量子力学 3

(筑波大学理工学群物理学類 3 年)

平成25 年8 月5 日版

2013年春学期

初貝 安弘

Email: hatsugai.yasuhiro.ge@u.tsukuba.ac.jp

目 次

第1章　量子論における対称性

1.1　対称性と保存量

1.1.1　対称操作と波動関数

まず最初に一次元を運動する質点をを例にとり，x 方向に a だけ移動する操作 T_a を考えよう。これを波動関数で表せば，元の波動関数を $\psi(x)$ として移動させた後の波動関数を $\psi'(x)$ とすれば

$$\psi'(x+a) \;=\; \psi(x)$$

と書けるであろう。平行移動した場所 $x+a=T_a x$ で元の位置での波動関数の値をとる関数が平行移動した波動関数というわけである。これを

$$\begin{aligned}
x' &= T_a x = x + a \\
\psi' &= T_a \psi \\
\psi'(x') &= \psi(x)
\end{aligned}$$

と書いて，波動関数が x 方向に a だけ平行移動することにより $\psi \to T_a\psi$ と変換されたと考える。よってテイラー展開から

$$\begin{aligned}
T_a\psi(x) &= \psi'(x) = \psi(T_a^{-1}x) = \psi(x-a) \\
&= \psi(x) - a\psi^{(1)}(x) + \frac{a^2}{2}\psi^{(2)}(x) \mp \cdots \\
&= \sum_{n=0} \frac{(-a)^n}{n!}\psi^{(n)}(x) \\
&= \sum_{n=0} \frac{(a\partial_x)^n}{n!}\psi^{(n)}(x) \\
&= e^{-a\partial_x}\psi(x)
\end{aligned}$$

となる。これは，<u>並進操作</u> T_a が

$$T_a \;=\; e^{-a\partial_x} = e^{-iap_x/\hbar}$$

と 運動量演算子 $p_x = -i\hbar\partial_x$ を用いて，表現できることを意味する。なお $p_x^\dagger = p_x$ と運動量はエルミート演算子なので，

$$T_a^\dagger = e^{+iap_x^\dagger/\hbar} = e^{+iap_x/\hbar} = T_a^{-1}$$

となり

$$T_a^\dagger T_a = T_a T_a^\dagger = 1$$

となる。この関係を満たす演算子を ユニタリ演算子 という。

1.1.2 無限小変換と保存則

まず，ある対称操作に対応するユニタリ変換 U により波動関数が $\psi' = U\psi$ と変換するとしよう。

$$\psi \to \psi' = U\psi, \quad U^\dagger = U^{-1}$$

この時，変換によって物理量 $\mathcal{O}$, ($\mathcal{O}^\dagger = \mathcal{O}$) の期待値は

$$\langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle = \langle\psi'|U\mathcal{O}U^{-1}|\psi'\rangle$$

となるから，物理量は対称操作によって

$$\mathcal{O} \to \mathcal{O}' = U\mathcal{O}U^{-1}$$

と変換する。つまり

$$\langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle = \langle\psi'|\mathcal{O}'|\psi'\rangle$$

である。また

$$\mathcal{O}' = U\mathcal{O}U^{-1} = \mathcal{O}$$

の時，物理量 $\mathcal{O}$ は変換のもとで不変であるという。これは

$$[\mathcal{O}, U] = 0$$

とも表せる。

特に $\delta\lambda$ を無限小の物理量として，次の形のユニタリ変換を 無限小変換 という。

$$U_\lambda = e^{i\delta\lambda G/\hbar}, \quad G^\dagger = G$$

ここで，U のユニタリ性から G はエルミート演算子となり，ある物理量に対応する。($\delta\lambda$ と G との積が $\hbar$ の次元をもつ (お互いに共役) であることにも注意しよう) この G を無限小変換の 母関数 と呼ぶ。この無限小変換に対して一般の物理量と波動関数の変換則をまとめよう。($\delta\lambda$ の最低次で) [1]

無限小変換

$$
\begin{aligned}
U &= e^{i\delta\lambda G/\hbar} \\
\delta\psi &= \psi' - \psi = i\lambda G\psi \\
\delta\mathcal{O} &= \mathcal{O}' - \mathcal{O} = i\delta\lambda[G,\mathcal{O}]/\hbar
\end{aligned}
$$

よって $[G,\mathcal{O}]=0$ の時，$\mathcal{O}$ は無限小変換の下で不変である。

ここで一般にシュレディンガー方程式 $i\hbar\Psi = H\psi$ の形式解を

$$
\Psi(t) = e^{-iHt/\hbar}\Psi(0)
$$

と書けば，G の期待値 $\langle G\rangle_t = \langle\Psi(t)|G|\Psi(t)\rangle$ の時間変化は次のように書ける

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle G\rangle_t &= \frac{d}{dt}\langle\Psi(0)|e^{iHt/\hbar}Ge^{-iHt/\hbar}|\Psi(0)\rangle \\
&= (i/\hbar)\langle\Psi(0)|e^{iHt/\hbar}[H,G]e^{-iHt/\hbar}|\Psi(0)\rangle
\end{aligned}
$$

よってハミルトニアンが無限小変換 $e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ で不変なとき，$[H,G]=0$ であり $\langle G\rangle_t$ は時間に依存せず 保存量 となる。これを次のようにまとめよう。

無限小変換と保存則

ハミルトニアン H が無限小変換 $e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ の下で不変な時，$[H,G]=0$ とハミルトニアンと G は可換であり，G は保存量となる。

---

[1]

$$
\mathcal{O}' = (1+i\delta\lambda G/\hbar+\cdots)\mathcal{O}(1-i\delta\lambda G/\hbar+\cdots) = \mathcal{O}+i\delta\lambda[G,\mathcal{O}]/\hbar
$$

1.2 保存則の具体例

以下、前節での対称操作と保存則に関する相互関係の具体例を示そう。

1.2.1 時間推進とエネルギー

時間間隔 $\delta\tau$ の 時間推進 $T_{\delta\tau}$ を

$$
\begin{aligned}
t &\to t' = T_\tau t = t + \tau \\
\psi(t) &\to \psi'(t) = U_{\delta\tau}\psi(t)
\end{aligned}
$$

とすれば、$\psi'(t') = \psi(t)$ より

$$
\psi'(t) = \psi(t-\delta\tau) = U_{\delta\tau}\psi(t)
$$

である。$\delta\tau$ を無限小とすれば

$$
\delta\psi = \psi(t-\delta\tau) - \psi(t) = -\delta\tau\partial_t\psi
$$

ここで、シュレディンガー方程式を使えば

$$
\delta\psi = -\delta\tau(H\psi)/(i\hbar) = i\delta\tau H\psi/\hbar
$$

これをまとめて

時間推進

時間推進の演算子の母関数はハミルトニアンである。

$$
U_{\delta\tau} = e^{+iH\delta\tau/\hbar}
$$

時間に依存しないハミルトニアンはそれ自身と可換でありよって時間に依存しないハミルトニアンで記述される系はエネルギーを保存量とする。

1.2.2 空間推進と運動量

3 次元の 空間推進 $\boldsymbol{a}$ を考えると，1 次元の議論にならって

$$
\begin{aligned}
T_{\boldsymbol{a}}\boldsymbol{r} &\to \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a} \\
\psi &\to \psi'
\end{aligned}
$$

ここで $\psi'(\boldsymbol{r}') = \psi(\boldsymbol{r})$ より

$$\psi'(\boldsymbol{r}) \quad = \quad \psi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{a})$$

よって $\boldsymbol{a}$ を無限小として

$$\delta\psi \quad = \quad -\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{\nabla}\psi = i\boldsymbol{a} \cdot (i\hbar\boldsymbol{\nabla}\psi)/\hbar = -i\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{p}\psi/\hbar, \quad \boldsymbol{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$$

以上まとめて

空間推進

空間推進の母関数は運動量である。

$$U_{\delta\boldsymbol{a}} \quad = \quad e^{-i\delta\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p}}$$

空間推進で不変 (並進対称性を持つ) 系では運動量は保存する。

例えば自由空間でのハミルトニアン $H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ は

$$[H, \boldsymbol{p}] \quad = \quad 0$$

であるから、自由粒子系は空間推進で不変であり (並進対称性 を持つ)，運動量を保存する。

並進操作

$U = T_a = e^{-i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p}/\hbar}$ として $\delta\boldsymbol{a}$ を無限小のパラメターとすれば

$$\begin{aligned} G \quad &= \quad -\delta\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{p} \\ \delta r_i \quad &= \quad i[-\delta\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{p}/\hbar, r_i] = i\delta a_j [r_i, p_j/\hbar] = -a_i \\ \delta\boldsymbol{r} \quad &= \quad -\delta\boldsymbol{a} \end{aligned}$$

$\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} - \delta\boldsymbol{a}$ となることを意味するが，これは $\psi'(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r} - \delta\boldsymbol{a})$ と整合的である。[2] 紛らわしいが、これを $T_{\boldsymbol{a}}\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}$ と混同しないようにしよう。また

$$\delta\boldsymbol{p} \quad = \quad -i[\delta\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}] = 0$$

である。

[2]

$$\langle\psi'|x'|\psi'\rangle \quad = \quad \int dx \psi'(x) x' \psi'(x) = \int dx \psi(x-a)(x-a)\psi(x-a) = \int dx \psi(x)(x)\psi(x) = \langle\psi|x|\psi\rangle$$

1.2.3　空間回転と角運動量

原点周りの 回転R による変換を考えよう。ここで R を 3×3 の実行列として

$$\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \to \boldsymbol{r}' = R\boldsymbol{r}$$

と書こう。回転はベクトルの大きさを不変にするので

$$|\boldsymbol{r}|^2 = \tilde{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{r} = \tilde{\boldsymbol{r}'}\tilde{R}R\boldsymbol{r}'$$

これは

$$\tilde{R}R = E_3, \quad \tilde{R} = R^{-1}$$

であることを要求する。この条件を満たす行列を 直交行列$O(3)$ という。これから $(\det R)^2 = 1$ となるが，特に単位行列に連続変形できるものは $\det R = 1$ であり，$SO(3)$ と呼ばれる。

次に例によって，この回転を表現する無限小変換を求めてみよう。無限小変換は R が単位行列に近い場合に対応するので、

$$R = E_3 + \delta R$$

とすれば，最低次で

$$\tilde{R}R = E_3 + \delta R + \widetilde{\delta R} = E_3$$

つまり δR は反対称である。これを無限小のベクトル $\delta\boldsymbol{\omega}$ を用いて次のように書こう。

$$(\delta R)_{ij} = -\epsilon_{ijk}\delta\omega_k$$

よって

$$\begin{aligned} (\delta r)_i &= (\delta R\boldsymbol{r})_i = -\epsilon_{ijk}r_j\delta\omega_k \\ \delta\boldsymbol{r} &= \delta\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r} \end{aligned}$$

これは $\boldsymbol{r}$ を $\delta\boldsymbol{\omega}$ 軸まわりに $\delta\boldsymbol{\omega}$ を右ねじが進む向きとして $|\delta\boldsymbol{\omega}|$ だけねじの回転する方向に回転することを意味する。

ここで[3]

$$\begin{aligned}\psi'(R\boldsymbol{r}) &= \psi(\boldsymbol{r}),\quad \psi'(\boldsymbol{r}) = \psi(R^{-1}\boldsymbol{r})\\ \delta\psi &= -i\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}\psi/\hbar\end{aligned}$$

と変形できる。なお

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p} = -i\hbar\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla}$$

は角運動量演算子である。まとめて,

空間回転

空間回転の演算子の母関数は角運動量である。

$$U_{\delta\boldsymbol{\omega}} = e^{-i\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar}$$

よって空間回転に対して不変な系では角運動量は保存量する。

回転操作

次に物理量の変換則を確認しておこう。まずは、座標演算子 $\boldsymbol{r}$ を考えよう。

$$\begin{aligned}G &= -\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}\\ \delta r_i &= i[-\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar, r_i] = i\delta\omega_j[r_i, L_j/\hbar]\\ &= i\delta\omega_j\epsilon_{jk\ell}r_k[r_i, p_\ell/\hbar] = -\delta\omega_j\epsilon_{jk\ell}r_k\delta_{i\ell}\\ &= -\delta\omega_j\epsilon_{jki}r_k = \epsilon_{ikj}r_k\delta\omega_j\end{aligned}$$

つまり

$$\delta\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}\times\delta\boldsymbol{\omega} = -\delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}$$

となる。

---

[3]

$$\begin{aligned}\psi'(R\boldsymbol{r}) &= \psi(\boldsymbol{r}),\quad \psi'(\boldsymbol{r}) = \psi(R^{-1}\boldsymbol{r})\\ \delta\psi &= \psi(R^{-1}\boldsymbol{r}) - \psi(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r}-\delta R\boldsymbol{r}) - \psi(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r}-\delta\boldsymbol{r}) - \psi(\boldsymbol{r}) = -(\delta\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi\\ &= -(\delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi = -\delta\boldsymbol{\omega}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla})\psi = -i\delta\boldsymbol{\omega}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})\psi/\hbar = -i\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}\psi/\hbar\end{aligned}$$

続いて

$$\begin{aligned}\delta p_i &= i[-\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar, p_i] = i\delta\omega_j[-L_j/\hbar, p_i]\\ &= -i\delta\omega_j\epsilon_{jab}[r_a p_b, p_i]/\hbar = \delta\omega_j\epsilon_{jab}\delta_{ai}p_b\\ &= \delta\omega_j\epsilon_{jib}p_b\end{aligned}$$

$$\delta\boldsymbol{p} = -\delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{p}$$

ここで[4]

$$[L_i, L_j] = i\hbar(r_i p_j - r_j p_i)$$

一方

$$\epsilon_{ijk}L_k = \epsilon_{ijk}\epsilon_{kab}r_a p_b = (\delta_{ia}\delta_{jb} - \delta_{ib}\delta_{ja})r_a p_b = r_i p_j - r_j p_b$$

よって

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$$

$$\delta L_i = -i[\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar, L_i] = i\delta\omega_j[L_i, L_j/\hbar] = -\delta\omega_j\epsilon_{ijk}L_k$$

つまり

$$\delta\boldsymbol{L} = -\delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{L}$$

となる。

ベクトル演算子

一般に回転 R に対して $\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$ という 3 成分の物理量 (演算子) は

$$\begin{aligned}\boldsymbol{V}' &= U\boldsymbol{V}U^{-1}\\ U &= e^{-i\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar}\end{aligned}$$

[4]

$$\begin{aligned}[L_i, L_j] &= [\epsilon_{iab}r_a p_b, \epsilon_{jcd}r_c p_d] = \epsilon_{iab}\epsilon_{jcd}[r_a p_b, r_c p_d] = \epsilon_{iab}\epsilon_{jcd}\big\{r_a[p_b, r_c p_d] + [r_a, r_c p_d]p_b\big\}\\ &= i\hbar\epsilon_{iab}\epsilon_{jcd}\big\{-r_a\delta_{bc}p_d + r_c\delta_{ad}p_b\big\} = -i\hbar\epsilon_{iab}\epsilon_{jbd}r_a p_d + i\hbar\epsilon_{iab}\epsilon_{jca}r_c p_b\\ &= i\hbar\epsilon_{iab}\epsilon_{jdb}r_a p_d - i\hbar\epsilon_{iba}\epsilon_{jca}r_c p_b = i\hbar(\delta_{ij}\delta_{ad} - \delta_{id}\delta_{aj})r_a p_d - i\hbar(\delta_{ij}\delta_{bc} - \delta_{ic}\delta_{jb})r_c p_b\\ &= i\hbar(\delta_{ij}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} - r_j p_i) - i\hbar(\delta_{ij}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} - r_i p_j) = i\hbar(r_i p_j - r_j p_i)\end{aligned}$$

