始

量子力學序論

坂井卓三著

昭和十年

大日本氣象學會

46-417.

序

氣象學は狹義に定義をすると大氣の物理學であるからその研究を爲し，その應用に携つてゐるものは平素純正物理學の進歩に目を配ばり少くともその輪廓だけでも會得する樣に心掛けないと自分の專門學にすらも時代後れとなる．夫故に中央氣象臺に於ては職員の不斷の修養を大切と考へ曩に田丸卓郎先生に振動學，中村清二先生に氣象光學，寺田寅彦先生に海洋物理學の講義を御願いしたし，聽講者の修養に非常に爲めになり且つ日常の業務の上にも稗益するところ甚大であつて，一同諸先生の御厚志を感銘致して居ります．近時原子物理學が飛躍的の進歩をし，超高層氣象の現象を解釋するには少くともその根本思想丈けは確かりと摑んでをく必要を痛切に感せられるに至つたので，嘗て測候技術官養成所に御教授を御願した御緣故により坂井卓三先生に原子物理學の御講義をお願することとなつた．坂井先生には御快諾を下さいまして公務の餘閑の御休息の御時間を御割愛下され，昭和八年の暮から九年の春まで約十五回に亙り原子物理學の概要を簡明平易に講義せら

れ，聽講者一同は御蔭樣を以て日頃の讀書丈けでは會得出來なかつた點までも判明することが出來偏に感謝をして居ります．只當時の聽講者は單に中央氣象臺の有志若干名でありましたから全國の同業者にも何とかして此有益なる御講義の恩澤を配けることが出來れば事業の爲め非常に有益であると存じ，幸に和達，荒川，寺田の三君が當時筆記せられた稿本があつたので夫を坂井先生に御加筆を願ひ先生の御承認を得て大日本氣象學會に依賴して刊行することとなりました．本書が測候事業に從事するものの修養の助けとなる許りではなく，純正物理學を學ばんとする青年學徒の爲め研究の楷梯とならんことを切望して止まないのであります．玆に本書を刊行するに至つた由來を述べて序と致します．

中央氣象臺に於て

岡 田 武 松 識

は し が き

岡田先生の序文に述べられてある樣に，この書物は中央氣象臺で講述した際の原稿を基礎にして出來あがつたものである．初め氣象臺の荒川君が來て，この方面の話をむづかしくなく，さりとてあまり通俗的でもなく述べよとの御話があつた時，聞けば昔諸先生が夫々得意の御話をした名譽ある催しに傚ふものであつたので，それを受け容れるのにいささか二の足を踏まざるを得なかつたが，氣象臺の方々が常に新しい理論にも心を寄せて明日の進步に備へてゐられる御熱心に感じ，自分が今迄見聞きしたこと考へたことを御傳へするのも諸賢の研究上の參考になるであらうと思つて，玆に心を決めたのであつたが今更に書物に纏めて下さつたことに對してはこの仕事の無益でなからんことを切に希ふ次第である．

扨て現在非常に廣い範圍に發展してしまつてゐる理論の全部を話すことは到底出來なかつたので，基礎的の部分を述べることとし，昔の物理學だけを學んだ者がこの方面のことを知る爲の手引になる樣に心がけたのだから，この方面の專門家が讀んで新し

く得る所はあまり無いであらうと考へる．又理論の立場については，最も廣く行はれてゐるボーアとハイゼンベルクの物理的解釋以上によいものがない現在では，それに從ふ他なく，その立場から個々の問題に對する正しい批判を與へる樣に努めた．併し現在の解釋を不滿足としてゐる大家もあることだし，「學而不思則罔」であるから，讀む者も肯定的態度と共に懷疑的態度をも棄てないことを望む．

今ここに活字體となつたものを讀んでみると，未だ言葉が足りなかつたではなからうかと思ふ箇所も出て來て，むづかしくなく併し通俗的でもないものを作り上げ得たかどうかあやしいので，無用のつけ足しかも知れないが，一應この書物の方針を述べると，先づ第一章と第二章とで量子力學を組み立ててゐる根本の概念を擧げて，抽象的な數學的理論へ移る爲の準備をしてある．例へば「運算子が物理的量を表はす」と云ふ樣な抽象的の表はし方を，どう考へて置いたら大して不思議がるに及ばないかを述べてある．そこで第三章から第四章に亘つて抽象的量の數學的關係を述べ，終りの章で今までの知識をいかに應用したらよいかの例として光の輻射の問題を取扱つたのである．その他の應用については他日を

期する他ない．

終りに中央氣象臺長岡田先生初め皆の方が示された御好意に對し，厚く感謝の意を表はす．特に岡田先生には序文を賜はり，又畏友和達清夫君には出版の際の御骨折りに對し，又寺田一彦君には出版の際のみならず原稿を整理して下さつた事に對し，改めて御禮申上げる．

昭和十年六月

坂井卓三

目　次

第三章
數學的理論の基礎概念

第四章
シュレーディンガー運算子のマトリックス表現

第五章
光の輻射，吸收の理論

索　引

第一章　粒と波

§1.　粒と波との考へは矛盾してゐたか　粒とは日常目にふれる長さにくらべて非常に狹い範圍内に物理的作用の源をもつもののことである．又ここで言ふ波とは，我々の三次元空間を連續的に滿す媒質によつて云ひ表はされる現象のことであり，言ひ換へれば場の時間空間的變化のことである．

今世紀の初め頃の立場は波動論であつた．卽ち光が場の理論であつたことは勿論，物質粒子も場の理論から解釋しようとした．例へばローレンツ(Lorentz)の電子論では電氣は有限の密度をもつて空間に分布してゐ，電子はある狹い範圍内だけでこの密度が零でないとすることによつて表はされ，又相對論ではアインスタイン(Einstein)は場の異常點卽ち場の量が不連續になる點で粒子を表はすとする如きである．

併しこの考へが滿足でない事實が現れて來たことから，先づ述べようと思ふ．よく光は波動的であつたし，物質は粒子的であつたと言ふ人があるけれども，物質の粒子的性質を場の理論から解釋しようとしてゐたのが上に述べた樣

に事實なのであつて，上の樣な粒と波との考へには矛盾があるわけでは無かつた．矛盾してゐると云ふのはこれから述べる樣な意味に於てである．

§ 2. 光の粒子說 光はマックスエル (Maxwell) の電磁論で代表される波動說であつたが，1905 年にアインスタインは粒の說を唱へた．

即ち振動數 ν の平面波は，

$$E=h\nu \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (1)$$

のエネルギーと，平面波の進む方向に

$$p=h\nu/c \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (2)$$

なる運動量と，平面波の場合の樣に適宜の偏りとをもつて光の速度 c で運動量の方向に進む粒で表はされると云ふ說である．玆に h はプランク (Planck) の常數と呼ばれる宇宙常數であつて，その値は $h=6.55\times10^{-27}$ エルグ·秒である．

この說は平面波が粒であると云ふことに於て旣に矛盾を含んでゐる．なぜなら振動數 ν の平面波は充分長い範圍に亘つてゐるものであるから，粒の性質と合はない．或は振動數 ν に相當する波長の二三倍程度の長さを持つた光の波を考へるとしても，この樣なものがどうして干涉の現象を起し得るだらうかの說明がつかない．從つて電子が電子論で表はされた樣に，狹い範圍内だけに存在する光の波としてこの光の粒子を表はすことも實驗の事實と矛盾する．

併し光を粒子と考へなければ說明が出來ない新しい實驗

の事實があつたし，又さう考へるのが最もすなほな考へ方である理論的の根據もあつた．

先づアインスタインがこの考へに導かれた理論的根據はプランクの黑體輻射の理論であつた．黑體とは投射するすべての輻射を完全に吸收する物のことであり，黑體輻射とは一定の溫度の黑體が眞空へ輻射をして定常の狀態にある時の輻射の事である．熱輻射の理論によると，光を完全に反射する壁をもつた箱の中に任意の物質を置いた時，箱の中の輻射の狀態は黑體輻射と同じになる事が結論される．プランクはこの任意の物質の分子の最も簡單な模型として單振動をする振動體をとり，そのエネルギーは一定分量 ε の整數倍に限ること，ε は振動體の振動數 ν に比例すること，更に振動體はその振動數と同じ振動數の光だけを射出又は吸收すると假定する事によつて，黑體輻射の實驗の結果と一致する式を導くことが出來た．ε と ν との比例常數として導き入れた數が，實は前に述べた常數 h であつて，黑體輻射の實驗結果から前に述べた値が得られたのである．

以上の考へから，光の粒子說は容易に出て來る筈である．即ち波動論で云ふ樣に光のエネルギーが空間に連續的に擴がつてゐるならば，振動體はそのエネルギーを少しづつ吸收する他ないのであり，從つて ε の整數倍でない中間のエネルギーの狀態にも振動體はあり得ることになるが，この中間の狀態が無いことをプランクは假定してゐるからであ

る．併しプランクは光の粒子說をとることによつて從來の光の理論に大きな差し障りが起きるのを恐れた爲であらうか，そこまでは進まなかつたけれど，アインスタインは光の粒子說が黑體輻射の理論の自然的な結果であることを考へたのであつた．

尙この理由の他に，光電效果 (photoelectric effect) の實驗事實は光の波動論では說明がつかず，光の粒子說に有利な事柄であることを指摘した．光電效果とは周く知る如く物質に光をあてると電子が飛び出ると云ふことであつて，その電子の速度は光の强さには無關係で振動數だけに關係し，光の强さは單に電子の數に關係すること，又光の强さが小さくても電子は光があたると殆んど同時に飛び出ることが實驗的に知られたが，これらの事實は光のエネルギーが空間に連續に擴がるとしたのでは說明がつかず，(1)の式で與へられるエネルギーの塊として存在するとする粒子說をとるならば容易に解釋が出來るのである．

以上は主としてエネルギーの式(1)の根據を述べたのであるが，運動量の式(2)の理論的根據は次の樣である．相對論によれば，エネルギーEをもつ粒子の質量は

$$m=E/c^2 \qquad \cdots\cdots (3)$$

で與へられる．この式を光粒子にあてはめれば，光粒子は$h\nu/c^2$ の質量をもち，これは勿論觀測者に對してcの速度で動いてゐる粒子に關するものであるから，これに速度c

を掛けたものが運動量と考へられ，正に(2)の式が得られることとなる．ここに注目されることは質點の力學に於ける概念をそのまま光粒子にあてはめてゐることであつて，コンプトン (Compton) は光が電子にあたる時，丁度二つの質點の衝突に於ける樣に，エネルギーと運動量との保存の法則がなり立つとして，衝突後の光の振動數の變化——卽ちエネルギーが變るから光の振動數が變る筈である——を出し，實際實驗の結果とよく一致することを示したのである(コンプトン效果)．

以上の樣に光の粒子說に有利な事實があつたけれども，光の干涉，廻折等の說明に對しては全く無力であることは，昔ニュートンの粒子說がさうであつたと全く同じであつた．

§ 3. 物質粒子の波動說 物質を組み立ててゐる窮極のものは電子とか水素原子の核である陽核とか放射能物質から出るα-粒子であるとかの粒子であると云ふのが，從來の考へであり，これらを波動論の立場から解釋しようとした理論があつたことは，初めに(§ 1)述べた如くである．併しルイ・ド・ブロイ (Louis de Broglie) は 1925 年にこれらと全く異なつた物質粒子の波動說を唱へた．

卽ちエネルギーEをもつ物質粒子には，光の場合と同じ形の關係式

$$E=h\nu \qquad \cdots\cdots (1)'$$

で定まる振動數νのある波が伴つてゐると云ふ說である．

この波は無限の遠く迄擴がる平面波であつても差支へ無いのであつて，從來の波動論で粒子を表はす時は狹い範圍内に限られた波の場とか異常點をもつた波の場とかであつて，一定の振動數をもつた平面波であると考へては粒子の性質と既に矛盾するものであることは光の場合と同樣であつた．

若しこの說が事實であるならば，電子を廻折格子にあてると光の場合の樣に干涉，廻折の現象を起す筈であると云ふことをエルザッセル(Elsasser)と云ふ人が指摘したが，これに全くあてはまる實驗がダビソン(Davison)，ジャーマー(Germer)の二人によつて既に偶然行はれてゐることが判つた．卽ちニッケルの結晶體に電子の流れをあてて，結晶面から反射される電子を調べると，X-線が結晶面から反射される時出來るラウエ(Laue)の斑點と同樣の現象が起つてゐたのである．その後各國の實驗家も皆電子の廻折現象の事實を確かめ，物質粒子の波動說の動かすべからざることを認めたが，一方でウィルソン(Wilson)の霧箱の實驗等で見られる電子等の物質粒子の粒子性と如何にして融和し得るかと云ふことは，光の場合と同じく困難な問題となつて來た．

この問題を考へる前に，ブロイの與へた簡單な關係式を少し考へて置くことにする．特殊相對論によれば，靜止質量m_0の粒子がvの速度で自由に運動してゐる時は，

$$E=\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}},\ \left(\beta=\frac{v}{c}\right) \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (4)$$

のエネルギーを持つてゐる，電子に附隨した座標系の時間t_0，空間座標x_0(電子はxの方向に運動するとする)と觀測系に於ける時間空間の座標t，xとの間には，

$$t_0=\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\left(t-\frac{\beta x}{c}\right),\quad x_0=\frac{x-vt}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (5)$$

の關係がある．初めの座標系では粒子の速度が0であるから，(1)′の關係によつて

$$\nu_0=\frac{(E)_{\beta=0}}{h}=\frac{m_0c^2}{h}$$

の振動數をもつた振動現象があることになるから，この現象を代表的に

$$\psi=A\sin 2\pi\nu_0t_0 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (6)$$

の式で表はすことにする．振幅Aは常數と考へて置く．この振動現象を後の座標系から見るならば，(5)の初めの式によつて，

$$\psi=A\sin\frac{2\pi\nu_0}{\sqrt{1-\beta^2}}\left(t-\frac{\beta x}{c}\right) \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (7)$$

なる進行波として現はれることになり，その振動數は

$$\nu=\nu_0/\sqrt{1-\beta^2} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (8)$$

で，(4)をhで割つた値と一致するから(1)′の關係には矛盾が起らず，又速度は

$$V=c/\beta \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (9).$$

となる．この値はβがいつも1より大きく無いから，一般

に光の速度以上の値となるが，(9)の速度の値は波の形の進む速度，所謂位相の速度であつて，物質の進む速度ではないから，相對論の原則と矛盾することは無い．物質の進む速度は明かに v である．又相對論で時刻の進み方の違ひから計算される振動數の變換式は(8)ではなくて，$\nu'=\nu_0\sqrt{1-\beta^2}$ であるが，(8)の式はこの式と別に矛盾するものでない．卽ちこの式は電子に附隨した座標系の一定の位置に，例へば原點 $x_0=0$ に，時計を置いてその周期的現象を (t,x) の座標系から見てゐるのであるから，着目點は v の速度で動いて行くのであるが，(8)の式は (t,x) の座標系に於ける一定の位置に起る周期的現象を見てゐるのであつて着目點は固定されてゐるのである．

位相の波の波長は(8)と(9)とから，ν_0 の値を代入して

$$\lambda=\frac{h}{m_0v}\sqrt{1-\beta^2} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (10)$$

となる．今 β を小さいとし，更に靜止してゐる電子を電位差 P の電場で加速させ v の速度をもたせたとすれば，電子の電氣量を e として，$m_0v^2/2=eP$ の關係があるから，(10)で β をすて v を P で表はすなら，

$$\lambda=\frac{h}{\sqrt{2m_0e}}\,\frac{1}{\sqrt{P}} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (11)$$

となる．今 $m_0=1\times10^{-27}$ *c.g.s.*, $e=4{\cdot}77\times10^{-10}$ *e.s.u.* をとり，P をボルトで表はせば

$$\lambda=\frac{12{\cdot}2}{\sqrt{P}}\,10^{-8}\,\mathrm{cm} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (12)$$

となり，$P=300$ とすれば，$\lambda=0{\cdot}70$ Å となつて，X-線の波長の程度となる．P が大になれば波長は更に小となる．從つて電子の廻折の現象はX-線に於ける様に結晶體に於て現はれることになるのである．

§ 4.　**物質粒子の運動量**　自由に運動する物質粒子のエネルギーについては，光の場合と同じ形の關係式(1)'が成立することを知つたが，運動量についても亦同樣の關係が成立することになる．

前の節では粒子は x-方向に進むとしたが，事柄をやや一般にする爲に，新らしい座標軸 x, y, z をとり，前の節の x-方向は，この座標軸について l, m, n の方向餘弦をもつ方向であるとすれば，速度の三つの成分は $v_x=vl$, $v_y=vm$, $v_z=vn$ となる．又運動量の三つの成分は，

$$p_x=\frac{m_0v_x}{\sqrt{1-\beta^2}},\quad p_y=\frac{m_0v_y}{\sqrt{1-\beta^2}},\quad p_z=\frac{m_0v_z}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

である故，(10)によつて波長 λ を代入すれば，

$$p_x=\frac{l}{\lambda}h,\quad p_y=\frac{m}{\lambda}h,\quad p_z=\frac{n}{\lambda}h$$

となる．今

$$\frac{l}{\lambda}=k_x,\quad \frac{m}{\lambda}=k_y,\quad \frac{n}{\lambda}=k_z \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (13)$$

と置けば，

$$p_x=k_xh,\quad p_y=k_yh,\quad p_z=k_zh \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (14)$$

を得る．k_x, k_y, k_z は $1/\lambda$ 卽ち波數 (wave number) の大きさを

もつベクトル$\mathfrak{k}$の三つの成分と考へることが出來る．$\mathfrak{k}=(k_x, k_y, k_z)$を波數ベクトルと呼ぶことにする．光の粒の場合にも，その進む方向をl, m, nなる方向餘弦の方向とするなら，(14)と全く同じ形の式がなり立つことは，(2)の式へ夫夫l, m, nを掛けてみれば明かである．從つて光の場合にも，物質の場合にも，粒子的の量E, p_x, p_y, p_zと波動的の量ν, k_x, k_y, k_zとの間に一般に

$$E=h\nu,\quad \mathfrak{p}=\mathfrak{k}h \qquad\cdots\cdots(15)$$

の關係が成り立つ．$\mathfrak{p}$は運動量のベクトルである．

シュレーディンガーの方程式

§ 5. **ハミルトン-ヤコビの理論**　前の諸節で相對論の助けをかりたブロイの波動說を紹介したが，シュレーディンガー(Schrödinger)はニュートンの力學でも同樣の事柄が成り立つことを示し，物質粒子の波動說を更に發展させた．粒子と波動の概念を分析する前に，シュレーディンガーの理論を考察してみる．この理論の出發點は，ニュートンの力學は幾何光學と同じ形式のものであり，從つて幾何光學に對する波動光學の樣に，波動力學を作つてみると云ふ考へ方であつた．ところで幾何光學の形に似通つた力學の形式はハミルトン(Hamilton)-ヤコビ(Jacobi)の理論であるので，先づこれを簡單に述べることとする．

N個の質點を考へ，n番目のものの座標をx_n, y_n, z_n，又速

度の成分を$\dot{x}_n, \dot{y}_n, \dot{z}_n$，その質量を$m_n$とすれば運動エネルギーは

$$T=\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N} m_n(\dot{x}_n^2+\dot{y}_n^2+\dot{z}_n^2)$$

である．又質點はポテンシャルをもつ力の作用をうけるとして，ポテンシャル・エネルギーを一般に

$$U(x_1,\ y_1,\ldots\ldots z_N)$$

とする．Uは時間tをあらはに含まないとする．速度の代りに運動量の成分$p_{nx}=m_n\dot{x}_n,\ldots\ldots$を用ゐて運動エネルギーを書き

$$H(x_1,\ldots,p_{1x}\ldots)=\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\frac{1}{m_n}(p_{nx}^2+p_{ny}^2+p_{nz}^2)+U(x_1,y_1,\ldots z_N) \qquad\cdots\cdots(16)$$

と置けば全エネルギーEは函數Hと

$$H-E=0 \qquad\cdots\cdots(17)$$

なる關係をもつてゐる．Hをハミルトンの函數と云ふ．今$E, p_{nx}, p_{ny}, p_{nz}$を夫々$-\frac{\partial W}{\partial t}$, $\frac{\partial W}{\partial x_n}$, $\frac{\partial W}{\partial y_n}$, $\frac{\partial W}{\partial z_n}$で置きかへて得られる微分方程式

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\frac{1}{m_n}\left[\left(\frac{\partial W}{\partial x_n}\right)^2+\left(\frac{\partial W}{\partial y_n}\right)^2+\left(\frac{\partial W}{\partial z_n}\right)^2\right]+U=0 \qquad\cdots\cdots(18)$$

を考へてみる．偏微分方程式であるから，一般に種々の形の解があり得るが，その中で$3N$個の常數を含んだ任意の解

$$W(x_1,\ y_1,\dots,\ z_N,\ t,\ \alpha_1,\ \alpha_2,\dots\alpha_{3N})$$

を得たとする．そこで

$$p_{nx}=\frac{\partial W}{\partial x_n},\quad p_{ny}=\frac{\partial W}{\partial y_n},\quad p_{nz}=\frac{\partial W}{\partial z_n}\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\ (19)$$

と置くと，これがニュートンの運動方程式を滿足してゐる，言ひ換へれば運動方程式の解になつてゐると云ふのが，ハミルトン-ヤコビの理論なのである．勿論(19)は運動量と座標及び時間の間の關係を與へるのであるから，座標と時間との間の關係卽ち運動の軌道を知るには，更に積分しなければならず，それによつて更に $3N$ 個の任意常數が入ることになるのであるから，(19) は運動方程式の中間の積分となる．(19) が運動方程式を滿足してゐることの證明は，例へば $p_{1x}=\dfrac{\partial W}{\partial x_1}$ をとり，兩邊を t で微分してみればよろしい．

卽ち

$$\frac{dp_{1x}}{dt}=m_1\ddot{x}_1=\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\partial^2 W}{\partial x_n\partial x_1}\dot{x}_n+\frac{\partial^2 W}{\partial y_n\partial x_1}\dot{y}_n+\frac{\partial^2 W}{\partial z_n\partial x_1}\dot{z}_n\right)+\frac{\partial^2 W}{\partial t\,\partial x_1}$$

これから，$m_n\dot{x}_n=\dfrac{\partial W}{\partial x_n},\dots$ により，$\dot{x}_n,\ \dot{y}_n,\ \dot{z}_n$ を消去すれば，上式は

$$m_1\ddot{x}_1=\frac{\partial}{\partial x_1}\left\{\sum_{n=1}^{N}\frac{1}{2m_n}\left[\left(\frac{\partial W}{\partial x_n}\right)^2+\left(\frac{\partial W}{\partial y_n}\right)^2+\left(\frac{\partial W}{\partial z_n}\right)^2\right]+\frac{\partial W}{\partial t}\right\}$$

となるから，(18) によつて

$$m_1\ddot{x}_1=-\frac{\partial U}{\partial x_1}$$

となり，これは普通の形の運動方程式に他ならない．(19) の中の $3N$ 個の常數と，更に積分することによつて入つて來る $3N$ 個の常數とは，時間の初めに於ける質點の位置と速度とを與へるに役立つのである．

ポテンシャル・エネルギーが t を含まない今の場合には，一つの積分常數は直ちに得られる．卽ち常數 E をとつて

$$W=-Et+S(x_1,\ y_1,\dots,\ z_N)\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\ (20)$$

と置けば，t を含まない函數 S について (18) から

$$\sum_{n=1}^{N}\frac{1}{2m_n}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial x_n}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial y_n}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial z_n}\right)^2\right]+U=E\ \dots\ (21)$$

なる變數 t が一つ減つた方程式が得られる．從つてこの式から $3N-1$ 個の常數を含む解を求めればよいことになり，(19) は (20) によつて

$$p_{nx}=\frac{\partial S}{\partial x_n},\quad p_{ny}=\frac{\partial S}{\partial y_n},\quad p_{nz}=\frac{\partial S}{\partial z_n}\ \cdots\cdots\cdots\cdots\ (22)$$

となる．この式を (21) へ入れれば，常數 E は實は全エネルギーを表はすこととなる．U が t を含まなければ，全エネルギー E は一定である筈だから，一つの常數がすぐ見つかると云ふことは當然のことである．尙 (20) で E の前に負の記號をつけたのは，便宜上の事にすぎない．

卽ち若し (20) で E の前に正の記號をとれば，(21) の右邊は $-E$ となるから常數 E は全エネルギーの値ではなくて，

この値と記號を反對にする常數を表はすと云ふことになるだけである．(20)の様にとつたのは，常數Eがそのまま全エネルギーを表はす様にしたまでである．

今(21)の解Sが見出されたとし，その任意常數に一定の値を與へ，更にx_n, y_n, z_nの代りに

$$\xi_n=\sqrt{m_n}\,x_n,\quad \eta_n=\sqrt{m_n}\,y_n,\quad \zeta_n=\sqrt{m_n}\,z_n$$

をとつて，Sを$\xi_1, \eta_1, \dots \zeta_N$の函數と考へる．そこで$\xi_1, \eta_1, \dots \zeta_N$を直角座標とする$3N$-次元の空間を想像してみるならば，

$$S(\xi_1, \eta_1, \dots \zeta_N)=\text{常數}$$

は，この假想空間に於ける曲面を表はし，更に各質點の位置はこの空間に於ける一點によつて言ひ表はされるから，質點系の運動の道筋はこの空間の曲線で代表される．さて

$$\frac{\partial}{\partial\xi_n}S(\xi_1,\dots\zeta_N)=\frac{1}{\sqrt{m_n}}\frac{\partial}{\partial x_n}S(x_1,\dots z_N)=\frac{1}{\sqrt{m_n}}p_{nx}=\sqrt{m_n}\dot{x}_n,$$

卽ち

$$\frac{\partial}{\partial\xi_n}S(\xi_1,\dots\zeta_N)=\dot{\xi}_n$$

であるから，$\dot{\xi}_1, \dot{\eta}_1, \dots, \dot{\zeta}_N$は$S$=常數 の面の法線方向と一致する故，質點系の道筋はこの面に直交することとなる．法線方向をsとすれば，その方向餘弦は$\frac{d\xi_1}{ds}, \frac{d\eta_1}{ds}, \dots \frac{d\zeta_N}{ds}$と考へられるから，質點系の$s$-方向の速度は

$$\sum_{n=1}^{N}\left(\dot{\xi}_n\frac{d\xi_n}{ds}+\dot{\eta}_n\frac{d\eta_n}{ds}+\dot{\zeta}_n\frac{d\zeta_n}{ds}\right)$$
$$=\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\partial S}{\partial\xi_n}\frac{d\xi_n}{ds}+\frac{\partial S}{\partial\eta_n}\frac{d\eta_n}{ds}+\frac{\partial S}{\partial\zeta_n}\frac{d\zeta_n}{ds}\right)=\frac{\partial S}{\partial s}$$

である．又一方で$\dot{\xi}_1, \dot{\eta}_1, \dots \dot{\zeta}_N$の合成の自乘を作れば，

$$\sum_{n=1}^{N}(\dot{\xi}_n^2+\dot{\eta}_n^2+\dot{\zeta}_n^2)=\sum_{n=1}^{N}m_n(\dot{x}_n^2+\dot{y}_n^2+\dot{z}_n^2)=2T$$
$$=2(E-U)$$

となるから，上の二つの式から

$$\frac{\partial S}{\partial s}=\sqrt{2(E-U)} \qquad \cdots\cdots (23)$$

を得る．所で(20)を考へるに，ある時刻にはWの値が一定なる假想空間內の點はすべて S=常數 なる面の上にあることとなり，若し時間が變ればWの値が一定の面は假想空間內を移動する．この移動の速度は(20)をtで微分して得られる

$$0=-E+\frac{\partial S}{\partial s}\frac{ds}{dt}$$

の$\frac{ds}{dt}$で與へられるから，

$$\frac{ds}{dt}=\frac{E}{\sqrt{2(E-U)}} \qquad \cdots\cdots (24)$$

となる．

以上の考察からWの値が一定の面は幾何光學に於ける波面に，(24)はこの波面の位相速度に，又質點系の道筋は光の射線に**類似してゐる性質**のものであることが知られる．又ブロイの理論との對應を求めるなら，質點系の速度(23)は§3のvに，位相速度(24)は(9)にあたるものと考へられる．實際唯一つの質點をとり，自由な運動をするものとして$U=m_0c^2$にとるなら，$E=m_0v^2/2+m_0c^2$であるから，(23),

(24) は夫々 $\sqrt{m_0}v$, $\sqrt{m_0}c^2/v$ となり假想空間に於ける長さは實際空間に於ける長さへ $\sqrt{m_0}$ を掛けたものであることを考へれば, §3 に於ける質點の速度及び位相速度が與へられる.

§ 6. **シュレーディンガーの波動方程式** 以上の樣にして質點系の位相速度が定められた上は, 一步を進めて波動方程式を作つてみることは容易である. 卽ち三次元空間に於けると同樣に, $3N$- 次元空間の波動方程式は Vを位相速度として

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=V^2\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi_1^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial\eta_1^2}+\cdots\cdots+\frac{\partial^2\psi}{\partial\zeta_N^2}\right)$$

であらう. Vの代りに (24), $\xi_1,\ldots\zeta_N$ の代りに $x_1,\ldots z_N$をとるなら上の式は

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\frac{E^2}{2(E-U)}\sum_{n=1}^{N}\frac{1}{m_n}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x_n^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y_n^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z_n^2}\right)\text{.........}\ (25)$$

となる. この式は尙 Eをあらはに含んでゐるが, すべての Eの値に共通な方程式を作る方が一般的と考へられるので, ブロイに從つて ψは時間について $\nu=E/h$の振動數で振動するとして,

$$\psi=e^{-\frac{i2\pi E}{h}t}\ \varphi(x_1,\ldots z_N)\ \text{..............................}\ (26)$$

と置けば, $\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{i2\pi E}{h}\psi$, $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\left(\frac{i2\pi E}{h}\right)^2\psi$ であるから, この第二の式によつて (25) の兩邊から, $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$ とE^2とを拂ひ, 更に第一の式によつて $E-U$のEを消去して,

$$\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2\sum_{n=1}^{N}\frac{1}{2m_n}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x_n^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y_n^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z_n^2}\right)+U\psi+\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=0\text{.........}(27)$$

を得る. (26) で t を含む指數函數の指數に負の記號をつけたのは全く便宜上の事柄であつて, (26) の共軛複素數をとるなら正の記號をもつた式が得られるが, それに從つて(27)の代りにその共軛複素數をとつた式が得られることになるだけである. 上の微分方程式を**シュレーディンガーの波動方程式**と云ひ, 質點系の量子力學の一つの根本の式であることが判つて來たのである.

尙舊力學に於ける關係式 (16), (17) とこの式とを比較するなら, 舊力學の式で形式的に

$$p_{nx}=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x_n},\ p_{ny}=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial y_n},\ p_{nz}=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial z_n},\ E=-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}\ \text{......}(28)$$

と置き, こうして得られた微分記號をψに施すとすれば(27)が得られることになる. この初めには形式的な手續きが, その後, 量子力學に於ける根本的な概念となつたことは後に述べることとする.

