

「波動力学の数理的ことば」

佐 藤 均

— Ergänzung —

Einige Grundzüge der heutigen Wellenmechanik

von. Hitoshi Sato

前回は波動力学の創始者についての物理思想的側面のみを扱い、肝腎な数理的的局面にはふれる余裕がなかった。今回の研究はこれを補完するためのものである。とりあえず波動と波束での数学的議論からスタートする様試みた。

◇分散法則と波動方程式 (フォトン場)

我々はすでに多くの関連に於いて光電効果, Compton 効果が光や電磁波のエネルギーや運動量が量子化されていると仮定してのみ説明可能であることを確かめた。これは de Broglie-Einstein の式が妥当する。 $E=h\nu=\hbar\omega$ 及び $p=h/\lambda=\hbar k$, ここで $\hbar=h/2\pi$ である。元来古典的輻射理論の枠内で導かれた $E=c_0 p$ の関係が依然として真空中での電磁場に対しても妥当することを意味する。 w と k に対しても妥当することを意味する。 w と k に対しこれに対応する関係は $w=c_0 k$ である。エネルギー E と運動量 p , 択一的には w と k との間のこれ等二つの関係はフォトン場の分散法則を決定する。真空中でのフォトン場からスタートすれば我々は次の各式を得るであろう。 $v_f=w/k=c_0$, $v_g=dw/dk=c_0$ $\therefore v_f=v_g$ 。すなわち位相速度と群速度は共に光速と一致してしまう。この事は物理学的には平面波のオーバーラップにより得られた波束が光速で伝わることを意味する。これら平面波の波動ベクトルが共線上にあればその波束は自己の形を維持し、つまりその波の拡がりは歪の無いものとなる。従ってこの場合 t の小さな値に限定されることなくより一般的な波動場の解析が出来る、と云うのはこの分散法則はここでは次の様に書けるからである。

$$w(k)=w_0+c_0(k-k_0), \text{ ここで } w_0=c_0 k_0 \text{ である。} \quad (I)$$

フォトン場での波動の拡がりに対するこの性質は大変ユニークである、何故ならばすべての他の分散法則は波束の形に依り、一つの時間依存的な歪をもたらすからである。前回に方程式, $\phi(r, t)=\iint d^3k dw a(k, w) \exp [i(k \cdot r - wt)]$ において或る波束の為の一般式を提示し

た。これをこのフォトン場に対し表現すれば次の様に書けるに違いない。

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\hbar^3} \int d^3p a(\mathbf{p}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right] \quad (\text{I})$$

これから次式が誘導される筈である。

$$\left(\Delta^2 - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\hbar^3} \int d^3p \frac{E^2 - \mathbf{p}^2 c_0^2}{\hbar^2 c_0^2} a(\mathbf{p}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right] \quad (\text{II})$$

フォトンに対する分散則に依れば、この被積分値は真空中のフォトンに対しゼロになる。

それで我々は $\left(\Delta^2 - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \phi(\mathbf{r}, t) = 0$ の式がフォトン場、電磁場の為の波動方程式であることを認める。この結果を我々はいわば一つの簡単な記憶をする為のルールに直おすことができる。つまり若しこの分散則が或る形で書かれそこで運動量 \mathbf{p} が奇数乗で出現するのでなければ、その分散則中に下記の如き置換を導入することによりこれに属する波動方程式に於いて、operator (線形演算子) を得ることになる。すなわち、 $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} : \mathbf{p} \rightarrow i\hbar \Delta$

この問題になるケースでは我々は、 $E^2 - \mathbf{p}^2 c_0^2 = 0$ の関係式からスタートするであろう。

◇ De Broglie の物質波の仮説

元来物質波の大胆な考えは相対性理論の形式から導かれ、つまり量子を記述する基本量である三次元の運動量ベクトル $\vec{\mathbf{p}}$ とエネルギー E とを一組にした $(E, \vec{\mathbf{p}})$ と、波を記述する基本量の波数ベクトル $\vec{\mathbf{k}}$ と振動数 ω とをセットにした $(\omega, \vec{\mathbf{k}})$ がミンコフスキー的構造をもつ相対性理論ではいずれも一つの Vierervektor の性質を持つことに着目されたのであった。そこでこの二つの四次元ベクトルを定数 \hbar によって対応させる事によって物質粒子に波動の性質を融合させるのだがこの時空的に局在化した粒子に対応する波は Young 的な波でも又 Huygens 的な波でもなく、有限な拡がりをもつ Wellenpaket (波束) になる。そして所謂 de Broglie の式は粒子運動を示すヤコビ関数 S と波動の位相関数 φ をやはりプランク定数 h で結合させた結果に外ならない。⁸⁾ $S = \hbar \varphi$ さて電磁場に対する波と粒子の dualism から出発し Louis de Broglie は一個の粒子が適当な実験条件下で物質波として挙動するとした提案をしたがその際次式があてはまる。

