

数学・物理通信

6卷3号 2016年3月

編集 新関章三・矢野 忠

2016年3月16日

目次 (Contents)

1. 相対論の話

江沢康生 2

2. 量子力学における周期ポテンシャル問題 (1)

世戸憲治 20

3. 編集後記

矢野 忠 30

1. A Story on the Theory of Relativity

Yasuo EZAWA 2

2. A Periodic Potential Problem in Quantum Mechanics (1)

Kenji SETO 20

4. Editorial Comments

Tadashi YANO 30

相 対 論 の 話

江沢康生¹

A Story on the Theory of Relativity

Yasuo EZAWA²

目次

1. 相対論とは
 - 1.1 相対性理論は「難しい」...
 - 1.2 ニュートンの理論
 - 1.3 ガリレイの相対性原理
 - 1.4 特殊相対性理論
2. 一般相対論
 - 2.1 一般相対論の考え方
 - 2.2 基礎方程式の導き方
 - 2.3 時空の性質とは
 - 2.4 局所慣性系・等価原理
3. 水星の近日点の移動
4. 光に作用する万有引力
 - 4.1 太陽の周りの光の屈折
 - 4.2 ダーク・マターの探査
5. 宇宙の「進化」
 - 5.1 標準宇宙論
 - 5.2 エネルギー保存則, ハッブルの法則
 - 5.3 インフレーション宇宙論
6. ブラックホールの存在
 - 6.1 ブラックホールとは
 - 6.2 ブラックホールを「見る」
 - 6.3 ブラックホールへの落下
7. 重力波

¹愛媛大学名誉教授

²ytar@hi2.enjoy.ne.jp

- 7.1 線形近似
- 7.2 trace 反転テンソル
- 7.3 無限小座標変換
- 7.4 ゆらぎの伝播
- 8. 一般相対論の今後
 - 8.1 アインシュタイン方程式と変分原理
 - 8.2 一般相対論以外の重力理論

1 相対論とは

1.1 相対性理論は「難しい」…

最近、アインシュタインの一般相対論の予言の最後の検証としての重力波が発見されたということで話題になっている。それに関する解説も多くなされているが、「難しい」というのがつきもののようにになっている。確かに難しいのであるが、そうだけ言っても仕方がないので、なるべく易しいと思われるように話をしてみよう。

難しさは、使われる数学である(一般には物理学も難しいと思われていそうだが)。物理学では、ベクトル解析(3次元)は日常的に使われる。もちろん、その掛け算も使われるが、通常は特別な掛け算、スカラー積(内積)とベクトル積(外積)、だけで足りる。相対論では、特殊相対論でも、4次元のベクトル解析が用いられ、掛け算は一般的な掛け算が用いられる。掛け算の結果を相対論に合うように一般化したものはテンソルと呼ばれ、それを用いた算法はテンソル解析といわれ、相対論では必須の算法である。ただし、相対論を用いる分野は、物理学の中でも特殊な分野(高エネルギー物理学: エネルギーがほぼ GeV 以上)なので、物理学者の中でも、嫌われ者の算法である。

数学的には、相対論でのテンソル解析は応用法なので、数学者にはあまり好まれないと思われる算法である。それで、ここでは数学的な詳細・厳密さにはこだわらない。

1.2 ニュートンの理論

アインシュタインの相対論以前の相対性はガリレイの相対性原理である。ガリレイは科学の祖といわれ『(哲学の)理論が正しいかどうかは実験で決めろ』と言ったといわれている。恐らくそうであろう。今でもそうである。その後、ニュートンが「自然哲学の数学的原理」(略称「プリンキピア」)で、ギリシャ時代以来最も厳密な理論と認められていたユークリッド幾何学を用いて、あいまいさの無い哲学の表現を提案し、ケプラーの法則を説明したことにより認められた。当時から、諸現象は見る人によって異なることは周知であった。ニュートンは真の自然法則は1つで、見かけの運動ではなく、真の運動に対して成り立つと考え、運動の法則は真の運動を見る座標系(絶対座標系と言われる)で成り立つと考えた。相対性について述べていないようである。と

ころで、実験をすると測定値が得られるが、その値を説明するには幾何学では不十分であったので、解析学を發明し『言いたいことは数式に乗せる』と言った。これも今でもそうである。

1.3 ガリレイの相対性原理

その後、理論が整備され、各座標系 (見る人に対応) で見える運動の関係 (=座標変換) がガリレイ変換で与えられることが分かると、慣性系では運動の法則は同じ形に表されることも示された (ガリレイの相対性)。これが、相対性の始まりとされる。ガリレイ変換では、(物体の)速度は (一般には速さも) 座標系で異なる。

1.4 特殊相対性理論

19世紀に電磁気学が進歩して、マックスウェルの電磁気学が確立し、電磁波の存在も実験で示された。予言された速さは絶対座標系でのものと考えられ、地上での速度を測定する実験が盛んになされた。しかし、光速は座標系によらないという結果になった：マイケルソン-モーリーの実験が決定的。そうすると、時間も座標変換されなければならない(*)。

(*) 車両の中央から光を出し、前後の扉に到達する時間を考える。車両の中で見ると、光は同時に前後の扉に達するが、地上に静止して見ると、後の扉に達する方が早い。

この実験結果を認め、アインシュタインは慣性系の中の座標変換を求めた。ただし、各座標系では3次元空間は、ガリレイ変換の場合と同様、ユークリッド空間であり、時間は一様に流れるとした (4次元空間はミンコフスキー空間：重力がない場合の空間)。変わったのは、光速が一定である (光速不変の原理) ということだけである。このようにして求められた座標変換 (ローレンツ変換という) は、ある座標系 (O) 系から見て、その x 方向に速さ v で進む O' 系への変換の場合には次のようになる；

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad ct' = \frac{ct - (v/c)x}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \quad (1)$$

$1/\sqrt{1 - (v/c)^2}$ は γ とよく略記される。物理法則を表す式がローレンツ変換で不変であるような理論が特殊相対性理論である：両辺が同じ型のテンソルである方程式。 $v/c \rightarrow 0$ ではニュートン理論など (非相対論) になる：手順としては、(瞬間) 静止系ではニュートン理論などが成立するとし、それをローレンツ変換して一般の慣性系での形が求まる。

このような理論では重力は扱えない：2個の質点が万有引力 (=重力) を作用しあっているとき、ニュートンの運動方程式は (G：万有引力定数)

$$m_1 \ddot{\mathbf{r}}_1(t) = \frac{Gm_1 m_2}{|\mathbf{r}_2(t) - \mathbf{r}_1(t)|^2} \frac{\mathbf{r}_2(t) - \mathbf{r}_1(t)}{|\mathbf{r}_2(t) - \mathbf{r}_1(t)|}, \quad m_2 \ddot{\mathbf{r}}_2(t) = -\frac{Gm_1 m_2}{|\mathbf{r}_2(t) - \mathbf{r}_1(t)|^2} \frac{\mathbf{r}_2(t) - \mathbf{r}_1(t)}{|\mathbf{r}_2(t) - \mathbf{r}_1(t)|}. \quad (2)$$

この式は質点間の力が瞬間的に伝わることをあらわしているが、これは特殊相対論の因果律に反する (力の伝播速度も光速以下)。この問題に対する答えが一般相対論である。

2 一般相対論

2.1 一般相対論の考え方

重力を相対論的に扱うには、重力に対する考え方を変えなければならない。重力の特徴は何であろうか。普通の力、例えば、ばねの力はそのばねで物体をはじけばよい。質量の大きい物体ほどその速度は遅い：ばねの力は質量の違う物体を区別する。電磁気的な力は、電荷（厳密には比電荷）が違う物体を区別する。ニュートンの重力の大きさは質量だけで決まるが、観測的には重力だけが作用している場合には、運動を見ても質量を区別できない：運動方程式は

$$\ddot{\mathbf{r}} = -\nabla\phi(\mathbf{r}), \quad \phi \text{は重力ポテンシャル} \quad (3)$$

となり、質量によらない。よって、重力は物体を区別しない。これは力としては欠陥として力から除く。他方、すべての物体の運動に共通なのは、それらが運動する空間である：

⇒『重力を空間の性質で表す：重力があると空間が変わる：例えば、曲がる。』

空間の性質を記述する方法として、グロスマンはリーマンが開発した（長さの測り方を決める）計量テンソルに基づいた幾何学（リーマン幾何学）を紹介し、アインシュタインはそれを用いた：任意の座標系を用いても（誰が見ても）よいことになった。

2.2 基礎方程式の導き方

計量テンソルは対称テンソルで独立な成分は10個ある。それらを決めるには10個の方程式が必要である。前述のニュートンの重力理論は1個の重力ポテンシャル ϕ で記述できる。 ϕ に対する方程式は次の2階の偏微分方程式である（Poisson方程式）；

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = 4\pi G\rho(\mathbf{r}). \quad (4)$$

$\rho(\mathbf{r})$ は重力源の質量密度であり、重力は質量密度だけで決まる。既知の有効な重力理論はニュートン理論だけなので、それに基づいて理論を拡張するのが最も自然であろう。(2)式による記述は因果律の問題を含んでいたが、(4)式にはその問題はない。アインシュタインは(4)式に基づいたと思われる。ここでもそれをやってみよう。

(i) 右辺の拡張

相対論では、質量はエネルギーの一つの形である。従って、最初の拡張は、重力源を ρ からエネルギー密度 ϵ とすることであろう。さらに、エネルギーは4元運動量の時間成分である。よって、次の拡張は、エネルギー密度を4元運動量密度に拡張することであろう。4元運動量密度がどのようなものかは、通常電磁気学の電流密度が参照される：4元電流密度の時間成分が電荷密度である。これから、時間成分を積分すると4元運動量の成分になる4個の「ベクトル」がありそうである。これをまとめて $T^{\mu\nu}$ とすると、これは2階の（反変）テンソルになる。さらに、対称テンソルであることも、物理的考察から示せるので、独立な成分は10個である。従って、これらの成分がすべて重力源ならば、必要な重力源の数が得られる。アインシュタインはそうした。

これで右辺の拡張はできたことになる。なお、 $T^{\mu\nu}$ はエネルギー・運動量テンソルと呼ばれる。このように、重力源が拡張されたので、ニュートン理論にはない現象が起きても不思議ではない。

