初歩から学ぶ量子力学（講談社）
章末問題解答

佐藤　博彦

2024 年 4 月 24 日

第 1 章

【1.1】

発光ダイオードに電圧 V をかけると，接合の両端に電位差 V が発生する。接合部を電荷 $-e$ の電子が通過する際には，電子のエネルギーが eV だけ減少し，それに等しいエネルギーをもつ光子が放出される。光の振動数を ν とすると $eV = h\nu$ であり，光速を c とすると波長は $\lambda = \frac{c}{\nu}$ である。これに $e = 1.6 \times 10^{-19}$ C, $V = 3$ V，$h = 6.6 \times 10^{-34}$ Js，$c = 3.0 \times 10^{8}$ m/s を代入すると

$$\lambda = 4.1 \times 10^{-7}\ \mathrm{m} = 410\ \mathrm{nm} \tag{1}$$

となる。これは紫色の光に相当する。実際には，エネルギーがもう少し小さい青色の光が出る。

【1.2】

ド・ブロイの式に $m = 0.1$ kg，$v = 10$ m/s を代入すると，

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6.6 \times 10^{-34}}{0.1 \times 10} = 6.6 \times 10^{-34}\ \mathrm{m} \tag{2}$$

となる。

【1.3】

加速後の電子の運動エネルギーは $\frac{1}{2}mv^2 = eV$ なので $mv = \sqrt{2meV}$ である。したがって

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2meV}} = \frac{6.6 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times 9.1 \times 10^{-31} \times 1.6 \times 10^{-19} \times 10^{4}}} = 1.2 \times 10^{-11}\ \mathrm{m} \tag{3}$$

となる。

第 2 章

【2.1】

α, β を実数として $a = i\alpha,\ b = i\beta$ とする。このとき，オイラーの公式より

$$e^{a+b} = e^{i(\alpha+\beta)} = \cos(\alpha+\beta) + i\sin(\alpha+\beta) \tag{4}$$

である。三角関数の加法定理を用いると，これはさらに

$$\begin{aligned}&\cos\alpha\cos\beta - \sin\alpha\sin\beta + i(\sin\alpha\cos\beta + \cos\alpha\sin\beta)\\ &= (\cos\alpha + i\sin\alpha)(\cos\beta + i\sin\beta) = e^{i\alpha}e^{i\beta} = e^a e^b\end{aligned} \tag{5}$$

となり，示された。

【2.2】

2.2.1 項に書かれているように $m = \rho\Delta x$ なので ρ の単位は [kg m^{-1}] である。ばね定数 κ の単位は [N m^{-1}] であり，$\alpha = \kappa\Delta x$ なので α の単位は [N]=[kg m s^{-2}] である。したがって $\sqrt{\frac{\alpha}{\rho}}$ の単位は

$$\sqrt{\frac{[\mathrm{kg\ m\ s^{-2}}]}{[\mathrm{kg\ m^{-1}}]}} = \sqrt{[\mathrm{m^2\ s^{-2}}]} = [\mathrm{m/s}] \tag{6}$$

である。よって $\sqrt{\frac{\alpha}{\rho}}$ は速度の次元をもつ。

【2.3】

(a) 合成関数の微分の公式を用いると

$$\frac{\partial}{\partial x}f(r) = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{d}{dr}f(r) \tag{7}$$

である。ここで

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}(x^2+y^2+z^2)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}2x(x^2+y^2+z^2)^{-\frac{1}{2}} = \frac{x}{r} \tag{8}$$

を用いることにより示された。

(b) 問題 (a) の結果を用いると

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2}f(r) &= \frac{\partial}{\partial x}\left\{\frac{x}{r}\frac{d}{dr}f(r)\right\} = \left\{\frac{1}{r} + x\frac{x}{r}\frac{d}{dr}\left(\frac{1}{r}\right)\right\}\frac{d}{dr}f(r) + \frac{x^2}{r^2}\frac{d^2}{dr^2}f(r)\\ &= \left(\frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3}\right)\frac{d}{dr}f(r) + \frac{x^2}{r^2}\frac{d^2}{dr^2}f(r)\end{aligned} \tag{9}$$

となる（他の成分の場合も同様）。したがって

$$\begin{aligned}\nabla^2 f(r) &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)f(r) = \frac{2}{r}\frac{d}{dr}f(r) + \frac{d^2}{dr^2}f(r)\\ &= \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left\{r^2\frac{d}{dr}f(r)\right\}\end{aligned} \tag{10}$$

が得られる。

(c) $f(r) = \frac{1}{r}e^{ikr}$ とすると

$$\nabla^2 f(r) = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(-e^{ikr} + ikre^{ikr}\right) = -\frac{k^2}{r}e^{ikr} = -k^2 f(r) \tag{11}$$

となる。$\psi(\boldsymbol{r}, t) = f(r)e^{-i\omega t}$ なので，$\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}, t) = -k^2\psi(\boldsymbol{r}, t)$ が得られる。一方，$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(\boldsymbol{r}, t) = -\omega^2\psi(\boldsymbol{r}, t)$ なので，$\omega = c|k|$ であればこの $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ は 3 次元における波動方程式

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\psi(\boldsymbol{r}, t) = 0 \tag{12}$$

をみたす。

第 3 章

【3.1】

時刻 t における確率密度関数を $\rho(x,t)$ とすると，位置の観測値が x と $x+dx$ の間の値をとる確率は，dx が微小量の場合，

$$\rho(x,t)dx \tag{13}$$

と書くことができる。このことから，実験を N 回繰り返したとき，位置が x と $x+dx$ の間に観測される回数は，N が十分大きければ

$$N\rho(x,t)dx \tag{14}$$

である。この回数に x をかければ，N 回の実験のうち，x と $x+dx$ の間の範囲に観測された測定値をすべてたし合わせたものとほぼ等しい。以上より，N 回の実験で得られた位置の測定値をすべてたしたものは積分

$$\int_{-\infty}^{+\infty} Nx\rho(x,t)dx \tag{15}$$

で表される。これを測定回数 N で割った平均値が位置の期待値である。

【3.2】

ハミルトニアンを作用させると

$$\hat{H}\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_j c_j \hat{H}\varphi_j(\boldsymbol{r})e^{-i\omega_j t} = \sum_j c_j \hbar\omega_j\varphi_j(\boldsymbol{r})e^{-i\omega_j t} = i\hbar\sum_j c_j\varphi_j(\boldsymbol{r})(-i\omega_j)e^{-i\omega_j t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{16}$$

であるので，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ は時間を含むシュレディンガー方程式の解である。

【3.3】

たとえば，2 つの定常状態を重ね合わせて $\psi(\boldsymbol{r},t) = \varphi_1(\boldsymbol{r})e^{-i\omega_1 t} + \varphi_2(\boldsymbol{r})e^{-i\omega_2 t}$ とすると

$$\begin{aligned} |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 &= |\varphi_1(\boldsymbol{r})|^2 + |\varphi_2(\boldsymbol{r})|^2 \\ &\quad + \varphi_1^*(\boldsymbol{r})\varphi_2(\boldsymbol{r})e^{i(\omega_1-\omega_2)t} + \varphi_2^*(\boldsymbol{r})\varphi_1(\boldsymbol{r})e^{i(\omega_2-\omega_1)t} \end{aligned} \tag{17}$$

となり，確率密度が時間とともに変動するので，この $\psi(\boldsymbol{r},t)$ は定常状態とはいえない。

【3.4】

確率密度を $\rho(x,t)$，確率の流れを $j(x,t)$ とすると，連続の方程式より

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = 0 \tag{18}$$

である。これを全領域で積分すると

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}}\left(\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t)+\frac{\partial}{\partial x}j(x,t)\right)dx=\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}}\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t)dx+j\left(\frac{L}{2},t\right)-j\left(-\frac{L}{2},t\right)=0 \tag{19}$$

である。ここで，波束の場合には $L\to+\infty$ の極限で $j\to 0$ であり，周期的境界条件の場合には $j\left(\frac{L}{2},t\right)=j\left(-\frac{L}{2},t\right)$ であるので，いずれにせよ，第 2 項と第 3 項は合わせて 0 となり，

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}}\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t)dx=0 \qquad \therefore\frac{d}{dt}\left\{\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}}\rho(x,t)dx\right\}=0 \tag{20}$$

となる。これは

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}}\rho(x,t)dx \tag{21}$$

が時刻によらず一定であることを意味する。したがって，波動関数がある時刻で規格化されていれば，任意の時刻でも規格化されている。

第 4 章

【4.1】

粒子は井戸の底のどこかに発見されるので，位置のばらつき Δx は井戸の幅 a とみなすことができる。一方，4.2.1 項の式（4.44）の固有関数は右向き，左向きに進む進行波の重ね合わせとして

$$\frac{1}{2i}\sqrt{\frac{2}{a}}\left(e^{i\frac{n\pi}{a}x} - e^{-i\frac{n\pi}{a}x}\right) \tag{22}$$

と表され，それぞれの運動量は $+\hbar\frac{n\pi}{a}, -\hbar\frac{n\pi}{a}$ である（n は正の整数）。これらの差を運動量のばらつき Δp とみなすと $p = \frac{nh}{a}$ である。したがって $\Delta x \Delta p$ の最小値は h 程度である。

【4.2】

この場合の解は

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < -a) \\ Ce^{ilx} + De^{-ilx} & (-a \leq x \leq a) \\ Fe^{ikx} & (x > a) \end{cases} \tag{23}$$

となる。ただし

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad l = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \tag{24}$$

とした。

$x = -a$ における波動関数およびその導関数の接続条件より

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{-ila} + De^{ila} \tag{25}$$

$$ik(Ae^{-ika} - Be^{ika}) = il(Ce^{-ila} - De^{ila}) \tag{26}$$

が得られ，これらより，

$$2Ce^{-ila} = \alpha Ae^{-ika} + \beta Be^{ika} \tag{27}$$

$$2De^{ila} = \beta Ae^{-ika} + \alpha Be^{ika} \tag{28}$$

となる。ここで

$$\alpha = 1 + \frac{k}{l}, \ \ \beta = 1 - \frac{k}{l} \tag{29}$$

とおいた。同様に，$x = a$ における，波動関数およびその導関数の接続条件は

$$Ce^{ila} + De^{-ila} = Fe^{ika} \tag{30}$$

$$il(Ce^{ila} - De^{-ila}) = ikFe^{ika} \tag{31}$$

であり，さらに

$$2Ce^{ila} = \alpha Fe^{ika} \tag{32}$$

$$2De^{-ila} = \beta Fe^{ika} \tag{33}$$

が得られる。これらを式（27），式（28）に代入すると

$$\alpha F e^{ika} e^{-2ila} = \alpha A e^{-ika} + \beta B e^{ika} \tag{34}$$

$$\beta F e^{ika} e^{2ila} = \beta A e^{-ika} + \alpha B e^{ika} \tag{35}$$

となる。これらより B を消去すると

$$(\alpha^2 e^{-2ila} - \beta^2 e^{2ila}) F e^{ika} = (\alpha^2 - \beta^2) A e^{-ika} \tag{36}$$

となり，この式の複素共役を両辺にそれぞれかけると

$$\begin{aligned} &\left\{\alpha^4 + \beta^4 - \alpha^2\beta^2(e^{-4ila} + e^{4ila})\right\} |F|^2 = (\alpha^2 - \beta^2)^2 |A|^2 \\ \therefore\ &\left\{(\alpha^2 - \beta^2)^2 + 4\alpha^2\beta^2 \sin^2(2la)\right\} |F|^2 = (\alpha^2 - \beta^2)^2 |A|^2 \end{aligned} \tag{37}$$

となる。ここで

$$\alpha^2 - \beta^2 = 4\frac{k}{l}, \quad \alpha\beta = \frac{l^2 - k^2}{l^2} \tag{38}$$

がみたされるので，透過率は

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{(k^2 - l^2)^2}{4k^2 l^2} \sin^2(2la)} \tag{39}$$

と求まる。この式より，トンネルの壁の厚みがトンネルの壁における波動関数の半波長の整数倍のときに，透過率は 1 となることがわかる。

【4.3】

波動関数 $\varphi_1(x)$ と $\varphi_2(x)$ が同じエネルギー固有値 E をもつとすると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_1''(x) + V(x)\varphi_1(x) = E\varphi_1(x) \tag{40}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_2''(x) + V(x)\varphi_2(x) = E\varphi_2(x) \tag{41}$$

となる。式（40）に $\varphi_2(x)$ をかけたものから式（41）に $\varphi_1(x)$ をかけたものを引くことにより

$$\varphi_1''(x)\varphi_2(x) = \varphi_1(x)\varphi_2''(x) \tag{42}$$

が得られ，これはさらに

$$\{\varphi_1'(x)\varphi_2(x) - \varphi_1(x)\varphi_2'(x)\}' = 0 \tag{43}$$

と表すことができる。両辺を $-\infty$ から x_1 までの区間で積分すると

$$[\varphi_1'(x)\varphi_2(x) - \varphi_1(x)\varphi_2'(x)]_{-\infty}^{x_1} = 0 \tag{44}$$

となる。束縛状態では $x \to -\infty$ で波動関数とその導関数は 0 とみなせるので，上式であらためて x_1 を x と書き，$\varphi_1(x)\varphi_2(x)$ で割ると

$$\frac{\varphi_1'(x)}{\varphi_1(x)} - \frac{\varphi_2'(x)}{\varphi_2(x)} = 0 \tag{45}$$

となり，これは自然対数を用いて

$$\{\ln \varphi_1(x) - \ln \varphi_2(x)\}' = 0 \tag{46}$$

と表すこともできる。これより

$$\ln \frac{\varphi_1(x)}{\varphi_2(x)} = C \tag{47}$$

すなわち

$$\varphi_2(x) = c\varphi_1(x) \tag{48}$$

が導かれた（C, c は定数）。これは，2 つの波動関数が同じエネルギー固有値をもつなら，必ず一方は他方の定数倍として表すことができることを意味する。

【4.4】

時間を含まないシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{49}$$

の複素共役をとると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi^{*\prime\prime}(x) + V(x)\varphi^*(x) = E\varphi^*(x) \tag{50}$$

であるので，$\varphi(x)$ と $\varphi^*(x)$ は同じエネルギー固有値をもつ。その場合には前問の結果より必ず

$$\varphi^*(x) = c\varphi(x) \tag{51}$$

がなりたつ。規格化条件より c は絶対値 1 の複素数でなければならないので $c = e^{2i\theta}$ と書くことにすると

$$e^{-i\theta}\varphi^*(x) = e^{i\theta}\varphi(x) \tag{52}$$

となる。ここで $\psi(x) = e^{i\theta}\varphi(x)$ とおけば

$$\psi^*(x) = \psi(x) \tag{53}$$

がなりたつ。これは $\psi(x)$ が実数関数であることを意味する。つまり，1 次元の束縛状態の波動関数は，必ず実数関数として表すことが可能である。

【4.5】

まず k が偶数の場合を考えよう。k が λ と比べて非常に大きい場合，4.4 節の漸化式（4.98）は

$$c_k \approx \frac{2}{k}c_{k-2} \tag{54}$$

と近似できるので，係数を大雑把に見積もるのであれば

$$c_k \approx \frac{2}{k}\cdot\frac{2}{k-2}\cdots\frac{2}{2}c_0 = \frac{1}{\left(\frac{k}{2}\right)!}c_0 \tag{55}$$

である。このとき，$k=2n$ （n は整数）とすると，偶数次の項をすべてたした関数は

$$c_0\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{1}{n!}z^{2n}=c_0e^{z^2} \tag{56}$$

に近似できる。

一方，k が奇数の場合には

$$c_k\approx\frac{2}{k-1}c_{k-2} \tag{57}$$

と近似すると

$$c_k\approx\frac{2}{k-1}\cdot\frac{2}{k-3}\cdots\frac{2}{2}c_1=\frac{1}{\left(\frac{k-1}{2}\right)!}c_1 \tag{58}$$

よって $k-1=2n$ （n は整数）とすると，奇数次の項をすべてたした関数は

$$c_1z\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{1}{n!}z^{2n}=c_1ze^{z^2} \tag{59}$$

に近似できる。以上より，

$$u(z)\approx(c_0+c_1z)e^{z^2} \tag{60}$$

と近似でき，$|z|$ が大きくなるほど高次の項が効いてくるので，この近似はより正確になる。これをもとに，無次元化した波動関数 $f(z)$ を表すと

$$f(z)\approx(c_0+c_1z)e^{+\frac{1}{2}z^2} \tag{61}$$

となる。これは $|z|\to+\infty$ で発散してしまうので，固有関数としてふさわしくない。

第 5 章

【5.1】

n_x, n_y, n_z をそれぞれ正の整数とすると，エネルギー固有値は

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right) \tag{62}$$

である。したがって，固有関数を (n_x, n_y, n_z) で指定し，$\varepsilon = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ とすると

- 基底状態は $(1,1,1)$ で 1 重縮退，エネルギー準位は 3ε
- 第 1 励起状態は $(2,1,1)$ およびその並び替えで 3 重縮退，エネルギー準位は 6ε
- 第 2 励起状態は $(2,2,1)$ およびその並び替えで 3 重縮退，エネルギー準位は 9ε
- 第 3 励起状態は $(3,1,1)$ およびその並び替えで 3 重縮退，エネルギー準位は 11ε
- 第 4 励起状態は $(2,2,2)$ およびその並び替えで 1 重縮退，エネルギー準位は 12ε
- 第 5 励起状態は $(3,2,1)$ およびその並び替えで 6 重縮退，エネルギー準位は 14ε

となる。

【5.2】

シュレディンガー方程式は

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right\}\varphi(\boldsymbol{r}) = E\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{63}$$

すなわち

$$\begin{aligned}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)\right\}\varphi(x,y,z) \\ = E\varphi(x,y,z)\end{aligned} \tag{64}$$

となる。この方程式は変数分離可能であり，解を $\varphi(\boldsymbol{r}) = X(x)Y(y)Z(z)$ とおくと，それぞれの変数に対する方程式は 1 次元調和振動子のものと同じである。その解についてはすでに 4.4 節の式（4.101）のようにエルミート多項式とガウス型関数の積で与えられる。また，エネルギー固有値は，各々の 1 次元調和振動子における式（4.103）をたした

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \hbar\omega\left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right) \tag{65}$$

となる（ただし n_x, n_y, n_z はそれぞれ正または 0 の整数）。$n_x + n_y + n_z$ が同じ整数の場合には同じエネルギーをもつので，この場合にもエネルギーの縮退がある。