$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \frac{\hbar}{\lambda} \mathbf{k} = \hbar \mathbf{k}$ つまりこれはフォトンの場合と同じ関係が妥当する。一個の相対論的粒子に対する分散則は m を静止質量とすれば、 $E^2 = \mathbf{p}^2 c_0^2 + m^2 c_0^4$ である。

我々は $m=0$ に対しこの分散則がフォトンのそれへ移行することを認める。上記の分散則は $\omega^2 = c_0^2(k^2 + k_0^2)$ と書くことができ、そこで $k_0 = m c_0 / \hbar$ であるがこれは粒子の Compton 波長 λ_0 に対応する波数である。 $\lambda_0 = h/mc_0$

この分散則から出発し今や我々は一つの波束の為の群速度 v_g を決めることができる。

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{c_0 k}{\sqrt{k^2 + k_0^2}} = \frac{\mathbf{p} c_0^2}{E} \quad \text{そこですでに知られた関係} \quad \mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad \text{および}$$

$$E = \frac{m c_0^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad \text{但し} \quad \beta = v/c_0 \quad \text{から} \quad v = \frac{\mathbf{p} c_0^2}{E} \quad \text{を得る。つまり} \quad v_g = v \quad \text{となる。すなわち物質}$$

波の群速度は古典的粒子の速度と一致する。若しこうでなかったならば物質波の物理的解釈は全く不可能であったに違いない。更に若し一個の波束が何らかの仕方で一個の粒子を表わすか或いは記述することができるものとすれば、これは正にその粒子のごく近辺に極在しなくてはならない筈である。同様に我々は物質波の位相速度 v_f も計算できる。すなわち、

$$v_f = w/k = c_0 \sqrt{1 + (k_0/k)^2} = E/p \quad (\text{IV})$$

v_g と v_f の式から $v_g < c_0$, $v_f > c_0$ となる。すなわち物理的測定可能量たる v_g は決して光速を超えてはならず、他方測定不能量たる v_f は決して光速を下まわってはならない筈である。

実際に我々は一粒子のエネルギーとそれに対応する物質波の波長の間の関係を決めることが可能でありこの関係は $E = \hbar w$, $p = \hbar k$ 及び分散式 $E^2 = p^2 c_0^2 + m^2 c_0^4$ の三つから与えられかくして $\lambda = \frac{\hbar c_0}{\sqrt{E^2 - m^2 c_0^4}}$ 或いは $\epsilon = E - m c_0^2$ により $\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\epsilon}} \left[1 + \frac{\epsilon}{2m c_0^2} \right]^{-\frac{1}{2}}$ が得られる。ここで ϵ は運動エネルギーつまり静止質量以上の質量の粒子のエネルギーをあらわす。引きつづいて我々は非相対論的問題にもふれなくてはならない。その場合の分散則は、

$E = p^2/2m + m c_0^2$ 又は $w = \hbar k^2/2m + w_0$ と書ける。但し、 $w_0 = c_0 k_0 = m c_0^2/\hbar$ である。或る一つの波束においては w_0 が一つの共通因子 $\exp(-i w_0 t)$ の形で寄与することになりこれは波の伝波の性格には影響しないからこれを除外することができるであろう。この非相対論の分散則からスタートすれば我々はフォトンの場合と同様にしてこの物質場 $\varphi(r, t)$ の為の次の様な非相対論的線形波動方程式を得ることができる。 $-\hbar^2/2m \nabla^2 \varphi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(r, t)$ 又は

$$H\varphi(r, t) = i\hbar \frac{\partial \varphi(r, t)}{\partial t} \quad (\text{V})$$

これは自由粒子に対する de Broglie-Schrödinger の方程式に他ならない。若しその代わり一つの物質場に対し相対論的分散則から出発すれば我々は当然相対論的波動方程式を得ることになり、これは明らかに時空に関し二次の微分演算子となるに違いない。

$$\left(\Delta^2 - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \varphi(r, t) = \frac{m^2 c_0^2}{\hbar^2} \varphi(r, t) \quad \text{或いは,} \quad \square^2 \equiv \Delta^2 - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad \text{と置けば,}$$