(ii) 左辺の拡張

(4) 式は2階の偏微分方程式であった。そこで、左辺の拡張は、右辺が対称テンソルに拡張されたので、計量テンソル ($g_{\mu\nu}$ と記される) の2階微分までから作られる2階の対称テンソルで、2階微分については線形であるとしよう。さらに、エネルギーや運動量の保存則は $T^{\mu\nu}$ の共変発散が0になるということによって表される。従って、左辺についても同様に共変発散が0であるとしよう。そうすると、左辺は比例定数を除いて1通りに定まる (正確には、計量テンソルに比例する項、宇宙項、を除いて)。証明は (難しく) 長くなるので省くが、結果は次のように表される。定まったテンソルは；

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R. \quad (5)$$

ここで、 $R_{\mu\nu}$ は Ricci テンソルと呼ばれ、次のように定義される；

$$R_{\mu\nu} \equiv \partial_\lambda \Gamma_{\mu\nu}^\lambda - \partial_\nu \Gamma_{\mu\lambda}^\lambda + \Gamma_{\mu\nu}^\lambda \Gamma_{\lambda\rho}^\rho - \Gamma_{\mu\rho}^\lambda \Gamma_{\nu\lambda}^\rho. \quad (6)$$

$\Gamma_{\mu\nu}^\lambda$ はクリストッフェル記号と呼ばれ、次のように定義される；

$$\Gamma_{\mu\nu}^\lambda \equiv \frac{1}{2}g^{\lambda\rho} (\partial_\mu g_{\rho\nu} + \partial_\nu g_{\mu\rho} - \partial_\rho g_{\mu\nu}). \quad (7)$$

また、 R はスカラー曲率と呼ばれ (Ricci スカラーと呼ばれることもある)、次のように定義される；

$$R \equiv g^{\mu\nu} R_{\mu\nu}. \quad (8)$$

(6)~(8) 式で、上下に同じ添え字がある場合には、その添え字を 0~3 と変えて和をとるものとする (アインシュタインの規約と言われ、以下で用いる)。従って、これらの量を用いて表した計量テンソルに対する方程式は次のようになる；

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R + \Lambda g_{\mu\nu} = \kappa T_{\mu\nu}. \quad (9)$$

ここでは宇宙項を含めた (Λ は宇宙定数といわれる)。この式、(9)、はアインシュタイン方程式と呼ばれ、一般相対論の基礎方程式である。また、 κ は理論からは決まらず、実験との比較から決められる。具体的には、重力が弱いときニュートン理論と一致するように決める。重力が弱い場合の (9) 式については、後出の重力波の節参照。

2.3 時空の性質とは

重力を時空の性質であらわすということにしたが、重力がない場合の時空は平坦と考える。平坦な時空では、3次元空間はユークリッド空間で時間は一様に流れる、ミンコフスキー空間である (ミンコフスキー空間の計量テンソルは $\eta_{\mu\nu}$ と記されることが多い。以下そうする)。重力がある場合には、一般に時空は曲がると表現され

る。4次元時空や3次元空間が曲がるというのは想像しにくいので、実際に見ることができる2次元空間の場合で理解し、それに基づいて類推するという方法が通常とられる。

2次元の場合、平坦な空間は平面であり、代表的な曲がった空間には球面がある。球面上の各点で、その点を通るいろいろな曲線を描く。その点でのこれらの曲線の接線の全体はその点での接空間と言われる。接線は直線なので、もちろん、球面の接空間は平面である。曲がった2次元空間が球面でない場合でも接空間は平面である。

空間が3次元の場合にも、曲がった空間の各点で平坦な接空間を考えることができる。この場合の接空間はユークリッド空間である。

類推はさらに難しいが、4次元時空の各点にも平坦な4次元接時空があり、それはミンコフスキー空間である。

2.4 局所慣性系・等価原理

これまでは時空の「物理化」の話であった。一般相対論は時空における物質の運動も記述する。それには直前に述べたことを利用する：時空の各点に平坦な接時空があるということは、各点の近くだけに限るとかなり平坦だということであろう。計量テンソルに対する方程式は2階の偏微分方程式であったから、1階の偏導関数の変化は各点付近では小さい。このようなことは次の局所平坦性の定理にまとめられる：

『各時空点 P で

$$g_{\mu\nu}(P) = \eta_{\mu\nu} \quad \text{かつ} \quad \partial_\lambda g_{\mu\nu}(P) = 0 \quad \left(\text{あるいは} \quad \Gamma_{\mu\nu}^\lambda(P) = 0 \right) \quad (10)$$

となるような座標系が選べる。』

(略証) x^μ を座標とする系から $x^{\mu'}$ を座標とする系へ座標変換する。時空点 P では $g_{\mu\nu}(P)$ は定数の対称行列である。これが座標変換で $\eta_{\mu\nu}$ になるかを調べよう。まず

$$\eta_{\mu'\nu'} = \frac{\partial x^\lambda}{\partial x^{\mu'}}(P) \frac{\partial x^\rho}{\partial x^{\nu'}}(P) g_{\lambda\rho}(P)$$

となるような座標変換はあるであろうか。ここで、係数 $\frac{\partial x^\lambda}{\partial x^{\mu'}}(P)$ は16個あるので、上の10個の方程式を満たすことは可能であり、座標変換はあることになる。変換後の座標を改めて x^μ と記そう。次に $\Gamma_{\mu\nu}^\lambda(P) = 0$ を満たす系への座標変換についてであるが、求める座標系の座標を $x^{\mu'}$ としよう。座標変換を

$$x^\mu - x^\mu(P) = x^{\mu'} - x^{\mu'}(P) + \frac{1}{2} a_{\lambda'\rho'}^\mu (x^{\lambda'} - x^{\lambda'}(P)) (x^{\rho'} - x^{\rho'}(P))$$

と置こう。Pの近くでは $x^\mu(P)$ との座標の差は小さいから、この逆変換は

$$x^{\mu'} - x^{\mu'}(P) = x^\mu - x^\mu(P) + \frac{1}{2} a_{\lambda\rho}^{\mu'} (x^\lambda - x^\lambda(P)) (x^\rho - x^\rho(P)) + \dots$$

と表せる。よって

$$\frac{\partial x^\lambda}{\partial x^{\mu'}}(P) = \delta_{\mu'}^\lambda, \quad \frac{\partial x^{\mu'}}{\partial x^\lambda}(P) = \delta_\lambda^{\mu'}, \quad \frac{\partial^2 x^\lambda}{\partial x^{\mu'} \partial x^{\nu'}} = a_{\mu'\nu'}^\lambda.$$

また、クリストッフェル記号の座標変換は

$$\Gamma_{\mu'\nu'}^{\lambda'}(P) = \frac{\partial x^{\lambda'}}{\partial x^{\gamma}}(P) \frac{\partial x^{\alpha}}{\partial x^{\mu'}}(P) \frac{\partial x^{\beta}}{\partial x^{\nu'}}(P) \Gamma_{\alpha\beta}^{\gamma}(P) + \frac{\partial x^{\lambda'}}{\partial x^{\gamma}}(P) \frac{\partial^2 x^{\gamma}}{\partial x^{\mu'} \partial x^{\nu'}}(P) \quad (11)$$

であるから、それが変換後 0 になる条件は

$$0 = \Gamma_{\mu'\nu'}^{\lambda'}(P) = \Gamma_{\mu\nu}^{\lambda}(P) + a_{\mu'\nu'}^{\lambda}$$

と書ける。よって、変換係数を

$$a_{\mu'\nu'}^{\lambda} = -\Gamma_{\mu\nu}^{\lambda}(P)$$

とすればよい。

(証明終)

局所平坦性の定理が成り立つ座標系は**局所慣性系**と言われ、その座標系では P 付近で

$$g_{\mu\nu}(x^{\lambda}) = \eta_{\mu\nu} + \frac{1}{2} \partial_{\lambda} \partial_{\rho} g_{\mu\nu}(P) (x^{\lambda} - x(P)^{\lambda}) (x^{\rho} - x(P)^{\rho}) + \dots \quad (12)$$

となる。すなわち、局所慣性系では、P 付近では時空はほぼ平坦といえよう。

この結果を用いると、等価原理は次のように言うことができる：

『局所慣性系では重力はほぼ消えて見え、物理法則は特殊相対論と同じ形に表せる。』

一般の座標系での物理法則の形は、これから、座標変換によって得られる。スカラー曲率は座標系によらないから 0 でなければ局所慣性系でも 0 でない。従って、等価原理は物理法則には曲率は現れないことを主張している。

個々の物理法則の形には立ち入らないが、一般相対論における物理法則の求め方は上に述べたようなものである。その法則が特殊相対論の場合の一般化になっていることは自明である。ここまでは、ガリレイ流に言えば『実験で正誤を決めるべき』理論の話である。以後は、一般相対論によって説明が可能になった実験(観測)結果、一般相対論が新たに予言したこと、例えば重力源が増えたことによる、がどのくらい検証されたかについて述べよう。

最後に、一般相対論の今後について少し触れよう。

3 水星の近日点の移動

よく知られているように、太陽の周りの惑星の運動は、観測の解析から得られたケプラーの法則によれば、太陽を焦点の一つとする楕円軌道を描く。ニュートンの理論はこのことを説明したことによって**公認**された。その後の観測から、水星の近日点がわずかながら移動していることが見出された：約 574''/100 年 [cf. 1° = (60×60)'']。この内、43'' 分だけが説明されてなかった。

惑星に対する運動方程式がニュートン理論とわずかに異なることを利用して、この数値が説明された。この説明は(多分)ほとんどの教科書でなされている。質点に対する運動方程式は上述の方法で求めると次のようになる；

$$\frac{d^2 x^{\mu}}{d\tau^2} + \Gamma_{\lambda\rho}^{\mu} \frac{dx^{\lambda}}{d\tau} \frac{dx^{\rho}}{d\tau} = 0. \quad (13)$$

ここで、 τ は固有時 (後の (16) 式の $ds^2 \equiv c^2 d\tau^2$ としたもの). この式を重力が弱い場合に適用したものを解くと、上の数値が説明できる (長い計算を要するが).

4 光に作用する万有引力

光は質量を持たないので、ニュートン理論では万有引力が作用しないが、運動量を持つので、一般相対論では作用を受ける. 光の進路は次のようにして求められる:

まず、特殊相対論では、光速不変の原理から (光速を c として)

$$c^2 = \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dz}{dt}\right)^2$$

dt^2 を掛けて、固有時の 2 乗 ($d\tau$)² で割ったものを計量テンソル $\eta_{\mu\nu}$ を用いてテンソル (具体的にはスカラー) 形に表すと

$$\eta_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx^\nu}{d\tau} = 0 \quad (14)$$

となる. これが局所慣性系で成り立つから、一般の座標系に変換すると

$$g_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx^\nu}{d\tau} = 0 \quad (15)$$

と表せることになる.

