現代の物質観その 9
Modern view on the constituents of matter IX.
近代物理学-1: 微視の世界の力学法則
- 量子力学 -

Fujiwara Yoshikazu

2024 年 10 月 26 日

目次

はじめに

20 世紀の物理学を近代物理学とすれば、その幕開けは原子核・素粒子をはじめとする微視の世界の基本原理である「量子力学」の確立に始まる。量子力学は既にそれまでに大きく発展していた各物理分野へすぐさま応用され、現在我々が持っている物理学の全体像を微視的視点から系統的に捉える事を可能にした。勿論、微視的視点からの道筋ができたからと言って全ての巨視的現象が解明される訳ではないが、少なくとも我々は現在ほとんどの物理的現象を考える時の正しい道筋を得たことはまず間違いがない。近年のメディアの報道を見ると、科学分野のニュースはそのほとんどが 20 世紀の近代物理学の発展に関係していて、量子力学の知識なしには正確には理解しきれない。例えば、最近の原子炉事故に関係した原子炉溶解、放射性物質、超新星爆発、ニュートリノ天文学、量子コンピュータ、重力波、中性子星、ブラックホール、暗黒物質 (ダークマター) 等､､､その意味で量子力学の何たるかをある程度知っておくことは、我々が現代を生きる上で必要欠くべからざるものとなりつつある。

1　前期量子論

1.1　Bohr の原子模型

前回黒体輻射の項で述べた様に、温度の高いその物質に特有な周波数を持つ光をはじめとする種々の電磁波を発する。太陽の光は白色光であるが、それは太陽にはさまざまな種類の元素が存在していてそれら種々の周波数を持つ光がランダムに混ざり合っているためである。スリットを通過した白色光はプリズムを通ると周波数に応じてガラスの屈折率が違うため、曲がりにくい赤色から曲がりやすい紫色の七色に連続的に別れることはニュートンも知っていた。彼はそれを光のスペクトルと呼んだ。僅かばかりの光の周波数の違い (すなわち波長の違い) は、非常に接近した二つのスリットをくぐらすことにより生じる干渉縞の隣り合う明るい縞模様の間の距離を精密に測ることにより決定される。こうした干渉縞の実験は屈折現象とともに、光の波動としての揺るぎない性質として幾何光学の分野で詳しく研究された。

我々は蛍光灯から出る光は、電球から出る光と違ってかなり青白いということを知っている。高速道路のトンネル内での照明に使われることの多いオレンジ色の照明は、低圧ナトリウムランプを使用しているためである。他にもバーナやガスコンロの炎は青いのに炭

火は赤く光ったり、またロウソクの炎は独特のものがある。夜空を美しく飾る花火は、さまざまな種類の色をだすためにストロンチウムとかバリウム、銅、アルミニウム、カルシウムやナトリウムなど多くの金属塩を組み合わせて使っている。これら物質に固有な光は、原子核の周りをめぐる電子の運動に関係していることはほぼ確実であったが、いくつかの規則性があることは分かってもその本質は長い間分からなかった。結果を先取りして結論から先に言うと、それは微視の世界の新しい力学原理である量子力学の本質に関係したものだったのである。解決の糸口は 1913 年、デンマークの理論物理学者である ニールス・ボーア (Niels Bohr) の提出した原子の Bohr 模型から始まる。

それに先立つ 1911 年、ラザーフォード (Ernest Rutherford) は原子は中心にある小さいが重い原子核とその周りをめぐる幾つかの軽い電子からなっていることを見出した。それは土星模型と言われたが実際には矛盾に満ちたものであった。既に確立していた電磁気学によれば、円運動の様に加速度運動をする荷電粒子は電磁波を放出することによって徐々にそのエネルギーを失い、最終的には中心の原子核のもとに落下するはずであった。まず簡単のため水素原子の模型である陽子の周りを廻る等速円運動を考える。円の半径を r、速度を v とするとクーロン引力 $-e^2/r^2$ による運動方程式は

$$m\frac{v^2}{r} = -\frac{e^2}{r^2} \tag{1.1.1}$$

ここに m は電子の質量である。(実際は陽子と電子の換算質量であるが、陽子の質量は電子の質量の約 2,000 倍と大きいので重心はほぼ陽子の位置にあると考えてよい。) クーロン力は中心力でありかつ保存力であるため、円の運動平面に垂直な方向の角運動量 $M = mrv$ と全エネルギー

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r} \tag{1.1.2}$$

は保存する。$1/r^2$ 中心力のもとでの角運動量保存則はケプラーの第二法則「面積速度一定」の法則としても知られている。$v = M/mr$ を (1.1.3) に代入して

$$E = \frac{M^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \tag{1.1.3}$$

とすると $M \neq 0$ である限り E は $r \to 0$ で $E \to \infty$、$r \to \infty$ で $E \to 0$ である有限の r で E は負の最小値を取る。実際 (1.1.3) を r で微分して $-M^2/mr^3 + e^2/r^2 = 0$ より $r = M^2/me^2$ つまり $a = \frac{M^2}{me^2}$ で最小値 $E_{\text{min}} = -\frac{e^2}{2a} < 0$ を取る。円運動の場合は $r = a$, $E = E_{\text{min}}$ の場合である。$0 > E > E_{\text{min}}$ なら軌道は楕円となる。

ボーアはプランクの黒体輻射の理論で振動数 ν の電磁波がエネルギー $h\nu$ の整数倍の飛び飛びの値だけを持つという光量子仮説に刺激され、電子の円軌道に結びついた角運動

量 M も飛び飛びの値しか持ち得ないということを仮定した。すなわち量子条件として

$$M = mrv = \hbar n = \frac{h}{2\pi} n \qquad (n = 1, 2, \cdots) \tag{1.1.4}$$

を仮定すると

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{M^2}{me^2} = \frac{\hbar^2}{me^2} n^2 \\ E_n &= -\frac{e^2}{2a_n} = -\frac{1}{2n^2}\left(\frac{me^4}{\hbar^2}\right) \end{aligned} \tag{1.1.5}$$

が得られる。$E_1 \sim -13.6$ eV は水素原子の基底状態である $1s$ 状態の電子のエネルギー、また a_1 はしばしば $a_0 \sim 0.5$ Å と書かれその電子の軌道半径である。(「近代物理学前史」の「メンデレーエフの周期律表」の項参照) 電子の軌道が飛び飛びのエネルギー値だけを取ることにより、軌道間の電子の遷移に応じてそのエネルギーの差だけのエネルギーを持つ光量子が放出、吸収される。すなわち n' から n への電子の遷移に対して

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = E_{n'} - E_n \tag{1.1.6}$$

ここに $n' > n$ が光を放出する場合、$n' < n$ が光を吸収する場合である。(1.1.6) を光の波長で書くと

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} &= \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right) \\ &= R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right) \end{aligned} \tag{1.1.7}$$

ここに R をリュードベリ定数 (Rydberg constant) という。公式 (1.1.7) はバルマー系列 (Balmer series) 等の水素原子の輝線スペクトルを見事に再現した。

1.2 de Broglie の物質波

原子の Bohr 模型はしかし、何故電子の軌道が飛び飛びのエネルギーしか持ち得ないのかという疑問には答えていない。1924 年、フランスの理論物理学者 de Broglie は運動量 p を持つ古典的粒子は波長 $\lambda = h/p$ の波動としての性質を併せ持つという考え方を提唱し、それを物質波と名付けた。質量 m の古典的粒子に対しては $p = mv$ より $\lambda = \frac{h}{mv}$ となり、これを de Broglie 波長という。(λ を 2π で割った $\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{\hbar}{mv}$ を de Broglie 波長ということもある。) プランク定数 h の大きさがあまりにも小さいため、巨視的物体の波長は極めて小さく、ほとんど波としての性質は現れない。しかし電子の様な微視的粒

子に対しては、de Broglie 波長は原子・分子の大きさのオーダーになる。実際 1927 年になって電子線を金属結晶に当てることにより、X 線の時と同じ波としての回折現象が得られることが実験的にも実証された。更に、量子条件 (1.1.4) を書き換えると

$$2\pi a_n = \frac{h}{mv} n \qquad (n = 1, 2, \cdots) \tag{1.2.1}$$

となって、円周が de Broglie 波長の自然数倍という元の定常波条件とよく似た条件が得られる。de Broglie 波長に入る運動量が $p = mv$ と非相対論的表式であることが気になるが、上の水素原子の基底状態について v/c を求めてみると

$$\begin{aligned} \lambda\!\!\!^{-}_e &= \frac{\hbar}{mc} = \frac{\hbar c}{mc^2} \sim \frac{200 \text{ MeV} \cdot fm}{0.5 \text{ MeV}} \\ &= 400 \text{ fm} = 0.004 \text{ Å} \end{aligned} \tag{1.2.2}$$

(1 fm=10^{-13} cm=$10^{-5} \times 10^{-8}$ cm=10^{-5} Å) を使って

$$\frac{v}{c} = \frac{\hbar}{mc}\frac{1}{a_1} \sim \frac{0.004}{0.5} = 0.008 \ll 1 \tag{1.2.3}$$

となって、電子の運動は充分非相対論的であることがわかる。(1.2.2) の $\lambda\!\!\!^{-}_e$ を電子のコンプトン波長 (Compton wave length) という。重い粒子ほどコンプトン波長は小さい。例えば、陽子のコンプトン波長は陽子質量がほぼ 1 GeV=1000 MeV であることより $\lambda\!\!\!^{-}_p = \hbar/m_p c \sim 0.2$ fm 程度である。光子に対しては $m = 0, \mathcal{E} = cp = h\nu$ であることより

$$\frac{h}{p} = \frac{hc}{pc} = \frac{hc}{\mathcal{E}} = \frac{c}{\nu} = \lambda \tag{1.2.4}$$

となって、de Broglie 波長は電磁波としての通常の波長に戻る。

この様に、質量を持つ粒子の波としての性質はその作用の変動 $\Delta S = p\Delta x$ がプランク定数 h に比べて大きいかどうかにかかっている。もし $\Delta S \gg h$ であれば $\Delta x \gg h/p$ であり粒子の移動距離は de Broglie 波長よりも大きく、粒子の運動は巨視的と考えられる。もし $\Delta S \ll h$ であれば Δx は de Broglie 波長よりも短くその様な運動を巨視的運動法則に従って記述することは不可能である。以前大海原で波に揺られる小舟から反射される反射波の例えで述べた様に、およそ波長千Å の可視光線で数Å の大きさの原子や分子を見る事は不可能である。しかし、電子顕微鏡を用いれば電子を強い電磁場で大きく加速することにより de Broglie 波長を数Å 程度に持っていくことにより、数百Å オーダーの高分子を見る事が出来るかも知れない。実際、電子を巨大な線形加速器を使って殆んど光の速度に迫る速さに加速することによって、原子核の大きさや原子核構造が詳しく調べられ

た。(Robert Hofstadter) また、核子や素粒子の構成要素であるクォークが発見されたのも、超巨大サイクロトロン加速器を使った電子の深部非弾性散乱によってであった。

1.3 Compton 散乱

光子 (光量子) の粒子としての性質を確実にしたものとして、光と荷電粒子との散乱である Compton 散乱を挙げることが出来る。Compton 散乱は光電効果、電子と陽電子の対生成 (pair creation) と合わせて、光と物質の相互作用の中で光の粒子性を如実に現す三つの現象の一つである。原子核にゆるく結合している電子は、入射する光に対してほぼ静止していると考えることが出来る。そこで図 1 の様に静止した質量 m の電子に左から振動数 ν の光をあてて、光子-電子散乱のエネルギー保存と運動量保存の kinematics を考察する。入射光の運動量 $h\nu/c$ の方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{n}$, 散乱された光子のエネルギーと運動量の向きを $h\nu', \boldsymbol{n}'$, 反跳された電子のエネルギーと運動量を E と $\boldsymbol{p}$ とすると、これらは

$$\begin{aligned} h\nu + mc^2 &= h\nu' + E \\ \frac{h\nu}{c}\boldsymbol{n} &= \frac{h\nu'}{c}\boldsymbol{n} + \boldsymbol{p} \end{aligned} \tag{1.3.1}$$

で与えられる。ここから E^2, $\boldsymbol{p}^2$ を求めて関係式 $(E/c)^2 = (mc)^2 + \boldsymbol{p}^2$ に代入すると、$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}') = \cos\theta$ として

$$\begin{aligned} \left(\frac{E}{c}\right) &= \left(\frac{h(\nu-\nu')}{c}\right)^2 + 2mh(\nu-\nu') + (mc)^2 \\ \boldsymbol{p}^2 &= \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 - 2\frac{h^2\nu\nu'}{c^2}\cos\theta \\ &= \left(\frac{h(\nu-\nu')}{c}\right)^2 + 2\frac{h^2\nu\nu'}{c^2}(1-\cos\theta) \\ \nu-\nu' &= \frac{h\nu\nu'}{mc^2}(1-\cos\theta) \\ \frac{c}{\nu'} - \frac{c}{\nu} &= \frac{h}{mc}(1-\cos\theta) \\ \lambda' - \lambda &= \frac{h}{mc}(1-\cos\theta) \end{aligned} \tag{1.3.2}$$

ここに、最後の行では $\lambda = c/\nu$ 等を使った。結局散乱後の光の波長は散乱角 θ に応じて Compton 波長 $\times(1-\cos\theta)$ だけずれる。$\theta = 0$ は前方散乱で光が素通りする場合である。$\theta = \pi/2$ は直角方向に散乱された場合で、この時光の波長はおよそ $2\pi \times 0.004 \sim 0.025$

Å だけ赤い方にずれる。これは勿論、電子の反跳のため光子のエネルギーが一部失われるためである。以上の議論では電子と光子の相互作用 (電磁相互作用) の性質を何ら使っていないという事は注意に値する。使っているのは、光量子仮説とエネルギー・運動量保存則、および電子の相対論的関係式 $(E/c)^2 = (mc)^2 + \boldsymbol{p}^2$ だけである。

1.4 Bohr-Sommerfeld の量子化条件

Bohr の量子化条件は容易に多次元自由度の位相空間内の閉じた運動に対して一般化される。今、ラグランジュ形式で定式化された自由度 n の一般化座標 $(q_1, q_2, \cdots, q_n)$ とその一般化運動量 $(p_1, p_2, \cdots, p_n)$ を考える。粒子の運動は $2n$-次元位相空間内で周期的に閉じていると仮定する。この時、閉じた軌道内の面積である作用に対して各 $k = 1, 2, \cdots, n$ ごとに

$$\oint p_k dp_k = n_k h \qquad (n_k = 1, 2, \cdots) \frac{h}{p} = \frac{hc}{pc} = \frac{hc}{\mathcal{E}} = \frac{c}{\nu} = \lambda \tag{1.4.1}$$

が成り立つ。これを Bohr-Sommerfeld の量子化条件という。$h = 2\pi\hbar$ はプランク定数である。

まず始めに一番簡単な例として一次元調和振動子を考える。ハミルトニアンは保存されるエネルギーと同じで

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kq^2 \tag{1.4.2}$$

ここで角振動数を $\omega = \sqrt{k/m}$ と書くと、ポテンシャル項は $(1/2)m\omega^2 q^2$ より (1.4.2) が

$$\left(\frac{p}{\sqrt{2mE}}\right)^2 + \left(\frac{q}{\sqrt{2E/(m\omega^2)}}\right)^2 = 1 \tag{1.4.3}$$

と書けることにより、楕円の面積の公式から積分 $\oint pdq$ は簡単に

$$\oint pdq = \pi\sqrt{2mE}\sqrt{2E/(m\omega^2} = 2\pi\frac{E}{\omega} = nh = 2\pi n\hbar \tag{1.4.4}$$

と求められる。そこで結局量子化条件は

$$E = n\hbar\omega \qquad (n = 1, 2, \cdot) \tag{1.4.5}$$

となる。$\hbar\omega = h\nu$ であるからは光量子の離散エネルギーの公式 $\mathcal{E} = nh\nu$ と同じである。勿論光子の質量はゼあるから、この対応は偶然でしかないが、あとで電磁波のベクトルポテンシャルの運動方程式を電磁波の量子化と見做すことで量子力学的調和振動子を電磁波の実態と見なすことが出来る。(ただし、正しい量子力学的一次元調和振動子の解は

ゼロ点エネルギーの寄与 $(1/2)\hbar\omega$ を含めて (1.4.5) のエネルギーを $E=(n+1/2)\hbar\omega$ $(n=0,1,\cdots)$ としておかなければならない。)

次に三次元のクーロン中心力場の例として再び水素原子の問題を考える。ハミルトニアンは

$$
\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m}\left\{{p_r}^2 + \frac{M^2}{r^2}\right\} - \frac{e^2}{r} \\
M^2 &= {p_\theta}^2 + \frac{{p_\varphi}^2}{\sin^2\theta} \\
M_z &= p_\varphi
\end{aligned}
\tag{1.4.6}
$$

であり、系の保存量はエネルギー $E=H$ 以外に角運動量の二乗 M^2 およびその z-軸方向の成分 M_z である。循環座標 p_φ については Bor-Sommerfeld の量子化条件は特に簡単である。作用積分は

$$
S_\varphi = \oint p_\varphi d\varphi = M_z \int_0^{2\pi} = 2\pi M_z = mh \tag{1.4.7}
$$

より、$M_z = m\hbar$ これは Bohr の量子化条件 (1.1.4) と同じである。ただし今度は M_z が M の z- 成分より m は $|m|\hbar \leqq M$ を満たす 0 を含む整数である。次に p_θ に対しては

$$
S_\theta = 2\int_{\theta_1}^{\theta_2}\sqrt{M^2 - \frac{{M_z}^2}{\sin^2\theta}}d\theta \tag{1.4.8}
$$

ここに θ は三次元極座標の (r,θ,φ) の θ であるから、z-軸から測った角度で、x-y 平面に対して $\alpha(0\leqq\alpha\leqq\pi/2)$ だけ傾いた平面上の軌道を廻るとすると $\theta_1=\pi/2-\alpha, \theta_2=\pi/2+\alpha$ である。(1.4.8) の factor 2 は反対側の半球面の寄与を表わす。積分を θ_1 から $\pi/2$ までで折り返して、更に積分変数を $x=\pi/2-\theta$ により θ から x に変換すると

$$
\begin{aligned}
S_\theta &= 4\int_0^\alpha \sqrt{M^2 - \frac{{M_z}^2}{\cos^2 x}}dx \\
&= 4M\int_0^\alpha \sqrt{1 - \left(\frac{\cos\alpha}{\cos x}\right)^2}dx
\end{aligned}
\tag{1.4.9}
$$

ここに $|M_z| = M\cos\alpha$ である。ここで積分公式

$$
\int\sqrt{1-\left(\frac{a}{\cos x}\right)^2}dx = \arcsin\frac{\sin x}{\sqrt{1-a^2}} - a\arcsin\frac{a\tan x}{\sqrt{1-a^2}} \qquad \text{for} \quad |a|<1 \tag{1.4.10}
$$

を使うと $a = \cos\alpha$ とおいて

$$
\begin{aligned}
S_\theta &= 4M\left[\arcsin\frac{\sin x}{\sin\alpha} - \cos\alpha\arcsin\frac{\tan x}{\tan\alpha}\right]_0^\alpha \\
&= 4M[\arcsin 1 - \cos\alpha\arcsin 1] = 4\frac{\pi}{2}[M - |M_z|] = 2\pi[M - |M_z|] \\
&= n_\theta h \qquad (n_\theta = 0, 1, \cdots)
\end{aligned}
\tag{1.4.11}
$$

となる。結局

$$
M = |M_z| + n_\theta\hbar = (m + n_\theta)\hbar = \ell\hbar \tag{1.4.12}
$$

となる。ここに $\ell = 0, 1, \cdots$ は全角運動量の大きさ (を $\hbar$ を単位として測った量) であり、$m = -\ell, -(\ell-1), \cdots, 0, \cdots, \ell$ である。あとで正しい全角運動量の表式は $\boldsymbol{M}^2/\hbar^2 = \ell(\ell+1)$ であることがわかる。最後に動径部分の作用積分は、(1.4.6) より

$$
\begin{aligned}
S_r &= 2\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{2m\left(E + \frac{e^2}{r}\right) - \frac{M^2}{r^2}}dr \\
&= 2\frac{M}{d}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{\varepsilon^2 - \left(1 - \frac{d}{r}\right)^2}dr
\end{aligned}
\tag{1.4.13}
$$

ここでラグランジュ形式のケプラー問題のとろで導入した $d = r_{\text{min}}$ と二次曲線の離心率 ε を用いた。すなわち、以前の μ, α, h を $\mu\to m, \alpha\to e^2, h\to M$ と変えて (see (**??**)

$$
\begin{aligned}
d &= r_{\text{min}} = \frac{M^2}{me^2} \\
\varepsilon &= \sqrt{1 + \frac{2mEd^2}{M^2}} = \sqrt{1 + \frac{2M^2E}{me^4}} = \sqrt{1 - \frac{E}{U_{\text{min}}}}
\end{aligned}
\tag{1.4.14}
$$

また積分範囲は (1.4.14) の平方根の中がゼロとなることにより $r_1 = d/(1+\varepsilon)$, $r_2 = d/(1-\varepsilon)$ である。今楕円軌道を考えているので、 $E < 0$ かつ $0 \leqq \varepsilon < 1$ である。ここで右辺の積分で $r = \frac{d}{u}$ とおいて u の積分に移ると (1.4.13) の積分は

$$
S_r = 2M\int_{1-\varepsilon}^{1+\varepsilon}\frac{\sqrt{\varepsilon^2 - (1-u)^2}}{u^2}du \tag{1.4.15}
$$

となる。この積分は以下の公式 (岩波「数学公式-I」122 ページ)

$$
\int\frac{\sqrt{ax^2+bx+c}}{x^2}dx = -\frac{\sqrt{ax^2+bx+c}}{x} + a\int\frac{1}{\sqrt{ax^2+bx+c}}dx + \frac{b}{2}\int\frac{1}{x\sqrt{ax^2+bx+c}}dx \tag{1.4.16}
$$

によって不定積分が求まる。ここに

$$
\begin{aligned}
I_F &= \int \frac{1}{\sqrt{ax^2+bx+c}}dx \\
I_G &= \int \frac{1}{x\sqrt{ax^2+bx+c}}dx
\end{aligned}
\tag{1.4.17}
$$

とすると、I_F は $a<0$ の時

$$
I_F = -\frac{1}{\sqrt{|a|}}\arcsin\frac{2ax+b}{\sqrt{b^2-4ac}} \qquad \text{for} \quad a<0 \tag{1.4.18}
$$

また I_G は $x=1/t$ と変数変換することにより I_F に帰着されて、$c<0$ の時

$$
I_G = \frac{1}{\sqrt{|c|}}\arcsin\frac{2c/x+b}{\sqrt{b^2-4ac}} \qquad \text{for} \quad c<0 \tag{1.4.19}
$$

となる。そこで $a<0$ かつ $c<0$ の時

$$
\begin{aligned}
&\int \frac{\sqrt{ax^2+bx+c}}{x^2}dx = -\frac{\sqrt{ax^2+bx+c}}{x} \\
&-a\frac{1}{\sqrt{|a|}}\arcsin\frac{2ax+b}{\sqrt{b^2-4ac}} + \frac{b}{2}\frac{1}{\sqrt{|c|}}\arcsin\frac{2c/x+b}{\sqrt{b^2-4ac}} \\
&\quad \text{for} \quad a<0 \quad \text{and} \quad c<0
\end{aligned}
\tag{1.4.20}
$$

が得られる。 $ax^2+bx+c=\varepsilon^2-(1-u)^2=\varepsilon^2-1+2u-u^2$ として $x\to u$ かつ $a=-1, b=2, c=\varepsilon^2-1<0$ とすると

$$
\begin{aligned}
&\int \frac{\varepsilon^2-(1-u)^2}{u^2}du = -\frac{\sqrt{\varepsilon^2-(1-u)^2}}{u} \\
&+\arcsin\frac{1-u}{e} + \frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}}\arcsin\frac{u-1+\varepsilon^2}{eu}
\end{aligned}
\tag{1.4.21}
$$

となる。そこで (1.4.15) の定積分は

$$
\begin{aligned}
&\int_{1-\varepsilon}^{1+\varepsilon} \frac{\sqrt{\varepsilon^2-(1-u)^2}}{u^2}du \\
&= \arcsin(-1) - \arcsin 1 + \frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}}[\arcsin 1 - \arcsin(-1)] \\
&= -\pi + \pi\frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}}
\end{aligned}
\tag{1.4.22}
$$

が得られる。ここに (1.4.14) より

$$\frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} = \frac{M}{d}\sqrt{\frac{1}{2m(-E)}} = \frac{M}{2md}\sqrt{\frac{2m}{(-E)}}$$
$$= \frac{e^2}{2M}\sqrt{\frac{2m}{(-E)}} \tag{1.4.23}$$

だから、(**??**) は結局

$$S_r = 2M\pi\left[-1+\frac{e^2}{2M}\sqrt{\frac{2m}{(-E)}}\right]$$
$$= -2\pi M + \pi e^2\sqrt{\frac{2m}{(-E)}}$$
$$= 2\pi\hbar n_r \qquad (n_r = 1, 2, \cdots) \tag{1.4.24}$$

となる。そこで $M = \ell\hbar,\ n = n_r + \ell = 1, 2, \cdots$ として

$$E = -\frac{1}{2n^2}\frac{me^4}{\hbar^2} \qquad (n = 1, 2, \cdots) \tag{1.4.25}$$

と以前と同じ結果が得られる。ここに $n = 1, 2, \cdots$ を与えた時、$\ell = 0, 1, \cdots, n-1$ また各 ℓ ごとに $m = 0, \pm 1, \cdots, \pm\ell$ の状態は全て同じエネルギーを持つ。これをエネルギーの縮退という。n を主量子数、ℓ を角運動量、m を磁気量子数という。各 n ごとの縮退の数は

$$\sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = 2\cdot\frac{(n-1)n}{2} + n = n^2 \tag{1.4.26}$$

しかし、あとで見るように電子はスピン 1/2 をもつ Fermi 粒子でスピン上向き 1/2 と下向き $-1/2$ と二重の自由度をもつので、結局縮退度は $2n^2$ となる。これもまたあとで詳しく学ぶが Fermi 粒子は Pauli 原理により一つの量子力学的状態には一粒子しか占有できないので、電子はエネルギーの低い軌道から順に詰まっていく。この事は、原子番号 Z の周りを Z 個の電子がまわっている一般の原子を考える時重要となる。電荷 Ze をもつ原子核の周りをめぐる一電子の軌道は、いわゆる水素型原子模型によって考察される。その解はこれまでの水素模型でクーロン力の e^2 を Ze^2 に変えることにより簡単に得られる。例えば、エネルギー E_n と電子軌道の半径 a_n は

$$a_n = \left(\frac{\hbar^2}{Zme^2}\right)n^2$$
$$E_n = -\frac{1}{2n^2}\left(\frac{Z^2me^4}{\hbar^2}\right) \tag{1.4.27}$$

となる。$n=1$ の時の 1s 軌道に二個の電子が詰まったものが $Z=2$ の He^4 原子、$n=2$ の時の 2s , 1p 軌道まで全て詰まったものは $Z=2+8=10$ で Ne^{10} 原子、$n=3$ の時の 3s, 2p 軌道まで全て詰まったものは $Z=2+8+8=18$ で Ar^{18} 原子に対応する。重い原子では、電子間の相互作用やクーロン力以上の高次の相互作用の効果が効いてきて、ここでの単純なルールは成り立たなくなる。ちなみに角運動量は $\ell=0,1,2,3,\cdots$ ごとに s, p, d, f, $\cdots$ と呼ぶことが習しになっている。

1.5 準古典的近似でのエントロピー

多次元問題における作用への Bohr-Sommerfeld 量子化条件のもう一つの応用は、既に前回黒体輻射のところで議論した量子力学的状態数の計算である。ここでは Boltzmann の H-定理のところで議論した理想気体のエントロピーの導出について議論しよう。体積 V に封じ込められた質量 m の粒子 N 個の古典運動を考えよう。空間 3 次元の位相空間を細かく分け $d^3\boldsymbol{x}d^3\boldsymbol{p}=dxdydzdp_xdp_ydp_z$ に含まれる量子力学的状態の数を $d\tau=(d^3\boldsymbol{x}d^3\boldsymbol{p})/(2\pi\hbar)^3$ とする。ここに $d^3\boldsymbol{x}d^3\boldsymbol{p}$ の細胞の体積は $(2\pi\hbar)^3$ よりは充分大きく $d\tau\gg 1$ だが、この細胞内の粒子は $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{p}$ によって特徴づけられ 古典的分布関数 $f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p})>0$ を持つと仮定する。　この細胞内の粒子数は $dn=f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p})d\tau$ で与えられる。今簡単のためこれらを離散化して $G_i=d\tau_i, N_i=dn_i$ として $G_i\gg N_i\gg 1$ とする。全粒子を各 N_i に振り分けると $\sum_i N_i=N$ である。各細胞における古典的粒子の離散的状態への振り分け方は ${G_i}^{N_i}$ 通りあるが N_i 個の粒子の同等性から $N!$ で割っておいて $\Delta\Gamma_i=({G_i}^{N_i})/N_i!$ となる。また各細胞への古典的粒子の振り分け方は互いに独立とすると、N 粒子の離散準位への振り分け方の総数は

$$\begin{aligned}\Delta\Gamma &= \prod_i \Delta\Gamma_i \\ &= \prod_i \frac{{G_i}^{N_i}}{N_i!}\end{aligned} \tag{1.5.1}$$

となる。ここでエントロピーを

$$S=k\log\Delta\Gamma=k\sum_i\log\Delta\Gamma_i \tag{1.5.2}$$

で定義する。$k=R/\mathrm{N_A}$ は Boltzmann 定数である。$\log\Gamma_i$ の計算で、近似公式

$$\log N!\sim N\log\frac{N}{e} \tag{1.5.3}$$

(この公式は $\log N! = \log 1 + \log 2 + \cdots + \log N$ を積分 $\int_0^N \log x dx$ で近似して得られる。$\lim_{x\to 0} x\log x = 0$ に注意!) を使うと

$$
\begin{aligned}
\log \Delta\Gamma_i = N_i \log G_i - \log N_i! = N_i\ log \frac{eG_i}{N_i} \\
S = k\sum_i N_i \log \frac{eG_i}{N_i} \\
= k\sum_i f_i G_i \log \frac{e}{f_i}
\end{aligned}
\tag{1.5.4}
$$

ここに $N_i = f_i G_i$ とした。最後に $G_i \to d\tau_i$ に戻し連続変数の積分に戻って、$f_i \to f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}) = f(\boldsymbol{p})$ が $\boldsymbol{x}$ に依存しないとして体積積分を実行すると

$$
S = k\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\int f(\boldsymbol{p}) \log \frac{e}{f(\boldsymbol{p})} d^3\boldsymbol{p} \tag{1.5.5}
$$

が得られる。これは (前の係数 $kV/(2\pi\hbar)^3$ を除いて) 以前 Boltzmann の H-定理の証明の際用いたエントロピーの表式である。

(1.5.4) を用いて、熱力学的平衡状態にある理想気体の Maxwell-Boltzmann 分布をエントロピー極大の条件から導くことが出来る。そのためには、粒子数の保存則とエネルギーの保存則を

$$
\begin{aligned}
N = \sum_i f_i G_i \\
E = \sum_i \varepsilon_i f_i G_i
\end{aligned}
\tag{1.5.6}
$$

として拘束条件を課し、ラグランジュの未定乗数法則をもちいて

$$
\frac{\partial}{\partial f_j}\left(S + \gamma N + \alpha E\right) = 0 \tag{1.5.7}
$$

とする。ここから

$$
G_j\left(-k\log f_j + \gamma + \alpha\varepsilon_j\right) = 0 \tag{1.5.8}
$$

すなわち

$$
\begin{aligned}
\log f_j = \frac{1}{k}(\gamma + \alpha\varepsilon_j) \\
f_j = e^{\frac{1}{k}(\gamma+\alpha\varepsilon_j)}
\end{aligned}
\tag{1.5.9}
$$

が得られる。ここにパラメータ γ, α は原理的には補助条件 (1.5.6) から決まるが、ここではむしろ熱力学的諸量の関係式 (以前の (1.5.10) で $E = F + ST$: E は内部エネルギー

U)

$$dE = TdS - PdV + \sum_i \mu_i dN_i \tag{1.5.10}$$

を用いる。すなわち (1.5.7) を

$$\begin{aligned} &\delta S + \gamma\delta N + \alpha\delta E = 0 \\ &\delta E = -\frac{1}{\alpha}\delta S - \frac{\gamma}{\alpha}\delta N \end{aligned} \tag{1.5.11}$$

と比較して

$$\alpha = -\frac{1}{T} \quad , \quad \gamma = \frac{\mu}{T} \tag{1.5.12}$$

であることがわかる。ここに T は絶対温度、μ は化学ポテンシャル (chemical potential) である。結局 (1.5.9) は

$$\begin{aligned} f_j &= e^{\frac{\mu-\varepsilon_j}{kT}} \\ f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) &= e^{\beta(\mu-\varepsilon(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})} \quad \text{with} \quad \beta = \frac{1}{kT} \end{aligned} \tag{1.5.13}$$

となる。

ここでの展開の応用として、いくつかの簡単な場合に理想気体の熱力学的諸量を求めることができる。まず粒子数と内部エネルギーは (1.5.6) を積分で書いて

$$\begin{aligned} N &= \int f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})\frac{d^3\boldsymbol{q}d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\int f(\boldsymbol{p})d^3\boldsymbol{p} \\ E &= \int \varepsilon(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})\frac{d^3\boldsymbol{q}d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\int \varepsilon(\boldsymbol{p})f(\boldsymbol{p})d^3\boldsymbol{p} \end{aligned} \tag{1.5.14}$$

から求められる。ここに一粒子エネルギーが運動量だけの関数で ($\varepsilon(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) = \varepsilon(\boldsymbol{p})$) 分布関数が粒子の位置によらない場合 ($f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) = f(\boldsymbol{p})$) の式も書いておいた。特に理想気体の分子が単原子分子で一粒子エネルギーが並進の運動エネルギーだけの場合は $\varepsilon(\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ で、(1.5.13) は $f(\boldsymbol{p}) = e^{\beta\mu}e^{-\beta\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m)}}$ であるから簡単にガウス積分が出来て

$$\begin{aligned} N &= V\left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\beta\mu} \\ E &= N\frac{3}{2\beta} = N\frac{3}{2}kT \end{aligned} \tag{1.5.15}$$

が求まる。はじめの式から chemical potential μ は

$$\mu = -k\log\left[\left(\frac{V}{N}\right)\left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\right] \tag{1.5.16}$$

と表わされる。またエントロピーは (1.5.5) から

$$
\begin{aligned}
S &= k\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}e^{\beta\mu}\int e^{-\beta\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}}\left(1-\beta\mu+\beta\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\right)d^3\boldsymbol{p} \\
&= k\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}e^{\beta\mu}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}}\left((1-\beta\mu)+\beta\frac{3}{2\beta}\right) \\
&= kV\left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}e^{\beta\mu}\left(\frac{5}{2}-\beta\mu\right) \\
&= kN\left(\frac{5}{2}-\beta\mu\right) \qquad (1.5.17)
\end{aligned}
$$

となる。そこで Helmholtz の自由エネルギーは (1.5.15) とあわせて

$$
\begin{aligned}
F = E - ST &= \frac{3}{2}kNT - \left(\frac{5}{2}-\beta\mu\right)kNT \\
&= (\beta\mu-1)kNT = \mu N - kNT = (\mu - kT)N \qquad (1.5.18)
\end{aligned}
$$

が得られる。ここで (1.5.16) の μ の式を代入すると結局

$$
F = -kTN\left[\log\left(\frac{V}{N}\right)\left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right))^{\frac{3}{2}}+1\right] \qquad (1.5.19)
$$

が得られる。$F = F(T, V, N)$ が与えられると種々の熱力学的諸量が全てここから得られる。例えば

$$
\begin{aligned}
S &= -\frac{\partial F}{\partial T} \\
&= kN\left[\log\left(\frac{V}{N}\right)\left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3_2}+1+\frac{3}{2}\right] \\
P &= -\frac{\partial F}{\partial V} = \frac{kTN}{V} \rightarrow PV = kNT \rightarrow PV = nRT \\
\mu &= \frac{\partial F}{\partial N} = -kT\log\left(\frac{V}{N}\right)\left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad (1.5.20)
\end{aligned}
$$

はじめの式で (1.5.15) から得られる $kT = \frac{2E}{3N}$ を代入すると

$$
S = S(E, V, N) = kN\left[\log\left(\frac{V}{N}\right)\left(\frac{mE}{3\pi N\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}+\frac{5}{2}\right] \qquad (1.5.21)
$$

が得られる。この式は関数形 $E = E(S, V, N)$ あるいは $S = S(E, V, N)$ による関係式

$$
\begin{aligned}
dE &= TdS - PdV + \mu dN \\
dS &= \frac{1}{T}dE + \frac{P}{T}dV - \frac{\mu}{T}dN \qquad (1.5.22)
\end{aligned}
$$

によって Helmholtz の自由エネルギー $F = F(T, V, N)$ と全く対等な記述を与える。すなわち

$$\begin{aligned}\frac{1}{T} &= \frac{\partial S}{\partial T}\\ &= \frac{3}{2}\frac{kN}{E} \to E = \frac{3}{2}kNT \to \frac{E}{N} = \frac{3}{2}kT\\ \frac{P}{T} &= \frac{\partial S}{\partial V} = \frac{kN}{V} \to PV = kNT \to PV = nRT\\ \frac{\mu}{T} &= -\frac{\partial S}{\partial N}\\ &= -k\log\left[\left(\frac{V}{N}\right)\left(\frac{mE}{3\pi N\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} + \frac{5}{2}\right] + \frac{5}{2}k\\ &= -k\log\left(\frac{V}{N}\right)\left(\frac{mE}{3\pi N\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\end{aligned} \tag{1.5.23}$$

が得られる。

(練習問題) エネルギー E と体積 V、粒子数 N を固定した時のエントロピーの表式 (1.5.21) はまた、$n = 3N$ 次元の位相空間におけるエネルギー E 以下の運動エネルギーを持つ準古典的状態の数を数えることによっても求めることができる。ただし、粒子の同等性を考慮して N 個の粒子の占める準古典的状態の数を $N!$ で割って $\Gamma(E)$ を定義しておく。すなわち

$$\Gamma(E) = \frac{1}{N!}\int_{({p_1}^2+\cdots+{p_n}^2)/2m \leqq E} \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}(\int dx_1\cdots dx_n)dp_1\cdots dp_n \tag{1.5.24}$$

として

$$S = S(E, V, N) = k\log\Gamma(E) \tag{1.5.25}$$

を計算する。

(1.5.24) の積分は $p_i = \sqrt{2mE}x_i$ $(i = 1\cdots n)$ (x_i は新しい積分変数) の変数変換により、n-次元球の体積の公式

$$v_n = \int_{{x_1}^2+\cdots+{x_n}^2 \leqq 1} dx_1\cdots dx_n = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2+1)} \tag{1.5.26}$$

に帰着される。v_n は半径 1 の球の体積で、半径 R の n-次元球の体積は $V_n = v_n R^n$ である。(1.5.26) で $\Gamma(s)$ はガンマ関数

$$\Gamma(s) = \int_0^\infty x^{s-1}e^{-x}dx \tag{1.5.27}$$

((1.5.24) の $\Gamma(E)$ とは別の関数) である。$N=1,2,3,\cdots$ (自然数) の時は $\Gamma(N+1) = N! \sim N\log(N/e)$ である。$N \to n/2 = 3N/2$ に対してもこの近似式を流用すると

$$
\begin{aligned}
\Gamma(E) &= \frac{V^N}{N!}(\sqrt{2mE})^{\frac{n}{2}}\frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2+1)} \\
&= \frac{V^N}{N!}\left(\frac{mE}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3N}{2}}\frac{1}{\Gamma(3N/2+1)} \\
&. \sim \left(\frac{eV}{N}\right)^N\left(\frac{emE}{3\pi N\hbar^2}\right)^{\frac{3N}{2}}
\end{aligned}
\tag{1.5.28}
$$

より (1.5.25) は

$$
\begin{aligned}
S &= k\log\Gamma(E) \\
&\sim kN\log\left[\left(\frac{eV}{N}\right)\left(\frac{emE}{3\pi N\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\right] \\
&= kN\left[\log\left(\frac{V}{N}\right)\left(\frac{mE}{3\pi N\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}+\frac{5}{2}\right]
\end{aligned}
\tag{1.5.29}
$$

となって (1.5.21) の結果と一致する。(証明終わり)

1.6 ギブス分布

ここで、あとで量子統計を学ぶ時のために非常に一般的な統計力学的手法であるギブス分布について説明する。既に熱力学のところで学んだ様に熱力学の巨視的対象として、孤立系、閉じた系、開いた系の三つを区別することができる。孤立系とは外界と障壁等で断絶していて、物質とエネルギーの出入りが全くない物体である。例えば鉄のシリンダー内に封じ込められた気体を考える時、物質の種類と粒子数、エネルギーは保存される。しかしながら、完全に孤立した物質というものは自然界には実は存在し得ない。例えば今考えているシリンダー内の気体については、鉄のシリンダーの効果は無限大の高さを持つポテンシャルの壁として表わされる。これは外場の中にある気体分子であるから、気体のエネルギーは厳密には保存されない。しかし気体の体積が充分大きい時には、シリンダーに接している表面積の効果は大多数を占める体積部分の効果に比べて無視できると考えられる。統計物理学で対象とする物質は、常にこの様に理想化した物質である。同様に、閉じた系とは外界とは物質の出入りは無いが熱やエネルギーは自由に出入りできる物質であるが、これも自然界では近似的に成り立っているにすぎない。ギブス統計が対象とする物質は孤立系の中にある、ほとんど閉じた巨視的部分系でそれ自体熱平衡にあるものである。

これを統計集団 (canonical ensenble) という。一般には、こうした部分系が多数集まって孤立系を形作っていると考える。部分系はまた別の部分系と隣り合っている訳だから、勿論完全に閉じた系ではない。長い時間の間にはこれらの部分系は互いに物質とエネルギーを交換し合い、最終的に系全体としての熱平衡に達することになる。しかしながら、部分系は充分多くの微視的分子を含んでおり、それが熱平衡に達するまでのいわゆる緩和時間は巨視的時間に比べて充分小さいと考えられる。こういう訳で、我々はほとんど閉じた巨視的部分系の熱力学的性質を議論することができる。最後に部分系が開いた系とは部分系間に物質もエネルギーもやりとりがある場合であって、いくつかの物質が共存する場合にはこの様な系の集団を取り扱うことになる。

前節で一粒子位相空間内の分布関数 f_i を $N_i = f_i G_i$ によって導入したが、量子統計でも部分系 a の確率分布をあとで導入する量子力学の密度行列 w を用いて ${w_n}^a$ で表わすことにする。ここに n は離散的な量子力学的状態を表わす。 既に量子力学の準古典的取扱で何遍も見た様に、量子力学では有界運動をする粒子は必ず離散的なエネルギー固有値 E_n を持つ。気体分子の並進運動は常に準古典的であるのでこの意味では $E_n(q,p)$ と書くべきであるが、今簡単のためこれも離散化して E_n と書く事にする。部分系のエネルギーを ${E_n}^a$ と書くと、部分系の確率分布が全て独立である事を用いると準古典的の時と同様にして $\log {w_n}^a$ は加算量であり運動の積分で表わされることがわかる。最もありふれた運動の積分はエネルギー以外に部分系の全体としての運動量と角運動量であるが、今これらを無視すると

$$\log {w_n}^a = \alpha + \beta {E_n}^a \tag{1.6.1}$$

であることが導かれる。ここに α, β は a, n に依存しない定数で、${E_n}^a \rightarrow \infty$ で ${w_n}^a$ が有限であるためには $\beta < 0$ である。今全ての a に対して同じ関係式が成り立つとして a を省略すると

$$\log w_n = \alpha + \beta E_n \tag{1.6.2}$$

である。この確率分布は理想気体の Maxwell-Boltzmann 分布と全く同じものであり、β を $-\beta$ と変えると $\beta = 1/(kT)$ である。更に $e^\alpha = A$ と書くと

$$w_n = A e^{-\beta E_n} \tag{1.6.3}$$

と書ける。この結果は今考えている部分系が巨視的な系であることから、ある意味では当然のことである。係数 A は規格化条件

$$\sum_n w_n = 1 \tag{1.6.4}$$

から

$$\frac{1}{A} = \sum_n e^{-\beta E_n} \tag{1.6.5}$$

を計算して求まる。この式を $Z(\beta)$ と書いて分配関数という。つまり $A = 1/Z(\beta)$ である。部分系の種々の物理量 f の平均値は n 状態の量子力学的行列要素 (の対角部分) f_n を用いて

$$\bar{f} = \sum_n f_n w_n = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_n f_n e^{-\beta E_n} \tag{1.6.6}$$

と計算される。特に f がエネルギーの時は簡単に

$$\begin{aligned}\bar{E} &= \frac{1}{Z(\beta)} \sum_n E_n e^{-\beta E_n} = -\frac{1}{Z(\beta)} \frac{\partial}{\partial \beta} Z(\beta) \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta) \end{aligned} \tag{1.6.7}$$

により求めることができる。以下しばしば $\bar{E}$ を単に E と書く事にする。

ギブス統計のほとんど閉じた部分系は巨視的な系だから、エネルギーの巨視的分布関数 $W(E)$ を用いて部分系の種々の巨視的物理量を計算することができる。$W(E)$ は微視的量子状態の離散的なエネルギー準位 E_n のギブス分布関数 $w_n = Ae^{-\beta E_n}$ と結び付いているはずである。この関係を見出すために、我々は再び準古典的近似による量子状態の記述を用いる。すなわち、部分系が完全に閉じた孤立系系だとみなして、前節の (練習問題) で導入したエネルギー E 以下の N 個の粒子の準古典的状態数を $\Gamma(E)$ (see (1.5.28) とする。充分小さい巨視的エネルギー間隔 ΔE には

$$\Delta\Gamma(E) = \frac{d\Gamma(E)}{dE} \Delta E = \Gamma'(E) \Delta E \tag{1.6.8}$$

個の量子状態が存在すると仮定する。$\Gamma'(E)$ は単位エネルギーあたりに含まれる量子状態の数を表わす。ギブス分布の分布関数を連続変数 E の連続関数 $w(E)$ を用いて $w_n = w(E_n)$ と表わすと $w(E) = Ae^{-\beta E}$ である。巨視的分布関数は

$$W(E) = w(E)\Gamma'(E) \tag{1.6.9}$$

と表わされる。(1.5.28) から $\Gamma'(E) \propto E^{3N/2-1}$ だ t から $n = (3N/2) - 1 \gg 1$ として $W(E) \propto E^n e^{-\beta E}$ である。従って $W(E)$ はあるところ $E_{\max}$ にピークをもつ鋭い分布関数である。ここに $E_{\max}$ は $(dW(E)/dE) = 0$ から $E_{\max} = n/\beta = nkT$ と求まる。もっと正確には分布関数 (1.6.9) を用いて、エネルギーの平均値を求めると

$$
\begin{aligned}
\bar{E} &= \frac{\int_0^\infty EE^n e^{-\beta E} dE}{\int_0^\infty E^n e^{-\beta E} dE} \\
&= \frac{\frac{\Gamma(n+2)}{\beta^{n+2}}}{\frac{\Gamma(n+1)}{\beta^{n+1}}} \\
&= \frac{n+1}{\beta} = (n+1)kT = \frac{3}{2}kTN
\end{aligned}
\tag{1.6.10}
$$

となるが $N \gg 1$ より E_{min} とほぼ同じになる。(1.6.9) に対する規格化条件とエネルギー期待値は

$$
\begin{aligned}
1 &= \int W(E)dE \\
&= \int_0^\infty w(E)\Gamma'(E)dE = 1 \\
\bar{E} &= \int EW(E)dE = \int_0^\infty Ew(E)\Gamma'(E)dE
\end{aligned}
\tag{1.6.11}
$$

で与えられるので、それぞれの行の二番目の式で $w(E) = Ae^{-\beta E}$ を代入して β で微分すると

$$
\begin{aligned}
&\int_0^\infty \left(\frac{\partial A}{\partial \beta} - AE\right) e^{-\beta E}\Gamma'(E)dE = 0 \\
&\int_0^\infty \left(\frac{\partial A}{\partial \beta} - AE\right) Ee^{-\beta E}\Gamma'(E)dE = \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta}
\end{aligned}
\tag{1.6.12}
$$

が得られる。一番目の式より

$$
\frac{\partial A}{\partial \beta} = A\bar{E} \tag{1.6.13}
$$

が得られるから、これを二番目の式に代入すると

$$
\begin{aligned}
&\int_0^\infty \left(\bar{E} - E\right) EAe^{-\beta E}\Gamma'(E)dE \\
&= \bar{E}^2 - \bar{E}^2 = \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta}
\end{aligned}
\tag{1.6.14}
$$

が得られる。そこで、絶対的揺らぎ (標準偏差) を二乗平均 $\sigma = \sqrt{(\Delta \bar{E})^2}$ で定義すると $(\Delta \bar{E})^2 = (E - \bar{\Delta} E)^2 = \bar{E}^2 - \bar{E}^2$ だから $\beta = kT$ より

$$
(\Delta \bar{E})^2 = kT^2 \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \tag{1.6.15}
$$

が得られる。絶対的揺らぎをエネルギーの平均値で割った相対揺らぎは

$$\frac{\sqrt{(\Delta \bar{E})^2}}{\bar{E}} = \frac{kT}{\bar{E}}\sqrt{\frac{\partial \bar{E}}{\partial kT}} \tag{1.6.16}$$

となる。(1.6.10) で見た様に、一般に $\bar{E}$ は粒子数 N に比例する。特に $\bar{E} = (3/2)kTN$ の場合は、(1.6.16) は $\sqrt{2/3}1/\sqrt{N}$ となる。そこで一般に

$$\frac{\sqrt{(\Delta \bar{E})^2}}{\bar{E}} \propto \frac{1}{N} \tag{1.6.17}$$

が成り立つ。結局古典的分布関数 (1.6.9) は部分系が充分大きな粒子数を持つ時、$E = \bar{E}$ に鋭いピークを持った正規分布

$$W(E) \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(E-\bar{E})^2}{2\sigma^2}} \tag{1.6.18}$$

に似た分布となる。ここに $\sigma = \sqrt{(\Delta \bar{E})^2}$ である。

以上の議論に基づいて (1.6.9) の関係式を $E = \bar{E}$ で適用し、(1.6.11) の規格化条件を

$$W(\bar{E})\Delta E = 1 \tag{1.6.19}$$

と変形して ΔE をこの式で定義すると、$\Delta E \sim \sigma$ の程度の微小量であり、$[\bar{E}, \bar{E} + \Delta E]$ のエネルギー区間に含まれる準古典的準位の数は (1.6.8) より

$$\Delta\Gamma(\bar{E}) = \Gamma'(\bar{E})\Delta E \tag{1.6.20}$$

となる。これを使うと (1.6.11) の二番目の規格化条件は

$$w(\bar{E})\Delta\Delta\Gamma(\bar{E}) = 1 \tag{1.6.21}$$

となる。そこで (**??**) の $\Delta\Gamma = \Delta\Gamma(E)$ と見做すと部分系のエントロピーは

$$\begin{aligned} S(\bar{E}) &= k \log \Delta\Gamma(\bar{E}) = -k \log w(\bar{E}) \\ &= -k \log A e^{-\beta \bar{E}} = -k \log A + k\beta \bar{E} \\ &= -k \log A + \frac{\bar{E}}{T} \end{aligned} \tag{1.6.22}$$

と求まる。そこで、Helmhortz の自由エネルギー F を $F = \bar{E} - S(\bar{E})T$ で定義すると $F = kT \log A = (\log A/\beta)$ つまり $A = e^{\beta F}$ が得られる。結局 (1.6.3) - (1.6.5) は

$$\begin{aligned} w_n &= e^{\beta(F-E_n)} \qquad \text{with} \quad \sum_n w_n = 1 \\ Z(\beta) &= \sum_n e^{-\beta E_n} \\ F &= -kT \log Z(\beta) \end{aligned} \tag{1.6.23}$$

となる。

前節の (練習問題) の時の様に部分系をあたかも閉じた孤立系の様に考えて、保存するエネルギーと粒子数の下にある全ての微視的状態の確率分布に帰着させた統計集団をミクロ正準集団 (micro canonical ensemble) という。それと逆に、部分系が完全に開いた系で周りの部分系と自由に物質とエネルギーをやり取りできる系を大正準集団 (macro canonical ensemble) という。幾つかの種類の粒子の混ざった気体や溶液の化学平衡状態を議論するためには、この大正準集団の取り扱いが特に有益である。またあとで議論する量子統計力学でも、この考え方が大変役に立つ。今まで部分系の粒子数は暗黙のうちに一定と仮定してきたが、今度は部分系の N は自由に変わり得るとしてこれについても統計平均を取ることとする。すなわち (1.6.3) の量子力学的確率分布は今度は各 N ごとに

$$w_{n,N} = Ae^{\beta(\mu N - E_n)} \tag{1.6.24}$$

となる。ここに μ は今考えている物質の chemical potenial である。大正準集団の分配関数は

$$\Xi(\beta) = \sum_{n,N} e^{\beta(\mu N - E_{n,N})} \tag{1.6.25}$$

で与えられる。(1.6.24) の規格化は

$$\sum_{n,N} w_{n,N} = 1 \tag{1.6.26}$$

だから $A\Xi(\beta) = 1$ より $A = e^{\beta\Omega}$ として

$$w_{n,N} = e^{\beta(\Omega + \mu N - E_{n,N})} \tag{1.6.27}$$

が得られる。$\log A = -\log\Xi(\beta) = \beta\Omega$ を考えることにより

$$\Omega = -(1/\beta)\log\Xi(\beta) = -kT\log\Xi(\beta) \tag{1.6.28}$$

が得られるが、この式はカノニカル集団の時の Helmholtz の自由エネルギー F に対する式 $F = -kT\log Z(\beta)$ (see (1.6.23) に似ている。あとで示す様に $\Omega = F - \mu N$ の関係があり、Ω をグランドポテンシャルという。種々の物理量 f の平均値は $P_{n,N} = (1/\Xi(\beta))e^{\beta(\mu N - E_{n,N})}$ を用いて

$$\begin{aligned}
\bar{f} &= \sum_{n,N} f_{n,N} P_{n,N} \\
&= \frac{1}{\Xi(\beta)} \sum_{n,N} f_{n,N} e^{\beta(\mu N - E_{n,N})} \\
&= \frac{1}{\Xi(\beta)} \sum_{N} e^{\beta\mu N} \sum_{n} f_{n,N} e^{-\beta E_{n,N}}
\end{aligned} \tag{1.6.29}$$

によって求められる。そこで

$$
\begin{aligned}
\mu\bar{N}-\bar{E} &= \frac{1}{\Xi(\beta)}\frac{\partial}{\partial\beta}\Xi(\beta) \\
&= \frac{\partial}{\partial\beta}\log\Xi(\beta) \\
&= -\frac{\partial}{\partial\beta}\beta\Omega = -\Omega-\beta\frac{\partial}{\partial\beta}\Omega \\
&= -\Omega+T\frac{\partial}{\partial T}\Omega
\end{aligned}
\tag{1.6.30}
$$

となる。一方、部分系のエントロピーは (1.6.22) と同様にして

$$
\begin{aligned}
S(\bar{E},\bar{N}) &= -k\log w_{\bar{n},N} \\
&= -k\log Ae^{\beta(\mu\bar{N}-\bar{E})} = -k\log A-k\beta(\mu\bar{N}-\bar{E}) \\
&= -\frac{1}{T}\Omega-\frac{1}{T}(\mu\bar{N}-\bar{E})
\end{aligned}
\tag{1.6.31}
$$

より、結局

$$
\Omega=\bar{E}-S(\bar{E},\bar{N})T-\mu\bar{N}=F-\mu\bar{N} \tag{1.6.32}
$$

が得られる。これを (1.6.30) に代入すると

$$
S(\bar{E},\bar{N})=-\frac{\partial}{\partial T}\Omega \tag{1.6.33}
$$

となる。以下、$\bar{E},\bar{N}$ 等を E,N と書くと

$$
\begin{aligned}
\Omega &= F-\mu N=E-ST-\mu N \\
d\Omega &= dF-d(\mu N)=-SdT-PdV+\mu dN-d(\mu N) \\
&= -SdT-PdV-Nd\mu
\end{aligned}
\tag{1.6.34}
$$

そこで $\Omega=\Omega(T,V,\mu)$ であり

$$
\begin{aligned}
S &= -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu} \\
P &= -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial V}\right)_{T,\mu} \\
N &= -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{T,V}
\end{aligned}
\tag{1.6.35}
$$

がある得られる。ここに最初の式は (1.6.33) と同じである。

2　量子力学の基本的概念

2.1　量子力学における状態概念

既に何回か述べた様に古典力学における粒子の状態は位置と運動量によって一意的に指定される。初期条件が与えられるとそれ以後の位置と運動量は 2 階の微分方程式であるニュートン方程式を解くことにより完全に決定される。微視の世界を支配する力学法則である量子力学の状態概念は、これとは全く異なっている。粒子の状態は表示にもよるがよく使われる座標表示では座標 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots$ と時間 t の複素関数である波動関数 $\Psi = \Psi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, t)$ によって表わされる。今簡単のために空間 1 次元、一粒子の場合を考える。この時 $\psi(x,t)$ である。$|\psi(x,t)|^2$ (正確には $|\psi(x,t)|^2 dx$) はその粒子が t の時 $[x, x+dx]$ の間にある確率を表わす。規格化条件は

$$\int |\psi(x,t)|^2 dx = 1 \tag{2.1.1}$$

である。これは空間のどこかに粒子があるということを意味する。例えば

$$\psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)} = e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \tag{2.1.2}$$

(ここに $p = \hbar k,\ E = \hbar\omega$) は平面波を表わすが、全空間を取ったのでは (2.1.1) の様には規格化できない。そこで、あとで示す様に充分大きな長さ L を取って $\psi(x,t) = (1/\sqrt{L})e^{(i/\hbar)(px-Et)}$ と定義し、その後 $L \to \infty$ の極限をとって考える。

量子力学における物理量は、一般には波動関数に作用する線形作用素 (linear operator) である。観測される物理量 (観測量あるいは観測可能量: observable という) は、線型空間論に現われるいわゆる固有値によって表現される。例えば、座標と運動量はハミルトン形式における互いに共役な正準変換量であるが、いずれも線形作用素 (あるいは演算子: 単に operator ともいう) で

$$\hat{p}\psi(x,t) = p\psi(x,t) \quad \hat{x}\psi(x,t) = x\psi(x,t) \tag{2.1.3}$$

の性質を満たす。座標表示では $\hat{x} = x,\ \hat{p} = (\hbar/i)(\partial/\partial x)$ である。以下、物理量 A の作用素を $\hat{A}$ で表わす。p や x は固有値、波動関数は固有ベクトルに対応する。同様に、時間変数に共役な正準変換量であるエネルギーの作用素は $i\hbar(\partial/\partial t)$ で表わされる。結局

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} &= pe^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} &= Ee^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \end{aligned} \tag{2.1.4}$$

である。ポテンシャル $U(x)$ 内を運動する粒子に対しては

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\hat{H}\Psi(x,t) \tag{2.1.5}$$

ここに $\hat{H}$ はハミルトニアン $H(p,x)=\frac{p^2}{2m}+U(x)$ で運動量 p を $\hat{p}$ で置き換えて得られる作用素である。つまり

$$\hat{H}=H(\hat{p},x)=\frac{\hat{p}^2}{2m}+U(x)=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x) \tag{2.1.6}$$

である。ポテンシャル $U(x)$ が時間変数を陽に含まない場合、系のエネルギー E は保存される。これを使うと (2.1.5) は

$$\begin{aligned}\Psi(x,t)&=e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x)\\ \hat{H}\psi(x)&=E\psi(x)\end{aligned} \tag{2.1.7}$$

と変数分離される。(2.1.5) や (2.1.7) を Schrödinger 方程式という。

数学的には量子力学の波動関数、例えば $\psi(x)$ の属する関数空間は複素ヒルベルト空間と呼ばれる無限次元の線形空間である。(von Neymann 著「量子力学の数学的基礎」参照) $\psi(x)$ を $f(x)$ と書いて $f_1=f(x_1), f_2=f(x_2),\cdots$ としてベクトル $\boldsymbol{f}=(f_1,f_2,\cdots,f_N)$ からなる N 次元線型空間で $N\to\infty$ ととったものが $f(x)$ の関数空間である。二つの関数 $f(x),g(x)\in L^2(\Omega)$ に対して内積 (f,g) は

$$(f,g)=\int_\Omega f(x)^*g(x)d\mu(x) \tag{2.1.8}$$

で定義されている。ここに、Ω は有界領域、積分は普通の Riemann 積分ではなく Lebesgue 積分である。ヒルベルト空間は $||f||^2=(f,f)$ から決まるノルム $||f||\geqq 0$ を持った距離空間であるが、その重要な特徴は完備性 (completeness) である。すなわち、有限のノルム $||f||<\infty$ を持った 2 乗可積分関数全体の線型空間 $L^2(\Omega)$ は

$$L^2(\Omega)=\left\{f(x)\|\int_\Omega|f(x)|^2d\mu(x)<\infty\right\} \tag{2.1.9}$$

で定義される。完備性とは (強収束の) 無限関数列 $\{f_n(x)\}\in L^2(\Omega)$ が必ずその極限を $L^2(\Omega)$ にもつこと: $f_n(x)\to f(x)\in L^2(\Omega)$ for $n\to\infty$ である。この事は有限次元の線型空間においては自明であるが、無限次元では自明ではない。実はそれを保証するのが Lebesgue 積分である。有限次元線型空間におけるベクトルに作用する正方行列は線形作用素 $\hat{O}$ である。これは微分作用素 $\hat{O}(x)$ や積分核 $O(x,x')$ で表わされる。

$$(\hat{O}f)(x)=\hat{O}(x)f(x)\qquad,\qquad\int_\Omega O(x,x')f(x')d\mu(x')\qquad\text{etc.} \tag{2.1.10}$$

ヒルベルト空間における固有値問題は

$$(\hat{O}f_n)(x) = O_n f_n(x) \tag{2.1.11}$$

と表わされる。O_n を作用素 $\hat{O}$ の固有値、$f_n(x)$ を波動関数 (固有ベクトル) といって、しばしば $f_n(x) = |n\rangle$ で表わす。$\hat{O}\,|n\rangle = O_n\,|n\rangle$ である。また、$g_m(x) = |m\rangle$ として 内積 (2.1.8) を $(g_m, f_n) = \langle m|n\rangle$ と表わすこともある。$\langle m|$ をブラ状態、$|n\rangle$ をケット状態といい、あわせてブラケット表示 (ディラック表示) という。この表示は Paul Dirac によって導入された。(岩波書店刊「量子力学」参照) $f(x), g(x) \in L^2(\Omega)$ として、線形作用素 $\hat{O}$ が与えられた時

$$(g, \hat{O}f) = (\hat{O}^\dagger g, f) \tag{2.1.12}$$

によって決まる作用素 $\hat{o}^\dagger$ を $\hat{O}$ の共役作用素 (adjoint operator) という。特に $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$ の時、これを自己共役作用素 (self-adoint operator) あるいはエルミート作用素 (hermetian operator) といい、物理学では特に重要である。それは、一般に物理量は実数であり対応する作用素は必ずエルミートでなければならないからである。有限次元の線型空間ではエルミート作用素はエルミート行列 $O_{n,m} = O_{m,n}{}^*$ に対応する。$\hat{O}^\dagger$ の行列要素 (matrix element) は

$$\begin{aligned} O_{m,n}{}^* &= \langle m|O|n\rangle^* = \left\langle g_m \middle| \hat{O}f_n \right\rangle^* \\ &= \left\langle \hat{O}^\dagger g_m \middle| f_n \right\rangle^* = \left\langle f_n \middle| \hat{O}^\dagger g_m \right\rangle \\ &= \hat{O}^\dagger_{n,m} \end{aligned} \tag{2.1.13}$$

である。そこで対角要素は $O_{n,n} = O_{n,n}{}^* =$ (実数) である。もし $\hat{O}$ の固有値問題が (2.1.11) なら $O_n = O_{n,n}$ で固有値は実数である。特に (2.1.6) のハミルトニアン $\hat{H}$ はエルミート作用素であり (2.1.7) の固有値問題

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \tag{2.1.14}$$

のエネルギー固有値 E_n は実数である。

量子力学ではエネルギーの原点は、古典力学と違って特別な意味を持っている。非相対論的量子力学では、有限領域の運動は全て負のエネルギーを持っておりそのエネルギー固有値は離散的である。実際、前節の「前期量子論」で扱った例は全てこの様な場合で全て離散的に量子化されていた。この様な場合、(2.1.14) の離散的固有値 E_n にはただ一つの固有状態が対応する場合もあるし、幾つか複数の固有状態が対応する場合もある。後者の場合、状態が縮退しているという。固有状態が作る部分空間を固有空間といい、1 次元の

場合もあるし多次元の場合もある。(2.1.14) の固有方程式の左から $\langle\psi_m|$ を掛けて内積を取ると、ハミルトニアンのエルミート性 $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ を使って

$$\begin{aligned}\langle\psi_m|\hat{H}|\psi_n\rangle &= E_n \langle m|n\rangle \\ &= \left\langle \hat{H}^\dagger\psi_m \middle| \psi_n \right\rangle = \left\langle \hat{H}\psi_m \middle| \psi_n \right\rangle = E_m \langle m|n\rangle \\ &(E_n - E_m)\langle m|n\rangle = 0 \end{aligned} \tag{2.1.15}$$

が示せる。従って、エネルギー固有値に縮退がなければ $E_n \neq E_m$ の時 $\langle m|n|m|n\rangle = 0$ が示せる。すなわち、異なる固有値の固有状態は互いに直交している。そこで $|n\rangle$ を

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m} \tag{2.1.16}$$

により正規直交化する。実は固有空間が 1 次元でなくても、それが有限次元である限り Schmidt の直交化法を用いて固有ベクトル $\{\psi_n\}$ を完全に直交化できる。ヒルベルト空間に含まれる任意の関数が固有ベクトルの系 (正規直交基底) $\{\psi_n\}$ で展開できる時、$\{\psi_n\}$ を完全系という。

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) \qquad \text{for} \quad \psi(x) \in L^2(\Omega) \tag{2.1.17}$$

実際距離空間で収束する関数列 $\{f_n(x)\}$ がある時その極限関数 $\lim_{n\to\infty} f_n(x) = f(x)$ が $L^2(\Omega)$ に属する事はヒルベルト空間の完備性により保証される。複素係数 $c_n = \langle\psi|\psi_n|\psi|\psi_n\rangle$ の絶対値の 2 乗 $|c_n|^2$ は、状態 $|\psi\rangle$ に含まれる $|\psi_n\rangle$ 成分の確率を与える。特に

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \tag{2.1.18}$$

である。この式はまた、(2.1.17) を

$$\psi(x) = \sum_n \langle\psi|\psi_n\rangle \psi_n(x) \qquad \text{for} \quad {}^\forall\psi(x) \tag{2.1.19}$$

と書いて得られる

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1 \tag{2.1.20}$$

からも得ることができる。実際

$$\begin{aligned}\sum_n |c_n|^2 = \sum_n {c_n}^* c_n &= \sum_n \langle\psi|\psi_n\rangle^* \langle\psi|\psi_n\rangle \\ &= \sum_n \langle\psi|\psi_n\rangle \langle\psi_n|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \\ &= 1\end{aligned} \tag{2.1.21}$$

が得られる。(2.1.20) を $\{\psi_n\}$ の完全性 (completeness) の関係という。この式の左から $\hat{H}$、あるいは右から $\hat{H}^\dagger$ をかけ (2.1.14) を使うことにより

$$\hat{H} = \sum_n |\psi_n\rangle \, E_n \, \langle\psi_n| \tag{2.1.22}$$

が得られる。これを $\hat{H}$ のスペクトル分解という。

もう一つの離散的固有値をもつ典型例は角運動量作用素である。周期的運動を記述する角運動量の固有値問題は、ハミルトン-ヤコビの運動方程式のところで既に見た様に循環変数に関する波動方程式であり、量子力学的波動関数は極座標系の角度変数 φ や θ で表される。その値のとり得る範囲は 2π や π で、明らかに有限領域である。角運動量の詳細な取り扱いはあとに譲ることにして、ここでは最も簡単な 3 次元空間の z-軸周りの回転運動を記述する Schrödinger 方程式を示すにとどめる。

$$\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} = m\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \qquad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{2.1.23}$$

ここに $\hat{p}_\varphi = (1/i)(\partial\varphi)$ は角運動量作用素、$\psi_m(\varphi) = (1/\sqrt{2\pi})e^{im\varphi}$ は正規直交化された角運動量波動関数である。これらを使って上式は

$$\hat{p}_\varphi \psi_m(\varphi) = m\psi_m(\varphi) \tag{2.1.24}$$

と書かれる。波動関数 ψ_m が 2π の周期関数であることにより、$\psi_m(\varphi + 2\pi) = \psi_m(\varphi)$ だから $e^{2\pi m} = 1$ すなわち $m =$ (整数) であることが導かれる。

離散的固有状態とそれらによる観測量の行列要素だけで量子力学を構成する方法は Schrödinger に先駆け Heisenberg によって見出された。これを Heisenberg の行列量子力学という。Schrödinger 方程式による波動量子力学と Heisenberg による行列量子力学はあとで見るように全く同じものであることは、すぐさま見出された。

ケプラー問題のところで既に見た様に $1/r$ 引力ポテンシャルの場合でも、エネルギーが正の時は運動は有界運動ではない。放物線運動や双曲線運動の場合には、正確には Schrödinger 方程式は固有値問題ではなくエネルギーは外部から与えられる単なる外部パラメータである。Rutherford 散乱の時のクーロン斥力問題の場合の様な量子力学的問題は量子力学的散乱問題と言われる。二体散乱問題の時ですら、有界の Ω を持った $L^2(\Omega)$ ヒルベルト空間だけでは充分ではなく、それを無限領域にまで拡張した高度な取り扱いが必要である。例えば (2.1.25) のハミルトニアンのスペクトル分解は

$$\hat{H} = \sum_n |\psi_n\rangle \, E_n \, \langle\psi_n| + \int_{\mathcal{E} \geqq 0} |\mathcal{E}\rangle \, \mathcal{E} \, \langle\mathcal{E}| \, d\mathcal{E} \tag{2.1.25}$$

のかたちを取る。ここに $E_n < 0$、また $|\mathcal{E}\rangle$ 等は連続スペクトル $\mathcal{H} \geqq 0$ のエネルギー固有状態で $\langle\psi_n|\mathcal{E}\rangle = 0$ 等が成り立っている。　三体、四体散乱問題の取り扱いでは、散乱状態を記述する波動関数の構造は種々の漸近波を境界条件として持つ甚だ複雑なものとなる。ここでは、そうした難しい問題には立ち入らないで、数学的には不完全だが物理的直観に基づいた分かりやすい方法を用いる事にする。その様な方法は Dirac によって与えられた。例えば (2.1.2) の平面波の直交関係は Dirac のデルタ関数 $\delta(x)$ を用いて

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p') \tag{2.1.26}$$

と表わされる。ket 状態 $|p\rangle$ の具体的な波動関数としての表示は左から bra 状態 $\langle x|$ を掛けて

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{2.1.27}$$

と表わされる。$\langle x|p\rangle^* = \langle p|x\rangle$ である。bra 状態と ket 状態を切り離した braket 表示はまた、抽象ベクトル表示ともいわれる。完全性の関係は (2.1.20) にならって

$$\begin{aligned} \int |x\rangle\langle x|\, dx = 1 \\ \int |p\rangle\langle p|\, dp = 1 \end{aligned} \tag{2.1.28}$$

と表わされる。これらを使って (2.1.26) は

$$\begin{aligned} \langle p|p'\rangle &= \int \langle p|x\rangle \, \langle x|p'\rangle \, dx \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} dx = \delta(p - p') \end{aligned} \tag{2.1.29}$$

等となる。

$L^2(\Omega)$ ヒルベルト空間は無限次元の線型空間であるから、有限次元のベクトル空間で成り立つ関係はほとんど類似のものがある。例えば、Schwartz の不等式

$$|(\psi, \varphi)| \leqq ||\psi||\ ||\varphi|| \tag{2.1.30}$$

はベクトルの内積に関する関係式 $|(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b})| \leqq |\boldsymbol{a}|\ |\boldsymbol{b}|$ に対応する。(2.1.30) を示すには、t を実数 z を複素数として

$$\begin{aligned} ||\psi + tz\varphi||^2 &= (\psi + tz\varphi, \psi + tz\varphi) \\ &= ||\psi||^2 + t[z(\psi, \varphi) + z^*(\varphi, \psi)] + t^2|z|^2||\varphi||^2 \geqq 0 \end{aligned} \tag{2.1.31}$$

を用いる。$(\psi, \varphi) = |(\psi, \varphi)|e^{i\gamma}$ として $z = e^{-i\gamma}$ とすると

$$||\psi||^2 + 2t|(\psi, \varphi)| + t^2||\varphi||^2 \geqq 0 \tag{2.1.32}$$

が任意の実数 t について成り立つ。そこで t の 2 次式としての判別式がゼロか負であることにより

$$D/4 = |(\psi, \varphi)|^2 - ||\psi||^2||\varphi||^2 \leqq 0 \tag{2.1.33}$$

が成り立つ。等号が成り立つのは $\psi + tz\varphi = 0$ の時、つまり ψ と φ が線形従属の場合だけである。また、エルミート作用素 $\bar{A}^\dagger = \bar{A}$ は複素エルミート行列 $A^\dagger = {}^tA^* = A$ に対応する。^{t} は行列の転置 (transpose) で行と列をひっくり返すことを示す。実行列の場合は対称行列 ${}^tS = S$ つまり $S_{n,m} = S_{m,n}$ である。同様に、複素ユニタリー行列 $U^\dagger U = UU^\dagger = 1$ に対してユニタリー作用素 $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = 1$ がある。ユニタリー作用素に対しては逆作用素が存在し、$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$ である。この行列や作用素は、正規直交基底をまた別の正規直交基底に変数する。すなわち (2.1.16) の正規直交基底 $\{|n\rangle\} = \{|\psi_n\rangle\}$ に対して $|\varphi_m\rangle$ を $|\varphi_m\rangle = \sum_n |\pi_n\rangle U_{n,m}$ で定義すると

$$\langle\varphi_m|\varphi_{m'}\rangle = \sum_n U_{n,m}{}^* U_{n,m'} = \delta_{m,m'} \tag{2.1.34}$$

となって $\{|\varphi_m\rangle\}$ も正規直交基底となる。従って、$\{|\psi_n\rangle\}$ と $\{|\varphi_m\rangle\}$ のはる部分空間は一致する。実ベクトル空間では、ユニタリー行列は直交行列 (回転行列) ${}^tOO = O^tO = 1$ に対応する。 演算子を引数とする指数関数も行列の場合と同じ様に定義できる。つまり

$$e^A = 1 + A + \frac{1}{2!}A^2 + \frac{1}{3!}A^3 + \cdots \tag{2.1.35}$$

よく使うユニタリー作用素は、$\hat{H}$ をハミルトニアン等のエルミート作用素として実数 t に対して定義された

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{2.1.36}$$

である。これはハミルトニアンのスペクトル分解 (2.1.25) を使って (2.1.35) に帰着できる。$(i\hat{H})^\dagger = -i\hat{H}$ を使うと $\hat{U}(t)$ がユニタリー作用素であることが導かれる。そこで (2.1.7) は

$$\Psi(x,t) = \hat{U}(t)\psi(x) \tag{2.1.37}$$

と表わされる。また、$\hat{U}(t - t_0) = \hat{U}(t)\hat{U}(-t_0)$ 等を使って

$$\Psi(x,t) = \hat{U}(t - t_0)\Psi(x, t_0) \tag{2.1.38}$$

を簡単に示すことができる。(2.1.38) はユニタリー変換 $\hat{U}(t,t_0)=\hat{U}(t-t_0)$ が t_0 における波動関数を t における波動関数に移すことを示しており、それゆえ $\hat{U}(t,t_0)$ は時間推進の作用素 (time evolution operator) と呼ばれる。$\hat{U}(t)$ を用いて、波動関数の時間依存性を作用素の方に移すことができる。まずハミルトニアン $\hat{H}$ に対しては $\hat{H}\hat{U}(t)=\hat{U}(t)\hat{H}$ であることにより

$$\hat{U}(t)^{-1}\hat{H}\hat{U}(t)=\hat{H} \tag{2.1.39}$$

は時間に依存しない作用素である。(今ハミルトニアンは時間に陽に依存しないと仮定している。) しかしながら、一般の線形作用素は $\hat{H}$ とは交換可能ではないから、こうはならない。今 $\hat{A}$ を観測量の線形エルミート作用素として、時間に陽に依存しないとする。状態 $\psi(t)$ による期待値は

$$\bar{A}_t=\left\langle\psi(t)\middle|\hat{A}\middle|\psi(t)\right\rangle \tag{2.1.40}$$

で与えられる。ここで $t_0=0$ とした (2.1.38) を使うと

$$\bar{A}(t)=\left\langle\psi(0)\middle|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\middle|\psi(0)\right\rangle \tag{2.1.41}$$

が得られる。そこで、時間に依存する作用素 $\hat{A}(t)$ を

$$\hat{A}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}=\hat{U}(t)^{-1}\hat{A}\hat{U}(t) \tag{2.1.42}$$

で定義すると

$$\bar{A}_t=\left\langle\psi(0)\middle|\hat{A}(t)\middle|\psi(0)\right\rangle \tag{2.1.43}$$

が得られる。(2.1.40) と (2.1.43) を比べると時間依存性が波動関数から作用素の方に移っている事がわかる。(2.1.42) を Heisenberg 表示の operator という。(これに対して、時間に依存しない元の operator $\hat{A}$ を Schrödinger 表示の operator という。) (2.1.42) を時間で微分すると

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt}=\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}\hat{A}(t)-\hat{A}(t)\hat{H}\right] \tag{2.1.44}$$

となるが、ここで $\hat{A}$ は時間に陽には依存していないと仮定している。ここで、二つの線形作用素 $\hat{f},\hat{g}$ に対して交換子 (commutator) を

$$\left[\hat{f},\hat{g}\right]=\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f} \tag{2.1.45}$$

で定義する。これは古典力学のハミルトン形式における Poisson 括弧に対応する。交換子がゼロの時二つの作用素は可換、ゼロでない時非可換といい、これらを作用素 $\hat{f}$ と $\hat{g}$ の

交換関係 (commutation relation) という。交換子は Poisson 括弧と同様な次の関係式を満たす。一般に座標や時間に依存しない作用素以外の (複素) 定数を c-number (classical number) といって $a, b, c, \cdots$ 等で表わす。作用素と c-number、更に作用素とその自分自身は常に可換である。

$$
\begin{aligned}
&\left[\hat{f}, \hat{g}\right] = -\left[\hat{g}, \hat{f}\right] \qquad \text{(反対称性)} \\
&\left[a\hat{f} + b\hat{g}, \hat{h}\right] = a\left[\hat{f}, \hat{h}\right] + b\left[\hat{g}, \hat{h}\right] \qquad \text{(線形性)} \\
&\left[\hat{f}\hat{g}, \hat{h}\right] = \left[\hat{f}, \hat{h}\right]\hat{g} + \hat{f}\left[\hat{g}, \hat{h}\right] \\
&\left[\left[\hat{f}, \hat{g}\right], \hat{h}\right] + \left[\left[\hat{g}, \hat{h}\right], \hat{f}\right] + \left[\left[\hat{h}, \hat{f}\right], \hat{g}\right] = 0 \qquad \text{(Jacobi 恒等式)}
\end{aligned}
\tag{2.1.46}
$$

これらは全て、定義式 (2.1.45) から簡単に証明される。互いに共役な正準変数である運動量と座標の作用素 $\hat{p}$ と x は交換関係

$$
[\hat{p}, \hat{p}] = 0, \quad [x, x] = 0, \quad [\hat{p}, x] = \frac{\hbar}{i} \tag{2.1.47}
$$

を満たす。これを正準交換関係という。交換子を使って (2.1.44) は

$$
\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{h}\left[\hat{H}, \hat{A}(t)\right] \tag{2.1.48}
$$

と表わされる。これまで、波動関数や作用素の時間依存性が (2.1.36) のタイプだけのものを考えてきたが、(2.1.40) の $\hat{A}$ が陽に時間に依存する場合も存在する。この場合には、右辺に時間についての偏微分が加わる。

$$
\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{h}\left[\hat{H}, \hat{A}(t)\right] + \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right)(t) \tag{2.1.49}
$$

一般には、これを Heisenberg の運動方程式といっている。特別の場合として $\hat{A} = \hat{p} = (\hbar/i)(\partial/\partial x)$ や $\hat{A} = \hat{x} = x$ とすると、ハミルトニアンの kinetic energy term は $\hat{p}$ と可換であり potential energy term $U(x)$ は x と可換であることにより

$$
\begin{aligned}
\frac{d\hat{x}(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{x}(t)\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hat{p}(t)^2}{2m}, \hat{x}(t)\right] \\
\frac{d\hat{p}(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{p}(t)\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{U}(t), \hat{p}(t)\right]
\end{aligned}
\tag{2.1.50}
$$

が得られる。ここに $\hat{U}(t) = e^{(i/\hbar)Ht}U(x)e^{-(i/\hbar)Ht}$ である。一般に $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ を Schrödinger 表示の operator として $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$ とすると Heisenberg 表示の operator

も同じ交換関係を満たす。つまり

$$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{C}\Longleftrightarrow[\hat{A}(t),\hat{B}(t)]=\hat{C}(t) \tag{2.1.51}$$

が成り立つ。これは、両辺の左右から $\hat{U}(-t)$ と $\hat{U}(t)$ を掛けることによって簡単に示せる。特に正準交換関係 (2.1.47) は $\hat{C}=$ c-number $=\hat{C}(t)$ より、Heisenberg 表示でもそのまま成り立つ。つまり

$$[\hat{p}(t),\hat{p}(t)]=0,\quad[\hat{x}(t),\hat{x}(t)]=0,\quad[\hat{p}(t),\hat{x}(t)]=\frac{\hbar}{i} \tag{2.1.52}$$

が成り立つ。(2.1.50) の右辺二番目の式を導くには、まず $\hat{H}=\hat{H}(t)$ を用いて kinetic energy term と potential energy term に分け、それぞれについて (2.1.51) を使う。更に (2.1.52) と (2.1.46) を使って

$$\begin{aligned}
&\left[\frac{\hat{p}(t)^2}{2m},\hat{x}(t)\right]=\frac{1}{2m}\left[\hat{p}(t)\left[\hat{p}(t),\hat{x}(t)\right]+\left[\hat{p}(t),\hat{x}(t)\right]\hat{p}(t)\right]\\
&=\frac{\hbar}{im}\hat{p}(t)\\
&\left[\hat{U}(t),\hat{p}(t)\right]=e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\left[U(x),\hat{p}\right]e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}=-\frac{\hbar}{i}e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\frac{\partial U(x)}{\partial x}e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\\
&=i\hbar\left(\frac{\partial U(x)}{\partial x}\right)(t)
\end{aligned} \tag{2.1.53}$$

が得られるから、結局

$$\begin{aligned}
\frac{d\hat{x}(t)}{dt}&=\frac{\hat{p}(t)}{m}\\
\frac{d\hat{p}(t)}{dt}&=-\left(\frac{\partial U(x)}{\partial x}\right)(t)
\end{aligned} \tag{2.1.54}$$

が得られる。これは古典力学におけるニュートン方程式と形式的に同じである。

正方行列 A,B について関係式

$$e^BAe^{-B}=A+[B,A]+\frac{1}{2!}[B,[B,A]+\cdots \tag{2.1.55}$$

が成り立つ。同様にして線形作用素 $\hat{A},\hat{B}$ についても

$$e^{\hat{B}}\hat{A}e^{-\hat{B}}=\hat{A}+\left[\hat{B},\hat{A}\right]+\frac{1}{2!}\left[\hat{B},\left[\hat{B},\hat{A}\right]\right]+\cdots \tag{2.1.56}$$

が成り立つ。これらを証明するには $F(\lambda)=e^{\lambda\hat{B}}\hat{A}e^{-\lambda\hat{B}}$ を考え、λ について Maclaurin 展開をしてそのあと $\lambda=1$ とおく。 (2.1.55) や (2.1.56) を Hausdorff の公式という。こ

れを使うと

$$\begin{aligned}\hat{A}(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\ &= \mathrm{A} + \frac{it}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{A}\right] + \frac{1}{2!}\left(\frac{it}{\hbar}\right)^2\left[\hat{H},\left[\hat{H},\hat{A}\right]\right] + \cdots \end{aligned} \tag{2.1.57}$$

が得られる。一般には右辺の交換子を全て計算することは容易ではない。しかし $\hat{A}$ と $\hat{H}$ との交換子を何回か取ると c-number になる場合には、右辺の項は有限個にとどまる。簡単な例として $\hat{H} = \hat{H}_0 = \hat{p}^2/(2m)$ の自由運動の場合を考える。この場合は容易に

$$\begin{aligned}\hat{x}(t) &= x + \frac{\hat{p}}{m}t \\ \hat{p}(t) &= \mathrm{p}\end{aligned} \tag{2.1.58}$$

が得られる。

2.2 Heisenberg の不確定性原理

物理量の本質が線形エルミート作用素であるという量子力学の原則は、運動量と座標に見られる様に正準共役量の非可換性 (2.1.47) に結びついていて、それは物理量の観測の問題に深く関わっている。既に何回か取り上げた様に、微視の世界では粒子としての運動はエネルギー領域によっては波としての性格を併せ持ち、光が波と光量子としての二面性を持つことと対応している。例えば、可視光線は波長数千オングストローム (Å) の電磁波であるから、これを用いて 10^{-5} 以下の大きさを持つ電子や陽子の位置を正確に測定することは出来ない。正弦波の位相 $kr = 2\pi$ から決まる $r = 2\pi/k = \lambda$ が光で物質を見ることができる大きさの限界である。この位相にプランク定数 $\hbar = h/(2\pi)$ を掛けて $p = \hbar k$ とすると $pr = 2\pi\hbar = h$ となって $\lambda = h/p$ が物質波の de Broglie 波長に対応することがわかる。

以前電磁波について学んだ時に、単色光は信号を伝えることはできないということに注意した。信号を伝えるためには、いくつかの周波数の電磁波を重ね合わせていわゆる「波束」を作らなければならない。例えば、図 1 の様な周波数分布 $f(\omega)$ について単色光を重ね合わせて得られる電場の波束を考えよう。ここに $\Delta\omega \ll \omega_0$ と仮定する。

$$\begin{aligned}E(x,t) &= \int f(\omega)e^{i(kx-\omega t)}d\omega \\ &= E_0\int_{\omega_0-\Delta\omega/2}^{\omega_0+\Delta\omega/2} e^{i(kx-\omega t)}d\omega\end{aligned} \tag{2.2.1}$$

一般に振動数 ω は波数 k の関数であり、$\omega = \omega(k)$ を分散関係という。真空中では $\omega = ck$ (c は光速) であるが、物質中ではさまざまな関係を持つ。分散関係を逆に解き $k = k(\omega)$ を ω_0 の周りで展開して 1 次までとると

$$\begin{aligned} k &= k(\omega_0) + \left(\frac{dk(\omega)}{d\omega}\right)_{\omega_0} (\omega - \omega_0) \\ &= k_0 + \frac{1}{u}(\omega - \omega_0) \end{aligned} \tag{2.2.2}$$

ここに $k_0 = k(\omega_0)$ で $v = \omega_0/k_0$ を位相速度

$$u = \left(\frac{d\omega(k)}{dk}\right)_{\omega_0} \tag{2.2.3}$$

を群速度という。これらを使うと (2.2.1) は

$$\begin{aligned} E(x,t) &= E_0 e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{\omega_0 - \Delta\omega/2}^{\omega_0 + \Delta\omega/2} e^{i(\frac{x}{u} - t)(\omega - \omega_0)} d\omega \\ &= E_0 e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta\omega/2}^{\Delta\omega/2} e^{i(\frac{x}{u} - t)\xi} d\xi \\ &= E_0 e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \frac{2}{\left(\frac{x}{u} - t\right)} \sin\left[\left(\frac{x}{u} - t\right)\frac{\Delta\omega}{2}\right] \\ &= E_0 e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \psi\left(\frac{x}{u} - t\right) \end{aligned} \tag{2.2.4}$$

と書ける。ここに

$$\psi(\xi) = \frac{2}{\xi}\sin\left[\xi\frac{\Delta\omega}{2}\right] \tag{2.2.5}$$

は $\psi(0) = \Delta\omega$ に peak を持ち $\xi_0 = 2\pi/(\Delta\omega)$ で $\psi(\xi_0) = 0$ となる波束である。(図 2 参照) この波束の中心は、群速度 u で x の方向に進んでいる。この波束の信号を感知するためには $\Delta t\Delta\omega/2 = \pi$ から決まる Δt 以上の時間が必要である。すなわち

$$\Delta t\Delta\omega \geqq 2\pi \tag{2.2.6}$$

が成り立つ。同様に、今度は t を固定して信号を感知するために最低限必要な距離 Δx を求めると、$\Delta x(1/u)\Delta\gamma/2 = \Delta x(dk(\omega)/d\omega)_{\omega_0}\Delta\omega/2 = \Delta x\Delta k/2 \geqq \pi$ より

$$\Delta x\Delta k \geqq 2\pi \tag{2.2.7}$$

が得られる。(2.2.6) - (2.2.7) に $\hbar = h/(2\pi)$ を掛けて $\hbar k = p$, $\hbar\omega = E$ によって物質波の関係式に移ると

$$\Delta x\Delta p \geqq h \quad , \quad \Delta t\Delta \geqq h \tag{2.2.8}$$

この式 (とあとで導く (2.2.12)) を Heisenberg の不確定性原理 (Heisenberg's uncertainty principle) という。

より正確な不確定性原理は Δx や Δp を絶対的揺らぎ (標準偏差) と考えることによって導かれる。すなわち、ある正規化された量子力学的状態 ψ に対して $\bar{x} = \langle\psi|x\rangle\,\psi$ として Δx 等を

$$(\Delta x)^2 = \left\langle\psi\middle|(x-\bar{x})^2\right\rangle\psi = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \tag{2.2.9}$$

で定義する。これは $\hat{x} = x$ のエルミート性を使うと

$$(\Delta x)^2 = \langle(x-\bar{x})\psi|(x-\bar{x})\psi\rangle = ||(x-\bar{x})\psi||^2 \tag{2.2.10}$$

とも書ける。同様な式が $\hat{p}$ に対しても書けるので、Schwartz の不等式 (2.1.30) から

$$\begin{aligned}
&(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = ||(x-\bar{x})\psi||^2||(\hat{p}-\bar{p})\psi||^2 \geqq \|\,((x-\bar{x})\psi,(\hat{p}-\bar{p})\psi)\,\|^2 \\
&\geqq \|\,\mathrm{Im}\,m\,((x-\bar{x})\psi,(\hat{p}-\bar{p})\psi)\,\|^2 \\
&= \frac{1}{4}\|\,((x-\bar{x})\psi,(\hat{p}-\bar{p})\psi) - ((\hat{p}-\bar{p})\psi,(x-\bar{x})\psi)\,\|^2 \\
&= \frac{1}{4}\|\,(\psi,[(x-\bar{x})(\hat{p}-\bar{p}) - (\hat{p}-\bar{p})(x-\bar{x})]\psi)\,\|^2 \\
&= \frac{1}{4}\|\,(\psi,[x,\hat{p}]\psi)\,\|^2
\end{aligned} \tag{2.2.11}$$