第二章

確率波と不確定原理

§ 7. **物質粒子の確率波** 前の章で，光及び物質粒子はある場合には波動的でありある場合には粒子的であることを述べた．併し既に述べた樣にこれらの性質は互に相容れないと考へられるのに，同一のものを場合に從つて二樣に考へることが許される爲には，更にその根本を明かにしなければならない．勿論例へば光には二種類があつて，その一つは波動的性質をもち，他のものは粒子的性質をもつてゐて，この二種類の混合物が一般に光であると假定し，廻折の現象では波動性のものだけが作用し，光電效果では粒子性のものだけが作用する等假定することは出來る．併し場合に從つてなぜある種類は作用し他の種類は作用しないかが明かにされなければ，我々は滿足しないのである．これは自然現象に對して豫言可能の理論を得たいと云ふ人間の要求に基いてゐるのである．

シュレーディンガーは初め波動論の立場に立つて，波動が根本的なものであるとして粒子を說明し樣とした．この立場では物質は丁度雲の樣に空間に瀰滿したものであり，電子はこの雲が比較的小さい空間の範圍內に凝集したものであると考へる．この小さい範圍內に於ても，波動方程式が成立してゐると考へること，宛かも昔の電子論に於けるが如くである．この樣な粒子の數式的表現は，フーリエの定理で三角函數の重ね合せによつて任意の函數を表はし得る樣に，波動方程式の，單振動に相當する特殊解を重ね合せることによつてなしとげられるであらう．併しこの見解に對しては次の反對が擧げられた．第一に，上に述べた樣な重なりの波は，一般に，時間の經過と共にその形を變へ，例へば初め小さい範圍內に塊つてゐたとしても時間と共に擴散すること，宛かも熱傳導論で溫度が次第に擴散すると同樣である．それだのに實際の事實は電子はいつも粒子としての性質を持つて居り，例へばβ-線の幅が先へ行く程太くなるなど云ふことは事實に遠い事柄である．第二にシュレーディンガーの方程式は，唯一つの粒子の場合には，なる程空間座標 x, y, z と時間 t とに關係して居るが，粒子の數が多い時は，この方程式は假想的な多次元空間に關するものであつて，從來の波動論（§1參照）が太陽の輝くを見，星の瞬くを感じてゐる我々のこの三次元空間に關するものであるのとは，全く別の種類のものである．シュレーディンガーの云ふ波動とは，§1 に定義した樣なこの三次元空間に現はれてゐる波動ではないと云ふ反對である．

ボルン (Born) はα-粒子が原子によつて分散される問題を，シュレーディンガーの方程式を基礎にして解いてみた．原

子は核とこれをかこむいくつかの電子から成つてゐる．遠方から飛び來つた α-粒子は原子の近くを通る際，クーロンの法則による作用を受けて，その運動の方向を變化する．昔ラザーフォード (Rutherford) はこれにニュートンの力學を應用し，原子，α-粒子が數多あるとして統計的の考へを入れて，ある方向に分散して來る α-粒子の數の平均値を算出した．波動の立場からは，飛び來る α-粒子は平面波で表はされるであらう．これが原子に當つて分散することは，丁度光の波が塵芥の粒子によつて分散されると似た現象となる．光の場合と異なる所は，塵芥の粒の表面の境界條件に代つて，クーロンの場をとることであり，更に波動方程式の變數の數が多くなつてゐることである．ボルンは分散された α-粒子に相當する波動函數 ψ を求め，これの共軛複素數 ψ^* をとり，$\psi^*\psi$ 卽ち ψ の絶對値の自乘を作ると，昔ラザーフォードが出した式と全く一致することを見た．この一致から シュレーディンガーの波動函數 ψ は舊來の波動論の波動を表はすものではなくて，$\psi^*\psi$ は粒子がある場所に存在する確率を表はすものであることを唱へたのである．舊來の波動と區別する爲に，この ψ-波を**確率波**と呼ぶことがある．これは實に劃期的な新しい槪念であつた．以下この確率波の內容を更に調べてみよう．

§ 8. 先づ確率波の立場からは，前に述べた波動論に對する反對は消失する．我々の考へてゐるのは矢張り粒子なのであつて，從つて波が擴散することは單に粒子が空間のある場所に存在する確らしさが小になることを意味するだけだからである．

次に粒子の數が多い時は，各粒子が空間の各點に夫々存在する確率を問ふことになるから，確率波 ψ が多くの粒子の座標の函數となり從つて假想的な高次空間の波となることは當然のことと考へられる．

確率波は我々の身體，我々の住家が存在する三次元空間を傳播するものではなくて，粒子に關する我々の智識を表はすものに過ぎない．比喩を一つ擧げよう．空の遠い所に一點としか見えない飛行機を，窓を開いた瞬間に認め，次の瞬間にはもう窓を閉めたとする．飛行機がどの方向に如何なる速度で進んでゐたかは全く判らないが，その後の飛行機の位置をある確らしさで推定することは出來る．卽ち初めの點を中心として，飛行機が持ち得る最大速度に初めの瞬間から現在に到るまでの時間を掛けた距離を半徑とする球を畫くなら，飛行機は現在はこの球の中のどこかに存在するのであり，そのいづれの點にあることも同じ確らしさをもつてゐるであらう．この球は，初めの瞬間には一點に凝集してゐたが，時間と共にその半徑が飛行機に許される最大速度を以て擴がり，充分時間が經てば充分に大きくなるであらう．この終りの狀態では，飛行機は全空間のどこかに居ると云へるだけであつて，これはその位置に關す

る智識が全く無いことと同じとなる．確率波とは，全く上の例の球に相當するものであり，この球が山や雲と同様の空間的實在性をもつものでないことを疑ふ人はないであらう．卽ち單に飛行機の位置に關する我々の智識に過ぎないのである．

更に比喩を續けよう．今再び窓を開いて北以外の方向をすばやく觀測し，この方向には機影の存在しないことを知つたとすれば，その瞬間に今までの完全な球は北方に擴がつた錐體の部分を殘して忽ち消え去つてしまふ．北以外の方向に飛行機の存在する確率は零になつたからである．併し時間が經てばこの殘つた錐體の部分は膨れて行く．そこで三度窓を開いて北の空の一點に機影を認めたとすれば，その瞬間に今までの確率の波は一點に凝集してしまふ．

併し確率の波はいつも擴散すると云ふわけではない．例へば飛行機の例で，それが二つの都市の間の定期航空に從事してゐるものであることが判つてゐるならば，初めに考へた飛行機の確率波は時間と共にどこ迄も擴散してしまふのではなくて，都市の間の航空路の近傍では密でそれを離れるに從つて淡くなる定常的な波となるであらう．これと同様に，例へば電子が陽核の附近にあるならば，相互間の引力によつて電子は陽核の近くを去り得ないから，電子の確率波は陽核の附近で密で遠ざかる程淡くなる一種の定常波となるのである．(§ **23** 水素原子の例參照)

以上說明した所によつて，ψ を確率波と解釋するならばシュレーディンガーの理論は實は波動論ではなくて，やはり粒子論に屬するものであり，論理的矛盾を起すと云ふことにはならない．昔の粒子の概念と異なる點は，粒が確率の概念に支配されてゐる事である．

§ 9. 光粒子の確率波 光についても，物質粒子と同様に確率波を假定することが出來るであらう．確率波の概念を示す爲に，更に一つの例を擧げれば次の如くである．

薄く銀づけした硝子板をとり，一つの光の粒子をこれにあてるとする．波動の考へに從へば，光波の一部分は硝子板を透過し，一部は反射されて來，充分時間が經つならばこの二つの波は互にいくらでも遠去かることが出來る．今反射波の來る側に光粒子を檢出する裝置(例へば理想的な鋭い感度をもつた寫眞の乾板)を置いたとし，ある瞬間に光粒子の存在を檢出したとする．この瞬間に二つの波は消失して，裝置上の一點に凝集してしまふ．なぜなら波は確率波であるからである．裝置のある一點で，光粒子を檢出したと云ふ作用が，充分遠方にある波を消失させると云ふことは，若し波が實在空間的のものであるならば，光の速度以上の速度で作用が傳達することを意味し，相對論の原理に矛盾することとなるけれど，波が確率なる我々の智識を表はすのであるならば，波が瞬間に消失することは單なる思考の過程を表はしてゐるに過ぎないから，相對論の原理と

矛盾することは無い.

それならば一つの光粒子に對する確率波の滿足する式は如何に與へられるであらうか. ブロイは, その著書で

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=0$$

が光粒子の確率波 ψ をきめる式であることを提唱する.

併しマックスエルの理論との關係や, 又光の粒子の偏りの問題と, 上の式との關係は全く不明であるから, 一つの光粒子の確率波の概念を假定するとしても, その數式的關係は今後の發展にまたねばならないと思はれる.

他の見地ではマックスエルの式そのものを光粒子の波動方程式と考へる. 併しこの考へに於ても光粒子の位置の確率を決めるのには困難を生ずる. 或る者は, 電磁場のエネルギー密度が確率を與へるものとの考へに誘なはれるかも知れない. 若し相對論を無視するならば, 確率の流れの密度(後にこの概念を述べる)を連續の方程式の存在することから定義出來る故に(この時確率の流れの密度はポインティングのベクトルとなる), この見地は許されるであらうが, 相對論の立場からはこの連續の方程式はローレンツの轉換に對して不變でなくなり, 從つてエネルギー密度を確率と考へることは不適當となる.

後に論ずる樣に, 相對論の立場からは一般に粒子の位置はある程度以上に確定出來ない樣に見える. 從つてパウリ(Pauli)によれば, 位置の確率の概念は, 非相對論の立場に於て近似的に許されるらしいが, 又一方で, ディラック(Dirac)の電子論では相對論的でありながら位置の確率の概念が正確に成立してゐるものもある. 從つてマックスエルの方程式をある程度に改革するとの考へも生れるが, 要するにこれらの點は更に深い攻究を必要とするらしい.

§10. 不確定原理　扨て如何なる物理的の根據から, 以上に述べた粒子の確率的性質が由來するのであらうか. これに關して次の點が注目される樣になつた.

「現在の物理學の測定は, 測定される對稱物と, これを測定する方法とを各切り離して考へることが出來ない境地に迄達してゐる」

例へば電子の位置を觀測するのに光をあてて行ふと考へてみる. 上述の對稱物とは電子であり, 測定の方法とは光をあてることである. 今1ボルトの電位差を電子が通過した爲にもつエネルギー, 即ち1エレクトロン・ボルトを計算するに, 電子の電荷を $e=4{\cdot}77\times10^{-10}$ *e.s.u.* として, 1エレクトロン・ボルト$=1{\cdot}6\times10^{-12}$ *c.g.s.* となるから, 300エレクトロン・ボルト$=4{\cdot}77\times10^{-10}$ *c.g.s.* である. この電子の速度, 運動量を $v=\sqrt{\frac{2}{m_0}eP}$, $p=m_0v$ の關係から計算すれば, $m_0=1\times10^{-27}$ *c.g.s.* の程度であるから(ePはエレクトロン・ボルト) $v=10^9$ *c.g.s.* (これは光の速度の 1/10 の程度となるが, 相對論の補正は $(1/10)^2$ の程度であるから, 程度をみる範圍内では差支ない), $p=10^{-18}$ *c.g.s.* となる. この樣な値をもつ電子は我々が實際

普通に使用してゐるものである.

所で上の電子のエネルギーと同じエネルギーをもつ光の粒子の波長を計算すると, $h\nu=E=eP$ の關係から, $\lambda=\frac{ch}{eP}$ であるから, 300 エレクトロン・ボルトに對して, $\lambda=40\,\mathring{A}$ となる. 又上述の運動量に相當する値をもつ光粒子の波長を計算すると, $h\nu/c=p$ から $\lambda=h/p$ であるから, $\lambda=0{\cdot}65\,\mathring{A}$ となる. この様な波長の光はX-線の範圍に實在する程度のものである.

從つてこの様な波長の光を, 上述のエネルギー又は運動量をもつ電子にあてると云ふことが, 實際行はれ得るのであるが, 兩者のエネルギー, 運動量は對比出來る程度のものであるから, エネルギー, 運動量の保存の法則から考へて判る様に, 電子の位置を測定し樣として光をあてれば, 電子の速度は著しい攪亂を受けて, 測定前とは異なる値をもつ様になる. 卽ち測定の爲に電子の狀態は亂されるのである.

このことから, 電子の位置と運動量とを同時に測定することが不可能であることとなる.

從來の考へでは, 測定の爲に測定の對稱物の狀態が亂されるとは考へず, その狀態(ここでは電子の位置と運動量とを指す)が一義に定義されると考へてゐた. 實際若し電子の質量が假りに充分大きいとするならば, これに光の粒子が當つた爲の反作用を無視することが出來るから, その狀態

は亂されないと云へるけれども, 現今の測定ではこれが不可能になつたと考へねばならないのである. そこで

「粒子の狀態を一義に決定することが出來ない」

と云ふことを一般的の事實とするならば,

「實驗の結果は統計的の形で表はされる」

ことを豫期することが出來よう. 例へばAの球をBの球に衝突させることを考へるに, 昔の考へでは兩方の狀態がはつきり決まつてゐるからBの球のある部分にAの球を衝突させる様に, 實驗を案配することが出來, 從つていつも一定の方向に球AをBによつて反射させることが出來たが, 新しい考へでは, この様なことは不可能となる. 反射して來る球Aの方向は, 實驗の度毎に一般に一定しないであらう. 併しそれらの結果を統計的に云ひ表はすことは可能であるだらう. 前に述べたα-粒子を原子によつて分散させる實驗は, 正にこの事に相當してゐるのである.

玆に注意される事柄は, 昔の統計學, 例へば氣體の分子運動論で分子の數があまりに多すぎる爲に生じた統計學とは, その根本の據り所を異にしてゐる點である. 量子論では, 假令分子一つがあつたとしても, 尙その狀態が不決定であることに由來する確率の概念に分子は支配されてゐるのである.

狀態が不決定であることに伴ふ誤差を, 數量的に表はす關係を, ハイゼンベルク(Heisenberg)は次の如く表はした.

Δx, Δy, Δz, Δt を夫々空間の三つの方向及び時間の位置の誤差とし, Δp_x, Δp_y, Δp_z, ΔE を夫々上述の量に對應する方向の運動量, 及びエネルギーの誤差とするならば,

$$\Delta p_x \Delta x \geqq h,\ \Delta p_y \Delta y \geqq h,\ \Delta p_z \Delta z \geqq h,\ \Delta E \Delta t \geqq h \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (29)$$

であると假定する. これは極めて一般的な粒子の狀態に關する誤差の關係式であつて, **不確定原理の關係式**と呼ばれてゐる. これは勿論(一般に物理學の原理がさうである樣に)多くの事實から抽象せられた結果なのであつて, 若し粒子に關するある理論が立てられたとしたなら, それは少くとも上の關係式を滿足してゐなければならないのである.

この關係式は, 運動量と位置, エネルギーと時刻を同時に正確に決定出來ないことを意味し, 誤差をいくら小さくした所でこれらの積の値が精々プランクの常數 h の程度にまでしかなり得ないことを表はしてゐる.

例へば一つの粒子が長さ l なる立方體の箱の中にあることだけが判つてゐるなら, 粒子の位置の誤差は l であるから, その運動量の誤差は最も小さくても h/l の程度である. 言ひ換へれば, 粒子の運動量が 0 の値をとり得るとすれば, 粒子は 0 と h/l との間のいづれかの値を持つてゐることを意味する. 同樣のことが, エネルギーと時間とについても言はれる.

§11. 波動論 粒子について, 新たに確率波の概念が生じたことを述べた. それかと言つて §1 に述べた樣な言葉通りの波動論が無用になつたと言ふのではない.

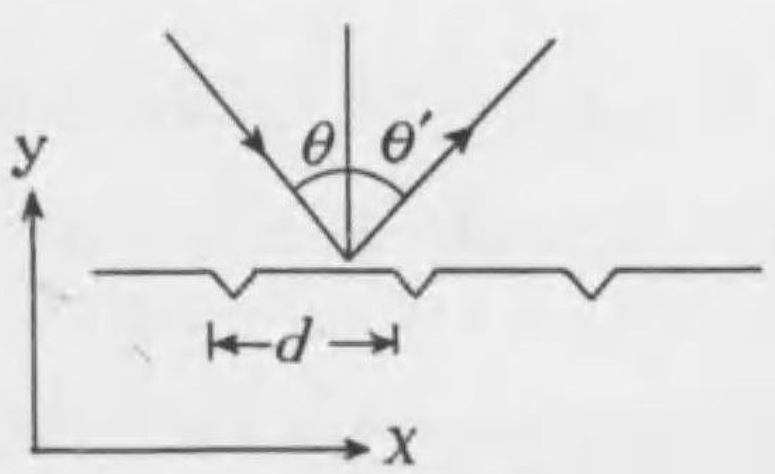
實際例へば光の場合に實在空間的の長さである波長を測定し得る. 例へば鏡の前に斜に鹽化銀コロヂゥムの膜を張り, 鏡の面に垂直に單色光をあてるならば, 投射波と反射波との干涉の極大の位置で, 鹽化銀コロヂゥムの膜が最もよく感光することから, この光の波長を測ることが出來る. 同樣に電子の廻折の實驗に於ける廻折の紋樣から, ブロイの波の波長を測定することが出來る. これらの現象を記述する事は, 波動の考へによつて最も簡單になしとげられる.

若しこの場合に昔からの粒子の考へを用ゐるならば, 超へ難い困難を生ずるのである. 考へを限定する爲に, 廻折格子で光が廻折する場合を考へてみよう. 光が粒子であるならば, 格子の一つの間隙だけにあたる時は, その他のすべての間隙には, 光は來ないこととなる. 扨てこの一つの間隙にあたつた粒子は, 格子を作る物質と作用してある方向に分散されるであらう. 昔の粒子の概念に從へば, この通りの實驗を幾度でも繰返すことが出來るから, この場合には假令いくら多くの粒子をあてたとしても, 實際觀測されてゐる樣な廻折の紋樣は得られないことになる.

併し若し新しい粒子の概念に從ふならば, 若し投射する光が一定の振動數で一定の方向に進むのであるなら, そのエネルギーと運動量とは一定してゐる. 從つて不確定原理によつて粒子の空間時間上の位置は全く不明であり, 格子

のきまつた部分に粒子をあてることが既に不可能となる．從つて多くの粒子をとるならば格子のどこの部分に衝突するかにより，分散される方向も唯一つにはならない．これが粒子と考へた場合にも，波動と考へた場合と同じ廻折の紋樣を生ずることの可能であることの解釋である．

この樣な考へが，すべての場合に可能なのであつて，ある現象の記述に粒子の概念（勿論新しい意味での）によらうが，波動の概念によらうが，全く同一であることを，現在の物理學は信じてゐるのである．多くの個々の例をあげて，ある現象がこの二つの形式で全く同じに説明されることを，ハイゼンベルクはその著書[1]で論じてゐる．玆では廻折格子によつて反射する光の方向を決める式を，粒子の考へから導くデュエン(Duane)の方法を幾分變更した形で述べるだけに止める．



第 1 圖

粒子が格子にあたると，小さいにはしても，格子は反作用をうける．故に一般に格子は動き得るとして，運動量に關する一つの關係を先づ求めてみる．格子の質量をMとし，その平面はx-軸に平行であるとし，面の法線方向をyとする(第1圖)．シュレーディンガー

(1) W. Heisenberg; Die physikalischen Prinzipien der Quantentheorie.

の式によれば，格子全部を一つの物體と考へて，その中心の座標をx, yとし $U=0$ と置けば，

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t}-\frac{h^2}{8\pi^2 M}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\right)=0$$

がなり立つ．この一つの特解は，

$$\psi=e^{-\frac{i2\pi}{h}(Et-P_x x-P_y y)}\qquad(29)$$

玆に $$E=\frac{1}{2M}(P_x^2+P_y^2)$$

である．所で格子の長さを充分長いと考へてその端の影響を無視すれば格子の常數dだけx-方向に移動したとしても，移動前の形と全く一致するから，ψはxについてdの周期をもつと考へられる．從つてnを整數とすれば

$$P_x=\frac{nh}{d}\qquad(30)$$

でなければならない．併しP_yは勝手な値をもち得る．後の數學的理論で更に論ずる樣に(又(29)の第二の式でEは初めからの考へに從つてエネルギーであることから推察される樣に) P_x, P_y は格子の x, y 方向の運動量の成分である．(30)はx-方向の運動量の成分が h/d の整數倍の値しかもち得ないことを示して居り，從つて格子の運動量に變化があるとしても，その變り高はやはり h/d の整數倍であることを示してゐる．

粒子が衝突する前の格子の運動量をP_x, P_y, 衝突後のものをP_x', P_y', 更に衝突前の粒子の運動量をp_x, p_y, 衝突後のものをp_x', p_y'とすれば，運動量保存の法則は，

$$P_x+p_x=P_x'+p_x',\quad P_y+p_y=P_y'+p_y' \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (31)$$

である．又衝突前の粒子のエネルギーをε,衝突後のものをε'とすれば，エネルギー保存の法則は，

$$\frac{1}{2M}(P_x^2+P_y^2)+\varepsilon=\frac{1}{2M}(P_x'^2+P_y'^2)+\varepsilon' \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (32)$$

である．又はMが充分大きいと假定出來るから，$\varepsilon=\varepsilon'$とすることが出來る．從つて光の場合にも，物質粒子の場合にも，$p_x^2+p_y^2=p_x'^2+p_y'^2(=p^2)$とすることが出來る．所で$P_x-P_x'=\dfrac{mh}{d}$ (mは整數) であるから，(31) の初めの式は

$$p_x'-p_x=\frac{mh}{d}$$

となり，これをpで割れば$p_x'/p=\sin\theta'$, $p_x/p=\sin\theta$ (圖を見よ) であり，一般に$h/p=\lambda$ (λは波長，(13), (14) 參照) であるから，波動論と同じ式

$$d(\sin\theta'-\sin\theta)=m\lambda \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (33)$$

により可能な反射角が決まり，光粒子はこれらのどの方向にも進み得るのである．

§12. 波動論から不確定關係式を導く　波動論でも粒子論でも事柄が同じであるならば，波動的記述から粒子の不確定關係式を導くことが出來るであらう．粒子の立場からこれを導くことは，後で述べることとする．

先づ光の場合を考へて，波動論から粒子が如何に言ひ表はされるかを吟味してみる．この爲には，

「空間的擴がりの充分小さい波の塊で粒子を代表させる」

のであるが，又光の粒子であるからその說に從へば

「振動數の意味を持つてるなければならない」．

先づ第二の制限を考へるに，粒子の擴がりをΔlの長さの程度とすれば，これが少くとも一波長を含まなければならないから

$$\Delta l \geqq \lambda \qquad \text{又は} \qquad \Delta l \geqq \frac{c}{\nu} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (34)$$

でなければならない．ここにλは光の波長，νは振動數とする．從つてこの波の塊りがある點を通過するに要する時間Δtも亦少くとも一週期τより大きくなければならない．

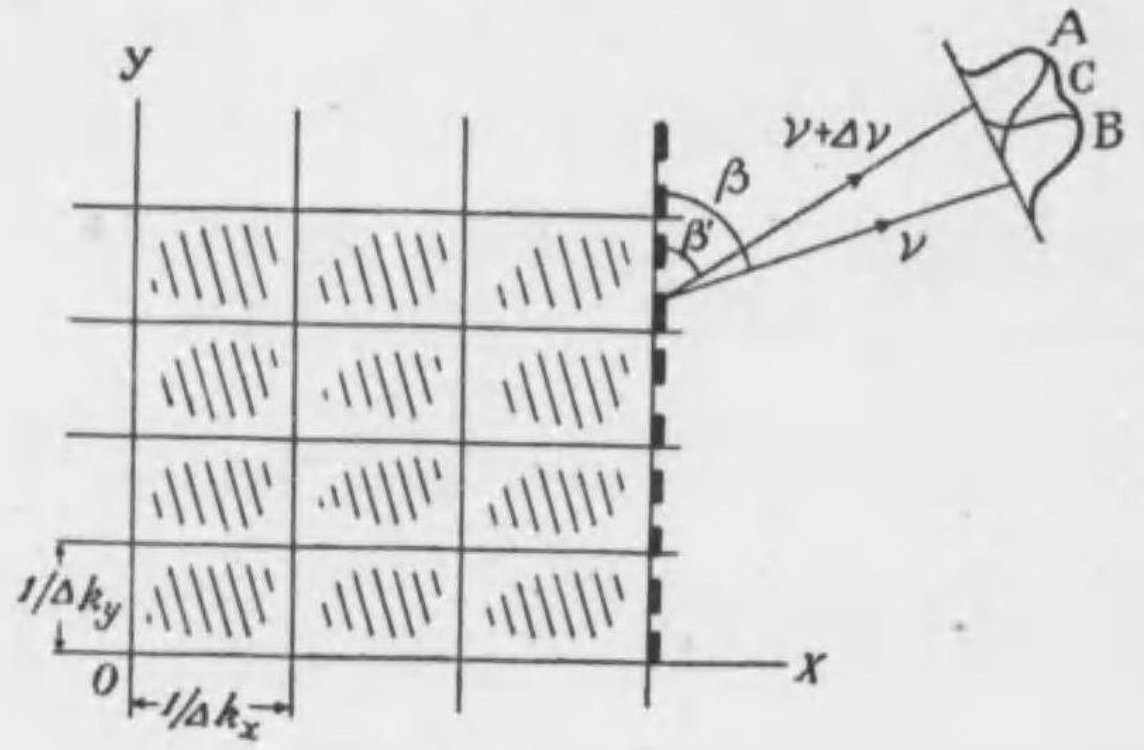
$$\Delta t \geqq \tau \qquad \text{又は} \qquad \Delta t \geqq \frac{1}{\nu} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (35)$$

Δl, Δtを充分小さくするには，振動數νの充分大きな光に於てのみ可能である．

次に第一の條件を表はす爲に，二つの正弦波を重ね合はせることにする．卽ち波數のベクトル$\mathfrak{k}$と$\mathfrak{k}'$の方向に進む二つの波をとり，これを加へれば，

$$\begin{aligned}\psi&=Ae^{-i2\pi(\nu t-k_x x-k_y y-k_z z)}\\&\quad+Ae^{-i2\pi(\nu' t-k_x' x-k_y' y-k_z' z)}\\&=2Ae^{-i\pi[(\nu+\nu')t-(k_x+k_x')x-(k_y+k_y')y-(k_z+k_z')z]}\\&\quad\times\cos\pi(\Delta\nu\cdot t-\Delta k_x\cdot x-\Delta k_y\cdot y-\Delta k_z\cdot z) \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (36)\end{aligned}$$

玆に$\Delta\nu=\nu'-\nu$, $\Delta k_x=k_x'-k_x$, $\Delta k_y=k_y'-k_y$, $\Delta k_z=k_z'-k_z$. 今簡單の爲x, yの平面を考へれば，ψはx-方向について$1/\Delta k_x$だけ隔たる毎に，又y-方向について$1/\Delta k_y$だけ隔たる毎に



第 2 圖

零となるから，第2圖で座標軸に平行な線で區切られた矩形內に波の塊があることとなり，この塊りはそれ自身更に振動的であつて，その振動數は(36)の初めの因數から判る樣に $(\nu+\nu')/2$ 卽ち ν と ν' との平均値である．これは音響學ならば唸りの現象に他ならない．三次元の場合には，

$$X=\frac{1}{\Delta k_x},\quad Y=\frac{1}{\Delta k_y},\quad Z=\frac{1}{\Delta k_z}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots(37)$$

の三つの邊をもつ直六面體の中に一つの波の塊りがあると考へられる．

次に時間的には $t=\frac{1}{\Delta\nu}$ の時間が經つと唸りの部分は元の値に戻るから，時間上の長さ

$$T=\frac{1}{\Delta\nu}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(38)$$

を持つと考へられる．

今 y-軸に平行に置いた格子によつて，波の塊りの振動數を分析するとする．塊りは ν と $\nu'=\nu+\Delta\nu$ との振動數の單振動平面波の重ね合せであるから，廻折の理論によつて y-軸と β, β' なる角の方向に干渉の極大の位置が出來るであらう(第2圖)．ν と ν' とがあまり値を異にしないならば，この極大の近くの二つの山の部分は一部分が重り合つて，ACBの如き形をとるから，二つの振動數を別々に分けることが出來ず，$\Delta\nu$ の程度の誤差を伴ふこととなる．同樣に傳播の方向も $\beta'-\beta$ の誤差を伴ひ，從つて $\frac{\cos\beta}{\lambda}=k_y$ もこれに對應して Δk_y の程度の誤差を伴ふこととなる．同樣のことが $\Delta k_z, \Delta k_x$ についても云はれる．

一方で(37), (38)の X, Y, Z, T は，波の塊りを粒子であるとすれば，この大きさの程度だけ粒子の空間及び時間上の位置が決定されないから，この値は夫々の誤差の程度であると考へられる．今一般の測定の誤差を $\Delta\nu, \Delta k_x, \ldots \Delta t, \Delta x, \ldots$ とすれば，これらは一般に上述の最小の誤差より大きいから，

$$\Delta k_x\Delta x\geqq 1,\ \Delta k_y\Delta y\geqq 1,\ \Delta k_z\Delta z\geqq 1,\ \Delta\nu\Delta t\geqq 1\ldots(39)$$

の關係がなり立つ．

この結果を粒子に特有な量で表はすのに，ν, k_x, k_y, k_z と E, p_x, p_y, p_z とを結びつける關係式(15)を用るれば，(39)は，

$$\Delta p_x\Delta x\geqq h,\ \Delta p_y\Delta y\geqq h,\ \Delta p_z\Delta z\geqq h,\ \Delta E\Delta t\geqq h\ldots(29)'$$

となり，(34), (35) は

$$\Delta l \geqq \frac{hc}{E}, \quad \Delta t \geqq \frac{h}{E} \qquad \cdots\cdots(40)$$

となる．

(40) は位置と時刻の決定に一定の限度があることを表はしてる，これが §9 の終りに述べた位置，時刻の正確な決定を不可能にする條件なのであつて，初めランドウ (Landau) とパイエルス (Peierls) とにより指摘された．

物質粒子についても (29)′ の關係が成立することは，物質粒子の觀測に光を使用することを考へれば，結局光の粒子と物質の粒子との衝突を考へることとなる事から明かである．卽ち光粒子には (29)′ の關係があるが，光粒子の位置，時刻の不正確さだけ衝突の位置，時刻が不正確であり，從つて物質粒子の位置，時刻もそれだけ不正確となる．一方でエネルギー，運動量の保存の法則から，衝突後の物質粒子のエネルギー，運動量は，(29)′ で與へられる光粒子のそれらの値だけ不正確となる．從つて物質粒子についても(29)′ の關係式が成立することとなる．

或は光について行つたと同樣に，物質についても物質波を假定すれば，直接波動の立場から不確定關係式が得られる．

物質粒子についても (40) の關係が成立するか否かについては，もう少し精しく調べてみなければならない．なぜな

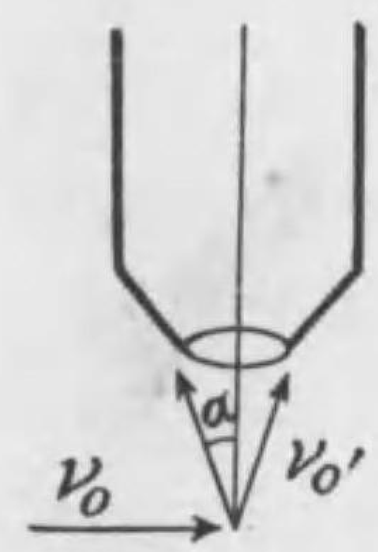
らば，若し (40) の式が成立すると考へても，エネルギーは一般に一定の附加常數だけ，その絕對値は決まらないから，エネルギー E に如何なる値をとつてよいかと云ふ點が決まらないのである．

§13. γ－線顯微鏡 そこで先づ物質粒子 (例へば電子) を光で照らして位置の測定を行ふことを考へてみるに位置の測定を正確に行ふのには，出來るだけ小さい波長の光を用ゐ，顯微鏡で位置の觀測を行へばよいであらう．この樣な實驗を理想的に行ふことは出來ないかも知れないが，原理的には許されると考へられる．

ν_0 の振動數をもつ光を粒子にあてて，投射光と直角方向に散亂されて來る光を顯微鏡の對物レンズに通す．散亂光の振動數を ν_0' 波長を λ_0' とする．後で更に精しく調べる樣に一般に ν_0 と ν_0' とは異なる．顯微鏡の理論によれば，粒子の位置の誤差 Δl は λ_0' が小さい程小さくなり，

$$\Delta l \geqq \lambda_0'/\sin\alpha \qquad \cdots\cdots(41)$$

で與へられる．玆に α はレンズが觀測する點に對する開きの角の半分である (第 3 圖)．先づこの場合不確定關係式の成り立つことを序に示す．

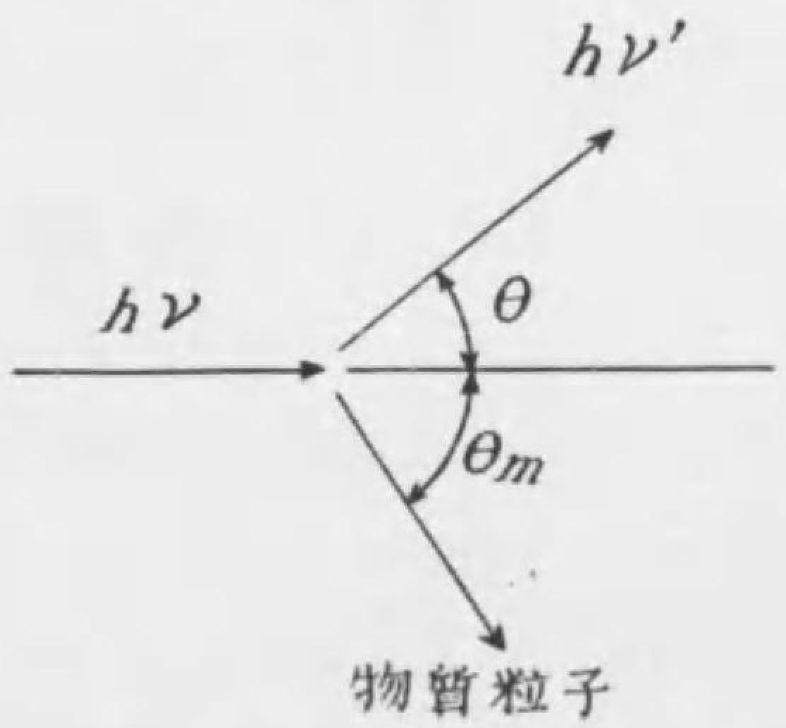


第 3 圖

分散されてレンズに達する光は 2α の角の中にあるから，投射光の方向の運動量 p は $\frac{h\nu_0'}{c}\sin\alpha$ だけの不決定を伴ひ，

衝突に於ける運動量保存の法則から，電子の同方向に於ける成分もこれだけの不決定を伴ふ．從つて $\Delta l \Delta p \geqq h$ の關係を得る．この様な考へ得られる多くの實驗や又前の節に述べた波動論から考へても，いつも不確定關係式が成立することを，ハイゼンベルグは前にあげた著書で論じ，不確定原理を立てたのである．

扨て上の實驗に於ける數量的關係を更に精しく調べてみよう．一般に物質粒子は光をあてる前に v の速度をもつてゐるとし，光粒子との衝突問題を，相對論の補正を加へて吟味する．計算を簡單にする爲に，物質粒子に結びついた座標系で先づ計算するとすれば，物質粒子はこの系では初め靜止してゐると考へることが出來る．この計算の後で，ローレンツ轉換を行ひ，物質粒子が初めに v の速度を觀測者に對して持つ樣にする．



第 4 圖

從つて先づ初め靜止してゐる質量 m_0 の粒子に，$h\nu$ の光粒子があたり，θ の方向に $h\nu'$ の光の粒子となつて分散され，一方物質粒子は θ_m の方向に反撥されると云ふ問題を先づ解くこととなる．この樣な計算はコンプトンが所謂コンプトン效果(§2)を發見

する時に行つた計算に他ならないのである．エネルギー保存の法則から，

$$m_0c^2+h\nu=h\nu'+\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta'^2}},\quad \left(\beta'=\frac{v'}{c}\right)$$

を得る．v' は衝突後の物質粒子の速度である．又運動量保存の法則から，

$$\frac{h\nu}{c}=\frac{h\nu'}{c}\cos\theta+\frac{m_0v'}{\sqrt{1-\beta'^2}}\cos\theta_m,$$

$$\frac{h\nu'}{c}\sin\theta=\frac{m_0v'}{\sqrt{1-\beta'^2}}\sin\theta_m$$

が成り立つ．上の三つの式から，v', θ_m を消去すれば，ν' と ν, θ との間の關係を求めることが出來，

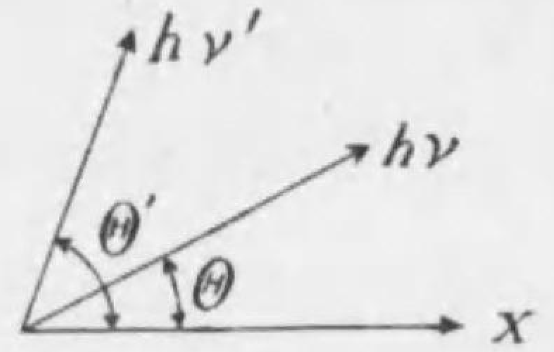
$$\nu'=\frac{\nu}{1+\frac{h\nu}{c^2m_0}(1-\cos\theta)} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots(42)$$

