

# J.J.Sakurai 量子力学の解答

更新日時 2014 年 3 月 15 日

作成者 かしゃるふぁ

## はじめに

J.J.Sakurai『現代の量子力学(上・下)』の章末問題の解答集です。一部記号の使い方が違うかもしれません。

# 目次

1	基礎概念	4
1.1	交換子、半交換子	4
1.2	Pauli 行列	4
1.3	$SU(2)$ の随伴表現	5
1.4	演算子の種々の性質	6
2	量子ダイナミックス	8
3	角運動量の理論	9
3.1	Pauli 行列	9
3.2	Pauli 行列から作られる Unitary 行列	9
3.3	電子・陽電子の相互作用	10
3.4	スピン $s = 1$	11
3.5	剛体 Hamiltonian	11
3.6	Euler 角	12
3.7	ベクトル演算子	13
3.8	回転の 2 価表現	13
3.9	スピン $1/2$ のアンサンブル	14
3.10	密度演算子の時間発展	16
3.11	スピン $1$ のアンサンブル	16
3.12	$y$ 軸周りの微小回転	17
3.13	角運動量代数の随伴表現	18
3.14	角運動量の昇降演算子	19
3.15	球面調和関数	20
3.16	角運動量と半古典解釈	22
3.17	軌道角運動量	22
3.18	回転	23
3.19	Scwinger モデル	23
3.20	角運動量 $j_1 = j_2 = 1$ の合成	24
3.21	Wigner の $d$ 行列に関する公式	25
3.22	$j = 1$ の角運動量	26
3.23	行列要素	27
3.24	スピン $s = 1/2$ の 2 粒子系	27
3.25	1 階の球面テンソル	28
3.26	球面テンソルの合成	28
3.27	Wigner-Eckart の定理の応用	29
3.28	4 重極モーメント	31
3.29	電気 4 重極相互作用	32
4	量子力学における対称性	34
5	近似法	35

6	同種粒子	36
6.1	1次元調和振動子	36
6.2	スピン1の2粒子	36
6.3	ヘリウム原子	36
6.4	正三角形の対称性と角運動量	37
6.5	スピン1の3粒子	37
6.6	スピン3/2	37
6.7	井戸型ポテンシャル中の2つのFermi粒子	37
7	散乱理論	38
7.1	1次元の透過・反射問題	38
7.2	全断面積に対する近似	39
7.3	井戸型ポテンシャル	40
7.4	湯川ポテンシャル	42
7.5	剛体球と不確定性関係	42
7.6	剛体球散乱の位相のズレによる解析	42
7.7	高エネルギー散乱の位相のズレ	43
7.8	球対称ポテンシャルによる散乱の形式的理論	43
7.9	デルタ殻ポテンシャルによる散乱	43
7.10	単振動するポテンシャルによる散乱	43
7.11	水素原子の基底状態による散乱	43
7.12	Coulombポテンシャル	43

# 1. 基礎概念

## 1.1 交換子、半交換子

交換子の定義より、

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D} - \hat{C}\hat{D}\hat{A}\hat{B} \quad (1.1)$$

である。一方、反交換子の定義より、

$$\begin{aligned} & -\hat{A}\hat{C}\{\hat{D}, \hat{B}\} + \hat{A}\{\hat{C}, \hat{B}\}\hat{D} - \hat{C}\{\hat{D}, \hat{A}\}\hat{B} + \{\hat{C}, \hat{A}\}\hat{D}\hat{B} \\ & = -\hat{A}\hat{C}(\hat{D}\hat{B} + \hat{B}\hat{D}) + \hat{A}(\hat{C}\hat{B} + \hat{B}\hat{C})\hat{D} - \hat{C}(\hat{D}\hat{A} + \hat{A}\hat{D})\hat{B} + (\hat{C}\hat{A} + \hat{A}\hat{C})\hat{D}\hat{B} \end{aligned} \quad (1.2)$$

$$= \hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D} - \hat{C}\hat{D}\hat{A}\hat{B} \quad (1.3)$$

となるから、

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}] = -\hat{A}\hat{C}\{\hat{D}, \hat{B}\} + \hat{A}\{\hat{C}, \hat{B}\}\hat{D} - \hat{C}\{\hat{D}, \hat{A}\}\hat{B} + \{\hat{C}, \hat{A}\}\hat{D}\hat{B} \quad (1.4)$$

である。

## 1.2 Pauli 行列

$2 \times 2$  複素行列  $X$  を

$$X \equiv a_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \quad (a_0 \in \mathbb{C} \wedge \mathbf{a} \in \mathbb{C}^3) \quad (1.5)$$

により定める。

(a) Pauli 行列はトレースレス

$$\text{tr}\sigma_k = 0 \quad (1.6)$$

であることと、Pauli 行列の積に関する性質

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + \sqrt{-1}\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad (1.7)$$

を用いて、Pauli 行列の積のトレースを計算すると、

$$\text{tr}\sigma_i \sigma_j = 2\delta_{ij} \quad (1.8)$$

となる。ここで、 $\text{tr}\delta_{ij} = 2$  を用いた。したがって、

$$\text{tr}X = 2a_0, \quad \text{tr}(\sigma_k X) = 2a_k \quad (1.9)$$

となる。

(b) 行列  $X$  を

$$X = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

と表すと、(a) の計算結果より、

$$a_0 = \frac{1}{2}\text{tr}(X) = \frac{1}{2}(X_{11} + X_{22}) \quad (1.11)$$

$$a_1 = \frac{1}{2}\text{tr}(\sigma_1 X) = \frac{1}{2}(X_{21} + X_{12}) \quad (1.12)$$

$$a_2 = \frac{1}{2}\text{tr}(\sigma_2 X) = -\frac{i}{2}(X_{21} - X_{12}) \quad (1.13)$$

$$a_3 = \frac{1}{2}\text{tr}(\sigma_3 X) = \frac{1}{2}(X_{11} - X_{22}) \quad (1.14)$$

である。

### 1.3 $SU(2)$ の随伴表現

行列式の性質より、

$$\det(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}') = \det \left( e^{\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}}{2} \phi} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} e^{-\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}}{2} \phi} \right) \quad (1.15)$$

$$= \det \left( e^{\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}}{2} \phi} \right) \det(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}) \det \left( e^{-\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}}{2} \phi} \right) \quad (1.16)$$

$$= \det \left( e^{\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}}{2} \phi} \right) \det(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}) \left\{ \det \left( e^{\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}}{2} \phi} \right) \right\}^{-1} \quad (1.17)$$

$$= \det(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}) \quad (1.18)$$

となるから、変換に際し行列式は不変である (相似な行列同士の行列式は等しい)。

$\mathbf{n}$  が  $z$  軸方向を向いているとすると、

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}' = e^{\frac{i\sigma_z \phi}{2}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} e^{-\frac{i\sigma_z \phi}{2}} \quad (1.19)$$

である。ここで、行列の指数関数を計算すると

$$e^{\frac{i\sigma_z \phi}{2}} = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

$$e^{-\frac{i\sigma_z \phi}{2}} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

であるから、Pauli 行列の変換則は

$$e^{\frac{i\sigma_z \phi}{2}} \sigma_x e^{-\frac{i\sigma_z \phi}{2}} = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

$$= \sigma_x \cos \phi - \sigma_y \sin \phi \quad (1.24)$$

$$e^{\frac{i\sigma_z \phi}{2}} \sigma_y e^{-\frac{i\sigma_z \phi}{2}} = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -ie^{i\phi} \\ ie^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} \quad (1.26)$$

$$= \sigma_y \cos \phi + \sigma_x \sin \phi \quad (1.27)$$

$$e^{\frac{i\sigma_z \phi}{2}} \sigma_z e^{-\frac{i\sigma_z \phi}{2}} = \sigma_z \quad (1.28)$$

となる。したがって、

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}' = e^{\frac{i\sigma_z \phi}{2}} (\sigma_x a_x + \sigma_y a_y + \sigma_z a_z) e^{-\frac{i\sigma_z \phi}{2}} \quad (1.29)$$

$$= \sigma_x (a_x \cos \phi + a_y \sin \phi) + \sigma_y (-a_x \sin \phi + a_y \cos \phi) + \sigma_z a_z \quad (1.30)$$

となる。よって、ベクトル  $\mathbf{a}'$  は

$$\begin{pmatrix} a'_x \\ a'_y \\ a'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} \quad (1.31)$$

となり、これはベクトル  $\mathbf{a}$  の  $z$  軸周りの  $-\phi$  回転を表している。

## 1.4 演算子の種々の性質

(a)  $I$  を量子数の集合とする。このとき、完全性

$$\sum_{i \in I} |i\rangle \langle i| = \hat{1} \quad (1.32)$$

が成り立つとする。

$$\text{tr}(\hat{X}\hat{Y}) = \sum_{i \in I} \langle i|\hat{X}\hat{Y}|i\rangle \quad (\because \text{トレースの定義}) \quad (1.33)$$

$$= \sum_{i,j \in I} \langle i|\hat{X}|j\rangle \langle j|\hat{Y}|i\rangle \quad (1.34)$$

$$= \sum_{i,j \in I} \langle j|\hat{Y}|i\rangle \langle i|\hat{X}|j\rangle \quad (1.35)$$

$$= \sum_{j \in I} \langle j|\hat{Y}\hat{X}|j\rangle \quad (1.36)$$

$$= \text{tr}(\hat{Y}\hat{X}) \quad (\because \text{トレースの定義}) \quad (1.37)$$

(b) ket ベクトルに対する内積  $(\cdot, \cdot)$  を

$$(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \equiv \langle \psi|\phi\rangle \quad (1.38)$$

により定める。すると、演算子の Hermite 共役の定義は

$$(|\psi\rangle, \hat{X}|\phi\rangle) = (\hat{X}^\dagger|\psi\rangle, |\phi\rangle) \quad (1.39)$$

となる。この式にしたがって計算をすると、

$$((\hat{X}\hat{Y})^\dagger|\psi\rangle, |\phi\rangle) = (|\psi\rangle, (\hat{X}\hat{Y})|\phi\rangle) \quad (1.40)$$

$$= (|\psi\rangle, \hat{X}(\hat{Y}|\phi\rangle)) \quad (1.41)$$

$$= (\hat{X}^\dagger|\psi\rangle, \hat{Y}|\phi\rangle) \quad (1.42)$$

$$= (\hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger|\psi\rangle, |\phi\rangle) \quad (1.43)$$

であるから、

$$(\{(\hat{X}\hat{Y})^\dagger - \hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger\}|\psi\rangle, |\phi\rangle) = 0 \quad (1.44)$$

となるが、 $|\phi\rangle$  は任意のベクトルであるから、

$$\{(\hat{X}\hat{Y})^\dagger - \hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger\}|\psi\rangle = 0 \quad (1.45)$$

となる。 $|\psi\rangle$  も任意のベクトルであるから、

$$(\hat{X}\hat{Y})^\dagger = \hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger \quad (1.46)$$

となる。

(c) Hermite 演算子  $\hat{A}$  の固有値を  $a_j$  ( $j \in I$ ) とし、対応する固有ベクトルを  $|a_j\rangle$  とする。すると、演算子  $\hat{A}$  の指数関数

$$\exp[if(\hat{A})] \quad (1.47)$$

の固有値は  $e^{if(a_j)}$  であり、対応する固有ベクトルは  $|a_j\rangle$  である。したがって、スペクトル分解すると、

$$\exp[if(\hat{A})] = \sum_{j \in I} |a_j\rangle \exp[if(a_j)] \langle a_j| \quad (1.48)$$

となる。

(d)

$$\sum_{a'} \phi_{a'}^*(\mathbf{x}') \phi_{a'}(\mathbf{x}'') = \sum_{a'} (\langle \mathbf{x}' | a' \rangle)^* \langle \mathbf{x}'' | a' \rangle \quad (1.49)$$

$$= \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | a' \rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle \quad (1.50)$$

$$= \langle \mathbf{x}'' | \mathbf{x}' \rangle \quad (\because \text{完全性}) \quad (1.51)$$

$$= \delta(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}') \quad (\because \text{連続スペクトルの直交規格化条件}) \quad (1.52)$$



## 2. 量子ダイナミクス

### 3. 角運動量の理論

#### 3.1 Pauli 行列

Pauli 行列  $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$  の固有値、固有ベクトルを求めよう。固有方程式は

$$\det \begin{bmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{bmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0 \quad (3.1)$$

となるから、これを解いて、

$$\lambda = \pm 1 \quad (3.2)$$

が固有値である。これは初めから予想されていたことである。次に固有ベクトルを求めよう。

$\lambda = +1$  のとき、

$$\begin{cases} -iy = x \\ ix = y \end{cases} \quad (3.3)$$

より、固有ベクトルは

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

となる。

$\lambda = -1$  のとき、

$$\begin{cases} -iy = -x \\ ix = -y \end{cases} \quad (3.5)$$

より、固有ベクトルは

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

となる。<sup>\*1</sup>

#### 3.2 Pauli 行列から作られる Unitary 行列

$a_0 \in \mathbb{R}, \mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$  に対して、 $2 \times 2$  行列  $U$  を

$$U \equiv \frac{a_0 + i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{a_0 - i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}} \quad (3.7)$$

