一般社団法人

国際数理科学協会会報

No.122/2022.10

編集委員： 藤井淳一（委員長）

目次

国際数理科学協会 2022 年度年会のお知らせとご報告

年会担当理事 濵田 悦生

少し遅れて開かれる予定の年会と、既に開かれた年会のご報告をいたします。
まず確率モデルと最適化分科会のお知らせから：

国際数理科学協会「確率モデルと最適化」分科会 2022 年度年会
（日本オペレーションズ・リサーチ学会「確率最適化とその応用」
主査 來島愛子（上智大学），幹事 堀口正之（神奈川大学），王琦（長崎総合科学大学）との共催）

世話役：北條仁志（大阪公立大学）
日時：2022 年 10 月 15 日 (土) 14:00 – 16:00
開催方法：Zoom によるオンライン形式
参加ご希望の方は、10 月 13 日 (木) までに北條 (mailto:hojo@omu.ac.jp) までご一報ください。
接続情報をメールにてお送りいたします。

プログラム

14:00–14:05 開会のあいさつ

14:05–14:25 **川中雄斗，北條仁志**（大阪公立大学）
『二種のハニーポットによる防御戦略の構築』

14:25–14:45 **安永直央** (大阪府立大学), **北條仁志** (大阪公立大学)
『木構造型ニューラルネットワークを用いた野球における勝率予測と解釈に関する研究』

14:45–15:05 **菊地湧也，堀口正之**（神奈川大学）
『フィッシャーとマハラノビスの判別分析と企業経営状態の予測妥当性評価の研究』

（休憩）

15:15–15:45 **北條仁志，田部直人** (大阪公立大学)，**橋本虎汰郎**（大阪府立大学）
『ネーミングゲームの理論と応用』

15:45–15:50 閉会のあいさつ

以下、年会ご報告です：

「統計的推測と統計ファイナンス」分科会研究集会

日時: 2022 年 8 月 21 日 (日) 10:00–17:00
場所: 大阪公立大学 Zoom 開催

プログラム

午前の部

10:00–10:20 **森 丈二** (大阪公立大学大学院情報学研究科), **林 利治** (大阪公立大学大学院情報学研究科)
『Twin support vector machine とその学習時間に関する改良の紹介』
概要: Twin SVM (TWSVM) の改良として Smoothing TWSVM (STWSVM, Kumar and Gopal (2008)), Least Squares TWSVM (LSTSVM, Kumar and Gopal (2009)) を紹介した．TWSVM が双対問題を解くことに対し, STWSVM と LSTSVM は主問題を解く．これら 2 つの手法は TWSVM よりも高速な学習が可能であり, 規模の大きなデータセットに対して有効であることを解説した.

10:20–10:40 **稲葉 優紀** (大阪公立大学大学院情報学研究科), **林 利治** (大阪公立大学大学院情報学研究科)
『射影近似により計算量が削減されたべき乗法の紹介』
概要: 主成分分析では, 主成分を得るため分散行列の固有ベクトルを求める．時系列データの分散行列から固有ベクトルを, 例えばべき乗法で求めるには大きな計算量を要する．そこで, Roland et al. (2005) はべき乗法に射影近似を取り入れ, 逐次的に固有ベクトルを近似する手法を提案した．本発表では, 彼らの手法を紹介し, 計算量が減少することを報告した.

10:40–11:00 **大村 泉** (大阪公立大学大学院情報学研究科), **林 利治** (大阪公立大学大学院情報学研究科)
『分類器として CatBoost を用いた半教師あり学習法の紹介』
概要: 本発表では, まず勾配ブースティング決定木と, その中でも複数の置換を用いる CatBoost 分類器 (Prokhorenkova et al. (2018)) を紹介した．そして, 半教師あり学習法の 1 つであり, 3 つの分類器の内 2 つによる疑似ラベル付けを順次繰り返す Tri-Training を CatBoost 分類器に適用した Tri-CatBoost (Liu et al. (2020)) を紹介した.

11:00–11:20 **木幡 圭吾** (大阪公立大学大学院情報学研究科), **林 利治** (大阪公立大学大学院情報学研究科)
『ランダムフォレストのハイパーパラメータ最適化アルゴリズムにおける剪定による時間に対する性能向上の調査』
概要: ランダムフォレスト (RF) は, ハイパーパラメータを適切な値に調整することで性能の改善が期待できる．Optuna (Akiba et al. (2019)) はこれを自動的に行うフレームワークである．本発表では, Optuna 及びその内部で利用できる手法 TPE+CMA-ES を紹介した．さらに, Optuna を RF へ適用した実験の結果を報告した.

11:30–11:50 **本田 一樹** (大阪府立大学大学院工学研究科), **林 利治** (大阪公立大学大学院情報学研究科)
『ランダムフォレストの異形を踏まえた分割点に関するランダム化の制御を行う手法の提案に向けて』
概要: 分類問題を解く手法にランダムフォレストがある．これの異形に Extra-Trees, Forest-PA があり, これらを組合わせれば, より良い性能を達成できそうだと考えた．本発表では, 上記二つの異形を紹介し,

分割点に関する新しいランダム化の制御を行う手法について発表した.

11:50–12:10 **角 達也** (大阪府立大学大学院工学研究科), **林 利治** (大阪公立大学大学院情報学研究科)
『少数のクラスタに分かれるような共通因子スコアの探索アルゴリズムの紹介』
概要: 因子分析における因子得点が一意に定まらない性質は, 因子得点を決定された部分と未決定な部分に分けることで表される. Uno et al. (2019) はこの表現を用いて, 因子得点が望ましい特徴を持つように未決定な部分を求める方法を提案した. 彼らは望ましい特徴として, 共通因子得点が少数のクラスタに分かれることを選択した. 本発表では, その方法について紹介した.

12:10–12:30 **幸田 翼** (大阪府立大学大学院工学研究科), **林 利治** (大阪公立大学大学院情報学研究科)
『カーネルの自動選択手法の紹介とその一般化確率主成分分析への適用に関する検討』
概要: カーネル関数の選択はカーネルに基づく手法の性能に影響する. 本発表では, Oyetunde and Liem (2022) が提案したカーネル関数の選択手法を, クリギング通して紹介した. さらに, 彼らの選択手法の一般化確率主成分分析 (Gu and Shen (2020)) への適用, およびその検討について説明した.

13:30–14:10 **濵田 悦生** (大阪工業大学情報科学部)
『肺癌年齢調整死亡率のピークについて』
概要: 肺癌年齢調整は死亡率に関連する話題を 3 つ提供した.
（1）都道府県別の喫煙率と肺癌罹患率の関係において, シンプソンのパラドックスが存在することを示した.
（2）国立がん研究センターにおけるデータの肺癌年齢調整死亡率において, 男性データと女性データでそれぞれ overestimate と underestimate があることを指摘した.
（3）年齢調整死亡率のピークにおける要因を探り, 男性では昭和一桁世代, 女性では大正二桁世代の貢献を確認した.