となる．即ち分散される光の振動數は方向によつて異なる．物質粒子の初めの速度は考へなくてよい時には，分散光の波長の變化は，

$$\Delta\lambda=\lambda'-\lambda=\frac{c}{\nu'}-\frac{c}{\nu}=\frac{h}{m_0c}(1-\cos\theta)=\frac{2h}{m_0c}\sin^2\frac{\theta}{2}\ldots(43)$$

であつて，物質粒子が電子のときコンプトンの實驗によりこの關係は確められてゐる．

扨て初めの問題に歸り，物質粒子に結びついた座標系と觀測系との x-軸の方向を同じにとり，觀測系に對して粒子は x-軸の方向に v の速度で動くとする．更に粒子の座標系で投射光 $h\nu$ は x-軸に對し θ，分散光 $h\nu'$ は同じく



第　5　圖

Θ'の角度の方向をとるとする．觀測系に於ける値に接尾字0をつけることにすれば，相對論に從ふと

$$\cos\Theta=\frac{\cos\Theta_0-\beta}{1-\beta\cos\Theta_0},\quad \sin\Theta=\frac{\sin\Theta_0\sqrt{1-\beta^2}}{1-\beta\cos\Theta_0}$$

更に，

$$\nu=\nu_0\frac{1-\beta\cos\Theta_0}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

の關係がある．玆に $\beta=v/c$. 同樣の關係が Θ', Θ_0', ν', ν_0' についてなり立つ．

從つて (42) を

$$\nu_0'=\nu_0\frac{1-\beta\cos\Theta_0}{1-\beta\cos\Theta_0'}\frac{1}{1+\frac{h\nu_0}{c^2m_0}\frac{1-\beta\cos\Theta_0}{\sqrt{1-\beta^2}}(1-\cos\theta)} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (44)$$

と書くことが出來る．この式の θ は，$\theta=\Theta'-\Theta$ であるから，Θ_0, Θ_0' で書き表はすことが出來るが，今そこまでの必要はないから，このままにして置く．上の式から，ν_0' が最大の値をとるのは，各方向について $\nu_0\to\infty$ のときで，このときは

$$\nu_0'=\frac{1}{(1-\beta\cos\Theta_0')(1-\cos\theta)}\frac{c^2m_0}{h}\sqrt{1-\beta^2}\cdots\cdots\cdots (45)$$

となる．卽ち投射光の振動數が無限大であつても，分散光の振動數は一般に有限である．

そこで (41) によれば，上の樣な場合が物質粒子の位置を

最も正確に定め得る場合となり，觀測裝置の關係から θ の値の小さい方向は不便である故に，θ の値の比較的大きい方向をとるとすれば，$1-\cos\theta$ は有限であり，$1-\beta\cos\Theta_0'\approx1-\beta$ と考へられるから，

$$\frac{\sqrt{1-\beta^2}}{1-\beta}=\frac{1+\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}\approx\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

として，

$$\nu_0'\approx\frac{c^2m_0}{h\sqrt{1-\beta^2}}$$

となる．從つて (41) により，位置の測定の可能な最小の誤差は，

$$\Delta l\approx\frac{h}{m_0c}\sqrt{1-\beta^2}=\frac{hc}{E}=\frac{v}{c}\lambda_m \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (40)'$$

となる．玆に E は電子のエネルギー，λ_m はそれに相當するブロイの波の波長である．

更に光がある點を通過するに要する最小の時間は (35) により，$\Delta t\geqq\frac{1}{\nu_0'}$ であり，衝突の起つた時刻も最小に於てこれだけ不決定となる．上に導いた ν_0' の値を入れれば，

$$\Delta t\approx\frac{h}{m_0c^2}\sqrt{1-\beta^2}=\frac{h}{E} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (40)''$$

となる．(40)′, (40)″ は (40) と全く同じ形である．

併しこの關係は現在までの物質粒子の量子力學の數學的理論には未だ入つてゐないことを注意して置く．

§14.　最小誤差の簡單な推定法　(40) と (40)′, (40)″ とが同じ形であるから，一方から他方を導く簡單な考へ方があ

りさうに思へる．最近の事實によると，電子と同じ質量をもち，電荷も同じ絶對値をもつがその符號が正である所謂陽電子 (positron) が發見せられた．この陽電子は大きなエネルギーをもつ一種の粒子線 (cosmic ray) によつて，電子と共に生成されることも判つてゐる．今この樣な粒子線に振動數の大きい光の粒子があり，これが變化して物質粒子を作ると考へれば，初めに電荷は無いのであるから，電子と陽電子とが生成されねばならない．そこで光の粒子の位置，時刻の最小誤差は，(40) であるから，この樣にして物質粒子が生成される範圍も同程度の不正確さを伴ふわけである．一方で光のエネルギーが全部物質粒子のエネルギーに變化したとすれば，(40) の E は，物質粒子が得たエネルギーの程度であると云ふことが出來，從つて (40)′, (40)″ の關係式が得られることとなる．

上の觀察は光のエネルギーと物質のエネルギーが互に移り換り得ると云ふこと，更に m_3c^2 なる物質のエネルギーがこの變換に與ると云ふことを基礎にしてゐる．卽ちこの考へに從へば**物質は生滅する**こととなるが，近頃の事實からは，このことは正しい樣に思はれる．

§15. 量子的波動論 今迄波動論と言つた時に，その基礎の方程式が何であるかには言ひ及ぼさず，單に性質的にそれを考へただけであつた．

光については，マックスエルの方程式を採用するのが，

先づ自然の考へ方である．又物質については，電子の廻折の有樣がブロイの波動で說明される故に，相對論を考へに入れない時は，唯一つの粒子のシュレーディンガーの式

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t}-\frac{h^2}{8\pi^2 m_3}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+U\psi=0$$

をそのまま波動論の式とすべきであると考へられる．但しこの式に於ては，m_3 はマックスエルの式の中の光速度 c の樣に，波動論の方程式に入つてゐる單なる常數と考ふべきであり，若し電子だけとするなら m_3 を電子の質量と同じ値の常數と考へて置くのである．更に U については，一つの電子に外から作用する力のポテンシャル-エネルギー (粒子論的にはこの樣に考へてゐたのである) とすべきではなくて，空間の各部分の**物質波**の互の作用に由來するものと考へるべきである．

一方で我々の一般的な立場から云へば，波動論と粒子論とは全く同價のものでなければならないから，波動論の基礎方程式は適當な數學的轉換によつて，粒子論の方程式にならねばならないと考へられる．

併し上の樣な波動論の基礎方程式を嚴密に正しいとすると，この樣な數學的關係を粒子論との間に立てることが出來ない事が判つて來，上の樣な基礎方程式は尙量子論的でない近似的理論であると云ふ考へに傾いて來たのである．

量子的な波動論は，質點の場合に不確定關係があると同

様に，場の量の間に一種の不確定關係を顧慮することによつて可能となつて來た．光の場の例をとるに，$\mathfrak{E}_x$, $\mathfrak{E}_y$, $\mathfrak{E}_z$, $\mathfrak{H}_x$, $\mathfrak{H}_y$, $\mathfrak{H}_z$ を，觀測で問題になる電場，磁場の强さの x, y, z 方向の成分とし，$\mathfrak{E}(\mathrm{I})$, $\mathfrak{E}(\mathrm{II})$ 等で，時間空間の座標 t_{I}, x_{I}, y_{I}, z_{I}; t_{II}, x_{II}, y_{II}, z_{II}, の點に於ける $\mathfrak{E}$ の値とするならば，

$$\varDelta\mathfrak{E}_x(\mathrm{I})\,\varDelta\mathfrak{E}_x(\mathrm{II}) \geqq hA_{xx}(\mathrm{I},\mathrm{II}), \quad \varDelta\mathfrak{E}_x(\mathrm{I})\,\varDelta\mathfrak{E}_y(\mathrm{II}) \geqq hA_{xy}(\mathrm{I},\mathrm{II}) \qquad \cdots\cdots (46)_1$$

及び $\mathfrak{E}$ を $\mathfrak{H}$ で置きかへた式，更に

$$\varDelta\mathfrak{E}_x(\mathrm{I})\,\varDelta\mathfrak{H}_x(\mathrm{II}) = 0, \quad \varDelta\mathfrak{E}_x(\mathrm{I})\,\varDelta\mathfrak{H}_y(\mathrm{II}) \geqq hB_{xy}(\mathrm{I},\mathrm{II}) \ldots (46)_2$$

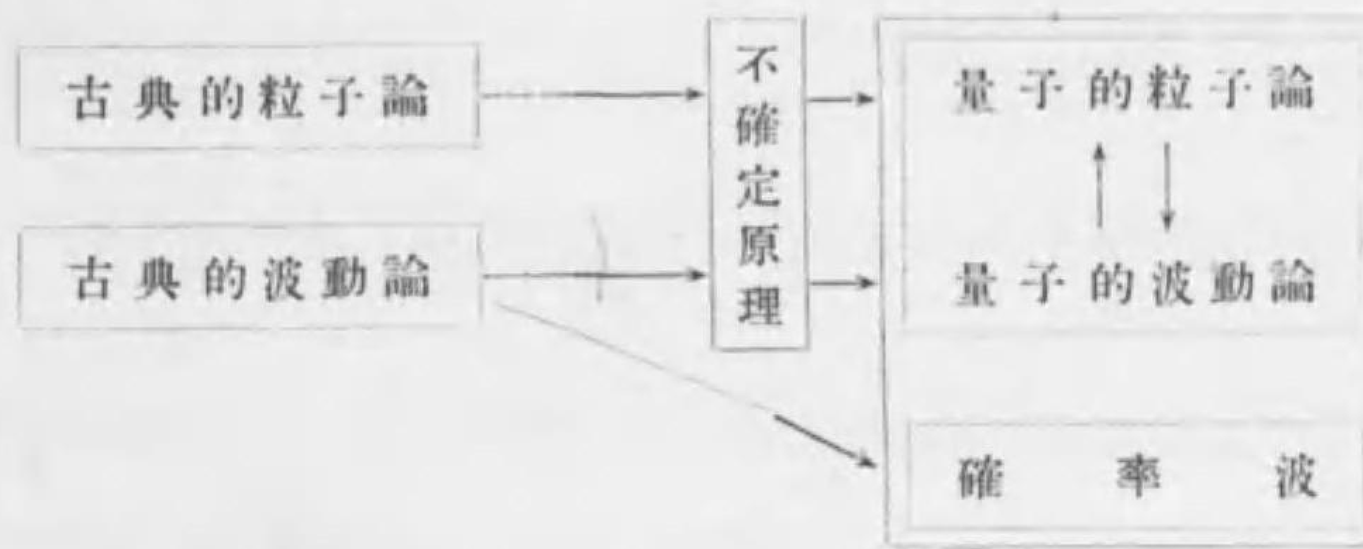
及び以上の式で x, y, z を順環變化した式で，誤差の關係(不確定關係)が與へられる.(1) 玆に $A_{xx}(\mathrm{I},\mathrm{II})$, $B_{xy}(\mathrm{I},\mathrm{II})$ は時間空間の上述の二點の函數で，記號 A で表はされるものは，二つの點の時間が一致すれば 0 になり，B で表はされるものは空間點が一致すれば 0 になる如き性質のものである．從つて例へば $(46)_1$ の第一の式から判る樣に，$\mathfrak{E}_x(\mathrm{I})$ と $\mathfrak{E}_x(\mathrm{II})$ とは一般に共々に正確には決定されないが，時間が一致した時だけ正確に決定される．從つて粒子の位置がある確率を以て表はされる樣に，場の量 $\mathfrak{E}$, $\mathfrak{H}$ の値もある確率を以て表はされることとなるのである．

物質波の場の量 ψ についても一種の不確定關係式があるが，これらの理論を正しく述べるには尙多くの準備を必要

(1) N. Bohr u. L. Rosenfeld: Det Kgl. Danske Videnskabernes Selskab. Math-fysiske Med. XII, 8. (1933)

とするので，現在達した結果を述べるに止めて置く．とにかく，この種の不確定關係を顧慮した數學的の理論では，波動論も粒子論もその內容が全く同一のものであることが判り，初めに述べた波動方程式は近似的なものであつて，場の量の誤差が $(46)_1$, $(46)_2$ の式の右邊の量にくらべて充分大きくて，右邊を省略してよい場合になり立つ近似的理論の式なのである．

§16. 今までの考への概括　終りに今迄の概念の發展の順序を表にしてまとめて置く．



上の表は，互に獨立な古典的粒子論，古典的波動論へ，不確定原理を加へることによつて，互に相通ずる獨立でない量子的粒子論，量子的波動論が生ずることを示し，更に一見古典的波動論に屬すと思はれた部分から，全く新しい概念の確率波が生れ，量子的理論は，この確率の概念を含んでゐるものであることを示す．

斯くして，不確定原理は古典的概念を修飾する最も根本的な概念であると云ふことが出來る．同時に正確に決定す

ることの出來ない量，例へば位置と運動量の如きを，互に補足性 (complementary) であると云ふ．量子論は補足性の理論であると云へる．

§17.　因果律　この問題は幾分形而上學的のものであり，著者は何等かの決定的意見を述べる充分の智識をもつてゐないことを遺憾とする．玆には新しい量子論の概念と共に因果律も亦新しく問題となつてゐることを簡單にのべるだけである．

「現在に於ける狀態から未來に於ける或る出來事を正確に豫知することが出來るとき，この出來事は因果的であると云ふ」．

因果律が自然界に必然的に成立してゐると云ふ何の論理的證明があるわけではない．例へばプランクによれば，「自分は，選擇の自由を許されるなら，不決定論より決定論を採るべきだと思ふ．なぜなら曖昧な解答よりは確定した解答の方が**好ましい**からである」[1] 玆に決定論とは，因果的の主張を指してゐるのである．又次の樣にも云つてゐる．「智識慾を充分滿足する唯一の法則は，嚴密に力學的 (決定論的) でなければならない．統計的法則は根本的に不滿足である．その理由は極めて簡單であつて，統計的法則は絕對性がなく，場合によつて例外を許すからである」[2]

(1), (2) プランク著: The Universe in the Light of Modern Physics (1931), 42頁, 82頁. これは同著者の Das Weltbild der neuen Physik, 及び Physikalische Gesetzlichkeit in neuerer Forschung を一まとめにしたものである.

併し物體の狀態を時間空間的に記述する立場からみると原子的の長さの範圍內では因果律は成立してゐない．不確定原理によつて，粒子又は波動の時間空間に於ける狀態は確率的に決まるだけであり，從つて將來の豫言も確率的に行はれるだけであり，そこには例外を許してゐるからである．

我々の觀測は，時間空間に於て行はれるものであること，更に不確定原理が成立してゐることを率直に受け入れて，不決定論を主張する人も，從つてまた存在する．[1]

更に他の考へ方がある．卽ち今暫く自然現象を時間空間的に記述することを離れて，量子論に於ける數學的形式だけを考へてみる．(この形式は後で精しく述べるのであるが) 例へばシュレーディンガーの式の ψ を單なる數學的の記號 (symbol) と考へる如きで，この數學的形式では，すべての量が完全に時間に對して因果的に結びつけられてゐて，初めの時刻に於ける値によつて，後の時刻に於ける値は完全に決定される．

そこでこの形式で得られた結果を我々の觀測が直接關係するところの時間空間に於ける値として解釋するには，ψ に確率的の概念を與へること，卽ち確率の概念の仲介を必要とするのであるが，この時には最早因果的關係は成立し

(1) 例へばシュレーディンガー著: Über Indeterminismus in der Physik. Ist die Naturwissenschaft milieubedingt. (1932)

ないこととなる．まとめて言へば，因果律は時間空間的記述でない抽象的な數學的形式では成立するが，時間空間的記述では成立しなくなる．この關係をボーア (Bohr) は，時間空間的記述と因果律との補足關係と呼んでゐる．

このボーアの批判は現在あるがままの理論の事實を率直に言ひ表はしたのであるが，認識論的には，これだけで滿足であるとは言へないであらう．例へば，一體，抽象的な數學形式とは我々にとつて何を意味してゐるのだらうかとの如き疑問である．これに對する滿足な解答を著者は與へることは出來ないけれども，一つの立場を述べれば次の如くである．

特にプランクが主張する樣に，物理學の進歩は感覺世界の離脱の方向に進んでゐるのが常であつて，例へば明暗色彩の感覺から出發した光學は，電磁場の振動なる抽象的世界にその決勝點を見出したし，第二種の永久運動が不可能と云ふ感覺世界から，エントロピーに依つて記述される抽象世界に達してゐる．新しい量子論では，時間空間は未だ感覺世界であり，數學的形式が抽象世界であると考へることが出來るであらう．

玆に我々は，恐らく永久に，感覺世界を完全に棄て去ることの出來ないことにも，注意すべきである．物理學に於ては，抽象世界の記號が感覺世界に如何に關聯してゐるかを探索し得て，初めて物理學を理解したと言ひ得る．例へば光學では電磁波の振動數とスペクトル上の色との對應關係を立てて置く如きであつて，量子論に於けるこの對應關係は，數學的形式と時間空間的記述との間にあり，その連鎖として確率の概念が存在する．即ち光學では色が，量子論では時間空間が感覺的のものであり，これに對應して光學の振動數，量子論の數學的形式があると考へられる．

後に述べる樣に，量子論の數學的形式では，物理的量，例へば運動量，エネルギー等は，今迄物理學に無かつた概念（例へば運算子）で表はされ，この樣な抽象的な表はし方は，光に於ける電磁的振動の概念と較べると，餘程判りにくいと考へられるであらう．若しこの理由を求めるならば，光の電磁的振動は第一に靜電磁氣學等に於ける電磁力の概念の延長であり，第二にそれが水面上の波，質點の振動等日常目に見える振動現象の延長であり，第三にそれは尙完全に時間空間的記述になつてゐ，第四に旣に長い間光の電磁的振動の考へに馴らされてゐるのに，量子論に於ける數學的形式は遙かに高い程度の抽象性を帶びてゐる爲であるのだらう．

以上の樣な考へによつて，眞の物理的世界を數學的形式の世界にとるならば，眞の世界に於ては因果的關係は成立してゐることになる．感覺的な時間空間は，云はば彎曲した鏡の如きものであつて，この鏡に寫つた像は不確定的に見えるのである．

茲に抽象世界を眞の世界と考へる事に關する一つの比喩を更につけ加へて置かう．ポアンカレーの比喩に從つて平面内に住む生物を假想しこの生物が，我々の三次元空間にある有限の長さの柱形の物體の高さと切斷面を觀測することを考へてみる．平面内の生物にとつては，この立體的のものは感覺を超へたものであるだらう．切斷面を觀測するには切斷面が平面に正射影を投げる時に於て可能であるだらう．併しこの時には高さの觀測は全く失はれるであらう．逆に物體の高さが平面に平行になつた時には，切斷面の觀測は全く失はれるであらう．この生物にとつては，切斷面と高さとの觀測が同時に行はれない事，宛かも我々の不確定關係の如くである．併しこの生物はその觀測の結果を合理的に表はすのに，彼にとつては感覺の世界を超越した三次元の抽象的な表はし方によつて，理論を構成することが出來，この抽象的なものを眞の世界と考へたであらうかも知れない．

著者はもはや物理學徒として言ひ得る事柄の境を少し越えた樣である．茲にはこれらの問題に對する二三の人の言葉を引いてこの節を終らうと思ふ．

ジーンスは次の樣に言ふ．[1]「時間空間は自然全體を表はすのには，不充分な枠形であり，感覺的印象の枠形として適當してゐるに過ぎず，實際この目的の爲に初めこれは作ら

(1) ジーンス: The New Background of Science (1933) 260 頁

れた．時間空間は，深き流れの表面の如く，自然の一種の皮相と想像されよう．我々の感覺に作用する出來事は，この流れの表面の漣の樣なもので，その源となる實體は流れの底深くに根を下してゐる．煉瓦が三次元的であると云ふのは，三次元空間で感覺によつてそれに接觸することが出來ることを意味してゐるに過ぎない．漣は三次元空間に於て煉瓦から我々に來る．併しこれが煉瓦の眞の存在を三次元空間に限ると云ふことにはならない．

二つの漣が全く相似に現はれても，流れの深みに於ける異なる原因から起されてゐるのだかも知れない……時間空間の皮相現象が決定論的でないとしても，これから直ちに眞の客觀的自然が決定論的か又はさうでないかとの問に答へることは出來ない．……感覺を超えた對象を時間空間で表はすとき，決定論が見かけ上失はれるのは，眞の自然世界をあまりに狹い枠形に押し込め樣とする爲である」

アインスタインは次の樣に言つたさうである．[1]「不決定論は全く非論理的概念である．放射能原子の平均生命がこれこれだと云ふなら，それは確かに或る法則性を表はしては居るが，これは平均性法則と云はるべきもので，因果的特色をもつとは言ひ難い……アリストテレス及びその學派の人が，原因とは何を意味するかを考へた時には，理學的意味の客觀的實驗の思想が未だ起つてゐなかつた爲，形而上

(1) 前出ジーンスの著書 228頁

學的概念に滿足してゐたのである．カントに於ても同樣である．ニュートン自身はこの前理學的時代の形式は物理學には不充分であることを感じてゐたらしい……一つの事件が他の事件の原因であると言ふ時には，今日考へられてゐるより更に嚴格な緊密な法則で自然の現象が支配されてゐることを意味するのであると信ずる．今日の概念は，一つの時間的斷面内の出來事に限られてゐ，因果律を應用する現在の方法は全く皮相的である．我々は詩を韻だけから見てゐる小兒の樣なもので，全體的諧調を知らないでゐる．……量子物理學は非常に複雜の作用を提供したが，これに適應する爲には因果律の概念を擴張し精錬しなければならない」

第三章

數學的理論の基礎概念

§18.　數學的理論の展望　これから主として質點量子力學の數學的形式を述べる．數學的形式が時間空間的記述に直接關聯してゐないと云ふ前節の說明から豫測される樣に，古典的理論にのみなれた者には，初め極めて近づきにくいものとなるのは止むを得ない．

先づ次の注意を述べて置く．量子力學の根本的根據と思はれる不確定關係に從ふ理論は，必ずこれこれの形式でなければならないと云ふ樣に，理論を進めて行くことは，現在の所不可能である．不可能と云ふよりは寧ろ條件が尙不充分と云ふべきであつて，尙多くの新しい力學的概念を必要とする．この講述では，先づこれらの力學的概念を說明し，よつて理論の形式を立て，この形式に實際不確定原理が含まれてゐることを示すと云ふ順序をとることにする．

所で近づき難いものは，これらの新概念なのである．歷史的に見れば，これらの概念は必然の運命によつて徐々に，又は飛躍的に現はれて來たが，古典力學からボーアの量子論を經て遂に新概念に達したその長い歷史的經路を說明してゐることは出來ない．これらの經路は，新概念を近づき

易いものとする手段にはなるが，一度新概念が定義されてしまへば，結局は不必要なものとして棄て去つて差支ないから玆では幾分公理的立場から，初めから必要な概念を一つ一つ擧げて行くこととする．勿論著者はこの叙述の形式がすべての場合に一番よいと信じてゐるのではなく，手取り早く數學的形式を知らうとする者の便宜の爲に他ならない．

§19.　波動函數の意味　シュレーディンガーの式の ψ は實在空間の波動ではないが，初めこの様な波動ではないかと想像されたので，やはり波動函數と云ふことがある．これが確率波であることは旣に說明したが，玆に順序としてもう一度これに關聯した二三の數式を擧げて置く．

先づ確率の概念を正確に形式立てて置けば次の如くである．

$$\int\cdots\int\psi^*\psi\,dx_1dy_1\ldots dz_N=1 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (47)$$

なる時は，

$$\psi^*\psi\,dx_1dy_1\ldots dz_N(=\rho dx_1dy_1\ldots dz_N\text{と置く})\cdots\cdots (48)$$

は時刻 t に n 番目の粒子が x_n, y_n, z_n と x_n+dx_n, y_n+dy_n, z_n+dz_n(他の粒子についても同様)との間に在る確率を與へる」．

(47) の積分は變數のすべての變域に積分するのであつて，一般に各變數について $-\infty$ から $+\infty$ まで積分する．これが 1 の値をとることは，(48) の確率の和が 1 になることを示してゐる．シュレーディンガーの式の或る解があつた時にはこれへ任意の常數の因數を掛けても解であることに變りはないから，この因數を適當にとれば (47) の條件に合はせることが出來る．

場合によつては，(47)の積分の値が有限でない事(勿論(48)は物理的意味から有限であることを要求する)が起る．例へば自由な運動をする一つの質點をとれば，シュレーディンガーの式は，$U=0$ として

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t}+\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)=0 \quad\cdots\cdots (49)$$

であり，この一つの解は

$$\psi=Ce^{-\frac{i2\pi}{h}(Et-p_xx-p_yy-p_zz)}\cdots\cdots\cdots\cdots (50)$$

$$\left(E=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)\right)$$

であつて，この解では (47) の條件は滿足されない．

併しこれは物理的問題をとく爲の一つの數學的な近似方法であると解釋出來る．なぜならば數學に於ける $-\infty$ から $+\infty$ に亘る無限に廣い空間內で自由に運動する粒子は，物理的には實在しないと考へられ，假令視野の範圍では外力の作用がないと考へられても，數學的な無限大を考へれば何等かの外力が入つて來ると考へられるからである．從つて上の樣な方程式は，外力がないと考へられる我々の視野の中に於ける事柄を數學的に云ひ表はす方法であると考へられる．故に物理的には (47) が嚴密に行はれるが，上の樣

な近似的意味では單に

「$\psi^*\psi$ が粒子が $x_1, y_1, \ldots z_N$ の異なる値に對する確率の比(**比確率**)を表はす」

との事だけを示す．玆に $\psi^*\psi\, dx_1 \ldots dz_N$ をとらないで $\psi^*\psi$ をとることが出來ることに注意すべきであつて，比確率であるから體積素片 $dx_1 \ldots dz_N$ は一定と考へて，單に $\psi^*\psi$ をとるのである．例へば直角座標軸でない時の體積素片を考へてみるがよい．(50) では $\psi^*\psi=|C|^2$ で，空間の到る處で一定であるから，比確率は一定であり，從つて粒子が空間の何處にあることも同じ確らしさを持つてゐる．言ひ換へれば粒子の位置は全然不定なのである．

(48) を $x_2, y_2, \ldots z_N$ で積分した値を $\rho_1\, dx_1\, dy_1\, dz_1$ と置けば，

$$\rho_1=\int \ldots \int \psi^*\psi dx_2 dy_2 \ldots dz_N \qquad \text{(51)}$$

$\rho_1 dx_1 dy_1 dz_1$ は，粒子 1 が x_1, y_1, z_1 と $x_1+dx_1,\ y_1+dy_1,\ z_1+dz_1$ との間に在り，他の粒子は全空間のどこかに在る確率を表はしてゐる．

時間の初めに一つの粒子が存在することを認めたとすれば，物質不滅の考へにより(玆では物質が光になることは考へない．(§ **14** 參照)若しこれが不能なときは，物質と光とを同時にとり入れた理論が必要である)，後の時刻にも空間のどこかに粒子が存在する筈であり，$\iiint \psi^*\psi dx\, dy\, dz=1$ はこのことを意味してゐると云へる．粒子の數が多い時も同樣である．從つてこの關係は，時間に無關係でなければな

らないが，實際そうなつてゐる．卽ち

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t}=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

へ，シュレーディンガーの式

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{h}{2\pi i}\sum_n\frac{1}{2m_n}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x_n{}^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y_n{}^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z_n{}^2}\right)-\frac{2\pi i}{h}U\psi$$

及びこれの共軛複素數の式

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=\frac{h}{2\pi i}\sum_n\frac{1}{2m_n}\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x_n{}^2}+\frac{\partial^2\psi^*}{\partial y_n{}^2}+\frac{\partial^2\psi^*}{\partial z_n{}^2}\right)+\frac{2\pi i}{h}U\psi^*$$

を代入すれば，

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{h}{2\pi i}\sum_n\frac{1}{2m_n}\left\{\frac{\partial}{\partial x_n}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x_n}\psi-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x_n}\right)+\cdots\cdots\cdots\right\} \qquad \text{(52)}$$

を得る．玆に …… は初めの項の x_n の代りに y_n, z_n をとつた二つの項を意味する．上の式を $x_1, y_1, \ldots, z_N$ で積分すれば，右邊は 0 となる．

例へば，

$$\int\cdots\int\frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x_1}\psi-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x_1}\right)dx_1dy_1\ldots dz_N$$

$$=\int\cdots\int\left[\frac{\partial\psi^*}{\partial x_1}\psi-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x_1}\right]_{x_1=-\infty}^{x_1=+\infty}dy_1dz_1\ldots\ldots dz_N$$

となり，$\int\cdots\int\psi^*\psi dx_1\ldots dz_N$ が有限であるから ψ は無限遠方で 0 にならねばならず，從つて上の式の値は 0 となる．故に $\frac{\partial}{\partial t}\int\cdots\int\rho dx_1dy_1\ldots dz_N=0$ であり，從つてこの式の積分の部分は時間に無關係な常數であるから，時間の初めに常數を 1 にして置けば常に 1 の値をもつてゐる．

$\int\cdots\int\psi^*\psi\, dx_1dy_1\ldots dz_N$ が時間にかかわらず一定であるから，

$3N$-次元の空間の一部分に於ける確率の時間上の變化は，他の部分に於けるこれに相當する變化を起す．シュレーディンガーの式によつて，ψ は空間的に連續に變化するから，一部分に於ける微小時間の確率の變化はそれに隣つた部分の確率の變化を伴ふ．故に例へば粒子 1 をとれば，その確率の分布の場に對して，流體に於ける物質の流れの密度の様に，確率の移動を表はす**確率の流れの密度**を想像することが出來る．確率の流れの密度とは，確率の流れの方向に垂直な單位面積を單位時間に通過する確率の分量を大きさとし，流れの方向に向きをもつたヹクトルのことである．

今このヹクトル i_1 の x, y, z 方向の成分を i_{1x}, i_{1y}, i_{1z} とすれば，確率の移動(流れ)の連續性から，連續の方程式

$$\frac{\partial\rho_1}{\partial t}+\frac{\partial i_{1x}}{\partial x_1}+\frac{\partial i_{1y}}{\partial y_1}+\frac{\partial i_{1z}}{\partial z_1}=0 \qquad (53)$$

がなりたたなければならない．シュレーディンガーの式を基礎にするならば，

$$\left.\begin{aligned}
i_{1x}&=-\frac{h}{4\pi m_1 i}\int\cdots\int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x_1}\psi-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x_1}\right)dx_2dy_2\ldots dz_N,\\
i_{1y}&=-\frac{h}{4\pi m_1 i}\int\cdots\int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial y_1}\psi-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial y_1}\right)dx_2dy_2\ldots dz_N,\\
i_{1z}&=-\frac{h}{4\pi m_1 i}\int\cdots\int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial z_1}\psi-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial z_1}\right)dx_2dy_2\ldots dz_N,
\end{aligned}\right\}(54)$$

であることが判る．實際 (52) を $x_2, y_2, \ldots z_N$ で積分するなら，i_{1x}, i_{1y}, i_{1z} を上の如くとることにより (53) が成立することとなる．

以上の如くシュレーディンガーの理論では，確率は連續方程式に從ふから，その確率の概念は云はば近接作用的であるが，確率の概念そのものは，我々の單なる知識であるから遠達作用的であつても差支ない．例へば §8, §9 で述べた様に，擴がつた確率の波も，若し粒子がある點に存在することが確認された瞬間には，この確認すると云ふ作用によつて遠方の確率波も瞬間的に消失する如きである．併しこれはシュレーディンガーの理論と矛盾してゐると云ふのではなく，シュレーディンガーの式は，觀測を行はないで粒子の位置が如何樣になつてゐるかの我々の豫測を表はしてゐるものだからである．

扨て初めに歸つて，ある部分の確率の變化がそれに隣つた部分の確率の變化と近接的に關聯してゐるとのことの物理的理由は何處にあるか．先づ通俗な例をとつて，ある瞬間だけに見た飛行機のその後の時刻に於ける確率の波の場合を考へるに (§8)，飛行機の速度が有限である以上，確率の波はその速度で傳はり，突發的にかけ離れた地點に波が現はれるとは考へられない．粒子の場合にも，思考上に於ける粒子の運動は連續的であると考へてゐるのである．

この考へを基礎として，粒子にある確率的速度を定義することが出來る．卽ち $m_1\mathrm{i}_1$ は，確率の流れの方向に垂直な單位面積を通して單位時間に粒子一つが運ばれる際の質量の確率を表はしてゐる．他方單位容積中の確率的質量は

$m_1\rho_1$ であるから，質量の運ばれる確率的速度は，

$$\mathfrak{u}_1=m_1\mathfrak{i}_1/m_1\rho_1=\mathfrak{i}_1/\rho_1 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (55)$$

となる．この速度は一般に實測して得られる粒子の速度(後にのべる速度の運算子の固有値)ではない．この $\mathfrak{u}_1$ を用ゐれば，連續方程式を流體力學に於ける樣に，

$$\frac{1}{\rho_1}\frac{d\rho_1}{dt}+\frac{\partial u_{1x}}{\partial x_1}+\frac{\partial u_{1y}}{\partial y_1}+\frac{\partial u_{1z}}{\partial z_1}=0 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (56)$$

と書くことが出來る．玆に $\frac{d}{dt}=\frac{\partial}{\partial t}+u_{1x}\frac{\partial}{\partial x_1}+u_{1y}\frac{\partial}{\partial y_1}+u_{1z}\frac{\partial}{\partial z_1}$ である．

上に 1 の粒子について述べたことは，他の粒子についても同樣であり，又唯一つ粒子がある場合には (51) (54) 等の積分をとり去ればよろしい．

§20. シュレーディンガーの運算子　次に量子力學で必要な概念は**運算子**(operator)である．數學的には，この概念は別に新しいものではなくて，ある種の微分方程式をとく場合に古くから應用されてゐる．既に **§6** の終りで，古典力學に於けるハミルトン函數の中で p_{nx}, p_{ny}, p_{nz}, 更にエネルギーの値 E を夫々

$$\boldsymbol{p}_{nx}=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x_n},\quad \boldsymbol{p}_{ny}=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial y_n},\quad \boldsymbol{p}_{nz}=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial z_n},$$
$$\boldsymbol{E}=-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (57)$$

なる運算子で置きかへ，かくして $\boldsymbol{H-E}$ なる運算子の函數を作つて $x_1, y_1, \ldots\ldots, z_N, t$ の函數 ψ にこれを作用させたものを 0 と置くと，シュレーディンガーの方程式が得られることを述べたが，この關係はシュレーディンガーが，他方ハイゼンベルクの提出したマトリックスの力學理論(後で述べる)との關係を論じた時，既に注意した事柄である．