4.1 太陽の周りの光の屈折

地球付近の最大の重力源は、もちろん、太陽なので、太陽による光の屈折が最初に提案された一般相対論の検証であった. 実際、1919 年の皆既日食の際にエディントンのグループによって観測された. 一般相対論では、屈折の角度も求められるが、それには太陽による空間の**曲がり**、すなわち、太陽付近の計量テンソルを求める必要がある. 太陽は球形で、それが作る空間は時間的に一定で、十分遠方では平坦に近づくとすると、計量テンソルは次の**シュワルツシルドの外部解**で与えられ、極座標では

$$ds^2 \equiv g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = -\left(1 - 2GM/r\right) dt^2 + \frac{1}{1 - 2GM/r} dr^2 + r^2 d\Omega^2 \quad (16)$$

$$d\Omega^2 \equiv d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2 \quad (17)$$

と表される. M は太陽 (重力源) の質量. ただし、 $2GM/r$ は小さく、その 1 次までとる. ds は 4 次元時空の線素、 $d\Omega$ は 2 次元単位球面上の線素、とそれぞれ呼ばれる. ds は座標系によらないので、**物理的距離 (長さ)** とも言われる. (15) 式の導出法を見れば、光速よりも遅い運動に対しては $ds^2 < 0$ が成り立つことが分かる. **時間的運動** という.

4.2 ダーク・マターの探査

上述のように、物質の作る重力によって、光は屈折する。これを重力の**レンズ効果**という。円盤型銀河の物質（水素ガスなど）の中心の周りの回転速度と中心からの距離の関係（**回転曲線**という）は、重力源を光で見えている星だけだとすると説明ができない：見えていない所まで重力源がないといけない。この見えない重力源はダーク・マターと呼ばれ光を曲げるが、その曲がり方は相対論によるものとして説明可能である。

このレンズ効果を用いてダーク・マターの宇宙における分布が調べられている。銀河内のダーク・マターの分布は見えている物質の分布よりも滑らかである。このことは光と相互作用しないくらい相互作用が弱く、従って結合力が弱いことと符合している。

5 宇宙の「進化」

宇宙とは時空全体のこととしよう。宇宙の「進化」（時間変化）が「科学的に」研究されるようになったのは、一般相対論で時空の幾何学を決める方程式が求められてからである。しかし、既述のように、その方程式は10元の連立偏微分方程式なので、解くのは容易ではない。さらに、右辺の重力源のエネルギー運動量テンソルも知らなければならないが、これは観測的にによって求めなければならない。

5.1 標準宇宙論

現在は、**宇宙マイクロ波背景放射 (CMBR)** の観測が精密に行われた結果、それがほぼ一様等方な完全流体からのものとしてよいことが分かった。さらに、宇宙項もありそうである。CMBRとは高温のため、プラズマ状態にあった宇宙が冷えて3000°C程度になり陽子と電子が結合したため、直進できるようになった光のことである。この時を**通常宇宙の晴れ上がり**といい、ビッグ・バンから約30万年頃である。その光の波長が、宇宙膨張によって伸ばされ、現在はマイクロ波になっている。他方、銀河などの天体は、晴れ上がり後、密度揺らぎが重力によって成長・結合してできたと考えられ、やはり、全体的にはほぼ一様等方に見える。このような状況をかっつて、内山龍雄氏は『宇宙は銀河団という分子が一様等方に分布している』と表現した。

重力源と同様に、時空も一様等方と考えられるので、時空の計量は次の形のフリードマン-ロバートソン-ウォーカー計量で与えられるとされる；

$$ds^2 = -N^2(t)dt^2 + a^2(t)d\sigma^2, \quad d\sigma^2 \equiv \frac{dr^2}{1-kr^2} + r^2 d\Omega^2. \quad (18)$$

(18) 式の形は、座標系として**共同座標系**（銀河団と共に自由落下している系）で表した場合である。 $d\sigma$ はこの座標系における距離（距離は特殊相対論の場合と同じく、同時刻における2点の座標を測って求められる）で、**座標距離**と言われる。 $a(t)$ はこの座標距離と、**物理的距離** ds を調整するので、**スケール因子**と言われ、宇宙の膨張・収縮を記述する（ $ds = a(t)d\sigma$ なので、 $\dot{a} > 0$ ならば宇宙は膨張している。膨張率 $\dot{a}/a \equiv H$ 、ハッブル・パラメーター、も重要）。「進化」は $a(t)$ が求められてから「考えられ始めた」。また、この座標系では、一様

等方な完全流体のエネルギー運動量テンソルは混合成分では

$$(T^\mu_\nu) = \begin{pmatrix} \rho & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p \end{pmatrix} \quad (19)$$

と表せる (銀河団は静止して見える). ここで, ρ はエネルギー密度, p は圧力である. 厳密には, (18) 式における dr^2 の係数は, (18), (19) 式を用いたアインシュタイン方程式を用い, r を積分定数に関連した定数倍したものを改めて r としたものである. また, $N(t)$ は時間座標の取り方に対応し, アインシュタイン方程式からは決まらない. しかし, $N(t)dt \equiv dt'$ によって定義される時間 t' を用いると, これは $N'(t') = 1$ に対応する. この時間座標は宇宙時間と呼ばれることが多い.

(18), (19) 式を用いて混合テンソル型のアインシュタイン方程式を表すと次のようになる;

$$\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 + \frac{k}{a^2} = \frac{1}{3}(\kappa\rho + \Lambda). \quad (20)$$

$$2\frac{\ddot{a}}{a} + \left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 + \frac{k}{a^2} = -\kappa p + \Lambda \quad (21)$$

(20), (21) 式は 3 つの未知関数 $a(t), \rho(t), p(t)$ に対する 2 つの方程式でフリードマン方程式と言われるが, 数が足りない. 重力源の物質に対する運動方程式を用いていないためであるが, 通常は物質は熱平衡状態にあるとして, 次の形の状態方程式を用いる;

$$p = \gamma\rho. \quad (22)$$

ここで, γ は定数 (ほぼ, 一方向の運動エネルギー密度の全エネルギー密度に対する割合. 光の場合は $1/3$, 通常の物質では $1/3 > \gamma \geq 0$). 共動座標系では物質は静止していて $\gamma = 0$ にとられる. ダーク・マターも同様.

(20), (21), (22) 式によって記述される宇宙論を標準宇宙論という. (21)–(20) を作ると

$$2\frac{\ddot{a}}{a} = -\frac{1}{3}(1 + 3\gamma)\kappa\rho + \frac{2}{3}\Lambda. \quad (23)$$

右辺は通常の物質に対しては $1 + 3\gamma > 0$ なので, $\Lambda = 0$, すなわち, 宇宙定数が 0 ならばマイナスである, すなわち, 膨張は減速的である. しかし, 最近の観測では現在は膨張は加速的のようである. そうすると『標準宇宙論では正の宇宙定数が存在する』ことになる. (通常ではない, $\gamma < -1/3$ である物質, phantom = お化け, を考える人もいる.)

お化けは考えず, 宇宙定数と通常の物質およびダーク・マター (どちらも現在は $\gamma = 0$ でよい) だけを考える宇宙モデルを Λ CDM モデルと言う.

5.2 エネルギー保存則, ハッブルの法則

(i) エネルギー保存則

エネルギー保存則, $\nabla_\nu T^{\mu\nu} = 0$, を用いると次式が得られる;

$$\frac{d}{dt}(\rho a^3) = -p \frac{da^3}{dt}. \quad (24)$$

a^3 は単位座標体積の物理的体積, ρa^3 はその中のエネルギーなので, 上式は確かにエネルギーの保存則 (ここでの熱力学第 1 法則) を表す. (23), (24) 式から

$$\rho a^{3(\gamma+1)} = \text{const.} \quad (25)$$

が得られる. (20), (25) 式から $a(t)$ に対する方程式

$$\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 + \frac{k}{a^2} = \frac{\kappa}{3}\rho_0 \left(\frac{a_0}{a}\right)^{3(\gamma+1)} + \frac{\Lambda}{3} \quad (26)$$

が得られる. 下付き添え字 0 は現在値を示す. (26) 式を解けば進化が分かる. 具体的に解くには $\gamma = 1/3$ (輻射優勢期), $\gamma = 0$ (物質優勢期) に分ける.

(ii) ハッブルの法則, 赤方偏移

地球 (観測者) を原点とし, 座標が $r = r_1$ にある天体を考える. そこまでの物理的距離 $d(t)$ は

$$d(t) = a(t)r_1$$

で与えられ, 膨張宇宙では時間的に遠ざかることになる. 後退速度は

$$v(t) = \dot{d}(t) = \dot{a}r_1 = H(t)d(t).$$

現在は, $v_0 = H_0 d_0$ となり, ハッブルの法則に対応する. ただし, $d(t), r_1$ は測定できないので, 測定可能量に翻訳して (詳細は省略), 確かめられている. この関係は (重力による) ドップラー効果の存在を意味する. 赤方偏移のパラメーター, $z \equiv (\lambda_O - \lambda_S)/\lambda_S$ に対して

$$t_1 = t_0 \left(\frac{1}{1+z}\right)^{3/2} \quad (27)$$

が成立する. t_1 は光の放出時刻, $\gamma = 0$ を用いた. z は観測量で, $z = 0$ は現在で, その観測値から光の放出時刻, さらに, 光源までの距離が知られる.

