軌道角運動量

#### 2.1.1 軌道角運動量演算子の基本的性質

$$\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = {}^t(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) \quad (8)$$

これをより一般的な形で表すと次のように書くことができる

$$\hat{l}_i = \sum_{j,k=x,y,z} \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{p}_k \quad (9)$$

これは古典力学における角運動量の表式を書き直しただけなので次の式をみたすことが必要でありそうである。

$$\hat{\mathbf{l}}' = -\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{l}} \quad (10)$$

この式の証明は次である。

証明

$\hat{l}' = \hat{l}$  を証明する。

$$\hat{l}'_{\alpha} = - \sum_{\beta, \gamma=x, y, z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{p}_{\beta} \hat{r}_{\gamma} \quad (11)$$

$$= - \sum_{\beta \neq \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{p}_{\beta} \hat{r}_{\gamma} - \sum_{\beta=\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{p}_{\beta} \hat{r}_{\gamma} \quad (12)$$

$$= - \sum_{\beta \neq \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{r}_{\gamma} \hat{p}_{\beta} + 0 \quad (13)$$

$$= \sum_{\beta, \gamma=x, y, z} \epsilon_{\alpha\gamma\beta} \hat{r}_{\beta} \hat{p}_{\gamma} \quad (14)$$

$$= \hat{l}_{\alpha} \quad (15)$$

また角運動量演算子がエルミート演算子になっていることすなわち  $\hat{l}'_{\alpha} = \hat{l}_{\alpha}$  であることを確かめる。

$$\hat{l}'_{\alpha} = \hat{l}_{\alpha} \quad (16)$$

証明

角運動量演算子の成分についてエルミート性を確認する。

$$\hat{l}'_{\alpha} = \sum_{\beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{p}_{\gamma} \hat{r}_{\beta} \quad (17)$$

$$= \sum_{\beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (i\hbar\delta_{\beta\gamma} - \hat{r}_{\beta} \hat{p}_{\gamma}) \quad (18)$$

$$= \sum_{\beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\gamma\beta} \hat{r}_{\beta} \hat{p}_{\gamma} \quad (19)$$

$$= \hat{l}_{\alpha} \quad (20)$$

角運動量演算子についての交換関係は  $[\hat{r}_{\alpha}, \hat{p}_{\beta}] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$  を用いることで次のようになる：

$$[\hat{l}_{\alpha}, \hat{l}_{\beta}] = i\hbar \sum_{\gamma=x, y, z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{l}_{\gamma} \quad (21)$$

この証明のためにまず次の式の証明を行う。

$$\hat{A}_{\alpha} \hat{B}_{\beta} - \hat{A}_{\beta} \hat{B}_{\alpha} = \sum_{\gamma=x, y, z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (\hat{\mathbf{A}} \times \hat{\mathbf{B}})_{\gamma} \quad (22)$$

証明

$\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}$  をベクトル演算子とする。

$$\sum_{\gamma=x, y, z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (\hat{\mathbf{A}} \times \hat{\mathbf{B}})_{\gamma} = \sum_{\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \left( \sum_{j, k} \epsilon_{\gamma j k} \hat{A}_j \hat{B}_k \right) \quad (23)$$

$$= \sum_{j,k} (\delta_{\alpha j} \delta_{\beta k} - \delta_{\alpha k} \delta_{\beta j}) \hat{A}_j \hat{B}_k \quad (24)$$

$$= \hat{A}_\alpha \hat{B}_\beta - \hat{A}_\beta \hat{B}_\alpha \quad (25)$$

これを用いて証明を行う。

$$[l_\alpha, l_\beta] = \sum_{i,j} \sum_{k,l} \epsilon_{\alpha i j} \epsilon_{\beta k l} \hat{r}_i \hat{p}_j \hat{r}_k \hat{p}_l - \sum_{i,j} \sum_{k,l} \epsilon_{\beta k l} \epsilon_{\alpha i j} \hat{r}_k \hat{p}_l \hat{r}_i \hat{p}_j \quad (26)$$

$$= \sum_{i,j} \sum_{k,l} \epsilon_{\alpha i j} \epsilon_{\beta k l} \{ (i\hbar \delta_{jk} \hat{r}_i \hat{p}_l - \hat{r}_i \hat{r}_k \hat{p}_j \hat{p}_l) - (i\hbar \delta_{li} \hat{r}_k - \hat{r}_i \hat{r}_k \hat{p}_j \hat{p}_l) \} \quad (27)$$

$$= i\hbar \left( \sum_{i,l} (\delta_{\alpha l} \delta_{i\beta} - \delta_{\alpha\beta} \delta_{i\beta}) \hat{r}_i \hat{p}_l - \sum_{j,k} \delta_{j,\beta} (\delta_{\alpha k} - \delta_{jk} \delta_{\alpha\beta}) \hat{r}_k \hat{p}_j \right) \quad (28)$$

$$= i\hbar \left( \hat{r}_\alpha \hat{p}_\beta - \hat{r}_\beta \hat{p}_\alpha + \sum_i \hat{r}_i \hat{p}_i - \sum_j \hat{r}_j \hat{p}_j \right) \quad (29)$$

$$= i\hbar (\hat{r}_\alpha \hat{p}_\beta - \hat{r}_\beta \hat{p}_\alpha) \quad (30)$$

$$= i\hbar \sum_\gamma \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}})_\gamma \quad (31)$$

$$= i\hbar \sum_\gamma \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{l}_\gamma \quad (32)$$

ここで式変形の途中で  $[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$  と  $\sum_k \epsilon_{ijk} \epsilon_{klm} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}$  を使い、先に示した式で  $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{p}}$  とした。

次の演算子についての性質を調べる。

$$\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y \quad (33)$$

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 \quad (34)$$

$\hat{l}^2$  がエルミートであることはすぐに示すことができるのでここでは省略する。次の交換関係については証明を行う。

$$\hat{l}^{2\dagger} = \hat{l}^2, \quad [\hat{l}^2, \hat{l}_\alpha] = 0 \quad (35)$$