14:10–14:50 **地道 正行** (関西学院大学商学部) , **宮本 大輔** (東京大学大学院情報理工学系研究科),
阪 智香 (関西学院大学商学部), **永田 修一** (関西学院大学商学部)
『R による探索的財務データ解析と再現可能研究: NEEDS 企業財務データの利用』
概要: 本研究では，東京証券取引所第一部上場企業の財務データに対して非対称分布族を考慮した誤差分布をもつ両対数モデルを用いて売上高の統計モデリングを行った. その際，探索的データ解析の視点から，データ可視化によって得られた知見を統計モデリングに利用し，さらに赤池情報量規準を利用することによってモデル選択を行った. 結果として売上高を予測するモデルとして, 非対称ティー誤差を持つ両対数モデルが適切であることがわかった. なお，本研究は動的文書生成によって再現可能研究の立場から実施された.

14:50–15:30 **地道 正行** (関西学院大学商学部)
『財務データの匿名化 』
概要: 本研究では, 企業の売上高や資産合計などの財務データを匿名化することに対する種々の問題 (技術, 理論, 制度等) を調査し, 実際の匿名化法を検討した. 具体的には, 日経 NEEDS 財務データを利用し, 母集団分布を分割・適用・結合戦略の立場から特定化することによって, パラメトリック・ブートストラップ法を用いて疑似乱数を生成し, 合成データを作成した. さらに, 元データと合成 (疑似) データを

要約・可視化・解析することによる差異を比較し, 統計モデリングのために必要な本質的な性質が保存されていることを確認した.

15:40–16:20 **林 利治** (大阪公立大学大学院情報学研究科)
『ゲート付き再帰型ニューラルネットワークとその単純化に関する一考察』
概要: 系列データを扱える再帰型ニューラルネットワークはLSTM (Hochreiter and Schmidhuber (1997)) により大きく発展したが, その後, 複雑なゲート構造が GRU (Cho et al. (2014)), MGU (Zhou et al. (2016)), S-MGU (Heck and Salem (2017)) と単純化されてきた. 本発表では, これらを紹介し, さらなる単純化についての考察を行った.

「第三十三回 ALGI 代数，論理，幾何と情報科学研究集会」

場所：秋田拠点センター ALVE
日時：9 月 11 日から 9 月 12 日まで
講演数：8 件
参加者：11 名

９月１１日（日）
13:15 〜 13:45 **西澤弘毅**（神奈川大学）
演題：Priestley duality from opfibrations and fibrations
梗概：ストーン双対性は、ある代数たちの圏とある位相空間たちの圏の間の反変圏同値であり、その本質的な情報は双対随伴の中にある。昨年の発表では、位相に関する議論なしでこの双対随伴を得ることを目的とし、代数と付加的なパラメータを基に、形式空間という抽象的な位相空間を構成する方法を示した。通常の位相空間はその例になる。今回の発表では、その理論を拡張することによって、プリーストリー双対性も構成できたことを報告する。

13:45 〜 14:15 **田中康平**（信州大学）
演題：Topological motion planning on stratified spaces
梗概：カーナビゲーションや自動運転技術を支えるシステムの根幹には，動作領域上の 2 点が与えられた際に，それらを繋ぐパスをどのように指定するかという問題がある．本研究では，分割された領域上で境界を跨がない経路指定に限定し，領域全体で移動を制御するためには，最低何種類の経路指定アルゴリズムが必要かを考える．

14:30 〜 15:30 **松田直祐**（新潟工科大学）
演題：直観主義論理と Kripke 意味論と Bool 関数の関数的完備性
梗概：Bool 関数の集合 F が（古典意味論上で）関数的完備であるとは，どんな Bool 関数 f に対しても，f と同等な (古典意味論上で）論理式を F の関数を組み合わせて与えられる時をいう。F が関数的完備であるための必要十分条件は 1942 年に Post により与えられている。本講演では Kripke 意味論上での関数的完備性を考え，Bool 関数の集合 F が Kripke 意味論上で関数的完備であるための必要十分条件を，Post の条件を拡張する形で与える。

15:45 〜 16:15 **間庭彬仁**（東京工業大学）
演題：Nested modal λ-calculi
梗概：本発表では，nested sequent calculus のアイディアに基づいた様相論理の natural deduction を与え，それらの Curry-Howard 対応について考える．

16:15 〜 16:45 **新屋良磨**（秋田大学）
演題：局所的な性質で記述できる正規言語部分クラスについて
梗概：本講演では，正規言語（単項二階述語論理で定義可）のいくつかの部分クラス（星無し言語，局所検査可能言語，etc）について背景や理論を紹介し，講演者の研究テーマである可測性に関する結果と未解決問題を報告する．

９月１２日（月）
10:00 〜 10:30 **小川瑞史**（JAIST）
演題：On axiomatization of graphs with bounded tree width
梗概：Inspired by the complete axiomatization of series-parallel graphs (Pous, et.al 2018), we try to extend it to graphs with tree width k by using SP term construction (Ogawa, et.al. 2003).

10:30 〜 11:00 **西村進**（京都大学）
演題：認識論理による分散タスク不可解性とその証明能力について
梗概：分散タスクの不可解性、すなわち与えられた分散計算タスクが特定の分散システムで実現不可能であることを示すには単体的複体モデルを用いた幾何的手法が有効であることがよく知られている。近年 Goubault らによって、複体モデルから導出した認識論理の Kripke モデル上で可解性に矛盾する障害論理式を発見することによっても不可解性証明が可能であることが示された。しかしながら現在のところ、障害論理式の実例はあまり知られていない。
本講演では、認識論理の障害論理式の存否が、異なる認識論理言語 (知識様相の種類や命題不動点の有無) や分散システムの計算力 (1 ラウンド/多ラウンドプロトコル) の組合せでどう変わるかについての現時点での知見を、講演者の最近の結果も交えながら紹介する。また、分散タスク不可解性に対して認識論理を用いることの有効性についても考察する。

11:00 〜 11:30 **中村誠希**（東京工業大学）
演題：ハイパーエッジ置換文法のための空間ポジティブ存在論理について
梗概：本発表では、ハイパーグラフ言語のための空間意味論およびこの意味論に基づくポジティブ存在論理式とハイパーエッジ置換文法の間のいくつかの Kleene の定理（表現可能な言語のクラスが一致すること）について、 (Nakamura 2022) に基づき紹介する。

＊寄稿

Stability of a He Atom

池田 正幸 （青山学院大・理工学部物理学科 名誉教授）(2022 June 15)

概 要

ヘリウム原子内の電子を Dirac 方程式によって記述する。この Dirac 電子場を第 2 量子化形式で扱うと、電子の Fermion としての個性と電子がもつ spin の属性が必然的に組込まれることになる。『このモデルに立てば、Helium 原子の基底状態の際立った安定性が素直に記述できるだろう』と期待して議論を構成してみた結果をご紹介します。

Helium 原子は、液化温度が $-268.928°C$ (wikipedia による) にも及ぶ、極めて安定な原子です。この著しい安定性を最少限の前提から理解したいとの試みです。

1 Dirac 電子場と、その第 2 量子化

Dirac[1] は Schrödinger 方程式を相対性原理を満たすように書き直して、Dirac 方程式：

$$\left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - c\rho_1(\sigma\cdot p) - \rho_3 mc^2\right\}\psi = 0. \tag{1. 1}$$

を得た。ここでは、良く知られた $\vec{\alpha}$, β matrix の代わりに、spin matrix: $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ と、ρ_1, ρ_3 を使って書いた ($\vec{\alpha} = \rho_1\vec{\sigma}, \beta = \rho_3$)。 spin matrix: $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ と、$\rho_1, \rho_3(=\beta)$ をあらわに書くと：

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.2}$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \qquad \rho_3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \qquad \left\{I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right\} \tag{1.3}$$