が得られる。ここで交換関係 $[x,\hat{p}] = i\hbar$ を使うと (2.2.11) は $(\hbar^2/4)(\psi,\psi) = (\hbar/2)^2$ となるから、結局

$$\Delta x\Delta p \geqq \frac{\hbar}{2} \tag{2.2.12}$$

となる。同様にして

$$\Delta t\Delta E \geqq \frac{\hbar}{2} \tag{2.2.13}$$

も導かれる。

(練習問題) 任意の実数 a について、状態 $|\Psi\rangle = [(x-\bar{x}) + ia(\hat{p}-\bar{p})]\,|\psi\rangle$ が常に $\langle\Psi|\Psi\rangle \geqq 0$ を満たすことを用いて (2.2.12) を導け。

(2.2.11) は x と $\hat{p}$ の様に正準共役量でなくても、一般に任意の線形エルミート作用素 $\hat{A}, \hat{B}$ に対して導かれる。すなわち

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geqq \frac{1}{4}\|\left(\psi,[\hat{A},\hat{B}]\psi\right)\|^2 \tag{2.2.14}$$

が成り立つ。これを Robertson の不等式という。特に $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が可換の時は、一つの状態 ψ の $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の標準偏差が同時にゼロとなることも可能である。そのためには ψ を $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有状態

$$\hat{A}\left|\psi\right\rangle = A\left|\psi\right\rangle \quad , \quad \hat{B}\left|\psi\right\rangle = B\left|\psi\right\rangle \tag{2.2.15}$$

にとればよい。ここで重要なことは (2.2.15) が $[\hat{A},\hat{B}] = 0$ の時だけ可能だということである。これは、次の様にして示すことができる。まず $\hat{A}$ の固有値問題

$$\hat{A}\left|n,i\right\rangle = A_n\left|n,i\right\rangle \tag{2.2.16}$$

を考える。ここに、i は縮退した固有状態 n を区別する量子数で、状態 $\left|n,i\right\rangle$ は

$$\left\langle n,i|n',i'\right\rangle = \delta_{n,n'}\delta_{i,i'} \tag{2.2.17}$$

と正規直交化されているものとする。また A_n は全て異なるとする。すなわち $A_n \neq A_{n'}$ for $n \neq n'$ この時 $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ の行列要素をとって、$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ かつ A_n =real を使うと

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{A}^\dagger n,i\middle| \hat{B}\left|n',i'\right\rangle\right. &= \left\langle n,i\middle|\hat{A}n',i'\right\rangle \\ (A_n - A_{n'})\left\langle n,i\middle|\hat{B}\right\rangle n',i' &= 0\end{aligned} \tag{2.2.18}$$

が得られる。そこで、もし $n \neq n'$ なら $\hat{B}$ の行列要素はゼロである。そこで

$$\left\langle n,i\middle|\hat{B}\right\rangle n',i' = \delta_{n,n'}\left\langle n,i\middle|\hat{B}\right\rangle n,i' \tag{2.2.19}$$

ここで $\left\langle n,i\middle|\hat{B}\right\rangle n,i' = \left\langle i\middle|\hat{B}\right\rangle i'$ はエルミート行列だから、ユニタリー行列 $U_{i,m}$ で対角化できる。

$$\left\langle i\middle|\hat{B}\right\rangle i' = \sum_m U_{i,m}B_m U_{i',m}{}^* \tag{2.2.20}$$

そこで

$$\left|n,m\right\rangle = \sum_i \left|n,i\right\rangle U_{i,m} \tag{2.2.21}$$

として $\sum_{i'} U_{i',m'}{}^* U_{i',m} = \delta_{m',m}$ を使うと

$$\begin{aligned}\hat{B}\left|n,m\right\rangle &= \sum_i \left|n,i\right\rangle \left\langle n,i\right| \hat{B} \sum_{i^prime} \left|n,i'\right\rangle U_{i',m} \\ &= \sum_{i,i'}\sum_{m'} \left|n,i\right\rangle U_{i,m'}B_{m'}U_{i',m'}{}^* U_{i',m} \\ &= \left|n,m\right\rangle B_m\end{aligned} \tag{2.2.22}$$

が得られる。結局 $|n,m\rangle$ は

$$\langle n,m|n',m'\rangle = \delta_{n,n'}\delta_{m,m'} \tag{2.2.23}$$

を満たす正規直交系で、$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有状態

$$\hat{A}\,|n,m\rangle = A_n\,|n,m\rangle \quad , \quad \hat{B}\,|n,m\rangle = B_m\,|n,m\rangle \tag{2.2.24}$$

である。可換なエルミート作用素の同時固有状態は量子力学的問題の多くの場面で現れる。例えば 3 次元角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}$ の大きさ $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ とある軸の方向への射影、例えば z-軸方向への成分 L_z は可換 $[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_z]$ なので同時対角化可能である。その状態を $|\ell,m\rangle$ とすると

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2\,|\ell,m\rangle = \ell(\ell+1)\,|\ell,m\rangle \quad , \quad \hat{L}_z\,|\ell,m\rangle = m\,|\ell,m\rangle \tag{2.2.25}$$

が成り立つ。更に、クーロン力等の 3 次元中心力場の問題ではハミルトニアンは角運動量作用素と可換 $[\hat{H},\hat{\boldsymbol{L}}]=0$ であるから

$$\hat{H}\,|n,\ell,m\rangle = E_n\,|n,\ell,m\rangle \tag{2.2.26}$$

等が成り立つ。これらについては以下の章で詳しく述べる。

(数学的補遺)

複素正方行列 N がユニタリー行列 U $(U^\dagger U = UU^\dagger = 1)$ で対角化可能なための条件は N が正規行列 $NN^\dagger = N^\dagger N$ すなわち N がそのエルミート共役 $N^\dagger$ と可換 $[N,N^\dagger]$ であることである。この時

$$A = \frac{1}{2}(N+N^\dagger) \quad , \quad B = \frac{1}{2i}(N-N^\dagger) \tag{2.2.27}$$

を作ると $[A,B]=0$ すなわち A と B は可換である。そこで、これらは共通のユニタリー行列で同時対角化可能である。また $N=A+iB, N^\dagger = A-iB$ より、いずれも同じユニタリー行列で対角化可能である。エルミート行列 $(H=H^\dagger)$ やユニタリー行列はいずれも正規行列である。

2.3 パウリの排他律

既にメンデレーエフの周期律表のところで学んだ様に、電子にはスピンという内部自由度があって一つの電子軌道にはスピンが上向きと下向きの二つの異なった量子状態が存在し得る。スピンはその言葉 のニュアンスとは全く異なり、剛体の古典的回転とは全く異

なる純粋に量子力学的な概念である。それは相対論的な電子の量子力学的方程式を考えることにより始めてその実態が明らかになった。(1928 年、Paul Dirac) 結論から先に言えば、電子はスピン $S = 1/2$ の値を持つフェルミ粒子 (fermion) で、一般に Dirac 粒子 (Dirac particle) と呼ばれる。スピンは角運動量の様に離散化されており、そのある軸 (例えば z-軸) の方向への射影値は $S_z = 1/2$ と $-1/2$ を持つ。スピン量子数には (角運動量に空間座標 $\boldsymbol{r}$ が対応する様に) スピン変数 (またはスピン座標) σ が存在して、それも離散化されており $\sigma = 1/2, -1/2$ である。従って、一つの電子の波動関数は (量子数を無視して) $\psi(\boldsymbol{r}, \sigma)$ と表わされる。$\boldsymbol{r}$ と σ をまとめて　ξ と書けば $\psi(\boldsymbol{r}, \sigma) = \psi(\xi)$ である。

微視の世界の状態概念は、同じ質量、電荷、スピン等を持つ同種粒子は互いに区別することが出来ないという大変重要な結論に導く。古典力学の成り立つ巨視的世界では、同種粒子でもそれぞれの粒子に番号をつけてそれらを時間の変化に沿って追跡していくことができる。しかし微視の世界では、ある時間に番号 1, 2, $\cdots$ をつけても次の瞬間にはそれらのエネルギーは全く違うエネルギーを持ちうるという不確定性関係からどの番号の粒子であったかを予想することはできない。位置と運動量についての不確定性についても同じことがいえる。その結果、同種粒子のそれぞれの個性は失われ一つの量子力学的状態として認識されるのみである。今簡単のために二つの同種粒子、例えば電子からなる系を考えその波動関数を $\psi(\xi_1, \xi_2)$ とする。二つの粒子番号を交換しても、全ての物理量は全く変わらないはずだから $e^{i\varphi}$ を単なる複素位相として $\psi(\xi_2, \xi_1) = e^{i\varphi}\psi(\xi_1, \xi_2)$ が成り立つ。更にもう一度粒子番号を交換して $\psi(\xi_1, \xi_2) = e^{i\varphi}\psi(\xi_2, \xi_1) = e^{2i\varphi}\psi(\xi_1, \xi_2)$ つまり $e^{2i\varphi} = 1$ が成りたつ。ここから $e^{i\varphi} = \pm 1$ であることがわかる。-1 の時は波動関数は二つの粒子番号の交換に対して反対称、$+1$ の時は対称である。電子の場合は反対称である。波動関数が対称であるか反対称であるかは粒子のスピンの値に関係している。スピンの値が 1/2, 3/2, $\cdots$ と半整数値の時波動関数は反対称でそのような粒子をフェルミ粒子 (fermion) と呼んでいる。一方スピンの値が 1, 2, $\cdots$ と整数値の時は波動関数が対称で、そのような粒子をボーズ粒子 (boson) と呼ぶ。これらの波動関数の対称性は 3 粒子以上の粒子数からなる多体系になった時にも厳密に成り立っている。すなわち n 個の同種粒子系を考えるとき、異なる粒子番号 $i \neq j$ に対して波動関数はそれらの粒子の交換についてフェルミ粒子の時反対称でボーズ粒子の時対称である。これらの対称性は波動関数の作る空間が線形空間であることにより、すべての粒子数の系に対して同じである。その訳は、線形空間の当然の結果として「重ね合わせの原理が」成り立たなければならないから

である。すなわち $i \neq j$ に対して

$$
\begin{aligned}
&\psi(\xi_1, \cdots, i, \cdots, j, \cdots, \xi_n) = -\psi(xi_1, \cdots, j, \cdots, i, \cdots, \xi_n) \\
&\qquad \text{for} \quad S = 1/2, 3/2, \cdots \quad (\text{fermi 粒子}) \\
&\psi(\xi_1, \cdots, i, \cdots, j, \cdots, \xi_n) = \psi(xi_1, \cdots, j, \cdots, i, \cdots, \xi_n) \\
&\qquad \text{for} \quad S = 1, 2, \cdots \quad (\text{bose 粒子})
\end{aligned} \tag{2.3.1}
$$

が成り立つ。

粒子間に相互作用がない時、あるいは弱くてその効果がほとんど無視できる時、多粒子系の波動関数を一粒子系状態の積 (あるいはその線型結合) で表わすことがしばしば良い近似となる。その様な近似を、一粒子近似あるいは一体場近似 (あるいは Hartree 近似) という。この時 n 粒子系の量子状態を A、その近似を $\{a_1, a_2, \cdots, a_n\}$ として (2.3.1) は

$$
\begin{aligned}
&\Psi_A(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n) = \mathcal{A}\{\psi_{a_1}(\xi_1), \psi_{a_2}(\xi_2), \cdots, \psi_{a_n}(\xi_n)\} \\
&\qquad \text{for} \quad \text{を } S = 1/2, 3/2, \cdots \quad (\text{fermi 粒子}) \\
&\Psi_A(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n) = \mathcal{S}\{\psi_{a_1}(\xi_1), \psi_{a_2}(\xi_2), \cdots, \psi_{a_n}(\xi_n)\} \\
&\qquad \text{for} \quad S = 1, 2, \cdots \quad (\text{bose 粒子})
\end{aligned} \tag{2.3.2}
$$

と表わされる。ここに $\mathcal{A}$ あるいは $\mathcal{S}$ は粒子番号 (あるいは量子数) の反対称化、あるいは対称化を表わす。特に反対称波動関数にたいしては

$$
\Psi_A(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_{a_1}(\xi_1) & \psi_{a_1}(\xi_2) & \cdots & \psi_{a_1}(\xi_n) \\ \psi_{a_2}(\xi_1) & \psi_{a_2}(\xi_2) & \cdots & \psi_{a_2}(\xi_n) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_{a_n}(\xi_1) & \psi_{a_n}(\xi_2) & \cdots & \psi_{a_n}(\xi_n) \end{vmatrix} \tag{2.3.3}
$$

と表わされ、これをスレーター行列 (Slater determinant) という。ここに、$1/\sqrt{n!}$ の因子は正規直交基底 $\{\psi_{a_i}(\xi)\}$ に対して全系の波動関数 Ψ_A を規格化するためのものである。例えば $n = 2$ の時は

$$
\begin{aligned}
&\Psi_A(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{a_1}(\xi_1) & \psi_{a_1}(\xi_2) \\ \psi_{a_2}(\xi_1) & \psi_{a_2}(\xi_2) \end{vmatrix} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{a_1}(\xi_1)\psi_{a_2}(\xi_2) - \psi_{a_2}(\xi_1)\psi_{a_1}(\xi_2)] \qquad \text{for} \quad S = 1/2, 3/2, \cdots \quad (\text{fermi 粒子}) \\
&\Psi_A(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{a_1}(\xi_1)\psi_{a_2}(\xi_2) + \psi_{a_2}(\xi_1)\psi_{a_1}(\xi_2)] \qquad \text{for} \quad S = 1, 2, \cdots \quad (\text{bose 粒子})
\end{aligned} \tag{2.3.4}
$$

である。

以上の結果は fermi 粒子に対しては二つの fermi 粒子が同一の一粒子状態を占めることとは出来ないことを示している。特に Slater 行列 (2.3.3) に対しては、この事は同じ量子数を持った行 $a_i = a_j$ がある場合には行列式はゼロである事に現われている。また $n=2$ の時の (2.3.1) で $\xi_1 = \xi_2 = \xi$ の時、fermi 粒子に対しては $\psi(\xi,\xi) = -\psi(xi,\xi) = 0$ である。これを fermi 粒子のパウリの排他律、あるいはパウリ原理 (Pauli exclusion principle) いう。(1925 年、W. E. Pauli)

スピン 1/2 の粒子が対称であるか反対称であるかは純粋に理論的に予言できるわけではない。歴史的にはメンデレーエフの周期律表から電子軌道の二重性が予想されたが、それを電子の二重状態に結びつけたのはパウリである。スピンという言葉はウーレンベックとゴーズミットによるが、それが粒子の回転とは無縁のもので純粋に量子力学的内部自由度であることはその後すぐに明らかにされた。空間回転に関する量子数の最小単位はプランク定数 $\hbar$ を単位として 1/2 であるが、そのことが空間回転のユニタリー変換群の既約表現と粒子対称性の間に密接な関係をもたらす事はその後の発展の示すところである。(E. Wigner, H. Weyl「群論と量子力学」参照)

2.4　スピンと統計性の関係

スピン半整数値をもつフェルミ粒子は、二つの同種粒子が単一の量子状態を占めることは出来ないという Pauli の排他律を満たす。一方スピン整数値をもつボーズ粒子には、その様な制限はなく一つの量子状態を幾つもの同種粒子が占めることが出来る。これらの性質を「スピンと統計性の関係」といって、量子統計力学や粒子の生成・消滅を扱う第二量子化という取り扱いでは大変重要な役割を演じる。フェルミ粒子の満たす統計性をフェルミ-デラック統計 (Fermi-Dirac statistics)、ボーズ粒子の満たす統計性をボーズ-アインシュタイン統計 (Bose-Einstein 統計) と言う。これらは後で見るように、熱力学的揺動の弱くなる極低温に近い温度での物質の状態の記述や光量子輻射等において顕著に現れてくる。温度の高い状態ではこれらの粒子の統計性の特徴は失われ、常温での理想気体に見られる様ないわゆる古典的ボルツマン統計に移行する。ここでは、ギブス分布のところで学んだ大性準集団の考え方を用いてフェルミ分布とボーズ分布 の分布関数を導く。

量子力学的確率分布 $w_{n,N}$ (1.6.24) と大正準集団の分配関数 $\Xi(\beta,\mu)$ (1.6.25) は、多体系の量子状態 n を各一粒子のエネルギー状態 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots$ の粒子占有数 $n_1, n_2, \cdots$ を用いて $n = (n_1, n_2, \cdots)$ とすると

$$\begin{aligned} N &= n_1 + n_2 + \cdots \\ E_{n,N} &= n_1\varepsilon_1 + n_2\varepsilon_2 + \cdots \end{aligned} \tag{2.4.1}$$

より

$$
\begin{aligned}
w_{n,N} &= Ae^{\beta(\mu N - E_n)} \\
&= Ae^{\beta\sum_i(\mu-\varepsilon_i)n_i} \\
&= A\prod_i\left(e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}\right)^{n_i} \\
\Xi(\beta,\mu) &= \sum_{n_1}\sum_{n_2}\cdots\prod_i\left(e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}\right)^{n_i} \\
&= \prod_i\sum_{n_i}\left(e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}\right)^{n_i} \\
&= \prod_i\Xi^i(\beta,\mu) \qquad (2.4.2)
\end{aligned}
$$

ここに

$$
\Xi^i(\beta,\mu) = \sum_{n_i}\left(e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}\right)^{n_i} \qquad (2.4.3)
$$

である。まずフェルミ粒子に対してはパウリ原理から $n_i = 0$ or 1 だけだから

$$
\begin{aligned}
\Xi^i(\beta,\mu) &= \sum_{n_i=0}^{1}\left(e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}\right)^{n_i} \\
&= 1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)} \qquad (2.4.4)
\end{aligned}
$$

となる。そこで粒子数の期待値 $\langle n_i|n_i\rangle$ は

$$
\begin{aligned}
\langle n_i|n_i\rangle &= \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\log\Xi^i(\beta,\mu) \\
&= \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\log\left[1+e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}\right] \\
&= \frac{1}{1+e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}} \qquad (2.4.5)
\end{aligned}
$$

となる。ここから $1 > \langle n_i|n_i\rangle > 0$ で、$\langle n_i|n_i\rangle$ は 1 より小さい値から 0 に変化する ε_i の単調減少関数であることがわかる。このことはパウリ原理による制限と呼応している。(2.4.5) をフェルミ分布という。系全体の粒子数は $N = \sum_i\langle n_i|n_i\rangle$ で与えられるから

$$
N = \sum_i\frac{1}{1+e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}} \qquad (2.4.6)
$$

である。この式は N と T が与えられた時、μ を与える関係を与えている。分配関数全体は (2.4.2) より

$$
\Xi(\beta,\mu) = \prod_i\Xi^i(\eta,\mu) = \prod_i\frac{1}{1+e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}} \qquad (2.4.7)
$$

である。次にボーズ粒子に対しては $n_i = 0, 1, 2, \cdots$ とすべて許されるから

$$\Xi^i(\beta,\mu) = \sum_{n_i=0}^{\infty}\left(e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}\right)^{n_i} = \frac{1}{1-e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}} \tag{2.4.8}$$

となる。ここで、$n_i = 0$ - ∞ の和が全ての $\varepsilon > 0$ に対して収束するためには $\mu < 0$ でなければならない。古典的ボルツマン分布に対しては μ は大きな負の値をもつ。これに対してフェルミ分布に対しては、μ の値は正にも負にもなり得る。粒子数の期待値 $\langle n_i|n_i\rangle$ はフェルミ粒子の場合と同様にして

$$\langle n_i|n_i\rangle = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\log\left[1-e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}\right] = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}-1} \tag{2.4.9}$$

となる。$\mu < 0$ であるので、$\varepsilon > 0$ に対して $\langle n_i|n_i\rangle > 0$ である。(2.4.9) をボーズ分布という。フェルミ分布もボーズ分布も、温度 kT に対して一粒子エネルギー ε_i が十分大きい時、すなわち $\varepsilon \gg kT$ の時にはいずれも古典的ボルツマン分布

$$\langle n_i|n_i\rangle \to n(\varepsilon) = e^{\beta(\mu-\varepsilon)} \tag{2.4.10}$$

に移行する。また粒子数保存の式は

$$N = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}-1} \tag{2.4.11}$$

となる。分配関数全体は今度は

$$\Xi(\beta,\mu) = \prod_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_b etai-\mu)}-1} \tag{2.4.12}$$

である。

2.5 素粒子の理想気体

一つの例として、スピン S の素粒子の作る体積 V、粒子数 N の理想気体を考える。理想気体の定義として粒子間の相互作用はないが、スピンと統計性の関係は粒子間に交換相互作用と呼ばれる特殊な相関を与える事になる。今素粒子の質量を m その運動エネル

ギーを $\varepsilon=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ とすると、準古典的量子状態の数は $g=2S+1$ をスピンの縮退自由度として

$$gd\tau = g\frac{dVdp_xdp_ydp_z}{(2\pi\hbar)^3} \tag{2.5.1}$$

となる。分布関数を空間、運動量空間について等方的と仮定して $d\tau$ を体積 V および運動量空間の角度について積分すると $dp_xdp_ydp_z = p^2dpd\Omega \rightarrow 4\pi p^2dp$ より $d\tau \rightarrow 4\pi V/(2\pi\hbar)^3p^2dp$ 更に $\varepsilon=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ により運動量の積分からエネルギーの積分に移ると $pdp=md\varepsilon$, $p=\sqrt{2m\varepsilon}$ より $p^2dp=2^{1/2}m^{3/2}\varepsilon^{1/2}d\varepsilon$ そこで、(2.5.1) に (2.4.5) ないしは (2.4.9) のフェルミ分布かボーズ分布の分布関数を掛けて体積 V と全運動量空間で積分すると

$$dN_\varepsilon = g\int\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}\pm 1}\frac{Vm^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^3}\varepsilon^{1/2}d\varepsilon \tag{2.5.2}$$

が得られる。以下、上の符号は fermion 下の符号は boson としてこれらを統一的に表わすこととする。(2.5.2) を全エネルギー $\varepsilon = 0$ - ∞ で積分すると系の粒子数 N が得られる。

$$\begin{aligned} N &= \int dN_\varepsilon \\ &= gVm^{\frac{3}{2}}\frac{1}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty\frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}\pm 1}d\varepsilon \end{aligned} \tag{2.5.3}$$

また全系のエネルギー E は

$$\begin{aligned} E &= \int \varepsilon dN_\varepsilon \\ &= gVm^{\frac{3}{2}}\frac{1}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty\frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}\pm 1}d\varepsilon \end{aligned} \tag{2.5.4}$$

として得られる。大正準集団の分配関数 $\Xi(\beta,\mu)=\prod_i \Xi^i(\beta,\mu)$ とそのグランドポテンシャル Ω は (1.6.28) から

$$\Omega = \Omega(T,V,\mu) = -kT\log\Xi(\beta,\mu) = -kT\sum_i\log\Xi^i(\beta,\mu) \tag{2.5.5}$$

であることにより、(2.4.4) と (2.4.8) をまとめて書いて (2.5.2) を使うと

$$\begin{aligned} \Omega &= \mp kT\sum_i\log\left(1\pm e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}\right) \\ &= \mp kT\int\log\left(1\pm e^{\beta(\mu-\varepsilon)}\right)dN_\varepsilon \\ &= \mp kTgVm^{\frac{3}{2}}\frac{1}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty\varepsilon^{1/2}\log\left(1\pm e^{\beta(\mu-\varepsilon)}\right)d\varepsilon \end{aligned} \tag{2.5.6}$$

ここで部分積分して $(2/3)\varepsilon^{3/2}\log(\cdots)|_0^\infty = 0$ より

$$\begin{aligned}\Omega &= -\mp\frac{2}{3}kTgVm^{\frac{3}{2}}\frac{1}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \varepsilon^{\frac{3}{2}}\pm(-\beta)\frac{e^{\beta(\mu-\varepsilon)}}{1\pm e^{\beta(\mu-\varepsilon)}}d\varepsilon \\ &= -\frac{2}{3}gVm^{\frac{3}{2}}\frac{1}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}\pm 1}d\varepsilon \end{aligned} \tag{2.5.7}$$

が得られる。これを (2.5.4) の E の表式と比べると

$$\Omega = -\frac{2}{3}E \tag{2.5.8}$$

であることがわかる。ここで更にスケール変換から導かれる $\Omega = -PV$ であることを使うと

$$PV = \frac{2}{3}E \tag{2.5.9}$$

が得られる。Boltzmann 理想気体では $E = (3/2)kNT = (3/2)nRT$ であることを用いると、通常の理想気体の状態方程式 $PV = nRT$ が得られる。ここに $n = N/N_A$ は理想気体のモル数である。

(2.5.7) で ε の積分から $z = \beta\varepsilon$ の積分に移ると

$$\Omega = -\frac{2}{3}gVm^{\frac{3}{2}}(kT)^{\frac{5}{2}}\frac{1}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{z^{\frac{3}{2}}}{e^{z-\frac{\mu}{kT}}\pm 1}dz \tag{2.5.10}$$

と書ける。そこで $f(x)$ をある関数として

$$\Omega(T,V,\mu) = VT^{\frac{5}{2}}f(\mu/T) \tag{2.5.11}$$

と書ける。更に $\Omega = -PV$ を使うと

$$P = -T^{\frac{5}{2}}f(\mu/T) \tag{2.5.12}$$

が得られる。(2.5.11) の $\Omega = \Omega(T,V,\mu)$ を用いると (1.6.35) から S, P, N が求まる。す

なわち

$$
\begin{aligned}
S &= -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu} \\
&= -\frac{5}{2}VT^{\frac{3}{2}}f(\mu/T) + VT^{\frac{1}{2}}\mu f'(\mu/T) \\
P &= -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial V}\right)_{T,\mu} \\
&= -T^{\frac{5}{2}}f(\mu/T) \\
N &= -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} \\
&= -VT^{\frac{3}{2}}f'(\mu/T)
\end{aligned} \tag{2.5.13}
$$

となる。P の結果は (2.5.12) と同じである。また、これらと (2.5.9) から

$$
E = \frac{3}{2}PV = -\frac{3}{2}VT^{\frac{5}{2}}f(\mu/T) \tag{2.5.14}
$$

これらを組み合わせると $E = TS - PV + \mu N$ が再び確かめられる。そこで $F = E - TS = -PV + \mu N$ かつ $\Omega = F - \mu N = -PV$ である。

3 Schrödinger 方程式

3.1 流れの密度と確率の保存

既に「量子力学の基本的概念」のところで述べた様に量子力学の基礎方程式は Schrödinger 方程式である。これは古典力学 (あるいはニュートン力学) におけるニュートンの第二法則に対応する。我々の住む三次元空間では、これは

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t) = H\psi(\boldsymbol{x},t) \tag{3.1.1}
$$

以下では物理量は全て量子力学的演算子と考えて、演算子を表わす hat ˆ はすべて省略する。この様にしても、それが operator であるか c-number であるかは文脈から明らかである。例えば (3.1.1) ではハミルトニアン H は $H = H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{x}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + U(\boldsymbol{x})$ で、$\boldsymbol{p}$ は運動量 operator $\boldsymbol{p} = (\hbar/i)\nabla$ である。$\boldsymbol{p},\boldsymbol{x}$ の各成分は次の交換関係 (commutation relation) を満たす。

$$
[p_i, p_j] = 0 \quad , \quad [x_i, x_j] = 0 \quad , \quad [p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i}\delta_{i,j} \tag{3.1.2}
$$

また Heisenberg の不確定性原理 (uncertainty principle) は各成分ごとに

$$\Delta p_i \Delta x_i \gtrsim \frac{\hbar}{2} \quad , \quad \Delta E \Delta t \gtrsim \frac{\hbar}{2} \tag{3.1.3}$$

が成り立つ。

$\rho = |\psi(\boldsymbol{x}, t)|^2$ は粒子の存在密度であることから、確率の保存を表わす流れの密度と連続の式を導くことが出来る。まず (3.1.1) に ψ^* を掛け、そこから (3.1.1) の複素共役をとって ψ を掛けたものを引くとポテンシャル $U(\boldsymbol{x}, t) = real$ として

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(\boldsymbol{x}, t)|^2 &= \psi(\boldsymbol{x}, t)^* H \psi(\boldsymbol{x}, t) - \psi(\boldsymbol{x}, t) H^* \psi(\boldsymbol{x}, t)^* \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi(\boldsymbol{x}, t)^* \nabla^2 \psi(\boldsymbol{x}, t) - \psi(\boldsymbol{x}, t) \nabla^2 \psi(\boldsymbol{x}, t)^*\right] \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot \left[\psi(\boldsymbol{x}, t)^* \nabla \psi(\boldsymbol{x}, t) - \psi(\boldsymbol{x}, t) \nabla \psi(\boldsymbol{x}, t)^*\right]
\end{aligned} \tag{3.1.4}$$

が得られる。これをある有限体積 V で積分してガウスの定理を用いると

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}|\psi(\boldsymbol{x}, t)|^2 d\boldsymbol{x} = -\frac{\hbar}{2mi} \int_S \left[\psi(\boldsymbol{x}, t)^* \nabla \psi(\boldsymbol{x}, t) - \psi(\boldsymbol{x}, t) \nabla \psi(\boldsymbol{x}, t)^*\right] \cdot d\boldsymbol{S} \tag{3.1.5}$$

となる。ここに、粒子の存在密度 ρ と流れの密度 $\boldsymbol{j}$ を

$$\begin{aligned}
\rho &= |\Psi(x, t)|^2 \\
\boldsymbol{j} &= \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi(\boldsymbol{x}, t)^* \nabla \psi(\boldsymbol{x}, t) - \psi(\boldsymbol{x}, t) \nabla \psi(\boldsymbol{x}, t)^*\right] \\
&= \frac{1}{2m}\left[\psi(\boldsymbol{x}, t)^* \boldsymbol{p} \psi(\boldsymbol{x}, t) + (\boldsymbol{p} \psi(\boldsymbol{x}, t))^* \psi(\boldsymbol{x}, t)\right]
\end{aligned} \tag{3.1.6}$$

で定義すると

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho d\boldsymbol{x} = -\int \boldsymbol{j} \cdot d\boldsymbol{S} \tag{3.1.7}$$

が得られる。ここでもう一度ガウスの定理を用いて表面積分を体積積分に移すと

$$\int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} \rho d\boldsymbol{x} + \mathrm{div} \boldsymbol{j}\right] d\boldsymbol{x} = 0 \tag{3.1.8}$$

ここに V は任意だから

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \mathrm{div} \boldsymbol{j} = 0 \tag{3.1.9}$$

が得られる。この式は、ポテンシャルが実数で虚数部を含まない場合粒子の存在確率は保存されることを示す。例として三次元の平面波

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{v} e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\boldsymbol{x} - Et)} \tag{3.1.10}$$

を考える。ρ と $\boldsymbol{j}$ は $\rho = 1/v$, $\boldsymbol{j} = \boldsymbol{p}/(mv) = \boldsymbol{v}/v = \hat{\boldsymbol{v}}$ ($\boldsymbol{v}$ 方向の単位ベクトル) であり、古典的な関係式 $\boldsymbol{j} = \rho\boldsymbol{v}$ が成り立っている。(3.1.10) は粒子の進行方向 $\boldsymbol{j}$ に垂直な単位平面を単位時間あたりに通過する粒子数が 1 個である様に規格化された平面波であり、$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{n}_v$ は波の進行方向を示している。

ポテンシャル $U(\boldsymbol{x})$ が時間依存性を含まない時、偏微分方程式 (3.1.1) の解 $\psi(\boldsymbol{x}, t)$ はいわゆる変数分離の方法によって時間部分と空間部分を分離することが出来る。$\psi(\boldsymbol{x}, t)$ を $\Psi(\boldsymbol{x}, t)$ と書いて、新しく $\Psi(\boldsymbol{x}, t) = \varphi(t)\psi(\boldsymbol{x})$ とおくと

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t)\psi(\boldsymbol{x}) = H\varphi(t)\psi(\boldsymbol{x}) \tag{3.1.11}$$

これを $\varphi(t)\psi(\boldsymbol{x})$ で割ると

$$i\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) = \frac{1}{\psi(\boldsymbol{x})}H\psi(\boldsymbol{x}) \tag{3.1.12}$$

ここに $H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + U(\boldsymbol{x})$ が t を含まないことにより、左辺は t だけの関数、右辺は $\boldsymbol{x}$ だけの関数であることからこれは単なる定数である。これを E と書くと E は保存されるエネルギーの意味をもち、(3.1.1) は二つの式

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) &= E\varphi(t) \\ H\phi(\boldsymbol{x}) &= E\phi(\boldsymbol{x}) \end{aligned} \tag{3.1.13}$$

に分解される。最初の式は $\varphi(t) \propto e^{(i/\hbar)Et}$ と解けるから、結局ポテンシャルが時間依存性を含まないときはエネルギー E は保存され (3.1.1) の解は

$$\phi(\boldsymbol{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}Et}\psi(\boldsymbol{x}) \tag{3.1.14}$$

となる。(3.1.12) の二番目の式 $H\phi(\boldsymbol{x}) = E\phi(\boldsymbol{x})$ を時間に依存しない Schrödinger 方程式 (time-independent Schrödinger equation) という。(非相対論的) Schrödinger 方程式といえば、普通時間に依存しない Schrödinger 方程式をさす。三次元座標 $\boldsymbol{x} = (x, y, z) = (x_1, x_2, x_3)$ は、問題に応じて最も解法が簡単になる様に取ればよい。例えばクーロン力ポテンシャル等の中心力問題では三次元極座標がしばしば用いられる。この時、三次元座標 $\boldsymbol{x}$ を $\boldsymbol{r} = (r, \theta, \varphi)$ と同型部分 $r = |\boldsymbol{r}|$ と二つの角度部分 θ, φ に書くとポテンシャル部分は $U(r)$ となる。三次元直交座標 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{x} = (x, y, z)$ との関係は (図 1 参照)

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \tag{3.1.15}$$

となる。あとで練習問題で導く様に、非相対論的シュレーディンガー方程式の運動エネルギー項に現れる 3 次元ラプラシアンは極座標では

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2} \tag{3.1.16}$$

という風に表されるここに $\boldsymbol{L}$ は $\hbar$ で測った角運動量演算子 $\boldsymbol{L} = \frac{1}{\hbar}[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}]$ で、$\boldsymbol{L}^2 = (\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{L})$ は極座標では

$$\boldsymbol{L}^2 = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{3.1.17}$$

と表わされる。(練習問題-1 参照) 角運動量代数については以下の項で詳しく議論する。三次元極座標における質量 m を持つ粒子のポテンシャル問題のシュレーディンガー方程式は、結局

$$\left[-\frac{\hbar^2}{m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}\right\} + U(r,\theta,\varphi)\right]\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi) \tag{3.1.18}$$

となる。

図 1 : 三次元極座標

(練習問題-1) 三次元極座標における角運動量演算子とラプラシアン: (3.1.16), (3.1.17) を求めよ。

(略解)

三次元極座標の互いに直交する単位ベクト $\boldsymbol{e}_r, \boldsymbol{e}_\theta, \boldsymbol{e}_\varphi$ (図 1 参照) をユークリッド直交ベクトル表示で表わすと、まず $\boldsymbol{r} = r\boldsymbol{e}_r$ と (3.1.15) より

$$\boldsymbol{e}_r = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix} \tag{3.1.19}$$

と書ける。ここでは、三次元ユークリッド成分を縦向きの三次元ベクトルで表わすこととする。$\boldsymbol{e}_\theta$ は (3.1.19) で $\theta \to \theta + \pi/2$ として、また $\boldsymbol{e}_\varphi$ は $\boldsymbol{e}_\varphi = [\boldsymbol{e}_r \times \boldsymbol{e}_\theta]$ (右手系をとる) として求めることが出来る。すなわち

$$\boldsymbol{e}_\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\varphi \\ \cos\theta\sin\varphi \\ -\sin\theta \end{pmatrix} \tag{3.1.20}$$

かつ

$$\boldsymbol{e}_\varphi = [\boldsymbol{e}_r \times \boldsymbol{e}_\theta] = \begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.1.21}$$

となる。三次元極座標の 3 つの単位ベクトル $\boldsymbol{e}_r, \boldsymbol{e}_\theta, \boldsymbol{e}_\varphi$ は互いに直交する ($\boldsymbol{e}_r \cdot \boldsymbol{e}_\theta = \boldsymbol{e}_r \cdot \boldsymbol{e}_\varphi = \boldsymbol{e}_\theta \cdot \boldsymbol{e}_\varphi = 0$) が、絶対静止座標系である直交座標系の単位ベクトル $\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z$ と違って極座標の位置に依存する。従って、$\boldsymbol{e}_r, \boldsymbol{e}_\theta, \boldsymbol{e}_\varphi$ を r, θ, φ で偏微分すると一般にはゼロではない。直接微分することにより、ゼロでない成分は次の五つであることが分かる。これらは単位ベクトルを微分した時のルールに従って、ゼロでない場合はその単位ベクトル以外の二つの単位ベクトルで表わすことが出来る。つまり

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \theta} = \boldsymbol{e}_\theta \quad , \quad \frac{\partial \boldsymbol{e}_\theta}{\partial \theta} = \boldsymbol{e}_r \\ &\frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \varphi} = \sin\theta \boldsymbol{e}_\varphi \quad , \quad \frac{\partial \boldsymbol{e}_\theta}{\partial \varphi} = \cos\theta \boldsymbol{e}_\varphi \\ &\frac{\partial \boldsymbol{e}_\varphi}{\partial \varphi} = \sin\theta \boldsymbol{e}_r + \cos\theta \boldsymbol{e}_\theta \end{aligned} \tag{3.1.22}$$

となる。 また図 1 から明らかな様に $\boldsymbol{e}_r, \boldsymbol{e}_\theta, \boldsymbol{e}_\varphi$ 方向への微小線分要素はそれぞれ $dr, rd\theta, r\sin\theta d\varphi$ なので、三次元極座標における nabla (gradient) は

$$\nabla = \boldsymbol{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \boldsymbol{e}_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{3.1.23}$$

と表わされる。そこで極座標における三次元ラプラシアン $\Delta = \nabla \cdot \nabla$ は (3.1.22) を使って丹念に計算すると

$$\begin{aligned} \Delta &= \nabla \cdot \nabla \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left[\left(\frac{\partial}{\partial \theta}\right)^2 + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\right] + \left(\frac{1}{r\sin\theta}\right)^2 \left(\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)^2 \\ &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \left(\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\right)\left(\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)^2 \end{aligned} \tag{3.1.24}$$

が得られる。

三次元極座標における角運動量演算子は、その定義 $\boldsymbol{L} = \frac{1}{\hbar}[\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}] = \frac{1}{i}[\boldsymbol{r} \times \nabla]$ から求めることが出来る。$\boldsymbol{r} = r\boldsymbol{e}_r$ と (3.1.23) とを用いて $[\boldsymbol{e}_r \times \boldsymbol{e}_\theta] = \boldsymbol{e}_\varphi$, $[\boldsymbol{e}_\theta \times \boldsymbol{e}_\varphi] = \boldsymbol{e}_r$,

$[\boldsymbol{e}_\varphi \times \boldsymbol{e}_r] = \boldsymbol{e}_\theta$ を用いると

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{L} &= \frac{1}{i}[\boldsymbol{r} \times \nabla] \\
&= \frac{1}{i}\left[r\boldsymbol{e}_r \times \left(\boldsymbol{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \boldsymbol{e}_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\right] \\
&= \frac{1}{i}\left(\boldsymbol{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right) \qquad (3.1.25)
\end{aligned}
$$

となり角度変数だけに依存することが分かる。そこで (3.1.20), (3.1.21) を用いると

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{L} &= \frac{1}{i}\begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{i}\begin{pmatrix} y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \\ z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \\ x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{i}\begin{pmatrix} -\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \cos\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \qquad (3.1.26)
\end{aligned}
$$

であることが分かる。ここから $L_\pm = L_x \pm iL_y$ を作ると

$$
\begin{aligned}
L_+ &= L_x + iL_y = e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial \varphi}\right) \\
L_- &= L_x - iL_y = e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)
\end{aligned} \qquad (3.1.27)
$$

更に $(L_+)^\dagger = L_-$ であることが分かる。また (3.1.25) から $\boldsymbol{L}^2 = (\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{L})$ を計算すると、ラプラシアンの時と同様にして (3.1.22) を使って

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{L}^2 &= -\left(\boldsymbol{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\cdot\left(\boldsymbol{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right) \\
&= -\left[\left(\frac{\partial}{\partial \theta}\right)^2 + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta} + \left(\frac{1}{\sin\theta}\right)^2\left(\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)^2\right] \\
&= -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)^2\right] \qquad (3.1.28)
\end{aligned}
$$

となる。これが (3.1.17) の結果である。この式と (3.1.24) を組み合わせると (3.1.16) が得られる。(証明終わり)

3.2　運動の生成子

最後に、外場のない一様な空間を運動する多粒子系が持つ保存量に関係した運動の生成子 (generator) について述べる。まずはじめに「並進運動」の generator は全運動量演算子

$$\hat{\boldsymbol{P}} = \sum_\alpha \hat{\boldsymbol{p}}_\alpha = \frac{\hbar}{i}\sum_\alpha \nabla_\alpha = \frac{\hbar}{i}\sum_\alpha \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_\alpha} \tag{3.2.1}$$

に関係している。ここに α は粒子の識別番号である。有限の並進運動の代わりに無限小並進運動 $\delta\boldsymbol{r}$ を考えれば十分である。多体系の波動函数は各座標 $\boldsymbol{r}_\alpha$ を $\boldsymbol{r}_\alpha + \delta\boldsymbol{r}$ にずらして

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r}_1+\delta\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_2+\delta\boldsymbol{r}, \cdots) &= \phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots) + (\delta\boldsymbol{r})\sum_\alpha \nabla_\alpha \phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots) + \cdots \\ &= \left[1 + \frac{i}{\hbar}(\delta\boldsymbol{a})\hat{\boldsymbol{P}} + \cdots\right]\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots)\end{aligned} \tag{3.2.2}$$

より、無限小並進運動の generator は $e^{\frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{r}\hat{\boldsymbol{P}}}$ であることが分かる。今 $\delta\boldsymbol{r}$ の符号を変えて有限の $-\boldsymbol{a}$ に対して shift operator を

$$T(\boldsymbol{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\hat{\boldsymbol{P}}} \tag{3.2.3}$$

で定義すると、$\hat{\boldsymbol{P}}$ は hermite operator であるから $T(\boldsymbol{a})$ は unitrary operator であり

$$T(\boldsymbol{a})\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots) = \psi(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{a}, \boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{a}, \cdots) \tag{3.2.4}$$

が成り立つ。有限の shift に対する公式は実は Taylor 展開である。このことは、また Hausdorff の公式 (2.1.56) を用いても証明される。実際、全ての座標 $\boldsymbol{r}_\alpha$ に対して $[\hat{\boldsymbol{P}}, \boldsymbol{r}_\alpha] = (i/\hbar)$ であるので展開は 1 次で終わり $T(\boldsymbol{a})\boldsymbol{r}_\alpha T^{-1}(ba) = \boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{a}$ であることが分かる。また $T(\boldsymbol{a})1 = 0$ である。そこで、任意の $\boldsymbol{r}_\alpha$ の関数である operator $\mathcal{O}(\boldsymbol{r}_\alpha)$ に対して $T(\boldsymbol{a})\mathcal{O}(\boldsymbol{r}_\alpha)T^{-1}(\boldsymbol{a}) = \mathcal{O}(\boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{a})$ であることが分かる。特に $\mathcal{O}$ が Hamitonian の時、それが並進不変性を持つなら右辺は再び $\mathcal{O}(\boldsymbol{r}_\alpha)$ で、$T(\boldsymbol{a})H = HT(\boldsymbol{a})$ つまり $T(\boldsymbol{a})$ と H は可換 $[T(\boldsymbol{a}), H] = 0$ である。これは更に $\boldsymbol{a}$ で微分して $\boldsymbol{a} = 0$ と置くことによって $[\hat{\boldsymbol{P}}, H] = 0$ が導かれる。更に H が explicit な時間依存性を持たないなら、Heisenberg の運動方程式 (2.1.48) より全運動量は保存される。

もう一つの重要な運動の生成子は空間の等方性に結び付いていて、Hamiltonian の回転不変性と角運動量の保存則に関係している。まずある軸の周りの微小回転 $\delta\boldsymbol{\varphi}$ を考えよ

う。この回転による座標ベクトルの変化は $\delta\boldsymbol{r}_\alpha = [\delta\boldsymbol{\varphi} \times \boldsymbol{r}_\alpha]$ であることより、(3.2.2) は

$$
\begin{aligned}
\psi(\boldsymbol{r}_1 + \delta_1\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_2 + \delta\boldsymbol{r}_2, \cdots) &= \phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots) + \sum_\alpha (\delta\boldsymbol{r}_\alpha)\nabla_\alpha \phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots) + \cdots \\
\text{α} &= \phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots) + \sum_\alpha [\delta\boldsymbol{\varphi} \times \boldsymbol{r}_\alpha]\nabla_\alpha \phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots) + \cdots \\
&= \phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots) + \sum_\alpha \delta\boldsymbol{\varphi}[\boldsymbol{r}_\alpha \times \nabla_\alpha]\phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots) + \cdots \\
&= \left[1 + \frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\varphi}\sum_\alpha [\boldsymbol{r}_\alpha \times \hat{\boldsymbol{p}}_\alpha] + \cdots\right]\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots) \\
&= \left[1 + i\delta\boldsymbol{\varphi}\hat{\boldsymbol{L}} + \cdots\right]\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots) \qquad (3.2.5)
\end{aligned}
$$

となる。ここに $\hat{\boldsymbol{L}} = \frac{1}{\hbar}\sum_\alpha [\boldsymbol{r}_\alpha \times \nabla_\alpha]$ は $\hbar$ を単位として測った系の全角運動量である。ここから、無限小回転運動の generator は $e^{i\delta\boldsymbol{\varphi}\hat{\boldsymbol{L}}}$ であることが分かる。角運動量 operator $\hat{\boldsymbol{L}}$ は hermite operator だから、これは unitary operator である。有限回転運動の generator として $\delta\boldsymbol{\varphi}$ の符号を変えて $-\boldsymbol{\varphi}$ として

$$
\mathcal{R}(\boldsymbol{\varphi}) = e^{-i\boldsymbol{\varphi}\hat{\boldsymbol{L}}} \qquad (3.2.6)
$$

で定義する。波動函数に対する作用としては $\psi' = \mathcal{R}(\boldsymbol{\varphi})\psi$, operator への作用としては $\mathcal{O}' = \mathcal{R}(\boldsymbol{\varphi})\mathcal{O}\mathcal{R}(-\boldsymbol{\varphi})$ となる。後者に対しては再び Hausdorff の公式が使える。異なる座標の角運動量 operator は互いに交換するから、以後しばらく一粒子問題だけを考える。特に $\mathcal{O} = \boldsymbol{r}$ 座標の時

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{r}' &= \mathcal{R}(\boldsymbol{\varphi})\boldsymbol{r}\mathcal{R}(-\boldsymbol{\varphi}) \\
&= \boldsymbol{r} - i[(\boldsymbol{\varphi}\hat{\boldsymbol{L}}), \boldsymbol{r}] + \frac{(-i)^2}{2!}[(\boldsymbol{\varphi}\hat{\boldsymbol{L}}), [(\boldsymbol{\varphi}\hat{\boldsymbol{L}}), \boldsymbol{r}]] + \cdots \qquad (3.2.7)
\end{aligned}
$$

が成り立つ。回転軸の方向を単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ の方向として、まず ε の微小回転とすると $\boldsymbol{\varphi} = \varepsilon\boldsymbol{n}$ として (3.2.7) は 1 次の項で止まる。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{r}' &= e^{-i\varepsilon(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}})}\boldsymbol{r}e^{i\varepsilon(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}})} \\
&= \boldsymbol{r} - i\varepsilon[(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}}), \boldsymbol{r}] \qquad (3.2.8)
\end{aligned}
$$

更に $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{e}_z$ と z-軸方向の単位ベクトルに取ると z-軸周りの無限小回転 $\mathcal{R}(\varepsilon\boldsymbol{e}_z) = e^{-i\varepsilon\hat{L}_z}$ の効果は、角運動量 operator の定義 $\hat{\boldsymbol{L}} = \frac{1}{\hbar}[\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{p}}]$ から $\hat{L}_z = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ だから

$[\hat{L}_z, x] = iy, [\hat{L}_z, y] = -ix, [\hat{L}_z, z] = 0.$ そこで

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} &= e^{-i\varepsilon \hat{L}_z} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \boldsymbol{r} e^{i\varepsilon \hat{L}_z} \\
&= \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} - i\varepsilon[\hat{L}_z, \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}] = \begin{pmatrix} x + \varepsilon y \\ y - \varepsilon x \\ z \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon & 0 \\ -\varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.2.9}
$$

となる。実は後で見る様に、有限回転 φ に対しても

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} &= e^{-i\varphi \hat{L}_z} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \boldsymbol{r} e^{i\varphi \hat{L}_z} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.2.10}
$$

が得られる。

角運動量代数についてはあとでまた詳しく述べるが、角運動量演算子 $\boldsymbol{L}$ は一般に任意のベクトル演算子 $\boldsymbol{V}$ に対して次の交換関係を満たす。(See (3.5.6).)

$$[\hat{L}_i, \hat{A}_j] = ie_{i,j,k}\hat{A}_k \tag{3.2.11}$$

ここに $i = 1, 2, 3 = x, y, z$、また $e_{i,j,k}$ は 3 次元反対称テンソンである。(3.2.11) で繰り返し現われる添え字 k については、$k = 1, 2, 3$ について和を取ることとする。そこで $[\hat{L}_z, x] = iy$ 等である。そこで $[(\boldsymbol{e}_z\hat{\boldsymbol{L}}), x_i] = [\hat{L}_3, x_i] = ie_{3,i,j}x_j = -ie_{i,3,j}x_j$ である。一方外積の定義から $[\boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{r}]_i = e_{i,3,j}x_j$ ($\boldsymbol{r}_j = x_j$ に注意!) より $[(\boldsymbol{e}_z\hat{\boldsymbol{L}}), \boldsymbol{r}_j] = -i[\boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{r}]_j$. そこでベクトル $\boldsymbol{r}$ に対して $[(\boldsymbol{e}_z\hat{\boldsymbol{L}}), \boldsymbol{r}] = -i[\boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{r}]$ が成り立つ。容易に分かる様に、$\boldsymbol{e}_z$ を $\boldsymbol{n}$ に一般化してもこれは成り立っている。

$$[(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}}), \boldsymbol{r}] = -i[\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r}] \tag{3.2.12}$$

これは 3 次元ベクトル $\boldsymbol{r}$ の 3 成分と右辺の外積の 3 成分に関する三つの関係式をまとめて書いたものである。これを使うと (3.2.8) は

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{r}' &= e^{-i\varepsilon(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}})} \boldsymbol{r} e^{i\varepsilon(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}})} \\
&= \boldsymbol{r} - i\varepsilon[(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}}), \boldsymbol{r}] = \boldsymbol{r} - \varepsilon[\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r}]
\end{aligned} \tag{3.2.13}
$$

ここで $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_z$ とすると (3.2.9) がすぐ得られる。(3.2.12) を使うと $\boldsymbol{\varphi}=\varphi\boldsymbol{n}$ の時の有限回転の (3.2.7) に対しても、比較的容易に座標に対する効果を計算することが出来る。即ち (3.2.12) を 2 回使うと、$(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}})$ は右辺の $\boldsymbol{r}$ に作用するだけだから

$$\begin{aligned}&[(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}}),[(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}}),\boldsymbol{r}]]=-i[\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{r}\hat{\boldsymbol{L}})\boldsymbol{r}]=(-i)^2[\boldsymbol{n}\times[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}]]\\&=\boldsymbol{r}-\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\boldsymbol{r})\end{aligned}\tag{3.2.14}$$

となる。Hausdorff の公式の展開は、実質的にこの 2 次までの展開の繰り返しとなる。その訳は (3.2.14) の交換関係をもう一度取ると最後の $-\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\boldsymbol{r})$ の項は $(\boldsymbol{n}[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}])=0$ により寄与しないからである。そこで交換関係を 3 回取ったものは

$$\begin{aligned}&[(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}}),[(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}}),[(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}}),\boldsymbol{r}]]]=[(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}}),\boldsymbol{r}]=-i[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}]\\&=(3.2.12)\ \text{と同じ}\end{aligned}\tag{3.2.15}$$

となる。そこで

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}'&=e^{-i\varphi(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}})}\boldsymbol{r}e^{i\varphi(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}})}\\&=\boldsymbol{r}-i\varphi[(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}}),\boldsymbol{r}]+\frac{(-i)^2}{2!}\varphi^2[(\boldsymbol{n}\hbar\boldsymbol{L}),[(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}}),\boldsymbol{r}]+\cdots\end{aligned}\tag{3.2.16}$$

の展開の偶数次の項は

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{r}+\frac{(-i)^2}{2!}\varphi^2[\boldsymbol{r}-\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\boldsymbol{r})]+\frac{(-i)^4}{4!}\varphi^4[\boldsymbol{r}-\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\boldsymbol{r})]+\cdots\\&=\cos\varphi\boldsymbol{r}+(1-\cos\varphi)\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\boldsymbol{r})\end{aligned}\tag{3.2.17}$$

奇数次の項は

$$\begin{aligned}&-i\varphi(-i)[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}]+\frac{(-i)^3}{3!}\varphi^3(-i)[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}]+\cdots\\&=-\sin\varphi[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}]\end{aligned}\tag{3.2.18}$$

となる。結局 (3.2.16) は

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}'&=e^{-i\varphi(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}})}\boldsymbol{r}e^{i\varphi(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{L}})}\\&=\cos\varphi\ \boldsymbol{r}-\sin\varphi[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}]+(1-\cos\varphi)\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\boldsymbol{r})\end{aligned}\tag{3.2.19}$$

となる。無限小回転 $\varphi=\varepsilon$ の時、この式は (3.2.14) に帰着する。また z-軸周りの有限回転の時は、$\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_z$ と置いて (3.2.19) は (3.2.10) と一致する。(3.2.19) を用いると、x-軸、y-軸の周りの有限回転の効果もすぐに求める事が出来る。しかしもっと簡単には、

(3.2.10) で (x,y,z) を $(x,y,z)\to(y,z,x),(z,x,y)$ と cyclic に回してこれらを求める事が出来る。結果は

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix}x'\\y'\\z'\end{pmatrix}&=e^{-i\varphi\hat{L}_x}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}\boldsymbol{r}e^{i\varphi\hat{L}_x}\\&=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&\cos\varphi&\sin\varphi\\0&-\sin\varphi&\cos\varphi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}\end{aligned}\tag{3.2.20}$$

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix}x'\\y'\\z'\end{pmatrix}&=e^{-i\varphi\hat{L}_y}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}\boldsymbol{r}e^{i\varphi\hat{L}_y}\\&=\begin{pmatrix}\cos\varphi&0&-\sin\varphi\\0&1&0\\\sin\varphi&0&\cos\varphi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}\end{aligned}\tag{3.2.21}$$

となる。

(練習問題-1) まず (3.2.20), (3.2.21), (3.2.10) を用いて、ε の微小回転について $\boldsymbol{r}$ をまず y-軸の周りに ε_y だけ回転し続いて x-軸の周りに ε_x だけ回転する時、それと順番を入れ替えて x-軸の周りにまず回転し次に y-軸の周りに回転したものとの差を取ると z-軸の周りに $\varepsilon_x\varepsilon_y$ だけ微小回転した時の効果と等しい事を示せ。つまり

$$\begin{aligned}&\mathcal{R}(\varepsilon_x\boldsymbol{e}_x)\mathcal{R}(\varepsilon_y\boldsymbol{e}_y)\boldsymbol{r}\mathcal{R}(-\varepsilon_y\boldsymbol{e}_y)\mathcal{R}(-\varepsilon_x\boldsymbol{e}_x)-\mathcal{R}(\varepsilon_y\boldsymbol{e}_y)\mathcal{R}(\varepsilon_x\boldsymbol{e}_x)\boldsymbol{r}\ CR(-\varepsilon_x\boldsymbol{e}_x)\mathcal{R}(-\varepsilon_y\boldsymbol{e}_y)\\&=\mathcal{R}(\varepsilon_x\varepsilon_y\boldsymbol{e}_z)\boldsymbol{r}\mathcal{R}(-\varepsilon_x\varepsilon_y\boldsymbol{e}_z)-\boldsymbol{r}\end{aligned}\tag{3.2.22}$$

次に波動函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ に対して

$$\left[\mathcal{R}(\varepsilon_x\boldsymbol{e}_x)\mathcal{R}(\varepsilon_y\boldsymbol{e}_y)-\mathcal{R}(\varepsilon_y\boldsymbol{e}_y)\mathcal{R}(\varepsilon_x\boldsymbol{e}_x)\right]\psi(\boldsymbol{r})=[\mathcal{R}(\varepsilon_x\varepsilon_y\boldsymbol{e}_z)-1]\psi(\boldsymbol{r})\tag{3.2.23}$$

より、角運動量演算子の交換関係 $[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=i\hat{L}_z$ が得られることを示せ。

(略解) $\mathcal{R}(\theta\boldsymbol{e}_x)=e^{-i\theta(\boldsymbol{e}_x\hat{\boldsymbol{L}})}=e^{-i\theta\hat{L}_x}$ より

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(\theta\boldsymbol{e}_x)\boldsymbol{r}\mathcal{R}(-\theta\boldsymbol{e}_x)=e^{-i\theta L_x}\boldsymbol{r}e^{i\theta L_x}&=M_x(\theta)\boldsymbol{r}\\M_x(\theta)&=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&\cos\theta&\sin\theta\\0&-\sin\theta&\cos\theta\end{pmatrix}\end{aligned}\tag{3.2.24}$$

と書けば、(3.2.22) は行列の順番に注意して

$$
\begin{aligned}
&M_y(\varepsilon_y)M_x(\varepsilon_x) - M_x(\varepsilon_x)M_y(\varepsilon_y) \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\varepsilon_y \\ 0 & 1 & 0 \\ \varepsilon_y & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varepsilon_x \\ 0 & -\varepsilon_x & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varepsilon_x \\ 0 & -\varepsilon_x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\varepsilon_y \\ 0 & 1 & 0 \\ \varepsilon_y & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon_x\varepsilon_y & -\varepsilon_y \\ 0 & 1 & \varepsilon_x \\ \varepsilon_y & -\varepsilon_x & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\varepsilon_y \\ \varepsilon_x\varepsilon_y & 1 & \varepsilon_x \\ \varepsilon_y & -\varepsilon_x & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_x\varepsilon_y & 0 \\ \varepsilon_x\varepsilon_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon_x\varepsilon_y & 0 \\ \varepsilon_x\varepsilon_y & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (3.2.25)
\end{aligned}
$$

(練習問題-2) Euler 角による回転: 一般に 3 次元回転は φ と 2 つの方向によって指定される $\boldsymbol{n}$ に見られるように、 3 つの角度パラメータを含んでいる。それを指定する一番便利な方法は Euler 角を用いることである。まず (3.2.24) の様に

$$
e^{-i\varphi L_z}\ \boldsymbol{r}\ e^{i\varphi L_z} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{r} = M_z(\varphi)\boldsymbol{r} \qquad (3.2.26)
$$

と書いて、更に同様に $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{e}_y$, $\varphi \to \theta$ として y-軸周りの θ 回転を考えると

$$
e^{-i\theta L_y}\ \boldsymbol{r}\ e^{i\theta L_y} = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \boldsymbol{r} = M_y(\theta)\boldsymbol{r} \qquad (3.2.27)
$$

ここでは、簡単のため $\hat{L}_z = L_z$ 等と書く。そこで、次の三つの回転の積

$$
\mathcal{R}(\varphi,\theta,\psi) = e^{-i\varphi L_z} e^{-i\theta L_y} e^{-i\psi L_z} \qquad (3.2.28)
$$

を考えると、その座標への変換は

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{r}' &= \mathcal{R}(\varphi,\theta,\psi)\ \boldsymbol{r}\ \mathcal{R}(\varphi,\theta,\psi)^{-1} = e^{-i\varphi L_z} e^{-i\theta L_y} e^{-i\psi L_z}\ \boldsymbol{r}\ e^{i\psi L_z} e^{i\theta L_y} e^{i\varphi L_z} \\
&= e^{-i\varphi L_z} e^{-i\theta L_y}\ M_z(\psi)\boldsymbol{r}\ e^{i\theta L_y} e^{i\varphi L_z} = M_z(\psi) e^{-i\varphi L_z} e^{-i\theta L_y}\ \boldsymbol{r}\ e^{i\theta L_y} e^{i\varphi L_z} = \cdots \\
&= M_z(\psi) M_y(\theta) M_z(\varphi)\ \boldsymbol{r} = M(\varphi,\theta,\psi)\ \boldsymbol{r} \qquad (3.2.29)
\end{aligned}
$$

と表される。即ち、(3.2.27) の変換は、3×3 行列 $M(\varphi,\theta,\psi) = M_z(\psi)M_y(\theta)M_z(\varphi)$ を用いた 3 つの連続回転: 1) z-軸の周りの φ 回転、2) 新しい y'-軸の周りの θ 回転、3) 新

しい z''-軸の周りの ψ 回転、をほどこすことに対応している。$M(\varphi, \theta, \psi)$ を具体的に求めることは容易である。答えは

$$
\begin{aligned}
&M(\varphi, \theta, \psi) \\
&= \begin{pmatrix} \cos\varphi\cos\theta\cos\psi + \sin\varphi\sin\psi & \sin\varphi\cos\theta\cos\psi + \cos\varphi\sin\psi & -\sin\theta\cos\psi \\ -\cos\varphi\cos\theta\sin\psi - \sin\varphi\cos\psi & -\sin\varphi\cos\theta\sin\psi + \cos\varphi\cos\psi & \sin\theta\sin\psi \\ \cos\varphi\sin\theta & \sin\varphi\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.2.30}
$$

となる。

3.3　1 次元障壁問題

空間一次元の障壁問題は、シュレーディンガー方程式を解いて量子力学的問題を解く一般的枠組みを示すための一番簡単な例を与える。まず $0 < x < a$ の区間に閉じ込められた質量 m の粒子の運動を考える。これは $x = 0$ と $x = a$ に立った無限大の高さの壁で表わすことが出来る。(図 2 参照)

$$
U(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad 0 < x < a \\ +\infty & \quad \text{otherwise} \end{cases} \tag{3.3.1}
$$

$0 < x < a$ におけるシュレーディンガー方程式は

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad \text{for} \quad 0 < x < a \tag{3.3.2}
$$

であるから、$(2mE/\hbar^2) = k^2$ として

$$
\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) \quad \text{for} \quad 0 < x < a \tag{3.3.3}
$$

そこで、その解 $\psi(x)$ は $E = (\hbar k)^2/(2m)$ として e^{ikx} と e^{-ikx} の線型結合 $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ で表わされる。まず $\psi(0) = 0$ から $A + B = 0$ つまり $2iA = C$ として $\psi(x) = C\sin kx$ である。次に $\psi(a) = 0$ から $ka = n\pi$ with $n = 1, 2, 3, \cdots$ である。ここから $k = n\pi/a$、また C は規格化積分 $\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1$ から位相因子を除いて決まる。結局 (3.3.2) の解は

$$
\begin{gathered}
\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin ka & \text{for} \quad 0 < x < a \\ 0 & \quad \text{otherwise} \end{cases} \\
\text{with} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{and} \quad k = \frac{n\pi}{a} \quad (n = 1, 2, \cdots)
\end{gathered} \tag{3.3.4}
$$

この式は長さ a の弦に生じる定常波と類似している。粒子の運動は有限運動だから固有値 E は離散値をとる。結局

$$
\begin{aligned}
&H_0\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \\
&\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} \\
&E_n = n^2\frac{(\pi\hbar)^2}{2ma^2} \quad \text{with} \quad n = 1, 2, \cdots
\end{aligned}
\tag{3.3.5}
$$

である。(図 2 参照)

図 2: 一次元井戸型ポテンシャルと定常波-その 1

三次元問題で領域 $x \in [0, a], y \in [0, b], z \in [0, c]$ 内に閉じ込められた粒子の運動も、変数分離の方で同様にとくことができる。ハミルトニアンは x, y, z 成分の和であり、波動関数はそれぞれの成分の積 $\psi_{n_1,n_2,n_3}(x, y, z) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)$ である。従って、エネルギー固有値は

$$
\begin{aligned}
E_{n_1,n_2,n_3} = {n_1}^2\frac{(\pi\hbar)^2}{2ma^2} + {n_2}^2\frac{(\pi\hbar)^2}{2mb^2} + {n_3}^2\frac{(\pi\hbar)^2}{2mc^2} \\
\text{with} \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \cdots
\end{aligned}
\tag{3.3.6}
$$

である。

(3.3.1) で壁の高さが有限で $U(x) = U_0$ for $x \notin [0, a]$ (図 3 参照) の時にはエネルギー E が $0 < E < U_0$ か $E > U_0$ かで事情が異なる。前者の場合には粒子の運動は、古典力学的には $[0, a]$ の間にとどまるが、量子力学的には波動関数はこの区間の外にはみ出している。そこでは、シュレーディンガー方程式は

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U_0 = E\psi(x) \quad \text{for} \quad 0 > x \quad \text{or} \quad x > a \tag{3.3.7}
$$

により記述される。$\sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar = \kappa$ とすると、この式は

$$
\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \kappa^2\psi(x) \quad \text{for} \quad x \notin [0, a] \tag{3.3.8}
$$

となる。この方程式の解は、$x \to \pm\infty$ で粒子は存在しないという物理的要請から $x < 0$ で $\psi(x) = Ce^{\kappa x}$、$x > a$ で $\psi(x) = De^{-\kappa(x-a)}$ の形をとる。この解は (3.3.3) の解 $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ と $x = 0$ と $x = a$ で滑らかに繋がらなければならない。すなわち、関数の数値 $\psi(x)$ だけでなくその微分 $\psi'(x) = (d\psi(x)/dx)$ も $x = 0, a$ で連続である。このことは、シュレーディンガー方程式が二階の線形微分方程式であり、粒子の流れの密度が x の連続関数であることからの要請である。関数の微分の代わりに、その対数

微分 $(\log\psi(x)' = (\psi'(x)/\psi(x))$ を用いることもある。これらを波動関数の接続条件という。つまり

$$\begin{aligned} C = A+B \quad &, \quad Ae^{ika}+Be^{-ika} = D \\ \kappa = ik\frac{A-B}{A+B} \quad &, \quad ik\frac{Ae^{ika}-Be^{-ika}}{Ae^{ika}+Be^{-ika}} = -\kappa \end{aligned} \tag{3.3.9}$$

が成り立つ。$x \in [0,a]$ の解として $\psi(x) = A\sin(kx+\delta)$ with $-\pi/2 < \delta < \pi/2$ を選ぶと便利である。この時、接続条件は

$$\begin{aligned} C = A\sin\delta, \quad &A\sin(ka+\delta) = D \\ \kappa = k\cot\delta \quad , \quad &k\cot(ka+\delta) = -\kappa \end{aligned} \tag{3.3.10}$$

となる。まず二行目の式で $\kappa/k = \cot\delta > 0$ より $0 < \delta < \pi/2$ だが、$\sin x = \pm\sqrt{1/(1+\cot^2 x)}$ で $x = \delta$ として $\sin x > 0$ で $1+(\kappa/k)^2 = U_0/E$ を使うと、$\delta = \sin^{-1}\sqrt{\frac{E}{U_0}} = \sin^{-1}\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}$ が得られる。ここに $0 < \sin^{-1} x < \pi/2$ とする。一方で $\cot(ka+\delta) = -k/\kappa < 0$ より $(n-1/2)\pi < ka+\delta < n\pi$ である。ここに $n = 1,2,\cdots$ で、もし n が奇数なら $\sin(ka+\delta) > 0$、偶数なら $\sin(ka+\delta) < 0$ つまり $\sin(ka+\delta) = (-1)^{n+1}\sqrt{\frac{E}{U_0}}$ である。そこで再び $0 < \sin^{-1}\sqrt{\frac{E}{U_0}} < \pi/2$ とすると $ka+\delta = n\pi - \sin^{-1}\sqrt{\frac{E}{U_0}}$ が得られる。結局

$$ka = n\pi - 2\sin^{-1}\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} \qquad (n = 1,2,\cdots) \tag{3.3.11}$$

となる。

図 3: 有限の深さの 1 次元ポテンシャル井戸 ($U_1 = U_0 > 0$ の場合)

図 4: 有限の深さの 1 次元ポテンシャル井戸 ($U_1 > U_0 > 0$ の場合)

上の議論は $x > a$ の部分の壁の高さが U_0 でなく $U_1 > U_0$ の場合にもほぼ同様に成り立つ。(図 4 参照) この時 $U_1 > U_0 > E > 0$ の場合には (3.3.11) の代わりに

$$\begin{aligned} ka = n\pi - \sin^{-1}\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} - \sin^{-1}\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_1}} \\ (n = 1,2,\cdots) \end{aligned} \tag{3.3.12}$$

が成り立つ。粒子の束縛エネルギー $E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$ は各 $n = 1,2,\cdot$ に対して (3.3.12) を k について解いて得られる。(3.3.12) の左辺は k の単調増大関数、右辺は単調減少関数だから各 n に対して必ずひとつ解が存在する。特に $n = 1$ の時、束縛状態が存在することためには (3.3.12) で $k = \sqrt{2mU_0}/\hbar$ とおいて

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}a \geqq \frac{\pi}{2} - \sin^{-1}\frac{U_0}{U_1} \tag{3.3.13}$$

が満たされなければならない。$U_1 > U_0$ の時、a を小さくとれば常にこの条件を満たさない様に出来る。すなわちこの場合には、a を小さくとって束縛状態が存在しない様にすることが出来る。一方、$U_1 = U_0$ の時は (3.3.13) の条件は常に満たされている。

図 5: 片側有限の深さの 1 次元ポテンシャル井戸 ($U_1 = \infty, U_0 > E > 0$ の場合)

図 5 の様に、$U_1 = \infty$ で $U_0 > 0$ の時は 3 次元井戸型ポテンシャルとの関係において特に重要である。この場合は始めから $x = 0$ における境界条件を満たす $\psi(x) = A\sin kx \quad \text{for} \quad 0 < x < a$ から始める方が簡単である。ここに、$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0 \quad with \quad k > 0$ である。もし $E < U_0$ であるなら、有限運動であるからエネルギースペクトルは離散的で $x > a$ における波動函数は $\psi(x) = Be^{-\kappa(x-a)}$ と表わされる。ここに、$U_0 - E = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} > 0 \quad with \quad \kappa > 0$ である。更に $x = a$ における境界条件から

$$\begin{aligned} A\sin ka &= B \\ k\cot ka &= -\kappa \end{aligned} \tag{3.3.14}$$

そこで下の式から

$$\begin{aligned} (\sin ka)^2 &= \frac{1}{1+(\cot ka)^2} = \frac{k^2}{k^2+\kappa^2} = \frac{E}{U_0} \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2mU_0} = \frac{(ka)^2}{2ma^2U_0/\hbar^2} \\ \sin ka &= \pm\frac{\hbar}{\sqrt{2ma^2U_0}}(ka) \end{aligned} \tag{3.3.15}$$

図 6: 図 5 の 1 次元ポテンシャル井戸のもつ束縛状態の条件

ここに最後の式は図 6 の様に $\pm\sin ka$ と傾き $\frac{\hbar}{\sqrt{2ma^2U_0}}$ の直線の交点を表わすが、(3.3.14) の下の式から $\cot ka < 0$ から $\pi/2 < ka < \pi, (3\pi)/2 < ka < 2\pi, \cdots$ だけである。そこで基底状態のエネルギーは $ka = \pi/2$ の時、つまり $E = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ となる。 この時、傾きが $1/(ka)$ である事より

$$U_0 = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = E = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2} \tag{3.3.16}$$

であることがわかる。U_0 が E と同じであることにより、この U_0 がポテンシャルを深くしていって初めて束縛状態が出来るポテンシャルの深さであることが分かる。それは、不確定性関係を使って見積もられる運動量 $p \sim \frac{\hbar}{a}$ から得られるエネルギーの大きさ $E = \frac{p^2}{2m}$ とほぼ等しい。ポテンシャルをこれより深くしていくと、基底状態は徐々に下に沈んでいき $U_0 = \left(\frac{3\pi}{2}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ のところで第一励起状態がポテンシャルの縁のところに現れる。次々に束縛状態が現われるポテンシャルの深さは $n = 0, 1, 2, \cdots$ として

$U_0 = \left(\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\right)^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ である。ここで重要な事は、ポテンシャルが束縛状態を支えるためには十分な深さと広がり a がいるという事である。(3.3.16) より浅いポテンシャルは束縛状態を支える事が出来ない。これは純粋に量子力学の効果である。(反対に古典力学ではャルがいかに浅くても束縛状態が存在する。)

図 7: 左から壁にぶつかる平面波

もう一度簡単な一次元障壁問題に戻って、図 7 の様な高さ $U_0 > 0$ の壁で質量 m の粒子が左からエネルギー $0 < E < U_0$ で入射する場合を考える。すなわち

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad x < 0 \\ U_0 & \text{for} \quad x > 0 \end{cases} \tag{3.3.17}$$

シュレーディンガー方程式の解は、$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$ として

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Ae^{-ik} & \text{for} \quad x < 0 \\ Ce^{-\kappa x} & \text{for} \quad x > 0 \end{cases} \tag{3.3.18}$$

が得られる。$x = 0$ における接続条件は

$$1 + A = C \quad , \quad ik\frac{1-A}{1+A} = -\kappa \tag{3.3.19}$$

ここから

$$A = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \quad , \quad C = \frac{2k}{k + i\kappa} \tag{3.3.20}$$

が導かれる。ここで (3.1.6) を用いて x-方向への流れの密度 $j_x = \frac{1}{m}\mathrm{Re}\, e\left\{(\psi(x)^* p_x \psi(x)\right\}$ を計算すると、$x > 0$ では容易に $\boldsymbol{j} = 0$, $x > 0$ では cross term が互いに打ち消しあって $j_x = v_x(1 - |A|^2)$ であることが分かる。ここに $v_x = \hbar k/m = p_x/m$ は x- 軸方向の速度である。最後の結果は、進行波と後退波の流れの密度をそれぞれ別々に計算して加えても結果は等しいことを示している。$x = 0$ における流れの密度が連続であることにより $|A| = 1$ であるが、このことは (3.3.20) から容易に確かめられる。(3.3.18) の後退波を反射波、A を反射係数という。

$E > U_0$ の時は、上の議論で $-\kappa \to ik_0$ with $k_0 = \sqrt{E - U_0}/\hbar < k$ として

$$A = \frac{k - k_0}{k + k_0} \quad , \quad C = \frac{2k}{k + k_0} \tag{3.3.21}$$

となる。そこで $x > 0$ の波 $\psi(x) = Ce^{ik_0}$ は右方向への流れの密度 $(v_0)_x|C|^2$ with $(v_0)_x = (p_0)_x/m$ を持つことになり

$$v_x|A|^2 + (v_0)_x|C|^2 = v_x \tag{3.3.22}$$

が成り立つのことになる。これも (3.3.21) から直接示すことができる。$x > 0$ の波を通過波 (あるいは透過波)、$\sqrt{\frac{(v_0)_x}{v_x}}C = T$ を透過係数という。これに対応して、反射係数 A を R ともかく。これらには $|T| + |R| = 1$ の関係がある。

図 8: 1 次元障壁通過問題

最後に、図 8 の様な左からの入射波が 1 次元の障壁を通過する問題を考えよう。ポテンシャルは $U_0 > 0$ として

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{for} \quad 0 < x < a \\ 0 & \qquad \text{otherwise} \end{cases} \tag{3.3.23}$$

である。まず $E < U_0$ の場合を考えて $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$ として波動函数は

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \qquad x < 0 \\ Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} & \text{for} \quad 0 < x < a \\ Fe^{ikx} & \qquad x > a \end{cases} \tag{3.3.24}$$

である。$x > a$ 領域には通過波だけが存在する。$x = 0$ と $x = a$ における接続条件は

$$\begin{aligned} A + B = C + D \quad &, \quad ik\frac{A - B}{A + B} = \kappa\frac{C - D}{C + D} \\ Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a} = Fe^{ika} \quad &, \quad \kappa\frac{Ce^{\kappa a} - De^{-\kappa a}}{Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a}} = ik \end{aligned} \tag{3.3.25}$$

である。未知数は A, B, C, D, F と 5 つで条件は 4 つでひとつ足らないが、全体の normalization があるので $B/A, C/A, D/A, F/A$ の比だけが求まる。まずはじめの二式から $\frac{C}{A}$, $\frac{D}{A}$ を求めて $\frac{B}{A}$ で表わすと

$$\begin{aligned} \frac{C}{A} &= \frac{(\kappa - ik)}{2\kappa}\left[\frac{(\kappa + ik)}{(\kappa - ik)} + \frac{B}{A}\right] \\ \frac{D}{A} &= \frac{(\kappa - ik)}{2\kappa}\left[1 + \frac{(\kappa + ik)}{(\kappa - ik)}\frac{B}{A}\right] \end{aligned} \tag{3.3.26}$$

一方 (3.3.25) の 4 番目の式より

$$\frac{C}{D} = \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik}e^{-2\kappa a} \tag{3.3.27}$$

が得られるから、これに (3.3.26) を代入して $\frac{B}{A}$ を求めると $r = \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik}$ として $\left(\frac{r + \frac{B}{A}}{1 + r\frac{B}{A}}\right) =$

$re^{-2\kappa a}$ より

$$\begin{aligned}\frac{B}{A} &= \frac{r(e^{-2\kappa a}-1)}{1-r^2e^{-2\kappa a}} \\ &= \frac{(\kappa^2+k^2)(e^{-2\kappa a}-1)}{(\kappa-ik)^2-(\kappa+ik)^2e^{-2\kappa a}} \\ &= -\frac{(\kappa^2+k^2)(e^{\kappa a}-e^{-\kappa a})}{(\kappa-ik)^2e^{\kappa a}-(\kappa+ik)^2e^{-\kappa a}}\end{aligned} \tag{3.3.28}$$

が得られる。これを (3.3.26) に代入すると

$$\begin{aligned}\frac{C}{A} &= -\frac{(\kappa+ik)2ike^{-\kappa a}}{(\kappa-ik)^2e^{\kappa a}-(\kappa+ik)^2e^{-\kappa a}} \\ \frac{D}{A} &= -\frac{(\kappa-ik)2ike^{\kappa a}}{(\kappa-ik)^2e^{\kappa a}-(\kappa+ik)^2e^{-\kappa a}}\end{aligned} \tag{3.3.29}$$

となる。さらにこれらを (3.3.25) の 3 番目の式より得られる次の式に代入すると

$$\begin{aligned}\frac{F}{A} &= e^{-ika}\left[\frac{C}{A}e^{\kappa a}+\frac{D}{A}e^{-\kappa a}\right] \\ &= -2ike^{-ika}\frac{(\kappa+ik)+(\kappa-ik)}{(\kappa-ik)^2e^{\kappa a}-(\kappa+ik)^2e^{-\kappa a}} \\ &= -2ike^{-ika}\frac{2\kappa}{(\kappa-ik)^2e^{\kappa a}-(\kappa+ik)^2e^{-\kappa a}}\end{aligned} \tag{3.3.30}$$

となる。(3.3.28) - (3.3.30) の結果は $\sinh x = (e^x-e^{-x})/2$, $\cosh x = (e^x+e^{-x})/2$ を用いると $(\kappa-ik)^2e^{\kappa a}-(\kappa+ik)^2e^{-\kappa a} = (\kappa^2-k^2)(e^{\kappa a}-e^{-\kappa a})-2\kappa ik(e^{\kappa a}+e^{-\kappa a}) = 2[(\kappa^2-k^2)\sinh\kappa a-2ik\kappa\cosh\kappa a]$ より

$$\begin{aligned}\frac{B}{A} &= -\frac{(\kappa^2+k^2)\sinh\kappa a}{(\kappa^2-k^2)\sinh\kappa a-2ik\kappa\cosh\kappa a} \\ \frac{F}{A} &= -2ike^{-ika}\frac{\kappa}{(\kappa^2-k^2)\sinh\kappa a-2ik\kappa\cosh\kappa a}\end{aligned} \tag{3.3.31}$$

と表わされる。反射係数 R と透過係数 T をこれらの絶対値の二乗で定義すると $(\cosh x)^2 = (\sin x)^2+1$ を用いて $|(\kappa^2-k^2)\sinh\kappa a-2ik\kappa\cosh\kappa a|^2 = (\kappa^2-k^2)^2(\sinh\kappa a)^2+(2k\kappa)^2(\cosh\kappa a)^2 = (\kappa^2+k^2)^2(\sinh\kappa a)^2+(2k\kappa)^2$ より

$$\begin{aligned}R &= \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{(\kappa^2+k^2)^2(\sinh\kappa a)^2}{(\kappa^2+k^2)^2(\sinh\kappa a)^2+(2k\kappa)^2} \\ T &= \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{(2k\kappa)^2}{(\kappa^2+k^2)^2(\sinh\kappa a)^2+(2k\kappa)^2}\end{aligned} \tag{3.3.32}$$

が得られる。流れの密度の保存則はここでも $R+T=1$ で成り立っていることが分かる。

$E \geqq U_0$ の時は $0<x<a$ の波動函数のかたちが $\psi(x)=Ce^{ik_0x}+De^{-ikx}$ と変わる。ここに $k_0=\frac{2m(E-U_0)}{\hbar} \leqq k$ である。これにより (3.3.25) の接続条件の形が変わるが、(3.3.32) の R, T に関する限りこれらの面倒な計算を避けて通ることができる。それは (3.3.32) で $\kappa \to \pm ik_0$ と変えることである。(3.3.32) は κ の偶関数であるから、どちらの符号を取っても同じ結果を与える。即ち $E \geqq U_0$ の時

$$
\begin{aligned}
R &= \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{(k^2-k_0^2)^2(\sin k_0a)^2}{(k^2-k_0^2)^2(\sin k_0a)^2+(2kk_0)^2} \\
T &= \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{(2kk_0)^2}{(k^2-k_0^2)^2(\sin k_0a)^2+(2kk_0)^2}
\end{aligned}
\tag{3.3.33}
$$

となる。ここで $k_0a=n\pi$ $(n=0,1,2,\cdots)$ において $R=0, T=1$ となる。即ち $E=U_0+\frac{(n\pi)^2\hbar^2}{2ma^2}$ で障壁は透明で、全ての入射波が $x>a$ 領域に伝わる。

3.4 一次元調和振動子とその応用

一次元調和振動子はシュレディンガー方程式の冪級数展開による一般的な解法を学ぶのに最適である。さらにそれは、電磁波の量子化に関係した第二量子化の手法とつながっており coherent state や種々の boson 状態の記述に必要不可欠である。古典的調和振動子のポテンシャル項 $U^{\mathrm{ho}}(x)=(1/2)kx^2$ のバネ定数 $k=m\omega^2$ を角 振動数 ω で表わして一次元調和振動子のハミルトニアンを座標表示で

$$
\begin{aligned}
H &= \frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \\
H\Psi(x) &= E\Psi(x)
\end{aligned}
\tag{3.4.1}
$$

としよう。ここに $p=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ は運動量演算子である。ポテンシャル項が $x\to\pm\infty$ で ∞ になることから、調和振動子のエネルギースペクトルは必ず離散的である。$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ が長さの次元を持つ事をに注意して、無次元座標 ξ を

$$
x=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi \tag{3.4.2}
$$

により定義すると元のハミルトニアンのシュレーディンガー方程式は

$$
\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{d}{d\xi}\right)^2+\frac{1}{2}\xi^2\right]\psi(\xi)=\beta\psi(\xi) \tag{3.4.3}
$$

と書かれる。ここに $\Psi(x)=\psi(\xi)$ かつ元のエネルギー固有値 E は

$$E=\hbar\omega\beta \tag{3.4.4}$$

である。

まず (3.4.3) で $\xi\rightarrow\pm\infty$ の極限を考えるとその解は $e^{-(1/2)\xi^2}$ であることが分かる。実際この極限では $\beta\psi(\xi)$ の項は無視出来て

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\xi}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}&=-\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\\ \left(\frac{d}{d\xi}\right)^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2}&=(\xi^2-1)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\\ &\sim\xi^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\end{aligned} \tag{3.4.5}$$

なるからである。そこで (3.4.3) の正確な解を (多項式)$\times e^{-(1/2)\xi^2}$ の形に求めるために $\psi(\xi)=h(\xi)e^{-(1/2)\xi^2}$ を仮定して $h(\xi)$ の微分方程式を求めると

$$h"-2\xi h'+(2\beta-1)h=0 \tag{3.4.6}$$

が得られる。ここに $h"$, h' はそれぞれ $h(\xi)$ の ξ についての二階及び一階導関数である。またハミルトニアンは ξ の偶関数であるため、 $h(\xi)$ は ξ の偶関数であるか奇関数であるかどちらかである。特に $h(\xi)=1$ の時 $\beta=1/2$ であり $E=\hbar\omega/2$ は基底状態 $\psi(\xi)=e^{-\xi^2/2}$ のエネルギーであり「零点振動のエネルギーと呼ばれる。第一励起状態は $h(\xi)=\xi$ であり $\beta=3/2$ である。一般には $h(\xi)$ を $h(\xi)=\sum_{n=0}a_nx^n$ と冪展開して

$$\begin{aligned}h'&=\sum_{n=0}(n+1)a_{n+1}x^n\\ h"&=\sum_{n=0}(n+1)(n+2)a_{n+2}x^n\\ 2\xi h'&=\sum_{n=1}2na_nx^n=\sum_{n=0}2na_nx^n\end{aligned} \tag{3.4.7}$$

そこで、これらを (3.4.6) に代入して x^n の項の係数を比較すると

$$\begin{aligned}(n+1)(n+2)a_{n+2}-2na_n+(2\beta-1)a_n&=0\\ a_{(n+2)}&=\frac{2n+1-2\beta}{(n+1)(n+2)}a_n\end{aligned} \tag{3.4.8}$$

が分かる。最後の式は、$a_0=1,a_2,a_4,\cdots$ と続く偶関数多項式、或いは $a_1=1,a_3,a_5,\cdots$ と続く奇関数多項式の係数を次々と決定する、いわゆる漸化式を与えている。これらの

うち、有限の多項式にとどまるものは $n = 0, 1, 2, \cdots$ をある決まった正の整数として $\beta = (n + 1/2)$ の時であることが分かる。この時の $h(\xi)$ を $h_n(\xi)$ と書いて、具体的に幾つかの小さい n の多項式を求めると

$$(h_n)" - 2\xi(h_n)' + 2nh_n = 0 \quad (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{3.4.9}$$

$$\begin{aligned}
h_0(\xi) &= 1 \\
h_2(\xi) &= 1 - 2\xi^2 \\
h_4(\xi) &= 1 - 4\xi^2 + \frac{4}{3}\xi^2 \\
&\cdots \\
h_1(\xi) &= \xi \\
h_3(\xi) &= \xi - \frac{2}{3}\xi^3 \\
h_5(\xi) &= \xi - \frac{4}{3}\xi^3 + \frac{4}{15}\xi^4 \\
&\cdots
\end{aligned} \tag{3.4.10}$$

結局 (3.4.3) の解は $\psi(\xi) = h_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$, $\beta = n + 1/2$ で与えられる。一般に (3.4.9) の解は

$$h_n(\xi) = \mathrm{const} \sum_{r=0}^{[n/2]} \frac{(-)^r}{r!(n-2r)!}(2\xi)^{n-2r} \tag{3.4.11}$$

と表わされる。ここに $[n/2]$ は $n/2$ を越えない整数を表わし Gauss 記号と呼ばれる。つまり n=even の時 $[n/2] = n/2$, n=odd の時 $[n/2] = (n-1)/2$ である。また const は一般には n に依存する任意定数である。

(3.4.9) - (3.4.11) で特に const=$n!$ の時 $h_n(\xi)$ を $H_n(\xi)$ と書いて Hermite 多項式という。今簡単のため $\xi \to x$ と書くと $x \in [-\infty, \infty]$ として

$$\begin{aligned}
&\frac{d^2}{dx^2}H_n(x) - 2x\frac{d}{dx}H_n(x) + 2nH_n(x) = 0 \quad (n = 0, 1, 2, \cdots) \\
&H_n(x) = n! \sum_{r=0}^{[n/2]} \frac{(-)^r}{r!(n-2r)!}(2x)^{n-2r}
\end{aligned} \tag{3.4.12}$$

更に

$$g(t, x) = e^{-t^2+2xt} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{t^n}{n!} \tag{3.4.13}$$

で定義される函数を Hermite 多項式の母関数という。(3.4.12) の $H_n(x)$ の表式を使って (3.4.13) の右辺を計算すると

$$\begin{aligned} g(t,x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{r=0}^{[n/2]} \frac{(-)^r}{r!(n-2r)!}(2xt)^{n-2r}(t^2)^r \\ &= \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{n=2r}^{\infty} \frac{1}{(n-2r)!}(2xt)^{n-2r}\frac{(-)^r}{r!}(t^2)^r \\ &= e^{2xt-t^2} \end{aligned} \tag{3.4.14}$$

得られる。また (3.4.13) を t についての Maclaurin 展開と考えて、ガウスの定理を用いると

$$\begin{aligned} H_n(x) &= \frac{d^n}{dt^n}g(t,x)|_{t=0} \\ &= \frac{2^n}{2\pi i}\oint \frac{e^{-t^2+2xt}}{t^{n+1}}dt \\ &= e^{x^2}\frac{2^n}{2\pi i}\oint \frac{e^{-(t-x)^2}}{t^{n+1}}dt \end{aligned} \tag{3.4.15}$$

ここに、複素変数 t の経路積分は座標原点をめぐる任意の円でよい。ここで更に $t \to t+x$ と積分変数変換して原点周りの経路積分を x 周りの経路積分に移すと、もう一度ガウスの定理を用いて

$$\begin{aligned} H_n(x) &= e^{x^2}\frac{2^n}{2\pi i}\oint_C \frac{e^{-z^2}}{(z+x)^{(n+1)}}dz \\ &= e^{x^2}\frac{d^n}{dz^n}e^{-z^2}|_{z=-x} \\ &= (-)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} \end{aligned} \tag{3.4.16}$$

これを Hermite 多項式に対するロドリゲスの公式 (Rodrigues' formula) という。

$$\begin{aligned} H_n(x) &= (-)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} \\ &= n!\sum_{r=0}^{[n/2]} \frac{(-)^r}{r!(n-2r)!}(2x)^{(n-2r)} \end{aligned} \tag{3.4.17}$$

母関数を使うとエルミート多項式の満たす種々の関係式を求めることができる。まず (3.4.13) を t で微分して

$$2(x-t)g(t,x) = \sum_{n=0}^{\infty} H_{n+1}(x)\frac{t^n}{n!} \tag{3.4.18}$$

が得られる。そこで

$$
\begin{aligned}
2tg(t,x) &= \sum_{n=0}^{\infty} 2(n+1)H_n(x)\frac{t^{(n+1)}}{(n+1)!} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} 2nH_{(n-1)}(x)\frac{t^n}{n!} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} 2nH_{(n-1)}(x)\frac{t^n}{n!} \qquad (3.4.19)
\end{aligned}
$$

