

備忘録：朝永振一郎著 「量子力学I」

伊藤榮信

2019 年 8 月 30 日



図 1: 1972 年（昭和 47 年）11 月 12 日（日）朝永先生宅を訪問した帰りの切符「武蔵境」駅の発券で、新宿方面に向かったと記憶する。当日の天候は曇り。先生からはノーベル賞を受賞した湯川秀樹，川端康成の 3 人で夜の京都の町へ繰り出したお話なども聞きました。湯川先生は先に帰られ，二人は川端の誘いで（若者のたむろす）アングラの酒場に行かれたそうです。この話はこれまでは公にはなっていないと思います。（若干私の記憶が怪しくなってきましたが）この時川端が真っ赤なシャツを着ていたことをそこで知ったそうです。川端康成が自殺した年の朝永先生の話です。まさしく備忘録です。

第3章 前期量子力学

§ 16 原子の構造

(iv) Rutherford の計算

原子核に集中した正の電荷を Ze とする．そして α 粒子がこの近くを通り抜けたと考える．図 23 の S をその原子の中心とする．そうすると α 粒子はこの S を外の焦点とする双曲線を描く．この双曲線がこの計算での x -軸を切る点を A とする．テキスト図 23 での AS を以下の計算では x 軸とする．よって双曲線は

$$\frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{B^2} = 1$$

であり， S と A の座標は

$$S = (-\sqrt{a^2 + B^2}, 0), \quad S' = (\sqrt{a^2 + B^2}, 0), \quad A = (a, 0),$$

である．テキストでは b が他の変数として使われているので，あえて大文字 B とした．よって 2 つの漸近線 1 と 2 を順に

$$y = \frac{B}{a}x, \quad y = -\frac{B}{a}x$$

とする．原点 O はテキストでもこの計算でも同じく原点となっている． P は漸近線 1 の $x \rightarrow \infty$ 方向で α 粒子がやってくる方向である．また漸近線 2 の同じく $x \rightarrow \infty$ 方向に Q があるとする．すなわち， α 粒子はこの漸近線 1 から到来し漸近線 2 へと進行していく．この方向転換角 $\angle POQ$ を屈曲角と言い

$$\angle POQ = \theta$$

とする．ここで $\angle S'OP = \varphi$ を導入すると

$$\tan \varphi = \frac{B}{a} \quad (1)$$

となる．漸近線 2 に平行で S' を通る直線を

$$y = -\frac{B}{a}x - \frac{B}{a}\sqrt{a^2 + B^2}$$

とし，これが y 軸と交わる点を Q とする．さらに Q から漸近線 2 に下ろした垂線が交わる点を R とすると

$$\overline{OQ} = \frac{B}{a}\sqrt{a^2 + B^2} \quad (2)$$

$$\overline{QR} = p \quad (3)$$

となる．ここで p は衝突係数である．図から明らかに

$$\overline{OQ} \cos \varphi = p \quad (4)$$

となる．よって

$$\overline{OQ} \cos \varphi = \frac{B}{a} \sqrt{a^2 + B^2} \cos \varphi = \frac{B}{a} a \sqrt{1 + \tan^2 \varphi} \cdot \cos \varphi = B = p$$

となり

$$B = p \quad (5)$$

この関係と (1) より,

$$a = \frac{p}{\tan \varphi}. \quad (6)$$

よって, 長さ $\overline{SA}$ は

$$\begin{aligned} \overline{SA} &= \sqrt{a^2 + B^2} + a = a \frac{1}{\cos \varphi} + a = \frac{p}{\tan \varphi} \frac{1}{\cos \varphi} + \frac{p}{\tan \varphi} = p \left(\frac{1}{\sin \varphi} + \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \right) \\ &= p \frac{1 + \cos \varphi}{\sin \varphi} = p \frac{2 \cos^2(\varphi/2)}{2 \sin(\varphi/2) \cos(\varphi/2)} = p \frac{\cos(\varphi/2)}{\sin(\varphi/2)}. \end{aligned} \quad (7)$$

α 粒子の遠方における速度を v , この粒子が原子に最接近する点 A での速度を u とすると, 角運動量の保存則から

$$pv = \overline{SA} \cdot u$$

エネルギー保存則より

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}mu^2 + \frac{2Ze^2}{\overline{SA}}$$

を得る．ここで

$$\frac{4Ze^2}{mv^2} = b, \quad (16.6)$$

とおき, 上の 2 つの式から u を消去すると

$$p^2 = \overline{SA}(\overline{SA} - b), \quad (16.7)$$

が導出される．

粒子の軌道図より

$$\frac{\theta}{2} = \frac{\pi}{2} - \varphi$$

なので

$$\varphi = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}. \quad (16.8)$$

以下, テキストとは若干異なるが, (16.7) 式に (7) を代入すれば求める式が得られる．

$$p^2 = p \frac{\cos(\varphi/2)}{\sin(\varphi/2)} \left(p \frac{\cos(\varphi/2)}{\sin(\varphi/2)} - b \right)$$

よって

$$p \frac{\sin(\varphi/2)}{\cos(\varphi/2)} = p \frac{\cos(\varphi/2)}{\sin(\varphi/2)} - b \implies b = p \left(\frac{\cos \varphi/2}{\sin \varphi/2} - \frac{\sin \varphi/2}{\cos \varphi/2} \right)$$
$$b = p \frac{\cos^2 \varphi/2 - \sin^2 \varphi/2}{\sin \varphi/2 \cos \varphi/2} = p \frac{2 \cos \varphi}{\sin \varphi}$$

この式を整理し, $\varphi = (\pi - \theta)/2$ により φ を消去すると

$$\frac{2p}{b} = \frac{\sin \varphi}{\cos \varphi} = \frac{\sin(\pi/2 - \theta/2)}{\cos(\pi/2 - \theta/2)} = \frac{\cos \theta/2}{\sin \theta/2} = \cot \frac{\theta}{2} \quad (16.11)$$

を得る.

第5章マトリックス力学の誕生

§ 32 Heisenberg の発見

対応原理によれば，原子系における電子の遷移の一つ一つには古い力学で与えられる電子の軌道運動の Fourier 成分の一つ一つが対応している．すなわち量子論における $n \rightarrow n - \tau$ なる遷移に対しては， n なる電子の運動状態における電子の τ 番目の高調成分が対応している．

この原理はもともと量子数 n が大きい場合にしか正確な結果を与えない．問題は n が小さい場合に用いるコードを発見することである．

古い理論と量子的な量との対応はいつも Fourier 成分を通じてつけられる．よってすべてを Fourier 級数の形に書いてしまうことである．

Fourier 級数で書き直した暗号面で座標 x の Fourier 成分

$$X(n, \tau) \exp\{2\pi i \nu(n, \tau)t\} \quad (32.1)$$

とする．ここで n は運動が n 番目の定常状態における運動であることを示し， τ は τ 番目の高調成分であることを示す．この時，これに関連する量子論的 x の $n \rightarrow n - \tau$ の遷移に関係ある遷移成分

$$X(n; n - \tau) \exp\{2\pi i \nu(n; n - \tau)t\} \quad (32.1')$$

により Fourier 成分を置き換える¹．ここで，古い考えにおける軌道運動の振動数 $\nu(n, \tau)$ については

$$\nu(n, \tau) = \tau \nu(n, 1)$$

が成立しているから

$$\nu(n, \tau) = -\nu(n, -\tau) \quad (32.2)$$

が成立する．さらに，Bohr の関係

$$\nu(n; n - \tau) = \frac{W_n - W_{n-\tau}}{h}$$

から

$$\nu(n; n - \tau) = -\nu(n - \tau; n) \quad (32.2')$$

が成立する²．

¹伊藤注：ここで (n, τ) での「 ν 」と $(n; n - \tau)$ での「 ν 」と使い分けている．量子論的な量を扱う場合には「 ν 」を使用するようである．

²伊藤注：証明をつけるまでもないが，

$$\nu(n; n - \tau) = \frac{W_n - W_{n-\tau}}{h} = -\frac{W_{n-\tau} - W_n}{h} = -\nu(n - \tau; n)$$

□

座標 x が実数であることから (32.1) より

$$X(n, \tau) = X^*(n, -\tau), \quad (32.3)$$

が成立する³.