と変換する。ここで

$$\boldsymbol{V}' \;=\; \tilde{R}\boldsymbol{V}, \quad R \in SO(3)$$

と変換するとき、$\boldsymbol{V}$ を ベクトル演算子 と呼ぶ。特に 無限小回転 に対しては

$$\begin{aligned}(\delta R)_{ij} &= -\epsilon_{ijk}\delta\omega_k \\ U &= 1 - i\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar\end{aligned}$$

であり、一般論から

$$\delta\boldsymbol{V}_i \;=\; -i[\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}, \boldsymbol{V}_i]/\hbar$$

また、ベクトル演算子としての変換則から

$$\delta\boldsymbol{V}_i \;=\; (\widetilde{\delta R_{ij}}\boldsymbol{V})_j = -\epsilon_{jik}\delta\omega_k\boldsymbol{V}_j = -\big(\delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{V}\big)_i$$

よって

$$\delta\boldsymbol{V} \;=\; [\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}, \boldsymbol{V}]/\hbar = -\big(\delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{V}\big)_i$$

回転の下で今まで示したように

$$\begin{aligned}\delta\boldsymbol{r} &= -\delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r} \\ \delta\boldsymbol{p} &= -\delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r} \\ \delta\boldsymbol{L} &= -\delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{L}\end{aligned}$$

であり、$\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{L}$ は全て，ベクトル演算子として変換する。
　また上記の関係式は以下の様に書けることに注意しよう。

$$-i\delta\omega_j[L_j, V_i]/\hbar \;=\; -\epsilon_{ijk}\delta\omega_j V_k$$

$\delta\omega_j$ は任意だからその係数を比べて

$$[L_j, V_i] \;=\; -i\hbar\epsilon_{ijk}V_k$$

ベクトル演算子と角運動量との交換子

$$[L_i, V_j] \;=\; i\hbar\epsilon_{ijk}V_k$$

なお、ベクトル量 V_1, V_2 の内積

$$\boldsymbol{V}_1 \cdot \boldsymbol{V}_2$$

などは

$$\begin{aligned}
\delta(\boldsymbol{V}_1 \cdot \boldsymbol{V}_2) &= -i[\delta\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{L}/\hbar, \boldsymbol{V}_1 \cdot \boldsymbol{V}_2)] \\
&= -i\boldsymbol{V}_1 \cdot [\delta\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{L}/\hbar, \boldsymbol{V}_2] - i[\delta\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{L}/\hbar, \boldsymbol{V}_1] \cdot \boldsymbol{V}_2 \\
&= -\boldsymbol{V}_1 \cdot (\delta\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{V}_2) - (\delta\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{V}_1) \cdot \boldsymbol{V}_2 = 0
\end{aligned}$$

となり、変換で不変な <u>スカラー演算子</u> となる。

よって自由粒子系のハミルトニアン $H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$, 水素類似原子のハミルトニアン $H_{hyd} = H_0 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Z}{r}$, 3 次元調和振動子のハミルトニアン $H_{osc} = H_0 + \frac{1}{2}m\omega^2\boldsymbol{r}^2$ などは <u>回転対称性</u> を持ち、角運動量を保存する。

第2章　角運動量

2.1　角運動量の交換関係

前節の議論を少し一般に書いて，角運動量 $\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix}$ とは以下の交換関係を満たす演算としよう。

$$[J_i, J_j] \;=\; i\epsilon_{ijk}\hbar J_k$$

もちろん $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L}$ は角運動量である。これは次のようにも書ける。[1]

$$\boldsymbol{J} \times \boldsymbol{J} \;=\; i\hbar\boldsymbol{J}$$

この時、$\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ を任意の (c-数の) ベクトルとして

$$[(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{J}), (\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{J})] \;=\; a_i b_j [J_i, J_k] = i\hbar\epsilon_{ijk}a_i b_j J_k = i\hbar(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{J}$$

また $\boldsymbol{J}^2$ は全角運動量とよばれ [2]

$$[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{J}] \;=\; 0$$

と $\boldsymbol{J}$ の各成分と可換である。ただし、$\boldsymbol{J}$ の各成分ごとはお互いに可換ではないので、全てを同時対角化することはできない。そこで通常 J_z を特別視し (もちろん

[1]

$$\begin{aligned} \epsilon_{ija}[J_i, J_j] &= \epsilon_{ija}J_iJ_j - \epsilon_{ija}J_jJ_i = \epsilon_{ija}J_iJ_j - \epsilon_{jia}J_iJ_j = 2\epsilon_{ija}J_iJ_j = 2(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J})_a \\ i\epsilon_{ija}\epsilon_{ijk}J_k/\hbar &= 2i\delta_{ak}J_k = 2iJ_a/\hbar \end{aligned}$$

[2]

$$[\boldsymbol{J}^2, J_i] \;=\; [J_jJ_j, J_i] = J_j[J_j, J_i] + [J_j, J_i]J_j = i\epsilon_{ijk}(J_jJ_k - J_kJ_j) = 0$$

J_x, J_y でも同様である) $\boldsymbol{J}^2$ と J_z を同時対角化することを念頭に 昇降演算子 と呼ばれる次の演算子を定義する

$$J_\pm = J_x \pm i J_y$$

を定義する。逆に解けば

$$\begin{aligned} J_x &= \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \\ J_y &= \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) \end{aligned}$$

である。

なおこれらは次の関係式を満たす。[3]

$$\begin{aligned} [\boldsymbol{J}^2, J_\pm] &= 0 \\ [J_z, J_\pm] &= \pm\hbar(J_x \pm iJ_y) = \pm\hbar J_\pm \\ [J_+, J_-] &= 2\hbar J_z \end{aligned}$$

この昇降演算子を用いて一般の角運動量演算子の内積はつぎのようになる [4]

$$\boldsymbol{J}^1 \cdot \boldsymbol{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+^1 J_-^2 + J_-^1 J_+^2) + J_z^1 J_z^2$$

特に $\boldsymbol{J}^1 = \boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{J}$ として

$$\boldsymbol{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2$$

これと

$$J_z = \frac{1}{2}(J_+ J_- - J_- J_+)$$

---

[3]

$$\begin{aligned} [J_z, J_\pm] &= [J_z, J_x \pm iJ_y] = i\hbar(J_y \mp iJ_x) = \hbar J_\pm = \pm\hbar(J_x \pm iJ_y) = \pm\hbar J_\pm \\ [J_+, J_-] &= [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] = -i[J_x, J_y] + i[J_y, J_x] = 2J_z \end{aligned}$$

[4]

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}^1 \cdot \boldsymbol{J}^2 &= J_x^1 J_x^2 + J_x^1 J_x^2 + J_z^1 J_z^2 \\ &= \frac{1}{4}(J_+^1 + J_-^1)(J_+^2 + J_-^2) - \frac{1}{4}(J_+^1 - J_-^1)(J_+^2 - J_-^2) + J_z^1 J_z^2 \\ &= \frac{1}{2}(J_+^1 J_-^2 + J_-^1 J_+^2) + J_z^1 J_z^2 \end{aligned}$$

を併記すれば

$$
\begin{aligned}
J_+J_- &= \boldsymbol{J}^2 - J_z(J_z - \hbar) \\
J_-J_+ &= \boldsymbol{J}^2 - J_z(J_z + \hbar)
\end{aligned}
$$

となる。

2.2　角運動量の量子化

$$[\boldsymbol{J}^2, J_z] \;=\; 0$$

に注意して，その規格直交化された完全な同時固有状態を $|jm\rangle$ と書こう。

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2|jm\rangle &= j(j+1)\hbar^2|jm\rangle \\ J_z|jm\rangle &= m\hbar|jm\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle jm|j'm'\rangle &= \delta_{jj'}\delta_{mm'} \\ \sum_{jm}|jm\rangle\langle jm| &= 1\end{aligned}$$

ただし、$\boldsymbol{J}^2$ はエルミート演算子の 2 乗の和であるから $j(j+1)$ は 0 以上の実数である。

　まず $[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm$ を $\langle jm|$, $|jm'\rangle$ で挟めば

$$(m-m')\hbar\langle jm|J_\pm|jm'\rangle \;=\; \pm\langle jm|J_\pm|jm'\rangle$$

よって $\langle jm|J_\pm|jm'\rangle$ は

$$\langle jm|J_\pm|jm'\rangle \;=\; 0, \quad m \neq m' \pm 1$$

　続いて

$$\begin{aligned}J_zJ_+|jm\rangle &= [J_z, J_+]|jm\rangle + J_+J_z|jm\rangle \\ &= \hbar(m+1)J_+|jm\rangle\end{aligned}$$

つまり J_+ は m が一つ増えた状態をつくる上昇演算子となる。

$$J_+|jm\rangle \;\propto\; |jm+1\rangle$$

同様に J_- は次のような下降演算子である。

$$J_-|jm\rangle \;\propto\; |jm-1\rangle$$

よってある $|jm\rangle$ から $J_\pm$ を作用させることで任意の m の状態が構成できることとなる。

そこで $|jm+1\rangle = CJ_+|jm\rangle$ として規格化定数 C を決めよう。ここで $J_-J_+ = \boldsymbol{J}^2 - J_z(J_z+\hbar)$ に注意して

$$
\begin{aligned}
\langle jm+1|jm+1\rangle &= |C|^2 \langle jm|J_-J_+|jm\rangle \\
&= \hbar^2\big[j(j+1)-m(m+1)\big] = \hbar^2(j-m)(j+m+1)
\end{aligned}
$$

よって C を正に選べば (もちろんここに位相の自由度がある)

$$
|jm+1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}}J_+|jm\rangle
$$

よって

$$
\langle jm+1|J_+|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}
$$

同様に $|jm-1\rangle = CJ_-|jm\rangle$ として規格化定数 C を決めよう。ここで $J_+J_- = \boldsymbol{J}^2 - J_z(J_z-\hbar)$ に注意して

$$
\begin{aligned}
\langle jm-1|jm-1\rangle &= |C|^2 \langle jm|J_+J_-|jm\rangle \\
&= \hbar^2\big[j(j+1)-m(m-1)\big] = \hbar^2(j+m)(j-m+1)
\end{aligned}
$$

よって C を正に選べば

$$
|jm-1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}}J_-|jm\rangle
$$

よって

$$
\langle jm-1|J_-|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}
$$

この符号の決め方は全てが正であることからわかるように整合的である。これを次のように確認しておこう。

$$
\begin{aligned}
|jm+1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{(j+m+1)(j-m)}}J_+|jm\rangle \\
\text{よって}\quad |jm\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{(j+m+1)(j-m)}}J_-|jm+1\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar^2(j+m+1)(j-m)}J_-J_+|jm\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar^2(j+m+1)(j-m)}(\boldsymbol{J}^2 - J_z(J_z+\hbar))|jm\rangle \\
&= \frac{1}{(j+m+1)(j-m)}(j(j+1)-m(m+1)))|jm\rangle \\
&= \frac{(j-m)(j+m+1)}{(j+m+1)(j-m)}|jm\rangle = |jm\rangle
\end{aligned}
$$

一方で $J_x^2+J_y^2=\boldsymbol{J}^2-J_z^2=\frac{1}{2}(J_+J_-+J_-J_+)$ より

$$\langle jm|(\boldsymbol{J}^2-J_z^2)|jm\rangle = \hbar^2[j(j+1)-m^2]=\frac{1}{2}(\|J_-|jm\rangle\|^2+\|J_+|jm\rangle\|^2)\geq 0$$

これから

$$-\sqrt{j(j+1)}\leq m\leq\sqrt{j(j+1)}$$

つまり m には最大と最小値がある。よって $J_\pm$ を作用させることにより m の異なる状態を構成していく手続きは何処かで終了する必要がある。よってその最大値と最小値を $m_1,-m_2$ とすれば

$$\begin{aligned} J_+|jm_1\rangle &= 0\\ J_-|j-m_2\rangle &= 0\end{aligned}$$

となることを要求しよう。

$J_-J_+=\boldsymbol{J}^2-J_z(J_z+1)$ より

$$\begin{aligned}\||J_+|jm_1\rangle\|^2/\hbar^2 &= j(j+1)-m_1(m_1+1)\\ &= (j+m_1)(j-m_1)+j-m_1=(j-m_1)(j+m_1+1)=0\end{aligned}$$

これから $m_1=j$ つまり

$$J_+|jj\rangle = 0$$

また、$J_+J_-=\boldsymbol{J}^2-J_z(J_z-1)$ より

$$\begin{aligned}\||J_-|j-m_2\rangle\|^2/\hbar^2 &= j(j+1)+m_2(-m_2+1)\\ &= (j+m_2)(j-m_2)+j+m_2=(j+m_2)(j-m_2+1)=0\end{aligned}$$

これから $m_2=j$ つまり

$$J_-|j-j\rangle = 0$$

となる。

よって $\||jj\rangle\|\neq 0$ である状態からはじめて

$$(J_-)^k|jj\rangle \propto |jj-k\rangle$$

を順に作ったとしよう。これが無限に続かないためにはある 0 以上の整数 k に対して $j-k=-j$ とならなければならない。つまり、$j=\frac{k}{2}=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},\cdots$ が必要である。つまり角運動量は任意の値をとらず、量子化値のみをとる。まとめて

角運動量の量子化

角運動量は半整数に量子化される

$$j = \frac{k}{2} = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$$

$$\langle jm-1|J_-|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

よって

$$\langle jm+1|J_+|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j+m+1)(j-m)}$$

　これで j ごとの $2j+1$ 次元行列としての J_x, J_y, J_z の全ての行列要素が決定される。

　ここで

$$\begin{aligned} |jm+1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{(j+m+1)(j-m)}}J_+|jm\rangle \\ &= \hbar^{-1}\left[\frac{(j+m+1)!}{(j+m)!}\frac{(j-m)!}{(j-(m+1))!}\right]^{-1/2}J_+|jm\rangle \end{aligned}$$

をつづけて

$$\begin{aligned} |jm+2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(j+m+1)(j+m+2)(j-m)(j-m-1)}}(J_+)^2|jm\rangle \\ &= \hbar^{-2}\left[\frac{(j+m+2)!}{(j+m)!}\frac{(j-m)!}{(j-(m+2)!}\right]^{-1/2}(J_+)^2|jm\rangle \end{aligned}$$

一般に

$$\begin{aligned} |jm+k\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(j+m+1)\cdots(j+m+k)\cdot(j-m)\cdots(j-m-k+1)}}(J_+)^k|jm\rangle \\ &= \hbar^{-k}\left[\frac{(j+m)!}{(j+m+k)!}\frac{(j-(m+k)!}{(j-m)!}\right]^{1/2}(J_+)^k|jm\rangle \end{aligned}$$

または、

$$|jm\rangle = \hbar^{-k}\left[\frac{(j+m-k)!}{(j+m)!}\frac{(j-m)!}{(j-m+k)!}\right]^{1/2}(J_+)^k|jm-k\rangle$$

これを

$$\langle jm|(J_+)^{m-m'}|jm'\rangle \;=\; \hbar^{m-m'}\left[\frac{(j+m)!}{(j+m')!}\frac{(j-m')!}{(j-m)!}\right]^{1/2}, \quad (m>m')$$

と書こう。 [Schwinger(1.24)]

また、

$$\begin{aligned}
|jm-1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}}J_-|jm\rangle \\
|jm-2\rangle &= \frac{1}{\hbar^2\sqrt{(j+m)(j+m-1)(j-m+1)(j-m+2))}}J_-^2|jm\rangle \\
|jm-k\rangle &= \frac{1}{\hbar^k\sqrt{(j+m)\cdots(j+m-k+1)\cdot(j-m+1)\cdots(j-m+k)}}(J_-)^k|jm\rangle \\
&= \hbar^{-k}\left[\frac{(j+m-k)!}{(j+m)!}\frac{(j-m)!}{(j-(m-k)!}\right]^{1/2}(J_-)^k|jm\rangle
\end{aligned}$$