と表わせる。(1.3) の最初の 2 式では、本来は、4×4 の行列であるものを、2×2 の行列 I と 0 を利用して 2×2 の形で書いた。(ρ_1, ρ_3 は 4×4 のマトリックスである) これらはつぎの性質を持つ：

$$\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z,\ \sigma_x^2 = 1,\ (\text{cyclic}) \qquad \rho_1^2 = \rho_3^2 = 1, \qquad \rho_1\rho_3 = -\rho_3\rho_1, \tag{1.4}$$

Dirac 電子は固有の属性として、spin 自由度を備え持つている。

1.1 2nd Quantization Condition

第 2 量子化形式で議論したいので、Dirac 電子場の Lagrangian density を知りたい：

$$\mathcal{L} = \psi^*\left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - c\rho_1(\sigma\cdot p) - \rho_3 mc^2\right\}\psi, \tag{1.5}$$

この Lagrangian に変分原理により：$\delta\mathcal{L}/\delta\psi^* = 0$ を要求すれば Dirac 方程式 (1.1) が導ける。

第２量子化を実行する。Lagrangian(1.5) から ψ の共役運動量 Π_ψ を決め、量子条件 [1] を課す：

$$\Pi_\psi \equiv \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \dot{\psi}} = i\hbar\psi^* \Rightarrow i\hbar\hat{\psi}^\dagger, \qquad \{\hat{\psi}(x,t), \hat{\psi}^\dagger(x',t')\} = \delta(x-x')\delta(t-t'). \tag{1.6}$$

波形括弧は反交換子：$\{A,\, B\} \equiv AB + BA$ を表わす。査読の方が指摘されたとおり、通常は同時刻面 $t = t'$ 上で量子化条件を要求するのだが、この考察では敢えて (1.6) の形を試みる。

この量子化条件 (1.6) によって、Dirac 場の量 $(\hat{\psi},\, \hat{\psi}^\dagger)$ は単純な場の量でなく、Dirac 電子を消滅・生成させる第２量子化された演算子 (＾の記号が示す) になる。反交換関係を仮定したので Dirac 電子は Pauli の排他律に支配されることになる。これ以後 $\hat{\psi},\, \hat{\psi}^\dagger$ は第２量子化された量である。

§. 1.1 に戻り、量子化条件 (1.6) の働きを確認する。　Dirac 電子場の真空 $|0\rangle$ を条件式 [2] ：

$$\hat{\psi}\,|0\rangle \equiv 0, \qquad \Big(\langle 0|\,\hat{\psi}^\dagger \equiv 0\Big), \tag{1.7}$$

によって定義する。条件 (1.7) は厳密には正しくない。Dirac 方程式には負エネルギーの解もあり [§.5.2(5.13)]、最低エネルギー状態 $|0\rangle$ は正エネルギー準位が空で負エネルギー準位が完全に占有されている状態である。しかし、いま対象にしている Helium 原子の基底状態のような低エネルギーの励起 ($\ll 2mc^2$) のみが関わる問題をあつかう限り (1.7) は正しい。　さらに、この真空から

$$\hat{\psi}^\dagger(x_1,t)|0\rangle, \qquad \hat{\psi}^\dagger(x_1,t)\hat{\psi}^\dagger(x_2,t)|0\rangle, \qquad \cdots \tag{1.8}$$

を作ると１電子状態、２電子状態が記述される。より多くの電子がある場合も同様である。

2　電磁場内の Dirac 電子

つぎに、電磁場と Dirac 電子場とが相互作用する系に焦点を当てる。Lagrangian 密度：

$$\mathcal{L} = \frac{1}{8\pi}\left\{\left(\nabla\phi + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}A\right)^2 - (\nabla\times A)^2\right\} \qquad \text{(charge of electron} = -e)$$
$$+\,\psi^*\left\{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\phi\right) - c\rho_1\sigma\cdot\left(p + \frac{e}{c}A\right) - \rho_3 mc^2\right\}\psi, \tag{2.1}$$

から運動方程式を導くと、正しい電磁場の方程式が得られる：

$$\left(\nabla\cdot\nabla - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)A - \nabla\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla\cdot A\right) = 4\pi\psi^* e\rho_1\sigma\psi, \tag{2.2}$$

$$(\nabla\cdot\nabla)\,\phi + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\nabla\cdot A = 4\pi\psi^* e\psi. \tag{2.3}$$

また、(2.2) と (2.3) から電荷保存則も導ける：

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi^* e\psi + \nabla\cdot\psi^* ec\rho_1\sigma\psi = 0. \tag{2.4}$$

3　原子内の電子が創る電磁場

基本の枠組みはこれまでの議論で出来上がったと考えるので、以下で、その問題に専念したい。

[1] 査読の方から大きく３つほど鋭い指摘 (footnote (1.2.4) に相当) を戴いた。この箇所の１は特に重要で、最後に節 §.6 を設けて記述したい。

[2] Dirac 電子は負エネルギー解も持つため、真空の定義 (1.7) には注意が必要である。この点には後 (§.5.1.2) で触れたい。

3.1 Lorentz ゲージ

前節で得た Dirac 電子の電荷と電流によって作られる電磁場の方程式 (2.2)(2.3) に注目する。しかし、これはあまり扱い易くないので、Lorentz ゲージ ($\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\phi + \nabla \cdot A) = 0$ を採用して書き直す：

$$\left(\nabla \cdot \nabla - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) A(x,t) = 4\pi e \hat{\psi}^\dagger \rho_1 \sigma \hat{\psi}, \tag{3.1}$$

$$\left(\nabla \cdot \nabla - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \phi(x,t) = 4\pi e \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}, \tag{3.2}$$

もう 1 点、(3.1)(3.2) 式では、Dirac 電子場を第 2 量子化された演算子によって読み代えている。

3.2 電子が創る電磁場 (第 2 量子化描像の適用)、Retarded field propagation

電子 1 個が創る電磁場を調べる。(3.1)(3.2) は同形だから以下の議論は (3.2) のみについて示す。(3.2) 式の方程式全体を 1 電子状態 $\hat{\psi}^\dagger(x_1,t_1)|0\rangle$ に作用させる。ついで、消滅演算子 $\hat{\psi}$ を右に移動させ真空の定義 (1.7) を利用する。得られた反交換子には量子化条件 (1.6) を適用させる：

$$\begin{aligned}\left(\nabla \cdot \nabla - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \phi(x,t)\, \hat{\psi}^\dagger(x_1,t_1)|0\rangle &= 4\pi e \hat{\psi}^\dagger(x,t)\hat{\psi}(x,t)\, \hat{\psi}^\dagger(x_1,t_1)|0\rangle \\ = 4\pi e \hat{\psi}^\dagger(x,t)\{\hat{\psi}(x,t),\, \hat{\psi}^\dagger(x_1,t_1)\}|0\rangle &= 4\pi e \hat{\psi}^\dagger(x,t)\delta(x-x_1)\delta(t-t_1)|0\rangle \\ &= 4\pi e \delta(x-x_1)\delta(t-t_1)\, \hat{\psi}^\dagger(x_1,t_1)|0\rangle,\end{aligned} \tag{3.3}$$

この 2 つの式 (最初と最後) の両辺から共通の状態ベクトル $\psi^\dagger(x_1,t_1)|0\rangle$ を外すと、微分方程式：

$$\left(\nabla \cdot \nabla - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \phi(x,t) = 4\pi e \delta(x-x_1)\delta(t-t_1), \tag{3.4}$$