を使うと

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1} \qquad (3.4.20)$$

が導かれる。また $g(t,x)$ を x で微分して (3.4.21) を使うと

$$\frac{d}{dx}H_n(x) = 2nH_{n-1}(x) \qquad (3.4.21)$$

が得られる。これらを使って

$$\frac{d}{dx}H_n(x) = 2xH_n(x) - H_{n+1}(x) \qquad (3.4.22)$$

となる。これをもう一度 x で微分すると Hermite 多項式の満たす微分方程式が得られる。

$$\frac{d^2}{dx^2}H_n(x) - 2x\frac{d}{dx}H_n(x) + 2nH_n(x) = 0 \qquad (3.4.23)$$

また (3.4.21), (3.4.22) から Hermite 多項式の微分項を消去すると

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0 \qquad (3.4.24)$$

という三つ並んだ n を持つ Hermite 多項式の漸化式が得られる。

Hermite 多項式は重み函数 $w(x) = e^{-x^2}$ を持つ領域 $[-\infty, \infty]$ で定義された直交多項式である。即ち

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}2^n n!\delta_{n,m} \quad (n,m = 0,1,2,\cdot) \qquad (3.4.25)$$

が成り立つ。n,m の偶奇性が違えば積分は当然ゼロである。偶奇性が同じ時には $n \neq m$ の時は固有値が異なることから直交する。そこで $m = n$ の時だけ示せば良い。この時、一方の $H_n(x)$ にロドリゲスの公式を用いて部分積分すると

$$
\begin{aligned}
lhs &= \int (-)^n H_n(x)\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}dx \\
&= (-)^{n-1}\int \frac{d}{dx}H_n(x)\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}e^{-x^2}dx \qquad (3.4.26)
\end{aligned}
$$

ここで積分の端の値は $x \to \pm\infty$ で消える。ここで更に $\frac{d}{dx}H_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$ を使うと

$$lhs = (-)^{n-1}2n\int H_{n-1}(x)\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}e^{-x^2}dx \tag{3.4.27}$$

が得られる。この操作を n 回繰り返すと

$$lhs = (2n)(2(n-1))\cdots 2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}2^n n! \tag{3.4.28}$$

が得られる。

最も簡単に低い n のエルミート多項式を具体的に求める方法は (3.4.14) の母関数 $g(t,x)$ を t の昇冪の順に展開する事である。例えば $H_5(x)$ まで欲しければ $(-t^2+2tx)$ の五次まで展開すれば良い。

$$\begin{aligned}
g(t,x) &= 1 + (-t^2+2xt) + \frac{1}{2!}(t^2-2xt)^2 + \frac{1}{3!}(-t^2+2xt)^3 + \frac{1}{4!}(t^2-2xt)^4 + \frac{1}{5!}(-t^2+2xt)^5 + \dots \\
&= 1 - t^2 + 2xt + \frac{1}{2}t^4 - 2xt^3 + 2x^2t^2 + xt^5 - 2x^2t^4 + \frac{4}{3}x^3t^3 - \frac{4}{3}x^3t^5 + \frac{2}{3}x^4t^4 + \frac{4}{15}x^5t^5 \\
&= 1 - (1-2x^2)t^2 + (\frac{1}{2} - 2x^2 + \frac{2}{3}x^4)t^4 + \cdots \\
&\quad +2xt + (-2x + \frac{4}{3}x^3)t^3 + (x - \frac{4}{3}x^3 + \frac{4}{15})t^5 + \cdots
\end{aligned} \tag{3.4.29}$$

より

$$\begin{aligned}
H_0(x) &= 1 \\
H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\
H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12 \\
&= \cdots \\
H_1(x) &= 2x \\
H_3(x) &= 8x^3 - 12x \\
H_5(x) &= 32x^5 - 160x^3 + 120x \\
&= cdots
\end{aligned} \tag{3.4.30}$$

が得られる。これらの式は (3.4.10) の結果と全体の normalization を除いて完全に一致している。これらはまた (3.4.25) の漸化式を用いて $H_{-1}(x) = 0, H_0(x) = 1$ から出発しても次々に得られる。

調和振動子の固有値問題は、次の様な代数的手法によっても解くことができる。古典的振動運動に対応する量子はフォノン (phonon) と呼ばれ、基底状態はゼロフォノン状態、第一励起状態はフォノン 1 個の状態である。更にエネルギーが高い状態は $n = 0, 1, 2, \cdots$

フォノンの状態であり、その固有エネルギーは $E = \hbar\omega(n + 1/2)$ である。あとで述べる様に、電磁波のベクトルポテンシャルの古典的波動方程式を量子力学的 Schr"odinger 方程式と見做すことによっても調和振動子 Hamiltonian が得られる。電磁波の量子は光子 (フォトン: photon) であり、それ故にフォノンとフォトンは同じ代数的取り扱いが可能である。 フォノンまたはフォトンの個数によって量子状態を指定する方法は第二量子化表示と呼ばれ、そこでは基本量子間の相互作用は無視されている。(3.4.3) の固有値問題で第二量子化の生成、消滅演算子 $a^\dagger$, a を

$$
\begin{aligned}
a &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) \\
a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)
\end{aligned}
\tag{3.4.31}
$$

で定義する。これらはボソン粒子の正準交換関係を見たす。

$$
[a, a] = 0 \quad , \quad [a, a^\dagger] = 1 \quad , \quad [a^\dagger, a^\dagger] = 0 \tag{3.4.32}
$$

(3.4.3) の Hamiltonian は $a^\dagger a + 1/2$ と書けるから、固有値を $n + 1/2$ 波動函数を $\psi_n(\xi) = \langle \xi | \psi_n \rangle = \langle \xi | n \rangle$ と書いて $a^\dagger a \, \langle \xi | n \rangle = n \, \langle \xi | n \rangle$ が得られる。座標表示と第二量子化表示は互いに独立な表示だから、これは $N = a^\dagger a$ として

$$
N \, |n\rangle = n \, |n\rangle \tag{3.4.33}
$$

と表わされる。N はボソンの数演算子 (Number operator) と呼ばれる。特に $n = 0$ の時 $N \, |0\rangle = 0$ から $\left\langle 0 \middle| a^\dagger a \right\rangle 0 = 0$ より

$$
a \, |0\rangle = 0 \tag{3.4.34}
$$

が導かれる。これをボソン真空の定義という。そのエネルギーはゼロではなく、ゼロ点運動のエネルギー $\hbar\omega/2$ である。ボソンが一つ増えるたびに $\hbar\omega$ のエネルギーが付け加わる。次に、$[a^\dagger a, a] = -1$, $[a^\dagger a, a^\dagger] = 1$ より

$$
\begin{aligned}
Na \, |n\rangle &= (aN - a) \, |n\rangle = (n - 1) a \, |n\rangle \\
Na^\dagger \, |n\rangle &= (n + 1) a^\dagger \, |n\rangle
\end{aligned}
\tag{3.4.35}
$$

が得られる。更に

$$
\begin{aligned}
\left[a, (a^\dagger)^n\right] &= n (a^\dagger)^{n-1} \\
\left[a^2, (a^\dagger)^n\right] &= n(n-1) (a^\dagger)^{n-2} \\
&\cdots \\
\left[a^n, (a^\dagger)^n\right] &= n!
\end{aligned}
\tag{3.4.36}
$$

より $\left\langle 0\middle|a^n(a^\dagger)^n\right\rangle 0 = n!$ から normalize された基底として

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n |0\rangle \tag{3.4.37}$$

が得られる。またここから $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$ 等を用いて

$$\begin{aligned}\left\langle n+1\middle|a^\dagger\right\rangle n &= \sqrt{n+1}\\ \langle n-1|a\rangle\, n &= \sqrt{n}\end{aligned} \tag{3.4.38}$$

が分かる。(**??** の normalization は座標表示での normalization

$$\langle \xi|n\rangle = C_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{3.4.39}$$

に対応する。ここに (3.4.25) より $C_n = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}}$ である。 そこで

$$\langle \xi|0\rangle = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{3.4.40}$$

より $H_0(\xi) = 1$ である。また (3.4.38) は

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) C_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \sqrt{n+1} C_{n+1} H_{n+1}(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{3.4.41}$$

より

$$\frac{C_{n+1}}{C_n} = \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}} \tag{3.4.42}$$

を使うと

$$\begin{aligned}&\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = H_{n+1}(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\\ &\frac{d}{d\xi} H_n(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - H_{n+1}(\xi)\end{aligned} \tag{3.4.43}$$

が得られる。同様に

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) C_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \sqrt{n} C_{n-1} H_{n-1}(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\\ &\frac{C_{n-1}}{C_n} = \sqrt{2n}\\ &\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = 2n H_{n-1}(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\\ &\frac{d}{d\xi} H_n(\xi) = 2n H_n\end{aligned} \tag{3.4.44}$$

や Hermite 多項式の微分方程式 (3.4.23)、漸化式 (3.4.25) も得られる。

第二量子化表示は harmonic oscillator cohernt state 等の光学的応用の面でも重要であり、かつ不確定性原理などの量子力学的基本原理とも密接に関係している。

第二量子化表示は harmonic oscillator cohernt state (以下 ho coherent state と略記する) 等の光学的応用の面でも重要であり、かつ不確定性原理などの量子力学的基本原理とも密接に関係している。まず、ボソン粒子の正準交換関係 (3.4.32) と真空の定義 (3.4.34) から出発して複素パラメータ $\alpha \in \boldsymbol{C}$ をもつ ho coherent state $|\alpha\rangle$ を以下の式で定義する。

$$
\begin{aligned}
|\alpha\rangle = \exp\{\alpha a^\dagger - \alpha^* a\}\,|0\rangle = D(\alpha)\,|0\rangle \\
D(\alpha) = e^f \quad \text{with} \quad f = X - X^\dagger \quad \text{and} \quad X = \alpha a^\dagger \\
f^\dagger = -f \quad \text{(anti-hermite)}
\end{aligned}
\tag{3.4.45}
$$

f は anti-hermite だから $D(\alpha) = e^f$ は unitary である。ここで、あとで述べる Baker–Campbell–Hausdorff の公式

$$
e^{At}e^{Bt} = \exp\left\{(A+B)t + \frac{t^2}{2}[A,B] + \frac{t^3}{12}([A,[A,B]] + [B,[B,A]]) + \cdots\right\} \tag{3.4.46}
$$

を用いると $D(\alpha)$ は以下の様に書き換える事ができる。

$$
\begin{aligned}
D(\alpha) &= e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} \\
&= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a}
\end{aligned}
\tag{3.4.47}
$$

実際 (3.4.46) で $A \to A^\dagger, B \to -A$ として

$$
[A^\dagger, A] = |\alpha|^2 [a^\dagger, a] = -|\alpha|^2 \tag{3.4.48}
$$

を使うと、t^3 次以降の項は全て消えて、最後に $t \to 1$ と変えて (3.4.47) が得られる。これらを使うと、次の様な $D(\alpha)$ の性質が得られる。

$$
\begin{aligned}
&1.D^\dagger(\alpha) = D^{-1}(\alpha) = D(-\alpha) \qquad \text{unitary} \\
&2.D^\dagger(\alpha) a D(\alpha) = a + \alpha \\
&3.D^\dagger(\alpha) a^\dagger D(\alpha) = a^\dagger + \alpha^* \\
&4.D(\alpha+\beta) = D(\alpha)D(\beta)e^{-i\mathcal{I}m(\alpha\beta^*)}
\end{aligned}
\tag{3.4.49}
$$

(練習問題) (3.4.49) を証明せよ。

(ヒント) Hausdorff の公式 (2.1.56) (**??**) と (3.4.46) を用いる。4 番目は

$$
\begin{aligned}
D(\alpha+\beta) &= e^{(\alpha+\beta)a^\dagger-(\alpha^*+\beta^*)a} = e^{(\alpha a^\dagger-\alpha^* a)+(\beta a^\dagger-\beta^* a)} \\
&= e^{\alpha a^\dagger-\alpha^* a}e^{\beta a^\dagger-\beta^* a}e^{-\frac{1}{2}[\alpha a^\dagger-\alpha^* a,\beta a^\dagger-\beta^* a]} \\
&= D(\alpha)D(\beta)e^{\frac{1}{2}(\alpha^*\beta-\alpha\beta^*)} \\
&= D(\alpha)D(\beta)e^{-i\mathcal{I}m(\alpha\beta^*)}
\end{aligned}
\tag{3.4.50}
$$

(3.4.47) を用いると

$$
\begin{aligned}
|\alpha\rangle &= D(\alpha)|0\rangle = e^{\alpha a^\dagger-\alpha^* a}|0\rangle \\
&= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}e^{\alpha a^\dagger}e^{-\alpha^* a}|0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}e^{\alpha a^\dagger}|0\rangle \\
&= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!}|0\rangle \\
&= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle
\end{aligned}
\tag{3.4.51}
$$

が得られる。この式、或いは (3.4.49) の 2 番目の式より容易に ho coherent state を特徴づける重要な関係式

$$
a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{3.4.52}
$$

が得られる。即ち $|\alpha\rangle$ は消滅演算子 a の固有値 α の固有状態である。(3.4.51) によると $|\alpha\rangle$ は多くの固定占有数状態 $|n\rangle$ $(n=0,1,2,\cdots)$ の重ね合わせからなっている。その平均的占有数 n_0 は

$$
n_0 = \langle\alpha|N|\alpha\rangle = \left\langle\alpha\middle|a^\dagger a\middle|\alpha\right\rangle = |\alpha|^2 \tag{3.4.53}
$$

である。ここに $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ を使った。((3.4.50) の 1 参照) これを使うと $|\alpha\rangle$ の n-占有数状態の分布 P_n は (3.4.51) より

$$
\begin{aligned}
P_n &= \langle\alpha|n\rangle\langle n|\alpha\rangle \\
&= e^{-|\alpha|^2}\frac{(|\alpha|^2)^n}{n!} \\
&= \frac{(n_0)^n}{n!}e^{-n_0}
\end{aligned}
\tag{3.4.54}
$$

この様な分布は Poisson 分布といわれる。この分布の平均二乗偏差 σ^2 を求めるために

(3.4.52) を用いると

$$\begin{aligned}\langle n^2\rangle &= \langle\alpha|N^2|\alpha\rangle \\ &= \langle\alpha|a^\dagger a a^\dagger|\alpha\rangle = \langle\alpha|(a^\dagger)^2 a^2 + a^\dagger a\rangle\,\alpha = |\alpha|^4 + |\alpha|^2 \\ &= (n_0)^2 + n_0 \end{aligned} \tag{3.4.55}$$

だから

$$\begin{aligned}\Delta n &= \sqrt{\langle n^2\rangle - \langle n|n\rangle^2} = \sqrt{(n_0)^2 + n_0 - (n_0)^2} \\ &= \sqrt{n_0}\end{aligned} \tag{3.4.56}$$

より

$$\frac{\Delta n}{n_0} = \frac{1}{\sqrt{n_0}} \tag{3.4.57}$$

であることがわかる。実は $n_0 \gg 1$ の時 Poisson 分布 (3.4.54) は $\sigma = \sqrt{n_0}$ の時の正規分布 (ガウス分布) に近づくことが分かっている。即ち

$$P_n = \frac{(n_0)^n}{n!}e^{-n_0} \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi n_0}}e^{-\frac{(n-n_0)^2}{2n_0}} \quad \text{for} \quad n_0 \gg 1 \tag{3.4.58}$$

が成り立つ。

(練習問題) Stirling の公式 (の対数をとったもの) $\log n! = n\log n - n + \log\sqrt{2\pi n}$ を用いて (3.4.58) を示せ。　(略解) (3.4.54) の P_n の log を取り Stirling の公式を用いると

$$\begin{aligned}\log P_n &= n\log n_0 - n\log n + n - \log\sqrt{2\pi n} - n_0 \\ &= n\log\frac{n_0}{n} + (n - n_0) - \log\sqrt{2\pi n}\end{aligned} \tag{3.4.59}$$

そこで $x = \frac{n-n_0}{\sqrt{n_0}}$ として $|x| \ll \sqrt{n_0}$、つまり $n = n_0 + \sqrt{n_0}x = n_0\left(1 + \frac{x}{\sqrt{n_0}}\right)$ with $|\frac{x}{\sqrt{n_0}}| \ll 1$ とすると

$$\begin{aligned}\log P_n &= -n\log\left(1 + \frac{x}{\sqrt{n_0}}\right) + \sqrt{n_0}x - \log\sqrt{2\pi n} \\ &= -n\left(\frac{x}{\sqrt{n_0}} - \frac{1}{2}\frac{x^2}{n_0} + \cdots\right) + \sqrt{n_0}x - \log\sqrt{2\pi n} \\ &= -n_0\left(1 + \frac{x}{\sqrt{n_0}}\right)\left(\frac{x}{\sqrt{n_0}} - \frac{1}{2}\frac{x^2}{n_0} + \cdots\right) + \sqrt{n_0}x - \log\sqrt{2\pi n} \\ &= -x^2 + \frac{1}{2}x^2 - \cdots - \log\sqrt{2\pi n} \\ &\sim -\frac{1}{2}x^2 - \cdots - \log\sqrt{2\pi n_0}\end{aligned} \tag{3.4.60}$$

より (3.4.58) が得られる。ここに $n_0 \gg 1$ かつ $|\frac{x}{\sqrt{n_0}}| \ll 1$ である。

次に ho coherent state の直交性と完全性について議論する。 (3.4.49) の 4 番目の性質から、それを真空で挟んで

$$\begin{aligned}
\langle\alpha|\beta\rangle &= \langle 0| D^\dagger(\alpha)D(\beta)|0\rangle = \langle 0| D(-\alpha)D(\beta)|0\rangle \\
&= \langle 0| D(-\alpha+\beta)|0\rangle e^{-i\mathcal{I}m(\alpha\beta^*)} = \langle 0|\beta-\alpha\rangle e^{-i\mathcal{I}m(\alpha\beta^*)} \\
&= e^{-\frac{|\beta-\alpha|^2}{2} - i\mathcal{I}m(\alpha\beta^*)}
\end{aligned} \tag{3.4.61}$$

そこで $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ である事はその定義から当然であるが、更に

$$|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 = e^{-|\alpha-\beta|^2} \tag{3.4.62}$$

である事が分かる。即ち ho coherent states $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ の重なり大きさは、複素平面上の 2 点 $\alpha, \beta \in \boldsymbol{C}$ の間の距離が大きいほど急激に小さくなる。次に完全性については、(3.4.51) を用いて

$$\int d^2\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} |n\rangle\langle m| \int d^2\alpha e^{-|\alpha|^2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \frac{(\alpha^*)^m}{\sqrt{m!}} \tag{3.4.63}$$

を考える。ここに $\int d^2\alpha = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{R}e\alpha\mathcal{I}m\alpha$ の複素平面 $\boldsymbol{C}$ 全体にわたる 2 次元積分である。2 次元極座標 $\alpha = re^{i\theta}$ を取ってこの積分を実行すると、$d^2\alpha = rdrd\theta$ ($r = 0$-$\infty, \theta = 0$-2π) より

$$\begin{aligned}
&\int d^2\alpha e^{-|\alpha|^2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \frac{(\alpha^*)^m}{\sqrt{m!}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \int_0^{\infty} drr^{n+m+1} e^{-r^2} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i(n-m)\theta} \\
&= \delta_{n,m} \frac{2\pi}{n!} \int_0^{\infty} drr^{2n+1} e^{-r^2} \\
&= \delta_{n,m}\pi
\end{aligned} \tag{3.4.64}$$

そこで (3.4.63) は

$$\frac{1}{\pi}\int d^2\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = 1 \tag{3.4.65}$$

となる。この様に、正規直交基底でない基底が完全性を満たす時 over completeness を満たすという。

次に座標表示の ho coherent state を求めよう。 (3.4.51) より $\langle\xi|n\rangle = C_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ (see (3.4.39)) かつ $C_n = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}}$ (see (3.4.25)) を用いると

$$
\begin{aligned}
\langle\xi|\alpha\rangle &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle\xi|n\rangle \\
&= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}} H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\
&= e^{\frac{|\alpha|^2}{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right)^n}{n!} H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\
&= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right)^n}{n!} H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\
&= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha^2}{2} + \sqrt{2}\xi\alpha - \frac{1}{2}\xi^2} \\
&= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\left(\xi - \sqrt{2}\alpha\right)^2 + \frac{\alpha^2}{2}}
\end{aligned}
\tag{3.4.66}
$$

ここに $t = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}$ とおいたときの Hermite 多項式の母関数 $g(\xi, t) = e^{-t^2 + 2\xi t} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) \frac{t^n}{n!}$ (see (3.4.13)) を用いた。ここに

$$
\begin{aligned}
\langle\xi|\alpha\rangle e^{\frac{|\alpha|^2}{2}} &= \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\left(\xi - \sqrt{2}\alpha\right)^2 + \frac{\alpha^2}{2}} \\
&= A(\xi, \alpha)
\end{aligned}
\tag{3.4.67}
$$

とおくと、積分核 $A(\xi, \alpha)$ は調和振動子基底の作る $L^2(\boldsymbol{R})$ 可積分解析函数 $f(\xi)$ と、数学分野でよく知られた複素整関数 $f(\alpha)$ からなる函数空間 (Bargmann space という) との間の積分変換を与える。 (この積分変換は Bargmann-Segal transformation と呼ばれる。) まず (3.4.51) から

$$
v_n(z) = \frac{z^n}{\sqrt{n!}} = \langle n|z\rangle e^{\frac{|z|^2}{2}} \tag{3.4.68}
$$

を定義する。以降、複素変数 α を $z \in \boldsymbol{C}$ と書くことにする。また複素函数に対する積分測度 (integral measure) $\mu(z)$ を

$$
\int d\mu(z) = \frac{1}{\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{R}e\ z\ d\mathcal{I}m\ z\ e^{-|z|^2} \tag{3.4.69}
$$

と定義して、複素函数 $f(z), g(z)$ の内積を

$$
(f, g) = \int d\mu f(z) g^*(z) \tag{3.4.70}
$$

で定義する。例えば $f = v_n, g = v_m$ の時 $f(z) = v_n(z), g(z) = v_m(z)$ で、ho coherent state の完全性 (3.4.63) を用いると

$$\begin{aligned}(v_n, v_m) &= \int d\mu(z) v_n(z)(v_m(z))^* \\ &= \int d\mu(z) \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \frac{(z^*)^m}{\sqrt{m!}} \\ &= \frac{1}{\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{R}e\ z\ d\mathcal{I}m\ z\ e^{-|z|^2} \langle n|z\rangle\, e^{\frac{|z|^2}{2}} \langle z|m\rangle\, e^{\frac{|z|^2}{2}} \\ &= \frac{1}{\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{R}e\ z\ d\mathcal{I}m\ z\ \langle n|z\rangle \langle z|m\rangle \\ &= \langle n|m\rangle = \delta_{n,m} \end{aligned} \tag{3.4.71}$$

が得られる。この結果は、2 行目の 2 次元積分を直接計算しても得られる。(3.4.71) は $\{v_n(z)\}$ $(n = 0, 1, 2, \cdots)$ が Bargmann space での正規直交基底を成していることを示している。実は、これらは実空間での調和振動子基底函数 $\{\psi_n(\xi)\}$ に対応する Bargmann image である。一方 $\{v_n(z)\}$ の完全性は

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty} v_n(z)(v_n(z'))^* &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z(z')^*)^n}{n!} = e^{z(z')^*} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|z\rangle\, e^{\frac{|z|^2}{2}} \langle z'|n\rangle\, e^{\frac{|z'|^2}{2}} = \langle z'|z\rangle\, e^{\frac{|z|^2+|z'|^2}{2}} \\ &= e^{-\frac{|z'-z|^2}{2} - i\mathcal{I}m(z'z^*) + \frac{|z|^2+|z'|^2}{2}} \\ &= e^{\frac{(z')^*z + z^*z' - z'z^* + (z')^*z}{2}} = e^{z(z')^*} \end{aligned} \tag{3.4.72}$$

である。ここに、後半では (3.4.61) を用いた。 $e^{z(z')^*}$ は Bargmann space における再生核 (reproducing kernel) と言われ、実空間における Dirac delta $\delta(\xi - \xi')$ と同じ役割を果たす。実際

$$f(z) = \int d\mu(z') e^{z(z')^*} f(z') \tag{3.4.73}$$

が成り立つ。 $f(z)$ は (3.4.69) の $v_n(z)$ に倣って

$$\begin{aligned} f(z) &= \langle f|z\rangle\, e^{\frac{|z|^2}{2}} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle f|n\rangle \langle n|z\rangle\, e^{\frac{|z|^2}{2}} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} f_n^* v_n(z) \end{aligned} \tag{3.4.74}$$

によって定義さているから、(3.4.73) の右辺は

$$r.h.s.\ of(3.4.73) = \int d\mu(z') \sum_{n=0}^{\infty} v_n(z)(v_n(z'))^* \sum_{m=0}^{\infty} f_m^* v_m(z')$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} f_n^* v_n(z) = f(z) \tag{3.4.75}$$

と証明される。ここに

$$f_n = \langle n|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, \langle n|\xi\rangle \, \langle \xi|f\rangle$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \psi_n(\xi) f(\xi) \tag{3.4.76}$$

は通常函数 $f(\xi)$ の調和振動子成分 (ho component) である。(3.4.74) は Bargmann space における調和振動子展開で、通常の展開 $f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \psi_n(\xi)$ の複素共役 (complex conjugate) となっていることが分かる。

$v_n(z)$ を使うと (3.4.67) の $A(\xi, z)$ は

$$A(\xi, z) = \langle \xi|z\rangle \, e^{|\alpha|^2} 2$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \langle \xi|n\rangle \, \langle n|z\rangle \, e^{|\alpha|^2} 2$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(\xi) v_n(z) \tag{3.4.77}$$

と表わされる。これを使って

$$\int d\mu(z) A(\xi, z) A^*(\xi', z) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(\xi)\psi_n(\xi') = \langle \xi|\xi'\rangle = \delta(\xi - \xi')$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} A(\xi, z) A^*(\xi', z) = \sum_{n=0}^{\infty} v_n(z) v_n^*(z') = e^{z(z')^*} \tag{3.4.78}$$

であることが分かる。更に

$$f(\xi) = \int d\mu(z) A(\xi, z) f^*(z)$$
$$f(z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi A(\xi, z) f^*(\xi) \tag{3.4.79}$$

が容易に示せる。これを Bargmann-Segal 変換という。

長さの次元を復活して、基底状態の調和振動子波動函数を

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} = \left(\frac{2\gamma}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\gamma x^2} \tag{3.4.80}$$

と書くと、$\gamma = \frac{m\omega}{2\hbar}$ として

$$\begin{aligned}
A_\gamma(x,z) &= \left(\frac{2\gamma}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\gamma\left(x-\frac{1}{\sqrt{\gamma}}z\right)^2+\frac{|z|^2}{2}} && (3.4.81)\\
&= \left(\frac{2\gamma}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\gamma x^2+2\sqrt{\gamma}zx-\frac{|z|^2}{2}}\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\psi_n(x)v_n(z)\\
f(x) &= \int d\mu(z)A_\gamma(x,z)f^*(z)\\
&= \int d\mu(z)\sum_{n=0}^{\infty}\psi_n(x)v_n(z)\sum_{m=0}^{\infty}f_m v_m^*(z)\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}f_n\psi_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} < x|n >< n|f > && (3.4.82)\\
&= \langle x|f\rangle\\
f(z) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx A_\gamma(x,z)f^*(x)\\
&= \sum_{n=0}^{\infty} f_n^* v_n(z) && (3.4.83)
\end{aligned}$$

が得られる。

最後に ho coherent state の不確定性関係について調べてみる。まず (3.4.31) を逆に解いて

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(a+a^\dagger) \quad , \quad p_\xi = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{\sqrt{2}}(a-a^\dagger) \tag{3.4.84}$$

より、占有数状態 $|n\rangle$ に対しては容易に

$$\begin{aligned}
&\langle n|\xi\rangle n = \langle n|p_\xi\rangle n = 0\\
&\langle n|\xi^2\rangle n = n+\frac{1}{2} \quad , \quad \langle n|p_\xi^2\rangle n = \hbar^2\left(n+\frac{1}{2}\right)\\
&\Delta\xi\Delta p_\xi = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right) \geqq \frac{\hbar}{2} && (3.4.85)
\end{aligned}$$

であることが分かる。即ち座標と運動量の不確定性は $n=0$ 基底状態が一番小さく、励起状態では古典的様相が益々強くなる。

一方 ho coherent state $|\alpha\rangle$ に対しては

$$
\begin{aligned}
\langle\alpha|\xi|\alpha\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\alpha^*) \\
\langle\alpha|p_\xi|\alpha\rangle &= \hbar\frac{1}{i\sqrt{2}}(\alpha-\alpha^*) \\
\left\langle\alpha\middle|\xi^2\middle|\alpha\right\rangle &= \frac{1}{2}\left((\alpha+\alpha^*)^2+1\right) \\
\left\langle\alpha\middle|p_\xi^2\middle|\alpha\right\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2}\left((\alpha-\alpha^*)^2-1\right) \\
\Delta\xi &= \frac{1}{\sqrt{2}} \quad , \quad \Delta p_\xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\
\Delta\xi\Delta p_\xi &= \frac{\hbar}{2}
\end{aligned}
\tag{3.4.86}
$$

が得られる。はじめの 2 式は、ho coherent state のパラメータ α の実部と虚部がそれぞれ座標と運動量の平均値に結び付いていることを示している。また最後の式は、ho coherent state が種々の占有数状態の重ね合わせであるにも関わらず常に best の (基底状態と同じ) 不確定性を持っていることを示している。座標と運動量の標準偏差値は ($\hbar$ を除いて) 同じであるが、これらを一方の不確定性を小さくもう一方の不確定性を大きくすることも出来る。それらの状態は squeezed coherent state と呼ばれる。しかしながら、既に述べた不確定性関係 $\Delta\xi\Delta p_\xi \geqq \frac{\hbar}{2}$ を決して越えることが出来ないのは当然である。

3.5　角運動量の固有値問題

回転等の周期運動は有界運動なので、角運動量の固有値は当然離散的となる。その波動函数は角度函数である。Schrödinger 方程式のところで既に述べた様に、$\hbar$ を単位として計った角運動量作用素 $\boldsymbol{L}=\frac{1}{\hbar}[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}]$ は 3 次元極座標の角度成分 θ,φ だけで表わされる。しかしながら (3.1.26) の時の様に 3 次元直交成分 x,y,z を使って簡単に計算される場合も多く、ここでは双方の表示を使い分ける。

まず角運動量演算子の交換関係だけから導かれる一般的性質を議論する。これらは角運動量代数と呼ばれる。一番基本的な交換関係は

$$[L_x,L_y]=iL_z \tag{3.5.1}$$

である。この式は (x,y,z) (或いは (1, 2, 3)) を cyclic に回して $(y,z,x),(z,x,y)$ として

も成り立っている。この様な表式を一般的に表わす方法は、3 次元の反対称テンソル

$$e_{i,j,k} = \begin{cases} 1 & \text{for} \quad (i,j,k) = (1,2,3),(2,3,1),(3,1,2) \\ -1 & \text{for} \quad (i,j,k) = (1,3,2),(3,2,1),(2,1,3) \\ 0 & \qquad \text{otherwise} \end{cases} \tag{3.5.2}$$

を用いることである。これを使うと (3.5.1) は

$$[L_i, L_j] = i \sum_{k=1}^{3} e_{i,j,k} L_k \tag{3.5.3}$$

と表わされる。同じ添え字については和を取るといういわゆる Einstein の規約を用いて、$[L_i, L_j] = ie_{i,j,k}L_k$ と書くことも多い。この規約を使うと $L_i = \frac{1}{\hbar} e_{i,j,k} x_j p_k$ と書ける。

(練習問題) $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{i,j}$ を用いて

$$[L_i, x_j] = ie_{i,j,k}x_k \quad , \quad [L_i, p_j] = ie_{i,j,k}p_k \tag{3.5.4}$$

示せ。更にこれらを使って (3.5.3) を示せ。ここに

$$\begin{aligned} e_{i,j,k}e_{i,j',k'} &= \delta_{j,j'}\delta_{k,k'} - \delta_{j,k'}\delta_{k,j'} \\ e_{i,j,k}e_{i,j,k} &= 3! = 6 \end{aligned} \tag{3.5.5}$$

である。

あとで見る様に、角運動量演算子は座標系の回転に結びついた運動の生成子でありベクトル、テンソルの概念と密接に関係している。これらが座標系の回転に対して座標と同じ様に変換することにより、一般のベクトル $\boldsymbol{A}$ に対して常に

$$[L_i, A_j] = ie_{i,j,k}A_k \tag{3.5.6}$$

が成り立つ。上で述べた (3.5.4) や (3.5.3) はすべて (3.5.6) の特別の場合である。

角運動量作用素 $\boldsymbol{L}$ は Hermite (self-adjoint) 演算子 $\boldsymbol{L}^\dagger = \boldsymbol{L}$ であり、$\boldsymbol{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ である事から容易に $[\boldsymbol{L}^2, L_z] = 0$ であり $\boldsymbol{L}^2$ と L_z は同時対角化可能であることが分かる。 (x, y, z) を cyclic に回すことにより、$\boldsymbol{L}^2$ と L_x 或いは $\boldsymbol{L}^2$ と L_y もそれぞれ同時対角化可能であることが分かるが、普通は $\boldsymbol{L}^2$ と L_z を採用してこれを「角運動量の量子化軸を z-軸に取る」という。更に $L_+ = L_x + iL_y$, $L_- = L_x - iL_y$ を定義すると $L_-^\dagger = L_+$ であり、基本的関係式として (3.1.26) - (3.1.28) の満たす次の交換関係を導くことが出

来る。

$$
\begin{aligned}
[\boldsymbol{L}^2, L_x] = [\boldsymbol{L}^2, L_y] = [\boldsymbol{L}^2, L_z] = 0 \\
L_\pm = L_x \pm iL_y \\
L_\pm = L_\mp^\dagger \quad , \quad [L_+, L_-] = 2L_z \\
\frac{1}{2}(L_+L_- + L_-L_+) = L_x^2 + L_y^2 \\
\boldsymbol{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L_-L_+ + L_z + L_z^2 = L_+L_- - L_z + L_z^2 \\
[L_z, L_\pm] = \pm L_\pm
\end{aligned}
\tag{3.5.7}
$$

まず L_z と $\boldsymbol{L}^2$ の同時固有状態を $|m\rangle$ と書いて

$$
L_z |m\rangle = m |m\rangle \quad , \quad \boldsymbol{L}^2 |m\rangle = a |m\rangle \\
\text{with} \quad \langle m|m'\rangle = \delta_{m,m'}
\tag{3.5.8}
$$

とする。ここに a は m の値に関係しない $\boldsymbol{L}^2$ の固有値である。まず $\boldsymbol{L}$ が Hermite である事と (3.5.7) から、実数 m の値に必ず上限値、下限値が存在することを示すことが出来る。実際

$$
L_z L_\pm |m\rangle = (m \pm 1) L_\pm |m\rangle
\tag{3.5.9}
$$

から $L_\pm |m\rangle \propto |m \pm 1\rangle$ であり $L_\pm$ は m の値を一つずつ上げ下げする、いわゆる昇降演算子であることが分かる。L_+ を何回も作用させて大きな m をもつ固有状態 $|m\rangle$ が作れると仮定すると、これらはいずれも $\boldsymbol{L}^2$ の固有状態であるから $\langle m|L_x^2 + L_y^2|m\rangle = \langle m|\boldsymbol{L}^2 - L_z^2|m\rangle = a - m^2 \geqq 0$ を満たすことが出来ない。そこで必ず最大値 m_{max} が存在する。これを $\ell \geqq 0$ と書くと $L_+ |\ell\rangle = 0$ であり $L_z |\ell\rangle = \ell |\ell\rangle$ であるから、固有値 a は

$$
a = \langle \ell|\boldsymbol{L}^2|\ell\rangle = \langle \ell|L_-L_+ + L_z^2 + L_z|\ell\rangle = \ell(\ell+1)
\tag{3.5.10}
$$

であることが分かる。そこで (3.5.8) は $|m\rangle$ を $|m\rangle = |\ell m\rangle$ と書いて

$$
L_z |\ell m\rangle = m |\ell m\rangle \quad , \quad \boldsymbol{L}^2 |\ell m\rangle = \ell(\ell+1) |\ell m\rangle \\
\text{with} \quad \langle \ell m|\ell m'\rangle = \delta_{m,m'}
\tag{3.5.11}
$$

となる。次に (3.5.7) を使うと

$$
\begin{aligned}
\langle \ell m|L_-L_+|\ell m\rangle &= \langle \ell m|\boldsymbol{L}^2 - L_z^2 - L_z|\ell m\rangle = \ell(\ell+1) - m^2 - m \\
&= (\ell - m)(\ell + m) + (\ell - m) = (\ell - m)(\ell + m + 1) \\
\langle \ell m|L_+L_-|\ell m\rangle &= \langle \ell m|\boldsymbol{L}^2 - L_z^2 + L_z|\ell m\rangle = \ell(\ell+1) - m^2 + m \\
&= (\ell - m)(\ell + m) + (\ell + m) = (\ell + m)(\ell - m + 1)
\end{aligned}
\tag{3.5.12}
$$

だから $L_\pm |m\rangle \propto |m\pm 1\rangle$ に注意すると phase を除いて

$$L_\pm |\ell m\rangle = \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m+1)}\,|\ell, m\pm 1\rangle \tag{3.5.13}$$

であることが分かる。当然の事ながら $L_+ |\ell,\ell\rangle = 0$ である。また $\langle m|L_x^2 + L_y^2\rangle m = \langle m|\boldsymbol{L}^2 - L_z^2|m\rangle = \ell(\ell+1) - m^2 \geqq 0$ から $|m| \leqq \sqrt{\ell(\ell+1)}$ が分かる。そこで $|\ell,\ell\rangle$ の状態 (これを maximum weight の状態という) に L_- をかけて次々と m の値を下げていくと $L_-^{\ell-m}|\ell,\ell\rangle \propto |\ell, m\rangle$ が得られる。特に $m=-\ell$ とすると $L_-^{2\ell}|\ell,\ell\rangle \propto |\ell,-\ell\rangle$ であるが、(3.5.13) の特別の場合として $L_-|\ell,-\ell\rangle = 0$ が得られるから $|\ell,-\ell\rangle$ は minimum weight の状態である。結局 (3.5.11) の固有状態 $|\ell,m\rangle$ として $m = \ell, \ell-1, \cdots -\ell$ の $2\ell+1$ 個の状態が可能である。ここから $2\ell+1$ が非負整数であり $\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots$ だけが可能であることが分かる。

以上の結果は $\boldsymbol{L} = (L_x, L_y, L_z)$ の Hermite 性と (3.5.3) の交換関係だけから導かれている事に注意しよう。軌道角運動量は ℓ, m が整数の場合である。次の章で見る様に、原子核・素粒子にはスピン角運動量と呼ばれるものがあって一般にはその固有値は半整数値である。その双方の和が全角運動量である。また多粒子系では、それぞれの粒子の全角運動量を加えたものが系全体の全角運動量である。これを $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}^{(1)} + \boldsymbol{J}^{(2)}$ 等としてみよう。$\boldsymbol{J}^{(\alpha)}$ それぞれが交換関係 $[J_i^{(\alpha)}, J_j^{(\alpha)}] = ie_{i,j,k}J_k^{(\alpha)}$ を満たすとすると、全角運動量 $\boldsymbol{J} = \sum_\alpha \boldsymbol{J}^{(\alpha)}$ の交換関係は異なる粒子の演算子は交換可能である事により

$$\begin{aligned}[J_i, J_j] &= [\sum_\alpha J_i^{(\alpha)}, \sum_\beta J_j^{(\beta)}] = \sum_\alpha [J_i^{(\alpha)}, J_j^{(\alpha)}] \\ &= \sum_\alpha ie_{i,j,k}J_k^{(\alpha)} = ie_{i,j,k}J_k \end{aligned} \tag{3.5.14}$$

となり、再び (3.5.3) の交換関係が成り立っていることが分かる。

軌道角運動量 $\boldsymbol{L}$ に対して具体的に角運動量状態 $|\ell,m\rangle$ を構成するためには、(練習問題-1) で導いた極座標表示を用いるのが便利である。まず z-軸周りの φ 回転に対しては (3.1.26) から $L_z|m\rangle = m|m\rangle$ は

$$\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} = m\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \tag{3.5.15}$$

となる。ここに

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \tag{3.5.16}$$

は角度波動函数 $\langle\varphi|m\rangle$ であり、$\Phi_m(2\pi) = \Phi(0)$ より m は整数である。また $\Phi_m(\varphi)$ は次の正規直交関係を満たす。

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*_m(\varphi)\Phi_{m'}(\varphi)d\varphi = \delta_{m,m'} \tag{3.5.17}$$

更に $\langle\theta,\varphi|\ell,m\rangle = Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = \Theta_{\ell,m}(\theta)\Phi_m(\varphi)$ と θ に依存する部分を分離して (3.5.11) を

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{L}^2 Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) &= \ell(\ell+1)Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)\\
L_z Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) &= mY_{\ell,m}(\theta,\varphi)\\
Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) &= \Theta_{\ell,m}(\theta)\Phi_m(\varphi)
\end{aligned} \tag{3.5.18}$$

と書くと、(3.1.28)) から $\Theta_{\ell,m}(\theta)$ は次の微分方程式を満たす。($Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ を Y-函数という。)

$$\left[-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta_{\ell,m}(\theta) = \ell(\ell+1)\Theta_{\ell,m}(\theta) \tag{3.5.19}$$

この解を調べる前に次の様な解法を考える。まず (3.1.27) から

$$L_\pm = e^{\pm\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{3.5.20}$$

であるので、これを (3.5.13) で使うと

$$\left(\pm\frac{d}{d\theta}-m\cot\theta\right)\Theta_{\ell,m}(\theta) = \sqrt{(\ell\mp m)(\ell\pm m+1)}\Theta_{\ell,m\pm1}(\theta) \tag{3.5.21}$$

が得られる。特に $m=\ell$ として上の符号の場合を使うと

$$\left(\frac{d}{d\theta}-\ell\cot\theta\right)\Theta_{\ell,\ell}(\theta) = 0 \tag{3.5.22}$$

となる。この微分方程式は簡単に解けて

$$\Theta_{\ell,\ell}(\theta) = A_\ell(\sin\theta)^\ell \tag{3.5.23}$$

が得られる。ここに A_ℓ は nomalization factor で

$$\begin{aligned}
|A_\ell|^{-2} &= \int_0^\pi (\sin\theta)^{2\ell}\sin\theta d\theta\\
&= \int_{-1}^1 (1-x^2)^\ell dx = 2^{2\ell}\int_{-1}^1\left(\frac{1+x}{2}\right)^\ell\left(\frac{1-x}{2}\right)^\ell dx
\end{aligned} \tag{3.5.24}$$

ここに積分変数を $t=(1+x)/2$ と変換すると $x=2t-1,(1-x)/2=1-t$ で

$$
\begin{aligned}
|A_\ell|^{-2} &= 2^{2\ell+1}\int_0^1 t^\ell(1-t)^\ell dt = 2^{2\ell+1}B(\ell+1,\ell+1)\\
&= 2^{2\ell+1}\frac{(\Gamma(\ell+1))^2}{\Gamma(2\ell+2)} = 2^{2\ell+1}\frac{(\ell!)^2}{(2\ell+1)!}\\
&= 2\frac{(2^\ell\ell!)^2}{(2\ell+1)!}
\end{aligned}
\tag{3.5.25}
$$

から phase を除いて決まる。ここでは $(-)^\ell$ を補って

$$
A_\ell = (-)^\ell\frac{1}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2}}
\tag{3.5.26}
$$

としておく。一般の $\Theta_{\ell,m}(\theta)$ に対しては、(3.5.21) の下の符号の式から

$$
\begin{aligned}
\Theta_{\ell,m-1}(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}}\left(-\frac{d}{d\theta}-m\cot\theta\right)\Theta_{\ell,m}(\theta)\\
&= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}}\frac{-1}{\sin^m\theta}\frac{d}{d\theta}\sin^m\theta\ \Theta_{\ell,m}(\theta)\\
&= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}}\frac{1}{\sin^{m-1}\theta}\frac{d}{d\cos\theta}\sin^m\theta\ \Theta_{\ell,m}(\theta)
\end{aligned}
\tag{3.5.27}
$$

である事から、まず $m=\ell$ として

$$
\Theta_{\ell,\ell-1}(\theta) = \frac{A_\ell}{\sqrt{(1\cdot(2\ell))}}\frac{1}{\sin^{\ell-1}\theta}\frac{d}{d\cos\theta}\sin^{2\ell}\theta
\tag{3.5.28}
$$

次に $m=\ell-1$ として

$$
\begin{aligned}
\Theta_{\ell,\ell-2}(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{2\cdot(2\ell-1)}}\frac{1}{\sin^{\ell-2}\theta}\frac{d}{d\cos\theta}\sin^{\ell-1}\theta\ \Theta_{\ell,\ell-1}(\theta)\\
&= \frac{A_\ell}{\sqrt{1\cdot2\cdot(2\ell)(2\ell-1)}}\frac{1}{\sin^{\ell-2}\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^2\sin^{2\ell}\theta
\end{aligned}
\tag{3.5.29}
$$

$m=\ell-2$ ならば

$$
\begin{aligned}
\Theta_{\ell,\ell-3}(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{3\cdot(2\ell-2)}}\frac{1}{\sin^{\ell-3}\theta}\frac{d}{d\cos\theta}\sin^{\ell-2}\theta\ \Theta_{\ell,\ell-2}(\theta)\\
&= \frac{A_\ell}{\sqrt{1\cdot2\cdot3\cdot(2\ell)(2\ell-1)(2\ell-2)}}\frac{1}{\sin^{\ell-3}\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^3\sin^{2\ell}\theta
\end{aligned}
\tag{3.5.30}
$$

これを $\ell - m$ 回繰り返して

$$
\begin{aligned}
\Theta_{\ell,m}(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m)\cdot(\ell+m+1)}}\frac{1}{\sin^m\theta}\frac{d}{d\cos\theta}\sin^{m-1}\theta\;\Theta_{\ell,m-1}(\theta) \\
&= \frac{A_\ell}{\sqrt{1\cdot 2\cdot 3\cdots(\ell-m)\cdot(2\ell)(2\ell-1)(2\ell-2)\cdots(\ell+m+1)}} \\
&\quad \times\frac{1}{\sin^m\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell-m}\sin^{2\ell}\theta \\
&= (-)^\ell\frac{1}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2}}\sqrt{\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!(2\ell)!}}\frac{1}{\sin^m\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell-m}\sin^{2\ell}\theta \\
&= \frac{(-)^\ell}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell+m)!}{2(\ell-m)!}}\frac{1}{\sin^m\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell-m}\sin^{2\ell}\theta \\
&= \frac{(-)^\ell}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell+m)!}{2(\ell-m)!}}\frac{1}{(1-x^2)^{m/2}}\left(\frac{d}{dx}\right)^{\ell-m}(1-x^2)^\ell|_{x=\cos\theta}
\end{aligned}
\tag{3.5.31}
$$

が得られる。ここに $m = \ell, \ell-1, \cdots, -\ell$ である。特に $m = 0$ の時

$$
\begin{aligned}
\Theta_{\ell,0}(\theta) &= \frac{(-)^\ell}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{2}}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell}\sin^{2\ell}\theta \\
&= \frac{(-)^\ell}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{2}}\left(\frac{d}{dx}\right)^{\ell}(1-x^2)^\ell|_{x=\cos\theta}
\end{aligned}
\tag{3.5.32}
$$

となる。ここに ℓ 次の多項式

$$
P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell\ell!}\left(\frac{d}{dx}\right)^\ell(x^2-1)^\ell \tag{3.5.33}
$$

は Legendre 多項式と呼ばれ、Hermite 多項式と同様に直交多項式系の一種である。これを使って (3.5.32) は

$$
\Theta_{\ell,0}(\theta) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{2}}P_\ell(\cos\theta) \tag{3.5.34}
$$

と表わされる。Legendre 多項式は (3.5.19) で $m = 0$ と置いた時の微分方程式

$$
\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial P_\ell(\cos\theta)}{\partial\theta}\right) + \ell(\ell+1)P_\ell(\cos\theta) = 0 \tag{3.5.35}
$$

を満足する。更に、一般の $m=1,2,\cdots,\ell$ に対して

$$
\begin{aligned}
P_\ell^m(\cos\theta) &= \sin^m\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^m P_\ell(\cos\theta) \\
&= \frac{1}{2^\ell \ell!}\sin^m\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell+m}(\cos^2\theta-1)^\ell
\end{aligned}
\tag{3.5.36}
$$

を Legendre 陪多項式という。(3.5.31) の $\Theta_{\ell,m}(\theta)$ はこの Legendre の陪多項式で表わされる。これを見るためにもう一度 (3.5.21) に戻って、今度は上の符号の式から

$$
\begin{aligned}
\Theta_{\ell,m+1}(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}}\left(\frac{d}{d\theta}-m\cot\theta\right)\Theta_{\ell,m}(\theta) \\
&= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}}\sin^m\theta\frac{d}{d\theta}\frac{1}{\sin^m\theta}\ \Theta_{\ell m}(\theta) \\
&= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}}(-)(\sin^{m+1}\theta)\frac{d}{d\cos\theta}\frac{1}{\sin^m\theta}\ \Theta_{\ell m}(\theta)
\end{aligned}
\tag{3.5.37}
$$

そこで、まず $m=0$ として (3.5.34) を用いると

$$
\begin{aligned}
\Theta_{\ell 1}(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{\ell(\ell+1)}}(-\sin\theta)\frac{d}{d\cos\theta}\Theta_{\ell 0}(\theta) \\
&= \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{2\ell(\ell+1)}}(-\sin\theta)\frac{d}{d\cos\theta}P_\ell(\cos\theta)
\end{aligned}
\tag{3.5.38}
$$

次に $m=1$ として

$$
\begin{aligned}
\Theta_{\ell 2}(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{(\ell-1)(\ell+2)}}(-)(\sin^2\theta)\frac{d}{d\cos\theta}\frac{1}{\sin\theta}\ \Theta_{\ell 1}(\theta) \\
&= (-)^2\sqrt{\frac{2\ell+1}{2(\ell-1)\ell(\ell+1)(\ell+2)}}(\sin^2\theta)\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^2 P_\ell(\theta)
\end{aligned}
\tag{3.5.39}
$$

これを繰り返して

$$
\begin{aligned}
\Theta_{\ell m}(\theta) &= (-)^m\sqrt{\frac{2\ell+1}{2(\ell-m+1)(\ell+m+2)\cdots(\ell+m)}}(\sin^m\theta)\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^m P_\ell(\cos\theta) \\
&= (-)^m\sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{2(\ell+m)!}}(\sin^m\theta)\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^m P_\ell(\cos\theta) \\
&= (-)^m\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{2}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P_\ell^m(\cos\theta)
\end{aligned}
\tag{3.5.40}
$$

が $m=1,2,\cdots\ell$ に対して得られる。これを (3.5.31) と等しいとおくと

$$P_\ell^m(\cos\theta) = (-)^{\ell-m}\frac{1}{2^\ell\ell!}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\frac{1}{\sin^m\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell-m}\sin^{2\ell}\theta \tag{3.5.41}$$

という Legendre 陪多項式のまた別の表式が得られる。Legendre 倍多項式は $\Theta_{\ell,m}(\theta)$ と同じ微分方程式を満たす。即ち

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial P_\ell^m(\cos\theta)}{\partial\theta}\right)+\left(\ell(\ell+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)P_\ell^m(\cos\theta)=0 \tag{3.5.42}$$

$m=-1,-2,\cdots,-\ell$ の時の $P_\ell^m(\cos\theta)$ と $\Theta_{\ell,m}(\theta)$ の間の関係は、符号に注意が必要である。これを調べるために再び (3.5.27) へ戻って $m=0$ として (3.5.34) を使って

$$\Theta_{\ell,-1}(\theta) = (-)\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{2\ell(\ell+1)}}\sin\theta\frac{d}{d\theta}P_\ell(\cos\theta) \tag{3.5.43}$$

更に $m=-1$ として

$$\begin{aligned}\Theta_{\ell,-2}(\theta) &= (-)\frac{1}{\sqrt{(\ell-1)(\ell+2)}}\sin^2\theta\frac{d}{d\theta}\sin^{-1}\theta\ \Theta_{\ell,-1}(\theta)\\ &= \sqrt{\frac{(2\ell+1}{2}}\sqrt{\frac{1}{(\ell-1)\ell(\ell+1)(\ell+2)}}\sin^2\theta\left(\frac{d}{d\theta}\right)^2 P_\ell(\theta)\end{aligned} \tag{3.5.44}$$

この操作を繰り返して

$$\begin{aligned}\Theta_{\ell,-m}(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}}\sin^m\theta\frac{d}{d\theta}\sin^{-m+1}\ \theta\Theta_{\ell,-m+1}(\theta)\\ &= \sqrt{\frac{(2\ell+1}{2}}\sqrt{\frac{1}{(\ell-m+1)(\ell-m+2)\cdots(\ell+m)}}\sin^m\theta\left(\frac{d}{d\theta}\right)^m P_\ell(\theta)\\ &= \sqrt{\frac{(2\ell+1}{2}}\sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P_\ell^m(\theta)\end{aligned} \tag{3.5.45}$$

が得られる。この式は (3.5.40) で m を $|m|$ とした時の式と比較して $(-)^m$ の phase factor がない分だけが違う。そこで $m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm\ell$ の時成り立つ $\Theta_{\ell,m}(\theta)$ の式として一般に

$$\Theta_{\ell,m}(\theta) = (-)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{2}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}P_\ell^{|m|}(\cos\theta) \tag{3.5.46}$$

を使うことが出来る。結局軌道角運動量の固有値問題は (3.5.18) の様に Y-函数を $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)=\Theta_{\ell,m}(\theta)\Phi_m(\varphi)$ として Legendre 倍多項式を持って表わされる。

Legendre 多項式や Legendre 倍多項式は次の直交関係式を満たす。

$$\int_{-1}^{1} P_\ell(x) P_{\ell'}(x) dx = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell,\ell'} \tag{3.5.47}$$

$$\int_{-1}^{1} P_\ell^m(x) P_{\ell'}^m(x) dx = \frac{2}{(2\ell+1)}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\delta_{\ell,\ell'} \tag{3.5.48}$$

ここに $\ell = 0, 1, 2, \cdots$, $m = 0, 1, 2, \cdots, \ell$ である。ここから次の Y-函数の正規直交関係を示すことが出来る。ここに $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ は 3 次元極座標の体積要素の角度部分である。

$$\int Y_{\ell,m}^*(\theta,\varphi) Y_{\ell',m'}(\theta,\varphi) d\Omega = \delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'} \tag{3.5.49}$$

(練習問題) (3.5.33), (3.5.36), (3.5.41) を用いて、(3.5.47) - (3.5.49) を示せ。

(略解) 異なる量子数の直交性は $\ell(\ell+1) - \ell'(\ell'+1) = (\ell-\ell')(\ell+\ell'+1)$ から明らかである。したがって規格化因子だけを調べれば良い。以下、簡単のため $D = (d/dx)$ として

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} (P_\ell(x))^2 dx &= \left(\frac{1}{2^\ell \ell!}\right)^2 \int_{-1}^{1} \left(D^\ell (x^2-1)^\ell\right)\left(D^\ell (x^2-1)^\ell\right) dx \\
&= (-)\left(\frac{1}{2^\ell \ell!}\right)^2 \int_{-1}^{1} \left(D^{\ell-1} (x^2-1)^\ell\right)\left(D^{\ell+1} (x^2-1)^\ell\right) dx \\
&= \cdots \\
&= (-)^\ell \left(\frac{1}{2^\ell \ell!}\right)^2 \int_{-1}^{1} (x^2-1)^\ell \left(D^{2\ell} (x^2-1)^\ell\right) dx
\end{aligned} \tag{3.5.50}$$

ここに部分積分の時の端の値は (x^2-1) の factor が必ず一つ以上残るから消える。更に $D^{2\ell}(x^2-1)^\ell = D^{2\ell}x^{2\ell} = (2\ell)!$ かつ

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} (x^2-1)^\ell dx &= 2^{2\ell} \int_{-1}^{1} \left(\frac{x+1}{2}\right)^\ell \left(\frac{x-1}{2}\right)^\ell dx \\
&= (-)^\ell 2^{2\ell+1} \int_{-1}^{1} t^\ell (1-t)^\ell dt \\
&= (-)^\ell 2^{2\ell+1} B(\ell+1, \ell+1) = (-)^\ell 2^{2\ell+1} \frac{\Gamma(\ell+1)^2}{\Gamma(2\ell+2)} \\
&= (-)^\ell 2^{2\ell+1} \frac{(\ell!)^2}{(2\ell+1)!}
\end{aligned} \tag{3.5.51}$$

より

$$
\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} (P_\ell(x))^2\, dx = (-)^\ell \left(\frac{1}{2^\ell \ell!}\right)^2 (-)^\ell 2^{2\ell+1}\frac{(\ell!)^2}{(2\ell+1)!} \\
\frac{2}{2\ell+1}
\end{aligned}
\tag{3.5.52}
$$

次に $P_\ell^m(x)$ $(m=0,1,\cdots,\ell)$ の規格化は

$$
\begin{aligned}
P_\ell^m(x) &= (1-x^2)^{\frac{m}{2}} D^m P_\ell(x) \\
&= \frac{1}{2^\ell \ell!}(1-x^2)^{\frac{m}{2}} D^{\ell+m}(x^2-1)^\ell \\
&= (-)^{\ell-m}\frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\frac{1}{(1-x^2)^{\frac{m}{2}}} D^{\ell-m}(1-x^2)^\ell
\end{aligned}
\tag{3.5.53}
$$

より

$$
\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} (P_\ell^m(x))^2\, dx &= (-)^{\ell-m}\frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\frac{1}{2^\ell \ell!}\int_{-1}^{1}\left(D^{\ell-m}(1-x^2)^\ell\right) D^{\ell+m}(x^2-1)^\ell dx \\
&= \frac{1}{2^{2\ell}(\ell!)^2}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\int_{-1}^{1}(1-x^2)^\ell D^{2\ell}(x^2-1)^\ell dx \\
&= \frac{1}{2^{2\ell}(\ell!)^2}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}2^{2\ell+1}\frac{(\ell!)^2}{(2\ell+1)!}(2\ell)! \\
&= \frac{2}{2\ell+1}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}
\end{aligned}
\tag{3.5.54}
$$

最後に (3.5.46) から

$$
\begin{aligned}
\int Y_{\ell,m}^*(\theta,\varphi) Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) d\Omega &= \int_0^\pi (\Theta_{\ell,m}(\theta))^2 \sin\theta d\theta \\
&= \frac{(2\ell+1)}{2}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\left(P_\ell^{|m|}(\cos\theta)\right)^2 \sin\theta d\theta = 1
\end{aligned}
\tag{3.5.55}
$$

が得られる。

(数学的補遺-1)

Legendre (陪) 多項式は Jacobi 多項式、Gegenbaure 多項式、Chebyshev 多項式等と共に合流型超幾何級数によって表わされる直交多項式である。これらは一般に Schr"odinger 方程式の角度波動函数部分に現われる。一方 Schr"odinger 方程式の動径部分の微分方程式の解としては、Gauss の超幾何級数で表わされる Hermite 多項式や

Laguerre 多項式、Coulomb 波動函数等が現れる。これらの直交多項式については統一的な取り扱いが可能である。例えば、犬井哲郎著「特殊函数」(岩波全書 252) に見事な解説がある。ここではその一端を紹介する。

(直交多項式)

種々の直交多項式は、ある区間 $x \in [a,b]$ で定義された n 次多項式で、Rodrigues の公式で表わすことが出来る。まず Jacobi 多項式や Legendre 多項式は有限区間 $[-1,1]$ で定義された n-次多項式

$$\begin{aligned} X(x) &= (1-x)(x+1) \quad , \quad \rho(x) = (1-x)^{\alpha}(x+1)^{\beta} \\ F_n(x) &= (1/\rho(x))D^n \rho(x) X^n(x) \end{aligned} \tag{3.5.56}$$

を考える。ここに、$D = (d/dx)$ かつあとの積分が収束するために $\alpha, \beta > -1$ と仮定する。このタイプの表示式を全て Rodrigues の公式と呼ぶ。微分法のよく知られた Leibniz rule を用いて $F_n(x)$ の微分項は

$$\begin{aligned} & D^n(1-x)^{n+\alpha}(x+1)^{n+\beta} = \sum_{m=0}^{n} \binom{n}{m} \left[D^m(1-x)^{n+\alpha}\right]\left[D^{n-m}(x+1)^{n+\beta}\right] \\ & = \sum_{m=0}^{n}(-)^m \binom{n}{m}(n+\alpha)(n+\alpha-1)\cdots(n+\alpha-m+1)(1-x)^{n+\alpha-m} \\ & \times(n+\beta)(n+\beta-1)\cdots(\beta+m+1)(x+1)^{\beta+m} \end{aligned} \tag{3.5.57}$$

から

$$\begin{aligned} F_n(x) &= (1-x)^{-\alpha}(x+1)^{-\beta}D^n(1-x)^{n+\alpha}(x+1)^{n+\beta} \\ &= \sum_{m=0}^{n}(-)^m \binom{n}{m}(n+\alpha)(n+\alpha-1)\cdots(n+\alpha-m+1)(1-x)^{n-m} \\ &\quad \times(n+\beta)(n+\beta-1)\cdots(\beta+m+1)(x+1)^m \\ &= \sum_{m=0}^{n}(-)^m \binom{n}{m}\frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{\Gamma(n+\alpha-m+1)}\frac{\Gamma(n+\beta+1)}{\Gamma(\beta+m+1)} \\ &\quad \times(1-x)^{n-m}(x+1)^m \end{aligned} \tag{3.5.58}$$

となる。ここから $F_n(x)$ は n-次多項式であることが分かる。

$F_n(x)$ と他の函数 $\Pi(x)$ との内積を

$$(F_n, \Pi) = \int_{-1}^{1} \rho(x) F_n(x) \Pi(x) dx \tag{3.5.59}$$

で定義すると、$(n-1)$- 次までの多項式 $\Pi(x)$ について常に $(F_n, \Pi) = 0$ が成立する。つまり F_n と $\Pi(x)$ は直交する。実際

$$(F_n, \Pi) = \int_{-1}^{1} \left[D^n (1-x)^{n+\alpha} (x+1)^{n+\beta} \right] \Pi(x) dx \tag{3.5.60}$$

を部分積分すれば、条件 $\alpha, \beta > -1$ から積分の端の値は必ずゼロとなる。そこでこれを n-回繰り返して D^n を $\Pi(x)$ に移すと、$D^n \Pi(x) = 0$ より内積は常にゼロとなる。特に

$$(F_n, F_m) = 0 \quad \text{for} \quad m = 0, 1, \cdots, n-1 \tag{3.5.61}$$

が成り立つ。また $m = n$ の時も、$F_n(x)$ は n-次の多項式であるから $D^n F_n(x)$ は単なる定数であるが、(3.5.58) から x の最高次の項だけを残してこの定数は $(-)^n D^n (2n+\alpha+\beta)(2n+\alpha+\beta-1) \cdots (n+\alpha+\beta+1) x^n = (-)^n n! \frac{\Gamma(2n+\alpha+\beta+1)}{\Gamma(n+\alpha+\beta+1)}$. そこで

$$\begin{aligned}
(F_n, F_n) &= n! \frac{\Gamma(2n+\alpha+\beta+1)}{\Gamma(n+\alpha+\beta+1)} \int_{-1}^{1} (1-x)^{n+\alpha} (x+1)^{n+\beta} dx \\
&= n! \frac{\Gamma(2n+\alpha+\beta+1)}{\Gamma(n+\alpha+\beta+1)} 2^{2n+\alpha+\beta} \int_{-1}^{1} \left(\frac{1-x}{2} \right)^{n+\alpha} \left(\frac{x+1}{2} \right)^{n+\beta} dx \\
&= n! \frac{\Gamma(2n+\alpha+\beta+1)}{\Gamma(n+\alpha+\beta+1)} 2^{2n+\alpha+\beta+1} \int_{0}^{1} t^{n+\alpha} (1-t)^{n+\beta} dx \\
&= n! \frac{\Gamma(2n+\alpha+\beta+1)}{\Gamma(n+\alpha+\beta+1)} 2^{2n+\alpha+\beta+1} B(n+\alpha+1, n+\beta+1) \\
&= n! \frac{\Gamma(2n+\alpha+\beta+1)}{\Gamma(n+\alpha+\beta+1)} 2^{2n+\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{\Gamma(2n+\alpha+\beta+2)} \\
&= n! 2^{2n+\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{(2n+\alpha+\beta+1)\Gamma(n+\alpha+\beta+1)}
\end{aligned} \tag{3.5.62}$$

が得られる。

Jacobi 多項式 $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ は、$K_n = (-)^n 2^n n!$ として $F_n(x) = K_n P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ と normalization を変えて定義される。 (3.5.58) より $F_n(1) = (-)^n n! \frac{(n+\alpha)(n+\alpha-1)\cdots(\alpha+1)}{n!} 2^n$ であるから、多項式 $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ は

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(1) = \binom{n+\alpha}{\alpha} \tag{3.5.63}$$

と normalize されている。そこで Jacobi 多項式の Rodrigues の公式は

$$
\begin{aligned}
P_n^{(\alpha,\beta)}(x) &= (-)^n \frac{1}{2^n n!}(1-x)^{-\alpha}(x+1)^{-\beta} D^n (1-x)^{n+\alpha}(x+1)^{n+\beta} \\
&= \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{n} \frac{(n+\alpha)(n+\alpha-1)\cdots(n+\alpha-m+1)}{m!} \\
&\qquad \frac{(n+\beta)(n+\beta-1)\cdots(\beta+m+1)}{(n-m)!}(x-1)^{n-m}(x+1)^m
\end{aligned}
\tag{3.5.64}
$$

となる。また直交性は (3.5.62) より

$$
(P_n^{(\alpha,\beta)}, P_m^{(\alpha,\beta)}) = \delta_{n,m} 2^{\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{(2n+\alpha+\beta+1)n!\Gamma(n+\alpha+\beta+1)}
\tag{3.5.65}
$$

である。$\alpha = \beta = 0$ の場合が Legendre 多項式 $P_n(x) = P_n^{(0,0)}(x)$ である。つまり

$$
\begin{aligned}
P_n(x) &= \frac{1}{2^n n!} D^n (x^2-1)^n \\
&= \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{n} \binom{n}{m}^2 (x-1)^{n-m}(x+1)^m \\
&= \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{[n/2]} (-)^m \frac{(2n-2m)!}{(n-m)!m!} \frac{x^{n-2m}}{(n-2m)!}
\end{aligned}
\tag{3.5.66}
$$

となる。ここに最後の式は、1 行目を直接微分して得られる。即ち

$$
\begin{aligned}
P_n(x) &= \frac{1}{2^n n!} \sum_{m=0}^{[n/2]} (-)^m \binom{n}{m} D^n x^{2(n-m)} \\
&= frac12^n n! \sum_{m=0}^{[n/2]} (-)^m \binom{n}{m} (2n-2m)(2n-2m-1)...(n-2m+1) x^{n-2m} \\
&= frac12^n n! \sum_{m=0}^{[n/2]} (-)^m \binom{n}{m} \frac{(2n-2m)!}{(n-2m)!} x^{n-2m} \\
&= \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{[n/2]} (-)^m \frac{(2n-2m)!}{(n-m)!m!} \frac{x^{n-2m}}{(n-2m)!}
\end{aligned}
\tag{3.5.67}
$$

となる。ここから、$P_n(x)$ の偶奇性は n の偶奇性による事は明らかである。また直交性は (3.5.65) より

$$
(P_n, P_m) = \delta_{n,m} \frac{2}{2n+1}
\tag{3.5.68}
$$

となる。

次に Laguerre・Sonine 多項式は (3.5.56) で区間を $[0,\infty)$ として

$$
\begin{aligned}
X(x) &= x \quad , \quad \rho(x) = x^{\mu} e^{-x} \quad , \quad \mu > -1 \\
F_n(x) &= (1/\rho(x)) D^n \rho(x) X^n(x) \\
&= x^{-\mu} e^{x} D^n x^{n+\mu} e^{-x}
\end{aligned}
\tag{3.5.69}
$$

から得られる。具体的に Leibniz rule により微分を実行すると

$$
\begin{aligned}
F_n(x) &= x^{-\mu} e^{x} D^n x^{n+\mu} e^{-x} \\
&= e^{x} x^{-\mu} \sum_{m=0}^{n} (-)^m \binom{n}{m} (n+\mu)(n+\mu-1)\cdots(m+\mu+1) x^{m+\mu} e^{-x} \\
&= \sum_{m=0}^{n} (-)^m \binom{n}{m} (n+\mu)(n+\mu-1)\cdots(m+\mu+1) x^{m} \\
&= n! \sum_{m=0}^{n} (-)^m \binom{n+\mu}{m+\mu} \frac{x^m}{m!} \\
&= n! \left[(-)^n \frac{x^n}{n!} + (-)^{n-1}(n+\mu) \frac{x^{n-1}}{(n-1)!} + \cdots \right]
\end{aligned}
\tag{3.5.70}
$$

が得られる。更に、内積と直交性も Jacobi 多項式の場合と同様に

$$
\begin{aligned}
(F_n, \Pi) &= \int_0^{\infty} \rho(x) F_n(x) \Pi(x) dx \\
&= \int_0^{\infty} x^{\mu} e^{-x} F_n(x) \Pi(x) dx \\
&= \int_0^{\infty} \left[D^n x^{n+\mu} e^{-x} \right] \Pi(x) dx \\
&= (-)^n \int_0^{\infty} x^{n+\mu} e^{-x} D^n \Pi(x) dx
\end{aligned}
\tag{3.5.71}
$$

ここでも再び条件 $\mu > -1$ から、積分の端での値はゼロになるから、$(n-1)$- 次までの多項式 $\Pi(x)$ について常に $(F_n, \Pi) = 0$ が成立する。また $F_n(x)$ の normalization は、(3.5.70) から $D^n F_n(x) = (-)^n n!$ より

$$
\begin{aligned}
(F_n, F_n) &= n! \int_0^{\infty} x^{n+\mu} e^{-x} dx \\
&= n! \Gamma(n+\mu+1)
\end{aligned}
\tag{3.5.72}
$$

そこで

$$
(F_n, F_m) = \delta_{n,m} n! \Gamma(n+\mu+1) \tag{3.5.73}
$$

が成り立つ。

Laguerre・Sonine 多項式 (岩波全書、「数学公式 III」では Laguerre 陪多項式) は $L(\mu)_n(x) = \frac{1}{n!}F_n(x)$ で定義される。そこで

$$\begin{aligned} L_n^{(\mu)}(x) &= \frac{1}{n!}x^{-\mu}e^x D^n x^{n+\mu}e^{-x} \\ &= \sum_{m=0}^{n}(-)^m \binom{n+\mu}{m+\mu}\frac{x^m}{m!} \\ &= (-)^n\left[\frac{x^n}{n!} - (n+\mu)\frac{x^{n-1}}{(n-1)!} + \cdots\right] \\ (L_n^{(\mu)}, L_m^{(\mu)}) &= \delta_{n,m}\frac{\Gamma(n+\mu+1)}{n!} \end{aligned} \tag{3.5.74}$$

が得られる。また、ここで $\mu = 0$ と置いて Laguerre 多項式 $L_n(x) = L_n^{(0)}(x)$ が得られる。これに対して

$$\begin{aligned} L_n(x) &= \frac{1}{n!}e^x D^n x^n e^{-x} \\ &= \sum_{m=0}^{n}(-)^m \binom{n}{m}\frac{x^m}{m!} \\ &= (-)^n\left[\frac{x^n}{n!} - n\frac{x^{n-1}}{(n-1)!} + \cdots\right] \\ (L_n, L_m) &= \delta_{n,m} \end{aligned} \tag{3.5.75}$$

が成り立つ。

(注意)

Laguerre 多項式には幾つかの異なった定義があるから注意を要する。岩波全書、犬井哲郎著「特殊函数」では、上の Laguerre・Sonine 多項式は単に Sonine 多項式と呼んで Lagueere 陪多項式を $\tilde{L}_n^m(x) = (-)^m n! L_{n-m}^{(m)}(x)$ と定義している。この時 Laguerre 多

項式は $\tilde{L}_n(x) = \tilde{L}_n^0(x)$ であり $L_n(x)$ と $n!$ の違いが存在する。そこで

$$\begin{aligned}
\tilde{L}_n^m(x) &= (-)^m \frac{n!}{(n-m)!} x^m e^x D^{n-m} x^n e^{-x} \\
&= n! \sum_{r=0}^{n-m} (-)^{r+m} \binom{n}{r+m} \frac{x^r}{r!} \\
&= (-)^n n! \left[\frac{x^{n-m}}{(n-m)!} - n \frac{x^{n-m-1}}{(n-m-1)!} + \cdots \right] \\
(L_n^m, L_(^m n')) &= \delta_{n,n'} \frac{(n!)^3}{(n-m)!}
\end{aligned} \tag{3.5.76}$$

かつ

$$\begin{aligned}
\tilde{L}_n(x) &= e^x D^n x^n e^{-x} \\
&= n! \sum_{r=0}^{n} (-)^r \binom{n}{r} \frac{x^r}{r!} \\
&= (-)^n n! \left[\frac{x^n}{n!} - n \frac{x^{n-1}}{(n-1)!} + \cdots \right] \\
(\tilde{L}_n, \tilde{L}_{n'}) &= \delta_{n,n'} (n!)^2
\end{aligned} \tag{3.5.77}$$

が成り立つ。上からすぐ分かる様に、$\tilde{L}_n^m(x)$ は x の $(n-m)$-次多項式、$\tilde{L}_n(x)$ は n 次多項式である。また直接微分を計算することにより

$$\left(\frac{d}{dx} \right)^m \tilde{L}_n(x) = \tilde{L}_n^m(x) \tag{3.5.78}$$

が成り立つ。実際

$$\begin{aligned}
D^m \tilde{L}_n(x) &= n! \sum_{r=0}^{n} (-)^r \frac{n!}{(n-r)!(r!)^2} D^m x^r \\
&= \sum_{r=m}^{n} (-)^r \frac{(n!)^2}{(n-r)!(r-m)!} \frac{x^{r-m}}{r!} \\
&= \sum_{r=0}^{n-m} (-)^{r+m} \frac{(n!)^2}{(n-r-m)!(r+m)!} \frac{x^r}{r!} \\
&= \tilde{L}_n^m(x)
\end{aligned} \tag{3.5.79}$$

となる。ランダウ・リフシッツの「量子力学 I」でも、これらの定義が用いられている。

最後に Hermite 多項式に対しては、積分区間は $(-\infty, \infty)$ であり $X(x) = 1, \rho(x) = e^{-x^2}$ である。この場合 phase $(-)^n$ をはじめから加えて

$$
\begin{aligned}
H_n(x) &= (-)^n e^{x^2} D^n e^{-x^2} \\
&= \sum_{m=0}^{[n/2]} (-)^m \frac{n!}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m}
\end{aligned}
\tag{3.5.80}
$$

と定義する。ここに、2 行目は

$$
D^n e^{-x^2} = \sum_{m=0}^{[n/2]} (-)^{n+m} \frac{n!}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m} e^{-x^2} \tag{3.5.81}
$$

に対する数学的帰納法で簡単に証明することができる。(各自試みよ) ここから、$H_n(x)$ の偶奇性は (Legendre 多項式の場合と同様) n の偶奇性と同じであることが分かる。また内積と直交性は、これまでと同様に示すことができる。

$$
\begin{aligned}
(H_n, H_m) &= \int_{\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx \\
&= \delta_{n,m} \sqrt{\pi} 2^n n!
\end{aligned}
\tag{3.5.82}
$$

が得られる。

(3 項漸化式)

直交多項式にはかなり一般的な隣り合う 3 つの n に関する漸化式が存在する。まず一般論を述べてから、そのあとで具体的な例について考察する。n-次の直交多項式 $F_n(x)$ を

$$
F_n(x) = \sum_{r=0}^{n} a_r^{(n)} x^r \tag{3.5.83}
$$

とする。$F_n(x)$ の x^n の項を次の様にして消去すると、残りは $F_{n-1}(x), \cdots, F_1(x)$ で展開できる。

$$
F_n(x) - \frac{a_n^{(n)}}{a_{n-1}^{(n-1)}} x F_{n-1}(x) = \sum_{r=0}^{n-1} b_r F_r(x) \tag{3.5.84}
$$

この式と $F_j(x)$ $(j = 1, \cdots, n-3)$ との内積を取ると、左辺から x を $xF_j(x)$ が $(n-2)$-次までの多項式であることから $b_j = 0$. そこで右辺で $r = n-1, n-2$ only で

$$
F_n(x) - \frac{a_n^{(n)}}{a_{n-1}^{(n-1)}} x F_{n-1}(x) = b_{n-1} F_{n-1}(x) + b_{n-2} F_{n-2}(x) \tag{3.5.85}
$$

となる。更に

$$\alpha_n = \frac{a_n^{(n)}}{a_{n-1}^{(n-1)}} \tag{3.5.86}$$

として、(3.5.85) と $F_{n-1}(x), F_{n-2}(x)$ との内積を取ると

$$\begin{aligned} b_{n-1} &= -\alpha_n \frac{(xF_{n-1}, F_{n-1})}{(F_{n-1}, F_{n-1})} \\ b_{n-2} &= -\alpha_n \frac{(xF_{n-1}, F_{n-2})}{(F_{n-2}, F_{n-2})} \end{aligned} \tag{3.5.87}$$

が得られる。ここに b_{n-2} で x を $F_{n-2}(x)$ の方に移すと

$$\begin{aligned} b_{n-2} &= -\frac{\alpha_n}{\alpha_{n-1}} \frac{(F_{n-1}, a_{n-1}^{n-1} x^{n-1} + \cdots)}{(F_{n-2}, F_{n-2})} \\ &= -\frac{\alpha_n}{\alpha_{n-1}} \frac{(F_{n-1}, F_{n-1})}{(F_{n-2}, F_{n-2})} \end{aligned} \tag{3.5.88}$$

となる。そこで $b_{n-1} = -\beta_n, b_{n-2} = -\gamma_n$ と置いて

$$\begin{aligned} &F_n(x) + (\beta_n - \alpha_n x) F_{n-1}(x) + \gamma_n F_{n-2}(x) = 0 \\ &\alpha_n = \frac{a_n^{(n)}}{a_{n-1}^{(n-1)}} \\ &\beta_n = \alpha_n \frac{(xF_{n-1}, F_{n-1})}{(F_{n-1}, F_{n-1})} \\ &\gamma_n = \frac{\alpha_n}{\alpha_{n-1}} \frac{(F_{n-1}, F_{n-1})}{(F_{n-2}, F_{n-2})} \end{aligned} \tag{3.5.89}$$

という公式が得られる。以下幾つかの簡単な場合について、この公式を適用する。

まず Legendre 多項式に対しては (3.5.67) から $P_n(x) = (2n-1)!!\frac{x^n}{n!} + \cdots$ より $a_n^{(n)} = \frac{(2n-1)!!}{n!}$. そこで

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \frac{a_n^{(n)}}{a_{n-1}^{(n-1)}} = \frac{(2n-1)!!(n-1)!}{(2n-3)!!n!} \\ &= \frac{2n-1}{n} \\ \alpha_{n-1} &= \frac{2n-3}{n-1} \\ \frac{\alpha_n}{\alpha_{n-1}} &= \frac{(2n-1)(n-1)}{(2n-3)n} \end{aligned} \tag{3.5.90}$$

次に β_n は函数の偶奇性から $(xP_{n-1}, P_{n-1}) = 0$ であるから、$\beta_n = 0$. 更に γ_n は $(P_n, P_n) = \frac{2}{2n+1}$ より

$$\gamma_n = \frac{(2n-1)(n-1)}{(2n-3)n} \frac{2n-3}{2n-1} = \frac{n-1}{n} \tag{3.5.91}$$

そこで公式から

$$\begin{aligned} &P_n(x) - \frac{2n-1}{n} x P_{n-1}(x) + \frac{n-1}{n} P_{n-2}(x) = 0 \\ &nP_n(x) - (2n-1)xP_{n-1}(x) + (n-1)P_{n-2}(x) = 0 \end{aligned} \tag{3.5.92}$$

が得られる。

次に Laguerre・Sonine 多項式に対しては

$$\begin{aligned} &L_n^{(\mu)}(x) = (-)^n \left[\frac{x^n}{n!} - (n+\mu) \frac{x^{n-1}}{(n-1)!} + \cdots \right] \\ &(L_n^{(\mu)}, L_n^{(\mu)}) = \frac{\Gamma(n+\mu+1)}{n!} \end{aligned} \tag{3.5.93}$$

から

$$\begin{aligned} &a_n^{(n)} = (-)^n \frac{1}{n!} \\ &\alpha_n = \frac{a_n^{(n)}}{a_{n-1}^{(n-1)}} = -\frac{1}{n} \\ &\gamma_n = \frac{n-1}{n} \frac{\Gamma(n+\mu)(n-2)!}{\Gamma(n+\mu-1)(n-1)!} = \frac{n+\mu-1}{n} \end{aligned} \tag{3.5.94}$$

次に β_n を求めるには多少の計算がいる。まず

$$
\begin{aligned}
&(xL_n^{(\mu)}, L_n^{(\mu)}) = \frac{1}{n!}\int_0^\infty D^n[e^{-x}x^{n+\mu}]xL_n^{(\mu)}(x)dx \\
&= (-)^n\frac{1}{n!}\int_0^\infty e^{-x}x^{n+\mu}D^n\left[xL_n^{(\mu)}(x)\right]dx \\
&= (-)^n\frac{1}{n!}\int_0^\infty e^{-x}x^{n+\mu}(-)^n\left[(n+1)x - n(n+\mu)\right]dx \\
&= \frac{1}{n!}\int_0^\infty e^{-x}x^{n+\mu}\left[(n+1)x - n(n+\mu)\right]dx \\
&= \frac{1}{n!}\left[(n+1)\Gamma(n+\mu+2) - n(n+\mu)\Gamma(n+\mu+1)\right] \\
&= \frac{\Gamma(n+\mu+1)}{n!}\left[(n+1)(n+\mu+1) - n(n+\mu)\right] \\
&= \frac{\Gamma(n+\mu+1)}{n!}(2n+\mu+1) \\
&(xL_{n-1}^{(\mu)}, L_{n-1}^{(\mu)}) = \frac{\Gamma(n+\mu)}{(n-1)!}(2n+\mu-1)
\end{aligned}
\tag{3.5.95}
$$

そこで

$$
\beta_n = -\frac{1}{n}(2n+\mu-1) = -\frac{2n+\mu-1}{n} \tag{3.5.96}
$$

結局公式は

$$
\begin{aligned}
&L_n^{(\mu)}(x) + \left(-\frac{2n+\mu-1}{n} + \frac{1}{n}x\right)L_{n-1}^{(\mu)}(x) + \frac{n+\mu-1}{n}L_{n-2}^{(\mu)}(x) = 0 \\
&nL_n^{(\mu)}(x) + (x-2n-\mu+1)L_{n-1}^{(\mu)}(x) + (n+\mu-1)L_{n-2}^{(\mu)}(x) = 0
\end{aligned}
\tag{3.5.97}
$$

となる。Laguerre 多項式については、上で $\mu = 0$ としたものになる。

最後に Hermite 多項式については、再び偶奇性から $\beta_n = 0$ になるので

$$
\begin{aligned}
&a_n^{(n)} = 2^n \\
&\alpha_n = 2 \\
&\beta_n = 0 \quad \text{from parity} \\
&\frac{\alpha_n}{\alpha_{n-1}} = 1 \\
&(H_n, H_n) = \int_{-\infty}^\infty H_n(x)H_n(x)e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}2^n n! \\
&\gamma_n = \frac{2^{n-1}(n-1)!}{2^{n-2}(n-2)!} = 2(n-1) \\
&H_n(x) - 2xH_{n-1}(x) + 2(n-1)H_{n-2} = 0
\end{aligned}
\tag{3.5.98}
$$

である。

そ (直交多項式の満たす微分方程式)

直交多項式は 2 階の線形微分方程式を満たす。ここでも、まず $F_n(x)$ に対する一般論を展開し、それから個々の場合を考察する。以下 $X(x)$ は x の二次以下の多項式で、ダッシュは x についての微分とし x は簡単のため省略する。まず、$F_n = (1/\rho)D^n \rho X^n$ より $\rho F_n = D^n[\rho X^n]$ に注意する。あとで F_1 が x の 1 次式であることと、F_1' が定数であることが重要となる。

まず Leibniz の公式を使って

$$
\begin{aligned}
D^{n+1}[XD[\rho X^n]] &= XD^{n+2}[\rho X^n] + (n+1)(DX)D^{n+1}[\rho X^n] \\
&\quad + \frac{(n+1)n}{2}(D^2X)D^n[\rho X^n] \\
&= \left[XD^2 + (n+1)X'D + \frac{n(n+1)}{2}X''\right](\rho F_n) \qquad (3.5.99)
\end{aligned}
$$

更に同じ式が

$$
\begin{aligned}
D^{n+1}[XD[\rho X^n]] &= D^{n+1}[XD[\rho X X^{n-1}]] \\
&= D^{n+1}[(D\rho X)X^n + (n-1)\rho X^n X'] \\
&= D^{n+1}[\rho F_1 X^n + (n-1)\rho X' X^n] = D^{n+1}[F_1 + (n-1)X'](\rho X^n) \\
&= [F_1 + (n-1)X']D^{n+1}[\rho X^n] + (n+1)[F_1' + (n-1)X'']D^n[\rho X^n] \\
&= [(F_1 + (n-1)X')D + (n+1)(F_1' + (n-1)X'')](\rho F_n) \qquad (3.5.100)
\end{aligned}
$$

そこでこれらの二つを等しいと置いて

$$
\left[XD^2 + (2X' - F_1)D + \left(\frac{n(n+1)}{2} - n^2 + 1\right)X'' - (n+1)F_1'\right](\rho F_n) = 0 \qquad (3.5.101)
$$

ここに

$$
\frac{n(n+1)}{2} - n^2 + 1 = \frac{n(1-n)}{2} + 1 = \frac{2+n-n^2}{2} = \frac{(2-n)(1+n)}{2} = -\frac{(n+1)(n-2)}{2} \qquad (3.5.102)
$$

より

$$
\left[XD^2 + (2X' - F_1)D - (n+1)\left(F_1' + X''\frac{n-2}{2}\right)\right](\rho F_n) = 0 \qquad (3.5.103)
$$

そこで

$$
\begin{aligned}
D\rho F_n &= \rho DF_n + \rho' F_n \\
D^2\rho F_n &= \rho D^2 F_n + 2\rho' DF_n + \rho'' F_n
\end{aligned}
\tag{3.5.104}
$$

を使うと

$$
\begin{aligned}
&X(\rho D^2 F_n + 2\rho' DF_n + \rho'' F_n) + (2X' - F_1)(\rho DF_n + \rho' F_n) \\
&-(n+1)\left(F_1' + \frac{n-2}{2}X''\right)\rho F_n = 0 \\
&\rho X D^2 F_n + (2\rho' X + 2\rho X' - \rho F_1) DF_n \\
&+\left(\rho'' X + 2\rho' X' - \rho' F_1 - (n+1)\left(F_1' + \frac{n-2}{2}X''\right)\rho\right) F_n = 0
\end{aligned}
\tag{3.5.105}
$$

が得られる。更に $\rho F_1 = D(\rho X) = \rho' X + \rho X'$, $\rho' F_1 + \rho F_1' = \rho'' X + 2\rho' X' + \rho X''$ を使うと $\rho F_n = D^n[\rho X^n]$ へ戻して

$$
\begin{aligned}
&\left[XD^2 + (2X' - F_1)D - (n+1)\left(F_1' + X''\frac{n-2}{2}\right)\right](\rho F_n) = 0 \\
&\rho X D^2 F_n + (2\rho' X + 2\rho X' - \rho F_1) DF_n \\
&+\left(\rho'' X + 2\rho' X' - \rho' F_1 - (n+1)\left(F_1' + \frac{n-2}{2}X''\right)\rho\right) F_n = 0
\end{aligned}
\tag{3.5.106}
$$

ここで $\rho F_1 = D(\rho X) = \rho' X + \rho X'$, $\rho' F_1 + \rho F_1' = \rho'' X + 2\rho' X' + \rho X''$ を使うと、2 項目の初めのカッコは $(\cdots) = \rho F_1$. また 3 項目の大きなカッコは

$$
\begin{aligned}
&\text{2-nd}(\cdots) = \left(\rho' F_1 + \rho F_1' - \rho X'' - \rho' F_1 - (n+1)F_1'\rho - \rho\frac{(n+1)(n-2)}{2}X''\right) \\
&= \left(-n\rho F_1' - \rho\frac{(n+1)(n-2)}{2}X'' - \rho X''\right) = -\rho n\left(F_1' + \frac{n-1}{2}X''\right)
\end{aligned}
\tag{3.5.107}
$$

より

$$
\begin{aligned}
&XD^2F + F_1 DF - n\left(F_1' + \frac{n-1}{2}X''\right)F_n = 0 \\
&X(x)\frac{d^2F_n}{dx^2} + F_1(x)\frac{dF_n}{dx} + \lambda_n F_n = 0 \\
&\text{where}\quad \lambda_n = -n\left(F_1' + \frac{n-1}{2}X''\right) = \text{const}
\end{aligned}
\tag{3.5.108}
$$

が得られる。この式は、また左から $\rho(x)$ を掛けて

$$
\frac{d}{dx}\left(\rho X\frac{dF_n}{dx}\right) + \lambda_n \rho F_n = 0 \tag{3.5.109}
$$

とも書ける。これらの方程式は線形だから、$F_n(x)$ と normalization が違う任意の多項式についても成り立つ。

具体的な例に戻って、まず Jacobi 多項式については、$X(x) = (1-x)(x+1)$ から $X'' = -2$. また $F_1(x), F_1'(x), \lambda_n$ に対しては

$$\begin{aligned}
F_1 &= (1-x)^{-\alpha}(x+1)^{-\beta}D(1-x)^{1+\alpha}(x+1)^{1+\beta} \\
&\quad -(1+\alpha)(x+1)+(1+\beta)(1-x) = -(\alpha+\beta+2)x+(\beta-\alpha) \\
F_1' &= -(\alpha+\beta+2) \\
\lambda_n &= -n(-(\alpha+\beta+2)-(n-1)) = n(n+\alpha+\beta+1)
\end{aligned} \tag{3.5.110}$$

から

$$\begin{aligned}
&(1-x)(x+1)\frac{d^2}{dx^2}P_n^{(\alpha,\beta)}(x)+(\beta-\alpha-(\alpha+\beta+2)x)\frac{d}{dx}P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \\
&+n(n+\alpha+\beta+1)P_n^{(\alpha,\beta)}(x)=0 \\
&\frac{d}{dx}\left((1-x)^{\alpha+1}(x+1)^{\beta+1}\frac{dP_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{dx}\right) \\
&+n(n+\alpha+\beta+1)(1-x)^{\alpha}(x+1)^{\beta}P_n^{(\alpha,\beta)}(x)=0
\end{aligned} \tag{3.5.111}$$