と定める。

(a) まず、Unitary 性を示す。Pauli 行列は Hermite 行列であるから、

$$U^\dagger = \left( \frac{a_0 + i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{a_0 - i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}} \right)^\dagger = \frac{a_0 - i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{a_0 + i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}} \quad (3.8)$$

である。したがって、

$$UU^\dagger = \frac{a_0 + i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{a_0 - i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}} \frac{a_0 - i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{a_0 + i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}} = 1 \quad (3.9)$$

---

<sup>\*1</sup> Hermite 行列の異なる固有値に属する固有ベクトルが直交することを用いて計算することも可能

が成り立つから、行列  $U$  が Unitary であることが分かる。

さらに、行列  $U$  の行列式は

$$\det U = \det(a_0 + i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \{\det(a_0 - i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})\}^{-1} \quad (3.10)$$

であるが、

$$\det(a_0 \pm i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \det \begin{bmatrix} a_0 \pm ia_3 & \pm ia_1 + ia_2 \\ \pm ia_1 - ia_2 & a_0 \mp ia_3 \end{bmatrix} = a_0^2 + a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 = |\mathbf{a}|^2 \quad (3.11)$$

となるから、

$$\det U = \frac{|\mathbf{a}|^2}{|\mathbf{a}|^2} = 1 \quad (3.12)$$

である。よって、 $U \in \text{SU}(2)$  が示された。

### 3.3 電子・陽電子の相互作用

$z$  方向に一様磁場  $B$  がかけられているときの電子と陽電子の 2 つからなる系を記述する Hamiltonian のスピンの部分に関する部分は、

$$\hat{H} = A\hat{S}^{e^-} \cdot \hat{S}^{e^+} + \left(\frac{eB}{mc}\right) (\hat{S}_z^{e^-} - \hat{S}_z^{e^+}) \quad (3.13)$$

となる。このとき、

$$\hat{S}^{e^-} \cdot \hat{S}^{e^+} = \frac{1}{2} (\hat{S}^{\text{tot}2} - \hat{S}^{e^-2} - \hat{S}^{e^+2}) \quad (3.14)$$

$$= \frac{1}{2} (\hat{S}^{\text{tot}2} - 3\hbar^2) \quad (3.15)$$

となる。ここで、全スピン  $\hat{S}^{\text{tot}} = \hat{S}^{e^-} + \hat{S}^{e^+}$  である。したがって、Hamiltonian は

$$\hat{H} = \frac{A}{2} (\hat{S}^{\text{tot}2} - 3\hbar^2) + \left(\frac{eB}{mc}\right) (\hat{S}_z^{e^-} - \hat{S}_z^{e^+}) \quad (3.16)$$

となる。今、系のスピン状態が  $|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle$  にあるとする。

(a)  $A = 0$  のとき、

$$\hat{H} |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle = \left(\frac{eB}{mc}\right) (\hat{S}_z^{e^-} - \hat{S}_z^{e^+}) |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle \quad (3.17)$$

$$= \left(\frac{e\hbar B}{mc}\right) |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle \quad (3.18)$$

であり、状態  $|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle$  はエネルギー固有値  $\left(\frac{e\hbar B}{mc}\right)$  のエネルギー固有状態になっている。

(b)  $A \neq 0, B = 0$  のとき、

$$\hat{H} |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle = \frac{A}{2} (\hat{S}^{\text{tot}2} - 3\hbar^2) |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle \quad (3.19)$$

$$= \frac{A}{2} (\hat{S}^{\text{tot}2} - 3\hbar^2) \frac{1}{\sqrt{2}} (|S^{\text{tot}} = 1, S_z^{\text{tot}} = 0\rangle + |S^{\text{tot}} = 0, S_z^{\text{tot}} = 0\rangle) \quad (3.20)$$

$$= -\frac{A\hbar^2}{2\sqrt{2}} |S^{\text{tot}} = 1, S_z^{\text{tot}} = 0\rangle \quad (3.21)$$

となるから、 $\hat{H}$  のエネルギー固有状態でない。エネルギー期待値  $\langle H \rangle_{\uparrow\downarrow}$  は、

$$\langle H \rangle_{\uparrow\downarrow} = -\frac{A\hbar^2}{4} \quad (3.22)$$

となる。

### 3.4 スピン $s = 1$

スピン  $S = 1$  の粒子を考える。

$$\begin{cases} \hat{S}_x | +1 \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} | 0 \rangle \\ \hat{S}_x | 0 \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} (| +1 \rangle + | -1 \rangle) \\ \hat{S}_x | -1 \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} | 0 \rangle \end{cases} \quad \begin{cases} \hat{S}_y | +1 \rangle = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} | 0 \rangle \\ \hat{S}_y | 0 \rangle = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} (| +1 \rangle - | -1 \rangle) \\ \hat{S}_y | -1 \rangle = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} | 0 \rangle \end{cases} \quad \begin{cases} \hat{S}_z | +1 \rangle = +\hbar | +1 \rangle \\ \hat{S}_z | 0 \rangle = 0 \\ \hat{S}_z | -1 \rangle = -\hbar | -1 \rangle \end{cases} \quad (3.23)$$

であるから、大きさ 1 のスピン演算子の行列表現は

$$S_x \sim \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y \sim \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z \sim \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

となる。この行列表示で計算すると、

$$S_z(S_z + \hbar)(S_z - \hbar) = 0, \quad S_x(S_x + \hbar)(S_x - \hbar) = 0 \quad (3.25)$$

となる。

(別解)

角運動量固有状態  $|m\rangle$  ( $m = +1, 0, -1$ ) を基底にとると、

$$\hat{S}_z(\hat{S}_z + \hbar)(\hat{S}_z - \hbar) |m\rangle = m(m+1)(m-1)\hbar |m\rangle = 0 \quad (m = +1, 0, -1) \quad (3.26)$$

となるから、基底  $|m\rangle$  ( $m = +1, 0, -1$ ) の線形結合で表される任意のベクトル  $|\Psi\rangle$  について

$$\hat{S}_z(\hat{S}_z + \hbar)(\hat{S}_z - \hbar) |\Psi\rangle = 0 \quad (3.27)$$

となるから、

$$\hat{S}_z(\hat{S}_z + \hbar)(\hat{S}_z - \hbar) = 0 \quad (3.28)$$

である。 $\hat{S}_x$  についても  $\hat{S}_x$  の固有状態を基底にとって考えれば同じである。

### 3.5 剛体 Hamiltonian

剛体座標系での角運動量  $\hat{\mathbf{K}}$  は静止座標系での回転の生成子に対応しているから満たすべき交換関係は

$$[\hat{K}_i, \hat{K}_j] = -i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{K}_k \quad (3.29)$$

である。剛体の Hamiltonian を

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left( \frac{\hat{K}_1^2}{I_1} + \frac{\hat{K}_2^2}{I_2} + \frac{\hat{K}_3^2}{I_3} \right) \quad (3.30)$$

とすると、Heisenberg 方程式は

$$i\hbar \frac{d\hat{K}_i}{dt} = [\hat{K}_i, \hat{H}] \quad (3.31)$$

$$= \sum_j \frac{1}{2I_j} [\hat{K}_i, \hat{K}_j^2] \quad (3.32)$$

$$= \sum_j \frac{1}{2I_j} \left\{ \hat{K}_j [\hat{K}_i, \hat{K}_j] + [\hat{K}_i, \hat{K}_j] \hat{K}_j \right\} \quad (3.33)$$

$$= \sum_{j,k} \frac{-i\hbar}{2I_j} \epsilon_{ijk} \left\{ \hat{K}_k \hat{K}_j + \hat{K}_j \hat{K}_k \right\} \quad (3.34)$$

$$\therefore \frac{d\hat{K}_i}{dt} = - \sum_{j,k} \frac{1}{2I_j} \epsilon_{ijk} \left\{ \hat{K}_k \hat{K}_j + \hat{K}_j \hat{K}_k \right\} \quad (3.35)$$

となる。 $\hbar \rightarrow 0$ として古典極限をとると剛体座標系での角運動量の非可換性はなくなるから、運動方程式は

$$\frac{dK_i}{dt} = - \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} \frac{K_j}{I_j} K_k \quad (3.36)$$

となる。角運動量と角速度  $\omega_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) が慣性モーメントによって、

$$K_i = I_i \omega_i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (3.37)$$

の関係があることを用いると、運動方程式は

$$\frac{dK_i}{dt} = - \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} \omega_j K_k \quad (3.38)$$

となり、これはトルクがゼロの場合の Euler の運動方程式に一致している。

### 3.6 Euler 角

$(\alpha, \beta, \gamma)$  を Euler 角とする。このとき、演算子  $\hat{U}$  を

$$\hat{U} = e^{i\hat{G}_3\alpha} e^{i\hat{G}_2\beta} e^{i\hat{G}_3\gamma} \quad (3.39)$$

とする。Euler 角  $(\alpha, \beta, \gamma)$  をパラメータとする回転演算子は

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i\frac{\hat{J}_z\alpha}{\hbar}} e^{-i\frac{\hat{J}_y\beta}{\hbar}} e^{-i\frac{\hat{J}_z\gamma}{\hbar}} \quad (3.40)$$

である。ここで、 $\hat{J}_i$  ( $i = x, y, z$ ) は角運動量演算子である。したがって、演算子  $\hat{U}$  が Euler 角  $(\alpha, \beta, \gamma)$  をパラメータとする回転を表すとき、

$$e^{i\hat{G}_3\alpha} e^{i\hat{G}_2\beta} e^{i\hat{G}_3\gamma} = e^{-i\frac{\hat{J}_z\alpha}{\hbar}} e^{-i\frac{\hat{J}_y\beta}{\hbar}} e^{-i\frac{\hat{J}_z\gamma}{\hbar}} \quad (3.41)$$

が任意の角度  $(\alpha, \beta, \gamma)$  について成立する。したがって、

$$\hat{G}_2 = -\frac{\hat{J}_y}{\hbar} \quad (3.42)$$

$$\hat{G}_3 = -\frac{\hat{J}_z}{\hbar} \quad (3.43)$$

である。

$$[\hat{G}_2, \hat{G}_3] = \left(-\frac{1}{\hbar}\right)^2 [\hat{J}_y, \hat{J}_z] \quad (3.44)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \hat{J}_x =: -i\hat{G}_1 \quad (3.45)$$

により演算子  $\hat{G}_1$  を定めるとすると、交換関係は

$$[\hat{G}_i, \hat{G}_j] = -i\epsilon_{ijk} \hat{G}_k \quad (3.46)$$

となる。

### 3.7 ベクトル演算子

3つの演算子  $\hat{A}_k$  ( $k = x, y, z$ ) が回転演算子  $\hat{U}$  と3次元回転行列  $R$  について、次の等式を満たしているとする。

$$\hat{U}^{-1} \hat{A}_k \hat{U} = \sum_l R_{kl} \hat{A}_l \quad (3.47)$$

これは  $\hat{A}_k$  がベクトル演算子の第  $k$  成分であることを表している。したがって、 $\hat{\mathbf{A}} = (\hat{A}_x, \hat{A}_y, \hat{A}_z)$  はベクトル演算子である。この (3.47) 式は Unitary 変換  ${}^*2 \hat{\mathbf{A}} \rightarrow \hat{U}^{-1} \hat{\mathbf{A}} \hat{U}$  を受けたベクトル演算子の成分  $\hat{A}'_k = \hat{U}^{-1} \hat{A}_k \hat{U}$  を変換前のベクトル演算子  $\hat{A}_k$  の線形結合で表す公式であり、線形結合の重み係数が回転行列であることから、Unitary 変換  $\hat{\mathbf{A}} \rightarrow \hat{U}^{-1} \hat{\mathbf{A}} \hat{U}$  において、ベクトル演算子の各成分が普通の幾何学的ベクトルを回転させた時の成分の変換則と同じになることを示している。

回転を行った後の状態は

$$|m\rangle \rightarrow |m\rangle_R = \hat{U} |m\rangle \quad (3.48)$$

となるから、このときの  $\hat{A}_k$  の行列要素は

$${}_R \langle m | \hat{A}_k | n \rangle_R = \langle m | \hat{U}^{-1} \hat{A}_k \hat{U} | n \rangle \quad (3.49)$$

$$= \sum_l R_{kl} \langle m | \hat{A}_l | n \rangle \quad (3.50)$$

となる。これは状態を3次元の回転変換させたときに行列要素  $\langle m | \hat{A}_k | n \rangle$  がベクトルの成分のように変換することを表している。

### 3.8 回転の2価表現

Euler 角  $(\alpha, \beta, \gamma)$  をパラメータとする回転の2次元表現は

$$D^{1/2}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp\left(\frac{-i\sigma_3\alpha}{2}\right) \exp\left(\frac{-i\sigma_2\beta}{2}\right) \exp\left(\frac{-i\sigma_3\gamma}{2}\right) \quad (3.51)$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} \\ e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

である。<sup>\*3</sup> 一方、 $\hat{\mathbf{n}} = (n_x, n_y, n_z)$  を回転軸とする  $\theta$  ( $0 \leq \theta < \pi$ ) 回転の2次元表現は (3.2.45) 式より、

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} - in_z \sin \frac{\theta}{2} & (-in_x - n_y) \sin \frac{\theta}{2} \\ (-in_x + n_y) \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} + in_z \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (3.53)$$