所でハミルトン函數の中のポテンシャルの項には，位置の座標が含まれてゐるから，この項をも運算子として解釋するには，時間も同樣に取扱ふとしてこれらを

$$\boldsymbol{q}_{nx}=x_n\times,\ \boldsymbol{q}_{ny}=y_n\times,\ \boldsymbol{q}_{nz}=z_n\times,\ \boldsymbol{t}=t\times \quad\cdots\cdots\cdots (58)$$

なる運算子と置けばよい．

以上の樣に古典的の量を運算子で置き換へることは，一見形式的の事柄と思はれるが，理論の發展と共に極めて深い意味があることが判つて來，すべての力學的量を運算子で書き表はすことが充分の物理的意義をもつこととなつて來たのである．この意義を順を追つて後に述べて行く．

更に運算子の例を示せば，古典的の角運動量 $m_{nx}=y_np_{nz}-z_np_{ny}$, $m_{ny}=z_np_{nx}-x_np_{nz}$, $m_{nz}=x_np_{ny}-y_np_{nx}$ に對して (57) (58) により夫々，

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{m}_{nx}&=\frac{h}{2\pi i}\left(y_n\frac{\partial}{\partial z_n}-z_n\frac{\partial}{\partial y_n}\right)\\
\boldsymbol{m}_{ny}&=\frac{h}{2\pi i}\left(z_n\frac{\partial}{\partial x_n}-x_n\frac{\partial}{\partial z_n}\right)\\
\boldsymbol{m}_{nz}&=\frac{h}{2\pi i}\left(x_n\frac{\partial}{\partial y_n}-y_n\frac{\partial}{\partial x_n}\right)
\end{aligned}\right\}\cdots\cdots\cdots\cdots (59)$$

の運算子が對應し，合成角運動量の成分としては，

$$\boldsymbol{M}_x=\sum_n \boldsymbol{m}_{nx},\quad \boldsymbol{M}_y=\sum_n \boldsymbol{m}_{ny},\quad \boldsymbol{M}_z=\sum_n \boldsymbol{m}_{nz} \quad\cdots\cdots (60)$$

その大きさの自乘としては，$\boldsymbol{M}_x\boldsymbol{M}_x=\boldsymbol{M}_x^2$ と書いて，

$$\boldsymbol{M}_x^2+\boldsymbol{M}_y^2+\boldsymbol{M}_z^2\equiv\boldsymbol{M}^2 \quad\cdots\cdots\cdots(61)$$

が對應するとする．

以上の樣に古典的の量の形はそのままにして，その量の概念を，運算子なるものとして，變更するのだがこの變更は一義的に行はれるかと云ふと，實はさうでない．例へば古典論で xp_x なる量があつたとき，古典論では p_xx, $x^2p_xx^{-1}$ 等はすべて初めの形と同等であるが，これを運算子と考へるときには，以上三つのものは夫々 $\frac{h}{2\pi i}x\frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x}x$, $\frac{h}{2\pi i}x^2\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{x}$ となり，これらが函數 ψ に作用するものであることを考へれば，上の三つの運算子はもはや同等でないことは明かである．古典的の量を如何なる形にとつて置くべきかの一般的規則はなく，むしろある形をとり，それから得られる結果が實驗の事實に適合するか否かによつて，正否を判斷する他致方がない．これは原子的現象を昔の樣に時間空間的に記述することが不可能であることによると考へられる．玆に，それなら常に實驗の事實を引合ひに出さなければ，理論が出來上がらないのだから，この樣な理論は値打が低いではないかとの疑問が生ずる．若し個々の場合毎に，例へば水素原子，ヘリウム原子等の如く取扱はれる問題毎に，例へば角運動量の運算子の形が異なるのであるならば，實際理論の値打は無いけれども，或る一つの場合に決めた運算子の形がすべての場合に普遍性を保つてゐ

ると云ふ意味に於て，理論に充分の値打があるのである．

實は古典的量に對應してゐると考へることは，抽象的量と感覺的量との對應に類するものなのであつて，古典的量からの飜譯を行ふ事は，新しい概念の量を定義する方便なのであり，大切なのは新しく定義された量の方にある．

實際問題としては，多くの場合に直角座標軸に關する古典的の式をとり，これをなるべく簡單な形に書いて置けば(通約等を行ふ)量の順序は問題にならないのが普通である．

運算子 $\boldsymbol{A}$ が任意の波動函數 φ,ψ に對して

$$\left.\begin{array}{l} \boldsymbol{A}(\varphi+\psi)=\boldsymbol{A}\varphi+\boldsymbol{A}\psi, \\ \text{更に數 } \alpha \text{ をとつて} \\ \boldsymbol{A}\alpha\varphi=\alpha\boldsymbol{A}\varphi \end{array}\right\} \quad\cdots\cdots\cdots(62)$$

である時，數學者は $\boldsymbol{A}$ を線形運算子 (linear operator) と云ふ．今迄に定義した $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{p}_x$, $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{m}_x$, 等の運算子はすべて線形である．一般に量子力學に於ける量は，すべて線形運算子でなければならないとの新しい概念を立てる．(このことの根據は後の §28 で更に述べる)

線形運算子でないものの例は，$\boldsymbol{D}\varphi=\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)^2$ で定義された $\boldsymbol{D}$ の如きものであつて，このときは $\boldsymbol{D}(\varphi+\psi)=\left\{\frac{d(\varphi+\psi)}{dx}\right\}^2=\left(\frac{d\varphi}{dx}+\frac{d\psi}{dx}\right)^2=\boldsymbol{D}\varphi+\boldsymbol{D}\psi+2\frac{d\varphi}{dx}\frac{d\psi}{dx}$ となり，線形の條件を滿足しない．

量子力學の運算子は，尙エルミット的 (hermitic[1]) であ

(1) 數學者 Hermite の名から出た言葉．この代りに self-adjoint (自己隨伴) とも云ふ．

るとする．即ち任意の波動函數 φ, ψ に對して

$$\int \varphi^* \boldsymbol{A} \psi d\tau = \int \psi \boldsymbol{A}^* \varphi^* d\tau \qquad \cdots\cdots (63)$$

の條件に從ふとする．玆に $\boldsymbol{A}^*$ は $\boldsymbol{A}$ の中に含まれる虛數單位 $i=\sqrt{-1}$ の符號を變へた運算子を意味し，又 $d\tau=dx_1dy_1\ldots\ dz_N$ である．例へば $\boldsymbol{p}_x=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x}$ をとるに，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \psi}{\partial x} dx = \frac{h}{2\pi i}\Big[\varphi^*\psi\Big]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \psi\left(-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi^* dx$$

であつて，$\int \varphi^*\varphi dx$, $\int \psi^*\psi dx$ が有限である爲に，φ, ψ は充分の遠方で 0 であり，從つて上式の右邊の第一項は消えるから (63) が滿足されてゐる．今迄に述べた運算子はすべてこの性質のものであることが容易に判る．

この條件の物理的意味については，後に述べることとする．

相對性理論の出來た初めには，テンソルは近づきにくいものであつたかも知れないが，アインスタインにとつてはテンソルは物理的量に過ぎなかつた．量子力學に於ける運算子も物理的量の抽象的表現に過ぎないのである．

§21. 運算子の値 運算子が物理的量の表現であるならば，觀測される値をもたなければ無意味であつて運算子には次に述べる樣にして，その値の概念が結びついてゐる．

先づ具體的の例をとつて，一つの粒子が x-方向に自由な運動をするとすれば，ハミルトン函數は $H=\frac{1}{2m_0}p_x^2$ であるから (玆に $U=0$ にとつた) $H-E=0$ から，シュレーディンガーの式

$$\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2 \frac{1}{2m_0}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \psi}{\partial t} = 0$$

が得られ，この式の一つの解は

$$\psi = Ce^{-\frac{i2\pi}{h}(Et-p_x x)},$$

玆に $E=\frac{1}{2m_0}p_x^2$ である．今 $\varphi=Ce^{\frac{i2\pi}{h}p_x x}$ と置けば，

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x}\varphi = p_x \varphi \qquad \cdots\cdots (64)$$

となる．p_x は玆では微分方程式の積分常數であるが，$E=p_x^2/2m_0$ から判る樣に運動量の値と解してよいものであつて，p_x は $\boldsymbol{p}_x=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x}$ に屬する値であると云ふ．逆に $\boldsymbol{p}_x$ の値を上の微分方程式 (64) によつて定義することが出來る．その際 φ は一價の連續函數 (勿論一回微分可能な) であるとする．從つて φ は一定の形のものとして決まることとなる．

上の例の如く一般に $\boldsymbol{A}$ の値とは，

$$\boldsymbol{A}\varphi = \alpha\varphi \qquad \cdots\cdots (65)$$

なる關係で與へられる數 α のことであるとする．その際一般に φ は

$$\int \varphi^*\varphi\, d\tau = \text{有限} \qquad \cdots\cdots (66)$$

の條件に從ふ恒等的に 0 でない一價の連續函數であるとする．(65) は一般に微分方程式となり，(66) の條件によつて α の値の範圍，及び φ の函數形は一定に決まり，α を固有

値 (characteristic value), φ を固有函數 (characteristic function) と云ふ.

(66) の條件は, φ が波動函數であるとすることから生じたのであるが, §**19** で述べた樣にある問題では (66) は成立しないが,

$$\varphi^*\varphi=\text{有限} \qquad\qquad (67)$$

だけでよいと考へられる場合(上の例の (64) はこの場合) には, (66) の代りに φ はこの條件に從ふ恒等的に 0 でない一價の連續函數であるとする.

併し (67) は §**19** で述べた樣に實際の物理の問題への數學的近似を表はすと考へ, 以下の議論では (66) を常に假定する. そして (67) に相當する場合があるかないかは, 問題每に吟味するとする.

扨て固有値は常に實數であることが容易に判る. 卽ち(65) の兩邊に φ^* を掛けて積分すれば

$$\int\varphi^*\boldsymbol{A}\varphi d\tau=\alpha\int\varphi^*\varphi d\tau$$

を得るし, 又これの共軛複素數をとれば

$$\int\varphi\boldsymbol{A}^*\varphi^* d\tau=\alpha^*\int\varphi^*\varphi d\tau$$

となるが, $\boldsymbol{A}$ がエルミット的であるから上の二式の左邊は等しく從つて $\alpha=\alpha^*$ となる.

物理的意味をもつ運算子 ($\boldsymbol{p}_x+i\boldsymbol{p}_y$ そのものには物理的意味はなく $\boldsymbol{p}_x$, $\boldsymbol{p}_y$ の夫々が意味をもつてゐる. 上の事はこの樣なことを指す) の値は觀測されるものであるから實數で

なければならないと考へられる. 運算子のエルミット性はこれを表はしてゐるのである.

所で (67) の場合には上の證明は成り立たないことになるが, この時には固有値の實數性を假定した上で (67) の條件に合ふ (65) の解があるか否かを調べることにするのである.

固有値の問題に關聯した一般的な事柄を述べる前に, 具體的な例題を掲げることとする.

§**22.** **角運動量の値** 一つの粒子の角運動量の値を求める爲に, 便宜上直角座標の代りに,

$$x=r\sin\theta\cos\phi,\quad y=r\sin\theta\sin\phi,\quad z=r\cos\theta \qquad\qquad (68)$$

で定義された球面座標 r, θ, ϕ を用ゐるのが便利である. 先づ角運動量の運算子を球面座標に轉換する. $\mathfrak{D}=\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$ はヹクトルの樣に轉換し, 球面座標に關する $\mathfrak{D}$ の成分は r, θ, ϕ の方向について夫々 $\left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{r\partial\theta}, \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$ であることから, $\mathfrak{D}$ の二つの座標軸に關する關係式を容易に書くことが出來る. 卽ち

$$\left.\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x}&=\sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}+\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{r\partial\theta}-\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi},\\
\frac{\partial}{\partial y}&=\sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r}+\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{r\partial\theta}+\frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi},\\
\frac{\partial}{\partial z}&=\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\sin\theta\frac{\partial}{r\partial\theta}.
\end{aligned}\right\}\qquad (69)$$

從つて角運動量の定義 (59) によつて,

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{m}_z&=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial\phi},\\
\boldsymbol{m}_x+i\boldsymbol{m}_y&=\frac{h}{2\pi i}e^{i\phi}\left(i\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right),\\
\boldsymbol{m}_x-i\boldsymbol{m}_y&=-\frac{h}{2\pi i}e^{-i\phi}\left(i\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right),\\
\boldsymbol{m}^2&=-\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2\frac{1}{\sin\theta}\left\{\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}
\end{aligned}\right\}\cdots(70)$$

となる．玆に上の式の中で，第二と第三の式の右邊が互に共軛でないことは，左邊の i の符號を變へるだけであつて $\boldsymbol{m}_x$, $\boldsymbol{m}_y$ の中に含まれてゐる $h/2\pi i$ の i の符號は變へない爲である．

(i) $\boldsymbol{m}_z$ の固有値．(65) に從つて

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial\phi}\varphi=\alpha\varphi\cdots\cdots(71)$$

を解くこととなる．解は，

$$\varphi=fe^{im\phi},\ \alpha=\frac{h}{2\pi}m\cdots\cdots(72)$$

であつて，f は ϕ に無關係，更に φ が一價函數である爲には

$$m=0,\ \pm1,\ \pm2,\cdots\cdots\qquad\cdots\cdots(73)$$

でなければならない．所で (66) の條件式は，ϕ が 0 から 2π までの價をとるから，$\int_0^{2\pi}\varphi^*\varphi d\phi$ となり，明かに滿足される．

(ii) $\boldsymbol{m}^2$ の固有値．(70) の式を見て

$$\frac{1}{\sin\theta}\left\{\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2\varphi}{\partial\phi^2}\right\}+\left(\frac{2\pi}{h}\right)^2\alpha\varphi=0\cdots\cdots(74)$$

を解くことになるが，これは球面函數 $Y(\theta,\phi)$ の微分方程式であり，$d\tau=dxdydz=r^2\sin\theta\,drd\theta d\phi$ から判る樣に，(66) は $\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\varphi^*\varphi\sin\theta\,d\theta\,d\phi=$ 有限 となるが，この爲には球面函數の性質から判つてゐる樣に，

$$\left.\begin{aligned}
&\left(\frac{2\pi}{h}\right)^2\alpha=l(l+1),\ \text{卽ち}\ \alpha=\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 l(l+1),\\
&\text{玆に}\qquad l=0,\ 1,\ 2,\ \cdots\cdots
\end{aligned}\right\}\cdots\cdots(75)$$

でなければならない．ある l の價に對して，球面函數は l-次の式 $Y_l(\theta,\phi)$ となる．

以上の例では，固有値はすべて個別的である．l-次の球面函數は，ルヂェンドルの陪函數 $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ をとると，

$$Y_l(\theta,\phi)=\sum_{m=-l}^{l}C_m e^{im\phi}P_l^{|m|}(\cos\theta)$$

の形に書ける．玆に C_m は任意の常數である．從つて一般に $\boldsymbol{m}^2$ の固有函數は未だ $\boldsymbol{m}_z$ の固有函數にはなつてゐないが，上の和の中の一項をとつて，$Y_l(\theta,\phi)=C_m e^{im\phi}P_l^{|m|}(\cos\theta)$ とすれば，これは $\boldsymbol{m}^2$, $\boldsymbol{m}_z$ に對し同時に固有函數となつてゐる．玆に一定の l に對して，

$$m=-l,\ -l+1,\cdots\cdots l-1,\ l\cdots\cdots(76)$$

なる $2l+1$ 個の値をとり得るだけとなる．

以上の如く，昔の概念による角運動量と異なつて，個別的の値だけしかとり得ないこと，更に合成の値の自乘は

$$\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 l(l+1)$$

であるが，z－方向の成分は (76) の m をとつて，

$$\frac{h}{2\pi}m$$

の形であることになる．

合成の値を $\frac{h}{2\pi}\sqrt{l(l+1)}$ として，z－方向に對する合成角運動量の方向を $\cos\Theta=m/\sqrt{l(l+1)}$ と考へ，この方向に $\frac{h}{2\pi}\sqrt{l(l+1)}$ の角運動量が實際あると考へることは，無意味である．なぜなら l, m, n の方向餘弦をもつ任意の方向の角運動量は $l\boldsymbol{m}_x+m\boldsymbol{m}_y+n\boldsymbol{m}_z$ となるが，この方向を新しい座標軸の z－方向にとれば，上の式の値は矢張り (72) で與へられる以外のものとはならないからである．

次にエネルギーの値は，(16) によりハミルトン函數がエネルギーを表はすことになつてゐるから，

$$\boldsymbol{H}\varphi=E\varphi \qquad (77)$$

を解けば，エネルギーの値 E が決まる．$\boldsymbol{H}$ が t を含まないとき，シュレーディンガーの式 (27) で $\psi=\omega\varphi$ と置けば，φ は (77) を滿足するから，

$$-\frac{h}{2\pi i}\frac{d\omega}{dt}=E\omega$$

を得る．これは運算子 $\boldsymbol{E}=-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}$ について，固有値の問題の形式になつてゐる．解は積分常數を φ に含ませて，

$$\omega=e^{-\frac{i2\pi}{h}Et}$$

ととることが出來る．併しこの場合に條件 (66) に相當する

ものは無い．我々はここに固有値の問題は空間と時間とについて全く對稱的になつてゐないことを知るのであり，相對論からみると，茲に何か或るものがあるかも知れない．§20 で述べた固有値の問題の運算子は，$\boldsymbol{E}$ を含まないものについて述べたことを特に注意して置く．若し t を含むときは，これを t にとつて單に媒介變數 (parameter) として取扱ふ．

(77) の式をシュレーディンガーの式と呼ぶことがあるがこれはエネルギーの値を決める式であり，前の (27) の式は確率波の時間空間に關する變化を決める式なのである．(27) で $\psi=e^{-\frac{i2\pi}{h}Et}\varphi$ と置くことによつて (77) が得られるのは，形式的の事柄であつて，假りに $\boldsymbol{H}$ が t を含んでゐる場合を考へてみるがよい．$\boldsymbol{H}$ が t を媒介變數として含むときにも，(77) の問題を考へることは差支ないのである（今まで $\boldsymbol{H}$ は t を含まないとして來た．§6 參照．t を含むことについては §31 參照）．

§23. 水素原子 エネルギーを決める例として水素原子をとる．水素原子は $-e$ の電荷の電子が $+e$ の電荷の陽核 (proton) のまわりに運動してゐると考へられてゐる．今事柄をやや擴張して，核の電荷を Ze とする．Z は核の電荷の數であつて，$Z=1$ なら水素原子，$Z=2$ なら一價にイオン化したヘリウム原子の場合となる．併し核の質量は電子にくらべて大きいから（水素原子の場合に約 1,800 倍である）核は

靜止してゐるとし，座標の原點を核にとるとする．m_0 を電子の質量とすれば，ハミルトン函數の運算子は，

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{H}&=\frac{1}{2m_0}(\boldsymbol{p}_x^2+\boldsymbol{p}_y^2+\boldsymbol{p}_z^2)+\boldsymbol{U}\\
&=-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{Ze^2}{r} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (78)
\end{aligned}
$$

$$(r^2=x^2+y^2+z^2)$$

となるから，球面座標に移せば，(77) は，

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{r^2}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)+\frac{1}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2\varphi}{\partial\phi^2}\right\}\\
&\qquad+\frac{8\pi^2 m_0}{h^2}\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)\varphi=0 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (79)
\end{aligned}
$$

となる．そこで電子は一定の角運動量の値をもつとすれば，$\varphi=\chi(r)Y_l(\theta,\phi)$ として (74), (75) を參照することにより，

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\frac{2}{r}\,\frac{d\chi}{dr}+\left(a+\frac{b}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi=0 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (80)$$

を得る．玆に

$$a=\frac{8\pi^2 m_0 E}{h^2},\quad b=\frac{8\pi^2 m_0 e^2 Z}{h^2} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (81)$$

今

$$\chi=e^{-\sqrt{-a}\,r}\,v \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (82)$$

と置けば，(80) は

$$\frac{d^2v}{dr^2}+2\left(\frac{1}{r}-\sqrt{-a}\right)\frac{dv}{dr}+\left(\frac{b-2\sqrt{-a}}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)v=0 \quad\cdots\cdots (83)$$

となる．この微分方程式は，$r=0$ で $\dfrac{dv}{dr}$ の係數が $1/r$ の程度で，v の係數が $1/r^2$ の程度で無限大になるから，$r=0$ は微分方程式論で言ふ正則異常點であつて，(83) は

$$v=\sum_{k=0}^{\infty}a_k r^{k+\beta} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (84)$$

と置くことによつて必ず解かれる．玆に β は上の級數の初項の r の羃數が未だ判らないからつけ加へたのであり，未知の係數 a_k と共に微分方程式を滿足する樣に決定すべきものである．尙 $a_0\neq 0$ として差支ない．今上の級數を (83) に代入し，r についての昇羃の順に整理すると，

$$
\begin{aligned}
&a_0\{\beta(\beta+1)-l(l+1)\}r^{\beta}+\sum_{k=0}^{\infty}\{a_{k+1}(k+\beta+1-l)(k+\beta+l+2)\\
&\qquad-a_k[2(k+\beta+1)\sqrt{-a}-b]\}r^{k+\beta+1}=0
\end{aligned}
$$

を得る．從つて r^{β}, $r^{\beta+k+1}$ の係數が 0 でなければならないが，$a_0\neq 0$ であるから，

$$\beta(\beta+1)-l(l+1)=0 \quad \text{卽ち} \quad \beta=l \ \text{又は} \ -l-1$$

及び

$$a_{k+1}=\frac{2(k+\beta+1)\sqrt{-a}-b}{(k+\beta+1-l)(k+\beta+l+2)}a_k \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (85)$$

が得られる．

先づ $\beta=l$ の場合をとれば，a_k は上式により a_0 を殘して全部決まることとなり，得られた解 (84) は一般に收斂する．次に $\beta=-l-1$ とすれば，k のある値以上では，(85) の分母が消えることから判る樣に，有限な a_k は存在しないこととなる．この時は微分方程式論によると，

$$v=r^l\log r\sum_{k=0}^{\infty}b_k r^k+\frac{1}{r^{l+1}}\sum_{k=0}^{\infty}c_k r^k$$

の形の解が得られることとなる.[1] 所がこれは $r=0$ で與へられた微分方程式を滿足してゐないことが判る. 即ち r が充分小さいときは, $v=c_0/r^{l+1}$ となるから, $\varphi=c_0 Y_l(\theta,\phi)/r^{l+1}$ の形となり, 一方微分方程式 (79) は $r=0$ の近くで元の直角座標軸をとれば,

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}=0$$

なるラプラースの式とすることが出來る. 所で上に述べた解は, 一般に $r=0$ に多重極がある時のポテンシャルに相當し, ポテンシャル論で知つてゐる樣に $r=0$ ではラプラースの式を滿足しない.

從つて $\beta=l$ の場合に限ることが出來る.

(i) 先づ $E<0$ の場合を考へる. このときは $-a>0$ である. そこで級數 (84) が無限に續くとすれば, (85) は k が充分大きくなると, $a_{k+1}=2\sqrt{-a}\,a_k/(k+1)$ となるから, $a_k=C(2\sqrt{-a})^k/k!$ の形となり, v は r が充分大きくなると, $e^{+2\sqrt{-a}\,r}$ の程度になり, 從つて $\chi(r)$ は $e^{+\sqrt{-a}\,r}$ の程度となる. 所で $d\tau=r^2dr\sin\theta\,d\theta d\phi$ であるから條件 (66) の中には $\int_0^\infty \chi^*\chi r^2dr$ が含まれることになるが, この積分のみならず $\chi^*\chi$ が有限であるとの條件も滿足されてゐない.

從つて級數 (84) は無限に續かないで, 途中で切れなければならない. 今この級數が $k=n_r$ までであるとすれば,

(1) 寺澤寛一; 自然科學者の爲の數學概論, 7·13, 335 頁

$a_{n_r+1}=0$ であるから, (85) の分子から

$$2(n_r+l+1)\sqrt{-a}-b=0$$

となり, これを E について解けば,

$$E=-\frac{2\pi^2 m_0 e^4 Z^2}{h^2 n^2} \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (86)$$

を得る. 茲に $n=n_r+l+1$ であり, $n_r=0, 1, 2, \ldots$, $l=0, 1, 2, \ldots$ であるから,

$$n=1, 2, 3, \cdots\cdots \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (87)$$

の値をとり得る.

(ii) $E>0$ の場合には, $a>0$ であり, 從つて級數 (84) が無限級數になるとしても, r が大きい時 $\chi(r)$ は有限の値をとり得ることとなる. (i) の場合の吟味からみて, $e^{+\sqrt{-a}\,r}=e^{i\sqrt{a}\,r}$ の形の項を含むが, 又 $e^{-i\sqrt{a}\,r}$ の形の項を含み得るであらう. (i) の場合にはこの後の項は $e^{-\sqrt{-a}\,r}$ の形であるから r が大きい時には問題とならなかつたのである. 實際 r が大きいとき, χ, $\frac{d\chi}{dr}$, $\frac{d^2\chi}{dr^2}$ を同じ程度とすれば, (80) は

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+a\chi=0$$

となり, これは $\chi=C_1e^{-i\sqrt{a}\,r}+C_2e^{i\sqrt{a}\,r}$ の形の解をもつてゐる. 茲にこれが (84) の r が充分大きい所に於ける値であるから, C_1 と C_2 との間には一定の關係がある.

所でこの場合には E が正のすべての値をとつても $\chi^*\chi$, 從つて $\varphi^*\varphi$ が有限であるから $\left(\int_0^\infty \chi^*\chi r^2dr\right.$ は發散する$\left.\right)$, $E>0$ の連續的なすべての値が求める固有値となる.

(iii) $E=0$ の場合には χ の方程式は

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\chi}{dr}+\left(\frac{b}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi=0$$

となる．今 $4br=\xi^2$ と置き，更に $\chi=\xi^{-1}w$ と置けば

$$\frac{d^2w}{d\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{dw}{d\xi}+\left(1-\frac{(2l+1)^2}{\xi^2}\right)w=0$$

なるベッセルの微分方程式となる．故に $w=J_{2l+1}(\xi)$ が一つの解であり，從つて

$$\chi(r)=\frac{1}{2\sqrt{br}}J_{2l+1}(2\sqrt{br})\quad\cdots\cdots\cdots(88)$$

を得る．ベッセル函數の漸近展開式から判る樣に，$\chi^*\chi$ は $r=\infty$ でも有限であるから，上の解が求めるものである．尚第二種のベッセル函數の解もあるが，このときは $\chi^*\chi$ は $r=0$ で有限でないから，求めるものとならない．

昔の力學では $E<0$, $E>0$, $E=0$ は夫々楕圓，双曲線，抛物線の軌道に相當する．

§24.　固有函數の直交性　固有函數についての二三の數學的な事柄をつけ加へる．

一囲の函數列 $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ が互に

$$\int\varphi_a{}^*\varphi_b d\tau=\delta_{ab}\quad\cdots\cdots\cdots(89)$$

の關係を滿足するとき，これらの函數は互に規格直交であると云ふ．茲に

$$\delta_{ab}=\begin{cases}1 & (a=b\text{ のとき})\\ 0 & (a\neq b\text{ のとき})\end{cases}\quad\cdots\cdots\cdots(90)$$

であつて，規格とは $\int\varphi_a{}^*\varphi_a d\tau=1$ のことを言ふ．又直交と

は $\int\varphi_a{}^*\varphi_b d\tau=0\,(a\neq b)$ のことを云ひ，函數の値 $\varphi_a(x_1\ldots z_N)$ をヹクトル φ_a の $x_1,\ldots z_N$ 方向の成分と考へたとき，三次元空間のヹクトルの直交になぞらへて出て來た言葉である．

$\int\varphi_a{}^*\varphi_a d\tau$ が有限である固有函數は規格直交であることが容易に判る．

先づ固有函數に任意の常數をかけても，固有函數であることに變りはないから，若し $\int\varphi_a{}^*\varphi_a d\tau=1$ になつてゐない時には φ_a へ常數をかけてこれを適當にとれば必ず規格の條件を滿足することが出來る．次に $\boldsymbol{A}$ の異なる固有値 α_a, α_b に屬する固有函數 φ_a, φ_b は互に直交である．なぜなら

$$\boldsymbol{A}\varphi_a=\alpha_a\varphi_a,\quad \boldsymbol{A}\varphi_b=\alpha_b\varphi_b$$

であるから，第一の式の共軛複素數をとつて兩邊に φ_b を掛け，次に第二の式へ $\varphi_a{}^*$ を掛け，二つの式を積分すれば，作用子のエルミット性によつて二つの式の左邊は等しいから

$$(\alpha_a-\alpha_b)\int\varphi_a{}^*\varphi_b d\tau=0$$

となり，$\alpha_a\neq\alpha_b$ であるから φ_a と φ_b とは直交でなければならない．

併し場合によつては一つの固有値 α_a に對して有限個の互に線形獨立の固有函數 $\varphi_{a1}, \varphi_{a2}, \cdots\varphi_{ag}$ が屬することがある (例へば **§22** の $\boldsymbol{m}^2$ の固有値の問題では $\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 l(l+1)$ の固有値に對して互に線形獨立な $e^{im\phi}P_l^{|m|}(\cos\theta)\,(m=-l,\ -l+1,\ldots,l)$ の形の $2l+1$ 個の固有函數がある) この時互に異なる固有値を持つべきのが同じ値になつたと想像して固有値は g-重に退

化 (degenerate) してゐると云ふ. 玆に線形獨立とは, 同時に 0 でない如何なる常數 $c_1, c_2, \ldots c_g$ をとつても, 函數の變數に對して恒等的に

$$c_1\varphi_{a1}+c_2\varphi_{a2}+\ldots\ldots+c_g\varphi_{ag}=0$$

が成立しないことを意味する. 互に直交の函數は線形獨立であることが容易に判る.

所でこれらの g-個の函數が既に互に直交性を滿足してゐる(多くの場合に偶然に)ならそれでよいが ($e^{im\phi}P_l^{|m|}(\cos\theta)$ は ϕ, θ の變域で既に直交性を滿足してゐる)さうでない時も必ずこれらの適當な和を作ることによつて新たに $\varphi'_{a1}, \varphi'_{a2}, \ldots \varphi'_{ag}$ なる規格直交函數を作ることが出來る. 例へば先づ $\varphi'_{a1}=\varphi_{a1}$ にとる. 次に

$$\varphi'_{a2}=c_1\varphi_{a1}+c_2\varphi_{a2},\quad \varphi'_{a3}=d_1\varphi_{a1}+d_2\varphi_{a2}+d_3\varphi_{a3}, \ldots$$

にとつて, $\int\varphi'^*_{a1}\varphi'_{a2}d\tau=0$, $\int\varphi'^*_{a2}\varphi'_{a2}d\tau=1$; $\int\varphi'^*_{a1}\varphi'_{a3}d\tau=0$, $\int\varphi'^*_{a2}\varphi'_{a3}d\tau=0$, $\int\varphi'^*_{a3}\varphi'_{a3}d\tau=1$; …… を滿足する樣に $c_1, c_2; d_1, d_2, d_3; \ldots$ を必ず決定することが出來る (これらの常數は同時に 0 になることは無い).

これで初めに述べた定理の證明が出來たこととなる.

上の議論では $\int\varphi_a^*\varphi_a d\tau$ が有限であること, 固有値は個別的なることを假定したが, 單に $\varphi_a^*\varphi_a$ が有限であるときは複雜な事柄が生ずる. 普通にこの後の場合には §**21** の自由に運動する粒子の運動量, エネルギーの値や §**23** の水素原子の $E\geqq0$ の場合の如くに, 固有値も連續の値をとること

となる. この場合には規格, 直交に關するある形式を與へることも出來るが,(1) 又次の樣な數學的の方法によつて連續固有値の場合の複雜な數式關係を脫れることも出來る.

具體的な例をとつて, 自由に運動する粒子のエネルギーの値を決める問題をとり扱ふ.

即ち

$$\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2\frac{1}{2m_0}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right)=E\varphi \quad\ldots\ldots\ldots\ldots(91)$$

を解くこととなる. 今無限に廣い空間をとるならば, この式の解は

$$\varphi=Ce^{\frac{i2\pi}{h}(p_x x+p_y y+p_z z)} \quad\ldots\ldots\ldots\ldots(92)$$

である. 但し $E=\frac{1}{2m_0}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)$ で, p_x, p_y, p_z は夫々 $-\infty$ から $+\infty$ 迄のすべての實數をとり得るから E は負でない任意の實數をとり得る.

そこで上の樣に解く代りに原點を中心とする長さ $2L$ の立方體をとり, この立方體の中だけに視野を限つて, この中で物理的に意味のあるすべての波動函數を表はし得る解を求める.(2) フーリエの定理を考へるならば, 求める解は $2L$ の周期をもつ三角函數であればよい. 即ち

$$\varphi=Ce^{i\pi\left(\frac{k_x}{L}x+\frac{k_y}{L}y+\frac{k_z}{L}z\right)} \quad\ldots\ldots\ldots\ldots(93)$$

---

(1) H. Weyl; Math. Ann. 68 (1910), 220, Nachrichten der Göttinger Ges. Wiss. 1910. E. Fues; Ann d. Phys. 81 (1926) 281. 但しこれらの論文も固有値の微分方程式が常微分方程式の場合に關してゐる. (2) 或る著者は立方體の境界で $\varphi=0$ と云ふ條件を立てるとするが, これは正しいと云へない. これでは交換運算子に關する定理が成り立たなくなる.