5.3 インフレーション宇宙論

(i) 標準宇宙論の問題

(1) 地平線問題

現在観測されている CMBR は全天についてほぼ一様 (例えば温度 T では $\delta T/T \approx 10^{-5}$). しかし, これは以下の理由で自然とは考えられない: 宇宙には始まりがあるとされているので, 時刻 t までに光が進める距離 ($d_p(t)$) は有限. この距離の所を粒子的地平線という. 晴れ上がりの時刻 (t_N) での地平線までの距離は $d_p(t_N)$. 全天は現在の粒子的地平線の内部で, そこまでの距離は晴れ上がりの時刻には, d_N であったとする. 計算によると $d_N/d_p(t_N) \sim 50$. これは, 全天では $50^2 = 2500$ 個の領域が晴れ上がりまで全く作用しあわないことを意味する. この多くの領域の揺らぎが上記のようにほぼ同じなのは自然とは考えにくい:

『地平線内が狭すぎる.』

(2) 平坦性の問題

空間の曲率 k が 0 のとき、空間は平坦で、そのエネルギー密度は臨界密度 (ρ_C) といわれ、晴れ上がりの時には $\rho_C = (3/4\kappa)t^{-2}$ なので CMBR の観測から $|\rho_C/\rho_N - 1| \approx 10^{-5}$ である。これから時間を、アインシュタイン方程式が有効な限界と考えられるプランク時間 t_P まで遡ると、上の量は 10^{-61} のオーダーになる：エネルギー密度では、有効数字が 61 桁。

『なぜ宇宙はこれほど平坦に近いのか。』

(ii) インフレーションモデル

宇宙が膨張すると、地平線内は広くなり、また、平坦になる。標準宇宙論に問題があるのは、膨張が不十分だということである。膨張を十分大きくするには、宇宙定数が十分大きければ、指数関数的に加速膨張し(ドジッター宇宙的になり)、可能であろうということは知られていた。このような膨張は宇宙のインフレーション(広い意味では、加速度的膨張ならば用いられる：下記参照)と言われる。しかし、インフレーション中は膨張が早過ぎて物質が重力で結合することによる天体が出来ないので、インフレーションは終わらなければならないが、宇宙定数によるのであれば、終わることはない。

現在では、宇宙定数に似た役割をする適切なポテンシャルを持つスカラー場 (ϕ ; インフレーション場) を仮定して説明することがなされている。ポテンシャルの性質としては、

- (1) ほぼ平らな領域が、必要なだけある。十分なインフレーション後は減少して 0 になるが、膨張で冷えた宇宙を再加熱するため増加するとされる。
- (2) ϕ の 2 乗あるいは 4 乗に比例する。比例定数は必要なだけ小さい。

この (2) は指数関数的膨張ではない。他にもモデルはある。例えば、後出の $f(R)$ 型重力理論(インフレーション場を内蔵している)。

6 ブラックホールの存在

6.1 ブラックホールとは

天体は自転していなければ、太陽のように球形と考えてよく、一般相対論では、その付近の時空は太陽と同じシュワルツシルドの外部解 (16) 式で記述される：

$$ds^2 \equiv g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = -\left(1 - 2GM/r\right) dt^2 + \frac{1}{1 - 2GM/r} dr^2 + r^2 d\Omega^2 \quad (16)$$

M はもちろん天体の質量である。この天体から十分遠方 ($r \rightarrow \infty$) では時空は平坦になる。他方、 r が小さくなった場合、 $r = 2GM$ が天体の外部にあるときには、 r がさらに小さくなると、時空の様子が全く違うように見える：

$r \rightarrow 2GM + 0$ のとき、 dr^2 の係数は大きくなるが dt^2 の係数の絶対値は小さくなり、 $2GM$ より小さくなると、係数の符号が変わる。この $r = 2GM \equiv r_S$ はシュワルツシルド半径と言われる。また、半径 r_S の球面

はシュワルツシルド面と言われる。太陽の場合には r_S は約 3km なので、シュワルツシルド面は太陽の内部にある。

さて、 $r_0 < r_S$ から出た光が、 r が大きくなる方向に真っすぐに進む場合を考えよう。光の場合は $ds^2 = 0$ なので、

$$(\text{光速})^2 = \left(\frac{dr}{dt}\right)^2 = (r_S/r - 1)^2.$$

従って、 r が大きくなると光速は遅くなり、 $r = r_S$ では 0 になる。すなわち、シュワルツシルド面内で放出された光はシュワルツシルド面外に出ることはできない。このことから、シュワルツシルド面内をブラックホールという。光でさえ、ブラックホールから外部に出られないので、物質は勿論出られない。

6.2 ブラックホールを「見る」

ブラックホールからは光も出てこないが、どうすれば見たと言えるであろうか。類似の現象は大気圏に突入した流星が、大気の摩擦で熱せられて光る現象である。ブラックホールは引力が強いので、周囲には物質がたくさんある。その領域にさらに物質が落下すると、摩擦熱で熱せられて光る。この光 (エネルギーが高くなり X 線が出る場合もあり得る) が現実に観測されたと考えられている。

6.3 ブラックホールへの落下

シュワルツシルド面の外からシュワルツシルド面に向けて落下する物体を考えよう。(16) 式を見ると、 r が r_S に近づくと、 dt^2 の係数は 0 に近づき、有限の dt からの寄与は無視できる。他方、 dr^2 の係数は無限大に近づき ($r = r_S$ は特異点)、有限の dr に対しては無限大の寄与を与える。このことと、 $ds^2 < 0$ とを考慮すると、 r が r_S に近づくと、空間的にわずかに移動 (落下) するにも無限の時間がかかる、すなわち、ブラックホールには入れないように見える。しかし、これは座標系の取り方のためである。(16) 式で $r \rightarrow \infty$ とすると、 $g_{\mu\nu} \rightarrow \eta_{\mu\nu}$ となるが、このことはブラックホールから十分離れた所にいる観測者にとっては予想されることである。それで、(16) 式はそのような観測者が用いた場合の式と考えられている (注: テンソルの成分は座標系による)。時間として座標系によらない固有時を用いると、計算は省略するが、有限の時間でブラックホールに達し、中に入る。

7 重力波

重力波は定常的な時空 (背景時空) の小さな揺らぎが伝わるものであり、その伝播の仕方はアインシュタイン方程式の線形近似によって記述される。

7.1 線形近似

背景時空の計量テンソルを $g_{(0)\mu\nu}$ とし、その揺らぎ $h_{\mu\nu}$ がある時の計量テンソル $g_{\mu\nu}$ が

$$g_{\mu\nu} = g_{(0)\mu\nu} + h_{\mu\nu}, \quad h_{\mu\nu} \ll 1, \quad (28)$$

となる座標系が採れる時、揺らぎは小さいという。このとき線形近似では

(1) 反変成分は

$$g^{\mu\nu} = g_{(0)}^{\mu\nu} - h^{\mu\nu}, \quad h^{\mu\nu} \equiv g_{(0)}^{\mu\lambda} g_{(0)}^{\nu\rho} h_{\lambda\rho} \quad (29)$$

(2) クリストッフエル記号は

$$\Gamma_{\mu\nu}^{\lambda} = \Gamma_{(0)\mu\nu}^{\lambda} + \Gamma_{(1)\mu\nu}^{\lambda}, \quad \Gamma_{(1)\mu\nu}^{\lambda} = \frac{1}{2} g_{(0)}^{\lambda\rho} \left(\nabla_{\mu} h_{\rho\nu} + \nabla_{\nu} h_{\mu\rho} - \nabla_{\rho} h_{\mu\nu} \right) \quad (30)$$

以下同様にして、1次の量は

(3) リッチ・テンソル

$$R_{(1)\mu\nu} = \frac{1}{2} \left(\nabla_{\lambda} \nabla_{\nu} h_{\mu}^{\lambda} + \nabla_{\lambda} \nabla_{\mu} h_{\nu}^{\lambda} - \square h_{\mu\nu} - \nabla_{\mu} \nabla_{\nu} h \right) \quad (31)$$

ここで、

$$h \equiv h^{\lambda}_{\lambda}, \quad \square \equiv g_{(0)}^{\mu\nu} \nabla_{\mu} \nabla_{\nu} \quad (32)$$

ここで、 ∇_{μ} は背景時空に関するものである。

(4) スカラー曲率

$$R_{(1)} = \nabla_{\lambda} \nabla_{\rho} h^{\lambda\rho} - \square h \quad (33)$$

(5) アインシュタイン・テンソル

$$\begin{aligned} G_{(1)\mu\nu} &= \frac{1}{2} \left(\nabla_{\lambda} \nabla_{\nu} h_{\mu}^{\lambda} + \nabla_{\lambda} \nabla_{\mu} h_{\nu}^{\lambda} - \square h_{\mu\nu} - \nabla_{\mu} \nabla_{\nu} h \right) \\ &- \frac{1}{2} \left[g_{(0)\mu\nu} \left(\nabla_{\lambda} \nabla_{\rho} h^{\lambda\rho} - \square h \right) + h_{\mu\nu} R_{(0)} \right] \end{aligned} \quad (34)$$

7.2 trace 反転テンソル

trace 反転テンソルと呼ばれるテンソル $\psi_{\mu\nu}$;

$$\psi_{\mu\nu} \equiv h_{\mu\nu} - \frac{1}{2} g_{(0)\mu\nu} h \quad (35)$$

を用いると、記述が簡単になることが以下のようにして分かる。(35) 式を逆に解くと

$$h_{\mu\nu} = \psi_{\mu\nu} - \frac{1}{2} g_{(0)\mu\nu} \psi \quad (36)$$

ここで

$$\psi \equiv g_{(0)}^{\mu\nu} \psi_{\mu\nu} = -h \quad (37)$$

第 1, 3 項が名前の由来. $\psi_{\mu\nu}$ を用いるとアインシュタイン・テンソルは

$$G_{(1)\mu\nu} = -\frac{1}{2}\left(\square\psi_{\mu\nu} + \frac{1}{2}g_{(0)\mu\nu}\nabla_\lambda\nabla_\rho\psi^{\lambda\rho}\right) - R_{(0)\mu\lambda\rho\nu}\psi^{\lambda\rho} \\ + \frac{1}{2}\left(\nabla_\mu\nabla_\lambda\psi^\lambda_\nu + \nabla_\nu\nabla_\lambda\psi^\lambda_\mu + R_{(0)\mu\sigma}\psi^\sigma_\nu + R_{(0)\nu\sigma}\psi^\sigma_\mu\right) \quad (38)$$

ここで, $R_{\mu\nu\lambda\rho}$ はリーマン・テンソルと呼ばれ, これが 0 でない場合だけ, 時空は曲がっている (式は長いので省略). アインシュタイン方程式は微小量の 1 次では

$$G_{(1)\mu\nu} = \kappa T_{(1)\mu\nu}. \quad (39)$$

$T_{(1)\mu\nu}$ は計量テンソルや重力源の小さな揺らぎによるもの.