同様に (32.1') に対しては

$$X(n; n - \tau) = X^*(n - \tau; n), \quad (32.3')$$

が成立すべきである⁴.

$$\nu_{n \rightarrow n - \tau} = \tau \left(\frac{dW}{dJ} \right)_{J=nh} = \tau \nu. \quad (23.19)$$

(23.19) より

$$\nu(n; n - \tau) = \nu(n, \tau) = \frac{\tau}{h} \frac{\partial W}{\partial n}. \quad (32.4)$$

しかし n が小さい場合には、この代わりに量子論的振動数

$$\nu(n; n - \tau) = \nu(n, \tau) = \frac{1}{h} [W(n) - W(n - \tau)]. \quad (32.4')$$

が現れる．そこで暗号面に $\nu(n, \tau)$ が現れたら、いつもこれを量子論的振動数 $\nu(n; n - \tau)$ で置き換えることにする．

古典論における振動数 $\nu(n, \tau)$ を量子論的振動数 $\nu(n; n - \tau)$ で置き換えるこの規則は微分

$$\tau \frac{\partial W}{\partial n}. \quad (32.5)$$

を差

$$W(n) - W(n - \tau), \quad (32.5')$$

で置き換えることと考えてよい⁵．これを一般化して、運動状態ごとに値をもつ任意の関数 $F(n)$ があったとき、微分

$$\tau \frac{\partial F(n)}{\partial n}. \quad (32.6)$$

³伊藤注：(32.1) の複素共役をとると

$$[X(n, \tau)]^* \exp[-2\pi i \nu(n, \tau)t] = [X(n, -\tau)]^* \exp[2\pi i \nu(n, -\tau)t]$$

とする．ただし X 内の τ については、指数部内の τ と表記を合わせる．さらに $[X(n, -\tau)]^* = X^*(n, -\tau)$ と書く． $\nu(n, \tau)$ は整数であるから、 $\exp[-2\pi i \nu(n, \tau)] = \exp[2\pi i \nu(n, \tau)]$ とすることができる．よって x が実数であるとする、(32.3) 式が得られる．

⁴伊藤注：(32.1') の複素共役をとると

$$\begin{aligned} [X(n; n - \tau)]^* \exp\{-2\pi i \nu(n; n - \tau)t\} &= [X(n; n - \tau)]^* \exp\{2\pi i [-\nu(n; n - \tau)]t\} \\ &= [X(n - \tau; n)]^* \exp\{2\pi i \nu(n - \tau; n)t\} = X^*(n - \tau; n) \exp\{2\pi i \nu(n - \tau; n)t\} \end{aligned}$$

ここで (32.2') の $-\nu(n; n - \tau) = \nu(n - \tau; n)$ を使った．また指数部については前の注と同じ考えを使った．

⁵伊藤注：これは後退差分と考えることもできる：

$$-[W(n - \tau) - W(n)] = \tau \frac{W(n - \tau) - W(n)}{(-\tau)} = \tau \frac{dW}{dn}$$

が現れたならば、それを差

$$F(n) - F(n - \tau), \quad (32.6')$$

で置き換えてよいだろう.

さらに暗号面において

$$\tau \frac{\partial \nu(n, \tau)}{\partial n}. \quad (32.7)$$

なる形の微分が現れることがある. これは (32.4) を考慮すると

$$\tau \frac{\partial}{\partial n} \cdot \left(\frac{\tau}{h} \frac{\partial W(n)}{\partial n} \right)$$

なる 2 階の微分商で表されるから, その定義

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f}{dx^2} &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} \\ &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\{f(x + \Delta x) - f(x)\} - \{f(x) - f(x - \Delta x)\}}{(\Delta x)^2} \end{aligned}$$

に暗示を得て, 暗号面の (32.7) は

$$\frac{1}{h} [\{W(n + \tau) - W(n)\} - \{W(n) - W(n - \tau)\}] = \nu(n + \tau; n) - \nu(n; n - \tau) \quad (32.7')$$

によって置き換えるべきということになる⁶.

$\nu(n, \tau)$ のように運動状態を示す整数 n と高調次数を示す整数 τ とを含み⁷したがって, 量子論的にはある遷移 $n \rightarrow n - \tau$ に付随するものとなるような任意の量 $F(n, \tau)$ があつたとき

$$\tau \frac{\partial F(n, \tau)}{\partial n}. \quad (32.8)$$

は暗号解釈の場合には

$$F(n + \tau; n) - F(n; n - \tau), \quad (32.8')$$

によって置き換えるべきである. $F(n, \tau)$ の一例は座標 x の Fourier 成分 $X(n, \tau) \exp\{2\pi i \nu(n, \tau)t\}$ である.

座標 x が⁸

$$x = \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} X(n, \tau) \exp\{2\pi i \nu(n, \tau)t\}$$

⁶伊藤注: (32.4) を考慮したうえで, 差分法により

$$\begin{aligned} \tau \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{\tau}{h} \frac{\partial W(n)}{\partial n} \right) &= \frac{\tau^2}{h} \frac{\partial^2 W(n)}{\partial n^2} = \frac{\tau^2}{h} \frac{\{W(n + \tau) - W(n)\} - \{W(n) - W(n - \tau)\}}{\tau^2} \\ &= \frac{1}{h} [\{W(n + \tau) - W(n)\} - \{W(n) - W(n - \tau)\}] \end{aligned}$$

が得られる.

⁷原注: 暗号面にあるのは古典力学の記述であるから, n は必ずしも整数でなくてもよいことに注意しておく. これに対して τ は古典論でも整数である.

で表されるとき $x^2, x^3, \dots$ など考える。

以下、テキストでは古典的な場合について解説しているが、ほんの少し省略する。

量子的な振動数に対しては Rydberg-Ritz の法則

$$\left. \begin{aligned} \nu(n; n - \tau) + \nu(n - \tau; n - \tau - \tau') &= \nu(n; n - \tau - \tau'), \\ \nu(n - \tau'; n - \tau - \tau') + \nu(n; n - \tau - \tau') &= \nu(n; n - \tau - \tau') \end{aligned} \right\} \quad (32.10')$$

が成立している。

以下、テキストをほんの少し省略する。

これを満たすような $x^2, x^3, \dots$ など考える。

Rydberg-Ritz の法則を満たす x^2 の τ 番目の遷移成分として

$$\begin{aligned} & \sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} [X(n; n - \tau') \exp\{2\pi i \nu(n; n - \tau')t\} \\ & \quad \cdot X(n - \tau'; n - \tau) \exp\{2\pi i \nu(n - \tau'; n - \tau)t\}] \\ &= \left\{ \sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} X(n; n - \tau') X(n - \tau'; n - \tau) \right\} \exp\{2\pi i \nu(n; n - \tau)t\}, \quad (32.9') \end{aligned}$$

を用いることにする。

掛算の規則の一般化をする。古い理論で

$$\left. \begin{aligned} x \text{ の Fourier 成分} &= X(n, \tau) \exp\{2\pi i \nu(n, \tau)t\}, \\ y \text{ の Fourier 成分} &= Y(n, \tau) \exp\{2\pi i \nu(n, \tau)t\} \end{aligned} \right\} \quad (32.12)$$

があり、その積として xy の Fourier 成分

$$\left\{ \sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} X(n, \tau) Y(n, \tau' - \tau) \right\} \exp\{2\pi i \nu(n, \tau)t\}, \quad (32.13)$$

が現れたところには

$$\left. \begin{aligned} \text{量子的な } x \text{ の遷移成分} &= X(n; n - \tau) \exp\{2\pi i \nu(n; n - \tau)t\}, \\ \text{量子的な } y \text{ の遷移成分} &= Y(n; n - \tau) \exp\{2\pi i \nu(n; n - \tau)t\} \end{aligned} \right\} \quad (32.12')$$

と、その積として、量子的な xy の遷移成分

$$\left\{ \sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} X(n; n - \tau') Y(n - \tau'; n - \tau) \right\} \exp\{2\pi i \nu(n; n - \tau)t\}, \quad (32.13')$$

を用いるべきである⁸。注意すべきことは、量子的な掛算規則 (32.13') で、一般に積 xy と yx とは等しいとは限らないということである。

古い考えにおける量子条件

$$\oint pdq = nh$$

にしても、そのままの形では通用しない。そこでこの量子条件の解説を試みよう。

簡単化のために 1 次元の場合を考える。量子条件はまず

$$\oint pdq = \oint pqdt = nh$$

の形に書くことができる。次に、 p と q の Fourier 級数

$$p = \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n, \tau) \exp\{2\pi i \nu(n, \tau)t\},$$

$$q = \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} Q(n, \tau) \exp\{2\pi i \nu(n, \tau)t\}$$

を代入すると

$$\begin{aligned} nh = 2\pi i \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} \sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} & \left[\int P(n, \tau) Q(n, \tau') \nu(n, \tau') \right. \\ & \times \exp\{2\pi i [\nu(n, \tau)t + \nu(n, \tau')t]\} dt \Big] \end{aligned}$$

となる。ただし積分は運動の 1 周期にわたって、すなわち t の 0 から $1/\nu(n, 1)$ までの間に行う。この積分を行うとただちに

$$nh = 2\pi i \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n, \tau) Q(n, -\tau) \frac{\nu(n, -\tau)}{\nu(n, 1)},$$

を得る⁹。あるいは $\nu(n, -\tau) = -\tau(n, 1)$ と (32.2) 式から

$$nh = -2\pi i \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n, \tau) Q^*(n, \tau) \tau, \quad (32.14)$$

⁸伊藤注：テキストでは引数が

$$\sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} X(n; n - \tau) Y(n - \tau; n - \tau')$$

となっているが、上記が正しいであろう。

⁹伊藤注： $\exp(2\pi i \nu t)$ の積分は指数部がゼロとなる場合のみゼロでない結果を得る。すなわちこの場合の指数部は $\nu(n, \tau)t + \nu(n, \tau')t$ であり、規則 (32.2) すなわち $\nu(n, -\tau) = -\nu(n, \tau)$

を得る。これが Fourier 係数を用いて表した量子条件である。

次に行うことは、この量子条件を量子力学的に読みかえることである。しかしその前に (32.14) の関係の真の意味を考えておく。Bohr の考えによれば、この関係は量子条件、すなわち n を整数とおくことによって、量子的に許されとびとびの状態をひろいだすための条件であった。しかし § 23(v) の考えに立つと、状態がとびとびになるのは τ がとびとびになるという事実に対応している。実際前の脚注（原注）でも記したように n が整数となる必然性は全くないということを注意しておく。

(32.14) の量子力学的な読みかえを考える。そのために (32.8) と (32.8') をカギとして、(32.14) を n について微分する。よって

$$\frac{h}{2\pi i} = - \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} \tau \frac{\partial}{\partial n} \{P(n, \tau) Q^*(n, \tau)\}, \quad (32.15)$$

