Modern Quantum Mechanics (Sakurai and Napolitano)

使用しているのは second edition.

Chapter1

Fundamental Concepts

■(1.7.20) $\langle x'| p^n |\alpha\rangle = (-i\hbar)^n \nabla'^n \langle x'|\alpha\rangle$ は大事

Chapter3

Theory of Angular Momentum

■(3.11.19), (3.11.23)　(3.5.49)

■角運動量の合成　2 種類の角運動量 $\boldsymbol{J}_1$, $\boldsymbol{J}_2$ を考える．$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \boldsymbol{J}_2$ とする．このとき，2 種類の同時固有函数を考える．すなわち

ef 1. ${\boldsymbol{J}_1}^2$, ${\boldsymbol{J}_2}^2$, J_{1z}, J_{2z} の同時固有函数 $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$：

$$\begin{aligned}
({\boldsymbol{J}_1}^2 \otimes 1)\,|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle &= j_1(j_1+1)\,|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\,,\\
(1 \otimes {\boldsymbol{J}_2}^2)\,|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle &= j_2(j_2+1)\,|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\,,\\
(J_{1z} \otimes 1)\,|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle &= m_1\,|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\,,\\
(1 \otimes J_{2z})\,|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle &= m_2\,|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\,.
\end{aligned} \tag{3.0.1}$$

ef 2. ${\boldsymbol{J}_1}^2$, ${\boldsymbol{J}_2}^2$, $\boldsymbol{J}^2$, J_z の同時固有函数 $|j_1 j_2; jm\rangle$：

$$\begin{aligned}
({\boldsymbol{J}_1}^2 \otimes 1)\,|j_1 j_2; jm\rangle &= j_1(j_1+1)\,|j_1 j_2; jm\rangle\,,\\
(1 \otimes {\boldsymbol{J}_2}^2)\,|j_1 j_2; jm\rangle &= j_2(j_2+1)\,|j_1 j_2; jm\rangle\,,\\
\boldsymbol{J}^2\,|j_1 j_2; jm\rangle &= j(j+1)\,|j_1 j_2; jm\rangle\,,\\
J_z\,|j_1 j_2; jm\rangle &= m\,|j_1 j_2; jm\rangle\,.
\end{aligned} \tag{3.0.2}$$

同時固有函数 ef 1. は容易に構成できる．すなわち，${\boldsymbol{J}_1}^2$, J_{1z} の同時固有函数 $|j_1 m_1\rangle$：

$$ {\boldsymbol{J}_1}^2\,|j_1 m_1\rangle = j_1(j_1+1)\,|j_1 m_1\rangle\,, \tag{3.0.3}$$

$$ J_{1z}\,|j_1 m_1\rangle = m_1\,|j_1 m_1\rangle \tag{3.0.4}$$

及び ${\boldsymbol{J}_2}^2$, J_{2z} の同時固有函数 $|j_2 m_2\rangle$：

$$ {\boldsymbol{J}_2}^2\,|j_2 m_2\rangle = j_2(j_2+1)\,|j_1 m_1\rangle\,, \tag{3.0.5}$$

$$ J_{2z}\,|j_2 m_2\rangle = m_2\,|j_2 m_2\rangle \tag{3.0.6}$$

が与えられていれば,

$$ |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \tag{3.0.7}$$

とすればよい.

j_1, j_2 を固定する（これによって部分空間が得られる）．$|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$, $|j_1 j_2; jm\rangle$ はこの部分空間の基底となるので,

$$\sum_{m_1}\sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2| = 1. \tag{3.0.8}$$

従って,

$$|j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1}\sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle \tag{3.0.9}$$

が成立する．

追加定義 3.0.10. $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle$ を Clebsch-Gordan 係数と呼ぶ．

追加定理 3.0.11. Clebsch-Gordan 係数 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle$ は $m = m_1 + m_2$ でない限り 0 となる．

例えば, 電子の軌道角運動量とスピン角運動量の場合は $j_1 = l$, $j_2 = 1/2$. 全角運動量の大きさが $j = l + 1/2$ で, その z 成分が m の函数を展開してみる．Clebsch-Gordan 係数が非零なのは $(m_1, m_2) = (m \mp 1/2, \pm 1/2)$ の場合のみなので,（$j_1 j_2$; は省略して）

$$\left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle = \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle + \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left\langle m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle. \tag{3.0.12}$$