が得られる。これが時空点 (x_1,t_1) に位置する電子 1 が時空点 (x,t) に創る電磁場を導く式である。

Fourier 展開 (3.5a) と δ 関数の公式 (3.6) により、

$$\phi(x,\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi}\, e^{i\omega t}\, \phi(x,t), \qquad (3.5a) \qquad \phi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, e^{-i\omega t}\, \phi(x,\omega), \tag{3.5b}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, e^{-i\omega(t-t')} = 2\pi\, \delta(t-t'), \tag{3.6}$$

Fourier 成分 $\phi(x,\omega)$ に対する方程式 (3.7) が得られる：

$$\left(\nabla \cdot \nabla + \frac{\omega^2}{c^2}\right) \phi(x,\omega) = 4\pi e\, \delta(x-x_1)\, \frac{1}{2\pi}\, e^{i\omega t_1}, \tag{3.7}$$

さらに、つぎの Green 関数の公式 (3.8)：(確認のため Appendix A を書いた) を利用すると：

$$\left(\nabla \cdot \nabla + k^2\right) G_k(x-x') = \delta(x-x'), \qquad G_k(x-x') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|x-x'|}}{|x-x'|}, \tag{3.8}$$

$$\phi(x,\omega) = -e\int_{-\infty}^{\infty} d^3x' \frac{e^{ik|x-x'|}}{|x-x'|}\delta(x'-x_1)\, \frac{1}{2\pi}\, e^{i\omega t_1} = -e\, \frac{e^{ik|x-x_1|}}{|x-x_1|}\, \frac{1}{2\pi}\, e^{i\omega t_1}, \quad (\omega = ck) \tag{3.9}$$

の $\phi(x,\omega)$ の表現が得られる。これを (3.5b) により Fourier 逆変換すると：

$$\phi(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\,e^{-i\omega t}\phi(x,\omega)=-e\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\,e^{-i\omega t}\,\frac{e^{i\omega|x-x_1|/c}}{|x-x_1|}\,\frac{1}{2\pi}\,e^{i\omega t_1}$$
$$=\delta\left(t-t_1-|x-x_1|/c\right)\frac{-e}{|x-x_1|},\tag{3.10}$$

x_1 にある電荷 $-e$ が創る電場が点 x に光速 c で伝わることを示す (“retarded”) 表式が得られた。

4 Helium 原子内の 2 電子間の Coulomb 相互作用

4.1 Helium 原子内の電子に対する Hamiltonian Density

(2.1) を手掛かりに、Dirac 電子場を記述する Lagrangian density：$\mathcal{L}_{\rm Dirac}$ として、

$$\mathcal{L}_{\rm Dirac}=\psi^*\left\{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\phi\right)-c\rho_1\sigma\cdot\left(p+\frac{e}{c}A\right)-\rho_3mc^2\right\}\psi,\tag{4.1}$$

を採用する。量子化された Dirac 電子を記述する Hamiltonian density はつぎのように導びかれる：

$$\Pi_\psi\equiv\frac{\delta\mathcal{L}_{\rm Dirac}}{\delta\dot\psi}=i\hbar\psi^*(x)\Rightarrow i\hbar\hat\psi^\dagger(x),$$
$$\mathcal{H}_{\rm Dirac}\equiv\Pi_\psi\dot\psi-\mathcal{L}_{\rm Dirac}\Rightarrow\hat\psi^\dagger(x)\left\{-e\phi(x)+c\rho_1\sigma\cdot\left(p+\frac{e}{c}A\right)+\rho_3mc^2\right\}\hat\psi(x).\tag{4.2}$$

4.1.1 原子内の電子軌道の決定に vector potential は関与しない

原子内の電子の軌道間遷移にはフォトンの放出・吸収が伴うが、原子内の電子の軌道の決定には vector potential A は関与しない。それゆえ、以後つぎの Hamiltonian density を採用する [3)]：

$$\mathcal{H}_{\rm Dirac}=\hat\psi^\dagger(x)\left\{-e\phi(x)+c\rho_1\sigma\cdot p+\rho_3mc^2\right\}\hat\psi(x),\tag{4.3}$$

(4.3) 式内の scalar potential $\phi(x)$ は原子核電荷の作る $\phi_{\rm nuc}(x)$ と、x と異なる位置 x' にある第 2 の電子の作る電位 $\phi_e(x)$ の和だと理解すべきである：

$$\phi(x)=\phi_{\rm nuc}(x)+\phi_e(x),\qquad\left(\phi_{\rm nuc}(x)=\frac{2e}{|x|},\quad\phi_e(x)=\frac{-e}{|x-x'|}\hat\psi^\dagger(x')\hat\psi(x')\right),\tag{4.4}$$

(4.4) の括弧内 2 項目の電荷分布 $-e\hat\psi^\dagger(x')\hat\psi(x')$ による電位では time-retardation を無視した。原子内の微小空間では、光速で伝わる電場は事実上瞬時到達する電場だと理解して良いだろう。

こうして Helium 原子を記述する Hamiltonian として、つぎの表現に到達した (電子の電荷: $-e$)：

$$H_{He}=\int d^3x'\hat\psi^\dagger(x')\left\{-\frac{2e^2}{|x'|}-e\phi_e(x')+c\rho_1(\sigma\cdot p')+\rho_3mc^2\right\}\hat\psi(x')=H_0+H_{\rm int},\tag{4.5}$$

[3)] **note added in proof** 「原子軌道の決定には関与しない」と『vector potential を落した (4.2)→(4.3)』のが、この議論の欠点で利点です。量子電磁力学の立場からは、仮に photon の働きは落とせても、virtual photon の効果は落とせず、電子の質量は発散する。この議論は Maxwell 方程式への Homage です。

これは、1 電子項 H_0 と 2 電子相互作用項 $H_{\rm int}$ との和である：

$$H_0 = \int d^3x'\, \hat\psi^\dagger(x') \left\{ -\frac{2e^2}{|x'|} + c\rho_1(\sigma\cdot p) + \rho_3 mc^2 \right\} \hat\psi(x'), \tag{4.6}$$

$$H_{\rm int} = \frac{1}{2}\int\int d^3x' d^3x"\, \hat\psi^\dagger(x') \frac{e^2}{|x'-x"|} \hat\psi^\dagger(x")\hat\psi(x")\hat\psi(x'), \tag{4.7}$$

(4.7) で因子 1/2 を補った。その理由は (3.10) で得られたretardation を考慮した結果である。x' は $x"$ の未来の空間に限られるにも関わらず、単純な積分 (4.7) では過去空間まで含まれてしまう。

5 Helium 原子のエネルギー期待値

Helium 原子内の 2 電子系の量子状態 $\hat\psi^\dagger_{1s\beta}\,\hat\psi^\dagger_{1s\alpha}|0\rangle$ におけるエネルギー期待値:

$$\langle H_{He}\rangle = -\langle 0|\hat\psi_{1s\alpha}\hat\psi_{1s\beta}\, H_{He}\, \hat\psi^\dagger_{1s\beta}\,\hat\psi^\dagger_{1s\alpha}|0\rangle, \tag{5.1}$$

