原子衝突研究協会誌　2010年第7巻第4号

しょうとつ

Journal of Atomic Collision Research

The Society for
ATOMIC COLLISION
RESEARCH

原子衝突研究協会　2010年7月15日発行
http://www.atomiccollision.jp/

しょうとつ

第 7 巻 第 4 号

目 次

(シリーズ) 衝突論ノート II. ハミルトニアンがエルミートだったら
－ 世に散乱現象はあり得るか? －
（島村勲） … 4

原子衝突の新しい風 （羽馬哲也） … 8
（水野智也） … 9
（宮城晴英） … 10

原子衝突研究協会第 35 回年会プログラム （行事委員長） … 11

第27回PIXEシンポジウムのお知らせ … 12

第4回プラズマエレクトロニクス インキュベーションホール
～プラズマの生成から応用まで～ … 12

2010 年度 日本物理学会科学セミナー
スピントロニクス －最先端の物理と技術－ … 13

第 37 回総会開催のお知らせ （庶務幹事） … 14

2010 年度第 2 回運営委員会報告 （庶務幹事） … 14

国際会議発表奨励事業に関するお知らせ （庶務幹事） … 15

「しょうとつ」原稿募集 （編集委員会事務局） … 15

今月のユーザー名とパスワード … 16

シリーズ

衝突論ノート
II．ハミルトニアンがエルミートだったら
－ 世に散乱現象はあり得るか？ －

島村　勲
理化学研究所原子物理研究室
shimamur@ribf.riken.jp

平成 22 年 6 月 14 日 原稿受付

1　量子論の基本原理の破綻？

量子論の物理量は演算子により表されます．その演算子は必ずエルミートという性質 (第 2 節) をもつと教科書に書いてあります．エルミート演算子の概念は量子力学で基本中の基本です．実際，物理量演算子のこの性質は理論展開のいろいろな場面で駆使され，その重要性は広く知られています．

ところが，散乱理論で当然のようにハミルトニアンのエルミート性を使ってしまうと，とんでもない間違いを犯してしまうことがあります．そんな実例を後ほど紹介しましょう (第 3 節)．ということは，衝突論の世界では量子力学の基本原理が崩れてしまうのでしょうか．散乱現象は量子論では扱えないのでしょうか．

2　エルミート演算子と実数観測値

前回は (複素共役を*印で表して) 内積

$$(\phi,\psi)=\int\phi^*\psi\,d\tau \tag{1}$$

を議論しました．$\int d\tau$ は系を記述する座標空間全体に亘る積分です．今回は ψ か ϕ に演算子 $\hat{A}$ を施した内積 $(\phi,\hat{A}\psi)$, $(\hat{A}\phi,\psi)$ を調べます．

まず，$\hat{A}$ が何らかの実数定数か実数関数 A を掛ける演算としましょう．すると $A^*=A$ で，また単純な掛け算はどこへ移しても構わないので

$$(\phi,\hat{A}\psi)=(\hat{A}\phi,\psi) \tag{2}$$

が成り立ちます．さらに，内積 (1)で左右の関数を入れ換えると $(\psi,\phi)=(\phi,\psi)^*$ と，元の内積の複素共役になりますから，式 (2) と同等な

$$(\phi,\hat{A}\psi)=(\psi,\hat{A}\phi)^* \tag{3}$$

も簡単に得られます．一般の複素数定数や複素数関数を掛ける演算では，$A^*\neq A$ なので式 (2), (3) は満たされません．

一般に，どんな ϕ, ψ に対しても式 (2) のように $\hat{A}$ が施される位置を移しても内積は変わらず，式 (3) のように ϕ と ψ を交換すると元の値の複素共役になるなら，$\hat{A}$ はエルミートだと言います．実数定数や実数関数を掛ける演算子はもちろんエルミートです．$\hat{A}$ が微分演算や積分演算を含めば，エルミートかどうかは場合により違います．エルミート性は「実数」関数の掛け算の拡張概念と理解できます．