■2 電子系

1 電子のスピン　まず，1 電子のスピンについて考える．スピンの z 成分 s_z の固有函数を $|+\rangle$, $|-\rangle$ とする：

$$s_z |+\rangle = \frac{1}{2} |+\rangle, \quad s_z |-\rangle = -\frac{1}{2} |-\rangle.$$

固有函数の性質から

$$\langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1, \quad \langle + | - \rangle = \langle - | + \rangle = 0, \quad |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = 1.$$

s_x, s_y, s_z は次のように書ける：

$$\begin{aligned} s_x &= \frac{1}{2}\left(|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|\right), \\ s_y &= \frac{i}{2}\left(|-\rangle\langle +| - |+\rangle\langle -|\right), \\ s_z &= \frac{1}{2}\left(|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|\right). \end{aligned}$$

さらに,

$$s_+ = s_x + i s_y = |+\rangle\langle -|, \quad s_- = s_x - i s_y = |-\rangle\langle +|$$

とすれば,

$$s_+ |+\rangle = s_- |-\rangle = 0, \quad s_- |+\rangle = |-\rangle, \quad s_+ |-\rangle = |+\rangle.$$

2 電子のスピン　2 電子のスピンを $\boldsymbol{s}_1$, $\boldsymbol{s}_2$ で表す．合成スピンを

$$\boldsymbol{s} = \boldsymbol{s}_1 \otimes 1 + \boldsymbol{s}_2 \otimes 1$$

とする．合成スピンの z 成分は

$$s_z = s_{1z} \otimes 1 + 1 \otimes s_{2z}$$

で与えられ，その大きさは

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{s}^2 &= {s_{1x}}^2 \otimes 1 + 1 \otimes {s_{2x}}^2 + 2s_{1x} \otimes s_{2x} + \cdots \\
&= {\boldsymbol{s}_1}^2 \otimes 1 + 1 \otimes {\boldsymbol{s}_2}^2 + 2s_{1z} \otimes s_{2z} + s_{1+} \otimes s_{2-} + s_{1-} \otimes s_{2+}
\end{aligned}$$

となる．

$\boldsymbol{s}^2$, $\boldsymbol{s}_z$ の同時固有函数が Clebsch-Gordan 係数を使って求まるが，それの検算をしてみる．

$|+\rangle \otimes |+\rangle$.

$$\begin{aligned}
s_z(|+\rangle \otimes |+\rangle) &= (s_{1z} \otimes 1)(|+\rangle \otimes |+\rangle) + (1 \otimes s_{2z})(|+\rangle \otimes |+\rangle) \\
&= |+\rangle \otimes |+\rangle
\end{aligned}$$

なので，合成スピンの z 成分は 1.

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{s}^2(|+\rangle \otimes |+\rangle) &= ({\boldsymbol{s}_1}^2 \otimes 1)(|+\rangle \otimes |+\rangle) + (1 \otimes {\boldsymbol{s}_2}^2)(|+\rangle \otimes |+\rangle) + 2(s_{1z} \otimes s_{2z})(|+\rangle \otimes |+\rangle) \\
&\quad + (s_{1+} \otimes s_{2-})(|+\rangle \otimes |+\rangle) + s_{1-} \otimes s_{2+}(|+\rangle \otimes |+\rangle) \\
&= \frac{3}{4}(|+\rangle \otimes |+\rangle) + \frac{3}{4}(|+\rangle \otimes |+\rangle) + \frac{1}{2}(|+\rangle \otimes |+\rangle) \\
&= 2(|+\rangle \otimes |+\rangle)
\end{aligned}$$

なので，スピンの大きさは $2 = 1(1+1)$.

$|-\rangle \otimes |-\rangle$.

$$\begin{aligned}
s_z(|-\rangle \otimes |-\rangle) &= (s_{1z} \otimes 1)(|-\rangle \otimes |-\rangle) + (1 \otimes s_{2z})(|-\rangle \otimes |-\rangle) \\
&= -|-\rangle \otimes |-\rangle
\end{aligned}$$

なので，合成スピンの z 成分は -1.