が得られる。 $\alpha=\beta=0$ の場合の Legendre 多項式に対しては

$$\begin{aligned}
&\frac{d^2}{dx^2}P_n(x)-\frac{2x}{1-x^2}\frac{d}{dx}P_n(x)+\frac{n(n+1)}{1-x^2}P_n(x)=0 \\
&\frac{d}{dx}\left((1-x^2)\frac{dP_n(x)}{dx}\right)+n(n+1)P_n(x)=0
\end{aligned} \tag{3.5.112}$$

となる。

次に Laguerre・Sonine 多項式に対しては $X(x)=x$ より $X''=0$. また F_1 に対しては $F_1 = x^{-\mu}e^{x}D\left[e^{-x}x^{1+\mu}\right] = (1+\mu)-x$ より $F_1'(x)=-1$. そこで $\lambda_n = n$ となって、微分方程式は

$$x\frac{d^2}{dx}L_n^{(\mu)}(x)+(\mu+1-x)\frac{d}{dx}L_n^{(\mu)}(x)+nL_n^{(\mu)}(x)=0 \tag{3.5.113}$$

となる。ちなみに、この方程式の解は合流型超幾何級数 $F(-n,\mu+1,x)$ で表されて、相互の関係は

$$L_n^{(\mu)}(x)=\frac{1}{n!}F_n(x)=\binom{n+\mu}{n}F(-n,\mu+1,x) \tag{3.5.114}$$

である。

最後に Hermite 多項式に対しては $X=1,\ \rho=e^{-x^2}$ より $F_1=-2x$ である。そこで $\lambda_n=-nF_1'=2n$ で

$$\frac{d^2}{dx^2}H_n(x)-2x\frac{d}{dx}H_n(x)+2nH_n(x)=0 \tag{3.5.115}$$

となる。ここで Hermite 多項式の定義 $H_n(x)=(-)^nF_n(x)=(-)^ne^{x^2}D^ne^{-x^2}$ から Leibniz rule を利用して得られる、幾つかの簡単な関係式を示しておこう。まずこの式 を 1 回微分すると

$$H_n'(x)=2xH_n(x)-H_{n+1}(x) \tag{3.5.116}$$

が得られる。次に定義式を書き直して

$$\begin{aligned}H_n&=(-)^ne^{x^2}D^{n-1}[(-2x)e^{-x^2}]\\&=(-)^ne^{x^2}[(-2x)D^{n-1}e^{-x^2}+(n-1)(-2)D^{n-2}e^{x^2}]\\&=2xH_{n-1}-2(n-1)H_{n-2}\end{aligned} \tag{3.5.117}$$

そこで $n\to n+1$ と変えて

$$H_{n+1}(x)=2xH_n(x)-2nH_{n-1}(x) \tag{3.5.118}$$

これを (3.5.116) と比較して

$$H_n'(x)=2nH_{n-1}(x) \tag{3.5.119}$$

が得られる。この式はもちろん、$H_n(x)$ の具体的な表式 (3.5.80) からも得られる。

(直交多項式の積分表示式)

直交多項式の Rodrigues の公式に Goursat の積分公式を適用し、何回か積分変数変換を行うことにより、直交多項式の母関数とその母関数展開を求めることができる。まず Jacobi 多項式を考察しよう。Rodrigues の公式は

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)=(-)^n\frac{1}{2^nn!}(1-x)^{-\alpha}(x+1)^{-\beta}D^n(1-x)^{n+\alpha}(x+1)^{n+\beta} \tag{3.5.120}$$

だから Goursat の積分公式

$$f^{(n)}(x)=\frac{n!}{2\pi i}\oint\frac{f(z)}{(z-x)^{n+1}}dz \tag{3.5.121}$$

を適用すると

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)=\frac{1}{(-)^n 2^n n!}(1-x)^{-\alpha}(x+1)^{-\beta}\frac{n!}{2\pi i}\oint\frac{(1-z)^{n+\alpha}(z+1)^{n+\beta}}{(z-x)^{n+1}}dz$$
$$=\frac{1}{2\pi i}\oint(\frac{z^2-1}{2(z-x)})^n(\frac{1-z}{1-x})^\alpha(\frac{z+1}{x+1})^\beta\frac{dz}{z-x} \tag{3.5.122}$$

となる。ここに複素積分の閉じた経路は x の周りに取る。ここで、積分変数を $\frac{z^2-1}{2(z-x)}=\frac{1}{\xi}$ により z から t に移ると、2 次方程式 $\xi z^2-2z+(2x-\xi)=0$ を解くことにより $z=\frac{1}{\xi}(1\pm\sqrt{1-2x\xi+\xi^2})$ が得られるが、$z=x$ が $\xi=0$ に対応することにより $-$ 符号だけが題意に適する。そこで $z=\frac{1-R}{\xi}$ with $R=\sqrt{1-2x\xi+\xi^2}$ となる。そこで

$$dz=\left(-\frac{1-R}{\xi^2}-\frac{\xi-x}{R\xi}\right)d\xi=-\frac{R-R^2+\xi^2-x\xi}{R\xi^2}d\xi$$
$$=-\frac{R-1+x\xi}{R\xi^2}d\xi=\frac{(z-x)\xi}{R\xi^2}d\xi=\frac{z-x}{R\xi}d\xi$$
$$\frac{dz}{z-x}=\frac{d\xi}{R\xi}$$
$$1-z=-\frac{1-\xi-R}{\xi}=-\frac{(1-\xi)^2-R^2}{(1-\xi+R)\xi}=-\frac{2x\xi-2\xi}{(1-\xi+R)\xi}$$
$$\frac{1-z}{1-x}=2\frac{1}{1-\xi+R}$$
$$z+1=\frac{1+\xi-R}{\xi}=\frac{2\xi(x+1)}{(1+\xi+R)\xi}=2(x+1)\frac{1}{1+\xi+R}$$
$$\frac{z+1}{x+1}=2\frac{1}{1+\xi+R} \tag{3.5.123}$$

より

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)=\frac{1}{2\pi i}\oint\frac{1}{\xi^n}\left(\frac{2}{1-\xi+R}\right)^\alpha\left(\frac{2}{1+\xi+R}\right)^\beta\frac{dz}{R\xi}$$
$$=2^{\alpha+\beta}\frac{1}{2\pi i}\oint\frac{1}{R(1-\xi+R)^\alpha(1+\xi+R)^\beta}\frac{d\xi}{\xi^{n+1}} \tag{3.5.124}$$

ここに $R=\sqrt{1-2x\xi+\xi^2}$. そこで、もう一度 Grousat の公式でもとへ戻すと

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)=\frac{2^{\alpha+\beta}}{n!}D^n\frac{1}{R(1-\xi+R)^\alpha(1+\xi+R)^\beta}|_{\xi=0}$$
$$g(x,\xi)=\frac{2^{\alpha+\beta}}{R(1-\xi+R)^\alpha(1+\xi+R)^\beta}$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty}P_n^{(\alpha,\beta)}(x)\xi^n \tag{3.5.125}$$

ここに、$g(x,\xi)$ が Jacobi 多項式の母関数である。

次に Laguerre 多項式の母関数を求めよう。

$$\begin{aligned} L_n^{(\mu)}(x) &= x^{-\mu}e^x\frac{1}{2\pi i}\oint\frac{z^{n+\mu}e^{-z}}{(z-x)^{n+1}}dz \\ &= x^{-\mu}\frac{1}{2\pi i}\oint\frac{z^{n+\mu}e^{x-z}}{(z-x)^{n+1}}dz \end{aligned} \tag{3.5.126}$$

ここに $z=\frac{x}{1-\xi}$ と積分変数変換すると

$$\begin{aligned} z-x &= x\frac{\xi}{1-\xi} \\ dz &= \frac{x}{(1-\xi)^2}d\xi \\ \frac{dz}{z-x} &= \frac{d\xi}{\xi(1-\xi)} \\ \frac{z}{z-x} &= \frac{1}{\xi} \\ \frac{z}{x} &= \frac{1}{1-\xi} \end{aligned} \tag{3.5.127}$$

そこで

$$\begin{aligned} L_n^{(\mu)}(x) &= \frac{1}{2\pi i}\oint\left(\frac{z}{x}\right)^{\mu}\left(\frac{z}{z-x}\right)^{n}e^{x-z}\frac{dz}{z-x} \\ &= \frac{1}{2\pi i}\oint\frac{e^{-x\frac{\xi}{1-\xi}}}{(1-\xi)^{\mu+1}\xi^{n+1}}d\xi \\ &= \frac{1}{n!}D^n\frac{e^{-x\frac{\xi}{1-\xi}}}{(1-\xi)^{n+1}}|_{\xi=0} \\ \frac{e^{-x\frac{\xi}{1-\xi}}}{(1-\xi)^{n+1}} &= \sum_{n=0}^{\infty}L_n^{(\mu)}(x)\xi^n \end{aligned} \tag{3.5.128}$$

となる。

最後に Hermite 多項式の母関数の場合は

$$
\begin{aligned}
H_n(x) &= (-)^n e^{x^2} D^n e^{-x^2} \\
&= (-)^n \frac{n!}{2\pi i} \oint \frac{e^{x^2-z^2}}{(z-x)^{n+1}} dz \\
&= (-)^n \frac{n!}{2\pi i} \oint \frac{e^{-2x\xi-\xi^2}}{\xi^{n+1}} d\xi \\
&= \frac{n!}{2\pi i} \oint \frac{e^{2x\xi-\xi^2}}{\xi^{n+1}} d\xi \\
&= D^n e^{2x\xi-\xi^2}|_{\xi=0} \\
g(x,\xi) &= e^{2x\xi-\xi^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{\xi^n}{n!}
\end{aligned}
\tag{3.5.129}
$$

即ち $g(x,\xi) = e^{2x\xi-\xi^2}$ が Hermite 多項式の母関数である。

(積分表示式　数学的補遺-1 終わり)

3.6　spin 角運動量

一般に原子・分子の世界を構成する素となる粒子 (今の所、それらを大雑把に素粒子と呼んでおこう) である電子や陽子・中性子にはスピンという内部自由度が存在する。スピンという名前は巨視的粒子の「自転」を連想させるが、それとは違ってこれは全く量子力学的なものである。前節で角運動量作用素の交換関係だけからは、整数だけでなく半整数の角運動量が許されることを見たが、角運動量代数の基礎単位となるのは実は角運動量 1 (実際は $\hbar$) でなく 1/2 (実際は $\hbar/2$) である。量子力学から巨視的力学への移行は形式的には $\hbar \to 0$ により成し遂げられるので、スピンという自由度は巨視的運動に対しては消滅する。軌道角運動量 ℓ に対しては、いくらでも大きな ℓ が可能なためこの様な制限はない。電子、陽子、中性子はいずれも 1/2 の大きさのスピン角運動量を持っている。 スピン 1/2 を持つ粒子は Dirac 粒子と呼ばれ、あとで詳しく学ぶ様に相対論的量子力学である Dirac 方程式に従うフェルミ粒子 (Fermion) である。角運動量には磁気モーメントが対応しており、スピン角運動量に結び付いたスピン磁気モーメントが現われる。磁気モーメントを持つ発光体を磁場の中に置くと、いわゆるゼーマン効果 (Zeeman effect) により磁気量子数に応じたエネルギースペクトルの分岐が起こり、一定の周波数を持つ発光スペクトルは有限個の離散的スペクトルに分離する。1922 年の Stern-Gerlach のの実験では銀の原子ビームを不均一な磁場の中を通過させることにより、外殻電子の持つ電子の磁気

量子数が 1/2 と -1/2 の二つの値を持つものに分類される事を示した。電子がこの様な二重性を持つことは、既にメンデレーエフの周期律表からも推測される。水素の原子核である陽子は電子一つがつけ加わって中性の水素原子が形成されるが、同じ $(1s)$ 軌道を廻るもう一つの電子が陽子二つと中性子二つからなる He の原子核 (この場合原子核のスピンはゼロである) と結合して安定な He の単体原子を形作っている。また、水素分子 H_2 はふたつの水素原子が共有結合という結合様式に従って二つの電子を共有する構造を持っているが、この場合は二つの陽子のスピンが揃ったものと逆方向の二種類の分子が共存しており、それぞれオルソ水素、パラ水素と呼ばれ微妙に異なった化学的性質を持っている。

一般にスピン 1/2 を持つ粒子の波動函数は二重に縮退しているため、2 次元線型空間の元の様に扱う事が出来る。即ち空間 z-軸方向への角運動量射影の値を $1/2,\ -1/2$ としてその成分を $\psi^1 = \psi(1/2)$, $\psi^2 = \psi(-1/2)$ とすると、波動函数は

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(1/2) \\ \psi(-1/2) \end{pmatrix} \tag{3.6.1}$$

と表わされる。より正確には波動函数は空間 (軌道) 部分の自由度を持っているため、2 成分波動函数

$$\{\psi(\boldsymbol{r})\} = \begin{pmatrix} \psi^{(1/2)}(\boldsymbol{r}) \\ \psi^{(-1/2)}(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix} \tag{3.6.2}$$

である。これを $\psi(\boldsymbol{r}, \sigma)$ ($\sigma = 1/2$ or $\sigma = -1/2$) と書くこともあるが、σ は $\boldsymbol{r}$ と異なって量子数或いは離散的変数であることは注意を要する。今離散的変数だと見做してスピン変数の演算子を $\hat{f}$ とすると、そのスピン波動函数の作用は一般には

$$(\hat{f}\psi)(\sigma) = \sum_{\sigma'} f_{\sigma,\sigma'}\psi(\sigma') \tag{3.6.3}$$

と表わされる。右辺の f の行列要素の書き方は σ と σ' が逆のように思えるが、そうではなくこれが正しい書き方である。実際、今スピン固有状態の波動函数として z-軸方向の成分が $\sigma_0 = 1/2, -1/2$ のものを $\psi(\sigma) = \delta_{\sigma,\sigma_0}$ とすると、 (6.2.3) の右辺は f_{σ,σ_0}. これは $\sum_{\sigma'} f_{\sigma',\sigma_0}\delta_{\sigma',\sigma}$ とも書けるから (6.2.3) は

$$\hat{f}\delta_{\sigma,\sigma_0} = \sum_{\sigma'} f_{\sigma',\sigma_0}\delta_{\sigma',\sigma} \tag{3.6.4}$$

これは σ を離散的変数と考えれば、普通の行列要素の定義である。以下では、スピン自由度だけに注目してスピン作用素の行列表現を考える。空間自由度はないか、或いはその運動は座標原点に固定されていると考える。

以上の考察から前節で導いた角運動量演算子の行列要素の表式 (3.5.13) を用いて、スピンが半整数の場合を含めてスピン行列を求めることが出来る。まず (3.5.13) を次の様に表わしておく。

$$\langle \ell, m| L_+ |\ell m-1\rangle = \langle \ell, m-1| L_- |\ell, m\rangle = \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)} \tag{3.6.5}$$

或いは、$L_\pm = L_x \pm iL_y$ より

$$\begin{aligned}
\langle \ell, m|L_x|\ell, m-1\rangle &= \langle \ell, m-1|L_x|\ell, m\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)} \\
\langle \ell, m|L_y|\ell, m-1\rangle &= -\langle \ell, m-1|L_y|\ell, m\rangle = \frac{-i}{2}\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)} \\
\langle \ell, m|L_z|\ell, m\rangle &= m
\end{aligned} \tag{3.6.6}$$

そこでスピン 1/2 の時は $\ell = 1/2, \boldsymbol{L} \to \boldsymbol{s}$ として

$$\begin{aligned}
s_x &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
s_y &= \frac{1}{2i}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\
s_z &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.6.7}$$

であることが分かる。ここからまた

$$\begin{aligned}
s_+ &= s_x + is_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\
s_- &= s_x + is_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.6.8}$$

という当然の結果が導かれる。同等にスピン 1 の場合には $\ell = 1, \boldsymbol{L} \to \boldsymbol{S}$ として

$$
\begin{aligned}
S_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\
S_y &= \frac{1}{\sqrt{2}i} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\
S_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
S_+ &= S_x + iS_y = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
S_y &= S_x - iS_y = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.6.9}
$$

となる。これらは当然の事ながら角運動量の交換関係 (3.5.2) を満たす。

スピン 1/2 の場合に戻って (6.2.7) はしばしば 1/2 factor を除いて $\boldsymbol{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ で表わされる。

$$
s_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad s_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad s_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.6.10}
$$

これらは Pauli のスピン行列と呼ばれる。$\boldsymbol{\sigma}$ は次の交換関係を満たす: $[\sigma_i, \sigma_j] = 2ie_{i,j,k}\sigma_k$. 更に $(\sigma_i)^2 = 1$ は全て単位行列であり、次の反対称交換関係を満たす: $\{\sigma_x, \sigma_y\} = \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0$, $\{\sigma_y, \sigma_z\} = 0$, $\{\sigma_z, \sigma_x\} = 0$. これらはまとめて

$$
\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{i,j} \tag{3.6.11}
$$

と書けるので、結局

$$
\sigma_i\sigma_j = \delta_{i,j} + ie_{i,j,k}\sigma_k \tag{3.6.12}
$$

が成り立つ。これに 3 次元定数ベクトル $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ の各成分を掛けて足し上げると

$$
(\boldsymbol{\sigma a})(\boldsymbol{\sigma b}) = (\boldsymbol{ab}) + i[\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}]\boldsymbol{\sigma} \tag{3.6.13}
$$

即ちスピン演算子 $\boldsymbol{\sigma}$ の多項式は常に 1 次以下の多項式に還元出来る。例えば、後で重要となる単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ $(\boldsymbol{n}^2 = 1)$ の周りの有限角度 φ の大きさの座標回転の生成子

(generator) (これを $\mathcal{R}(\varphi\boldsymbol{n})$ と書く) は

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(\varphi\boldsymbol{n}) &= e^{-i\varphi\boldsymbol{n}\boldsymbol{s}} = e^{-i\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{n}\boldsymbol{\sigma}} = \sum_{n=0}\frac{(-i)^n}{n!}(\boldsymbol{n}\boldsymbol{\sigma})^n\left(\frac{\varphi}{2}\right)^n \\ &= \sum_{m=0}(-)^m\frac{1}{(2m)!}\left(\frac{\varphi}{2}\right)^{2m} - i(\boldsymbol{n}\boldsymbol{\sigma})\sum_{m=0}(-)^m\frac{1}{(2m+1)!}\left(\frac{\varphi}{2}\right)^{2m+1} \\ &= \cos\frac{\varphi}{2} - i(\boldsymbol{n}\boldsymbol{\sigma})\sin\frac{\varphi}{2} \\ &= \begin{pmatrix}\cos\frac{\varphi}{2} - in_z\sin\frac{\varphi}{2} & -(in_x+n_y)\sin\frac{\varphi}{2} \\ -(in_x-n_y)\sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2}+in_z\sin\frac{\varphi}{2}\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{3.6.14}$$

と表わされる。特に $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{e}_z$ と z-軸方向の単位ベクトルに取ってスピン固有状態 $\psi(\sigma)$ に作用させると、$\sigma_z\psi(\sigma) = 2\sigma\psi(\sigma)$ に注意して

$$\begin{aligned}\mathcal{A}(\varphi\boldsymbol{e}_z)\psi(\sigma) &= e^{-i\varphi s_z}\psi(\sigma) = \left(\cos\frac{\varphi}{2} - i2\sigma_z\sin\frac{\varphi}{2}\right)\psi(\sigma) \\ &= \left(\cos\frac{\varphi}{2} - 2i\sigma\sin\frac{\varphi}{2}\right)\psi(\sigma) \\ &= e^{-2i\sigma\frac{\varphi}{2}}\psi(\sigma)\end{aligned} \tag{3.6.15}$$

ここに $\sigma = \pm(1/2)$ だから $\varphi = 2\pi$ の時波動函数 $\psi(\sigma)$ は符号を変える。$\varphi = 4\pi$ と二回転してはじめて元へ戻る。このことは、z-軸に限らずどんな $\boldsymbol{n}$ 方向についても成り立つことで、それは (6.2.15) で $\varphi = 2\pi$ とすることによってすぐ分かる。ここでは証明しないが、これは半整数のスピンを持つ全てのスピン波動函数について言えることである。

(6.2.15) を用いて、空間回転の generator のところで導入したオイラー角に対する変換則を導く事も難しくないが、ここでは一般回転に対するスピン函数 (6.2.1) に対する変換行列の一般的性格をまず議論する。回転の generator は unitary だから、変換行列が unitary 行列 $U^\dagger U = UU^\dagger = 1$ である事は明らかである。これを

$$\psi' = \begin{pmatrix}(\psi')^1 \\ (\psi')^2\end{pmatrix} = U\psi = \begin{pmatrix}\alpha & \beta \\ \gamma & \delta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi^1 \\ \psi^2\end{pmatrix} \tag{3.6.16}$$

と書く。スピン 1/2 の二粒子の合成を考えると $2\times 2 = 4$ つの状態は、スピン 0 の状態と 3 つのスピン 1 の状態に別れる。二組のスピン波動函数を ψ, φ とすると、スピン 0 の状態は反対称波動函数

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^1\varphi^2 - \psi^2\varphi^1) \tag{3.6.17}$$

によって表わされる。この函数は (3.6.16) の変換によって

$$(\psi')^1(\varphi')^2 - (\psi')^2(\varphi')^1 = (\alpha\delta - \gamma\beta)(\psi^1\varphi^2 - \psi^2\varphi^1) \tag{3.6.18}$$

と変換される。スピン 0 の系は回転不変だから $\alpha\delta - \gamma\beta = 1$ でなければならない。det$U = 1$ である様な 2×2 unitary 行列の全体は $SU(2)$ 群 (2 dimensional untary group) と言われ、幾つもある連続 Lie 群の一つである。また後で示す様に SU(2) 行列 $U \in SU(2)$ は 3 つの独立な実パラメータを持っており、例えばそれを空間回転のオイラー角に選ぶことが出来る。全ての U は Pauli 行列から作った空間回転の generator から生成され、これらの 3 つの実パラメータについて連続である。この様に変換されるスピン 1/2 の 2 成分波動函数 (6.2.1) をスピノール (spinor) という。

2 次元スピノール空間は 2 次元のベクトル空間であり、そこに次の様な反対称計量 (metric) を導入することにより一般のテンソル構造を導入して、より高階のスピノールを構成することができる。(1913, Elie Cartan)

$$g_{\lambda,\mu} = g^{\lambda,\mu} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.6.19}$$

ここに $g^{\lambda,\mu} = -g^{\mu,\lambda}, g_{\lambda,\mu} = -g_{\mu,\lambda}$ である。これを使って、添え字の上げ下げを

$$\psi_\lambda = g_{\lambda,\mu}\psi^\mu \quad , \quad \psi^\lambda = g^{\mu,\lambda}\psi_\mu \tag{3.6.20}$$

に従って行う。(g の添え字の順序に注意！) ここに、上と下に現われる同じギリシャ記号については 1 と 2 の和を取るものとする (縮約という)。上付きの成分は反変成分 (こちらが普通のベクトルである)、下付きの成分を共変成分という。($g^{\lambda,\mu}, g_{\lambda,\mu}$ をこのルールに従って変換すると ${g^\lambda}_\mu = {g_\lambda}^\mu = \delta^\lambda_\mu =$ 単位行列となる。) (3.6.20) を使うと

$$\psi_1 = \psi^2 \quad , \quad \psi_2 = -\psi^1 \tag{3.6.21}$$

となる。この規則のもとに (3.6.17) の反対称波動函数は

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^1\varphi_1 + \psi^2\varphi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi^\lambda\varphi_\lambda \tag{3.6.22}$$

となる。特に $\varphi = \psi$ の時は

$$\psi^\lambda\psi_\lambda = -\psi_\lambda\psi^\lambda = 0 \tag{3.6.23}$$

である。スピノールの複素共役については

$$|\psi^1|^2 + |\psi^2|^2 = \psi^1(\psi^1)^* + \psi^2(\psi^2)^* \tag{3.6.24}$$

が粒子の存在確率を与える事により、$(\psi_1)^*$ と $(\psi^2)^*$ がスピノールの共変成分 ψ_1 と ψ_2 の様に変換する事は明らかである。そこで

$$(\phi_1')^* = \delta(\psi_1)^* - \gamma(\psi_2)^* \quad , \quad (\psi_2')^* = -\beta(\psi_1)^* + \alpha(\psi_2)^* \tag{3.6.25}$$

これを元の式の複素共役を取ったものと比較すると

$$\alpha = \delta^* \quad , \quad \beta = -\gamma^* \tag{3.6.26}$$

であることが分かる。 2×2 unitary matrix の $4 \times 2 = 8$ 個の実パラメータに (3.6.26) の 4 つの条件と一つの条件 $\alpha\delta - \gamma\beta = 1$ が付くので 3 つの実パラメータだけが独立である。それが 3 つのオイラー角に対応する。

2 粒子系のスピン 1 の状態に戻って、波動函数は z-軸方向の時期磁気子数が $1, 0, -1$ のものに対応して

$$\begin{aligned} &\psi^1\psi^1 \\ &\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^1\varphi^2 + \psi^2\varphi^1) \\ &\psi^2\varphi^2 \end{aligned} \tag{3.6.27}$$

で表されるが、これらはまた 2 階の対称スピノール

$$\begin{aligned} &\psi^{11} \\ &\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^{12} + \psi^{21}) \\ &\psi^{22} \end{aligned} \tag{3.6.28}$$

によっても表わされる。$\psi^{\lambda,\mu} = \psi^{\mu,\lambda}$ は λ と μ のそれぞれについて (3.6.16) と同じ様に変換する。更に高階のスピノールも、同様に定義される。例えば、$2s$ 階の対称スピノールはスピン s の状態を表わす。反変スピノールは $\psi^{\lambda,\mu,\nu,\cdots}$ と $2s$ 個の添字を持つが、添え字の任意の交換について不変であるため、最初に 1 を並べそのあと 2 を並べてよい。そこで $\psi^{111\cdots222\cdots}$ の 1 の数を $s+\sigma$ 個、2 の数を $s-\sigma$ 個とすると磁気量子数の値は $(s+\sigma)/2 - (s-\sigma)/2 = \sigma$ よりこの状態は $\psi(s,\sigma)$ の状態に対応する。ここに、$\sigma = s, s-1, \cdots, -s$ である。比例係数は規格化の条件

$$\sum_{\sigma=-s}^{s} |\psi(s,\sigma)|^2 = \sum_{\lambda,\mu,\cdots}^{2} |\psi^{\lambda,\mu,\cdots}|^2 \tag{3.6.29}$$

から決まる。添え字の縮退による自由度は $2s$ 個の並びから $s+\sigma$ 個の 1 を選びだす方法 (それ以外は全て 2) $\binom{2s}{ss+\sigma}$ に等しいから、phase の不定性を別にすると

$$\psi(s,\sigma) = \sqrt{\frac{(2s)!}{(s+\sigma)!(s-\sigma)!}}\psi^{111\cdots222\cdots} \tag{3.6.30}$$

となる。ここに 1 の数は $s+\sigma$、2 の数は $s-\sigma$ 個である。

以前 (3.2.29) で軌道角運動量について空間回転の generator を用いた空間座標 $\boldsymbol{r}$ のオイラー角による変化を求めたが、同様に (6.2.15) を用いてオイラー角に対するスピン波動函数の成分 (6.2.1) の変換行列を求めるのは容易である。(**??**) に倣って空間回転の generator を

$$\mathcal{R}(\varphi,\theta,\psi)=e^{-i\varphi s_z}e^{-i\theta s_y}e^{-i\psi s_z} \tag{3.6.31}$$

とすると (6.2.15) から直接

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(\varphi,\theta,\psi)&=\begin{pmatrix}e^{-i\frac{\varphi}{2}} & 0\\ 0 & e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{-i\frac{\psi}{2}} & 0\\ 0 & e^{i\frac{\phi}{2}}\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\psi}{2}} & -e^{-i\frac{\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\psi}{2}}\\ e^{i\frac{\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\psi}{2}} & e^{i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\psi}{2}}\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{3.6.32}$$

が得られる。これはスピン 1/2 の場合の Wigner の D-函数である。

実際にはスピン自由度と軌道自由度は同時に存在するため、それらの和でもって空間回転の generator を構成しなければならない。原子核物理でよく用いられる結合形式は、i-番目の核子の全角運動量を軌道角運動量 ℓ_i と $\boldsymbol{s}_i$ から $\boldsymbol{j}_i=\boldsymbol{l}_i+\boldsymbol{s}_i=\boldsymbol{l}_i+\frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{2}$ とし、更に系の全角運動量を $\boldsymbol{J}=\sum_i\boldsymbol{j}_i$ とすることである。これを jj coupling scheme という。一方、まず軌道角運動量とスピン角運動量を $\boldsymbol{L}=\sum_i\boldsymbol{l}_i,\boldsymbol{S}=\sum_i$ で定義し、そのあと全角運動量を $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$ で定義することも可能で、こちらの方は LS coupling scheme と呼ばれる。いずれの場合にも空間回転の generator は (3.6.31) で $\boldsymbol{s}$ を $\boldsymbol{J}$ で置き換えたもので定義される。各角運動量自由度は互いに独立なので、その効果は全ての粒子の軌道・スピン変数への効果の積み重ねである。

角運動量代数の学びには、ここで述べたもの以外に Clebsch-Gordan 係数による角運動量の合成や Wigner の D-函数、Wigner-Eckert の定理等重要 なものが数多くあるがここでは簡単に定義と結果だけを述べるにとどめる。興味のある方は、例えば私の A3 ゼミノート「角運動量」(http://qmpack.homelinux.com/fujiwara/old-homepage/ensyu/data/A3.pdf) や Rose の教科書、「角運動量の理論」、Bohr and Mottelson「Nuclear Structure -Vol. 1」の pps.xx - xx を参照されたい。

(角運動量の合成, Clebsch-Gordan 係数)

2 つの独立な自由度に関する角運動量 $\boldsymbol{J}_1$, $\boldsymbol{J}_2$ の合成、$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$ ($\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{L}+\boldsymbol{\sigma}/2$ 等を含む) を考える。$\boldsymbol{J}$ も角運動量の交換関係 $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=i\boldsymbol{J}$ を満す。例えば、2

粒子状態を

$$|(j_1 j_2) jm\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \tag{3.6.33}$$

で定義すると、

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{J}^2 |(j_1 j_2) jm\rangle = j(j+1) |(j_1 j_2) jm\rangle \ , \\ &J_z |(j_1 j_2) jm\rangle = m |(j_1 j_2) jm\rangle \end{aligned} \tag{3.6.34}$$

を満す。可能な j の値は, $j = |j_1 - j_2|,\ |j_1 - j_2| + 1,\ \cdots,\ j_1 + j_2$ で

$$\sum_{j=|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} (2j+1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \tag{3.6.35}$$

より、(6.1.20) は、j_1 と j_2 を fix した時の基底 $\{|j_1 m_1\rangle, |j_2 m_2\rangle\}_{m_1 m_2}$ から $\left\{|jm\rangle\right\}_{jm}$ (with $m = m_1 + m_2$) への直交変換であり、直交行列 $C^{jm}_{m_1, m_2} = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle$ は次の直交関係を満す。(実際は unitary 行列だが、基底の phase の取りかたにより実数にとれる。)

$$\begin{aligned} &\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle\ \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j' m'\rangle = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \\ &\sum_{jm} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle\ \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | jm\rangle = \delta_{m_1, m_1'} \delta_{m_2, m_2'} \end{aligned} \tag{3.6.36}$$

$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle$ を Clebsch-Gordan 係数という。これを求めるには、原理的には $m = m_1 + m_2$ を満たす基底 $\{|j_1 m_1\rangle, |j_2 m_2\rangle\}$ でもって、$\boldsymbol{J}^2$ を対角化すればよい。実際には、また別の方法で closed expression が求められる。その表式により、次のような Clebsch-Gordan 係数の対称性が得られる。

$$\begin{aligned} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle &= (-1)^{j_1 + j_2 - j}\ \langle j_2 m_2 j_1 m_1 | jm\rangle \\ &= (-1)^{j_1 + j_2 - j}\ \langle j_1\ -m_1\ j_2\ -m_2 | j\ -m\rangle \\ &= (-1)^{j_1 - m_1}\ \left(\frac{2j+1}{2j_2+1}\right)^{\frac{1}{2}} \langle j_1 m_1\ j\ -m | j_2\ -m_2\rangle \\ &= (-1)^{j_2 + m_2}\ \left(\frac{2j+1}{2j_1+1}\right)^{\frac{1}{2}} \langle j\ -m\ j_2\, m_2 | j_1\ -m_1\rangle \\ &= \cdots \end{aligned} \tag{3.6.37}$$

具体的には、例えば

$$
\begin{aligned}
&\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle = 0 \qquad \text{if} \qquad m_1 + m_2 \neq m \ , \\
&\langle jm\ 00 | jm \rangle = 1 \ , \\
&\langle jm\ j\ -m | 00 \rangle = (-1)^{j-m} \frac{1}{\sqrt{2j+1}}
\end{aligned}
\tag{3.6.38}
$$

また、普通

$$
\langle j_1 j_1 j_2 m_2 | jj \rangle \geq 0 \tag{3.6.39}
$$

の phase convention (Condon-Shortley の phase convention) を採用する。

(座標回転の表現行列、D-函数)

$\boldsymbol{J}$ を角運動量として $\boldsymbol{J}^2$ とその z-成分 J_z の同時固有状態を

$$
\boldsymbol{J}^2 | jm \rangle = j(j+1) | jm \rangle \ \ , \qquad J_z | jm \rangle = m | jm \rangle \tag{3.6.40}
$$

とする。$\boldsymbol{J}$ の $|jm\rangle$ への作用は j の値を変えないから

$$
\mathcal{R}(\varphi, \theta, \psi) | jm \rangle = \sum_{m'} | jm' \rangle \langle jm' | \mathcal{R}(\varphi, \theta, \psi) | jm \rangle \tag{3.6.41}
$$

と展開出来る。ここで現れる係数

$$
\mathcal{D}^j_{m',m}(\varphi, \theta, \psi) = \langle jm' | \mathcal{R}(\varphi, \theta, \psi) | jm \rangle = \langle jm' | e^{-i\varphi J_z} e^{-i\theta J_y} e^{-i\psi J_z} | jm \rangle \tag{3.6.42}
$$

を D-函数という。両端の $e^{-i\varphi J_z}$ を bra と ket に作用させて

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{D}^j_{m',m}(\varphi, \theta, \psi) = e^{-im'\varphi} d^j_{m',m}(\theta) e^{-im\psi} \ , \\
&d^j_{m',m}(\theta) = \langle jm' | e^{-i\theta J_y} | jm \rangle
\end{aligned}
\tag{3.6.43}
$$

と分解できる。$d^j_{m',m}(\theta)$ (d function という) の具体的な表式は、例えば Rose の教科書の (4.13) 式に与えられている。それは、θ の実関数であり次の様な対称性をもつ。

$$
\begin{aligned}
d^j_{m',m}(\theta) &= (-1)^{m'-m} d^j_{m,m'}(\theta) \\
&= (-1)^{m'-m} d^j_{-m',-m}(\theta) \\
&= d^j_{m,m'}(-\theta)
\end{aligned}
\tag{3.6.44}
$$

ここから、D-函数の対称性

$$
\begin{aligned}
\mathcal{D}^{j*}_{m',m}(\varphi, \theta, \psi) &= (-1)^{m'-m} \mathcal{D}^j_{-m',-m}(\varphi, \theta, \psi) \\
&= \mathcal{D}^j_{m,m'}(-\psi, -\theta, -\varphi)
\end{aligned}
\tag{3.6.45}
$$

が導かれる。D-函数はさらに、次の unitary matrix としての性質と直交関係を満す。以下、Euler angle を $\Omega=(\varphi,\theta,\psi)$ と略記する。

$$\begin{aligned}
&\sum_m \mathcal{D}^{j*}_{m,m_1}(\Omega)\ \mathcal{D}^{j}_{m,m_2}(\Omega)=\delta_{m_1,m_2}\\
&\sum_m \mathcal{D}^{j*}_{m_1,m}(\Omega)\ \mathcal{D}^{j}_{m_2,m}(\Omega)=\delta_{m_1,m_2}
\end{aligned}\tag{3.6.46}$$

もし、j_1 と j_2 がともに整数、あるいは半整数なら

$$\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{2\pi}d\psi\ \mathcal{D}^{j_1*}_{m_1,m_1'}(\Omega)\ \mathcal{D}^{j_2}_{m_2,m_2'}(\Omega)=\frac{8\pi^2}{2j_1+1}\delta_{j_1,j_2}\delta_{m_1,m_2}\delta_{m_1',m_2'}\tag{3.6.47}$$

が成り立つ。

(Clebsch-Gordan series)

(6.1.20) の逆変換

$$|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle=\sum_{jm}\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle\ |(j_1j_2)jm\rangle\tag{3.6.48}$$

に $\mathcal{R}(\Omega)$ をかけて

$$\mathcal{R}(\Omega)|jm\rangle=\sum_{m'}\mathcal{D}^{j}_{m',m}(\Omega)|jm'\rangle\tag{3.6.49}$$

等を使うと

$$\begin{aligned}
&\sum_{m_1'm_2'}\mathcal{D}^{j_1}_{m_1',m_1}(\Omega)|j_1m_1'\rangle\ \mathcal{D}^{j_2}_{m_2',m_2}(\Omega)|j_2m_2'\rangle\\
&=\sum_{jm'm}\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle\ \mathcal{D}^{j}_{m',m}(\Omega)|(j_1j_2)jm'\rangle
\end{aligned}\tag{3.6.50}$$

左から $\langle j_1m_1'|\langle j_2m_2'|$ をかけると

$$\mathcal{D}^{j_1}_{m_1',m_1}(\Omega)\ \mathcal{D}^{j_2}_{m_2',m_2}(\Omega)=\sum_{jmm'}\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm'\rangle\ \mathcal{D}^{j}_{m',m}(\Omega)\tag{3.6.51}$$

更に、$\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle$ をかけて m_1, m_2 で和をとると、Clebsch-Gordan 係数の直交性より

$$\sum_{m_1m_2}\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle\ \mathcal{D}^{j_1}_{m_1',m_1}(\Omega)\ \mathcal{D}^{j_2}_{m_2',m_2}(\Omega)=\sum_{m'}\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm'\rangle\ \mathcal{D}^{j}_{m',m}(\Omega)\tag{3.6.52}$$

が得られる。同様に

$$\sum_{m_1'm_2'} \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | jm \rangle \; \mathcal{D}^{j_1}_{m_1',m_1}(\Omega) \; \mathcal{D}^{j_2}_{m_2',m_2}(\Omega) = \sum_{m} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle \; \mathcal{D}^{j}_{m',m}(\Omega) \tag{3.6.53}$$

更に、(3.6.52) に $\langle j_1 m_1' j_2 m_2' | jm' \rangle$ を掛けて m_1', m_2' で和をとると

$$\sum_{m_1 m_2 m_1' m_2'} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle \; \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | jm' \rangle \; \mathcal{D}^{j_1}_{m_1',m_1}(\Omega) \; \mathcal{D}^{j_2}_{m_2',m_2}(\Omega) = \mathcal{D}^{j}_{m',m}(\Omega) \tag{3.6.54}$$

が得られる。(3.6.51) - (3.6.54) を Clebsch-Gordan series という。(同一の Euler angle Ω についての式であることに注意!)

次の章で示すように D-函数と Y-函数の間には整数の $j = \ell$ に対して

$$\mathcal{D}^{\ell}_{m,0}(\varphi, \theta, 0) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell + 1}} \; Y^*_{\ell m}(\theta, \varphi) \tag{3.6.55}$$

の関係がある。そこで、(3.6.51) の特別の場合として

$$\mathcal{D}^{\ell_1}_{m_1,0}(\varphi, \theta, 0) \; \mathcal{D}^{\ell_2}_{m_2,0}(\varphi, \theta, 0) = \sum_{\ell m} \langle \ell_1 m_1 \ell_2 m_2 | \ell m \rangle \langle \ell_1 0 \ell_2 0 | \ell 0 \rangle \; \mathcal{D}^{\ell}_{m,0}(\varphi, \theta, 0) \tag{3.6.56}$$

で (3.6.55) を用いた後 complex conjugate をとると

$$Y_{\ell_1 m_1}(\theta, \varphi) \; Y_{\ell_2 m_2}(\theta, \varphi) = \sum_{\ell m} \frac{\widehat{\ell_1} \widehat{\ell_2}}{\sqrt{4\pi} \widehat{\ell}} \langle \ell_1 m_1 \ell_2 m_2 | \ell m \rangle \langle \ell_1 0 \ell_2 0 | \ell 0 \rangle \; Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \tag{3.6.57}$$

が得られる。ここに、$\widehat{a} = \sqrt{2a + 1}$ の notation を用いた。更に、左から $Y^*_{\ell m}(\theta, \varphi)$ を掛けて θ と φ で積分すると

$$\langle Y_{\ell m} | Y_{\ell_1 m_1} | Y_{\ell_2 m_2} \rangle = \langle Y_{\ell m} | Y_{\ell_2 m_2} | Y_{\ell_1 m_1} \rangle = \frac{\widehat{\ell_1} \widehat{\ell_2}}{\sqrt{4\pi} \widehat{\ell}} \langle \ell_1 m_1 \ell_2 m_2 | \ell m \rangle \langle \ell_1 0 \ell_2 0 | \ell 0 \rangle \tag{3.6.58}$$

が得られる。これを、後で証明する Wigner-Eckart の定理

$$\langle j' m' | \mathcal{O}_{\lambda \mu} | jm \rangle = \langle jm \lambda \mu | j' m' \rangle \; \langle j' || \mathcal{O}_{\lambda} || j \rangle_{\text{unc}} \tag{3.6.59}$$

を用いて表すと

$$\langle Y_{\ell'} || Y_{\lambda} || Y_{\ell} \rangle_{\text{unc}} = \frac{\widehat{\lambda} \widehat{\ell}}{\sqrt{4\pi} \widehat{\ell'}} \; \langle \ell 0 \lambda 0 | \ell' 0 \rangle \tag{3.6.60}$$

となる。(3.6.57) も Clebsch-Gordan series と呼ばれる。

(Eq. (3.6.47) の証明)

D-函数の対称性 (3.6.45) と Clebsch-Gordan series (3.6.51) を使うと (3.6.47) の左辺は

$$\sum_{j,m,m'}(-1)^{m_1-m_1'}\langle j_1\ -m_1\ j_2m_2|jm\rangle\ \langle j_1\ -m_1'\ j_2m_2'|jm'\rangle \\ \times\int_0^{\pi}\sin\theta d\,\theta\int_0^{2\pi}d\,\varphi\int_0^{2\pi}d\,\psi\ e^{-im\varphi}\ d^j_{m,m'}(\theta)\ e^{-im'\psi} \tag{3.6.61}$$

ここに、もし j_1 と j_2 がともに整数、あるいは半整数なら、m, m', j はともに整数となるから、φ, ψ の積分で $m=0$, $m'=0$ only nonzero より、(3.6.61) の 2 行目は

$$(2\pi)^2\delta_{m,0}\delta_{m',0}\int_0^{\pi}\sin\theta d\,\theta\ d^j_{0,0}(\theta) \tag{3.6.62}$$

となる。一方、j が整数なら、(3.6.55) より

$$\mathcal{D}^{\ell}_{0,0}(0,\theta,0)=d^{\ell}_{0,0}(\theta)=P_\ell(\cos\theta) \tag{3.6.63}$$

となるから、Legendre 函数の直交性より $j=0$ only. 更に、(6.1.26) の Clebsch-Gordan 係数の値より、容易に (3.6.47) が得られる。

(D-函数と Y-函数の関係)

(3.6.55) を示す為に、まず $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}$ (軌道角運動量) とした (3.6.41) が

$$Y_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}}')=\mathcal{R}(\Omega)\ Y_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}})=\sum_{m'}\mathcal{D}^{\ell}_{m',m}(\Omega)\ Y_{\ell m'}(\widehat{\boldsymbol{r}}) \tag{3.6.64}$$

となることに注意する。ここに、$\widehat{\boldsymbol{r}}=(\theta,\varphi)$ であり、$\widehat{\boldsymbol{r}}'$ は (**??**) の直交変換により $\widehat{\boldsymbol{r}}$ と Euler angle Ω (例えば、ここでは $\Omega=(\alpha,\beta,\gamma)$ とする) によって決まる方向ベクトルである。即ち、D-函数とは規約テンソル表示の表現行列 $M(\Omega)$ である。(一方、(**??**) の $M(\Omega)$ は直交表示である。) (3.6.64) より、D-函数の直交性 (3.6.46) を用いると、次の量は回転不変である事がすぐわかる。

$$I=\sum_m Y^*_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}}_1)\ Y_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}}_2) \tag{3.6.65}$$

従って、I はいかなる座標系で計算しても同じである。そこで、$\widehat{\boldsymbol{r}}_2=(\theta_2,\varphi_2)$ を z-軸にとると $\theta_2=0$ より、θ_1 が 2 つのベクトル $\widehat{\boldsymbol{r}}_1$ と $\widehat{\boldsymbol{r}}_2$ の間のなす角となる。つまり、

$\cos\theta = (\widehat{\boldsymbol{r}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{r}}_2)$ with $\theta = \theta_1$. 一方、$Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ の具体的な表式

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}\ P_\ell^{|m|}(\cos\theta)\ e^{im\varphi} \tag{3.6.66}$$

より

$$Y_{\ell m}(0, \varphi) = \delta_{m,0} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\ ,$$
$$Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\ P_\ell(\cos\theta) \tag{3.6.67}$$

が分かるから、$I = \{(2\ell+1)/4\pi\}\ P_\ell(\cos\theta)$ となる。結局

$$\sum_m Y^*_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}}_1)\ Y_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}}_2) = \frac{2\ell+1}{4\pi}\ P_\ell(\cos\theta) \qquad \text{with} \qquad \cos\theta = (\widehat{\boldsymbol{r}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{r}}_2) \tag{3.6.68}$$

が成り立つ。

次に、(3.6.64) で $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$, $m = 0$ とおいて

$$Y_{\ell 0}(\theta', \varphi') = \mathcal{R}(\alpha, \beta, \gamma)\ Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) = \sum_m \mathcal{D}^\ell_{m,0}(\alpha, \beta, \gamma)\ Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \tag{3.6.69}$$

が得られるが、この式は γ にはよらず、また (3.2.29) - (3.2.30) から θ' は 2 つの方向ベクトル (θ, φ) と (β, α) の間のなす角であることが分かる。(実際、$\cos\theta' = \sin\beta \sin\theta \cos(\beta - \varphi) + \cos\beta \cos\theta$) (3.6.67) の 2 番目の式から $Y_{\ell 0}(\theta', \varphi') = \sqrt{(2\ell+1)/4\pi}\ P_\ell(\cos\theta')$ であるので、(3.6.69) は (3.6.68) そのものである。係数をそろえると

$$\mathcal{D}^\ell_{m0}(\alpha, \beta, 0) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}\ Y^*_{\ell m}(\beta, \alpha) \tag{3.6.70}$$

である。ここに、γ は任意であるので 0 とおいた。この式と、D-函数の対称性 (3.6.45) を組合せると

$$Y^*_{\ell m}(\theta, \varphi) = (-1)^m\ Y_{\ell\, -m}(\theta, \varphi) \tag{3.6.71}$$

が分かる。

(Wigner-Eckart の定理)

tensor operator $T_{\lambda\mu}$ を変換法則

$$T'_{\lambda\mu} = \mathcal{R}(\Omega)\ T_{\lambda\mu}\ \mathcal{R}(\Omega)^{-1} = \sum_{\mu'} \mathcal{D}^\lambda_{\mu', \mu}(\Omega)\ T_{\lambda\mu'} \tag{3.6.72}$$

によって定義する。ここに、$T_{\lambda\mu} = T_{\lambda\mu}(\boldsymbol{r})$ の時、$T'_{\lambda\mu} = T_{\lambda\mu}(\boldsymbol{r}')$ の意味である。この時、$|I'M'\rangle$ の角運動量状態を

$$T_\lambda|I\rangle_{(I\lambda)I'M'} = \sum_{M\mu}\langle IM\lambda\mu|I'M'\rangle\, T_{\lambda\mu}|IM\rangle \tag{3.6.73}$$

(角運動量結合の順序に注意!) により定義すると、これは実際に $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の固有値 $I'(I'+1)$, M' の固有状態になる。このことは、(3.6.73) に $\mathcal{R}(\Omega)$ を作用させて、D-函数の Clebsch-Gordan series を使うことにより、簡単に示すことが出来る。 そこで

$$T_\lambda|I\rangle_{(I\lambda)I'M'} = \sum_{M\mu}\langle IM\lambda\mu|I'M'\rangle\, T_{\lambda\mu}|IM\rangle = |I'M'\rangle\langle I'||T_\lambda||I\rangle_{\rm unc} \tag{3.6.74}$$

となる $\langle I'||T_\lambda||I\rangle_{\rm unc}$ を (unconventional) reduced matrix element という。(3.6.74) に $\langle IM\lambda\mu|I'M'\rangle$ を掛けて $I'M'$ で和をとると

$$T_{\lambda\mu}|IM\rangle = \sum_{I'M'}\langle IM\lambda\mu|I'M'\rangle\; |I'M'\rangle\langle I'||T_\lambda||I\rangle_{\rm unc} \tag{3.6.75}$$

が得られる。更に、左から $\langle I'M'|$ を掛けて

$$\langle I'M'|T_{\lambda\mu}|IM\rangle = \langle IM\lambda\mu|I'M'\rangle\; \langle I'||T_\lambda||I\rangle_{\rm unc} \tag{3.6.76}$$

としたものを Wigner-Eckart の定理という。この関係式は行列要素の z-方向へのテンソル成分への依存性が Clebsch-Gordan 係数 $\langle IM\lambda\mu|I'M'\rangle$ によって完全に決まっていることを表している。通常の reduced matrix element の定義には final state の dimension factor $\sqrt{2I'+1}$ を括り出した

$$\langle I'||T_\lambda||I\rangle_{\rm unc} = \frac{1}{\sqrt{2I'+1}}\langle I'||T_\lambda||I\rangle \tag{3.6.77}$$

が普通使われるが、これは $\langle I'||T_\lambda||I\rangle$ における bra state と ket state の交換による対称性を良くするためであって、実際の角運動量の組み替え演算のためにはむしろ unconventional reduced matrix element の方が便利である。これらは、unitary form の Wigner 係数の定義とともに用いられる。

4　中心力場の問題

4.1　中心力場の問題の一般的性質

外場のポテンシャル $U(\boldsymbol{r})$ の中を運動する質量 m の粒子の一体問題で、$U(\boldsymbol{r}) = U(r,\theta,\varphi)$ が極座標の動径部分 $r = |\boldsymbol{r}|$ だけによる時、これを中心力場の問題という。こ

の時、力は座標原点の方向を向く。古典力学の時と同様に、$U(r)$ で相互作用する二体問題も重心運動を分離する事によってここでの一体問題に帰着される。$\Delta = \nabla^2$ を三次元ラプラシアンとして二体系の非相対論的運動エネルギ演算子 $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2$ は、座標変換

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1 \quad , \quad \boldsymbol{R} = \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1 + m_2} \tag{4.1.1}$$

によって $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\boldsymbol{R}} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{r}}$ と変換される。ここに M は全質量、m は換算質量である。

$$M = m_1 + m_2 \quad , \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{4.1.2}$$

そこで全系のハミルトニアン $H = H_0 + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\boldsymbol{R}} + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{r}} + U(r)\right)$ は $\boldsymbol{R}$ についての自由運動と $\boldsymbol{r}$ についての一体問題に変数分離される。

相対運動のハミルトニアン $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)$ は座標回転に対して不変であり、角運動量演算子 $\boldsymbol{L}^2, L_z$ と可換である: $[H, \boldsymbol{L}^2] = [H, L_z] = 0$. 従って、エネルギー E と角運動量 ℓ, m を同時に対角化する表示が可能である。系の全波動函数函数を $\Psi(\boldsymbol{r}) = R_\ell(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ とすると、動径部分の波動函数 $R_\ell(r)$ は次の Schrödinger 方程式を満たす。((3.1.26) 参照)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) + U(r)\right] R_\ell(r) = E R_\ell(r) \tag{4.1.3}$$

以下簡単のため $R_\ell(r)$ を $R(r)$ と書く。$R(r)$ の微分の 1 次の項は $R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$ によって消去することができる。即ち

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + U(r)\right] \chi(r) = E\chi(r) \tag{4.1.4}$$

古典力学の場合と同様に、これらは領域 $r = 0$-∞ における有効ポテンシャル

$$U^{(eff)}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + U(r) \tag{4.1.5}$$

内での一次元問題である。右辺第一項目は、$M^2 = \hbar^2\ell(\ell+1)$ が古典的角運動量に対応するので遠心力ポテンシャルの部分である。解の解析的な性質は $U(r)$ の性質によって決まる。もし $U(r)$ が領域 $[0, \infty)$ で有界なら $R(r)$ もこの領域で有界である。そこで $\chi(0) = 0$ が成り立つ。実際にはもっと弱い条件でもこれは成り立つ。一般に $U(r)$ は連続だから、$r = 0$ と $r = \infty$ における振る舞いが問題である。普通 $\lim_{r\to 0} r^2 U(r) = 0$ が満たされている。この時は $r \to 0$ の領域で $\ell(\ell+1)/r^2$ の項に比べて $U(r)$ の項やエネル

ギーの項は無視することが出来る。そこで $R(r)$ の漸近的振る舞いとして $R(r) \sim r^s$ を仮定すると (4.1.3) より $s(s+1)-\ell(\ell+1)=(s-\ell)(s+\ell+1)=0$ から $s=\ell$ or $-(\ell+1)$ が得られる。このうち、物理的状況に沿った解は $s=\ell$ である。そこで座標原点付近での解の振る舞いは $R(r) \sim r^\ell$、あるいは $\chi(r) \sim r^{\ell+1}$ である。一方、r の遠方での振る舞い微妙である。特に $U(r) \sim 1/r$ の場合は十分早く遠方で減少する解とそうでない解の境目になっており注意深い取り扱いが必要である。この事は、クーロンエネルギー準位が負のエネルギーからゼロエネルギーに向けて無限に集積していく現象にも現われている。

4.2 自由運動

$U(r)=0$ の場合は平面波で全て無限運動だから連続スペクトルだけが存在する。そこでこれを $E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ とすると Schrödinger 方程式は

$$\frac{d^2 R_{k,\ell}(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_{k,\ell}(r)}{dr}+\left(k^2-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R_{k,\ell}(r)=0 \tag{4.2.1}$$

となる。全波動函数は $\psi_{k,\ell,m}=R_{k,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ は

$$\int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \psi_{k,\ell,m}\psi_{k',\ell',m'}=\delta(k-k')\delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'}$$
$$\int_0^\infty r^2 dr R_{k,\ell}(r)R_{k',\ell}(r)=\delta(k-k') \tag{4.2.2}$$

で normalize されている。特に $\ell=0$ の時

$$\frac{d^2}{dr^2}rR_{k,0}(r)+k^2 rR_{k,\ell}(r)=0 \tag{4.2.3}$$

より、解は $rR_{k,0}(r)=A\sin(kr)+B\cos(kr)$ だが原点で正則な解は sine の解だけである。 normalize された解は

$$R_{k,0}(r)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\sin kr}{r} \tag{4.2.4}$$

となる。 $\ell \neq 0$ の解を求めるために $R_{k,\ell}=r^\ell w_{k,\ell}$ として、まず $w_{k,\ell}$ に対する方程式を求める。(当面 k は省略する。) 結果は

$$\frac{d^2 w_\ell}{dr^2}+\frac{2(\ell+1)}{r}\frac{dw_\ell}{dr}+k^2 w_\ell=0 \tag{4.2.5}$$

となる。この式をもう一度 r で微分して $\frac{dw_\ell}{dr}=rw_{\ell+1}$ とおくと、$w_{\ell+1}$ は (4.2.5) で $\ell \to \ell+1$ とした方程式を満たす。結局 $w_{\ell+1} \sim \frac{1}{r}\frac{d}{dr}w_\ell$ が得られる。$\ell=0$ の $w_0=R_{k,0}$

から出発してこれを ℓ 回繰り返すと、$w_\ell \sim \left(\frac{d}{rdr}\right)^\ell R_{k,0}$ となる。そこで (4.2.4) より

$$R_{k,\ell}(r) = (-)^\ell \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{r}{k}\right)^\ell \left(\frac{d}{rdr}\right)^\ell \frac{\sin kr}{r} \tag{4.2.6}$$

が得られる。ここに、$1/k^\ell$ は dimension を合わせるため必要である。また、$(-)^\ell$ は後での便宜上導入した。

(4.2.6) を用いて、$r \to \infty$ の漸近的振る舞いを調べる事ができる。この場合、微分が全て sine 函数に掛かる項だけを残して

$$R_{k,\ell}(r) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \frac{1}{k^\ell} \left(-\frac{d}{dr}\right)^\ell \sin kr \tag{4.2.7}$$

ここに、$(-d/dr) \sin kr = -k \cos kr = k \sin(kr - \pi/2)$, $(-d/dr)^2 \sin kr = k^2 \sin(kr - \pi)$, $\cdots$, $(-d/dr)^\ell \sin kr = k^\ell \sin(kr - (\ell\pi/2))$ より結局

$$R_{k,\ell}(r) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{r} \tag{4.2.8}$$

が得られる。この漸近型は例えポテンシャル $U(r)$ がゼロでなくても、十分遠方でそれが無視出来れば、一般的な形で成り立っている。即ち

$$R_{k,\ell}(r) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right)}{r} \tag{4.2.9}$$

が成り立つ。ここに δ_ℓ は位相差 (phase shift) と言われ、ポテンシャルを特徴づける重要な量である。これを求めるには、勿論このポテンシャルのもとでの Schrödinger 方程式を解かねばならない。δ_ℓ は勿論 k にも依存する。

逆に $r \to 0$ における漸近的振る舞いは、(4.2.6) の sine 部分をベキ展開して r^ℓ 以上の項だけが残って

$$\begin{aligned} R_{k,\ell}(r) &= (-)^\ell \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{2r}{k}\right)^\ell \left(\frac{d}{d(r^2)}\right)^\ell \sum_{n=0}^{\infty} (-)^n \frac{k^{2n+1} r^{2n}}{(2n+1)!} \\ &\sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} k (2kr)^\ell \frac{\ell!}{(2\ell+1)!} \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} k \frac{(kr)^\ell}{(2\ell+1)!!} \end{aligned} \tag{4.2.10}$$

となる。ここに $(2\ell+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2\ell+1)$ である。

しばしば、ここで述べた原点正則解の代わりに外向き球面波やその複素共役である内向き球面波が必要になる場合がある。これらは (4.2.6) で sin を cos に変えた非正則解に関

係している。非正則解の漸近型は遠方では (4.2.8) で sin を cos に変えるだけで良いが、$r=0$ では全く異なっている。この場合は $\cos kr = 1$ と置いて

$$
\begin{aligned}
R_{k,\ell}^{\mathrm{irr}}(r) &\sim (-)^{\ell}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{r}{k}\right)^{\ell}\left(\frac{d}{rdr}\right)^{\ell}\frac{1}{r} \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{r}{k}\right)^{\ell}\frac{(2\ell-1)!!}{r^{\ell+1}} \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}}k\frac{(2\ell-1)!!}{(kr)^{\ell+1}}
\end{aligned}
\tag{4.2.11}
$$

が得られる。ここに $(-1)!!=1$ と約束する。けこの非正則性は、外向き・内向き球面波にも受け継がれる。 $\ell=0$ の時、これらは

$$
R_{k,\ell}^{(\pm)}(r) = A\frac{\pm ikr}{r} \tag{4.2.12}
$$

で与えられる。 $\ell \neq 0$ の時は (4.2.6) を導いた時と同様にして

$$
R_{k,\ell}^{(\pm)}(r) = (-)^{\ell}A\left(\frac{r}{k}\right)^{\ell}\left(\frac{d}{rdr}\right)^{\ell}\frac{e^{\pm ikr}}{r} \tag{4.2.13}
$$

が得られる。漸近型は遠方と原点近傍でそれぞれ

$$
R_{k,\ell}^{(\pm)}(r) \sim \begin{cases} A\frac{e^{\pm i\left(kr-\frac{\ell\pi}{2}\right)}}{r} & (r\to\infty) \\ k\frac{(2\ell-1)!!}{(kr)^{\ell+1}} & (r\to 0) \end{cases} \tag{4.2.14}
$$

である。ここに normalization は $v=\frac{\hbar k}{m}$ を古典的速度として、単位時間あたりに流れ出る、あるいは入射する粒子 1 個で規格化する。即ち、角度部分の normalization を通常通り取っておくと $\oint v|\psi^{(\pm)}|^2 r^2 d\Omega = v|A|^2 = 1.$ そこで $A=\sqrt{\frac{m}{\hbar k}}$ である。

一般に Schrödinger 方程式の動径部分の波動函数は、合流型超幾何函数で表される。自由運動の場合は、これは半整数次の Bessel 函数に帰着する。即ち $R_{k,\ell}(r) = \sqrt{\frac{k}{r}}J_{\ell+1/2}(kr)$ が示せる。 半整数次の Bessel 函数を $j_\ell(x)=\sqrt{\frac{\pi}{2x}}J_{\ell+1/2}(x)$ で表わすと便利である。(これを球 Bessel function という。) そうすると (4.2.6) の $R_{k,\ell}(r)$ は $R_{k,\ell}(r)=k\sqrt{\frac{2}{\pi}}j_\ell(kr)$ となる。ここに $j_\ell(x)$ は、次の微分方程式を満たす。

$$
\frac{d^2 j_\ell(x)}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{dj_\ell(x)}{dx} + \left(1-\frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\right)j_\ell(x) = 0 \tag{4.2.15}
$$

非正則解や外向き・内向き球面波解はそれぞれ、半整数次の Neumann 函数 (球 Neumann

函数) や第一種、第二種の Hankel 函数 (球 Hankel 函数) で表わされる。即ち

$$
\begin{aligned}
R^{\mathrm{irr}}_{k,\ell}(r) &= -k\sqrt{\frac{2}{\pi}}n_\ell(kr) \\
R^{(\pm)}_{k,\ell}(r) &= \pm iAh^{1,2}_\ell(kr)
\end{aligned} \tag{4.2.16}
$$

の関係がある。 (岩波全書「数学公式 III - 特殊函数 -」参照)

4.3 平面波の部分波展開

量子力学的散乱問題で特に重要なのは、平面波の部分波展開である。今 z- 軸方向に進む平面波 e^{ikz} を考えよう。これは、$R_{k,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ で展開できるはずである。しかしこの平面波は z-軸のまわりに対称なので φ の依存性を含んではならない。そこで $m=0$ だけが寄与する。$Y_{\ell,0}\sim P_\ell(\cos\theta)$ だから

$$
e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell j_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta) \tag{4.3.1}
$$

が成り立つはずである。比例係数 C_ℓ を決定するには

$$
e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell P_\ell(\cos\theta)(-)^\ell\left(\frac{r}{k}\right)^\ell\left(\frac{d}{rdr}\right)^\ell\frac{\sin kr}{kr} \tag{4.3.2}
$$

で指数関数をベキに展開して $(r\cos\theta)^n$ の項を比較すれば良い。まず $P_\ell(\cos\theta)$ は $\cos\theta$ のたかだか ℓ-次の多項式だから $n\leqq\ell$ である。一方 r^n の方は (4.2.10) と同様にして r^ℓ 以上が残るから $n\geqq\ell$. 従って $n=\ell$ の項だけが残って左辺は $i^\ell(kr)^\ell(\cos\theta)^\ell/(\ell!)$. 右辺では、まず $P_\ell(\cos\theta)$ の $(\cos\theta)^\ell$ の係数は (3.5.33) から $\frac{(2\ell)!}{2^\ell(\ell!)^2}=\frac{(2\ell-1)!!}{\ell!}$. 動径部分は $\frac{(kr)^\ell}{(2\ell+1)!!}$ より、$i^\ell/(\ell!)=C_\ell\frac{(2\ell-1)!!}{\ell!(2\ell+1)!!}$. そこで結局 $C_\ell=i^\ell(2\ell+1)$ となる。

$$
e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)i^\ell j_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta) \tag{4.3.3}
$$

(注意) (4.3.3) は 球 Bessel 函数に対する Wittaker の積分表示式

$$
j_n(z) = \frac{1}{2i^n}\int_{-1}^{1} e^{izt}P_n(t)dt \tag{4.3.4}
$$

である。

入射平面波 e^{ikz} を単位時間あたり 1 個の粒子が入射する様に規格化すると $A=\sqrt{\frac{m}{\hbar k}}$ として $\frac{1}{\sqrt{v}}e^{ikz}=Ae^{ikz}$ となるので (4.3.3) を使うと

$$\frac{1}{\sqrt{v}}e^{ikz}=\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)i^{\ell}Aj_{\ell}(kr)P_{\ell}(\cos\theta) \tag{4.3.5}$$

ここで、$Aj_{\ell}(kr)=\frac{1}{2ik}\left(R_{k,\ell}^{(+)}-R_{k,\ell}^{(-)}\right)$ および $Y_{\ell,0}=\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}P_{\ell}(\cos\theta)$ を使って、外向き・内向き球面波の規格化された波動函数 $\psi_{k,\ell,m}^{(\pm)}=R_{k,\ell}^{(\pm)}Y_{\ell,m}$ を定義すると (4.3.5) は

$$\frac{1}{\sqrt{v}}e^{ikz}=\sum_{\ell=0}^{\infty}i^{\ell-1}\sqrt{\pi(2\ell+1)}\frac{1}{k}\left(\psi_{k,\ell,0}^{(+)}-\psi_{k,\ell,0}^{(-)}\right) \tag{4.3.6}$$

となる。粒子は全て単位時間あたり 1 個の流れの密度で規格化されているから、右辺の $\psi^{(\pm)}$ の前の係数 (の絶対値の 2 乗) は全空間を角運動量 $\ell=0$-∞ に分けた時の確率を与える。それは、面積の次元を持っている。これを、断面積への各部分波の寄与とすると

$$\sigma_{\ell}=\pi(2\ell+1)\frac{1}{k^2} \tag{4.3.7}$$

そこで ℓ から $\ell+\Delta\ell$ までの寄与は、$\ell\gg\Delta\ell\gg 1$ の時

$$\sum_{\ell}^{\ell+\Delta\ell}\sigma_{\ell}\sim 2\pi\ell\frac{1}{k^2}\Delta\ell \tag{4.3.8}$$

ここで、 ρ をいわゆる衝突係数 (impact parameter) として $\hbar\ell=\rho p$ を使うと $\ell=\rho k$ で

$$\sum_{\ell}^{\ell+\Delta\ell}\sigma_{\ell}\sim 2\pi\rho\Delta\rho \tag{4.3.9}$$

となる。この結果は古典的結果と同じである。これは ℓ が大きくなった時、古典的結果に近づくことを意味する。

4.4　調和函数

自由運動で $k^2=0$ の時の Scrödinger 方程式は Laplace 方程式と呼ばれ $\Delta\psi=0$ になる。この時 $R_{0,\ell}(r)=A_{\ell}r^{\ell}+B_{\ell}r^{-(\ell+1)}$ だが、ここで原点正則解をとつて Y-函数に r^{ℓ} を掛けた

$$\begin{aligned}\mathcal{Y}_{\ell m}(\boldsymbol{r})&=\sqrt{\frac{4\pi}{(2\ell+1)!!}}\;r^{\ell}\;Y_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}})\\&=\frac{1}{\sqrt{\ell!}}\;[\cdots[[rr]_2]r]_3\cdots]_{\ell m}\end{aligned} \tag{4.4.1}$$

(ここに $\widehat{\boldsymbol{r}} = (\theta, \varphi)$ である) は、直交座標成分 $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ について ℓ 次の同次多項式であり、かつ $\Delta\ \mathcal{Y}_{\ell m}(\boldsymbol{r}) = 0$ を満たす。これを調和函数という。(4.4.1) が ℓ 次の同次多項式であることを示すには、まず、(3.5.41) から $P_\ell^\ell(\theta) = (2\ell-1)!!\ (\sin\theta)^\ell$. また (3.5.46) から $Y_{\ell,\ell}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}}\sqrt{\frac{1}{(2\ell)!}}P_\ell^\ell(\theta)e^{i\ell\varphi}$ を使って

$$\mathcal{Y}_{\ell\ell}(\boldsymbol{r}) = (-1)^\ell \frac{1}{\sqrt{(2\ell)!!}}\ (x+iy)^\ell = \frac{1}{\sqrt{\ell!}}\ \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy)\right)^\ell \tag{4.4.2}$$

が示せるので、

$$L_- = L_x - iL_y = \left(y\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial y}\right) - i\ \left(z\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{4.4.3}$$

を次々に掛けていくと、いずれも ℓ 次の同次多項式であることが分かる。

(4.4.1) の 2 行目の関係を示すには、あとで示す様に $m = \ell$ とおいて 1 行目と等しいことを示せば十分である。その前にまず、(4.4.1) の 1 行目の式の $\ell = 0$ の時は $\mathcal{Y}_{00}(\boldsymbol{r}) = 1$, $\ell = 1$ の時は

$$\mathcal{Y}_{1,\mu}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\ r\ Y_{1,\mu}(\widehat{\boldsymbol{r}}) = r_\mu \tag{4.4.4}$$

$Y_{1,\mu}(\widehat{\boldsymbol{r}})$ の具体的な表式を用いることにより

$$\begin{aligned}
&\mathcal{Y}_{1,1}(\boldsymbol{r}) = r_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy)\ , \\
&\mathcal{Y}_{1,0}(\boldsymbol{r}) = r_0 = z\ , \\
&\mathcal{Y}_{1,-1}(\boldsymbol{r}) = r_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy)
\end{aligned} \tag{4.4.5}$$

が得られる。r_μ ($\mu = 1,\ 0,\ -1$) を球面ベクトル (sperical vector) といい、座標ベクトル $\boldsymbol{r}$ に対応する rank 1 の tensor operator である。一般に、ベクトル $\boldsymbol{V}$ の sperical vector 表示は

$$\begin{aligned}
&V_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(V_x + iV_y)\ , \\
&V_0 = V_z\ , \\
&V_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_x - iV_y)
\end{aligned} \tag{4.4.6}$$

である。この様に、3 次元ベクトルの直交表示と sperical vector 表示は、直交変換

$$r_\mu = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_0 \\ r_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}\ \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = U\ \boldsymbol{r} \tag{4.4.7}$$

によって移り変る。2 のベクトル $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ から、1 成分のスカラー $(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})$ (内積)、3 成分のベクトル $[\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}]$ (外積)、 5 成分の traceless 対称テンソル

$$T_{i,j} = \begin{pmatrix} c_1 & c_3 & c_4 \\ c_3 & c_2 & c_5 \\ c_4 & c_5 & -c_1-c_2 \end{pmatrix} \tag{4.4.8}$$

(ここに、$T_{i,j}=T_{j,i}$ かつ $\mathrm{Tr}\,T=\sum_{i=1,3}T_{ii}=0$) が作れるが、これらは sperical vector 表示で書くと、2 つの角運動量 1 の tensor の積の、既約表現への分解 $1\times1=0+1+2$ に対応する。簡単のため、ベクトル $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ に対して

$$\begin{aligned} a_\mu &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,a\,Y_{1,\mu}(\widehat{\boldsymbol{a}}) = \mathcal{Y}_{1,\mu}(\boldsymbol{a})\ , \\ [ab]_{\lambda\mu} &= \sum_{\mu_1,\mu_2}\langle 1\mu_1 1\mu_2|\lambda\mu\rangle\,a_{\mu_1}\,b_{\mu_2} \end{aligned} \tag{4.4.9}$$

の notation を導入すると

$$\begin{aligned} [ab]_{00} &= -\frac{1}{\sqrt{3}}\ (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\ , \\ [ab]_{1\mu} &= i\frac{1}{\sqrt{2}}\ [\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}]_\mu \end{aligned} \tag{4.4.10}$$

の関係が得られる。ここに、$[\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}]_\mu$ は、まず $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ の外積をとった後、spherical vector 表示に変換することを意味する。Clebsch-Gordan 係数の対称性 $\langle 1\mu_1 1\mu_2|1\mu\rangle = (-1)^{1+1-1}\langle 1\mu_2 1\mu_1|1\mu\rangle$ は外積で 2 つのベクトルの順序の交換が符号を変えることに対応する。また、$[ab]_{2\mu}$ は、2 階のテンソルで成分は $2\times2+1=5$ 個ある。

(4.4.1) の 2 行目の表式は、1 階のテンソル r_μ を次々に Clebsch-Gordan 係数で組んでいって、rank ℓ のテンソルを作ることを意味する。ここで、ℓ 個の r_μ がかかっているので、r_μ が一つかかるごとに rank が 1 増大する。この様な結合様式を stretched coupling という。角運動量の固有値から

$$\mathcal{Y}_{\ell m}(\boldsymbol{r}) = A_\ell\ [\cdots[[rr]_2 r]_3\cdots]_{\ell m} \tag{4.4.11}$$

となるはずであるが、ここで特に $m=\ell$ とおくと、現れる Clebsch-Gordan 係数は全て $\langle 1111|11\rangle = 1$ である。そこで

$$\mathcal{Y}_{\ell\ell}(\boldsymbol{r}) = A_\ell\ (r_1)^\ell \tag{4.4.12}$$

これを、(4.4.2) と比較すると、 $A_\ell = 1/\sqrt{\ell!}$ が分かる。

直交表示による、座標ベクトルの回転 (3.2.29) と直交表示から spherical vector 表示への変換 (4.4.7) を組合せると、 $\ell = 1$ の場合の D-函数を具体的に求めることが出来る。すなわち

$$r'_\mu = U\boldsymbol{r}' = U\ M(\varphi,\theta,\psi)\ U^{-1}\ r_\mu \tag{4.4.13}$$

を (3.6.64) と比較して、$UM(\varphi,\theta,\psi)U^{-1}$ の transpose が $\mathcal{D}^1_{\mu,\mu'}(\varphi,\theta,\psi)$ に対応する。この様にして

$$\mathcal{D}^1(\varphi,\theta,\psi) = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi}\frac{1+\cos\theta}{2}e^{-i\psi} & -e^{-i\varphi}\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} & e^{-i\varphi}\frac{1-\cos\theta}{2}e^{i\psi} \\ \frac{\sin\theta}{\sqrt{2}}e^{-i\psi} & \cos\theta & -\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}}e^{i\psi} \\ e^{i\varphi}\frac{1-\cos\theta}{2}e^{-i\psi} & e^{i\varphi}\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} & e^{i\varphi}\frac{1-\cos\theta}{2}e^{i\psi} \end{pmatrix} \tag{4.4.14}$$

が得られる。(実際には、まず $\varphi = 0,\ \psi = 0$ として $d^1_{\mu,\mu'}(\theta)$ を求め、次に (3.6.43) を用いると簡単である。)

4.5　3 次元調和振動子

x, y, z 方向の角振動数 ω が共通な 3 次元調和振動子 $U(r) = \frac{1}{2}m\omega r^2$ も中心力場の問題に属する。この場合、直交座標系での解は変数分離形で三つの 1 次元調和振動子の積として表わされる。 長さの逆数の次元を持つパラメータを $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ で導入すると、波動函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ は

$$\psi(\boldsymbol{r}) = CH_{n_x}(\alpha x)H_{n_y}(\alpha y)H_{n_y}(\alpha z)e^{-\frac{1}{2}(\alpha r)^2} \tag{4.5.1}$$

で与えられる。エネルギースペクトルは 3 つのエネルギー固有値の和で

$$E = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{4.5.2}$$

で、基底状態は $(3/2)\hbar\omega$ であるが、一般の $N = n_x + n_y + n_z$ に対しては $N = 1$ の時 $(n_x, n_y, n_z) = (1,0,0), (0,1,0), (0,0,1)$ 等と縮退している。この多自由度は、N 個の玉を 3 つの箱に詰める詰め方と同じで

$$\binom{N+2}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2} \tag{4.5.3}$$

である。波動函数 (??) のパリティー変換 $\mathcal{P}\boldsymbol{r} = -\boldsymbol{r}$ に対する効果は $(-)^{n_x+n_y+n_z} = (-)^N$ で N の偶奇性と同じである。ここから、同じ波動函数を極座標で $\psi(\boldsymbol{r}) = R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m}$ と書いた時に、$N = 2n + \ell$ であろう事は容易に予想がつく。ここに $n = 0, 1, 2, \cdots$ であり、基底状態は $n = 0, \ell = 0$ 、第一励起状態は $n = 0, \ell = 1$

で 3 重に縮退している。 $N=2$ の時は $n=0,\ell=2$ および $n=1,\ell=0$ で 6 重に縮退している。一般に Gauss 記号 [ ] を使って $n=0,1,\cdots,[N/2]$, $\ell=N-2n$ であるから、ある決まった N の時の多自由度は

$$\sum_{n=0}^{[N/2]}(2N-4n+1)=(2N+1)([N/2]+1)-2[N/2]([N/2]+1)=\frac{(N+1)(N+2)}{2} \tag{4.5.4}$$

となつて (4.5.3) と一致する。

$R_{n,\ell}(r)$ の満たすべき Schrödinger 方程式は

$$\frac{d^2R_{n,\ell}(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_{n,\ell}(r)}{dr}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}-\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2r^2\right)R_{n,\ell}(r)=0 \tag{4.5.5}$$

ここで $\xi=\alpha r$ に移って (4.5.2) を使うと

$$\frac{d^2R_{n,\ell}(r)}{d\xi^2}+\frac{2}{\xi}\frac{dR_{n,\ell}(r)}{d\xi}+\left(2N+3-\frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2}-\xi^2\right)R_{n,\ell}(r)=0 \tag{4.5.6}$$

(**??**) から $R_{n,\ell}(r)=\xi^\ell u(\xi^2)e^{-\xi^2/2}$ とおくと

$$x\frac{d^2u(x)}{dx^2}+\left(\ell+\frac{3}{2}-x\right)\frac{du(x)}{dx}+nu(x)=0 \tag{4.5.7}$$

ここに $u(x)$ は合流型超幾何級数、あるいは Laguerre 陪多項式 (Laguerre・Sonine 多項式) で表わされる。

$$u(x)=\frac{\Gamma n+\ell+\frac{1}{2}}{\Gamma\ell+\frac{1}{2}n!}F(-n,\ell+\frac{3}{2},x)=L_n^{(\ell+\frac{1}{2})}(x) \tag{4.5.8}$$

そこで

$$R_{n,\ell}(r)=C\xi^\ell L_n^{(\ell+1/2)}(\xi^2)e-\frac{\xi^2}{2} \tag{4.5.9}$$

normalizaton C は

$$\int_0^\infty R_{n,\ell}(r)R_{m,\ell}(r)r^2dr=\delta_{n,m} \tag{4.5.10}$$

から決まる。即ち

$$\begin{aligned}C^{-2}&=\frac{1}{\alpha^3}\int_0^\infty\xi^{2\ell+2}e^{-\xi^2}\left(L_n^{(\ell+1/2)}(\xi^2)\right)^2d\xi\\&=\frac{1}{2\alpha^3}\int_0^\infty x^{\ell+1/2}e^{-x}\left(L_n^{(\ell+1/2)}(x)\right)^2dx\\&=\frac{1}{2\alpha^3}\frac{\Gamma(n+\ell+3/2)}{n!}\end{aligned} \tag{4.5.11}$$

ここで Laguerre・Sonine 多項式の直交性

$$\int_0^\infty x^\mu e^{-x} L_n^{(\mu)}(x) L_{n'}^{(\mu)}(x)dx = \delta_{n,n'} \frac{\Gamma(n+\mu+1)}{n!} \tag{4.5.12}$$

を使った。そこで $C = \sqrt{\frac{2\alpha^3 n!}{\Gamma(n+\ell+3/2)}}$ である。

(数学的補遺-2)

Kummer の微分方程式

$$zu'' + (\gamma - z)u' - \alpha u = 0 \tag{4.5.13}$$

の正則解は合流型超幾何函数

$$u = F(\alpha, \gamma, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n}{(\gamma)_n} \frac{z^n}{n!} \tag{4.5.14}$$

である。ここに

$$(\alpha)_n = \alpha(\alpha+1)(\alpha+2)\cdots(\alpha+n-1) = \frac{\Gamma(\alpha+n)}{\Gamma(\alpha)} \tag{4.5.15}$$

は Pochhammer の記号である。($(\alpha)_0 = 1$) この事は (4.5.14) を (4.5.13) に代入することによって直接証明することができる。一方非正則解は $\gamma \neq 1$ の時は $u = z^{1-\gamma}w$ と置いて w の満たすべき方程式を求めると $w = F(\alpha-\gamma+1, 2-\gamma, z)$ となる。そこで一般解は

$$u = c_1 F(\alpha, \gamma, z) + c_2 F(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, z) \tag{4.5.16}$$

で与えられる。($\gamma = 1$ の時は、もう少し進んだ取り扱いが必要である。)

次に $D = \frac{d}{dz}$ として

$$\begin{aligned} T^{(\alpha)} &= \frac{z}{\alpha}D + 1 \\ T_{(\alpha)} &= \frac{z}{\gamma - \alpha}D \circ - \left(\frac{z}{\gamma-\alpha} - 1\right) \end{aligned} \tag{4.5.17}$$

とすると、これらはパラメータ α に関する昇降演算子となつていることが直接計算することにより容易に確かめられる。即ち

$$\begin{aligned} T^{(\alpha)} F(\alpha, \gamma, z) &= F(\alpha+1, \gamma, z) \\ T_{(\alpha)} F(\alpha, \gamma, z) &= F(\alpha-1, \gamma, z) \end{aligned} \tag{4.5.18}$$

が成り立っている。そこで、この二つの式から微分項を消去すると

$$(z+2\alpha-\gamma)F(\alpha,\gamma,z)=\alpha F(\alpha+1,\gamma,z)+(\alpha-\gamma)F(\alpha-1,\gamma,z) \tag{4.5.19}$$

という α に関する漸化式が得られる。

特に $\alpha=-n$ (負の整数) の時は $(-n)_{n+1}=0$ より、$F(-n,\gamma,z)$ は z の n-次の多項式となる。以前「直交多項式」のところで議論した Laguerre・Sonine 多項式は、$\gamma=\mu+1$ でまさにこの様な場合になっている。即ち、微分方程式 (z を x に変える)

$$xu''+(\mu+1-z)u'-\alpha u=0 \quad (\mu>-1) \tag{4.5.20}$$

に対して

$$\begin{aligned} L_n^{(\mu)}(x) &= \frac{1}{n!}x^{-\mu}e^x D^n[e^{-x}x^{n+\mu}] \\ &= \sum_{m=0}^{n}(-)^m\binom{n+\mu}{m+\mu}\frac{x^m}{m!} \\ &= \binom{n+\mu}{n}F(-n,\mu+1,x) \end{aligned} \tag{4.5.21}$$

$F(-n,\mu+1,x)$ の前の係数は $x=0$ として得られる。また n についての漸化式は (4.5.19) から

$$nL_n^{(\mu)}(x)+(x-2n-\mu+1)L_{n-1}^{(\mu)}(x)+(n+\mu-1)L_{n-2}^{(\mu)}(x)=0 \quad (n\geqq 2)) \tag{4.5.22}$$

が得られる。

あとで Coulomb 力の場合に (4.5.12) の Laguerre・Sonin 多項式の normalization 積分を多少拡張したものが必要となるが、それも (4.5.22) を用いて計算することができる。即ち、$xL_n^{(\mu)}(x)$ を n 次と $n\pm1$ 次の多項式で表しておくと

$$\int_0^\infty x^{\mu+1}e^{-x}\left(L_n^{(\mu)}(x)\right)^2dx=(2n+\mu+1)\frac{\Gamma(n+\mu+1)}{n!} \tag{4.5.23}$$

が得られる。

最後に、小さい n の値に対して幾つかの $L_n^{(\mu)}(x)$ の具体的な表式を与えておく。これ

らは $n=0,1$ の表式から (4.5.22) を用いても得られる。

$$
\begin{aligned}
&L_0^{(\mu)}(x) = 1 \\
&L_1^{(\mu)}(x) = (1+\mu) - x \\
&L_2^{(\mu)}(x) = \frac{(2+\mu)(1+\mu)}{2} - (2+\mu)x + \frac{x^2}{2} \\
&L_3^{(\mu)}(x) = \frac{(3+\mu)(2+\mu)(1+\mu)}{6} - \frac{(3+\mu)(2+\mu)}{2}x + (3+\mu)\frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} \\
&L_4^{(\mu)}(x) = \frac{(4+\mu)(3+\mu)(2+\mu)(1+\mu)}{24} - \frac{(4+\mu)(3+\mu)(2+\mu)}{6}x \\
&+\frac{(4+\mu)(3+\mu)}{2}\frac{x^2}{2} - (4+\mu)\frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} \\
&L_5^{(\mu)}(x) = \frac{(5+\mu)(4+\mu)(3+\mu)(2+\mu)(1+\mu)}{120} - \frac{(5+\mu)(4+\mu)(3+\mu)(2+\mu)}{24}x \\
&+\frac{(5+\mu)(4+\mu)(3+\mu)}{6}\frac{x^2}{2} - \frac{(5+\mu)(4+\mu)}{2}\frac{x^3}{6} + (5+\mu)\frac{x^4}{24} - \frac{x^5}{120} \\
&\cdots
\end{aligned}
\tag{4.5.24}
$$

4.6　クーロン場

クーロン力場の問題は原子・分子の問題で基本的な役割を持っている。その訳は、水素原子の問題がほぼ電子質量に近い換算質量を持った一体問題に帰着されるのみならず、原子番号 Z を持った普通の原子でも原子核が非常に重くて小さいため Ze の電荷と換算質量を持った 1 電子の一体問題 (これを水素類似原子という) が出発点として良い近似になるからである。原子核を廻る多くの電子の相関は種々の近似として取り扱われる。電磁相互作用を取り扱う正確な理論は量子電磁気学であるが、その非相対論的近似としてクーロン力は原子・分子の問題に関する限り非常に良い近似で成り立っている。

クーロンポテンシャル $U(r)=\frac{\alpha}{r}$ をもつ質量 m の一体問題を考えよう。散乱問題の場合、多くは $\alpha>0$ である。この場合エネルギーは正で連続スペクトルだけが存在する。一方 $\alpha<0$ の場合は負エネルギーの離散スペクトルと正エネルギーの連続スペクトルの双方が存在する。今この様な場合を考えて $\alpha>0$ として $U(r)=-\frac{\alpha}{r}$ とする。この場合、クーロン単位と呼ばれる次の様な単位を導入すると便利である。

$$
\text{質量: } m \quad , \quad \text{長さ: } \frac{\hbar^2}{m\alpha} \quad , \quad \text{エネルギー: } \frac{m\alpha^2}{\hbar^2} \tag{4.6.1}
$$

この時、動径部分の Schrödinger 方程式は

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R+2\left(E+\frac{1}{r}\right)=0 \tag{4.6.2}$$

まず $E<0$ の場合を考えて $E=-\frac{1}{2n^2}$, $r=\frac{n}{2}\rho$ とすると、ダッシュを ρ の微分として

$$R''+\frac{2}{\rho}R'+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]R=0 \tag{4.6.3}$$

が得られる。ここで $\rho\to\infty$ とすると $R\sim e^{-\rho/2}$ が得られるから、$R=\rho^\ell e^{-\rho/2}w(\rho)$ として

$$\rho w''+(2\ell+2-\rho)w'+(n-\ell-1)w=0 \tag{4.6.4}$$

が得られる。この解は (normalization を除いて) 合流型超幾何級数 $F(-(n-\ell-1),2\ell+2,\rho)$ あるいは Laguerre 陪多項式 $L^{(2\ell+1)}_{n-\ell-1}(\rho)=\tilde{L}^{2\ell+1}_{n+\ell}(x)$ で表わされる。$n_r=n-\ell-1$ とすると、$w(\rho)$ は $n_r=0,1,w,\cdots$ の時のみ ρ の有限の n_r-次多項式である。$n=n_r+\ell+1$ を主量子数という。(n,ℓ) =(1,s), (2,s),(2p), (3s), (3p), (3d), $\cdots$ でエネルギーが n だけの函数であることを考えると、エネルギー準位は各 n ごとに縮退していて $\ell=0,1,\cdots,n-1$ でありその縮退度は

$$\sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1)=n^2 \tag{4.6.5}$$

である。エネルギーを通常の単位で表わすと

$$E=-\frac{1}{2n^2}\frac{m\alpha^2}{\hbar^2} \tag{4.6.6}$$

である。基底状態は (1,s) 状態で動径波動函数は node を持たない。エネルギー準位の間隔は n が増えるにつれて急激に縮小していき、$n\to\infty$ でゼロに集積しあとは連続スペクトルに繋がっていく。これは $1/r$ できわめてゆっくり減少するクーロン力の特徴である。

クーロン動径波動函数は、Whittaker 函数 $W_n^\nu(\rho)$ を用いても表わされる。これは

$$\chi''+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}+\frac{\frac{1}{4}-\nu^2}{\rho^2}\right]\chi=0 \tag{4.6.7}$$

の解である。容易に分かる様に、(4.5.12) は $\chi(\rho)=\rho R(\rho)$ と置くことによって $\mu=\ell+1/2$ の Whittaker 函数となる。つまり

$$R(\rho)=C\frac{1}{\rho}W_n^{\ell+\frac{1}{2}}(\rho) \tag{4.6.8}$$

ここに normalization C は

$$C^{-2} = \int_0^\infty \left(W_n^{\ell+\frac{1}{2}}(\rho)\right)^2 d\rho = 1 \tag{4.6.9}$$

から決まる。

Laguerre・Sonine 多項式での記述へ戻って $R_{n,\ell}(r)$ を

$$R_{n,\ell}(r) = C\left(\frac{2r}{n}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}\left(\frac{2r}{n}\right) e^{-\frac{r}{n}} \tag{4.6.10}$$

として normalization C を

$$\begin{aligned} C^{-2} &= \int_0^\infty \left(R_{n,\ell}(r)\right)^2 r^2 dr = 1 \\ &= \left(\frac{n}{2}\right)^3 \int_0^\infty \rho^{2\ell+2}\left(L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\rho)\right)^2 e^{-\rho} d\rho \end{aligned} \tag{4.6.11}$$

によって決める。積分は (4.5.23) で $\mu = 2\ell+1, n \to n-\ell-1$ として求まる。

$$C^{-2} = \left(\frac{n}{2}\right)^3 (2n)\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!} = \left(\frac{n^2}{2}\right)^2 \frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!} \tag{4.6.12}$$

そこで $C = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{(n+\ell)!}}$ として

$$\begin{aligned} R_{n,\ell}(r) &= \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{(n+\ell)!}}\left(\frac{2r}{n}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}\left(\frac{2r}{n}\right) e^{-\frac{r}{n}} \\ &= \frac{2}{n^2(2\ell+1)!}\sqrt{\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}}\left(\frac{2r}{n}\right)^\ell F\left(-(n-\ell-1), 2\ell+1, \frac{2r}{n}\right) e^{-\frac{r}{n}} \end{aligned} \tag{4.6.13}$$

が得られる。$R_{n,\ell}(r)$ の原点近傍での振る舞いは

$$R_{n,\ell}(r) \sim r^\ell \frac{2^{\ell+1}}{n^{\ell+2}(2\ell+1)!}\sqrt{\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}} \tag{4.6.14}$$