【5.3】

式（5.71）を展開した 9 個の項はそれぞれ

$$
\begin{aligned}
e^{i\phi}\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(e^{-i\phi}\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) &= e^{i\phi}\sin\theta\cdot e^{-i\phi}\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\\
&= \sin^2\theta\frac{\partial^2}{\partial r^2} \qquad (66)\\
e^{i\phi}\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(e^{-i\phi}\frac{1}{r}\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) &= e^{i\phi}\sin\theta\cdot e^{-i\phi}\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\\
&= \sin\theta\cos\theta\left(-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r\partial\theta}\right) \qquad (67)\\
e^{i\phi}\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(-ie^{-i\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) &= -e^{i\phi}\sin\theta\cdot ie^{-i\phi}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\
&= -i\left(-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\phi}+\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r\partial\phi}\right) \qquad (68)\\
e^{i\phi}\frac{1}{r}\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(e^{-i\phi}\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) &= e^{i\phi}\frac{1}{r}\cos\theta\cdot e^{-i\phi}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right)\\
&= \frac{1}{r}\cos\theta\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}+\sin\theta\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial r}\right) \qquad (69)\\
e^{i\phi}\frac{1}{r}\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(e^{-i\phi}\frac{1}{r}\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) &= e^{i\phi}\frac{1}{r}\cos\theta\cdot e^{-i\phi}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\\
&= \frac{1}{r^2}\cos\theta\left(-\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\cos\theta\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right) \qquad (70)\\
e^{i\phi}\frac{1}{r}\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(-ie^{-i\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) &= e^{i\phi}\frac{1}{r}\cos\theta\cdot ie^{-i\phi}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\
&= \frac{i\cos\theta}{r^2}\left(\frac{\cos\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi}\right) \qquad (71)\\
ie^{i\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(e^{-i\phi}\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) &= ie^{i\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\cdot\sin\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\left(e^{-i\phi}\frac{\partial}{\partial r}\right)\\
&= \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+i\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial r} \qquad (72)\\
ie^{i\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(e^{-i\phi}\frac{1}{r}\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) &= ie^{i\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{1}{r}\cos\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\left(e^{-i\phi}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\\
&= \frac{\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+i\frac{\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta} \qquad (73)\\
ie^{i\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(ie^{-i\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) &= ie^{i\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(-ie^{-i\phi}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\
&= -i\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \qquad (74)
\end{aligned}
$$

となる。これらをたすと虚部は消え，式（5.72）が得られる。

【5.4】

式（5.75）～（5.77）において，変数を球面極座標で表せばよい。座標変換についての式（5.39）～（5.41）や，偏微分についての式（5.56）～（5.58）を用いることにより，まず x 成分を計算すると

$$
\begin{aligned}
\hat{l}_x &= -i\left\{r\sin\theta\sin\phi\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right. \\
&\quad \left. - r\cos\theta\left(\sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r}\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right\} \\
&= i\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned} \tag{75}
$$

となる。同様に，y 成分

$$
\begin{aligned}
\hat{l}_y &= -i\left\{r\cos\theta\left(\sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{1}{r}\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right. \\
&\quad \left. - r\sin\theta\cos\phi\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right\} \\
&= -i\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned} \tag{76}
$$

および z 成分

$$
\begin{aligned}
\hat{l}_z &= -i\left\{r\sin\theta\cos\phi\left(\sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r}\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right. \\
&\quad \left. - r\sin\theta\sin\phi\left(\sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{1}{r}\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right\} \\
&= -i\frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned} \tag{77}
$$

が得られる。これらはいずれも最終的には r を含まない式になっている。

【5.5】

(a) 関数 $P(z)$ がルジャンドルの陪微分方程式（5.100）をみたすものとする。このとき

$$
Q(z)=\frac{1}{\sqrt{1-z^2}}\left\{(1-z^2)P'(z)+mzP(z)\right\} \tag{78}
$$

で定義される関数の性質を調べてみよう。$P(z)$ は式（5.100）をみたすので

$$
\frac{d}{dz}\left\{(1-z^2)P'(z)\right\}=\left(\frac{m^2}{1-z^2}-\lambda\right)P(z) \tag{79}
$$

となる。これを利用すると、式（78）を z で微分したものは

$$
\begin{aligned}
Q'(z) &= \frac{d}{dz}\left(\frac{1}{\sqrt{1-z^2}}\right)\left\{(1-z^2)P'(z)+mzP(z)\right\} \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{1-z^2}}\left\{\left(\frac{m^2}{1-z^2}-\lambda\right)P(z)+mP(z)+mzP'(z)\right\} \\
&= \frac{(m+1)z}{\sqrt{1-z^2}}P'(z)+\frac{1}{\sqrt{1-z^2}}\left\{\frac{m(m+1)}{1-z^2}-\lambda\right\}P(z)
\end{aligned} \tag{80}
$$

となる。この両辺に $1-z^2$ をかけたものを z で微分し、途中で式（79）も用いて整理すると

$$
\begin{aligned}
&\frac{d}{dz}\left\{(1-z^2)Q'(z)\right\} \\
&=(m+1)\frac{d}{dz}\left(\frac{z}{\sqrt{1-z^2}}\right)(1-z^2)P'(z)+\frac{(m+1)z}{\sqrt{1-z^2}}\left(\frac{m^2}{1-z^2}-\lambda\right)P(z) \\
&\quad +m(m+1)\frac{d}{dz}\left(\frac{1}{\sqrt{1-z^2}}\right)P(z)-\lambda\frac{d}{dz}\left(\sqrt{1-z^2}\right)P(z) \\
&\quad +\sqrt{1-z^2}\left\{\frac{m(m+1)}{1-z^2}-\lambda\right\}P'(z) \\
&=\left\{\frac{(m+1)^2}{1-z^2}-\lambda\right\}\left\{\sqrt{1-z^2}P'(z)+m\frac{z}{\sqrt{1-z^2}}P(z)\right\} \\
&=\left\{\frac{(m+1)^2}{1-z^2}-\lambda\right\}Q(z) \qquad (81)
\end{aligned}
$$

となる。これは関数 $Q(z)$ が、ルジャンドルの陪微分方程式（5.100）の m を $m+1$ に置き換えたものをみたしていることを意味する。

(b) 問題 (a) で $P(z)$ を $P_l^m(z)$ と書き、$Q(z)$ を $P_l^{m+1}(z)$ と書くことにすると，式（78）は、$P_l^m(z)$ がわかっているときに $P_l^{m+1}(z)$ を求めるための漸化式

$$
P_l^{m+1}(z)=\left(\sqrt{1-z^2}\frac{d}{dz}+m\frac{z}{\sqrt{1-z^2}}\right)P_l^m(z) \qquad (82)
$$

であるといえる。このとき，

$$
P_l^m(z)=(1-z^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{dz^m}P_l(z) \qquad (83)
$$

と表せることを，数学的帰納法を用いて示そう。この式は $m=0$ のときは $P_l^0(z)=P_l(z)$ となり，ルジャンドルの陪多項式の定義と一致する。式（83）がなりたっていると仮定し，漸化式（82）を用いて $P_l^{m+1}(z)$ を計算すると

$$
\begin{aligned}
P_l^{m+1}(z)&=\sqrt{1-z^2}\left(\frac{d}{dz}+m\frac{z}{1-z^2}\right)(1-z^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{dz^m}P_l(z) \\
&=\sqrt{1-z^2}\left\{(1-z^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d}{dz}-mz(1-z^2)^{\frac{m}{2}-1}+m\frac{z}{1-z^2}(1-z^2)^{\frac{m}{2}}\right\}\frac{d^m}{dz^m}P_l(z) \\
&=(1-z^2)^{\frac{m+1}{2}}\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_l(z) \qquad (84)
\end{aligned}
$$

となり，式（83）で m を $m+1$ に置き換えたものが得られる。したがって式（83）があらゆる m （ただし $m\le l$）についてなりたつことが示された。

【5.6】

波動関数を $\varphi(\boldsymbol{r})=R(r)Y(\theta,\phi)$ とする。角運動量の大きさが 0 の解は $Y(\theta,\phi)=Y_0^0(\theta,\phi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ である。動径方向の方程式は，式（5.133）で $l=0, V(r)=0$ とおくことにより

$$
\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}\left\{rR(r)\right\}&=E\left\{rR(r)\right\} \\
\frac{d^2}{dr^2}\left\{rR(r)\right\}&=-\frac{2mE}{\hbar^2}\left\{rR(r)\right\} \qquad (85)
\end{aligned}
$$

となる。この一般解は，$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ とすると

$$rR(r) = c_1 e^{ikr} + c_2 e^{-ikr} \tag{86}$$

となるので，求める波動関数は $C_j = \frac{c_j}{\sqrt{4\pi}}$ とすると

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \frac{C_1}{r} e^{ikr} + \frac{C_2}{r} e^{-ikr} \tag{87}$$

となる。これは外向きに進む球面波と内向きに進む球面波の重ね合わせである。

【5.7】

- 1s 軌道：　動径関数も球面調和関数も 0 になることはないので，節はない。
- 2s 軌道：　動径関数は 1 箇所で 0 になり，球面調和関数は 0 になることはない。したがって 1 枚の球面が節になり，空間が 2 分割される。
- 2p 軌道：　動径関数は 0 にならないが，球面調和関数はある 1 つの平面上の方位で 0 になる。したがって 1 枚の平面が節になり，空間が 2 分割される。
- 3s 軌道：　動径関数は 2 箇所で 0 になり，球面調和関数は 0 になることはない。したがって 2 枚の球面が節になり，空間が 3 分割される。
- 3p 軌道：　動径関数は 1 箇所で 0 になり，球面調和関数はある 1 つの平面上の方位で 0 になる。したがって 1 枚の球面と 1 枚の平面が節になり，空間が 4 分割される。
- 3d 軌道：　動径関数は 0 にならないが，球面調和関数はある 2 つの平面上の方位で 0 になる。したがって 2 枚の平面が節になり，空間が 4 分割される。

第 6 章

【6.1】

ベクトルを反時計回りに角度 α 回転させる行列を $\mathbf{U}(\alpha)$ とすると，これは $(1,0)$ を $(\cos\alpha, \sin\alpha)$ に，$(0,1)$ を $(-\sin\alpha, \cos\alpha)$ に変換させる行列なので

$$\mathbf{U}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \tag{88}$$

と書くことができる。このとき，三角関数の加法定理を用いると

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\alpha)\mathbf{U}(\beta) &= \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\beta & -\sin\beta \\ \sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\alpha\cos\beta - \sin\alpha\sin\beta & -\cos\alpha\sin\beta - \sin\alpha\cos\beta \\ \sin\alpha\cos\beta + \cos\alpha\sin\beta & -\sin\alpha\sin\beta + \cos\alpha\cos\beta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\alpha+\beta) & -\sin(\alpha+\beta) \\ \sin(\alpha+\beta) & \cos(\alpha+\beta) \end{pmatrix} = \mathbf{U}(\alpha+\beta) \end{aligned} \tag{89}$$

となる。よって $\mathbf{U}(\alpha)\mathbf{U}(\beta) = \mathbf{U}(\alpha+\beta)$ が示された。

【6.2】

式（6.50）の行列を対角化するための直交行列は，式（6.61）の固有ベクトルを並べてつくった行列なので

$$\mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \tag{90}$$

である。実際に ${}^t\mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}$ を計算してみると

$$\frac{1}{5} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.7 & 0.4 \\ 0.4 & 1.3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 3/2 \end{pmatrix} \tag{91}$$

と対角化されており，対角成分が固有値になっていることがわかる。

【6.3】

(a)

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & \cdots & U_{1N} \\ U_{21} & U_{22} & \cdots & U_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ U_{N1} & U_{N2} & \cdots & U_{NN} \end{pmatrix} \tag{92}$$

とすると

$$\mathbf{U}\boldsymbol{e}_j = \begin{pmatrix} U_{1j} \\ U_{2j} \\ \vdots \\ U_{Nj} \end{pmatrix} \tag{93}$$

であるので $U_{ij} = \boldsymbol{e}_i \cdot \mathbf{U}\boldsymbol{e}_j$ が得られる。
(b)

$$\boldsymbol{a}' = \sum_j a'_j \boldsymbol{e}_j \tag{94}$$

であるので $a'_i = \boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{a}'$ である。これより

$$a'_i = \boldsymbol{e}_i \cdot \mathbf{U}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{e}_i \cdot \sum_j a_j \mathbf{U}\boldsymbol{e}_j = \sum_j a_j \left(\boldsymbol{e}_i \cdot \mathbf{U}\boldsymbol{e}_j\right) = \sum_j U_{ij} a_j \tag{95}$$

となる。ここでは問題 (a) の結果も用いた。
(c)

$$(\mathbf{U}\boldsymbol{a}) \cdot (\mathbf{U}\boldsymbol{b}) = \sum_i a'_i b'_i = \sum_i \sum_k \sum_l U_{ik} a_k U_{il} b_l \tag{96}$$

ここで $\mathbf{U}$ は直交行列なので $U_{ik} = (\mathbf{U}^{-1})_{ki}$ であり，単位行列を $\mathbf{I}$ とすると

$$\sum_i U_{ik} U_{il} = \sum_i (\mathbf{U}^{-1})_{ki} (\mathbf{U})_{il} = (\mathbf{I})_{kl} = \delta_{kl} \tag{97}$$

である。よって

$$(\mathbf{U}\boldsymbol{a}) \cdot (\mathbf{U}\boldsymbol{b}) = \sum_k \sum_l \delta_{kl} a_k b_k = \sum_k a_k b_k = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} \tag{98}$$

が示された。これより，互いに直交しているベクトルを直交行列でそれぞれ変換すると，変換後もこれらのベクトルが直交していることがわかる。

【6.4】

行列 $\mathbf{T}$ を対角化するには，直交行列 $\mathbf{U}$ を用いて $\boldsymbol{\Lambda} = {}^t\mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}$ とすればよい。この対角化された行列 $\boldsymbol{\Lambda}$ のトレースは

$$\sum_{i=1}^{N} \Lambda_{ii} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} U_{ki} T_{kl} U_{li} = \sum_{k=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} \left(\sum_{i=1}^{N} U_{li} U_{ki} \right) T_{kl} = \sum_{k=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} \delta_{kl} T_{kl} = \sum_{k=1}^{N} T_{kk} \tag{99}$$

となり，$\mathbf{T}$ のトレースに一致する。ここでは上式の (　) の部分が $(\mathbf{U}\mathbf{U}^{-1})_{kl}$ であることも用いた。

第 7 章

【7.1】

　積分を計算すると

$$
\begin{aligned}
&\iiint e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}dV \\
&\quad = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i(k_x-k_x')x}dx \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i(k_y-k_y')y}dy \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i(k_z-k_z')z}dz
\end{aligned}
\tag{100}
$$

である。ここで

$$
\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i(k_x-k_x')x}dx = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i\frac{2\pi}{L}(n_x-n_x')x}dx \tag{101}
$$

は $n_x = n_x'$ のとき L であり，$n_x \neq n_x'$ のときは

$$
\left[\frac{L}{2\pi i(n_x-n_x')} e^{i\frac{2\pi}{L}(n_x-n_x')x}\right]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} = 0 \tag{102}
$$

となる。他の積分についても同様であるので，以上より

$$
\iiint e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}dV = L^3 \delta_{n_x,n_x'}\delta_{n_y,n_y'}\delta_{n_z,n_z'} = V\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \tag{103}
$$

が示された。これより，波数の固有関数 $\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ が

$$
\iiint \varphi_{\boldsymbol{k}}^*(\boldsymbol{r})\varphi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})dV = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \tag{104}
$$

のように正規直交系をなすことがわかる。

【7.2】

$$
g(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{105}
$$

とすると，任意の関数 $f(\boldsymbol{r})$ に対して

$$
\iiint f(\boldsymbol{r})g(\boldsymbol{r})dV = \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}} \iiint f(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}dV \tag{106}
$$

がなりたつ。ここで $f(\boldsymbol{r})$ を

$$
f(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}'} f_{\boldsymbol{k}'} e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}} \tag{107}
$$

とフーリエ展開して式（106）に代入し，章末問題 7.1 の結果も用いると

$$\begin{aligned}\frac{1}{V\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'}f_{\boldsymbol{k}'}\iiint e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}dV &= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'}f_{\boldsymbol{k}'}\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'} = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}}f_{\boldsymbol{k}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}}f_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{0}} = f(\boldsymbol{0})\end{aligned} \tag{108}$$

となる。これより

$$\iiint f(\boldsymbol{r})g(\boldsymbol{r})dV = f(\boldsymbol{0}) \tag{109}$$

が任意の関数 $f(\boldsymbol{r})$ についてなりたつので，$g(\boldsymbol{r})$ はデルタ関数の性質をもつといえる。

【7.3】

位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ は位置 $\boldsymbol{r}$ そのものであり，これは実数である。したがって任意の関数 $f(\boldsymbol{r}), g(\boldsymbol{r})$ に対して

$$\iiint f^*(\boldsymbol{r})\boldsymbol{r}g(\boldsymbol{r})dV = \iiint g(\boldsymbol{r})\left\{\boldsymbol{r}f(\boldsymbol{r})\right\}^* dV \tag{110}$$

がなりたつので，位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ がエルミート演算子であることはあきらかである。

運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$ については，付録 D.4 のベクトル恒等式（D.20）を用いることにより

$$\begin{aligned}\iiint f^*(\boldsymbol{r})\hat{\boldsymbol{p}}g(\boldsymbol{r})dV &= -i\hbar\iiint f^*\nabla g dV \\ &= -i\hbar\iiint \nabla(f^*g)dV + i\hbar\iiint g\nabla f^* dV\end{aligned} \tag{111}$$

である。たとえば 1 辺の長さが L の立方体を積分領域とすると，第 1 項の積分の x 成分は

$$\iiint \frac{\partial}{\partial x}(f^*g)dV = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}\Big[f^*g\Big]_{x=-\frac{L}{2}}^{x=\frac{L}{2}}dydz \tag{112}$$

となるが，これは遠方で波動関数を 0 とする波束の場合でも，周期的境界条件の場合でも 0 になる。他の成分についても同様なので，式（111）は第 1 項が消えて

$$\iiint g(\boldsymbol{r})\left\{\hat{\boldsymbol{p}}f(\boldsymbol{r})\right\}^* dV \tag{113}$$

と書くことができる。よって，3 次元における運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ はエルミート演算子である。

【7.4】

ある状態 $|\varphi\rangle$ を運動量表示で表すと $F(p) = \langle p|\varphi\rangle$ であり，状態 $|\varphi\rangle$ に位置演算子 $\hat{x}$ を作用させたものを運動量表示で表すと $G(p) = \langle p|\hat{x}|\varphi\rangle$ である。求めたいのは $F(p)$ から $G(p)$ を導く演算子であり，それは変数 p で表さなければならない。恒等演算子 $\int|x\rangle\langle x|\,dx$ を挿入することにより，これらは

$$F(p) = \langle p|\varphi\rangle = \int\langle p|x\rangle\langle x|\varphi\rangle\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\varphi(x)dx \tag{114}$$

$$G(p) = \langle p|\hat{x}|\varphi\rangle = \int\langle p|x\rangle\langle x|\hat{x}|\varphi\rangle\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-i\frac{p}{\hbar}x}x\varphi(x)dx \tag{115}$$