なお，$\hat{A}$ がエルミートでなくても，特定の種類の ϕ, ψ に対して式 (2), (3) が成り立つことは当然あります．例を後ほどお見せします．

エルミート演算子の固有値はすべて実数であり，逆に演算子 $\hat{A}$ の固有値がすべて実数なら $\hat{A}$ はエルミートであることを付録 A で証明してあります．固有値 α_i をもつ $\hat{A}$ の固有関数 ψ_i で系の状態が表されるとき，その物理量を観測すれば値 α_i を得ます．物理量の観測値は必ず実数ですから，固有値 α_i はすべて実数のはずで，したがって物理量を表す演算子はみなエルミートです．全エネルギーの演算子であるハミルトニアンもエルミートなのは量子論の常識です．

$$(\phi,\hat{H}\psi)\ \frac{\textbf{えるみ糸で}}{\textbf{結ばれる？}}\ (\hat{H}\phi,\psi)$$

3　散乱現象非存在定理

ポテンシャル場による粒子の散乱を考えます．ハミルトニアン $\hat{H}$ は運動エネルギー演算子 $\hat{T}$ とポテンシャルエネルギー $\hat{V}$ の和，$\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}$ です．散乱境界条件を満たす波動関数 Ψ_E とその入射平面波部分 Φ_E は波動方程式

$$\hat{H}\Psi_E = E\Psi_E, \quad \hat{T}\Phi_E = E\Phi_E \tag{4}$$

を満たします．E は全エネルギーです．

散乱振幅 f_E は一般に Ψ_E と Φ_E で

$$f_E \propto (\Phi_E, \hat{V}\Psi_E) = (\Phi_E, [\hat{H}-\hat{T}]\Psi_E) \tag{5}$$

と書けることが知られています．式 (4) に基づきこれを変形すると

$$\begin{aligned} f_E &\propto (\Phi_E, [E-\hat{T}]\Psi_E) = ([E-\hat{T}]\Phi_E, \Psi_E) \\ &= (0, \Psi_E) = 0 \end{aligned} \tag{6}$$

となります．ここで $\hat{V}$ の具体形は全く使っていませんから，どんなポテンシャル場の下でも決して散乱は起こり得ないとの定理が証明されました．えッ，そんなバカな⋯．

一体, この証明のどこが悪いのでしょう. 式(5)は良く知られた散乱理論の基本公式で，疑う余地はありません．式 (6) でエネルギー E と自由運動のハミルトニアン $\hat{T}$ との差がエルミートとの事実を使いました．量子論の常識 (第 2 節) として，これにも問題はないはずです.

4　エルミート性の破れ

少し別の角度から話を進めましょう．球対称ポテンシャルによる質量 m，運動量 $\hbar k$ の粒子の部分波散乱を調べてみます．動径運動エネルギー演算子は $\hat{T}_r = -(\hbar^2/2m)(d^2/dr^2)$，また粒子の全エネルギーは $E=\hbar^2k^2/2m$ と書け,

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E-\hat{T}_r) = \frac{d^2}{dr^2} + k^2 \equiv \hat{L}, \tag{7}$$

記号 $\equiv$ はその左の式を $\hat{L}$ と置くという意味です.

$r=0$ でゼロになる動径波動関数で，さらに

$$\lim_{r\to\infty}\phi(r) = \sin kr, \quad \lim_{r\to\infty}\psi(r) = \cos kr \tag{8}$$

という漸近形をもつ ϕ, ψ を例に取り，式 (2) の両辺の差を $\hat{A}=\hat{L}$ につき計算します．実はそれぞれの積分を実際に計算しなくても，差を取れば，付録 B の式 (B.2) と漸近形 (8) から

$$\begin{aligned} (\phi, \hat{L}\psi) - (\hat{L}\phi, \psi) &= [\phi^*\psi' - \phi^{*\prime}\psi]_{r\to\infty} \\ &= -k\sin^2 kr - k\cos^2 kr = -k \end{aligned} \tag{9}$$

と，関数 $\phi(r)$, $\psi(r)$ の具体形に依らず，ゼロでない値になることが分かります.

どんな ϕ, ψ に対しても式(2),(3) が成り立てば $\hat{A}$ はエルミートです. 式(2), (3) を満たさない ϕ, ψ の組が一つでもあればエルミートでない (非エルミートな) ので, 式 (9) は $\hat{L}$ が, つまり $E-\hat{T}_r$ が非エルミートなことを表します. 遠心力を含め, ポテンシャル演算子はふつう実数関数の掛け算で, 第 2 節によりエルミートなので, $E-\hat{T}$ も $E-\hat{H}$ も非エルミートです.

というわけで，前節の奇妙な結論は，$E-\hat{T}$ はエルミートだと決めつけたことが原因だったのです．Φ_E, Ψ_E につき式 (9) に似た項が残るため，式 (2), (3) が破綻するのです.