証明

$\hat{l}^2$  と  $\hat{l}_\alpha$  の交換関係の計算を行う。

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_\alpha] = \sum_{i=x,y,z} [\hat{l}_i^2, \hat{l}_\alpha] \quad (36)$$

$$= \sum_{i=x,y,z} (\hat{l}_i [\hat{l}_i, \hat{l}_\alpha] + [\hat{l}_i, \hat{l}_\alpha] \hat{l}_i) \quad (37)$$

$$= \sum_{i=x,y,z} i\hbar \left( \sum_{\gamma=x,y,z} \epsilon_{i\alpha\gamma} \hat{l}_i \hat{l}_\gamma + \epsilon_{i\alpha\gamma} \hat{l}_\gamma \hat{l}_i \right) \quad (38)$$

$$= i\hbar \sum_{i=x,y,z} \sum_{\gamma=x,y,z} (-\epsilon_{\alpha i \gamma} \hat{l}_i \hat{l}_\gamma + \epsilon_{\alpha \gamma i} \hat{l}_\gamma \hat{l}_i) \quad (39)$$

$$= i\hbar(-[\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{l}}]_\alpha + [\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{l}}]_\alpha) \quad (40)$$

$$= 0 \quad (41)$$

### 2.1.2 軌道角運動量の座標表示

角運動量演算子は運動量演算子の座標表示  $\langle x|\hat{p}| \psi \rangle = (\hbar/i)(\partial/\partial x) \langle x|\psi \rangle$  により次の式を満たす。

$$\langle x, y, z|\hat{l}_x|\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \langle x, y, z|\psi \rangle \quad (42)$$

$$\langle x, y, z|\hat{l}_y|\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \langle x, y, z|\psi \rangle \quad (43)$$

$$\langle x, y, z|\hat{l}_z|\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \langle x, y, z|\psi \rangle \quad (44)$$

これを極座標表示で表す ( $|x, y, z\rangle = |r, \theta, \varphi\rangle$ )。また極座標として用いるのは習慣通りの次の置き方である：

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (45)$$

これを用いることにより次が得られる。

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \tan \varphi = \frac{y}{x}, \tan^2 \theta = \frac{x^2 + y^2}{z^2} \quad (46)$$

まず上を用いることで次の結果を得ることができ。

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r}, \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r}, \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta}, \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta}, \frac{\partial r}{\partial z} = \cos \theta, \frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sin \theta}{r} \quad (47)$$

これらを用いることより  $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$  は次のように書くことができる：

$$\langle r, \theta, \varphi|\hat{p}_x|\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x, y, z|\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left( \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi|\psi \rangle \quad (48)$$

$$\langle r, \theta, \varphi|\hat{p}_y|\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \langle x, y, z|\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left( \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi|\psi \rangle \quad (49)$$

$$\langle r, \theta, \varphi|\hat{p}_z|\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \langle x, y, z|\psi \rangle = \left( \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \langle r, \theta, \varphi|\psi \rangle \quad (50)$$

これを角運動量の式に代入して角運動量について次の式が成り立つ：

$$\langle r, \theta, \varphi|\hat{l}_x|\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left( -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \varphi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi|\psi \rangle \quad (51)$$

$$\langle r, \theta, \varphi|\hat{l}_y|\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left( +\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi|\psi \rangle \quad (52)$$

$$\langle r, \theta, \varphi|\hat{l}_z|\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle r, \theta, \varphi|\psi \rangle \quad (53)$$

また、次の演算子を定義する：

$$\begin{cases} \hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y \\ \hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 \end{cases} \quad (54)$$

この演算子について調べる。

$$\langle r, \theta, \varphi|\hat{l}_\pm|\psi \rangle = \langle r, \theta, \varphi|\hat{l}_x|\psi \rangle \pm i \langle r, \theta, \varphi|\hat{l}_y|\psi \rangle \quad (55)$$

$$= \pm \hbar e^{\pm i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi|\psi \rangle \quad (56)$$

また次の式が成り立つ。

$$\hat{l}_+ \hat{l}_- = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hbar \hat{l}_z \quad (57)$$

$$\hat{l}_- \hat{l}_+ = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 - \hbar \hat{l}_z \quad (58)$$

これにより  $\hat{l}^2$  について

$$\langle r, \theta, \varphi | \hat{l}^2 | \psi \rangle = \langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_+ \hat{l}_- - \hbar \hat{l}_z + \hat{l}_z^2 | \psi \rangle \quad (59)$$

$$(60)$$

が成り立つ。現れた演算子についてそれぞれ計算すると次の式が得られる。

$$\langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_+ \hat{l}_- | \psi \rangle = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\tan^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \langle r, \theta, \varphi | \psi \rangle \quad (61)$$

$$\langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_z | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle r, \theta, \varphi | \psi \rangle \quad (62)$$

$$\langle r, \theta, \varphi | \hat{l}^2 | \psi \rangle = -\hbar^2 \langle r, \theta, \varphi | \psi \rangle \quad (63)$$

ゆえにこれらをまとめて次の式が得られる:

$$\langle r, \theta, \varphi | \hat{l}^2 | \psi \rangle = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \langle r, \theta, \varphi | \psi \rangle \quad (64)$$

角運動量について  $r$  が現れていないので  $|r, \theta, \varphi\rangle = |r\rangle |\theta, \varphi\rangle$  と直積で表し、 $|\psi\rangle = |\psi_{\text{radial}}\rangle |\psi_{\text{angle}}\rangle$  とおく。 $|r\rangle, |\psi_{\text{radial}}\rangle \in \mathcal{H}_{\text{radial}}, |\theta, \varphi\rangle, |\psi_{\text{angle}}\rangle \in \mathcal{H}_{\text{angle}}$  である。これを用いて改めて書き換えることでこれまでに得た式は次のように書き換えられる:

$$\langle \theta, \varphi | \hat{l}^2 | \psi_{\text{angle}} \rangle = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \langle \theta, \varphi | \psi_{\text{angle}} \rangle \quad (65)$$

$$\begin{aligned} \langle \theta, \varphi | \hat{l}_{\pm} | \psi_{\text{angle}} \rangle &= \langle \theta, \varphi | \hat{l}_x | \psi_{\text{angle}} \rangle \pm i \langle \theta, \varphi | \hat{l}_y | \psi_{\text{angle}} \rangle \\ &= \pm \hbar e^{\pm i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle \theta, \varphi | \psi_{\text{angle}} \rangle \end{aligned} \quad (66)$$

$$\langle \theta, \varphi | \hat{l}_z | \psi_{\text{angle}} \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle \theta, \varphi | \psi_{\text{angle}} \rangle \quad (67)$$