となる。ただし $\varphi(x)=\langle x|\varphi\rangle$ とし，$\langle x|\,\hat{x}=\langle x|\,x$ を用いた。ここで

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial p}e^{-i\frac{p}{\hbar}x}=xe^{-i\frac{p}{\hbar}x} \tag{116}$$

であるので

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial p}F(p)=G(p) \tag{117}$$

という関係がなりたつ。したがって，運動量表示における位置演算子は $\hat{x}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$ である。

【7.5】

求めるべきは

$$f(x)=\left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2}a(x-b)^2} \tag{118}$$

のフーリエ変換

$$F(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-ikx}e^{-\frac{1}{2}a(x-b)^2}dx \tag{119}$$

である。$x-b=x'$ と変数変換すると，

$$F(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-ik(x'+b)}e^{-\frac{1}{2}ax'^2}dx'=e^{-ikb}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-ikx'}e^{-\frac{1}{2}ax'^2}dx' \tag{120}$$

となる。ここで，7.3.4 項のガウス型関数のフーリエ変換より

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-ikx'}e^{-\frac{1}{2}ax'^2}dx'=\left(\frac{1}{a\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2a}k^2} \tag{121}$$

なので，求めるフーリエ変換は，関数 $\left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2}ax^2}$ のフーリエ変換に e^{-ikb} をかけた

$$F(k)=\left(\frac{1}{a\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2a}k^2-ibk} \tag{122}$$

である。

第 8 章

【8.1】

式（8.6）の右辺を計算すると

$$\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right]\hat{B}=\hat{A}\left(\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{B}\right)+\left(\hat{A}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}\right)\hat{B}$$
$$=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{A}\hat{C}\hat{B}+\hat{A}\hat{C}\hat{B}-\hat{C}\hat{A}\hat{B}=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}\hat{B}=\left[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\right] \tag{123}$$

となり，左辺に一致する。同様に

$$\hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C}=\hat{B}\left(\hat{A}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}\right)+\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)\hat{C}$$
$$=\hat{B}\hat{A}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}+\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{A}\hat{C}=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}=\left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right] \tag{124}$$

も示された。

【8.2】

(a) 基底状態 $|0\rangle$ は，式（8.40）より

$$\hat{a}\,|0\rangle=0 \tag{125}$$

をみたさなくてはならない。この式を位置表示の関数で具体的に表してみよう。まず状態ベクトル $|0\rangle$ を位置 x の関数として

$$|0\rangle\to\varphi_0(x) \tag{126}$$

と書く。次に演算子については

$$\hat{x}\to x,\ \ \hat{p}\to -i\hbar\frac{d}{dx} \tag{127}$$

と書き直す。そうすると，演算子 $\hat{a},\hat{a}^\dagger$ は

$$\hat{a}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x+\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx},\quad \hat{a}^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx} \tag{128}$$

となる。ここで

$$z=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \tag{129}$$

と変数変換すれば

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(z+\frac{d}{dz}\right),\quad \hat{a}^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(z-\frac{d}{dz}\right) \tag{130}$$

である。$g_0(z)=\varphi_0(x)$ とするなら，式（125）に相当する微分方程式は

$$\left(z+\frac{d}{dz}\right)g_0(x)=0 \tag{131}$$

となる。この微分方程式は変数分離法で簡単に解ける。まず

$$\frac{dg_0}{g_0} = -zdz \tag{132}$$

と変形し，両辺にインテグラル記号をつけて不定積分すると，積分定数を C として

$$\ln|g_0| = -\frac{1}{2}z^2 + C \tag{133}$$

となり，$g_0(z)$ が

$$\therefore g_0(z) = \pm e^C e^{-\frac{1}{2}z^2} = Ae^{-\frac{1}{2}z^2} \tag{134}$$

と求まる（A は 0 でない定数)。変数を x に戻すと，基底状態の波動関数は

$$\varphi_0(x) = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{135}$$

となる。さらに付録 H.1 のガウス型積分の公式（H.6）を用いると，規格化定数が

$$A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \tag{136}$$

と求まる。この結果は 4.4 節の式（4.101）の $\varphi_0(x)$ と一致している。

(b)

$$g_n(z) = u_n(z)e^{-\frac{1}{2}z^2} \tag{137}$$

とおくと

$$\begin{aligned} |n+1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}}\left(z - \frac{d}{dz}\right)g_n(z) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}}\left\{2zu_n(z) - u_n'(z)\right\}e^{-\frac{1}{2}z^2} \end{aligned} \tag{138}$$

である。$|n+1\rangle = u_{n+1}(z)e^{-\frac{1}{2}z^2}$ であるので，$u_n(z)$ に対する漸化式

$$u_{n+1}(z) = \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}}\left\{2zu_n(z) - u_n'(z)\right\} \tag{139}$$

が得られる。これを用いると $\varphi_n(x)$ から $\varphi_{n+1}(x)$ を求めることができる。

(c) もし $u_n(z)$ が規格化定数とエルミート多項式を用いて

$$u_n(z) = \left(\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\right)^{\frac{1}{2}} H_n(z) \tag{140}$$

のように表されるなら，今回の方法で得られた固有関数が 4.4 節での式（4.101）と一致することになる。数学的帰納法でそれを示そう。まず，$n=0$ の場合に一致することは前問によりすでに示されている。次に，ある n $(n>0)$ について式（140）がなりたっていると仮定する。そのとき，式（139）により

$$u_{n+1}(z) = \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}}\left(\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\right)^{\frac{1}{2}}\left\{2zH_n(z) - H_n'(z)\right\} \tag{141}$$

である。ここで，付録 G.1 のエルミート多項式がみたす漸化式（G.2）も用いて整理すると，これは

$$u_{n+1}(z) = \left(\frac{1}{2^{n+1}(n+1)!}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\right)^{\frac{1}{2}} H_{n+1}(z) \tag{142}$$

となり，式（140）で n を $n+1$ に書き換えたものが得られる。よって示された。

【8.3】

(a) $\nabla \times \boldsymbol{A}$ を具体的に計算すると

$$\left(\frac{\partial 0}{\partial y} - \frac{\partial (Bx)}{\partial z},\ \frac{\partial 0}{\partial z} - \frac{\partial 0}{\partial x},\ \frac{\partial (Bx)}{\partial x} - \frac{\partial 0}{\partial y}\right) = (0, 0, B) \tag{143}$$

となり，示された。

(b) 時間を含まないシュレディンガー方程式は

$$\frac{1}{2m}\left\{\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y - qBx)^2 + \hat{p}_z^2\right\}\varphi(\boldsymbol{r}) = E\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{144}$$

となる。

(c) 解を $\varphi(\boldsymbol{r}) = f(x)e^{i(k_y y + k_z z)}$ と仮定すると，式（144）左辺のハミルトニアン内で $\hat{p}_y \to \hbar k_y$，$\hat{p}_z \to \hbar k_z$ という置き換えができる。さらに，両辺を $e^{i(k_y y + k_z z)}$ で割ることにより，$f(x)$ に関する微分方程式

$$\frac{1}{2m}\left\{\hat{p}_x^2 + (\hbar k_y - qBx)^2 + \hbar^2 k_z^2\right\} f(x) = Ef(x) \tag{145}$$

が導かれる。

(d) 式（145）をさらに変形すると

$$\left\{\frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2}m\left(\frac{qB}{m}\right)^2\left(x - \frac{\hbar k_y}{qB}\right)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right\} f(x) = Ef(x) \tag{146}$$

となる。ここで

$$X = x - \frac{\hbar k_y}{qB} \tag{147}$$

と変数変換すると，この演算子に対する運動量は

$$\hat{P} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial X} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}_x \tag{148}$$

であるので，式（146）は

$$\left\{\frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}m\omega_{\mathrm{c}}^2\hat{X}^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right\} f(x) = Ef(x) \tag{149}$$

となる。ただし

$$\omega_{\mathrm{c}} = \frac{qB}{m} \tag{150}$$

とした。これはサイクロトロン角振動数とよばれる。式（149）は定数のエネルギー $\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$ がたされた調和振動子に関するシュレディンガー方程式の形をしている。調和振動子の一般論を用いれば，$k_z = 0$ の場合のエネルギー固有値は

$$E_n = \hbar\omega_{\mathrm{c}}\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{151}$$

となり，自由粒子であるにもかかわらず，磁場中ではエネルギー固有値が離散的な準位をとる。これをランダウ準位という。古典力学においても，（初速度が磁場方向の成分をもたなければ）磁場中の荷電粒子は磁場に垂直な面を円運動する。これをサイクロトロン運動という。サイクロトロン運動は真横から見ると単振動に見える。この単振動が量子化されたものとして，式（151）を理解することができる。

【8.4】

(a) 1.4.6 項の式（1.29）を運動量 p を用いて表すことにより，力学的エネルギーは

$$E = \frac{1}{2m}p^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \tag{152}$$

となる。

(b) p を 0 にし，r を 0 に近づければ，力学的エネルギーをいくらでも小さくすることができる。しかし，p も r も 0 にすることは不確定性原理に反する。そこで運動量の不確定性と，原点からの距離の不確定性をそれぞれ $\Delta p, \Delta r$ と書くと，力学的エネルギーは

$$E = \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{\Delta r} \tag{153}$$

となる。不確定性原理より

$$\Delta p \cdot \Delta r > \hbar \quad \therefore -\frac{1}{\Delta r} > -\frac{\Delta p}{\hbar} \tag{154}$$

である。これより

$$\begin{aligned} E &> \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 - \frac{e^2 \Delta p}{4\pi\varepsilon_0\hbar} \\ &= \frac{1}{2m}\left\{\left(\Delta p - \frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\right)^2 - \frac{m^2e^4}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\right\} \end{aligned} \tag{155}$$

であるので，右辺が最小になるような Δp を選んだとしても

$$E > -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2h^2} \tag{156}$$

となり，エネルギーのとりうる値に下限があることがわかる。その下限は 1.4.6 項のボーアの原子模型の式（1.31）で $n=1$ とした，水素原子の最低エネルギーと一致する。

【8.5】

(a) $E_n = \hbar\omega_n$ とすると，シュレディンガー描像で表した状態 $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-i\omega_n t}|n\rangle$ における位置演算子 $\hat{x}$ の期待値は

$$\langle\psi(t)|\hat{x}|\psi(t)\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n e^{i(\omega_m-\omega_n)t}\langle m|\hat{x}|n\rangle \tag{157}$$

となる（ここでの m は質量ではなく整数を表す)。8.1.5 項の式（8.25）の昇降演算子を用いると，$\hat{x}$ は

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \tag{158}$$

と表すことができる。また，式（8.39）および式（8.40）より

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{159}$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{160}$$

なので，式（157）は

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\sum_{n=0}^{+\infty}\left\{c_{n+1}^{*}c_{n}e^{i(\omega_{n+1}-\omega_{n})t}\sqrt{n+1}\right\}+\sum_{n=1}^{+\infty}\left\{c_{n-1}^{*}c_{n}e^{i(\omega_{n-1}-\omega_{n})t}\sqrt{n}\right\}\right] \tag{161}$$

となる。調和振動子の場合には $\omega_n=\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$ なので，式（161）はさらに

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\left(\sum_{n=0}^{+\infty}\sqrt{n+1}c_{n+1}^{*}c_{n}\right)e^{i\omega t}+\left(\sum_{n=1}^{+\infty}\sqrt{n}c_{n-1}^{*}c_{n}\right)e^{-i\omega t}\right\} \tag{162}$$

となる。$n'=n+1$ とすれば

$$\sum_{n=0}^{+\infty}\sqrt{n+1}c_{n-1}^{*}c_{n}=\sum_{n'=1}^{+\infty}\sqrt{n'}c_{n'}^{*}c_{n'-1} \tag{163}$$

である。これを A とおけば，式（162）は

$$\langle x\rangle=\langle\psi(t)|\hat{x}|\psi(t)\rangle=Ae^{i\omega t}+A^{*}e^{-i\omega t}=2|A|\cos\omega(t+\alpha) \tag{164}$$

という形をしている。ただし $A=|A|e^{i\alpha}$ とした。これより，位置の期待値は角振動数 ω で単振動する。
(b) 位置演算子と運動量演算子がそれぞれ $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$ のように時刻に依存するハイゼンベルグ描像で考える。これらの時間微分は，ハイゼンベルグ方程式により，それぞれ

$$\dot{\hat{x}}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x},\hat{H}\right]=\frac{1}{2mi\hbar}\left[\hat{x},\hat{p}^{2}\right]=\frac{1}{m}\hat{p} \tag{165}$$

$$\dot{\hat{p}}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p},\hat{H}\right]=\frac{m\omega^{2}}{2i\hbar}\left[\hat{p},\hat{x}^{2}\right]=-m\omega^{2}\hat{x} \tag{166}$$

となる。
(c) 問題 (b) の結果を用いると，位置演算子の 2 階微分は

$$\ddot{\hat{x}}=\frac{1}{m}\dot{\hat{p}}=-\omega^{2}\hat{x} \tag{167}$$

となる。これは変数を t とする微分方程式の形をしており，その一般解は時刻によらない演算子 $\hat{x}_0$ を用いて

$$\hat{x}(t)=\hat{x}_{0}e^{i\omega t}+\hat{x}_{0}^{\dagger}e^{-i\omega t} \tag{168}$$

と表すことができる（$\hat{x}(t)$ はオブザーバブルすなわちエルミート演算子でなければならないので，この形の解に限定される）。ハイゼンベルグ描像では状態ベクトルは時刻に依存しない。ある状態 $|\varphi\rangle$ において位置演算子の期待値を求めると

$$\langle x\rangle=\langle\varphi|\hat{x}(t)|\varphi\rangle=\langle\varphi|\hat{x}_{0}|\varphi\rangle e^{i\omega t}+\langle\varphi|\hat{x}_{0}^{\dagger}|\varphi\rangle e^{-i\omega t} \tag{169}$$

となる，ここで，エルミート共役の定義より $\langle\varphi|\hat{x}_0|\varphi\rangle$ と $\langle\varphi|\hat{x}_0^{\dagger}|\varphi\rangle$ は互いに複素共役の関係なので，これらをそれぞれ A, A^* と書くことにすれば式（164）とまったく同じ単振動の式が得られる。

【8.6】

$$\left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{A}\right)^2+V(\boldsymbol{r})\right\}\varphi'(\boldsymbol{r})=E'\varphi'(\boldsymbol{r}) \tag{170}$$

を解き，$\varphi'(\boldsymbol{r})$ と $\varphi(\boldsymbol{r})$ を比べてみればよい。ためしに解の形を

$$\varphi'(\boldsymbol{r})=e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{171}$$

とおいてみよう。$\theta(\boldsymbol{r})$ はあるスカラー関数とする。このとき，付録 D.4 のベクトル恒等式（D.20）や

$$\nabla e^{i\theta(\boldsymbol{r})}=i\left\{\nabla\theta(\boldsymbol{r})\right\}e^{i\theta(\boldsymbol{r})} \tag{172}$$

を用いると

$$\begin{aligned}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{A}\right)\varphi'(\boldsymbol{r})&=\left(-i\hbar\nabla-q\boldsymbol{A}\right)\left\{e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\varphi(\boldsymbol{r})\right\}\\&=-i\hbar e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\nabla\varphi(\boldsymbol{r})-i\hbar\varphi(\boldsymbol{r})\nabla\left\{e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\right\}-q\boldsymbol{A}e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\varphi(\boldsymbol{r})\\&=-i\hbar e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\nabla\varphi(\boldsymbol{r})+\left\{\hbar\nabla\theta(\boldsymbol{r})-q\boldsymbol{A}\right\}e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\varphi(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{173}$$

であるので，もし

$$\hbar\nabla\theta(\boldsymbol{r})=q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \tag{174}$$

をみたすように $\theta(\boldsymbol{r})$ を定めることができるなら，必ず

$$\left(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{A}\right)\varphi'(\boldsymbol{r})=e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\hat{\boldsymbol{p}}\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{175}$$

となり，さらに同様の計算を繰り返すと，式（174）をみたす $\theta(\boldsymbol{r})$ に対しては

$$\left(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{A}\right)^2\varphi'(\boldsymbol{r})=e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\hat{p}^2\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{176}$$

がなりたつので，

$$\begin{aligned}\left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{A}\right)^2+V(\boldsymbol{r})\right\}\left\{e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\varphi(\boldsymbol{r})\right\}&=e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\left\{\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2+V(\boldsymbol{r})\right\}\varphi(\boldsymbol{r})\\&=e^{i\theta(\boldsymbol{r})}E\varphi(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{177}$$

となり，結局

$$\left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{A}\right)^2+V(\boldsymbol{r})\right\}\left\{e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\varphi(\boldsymbol{r})\right\}=E\left\{e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\varphi(\boldsymbol{r})\right\} \tag{178}$$

がみたされることがわかった。

第 9 章

【9.1】

角運動量演算子の x 成分 $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$ のエルミート共役は

$$\hat{L}_x^\dagger = \hat{p}_z^\dagger \hat{y}^\dagger - \hat{p}_y^\dagger \hat{z}^\dagger \tag{179}$$

である。角運動量演算子と位置演算子はそれぞれエルミート演算子であり，$[\hat{y}, \hat{p}_z] = 0, [\hat{z}, \hat{p}_y] = 0$ であることを用いると式（179）の右辺は結局 $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$ と書き直すことができ，それは $\hat{L}_x$ に等しい。よって $\hat{L}_x$ はエルミート演算子である。他の成分についても同様である。

【9.2】

行列で表した（無次元化した）角運動量演算子

$$\hat{j}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{j}_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{j}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{180}$$

について計算を行うと，

$$\begin{aligned} \hat{j}_x\hat{j}_y &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} i & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & -i \end{pmatrix} \\ \hat{j}_y\hat{j}_x &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -i & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & i \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{181}$$

なので,

$$\left[\hat{j}_x, \hat{j}_y\right] = \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \end{pmatrix} = i\hat{j}_z \tag{182}$$

となる。他の交換関係についても同様の成分計算から示すことができる。次に，$\hat{j}_x^2$, $\hat{j}_y^2$, $\hat{j}_z^2$ を行列として具体的に計算してみると，それぞれ

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{183}$$

であり，これらをたすことにより

$$\hat{j}^2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{184}$$

が得られる。

【9.3】

式（9.48）のベクトルポテンシャルのローテーションの x 成分は

$$\frac{1}{2}\left\{\frac{\partial}{\partial y}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})_z-\frac{\partial}{\partial z}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})_y\right\}=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial y}(B_xy-B_yx)-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial z}(B_zx-B_xz)=B_x \tag{185}$$