となるから、この回転行列を表す2式を比較して、

$$\cos \frac{\theta}{2} = \cos \frac{\alpha + \gamma}{2} \cos \frac{\beta}{2} \quad (3.54)$$

となる。したがって、回転角  $\theta$  は

$$\theta = 2 \text{Arccos} \left( \cos \frac{\alpha + \gamma}{2} \cos \frac{\beta}{2} \right) \quad (3.55)$$

である。

<sup>\*2</sup> ベクトル演算子に回転変換を施しているわけではない。

<sup>\*3</sup> これは  $SU(2)$  の Cayley-Klein パラメータ表示である。

### 3.9 スピン 1/2 のアンサンブル

スピン 1/2 の粒子からなる系を考える。

(a) 純粋アンサンブル

系の純粋状態を

$$|\psi\rangle = \langle\uparrow|\psi\rangle|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\psi\rangle|\downarrow\rangle \quad (3.56)$$

とする。規格化条件より、

$$|\langle\uparrow|\psi\rangle|^2 + |\langle\downarrow|\psi\rangle|^2 = 1 \quad (3.57)$$

である。したがって、全体にかかる位相の不定性を無視すれば、

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle \quad (0 \leq \theta \leq \pi \wedge 0 \leq \phi \leq 2\pi) \quad (3.58)$$

と表せる。<sup>\*4</sup> スピンの  $x$  成分  $\hat{S}_x$  の期待値は

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) \quad (3.59)$$

より、

$$\langle\hat{S}_x\rangle = \cos^2\frac{\theta}{2}\langle\uparrow|\hat{S}_x|\uparrow\rangle + e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\langle\uparrow|\hat{S}_x|\downarrow\rangle + e^{-i\phi}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\langle\downarrow|\hat{S}_x|\uparrow\rangle + \sin^2\frac{\theta}{2}\langle\downarrow|\hat{S}_x|\downarrow\rangle \quad (3.60)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\left(e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} + e^{-i\phi}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\right) \quad (3.61)$$

$$= \hbar\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\cos\phi \quad (3.62)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\phi \quad (3.63)$$

である。同様にして、

$$\langle\hat{S}_y\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin\phi \quad (3.64)$$

$$\langle\hat{S}_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\theta \quad (3.65)$$

となる。ここで、 $\theta$  は (3.65) 式より一意的に決定される。一方、 $\phi$  については (3.63) 式より、 $\cos\phi$  の値が決定されるが、 $\phi$  の定義域は  $0 \leq \phi \leq 2\pi$  であるから、等式を満たす  $\phi$  は 2 つ存在する。 $\phi$  がどちらなのかを決定するには  $\sin\phi$  の符号が分かればよく、 $\langle\hat{S}_y\rangle$  の符号から定めることができる。

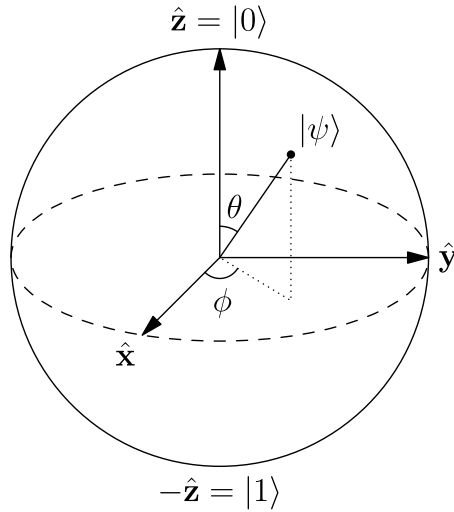
このとき、期待値  $\langle\hat{S}_x\rangle, \langle\hat{S}_y\rangle, \langle\hat{S}_z\rangle$  について、

$$\langle\hat{S}_x\rangle^2 + \langle\hat{S}_y\rangle^2 + \langle\hat{S}_z\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} \quad (3.66)$$

が常に成り立つから、 $\langle\hat{S}_y\rangle$  の大きさを知る必要はない。

<sup>\*4</sup> 大きさ 1/2 のスピン 1 つの量子状態のなす空間は 2 次元球面  $S^2$  なのである。この 2 次元球面は Bloch 球面と呼ばれている。さらに光の偏光状態の空間も 2 次元球面であり、1/2 スピンと光の偏光状態を同一視することができるのである。

図1 Bloch 球面 (Wikipedia より引用)



(b) 混合アンサンブル

密度演算子  $\hat{\rho}$  の行列表現を

$$\hat{\rho} \doteq \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (3.67)$$

とする。密度演算子の規格化条件より、

$$\text{tr} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = a + d = 1 \quad (3.68)$$

である。スピン演算子の期待値を計算すると、

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \text{tr} \left[ \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{\hbar}{2} (b + c) \quad (3.69)$$

$$\langle \hat{S}_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \text{tr} \left[ \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{i\hbar}{2} (b - c) \quad (3.70)$$

$$\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \text{tr} \left[ \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] = \frac{\hbar}{2} (a - d) \quad (3.71)$$

となるから、以上の4式より、

$$a = \frac{1}{2} + \frac{\langle \hat{S}_z \rangle}{\hbar} \quad (3.72)$$

$$b = \frac{1}{\hbar} \left( \langle \hat{S}_x \rangle - i \langle \hat{S}_y \rangle \right) \quad (3.73)$$

$$c = \frac{1}{\hbar} \left( \langle \hat{S}_x \rangle + i \langle \hat{S}_y \rangle \right) \quad (3.74)$$

$$d = \frac{1}{2} - \frac{\langle \hat{S}_z \rangle}{\hbar} \quad (3.75)$$

となり、密度演算子は

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle & |\downarrow\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{\langle \hat{S}_z \rangle}{\hbar} & \frac{1}{\hbar} \left( \langle \hat{S}_x \rangle - i \langle \hat{S}_y \rangle \right) \\ \frac{1}{\hbar} \left( \langle \hat{S}_x \rangle + i \langle \hat{S}_y \rangle \right) & \frac{1}{2} - \frac{\langle \hat{S}_z \rangle}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \\ \langle \downarrow | \end{pmatrix} \quad (3.76)$$

と定まる。



### 3.10 密度演算子の時間発展

密度演算子の時間発展を Schrödinger 描像で考える。

(a) 密度演算子を

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i w_i |\varphi_i(t)\rangle \langle \varphi_i(t)| \quad (3.77)$$

とする。Schrödinger 描像では  $|\varphi_i(t)\rangle$  は時間発展演算子  $\hat{U}(t, t_0)$  を用いて、

$$|\varphi_i(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\varphi_i(t_0)\rangle \quad (3.78)$$

表されるから、

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i w_i \hat{U}(t, t_0) |\varphi_i(t_0)\rangle \langle \varphi_i(t_0)| \hat{U}(t, t_0)^\dagger \quad (3.79)$$

$$= \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}(t, t_0)^\dagger \quad (3.80)$$

となる。

(b)  $t = 0$  で純粋アンサンブル

$$\hat{\rho}(0) = |\varphi\rangle \langle \varphi| \quad (3.81)$$

であったとする。トレースを計算すると、

$$\text{tr}(\hat{\rho}(t)^2) = \text{tr}(\hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0)^2 \hat{U}(t, t_0)^\dagger) \quad (3.82)$$

$$= \text{tr}(\hat{U}(t, t_0)^\dagger \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0)^2) \quad (3.83)$$

$$= \text{tr}(\hat{\rho}(t_0)^2) \quad (3.84)$$

$$= 1 \quad (3.85)$$

となるから、純粋アンサンブルは時間発展しても純粋アンサンブルである。

### 3.11 スピン 1 のアンサンブル

密度演算子  $\hat{\rho}$  の行列表現を

$$\hat{\rho} \doteq \rho = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} \quad (3.86)$$

とする。まず、密度演算子のトレースの条件より、

$$\text{tr}(\rho) = a + e + i = 1 \quad (3.87)$$

である。

次に密度演算子は正のオペレーターであるから、特に Hermite 演算子である。したがって、

$$\begin{cases} c = g^* \\ b = d^* \\ f = h^* \end{cases} \quad (3.88)$$

である。さらに基底ベクトル  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$   $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$   $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  について、

$$(1 \ 0 \ 0) \rho \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = a \geq 0 \quad (3.89)$$

$$(0 \ 1 \ 0) \rho \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = e \geq 0 \quad (3.90)$$

$$(0 \ 0 \ 1) \rho \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = i \geq 0 \quad (3.91)$$

となる。したがって、パラメータをとり直すと、

$$\rho = \begin{pmatrix} p & s & t \\ s^* & q & u \\ t^* & u^* & 1-p-q \end{pmatrix} \quad (p, q \geq 0 \wedge p+q \leq 1 \wedge s, t, u \in \mathbb{C}) \quad (3.92)$$

となる。したがって、密度行列を特徴づけるために必要な実パラメータは 8 つである。

8 つのパラメータを決定するためには 8 個の一次独立な演算子の期待値が分かれば良い。特にこのような演算子として、

$$\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z, \hat{S}_x^2, \hat{S}_y^2, \frac{1}{2}(\hat{S}_x \hat{S}_y + \hat{S}_y \hat{S}_x), \frac{1}{2}(\hat{S}_y \hat{S}_z + \hat{S}_z \hat{S}_y), \frac{1}{2}(\hat{S}_z \hat{S}_x + \hat{S}_x \hat{S}_z) \quad (3.93)$$

が選べる。

### 3.12 $y$ 軸周りの微小回転

$y$  軸を回転軸とする角度  $\epsilon$  の回転は  $e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{J}_y}$  により与えられる。 $e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{J}_y}$  を  $\epsilon$  について展開し、2 次の項までとると

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{J}_y} \simeq 1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon \cdot \hat{J}_y - \frac{1}{2\hbar^2}\epsilon^2 \cdot \hat{J}_y^2 \quad (3.94)$$

となる。ここで、

$$\hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-) \quad (3.95)$$

$$\hat{J}_y^2 = -\frac{1}{4}(\hat{J}_+^2 + \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_-^2) \quad (3.96)$$

であるから、これらの演算子の最高ウェイト状態  $|j, j\rangle$  における期待値は

$$\langle j, j | \hat{J}_y | j, j \rangle = 0 \quad (3.97)$$

$$\langle j, j | \hat{J}_y^2 | j, j \rangle = \frac{1}{2}j\hbar^2 \quad (3.98)$$

となる。したがって、状態  $|j, j\rangle$  を  $y$  軸周りに微小角  $\epsilon$  だけ回転させられた新しい状態  $e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{J}_y} |j, j\rangle$  が元の状態  $|j, j\rangle$  に見いだされる確率  $P$  は、

$$P = |\langle j, j | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{J}_y} | j, j \rangle|^2 \quad (3.99)$$

$$= \left| 1 - 0 - \frac{1}{2\hbar^2}\epsilon^2 \cdot \frac{1}{2}j\hbar^2 \right|^2 \quad (3.100)$$

$$= 1 - \frac{1}{2}\epsilon^2 \quad (3.101)$$

である。

### 3.13 角運動量代数の随伴表現

行列要素  $(G_i)_{jk}$  ( $i, j, k = 1, 2, 3$ ) を次のように定める。

$$(G_i)_{jk} \equiv -i\hbar\epsilon_{ijk} \quad (3.102)$$

ここで、 $\epsilon_{ijk}$  はレヴィ=チヴィタ記号である。行列  $G_i$  の満たす交換関係は

$$([G_i, G_j])_{kl} = (-i\hbar)^2 (\epsilon_{ikm}\epsilon_{jml} - \epsilon_{jkm}\epsilon_{iml}) \quad (3.103)$$

となるが、ここで、レヴィ=チヴィタ記号  $\epsilon_{ijk}$  の反対称性と縮約公式

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl} \quad (3.104)$$

を用いると、計算を進めることができ、

$$([G_i, G_j])_{kl} = (-i\hbar)^2 (\delta_{il}\delta_{kj} - \delta_{jl}\delta_{ki}) \quad (3.105)$$

$$= (-i\hbar)^2 (\delta_{il}\delta_{jk} - \delta_{jl}\delta_{ik}) \quad (3.106)$$

$$= (-i\hbar)^2 \epsilon_{ijm}\epsilon_{lkm} \quad (3.107)$$

$$= i\hbar\epsilon_{ijm}(G_m)_{kl} \quad (3.108)$$

となる。これは角運動量代数に一致している。

行列  $G_i$  を露わに書き下すと

$$G_1 = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad G_2 = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad G_3 = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.109)$$

となる。ここで、Euler 角  $(\alpha, \beta, \gamma)$  で表される 3 次元回転行列は

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.110)$$

$$= \begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \sin \alpha \sin \gamma & -\cos \alpha \cos \beta \sin \gamma - \sin \alpha \cos \gamma & \cos \alpha \sin \beta \\ \sin \alpha \cos \beta \cos \gamma + \cos \alpha \sin \gamma & -\sin \alpha \cos \beta \sin \gamma + \cos \alpha \cos \gamma & \sin \alpha \sin \beta \\ -\sin \beta \cos \gamma & \sin \beta \sin \gamma & \cos \beta \end{pmatrix} \quad (3.111)$$

であるが、

$$\left. \frac{d}{d\alpha} R(\alpha, 0, 0) \right|_{\alpha=0} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{i}{\hbar} G_3 \quad (3.112)$$

$$\left. \frac{d}{d\beta} R(0, \beta, 0) \right|_{\beta=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{i}{\hbar} G_2 \quad (3.113)$$