を考える。 ここで、H_{He} は (4.5)(4.6)(4.7) で与えた Helium 原子を記述する Hamiltonian である。

$\hat\psi^\dagger_{1s\alpha}$ と $\hat\psi^\dagger_{1s\beta}$ は (水素原子の固有関数に準じて電荷 $2e$ を持つ Helium 原子核による Coulomb 場内の最低準位 $1s$ 軌道を想定し) $1s$ 軌道を占める電子を生成する演算子である。その suffix に α, β の記号を付けたのは、電子軌道の量子数 $1s$ に加えて内部自由度を持つことを期待したものである。

5.1 1 電子項の期待値

はじめに、期待値 (5.1) の内の 1 電子項 H_0 (4.6) の期待値の評価を試みる。

$$\langle|H_0|\rangle = \int d^3x' \langle 0|\hat\psi_{1s\alpha}\hat\psi_{1s\beta}\, \hat\psi^\dagger(x') \left\{ -\frac{2e^2}{|x'|} + c\rho_1(\sigma\cdot p) + \rho_3 mc^2 \right\} \hat\psi(x')\hat\psi^\dagger_{1s\beta}\,\hat\psi^\dagger_{1s\alpha}|0\rangle, \tag{5.2}$$

この評価には真空 $|0\rangle$ の定義 $\hat\psi|0\rangle = 0$ (1.7) を利用するため、消滅演算子 $\hat\psi(x')$ を右端まで移す：

$$\begin{aligned}\langle|H_0|\rangle = \int d^3x' \langle 0|\hat\psi_{1s\alpha}\hat\psi_{1s\beta}\, \hat\psi^\dagger(x') &\left\{ -\frac{2e^2}{|x'|} + c\rho_1(\sigma\cdot p) + \rho_3 mc^2 \right\} \times \\ &\times \left(\{\hat\psi(x'),\, \hat\psi^\dagger_{1s\beta}\}\hat\psi^\dagger_{1s\alpha} - \hat\psi^\dagger_{1s\beta}\{\hat\psi(x'),\, \hat\psi^\dagger_{1s\alpha}\} \right)|0\rangle,\end{aligned} \tag{5.3}$$

反交換子 $\{\hat\psi(x'),\, \hat\psi^\dagger_{1s\beta}\}$ などは、Dirac 演算子を適当な固有関数の完全系 $\phi_n(x)$ による展開:

$$\hat\psi(x) = \sum_n \phi_n(x)\hat\psi_n, \tag{5.4}$$

を利用したい [4]。　展開 (5.4) を利用すれば、反交換子 $\{\hat\psi(x'),\, \hat\psi^\dagger_{1s\beta}\}$ などは：

$$\{\hat\psi(x),\, \hat\psi^\dagger_{1s\alpha}\} = \sum_n \phi_n(x)\{\hat\psi_n,\, \hat\psi^\dagger_{1s\alpha}\} = \phi_{1s\alpha}, \tag{5.5}$$

[4] 査読者に指摘されたのだが、この展開式 (5.4) は電子が 1 個だけ存在する問題でなら可能だが、電子間相互作用のある多電子系でこのような表現は不可能だと言われる。そうすると摂動論的な議論も、そもそも電子など言う描像も成り立たないと思う

とすれば良い。ここで $\phi_{1s\alpha}$ は Helium 原子内の基底軌道 $1s$ の波動関数で、suffix α は軌道量子数 (今の場合では量子数 $1s$) に加えて、何等かの内部自由度を示す量子数である。

$$\langle|H_0|\rangle = \int d^3x' \langle 0|\hat{\psi}_{1s\alpha}\hat{\psi}_{1s\beta}\,\hat{\psi}^\dagger(x')\times$$
$$\times\left\{-\frac{2e^2}{|x'|} + c\rho_1(\sigma\cdot p) + \rho_3 mc^2\right\}\left(\phi_{1s\beta}(x')\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\alpha} - \phi_{1s\alpha}(x')\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\beta}\right)|0\rangle, \tag{5.6}$$

つづいて (5.3) と同様真空 $\langle 0|$ の定義 $\langle 0|\hat{\psi}^\dagger = 0$ を利用し、生成演算子 $\hat{\psi}^\dagger(x')$ を左端まで移すと：

$$\begin{aligned}\langle|H_0|\rangle &= \frac{1}{2}\int d^3x' \langle 0|(\hat{\psi}_{1s\alpha}\{\hat{\psi}_{1s\beta},\,\hat{\psi}^\dagger(x')\} - \{\hat{\psi}_{1s\alpha},\,\hat{\psi}^\dagger(x')\}\hat{\psi}_{1s\beta})\times\\ &\times\left\{-\frac{2e^2}{|x'|} + c\rho_1(\sigma\cdot p) + \rho_3 mc^2\right\}\left(\phi_{1s\beta}(x')\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\alpha} - \phi_{1s\alpha}(x')\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\beta}\right)|0\rangle\\ &= \frac{1}{2}\int d^3x' \langle 0|\left(\hat{\psi}_{1s\alpha}\,\phi^*_{1s\beta}(x') - \phi^*_{1s\alpha}(x')\,\hat{\psi}_{1s\beta}\right)\times\\ &\times\left\{-\frac{2e^2}{|x'|} + c\rho_1(\sigma\cdot p) + \rho_3 mc^2\right\}\left(\phi_{1s\beta}(x')\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\alpha} - \phi_{1s\alpha}(x')\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\beta}\right)|0\rangle,\end{aligned} \tag{5.7}$$

一見、4 つの項があるかに見えるが、2 つの項のみが残る。期待値の表現 (5.1) を提案したとき、軌道量子数 $1s$ 以外に何らかの内部自由度 (α と β で記述) があるとした。　そのとき既に、直交性：

$$\langle 0|\hat{\psi}_{1s\alpha}\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\beta}|0\rangle = 0, \qquad \langle 0|\hat{\psi}_{1s\alpha}\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\beta}|0\rangle = 0, \tag{5.8}$$

を前提としていた訳である。その結果 (5.7) 式の中でクロス積の項は落ち、つぎの 2 項のみが残る：

$$\begin{aligned}\langle|H_0|\rangle &= \int d^3x'\,\phi^*_{1s\beta}(x')\left\{-\frac{2e^2}{|x'|} + c\rho_1(\sigma\cdot p) + \rho_3 mc^2\right\}\phi_{1s\beta}(x')\langle 0|\hat{\psi}_{1s\alpha}\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\alpha}|0\rangle\\ &+ \int d^3x'\phi^*_{1s\alpha}(x')\left\{-\frac{2e^2}{|x'|} + c\rho_1(\sigma\cdot p) + \rho_3 mc^2\right\}\phi_{1s\alpha}(x')\langle 0|\hat{\psi}_{1s\beta}\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\beta}|0\rangle\\ &= \int d^3x'\phi^*_{1s\beta}(x')\left\{-\frac{2e^2}{|x'|} + c\rho_1(\sigma\cdot p) + \rho_3 mc^2\right\}\phi_{1s\beta}(x')\\ &+ \int d^3x'\,\phi^*_{1s\alpha}(x')\left\{-\frac{2e^2}{|x'|} + c\rho_1(\sigma\cdot p) + \rho_3 mc^2\right\}\phi_{1s\alpha}(x')\end{aligned} \tag{5.9}$$