となる（この問題では $\boldsymbol{B}$ は定数ベクトルであることに注意する)。他の成分も同様に計算することにより

$$\frac{1}{2}\nabla\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})=\boldsymbol{B} \tag{186}$$

が示される。

【9.4】

いずれも実際に計算すれば容易に確かめられる。まず式 (9.68) は

$$\sigma_x^2=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} \tag{187}$$

$$\sigma_y^2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} \tag{188}$$

$$\sigma_z^2=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} \tag{189}$$

よりあきらかである。式 (9.69) についても

$$\sigma_x\sigma_y=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}i&0\\0&-i\end{pmatrix}=i\sigma_z \tag{190}$$

$$\sigma_y\sigma_z=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&i\\i&0\end{pmatrix}=i\sigma_x \tag{191}$$

$$\sigma_z\sigma_x=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}=i\sigma_y \tag{192}$$

によりあきらかである。式 (9.70) については，パウリ行列がエルミート行列であることを利用してもよい。たとえば式 (9.69) のエルミート共役をとると，積の順序が入れ替わり，複素数については複素共役をとることになるので

$$\sigma_y\sigma_x=-i\sigma_z,\sigma_z\sigma_y=-i\sigma_x,\sigma_x\sigma_z=-i\sigma_y \tag{193}$$

である。よって式（9.70）も示された。

【9.5】

9.2.2 項の式（9.77)，（9.78）において $\theta=\frac{\pi}{2},\phi=\frac{\pi}{2}$ とすればスピンの y 軸方向の固有状態が得られる。固有値がそれぞれ $+1,-1$ の状態を書くと

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow\right\rangle+i\left|\downarrow\right\rangle\right),\ \ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\left|\uparrow\right\rangle+i\left|\downarrow\right\rangle\right) \tag{194}$$

となる。

【9.6】

ハミルトニアンを $\hat{H} = g\mu_{\mathrm{B}} \boldsymbol{B} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}$ とすると，無次元化したスピン角運動量演算子に関するハイゼンベルグの運動方程式は

$$i\hbar \dot{\hat{\boldsymbol{s}}} = \left[\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{H}\right] = g\mu_{\mathrm{B}} \left[\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{B} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}\right] \tag{195}$$

である。$[\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{B} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}]$ の x 成分は

$$[\hat{s}_x, B_x \hat{s}_x + B_y \hat{s}_y + B_z \hat{s}_z] = B_y [\hat{s}_x, \hat{s}_y] + B_z [\hat{s}_x, \hat{s}_z] = i (B_y \hat{s}_z - B_z \hat{s}_y) = i (\boldsymbol{B} \times \hat{\boldsymbol{s}})_x \tag{196}$$

となる。他の成分も同様に考えれば

$$\dot{\hat{\boldsymbol{s}}} = \frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{\hbar} \boldsymbol{B} \times \hat{\boldsymbol{s}} \tag{197}$$

が得られる。

スピンを古典的なベクトルとみなし，磁束密度を $\boldsymbol{B} = (0, 0, B)$ とすると，式（197）のそれぞれの成分は

$$\dot{s}_x = -\frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{\hbar} B s_y \tag{198}$$

$$\dot{s}_y = \frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{\hbar} B s_x \tag{199}$$

$$\dot{s}_z = 0 \tag{200}$$

となる。ここで $\frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{\hbar} B = \omega$ とおくと，一般解は

$$s_x = s_\perp \cos \omega t \tag{201}$$

$$s_y = s_\perp \sin \omega t \tag{202}$$

$$s_z = s_\parallel \tag{203}$$

となる（$s_\parallel, s_\perp$ は定数)。これはスピンを古典的なベクトルとみなした場合に，磁場方向を軸として，円錐を描くように歳差運動するようすを表している。

【9.7】

具体的に成分で表して計算すると

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{P} \times \boldsymbol{Q}) \cdot \nabla &= (P_y Q_z - P_z Q_y) \frac{\partial}{\partial x} + (P_z Q_x - P_x Q_z) \frac{\partial}{\partial y} + (P_x Q_y - P_y Q_x) \frac{\partial}{\partial z} \\ &= P_x \left(Q_y \frac{\partial}{\partial z} - Q_z \frac{\partial}{\partial y} \right) + P_y \left(Q_z \frac{\partial}{\partial x} - Q_x \frac{\partial}{\partial z} \right) + P_z \left(Q_x \frac{\partial}{\partial y} - Q_y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &= \boldsymbol{P} \cdot (\boldsymbol{Q} \times \nabla) \end{aligned} \tag{204}$$

となり，示された。

第 10 章

【10.1】

$(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4$ を展開した際に，$\hat{a}^\dagger$ と $\hat{a}$ をそれぞれ 2 つ含む項のみを抜き出すと

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger \tag{205}$$

である。ここで，8.1.5 項の式（8.28）で述べた昇降演算子の交換関係を用いると，$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1$ であり，また $\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{n}$ と書くことにすると，各項は

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} = \hat{a}^\dagger(\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1)\hat{a} = \hat{n}^2 - \hat{n} \tag{206}$$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{n}^2 \tag{207}$$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{n}(\hat{n} + 1) = \hat{n}^2 + \hat{n} \tag{208}$$

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} = (\hat{n} + 1)\hat{n} = \hat{n}^2 + \hat{n} \tag{209}$$

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger = (\hat{n} + 1)(\hat{n} + 1) = \hat{n}^2 + 2\hat{n} + 1 \tag{210}$$

$$\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger = \hat{a}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)\hat{a}^\dagger = \hat{n}^2 + 2\hat{n} + 1 + \hat{n} + 1 = \hat{n}^2 + 3\hat{n} + 2 \tag{211}$$

のように $\hat{n}$ を用いて表される。これらをたすと，式（205）は

$$6\hat{n}^2 + 6\hat{n} + 3 \tag{212}$$

となる。したがって式（10.32）が示される。

【10.2】

摂動のハミルトニアンは

$$\hat{H}' = V_0 \cos qx = \frac{1}{2}V_0\left(e^{iqx} + e^{-iqx}\right) \tag{213}$$

と表すことができる。このハミルトニアンの，自由粒子の固有状態[*1]

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx} \tag{214}$$

に対する行列要素は

$$\langle k'|\hat{H}'|k\rangle = \frac{V_0}{2L}\int_0^L \left\{e^{i(k-k'+q)} + e^{i(k-k'-q)}\right\}dx = \frac{V_0}{2}\left(\delta_{k+q,k'} + \delta_{k-q,k'}\right) \tag{215}$$

である。ただし，波動関数は周期的境界条件をみたすものとし，波数は整数 n を用いて $k = \frac{2\pi}{L}n$ と表されるものとする。

まずは状態 $|k\rangle$ に対する 1 次の摂動エネルギーを求めると

$$\langle k|\hat{H}'|k\rangle = \frac{V_0}{2}\left(\delta_{k+q,k} + \delta_{k-q,k}\right) \tag{216}$$

[*1] 教科書の記述に合わせるなら，ここでの k は離散変数なので，以下の式の状態は $|\varphi_k\rangle$ と書くべきである。しかし煩雑さを避けるため，ここではこの状態を $|k\rangle$ と書くことにする。

であるが，$q \neq 0$ なのでこれは 0 になる（ただし，後述するように $k = \pm\frac{q}{2}$ の場合には注意が必要である）。一方，2 次の摂動エネルギーは

$$\sum_{k'} \frac{|\langle k'|\hat{H}'|k\rangle|^2}{E_k - E_{k'}} = \frac{|\langle k+q|\hat{H}'|k\rangle|^2}{E_k - E_{k+q}} + \frac{|\langle k-q|\hat{H}'|k\rangle|^2}{E_k - E_{k-q}} \tag{217}$$

である。ここで

$$\langle k+q|\hat{H}'|k\rangle = \langle k-q|\hat{H}'|k\rangle = \frac{1}{2}V_0 \tag{218}$$

であり，

$$E_k - E_{k\pm q} = \frac{1}{2m}\left\{k^2 - (k\pm q)^2\right\} = \frac{1}{2m}\left(\mp 2kq - q^2\right) = -\frac{q}{2m}(q \pm 2k) \tag{219}$$

であるので式（217）はさらに

$$-\frac{1}{4}V_0^2 \frac{2m}{q}\left(\frac{1}{q+2k} - \frac{1}{q-2k}\right) = \frac{2V_0^2 mk}{q(q^2-4k^2)} \tag{220}$$

と書くことができる。

ただし，$k = \pm\frac{q}{2}$ のとき，2 次の摂動エネルギーは発散してしまうので，その場合には別の方法を考えなくてはならない。状態 $\left|+\frac{q}{2}\right\rangle$ と状態 $\left|-\frac{q}{2}\right\rangle$ は同じエネルギーをもつので，これらは必ず縮退している。したがって，これらの状態については，縮退を考慮の上，あらためて 1 次の摂動エネルギーを求める必要がある。ここで

$$\left\langle +\frac{q}{2}\middle|\hat{H}'\middle|-\frac{q}{2}\right\rangle = \frac{1}{2}V_0,\ \left\langle -\frac{q}{2}\middle|\hat{H}'\middle|+\frac{q}{2}\right\rangle = \frac{1}{2}V_0 \tag{221}$$

なので，縮退がある場合の 1 次の摂動エネルギー ε は

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{2}V_0 - \varepsilon & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}V_0 - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \tag{222}$$

という永年方程式を解くことにより，$\varepsilon = \pm\frac{1}{2}V_0$ と求まる。

以上より，波数が $\pm\frac{q}{2}$ の電子がもっとも摂動の影響をうけることがわかる[*2]。

【10.3】

積分を

$$I = \int_0^{+\infty} e^{-\kappa r}\sin Kr dr \tag{223}$$

とおいて，部分積分を 2 回行うと，

$$\begin{aligned} I &= \left[-\frac{1}{\kappa}e^{-\kappa r}\sin Kr\right]_0^{+\infty} + \frac{K}{\kappa}\int_0^{+\infty} e^{-\kappa r}\cos Kr dr \\ &= \frac{K}{\kappa}\left\{\left[-\frac{1}{\kappa}e^{-\kappa r}\cos Kr\right]_0^{+\infty} - \frac{K}{\kappa}I\right\} \end{aligned} \tag{224}$$

[*2] この問題は，結晶中における電子を表すモデルの 1 つである。電子の波数の大きさが，周期ポテンシャルの波数の半分になると，エネルギーが不連続に跳ぶ。それにより，電子がとりうるエネルギーは，ある有限の幅の領域（バンド）に分断される。これが，固体物理学のバンド理論の簡単な説明である。

となる。ここで

$$\left[-\frac{1}{\kappa}e^{-\kappa r}\cos Kr\right]_0^{+\infty}=\frac{1}{\kappa} \tag{225}$$

なので，式（224）を I について解くと

$$I=\frac{K}{\kappa^2+K^2} \tag{226}$$

となる。

【10.4】

10.2.4 項の式（10.83）で $\omega_-=\omega_{nk}-\omega$, $\omega_+=\omega_{nk}+\omega$ とおくと

$$\dot{c}_k(t)\approx\frac{1}{2i\hbar}\langle k|\hat{H}_1'|n\rangle\left(e^{i\omega_-t}+e^{i\omega_+t}\right) \tag{227}$$

である。これを時刻 t で積分し，$c_k(0)=0$ となるように積分定数を選ぶと

$$c_k(t)=\frac{1}{2\hbar}\langle k|\hat{H}_1'|n\rangle\left\{\frac{1}{\omega_-}\left(1-e^{i\omega_-t}\right)+\frac{1}{\omega_+}\left(1-e^{i\omega_+t}\right)\right\} \tag{228}$$

となる。ここで $A=\frac{1}{2\hbar}\langle k|\hat{H}_1'|n\rangle$ とすると

$$\begin{aligned}|c_k(t)|^2=|A|^2\Bigg\{&\frac{\left(1-e^{-i\omega_-t}\right)\left(1-e^{i\omega_-t}\right)}{\omega_-^2}+\frac{\left(1-e^{-i\omega_+t}\right)\left(1-e^{i\omega_+t}\right)}{\omega_+^2}\\&+\frac{\left(1-e^{-i\omega_-t}\right)\left(1-e^{i\omega_+t}\right)}{\omega_-\omega_+}+\frac{\left(1-e^{-i\omega_+t}\right)\left(1-e^{i\omega_-t}\right)}{\omega_-\omega_+}\Bigg\}\end{aligned} \tag{229}$$

である。t が十分に大きいとき，10.2.1 項に示したようにこの式の 1 行目は

$$2\pi\hbar t|A|^2\left\{\delta(\hbar\omega_-)+\delta(\hbar\omega_+)\right\} \tag{230}$$

に近づく。これは $\omega_-\to0$ あるいは $\omega_+\to0$ のときに $+\infty$ に近づく。一方，式（229）の 2 行目も $\omega_-\to0$ あるいは $\omega_+\to0$ のときに分母が 0 になるので気をつけなければならないが，例えば $\omega_-\to0$ のとき

$$\frac{1-e^{\pm i\omega_-t}}{\omega_-}\to\frac{\mp i\omega_-t}{\omega_-}=\mp it \tag{231}$$

なので，式（229）の 2 行目は

$$\frac{it|A|^2}{\omega_+}\left\{\left(1-e^{i\omega_+t}\right)-\left(1-e^{-i\omega_+t}\right)\right\}=2t|A|^2\sin\omega_+t \tag{232}$$

となり，有限の値にとどまる。これはデルタ関数と比べたら無視できるので，結局単位時間あたりの遷移確率は

$$2\pi\hbar|A|^2\left\{\delta(\hbar\omega_-)+\delta(\hbar\omega_+)\right\} \tag{233}$$

となり，式（10.84）が示された。

第 11 章

【11.1】

　式

$$\sum_{n=1}^{N} e^{2\pi \frac{n(l'-l)}{N} i} \tag{234}$$

は，$l' = l$ のときは

$$\sum_{n=1}^{N} 1 = N \tag{235}$$

である。$l' \neq l$ のときは，等比級数の和の公式より

$$\frac{e^{\frac{2\pi(l'-l)}{N} i} \left\{ e^{2\pi(l'-l)i} - 1 \right\}}{e^{\frac{2\pi(l'-l)}{N} i} - 1} = 0 \tag{236}$$

となるので示された（$l - l'$ が整数であることを用いた）。

【11.2】

　式

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N} \hat{u}_n e^{-2\pi \frac{nl}{N} i} \tag{237}$$

に

$$\hat{u}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l'=1}^{N} \hat{U}_{l'} e^{2\pi \frac{nl'}{N} i} \tag{238}$$

を代入すると

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \sum_{l'=1}^{N} \hat{U}_{l'} e^{2\pi \frac{n(l'-l)}{N} i} = \frac{1}{N} \sum_{l'=1}^{N} \hat{U}_{l'} N \delta_{l,l'} = \hat{U}_l \tag{239}$$

となる（章末問題 11.1 の結果を用いた）。よって示された。

【11.3】

　まず

$$\dot{\hat{u}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho L}} \sum_k \sqrt{\omega_k} \left\{ -i\hat{b}_k e^{i(kx-\omega_k t)} + i\hat{b}_k^\dagger e^{-i(kx-\omega_k t)} \right\} \tag{240}$$

なので

$$
\begin{aligned}
\dot{\hat{u}}^2 &= \frac{\hbar}{2\rho L}\sum_k\sum_{k'}\sqrt{\omega_k}\sqrt{\omega_{k'}}\left\{-i\hat{b}_k e^{i(kx-\omega_k t)}+i\hat{b}_k^\dagger e^{-i(kx-\omega_k t)}\right\} \\
&\quad\times\left\{-i\hat{b}_{k'} e^{i(k'x-\omega_{k'} t)}+i\hat{b}_{k'}^\dagger e^{-i(k'x-\omega_{k'} t)}\right\} \\
&= \frac{\hbar}{2\rho L}\sum_k\sum_{k'}\sqrt{\omega_k}\sqrt{\omega_{k'}}\left\{-\hat{b}_k\hat{b}_{k'}e^{i\{(k+k')x-(\omega_k+\omega_{k'})t\}}\right. \\
&\quad+\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_{k'}e^{i\{(-k+k')x-(-\omega_k+\omega_{k'})t\}}+\hat{b}_k\hat{b}_{k'}^\dagger e^{i\{(k-k')x-(\omega_k-\omega_{k'})t\}} \\
&\quad\left.-\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_{k'}^\dagger e^{i\{(-k-k')x-(-\omega_k-\omega_{k'})t\}}\right\}
\end{aligned} \tag{241}
$$

である。ここで

$$
\int_0^L e^{i(k-k')x}dx = L\delta_{k,k'} \tag{242}
$$

や（これは章末問題 7.1 の 1 次元版である），$\omega_{-k}=\omega_k$ などを用いると，

$$
\int_0^L \dot{\hat{u}}^2 dx = \frac{\hbar}{2\rho}\sum_k\omega_k\left(-\hat{b}_k\hat{b}_{-k}e^{-2i\omega_k t}+\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k+\hat{b}_k\hat{b}_k^\dagger-\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_{-k}^\dagger e^{2i\omega_k t}\right) \tag{243}
$$

となる。同様に

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial\hat{u}}{\partial x}\right)^2 &= \frac{\hbar}{2\rho L}\sum_k\sum_{k'}\frac{k}{\sqrt{\omega_k}}\frac{k'}{\sqrt{\omega_{k'}}}\left\{i\hat{b}_k e^{i(kx-\omega_k t)}-i\hat{b}_k^\dagger e^{-i(kx-\omega_k t)}\right\} \\
&\quad\times\left\{i\hat{b}_{k'} e^{i(k'x-\omega_{k'} t)}-i\hat{b}_{k'}^\dagger e^{-i(k'x-\omega_{k'} t)}\right\} \\
&= \frac{\hbar}{2\rho L}\sum_k\sum_{k'}\frac{k}{\sqrt{\omega_k}}\frac{k'}{\sqrt{\omega_{k'}}}\left\{-\hat{b}_k\hat{b}_{k'}e^{i\{(k+k')x-(\omega_k+\omega_{k'})t\}}\right. \\
&\quad+\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_{k'}e^{i\{(-k+k')x-(-\omega_k+\omega_{k'})t\}}+\hat{b}_k\hat{b}_{k'}^\dagger e^{i\{(k-k')x-(\omega_k-\omega_{k'})t\}} \\
&\quad\left.-\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_{k'}^\dagger e^{i\{(-k-k')x-(-\omega_k-\omega_{k'})t\}}\right\}
\end{aligned} \tag{244}
$$