但し　　$E=\dfrac{h^2}{8m_0L^2}(k_x{}^2+k_y{}^2+k_z{}^2)$

で k_x, k_y, k_z は $-\infty$ から $+\infty$ までのすべての整數をとるとする．この時は E は個別的な負でない實數をとることとなる．今 L を充分大きく取るならば，相續く二つの E の値の差はいくらでも小さくなり，(92) の場合の連續の値をとる場合に近似することとなる．玆に固有函數 (93) を指數函數の形にとつたが，これを

$$\left.\begin{matrix}\sin\pi\dfrac{k_x}{L}x\\[2ex] \cos\pi\dfrac{k_x}{L}x\end{matrix}\right\}\quad\left.\begin{matrix}\sin\pi\dfrac{k_y}{L}y\\[2ex] \cos\pi\dfrac{k_y}{L}y\end{matrix}\right\}\quad\left.\begin{matrix}\sin\pi\dfrac{k_z}{L}z\\[2ex] \cos\pi\dfrac{k_z}{L}z\end{matrix}\right\}$$

の x, y, z を含む任意の三つの項の積にとつても勿論差支ない．併し若し運動量 $\dfrac{h}{2\pi i}\dfrac{\partial}{\partial x}$, $\dfrac{h}{2\pi i}\dfrac{\partial}{\partial y}$, $\dfrac{h}{2\pi i}\dfrac{\partial}{\partial z}$ も値をもつ様に固有函數を選ぶとすれば (93) の形でなければならず，運動量の値は夫々

$$p_x=\frac{hk_x}{2L},\ p_y=\frac{hk_y}{2L},\ p_z=\frac{hk_z}{2L}\ \cdots\cdots\cdots\cdots(94)$$

なる個別的の値をとることとなる．

以上の例の様に，連續固有値の場合にも視野を有限の範圍に限るならば，個別的の固有値の場合として適宜に近似することが出來るのである．以下ではこの様な數學的の技工の方法をとつて，固有値は個別的のものであると假定する．

この場合には積分範圍は有限であるから $\int\varphi^*\varphi d\tau$ は有限

となる．從つて固有函數を規格することが出來る．例へば玆の例題では規格された固有函數としては (93) で $C=(2L)^{-\frac{3}{2}}$ にとればよいこととなる．又これらの函數が直交であることも明かである．

§25.　δ－函數　前節の個別的な固有値から連續的なるものへの極限化を觀察して見る．簡單の爲に x－方向に關する事柄だけ考へて，(92) と (93) とを比較すれば，

$$\frac{k_xh}{2L}\rightarrow p_x$$

である．玆に p_x は連續の値をとるし，k_x は $0, \pm1, \pm2, \ldots$ をとる．$k_xh/2L$ を一直線上に竝べれば，$h/2L$ の間隔をもつ點の竝びが得られる．故に $k_xh/2L$ と $(k_x+1)h/2L$ の間を $k_xh/2L$ に相當する函數 $\varphi(x)$ の價で結んで，階段的な函數を作り，そこで L を充分大きくとつて各點の間の距離を無限に小さくすれば，求める極限化が達せられるであらう．從つて

$$\frac{h}{2L}\rightarrow dp_x$$

と置いてよいであらう．

この考へによつて，極限化を行つた函數の規格直交性を考へてみるに

$$\varphi_{k_x}(x)=\frac{1}{(2L)^{\frac{1}{2}}}e^{\frac{i\pi}{L}k_xx}=\frac{1}{\sqrt{h}}\sqrt{\frac{h}{2L}}\,e^{\frac{i2\pi}{h}\left(k_x\frac{h}{2L}x\right)}$$

であるから，

$$\int_{-L}^{L}\varphi_{k_x}{}^*(x)\varphi_{k'_x}(x)dx\rightarrow\frac{dp_x}{h}\int_{-L}^{L}e^{+\frac{i2\pi}{h}(p_x'-p_x)x}dx$$

$$=\frac{dp_x}{\pi}\frac{\sin\frac{2\pi}{h}(p_x'-p_x)L}{p_x'-p_x}$$

となる．この式の右邊の値は最早直ちに規格直交の關係を示してゐないので，幾分定義を變更しなければならないのである．

今上式の右邊の値をとつて，

$$\lim_{L\to\infty}\frac{1}{\pi}\int_{(\Delta p_x)}\frac{\sin\frac{2\pi}{h}(p_x'-p_x)L}{p_x'-p_x}dp_x$$

を考へるに，積分の範圍 (Δp_x) が p_x' を含めばこの値は 1 になるが，さうでなければ 0 になることを知つてゐる．これはフーリエ級數論に於けるヂリクレー (Dirichlet) の定理である．

一般には

$$\lim_{L\to\infty}\frac{1}{\pi}\int_{(\Delta p_x)}f(p_x)\frac{\sin\frac{2\pi}{h}(p_x'-p_x)L}{p_x'-p_x}dp_x=\begin{cases}f(p_x')\\0\end{cases}\quad\cdots\cdots\cdots(95)$$

であつて，右邊の $f(p_x')$ は (Δp_x) が p_x' を含む場合，0 はさうでない場合である．

從つて

$$\varphi_{p_x}(x)=\frac{1}{\sqrt{h}}e^{\frac{i2\pi}{h}p_xx}$$

と置けば，連續固有値の場合には

$$\lim_{L\to\infty}\int_{(\Delta p_x)}dp_x\int_{-L}^{L}\varphi_{p_x}^*(x)\varphi_{p'_x}(x)dx$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}dx\varphi_{p'_x}(x)\int_{(\Delta p_x)}\varphi_{p_x}^*(x)dp_x=\begin{cases}1\\0\end{cases}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(96)$$

が規格直交性を表はすものと考へられる．玆には特別の例について述べたが，この終りの (96) の形はその他の連續固有値の場合にも亦あてはまるのである．[1]

ディラックは上述の性質を簡單に示す爲に (95) の代りに

$$\int_{(\Delta p_x)}f(p_x)\delta(p_x'-p_x)dp_x=\begin{cases}f(p_x')\\0\end{cases}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\quad\cdots\cdots\cdots(97)$$

で定義された運算子 $\delta(p_x'-p_x)$ を導入した．又 $\delta(p_x'-p_x)$ を實數の偶函數の如くに取扱つて得られるその他の運算子も導入した．例へば $\delta'(p_x'-p_x)$ なる運算子を

$$\int_{(\Delta p_x)}f(p_x)\delta'(p_x'-p_x)dp_x=\begin{cases}\dfrac{df}{dp_x'}\\0\end{cases}$$

の性質で定義する如きである．この定義は $\delta(p_x'-p_x)$ が上述の樣な函數と考へれば，(97) の兩邊を p'_x で微分することによつて直ちに得られる．

(95) と比較するならば，

$$\delta(p_x'-p_x)=\lim_{L\to\infty}\cdots\frac{\sin\frac{2\pi}{h}(p_x'-p_x)L}{\pi(p_x'-p_x)}$$

$$=\lim_{L\to\infty}\cdots\int_{-L}^{L}\varphi_{p_x}^*(x)\varphi_{p'_x}(x)dx$$

なる運算子にあたる．玆に…は (95) で示された積分が挿入

(1) 前出 79 頁の脚註

される位置を示す．この種の數學的關係を暗に了解して，簡單に屢ゝ

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_{p_x}^*(x)\varphi_{p'_x}(x)dx=\delta(p_x-p_x') \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (98)$$

と書く，$\delta(p_x-p_x')$ は個別的な固有値の場合の δ_{ab} にあたるものである．

$\delta(p_x'-p_x)$ を，また，$p_x=p_x'$ では無限に大きくなりその他では 0 であるが但し

$$\int_{(\Delta p_x)}\delta(p_x'-p_x)dp_x=\left\{\begin{matrix}1\\0\end{matrix}\right.$$

なる函數の如く想像することも出來る．なぜなら

$$\int_{(\Delta p_x)}f(p_x)\delta(p_x'-p_x)dp_x=f(p_x')\int_{(\Delta p_x)}\delta(p_x'-p_x)dp_x=\left\{\begin{matrix}f(p_x')\\0\end{matrix}\right.$$

となり，(97) の關係が得られるからである．

§26.　交換運算子　$\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ とが交換性 (commutative) であるとは，$\int\varphi^*\varphi d\tau$ が有限である任意の φ に對して，計算を $\boldsymbol{AB}$ の順に行つても(卽ち先づ $\boldsymbol{B}$ を行ひ更に $\boldsymbol{A}$ を行ふ) $\boldsymbol{BA}$ の順に行つても結果が同じであるものを云ふ．卽ち

$$\boldsymbol{AB}\varphi=\boldsymbol{BA}\varphi \qquad (\boldsymbol{AB}-\boldsymbol{BA})\varphi=0 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (99)$$

これを亦

$$\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA} \qquad \boldsymbol{AB}-\boldsymbol{BA}=\boldsymbol{0} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (99)'$$

と書く．所で

「交換運算子は同じ固有函數をもつ」

ことを證明することが出來る．物理的には，それらの運算

子で表はされる量が同時に値をもつことが出來る事を意味する．交換運算子の例は §22, §23 に於ける $\boldsymbol{m}_z$, $\boldsymbol{m}^2$, $\boldsymbol{H}$ の如きであつて，此等は實際同じ固有函數 $\varphi=e^{im\phi}P_l^{|m|}(\cos\theta)\chi(r)$ を持つてゐる．

定理を證明する爲に，$\boldsymbol{A}$ の規格直交の固有函數を φ_1, φ_2, $\ldots\varphi_a,\ldots$ とすれば，

$$\boldsymbol{AB}\varphi_a=\boldsymbol{BA}\varphi_a=\alpha_a\boldsymbol{B}\varphi_a$$

であるから，先づ $\boldsymbol{B}\varphi_a$ も α_a に屬する $\boldsymbol{A}$ の固有函數であることが判る．

今 α_a に屬する線形獨立な固有函數を $\varphi_{a1},\ldots\varphi_{ak},\ldots\varphi_{ag}$ とすれば，$\boldsymbol{B}\varphi_{al}$ も α_a に屬するから，一般にこれは $\varphi_{a1},\ldots\varphi_{ag}$ で線形に表はされる筈である．卽ち

$$\boldsymbol{B}\varphi_{al}=\sum_{k=1}^{g}b_{kl}\varphi_{ak}$$

玆に $b_{kl}=\int\varphi_{ak}^*\boldsymbol{B}\varphi_{al}d\tau$ から決まることは，上式の兩邊に φ_{ak}^* を掛けて積分することにより明かである．

特に $g=1$ ならば $\boldsymbol{B}\varphi_{a1}=b_{11}\varphi_{a1}$ であるから，φ_{a1} は $\boldsymbol{B}$ の固有函數で固有値は b_{11} となる．一般に $g\neq1$ の時も，$\varphi_{a1},\ldots\varphi_{ag}$ を線形に組合すことによつて，$\boldsymbol{B}$ の固有函數を得ることが出來る．今

$$\begin{vmatrix} b_{11}-\lambda & b_{12} & b_{13}\ \cdots\cdots\ b_{1g} \\ b_{21} & b_{22}-\lambda & b_{23}\ \cdots\cdots\ b_{2g} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots\cdots\cdots \\ b_{g1} & b_{g2} & b_{g3}\ \cdots\cdots\ b_{gg}-\lambda \end{vmatrix}=0$$

の λ に關する一つの根を β_1 とすれば，

$$\left.\begin{array}{l} b_{11}\xi_1+b_{12}\xi_2+\cdots\cdots\cdots+b_{1g}\xi_g=\beta_1\xi_1 \\ b_{21}\xi_1+b_{22}\xi_2+\cdots\cdots\cdots+b_{2g}\xi_g=\beta_1\xi_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ b_{g1}\xi_1+b_{g2}\xi_2+\cdots\cdots\cdots+b_{gg}\xi_g=\beta_1\xi_g \end{array}\right\}$$

を滿足する解 $\xi_1^{(1)}, \xi_2^{(1)}, \ldots \xi_g^{(1)}$ なる $\xi_1, \xi_2, \ldots \xi_g$ の一組がある．そこで

$$\varphi_{a1}'=\sum_{l=1}^{g}\xi_l^{(1)}\varphi_{al}$$

を作り，他に $\varphi_{a1}, \ldots \varphi_{ag}$ から線形の組合せ $\varphi'_{a2}, \varphi'_{a3}, \ldots \varphi'_{ag}$ をとつて，$\int \varphi'_{ak}{}^*\varphi'_{al}d\tau=\delta_{k,l}$ である樣にする．φ'_{a1} については

$$\begin{aligned} \boldsymbol{B}\varphi'_{a1}&=\sum_{l=1}^{g}\xi_l^{(1)}\boldsymbol{B}\varphi_{al}=\sum_{l,k}b_{kl}\xi_l^{(1)}\varphi_{ak}=\beta_1\sum_{k}\xi_k^{(1)}\varphi_{ak} \\ &=\beta_1\varphi'_{a1} \end{aligned}$$

であるから，φ'_{a1} は $\boldsymbol{B}$ の固有函數となる．

更に

$$\boldsymbol{B}\varphi'_{a2}=\sum_{k=2}^{g}b'_{k2}\varphi'_{ak}$$

の形でなければならない．なぜならば，

$$\int \varphi'_{a1}{}^*(\boldsymbol{B}\varphi'_{a2})d\tau=\int \varphi'_{a2}\boldsymbol{B}^*\varphi'_{a1}{}^*d\tau=\beta_1\int \varphi'_{a2}\varphi'_{a1}{}^*d\tau=0$$

であるが，若し $\boldsymbol{B}\varphi'_{a2}$ が φ'_{a1} を含めば，上の積分の値は 0 にならないからである．$\boldsymbol{B}\varphi'_{a3}$ 以下のものについても同樣である．從つて $\varphi_{a1}, \ldots \varphi_{ag}$ について行つたことを $\varphi'_{a2}, \ldots \varphi'_{ag}$ について行へば，更に $\boldsymbol{B}$ の規格直交の固有函數を作ることが出來る．これらの固有函數は，又 α_a に屬する $\boldsymbol{A}$ の固有函數であることに變りはない．なぜならこれらの新しいものは，初めに與へられたものの線形の組合せだからである．

これで定理の證明が出來たこととなる．尚三つ以上の交換性の運算子がある場合にも，定理が成立することは，初めの二つについて上の如く固有函數を決め，その中で二つの運算子に對し一定の固有値をもつ線形に獨立な固有函數をとつて第三の運算子に對しても固有函數となる樣なものを作り得ること，上の場合と全く同樣であることから，容易に判る．

尚上の證明で，$\boldsymbol{B}$ の固有函數は上の樣にして決められたものだけであることも，$\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ の立場を變へても全く同樣の證明が行はれることから明かである．

次に上の定理の逆を考へる．即ち

「同じ固有函數をもつ運算子 $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ とは交換的である」

と云ふ定理である．玆に初めに述べた任意の函數 φ はこの固有函數によつて展開出來ることを假定する．即ち共通の規格直交の固有函數を φ_a とせば

$$\varphi=\sum_{a}c_a\varphi_a$$

であるとする．玆に c_a は兩邊へ φ_a^* を掛けて積分すること

から判る様に

$$c_a=\int\varphi_a{}^*\varphi d\tau$$

から決まる．今 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ の φ_a に對する固有値を夫々 α_a, β_a とすれば,

$$(\boldsymbol{AB}-\boldsymbol{BA})\varphi=\sum_a c_a(\boldsymbol{AB}-\boldsymbol{BA})\varphi_a=\sum_a c_a(\alpha_a\beta_a-\beta_a\alpha_a)\varphi_a=0$$

となり，定義により $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ とは交換的である．

この定理から，交換的でない運算子は，**すべて**の固有函數を同じに持つことは出來ないとは云へるけれども，單に交換的でない運算子は同じ固有函數を持ち得ないとは言へない．例へば角運動量 $\boldsymbol{m}_x, \boldsymbol{m}_y, \boldsymbol{m}_z$ は交換的でない．併し §**22** で $l=0$ 從つて $m=0$ である固有函數 $\varphi_0=P_0(\cos\theta)=1$ をとるならば,

$$\boldsymbol{m}_x\varphi_0=0,\quad \boldsymbol{m}_y\varphi_0=0,\quad \boldsymbol{m}_z\varphi_0=0$$

となるから，φ_0 は角運動量の三つの成分の値が皆 0 である場合の固有函數と考へられるのである．

§27.　位置と運動量　上の觀察は固有値の問題の固有函數が既に說明した樣な意味で決まる場合を假定したのであるが，尙特別な場合がある．卽ち例へば位置の運算子 $\boldsymbol{q}_x=x\times$ の固有値の問題であつて，この時には上述の意味の固有函數は決まつて來ない．卽ち我々の固有値の問題の形式に從へば，x を變數として,

$$x\varphi_{x'}(x)=x'\varphi_{x'}(x)$$

を滿足する x' と $\varphi_{x'}(x)$ とが固有値及び固有函數となるわけであるから，$x'=x$ ならば $\varphi_{x'}(x)\neq0$, $x'\neq x$ ならば $\varphi_{x'}(x)=0$ の如き性質を，$\varphi_{x'}(x)$ はもつこととなり，$\int\varphi_{x'}{}^*(x)\varphi_{x'}(x)dx$ が有限と云ふ樣な意味は失はれることとなるし，任意の函數を $\varphi_{x'}(x)$ で展開すると云ふことも意味を失ふことになる．

從つて上の定理から直ちに，運動量 $\boldsymbol{p}_x$ と位置 $\boldsymbol{q}_x$ とは交換的でない故同じ固有函數を持ち得ないと云ふことは出來ない．併し $\boldsymbol{p}_x$ の固有函數は既に知れる如く，$\varphi=ce^{\frac{i2\pi}{h}p_xx}$ の形で一定に決まるのであるから，そしてこれが $\boldsymbol{q}_x$ の固有函數でないことも明かであるから，この意味に於て運動量と位置とは同じ固有函數をもたないと云ひ得る．

今 $\boldsymbol{q}_x$ の固有値の問題を幾分變へて，連續的な變數 x の代りに ε なる間隔をもつ點の集りを考へれば，x の代りに $n\varepsilon$（n は整數）なる個別的な値をとることとなる．從つて函數 $\varphi(x)$ もこれらの點に於てだけ定義されるとすれば，固有値 x' の代りに $n'\varepsilon$ をとることとなり，固有函數 $\varphi_{n'\varepsilon}(n\varepsilon)$ は $n'=n$ のとき 1 でその他では 0 とすることが出來る．$n'=n$ のとき 1 としたのは

$$\int\varphi_{x'}{}^*(x)\varphi_{x'}(x)dx\to\sum_n\varphi^*{}_{n'\varepsilon}(n\varepsilon)\varphi_{n'\varepsilon}(n\varepsilon)=\varphi^*{}_{n'\varepsilon}(n'\varepsilon)\varphi_{n'\varepsilon}(n'\varepsilon)=1$$

なる規格の條件に合ふ樣にしたのである．この時には任意の函數 $\varphi(n\varepsilon)$ は

$$\varphi(n\varepsilon)=\sum_{n'=-\infty}^{\infty}c_{n'}\varphi_{n'\varepsilon}(n\varepsilon)$$

の如く展開され，$c_{n'}$ は

$$c_{n'}=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\varphi(n\varepsilon)\varphi_{n'\varepsilon}(n\varepsilon)=\varphi(n'\varepsilon)$$

から與へられる．

そこで上の關係を連續的に變る變數の場合への極限化を行ひ，$n\varepsilon\to x$，$\varepsilon\to dx$，$c_n\to c(x')$ とせば，$\varphi_{n'\varepsilon}(n\varepsilon)/\varepsilon\to f_{x'}(x)$ として，上の式は

$$\varphi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}c(x')f_{x'}(x)dx',$$

$$c(x')=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)f_{x'}(x)dx=\varphi(x')$$

となるであらう．上の式から見ると，$\varphi_{n'\varepsilon}(n\varepsilon)/\varepsilon$ の極限化の函數は $\delta(x-x')$ の性質のものとなり，函數としては存在しないこととなる．卽ち問題は不定となる．

併し考へを統一して置く爲に，上の關係から見て，固有函數を $\delta(x-x')$ と見，任意の函數のこの固有函數による展開係數を $\varphi(x')$ と約束して置くことは差支ない．一般に變數が多くある場合には，固有函數を $\delta(x_1-x_1')\,\delta(y_1-y_1')\dots\delta(z_N-z_N')$ 又 $\varphi(x_1,\dots z_N)$ の展開係數を $\varphi(x_1',\dots z_N')$ と約束して置く．

δ-函數を必要としない固有値の問題の一般的な形式化(1)

(1) J. v. Neumann; Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik (1932), Julius Springer.

は多くの準備を必要とするので，玆では以上の觀察に止めて置く．

§28. 統計的概念の擴張．平均値 q_{1x} が x_1 と x_1+dx_1 との間にある確率は $dx_1\int\dots\int\psi^*\psi dy_1dz_1\dots dz_N$ であるから，平均値は明かに

$$\hat{q}_{1x}=\int\dots\int x_1\psi^*\psi dx_1dy_1\dots dz_N=\int x_1\psi^*\psi d\tau \quad \dots (100)$$

である．この概念を一般の運算子にも擴張する爲に，上式の積分の中の $\psi(x_1,\dots z_N)$ は q_{1x}, $q_{1y}\dots$ の固有値 x_1, $y_1\dots$ に對する固有函數によつて任意の函數を展開した場合の展開係數であると云ふ解釋を採用して，他の運算子 $\boldsymbol{A}$ についてこれと同じ事柄を形式的に先づ考へる．卽ち $\boldsymbol{A}$ の固有値，固有函數を夫々 α_a, φ_a とし，

$$\psi=\sum_{a=1}^{f}c_a\varphi_a \quad \dots\dots (101)$$

なる函數を考へる．c_a が (100) の ψ にあたる量であるから

「$c_a^*c_a$ が固有値 α_a の現はれる確率を表はす．又は更に一般に α_a の固有値をもつ固有函數が(101)の中に多くあるとすれば，これらの係數の絕對値の自乘の和 $\sum c_a^*c_a$ が α_a の現はれる確率を表はす」

と考へられる．實際量子力學ではこの物理的解釋に一般性を與へるのである．從つて $\boldsymbol{A}$ の値の平均値は

$$\hat{A}=\sum_{a=1}^{f}c_a^*c_a\alpha_a \quad \dots\dots (102)$$

となるが，一方で $\int\psi^*\boldsymbol{A}\psi d\tau$ も，(101) の式を代入することにより，固有函數の規格直交性から (102) の右邊と同じ式となるから，

$$\hat{A}=\int\psi^*\boldsymbol{A}\psi d\tau \quad\cdots\cdots(103)$$

と書くことが出來る.

平均値は實數であることが，(102) の式から直ちに判る. 又 (101) の式で表はされる粒子の狀態では，$\boldsymbol{A}$ なる量が種々の値をもつてゐる. 昔の力學では一つの量が種々の値を同時にもつことは許されなかつたが，量子力學では確率の概念の下にこれが許されるのである. 卽ち量子力學では個々の値をもつ狀態 φ_a の重なりが許されるのである(重なりの原理).

今 (101) で示された個々の狀態の重なりを許し，更に (102), (103) で示された平均値の概念を認めるとすれば，(103) から (102) に達するには $\boldsymbol{A}$ が線形運算子であることが大切な意味をもつことが判る (§20).

更に ψ はシュレーディンガーの式を滿足しなければならない事から，(101) に於ける係數 c_a の滿足すべき關係式が容易に得られる，卽ち

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t}+\boldsymbol{H}\psi=0$$

へ (101) を代入し，φ_b^* をかけて積分すれば，

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{dc_b}{dt}+\sum_{a=1}^{f}H_{ba}c_a=0 \quad\cdots\cdots(104)$$

なる c_a に關する聯立微分方程式が得られる.

玆に

$$H_{ba}=\int\varphi_b^*\boldsymbol{H}\varphi_a d\tau \quad\cdots\cdots(105)$$

である. $t=0$ に於ける c_a の値が與へられれば，後の時刻に於ける c_a は，この式から決定される.

玆に今迄に述べた數學的理論の基礎概念をまとめて述べるならば，

(i) 確率波の概念,

(ii) 運算子の概念,

(iii) 一般的な確率及び平均値の概念,

である. (i)の確率波の時間空間的變化はシュレーディンガーの式によつて決められることが主なことである. (ii) については運算子の線形エルミット性及びその値の概念が大切である. (iii) では(i)の場合の位置に關する確率の概念を，一般の量に擴張する事が主な事である.

(ii) の運算子の概念は，運動學的概念(kinematical conception) であつて，確率の概念をもつたシュレーディンガーの式によつて力學 (mechanics) が成立するのである.

以下これらの概念を基礎として得られる簡單な一二の結果を述べる.

§29. 不確定關係の證明 今迄の理論に，不確定原理が含まれてゐることの證明を行ふ．

簡單の爲に一次元の問題を考へて，座標 $\boldsymbol{q}=x\times$ と運動量 $\boldsymbol{p}=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x}$ の値の誤差の關係を調べてみる．先づ任意の狀態 ψ に於ける平均値は夫々

$$\hat{q}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^* x\psi dx,\quad \hat{p}=\frac{h}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx$$

である．誤差としては，平均値からの偏差の自乘の平均値をとる．卽ち

$$\left.\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{q}-\hat{q})^2\psi dx\equiv(\varDelta x)^2,\\&\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{p}-\hat{p})^2\psi dx\equiv(\varDelta p)^2.\end{aligned}\right\}\cdots\cdots(106)$$

所で $x-\hat{q}=\xi$，$\psi(x)=\varphi(\xi)e^{\frac{i2\pi}{h}\hat{p}\xi}$ の變換を行へば，

$$(\varDelta x)^2=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*(\xi)\xi^2\varphi(\xi)d\xi,$$

$$(\varDelta p)^2=-\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*\frac{\partial^2\varphi}{\partial\xi^2}d\xi=\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\varphi^*}{\partial\xi}\frac{\partial\varphi}{\partial\xi}d\xi$$

となる．玆に第二の式では，部分積分を行ひ，無限遠方で $\varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial\xi}=0$ なることを用ゐた．これは $\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi dx=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*\varphi d\xi$ が有限でなければならないからである．

今

$$f=\left|\frac{\xi\varphi}{2(\varDelta x)^2}+\frac{\partial\varphi}{\partial\xi}\right|^2\geqq 0$$

を考へて，これを書き換へると，

$$f=\frac{1}{4(\varDelta x)^4}\xi^2\varphi^*\varphi+\frac{1}{2(\varDelta x)^2}\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi\varphi^*\varphi)-\frac{1}{2(\varDelta x)^2}\varphi^*\varphi+\frac{\partial\varphi^*}{\partial\xi}\frac{\partial\varphi}{\partial\xi}$$

であるから，

$$\int_{-\infty}^{\infty}fd\xi=-\frac{1}{4(\varDelta x)^2}+\left(\frac{2\pi}{h}\right)^2(\varDelta p)^2\geqq 0$$

となる．從つて

$$\varDelta x\varDelta p\geqq\frac{h}{4\pi}\cdots\cdots(107)$$

なる不確定關係の成立することが判る．

$\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{q}$ とは互に交換的でない．實際

$$\boldsymbol{pq}-\boldsymbol{qp}=\frac{h}{2\pi i}\mathbf{1}\cdots\cdots(108)$$

である．玆に $\mathbf{1}$ は $1\times$ を意味する．不確定關係式(107)はこの抽象的な非交換性を，確率の概念の仲介によつて，感覺的な時空に於ける關係として，表はしてゐるものと考へられる．

§30. 昔の力學との關係 今運動量の平均値を時間について微分すれば，

$$\frac{d\hat{p}_{nx}}{dt}=\int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\boldsymbol{p}_{nx}\psi+\psi^*\boldsymbol{p}_{nx}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)d\tau$$

となる．玆に $d\tau=dx_1dy_1\ldots dz_N$ である．これへシュレーディンガーの式

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t}+H\psi=0,\quad H=\sum\frac{1}{2m_n}(p^2_{nx}+p^2_{ny}+p^2_{nz})+U$$

を代入すれば，

$$\frac{d\hat{p}_{nx}}{dt}=\frac{2\pi i}{h}\int(H^*\psi^*\cdot p_{nx}\psi-\psi^*p_{nx}H\psi)d\tau$$

となる．更にHがエルミット性であることを考へれば，積分の中の第一項は $\int\psi^*Hp_{nx}\psi d\tau$ となるから，

$$\frac{d\hat{p}_{nx}}{dt}=\frac{2\pi i}{h}\int\psi^*(Hp_{nx}-p_{nx}H)\psi d\tau \quad\text{.................}(109)$$

となる．所でHの形を考へれば，$Hp_{nx}-p_{nx}H=Up_{nx}-p_{nx}U=-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial U}{\partial x_n}$ であるから

$$\frac{d\hat{p}_{nx}}{dt}=-\int\psi^*\frac{\partial U}{\partial x_n}\psi d\tau \quad\text{...............................}(110)$$

同様にして $\hat{q}_{nx}$ の時間についての微分を作れば，(109) の p_{nx} の代りに q_{nx} の入つた式が得られ，

$$Hq_{nx}-q_{nx}H=\frac{1}{2m_n}(p^2_{nx}q_{nx}-q_{nx}p^2_{nx})=\frac{h}{2\pi i}\frac{p_{nx}}{m_n}$$ となるから，

$$\frac{d\hat{q}_{nx}}{dt}=\frac{1}{m_n}\hat{p}_{nx} \quad\text{..}(111)$$

を得る．従つて(110)は，

$$m_n\frac{d^2\hat{q}_{nx}}{dt^2}=-\int\psi^*\frac{\partial U}{\partial x_n}\psi d\tau \quad\text{..........................}(112)$$

となる．

今 $\psi^*\psi$ は$\hat{q}_{nx}$を中心とする狭い範圍 (Δx_n の程度の) 以外では 0 になるとし，且つこの範圍內では $\frac{\partial U}{\partial x_n}$ は殆んど一定

の値をもつとすれば，(112)の右邊で $\frac{\partial U}{\partial x_n}\approx\frac{\partial U}{\partial\hat{q}_{nx}}$ を積分の外に出し，$\int\psi^*\psi d\tau=1$ を考へて，

$$m_n\frac{d^2\hat{q}_{nx}}{dt^2}=-\frac{\partial U}{\partial\hat{q}_{nx}} \quad\text{.....................................}(113)$$

を得る．その他の座標についても全く同様の關係式が得られる．これらの式は，舊力學の運動方程式に他ならない．

従つて Δx_n の程度の誤差を無視し，従つて又不確定關係で決まる運動量の誤差を無視した程度の正確さの範圍內では昔の力學があてはまることとなる．卽ちこの程度に於て，粒子の運動軌道の考へが許されることになる．

併し注意すべきは，既に述べた樣に，確率波は時間と共に一般に擴散することであつて，[1] この時には舊力學の粒子の概念は，ある時間の後には，失はれることとなる．

更に上に述べた條件に従ふψを作るには，一定のエネルギーを持つたシュレーディンガーの式の特解の多くを加へて目的を達せられるであらう．従つてエネルギーも又或る程度の誤差を伴つてゐる．従つてこれらの誤差が平均値にくらべて小さい時に舊力學の概念はある時間內だけに於て許されることとなる．

§31.　時間を含むハミルトン函數　ハミルトン函數が時間 t を含む場合にも，その固有値の問題を考へることは差

(1) 特別な場合には（單振動をする質點の場合等）擴散しないで，平均の座標が何時までも舊力學の法則に従ふこともある．(Schrödinger, Abhandlungen zur Wellenmechanik, 56頁)

支ない．但し固有値は時間を媒介變數として含むことになるから一定の時刻に於て一定のエネルギーの値を問題とすることが可能となる．これはエネルギーと時間との間の不確定關係式に矛盾することではないだらうか．

これを解決する爲に，不確定關係式で云ふ所のエネルギーと時間とは，精しく云へばハミルトン函數が時間を含まない保存系 (conservative system) に於けるエネルギーと時間とであること，ハミルトン函數が時間を含む時には，更に別の體系との相互作用があることに注意する．さうすれば，時間を含むハミルトン函數の値を，時間を媒介變數として決め得ると云ふことは，これと相互作用をもつすべての別の體系を取り入れて保存系とした全體のエネルギーを決めてゐるのではなくて，別の體系のエネルギーは全然問はないで，單に考へてゐる小部分のエネルギーを問題としてゐると解釋することが出來る．從つて全體系から見るならば，全エネルギーの値には既に大きな誤差があるのだから，時刻の方が正確に決まり，從つて小部分のエネルギーの値を時間を媒介變數として決め得ると云ふことに，矛盾は起らないこととなる．

この考へを數式を用ゐて表はす爲に，問題としてゐる系 I だけが存在した時のハミルトン函數を $\boldsymbol{H}_1$ とし，これと相互作用をもつ別の體系 II だけが存在した時のハミルトン函數を $\boldsymbol{H}_2$ とし，これらが相互作用をもつ時の相互作用の

エネルギーを $\boldsymbol{H}_{12}$ とする．$\boldsymbol{H}_1+\boldsymbol{H}_2+\boldsymbol{H}_{12}$ の全體系は保存系であるから，シュレーディンガーの式は

$$\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{H}_1+\boldsymbol{H}_2+\boldsymbol{H}_{12}\right)\psi=0 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots(114)$$

となる．そこで $\boldsymbol{H}_2$ は $\boldsymbol{H}_1$, $\boldsymbol{H}_{12}$ にくらべて非常に大きい値をもつと假定し，II の系は殆んど何等の反作用を受けないと考へて，

$$\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{H}_2\right)\psi=0 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots(115)$$

が獨立に成立するとする．これの解を φ_2 とし，(114) で

$$\psi=\varphi_2\varphi$$

と置く．φ_2 は II の座標だけを含むが，上式の φ は近似的に I の座標だけに關すると假定して，φ の滿足する方程式を決める．上の ψ の値によつて (114) は

$$\left(\varphi_2\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}+\varphi_2\boldsymbol{H}_1+\boldsymbol{H}_{12}\varphi_2\right)\varphi=0$$

となる．$\boldsymbol{H}_{12}$ は II の座標を含むから，上の式で φ_2 をこれの左へ移すことは出來ない．今 $\int\varphi^*_2\varphi_2 d\tau_2=1$ として，上の方程式へ φ_2^* をかけて II の座標で積分すれば，

$$\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{H}_1+\hat{\boldsymbol{H}}_{12}\right)\varphi=0 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots(116)$$

を得る．玆に $\hat{\boldsymbol{H}}_{12}$ は II の狀態に關する相互作用のエネルギーの平均値である．普通に起る場合の樣に，II の系は殆んど昔の力學の法則に從つて運動してゐる場合をとつて，これと I との相互作用を考へる場合の如き時には，φ_2 は前節

で述べた樣に空間的擴がりの小さい波の塊を表はす故に，例へば $\varphi_2=\sum_a c_a e^{-\frac{i2\pi}{h}E_a^{(2)}t}$ (c_a は常數) の如き形であり，$\hat{H}_{12}$ は時間 t を含むこととなる．

方程式(116)は $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}_1+\hat{\boldsymbol{H}}_{12}$ をⅠのハミルトン函數と考へれば，保存系の場合のシュレーディンガーの式と全く同じ形である．この意味に於て，保存系について立てられたシュレーディンガーの式(27)が t を含むハミルトン函數の場合へも擴張されるのである．

第四章

シュレーディンガー運算子のマトリックス表現

§32. ヒルベルト空間　今任意の規格直交の函數列 φ_1, φ_2,… があつて，任意の波動函數はこの函數列でフーリエの定理に於ける樣に展開出來るものと假定する．即ち任意の ψ を

$$\psi(x_1y_1\ldots)=\sum_k\varphi_k(x_1y_1\ldots)\xi_k \quad\ldots\ldots\ldots\ldots (117)$$

の形に展開出來ると假定する．ξ_k は

$$\xi_k=\int\varphi_k^*\psi d\tau \quad\ldots\ldots\ldots\ldots (118)$$

で與へられることとなる．

更に他の規格直交の函數列を $\psi_1, \psi_2,\ldots$ とすれば，(117)に從つて

$$\psi_a(x_1,y_1\ldots)=\sum_k u_{ka}\varphi_k(x_1y_1\ldots) \quad\ldots\ldots\ldots\ldots (119)$$

の如く展開されるであらう．我々は**この關係は逆にすることが出來る**と假定する．即ち φ_k を $\psi_1, \psi_2,\ldots$ で展開することが出來ると假定する．$\psi_1, \psi_2,\ldots$ が規格直交であるから，

$$\delta_{ab}=\int\psi_a^*\psi_b d\tau=\sum_{kl}u_{ka}^*u_{lb}\int\varphi_k^*\varphi_l d\tau=\sum_k u_{ka}^*u_{kb},$$

即ち u_{ka} は

$$\sum_k u_{ka}^* u_{kb}=\delta_{ab} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(120)$$

の關係を滿足しなければならない.