### 2.1.3 角運動量の同時固有状態 $|l, m\rangle$

角運動量の大きさの演算子  $\hat{l}^2$  と角運動量演算子の  $z$  方向の演算子  $\hat{l}_z$  の同時固有状態  $|l, m\rangle$  を次のように定める:

$$\begin{cases} \hat{l}^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle \\ \hat{l}_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle \end{cases} \quad (68)$$

## 2.2 一般角運動量

ここからは  $\hat{l}$  のかわりに  $\hat{j}$  を用いる。上で導入した演算子  $\hat{j}^2$  と  $\hat{j}$  の成分の一つ  $\hat{j}_\alpha$  についてこれらと交換する演算子  $\hat{A}$  とを考える。 $\hat{j}^2$  と  $\hat{j}_\alpha$  が互いに独立であることは容易に示すことができる。これにより  $\hat{A}$  が  $\hat{j}^2, \hat{j}_\alpha$  と交換するならば  $\hat{A}$  は  $\hat{j}^2$  と  $\hat{j}_\alpha$  の関数として表すことができる (これも証明可能らしい)。ここで用いている  $\hat{j}_\alpha$  として伝統的に  $\hat{j}_z$  が用いられている。

これから  $\hat{j}^2, \hat{j}_z$  の同時固有ベクトル  $|j, m\rangle$  をつくりその性質を調べていく。

Hermite 演算子  $\hat{A}$  が与えられたときゼロでない任意のベクトル  $|\phi\rangle$  が与えられたとき、不等式  $\langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle > 0$  が成り立つならば  $\hat{A}$  は正定値であると呼ばれる。これを次のような表記を定義する:

$$\hat{A} > 0 \stackrel{\text{def}}{\iff} \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H} - \{0\} \quad \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle > 0 \quad (69)$$

正定値と同じように非負定値を定義する。これはゼロでない任意のベクトル  $|\phi\rangle$  に対して  $\langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle \geq 0$  が成り立つことである。次のような表記を定義する:

$$\hat{A} \geq 0 \stackrel{\text{def}}{\iff} \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H} - \{0\} \quad \langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle \geq 0 \quad (70)$$

Hermite 演算子が正定値であることはそのすべての固有値が正であることと同値であることが成り立つ。すなわち次が成り立つ:

$$\hat{A} > 0 \iff \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H} \quad \forall \lambda \in \mathbb{R} \quad [\hat{A}|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle \wedge |\phi\rangle \neq 0 \Rightarrow \lambda > 0] \quad (71)$$

証明

0 でない任意のベクトル  $|\phi\rangle$  を考える。 $\hat{A}$  を対角化する固有ベクトル  $\{|a_i\rangle\}$  が完全系を成すとする。これを用いると  $\langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle$  は次のように変形できる:

$$\langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle = \langle\phi|(\sum_i |a_i\rangle\langle a_i|)\hat{A}|\phi\rangle \quad (72)$$

$$= \sum_i a_i |\langle a_i|\phi\rangle|^2 \quad (73)$$

上の式の右辺を見ると固有値がすべて正であるとき右辺が正になるのは明らかであるから  $\Leftarrow$  が成り立つことはすぐにわかる。

逆については、 $|\phi\rangle$  が任意であることから  $|a_i\rangle$  以外と直交するように選ぶことによって (たとえば  $|\phi\rangle = |a_i\rangle$ ) 右辺  $= a_i |\langle a_i|\phi\rangle|^2$  となるからこれが正であるためには  $a_i > 0$  でなければならない。これはすべての固有値についていうことができるので  $\Rightarrow$  も成り立つ。

非負定値についても同様のことが言える。

$$\hat{A} \geq 0 \iff \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H} \quad \forall \lambda \in \mathbb{R} \quad [\hat{A}|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle \wedge |\phi\rangle \neq 0 \Rightarrow \lambda \geq 0] \quad (74)$$

また次のことが簡単にわかる。

$$\hat{A}^2 > 0 \quad (75)$$

$$\hat{A}, \hat{B} > 0 \Rightarrow \hat{A} + \hat{B} > 0 \quad (76)$$

これらを用いることで角運動量演算子  $\hat{j}$  の 2 乗の演算子  $\hat{j}^2$  の固有値について次のことがわかる。 $j \geq 0$  とし次のように書く。

$$\hat{j}^2 |\phi\rangle = j(j+1)\hbar^2 |\phi\rangle \quad \text{かつ} \quad |\phi\rangle \neq 0 \quad \text{with} \quad j \geq 0 \quad (77)$$

以前に考えたように  $[\hat{j}^2, \hat{j}_z] = 0$  が成り立つのでこれらは同時固有状態をとることができる。 $\hat{j}_z$  の固有値を  $m\hbar$  と書くことにする。この固有状態は規格化されているとして次のように書かれる。

$$\begin{cases} \hat{j}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \\ \hat{j}_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \end{cases} \quad \text{with } \| |j, m\rangle \| = 1 \wedge j \geq 0 \wedge m \in \mathbb{R} \quad (78)$$

次に  $\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2$  が非負定値であることがすぐに示すことができ、これを用いると次を得ることができる:

$$-\sqrt{j(j+1)} \leq m \leq \sqrt{j(j+1)} \quad (79)$$

証明

$\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 \geq 0 \iff \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H} - \{0\} \langle \phi | (\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2) | \phi \rangle \geq 0$  により任意のベクトル  $|\phi\rangle$  として  $|j, m\rangle$  を用いることにより次が得られる。

$$\langle j, m | \hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 | j, m \rangle = (j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2) \langle j, m | j, m \rangle \quad (80)$$

$$= \{j(j+1) - m^2\} \hbar^2 \geq 0 \quad (81)$$

ゆえに

$$-\sqrt{j(j+1)} \leq m \leq \sqrt{j(j+1)} \quad (82)$$

次に  $\hat{j}_\pm = \hat{j}_z \pm i\hat{j}_y$  を考える。これらは Hermite になっておらず互いに Hermite 共役になっていて  $\hat{j}_\pm^\dagger = \hat{j}_\mp$  が成り立っている。またこれらは次の交換関係を満たす。

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm\hbar\hat{j}_\pm, \quad [\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hbar\hat{j}_z \quad (83)$$

証明

これを示すのには以前に示した  $[\hat{j}_\alpha, \hat{j}_\beta] = i\hbar \sum_{x,y,z} \epsilon_{\alpha,\beta,\gamma} \hat{j}_\gamma$  を用いる。