または、

$$|jm\rangle \;=\; \hbar^{-k}\left[\frac{(j+m)!}{(j+m+k)!}\frac{(j-m-k)!}{(j-m)!}\right]^{1/2}(J_-)^k|jm+k\rangle$$

よって

$$\langle jm|(J_-)^{m'-m}|jm'\rangle \;=\; \hbar^{m'-m}\left[\frac{(j+m')!}{(j+m)!}\frac{(j-m)!}{(j-m')!}\right]^{1/2}, \quad m<m'$$

となる。[Schwinger(1.26)]

2.3　軌道角運動量と球面調和関数

この節では軌道角運動量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ について詳しく議論しよう。

2.3.1　極座標での角運動量演算子

3 次元極座標を $\boldsymbol{r}=\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} r\cos\phi\sin\theta \\ r\sin\phi\sin\theta \\ r\cos\theta \end{pmatrix}$, $(\Omega=|\theta,\phi\rangle)$ として $Y_{\ell m}(\Omega)=\langle\Omega|\ell m\rangle$ を全角運動量とその z 方向の成分の同時固有状態としてもとめよう。

(1) まず極座標に関して整理しよう。

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{e}_r,\boldsymbol{e}_\theta,\boldsymbol{e}_\phi) &\equiv (\frac{\partial_r\boldsymbol{r}}{h_r},\frac{\partial_\theta\boldsymbol{r}}{h_\theta},\frac{\partial_\phi\boldsymbol{r}}{h_\phi})=\begin{pmatrix} \cos\phi\sin\theta & \cos\phi\cos\theta & -\sin\phi \\ \sin\phi\sin\theta & \sin\phi\cos\theta & \cos\phi \\ \cos\theta & -\sin\theta & 0 \end{pmatrix}\equiv T \\
h_r &= |\partial_r\boldsymbol{r}|=1,\ h_\theta=|\partial_\theta\boldsymbol{r}|=r,\ h_\phi=|\partial_\phi\boldsymbol{r}|=r\sin\theta
\end{aligned}
$$

ここで $\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{e}_j=\delta_{ij}$ よって $\tilde{T}T=E_3$, $\tilde{T}=T^{-1}$。更に $\boldsymbol{e}_i\times\boldsymbol{e}_j=\epsilon_{ijk}\boldsymbol{e}_k$。
一方

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\phi \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \theta} \\ \frac{\partial x}{\partial \phi} & \frac{\partial y}{\partial \phi} & \frac{\partial z}{\partial \phi} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} h_r\widetilde{\boldsymbol{e}}_r \\ h_\theta\widetilde{\boldsymbol{e}}_\theta \\ h_\phi\widetilde{\boldsymbol{e}}_\phi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \\
&= \mathrm{diag}\,(h_r,h_\theta,h_\phi)\begin{pmatrix} \widetilde{\boldsymbol{e}}_r \\ \widetilde{\boldsymbol{e}}_\theta \\ \widetilde{\boldsymbol{e}}_\phi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}=\mathrm{diag}\,(h_r,h_\theta,h_\phi)\widetilde{T}\begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

逆に解いて

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\nabla} &= \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}=T\begin{pmatrix} \partial_r \\ \frac{1}{r}\partial_\theta \\ \frac{1}{r\sin\theta}\partial_\phi \end{pmatrix}=\boldsymbol{e}_r\partial_r+\boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\partial_\theta+\boldsymbol{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\partial_\phi \\
\boldsymbol{r} &= r\boldsymbol{e}_r
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{L} &= \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}=-i\hbar\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla}=-i\hbar(\boldsymbol{e}_\phi\partial_\theta-\boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\partial_\phi) \\
&= \hbar\begin{pmatrix} i\sin\phi \\ -i\cos\phi \\ 0 \end{pmatrix}\partial_\theta+\hbar\begin{pmatrix} i\cos\phi\cot\theta \\ i\sin\phi\cot\theta \\ -i \end{pmatrix}\partial_\phi
\end{aligned}
$$

これから角運動量演算子を極座標で書こう。

$$\begin{aligned} L_+ &= \hbar(i\sin\phi+\cos\phi)\partial_\theta+(i\cos\phi-\sin\phi)\cot\theta\partial_\phi \\ &= \hbar e^{i\phi}(\partial_\theta+i\cot\theta\partial_\phi) \\ L_- &= \hbar(i\sin\phi-\cos\phi)\partial_\theta+(i\cos\phi+\sin\phi)\cot\theta\partial_\phi \\ &= \hbar e^{-i\phi}(-\partial_\theta+i\cot\theta\partial_\phi) \\ L_z &= -i\hbar\partial_\phi \end{aligned}$$

なお $(\partial^\dagger=-\partial)$ に注意。

(2) 極座標での変数分離と角運動量演算子の作用をまとめよう。

以下一般論に従い次の関係を満たす関数を求める

$$\begin{aligned} \boldsymbol{L}^2 Y_{\ell m} &= \hbar^2 j(j+1)Y_{\ell m} \\ L_z Y_{\ell m} &= \hbar m Y_{\ell m} \\ L_+ Y_{\ell\ell} &= L_- Y_{\ell\ell}=0 \end{aligned}$$

$Y_{\ell m}(\Omega)=\Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi)$ と変数分離形におくと $L_zY_{\ell m}=\hbar m Y_{\ell m}$ より

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

ただし $\displaystyle\int_0^{2\pi} d\phi|\Phi_m(\phi)|^2=1$ と規格化した。

またこの関数の一価性より $e^{i2\pi m}=1$ つまり m は整数である。よって j も 0 以上の整数となる。

ここで θ の関数 $f(\theta)$ に対して

$$\begin{aligned} L_+[e^{im\phi}f(\theta)] &= e^{im\phi}\hbar e^{i\phi}[\frac{df}{d\theta}-mf\cot\theta] \\ L_-[e^{im\phi}f(\theta)] &= -e^{im\phi}\hbar e^{-i\phi}[\frac{df}{d\theta}+mf\cot\theta] \end{aligned}$$

これは以下の様に書き直される。[5]

$$\begin{aligned} L_+[e^{im\phi}f(\theta)] &= -\hbar e^{i(m+1)\phi}\sin^{m+1}\theta\frac{d}{d\cos\theta}[\sin^{-m}\theta f(\theta)] \\ L_-[e^{im\phi}f(\theta)] &= \hbar e^{i(m-1)\phi}\sin^{-(m-1)}\theta\frac{d}{d\cos\theta}[\sin^{m}\theta f(\theta)] \end{aligned}$$

[5]

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\theta} &= \frac{d\cos\theta}{d\theta}\frac{d}{d\cos\theta}=-\sin\theta\frac{d}{d\cos\theta} \\ \frac{d\sin\theta}{d\cos\theta} &= \frac{d(1-\cos^2\theta)^{1/2}}{d\cos\theta}=\frac{1}{2}(1-\cos^2\theta)^{-1/2}(-2\cos\theta)=-\cot\theta \end{aligned}$$

これを k 回繰り返せば

$$
\begin{aligned}
L_+^k[e^{im\phi}f(\theta)] &= (-\hbar)^k e^{i(m+k)\phi}\sin^{m+k}\theta\left[\frac{d}{d(\cos\theta)}\right]^k[\sin^{-m}\theta f(\theta)] \\
L_-^k[e^{im\phi}f(\theta)] &= \hbar^k e^{i(m-k)\phi}\sin^{-(m-k)}\theta\left[\frac{d}{d\cos\theta}\right]^k[\sin^{m}\theta f(\theta)]
\end{aligned}
$$

(3) まず、$Y_{\ell 0}$ を求めよう。

$L_+Y_{\ell\ell}=0$ から $\Theta_{\ell\ell}$ が満たす方程式を書けば

$$
\frac{\partial\Theta_{\ell\ell}}{\partial\theta}-\ell\cot\theta\Theta_{\ell\ell} = 0
$$

この解は $\Theta_{\ell\ell}=C_\ell\sin^\ell\theta$ とかける。

ここで、 規格化条件 $\displaystyle\int_0^\pi d\theta\,\sin\theta|\Theta_{\ell\ell}(\theta)|^2=1$ より定数 C_ℓ を求めれば以下の

よって

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{d\cos\theta}[\sin^{-m}\theta f(\theta)] &= -m\sin^{-m-1}\theta(-\cot\theta)f(\theta)+\sin^{-m}\theta\frac{1}{-\sin\theta}\partial_\theta f(\theta) \\
&= -\sin^{-m-1}\theta[\frac{d}{d\theta}-m\cot\theta]f \\
\frac{d}{d\cos\theta}[\sin^{m}\theta f(\theta)] &= m\sin^{m-1}\theta(-\cot\theta)f(\theta)+\sin^{m}\theta\frac{1}{-\sin\theta}\partial_\theta f(\theta) \\
&= -\sin^{m-1}\theta[\frac{d}{d\theta}+m\cot\theta]f
\end{aligned}
$$

様になる。ただし $C_\ell=(-)^\ell C'_\ell$, $C'_\ell>0$ と符号を選んだ。[6]

$$Y_{\ell\ell}(\Omega) = (-)^\ell\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2}}\frac{1}{2^\ell \ell!}e^{i\ell\phi}\sin^\ell\theta$$

ここで $|\ell 0\rangle=\hbar^{-\ell}\sqrt{\frac{\ell!}{(2\ell)!}\frac{1}{\ell!}}|\ell\ell\rangle$ より [7]

$$Y_{\ell 0}(\Omega) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}P_\ell(\cos\theta)$$

ここで

$$P_\ell(t) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dt^\ell}(t^2-1)^\ell$$

は ℓ 次の ルジャンドル多項式 である。この関係式はルジャンドル多項式の ロドリゲスの公式 とよばれる。

[6]

$$\begin{aligned}\int_0^\pi d\theta\sin\theta|\Phi|^2 &= C_\ell^2\int_0^\pi d\theta\sin^{2\ell+1}\theta = C_\ell^2\int_{-1}^1 d(-\cos\theta)(1-\cos^2\theta)^\ell\\ &= 2C_\ell^2\int_0^1 dt\,(1-t^2)^\ell,\quad t=s^{1/2},(dt=\frac{1}{2}s^{-1/2}ds)\\ &= C_\ell^2\int_0^1 ds\,s^{-1/2}(1-s)^\ell = C_\ell^2 B(1/2,\ell+1)\\ &= C_\ell^2\frac{\Gamma(1/2)\Gamma(\ell+1)}{\Gamma(\ell+3/2)} = C_\ell^2\frac{\Gamma(1/2)\ell!}{(\ell+1/2)\cdots(1/2)\Gamma(1/2)}\\ &= C_\ell^2\frac{2^{\ell+1}\ell!}{1\cdot 3\cdot\cdots\cdot(2\ell+1)} = C_\ell^2\frac{2^{\ell+1}\ell!(2^\ell\ell!)}{(2\ell+1)!}\end{aligned}$$

よって

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

[7]

$$\begin{aligned}Y_{\ell 0}(\Omega) &= (-)^\ell\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2(2\ell)!}}\frac{1}{2^\ell\ell!}e^{i\ell\phi}\frac{d}{d\cos\theta}\sin^{2\ell}\theta\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{2\ell+1}{2}}\frac{1}{2^\ell\ell!}\frac{d}{d\cos\theta}(\cos^{2\ell}\theta-1)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{2\ell+1}{2}}P_\ell(\cos\theta)\end{aligned}$$

(4) $m > 0$ に対して $Y_{\ell m}$ を求めれば、$|\ell m\rangle = \hbar^{-m}\sqrt{\frac{\ell!}{(\ell+m)!}\frac{(\ell-m)!}{\ell!}}|\ell 0\rangle$ より

$$Y_{\ell m}(\Omega) \;=\; (-)^m\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\sin^m\theta\left[\frac{d}{d\cos\theta}\right]^m P_\ell(\cos\theta)e^{im\phi}$$

(5) $m' = -m, m > 0$ に対して $Y_{\ell m'} = Y_{\ell -m}$ を求めれば、$|\ell{-m}\rangle = \hbar^{-m}\sqrt{\frac{(\ell-m)!}{\ell!}\frac{\ell!}{(\ell+m)!}}|\ell 0\rangle$ より

$$Y_{\ell m'}(\Omega) \;=\; Y_{\ell-m}(\Omega) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\sin^m\theta\left[\frac{d}{d\cos\theta}\right]^m P_\ell(\cos\theta)e^{-im\phi}$$

(6) $m > 0$ として $\Theta_{\ell m}$ と $\Theta_{\ell -m}$ の間には

$$\Theta_{\ell m} \;=\; (-)^m\Theta_{\ell -m}$$

の関係がある。これより

$$Y^*_{\ell m} \;=\; (-)^m Y_{\ell -m}$$

この $Y_{\ell m}(\Omega)$ を <u>球面調和関数</u> と呼ぶ。

2.4　スピン

2.4.1　ゼーマン効果

一様磁場 $\boldsymbol{B}$ の下の量子系のハミルトニアンは、ローレンツ力 を導く古典系のハミルトニアンを考えて

$$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + e\phi$$

としよう。ここでベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ は

$$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$$

である。

この条件を満たすベクトルポテンシャルとしていわゆる 対称ゲージ

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}$$

をとろう。なお $e\phi$ はスカラーポテンシャルで原子中の電子等の場合、原子核からの中心力などは ϕ により記述される。

ここで

$$\begin{aligned}(\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A})_i &= \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\partial_j\epsilon_{kab}B_a r_b \\ &= \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\epsilon_{kaj}B_a = \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\epsilon_{ajk}B_a = \delta_{ia}B_a = B_i\end{aligned}$$

より

$$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$$

である。よって

$$\begin{aligned}H &= H_0 + H_P + H_D \\ H_0 &= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \\ H_P &= -\frac{e}{2m}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}) \\ H_D &= \frac{e^2}{m}\boldsymbol{A}^2\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
H_D &= \frac{e^2}{4m}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}) \\
&= \frac{e^2}{4m}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}) \\
&= \frac{e^2}{4m}\Big[(\boldsymbol{B}^2\boldsymbol{r}^2)-(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{r})^2\Big] = \frac{e^2}{4m}\boldsymbol{B}^2\boldsymbol{r}_\perp^2 \\
\boldsymbol{r}_\perp &= \boldsymbol{r}\sin\theta
\end{aligned}$$

ここで θ は $\boldsymbol{B}$ と $\boldsymbol{r}$ のなす角である。

この項は第 2 項 H_P に対して普通の原子では中小さいと見積もられるので、第 2 項のみをここでは考えよう。

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A} = -i\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$$

より

$$H_P = -\frac{e}{m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} = -\frac{e}{2m}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{p} = -\frac{e}{2m}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}) = -\frac{e}{2m}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}$$

原子内の電子が受ける原子核からのポテンシャルは中心力であり、回転不変であるから一般に角運動量は保存し、エネルギー準位ごとに定まる $\boldsymbol{L}^2=\hbar^2\ell(\ell+1)$ に対応して、エネルギー準位は $2\ell=1$ 重に縮退する。更に磁場下の原子では磁場によりこの H_P を考える必要があり，$\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}$ はスカラーであるから任意の方向に座標をとってもよく、$\boldsymbol{B}$ 方向に z 軸をとれば、その固有状態は L_z の固有値ごとに $2\ell+1$ 個に分裂するはずである。これを ゼーマン効果 とよぶ。