である。これを x で積分すると

$$
\int_0^L\left(\frac{\partial\hat{u}}{\partial x}\right)^2 dx = \frac{\hbar}{2\rho}\sum_k\frac{k^2}{\omega_k}\left(\hat{b}_k\hat{b}_{-k}e^{-2i\omega_k t}+\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k+\hat{b}_k\hat{b}_k^\dagger+\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_{-k}^\dagger e^{2i\omega_k t}\right) \tag{245}
$$

となる。式（11.55）の関係も用いると，式（11.50）のハミルトニアンは

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2}\hbar\sum_k\omega_k\left(\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k+\hat{b}_k\hat{b}_k^\dagger\right) \\
&= \sum_k\hbar\omega_k\left(\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k+\frac{1}{2}\right)
\end{aligned} \tag{246}
$$

となり，独立なフォノンのエネルギーの和の形に書くことができた。

【11.4】

あるデカルト座標系の基底を $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$ とし，それが直交行列 $\mathbf{U}$ で $\boldsymbol{e}'_i = \mathbf{U}\boldsymbol{e}_i$ のように別の基底 $\boldsymbol{e}'_1, \boldsymbol{e}'_2, \boldsymbol{e}'_3$ に変換されるものとする。このとき，同じ変位をそれぞれの基底の線形結合として

$$\boldsymbol{u} = u_1\boldsymbol{e}_1 + u_2\boldsymbol{e}_2 + u_3\boldsymbol{e}_3, \quad \boldsymbol{u} = u'_1\boldsymbol{e}'_1 + u'_2\boldsymbol{e}'_2 + u'_3\boldsymbol{e}'_3 \tag{247}$$

と表すことにする。その場合

$$u'_i = \boldsymbol{e}'_i \cdot \boldsymbol{u} = \mathbf{U}\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{u} \tag{248}$$

という関係がある。位置ベクトルを

$$\boldsymbol{r} = x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 + x_3\boldsymbol{e}_3, \quad \boldsymbol{r} = x'_1\boldsymbol{e}'_1 + x'_2\boldsymbol{e}'_2 + x'_3\boldsymbol{e}'_3 \tag{249}$$

とすると

$$\begin{aligned} x'_i &= \boldsymbol{e}'_i \cdot \boldsymbol{r} = \boldsymbol{e}_1 \cdot \mathbf{U}\boldsymbol{e}_i x_1 + \boldsymbol{e}_2 \cdot \mathbf{U}\boldsymbol{e}_i x_2 + \boldsymbol{e}_3 \cdot \mathbf{U}\boldsymbol{e}_i x_3 \\ &= U_{1i}x_1 + U_{2i}x_2 + U_{3i}x_3 \end{aligned} \tag{250}$$

である。ここで U_{ji} は行列 $\mathbf{U}$ の成分である。これより，座標や変位の成分が

$$x'_i = \sum_{j=1}^{3} U_{ji}x_j, \quad u'_i = \sum_{j=1}^{3} U_{ji}u_j \tag{251}$$

のように変換されることがわかる。直交行列の性質 $(\mathbf{U}^{-1})_{ij} = (\mathbf{U})_{ji}$ を用いると，これらより逆変換

$$x_i = \sum_{j=1}^{3} U_{ij}x'_j, \quad u_i = \sum_{j=1}^{3} U_{ij}u'_j \tag{252}$$

も得られる。

一方で，チェーンルールより

$$\frac{\partial}{\partial x'_i} = \frac{\partial x_1}{\partial x'_i}\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial x_2}{\partial x'_i}\frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial x_3}{\partial x'_i}\frac{\partial}{\partial x_3} = U_{1i}\frac{\partial}{\partial x_1} + U_{2i}\frac{\partial}{\partial x_2} + U_{3i}\frac{\partial}{\partial x_3} \tag{253}$$

であるので，偏微分の演算子は

$$\frac{\partial}{\partial x'_i} = \sum_{j=1}^{3} U_{ji}\frac{\partial}{\partial x_j}, \quad \frac{\partial}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^{3} U_{ij}\frac{\partial}{\partial x'_j} \tag{254}$$

のように変換される。また，$\mathbf{U}$ は直交行列なので

$$\sum_{i=1}^{3} U_{ij}U_{ik} = \sum_{i=1}^{3} (\mathbf{U}^{-1})_{ji}(\mathbf{U})_{ik} = (\mathbf{I})_{jk} = \delta_{jk} \tag{255}$$

もなりたつ。

このとき，式（11.58）の右辺で $\boldsymbol{u}$ の代わりに $\boldsymbol{u}'$ とおいたものは

$$\mu \sum_{k=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} U_{ki}\frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j^2} + (\lambda + \mu)\sum_{k=1}^{3} U_{ki}\frac{\partial}{\partial x_k}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \tag{256}$$

となる。ここで

$$u_k = \sum_{l=1}^{3} U_{kl} u'_l \tag{257}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} = \frac{\partial}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial x_j} = \sum_{m=1}^{3}\sum_{n=1}^{3} U_{jm}U_{jn}\frac{\partial}{\partial x'_m}\frac{\partial}{\partial x'_n} \tag{258}$$

などを用いると，式（256）の第 1 項の和の部分は

$$\sum_{k=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\sum_{l=1}^{3}\sum_{m=1}^{3}\sum_{n=1}^{3} U_{ki}U_{kl}U_{jm}U_{jn}\frac{\partial}{\partial x'_m}\frac{\partial}{\partial x'_n}u'_l \tag{259}$$

となり，式（255）を利用すると，これは

$$\sum_{l=1}^{3}\sum_{m=1}^{3}\sum_{n=1}^{3}\delta_{il}\delta_{mn}\frac{\partial}{\partial x'_m}\frac{\partial}{\partial x'_n}u'_l = \sum_{m=1}^{3}\frac{\partial^2}{\partial {x'_m}^2}u'_i \tag{260}$$

となる。式（256）の第 2 項の和の部分は

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{3}\sum_{l=1}^{3}\sum_{m=1}^{3}\sum_{n=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} U_{ki}U_{kl}U_{jm}U_{jn}\frac{\partial}{\partial x'_l}\frac{\partial u'_m}{\partial x'_n} &= \sum_{l=1}^{3}\sum_{m=1}^{3}\sum_{n=1}^{3}\delta_{il}\delta_{nm}\frac{\partial}{\partial x'_l}\frac{\partial u'_m}{\partial x'_n} \\ &= \frac{\partial}{\partial x'_i}\sum_{m=1}^{3}\frac{\partial u'_m}{\partial x'_m}\end{aligned} \tag{261}$$

となる。以上より

$$\rho \ddot{u}'_i = \mu\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2 u'_i}{\partial {x'_j}^2} + (\lambda+\mu)\frac{\partial}{\partial x'_i}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial u'_j}{\partial x'_j} \qquad (i = 1, 2, 3) \tag{262}$$

が得られる。これはもとの波動方程式と全く同じ形をしている。

エネルギーの式

$$\iiint \left[\frac{1}{2}\rho\sum_{i=1}^{3}\dot{u}_i^2 + \frac{1}{2}\lambda\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j}\right) + \frac{1}{2}\mu\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\left\{\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)\right\}\right] dV \tag{263}$$

について考える。積分の中の第 1 項の和の部分は

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{3}\dot{u}_i^2 &= \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\sum_{k=1}^{3} U_{ij}U_{ik}\dot{u}'_j\dot{u}'_k = \sum_{j=1}^{3}\sum_{k=1}^{3}\delta_{jk}\dot{u}'_j\dot{u}'_k \\ &= \sum_{j=1}^{3}(\dot{u}'_j)^2\end{aligned} \tag{264}$$

とな。第 2 項の和の部分は

$$\begin{aligned}&\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\sum_{k=1}^{3}\sum_{l=1}^{3}\sum_{m=1}^{3}\sum_{n=1}^{3} U_{ik}U_{il}U_{jm}U_{jn}\left(\frac{\partial u'_k}{\partial x'_l}\right)\left(\frac{\partial u'_m}{\partial x'_n}\right) \\ &= \sum_{k=1}^{3}\sum_{l=1}^{3}\sum_{m=1}^{3}\sum_{n=1}^{3}\delta_{kl}\delta_{mn}\left(\frac{\partial u'_k}{\partial x'_l}\right)\left(\frac{\partial u'_m}{\partial x'_n}\right) = \sum_{k=1}^{3}\sum_{m=1}^{3}\left(\frac{\partial u'_k}{\partial x'_k}\right)\left(\frac{\partial u'_m}{\partial x'_m}\right)\end{aligned} \tag{265}$$

となる。第 3 項，第 4 項についても同様に計算すれば，形を変えないことがわかる。以上より，等方的弾性体のエネルギーを別のデカルト座標系で表すと

$$\iiint \left[\frac{1}{2}\rho \sum_{i=1}^{3} (\dot{u}'_i)^2 + \frac{1}{2}\lambda \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x'_i}\right)\left(\frac{\partial u'_j}{\partial x'_j}\right) + \frac{1}{2}\mu \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} \left\{ \left(\frac{\partial u'_j}{\partial x'_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial u'_j}{\partial x'_i}\right)\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x' s_j}\right) \right\} \right] dV \tag{266}$$

となり，全く同じ形で書けることがわかる。

【11.5】

まず変位のフーリエ展開を

$$\hat{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{r}, t) = \sum_{\boldsymbol{k},p} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p} \hat{u}_{\boldsymbol{k},p}(\boldsymbol{r}, t) \tag{267}$$

のように表そう。ただし

$$\hat{u}_{\boldsymbol{k},p}(\boldsymbol{r}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\boldsymbol{k},p}}} \left\{ \hat{b}_{\boldsymbol{k},p} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega_{\boldsymbol{k},p} t)} + \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p} e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega_{\boldsymbol{k},p} t)} \right\} \tag{268}$$

とする。第 j 成分（$j = 1, 2, 3$）の単位ベクトルを $\boldsymbol{e}_j$ とすると，$\hat{\boldsymbol{u}}$ の第 j 成分は

$$\hat{u}_j(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{e}_j \cdot \hat{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{r}, t) = \sum_{\boldsymbol{k},p} (\boldsymbol{e}_j \cdot \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p}) \hat{u}_{\boldsymbol{k},p}(\boldsymbol{r}, t) \tag{269}$$

と表される。ここでさらに

$$\hat{v}_{\boldsymbol{k},p}(\boldsymbol{r}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\boldsymbol{k},p}}} \left\{ \hat{b}_{\boldsymbol{k},p} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega_{\boldsymbol{k},p} t)} - \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p} e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega_{\boldsymbol{k},p} t)} \right\} \tag{270}$$

とすると

$$\dot{\hat{u}}_j(\boldsymbol{r}, t) = -i \sum_{\boldsymbol{k},p} (\boldsymbol{e}_j \cdot \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p}) \omega_{\boldsymbol{k},p} \hat{v}_{\boldsymbol{k},p}(\boldsymbol{r}, t) \tag{271}$$

と表される。また

$$\frac{\partial}{\partial x_l} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = i k_l e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = i(\boldsymbol{e}_l \cdot \boldsymbol{k}) e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{272}$$

を用いると

$$\frac{\partial \hat{u}_j(\boldsymbol{r}, t)}{\partial x_l} = i \sum_{\boldsymbol{k},p} (\boldsymbol{e}_j \cdot \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p})(\boldsymbol{e}_l \cdot \boldsymbol{k}) \hat{v}_{\boldsymbol{k},p}(\boldsymbol{r}, t) \tag{273}$$

である。今後のために $\hat{v}_{\boldsymbol{k},p}(\boldsymbol{r}, t)\hat{v}_{\boldsymbol{k}',p'}(\boldsymbol{r}, t)$ を計算しておくと，

$$\begin{aligned}
&\hat{v}_{\boldsymbol{k},p}(\boldsymbol{r}, t)\hat{v}_{\boldsymbol{k}',p'}(\boldsymbol{r}, t) \\
&\quad = \frac{\hbar}{2\rho V} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\boldsymbol{k},p}\omega_{\boldsymbol{k}',p'}}} \\
&\qquad \times \Big[\hat{b}_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}_{\boldsymbol{k}',p'} e^{i\{(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r} - (\omega_{\boldsymbol{k},p} + \omega_{\boldsymbol{k}',p'})t\}} + \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}',p'} e^{-i\{(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r} - (\omega_{\boldsymbol{k},p} + \omega_{\boldsymbol{k}',p'})t\}} \\
&\qquad - \hat{b}_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}',p'} e^{i\{(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r} - (\omega_{\boldsymbol{k},p} - \omega_{\boldsymbol{k}',p'})t\}} + \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}_{\boldsymbol{k}',p'} e^{-i\{(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r} - (\omega_{\boldsymbol{k},p} - \omega_{\boldsymbol{k}',p'})t\}} \Big]
\end{aligned} \tag{274}$$

となる。これを全空間で積分したものは，章末問題 7.1 の結果を用いると

$$
\begin{aligned}
&\iiint \hat{v}_{\boldsymbol{k},p}(\boldsymbol{r},t)\hat{v}_{\boldsymbol{k}',p'}(\boldsymbol{r},t)dV \\
&= \frac{\hbar}{2\rho\sqrt{\omega_{\boldsymbol{k},p}\omega_{\boldsymbol{k}',p'}}} \\
&\quad \times \Big\{ \hat{b}_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}_{-\boldsymbol{k},p'}e^{-i(\omega_{\boldsymbol{k},p}+\omega_{-\boldsymbol{k},p'})t}\delta_{\boldsymbol{k}',-\boldsymbol{k}} + \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k},p'}e^{i(\omega_{\boldsymbol{k},p}+\omega_{-\boldsymbol{k},p'})t}\delta_{\boldsymbol{k}',-\boldsymbol{k}} \\
&\quad -\hat{b}_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p'}e^{-i(\omega_{\boldsymbol{k},p}-\omega_{\boldsymbol{k},p'})t}\delta_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} + \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}_{\boldsymbol{k},p'}e^{i(\omega_{\boldsymbol{k},p}-\omega_{\boldsymbol{k},p'})t}\delta_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} \Big\}
\end{aligned} \tag{275}
$$

と表すことができる。以上で計算に必要な道具がそろった。

まず，式（267）より

$$
\iiint \sum_{j=1}^{3} \dot{\hat{u}}_j^2 dV = -\sum_{\boldsymbol{k},p}\sum_{\boldsymbol{k}',p'}\sum_{j=1}^{3}(\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p})(\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}',p'})\omega_{\boldsymbol{k},p}\omega_{\boldsymbol{k}',p'}\iiint \hat{v}_{\boldsymbol{k},p}\hat{v}_{\boldsymbol{k}',p'}dV \tag{276}
$$

である。式（275）より，積分の部分が 0 でない値をとるのは $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}$ あるいは $\boldsymbol{k}'=-\boldsymbol{k}$ の場合に限られる。ここで

$$
\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{3}(\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p})(\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p'}) &= \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p'} = \delta_{pp'}, \\
\sum_{j=1}^{3}(\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p})(\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{e}_{-\boldsymbol{k},p'}) &= \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p}\cdot\boldsymbol{e}_{-\boldsymbol{k},p'} = -\delta_{pp'}
\end{aligned} \tag{277}
$$

を用いると，式（276）は

$$
\sum_{\boldsymbol{k},p}\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k},p}}{2\rho}\left(\hat{b}_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}_{-\boldsymbol{k},p}e^{-2i\omega_{\boldsymbol{k},p}t} + \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k},p}e^{2i\omega_{\boldsymbol{k},p}t} + \hat{b}_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p} + \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}_{\boldsymbol{k},p}\right) \tag{278}
$$

となる（ただし $\omega_{-\boldsymbol{k},p}=\omega_{\boldsymbol{k},p}$ も用いた）。

次に，

$$
\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{3}\sum_{l=1}^{3}\left(\frac{\partial\hat{u}_j}{\partial x_j}\right)\left(\frac{\partial\hat{u}_l}{\partial x_l}\right) &= -\sum_{\boldsymbol{k},p}\sum_{\boldsymbol{k}',p'}\sum_{j=1}^{3}\sum_{j=l}^{3}(\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p})(\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{k})(\boldsymbol{e}_l\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}',p'})(\boldsymbol{e}_l\cdot\boldsymbol{k}')\hat{v}_{\boldsymbol{k},p}\hat{v}_{\boldsymbol{k}',p'} \\
&= -\sum_{\boldsymbol{k},p}\sum_{\boldsymbol{k}',p'}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p})(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}',p'})\hat{v}_{\boldsymbol{k},p}\hat{v}_{\boldsymbol{k}',p'}
\end{aligned} \tag{279}
$$

である。$p=1,2$ の場合は横波，$p=3$ の場合は縦波を表すので，たとえば $(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_{\pm\boldsymbol{k},p})$ は $p=3$ のときのみ 0 でない値 k をとる。よって式（279）は

$$
-\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}}kk'\hat{v}_{\boldsymbol{k},3}\hat{v}_{\boldsymbol{k}',3} \tag{280}
$$

となり，これを空間積分すると

$$
\sum_{\boldsymbol{k}}k^2\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\boldsymbol{k},3}}\left(-\hat{b}_{\boldsymbol{k},3}\hat{b}_{-\boldsymbol{k},3}e^{-2i\omega_{\boldsymbol{k},3}t} - \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},3}\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k},3}e^{2i\omega_{\boldsymbol{k},3}t} + \hat{b}_{\boldsymbol{k},3}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},3} + \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},3}\hat{b}_{\boldsymbol{k},3}\right) \tag{281}
$$

である。

さらに

$$
\begin{aligned}
&\sum_{j=1}^{3}\sum_{l=1}^{3}\left(\frac{\partial \hat{u}_j}{\partial x_j}\right)^2 \\
&\quad = -\sum_{\boldsymbol{k},p}\sum_{\boldsymbol{k}',p'}\sum_{j=1}^{3}\sum_{j=l}^{3}(\boldsymbol{e}_l\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p})(\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{k})(\boldsymbol{e}_l\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}',p'})(\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{k}')\hat{v}_{\boldsymbol{k},p}\hat{v}_{\boldsymbol{k}',p'} \\
&\quad = -\sum_{\boldsymbol{k},p}\sum_{\boldsymbol{k}',p'}(\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}',p'})(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}')\hat{v}_{\boldsymbol{k},p}\hat{v}_{\boldsymbol{k}',p'}
\end{aligned} \tag{282}
$$

である。これを空間積分したものは，式（277）も用いることにより

$$
\sum_{\boldsymbol{k},p} k^2\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\boldsymbol{k},p}}\left(-\hat{b}_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}_{-\boldsymbol{k},p}e^{-2i\omega_{\boldsymbol{k},p}t}-\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k},p}e^{2i\omega_{\boldsymbol{k},p}t}+\hat{b}_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p}+\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}_{\boldsymbol{k},p}\right) \tag{283}
$$