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = [\hat{j}_z, \hat{j}_x] \pm i[\hat{j}_z, \hat{j}_y] \quad (84)$$

$$= i\hbar\hat{j}_y \pm \hbar\hat{j}_x \quad (85)$$

$$= \pm\hbar\hat{j}_\pm \quad (86)$$

まず第一式が示された。

$$[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = -i[\hat{j}_x, \hat{j}_y] + i[\hat{j}_y, \hat{j}_x] \quad (87)$$

$$= \hbar\hat{j}_z + \hbar\hat{j}_z \quad (88)$$

$$= 2\hbar\hat{j}_z \quad (89)$$

よって第二式も示された。

次に  $\hat{j}_\pm$  を用いた  $\hat{j}^2$  の表式を調べる。

$$\hat{j}^2 = \frac{1}{2}(\hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_-\hat{j}_+) + \hat{j}_z^2 \quad (90)$$

$$= \hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_z(\hat{j}_z - \hbar) \quad (91)$$

$$= \hat{j}_- \hat{j}_+ + \hat{j}_z (\hat{j}_z + \hbar) \quad (92)$$

証明

$\hat{j}_\pm \hat{j}_\mp$  を計算する。

$$\hat{j}_+ \hat{j}_- = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + i(\hat{j}_y \hat{j}_x - \hat{j}_x \hat{j}_y) = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + i[j_y, j_x] = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hbar \hat{j}_z \quad (93)$$

$$\hat{j}_- \hat{j}_+ = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + i(\hat{j}_x \hat{j}_y - \hat{j}_y \hat{j}_x) = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + i[j_x, j_y] = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 - \hbar \hat{j}_z \quad (94)$$

これらを足し合わせることで一番目の等式を得ることができる。また、 $\pm \hbar \hat{j}_z$  の項を移行することで第二、第三の等式を得ることができる。

また  $\hat{j}^2$  と上で導入した演算子  $\hat{j}_\pm$  と交換する。

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_\pm] = 0, [\hat{j}^2, \hat{j}_z] = 0 \quad (95)$$

証明

しょうめいは  
めんどうなので  
またあとで

上のことから次が成り立つことがわかる。

$$\begin{cases} \hat{j}^2 (\hat{j}_\pm |j, m\rangle) = j(j+1)\hbar^2 (\hat{j}_\pm |j, m\rangle) \\ \hat{j}_z (\hat{j}_\pm |j, m\rangle) = (m \pm 1)\hbar (\hat{j}_\pm |j, m\rangle) \end{cases} \quad (96)$$

証明

二つのうち第一式は明らかであるから第二式について証明を行う。演算子  $\hat{j}_z$  と  $\hat{j}_\pm$  の交換関係を用いる。

$$\hat{j}_z \hat{j}_\pm |j, m\rangle = (\hat{j}_\pm \hat{j}_z \pm \hbar \hat{j}_\pm) |j, m\rangle \quad (97)$$

$$= (m\hbar \pm \hbar) \hat{j}_\pm |j, m\rangle \quad (98)$$

$$= (m \pm 1)\hbar \hat{j}_\pm |j, m\rangle \quad (99)$$

よって第二式は証明された。

ゆえにこの式をよく見ると  $\hat{j}_\pm |j, m\rangle$  はこれが 0 ベクトルでなければ  $|j, m \pm 1\rangle$  (このベクトルの定義を思い出してほしい) に比例していると考えることができる。すなわち次のように書ける。

$$\hat{j}_\pm |j, m\rangle \neq 0 \Rightarrow \hat{j}_\pm |j, m\rangle \propto |j, m \pm 1\rangle \quad (100)$$

また  $\|\hat{j}_\pm |j, m\rangle\|$  を計算すると 0 ベクトルでないベクトルのノルムは 0 以上になることがわかっているのでこれを計算することで次が得られる。

$$-j \leq m \leq j \quad (101)$$

証明

$\|\hat{j}_\pm |j, m\rangle\|$  を計算する。 $\langle j, m | j, m \rangle = 1$ ,  $j \geq 0$  を用いる。

$$\|\hat{j}_\pm |j, m\rangle\| = \langle j, m | \hat{j}_\mp \hat{j}_\pm |j, m\rangle \quad (102)$$

$$= \langle j, m | (\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 \pm \hbar \hat{j}_z) |j, m\rangle \quad (103)$$

$$= \{j(j+1) - m(m \pm 1)\} \hbar^2 \quad (104)$$

$$= \{(j \pm m)(j \mp m) + (j \mp m)\} \hbar^2 \quad (105)$$

$$= (j \mp m)(j \pm m + 1) \hbar^2 \geq 0 \quad (106)$$

$\|\hat{j}_+ |j, m\rangle\|$  については、

$$-j - 1 \leq m \leq j. \quad (107)$$

$\|\hat{j}_- |j, m\rangle\|$  については、

$$-j \leq m \leq j + 1. \quad (108)$$

ゆえにどちらも成り立たないといけないので  $-j \leq m \leq j$  が成り立つ。

上の証明の過程から  $\hat{j}_\pm |j, m\rangle$  について次が成り立つ。

$$\hat{j}_\pm |j, m\rangle = 0 \Leftrightarrow m = \pm j \quad (109)$$

ここから同時固有状態  $|j, m\rangle$  に繰り返し  $\hat{j}_+$  を作用させることを考える。 $k$  回作用させたとき次のことが成り立つ。

$$\hat{j}_+^k |j, m\rangle \neq 0 \implies \hat{j}_+^k |j, m\rangle \propto |j, m+k\rangle \quad (110)$$

証明

これを証明するには  $\hat{j}_+^k |j, m\rangle (\neq 0)$  に  $\hat{j}_z, \hat{j}^2$  を作用させたとき固有値がそれぞれ  $m+k, j(j+1)$  となることを示せばよい。 $\hat{j}^2$  と  $\hat{j}_+$  は交換することは以前に示したものでそれを繰り返し用いることで  $\hat{j}^2$  について次が得られる。

$$\hat{j}^2 (\hat{j}_+^k |j, m\rangle) = j(j+1) \hbar^2 (\hat{j}_+^k |j, m\rangle) \quad (111)$$