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{s}^2(|-\rangle \otimes |-\rangle) &= ({\boldsymbol{s}_1}^2 \otimes 1)(|-\rangle \otimes |-\rangle) + (1 \otimes {\boldsymbol{s}_2}^2)(|-\rangle \otimes |-\rangle) + 2(s_{1z} \otimes s_{2z})(|-\rangle \otimes |-\rangle) \\
&\quad + (s_{1+} \otimes s_{2-})(|-\rangle \otimes |-\rangle) + s_{1-} \otimes s_{2+}(|-\rangle \otimes |-\rangle) \\
&= \frac{3}{4}(|-\rangle \otimes |-\rangle) + \frac{3}{4}(|-\rangle \otimes |-\rangle) + \frac{1}{2}(|-\rangle \otimes |-\rangle) \\
&= 2(|-\rangle \otimes |-\rangle)
\end{aligned}$$

なので，スピンの大きさは $2 = 1(1+1)$.

$|+\rangle \otimes |-\rangle$.

$$\begin{aligned}
s_z(|+\rangle \otimes |-\rangle) &= (s_{1z} \otimes 1)(|+\rangle \otimes |-\rangle) + (1 \otimes s_{2z})(|+\rangle \otimes |-\rangle) \\
&= 0
\end{aligned}$$

なので，合成スピンの z 成分は 0.

$$\boldsymbol{s}^2(|+\rangle \otimes |-\rangle) = ({\boldsymbol{s}_1}^2 \otimes 1)(|+\rangle \otimes |-\rangle) + (1 \otimes {\boldsymbol{s}_2}^2)(|+\rangle \otimes |-\rangle) + 2(s_{1z} \otimes s_{2z})(|+\rangle \otimes |-\rangle)$$

$$
\begin{aligned}
&+ (s_{1+} \otimes s_{2-})(|+\rangle \otimes |-\rangle) + s_{1-} \otimes s_{2+}(|+\rangle \otimes |-\rangle) \\
&= \frac{3}{4}(|+\rangle \otimes |-\rangle) + \frac{3}{4}(|+\rangle \otimes |-\rangle) - \frac{1}{2}(|+\rangle \otimes |-\rangle) + |-\rangle \otimes |+\rangle \\
&= |+\rangle \otimes |-\rangle + |-\rangle \otimes |+\rangle \, .
\end{aligned}
$$

$|-\rangle \otimes |+\rangle$.

$$
\begin{aligned}
s_z(|-\rangle \otimes |+\rangle) &= (s_{1z} \otimes 1)(|-\rangle \otimes |+\rangle) + (1 \otimes s_{2z})(|-\rangle \otimes |+\rangle) \\
&= 0
\end{aligned}
$$

なので，合成スピンの z 成分は 0.

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{s}^2(|-\rangle \otimes |+\rangle) &= ({\boldsymbol{s}_1}^2 \otimes 1)(|-\rangle \otimes |+\rangle) + (1 \otimes {\boldsymbol{s}_2}^2)(|-\rangle \otimes |+\rangle) + 2(s_{1z} \otimes s_{2z})(|-\rangle \otimes |+\rangle) \\
&\quad + (s_{1+} \otimes s_{2-})(|-\rangle \otimes |+\rangle) + s_{1-} \otimes s_{2+}(|-\rangle \otimes |+\rangle) \\
&= \frac{3}{4}(|-\rangle \otimes |+\rangle) + \frac{3}{4}(|-\rangle \otimes |+\rangle) - \frac{1}{2}(|-\rangle \otimes |+\rangle) + |+\rangle \otimes |-\rangle \\
&= |-\rangle \otimes |+\rangle + |+\rangle \otimes |-\rangle \, .
\end{aligned}
$$

後半 2 つは $\boldsymbol{s}^2$ の固有函数ではないので，これらの線形結合を考える．

$$
\begin{aligned}
s_z \frac{|+\rangle \otimes |-\rangle + |-\rangle \otimes |+\rangle}{\sqrt{2}} &= 0, \\
\boldsymbol{s}^2 \frac{|+\rangle \otimes |-\rangle + |-\rangle \otimes |+\rangle}{\sqrt{2}} &= 2\frac{|+\rangle \otimes |-\rangle + |-\rangle \otimes |+\rangle}{\sqrt{2}}
\end{aligned}
$$

なので，$(|+\rangle \otimes |-\rangle + |-\rangle \otimes |+\rangle)/\sqrt{2}$ はスピンの大きさが $2 = 1(1+1)$.

$$
\begin{aligned}
s_z \frac{|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle}{\sqrt{2}} &= 0, \\
\boldsymbol{s}^2 \frac{|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle}{\sqrt{2}} &= 0
\end{aligned}
$$

なので，$(|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle)/\sqrt{2}$ はスピンの大きさが $0 = 0(0+1)$.