D 論のテーマ, 散乱の位相のずれに対するコーンの変分法を自力で導こうとして $E-\hat{H}$ のエルミート性を使い，とんでもない結果にしばし悩んだことを思い出します．ハミルトニアンの非エルミート性の深刻さに目覚めた夜でした.

なお, ϕ か ψ の一方でも遠方で指数関数的に減衰する束縛状態型なら式(9)はゼロで, $\hat{A}=\hat{L}$ とした式 (2), (3)は成り立ちます. また, 連続状態型 ϕ, ψ の場合, 内積$(\phi, \hat{H}\psi)$の値自体は, 前回説明した(ϕ, ψ)と同様, ふつう決まりません.

$E-\hat{H}$ や $E-\hat{T}$ が連続状態型関数について非エルミートになるのは, 無限区間での積分ゆえの異常でしょうか. では, 内積 (u, v) を動径変数の有限区間 $0\le r\le R$ での積分 $(u, v)_R$ に置き換えてみましょう．すると式 (9) は

$$(\phi, \hat{L}\psi)_R - (\hat{L}\phi, \psi)_R = [\phi^*\psi' - \phi^{*\prime}\psi]_{r=R} \tag{10}$$

になることが式(B.2)から分かります. この半径 R の球面上での値 (表面項と呼びます) は一般にゼロでなく, 有限区間でもエルミート性は破れます. この破綻は, 座標空間を有限領域とその残りに分けて扱うR行列理論などに現れます.

しかし, 無限区間ではエネルギー固有値, 観測値は明らかにすべて実数です. 有限区間でも恐らくそうでしょう. それなのに $\hat{H}$, あるいは $E-\hat{H}$ が非エルミートということは, 付録A後段の証明に矛盾します. 新たな悩ましい困難の出現です．これはまた第 6 節で改めて考えましょう.

5　固有関数の直交性：前号の宿題

前回，同じハミルトニアン $\hat{H}$ の固有関数 ψ_i, ψ_j はその固有エネルギー E_i, E_j が異なれば直交すると証明しました．ψ_i, ψ_j の波動方程式を

$$E_i\psi_i = \hat{H}\psi_i,\ \ E_j\psi_j^* = (E_j\psi_j)^* = (\hat{H}\psi_j)^* \quad (11)$$

という形に書き，第 1 式に ψ_j^* を掛け，第 2 式に ψ_i を掛けて辺々引き算し，積分すると，

$$(E_i - E_j)(\psi_j, \psi_i) = (\psi_j, \hat{H}\psi_i) - (\hat{H}\psi_j, \psi_i), \quad (12)$$

ここで $\hat{H}$ につきエルミート関係式 (2) を使うと

$$(E_i - E_j)(\psi_j, \psi_i) = 0, \quad (13)$$

したがって, $E_i \neq E_j$ ならば $(\psi_j, \psi_i) = 0$, というのが証明の大筋でした．他方，連続状態波動関数は直交しない事実を説明し，この証明との矛盾を解決せよという宿題を出しました．

もうお分かりでしょう, 連続状態では $\hat{H}$ は非エルミートだったのです. 本稿の解説で初めて分かる, 前回にはまだ上級編の問題でした.

一方，無限区間での積分が心配なら，大きな有限区間での積分につき式 (13) に達し，積分領域をどんどん広げた極限として無限区間での直交性が証明できるだろうと，前稿の最後辺りで述べました．しかし，有限区間でもハミルトニアンのエルミート性が破れることはすでに述べた通りで，この証明も誤りです.

6　演算子とは何か，完全系とは何か

連続状態では教科書に反してハミルトニアン $\hat{H}$ が非エルミートだという事実，また有限領域に閉じ込められた系には離散状態しかないはずなのに，有限領域でも $\hat{H}$ がエルミート性を失うことをどう解釈すればよいのでしょう．

実は演算子は演算手順, 例えば $\hat{A} = d/dr$ を指定しただけでは決まらず，どんな種類の関数に施すのか (これを $\hat{A}$ の定義域と呼びます. これが数学的には結構面倒なのですが, 以下に物理屋的センスで解説します.) 指定して初めて明確に定義され, その性質を議論できます. 束縛状態型関数に施されるハミルトニアンと連続状態型関数に施されるものとは形は同じでも別々の演算子で，前者はエルミートでも後者は違います．教科書では前者を扱い，後者に注目する本稿と矛盾して見えます．著者自身が前者と後者を混同していると思える書物もかなり見受けます.