$\left\{ \square^2 - \frac{m^2 c_0^2}{\hbar^2} \varphi(r, t) \right\} = 0$ これは前回にふれは Klein-Gordon 方程式で一度は de Broglie が電子の物質波に当てはめた式であった。彼は orbit に束縛された粒子の物質波の解明にとどまらず多粒子系の力学についても研究をひろめ自由空間中の電子の物質波の解明も可能にし更に磁場内での電子 beam の分裂を正しく予測しその現象を spin 仮説に依らずに説明することにも成功した。Stern-Gerlach の実験は角運動量 (Drehimpuls) が量子化されるとしてのみ理解出来る現象であった。

◇前回の13頁の diagram に対する説明の追加と訂正：²⁾ これは原子の最も基本的な構成性粒子たる n と e^- に対する非相対論的粒子に対する de Broglie 波の波長をなるべく広範囲に示すことを目的とし特に電子に対する式は次の様でなくてはならなかった。すなわち $p^2/2m = eU$ つまり $p = \sqrt{2meU}$ から $\lambda = \hbar/\sqrt{2meU} = 1.23 \times 10^{-9} \times \sqrt{m/m_e U}$ (メートル)。

◇調和振動子への応用（代数的解法）

原子中の電子を実在の波と考えると電子波を一カ所に閉込めても時間と共に拡散してしまうことが Schrödinger の等式から示されたが調和振動子のモデルでは幸いに波が拡がらなかった。従ってたとえ今日量子力学には厳密な意味で調和振子は無いとされるにも拘わらず現実には捨てがたい。そこで調和振動子つまり系のポテンシャルエネルギーが $E_p(x) = \frac{1}{2}kx^2$ で表わされる場合を扱うことにしよう。これが一つの重要な物理学的適用である事は例えば分子又は結晶中での原子やイオンの振動運動がしばしばこの様に記述出来ることに依るからである。振動振巾がごく小さければこれらを厳密な調和振動子として扱うことが許される。その場合での Schrödinger の方程式は次の形になる。
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\varphi = E\varphi \quad (\text{VI})$$

原理的にはこの微分方程式を解析的に解くことが出来る筈だがここではその代わり代数的方法（非可換演算子的に）を選ぶことにしよう。これは時間に無関係な Schrödinger 方程式を意味する様なこの種の固有値問題を解く為の別のやり方が存することを明らかにするであろう。そこで今、変位 x を $x = \sqrt{\frac{\hbar}{mw}}\xi$ と置こう。ここで力の定数は $k = mw^2$ である。

すると先刻の方程式は次の様に表記できる。 $h\varphi(\xi) = \varepsilon\varphi(\xi) \dots\dots\dots ①$ ここで、 $h = -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2$ および、 $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar w} \dots\dots\dots ②$ である。

我々は次の式に依り二つの新しい演算子 a_+ , a_- を定義しよう。 $a_{\pm} = \frac{d}{d\xi} \pm \xi$

すると演算子 h は次の様に表わすことができる。 $h = -a_+a_- - 1$ 又は $h = -a_-a_+ + 1$

これらの式は a_+ と a_- に対する式を直接代入することによって容易に確かめられる。これら二つの等式から a_+ と a_- が交換しないことが判る。直かにこれを計算すると、

$[a_+a_-] = a_+a_- - a_-a_+ = -2$ 及び $[a_+, h] = 2a_+$ となる。この後の関係は次の様にも書き直せる。 $a_+h = (h+2)a_+$ この事は若し我々が $h\varphi(\xi) = \varepsilon\varphi(\xi)$ に左側から a_+ を作用させ且上述の式を利用すると次の重要な関係を見出す事を意味する。すなわち、

$h(a_+\varphi(\xi)) = (\varepsilon-2)(a_+\varphi(\xi)) \quad ③$ これを文字通り解釈すれば次の様に云い表わすことができる。つまり「若し $\varphi(\xi)$ が固有値 ε を持った h への一つの固有関数であるならば、 $[a_+\varphi(\xi)]$ は固有値 $(\varepsilon-2)$ を持った一つの固有関数となる」。