7.3 無限小座標変換

無限小座標変換を

$$x^{\mu'} = x^\mu + \xi^\mu(x^\lambda), \quad |\xi^\mu| \ll 1 \quad (40)$$

とする. このとき

$$g_{(0)\mu'\nu'} + h_{\mu'\nu'} \approx g_{(0)\mu\nu} + h_{\mu\nu} - (\partial_\nu\xi^\alpha g_{(0)\alpha\mu} + \partial_\mu\xi^\alpha g_{(0)\alpha\nu}). \quad (41)$$

もちろん, 左辺の座標は $x^{\mu'}$, 右辺は x^μ である. $g_{(0)\mu'\nu'}$ の座標を x^μ にすると

$$h_{\mu'\nu'} = h_{\mu\nu} - (\xi_{\mu;\nu} + \xi_{\nu;\mu}) \quad (42)$$

が得られる. 両辺の座標が同じであることから, 電磁気学との類似性で (42) 式はゲージ変換と呼ばれることが多い. $\psi_{\mu\nu}$ に対しては次のようになる;

$$\psi_{\mu'\nu'} = \psi_{\mu\nu} - (\xi_{\mu;\nu} + \xi_{\nu;\mu} - g_{(0)\mu\nu}\xi^\lambda_{;\lambda}). \quad (43)$$

座標条件

ゲージ変換で不変な電磁気学のゲージ条件と同様に, 座標変換で不変な重力理論では座標条件が用いられる. よく用いられるのは次のものである;

$$\nabla_\lambda\psi^\lambda_\mu = 0. \quad (44)$$

この条件は, 電磁気学との類似性からローレンツ条件, あるいは, 横波 (transverse) 条件, 調和条件, ドンダー (de Donder) 条件などと呼ばれる. この条件を課すと, 1 次のアインシュタイン・テンソルは次のようになる;

$$G_{(1)\mu\nu} = -\frac{1}{2}\square\psi_{\mu\nu} - R_{(0)\mu\lambda\rho\nu}\psi^{\lambda\rho} + \frac{1}{2}\left(R_{(0)\mu\lambda}\psi^\lambda_\nu + R_{(0)\nu\lambda}\psi^\lambda_\mu\right). \quad (45)$$

7.4 揺らぎの伝播

ここでは、真空中を伝播する重力波について考える。実際に観測が進められている場合には、重力波源と地球の間は真空とみなしてもよいと考えられる。このときには $R_{(0)\mu\nu} = 0$ 。また、重力源は近いとしてよいので、空間はユークリッド空間としてよいであろう。従って、 $R_{(0)\mu\nu\lambda\rho} = 0$ としてよい。従って、1次のアインシュタイン方程式、および、ローレンツ条件は次のようになる；

$$\square\psi_{\mu\nu} = 0, \quad \partial_\nu\psi^{\mu\nu} = 0. \quad (46)$$

第1式は波動方程式であり、計量テンソルの(時空の)揺らぎが波動として伝播することを示している。これが**重力波**である。ローレンツゲージ内で、さらにゲージ変換して $\psi = 0$ (traceless) にすることができる。このゲージを **TTゲージ** という。このゲージで考えると、重力波の自由度が2(偏極が2個)であることが分かる((46)式は重力子の質量が0であることに対応する)。

相対論の「検証」の話は以上で終わるが、最近では検証の段階を超えて、GPS(Global Positioning System, 全地球測位システム)などで応用されるようになった。

8 一般相対論の今後

8.1 アインシュタイン方程式と変分原理

アインシュタイン方程式は変分原理から導くこともできる。この際の作用 S_{EH} は

$$S_{EH} = \int_{t_1}^{t_2} L(\Sigma_t) dt \quad (47)$$

ここで、 Σ_t は t を時間的な曲線のパラメーターとするとき、 $t = \text{一定}$ である3次元曲面。また

$$L(\Sigma_t) \equiv \int_{\Sigma_t} \sqrt{-g} \mathcal{L} d^3x, \quad \mathcal{L}_{EH} = \frac{1}{8\pi G} (R - 2\Lambda), \quad g \equiv \det g_{\mu\nu} \quad (48)$$

S_{EH} はアインシュタイン-ヒルベルトの作用と言われる。(古典)重力理論はラグランジアン密度 \mathcal{L} を与えると定まる。

8.2 一般相対論以外の重力理論

考えられている他の重力理論もラグランジアン密度によって決められるものも多い。よく用いられるいくつかを挙げよう。

(1)

$$\mathcal{L}_G = f(R) \quad (49)$$

の場合： $f(R)$ 型理論とよく言われる。もっとも単純な \mathcal{L}_{EH} の一般化と考えられよう。場の方程式は、4階の偏微分方程式になる。この理論はアインシュタイン理論の一般化であるため、より多くの事柄を説明

する可能性がある :

- (*) スカラーに対応する自由度を含んでいるため、インフレーション場あるいはダークエネルギーを内蔵している可能性がある.
- (*) 重力波の自由度が 2 より大きい : 偏極が 2 個より大きく、縦波もある.
- (*) 重力の量子論を考えると、アインシュタイン理論では、重力子の理論は繰り込めないが、この理論では繰り込める可能性がある.
- (*) S_{EH} は変分原理的には、厳密には不完全で、表面項による補正が必要になるが、この理論では不要.

(2)

$$\mathcal{L}_{BD} = \frac{1}{8\pi G} \phi R - \frac{\omega_{BD}}{2\phi} (\nabla\phi)^2 - V(\phi), \quad (\phi > 0) \quad (50)$$

の場合ブランス-ディッケ (Brans-Dicke) 理論と言われる. ϕ はスカラー場, ω_{BD} は定数. 古典論では $f(R)$ 型理論と同等 (「等価定理」がある).

(3)

$$\mathcal{L}_{GB} = \frac{1}{8\pi G} (R^2 - 4R_{\mu\nu}R^{\mu\nu} + 9R_{\mu\nu\lambda\rho}R^{\mu\nu\lambda\rho}) \quad (51)$$

の場合 Gauss-Bonnet 理論と言われる. 場の方程式は 2 階微分方程式になる.

(4) ラブロック (Lovelock) 理論

場の方程式が 2 階微分方程式になるという条件で、曲率の任意の次数を含むように \mathcal{L} を一般化したもの. \mathcal{L} の表式は簡単ではない.

(5) ワイル (Weyl) 理論

多分、最初に一般相対論を変えようとした重力理論である. 一般座標変換に対する 不変性以外に共形変換 (形を変えない変換) での不変性を満たすように作られている. 現実性はないと思われるが、形がきれいなので、今でも研究している人がいる. 具体的には、共形変換は

$$g'_{\mu\nu}(x^\lambda) = \Omega^2(x^\lambda) g_{\mu\nu}(x^\lambda). \quad (52)$$

Riemann テンソル $R_{\lambda\rho\mu\nu}$ の traceless 部分 ($C_{\lambda\rho\mu\nu}$ と記す) を Weyl テンソルという. (前後の 2 対についてはそれぞれ反対称なので、それぞれについては traceless. 従って、 $g^{\lambda\mu} C_{\lambda\rho\mu\nu} = 0$ が条件). それは次のように与えられる :

$$C^\lambda{}_{\rho\mu\nu} = R^\lambda{}_{\rho\mu\nu} - \frac{2}{D-2} \left(\delta^\lambda_{[\mu} R_{\nu]\rho} - g_{\rho[\mu} R^\lambda{}_{\nu]} \right) + \frac{R}{(D-1)(D-2)} \delta^\lambda_{[\mu} g_{\nu]\rho} \quad (53)$$

ここで、 D は時空の次元、また

$$T_{\dots[\mu\dots\nu]\dots} \equiv T_{\dots\mu\dots\nu\dots} - T_{\dots\nu\dots\mu\dots} \quad (54)$$

この $C_{\rho\mu\nu}^{\lambda}$ を用いてラグランジアン密度は次のように表される

$$\mathcal{L}_W = \alpha C_{\mu\nu\lambda\rho} C^{\mu\nu\lambda\rho}. \quad (55)$$

この他に、超対称性に基づくものや超弦理論によるものなどがある。

このように、一般相対論以外の多くの重力理論では、重力波の偏極は2個よりも多い。しかし、やっとな重力波が探知できたような段階なので、偏極数まで観測するのは簡単ではなさそうだが、観測できれば、重力理論の区別に役立つ。

また、重力の量子論も盛んに研究されているが、確定的な理論には達するのはまだ先のことと考えられており、実験的検証はさらに先のことであろう。

量子力学における周期ポテンシャル問題 (1)

世戸 憲治*

A Periodic Potential Problem in Quantum Mechanics (1)

Kenji SETO*

1 はじめに

ここでは、量子力学における周期ポテンシャル問題を扱ってみる。すなわち、時間に依存しない1次元の Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi = E\Psi \quad (1.1)$$

において、ポテンシャル $V(x)$ が周期性を持つ場合を考える。もし、この $V(x)$ が三角関数で表される場合は、Mathieu 方程式となる。しかし、この Mathieu 方程式は、周期項を持つ方程式としては最も良く知られた代表的なものではあるが、解析的には非常に扱い難いものであることも確かである。

周期ポテンシャルの問題として、量子力学の教科書でよく見かけるのは、Kronig-Penney のモデルと言われるものである*¹。これは、ポテンシャル $V(x)$ が周期 ℓ を持つ、すなわち、 $V(x+\ell) = V(x)$ とし、 $0 \leq x < \ell$ の範囲で、

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x < a \\ V_0, & a \leq x < \ell \end{cases} \quad (1.2)$$

と定義される。この場合はすべて初等関数の範囲内で解かれるが、 $0 \leq x < a$ と $a \leq x < \ell$ の範囲で別々に解いてから、 $x = a$ と $x = \ell$ の2か所で解の接続が必要となり、実際にやってみるとかなり煩雑な計算を要求される。教科書ではエネルギー固有値を求めるところまでは書いてあるが、それ以上の波動関数の規格化等に関して書かれたものは見当たらない。これは計算があまりに大変になるためだろう。

この Kronig-Penney モデルに関する固有値問題、および、規格化については、次回にまわすことにして、ここでは、このモデルをより単純化したものを扱うことにする。すなわち、このポテンシャルに $\ell/(\ell-a)$ を掛けてから、 $a \rightarrow \ell$ という極限值をとることにすると、ポテンシャルの幅が狭くなるにつれ、高さが高くなるので、最終的にはデルタ関数が距離 ℓ の間隔で周期的に並んだもの

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ell V_0 \delta(x - n\ell) \quad (1.3)$$

となる。ここではこのポテンシャルを用いた解析をするが、この場合は、 $0 < x < \ell$ の範囲で解いたものを $x = \ell$ の1か所で接続するだけですむので、元の Kronig-Penney モデルに比べるとかなり単純化される。

* 北海学園大学名誉教授

E-mail: seto@pony.ocn.ne.jp

*¹ 大学演習「量子力学」小谷正雄・梅沢博臣編(裳華房) p.223, 大学演習「量子物理学」山内恭彦・武田暁, 他(裳華房) p.107

ここでは、以下で扱う数式簡素化のため、座標 x 、ポテンシャルの大きさ V_0 、およびエネルギー E を無次元化し、

$$x/\ell \rightarrow x, \quad \frac{2m\ell^2 V_0}{\hbar^2} \rightarrow V_0, \quad \frac{2m\ell^2 E}{\hbar^2} \rightarrow E \quad (1.4)$$