こうして直ちに、(32.8) と (32.8') により量子力学的な読みかえが行える。すなわち (32.15) に代わるべき条件として

$$\frac{h}{2\pi i} = - \left\{ \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n + \tau; n) Q^*(n + \tau; n) - \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n; n - \tau) Q^*(n; n - \tau) \right\}$$

さらに (32.3') の関係すなわち $Q(n; n + \tau)$ と $Q(n + \tau; n)$ が複素共役であるという条件により

$$\frac{h}{2\pi i} = \left\{ \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n + \tau; n) Q(n; n + \tau) - \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n; n - \tau) Q(n - \tau; n) \right\}$$

と書くこともできる。また、第 2 の和で $\tau \rightarrow -\tau$ として

$$\frac{h}{2\pi i} = - \left\{ \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n; n + \tau) Q(n + \tau; n) - \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} Q(n; n + \tau) P(n + \tau; n) \right\}, \quad (32.15')$$

と書くことができる。これが (32.15) に代わるべき量子的関係である。

を考慮すると

$$\begin{aligned} & \sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} \int P(n, \tau) Q(n, \tau') \nu(n, \tau') \exp\{2\pi i[\nu(n, \tau)t + \nu(n, \tau')t]\} dt \\ &= \int P(n, \tau) Q(n, -\tau) \nu(n, -\tau) \exp\{2\pi i[\nu(n, \tau)t + \nu(n, -\tau)t]\} dt \\ &= \int_0^{1/\nu(n, 1)} P(n, \tau) Q(n, -\tau) \nu(n, -\tau) 1 dt \\ &= P(n, \tau) Q(n, -\tau) \nu(n, -\tau) \left[t \right]_0^{1/\nu(n, 1)} \end{aligned}$$

運動量 p が $m\dot{x}$ で与えられる場合, (32.15') は

$$h = (2\pi)^2 m \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} \{ |Q(n+\tau; n)|^2 \nu(n+\tau; n) - |Q(n; n-\tau)|^2 \nu(n; n-\tau) \}, \quad (32.15'')$$

と書くこともできる¹⁰.

Heisenberg の暗号解読法を具体例に適用してみる. 最も簡単な例は Planck の振動子である. (32.9') を適用したいので, 例えば一般的に x^2 に比例する力が働く例を考える. 運動方程式は

$$\ddot{x} + (2\pi\nu)^2 x + \lambda x^2 = 0, \quad (32.16)$$

となる. ただし, $(2\pi\nu)^2 = k/m$ である.

古い力学では, この座標 x を時間に関する Fourier 級数に展開したと考える. すなわちその一般項を

$$Q(n, \tau) \exp\{2\pi i \nu(n, \tau) t\}, \quad (32.17)$$

と書く. ただし $\nu(n, \tau) = \tau \nu(n, 1)$, $\nu(n, \tau) = -\nu(n, -\tau)$ であり, かつ x が実数であることから $Q(n, \tau) = Q^*(n, -\tau)$ である.

$\ddot{x}$ の Fourier 成分は

$$-\{2\pi\nu(n, \tau)\}^2 Q(n, \tau) \exp\{2\pi i \nu(n, \tau) t\}, \quad (32.18)$$

であり, x^2 の Fourier 成分は

$$\sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} Q(n, \tau') Q(n, \tau - \tau') \exp\{2\pi i \nu(n, \tau) t\}, \quad (32.19)$$

である. これらを運動方程式に代入して各成分ごとにゼロとおくと

$$(2\pi)^2 \{\nu^2 - \nu(n, \tau)^2\} Q(n, \tau) + \lambda \sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} Q(n, \tau') Q(n, \tau - \tau'), \quad (32.20)$$

¹⁰伊藤注: (32.15') の最初の式を使う:

$$\frac{h}{2\pi i} = - \left\{ \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n+\tau; n) Q^*(n+\tau; n) - \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n; n-\tau) Q^*(n; n-\tau) \right\}$$

これから先はまともな数学は使えないようである. まず $m\dot{x}$ より指数部の時間微分係数を含め $P(n+\tau; n) \rightarrow m2\pi i Q(n+\tau; n) \nu(n+\tau; n)$, $P(n; n-\tau) \rightarrow m2\pi i Q(n; n-\tau) \nu(n; n-\tau)$ とし, $\exp$ 部は複素共役因子との相殺でゼロといったイメージで考える. いわゆる暗号の解読である. これらを上の式に代入し $2\pi i$ をはらうと

$$h = (2\pi)^2 m \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} \{ |Q(n+\tau; n)|^2 \nu(n+\tau; n) - |Q(n; n-\tau)|^2 \nu(n; n-\tau) \}$$

を得る. ただ, テキストでは右辺の先頭で 2 が掛けられ $2(2\pi)^2$ となっているが間違いだと思う. これは次の (32.22') 式で明らかになる. 同じくテキストでは $|Q(n; n+\tau)|^2 \nu(n+\tau; n)$ となっているがこれも誤記であると思う.

を得る。これは $Q(n, \tau)$ についての連立方程式であって、これを解けば Fourier 成分がすべて得られ、同時にこの方程式が解をもつ条件として振動数 $\nu(n, 1)$ が決定される。

途中少し略

式 (32.20) に対応する量子論的な運動方程式は

$$(2\pi)^2 \{ \nu^2 - \nu(n; n - \tau)^2 \} Q(n; n - \tau) + \lambda \sum_{\tau' = -\infty}^{+\infty} Q(n; n - \tau') Q(n - \tau'; n - \tau), \quad (32.20')$$

であり、これが量子論的な x の遷移成分 $Q(n; n - \tau)$ に対する方程式である。

$\lambda \neq 0$ に対して解を求めるのは難しい。よって $\lambda = 0$ の場合を考える。(32.20) の解は、すべての n に対して $\tau = \pm 1$ 以外は

$$\left. \begin{aligned} Q(n, \tau) &= 0, & Q(n, \pm 1) &\neq 0, \\ \nu(n, 1) &= \nu = -\nu(n, -1) \end{aligned} \right\}, \quad (32.21)$$

である¹¹。

同様に (32.20') に対しては

$$\left. \begin{aligned} Q(n; n \pm \tau) &= 0, & Q(n; n \pm 1) &\neq 0, \\ \nu(n; n - 1) &= \nu = -\nu(n - 1; n) \end{aligned} \right\}, \quad (32.21')$$

が得られる¹²。

(32.15) 式から

$$h = 8\pi^2 m \nu \frac{\partial}{\partial n} |Q(n, 1)|^2, \quad (32.22)$$

を得る¹³。これを積分して

$$|Q(n, 1)|^2 = \frac{1}{8\pi^2 \nu m} (n + \text{const.}) h$$

¹¹伊藤注： $\lambda = 0$ であるから、方程式は

$$\{ \nu^2 - \nu(n, \tau)^2 \} Q(n, \tau) = 0$$

となる。 $\nu(n, \tau) = \tau \nu(n, 1) = \tau \nu$ であるから、これを上の方程式に代入すると

$$(\nu^2 - \tau^2 \nu(n, 1)^2) Q(n, \tau) = 0, \quad \longrightarrow \quad (\nu^2 - \tau^2 \nu^2) Q(n, \tau) = 0$$

が得られる。よって $Q \neq 0$ の解を得るためには $\nu^2 - \tau^2 \nu^2 = 0$ ，すなわち $\tau = \pm 1$ 。

¹²伊藤注： $\nu(n; n - \tau) = \tau \nu(n; n - 1)$ という明確な定義はこれまでのところ記されていない。しかし、(32.4) での左辺と中辺で $\nu(n; n - \tau) = \nu(n, \tau)$ としているので $\nu(n; n - \tau) = \nu(n, \tau) = \tau \nu(n, 1) = \tau \nu(n; n - 1)$ を導き出すことができる。また (32.4') の下の行では「 $\nu(n, \tau)$ が現れたら、いつもこれを量子的振動数 $\nu(n; n - \tau)$ で置き換えることにする。」とされているので、

$$\nu(n; n - \tau) = \tau \nu(n; n - 1)$$

が成立するとしてもよいだろう。あとは (32.2') を使う。

¹³伊藤注：(32.15) 式から得られるのは

$$h = (2\pi)^2 m \sum_{\tau = -\infty}^{+\infty} \tau \nu(n, \tau) \frac{\partial}{\partial n} |Q(n, \tau)|^2$$

であり、既に記したようにあくまで $(2\pi)^2$ であり、テキストのように $2(2\pi)^2$ ではない。これは

を得る.

同じように (32.15'') 式から

$$h = 8\pi^2 m \nu \{|Q(n+1; n)|^2 - |Q(n; n-1)|^2\}, \quad (32.22')$$

を得るから, これを「積分」して

$$|Q(n; n-1)|^2 = \frac{1}{8\pi^2 \nu m} (n + \text{const.}) h$$

が得られる.