そうすると a_+ は一つの step 演算子であると云える。若し今 a_+ を n 回 $\varphi(\xi)$ に作用させるならば我々は同様にして固有値 $(\varepsilon-2n)$ に対応する h への一つの固有関数を得ることができる。

このポテンシャルは正であるからそのエネルギーは調和振子に対して負ではあり得ない、すなわち n に対する最大値 N がなくてはならず、それによりこれら固有関数 $a_+^n\varphi(\xi)$ の級数は切断される、つまり $a_+^{N+1}\varphi(\xi) = 0 \quad ④$

若しこの最低エネルギー値に対する固有関数を $\varphi_0(\xi)$ とあらわせばこれは次の条件を満足する筈である。 $a_+\varphi_0(\xi) = 0 \quad ⑤$

これは一次の微分方程式であり次の形で表現される： $\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right)\varphi_0(\xi) = 0$ ⑥ その一般解は次の形をとる。

$\varphi_0(\xi) = \alpha_0 \exp\left[-\frac{1}{2}\xi^2\right]$, ここで α_0 は規格化の為の定数である。この一般解を元来の固有値の等式 $h\varphi(\xi) = \varepsilon\varphi(\xi)$ へ代入すれば $\varepsilon_0 = 1$ となる。つまり我々はこれに属する波動関数と同様に基底状態の固有値を見出した事になる。さて若し a_+ の代わりに演算子 a_- を考えれば次の式が求められる。

$a_-h = (h-2)a_-$ かようにして先程と同様に, $h[a_-\varphi(\xi)] = (\varepsilon+2)[a_-\varphi(\xi)]$ となるがこの事は「若し $\varphi(\xi)$ が固有値 ε をもつ h への或る固有関数ならば $[a_-\varphi(\xi)]$ は固有値 $(\varepsilon+2)$ をもつ h への一つの固有関数になる」事を意味する。この演算子 a_- も一つの昇降演算子でエネルギーを段階的に上昇させることができる。従って我々はこの演算子 a_- を, 基底状態の助けにより調和振動子に対しより高目の状態を生ずる為に利用することができる。そうすると, $\varphi_n(\xi) = a_-^n \varphi_0(\xi)$ となるがこれは次の固有値をもつ h への一つの固有解である。つまり, $\varepsilon_n = \varepsilon_0 + 2n = 2n + 1$

しかし我々は未だこの様にして実際に調和振動子のあらゆる状態を得ることに対する証明がしていない。そこで先刻の二つの等式 $\varepsilon_n = 2n + 1$ および $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$ からエネルギー値に対し, 次式を導くことができる。

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{k}{m}} \quad (\text{VII})$$

これは接近するレベル間のエネルギー差がいつも $\hbar\omega$ である事を示し更にこの調和振子が一つのゼロ点エネルギー $\frac{1}{2}\hbar\omega$ を持つことも判かる。²⁾ これからポテンシャル曲線と二三のエネルギーレベルがこれらはスペクトルの性格を示す。この調和振子は完全にディスクリートのスペクトルを有しつまり連続スペクトル部分が無いのは注目に値する。

主量子数 n はそこでは節の数に等しい。さて先刻の等式つまり $\varphi_n(\xi) = a_-^n \varphi_0(\xi)$ 及び $\varphi_0(\xi) = \alpha_0 \exp\left[-\frac{1}{2}\xi^2\right]$ からスタートすれば我々は単的にすべての固有関数を見出すことができる。例えば,

$$\varphi_1(\xi) = \alpha_1 \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \exp\left[-\frac{1}{2}\xi^2\right] = -2\alpha_1 \xi \exp\left[-\frac{1}{2}\xi^2\right] \quad (\text{VIII})$$

こう云った構成から, $\varphi_n(\xi)$ が,

$\varphi_n(\xi) = \alpha_n H_n(\xi) \exp\left[-\frac{1}{2}\xi^2\right]$ の形をもつのが判る。ここで $H_n(\xi)$ は n 次のエルミート多項式である。(前回の論文11頁の公式⑩がかようにして得られたのだった。)

◇角運動量とその量子化 (空間の量子化)

量子化は元來電子の波動性に由来し電子が円形軌道を一周した時にそれに伴う物質波の位相が一致した定常波が形成されることが de Broglie の条件で彼によって位相概念が確立されその数学的な保障が約束された。副量子数の $s, p, d, f \dots$ は面積速度つまり角運動量の順