しかしながら，この H_P の項のみでは実際の原子の磁場下のスペクトルの実験を説明できず

$$\begin{aligned}
H_P' &= -\frac{e}{2m}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{L}+g\boldsymbol{S}), \quad g\approx 2 \\
&= H_P + H_S \\
H_S &= -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} \\
\boldsymbol{\mu} &= g\frac{e}{2m}\boldsymbol{S} = g\mu_B\boldsymbol{S}/\hbar \\
\mu_B &= \frac{e\hbar}{2m}
\end{aligned}$$

の余分な角運動量 $\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{S}^2=\hbar^2(1/2+1)/2, S=1/2$ を導入することが必要であった。この仮想的な角運動量を スピン と呼んだ (パウリのスピン仮説)。この仮説は後にディラックにより 特殊相対論 と整合的な量子論の導入によって理論的に導かれた。なお、ここで現れた磁化の次元をもつ量 μ_B を ボーア磁子 とよぶ。

2.4.2　スピンとパウリ行列

角運動量の固有状態として j が整数のものは前節の球面調和関数として具体化されたが、$j=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\cdots$ (半奇整数という) の系列のものは現れなかった。これに対応する角運動量は、スピンとよばれる内部座標に対応すると考えられる。歴史的には原子のスペクトルの解釈のためにパウリにより最初に現象論的に導入され、後にディラックにより、相対論 (特殊相対論) と整合的な波動方程式 (ディラック方程式) を導入することで理論としても満足な形でその存在が理解された。ここでは角運動量の量子化則を満たす角運動量として議論しよう。

特にここでは $j=S=1/2$ である最も単純でかつ最も重要なスピン $S=1/2$ とよばれる角運動量に限り具体的に議論する。ここでは $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{S}$ と書こう、まず固有方程式は

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{S}^2|Sm\rangle &= S(S+1)|Sm\rangle, \quad S=1/2\\
S_z|S+\frac{1}{2}\rangle &= +\hbar\frac{1}{2}|S+\frac{1}{2}\rangle\\
S_z|S-\frac{1}{2}\rangle &= -\hbar\frac{1}{2}|S-\frac{1}{2}\rangle
\end{aligned}
$$

上昇、下降演算子の行列要素は

$$
\begin{aligned}
\langle S+\frac{1}{2}|S_-|S-\frac{1}{2}\rangle &= \hbar\sqrt{(\frac{1}{2}+\frac{1}{2})(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1)}=\hbar\\
\langle S+\frac{1}{2}|S_+|S-\frac{1}{2}\rangle &= \hbar\sqrt{(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1)(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+1)}=\hbar
\end{aligned}
$$

ここで

$$
\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}
$$

とすれば

$$
\begin{aligned}
\langle +|\sigma_z|+\rangle &= 1\\
\langle -|\sigma_z|-\rangle &= -1
\end{aligned}
$$

ここで $|S\pm S\rangle=|\pm\rangle$ と書いた。σ_z はこの基底 (固有状態) で対角的だから

$$
\psi = (|+\rangle,|-\rangle)
$$

として

$$
\psi^\dagger\sigma_z\psi = \begin{pmatrix} \langle +|\sigma_z|+\rangle & \langle +|\sigma_z|-\rangle \\ \langle -|\sigma_z|+\rangle & \langle -|\sigma_z|-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
$$

また

$$
\begin{aligned}
\langle +|\sigma_+|-\rangle &= 2 \\
\langle -|\sigma_-|+\rangle &= 2
\end{aligned}
$$

もちろん

$$
\begin{aligned}
\langle +|\sigma_+|+\rangle &= \langle -|\sigma_+|-\rangle = 0 \\
\langle +|\sigma_-|+\rangle &= \langle -|\sigma_-|-\rangle = 0
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
\psi^\dagger\sigma_+\psi &= \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\
\psi^\dagger\sigma_-\psi &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
\psi^\dagger\sigma_x\psi &= \frac{1}{2}(\psi^\dagger\sigma_-\psi + \psi^\dagger\sigma_-\psi) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
\psi^\dagger\sigma_y\psi &= \frac{1}{2i}(\psi^\dagger\sigma_-\psi - \psi^\dagger\sigma_-\psi) = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

この標準的な基底での行列表示を用いて次のようにいわゆる <u>パウリ行列</u> を定義する

$$
\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
$$

これらは次の関係を満たす。

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\sigma_i &= 0 \\
\sigma_i\sigma_j &= \begin{cases} \sigma_0 & i = j \\ i\epsilon_{ijk}\sigma_k & i \neq j \end{cases}
\end{aligned}
$$

ここで

$$
\sigma_0 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}
$$

少し具体的に書けば

$$\begin{aligned}\sigma_i^2 &= \sigma_0\\ \{\sigma_i,\sigma_j\} &= \sigma_i\sigma_j+\sigma_j\sigma_i=0,\quad i\neq j\end{aligned}$$

これをまとめて

$$\{\sigma_i,\sigma_j\} = 2\delta_{ij}\sigma_0$$

また一般に 2×2 行列 A は次のように展開できる

$$A = \sum_{i=0}^{3} A_i\sigma_i,\quad A_i=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}A\sigma_i$$

2 つの 3 次元ベクトル $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ に対して [8]

$$(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = (\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v})\sigma_0+i(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{v})\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

となる。

これを用いると一様磁場下のスピンのハミルトニアンを

$$H = -\mu\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{S},\quad \mu=g\mu_B/\hbar$$

としたとき

$$\mathrm{Tr}H = -\mu\boldsymbol{B}\cdot\mathrm{Tr}\boldsymbol{S}=0$$

であるからそのエネルギーを E_1,E_2 としたとき、$E_1+E_2=0$ であり、$E_1=-E_2=E$ とすれば

$$H^2 = E^2=\mu^2\boldsymbol{B}^2/4$$

よって固有値は $E_\pm=\pm\mu|\boldsymbol{B}|/2$ となる。

[8]

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\sigma}) &= u_i\sigma_iv_j\sigma_j=(\sum_{i=j}+\sum_{i\neq j})u_iv_j\sigma_i\sigma_j\\ &= \sum_i u_iv_i\sigma_i^2+\epsilon_{ijk}u_iv_j\sigma_i\sigma_j=(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v})\sigma_0+i\sum_{ijk}u_iv_j\epsilon_{ijk}\sigma_k\end{aligned}$$

2.4.3　スピン軌道関数

この内部自由度を考えると原子内の電子の波動関数は次のようにスピノルとよばれる 2 成分の量となる。

$$|\psi(\boldsymbol{r})\rangle = \begin{pmatrix} \psi(\boldsymbol{r},+) \\ \psi(\boldsymbol{r},-) \end{pmatrix}$$

ここで $\tau=(\boldsymbol{r},\sigma)$, $\sigma=\pm$ とまとめて書いて

$$\psi(\tau) = \psi(\boldsymbol{r},\sigma)$$

を スピン軌道関数 と呼ぶこともある。

例えばゼーマン項がある場合、スピンに依存しない部分のハミルトニアンを $H_0(\boldsymbol{r})$ として、シュレディンガー方程式は以下の様に変更される。

$$\Big[H_0(\boldsymbol{r})-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}\Big]|\psi(\boldsymbol{r})\rangle = \Big[H_0(\boldsymbol{r})-(g\mu_B/\hbar)\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{S}\Big]|\psi(\boldsymbol{r})\rangle = E|\psi(\boldsymbol{r})\rangle$$

この場合波動関数を次のような変数分離形に仮定し

$$\begin{aligned}|\psi(\boldsymbol{r})\rangle &= \psi(\boldsymbol{r})|\chi\rangle \\ \psi(\boldsymbol{r},\sigma) &= \psi(\boldsymbol{r})\chi(\sigma)\end{aligned}$$

$|\chi\rangle$ を $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}$ の固有状態にとろう。ここで前節の計算から

$$\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}|\chi_\pm\rangle = \pm(g\mu_B/2\hbar)|\chi_\pm\rangle$$

よって空間部分を

$$H_0\psi(\boldsymbol{r}) = E_j\psi(\boldsymbol{r})$$

と H_0 の固有状態にとれば

$$\begin{aligned}\Big[H_0(\boldsymbol{r})-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}\Big]|\psi_{j\pm}(\tau) &= E_{j\pm}\psi(\tau) \\ E_{j\pm} &= E_j \pm g\mu_B/2\hbar\end{aligned}$$

となる。

2.4.4 時間反転対称性とクラマース縮退

前節の計算より明らかに磁場ゼロ $\boldsymbol{B} = 0$ の場合、全系のエネルギー固有値は全て 2 重に縮退する。実は、この性質はスピンに依存する相互作用があっても時間反転対称性と呼ばれる対称性があれば常に引き継がれる性質であり，この縮退をクラマース縮退とよぶ。この節ではこれに関して説明しよう。

時間反転対称性を定義する時間反転操作とは次のものを指す。

$$\Theta = i\sigma_2\mathcal{K} = J\mathcal{K}, \quad J = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

ここで $\mathcal{K}$ は複素共役演算子であり σ_2 はスピン空間に作用する。このようなユニタリ変換に追加して複素共役を考える変換を反ユニタリ(Anti-Unitary) 変換と呼ぶ。この作用を幾つかの例について確認して見よう。まずスピンを含まない場合

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{r} &\mapsto \boldsymbol{r}' = \Theta\boldsymbol{p}\Theta^{-1} = J(\boldsymbol{r})^* J^{-1} = \boldsymbol{r} \\
\boldsymbol{p} &\mapsto \boldsymbol{p}' = \Theta\boldsymbol{p}\Theta^{-1} = J(\boldsymbol{p})^* J^{-1} = (-i\hbar\boldsymbol{\nabla})^* = i\hbar\boldsymbol{\nabla} = -\boldsymbol{p} \\
\boldsymbol{L} &\mapsto \boldsymbol{L}' = \Theta\boldsymbol{L}\Theta^{-1} = (\Theta\boldsymbol{r}\Theta^{-1}) \times (\Theta\boldsymbol{p}\Theta^{-1}) = \boldsymbol{r} \times (-\boldsymbol{p}) = -\boldsymbol{L}
\end{aligned}$$

と変換する。運動量、(軌道) 角運動量は符号をかえることに注意しよう。次にスピンに関しては

$$\begin{aligned}
S_1 &\mapsto S_1' = \frac{1}{2}(i\sigma_2)(\sigma_1)^*(-i\sigma_2) = \frac{1}{2}(\sigma_2)(\sigma_1)(\sigma_2) = \frac{1}{2}\sigma_2 i\sigma_3 = \frac{i^2}{2}\sigma_1 = -S_1 \\
S_2 &\mapsto S_2' = \frac{1}{2}(i\sigma_2)(\sigma_2)^*(-i\sigma_2) = \frac{1}{2}(\sigma_2)(-\sigma_2)(\sigma_2) = -\frac{1}{2}\sigma_2^3 = -\frac{1}{2}\sigma_2 = -S_2 \\
S_3 &\mapsto S_3' = \frac{1}{2}(i\sigma_2)(\sigma_3)^*(-i\sigma_2) = \frac{1}{2}(\sigma_2)(\sigma_3)(\sigma_2) = \frac{1}{2}i\sigma_1\sigma_2 = \frac{i^2}{2}\sigma_3 = -S_3
\end{aligned}$$

以上合わせて

$$\boldsymbol{S} \mapsto \boldsymbol{S}' = \Theta\boldsymbol{S}\Theta^{-1} = -\boldsymbol{S}$$

となり、やはり符号を変える。つまり角運動量は常に符号を変えることとなる。

よって，磁場中の系では　$\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{S}$ 及び $\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}$ 等の項があるからハミルトニアンは時間反転に対して不変ではないこととなる。対して以下の節で議論するが次式で表されるスピン軌道相互作用は時間反転に対して不変となり、この項があっても全系の時間反転対称性は保たれる。

$$\begin{aligned}
H_{SO} &= f(\boldsymbol{r})\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L} \quad f: \text{実} \\
H_{SO} &\mapsto \Theta H_{SO}\Theta^{-1} = f^*(\boldsymbol{r})(-\boldsymbol{S})\cdot(-\boldsymbol{L}) = H_{SO}
\end{aligned}$$

　このスピン軌道相互作用がある系など次の関係式を満たす系を時間反転不変な系と呼ぶ。

$$\Theta H \Theta^{-1} \;=\; J H^* J^{-1} = H$$

これはユニタリ不変な系にならって

$$[H, \Theta] \;=\; \Theta H - H\Theta = 0$$

とも書かれる。なお

$$\Theta^2 \;=\; \mathcal{K} J \mathcal{K} J = J^2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} 0^2 == -1$$

である。

　以下、スピンをもつ系がこの時間反転対称性を持つときを考えよう。このとき、スピン軌道関数 に対するシュレディンガー方程式を

$$H(\boldsymbol{r})|\psi(\boldsymbol{r})\rangle \;=\; E|\psi(\boldsymbol{r})\rangle, \quad |\psi(\boldsymbol{r})\rangle = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$$

とあらわに書こう。ここで時間反転不変性から

$$\begin{aligned} \Theta H(\boldsymbol{r})|\psi(\boldsymbol{r})\rangle &= H(\boldsymbol{r})\Theta|\psi(\boldsymbol{r})\rangle \\ &= E\Theta|\psi(\boldsymbol{r})\rangle \end{aligned}$$

よって

$$|\psi^\Theta\rangle \;=\; \Theta|\psi\rangle$$

として

$$H|\psi^\Theta\rangle \;=\; E|\psi^\Theta\rangle$$

と $|\psi\rangle$ と同じエネルギーを持つ。更に

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi^\Theta\rangle &= (\psi_+^*, \psi_-^*)(i\sigma_2)\mathcal{K} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} \\ &= (\psi_+^*, \psi_-^*) \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+^* \\ \psi_-^* \end{pmatrix} \\ &= (\psi_+^*, \psi_-^*) \begin{pmatrix} \psi_-^* \\ -\psi_+^* \end{pmatrix} = \psi_+^*\psi_-^* - \psi_-^*\psi_+^* = 0 \end{aligned}$$

つまり $|\psi\rangle$ と $|\psi^\Theta\rangle$ は直交しているので異なる状態である。これから時間反転不変な系は縮退することとなる。この縮退をクラマース縮退と呼ぶ。ここでは一粒子系の時間反転対称性を考えた。

多粒子系の例として N 個のスピン系の場合を考えよう。このとき、状態は次のように状態の (テンソル) 積として指定される。

$$|\sigma^1, \sigma^2, \cdots, \sigma^N\rangle \;=\; |\sigma^1\rangle|\sigma^2\rangle\cdots|\sigma^N\rangle, \quad \sigma^i = \pm$$

この系に対して時間反転は

$$\Theta \;=\; K(i\sigma_2^1)(i\sigma_2^2)\cdots(i\sigma_2^N)$$

と定義され

$$\Theta^2 \;=\; K^2(i\sigma_2^1)^2(i\sigma_2^2)^2\cdots(i\sigma_2^N)^2 = (-1)^N$$

となる。一般に反ユニタリ演算子 $A = UK$ とユニタリ演算子 U であらわされるから任意の状態 ψ, ϕ に対して

$$\begin{aligned}\langle\Theta\psi|\Theta\phi\rangle &= \langle KU\psi|KU\phi\rangle = [(U_{ai}\psi_i)^*]^*(U_{aj}\phi_j)^* = U_{ai}\psi_i U_{aj}^*\phi_j^* \\ &= (U_{ai}^* U_{aj})^*\psi_i\phi_j^* = (U^\dagger U)_{ij}^*\psi_i\phi_j^* = \delta_{ij}\psi_i\phi_j^* = \langle\phi|\psi\rangle\end{aligned}$$