////////////////////伊藤脚注(始まり)////////////////////
既に記したように (32.15'') 式はテキストでは $2(2\pi)^2$ であるが³, 正しくは $(2\pi)^2$ である. すなわち

$$h = (2\pi)^2 m \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} \{|Q(n+\tau; n)|^2 \nu(n+\tau; n) - |Q(n; n-\tau)|^2 \nu(n; n-\tau)\},$$

である. また (32.21') 式から $Q(n; n\pm 1)$ だけがゼロでないから τ の無限和は

$$h = (2\pi)^2 m \left[\{|Q(n+1; n)|^2 \nu(n+1; n) - |Q(n; n-1)|^2 \nu(n; n-1)\} \right. \\ \left. + \{|Q(n-1; n)|^2 \nu(n-1; n) - |Q(n; n+1)|^2 \nu(n; n+1)\} \right],$$

ここで, (32.2') 式と (32.21') 式より $\nu(n-1; n) = -\nu(n; n-1) = -\nu$ であり, 方程式 (32.20') でゼロでない解を持つ条件から $\nu(n; n+1) = \nu$ であるから $\nu(n; n+1) = -\nu(n+1; n) = -\nu$ である. これらを上の式に代入すると

$$h = 8\pi^2 m \{|Q(n+1; n)|^2 \nu(n+1; n) - |Q(n; n-1)|^2 \nu(n; n-1)\}$$

を得る. ただし, $|Q(n-1; n)|^2 \rightarrow |Q(n; n-1)|^2$ と $\nu(n; n-1)$ に合わせた. さらに $\nu(n+1; n) = \nu(n; n-1) = \nu$ とするならば (32.22') を得る.

τ に関する和はマイナスからプラスまでとなることに注意すると解決される. (32.21) の結果を使うとゼロと異なるのは $\tau = \pm 1$ の $Q(n, \pm 1)$ だけである. よって, 上の式で τ に関する和をとると

$$h = (2\pi)^2 m (-1) \nu(n, -1) \frac{\partial}{\partial n} |Q(n, -1)|^2 + (2\pi)^2 m (+1) \nu(n, +1) \frac{\partial}{\partial n} |Q(n, +1)|^2$$

を得る. ここで (32.21) の下段の結果より $-\nu(n, -1) = \nu(n, +1) = \nu$ であるから上の式は

$$h = 2(2\pi)^2 m \nu \frac{\partial}{\partial n} |Q(n, 1)|^2$$

となる.

次にテキストではカッコ付きで「積分」と記述されている計算を行う。

$$\begin{aligned}
 h &= 8\pi^2 m\nu \{|Q(n; n-1)|^2 & - & |Q(n-1; n-2)|^2\} \\
 h &= 8\pi^2 m\nu \{|Q(n-1; n-2)|^2 & - & |Q(n-2; n-3)|^2\} \\
 \dots & & - & \dots \\
 \dots & & - & \dots \\
 h &= 8\pi^2 m\nu \{|Q(4; 3)|^2 & - & |Q(3; 2)|^2\} \\
 h &= 8\pi^2 m\nu \{|Q(3; 2)|^2 & - & |Q(2; 1)|^2\} \\
 h &= 8\pi^2 m\nu \{|Q(2; 1)|^2 & - & |Q(1; 0)|^2\}
 \end{aligned}$$

これらの両辺を順に加算すると

$$(n-1)h = 8\pi^2 m\nu \{|Q(n+1; n)|^2 - |Q(1; 0)|^2\}$$

を得るから、

$$|Q(n; n-1)|^2 = \frac{nh}{8\pi^2 m\nu} + \left[|Q(1; 0)|^2 - \frac{h}{8\pi^2 m\nu} \right]$$

を得る。

この後、触れられているがこの差分の和が計算できるのは、最初は仮定されていなかった n の整数性がここでは明確に n が整数であることを仮定することで和を求めていることである。

////////////////////////////////脚注（終わり）////////////////////////////////

以上が Heisenberg の考え方の骨子である。この考え方は多分に形式的であって、真の物理的意味の明らかな点が多い。例えば

- (1) 電子の直交座標 x などといっても、ここではそれが遷移成分 $X(n; n-\tau) \exp\{2\pi i \nu(n; n-\tau)t\}$ の集まりであるという意味をもつだけで、電子の存在する場所という古い考え方とどう結びつけられるべきものかまったく不明である。
- (2) この電子の場所という概念がそんな抽象的な集まりの中に解消してしまうのだとすると、われわれが Wilson の霧箱の中でみる電子の飛跡というものは、この理論でどのように考えなければならないのだろうか。

進歩したのは

- (1) 古典的な軌道運動の Fourier 成分の代わりに、量子的な遷移成分が用いられるということまでである。
- (2) そしてそのあとは、そういう成分をもって振動する仮想的な双極子を考え、古い Maxwell の理論を用いてその双極子の射出する光の計算を行い、それを統計的に解釈しなおすという方法をとる。

この理論の性格はなお中途半端である。

この理論では

- 原子の側に関しては、はじめから Heisenberg の計算法を用いて量子的な量の関係のみによって結論を引きだすことができたが、
- 光の側については、やはり古い理論を用いた計算をまず行い、その結果にあとから量子的な意味づけを行うという手法である。

よって、この方法もまだ完全なものでなく、光の二重性などの解決にはまだまだ遠いものである。

しかしながら、いろいろな問題にこの Heisenberg の理論を適用すると奇妙に正しい結果が得られる。さしあたって次に行うことはこの理論の数学的形式をさらに整備して、もっと簡単な形にすることである。

§ 33 マトリックス力学

前節で述べたように Heisenberg の考えによると電子の座標 x とか運動量 p とかは、古い考えのように時間 t の通常関数として考えるべきではない。

座標 x とか運動量 p とか、その他いろいろな物理的な量はそれぞれの遷移成分の集まりと考えられる。例えば座標 x は

$$X_{n,n'} \exp(2\pi i \nu_{n,n'} t),$$

の集まり、運動量 p は

$$P_{n,n'} \exp(2\pi i \nu_{n,n'} t),$$

の集まりと考える。すなわち

$$x = \begin{bmatrix} X_{1,1} \exp(2\pi i \nu_{1,1} t) & X_{1,2} \exp(2\pi i \nu_{1,2} t) & X_{1,3} \exp(2\pi i \nu_{1,3} t) & \cdots \\ X_{2,1} \exp(2\pi i \nu_{2,1} t) & X_{2,2} \exp(2\pi i \nu_{2,2} t) & X_{2,3} \exp(2\pi i \nu_{2,3} t) & \cdots \\ X_{3,1} \exp(2\pi i \nu_{3,1} t) & X_{3,2} \exp(2\pi i \nu_{3,2} t) & X_{3,3} \exp(2\pi i \nu_{3,3} t) & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}, \quad (33.1)$$

座標 x が実数であること、振動数が Bohr の条件で与えられることから

$$X_{n,n'} = X_{n',n}^*, \quad \nu_{n,n'} = -\nu_{n',n}, \quad \nu_{n,n} = 0, \quad (33.2)$$

$$X_{n,n'} \exp(2\pi i \nu_{n,n'} t) = x_{nn'},$$

と書くとする (33.1) は

$$x = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & \cdots \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & \cdots \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}, \quad (33.3)$$

x 実数：エルミート（テキストではエルミトとかたかな表記）

$$x_{nn'} = x_{n'n}^*, \quad (33.4)$$

x の対角線部分

$$x_{nn} = \text{実数} \quad (33.4')$$

なぜなら $\nu_{nn} = 0$.

p 実数：エルミート

$$p_{nn'} = p_{n'n}^*, \quad (33.6)$$

p の対角成分

$$p_{nn} = \text{実数}, \quad (33.6')$$

一般に座標や運動量のほかに任意の力学的量（例えば、角運動量とかエネルギーとか） A があったとき、この A はやはり次のようなマトリックスであると考え：

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}, \quad (33.7)$$

ただし各要素は $A_{n,n'}$ はやはり時間の関数で時間につき $\exp(2\pi i \nu_{n,n'} t)$ の形で変化すると考える。

仮定 (I) いろいろな物理量はそれぞれマトリックスである。その量が実数的なものなら、そのマトリックスはエルミートのである。

仮定 (II) いろいろな量の (n, n') 要素は時間につき $\exp(2\pi i \nu_{n,n'} t)$ の形で振動している。

仮定 (III) 振動数 $\nu_{n,n'}$ については Rydberg-Ritz の組合せ法則

$$\nu_{n,n'} + \nu_{n',n''} = \nu_{n,n''}, \quad (\text{III.1})$$

が成立している。これから

$$\nu_{n,n} = 0, \quad \nu_{n,n'} = -\nu_{n',n}, \quad (\text{III.2})$$

を得る．

仮定 (IV) ある物理量の時間導関数として定義される物理量は，その量を表すマトリックスの各要素を時間微分して得られるマトリックスである．例えば

$$x = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & \cdots \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & \cdots \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}$$

であると速度は

$$\dot{x} = \begin{bmatrix} \dot{x}_{11} & \dot{x}_{12} & \dot{x}_{13} & \cdots \\ \dot{x}_{21} & \dot{x}_{22} & \dot{x}_{23} & \cdots \\ \dot{x}_{31} & \dot{x}_{32} & \dot{x}_{33} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}, \quad (\text{IV.1})$$

である．仮定 (I) と仮定 (II) から

$$v = 2\pi i \begin{bmatrix} 0 & \nu_{12}x_{12} & \nu_{13}x_{13} & \cdots \\ \nu_{21}x_{21} & 0 & \nu_{23}x_{23} & \cdots \\ \nu_{31}x_{31} & \nu_{32}x_{32} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}, \quad (\text{IV.2})$$