$\sqrt{2}$ は規格化定数．実際，

$$
\begin{aligned}
&(\langle +| \otimes \langle -| + \langle -| \otimes \langle +|)(|+\rangle \otimes |-\rangle + |-\rangle \otimes |+\rangle) \\
&= \langle +|+\rangle \otimes \langle -|-\rangle + \langle -|-\rangle \otimes \langle +|+\rangle \\
&= 2.
\end{aligned}
$$

■(3.2.47)　単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ の周りに ϕ だけ回転する時，スピノル χ は

$$
\chi \to \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right)\chi \tag{3.0.13}
$$

と変化する．この時，$\chi^\dagger \sigma_k \chi$ は

$$
\chi^\dagger \sigma_k \chi \to \chi^\dagger \exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right) \sigma_k \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right)\chi
$$

となる．ここで出てきた

$$
\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right) \sigma_k \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right) \tag{3.0.14}
$$

を計算する．$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ は Pauli 行列で

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.0.15}$$

で与えられる．指数関数の部分は Taylor 展開され，$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n})^2 = 1$ などを使うと，

$$\exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}\phi}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & -(in_x + n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ (-in_x + n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix} \tag{3.0.16}$$

となる．また，3 次元で $\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z)$ の周りの ϕ の回転は次の行列：

$$R = \begin{pmatrix} \cos\phi + {n_x}^2(1-\cos\phi) & n_x n_y(1-\cos\phi) - n_z \sin\phi & n_z n_x(1-\cos\phi) + n_y \sin\phi \\ n_x n_y(1-\cos\phi) + n_z\sin\phi & \cos\phi + {n_y}^2(1-\cos\phi) & n_y n_z(1-\cos\phi) - n_x\sin\phi \\ n_z n_x(1-\cos\phi) - n_y\sin\phi & n_y n_z(1-\cos\phi) + n_x \sin\phi & \cos\phi + {n_z}^2(1-\cos\phi) \end{pmatrix} \tag{3.0.17}$$

で与えられる．

まずは σ_1 の計算から．[3.0.15][3.0.16] から

$$\begin{aligned}
&\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}\phi}{2}\right)\sigma_1 \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}\phi}{2}\right) \\
&= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (in_x + n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ (in_x - n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
&\quad \times \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & -(in_x + n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ (-in_x + n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (in_x + n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ (in_x - n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (-in_x + n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & -(in_x + n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12}^* & -A_{12} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.0.18}$$

成分を計算すれば，

$$\begin{aligned}
A_{11} &= \left[\cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\right](-in_x + n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) + (in_x + n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\left[\cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\right] \\
&= n_y \sin\phi + n_z n_x(1-\cos\phi), \\
A_{12} &= \left[\cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\right]^2 - (in_x + n_y)^2 \sin^2\left(\frac{\phi}{2}\right) \\
&= \cos\phi + {n_x}^2(1-\cos\phi) - in_x n_y(1-\cos\phi) + in_z \sin\phi.
\end{aligned} \tag{3.0.19}$$

ところで，[3.0.15][3.0.16][3.0.17][3.0.19] から

$$R_{11}\sigma_1 + R_{12}\sigma_2 + R_{13}\sigma_3 = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12}^* & -A_{11} \end{pmatrix} \tag{3.0.20}$$

となる．[3.0.18][3.0.20] から

$$\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}\phi}{2}\right)\sigma_1 \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}\phi}{2}\right) = \sum_l R_{1l}\sigma_l. \tag{3.0.21}$$

次に σ_2 の計算．[3.0.15][3.0.16] から

$$
\begin{aligned}
&\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right)\sigma_2\exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right)\\
&=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\\ (in_x-n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right)-in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -1\\ i & 0\end{pmatrix}\\
&\quad\times\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)-in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & -(in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\\ (-in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\end{pmatrix}\\
&=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\\ (in_x-n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right)-in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\end{pmatrix}\\
&\quad\times\begin{pmatrix}(-n_x-in_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & -i\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+n_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\\ i\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+n_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & -(-n_x-in_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\end{pmatrix}\\
&=\begin{pmatrix}B_{11} & B_{12}\\ B_{12}^* & -B_{11}\end{pmatrix}.
\end{aligned}
\tag{3.0.22}
$$