となる。最後に，

$$
\begin{aligned}
&\sum_{j=1}^{3}\sum_{l=1}^{3}\left(\frac{\partial \hat{u}_l}{\partial x_j}\right)\left(\frac{\partial \hat{u}_j}{\partial x_l}\right) \\
&\quad = -\sum_{\boldsymbol{k},p}\sum_{\boldsymbol{k}',p'}\sum_{j=1}^{3}\sum_{j=l}^{3}(\boldsymbol{e}_l\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p})(\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{k})(\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}',p'})(\boldsymbol{e}_l\cdot\boldsymbol{k}')\hat{v}_{\boldsymbol{k},p}\hat{v}_{\boldsymbol{k}',p'} \\
&\quad = -\sum_{\boldsymbol{k},p}\sum_{\boldsymbol{k}',p'}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}',p'})(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k},p})\hat{v}_{\boldsymbol{k},p}\hat{v}_{\boldsymbol{k}',p'}
\end{aligned} \tag{284}
$$

である。これを空間積分すると

$$
\sum_{\boldsymbol{k}} k^2\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\boldsymbol{k},3}}\left(-\hat{b}_{\boldsymbol{k},3}\hat{b}_{-\boldsymbol{k},3}e^{-2i\omega_{\boldsymbol{k},3}t}-\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},3}\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k},3}e^{2i\omega_{\boldsymbol{k},3}t}+\hat{b}_{\boldsymbol{k},3}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},3}+\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},3}\hat{b}_{\boldsymbol{k},3}\right) \tag{285}
$$

となり，式（281）と同じものが得られる。

以上の結果をハミルトニアン

$$
\hat{H}=\iiint\left[\frac{1}{2}\rho\sum_{i=1}^{3}\dot{\hat{u}}_i^2+\frac{1}{2}\lambda\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial \hat{u}_j}{\partial x_j}\right)+\frac{1}{2}\mu\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\left\{\left(\frac{\partial \hat{u}_j}{\partial x_i}\right)^2+\left(\frac{\partial \hat{u}_j}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j}\right)\right\}\right]dV \tag{286}
$$

に代入して整理すると

$$
\hat{H}=\sum_{\boldsymbol{k},p}\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k},p}}{4}\left(\hat{A}_{\boldsymbol{k},p}+\hat{B}_{\boldsymbol{k},p}\right)+\sum_{\boldsymbol{k},p}\frac{k^2\hbar}{4\rho\omega_{\boldsymbol{k},p}}\left\{\lambda+(\lambda+\mu)\delta_{p,3}\right\}\left(-\hat{A}_{\boldsymbol{k},p}+\hat{B}_{\boldsymbol{k},p}\right) \tag{287}
$$

となる。ただし

$$
\begin{aligned}
\hat{A}_{\boldsymbol{k},p}&=\hat{b}_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}_{-\boldsymbol{k},p}e^{-2i\omega_{\boldsymbol{k},p}t}+\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k},p}e^{2i\omega_{\boldsymbol{k},p}t} \\
\hat{B}_{\boldsymbol{k},p}&=\hat{b}_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p}+\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p}\hat{b}_{\boldsymbol{k},p}
\end{aligned} \tag{288}
$$

とした。ここでさらに $\omega_{\boldsymbol{k},p}=c_pk$ で

$$
c_1=c_2=c_\perp=\sqrt{\frac{\mu}{\rho}},\quad c_3=\sqrt{\frac{\lambda+2\mu}{\rho}} \tag{289}
$$

を用いることで，

$$\frac{k^2\hbar}{4\rho\omega_{\boldsymbol{k},p}} = \frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k},p}}{\mu + (\lambda + \mu)\delta_{p,3}} \tag{290}$$

と書き直せるので $\hat{A}_{\boldsymbol{k},p}$ の項は消えて，式（287）は結局

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k},p} \frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k},p}}{2} \hat{B}_{\boldsymbol{k},p} = \sum_{\boldsymbol{k},p} \hbar\omega_{\boldsymbol{k},p} \left(\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},p} \hat{b}_{\boldsymbol{k},p} + \frac{1}{2} \right) \tag{291}$$

と変形できる。

第 12 章

【12.1】

ハミルトニアンを $\boldsymbol{r}_1$ を含む部分と $\boldsymbol{r}_2$ を含む部分に分けて $\hat{H} = \hat{h}(\boldsymbol{r}_1) + \hat{h}(\boldsymbol{r}_2)$ とする。ここで

$$\hat{h}(\boldsymbol{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}) \tag{292}$$

とした。固有方程式 $\hat{H}\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = E\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ で解を $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \varphi_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{r}_2)$ と仮定して代入し，両辺を $\varphi_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{r}_2)$ で割ると

$$\frac{\hat{h}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r}_1)}{\varphi_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r}_1)} + \frac{\hat{h}(\boldsymbol{r}_2)\varphi_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{r}_2)}{\varphi_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{r}_2)} = E \tag{293}$$

となる。右辺は定数なので，左辺も定数でなくてはならない。左辺の第 1 項，第 2 項はそれぞれ $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ のみを含みうる関数であるが，たすと定数にならなくてはならないので，結局両項とも定数でなければならない。それらの定数をそれぞれ $\varepsilon_n, \varepsilon_{n'}$ とおくと

$$\hat{h}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r}_1) = \varepsilon_n\varphi_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r}_1), \quad \hat{h}(\boldsymbol{r}_2)\varphi_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{r}_2) = \varepsilon_{n'}\varphi_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{r}_2) \tag{294}$$

という 1 粒子のシュレディンガー方程式に分離できる。それぞれの固有関数を $\varphi_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r}_1) = \varphi_n(\boldsymbol{r}_1)$，$\varphi_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{r}_2) = \varphi_{n'}(\boldsymbol{r}_2)$ とすれば，解は $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \varphi_n(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{n'}(\boldsymbol{r}_2)$ となる。

【12.2】

$i \neq j$ のとき

$$\hat{b}_i\hat{b}_j\,|\cdots, n_i, \cdots, n_j, \cdots\rangle = \sqrt{n_i}\sqrt{n_j}\,|\cdots, n_i - 1, \cdots, n_j - 1, \cdots\rangle \tag{295}$$

$$\hat{b}_j\hat{b}_i\,|\cdots, n_i, \cdots, n_j, \cdots\rangle = \sqrt{n_i}\sqrt{n_j}\,|\cdots, n_i - 1, \cdots, n_j - 1, \cdots\rangle \tag{296}$$

なので $\hat{b}_i\hat{b}_j = \hat{b}_j\hat{b}_i$ である。同様に

$$\hat{b}_i^\dagger\hat{b}_j^\dagger\,|\cdots, n_i, \cdots, n_j, \cdots\rangle = \sqrt{n_i + 1}\sqrt{n_j + 1}\,|\cdots, n_i + 1, \cdots, n_j + 1, \cdots\rangle \tag{297}$$

$$\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_i^\dagger\,|\cdots, n_i, \cdots, n_j, \cdots\rangle = \sqrt{n_i + 1}\sqrt{n_j + 1}\,|\cdots, n_i + 1, \cdots, n_j + 1, \cdots\rangle \tag{298}$$

なので $\hat{b}_i^\dagger\hat{b}_j^\dagger = \hat{b}_j^\dagger\hat{b}_i^\dagger$ がなりたつ。一方，

$$\hat{b}_i^\dagger\hat{b}_i\,|\cdots, n_i, \cdots\rangle = \sqrt{n_i}\sqrt{n_i}\,|\cdots, n_i, \cdots\rangle \tag{299}$$

$$\hat{b}_i\hat{b}_i^\dagger\,|\cdots, n_i, \cdots\rangle = \sqrt{n_i + 1}\sqrt{n_i + 1}\,|\cdots, n_i, \cdots\rangle \tag{300}$$

なので $\hat{b}_i\hat{b}_i^\dagger = \hat{b}_i^\dagger\hat{b}_i + 1$ である。以上を合わせると，交換関係

$$[\hat{b}_j, \hat{b}_k^\dagger] = \delta_{jk}, \quad [\hat{b}_j, \hat{b}_k] = 0, \quad [\hat{b}_j^\dagger, \hat{b}_k^\dagger] = 0 \tag{301}$$

が得られる。

【12.3】

$j<k$ の場合を例にとって考える。ケット内で数字が書いている箇所は，左から順に j 番目，k 番目の状態の粒子数を表すことにする。このとき

$$\begin{aligned}\hat{a}_j\hat{a}_k^{\dagger}\left|\cdots,1,\cdots,0,\cdots\right\rangle &= \hat{a}_j(-1)^{s_1}\left|\cdots,1,\cdots,1,\cdots\right\rangle \\ &= (-1)^{s_2}(-1)^{s_1}\left|\cdots,1,\cdots,1,\cdots\right\rangle \end{aligned} \tag{302}$$

である。ただし

$$s_1 = n_1+\cdots+n_{k-1}, \quad s_1 = n_1+\cdots+n_{j-1} \tag{303}$$

とした。一方，

$$\hat{a}_k^{\dagger}\hat{a}_j\left|\cdots,1,\cdots,0,\cdots\right\rangle = \hat{a}_k^{\dagger}(-1)^{s_2}\left|\cdots,0,\cdots,0,\cdots\right\rangle \tag{304}$$

$$= (-1)^{s_1'}(-1)^{s_2}\left|\cdots,0,\cdots,1,\cdots\right\rangle \tag{305}$$

である。ここで s_1' は j 番目の粒子を消した後で，k 番目よりも左にある粒子の数をたしたものなので，必ず $s_1' = s_1 - 1$ という関係がある。そこで，式（304）はさらに

$$-(-1)^{s1}(-1)^{s_2}\left|\cdots,0,\cdots,1,\cdots\right\rangle = -\hat{a}_j\hat{a}_k^{\dagger}\left|\cdots,1,\cdots,0,\cdots\right\rangle \tag{306}$$

と書き直すことができる。以上より $\hat{a}_j\hat{a}_k^{\dagger} = -\hat{a}_k^{\dagger}\hat{a}_j$ が示された。

【12.4】

右辺から計算すると

$$\begin{aligned}\left\{\hat{A},\hat{B}\right\}\hat{C}-\hat{B}\left\{\hat{A},\hat{C}\right\} &= \left(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}\right)\hat{C}-\hat{B}\left(\hat{A}\hat{C}+\hat{C}\hat{A}\right) \\ &= \hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A} = \left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right]\end{aligned} \tag{307}$$

となり，左辺に等しいことが示された。

【12.5】

$\boldsymbol{r}_2$ を定数とみなすと，$f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ は $\boldsymbol{r}_1$ の関数として

$$f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \sum_k c_k(\boldsymbol{r}_2)\varphi_k(\boldsymbol{r}_1) \tag{308}$$

のように直交関数系 $\varphi_k(\boldsymbol{r}_1)$ で展開できる（ここで展開係数は $\boldsymbol{r}_2$ に依存するので $c_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}_2)$ と書いた)。さらに $c_k(\boldsymbol{r}_2)$ は $\boldsymbol{r}_2$ の関数なので，直交関数系により

$$c_k(\boldsymbol{r}_2) = \sum_l c_{k,l}\varphi_l(\boldsymbol{r}_2) \tag{309}$$

と展開できる。以上より

$$f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \sum_k\sum_l c_{k,l}\varphi_k(\boldsymbol{r}_1)\varphi_l(\boldsymbol{r}_2) \tag{310}$$

と表せることが示された。$c_{k,l}$ を求めるには，直交関数系の性質を用いて

$$c_{k,l} = \iiint \iiint \varphi_k^*(\boldsymbol{r}_1)\varphi_l^*(\boldsymbol{r}_2) f(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) dV_1 dV_2 \tag{311}$$

とすればよい。なぜなら，式（311）の右辺の $f(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ を

$$f(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \sum_{k'} \sum_{l'} c_{k',l'} \varphi_{k'}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{l'}(\boldsymbol{r}_2) \tag{312}$$

とすると（混同を避けるため，式（310）と文字を変えた），式（311）の右辺は

$$\sum_{k'} \sum_{l'} \left\{ c_{k',l'} \iiint \varphi_k^*(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{k'}(\boldsymbol{r}_1) dV_1 \iiint \varphi_l^*(\boldsymbol{r}_2)\varphi_{l'}(\boldsymbol{r}_2) dV_2 \right\} = \sum_{k'} \sum_{l'} c_{k',l'} \delta_{k,k'} \delta_{l.l'} = c_{k.l} \tag{313}$$

となるからである。

【12.6】

フェルミ粒子が 3 個ある場合を例にとって考える。それぞれ 1 粒子状態 $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ をもつフェルミ粒子系は

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|1\rangle|2\rangle|3\rangle - |1\rangle|3\rangle|2\rangle + |3\rangle|1\rangle|2\rangle - |3\rangle|2\rangle|1\rangle + |2\rangle|3\rangle|1\rangle - |2\rangle|1\rangle|3\rangle \right) \tag{314}$$

と表すことができる。1 粒子状態 $|i\rangle$ に 1 粒子ポテンシャルが作用すると $|i\rangle' = \hat{V}|i\rangle$ のように変化するとするなら，式（314）の状態にポテンシャル

$$V_1(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3) = V(\boldsymbol{r}_1) + V(\boldsymbol{r}_2) + V(\boldsymbol{r}_3) \tag{315}$$

を作用させたものは

$$\begin{aligned} &\hat{V}_1|\Phi\rangle \\ &\quad = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|1\rangle'|2\rangle|3\rangle - |1\rangle'|3\rangle|2\rangle + |3\rangle'|1\rangle|2\rangle - |3\rangle'|2\rangle|1\rangle + |2\rangle'|3\rangle|1\rangle - |2\rangle'|1\rangle|3\rangle \right) \\ &\qquad + \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|1\rangle|2\rangle'|3\rangle - |1\rangle|3\rangle'|2\rangle + |3\rangle|1\rangle'|2\rangle - |3\rangle|2\rangle'|1\rangle + |2\rangle|3\rangle'|1\rangle - |2\rangle|1\rangle'|3\rangle \right) \\ &\qquad + \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|1\rangle|2\rangle|3\rangle' - |1\rangle|3\rangle|2\rangle' + |3\rangle|1\rangle|2\rangle' - |3\rangle|2\rangle|1\rangle' + |2\rangle|3\rangle|1\rangle' - |2\rangle|1\rangle|3\rangle' \right) \end{aligned} \tag{316}$$

となる。これを，ケットの組み合わせ別に項をまとめると

$$\hat{V}_1|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle + |\Psi_3\rangle \right) \tag{317}$$

となる。ここでは，たとえば

$$|\Psi_1\rangle = |1\rangle'|2\rangle|3\rangle - |1\rangle'|3\rangle|2\rangle + |3\rangle|1\rangle'|2\rangle - |3\rangle|2\rangle|1\rangle' + |2\rangle|3\rangle|1\rangle' - |2\rangle|1\rangle'|3\rangle \tag{318}$$

のように，$|i\rangle$ のみにダッシュを付けたケットの組み合わせを $|\Psi_i\rangle$ と書くことにした。ここで 12.3.2 項の式（12.74）より

$$\hat{V}|i\rangle = \sum_j \langle j|V|i\rangle |j\rangle \tag{319}$$

であるので，式（318）は

$$|\Psi_1\rangle = \sum_j \{\langle j|V|1\rangle \\ \times (|j\rangle|2\rangle|3\rangle - |j\rangle|3\rangle|2\rangle + |3\rangle|j\rangle|2\rangle - |3\rangle|2\rangle|j\rangle + |2\rangle|3\rangle|j\rangle - |2\rangle|j\rangle|3\rangle)\} \tag{320}$$

のように書くことができる。この（ ）の中は $\sqrt{6}\,|\Phi\rangle$ のうちの $|1\rangle$ を $|j\rangle$ に書き換えた形をしている。それを生成・消滅演算子を用いて簡潔に表す方法を考えよう。まず $|\Phi\rangle$ に $\hat{a}_1$ を作用させると，12.3.1 項の操作 4 により

$$\hat{a}_1|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle|3\rangle - |3\rangle|2\rangle) \tag{321}$$

が得られる。これに生成演算子 $\hat{a}_j^\dagger$ を作用させると，12.3.1 項の操作 3 により

$$\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_1|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|j\rangle|2\rangle|3\rangle - |j\rangle|3\rangle|2\rangle + |3\rangle|j\rangle|2\rangle - |3\rangle|2\rangle|j\rangle + |2\rangle|3\rangle|j\rangle - |2\rangle|j\rangle|3\rangle) \tag{322}$$

となり，これは $|\Phi\rangle$ に含まれる $|1\rangle$ をすべて $|j\rangle$ に書き換えた式である。したがって式（320）は

$$|\Psi_1\rangle = \sqrt{6}\sum_j \langle j|V|1\rangle\,\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_1|\Phi\rangle \tag{323}$$

と書くことができる。フェルミ粒子の場合には符号に注意する必要があるので，例えば $|\Phi\rangle$ に $\hat{a}_2$ を作用させた場合も確かめてみると

$$\hat{a}_2|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|1\rangle|3\rangle + |3\rangle|1\rangle) \tag{324}$$

であり，これにさらに $\hat{a}_j^\dagger$ を作用させると

$$\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_2|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1\rangle|j\rangle|3\rangle - |1\rangle|3\rangle|j\rangle + |3\rangle|1\rangle|j\rangle - |3\rangle|j\rangle|1\rangle + |j\rangle|3\rangle|1\rangle - |j\rangle|1\rangle|3\rangle) \tag{325}$$

となり，やはり $|\Phi\rangle$ のうちの $|2\rangle$ を $|j\rangle$ に書き換えた形をしている。以上より，

$$|\Psi_i\rangle = \sqrt{6}\sum_j \langle j|V|i\rangle\,\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i|\Phi\rangle \tag{326}$$

となるので，式（317）は

$$\hat{V}_1|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\sum_i |\Psi_i\rangle = \sum_i\sum_j \langle j|V|i\rangle\,\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i|\Phi\rangle \tag{327}$$

と書くことができる。j はすべての 1 粒子状態について和をとり，i は $1, 2, 3$ についてのみ和をとればよいが，i についてもすべての 1 粒子状態についての和に拡張しても結果は変わらない。よって

$$\hat{V}_1 = \sum_i\sum_j \langle j|V|i\rangle\,\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i \tag{328}$$

となる。

次に 2 粒子間相互作用について考える。今の場合は

$$V_2(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3) = U(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) + U(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3) + U(\boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_1) \tag{329}$$