としてもよい．短く

$$v_{n,n'} = \dot{x}_{n,n'} = 2\pi i \nu_{n,n'} x_{n,n'}, \quad (\text{IV.3})$$

と書くこともできる．一般に任意の実数的な物理量 A に対して

$$(\dot{A})_{n,n'} = 2\pi i \nu_{n,n'} A_{n,n'}, \quad (\text{IV.4})$$

が成立する．

仮定 (V) マットリックスの和

仮定 (VI) マットリックスの積

仮定 (VII) 座標 x は「与えられた力学系に特有な」運動方程式を満たす．

仮定 (VIII) 座標 x に対して運動量 p が定義されていて，この二つの量の間には

$$px - xp = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{I}, \quad (\text{VIII.1})$$

が成立している．(VIII.1) の関係を正準な交換関係と名付ける．この仮定は量子条件 $\oint pdq = nh$ から得られる．これをマトリックスの積の記法により

$$(px)_{n,n} - (xp)_{n,n} = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{I}, \quad (\text{VIII.3})$$

と書いてよい．そこで $\oint pdq = nh$ から得られた関係の上にさらに

$$0 = (px)_{n,n'} - (xp)_{n,n'}, \quad (n \neq n' \text{ に対して}), \quad (\text{VIII.4})$$

なる新たな仮定付加する．

この条件 (VIII.4) を付加してはじめて方程式の個数と未知数の個数が一致する．

力学系の自由度が 1 より大きくて、いくつかの座標 $x_1, x_2, \dots, x_f$ が存在するときにはさらに次の仮定が必要である．仮定 (IX) 座標 $x_1, x_2, \dots, x_f$ に対しそれぞれ共役な運動量 $p_1, p_2, \dots, p_f$ が定義されていて、それらの量の間に

$$\left. \begin{aligned} x_s x_{s'} - x_{s'} x_s &= 0, \\ p_s p_{s'} - p_{s'} p_s &= 0, \\ x_s p_{s'} - p_{s'} x_s &= 0, \\ p_s x_s - x_s p_s &= \frac{h}{2\pi i} \mathbf{I}, \end{aligned} \right\} \quad s \neq s', \quad (\text{IX.1})$$

が成立する．

以上のいくつかの仮定を土台にして実際の例について考える．そのもっとも簡単なものは前節で取り上げた振動子の場合である．座標 x のマトリックスから (IV) の仮定によって加速度のマトリックスを計算する．

$$\left(\frac{d^2 x}{dt^2} \right)_{n,n'} = (2\pi i)^2 (\nu_{n,n'})^2 x_{n,n'} \quad (8)$$

次に (V) と (VI) によって力のマトリックスを計算する．

$$\begin{aligned} f_{n,n'} &= -m \{ (2\pi\nu)^2 x + \lambda x^2 \}_{n,n'} \\ &= -m \left\{ (2\pi\nu)^2 x_{n,n'} + \lambda \sum_{n''} x_{n,n''} x_{n'',n'} \right\} \end{aligned} \quad (33.16)$$

次にこれを電子の運動方程式

$$\left(\frac{d^2 x}{dt^2} \right) = f, \quad (33.17)$$

に代入してマトリックス要素の間の関係

$$(2\pi i)^2 (\nu_{n,n'})^2 = - (2\pi\nu)^2 x_{n,n'} - \lambda \sum_{n''} x_{n,n''} x_{n'',n'} \quad (33.17')$$

を得る．この形の方程式は n と n' との可能な組み合わせの個数だけ存在する．

次に量子条件 (VIII.1) によって

$$(2\pi i)m \sum_{n''} \{ \nu_{n,n''} x_{n,n''} x_{n'',n'} - \nu_{n'',n} x_{n,n''} x_{n'',n'} \} = \frac{h}{2\pi i} \delta_{n,n'}, \quad (33.18)$$

が成立する。われわれの知りたい量は $n_{n,n'}$ と $x_{n,n'}$ とであって、式の数もその数だけある。

こうして得られた解をエネルギーの式

$$W = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{m}{2} (2\pi\nu)^2 x^2 + \frac{m\lambda}{3} x^3, \quad (33.19)$$

に代入し、 W のマトリックスを求めた（ただし前節では $\lambda = 0$ としてしまったが）。前節の例で W_n を計算してみると、前に計算しておいた $\nu_{n,n'}$ とこの W_n から Bohr の関係

$$\nu_{n,n'} = \frac{W_n - W_{n'}}{h}, \quad (33.21)$$

を満足していることが確かめられた。

途中略

一般の場合、(33.21) が成立しているかどうかを計算によって調べることは困難である。しかし、この関係が上に導入した (I) から (IX) までの仮定から一般的に導き出されることを証明しておかなければ、この理論が正しいことを主張できない。この証明を行うにはマトリックス力学においても運動方程式を Hamilton 正準方程式の形に書きうるという前提をおかなくてはならない。この形に運動方程式を書くと、それを積分して解を求めるのにまた新たな道が開かれる。

§ 34 正準運動方程式と Bohr の振動数関係

前節でマトリックス力学の土台となる (I)―(IX) の仮定を並べたが、電子の座標が (33.17) のような運動方程式を満たすことも仮定している。またエネルギーのマトリックスも、古い力学の場合と同じ (33.19) といった形も仮定している。すなわちわれわれは系のエネルギーと運動方程式の中の力とが古い力学におけるのと同じの形の関係にあると仮定している。そこでこの関係をもっと一般化して

仮定 (X) 力学系のエネルギーが座標 x と運動量 p との関数（ただし、実数的な、したがってそのマトリックスはエルミート）

$$H(x, p), \quad (X.1)$$

として与えられえる場合に，その系の運動方程式は

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (\text{X.2})$$

なる Hamilton の正準方程式によって与えられる．

という仮定をここで導入する．

(i) 数学的準備¹⁴

定理 座標 x や運動量 p との関数 $f(x, p)$ があったとする．そうすると

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{2\pi i}{h}(pf - fp), \\ \frac{\partial f}{\partial p} &= -\frac{2\pi i}{h}(xf - fx), \end{aligned} \right\} \quad (34.7)$$

が成立する．

(証明) まず f として p をとったとする．このとき (34.7) が成立することは明らかである．すなわちこのとき (34.7) の第 1 式は明らかに $\partial p / \partial x = 0$ を与え，第 2 式は仮定 (VIII.1) を用いて $\partial p / \partial p = 1$ を与える．次に f として x をとった場合にも同様に (34.7) が成立する．

次に (34.7) が二つの関数 f_1 と f_2 について成立しているとする，それは和 $f_1 + f_2$ についてやはり成立することが示される．これはマトリックス積についての分配の法則

$$\left. \begin{aligned} p(f_1 + f_2) &= pf_1 + pf_2, \\ (f_1 + f_2)p &= f_1p + f_2p, \\ x(f_1 + f_2) &= xf_1 + xf_2, \\ (f_1 + f_2)x &= f_1x + f_2x, \end{aligned} \right\}$$

が成立することから導かれる．

次に (34.7) が二つの関数 f_1 と f_2 について成立しているとして，それは積 $f_1 f_2$ についてやはり成立することが示す．

$$\frac{\partial(f_1 f_2)}{\partial x} = \frac{\partial f_1}{\partial x} f_2 + f_1 \frac{\partial f_2}{\partial x},$$

このとき f_1 と f_2 については (34.7) が成立するから

$$= \frac{2\pi i}{h} \{ (pf_1 - f_1p)f_2 + f_1(pf_2 - f_2p) \}$$

¹⁴伊藤注：ここではマトリックスとしての量で微分する操作が現れるが，テキストでのマトリックスによる微分法の定義は不自然である．すなわち変数であるマトリックスが微分されるのは対角成分のみである．マトリックスである座標 x や運動量 p に関する微分法はこのあと形式的な形でしか行われない．すなわち実際に座標 x や運動量 p での微分操作は出現しないので，これに関する定義等は無視する．

ここで分配の法則より

$$\begin{aligned}
&= \frac{2\pi i}{h} \{pf_1f_2 - f_1pf_2 + f_1pf_2 - f_1f_2p\} \\
&= \frac{2\pi i}{h} (pf_1f_2 - f_1f_2p).
\end{aligned}$$

つまり f_1f_2 についても (34.7) の第 1 の関係式が成立している．第 2 式についても同様である．

これから，(34.7) で f が x と p の任意の多項式に対しても成立することが証明された．

□

次に必要なのはマトリックスの積の時間微分法に関するものである．

定理 二つの物理量 f と g とがあったとき

$$\frac{d}{dt}(f+g) = \frac{df}{dt} + \frac{dg}{dt} \quad (34.8)$$

$$\frac{d}{dt}(fg) = f\frac{dg}{dt} + \frac{df}{dt}g \quad (34.9)$$

が成立する．

証明 (34.9) について証明する．まず左辺の (n, n') 成分を求めると，(IV.4) によって

$$\left(\frac{d(fg)}{dt}\right)_{n,n'} = 2\pi i \nu_{n,n'}(fg)_{n,n'} = 2\pi i \nu_{n,n'} \sum_{n''} f_{n,n''} g_{n'',n'},$$

である．次に右辺の (n, n') 成分は

$$\begin{aligned}
\left(f\frac{dg}{dt} + \frac{df}{dt}g\right)_{n,n'} &= \sum_{n''} f_{n,n''} 2\pi i \nu_{n'',n'} g_{n'',n'} + \sum_{n''} 2\pi i \nu_{n,n''} f_{n,n''} g_{n'',n'} \\
&= 2\pi i \sum_{n''} (\nu_{n,n''} + \nu_{n'',n'}) f_{n,n''} g_{n'',n'}
\end{aligned}$$