成分を計算すれば，

$$
\begin{aligned}
B_{11}&=\left[\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\right](-n_x-in_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)+(in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\left[i\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+n_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\right]\\
&=n_yn_z(1-\cos\phi)-n_x\sin\phi,\\
B_{12}&=\left[\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\right]\left[-i\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+n_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\right]\\
&\qquad-(in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)(-n_x-in_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\\
&=n_xn_y(1-\cos\phi)+n_z\sin\phi-i\cos\phi-i{n_y}^2(1-\cos\phi).
\end{aligned}
\tag{3.0.23}
$$

ところで，[3.0.15][3.0.16][3.0.17][3.0.23] から

$$
R_{21}\sigma_1+R_{22}\sigma_2+R_{23}\sigma_3=\begin{pmatrix}B_{11} & B_{12}\\ B_{12}^* & -B_{11}\end{pmatrix}
\tag{3.0.24}
$$

となる．[3.0.22][3.0.24] から

$$
\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right)\sigma_2\exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right)=\sum_l R_{2l}\sigma_l.
\tag{3.0.25}
$$

最後に σ_3 の計算．[3.0.15][3.0.16] から

$$\begin{aligned}
&\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right)\sigma_3\exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right)\\
&=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\\ (in_x-n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right)-in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\\
&\quad\times\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)-in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & -(in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\\ (-in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\end{pmatrix}\\
&=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\\ (in_x-n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right)-in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\end{pmatrix}\\
&\quad\times\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)-in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & -(in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\\ -(-in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & -\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)-in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\end{pmatrix}\\
&=\begin{pmatrix}C_{11} & C_{12}\\ C_{12}^* & -C_{11}\end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.0.26}$$

成分を計算すれば，

$$\begin{aligned}
C_{11}&=\left[\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\right]\left[\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)-in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\right]-(in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)(-in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\\
&=\cos\phi+{n_z}^2(1-\cos\phi),\\
C_{12}&=-\left[\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\right](in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\\
&\qquad+(in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\left[-\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)-in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\right]\\
&=n_zn_x(1-\cos\phi)n_y\sin\phi-in_yn_z(1-\cos\phi)-in_x\sin\phi.
\end{aligned} \tag{3.0.27}$$

ところで，[3.0.15][3.0.16][3.0.17][3.0.27] から

$$R_{31}\sigma_1+R_{32}\sigma_2+R_{33}\sigma_3=\begin{pmatrix}C_{11} & C_{12}\\ C_{12}^* & -C_{11}\end{pmatrix} \tag{3.0.28}$$

となる．[3.0.26][3.0.28] から

$$\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right)\sigma_3\exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right)=\sum_l R_{3l}\sigma_l. \tag{3.0.29}$$

[3.0.21][3.0.25][3.0.29] から

$$\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right)\sigma_k\exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\phi}{2}\right)=\sum_l R_{kl}\sigma_l.$$

Chapter4

Symmetry in Quantum Mechanics

■変換とか

定義　ケットに対する微小変換を

$$|\psi'\rangle = U(\epsilon)\,|\psi\rangle$$

と定義する．U はユニタリ演算子（下の計算でノルムを考えれば直ちに分かる）．

$$\langle\psi|\,A\,|\psi\rangle \to \langle\psi'|\,A\,|\psi'\rangle = \langle\psi|\,U^\dagger AU\,|\psi\rangle = \langle\psi|\,U^{-1}AU\,|\psi\rangle$$

なので，微小変換によって，**演算子**が

$$A \to U^{-1}AU$$

に変化するとも考えることができる．微小変換 $U(\epsilon)$ を

$$U(\epsilon) = 1 - i\epsilon T$$

と書く．ユニタリ演算子 T を**生成子**と呼ぶ．

$$\delta A = U^{-1}AU - A = i\epsilon[T, A]$$

となる．これを生成子の定義とすることもある．

空間並進　$\boldsymbol{t}$ の向きに ϵ 進む空間並進を考える．これにより，$\delta x^\nu = \epsilon^\nu$ となる．この変換の生成子は $\boldsymbol{t}\cdot\boldsymbol{P}$．実際，

$$i\epsilon[t^\mu P^\mu, X^\nu] = \epsilon t^\mu \delta^{\mu\nu} = \epsilon t^\nu = \delta x^\nu.$$