と置き直すことにする。この変換で、ポテンシャルは周期 1 の周期関数となり、波動方程式は

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + E - \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0 \delta(x-n) \right] \Psi = 0 \quad (1.5)$$

となる。

2 Floquet の定理

初めに、周期項を持つ 2 階線形微分方程式における Floquet の定理について説明しておく。ここでは方程式に一般性を持たせて、

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + F(x) \right] \Phi = 0 \quad (2.1)$$

と書いておく。ここに、 $F(x)$ は $F(x+1) = F(x)$ なる周期性を持つものとする。この方程式の線形独立な 2 つの解を $\Phi_1(x)$ 、 $\Phi_2(x)$ とする。このとき、方程式が持つ周期性から、 $\Phi_1(x+1)$ 、 $\Phi_2(x+1)$ も解になるが、独立な解は 2 個しかないので、これら 2 つは、 $\Phi_1(x)$ 、 $\Phi_2(x)$ に線形従属になるはずで、

$$\begin{pmatrix} \Phi_1(x+1) \\ \Phi_2(x+1) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \Phi_1(x) \\ \Phi_2(x) \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

と書ける。ただし、ここに、係数行列 A を

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

とする。この式、およびこの式を x で微分したものとを組み合わせると

$$\begin{pmatrix} \Phi_1'(x+1) & \Phi_1(x+1) \\ \Phi_2'(x+1) & \Phi_2(x+1) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \Phi_1'(x) & \Phi_1(x) \\ \Phi_2'(x) & \Phi_2(x) \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

となる。ここに、プライムは x での微分を表す。さらにこの式の行列式をとると

$$W(x+1) = (\det A)W(x) \quad (2.5)$$

となる。ただし、ここで、Wronskian $W(x)$ を

$$W(x) = \begin{vmatrix} \Phi_1'(x) & \Phi_1(x) \\ \Phi_2'(x) & \Phi_2(x) \end{vmatrix} \quad (2.6)$$

とおいた。ここで、方程式 (2.1) を用いると、

$$\frac{dW(x)}{dx} = 0 \quad (2.7)$$

が証明されるので、この Wronskian $W(x)$ は定数でなければならない。しかも、それは、 Φ_1 、 Φ_2 が独立な解なので、ゼロでない定数のはずである。したがって、(2.5) 式から、

$$\det A = 1 \quad (2.8)$$

となる.

つぎに, 係数行列 A の対角化を行う. 固有値を λ , 固有ベクトルを $(u_1, u_2)^T$ とした固有値方程式

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

を考える. よく知られているように, このときの固有値 λ は方程式

$$\begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (2.10)$$

の解になるが, この方程式は (2.8) 式を考慮すると

$$\lambda^2 - (a_{11} + a_{22})\lambda + 1 = 0 \quad (2.11)$$

となる. ここでは, 2 個の独立解 $\Phi_1(x)$, $\Phi_2(x)$ が実数で求まるようなものに限定すると (2.3) 式 A の各要素も実数となることに注意して, この方程式の解

$$\lambda_{1, 2} = \frac{1}{2} [a_{11} + a_{22} \pm \sqrt{(a_{11} + a_{22})^2 - 4}] \quad (2.12)$$

は, $a_{11} + a_{22}$ の値によって, つぎのように分類される. すなわち,

$$\begin{cases} a_{11} + a_{22} < -2, & -1 < \lambda_1 < 0, \lambda_2 < -1 \\ a_{11} + a_{22} = -2, & \lambda_1 = \lambda_2 = -1 \\ -2 < a_{11} + a_{22} < 2, & \lambda_1, \lambda_2 \text{ は絶対値 1 の複素数で互いに複素共役} \\ a_{11} + a_{22} = 2, & \lambda_1 = \lambda_2 = 1 \\ 2 < a_{11} + a_{22}, & 1 < \lambda_1, 0 < \lambda_2 < 1 \end{cases} \quad (2.13)$$

となる. つぎに, ここで求められた固有値 λ_1, λ_2 に属する規格化された固有ベクトルを, それぞれ, $(u_{11}, u_{21})^T, (u_{12}, u_{22})^T$ とし, これから作られる行列 U を

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

と定義しておく. (2.2) 式にこの U の逆行列 U^{-1} を作用させると

$$U^{-1} \begin{pmatrix} \Phi_1(x+1) \\ \Phi_2(x+1) \end{pmatrix} = U^{-1} A U U^{-1} \begin{pmatrix} \Phi_1(x) \\ \Phi_2(x) \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

となるが, ここで, $(\Phi_1, \Phi_2)^T$ から $(\Psi_1, \Psi_2)^T$ への変換を

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(x) \\ \Psi_2(x) \end{pmatrix} = U^{-1} \begin{pmatrix} \Phi_1(x) \\ \Phi_2(x) \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

と定義し, $U^{-1} A U$ が対角行列になることを考慮すると, この式は

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(x+1) \\ \Psi_2(x+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1(x) \\ \Psi_2(x) \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

となる^{*2}. さらに, この式を n 回繰り返すと

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(x+n) \\ \Psi_2(x+n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1^n & 0 \\ 0 & \lambda_2^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1(x) \\ \Psi_2(x) \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

^{*2} より一般的には, λ が重解になるときは, 対角化されないで三角行列 (Jordan の標準形) になる場合もあるが, その場合でも $\Psi_1(x)$ あるいは $\Psi_2(x)$ のどちらか一方は, $\Psi_i(x+1) = \lambda_i \Psi_i(x)$ の形に書ける.

となる。

(2.13) 式で示したように, λ_i は $|\lambda_i| < 1$ あるいは $|\lambda_i| > 1$ となる場合があるが, このいずれの場合も (2.18) 式から, $n \rightarrow -\infty$ あるいは $n \rightarrow \infty$ で $\Psi(x+n)$ は発散してしまい量子力学の波動関数としては不適格になる。適合するのは, $|\lambda_i| = 1$ の場合で, ここでは, $0 \leq K \leq \pi$ なる実数 K を用いて,

$$\lambda_1 = e^{iK}, \quad \lambda_2 = e^{-iK} \quad (2.19)$$

とおくことにする。このときの関数 Ψ の周期性は, (2.17) 式から,

$$\Psi_1(x+1) = e^{iK}\Psi_1(x), \quad \Psi_2(x+1) = e^{-iK}\Psi_2(x) \quad (2.20)$$

と, 周期が1つ上がるごとに位相 e^{iK} , または, e^{-iK} が付くことになる。さらに, ここで, Ψ_1 の方について, 添え字を省いて,

$$\Psi(x) = e^{iKx}P(x) \quad (2.21)$$

とおくことにして, (2.20) 式に代入すると

$$P(x+1) = P(x) \quad (2.22)$$

と, 関数 $P(x)$ は周期関数となる。 Ψ_2 の方についても同様である。

ここでは, 空間1次元の解析をしてきたが, 金属結晶中の電子の波動を記述する研究は Bloch によってなされ, (2.21) 式を3次元化したものは, Bloch 関数と呼ばれる。また, このとき K は3次元ベクトルとなり, 伝搬ベクトルと呼ばれる。ここでは1次元解析なので, K のことを伝搬数と呼ぶことにする。

3 方程式の解法

3.1 $V_0 < 0, E < 0$ の場合

初めの問題に帰って方程式 (1.5) を解くことを試みるが, ここでは, $V_0 < 0, E < 0$ の場合を考える。通常ならば, これは束縛状態にある電子の運動を記述するが, ここでは周期ポテンシャルになっているので, はたしてどうなるであろうか。後の記述を簡素化するために,

$$\kappa = \sqrt{-E} \quad (3.1)$$

とおいて, (1.5) 式を $0 < x < 1$ の範囲内で解くと, A, B を任意定数として,

$$\Psi(x) = A \cosh(\kappa x) + B \sinh(\kappa x) \quad (3.2)$$

となる。また, $1 < x < 2$ の範囲での $\Psi(x)$ は (2.20) の第1式から,

$$\Psi(x) = e^{iK} [A \cosh(\kappa(x-1)) + B \sinh(\kappa(x-1))] \quad (3.3)$$

となる。もちろんこのとき, K の符号を変えた (2.20) の第2式の方も存在するが, ここでは当分のあいだ, 第1式の方で話を進める。

ここで, (3.2) 式と (3.3) 式の2つの解を $x = 1$ で接続しなければならないが, 初めに, 関数自身の連続性から,

$$A \cosh \kappa + B \sinh \kappa = e^{iK} A \quad (3.4)$$

を得る。つぎに微係数の接続であるが、これはポテンシャルにデルタ関数を含むために連続にすることはできない。 ε を正の微小量として、(1.5) 式を $1 - \varepsilon$ から $1 + \varepsilon$ まで積分すると

$$\left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x=1+\varepsilon} - \left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x=1-\varepsilon} = V_0 \Psi(1) \quad (3.5)$$

となって、微係数にはギャップがあることになる。(3.2) (3.3) 式をこの式に代入すると

$$e^{iK} \kappa B - \kappa(A \sinh \kappa + B \cosh \kappa) = V_0 e^{iK} A \quad (3.6)$$

となる。この (3.4) 式と (3.6) 式をまとめると、

$$\begin{pmatrix} \cosh \kappa - e^{iK} & \sinh \kappa \\ \frac{V_0 e^{iK}}{\kappa} + \sinh \kappa & \cosh \kappa - e^{iK} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 \quad (3.7)$$

となるが、係数 A , B が両方ともゼロにならないためには、この式の係数行列式の値がゼロでなければならない、方程式

$$\cos K = \cosh \kappa + \frac{V_0}{2\kappa} \sinh \kappa \quad (3.8)$$

を得る。この式から伝搬数 K と κ の間に関係が付くことになるが、そのためには右辺の絶対値が 1 以下でなければならない、以下の第 4 節のグラフで示すように、この式を満たす κ の値は、離散的ではなく、ある幅を持った、いわゆるバンド構造になる。また、(3.1) 式から κ はエネルギー E で決まるので、この式は、エネルギー E と伝播数 K の関係を決めることになる。この意味で、この (3.8) 式を (広義の) 固有値方程式と呼ぶことにする。さらに、この式の左辺は K の偶関数になっているので、一般には、1 個の E に対し、正負 2 個の K が決まることになる。このことが、(2.20) 式で K の符号を変えた 2 個の波動関数が存在する理由であり、この意味で、波動関数は縮退していることになる。ただし、 $K = 0$, π のときは、これら 2 つの波動関数は同じものになってしまうので、 K で偏微分したものがもう 1 つの波動関数となるはずであるが、ここではこの場合を例外として扱わないことにする。したがって以下では、 K の範囲を $0 < K < \pi$ とする。