これらは、$1s\beta$ 量子状態と $1s\alpha$ 量子状態とにある Dirac 電子のエネルギー期待値の和である。

5.1.1　1 電子エネルギー固有値の評価

(5.9) は 2 つの Dirac 電子の個々のエネルギー期待値の和だが、その扱いは決して容易でない。だが、ρ_1 と ρ_3 のマトリックス表示 (1.3) を利用して、Dirac 電子の Schrödinger 方程式を

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix} = \left\{-e\phi\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} + c\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}(\sigma\cdot p) + mc^2\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix} \tag{5.10}$$

と表現すると、このエネルギー固有値を求めるのは簡単である。ここでは、本来 4 成分量である波動ベクトル ψ を 2 成分ベクトルの形で表わした。ψ_+ と ψ_- は、それぞれ、Dirac 電子の正と負のエネルギー

成分に相当している。((5.13) まで、煩わしさを避けて $\phi_{\rm nuc}(4.4)$ を ϕ で代用する) [5)]

方程式 (5.10) の定常解のエネルギー固有値 E を求めてみよう：

$$E\begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-e\phi+mc^2 & c(\sigma\cdot p)\\ c(\sigma\cdot p) & -e\phi-mc^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix} \tag{5.11}$$

(5.11) に対応する固有値方程式の解として正と負のエネルギー固有値の組 (5.13) が得られる:

$$\begin{vmatrix}-e\phi+mc^2-E & c(\sigma\cdot p)\\ c(\sigma\cdot p) & -e\phi-mc^2-E\end{vmatrix}=0 \tag{5.12}$$

$$(-e\phi+mc^2-E)(-e\phi-mc^2-E)-c^2(\sigma\cdot p)^2=0$$
$$E^2+2e\phi E+(e\phi)^2-m^2c^4-c^2(\sigma\cdot p)^2=0$$
$$E=-e\phi\pm\sqrt{m^2c^4+c^2(\sigma\cdot p)^2}=-e\phi\pm mc^2\sqrt{1+\left(\frac{\sigma\cdot p}{mc}\right)^2}$$
$$\simeq -e\phi\pm mc^2\left\{1+\frac{1}{2}\left(\frac{\sigma\cdot p}{mc}\right)^2\right\}=-e\phi\pm\left\{mc^2+\frac{(\sigma\cdot p)^2}{2m}\right\}=-e\phi\pm\left\{mc^2+\frac{p^2}{2m}\right\} \tag{5.13}$$

5.1.2 真空の定義:(1.7) についての補足

結果 (5.13) はあくまでも近似式だが、1 電子状態の解は正・負エネルギー部分 ψ_+, ψ_- から成る：

$$\psi_+:\ \ E_+=-e\phi+\left\{mc^2+\frac{p^2}{2m}\right\},\qquad \psi_-:\ \ E_-=-e\phi-\left\{mc^2+\frac{p^2}{2m}\right\} \tag{5.14}$$

基底状態 (最低エネルギー状態) でもある真空 $|0\rangle$ は、Dirac の主張するように負エネルギー部分が完全に占有されて、正エネルギー部分が空である状態であると考える。

この状態 $|0\rangle$ から正エネルギー電子を消滅させることはできない:$(\hat{\psi}_+|0\rangle=0)$ が、負エネルギー部分については $\hat{\psi}_-$ を positron の生成演算子と理解せねばならず単純でないが、少なくとも今の対象の低エネルギー ($\ll 2mc^2$) の励起領域に限れば： $\hat{\psi}|0\rangle=0$ を要求できるだろう。

5.1.3 補：$(\sigma\cdot A)(\sigma\cdot B)$ の数式処理

(5.13) の最後の辺への移行には、σ マトリックスの性質 ((1.4) 式参照) を使った少し細かい数式処理が隠れている。細かい議論で恐縮だが積：$(\sigma\cdot A)(\sigma\cdot B)$ の処理に使った数式公式を示す。

(1.4) により、スピン σ_x, σ_y, σ_z の積が、同成分の積と異成分の積とで全く異なる。その結果：

$$(\sigma\cdot A)(\sigma\cdot B)=(\sigma_xA_x+\sigma_yA_y+\sigma_zA_z)(\sigma_xB_x+\sigma_yB_y+\sigma_zB_z)=A\cdot B+i\sigma\cdot(A\times B), \tag{5.2.1}$$
$$\text{because}\quad=\sum_{xyz}^{\rm cyclic}\{\sigma_x^2A_xB_x+\sigma_x\sigma_yA_xB_y+\sigma_y\sigma_xA_yB_x\}=\sum_{xyz}^{\rm cyclic}\{A_xB_x+i\sigma_z(A_xB_y-A_yB_x)\}$$

ついでに vector potential の存在を許すと：(これが σ が磁気能率を伴う物理量であることを示す)

$$\left(\sigma\cdot(p+\frac{e}{c}A)\right)^2=((p+\frac{e}{c}A)\cdot(p+\frac{e}{c}A))+i\sigma\cdot[(p+\frac{e}{c}A)\times(p+\frac{e}{c}A)]$$
$$\left(\text{since } p=\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\qquad =(p+\frac{e}{c}A)^2+\frac{e\hbar}{c}\sigma\cdot(\nabla\times A), \tag{5.2.2}$$

[5)] ここまで、議論の流れから、スカラー・ポテンシャル ϕ に ϕ_e ((4.4) 参照) を含めずに議論したが、正しくは含めて: $\phi=\phi_{\rm nuc}+\phi_e$ おくべきだったようだ、この詳細については最後の Conclusion の節 §.5.3 で述べる

5.1.4 1 電子エネルギー固有値の評価 (つづき)

(本筋 (5.14) に戻る)　この結果 (5.14) は、負エネルギー成分の部分を無視すると、He 原子内の電子のエネルギーの表現として納得できるものである。特に、(5.14) 式の正エネルギー解だけに注目して良いなら、He 原子内の電子軌道の Schrödinger 方程式 ($\phi = \phi_{\rm nuc}(4.4)$) そのものである。その最低エネルギー解として電荷 $2e$ の Coulomb 場 (4.4) 内の $1s$ 軌道を暗示している。そして電子軌道のエネルギー固有値は内部自由度 (スピン) σ に依存せず縮退している。

負エネルギー解の成分が何等かの役割を果たしているらしいのだが、この点に関しては、弁解みたいだが、Appendix の最後で少しだけ触れてみたいと考えている。

5.2 電子間相互作用エネルギーの期待値

つぎに、相互作用エネルギーを評価しよう：

$$E_{\rm int} = \frac{e^2}{2}\int\!\!\int d^3x' d^3x" \langle 0|\hat{\psi}_{1s\alpha}\hat{\psi}_{1s\beta}\,\hat{\psi}^\dagger(x')\,\frac{\hat{\psi}^\dagger(x")\hat{\psi}(x")}{|x'-x"|}\hat{\psi}(x')\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\beta}\hat{\psi}^\dagger_{1s\alpha}|0\rangle, \tag{5.15}$$