空間回転　$\boldsymbol{n}$ を軸として ϵ 回る回転を考える．これにより，$\delta x^\nu = \epsilon(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{X})^\nu$ となる．この変換の生成子は $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}$．実際

$$\begin{aligned} i\epsilon[n^\mu L^\mu, X^\nu] &= i\epsilon n^\mu[\epsilon^{\mu\rho\sigma}X^\rho P^\sigma, X^\nu] = i\epsilon n^\mu \epsilon^{\mu\rho\sigma}X^\rho[P^\sigma, X^\nu] = \epsilon n^\mu \epsilon^{\mu\rho\sigma}X^\rho \delta^{\sigma^\nu} = \epsilon n^\mu \epsilon^{\mu\rho\nu}X^\rho = \epsilon(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{X})^\nu \\ &= \delta x^\nu. \end{aligned}$$

時間並進　時刻が ϵ 経過する変換を考える．これについては，生成子は H．実際，$\psi(t+\epsilon) = \psi(t) - i\epsilon H\psi(t)$．

Chapter5

Approximation Methods

■(5.2.13)　解くべき摂動方程式は

$$(H_0 + \lambda V)\,|l\rangle = E\,|l\rangle\,.$$

$|l\rangle$ の摂動展開は

$$|l\rangle = |l^{(0)}\rangle + \lambda\,|l^{(1)}\rangle + \cdots$$

で E の摂動展開は

$$E = E_D^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \cdots$$

とする．非摂動状態 $(\lambda = 0)$ でエネルギー固有値 $E_D^{(0)}$ に属する状態を $|m^{(0)}\rangle$ $(m = 0, 1, \ldots)$ とする：

$$H_0\,|m^{(0)}\rangle = E_D^{(0)}\,|m^{(0)}\rangle\,.$$

$|l\rangle$ は $\lambda \to 0$ で $|l^{(0)}\rangle$ になり，エネルギーが $E_D^{(0)}$ になるので，$|l^{(0)}\rangle$ は $|m^{(0)}\rangle$ の線形結合となる：

$$|l^{(0)}\rangle = \sum_{m\in D} \langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle\,|m^{(0)}\rangle\,.$$

摂動をあらわに書けば

$$(H_0 + \lambda V)(|l^{(0)}\rangle + \lambda\,|l^{(1)}\rangle + \cdots) = (E_D^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \cdots)(|l^{(0)}\rangle + \lambda\,|l^{(1)}\rangle + \cdots).$$

　まずは λ の係数を比較して，

$$V\,|l^{(0)}\rangle + H_0\,|l^{(1)}\rangle = E_D^{(0)}\,|l^{(1)}\rangle + E^{(1)}\,|l^{(0)}\rangle\,.$$

$|l^{(0)}\rangle$ を展開して，

$$\sum_{m\in D} \langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle\,V\,|m^{(0)}\rangle + H_0\,|l^{(1)}\rangle = E_D^{(0)}\,|l^{(1)}\rangle + E^{(1)} \sum_{m\in D} \langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle\,|m^{(0)}\rangle\,.$$

両辺に $\langle m'^{(0)}|$ をかけて，

$$\sum_{m\in D} \langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle\,\langle m'^{(0)}|\,V\,|m^{(0)}\rangle + \langle m'^{(0)}|\,H_0\,|l^{(1)}\rangle = E_D^{(0)}\,\langle m'^{(0)}|l^{(1)}\rangle + E^{(1)} \sum_{m\in D} \langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle\,\langle m'^{(0)}|m^{(0)}\rangle\,.$$

$\langle m'^{(0)}|m^{(0)}\rangle = \delta_{mm'}$ なので

$$\sum_{m\in D} V_{m'm}\,\langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle + E_D^{(0)}\,\langle m'^{(0)}|l^{(1)}\rangle = E_D^{(0)}\,\langle m'^{(0)}|l^{(1)}\rangle + E^{(1)}\,\langle m'^{(0)}|l^{(0)}\rangle\,.$$

従って，

$$\sum_{m\in D} V_{m'm} \langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle = E^{(1)} \langle m'^{(0)}|l^{(0)}\rangle .$$

あらわに書けば，

$$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots \\ V_{21} & V_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)}|l^{(0)}\rangle \\ \langle 2^{(0)}|l^{(0)}\rangle \\ \vdots \\ \langle g^{(0)}|l^{(0)}\rangle \end{pmatrix} = E^{(1)} \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)}|l^{(0)}\rangle \\ \langle 2^{(0)}|l^{(0)}\rangle \\ \vdots \\ \langle g^{(0)}|l^{(0)}\rangle \end{pmatrix}$$