となるから、 $G_i$  は 3 次元回転群  $SO(3)$  の生成子になっていることが分かる。

ここで、行列  $G_3/\hbar = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$  を対角化しよう。

- $G_3/\hbar$  の固有値  $+1$  の固有ベクトルは  $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}$

- $G_3/\hbar$  の固有値 0 の固有ベクトルは  $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
- $G_3/\hbar$  の固有値  $-1$  の固有ベクトルは  $\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}$

であるから、

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.114)$$

となる。

ここで、角運動量演算子  $\hat{J}_i$  の 3 次元表現は

$$J_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad J_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix} \quad J_3 = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.115)$$

であるから、ユニタリー変換

$$U^\dagger G_i U = J_i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (3.116)$$

を満たすユニタリー行列  $U$  は

$$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.117)$$

と表される。さらに、 $\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$  に対して、

$$U^\dagger \mathbf{r} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (3.118)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{x-iy}{\sqrt{2}} \\ z \\ -\frac{x+iy}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (3.119)$$

$$= \begin{pmatrix} T_{-1}^{(1)} \\ T_0^{(1)} \\ T_{+1}^{(1)} \end{pmatrix} \quad (3.120)$$

となるから、変換行列  $U$  はベクトルの直交座標成分と 1 階の球テンソル成分を結びつけている。

### 3.14 角運動量の昇降演算子

(a) 昇降演算子  $\hat{J}_\pm$  について、

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = (\hat{J}_x + i\hat{J}_y)(\hat{J}_x - i\hat{J}_y) \quad (3.121)$$

$$= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 - i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] \quad (3.122)$$

$$= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hbar \hat{J}_z \quad (3.123)$$

となるから、

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \hat{J}_z^2 + \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hbar \hat{J}_z \quad (3.124)$$

である。

(b) 上述の等式を変形すると、

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z - \hbar) \quad (3.125)$$

となる。したがって、

$$\langle jm | \hat{J}_+ \hat{J}_- | jm \rangle = j(j+1)\hbar^2 - m(m-1)\hbar^2 = (j+m)(j-m+1)\hbar^2 \quad (3.126)$$

となる。ここで、

$$\hat{J}_- |j, m\rangle = c_- |j, m-1\rangle \quad (3.127)$$

とすると、

$$|c_-|^2 = \|\hat{J}_- |jm\rangle\|^2 = \langle jm | \hat{J}_+ \hat{J}_- |jm\rangle = (j+m)(j-m+1)\hbar^2 \quad (3.128)$$

であるから、係数  $c_-$  には位相の不定性があり、

$$c_- = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar \times e^{i\theta} \quad (\theta \in \mathbb{R}) \quad (3.129)$$

である。ここで、位相の規約を  $\theta = 0$  とすれば

$$c_- = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar \quad (3.130)$$

と決定される。

### 3.15 球面調和関数

中心力ポテンシャル  $V(r)$  中にある粒子の波動関数が

$$\psi(\mathbf{x}) = (x + y + 3z)f(r) = (\sin\theta \cos\phi + \sin\theta \sin\phi + 3\cos\theta)rf(r) \quad (3.131)$$

と与えているとする。

(a) ここで、波動関数の角度部分に注目して、

$$\hat{\mathbf{L}}^2(\sin\theta \cos\phi + \sin\theta \sin\phi + 3\cos\theta) = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right] (\sin\theta \cos\phi + \sin\theta \sin\phi + 3\cos\theta) \quad (3.132)$$

$$= 2\hbar^2 (\sin\theta \cos\phi + \sin\theta \sin\phi + 3\cos\theta) \quad (3.133)$$

となるから、

$$\hat{\mathbf{L}}^2\psi(\mathbf{x}) = 2\hbar^2\psi(\mathbf{x}) \quad (3.134)$$

である。これは波動関数  $\psi(\mathbf{x})$  が角運動量の 2 乗  $\hat{\mathbf{L}}^2$  の  $l = 1$  の固有関数であることを示している。

(別解)

軌道角運動量子数  $l = 1$  の球面調和関数は

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \quad (3.135)$$

$$Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi} \quad (3.136)$$

であるから、

$$\psi(\mathbf{x}) = (\sin \theta \cos \phi + \sin \theta \sin \phi + 3 \cos \theta) r f(r) \quad (3.137)$$

$$= \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \left( \frac{i-1}{2} Y_1^{+1}(\theta, \phi) + \frac{i+1}{2} Y_1^{-1}(\theta, \phi) + \frac{3}{\sqrt{2}} Y_1^{\pm 0}(\theta, \phi) \right) r f(r) \quad (3.138)$$

となり、波動関数  $\psi(\mathbf{x})$  が  $l = 1$  の球面調和関数の線形結合で表されている。よって、波動関数  $\psi(\mathbf{x})$  は角運動量の 2 乗  $\hat{L}^2$  の軌道角運動量量子数  $l = 1$  の固有関数である。

(b) ここで、波動関数  $\psi(\mathbf{x})$  で記述される状態は ket 記法では

$$|\psi\rangle = |\phi_{\text{radial}}\rangle \otimes c \left( \frac{i-1}{2} |1, +1\rangle + \frac{i+1}{2} |1, -1\rangle + \frac{3}{\sqrt{2}} |1, 0\rangle \right) \quad (3.139)$$

と表せる。ここで、 $c$  は規格化定数である。したがって、粒子が磁気量子数  $m = -1, 0, +1$  に見いだされる確率  $P(m)$  は

$$P(m = -1) = |\langle 1, -1 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2} c^2 \quad (3.140)$$

$$P(m = 0) = |\langle 1, 0 | \psi \rangle|^2 = \frac{9}{2} c^2 \quad (3.141)$$

$$P(m = +1) = |\langle 1, +1 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2} c^2 \quad (3.142)$$

となる。規格化条件

$$P(m = -1) + P(m = 0) + P(m = +1) = 1 \quad (3.143)$$

より、規格化定数が  $c = \sqrt{\frac{2}{11}}$  と定まる。よって、確率は

$$P(m = -1) = \frac{1}{11} \quad (3.144)$$

$$P(m = 0) = \frac{9}{11} \quad (3.145)$$

$$P(m = +1) = \frac{1}{11} \quad (3.146)$$

である。

(c) 波動関数  $\psi(\mathbf{x})$  が固有値  $E$  の固有関数とすると、Schrödinger 方程式は

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (3.147)$$

となる。 $\psi(\mathbf{x})$  の表式を代入すると、動径方向の微分方程式

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2}{mr^2} + V(r) \right] r f(r) = E r f(r) \quad (3.148)$$

が得られる。さらに計算すると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (r f''(r) + 4 f'(r)) + r V(r) f(r) = E r f(r) \quad (3.149)$$

となる。これを  $V(r)$  について解くと

$$V(r) = E + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{r f''(r) + 4 f'(r)}{r f(r)} \right) \quad (3.150)$$

となり、ポテンシャル  $V(r)$  を波動関数から求めることができる。

### 3.16 角運動量と半古典解釈

球対称ポテンシャル中の 1 粒子が軌道角運動量固有状態  $|l, m\rangle$  にあるとする。このとき、

$$\hat{L}_{\pm} |l, m\rangle = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} \hbar |l, m \pm 1\rangle \quad (3.151)$$

であるから、

$$\hat{L}_x |l, m\rangle = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2} |l, m\rangle \quad (3.152)$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \hbar |l, m+1\rangle + \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \hbar |l, m-1\rangle \right\} \quad (3.153)$$

$$\hat{L}_y |l, m\rangle = \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i} |l, m\rangle \quad (3.154)$$

$$= \frac{1}{2i} \left\{ \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \hbar |l, m+1\rangle - \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \hbar |l, m-1\rangle \right\} \quad (3.155)$$

$$(3.156)$$

となる。したがって、角運動量の  $x$  成分、 $y$  成分の期待値は

$$\langle \hat{L}_x \rangle_{lm} = 0 \quad (3.157)$$

$$\langle \hat{L}_y \rangle_{lm} = 0 \quad (3.158)$$

となる。また、

$$\langle \hat{L}_x^2 \rangle_{lm} = \langle lm | \hat{L}_x^2 | lm \rangle \quad (3.159)$$

$$= \frac{1}{4} \{ (l-m)(l+m+1) + (l+m)(l-m+1) \} \hbar^2 \quad (3.160)$$

$$= \frac{1}{2} \{ l(l+1) - m^2 \} \hbar^2 \quad (3.161)$$

となる。同様にして、

$$\langle \hat{L}_y^2 \rangle_{lm} = \frac{1}{2} \{ l(l+1) - m^2 \} \hbar^2 \quad (3.162)$$

である。

以上の計算結果より、半古典的には角運動量ベクトル  $\mathbf{L}$  は  $z$  軸に対して、 $m$  により決まるある一定の角度をなす領域に一様に広がっているとみることができる。

### 3.17 軌道角運動量

$$\hat{L}_{\pm} \doteq L_{\pm} \equiv \pm i \hbar e^{\pm i \phi} \left( -i \frac{\partial}{\partial \theta} \pm \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (3.163)$$

(a)  $Y_{1/2}^{1/2}(\theta, \phi)$  に  $L_-$  を作用させると、

$$Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \phi) \sim L_- Y_{1/2}^{1/2}(\theta, \phi) \quad (3.164)$$

$$\sim L_- \left( e^{i \phi / 2} \sqrt{\sin \theta} \right) \quad (3.165)$$

$$= -i \hbar e^{-i \phi} \left( -i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) e^{i \phi / 2} \sqrt{\sin \theta} \quad (3.166)$$

$$= -i \hbar e^{-i \phi} \left( -i e^{i \phi / 2} \frac{\cos \theta}{2 \sqrt{\sin \theta}} - \frac{i}{2} \cot \theta \cdot e^{i \phi / 2} \cdot \sqrt{\sin \theta} \right) \quad (3.167)$$

$$= -\hbar \cdot e^{-i \phi / 2} \cdot \frac{\cos \theta}{\sqrt{\sin \theta}} \quad (3.168)$$

となる。

(b)

$$L_- Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \phi) \sim e^{-i\phi} \left( -i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) e^{-i\phi/2} \frac{\cos \theta}{\sqrt{\sin \theta}} \quad (3.169)$$

$$= e^{-i\phi} \left( \frac{i}{2} e^{-i\phi/2} (\sin^{1/2} \theta + \sin^{-3/2} \theta) + \frac{i}{2} \cdot \frac{\cos \theta}{\sqrt{\sin \theta}} \cot \theta \cdot e^{-i\phi/2} \right) \quad (3.170)$$

$$\neq 0 \quad (\text{例えば } \theta = \pi/2, \phi = 0 \text{ を代入する。}) \quad (3.171)$$

これは問題文の  $L_- Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \phi) = 0$  に矛盾する。

(別解)

$Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \phi)$  の満たすべき微分方程式は

$$L_- Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \phi) = 0 \quad (3.172)$$

である。これは方程式  $L_+ Y_{1/2}^{1/2}(\theta, \phi) = 0$  で  $\phi \rightarrow -\phi$  と置き換えたものに等しいから、

$$Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \phi) \sim e^{-i\phi/2} \sqrt{\sin \theta} \quad (3.173)$$

となる。これは明らかに (a) に矛盾している。

### 3.18 回転

状態  $|2, 0\rangle$  を  $y$  軸のまわりに角度  $\beta$  回転させる。この新しい状態が  $m = 0, \pm 1, \pm 2$  に見いだされる確率は

$$P(m) = |\langle 2, m | \hat{R}(0, \beta, 0) | 2, 0 \rangle|^2 \quad (3.174)$$

$$= |d_{m,0}^{(2)}(\beta)|^2 \quad (3.175)$$

である。Wigner の公式を用いて  $d_{m,0}^{(2)}(\beta)$  の計算を実行する<sup>\*5</sup> と、

$$P(m=0) = \frac{1}{4} (3 \cos^2 \beta - 1)^2 \quad (3.176)$$

$$P(m=\pm 1) = \frac{3}{2} (\sin \beta \cos \beta)^2 \quad (3.177)$$

$$P(m=\pm 2) = \frac{3}{8} \sin^2 \theta \quad (3.178)$$

となる。

### 3.19 Scwinger モデル

演算子  $\hat{K}_{\pm}$  を

$$\hat{K}_+ \equiv \hat{a}_+^\dagger \hat{a}_-^\dagger \quad (3.179)$$

$$\hat{K}_- \equiv \hat{a}_+ \hat{a}_- \quad (3.180)$$

と定めると、

$$\hat{K}_+ |n_+, n_-\rangle = \hat{a}_+^\dagger \left( \sqrt{n_- + 1} |n_+, n_- + 1\rangle \right) \quad (3.181)$$

$$= \sqrt{(n_+ + 1)(n_- + 1)} |n_+ + 1, n_- + 1\rangle \quad (3.182)$$

$$\hat{K}_- |n_+, n_-\rangle = \hat{a}_+ \left( \sqrt{n_-} |n_+, n_- - 1\rangle \right) \quad (3.183)$$

$$= \sqrt{n_+ n_-} |n_+ - 1, n_- - 1\rangle \quad (3.184)$$

<sup>\*5</sup> 球面調和関数を用いて計算することもできる。



となる。ここで、

$$j = \frac{n_+ + n_-}{2}, \quad m = \frac{n_+ - n_-}{2} \quad (3.185)$$

であるから、

$$\hat{K}_+ : j \rightarrow j + 1 \wedge m \text{ 不変} \quad (3.186)$$

$$\hat{K}_- : j \rightarrow j - 1 \wedge m \text{ 不変} \quad (3.187)$$

となる。よって、演算子  $\hat{K}_\pm$  の意味は角運動量の  $z$  成分を変えずに全体の大きさを大きく (小さく) するということである。

行列要素で 0 でないものは

$$\langle j \pm 1, m | \hat{K}_\pm | j, m \rangle = \begin{cases} \sqrt{(j+m+1)(j-m+1)} \\ \sqrt{(j+m)(j-m)} \end{cases} \quad (3.188)$$