ここで、係数 A , B を、(3.4) 式が満たされるように

$$A = \sinh \kappa, \quad B = e^{iK} - \cosh \kappa \quad (3.9)$$

と選ぶことにする。以後、このときの波動関数を、 κ 依存性を明記して、 $\Psi(x, \kappa)$ と書くことにすると、(2.20) 式から、 n を任意整数とした区間 $n < x < n + 1$ の範囲において、

$$\Psi(x, \kappa) = e^{iKn} [\sinh \kappa \cosh (\kappa(x - n)) + (e^{iK} - \cosh \kappa) \sinh (\kappa(x - n))] \quad (3.10)$$

あるいは、双曲線関数の加法定理を用いて、

$$\Psi(x, \kappa) = e^{iKn} [e^{iK} \sinh (\kappa(x - n)) - \sinh (\kappa(x - n - 1))] \quad (3.11)$$

と得られたことになる。ただし、これは規格化されたものではない。

つぎに、この波動関数 $\Psi(x, \kappa)$ の規格化がどうなるかを調べてみよう．一般に異なる 2 個の κ, κ' を考え、それに対応する伝搬数を K, K' とする．(3.11) 式を用いると、規格化のための積分式は

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, \kappa)} \Psi(x, \kappa') dx &= \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{n=-M}^M \int_n^{n+1} \overline{\Psi(x, \kappa)} \Psi(x, \kappa') dx \\ &= \left(\lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{n=-M}^M e^{-i(K-K')n} \right) \int_0^1 \overline{\Psi(x, \kappa)} \Psi(x, \kappa') dx \quad (3.12) \end{aligned}$$

となる．ここに、上付バーは複素共役をとることを意味する．ここで、先にこの積分の部分を実行しよう．(1.5) 式で $E = -\kappa^2$, or $-\kappa'^2$ において、 $\overline{\Psi(x, \kappa)}$, $\Psi(x, \kappa')$ が満たす式を、それぞれ、

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2}{dx^2} - \kappa^2 - \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0 \delta(x-n) \right] \overline{\Psi(x, \kappa)} &= 0 \\ \left[\frac{d^2}{dx^2} - \kappa'^2 - \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0 \delta(x-n) \right] \Psi(x, \kappa') &= 0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

と書いておく．この第 1 式に $\Psi(x, \kappa')$ を、また、第 2 式に $\overline{\Psi(x, \kappa)}$ を掛けて辺々を引き算すると、

$$\frac{d}{dx} \left[\Psi(x, \kappa') \frac{d\overline{\Psi(x, \kappa)}}{dx} - \overline{\Psi(x, \kappa)} \frac{d\Psi(x, \kappa')}{dx} \right] - (\kappa^2 - \kappa'^2) \overline{\Psi(x, \kappa)} \Psi(x, \kappa') = 0 \quad (3.14)$$

となる．この式を 0 から 1 まで積分すると、

$$\int_0^1 \overline{\Psi(x, \kappa)} \Psi(x, \kappa') dx = \frac{1}{\kappa^2 - \kappa'^2} \left[\Psi(x, \kappa') \frac{d\overline{\Psi(x, \kappa)}}{dx} - \overline{\Psi(x, \kappa)} \frac{d\Psi(x, \kappa')}{dx} \right]_0^1 \quad (3.15)$$

となり、さらに、 $n=0$ とした (3.11) 式を用いて、この右辺を計算すると、

$$\begin{aligned} \int_0^1 \overline{\Psi(x, \kappa)} \Psi(x, \kappa') dx &= \frac{1}{\kappa^2 - \kappa'^2} \left[(1 + e^{-i(K-K')}) (\kappa \sinh \kappa' \cosh \kappa - \kappa' \sinh \kappa \cosh \kappa') \right. \\ &\quad \left. + (e^{-iK} + e^{iK'}) (\kappa' \sinh \kappa - \kappa \sinh \kappa') \right] \quad (3.16) \end{aligned}$$

となる．もちろん、これは、この積分のところに、(3.11) 式を直接代入して積分しても得られるが、計算は面倒になる．つぎに、(3.12) 式の和の部分であるが、これはデルタ関数に関する公式を用いると、

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{n=-M}^M e^{-i(K-K')n} = 2\pi \delta(K - K'), \quad 0 < K, K' < \pi \quad (3.17)$$

となるので、(3.12) 式は、結局、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, \kappa)} \Psi(x, \kappa') dx &= \frac{4\pi}{\kappa^2 - \kappa'^2} \left[\kappa \sinh \kappa' \cosh \kappa - \kappa' \sinh \kappa \cosh \kappa' \right. \\ &\quad \left. + \cos(K) (\kappa' \sinh \kappa - \kappa \sinh \kappa') \right] \delta(K - K') \quad (3.18) \end{aligned}$$

となる．ここで、固有値方程式 (3.8) 式に戻って、以下の 4 節のグラフで示すように、この $V_0 < 0, E < 0$ の領域では、バンドは 1 個しか存在しないので、 K の値を決めると対応する κ は一意的に決まる．つまり、 $K = K'$

ならば $\kappa = \kappa'$ となることを注意しておく。したがって、この式のデルタ関数以外の部分は $\kappa \rightarrow \kappa'$ で、 $0/0$ の不定形となっているので、この極限值を求めると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, \kappa)} \Psi(x, \kappa') dx = \frac{2\pi}{\kappa} [-\kappa + \sinh \kappa \cosh \kappa - \cos(K)(\sinh \kappa - \kappa \cosh \kappa)] \delta(K - K') \quad (3.19)$$

となるが、右辺の大括弧の部分に固有値方程式 (3.8) 式を用いると、

$$-\kappa + \sinh \kappa \cosh \kappa - \cos(K)(\sinh \kappa - \kappa \cosh \kappa) = \kappa \sinh \kappa \frac{d \cos(K)}{d\kappa} \quad (3.20)$$

となる。ここで、 $\delta(K - K')$ を $\delta(\kappa - \kappa')$ で表すようにすると、第 4 節のグラフで示すように、この場合は、 $dK/d\kappa < 0$ となることに注意し、波動関数の直交性

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, \kappa)} \Psi(x, \kappa') dx = 2\pi \sinh(\kappa) \sin(K) \delta(\kappa - \kappa') \equiv N^2(\kappa) \delta(\kappa - \kappa') \quad (3.21)$$

を得る。ここでは、 $0 < K < \pi$ としているので、この積分結果は正定値であり、規格化定数を $N(\kappa)$ とすると、 $\Psi(x, \kappa)/N(\kappa)$ が規格化された波動関数となる。なお、 K の符号を変えた場合は、 $\sin(K)$ の部分は負となるが、 $dK/d\kappa$ が逆に正となるので、この規格化積分の結果は同じく正定値となることを注意しておく。

3.2 $E > 0$ の場合

ここでは、 V_0 の符号は正負どちらでもよいものとし、 $E > 0$ の場合を解析する。数式簡素化のため、

$$k = \sqrt{E} \quad (3.22)$$

とし、これまでと同じ処方箋で進めることはできるが、それよりは、これまでの κ を

$$\kappa = ik \quad (3.23)$$

とおくことにして、前の結果をそのまま借用することにする。 K と k の関係を決める式は (3.8) 式より、この場合の固有値方程式

$$\cos K = \cos k + \frac{V_0}{2k} \sin k \quad (3.24)$$

となり、波動関数は、(3.11) 式より、 $\Psi(x, k)$ と書くことにして、区間 $n < x < n+1$ の範囲において、

$$\Psi(x, k) = ie^{iKn} [e^{iK} \sin(k(x-n)) - \sin(k(x-n-1))] \quad (3.25)$$

となる。ここまでは、前の結果の借用ですむが、つぎの波動関数の規格化の段階では、複素共役をとるので、(3.23) 式の解析接続ができなくなるので注意が必要である^{*3}。この場合も (3.12) 式から (3.15) 式までと同様の計算で、(3.15) 式に代わるものとして、

$$\int_0^1 \overline{\Psi(x, k)} \Psi(x, k') dx = -\frac{1}{k^2 - k'^2} \left[\Psi(x, k') \frac{d\overline{\Psi(x, k)}}{dx} - \overline{\Psi(x, k)} \frac{d\Psi(x, k')}{dx} \right]_0^1 \quad (3.26)$$

^{*3} 例えば、 κ が実数のとき、 $\bar{\kappa} = \kappa$ であるが、ここで、解析接続 $\kappa = ik$ をしてしまうと、 $-ik = ik$ というおかしな式になる。

となり、この右辺に $n = 0$ とした (3.25) 式を代入し、さらに、(3.17) 式を用いて、(3.18) 式に代わるものを作ると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, k)} \Psi(x, k') dx = -\frac{4\pi}{k^2 - k'^2} [k \sin k' \cos k - k' \sin k \cos k' + \cos(K)(k' \sin k - k \sin k')] \delta(K - K') \quad (3.27)$$

を得る。ここで一つ問題が生じる。 $V_0 < 0$, $E < 0$ のときはバンドが 1 本しかなかったので、 K を決めると κ が決まったが、この場合は、伝播数 K を決めても k は一意には決まらずに、各バンド毎に 1 個ずつの k が決まってしまうということである。したがって、 $K = K'$ であっても $k = k'$ になるとは限らない。しかし、この式の大括弧の部分で、(3.24) 式を用いて、 $\cos k$, $\cos k'$ を消去すると、

$$k \sin k' \cos k - k' \sin k \cos k' + \cos(K)(k' \sin k - k \sin k') = k' \sin k (\cos(K) - \cos(K')) \quad (3.28)$$

となり、これに $\delta(K - K')$ を掛けたときは常にゼロとなる。これは波動関数の周期境界条件に依拠することである。したがって、 k, k' が異なるバンドに属しているときは、 $k \neq k'$ となるので、この積分はゼロとなり、異なるバンド間の直交性がでる。 k, k' が同じバンドに属するときは、 $k = k'$ となって、(3.27) 式の分母もゼロとなるので極限值をとることにすると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, k)} \Psi(x, k') dx = -2\pi \sin k \frac{d \cos(K)}{dk} \delta(K - K') \quad (3.29)$$