一方、遠方では

$$R_{n,\ell}(r) \sim (-)^{n-\ell-1}\frac{2^n}{n^{n+1}}\frac{1}{\sqrt{(n-\ell-1)!(n+\ell)!}} r^{n-1} e^{-\frac{r}{n}} \tag{4.6.15}$$

となる。

具体的な $R_{n,\ell}(r)$ の表式は (4.5.24) を使って得られる。n が小さい時の幾つかの例を挙げておく。ここに $n = n_r + \ell + 1$ である。

5　非相対論的量子力学の散乱問題

はじめに

微視的粒子間の相互作用や粒子の構造を調べるためには、二つの粒子を衝突させてその結果生成される二次粒子の運動量分布や生成量の角分布を測定したり、反応に関与する粒子の崩壊過程を調べることが普通行われる。測定されるのは初期状態と最終状態におけるエネルギー、運動量等の物理量だけであるので、これらが相互にどのように関係しているかを知ることは大変重要で、その理論体系は運動学 (kinematics) と呼ばれる。これらの基礎には、エネルギーや運動量の保存則、対称性がある。しかしながら、実際に、ある決まった方向にある一定のエネルギーを持った粒子がどれだけ観測されるかは粒子の相互作用に関係しており、これらを結びつけるためには微視の世界における模型と近似法が必要である。これを動力学 (dynamics) という。粒子の崩壊もまた相互作用の結果として起きる。

この章の目的は、この dynamical な側面、すなわち原子核や核子、原子、電子等を対象としてそれらの散乱、崩壊過程を記述する標準的な枠組みを学ぶことにある。これらの枠組みの多くは、量子力学の創成のあとすぐ、あるいはそれとほとんど同時に完成した。

表 1　$R_{n,\ell}(r)$ with $n \leqq 4$

(n,ℓ)	n_r	ℓ	$R_{n,\ell}(r)$
(1s)	0	0	$2e^{-r}$
(2s)	1	0	$\frac{1}{sqrt2}\left(1-\frac{r}{2}\right)e^{-r/2}$
(2p)	0	1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}re^{-r/2}$
(3s)	2	0	$\frac{2}{3\sqrt{3}}\left(1-\frac{2r}{3}+\frac{2r^2}{27}\right)e^{-r/3}$
(3p)	1	1	$\frac{8}{27\sqrt{6}}r\left(1-\frac{r}{6}\right)e^{-r/3}$
(3d)	0	2	$\frac{4}{81\sqrt{30}}r^2e^{-r/3}$
(4s)	3	0	$\frac{1}{16}\left(4-3r+\frac{r^2}{2}-\frac{r^3}{48}\right)e^{-r/4}$
(4p)	2	1	$\frac{1}{32\sqrt{15}}r\left(10-\frac{5r}{2}+\frac{r^2}{8}\right)e^{-r/4}$
(4d)	1	2	$\frac{1}{192\sqrt{5}}r^2\left(3-\frac{r}{4}\right)e^{-r/4}$
(4f)	0	3	$\frac{1}{768\sqrt{35}}r^3e^{-r/4}$

その特徴は、対象とする系に最も適した記述法が非常に早い時期に発見されたことである。例えば、原子核間に働く力はクーロン力とは違って、非常に短距離的な力である。そこで、原子炉内でおこる熱中性子の原子核による散乱では、短距離力だけを扱っておればよい。しかしながら、原子核衝突の問題では、クーロン斥力が存在する場合の短距離力の問題を扱わなければならない。更に、粒子衝突のエネルギーが高いかどうかでも、全く異なった記述方法が使われる。相対論的運動学を用いなくては記述できないような系もある。一方、またある場合には、古典軌道を用いた半古典近似が非常によく成り立っている。このように、量子力学的散乱理論の取り扱う対象は多種多様であり、それぞれに対して理論があるといっても言い過ぎではない。しかしながら、その中でいくつかのものは、非常に広い適用範囲を持っている。例えば、散乱振幅の部分波展開や位相差の考え方などはエネルギーがそれほど高くない限り、どのような系に対しても適用可能である。それゆえ、これらは量子力学的散乱問題の普通の量子力学の教科書には必ず書かれている。

この章では、非相対論的量子力学の枠内で構造を持たない粒子のポテンシャル問題を議論する。一体問題ではポテンシャル $V(r)$ は原点からの距離、二体問題では二つの粒子の間の距離 $r = |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|$ だけの函数である。微視的粒子としては一応原子核を想定しているが、基本的枠組みは電子などの素粒子や原子などの場合も同じである。これは、もっと複雑な以下のような系を取り扱う時の基礎となるものである。

1. ここでは、主に中心力 $V(r)$ ($r = |\boldsymbol{r}| = |\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1|$) について話を進めるが、一般的にはスピンの自由度に依存する非中心力 ($\boldsymbol{LS}$ 力やテンソル力) が現れるのが普通である。粒子がスピンを持つ場合には、散乱過程のなかでこれらの力によってスピンの組み換えが起きる。この場合には、二粒子間の相互作用は相対距離の大きさ r だけではなしにその向きにも依存する。すなわち、$V = V(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2)$ etc.
2. 一般に粒子が構造を持つ場合にはその励起が起こり、内部エネルギーの増大を伴う非弾性散乱や入射粒子の一部分が標的粒子に吸収されたりまたその逆の場合も含む組み替え反応が起きる。二体散乱問題の拡張として扱える場合も多いが、三つの粒子の組み換えとして問題を捉える量子力学的三体問題を考えることが必要な場合もある。
3. 簡単なポテンシャルによる記述が常に正しい結果を与えるとは限らない。特に、複合粒子の散乱では、パウリ原理に基づく反対称化の効果等で非局所 (nonlocal) な相互作用 $V(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ が普通に現れる。また、相対論的エネルギーにおける粒子の散乱では、新しい粒子の生成や消滅が (対称性や保存則によって禁止されない限り) 自由に起こり、単純なポテンシャルによる記述が出来ない場合がある。(粒子の生

成・消滅を含む相対論的散乱理論的については、あとで「量子力学的場の理論」のところで「散乱行列」、「不変摂動論」として学ぶ。)

等が考えられるが、ここでは非弾性散乱の初等的な事項は例外として、上の様な場合や量子力学的三体問題は取り扱わない。

ここでは、まず初めに散乱断面積の概念を説明し、それを計算するための散乱振幅をどうやって求めるかを、時間に依存しない Schrödinger 方程式から導く。その際境界条件の選び方が重要である。次に、この Schrödinger 方程式を 3 次元の Green 函数を用いて、積分方程式 (Lippmann-Schwinger 方程式) に変換し、いわゆる逐次近似 (Born 近似) によって求める方法を示す。多くの場合現実的に用いられる部分波による記述を学ぶ。そこで現れる位相差 (phase shift) は散乱振幅を構成するために用いられる。

もっと現実的に波束の散乱や、もうひとつの散乱問題へのアプローチとして知られる、時間に依存する散乱問題の取り扱いについて、更には Jost 函数を用いた解の存在定理や解析性の証明は重要ではあるがここでは省略する。分散式や Levinson の定理は、この散乱振幅の解析性を利用している。また、核子間に働く湯川ポテンシャルや有効核力、よく使われるガウス型や Wood-Saxon 型ポテンシャルに対しては、低エネルギーにおける有効距離の理論がよく用いられる。低エネルギーにおける S-波共鳴散乱の共鳴公式や高い部分波での角運動量障壁による鋭い共鳴は、原子核の核構造を理解する上で大変重要である。これらについては、あとの「原子核構造・核反応」の項や下に挙げておく標準的な原子核の教科書、また優れた多くの散乱問題についての教科書を参考にしていただきたい。ここでの記述は、おもに私の古いホームページにある講義ノート No1-13 (http://qmpack.homelinux.com/~fujiwara/old_homepage/tokuron1.html) に基づいている。

[参考図書] (量子力学の教科書)（多くの名著がある）例えば

ランダウ・リフシッツ　「量子力学 1,2」　（東京図書）
シッフ　「量子力学、上、下」　（吉岡書店）
モット・マッセイ　「衝突の理論、上・I」　（吉岡書店）

更に進んだものとしては

Roger G. Newton, Scattering theory of waves and particles (McGrow-Hill, 1966)
Goldberger and Watson, Nuclear Collissin Theory
Walter Glöckle, The quantum mechanical few-body problem (Springer-

Verlag,1983)

5.1 散乱断面積・微分断面積

[幾何学的散乱断面積]

微視の世界の散乱・反応過程を議論する上で、散乱断面積の概念は大変重要である。これに対しては、古典力学における断面積の概念を一般化した幾何学的散乱断面積の概念が役にたつ。まず、エネルギー一定の一様な入射粒子のビーム a が、粒子が一様に分布した標的 (target) b に垂直に入射する状況を考える。(図 1 参照) ここで、二つの量が基本的である。一つは、入射粒子の flux と呼ばれる流れの密度 $j_a = \rho_a v_a$ で、これは単位時間あたり単位面積を通して流れ込む粒子の数 (ビームの粒子数) として定義される。単位は、例えば 1/cm$^2\cdot$ s である。もう一つは全反応率 $\dot{N}_b = dN_b/dt$ で、これは単位時間あたりの反応の合計数 (イベントの数) として定義される。単位は 1/s である。$\dot{N}_b$ は j_a と散乱体の数 $N_b = \rho_b A d$ (A はビームのあたる表面積、d は target の厚さ、ρ_b は標的粒子の target 内での密度) に比例する。そこで、幾何学的な全反応断面積 σ_b は

$$
\begin{aligned}
\sigma_b &= \frac{\dot{N}_b}{j_a N_b} \qquad (\text{単位 cm}^2 \text{ etc.}) \\
&= \frac{\text{単位時間あたりの反応数}}{\text{単位時間あたりに単位面積を通過するビーム粒子数} \times \text{散乱中心の数}} \\
&= \frac{\text{1 散乱中心あたりの単位時間あたりの反応数}}{\text{流れの密度}} \qquad (5.1.1)
\end{aligned}
$$

で定義される。ここでは、1 散乱中心について考えるのが基本である。また、注意しなければいけない事は、1) ビーム中の粒子の相互作用や、ターゲット内の粒子の相互作用は無視している。これは、ビームやターゲットの密度が希薄で粒子間の距離が今考えている相互作用のレンジ (到達距離) より充分小さいと正当化される。また、2) 異なる散乱中心からの散乱の干渉 (波としての効果) は無視出来る事を仮定している。これは、エネルギーが極端に小くなければ成り立っている。例えば、原子炉内での核分裂の連鎖反応を引き起こす熱中性子のエネルギーは数 eV であるが、そのドブロイ波長は 10^3 fm 程度でウラニウム原子の大きさよりも遥かに小さい。Rutherford 散乱では α 粒子を 軽い原子核 ^{2}H のガスターゲットや ^{12}C、^{16}O 等の原子核に衝突させるが、α 粒子は放射性物質のアルファ線を使うためそのエネルギーは数十エネルギーである。また、3) ターゲットの散乱中心は実験室系では静止していると考える。実際には、普通常温で実験するため有限温度による熱運動が必ず存在するが、そのエネルギーは入射粒子のエネルギーに比べてはるか

に小さい。

[微分断面積]

以下、中心力場 $V(r)$ ($r=|\boldsymbol{r}|=|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|$: 相対距離) による弾性散乱 (粒子の内部エネルギー等の変化なし) を考える。この場合、粒子の入射方向を z-軸として極座標をとると粒子の散乱方向を (θ,φ) で表わして散乱は軸対称で方位角 φ には依存ない。(図 1 参照) そこで、立体角 $d\Omega=2\pi\sin\theta d\theta$ に対して、単位時間あたり、角度 $\Omega=(\theta,\phi)$ 方向の単位立体角の中に出てくる粒子の数を $d\dot{N}_b/d\Omega$ として

$$
\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{\frac{d\dot{N}_b}{d\Omega}}{j_a} \\
&= \frac{\text{単位時間に }\Omega\text{ 方向の単位立体角内に散乱される粒子の数}}{\text{単位時間あたりに単位面積を通じて入射する粒子の数}} \qquad (5.1.2)
\end{aligned}
$$

を「微分断面積」という。標的粒子 b と入射粒子 a の相互作用だけによって決る量である。また積分量

$$\sigma(=\sigma_{\text{tot}})=\int\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega \qquad (5.1.3)$$

を全散乱断面積 (total scattering cross section) という。実際には、非弾性散乱や種々の組み替え反応があるので $\sigma_{\text{total}}=\sigma_{\text{el}}+\sigma_{\text{inel}}+\sigma_{\text{reac}}$ である。flux が失われる吸収反応 σ_{abs} が起きる場合もある。

[実験室系と重心系]

入射波束と散乱波束を粒子と考える限り kinematics 自体は量子論でも古典論でも同じである。すでに前節の「中心力場の問題」のところで述べた様に、いずれの場合にも、相互作用が二粒子の間の距離だけに依存するとすると、重心系の運動は常に正確に分離出来る。運動量やエネルギーの保存則も同様に成り立つ。

入射粒子 (projectile) と標的粒子 (target) の質量を m_1, m_2 として、相対速度 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}_1-\boldsymbol{v}_2=\dot{\boldsymbol{x}}_1-\dot{\boldsymbol{x}}_2$ で運動している系を考える。散乱問題では標的粒子が静止している座標系を実験室系 (laboratory system, lab system)、系全体の重心が静止している様な座標系を重心系 (center-of-mass system, c.m. system) という。lab 系では $\boldsymbol{v}_2=0$ より、系全体のエネルギーは $E_{\text{lab}}=(1/2)m_1v^2$、全運動量は $\boldsymbol{P}=m_1\boldsymbol{v}=(m_1+m_2)\boldsymbol{V}$ である。ここに、$\boldsymbol{V}=(m_1/(m_1+m_2))\boldsymbol{v}$ は重心の速度である。重心系では全運動量がゼロに

なるから、重心系における二粒子の入射速度は

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{u}_1 &= \boldsymbol{v} - \boldsymbol{V} = \frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{v} \\
\boldsymbol{u}_2 &= 0 - \boldsymbol{V} = -\frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{v}
\end{aligned} \tag{5.1.4}
$$

で与えられる。実際、$\boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2 = m_1\boldsymbol{u}_1 + m_2\boldsymbol{u}_2 = 0$ である。エネルギー $E_{\rm lab}$ も重心の運動エネルギーと相対部分の運動エネルギーに分けられる。まず

$$
E_{\rm cm} = \frac{1}{2}m_1\boldsymbol{u}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\boldsymbol{u}_2^2 = \frac{1}{2}\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{v}^2 = \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 \tag{5.1.5}
$$

ここに、$1/m = 1/m_1 + 1/m_2$ で定義される m を換算質量 (reduced mass) という。そこで、簡単な計算で

$$
E_{\rm lab} = \frac{1}{2}(m_1+m_2)\boldsymbol{V}^2 + \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 = \frac{1}{2}(m_1+m_2)\boldsymbol{V}^2 + E_{\rm cm} = \frac{1}{2}m_1\boldsymbol{v}^2 \tag{5.1.6}
$$

が確かめられる。

重心・相対に分けると、散乱後の取扱が特に簡単になる。散乱後の量を $\prime$ をつけて表すと $\boldsymbol{p}_1{}' = -\boldsymbol{p}_2{}' = \boldsymbol{p}'$ として

$$
E_{\rm cm} = \frac{\boldsymbol{p}_1'^2}{2m_1} + \frac{\boldsymbol{p}_2'^2}{2m_2} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)\boldsymbol{p}'^2 = \frac{\boldsymbol{p}'^2}{2m} \tag{5.1.7}
$$

そこで、$\boldsymbol{p}' = m\boldsymbol{v}'$ とすると、$v' = v$ (相対速度の大きさは変化しない) が導かれる。これは、$E_{\rm cm}$ が散乱の前後で保存されることを示している。(今は弾性散乱だけを考えている。) 重心系での散乱方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{n}$ とすると

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{p}' &= m_1\boldsymbol{u}_1{}' = mv\boldsymbol{n} \\
-\boldsymbol{p}' &= m_2\boldsymbol{u}_2{}' = -mv\boldsymbol{n}
\end{aligned} \tag{5.1.8}
$$

より

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{u}_1{}' &= \frac{m_2}{m_1+m_2}v\boldsymbol{n} \\
\boldsymbol{u}_2{}' &= -\frac{m_1}{m_1+m_2}v\boldsymbol{n}
\end{aligned} \tag{5.1.9}
$$

実験室系に戻ると

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{v}_1{}' &= \boldsymbol{u}_1{}' + \boldsymbol{V} = \frac{m_2}{m_1+m_2}v\boldsymbol{n} + \frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{v} \\
\boldsymbol{v}_2{}' &= \boldsymbol{u}_2{}' + \boldsymbol{V} = -\frac{m_1}{m_1+m_2}v\boldsymbol{n} + \frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{v}
\end{aligned} \tag{5.1.10}
$$

となるが、運動量で書く方が便利である。reduced mass m を用いて

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{p}_1{}' &= mv\boldsymbol{n} + \frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{P} \\
\boldsymbol{p}_2{}' &= -mv\boldsymbol{n} + \frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{P}
\end{aligned} \tag{5.1.11}
$$

となる。ここに、$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2 = m_1\boldsymbol{v}$ より、$(m_2/(m_1+m_2))|\boldsymbol{P}| = mv$ である。これを用いて、簡単な作図により重心系での散乱角 $\theta_{\rm cm} = \theta$ と実験室系での散乱角 $\theta_{\rm lab}$ の間の関係を求めることが出来る。(問題 1) 結果は

$$
\tan\theta_{\rm lab} = \frac{\sin\theta}{\cos\theta + x} \qquad \text{with} \quad x = \frac{m_1}{m_2} \tag{5.1.12}
$$

ここに、x は入射粒子の質量と標的粒子の質量の比である。x の大きさによって事情は異なる。$x < 1$ の場合は、θ と $\theta_{\rm lab}$ は 1:1 に対応するが、$x > 1$ の場合には一つの実験室系での角度 $\theta_{\rm lab}$ に対して、二つの重心系での角度 θ が対応し、それぞれ粒子のエネルギーが異なる。また、この場合は、実験室系では、或る角度 $\theta_{\rm lab}^{\rm max}$ より後側では粒子が出てこないという事が発生する。これは明らかに、入射粒子が非常に軽い場合である。

(問題 1) lab 系の散乱角と cm 系の散乱角の関係: Eq. (5.1.11) の関係式を作図し (図 2)、5.1.12 を証明せよ。

図 1　図 2: lab 系の散乱角と cm 系の散乱角の関係、$\theta_1 = \theta_{\rm lab}$

(ランダウ・リフシッツ「力学」にある。また、相対論的 kinematics の場合の同様な取扱が、「場の古典論」のはじめの部分で展開されている。この場合、非相対論の場合の円は楕円となる。) $x < 1$ の時と $x > 1$ の時に分けて作図せよ。また、$x = 1$ の時には、どの様なことが起きるか? $x > 1$ の時の実験室系での最大の散乱角 $\theta_{\rm max}$ を求めよ。更に、横軸に φ, 縦軸に θ をとり、x がそれぞれ $x = 0,\ 0.5,\ 1,\ 1.2,\ 2$ の時のグラフの概略図を画け。(G. R. Satchler, Introduction to Nuclear Reactions, page 300 に図がある。)

(注意) 実際の実験データの解析には、常により正確な相対論的 kinematics が使われる。粒子の崩壊と散乱に対するこれらの取り扱いは、例えば Nuclear and Particle Physics

Simulations : The Consortium for Upper-Level Physics Software (PAP/DSKT), Chapter 3, Relativistic Kinematics, pp. 44- 71 にある。また、古いホームページの http://qmpack.homelinux.com/を参照のこと。

[散乱断面積の変換]

発生するイベントの数 $d\dot{N}_b$ と入射する流れの密度 j_a は座標系によらない[*1]が、散乱の立体角 $d\Omega$ は座標系に依存するから Eq. (??) で定義される微分散乱断面積も座標系に依存する。すなわち

$$d\dot{N}_b = j_a \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\rm lab} d\Omega_{\rm lab} = j_a \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\rm cm} d\Omega_{\rm cm} \tag{5.1.13}$$

より

$$\begin{aligned}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\rm cm} &= \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\rm lab} \frac{d\Omega_{\rm lab}}{d\Omega_{\rm cm}} \\ &= \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\rm lab} \frac{d\cos\theta_{rmlab}}{d\cos\theta_{\rm cm}}\end{aligned} \tag{5.1.14}$$

より、最後の係数を Eq. (5.1.12) から求めると

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\rm cm} = \frac{1 + x\cos\theta_{\rm cm}}{(1 + x^2 + 2x\cos\theta_{\rm cm})^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\rm lab} \tag{5.1.15}$$

が導かれる。(これを導け。$(\cos\theta_{\rm lab}/(\cos\theta_{\rm cm}+x))^2 = 1/(1+x^2+2x\cos\theta_{\rm cm})$ を使う。) 原子核の散乱では、通常はこの重心系での散乱断面積が実験データとして提示される。散乱角も通常は $\theta = \theta_{\rm cm}$ か $\cos\theta$ を使う。しかし、エネルギーに対しては実験室系の $E_{\rm lab}$ や一核子あたりの入射エネルギー $E_{\rm lab}/A$ (A は入射原子核の質量数) を使うのが普通である。(入射運動量 $p_{\rm lab}$ を代りに用いることもある。)

[古典力学の二体衝突問題の復習]

古典力学では、粒子の状態は位置と運動量によって指定される。それ故、標的粒子が座標原点に静止している実験室系での入射粒子の運動は古典的軌道によって完全に記述される。今図 3 の様に、$z = -\infty$ の方向から z-軸に平行に入射してくる粒子の半径 a の絶対剛体球 ($V(r) = \infty$ for $r < a$, $V(r) = 0$ for $r > a$) のによる反射軌道を考える。球表

[*1] j_a が座標系によらないということは、相対論的 kinenatics では正しくない。ベレステツキー・リフシッツ・ピタエフスキー,「相対論的量子力学 I」を参照。ここでは常に非相対論的 kinematics で考えている。

面で垂線に等角度で跳ね返るとすると、図の様に z-軸から b だけ離れた粒子はすべて散乱角 $\theta = \pi - 2\varphi$ で跳ね返される。ここに、$b = a\sin\varphi$ である。b を衝突係数 (impact parameter) という。

図 3: 完全剛体球による粒子の古典的反射

z-軸周りの b から $b + \delta b$ ($0 < \delta b \ll b$ の微小量) までの円環を考えて、これを通過する密度 ρ、速度 v の粒子の数は単位時間あたり $\dot{N} = \rho v 2\pi b\delta b$ である。これらはすべて散乱角 θ-$\theta + \delta\theta$ の方向に飛び散るから、これを幾何学断面積の定義から $\dot{N}$ を流れの密度 $j = \rho v$ で割り、かつ立体角 $\delta\Omega = 2\pi\sin\theta\delta\theta$ で割って単位立体角あたりの微分断面積にすると ($\delta b \to 0$ の極限をとって)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin\theta}\left|\frac{db}{d\theta}\right| \tag{5.1.16}$$

が得られる。ここで、b を θ の関数として求めておくと、b が減少するとき θ が増大し一般には $b = b(\theta)$ は θ の減少関数であるから $db/d\theta$ に絶対値記号を付け加えておいた。今の場合、散乱は $b = 0$ から $b = a$ までだけ起こるので、全散乱断面積は

$$\begin{aligned} \sigma &= \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \\ &= \int_0^\pi 2\pi b(-)\frac{db}{d\theta} d\theta = \int_0^a 2\pi b db = \pi a^2 \end{aligned} \tag{5.1.17}$$

つまり球の断面積になる。これが幾何学的散乱断面積の由来である。

結局、古典力学では衝突係数と散乱角との間の関係 $b = b(\theta)$ がすべてであり、これさえ求めれば微分断面積は (5.1.16) から求められる。$b(\theta)$ を求めるには、角運動量の保存則 $M = mr^2(d\theta/dt) = mbv$ (v は入射速度) とエネルギー保存則 $E = (m/2)(dr/dt)^2 + (1/2m)(M/r)^2) + V(r)$ から dt を消去して θ を r の積分のかたちに求めればよい。多少の計算の結果

$$\begin{aligned} &\theta = \pi - 2\varphi_0 \\ &\varphi_0 = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{\frac{M}{r^2}dr}{\sqrt{2m(E - V(r)) - \frac{M^2}{r^2}}} = \varphi_0(b, v) \qquad \text{with} \quad M = mbv \end{aligned} \tag{5.1.18}$$

が得られる。ここに、$r_{\min}$ は $2m(E - V(r)) = (M/r)^2$ から決る転回点 (turning point)) である。

(問題-2) (5.1.18) を導け。また、$V(r) = 0$ の時は、積分はどうなるか？ クーロン力

(Coulomb 力), $V(r) = \alpha/r$ with $\alpha = Z_1 Z_2 e^2$, の時に積分を求め、Rutherford の公式

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left(\frac{\alpha}{2mv^2}\right)^2 \left(\frac{1}{\sin\frac{\theta}{2}}\right)^4 \\ &= \left(\frac{\alpha}{4E}\right)^2 \left(\frac{1}{\sin\frac{\theta}{2}}\right)^4 \end{aligned} \tag{5.1.19}$$

を導け。ここに、$E = (1/2)mv^2$ は入射エネルギーである。

(問題 3) 古典力学における微少角散乱

今、impact parameter b が小く、散乱角 θ が小さいとすると、この散乱角は

$$\theta \sim \sin\theta = \frac{\Delta p_x}{p_z} \sim \frac{\Delta p_x}{mv} \tag{5.1.20}$$

で表される。ここに、Δp_x は入射粒子の方向を z-軸として、それと垂直な x-方向に粒子が (相互作用の結果として) 受ける運動量変化である。p_z は衝突の全過程であまり変らないと仮定する。Coulomb 力の古典的運動について、電荷 q $(= Z_1 e)$ が速度 v で、原点に固定された電荷 Q $(= Z_2 e)$ に衝突する時の Δp_x を古典力学の力積の式から求めよ。(答え: $\Delta p_x = 2qQ/vb$) この結果は、どんなに b が大きくても、相互作用による運動量の変化 $\Delta p_x = 2qQ/vb$ が、運動量の不確定性 $(\Delta p_x)_Q \sim \hbar/b$ と同程度であることを示している。ふたつの運動量の比

$$\frac{\Delta p_x}{(\Delta p_x)_Q} = \frac{2qQ}{\hbar v} = 2\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} = 2\frac{\alpha}{\hbar v} = 2\eta \tag{5.1.21}$$

を示す parameter η (Sommerfeld parameter という) の函数としてどのような場合に Coulomb 力による散乱問題を古典的に扱ってよいかを論じよ。(一般には、速度が大きくてエネルギーが高い時、散乱は古典的になる。) また、(5.1.20) の関係式から b と θ の関係を導き、それにより θ が小さい場合の微分散乱断面積を (5.1.16) により導き、それが正確な結果 (5.1.19) の特別な場合になっていることを示せ。

[量子力学的散乱問題の特異性]

量子力学的散乱問題の特異性は “古典的軌道の概念が成り立たない” ということである。これは、量子力学的状態が波動函数によって記述されることによる。その結果として、多くの問題で量子力学的取り扱いは古典力学の予想とは違う結果を与える。例えば

1. $V(r)$ の range が有限でない時 (例えば $V(r)=V_0e^{-\kappa r}$)、古典力学では $\sigma=\infty$ である。実際、(5.1.17) で

$$\begin{aligned}\sigma &= \int \frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega \\ &= \int_0^{\pi} 2\pi b(-)\frac{db}{d\theta}d\theta = \int_0^{\infty} 2\pi b db = \infty \end{aligned} \tag{5.1.22}$$

ただし、Coulomb 力の場合の様に遠距離力の時は量子でも無限大になり得る。

2. 半径 a の絶対剛体球 ($V(r)=\infty$ for $r<a$, $V(r)=0$ for $r>a$) の全散乱断面積は、古典力学では $\sigma=\pi a^2$。しかるに、量子力学では、低いエネルギーでは $\sigma=4\pi a^2$ (後で出てくる)。これは、量子力学の波としての干渉効果による。

5.2 散乱の定常状態

5.2.1 散乱の波動方程式とその境界条件

以下特に断らない限り、まず重心・相対変数をほどこして重心系で扱う。ここでは、簡単のため中心力場の問題 $V=V(r)$ だけを考える。

$$\begin{aligned}&\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)\right)\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \\ &E=\frac{\hbar^2}{2m}k^2 \qquad k:\ \text{wave number} \qquad m:\ \text{reduced mass}\end{aligned} \tag{5.2.1}$$

$V(r)$ は $1/r$ より早く 0 に近づくとする。つまり、$\lim_{r\to\infty} rV(r)=0$

$r\to\infty$ では、$V(r)\to 0$ より

$$\left(\nabla^2+k^2\right)\psi(\boldsymbol{r})=0 \qquad \text{as} \quad r\to\infty \tag{5.2.2}$$

この解として

$$\begin{aligned}&\text{入射波}:\ \psi_{\rm inc}=e^{ikz} \\ &\text{散乱波}:\ \psi_{\rm sc}=f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\end{aligned} \tag{5.2.3}$$

を考える。この形の散乱波が $r\to\infty$ で解となっている事は、

$$\nabla^2=\frac{1}{r}\left(\frac{d}{dr}\right)^2 r-\frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2} \tag{5.2.4}$$

である事から、$1/r^3$ の項を無視することによって分かる。ここに、$\boldsymbol{L} = -i[\boldsymbol{r} \times \nabla]$ は軌道角運動量演算子 (を $\hbar$ で割ったもの) であり、θ および φ だけに依存する。我々は、z-軸 (入射粒子の方向) の周りに軸対称な解に興味があるから、$\boldsymbol{L}_z\psi(\boldsymbol{r}) = 0$ としてよい。すなわち、Eq. (5.2.3) の $f(\theta)$ は φ 依存性がない。そこで、微分方程式 Eq. (5.2.1) の境界条件として、原点 ($\boldsymbol{r} = 0$) で $r\psi(\boldsymbol{r})$ が 0 という条件以外に

$$\psi(\boldsymbol{r}) \to e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad \text{as} \quad r \to \infty \tag{5.2.5}$$

という条件を置く。

5.2.2 散乱振幅と散乱断面積

量子力学における流れの密度は

$$\boldsymbol{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right) = \frac{1}{m}\,\mathrm{Re}\,e\left(\psi^*\frac{\hbar}{i}\nabla\psi\right) \tag{5.2.6}$$

によって与えられる。(量子力学の確率の保存を復習のこと。) そこで

$$\begin{aligned}
&\psi_{\mathrm{inc}}:\ j_{\mathrm{inc}} = \frac{1}{m}\,\mathrm{Re}\,e\left({\psi_{\mathrm{inc}}}^*\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}\psi_{\mathrm{inc}}\right) = \frac{\hbar k}{m}\ (= v) \qquad z-\text{方向}\\
&\psi_{\mathrm{sc}}:\ j_{\mathrm{sc}} = \frac{1}{m}\,\mathrm{Re}\,e\left({\psi_{\mathrm{sc}}}^*\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}\psi_{\mathrm{sc}}\right) = \frac{1}{m}\,\mathrm{Re}\,e\left\{\frac{|f(\theta)|^2}{r^2}\hbar\left(k - \frac{1}{ir}\right)\right\} = \frac{\hbar k}{m}\frac{|f(\theta)|^2}{r^2}\\
&\hspace{30em} r-\text{方向}
\end{aligned} \tag{5.2.7}$$

そこで

$$\begin{aligned}
d\dot{N} &= j_{\mathrm{sc}}r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{m}|f(\theta)|^2 d\Omega\\
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{\frac{d\dot{N}}{d\Omega}}{j_{\mathrm{inc}}} = |f(\theta)|^2
\end{aligned} \tag{5.2.8}$$

が得られる。

[干渉項からの寄与の役割]

上記の計算では、散乱の波動関数の中から入射波 $\psi_{\mathrm{inc}}(\boldsymbol{r})$ と散乱波 $\psi_{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{r})$ を独立に切りとったので両者の干渉の項の働きが議論されていない。ここでは詳しい事は省略するが、波動函数全体の流れの密度の収支を考察すると確率の保存に対応する「光学定理」

$$\sigma = \int d\Omega |f(\theta)|^2 = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) \tag{5.2.9}$$

が得られる。この関係式は、前方散乱振幅の虚数部分と全散乱断面積との関係を表している。

5.2.3 散乱の積分方程式

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(r)\psi(\boldsymbol{r}) \tag{5.2.10}$$

を積分方程式のかたちに書きかえる。或る境界条件をもった Green 函数 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ を

$$\left({\nabla_r}^2 + k^2\right)G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{5.2.11}$$

となる様に求めると、(5.2.10) は

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \phi(\boldsymbol{r}) + \int d\boldsymbol{r}' G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\frac{2m}{\hbar^2}V(r')\psi(\boldsymbol{r}') \tag{5.2.12}$$

というふうに書きかえられる。ここに、$\phi(\boldsymbol{r})$ は斉次 (斎次) 方程式

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\phi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{5.2.13}$$

の解で、今の場合 $\phi(\boldsymbol{r}) = e^{ikz}$ と選ぶ。問題は、境界条件 (5.2.5) を満す Green 函数を求めることである。この答えは

$$G^{(\pm)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{5.2.14}$$

の plus (+) の方であり、それは外向き球面波に対応する。

(5.2.14) を (**??**) に代入した式は、本質的には ($\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}' \to \boldsymbol{r}$ に変えると)

$$\left(\Delta + k^2\right)\frac{e^{\pm ikr}}{r} = -4\pi\delta(\boldsymbol{r}) \tag{5.2.15}$$

である。(右辺 δ-函数の引数は r ではなく、ベクトル $\boldsymbol{r}$ であることに注意。) また $k=0$ なら

$$\Delta\frac{1}{r} = -4\pi\delta(\boldsymbol{r}) \qquad \text{(Poisson formula)} \tag{5.2.16}$$

これは、電磁気学で学ぶ Poisson の公式である。(**??**) で $k \to i\kappa$ とした

$$\left(\Delta - \kappa^2\right)\frac{e^{\pm\kappa r}}{r} = -4\pi\delta(\boldsymbol{r}) \tag{5.2.17}$$

も成り立つ。

[漸近形]

$r \to \infty$ の時、$O(1/r)$ の order の項を無視すると、$r \gg r'$ として

$$|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'| = \sqrt{r^2 + {r'}^2 - 2rr'\cos\theta} = r\left(1 + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 - 2\frac{r'}{r}\cos\theta\right)^{\frac{1}{2}}$$
$$\sim r - r'\cos\theta \qquad \text{as} \quad r \to \infty \tag{5.2.18}$$

より

$$\frac{e^{\pm ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \sim \frac{1}{r}e^{\pm ikr}e^{\mp ikr'\cos\theta} \qquad \text{as} \quad r \to \infty \tag{5.2.19}$$

ここに、$\cos\theta = (\widehat{\boldsymbol{r}}\cdot\widehat{\boldsymbol{r}}')$ で、θ は $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{r}'$ がなす角である。つまり、(5.2.14) の Green 函数は、$+$ が外向き球面波、$-$ が内向き球面波に対応していることがわかる。結局、(5.2.12) を explicit に書くと

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int d\boldsymbol{r}'\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(r')\psi(\boldsymbol{r}') \tag{5.2.20}$$

ここで、$r \to \infty$ として、(5.2.19) を使うと右辺は

$$\to e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int d\boldsymbol{r}' e^{-ikr'\cos\theta}V(r')\psi(\boldsymbol{r}') \tag{5.2.21}$$

そこで、これを漸近形 (5.2.5) と比較して、$\boldsymbol{k}' = k\widehat{\boldsymbol{r}} = k(\boldsymbol{r}/r)$ とおくと

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\boldsymbol{r}' e^{-i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}'}V(r')\psi(\boldsymbol{r}') \tag{5.2.22}$$

を得る。これが、(5.2.20) の真の解 $\psi(\boldsymbol{r})$ から散乱振幅 $f(\theta)$ を求める式である。(5.2.20) を (波動函数に対する) Lippmann-Schwinger 方程式という。

(問題 4) 3 次元 Schrödinger 方程式の Green 函数

まず、(5.2.4) を用いて、$r \neq 0$ の時、$(\Delta + k^2)(e^{\pm ikr}/r) = 0$ である事を示せ。次に、原点 ($r = 0$) の周りの小さい球について、(5.2.15) の右辺と左辺を体積積分することにより、(5.2.15) が正しいことを示せ。(体積積分に対する Gauss の公式を用いる。)

(問題 5) 束縛状態の積分方程式

束縛状態（$E<0$）の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ の満たす積分方程式は

$$\psi(\boldsymbol{r})=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\boldsymbol{r}'\frac{e^{-\kappa|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(r')\psi(\boldsymbol{r}') \tag{5.2.23}$$

であることを示せ。ここで $E=-(\hbar^2\kappa^2/2m)$ である。この解の $r\to\infty$ における振舞いを調べよ。また、解が原点で正則 (regular) であるためには、ポテンシャル $V(r)$ がどの様な性質を満たす必要があるか？

5.2.4 Born 近似

散乱の積分方程式 (5.2.20) を $\psi=\phi+G^{(+)}V\psi$ と書く。ϕ から出発して、右辺の ψ に左辺の ψ を代入して、逐次近似により求められる解を Born 級数 (Born series) という。すなわち

$$\begin{aligned}\psi&=\phi+G^{(+)}V\psi\\&=\phi+G^{(+)}V\left(\phi+G^{(+)}V\psi\right)\\&=\phi+G^{(+)}V\phi+G^{(+)}VG^{(+)}V\psi\\&=\cdots\\&=\phi+G^{(+)}V\phi+G^{(+)}VG^{(+)}V\phi+\cdots\\&=\psi^{(0)}+\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots\end{aligned} \tag{5.2.24}$$

Born series が収束するかどうかは、ポテンシャルについての詳細な数学的検討が必要である。ここでは、収束すると仮定して、その時ポテンシャルが満さなければならない条件を考察するにとどめる。波動函数 ψ が、$\psi^{(0)}+\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots$ と分解されるのに対応して、散乱振幅 $f(\theta)$ も $f(\theta)=f^{(1)}(\theta)+f^{(2)}(\theta)+f^{(3)}(\theta)+\cdots$ と展開される。

最も簡単な近似は、波動函数として入射平面波 $\psi=\psi^{(0)}=e^{ikz}$ をとって散乱振幅 $f(\theta)=f^{(1)}(\theta)$ を計算する事である。

$$f^{\mathrm{Born}}(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\boldsymbol{r}e^{-i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}}V(r)e^{ikz} \tag{5.2.25}$$

これを Born 近似 (平面波近似) という。この場合、入射波の波数ベクトルを $\boldsymbol{k}=k\boldsymbol{e}_z$ として

$$f^{\mathrm{Born}}(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\boldsymbol{r}e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}V(r) \tag{5.2.26}$$

となる。ここに、$\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}$ で、運動量移行 (momentum transfer) と呼ばれる。簡単な計算により、その大きさは ($|\boldsymbol{k}'|=|\boldsymbol{k}|=k$ を使って)

$$|\boldsymbol{q}|=2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{5.2.27}$$

と表される。ここに、θ は重心系での散乱角である。Born 近似の適用範囲は必ずしも中心力場に限られないが、今それを仮定して角度部分について積分すると

$$f^{\mathrm{Born}}(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty dr\ r\sin(qr)\ V(r) \tag{5.2.28}$$

が得られる。

(問題 6) 湯川函数の Born 振幅

$V(r) = V_0 e^{-\kappa r}/r$ に対して Born 振幅を計算し、それが

$$f^{\mathrm{Born}}(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2}V_0\frac{1}{\kappa^2 + \boldsymbol{q}^2} \tag{5.2.29}$$

で与えられる事を示せ。また、ここで、$V_0 \to \alpha,\ \kappa \to 0$ とすると、Coulomb 力 ($V(r) = \alpha/r$) の場合の Born 振幅が求められる。これを使って微分断面積を求め、それが Rutherford の公式 (5.1.19) に一致する事を確かめよ。

(問題 7) Born 近似における、光学定理

今、$V(r)$ を実数の中心力であるとして、光学定理を $f(\theta) = f^{(1)}(\theta) + f^{(2)}(\theta) + \cdots$ に適用すると

$$\mathrm{Im}\, m f^{(1)}(0) = 0 \quad , \qquad \mathrm{Im}\, m f^{(2)}(0) = \frac{k}{4\pi}\int d\Omega |f^{(1)}(\theta)|^2 \tag{5.2.30}$$

である事を示せ。Born 振幅が実数である事は注目に値する。(例えば、スピン偏極量はこの近似ではゼロになる。) また、光学定理はその近似の範囲でしか満されていない。

[Born 近似の成り立つ条件]

今 $V(r)$ は短距離力であると仮定し、その力の到達距離を a とする。Born 近似の成り立つ条件として、1 次の波動函数

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\boldsymbol{r}'\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(r')\psi^{(0)}(\boldsymbol{r}') \tag{5.2.31}$$

が、0 次の波動函数 $\psi^{(0)}(\boldsymbol{r}) = e^{ikz}$ より小さいという条件を考える事が出来る。エネルギーが十分低く $ka \leq 1$ の場合には (5.2.31) の右辺の積分の中でゆっくり振動する項 $e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$ や $e^{ikz'}$ は、1 とおく事ができる。そこで、右辺の積分を見積ると $|V|$ を $r < a$

における平均的な大きさとして、$(2m/\hbar^2)a^2|V|$ が得られる。これを、1 よりも小さいと置くことにより、Born 近似が成り立つ一つの条件として

$$|V| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \qquad \text{when} \quad ka \leq 1 \tag{5.2.32}$$

が得られる。右辺は 1 辺の長さが a の体積中に閉じ込められた粒子が持つであろう運動エネルギーと同程度の大きさである。この様な場合には、ポテンシャルは弱く、一般には束縛状態は存在しない。(問題 14) 一方、エネルギーが高く $ka \gg 1$ が満される場合には、Eq. (**??**) の積分で利いて来るのは $\boldsymbol{r}' \sim \boldsymbol{r}$ かつ $z' \sim 0$ の領域である。今ポテンシャルは短距離的であると仮定しているので、$\boldsymbol{r} = 0$ として $|\psi^{(1)}(0)| \ll 1$ の条件を求めると

$$1 \gg \left|\psi^{(1)}(0)\right| = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\left|\int d\boldsymbol{r}' \frac{e^{ikr'}}{r'} V(r') e^{ikz'}\right| \tag{5.2.33}$$

となる。右辺の積分の角度部分を計算すると

$$\begin{aligned} 1 \gg \left|\psi^{(1)}(0)\right| &= \frac{m}{\hbar^2 k}\left|\int_0^\infty dr' V(r')\left(1 - e^{2ikr'}\right)\right| \\ &\sim \frac{m}{\hbar^2 k}\left|\int_0^\infty dr' V(r')\right| \qquad \text{when} \quad ka \gg 1 \end{aligned} \tag{5.2.34}$$

となる。再び $V(r)$ の平均的な大きさ $|V|$ を用いると、この条件は

$$|V| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} ka = \frac{\hbar v}{a} \qquad \text{when} \quad ka \gg 1 \tag{5.2.35}$$

となる。この条件はエネルギーが高く、十分速い粒子に対してはあらゆる場合に満されている。

[高いエネルギーでの微分断面積の大まかな特徴]

Born 近似 (5.2.26) を用いると、高いエネルギーでの微分断面積の大まかな特徴を調べることが出来る。

前方: $\theta = 0$ では $\boldsymbol{k}' \sim k\boldsymbol{e}_z$ より $\boldsymbol{q} \sim 0$

$$\left|f^{\text{Born}}(0)\right| = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\left|\int d\boldsymbol{r} V(r)\right| = \frac{2m}{\hbar^2}\left|\int_0^\infty dr\ r^2\ V(r)\right| \tag{5.2.36}$$

従って、$d\sigma/d\Omega$ は前方では入射エネルギーによらず一定。(発散する場合もある。)

後方: $\theta = \pi$ では $\boldsymbol{k}' \sim -k\boldsymbol{e}_z$ より

$$\left|f^{\text{Born}}(\pi)\right| = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\left|\int d\boldsymbol{r}\ e^{2ikz}\ V(r)\right| \tag{5.2.37}$$

この式は k 大の時、激しく振動する factor e^{2ikz} により、$f^{\rm Born}(\pi)$ は小くなる事を示している。

すなわち、中心力場での散乱ではエネルギーが高くなると、微分断面積の角度分布は前方ピークになる事がわかる。これは、古典力学の場合と同様な振舞いである。

(問題 8) Born 近似が適用出来る様なポテンシャルの井戸

井戸型ポテンシャル、$V(r) = -V_0$ for $r < a$, $V(r) = 0$ for $r > a$ において、条件 (5.2.32) が満されている場合は、束縛状態は存在しない事を示せ。このことは、一般の短距離力の場合に場合に成り立っている。(ランダウ・リフシッツ「量子力学 1 page 174 参照)

(問題 9) Coulomb 力の Born 近似

条件 (5.2.35) を Coulomb 力 $V(r) = \alpha/r$ に適用するためには、右辺の a を r とおけばよい。この事から、Coulomb 力を摂動とみなせるための条件は Sommerfeld parameter、$\eta = (\alpha/\hbar v)$ (問題 3 参照) が 1 より十分小さい時である事を示せ。

5.3 波束の散乱 (potential scattering)

5.3.1 Møller operator

以下、この qsction では $\hbar = 1$ の単位を用いる。

[初期状態]

$$
\begin{aligned}
&i\frac{\partial}{\partial t}\phi_\alpha(t) = H_0\phi_\alpha(t) \\
&H_0 = -\frac{1}{2m}\nabla^2 \qquad \left(\nabla = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\right) \qquad \text{free Hamiltonian}
\end{aligned} \tag{5.3.1}
$$

の一般解は

$$
\phi_\alpha(t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d\boldsymbol{q}e^{i(\boldsymbol{qx}-E_qt)}f(\boldsymbol{q}) \qquad \text{with} \quad E_q = \frac{q^2}{2m} \tag{5.3.2}
$$

実際、平面波を

$$
|\boldsymbol{q}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\boldsymbol{qx}} \tag{5.3.3}
$$

として $H_0|\boldsymbol{q}\rangle = E_q|\boldsymbol{q}\rangle$ の static solution を表すと、$|\boldsymbol{q}\rangle e^{-iE_qt}$ は (5.3.1) を満す。$\phi_\alpha(t)$ は $|\boldsymbol{q}\rangle e^{-iE_qt}$ を $\boldsymbol{q}$ について weight $f(\boldsymbol{q})$ で重ねあわせたものであり、これを wave packet

(波束) という。(5.3.1) の形式解は、任意の t_0 に対して

$$\phi_\alpha(t) = e^{-iH_0(t-t_0)}\phi_\alpha(t_0) \tag{5.3.4}$$

と書ける。特に $t_0 = 0$ と選んで

$$\phi_\alpha(0) = \int d\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}\rangle f(\boldsymbol{q}) = \phi_\alpha \tag{5.3.5}$$

と書く。すると

$$\phi_\alpha(t) = \int d\boldsymbol{q} e^{-iH_0 t}|\boldsymbol{q}\rangle f(\boldsymbol{q}) = \int d\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}\rangle e^{-iE_q t} f(\boldsymbol{q}) \tag{5.3.6}$$

[相互作用のある場合]　　真の状態

$$\begin{aligned} &i\frac{\partial}{\partial t}\psi_\alpha(t) = H\psi_\alpha(t) \\ &H = H_0 + V(\boldsymbol{x}) \end{aligned} \tag{5.3.7}$$

の形式解は、$\psi_\alpha = \psi_\alpha(0)$ として $\psi_\alpha(t) = e^{-iHt}\psi_\alpha$ である。

[$f(\boldsymbol{q})$ の選び方]

例えば

$$f(\boldsymbol{q}) = \left(\frac{2}{\pi b^2}\right)^{3/4} e^{-\left(\frac{\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}_i}{b}\right)^2} \qquad \text{with} \quad \int d\boldsymbol{q}|f(\boldsymbol{q})|^2 = 1 \qquad \text{normalized} \tag{5.3.8}$$

とすると、(5.3.2) の $\boldsymbol{q}$ の積分は実行できて

$$\phi_\alpha(t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\left(\boldsymbol{q}_i\boldsymbol{x} - E_{q_i}t\right)} \left(\frac{\sqrt{2\pi}b}{1+i\frac{tb^2}{2m}}\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{b^2}{4}\frac{\left(\boldsymbol{x} - t\frac{\boldsymbol{q}_i}{m}\right)^2}{1+i\frac{tb^2}{2m}}\right\} \tag{5.3.9}$$

これは、$(t/m)\boldsymbol{q}_i$ を中心として群速度 $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{q}_i/m$ で動いている平面波を表す。問題は、$t \to \pm\infty$ で波束はどんどん拡がっていく事である。この波束の拡がりを特徴づけるパラメータは

$$\xi = \frac{tb^2}{2m} = \frac{tv}{2mv}b^2 = \frac{L}{2q_i}b^2 = \frac{L}{d}\frac{b}{q_i} \ll 1 \qquad (\text{普通は}) \tag{5.3.10}$$

ここに、L は source と detector との間の距離、$d = 2/b$ は $t = 0$ における波束の空間的な拡がりである。($b \to 0$ で $d \to \infty$) すなわち、「波束のひろがる効果は、普通は無視できる」という事ができる。

(問題 10) Gauss 積分: (5.3.9) を示せ。

次に、$\phi_\alpha(t)$ と $\psi_\alpha(t)$ の関係をつけるのであるが、空間の各点ごとに $\psi_\alpha(t) \to \phi_\alpha(t)$ for $t \to -\infty$ とは出来無い！ (too strong) これらは、いずれも $t \to -\infty$ の時 pointwise に $1/|t|^{3/2}$ でゼロに近付く。そこで、2 乗 norm、$\|\psi(t)\|^2 = \int d\boldsymbol{x}|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2$ を使って

$$\lim_{t\to-\infty} \|\psi_\alpha(t) - \phi_\alpha(t)\| = 0 \tag{5.3.11}$$

を要請する。これは

$$\lim_{t\to-\infty} \|\psi_\alpha - e^{iHt}e^{-iH_0t}\phi_\alpha\| = 0 \tag{5.3.12}$$

と同じであり、これを

$$\psi_\alpha = s\text{-}\lim_{t\to-\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t}\phi_\alpha \tag{5.3.13}$$

と書く。s-lim は strong limit (強収束) と読み函数空間の norm の意味での収束を表す。また

$$\Omega^{(+)} = s\text{-}\lim_{t\to-\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t} \tag{5.3.14}$$

を Møller operator と言う。(散乱演算子、散乱行列とも言う。) 後で必要になるので、(5.3.14) で $t \to -\infty$ ではなく、$t \to \infty$ としたものも定義しておく。すなわち

$$\Omega^{(\pm)} = s\text{-}\lim_{t\to\mp\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t}$$
$$\psi_\alpha^{(\pm)} = \Omega^{(\pm)}\phi_\alpha \tag{5.3.15}$$

Møller operator は asymptotic wave に真の状態を対応させる等距離写像である。$\Omega^{(\pm)}$ が存在すれば、以下の事が成り立つ。

i) intertwining relationship

$$s\text{-}\lim_{t\to\mp\infty} e^{iH(t+\tau)}e^{-iH_0(t+\tau)} = \Omega^{(\pm)} = e^{iH\tau}\Omega^{(\pm)}e^{-iH_0\tau} \tag{5.3.16}$$

τ で微分して

$$0 = \frac{d\Omega^{(\pm)}}{d\tau} = ie^{iH\tau}(H\Omega^{(\pm)} - \Omega^{(\pm)}H_0)e^{-iH_0\tau} \tag{5.3.17}$$

より

$$H\Omega^{(\pm)} = \Omega^{(\pm)}H_0 \tag{5.3.18}$$

これを使うと (5.3.15) より

$$H\psi_\alpha^{(\pm)} = H\Omega^{(\pm)}\phi_\alpha = \Omega^{(\pm)}H_0\phi_\alpha = \Omega^{(\pm)}E_\alpha\phi_\alpha = E_\alpha\psi_\alpha \tag{5.3.19}$$

すなわち、$\psi_\alpha^{(\pm)}$ は ϕ_α と同じエネルギーを持つ H の固有状態である。

ii) H, H_0 の Hermite 性から $\Omega^{(\pm)\dagger}\Omega^{(\pm)} = 1$ (しかし、あとで示す様に $\Omega^{(\pm)}\Omega^{(\pm)\dagger} = 1 - |\psi_{\rm B}\rangle\langle\psi_{\rm B}|$) そこで、$\Omega^{(\pm)\dagger}\psi_\alpha^{(\pm)} = \phi_\alpha$ (注意) $\Omega^{(\pm)}$ は unitary operator ではなく、等長作用素である。(operator の定義域が問題)

iii) H の bound state を $\psi_{\rm B}$ とすると $H\psi_{\rm B} = E_B\psi_{\rm B}$ そこで

$$\langle\Omega^{(\pm)\dagger}\psi_{\rm B}|\phi_\alpha\rangle = \langle\psi_{\rm B}|\Omega^{(\pm)}|\phi_\alpha\rangle = \langle\psi_{\rm B}|\psi_\alpha^{(\pm)}\rangle = 0 \qquad \text{for} \quad \forall\alpha \tag{5.3.20}$$

ここで $|\phi_\alpha\rangle$ の完全性、$\sum_\alpha|\phi_\alpha\rangle\langle\phi_\alpha| = 1$ or $\sum_{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}| = 1$、を使うと $\Omega^{(\pm)\dagger}\psi_{\rm B} = 0$

iv) $\Omega^{(-)\dagger}\Omega^{(+)} = S$ $\qquad$ (S-matrix) $\qquad$ (後出)

[$\Omega^{(\pm)}$ の存在の条件]

$W(t) = e^{iHt}e^{-iH_0t}$ として

$$\|\left(W(t_2) - W(t_1)\right)\phi_\alpha\| = \|\int_{t_1}^{t_2} dt\frac{d}{dt}W(t)\phi_\alpha\| \to 0$$
$$\text{for} \quad t_1 < t_2 \to -\infty \tag{5.3.21}$$

ならよい。(距離空間における Cauchy の収束条件) $(dW(t)/dt) = ie^{iHt}(H - H_0)e^{-iH_0t} = ie^{iHt}Ve^{-iH_0t}$ より

$$\begin{aligned}\|\int_{t_1}^{t_2} dt\frac{d}{dt}W(t)\phi_\alpha\| &\leq \int_{t_1}^{t_2} dt\|\frac{d}{dt}W(t)\phi_\alpha\| \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt\|e^{iHt}V\phi_\alpha(t)\| \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt\|V\phi_\alpha(t)\| \end{aligned}\tag{5.3.22}$$

ここで $|\phi_\alpha(t)| \leq c_1/(c_2 + |t|^{3/2})$ for $t \to \infty$ ((5.3.9) 参照) を用いて

$$\|\left(W(t_2) - W(t_1)\right)\phi_\alpha\| \leq \|V\|\int_{t_1}^{t_2} dt\frac{c_1}{(c_2 + |t|^{3/2})} = C\|V\| \tag{5.3.23}$$

ここに、$C \to 0$ as $t_1,\ t_2 \to -\infty$. 従って

$$\|V\|^2 = \int d\boldsymbol{x}|V(x)|^2 = 4\pi\int_0^\infty dx\, x^2|V(x)|^2 < \infty \qquad (\text{有界}) \tag{5.3.24}$$

であれば Møller operator は存在する。

- Coulomb potential はダメ

○ 実は、もっと弱い条件でも存在する時がある。

(問題 11) (5.3.9) を用いて $|\phi_\alpha(t)| \le c_1/(c_2+|t|^{3/2})$ for $|t|\to\infty$ を示し、(5.3.23) を示せ。(ヒント：前半は、a, c をある定数として $|\phi_\alpha(t)| \le c(1/\sqrt{a^2+|t|^2})^{3/2}$ であることより、$(c_2+|t|^{3/2})|\phi_\alpha(t)| \to c$ (有限) for $|t|\to\infty$ から分かる。)

(まとめ)「時間依存 Schödinger equation の散乱解は potential が十分 short range である限り、$t=-\infty$ における初期状態によって決まる。」

5.3.2 Resolvent と Green 函数

[Static な記述への移行] 次の公式を使うと、wave packet による記述から static な記述へ移ることができる。

(公式)

$$\lim_{t\to-\infty} f(t) = \lim_{\varepsilon\to 0} \varepsilon \int_{-\infty}^{0} dt\, e^{\varepsilon t} f(t) \qquad (\varepsilon > 0) \tag{5.3.25}$$

実際、右辺の積分で $x=\varepsilon t$ とすると、$\varepsilon>0$ より

$$\text{右辺} = \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\infty}^{0} dx\, e^{x} f\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) = f(-\infty)\int_{-\infty}^{0} dx\, e^{x} = f(-\infty) \tag{5.3.26}$$

同様に

$$\lim_{t\to\mp\infty} f(t) = \lim_{\varepsilon\to 0} (\pm\varepsilon) \int_{\mp\infty}^{0} dt\, e^{\pm\varepsilon t} f(t) \qquad (\varepsilon > 0) \tag{5.3.27}$$

これを使うと (5.3.15) は、$\phi_\alpha = \int d\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}\rangle f(\boldsymbol{q})$ として

$$\begin{aligned}
\psi_\alpha^{(\pm)} = \Omega^{(\pm)}\phi_\alpha &= s\text{-}\lim_{t\to\mp\infty} e^{iHt}e^{-iH_0 t}\phi_\alpha \\
&= \lim_{\varepsilon\to 0}(\pm\varepsilon)\int_{\mp\infty}^{0} dt\, e^{\pm\varepsilon t} e^{iHt} e^{-iH_0 t}\int d\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}\rangle f(\boldsymbol{q}) \\
&= \lim_{\varepsilon\to 0}\int d\boldsymbol{q}\,(\pm\varepsilon)\int_{\mp\infty}^{0} dt\, e^{-i(E_q \pm i\varepsilon - H)t}|\boldsymbol{q}\rangle f(\boldsymbol{q}) \\
&= \lim_{\varepsilon\to 0}\int d\boldsymbol{q}\frac{\pm i\varepsilon}{E_q \pm i\varepsilon - H}|\boldsymbol{q}\rangle f(\boldsymbol{q})
\end{aligned} \tag{5.3.28}$$

ここに

$$G(z) = \frac{1}{z-H} \qquad (z \in \boldsymbol{C}\setminus\{\boldsymbol{R}_+, E_{\mathrm{B}}\}) \tag{5.3.29}$$

と書いて、H の resolvent という。同様に、相互作用のない場合について (H_0 に対して)

$$G_0(z) = \frac{1}{z - H_0} \qquad (z \in \boldsymbol{C} \setminus \boldsymbol{R}_+) \tag{5.3.30}$$

(5.3.29) を使うと、(5.3.28) は

$$\psi_\alpha^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon \to 0} \int d\boldsymbol{q} \pm i\varepsilon G(E_q \pm i\varepsilon)|\boldsymbol{q}\rangle f(\boldsymbol{q}) \tag{5.3.31}$$

更に

$$|\boldsymbol{q}\rangle^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon \to 0} \pm i\varepsilon G(E_q \pm i\varepsilon)|\boldsymbol{q}\rangle \tag{5.3.32}$$

とすると

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{q}\rangle^{(\pm)} &= \Omega^{(\pm)}|\boldsymbol{q}\rangle \\ \psi_\alpha^{(\pm)} &= \int d\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}\rangle^{(\pm)} f(\boldsymbol{q}) \end{aligned} \tag{5.3.33}$$

これは、平面波の場合の $\phi_\alpha = \int d\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}\rangle f(\boldsymbol{q})$ と同じかたちである。結局、或る決った $|\boldsymbol{q}\rangle$ に対しては、$\Omega^{(\pm)}$ は

$$\Omega^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon \to 0} \pm i\varepsilon G(E_q \pm i\varepsilon) \tag{5.3.34}$$

と書ける。

(注意) ${}^{(\pm)}\langle \boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}'\rangle^{(\pm)} = \delta(\boldsymbol{q} - \boldsymbol{q}')$ 　　(後出)

[Resolvent operator の性質]

i) 座標表示では Green 函数

平面波の完全性、$\int d\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}\rangle\langle\boldsymbol{q}| = 1$ から

$$G_0(z) = \frac{1}{z - H} = \int d\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}\rangle \frac{1}{z - E_q}\langle\boldsymbol{q}| \qquad \text{with} \quad E_q = \frac{q^2}{2m} \tag{5.3.35}$$

$\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{q}\rangle = (1/(2\pi)^{3/2})e^{i\boldsymbol{q}\boldsymbol{x}}$ を使うと

$$\langle\boldsymbol{x}|G_0(z)|\boldsymbol{x}'\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{q} e^{i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} \frac{1}{z - \frac{q^2}{2m}} \tag{5.3.36}$$

そこで

$$(z - H_0)\langle\boldsymbol{x}|G_0(z)|\boldsymbol{x}'\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{q} e^{i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} = \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') \tag{5.3.37}$$

一方、(5.2.11), (5.2.14) より

$$\left(\Delta_{\boldsymbol{x}}+k^2\right)\left(-\frac{1}{4\pi}\right)\frac{e^{\pm ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{5.3.38}$$

だから、$z=E_k\pm i\varepsilon$ with $\varepsilon\to 0$ として

$$\begin{aligned}\lim_{\varepsilon\to 0}\langle\boldsymbol{x}\left|G_0\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2\pm i\varepsilon\right)\right|\boldsymbol{x}'\rangle &= \langle\boldsymbol{x}\left|G_0\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2\pm i0\right)\right|\boldsymbol{x}'\rangle \\ &= \left(-\frac{1}{4\pi}\right)\frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{\pm ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \end{aligned}\tag{5.3.39}$$

(問題 12) (5.3.36) から complex q plane の複素積分によって直接 (5.3.39) を示せ。

ii) $G_0(z)^{-1}-G(z)^{-1}=V$ を使えば

$$G(z)=G_0(z)+G_0(z)VG(z)=G_0(z)+G(z)VG_0(z) \tag{5.3.40}$$

iii) $G(z)^{-1}-G(z')^{-1}=z-z'$ を使えば

$$G(z')-G(z)=(z-z')G(z)G(z')=(z-z')G(z')G(z) \tag{5.3.41}$$

$G_0(z)$ についても、同様な式が成り立つ。

[static な記述との関係]

(5.3.40) の上の式を用いると $\lim_{\varepsilon\to 0}\pm i\varepsilon G(E_q\pm i\varepsilon)|\boldsymbol{q}\rangle=|\boldsymbol{q}\rangle^{(\pm)}$ より

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{q}\rangle^{(\pm)} &= \lim_{\varepsilon\to 0}\pm i\varepsilon G(E_q\pm i\varepsilon)|\boldsymbol{q}\rangle \\ &= \lim_{\varepsilon\to 0}\pm i\varepsilon G_0(E_q\pm i\varepsilon)|\boldsymbol{q}\rangle \\ &\quad +\lim_{\varepsilon\to 0}G_0(E_q\pm i\varepsilon)V(\pm i\varepsilon)G(E_q\pm i\varepsilon)|\boldsymbol{q}\rangle \\ &= |\boldsymbol{q}\rangle+\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{E_q\pm i\varepsilon-H_0}V|\boldsymbol{q}\rangle^{(\pm)}\end{aligned}\tag{5.3.42}$$

一方、(5.3.40) の下の式を用いると $\lim_{\varepsilon\to 0}\pm i\varepsilon G_0(E_q\pm i\varepsilon)|\boldsymbol{q}\rangle=|\boldsymbol{q}\rangle$ より

$$|\boldsymbol{q}\rangle^{(\pm)}=|\boldsymbol{q}\rangle+\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{E_q\pm i\varepsilon-H}V|\boldsymbol{q}\rangle \tag{5.3.43}$$

が得られる。

通常、z-平面の実軸の上半平面から ε が 0 に近づく場合を $G_0^{(+)}(E_q)$ と書く。つまり

$$G_0^{(+)}(E) = \lim_{\varepsilon \to 0} G_0(E \pm i\varepsilon) \qquad (E \in \boldsymbol{R}) \qquad etc. \tag{5.3.44}$$

これを使うと (5.3.42) は

$$|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} = |\boldsymbol{q}\rangle + G_0^{(+)}(E_q)V|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} \qquad \left(E_q = \frac{q^2}{2m}\right) \tag{5.3.45}$$

これは「散乱の定常状態」で導いた、波動函数に対する Lippmann-Schwinger 方程式である。((5.2.12), (5.2.20)) これに、左から $\langle \boldsymbol{q}_f|V$ を掛けて、平面波の完全性を使うと

$$\langle \boldsymbol{q}_f|V|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} = \langle \boldsymbol{q}_f|V|\boldsymbol{q}\rangle + \lim_{\varepsilon \to 0}\int d\boldsymbol{q}'\langle \boldsymbol{q}_f|V|\boldsymbol{q}'\rangle \frac{1}{E_q + i\varepsilon - E_{q'}}\langle \boldsymbol{q}'|V|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} \tag{5.3.46}$$

ここで

$$T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} \equiv \langle \boldsymbol{q}_f|V|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} \tag{5.3.47}$$

は ($\boldsymbol{q}$ から $\boldsymbol{q}_f$ への) T-行列 (T-matrix) と呼ばれる。これを使うと

$$T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} = \langle \boldsymbol{q}_f|V|\boldsymbol{q}\rangle + \lim_{\varepsilon \to 0}\int d\boldsymbol{q}'\langle \boldsymbol{q}_f|V|\boldsymbol{q}'\rangle \frac{1}{E_q + i\varepsilon - E_{q'}} T_{\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}} \tag{5.3.48}$$

これを T-行列に対する Lippmann-Schwinger 方程式という。

(一般化) $E_q + i\varepsilon \to z \in \boldsymbol{C}$ とおいて上の式を一般化できる。今度は、$T_{\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}}$ は z にもよるので、これを $T_{\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}}(z) = \langle \boldsymbol{q}'|T(z)|\boldsymbol{q}\rangle$ と書くと

$$\langle \boldsymbol{q}_f|T(z)|\boldsymbol{q}\rangle = \langle \boldsymbol{q}_f|V|\boldsymbol{q}\rangle + \langle \boldsymbol{q}_f|VG_0(z)T(z)|\boldsymbol{q}\rangle \tag{5.3.49}$$

から operator の関係式として

$$T(z) = V + VG_0(z)T(z) \qquad (z \in \boldsymbol{C} \setminus \{\boldsymbol{R}_+, E_B\}) \tag{5.3.50}$$

が得られる。これが、最も一般的な T-matrix の Lippmann-Schwinger 方程式である。(5.3.48) の解は

$$\langle \boldsymbol{q}_f|T(E_q + i\varepsilon)|\boldsymbol{q}\rangle = T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}}(E_q + i\varepsilon) = T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} \tag{5.3.51}$$

の特別の場合であり、half off-shell T-matrix と呼ばれる。

(on-shell T-matrix) 更に、$|\boldsymbol{q}_f| = |\boldsymbol{q}|$ の時、$T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}}$ は「散乱の定常状態」のところで議論した散乱振幅に関係している。(5.2.22) から

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\boldsymbol{r} e^{-i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}} V(r)\psi(\boldsymbol{r}) \tag{5.3.52}$$

より、normalization の違い ($\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} = (1/(2\pi)^{3/2})\psi(\boldsymbol{r})$) に注意して

$$\begin{aligned} T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} &= \int d\boldsymbol{r} \langle \boldsymbol{q}_f|\boldsymbol{r}\rangle V(r) \langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{r} e^{-i\boldsymbol{q}_f\boldsymbol{r}} V(r)\psi(\boldsymbol{r}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{(2\pi)^2 m} f(\theta) \qquad \text{for on-shell} \quad (|\boldsymbol{q}_f| = |\boldsymbol{q}|) \end{aligned} \tag{5.3.53}$$

(dimension に注意: $\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{fm}^3$)

(Resolvent と T-matrix の代数)

(5.3.40) と (5.3.50) から出発して、逐次近似の方法を適用することにより

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)T(z)G_0(z) \quad , \qquad T(z) = V + VG(z)V \tag{5.3.54}$$

を示す事ができる。これにより、$G(z)$ を解くことと $T(z)$ を解くことは完全に同等である。T-matrix の逐次近似式を Neumann 級数 (Neumann series) という。更にはじめの式と比較して

$$VG(z) = T(z)G_0(z) \quad , \qquad G(z)V = G_0(z)T(z) \tag{5.3.55}$$

が得られる。これらの関係式は実は逐次近似の式が収束しなくても成り立っている。(問題 13) (5.3.55) は、例えば

$$V|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} = \lim_{\varepsilon\to 0} T(E_q + i\varepsilon)|\boldsymbol{q}\rangle \tag{5.3.56}$$

を意味する。

(問題 13) T-matrix と Resolvent の関係式

(5.3.54), (5.3.55) は実は、$T(z)$, $G(z)$ の無限級数が収束しなくても証明できる。まず、(5.3.40) を用いて

$$\begin{aligned} &[1 + VG(z)][1 - VG_0(z)] = 1 \\ &[1 + G(z)V][1 - G_0(z)V] = 1 \end{aligned} \tag{5.3.57}$$

を示せ。上の式を用いると、$[1-VG_0(z)]T(z)=V$ から (5.3.54) の $T(z)$ に対する式がでる。同様に、以下の関係式を示せ。

i) $T(z)=V+T(z)G_0(z)V$
ii) $G_0(z)T(z)=G(z)V \qquad \text{and} \qquad T(z)G_0(z)=VG(z)$
iii) $G(z)=G_0(z)+G_0(z)T(z)G_0(z)$

[spectral decomposition]

free resolvent の spectral decomposition に並行して、真の resolvent に対しても spectral decomposition が可能である。すなわち

$$\begin{aligned} G_0(z) &= \int d\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}\rangle\frac{1}{z-E_q}\langle\boldsymbol{q}| \\ G(z) &= \sum_B|\psi_B\rangle\frac{1}{z-E_B}\langle\psi_B| + \int d\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}\rangle^{(\pm)}\frac{1}{z-E_q}{}^{(\pm)}\langle\boldsymbol{q}| \end{aligned} \tag{5.3.58}$$

(5.3.54) を用いると、T-matrix に対する spectral decomposition が 得られる。

$$\begin{aligned} T(z) &= V+VG(z)V \\ &= V+\sum_B\frac{V|\psi_B\rangle\langle\psi_B|V}{z-E_B} + \int d\boldsymbol{q}V|\boldsymbol{q}\rangle^{(\pm)}\frac{1}{z-E_q}{}^{(\pm)}\langle\boldsymbol{q}|V \end{aligned} \tag{5.3.59}$$

$z\sim E_B<0$ では右辺第二項目が dominant となる。

5.3.3 $\boldsymbol{S}$-行列、$\boldsymbol{T}$-行列、$\boldsymbol{K}$-行列

[S-matrix の unitary 性]

(5.3.33) より $\psi_\alpha^{(+)}=\int d\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)}f(\boldsymbol{q})$ だから

$$\psi_\alpha^{(+)}(t)=e^{-iHt}\psi_\alpha^{(+)}=\int d\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)}e^{-iE_qt}f(\boldsymbol{q}) \tag{5.3.60}$$

一方、final の asymptotic state を

$$\phi_{\boldsymbol{q}_f}(t)=e^{-iH_0t}|\boldsymbol{q}_f\rangle=e^{-iE_{q_f}t}|\boldsymbol{q}_f\rangle \tag{5.3.61}$$

として、遷移確率

$$A_{\boldsymbol{q}_f\alpha}(t)=\langle\phi_{\boldsymbol{q}_f}(t)|\psi_\alpha^{(+)}(t)\rangle=\langle\boldsymbol{q}_f|e^{iH_0t}e^{-iHt}|\psi_\alpha^{(+)}\rangle \tag{5.3.62}$$

の $t \to \infty$ の極限を計算する。

$$\lim_{t\to\infty} e^{iHt}e^{-iH_0 t}|\boldsymbol{q}_f\rangle = \Omega^{(-)}|\boldsymbol{q}_f\rangle = |\boldsymbol{q}_f\rangle^{(-)} \tag{5.3.63}$$

を用いると

$$\begin{aligned}\lim_{t\to\infty} A_{\boldsymbol{q}_f\alpha}(t) &= {}^{(-)}\langle\boldsymbol{q}_f|\psi_\alpha^{(+)}\rangle = \int d\boldsymbol{q}\ {}^{(-)}\langle\boldsymbol{q}_f|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} f_\alpha(\boldsymbol{q}) \\ &= \int d\boldsymbol{q}\, S_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}}\, f_\alpha(\boldsymbol{q})\end{aligned} \tag{5.3.64}$$

ここに

$$\begin{aligned}S_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} &= {}^{(-)}\langle\boldsymbol{q}_f|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} = \langle\boldsymbol{q}_f|\Omega^{(-)\dagger}\Omega^{(+)}|\boldsymbol{q}\rangle \\ &= \langle\boldsymbol{q}_f|S|\boldsymbol{q}\rangle \qquad \text{with} \qquad S = \Omega^{(-)\dagger}\Omega^{(+)}\end{aligned} \tag{5.3.65}$$

と書いて、S を S-matrix (S-operator) という S-matrix は unitarity を満たす。(問題 16)

(S-mtrix と T-matrix の関係)

(5.3.43) を用いて、まず ${}^{(-)}\langle\boldsymbol{q}_f|$ を代入すると

$$S_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} = {}^{(-)}\langle\boldsymbol{q}_f|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} = \langle\boldsymbol{q}_f|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} + \lim_{\varepsilon\to0}\langle\boldsymbol{q}_f|V\frac{1}{E_{q_f}+i\varepsilon-H}V|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} \tag{5.3.66}$$

ここに resolvent の中の H は $|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)}$ に作用させると E_q を与えるので、最後の matrix element は $T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} = \langle\boldsymbol{q}_f|V|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)}$ で表される。つまり

$$S_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} = \langle\boldsymbol{q}_f|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} + \lim_{\varepsilon\to0}\frac{1}{E_{q_f}+i\varepsilon-E_q}T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} \tag{5.3.67}$$

一方、(5.3.42) を使うと、1 項目は

$$\langle\boldsymbol{q}_f|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} = \delta(\boldsymbol{q}_f-\boldsymbol{q}) + \lim_{\varepsilon\to0}\frac{1}{E_q+i\varepsilon-E_{q_f}}T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} \tag{5.3.68}$$

そこで

$$S_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} = \delta(\boldsymbol{q}_f-\boldsymbol{q}) + \lim_{\varepsilon\to0}\left(\frac{1}{E_q+i\varepsilon-E_{q_f}} - \frac{1}{E_q-i\varepsilon-E_{q_f}}\right)T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} \tag{5.3.69}$$

ここで、主値積分に対する公式

$$\lim_{\varepsilon\to0}\frac{1}{x\pm i\varepsilon} = \mathcal{P}\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \tag{5.3.70}$$

を用いると、次の S-matrix と T-matrix の関係が得られる。

$$S_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} = \delta(\boldsymbol{q}_f - \boldsymbol{q}) - 2\pi i \delta(E_{q_f} - E_q) T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} \tag{5.3.71}$$

(注意) S-matrix は常にエネルギー保存の δ-関数を含んでいる。これを

$$\begin{aligned}
\delta(\boldsymbol{q}_f - \boldsymbol{q}) &= \frac{\delta(q_f - q)}{q_f q}\delta(\widehat{\boldsymbol{q}}_f - \widehat{\boldsymbol{q}}) \quad , \\
\delta(E_{q_f} - E_q) &= \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}({q_f}^2 - q^2)\right) = \delta\left(\frac{\hbar^2 q_f}{m}(q_f - q)\right) \\
&= \frac{m}{\hbar^2 q_f}\delta(q_f - q)
\end{aligned} \tag{5.3.72}$$

により分離すると

$$\begin{aligned}
S_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} &= \frac{\delta(q_f - q)}{q_f q}\langle \widehat{\boldsymbol{q}}_f | S | \widehat{\boldsymbol{q}} \rangle \quad , \\
\langle \widehat{\boldsymbol{q}}_f | S | \widehat{\boldsymbol{q}} \rangle &= \delta(\widehat{\boldsymbol{q}}_f - \widehat{\boldsymbol{q}}) - 2\pi i \frac{mq}{\hbar^2} T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}}
\end{aligned} \tag{5.3.73}$$

が得られる。ここに、$|\boldsymbol{q}_f| = |\boldsymbol{q}|$, $E = (\hbar^2 q^2/2m)$ (on-shell) である。

(問題 15) (5.3.70) を証明せよ。(ヒント: 超函数としての関係式である。) また、これを用いて (5.3.71) の証明を完成せよ。

(問題 16) 真の解の直交性と完全性: 上と同様に (5.3.43) と (5.3.42) を使って, 真の解の直交性

$$^{(\pm)}\, |\boldsymbol{q}\rangle \, \langle \boldsymbol{q}'|^{(\pm)} = \delta(\boldsymbol{q} - \boldsymbol{q}') \tag{5.3.74}$$

を示せ。これを operator 表示で書くと、$\Omega^{(\pm)\dagger}\Omega^{(\pm)} = 1$ となる。一方、真の解の完全性は $|\psi_B\rangle$ を H の束縛状態として

$$\sum_B |\psi_B\rangle\langle\psi_B| + \int d\boldsymbol{q} |\boldsymbol{q}\rangle^{(\pm)(\pm)}\langle \boldsymbol{q}| = 1 \tag{5.3.75}$$

と表される。これと平面波の完全性により Møller operator に対して

$$\Omega^{(\pm)\dagger}\Omega^{(\pm)} = 1 \quad , \qquad \Omega^{(\pm)}\Omega^{(\pm)\dagger} = 1 - \sum_B |\psi_{\mathrm{B}}\rangle \, \langle \psi_{\mathrm{B}}| \tag{5.3.76}$$

が得られる。(5.3.76)、および (5.3.18) で導かれた $\Omega^{(\pm)\dagger}\,|\psi_B\rangle = 0$ を用いて

$$SS^\dagger = S^\dagger S = 1 \tag{5.3.77}$$

を示せ。

(問題 17) 光学定理: S-matrix の unitary 性 ((5.3.77))

$$\int d\boldsymbol{q} S_{\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}} S^*_{\boldsymbol{q}'',\boldsymbol{q}} = \delta(\boldsymbol{q}'-\boldsymbol{q}'') \quad , \qquad \int d\boldsymbol{q} S^*_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}'} S_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}''} = \delta(\boldsymbol{q}'-\boldsymbol{q}'') \tag{5.3.78}$$

を T-matrix で書くと $|\boldsymbol{q}'| = |\boldsymbol{q}''|$ として

$$\begin{aligned} i\left(T^*_{\boldsymbol{q}'',\boldsymbol{q}'} - T_{\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}''}\right) + 2\pi \int d\boldsymbol{q}\,\delta(E_q - E_{q'})\,T_{\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}}\,T^*_{\boldsymbol{q}'',\boldsymbol{q}} = 0 \\ i\left(T^*_{\boldsymbol{q}'',\boldsymbol{q}'} - T_{\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}''}\right) + 2\pi \int d\boldsymbol{q}\,\delta(E_q - E_{q'})\,T^*_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}'}\,T_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}'\prime} \end{aligned} \tag{5.3.79}$$

となる。$\boldsymbol{q}' = \boldsymbol{q}''$ と置くことにより、散乱振幅 $f(\theta)$ ((5.3.53)) に対する光学定理を示せ。(ヒント: (5.3.72) を使う。)

(S-matrix の意味)

波束の定義、$\psi_\alpha^{(+)} = \int d\boldsymbol{q}\,|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} f_\alpha(\boldsymbol{q})$、で、 $f_\alpha(\boldsymbol{q}) = \frac{\delta(q-q_i)}{q^2} F(\widehat{\boldsymbol{q}})$ として

$$\langle \boldsymbol{x}|\psi^{(+)}\rangle = \int d\boldsymbol{q}\,\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} f_\alpha(\boldsymbol{q}) \tag{5.3.80}$$

の $|x| = r \to \infty$ での漸近形を考える。ここに

$$\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} = \langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{q}\rangle + \langle \boldsymbol{x}|G_0^{(+)}(E_q)V|\boldsymbol{q}\rangle^{(+)} \tag{5.3.81}$$

まず (**??**) の c.c. をとって

$$e^{ikr\cos\theta} \sim 4\delta(1-\cos\theta)\frac{e^{ikr}}{2ikr} - 4\delta(1+\cos\theta)\frac{e^{-ikr}}{2ikr} \qquad \text{as} \quad r\to\infty \tag{5.3.82}$$

この式は $\boldsymbol{x} = r\widehat{\boldsymbol{q}}_f$、$k\boldsymbol{e}_z = \boldsymbol{q}$ と読みかえることにより

$$\begin{aligned} &4\delta(1-\cos\theta) = 4\pi\delta(\widehat{\boldsymbol{q}} - \widehat{\boldsymbol{q}}_f) \\ &4\delta(1+\cos\theta) = 4\delta(1-\cos(\pi-\theta)) = 4\pi\delta(\widehat{\boldsymbol{q}} + \widehat{\boldsymbol{q}}_f) \end{aligned} \tag{5.3.83}$$

を用いて

$$e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}} \sim 4\pi\delta(\widehat{\boldsymbol{q}} - \widehat{\boldsymbol{q}}_f)\frac{e^{iqr}}{2iqr} - 4\pi\delta(\widehat{\boldsymbol{q}} + \widehat{\boldsymbol{q}}_f)\frac{e^{-iqr}}{2iqr} \qquad \text{as} \quad r\to\infty \tag{5.3.84}$$

と表される。そこで 1 項目は $r \to \infty$ の極限で

$$1\ 項目 = \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \frac{i}{2q_i} \left[\frac{e^{-iq_i r}}{r} F(-\widehat{\boldsymbol{q}}_f) - \frac{e^{iq_i r}}{r} F(\widehat{\boldsymbol{q}}_f) \right] \qquad \text{as} \quad r \to \infty \tag{5.3.85}$$

一方、2 項目は (5.2.19) の漸近形より

$$\langle \boldsymbol{x} | G_0^{(+)}(E_q) V | \boldsymbol{q} \rangle^{(+)} \sim (2\pi)^{\frac{3}{2}} \left(-\frac{1}{4\pi} \right) \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{iqr}}{r} T_{\boldsymbol{q}_f, \boldsymbol{q}} \qquad \text{with} \quad |\boldsymbol{q}_f| = |\boldsymbol{q}| = q_i \tag{5.3.86}$$

だから

$$2\ 項目 = (2\pi)^{\frac{3}{2}} \left(-\frac{1}{4\pi} \right) \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{iq_i r}}{r} \int d\widehat{\boldsymbol{q}}\ T_{\boldsymbol{q}_f, \boldsymbol{q}}\, F(\widehat{\boldsymbol{q}}) \qquad \text{with} \quad |\boldsymbol{q}_f| = |\boldsymbol{q}| = q_i \tag{5.3.87}$$

が得られる。そこで、全体を factor $\frac{4\pi}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{i}{2q_i}$ で割っておくと

$$\begin{aligned} \frac{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}{4\pi} \frac{2q_i}{i} \langle \boldsymbol{x} | \boldsymbol{q} \rangle^{(+)} = \frac{e^{-iq_i r}}{r} F(-\widehat{\boldsymbol{q}}_f) - \frac{e^{iq_i r}}{r} \left[F(\widehat{\boldsymbol{q}}_f) - 2\pi i \frac{m q_i}{\hbar^2} \int d\widehat{\boldsymbol{q}}\ T_{\boldsymbol{q}_f, \boldsymbol{q}}\, F(\widehat{\boldsymbol{q}}) \right] \\ \text{with} \quad |\boldsymbol{q}_f| = |\boldsymbol{q}| = q_i \qquad \text{as} \quad r \to \infty \end{aligned} \tag{5.3.88}$$

ここに、右辺 2 項目は (5.3.73) を用いて

$$\begin{aligned} [\cdots] &= \int d\widehat{\boldsymbol{q}} \left[\delta(\widehat{\boldsymbol{q}}_f - \widehat{\boldsymbol{q}}) - 2\pi i \frac{m q_i}{\hbar^2} T_{\boldsymbol{q}_f, \boldsymbol{q}} \right] F(\widehat{\boldsymbol{q}}) = \int d\widehat{\boldsymbol{q}}\, \langle \widehat{\boldsymbol{q}}_f | S | \widehat{\boldsymbol{q}} \rangle\, F(\widehat{\boldsymbol{q}}) \\ &= (SF)(\widehat{\boldsymbol{q}}_f) \end{aligned} \tag{5.3.89}$$

と表される。結局

$$\langle \boldsymbol{x} | \boldsymbol{q} \rangle^{(+)} \propto \frac{e^{-iq_i r}}{r} F(-\widehat{\boldsymbol{q}}_f) - \frac{e^{iq_i r}}{r} (SF)(\widehat{\boldsymbol{q}}_f) \qquad (\widehat{\boldsymbol{q}}_f = \widehat{\boldsymbol{x}}) \qquad \text{as} \quad r = |\boldsymbol{x}| \to \infty \tag{5.3.90}$$

ここに、右辺 1 項目は内向き球面波、第 2 項目は外向き球面波であって S-matrix はその比を表す。S-matrix の unitarity $SS^\dagger = S^\dagger S = 1$ は確率の保存を表す。

[Time reversal invariance]

Time reversal operator $\mathcal{T}$ は unitary 変換 $\mathcal{U}$ と複素共役をとる操作 K との積によって表される。

$$\mathcal{T} = \mathcal{U} K \tag{5.3.91}$$

一般に $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\mathcal{T}\varphi|\mathcal{T}\psi\rangle^*$ が成り立つ。ポテンシャル $V(r)$ が (hermite で) time reversal invariance を満たすという事は

$$\mathcal{T}V\mathcal{T}^{-1} = V \qquad \text{or} \qquad [\mathcal{T}, V] = 0 \quad (\text{可換}) \tag{5.3.92}$$

と表される。(中心力 potential $V(r)$ に対しては、それが real であればよい。) 更に、$|\boldsymbol{q}\rangle$ の time reversal state は

$$\mathcal{T}|\boldsymbol{q}\rangle = |-\boldsymbol{q}\rangle \tag{5.3.93}$$

である。一方、(5.3.47) と (5.3.43) より

$$T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}_i} = \langle\boldsymbol{q}_f|V|\boldsymbol{q}_i\rangle^{(+)} = \langle\boldsymbol{q}_f|V|\boldsymbol{q}_i\rangle + \lim_{\varepsilon\to 0}\langle\boldsymbol{q}_f|V\frac{1}{E_{q_i} + i\varepsilon - H}V|\boldsymbol{q}_i\rangle \tag{5.3.94}$$

そこで

$$\begin{aligned}
T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}_i} &= \langle\mathcal{T}\boldsymbol{q}_f|\mathcal{T}V|\boldsymbol{q}_i\rangle^* + \lim_{\varepsilon\to 0}\langle\mathcal{T}\boldsymbol{q}_f|\mathcal{T}V\frac{1}{E_{q_i} + i\varepsilon - H}V|\boldsymbol{q}_i\rangle^* \\
&= \langle-\boldsymbol{q}_f|V|-\boldsymbol{q}_i\rangle^* + \lim_{\varepsilon\to 0}\langle-\boldsymbol{q}_f|V\frac{1}{E_{q_i} - i\varepsilon - H}V|-\boldsymbol{q}_i\rangle^* \\
&= \langle-\boldsymbol{q}_i|V|-\boldsymbol{q}_f\rangle + \lim_{\varepsilon\to 0}\langle-\boldsymbol{q}_i|V\frac{1}{E_{q_f} + i\varepsilon - H}V|-\boldsymbol{q}_f\rangle \\
&= T_{-\boldsymbol{q}_i,-\boldsymbol{q}_f}
\end{aligned} \tag{5.3.95}$$

ここで 3 行目では $E_{q_i} = E_{q_f}$ を用いた。結局、$V(r)$ が time reversal invariance を満たせば (real なら O.K.)

$$T_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}_i} = T_{-\boldsymbol{q}_i,-\boldsymbol{q}_f} \qquad (\text{Reciprocity theorem}) \tag{5.3.96}$$

同様に、S-matrix に対しても $S_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}_i} = S_{-\boldsymbol{q}_i,-\boldsymbol{q}_f}$ が成り立つ。(部分波展開すると parity の保存から、time reversal invariance の要請は T-matrix, S-matrix が対称になることに導く。)

[Lippmann-Schwinger 方程式から unitarity を導く]

Lippmann-Schwinger 方程式 (5.3.50) はそれ自身の中に unitarity の性質を含んでいる。それを見るために、まず $T(E+i\varepsilon) = T$, $G_0(E+i\varepsilon) = G_0$ と略記して、

$$T = V + TG_0V \quad , \qquad T^\dagger = V + V{G_0}^\dagger T^\dagger \tag{5.3.97}$$

から出発する。2 番目の式は、始めの式から hermite conjugate (h.c.) をとって $V^\dagger = V$ を仮定して得られる。2 番目の式を $V = T^\dagger - V{G_0}^\dagger T^\dagger$ と書いて 1 番目の式に代入すると

$$T = V + TG_0T^\dagger - TG_0VG_0{}^\dagger T^\dagger \tag{5.3.98}$$

再び h.c. をとると

$$T^\dagger = V + TG_0{}^\dagger T^\dagger - TG_0VG_0{}^\dagger T^\dagger \tag{5.3.99}$$

これらを辺々引くと

$$T - T^\dagger = T\left(G_0 - G_0{}^\dagger\right)T^\dagger \tag{5.3.100}$$

が得られる。ここで、$\varepsilon \to 0$ をとると (5.3.70) より

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[G_0(E+i\varepsilon) - G_0(E-i\varepsilon)\right] = -2\pi i\delta(E-H_0) \tag{5.3.101}$$

より、平面波 matrix element $\langle \boldsymbol{q}'|\cdots|\boldsymbol{q}''\rangle$ をとって、$\lim_{\varepsilon\to 0} T(E+i\varepsilon)$ を $T(E)$ と書くことにより

$$i\left(T^*_{\boldsymbol{q}'',\boldsymbol{q}'}(E) - T_{\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}''}(E)\right) + 2\pi\int d\boldsymbol{q}\,\delta(E-E_q)\,T_{\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}}(E)\,T^*_{\boldsymbol{q}'',\boldsymbol{q}}(E) = 0 \tag{5.3.102}$$

が得られる。(5.3.79) の上の式は、この式で $E = E_{q'} = E_{q''}$ とした式である。

[K-matrix]

$G_0^{(+)}(E)$ の場合と同様、上半面から近付いた時の正の実軸上における T-matrix を普通 $T(E)$ と書く。すなわち、$T(E) = \lim_{\varepsilon\to 0} T(E+i\varepsilon)$ とすると

$$T(E) = V + VG_0^{(+)}(E)T(E) \tag{5.3.103}$$

で (5.3.70) を使うことにより

$$T(E) = V + V\mathcal{P}\frac{1}{E-H_0}T(E) - i\pi V\delta(E-H_0)T(E) \tag{5.3.104}$$

そこで

$$K(E) = V + V\mathcal{P}\frac{1}{E-H_0}K(E) \qquad (K\text{-matrix}) \tag{5.3.105}$$

とすると

$$T(E) = K(E) - i\pi K(E)\delta(E-H_0)T(E) \tag{5.3.106}$$

$K(E)$ の方程式は $T(E)$ の方程式で $G_0^{(+)}(E)$ を $\mathcal{P}G_0(E)$ と変えたものであり、V が real なら $K(E)$ も real な量となる。