よって N 粒子系の状態 $|\psi_N\rangle$ に関して $|\psi_N^\Theta$ との重なり積分は

$$\langle\psi_N|\psi_N^\Theta\rangle \;=\; \langle\psi_N|\Theta\psi_N\rangle = \langle\Theta^2\psi_N|\Theta\psi_N\rangle = (-)^N\langle\psi_N|\Theta\psi_N\rangle(-)^N\langle\psi_N|\psi_N^\Theta\rangle$$

よって粒子数 N が奇数の時は一粒子の場合と同様に $\langle\psi_N|\psi_N^\Theta\rangle = -\langle\psi_N|\psi_N^\Theta\rangle$ から

$$\langle\psi_N|\psi_N^\Theta\rangle \;=\; 0$$

と直交性が示せ、クラマース縮退が生じることになる。

2.4.5　2 つのスピンの作る一重項と三重項

ここでは特に 2 つのスピン $\boldsymbol{S}_1$, $\boldsymbol{S}_2$ を考えよう。ここで異なるスピンは無関係だからお互いに可換であるとしよう。

$$[S_{i\mu}, S_{j\nu}] \;=\; 0,\; i \neq j$$

よって

$$\boldsymbol{S} \;=\; \boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2$$

として

$$[S_\mu, S_\nu] \;=\; i\epsilon_{\mu\nu\lambda}\hbar S_\lambda$$

と $\boldsymbol{S}$ も角運動量となる。状態は $\boldsymbol{S}_1$, $\boldsymbol{S}_2$ の状態 $|m_1\rangle$,$(m_1=\pm)$ と $|m_2\rangle$,$(m_2=\pm)$

$$S_{1z}|m_1\rangle_1 = \hbar m_1 |m_1\rangle_1,\ m_1 = \pm 1/2$$
$$S_{2z}|m_2\rangle_2 = \hbar m_2 |m_2\rangle_2,\ m_2 = \pm 1/2$$

から

$$|m_1 m_2\rangle \;=\; |m_1\rangle_1 |m_2\rangle_2$$

と作られる全 4 状態であることに注意しよう。具体的には

$$m_i \;=\; \begin{cases} +\frac{1}{2} & \to \uparrow \\ -\frac{1}{2} & \to \downarrow \end{cases}$$

と書けば

$$|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$$

の 4 状態である。ここで全スピン $\boldsymbol{S}$ に関して一般の角運動量について議論したような次のような状態

$$S^2|SM\rangle \;=\; \hbar^2 S(S+1)|SM\rangle$$
$$S_z|SM\rangle \;=\; \hbar M|SM\rangle$$

を求めることを考えよう。

まず、$|\uparrow\uparrow\rangle$ を考えると $S_+ = S_{1+} + S_{2+}$ に対して

$$S_+|\uparrow\uparrow\rangle = (S_{1+}+S_{2+})|\uparrow\uparrow\rangle = \big(S_{1+}|\uparrow\rangle_1\big)|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1\big(S_{2+}|\uparrow\rangle_2\big) = 0$$

$S_z = S_{1z} + S_{2z}$ に対して

$$\begin{aligned} S_z|\uparrow\uparrow\rangle = (S_{1z}+S_{2z})|\uparrow\uparrow\rangle &= \big(S_{1z}|\uparrow\rangle_1\big)|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1\big(S_{2z}|\uparrow\rangle_2\big) \\ &= (\frac{\hbar}{2}+\frac{\hbar}{2})|\uparrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

よって一般論から $|\uparrow\uparrow\rangle$ は $S=\hbar s$, $M=\hbar m$ とかいて $s=1, m=1$ の状態となる。

$$|11\rangle \;=\; |\uparrow\uparrow\rangle$$

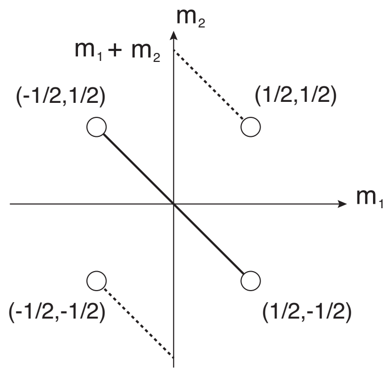

図 2.1: $S_1 = \hbar/2$, $S_2 = \hbar/2$ のスピンの合成

よって、これも一般論から

$$
\begin{aligned}
|10\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{(s+m)(s-m+1)}} S_-|11\rangle, \; s=1, m=1 \\
&= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} S_-|\uparrow\uparrow\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} (S_{1-} + S_{2-})|\uparrow\uparrow\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle) \\
|1-1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{(s+m)(s-m+1)}} S_-|10\rangle, \; s=1, m=0 \\
&= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} S_- \frac{1}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\
&= \frac{1}{\hbar\sqrt{2^2}} (S_{1-} + S_{2-}) \frac{1}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\
&= \frac{1}{2}(2|\downarrow\downarrow\rangle) \\
&= |\downarrow\downarrow\rangle
\end{aligned}
$$

まとめて

$$
\begin{aligned}
|11\rangle &= \psi_{m=1}(1) \\
|10\rangle &= \psi_{m=0}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\
|1-1\rangle &= \psi_{m=-1}(1) \\
\psi_1 &= (|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle) = (|\uparrow\uparrow\rangle) \\
\psi_0 &= (|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle,|-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle) = (|\uparrow\downarrow\rangle,|\downarrow\uparrow\rangle) \\
\psi_{-1} &= (|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle) = (|\downarrow\downarrow\rangle)
\end{aligned}
$$

$m=m_1+m_2=0$ の状態は 2 次元の ψ_0 で張られているから $|1,0\rangle$ 以外にもう一つ状態がつくれて、直交した状態をとれば

$$
|t\rangle = \psi_0\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)
$$

となるが、$m=1$ に他の状態は作れないはずだから $S_+|t\rangle = 0$ のはず、これを念のため確認すれば

$$
S_+|t\rangle = (S_{1+}+S_{2+})(|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle,|-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle) = 0
$$

よってこの状態は $s=0$, つまり

$$
|t\rangle = |00\rangle
$$

　一般に

$$
|sm\rangle = |m_1m_2\rangle\langle m_1m_2|sm\rangle \quad (m_1,m_2\text{で和をとる})
$$

と書けば

$$
\langle m_1m_2|sm\rangle = 0, \quad m_1+m_2\neq m
$$

$$
\begin{aligned}
|1,1\rangle &= |\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}|1,1\rangle \\
|1,0\rangle &= |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|1,0\rangle + |-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle\langle-\frac{1}{2},\frac{1}{2}|1,0\rangle \\
|0,0\rangle &= |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|0,0\rangle + |-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle\langle-\frac{1}{2},\frac{1}{2}|0,0\rangle \\
|1,-1\rangle &= |-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle\langle-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|-1,-1\rangle
\end{aligned}
$$

書き直して

$$
\begin{aligned}
|1,1\rangle &= \psi_1(\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}|1,1\rangle) \\
(|1,0\rangle,|0,0\rangle) &= \psi_0\begin{pmatrix} \langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|1,0\rangle & \langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|0,0\rangle \\ \langle-\frac{1}{2},\frac{1}{2}|1,0\rangle & \langle-\frac{1}{2},\frac{1}{2}|0,0\rangle \end{pmatrix} \\
|1,-1\rangle &= \psi_{-1}(\langle-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|-1,-1\rangle)
\end{aligned}
$$

更にまとめて

$$
\begin{aligned}
(|1,1\rangle,|1,0\rangle,|0,0\rangle,|1,-1\rangle) &= (\psi_1,\psi_0,\psi_{-1})\big[\langle m_1,m_2|sm\rangle\big] \\
&= (\psi_1,\psi_0,\psi_{-1})\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & & & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

　これらの係数 $\langle m_1m_2|sm\rangle$ を クレブシュ・ゴルダン係数 という。
　ここで

$$
\langle m_1,m_2|m_1',m_2'\rangle = \delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}
$$

だから
　ここで $|sm\rangle$ で $s=1,0$, $m=-s,\cdots,s$ も完全系を作るから

$$
|sm\rangle\langle sm| = 1
$$

よって

$$
|m_1m_2\rangle = |sm\rangle\langle sm|m_1m_2\rangle
$$

　また、$|m_1m_2\rangle$ がそれぞれスピン $\frac{1}{2}$ の状態から構成されていることを明示して次のように書くこともある。

$$
|\frac{1}{2}m_1\frac{1}{2}m_2\rangle = |m_1m_2\rangle = |m_1\rangle|m_2\rangle
$$

交換相互作用

　2 つのスピンとして以下の 交換相互作用 交換相互作用と呼ばれるハミルトニアンを考えて見よう。

$$
H = J\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2,\quad J>0
$$

ここで次の関係式に注意すれば

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)^2 &= \boldsymbol{S}_1^2+\boldsymbol{S}_2^2+2\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2 \\ &= \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)+\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)+2\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2\end{aligned}$$

$$H = J\left[\frac{1}{2}(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)^2-\frac{3}{4}\right]$$

よってこの系の基底状態は唯一であり、

$$|s=0 m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)$$

で与えられそのエネルギーは

$$E_0 = J\big(\frac{1}{2}0(0+1)-\frac{3}{4}\big) = -\frac{3}{4}J$$

励起状態は 3 重に縮退していて

$$|11\rangle,\quad |10\rangle,\quad |1-1\rangle$$

であり、そのエネルギーは

$$E_1 = J\big(\frac{1}{2}1(1+1)-\frac{3}{4}\big) = \frac{1}{4}J$$

となる。この前者を (スピン)<u>一重項</u>(<u>シングレット</u>)、後者を (スピン)<u>三重項</u>(<u>トリプレット</u>) と呼ぶ。

2.4.6　スピン軌道相互作用

次に軌道角運動量とスピンの合成を考えてみよう。つまり、

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$$

として

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2|jm\rangle &= \hbar^2 j(j+1) \\ J_z|jm\rangle &= \hbar m|jm\rangle\end{aligned}$$

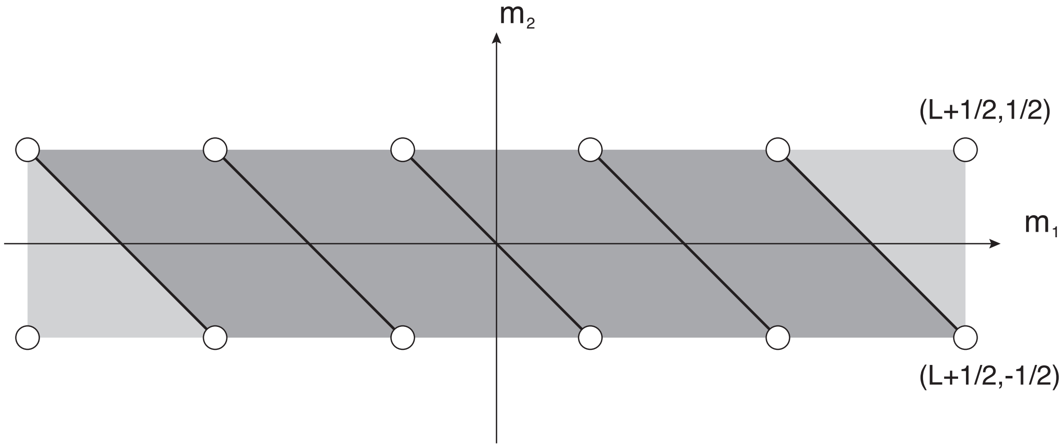

図 2.2: L と $S=\hbar/2$ の合成

となる $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の同時固有状態を

$$|m_1m_2\rangle \;=\; |\ell m_1,\frac{1}{2}m_2\rangle = |\ell m_1\rangle|\frac{1}{2}m_2\rangle$$

で展開することを考える。つまり、

$$|jm\rangle \;=\; |m_1m_2\rangle\langle m_1m_2|jm\rangle$$

となる クレブシュ・ゴルダン係数 を求めてみよう。勿論この逆は

$$|m_1m_2\rangle \;=\; |jm\rangle\langle jm|m_1m_2\rangle$$

となる。

まず $m=m_1+n_2$ に注意して

$$J_+|\ell\frac{1}{2}\rangle \;=\; 0$$

であるから

$$|\ell+\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}\rangle \;=\; |\ell,\frac{1}{2}\rangle$$

一般論から

$$|jm-k\rangle \;=\; \hbar^{-k}\sqrt{\frac{(j+m-k)!}{(j+m)!}\frac{(j-m)!}{(j-m+k)!}}J_-^k|jm\rangle$$

$$
\begin{aligned}
L_-^k|\ell\ell\rangle\rangle &= \hbar^k\sqrt{\frac{(2\ell)!k!}{(2\ell-k)!}}|\ell-k\rangle \\
S_-|\frac{1}{2}\rangle &= \hbar|-\frac{1}{2}\rangle
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
|\ell+\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}-k\rangle &= \hbar^{-k}\sqrt{\frac{(2\ell+1-k)!}{(2\ell+1)!}\frac{(0)!}{k!}}J_-^k|\ell+\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}\rangle \\
&= \hbar^{-k}\sqrt{\frac{(2\ell+1-k)!}{(2\ell+1)!}\frac{(0)!}{k!}}(L_-+S_-)^k|\ell,\frac{1}{2}\rangle \\
&= \hbar^{-k}\sqrt{\frac{(2\ell+1-k)!}{(2\ell+1)!k!}}(L_-^k+kL_-^{k-1}S_-)|\ell,\frac{1}{2}\rangle \\
&= \sqrt{\frac{(2\ell+1-k)!}{(2\ell+1)!k!}} \\
&\quad\times\left(\sqrt{\frac{(2\ell)!k!}{(2\ell-k)!}}|\ell-k,\frac{1}{2}\rangle+k\sqrt{\frac{(2\ell)!(k-1)!}{(2\ell-k+1)!}}|\ell+1-k,-\frac{1}{2}\rangle\right) \\
&= \sqrt{\frac{2\ell+1-k}{2\ell+1}}|\ell-k,\frac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{k}{2\ell+1}}|\ell+1-k,-\frac{1}{2}\rangle
\end{aligned}
$$

これを

$$
\begin{aligned}
&J=\ell+\frac{1}{2},\quad M=\ell+\frac{1}{2}-k \\
&j_1=\ell,\qquad m_1=M-m_2=\begin{cases}\ell-k, & m_2=\frac{1}{2}\\ \ell+1-k, & m_2=-\frac{1}{2}\end{cases} \\
&j_2=\frac{1}{2},\qquad m_2=\pm\frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

として

$\langle j_1,m_1=m-m_2,\frac{1}{2},m_2|JM\rangle$:その 1(応用群論 p143)

J	$m_2=\frac{1}{2}$	$m_2=-\frac{1}{2}$
$j_1+\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j_1+M+1/2}{2j_1+1}}$	$\sqrt{\frac{j_1-M+1/2}{2j_1+1}}$

特に $m=L-1/2$ に関しては

$$
|\ell+\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}}|\ell-1,\frac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}|\ell,-\frac{1}{2}\rangle
$$

もう一つ $m=\ell-\frac{1}{2}$ の状態はあるはずで (図)、それが $|\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle$ のはず。よって、これに直交する状態をとって、

$$|\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle \;=\; -\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}|\ell-1,\frac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}}|\ell,-\frac{1}{2}\rangle$$

これに J_+ を作用させてみれば

$$L_+|\ell,m\rangle \;=\; \hbar\sqrt{(\ell+m+1)(\ell-m)}|\ell m+1\rangle$$

であったから

$$\begin{aligned}J_+|\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}L_+|\ell-1\rangle|\frac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}}S_+|\ell\rangle|-\frac{1}{2}\rangle\\ &= -\hbar\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}\sqrt{(2\ell)(1)}|\ell\rangle|\frac{1}{2}\rangle+\hbar\sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}}|\ell\rangle|\frac{1}{2}\rangle=0\end{aligned}$$