次に  $\hat{j}_z$  を作用させた場合を考える。以前に示した交換関係により  $\hat{j}_z \hat{j}_+ = \hbar \hat{j}_+ + \hat{j}_+ \hat{j}_z$  が成り立っており、これを用いることで次が得られる。

$$\hat{j}_z (\hat{j}_+^k |j, m\rangle) = \hat{j}_+ (\hbar + \hat{j}_z) \hat{j}_+^{k-1} |j, m\rangle \quad (112)$$

$$= \hbar \hat{j}_+^k |j, m\rangle + \hat{j}_+ \hat{j}_z \hat{j}_+^{k-1} |j, m\rangle \quad (113)$$

$$= \dots \quad (114)$$

$$= k\hbar\hat{j}_+^k |j, m\rangle + \hat{j}_+^k \hat{j}_z |j, m\rangle \quad (115)$$

$$= (m+k)\hbar\hat{j}_+^k |j, m\rangle \quad (116)$$

このことから  $\hat{j}_+^k |j, m\rangle$  が 0 でなければ固有ベクトル  $|j, m+k\rangle$  に比例していると考えてもよいことがわかる。

また  $j, m$  について次が成り立つ。

$$j-m, j+m \in \mathbb{N}_0 \quad (\mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \dots\}) \quad (117)$$

証明

$j-m$  についての証明をまず行う。

$j-m \in \mathbb{N}_0$  のとき、このとき  $k$  は 1 から  $j-m$  の値をとることができる (これは以前に示した  $|j, 0\rangle$  の  $0$  の絶対値は  $j$  を超えないという不等式による)。よって以前の結果から  $k=1, \dots, j-m$  とすることで次のことがわかる。

$$|j, m\rangle, \hat{j}_+ |j, m\rangle, \dots, \hat{j}_+^{j-m} |j, m\rangle \propto |j, m\rangle, |j, m+1\rangle, \dots, |j, j\rangle \quad (118)$$

また、以前に示した  $\hat{j}_\pm |j, m\rangle = 0 \iff m = \pm j$  を考えると  $k \geq j-m+1$  では  $\hat{j}_+^k |j, m\rangle$  は 0 ベクトルになる。すなわち、

$$\hat{j}_+^k |j, m\rangle = 0 \quad \text{for } k = j-m+1, j-m+2, \dots, j \quad (119)$$

次に、 $j-m \notin \mathbb{N}_0$  のときを考える。この場合に矛盾が乗じることを示す。

$|j, m\rangle, \hat{j}_+ |j, m\rangle, \dots, \hat{j}_+^k |j, m\rangle$  ( $k=0, 1, 2, \dots$ ) を考える。このベクトルはすべて 0 ベクトルではない。(なぜなら「 $\hat{j}_\pm |j, m\rangle = 0 \iff m = \pm j$ 」より先の列が 0 ベクトルでないならば、それぞれ  $|j, m\rangle, |j, m+1\rangle, \dots, |j, m+k\rangle$  に比例することを以前に示したため (下から  $k=0$  から) 考えるとよい)  $|j, m\rangle, |j, m+1\rangle, \dots, |j, m+k\rangle$  は無限に存在するが  $k$  が大きくなると  $|j, 0\rangle$  の  $0$  の絶対値は  $j$  を超えないという不等式を満たさなくなる。よって仮定が間違っていたことがわかる。

$j+m \in \mathbb{N}_0$  の証明は  $\hat{j}_-$  について同様の考察を行うことによって証明できる。

上のことから  $j, m$  について次のことがわかる。

$j$  は整数または半整数である。

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots \quad (120)$$

$m$  も整数または半整数を  $j$  によってとる。

$$m = -j, -j+1, -j+2, \dots, j-2, j-1, j \quad (121)$$

上のことは容易に証明できるのでここでは省略する。 $\hat{j}_+^k |j, m\rangle \propto |j, m+k\rangle$  がわかったので比例係数を定める。まず  $\hat{j}_\pm |j, m\rangle = C_\pm |j, m \pm 1\rangle$  とおいてこの係数を計算すると次のようになる：

$$\begin{cases} \hat{j}_+ |j, m\rangle = e^{i\theta_{j,m}} \sqrt{(j+m+1)(j-m)\hbar} |j, m+1\rangle \\ \hat{j}_- |j, m\rangle = e^{-i\theta_{j,m-1}} \sqrt{(j+m)(j-m+1)\hbar} |j, m-1\rangle \end{cases} \quad (122)$$

証明

まず  $\hat{j}_{\pm} |j, m\rangle$  ノルムを計算する。これは以前に計算した結果を用いることで、

$$\|\hat{j}_{\pm} |j, m\rangle\| = \langle j, m | \hat{j}_{\mp} \hat{j}_{\pm} |j, m\rangle \quad (123)$$

$$= (j \mp m)(j \pm m + 1)\hbar^2 \quad (124)$$

よって  $C_{\pm}$  は位相部分も考慮することで上のようになることがわかる。

よく用いられる規約として  $\theta_{j,m} = 0$  があり、これを用いることで次が得られる:

$$\begin{cases} \hat{j}_+ |j, m\rangle = \sqrt{(j+m+1)(j-m)}\hbar |j, m+1\rangle \\ \hat{j}_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar |j, m-1\rangle \end{cases} \quad (125)$$

また  $|j, m\rangle$  について次の式が成り立つ:

$$|j, m\rangle = \left[ \frac{1}{(2j)!} \frac{(j+m)!}{(j-m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\hat{j}_-}{\hbar} \right)^{j-m} |j, j\rangle, \quad |j, m\rangle = \left[ \frac{1}{(2j)!} \frac{(j-m)!}{(j+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\hat{j}_+}{\hbar} \right)^{j+m} |j, -j\rangle \quad (126)$$

証明

以前に得ることのできた  $\hat{j}_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar |j, m-1\rangle$  を繰り返し用いる。

$$\hat{j}_- |j, j\rangle = \sqrt{2j \cdot 1}\hbar |j, j-1\rangle \quad (127)$$

めんどろなののでまたあとで

以上のことをここにまとめておく。

$$\begin{cases} \hat{j}_z^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \\ \hat{j}_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \end{cases} \quad \text{ただし} \quad \begin{cases} j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \end{cases} \quad (128)$$

$$\hat{j}_+ |j, j\rangle = \hat{j}_- |j, -j\rangle = 0 \quad (129)$$

$$\begin{cases} \hat{j}_+ |j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar |j, m+1\rangle \\ \hat{j}_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar |j, m-1\rangle \end{cases} \quad (130)$$

$$|j, m\rangle = \left[ \frac{1}{(2j)!} \frac{(j+m)!}{(j-m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\hat{j}_-}{\hbar} \right)^{j-m} |j, j\rangle, \quad |j, m\rangle = \left[ \frac{1}{(2j)!} \frac{(j-m)!}{(j+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\hat{j}_+}{\hbar} \right)^{j+m} |j, -j\rangle \quad (131)$$