S-matrix と T-matrix の関係 (5.3.71)

$$S_{\boldsymbol{q}_f,\boldsymbol{q}} = \delta(\boldsymbol{q}_f - \boldsymbol{q}) - 2\pi i \langle \boldsymbol{q}_f | \delta(E - H_0) T | \boldsymbol{q} \rangle \qquad \left(E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right) \tag{5.3.107}$$

を簡単に

$$S = 1 - 2\pi i \delta(E - H_0) T(E) \tag{5.3.108}$$

と書いて、$T(E) = K(E)\frac{1}{2}(1+S)$ に注意すると

$$S = \left[1 + \pi i \delta(E - H_0) K(E)\right]^{-1} \left[1 - \pi i \delta(E - H_0) K(E)\right] \tag{5.3.109}$$

が得られる。これは、 trivial factor を除いて $S = \frac{1-iK}{1+iK}$ の形であり、いわゆる Cayley 変換となっている。Cayley 変換は unitary 行列と hermite 行列の間の対応であり、今の場合、S-matrix の unitary 性が K-matrix の hermite 性 ($K = K^\dagger$) に対応する

5.4 部分波展開 (partial wave decomposition)

5.4.1 Schrödinger 方程式の部分波展開

中心力ポテンシャル $V = V(r)$ $(r = |\boldsymbol{r}|)$ による散乱の Schrödinger 方程式は

$$(\nabla + k^2)\Psi(\boldsymbol{r}) = \mathcal{V}(r)\Psi(\boldsymbol{r}) \qquad \text{with} \quad E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \ , \quad V(r) = \frac{\hbar^2}{2m}\mathcal{V}(r) \tag{5.4.1}$$

ここに、極座標表示における Laplacian は

$$\begin{aligned} \Delta &= \left(\frac{d}{dr}\right)^2 + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2} = \frac{1}{r}\left(\frac{d}{dr}\right)^2 r - \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2} \\ \boldsymbol{L} &= \frac{1}{\hbar}[\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}] = \left[\boldsymbol{r} \times \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right] \end{aligned} \tag{5.4.2}$$

$\boldsymbol{L}$ はオイラー角 $(\theta, \varphi) \equiv \widehat{\boldsymbol{r}}$ だけで表された角運動量演算子であり、その固有値問題の解は

$$\begin{aligned} \boldsymbol{L}^2 Y_{\ell m}(\theta,\varphi) &= \ell(\ell+1) Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \ , \qquad \boldsymbol{L}_z Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = m Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \\ t Y_{\ell m}(\theta,\varphi) &= (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} P_\ell^{|m|}(\cos\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \end{aligned} \tag{5.4.3}$$

である。ポテンシャルは r だけの函数だから、$[\boldsymbol{L}, V(r)] = 0$、つまり軌道角運動量は良い量子数となり、保存される。そこで、入射 z-軸まわりに軸対称な解を

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell \, R_\ell(r) \, Y_{\ell 0}(\widehat{\boldsymbol{r}}) \tag{5.4.4}$$

とおくと、各部分波ごとに

$$\left[\left(\frac{d}{dr}\right)^2+\frac{2}{r}\left(\frac{d}{dr}\right)-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}-\mathcal{V}(r)+k^2\right]R_\ell(r)=0 \tag{5.4.5}$$

あるいは

$$\left[\left(\frac{d}{dr}\right)^2-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}-\mathcal{V}(r)+k^2\right]\psi_\ell(r)=0 \qquad \text{with} \quad R_\ell(r)=\frac{\psi_\ell(r)}{r} \tag{5.4.6}$$

[平面波] (plane wave)

(5.4.6) で $\mathcal{V}(r)=0$ とおいて $\rho=kr$ の微分方程式へ移ると

$$\left[\left(\frac{d}{d\rho}\right)^2-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}+1\right]u_\ell(\rho)=0 \qquad \text{with} \quad u_\ell(\rho)=\psi_\ell(r) \tag{5.4.7}$$

あるいは、元の $R_\ell(r)$ では

$$\left[\left(\frac{d}{d\rho}\right)^2+\frac{2}{\rho}\left(\frac{d}{d\rho}\right)+1-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]R_\ell=0 \tag{5.4.8}$$

この方程式の解は球 Bessel 函数 (spherical Bessel function) であり、2 つの線形独立な解が存在する。

$$\begin{aligned}
j_\ell(\rho)&=\sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}J_{\ell+\frac{1}{2}}(\rho)=(-1)^\ell\rho^\ell\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell\frac{\sin\rho}{\rho} && \text{(球 Bessel 函数)}\\
n_\ell(\rho)&=(-1)^{\ell+1}\sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}J_{-\ell-\frac{1}{2}}(\rho)=(-1)^{\ell+1}\rho^\ell\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell\frac{\cos\rho}{\rho} && \text{(球 Neumann 函数)}\\
h_\ell^{(1)}(\rho)&=\sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}H^{(1)}_{\ell+\frac{1}{2}}(\rho)=j_\ell(\rho)+in_\ell(\rho) && \text{(第 1 種 Hankel 函数)}\\
h_\ell^{(2)}(\rho)&=\sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}H^{(2)}_{\ell+\frac{1}{2}}(\rho)=j_\ell(\rho)-in_\ell(\rho) && \text{(第 2 種 Hankel 函数)}
\end{aligned} \tag{5.4.9}$$

これらの函数の $\rho \to \infty$、および $r \to 0$ における漸近形は (問題 18)。

$$
\begin{aligned}
j_\ell(\rho) &\sim \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{\pi}{2}\ell\right) \\
n_\ell(\rho) &\sim -\frac{1}{\rho}\cos\left(\rho - \frac{\pi}{2}\ell\right) \qquad \text{for} \quad \rho \to \infty \\
j_\ell(\rho) &\sim \frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!} \\
n_\ell(\rho) &\sim -\frac{(2\ell-1)!!}{\rho^{\ell+1}} \qquad \text{for} \quad \rho \to 0
\end{aligned} \tag{5.4.10}
$$

ここに、 $(2\ell-1)!! = (2\ell+1)!!/(2\ell+1)$ は $\ell = 0$ の時 1 と理解する。あとで必要になるので、(5.4.7) の解を

$$
\begin{aligned}
u_\ell(\rho) &= \rho j_\ell(\rho) \sim \begin{cases} \sin\left(\rho - \frac{\pi}{2}\ell\right) & (\rho \to \infty) \\ \frac{\rho^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!} & (\rho \to 0) \end{cases} \\
v_\ell(\rho) &= -\rho n_\ell(\rho) \sim \begin{cases} \cos\left(\rho - \frac{\pi}{2}\ell\right) & (\rho \to \infty) \\ \frac{(2\ell-1)!!}{\rho^\ell} & (\rho \to 0) \end{cases} \\
w_\ell^{(\pm)}(\rho) &= v_\ell(\rho) \pm i u_\ell(\rho) \sim \begin{cases} e^{\pm i\left(\rho - \frac{\pi}{2}\ell\right)} & (\rho \to \infty) \\ \frac{(2\ell-1)!!}{\rho^\ell} & (\rho \to 0) \end{cases}
\end{aligned} \tag{5.4.11}
$$

と書いて、それぞれ Riccati Bessel 函数、Riccati Neumann 函数、Riccati Hankel 函数と呼んでいる。$w_\ell^{(-)} = w_\ell^{(+)*}$ である。

[平面波の部分波展開] (Rayleigh の式)

$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta}$ は free な Schrödinger 方程式の原点で正則な軸対称解だから

$$
e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell \, j_\ell(kr) \, P_\ell(\cos\theta) \tag{5.4.12}
$$

と展開出来るはずである。C_ℓ を決定する方法は色々あるが一つの方法が問題 19 に与えられている。結果は $C_\ell = (2\ell+1)i^\ell$ である。そこで

$$
e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \, i^\ell j_\ell(kr) \, P_\ell(\cos\theta) \tag{5.4.13}
$$

更に (5.4.3) より $m = 0$ とおいて

$$
Y_{\ell 0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos\theta) \tag{5.4.14}
$$

より

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2\ell+1)}\, i^{\ell} j_{\ell}(kr)\, Y_{\ell\,0}(\theta,\phi) \tag{5.4.15}$$

とも書ける。

[散乱振幅の部分波展開]

真の解 (5.4.4) の部分波展開を

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)A_{\ell}R_{\ell}(r)P_{\ell}(\cos\theta) \tag{5.4.16}$$

と書き、 $r \to \infty$ では $R_{\ell}(r)$ は $j_{\ell}(kr) \sim \sin(kr-(\pi/2)\ell)/kr$ と $n_{\ell}(kr) \sim -\cos(kr-(\pi/2)\ell)/kr$ の線型結合で書ける事を考えると、原点で regular な解 $R_{\ell}(r)$ の漸近形は

$$R_{\ell}(r) \sim \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell + \delta_{\ell}\right) \qquad \text{as} \quad r\to\infty \tag{5.4.17}$$

とすることが出来る。ここに、$\mathcal{V}(r) = 0$ の時 $\delta_{\ell} = 0$ となるように $-(\pi/2)\ell$ を加えてある。($R_{\ell}(r) = j_{\ell}(kr)$ for $\mathcal{V}(r) = 0$) δ_{ℓ} はポテンシャルによる平面波からの位相のズレであって、位相差 (phase shift) と呼ばれ、k の函数 $\delta_{\ell}(k)$ である。これを使うと (5.4.16) の $r\to\infty$ における漸近形は

$$\begin{aligned}\Psi(\boldsymbol{r}) &\sim \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)A_{\ell}P_{\ell}(\cos\theta)\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{\pi}{2}\ell+\delta_{\ell}\right)\\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)A_{\ell}P_{\ell}(\cos\theta)\frac{i}{2kr}\left[e^{-i\left(kr-\frac{\pi}{2}\ell+\delta_{\ell}\right)} - e^{i\left(kr-\frac{\pi}{2}\ell+\delta_{\ell}\right)}\right]\end{aligned} \tag{5.4.18}$$

一方、(5.4.13) と (5.4.10) より

$$e^{ikz} \sim \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)i^{\ell}P_{\ell}(\cos\theta)\frac{i}{2kr}\left[e^{-i\left(kr-\frac{\pi}{2}\ell\right)} - e^{i\left(kr-\frac{\pi}{2}\ell\right)}\right] \tag{5.4.19}$$

そこで

$$\Psi(\boldsymbol{r}) - e^{ikz} = f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad \text{as} \quad r\to\infty \tag{5.4.20}$$

より、(5.4.18) と (5.4.19) の差をとって右辺の e^{-ikr} の係数が打ち消しあう様にするには $A_\ell\, e^{-i\delta_\ell} = i^\ell$ すなわち $A_\ell = i^\ell\, e^{i\delta_\ell}$ とすればよい。そこで

$$\begin{aligned}\Psi(\boldsymbol{r}) &\sim \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)i^\ell P_\ell(\cos\theta)\frac{i}{2kr}\left[e^{-i\left(kr-\frac{\pi}{2}\ell\right)} - e^{2i\delta_\ell}e^{i\left(kr-\frac{\pi}{2}\ell\right)}\right] \\ &= \frac{i}{2kr}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\left[(-1)^\ell e^{-ikr} - S_\ell\, e^{ikr}\right] \qquad (5.4.21)\end{aligned}$$

ここに $S_\ell = e^{2i\delta_\ell}$ は S-matrix である。更に、 $r\to\infty$ で

$$\begin{aligned}\Psi(\boldsymbol{r}) - e^{ikz} &\sim \frac{i}{2kr}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)(1-S_\ell)\,P_\ell(\cos\theta)\,e^{ikr} \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\frac{S_\ell-1}{2ik}\,P_\ell(\cos\theta)\ \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= f(\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r} \qquad \text{as} \quad r\to\infty \qquad (5.4.22)\end{aligned}$$

そこで

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,f_\ell\,P_\ell(\cos\theta) \qquad \text{with} \qquad f_\ell = \frac{S_\ell-1}{2ik} = e^{i\delta_\ell}\frac{1}{k}\sin\delta_\ell \qquad (5.4.23)$$

これを、散乱振幅の部分波展開という。f_ℓ は $f(\theta)$ の部分波成分であり

$$f_\ell = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\,f(\theta)\,P_\ell(\cos\theta) \qquad (5.4.24)$$

から計算される。微分散乱断面積と全散乱断面積は

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta)|^2 = \left|\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,f_\ell\,P_\ell(\cos\theta)\right|^2 \\ \sigma &= \int\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = 4\pi\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,|f_\ell|^2 \\ &= \frac{\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,|S_\ell-1|^2 = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,(\sin\delta_\ell)^2 \qquad (5.4.25)\end{aligned}$$

で与えられる。

(問題 18) 球 Bessel 函数

$$\mathcal{O}_\ell^{(+)} = -\rho^\ell \frac{d}{d\rho}\rho^{-\ell} = -\frac{d}{d\rho} + \frac{\ell}{\rho}$$
$$\mathcal{O}_\ell^{(-)} = \rho^{-\ell} \frac{d}{d\rho}\rho^{\ell} = \frac{d}{d\rho} + \frac{\ell}{\rho} \tag{5.4.26}$$

とすると (5.4.7) は

$$\mathcal{O}_\ell^{(+)}\,\mathcal{O}_\ell^{(-)}\,u_\ell = \mathcal{O}_{\ell+1}^{(-)}\,\mathcal{O}_{\ell+1}^{(+)}\,u_\ell = u_\ell \tag{5.4.27}$$

と表されることを示せ。これを用いて

$$\mathcal{O}_\ell^{(+)}\,u_{\ell-1} = \mathrm{const}\cdot u_\ell \quad , \qquad \mathcal{O}_\ell^{(-)}\,u_\ell = \mathrm{const}\cdot u_{\ell-1}$$
$$u_\ell = \mathrm{const}\cdot \mathcal{O}_\ell^{(+)}\,\mathcal{O}_{\ell-1}^{(+)}\,\cdots\,\mathcal{O}_1^{(+)}\,u_0 = (-1)^\ell \rho^{\ell+1}\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \frac{u_0}{\rho} \tag{5.4.28}$$

を示せ。次に $u_0 = \sin\rho$ あるいは $\cos\rho$ として, $j_\ell(\rho)$, $n_\ell(\rho)$ を

$$\rho\, j_\ell(\rho) = (-1)^\ell \rho^{\ell+1}\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \frac{\sin\rho}{\rho}$$
$$\rho\, n_\ell(\rho) = (-1)^{\ell+1} \rho^{\ell+1}\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \frac{\cos\rho}{\rho} \tag{5.4.29}$$

により定義する。((5.4.9) 参照) まず $\rho\to\infty$ の時、次式を示せ。(ヒント: $w_\ell^{(+)}(\rho) = -\rho n_\ell(\rho) + i\,\rho j_\ell(\rho)$ を作って考える。)

$$\rho\, j_\ell(\rho) \to (-1)^\ell \left(\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \sin\rho = \sin\left(\rho - \frac{\pi}{2}\ell\right)$$
$$\rho\, n_\ell(\rho) \to (-1)^{\ell+1} \left(\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \cos\rho = -\cos\left(\rho - \frac{\pi}{2}\ell\right) \tag{5.4.30}$$

次に $\rho\to 0$ の時、次式を示せ。

$$\rho\, j_l(\rho) \to \frac{1}{(2\ell+1)!!}\,\rho^{\ell+1} \quad , \qquad \rho\, n_\ell(\rho) \to -\frac{(2\ell-1)!!}{\rho^\ell} \tag{5.4.31}$$

(問題 19) (5.4.12) の C_ℓ の計算

Legendre 多項式の直交関係

$$\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\, P_\ell(\cos\theta)\, P_{\ell'}(\cos\theta) = \delta_{\ell,\ell'}\ \frac{2}{2\ell+1} \tag{5.4.32}$$

を使うと (5.4.12) から

$$C_\ell\, j_\ell(\rho) = \frac{2\ell+1}{2}\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\, e^{i\rho\cos\theta}\, P_\ell(\cos\theta) \tag{5.4.33}$$

ここで、右辺の積分は $\rho\to\infty$ の時 ($x=\cos\theta$ として) 部分積分して

$$\int_{-1}^{1} dx\, e^{i\rho x}\, P_\ell(x) = \frac{1}{i\rho} e^{i\rho x}\, P_\ell(x)\Big|_{-1}^{1} - \frac{1}{i\rho}\int_{-1}^{1} dx\, e^{i\rho x}\, P_\ell'(x) \tag{5.4.34}$$

右辺第 2 項は $O(1/\rho^2)$ の order である。(漸近展開) そこで、第 1 項目と $j_\ell(\rho)$ の漸近形 (5.4.10) を比較して、$C_\ell = (2\ell+1)i^\ell$ が求まる。($P_\ell(1)=1$, $P_\ell(-1)=(-1)^\ell$ である。)

(問題 20) 光学定理

(5.4.23) と (5.4.25) から直接、光学定理 (5.2.9) を示せ。また、この光学定理を各部分波成分 f_ℓ で表すとどの様な関係式になるか?　$g_\ell = g_\ell(k) = \mathrm{Re}\, e(1/f_\ell)$ を k の実数値函数として、この関係式は

$$f_\ell = \frac{1}{g_\ell - ik} \tag{5.4.35}$$

となる事を示せ。ここに、$g_\ell = k\cot\delta_\ell$ である。(注意) short-range force に対して $k^{2\ell}\, g_\ell(k)$ は k^2 の解析函数である。従って、k^2 の冪級数に展開できる。ここから、effective range theory への展開が生れる。ランダウ・リフシッツ「量子力学 2」pages 554, 581 参照)

5.4.2　位相差 (phase shift)、いくつかの例

短距離的なポテンシャルによるポテンシャル散乱の場合には、位相差は座標原点において正則 (regular) な波動函数が相互作用の効果が無視できるような十分大きな距離 a でそこでの解である平面波に滑らかに繋がるという条件で決定される。すなわち、 $r\ge a$ では (5.4.17) は

$$\begin{aligned} krR_\ell(r) &= k\psi_\ell(r) \sim \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell + \delta_\ell\right) \\ &= \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right)\cos\delta_\ell + \cos\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right)\sin\delta_\ell \qquad \text{as} \quad r\to\infty \end{aligned} \tag{5.4.36}$$

あるいは、もっと正確には

$$k\psi_\ell(r) \sim \cos\delta_\ell\, u_\ell(kr) + \sin\delta_\ell\, v_\ell(kr) \qquad \text{when} \quad r\ge a \tag{5.4.37}$$

そこで、原点で正則な解 $\psi_\ell(r)$ の $r=a$ における対数微分を

$$\gamma_\ell = \frac{d}{dr}\log\psi_\ell(r)\bigg|_{r=a} = \frac{\psi'_\ell(r)}{\psi_\ell(r)}\bigg|_{r=a} \tag{5.4.38}$$

とすると

$$\frac{k\left[\cos\delta_\ell\, u'_\ell(ka) + \sin\delta_\ell\, v'_\ell(ka)\right]}{\cos\delta_\ell\, u_\ell(ka) + \sin\delta_\ell\, v_\ell(ka)} = \gamma_\ell \tag{5.4.39}$$

ここから

$$\tan\delta_\ell = -\frac{\frac{\gamma_\ell}{k}u_\ell(ka) - u'_\ell(ka)}{\frac{\gamma_\ell}{k}v_\ell(ka) - v'_\ell(ka)} \tag{5.4.40}$$

が得られる。

(5.4.40) の結果は Wronskian を用いても簡単に得られる。すなわち、Schrödinger 方程式 (5.4.6) の 2 つの独立な解 $f(r)$, $g(r)$ に対して Wronskian

$$W[f,g] \equiv f(r)\frac{d}{dr}g(r) - g(r)\frac{d}{dr}f(r) = \text{const.} \tag{5.4.41}$$

は r の値によらず一定である。従って、$W[f,g]$ の値は原点や漸近波から求めてよい。特に、$\mathcal{V}(r)=0$ の時

$$W[u_\ell, v_\ell] = -k \quad , \qquad W[u_\ell, u_\ell] = W[v_\ell, v_\ell] = 0 \tag{5.4.42}$$

である。そこで、$r \geq a$ で $k\psi_\ell$ と u_ℓ, v_ℓ との Wronskian をとって、(5.4.37) から

$$W[u_\ell, k\psi_\ell] = -k\,\sin\,\delta_\ell \quad , \qquad W[v_\ell, k\psi_\ell] = k\,\cos\,\delta_\ell \tag{5.4.43}$$

が得られる。ここから、$r=a$ における値をとることにより

$$\tan\delta_\ell = -\frac{W[u_\ell,\psi_\ell]_a}{W[v_\ell,\psi_\ell]_a} = -\frac{u_\ell(ka)\psi'_\ell(a) - \psi_\ell(a)ku'_\ell(ka)}{v_\ell(ka)\psi'_\ell(a) - \psi_\ell(a)kv'_\ell(ka)} \tag{5.4.44}$$

として (5.4.40) と同じ結果が得られる。

一般には、a はポテンシャルのレンジに比べて十分大きく取らなければならない。しかし、問題 22, 23 の様にそのレンジの外でポテンシャルが正確にゼロになる場合には、a をポテンシャルのレンジにとることが出来る。以下 a をポテンシャルのレンジとして、散乱振幅の各部分波の和でどの程度までの部分波をとらなければならないかを考察する。

a をポテンシャルのレンジとすると、$r=a$ では遠心力障壁の高さ $\hbar^2\ell(\ell+1)/2mr^2$ と入射エネルギーの大きさ $\hbar^2k^2/2m$ の相対的な比がその部分波の重要性を決めることになる。そこで、散乱に寄与する最大の部分波は

$$\ell_{\max} \sim ka \tag{5.4.45}$$

である。実際、$\ell \gg ka$ の場合には、Schrödinger 方程式 (5.4.6) で (ポテンシャルが原点でそれ程 singular でない限り)、$r \leq a$ の全領域で $\mathcal{V}(r)$ を無視する近似がよいと考えられ

$$k\psi_\ell(r) \sim u_\ell(kr) \qquad \text{for} \quad r \leq a \tag{5.4.46}$$

と近似できる。そこで (5.4.38) で

$$\gamma_\ell = k\left[\frac{u'_\ell(ka)}{u_\ell(ka)} + \varepsilon_\ell\right] \qquad \text{with} \quad |\varepsilon_\ell| \ll \left|\frac{u'_\ell(ka)}{u_\ell(ka)}\right| \sim \frac{\ell+1}{ka} \tag{5.4.47}$$

とすると (5.4.40) より

$$\tan\delta_\ell = -\frac{\varepsilon_\ell\, u_\ell(ka)^2}{1+\varepsilon_\ell\, u_\ell(ka)\, v_\ell(ka)} \tag{5.4.48}$$

が得られる。ここに、$u_\ell(\rho)\, v'_\ell(\rho) - u'_\ell(\rho)\, v_\ell(\rho) = -1$ (Wronskian の関係) を用いた。更に、$\ell \gg ka$ の時成り立つ $u_\ell(ka)$, $v_\ell(ka)$ の漸近式 (5.4.11) 式を用いると

$$\tan\delta_\ell = -\frac{\varepsilon_\ell\, (ka)^{2\ell+2}}{[(2\ell+1)!!]^2} \to 0 \qquad \text{as} \quad \ell \to \infty \tag{5.4.49}$$

が得られる。このことは、a をポテンシャルのレンジとして $\ell \gg ka$ の時には $\delta_\ell \ll 1$ は十分小さく、散乱振幅への寄与が無視できる事を示している。

(問題 21) (5.4.49) を示せ。

(問題 22) 完全剛体球による散乱 (Hard-sphere scattering)

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & r < a \\ 0 & r > a \end{cases} \tag{5.4.50}$$

のとき

$$\begin{aligned} \tan\delta_\ell &= \frac{j_\ell(ka)}{n_\ell(ka)} \quad , \qquad e^{2i\delta_\ell} = \frac{n_\ell(ka)+ij_\ell(ka)}{n_\ell(ka)-ij_\ell(ka)} \\ \sigma &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{k=0}^{\infty}(2\ell+1)\frac{(j_\ell(ka))^2}{(j_\ell(ka))^2+(n_\ell(ka))^2} \end{aligned} \tag{5.4.51}$$

を示せ。

$ka \ll 1$ の時、s-波だけが主に利いて来る。その時、微分散乱断面積は (古典力学の場合と同様) 等方的であるが、その大きさは古典力学の場合の 4 倍である。つまり

$$\lim_{k\to 0}\sigma = 4\pi a^2 \qquad (= 4\times\sigma_{\text{classical}}) \tag{5.4.52}$$

少しエネルギーが高くなって p-波が利き始めると角分布はどのように変化するか?

逆に $ka \gg 1$ の時、角分布は等方的な古典的散乱の部分 (反射部分) と鋭く前方ピークの量子力学的干渉効果 (影散乱) の部分に分かれ、それぞれが全散乱断面積に対して πa^2 の大きさをもっている。すなわち

$$\lim_{k\to\infty} \sigma = 2\pi a^2 \qquad (= 2\times\sigma_{\mathrm{classical}}) \tag{5.4.53}$$

これを、以下のような考察によって確かめよ。まず、(5.4.23) の散乱振幅における部分波の sum で ka 以上の ℓ は寄与しないと仮定して

$$\begin{aligned}
&f(\theta) = f_{\mathrm{refl}}(\theta) + f_{\mathrm{shad}}(\theta)\\
&f_{\mathrm{refl}}(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{ka}(2\ell+1)e^{2i\delta_\ell}P_\ell(\cos\theta)\\
&f_{\mathrm{shad}}(\theta) = -\frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{ka}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\\
&\sigma = \int d\Omega\,|f(\theta)|^2 = \int d\Omega\,|f_{\mathrm{refl}}(\theta)|^2 + \int d\Omega\,|f_{\mathrm{shad}}(\theta)|^2\\
&+2\,\mathrm{Re}\,e\int d\Omega f_{\mathrm{refl}}(\theta)f^*_{\mathrm{shad}}(\theta)
\end{aligned} \tag{5.4.54}$$

と分ける。このとき、次の事を示せ。

$$\begin{aligned}
&\int d\Omega\,|f_{\mathrm{refl}}(\theta)|^2 = \int d\Omega\,|f_{\mathrm{shad}}(\theta)|^2 = \pi a^2\\
&\int d\Omega\, f_{\mathrm{refl}}(\theta)f^*_{\mathrm{shad}}(\theta) = 0 \qquad \text{as} \quad k\to\infty
\end{aligned} \tag{5.4.55}$$

最後の式では、(5.4.51) の δ_ℓ を求める式で $ka \gg \ell$ として得られる関係式 $e^{2i\delta_\ell} \sim (-1)^\ell e^{-2ika}$ を用いよ。(注意: $\ell \sim ka$ 領域ではこの関係は成り立っていない。)

(補注: $ka \gg 1$ の時の微分断面積について) hard sphere scattering では $\delta_\ell \sim -ka + (\pi/2)\ell$ for $ka \gg \ell$ となって、$\delta_\ell \to 0$ as $k \to \infty$ が満されていない。従って、散乱振幅の部分波の和で $\ell = 0 \sim ka$ と作為的に切っている。しかし、詳しい数値計算によれば $\ell > ka$ の寄与は ka までの寄与に比べて実際に小さく、角分布は影散乱による前方 peak の部分 (total cross qsction πa^2) と等方的な古典的散乱部分 (total cross qsction πa^2) の和になることが確かめられる。(講義ノート (http://qmpack.homelinux.com/ fujiwara/old_homepage/tokuron1.html) の 補遺参照)

(問題 23) 井戸型ポテンシャル (square-well potential) による散乱

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0 & r > a \end{cases} \tag{5.4.56}$$

として、引力 ($V_0 > 0$) の井戸型ポテンシャルにおける s-波の低エネルギー散乱 ($ka \ll 1$) を考える。井戸の内と外における Schrödinger 方程式の解を

$$\psi_0(r) = \begin{cases} A \sin \kappa r & r < a \\ B \sin(kr + \delta_0) & r > a \end{cases} \tag{5.4.57}$$

とする。ここに、$\mathcal{V}_0 = (2m/\hbar^2)V_0$ として $\kappa = \sqrt{k^2 + \mathcal{V}_0}$ とおいた。$r = a$ における (ψ_0'/ψ_0) の値を等しいとおいて

$$\delta_0 = \tan^{-1}\left(ka \frac{\tan \kappa a}{\kappa a}\right) - ka \tag{5.4.58}$$

を示せ。$ka \ll 1$ の時は $\kappa a \sim (2n+1)(\pi/2)$ $(n = 0,\ 1,\ 2, \cdots)$ でないかぎり

$$\delta_0 \sim ka \left(\frac{\tan \kappa a}{\kappa a} - 1\right) \tag{5.4.59}$$

と書ける。そこで total cross qsction は

$$\sigma = 4\pi a^2 \left(\frac{\tan \kappa a}{\kappa a} - 1\right)^2 \tag{5.4.60}$$

(5.4.59) から、$\kappa a < \pi/2$ でそれほど深くない井戸の場合には、phase shift δ_0 は正であることがわかる。

　もし、 $\kappa a \ll 1$ で $ka \ll \kappa a \ll 1$ が成り立っておれば

$$\sigma = \frac{4}{9}\pi a^2 (\kappa a)^4 \tag{5.4.61}$$

この結果は、$V_0 \ll (\hbar^2/ma^2)$ の時の Born 近似の結果と一致する。(問題 24)

　次に、V_0 の符号を変えて $V_0 \to -V_0$ とすると今度は $\kappa = \sqrt{\mathcal{V}_0 - k^2}$ として

$$f_0 \sim \frac{\delta_0}{k} \sim a \left(\frac{\tanh \kappa a}{\kappa a} - 1\right) (< 0) \tag{5.4.62}$$

が得られる。更に $\kappa a \gg 1$ なら $f_0 \to -a$ かつ $\sigma = 4\pi a^2$ ここで $V_0 \to \infty$ より、これは前問の hard sphere scattering の場合に対応する。

　再び $V_0 > 0$ の引力の場合にもどって、低エネルギー corss qsction (5.4.60) の $\kappa a \sim (2n+1)(\pi/2)$ $(n = 0,\ 1,\ 2, \cdots)$ における急激な増大は、ポテンシャルを徐々に深くして

行った時に、ゼロエネルギーに次々と束縛状態が現れることに関係している。すなわち、$E = 0$ に束縛状態が現れるための条件は

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{\pi}{2}(2n+1)\right)^2 \qquad (n = 0,\ 1,\ 2, \cdots) \tag{5.4.63}$$

であることを示せ。

(問題 24) Born 近似による部分波振幅

平面波の部分波展開 (5.4.13) は (5.4.3) の $Y_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}}) = Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ ($\widehat{\boldsymbol{r}} = (\theta, \phi)$) を用いて

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \sum_{\ell m} 4\pi\, i^\ell j_\ell(kr)\, Y_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}}) Y^*_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{k}}) \tag{5.4.64}$$

と表される。((5.4.100) の第 1 式参照) これを用いて Born 近似による部分波振幅が

$$f_\ell^{\mathrm{Born}} = -\int_0^\infty r^2 dr\ (j_\ell(kr))^2\ \mathcal{V}(r) \tag{5.4.65}$$

で与えられることを示せ。特に $k \to \infty$ の時、$f_\ell \sim \delta_\ell/k,\ \delta_\ell \ll 1$ より、大きな ℓ に対して

$$\delta_\ell^{\mathrm{Born}}(k) \sim -\frac{\pi m}{\hbar^2}\int_0^\infty r dr\ \left[J_{\ell+\frac{1}{2}}(kr)\right]^2\ V(r) \tag{5.4.66}$$

また、$\ell = 0$ の時、問題 23 の井戸型ポテンシャルの Born 部分波振幅を求めると

$$f_0^{\mathrm{Born}} = \left(\frac{\kappa}{k}\right)^2 \left[\frac{a}{2} - \frac{\sin 2ka}{4k}\right] \tag{5.4.67}$$

となる。ここに κ は $V_0 = (\hbar^2/2m)\,\kappa^2$ から決まる値である。特に、$ka \ll 1$ の時は

$$f_0^{\mathrm{Born}} = \frac{1}{3}a(\kappa a)^2 \quad , \qquad \sigma = 4\pi\left|f_0^{\mathrm{Born}}\right|^2 = \frac{4}{9}\pi a^2(\kappa a)^4 \tag{5.4.68}$$

であることを示せ。

ポテンシャルの井戸による位相差の計算は、位相差の符号とポテンシャルの関係を明らかにしている。すなわち、$E = 0$ における位相差を 0 に選ぶと、エネルギーを上げて行った時に、斥力ポテンシャルに対しては位相差は負となる。引力ポテンシャルに対しては、そのような議論はポテンシャルが浅くて束縛状態が存在しない時のみ可能であり、この場合は引力ポテンシャルに対しては位相差は正符号となる。

s-波の場合について、ポテンシャルを徐々に深くする時、$E = 0$ に束縛状態が現れるたびに、$\delta_0(0)$ は 0 から $\pi/2$ まで jump し、ついで π まで jump する。従って、$\delta_0(k)$ が 0 から負に落ちる場合は、ポテンシャルが斥力の場合と、$E = 0$ のすぐ下に束縛状態が存在する場合の二つの場合が考えられる。

5.4.3 Green 函数の部分波展開

[Green 函数の一般論]

線型作用素 $L[y]$ を

$$L[y] = \frac{d^2 y}{dr^2} - q(r) y \tag{5.4.69}$$

として、$L[y_1] = L[y_2] = 0$ かつ y_1, y_2 は線型独立とする。Wronskian W を

$$W = W[y_1, y_2] = y_1 y_2' - y_1' y_2 = \text{const } (\neq 0) \tag{5.4.70}$$

として、Green 函数を

$$G(r, r') = \frac{1}{W}\, y_1(r_<)\, y_2(r_>) \quad \text{with} \quad r_< = \text{Min}\,\{r, r'\}\ , \quad r_> = \text{Max}\,\{r, r'\} \tag{5.4.71}$$

で定義する。$L[y] = \varphi$ の時、「特解」は

$$y = \int_0^\infty G(r, r')\, \varphi(r')\, dr' \tag{5.4.72}$$

で表される。漸近形は、積分が常に存在するとして

$$\begin{aligned} y(0) &= y_1(0)\, \frac{1}{W} \int_0^\infty y_2(r)\, \varphi(r)\, dr \\ y(r) &\to y_2(r)\, \frac{1}{W} \int_0^\infty y_1(s)\, \varphi(s)\, ds \qquad \text{as} \quad r \to \infty \end{aligned} \tag{5.4.73}$$

(問題 25) 上の (5.4.72), (5.4.73) を示せ。

$L[\psi_\ell] = {\psi_\ell}'' - q(r)\, \psi_\ell$, $q(r) = \ell(\ell+1)/r^2 - k^2$, $y_1 = u_\ell(kr)$, $y_2 = w_\ell^{(+)}(kr)$ として、上の議論を (5.4.6) の Schrödinger 方程式に適用すると、$L[u_\ell] = L[w_\ell^{(+)}] = 0$, かつ Wronskian は

$$\begin{aligned} W &= W[u_\ell, w_\ell^{(+)}] = k \left\{ u_\ell(kr) w_\ell^{(+)\prime}(kr) - u_\ell'(kr) w_\ell^{(+)}(kr) \right\} \\ &\sim k \left\{ \sin\left(kr - \frac{\pi}{\ell}\right) i e^{i\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right)} - \cos\left(kr - \frac{\pi}{\ell}\right) e^{i\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right)} \right\} = -k \\ &\qquad\qquad \text{when} \quad r \to \infty \end{aligned} \tag{5.4.74}$$

より

$$G_\ell(r,r') = -\frac{1}{k}\,u_\ell(kr_<)\,w_\ell^{(+)}(kr_>) \tag{5.4.75}$$

これを使うと (?? の解は

$$\begin{aligned}
\psi_\ell(r) &= Au_\ell(kr) + Bw_\ell^{(+)}(kr) + \int_0^\infty G_\ell(r,r')\,\mathcal{V}(r')\,\psi_\ell(r')\,dr' \\
&= u_\ell(kr)\,\left[A - \frac{1}{k}\int_r^\infty w_\ell^{(+)}(kr')\,\mathcal{V}(r')\,\psi_\ell(r')\,dr'\right] \\
&\quad + w_\ell^{(+)}(kr)\,\left[B - \frac{1}{k}\int_0^r u_\ell(kr')\,\mathcal{V}(r')\,\psi_\ell(r')\,dr'\right]
\end{aligned} \tag{5.4.76}$$

まず、原点で regular なためには $B = 0$。一方、真の解の漸近形

$$\Psi(\boldsymbol{r}) \sim e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad \text{as} \quad r \to \infty \tag{5.4.77}$$

を部分波展開して

$$\Psi(\boldsymbol{r}) \sim \sum_\ell (2\ell+1)\left\{i^\ell j_\ell(kr) + f_\ell\frac{e^{ikr}}{r}\right\}P_\ell(\cos\theta) \tag{5.4.78}$$

そこで

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \sum_\ell (2\ell+1)\,i^\ell\,R_\ell(r)\,P_\ell(\cos\theta) \tag{5.4.79}$$

とすると

$$R_\ell(r) \sim j_\ell(kr) + f_\ell\,\frac{1}{r}e^{i\left(kr-\frac{\pi}{2}\ell\right)} \qquad \text{as} \quad r \to \infty \tag{5.4.80}$$

$\psi_\ell(r) = rR_\ell(r)$ で書くと

$$\psi_\ell(r) \sim \frac{1}{k}u_\ell(kr) + f_\ell\,w_\ell^{(+)}(kr) \qquad \text{as} \quad r \to \infty \tag{5.4.81}$$

そこで、$B = 0$ とした (5.4.76) と (5.4.81) を $r \to \infty$ で比較すると

$$A = \frac{1}{k} \quad , \qquad f_\ell = -\frac{1}{k}\int_0^\infty u_\ell(kr)\,\mathcal{V}(r)\,\psi_\ell(r)\,dr \tag{5.4.82}$$

結局

$$\begin{aligned}
\psi_\ell(r) &= u_\ell(kr)\,\frac{1}{k}\left[1 - \int_r^\infty w_\ell^{(+)}(kr')\,\mathcal{V}(r')\,\psi_\ell(r')\,dr'\right] \\
&\quad - w_\ell^{(+)}(kr)\,\frac{1}{k}\int_0^r u_\ell(kr')\,\mathcal{V}(r')\,\psi_\ell(r')\,dr'
\end{aligned} \tag{5.4.83}$$

を得る。

[定在波]

上の議論で、$w_\ell^{(+)}$ の代りに v_ℓ を用いると同じく $W = -k$ より、今度は

$$G_\ell^s(r, r') = -\frac{1}{k}\, u_\ell(kr_<)\, v_\ell(kr_>) \tag{5.4.84}$$

そこで、(5.4.76) に対応する式は

$$\begin{aligned}\psi_\ell(r) = u_\ell(kr)&\left[A - \frac{1}{k}\int_r^\infty v_\ell(kr')\,\mathcal{V}(r')\,\psi_\ell(r')\,dr'\right]\\ &+ v_\ell(kr)\left[B - \frac{1}{k}\int_0^r u_\ell(kr')\,\mathcal{V}(r')\,\psi_\ell(r')\,dr'\right]\end{aligned} \tag{5.4.85}$$

今度は、境界条件として (5.4.81) の代りに

$$\psi_\ell^s(r) \sim \frac{1}{k} u_\ell(kr) + f_\ell^s\, v_\ell(kr) \qquad \text{as} \quad r \to \infty \tag{5.4.86}$$

を用いる。今度も原点で regular な解をとると $B = 0$。$r \to \infty$ で 2 つの式を比較して

$$A = \frac{1}{k} \quad , \qquad f_\ell^s = -\frac{1}{k}\int_0^\infty u_\ell(kr)\,\mathcal{V}(r)\,\psi_\ell^s(r)\,dr \tag{5.4.87}$$

つまり

$$\begin{aligned}\psi_\ell^s(r) = u_\ell(kr)\,\frac{1}{k}&\left[1 - \int_r^\infty v_\ell(kr')\,\mathcal{V}(r')\,\psi_\ell^s(r')\,dr'\right]\\ &- v_\ell(kr)\,\frac{1}{k}\int_0^r u_\ell(kr')\,\mathcal{V}(r')\,\psi_\ell^s(r')\,dr'\end{aligned} \tag{5.4.88}$$

を得る。一方、(5.4.83) で $w_\ell^{(+)} = v_\ell + iu_\ell$ とおくと

$$\begin{aligned}\psi_\ell(r) = u_\ell(kr)\,\frac{1}{k}&\left[1 - i\int_0^\infty u_\ell(kr')\,\mathcal{V}(r')\,\psi_\ell(r')\,dr' - \int_r^\infty v_\ell(kr')\,\mathcal{V}(r')\,\psi_\ell(r')\,dr'\right]\\ &- v_\ell(kr)\,\frac{1}{k}\int_0^r u_\ell(kr')\,\mathcal{V}(r')\,\psi_\ell(r')\,dr'\end{aligned} \tag{5.4.89}$$

そこで、全体を $1 - i\int_0^\infty u_\ell(kr)\mathcal{V}(r)\psi_\ell(r)dr = 1 + ikf_\ell$ で割っておくと

$$\psi_\ell^s(r) = \frac{\psi_\ell(r)}{1 - i\int_0^\infty u_\ell(kr)\mathcal{V}(r)\psi_\ell(r)dr} = \frac{1}{1 + ikf_\ell}\,\psi_\ell(r) \tag{5.4.90}$$

また逆に、$\psi_\ell(r) = (1+ikf_\ell)\psi^s_\ell(r)$ より

$$
\begin{aligned}
f_\ell &= -\frac{1}{k}\int_0^\infty u_\ell(kr)\,\mathcal{V}(r)\,\psi_\ell(r)\,dr \\
&= -\frac{1+ikf_\ell}{k}\int_0^\infty u_\ell(kr)\,\mathcal{V}(r)\,\psi^s_\ell(r)\,dr = (1+ikf_\ell)f^s_\ell
\end{aligned}
\tag{5.4.91}
$$

そこで

$$
f^s_\ell = \frac{f_\ell}{1+ikf_\ell}\quad ,\qquad f_\ell = \frac{f^s_\ell}{1-ikf^s_\ell}
\tag{5.4.92}
$$

1 番目の式に $f_\ell = (e^{2i\delta_\ell}-1)/2ik$ を代入すると

$$
f^s_\ell = \frac{1}{k}\tan\delta_\ell\quad ,\qquad \frac{1}{f^s_\ell} = k\cot\delta_\ell
\tag{5.4.93}
$$

つまり

$$
f_\ell = \frac{1}{\frac{1}{f^s_\ell}-ik} = \frac{1}{k\cot\delta_\ell - ik}
\tag{5.4.94}
$$

定在波解では、$\psi^s_\ell(r)$, f^s_ℓ 等は全て real である。

(問題 26) Green 函数の部分波展開

(5.4.82), (5.4.83) を (5.4.9) の Bessel 函数等で書けば

$$
\begin{aligned}
R_\ell(r) &= j_\ell(kr)\left[1-k\int_r^\infty r'^2dr'h^{(+)}_\ell(kr')\,\mathcal{V}(r')\,R_\ell(r')\right] \\
&\qquad -h^{(+)}_\ell(kr)\,k\int_0^r r'^2dr'j_\ell(kr')\,\mathcal{V}(r')\,R_\ell(r') \\
f_\ell &= -\int_0^\infty r^2drj_\ell(kr)\,\mathcal{V}(r)\,R_\ell(r)
\end{aligned}
\tag{5.4.95}
$$

ここに

$$
h^{(+)}_\ell(\rho) = \frac{w^{(+)}_\ell(\rho)}{\rho} = i\,h^{(1)}_\ell(\rho)\quad ,\qquad h^{(-)}_\ell(\rho) = \frac{w^{(-)}_\ell(\rho)}{\rho} = -i\,h^{(2)}_\ell(\rho)
\tag{5.4.96}
$$

である。この式はまた、公式

$$
\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = ik\sum_{\ell=0}^\infty(2\ell+1)\,j_\ell(kr_<)\,h^{(1)}_\ell(kr_>)\,P_\ell(\cos\theta)
\tag{5.4.97}
$$

を用いて、3 次元の Lippmann-Schwinger 方程式 (5.2.20)

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = e^{ikr\cos\theta} - \frac{1}{4\pi}\int d\boldsymbol{r}'\,\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,\mathcal{V}(r')\,\Psi(\boldsymbol{r}') \tag{5.4.98}$$

を部分波展開しても得られる。そのためには、Legendre 陪函数の加法定理から導かれる公式

$$P_\ell(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2\ell+1}\sum_m Y_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}})Y^*_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}}') \qquad \text{with} \quad \cos\theta = (\widehat{\boldsymbol{r}}\cdot\widehat{\boldsymbol{r}}') \tag{5.4.99}$$

を用いる。すると (5.4.13), (5.4.79), (5.4.97) は

$$\begin{aligned}
e^{ikr\cos\theta} &= \sum_{\ell m} 4\pi\, i^\ell j_\ell(kr)\, Y_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}})Y^*_{\ell m}(\boldsymbol{e}_z) \\
\Psi(\boldsymbol{r}) &= \sum_{\ell m} 4\pi\, i^\ell\, R_\ell(r)\, Y_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}})Y^*_{\ell m}(\boldsymbol{e}_z) \\
\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} &= k\sum_{\ell m} 4\pi\, j_\ell(kr_<)\, h^{(+)}_\ell(kr_>)\, Y_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}})Y^*_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{r}}')
\end{aligned} \tag{5.4.100}$$

と表される。また、散乱振幅の部分波展開 (5.4.23) は

$$f(\theta) = \sum_{\ell m}^{\infty} 4\pi\, f_\ell\, Y_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{k}}')Y^*_{\ell m}(\boldsymbol{e}_z) \qquad \text{with} \quad \widehat{\boldsymbol{k}}' = \widehat{\boldsymbol{r}} \tag{5.4.101}$$

である。これらを用いて (5.4.95) を示せ。

[Jost の解]

(5.4.76) (with $A = 1/k$, $B = 0$) を bra-ket notation で表すと

$$|\psi_\ell\rangle = \frac{1}{k}|u_\ell\rangle + G_\ell\,\mathcal{V}\,|\psi_\ell\rangle \tag{5.4.102}$$

ここに $G_\ell(r, r')$ は (5.4.75) より、Heaviside の step function $\theta(x) = 1$ for $x > 0$, 0 for $x < 0$ を使うと

$$\begin{aligned}
G_\ell(r, r') &= -\frac{1}{k}\, u_\ell(kr_<)\, w^{(+)}_\ell(kr_>) \\
&= -\frac{1}{k}\, u_\ell(kr)\, w^{(+)}_\ell(kr')\theta(r'-r) - \frac{1}{k}\, w^{(+)}_\ell(kr)\, u_\ell(kr')\theta(r-r')
\end{aligned} \tag{5.4.103}$$

そこで、$\theta(x)+\theta(-x)=1$ と $w_\ell^{(+)}(\rho)=v_\ell(\rho)+iu_\ell(\rho)$ を使うと

$$
\begin{aligned}
G_\ell(r,r') &= g_\ell(r,r') - \frac{1}{k}\,w_\ell^{(+)}(kr)\,u_\ell(kr') \\
g_\ell(r,r') &= -\frac{1}{k}\,\left[u_\ell(kr)\,v_\ell(kr') - v_\ell(kr)\,u_\ell(kr')\right]\,\theta(r'-r)
\end{aligned}
\tag{5.4.104}
$$

が得られる。operator 表示で書くと

$$
G_\ell = g_\ell - \frac{1}{k}\,|w_\ell^{(+)}\rangle\langle u_\ell| \tag{5.4.105}
$$

そこで (5.4.102) は

$$
|\psi_\ell\rangle = \left[\frac{1}{k}|u_\ell\rangle + |w_\ell^{(+)}\rangle f_\ell\right] + g_\ell\,\mathcal{V}\,|\psi_\ell\rangle \tag{5.4.106}
$$

ここに $f_\ell=(-1/k)\langle u_\ell|\mathcal{V}|\psi_\ell\rangle$ は、散乱部分波振幅 (5.4.82) である。ここで非斉次項を

$$
\left[\frac{1}{k}|u_\ell\rangle + |w_\ell^{(+)}\rangle f_\ell\right] \to |w_\ell^{(+)}\rangle \tag{5.4.107}
$$

と変えて、その解を $\psi_\ell(r)\to f_\ell(k,r)$ と書くと (散乱部分波振幅と区別すること)

$$
|f_\ell\rangle = |w_\ell^{(+)}\rangle + g_\ell\,\mathcal{V}\,|f_\ell\rangle \tag{5.4.108}
$$

explicit に書くと

$$
f_\ell(k,r) = w_\ell^{(+)}(kr) + \int_r^\infty g_\ell(r,r')\,\mathcal{V}(r')\,f_\ell(k,r')\,dr' \tag{5.4.109}
$$

これは、 Volterra 型積分方程式である。$f_\ell(k,r)$ は $r=0$ では s-波以外は非正則であるので

$$
F_\ell(k,r) = \frac{1}{(2\ell-1)!!}(kr)^\ell\,f_\ell(k,r) \tag{5.4.110}
$$

として、 $f_\ell(k,r)$ を Jost の解、$F_\ell(k,0)=F_\ell(k)$ を Jost 函数と呼んでいる。特に s-波の場合は、$f_0(k,r)=F_0(k,r)$, $g_0(r,r')=-(1/k)\sin k(r-r')\,\theta(r'-r)$ から、$\ell=0$ を省略して

$$
\begin{aligned}
f(k,r) &= e^{ikr} - \frac{1}{k}\int_r^\infty \sin k(r-r')\,\mathcal{V}(r')\,f(k,r')\,dr' \\
F(k) &= f(k,0) = 1 + \frac{1}{k}\int_0^\infty (\sin kr)\,\mathcal{V}(r)\,f(k,r)\,dr
\end{aligned}
\tag{5.4.111}
$$

が得られる。

5.5 クーロン散乱 (Coulomb Scattering)

5.5.1 Rutherford の公式

放物線座標でクーロン力の 1 体問題を解く。

$$\xi = r + z \ , \qquad \eta = r - z \ , \qquad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \frac{\xi + \eta}{2}$$
$$x = \sqrt{\xi\eta}\cos\varphi \ , \qquad y = \sqrt{\xi\eta}\sin\varphi \ , \qquad z = \frac{1}{2}(\xi - \eta) \tag{5.5.1}$$

この座標系では Laplacian は

$$\begin{aligned}\Delta = \nabla^2 &= \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial z}\right)^2 \\ &= \frac{4}{\xi + \eta}\left(\frac{\partial}{\partial \xi}\xi\frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta}\eta\frac{\partial}{\partial \eta}\right) + \frac{1}{\xi\eta}\left(\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)^2\end{aligned} \tag{5.5.2}$$

Coulomb 力を $V_C(r) = \alpha/r$ (with $\alpha = Z_1 Z_2 e^2$) として Schrödinger 方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{\alpha}{r}\right)\Psi = E\,\Psi \tag{5.5.3}$$

は変数分離の方法で解ける。

$$\Psi = f_1(\xi)\, f_2(\eta)\, e^{i\,m\,\varphi} \tag{5.5.4}$$

として

$$\begin{aligned}&\left[\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{d}{d\xi}\right) - \frac{m^2}{4\xi} + \left(\frac{k^2}{4}\xi - \beta_1\right)\right] f_1(\xi) = 0 \\ &\left[\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{d}{d\eta}\right) - \frac{m^2}{4\eta} + \left(\frac{k^2}{4}\eta - \beta_2\right)\right] f_2(\eta) = 0 \\ &\text{with} \quad \beta_1 + \beta_2 = \frac{m\alpha}{\hbar^2} = k\,n\end{aligned} \tag{5.5.5}$$

ここに、$E = (\hbar^2 k^2/2m)$ で $n = (\alpha/\hbar v)$ は Sommerfeld parameter である。(座標 η と区別するために、ここでは n を使う。) まず

$$\Psi \sim e^{ikz} + f(\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r} \tag{5.5.6}$$

の解を求めるので軸対称性を仮定して $m = 0$ とする。

$$-\infty < z < 0 \quad \text{かつ} \quad r \to \infty \quad \text{の時} \quad \Psi \to e^{ikz} \tag{5.5.7}$$

より

$$\xi < \eta \quad \text{かつ} \quad {}^{\forall}\xi \quad \text{に対して} \quad \eta \to \infty \quad \text{で} \quad \Psi \sim e^{i\,k\,\frac{\xi-\eta}{2}} \tag{5.5.8}$$

この様な解は

$$f_1(\xi) = e^{i\frac{1}{2}k\xi} \quad , \qquad \lim_{\eta\to\infty} f_2(\eta) = e^{-i\frac{1}{2}k\eta} \tag{5.5.9}$$

$f_1(\xi)$ を (5.5.5) の上の式に入れると $\beta_1 = ik/2$ を得る。そこで $\beta_2 = kn - \beta_1 = kn - ik/2$ で (5.5.5) の下の式は

$$\left[\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{d}{d\eta}\right) + \left(\frac{k^2}{4}\eta - k\,n + i\,\frac{k}{2}\right)\right] f_2(\eta) = 0 \tag{5.5.10}$$

となる。$f_2(\eta) = e^{-ik\eta/2}\,w(\eta)$ として w の方程式に移ると

$$\eta\,w'' + (1 - i\,k\,\eta)\,w' - k\,n\,w = 0 \tag{5.5.11}$$

更に、$\rho = ik\eta$ として

$$\rho\,\frac{d^2\,w}{d\rho^2} + (1-\rho)\,\frac{d\,w}{d\rho} + in\,w = 0 \tag{5.5.12}$$

一方、合流型超幾何級数の一般解は

$$\begin{aligned} &z\,u'' + (\gamma - z)\,u' - \alpha\,u = 0 \\ &u = c_1\,F(\alpha,\gamma,z) + c_2\,z^{1-\gamma}\,F(\alpha-\gamma+1, 2-\gamma, z) \qquad \text{for} \quad \gamma \neq \text{整数} \end{aligned} \tag{5.5.13}$$

$\gamma = 1$ の場合は、第 1 項目と第 2 項目は同じ寄与を与える。今の場合 $\eta = 0$ で発散しない解が欲しいので

$$w = \text{const}\cdot F(-in,\ 1,\ ik\eta) \tag{5.5.14}$$

結局

$$\Psi = \text{const}\cdot e^{ik\frac{\xi-\eta}{2}}\,F(-in,\ 1,\ ik\eta) \tag{5.5.15}$$

const は入射波の平面波が 1 の振幅を持つ様に決める。このためには、$F(\alpha,\gamma,z)$ の漸近展開式がいる。

$$\begin{aligned} F(\alpha,\gamma,z) = {}& \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}\,(-z)^{-\alpha}\,G(\alpha, \alpha-\gamma+1, -z) \\ & + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}\,e^z\,z^{\alpha-\gamma}\,G(\gamma-\alpha, 1-\alpha, z) \end{aligned} \tag{5.5.16}$$

ここに

$$\begin{aligned} G(\alpha,\beta,z) &= \frac{\Gamma(1-\beta)}{2\pi i}\int_{C_1}\left(1+\frac{t}{z}\right)^{-\alpha} t^{\beta-1}\,dt \\ &= 1 + \frac{\alpha\,\beta}{1!\,z} + \frac{\alpha(\alpha+1)\,\beta(\beta+1)}{2!\,z^2} + \cdots \end{aligned} \tag{5.5.17}$$

(例えば、ランダウ・リフシッツ「量子力学 1」数学的補遺 § d. 参照) 今これを認めると、$1/\eta$ について 1 次までの近似で

$$F(-in,\ 1,\ ik\eta) \sim \frac{e^{\frac{\pi}{2}n}}{\Gamma(1+in)} \left(1+\frac{n^2}{ik\eta}\right) e^{in\log(k\eta)} - \frac{ine^{\frac{\pi}{2}n}}{\Gamma(1-in)} \frac{e^{ik\eta}}{ik\eta} e^{-in\log(k\eta)} \tag{5.5.18}$$

これを (5.5.15) に代入し (5.5.6) と比較すると const$=\Gamma(1+in)\,e^{-\frac{\pi}{2}n}$ がわかり、最終的に

$$\begin{aligned}\Psi \sim &\left[1+\frac{n^2}{ikr(1-\cos\theta)}\right] e^{ikz+in\log[kr(1-\cos\theta)]}\\ &-\frac{n}{k}\frac{\Gamma(1+in)}{\Gamma(1-in)}\frac{1}{r(1-\cos\theta)} e^{ikr-in\log[kr(1-\cos\theta)]}\end{aligned} \tag{5.5.19}$$

という結果を得る。これを

$$\Psi \sim \left[1+\frac{n^2}{ikr(1-\cos\theta)}\right] e^{ikz+in\log[kr(1-\cos\theta)]} + f_C(\theta)\,\frac{1}{r}\, e^{ikr-in\log(2kr)} \tag{5.5.20}$$

と書くと

$$f_C(\theta) = -\frac{n}{2k\sin^2\frac{\theta}{2}}\, e^{-2in\log\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)} \frac{\Gamma(1+in)}{\Gamma(1-in)} \tag{5.5.21}$$

これを、クーロン散乱振幅という。total wave function は

$$\Psi = e^{-\frac{\pi}{2}n}\,\Gamma(1+in)\,e^{ik\frac{\xi-\eta}{2}}\,F(-in,\ 1,\ ik\eta) \tag{5.5.22}$$

で与えられる。クーロン散乱の微分散乱断面積は

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Rutherford}} = \left(\frac{n}{2k\sin^2\frac{\theta}{2}}\right)^2 = \left(\frac{\alpha}{2mv^2}\right)^2 \left(\frac{1}{\sin\frac{\theta}{2}}\right)^4 \tag{5.5.23}$$

で古典力学の結果や Born 近似の結果と完全に一致する。(5.5.23) を Rutherford の公式という。

(注意) 上では原子核散乱を例として斥力の場合を考えたが、引力に対しては $\alpha = Z_1Z_2e^2 \to -\alpha$ と変える必要がある。すなわち、Sommerfeld parameter も符号が変る ($n \to -n$)。再び $n = \alpha/\hbar v$ を正の Sommerfeld parameter として、クーロン散乱振幅 (5.5.21) は $1+in = 0,\ -1,\ -2, \cdots$ に pole をもつ。$-in$ を新しく n と書くと $n = 1,\ 2,\ 3, \cdots$ で

$$E_n = -\frac{m\,\alpha^2}{2\hbar^2}\left(\frac{1}{n}\right)^2 \qquad (n=1,\ 2,\ 3,\cdots) \tag{5.5.24}$$

という、引力クーロン場における束縛状態についてのよく知られた公式が導かれる。すなわち、引力クーロン場の束縛状態は $E=0$ に集積している。これは、クーロン力が long range であるためである。

(問題 27) 平面波の Coulomb distortion: $e^{ikz+in\log[kr(1-\cos\theta)]}$ の古典的解釈

(5.5.20) の「入射平面波」に現れる位相 $kz+n\log[kr(1-\cos\theta)]$ は、古典的クーロン散乱の $z\to-\infty$ における作用一定の波面に対応している。この事を示すために、放物線座標 (5.5.1) を用いて古典的クーロン散乱問題を Hamilton-Jacobi の方法で解く。

1) まず、$\rho=\sqrt{x^2+y^2}$, φ を z-軸まわりの回転角 (0 - 2π) として、Lagrangian は

$$L=\frac{m}{2}\left(\dot{\rho}^2+\rho^2\,\dot{\varphi}^2+\dot{z}^2\right)-\frac{\alpha}{r} \tag{5.5.25}$$

と表される。これを放物線座標を用いて書くと

$$L=\frac{m}{8}(\xi+\eta)\left(\frac{\dot{\xi}^2}{\xi}+\frac{\dot{\eta}^2}{\eta}\right)+\frac{m}{2}\xi\eta\,\dot{\varphi}^2-\frac{2\alpha}{\xi+\eta} \tag{5.5.26}$$

となる。ξ, η, φ 方向の運動量を p_ξ, p_η, p_φ として

$$p_\xi=\frac{m(\xi+\eta)}{4\xi}\,\dot{\xi}\quad,\qquad p_\eta=\frac{m(\xi+\eta)}{4\eta}\,\dot{\eta}\quad,\qquad p_\varphi=m\xi\eta\,\dot{\varphi} \tag{5.5.27}$$

また Hamiltonian は

$$H=\frac{2}{m}\frac{1}{\xi+\eta}\left(\xi {p_\xi}^2+\eta {p_\eta}^2\right)+\frac{1}{2m\xi\eta}\,{p_\varphi}^2+\frac{2\alpha}{\xi+\eta} \tag{5.5.28}$$

となる。

2) 作用を $S=-Et+S_0$ と書き、$p_\xi=\partial S_0/\partial\xi$ 等とおくと、Hamilton-Jacobi の方程式は

$$\frac{2}{m}\frac{1}{\xi+\eta}\left[\xi\left(\frac{\partial S_0}{\partial\xi}\right)^2+\eta\left(\frac{\partial S_0}{\partial\eta}\right)^2\right]+\frac{1}{2m\xi\eta}\left(\frac{\partial S_0}{\partial\varphi}\right)^2+\frac{2\alpha}{\xi+\eta}=E \tag{5.5.29}$$

と表される。そこで、これを変数分離によって解くと、簡約化された作用 S_0 は

$$S_0=p_\varphi\,\varphi+S_1(\xi)+S_2(\eta)\qquad\text{with}$$
$$\xi\left(\frac{\partial S_1}{\partial\xi}\right)^2+\frac{{p_\varphi}^2}{4\xi}+a-\frac{mE}{2}\,\xi=0\ ,\quad \eta\left(\frac{\partial S_2}{\partial\eta}\right)^2+\frac{{p_\varphi}^2}{4\xi}+b-\frac{mE}{2}\,\eta=0 \tag{5.5.30}$$

となる。ここに $a+b=m\alpha$ である。ここから

$$S=-Et+p_\varphi\varphi\pm\int d\xi\sqrt{\frac{mE}{2}-\frac{a}{\xi}-\frac{{p_\varphi}^2}{4\xi^2}}\pm\int d\eta\sqrt{\frac{mE}{2}-\frac{b}{\eta}-\frac{{p_\varphi}^2}{4\eta^2}} \tag{5.5.31}$$

と (5.5.29) の解が求まる。

3) 境界条件として $p_\varphi=0$ と選び、$t\to-\infty$ で $\dot\rho\to 0$, $\dot z\to v$ となる事を要請する。ここに $E=mv^2/2=p^2/2m$ とする。

$$\dot\rho=\frac{2\sqrt{\xi\eta}}{m(\xi+\eta)}\left(p_\xi+p_\eta\right)\quad ,\qquad \dot z=\frac{2}{m(\xi+\eta)}\left(\xi p_\xi-\eta p_\eta\right) \tag{5.5.32}$$

から、この条件は $p_\xi\to p/2$, $p_\eta\to -p/2$ と表される。一方、(5.5.30) は

$$\xi\left({p_\xi}^2-\frac{p^2}{4}\right)+a=0\quad ,\qquad \eta\left({p_\eta}^2-\frac{p^2}{4}\right)+b=0 \tag{5.5.33}$$

と表されるが、$t\to-\infty$, $z\to-\infty$ は ξ: 有限、$\eta\to\infty$ に対応する事により $a=0$, $b=m\alpha$ が結論される。そこで (5.5.31) は積分部分で + for ξ, − for η の符号をとって

$$\begin{aligned}S&=-Et+\frac{1}{2}p\,\xi-\frac{1}{2}p\int d\eta\sqrt{1-\frac{2\alpha}{\eta E}}\\&=-Et+\frac{1}{2}p\left[\xi-\sqrt{\eta\left(\eta-\frac{2\alpha}{E}\right)}+\frac{2\alpha}{E}\log\left(\sqrt{\frac{E}{2\alpha}\eta}+\sqrt{\frac{E}{2\alpha}\eta-1}\right)\right]\end{aligned} \tag{5.5.34}$$

となる。ここで $\eta\to\infty$ とすると

$$\Big[\cdots\Big]\to\xi-\eta+\frac{2\alpha}{E}\log\sqrt{\frac{2E}{\alpha}\eta} \tag{5.5.35}$$

そこで $p=\hbar k$, $n=(\alpha/\hbar v)$ (Sommerfeld parameter) を使って表すと (5.5.34) は

$$S\to -Et+\hbar\left[kz+n\log kr(1-\cos\theta)\right]+\text{const}\qquad \text{as}\quad z\to-\infty \tag{5.5.36}$$

すなわち、$z\to-\infty$ の時、$S=\text{const}$ の波面を表す方程式は $kz+n\log kr(1-\cos\theta)=\text{const}$ となる。

(問題 28) 部分波展開した時の Coulomb phase shift

$$\sigma_\ell=\arg\Gamma(\ell+1+in) \tag{5.5.37}$$

は、極座標でクーロン問題を解くことによって得られるが、上の $f_C(\theta)$ から直接求めることも出来る。まず

$$
\begin{aligned}
f_C(\theta) &= -\frac{n}{2k\,\sin^2\frac{\theta}{2}}\, e^{-2in\log\left(\sin\,\frac{\theta}{2}\right)}\,\frac{\Gamma(1+in)}{\Gamma(1-in)} \\
&= \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,\frac{e^{2i\sigma_\ell}-1}{2ik}\,P_\ell(\cos\,\theta)
\end{aligned}
\tag{5.5.38}
$$

で $\theta = 0$ は発散しており、意味がないから $e^{2i\sigma_\ell} - 1$ の 1 は落とす。(この項は

$$
\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,P_\ell(\cos\,\theta) = 4\,\delta(1-\cos\,\theta) \tag{5.5.39}
$$

に対応する。) Legendre 函数の直交性を用いると

$$
e^{2i\sigma_\ell} = \frac{\Gamma(1+in)}{2\,\Gamma(-in)}\int_{-1}^{1}dx\,\left(\frac{2}{1-x}\right)^{1+in}\,P_\ell(x) \tag{5.5.40}
$$

が得られる。まず $\ell = 0$ なら、積分は

$$
\int_{-1}^{1}dx\,\left(\frac{2}{1-x}\right)^{1+in} = 2\int_{0}^{1}dt\,t^{-in-1} = \frac{2}{-in} \tag{5.5.41}
$$

この積分は $t = 0$ で 0^{-in-1} の発散を含んでいるが、$\varepsilon > 0$ として n に小さな虚数部分を含めて $n + i\varepsilon$ としておけば、この発散を避ける事が出来る。また、一般の ℓ の場合にも、Legendre 多項式に対する Rodrigues の公式

$$
P_\ell(x) = (-1)^\ell\,\frac{1}{2^\ell\,\ell\,!}\left(\frac{d}{d\,x}\right)^\ell\,(1-x^2)^\ell \tag{5.5.42}
$$

を用い、部分積分によって微分の次数を減らしていくと簡単に積分出来て、最終的にベータ函数とガンマ函数に帰着できる。 この様にして

$$
e^{2i\sigma_\ell} = \frac{\Gamma(\ell+1+in)}{\Gamma(\ell+1-in)} \tag{5.5.43}
$$

を導け。結局、クーロン散乱振幅 (5.5.21) は、$\theta = 0$ を除いて

$$
f_C(\theta) = \frac{1}{2ik}\,\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,\frac{\Gamma(\ell+1+in)}{\Gamma(\ell+1-in)}\,P_\ell(\cos\,\theta) \tag{5.5.44}
$$

と表す事が出来る。

5.5.2　クーロン力に単距離力が加わった場合の散乱振幅

クーロン力のある場合の原子核の散乱問題を例にとって考える。Schrödinger 方程式

$$\left[\left(\frac{d}{dr}\right)^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + k^2 - \mathcal{V}_N(r) - \frac{\alpha}{r}\right]\psi_\ell(r) = 0 \tag{5.5.45}$$

の asymptotic wave を

$$\begin{aligned}\psi_\ell(r) &\sim F_\ell(kr,\eta)\cos\delta_\ell^N + G_\ell(kr,\eta)\sin\delta_\ell^N \\ &\sim \sin\left(kr - \eta\log 2kr - \frac{\pi}{2}\ell + \sigma_\ell + \delta_\ell^N\right) \qquad \text{as} \quad r\to\infty\end{aligned} \tag{5.5.46}$$

とする。ここに

$$\begin{aligned}F_\ell(kr,\eta) &\sim \sin\left(kr - \eta\log 2kr - \frac{\pi}{2}\ell + \sigma_\ell\right) \\ G_\ell(kr,\eta) &\sim \cos\left(kr - \eta\log 2kr - \frac{\pi}{2}\ell + \sigma_\ell\right) \qquad \text{as} \quad r\to\infty\end{aligned} \tag{5.5.47}$$

はそれぞれ対応する漸近形をもつ極座標表示での Coulomb 波動函数である。また $\eta = \alpha/\hbar v = Z_1 Z_2 e^2/\hbar v$ は Sommerfeld parameter である。δ_ℓ^N は nuclear phase shift と呼ばれる。S-matrix に入る phase shift は $\sigma_\ell + \delta_\ell^N$ だから

$$\frac{e^{2i(\sigma_\ell+\delta_\ell^N)} - 1}{2ik} = \frac{e^{2i\sigma_\ell} - 1}{2ik} + e^{2i\sigma_\ell}\,\frac{e^{2i\delta_\ell^N} - 1}{2ik} \tag{5.5.48}$$

と分けておいて、散乱振幅の部分波展開の式に代入すると

$$f(\theta) = f_C(\theta) + \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,e^{2i\sigma_\ell}\left(e^{2i\delta_\ell^N} - 1\right)P_\ell(\cos\theta) \tag{5.5.49}$$

となる。核力は short range だから、2 項目の和は一般には有限の角運動量 $\ell = 0 \sim \ell_{\max}$ までとれば十分である。核力による原子核間ポテンシャルの range が a の場合には

$$\ell_{\max} \sim k\,a \qquad \text{with} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{5.5.50}$$

微分断面積は散乱振幅の全体としての phase には無関係だから、$e^{-2i\sigma_0}$ を掛ておくのが便利である。すなわち

$$\begin{aligned}e^{-2i\sigma_0}\,f(\theta) &= e^{-2i\sigma_0}\,f_C(\theta) + f_N(\theta) \\ e^{-2i\sigma_0}\,f_C(\theta) &= -\frac{\eta}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)^2}\,e^{-2i\eta\log\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)} \\ f_N(\theta) &= \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}}(2\ell+1)\,e^{2i(\sigma_\ell-\sigma_0)}\left(e^{2i\delta_\ell^N} - 1\right)P_\ell(\cos\theta)\end{aligned} \tag{5.5.51}$$

ここに $\ell \geq 1$ に対して

$$e^{2i(\sigma_\ell - \sigma_0)} = \frac{\Gamma(\ell+1+i\eta)}{\Gamma(\ell+1-i\eta)} \frac{\Gamma(1-i\eta)}{\Gamma(1+i\eta)} = \frac{(\ell+i\eta)(\ell-1+i\eta)\cdots(1+i\eta)}{(\ell-i\eta)(\ell-1-i\eta)\cdots(1-i\eta)} \qquad (5.5.52)$$

そこで、微分断面積の計算式は

$$\frac{d\,\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left|e^{-2i\sigma_0} f_C(\theta) + f_N(\theta)\right|^2 \qquad (5.5.53)$$

となる。この式の数値計算には複素変数のガンマ函数の数値は不必要である。

(注意) Coulomb 力が入った場合の nuclear phase shift は Coulomb 力のない場合の phase shift とは一致しない！

(散乱の量子論の項、終わり)

6　Wigner-Racah calculus

角運動量代数に関連した D-函数や CG-係数 (Clebsche-Gordan coefficients) の理論は、量子力学の創成期とほぼ同時に Wigner や Racah を始めとする何人かの人達によってほぼ現在の形が作られた。現在の数学の言葉で言えば、それは連続 Lie 群の表現論である。D-函数や CG-係数の具体的な形は、アイソスピン SU(2) やハイパーチャージを含む SU(3) の場合についてその後の原子核構造論やゲージ理論、クオーク模型の発展の為の重要な基礎となったが、原論文に従った導出はローズの教科書にも書かれている様に極めて難解である。それを、多少とも素人にも分かる形で導くのがこの節の目的である。ここでは角運動量に関係した SU(2) に話を限るが、SU(3) や対称群の表現論との関係についてはあとのクオーク模型のところを見て頂きたい。幾つかの参考文献を以下に挙げておく。

1. 群論と量子力学: ウイグナー著, 森田正人, 森田玲子訳 (吉岡書店、物理学叢書
2. Group Theory: And Its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra, Eugene P. Wigner
3. Irreducible Tensorial Sets, U. Fano and G. Racah
4. Racah-Wigner Algebra in Quantum Thery (Encyclopedia of mathematics and its applications), Biedenharn L.C.
5. 角運動量の基礎理論 (1971 年)、M.E. ローズ著, 山内恭彦, 森田正人訳 (みすゞ書房)

6. Angular Momentum (Oxford Library of Physical Science) : Brink, D.M., Satchler, G. R.
7. Angular Momentum in Quantum Physics (Encyclopedia of mathematics and its applications), L.C. Biedenharn and J.D. Louck

6.1 角運動量代数の復習

6.1.1 角運動量代数の基礎

ここでは、スピン・軌道角運動量とその補遺のところで既に述べたことを振り返りその要点を証明なしで箇条書きする。

[Generator と正準交換関係]

角運動量演算子 (generator) は直交表示では $[J_x, J_y] = iJ_z$ etc. である。ここでは J_α, J_i with $(\alpha,\beta,\gamma) = (x,y,z), (i,j,k) = (1,2,3)$ etc. の notation を用いる。更に直交表示では $(J_\alpha)^\dagger = J_\alpha$ である。この時 $\boldsymbol{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = (J_+J_- + J_-J_+)/2 + J_z^2 = J_-J_+ + J_z + J_z^2 = J_+J_- - J_z + J_z^2$ である。raising and lowering operator は $J_\pm = J_x \pm J_y$ で次の正準交換関係 ccr を満たす。

$$[J_+, J_-] = 2J_z \quad , \quad [J_z, J_\pm] = \pm J_\pm \tag{6.1.1}$$

あるいは spherical tensor 表示で

$$J_1 = -1/\sqrt{2}J_+ \quad , \quad J_0 = J_z \quad , \quad J_{-1} = 1/\sqrt{2}J_- \tag{6.1.2}$$

これらを使うと hermete conjugate (hc) と ccr は

$$\begin{aligned}
&(J_\mu)^\dagger = (-)^\mu J_{-\mu} \\
&[J_\mu, J_\nu] = \sqrt{2} < 1\mu 1\nu | 1\mu+\nu > J_{\mu+\nu}
\end{aligned} \tag{6.1.3}$$

となる。ここに

$$\begin{aligned}
< jm11|jm+1 > &= -\sqrt{(j-m)(j+m+1)}/\sqrt{2j(j+1)} \\
< jm10|jm > &= m/\sqrt{j(j+1)} \\
< jm1-1|jm-1 > &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}/\sqrt{2j(j+1)}
\end{aligned} \tag{6.1.4}$$

である。ここでは、一貫して Condon-Shortley の phase convention

$$< j_1 j_1 j_2 m_2 | j_3 j_3 > \geqq 0 \quad \text{with} \quad m_2 = j_3 - j_1 \tag{6.1.5}$$

を使う事にする。

[固有値問題]

$\boldsymbol{J}^2$ と J_z は可換だから、それらの同時固有状態が存在する。それを $|jm>$ とする。すなわち

$$\boldsymbol{J}^2|jm>= j(j+1)|jm> \quad , \quad J_z|jm>= m|jm> \quad , \quad < jm|jm'>= \delta_{m,m'} \tag{6.1.6}$$

j の取り得る値は $j = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \cdots$ の整数か半整数である。$|jm>$ with $m = j, j-1, \cdots - j$ は $2j+1$ 次元のベクトル空間 $\mathcal{H}_j$ を作る。全空間は $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_{1/2} \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \cdots$ である。matrix element は (Condon-Shortley の phase convention で)

$$\begin{aligned} J_\pm|jm> &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm +m + 1)}|j, m \pm 1> \\ J_z|jm> &= m|jm> \quad \text{otherwise0} \end{aligned} \tag{6.1.7}$$

である。ここから Maximum weight の状態 $|\ell\ell>$ があれば全ての状態は

$$\begin{aligned} & J_+|\ell\ell>= 0 \\ & |\ell m>= \sqrt{\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!(2\ell)!}}(J_-)^{\ell-m}|\ell\ell> \\ & \text{for} \quad m = \ell \cdots - \ell \end{aligned} \tag{6.1.8}$$

から全て得られる。あるいは $|\ell 0>$ があれば

$$\begin{aligned} & |\ell m>= \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)}}(J_+)^m|\ell 0> \\ & |\ell - m>= \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)}}(J_-)^m|\ell 0> \\ & \text{for} \quad m = 0, 1, \cdots \ell \end{aligned} \tag{6.1.9}$$

でも良い。また J_- に対しては

$$
\begin{aligned}
|\ell 0> &= \sqrt{\frac{1}{(2\ell)!}}(J_-)^{\ell}|\ell\ell> \\
|\ell - m> &= \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!(2\ell)!}}(I_-)^{\ell+m}|\ell\ell> \\
&= \sqrt{\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}}(J_-)^{m}|\ell 0> \quad \text{for} \quad m = \ell \cdots -\ell
\end{aligned}
\tag{6.1.10}
$$

となって元へ戻る。

[座標回転の演算子と D-函数]

J_α と $|jm>$ を使って、座標回転の演算子を

$$
\mathcal{R}(\Omega) = e^{-i\varphi J_z} e^{-i\theta J_y} e^{-i\psi J_z} \tag{6.1.11}
$$

で定義する。ここに Ω=Euler angle=(φ, θ, ψ) である。逆変換は

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{R}(\Omega)^{-1} = (\mathcal{R}(\Omega))^{\dagger} = e^{i\psi J_z} e^{i\theta J_y} e^{i\varphi J_z} \\
&= \mathcal{R}(\Omega^{-1}) \quad \text{with} \quad \Omega^{-1} = (-\psi, -\theta, -\varphi)
\end{aligned}
\tag{6.1.12}
$$

である。$\boldsymbol{J}$ の $|jm\rangle$ への作用は j の値を変えないから $|jm>$ の完全性を使って

$$
\begin{aligned}
|jm>' &= \mathcal{R}(\Omega)|jm> = \sum_{m'} |jm'><jm'|\mathcal{R}(\Omega)|jm> \\
&= \sum_{m'} |jm'> D^{j}_{m',m}(\Omega) = \sum_{m'} D^{j}_{m',m}(\Omega)|jm'>
\end{aligned}
\tag{6.1.13}
$$

と展開出来る。$|jm>$ を座標系 $\mathcal{K}$ (実験室系) における状態とすると、$|jm>'$ は新しい座標系 (静止系、重心系、body-fixed frame) $\mathcal{K}'$ における同じ状態である。これらを、$|jm>_{\mathcal{K}}$, $|jm>_{\mathcal{K}'}$ 等と書く。(6.1.13) で現れる係数

$$
\mathcal{D}^{j}_{m',m}(\varphi, \theta, \psi) = \langle jm'|\mathcal{R}(\varphi, \theta, \psi)|jm\rangle = \langle jm'|e^{-i\varphi J_z} e^{-i\theta J_y} e^{-i\psi J_z}|jm\rangle \tag{6.1.14}
$$

を D-函数という。両端の $e^{-i\varphi J_z}$ 等を bra と ket に作用させて

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{D}^{j}_{m',m}(\varphi, \theta, \psi) = e^{-im'\varphi} d^{j}_{m',m}(\theta) e^{-im\psi} \ , \\
&d^{j}_{m',m}(\theta) = \langle jm'|e^{-i\theta J_y}|jm\rangle
\end{aligned}
\tag{6.1.15}
$$

と分解できる。$d^j_{m',m}(\theta)$ (d-function という) の具体的な表式は、例えば Rose の教科書の (4.13) 式に与えられている。あとの章では Double Gelfand 多項式 (DG-多項式) を用いてそれを導く。それは、θ の実関数であり次の様な対称性をもつ。

$$\begin{aligned} d^j_{m',m}(\theta) &= (-1)^{m'-m} d^j_{m,m'}(\theta) \\ &= (-1)^{m'-m} d^j_{-m',-m}(\theta) \\ &= d^j_{m,m'}(-\theta) \end{aligned} \tag{6.1.16}$$

ここから、D-函数の対称性

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{j*}_{m',m}(\varphi,\theta,\psi) &= (-1)^{m'-m} \mathcal{D}^j_{-m',-m}(\varphi,\theta,\psi) \\ &= \mathcal{D}^j_{m,m'}(-\psi,-\theta,-\varphi) \end{aligned} \tag{6.1.17}$$

が導かれる。D-函数はさらに、次の unitary matrix としての性質と直交関係を満す。以下、Euler angle を $\Omega = (\varphi,\theta,\psi)$ と略記する。

$$\begin{aligned} \sum_m \mathcal{D}^{j*}_{m,m_1}(\Omega)\ \mathcal{D}^j_{m,m_2}(\Omega) &= \delta_{m_1,m_2} \\ \sum_m \mathcal{D}^{j*}_{m_1,m}(\Omega)\ \mathcal{D}^j_{m_2,m}(\Omega) &= \delta_{m_1,m_2} \end{aligned} \tag{6.1.18}$$

もし、j_1 と j_2 がともに整数、あるいは半整数なら直交性

$$\int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\psi\ \mathcal{D}^{j_1*}_{m_1,m_1'}(\Omega)\ \mathcal{D}^{j_2}_{m_2,m_2'}(\Omega) = \frac{8\pi^2}{2j_1+1}\delta_{j_1,j_2}\delta_{m_1,m_2}\delta_{m_1',m_2'} \tag{6.1.19}$$

が成り立つ。

[角運動量の合成, Clebsch-Gordan 係数]

$$\mathcal{H}_{j_1} \oplus \mathcal{H}_{j_2} \leftrightarrow \mathcal{H}_j \quad \text{with} \quad j = |j_1-j_2|, |j_1-j_2|+1, \cdots j_1+j_2 \tag{6.1.20}$$

の対応を角運動量の合成 (vector coupling scheme) という。この時、状態の変換

$$\begin{aligned} &|j_1m_1> |j_2m_2> \leftrightarrow |jm> \\ &|jm> = \sum_{m_1,m_2} < j_1m_1j_2m_2|jm> |j_1m_1> |j_2m_2> \end{aligned} \tag{6.1.21}$$

の $\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}(2j+1)=(2j_1+1)(2j_2+1)$ 次元の変換行列 $C^{jm}_{m_1,m_2}=\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle$ は実係数の unitary 変換 (直交変換) である。(一般には unitary 行列だが、基底の phase の取りかたにより実数にとれる。) この係数を Clebsch-Gordan 係数 (CG-係数) という。CG-係数は次の直交条件を満たす。

$$\begin{aligned}
&\sum_{m_1m_2}\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle\ \langle j_1m_1j_2m_2|j'm'\rangle=\delta_{j,j'}\delta_{m,m'}\\
&\sum_{jm}\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle\ \langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle=\delta_{m_1,m_1'}\delta_{m_2,m_2'}
\end{aligned}\tag{6.1.22}$$

2 つの独立な自由度に関する角運動量 $\boldsymbol{J}_1,\ \boldsymbol{J}_2$ の合成、$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$ ($\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{\ell}+\boldsymbol{\sigma}/2$ 等を含む) を考える。$\boldsymbol{J}$ も角運動量の ccr を満す。例えば、軌道角運動量を $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1+\cdots+\boldsymbol{L}_n$、スピン角運動量を $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\cdots+\boldsymbol{s}_n$ と組んでから全角運動量を $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$ と組む方式を LS-coupling scheme という。また、核子多体系の様にまず $\boldsymbol{j}_i=\boldsymbol{\ell}_i+\boldsymbol{\sigma}_i$ と組んでから $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{j}_1+\cdots+\boldsymbol{j}_n$ と組む方法を jj-coupling scheme という。これらはいずれも、各段階で角運動量演算子の ccr を満たす。

[CG-series]

φJ_z を bra と ket に作用させて

$$\begin{aligned}
&\mathcal{D}^j_{m',m}(\varphi,\theta,\psi)=e^{-im'\varphi}d^j_{m',m}(\theta)e^{-im\psi}\ ,\\
&d^j_{m',m}(\theta)=\langle jm'|e^{-i\theta J_y}|jm\rangle
\end{aligned}\tag{6.1.23}$$

と分解できる。

(6.1.21) の下の式の両辺に $\mathcal{R}(\Omega)$ を掛けて

$$\begin{aligned}
&\sum_{m'}D^j_{m',m}(\Omega)|jm'>\\
&=\sum_{m_1,m_2}<j_1m_1j_2m_2|jm>\sum_{m_1',m_2'}D^{j_1}_{m_1',m_1}(\Omega)D^{j_2}_{m_2',m_2}(\Omega)|j_1m_1'>|j_2m_2'>
\end{aligned}\tag{6.1.24}$$

そこで左から $<j_1m_1'|<j_2m_2'|$ を掛けて

$$\begin{aligned}
&\sum_{m_1,m_2}<j_1m_1j_2m_2|jm>D^{j_1}_{m_1',m_1}(\Omega)D^{j_2}_{m_2',m_2}(\Omega)\\
&=\sum_{m}{}'<j_1m_1'j_2m_2'|jm'>D^j_{m',m}(\Omega)
\end{aligned}\tag{6.1.25}$$

が得られる。D-函数の対称性から

$$\sum_{m_1,m_2} < j_1m_1j_2m_2|jm > D^{j_1}_{m_1,m_1'}(\Omega)D^{j_2}_{m_2,m_2'}(\Omega)$$
$$= \sum_{m}{}' < j_1m_1'j_2m_2'|jm' > D^{j}_{m,m'}(\Omega) \tag{6.1.26}$$

CG-係数の直交性から

$$D^{j_1}_{m_1,m_1'}(\Omega)D^{j_2}_{m_2,m_2'}(\Omega)$$
$$= \sum_{m,m'} < j_1m_1j_2m_2|jm >< j_1m_1'j_2m_2'|jm' > D^{j}_{m,m'}(\Omega) \tag{6.1.27}$$

が得られる。また更に

$$\sum_{m_1,m_2,m_1',m_2'} < j_1m_1j_2m_2|jm >< j_1m_1'j_2m_2'|jm' > D^{j_1}_{m_1,m_1'}(\Omega)D^{j_2}_{m_2,m_2'}(\Omega)$$
$$= D^{j}_{m,m'}(\Omega) \tag{6.1.28}$$

が成り立つ。

[CG-係数の対称性]

$$< j_1m_1j_2m_2|j_3m_3 >= (-)^{j_2+m_2}\sqrt{\frac{2j_3+1}{2j_1+1}} < j_3-m_3j_2m_2|j_1-m_1 > \tag{6.1.29}$$

より

$$< jm|J_\mu|jm' >= (-)^{1+\mu} < j,-m'|J_\mu|j,-m >= (-)^{1+m-m'} < j,-m'|J_\mu|j,-m > \tag{6.1.30}$$

ここから

$$< jm|\boldsymbol{J}|jm' >= (-)^{1+m-m'} < j,-m'|\boldsymbol{J}|j,-m > \tag{6.1.31}$$

が得られる。

[Tensor operator]

$$|jm>'=|jm>_{\mathcal{K}'}=\mathcal{R}(\Omega)|jm> \quad \text{with} \quad |jm>=|jm>_{\mathcal{K}}$$
$$=\sum_{m'} D^{j}_{m',m}(\Omega)|jm'> \tag{6.1.32}$$

は Euler angle Ω による座標系 $\mathcal{K}$ から新しい座標系 $\mathcal{K}'$ への座標変換である。同様に tensor operator T^{λ}_{μ} (λ=non-zero integer) を

$$(T^{\lambda}_{\mu})'=\mathcal{R}(\Omega)T^{\lambda}_{\mu}\mathcal{R}(\Omega)^{-1}=\sum_{\mu'} D^{j}_{\mu',\mu}(\Omega)T^{\lambda}_{\mu'} \tag{6.1.33}$$

で定義する。特に J_{μ} はランク 1 のテンソル演算子である。

$$J'_{\mu}=\mathcal{R}(\Omega)J_{\mu}\mathcal{R}(\Omega)^{-1}=\sum_{\nu} D^{1}_{\nu,\mu}(\Omega)J_{\nu} \tag{6.1.34}$$

[Wigner-Eckert の定理]

$$T^{\lambda}|j>_{(j\lambda)j'm'}=\sum_{m,\mu}<jm\lambda\mu|j'm'>T^{\lambda}_{\mu}|jm> \tag{6.1.35}$$

は D-函数の CG-series から $|j'm'>$ の固有状態に比例することが分かる。そこで、これを $N_{j'm'}|j'm'>$ と置くと $N_{j'm'}$ は m' によらない。一般には、$|jm>$ の jm 以外の量子数を a とおいて $|a,jm>$ とすると $N_{j'}$ は j' 以外に a と j にも依存する。また T^{λ}_{μ} の $|a,jm>$ への作用は a を変えるかもしれない。そこでこれを c と置くと $N_{j'}$ は a,c,j,j' に依存する。そこでこれを $<c,j'||T^{\lambda}||a,j>_{\mathrm{unc}}$ と置くと

$$\sum_{m,\mu}<jm\lambda\mu|j'm'>T^{\lambda}_{\mu}|a,jm>=|c,j'm'><c,j'||T^{\lambda}||a,j>_{\mathrm{unc}} \tag{6.1.36}$$

と書くと、両辺に $<jm\lambda\mu|j'm'>$ を掛けて m' で sum を取ると CG-係数の直交性から

$$T^{\lambda}_{\mu}|a,jm>=\sum_{m}{}' <jm\lambda\mu|j'm'>|c,j'm'><c,j'||T^{\lambda}||a,j>_{\mathrm{unc}} \tag{6.1.37}$$

左から $<c,j'm'|$ で潰して

$$<c,j'm'|T^{\lambda}_{\mu}|a,jm>=<jm\lambda\mu|j'm'><c,j'||T^{\lambda}||a,j>_{\mathrm{unc}} \tag{6.1.38}$$

更に両辺に $< jm\lambda\mu|j'm' >$ を掛けて m,μ で和をとると

$$\begin{aligned}&\sum_{m,\mu} < jm\lambda\mu|j'm' >< c,j'm'|T^{\lambda}_{\mu}|a,jm > \\ &=< c,j'm'|T^{\lambda}|a,jm >_{(j\lambda)j'm'} =< c,j'||T^{\lambda}||a,j >_{\rm unc}\end{aligned} \tag{6.1.39}$$

これを unconventional reduced matrix element という。通常の reduced matrix element は

$$< c,j'||T^{\lambda}||a,j >_{\rm unc}= \frac{1}{\sqrt{2j'+1}} < c,j'||T^{\lambda}||a,j > \tag{6.1.40}$$

で定義されている。特に a,c を省略して

$$< j'm'|T^{\lambda}_{\mu}|jm >=< jm\lambda\mu|j'm' >< j'||T^{\lambda}||j >_{\rm unc} \tag{6.1.41}$$

これを Wigner-Eckert の定理という。unconventional reduced matrix element は、特にあとで出てくる角運動量の組み換え公式を表わす際便利である。特に T^{ℓ}_{μ} が J_{μ} の時

$$\begin{aligned}&< j'||J||j >_{\rm unc}= \delta_{j',j} < j||J||j >_{\rm unc} \\ &< j||J||j >_{\rm unc}= \sqrt{j(j+1)} \\ &< jm'|J_{\mu}|jm >= \sqrt{j(j+1)} < jm1\mu|jm' >\end{aligned} \tag{6.1.42}$$