と確かに $j=\ell-\frac{1}{2}$ に対応する最大の $m=\ell-\frac{1}{2}$ の状態である。

よって

$$\begin{aligned}|\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}-k\rangle &= \hbar^{-k}\sqrt{\frac{(2\ell-1-k)!}{(2\ell-1)!}\frac{(0)!}{k!}}J_-^k|\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\rangle\\ &= \hbar^{-k}\sqrt{\frac{(2\ell-1-k)!}{(2\ell-1)!}\frac{(0)!}{k!}}\\ &\quad\times(L_-+S_-)^k\Big(-\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}|\ell-1,\frac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}}|\ell,-\frac{1}{2}\rangle\Big)\\ &= \hbar^{-k}\sqrt{\frac{(2\ell-1-k)!}{(2\ell-1)!}\frac{(0)!}{k!}}\\ &\quad\times\Big(-\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}(L_-^k+kL_-^{k-1}S_-)|\ell-1,\frac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}}L_-^k|\ell,-\frac{1}{2}\rangle\Big)\end{aligned}$$

ここで一般論から

$$\begin{aligned}L_-^k|\ell\ell-1\rangle &= \hbar^k\sqrt{\frac{(2\ell-1)!}{(2\ell-1-k)!}\frac{(1+k)!}{(1)!}}|\ell-k-1\rangle\\ L_-^{k-1}|\ell\ell-1\rangle &= \hbar^{k-1}\sqrt{\frac{(2\ell-1)!}{(2\ell-k)!}\frac{(k)!}{(1)!}}|\ell-k\rangle\\ L_-^k|\ell\ell\rangle &= \hbar^k\sqrt{\frac{(2\ell)!k!}{(2\ell-k)!}}|\ell-k\rangle\end{aligned}$$

よって

$$
\begin{aligned}
|\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}-k\rangle &= -\sqrt{\frac{k+1}{2\ell+1}}|\ell-k-1,\frac{1}{2}\rangle \\
&\quad -k\sqrt{\frac{1}{(2\ell+1)(2\ell-k)}}|\ell-k,-\frac{1}{2}\rangle+(2\ell)\sqrt{\frac{1}{(2\ell+1)(2\ell-k)}}|\ell-k,-\frac{1}{2}\rangle \\
&= -\sqrt{\frac{k+1}{2\ell+1}}|\ell-k-1,\frac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{2\ell-k}{2\ell+1}}|\ell-k,-\frac{1}{2}\rangle
\end{aligned}
$$

これを

$$
\begin{aligned}
& J=\ell-\frac{1}{2}, \quad M=\ell-\frac{1}{2}-k \\
& j_1=\ell, \qquad m_1=M-m_2=\begin{cases} \ell-k-1, & m_2=\frac{1}{2} \\ \ell-k, & m_2=-\frac{1}{2}\end{cases} \\
& j_2=\frac{1}{2}, \qquad m_2=\pm\frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

として

$\langle j_1,m_1=m-m_2,\frac{1}{2},m_2|JM\rangle$:その 2(応用群論 p143)

J	$m_2=\frac{1}{2}$	$m_2=-\frac{1}{2}$
$j_1-\frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{j_1-M+1/2}{2j_1+1}}$	$\sqrt{\frac{j_1+M+1/2}{2j_1+1}}$

なお $J=j_1+1/2$ の状態は $2J+1=2j_1+1=2\ell+1$ 個あり、$J=j_1-1/2$ の状態は $2J+1=2j_1=2\ell$ 個で合わせて $4\ell+1=2(2\ell+1)=(2\cdot\frac{1}{2}+1)(2\ell+1)$ と整合的である。

2.5　角運動量の合成

ここでは $\boldsymbol{J}_1$ と $\boldsymbol{J}_2$ という 2 つの角運動量の合成について一般に議論しよう。まず

$$
\begin{aligned}
[J_{ai}, J_{aj}] &= i\hbar\epsilon_{ijk}J_{ak}, \quad a=1,2 \\
[J_{1i}, J_{2j}] &= 0
\end{aligned}
$$

であるから、

$$
\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2
$$

に対して

$$
[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k
$$

と $\boldsymbol{J}$ が角運動量となる。

2.5.1　合成角運動量の値

まず、個々の角運動量の状態を

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{J}_1^2|j_1m_1\rangle &= \hbar^2 j_1(j_1+1)|j_1m_1\rangle \\
J_{1z}^2|j_1m_1\rangle &= \hbar m_1|j_1m_1\rangle \\
\boldsymbol{J}_2^2|j_2m_2\rangle &= \hbar^2 j_2(j_2+1)|j_2m_2\rangle \\
J_{2z}^2|j_2m_2\rangle &= \hbar m_2|j_2m_2\rangle
\end{aligned}
$$

ととろう。これは計 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 状態あることに注意しよう。一方一般論に従えば

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{J}^2|jm\rangle &= \hbar j(j=1)|jm\rangle \\
J_z|jm &= \hbar m|jm\rangle
\end{aligned}
$$

となる $|jm\rangle$ が存在する。この間の線形関係を

$$
\begin{aligned}
|jm\rangle &= |j_1m_1j_2m_2\rangle A_{m_1m_2,jm} \\
|j_1m_1j_2m_2\rangle &= |jm\rangle B_{jm,m_1m_2}
\end{aligned}
$$

と書こう。左から $\langle j_1m_1'j_2m_2'|$ をかけて

$$
\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle = A_{m_1m_2,jm}
$$

同様に

$$\langle jm|j_1m_1j_2m_2\rangle = B_{jm,m_1m_2}$$

なおこれらは状態の重なり積分であるから

$$\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle^* = \langle jm|j_1m_1j_2m_2\rangle$$

であり、さらにこの係数 (クレブシュ・ゴルダン係数(Clebsch-Gordan 係数) は以下の手続きに従えば、常に実にとれるので、この場合

$$\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle = \langle jm|j_1m_1j_2m_2\rangle$$

となる。
　以下これらを

$$\begin{aligned} |jm\rangle &= |j_1m_1j_2m_2\rangle\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle \\ |j_1m_1j_2m_2\rangle &= |jm\rangle\langle jm|j_1m_1j_2m_2\rangle \end{aligned}$$

と書こう。
　これらを順に代入すれば

$$\begin{aligned} |jm\rangle &= |j'm'\rangle\langle j'm'|j_1m_1j_2m_2\rangle\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle \\ |j_1m_1j_2m_2\rangle &= |j_1m_1'j_2m_2'\rangle\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle\langle jm|j_1m_1j_2m_2\rangle \end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned} \langle j'm'|j_1m_1j_2m_2\rangle\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle &= \delta_{j'j}\delta_{m'm} \\ \langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle\langle jm|j_1m_1j_2m_2\rangle &= \delta_{m_1'm_1}\delta_{m_2'm_2} \end{aligned}$$

という2種類の直交関係が従う。
　まず

$$\begin{aligned} J_z|jm\rangle &= \hbar m|jm\rangle \\ &= (J_{1z}+J_{2z})|j_1m_1j_2m_2\rangle\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle \\ &= \hbar(m_1+m_2)|j_1m_1j_2m_2\rangle\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle \end{aligned}$$

から

$$\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle = 0: \text{ if } m \neq m_1+m_2$$

に注意しよう。
　よって $j_1 \geq j_2$ として

$$m_1 + m_2 \ = \ j_1 + j_2$$

の状態からは $j = j_1 + j_2$ が構成され、それに J_- を作用させることで全ての $m = -j, \cdots, j$ の状態が構成できる。つづいて

$$m_1 + m_2 \ = \ j_1 + j_2 - 1$$

の状態は

$$(m_1, m_2) \ = \ (j_1 - 1, j_2), (j_1, j_2 - 1)$$

の中で1つは $j = j_1 + j_2$ の状態として使われているので、それと直交する状態として、構成される。続いて

$$m_1 + m_2 \ = \ j_1 + j_2 - 2$$

の状態は

$$(m_1, m_2) \ = \ (j_1 - 2, j_2), (j_1 - 1, j_2 - 1), (j_1, j_2 - 2)$$

から構成されるが、そのためには $j_2 - 2 \geq -j_2$ が必要である。これは一般に

$$m_1 + m_2 \ = \ j_1 + j_2 - s$$

の状態で新しい $j = j_1 + j_2 - s$ が現れるためには

$$j_2 - s \geq -j_2$$

であることが必要である。よって

$$j \ = \ j_1 + j_2 - s \geq j_1 - j_2$$

つまり可能な j の値としては

$$j \ = \ j_1 + j_2, \cdots, j_1 - j_2 = j_1 - j_2$$

となる。尚、状態数を数えれば $j_< = |j_1 - j_2|, j_> = j_1 + j_2$ として

$$\begin{aligned}
\sum_{j=j_<}^{j_>} (2j+1) &= 2\frac{1}{2}(j_< + j_>)(j_> - j_< + 1) + (j_> - j_< + 1) \\
&= (j_> + j_< + 1)(j_> - j_< + 1) \\
&= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)
\end{aligned}$$

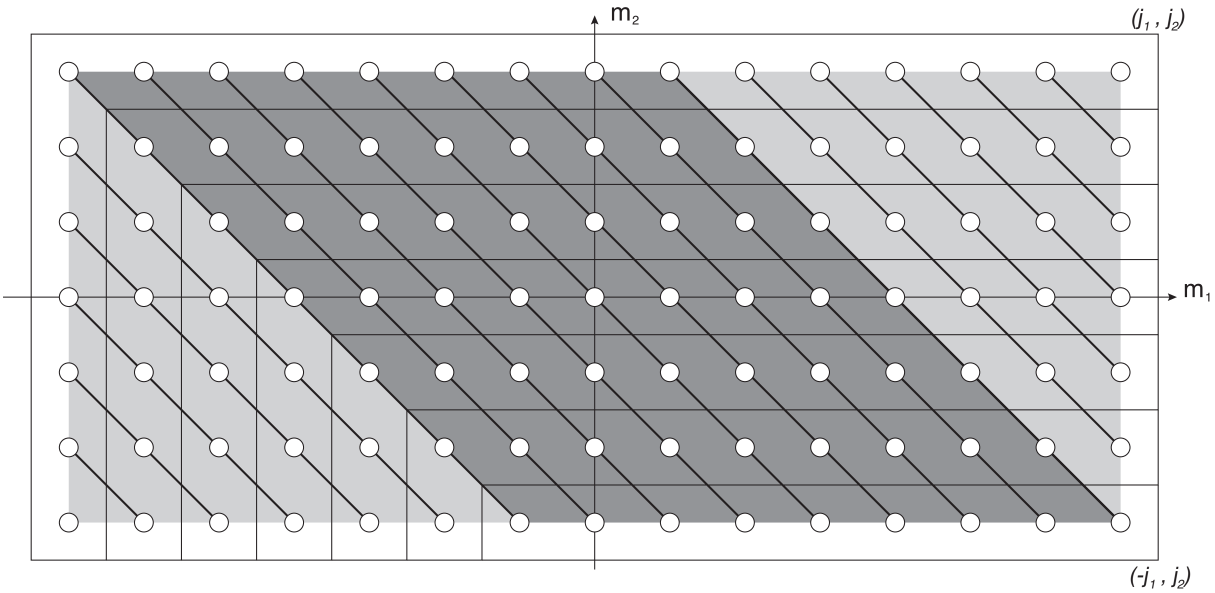

図 2.3: J_1, J_2 の 2 つの角運動量の合成

と整合的である。(図)

これを

$$j_1 \otimes j_2 \;=\; |j_1 - j_2| \oplus |j_1 - j_2| + 1 \oplus \cdots \oplus j_1 + j_2$$

と表そう。

2.5.2 クレブシュ・ゴルダン係数:漸化式による方法

以下この クレブシュ・ゴルダン係数 を順に決定する手続きを示してみよう。ここで

$$|jm\rangle \;=\; |j_1 m_1' j_2 m_2'\rangle\langle j_1 m_1' j_2 m_2'|jm\rangle$$

に $J_+ = J_{1+} + J_{2+}$ を作用させれば

$$J_+|jm\rangle \;=\; J_{1_+}|j_1 m_1' j_2 m_2'\rangle\langle j_1 m_1' j_2 m_2'|jm\rangle + J_{2_+}|j_1 m_1' j_2 m_2'\rangle\langle j_1 m_1' j_2 m_2'|jm\rangle$$

よって

$$\begin{aligned}
&\big[(j+m+1)(j-m)\big]^{1/2}|jm+1\rangle \\
&= \big[(j_1+m_1'+1)(j_1-m_1')\big]^{1/2}|j_1 m_1'+1 j_2 m_2'\rangle\langle j_1 m_1' j_2 m_2'|jm\rangle \\
&+\big[(j_2+m_2'+1)(j_2-m_2')\big]^{1/2}|j_1 m_1' j_2 m_2'+1\rangle\langle j_1 m_1' j_2 m_2'|jm\rangle
\end{aligned}$$

左から $\langle j_1m_1j_2m_2|$ をかけて

$$
\begin{aligned}
&\Big[(j+m+1)(j-m)\Big]^{1/2}\langle j_1m_1j_2m_2|jm+1\rangle\\
&=\Big[(j_1+m_1'+1)(j_1-m_1')\Big]^{1/2}\langle j_1m_1j_2m_2|j_1m_1'+1j_2m_2'\rangle\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle\\
&+\Big[(j_2+m_2'+1)(j_2-m_2')\Big]^{1/2}\langle j_1m_1j_2m_2|j_1m_1'j_2m_2'+1\rangle\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle\\
&=\Big[(j_1+m_1)(j_1-m_1+1)\Big]^{1/2}\langle j_1m_1-1j_2m_2|jm\rangle\\
&+\Big[(j_2+m_2)(j_2-m_2+1)\Big]^{1/2}\langle j_1m_1j_2m_2-1|jm\rangle
\end{aligned}
$$

同様に $J_-=J_{1-}+J_{2-}$ を作用させて

$$
J_-|jm\rangle \;=\; J_{1_-}|j_1m_1'j_2m_2'\rangle\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle+J_{2_-}|j_1m_1'j_2m_2'\rangle\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle
$$

よって

$$
\begin{aligned}
&\Big[(j-m+1)(j+m)\Big]^{1/2}|jm-1\rangle\\
&=\Big[(j_1-m_1'+1)(j_1+m_1')\Big]^{1/2}|j_1m_1'-1j_2m_2'\rangle\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle\\
&+\Big[(j_2-m_2'+1)(j_2+m_2')\Big]^{1/2}|j_1m_1'j_2m_2'-1\rangle\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle
\end{aligned}
$$

左から $\langle j_1m_1j_2m_2|$ をかけて

$$
\begin{aligned}
&\Big[(j-m+1)(j+m)\Big]^{1/2}\langle j_1m_1j_2m_2|jm-1\rangle\\
&=\Big[(j_1-m_1'+1)(j_1+m_1')\Big]^{1/2}\langle j_1m_1j_2m_2|j_1m_1'-1j_2m_2'\rangle\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle\\
&+\Big[(j_2-m_2'+1)(j_2+m_2')\Big]^{1/2}\langle j_1m_1j_2m_2|j_1m_1'j_2m_2'-1\rangle\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle\\
&\Big[(j-m+1)(j+m)\Big]^{1/2}\langle j_1m_1j_2m_2|jm-1\rangle\\
&=\Big[(j_1-m_1)(j_1+m_1+1)\Big]^{1/2}\langle j_1m_1+1j_2m_2|jm\rangle\\
&+\Big[(j_2-m_2)(j_2+m_2+1)\Big]^{1/2}\langle j_1m_1j_2m_2+1|jm\rangle
\end{aligned}
$$