である。

### 3.20 角運動量 $j_1 = j_2 = 1$ の合成

まず、全磁気量子数が  $m = +2$  となる状態は一つしか無く、位相の規約から

$$|j = 2, m = +2\rangle = |+1\rangle | +1\rangle \quad (3.189)$$

である。ここで、

$$\hat{J}_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle \quad (3.190)$$

であること<sup>\*6</sup>を用いると、 $j = 2$  の系列が<sup>3</sup>

$$|j = 2, m = +1\rangle = \frac{1}{2} \hat{J}_- |j = 2, m = +2\rangle \quad (3.191)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+1\rangle |0\rangle + |0\rangle |+1\rangle) \quad (3.192)$$

$$|j = 2, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \hat{J}_- |j = 2, m = +1\rangle \quad (3.193)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{3}} (\sqrt{2} |-1\rangle |+1\rangle + \sqrt{2} |0\rangle |0\rangle + \sqrt{2} |0\rangle |0\rangle + \sqrt{2} |+1\rangle |-1\rangle) \quad (3.194)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} (|-1\rangle |+1\rangle + 2 |0\rangle |0\rangle + |+1\rangle |-1\rangle) \quad (3.195)$$

$$|j = 2, m = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \hat{J}_- |j = 2, m = 0\rangle \quad (3.196)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1\rangle |0\rangle + |0\rangle |-1\rangle) \quad (3.197)$$

$$|j = 2, m = -2\rangle = \frac{1}{2} \hat{J}_- |j = 2, m = -1\rangle \quad (3.198)$$

$$= |-1\rangle |-1\rangle \quad (3.199)$$

と分かる。

次に  $j = 1$  の系列を求める。

$$|j = 1, m = +1\rangle = \alpha |+1\rangle |0\rangle + \beta |0\rangle |+1\rangle \quad (3.200)$$

<sup>\*6</sup> 最終的な結果には  $\hbar$  が現れないことが分かっているので  $\hbar = 1$  とした。

と置くと、 $|j = 2, m = +1\rangle$  との直交性と  $\langle 1, 1; 1, 0 | 1, +1 \rangle > 0$  より、

$$|j = 1, m = +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+1\rangle |0\rangle - |0\rangle |+1\rangle) \quad (3.201)$$

となる。同様に  $\hat{J}_-$  を作用させていくと、

$$|j = 1, m = 0\rangle = \frac{\hat{J}_-}{\sqrt{2}} |j = 1, m = +1\rangle \quad (3.202)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+1\rangle |-1\rangle - |-1\rangle |+1\rangle) \quad (3.203)$$

$$|j = 1, m = -1\rangle = \frac{\hat{J}_-}{\sqrt{2}} |j = 1, m = 0\rangle \quad (3.204)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle |-1\rangle - |-1\rangle |0\rangle) \quad (3.205)$$

となる。

$j = 0$  の状態は  $|j = 0, m = 0\rangle$  だけである。この  $|j = 0, m = 0\rangle$  は  $|j = 2, m = 0\rangle, |j = 1, m = 0\rangle$  と直交しているから、

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ 2 \\ -2 \end{bmatrix} \propto \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.206)$$

より、

$$|j = 0, m = 0\rangle = a (|+1\rangle |-1\rangle - |0\rangle |0\rangle + |-1\rangle |+1\rangle) \quad (3.207)$$

と表される。規格化条件と  $\langle 1, 1; 1, -1 \rangle > 0$  より、

$$|j = 0, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|+1\rangle |-1\rangle - |0\rangle |0\rangle + |-1\rangle |+1\rangle) \quad (3.208)$$

である。

### 3.21 Wigner の d 行列に関する公式

最終的な結果に  $\hbar$  は現れないことが分かるので  $\hbar = 1$  とする。

(a) Wigner の d 行列  $d_{mm'}^{(j)}(\beta)$  の定義より、

$$\sum_{m=-j}^j m \left| d_{mm'}^{(j)}(\beta) \right|^2 = \sum_{m=-j}^j \langle jm' | \exp(i\beta \hat{J}_y) \hat{J}_z | jm \rangle \langle jm | \exp(-i\beta \hat{J}_y) | jm' \rangle \quad (3.209)$$

$$= \langle jm' | \exp(i\beta \hat{J}_y) \hat{J}_z \exp(-i\beta \hat{J}_y) | jm' \rangle \quad (3.210)$$

となる。ここで、演算子  $\exp(i\beta \hat{J}_y) \hat{J}_z \exp(-i\beta \hat{J}_y)$  は角運動量の  $z$  成分を  $y$  軸のまわりに角度  $\beta$  だけ回転させたものだから、

$$\langle jm' | \exp(i\beta \hat{J}_y) \hat{J}_z \exp(-i\beta \hat{J}_y) | jm' \rangle = \langle jm' | \hat{J}_z \cos \beta - \hat{J}_x \sin \beta | jm' \rangle = m' \cos \beta \quad (3.211)$$

となる。ここで、 $\langle jm' | \hat{J}_x | jm' \rangle = 0$  を用いた。よって、公式

$$\sum_{m=-j}^j m \left| d_{mm'}^{(j)}(\beta) \right|^2 = m' \cos \beta \quad (3.212)$$

が得られた。

$j = 1/2$  のとき、(3.5.52) 式より、

$$d_{mm'}^{(1/2)}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad (3.213)$$

であるから、

$$\sum_{m=-1/2}^{1/2} m \left| d_{mm'}^{(1/2)}(\beta) \right|^2 = \begin{cases} \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\beta}{2} - \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2} = \frac{1}{2} \cos \beta & (m = +1/2) \\ \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2} - \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\beta}{2} = -\frac{1}{2} \cos \beta & (m = -1/2) \end{cases} \quad (3.214)$$

となり、公式が成立していることが分かる。

(b)

$$\sum_{m=-j}^j m^2 \left| d_{mm'}^{(j)}(\beta) \right|^2 = \sum_{m=-j}^j \left\langle jm' \left| \exp(i\beta \hat{J}_y) \hat{J}_z^2 \right| jm \right\rangle \left\langle jm \left| \exp(-i\beta \hat{J}_y) \right| jm' \right\rangle \quad (3.215)$$

$$= \left\langle jm' \left| \exp(i\beta \hat{J}_y) \hat{J}_z^2 \exp(-i\beta \hat{J}_y) \right| jm' \right\rangle \quad (3.216)$$

$$= \left\langle jm' \left| \left( \exp(i\beta \hat{J}_y) \hat{J}_z \exp(-i\beta \hat{J}_y) \right)^2 \right| jm' \right\rangle \quad (3.217)$$

$$= \left\langle jm' \left| \left( \hat{J}_z \cos \beta - \hat{J}_x \sin \beta \right)^2 \right| jm' \right\rangle \quad (3.218)$$

$$= \left\langle jm' \left| \left\{ \hat{J}_z^2 \cos^2 \beta - \left( \hat{J}_z \hat{J}_x + \hat{J}_x \hat{J}_z \right) \sin \beta \cos \beta + \hat{J}_x^2 \sin^2 \beta \right\} \right| jm' \right\rangle \quad (3.219)$$

$$= m'^2 \cos^2 \beta + \frac{1}{2} (j(j+1) - m'^2) \sin^2 \beta \quad (3.220)$$

$$= \frac{1}{2} j(j+1) \sin^2 \beta + \frac{m'^2}{2} (3 \cos^2 \beta - 1) \quad (3.221)$$

### 3.22 $j = 1$ の角運動量

角運動量量子数  $j = 1$  の系を考える。

(a)  $j = 1$  のときの角運動量の行列表示は (3.24) 式より、

$$\hat{J}_y \doteq J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.222)$$

である。

(b) この行列表示を用いて計算すると、

$$J_y^2 = -\frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad J_y^3 = \frac{i\hbar^3}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \hbar^2 J_y \quad (3.223)$$

となる。よって、 $\exp\left(-\frac{iJ_y\beta}{\hbar}\right)$  を展開して計算して、

$$\exp\left(-\frac{iJ_y\beta}{\hbar}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i\beta)^n \left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^n \quad (3.224)$$

$$= 1 + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i\beta)^{2m+1} J_y}{(2m+1)! \hbar} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-i\beta)^{2m}}{(2m)!} \left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2 \quad (3.225)$$

$$= 1 - \frac{iJ_y}{\hbar} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \beta^{2m+1}}{(2m+1)!} + \left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m \beta^{2m}}{(2m)!} \quad (3.226)$$

$$= 1 - i \sin \beta \left(\frac{iJ_y}{\hbar}\right) + (\cos \beta - 1) \left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2 \quad (3.227)$$

となる。

(c) 以上の結果により、

$$d_{m'm}^{(1)}(\beta) = \left\langle j=1, m' \left| \exp\left(-\frac{i\hat{J}_y\beta}{\hbar}\right) \right| j=1, m \right\rangle \quad (3.228)$$

$$= \left\langle j=1, m' \left| \left(1 - i\sin\beta\left(\frac{i\hat{J}_y}{\hbar}\right) + (\cos\beta - 1)\left(\frac{\hat{J}_y}{\hbar}\right)^2\right) \right| j=1, m \right\rangle \quad (3.229)$$

$$= \langle j=1, m' | j=1, m \rangle - i\sin\beta \left\langle j=1, m' \left| \frac{\hat{J}_y}{\hbar} \right| j=1, m \right\rangle + (\cos\beta - 1) \left\langle j=1, m' \left| \left(\frac{\hat{J}_y}{\hbar}\right)^2 \right| j=1, m \right\rangle \quad (3.230)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos\beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \frac{1}{2}(1 - \cos\beta) \\ \frac{1}{2}(1 + \cos\beta) & \cos\beta & -\frac{1}{2}(1 + \cos\beta) \\ \frac{1}{2}(1 - \cos\beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \frac{1}{2}(1 + \cos\beta) \end{pmatrix} \quad (3.231)$$

となる。

### 3.23 行列要素

???

### 3.24 スピン $s = 1/2$ の 2 粒子系

スピン  $1/2$  の 2 粒子からなる系を考える。この系のスピンの状態は一重項であるとする。つまり、全系の状態は

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z:+\rangle|z:-\rangle - |z:-\rangle|z:+\rangle) \quad (3.232)$$

である。

(a) 観測者 B が何もしないとき、観測者 A が  $S_{1z} = +1/2$  を得る確率は、

$$P(S_{1z} = +1/2) = \frac{1}{2} \quad (3.233)$$

である。また、全系の状態は

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x:+\rangle|x:-\rangle - |x:-\rangle|x:+\rangle) \quad (3.234)$$

とも表すことができるので、観測者 B が何もしないとき、観測者 A が  $S_{1x} = +1/2$  を得る確率は、

$$P(S_{1x} = +1/2) = \frac{1}{2} \quad (3.235)$$

である。

(b) 観測者 B が粒子 2 のスピンを測定して  $S_{2z} = +1/2$  という値を得たとする。すると、射影公理より全系の状態は

$$|\psi'\rangle = |z:-\rangle|z:+\rangle \quad (3.236)$$

となる。したがって、観測者 A が粒子 1 のスピンの  $z$  成分を測定すると必ず  $S_{1z} = -1/2$  を得る。また、

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x:-\rangle - |x:+\rangle)|z:+\rangle \quad (3.237)$$

と表されるから、観測者 A が粒子 1 のスピンの  $x$  成分を測定するとき、

- $S_{1x} = 1/2$  を得る確率は  $1/2$
- $S_{1x} = -1/2$  を得る確率は  $1/2$

となる。つまり、粒子 1 のスピンの  $x$  成分は完全にランダムになっているのである。これは不確定性の現れである。

### 3.25 1 階の球面テンソル

$V_q^{(1)}$  ( $q = +1, 0, -1$ ) を 1 階の球面テンソルの標準成分だとする。

$$V_q^{(1)'} = \sum_{q'} d_{qq'}^{(1)}(\beta) V_{q'}^{(1)} \quad (3.238)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & \cos \beta & -\frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{+1}^{(1)} \\ V_0^{(1)} \\ V_{-1}^{(1)} \end{pmatrix} \quad (3.239)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(V_{+1}^{(1)} + V_{-1}^{(1)}) + \frac{1}{2}(V_{+1}^{(1)} - V_{-1}^{(1)}) \cos \beta - \frac{1}{\sqrt{2}} V_0^{(1)} \sin \beta \\ V_0^{(1)} \cos \beta - \frac{1}{\sqrt{2}}(V_{+1}^{(1)} - V_{-1}^{(1)}) \sin \beta \\ \frac{1}{2}(V_{+1}^{(1)} + V_{-1}^{(1)}) + \frac{1}{2}(-V_{+1}^{(1)} + V_{-1}^{(1)}) \cos \beta - \frac{1}{\sqrt{2}} V_0^{(1)} \sin \beta \end{pmatrix} \quad (3.240)$$