となる．ここで Rydberg-Ritz の法則

$$\nu_{n,n''} + \nu_{n'',n'} = \nu_{n,n'}$$

を使用すると

$$= 2\pi i \nu_{n,n'} \sum_{n''} f_{n,n''} g_{n'',n'}$$

となるから左辺＝右辺である．

□

(ii) エネルギー一定の法則と Bohr の関係

上の数学的定理を用い、本筋の問題に戻る．Hamilton 関数 H が時間を含まない対角線マトリックスになること、およびその対角線要素と振動数 $\nu_{n,n'}$ との間に Bohr の関係が成立することを証明する．

前の定理により正準方程式 (X.2) は

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= -\frac{2\pi i}{h}(xH - Hx), \\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{2\pi i}{h}(pH - Hp), \end{aligned} \right\}, \quad (34.10)$$

という形に書けることに注意する．

次に、 x と p との関数を g としたとき

$$\frac{dg}{dt} = -\frac{2\pi i}{h}(gH - Hg), \quad (34.11)$$

の成立することを証明しておく必要がある．ただし、 g は時間を陽に含まないとする．

証明 まず g が x または p であるときは、(34.11) は (34.10) そのものである．次に g_1 が g_2 が (34.11) を満たしているとき和 $g_1 + g_2$ も (34.11) を満たしていることは

$$\begin{aligned} (g_1 + g_2)H &= g_1H + g_2H, \\ H(g_1 + g_2) &= Hg_1 + Hg_2, \end{aligned}$$

が成立することから明らかである．次に g_1g_2 に対して (34.11) が成立することを示す．

$$\frac{d(g_1g_2)}{dt} = g_1 \frac{dg_2}{dt} + \frac{dg_1}{dt} g_2$$

であるが、右辺の dg_2/dt や dg_1/dt について (34.11) が成立しているので

$$\begin{aligned} &= -\frac{2\pi i}{h}\{g_1(g_2H - Hg_2) + (g_1H - Hg_1)g_2\} \\ &= -\frac{2\pi i}{h}(g_1g_2H - Hg_1g_2) \end{aligned}$$

となり、(34.11) が成立している．

□

よって、(34.11) は x と p との任意の (x と p の冪級数によって表しえる) 関数について成立する．

この定理の特別な場合として g が H そのものである場合を考える．すると (34.11) からただちに次の結論がでる．

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{2\pi i}{h}(HH - HH) = 0, \quad (34.12)$$

これはマトリックス要素の間の関係として書くと

$$2\pi i \nu_{n,n'} H_{n,n'} = 0, \quad (34.12')$$

を意味する¹⁵．ところで一般に $\nu_{n,n'}$ は $n \neq n'$ に対してゼロではないので、(34.12') は

$$H_{n,n'} = 0, \quad ; n \neq n',$$

を意味する¹⁶．こうして、 H は対角線マトリックスであるという結論が得られた：

$$H_{n,n'} = W'_n \delta_{nn'}. \quad (34.13)$$

ここでもちろんこの対角線要素は時間を含まない．

こうして系の Hamilton 関数は対角要素だけがゼロと異なる値になっている．そしてそれは時間を含まない定数である．そこでこの n 番目の対角線要素 W_n を n 番目の定常状態におけるエネルギーと解釈するのである．これがすなわち「エネルギー一定の法則」である．

次に Bohr の法則を一般的に導く．それにはまず (34.11) をマトリックス要素の間の関係として書けばよい．

$$2\pi i \nu_{n,n'} g_{n,n'} = -\frac{2\pi i}{h} \left\{ \sum_{n''} g'_{n,n'} H_{n'',n'} - \sum_{n''} H_{n,n''} g_{n'',n'} \right\}$$

となるが、ここに (34.13) を用いることで

$$= -\frac{2\pi i}{h} g_{n,n'} (W_{n'} - W_n)$$

を得る．これが任意の g に対して成立するから

$$\nu_{n,n'} = \frac{1}{h} (W_n - W_{n'})$$

が成立しなければならない．これが Bohr の関係である．

§ 35 固有値問題

(34.17') の式が2次であるのは問題にしている力学系に働く力が x^2 までしか含まない結果である．もし力が x の高次の項を含むなら、炊かなければならない方程式はさらに高次となり、それから発生する方程式（例えば (34.18) 式を見よ）がさらに高次となり方程式を解くことが難しくなる．

¹⁵伊藤注：すでに (33.7) 式で定義された物理量のように、その時間変化は $\exp(2\pi i \nu_{n,n'} t)$ である．

¹⁶原注： $n \neq n'$ においても $\nu_{n,n'}$ がゼロとなるなら、こういう n と n' について $H_{n,n'} \neq 0$ となってもよい．この場合マトリックスは対角ではないが、しかしこのマトリックスは時間を含まない．この種の場合をどう解釈するかは後の話に譲ろう．

この節では Hamilton 形式のおかげで、一般に未知数につき 1 次の、方程式を解くことに問題を帰着できることを示す。

(i) エネルギー一定法則の逆

座標 x と運動量 p の関数としての Hamilton 関数 $H(x, p)$ が与えられているとき

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= -\frac{2\pi i}{h}(xH - Hx), \\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{2\pi i}{h}(pH - Hp), \end{aligned} \right\}, \quad (35.1)$$

および

$$\mathbf{1} = \frac{2\pi i}{h}(px - xp), \quad (35.2)$$

を満たす二つのエルミートマトリックス x と p を求めることであった（ただし、 x と p の (n, n') 要素は $\exp(2\pi i \nu_{n, n'} t)$ の形で振動しているとして）。

ところで、前節によるとこれを満たす x と p が見つかったならばそれを $H(x, p)$ に代入すると対角線マトリックス

$$H_{n, n'} = W'_n \delta_{n', n}, \quad (35.3)$$

となり、しかも、 x や p の振動数は

$$\nu_{n, n'} = \frac{1}{h}(W_n - W_{n'}) \quad (35.4)$$

を満足している。

以下では、この事実の逆が成立することを証明する。

定理 いま何らかの方法で、時間を含まない二つのエルミートマトリックス X と P が

$$\mathbf{1} = \frac{2\pi i}{h}(PX - XP), \quad (35.2')$$

を満足し、かつこの X と P とを代入した $H(X, P)$ が対角線マトリックスになるようにできたとする。このとき $H(X, P)$ の対角線要素を $W_1, W_2, \dots$ とする。すなわち

$$H(X, P)_{n, n'} = W'_n \delta_{n', n}, \quad (35.3')$$

で、そのとき

$$\nu_{n, n'} = \frac{1}{h}(W_n - W_{n'}) \quad (35.5)$$

とにおいて

$$\left. \begin{aligned} x_{n, n'} &= X_{n, n'} \exp(2\pi i \nu_{n, n'} t), \\ p_{n, n'} &= P_{n, n'} \exp(2\pi i \nu_{n, n'} t), \end{aligned} \right\}, \quad (35.6)$$

で定義される x と p を作ると、これらは (35.1) および交換関係 (35.2) を満足する。

証明 まず，以下の予備定理を証明しておく．

予備定理 x と p との任意の関数 $f(x, p)$ があったとき

$$f(x, p)_{n, n'} = f(X, P)_{n, n'} \exp(2\pi i \nu_{n, n'} t), \quad (35.7)$$

が成立する．

予備定理証明 f が x 自身もしくは p 自身であるときに (35.7) は (35.6) にほかならないから，成立している．次に (35.7) が f もしくは g に対して成立しているとする，(35.7) は $f + g$ および fg に対して成立する．すなわち

$$\{f(x, p) + g(x, p)\}_{n, n'} = \{f(X, P) + g(X, P)\}_{n, n'} \exp(2\pi i \nu_{n, n'} t), \quad (35.8)$$

および

$$\{f(x, p)g(x, p)\}_{n, n'} = \{f(X, P)g(X, P)\}_{n, n'} \exp(2\pi i \nu_{n, n'} t), \quad (35.9)$$

が成立することを証明する．第 1 式は明らかであるので第 2 式の証明を行う．

$$\begin{aligned} \{f(x, p)g(x, p)\}_{n, n'} &= \sum_{n''} f(x, p)_{n, n''} g(x, p)_{n'', n'} \\ &= \sum_{n''} f(X, P)_{n, n''} \exp(2\pi i \nu_{n, n''} t) g(X, P)_{n'', n'} \exp(2\pi i \nu_{n'', n'} t) \end{aligned}$$

Rydberg-Ritz の法則を考慮することによって

$$\begin{aligned} &= \left[\sum_{n''} f(X, P)_{n, n''} g(X, P)_{n'', n'} \exp\{2\pi i (\nu_{n, n''} + \nu_{n'', n'}) t\} \right] \\ &= \left[\sum_{n''} f(X, P)_{n, n''} g(X, P)_{n'', n'} \right] \exp(2\pi i \nu_{n, n'} t) \\ &= \{f(X, P)g(X, P)\}_{n, n'} \exp(2\pi i \nu_{n, n'} t) \end{aligned}$$

これは (35.9) 式である．よって x と p との任意の関数 $f(x, p)$ に対して (35.7) が成立する．

予備定理□

この予備定理により

$$(px - sp)_{n, n'} = (PX - XP)_{n, n'} \exp(2\pi i \nu_{n, n'} t)$$

ところが右辺は仮定 (35.2) により

$$\frac{h}{2\pi i} \delta_{n, n'} \exp(2\pi i \nu_{n, n'} t)$$

と書くことができる．さらに (35.5) から $\nu_{n, n} = 0$ であるから

$$(px - sp)_{n, n'} = \frac{h}{2\pi i} \delta_{n, n'}$$

となる。これは

$$px - xp = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1}$$

である。よって (35.2) が証明された。次に (35.1) が成立することを示す。まず (35.1) 左辺に (35.6) を代入すると

$$\left(\frac{dx}{dt} \right)_{n,n'} = 2\pi i \nu_{n,n'} X_{n,n'} \exp(2\pi i \nu_{n,n'} t) = 2\pi i \nu_{n,n'} x_{n,n'}, \quad (35.10)$$