である。ここに

$$\begin{aligned}&< jm11|jm+1 >= -\sqrt{(j-m)(j+m+1)}/\sqrt{2j(j+1)} \\ &< jm10|jm >= m/\sqrt{j(j+1)} \\ &< jm1-1|jm-1 >= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}/\sqrt{2j(j+1)}\end{aligned} \tag{6.1.43}$$

より

$$\begin{aligned}&< jm+1|J_1|jm >= -(1/\sqrt{2})\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \\ &< jm|J_0|jm >= m \\ &< jm-1|J_{-1}|jm >= (1/\sqrt{2})\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\end{aligned} \tag{6.1.44}$$

or

$$\begin{aligned}&< jm+1|J_{+}|jm >= \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \\ &< jm|J_z|jm >= m \\ &< jm-1|J_{-}|jm >= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\end{aligned} \tag{6.1.45}$$

となる。特に

$$< jm|J_\mu|jm' >= (-)^{1+\mu} < j,-m'|J_\mu|j,-m >= (-)^{1+m-m'} < j,-m'|J_\mu|j,-m > \tag{6.1.46}$$

ここから

$$< jm|\boldsymbol{J}|jm' >= (-)^{1+m-m'} < j,-m'|\boldsymbol{J}|j,-m > \tag{6.1.47}$$

が分かる。

[$\boldsymbol{n}$ 周りの φ 回転]

単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ 周りの有限角 φ 回転は

$$e^{-i\varphi\boldsymbol{nJ}} T^\lambda_\mu e^{i\varphi\boldsymbol{nJ}} = \sum_\nu < \lambda\nu|e^{-i\varphi\boldsymbol{nJ}}|\lambda\mu > T^\lambda_\nu \tag{6.1.48}$$

で定義される。ここで $\varphi \rightarrow \varepsilon \sim 0$ として、無限小回転を考えると

$$T^\lambda_\mu - i\varepsilon\boldsymbol{n}[\boldsymbol{J}, T^\lambda_\mu] + \cdots = \sum_\nu < \lambda\nu|1 - i\varepsilon\boldsymbol{nJ} + \cdots|\lambda\mu > T^\lambda_\nu \tag{6.1.49}$$

が任意の $\boldsymbol{n}$ について成り立つことにより

$$[\boldsymbol{J}, T^\lambda_\mu] = \sum_\nu < \lambda\nu|\boldsymbol{J}|\lambda\mu > T^\lambda_\nu \tag{6.1.50}$$

が成り立つ。そこで $\boldsymbol{J}$ の J_ν 成分をとって Wigner-Eckert の定理を用いると

$$[J_\nu, T_{\lambda\mu}] =< \lambda\mu 1\nu|\lambda\mu+\nu > \sqrt{\lambda(\lambda+1)} T_{\lambda\mu+\nu} \tag{6.1.51}$$

が得られる。ここで特に $T_{\lambda\mu} \rightarrow J_\mu$ とすると

$$[J_\nu, J_\mu] = \sqrt{2} < 1\mu 1\nu|1\mu+\nu > J_{\mu+\nu} \tag{6.1.52}$$

となる。ここから、以前の

$$\begin{aligned} &[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm \\ &[J_+, J_-] = (-2)\sqrt{2} < 1-111|10 > J_0 = 2J_z \end{aligned} \tag{6.1.53}$$

が再現される。更に (D-函数と Y-函数の関係)

$$(D^\ell_{m,0}(\Omega))^* = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \tag{6.1.54}$$

より $T_{\lambda\mu}\to(D^{\ell}_{m,0}(\Omega))^*$ として

$$
\begin{aligned}
&[J_\nu,(D^{\ell}_{m,s}(\Omega))^*]\\
&=<\ell m1\nu|\ell m+\nu>\sqrt{\ell(\ell+1)}(D^{\ell}_{m+\nu,s}(\Omega))^*
\end{aligned}
\qquad (6.1.55)
$$

が $s=0$ について成り立つ。

6.1.2 角運動量の組み換え公式、Wigner の $3j,6j,9j$-係数

CG-係数から得られる

$$
\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}=(-)^{j_1-j_2-m_3}\frac{1}{\sqrt{2j_3+1}}<j_1m_1j_2m_2|j_3-m_3> \qquad (6.1.56)
$$

を Wigner の $3j$-係数という。あとで示す様に $3j$-係数は、CG-係数よりより簡単な対称性を持つ。

四つの角運動量函数の組み換え係数を Wigner の $9j$-係数と言って、六つの CG-係数の積の和で表わされる (座標系の回転に関する) 不変量である。

$$
\begin{aligned}
&\langle[[\psi_{j_1}(1)\psi_{j_3}(3)]_{j_{13}}[\psi_{j_2}(2)\psi_{j_4}(4)]_{j_{24}}]_{jm}|[[\psi_{j_1}(1)\psi_{j_2}(2)]_{j_{12}}[\psi_{j_3}(3)\psi_{j_4}(4)]_{j_{34}}]_{jm}\rangle\\
&=\sum_{m_1,m_2,m_3,m_4,m_{12},m_{34},m_{13},m_{24}}\langle j_1m_1j_2m_2|j_{12}m_{12}\rangle\\
&\langle j_3m_3j_4m_4|j_{34}m_{34}\rangle\,\langle j_{12}m_{12}j_{34}m_{34}|jm\rangle\\
&\langle j_1m_1j_3m_3|j_{13}m_{13}\rangle\,\langle j_2m_2j_4m_4|j_{24}m_{24}\rangle\,\langle j_{13}m_{13}j_{24}m_{24}|jm\rangle\\
&=\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12}\\ j_3 & j_4 & j_{34}\\ j_{13} & j_{24} & j\end{bmatrix}\\
&=\sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{34}+1)(2j_{13}+1)(2j_{24}+1)}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12}\\ j_3 & j_4 & j_{34}\\ j_{13} & j_{24} & j\end{Bmatrix}
\end{aligned}
\qquad (6.1.57)
$$

$\{\cdots\}$ が通常の $9j$-係数、$[\cdots]$ は unconventiinal $9j$-係数と言われる。応用上は後者の方が便利である。実際

$$
\begin{aligned}
&[[\psi_{j_1}(1)\psi_{j_2}(2)]_{j_{12}}[\psi_{j_3}(3)\psi_{j_4}(4)]_{j_{34}}]_{jm}\\
&=\sum_{m_{13},m_{24}}\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12}\\ j_3 & j_4 & j_{34}\\ j_{13} & j_{24} & j\end{bmatrix}[[\psi_{j_1}(1)\psi_{j_3}(3)]_{j_{13}}[\psi_{j_2}(2)\psi_{j_4}(4)]_{j_{24}}]_{jm}
\end{aligned}
\qquad (6.1.58)
$$

である。$\{\cdots\}$ 型の通常の $9j$-係数はその定義 (6.1.57) から、次の様な対称性を持っている。まず、3×3 matrix の転置に対して不変である。また、任意の行、或いは列の交換

に対して位相 $(-)^{\text{total sum of } j}$ が付く。特に $j_3=0$ の時、$9j$-係数は $6j$-係数と言われる 。これを

$$
\begin{aligned}
S_{j_{12},j_{23}} &= (-)^{j_1+j_2+j_3+j}\sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix} \\
&= \sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)}W(j_1j_2jj_3;j_{12}j_{23}) \\
&= U(j_1j_2jj_3;j_{12}j_{23})
\end{aligned}
\tag{6.1.59}
$$

と書けば

$$
\begin{aligned}
S_{j_{12},j_{23}} &= \langle[\psi_{j_1}(1)[\psi_{j_2}(2)\psi_{j_3}(3)]_{j_{23}}]_{jm}|[[\psi_{j_1}(1)\psi_{j_2}(2)]_{j_{12}}\psi_{j_3}(3)]_{jm}\rangle \\
&= \sum_{m_1,m_2,m_3,m_{12},m_{23}} \langle j_1m_1j_2m_2|j_{12}m_{12}\rangle \langle j_{12}m_{12}j_3m_3|jm\rangle \\
&\quad \langle j_2m_2j_3m_3|j_{23}m_{23}\rangle \langle j_1m_1j_{23}m_{23}|jm\rangle
\end{aligned}
\tag{6.1.60}
$$

と表わされる。具体的な表式と対称性は例えば

1. ランダウ・リフシッツ、量子力学 II (東京図書出版)
2. Rose, 角運動量の理論

等にある。

最後に複合粒子系の matrix element の計算に便利な公式を幾つか挙げておく。これらの計算には、unconventional な reduced matrix element と $6j,9j$-系数の unconventional form が便利である。

6.2 幾つかの例

6.2.1 spin 1/2 spinor

$j=1/2$ の時 $\mathcal{H}_{1/2}$ は $2j+1=2$ 次元の複素ベクトル空間で

$$
|jm>=|1/2\ 1/2>=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad , \quad |1/2\ -1/2>=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}
\tag{6.2.1}
$$

をその単位基底とする。スピン 1/2 の場合に限って、スピン演算子はしばしば 1/2 factor を除いて $\boldsymbol{s}=\boldsymbol{\sigma}/2$ で表わされる。そこで $J_\alpha=s_\alpha=2\sigma_\alpha$ として s_+,s_- の me (matrix element) から $\boldsymbol{\sigma}$ が 2×2 matrix の形に簡単に求まる。

$$
\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}
\tag{6.2.2}
$$

これらは Pauli のスピン行列 (Pauli matrix) と呼ばれる。$\boldsymbol{\sigma}$ は次の交換関係を満たす: $[\sigma_i, \sigma_j] = 2ie_{i,j,k}\sigma_k$. 更に $(\sigma_i)^2 = 1$ は全て単位行列であり、次の反対称交換関係を満たす: $\{\sigma_x, \sigma_y\} = \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0$, $\{\sigma_y, \sigma_z\} = 0$, $\{\sigma_z, \sigma_x\} = 0$. これらはまとめて

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{i,j} \tag{6.2.3}$$

と書けるので、結局

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{i,j} + ie_{i,j,k}\sigma_k \tag{6.2.4}$$

が成り立つ。 これに 3 次元定数ベクトル $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ の各成分を掛けて足し上げると

$$(\boldsymbol{\sigma a})(\boldsymbol{\sigma b}) = (\boldsymbol{ab}) + i[\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}]\sigma \tag{6.2.5}$$

即ちスピン演算子 $\boldsymbol{\sigma}$ の多項式は常に 1 次以下の多項式に還元出来る。 例えば、スピン 1/2 の場合の単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ ($\boldsymbol{n}^2 = 1$) の周りの有限角度 φ の大きさの座標回転の生成子 (generator) (これを $\mathcal{R}(\varphi\boldsymbol{n})$ と書く) は

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}(\varphi\boldsymbol{n}) &= e^{-i\varphi\boldsymbol{ns}} = e^{-i\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{n\sigma}} = \sum_{n=0} \frac{(-i)^n}{n!}(\boldsymbol{n\sigma})^n \left(\frac{\varphi}{2}\right)^n \\
&= \sum_{m=0} (-)^m \frac{1}{(2m)!} \left(\frac{\varphi}{2}\right)^{2m} - i(\boldsymbol{n\sigma}) \sum_{m=0} (-)^m \frac{1}{(2m+1)!} \left(\frac{\varphi}{2}\right)^{2m+1} \\
&= \cos\frac{\varphi}{2} - i(\boldsymbol{n\sigma})\sin\frac{\varphi}{2} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} - in_z\sin\frac{\varphi}{2} & -(in_x + n_y)\sin\frac{\varphi}{2} \\ -(in_x - n_y)\sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} + in_z\sin\frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{6.2.6}$$

と表わされる。特に $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{e}_z$ と z-軸方向の単位ベクトルに取ると

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}(\varphi\boldsymbol{e}_z) &= \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \\
\mathcal{R}(\theta\boldsymbol{e}_y) &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{6.2.7}$$

より

$$\begin{aligned}
&\mathcal{R}(\varphi, \theta, \psi) = \mathcal{R}(\varphi\boldsymbol{e}_z)\mathcal{R}(\theta\boldsymbol{e}_y)\mathcal{R}(\psi\boldsymbol{e}_z) = e^{-i\varphi/2\sigma_z}e^{-i\theta/2\sigma_y}e^{-i\psi/2\sigma_z} \\
&= \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2}(\cos\theta/2)e^{-i\psi/2} & e^{-i\varphi/2}(-\sin\theta/2)e^{i\psi/2} \\ e^{i\varphi/2}(\sin\theta/2)e^{-i\psi/2} & e^{i\varphi/2}(\cos\theta/2)e^{i\psi/2} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{6.2.8}$$

となる。つまり スピン 1/2 の D-函数

$$D^{1/2}_{m,m'}(\varphi, \theta, \psi) =< 1/2\ m|\mathcal{R}(\varphi, \theta, \psi)|1/2\ m' > \tag{6.2.9}$$

の 2×2 matrix は $CR(\varphi,\theta,\psi)$ そのものである。すなわち

$$D^{1/2}(\varphi,\theta,\psi)=\mathcal{R}(\varphi,\theta,\psi) \tag{6.2.10}$$

6.2.2 spin 1 matrix

同様なことが spin 1 の行列演算子 $J_\alpha = S_\alpha$ についても成り立つ。この場合、non-zero me は

$$\begin{aligned}
&< 1,m+1|S_+|1,m >= \sqrt{(1-m)(2+m)}\\
&< 1,m-1|S_-|1,m >= \sqrt{(1+m)(2-m)}\\
&< 1,m|S_z|1,m >= m
\end{aligned} \tag{6.2.11}$$

だけだから $|1m >= (1,0,0),(0,1,0),(0,0,1)$ を直交基底とする 3 次元ベクトル空間の元に作用する 3×3 matrix として

$$S_+=\sqrt{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\0&0&0\end{pmatrix} \quad , \quad S_-=\sqrt{2}\begin{pmatrix}0&0&0\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix} \quad , \quad S_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix} \tag{6.2.12}$$

をとることができる。そこで

$$S_x=(1/\sqrt{2})\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}, \quad S_y=(-i)(1/\sqrt{2})\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}, \quad S_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix} \tag{6.2.13}$$

である。そこで、これらを exponentiate すると例えば

$$e^{-i\varphi S_z}=\sum_{n=0}^{\infty}(-i\varphi)^n(S_z)^n/n!=\begin{pmatrix}e^{-i\varphi}&0&0\\0&0&0\\0&0&e^{i\varphi}\end{pmatrix} \tag{6.2.14}$$

等から回転行列は

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}(\varphi,\theta,\psi)&=e^{-i\varphi S_z}e^{-i\theta S_y}e^{-i\psi S_z}=\begin{pmatrix}e^{-i\varphi}&0&0\\0&1&0\\0&0&e^{i\varphi}\end{pmatrix}\\
&\times\begin{pmatrix}(1+\cos\theta)/2&-\sin\theta/\sqrt{2}&(1-\cos\theta)/2\\ \sin\theta/\sqrt{2}&\cos\theta&-\sin\theta/\sqrt{2}\\(1-\cos\theta)/2&\sin\theta/\sqrt{2}&(1+\cos\theta)/2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{-i\psi}&0&0\\0&1&0\\0&0&e^{i\psi}\end{pmatrix}\\
&=\begin{pmatrix}e^{-i\varphi}(1+\cos\theta)/2e^{-i\psi}&e^{-i\varphi}(-\sin\theta)/\sqrt{2}&e^{-i\varphi}(1-\cos\theta)/2e^{i\psi}\\(\sin\theta)/\sqrt{2}e^{-i\psi}&\cos\theta&(-\sin\theta)/\sqrt{2}e^{i\psi}\\e^{i\varphi}(1-\cos\theta)/2e^{-i\psi}&e^{i\varphi}(\sin\theta)/\sqrt{2}&e^{i\varphi}(1+\cos\theta)/2e^{i\psi}\end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{6.2.15}$$

ここに

$$e^{-i\theta S_y} = \begin{pmatrix} (1+\cos\theta)/2 & (-\sin\theta)/\sqrt{2} & (1-\cos\theta)/2 \\ (\sin\theta)/\sqrt{2} & \cos\theta & (-\sin\theta)/\sqrt{2} \\ (1-\cos\theta)/2 & (\sin\theta)/\sqrt{2} & (1+\cos\theta)/2 \end{pmatrix} \tag{6.2.16}$$

はあとで明らかになる。

6.2.3　スピンの値が一般の場合

Biedenharn-Louck に従って一般の場合にも spin j の matrix 表現をを定義することができる。$|jm>$ を $(2j+1)$ 次元ベクトル空間の単位基底として $J_\alpha = J_\alpha^j$ with $(J_\alpha^j)_{m,m'} =< jm|J_\alpha|jm'>$ とする。$\boldsymbol{J}$ に対して $(2j+1)\times(2j+1)$ matrix の $\boldsymbol{J}^j$ は整数、半整数値の j に依存する。回転行列は

$$\mathcal{R}(\varphi,\theta,\psi) = e^{-i\varphi J_z^j} e^{-i\theta J_y^j} e^{-i\psi J_z^j} \tag{6.2.17}$$

である。J_z^j は対角部分に $j, j-1, \cdots, -j$ が並んだ $(2j+1)\times(2j+1)$ 行列だから $e^{-i\varphi J_z^j}$ は対角部分に $e^{-ij\varphi}, \cdots, e^{-im\varphi}, \cdots, e^{ij\varphi}$ の並んだ行列である。また

$$d^j(\theta) = e^{-i\theta J_y^j} = e^{-(\theta/2)(J_+^j - J_-^j)} \tag{6.2.18}$$

は ${}^t d^j(\theta) = (d^j(\theta))^{-1} = d^j(-\theta)$ を満たす real な直交行列である。具体的な表式は DG 多項式のところで与えられる。

[$\boldsymbol{J}$ の微分演算子]

$\boldsymbol{J}$ の ccr と $|jm>$ を満たす一般的なオイラー角の微分演算子を求める事が出来る。この時 $|jm>$ は D-函数そのものとなる。まず $\boldsymbol{J}$ を使って

$$\mathcal{R}(\Omega) = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z} \tag{6.2.19}$$

を定義する。ここではオイラー角 Ω を

$$\Omega = \text{Euler angle} = (\alpha, \beta, \gamma) \tag{6.2.20}$$

で定義する。$\mathcal{R} = \mathcal{R}(\Omega)$ を α, β, γ で偏微分して $\boldsymbol{J}$ の ccr を使うと

$$\begin{aligned}
&\partial_\alpha \mathcal{R} = (-i) J_z \mathcal{R} \\
&\partial_\beta \mathcal{R} = (-i) e^{-i\alpha J_z} J_y e^{i\alpha J_z} \mathcal{R} = (-i)(-(\sin\alpha) J_x + (\cos\alpha) I J_y) \mathcal{R} \\
&\partial_\gamma \mathcal{R} = (-i) e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} J_z e^{i\beta J_y} e^{i\alpha J_z} \mathcal{R} \\
&= (-i)(\sin\beta\cos\alpha) J_x + (\sin\beta\sin\alpha) J_y + (\cos\beta) J_z) \mathcal{R}
\end{aligned} \tag{6.2.21}$$

(ここに

$$
\begin{aligned}
&e^{-i\varphi I_z} I_y e^{i\varphi I_z} = I_y + (-i)\varphi/1![I_z, I_y] + (-i)^2(\varphi)^2/2![I_z,[I_z,I_y]] + \cdots \\
&= I_y + (-i)\varphi/1!(-iI_x) + (-i)^2(\varphi)^2/2! I_y + \cdots \\
&= (1 + (-i\varphi)^2/2! + \cdots)I_y + ((-i\varphi)/1! + (-i\varphi)^3/3! + \cdots)(-iI_x) \\
&= \cos\varphi I_y - \sin\varphi I_x \\
&\text{また} \\
&e^{-i\theta I_y} I_z e^{i\theta I_y} = \cos\theta I_z + \sin\theta I_x \quad \text{より} \\
&e^{-i\varphi I_z} e^{-i\theta I_y} I_z e^{i\theta I_y} e^{i\varphi I_z} \\
&= e^{-i\varphi I_z}(\cos\theta I_z + \sin\theta I_x) e^{i\varphi I_z} \\
&= (\sin\theta) e^{-i\varphi I_z} I_x e^{i\varphi I_z} + (\cos\theta) I_z \\
&= (\sin\theta)((\cos\varphi)I_x + (\sin\varphi)I_y) + (\cos\theta)I_z \\
&= I_y + (-i)\varphi/1![I_z, I_y] + (-i)^2(\varphi)^2/2![I_z,[I_z,I_y]] + \cdots \\
&= I_y + (-i)\varphi/1!(-iI_x) + (-i)^2(\varphi)^2/2! I_y + \cdots \\
&= (1 + (-i\varphi)^2/2! + \cdots)I_y + ((-i\varphi)/1! + (-i\varphi)^3/3! + \cdots)(-iI_x) \\
&= \cos\varphi I_y - \sin\varphi I_x
\end{aligned}
\tag{6.2.22}
$$

である。)

そこで

$$
\begin{aligned}
&\partial = \begin{pmatrix} \partial_\alpha \\ \partial_\beta \\ \partial_\gamma \end{pmatrix} \quad , \quad J = \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} \\
&A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ \sin\beta\cos\alpha & \sin\beta\sin\alpha & \cos\beta \end{pmatrix} \\
&M = AJ
\end{aligned}
\tag{6.2.23}
$$

とすると $\partial\mathcal{R} = (-i)M\mathcal{R} = (-iAJ)\mathcal{R} \to \partial = (-i)M = (-i)AJ \to J = iA^{-1}\partial$ より $I = (-i)A^{-1}\partial$ と $I = (-i)A^{-1}\partial = -J$ として $(-)$ をつけて I を定義しておくと、$A^{-1}A = E$ となる A^{-1} はだから

$$
A^{-1} = \begin{pmatrix} -\cos\alpha\cot\beta & -\sin\alpha & \cos\alpha/\sin\beta \\ -\sin\alpha\cot\beta & \cos\alpha & \sin\alpha/\sin\beta \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}
\tag{6.2.24}
$$

より

$$
\begin{aligned}
I &= (-i)A^{-1}\partial \\
&= (-i)\begin{pmatrix} -\cos\alpha\cot\beta\partial_\alpha - \sin\alpha\partial_\beta + \cos\alpha/\sin\beta\partial_\gamma \\ -\sin\alpha\cot\beta\partial_\alpha + \cos\alpha\partial_\beta + \sin\alpha/\sin\beta\partial_\gamma \\ \partial_\alpha \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{6.2.25}
$$

となる。直交成分で書くと

$$
\begin{aligned}
I_x &= i(\cos\alpha\cot\beta\partial_\alpha + \sin\alpha\partial_\beta - \cos\alpha/\sin\beta\partial_\gamma) \\
I_y &= i(\sin\alpha\cot\beta\partial_\alpha - \cos\alpha\partial_\beta - \sin\alpha/\sin\beta\partial_\gamma) \\
I_z &= (-i)\partial_\alpha
\end{aligned}
\tag{6.2.26}
$$

である。これらを $I_\pm$ で書けば

$$
\begin{aligned}
I_+ &= I_x + iI_y = e^{i\alpha}(\partial_\beta + i\cot\beta\partial_\alpha - i(1/\sin\beta)\partial_\gamma) \\
I_- &= I_x - iI_y = e^{-i\alpha}(-\partial_\beta + i\cot\beta\partial_\alpha - i(1/\sin\beta)\partial_\gamma)
\end{aligned}
\tag{6.2.27}
$$

である。そこで、ここから直接 $I_1 = -(1/\sqrt{2})I_+,\ I_0 = I_z,\ I_{-1} = (1/\sqrt{2})I_-$ と ccr $[I_+, I_-] = 2I_z,\ [I_z, I_\pm] = \pm I_\pm$ が確かめられる。これらを使って、結局 $I\mathcal{R}(\Omega) = -J\mathcal{R}(\Omega)$ が得られる。ここで $\boldsymbol{J} \to \boldsymbol{J}^j$ と変えて

$$
\mathcal{R}(\Omega) = e^{-i\alpha J_z^j} e^{-i\beta J_y^j} e^{-i\gamma J_z^j} = D^j(\alpha, \beta, \gamma) \tag{6.2.28}
$$

とすると $ID^j(\alpha,\beta,\gamma) = -J^j D^j(\alpha,\beta,\gamma)$ or ベクトルの直交成分を取って

$$
I_\alpha D^j(\alpha,\beta,\gamma) = -J_\alpha^j D^j(\alpha,\beta,\gamma) \tag{6.2.29}
$$

が得られる。そこで D-函数の m, m' 成分を取ると

$$
\begin{aligned}
I_\alpha D^j_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma) &= -(J^j_\alpha D^j(\alpha,\beta,\gamma))_{m,m'} \\
&= -\sum_{m"} (J^j_\alpha)_{m,m"} D^j(\alpha,\beta,\gamma)_{m",m'}
\end{aligned}
\tag{6.2.30}
$$

ここで対称性

$$
\begin{aligned}
&(D^j(\alpha,\beta,\gamma)_{m,m'})^* = (-)^{m-m'} D^j(\alpha,\beta,\gamma)_{-m,-m'} \\
&\boldsymbol{J}^j_{m,m'} = (-)^{1+m-m'} \boldsymbol{J}^j_{-m',-m}
\end{aligned}
\tag{6.2.31}
$$

を使うと

$$
\begin{aligned}
&I_\alpha (-)^{m-m'} (D^j_{-m,-m'}(\alpha,\beta,\gamma))^* \\
&= -\sum_{m"} (-)^{1+m-m"} (J^j_\alpha)_{-m",-m} (-)^{m"-m'} (D^j(\alpha,\beta,\gamma)_{-m",-m'})^*
\end{aligned}
\tag{6.2.32}
$$

が得られる。ここで $m, m', m"$ の符号を変えて

$$I_\alpha(D^j_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma))^* = \sum_{m"}(J^j_\alpha)_{m",m}(D^j(\alpha,\beta,\gamma)_{m",m'})^* \tag{6.2.33}$$

更に J^j_α の hemete 性 $(J^j_\alpha)^\dagger = J^j_\alpha$ から $(J^j_\alpha)_{m",m} = ((J^j_\alpha)^*)_{m,m"}$ が成り立つから

$$\begin{aligned}
&I_\alpha(D^j_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma))^* = (\sum_{m"}(J^j_\alpha)_{m,m"}D^j(\alpha,\beta,\gamma)_{m",m'})^* \\
&= ((J^j_\alpha)D^j(\alpha,\beta,\gamma))^*_{m,m'}
\end{aligned} \tag{6.2.34}$$

が得られる。特に $\alpha = z$ として J^j_z の matrix element の表式を使うと

$$I_z(D^j_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma))^* = m(D^j_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma))^* \tag{6.2.35}$$

同様に $I_\pm$ に対しても

$$I_\pm(D^j_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma))^* = \sqrt{(j\mp m)(j\pm +1)}(D^j_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma))^* \tag{6.2.36}$$

が得られる。そこで $\boldsymbol{I}$ が $\boldsymbol{J}$ と同じ ccr を満たすことを用いると

$$\boldsymbol{I}^2(D^j_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma))^* = j(j+1)(D^j_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma))^* \tag{6.2.37}$$

すなわち $\boldsymbol{I}$ の時の $|jm>$ は $|jm> = (D^j_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma))^*$ である。(m' に依存しない！)
また $D^j_{m,m'}$ は $\boldsymbol{J}$ の選び方に依存しないので

$$\begin{aligned}
&D^j_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma) =< jm|e^{-i\alpha I_z}e^{-i\beta I_y}e^{-i\gamma I_z}|jm'> \\
&= e^{-im\alpha}d^j_{m,m'}(\beta)e^{-im'\gamma}
\end{aligned} \tag{6.2.38}$$

とすることができる。更に Euler angle を通常の φ, θ, ψ の notation に戻して

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{I}^2(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi))^* = j(j+1)(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* \\
&I_z(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* = m(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^*
\end{aligned} \tag{6.2.39}$$

となる。ここに $\boldsymbol{I}$ は

$$\begin{aligned}
&I_+ = I_x + iI_y = e^{i\varphi}(\partial_\theta + i\cot\theta\partial_\varphi - i(1/\sin\theta)\partial_\psi) \\
&I_- = I_x - iI_y = e^{-i\varphi}(-\partial_\theta + i\cot\theta\partial_\varphi - i(1/\sin\theta\partial_\psi) \\
&I_z = (-i)\partial_\varphi
\end{aligned} \tag{6.2.40}$$

で定義される。

ここで特に j=整数かつ $m' = 0$ の時、以前「角運動量の固有値問題」と「スピン角運動量」 のところで詳述した関係式

$$(D^{\ell}_{m,0}(\varphi,\theta,0))^* = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \tag{6.2.41}$$

を使うと

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{I}^2 Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \\ &I_z Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = mY_{\ell m}(\theta,\varphi) \end{aligned} \tag{6.2.42}$$

ここに $\boldsymbol{I}$ の中の ∂_ψ の項は効いてこないので、上式は通常の $\boldsymbol{L}$ についての軌道角運動量の固有値問題と同じになる。

6.2.4 軌道角運動量

軌道角運動量 $\boldsymbol{L} = (1/\hbar)[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}]$ は j=整数の場合の典型的な場合である。特に $\boldsymbol{L}$ を極座標で表すと $\boldsymbol{L}$ は $\boldsymbol{I}$ で ∂_ψ 項を無視したものになる。すなわち

$$\begin{aligned} &L_+ = L_x + iL_y = e^{i\varphi}(\partial_\theta + i\cot\theta\partial_\varphi) \\ &L_- = L_x - iL_y = e^{-i\varphi}(-\partial_\theta + i\cot\theta\partial_\varphi) \\ &L_z = (-i)\partial_\varphi \end{aligned} \tag{6.2.43}$$

である。$[L_+, L_-] = 2L_z, [L_z, L_+] = L_+$ 等を直接計算することもできる。($[L_z, L_-] = -L_-$ は 2 番目の式から h.c. を取ることによって得られる。) そのためには

$$e^{i\varphi}\partial_\varphi e^{-i\varphi} = \partial_\varphi - i \tag{6.2.44}$$

を使って

$$L_+ = aX = (X + \cot\theta)a \quad , \quad L_- = bY = (Y - \cot\theta)b \tag{6.2.45}$$

としておくと便利である。ここに

$$\begin{aligned} &a = e^{i\varphi}, b = e^{-i\varphi} = a^{-1} \\ &X = \partial_\theta + i\cot\theta\partial_\varphi \quad , \quad Y = -\partial_\theta + i\cot\theta\partial_\varphi \end{aligned} \tag{6.2.46}$$

である。

$$[L_+, L_-] = (X + \cot\theta)Y - (Y - \cot\theta)X = [X,Y] + (\cot\theta)(X+Y) \tag{6.2.47}$$

ここに $\partial_\theta\cot\theta = -1 - (\cos\theta)^2/(\sin\theta)^2 = -1/(\sin\theta)^2$ より

$$[X,Y] = (-2i)/(\sin\theta)^2\partial_\varphi \quad , \quad X + Y = 2i\cot\theta\partial_\varphi \tag{6.2.48}$$

そこで

$$[L_+, L_-] = (-2i)\partial_\varphi = 2L_z \tag{6.2.49}$$

が分かる。また

$$[L_z, L_+] = (-i)[\partial_\varphi, a]X = aX = L_+ \tag{6.2.50}$$

更に $Z = (1/\sin\theta)\partial_\psi$ として

$$I_+ = a(X - iZ) = (X + \cot\theta - iZ)a \quad , \quad I_- = b(Y - iZ) = (Y - \cot\theta - i)b \tag{6.2.51}$$

より

$$\begin{aligned}
&[I_+, I_-] = (X + \cot\theta - iZ)(Y - iZ) - (Y - \cot\theta - iZ)(X - iZ) \\
&= 2I_z + (-i)((X - Y + 2\cot\theta)Z + Z(Y - X)) = 2I_z \\
&\text{since} \quad (\cdots) = [(X - Y), Z] + 2(\cot\theta)Z = 2[\partial_\theta, Z] + 2(\cot\theta)Z \\
&= 2([\partial_\theta, (1/\sin\theta)] + (\cot\theta)/\sin\theta)\partial_\psi = 0
\end{aligned} \tag{6.2.52}$$

また

$$[I_z, I_+] = [I_z, a](X - iZ) = a(X - iZ) = I_+ \tag{6.2.53}$$

が分かる。

[vector, spherical vector の定義]

空間回転に対して座標 $\boldsymbol{r}$ と同じ様に変換する量が vector である。この時、基礎になっているのが ccr

$$[L_\alpha, r_\beta] = ie_{\alpha,\beta,\gamma}r_\gamma \tag{6.2.54}$$

である。そこで、ベクトル $\boldsymbol{V} = (V_\alpha)$ は

$$[L_\alpha, V_\beta] = ie_{\alpha,\beta,\gamma}V_\gamma \tag{6.2.55}$$

によって定義される。更に、ランク 1 の Y-函数の表示から

$$\begin{aligned}
Y_{1,\pm1}(\theta,\varphi) &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(\sin\theta)e^{\mp i\varphi} \\
Y_{1,0}(\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}(\cos\theta)
\end{aligned} \tag{6.2.56}$$

が得られる。特に極座標表示で

$$rY_{1,\mu}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{4\pi}}r_\mu \tag{6.2.57}$$

と書いて

$$
\begin{aligned}
r_1 &= -(1/\sqrt{2})r\sin\theta(\cos\varphi + i\sin\varphi) = -(1/\sqrt{2})(x+iy) \\
r_0 &= r\cos\theta = z \\
r_{-1} &= (1/\sqrt{2})r\sin\theta(\cos\varphi - i\sin\varphi) = (1/\sqrt{2})(x-iy)
\end{aligned}
\tag{6.2.58}
$$

が得られる。そこで一般に real vector $\boldsymbol{V} = (V_x, V_y, V_z)$ に対して

$$
V_1 = -(1/\sqrt{2})(V_x + iV_y) \quad , \quad V_0 = V_z \quad , \quad V_{-1} = (1/\sqrt{2})(V_x - iV_y) \tag{6.2.59}
$$

である。これを vector $\boldsymbol{V}$ の spherical vector 表示という。$\boldsymbol{V}$ から (V_μ) の変換 $(V_\mu) = U\boldsymbol{V}$ は unitary 変換 U $(U^\dagger = U^{-1}$) である。すなわち

$$
(V_\mu) = \begin{pmatrix} V_1 \\ V_0 \\ V_{-1} \end{pmatrix} \quad , \quad \boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} \tag{6.2.60}
$$

として

$$
\begin{aligned}
U &= (1/\sqrt{2}) \begin{pmatrix} -1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & -i & 0 \end{pmatrix} \\
U^{-1} = U^\dagger &= (1/\sqrt{2}) \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ i & 0 & i \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{6.2.61}
$$

である。また

$$
\mathcal{Y}_{\ell m}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{(2\ell+1)!!}} r^\ell Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\ell!}}[\cdots[[r,r]_2,r]_3\cdots]_{\ell m} \tag{6.2.62}
$$

を spherical harmonics といい $\boldsymbol{r}$ の ℓ 次の同次多項式であって $\Delta\mathcal{Y}_{\ell m}(\boldsymbol{r}) = 0$ を満たす。ここに

$$
\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 = (1/r^2)\partial_r(r^2\partial_r) - \boldsymbol{L}^2/r^2 \tag{6.2.63}
$$

は Laplcian である。

[直交表示の回転行列]

空間回転の演算子は

$$
\mathcal{R}(\Omega) = e^{-i\varphi L_z} e^{-i\theta L_y} e^{-i\psi L_z} \tag{6.2.64}
$$

ここに Ω=Euler angle=(φ, θ, ψ) である。D-函数 $D^{\ell}_{m,m'}(\Omega)$ は

$$
\begin{aligned}
D^{\ell}_{m,m'}(\Omega) &= < jm|\mathcal{R}(\Omega)|jm' > \\
&= < jm|e^{-i\varphi L_z} e^{-i\theta L_y} e^{-i\psi L_z}|jm' > \\
&= e^{-im\varphi} d^{j}_{m,m'}(\theta) e^{-im'\psi}
\end{aligned}
\tag{6.2.65}
$$

で定義される。また d-函数 $d^{\ell}_{m,m'}(\theta)$ は

$$
d^{\ell}_{m,m'}(\theta) =< jm|e^{-i\theta L_y}|jm' > \tag{6.2.66}
$$

である。

直交表示の軌道角運動量演算子の ccr を用いて

$$
\begin{aligned}
& e^{-i\theta L_z} x e^{i\theta L_z} = x + (-i\theta)/1![L_z, x] + (-i\theta)^2/2![L_z, [L_z, x]] + \cdots \\
& = x\cos\theta + y\sin\theta \\
& e^{-i\theta L_z} y e^{i\theta L_z} = -x\sin\theta + y\cos\theta \\
& e^{-i\theta L_z} z e^{i\theta L_z} = z
\end{aligned}
\tag{6.2.67}
$$

が簡単に得られる。一般に、単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ の周りの有限角 φ だけの回転

$$
\boldsymbol{r}' = \mathcal{R}(\varphi \boldsymbol{n})\ \boldsymbol{r}\ \mathcal{R}(\varphi \boldsymbol{n})^{-1} = e^{-i\varphi \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}}\ \boldsymbol{r}\ e^{i\varphi \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}} \tag{6.2.68}
$$

の時も、Hausdorff の公式を使って簡単に求まる。

$$
\begin{aligned}
& [(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}), \boldsymbol{r}] = -i[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}]\ , \\
& [(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}), [(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}), \boldsymbol{r}]] = -[\boldsymbol{n}\times[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}]] = \boldsymbol{r} - (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{n}
\end{aligned}
\tag{6.2.69}
$$

より、高々 2 回繰り返せば十分である。こうして

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{r}' &= e^{-i\varphi \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}}\ \boldsymbol{r}\ e^{i\varphi \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}} \\
&= \boldsymbol{r}\cos\varphi - [\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}]\sin\varphi + (1-\cos\varphi)(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{n}
\end{aligned}
\tag{6.2.70}
$$

が求まる。

[Euler 角による回転]

一般に 3 次元回転は φ と 2 つの方向によって指定される $\boldsymbol{n}$ に見られるように、 3 つの角度パラメータを含んでいる。それを指定する一番便利な方法は Euler 角を用いることである。まず、Eq. (6.2.70) で $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{e}_z$ とすると、簡単な計算ののち

$$
e^{-i\varphi L_z}\ \boldsymbol{r}\ e^{i\varphi L_z} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{r} = M_z(\varphi)\boldsymbol{r} \tag{6.2.71}
$$

が得られる。同様に $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_y$, $\varphi\to\theta$ として y-軸周りの θ 回転を考えると

$$e^{-i\theta L_y}\ \boldsymbol{r}\ e^{i\theta L_y}=\begin{pmatrix}\cos\theta & 0 & -\sin\theta\\ 0 & 1 & 0\\ \sin\theta & 0 & \cos\theta\end{pmatrix}\boldsymbol{r}=M_y(\theta)\boldsymbol{r} \tag{6.2.72}$$

そこで、次の三つの回転の積 (6.2.64) を考えると、その座標への変換は

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}'&=\mathcal{R}(\varphi,\theta,\psi)\ \boldsymbol{r}\ \mathcal{R}(\varphi,\theta,\psi)^{-1}=e^{-i\varphi L_z}e^{-i\theta L_y}e^{-i\psi L_z}\ \boldsymbol{r}\ e^{i\psi L_z}e^{i\theta L_y}e^{i\varphi L_z}\\ &=M_z(\psi)M_y(\theta)M_z(\varphi)\ \boldsymbol{r}=M(\varphi,\theta,\psi)\ \boldsymbol{r}\end{aligned} \tag{6.2.73}$$

と表される。$M(\varphi,\theta,\psi)$ を具体的に書くと

$$\begin{aligned}&M(\varphi,\theta,\psi)\\ &=\begin{pmatrix}\cos\varphi\cos\theta\cos\psi-\sin\varphi\sin\psi & \sin\varphi\cos\theta\cos\psi+\cos\varphi\sin\psi & -\sin\theta\cos\psi\\ -\cos\varphi\cos\theta\sin\psi-\sin\varphi\cos\psi & -\sin\varphi\cos\theta\sin\psi+\cos\varphi\cos\psi & \sin\theta\sin\psi\\ \cos\varphi\sin\theta & \sin\varphi\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{6.2.74}$$

である。

[rank 1 の d-函数]

rank 1 の d-函数は、(6.2.61) を使って直交表示の座標回転 (6.2.72) から簡単に得られる。まず、$(r_\mu)=U\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{r}=U^{-1}(r_\mu)$ から

$$\boldsymbol{r}'=\mathcal{R}_y(\theta)\boldsymbol{r}\mathcal{R}_y(\theta)^{-1}=M_y(\theta)\boldsymbol{r} \tag{6.2.75}$$

は $(r'_\mu)=UM_y(\theta)U^{-1}(r_\mu)$ と書けるから

$$r'_\mu=\sum_\nu d^1_{\nu,\mu}(\theta)r_\nu=({}^td^1(\theta)(r_\mu))_\mu \tag{6.2.76}$$

より (6.2.61) を使って

$$\begin{aligned}{}^td^1(\theta)&=UM_y(\theta)U^{-1}=(1/2)\begin{pmatrix}-1 & -i & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{2}\\ 1 & -i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\theta & 0 & -\sin\theta\\ 0 & 1 & 0\\ \sin\theta & 0 & \cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 0 & 1\\ i & 0 & i\\ 0 & \sqrt{2} & 0\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}(1+\cos\theta)/2 & \sin\theta/\sqrt{2} & (1-\cos\theta)/2\\ -\sin\theta/\sqrt{2} & \cos\theta & \sin\theta/\sqrt{2}\\ (1-\cos\theta)/2 & -\sin\theta/\sqrt{2} & (1+\cos\theta)/2\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{6.2.77}$$

そこで

$$d^1(\theta) = \begin{pmatrix} (1+\cos\theta)/2 & -\sin\theta/\sqrt{2} & (1-\cos\theta)/2 \\ \sin\theta/\sqrt{2} & \cos\theta & -\sin\theta/\sqrt{2} \\ (1-\cos\theta)/2 & \sin\theta/\sqrt{2} & (1+\cos\theta)/2 \end{pmatrix} \tag{6.2.78}$$

が得られる。これが (6.2.16) である。ここから rank 1 の D-函数の表式として (6.2.15) が得られる。

6.3　オイラー角表示の角運動量演算子

[$\boldsymbol{I}'$ と $\boldsymbol{I}^2, \boldsymbol{I}'^2$, Jacobi 多項式との関係]

$\boldsymbol{I}$ に含まれている $\partial\psi$ 項の存在は、もしそれが無ければ $I_+(D^\ell_{\ell,m'}(\varphi,\theta,\varphi))^* = 0$　が任意の $m' = \ell \cdots - \ell$ が成り立たないことからある意味では必然的なものである。実際 $\boldsymbol{L}$ に対しては $m' = 0$ の時の $L_+(D^\ell_{\ell,0}(\varphi,\theta,\varphi))^* = 0$　しか成り立たない。更に、I_+ は半整数の D-函数に対しても $\ell \to j$ として上の式が成り立っている。例えば $j = 1/2$ の時

$$D^{1/2}_{m,m'}(\varphi,\theta,\varphi))^* = e^{im\varphi} d^{1/2}_{m,m'}(\theta) e^{im'\psi} \tag{6.3.1}$$

の $d^{1/2}_{m,m'}(\theta)$ に対しては

$$I_+ = e^{im\varphi}(\partial_\theta - m\cot\theta + m(1/sin\theta)) \tag{6.3.2}$$

から

$$\begin{aligned} & I_+ d^{1/2}_{1/2,1/2}(\theta) = e^{i(1/2)\varphi}(\partial_\theta - (1/2)\cot\theta + (1/2)(1/sin\theta))\cos\theta/2 \\ & = e^{i(1/2)\varphi}(-(1/2)\sin\theta/2 - (1/2)(\cos\theta)/(2\sin\theta/2) + (1/4)(1/sin\theta/2)) \\ & = e^{i(1/2)\varphi}(1/2)(1/\sin\theta/2)(-(\sin\theta/2)^2 - (1/2)(\cos\theta) + 1/2) \\ & = e^{i(1/2)\varphi}(1/2)(1/\sin\theta/2)((\cos\theta/2)^2 - (1/2)(\cos\theta) - 1/2) \\ & = e^{i(1/2)\varphi}(1/2)(1/\sin\theta/2)((1+\cos\theta)/2 - (1/2)(\cos\theta + 1)) = 0 \end{aligned} \tag{6.3.3}$$

また

$$\begin{aligned} & I_+ d^{1/2}_{1/2,-1/2}(\theta) = e^{i(1/2)\varphi}(\partial_\theta - (1/2)\cot\theta - (1/2)(1/sin\theta))(-\sin\theta/2) \\ & = e^{i(1/2)\varphi}(-(1/2)\cos\theta/2 + (1/2)(\cos\theta)/(2\cos\theta/2) + (1/4)(1/cos\theta/2)) \\ & = e^{i(1/2)\varphi}(1/2)(1/\cos\theta/2)(-(\cos\theta/2)^2 + (1/2)(1+\cos\theta)) \\ & = e^{i(1/2)\varphi}(1/2)(1/\cos\theta/2)(-(1+\cos\theta)/2 + (1/2)(1+\cos\theta)) = 0 \end{aligned} \tag{6.3.4}$$

同様に $m, m' = -1/2, m'$ に対しても正しい matrix element を与える事が確かめられる。

$\boldsymbol{I}$ はランク 1 のテンソル演算子であるから定義により

$$I'_\mu = \mathcal{R}(\Omega) I_\mu \mathcal{R}(\Omega)^{-1} = \sum_\nu D^1_{\nu,\mu}(\Omega) I_\nu \tag{6.3.5}$$

が成り立つ。ここに $\Omega = (\varphi, \theta, \psi)$ は Euler angle である。元の座標系は実験室系 $\mathcal{K}$, 変換先の座標系は運動する剛体に結びついた body-fixed frame $\mathcal{K}'$ である。ランク 1 の D-函数の具体的な表式 (6.2.15) を用いて、新しい座標系での "角運動量演算子" $\boldsymbol{I}'$ を求めることができる。しかし (6.3.5) の D-函数の Euler angle と $\boldsymbol{I}$ に含まれる Euler angle の微分が非可換なので、取り扱いには注意を要する。ここでは $\boldsymbol{I}$ を見出した方法に習ってより簡単な方法を示す。まず Euler ange $\Omega = (\alpha, \beta, \theta)$ を単なるパラメータして一般の $\boldsymbol{J}$ に対して $\mathcal{R}(\Omega) = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z}$ を定義する。J'_μ は

$$\boldsymbol{J}' = \mathcal{R}(\Omega) \boldsymbol{J} \mathcal{R}(\Omega)^{-1} = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z} \boldsymbol{J} e^{i\gamma J_z} e^{i\beta J_y} e^{i\alpha J_z} \tag{6.3.6}$$

で与えられる。直交成分では

$$\begin{aligned}
&e^{-i\gamma J_z} J_1 e^{i\gamma J_z} = J_1 + \gamma J_2 + (\gamma)^2/2!(-J_1) + (\gamma)^3/3!(-J_2) + \cdots \\
&= (\cos\gamma) J_1 + (\sin\gamma) J_2 \\
&e^{-i\gamma J_z} J_2 e^{i\gamma J_z} = J_2 - \gamma J_1 + (\gamma)^2/2!(-J_2) + (\gamma)^3/3!(-J_1) + \cdots \\
&= -(\sin\gamma) J_1 + (\cos\gamma) J_2 \\
&e^{-i\gamma J_z} J_3 e^{i\gamma J_z} = 0
\end{aligned} \tag{6.3.7}$$

より

$$e^{-i\gamma J_z} \boldsymbol{J} e^{i\gamma J_z} = \begin{pmatrix} \cos\gamma & \sin\gamma & 0 \\ -\sin\theta & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{J} \tag{6.3.8}$$

これは $\boldsymbol{r}$ の変換と同じである！ そこで 直交表示では $\boldsymbol{J}' = M(\Omega)\boldsymbol{J}$、 tensor 表示 (spherical vector 表示) では $(J'_\mu) = {}^tD^1(\Omega)(J_\mu)$ となる。ここで $\boldsymbol{J} \to \boldsymbol{I}$, Ω を普通の Euler angle へ戻して

$$I'_\mu = \sum_\nu D^1_{\nu,\mu}(\Omega) I_\nu = \sum_\nu e^{-\nu\varphi} d^1_{\nu,\mu}(\theta) e^{-i\nu\psi} I_\nu \tag{6.3.9}$$

と成る。ここに、直交表示と tensor 表示の間の変換は $I_1 = -(1/sqrt2)I_+, I_0 = I_z, I_{-1} = (1/\sqrt{2})I_-$ より

$$(I_\mu) = A \begin{pmatrix} I_+ \\ I_z \\ I_- \end{pmatrix} \quad \text{with} \quad A = \begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \tag{6.3.10}$$

と表わされる。そこで

$$
\begin{pmatrix} I'_+ \\ I'_z \\ I'_- \end{pmatrix} = A^{-1t}D^1(\Omega)A \begin{pmatrix} I_+ \\ I_z \\ I_- \end{pmatrix}
$$
$$
\text{with} \qquad ({}^t(D^1(\Omega)))_{\mu,\nu} = D^1_{\nu,\mu}(\Omega) = e^{-i\nu\varphi}d^1_{\nu,\mu}(\theta)e^{-i\mu\psi} \tag{6.3.11}
$$

と成る。A と $(e^{-i\mu\psi})$ は可換等より

$$
(A^{-1t}(D^1(\Omega)A))_{\mu,\nu} = e^{-i\mu\varphi}(A^{-1t}(d^1(\theta)A))_{\mu,\nu}e^{-i\nu\psi} \tag{6.3.12}
$$

ここに

$$
(A^{-1t}(d^1(\theta))A = \begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1+\cos\theta)/2 & \sin\theta/\sqrt{2} & (1-\cos\theta)/2 \\ (-\sin\theta)/\sqrt{2} & \cos\theta & \sin\theta/\sqrt{2} \\ (1-\cos\theta)/2 & (-\sin\theta)/\sqrt{2} & (1+\cos\theta)/2 \end{pmatrix}
$$
$$
\times \begin{pmatrix} -1\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1+\cos\theta)/2 & -\sin\theta & -(1-\cos\theta)/2 \\ (\sin\theta)/2 & \cos\theta & (\sin\theta)/2 \\ -(1-\cos\theta)/2 & -\sin\theta & (1+\cos\theta)/2 \end{pmatrix} \tag{6.3.13}
$$

一方

$$
\begin{pmatrix} I_+ \\ I_z \\ I_- \end{pmatrix} = (e^{i\nu\varphi}) \begin{pmatrix} i\cot\theta & 1 & (-i)(1/\sin\theta) \\ (-i) & 0 & 0 \\ i\cot\theta & (-1) & (-i)(1/\sin\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_\varphi \\ \partial_\theta \\ \partial_\psi \end{pmatrix} \tag{6.3.14}
$$

より

$$
\begin{pmatrix} I'_+ \\ I'_z \\ I'_- \end{pmatrix} = (e^{-i\mu\psi})
$$
$$
\times \begin{pmatrix} (1+\cos\theta)/2 & -\sin\theta & -(1-\cos\theta)/2 \\ (\sin\theta)/2 & \cos\theta & (\sin\theta)/2 \\ -(1-\cos\theta)/2 & -\sin\theta & (1+\cos\theta)/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i\cot\theta & 1 & (-i)(1/\sin\theta) \\ (-i) & 0 & 0 \\ i\cot\theta & (-1) & (-i)(1/\sin\theta) \end{pmatrix}
$$
$$
\times \left(\partial_\varphi // \partial_\theta // \partial_\psi\right) \tag{6.3.15}
$$

そこで

$$
\begin{pmatrix} I'_+ \\ I'_z \\ I'_- \end{pmatrix} = (e^{-i\mu\psi}) \begin{pmatrix} i(1/\sin\theta) & 1 & (-i)\cot\theta \\ 0 & 0 & -i \\ i(1/\sin\theta) & -1 & (-i)\cot\theta \end{pmatrix} \left(\partial_\varphi // \partial_\theta // \partial_\psi\right)
$$
$$
= \begin{pmatrix} e^{-i\psi}(\partial_\theta - i\cot\theta\partial_\psi + i(1/\sin\theta)\partial_\varphi \\ (-i)\partial_\psi \\ e^{i\psi}(-\partial_\theta - i\cot\theta\partial_\psi + i(1/\sin\theta)\partial_\varphi \end{pmatrix} \tag{6.3.16}
$$

つまり

$$
\begin{aligned}
&I'_+ = I'_x + iI_y = e^{-i\psi}(\partial_\theta - i\cot\theta\partial_\psi + i(1/\sin\theta)\partial_\varphi) \\
&I_- = I'_x - iI'y = e^{i\psi}(-\partial_\theta - i\cot\theta\partial_\psi + i(1/\sin\theta)\partial_\varphi) \\
&I'_z = (-i)\partial_\psi
\end{aligned}
\tag{6.3.17}
$$

これを以前の $\boldsymbol{I}$ の結果

$$
\begin{aligned}
&I_+ = I_x + iI_y = e^{i\varphi}(\partial_\theta + i\cot\theta\partial_\varphi - i(1/\sin\theta)\partial_\psi) \\
&I_- = I_x - iI_y = e^{-i\varphi}(-\partial_\theta + i\cot\theta\partial_\varphi - i(1/\sin\theta)\partial_\psi) \\
&I_z = (-i)\partial_\varphi
\end{aligned}
\tag{6.3.18}
$$

と比較すると $\varphi \leftrightarrow \psi, \theta \leftrightarrow -\theta$ の変換が $I_\pm \leftrightarrow I'_\mp, I_z \leftrightarrow I'_z$ の変換に対応していることが分かる。あとで DG-多項式のところで分かる様に、この変換は複素 matrix $R_{\alpha,i}$ の α と i をひっくり返す転置変換に対応する。ここでは、この変換を変換 (C) と呼ぶ事にする。この時

$$
\begin{aligned}
(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* &= e^{im\varphi}d^j_{m,m'}(\theta)e^{im'\psi} \rightarrow e^{im\psi}d^j_{m,m'}(-\theta)e^{im'\varphi} \\
&= e^{im'\varphi}d^j_{m',m}(\theta)e^{im'\varphi} = (D^j_{m',m}(\varphi,\theta,\psi)^*
\end{aligned}
\tag{6.3.19}
$$

より

$$
I_z(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* = m(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* \tag{6.3.20}
$$

は

$$
I'_z(D^j_{m',m}(\varphi,\theta,\psi)^* = m(D^j_{m',m}(\varphi,\theta,\psi)^* \tag{6.3.21}
$$

つまり $m \leftrightarrow m'$ として

$$
I'_z(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* = m'(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* \tag{6.3.22}
$$

となる。また後で示す様に $\boldsymbol{I}'^2 = \boldsymbol{I}^2$ より

$$
\boldsymbol{I}'^2(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* = j(j+1)(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* \tag{6.3.23}
$$

が成り立つ。

$\boldsymbol{I}$ の ccr で上の変換 (C) を行うと

$$
[I'_+, I'_-] = -2I'_z \quad , \quad [I'_z, I'_\pm] = \mp I'_\pm \tag{6.3.24}
$$

が得られる。ここから $[I'_x, I'_y] = -iI'_z$ 等と $\boldsymbol{I}$ の ccr と比べて符号が逆であることが分かる。従って、I'_- が raising operator, I'_+ が lowering operator に対応する。従って

$$
\begin{aligned}
I'_-(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* &= \sqrt{(j-m')(j'+m'+1)}(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* \\
I'_+(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* &= \sqrt{(j+m')(j-m'+1)}(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^*
\end{aligned}
\tag{6.3.25}
$$

が成り立つ。更に直接計算することにより

$$
[I'_z, I_\pm] = [I'_z, I_z] = 0 \quad , \quad [I'_+, I_+] = [I'_+, I_-] = [I'_+, I_z] = 0 \quad \text{and h.c.} \tag{6.3.26}
$$

が分かるから、全ての α, β に対して

$$
[I'_\alpha, I_\beta] = 0 \tag{6.3.27}
$$

である事が分かる。

(練習問題-1) (6.3.26) および (6.3.27) を示せ。

($[\boldsymbol{I}', \boldsymbol{I}] = 0$ の別の証明)

$I'_\mu = \sum_\nu D^1_{\nu,\mu}(\Omega) I_\nu$ より

$$
\begin{aligned}
[I'_\mu, I_\nu] &= \sum_{\mu'} [D^1_{\mu',\mu}(\Omega) I'_\mu, I_\nu] \\
&= -\sum_{\mu'} [I_\nu, D^1_{\mu',\mu}(\Omega)] I_{\mu'} + \sum_{\mu'} D^1_{\mu',\mu}(\Omega)[I_{\mu'}, I_\nu]
\end{aligned}
\tag{6.3.28}
$$

ここで最後の等式ではじめの項は $D^1_{\mu',\mu}(\Omega) = (-)^{\mu'-\mu}(D^1_{-\mu',-\mu}(\Omega))^*$ は tensor operator だから

$$
\begin{aligned}
&\text{1st term} = -\sum_{\mu'} I_{\mu'} (-)^{\mu'-\mu} [I_\nu, (D^1_{-\mu',-\mu}(\Omega))^*] I_{\mu'} \\
&= -\sum_{\mu'} (-)^{\mu'-\mu} \sqrt{2} < 1 - \mu' 1\nu | 1\nu - \mu' > (D^1_{\nu-\mu',-\mu}(\Omega))^* I_{\mu'} \\
&= -\sum_{\mu'} (-)^{\mu'-\mu} \sqrt{2} (-)^{1+\nu} < 1\mu' - \nu 1\nu | 1\mu' > (-)^{\nu-\mu'+\mu} D^1_{\mu'-\nu,\mu}(\Omega) I_{\mu'} \\
&= -\sum_{\mu'} \sqrt{2} < 1\nu 1\mu' - \nu | 1\mu' > D^1_{\mu'-\nu,\mu}(\Omega) I_{\mu'} \\
&= -\sum_{\mu'} \sqrt{2} < 1\nu 1\mu' | 1\nu + \mu' > D^1_{\mu',\mu}(\Omega) I_{\nu+\mu'}
\end{aligned}
\tag{6.3.29}
$$

また二項目は

$$
\begin{aligned}
\text{2nd term} &= \sum_{\mu'} D^1_{\mu',\mu}(\Omega)[I_{\mu'}, I_\nu] = \sum_{\mu'} D^1_{\mu',\mu}(\Omega)[I_{\mu'}, I_\nu] \\
&= \sum_{\mu'} D^1_{\mu',\mu}(\Omega)\sqrt{2} < 1\nu 1\mu' | \nu + \mu > I_{\nu+\mu'} \\
&= \sum_{\mu'} \sqrt{2} < 1\nu 1\mu' | \nu + \mu > D^1_{\mu',\mu}(\Omega) I_{\nu+\mu'} \qquad (6.3.30)
\end{aligned}
$$

より 2 項は互いに打ち消し合う。

一般に

$$
[I_\nu, (D^\ell_{m,m'}(\Omega))^*] = \sqrt{\ell(\ell+1)} < \ell m 1\nu | \ell \nu + m > (D^\ell_{\nu+m,m'}(\Omega))^* \qquad (6.3.31)
$$

が成り立つ。更に 変換 (C) によって $I_\nu \rightarrow (-)^\nu I'_{-\nu}$, D-函数は $m \leftrightarrow m'$ として

$$
(-)^\nu [I'_{-\nu}, (D^\ell_{m',m}(\Omega))^*] = \sqrt{\ell(\ell+1)} < \ell m 1\nu | \ell \nu + m > (D^\ell_{m',\nu+m}(\Omega))^* \qquad (6.3.32)
$$

より $\nu \rightarrow -\nu, m \leftrightarrow m'$ に戻して

$$
[I'_\nu, (D^\ell_{m,m'}(\Omega))^*] = (-)^\nu \sqrt{\ell(\ell+1)} < \ell m' 1 -\nu | \ell m' - \nu > (D^\ell_{m,m'-\nu}(\Omega))^* \qquad (6.3.33)
$$

あるいは

$$
\begin{aligned}
&(-)^{m-m'}[I'_\nu, D^\ell_{-m,-m'}(\Omega)] \\
&= (-)^\nu \sqrt{\ell(\ell+1)} < \ell m' 1 -\nu | \ell m' - \nu > (-)^{m-m'+\nu} D^\ell_{-m,-m'+\nu}(\Omega) \qquad (6.3.34)
\end{aligned}
$$

より m, m' の符号を変えて

$$
[I'_\nu, D^\ell_{m,m'}(\Omega)] = \sqrt{\ell(\ell+1)} < 1\nu \ell m' | \ell m' + \nu > D^\ell_{m,m'+\nu}(\Omega) \qquad (6.3.35)
$$

が得られる。そこで $[I'_\nu, I_\mu] = 0$ を使って

$$
\begin{aligned}
[I'_\nu, I'_\mu] &= \sum_{\mu'} [I'_\nu, D^1_{\mu',\mu}(\Omega)] I_{\mu'} \\
&= \sum_{\mu'} \sqrt{2} < 1\nu 1\mu | 1 \nu + \mu > D^1_{\mu',\mu+\nu}(\Omega) I_{\mu'} \\
&= \sqrt{2} < 1\nu 1\mu | 1\nu + \mu > I'_{\nu+\mu} \qquad (6.3.36)
\end{aligned}
$$

が得られる。つまり

$$
[I'_\nu, I'_\mu] = -\sqrt{2} < 1\mu 1\nu | 1\mu + \nu > I'_{\mu+\nu} \qquad (6.3.37)
$$

これは

$$[I_\nu, I_\mu] = \sqrt{2} < 1\mu 1\nu | 1\mu+\nu > I_{\mu+\nu} \tag{6.3.38}$$

と比較して符号が逆！ つまり直交成分では $[I'_i, I'_j] = -ie_{ijk}I'_k$ を意味する。

Cf. $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ が vector の時 ($[I_i, a_j] = ie_{i,j,k}a_k$ etc.)

$$(\boldsymbol{aI})(\boldsymbol{bI}) - (\boldsymbol{bI})(\boldsymbol{aI}) = -i[\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}]\boldsymbol{I} \tag{6.3.39}$$

しかし $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{b} = \boldsymbol{e}_y$ (絶対静止基底) の時は $[I_x, I_y] = iI_z$ である。(6.3.39) で $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ を $\boldsymbol{e}_\xi, \boldsymbol{e}_\eta, \boldsymbol{e}_\zeta$ (body fixed frame の基底) とすると

$$I'_x = (\boldsymbol{e}_\xi \boldsymbol{I}) \quad , \quad I'_y = (\boldsymbol{e}_\eta \boldsymbol{I}) \quad , \quad I'_z = (\boldsymbol{e}_\zeta \boldsymbol{I}) \tag{6.3.40}$$

として $[I'_x, I'_y] = -iI'_z$ と成る。

$[\boldsymbol{I}', \boldsymbol{I}] = 0$ だが二つは無関係ではない。$(\boldsymbol{I}')^2 = \boldsymbol{I}^2$ が成り立つ。まず $\boldsymbol{L}^2 = (L_x)^2 + (L_y)^2 + (L_z)^2 = (L_+L_- + L_-L_+)/2 + (L_z)^2$ を求める。そのためには

$$e^{i\varphi}\partial_\varphi e^{-i\varphi} = \partial_\varphi - i \tag{6.3.41}$$

を使って

$$L_+ = aX = (X + \cot\theta)a \quad , \quad L_- = bY = (Y - \cot\theta)b \tag{6.3.42}$$

としておくと便利である。ここに

$$\begin{aligned} &a = e^{i\varphi} \quad , \quad b = e^{-i\varphi} = a^{-1} \\ &X = \partial_\theta + i\cot\theta\partial_\varphi \quad , \quad Y = -\partial_\theta + i\cot\theta\partial_\varphi \end{aligned} \tag{6.3.43}$$

である。そこで

$$\begin{aligned} &(L_x)^2 + (L_y)^2 = (L_+L_- + L_-L_+)/2 \\ &= (aXbY + bYaX)/2 = ((X+\cot\theta)Y + (Y-\cot\theta)X)/2 \\ &= (XY + YX + \cot\theta(Y - X))/2 \\ &= -(\partial_\theta)^2 - (\cot\theta)^2(\partial_\varphi)^2 - \cot\theta\ \partial_\theta \end{aligned} \tag{6.3.44}$$

から

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{L}^2 = (L_+L_- + L_-L_+)2 + (L_z)^2 \\ &= -(\partial_\theta)^2 - \cot\theta\ \partial_\theta - (1/\sin\theta)^2(\partial_\varphi)^2 \\ &= -(1/\sin\theta)\partial_\theta(\sin\theta\ \partial_\theta) - (1/\sin\theta)^2(\partial_\varphi)^2 \end{aligned} \tag{6.3.45}$$

が得られる。更に $Z=(1/\sin\theta)\partial_\psi$ として

$$I_+ = a(X-iZ) = (X+\cot\theta - iZ)a \quad , \quad I_- = b(Y-iZ) = (Y-\cot\theta - i)b \quad (6.3.46)$$

より

$$\begin{aligned}
&(I_+I_- + I_-I_+)/2 = (a(X-iZ)b(Y-iZ) + b(Y-iZ)a(X-iZ))/2 \\
&= ((X+\cot\theta - iZ)(Y-iZ) + (Y-\cot\theta - iZ)(X-iZ))/2 \\
&= (XY+YX+\cot\theta(Y-X))/2 - i(X+Y)Z - Z^2 \\
&= (L_+L_- + L_-L_+)2 - i(X+Y)/2Z - Z^2 \\
&= -(\partial_\theta)^2 - (\cot\theta)^2(\partial_\varphi)^2 - \cot\theta\partial_\theta + 2(\cot\theta/\sin\theta)\varphi\psi - \frac{1}{(\sin\theta)^2}(\partial_\psi)^2
\end{aligned} \quad (6.3.47)$$

から

$$\boldsymbol{I}^2 = -\frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\ \partial_\theta) - \frac{1}{(\sin\theta)^2}[(\partial_\varphi)^2 + (\partial_\psi)^2 - 2\cos\theta\ \partial_\varphi\partial_\psi] \quad (6.3.48)$$

が得られる。この式は φ と ψ の交換に対して対称である。更に変換 (C) を用いると $(\boldsymbol{I}')^2 = \boldsymbol{I}^2$ も分かる。

以上から

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{I}^2(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* = j(j+1)(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* \\
&I_z(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* = m(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* \\
&\boldsymbol{I}'^2(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* = j(j+1)(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* \\
&I'_z(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^* = m'(D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)^*
\end{aligned} \quad (6.3.49)$$

が成り立つ。$d^j_{m,m'}(\theta)$ についてこれを表すと

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta) - \frac{m^2+m'^2-2mm'\cos\theta}{(\sin\theta)^2} + j(j+1)\right] d^j_{m,m'}(\theta) = 0 \quad (6.3.50)$$

or

$$\left[\partial_{\cos\theta}((1-(\cos\theta)^2)\partial_{\cos\theta}) - \frac{m^2+m'^2-mm'\cos\theta}{(1-(\cos\theta)^2} + j(j+1)\right] d^j_{m,m'}(\theta) = 0 \quad (6.3.51)$$

or $x=\cos\theta$ として

$$\left[\partial_x((1-x^2)\partial_x) - \frac{m^2+m'^2-2mm'x}{(1-x^2)} + j(j+1)\right] d^j_{m,m'}(\theta) = 0 \quad (6.3.52)$$

or

$$\left[(1-x^2)(\delta_x)^2 - 2x\partial_x - \frac{m^2+m'^2-2mm'x}{(1-x^2)} + j(j+1)\right] d^j_{m,m'}(\theta) = 0 \qquad (6.3.53)$$

特に $m = m' = 0$ かつ $j = \ell =$ integer の時 $d^\ell_{0,0}(\theta)$ は Legendre 函数 $P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!}(\partial_x)^\ell (x^2-1)^\ell$ となる。つまり

$$[\partial_x((1-x^2)\partial_x) + \ell(\ell+1)]P_\ell(x) = 0 \qquad (6.3.54)$$

2 階常微分方程式 (6.3.62) の解は定数因子を除いて Jacobi 多項式 $P^{(\alpha,\beta)}_n(x)$ with $x = \cos\theta$ で表わされる。

[Jacobi polynomial]

Jacobi 多項式は

$$\begin{aligned}&[(1-x^2)\partial_x^2 + (\beta-\alpha-(\alpha+\beta+2)x)\partial_x + n(n+\alpha+beta+1)]\\ &\times P^{(\alpha,\beta)}_n(x) = 0\end{aligned} \qquad (6.3.55)$$

を満たす n 次の多項式である。ここで $x = \cos\theta$ とすると

$$(\sin\theta)^2((1/\sin\theta)\partial_\theta)^2 = (\sin\theta)^2(1/\sin\theta)\partial_\theta)(1/\sin\theta)\partial_\theta) = (\partial_\theta)^2 - \cot\theta(\partial_\theta) \quad (6.3.56)$$

より

$$\left[(\partial_\theta)^2 + \left(\frac{\alpha-\beta}{\sin\theta} + (\alpha+\beta+1)\cot\theta\right)\partial_\theta + n(n+\alpha+beta+1)\right] P^{(\alpha,\beta)}_n(x) = 0 \qquad (6.3.57)$$

となる。一方、$d^j_{m,s}(\theta)$ の満たす式は

$$\left[(\partial_\theta)^2 + \cot\theta(\partial_\theta) - \frac{m^2+s^2-ms\cos\theta}{(\sin\theta)^2} + j(j+1)\right] d^j_{m,s}(\theta) = 0 \qquad (6.3.58)$$

である。

(normalization)

また直交性は、以前の角運動量のところの「数学的 補遺 1」の (3.5.65) 式より

$$\begin{aligned}(P^{(\alpha,\beta)}_n, P^{(\alpha,\beta)}_m) &= \int_{-1}^{1} dx (1-x)^\alpha (x+1)^\beta P^{(\alpha,\beta)}_n(x) P^{(\alpha,\beta)}_m(x)\\ &= \delta_{n,m} 2^{\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{(2n+\alpha+\beta+1)n!\Gamma(n+\alpha+\beta+1)}\end{aligned} \qquad (6.3.59)$$

である。あるいは $x=\cos\theta$ として

$$\begin{aligned}
&\int_0^\pi \sin\theta d\theta(\sin\theta/2)^{2\alpha}(\cos\theta/2)^{2\beta}P_n^{(\alpha,\beta)}(x)P_m^{(\alpha,\beta)}(x)\\
&=\delta_{n,m}2\frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{(2n+\alpha+\beta+1)n!\Gamma(n+\alpha+\beta+1)}\\
&=\delta_{n,m}2\frac{(n+\alpha)!(n+\beta)!}{(2n+\alpha+\beta+1)n!(n+\alpha+\beta)!}
\end{aligned}\tag{6.3.60}$$

である。d-函数と Jacobi 多項式の関係を

$$d^j_{m,s}(\theta)=N(\sin\theta/2)^\alpha(\cos\theta/2)^\beta P_n^{(\alpha,\beta)}(x)\tag{6.3.61}$$

として normalization を

$$\frac{(2j+1)}{2}\int_0^\pi \sin\theta d\theta(d^j_{m,s}(\theta))^2=1\tag{6.3.62}$$

とすると

$$N^{-2}=\frac{(2j+1)(n+\alpha)!(n+\beta)!}{(2n+\alpha+\beta+1)n!(n+\alpha+\beta)!}\tag{6.3.63}$$

そこで phase を除いて

$$\begin{aligned}
d^j_{m,s}(\theta)=(phase)&\sqrt{\frac{(2n+\alpha+\beta+1)n!(n+\alpha+\beta)!}{(2j+1)(n+\alpha)!(n+\beta)!}}\\
&\times(\sin\theta/2)^\alpha(\cos\theta/2)^\beta P_n^{(\alpha,\beta)}(x)
\end{aligned}\tag{6.3.64}$$

となる。ここで $B=(\sin\theta/2)^\alpha(\cos\theta/2)^\beta$ として

$$\partial_\theta B=B\frac{1}{2}\frac{\alpha(\cos\theta/2)^2-\beta(\sin\theta/2)^2}{(\sin\theta/2\cos\theta/2)}=B\frac{1}{2}\frac{A}{\sin\theta}\tag{6.3.65}$$

ここに

$$\begin{aligned}
A&=(\alpha-\beta)+(\alpha+\beta)(\cos\theta)\\
\partial_\theta A&=-(\alpha+\beta)\sin\theta
\end{aligned}\tag{6.3.66}$$

そこで

$$\partial_\theta(\sin\theta/2)^\alpha(\cos\theta/2)^\beta P=\partial_\theta BP=B\left(\frac{(1/2)A}{\sin\theta}P+\partial_\theta P\right)\tag{6.3.67}$$

より

$$(\sin\theta\partial_\theta)BP=B[(1/2)AP+\sin\theta\partial_\theta P]\tag{6.3.68}$$

そこで

$$
\begin{aligned}
&(1/\sin\theta)\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta)BP = (1/\sin\theta)\{\partial_\theta B\,[(1/2)AP+\sin\theta\partial_\theta P]\\
&+B\,[(1/2)(\partial_\theta A)P+(1/2)A\partial_\theta P+\cos\theta\partial_\theta P\\
&+(\sin\theta)(\partial_\theta)^2 P\big]\}\\
&=(1/\sin\theta)B\,[(1/2)A/\sin\theta[(1/2)AP+\sin\theta\partial_\theta P]\\
&+(1/2)(\partial_\theta A)P+(1/2)A\partial_\theta P+\cos\theta\partial_\theta P+(\sin\theta)(\partial_\theta)^2 P\big]\\
&=(1/\sin\theta)B\,\big[(1/2A)^2/\sin\theta P+(1/2)A\partial_\theta P\\
&-(1/2)(\alpha+\beta)\sin\theta P+(1/2)A\partial_\theta P+\cos\theta\partial_\theta P+(\sin\theta)(\partial_\theta)^2 P\big]\\
&=(1/\sin\theta)B\,\big[(1/2A)^2/\sin\theta P-(1/2)(\alpha+\beta)\sin\theta P\\
&+(A+\cos\theta)\partial_\theta P+(\sin\theta)(\partial_\theta)^2 P\big]\\
&=B\,\big[(1/2A)^2/(\sin\theta)^2 P-(1/2)(\alpha+\beta)P\\
&+((\alpha-\beta)+(\alpha+\beta+1)(\cos\theta))/\sin\theta\partial_\theta P+(\partial_\theta)^2 P\big]
\end{aligned}
\tag{6.3.69}
$$

更に

$$
\begin{aligned}
&(1/2A)^2/(\sin\theta)^2 = (1/4)((\alpha-\beta)+(\alpha+\beta)(\cos\theta))^2/(\sin\theta)^2\\
&=(1/4)((\alpha-\beta)^2+2(\alpha^2-\beta^2)\cos\theta+(\alpha+\beta)^2(1-(\sin\theta))^2)/(\sin\theta)^2\\
&=(1/2)((\alpha^2+\beta^2)+(\alpha^2-\beta^2)\cos\theta)/(\sin\theta)^2-((\alpha+\beta)/2)^2
\end{aligned}
\tag{6.3.70}
$$

より

$$
\begin{aligned}
&(1/\sin\theta)\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta)BP = B\,\big[(\partial_\theta)^2 P\\
&+((\alpha-\beta)/\sin\theta+(\alpha+\beta+1)(\cot\theta))(\partial_\theta)P\\
&+((1/2)((\alpha^2+\beta^2)+(\alpha^2-\beta^2)\cos\theta)/(\sin\theta)^2\\
&-((\alpha+\beta)/2)(\alpha+\beta)/2+1))P]
\end{aligned}
\tag{6.3.71}
$$

そこで

$$
\big[(\partial_\theta)^2+\cot\theta(\partial_\theta)-(m^2+s^2-2ms\cos\theta)/(\sin\theta)^2+j(j+1)\big]\,d^j_{m,s}(\theta)=0 \tag{6.3.72}
$$

は

$$
\begin{aligned}
&\big[(\partial_\theta)^2+((\alpha-\beta)/\sin\theta+(\alpha+\beta+1)\cot\theta)\partial_\theta\\
&+((\alpha^2+\beta^2)/2-(m^2+s^2)+((\alpha^2-\beta^2)/2+2ms)(\cos\theta)/(\sin\theta)^2\\
&+(j-(\alpha+\beta)/2)(j+(\alpha+\beta)/2+1))]\,P_n^{(\alpha,\beta)}(x)=0
\end{aligned}
\tag{6.3.73}
$$

これを

$$\left[(\partial_\theta)^2 + ((\alpha-\beta)/\sin\theta + (\alpha+\beta+1)\cot\theta)\partial_\theta + n(n+\alpha+\beta+1)\right] \\ \times P_n^{(\alpha,\beta)}(x) = 0 \tag{6.3.74}$$

と比較して $j(j+1)-((\alpha+\beta)/2)((\alpha+\beta)/2+1) = (j-(\alpha+\beta)/2)(j+(\alpha+\beta)/2+1) = n(n+\alpha+\beta+1)$ より

$$n = j - (\alpha+\beta)/2(\alpha^2+\beta^2)/2 = m^2+s^2 \\ (\alpha^2-\beta^2)/2 = -2ms \tag{6.3.75}$$

が得られる。そこで

$$\alpha^2 = (m-s)^2 \\ \beta^2 = (m+s)^2 \\ (\alpha\beta)^2 = (m^2-s^2)^2 \to \alpha\beta = m^2 - s^2 ors^2 - m^2 \tag{6.3.76}$$

となる。元の方程式はいずれも $m \leftrightarrow s, \alpha \leftrightarrow\leftrightarrow \beta$ の交換に対して対称であるから $\alpha\beta = m^2 - s^2$ と仮定して良い。この時

$$(\alpha+\beta)^2 = 2(m^2+s^2) + 2(m^2-s^2) = (2m)^2 \\ (\alpha-\beta)^2 = (2s)^2 \tag{6.3.77}$$

より二つの場合が存在する。

1. $(\alpha+\beta)/2 = m \to (\alpha-\beta)/2 = -s \to \alpha = m-s, \beta = m+s, n = j-m$
2. $(\alpha+\beta)/2 = -m \to (\alpha-\beta)/2 = s \to \alpha = -(m-s), \beta = -(m+s), n = j+m$

いずれの場合も

$$N = (phase)\sqrt{\frac{(2n+\alpha+\beta+1)n!(n+\alpha+\beta)!}{(2j+1)(n+\alpha)!(n+\beta)!}} \\ = (phase)\sqrt{\frac{(j+m)!(j-m)!}{(j+s)!(j-s)!}} \tag{6.3.78}$$

ここから $n = \mathrm{integer}$ が分かる。Jacobi 多項式は通常

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(1) = \binom{n+\alpha}{\alpha} \tag{6.3.79}$$

と normalize されている。この時、Jacobi 多項式の Rodrigues の公式は

$$\begin{aligned}P_n^{(\alpha,\beta)}(x) &= (-)^n \frac{1}{2^n n!}(1-x)^{-\alpha}(x+1)^{-\beta} D^n (1-x)^{n+\alpha}(x+1)^{n+\beta} \\ &= \frac{1}{2^n}\sum_{m=0}^{n}\frac{(n+\alpha)(n+\alpha-1)\cdots(n+\alpha-m+1)}{m!} \\ &\times\frac{(n+\beta)(n+\beta-1)\cdots(\beta+m+1)}{(n-m)!}(x-1)^{n-m}(x+1)^m \end{aligned} \tag{6.3.80}$$

より $x=\cos\theta$ として

$$\begin{aligned}&P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \\ &= \frac{1}{2^n}\sum_{m=0}^{n}\frac{(n+\alpha)(n+\alpha-1)\cdots(n+\alpha-m+1)}{m!} \\ &\frac{(n+\beta)(n+\beta-1)\cdots(\beta+m+1)}{(n-m)!}(x-1)^{n-m}(x+1)^m \\ &= \sum_{a=0}^{n}(-)^{n-a}\frac{(n+\alpha)!(n+\beta)!}{a!(n+\alpha-a)!(n-a)!(\beta+a)!}(\sin\theta/2)^{2(n-a)}(\cos\theta/2)^{2a}\end{aligned} \tag{6.3.81}$$

だから, 新しく

$$\begin{aligned}N &= (phase)\sqrt{\frac{(2n+\alpha+\beta+1)n!(n+\alpha+\beta)!}{(2j+1)(n+\alpha)!(n+\beta)!}} \\ &= (phase)\sqrt{\frac{(j+m)!(j-m)!}{(j+s)!(j-s)!}}\end{aligned} \tag{6.3.82}$$

として

$$\begin{aligned}&d^j_{m,s}(\theta) = N(\sin\theta/2)^{\alpha}(\cos\theta/2)^{\beta}P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \\ &= N\sum_{\max 0,-\beta}^{\min n,n+\alpha}(-)^{n-a}\frac{(n+\alpha)!(n+\beta)!}{(n+\alpha-a)!(\beta+a)!(n-a)!a!} \\ &\times(\sin\theta/2)^{2(n-a)+\alpha}(\cos\theta/2)^{2a+\beta}\end{aligned} \tag{6.3.83}$$

から 1. の場合

$$
\begin{aligned}
d^j_{m,s}(\theta) &= N \sum_{a=\max 0,-(m+s)}^{\min j-m,j-s} (-)^{j-m-a} \frac{(j-s)!(j+s)!}{(j-s-a)!(m+s+a)!(j-m-a)!a!} \\
&\times (\sin\theta/2)^{2(j-a)-(m+s)} (\cos\theta/2)^{2a+m+s} \\
&= (phase)\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+s)!(j-s)!} \\
&\times \sum_{a=\max 0,-(m+s)}^{\min j-m,j-s} (-)^{j-m-a} \frac{1}{(j-s-a)!(m+s+a)!(j-m-a)!a!} \\
&\times (\sin\theta/2)^{2(j-a)-(m+s)} (\cos\theta/2)^{2a+m+s}
\end{aligned}
\tag{6.3.84}
$$

2. の場合

$$
\begin{aligned}
d^j_{m,s}(\theta) &= N' \sum_{a=\max 0,(m+s)}^{\min j+m,j+s} (-)^{j+m-a} \frac{(j-s)!(j+s)!}{(j+s-a)!(-m-s+a)!(j+m-a)!a!} \\
&\times (\sin\theta/2)^{2(j-a)+(m+s)} (\cos\theta/2)^{2a-(m+s)} \\
&= N' \sum_{a=\max 0,-(m+s)}^{\min j-m,j-s} (-)^{j-s-a} \frac{(j-s)!(j+s)!}{(j-m-a)!a!(j-s-a)!(m+s+a)!} \\
&\times (\sin\theta/2)^{2(j-a)-(m+s)} (\cos\theta/2)^{2a+(m+s)} \\
&= (phase)'\sqrt{(2j+1)(j+m)!(j-m)!(j+s)!(j-s)!} \\
&\times \sum_{a=\max 0,-(m+s)}^{\min j-m,j-s} (-)^{j-s-a} \frac{1}{(j-m-a)!a!(j-s-a)!(m+s+a)!} \\
&\times (\sin\theta/2)^{2(j-a)-(m+s)} (\cos\theta/2)^{2a+(m+s)}
\end{aligned}
\tag{6.3.85}
$$

phase, phase' は微分方程式だけからは決まらない。ここではあとで議論する DG-多項式から導いた explicit な表示と比較する。これにより $phase = (-)^{m-s}, phase' = 1$ が分

かる。結局

$$
\begin{aligned}
&d^j_{m,s}(\theta) = \sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+s)!(j-s)!} \\
&\times \sum_{a=\max 0,-(m+s)}^{\min j-m,j-s} (-)^{j-s-a} \frac{1}{(j-m-a)!a!(j-s-a)!(m+s+a)!} \\
&\times (\sin\theta/2)^{2(j-a)-(m+s)} (\cos\theta/2)^{2a+(m+s)} \\
&= \sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+s)!(j-s)!} (\sin\theta/2)^{2j} \\
&\times \sum_{a=\max 0,-(m+s)}^{\min j-m,j-s} (-)^{j-s-a} \frac{1}{(j-m-a)!a!(j-s-a)!(m+s+a)!} (\cot\theta/2)^{2a+(m+s)}
\end{aligned}
\tag{6.3.86}
$$

が得られる。直交性は

$$
\frac{(2j+1)}{2} \int_0^\pi d^j_{m,s}(\theta) d^{j'}_{m,s}(\theta) = \delta_{j,j'} \tag{6.3.87}
$$

上の式により全ての $m, s = \ell \cdots - \ell$ について $d^\ell_{m,s}(\theta)$ を定義して、ここから対称性を求める。まず $m \leftrightarrow s$ とすると phase $(-)^{m-s}$ がでる。次に m, s の符号を変えると

$$
\begin{aligned}
&\text{sum 以下} = \sum_{a=\max 0,(m+s)}^{\min(\ell+m),(\ell+s)} (-)^{\ell+s-a} \frac{1}{(\ell+m-a)!a!(\ell+s-a)!(-m-s+a)!} \\
&\times (\cot\theta/2)^{2a-m-s}
\end{aligned}
\tag{6.3.88}
$$

ここで $a \to a+m+s$ に変えて phase $(-)^{\ell-m-a}$ に変わるから、$(-)^{m-s}$ の phase がでる。そこで、今度は $m \to -s, s \to -m$ と変えると

$$
\begin{aligned}
&\text{sum 以下} = \sum_{a=\max 0,(m+s)}^{\min(\ell+m),(\ell+s)} (-)^{\ell+m-a} \frac{1}{(\ell+s-a)!a!(\ell+m-a)!(-m-s+a)!} \\
&\times (\cot\theta/2)^{2a-m-s}
\end{aligned}
\tag{6.3.89}
$$

が得られる。今度は $a \to a+m+s$ に変えて phase は $(-)^{\ell-s-a}$ に変わるから全体として元へ戻る。結局

$$
\begin{aligned}
d^j_{m,s}(\theta) &= real = (-)^{m-s} d^j_{s,m}(\theta) \\
&= (-)^{m-s} d^j_{-m,-s}(\theta) = d^j_{-s,-m}(\theta)
\end{aligned}
\tag{6.3.90}
$$

次に $\theta \to -\theta$ に対しは matrix d^j は直交行列だから $(d^j(\theta))^t = (d^j(\theta)^{-1} = d^j(-\theta)$ そこで

$$
d^j_{m,s}(-\theta) = d^j_{s,m}(\theta) = (-)^{m-s} d^j_{m,s}(\theta) = d^j_{-m,-s}(\theta) \tag{6.3.91}
$$

結局、対称性

$$\begin{aligned} &d^j_{m,m'}(\theta) = real = (-)^{m-m'} d^j_{m',m}(\theta) = (-)^{m-m'} d^j_{-m,-m'}(\theta) \\ &= d^j_{-m',-m}(\theta) = d^j_{m',m}(-\theta) = d^j_{-m,-m'}(-\theta) \end{aligned} \tag{6.3.92}$$

が満たされている。(j =half integer の時の $-\theta$ の式は d の定義 $d^j_{m,m'}(\theta) =< jm|e^{-i\theta I_y}|jm' >$=real からでる。) これらを $D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)$ で書けば

$$\begin{aligned} (D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi))^* &= (-)^{m-m'} D^j_{-m,-m'}(\varphi,\theta,\psi) \\ &= D^j_{m',m}(-\psi,-\theta,-\varphi) \end{aligned} \tag{6.3.93}$$

となる。[特別の場合]

6.4 boson calculus

二種類の boson 演算子 $a_i^\dagger, a_i$ $(i=1,2)$ を導入する。ここに

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j}, [a_i, a_j] = 0, [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \tag{6.4.1}$$

これらを使って、2-次元スピノールと同じ数学的構造を作ることが出来る。これを quasi-spin とか boson calculus とか呼んでいる。$a_i|0>= 0$ $(i=1,2)$ を満たす $|0>$ を真空として

$$\begin{aligned} a_1^\dagger|0> &= |1/2, 1/2> = \psi^1 = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \\ a_2^\dagger|0> &= |1/2, -1/2> = \psi^2 = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \end{aligned} \tag{6.4.2}$$

を spin 1/2 の二つの状態とする。基本になる関係式は

$$\begin{aligned} &[a_i^\dagger a_j, a_k^\dagger a_\ell] = a_i^\dagger [a_j, a_k^\dagger a_\ell] - [a_i^\dagger, a_k^\dagger a_\ell] a_j \\ &= \delta_{j,k} a_i^\dagger a_\ell - \delta_{i,\ell} a_k^\dagger a_j m \end{aligned} \tag{6.4.3}$$

である。ここで shift operator を

$$E_{i,j} = a_i^\dagger a_j \quad , \quad E_{i,j}^\dagger = E_{j,i} \tag{6.4.4}$$

として、この式は一般に $i=1,\cdots,n$ に対して

$$[E_{i,j},E_{k,\ell}]=\delta_{j,k}E_{i,\ell}-\delta_{i,\ell}E_{k,j} \tag{6.4.5}$$

という U_n group の generaror を与える。特に $[E_{1,2},E_{2,1}]=E_{1,1}-E_{2,2}$ より $E_{1,2}$ を粒子 1 の 1 粒子状態から粒子 2 の 1 粒子状態への raising operator J_+, $E_{2,1}$ を lowering operator J_- に対応させせると、上の式が $[J_+,J_-]=2J_z$ となるためには $J_z=(E_{1,1}-E_{2,2})/2$ でなければならないということが分かる。もう一つの演算子の組み $N=E_{1,1}+E_{2,2}$ は系全体の粒子数で spinor の時の上付き添え字 1 or 2 の数で spinor の rank, すなわち角運動量の大きさの二倍 $2j$ を与える。すなわち $j=1/2$ の時が 1 粒子状態で、それはスピン 1/2 の二つの状態からなる 2 次元ベクトル空間である。すなわち $J_x=(J_++J_-)/2, J_y=(J_+-J_-)/(2i)$ とすると $\boldsymbol{J}=(J_x,J_y,J_z)$ がスピン角運動量演算子 $\boldsymbol{s}=\boldsymbol{\sigma}/2,\boldsymbol{\sigma}$ がパウリ行列である。これらは通常の角運動量演算子の交換関係を満たす。

一般の多粒子状態も角運動量状態に対応する。一般に j,m を整数、ないしは半整数として

$$|jm>=\frac{(a_1^\dagger)^{j+m}(a_2^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|0> \tag{6.4.6}$$

とするとこれらは

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{J}^2|jm>=j(j+1)|jm>\\&J_z|jm>=m|jm>\quad\text{where}\quad m=j,j-1,\cdots,-j\end{aligned} \tag{6.4.7}$$

を満たす。normalize された n boson 状態は $\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0>$ であるので $|jm>$ は normalize された正規直交状態で $<jm|j'm'>=\delta_{j,j'}\delta_{m,m'}$ を満たす。また、全 boson 数は $N=(j+m)+(j-m)=2j$ である。(6.4.5) で $\ell=k$ として k で sum を取ると $[N,E_{i,j}]=0$ が示せるから $N=2j$ は保存量である。

$n=2$ の時の $E_{i,j}$ はまた二つの複素変数 z_1,z_2 を使っても作ることができる。すなわち ∂_z を z についての微分作用素として

$$E_{i,j}=z_i\partial_{z_j}=z_i\frac{\partial}{\partial z_j}\quad\text{with}\quad i,j=1,2 \tag{6.4.8}$$

つまり z が $a^\dagger$, $\partial_z=\frac{\partial}{\partial z}$ が a に対応する。複素数 z には、調和振動子の coherent state のところで導入された Bargmann measure を仮定する。すなわち一種類の複素数 z に対