になる。波動関数の角度部分は原子核のまわりの電子運動と関係し化学結合の理論で重要な役を演じる。Bohr の原子モデルで我々はこの運動が電子の角運動量 (Drehimpuls) と密接な関係するのを見て来た。Bohr モデルの基本的な仮定は対応原理でありつまりこの角運動量が量子化される事であった。これと同様な事が波動力学に於いても妥当する筈で従って我々は角運動量に対する理論を展開しなくてはならない。すると先ず角運動量の古典的定義を思い出すことから始めよう。

$L = r \times p$ の基本式は $L_x = yP_z - zP_y$, $L_y = zP_x - xP_z$, $L_z = xP_y - yP_x$ の成分を与える。量子力学的処理をする為にそれらに対応する Rechenvorschrift (演算子) はデカルト座標では、

$$L_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \equiv \hbar l_x, \quad L_y \equiv \hbar l_y, \quad L_z \equiv \hbar l_z \quad \text{或いはラプラス座標では次の様になる。}^{7)}$$

$$\begin{cases} l_x = i \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ l_y = i \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ l_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{cases}$$

引続き次の二個の operator l_{\pm} を定義するのが適切であろう。 $l_{\pm} = l_x \pm il_y$ これから、

$$l_+ = e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad l_- = -e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad \text{が導かれる。}$$

$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$ を計算すれば $-\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$ となるがこれは一電子系での一般的中心ポテンシャルの式を思いおこさせる。

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} Y(\theta, \varphi) = -l(l+1) Y(\theta, \varphi) \quad (1)$$

従ってこれは $l^2 Y(\theta, \varphi) = l(l+1) Y(\theta, \varphi)$ と直せる。この事は波動関数 $\varphi(r)$ の角度部分従って全波動関数がポテンシャルが中心力的なケースでは演算子 l^2 への一つの固有関数である事を意味し又 l^2 の固有値が $l(l+1)$ であることを表わす。(1) 式を解く事は l^2 の為の固有関数を定めることと等価である。角運動量演算子の性質をしらべるには前の調和振子で使った様な代数的方法を用いるのが良いであろう。位置座標の為の交換ルールからスタートすればそれに対応する角運動量 operator は次の様に表わせる。

$[l_x, l_y] = il_z$ (サイクリックパーミュテーション) 択一的には $[l_z, l_+] = l_+$, $[l_z, l_-] = -l_-$, $[l_+, l_-] = 2l_z$ これらの関係は $[l^2, l_x] = [l^2, l_y] = [l^2, l_z] = 0$ を意味する。この交換ルールは角運動量の理論全体にわたり、基本的だがその物理的内容は触れないが上述の関係は我々は同時に l^2 とこれらの三成分の一つのみを指定できるがそれ以上は指定できないことを意味する。何故ならばこれらの成分は互いに交換しないからである。普通慣例的に l^2 の為の固有値を指定する様に選ぶ。つまり我々は演算子 l^2 と l_z の共通な固有関数及びそれに属する固有値を探すのである。適当に規格化すればこれらの固有関数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ を次の如く表記できるであろう。

$$\left. \begin{aligned} l^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) &= l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ l_z Y_{lm}(\theta, \varphi) &= m Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

我々は先ず下の $-i \frac{\partial Y_{lm}(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} = m Y_{lm}(\theta, \varphi)$ の形の式を解くのだがその解は、 $Y_{lm}(\theta, \varphi) = f_l^m(\theta) \exp[im\varphi]$ の形をしている。この解が一価つまり一義的である為には、つまり $Y_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi + 2\pi)$ が成立つ為には m が整数でなくてはならない。その後はこの等式中の一定数として生ずる $f_l^m(\theta)$ を定めなくては行けない。この事は我々が (3) 式においてあらわれる二次の等式を解くことによって実現できる筈である。そこで繁雑な計算を避ける為には別の道を選ぶことにしよう。今次の交換関係によりもたらされた式を考えよう。

$$[l_z, l_+] Y_{lm}(\theta, \varphi) = l_+ Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad \text{これも又次の様に表記することが可能であろう。}$$