となる．

$$\sum_{m\in D} \langle m'^{(0)}| V |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle = E^{(1)} \langle m'^{(0)}|l^{(0)}\rangle$$

だが，$P_0 = \sum_{m\in D} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|$ なので，

$$\langle m'^{(0)}| VP_0 |l^{(0)}\rangle = E^{(1)} \langle m'^{(0)}|l^{(0)}\rangle .$$

両辺に $|m'^{(0)}\rangle$ をかけて $m' \in D$ で和をとると，

$$\sum_{m'\in D} |m'^{(0)}\rangle \langle m'^{(0)}| VP_0 |l^{(0)}\rangle = E^{(1)} \sum_{m'\in D} |m'^{(0)}\rangle \langle m'^{(0)}|l^{(0)}\rangle .$$

従って

$$P_0VP_0P_0 |l^{(0)}\rangle = E^{(1)} P_0 |l^{(0)}\rangle .$$

これは P_0VP_0 の固有値問題となっている．従って，重解を含めて g 個の固有ベクトル $P_0 |l_i^{(0)}\rangle$ とエネルギー固有値 v_i が存在する：

$$P_0VP_0P_0 |l_i^{(0)}\rangle = v_i P_0 |l_i^{(0)}\rangle .$$

容易に分かるように，$|l_i^{(0)}\rangle$ は正規直交系をなす：$\langle l_i^{(0)}|l_j^{(0)}\rangle = \delta_{ij}$．よって，

$$(H_0 + \lambda P_0VP_0)P_0 |l_i^{(0)}\rangle = (E_D^{(0)} + \lambda v_i)P_0 |l_i^{(0)}\rangle .$$

(5.2.3) から

$$(E_i - E_D^{(0)} - \lambda P_0VP_0)P_0 |l_i\rangle = \lambda P_0VP_1 |l_i\rangle$$

なので，$E_i = E_D^{(0)} + \lambda v_i + \lambda^2\Delta_i^{(2)} + \cdots$ として，

$$(\lambda v_i + \lambda^2\Delta_i^{(2)} + \cdots - \lambda P_0VP_0)(P_0 |l_i^{(0)}\rangle + \lambda P_0 |l_i^{(1)}\rangle + \cdots) = \lambda P_0V(P_0 |l_i^{(0)}\rangle + \lambda P_0 |l_i^{(1)}\rangle + \cdots).$$

$P_1 |l_i^{(0)}\rangle = P_1P_0 |l_i^{(0)}\rangle = 0$ に注意して，λ^2 の係数を比較すれば，

$$v_iP_0 |l_1^{(0)}\rangle - P_0VP_0 |l_i^{(1)}\rangle + \Delta_i^{(2)} P_0 |l_i^{(0)}\rangle = P_0VP_1 |l_i^{(1)}\rangle .$$

(5.2.6) を代入して，

$$= P_0 \sum_{k\notin D} \frac{V |k\rangle \langle k| V |l_i^{(0)}\rangle}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$

$\langle l_j^{(0)}|$ をかけて，

$$v_i \langle l_j^{(0)}| P_0 |l_i^{(1)}\rangle - \langle l_j^{(0)}| P_0VP_0 |l_i^{(1)}\rangle + \Delta_i^{(2)} \langle l_j^{(0)}| P_0 |l_i^{(0)}\rangle = \sum_{k\notin D} \frac{\langle l_j^{(0)}| V |k\rangle \langle k| V |l_i^{(0)}\rangle}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$

少し変形して

$$(v_i - v_j)\langle l_j^{(0)}|\,P_0\,|l_i^{(1)}\rangle + \Delta_i^{(2)}\delta_{ij} = \sum_{k\notin D}\frac{\langle l_j^{(0)}|\,V\,|k\rangle\langle k|\,V\,|l_i^{(0)}\rangle}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$

$i = j$ なら

$$\Delta_i^{(2)} = \sum_{k\notin D}\frac{\left|\langle k|\,V\,|l_i^{(0)}\rangle\right|^2}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$

$i \neq j$ なら左から $|l_j^{(0)}\rangle$ をかけて，

$$|l_j^{(0)}\rangle\langle l_j^{(0)}|\,P_0\,|l_i^{(1)}\rangle = |l_j^{(0)}\rangle\frac{1}{v_i - v_j}\sum_{k\notin D}\frac{\langle l_j^{(0)}|\,V\,|k\rangle\langle k|\,V\,|l_i^{(0)}\rangle}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$