以上まとめて

クレブシュ・ゴルダン係数に関する漸化式 I

$$\langle j_1m_1j_2m_2|jm+1\rangle = \left[\frac{(j_1+m_1)(j_1-m_1+1)}{(j+m+1)(j-m)}\right]^{1/2}\langle j_1m_1-1j_2m_2|jm\rangle + \left[\frac{(j_2+m_2)(j_2-m_2+1)}{(j+m+1)(j-m)}\right]^{1/2}\langle j_1m_1j_2m_2-1|jm\rangle$$

$$\langle j_1m_1j_2m_2|jm-1\rangle = \left[\frac{(j_1-m_1)(j_1+m_1+1)}{(j-m+1)(j+m)}\right]^{1/2}\langle j_1m_1+1j_2m_2|jm\rangle + \left[\frac{(j_2-m_2)(j_2+m_2+1)}{(j-m+1)(j+m)}\right]^{1/2}\langle j_1m_1j_2m_2+1|jm\rangle$$

まず、$j=j_1+j_2$ の状態は１つで

$$\psi_{j_1+j_2} = (|j_1j_1,j_2j_2\rangle)$$

として、

$$\Psi_{j_1+j_2} = (|j_1+j_2,j_1+j_2\rangle) = \psi_{j_1+j_2}(1)$$
$$\psi^\dagger_{j_1+j_2}\Psi_{j_1+j_2} = (1)$$

と位相を決めよう。つづいて $j=j_1+j_2$ の状態は２つで

$$\psi_{j_1+j_2-1} = (|j_1j_1,j_2j_2-1\rangle,|j_1j_1-1,j_2j_2\rangle)$$
$$\Psi_{j_1+j_2-1} = (|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle,|j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle)$$

これを使って

$$\psi^\dagger_{j_1+j_2-1}|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle = M\psi^\dagger_{j_1+j_2}|j_1+j_2,j_1+j_2\rangle$$

まず、$m_1=j_1,m_2=j_2$, $j=j_1+j_2,m=m_1+m_2=j_1+j_2$ の状態は１つしかないので

$$\langle j_1j_1j_2j_2|j_1+j_2j_1+j_2\rangle = 1$$

ととる。以下これから m を減らす公式を順次つかって係数を決めていこう。

次に $m_1=j_1-1,m_2=j_2$, $j=j_1+j_2,m=j_1+j_2$ として

$$\big[2(j_1+j_2)\big]^{1/2}\langle j_1j_1-1j_2j_2|j_1+j_2j_1+j_2-1\rangle = \big[2j_1\big]^{1/2}\langle j_1j_1j_2j_2|j_1+j_2j_1+j_2\rangle = \big[2j_1\big]^{1/2}$$

これから

$$\langle j_1 j_1 - 1 j_2 j_2 | j_1 + j_2 j_1 + j_2 - 1\rangle \;=\; \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}$$

同じく

$$\langle j_1 j_1 j_2 j_2 - 1 | j_1 + j_2 j_1 + j_2 - 1\rangle \;=\; \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}$$

つまり

$$|j_1 + j_2 j_1 + j_2 - 1\rangle \;=\; \psi \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \\ \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \end{pmatrix}$$

ここで

$$\psi \;=\; (|j_1 j_1 - 1 j_2 j_2\rangle, |j_1 j_1 j_2 j_2 - 1\rangle)$$

であり

$$\psi^\dagger \psi \;=\; \psi\psi^\dagger = E_2$$

これを用いて

$$\begin{aligned} P &= |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle\langle j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1| \\ &= \psi \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \\ \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \end{pmatrix} (\sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}, \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}})\psi^\dagger \\ 1 - P &= \psi(1 - \begin{pmatrix} \frac{j_1}{j_1+j_2} & \frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} \\ \frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} & \frac{j_2}{j_1+j_2} \end{pmatrix})\psi^\dagger \\ &= \psi \begin{pmatrix} \frac{j_2}{j_1+j_2} & -\frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} \\ -\frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} & \frac{j_1}{j_1+j_2} \end{pmatrix})\psi^\dagger \end{aligned}$$

$$\phi \;=\; |j_1 j_1 j_2 j_2 - 1\rangle$$

ととれば $C > 0$ をある定数として

$$\begin{aligned} |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle &= C(1 - P)\phi \\ &= C\psi \begin{pmatrix} \frac{j_2}{j_1+j_2} & -\frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} \\ -\frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} & \frac{j_1}{j_1+j_2} \end{pmatrix}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= C\psi \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} \\ \frac{j_1}{j_1+j_2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

規格化して $\langle j_1+j_2-1, j_1+j_2-1|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = |C|^2\frac{(j_1+j_2)j_2}{(j_1+j_2)^2} = 1$ より $C = -\sqrt{\frac{j_1+j_2}{j_2}}$

$$|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = \psi\begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \\ \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \end{pmatrix}$$

よって

$$\begin{aligned}\langle j_1 j_1-1, j_2 j_2|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle &= -\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \\ \langle j_1 j_1, j_2 j_2-1|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\end{aligned}$$

ここで $C>0$ は一般に k をある自然数として

$$\phi = |j_1 j_1, j_2 j_2-k\rangle$$

$$\langle j_1 j_1, j_2 j_2-k|j_1+j_2-k, j_1+j_2-k\rangle > 0$$

ととることに対応する。

次に $m_1+m_2 = j_1+j_2-2$ に対応する係数を求めよう。ここで、$m = j_1+j_2-1$。まず $j = j_1+j_2$ に関しては $j-m = 1$, $j+m = 2j_1+2j_2-1$ である。$m_1 = j_1$, $m_2 = j_2-2$ として

$$\begin{aligned}&\langle j_1 j_1, j_2 j_2-2|j_1+j_2, j_1+j_2-2\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2(2j_2-1)}{2(2j_1+2j_2-1)}}\langle j_1 j_1, j_2 j_2-1|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle \\ &= \sqrt{\frac{j_2(2j_2-1)}{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}}\langle j_1 j_1, j_2 j_2-1|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle\end{aligned}$$

$m_1 = j_1-1$, $m_2 = j_2-1$ として

$$\begin{aligned}&\langle j_1 j_1-1, j_2 j_2-1|j_1+j_2, j_1+j_2-2\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2j_1}{2(2j_1+2j_2-1)}}\langle j_1 j_1, j_2 j_2-1|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle \\ &+\sqrt{\frac{2j_2}{2(2j_1+2j_2-1)}}\langle j_1 j_1-1, j_2 j_2|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle \\ &= \sqrt{\frac{4j_1 j_2}{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}}\end{aligned}$$

$m_1 = j_1 - 2,\ m_2 = j_2$ として

$$\begin{aligned}
&\langle j_1 j_1 - 2, j_2 j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle \\
&\quad = \sqrt{\frac{2(2j_1 - 1)}{2(2j_1 + 2j_2 - 1)}}\langle j_1 j_1 - 1, j_2 j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \\
&\quad = \sqrt{\frac{j_1(2j_1 - 1)}{(j_1 + j_2)(2j_1 + 2j_2 - 1)}}
\end{aligned}$$

続いて $j = j_1 + j_2 - 1$ に関しては $m = j_1 + j_2 - 1$ だから $j - m = 0,\ j + m = 2j_1 + 2j_2 - 2$

まず、$m_1 = j_1,\ m_2 = j_2 - 2$ として

$$\begin{aligned}
&\langle j_1 j_1, j_2 j_2 - 2 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle \\
&\quad = \sqrt{\frac{2(2j_2 - 1)}{(2j_1 + 2j_2 - 2)}}\langle j_1 j_1, j_2 j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle \\
&\quad = \sqrt{\frac{j_1(2j_2 - 1)}{(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)}}
\end{aligned}$$

つぎに、$m_1 = j_1 - 1,\ m_2 = j_2 - 1$ として

$$\begin{aligned}
&\langle j_1 j_1 - 1, j_2 j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 1 j_1 + j_2 - 2\rangle \\
&\quad = \sqrt{\frac{2j_1}{(2j_1 + 2j_2 - 2)}}\langle j_1 j_1, j_2 j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle \\
&\quad + \sqrt{\frac{2j_2}{(2j_1 + 2j_2 - 2)}}\langle j_1 j_1 - 1, j_2 j_2 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle \\
&\quad = \sqrt{\frac{j_1^2}{(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)}} - \sqrt{\frac{j_2^2}{(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)}} \\
&\quad = \frac{j_1 - j_2}{\sqrt{(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)}}
\end{aligned}$$

$m_1 = j_1 - 2,\ m_2 = j_2$ として

$$\begin{aligned}
&\langle j_1 j_1 - 2, j_2 j_2 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle \\
&\quad = \sqrt{\frac{2(2j_1 - 1)}{(2j_1 + 2j_2 - 2)}}\langle j_1 j_1 - 1, j_2 j_2 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle \\
&\quad = -\sqrt{\frac{j_2(2j_1 - 1)}{(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)}}
\end{aligned}$$

よって

$$\psi = (|j_1 j_1 - 2, j_2 j_2\rangle, |j_1 j_1 - 1, j_2, j_2 - 1\rangle, |j_1 j_1, j_2 j_2 - 2\rangle)$$

として

$$\psi^\dagger \psi = \psi \psi^\dagger = E_3$$

$$\begin{aligned}
|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle &= \psi \frac{1}{\sqrt{(j_1 + j_2)(2j_1 + 2j_2 - 1)}} \begin{pmatrix} \sqrt{j_1(2j_1 - 1)} \\ \sqrt{4 j_1 j_2} \\ \sqrt{j_2(2j_2 - 1)} \end{pmatrix} \\
|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle &= \psi \frac{1}{\sqrt{(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)}} \begin{pmatrix} -\sqrt{j_2(2j_1 - 1)} \\ j_1 - j_2 \\ \sqrt{j_1(2j_2 - 1)} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
P &= |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle\langle j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2| \\
&\quad + |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle\langle j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2| \\
&= \psi \frac{1}{(j_1 + j_2)(2j_1 + 2j_2 - 1)} \\
&\quad \begin{pmatrix} j_1(2j_1 - 1) & 2j_1\sqrt{j_2(2j_1 - 1)} & \sqrt{j_1 j_2 (2j_1 - 1)(2j_2 - 1)} \\ 2j_1\sqrt{j_2(2j_1 - 1)} & 4 j_1 j_2 & 2j_2\sqrt{j_1(2j_2 - 1)} \\ \sqrt{j_1 j_2 (2j_1 - 1)(2j_2 - 1)} & 2j_2\sqrt{j_1(2j_2 - 1)} & j_2(2j_2 - 1) \end{pmatrix} \psi^\dagger \\
&\quad + \psi \frac{1}{(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)} \\
&\quad \begin{pmatrix} j_2(2j_1 - 1) & -(j_1 - j_2)\sqrt{j_2(2j_1 - 1)} & -\sqrt{j_1 j_2 (2j_1 - 1)(2j_2 - 1)} \\ -(j_1 - j_2)\sqrt{j_2(2j_1 - 1)} & (j_1 - j_2)^2 & (j_1 - j_2)\sqrt{j_1(2j_2 - 1)} \\ -\sqrt{j_1 j_2 (2j_1 - 1)(2j_2 - 1)} & (j_1 - j_2)\sqrt{j_1(2j_2 - 1)} & j_1(2j_2 - 1) \end{pmatrix} \psi^\dagger
\end{aligned}$$

$m_1+m_2=j_1+j_2-1$ の時と同様に $\phi=|j_1j_1,j_2j_2-2\rangle$ ととって

$$
\begin{aligned}
&|j_1+j_2-2,j_1+j_2-2\rangle = C(1-P)\phi \\
=\;& C\psi\Bigg[\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} \\
&-\frac{1}{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}\begin{pmatrix}\sqrt{j_1j_2(2j_1-1)(2j_2-1)}\\ 2j_2\sqrt{j_1(2j_2-1)}\\ j_2(2j_2-1)\end{pmatrix} \\
&-\frac{1}{(j_1+j_2)(j_1+j_2-1)}\begin{pmatrix}-\sqrt{j_1j_2(2j_1-1)(2j_2-1)}\\ (j_1-j_2)\sqrt{j_1(2j_2-1)}\\ j_1(2j_2-1)\end{pmatrix}\Bigg] \\
=\;& C\psi\Bigg[\begin{pmatrix}\sqrt{j_1j_2(2j_1-1)(2j_2-1)}\\ \frac{-2j_2(j_1+j_2-1)-(j_1-j_2)(2j_1+2j_2-1)}{(j_1+j_2)(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}\sqrt{j_1(2j_2-1)}\\ 1+\frac{j_2(j_1+j_2-1)+j_1(2j_1+2j_2-1)}{(j_1+j_2)(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}(2j_2-1)\end{pmatrix}\Bigg] \\
=\;& C\psi\Bigg[\begin{pmatrix}\sqrt{j_1j_2(2j_1-1)(2j_2-1)}\\ \frac{1-2j_1}{(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}\sqrt{j_1(2j_2-1)}\\ \frac{j_1(2j_1-1)}{(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}\end{pmatrix}\Bigg] \\
=\;& C\psi\frac{\sqrt{j_1(2j_1-1)}}{(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}\begin{pmatrix}\sqrt{j_2(2j_2-1)}\\ -\sqrt{(2j_1-1)(2j_2-1)}\\ \sqrt{j_1(2j_1-1)}\end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

ここで

$$
j_2(2j_2-1)+(2j_1-1)(2j_2-1)+j_1(2j_1-1) \;=\; (j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)
$$

よって規格化して

$$
|j_1+j_2-2,j_1+j_2-2\rangle \;=\; \psi\frac{1}{\sqrt{(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}}\begin{pmatrix}\sqrt{j_2(2j_2-1)}\\ -\sqrt{(2j_1-1)(2j_2-1)}\\ \sqrt{j_1(2j_1-1)}\end{pmatrix}
$$

これから

$$
\begin{aligned}
\langle j_1j_1-2,j_2j_2|j_1+j_2-2,j_1+j_2-2\rangle &= \sqrt{\frac{j_2(2j_2-1)}{(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}} \\
\langle j_1j_1-1,j_2j_2-1|j_1+j_2-2,j_1+j_2-2\rangle &= -\sqrt{\frac{(2j_1-1)(2j_2-1)}{(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}} \\
\langle j_1j_1,j_2j_2-2|j_1+j_2-2,j_1+j_2-2\rangle &= \sqrt{\frac{j_1(2j_1-1)}{(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}}
\end{aligned}
$$

以降の係数も同様に定まる。

2.5.3　クレブシュ・ゴルダン係数:状態を構成する方法

まず、$j=j_1+j_2$ の状態は 1 つで

$$\psi_{j_1+j_2} = (|j_1j_1, j_2j_2\rangle)$$

として、

$$\begin{aligned}\Psi_{j_1+j_2} &= (|j_1+j_2, j_1+j_2\rangle) = \psi_{j_1+j_2}(1)\\ \psi^\dagger_{j_1+j_2}\Psi_{j_1+j_2} &= (1)\end{aligned}$$

と位相を決めよう。つづいて

$$|jm-1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}}J_-|jm\rangle$$

より

$$\begin{aligned}|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2(j_1+j_2)}}J_-|j_1+j_2, j_1+j_2\rangle\\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2(j_1+j_2)}}(J_{1-}|j_1, j_1\rangle|j_2, j_2\rangle + |j_1, j_1\rangle J_{2-}|j_2, j_2\rangle)\\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2(j_1+j_2)}}\Big[\hbar\sqrt{2j_1}|j_1, j_1-1\rangle|j_2, j_2\rangle + |j_1, j_1\rangle(\hbar\sqrt{2j_2})|j_2, j_2-1\rangle\Big]\\ &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}|j_1j_1-1, j_2j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}|j_1j_1-1, j_2j_2\rangle\end{aligned}$$