を得る。右辺については予備定理を用いると

$$\begin{aligned} \{xH(x,p) - H(x,p)x\}_{n,n'} &= \{XH(X,P) - H(X,P)X\} \exp(2\pi i \nu_{n,n'} t) \\ &= \sum_{n''} \{X_{n,n''} H(X,P)_{n'',n'} - H(X,P)_{n,n''} X_{n'',n'}\} \exp(2\pi i \nu_{n,n'} t) \end{aligned}$$

ここで仮定より $H(X,P)$ は対角線マトリックスであり、その対角要素は $W_1, W_2, \dots$ であるのだから

$$H(X,P)_{n,n'} = W_n \delta_{n,n'}.$$

これを上の式に適用すると

$$\begin{aligned} &= \sum_{n''} \{X_{n,n''} W_{n''} \delta_{n'',n'} - W_n \delta_{n,n''} X_{n'',n'}\} \exp(2\pi i \nu_{n,n'} t) \\ &= (W_{n'} - W_n) X_{n,n'} \exp(2\pi i \nu_{n,n'} t) = -h \nu_{n,n'} x_{n,n'}, \end{aligned} \quad (35.11)$$

これと (35.10) より

$$\left(\frac{dx}{dt} \right)_{n,n'} = -\frac{2\pi i}{h} \{xH(x,p) - H(x,p)x\}_{n,n'}$$

を得るが、これは (35.1) である。よって定理が証明された。

□

この逆定理を用いると、運動方程式を解くには、正準交換関係 (35.2') を満たし、かつ Hamilton 関数に代入すれば対角線マトリックスになるような、時間を含まないエルミートマトリックス X と P を求めればよいことになる。

定理 いくつかのマトリックス $X, Y, Z, \dots$ を自変数とする関数 $f(X, Y, Z, \dots)$ で定義されるマトリックス f があったとき

$$f' = U^\dagger f U$$

は

$$f(X', Y', Z', \dots)$$

に等しい。すなわち

$$U^\dagger f(X, Y, Z, \dots) U = f(U^\dagger X U, U^\dagger Y U, U^\dagger Z U, \dots), \quad (35.17)$$

が成立する。

(ii) ユニタリー変換

系 二つのマトリックス X と P があって、それが

$$PX - XP = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1}, \quad (35.2')$$

を満たすなら

$$P' = U^\dagger P U, \quad X' = U^\dagger X U \quad (35.16')$$

で定義される P' と X' も

$$P'X' - X'P' = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1}, \quad (35.2'')$$

を満たす。また X と P がエルミートなら X' と P' もエルミートである。証明は簡単であるから省く。

証明 (35.2') の両辺に左から $U^\dagger$ ，右から U を掛けると

$$U^\dagger (PX - XP) U = \frac{h}{2\pi i} U^\dagger \mathbf{1} U,$$

$U^\dagger U = \mathbf{I}$ であるから右辺は (35.2') の右辺のままである。また左辺は

$$U^\dagger P X U - U^\dagger X P U = U^\dagger P U U^\dagger X U - U^\dagger X U U^\dagger P U = P' X' - X' P'$$

となり、これは (35.2'') の左辺である。

また X がエルミートなら $X^\dagger = X$ であるから

$$(X')^\dagger = (U^\dagger X U)^\dagger = (X U)^\dagger (U^\dagger)^\dagger = U^\dagger X^\dagger U = U^\dagger X U = X'$$

となり $(X')^\dagger = X'$ となるのでエルミート。

□

(iii) 固有値問題

われわれの問題は

$$PX - XP = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1}, \quad (35.2')$$

を満たし、かつ

$$H(X, P) = \text{対角線マトリックス}, \quad (35.3')$$

となるような P と X を求めることであった。ただし、このとき P と X は時間を含まないものとする。

この問題を次のようにして解くことができる。まずどのようなものでもよいから正準交換関係を満たす二つの P^o と X^o が分かっていたとする。ここでは振動子で得られた p と x で $t=0$ としたマトリックスを使用する。

$$X^o = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{2}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}, \quad (35.18)$$

$$P^o = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{2}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}, \quad (35.19)$$

を使用する。

この P^o と X^o を H に代入したものを H^o と書く：

$$H^o = H(X^o, P^o), \quad (35.20)$$

もちろん、この H^o は対角線マトリックスとは限らない。

そこで

$$X = U^\dagger X^o U, \quad P = U^\dagger P^o U, \quad (35.21)$$

として、 H^o

$$H^o(X, P) = H^o(U^\dagger X^o U, U^\dagger P^o U)$$

が対角線マトリックスとなるようなユニタリーマトリックス U を決定する。

定理 (35.17) を用いると、問題は

$$U^\dagger H^o U = \text{対角線マトリックス}$$

となる、 U を求めることに帰着される。すなわち

$$\left. \begin{aligned} U^\dagger H^o U &= W, \\ W_{n,n'} &= W_n \delta_{n,n'}, \end{aligned} \right\} \quad (35.22)$$

になるように U を決定する。もしくは $UU^\dagger = \mathbf{I}$ を適用し

$$H^o U = U W, \quad (35.23)$$

としてもよい。

(35.23) を成分で表すと

$$\sum_{n''} H_{n,n''}^o U_{n'',n'} = \sum_{n''} U_{n,n''} W_{n''} \delta_{n'',n'} = U_{n,n'} W_{n'}, \quad (35.23')$$

を得る¹⁷。この方程式の数は n と n' の組み合わせの数だけある。異なる n' ごとに方程式は独立である。別な言い方をすれば、 n' を共通にもつ未知数 $U_{n'',n'}$ および $W_{n'}$ だけが方程式によって互いに関係付けられている。こうして、われわれは

$$\sum_{n''} H_{n,n''}^o \xi_{n''} - W \xi_n = 0, \quad n = 1, 2, \dots \quad (35.24)$$

なる方程式を解けばよい¹⁸。

(35.24) の形の方程式は 1 次方程式の理論にしばしば現れ、以下の形で記される。

$$\left. \begin{aligned} (H_{1,1}^o - W) \xi_1 + H_{1,2}^o \xi_2 + H_{1,3}^o \xi_3 + \dots &= 0, \\ H_{2,1}^o \xi_1 + (H_{2,2}^o - W) \xi_2 + H_{2,3}^o \xi_3 + \dots &= 0, \\ H_{3,1}^o \xi_1 + H_{3,2}^o \xi_2 + (H_{3,3}^o - W) \xi_3 + \dots &= 0, \\ \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \end{aligned} \right\} \quad (35.24')$$

である。この形の方程式は前にでてきた (33.17') や (33.18) と比べてはるかに簡単に取り扱うことができる。

この方程式が $\xi_1 = \xi_2 = \dots = 0$ 以外の解をもつためには、行列式が

$$\begin{vmatrix} H_{1,1}^o - W & H_{1,2}^o & H_{1,3}^o & \dots \\ H_{2,1}^o & H_{2,2}^o - W & H_{2,3}^o & \dots \\ H_{3,1}^o & H_{3,2}^o & H_{3,3}^o - W & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0, \quad (35.24'')$$

¹⁷伊藤注：具体的に $n = 1$ から 2, 3 個書いてみる：

$$\begin{aligned} H_{1,1}^o U_{1,n'} + H_{1,2}^o U_{2,n'} + H_{1,3}^o U_{3,n'} + \dots &= W_{n'} U_{1,n'}, \\ H_{2,1}^o U_{1,n'} + H_{2,2}^o U_{2,n'} + H_{2,3}^o U_{3,n'} + \dots &= W_{n'} U_{2,n'}, \\ H_{3,1}^o U_{1,n'} + H_{3,2}^o U_{2,n'} + H_{3,3}^o U_{3,n'} + \dots &= W_{n'} U_{3,n'}, \\ \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \end{aligned}$$

更に、($n = 1$ で) $n' = 1, 2, 3$ の場合を書いてみると（右辺を左辺に移行してまとめる）

$$\begin{aligned} (H_{1,1}^o - W_1) U_{1,1} + H_{1,2}^o U_{2,1} + H_{1,3}^o U_{3,1} + \dots &= 0, \\ (H_{1,1}^o - W_2) U_{1,2} + H_{1,2}^o U_{2,2} + H_{1,3}^o U_{3,2} + \dots &= 0, \\ (H_{1,1}^o - W_3) U_{1,3} + H_{1,2}^o U_{2,3} + H_{1,3}^o U_{3,3} + \dots &= 0, \\ \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \end{aligned}$$

($n = 2$ で) $n' = 1, 2, 3$ の場合

$$\begin{aligned} H_{2,1}^o U_{1,1} + (H_{2,2}^o - W_1) U_{2,1} + H_{2,3}^o U_{3,1} + \dots &= 0, \\ H_{2,1}^o U_{1,2} + (H_{2,2}^o - W_2) U_{2,2} + H_{2,3}^o U_{3,2} + \dots &= 0, \\ H_{2,1}^o U_{1,3} + (H_{2,2}^o - W_3) U_{2,3} + H_{2,3}^o U_{3,3} + \dots &= 0, \\ \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \end{aligned}$$