更に(119)の逆の關係を $\varphi_l=\sum\limits_a u'_{al}\psi_a$ とかけば，これへ(119)を代入して $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ の線形獨立性から $\sum\limits_a u_{ka}u'_{al}=\delta_{kl}$ でなければならないこととなる. 從つて(120)の兩邊に u'_{bl} を掛けて b について加へれば，$u_{la}^*=u'_{al}$ となるから，上の式を

$$\sum_a u_{ka}u_{la}^*=\delta_{kl} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(121)$$

と書くことが出來る.

今

$$\boldsymbol{u}=\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13}\cdots\cdots \\ u_{21} & u_{22} & u_{23}\cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \end{pmatrix}$$

なる u_{ka} を要素にもつ表を上に記した如く一つの記號 $\boldsymbol{u}$ で代表することにする. 更にこの表で横と縦の竝びを交換し，要素の共軛複素數をとつたものを $\boldsymbol{u}^\dagger$ とすれば

$$\boldsymbol{u}^\dagger=\begin{pmatrix} u_{11}^* & u_{21}^* & u_{31}^*\cdots\cdots \\ u_{12}^* & u_{22}^* & u_{32}^*\cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \end{pmatrix}$$

となる. そこで $\boldsymbol{u}^\dagger\boldsymbol{u}$ なる積として，デテルミナントの掛算に於ける樣に計算して得られる表を意味するとすれば，

$$\boldsymbol{u}^\dagger\boldsymbol{u}=\begin{pmatrix} \sum\limits_k u_{k1}^*\,u_{k1} & \sum\limits_k u_{k1}^*\,u_{k2} & \cdots\cdots\cdots \\ \sum\limits_k u_{k2}^*\,u_{k1} & \sum\limits_k u_{k2}^*\,u_{k2} & \cdots\cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \end{pmatrix}$$

が得られる. (120)によつてこの表は

$$\boldsymbol{1}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0\cdots\cdots \\ 0 & 1 & 0\cdots\cdots \\ 0 & 0 & 1\cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \end{pmatrix}$$

となる. この關係を

$$\boldsymbol{u}^\dagger\boldsymbol{u}=\boldsymbol{1} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(122)$$

同樣にして(121)を

$$\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^\dagger=\boldsymbol{1} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(123)$$

とかく. 等式の意味は左右兩邊の表の相對應する要素が互に等しいことを意味する. この樣な計算法に從ふ表を數學ではマトリックス (matrix) と云ひ，$\boldsymbol{1}$ を單位マトリックスと云ふ. 更にマトリックスの和又は差としては，相對應する要素の和又は差を作ること，マトリックスに數を掛けることは各要素にその數をかけること，又すべての要素が 0 のものを $\boldsymbol{0}$ の記號で示すこと等を定義する.

(122), (123) の關係に從ふ $\boldsymbol{u}$ を整一マトリックス (unitary matrix), 又 (119) の關係を整一マトリックスによる函數列の轉換と云ふ. 玆に整一マトリックスによる轉換では，初めの函數列が規格直交ならば，轉換されたものも亦さうであることに注意すべきである.

我々は更に進んで，(117)に於ける ψ を $\psi_1, \psi_2\cdots\cdots$ で展開したとする. 即ち

$$\psi(x_1y_1\ldots)=\sum_a\psi_a(x_1,\ y_1\ldots)\eta_a\quad\cdots\cdots(124)$$

これへ(119)を代入するならば，(117)と比較して $\varphi_1, \varphi_2\ldots$ の線形獨立性から

$$\xi_k=\sum_a u_{ka}\eta_a\quad\cdots\cdots(125)$$

の關係が得られる．今 ξ 又は η として，$\xi_1, \xi_2,\ldots$ 又は $\eta_1, \eta_2,\ldots$ を縦に竝べたヱクトルを作り，$\boldsymbol{u}\eta$ として(125)の右邊で示される成分をもつヱクトルを意味すると定義する．(125)を

$$\xi=\boldsymbol{u}\eta\quad\cdots\cdots(126)$$

と書くことが出來る．

上述の事柄を幾何學的に次の樣に解釋することが出來る．卽ち $\varphi_1, \varphi_2\ldots$ を單位ヱクトルに持つ空間を想像するならば，これらは三次元空間に於ける直角座標軸の方向の單位ヱクトルに相當する．(117)は任意のヱクトル ψ の座標軸の方向の成分が $\xi_1, \xi_2,\ldots$ であることにあたり，(119)は一つの直角座標軸から他のものへの轉換にあたり，$\boldsymbol{u}$ の要素はこの二つの座標軸の方向の方向餘弦を示し，(126)はヱクトルの成分の間の轉換式にあたる．

更に進んで次の事柄を假定することが出來る．既に §27 の終りに述べた樣に，$\psi(x_1, y_1\ldots)$ は $\delta(x_1-x'_1)\ \delta(y_1-y'_1)\ldots$ なる特異な規格直交函數で ψ を展開した時の展開係數と定義されるから，$\psi(x_1y_1\ldots)$ は連續的に變はる座標軸の方向へのヱ

クトル ψ の成分と考へられる．(118)はこの假想座標軸を $\varphi_1, \varphi_2,\ldots$ で表はされる座標系へ轉換する際のヱクトル ψ の成分の轉換式と考へられることとなる．この意味では，ヱクトル ψ と ξ との記號を變へる必要もなくなる．

(126)から $\boldsymbol{u}$ の性質に從つて，又は直接 (117), (124) から $\int\psi^*\psi d\tau$ を作ることによつて，

$$\int\psi^*\psi d\tau=\sum_k\xi_k{}^*\xi_k=\sum_a\eta_a{}^*\eta_a\quad\cdots\cdots(127)$$

を得る．逆に $\sum_k\xi_k{}^*\xi_k=\sum_a\eta_a{}^*\eta_a$ が可逆な(126)の轉換に對し，任意のヱクトル η について成立することから，$\boldsymbol{u}$ の整一性(卽ち (122), (123) の關係) を證明することが出來る．更に(119)に於ける $\varphi_k(x_1\ldots)$，又は(124)の $\psi_a(x_1\ldots)$ を(125)の u_{ka} と比較するならば，これらを u_{ka} の k の代りに連續的な $x_1,\ldots$ の指標をもつた整一マトリックスと考へることが出來る．

上に想像した(127)が有限であるヱクトルで張られた空間をヒルベルト空間と云ふ．

§33. 固有値問題の幾何學的意味　今ヒルベルト空間に $\delta(x_1-x_1')\delta(y_1-y_1')\ldots\delta(z_N-z_N')$ なる單位ヱクトルで想像された座標軸をとる．又は，座標軸の方向で位置 $\boldsymbol{q}_{1x}, \boldsymbol{q}_{1y},\ldots$ が値をもつてゐる樣な座標軸を想像すると云ふことも出來る．そこで運算子 $\boldsymbol{A}$ をとり，

$$\boldsymbol{A}\psi=\psi'$$

と置けば，$\boldsymbol{A}$ はヱクトル ψ を ψ' に寫像すると考へることが

出來る．卽ち $\psi(x)$ の成分をもつヱクトルを $\psi'(x)$ なる成分をもつヱクトルに移動することを表はすと考へられる．そこで固有値の問題

$$\boldsymbol{A}\psi_a=\alpha_a\psi_a$$

は，空間の中に他の直角座標軸を選んで，その方向のヱクトルは寫像 $\boldsymbol{A}$ によつて方向を變へず單に大きさを變へる樣なそんな座標軸を選び出すことであると考へられる．

上の場合には，$\boldsymbol{q}$ が固有値をもつ座標軸を基礎にしたが，他の任意の座標軸を基礎にして，上の固有値の問題を言ひ表はすことが出來る．卽ち，新しい座標軸の單位ヱクトルが任意の規格直交系 $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ で表はされるとすれば，ψ_a は (119) によつて φ_k で表はされる．故に上の固有値問題の式の兩邊へ ψ_b^* をかけ，(119) を代入して積分すれば，

$$\sum_{l,k} u_{lb}^* u_{ka} a_{lk}=\alpha_a\delta_{ba} \qquad \text{(128)}$$

となる．玆に

$$a_{lk}=\int\varphi_l^*\boldsymbol{A}\varphi_k d\tau \qquad \text{(129)}$$

である．

今 a_{lk} を要素にもつマトリックスを $\boldsymbol{a}$ と書けば，(128) は容易に，マトリックスの掛算から

$$\boldsymbol{u}^\dagger\boldsymbol{a}\boldsymbol{u}=\boldsymbol{\alpha} \qquad \text{(130)}$$

と同じであることが判る．玆に $\boldsymbol{\alpha}$ は

$$\boldsymbol{\alpha}=\begin{pmatrix}\alpha_1 & 0 & 0\ldots\ldots \\ 0 & \alpha_2 & 0\ldots\ldots \\ 0 & 0 & \alpha_3\ldots\ldots \\ \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots\end{pmatrix}$$

なるマトリックスを意味する．この樣な右下斜めの對角線上の要素以外のものが 0 であるものを對角線マトリックス (diagonal matrix) と云ふ．從つて

(129) の關係で運算子 $\boldsymbol{A}$ にマトリックス $\boldsymbol{a}$ を對應させるなら，固有値の問題は適當な整一マトリックス $\boldsymbol{u}$ を求めて $\boldsymbol{a}$ を對角線マトリックスにする

と云ふ問題と同等になるであらう．(123) の關係によつて，(130) の式の兩邊に左から $\boldsymbol{u}$ をかければ，

$$\boldsymbol{a}\boldsymbol{u}=\boldsymbol{u}\boldsymbol{\alpha}$$

となる．又はこれを要素について書けば，

$$\sum_k a_{lk}u_{ka}=\alpha_a u_{la} \qquad \text{(131)}$$

となる．從つて $\boldsymbol{u}$ のすべての縱の竝び (a が一定) は，

$$\boldsymbol{a}\xi=\alpha\xi \qquad \text{(131)}'$$

なる形の式を滿足することとなり，今迄の固有値の問題の形式 $A\psi=\alpha\psi$ に對應する形となる．從つて逆に (131)′ を解くことによつて，固有値の問題の解が得られることを豫期することが出來よう．併しこの式は一般に無限に多くの成分をもつた聯立代數方程式を表はしてゐるから解を求める方法は今迄の微分方程式の形式で書かれたものより困難を

伴ふ.

此所に述べた考へは，實は，初等の解析幾何學で我々のよく知つてゐる事柄である. (130)から

$$\xi^\dagger \boldsymbol{u}^\dagger \boldsymbol{a} \boldsymbol{u} \xi = \xi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \xi$$

を作り，

$$\xi' = \boldsymbol{u}\xi \quad \cdots\cdots (132)$$

と置けば，上式は

$$\xi'^\dagger \boldsymbol{a} \xi' = \xi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \xi \quad 又は \quad \sum_{l,k} a_{lk} \xi_l'^* \xi_k' = \sum_a \alpha_a \xi_a^* \xi_a \quad \cdots\cdots (133)$$

となる. 玆に $\xi^\dagger$ は ξ の成分を横に竝べて，共軛複素數をとつたものを意味し，$\xi'^\dagger \boldsymbol{a}$ の要素は $\sum_l \xi_l'^* a_{lk}$ を意味する. 又容易に $\xi'^\dagger = (\boldsymbol{u}\xi)^\dagger = \xi^\dagger \boldsymbol{u}^\dagger$ であることが判る. これらの定義及び關係を上の式では用ゐてある.

所で(133)は，ξ' を(132)の關係で ξ に轉換して，$\sum_{l,k} a_{lk} \xi_l'^* \xi_k'$ なる二次線形式を $\sum_a \alpha_a \xi_a^* \xi_a$ なる平方線形式に轉換することを意味する. 平面解析幾何學で或る直角座標軸に關する二次の線形式を，他の直角座標軸に轉換してこれを平方線形式にすることは，我々のよく知る所であつて，線形式が楕圓を表はすならば，新しい座標軸は楕圓の軸と一致し，この方向のヹクトルが求める固有函數又は固有ヹクトルにあたることとなり，係數 α_a に相當するものは楕圓の長軸，短軸の逆數に比例する. 線形式が圓の場合には，固有値 α_a

は等しくなり，固有ヹクトルの方向は一義に決定しないけれども，これを直交に選ぶことが出來ることは明かであつて，§24 の多重固有値の場合に相當してゐる.

§34. 運算子のマトリックス表現　(129)の關係によつて今までの運算子にマトリックスを對應させることが出來る. 今運算子 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ にマトリックス $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ が夫々對應するものとすれば，$\boldsymbol{AB}$ には $\boldsymbol{ab}$ が對應することとなる. なぜなら，$\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{C}$ に對應するマトリックス $\boldsymbol{c}$ の要素を作るに(129)によつて，

$$c_{lk} = \int \varphi_l^* \boldsymbol{AB} \varphi_k d\tau$$

であるが，

$$\boldsymbol{B}\varphi_k = \sum_j b_{jk} \varphi_j, \quad b_{jk} = \int \varphi_j^* \boldsymbol{B} \varphi_k d\tau$$

であることを考へれば，

$$c_{lk} = \int \sum_j \varphi^*_l \boldsymbol{A} \varphi_j \cdot b_{jk} d\tau = \sum_j a_{lj} b_{jk}$$

となり，實際マトリックス $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ との積として $\boldsymbol{c}$ が與へられるからである. 又 $\lambda\boldsymbol{A}+\mu\boldsymbol{B}$ (λ, μ は普通の數) に $\lambda\boldsymbol{a}+\mu\boldsymbol{b}$ が對應することも明かであり，從つて運算子の和，積から作られた函數 $f(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \ldots)$ にマトリックスの函數 $f(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \ldots)$ が對應することとなる. 運算子 $\boldsymbol{0}=0\times$ にはマトリックス $\boldsymbol{0}$ が對應するから，運算子の關係式 $f(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \ldots)=\boldsymbol{0}$ はマトリックスの關係式 $f(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \ldots)=\boldsymbol{0}$ になることも明かである. 從つて例へば，位置と運動量との運算子の間の關係式(108)又は一般に，

$$\boldsymbol{p}_l\boldsymbol{q}_k-\boldsymbol{q}_k\boldsymbol{p}_l=\frac{h}{2\pi i}\delta_{kl}\mathbf{1},\quad \boldsymbol{p}_l\boldsymbol{p}_k-\boldsymbol{p}_k\boldsymbol{p}_l=\mathbf{0},\quad \boldsymbol{q}_l\boldsymbol{q}_k-\boldsymbol{q}_k\boldsymbol{q}_l=\mathbf{0} \qquad \cdots\cdots (134)$$

は，そのままマトリックスの關係式として成り立つ．玆に l, k は nx, ny, nz のすべての値をとる．

更に運算子のエルミット性は，

$$a_{lk}=\int\varphi_l^*\boldsymbol{A}\varphi_k d\tau=\int\varphi_k\boldsymbol{A}^*\varphi_l^* d\tau=\left(\int\varphi_k^*\boldsymbol{A}\varphi_l d\tau\right)^*$$

から，

$$a_{lk}=a_{kl}^* \qquad \cdots\cdots (135)$$

又は §32 で述べた記號で

$$\boldsymbol{a}=\boldsymbol{a}^\dagger \qquad \cdots\cdots (136)$$

と書かれることとなる．或は(63)の式で $\varphi=\sum_k \eta_k\varphi_k,\ \psi=\sum_l \xi_l\varphi_l$ と置けば，

$$\eta^\dagger\boldsymbol{a}\xi=\tilde{\xi}\boldsymbol{a}^*\eta^*$$

を得る．玆に $\tilde{\xi}$ は ξ の成分を横に並べたものを意味する．φ, ψ が任意であるに對應して η, ξ が任意であることを考へれば，又(135)の關係が得られる．

又シュレーディンガーの方程式は，(104)の式を導いたと全く同樣にして，$\psi=\sum_k \xi_k\varphi_k$ にとれば，

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{d\xi}{dt}+\boldsymbol{H}\xi=0 \qquad \cdots\cdots (137)$$

となる．但しここの $\boldsymbol{H}$ は $H_{lk}=\int\varphi_l^*\boldsymbol{H}\varphi_k d\tau$ の要素をもつマトリックスを意味する．

斯くしてシュレーディンガー運算子についての關係式とマトリックスについての關係式は全く平行に行はれ，兩者を區別する必要を感じない．更に(126)の式の樣に，ベクトルとマトリックス $\boldsymbol{a}$ との積 $\boldsymbol{a}\eta$ も(125)で定義された運算を行ふことである事を考へるならば，マトリックスも一つの運算子なのである．一般にあるものに他のものを對應させる關係を示すものを運算子と云ふ．これまで考へて居た運算子は微分することと，數を掛けることであつたが，量子力學ではこの形式の運算子をシュレーディンガー等が初めて指摘したので，これをシュレーディンガー運算子と呼んだのである．この意味でシュレーディンガー運算子とマトリックスとの記號を兩方とも太い文字で書いた．

(134)の如く，一般に互に交換しない代數量を抽象して，或る代數的抽象理論を作ることが出來る．ディラックはこの量を普通の數と區別する爲に q-數(quantum の頭文字)と呼んでゐる.[1] この量がシュレーディンガーの運算子となるか又はマトリックスとなるかは，ヒルベルト空間に如何なる座標系を採るかによつて決まるのである．

量子力學では，關係式(134)は主要な位置を占めてゐる．なぜならば，物理的意味のある量は，$\boldsymbol{p}_k$，$\boldsymbol{q}_l$ の函數として書かれるからである．今 $\boldsymbol{f}$ をその樣な函數とすれば，

(1) P. A. M. Dirac; The Principles of Quantum Mechanics.

$$\boldsymbol{f}\boldsymbol{q}_k-\boldsymbol{q}_k\boldsymbol{f}=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{p}_k}\quad \boldsymbol{f}\boldsymbol{p}_k-\boldsymbol{p}_k\boldsymbol{f}=-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{q}_k}\quad\ldots\ldots(138)$$

の關係が成立することが判る．玆に右邊の偏微分は，$\boldsymbol{f}$ の中の因數の順序を變へずに普通の微分を行つて得られる式を意味する．これを證明するには，今假りに $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}$ なる二つ函數について上の關係が正しとすれば，

$$(\boldsymbol{uv})\boldsymbol{q}_k-\boldsymbol{q}_k(\boldsymbol{uv})=\boldsymbol{u}(\boldsymbol{v}\boldsymbol{q}_k-\boldsymbol{q}_k\boldsymbol{v})+(\boldsymbol{u}\boldsymbol{q}_k-\boldsymbol{q}_k\boldsymbol{u})\boldsymbol{v}$$
$$=\frac{h}{2\pi i}\left(\boldsymbol{u}\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \boldsymbol{p}_k}+\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{p}_k}\boldsymbol{v}\right)=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial(\boldsymbol{uv})}{\partial \boldsymbol{p}_k}$$

となり，同様にして又

$$(\boldsymbol{uv})\boldsymbol{p}_k-\boldsymbol{p}_k(\boldsymbol{uv})=-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial(\boldsymbol{uv})}{\partial \boldsymbol{q}_k}$$

となる．從つて $\boldsymbol{uv}$ なる積についても(138)が成立することとなる．更に $\lambda\boldsymbol{u}+\mu\boldsymbol{v}$ について(138)が成立することも明かである．所で $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}$ が特に $\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{q}_l$ である場合には，(138) は (134) そのものとなつて正しいから，$\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{q}_l$ の和，積から定義される任意函數 $\boldsymbol{f}$ についても正しいこととなる．

玆に運算子又はマトリックスの函數について一言注意して置く．例へば水素原子の場合のポテンシャル函數に現はれる $1/r$ の運算子のマトリックス表現を如何にとるか等の問題が起る．シュレーディンガーの運算子は，云はば位置が値をもつてゐる(固有値となつてゐる)場合の表現である．この様な場合には，この固有値によつて函數を定義するのである．卽ち $1/\boldsymbol{r}$ 又は $\boldsymbol{r}^{-1}$ なる運算子として，$\boldsymbol{q}_x, \boldsymbol{q}_y, \boldsymbol{q}_z$ が

夫々 x, y, z の値をとるとき，$1/\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ なる値をもつ運算子と定義するのであつて，$1/\boldsymbol{r}$ のマトリックスの成分は，$\int\varphi_l^*\frac{1}{r}\varphi_k d\tau$ から計算されるものである．又 $\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\left(\frac{1}{\boldsymbol{r}}\right)$ としては，$\int\varphi_l^*\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{r}\right)\varphi_k d\tau$ から決められるマトリックスを意味する．

$$\int\varphi_l^*\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{r}\right)\varphi_k d\tau=-\int\varphi_l^*\frac{x}{r^3}\varphi_k d\tau$$

であるから，形式的に

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\frac{\boldsymbol{1}}{\boldsymbol{r}}=-\frac{\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{r}^3}$$

の如く書く．

$$\boldsymbol{p}_x\frac{\boldsymbol{1}}{\boldsymbol{r}}-\frac{\boldsymbol{1}}{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}_x=\frac{h}{2\pi i}\left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{r}-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}\right)=-\frac{h}{2\pi i}\frac{x}{r^3}\times$$

の關係から，(138)の關係が成立すことは明かである．更に又

$$\frac{\boldsymbol{1}}{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}\frac{\boldsymbol{1}}{\boldsymbol{r}}=\boldsymbol{1}$$

が，マトリックスの關係として成立する．玆に $\boldsymbol{r}$ は $\int\varphi_l^* r\varphi_k d\tau$ から定義されたマトリックスである．

§35. ハイゼンベルクのマトリックス　今迄は任意の規格直交函數列 $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ を基礎として，運算子にマトリックスを對應することを考へて，力學的關係卽ちシュレーディンガーの方程式による時間的變化のことは考へなかつた．この關係を考へる爲に，上の函數列を $\varphi_k^{(0)}$ と書き，$t=0$ でこの値になるシュレーディンガーの方程式の解を φ_k と書く

こととする. φ_kも亦規格直交函數であることが容易に判る. 卽ち

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\varphi_k}{\partial t}+\boldsymbol{H}\varphi_k=0,\ -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\varphi_l^*}{\partial t}+\boldsymbol{H}^*\varphi_l^*=0 \quad\cdots\cdots(139)$$

の初めの式へ φ_l^* をかけ, 第二の式へφ_kをかけて積分し, 二式の差を作るならば$\boldsymbol{H}$のエルミット性から

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\varphi_l^*\varphi_k d\tau=0$$

が得られる. 從つて $\int\varphi_l^*\varphi_k d\tau$ は時間に無關係であるから $t=0$ でこれが δ_{lk} に等しければ任意の時刻でも亦 δ_{lk} に等しい.

從つてこの時間を含んだ規格直交系をとるとすれば, 今迄のマトリックスは時間に對して一定の關係をもつてゐることとなる.

特に$\boldsymbol{H}$が固有値をもつ場合に, その固有値 E_k に對する固有函數を $\varphi_k^{(0)}$ とすれば, $\varphi_k=\omega(t)\varphi_k^{(0)}$ と置くことによつて,

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{d\omega}{dt}+E_k\omega=0$$

となるから

$$\omega=e^{-\frac{i2\pi}{h}E_k t}$$

となり,

$$\varphi_k=e^{-\frac{i2\pi}{h}E_k t}\varphi_k^{(0)}$$

となる. 從つてマトリックス$\boldsymbol{a}$の成分は

$$a_{kl}=e^{i2\pi\nu_{kl}t}a_{kl}^{(0)} \quad\cdots\cdots(140)$$

となる. 玆に

$$\nu_{kl}=(E_k-E_l)/h,\ a_{kl}^{(0)}=\int\varphi_k^{(0)*}\boldsymbol{A}\varphi_l^{(0)}d\tau \quad\cdots\cdots(141)$$

である.

歷史的にはマトリックスの理論はこの特別の形式から出發して漸次一般化された. この節の意味のマトリックスをハイゼンベルクのマトリックスと呼ぶことにする. 前の節迄に述べたマトリックスの諸關係は, 又何等變る所はない. なぜならφ_kは規格直交系を作つてゐるからである.

上の說明から, シュレーディンガーの方程式は時間と共に規格直交系を他の規格直交系に轉換して行くものであることが判る.

今特にエネルギーが値をもつてゐる場合に位置のハイゼンベルク・マトリックスを作れば, (140)によつて

$$(k|q_{n\xi}|l)=e^{i2\pi\nu_{kl}t}(k|q_{n\xi}^{(0)}|l) \qquad (\xi=x,y,z)\quad\cdots\cdots(142)$$

の形となる. 玆に $\boldsymbol{q}_{n\xi}$ のマトリックスの成分を$q_{n\xi,kl}$と書く代りに, ディラックの記號$(k|q_{n\xi}|l)$を用ゐた. 指標が多い時にはこの記號が屢々便利である. $(k|q_{n\xi}^{(0)}|l)$ は(141)で$\boldsymbol{A}$の代りに$x_n\times$を代入したものを意味する. ハイゼンベルクは初め上のマトリックスが粒子の位置を示すものとした. 今原子の核を座標原點にとり, 電子の電荷を $-e$ とすれば, 電氣能率は

$$\boldsymbol{P}_\xi=-e\sum_{n=1}^{N}\boldsymbol{q}_{n\xi} \quad (\xi=x,y,z)$$

である．昔の力學に從へば，$\ddot{P}_\xi$に比例する電磁波が射出され，その强さは $\sum_\xi |\ddot{P}_\xi|^2$ に比例する．この事から類推して，原子は(141)の第一式で與へられる振動數をもつた光を出し，その强さは

$$\nu_{kl}^4 \sum_\xi \left|(k|P_\xi^{(0)}|l)\right|^2 \quad \cdots\cdots (143)$$

に比例することとなる．(141)の第一の式は昔の量子論でボーアの振動數條件として知られてゐたものである．新しい量子力學の考へに從つて光の射出についての諸關係を更に一般的な基礎から導き出すことは，次の章で述べることとする．

運算子の固有値は觀測し得る値であることを述べたが，玆にエネルギーが値を持つてゐる場合の位置のマトリックス要素も觀測し得る値であることを注意して置く．他の量のマトリックス要素が如何に觀測され得るか否かについては，未だ判つてゐない．

§36．正準運動方程式　今ハイゼンベルクのマトリックスの要素

$$a_{kl} = \int \varphi_k^* \boldsymbol{A} \varphi_l d\tau$$

を t で微分するならば，(139)を參照して$\boldsymbol{H}$のエルミット性から，

$$\dot{a}_{kl} = \int \left(\frac{\partial \varphi_k^*}{\partial t} \boldsymbol{A} \varphi_l + \varphi_k^* \boldsymbol{A} \frac{\partial \varphi_l}{\partial t} \right) d\tau$$

$$= \frac{2\pi i}{h} \int (\boldsymbol{H}^* \varphi_k^* \cdot \boldsymbol{A} \varphi_l - \varphi_k^* \boldsymbol{A} \boldsymbol{H} \varphi_l) d\tau$$

$$= \frac{2\pi i}{h} \int \varphi_k^* (\boldsymbol{H}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{H}) \varphi_l d\tau$$

を得る．§34 に從へば，右邊の積分はマトリックス$\boldsymbol{H}$と$\boldsymbol{a}$とから作られた$\boldsymbol{Ha}-\boldsymbol{aH}$の$(k,l)$要素に等しい．從つて

$$\dot{a}_{kl} = \frac{2\pi i}{h} (\boldsymbol{Ha} - \boldsymbol{aH})_{kl} \quad \cdots\cdots (144)$$

又は

$$\dot{\boldsymbol{a}} = \frac{2\pi i}{h} (\boldsymbol{Ha} - \boldsymbol{aH}) \quad \cdots\cdots (144)'$$

となる．特に$\boldsymbol{a}$が位置又は運動量であるならば，(138)によつて，

$$\dot{\boldsymbol{q}}_k = \frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial \boldsymbol{p}_k}, \quad \dot{\boldsymbol{p}}_k = -\frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial \boldsymbol{q}_k} \quad \cdots\cdots (145)$$

を得る．この形は昔の正準運動方程式 (canonical equation of motion)と全く同じ形である．(144)′を導く時に，$\boldsymbol{A}$はtを含まないと假定したが，tを含むときは，式を導く計算の途中で，$\int \varphi_k^* \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \varphi_l d\tau$ を加へなければならない．$\boldsymbol{A}$が運算子$\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}$の函數ならばマトリックス$\boldsymbol{a}$も亦マトリックス$\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}$について同形の函數であるから，上の積分は $\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial t}$ に等しい．但しこれは$\boldsymbol{a}$の中へ陽に入つてゐるtで微分することを意味し，$\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}$の$t$についての微分を意味しないとする．從つて(144)′の代りに

$$\dot{\boldsymbol{a}} = \frac{2\pi i}{h} (\boldsymbol{Ha} - \boldsymbol{aH}) + \frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial t} \quad \cdots\cdots (146)$$

を得る．

今 $\boldsymbol{a}$ が t を含まず，$\boldsymbol{H}$ と交換性ならば，$\dot{\boldsymbol{a}}=0$，卽ち $\boldsymbol{a}$ は時間に無關係の常數となる．これは $\boldsymbol{a}$ のすべての要素が t に無關係なことを意味する．この様な量を運動の常數と云ふ．例へば $\boldsymbol{H}$ が t を含まなければこれを $\boldsymbol{a}$ にとることによつて $\boldsymbol{H}$ は運動の常數となる．マトリックスの交換性は運算子の交換性と同等であるから，作用子 $\boldsymbol{H}$ と交換的な運算子で代表される量は運動の常數である．從つて保存系では運動の常數はエネルギーと共に固有値を取り得ることとなる．

§37.　轉換理論の要旨　我々はヒルベルト空間の中に直交座標系を想像した．特に波動函數が $\psi(x_1, y_1 \ldots\ldots)$ なる成分をもつヹクトルと考へられる座標系では，位置の運算子が固有値をもつと考へた．位置と交換的でない量例へば運動量，エネルギーは，その場合固有値をもつてゐない．併し他の直交座標系を選ぶならば，例へば運動量，エネルギーが固有値をもつ様にすることが出來る．數學的には固有値の問題に於ける固有函數を決定すればよいのである．併しこの時には初めの位置の運算子はもはや固有値をもたない．例へばエネルギーが値をもつ時は，位置は(142)で示される様なマトリックスとなる．これが量子論に於ける轉換の理論 (transformation theory) の考へである．

この立場から云ふならば，この我々の講述の道筋は，位置が値をもつてゐる特定の座標系から出發したと云ふことが出來る．この座標系では，すべての量はシュレーディンガーの運算子であつた．他の座標系をとるならば，マトリックスの如き他の量となるが，これらの量の間の關係は不變なのである．從つてこれらの關係だけを抽出して，シュレーディンガー運算子とかマトリックスとかの特殊の表現 (representation)を與へない代數量を考へて，所謂 q－數の理論を作るならば，ヒルベルト空間に於ける特殊の座標系を採用することから解放されることとなる．§**34** の脚註に揭げた著書で，ディラックはこの様な立場から理論を構成した．

玆に一つの特別な例を述べて，この章を終らうと思ふ．卽ち運動量が値をもつ座標系を選ぶならば，シュレーディンガー運算子はいかなる形のもので置き換えられるかとの例題である．簡單の爲に，唯一つの變數 x だけの場合をとるに，先づ運動量の固有値の問題

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\varphi}{\partial x}=\alpha\varphi \qquad (147)$$

をとかねばならない．この式の規格直交の固有函數は，§**25** の (95) の次の式で旣に與へられてゐる．卽ち

$$\varphi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{h}}e^{\frac{i2\pi}{h}px} \qquad (148)$$

である．玆に $\alpha=p$ であつて，$-\infty$ から $+\infty$ までのすべての値をとり得る．$\varphi_p(x)$ は波動函數が $\psi(x)$ の成分をもつ座標系に關して，$\varphi_p(x)$ の成分をもつ單位ヹクトルを表はしてゐ，これらが直交座標系を作つてゐる．今任意のヹクトルのこの座標系に於ける成分を $\chi(p)$ とすれば，初めの座標系に於

ける成分 $\psi(x)$ は

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty}\chi(p)e^{\frac{i2\pi}{h}px}dp \quad\text{..........................}\quad (149)$$

で與へられるであらう．これはフーリエの積分定理に他ならない．この逆の關係は，

$$\chi(p)=\frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-\frac{i2\pi}{h}xp}dx \quad\text{......................}\quad (150)$$

である．

ヒルベルト空間で位置が値をもつ座標系を基礎に置いた時，特にこれを位置空間と云ひ，運動量が値をもつ座標系を基礎に置いた時特にこれを運動量空間と云ふ．今運動量空間で $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{q}$ が如何なる形になるかをみるには，$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}$, $x\psi(x)$ が運動量空間で如何になるかを考へればよろしい．(150) の $\psi(x)$ の代りにこれらをとれば，

$$\frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}e^{-\frac{i2\pi}{h}xp}dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{h}}\frac{h}{2\pi i}\Big[\psi(x)e^{-\frac{i2\pi}{h}xp}\Big]_{-\infty}^{\infty}+p\frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-\frac{i2\pi}{h}xp}dx=p\chi(p),$$

$$\frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty}x\psi(x)e^{-\frac{i2\pi}{h}xp}dx$$

$$=-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-\frac{i2\pi}{h}px}dx=-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial p}\chi(p)$$

となるから，

$$\boldsymbol{p}=p\times,\quad \boldsymbol{q}=-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial p} \quad\text{..............................}\quad (151)$$

となる．この形でも $\boldsymbol{pq}-\boldsymbol{qp}=\frac{h}{2\pi i}\boldsymbol{1}$ が不變であることは明かである．又 $\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx$ が不變であることも容易に判る．即ち

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx=\frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}\chi^*(p)e^{-\frac{i2\pi}{h}px}dp\int_{-\infty}^{\infty}\chi(p')e^{\frac{i2\pi}{h}p'x}dp'$$

$$=\frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty}\chi^*(p)dp\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}\chi(p')e^{-\frac{i2\pi}{h}(p-p')x}dp'=\int_{-\infty}^{\infty}\chi^*(p)\chi(p)dp.$$

第五章

光の輻射，吸收の理論

§38. 光の場 今迄述べた考への一つの應用の例として，標題に揭げた問題を取扱ふ．卽ち電磁波の場の中に一つの原子があつて，電磁波と原子との相互作用を觀察するのである．我々は電磁波と原子とを一つの體系と考へて，この體系に對するシュレーディンガーの方程式を立てると云ふ考へで進む．併し極めて一般的な問題の取扱ひ[1]は簡單でないので，玆ではこの樣な問題の量子力學的な考へ方を說明するのを主な目的とする．

初めに眞空に於ける光の場についての觀察を行ふ．光の場はマックスエルの電磁方程式で與へられるのであるが，これからはヱクトル·ポテンシャル $\mathfrak{A}$ をとつて，電場の强さ $\mathfrak{E}$ 磁場の强さ $\mathfrak{H}$ は夫々

$$\mathfrak{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathfrak{A}}{\partial t},\ \mathfrak{H}=\mathrm{rot}\,\mathfrak{A} \qquad \cdots\cdots(152)$$

で與へられるとする．玆に $\mathfrak{A}$ の三つの成分 $\mathfrak{A}_x$, $\mathfrak{A}_y$, $\mathfrak{A}_z$ は

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathfrak{A}_\xi}{\partial t^2}-\varDelta\mathfrak{A}_\xi=0,\ \mathrm{div}\,\mathfrak{A}=0 \qquad \cdots\cdots(153)$$

の關係を滿足しなければならない．玆に $\xi=x, y, z$,

(1) W. Heisenberg 及び W. Pauli; Zeitschrift für Physik, Bd. 56 (1929), S. 1, Bd. 59 (1929), S. 711. L. Rosenfeld; Mém. de l'Inst. Henri Poincaré II (1932), p. 24.