$l_z[l_+ Y_{lm}(\theta, \varphi)] = l_+(l_z + 1) Y_{lm}(\theta, \varphi) = (m+1) l_+ Y_{lm}(\theta, \varphi)$ この式は若し我々が l_+ を $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ に作用させるならば m の代わりに $(m+1)$ の固有値をもつ l_z への一個の新しい固有関数を得ることを意味する。すると、 $l_+ Y_{lm}(\theta, \varphi) = \alpha_+(l, m) Y_{l, m+1}(\theta, \varphi)$ となるがここで $\alpha_+(l, m)$ は l と m に依存する定数である。 l_+ はつまり l_z の為の昇降演算子であると云える。同様にして、 $l_- Y_{lm}(\theta, \varphi) = \alpha_-(l, m) Y_{l, m-1}(\theta, \varphi)$ が成立ち、 l_- はつまり l_z において下方へ下る step 演算子である。これは l_z への一つの固有関数に作用させると一単位丈低い一つの固有値をもつ新しい固有解を得ることを意味する。 $\alpha_-(l, m)$ も l と m に依存する constant である。これらをより詳しく扱えば次の一般式が成立つことがわかる。

$$\alpha_{\pm}(l, m) = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \quad (4)$$

つまり二つの演算子 l_+ と l_- により m -値を上げ下げすることができる。そこではたして我々は或与えられた l -値に対し $|m|$ の為の任意に大きな値に到達することができるのだろうか。若しこの l -値が何らかの仕方でその定義が示す様に角運動量ベクトルの長さに関係づけられ又若し m 値が z 方向成分の長さを示すならば $|m| \leq l$ であることは直観的に明瞭であろう。これを厳密に証明することは長くて出来ないのだが、ともかく我々が視察するのは若し l が整数ならば ($l=0, 1, \dots$)。 $\alpha_+(l, l) = \alpha_-(l, -l) = 0$ である事である。

つまり $l_+ Y_{ll}(\theta, \varphi) = 0$, $l_- Y_{l, -l}(\theta, \varphi) = 0$ そして我々は $-l \leq m \leq l$ の範囲で上方にも下方にも固有関数の級数を切断する。我々はこの結果をそれ以上詳しい証明すること無く受け入れざるを得ない。つまり若し $|m| \leq l$ ならば l は或る整数でなくては行けない。そうすると先刻の $l_+ Y_{ll}(\theta, \varphi) = 0$, $l_- Y_{l, -l}(\theta, \varphi) = 0$ は $Y_{ll}(\theta, \varphi)$ の為の一つの一次式をもたす。すなわち、 $l_+ Y_{ll}(\theta, \varphi) = e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) f_l^l(\theta) e^{i\phi} = 0$ これから次式が得られる。

$$\left(\frac{d}{d\theta} - l \cot \theta \right) f_l^l(\theta) = 0 \quad \text{この等式は、} f_l^l(\theta) = \beta_l \sin^l \theta \quad \text{なる解を持つ筈である。}$$

l が負の整数でなければこの解は一義的でつまり、 $f_l^l(\theta) = f_l^l(\theta + 2\pi)$ が成立つ。規格化の定数 β_l は関数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ に対する一般的な規格化条件により一つの位相因子に対してのみじかに決定される。これは次の様にして確定できる。

$$\int_{-1}^{+1} \int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) d(\cos\theta) d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (5)$$

そこで今この位相を上式により選出すれば次の様になる。

$$Y_{ll}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \sin^l \theta \exp[i l \varphi] \quad (6)$$

この関係から出発して次に我々はすべての $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ を l の助けにより決定できる。

(→ Bulletin No. 14 の Appendix)¹⁾ 終わりに角運動量 L は方位角と同時に正確な量としては存在し得ない。つまり $\Delta L \cdot \Delta \varphi \leq h$ なる不確定性関係を認める。 L は又他の物理量たとえば三つの成分が同時に正確な値をもちうる運動量 p とは本質的に異なる。この事は p の投影が量子化されていない事から説明される。新力学(波動力学)でも保存則は存在するのだが不確定性関係により制限され、同時にピッタリとした量の間にもみ保存則が存在すると云える。又対称反対称とか Parity は波動力学に独得であった。極座標 (r, θ, φ) では次の置換がこれに相当する: $\theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \varphi + \pi, r \rightarrow r$ 一個の中心ポテンシャルでは前から我々は、

$\Psi(r) = f_{\alpha lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ が Schrödinger 方程式への一つの解である事を認めて来た。或る任意な potential に対し普遍妥当的であることは我々が次式に依って有限又は無限な項のトータル和として一つの解を記述できることである(一次結合の形式)。