¹⁸伊藤注：あえて書くと $\xi_n = U_{n,n}$ である。よって、この式は (35.23') 式のどの方程式にも対応していない。

となればよい。この n 次方程式を n 個¹⁹の W が得られる。 H^o が実数でエルミートならば ($H_{n,n'}^o = [H_{n',n}^o]^*$)、これらの根がすべて実数であることが証明される。

(35.24) の複素共役をとると

$$\sum_{n''} \xi_{n''}^* H_{n'',n}^o - W^* \xi_n^* = 0, \quad (35.24'')$$

となるが、(35.24) の両辺に ξ_n^* を乗じて n について和をとると

$$\sum_{n,n''} \xi_n^* H_{n,n''}^o \xi_{n''} - W \sum_n \xi_n^* \xi_n = 0 \quad (35.25)$$

と、(35.24'') の両辺に ξ_n を乗じて n について和をとると

$$\sum_{n,n''} \xi_n \xi_{n''}^* H_{n'',n}^o - W^* \xi_n \xi_n^* = 0,$$

となるが、左辺第 1 項の和で $n \rightarrow n''$, $n'' \rightarrow n$ と書き換えると

$$\sum_{n'',n} \xi_{n''} \xi_n^* H_{n,n''}^o - W^* \xi_n \xi_n^* = 0, \quad (35.25')$$

となる。こうして (35.25) から (35.25') を引くと

$$(W - W^*) \sum_n |\xi_n|^2 = 0$$

を得る。よって $\sum_n |\xi_n|^2 \neq 0$ であるから

$$W - W^* = 0$$

が得られる。すなわち W は実である。

□

行列式 (35.24'') の n 個²⁰の解を $W_1, W_2, \dots, W_n$ とする。簡単化のために、すべての解は異なるとする。得られた解の中の $W_{n'}$ と (35.24') から $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ を解くことができる。これらの解を $\xi_{1,n'}, \xi_{2,n'}, \dots, \xi_{n,n'}$ として表記する。この ξ は共通の因子を除き決定される。因子を適当に選択し

$$\sum_{n''} |\xi_{n'',n'}|^2 = 1, \quad (35.26)$$

¹⁹伊藤注：テキストでは n と n' との可能な組み合わせの数として N を使用しているが、(35.23) の最右辺で n' が同一な組の個数は n であり、 n' が同一な組の方程式の中から 1 つを抽出し (35.24) を作っている。よって方程式は n 元の n 個の連立方程式ではないか。

²⁰伊藤注：既に記したようにテキストでは N としている。

と規格化する．この ξ につきいくつかの性質を示しておく．

性質 1 n' と n'' が異なるとき

$$\sum_n \xi_{n,n'}^* \xi_{n,n''} = 0, \quad n' \neq n'' \quad (35.27)$$

証明 $\xi_{1,n'}, \xi_{2,n'}, \dots, \xi_{n,n'}$ は (35.24) の n' に属する解であるから

$$\sum_{n'''} H_{n,n'''}^o \xi_{n''',n'} - W_{n'} \xi_{n,n'} = 0,$$

を満たしている．この両辺に $\xi_{n,n''}^*$ をかけて n で和をとると

$$\sum_{n,n'''} \xi_{n,n''}^* H_{n,n'''}^o \xi_{n''',n'} - W_{n'} \sum_n \xi_{n,n''}^* \xi_{n,n'} = 0, \quad (35.28)$$

を得る．次に $\xi_{1,n''}, \xi_{2,n''}, \dots, \xi_{n,n''}$ は

$$\sum_{n'''} H_{n,n'''}^o \xi_{n''',n''} - W_{n''} \xi_{n,n''} = 0,$$

を満たしている．この複素共役は

$$\sum_{n'''} (H_{n,n'''}^o)^* \xi_{n''',n''}^* - W_{n''}^* \xi_{n,n''}^* = 0,$$

となるが, $(H_{n,n'''}^o)^* = H_{n''',n}^o$ であり $W_{n''}^* = W_{n''}$ であるから

$$\sum_{n'''} H_{n''',n}^o \xi_{n''',n''}^* - W_{n''} \xi_{n,n''}^* = 0,$$

となる．これに $\xi_{n,n'}$ をかけて n で和をとると

$$\sum_{n,n'''} \xi_{n''',n''}^* H_{n''',n}^o \xi_{n,n'} - W_{n''} \sum_n \xi_{n,n''}^* \xi_{n,n'} = 0, \quad (35.29)$$

が導かれる．ここで (35.29) の左辺第 1 項での和の添字を $n \rightarrow n'''$ とし $n''' \rightarrow n$ として, (35.28) から (35.29) を引くと

$$(W_{n'} - W_{n''}) \sum_n \xi_{n,n''}^* \xi_{n,n'} = 0, \quad (35.30)$$

が得られえるから, 仮定より $n' \neq n''$ であり, よって $W_{n'} - W_{n''} \neq 0$ ということは (35.27) が成立しなければならない．

□

規格化条件 (35.26) と直交条件 (35.27) をまとめて書くと

$$\sum_n \xi_{n,n'}^* \xi_{n,n''} = \delta_{n',n''} \quad (35.31)$$

と書ける.

性質 2 $\xi_{n,n'}$ の行列式

$$\Delta = \begin{vmatrix} \xi_{1,1} & \xi_{1,2} & \cdots & \xi_{1,n} \\ \xi_{2,1} & \xi_{2,2} & \cdots & \xi_{2,n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \xi_{n,1} & \xi_{n,2} & \cdots & \xi_{n,n} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \xi_{1,1} & \xi_{2,1} & \cdots & \xi_{n,1} \\ \xi_{1,2} & \xi_{2,2} & \cdots & \xi_{n,2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \xi_{1,n} & \xi_{2,n} & \cdots & \xi_{n,n} \end{vmatrix}$$

に対して

$$\Delta \neq 0. \quad (35.32)$$

もしくは

$$\Delta \Delta^* = 1, \quad (35.32')$$

が成立する.

証明

$$\Delta \Delta^* = \begin{vmatrix} \sum_n \xi_{n,1} \xi_{n,1}^* & \sum_n \xi_{n,1} \xi_{n,2}^* & \cdots & \sum_n \xi_{n,1} \xi_{n,n}^* \\ \sum_n \xi_{n,2} \xi_{n,1}^* & \sum_n \xi_{n,2} \xi_{n,2}^* & \cdots & \sum_n \xi_{n,2} \xi_{n,n}^* \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_n \xi_{n,n} \xi_{n,1}^* & \sum_n \xi_{n,n} \xi_{n,2}^* & \cdots & \sum_n \xi_{n,n} \xi_{n,n}^* \end{vmatrix}$$

であるが, (35.31) を用いると

$$= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{vmatrix} = 1$$

よって $\Delta \neq 0$ または $\Delta \Delta^* = 1$ が証明された.

□

こうして (35.24') の規格化された解 $\xi_{1,n'}, \xi_{2,n'}, \cdots, \xi_{n,n'}$ がすべての n' につき求められると

$$U_{n,n'} = \xi_{n,n'}, \quad (35.33)$$

として決定される.

$U_{n,n'}$ が (35.23') を満たすことは, ξ が (35.24) を満たすことから明らかである.

(35.31) により

$$\sum_{n''} U_{n'',n}^* U_{n'',n'} = \delta_{n,n'}$$

$$\sum_{n'''} \sum_{n'} U_{n''', n'}^* U_{n'', n'} U_{n'', n}^* = \sum_{n'} U_{n''', n'}^* \delta_{n, n'} = U_{n''', n}^*$$
$$\sum_{n''} \left(\sum_{n'} U_{n''',n'}^* U_{n'',n'} - \delta_{n''',n''} \right) U_{n'',n}^* = 0$$
$$\sum_{n''} \left(\sum_{n'} U_{n'',n'} U_{n'',n'}^* - \delta_{n'',n''} \right) \xi_{n'',n} = 0, \quad (35.34)$$
$$\begin{aligned}\eta_1\xi_{1,1} + \eta_2\xi_{2,1} + \cdots + \eta_n\xi_{n,1} &= 0, \\ \eta_1\xi_{1,2} + \eta_2\xi_{2,2} + \cdots + \eta_n\xi_{n,2} &= 0, \\ &\dots\dots\dots \\ \eta_1\xi_{1,n} + \eta_2\xi_{2,n} + \cdots + \eta_n\xi_{n,n} &= 0,\end{aligned}$$
$$\sum_{n'} U_{n''',n'}^* U_{n'',n'} - \delta_{n''',n''} = 0$$
☐

途中略

33

問題は 1 次斉次方程式の固有値と固有解を求める問題，いわゆる固有値問題に帰着された．中略．力学系において働く力の性質に無関係に，解くべき方程式が 1 次斉次となったことは，一般に高次の方程式であったもとの方程式 (33.17') と (33.18) とに取り組んで議論するよりもはるかに進歩したことになる．

それにもかかわらず，マトリックス力学によって実際問題を解くことは甚だ面倒である．Pauli と Dirac とはマトリックス力学およびそれに類似する方法で水素原子のエネルギー準位を実際に得られることを示した．しかしその計算はきわめて複雑であった．ここで波動力学の助けが無かったら，量子力学は手におえないしろものになっただろう．しかし幸いにも波動力学が発見されて，われわれにもっと親しみ深い数学を用いて，問題を解くことを可能にしてくれた．

量子力学 I 完