演算子の定義域の指定で重要なのが関数の境界条件です．無限区間では，束縛状態型関数と連続状態型関数で $r \to \infty$ での様子が違うことが境界条件の違いです．有限区間 $0 \leq r \leq R$ に限定した動径波動方程式を満たす固有関数 $\psi_i(r)$ には，当然の条件 $\psi_i(r=0) = 0$ 以外に境界条件

$$\psi_i(r=R) = 0 \quad (14)$$

または

$$r=R \text{ で } d(\log\psi_i)/dr = \psi_i'/\psi_i = \text{実数定数} \quad (15)$$

(対数微分一定) をしばしば要請します．これを満たす関数全体を定義域とするハミルトニアン $\hat{H}$の固有値問題を解くのです.

境界条件(14)か(15)を満たすψ_iの 1 次結合はすべてψ_iと同じ境界条件を満たし, この$\hat{H}$の定義域に入るので, 同じ定義の$\hat{H}$をこれらに自由に施せる利点が(14)や(15)にはあります.

ϕもψも式(14)を満たせば式(10)はゼロです. 両方が同じ定数で条件(15)を満たせば$r=R$で$\phi^{*\prime}/\phi^* = \phi'/\phi = \psi'/\psi$で, やはり式(10)はゼロです. いずれにせよ, $\hat{H}$はエルミート関係式 (2), (3) を満たすので, 定義域内では$\hat{H}$はエルミートで, 固有値はみな実数です. これが境界条件(14)や(15)を課す第二の利点です. しかし, 区間$0 \leq r \leq R$ の勝手な, 定義域外の関数では, 式 (10) は一般にゼロでなく, 式 (2), (3) は破綻します.

ハミルトニアンの固有関数 ψ_i 全体は完全系を成すと言います．それなら「勝手な」関数φが

$$\varphi = \sum_i c_i\psi_i \quad (16)$$

と固有関数展開できるはずです. しかし, 1 次結合φは必ずψ_iと同じ条件(14)か(15)を満たすわけですから, 逆に, 境界条件が違うφ, $\hat{H}$の定義域をはみ出すφは固有関数展開できません.

ところで,「すべての固有値が実数の演算子はエルミートである」という付録A後段の証明は固有関数展開に基づいています. このため, 固有関数と違う境界条件をもつ関数の場合, この証明が崩れ, ハミルトニアンは固有値 (観測値) がすべて実数なのにエルミート関係式 (2), (3) を満たしません. 第 4 節の最後で指摘した矛盾, つまりエルミート性の破れと付録A後段の証明との矛盾は, 有限区間ではこうして説明できます.

無限区間の事情は少し複雑です．離散状態 ψ_i と連続状態 ψ_E すべてで一つの完全系を成します．束縛状態型 (規格化可能) 関数 φ 全体は数学でヒルベルト空間と呼ばれるある種の関数集団の一例を成し，各 φ は完全系で展開できます．連続状態型関数はこのヒルベルト空間に属さず，一般に展開(16)が保証されません．そのため付録 A 後段の証明が崩れ，連続状態のハミルトニアンがエルミート性を失うことになります．

7　エピローグ

ハミルトニアン$\hat{H}$がエルミート関係式(2), (3) を満たす条件をまとめます. 無限空間ではϕ, ψとも連続状態型なら一般に満たさず, 一方でも束縛状態型なら満たします. 区間 $0 \leq r \leq R$ に閉じ込めた動径波動関数では, ϕ, ψとも $r = R$ でゼロか, 対数微分(15)が共通なら満たします. その極限として $r \to \infty$ で $\phi^{*\prime}/\phi^* \to \psi'/\psi$ なら無限区間でも満たします．以上はすべて式(10)の表面項 $\phi^*\psi' - \phi^{*\prime}\psi$が消えるか否かに依っています.

動径変数でなく，例えば座標 x, y, z の有限区間ならば，その下限で波動関数が必ずゼロとは限らないので，式 (2), (3) の保証には下限での表面項もゼロとの要請が必要です.

$\hat{H}$のエルミート性自身は問わず, 式 (2), (3) の成立条件だけ並べましたが, 連続状態のハミルトニアンや有限区間のハミルトニアンはその固有値, エネルギー観測値がみな実数なのに一般に非エルミートです．固有値がすべて実数の演算子はエルミートだとの証明が, 固有関数展開の破綻により崩れるためです. ただし, 有限区間では$\hat{H}$の定義域内に限り，固有関数展開が保証され, $\hat{H}$のエルミート性も保証されます.