であり，相互作用させるケットのペアにダッシュ記号を付けると

$$
\begin{aligned}
&\hat{V}_2 |\Phi\rangle \\
&\quad = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(|1\rangle' |2\rangle' |3\rangle - |1\rangle' |3\rangle' |2\rangle + |3\rangle' |1\rangle' |2\rangle - |3\rangle' |2\rangle' |1\rangle + |2\rangle' |3\rangle' |1\rangle - |2\rangle' |1\rangle' |3\rangle\right) \\
&\qquad + \frac{1}{\sqrt{6}}\left(|1\rangle |2\rangle' |3\rangle' - |1\rangle |3\rangle' |2\rangle' + |3\rangle |1\rangle' |2\rangle' - |3\rangle |2\rangle' |1\rangle' + |2\rangle |3\rangle' |1\rangle' - |2\rangle |1\rangle' |3\rangle'\right) \\
&\qquad + \frac{1}{\sqrt{6}}\left(|1\rangle' |2\rangle |3\rangle' - |1\rangle' |3\rangle |2\rangle' + |3\rangle' |1\rangle |2\rangle' - |3\rangle' |2\rangle |1\rangle' + |2\rangle' |3\rangle |1\rangle' - |2\rangle' |1\rangle |3\rangle'\right)
\end{aligned} \tag{330}
$$

となる。$|i\rangle$ と $|j\rangle$ にダッシュがついている項を集めたものを $|\Psi_{i,j}\rangle$ と書くことにすれば，たとえば

$$
|\Psi_{1,2}\rangle = |1\rangle' |2\rangle' |3\rangle - |1\rangle' |3\rangle |2\rangle' + |3\rangle |1\rangle' |2\rangle' - |3\rangle |2\rangle' |1\rangle' + |2\rangle' |3\rangle |1\rangle' - |2\rangle' |1\rangle' |3\rangle \tag{331}
$$

となり，

$$
|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(|\Psi_{1,2}\rangle + |\Psi_{2,3}\rangle + |\Psi_{3,1}\rangle\right) \tag{332}
$$

と表すことができる。さらに 12.3.3 項の式（12.92）を用いると，

$$
\begin{aligned}
|\Psi_{1,2}\rangle = \sum_k \sum_l \{&\langle k, l|U|1, 2\rangle \\
&\times \left(|k\rangle |l\rangle |3\rangle - |k\rangle |3\rangle |l\rangle + |3\rangle |k\rangle |l\rangle - |3\rangle |l\rangle |k\rangle + |l\rangle |3\rangle |k\rangle - |l\rangle |k\rangle |3\rangle\right)\}
\end{aligned} \tag{333}
$$

と表すこともできる。この ( ) の中身は $\sqrt{6}\,|\Phi\rangle$ のうち $|1\rangle, |2\rangle$ をそれぞれ $|k\rangle, |l\rangle$ に置き換えたものである。置き換えにあたっては，まず式（321）により $|1\rangle$ を消去した状態をつくってから，さらにそれに演算子 $\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_2$ を作用させることで

$$
\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 |\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|l\rangle |3\rangle - |3\rangle |l\rangle\right) \tag{334}
$$

のように $|2\rangle$ を $|l\rangle$ に置き換えた状態をつくる。その後，演算子 $\hat{a}_k^\dagger$ を作用させれば，結果として

$$
\begin{aligned}
&\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 |\Phi\rangle \\
&\quad = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(|k\rangle |l\rangle |3\rangle - |k\rangle |3\rangle |l\rangle + |3\rangle |k\rangle |l\rangle - |3\rangle |l\rangle |k\rangle + |l\rangle |3\rangle |k\rangle - |l\rangle |k\rangle |3\rangle\right)
\end{aligned} \tag{335}
$$

のように，$|1\rangle, |2\rangle$ をそれぞれ $|k\rangle, |l\rangle$ に置き換えた状態が得られる（フェルミ粒子の場合には生成・消滅演算子の順序を間違えると符号が変わるので注意しなくてはならないが，他についても同様に表すことができる)。

以上より，

$$
\hat{V}_2 |\Phi\rangle = \sum_k \sum_l \langle k, l|U|i, j\rangle\, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i |\Phi\rangle \tag{336}
$$

が得られた。

第 13 章

【13.1】

(a) 波数 $\boldsymbol{k}$ は 5.1.2 項の式（5.22）をみたす離散変数とする。このとき，式（5.19）の波数の固有関数は 7.3.2 項の式（7.109）を用いて

$$\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \langle\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{k}}\rangle \tag{337}$$

と表される。さらに，途中で恒等演算子 $\sum_{\boldsymbol{k}'}|\varphi_{\boldsymbol{k}'}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{k}'}|$ を挿入して式変形すると

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{b}_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{r}\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}}\langle\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{k}}\rangle\hat{b}_k|\boldsymbol{r}\rangle \tag{338}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'}\langle\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{k}}\rangle\hat{b}_k|\varphi_{\boldsymbol{k}'}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{k}'}|\boldsymbol{r}\rangle \tag{339}$$

である。ここで $\hat{b}_{\boldsymbol{k}}|\varphi_{\boldsymbol{k}'}\rangle = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}|\boldsymbol{0}\rangle$ であるので，式（338）は

$$\sum_{\boldsymbol{k}}\langle\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{k}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{r}\rangle|\boldsymbol{0}\rangle = \langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}\rangle|\boldsymbol{0}\rangle = |\boldsymbol{0}\rangle \tag{340}$$

となる。
(b) ボース粒子を例にとる。まず

$$\left[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\right] = \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}+\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}')}\left[\hat{b}_{\boldsymbol{k}},\hat{b}_{\boldsymbol{k}'}\right] = 0 \tag{341}$$

となる。同様に $\left[\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\right] = 0$ も示される。一方，

$$\begin{aligned}\left[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\right] &= \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}')}\left[\hat{b}_{\boldsymbol{k}},\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}'}\right] \\ &= \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}')}\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \\ &= \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\end{aligned} \tag{342}$$

である。最後の式変形では章末問題 7.2 の結果を用いた。以上の式の交換関係を反交換関係に置き換えれば，フェルミ粒子についても同様に示すことができる。

【13.2】

式（13.1），式（13.2）で，波数の固有関数を $\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ とすると

$$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{k}}\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}}, \quad \hat{\psi}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{k}}\varphi^*_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\hat{b}_{\boldsymbol{k}} \tag{343}$$

と書くことができる。これを式（13.28）に代入すると

$$\begin{aligned}\hat{V}_2 = &\sum_{\boldsymbol{k}_1}\sum_{\boldsymbol{k}_2}\sum_{\boldsymbol{k}_3}\sum_{\boldsymbol{k}_4} \\ &\left\{\frac{1}{2}\iiint\iiint \varphi^*_{\boldsymbol{k}_1}(\boldsymbol{r}_1)\varphi^*_{\boldsymbol{k}_2}(\boldsymbol{r}_2)U(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\varphi_{\boldsymbol{k}_3}(\boldsymbol{r}_2)\varphi_{\boldsymbol{k}_4}(\boldsymbol{r}_1)dV_1dV_2\right\}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}_1}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}_2}\hat{b}_{\boldsymbol{k}_3}\hat{b}_{\boldsymbol{k}_4} \\ = &\sum_{\boldsymbol{k}_1}\sum_{\boldsymbol{k}_2}\sum_{\boldsymbol{k}_3}\sum_{\boldsymbol{k}_4}\left\langle \boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2\left|\frac{1}{2}U\right|\boldsymbol{k}_4,\boldsymbol{k}_3\right\rangle \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}_1}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}_2}\hat{b}_{\boldsymbol{k}_3}\hat{b}_{\boldsymbol{k}_4}\end{aligned} \tag{344}$$

となる。これは式（12.103）と同じ形をしている。

【13.3】

ボース粒子の場合を例にとり，式（13.33）で定義された生成・消滅演算子の交換関係を実際に計算してみる。まず,

$$[\hat{c}_j,\hat{c}_i] = \sum_l\sum_k\left(U^\dagger_{jl}U^\dagger_{ik}\left[\hat{b}_l,\hat{b}_k\right]\right) = 0 \tag{345}$$

$$\left[\hat{c}^\dagger_j,\hat{c}^\dagger_i\right] = \sum_l\sum_k\left(U_{lj}U_{ki}\left[\hat{b}^\dagger_l,\hat{b}^\dagger_k\right]\right) = 0 \tag{346}$$

である。次に

$$\begin{aligned}\left[\hat{c}_j,\hat{c}^\dagger_i\right] &= \sum_l\sum_k\left(U^\dagger_{jl}U_{ki}\left[\hat{b}_l,\hat{b}^\dagger_k\right]\right) = \sum_l\sum_k U^\dagger_{jl}U_{ki}\delta_{lk} \\ &= \sum_k U^\dagger_{jk}U_{ki} = (\mathbf{U}^{-1}\mathbf{U})_{ji} = \delta_{ji}\end{aligned} \tag{347}$$

となる。したがって $\hat{c}^\dagger_i$，$\hat{c}_i$ はボース粒子の生成・消滅演算子としての交換関係をみたす。以上で，交換関係を反交換関係に置き換えれば，フェルミ粒子の場合にも同様に示すことができる。

【13.4】

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t) &= e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{\psi}(\boldsymbol{r})e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} \\ \hat{H} &= e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{H}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\end{aligned} \tag{348}$$

を用いると，式（13.62）の右辺は,

$$\left[\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t),\hat{H}\right] = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{\psi}(\boldsymbol{r})\hat{H}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} - e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{H}\hat{\psi}(\boldsymbol{r})e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\left[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{H}\right]e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} \tag{349}$$

となる。ここで式（13.47）を用いると，式（349）はさらに

$$e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\mathcal{H}(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r})e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} = \mathcal{H}(\boldsymbol{r})e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{\psi}(\boldsymbol{r})e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} = \mathcal{H}(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t) \tag{350}$$

となる。ここで $\mathcal{H}(\boldsymbol{r})$ は $\boldsymbol{r}$ の関数である $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$ のみに作用するので，$e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$ と順序を入れ替えてよいことを用いた。

【13.5】

スピン自由度は省略する。フェルミ粒子の場合，式（13.64）の積分の中身の交換関係は，章末問題 12.4 の結果も用いると

$$\begin{aligned}
&\left\{\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1)\right\}\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)-\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1)\left\{\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)\right\}\\
&=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)-\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1)\left[\left\{\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}_2)\right\}\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)\right.\\
&\quad\left.-\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}_2)\left\{\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)\right\}\right]\\
&=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)-\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)\\
&=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)+\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_2)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)
\end{aligned}\tag{351}$$

となる。これを式（13.64）に代入すると，フェルミ粒子の場合でも式（13.66）が得られる。

【13.6】

時間を含む場の生成演算子 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r},t)$ を $|\boldsymbol{0}\rangle$ に作用させると

$$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r},t)\,|\boldsymbol{0}\rangle=e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\,|\boldsymbol{0}\rangle\tag{352}$$

である。ここで $\hat{H}\,|\boldsymbol{0}\rangle=0$ より

$$e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\,|\boldsymbol{0}\rangle=\left\{1+\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)+\frac{1}{2!}\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)^2+\cdots\right\}|\boldsymbol{0}\rangle=|\boldsymbol{0}\rangle\tag{353}$$

なので，式（352）は

$$e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\,|\boldsymbol{0}\rangle=e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\,|\boldsymbol{r}\rangle\tag{354}$$

となる。このエルミート共役は

$$\langle\boldsymbol{0}|\,\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)=\langle\boldsymbol{r}|\,e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\tag{355}$$

である。これと $|\varphi\rangle$ の内積を求めると

$$\langle\boldsymbol{0}|\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)|\varphi\rangle=\langle\boldsymbol{r}|e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|\varphi\rangle=\langle\boldsymbol{r}|\varphi(t)\rangle\tag{356}$$

となる。ここでは 8.2.1 項の式（8.49）を用いた。式（356）は状態 $|\varphi(t)\rangle$ を位置表示で表した波動関数という意味をもっているのでこれを $\psi(\boldsymbol{r},t)$ と書くことにすると，結局

$$\langle\boldsymbol{0}|\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)|\varphi\rangle=\psi(\boldsymbol{r},t)\tag{357}$$

という関係が得られた。式（13.63）を $\langle\boldsymbol{0}|$ と 1 粒子状態 $|\varphi\rangle$ ではさむと

$$\begin{aligned}
\langle\boldsymbol{0}|\mathcal{H}\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)|\varphi\rangle&=i\hbar\left\langle\boldsymbol{0}\,\middle|\,\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)\,\middle|\,\varphi\right\rangle\\
\mathcal{H}\,\langle\boldsymbol{0}|\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)|\varphi\rangle&=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\langle\boldsymbol{0}\,\middle|\,\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)\,\middle|\,\varphi\right\rangle\\
\mathcal{H}\psi(\boldsymbol{r},t)&=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)
\end{aligned}\tag{358}$$

となり，時間を含むシュレディンガー方程式が得られた。この式変形では，演算子 $\mathcal{H}$ や $\frac{\partial}{\partial t}$ は状態ベクトルではなく場の演算子に作用するため，ブラケットの外に出してもよいことを用いた。

【13.7】

(a) 右辺から計算して左辺になることが以下のように示される。

$$\begin{aligned}
u_{\boldsymbol{k}}\hat{\beta}_{\boldsymbol{k}} - v_{\boldsymbol{k}}\hat{\beta}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}} &= u_{\boldsymbol{k}}(u_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}}) - v_{\boldsymbol{k}}(u_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{\boldsymbol{k}}) \\
&= (u_{\boldsymbol{k}}^2 - v_{\boldsymbol{k}}^2)\hat{b}_{\boldsymbol{k}} + (u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}} - v_{\boldsymbol{k}}u_{\boldsymbol{k}})\hat{b}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}} = \hat{b}_{\boldsymbol{k}} \\
u_{\boldsymbol{k}}\hat{\beta}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} - v_{\boldsymbol{k}}\hat{\beta}_{-\boldsymbol{k}} &= u_{\boldsymbol{k}}(u_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}}) - v_{\boldsymbol{k}}(u_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}) \\
&= (u_{\boldsymbol{k}}^2 - v_{\boldsymbol{k}}^2)\hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} + (u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}} - v_{\boldsymbol{k}}u_{\boldsymbol{k}})\hat{b}_{-\boldsymbol{k}} = \hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}
\end{aligned} \tag{359}$$

(b) それぞれを具体的に計算すると

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\beta}_{\boldsymbol{k}}, \hat{\beta}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}\right] &= \left[u_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}}, u_{\boldsymbol{k}'}\hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'} + v_{\boldsymbol{k}'}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}'}\right] \\
&= u_{\boldsymbol{k}}u_{\boldsymbol{k}'}\left[\hat{b}_{\boldsymbol{k}}, \hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}\right] + v_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}'}\left[\hat{b}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}}, \hat{b}_{-\boldsymbol{k}'}\right] \\
&= (u_{\boldsymbol{k}}u_{\boldsymbol{k}'} - v_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}'})\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}
\end{aligned} \tag{360}$$

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\beta}_{\boldsymbol{k}}, \hat{\beta}_{\boldsymbol{k}'}\right] &= \left[u_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}}, u_{\boldsymbol{k}'}\hat{b}_{\boldsymbol{k}'} + v_{\boldsymbol{k}'}\hat{b}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}'}\right] \\
&= u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}'}\left[\hat{b}_{\boldsymbol{k}}, \hat{b}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}'}\right] + v_{\boldsymbol{k}}u_{\boldsymbol{k}'}\left[\hat{b}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}}, \hat{b}_{\boldsymbol{k}'}\right] \\
&= (u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}'} - v_{\boldsymbol{k}}u_{\boldsymbol{k}'})\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'} = 0
\end{aligned} \tag{361}$$

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\beta}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}, \hat{\beta}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}\right] &= \left[u_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}}, u_{\boldsymbol{k}'}\hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'} + v_{\boldsymbol{k}'}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}'}\right] \\
&= u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}'}\left[\hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}, \hat{b}_{-\boldsymbol{k}'}\right] + v_{\boldsymbol{k}}u_{\boldsymbol{k}'}\left[\hat{b}_{-\boldsymbol{k}}, \hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}\right] \\
&= (u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}'} - v_{\boldsymbol{k}}u_{\boldsymbol{k}'})\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'} = 0
\end{aligned} \tag{362}$$

となる。よって示された。

(c) 式

$$u_{\boldsymbol{k}}^2 + v_{\boldsymbol{k}}^2 = \gamma_{\boldsymbol{k}}u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}} \tag{363}$$

の両辺を 2 乗し，$u_{\boldsymbol{k}}^2 = x, v_{\boldsymbol{k}}^2 = y, \gamma_{\boldsymbol{k}} = \gamma$ とすると

$$(x+y)^2 = \gamma^2 xy \qquad \therefore (x-y)^2 = (\gamma^2 - 4)xy \tag{364}$$

となる。ここでボゴリューボフ変換の定義より $x - y = 1$ であることを用いると

$$1 = (\gamma^2 - 4)x(x-1) \qquad \therefore x^2 - x - \frac{1}{\gamma^2 - 4} = 0 \tag{365}$$

という 2 次方程式が得られる。解の公式によりこれを解いて整理すると

$$x = \frac{1}{2}\left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{4}{\gamma^2 - 4}}\right) = \frac{1}{2} \pm \frac{\gamma^2}{2\sqrt{\gamma^2 - 4}} \tag{366}$$

となる。$u_{\boldsymbol{k}}$ は実数なので，解のうち正の方を選ぶと

$$u_{\boldsymbol{k}}^2 = \frac{1}{2} + \frac{\gamma_{\boldsymbol{k}}}{2\sqrt{\gamma_{\boldsymbol{k}}^2 - 4}}, \quad v_{\boldsymbol{k}}^2 = -\frac{1}{2} + \frac{\gamma_{\boldsymbol{k}}}{2\sqrt{\gamma_{\boldsymbol{k}}^2 - 4}} \tag{367}$$

が得られる。

(d) 式（363）も用いると

$$\gamma_{\boldsymbol{k}}(u_{\boldsymbol{k}}^2 + v_{\boldsymbol{k}}^2) - 4u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}} = \frac{\gamma_{\boldsymbol{k}}^2 - 4}{\gamma_{\boldsymbol{k}}}(u_{\boldsymbol{k}}^2 + v_{\boldsymbol{k}}^2) \tag{368}$$

となる。さらに式（367）を代入すると，式（368）は

$$\begin{aligned} \frac{\gamma_{\boldsymbol{k}}^2 - 4}{\gamma_{\boldsymbol{k}}}\frac{\gamma_{\boldsymbol{k}}}{\sqrt{\gamma_{\boldsymbol{k}}^2 - 4}} &= \sqrt{\gamma_{\boldsymbol{k}}^2 - 4} = \sqrt{(\gamma_{\boldsymbol{k}} - 2)(\gamma_{\boldsymbol{k}} + 2)} \\ &= \sqrt{\frac{2V}{gN_0}\varepsilon_{\boldsymbol{k}}\left(\frac{2V}{gN_0}\varepsilon_{\boldsymbol{k}} + 4\right)} \end{aligned} \tag{369}$$