$\varDelta=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ を意味する．(152) の $\mathfrak{E}$, $\mathfrak{H}$ の値によつて，(153) の關係により實際眞空に於けるマックスエルの方程式が滿足されてゐることを見るのは容易である．

取扱ひを簡單にする爲に，我々の視野を原點を中心とする長さ $2L$ の立方體の中に限り，或る時刻に與へられた任意の場が光粒子の集りであることを表はす爲に，(153) の第一式の特解として單振動をする平面波に相當するものを求める．この平面波の集合が任意の場を表はし得る爲には，フーリエの定理から判る樣に，波は $2L$ の周期をもてばよいから，實數の解は

$$\mathfrak{A}_{\mathfrak{k}\xi}=A_{\mathfrak{k}\xi}e^{i2\pi[\nu_{\mathfrak{k}}t-\frac{1}{2L}(\mathfrak{k},\mathfrak{r})]}+B_{\mathfrak{k}\xi}e^{-i2\pi[\nu_{\mathfrak{k}}t-\frac{1}{2L}(\mathfrak{k},\mathfrak{r})]} \qquad \cdots\cdots(154)$$

の形である．玆に $\mathfrak{k}$ は k_x, k_y, k_z の成分をもつヱクトル，$\mathfrak{r}$ は x, y, z なる座標のヱクトルとし，$(\mathfrak{k},\mathfrak{r})=k_xx+k_yy+k_zz$ を意味する．更に k_x, k_y, k_z は $0,\pm1,\pm2,\ldots$ の整數をとるが，これらがすべて同時に 0 の時は進行する波を表はさないから，この場合は除外する．更に $\mathfrak{A}_{\mathfrak{k}\xi}$ が實數であるから

$$A_{\mathfrak{k}\xi}^*=B_{\mathfrak{k}\xi}$$

であり．又 (154) が (153) の第一式の解である爲に，

$$|\mathfrak{k}|=\frac{2L\nu_{\mathfrak{k}}}{c} \qquad \cdots\cdots(155)$$

でなければならない．

今

$$a_{\mathfrak{k}\xi}=A_{\mathfrak{k}\xi}e^{i2\pi\nu_{\mathfrak{k}}t},\quad b_{\mathfrak{k}\xi}=B_{\mathfrak{k}\xi}e^{-i2\pi\nu_{\mathfrak{k}}t} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (156)$$

と置けば.

$$a_{\mathfrak{k}\xi}^{*}=b_{\mathfrak{k}\xi} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (157)$$

であり, 又一般の場は

$$\mathfrak{A}_{\xi}=\frac{1}{(2L)^{\frac{3}{2}}}\sum_{\mathfrak{k}=-\infty}^{\infty}\left\{a_{\mathfrak{k}\xi}e^{-\frac{i\pi}{L}(\mathfrak{k},\mathfrak{r})}+b_{\mathfrak{k}\xi}e^{\frac{i\pi}{L}(\mathfrak{k},\mathfrak{r})}\right\} \quad\cdots\cdots\cdots (158)$$

となる. 玆に $1/(2L)^{\frac{3}{2}}$ をつけたのは, $e^{\pm\frac{i\pi}{L}(\mathfrak{k},\mathfrak{r})}/(2L)^{\frac{3}{2}}$ の函數が $(2L)^3$ の容積の中で規格直交になつてゐる樣にしたのである. 又和は k_x, k_y, k_z の各について同時に 0 の場合を除いて $-\infty$ から $+\infty$ までとる.

尙(153)の第二の式から

$$(a_{\mathfrak{k}}\mathfrak{k})=0,\quad (b_{\mathfrak{k}}\mathfrak{k})=0 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (159)$$

の關係がなり立つ. 玆に $a_{\mathfrak{k}}, b_{\mathfrak{k}}$ は $a_{\mathfrak{k}x}, a_{\mathfrak{k}y}, a_{\mathfrak{k}z}$; $b_{\mathfrak{k}x}, b_{\mathfrak{k}y}, b_{\mathfrak{k}z}$ を成分とするヱクトルとする.

以上の事柄は昔の理論の範圍であるが, これを量子力學的に考へるのに, 電磁場の量は一般にもはや普通の量ではなくて, q－數であると考へる. 卽ち $\mathfrak{A}$, 從つて $a_{\mathfrak{k}\xi}, b_{\mathfrak{k}\xi}$, をこれから一般に互に交換的でない數と考へるのである. 交換の法則が如何になるかは, これから決める問題なのである.

その前に(157)の關係をいかに解釋して置くべきかを考へるのに, 一般に $a_{\mathfrak{k}\xi}, b_{\mathfrak{k}\xi}$ は複素數であるから,

$$a_{\mathfrak{k}\xi}=x+iy,\quad b_{\mathfrak{k}\xi}=x-iy$$

と置く. 玆に x, y は實數である. 所で量子力學では, 實數にはエルミット的の量が對應する. 卽ちマトリックスと考へて,

$$\boldsymbol{x}^{\dagger}=\boldsymbol{x} \qquad \boldsymbol{y}^{\dagger}=\boldsymbol{y}$$

なる性質の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ が對應する. 從つて $\boldsymbol{a}^{\dagger}_{\mathfrak{k}\xi}$ を作ると,

$$\boldsymbol{a}^{\dagger}_{\mathfrak{k}\xi}=\boldsymbol{x}^{\dagger}-i\boldsymbol{y}^{\dagger}=\boldsymbol{x}-i\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b}_{\mathfrak{k}\xi}$$

となるから, (157)に對應する關係は

$$\boldsymbol{a}^{\dagger}_{\mathfrak{k}\xi}=\boldsymbol{b}_{\mathfrak{k}\xi} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (160)$$

と考へられる.

更に場の電磁エネルギー

$$E=\frac{1}{8\pi}\int(\mathfrak{E}^2+\mathfrak{H}^2)d\mathfrak{r}=\frac{1}{8\pi}\int\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\mathfrak{A}}{\partial t}\right)^2+(\mathrm{rot}\,\mathfrak{A})^2\right]d\mathfrak{r}$$

を計算する. 玆に $d\mathfrak{r}=dxdyd.$ で積分は勿論 $(2L)^3$ の容積內に施す. (158)の式を代入し, $e^{\frac{i\pi}{L}(\mathfrak{k},\mathfrak{r})}/(2L)^{\frac{3}{2}}$ が規格直交であることを考へに入れ, 且つ $a_{\mathfrak{k}\xi}$, を q－數と解釋する故に項の順序を變へない樣に注意するならば, 容易に

$$E=\frac{\pi}{c^2}\sum_{\mathfrak{k}}\nu_{\mathfrak{k}}^2\{(a_{\mathfrak{k}}b_{\mathfrak{k}})+(b_{\mathfrak{k}}a_{\mathfrak{k}})\}-\frac{\pi}{2c^2}\sum_{\mathfrak{k}}\frac{\nu_{\mathfrak{k}}^2}{\mathfrak{k}^2}\{(a_{\mathfrak{k}}\mathfrak{k})(b_{\mathfrak{k}}\mathfrak{k})$$
$$+(b_{\mathfrak{k}}\mathfrak{k})(a_{\mathfrak{k}}\mathfrak{k})+(a_{\mathfrak{k}}\mathfrak{k})(a_{-\mathfrak{k}}\mathfrak{k})+(b_{\mathfrak{k}}\mathfrak{k})(b_{-\mathfrak{k}}\mathfrak{k})\} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (161)$$

が得られる. 玆に(156)から得られる

$$\dot{a}_{\mathfrak{k}}=i2\pi\nu_{\mathfrak{k}}a_{\mathfrak{k}},\quad \dot{b}_{\mathfrak{k}}=-i2\pi\nu_{\mathfrak{k}}b_{\mathfrak{k}} \quad\cdots\cdots\cdots\cdots (162)$$

なる關係を計算の途中で用ゐてある.

§39. 光の偏りと交換法則の導入 $\mathfrak{k}$ の方向の單位ヱクトルを $\mathfrak{e}_{\mathfrak{k}}^{(0)}$ とし, これと $\mathfrak{e}_{\mathfrak{k}}^{(1)}$, $\mathfrak{e}$)なる單位ヱクトルが右手

直角座標系を作るとする. $a_\mathfrak{k}$, $b_\mathfrak{k}$ のこの座標系に於ける成分を夫々, $\alpha_{\mathfrak{k}0}$, $\alpha_{\mathfrak{k}1}$, $\alpha_{\mathfrak{k}2}$; $\beta_{\mathfrak{k}0}$, $\beta_{\mathfrak{k}1}$, $\beta_{\mathfrak{k}2}$, とすれば,

$$\alpha_{\mathfrak{k}0}=\sum_{\xi=x,y,z}\mathfrak{e}_{\mathfrak{k},\xi}^{(0)}a_{\mathfrak{k}\xi},\ \alpha_{\mathfrak{k}\lambda}=\sum_{\xi=x,y,z}\mathfrak{e}_{\mathfrak{k},\xi}^{(\lambda)}a_{\mathfrak{k}\xi}\quad(\lambda=1,2)\ldots(163)$$

及び同様の關係が $\beta_\mathfrak{k}$ と $b_\mathfrak{k}$ との間になりたつ. 從つて

$$(a_\mathfrak{k},b_\mathfrak{k})=\sum_\lambda\alpha_{\mathfrak{k}\lambda}\beta_{\mathfrak{k}\lambda}+\alpha_{\mathfrak{k}0}\beta_{\mathfrak{k}0},$$

$$(b_\mathfrak{k},\ a_\mathfrak{k})=\sum_\lambda\beta_{\mathfrak{k}\lambda}\alpha_{\mathfrak{k}\lambda}+\beta_{\mathfrak{k}0}\alpha_{\mathfrak{k}0},$$

$$(a_\mathfrak{k}\mathfrak{k})=|\mathfrak{k}|\alpha_{\mathfrak{k}0},\quad(b_\mathfrak{k}\mathfrak{k})=|\mathfrak{k}|\beta_{\mathfrak{k}0},$$

$$-(a_{-\mathfrak{k}},\ \mathfrak{k})=|\mathfrak{k}|\alpha_{-\mathfrak{k},0},\quad-(\beta_{-\mathfrak{k}},\ \mathfrak{k})=|\mathfrak{k}|\beta_{-\mathfrak{k},0}$$

となるから,

$$E=\frac{\pi}{c^2}\sum_{\mathfrak{k}\lambda}\nu_\mathfrak{k}^2(\alpha_{\mathfrak{k}\lambda}\beta_{\mathfrak{k}\lambda}+\beta_{\mathfrak{k}\lambda}\alpha_{\mathfrak{k}\lambda})$$
$$+\frac{\pi}{2c^2}\sum_\mathfrak{k}\nu_\mathfrak{k}^2(\alpha_{\mathfrak{k}0}\beta_{\mathfrak{k}0}+\beta_{\mathfrak{k}0}\alpha_{\mathfrak{k}0}+\alpha_{\mathfrak{k}0}\alpha_{-\mathfrak{k}0}+\beta_{\mathfrak{k}0}\beta_{-\mathfrak{k}0})\ldots(164)$$

となり, 更に(159)は

$$\alpha_{\mathfrak{k}0}=0,\qquad\beta_{\mathfrak{k}0}=0\ldots\ldots\ldots\ldots(165)$$

となる.

從つて電磁場のハミルトン函數として,

$$\boldsymbol{H}^{(r)}=\frac{\pi}{c^2}\sum_{\mathfrak{k}\lambda}\nu_\mathfrak{k}^2(\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}\lambda}\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda}+\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda}\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}\lambda})\ \ldots\ldots\ldots\ldots(166)$$

を假定することにする, 又(163)の逆の關係式として,

$$\boldsymbol{a}_{\mathfrak{k}\xi}=\sum_\lambda\mathfrak{e}_{\mathfrak{k}\xi}^{(\lambda)}\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}\lambda}\ ,\quad\boldsymbol{b}_{\mathfrak{k}\xi}=\sum_\lambda\mathfrak{e}_{\mathfrak{k}\xi}^{(\lambda)}\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda}\ldots\ldots(167)$$

により, (158)の $\mathfrak{A}_\xi$ は $\boldsymbol{\alpha}_\mathfrak{k}$, $\boldsymbol{\beta}_\mathfrak{k}$ で表はされるとする. この量

によつて, (153)の關係を q-數と考へても, この關係は滿足され, 從つてマックスエルの式の $\mathfrak{E}$, $\mathfrak{H}$ を q-數と考へても, この式が滿足されてゐることは明かである.

そこで交換法則を決める爲に, $\boldsymbol{\alpha}_\mathfrak{k}$, $\boldsymbol{\beta}_\mathfrak{k}$ の時間微分は(144)′の形式で與へられることを要求する. 卽ち

$$\frac{h}{2\pi i}\dot{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathfrak{k}\lambda}=\boldsymbol{H}^{(r)}\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}\lambda}-\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}\lambda}\boldsymbol{H}^{(r)},\quad\frac{h}{2\pi i}\dot{\boldsymbol{\beta}}_{\mathfrak{k}\lambda}=\boldsymbol{H}^{(r)}\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda}-\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda}\boldsymbol{H}^{(r)}$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots(168)$$

一方で(162)の關係から

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathfrak{k}\lambda}=i2\pi\nu_\mathfrak{k}\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}\lambda}\quad\dot{\boldsymbol{\beta}}_{\mathfrak{k}\lambda}=-i2\pi\nu_\mathfrak{k}\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda}\ldots\ldots\ldots\ldots(169)$$

でなければならない. 今$(\mathfrak{k},\lambda)$の異なることは, 光粒子が異なることである故に, この場合に $\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}\lambda}$, $\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda}$ は互に交換的であると考へれば, (168)と(169)とは

$$\left.\begin{array}{l}\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda}\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}'\lambda'}-\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}'\lambda'}\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda}=\dfrac{c^2h}{2\pi\nu_\mathfrak{k}}\delta_{\mathfrak{k}\mathfrak{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}\mathbf{1},\\ \boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda}\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}'\lambda'}-\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}'\lambda'}\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda}=\mathbf{0},\quad\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}\lambda}\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}'\lambda'}-\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}'\lambda'}\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}\lambda}=\mathbf{0}\end{array}\right\}\ldots(170)$$

の時兩立することが容易に判る.

§40. エネルギーの固有値問題 (170)の條件の下にエネルギー(166)の固有値を計算する. (166)の和の中の各項は, (170)によつて互に交換的であるから, 或る一つの項を觀察すればよい. 簡單の爲指標 $\mathfrak{k}$, λ を省いて,

$$\boldsymbol{H}_{\mathfrak{k}\lambda}=\boldsymbol{H}=\frac{\pi\nu^2}{c^2}(\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha})\ \ldots\ldots\ldots\ldots(171)$$

と置く. 玆に(170)によつて,

$$\boldsymbol{\beta\alpha}-\boldsymbol{\alpha\beta}=\frac{c^2h}{2\pi\nu}\mathbf{1} \quad \cdots\cdots\cdots (172)$$

である．これからすべての量は時間 t に無關係とする．例へば $t=0$ の値とする．時間に對する關係は後からシュレーディンガーの式 (後の §**42**) の解により補はれる (§**35**)．質點の場合の樣に，$\boldsymbol{\alpha}$ を $\boldsymbol{q}$ に $\boldsymbol{\beta}$ を $\boldsymbol{p}$ に對應させて考へるならば，$\boldsymbol{\alpha}=\alpha\times, \boldsymbol{\beta}=\frac{c^2h}{2\pi\nu}\frac{\partial}{\partial\alpha}$ と置いて，(171) の固有値の問題を解いたらどうかと云ふことを，(172) の式は暗示する．併し質點の場合には $\boldsymbol{q}$ の値は連續的に變る事を物理的の理由から知つてるたけれども，今の場合に $\boldsymbol{\alpha}$ の値が如何なる性質のものであるかは初めからは判つてるない．從つて上の樣な運算子を假定することは，そんなに正しい事では無い．所で物理的に知つてるる事柄は，光は $h\nu$ なるエネルギーの値をもつた粒子として存在することであるから，(171) が ν の振動數に關するエネルギーの式であることを考へれば，エネルギーは一般に $h\nu$ の整數倍になるであらう(ある附加常數があるかも知れないが)と云ふ事柄である．エネルギーが固有値をもつときには，この固有値を指標とするマトリックスで，その他の量は書かれる事を考へるならば，我々は $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}$ をその要素が $\alpha_{E,E'}, \beta_{E,E'}$ の如きエネルギーの値 E (又は E') に關するマトリックスと考へるべきである．從つて $\boldsymbol{H}$ は對角線マトリックス (§**33**) になつてるる筈だから，

$$H_{E,E'}=E\delta_{E,E'} \quad \cdots\cdots\cdots (173)$$

と假定し，この條件の下に $\alpha_{E,E'}, \beta_{E,E'}$ 及び E の値が如何になるかを求めるとする．故にここの方法は，量をマトリックスと考へた時に，固有値の問題をとく例となるのである．

(171) から，(172) を使つて容易に，

$$\boldsymbol{\alpha H}=\frac{\pi\nu^2}{c^2}(\boldsymbol{\beta\alpha}^2+\boldsymbol{\alpha}^2\boldsymbol{\beta})-\frac{h\nu}{2}\boldsymbol{\alpha},$$

$$\boldsymbol{H\alpha}=\frac{\pi\nu^2}{c^2}(\boldsymbol{\beta\alpha}^2+\boldsymbol{\alpha}^2\boldsymbol{\beta})+\frac{h\nu}{2}\boldsymbol{\alpha}$$

を得るから，

$$\boldsymbol{H\alpha}-\boldsymbol{\alpha H}=h\nu\boldsymbol{\alpha} \quad \cdots\cdots\cdots (174)$$

となる．故に兩邊の (E, E') 要素を作れば (173) を考へに入れて

$$(E-E')\alpha_{E,E'}=h\nu\alpha_{E,E'} \quad 又は \quad (E-E'-h\nu)\alpha_{E,E'}=0$$

となる．故に

$$E=E'+h\nu$$

でなければ，$\alpha_{E,E'}=0$ となる．從つて E_0 が一つの固有値ならば，$E_0+h\nu$ も一つの固有値となり，從つて一般に固有値は

$$E_n=E_0+nh\nu \quad (n\ は整數) \quad \cdots\cdots\cdots (175)$$

の形となる．この時 $\boldsymbol{\alpha}$ は $\alpha_{E_n, E_{n-1}}$ の要素だけが一般に 0 でない．(160) から (167) により，

$$\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\alpha}^\dagger \quad 卽ち \quad \beta_{E',E}=\alpha^*_{E,E'}$$

であるから，$\boldsymbol{\beta}$ は β_{E_{n-1}, E_n} だけが一般に 0 でない．從つて $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}$ の表を $\ldots E_{-1}, E_0, E_1, E_2, \ldots$ の順に從つて作るならば，

$\boldsymbol{\alpha}$ の表は右下斜めの對角線に平行なすぐ下の線に沿つた要素だけが 0 でなく, $\boldsymbol{\beta}$ の表はすぐ上の線に沿つた要素だけが 0 でないこととなる.

茲に上の關係以外の, E と E' との關係を任意にとるとしても, $\boldsymbol{\alpha}$ 從つて $\boldsymbol{\beta}$ のすべての要素を 0 にとるならば, 卽ちこれらのマトリックスを $\mathbf{0}$ にとるならば, (174) の關係だけは滿足されるけれども, (172) の關係は滿足されないから, 許されるエネルギーの値は (175) の形のものだけである.

次にマトリックスの要素を決定する爲に, (171), (172) から先づ

$$\boldsymbol{\alpha\beta}=\frac{c^2}{2\pi\nu^2}\left(\boldsymbol{H}-\frac{h\nu}{2}\mathbf{1}\right)$$

を得て, 兩邊の對角線要素 (E_n, E_n) を作るならば,

$$\alpha_{E_n, E_{n-1}}\beta_{E_{n-1}, E_n}=\frac{c^2}{2\pi\nu^2}\left(E_n-\frac{h\nu}{2}\right)$$

となり, 更に $\beta_{E_{n-1}, E_n}=\alpha^*_{E_n, E_{n-1}}$ を考へて

$$\left|\alpha_{E_n, E_{n-1}}\right|^2=\frac{c^2}{2\pi\nu^2}\left(E_n-\frac{h\nu}{2}\right)$$

を得る. 左邊は正の値だから一般に

$$E_n\geqq\frac{h\nu}{2}$$

でなければならない. 故に

$$E_n=h\nu\left(n+\frac{1}{2}\right),\quad n=0,1,2 \qquad\cdots\cdots\cdots\cdots (176)$$

となり, 又この値によつて

$$\left|\alpha_{E_n, E_{n-1}}\right|=\sqrt{\frac{c^2hn}{2\pi\nu}}$$

となる. マトリックスの要素を指定するのに, E_n の代りに n を用ゐても差支ないから,

$$\left.\begin{aligned}&\alpha_{n,n-1}=\sqrt{\frac{c^2hn}{2\pi\nu}}e^{i2\pi\gamma_n}\\ &\text{となる. 從つて又}\\ &\beta_{n-1,n}=\alpha^*_{n,n-1}=\sqrt{\frac{c^2hn}{2\pi\nu}}e^{-i2\pi\gamma_n}\end{aligned}\right\}\cdots\cdots\cdots\cdots (177)$$

茲に γ_n は任意の實數である.

一般の場合に歸るならば, 光の場のエネルギーの値は

$$E=E_{n_1,n_2,\ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}\ldots}=\sum_{\mathfrak{k},\lambda}h\nu_{\mathfrak{k}}\left(n_{\mathfrak{k}\lambda}+\frac{1}{2}\right)\cdots\cdots\cdots\cdots (178)$$

で與へられることとなる. 茲に $n_{\mathfrak{k},\lambda}$ は進む方向が $\mathfrak{k}$ で, 偏りが λ である光粒子の數を表はすと考へられる. 左邊の n_1, n_2, ……はこれらの數を代表してゐる. 尙上の式には $\sum_{\mathfrak{k},\lambda}h\nu_{\mathfrak{k}}\frac{1}{2}$ なる常數がつけ加はつてゐ, 和を無限まで取るとすれば, これは無限に大きな値となる. 併し物理的には, 光粒子が原子から出たり又は原子に吸收されたりすることが問題となり, 從つて光の場のエネルギー (178) の差だけが問題となるから, この附加の常數は常に消え去つて問題とならないのである. この意味に於てこの項を (178) からとり去つてもよろしい.

上の式で示された如く, 一般の場合にはエネルギーは n_1, n_2, …$n_{\mathfrak{k}\lambda}$… に關係するから, マトリックスの成分も此等によ

つて指定しなければならない. 前章でマトリックスの成分を $a_{\mathfrak{k},l}=(\mathfrak{k}|a|l)$ の如く書いた $\mathfrak{k}$ とか l とかには, 上の値の一組が對應する. 從つて例へば $(n_1,n_2,\ldots n_{\mathfrak{k}\lambda},\ldots|\alpha|n_1', n_2',\ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}',\ldots)$ の如く書かねばならないこととなり, マトリックスが對角線的であるとは, 兩側の各々の n の値が等しいこと, 卽ち $n_1=n_1'$, $n_2=n_2'$,... である.

從つて $\boldsymbol{H}^{(r)}$ の要素は

$$(n_1,n_2,\ldots|H^{(r)}|n_1',n_2',\ldots)=E_{n_1,n_2,\ldots}\delta_{n_1n_1'}\delta_{n_2n_2'}\ldots\quad(179)$$

と書かれる. 又 $\boldsymbol{H}_{\mathfrak{k}\lambda}$ は $\boldsymbol{H}^{(r)}$ と交換的であるから, $(n_1,n_2\ldots\ldots|H_{\mathfrak{k}\lambda}|n_1',n_2',\ldots)=E_{n\mathfrak{k}\lambda}\delta_{n_1n_1'}\delta_{n_2n_2'}\ldots$ の形であり, $\boldsymbol{\alpha}_{\mathfrak{k}\lambda}$ は $\boldsymbol{H}_{\mathfrak{k}'\lambda'}(\mathfrak{k}'\neq\mathfrak{k},\lambda'\neq\lambda)$ と交換的であるから $(n_1,n_2\ldots|\alpha_{\mathfrak{k}\lambda}|n_1'n_2'\ldots)$ $=(n_{\mathfrak{k}\lambda}|\alpha_{\mathfrak{k}\lambda}|n'_{\mathfrak{k}\lambda})\delta_{n_1n_1'}\delta_{n_2n_2'}\ldots\delta_{n\mathfrak{k}\lambda-1,\ n'\mathfrak{k}\lambda-1}\delta_{n\mathfrak{k}\lambda+1,\ n'\mathfrak{k}\lambda+1},\ \ldots$ の形となるから, $E_{n\mathfrak{k}\lambda}$ が(176)の値をとる時は, $(n_{\mathfrak{k}\lambda}|\alpha_{\mathfrak{k}\lambda}|n'_{\mathfrak{k}\lambda})$ は (177) の形をとることとなる.

更に規格直交の固有函數(今の場合はむしろ固有ヹクトル)を考へるに, それを $\varphi_{n_1,n_2,\ldots}$ としてこの成分を $\varphi_{n_1,n_2}.(n_1',n_2'\ldots)$ と書けば(131)から

$$\sum_{n_1'',n_2'',\ldots}(n_1',n_2',\ldots|H^{(r)}|n_1'',n_2'',\ldots)\varphi_{n_1n_2\ldots}(n_1''n_2''\ldots)$$
$$=E_{n_1n_2\ldots}\varphi_{n_1n_2\ldots}(n_1'n_2'\ldots)$$

となり, (179) を考へに入れれば,

$$\varphi_{n_1,n_2\ldots}(n_1',n_2'\ldots)=\delta_{n_1n_1'}\delta_{n_2n_2'}\ldots\ldots\ldots\ldots\quad(180)$$

となる.

§41. 物質粒子のハミルトン函數　電磁波の場を粒子が運動する場合のハミルトン函數を決めるのに, 先づ昔の考へから出發する.

一般に N- 個の粒子があつて, k- 番目のものの電荷を $-e_k$ とし, 外からの電磁波の $\mathfrak{r}=(x,y,z)$ に於ける電場, 磁場の强さを $\mathfrak{E}(\mathfrak{r}), \mathfrak{H}(\mathfrak{r})$ とすれば, 粒子はローレンツの力

$$\mathfrak{K}_k=-\frac{e_k}{c}[\dot{\mathfrak{r}}_k,\ \mathfrak{H}(\mathfrak{r}_k)]-e_k\mathfrak{E}(\mathfrak{r}_k)$$

を, この電磁波から受ける. 玆に $\dot{\mathfrak{r}}_k$ は粒子の速度 $\dot{x}_k, \dot{y}_k, \dot{z}_k$, $\mathfrak{r}_k$ は k- 番目の粒子の位置の座標 x_k, y_k, z_k を表はし, $[\dot{\mathfrak{r}}_k, \mathfrak{H}(\mathfrak{r}_k)]$ は $\dot{\mathfrak{r}}_k$ と $\mathfrak{H}(\mathfrak{r}_k)$ とのヹクトル積を表はす. 粒子の運動方程式は

$$m_k\ddot{x}_k=\mathfrak{K}_{k,x}-\frac{\partial U}{\partial x_k}$$

及び x の代りに y, z をとつた式となる. 玆に U は靜電氣的のポテンシャルを表はすとする. この場合にハミルトン函數を決定するのには, 昔の力學をやや一般の形で考へてみなければならない.

今

$$V=\sum_k\frac{e_k}{c}(\mathfrak{A}(\dot{\mathfrak{r}}_k),\ \mathfrak{r}_k)+U$$

を考へるならば, (152) の關係によつて

$$-\frac{\partial V}{\partial x_k}+\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial V}{\partial\dot{x}_k}\right)=-e_k\mathfrak{E}_x(\mathfrak{r}_k)-\frac{e_k}{c}[\dot{\mathfrak{r}}_k,\mathfrak{H}(\mathfrak{r}_k)]_x-\frac{\partial U}{\partial x_k},\ldots\ldots\ldots$$

であることが容易に判るから, 運動エネルギーを T と置いて

$$L=T-U$$

と置けば, 上に書いた運動方程式は

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_k}\right)-\frac{\partial L}{\partial x_k}=0,\cdots\cdots\cdots$$

で與へられることとなる. この式をラグランヂ (Lagrange) の運動方程式と云ひLをラグランヂ函數と云ふ. そこで

$$p_{k,x}=\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_k}=m_k\dot{x}_k-\frac{e_k}{c}\mathfrak{A}_x(\mathfrak{r}_k),\cdots\cdots\cdots$$

で定義された量 $\mathfrak{p}_k=(p_{kx},p_{ky},p_{kz})$ を一般化された運動量と云ひ, この關係によつて

$$H=\sum_k(\mathfrak{p}_k,\dot{\mathfrak{r}}_k)-L$$

を$\mathfrak{p}_k$と$\mathfrak{r}_k$で書き表はした式をハミルトン函數と云ふのである. Hは

$$H=\sum_k\left[\frac{1}{2m_k}\left(\mathfrak{p}_k+\frac{e_k}{c}\mathfrak{A}(\mathfrak{r}_k)\right)^2\right]+U(\mathfrak{r}_1,\mathfrak{r}_2\ldots)$$

の形になる. $\mathfrak{A}=0$ である場には, 今迄用ゐてゐたハミルトン函數になることは明かであつて, 一般の場合には先づ運動方程式をラグランヂの形とし, 次に一般化された運動量を求め, 次にHの定義に從つてHを$\mathfrak{p}_k$と$\mathfrak{r}_k$とで表はすのである.

今電磁波の振幅は小さいとし, $\mathfrak{A}^2$の項を棄てるとすれば,

$$H=\sum_k\left[\frac{1}{2m_k}\mathfrak{p}_k^2+\frac{e_k}{cm_k}(\mathfrak{p}_k,\mathfrak{A}(\mathfrak{r}_k))\right]+U(\mathfrak{r}_1\mathfrak{r}_2\ldots)$$

となる. この式を量子論にとり入れるには p_{kx} 等を前の如

く $\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x_k}$ 等の運算子にとるのであるが, $\mathfrak{A}$は座標に關係してゐるから, 上式の[ ]の中の第二の項の因數の順序が問題となる. 普通に$\left(\mathfrak{A}(\mathfrak{r}_k),\mathfrak{p}_k\right)$の順序にとることによつて正しい結果が與へられるのである.

§42. 光と物質との全體のシュレーディンガーの式　光と物質との全體のハミルトル函數として, (166)と前の節で與へた物質のハミルトン函數との和であると假定する. 以下簡單の爲に物質粒子一つをとるとし,

$$\boldsymbol{H}^{(m)}=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}_x^2+\boldsymbol{p}_y^2+\boldsymbol{p}_z^2)+\boldsymbol{U}\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\ (181)$$

$$\boldsymbol{u}=\frac{e}{cm}(\boldsymbol{\mathfrak{A}}_x\boldsymbol{p}_x+\boldsymbol{\mathfrak{A}}_y\boldsymbol{p}_y+\boldsymbol{\mathfrak{A}}_z\boldsymbol{p}_z)\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\ (182)$$

と置けば, 全體のハミルトン函數は

$$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}^{(m)}+\boldsymbol{H}^{(r)}+\boldsymbol{u}\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\ (183)$$

となり, $\boldsymbol{u}$は光と物質との交互作用を表はすこととなる. この全系に對しても, 質點力學に於けるシュレーディンガーの式を擴張して用ゐて,

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}+(\boldsymbol{H}^{(m)}+\boldsymbol{H}^{(r)}+\boldsymbol{u})\Psi=0\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\ (184)$$

を得る. 玆にΨは前と同樣確率波の概念を持つてゐるものであり, 物質粒子の座標に關する他に光の場の量例へばn_1, $n_2,\ldots$にも關係して居る. この式を解く爲に先づ相互作用のない式

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}+(\boldsymbol{H}^{(m)}+\boldsymbol{H}^{(r)})\Psi=0\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\ (185)$$

を觀察し, 一定のエネルギーの値を持つてゐる場合の解を求める. 今 E_a を $H^{(m)}$ の固有値, φ_a をその規格直交の固有函數とするならば, 物質粒子が E_a のエネルギーを, 光の場が $E_{n_1,n_2,\ldots}$ のエネルギーの値をもつ事に相當する解 $\Psi_{a;n_1n_2\ldots}$ は,

$$\Psi_{a;n_1n_2\ldots}=e^{-\frac{i2\pi}{h}(E_a+E_{n_1,n_2\ldots})t}\varphi_a\varphi_{n_1n_2}\cdots\cdots\cdots(186)$$

である事は, これを(185)に代入する事によつてすぐ判る.