となる。さらに、この式を直交座標成分  $V_x, V_y, V_z$  を用いて書き直すと、

$$V_q^{(1)'} = \begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}} V_y - \frac{1}{\sqrt{2}} V_x \cos \beta - \frac{1}{\sqrt{2}} V_z \sin \beta \\ V_z \cos \beta + V_x \sin \beta \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} V_y + \frac{1}{\sqrt{2}} V_x \cos \beta + \frac{1}{\sqrt{2}} V_z \sin \beta \end{pmatrix} \quad (3.241)$$

となる。

一方、 $V_x, V_y, V_z$  を  $y$  軸周りに回転させると、回転後の成分は

$$\begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_x \cos \beta + V_z \sin \beta \\ V_y \\ V_z \cos \beta - V_x \sin \beta \end{pmatrix} \quad (3.242)$$

である。これを用いて回転後の球面テンソルの成分を計算すると、

$$\begin{pmatrix} V_{+1}^{(1)'} \\ V_0^{(1)'} \\ V_{-1}^{(1)'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}(V'_x + iV'_y) \\ V'_z \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(V'_x - iV'_y) \end{pmatrix} \quad (3.243)$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}} V_y - \frac{1}{\sqrt{2}} V_x \cos \beta - \frac{1}{\sqrt{2}} V_z \sin \beta \\ V_z \cos \beta + V_x \sin \beta \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} V_y + \frac{1}{\sqrt{2}} V_x \cos \beta + \frac{1}{\sqrt{2}} V_z \sin \beta \end{pmatrix} \quad (3.244)$$

となり、同じ結果が得られた。

### 3.26 球面テンソルの合成

$U, V$  を 1 階の球面テンソルとする。

(a) 2 つの 1 階の球面テンソル  $U, V$  から、(3.10.27) 式より新たな 1 階の球面テンソルを作ることができる。必

要となる Clebsh-Gordan 係数  $\langle 1, 1; q_1, q_2 | 1, q \rangle$  の値は次のようになる。0 でないのは

$$\langle 1, 1; +1, 0 | 1, +1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle 1, 1; 0, +1 | 1, +1 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (3.245)$$

$$\langle 1, 1; +1, -1 | 1, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle 1, 1; -1, +1 | 1, 0 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (3.246)$$

$$\langle 1, 1; 0, -1 | 1, -1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle 1, 1; 0, -1 | 1, -1 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (3.247)$$

であり、他のものは 0 である。したがって、合成して得られる 1 階の 1 階の球面テンソルは

$$T_{+1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}U_{+1}V_0 - \frac{1}{\sqrt{2}}U_0V_{+1} \quad (3.248)$$

$$= -\frac{1}{2}\{U_xV_z - U_zV_x + i(U_yV_z - U_zV_y)\} \quad (3.249)$$

$$T_0^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}U_{+1}V_{-1} - \frac{1}{\sqrt{2}}U_{-1}V_{+1} \quad (3.250)$$

$$= \frac{i}{\sqrt{2}}(U_xV_y - U_yV_x) \quad (3.251)$$

$$T_{-1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}U_0V_{-1} - \frac{1}{\sqrt{2}}U_0V_{-1} \quad (3.252)$$

$$= \frac{1}{2}\{U_zV_x - U_xV_z - i(U_zV_y - U_yV_z)\} \quad (3.253)$$

$$(3.254)$$

である。

(b)2 階の球面テンソル

### 3.27 Wigner-Eckart の定理の応用

中心力ポテンシャル  $V(r)$  により、束縛されたスピンを持たない粒子を考える。この系のエネルギー固有状態を  $|n, l, m\rangle$  とする。

(a) ここで、演算子  $\hat{T}_q^{(1)}$  ( $q = +1, 0, -1$ ) を位置座標演算子を用いて次のように定める。

$$\hat{T}_{\pm 1}^{(1)} \equiv \mp \frac{\hat{x} \pm i\hat{y}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{T}_0^{(1)} \equiv \hat{z} \quad (3.255)$$

すると、演算子  $\hat{T}_q^{(1)}$  は 1 階の球面テンソル演算子の標準成分となる。Wigner-Eckart の定理より、

$$\langle n', l', m' | \hat{T}_q^{(1)} | n, l, m \rangle = \langle l, 1; m, q | l', m' \rangle \frac{\langle n', l' || \hat{T}^{(1)} || n, l \rangle}{\sqrt{2l+1}} \quad (3.256)$$

となる。 $\langle n', l' || \hat{T}^{(1)} || n, l \rangle$  は縮約行列要素であり、 $m, m', q$  には依存しない。つまり、

$$\frac{\langle n', l', m' | \hat{T}_{+1}^{(1)} | n, l, m \rangle}{\langle l, 1; m, +1 | l', m' \rangle} = \frac{\langle n', l', m' | \hat{T}_0^{(1)} | n, l, m \rangle}{\langle l, 1; m, 0 | l', m' \rangle} = \frac{\langle n', l', m' | \hat{T}_{-1}^{(1)} | n, l, m \rangle}{\langle l, 1; m, -1 | l', m' \rangle} \quad (3.257)$$

という関係がある。行列要素  $\langle n', l', m' | \hat{T}_q^{(1)} | n, l, m \rangle$  が 0 とならないための必要条件の 1 つは Clebsh-Gordan 係数  $\langle l, 1; m, q | l', m' \rangle$  が 0 にならないことであるから、Clebsh-Gordan 係数の選択則より、

$$\langle n', l', m' | \hat{T}_q^{(1)} | n, l, m \rangle \neq 0 \implies m' - m = q \wedge l' - l = \pm 1, 0 \quad (3.258)$$

である。特に、ここで定めた 1 階の球面テンソル演算子  $\hat{T}_q^{(1)}$  は空間反転に対し符号を反転する極性ベクトルであるから、パリティ演算子  $\hat{P}$  に対し、

$$\hat{P}\hat{T}_q^{(1)}\hat{P} = -\hat{T}_q^{(1)} \quad (3.259)$$

となる。したがって、

$$\langle n', l', m' | \hat{T}_q^{(1)} | n, l, m \rangle = - \langle n', l', m' | \hat{P} \hat{T}_q^{(1)} \hat{P} | n, l, m \rangle \quad (3.260)$$

$$= (-1)^{l+l'+1} \langle n', l', m' | \hat{T}_q^{(1)} | n, l, m \rangle \quad (3.261)$$

となるから、 $l = l'$  のとき、行列要素は 0 となる。

$$\langle n', l, m' | \hat{T}_q^{(1)} | n, l, m \rangle = 0 \quad (3.262)$$

よって、行列要素  $\langle n', l', m' | \hat{T}_q^{(1)} | n, l, m \rangle$  の選択則は

$$\langle n', l', m' | \hat{T}_q^{(1)} | n, l, m \rangle \neq 0 \implies m' - m = q \wedge l' - l = \pm 1 \quad (3.263)$$

となる。

(b) 次に同じ問題を中心力場中の波動関数  $\langle \mathbf{r} | n, l, m \rangle = \varphi(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$  を用いて議論しよう。演算子  $\hat{T}_q^{(1)}$  をスペクトル分解して計算すると、

$$\langle n', l', m' | \hat{T}_{\pm 1}^{(1)} | n, l, m \rangle = \iiint d^3 \mathbf{r} \langle n', l', m' | \mathbf{r} \rangle \left\{ \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (x \pm iy) \right\} \langle \mathbf{r} | n, l, m \rangle \quad (3.264)$$

$$= \int dr r^3 R_{n'l'}^*(r) R_{nl}(r) \\ \times \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \int d\theta \int d\phi \sin \theta (\sin \theta \cos \phi \pm i \sin \theta \sin \phi) Y_{l'}^{m'*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (3.265)$$

$$\langle n', l', m' | \hat{T}_0^{(1)} | n, l, m \rangle = \int dr r^3 R_{n'l'}^*(r) R_{nl}(r) \\ \times \int d\theta \int d\phi \sin \theta \cos \theta Y_{l'}^{m'*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (3.266)$$

となる。ここで、

$$\langle \hat{r}^3 \rangle_{l'm';lm} \equiv \int dr r^3 R_{l'm'}^*(r) R_{lm}(r) \quad (3.267)$$

とすれば、

$$\langle n', l', m' | \hat{T}_q^{(1)} | n, l, m \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \langle \hat{r}^3 \rangle_{l'm';lm} \int d\Omega Y_{l'}^{m'*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) Y_1^q(\theta, \phi) \quad (3.268)$$

となる。球面調和関数の積分公式 (3.7.73) 式を用いると、

$$\langle n', l', m' | \hat{T}_q^{(1)} | n, l, m \rangle = \langle \hat{r}^3 \rangle_{l'm';lm} \sqrt{\frac{2l+1}{2l'+1}} \langle l, 1; 0, 0 | l', 0 \rangle \langle l, 1; m, q | l', m' \rangle \quad (3.269)$$

が得られる。ここで、

$$\langle n', l' | \hat{T}^{(1)} | n, l \rangle \equiv \langle \hat{r}^3 \rangle_{l'm';lm} \frac{2l+1}{\sqrt{2l'+1}} \langle l, 1; 0, 0 | l', 0 \rangle \quad (3.270)$$

とすれば (a) と同じになる。パリティの部分は  $\langle \hat{r}^3 \rangle_{l'm';lm}$  から計算できる。

### 3.28 4重極モーメント

軌道角運動量子数  $l = 2$  の球面調和関数について変数の置き換えをすることにより、位置座標演算子  $\hat{r} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$  から2階の球面テンソル演算子を次のように作ることができる。<sup>\*7</sup>

$$\hat{T}_{\pm 2}^{(2)} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (\hat{x} \pm i\hat{y})^2 \quad (3.271)$$

$$\hat{T}_{\pm 1}^{(2)} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} (\hat{x} \pm i\hat{y})\hat{z} \quad (3.272)$$

$$\hat{T}_0^{(2)} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\hat{z}^2 - \hat{r}^2) \quad (3.273)$$

したがって、

$$\hat{x}\hat{y} = \sqrt{\frac{2\pi}{15}} \frac{1}{i} (\hat{T}_{+2}^{(2)} - \hat{T}_{-2}^{(2)}) \quad (3.274)$$

$$\hat{x}\hat{y} = \sqrt{\frac{2\pi}{15}} (-\hat{T}_{+1}^{(2)} + \hat{T}_{-1}^{(2)}) \quad (3.275)$$

$$\hat{x}^2 - \hat{y}^2 = \sqrt{\frac{8\pi}{15}} (\hat{T}_{+2}^{(2)} + \hat{T}_{-2}^{(2)}) \quad (3.276)$$

と表される。

(b)4重極モーメント  $Q$  は

$$Q \equiv e \langle \alpha, j, j | (3\hat{z}^2 - \hat{r}^2) | \alpha, j, j \rangle \quad (3.277)$$

$$= \sqrt{\frac{16\pi}{5}} e \langle \alpha, j, j | \hat{T}_0^{(2)} | \alpha, j, j \rangle \quad (3.278)$$

と定義される。一方、

$$e \langle \alpha, j, m' | (\hat{x}^2 - \hat{y}^2) | \alpha, j, j \rangle = \sqrt{\frac{8\pi}{15}} e \langle \alpha, j, m' | (\hat{T}_{+2}^{(2)} + \hat{T}_{-2}^{(2)}) | \alpha, j, j \rangle \quad (3.279)$$

である。Wigner-Eckart の定理より、

$$\langle \alpha, j, m' | \hat{T}_q^{(2)} | \alpha, j, m \rangle = \langle j, 2; m, q | j, m' \rangle \frac{\langle \alpha, j | \hat{T}^{(2)} | \alpha, j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \quad (3.280)$$

となるから、縮約行列要素は4重極モーメント  $Q$  を用いて、

$$\langle \alpha, j | \hat{T}^{(2)} | \alpha, j \rangle = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \cdot \frac{\sqrt{2j+1}}{\langle j, 2; j, 0 | j, j \rangle} \cdot \frac{Q}{e} \quad (3.281)$$

となる。したがって、

$$\langle \alpha, j, m' | \hat{T}_{\pm 2}^{(2)} | \alpha, j, j \rangle = \langle j, 2; j, \pm 2 | j, m' \rangle \frac{\langle \alpha, j | \hat{T}^{(2)} | \alpha, j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \quad (3.282)$$

$$= \begin{cases} 0 \\ \langle j, 2; j, -2 | j, j-2 \rangle \frac{\langle \alpha, j | \hat{T}^{(2)} | \alpha, j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \delta_{j-2, m'} \end{cases} \quad (3.283)$$

であるから、

$$e \langle \alpha, j, m' | (\hat{x}^2 - \hat{y}^2) | \alpha, j, j \rangle = \frac{Q}{\sqrt{6}} \frac{\langle j, 2; j, -2 | j, j-2 \rangle}{\langle j, 2; j, 0 | j, j \rangle} \delta_{j-2, m'} \quad (3.284)$$