$\Psi(r) = \sum_{\alpha, l, m} a_{\alpha lm} f_{\alpha lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (7) ここで $a_{\alpha lm}$ はフーリエ級数和での展開係数と同じ性格の因子であり、今や我々は球面関数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ の為の次の様な重要な性質を示すことができる。 $Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (8) このルールの正当性は直ちに最も単純な球関数に対して確証でき、つまり $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ は $(-1)^l$ の Parity を持つと云える。従って奇(偶)の l 値をもつ項を含む解は空間反転によって符号が変化(又は不変)でその解は奇(又は偶)のパリティを持つ。

◇ 結語としての「波動力学のことば」

周期律体系と共に核外電子配列は物性論にとっても又化学にとっても総指揮の役を演じ電子配列表は主に二本の厳密な柱つまり一つは保存則(その中には角運動量の合成則も入るが)とパウリの原理に従って構成されしかも波動力学の考えで表現される。原子内電子の理論は太陽系モデルよりも楽器やヘルムホルツ共鳴器の理論の方がはるかに優れている。事実我々は太鼓の上に粉末を一様にまいて適当にたたけば二次元の s, p, d 電子雲の「パターン」を作り出すことができる。結局 Pauli の原理は特別な振動モードの一つが (n, l, m_l, m_s) 又は (n, l, j, m) を指定すれば決定する状態関数 Ψ 励起されるか否かであると主張することと同じになり、又ボアのモデルで一個の電子が一つの量子軌道から別のそれへ飛躍するとの表現はある一つの振動モードが消えて同時にもう一つの振動モードが消えて同時にもう一つの振動モードが現われると考えることができるであろう。波動一元論では「粒子」がどちらかと云えば臨時的に波動場であらわれると解釈し、確かに波動場のゆらぎ (Schwankung) から量子的粒子が数

学的に導けるのである。しかし反面化学ではその現実的な立場から粒子の概念を完全に追放してしまふわけにはいかない。そんな事をすれば困乱が生じよう。しかしその場合でも一個々々識別できる個性ある粒子を認めてはならないであろう。ミクロの世界では物体はたえず動揺しておりそのゆらぎは決して正確には予言できず波動力学の法則はそれらの *Schwankung* を長い時間にわたって平均した統計的挙動のみを確率的に予言してくれるのであるから波動力学は一般予測原理の特別なケースであり、その意味で *Schrödinger* が状態関数 Ψ を *Erwartungskatalog* (予測目録) と呼んだのが理解できよう。 Ψ が一般に実関数ではないので *Einstein* はこれを *Gespensterfeld* (幽霊場) とか、*Führungsfeld* (誘導場) とも呼んだことも興味深い。⁹⁾

一方化学者にとっては波動力学は、長い間共有結合での原子価力の真の意味がわからず苦しんで来たので大変な福音であったが、化学結合は M.O. 法であれ、A.O. (VB) 法であれ粗い近似にすぎないので真に解けたことにはならないと思う。

最後に波動力学の最重要な結論を一つのべて終ることにする。それはミクロ物理学は原子論であり本質的予測理論である事つまり被観測系は状態量の存在を許さないことをである。「状態」と「観測」が共に同時には存在しない概念である事をである。これが所謂 *principe de prévision, prévisibilité* (予測可能性) であった。

Zusammenfassung: Auf der Grundlage der deBroglieschen Vorstellung der Materiewellen wurde nebst Drehimpuls-Quantelung Dispersionsabhängigkeit von Wellenfeldgleichung erörtert und mittels Rechnenvorschriften (Hilfsoperator) wurde auch Eigenfunktion des harmonische Oszillators analytische abgeleiten, lassen.

文 献

- 1) 東海学園女子短期大学紀要 No. 14. (appendix) 佐藤 均。
- 2) 東海学園女子短期大学紀要 No. 15. (p.10~12) 佐藤 均。
- 3) *La mécanique ondulatoire*, J. L. Destouches.
- 4) *Kvantfysik*, I. Lindgren A&W Sthlm.
- 5) 新力学に於る量子化の理論. L. de Broglie.
- 6) 「原子の電子構造」Sven Westman A & W.
- 7) 物理ハンドブック。C. Nordling A & W. Sthlm.
- 8) 滅と粒子 D. ボーム他 (ダイヤモンド社)
- 9) 「Die Deutung der in der Wellenmechanik auftretenden Wellen」 (A. March) Deutsche Buch-Gemeinschaft, Berlin.