そこで(184)の一般の解を求めるのに,

$$\Psi=\sum_{a;n_1n_2,\ldots}c_{a:n_1n_2\ldots}e^{-\frac{i2\pi}{h}(E_a+E_{n_1,n_2\ldots})t}\varphi_a\varphi_{n_1,n_2}\cdots\cdots(187)$$

と置く. 玆に $\varphi_a\varphi_{n_1n_2\ldots}=\varphi_\mu$ 又は之に時間因數を掛けた $e^{-\frac{i2\pi}{h}(E_a+E_{n_1,n_2\ldots})t}\varphi_a\varphi_{n_1n_2\ldots}$ は規格直交系を作つてゐる. 但し

$$\int\varphi_\mu{}^*\varphi_\nu d\tau=\delta_{\mu\nu}$$

で, $\varphi_{n_1n_2\ldots}$ に關する部分は

$\sum_{n_1',n_2'\ldots}\varphi^*{}_{n_1n_2\ldots}(n_1'n_2'\ldots)\varphi_{m_1m_2\ldots}(n_1'n_2'\ldots)=\varphi^\dagger{}_{n_1n_2\ldots}\varphi_{m_1m_2\ldots}$ なる和をとることを意味する. 更に Ψ の確率波の概念に從つて,

$$|c_{a;n_1,n_2\ldots}|^2$$

は, 物質粒子が E_a のエネルギーを, 光の場が $E_{n_1,n_2\ldots}$ のエネルギーをもつてゐる狀態の確率である (§**28**).

(187) を (184) に代入し, $\varphi_b{}^*\varphi^\dagger{}_{m_1,m_2\ldots}$ をかけて x,y,z で積分すれば規格直交性から

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{dc_{b:m_1,m_2\ldots}}{dt}+\sum_{a;n_1,n_2\ldots}(b;m_1m_2\ldots|u|a;n_1n_2\ldots)$$

$$\times e^{\frac{i2\pi}{h}(E_b-E_a+E_{m_1\ldots}-E_{n_1\ldots})t}c_{a;n_1n_2\ldots}=0\cdots\cdots\cdots(188)$$

を得る. 玆に

$$(b;m_1m_2\ldots|u|a;n_1n_2\ldots)=\int\varphi^\dagger{}_{m_1m_2\ldots}\varphi_b{}^*\boldsymbol{u}\varphi_a\varphi_{n_1n_2\ldots}d\tau$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(189)$$

で, $d\tau=dx\,dy\,dz$ を意味する. (188) が $c_{b;m_1m_2\ldots}$ が時間と共に如何に變るかを決定することとなるが, これを一般に解くことは容易でない. 併し近似の方法で解くことが出來る.

今特に時間の初めに $c_{a;n_1n_2\ldots}=1$ でその他の c はすべて 0 であるとする. これは物理的には物質粒子が E_a のエネルギーを, 光の場が $E_{n_1,n_2\ldots}$ のエネルギーを持つてゐることを意味する. 第一近似として(188)の $\sum$ の中の c にこの値をとるとすれば, 一度積分して

$$c_{b;m_1m_2\ldots}=\delta_{b,a}\delta_{m_1,n_1\ldots}$$

$$-\frac{2\pi i}{h}\int_0^t(b;m_1\ldots|u|a;n_1\ldots)e^{\frac{i2\pi}{h}(E_b-E_a+E_{m_1\ldots}-E_{n_1\ldots})t}dt$$

$$=\delta_{b,a}\delta_{m_1,n_1\ldots}-(b;m_1\ldots|u|a;n_1\ldots)\frac{e^{\frac{i2\pi}{h}(E_b-E_a+E_{m_1\ldots}-E_{n_1\ldots})t}-1}{E_b-E_a+E_{m_1\ldots}-E_{n_1\ldots}}$$

を得る. 從つて $b\neq a$, $m_1\neq n_1,\ldots$ とせば,

$$|c_{b;m_1m_2\ldots}|^2=4|(b;m_1\ldots|u|a;n_1\ldots)|^2$$

$$\times\frac{\sin^2\frac{\pi}{h}(E_b-E_a+E_{m_1\ldots}-E_{n_1\ldots})t}{(E_b-E_a+E_{m_1\ldots}-E_{n_1\ldots})^2}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(190)$$

が, 初めと異なつたエネルギーの狀態が現れる確率を與へることとなる. 更に近似を進めるには, 上に得た c の式を(188)に入れて再び積分すると云ふ樣に進んで行けばよいが, 現在の我々の目的には第一近似までで充分である.

§43.　光の射出　時間の初めに物質粒子は E_a のエネルギーをもち, 光の場には $\nu_1, \nu_2, \ldots$ の振動數の光粒子が夫々 $n_1, n_2, \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}, \ldots$ だけあつたとする. 終りの狀態では物質粒子は E_b のエネルギーをもち, 光の場には $(\mathfrak{k}, \lambda)$ に相當する光粒子が 1 だけ初めより增したとする. 卽ちこれは $(\mathfrak{k}, \lambda)$ の性質の一つの光粒子が原子から射出されることを意味する. 從つて初めと終りの狀態に相當する固有函數は夫々

$$\varphi_a \varphi_{n_1 n_2 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda} \ldots}\ , \qquad \varphi_b \varphi_{n_1 n_2 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}+1 \ldots}$$

であり,　$E_{m_1 m_2 \ldots} - E_{n_1 n_2 \ldots} = h\nu_{\mathfrak{k}}$　となる. 今

$$E_a - E_b = h\nu_{ab} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (191)$$

と置けば, (190)の式は

$$|c_{b;\, n_1 n_2 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}+1 \ldots}|^2$$

$$= \frac{4}{h^2} |(b; n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}+1 \ldots |u| a; n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda} \ldots)|^2 \frac{\sin^2 \pi(\nu_{\mathfrak{k}} - \nu_{ab})t}{(\nu_{\mathfrak{k}} - \nu_{ab})^2}$$

となる. 所で(189), (182)により

$$(b; n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}+1 \ldots |u| a; n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda} \ldots)$$

$$= \frac{e}{cm} \int \varphi_b^* \varphi^\dagger_{n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}+1 \ldots} \sum_\xi \mathfrak{A}_\xi p_\xi \varphi_a \varphi_{n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda} \ldots} d\tau$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots (192)$$

であり, 更に(158), (167)により

$$\sum_\xi \mathfrak{A}_\xi p_\xi = \frac{1}{(2L)^{\frac{3}{2}}} \sum_{\mathfrak{k}\lambda} \boldsymbol{p}^{(\lambda)} \{ \boldsymbol{a}_{\mathfrak{k}\lambda} e^{-\frac{i\pi}{L}(\mathfrak{k}, \mathfrak{r})} + \boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda} e^{\frac{i\pi}{L}(\mathfrak{k}, \mathfrak{r})} \},$$

茲に

$$\boldsymbol{p}^{(\lambda)} = \sum_\xi \mathfrak{e}_\xi^{(\lambda)} p_\xi \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (193)$$

となる. 從つて $\boldsymbol{p}^{(\lambda)}$ は $\mathfrak{e}^{(\lambda)}$ の方向の運動量の成分を意味する. 所で上の式を(192)へ代入すると, $\varphi^\dagger_{n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}+1 \ldots} \boldsymbol{a}_{\mathfrak{k}\lambda} \varphi_{n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda} \ldots}$ なる量が出て來るが, $\boldsymbol{a}_{\mathfrak{k}\lambda}$ のマトリックス及び(180)を入れればマトリックスの掛け算の規則から

$$\varphi^\dagger_{n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}+1 \ldots} \boldsymbol{a}_{\mathfrak{k}\lambda} \varphi_{n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda} \ldots} = \sqrt{\frac{c^2 h (n_{\mathfrak{k}\lambda}+1)}{2\pi\nu_{\mathfrak{k}}}}.$$

同樣にして, $\boldsymbol{a}_{\mathfrak{k}\lambda}$ の代りに $\boldsymbol{\beta}_{\mathfrak{k}\lambda}$ をとつたものは 0 となる. 從つて(192)は結局

$$(b; n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}+1 \ldots |u| a; n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda} \ldots)$$

$$= \frac{e}{cm(2L)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{c^2 h (n_{\mathfrak{k}\lambda}+1)}{2\pi\nu_{\mathfrak{k}}}}\, p_{ba}^{(\lambda)},$$

$$p_{ba}^{(\lambda)} = \int \varphi_b^* e^{-\frac{i\pi}{L}(\mathfrak{k}, \mathfrak{r})} \boldsymbol{p}^{(\lambda)} \varphi_a d\tau \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (194)$$

となり,

$$|c_{b;\, n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}+1 \ldots}|^2 = \frac{2e^2 (n_{\mathfrak{k}\lambda}+1)}{\pi h m^2 (2L)^3 \nu_{\mathfrak{k}}} |p_{ba}^{(\lambda)}|^2 \frac{\sin^2 \pi(\nu_{\mathfrak{k}} - \nu_{ab})^2 t}{(\nu_{\mathfrak{k}} - \nu_{ab})^2}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots (195)$$

となる.

そこで初めに考へた立方體の邊の長さを充分大きくとつて, 光粒子のエネルギー, 運動量が連續の値をもつ場合へ

の極限化を行ふ. 所で, $hk_x/2L$, $hk_y/2L$, $hk_z/2L$ は光粒子の運動量の成分にあたる量である. なぜならこれらの自乘の和の平方根は (155) によつて $h\nu_{\mathfrak{t}}/c$ となるからである (§**2**). 故に連續的に變る光粒子の運動量の三つの成分を m_x, m_y, m_z と置けば,

$$\frac{hk_x}{2L}\to m_x, \qquad \text{従つて}\ \frac{h}{2L}\to dm_x$$

及び y, z に關する式が得られる(§**25** 參照). これに應じて $\nu_{\mathfrak{t}}$ も連續に變る $\nu_{\mathfrak{m}}$ になるとする ($\nu_{\mathfrak{t}}\to\nu_{\mathfrak{m}}$). 従つて(155)の極限化は

$$m_x^2+m_y^2+m_z^2=\frac{h^2\nu_{\mathfrak{m}}^2}{c^2}$$

となる. そこで m_x, m_y, m_z の空間で, この代りに極座標を入れて, m_x, m_y, m_z の座標の方向(物理的には $\nu_{\mathfrak{m}}$ の振動數の粒子の進む方向)の微小立體角 $d\Omega$ をとれば, 上の關係から

$$\frac{1}{(2L)^3}\to dm_xdm_ydm_z/h^3=\frac{\nu_{\mathfrak{m}}^2}{c^3}d\nu_{\mathfrak{m}}d\Omega \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (196)$$

となる. 更に $(\mathfrak{t},\lambda)$ の性質の光粒子は運動量が正しく決まつてゐるから, 不確定關係により $(2L)^3$ の容積内のどこにあることも同じ確率をもつてゐる. 従つて $h\nu_{\mathfrak{t}\lambda}n_{\mathfrak{t}\lambda}/(2L)^3$ は單位容積内に含まれる光粒子のエネルギー(エネルギー密度)である. 今極限化に於て $n_{\mathfrak{t}\lambda}\to n_{\mathfrak{m}\lambda}$ とすれば, (196) によつて

$$\frac{h\nu_{\mathfrak{t}\lambda}n_{\mathfrak{t}\lambda}}{(2L)^3}\to\frac{h\nu_{\mathfrak{m}}^3n_{\mathfrak{m}\lambda}}{c^3}d\nu_{\mathfrak{m}}d\Omega=\rho^{(\lambda)}(\nu_{\mathfrak{m}})d\nu_{\mathfrak{m}}d\Omega \quad \cdots\cdots (197)$$

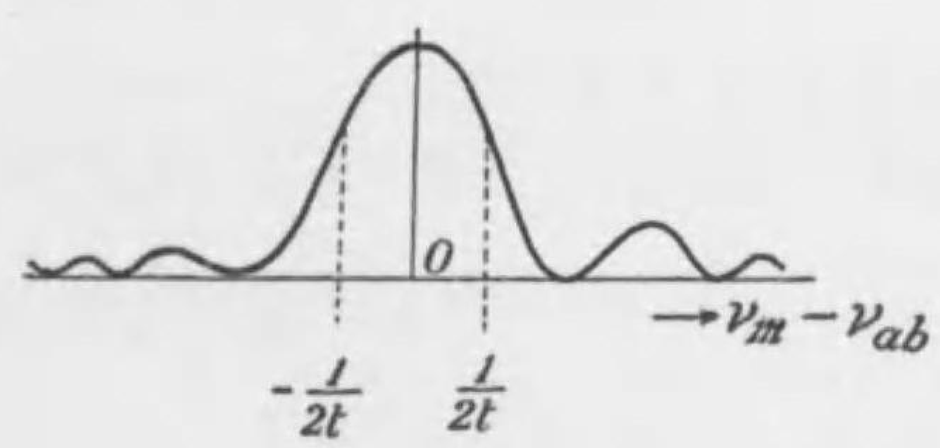
となる. 玆に

$$\rho_{\mathfrak{m}}^{(\lambda)}(\nu_{\mathfrak{m}})=\frac{h\nu_{\mathfrak{m}}^3n_{\mathfrak{m}\lambda}}{c^3} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (198)$$

は單位の振動數の間隔, $\mathfrak{m}$ の方向の單位の立體角に關する $\mathfrak{m}$ の方向に進む偏り λ の光のエネルギー密度である. かくして (196), (197) により, (195) は

$$\frac{2e^2}{\pi hm^2}|p_{b,a}^{(\lambda)}|^2\left(\frac{\rho_{\mathfrak{m}}^{(\lambda)}(\nu_{\mathfrak{m}})}{h\nu_{\mathfrak{m}}^2}+\frac{\nu_{\mathfrak{m}}}{c^3}\right)\frac{\sin^2\pi(\nu_{\mathfrak{m}}-\nu_{ab})t}{(\nu_{\mathfrak{m}}-\nu_{ab})^2}d\nu_{\mathfrak{m}}d\Omega \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (199)$$

となり, これが $(\mathfrak{m},\lambda)$ の性質の光が射出される確率を與へることとなる. 上の式の $\nu_{\mathfrak{m}}$ に對する變化は主に $\sin^2\pi(\nu_{\mathfrak{m}}-\nu_{ab})t/(\nu_{\mathfrak{m}}-\nu_{ab})^2$ によると考へられる. 今 $\nu_{ab}>0$ として, $\nu_{\mathfrak{m}}-\nu_{ab}$ を變數にとつてこの函數形を畫けば, 大略圖の様になる. 従つて大略 $|\nu_{\mathfrak{m}}-\nu_{ab}|\leqq\frac{1}{2t}$ の範圍では, この函數の値は他に較べて大きいから, 射出される光の振動數はこの範圍だけ正確に決まらないと考へられる. 故に $\nu_{\mathfrak{m}}-\nu_{ab}$ の誤差を $\Delta(\nu_{ab}-\nu_{\mathfrak{m}})$ とすれば, 一般に



第 6 圖

$$\Delta(\nu_{ab}-\nu_{\mathfrak{m}})\geqq\frac{1}{t}$$

となる. 又 t 時間内のどの時刻に射出が起つたかも不明で

あるから，t は現象の起つた時刻の誤差を與へる．從つて一般の時刻の誤差を $\Delta t \gtrless t$ とすれば，

$$\Delta(\nu_{ab}-\nu_{\mathrm{m}})\Delta t \gtrless 1$$

又は $\nu_{ab}=(E_a-E_b)/h$ を入れれば，

$$\Delta(E_a-E_b-h\nu_{\mathrm{m}})\Delta t \gtrless h \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (200)$$

となる．昔の量子論では，原子が $E_a \to E_b$ (E_a は初め，E_b は終りのエネルギー）の變化を起せば，ボーアの振動數條件（§35 の終り參照）によつて $h\nu=E_a-E_b$ から決まる振動數 ν の光が出るとした．我々は茲にこの關係は (200) で與へられる誤差の範圍內で正しいことを知る．併しこの關係はエネルギーと時刻との間の不確定關係式を，光の射出に於て確めたことに他ならない．

更に $\nu_{ab}<0$（卽ち物質粒子の初めのエネルギーが終りのエネルギーより小さい場合）の時は，ν_{m} は一般に正であるから，(199) の値は一般に小さい．從つて小さいエネルギーの狀態から大きいエネルギーの狀態へ移つて光を射出することも禁ぜられては居ないけれども，その確率は極めて小さいのである．

扨て原子が $E_a \to E_b$ の變化を起し光が $d\Omega$ の方向に出る確率を計算する．この爲には ν_{ab} を一定に保つて，ν_{m} について 0 から ∞ まで (199) を積分する．その際積分の値は $\nu_{\mathrm{m}}=\nu_{ab}$ ($\nu_{ab}>0$ としてゐる）の近くの被積分函數が主な部分となることを考へて，$\sin^2\pi(\nu_{\mathrm{m}}-\nu_{ab})t/(\nu_{\mathrm{m}}-\nu_{ab})^2$ 以外の項では $\nu_{\mathrm{m}}=\nu_{ab}$ に

とる．從つて

$$\int_0^\infty \frac{\sin^2\pi(\nu_{\mathrm{m}}-\nu_{ab})t}{(\nu_{\mathrm{m}}-\nu_{ab})^2}d\nu_{\mathrm{m}}$$

を計算することとなるが，$\pi(\nu_{\mathrm{m}}-\nu_{ab})t=\xi$ と置けば上の式は

$$\pi t\int_{-\pi\nu_{ab}t}^\infty \frac{\sin^2\xi}{\xi^2}d\xi \approx \pi t\int_{-\infty}^\infty \frac{\sin^2\xi}{\xi^2}d\xi \overset{(1)}{=} \pi^2 t$$

となる．從つて單位時間に $\mathfrak{m}$ の方向の單位の立體角內に偏り λ の光を出して原子が $E_a \to E_b$ の變化を起す確率は，上に得られた値を $td\Omega$ で割ることにより，

$$w_{a,b;\lambda}^{(e)}=\frac{2e^2\pi}{h^2m^2\nu_{ab}^2}\rho_{\mathrm{m}}^{(\lambda)}(\nu_{ab})\,|p_{ba}^{(\lambda)}|^2+\frac{2e^2\pi\nu_{ab}}{hm^2c^3}|p_{ba}^{(\lambda)}|^2 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (201)$$

で與へられる．

§ **44.**　上に得られた式についての二三の論議を附け加へる．初めにすべての光粒子の數 $n_{\mathrm{m}\lambda}$ が 0 であるとすれば，(198) から $\rho_{\mathrm{m}}^{(\lambda)}(\nu_{ab})=0$ であるから，

$$w_{a,b;\lambda}^{(e)}=\frac{2e^2\pi\nu_{ab}}{hm^2c^3}|p_{ba}^{(\lambda)}|^2 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (202)$$

となる．すべての $n_{\mathrm{m}\lambda}$ が 0 であることは，時間の初めに光粒子が存在しないことを意味する．この時にも $E_a \to E_b$ なる變化が (202) で與へられる割合で起る．(202) の値を自然射出の確率 (spontaneous emission probability) と云ふ．昔の電氣力學でこれに類似するものは，電荷のある粒子が振動する

(1) 寺澤寬一：自然科學者のための數學概論，90 頁，(3·21)

時エネルギーを出すと云ふ事である.

(201)の第一の項は, 光粒子が存在する爲に光の射出を起す所謂强制射出 (forced emission)の確率を與へる. 昔の電氣力學でこれに類似するものは, 電荷のある粒子が電磁波の場で振動する時には, その振動の位相と電磁波の位相との關係によつて粒子がエネルギーを外へ與へたり又は外から吸收したりするが, この場合は外へエネルギーを與へることに相當する. 外からエネルギーを吸收する場合に類似する事柄は, 次の節で述べる光の吸收の確率の場合にあたるのである.

次に $p_{b,a}{}^{(\lambda)}$ を觀察するに, (194)の定義の式によつて,

$$e^{-\frac{i\pi}{L}(\mathfrak{k},\,\mathfrak{r})}\rightarrow e^{-\frac{i2\pi}{h}(\mathfrak{m},\,\mathfrak{r})}$$

を含んでゐる. $\mathfrak{m}$ の方向と $\mathfrak{r}$ の方向との間の角の餘弦を $\cos(\mathfrak{m},\mathfrak{r})$ と書けば, 上式の右邊は $e^{-\frac{i2\pi}{h}|\mathfrak{m}|r\cos(\mathfrak{m},\mathfrak{r})}$ に等しい. 玆に $|\mathfrak{m}|$ は光粒子の運動量の絶對値, r は $\mathfrak{r}$ の絶對値であつて, l_{ba} を ν_{ba} の振動數の光の波長として, $|\mathfrak{m}|=h\nu_{ba}/c=h/l_{ba}$ であるから $|\mathfrak{m}|r/h=r/l_{ba}$ となる. 所で(194)の中の固有函數は, 原子の粒子の位置の確率を與へるものであり, 原子の核に結びつけられたこの粒子の確率は原子の中心に近い所で大きな値をもつであらう. (實際エネルギーの値が大きくないものではこのやうになる) この範圍が原子の大きさの大略を決めることとなる. 從つて(194)の積分の値は, 大略この範圍に關する積分で決定されることとなるから座

標の原點を核にとつたとすれば, 若し l_{ba} が原子の大きさにくらべて非常に大きい時には, (194)の積分の中で $r/l_{ba}\approx 0$ としてこれに關する指數函數は 1 にとることが出來る. この場合には $p_{ba}{}^{(\lambda)}$ は $\mathfrak{e}^{(\lambda)}$ の方向の物質粒子の運動量の成分のマトリックスの要素となる.

從つて粒子のハミルトン函數で $\boldsymbol{u}$ を小さいとして省略すれば, (181)により, 一般の法則(145)から

$$\dot{\boldsymbol{q}}_\xi=\frac{\partial \boldsymbol{H}^{(m)}}{\partial \boldsymbol{p}_\xi}=\frac{1}{m}\boldsymbol{p}_\xi$$

となるから, $\boldsymbol{p}^{(\lambda)}=m\dot{\boldsymbol{q}}^{(\lambda)}$, 卽ち(142)により

$$p_{ba}{}^{(\lambda)}=m\dot{q}_{ba}{}^{(\lambda)}=-i2\pi m\nu_{ab}q_{ba}{}^{(\lambda)}$$

となる. 故に

$$w^{(e)}{}_{a,b;\lambda}=\frac{8\pi^3e^2}{h^2}\rho_{\mathfrak{m}}{}^{(\lambda)}(\nu_{ab})|q^{(\lambda)}{}_{ba}|^2+\frac{8\pi^3e^2\nu_{ab}{}^3}{hc^3}|q_{ba}{}^{(\lambda)}|^2 \quad\ldots\ldots(203)$$

となる. 玆に自然射出の確率は第二項で與へられる.

更に光の場が, すべての種類の光に對して等方性であるならば, $\rho_{\mathfrak{m}}{}^{(\lambda)}(\nu_{ab})$ は $\mathfrak{m}$ の方向には無關係となる. 今 $\rho^{(\lambda)}(\nu_{ab})$で, λ の偏りをもつ振動數 ν_{ab} と $\nu_{ab}+d\nu_{ab}$ との間の光のエネルギー密度とすれば (卽ち (197) で單位立體角についての事を棄てるとする) これは $d\Omega$ で $\rho_{\mathfrak{m}}{}^{(\lambda)}(\nu_{ab})$ を積分したものに等しい.

$$\rho^{(\lambda)}(\nu_{ab})=4\pi\rho_{\mathfrak{m}}{}^{(\lambda)}(\nu_{ab}) \quad\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(204)$$

又(203)の確率の定義で, 單位の立體角に關すること及び偏りに關することを棄てて, 單に物質粒子が $E_a\rightarrow E_b$ の變化を

起す確率を $w^{(e)}{}_{a,b}$ と書けば，これは(203)を $d\Omega$ で積分し，又 $\lambda=1,2$ について加へ合はせることにより與へられる．その際 $\rho^{(1)}(\nu_{ab})=\rho^{(2)}(\nu_{ab})$ と假定し，

$$\rho(\nu_{ab})=\rho^{(1)}(\nu_{ab})+\rho^{(2)}(\nu_{ab}) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (205)$$

と置く．$\rho(\nu_{ab})$ は振動數が ν_{ab} と $\nu_{ab}+d\nu_{ab}$ との間の光のエネルギー密度である．更に物質粒子の固有函數 φ_a がエネルギー E_a をもつ他に一定の原子の向き(量子力學的には例へば z-方向の角運動量が一定の値をもつ様にすることで表はされる)をもつとすれば，$q_{ba}{}^{(\lambda)}$ は $d\Omega$ の方向に關係する．なぜなら $\boldsymbol{q}^{(\lambda)}$ は $d\Omega$ と垂直な方向 $\mathfrak{e}^{(\lambda)}$ の方向への $\boldsymbol{q}$ の射影だからである．併し φ_a を初めから原子の向きがすべての方向について同じ確率である狀態を表はすと考へて置くことも出來る．例へば水素原子の場合には $\varphi_a=C\sum_{m=-l}^{l}e^{im\phi}P_l{}^{|m|}(\cos\theta)\chi_{l,n}(r)$ の如くとる．このときは $q_{ba}{}^{(\lambda)}$ は $d\Omega$ の方向には無關係である．從つて

$$|q_{ba}|^2=|q_{x,ba}|^2+|q_{y,ba}|^2+|q_{z,ba}|^2$$

と置けば，

$$|q_{ba}{}^{(1)}|^2+|q_{ba}{}^{(2)}|^2=\frac{2}{3}|q_{ba}|^2 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (206)$$

ととることが出來る．かくして(204), (205), (206)によつて，

$$w^{(e)}{}_{a,b}=\frac{8\pi^3e^2}{3h^2}\rho(\nu_{ab})|q_{ba}|^2+\frac{64\pi^4e^2\nu_{ab}{}^3}{3hc^3}|q_{ba}|^2 \quad \cdots\cdots (207)$$

を得る．

§45.　光の吸收　この場合には，初めの狀態として，

$$\varphi_b\varphi_{n_1,n_2,\ldots n_{\mathfrak{k}\lambda},\ldots}$$

をとり，終りの狀態として

$$\varphi_a\varphi_{n_1,n_2,\ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}-1,\ldots}$$

をとつて $E_a-E_b=h\nu_{ab}>0$ とすれば前と全く同樣の計算を行ふことが出來る．卽ち終りの狀態の現はれる確率は

$$|c_{a;\,n_1,n_2\ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}-1\ldots}|^2=\frac{4}{h^2}|(a;n_1\ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}-1\ldots|u|b;n_1\ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}\ldots)|^2\frac{\sin^2\pi(\nu_{\mathfrak{k}}-\nu_{ab})t}{(\nu_{\mathfrak{k}}-\nu_{ab})^2}$$

となり，

$$(a;n_1\ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}-1\ldots|u|b;n_1\ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}\ldots)=\frac{e}{cm(2L)^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{c^2hn_{\mathfrak{k}\lambda}}{2\pi\nu_{\mathfrak{k}}}}p_{ab}{}^{(\lambda)}$$

となる．從つて $E_b\to E_a$ の變化を起して，$\mathfrak{m}$ の方向の立體角 $d\Omega$ 內に進む λ の偏りの光を吸收する($E_b<E_a$ だから)確率は單位立體角，單位時間について(201)の代りに

$$w^{(a)}{}_{a,b;\lambda}=\frac{2e^2\pi}{h^2m^2\nu_{ab}{}^2}\rho_{\mathfrak{m}}{}^{(\lambda)}(\nu_{ab})|p_{ab}{}^{(\lambda)}|^2 \cdots\cdots\cdots\cdots (208)$$

となる．

又は ν_{ab} の振動數の光の波長が原子の大きさにくらべて大きく，光の場が等方であり，二つの偏りについてエネルギー密度が等しく，原子の向きがすべて一樣であるなら，$E_b\to E_a$ の變化の起る確率は

$$w^{(a)}{}_{ba}=\frac{8\pi^3e^2}{3h^2}\rho(\nu_{ab})|q_{ab}|^2 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (209)$$

となる．玆に $\boldsymbol{q}$ のエルミット性から $|q_{ab}|^2=|q_{ba}|^2$ であること

に注意すべきである.

昔の考へに於けるこの式の類推は, 前節の初めに述べた如くである.

§46. 多くの粒子の場合　原子內に多くの粒子がある場合には, 今までの φ_a, φ_b をこれらの粒子の狀態を表はす函數と考へ, E_a, E_b をこれ等の粒子の全エネルギーと考へるだけでよい. 但し

$$\boldsymbol{H}^{(m)}=\sum_k \frac{1}{2m_k}\mathfrak{p}_k^2+\boldsymbol{U},$$

$$\boldsymbol{u}=\sum_k \frac{e_k}{cm_k}(\mathfrak{A}, \mathfrak{p}_k)$$

にとる. 從つて例へば(192)の代りに

$$(b; n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda}+1, \ldots |u| a; n_1 \ldots n_{\mathfrak{k}\lambda} \ldots)$$

$$=\sum_{k=1}^{N} \frac{e_k}{cm_k}\int \cdots \int \varphi_b^* \varphi_{n_1}^{\dagger} \ldots {}_{n_{\mathfrak{k}\lambda}+1} \ldots \sum_{\xi} \mathfrak{A}_{\xi} p_{k\xi} \varphi_a \varphi_{n_1} \ldots {}_{n_{\mathfrak{k}\lambda}} \ldots d\mathfrak{r}_1 \ldots d\mathfrak{r}_N$$

となる. 從つて粒子を電子と考へてすべての m_k, e_k を等しくとり, 光の波長を原子の大きさにくらべて大きいとして,

$$\boldsymbol{P}_{\xi}=-e\sum_{k=1}^{N} \boldsymbol{q}_{k\xi}$$

と置けば, 今までの式で單に $|eq_{ab}|^2$ の代りに $|P_{ab}|^2$ を入れた式が得られるだけとなる.

從つて例へば (207), (209) の代りに,

$$\left.\begin{aligned} w^{(e)}{}_{a,b}&=\frac{8\pi^3}{3h^2}\rho(\nu_{ab})|P_{ba}|^2+\frac{64\pi^4\nu_{ab}{}^3}{3hc^3}|P_{ba}|^2, \\ w^{(a)}{}_{b,a}&=\frac{8\pi^3}{3h^2}\rho(\nu_{ab})|P_{ba}|^2 \end{aligned}\right\} \cdots\cdots (210)$$

となる. これらの式は原子が $E_a \leftrightarrows E_b$ の變化を起す確率を與へる.

若し $\nu_{ab}-\varepsilon$ と $\nu_{ab}+\varepsilon$ (ε は小さい) との間の振動數の光が $E_a \leftrightarrows E_b$ の變化を伴つて射出又は吸收される場合の確率を求めるには, 例へば(199)の ν_m についての積分を 0 から ∞ までとる代りに, 上の振動數の範圍にとらなければならない. 併し積分の値が $\nu_m=\nu_{ab}$ の近くだけに主として關係することを考へるならば, 近似的に前と同樣の計算を行つてもよろしいから, (210) と全く同一の結果に達する.

從つて自然射出による ν_{ab} の振動數の光の强さは, (210) の第一式の第二項の確率へ $h\nu_{ab}$ をかけたものに比例するし, 既に昔の理論との類推から求めた(143)の式と同じ結果を得ることとなる.

§47. プランクの輻射の式　終りに黑體輻射のプランクの式を(210) を用ゐて出して見る. 今 E_a のエネルギーをもつ原子の數を N_a, E_b のエネルギーをもつ原子の數を N_b とするならば, 輻射が定常の狀態にあるときは, $E_a \rightarrow E_b$ の變化も $E_b \rightarrow E_a$ の變化も同じ割合で起らなければならないと考へられる.

從つて

$$N_a w^{(e)}_{ab} = N_b w^{(a)}_{ba}$$

である. $\nu_{ab}=\nu$ として, (210) により

$$N_a\left(\rho(\nu)+\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\right)=N_b\rho(\nu)$$

又は

$$\rho(\nu)=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\,\frac{1}{\dfrac{N_b}{N_a}-1}$$

となる. 統計力學の結果によれば, E_iのエネルギーをもつ原子の數 N_i は, $N=\sum_i N_i$ 卽ち原子全部の數の中で,

$$N_i = N\,\frac{e^{-\frac{E_i}{kT}}}{\sum_i e^{-\frac{E_i}{kT}}}$$

の割合だけある. 玆に T は絕對溫度, k はボルツマンの常數である. 從つて N_i を N_a, N_b にとれば,

$$\frac{N_b}{N_a}=e^{\frac{E_a-E_b}{kT}}=e^{\frac{h\nu}{kT}}$$

であるから,

$$\rho(\nu)=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\,\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1} \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (211)$$

を得る. これは黑體輻射の場の振動數が ν と $\nu+d\nu$ との間の光のエネルギー密度として, プランクが他の方法で求めた式に他ならない.

索　　引

(五十音順　數字は頁)

昭和十年九月十五日印刷
昭和十年九月二十日發行

量子力學序論
定價貳圓

著者 坂井卓三

東京市麴町區大手町中央氣象臺構內
發行者 大日本氣象學會
代表者 影井剛介

東京市本所區厩橋一丁目廿七番地
印刷者 井上源之丞

東京市本所區厩橋一丁目廿七番地
印刷所 凸版印刷株式會社本所分工場

東京市麴町區大手町一丁目七番地
中央氣象臺構內
發行所 大日本氣象學會
電話丸ノ內(23)301—305
振替口座東京五九五八

終