## 2.3 スピン

角運動量演算子は Hermite でありまた、次の式を満たす:

$$[\hat{j}_\alpha, \hat{j}_\beta] = i\hbar \sum_{x,y,z} \epsilon_{\alpha,\beta,\gamma} \hat{j}_\gamma \quad (132)$$

これが角運動量の要件である。また、 $\hat{j}^2$  と角運動量演算子の  $z$  成分  $\hat{j}_z$  の規格化された同時固有状態は  $|j, m\rangle$  と書かれる:

$$\begin{cases} \hat{j}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \\ \hat{j}_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \end{cases} \quad (133)$$

この固有値  $j$  はゼロまたは正の整数または半整数をとる。固有値  $m$  は  $-j$  以上  $j$  以下の間隔 1 の整数または半整数をとることがわかっている。

$$\begin{cases} j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \\ m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \end{cases} \quad (134)$$

また昇降演算子  $\hat{j}_\pm$  を等式  $\hat{j}_\pm = \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y$  によって導入した。この演算子については次の式が成り立っていた:

$$\hat{j}_\pm |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\hbar |j, m \pm 1\rangle \quad (135)$$

軌道角運動量の量子数  $l$  は半整数値をとることができず、整数のみであった。

ここでは粒子の内部自由度であるスピンを考える。そのスピンの演算子  $\hat{s}$  について次の式が成り立つ:

$$\begin{cases} \hat{s}^2 |s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m\rangle \\ \hat{s}_z |s, m\rangle = m\hbar |s, m\rangle \end{cases} \quad \text{with } \||s, m\rangle\| = 1 \quad (136)$$

この  $s$  は 0 以上の整数または半整数をとり、半整数のスピンを持つ粒子は Fermi 粒子と呼ばれ整数のスピンを持つ粒子は Bose 粒子と呼ばれる。

## 2.4 角運動量の合成

## 2.5 極座標のラプラシアン

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (137)$$

$$= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (138)$$

これによると

$$\langle x, y, z | \hat{p}^2 | \psi \rangle = \left( \frac{\hbar}{i} \right)^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \langle x, y, z | \psi \rangle \quad (139)$$

$$= -\hbar^2 \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \langle r, \theta, \varphi | \psi \rangle \quad (140)$$

## 3 水素原子

### 3.1 2体問題、重心運動の分離

ポテンシャルが2つの粒子の相対的な位置  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  によって決まるとき相対座標と重心座標を用いることにより2つの3次元の問題に分かれる。2つの粒子の質量をそれぞれ  $m_1, m_2$ , 運動量を  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ , 位置を

$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  とおく。今考えるハミルトニアンは

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (141)$$

という形である。これを次のように重心座標と相対座標を用いる。

$$M = m_1 + m_2, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \quad (142)$$

$$m = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{p} = \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}$$

ここで  $\mathbf{p}$  については  $\mathbf{p}/m = \mathbf{p}_1/m_1 - \mathbf{p}_2/m_2$  と相対速度になることがわかる。この変換によって次の式が成り立つ:

$$m_1m_2 = mM \quad (143)$$

$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} = \frac{p^2}{2m} + \frac{P^2}{2M} \quad (144)$$

$$m_1r_1^2 + m_2r_2^2 = mr^2 + MR^2 \quad (145)$$

$$\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}_2 = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{R} \quad (146)$$

$$\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 = \mathbf{l} + \mathbf{L} \quad (147)$$

また (原子核の質量)  $\gg$  (電子の質量) であるから  $m \simeq m_e$  である。これらを用いることでハミルトニアンを書き換えると次のように書くことができる:

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (148)$$

この変数変換を量子力学にも導入する。交換子を計算すると次の関係が成り立つことが容易にわかる。以下にあげるもの以外の交換子は 0 になることも容易にわかる。

$$[r_j, p_k] = i\hbar\delta_{j,k}, \quad [R_j, P_k] = i\hbar\delta_{j,k} \quad (149)$$

式 (148) は重心運動の部分と相対部分に分けることができ次のように分ける。

$$H = H_R + H_r \quad (150)$$

ただし、

$$H_R = \frac{\mathbf{P}^2}{2M}, H_r = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \quad (151)$$

このときシュレディンガー方程式は

$$\left\{ \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} \right) + \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) \right) \right\} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (152)$$

と書くことができ、さらにこのシュレディンガー方程式の解は変数分離することができて

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{R})\varphi(\mathbf{r}) \quad (153)$$

と書くことができる。ただし  $\Phi, \varphi$  は変数分離した次の式を満たす。

$$H_R\Phi(\mathbf{R}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} \right) \Phi(\mathbf{R}) = E_R\Phi(\mathbf{R}) \quad (154)$$

$$H_r\varphi(\mathbf{r}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) \right) \varphi(\mathbf{r}) = E_r\varphi(\mathbf{r}) \quad (155)$$

また系全体の固有エネルギーは部分系のエネルギーの和

$$E = E_R + E_r \quad (156)$$

である。ここまでの結果を用いて水素原子のシュレディンガー方程式を解く。

### 3.2 極座標におけるハミルトニアン

上で考えてきた相対運動に対するシュレディンガー方程式を考える。すると中心力ポテンシャル  $V(r)$  の中の質量  $m$  の粒子のシュレディンガー方程式を調べることと同値である。この粒子の運動量を  $\mathbf{p}$  とし、位置ベクトルを  $\mathbf{r}$  とするとハミルトニアンは次のように書くことができる:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(r) \quad (157)$$

時間によらないシュレディンガー方程式は次のように書くことができる:

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (158)$$

$$\therefore \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (159)$$

### 3.3 Laguerre 陪多項式 $L_n^k(x)$

Laguerre 多項式は次のように定義される:

$$L_n(z) = e^z \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^n) \quad (160)$$

これが  $n$  次の多項式であることはすぐにわかる。Laguerre 陪多項式は次のように定義される:

$$L_n^k(z) = (-1)^k \frac{d^k}{dz^k} L_{n+k}(z) \quad (161)$$

この Laguerre 陪多項式について次の等式が成り立つ。

$$L_n^k(z) = \{(n+k)!\}^2 \sum_{i=0}^n \frac{(-z)^i}{(i+k)!(n-i)!i!} \quad (162)$$