この量の評価のために、真空 $|0\rangle$ の定義 $\hat{\psi}|0\rangle = 0$ を利用し、相互作用 Hamiltonian 内の 2 つの $\hat{\psi}$ を右端まで、また、真空 $\langle 0|$ の定義 $\langle 0|\hat{\psi}^\dagger = 0$ を利用し、2 つの $\hat{\psi}^\dagger$ を左端まで移動させると：

$$\begin{aligned} E_{\rm int} = \frac{e^2}{2}\int\!\!\int d^3x' d^3x" \langle 0|[\{\hat{\psi}_{1s\alpha},\,\hat{\psi}^\dagger(x")\}\{\hat{\psi}_{1s\beta},\,\hat{\psi}^\dagger(x')\} - \{\hat{\psi}_{1s\alpha},\,\hat{\psi}^\dagger(x')\}\{\hat{\psi}_{1s\beta},\,\hat{\psi}^\dagger(x")\}]\times \\ \times\frac{1}{|x'-x"|}\left[\{\hat{\psi}(x'),\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\beta}\}\{\hat{\psi}(x"),\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\alpha}\} - \{\hat{\psi}(x"),\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\beta}\}\{\hat{\psi}(x'),\,\hat{\psi}^\dagger_{1s\alpha}\}\right]|0\rangle, \end{aligned} \tag{5.16}$$

となる。ここでも、反交換子の評価に、また (5.4)(5.5) の考えを利用すると、

$$\begin{aligned} E_{\rm int} = \frac{e^2}{2}\int\!\!\int d^3x' d^3x" [\phi^*_{1s\alpha}(x")\phi^*_{1s\beta}(x') - \phi^*_{1s\alpha}(x')\phi^*_{1s\beta}(x")]\times \\ \times\frac{1}{|x'-x"|}\left[\phi_{1s\beta}(x')\phi_{1s\alpha}(x") - \phi_{1s\beta}(x")\phi_{1s\alpha}(x')\right] \end{aligned} \tag{5.17}$$

x' と $x"$ を入れ替えた形の項が 2 つづつ得られて、結果をまとめると：

$$\begin{aligned} E_{\rm int} = \int\!\!\int d^3x' d^3x" |\phi_{1s\alpha}(x')|^2\frac{e^2}{|x'-x"|}|\phi_{1s\beta}(x")|^2 \\ -\int\!\!\int d^3x' d^3x" \phi^*_{1s\alpha}(x')\phi^*_{1s\beta}(x')\frac{e^2}{|x'-x"|}\phi_{1s\alpha}(x")\phi_{1s\beta}(x"), \end{aligned} \tag{5.18}$$

が得られる。第 1 項は $1s$ 軌道を占める 2 つの電子密度 $|\phi_{1s\alpha}(x')|^2$ と $|\phi_{1s\beta}(x")|^2$ 間の Coulomb 斥力である。それに加えて、第 2 項："交換相互作用項" と呼ばれる negative 項が得られた。

表現 (5.18) で、もし 1s 軌道関数 $\phi_{1s}(x)$ が実関数であれば、Coulomb 斥力項と交換相互作用項とは完全に打ち消し合う。Helium 原子内の 2 つの電子はともに基底電子軌道 $1s$ を占めて、原子核の近くに局在し、互いに強い Coulomb 斥力を及ぼし合っているのだが、電子の持つ spin 自由度による交換相互作用が direct Coulomb 斥力を打ち消し、電子間の Coulomb 斥力は実質的に無いに等しい。

5.3 Conclusion

Helium 原子内の 2 つの電子は原子核による Coulomb 引力だけで束縛され、いずれもが基底 $1s$ 状態を占めて、安定な原子を形成している。ただし §.5.1 では、議論の流れに沿って、ϕ として原子核による ϕ_{nuc} のみを考慮したが、正しくはもう一つの電子による $\phi_e(x)$ の効果も考慮すべきだった。それは (4.4) 式が示すとおり、もう一つの電子の電荷分布によって決まる。実はその分布を決めるのも、われわれが探している $1s$ 軌道の波動関数そのものである。つまり、Hamiltonian:

$$H_0 = \int d^3x'\, \hat{\psi}^\dagger(x') \left\{ -\frac{2e^2}{|x'|} + \int d^3x" \frac{e^2}{|x'-x"|} \hat{\psi}^\dagger(x")\hat{\psi}(x") + c\rho_1(\sigma\cdot p) + \rho_3 mc^2 \right\} \hat{\psi}(x'), \qquad (4.6')$$

の $\psi(x")$ として'modified'$1s$ 軌道を仮定し、$\phi_e(x')$ を決め、これから 1 電子問題を解き、得られた基底状態軌道関数がはじめに設定した'modified'$1s$ 軌道関数と一致していなければならない。

ここまでくると、もう Dirac 方程式の問題ではなくて、Schrödinger 方程式 :

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\nabla\psi(x) - \frac{2e^2}{|x|} + \int d^3x' \frac{e^2}{|x-x'|}\psi^*(x')\psi(x') \right)\psi(x), \qquad (5.19)$$

に対して、この右辺の積分内の波動関数 $\psi(x')$ を仮定して Schrödinger 方程式を解き、その結果 $\psi(x)$ がはじめに仮定したものに一致するものを得たいという、self-consistent な'modified'$1s$ 軌道を求める問題に帰着する。得られる'modified'$1s$ 軌道関数が、実で、球対称的であればよい。

以上の結論は既に確立されている描像を再現させたのみで、新しい知見を与えるものではない。He 原子の安定性の議論には、基底状態からの励起のエネルギーについての考察も必要かも知れないが、これらの問題は保留させて戴いた。

6 量子化条件 (1.6) について

量子化条件 :

$$\{\Psi(\vec{x},t),\, \Psi^\dagger(\vec{x'},t')\} = \delta(\vec{x}-\vec{x'})\,\delta(t-t'). \qquad (6.1)$$

は通常採用される同時刻面上で要求される :

$$\{\Psi(\vec{x},t),\, \Psi^\dagger(\vec{x'},t)\} = \delta(\vec{x}-\vec{x'}). \qquad (6.2)$$

ものと違う。正統的に議論したいなら、朝永先生の [2] のように covariant な delta 関数を使うべきだろう。すると Schrödinger 方程式の見直しもしなければならず・・・と言うことになるだろう。

筆者が目指したのは Helium 原子の安定性の簡明なイメージを探ることであった。その立場からすると、(6.1) は決して (6.2) と矛盾するものではない (Footnote(1))。

7 あとがき

朝永先生の量子力学講義のひとこまをご紹介します。テーマは縮退系の摂動論(エネルギー固有値が等しい 2 つの量子状態を、互いに縮退していると呼びます) で、朝永先生チョークで式 :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}H_0 & H'\\ H' & H_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}, \qquad \begin{vmatrix}E_0-E & \lambda\\ \lambda^* & E_0-E\end{vmatrix} = 0, \qquad (7.1)$$

を書かれました。第１式で、非摂動 ($H' = 0$) 系では、ψ_1 と ψ_2 は縮退した２つの量子状態です。
第２式では、E_0 は H_0 の縮退固有値、λ はマトリックス要素 $\lambda \equiv \langle\psi_1|H'|\psi_2\rangle$ で、E が求めたい摂動系のエネルギー固有値です。それは単に２次の代数方程式の解を求める問題に帰します：

$$(E_0 - E)^2 - |\lambda|^2 = 0, \qquad E = E_0 \pm |\lambda|. \tag{7.2}$$

な・なんと!! <u>摂動 H' がどんなものであろうとも、必ずエネルギーは下がるのだ !!</u>
量子的世界では、『非摂動の２つの縮退状態の間に何らかの相互作用が働くと、その相互作用の斥力的・引力的に関わりなく、縮退系で実現する解はいつも引力が働いているように見える。』