となる。ここで

$$\gamma_{\boldsymbol{k}} = \frac{2V}{gN_0}\varepsilon_{\boldsymbol{k}} + 2 \tag{370}$$

を用いた。よって

$$\frac{gN_0}{2V}\left\{\gamma_{\boldsymbol{k}}(u_{\boldsymbol{k}}^2 + v_{\boldsymbol{k}}^2) - 4u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}\right\} = \sqrt{\varepsilon_{\boldsymbol{k}}\left(\varepsilon_{\boldsymbol{k}} + \frac{2gN_0}{V}\right)} \tag{371}$$

である。

次に，$\gamma_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}^2 - 2u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}$ を計算する。まず

$$u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\gamma_{\boldsymbol{k}}}(u_{\boldsymbol{k}}^2 + v_{\boldsymbol{k}}^2) = \frac{1}{\sqrt{\gamma_{\boldsymbol{k}}^2 - 4}} \tag{372}$$

であるので

$$\gamma_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}^2 - 2u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}} = -\frac{1}{2}\gamma_{\boldsymbol{k}} + \frac{\gamma_{\boldsymbol{k}}^2 - 4}{2\sqrt{\gamma_{\boldsymbol{k}}^2 - 4}} = \frac{1}{2}\left(-\gamma_{\boldsymbol{k}} + \sqrt{\gamma_{\boldsymbol{k}}^2 - 4}\right) \tag{373}$$

となる。式（370）を用いてこれを書き換えると

$$\frac{1}{2}\left\{-\left(\frac{2V}{gN_0}\varepsilon_{\boldsymbol{k}} + 2\right) + \sqrt{\frac{2V}{gN_0}\varepsilon_{\boldsymbol{k}}\left(\frac{2V}{gN_0}\varepsilon_{\boldsymbol{k}} + 4\right)}\right\} \tag{374}$$

となる。よって

$$\frac{gN_0}{2V}\left(\gamma_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}^2 - 2u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}\right) = \frac{1}{2}\left\{\sqrt{\varepsilon_{\boldsymbol{k}}\left(\varepsilon_{\boldsymbol{k}} + \frac{2gN_0}{V}\right)} - \left(\varepsilon_{\boldsymbol{k}} + \frac{gN_0}{V}\right)\right\} \tag{375}$$

となる。

これらより式（13.94）が示された。

【13.8】

N 個すべての粒子が波数 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$ をもつ状態が $|\Phi_0\rangle$ である。波数 $\boldsymbol{0}$ の状態は運動エネルギーが 0 なので，ハミルトニアン $\hat{H}=\hat{K}+\hat{V}_2$ のうち，まず $\hat{K}|\Phi_0\rangle=0$ であることがわかる。したがって

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle &= \langle\Phi_0|\hat{V}_2|\Phi_0\rangle \\ &= \frac{g}{2V}\sum_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{k}_3+\boldsymbol{k}_4}\langle\Phi_0|\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}_4}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}_3}\hat{b}_{\boldsymbol{k}_2}\hat{b}_{\boldsymbol{k}_1}|\Phi_0\rangle\end{aligned} \tag{376}$$

であるが，$|\Phi_0\rangle$ は波数が $\boldsymbol{0}$ の状態しか含まないため，式（376）の和の各項が 0 でない値をとるのは $\boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{k}_3=\boldsymbol{k}_4=\boldsymbol{0}$ の場合のみなので

$$\langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle=\frac{g}{2V}\langle\Phi_0|\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{0}}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{0}}\hat{b}_{\boldsymbol{0}}\hat{b}_{\boldsymbol{0}}|\Phi_0\rangle \tag{377}$$

である。ここで

$$\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{0}}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{0}}\hat{b}_{\boldsymbol{0}}\hat{b}_{\boldsymbol{0}}=\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{0}}(\hat{b}_{\boldsymbol{0}}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{0}}-1)\hat{b}_{\boldsymbol{0}}=\hat{N}^2_{\boldsymbol{0}}-\hat{N}_{\boldsymbol{0}} \tag{378}$$

である。ただし $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$ 状態の粒子数を与える演算子を $\hat{N}_{\boldsymbol{0}}$ とした。状態 $|\Phi_0\rangle$ では $\hat{N}_{\boldsymbol{0}}|\Phi_0\rangle=N|\Phi_0\rangle$ であるので，N が十分大きいとき

$$\langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle=\frac{g}{2V}N(N-1)\approx\frac{g}{2V}N^2 \tag{379}$$

となる。

【13.9】

必要のない限り変数を省略する。グロス・ピタエフスキー方程式に左から Ψ^* をかけたものは

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*\nabla^2\Psi+V|\Psi|^2+g|\Psi|^4=i\hbar\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\Psi \tag{380}$$

であり，この式の複素共役は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi\nabla^2\Psi^*+V|\Psi|^2+g|\Psi|^4=-i\hbar\Psi\frac{\partial}{\partial t}\Psi^* \tag{381}$$

である。式（380）から式（381）を引くと

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*\right)=i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\Psi+\Psi\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\right) \tag{382}$$

である。付録 D.4 のベクトル恒等式（D.25）を用いると

$$\Psi^*\nabla^2\Psi=\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi)-\nabla\Psi^*\cdot\nabla\Psi \tag{383}$$

$$\Psi\nabla^2\Psi^*=\nabla\cdot(\Psi\nabla\Psi^*)-\nabla\Psi\cdot\nabla\Psi^* \tag{384}$$

であるので，式（382）の左辺の (　) の部分は

$$\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*) \tag{385}$$

と書き直せる。したがって，式（382）は

$$-\frac{\hbar}{2mi}\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)=\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 \tag{386}$$

となる。ここで

$$|\Psi|^2=\langle\Phi_{\mathrm{c}}|\hat{\psi}^\dagger|\Phi_{\mathrm{c}}\rangle\langle\Phi_{\mathrm{c}}|\hat{\psi}|\Phi_{\mathrm{c}}\rangle\approx\langle\Phi_{\mathrm{c}}|\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}|\Phi_{\mathrm{c}}\rangle=\rho \tag{387}$$

とすると，ρ は密度の期待値を表す。式（386）を連続の方程式と比較することにより，流れの密度が

$$\boldsymbol{J}=\frac{\hbar}{2mi}\{\Psi^*\nabla\Psi-(\nabla\Psi^*)\Psi\} \tag{388}$$

と求まる。

第 14 章

【14.1】

$t'x'$ 系の原点（$x'=0$）に時計があるとする。この時計が $t'=0$ 秒を指す事象を事象 A，$t'=1$ を指す事象を事象 B とすると，事象 A，事象 B はそれぞれ $(t',x')=(0,0)$，$(t',x')=(1,0)$ と表すことができる。事象 A,B を tx 系で眺めると，速度を $-v$ とするローレンツ変換

$$\begin{pmatrix} t \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & \frac{v}{c^2}\gamma \\ \gamma v & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t' \\ x' \end{pmatrix} \tag{389}$$

により，事象 A が $(t,x)=(0,0)$，事象 B が $(t,x)=(\gamma,\gamma v)$ に対応する。よって tx 系ではこれらの時間差は $\gamma=\dfrac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}$ 秒となり，より長い時間かかったように見える。

【14.2】

$t'x'$ 系で原点（$x'=0$）と $x'=1$ の間に棒が延びているとする。このとき $t'x'$ 系で時刻 t' のとき，それぞれの端は $(t',0)$，$(t',1)$ であり，それぞれを端 A, 端 B とよぶことにする。tx 系で時刻 $t=0$ のときに端 A を眺めると，

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\frac{v}{c^2}\gamma \\ -\gamma v & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{390}$$

により位置 $x=0$ にあるのはあきらか。一方，tx 系から眺めた，時刻 $t=0$ における端 B の位置を x とすると

$$\begin{pmatrix} t' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\frac{v}{c^2}\gamma \\ -\gamma v & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ x \end{pmatrix} \tag{391}$$

である。ここでは，時刻 $t'x'$ 系における時刻 0 が必ずしも tx 系の時刻 0 に相当するわけではないので時刻 t' とおいた。これより $1=\gamma x$ が得られ，tx 系で眺めたときの棒の長さが $x=\frac{1}{\gamma}=\sqrt{1-\left(\dfrac{v}{c}\right)^2}$ m と求まる。これにより，長さ方向に運動している棒は縮んで見えることがわかる。これをローレンツ収縮という。

【14.3】

1 kg の物体の静止エネルギーは，mc^2 で $m=1$ kg, $c=3\times10^8$ m/s とおくと 9×10^{16} J と求まる。これはダムの水をすべて沸騰させるくらいの熱量に相当する。原子力発電では，質量がエネルギーに変化する核反応を利用している。

【14.4】

速さ c で $-x$ 方向に進む光の n 番目の「山」に相当する位置は，波長を λ とすると $txyz$ 系で

$$x_n = n\lambda - ct \tag{392}$$

と表すことができる。隣どうしの「山」が，ある位置を通過する時刻の差が波の周期 T であり，その逆数が周波数である。今の場合，時刻 $t=0$ では 0 番目の「山」が原点 $x=0$ にあるので，1 番目の「山」が原点を通

過する時刻が波の周期 T である。したがって

$$0=\lambda-cT \tag{393}$$

である。$txyz$ 系に対して速さ v で x 方向に運動する $t'x'y'z'$ 系では，ローレンツ変換により 1 番目の「山」は

$$\left\{\begin{array}{l} t'=\gamma t-\frac{v}{c^2}\gamma(\lambda-ct)=-\frac{v\gamma}{c^2}\lambda+\frac{\gamma}{c}(c+v)t \\ x'=-\gamma vt+\gamma(\lambda-ct)=\gamma\lambda-\gamma(c+v)t \end{array}\right. \tag{394}$$

の時刻および位置に観測されることになる。$t'x'y'z'$ 系から見た波の周期 T' は，1 番目の「山」が $x'=0$ の位置を通過する時刻のことなので，上式の 2 行目の式で $x'=0$ とおくと $(c+v)t=\lambda$ となり，これを 1 行目の式に代入したものが T' である。よって

$$T'=\frac{c-v}{c^2}\gamma\lambda=\frac{c-v}{c}\gamma T \tag{395}$$

となる。ここでは式（393）も用いた。周期の逆数が周波数なので，周波数どうしの関係は

$$f'=\frac{c}{\gamma(c-v)}f=\frac{c}{(c-v)}\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}f=\sqrt{\frac{c+v}{c-v}}f \tag{396}$$

となる。これが光のドップラー効果の式である。$v>0$ の場合には $f'>f$ なので，光源に向かって運動している観測者にとっては，光の周波数は高くなったように見える。

【14.5】

行列を 2×2 ブロックに分けて計算する。

$$\alpha_x^2=\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{0} & \sigma_x \\ \hline \sigma_x & \mathbf{0} \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{0} & \sigma_x \\ \hline \sigma_x & \mathbf{0} \end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|c} \sigma_x^2 & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \sigma_x^2 \end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{array}\right) \tag{397}$$

となる。ここではパウリ行列の性質を用いた。得られた行列は 4×4 の単位行列であり，これを 4 成分のベクトルにかけることは 1 をかけることと同じなので，これを 1 と表記することもできる。α_y^2, α_z^2 についても同様に示すことができる。一方，

$$\beta^2=\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & -\mathbf{I} \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & -\mathbf{I} \end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{I}^2 & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & (-\mathbf{I})^2 \end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{I} & 0 \\ \hline 0 & \mathbf{I} \end{array}\right) \tag{398}$$

となる。

次に

$$\alpha_x\alpha_y=\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{0} & \sigma_x \\ \hline \sigma_x & \mathbf{0} \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{0} & \sigma_y \\ \hline \sigma_y & \mathbf{0} \end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|c} \sigma_x\sigma_y & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \sigma_x\sigma_y \end{array}\right) \tag{399}$$

となる。これより

$$\alpha_x\alpha_y+\alpha_y\alpha_x=\left(\begin{array}{c|c} \sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x \end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{array}\right) \tag{400}$$

となる。他の成分も同様である。

最後に

$$\alpha_x\beta=\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{0} & -\sigma_x \\ \hline \sigma_x & \mathbf{0} \end{array}\right), \quad \beta\alpha_x=\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{0} & \sigma_x \\ \hline -\sigma_x & \mathbf{0} \end{array}\right) \tag{401}$$

なので

$$\alpha_x\beta+\beta\alpha_x=\left(\begin{array}{c|c}\mathbf{0}&\mathbf{0}\\\hline\mathbf{0}&\mathbf{0}\end{array}\right) \tag{402}$$

となる。他の成分も同様に示せる。

【14.6】

$$\sigma'_x\alpha_x=\left(\begin{array}{c|c}\sigma_x&\mathbf{0}\\\hline\mathbf{0}&\sigma_x\end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c}\mathbf{0}&\sigma_x\\\hline\sigma_x&\mathbf{0}\end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|c}\mathbf{0}&\sigma_x^2\\\hline\sigma_x^2&\mathbf{0}\end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|c}\mathbf{0}&\mathbf{I}\\\hline\mathbf{I}&\mathbf{0}\end{array}\right) \tag{403}$$

$$\sigma'_x\alpha_y=\left(\begin{array}{c|c}\sigma_x&\mathbf{0}\\\hline\mathbf{0}&\sigma_x\end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c}\mathbf{0}&\sigma_y\\\hline\sigma_y&\mathbf{0}\end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|c}\mathbf{0}&i\sigma_z\\\hline i\sigma_z&\mathbf{0}\end{array}\right)=i\alpha_z \tag{404}$$

$$\sigma'_x\alpha_z=\left(\begin{array}{c|c}\sigma_x&\mathbf{0}\\\hline\mathbf{0}&\sigma_x\end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c}\mathbf{0}&\sigma_z\\\hline\sigma_z&\mathbf{0}\end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|c}\mathbf{0}&-i\sigma_y\\\hline -i\sigma_y&\mathbf{0}\end{array}\right)=-i\alpha_y \tag{405}$$

第 15 章

【15.1】

まず，スピンの z 成分の固有状態を x 成分の固有状態の重ね合わせで表すと

$$|{\uparrow}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{\rightarrow}\rangle - |{\leftarrow}\rangle\right), \quad |{\downarrow}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{\rightarrow}\rangle + |{\leftarrow}\rangle\right) \tag{406}$$

となる。よって

$$2\,|{\uparrow}\rangle\,|{\downarrow}\rangle = |{\rightarrow}\rangle\,|{\rightarrow}\rangle + |{\rightarrow}\rangle\,|{\leftarrow}\rangle - |{\leftarrow}\rangle\,|{\rightarrow}\rangle - |{\leftarrow}\rangle\,|{\leftarrow}\rangle \tag{407}$$

$$2\,|{\downarrow}\rangle\,|{\uparrow}\rangle = |{\rightarrow}\rangle\,|{\rightarrow}\rangle + |{\leftarrow}\rangle\,|{\rightarrow}\rangle - |{\rightarrow}\rangle\,|{\leftarrow}\rangle - |{\leftarrow}\rangle\,|{\leftarrow}\rangle \tag{408}$$

となる。これらの差を $2\sqrt{2}$ で割ることにより

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{\uparrow}\rangle\,|{\downarrow}\rangle - |{\downarrow}\rangle\,|{\uparrow}\rangle\right) = \left(|{\rightarrow}\rangle\,|{\leftarrow}\rangle - |{\leftarrow}\rangle\,|{\rightarrow}\rangle\right) \tag{409}$$

が示される。

【15.2】

演算子 $\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A$ は

$$\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A = \begin{pmatrix} \cos\theta_a & e^{-i\phi_a}\sin\theta_a \\ e^{i\phi_a}\sin\theta_a & -\cos\theta_a \end{pmatrix} \tag{410}$$

という行列になる。同様に

$$\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_B = \begin{pmatrix} \cos\theta_b & e^{-i\phi_b}\sin\theta_b \\ e^{i\phi_b}\sin\theta_b & -\cos\theta_b \end{pmatrix} \tag{411}$$

である。

$$|\mathrm{s}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{\uparrow}\rangle\,|{\downarrow}\rangle - |{\downarrow}\rangle\,|{\uparrow}\rangle\right) \tag{412}$$

とすると，

$$\begin{aligned} 2\,\langle \mathrm{s}|(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A)(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_B)|\mathrm{s}\rangle &= \langle{\uparrow\downarrow}\,|(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A)(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_B)|\,{\uparrow\downarrow}\rangle + \langle{\downarrow\uparrow}\,|(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A)(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_B)|\,{\downarrow\uparrow}\rangle \\ &\quad - \langle{\uparrow\downarrow}\,|(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A)(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_B)|\,{\downarrow\uparrow}\rangle - \langle{\downarrow\uparrow}\,|(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A)(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_B)|\,{\uparrow\downarrow}\rangle \end{aligned} \tag{413}$$

となる。ここで演算子 $\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A$ はスピン A，演算子 $\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_B$ はスピン B だけに作用するので，式（413）はさらに

$$\begin{aligned} &\langle{\uparrow}\,|(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A)|\,{\uparrow}\rangle\,\langle{\downarrow}\,|(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_B)|\,{\downarrow}\rangle + \langle{\downarrow}\,|(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A)|\,{\downarrow}\rangle\,\langle{\uparrow}\,|(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_B)|\,{\uparrow}\rangle \\ &\quad - \langle{\uparrow}\,|(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A)|\,{\downarrow}\rangle\,\langle{\downarrow}\,|(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_B)|\,{\uparrow}\rangle - \langle{\downarrow}\,|(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A)|\,{\uparrow}\rangle\,\langle{\uparrow}\,|(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_B)|\,{\downarrow}\rangle \end{aligned} \tag{414}$$

となる。ここで，

$$|{\uparrow}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |{\downarrow}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{415}$$

$$\langle{\uparrow}| = (1, 0), \quad \langle{\downarrow}| = (0, 1) \tag{416}$$

および式（410）の行列を用いると

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = \langle(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_A)(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_B)\rangle = -\cos\theta_a\cos\theta_b - \cos(\phi_a-\phi_b)\sin\theta_a\sin\theta_b \tag{417}$$

となる。一方 $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ の内積を成分により計算すると

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} &= \sin\theta_a\sin\theta_b(\cos\phi_a\cos\phi_b + \sin\phi_a\sin\phi_b) + \cos\theta_a\cos\theta_b \\ &= \sin\theta_a\sin\theta_b\cos(\phi_a-\phi_b) + \cos\theta_a\cos\theta_b\end{aligned} \tag{418}$$

なので

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = -\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} = \cos\theta \tag{419}$$

となる。ただし θ は $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}$ のなす角である。