以下でこの式が成り立つことを示す。

## 4 ヘリウム原子

ヘリウム原子はシュレディンガー方程式を解析的に解くことができない。このため摂動や変分などの近似法を用いることになる。

### 4.1 ヘリウム原子のハミルトニアン

系のハミルトニアンは原子核は静止しているとするとき 2 電子の位置をそれぞれ  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  とし運動量を  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$  とすることで次のように書くことができる:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (163)$$

最後の項は電子同士の相互作用によって生じる項である。

## 5 原子核物理学

### 5.1 Nuclear Stability

#### 5.1.1 ベータ ± 崩壊 ( $\beta^-$ and $\beta^+$ decays)

軽い安定核は陽子数  $Z$  と中性子数  $N$  がほぼ等しい ( $N \approx Z$ )。重い原子核では陽子間のクーロン斥力を補うために中性子数  $N$  が大きくなる。どちらの場合であっても平衡状態を保つための  $N$  より多く中性子が存在するときは、電子と反ニュートリノを放出して  $\beta^-$  decay が起こる。この反応は次のように中性子が陽子に変わり、電子と反ニュートリノが放出される。(ここでのニュートリノは電子ニュートリノである)



中性子数  $N$  が平衡を保つのに必要な量に足りていない場合は  $\beta^+$  decay が起こる。この反応は次のように陽子が中性子に変わり、陽電子とニュートリノが放出される。



これらで生じた  $Y$  は必ずしも安定ではなく、同様の過程やほかの崩壊をしよう。

$e^\pm$  をこれらの過程では生じさせるためのエネルギー差が必要になる。

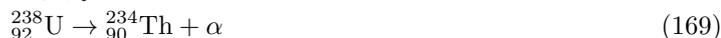
#### 5.1.2 電子捕獲 (*Electron capture*)

原子中の電子が原子核に取り込まれて陽子と反応して 1 陽子数を減らし 1 中性子数を増やす。この反応は  $\beta^+$  decay と同じで陽子数が過剰で不安定な原子核で起こりやすく、 $\beta^+$  decay と競合する場合もある。親核と娘核のエネルギー差が 1.022MeV に満たない場合は電子捕獲のみが起こる。反応は次のようである。



#### 5.1.3 $\alpha$ 崩壊 ( $\alpha$ decay)

この崩壊では  $\alpha$  粒子 ( ${}^4\text{He}$  原子核) が放出されるもので、この過程はエネルギーを考えると重い原子核のみに許されている。例としては次のような反応である。



この時放出するのは 4.2MeV の  $\alpha$  粒子である。 $Z > 83$  の安定元素がないのはこの  $\alpha$  崩壊のためである。

#### 5.1.4 (*Light fragment emission*)

${}^4\text{He}$  より重い原子核はエネルギー的に許されたいくつかの過程でのみ放出される。 ${}^{14}\text{C}$ ,  ${}^{24}\text{Ne}$ ,  ${}^{28}\text{Mg}$ ,  ${}^{32}\text{Si}$  が重い原子核から放出されたのは実験的にわかっているが、それらはすべて珍しく測定が難しい。分かれた方がエネルギーが得するよ!ということ

#### 5.1.5 (*Fission*)

## 6 統計力学

### 6.1 熱力学関数

次のやつらをだすなら  $dQ = dU + PdV - \mu dN$  とおもって  $dS = dQ/T$  を使うといいんじゃない

内部エネルギー:  $U$

$$dU(S, V, N) = TdS - pdV + \mu dN \quad (170)$$

Helmholtz 自由エネルギー:  $F(T, V, N) = U - TS$

$$dF(T, V, N) = -SdT - pdV + \mu dN \quad (171)$$

Gibbs 自由エネルギー:  $G(T, P, N) = F + PV$

$$dG(T, P, N) = -SdT + VdP + \mu dN \quad (172)$$

エンタルピー:  $H(S, P, N) = U + PV$

$$dH(S, P, N) = TdS + VdP + \mu dN \quad (173)$$

大きなポテンシャル:  $J(T, V, \mu) = F - \mu N$

$$dJ(T, V, \mu) = -SdT - PdV - Nd\mu \quad (174)$$

エントロピー:  $S(U, V, N)$

$$dS(U, V, N) = \frac{1}{T}dU + \frac{p}{T}dV - \frac{\mu}{T}dN \quad (175)$$

導出

自由エネルギーについての導出を行う。

$$dU = TdS - pdV + \mu dN \quad (176)$$

$$= d(TS) - SdT - pdV + \mu dN \quad (177)$$

$$\therefore d(U - TS) = -SdT - pdV + \mu dN \quad (178)$$

ここで  $F(T, V, N) = U - TS$  とおくと  $dF(T, V, N) = -SdT - pdV + \mu dN$  を得ることができる。ほかについても同様。

## 6.2 カノニカル分布

分配関数:  $Z(\beta)$ , 状態  $i$  をとる確率:  $p_i$

$$Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta E_i}, \quad p_i^{can} = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z(\beta)} \quad (179)$$

物理量  $\hat{f}$  の期待値は次のように書くことができる:

$$\langle \hat{f} \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_i f_i e^{-\beta E_i} \quad (180)$$

粒子を区別しないような場合は次のような分配関数を用いる:

$$Z_{V,N}(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (181)$$

期待値は次のようになる:

$$\langle \hat{f} \rangle = \frac{1}{Z_{V,N}(\beta)} \frac{1}{N!} \sum_i f_i e^{-\beta E_i} \quad (182)$$

これによると期待値の形は今までと変わらないことがわかる。(なぜなら  $N! \times Z_{V,N} = \sum_i e^{-\beta E_i}$  であるから。)

### 6.2.1 いろんな公式

上のことからカノニカル分布ではエネルギーの期待値  $\langle \hat{H} \rangle$  は次のように書くことができる:

$$\langle \hat{H} \rangle^{can} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta) \quad (183)$$

証明

これはすぐできるし  
いまは時間がないのでまたあとで

体積  $V$  の中に  $N$  個の同種粒子があるとき  $Z_{V,N}(\beta) = (1/N!) \sum_i e^{-\beta E_i}$  を用いて、Helmholtz の自由エネルギーは次のように書くことができる:

$$F(\beta, V, N) = -\frac{1}{\beta} \log Z_{V,N} \quad (184)$$

なんかわからないけど普通の分配関数でもいいのかもしれない ← だめか ← 何かわからないけど  $N$  個のスピンのときとかも使ってるみたい  $N$  びっくりついてないのに