<sup>\*7</sup> 章末問題の 3.26 の結果を用いても良い。



となる。

さらに Clebsh-Gordan 係数の計算をしよう。Clebsh-Gordan 係数に対する漸化式で、 $j_1 = j, j_2 = 2, m_1 = j, m_2 = -2, m = j - 1$  と置くと、

$$\sqrt{(2j-1)2} \langle j, 2; j, -2 | j, j-2 \rangle = 0 + 2 \langle j, 2; j, -1 | j, j-1 \rangle \quad (3.285)$$

となり、 $j_1 = j, j_2 = 2, m_1 = j, m_2 = -1, m = j$  と置くと、

$$\sqrt{2j} \langle j, 2; j, -1 | j, j-1 \rangle = 0 + \sqrt{6} \langle j, 2; j, 0 | j, j \rangle \quad (3.286)$$

が得られる。したがって、

$$\frac{\langle j, 2; j, -2 | j, j-2 \rangle}{\langle j, 2; j, 0 | j, j \rangle} = \sqrt{\frac{6}{j(2j-1)}} \quad (3.287)$$

となる。よって、

$$e \langle \alpha, j, m' | (\hat{x}^2 - \hat{y}^2) | \alpha, j, j \rangle = \frac{Q}{\sqrt{j(2j-1)}} \delta_{j-2, m'} \quad (3.288)$$

である。

### 3.29 電気 4 重極相互作用

スピン  $S = 3/2$  の原子核が外部から不均一な電場を受けている。このときの電気 4 重極相互作用の Hamiltonian は

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{eQ}{2S(S-1)\hbar^2} \left[ \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_0 \hat{S}_x^2 + \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)_0 \hat{S}_y^2 + \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right)_0 \hat{S}_z^2 \right] \quad (3.289)$$

で与えられる。 $\phi(\mathbf{r})$  は外部電場の静電ポテンシャルであり、Laplace 方程式の解となっている。

$$\left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_0 + \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)_0 + \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right)_0 = 0 \quad (3.290)$$

角運動量演算子に関する等式

$$\hat{S}_+^2 + \hat{S}_-^2 = 2(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) \quad (3.291)$$

を用いると、

$$A(3\hat{S}_z^2 - \hat{S}^2) + B(\hat{S}_+^2 + \hat{S}_-^2) = A(2\hat{S}_z^2 - \hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) + 2B(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) \quad (3.292)$$

$$= (2B - A)\hat{S}_x^2 - (2B + A)\hat{S}_y^2 + 2A\hat{S}_z^2 \quad (3.293)$$

となる。これを Hamiltonian  $\hat{H}_{\text{int}}$  の表式と比較して、連立方程式

$$\begin{cases} 2B - A = \frac{eQ}{2S(S-1)\hbar^2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_0 \\ -2B - A = \frac{eQ}{2S(S-1)\hbar^2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)_0 \\ 2A = \frac{eQ}{2S(S-1)\hbar^2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right)_0 \end{cases} \quad (3.294)$$

が得られる。この 3 つの方程式は Laplace 方程式の下では独立ではないので、 $A, B$  が

$$A = \frac{eQ}{4S(S-1)\hbar^2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right)_0 \quad (3.295)$$

$$B = \frac{eQ}{4S(S-1)\hbar^2} \left\{ \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_0 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right)_0 \right\} \quad (3.296)$$

$$= \frac{eQ}{8S(S-1)\hbar^2} \left\{ \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_0 - \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)_0 \right\} \quad (3.297)$$

$$= -\frac{eQ}{4S(S-1)\hbar^2} \left\{ \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)_0 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right)_0 \right\} \quad (3.298)$$

と求まる。Hamiltonian  $\hat{H}_{\text{int}}$  をスピン固有状態  $|3/2, m\rangle$  ( $m = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ ) に作用させると、

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{int}} |3/2, m\rangle &= A\hbar^2 \left(3m^2 - \frac{15}{4}\right) |3/2, m\rangle \\ &+ B\hbar^2 \sqrt{(3/2 - m)(5/2 + m)(1/2 - m)(7/2 + m)} |3/2, m + 2\rangle \\ &+ B\hbar^2 \sqrt{(3/2 + m)(5/2 - m)(1/2 + m)(7/2 - m)} |3/2, m - 2\rangle\end{aligned}\quad (3.299)$$

となるから、Hamiltonian  $\hat{H}_{\text{int}}$  の行列表示  $H_{\text{int}}$  は

$$H_{\text{int}} = \begin{pmatrix} 3A\hbar^2 & 0 & 2\sqrt{3}B\hbar^2 & 0 \\ 0 & -3A\hbar^2 & 0 & 2\sqrt{3}B\hbar^2 \\ 2\sqrt{3}B\hbar^2 & 0 & -3A\hbar^2 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{3}B\hbar^2 & 0 & -3A\hbar^2 \end{pmatrix}\quad (3.300)$$

となる。この  $4 \times 4$  行列の固有値問題を考えよう。固有方程式は

$$\det \begin{bmatrix} 3A\hbar^2 - x & 0 & 2\sqrt{3}B\hbar^2 & 0 \\ 0 & -3A\hbar^2 - x & 0 & 2\sqrt{3}B\hbar^2 \\ 2\sqrt{3}B\hbar^2 & 0 & -3A\hbar^2 - x & 0 \\ 0 & 2\sqrt{3}B\hbar^2 & 0 & -3A\hbar^2 - x \end{bmatrix} = (x^2 - 9A^2\hbar^4 - 12B^2\hbar^4)^2 = 0\quad (3.301)$$

となる。よって、固有エネルギーは

$$E = \pm \sqrt{9A^2 + 12B^2}\hbar^2\quad (3.302)$$

であり、2重縮退をしている。

#### 4. 量子力学における対称性

## 5. 近似法

## 6. 同種粒子

### 6.1 1次元調和振動子

1次元調和振動子の1粒子固有エネルギー  $\epsilon_n$  は

$$\epsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.1)$$

である。

(a)  $N$  個の Fermi 粒子が1次元調和振動子中で運動している場合、Pauli の排他律より、ある1粒子固有エネルギー  $\epsilon_n$  の状態にはスピンのアップの粒子とダウンの粒子の2つの粒子しか存在し得ない。したがって、 $N$  個の Fermi 粒子の系の基底エネルギーは

$$E_{\text{ground}} = \begin{cases} 2 \sum_{n=0}^{N/2-1} \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega & (N : \text{even}) \\ 2 \sum_{n=0}^{\lfloor N/2 \rfloor - 1} \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega + \left(\lfloor N/2 \rfloor + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega & (N : \text{odd}) \end{cases} \quad (6.2)$$

$$= \begin{cases} \frac{N^2}{4} \hbar\omega & (N : \text{even}) \\ \frac{N^2+1}{4} \hbar\omega & (N : \text{odd}) \end{cases} \quad (6.3)$$

となる。Fermi エネルギーは

$$E_{\text{Fermi}} = \begin{cases} \left\{ \left(\frac{N}{2} - 1\right) + \frac{1}{2} \right\} \hbar\omega & (N : \text{even}) \\ \left\{ \left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor + \frac{1}{2} \right\} \hbar\omega & (N : \text{odd}) \end{cases} \quad (6.4)$$

$$= \begin{cases} \frac{N-1}{2} \hbar\omega & (N : \text{even}) \\ \frac{N}{2} \hbar\omega & (N : \text{odd}) \end{cases} \quad (6.5)$$

である。

(b)  $N$  が非常に大きいときには、

$$E_{\text{ground}} = \frac{N^2}{4} \hbar\omega \quad (6.6)$$

$$E_{\text{Fermi}} = \frac{N}{2} \hbar\omega \quad (6.7)$$

となる。

### 6.2 スピン1の2粒子

スピン1の粒子は Bose 粒子であり、共に  $s$  状態にあるならば状態の空間部分は粒子の入れ替えに関して対称だから、スピン部分も粒子の入れ替えに対して対称でなければならない。演習問題の3.20の結果より、 $j_1 = j_2 = 1$ の角運動量の合成で対称な状態は全角運動量子数  $j = 2, 0$ の状態である。磁気量子数は制限されない。

### 6.3 ヘリウム原子

電子がスピンを持たない Bose 粒子だとすると、波動関数の空間部分は対称でなければならない。つまり、(6.4.2)式で+の符号のみが可能な状態である。したがって、エネルギー準位はパラヘリウムのエネルギー準位のみが現れる。

## 6.4 正三角形の対称性と角運動量

3個のスピン0の同種粒子が正三角形上の頂点に位置しているとする。この系を $z$ 軸のまわりの $\frac{2\pi}{3}$ 回転することは粒子1と粒子2を入れ替えて、粒子2と粒子3を入れ替えることに相当している。

図2 回転と置換



系の状態を $|\psi_{nj}\rangle |jm\rangle$ とすると、

$$\hat{R}\left(\alpha = \frac{2\pi}{3}\right) |\psi_{nj}\rangle |jm\rangle = \hat{P}_{12}\hat{P}_{23} |\psi_{nj}\rangle |jm\rangle \quad (6.8)$$

が成り立つ。このとき、左辺は

$$\hat{R}\left(\alpha = \frac{2\pi}{3}\right) |\psi_{nj}\rangle |jm\rangle = e^{-\frac{iJ_z}{\hbar} \frac{2\pi}{3}} |\psi_{nj}\rangle |jm\rangle \quad (6.9)$$

$$= e^{-i\frac{2\pi m}{3}} |\psi_{nj}\rangle |jm\rangle \quad (6.10)$$

となり、右辺は粒子が Bose 粒子であることから、

$$\hat{P}_{12}\hat{P}_{23} |\psi_{nj}\rangle |jm\rangle = |\psi_{nj}\rangle |jm\rangle \quad (6.11)$$

となる。したがって、

$$e^{-i\frac{2\pi m}{3}} |\psi_{nj}\rangle |jm\rangle = |\psi_{nj}\rangle |jm\rangle \quad (6.12)$$

つまり、

$$e^{-i\frac{2\pi m}{3}} = 1 \quad (6.13)$$

であるから、磁気量子数は

$$m = 3n \quad n \in \mathbb{Z} \quad (6.14)$$

でなければならない。

## 6.5 スピン1の3粒子

## 6.6 スピン3/2

## 6.7 井戸型ポテンシャル中の2つの Fermi 粒子

## 7. 散乱理論

### 7.1 1次元の透過・反射問題

Lippmann-Schwinger 方程式は

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} V(\hat{x}) |\psi^{(\pm)}\rangle \quad (7.1)$$

である。ただし、

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad V(x) = \begin{cases} V(x) & (|x| < a) \\ 0 & (|x| > a) \end{cases} \quad (7.2)$$

である。Lippmann-Schwinger 方程式を波動関数に対する積分方程式の形に書き換えるために、1次元の自由粒子の Green 関数  $G^{(\pm)}(x, x')$  を求めよう。<sup>\*8</sup>

$$G^{(\pm)}(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle x \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} \right| x' \right\rangle \quad (7.3)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} \frac{e^{ip'(x-x')/\hbar}}{\frac{p^2}{2m} - \frac{p'^2}{2m} \pm i\epsilon} \quad (7.4)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \frac{e^{ik'(x-x')}}{k^2 - k'^2 \pm i\epsilon} \quad (7.5)$$

ここで、最後の等式で微小量  $\epsilon$  を定義しなおした。被積分関数は  $k' = k \pm i\epsilon, -k \pm i\epsilon$  に1位の極を持つ。ここで、積分区間を  $x > x'$  の場合には複素平面の上半平面上の半円に変更し、 $x < x'$  の場合には下半平面上の半円に変更する。すると、上半平面に積分曲線を取った場合には、極  $k' = \pm k + i\epsilon$  が曲線の内部に含まれる。一方、下半平面に積分曲線を取った場合には、極  $k' = \mp k - i\epsilon$  が曲線の内部に含まれる。したがって、留数定理を用いると、

$$G^{(\pm)}(x, x') = -\frac{i}{2} \frac{e^{\pm ik|x-x'|}}{k} \quad (7.6)$$

となる。Lippmann-Schwinger 方程式の左から位置座標  $\text{bra}\langle x|$  を作用させると、

$$\psi^{(\pm)}(x) = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx' G^{(\pm)}(x, x') V(x') \psi^{(\pm)}(x) \quad (7.7)$$

$$= \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} - \frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-a}^a dx' e^{\pm ik|x-x'|} V(x') \psi^{(\pm)}(x) \quad (7.8)$$

となる。ここで、 $x > a$  の領域を考えよう。このとき、 $|x - x'| = x - x'$  となるから、Lippmann-Schwinger 方程式は

$$\psi^{(\pm)}(x) = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} - \frac{im}{\hbar^2 k} e^{\pm ikx} \int_{-a}^a dx' e^{\mp ikx'} V(x') \psi^{(\pm)}(x) \quad (7.9)$$

である。この積分方程式の意味を考えよう。上の符号を取ると、右辺は第1項、第2項共に  $x$  正方向に進む波を表す。つまり、入射波  $\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}$  が  $x$  負方向から入射し、ポテンシャル  $V(x)$  を透過した状況を表現している。一方、下の符号を選ぶと、右辺第1項は  $x$  正方向に進む波を表し、右辺第2項は  $x$  負方向に進む波を表している。つまり、 $x$  正方向と負方向の両方から波が入射している状況を表現している。<sup>\*9</sup> したがって、 $E \rightarrow E + i\epsilon$  とい