教科書には殆ど指摘がないものの, 連続状態の理論は束縛状態とかなり違う曲者であることを前回, 今回と述べました. 何かが導かれた前提条件や論理の筋道に注意を払うことがいかに大切か, 耳(目?)学問に頼り, 結果だけ鵜呑みにすると危険だと, 連続状態に教えられます.

なお, 式 (2), (3) 前後の掛け算演算子の議論には (内積の値が決まるかどうかは別として) 連続状態でも有限領域でも何ら変更はなく, 実数掛け算演算子は必ずエルミートです. 運動量演算子 $p_\alpha = -i\hbar\partial/\partial\alpha$ $(\alpha = x, y, z, r)$ では, 例えば $(\phi, \hat{p}_r\psi)_R - (\hat{p}_r\phi, \psi)_R = -i\hbar\,[\phi^*\psi]_{r=R}$ を式 (10) の替わりに得るので, ϕ か ψ が $r = R$ でゼロなら $\hat{p}_r$がエルミート関係式(2), (3)を満たします. 無限空間では, ϕかψが束縛状態型ならこれらを満たしますが, 両方とも連続状態型なら満たしません. 微分演算子は要注意です. 角度変数だけに依る演算子はむろん再検討を要しません.

付録 A：エルミート演算子の固有値

エルミート演算子 $\hat{A}$ が満たす式 (3) で，ϕ および ψ として固有値 α_i をもつ $\hat{A}$ の規格化された固有関数 ψ_i を選ぶと，$\hat{A}\psi_i = \alpha_i\psi_i$ により，

$$\alpha_i = (\psi_i, \hat{A}\psi_i) = (\psi_i, \hat{A}\psi_i)^* = \alpha_i^*, \quad \text{(A.1)}$$

つまりエルミート演算子の全固有値が実数です.

逆に，ある演算子 $\hat{A}$ の固有関数の正規直交完全系 [離散状態では $(\psi_i, \psi_j) = \delta_{ij}$, 連続状態ではデルタ関数] で ϕ, ψ を展開して

$$\phi = \sum_i a_i\psi_i, \quad \psi = \sum_j b_j\psi_j \qquad \text{(A.2)}$$

と書くと (連続状態では和を積分と解釈),

$$\begin{aligned}(\phi, \hat{A}\psi) &= \sum_{ij} a_i^* b_j \alpha_j (\psi_i, \psi_j) = \sum_i a_i^* b_i \alpha_i \\ (\hat{A}\phi, \psi) &= \sum_{ij} a_i^* \alpha_i^* b_j (\psi_i, \psi_j) = \sum_i a_i^* b_i \alpha_i^*\end{aligned} \qquad \text{(A.3)}$$

となり，すべての固有値 α_i が実数なら両式は等しいので式 (2) が成立し，$\hat{A}$ はエルミートです.

付録 B： 積分の差と表面項

動径変数 r の関数 f, g につき部分積分公式

$$\int_0^a f'g\,dr = [fg]_0^a - \int_0^a fg'dr \qquad \text{(B.1)}$$

で $f = \psi'$, $g = \phi^*$ とした式と ψ, ϕ^* を交換した式

$$\begin{aligned}\int_0^a \psi''\phi^*\,dr &= [\psi'\phi^*]_0^a - \int_0^a \psi'\phi^{*\prime}dr, \\ \int_0^a \phi^{*\prime\prime}\psi\,dr &= [\phi^{*\prime}\psi]_0^a - \int_0^a \phi^{*\prime}\psi'dr\end{aligned}$$

の差を取り，境界条件 $\phi(0) = \psi(0) = 0$ を使うと,

$$\begin{aligned}\int_0^a \Big[\phi^*\hat{L}\psi - (\hat{L}\phi)^*\psi\Big]dr &= \int_0^a \big[\phi^*\psi'' - \phi^{*\prime\prime}\psi\big]dr \\ &= [\phi^*\psi' - \phi^{*\prime}\psi]_0^a = \big[\phi^*\psi' - \phi^{*\prime}\psi\big]_{r=a} \quad \text{(B.2)}\end{aligned}$$

となり，積分上限での値だけで決まります.