### 6.3 グランドカノニカル分布

まず粒子が区別できないときの表式:

大分配関数:  $\Xi_V(\beta, \mu)$ , 状態  $i$  をとる確率:  $p_i$

$$\Xi_V(\beta, \mu) = \sum_{i=1}^{\infty} \exp[-\beta E_i + \beta \mu N_i], \quad p_i = \frac{1}{\Xi_V(\beta, \mu)} \exp[-\beta E_i + \beta \mu N_i] \quad (185)$$

次に粒子が区別できるときの表式: 『田崎』にはごちゃごちゃ書いてあるけど結局は次のように書く

大分配関数:  $\Xi_V(\beta, \mu)$ , 状態  $i$  をとる確率:  $p_i$

$$\Xi_V(\beta, \mu) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{N_i!} \exp[-\beta E_i + \beta \mu N_i], \quad p_i = \frac{1}{N_i! \Xi_V(\beta, \mu)} \exp[-\beta E_i + \beta \mu N_i] \quad (186)$$

分配関数がわかっているときは次のように書くことができ便利

$$\Xi(\beta, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{i=1}^{\infty} \exp[-\beta E_i^{(N)} + \beta \mu N] = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta \mu N} Z_{V,N}(\beta) \quad (187)$$

### 6.3.1 いろんな公式

粒子数  $N$  の期待値  $\langle N \rangle_{\beta, \mu}^{GC}$

$$\langle N \rangle_{\beta, \mu}^{GC} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \log \Xi(\beta, \mu) \quad (188)$$

証明

この証明は右辺を計算してみたらできる  
のでいまわやりません

$$\langle H \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \Xi_V + \frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \log \Xi \quad (189)$$

証明

この証明は右辺を計算してみたらできる  
のでいまわやりません

ヘルムホルツ自由エネルギーみたいに  $J$  をもちいるこれはグランドポテンシャルである。

$$J = -\frac{1}{\beta} \log \Xi \quad (190)$$

平衡状態における圧力  $P$  は次のように書ける:

$$P = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \log \Xi(\beta, \mu) \quad (191)$$

$V$  が大きい時には

$$P = \frac{\log \Xi(\beta, \mu)}{\beta V} = -j, \quad \text{ただし } j = \frac{J}{V} \quad (192)$$

## ボーズ分布関数とフェルミ分布関数

エネルギー  $\epsilon_j$  の状態が  $n_j$  個ある時に大分配関数は次のように書くことができる:

$$\Xi(\beta, \mu) = \sum_{(n_1, n_2, \dots)} \exp \left[ -\beta \sum_{j=1}^{\infty} \epsilon_j n_j + \beta \mu \sum_{j=1}^{\infty} n_j \right] \quad (193)$$

$$= \sum_{(n_1, n_2, \dots)} \prod_{j=1}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)n_j} \quad (194)$$

$$= \prod_{j=1}^{\infty} \left( \sum_n e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)n} \right) \quad (195)$$

$$= \prod_{j=1}^{\infty} \Xi_j(\beta, \mu) \quad (196)$$

ただし、 $\Xi_j(\beta, \mu) = \sum_n e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)n}$  ( $n$  はすべての  $n$  についてたしあげる) である。これを計算すれば大分配関数が求められる。ボゾンの場合、 $n$  は 0 以上ですべて足しあげるから

$$\Xi_j^{Bose}(\beta, \mu) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)n} = \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}} \quad (197)$$

フェルミオンの場合、 $n$  は 0 と 1 のみをとるので

$$\Xi_j^{Fermi}(\beta, \mu) = \sum_{n=0}^1 e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)n} = 1 + e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)} \quad (198)$$

ここで 1 粒子エネルギー固有状態の占有数  $n_j$  の期待値  $\langle n_j \rangle$  を計算する。

$$\langle n_j \rangle = \frac{1}{\Xi(\beta, \mu)} \sum_{(n_1, n_2, \dots)} n_j \exp \left[ -\beta \sum_{k=1}^{\infty} \epsilon_k n_k + \beta \mu \sum_{k=1}^{\infty} n_k \right] \quad (199)$$

$$= \frac{1}{\Xi(\beta, \mu)} \sum_{(n_1, n_2, \dots)} n_j \prod_{k=1}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)n_k} \quad (200)$$

$$= \frac{1}{\Xi_j(\beta, \mu)} \sum_{n_j} n_j e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)n_j} \quad (201)$$

$$= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \log \Xi_j(\beta, \mu) \quad (202)$$

これらをボゾンの場合とフェルミオンの場合で計算すると

$$\langle n_j \rangle^{Bose} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \log \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} - 1} \quad (203)$$

$$\langle n_j \rangle^{Fermi} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \log(1 + e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} + 1} \quad (204)$$

これをボーズ分布関数、フェルミ分布関数という。

$$f_{\beta, \mu}(\epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} - 1}, & \text{ボゾンの場合} \\ \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} + 1}, & \text{フェルミオンの場合} \end{cases} \quad (205)$$

全粒子数の期待値  $\langle N \rangle$  は次のように書ける:

$$\langle N \rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \langle n_j \rangle = \sum_{j=1}^{\infty} f_{\beta, \mu}(\epsilon_j) = \int_0^{\infty} d\epsilon D(\epsilon) f_{\beta, \mu}(\epsilon) \quad (206)$$

$D(\epsilon)$  は一粒子状態密度である。 ( $D(\epsilon) = d\Omega/d\epsilon$ )  
 エネルギーの期待値が次のように書ける:

$$\langle H \rangle = \int d\epsilon \epsilon D(\epsilon) f_{\beta, \mu}(\epsilon) \quad (207)$$

## 7 電磁気学

### マクスウェル方程式

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (208)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_e \quad (209)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} = 0 \quad (210)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D} = \mathbf{j}_e \quad (211)$$

ここで電束密度  $\mathbf{D}$  は

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon \mathbf{E} \quad (212)$$

である。物質中で分極電荷密度  $\rho_P$  は

$$\rho_P = -\nabla \cdot \mathbf{P} \quad (213)$$

で表すことができる。表面の分極電荷密度  $\sigma_P$  は

$$\mathbf{P} \cdot \mathbf{n} = \sigma_P \quad (214)$$

と書くことができる。 $\mathbf{n}$  は表面に垂直なベクトルである。