して $v_n(z) = z^n/\sqrt{n!}$ として

$$
\begin{aligned}
d\mu(z) &= \frac{1}{\pi} e^{-|z|^2}\,\mathrm{Re}\,z\,\mathrm{Im}\,z \\
\langle v_n | v'_n \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\mu(z) v_n(z)^* v'_n(z) = \delta_{n,n'}
\end{aligned}
\tag{6.4.9}
$$

$n = 2$ の時の $z_i (i = 1, 2)$ に対しては $z = (z_1, z_2)$ とまとめて

$$
\begin{aligned}
d\mu(z) &= d\mu(z_1) d\mu(z_2) \\
d\mu(z_i) &= \frac{1}{\pi} e^{-|z_i|^2} d\,\mathrm{Re}\,z_i d\,\mathrm{Im}\,z_i \quad \text{for} \quad i = 1, 2
\end{aligned}
\tag{6.4.10}
$$

とする。角運動量表示では

$$
\begin{aligned}
&J_+ = z_1 \partial_{z_2} \\
&J_- = z_2 \partial_{z_1} \\
&J_z = (1/2)(z_1 \partial_{z_1} - z_2 \partial_{z_2}) \\
&v_{jm}(z) = \frac{(z_1)^{j+m} (z_2)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} = v_{j+m}(z_1) v_{j-m}(z_2) \\
&\langle v_{jm} | v_{j'm'} \rangle = \int d\mu(z) (v_{j,m}(z))^* v_{j',m'}(z) = \delta_{j+m,j'+m'} \delta_{j-m,j'-m'} = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'}
\end{aligned}
\tag{6.4.11}
$$

すなわち $v_{jm}(z)$ は z_1, z_2 の $N = 2j$ 次同次式である。

[spin coherent state]

$$
\begin{aligned}
|\psi_j^z> &= \sum_{m=-j}^{j} |jm> v_{jm}(z) \\
&= \frac{1}{(2j)!} \binom{2j}{j+m} (a_1^\dagger)^{j+m} (a_2^\dagger)^{j-m} |0> z_1^{j+m} z_2^{j-m} \\
&= \frac{1}{(2j)!} (a_1^\dagger z_1 + a_2^\dagger z_2)^{2j}
\end{aligned}
\tag{6.4.12}
$$

は

$$
\int d\mu(z) v_{jm}(z) v^*_{j'm'} = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'}
\tag{6.4.13}
$$

から、完全性

$$\int d\mu(z)|\psi_j^z><\psi_j^z| = \sum_{m=-j}^{j}|jm><jm| \tag{6.4.14}$$

を満たす。$|\psi_j^z>$ は spin coherent state である。そこから、$j=0,1/2,1,\cdots$ の 全て spin 状態 $|jm>$ は $v_{jm}(z)$ で積分することによって得られる。更に

$$|\psi^z>=\sum_{j=0,1/2,1,\cdots}^{\infty}|\psi_j^z>=e^{a_1^\dagger z_1+a_2^\dagger z_2}\,|0\rangle \tag{6.4.15}$$

は全ての $|jm>$ 状態の coherent state である。すなわち

$$|jm>=\int d\mu(z)v_{jm}(z)^*|\psi^z> \tag{6.4.16}$$

が成り立っている。

6.5 Double Gel'fand Polynomials

最も簡単に D-函数 (d-函数) を求める方法は多分 Double Gel'fand Polynomial (DG-polynomial) を用いる方法である。ここでは簡単に $SU_2\times\,SU_2$ DG 多項式 (これを簡単に 2×2 DG 多項式と呼ぶ) の結果をまとめておく。詳しくは Y. Fujiwara and H. Horiuchi, 京大理学部紀要 (文献 1) を参考にしてほしい。

2×2 DG 多項式は 2×2 複素変数 $R_{\alpha,i}$ ($\alpha=x,y,i=1,2$) からなる多項式 (整函数) である。内積は Bargmann measure で定義する。すなわち

$$\begin{aligned} d\mu(R_{\alpha,i}) &= \frac{1}{\pi}e^{-|R_{\alpha,i}|^2}d\,\mathrm{Re}\,R_{\alpha,i}d\,\mathrm{Im}\,R_{\alpha,i} \\ d\mu(R) &= \prod_{\alpha=1,2}\prod_{i=1,2}d\mu(R_{\alpha,i}) \end{aligned} \tag{6.5.1}$$

$R_{\alpha,i}$ を 2×2 matrix の形に書くのが便利である

$$R=(R_{\alpha,i})=(\boldsymbol{R}_1,\boldsymbol{R}_2)=\begin{pmatrix}\boldsymbol{R}_x^r\\ \boldsymbol{R}_y^r\end{pmatrix} \tag{6.5.2}$$

b 二種類の U_2 generator が可能である。

$$\begin{aligned} A_{\alpha,\beta} &= \sum_i R_{\alpha,i}\frac{\partial}{\partial R_{\beta,i}} \\ T_{i,j} &\quad \sum_\alpha R_{\alpha,i}\frac{\partial}{\partial R_{\alpha,j}} \end{aligned} \tag{6.5.3}$$

それぞれ

$$
\begin{aligned}
&[A_{\alpha,\beta}, A_{\gamma,\delta}] = \delta_{\beta,\gamma}A_{\alpha,\delta} - \delta_{\alpha,\delta}A_{\gamma,\beta} \\
&[T_{i,j}, T_{k,\ell}] = \delta_{j,k}T_{i,\ell} - \delta_{i,\ell}T_{k,j}
\end{aligned}
\tag{6.5.4}
$$

また

$$
\begin{aligned}
&N = \sum_{\alpha} A_{\alpha,\alpha} = \sum_{i} T_{i,i} \\
&[A_{\alpha,\beta}, T_{i,j}] = 0
\end{aligned}
\tag{6.5.5}
$$

が成り立つ。SU_2 の規約表現は

$$
[f_1, f_2] = [\lambda+\mu, \mu] \quad \text{with} \quad f_1 \geqq f_2 \geqq 0, \lambda, \mu \geqq 0 \tag{6.5.6}
$$

で指定される。

$$
\begin{aligned}
&N = f_1 + f_2 = \lambda + 2\mu = 0, 1, 2, \cdots \\
&\{jm\} = \{\lambda/2, \lambda/2 - r\} \quad \text{with} \quad r = 0, 1, \cdots \lambda
\end{aligned}
\tag{6.5.7}
$$

規約表現内の状態の指定は canonical chain $SU_2 \supset SU_1$ によって実現される。すなわち $A_{\alpha,\beta}$ について言えば $\alpha = 1$ を持つ $R_{\alpha,i}$ の全冪乗を取る。これを $f_2 = f_{12}$ として

$$
|[f]\rangle = \left|\begin{matrix}[f_1] \\ [f_2]\end{matrix}\right\rangle = \left|\begin{matrix}[f_{11} f_{21}] \\ [f_{12}]\end{matrix}\right\rangle \tag{6.5.8}
$$

と書いてこれを Gel'fand pattern という。ここに $f_{11} \geqq f_{12} \geqq f_{21} \geqq 0$ で、これを betweenness condition という。あるいは $lambda, \mu \geqq 0$ として $f_{11} = \lambda + \mu, f_{21} = \mu$ として $f_{12} = \lambda + \mu - r$ として $r = 0, 1, \cdots, \mu$ である。これを

$$
|(\lambda)\mu, r\rangle = \left|\begin{matrix}\lambda+\mu \quad \mu \\ \lambda+\mu-r\end{matrix}\right\rangle \tag{6.5.9}
$$

$r = 0$ の状態を highest waite state と呼び

$$
|(\lambda), r = 0\rangle = |(\lambda)\mu, H\rangle \tag{6.5.10}
$$

で表わす。

$$
\begin{aligned}
&A_{1,2}\,|(\lambda)\mu, H\rangle = 0 \\
&N\,|(\lambda)\mu, H\rangle = (\lambda + 2\mu)\,|(\lambda)\mu, H\rangle \\
&A_{1,1}\,|(\lambda)\mu, H\rangle = (\lambda + \mu)\,|(\lambda)\mu, H\rangle
\end{aligned}
\tag{6.5.11}
$$

である。右の添字 i についても同様なことが成り立つ。$A_{\alpha,\beta}$ と $T_{i,j}$ は可換だから同時固有状態が存在する。$T_{i,j}$ の Gel'fand state を $|[f']\rangle$ とすると一番上の $[f_1]=[f_{11},f_{21}]$ は共通である。$[f'_1]=[f'_{11},f'_{21}]=[f_{11},f_{21}]$ そこで $\lambda'=\lambda,\mu'=\mu$ しかし $r'=0,1,\cdots,\lambda$ である。

$$\left|\begin{matrix}[f_{11}f_{21}] & [f_{11}f_{21}] \\ [f_1 2] & [f'_1 2]\end{matrix}\right\rangle = \left|\begin{matrix}\lambda+\mu \quad \mu & \lambda+\mu \quad \mu \\ \lambda+\mu-r & \lambda+\mu-r'\end{matrix}\right\rangle \tag{6.5.12}$$

を Double Gel'fand pattern (DG pattern) という。2×2 DG polynomial は DG pattern を量子数に持つ $R=(R_{\alpha,i})$ の多項式で $\varphi^{(\lambda)\mu}_{r,r'}(R)$ で表わす。

$$N\varphi^{(\lambda)\mu}_{r,r'}(R)=(\lambda+2\mu)\varphi^{(\lambda)\mu}_{r,r'}(R) \tag{6.5.13}$$

である。$r=r'=0$ の doubly heigest-weight state は

$$\begin{aligned}&\varphi^{(\lambda)\mu}_{0,0}(R)=\varphi^{(\lambda)\mu}_{H,H}(R)=N_H(\lambda\mu)R^{\lambda}_{x1}|R|^{\mu} \quad \text{with} \\ &|R|=\det R=\begin{vmatrix}R_{x1} & R_{x2} \\ R_{y1} & R_{y2}\end{vmatrix}\end{aligned} \tag{6.5.14}$$

で

$$\begin{aligned}&A_{xy}\varphi^{(\lambda)\mu}_{H,H}(R)=0 \\ &T_{12}\varphi^{(\lambda)\mu}_{H,H}(R)=0\end{aligned} \tag{6.5.15}$$

更に

$$\begin{aligned}&A_{xx}\varphi^{(\lambda)\mu}_{H,H}(R)=(\lambda+\mu)\varphi^{(\lambda)\mu}_{H,H}(R) \\ &A_{yy}\varphi^{(\lambda)\mu}_{H,H}(R)=\mu\varphi^{(\lambda)\mu}_{H,H}(R) \\ &T_{11}\varphi^{(\lambda)\mu}_{H,H}(R)=(\lambda+\mu)\varphi^{(\lambda)\mu}_{H,H}(R) \\ &T_{22}\varphi^{(\lambda)\mu}_{H,H}(R)=\mu\varphi^{(\lambda)\mu}_{H,H}(R)\end{aligned} \tag{6.5.16}$$

が成り立つ。heigest-weight state の nomalization factor $N_H(\lambda\mu)$ は

$$N_H(\lambda\mu)^{-2}=<R^{\lambda}_{x1}|R|^{\mu}|R^{\lambda}_{x1}|R|^{\mu}> \tag{6.5.17}$$

から求まる。

$$\begin{aligned}|R|^{\mu}&=(R_{x1}R_{y2}-R_{x2}R_{y1})^{\mu} \\ &=\sum_{a=0}^{\mu}(-)^a\binom{\mu}{a}(R_{x1}R_{y2})^{\mu-a}(R_{x2}R_{y1})^a\end{aligned} \tag{6.5.18}$$

より上式

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{a=0}^{\mu} (\binom{\mu}{a})^2 (\lambda+\mu-a)!(\mu-a)!(a!)^2 \\
&= (\mu!)^2 \sum_{a=0}^{\mu} \frac{(\lambda+\mu-a)!}{(\mu-a)!} \\
&= (\mu!)^2 \sum_{a=0}^{\mu} \frac{(\lambda+a)!}{a!} \\
&= (\lambda!)(\mu!)^2 \sum_{a+b=\mu} \binom{\lambda+a}{a}\binom{b}{b}
\end{aligned}
\tag{6.5.19}
$$

ここで

$$
\begin{aligned}
&\sum_{p+q=r} \binom{a+p}{p}\binom{b+q}{q} = \binom{a+b+r+1}{r} \\
&(1-x)^{-(u+1)} = 1 + (u+1)x + (u+1)(u+2)/2!x^2 + \cdots \\
&(1-x)^{-(a+1)}(1-x)^{-(b+1)} \\
&= (1-x)^{-(a+b+2)}
\end{aligned}
\tag{6.5.20}
$$

で x の $p+q=r$ 乗の幂だけを拾って得られる公式

$$
\sum_{p+q=r} \binom{a+p}{p}\binom{b+q}{q} = \binom{a+b+r+1}{r} \tag{6.5.21}
$$

を使って

$$
\begin{aligned}
N_H(\lambda\mu)^{-2} &= (\lambda!)(\mu!)^2 \binom{\lambda+\mu+1}{\mu} \\
&= (\lambda+\mu+1)!\mu!/(\lambda+1)
\end{aligned}
\tag{6.5.22}
$$

が得られる。そこで $N_H(\lambda\mu) > 0$ を仮定して

$$
N_H(\lambda\mu) = \sqrt{\frac{\lambda+1}{(\lambda+\mu+1)!\mu!}} \tag{6.5.23}
$$

であることが分かる。

[lowering operator の normalization]

次に lowering operator の normalization $\mathcal{N}(\lambda,r)$ を求める。まず結果から示せば

$$\mathcal{N}(\lambda,r)=\sqrt{\frac{(\lambda-r)!}{(\lambda!)r!}} \tag{6.5.24}$$

である。まず $\mathcal{N}(\lambda,r)$ の定義から

$$\begin{aligned}&\varphi^{(\lambda)\mu}_{r,H}(R)=\mathcal{N}(\lambda,r)A^r_{xy}\varphi^{(\lambda)\mu}_{0,H}(R)\\&=\mathcal{N}(\lambda,r)N_H(\lambda\mu)A^r_{yx}R^\lambda_{x1}|R|^\mu\end{aligned} \tag{6.5.25}$$

そこで

$$\begin{aligned}&A^r_{yx}R^\lambda_{x1}|R|^\mu=\frac{\lambda!}{(\lambda-r)!}R^{\lambda-r}_{x1}R^r_{y1}|R|^\mu\\&=\frac{\lambda!}{(\lambda-r)!}\sum_{a=0}^{\mu}(-)^a\binom{\mu}{a}(R_{x1})^{\lambda+\mu-r-a}(R_{y2})^{\mu-a}(R_{x2})^a(R_{y1})^{r+a}\end{aligned} \tag{6.5.26}$$

より

$$\begin{aligned}&< A^r_{yx}R^\lambda_{x1}|R|^\mu|A^r_{yx}R^\lambda_{x1}|R|^\mu >\\&=(\frac{\lambda!}{(\lambda-r)!})^2\sum_{a=0}^{\mu}(\binom{\mu}{a})^2(\lambda+\mu-r-a)!(\mu-a)!a!(r+a)!\\&=(\mu!)^2(\frac{\lambda!}{(\lambda-r)!})^2\sum_{a=0}^{\mu}\frac{(\lambda-r+\mu-a)!}{(\mu-a)!}\frac{(r+a)!}{a!}\\&=(\mu!)^2(\frac{\lambda!}{(\lambda-r)!})^2(\lambda-r)!r!\sum_{a=0}^{\mu}\binom{\lambda-r+\mu-a}{\mu-a}\binom{r+a}{a}\\&=(\mu!)^2(\frac{\lambda!}{(\lambda-r)!})^2(\lambda-r)!r!\binom{\lambda+\mu+1}{\mu}\\&=\frac{(\lambda+\mu+1)!(\mu!)}{(\lambda+1)!}(\frac{\lambda!}{(\lambda-r)!})^2(\lambda-r)!r!\\&=\frac{(\lambda+\mu+1)!(\mu!)}{(\lambda+1)}(\frac{(\lambda!)(r!)}{(\lambda-r)!}\\&=(N_H(\lambda\mu))^{-2}\frac{(\lambda!)(r!)}{(\lambda-r)!}\end{aligned} \tag{6.5.27}$$

そこで

$$(\mathcal{N}(\lambda,r))^{-2}=\frac{(\lambda!)(r!)}{(\lambda-r)!} \tag{6.5.28}$$

そこで符号の不定性を除いて

$$\mathcal{N}(\lambda,r)=\sqrt{\frac{(\lambda-r)!}{(\lambda!)(r!)}} \tag{6.5.29}$$

また (6.5.25)、(6.5.26) から

$$\begin{aligned}
&\varphi^{(\lambda)\mu}_{r,H}(R)=\mathcal{N}(\lambda,r)A^{r}_{xy}\varphi^{(\lambda)\mu}_{0,H}(R)\\
&=\mathcal{N}(\lambda,r)N_H(\lambda\mu)\frac{\lambda!}{(\lambda-r)!}R^{\lambda-r}_{x1}R^{r}_{y1}|R|^{\mu}\\
&=\mathcal{N}_H(\lambda\mu)\sqrt{(\lambda!)(\lambda-r)!r!}\frac{1}{(\lambda-r)!r!}R^{\lambda-r}_{x1}R^{r}_{y1}|R|^{\mu}\\
&=N(\lambda\mu r0)\frac{1}{(\lambda-r)!r!}R^{\lambda-r}_{x1}R^{r}_{y1}|R|^{\mu}
\end{aligned} \tag{6.5.30}$$

ここに

$$N(\lambda\mu rr')=N_H(\lambda\mu)\sqrt{(\lambda-r)!(\lambda-r')!r!r'!} \tag{6.5.31}$$

である。更に $\mathcal{N}(\lambda,r')T_{21}{}^{r'}$ により、r' についても lowering operator で降ろすと一般に

$$\begin{aligned}
&\varphi^{(\lambda)\mu}_{r,r'}(R)=\mathcal{N}(\lambda,r)A^{r}_{xy}\mathcal{N}(\lambda,r')T^{r'}_{21}\varphi^{(\lambda)\mu}_{0,0}(R)\\
&=\mathcal{N}(\lambda,r)\mathcal{N}(\lambda,r')N_H(\lambda\mu)\frac{\lambda!}{(\lambda-r)!}T^{r'}_{21}R^{\lambda-r}_{x1}R^{r}_{y1}|R|^{\mu}
\end{aligned} \tag{6.5.32}$$

ここに

$$\begin{aligned}
&T^{r'}_{21}R^{\lambda-r}_{x1}R^{r}_{y1}|R|^{\mu}\\
&=\sum_{a=0}^{r}\binom{r'}{a}\frac{(\lambda-r)!}{(\lambda-r-r'+a)!}R^{\lambda-r-r'+a}_{x1}R^{r'-a}_{x2}\frac{r!}{a!}R^{r-a}_{y1}R^{a}_{y2}|R|^{\mu}\\
&=(\lambda-r)!r!r'!\sum_{a=0}^{r}\frac{1}{(\lambda-r-r'+a)!(r-a)!(r'-a)!a!}R^{\lambda-r-r'+a}_{x1}R^{r'-a}_{x2}R^{r-a}_{y1}R^{a}_{y2}|R|^{\mu}
\end{aligned} \tag{6.5.33}$$

より

$$\begin{aligned}
&\varphi^{(\lambda)\mu}_{r,r'}(R)=\mathcal{N}(\lambda,r)\mathcal{N}(\lambda,r')N_H(\lambda\mu)(\lambda!r!r'!)\\
&\times\sum_{a=0}^{r}\frac{1}{(\lambda-r-r'+a)!(r-a)!(r'-a)!a!}R^{\lambda-r-r'+a}_{x1}R^{r-a}_{y1}R^{r'-a}_{x2}R^{a}_{y2}|R|^{\mu}
\end{aligned} \tag{6.5.34}$$

ここに

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{N}(\lambda,r)\mathcal{N}(\lambda,r')N_H(\lambda\mu)(\lambda!r!r'!)\\
&=N_H(\lambda\mu)\sqrt{(\lambda-r)!(\lambda-r')!r!r'!}\\
&=N(\lambda\mu rr')\\
&=\sqrt{\frac{(\lambda+1)(\lambda-r)!(\lambda-r')!r!r'!}{(\lambda+\mu+1)!\mu!}}
\end{aligned}
\tag{6.5.35}
$$

より

$$
\begin{aligned}
&\varphi^{(\lambda)\mu}_{r,r'}(R)=N(\lambda\mu rr')\\
&\times\sum_{a=\max 0,r+r'-\lambda}^{\min r,r'}\frac{1}{(\lambda-r-r'+a)!(r-a)!(r'-a)!a!}R_{x1}^{\lambda-r-r'+a}R_{y1}^{r-a}R_{x2}^{r'-a}R_{y2}^{a}|R|^{\mu}
\end{aligned}
\tag{6.5.36}
$$

が得られる。

DG-多項式は、その構成法から二通りの量子数について Bargmann measure の元で正規直交系を成している。つまり

$$
\left\langle\varphi^{(\lambda)\mu}_{a,b}\middle|\varphi^{(\lambda')\mu'}_{a',b'}\right\rangle=\int d\mu(R)(\varphi^{(\lambda)\mu}_{a,b}(R))^*\varphi^{(\lambda')\mu'}_{a',b'}(R)=\delta_{\lambda,\lambda'}\delta_{\mu,\mu'}\delta_{a,a'}\delta_{b,b'}
\tag{6.5.37}
$$

を満たす。そこで、$R=(R_{\alpha,i})$ の N-次の多項式空間 $\mathcal{B}^N$ は更に全ての異なる規約表現基底の張る部分空間に分解される。すなわち、R の整函数空間 $\mathcal{H}$ は

$$
\mathcal{H}=\sum_{N=0}^{\infty}\mathcal{B}^N=\sum_{N=0}^{\infty}\sum_{\lambda+2\mu=N}\mathcal{D}^{N(\lambda)}
\tag{6.5.38}
$$

と直和分解される。

一般に $n\times m$ 行列 $R=(R_{\alpha,i})$ $(\alpha=1,\cdots,n,\quad i=1,\cdots,m)$ の作る DG-多項式を $n\times m$ DG-多項式と言い、$\varphi^{(nm)[f]}_{a,b}(R)$ で表わす。$A_{\alpha,\beta},T_{i,j}$ はそれぞれ $n\times n,m\times m$ matrix である。これらに対しては、(6.5.37) - (6.5.38) はそれぞれ

$$
\left\langle\varphi^{(nm)[f]}_{a,b}\middle|\varphi^{(nm)[f']}_{a',b'}\right\rangle=\delta_{[f],[f']}\delta_{\mu,\mu'}\delta_{a,a'}\delta_{b,b'}
\tag{6.5.39}
$$

$$
\mathcal{H}(n,m)=\sum_{N=0}^{\infty}\mathcal{B}^N(n,m)=\sum_{N=0}^{\infty}\sum_{f_1+f_2+\cdots=N}\mathcal{D}^{[f]}(n,m)=\sum_{N=0}^{\infty}\sum_{(\lambda)}\mathcal{D}^{N(\lambda)}(n,m)
\tag{6.5.40}
$$

となる。ここに $[f]=N(\lambda)$ である。

次に $n\times m$ DG-多項式と二種類の SU_n, SU_m generator$A_{\alpha,\beta}, T_{i,j}$ の転置変換 $\mathcal{T}$ について簡単に述べる。Hilbert space $\mathcal{H}(n,m)$ の任意の元 $f(R)$ に対して $\mathcal{T}$ の効果を、$\mathcal{T}R_{\alpha,i}\mathcal{T}^{-1}=R_{i,\alpha}$ によって定義する。$R=(R_{\alpha,i})$ を $n\times m$ matrix とすると、$\mathcal{T}R\mathcal{T}^{-1}={}^tR$ は $m\times n$ matrix である。$f(R)\in\mathcal{H}(n,m)$ に対して $\mathcal{T}f(R)=f({}^tR)\in\mathcal{H}(m,n)$ である。また、$A=(A_{\alpha,\beta}), T=(T_{i,j})$ に対しては $\mathcal{T}A\mathcal{T}^{-1}=T, \mathcal{T}T\mathcal{T}^{-1}=A.$ つまり、$\mathcal{T}$ は $A_{\alpha,\beta}$ と $T_{i,j}$ の役割をひっくり返す。更に

$$\mathcal{T}\varphi_{a,b}^{(n,m)[f]}(R)\mathcal{T}^{-1}=\varphi_{a,b}^{(n,m)[f]}({}^tR)=\varphi_{b,a}^{(m,n)[f]}(R) \tag{6.5.41}$$

である。

[DG-多項式の二通りの vector-coupling expression]

DG-多項式が canonical chain $U_n\supset U_{n-1}\cdots U_2\supset U_1$ の量子数で指定されている事の当然の帰結として、それらは SU_n 代数の Clebsche-Gordan 係数によって結び付けられた vector-coupling expression を持つという事が重要である。これには generator $A_{\alpha,\beta}$ に結び付いた表現と $T_{i,j}$ に結び付いた表現がある。

まず、一番簡単に 2×1 DG-多項式から考える。

$$\varphi_{0,0}^{(\lambda)0}(R)=\frac{1}{\sqrt{\lambda}}R_{x1}^{\lambda}=N_H(\lambda 0)R_{x1}^{\lambda} \tag{6.5.42}$$

を doubly highest-weight の状態として

$$\begin{aligned}\varphi_{r,0}^{(\lambda)0}(R)&=\mathcal{N}(\lambda,r)A_{yx}^{r}\varphi_{0,0}^{(\lambda)0}(R)\\&=N(\lambda 0r0)R_{x1}^{\lambda-r}R_{y1}^{r}=\frac{1}{\sqrt{(\lambda-r)!r!}}R_{x1}^{\lambda-r}R_{y1}^{r}\\&=v_{\lambda/2,\lambda/2-r}(\boldsymbol{R}_1)\end{aligned} \tag{6.5.43}$$

ここに

$$v_{jm}(\boldsymbol{R})=\frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}R_x^{j+m}R_y^{j-m} \tag{6.5.44}$$

は $\boldsymbol{R}$ の SU_2 角運動量状態である。つまり

$$\begin{aligned}&A_{xy}=R_x\frac{\partial}{\partial R_y}=J_+\\&A_{yx}=J_-\\&(A_{xx}-A_{yy})/2=J_z\\&\boldsymbol{J}^2=(J_+J_-+J_-J_+)/2+J_z^2\end{aligned} \tag{6.5.45}$$

として $v_{jm}(\boldsymbol{R}) = \langle \boldsymbol{R}|jm\rangle$ と書くと

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{J}^2|jm>=j(j+1)|jm>\\&J_z|jm>=m|jm>\end{aligned} \tag{6.5.46}$$

である。これはまた、2 × 2 DG-多項式では

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{J}^2\varphi_{r,0}^{(\lambda)0}(R) = \lambda/2(\lambda/2+1)\varphi_{r,0}^{(\lambda)0}(R)\\&J_z\varphi_{r,0}^{(\lambda)0}(R) = (\lambda/2-r)\varphi_{r,0}^{(\lambda)0}(R)\end{aligned} \tag{6.5.47}$$

とも書ける。そこで

$$\varphi_{r,0}^{(\lambda)0}(R) = v_{\lambda/2,\lambda/2-r}(\boldsymbol{R}_1) \tag{6.5.48}$$

である。すなわち、通常の角運動量表示との関係は $\lambda/2 = j, \lambda/2 - r = m$ である。(6.5.45) にならって $T_{i,j}$ に対しても SU_2 演算子の角運動量表示、$T_{1,2} = J'_+, T_{2,1} = J'_-, (T_{1,1} - T_{2,2})/2 = J'_z$ を導入することが出来る。これを使えば $v_{jm'}(\boldsymbol{R}_x^r) = \frac{1}{\sqrt{(j+m')!(j-m')!}}R_{x,1}^{j+m'}R_{x,2}^{j-m'}$ である。また、$(\boldsymbol{J}')^2 = (J'_+J'_- + J'_-J'_+)/2 + {J'_z}^2 = \boldsymbol{J}^2$ である。

一般の $\varphi_{(\lambda)\mu}r, r'(R)$ に対しては (6.5.48) は次の様に変更を受ける。まず、(6.5.42) の代わりに higest-weight state $\varphi_{0,0}^{(\lambda)\mu}(R) = N_H(\lambda\mu)R_{x1}^{\lambda}|R|^{\mu}$ を考える。(6.5.43) に対応して (6.5.32) - (6.5.36) が得られるが、これらは (6.5.47) に対応してより一般的に

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{J}^2\varphi_{r,r'}^{(\lambda)\mu}(R) = (\boldsymbol{J}')^2\varphi_{r,r'}^{(\lambda)\mu}(R) = \lambda/2(\lambda/2+1)\varphi_{r,r'}^{(\lambda)\mu}(R)\\&J_z\varphi_{r,r'}^{(\lambda)\mu}(R) = (\lambda/2-r)\varphi_{r,r'}^{(\lambda)\mu}(R)\\&J'_z\varphi_{r,r'}^{(\lambda)\mu}(R) = (\lambda/2-r')\varphi_{r,r'}^{(\lambda)\mu}(R)\end{aligned} \tag{6.5.49}$$

を満たしている。(6.5.48) のより一般的な式は

$$\begin{aligned}&\varphi_{r,r'}^{(\lambda)\mu}(R) = [v_{(\lambda+\mu-r')/2}(\boldsymbol{R}_1)v_{(\mu+r')/2}(\boldsymbol{R}_2)]_{\lambda/2,\lambda/2-r}\\&= \sum_{r_1+r_2=\mu+r}\left\langle \frac{\lambda+\mu-r'}{2}, \frac{\lambda+\mu-r'}{2}-r_1, \frac{\mu+r'}{2}, \frac{\mu+r'}{2}-r_2 \middle| \frac{\lambda}{2}, \frac{\lambda}{2}-r\right\rangle\\&\times v_{(\lambda+\mu-r')/2,(\lambda+\mu-r')/2-r_1}(\boldsymbol{R}_1)v_{(\mu+r')/2,(\mu+r')/2-r_2}(\boldsymbol{R}_2)\end{aligned} \tag{6.5.50}$$

である。ここに $(\lambda+\mu-r')/2 - r_1 + (\mu+r')/2 - r_2 = \lambda/2 - r$ より $r_1 + r_2 = \mu + r$ である。そこで (6.5.50) に

$$v_{(\lambda+\mu-r')/2,(\lambda+\mu-r')/2-r_1}(\boldsymbol{R}_1) = \frac{1}{\sqrt{(\lambda+\mu-r'-r_1)!(r_1)!}}R_{x1}^{\lambda+\mu-r'-r_1}R_{y1}^{r_1} \tag{6.5.51}$$

を掛けて $d\mu(\boldsymbol{R}_1)$ で積分すると (6.5.36) を使って

$$
\begin{aligned}
&\int d\mu(\boldsymbol{R}_1) v_{(\lambda+\mu-r')/2,(\lambda+\mu-r')/2-r_1}(\boldsymbol{R}_1)^* \varphi^{(\lambda)\mu}_{r,r'}(R) \\
&= N(\lambda\mu r r') \frac{1}{\sqrt{(\lambda+\mu-r'-r_1)!(r_1)!}} \\
&\times \sum_{a=\max 0,r+r'-\lambda}^{\min r,r'} (-)^{a+r_1-r} \binom{\mu}{a+r_1-r} \frac{1}{(\lambda-r-r'+a)!(r-a)!(r'-a)!a!} \\
&\times (\lambda+\mu-r_1-r')!(r_1)! R_{x2}^{r'-r+r_1} R_{y2}^{\mu+r-r_1} \\
&= N(\lambda\mu r r') \sqrt{(\lambda+\mu-r'-r_1)!(r_1)!} \\
&\times \sum_{a=\max 0,r+r'-\lambda}^{\min r,r'} (-)^{a+r_1-r} \binom{\mu}{a+r_1-r} \frac{1}{(\lambda-r-r'+a)!(r-a)!(r'-a)!a!} \\
&\times R_{x2}^{r'-r+r_1} R_{y2}^{\mu+r-r_1} \\
&= \left\langle \frac{\lambda+\mu-r'}{2}, \frac{\lambda+\mu-r'}{2}-r_1, \frac{\mu+r'}{2}, \frac{\mu+r'}{2}-r_2 \middle| \frac{\lambda}{2}, \frac{\lambda}{2}-r \right\rangle \\
&\times \frac{1}{\sqrt{(\mu+r'-r_2)!(r_2)!}} R_{x2}^{\mu+r'-r_2} R_{y2}^{r_2}
\end{aligned} \tag{6.5.52}
$$

ここに $r_1+r_2=\mu+r$ より $r'-r+r_1=\mu+r'-r_2, \mu+r-r_1=r_2$ だから (6.5.52) の最後の式の R_{x2} と R_{y2} のベキは同じで

$$
\begin{aligned}
&\left\langle \frac{\lambda+\mu-r'}{2}, \frac{\lambda+\mu-r'}{2}-r_1, \frac{\mu+r'}{2}, \frac{\mu+r'}{2}-r_2 \middle| \frac{\lambda}{2}, \frac{\lambda}{2}-r \right\rangle \\
&= N(\lambda\mu r r') \sqrt{(\lambda+\mu-r'-r_1)!(r_1)!(\mu+r'-r_2)!(r_2)!} \\
&\times \sum_{a=\max 0,r+r'-\lambda}^{\min r,r'} (-)^{r_1-r+a} \binom{\mu}{r_1-r+a} \frac{1}{(\lambda-r-r'+a)!(r-a)!(r'-a)!a!} \\
&= \sqrt{\frac{(\lambda+1)(\mu!)(\lambda-r)!(\lambda-r')!r!r'!}{(\lambda+\mu+1)!}} \sqrt{(\lambda+\mu-r'-r_1)!(r_1)!(\mu+r'-r_2)!(r_2)!} \\
&\times \sum_{a=\max 0,r+r'-\lambda}^{\min r,r'} (-)^{a+r_1-r} \frac{1}{(r_2-a)!(a+r_1-r)!} \frac{1}{(\lambda-r-r'+a)!(r-a)!(r'-a)!a!}
\end{aligned} \tag{6.5.53}
$$

が得られる。ここで、更に

$$
\begin{aligned}
&j_1=(\lambda+\mu-r')/2, \quad m_1=(\lambda+\mu-r')/2-r_1\\
&j_2=(\mu+r')/2, \quad m_2=(\mu+r')/2-r_2\\
&j=\lambda/2, \quad m=\lambda/2-r
\end{aligned} \tag{6.5.54}
$$

と変えて

$$
\begin{aligned}
&< j_1m_1j_2m_2|jm >\\
&=\sqrt{\frac{(2j+1)(j_1+j_2-j)!(j+m)!(j+j_1-j_2)!(j-m)!(j-j_1+j_2)!}{(j_1+j2+j+1)!}}\\
&\times\sqrt{(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!}\\
&\times\sum_{a=\max 0,j_2-j_1-m}^{\min j-m,j-j_1+j2}(-)^{j_1-m_1-j+m+a}\frac{1}{(j_2-m_2-a)!(j_1-m_1-j+m+a)!}\\
&\times\frac{1}{(j_1-j_2+m+a)!(j-m-a)!(j-j_1+j_2-a)!a!}\\
&=\sqrt{\frac{(2j+1)(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!}{(j_1+j2+j+1)!}}\\
&\times\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!}\\
&\times\sum_{a=\max 0,j_2-j_1-m}^{\min j-m,j-j_1+j2}(-)^{j_1-m_1-j+m+a}\frac{1}{(j_2-m_2-a)!(j_1-m_1-j+m+a)!}\\
&\times\frac{1}{(j_1-j_2+m+a)!(j-m-a)!(j-j_1+j_2-a)!a!}
\end{aligned} \tag{6.5.55}
$$

という、一般に Racha の公式 と言われている表式が得られる。それを示す前に、ここで $m=j,m_1=j_1$ とすると $a=0$ only で $m_2=j-j_1$ かつ

$$
\begin{aligned}
&< j_1m_1j_2m_2|jm >\\
&=\sqrt{\frac{(2j+1)(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!(2j)!(2j_1)!(j-j_1+j_2)!}{(j_1+j2+j+1)!}}\\
&\times\frac{\sqrt{(j_1+j_2-j)!}}{(j_1+j_2-j)!(j_1-j_2+j)!(j-j_1+j_2)!}\\
&=\sqrt{\frac{(2j+1)!(\text{れ}\ 2j_1)!}{(j+j_1+j2+1)!(j+j_1-j_2)!}}>0
\end{aligned} \tag{6.5.56}
$$

と成る。これを Condon-Shortley の phase convention という。highest weight と lowering operator の normalizaton を正とすると、この条件が phase なしの vector-coupling expression (6.5.50) となる。

(6.5.55) の最後の行で sum 以下は

$$
\begin{aligned}
&(-)^{j_1-j+m_2}\frac{1}{(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j+j_2-j_1)!}\\
&\times\sum_a(-)^a\binom{j_1+j_2-j}{j_2-m_2-a}\binom{j-j_1+j_2}{a}\binom{j+j_1-j_2}{j-m-a}
\end{aligned}
\tag{6.5.57}
$$

と書ける。ここに三つの角運動量の合成則から $j_1+j_2-j, j-j_1+j_2, j+j_1-j_2$ は全て非負整数である。また負の整数 $-n$ の階乗の逆数を $1/(-n!)$ と規約することにより a の sum は二項係数の意味のある範囲全体とすることが出来る。そこで (6.5.57) で $a=j_2-m_2-a'$ と変えると

$$
\begin{aligned}
&(-)^{(j_1+j_2-j)}\frac{1}{(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j+j_2-j_1)!}\\
&\times\sum_a{}'(-)^{a'}\binom{j_1+j_2-j}{a'}\binom{j-j_1+j_2}{j_2-m_2-a'}\binom{j+j_1-j_2}{j-m-j_2+m_2+a'}\\
&=(-)^{(j_1+j_2-j)}\frac{1}{(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j+j_2-j_1)!}\\
&\times\sum_a(-)^a\binom{j_1+j_2-j}{a}\binom{j-j_1+j_2}{j_2-m_2-a}\binom{j+j_1-j_2}{j_1+m_1-a}
\end{aligned}
\tag{6.5.58}
$$

そこで

$$
\begin{aligned}
&< j_1m_1j_2m_2|jm >\\
&=\sqrt{\frac{(2j+1)(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!}{(j_1+j2+j+1)!}}\\
&\times\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!}\\
&\times(-)^{j_1+j_2-j}\frac{1}{(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j+j_2-j_1)!}\\
&\times\sum_a(-)^a\binom{j_1+j_2-j}{a}\binom{j-j_1+j_2}{j_2-m_2-a}\binom{j+j_1-j_2}{j_1+m_1-a}
\end{aligned}
\tag{6.5.59}
$$

ここで、あとで証明する対称性 $< j_1-m_1j_2-m_2|j-m >= (-)^{j_1+j_2-j} <$

$j_1m_1j_2m_2|jm>$ を使うと j_1+j_2-j =整数より

$$< j_1m_1j_2m_2|jm >= (-)^{j_1+j_2-j} < j_1-m_1j_2-m_2|j-m >$$
$$= \sqrt{\frac{(2j+1)(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!}{(j_1+j2+j+1)!}}$$
$$\times\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!}$$
$$\times\frac{1}{(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j+j_2-j_1)!}$$
$$\times\sum_a(-)^a\binom{j_1+j_2-j}{a}\binom{j-j_1+j_2}{j_2+m_2-a}\binom{j+j_1-j_2}{j_1-m_1-a} \tag{6.5.60}$$

が得られる。これが通常、Racha の公式と呼ばれる。

(対称性)

(6.5.60) で $j_1 \leftrightarrow j_2, m_1 \leftrightarrow m_2$ とする事は、m_1, m_2, m の符号を変える事と対応しており、いずれも同じ符号 $(-)^{j_1+j_2-j}$ が出る。実際 m_1, m_2 の符号を変えて $a = j_1+j_2-j-a'$ とすると

$$\text{sum 以下} = (-)^{j_1+j_2-j}\sum_a{}'(-)^{a'}\binom{j_1+j_2-j}{a'}$$
$$\times\binom{j-j_1+j_2}{j_2-m_2-j_1-j_2+j+a'}\binom{j+j_1-j_2}{j_1+m_1-j_1-j_2+j+a'} \tag{6.5.61}$$

ここに

$$\text{last line} = \binom{j-j_1+j_2}{j-j_1-m_2+a'}\binom{j+j_1-j_2}{j-j_2+m_1+a'} = \binom{j-j_1+j_2}{j_2+m_2-a'}\binom{j+j_1-j_2}{j_1-m_1-a'} \tag{6.5.62}$$

と成る。

更に、(6.5.57 で $j_2 \leftrightarrow j, m_2 \to -m, m \to -m_2$ と $a = j_1-m_1-a'$ とすると

$$< j_1m_1j-m|j_2m_2 >$$
$$= \sqrt{\frac{(2j_2+1)(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!(j+m)!(j-m)!}{(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(j_1+j2+j+1)!}}$$
$$\times\frac{1}{(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j+j_2-j_1)!}$$
$$\times\sum_a(-)^a\binom{j_1-j_2+j}{a}\binom{j_2-j_1+j}{j-m-a}\binom{j_1+j_2-j}{j_1-m_1-a} \tag{6.5.63}$$

更に

$$
\begin{aligned}
&< j_1 m_1 j - m | j_2 m_2 > \\
&= \sqrt{\frac{(2j_2+1)(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!(j+m)!(j-m)!}{(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(j_1+j2+j+1)!}} \\
&\times \frac{1}{(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j+j_2-j_1)!}(-)^{j_1-m_1} \\
&\times \sum_a{}' (-)^{a'} \begin{pmatrix} j_1-j_2+j \\ j_1-m_1-a' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2-j_1+j \\ j-m-j_1+m_1+a' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1+j_2-j \\ a' \end{pmatrix} \\
&= \sqrt{\frac{(2j_2+1)(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!(j+m)!(j-m)!}{(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(j_1+j2+j+1)!}} \\
&\times \frac{1}{(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j+j_2-j_1)!}(-)^{-j_1+m_1} \\
&\times \sum_a (-)^{a} \begin{pmatrix} j_1+j_2-j \\ a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j-j_1+j_2 \\ j_2+m_2-a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j+j_1-j_2 \\ j_1-m_1-a \end{pmatrix} \\
&= (-)^{-j_1+m_1} \frac{2j_2+1}{2j+1} < j_1 m_1 j_2 m_2 | jm >
\end{aligned} \tag{6.5.64}
$$

そこで結局

$$
< j_1 m_1 j_2 m_2 | jm > = (-)^{j_1-m_1} \frac{2j+1}{2j_2+1} < j_1 m_1 j - m | j_2 - m_2 > \tag{6.5.65}
$$

が得られる。更に $1 \leftrightarrow 2$ として $< j_2 m_2 j_1 m_1 | jm > = (-)^{j_1+j_2-j} < j_1 m_1 j_2 m_2 | jm >$ を使うと $(-)^{j_1+j_2-j}(-)^{-j_1+m_1} = (-)^{j_2-j+m_1}$ より

$$
< j_2 m_2 j_1 m_1 | jm > = (-)^{j_2-j+m_1} \frac{2j+1}{2j_2+1} < j_1 m_1 j - m | j_2 - m_2 > \tag{6.5.66}
$$

ここで $1 \leftrightarrow 2$ として

$$
\begin{aligned}
< j_1 m_1 j_2 m_2 | jm > &= (-)^{j_1-j+m_2} \frac{2j+1}{2j_1+1} < j_2 m_2 j - m | j_1 - m_1 > \\
&= (-)^{j_2+m_2} \frac{2j+1}{2j_1+1} < j - m j_2 m_2 | j_1 - m_1 >
\end{aligned} \tag{6.5.67}
$$

が得られる。結局まとめると

$$
\begin{aligned}
< j_1 m_1 j_2 m_2 | jm > &= (-)^{j_1+j_2-j} < j_2 m_2 j_1 m_1 | jm > \\
&= (-)^{j_1+j_2-j} < j_1 - m_1 j_2 - m_2 | j - m > \\
&= (-)^{j_2+m_2} \frac{2j+1}{2j_1+1} < j - m j_2 m_2 | j_1 - m_1 >
\end{aligned} \tag{6.5.68}
$$

となる。

CG-係数の対称性 (6.5.61) は、Wigner の $3j$ 係数

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-)^{j_1-j_2-m_3}\frac{1}{\sqrt{2j_3+1}} < j_1m_1j_2m_2|j_3-m_3 > \tag{6.5.69}$$

を使うと、$1,2,3$ 間の関係がより簡単に成る。すなわち

1. $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-)^{j_1+j_2+j_3}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$
2. $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ は $1,2,3$ の任意の偶置換に対して対称 、奇置換について符号 $(-)^{j_1+j_2+j_3}$ が付く。

(問題) (6.5.68) から上記の $3j$ symbol の対称性を示せ。

DG-多項式の転置変換 (6.5.41) より、(6.5.50) と並んでもう一つの vector-coupling expression

$$\begin{aligned}
&\varphi^{(\lambda)\mu}_{r,r'}(R) = \varphi^{(\lambda)\mu}_{r',r}({}^tR) \\
&= [v_{(\lambda+\mu-r)/2}(\boldsymbol{R}^r_x)v_{(\mu+r)/2}(\boldsymbol{R}^r_y)]_{\lambda/2,\lambda/2-r'} \\
&= \sum_{r'_1+r'_2=\mu+r'} \left\langle \frac{\lambda+\mu-r)}{2}, \frac{\lambda+\mu-r}{2}-r'_1, \frac{\mu+r}{2}, \frac{\mu+r}{2}-r'_2 \middle| \frac{\lambda}{2}\frac{\lambda}{2}-r' \right\rangle \\
&\times v_{(\lambda+\mu-r)/2(\lambda+\mu-r)/2-r'_1}(\boldsymbol{R}^r_x)v_{(\mu+r)/2(\mu+r)/2-r'_2}(\boldsymbol{R}^r_y)
\end{aligned} \tag{6.5.70}$$

が成り立つ。ここから $r'_1+r'_2=\mu+r' \rightarrow \mu+r-r'_2=r+r'_1-r', r'_2=\mu+r'-r'_1$ であ

る事により

$$
\begin{aligned}
&\left\langle \frac{\lambda+\mu-r)}{2}, \frac{\lambda+\mu-r}{2}-r_1', \frac{\mu+r}{2}, \frac{\mu+r}{2}-r_2' \middle| \frac{\lambda}{2}\frac{\lambda}{2}-r \right\rangle \\
&= N(\lambda\mu r r') < \frac{R_{x1}^{\lambda+\mu-r-r_1'} R_{x2}^{r_1'}}{\sqrt{(\lambda+\mu-r-r_1')!(r_1')!}} \frac{R_{y1}^{\mu+r-r_2'} R_{y2}^{r_2'}}{\sqrt{(\mu+r-r_2')!(r_2')!}} | \\
&\sum_{a=\max 0, r+r'-\lambda}^{\min r, r'} (-)^{a+r_1'-r'} \binom{\mu}{a+r_1'-r'} \frac{1}{(\lambda-r-r'+a)!(r-a)!(r'-a)!a!} \\
&\times R_{x1}^{\lambda+\mu-r-r_1'} R_{y1}^{r+r_1'-r'} R_{x2}^{r_1'} R_{y2}^{\mu+r'-r_1'} > \\
&= N(\lambda\mu r r') \sqrt{(\lambda+\mu-r-r_1')!(r_1')!(\mu+r-r_2')!(r_2')!} \\
&\times \sum_{a=\max 0, r+r'-\lambda}^{\min r, r'} (-)^{a+r_1'-r'} \binom{\mu}{a+r_1'-r'} \frac{1}{(\lambda-r-r'+a)!(r-a)!(r'-a)!a!} \\
&= \sqrt{\frac{(\lambda+1)(\mu!)(\lambda-r)!(\lambda-r')!r!r'!}{(\lambda+\mu+1)!}} \sqrt{(\lambda+\mu-r-r_1')!(r_1')!(\mu+r-r_2')!(r_2')!} \\
&\times \sum_{a=\max 0, r+r'-\lambda}^{\min r, r'} (-)^{a+r_1'-r'} \frac{1}{(r_2'-a)!(a+r_1'-r')!} \frac{1}{(\lambda-r-r'+a)!(r-a)!(r'-a)!a!}
\end{aligned}
\tag{6.5.71}
$$

となる。ここに $\mu-a-r_1'+r' = r_2'-a$ を使った。この式は (6.5.53) と比較して、$r \leftrightarrow r'$, $r_1 \leftrightarrow r_1'$, $r_2 \leftrightarrow r_2'$ だけ違っている。しかし、(6.5.54) でこの変換を行うと再び (6.5.55) と同じ式が得られるのでこれらは実は同じ式である。すなわち、$\mu = r_1+r_2-r = r_1'+r_2'-r'$ の条件の元に

$$
\begin{aligned}
&\left\langle \frac{\lambda+\mu-r')}{2}, \frac{\lambda+\mu-r'}{2}-r_1, \frac{\mu+r'}{2}, \frac{\mu+r'}{2}-r_2 \middle| \frac{\lambda}{2}\frac{\lambda}{2}-r \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{\lambda+\mu-r)}{2}, \frac{\lambda+\mu-r}{2}-r_1', \frac{\mu+r}{2}, \frac{\mu+r}{2}-r_2' \middle| \frac{\lambda}{2}\frac{\lambda}{2}-r' \right\rangle
\end{aligned}
\tag{6.5.72}
$$

が成り立つ。

$3j$ symbol を使うと (6.5.72) は次の $3j$-係数の Regge symmetry と言われている対称

性に成る。

$$\begin{bmatrix} -j_1+j_2+j_3 & j_1-j_2+j_3 & j_+j_2-j_3 \\ j_1-m_1 & j_2-m_2 & j_3-m_3 \\ j_1+m_1 & j_2+m_2 & j_3+m_3 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} j_3+m_3 & j_3-m_3 & j_1+j_2-j_3 \\ j_2+m_2 & j_2-m_2 & j_1-j_2+j_3 \\ j_1+m_1 & j_1-m_1 & -j_1+j_2+j_3 \end{bmatrix} \tag{6.5.73}$$

(練習) (6.5.73) を示せ。

[DG-多項式の変換公式]

$n\times m$ 行列 $R=(R_{\alpha,i})$ $(\alpha=1,\cdots,n,\quad i=1,\cdots,m)$ の整函数全体から成る Hilbert space (6.5.40) は、全ての可能な量子数 $N,[f],a,b$ を持つ $n\times m$ DG-多項式 $\varphi_{a,b}^{(nm)[f]}(R)$ に分解される。そこで、調和振動子の coherent state のところで既に述べた様に函数

$$\exp\{\sum_{\alpha=1}^{n}\sum_{i=1}^{m}R'_{\alpha i}R^*_{\alpha i}\}=\exp\{\mathrm{Tr}^t R' R^*\} \tag{6.5.74}$$

は $\mathcal{H}(n,m)$ の中で Dirac の δ-函数の様な働きを果たし reproducing kernel と呼ばれる。すなわち、全ての $f(R)$ に対して

$$\int d\mu(R)\exp\{\mathrm{Tr}^t R' R^*\}f(R)=f(R') \tag{6.5.75}$$

が成り立つ。そこで *DG*-多項式の完全性より

$$\begin{aligned}\exp\{\mathrm{Tr}^t R' R^*\} &= \sum_{N(\lambda)a,b}\varphi_{a,b}^{(n,m)N(\lambda)}(R')\varphi_{a,b}^{(n,m)N(\lambda)}(R)^* \\ &= \sum_{N(\lambda)a,b}\varphi_{b,a}^{(m,n)N(\lambda)}({}^tR')\varphi_{a,b}^{(n,m)N(\lambda)}(R)^* \end{aligned}\tag{6.5.76}$$

ここに、$[f]=N(\lambda)$ の notation を用いた。更に、R' と R^* の N-次の項を比較すると $N=0,1,2,\cdots$ に対して

$$\frac{1}{N!}\{\mathrm{Tr}^t R' R^*\}^N=\sum_{(\lambda)a,b}\varphi_{b,a}^{(m,n)N(\lambda)}({}^tR')\varphi_{a,b}^{(n,m)N(\lambda)}(R)^*$$

が得られる。これらは、${}^tR' = R_1,\ R^* = R_2$ とすると

$$\exp\{\mathrm{Tr}R_1R_2\} = \sum_{N(\lambda)} \mathrm{Tr}\varphi^{(m,n)N(\lambda)}(R_1)\varphi^{(n,m)N(\lambda)}(R_2)$$
$$\frac{1}{N!}\{\mathrm{Tr}R_1R_2\}^N = \sum_{(\lambda)} \mathrm{Tr}\varphi^{(m,n)N(\lambda)}(R_1)\varphi^{(n,m)N(\lambda)}(R_2) \qquad (6.5.77)$$

と成る。ここに、$R_1,\ R_2$ はそれぞれ $(m,n),\ (n,m)$ complex matrix である。

これらを使って、次の基本的な DG-多項式の変換公式を証明することが出来る。一般に、n,m,l を非負整数として $l < \min n,m$ を仮定すると $(n,l),\ (l,m)$ complex matrix $R_1,\ R_2$ に対して、もし既約表現 (λ) が U_l で許容される $((\lambda \subset U_l)$ なら

$$\varphi^{(n,m)N(\lambda)}_{a,b}(R_1R_2) = \frac{1}{N_H(N\lambda)}\sum_c \varphi^{(n,l)N(\lambda)}_{a,c}(R_1)\varphi^{(l,m)N(\lambda)}_{c,b}(R_2) \qquad (6.5.78)$$

が成り立つ。もし許容されない $((\lambda \notin U_l)$ なら、左辺はゼロである。同じ結論は、(λ) が許される十分大きな (n,n) を持つ DG-多項式から出発してより小さいランクの DG-多項式に制限する事によっても得られる。そこで、ここでは一般の (n,n) DG-多項式に対して

$$\varphi^{(n,n)N(\lambda)}_{a,b}(R_1R_2) = \frac{1}{N_H(N\lambda)}\sum_c \varphi^{(n,n)N(\lambda)}_{a,c}(R_1)\varphi^{(n,n)N(\lambda)}_{c,b}(R_2) \qquad (6.5.79)$$

を証明する。以下 (n,n) は省略する。

まず任意の $n\times n$ complex matrix X,Y,C に対して

$$\sum_{i,j} C_{j,i}\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{Y}^*_j = \sum_{i,j} C_{j,i}\sum_\alpha X_{\alpha i}Y^*_{\alpha j} = \mathrm{Tr}^tXY^*C \qquad (6.5.80)$$

を考える。この式は n-次元ベクトル $\boldsymbol{X}_i,\ \boldsymbol{Y}_j$ の U_n 変換に対して不変だから、$(\mathrm{Tr}^tXY^*C)^N$ は U_n の BIR (basis of irreducible representation: 既約表現基底 $\varphi^{(n,n)N(\lambda)}_{a,b}(R) = \varphi^{N(\lambda)}_{a,b}(R)$ with $R = X,Y$ で展開出来る。

$$\frac{1}{N}(\mathrm{Tr}^tXY^*C)^N = \sum_{(\lambda)}\sum_{b,c} f^{N(\lambda)}_{c,b}(C)\sum_a \varphi^{N(\lambda)}_{a,b}(X)\varphi^{N(\lambda)}_{a,c}(Y^*) \qquad (6.5.81)$$

ここに $\sum_a \varphi^{N(\lambda)}_{a,b}(X)\varphi^{N(\lambda)}_{a,c}(Y^*)$ は $X_i,Y_j\ (i,j=1,\cdots,n)$ の U_n 変換に対して不変である。また、$f^{N(\lambda)}_{c,b}$ は $C_{i,j}\ (i,j=1,\cdots,n)$ の N 次の多項式である。(6.5.80) は更に

$$\mathrm{Tr}^tXY^*C = \sum_{\alpha,i} X_{i,\alpha}\sum_j C_{j,i}Y^*_{\alpha,j} = \sum_{\alpha,i} X_{i,\alpha}\boldsymbol{C}_i\boldsymbol{Y}^{r\,*}_\alpha \qquad (6.5.82)$$

とも書ける。この式は、$\boldsymbol{C}_i, \boldsymbol{Y}^r_\alpha$ の U_n 変換に対して不変である。そこで

$$\frac{1}{N}(\mathrm{Tr}^t XY^* C)^N = \sum_{(\lambda)} \sum_{b',c'} \tilde{f}^{N(\lambda)}_{b',c'}({}^t X) \sum_{a'} \varphi^{N(\lambda)}_{a',b'}(C) \varphi^{N(\lambda)}_{a',c'}({}^t Y^*) \tag{6.5.83}$$

が成り立つ。ここに $\tilde{f}^{N(\lambda)}_{b',c'}({}^t X)$ は X の N-次多項式である。更に

$$\mathrm{Tr}^t XYC^* = \sum_{\alpha,j} Y_{\alpha,j} \sum_i C^*_{j,i} X_{i,\alpha} = \sum_{\alpha,j} Y_{\alpha,j} \boldsymbol{C}^{r*}_j \boldsymbol{X}^r_\alpha \tag{6.5.84}$$

を考えると、この式は $\boldsymbol{C}^r_j, \boldsymbol{Y}^r_\alpha$ の U_n 変換に対して不変である。そこで

$$\frac{1}{N}(\mathrm{Tr}^t XYC^*)^N = \sum_{(\lambda)} \sum_{b'',c''} \hat{f}^{N(\lambda)}_{b'',c''}(Y) \sum_{a''} \varphi^{N(\lambda)}_{a'',b''}({}^t X) \varphi^{N(\lambda)}_{a'',c''}({}^t C^*) \tag{6.5.85}$$

が成り立つ。ここに $\hat{f}^{N(\lambda)}_{b'',c''}(Y)$ は Y の N-次多項式である。結局 (6.5.81), (6.5.83), (6.5.85) から、任意の $n \times n$ matrix R_1, R_2, R_3 に対して

$$\begin{aligned}\frac{1}{N}(\mathrm{Tr} R_1 R_2 R_3)^N &= \sum_{(\lambda)} \sum_{a,b,c} \varphi^{N(\lambda)}_{a,b}(R_1) \varphi^{N(\lambda)}_{b,c}(R_2) f^{N(\lambda)}_{c,a}(R_3) \\ &= \sum_{(\lambda)} \sum_{a,b,c} \tilde{f}^{N(\lambda)}_{a,b}(R_1) \varphi^{N(\lambda)}_{b,c}(R_2) \varphi^{N(\lambda)}_{c,a}(R_3) \\ &= \sum_{(\lambda)} \sum_{a,b,c} \varphi^{N(\lambda)}_{a,b}(R_1) \hat{f}^{N(\lambda)}_{b,c}(R_2) \varphi^{N(\lambda)}_{c,a}(R_3) \end{aligned} \tag{6.5.86}$$

が成り立つ。

(6.5.86) の二番目の等式から

$$\tilde{f}^{N(\lambda)}_{a,b}(R_1) = \sum_{a'} \left\langle \varphi^{N(\lambda)}_{c,a}(R_3) \middle| f^{N(\lambda)}_{c,a'}(R_3) \right\rangle \varphi^{N(\lambda)}_{a',b}(R_1) \tag{6.5.87}$$

だが、ここから $\left\langle \varphi^{N(\lambda)}_{c,a}(R_3) \middle| f^{N(\lambda)}_{c,a'}(R_3) \right\rangle$ は c に依存しない事が分かる。そこで

$$\begin{aligned} &\tilde{f}^{N(\lambda)}_{a,b}(R_1) = \sum_{a'} F^{N(\lambda)}_{a,a'} \varphi^{N(\lambda)}_{a',b}(R_1) \\ &\text{with} \qquad F^{N(\lambda)}_{a,a'} = \left\langle \varphi^{N(\lambda)}_{c,a}(R_3) \middle| f^{N(\lambda)}_{c,a'}(R_3) \right\rangle \end{aligned} \tag{6.5.88}$$

これを使うと (6.5.86) の三番目の等式より

$$\hat{f}^{N(\lambda)}_{b,c}(R_2) = F^{N(\lambda)}_{a,a} \varphi^{N(\lambda)}_{b,c}(R_2) \tag{6.5.89}$$

ここから $F_{a,a}^{N(\lambda)}$ は実は a によらず $F_{a,a}^{N(\lambda)} = F^{N(\lambda)}$ である事が分かる。結局 (6.5.86) は

$$\frac{1}{N}(\mathrm{Tr}R_1R_2R_3)^N = \sum_{(\lambda)} F^{N(\lambda)} \sum_{a,b,c} \varphi_{a,b}^{N(\lambda)}(R_1)\varphi_{b,c}^{N(\lambda)}(R_2)\varphi_{c,a}^{N(\lambda)}(R_3) \tag{6.5.90}$$

である事が分かる。更にこの式と (6.5.77) より

$$\varphi_{b,c}^{N(\lambda)}(R_2R_3) = F^{N(\lambda)} \sum_a \varphi_{b,a}^{N(\lambda)}(R_2)\varphi_{a,c}^{N(\lambda)}(R_3) \tag{6.5.91}$$

が得られる。ここで更に $b = c = H$ と置いて、$R_2 = R_3 = E_n$ (unit matrix) とすると $F^{N(\lambda)} = 1/N_H(N(\lambda))$ である事が分かる。結局

$$\varphi_{a,b}^{N(\lambda)}(R_1R_2) = \frac{1}{N_H(N\lambda)} \sum_c \varphi_{a,c}^{N(\lambda)}(R_1)\varphi_{c,b}^{N(\lambda)}(R_2) \tag{6.5.92}$$

である事が分かる。

[DG-多項式の左変換と右変換]

DG-多項式の左変換と右変換を

$$\begin{aligned} T_G^L &= e^{i\sum_{\alpha,\beta} g_{\alpha,\beta}A_{\alpha,\beta}} \\ T_G^R &= e^{i\sum_{i,j} g_{i,j}T_{i,j}} \\ G &= e^{i\sum_{i,j} g_{i,j}e_{i,j}} \end{aligned} \tag{6.5.93}$$

で定義する。ここに $e_{i,j}$ は (i,j) 成分だけ 1 の 2×2 matrix (matrix unit) である。すなわち $g = \sum_{i,j} g_{i,j}e_{i,j}$ として $G = e^{ig} = \sum_{n=0}^{\infty}(ig)^n/n!$ は 2×2 matrix である。同様に 2×2 matrix A, T を

$$\begin{aligned} A &= \sum_{\alpha,\beta} A_{\alpha,\beta}e_{\alpha,\beta} \\ T &= \sum_{i,j} T_{i,j}e_{i,j} \end{aligned} \tag{6.5.94}$$

と定義する。

$$[i\sum_{\alpha,\beta} g_{\alpha,\beta}A_{\alpha,\beta}, R_{\gamma,k}] = i\sum_{\alpha,\beta,i} g_{\alpha,\beta}R_{\alpha,i}\delta_{\gamma,\beta}\delta_{k,i} = i\sum_{\alpha} g_{\alpha,\gamma}R_{\alpha,k} = i({}^tgR)_{\gamma,k} \tag{6.5.95}$$

より $R = \sum_{\gamma,k} R_{\gamma,k}e_{\gamma,k}$ として

$$[i\sum_{\alpha,\beta} g_{\alpha,\beta}A_{\alpha,\beta}, R] = \sum_{\gamma,k} i({}^tgR)_{\gamma,k}e_{\gamma,k} = i{}^tgR \tag{6.5.96}$$

つまり 1 回ごとに $i^t g$ がかかるから、n 回繰り返すと $i^n({}^t(g^n)R) = (i^t g)^n R$. そこで

$$T_G^L R (T_G^L)^{-1} = e^{i^t g} R = (e^{i^t g}) R = {}^t G R \tag{6.5.97}$$

同様に

$$T_G^R R (T_G^R)^{-1} = RG \tag{6.5.98}$$

更に

$$\begin{aligned} T_G^L \varphi_{a,c}^{[f]}(R)(T_G^L)^{-1} &= \varphi_{a,c}^{[f]}({}^t G R) \\ &= \frac{1}{N_H([f])} \sum_b \varphi_{a,b}^{[f]}({}^t G) \varphi_{b,c}^{[f]}(R) \\ &= \sum_b D_{b,a}^{[f]}(G) \varphi_{b,c}^{[f]}(R) \end{aligned} \tag{6.5.99}$$

そこで

$$< \varphi_{b,c}^{[f]} | T_G^L | \varphi_{a,c}^{[f]} >=< \varphi_{b,c}^{[f]} | e^{i \sum_{\alpha,\beta} g_{\alpha,\beta} A_{\alpha,\beta}} | \varphi_{a,c}^{[f]} >= D_{b,a}^{[f]}(G) \tag{6.5.100}$$

同様に

$$< \varphi_{a,b}^{[f]} | T_G^R | \varphi_{a,c}^{[f]} >=< \varphi_{a,b}^{[f]} | e^{i \sum_{i,j} g_{i,j} T_{i,j}} | \varphi_{a,c}^{[f]} >= D_{b,c}^{[f]}(G) \tag{6.5.101}$$

が得られる。

(6.5.99) を繰り返して

$$\begin{aligned} & T_{G_1}^L T_{G_2}^L \varphi_{a,c}^{(\lambda)\mu}(R)(T_{G_1}^L T_{G_2}^L)^{-1} = \varphi_{a,c}^{(\lambda)\mu}({}^t(G_2)^t(G_1)R) \\ & = \varphi_{a,c}^{(\lambda)\mu}({}^t(G_1 G_2)R) \\ & = \sum_b D_{b,a}^{(\lambda)\mu}(G_1 G_2) \varphi_{b,c}^{(\lambda)\mu}(R) \end{aligned} \tag{6.5.102}$$

そこで

$$\begin{aligned} & T^L(\Omega) = T_{G_1}^L T_{G_2}^L T_{G_3}^L \\ & G_1 G_2 G_3 = G \end{aligned} \tag{6.5.103}$$

として、同じ事をもう一度繰り返して

$$T^L(\Omega) \varphi_{a,c}^{(\lambda)\mu}(R)(T^L(\Omega))^{-1} = \sum_b D_{b,a}^{(\lambda)\mu}(G) \varphi_{b,c}^{(\lambda)\mu}(R) \tag{6.5.104}$$

そこで、これを 1 に作用させて $< \varphi_{b,c}^{(\lambda)\mu}|$ で潰すと

$$< \varphi_{b,c}^{\lambda(\mu)} | T^L(\Omega) | \varphi_{a,c}^{\lambda(\mu)} >= D_{b,a}^{(\lambda)\mu}(G) \tag{6.5.105}$$

が得られる。ここで Euler 角を $\Omega=(\alpha,\beta,\theta)$ として、角運動量表示

$$\frac{1}{2}(A_{x,x}-A_{y,y})=J_z,\quad A_{x,y}=J_+=J_x+iJ_y,\quad A_{y,x}=J_-=J_x-iJ_y \tag{6.5.106}$$

かつ

$$\frac{1}{2}(T_{1,1}-T_{2,2})=J'_z,\quad T_{1,2}=J'_+=J'_x+iJ'_y,\quad T_{2,1}=J'_-=J'_x-iJ'_y \tag{6.5.107}$$

を使うと、$J_y=(-i)(A_{x,y}-A_{y,x})/2$ 等より

$$\begin{aligned}
T^L(\Omega)&=T^L_{G_1}T^L_{G_2}T^L_{G_3}\\
&=e^{-i\alpha(1/2)(A_{x,x}-A_{y,y})}e^{-\beta(1/2)(A_{x,y}-A_{y,x})}e^{-i\gamma(1/2)(A_{x,x}-A_{y,y})}\\
&=e^{-i\alpha J_z}e^{-i\beta J_y}e^{-i\gamma J_z}\\
T^R(\Omega)&==T^R_{G_1}T^R_{G_2}T^R_{G_3}\\
&=e^{-i\alpha(1/2)(T_{1,1}-T_{2,2})}e^{-\beta(1/2)(T_{1,2}-T_{2,1})}e^{-i\gamma(1/2)(T_{1,1}-T_{2,2})}\\
&=e^{-i\alpha J'_z}e^{-i\beta J'_y}e^{-i\gamma J'_z}
\end{aligned} \tag{6.5.108}$$

として $G=G_1G_2G_3$ は

$$\begin{aligned}
G_1&=e^{-i\alpha/2(e_{11}-e_{22})}=e^{-i\alpha/2\sigma_z}=\sum_{n=0}^{\infty}(-i\alpha/2)^n/n!(\sigma_z)^n\\
&\quad=\cos\alpha/2-i\sigma_z\sin\alpha/2=\begin{pmatrix}e^{-i\alpha/2}&0\\0&e^{i\alpha/2}\end{pmatrix}\\
G_2&=e^{-\beta/2(e_{12}-e_{21})}=e^{-i\beta/2\sigma_y}=\sum_{n=0}^{\infty}(-i\beta/2)^n/n!(\sigma_y)^n\\
&\quad=\cos\beta/2-i\sigma_y\sin\beta/2=\begin{pmatrix}\cos\beta/2&-\sin\beta/2\\\sin\beta/2&\cos\beta/2\end{pmatrix}\\
G_3&=e^{-\gamma/2(e_{12}-e_{21})}=e^{-i\gamma/2\sigma_z}\\
&\quad=\cos\gamma/2-i\sigma_z\sin\gamma/2=\begin{pmatrix}e^{-i\gamma/2}&0\\0&e^{i\gamma/2}\end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{6.5.109}$$

より

$$\begin{aligned}
G&=G_1G_2G_3\\
&=\begin{pmatrix}e^{-i\alpha/2}(\cos\beta/2)e^{-i\gamma/2}&e^{-i\alpha/2}(-\sin\beta/2)e^{i\gamma/2}\\e^{i\alpha/2}(\sin\beta/2)e^{-i\gamma/2}&e^{i\alpha/2}(\cos\beta/2)e^{i\gamma/2}\end{pmatrix}\\
&=D^{1/2}(\Omega)
\end{aligned} \tag{6.5.110}$$

となる。ここに $D^{1/2}(\Omega)$ はスピン $j=1/2$ の D-函数である。

[状態表示と波動函数表示]

角運動量代数の一般論のところで既に述べた様に、$\boldsymbol{J}$ と $|jm\rangle$ に対して

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{J}^2|jm>=j(j+1)|jm>\\&J_z|jm>=m|jm>\end{aligned}\tag{6.5.111}$$

は状態表示の関係式である。それに対して

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{L}^2Y_{\ell m}(\boldsymbol{r})=\ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\boldsymbol{r})\\&L_zY_{\ell m}(\boldsymbol{r})=mY_{\ell m}(\boldsymbol{r})\end{aligned}\tag{6.5.112}$$

は、座標表示の演算子 $\boldsymbol{L}=(1/\hbar)[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}]$ が波動函数 $Y_{\ell m}(\boldsymbol{r})$ の座標 $\boldsymbol{r}$ に作用することを現わす。同様に (6.5.105) 等は DG-多項式の状態 $|\varphi_{a,b}^{\lambda(\mu)}>$ に対する関係式であって、演算子 $T^L(\Omega)$ は変数 $R=(R_{\alpha i})$ に作用する。これを explicit に示すために $\{a,b\}=\{r,r'\}$ に対して

$$|\varphi_{r,r'}^{\lambda(\mu)}>=\left|\begin{matrix}\lambda+\mu & & \mu & & \lambda+\mu & & \mu\\ & \lambda+\mu-r & & & & \lambda+\mu-r' & \end{matrix}\right\rangle\tag{6.5.113}$$

あるいは $\mu=0$ に対して

$$\left|\begin{matrix}\lambda & & 0 & & \lambda & & 0\\ & \lambda-r & & & & \lambda-r' & \end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{matrix} & j & \\ m & & m'\end{matrix}\right\rangle\tag{6.5.114}$$

の表示を導入する。ここに $\lambda=2j,\lambda/2-r=m,\lambda/2-r'=m'$ である。 これらを使って (6.5.100), (6.5.101), (6.5.105) 等は

$$\begin{aligned}&\left\langle\begin{matrix}\lambda+\mu & & \mu & & \lambda+\mu & & \mu\\ & \lambda+\mu-r & & & & \lambda+\mu-s & \end{matrix}\right|T^L(\Omega)\left|\begin{matrix}\lambda+\mu & & \mu & & \lambda+\mu & & \mu\\ & \lambda+\mu-r' & & & & \lambda+\mu-s & \end{matrix}\right\rangle=D_{r,r'}^{(\lambda)0}(\Omega)\\&\left\langle\begin{matrix}\lambda+\mu & & \mu & & \lambda+\mu & & \mu\\ & \lambda+\mu-r & & & & \lambda+\mu-s & \end{matrix}\right|T^R(\Omega)\left|\begin{matrix}\lambda+\mu & & \mu & & \lambda+\mu & & \mu\\ & \lambda+\mu-r & & & & \lambda+\mu-s' & \end{matrix}\right\rangle=D_{s,s'}^{(\lambda)0}(\Omega)\end{aligned}\tag{6.5.115}$$

また $\mu=0$ に対して角運動量表示を用いると

$$\begin{aligned}&\left\langle\begin{matrix} & j & \\ m & & s\end{matrix}\right|\mathcal{R}(\Omega)\left|\begin{matrix} & j & \\ m' & & s\end{matrix}\right\rangle=D_{m,m'}^j(\Omega)\\&\left\langle\begin{matrix} & j & \\ m & & s\end{matrix}\right|\mathcal{R}'(\Omega)\left|\begin{matrix} & j & \\ m & & s'\end{matrix}\right\rangle=D_{s,s'}^j(\Omega)\end{aligned}\tag{6.5.116}$$

と書ける。

(6.5.97) や (6.5.98) は G を (6.5.110) の $G=G_1G_2G_3$ とした時、DG-多項式自身が highest weight の normalization factor $N_H(\lambda\mu)$ を除いて D-函数になる事を示している。例えば、$\lambda=1,\mu=0$ の時 $R=(R_{\alpha,i})$ を 2×2 unitary 行列 G $(\det G=1)$ に制限したものが spin 1/2 の表現行列である。つまり

$$\frac{1}{N_H(\lambda 0)}\varphi^{(1)0}(R)=D^{1/2}(G)\quad \text{for}\quad R=G \tag{6.5.117}$$

同様に、一般の λ と $\mu=0$ に対しても DG-多項式の explicit な表式から

$$\begin{aligned}
&D^{\lambda/2}_{\lambda/2-r,\lambda/2-r'}(\Omega)=\frac{1}{N_H(\lambda 0)}\varphi^{(\lambda)0}_{r,r'}(R)\quad \text{for}\quad R=G\\
&=\sqrt{(\lambda-r)!(\lambda-r')!r!r'!}\sum_{a=\max\{0,r+r'-\lambda\}}^{\min\{r,r'\}}\frac{1}{(\lambda-r-r'+a)!(r-a)!(r'-a)!a!}\\
&\times(e^{-i\alpha/2}(\cos\beta/2)e^{-i\gamma/2})^{\lambda-r-r'+a}(e^{-i\alpha/2}(-\sin\beta/2)e^{i\gamma/2})^{r'-a}\\
&\times(e^{i\alpha/2}(\sin\beta/2)e^{-i\gamma/2})^{r-a}(e^{i\alpha/2}(\cos\beta/2)e^{i\gamma/2})^{a}\\
&=e^{-i\alpha(\lambda/2-r)}d^{\lambda/2}_{\lambda/2-r,\lambda/2-r'}(\beta)e^{-i\gamma(\lambda/2-r')}
\end{aligned} \tag{6.5.118}$$

ここに

$$\begin{aligned}
&d^{\lambda/2}_{\lambda/2-r,\lambda/2-r'}(\beta)=\sqrt{(\lambda-r)!(\lambda-r')!r!r'!}\\
&\times\sum_{a=\max\{0,r+r'-\lambda\}}^{\min\{r,r'\}}(-)^{r'-a}\frac{1}{(\lambda-r-r'+a)!(r-a)!(r'-a)!a!}\\
&\times(\cos\beta/2)^{\lambda-r-r'+2a}(\sin\beta/2)^{r+r'-2a}
\end{aligned} \tag{6.5.119}$$

あるいは、角運動量表示で

$$\begin{aligned}
&d^{j}_{m,m'}(\theta)=\sqrt{(j+m)!(j+m')!(j-m)!(j-m')!}\\
&\times\sum_{a=\max\{0,-m-m'\}}^{\min\{j-m,j-m'\}}(-)^{j-m'-a}\frac{1}{(m+m'+a)!(j-m-a)!(j-m'-a)!a!}\\
&\times(\cos\theta/2)^{m+m'+2a}(\sin\theta/2)^{2j-m-m'-2a}\\
&=(\sin\theta/2)^{2j}\sqrt{(j+m)!(j+m')!(j-m)!(j-m')!}\\
&\times\sum_{a=\max\{0,-m-m'\}}^{\min\{j-m,j-m'\}}(-)^{j-m'-a}\frac{1}{(m+m'+a)!(j-m-a)!(j-m'-a)!a!}\\
&\times(\cot\theta/2)^{m+m'+2a}
\end{aligned} \tag{6.5.120}$$

が得られる。

(6.5.120) は半整数と整数全ての j 及び $m, m' = j \cdots -j$ について $d^j_{m,m'}(\theta)$ を定義しているので、ここから次の d-函数の対称性が簡単に得られる。まず、$m \leftrightarrow m'$ とすると phase $(-)^{m-m'}$ がでる。次に、m, m' の符号を変えると sum 以下= $\sum_{a=\max\{0,(m+m')\}}^{\min\{(j+m),(j+m')\}} (-)^{j+m'-a} \frac{1}{(a-m-m')(j+m-a)!(j+m'-a)!a!} (\cot\theta/2)^{2a-m-m'}$ ここで $a \to a + m + m'$ に変えて phase が $(-)^{j-m-a}$ に変わるから、$(-)^{m-m'}$ の phase がでる。そこで、今度は $m \to -m', m' \to -m$ と変えると sum 以下= $\sum_{a=\max\{0,(m+m')\}}^{\min\{(j+m),(j+m')\}} (-)^{j+m-a} \frac{1}{(a-m-m')!(j+m'-a)!(j+m-a)!a!} (\cot\theta/2)^{2a-m-m'}$ 今度は $a \to a+m+m'$ に変えて、phase は $(-)^{j-m'-a}$ に変わるから全体として元へ戻る。結局

$$\begin{aligned} d^j_{m,m'}(\theta) &= real = (-)^{m-m'} d^j_{m',m}(\theta) \\ &= (-)^{m-m'} d^j_{-m,-m'}(\theta) = d^j_{-m',-m}(\theta) \end{aligned} \tag{6.5.121}$$

が得られる。次に $\theta \to -\theta$ に対しは matrix d^j は直交行列だから $(d^j(\theta))^t = (d^j(\theta))^{-1} = d^j(-\theta)$ そこで

$$d^j_{m,m'}(-\theta) = d^j_{m',m}(\theta) = (-)^{m-m'} d^j_{m,m'}(\theta) = d^j_{-m,-m'}(\theta) \tag{6.5.122}$$

結局、d-函数の対称性

$$\begin{aligned} d^j_{m,m'}(\theta) &= real = (-)^{m-m'} d^j_{m',m}(\theta) \\ &= (-)^{m-m'} d^j_{-m,-m'}(\theta) = d^j_{-m',-m}(\theta) \\ &= d^j_{m',m}(-\theta) = d^j_{-m,-m'}(-\theta) \end{aligned} \tag{6.5.123}$$

が得られる。これを $D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi)$ で書けば

$$\begin{aligned} (D^j_{m,m'}(\varphi,\theta,\psi))^* &= (-)^{m-m'} D^j_{-m,-m'}(\varphi,\theta,\psi) \\ &= D^j_{m',m}(-\psi,-\theta,-\varphi) \end{aligned} \tag{6.5.124}$$

が得られる。

[Euler 角表示の演算子]

spin matrix による時と同じ様に $\boldsymbol{J}$ と $\boldsymbol{J}'$ の Euler 角による表現を見出すことができる。以前の式 $\partial\mathcal{R}(\Omega) = (-i)M\mathcal{R}(\Omega) = (-iAJ)\mathcal{R}(\Omega)$ $\partial = (-i)M = (-i)AJ$ から $J = iA^{-1}\partial$ より $I = (-i)A^{-1}\partial$ と符号を変えておくと $I = -J$. そこで $I\partial\mathcal{R}(\Omega) =$

$(-)J\mathcal{R}(\Omega)$ より $\boldsymbol{I}$ は前と同じで

$$
\begin{aligned}
&I_+ = I_x + iI_y = e^{i\alpha}(\partial_\beta + i(\cot\beta)\partial_\alpha - i(1/\sin\beta)\partial_\gamma) \\
&I_- = I_x - iI_y = e^{-i\alpha}(-\partial_\beta + i(\cot\beta)\partial_\alpha - i(1/\sin\beta)\partial_\gamma) \\
&I_z = (-i)\partial_\alpha
\end{aligned} \tag{6.5.125}
$$

である。そこで (6.5.116) から, I, J の直交成分を取ると

$$
\begin{aligned}
I_\alpha D^j_{m,m'}(\Omega) &= (-)\left\langle {}^{\ \ j}_{m \quad s} \middle| J_\alpha \mathcal{R}(\Omega) \middle| {}^{\ \ j}_{m' \quad s} \right\rangle \\
&= (-)\sum_{m''} < jm|J_\alpha|jm'' > D^j_{m'',m'}(\Omega)
\end{aligned} \tag{6.5.126}
$$

まず $\alpha = z$ の時､$m'' = m$ only で D-函数の対称性 $D^j_{m,m'}(\Omega) = (-)^{m'-m}(D^j_{-m,-m'}(\Omega))^*$ を使うと

$$
I_z(-)^{m'-m}(D^j_{-m,-m'}(\Omega))^* = (-)m\ (-)^{m'-m}(D^j_{-m,-m'}(\Omega))^* \tag{6.5.127}
$$

そこで $m \to -m, m' \to -m'$ へ戻して

$$
I_z(D^j_{m,m'}(\Omega))^* = m(D^j_{m,m'}(\Omega))^* \tag{6.5.128}
$$

が得られる。同様に、$I_+ = I_x + iI_y$ の時は

$$
\begin{aligned}
&I_+(-)^{m'-m}(D^j_{-m,-m'}(\Omega))^* = (-) < jm|J_+|jm-1 > (-)^{m'-m+1}(D^j_{-m,-m'}(\Omega))^* \\
&= (-)\sqrt{(j-m+1)(j+m)}(-)^{m'-m+1}(D^j_{-m,-m'}(\Omega))^*
\end{aligned} \tag{6.5.129}
$$

そこで $\{-m, -m'\}$ を元へ戻して

$$
\begin{aligned}
I_+(D^j_{m,m'}(\Omega))^* &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}(D^j_{m,m'}(\Omega))^* \\
I_-(D^j_{m,m'}(\Omega))^* &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}(D^j_{m,m'}(\Omega))^*
\end{aligned} \tag{6.5.130}
$$

が得られる。これらから

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{I}^2(D^j_{m,m'}(\Omega))^* &= j(j+1)(D^j_{m,m'}(\Omega))^* \\
I_z(D^j_{m,m'}(\Omega))^* &= m(D^j_{m,m'}(\Omega))^*
\end{aligned} \tag{6.5.131}
$$

であることが分かる。(6.5.131) は $(D^j_{m,m'}(\Omega))^*$ が $\boldsymbol{I}$ 更には

$$
\mathcal{R}(\Omega) = e^{-i\alpha I_z}e^{-i\beta I_y}e^{-i\gamma I_z} \tag{6.5.132}
$$

および後出の

$$\mathcal{R}'(\Omega) = e^{-i\alpha I'_z} e^{-i\beta I'_y} e^{-i\gamma I'_z} \tag{6.5.133}$$

の波動函数となっている事を示している。そこで (6.5.131) は、状態ベクトルを D-函数 $(D^j_{m,m'}(\Omega))^*$ と考えることによっても成り立っている。実際既に示した様に、$j = \ell =$ integer, $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$ に対して

$$(D^j_{m,0}(\alpha, \beta, 0))^* = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell m}(\beta, \alpha) \tag{6.5.134}$$

である。

同様に DG-多項式の右変換 (6.5.101) に対しても、(6.5.108) の $T^R(\Omega)$ の角運動量表示 $\mathcal{R}'(\Omega) = e^{-i\alpha J'_z} e^{-i\beta J'_y} e^{-i\gamma J'_z}$ の Euler 角による演算子表示を求めることができる。まず、J'_α が J_α と同じ交換関係を満たす事により以前の式 $\partial_\alpha \mathcal{R}'(\Omega) = (-i) M'_\alpha \mathcal{R}(\Omega) = (-iAJ'_\alpha)\mathcal{R}'(\Omega)$ から、$I_\alpha \mathcal{R}'(\Omega) = (-) J'_\alpha \mathcal{R}'(\Omega)$ がそのまま成り立つ。ここに、$\boldsymbol{I}$ は前と同じ (6.5.125) で定義される。そこで、これを

$$I_\alpha \mathcal{R}'(\Omega) \left| \begin{matrix} & j & \\ m & & s' \end{matrix} \right\rangle = (-) J'_\alpha \mathcal{R}'(\Omega) \left| \begin{matrix} & j & \\ m & & s' \end{matrix} \right\rangle \tag{6.5.135}$$

と書いて、左から状態を掛けて

$$I_\alpha \left\langle \begin{matrix} & j & \\ m & & s \end{matrix} \right| \mathcal{R}'(\Omega) \left| \begin{matrix} & j & \\ m & & s' \end{matrix} \right\rangle = (-) \left\langle \begin{matrix} & j & \\ m & & s \end{matrix} \right| J'_\alpha \mathcal{R}'(\Omega) \left| \begin{matrix} & j & \\ m & & s' \end{matrix} \right\rangle \tag{6.5.136}$$

そこで (−) を左辺に移して me の cc を取ると

$$(-) I_\alpha \left\langle \begin{matrix} & j & \\ m & & s' \end{matrix} \right| \mathcal{R}'(\Omega)^\dagger \left| \begin{matrix} & j & \\ m & & s \end{matrix} \right\rangle^* = \left\langle \begin{matrix} & j & \\ m & & s' \end{matrix} \right| \mathcal{R}'(\Omega)^\dagger J'_\alpha \left| \begin{matrix} & j & \\ m & & s \end{matrix} \right\rangle^* \tag{6.5.137}$$

ここで直交表示では $(J'_\alpha)^\dagger = J'_\alpha$ であることを用いた。更に $\mathcal{R}'(\Omega)^\dagger = \mathcal{R}'(\Omega^{-1})$ with $\Omega^{-1} = (-\gamma, -\beta, -\alpha)$ より

$$(-) I_\alpha \left\langle \begin{matrix} & j & \\ m & & s' \end{matrix} \right| \mathcal{R}'(\Omega^{-1}) \left| \begin{matrix} & j & \\ m & & s \end{matrix} \right\rangle^* = \sum_{s''} \left\langle \begin{matrix} & j & \\ m & & s' \end{matrix} \right| \mathcal{R}'(\Omega^{-1}) \left| \begin{matrix} & j & \\ m & & s'' \end{matrix} \right\rangle^* \langle js'' | J'_\alpha | js \rangle^* \tag{6.5.138}$$

つまり

$$(-) I_\alpha (D^j_{s',s}(\Omega^{-1}))^* = \sum_{s''} (D^j_{s',s}(\Omega^{-1}))^* \langle js | J'_\alpha | js'' \rangle \tag{6.5.139}$$

ここで $m=m'$ として、まず J'_α の直交表示から $J'_+=J'_x+iJ'_y, J'_-=J'_x-iJ'_y, J'_z$, $I_+=I_x+iI_y, I_-=I_x-iI_y, I_z$ の表示に移ると

$$
\begin{aligned}
&(-)I_+(D^j_{s',s}(\Omega^{-1}))^*=(D^j_{s',s}(\Omega^{-1}))^*\sqrt{(j-s+1)(j+s)}\\
&(-)I_-(D^j_{s',s}(\Omega^{-1}))^*=(D^j_{s',s}(\Omega^{-1}))^*\sqrt{(j+s+1)(j-s)}\\
&(-)I_z(D^j_{s',s}(\Omega^{-1}))^*=(D^j_{s',s}(\Omega^{-1}))^*s
\end{aligned}
\tag{6.5.140}
$$

ここで $s'\to m$ に変え、$\alpha\to-\gamma,\beta\to-\beta,\gamma\to-\gamma$ の変換を行なって、再び Ω^{-1} を Ω に戻すと

$$
\begin{aligned}
&(-)I_+=(-)e^{i\alpha}(\partial_\beta+i(\cot\beta)\partial_\alpha-i(1/\sin\beta)\partial_\gamma)\\
&\to(-)e^{-i\gamma}(-\partial_\beta+i(\cot\beta)\partial_\gamma-i(1/\sin\beta)\partial_\alpha)=e^{-i\gamma}(\partial_\beta-i(\cot\beta)\partial_\gamma+i(1/\sin\beta)\partial_\alpha)\\
&=I'_-\\
&(-)I_-=(-)e^{-i\alpha}(-\partial_\beta+i(\cot\beta)\partial_\alpha-i(1/\sin\beta)\partial_\gamma)\\
&\to(-)e^{i\gamma}(\partial_\beta+i(\cot\beta)\partial_\gamma-i(1/\sin\beta)\partial_\alpha)=e^{i\gamma}(-\partial_\beta-i(\cot\beta)\partial_\gamma+i(1/\sin\beta)\partial_\alpha)\\
&=I'_+\\
&(-)I_z=(-)(-i)\partial_\alpha=i\partial_\alpha\to(-i)\partial_\gamma=I'_z
\end{aligned}
\tag{6.5.141}
$$

そこで

$$
\begin{aligned}
&I'_-(D^j_{m,s}(\Omega))^*=(D^j_{m,s}(\Omega))^*\sqrt{(j+s)(j-s+1)}\\
&I'_+(D^j_{m,s}(\Omega))^*=(D^j_{m,s}(\Omega))^*\sqrt{(j-s)(j+s+1)}\\
&I'_z(D^j_{m,s}(\Omega))^*=(D^j_{m,s}(\Omega))^*s
\end{aligned}
\tag{6.5.142}
$$

ここに

$$
\begin{aligned}
I'_+&=e^{i\gamma}(-\partial_\beta-i(\cot\beta)\partial_\gamma+i(1/\sin\beta)\partial_\alpha)\\
I'_-&=e^{-i\gamma}(\partial_\beta-i(\cot\beta)\partial_\gamma+i(1/\sin\beta)\partial_\alpha)\\
I'_z&=(-i)\partial_\gamma
\end{aligned}
\tag{6.5.143}
$$

である。$I_\pm$ と比べて逆に I'_- が raising operator I'_+ が lowering operator である。また $\boldsymbol{I}'^2=\boldsymbol{I}^2=j(j+1)$ であることがすぐ分かる。また $\mathcal{R}'(\Omega)=e^{-i\alpha J'_z}e^{-i\beta J'_y}e^{-i\gamma J'_z}$ を

$$
\mathcal{R}'(\Omega)=e^{-i\alpha I'_z}e^{-i\beta I'_y}e^{-i\gamma I'_z}
\tag{6.5.144}
$$

とすれば、その operater の波動函数は $(D^j_{m,s}(\Omega))^*$ である。最後に $\Omega=(\varphi,\theta,\psi)$ の通常のオイラー角の表示に戻れば、D-函数は $\boldsymbol{I}^2=\boldsymbol{I}'^2, I_z, I'_z$ の同時固有状態であることが分かる。

(DG-多項式項、終わり)