7.1 縮退系間の引力の実例３つ

7.1.1 水素分子

水素原子は最もシンプルな構造の原子です。電荷の最小単位である素電荷 e を持つ原子核: (プロトン) の作る Coulomb 力に負の素電荷 $-e$ をもつ電子がトラップされて、軌道運動をして、安定が保持されています。水素原子は結構安定性の高い原子だと理解できます。

しかし、この水素原子は１つ１つが安定した個体であることは事実ですが、実は孤立して存在することは稀です。２つの水素原子が近づくと、すぐさま H_2 分子を作ってしまうのです。

7.1.2 超伝導現象

ちょっと極端な議論のようですが、超伝導の起因もこの種の引力が原因らしいのです。金属が金属光沢をもつのは、金属内にほとんど自由に動き回れる電子がいっぱいに詰まっているからだそうです。『詰まっている』と言うのが意味深で、実は Fermi 球とゆう『運動量ゼロを中心 (運動量空間で) に Fermi 運動量の大きさを半径とする球』の表面まで電子がギュウヅメになっているらしいのです。自由に動けるのはその Fermi 球の表面にある電子だけらしいのです。

Cooper はその中の２つ、Fermi 球表面の「運動量ゼロに関して真反対 (運動量空間で)」に位置する２つの電子に注目しました。この２つは互いにエネルギー的には縮退していますから、もしこのペアの間に何らかの (斥力的でも良い) 摂動が働けば、このペアは結合して電子ペア (Cooper ペア) として活動するようになるだろうと指摘しました。この Cooper ペア結合系の存在が、縮退系の摂動論による引力 (引力と言っても空間的な意味ではありません) の第２の例です。

実はこのアイデアを手掛かりとして、多電子系のきちんとした超伝導理論に仕上げるには、Bardeen、Schrieffer、Bogoliubov とかの手が必要でした。

7.1.3 Helium 原子の安定性

既述の２例とくらべると、Helium 原子は最も単純な例です。原子核を原点とする座標系では、原子核の作る Coulomb 場内にある２つの電子の振舞いを扱えば良い。その『安定性』とは？

すべての物質は冷やすと液化し、もっと冷やすと固化します。水が一番身近な例です。物質によって、液化し固化する温度に違いがあります。水銀は常温でも液状です、ヘリウムだけは容易に液化しません。冷やして、冷やして、と努力した先駆者がオランダ人 Kamerlingh-Onnes でした。1908 年、何と絶対零度から測って 0.9[K]($-272.1[C^\circ]$) でやっと液化に成功しました。

この小論は、この安定性の根拠を最少の原理から導こうとしました。Dirac 電子論、第 2 量子化、電磁場との結びつきそれだけでした。ただ、Dirac の負エネルギーの電子 (positron) の項があるのが気になる。その点に関して、チョット弁解みたいな議論 “Zitterbewegung” を付録に書きます。

参考文献

[1] P. A. M. Dirac; The Principles of Quantum Mechanics, Oxford University Press ; (1963)

[2] S. Tomonaga; On a Relativistically invariant Formulation of Quantum Theory of Wave Field, Progress of Theoretical Physics, 1, 27(1945)

[3] Erwin Schrödinger; Sitzungsb. d. Berlin. Akad., (1930) p.418-

A Green function for $(\nabla \cdot \nabla + k^2)$

$$(\nabla \cdot \nabla + k^2)G(x) = -\delta(x), \qquad \left(G(x) = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|x|}}{|x|} \right), \tag{A.1}$$

A.1 Proof: 1st step

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \frac{e^{ik|x|}}{|x|} = \frac{\partial |x|}{\partial \vec{x}} \frac{\partial}{\partial |x|} \frac{e^{ik|x|}}{|x|} = \frac{\vec{x}}{|x|} \left(-\frac{1}{|x|^2} + \frac{ik}{|x|} \right) e^{ik|x|}, \tag{A.2}$$

チョット普通でないベクトル微分記号を使っていますが解っていただけると思います。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \frac{e^{ik|x|}}{|x|} &= \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \left[\frac{\vec{x}}{|x|} \left(-\frac{1}{|x|^2} + \frac{ik}{|x|} \right) e^{ik|x|} \right] = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \left[\vec{x} \left(-\frac{1}{|x|^3} + \frac{ik}{|x|^2} \right) e^{ik|x|} \right] \\
&= \left[3 \left(-\frac{1}{|x|^3} + \frac{ik}{|x|^2} \right) + \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}}{|x|} \left(\frac{3}{|x|^4} - \frac{i2k}{|x|^3} + ik \left(-\frac{1}{|x|^3} + \frac{ik}{|x|^2} \right) \right) \right] e^{ik|x|} \\
&= \left[3 \left(-\frac{1}{|x|^3} + \frac{ik}{|x|^2} \right) + \left(\frac{3}{|x|^3} - \frac{i2k}{|x|^2} + ik \left(-\frac{1}{|x|^2} + \frac{ik}{|x|} \right) \right) \right] e^{ik|x|} = -k^2 \frac{e^{ik|x|}}{|x|},
\end{aligned} \tag{A.3}$$

(A.3) で示されたことは、有限の $x\,(\neq 0)$ で (A.1) の両辺が等しくゼロだと言う事実である。

A.2 Proof: 2nd step: Divergence theorem

つぎに確かめるべきことは、$x = 0$ にある Singularity の強さを知ることである。

$$\begin{aligned}
\int_{r \simeq 0} d^3x (\nabla \cdot \nabla + \omega^2) \frac{e^{i\omega|x|}}{|x|} &\simeq \int_{r \simeq 0} d^3x (\nabla \cdot \nabla) \frac{e^{i\omega|x|}}{|x|} = \int_{r \simeq 0\,\mathrm{surface}} d^2x \nabla_n \frac{1}{|x|} \\
&= \int_{r \simeq 0\,\mathrm{surface}} r^2 d\Omega \, \frac{-1}{r^2} = -4\pi,
\end{aligned} \tag{A.4}$$

B　Zitterbewegung

この負エネルギー部分がところどころで顔を覗かせるのは Dirac 方程式の宿命、あるいは本質的側面、なのだと言うことだけ付け加えておきたい。Dirac のテキスト [1] で Dirac 自身が書いているのだが、例えば Dirac 電子の電流は (2.4) 式：

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi^* e\psi + \nabla \cdot \psi^* ec\rho_1 \sigma \psi = 0, \tag{B.1}$$

によれば、電流は $(-\psi^\dagger(x)ec\rho_1\sigma\psi(x))$ である。量：$c\rho_1\sigma_z$ をマトリックス表示すると

$$c\rho_1\sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c \\ c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -c & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{B.2}$$

これは Dirac 電子の瞬時の速度を測定できたとすると、測定結果は $\pm c$ に限られると言うことだ。
だが、こんな非常識な結果を導く値はマトリックス (B.2) の Dirac ψ の正・負エネルギー成分の交差領域に位置している。つまり常に $e^{\pm i2mc^2t/\hbar}$ の極めて高速の振動を伴っているらしいのである。

この激しい振動のある中で電子の瞬時の速度など観測不可能だ。$\pm c$ の固有値と急速な振動との組合わさった結果として実測電子速度が実現しているのだろう。この考えを初めて指摘したのは、量子力学の創始者の一人 Schrödinger[3] で、この effects を “Zitterbewegung” と名付けた。その効果を systematic に追う議論はまだないようだが、少なくとも例えば (5.13) の結果は、Zitterbewegung により発生しているのかもしれない。