$j \neq i$ で和を取って，

$$\sum_{j\neq i}|l_j^{(0)}\rangle\frac{1}{v_i - v_j}\sum_{k\notin D}\frac{\langle l_j^{(0)}|\,V\,|k\rangle\langle k|\,V\,|l_i^{(0)}\rangle}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}} = \sum_{j\neq i}|l_j^{(0)}\rangle\langle l_j^{(0)}|\,P_0\,|l_i^{(1)}\rangle.$$

$|l_j^{(0)}\rangle\langle l_j^{(0)}|\,P_0\,|l_i^{(1)}\rangle = |l_j^{(0)}\rangle\langle l_j^{(0)}|l_i^{(1)}\rangle$ で，$i = j$ ならば $\langle l_j^{(0)}|l_i^{(1)}\rangle = 0$ なので，

$$\sum_{j\neq i}|l_j^{(0)}\rangle\langle l_j^{(0)}|\,P_0\,|l_i^{(1)}\rangle = \sum_{j}|l_j^{(0)}\rangle\langle l_j^{(0)}|\,P_0\,|l_i^{(1)}\rangle = P_0\,|l_i^{(1)}\rangle.$$

($\{|l_j^{(0)}\rangle\}$ が完全系をなすのは縮退部分空間 D において，であることに注意）以上から，

$$P_0\,|l_i^{(1)}\rangle = \sum_{j\neq i}|l_j^{(0)}\rangle\frac{1}{v_i - v_j}\sum_{k\notin D}\frac{\langle l_j^{(0)}|\,V\,|k\rangle\langle k|\,V\,|l_i^{(0)}\rangle}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$

■(5.3.45)　(3.8.63)

■(5.3.50)　(3.8.39), (3.8.65)

■(5.6.43)　(2.6.38), (2.6.40), (2.7.68)

Chapter6

Scattering Theory

■(6.3.3)　(6.2.14)

■(6.3.17)　(6.2.3), (6.2.14)

■(6.4.14)　(6.2.23) と

$$\int_{-1}^{1} P_l(x) P_{l'}(x)\, dx = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}.$$

■(6.4.17)　(6.4.41)

■(6.5.7)　(6.2.14) と $\boldsymbol{k}$ が $+\hat{\boldsymbol{z}}$ の向きであることに注意.

■(6.5.19)　(6.4.41)

■(6.6.9)　(6.4.55)

■(6.6.31)　(6.6.13)

■(6.9.6)　(6.1.19) を $\rho(E_n) = mk'/\hbar^2(L/2\pi)^3\, d\Omega$, (6.1.20) を $w(i \to n) = mk'L^3/(2\pi)^2\hbar^3|T_{ni}|^2\, d\Omega$ として (6.1.22) が

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k'}{k}\left(\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\right)^3 |\langle \boldsymbol{k'}, n|\, T\, |\boldsymbol{k}, 0\rangle|^2.$$

さらに Born 近似 $T = V$ とする.

Chapter7

Identical Particles

■(7.3.9)　(3.8.12)(3.8.15) から $(\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)^2 = \boldsymbol{S}^2$ の固有値は triplet が $2\hbar^2$；singlet が 0．$\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 = (\boldsymbol{S}^2 - \boldsymbol{S}_1{}^2 - \boldsymbol{S}_1{}^2)/2$ なので，従う．

■(7.6.16)　磁場の計算：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}(x,t) &= \boldsymbol{\nabla} \times \sum_{\boldsymbol{k},\lambda} \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\lambda}(\boldsymbol{x},t) \\
&= \sum_{\boldsymbol{k},\lambda} \boldsymbol{\nabla} \times \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \left[\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\lambda} e^{-i(\omega_k t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})} + \boldsymbol{A}^*_{\boldsymbol{k},\lambda} e^{i(\omega_k t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})} \right] \\
&= \sum_{\boldsymbol{k},\lambda} i\boldsymbol{k} \times \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\lambda} e^{-i(\omega_k t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})} - \sum_{\boldsymbol{k},\lambda} i\boldsymbol{k} \times \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} \boldsymbol{A}^*_{\boldsymbol{k},\lambda} e^{i(\omega_k t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})} \\
&= i \sum_{\boldsymbol{k},\lambda} \left[\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\lambda} e^{-i(\omega_k t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})} - \boldsymbol{A}^*_{\boldsymbol{k},\lambda} e^{i(\omega_k t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})} \right] (\boldsymbol{k} \times \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}).
\end{aligned}$$