<sup>\*8</sup> 3次元の Green 関数とは異なる表式になる。

<sup>\*9</sup> 特に負方向から入射した波のポテンシャルでの反射波と正方向から入射した波の透過波が干渉したものがちょうど0になるような状況である。

う処方箋が正しい境界条件を与える。

(b)(7.8) 式で上の符号を選ぶ。ポテンシャルがデルタ関数型  $V = -\left(\frac{\gamma\hbar^2}{2m}\right)\delta(x)$  の場合には積分方程式 (7.8) 式は

$$\psi^{(+)}(x) = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{i\gamma}{2k} e^{+ik|x|}\psi^{(+)}(0) \quad (7.10)$$

となる。 $x = 0$  を代入して、 $\psi^{(+)}(0)$  について解くと、

$$\psi^{(+)}(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{2k}{2k - i\gamma} \quad (7.11)$$

が得られる。したがって、波動関数  $\psi^{(+)}(x)$  は

$$\psi^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{i\gamma}{2k - i\gamma} e^{ik|x|} \quad (7.12)$$

となる。よって、透過振幅  $A_T$  と反射振幅  $A_R$  は

$$A_T = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{i\gamma}{2k - i\gamma} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{2k}{2k - i\gamma} \quad (7.13)$$

$$A_R = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{i\gamma}{2k - i\gamma} \quad (7.14)$$

である。

(c) 引力的デルタ関数ポテンシャルの唯一の束縛状態の波動関数は

$$\psi(x) \propto e^{-\gamma|x|/2} \quad (7.15)$$

である。散乱状態の波動関数における波数  $k$  を複素数に拡張したときに  $e^{-\gamma|x|/2}$  の項が (7.12) 式に現れるのは、

$$k = \frac{i\gamma}{2} \quad (7.16)$$

のときである。これは透過振幅  $A_T$  と反射振幅  $A_R$  の 1 位の極になっている。

## 7.2 全断面積に対する近似

(a) 微分断面積  $\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{k}'}}$  の第 1Born 近似による計算結果は、

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{k}'}} = \left| f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right|^2 \quad (7.17)$$

$$= \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int d^3x d^3x' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}') \quad (7.18)$$

となる。したがって、全断面積  $\sigma_{\text{tot}}(\mathbf{k})$  は次のようになる。

$$\sigma_{\text{tot}}(\mathbf{k}) = \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int d\Omega_{\mathbf{k}'} \int d^3x d^3x' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}') \quad (7.19)$$

ここで、 $\int d\Omega_{\mathbf{k}'}$  は  $\mathbf{k}'$  の立体角についての積分を表す。積分の順番を入れ替えて、 $\Omega_{\mathbf{k}'}$  に関する積分を実行しよう。

$$\int d\Omega_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} = 2\pi \int_{-1}^{\pi} d\theta' \sin\theta' e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|\cos\theta'} \quad (7.20)$$

$$= 2\pi \int_{-1}^1 du e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|u} \quad (u \equiv \cos\theta') \quad (7.21)$$

$$= \frac{4\pi}{k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \sin(k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|) \quad (7.22)$$



よって、全断面積は

$$\sigma_{\text{tot}}(\mathbf{k}) = \frac{m^2}{\pi\hbar^4} \int d^3x d^3x' e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \frac{\sin(k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|)}{k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}') \quad (7.23)$$

と書ける。ここで、ポテンシャルが球対称  $V(\mathbf{x}) = V(r)$  としよう。すると、全断面積  $\sigma_{\text{tot}}(\mathbf{k})$  も波数ベクトル  $\mathbf{k}$  の向きには依存せず、波数の大きさ  $k$  だけの関数になるから、

$$\sigma_{\text{tot}}(k) = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{k}} \sigma_{\text{tot}}(\mathbf{k}) \quad (7.24)$$

が成り立つ。再び立体角の積分を先に実行すると、

$$\sigma_{\text{tot}}(\mathbf{k}) = \frac{m^2}{\pi\hbar^4} \int d^3x d^3x' \left( \frac{\sin(k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|)}{k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \right)^2 V(r)V(r') \quad (7.25)$$

が得られる。

(b) 光学定理より、全断面積  $\sigma_{\text{tot}}(\mathbf{k})$  は

$$\sigma_{\text{tot}}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\theta = 0) \quad (7.26)$$

$$= \frac{4\pi}{k} \text{Im} \left( f^{(1)}(\theta = 0) + f^{(2)}(\theta = 0) + \dots \right) \quad (7.27)$$

となる。球ポテンシャルに対する 1 次 Born 近似による散乱振幅  $f^{(1)}(\theta)$  は実数であるから、

$$\sigma_{\text{tot}}(k) = \frac{4\pi}{k} \text{Im} \left( f^{(2)}(\theta = 0) + \dots \right) \quad (7.28)$$

となる。ここで、

$$f^{(2)}(\theta = 0) = \frac{1}{(4\pi)^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \int d^3x \int d^3x' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} V(\mathbf{x}) \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'} \quad (7.29)$$

であるから、球対称性を用いると、

$$\sigma_{\text{tot}}(k) = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{k}} \sigma_{\text{tot}}(\mathbf{k}) \quad (7.30)$$

$$\simeq \frac{1}{k} \text{Im} \int d\Omega_{\mathbf{k}} f^{(2)}(\theta = 0) \quad (7.31)$$

$$= \frac{1}{(4\pi)^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{k} \text{Im} \int d^3x \int d^3x' \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}') \int d\Omega_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}'-\mathbf{x})} \quad (7.32)$$

$$= \frac{1}{4\pi} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{k} \text{Im} \int d^3x \int d^3x' \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \frac{\sin(k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|)}{k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}') \quad (7.33)$$

$$= \frac{m^2}{\pi\hbar^4} \int d^3x d^3x' \left( \frac{\sin(k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|)}{k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \right)^2 V(r)V(r') \quad (7.34)$$

となり、同一の式が得られた。

### 7.3 井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & (r < R) \\ 0 & (r > R) \end{cases} \quad (7.35)$$

位相のズレの公式

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \quad (7.36)$$

$$\sigma_{\text{tot}}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (7.37)$$

を用いて散乱断面積を計算する。このとき、位相のズレ  $\delta_l$  は (7.6.35) 式

$$\tan \delta_l = \frac{kR \cdot j_l'(kR) - \beta_l \cdot j_l(kR)}{kR \cdot n_l'(kR) - \beta_l \cdot n_l(kR)} \quad (7.38)$$

により求まる。ただし、

$$\beta_l \equiv \left( r \frac{d}{dr} \ln A_l(r) \right)_{r=R} \quad (7.39)$$

である。ここで、ポテンシャルは井戸型だから動径波動関数  $A_l(r)$  は  $r < R$  で

$$A_l(r) \propto j_l(k'r) \quad k' \equiv \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \quad (7.40)$$

となる。すると、

$$\beta_l = \frac{k'R j_l'(k'R)}{j_l(k'R)} \quad (7.41)$$

となるから、(7.37) 式は

$$\tan \delta_l = \frac{k \cdot j_l'(kR) j_l(k'R) - k' \cdot j_l(kR) j_l'(k'R)}{k \cdot n_l'(kR) j_l(k'R) - k' \cdot n_l(kR) j_l'(k'R)} \quad (7.42)$$

となる。

今、低エネルギー  $kR \ll 1$  を考えているから、 $l$  が大きい部分波は重要でない。そこで、 $l = 0$  をまず考える。 $l = 0$  の位相のズレ  $\delta_0$  は

$$\tan \delta_0 = \frac{k \cdot j_0'(kR) j_0(k'R) - k' \cdot j_0(kR) j_0'(k'R)}{k \cdot n_0'(kR) j_0(k'R) - k' \cdot n_0(kR) j_0'(k'R)} \quad (7.43)$$

により求まる。さらに  $|V_0| \ll E$  だから、 $k'R \sim kR \ll 1$  が成り立つ。 $kR, k'R$  が共に微小量として展開する。

$$j_0(x) \simeq 1 - \frac{x^2}{6}, \quad j_0'(x) \simeq -\frac{x}{3}, \quad n_0(x) \simeq -\frac{1}{x}, \quad n_0'(x) \simeq \frac{1}{x^2} \quad (7.44)$$

であるから、

$$\tan \delta_0 \simeq \frac{k \cdot \left(-\frac{kR}{3}\right) \cdot 1 - k' \cdot \left(-\frac{k'R}{3}\right) \cdot 1}{k \cdot \frac{1}{(kR)^2} \cdot 1 - k' \cdot \left(-\frac{1}{kR}\right) \cdot \left(-\frac{kR}{3}\right)} \quad (7.45)$$

$$\simeq \frac{\frac{R}{3}(k'^2 - k^2)}{\frac{1}{kR^2}} \quad (7.46)$$

$$= \frac{kR^3}{3}(k'^2 - k^2) \quad (7.47)$$

$$= -\frac{kR^3}{3} \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (7.48)$$

となる。よって、

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0 (P_0(\cos \theta))^2 \quad (7.49)$$

$$\simeq \frac{\tan^2 \delta_0}{k^2} \quad (7.50)$$

$$= \frac{4 m^2 V_0 R^6}{9 \hbar^4} \quad (7.51)$$

$$\sigma_{\text{tot}}(k) \simeq \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \quad (7.52)$$

$$\simeq \frac{4\pi}{k^2} \tan^2 \delta_0 \quad (7.53)$$

$$= \frac{16\pi m^2 V_0 R^6}{9 \hbar^4} \quad (7.54)$$

が得られる。これが全断面積の  $kR$  について 0 次近似である。

次の次数の計算を考えると微分断面積に角度依存性が現れる。このとき、 $l = 1$  の位相のズレ  $\delta_1$  について 1 次の項も計算に含めて、

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \frac{1}{k^2} (\sin^2 \delta_0 + 6 \cos(\delta_0 - \delta_1) \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos \theta) \quad (7.55)$$

となる。ここで、 $\delta_0$  については  $kR$  について上述の計算結果の次の次数の項まで計算する必要があるが、以下で分かるように  $B/A$  の値を求めるだけならば不要である。

$$A = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0, \quad B = \frac{6}{k^2} \cos(\delta_0 - \delta_1) \sin \delta_0 \sin \delta_1 \quad (7.56)$$

となるから、

$$B/A = 6 \cos(\delta_0 - \delta_1) \frac{\sin \delta_1}{\sin \delta_0} \simeq \frac{6 \tan \delta_1}{\tan \delta_0} \quad (7.57)$$

である。  $\tan \delta_0$  の場合と同様にして、  $\tan \delta_1$  を計算すると、

$$\tan \delta_1 \simeq -\frac{k^3 R^5}{45} \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (7.58)$$

となるから、

$$B/A \simeq \frac{2}{5} (kR)^2 \quad (7.59)$$

である。

## 7.4 湯川ポテンシャル

## 7.5 剛体球と不確定性関係

## 7.6 剛体球散乱の位相のズレによる解析

半径  $a$  の剛体球ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} 0 & (r > a) \\ \infty & (r < a) \end{cases} \quad (7.60)$$

による散乱を考える。

(a)s 波 ( $l = 0$ ) に対する動径波動方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{dR_k(r)}{dr} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} R_n(r) \quad (r > a) \quad (7.61)$$

であり、境界条件

$$R_k(a) = 0 \quad (7.62)$$

を満たす。この解は

$$R_k(r) \propto \begin{cases} \sin(k(r-a)) & (r > a) \\ 0 & (r < a) \end{cases} \quad (7.63)$$

となる。したがって、(7.6.45) 式と比較して、位相のズレは

$$\delta_0(k) = -ka \quad (7.64)$$

となる。

(b) 低エネルギー極限  $k \rightarrow 0$  での全断面積  $\sigma_{\text{tot}}(0)$  を求める。

$$\sigma_{\text{tot}}(k=0) = \lim_{k \rightarrow 0} \sigma_{\text{tot}}(k) \quad (7.65)$$

$$= \lim_{k \rightarrow 0} \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (7.66)$$

$$= \lim_{k \rightarrow 0} \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \quad (\because k \rightarrow 0 \text{ のとき、} \delta_l \sim k^{2l+1}) \quad (7.67)$$

$$= \lim_{k \rightarrow 0} \frac{4\pi}{k^2} (-ka)^2 \quad (7.68)$$

$$= 4\pi a^2 \quad (7.69)$$

これは幾何学的断面積  $\pi a^2$  の 4 倍となっている。これは量子力学の粒子の波動性が大きくなっている結果である。

## 7.7 高エネルギー散乱の位相のズレ

## 7.8 球対称ポテンシャルによる散乱の形式的理論

## 7.9 デルタ殻ポテンシャルによる散乱

## 7.10 単振動するポテンシャルによる散乱

## 7.11 水素原子の基底状態による散乱

## 7.12 Coulomb ポテンシャル

## 参考文献

- [1] J.J.Sakurai 『現代の量子力学 (上、下)』 (吉岡書店,1989)
- [2] 飯高敏晃 『演習 現代の量子力学』 (吉岡書店,1992)
- [3] 猪木 慶治、河合 光 『量子力学 II』 (講談社サイエンティフィック,1994)