となる。ここで、 $\delta(K - K')$ を $\delta(k - k')$ で表しておこう。第 4 節のグラフで示すように、 dK/dk の符号はバンドごとにより変わり、 n を非負整数として、区間 $n\pi < k < (n+1)\pi$ での符号は $(-1)^n$ となる。これは、 dK/dk の符号は $\sin k$ の符号と一致することを示す。これらのことを考慮すると、波動関数の直交性

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, k)} \Psi(x, k') dx = 2\pi |\sin k| \sin(K) \delta(k - k') \equiv N^2(k) \delta(k - k') \quad (3.30)$$

を得る。これから、規格化定数を $N(k)$ とすると、 $\Psi(x, k)/N(k)$ が規格化された波動関数となる。なお、 K の符号を変えたもう 1 つの解のときは、 $\sin(K)$ の符号が変わるが、 dK/dk の符号もこの場合と逆転するので、結果的にこれと同じ直交関係式になる。

ここで、流れ関数についても調べておく。(1.4) 式における変数の無次元化を、時間 t についても

$$\frac{\hbar}{m\ell^2} t \rightarrow t \quad (3.31)$$

と無次元化しておく、時間依存型の Schrödinger 方程式は

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0 \delta(x - n) \right] \Psi = 2i \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (3.32)$$

となる。これから、連続の方程式

$$\frac{\partial(\overline{\Psi}\Psi)}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \quad j = \frac{1}{2i} \overline{\Psi} (\overrightarrow{\partial}_x - \overleftarrow{\partial}_x) \Psi \quad (3.33)$$

が導かれる。ここで、 Ψ として、(3.25) 式を用いて、流れ関数 j を求めると、

$$j = k \sin k \sin(K) \quad (3.34)$$

となる。この式から、 $\sin k$ の符号はバンド毎に変わることを、および、ここでは、 $0 < K < \pi$ としているので、流れの方向は、バンドごとにエネルギーの小さい方から正と負の値を繰り返すことになる。また、 K の符号を変えた解の場合は、バンドごとに小さい方から負と正の値を繰り返すことになる。

4 数値解析によるグラフ表示

ここでは、数値計算によるグラフを表示する。初めに、 $E < 0$ の場合の固有値方程式 (3.8) 式を用いて、伝播数 K を κ の関数として求めたものを図 1 に、また同様に、 $E > 0$ の場合の (3.24) 式を用いて、伝播数 K を k の関数として求めたものを図 2 に示す。ただし、図 1 では $V_0 = -5$ の場合を、図 2 では $V_0 = 5$ の場合を示すことにした。これらいずれの場合も、伝播数 K が実数で決まるためには、式の右辺の絶対値が 1 以下でなければならない。また、 κ あるいは、 k の値がこの条件を満たすときは許容帯、満たさないときは禁止帯となって、いわゆるバンド構造を形成することになる。

これらの図からわかるように、 $E < 0$ の場合は、 $dK/d\kappa < 0$ となり、また、 $E > 0$ の場合は各バンド毎に dK/dk の符号は、 k の小さい方から正と負の値を繰り返す。

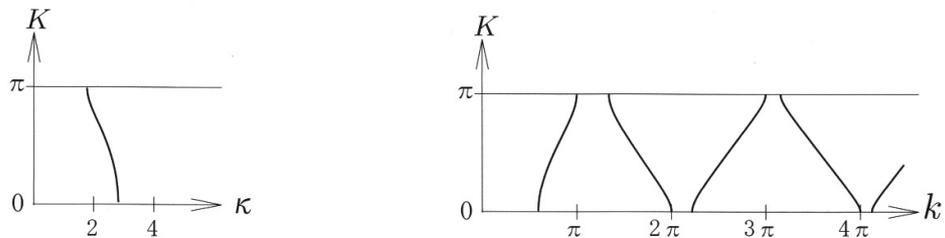


図 1 K と κ の関係 ($E < 0, V_0 = -5$) 図 2 K と k の関係 ($E > 0, V_0 = 5$)

これら図 1, 図 2 では、特定の V_0 の値の場合だけを示しただけなので、全体像が見えてこない。そこで、固有値方程式 (3.8) (3.24) 式からポテンシャルの大きさ V_0 を求め、 $\kappa = \sqrt{-E}$ 、 $k = \sqrt{E}$ として、2 つの式をまとめて書くと、

$$V_0 = \begin{cases} \frac{2\sqrt{-E}}{\sinh \sqrt{-E}} (\cos K - \cosh \sqrt{-E}), & \text{for } E < 0 \\ \frac{2\sqrt{E}}{\sin \sqrt{E}} (\cos K - \cos \sqrt{E}), & \text{for } E > 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

となる。ここで、 $\cos K$ の値が -1 から 1 まで動くとき、ポテンシャルの大きさ V_0 を、エネルギー E の関数として描いたのが次ページの図 3 である。

この図では、 $\cos K$ の値が -1 のときを青色で描き、その値が大きくなるにしたがい色を連続的に変化させ、 $\cos K = 1$ のときに赤色になるように描いたものである。この図から、 V_0 を正、あるいは負の一定値に固定したとき、エネルギー E はある幅を持った領域が離散的に現れ、いわゆるバンド構造になっていることが見て取れる。どのバンドにも $\cos K$ の値は -1 から 1 までの値が存在することに注意したい。また、このグラフで、不連続に立ち上がる場所は、 $k = n\pi$ ($n = 1, 2, \dots$) に相当する。

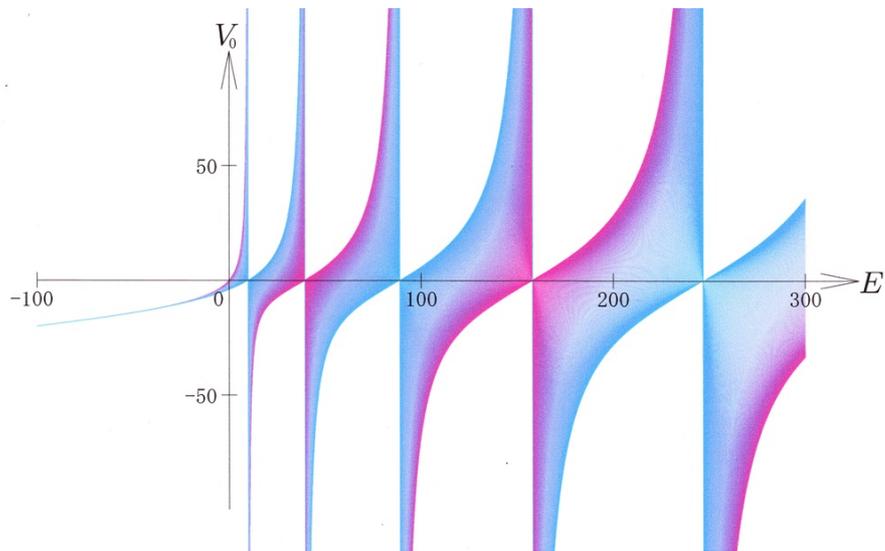


図3 V_0 と E の関係

5 おわりに

ここで扱った周期ポテンシャル問題は、私にとっては専門外の分野でもあり、理解し難いことの連続であった。いろいろな量子力学の教科書を調べてみたが、一般論を書いたものが多く、具体的なポテンシャルを与えて波動関数の規格化まで扱ったものは皆無であった。特に、この計算を始める前は、異なるバンド間の直交性と同一バンド内での直交性がどのような形で出てくるのかが、よくわからず疑問を感じていた。しかし、今回の計算で、これらはすべて1個のデルタ関数から生じることとなり、この疑問は矛盾なくきれいな形で氷解することとなった。

やはり一般論を理解するには、その前に、いくつかの具体例を知っておくことが、条件となるであろう。その点、ここで扱ったデルタ関数が周期的に並んだモデルは、周期ポテンシャルの中では最も解析しやすいものであり、この種の問題の理解のために役立つはずである。

今回は、Kronig-Penney モデルについて、また、次々回では、鋸歯状ポテンシャルの場合の固有値、固有関数の直交性について述べる予定である。

[謝辞]

今回もこの原稿を書くにあたって、京都大学名誉教授の中西襄先生にご精読いただき、たくさんコメントをいただきました。ここに、謹んで感謝いたします。先生から受けたコメントの中で、ここで、特記しておきたいことは、(2.11) 式の下で、「2個の独立解 $\Phi_1(x)$, $\Phi_2(x)$ が実数で求まるようなものに限定すると」と書いたが、このことは、Floquet の定理を導くためには、必ずしも必要な条件ではないのではないかというものである。この記述は、他の教科書にしたがったものであるが、先生から受けた注意は、 $\phi_1(x)$, $\phi_2(x)$ として、 $\phi(x)$, $\overline{\phi(x)}$ を選ぶと、 $a_{22} = \overline{a_{11}}$ となって、(2.11) 式に表れる $a_{11} + a_{22}$ は実数となるので、そのまま以下の議論が成り立つということである。

編集後記

6巻1号, 2号に続けて3号を発行します. 編集者が江沢康生さんをお願いしていた, 「一般相対論の実験的検証」(内容はもっと広範囲になりましたが) の解説論文が思ったよりも早くできあがったので, 例によって手元に原稿をあまりおきたくないの, 3号を発行します.

というのは, つぎの6月の発行ということになると3ヶ月も先のことすし, それに世戸さんの「量子力学の周期ポテンシャル問題 (1)」の原稿がすでに投稿されてあったからです.

世戸さんからはあまりあわてて掲載しないでいただきたいという要望もあったのですが, それでも早く掲載しては絶対いけないとは言われていないので, 3号を発行するのがよいと判断しました.

どちらにしても毎回の1号あたりのページ数を30ページ前後という制限を課しているの, ちょうど適切なページ数だと思います.

世間の関心がニュートリノ振動とか重力波とかの物理に集まっている時期なので, その要望に応えたいという気持ちもあります. 一般相対論の数学が難しいことも事実ですが, 「ブラックホールの存在がどうしてわかるか」などは一般の方々にとってもわかると思います.

読者の方から, バックナンバーをどこかのサイトで見られるようにした方がよいとのアドバイスをいただきましたが, これはすでに名古屋大学の谷村先生のサイトにすべて出ています. アドレスは

www.phys.cs.is.nagoya-u.ac.jp/~tanimura/math-phys/

です. この機会に谷村省吾さんにその労にあらためて感謝の意を表したいと思います.

上のアドレスでヒットしないときには, 「数学・物理通信」で検索をすれば, 必ずヒットします.

(矢野 忠)