$j=j_1+j_2-1$ の状態は 2 つで

$$\begin{aligned}\psi_{j_1+j_2-1} &= (|j_1j_1, j_2j_2-1\rangle, |j_1j_1-1, j_2j_2\rangle)\\ \Psi_{j_1+j_2-1} &= (|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle, |j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle)\end{aligned}$$

$$\Psi^\dagger_{j_1+j_2-1}\Psi_{j_1+j_2-1} = \psi^\dagger_{j_1+j_2-1}\psi_{j_1+j_2-1} = E_2$$

これを使って

$$\begin{aligned}\Psi_{j_1+j_2-1} &= \psi_{j_1+j_2-1}M\\ M &= (\psi_1, \psi) = (\begin{pmatrix}\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\\ \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\end{pmatrix}, \psi)\end{aligned}$$

として

$$\begin{aligned} E_2 &= MM^\dagger = \psi_1\psi_1^\dagger + \psi\psi^\dagger \\ \psi\psi^\dagger &= E_2 - \psi_1\psi_1^\dagger \equiv E_2 - P \\ \psi &= (E_2 - P)\psi \end{aligned}$$

よって ϕ を任意のベクトルとして

$$\begin{aligned} \psi' &= (E_2 - P)\phi \\ \psi &= \psi'/\|\psi'\| \end{aligned}$$

この一般論に従って ψ を決めよう。

$$\begin{aligned} P &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \\ \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \end{pmatrix} (\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}, \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}) \\ E_2 - P &= E_2 - \begin{pmatrix} \frac{j_1}{j_1+j_2} & \frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} \\ \frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} & \frac{j_2}{j_1+j_2} \end{pmatrix}) \\ &= \begin{pmatrix} \frac{j_2}{j_1+j_2} & -\frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} \\ -\frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} & \frac{j_1}{j_1+j_2} \end{pmatrix}) \end{aligned}$$

$$\phi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ととれば

$$\begin{aligned} \psi' &= (E_2 - P)\phi \\ &= \begin{pmatrix} \frac{j_2}{j_1+j_2} & -\frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} \\ -\frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} & \frac{j_1}{j_1+j_2} \end{pmatrix}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{j_1 j_2}}{j_1+j_2} \\ \frac{j_1}{j_1+j_2} \end{pmatrix} \\ \|\psi'\|^2 &= \frac{(j_1+j_2)j_2}{(j_1+j_2)^2} \end{aligned}$$

規格化して

$$\psi = \psi'/\|\psi'\| = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \\ \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \end{pmatrix}$$

よって

$$\Psi_{j_1+j_2-1} = \psi_{j_1+j_2-1}\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} & -\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \\ \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} & \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \end{pmatrix}$$

これから

$$\langle j_1 j_1-1, j_2 j_2 | j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = -\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}$$
$$\langle j_1 j_1, j_2 j_2-1 | j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}$$

ここで $\phi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ は一般に k をある自然数として

$$\phi = |j_1 j_1, j_2 j_2 - k\rangle$$

$$\langle j_1 j_1, j_2 j_2 - k | j_1+j_2-k, j_1+j_2-k\rangle > 0$$

ととることに対応する。

一般に

$$|jm-2\rangle = \frac{1}{\hbar^2\sqrt{(j+m)(j+m-1)(j-m+1)(j-m+2))}}J_-^2|jm\rangle$$

より

$$|j_1+j_2, j_1+j_2-2\rangle = \frac{1}{\hbar^2\sqrt{(2j_1+2j_2)(2j_1+2j_2-1)2}}\left[J_{1-}^2 + 2J_{1-}J_{2-} + J_{2-}^2\right]|j_1j_1, j_2j_2\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{(2j_1+2j_2)(2j_1+2j_2-1)2}}$$
$$\left(\sqrt{2j_1(2j_1-1)2}|j_1j_1-2, j_2j_2\rangle + 2\sqrt{2j_1}\sqrt{2j_2}|j_1j_1-1, j_2j_2-1\rangle + \sqrt{2j_2(2j_2-1)2}|j_1j_1, j_2j_2-2\rangle\right)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}}$$
$$\left(\sqrt{j_1(2j_1-1)}|j_1j_1-2, j_2j_2\rangle + \sqrt{4j_1j_2}|j_1j_1-1, j_2j_2-1\rangle + \sqrt{j_2(2j_2-1)}|j_1j_1, j_2j_2-2\rangle\right)$$
$$= \psi_{j_1+j_2-2}\psi_1$$

とかける。ここで、

$$\begin{aligned}\psi_{j_1+j_2-2} &= (|j_1 j_1-2, j_2 j_2\rangle, |j_1 j_1-1, j_2 j_2-1\rangle, |j_1 j_1, j_2 j_2-2\rangle) \\ \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)}}\begin{pmatrix}\sqrt{j_1(2j_1-1)} \\ \sqrt{4j_1j_2} \\ \sqrt{j_2(2j_2-1)}\end{pmatrix}\end{aligned}$$

続いて $j = j_1+j_2-1$ の状態を考えて

$$|j_1+j_2-1, j_1+j_2-2\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2(j_1+j_2-1)}}J_-|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle$$

$$= \frac{1}{\hbar\sqrt{2(j_1+j_2-1)}}J_-\psi_{j_1+j_2-1}\begin{pmatrix}-\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \\ \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\end{pmatrix}$$

ここで

$$J_-\psi_{j_1+j_2-1} = ((J_{1-}+J_{2-})|j_1 j_1-1, j_2 j_2\rangle, (J_{1-}+J_{2-})|j_1 j_1, j_2 j_2-1\rangle)$$

$$\begin{aligned}&= (\sqrt{2(2j_1-1)}|j_1 j_1-2, j_2 j_2\rangle + \sqrt{2j_2}|j_1 j_1-1, j_2 j_2-1\rangle \\ &\qquad , \sqrt{2j_1}|j_1 j_1-1, j_2 j_2-1\rangle + \sqrt{2(2j_2-1)}|j_1 j_1, j_2 j_2-2\rangle) \\ &= \hbar(|j_1 j_1-2, j_2 j_2\rangle, |j_1 j_1-1, j_2 j_2-1\rangle, |j_1 j_1, j_2 j_2-2\rangle)\begin{pmatrix}\sqrt{2(2j_1-1)} & 0 \\ \sqrt{2j_2} & \sqrt{2j_1} \\ 0 & \sqrt{2(2j_2-1)}\end{pmatrix} \\ &= \hbar\psi_{j_1+j_2-2}\begin{pmatrix}\sqrt{2(2j_1-1)} & 0 \\ \sqrt{2j_2} & \sqrt{2j_1} \\ 0 & \sqrt{2(2j_2-1)}\end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&|j_1+j_2-1, j_1+j_2-2\rangle \\ &\quad = \frac{1}{\sqrt{2(j_1+j_2-1)}}\psi_{j_1+j_2-2}\begin{pmatrix}\sqrt{2(2j_1-1)} & 0 \\ \sqrt{2j_2} & \sqrt{2j_1} \\ 0 & \sqrt{2(2j_2-1)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \\ \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\end{pmatrix} \\ &\quad = \psi_{j_1+j_2-2}\psi_2\end{aligned}$$

ここで

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{(j_1+j_2)(j_1+j_2-1)}}\begin{pmatrix}-\sqrt{(2j_1-1)j_2} \\ j_1-j_2 \\ \sqrt{j_1(2j_2-1)}\end{pmatrix}$$

$j = j_1 + j_2 - 2$ の状態は 3 つで

$$\Psi_{j_1+j_2-2} = (|j_1+j_2, j_1+j_2-2\rangle, |j_1+j_2-1, j_1+j_2-2\rangle, |j_1+j_2-2, j_1+j_2-2\rangle)$$

として

$$\Psi^\dagger_{j_1+j_2-2}\Psi_{j_1+j_2-2} = \psi^\dagger_{j_1+j_2-2}\psi_{j_1+j_2-2} = E_3$$

これを使って

$$\begin{aligned}\Psi_{j_1+j_2-2} &= \psi_{j_1+j_2-2}M \\ M &= (\psi_1, \psi_2, \psi) = (\psi_C, \psi)\end{aligned}$$

として

$$\begin{aligned}E_3 &= MM^\dagger = \psi_C\psi_C^\dagger + \psi\psi^\dagger \\ \psi\psi^\dagger &= E_3 - \psi_C\psi_C^\dagger \equiv E_3 - P \\ \psi &= (E_3 - P)\psi\end{aligned}$$

よって ϕ を任意のベクトルとして

$$\begin{aligned}\psi' &= (E_3 - P)\phi \\ \psi &= \psi'/\|\psi'\|\end{aligned}$$

この一般論に従って ψ を決めよう。

$$\begin{aligned}P &= \frac{1}{(j_1+j_2)(2j_1+2j_2-1)} \\ &\quad \begin{pmatrix} j_1(2j_1-1) & 2j_1\sqrt{j_2(2j_1-1)} & \sqrt{j_1j_2(2j_1-1)(2j_2-1)} \\ 2j_1\sqrt{j_2(2j_1-1)} & 4j_1j_2 & 2j_2\sqrt{j_1(2j_2-1)} \\ \sqrt{j_1j_2(2j_1-1)(2j_2-1)} & 2j_2\sqrt{j_1(2j_2-1)} & j_2(2j_2-1) \end{pmatrix} \\ &\quad + \frac{1}{(j_1+j_2)(j_1+j_2-1)} \\ &\quad \begin{pmatrix} j_2(2j_1-1) & -(j_1-j_2)\sqrt{j_2(2j_1-1)} & -\sqrt{j_1j_2(2j_1-1)(2j_2-1)} \\ -(j_1-j_2)\sqrt{j_2(2j_1-1)} & (j_1-j_2)^2 & (j_1-j_2)\sqrt{j_1(2j_2-1)} \\ -\sqrt{j_1j_2(2j_1-1)(2j_2-1)} & (j_1-j_2)\sqrt{j_1(2j_2-1)} & j_1(2j_2-1) \end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$\phi = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ととれば

$$
\begin{aligned}
\psi' &= (E_3 - P)\phi \\
&= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{j_1+j_2} \begin{pmatrix} (\frac{1}{2j_1+2j_2-1} - \frac{1}{j_1+j_2-1})\sqrt{j_1 j_2(2j_1-1)(2j_2-1)} \\ (\frac{2j_2}{2j_1+2j_2-1} + \frac{j_1-j_2}{j_1+j_2-1})\sqrt{j_1(2j_2-1)} \\ (\frac{j_2}{2j_1+2j_2-1} + \frac{j_1}{j_1+j_2-1})(2j_2-1) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{j_1 j_2(2j_1-1)(2j_2-1)}}{(2j_1+2j_2-1)(j_1+j_2-1)} \\ -\frac{(2j_1-1)\sqrt{j_1(2j_2-1)}}{(2j_1+2j_2-1)(j_1+j_2-1)} \\ -\frac{(2j_1+j_2-1)(2j_2-1)}{(2j_1+2j_2-1)(j_1+j_2-1)} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{(2j_1+2j_2-1)(j_1+j_2-1)} \begin{pmatrix} \sqrt{j_1 j_2(2j_1-1)(2j_2-1)} \\ -(2j_1-1)\sqrt{j_1(2j_2-1)} \\ j_1(2j_1-1) \end{pmatrix} \\
&= \frac{\sqrt{j_1(2j_1-1)}}{(2j_1+2j_2-1)(j_1+j_2-1)} \begin{pmatrix} \sqrt{j_2(2j_2-1))} \\ -\sqrt{(2j_1-1)(2j_2-1)} \\ \sqrt{j_1(2j_1-1)} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

規格化するために

$$
\begin{aligned}
j_2(2j_2-1) + (2j_1-1)(2j_2-1) + j_1(2j_1-1) &= 2j_2^2 - j_2 + 4j_1j_2 - 2j_1 - 2j_2 + 1 + 2j_1^2 - j_1 \\
&= 2j_1^2 - 3j_1 - 3j_2 + 2j_2^2 + 4j_1j_2 + 1 \\
&= 2(j_1+j_2)^2 - 3(j_1+j_2) + 1 \\
&= [(2j_1+j_2) - 1](j_1+j_2-1)
\end{aligned}
$$

に注意すれば

$$
\psi'/\|\psi'\| = \frac{1}{\sqrt{(2j_1+2j_2-1)(j_1+j_2-1)}} \begin{pmatrix} \sqrt{j_2(2j_2-1))} \\ -\sqrt{(2j_1-1)(2j_2-1)} \\ \sqrt{j_1(2j_1-1)} \end{pmatrix}
$$

$$
|j_1+j_2-2, j_1+j_2-2\rangle = \psi \frac{1}{\sqrt{(j_1+j_2-1)(2j_1+2j_2-1)}} \begin{pmatrix} \sqrt{j_2(2j_2-1)} \\ -\sqrt{(2j_1-1)(2j_2-1)} \\ \sqrt{j_1(2j_1-1)} \end{pmatrix}
$$

これから

$$
\begin{aligned}
\langle j_1 j_1 - 2, j_2 j_2 | j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 2 \rangle &= \sqrt{\frac{j_2(2j_2 - 1)}{(j_1 + j_2 - 1)(2j_1 + 2j_2 - 1)}} \\
\langle j_1 j_1 - 1, j_2 j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 2 \rangle &= -\sqrt{\frac{(2j_1 - 1)(2j_2 - 1)}{(j_1 + j_2 - 1)(2j_1 + 2j_2 - 1)}} \\
\langle j_1 j_1, j_2 j_2 - 2 | j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 2 \rangle &= \sqrt{\frac{j_1(2j_1 - 1)}{(j_1 + j_2 - 1)(2j_1 + 2j_2 - 1)}}
\end{aligned}
$$

以降の係数も同様に定まる。

2.5.4　$1 \otimes 1$ の例

ここでは2つのスピン1を合成してみよう。まず

$$
|2, 2\rangle = |1, 1, 1, 1\rangle
$$

これから

$$
\begin{aligned}
|2, 1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{4}} J_- |1, 1, 1, 1\rangle = \frac{1}{2\hbar}(J_{1-}|1, 1\rangle \otimes |1, 1\rangle + |1, 1\rangle \otimes J_{2-}|1, 1\rangle) \\
&= \frac{1}{2}(\sqrt{2}|1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle + |1, 0\rangle \otimes \sqrt{2}|1, 1\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0, 1, 1\rangle + |1, 1, 1, 0\rangle) \\
&= (|1, 0, 1, 1\rangle, |1, 1, 1, 0\rangle) \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

続いて

$$
\begin{aligned}
|2, 0\rangle &= \frac{1}{\hbar^2\sqrt{4 \cdot 3 \cdot 1 \cdot 2}} J_-^2 |2, 2\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar^2\sqrt{24}}(J_{1-}^2 + 2J_{1-}J_{2-} + J_{2-}^2)|1, 1, 1, 1\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{24}}(\sqrt{2 \cdot 2}|1, -1, 1, 1\rangle + 2 \cdot 2|1, 0, 1, 0\rangle + \sqrt{2 \cdot 2}|1, 1, 1, -1\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}}(|1, -1, 1, 1\rangle + 2|1, 0, 1, 0\rangle + |1, 1, 1, -1\rangle) \\
&= (|1, -1, 1, 1\rangle, |1, 0, 1, 0\rangle, |1, 1, 1, -1\rangle) \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
|2,-1\rangle &= \frac{1}{\hbar^2\sqrt{4\cdot 3\cdot 2\cdot 2\cdot 3}}J_-^3|2,2\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar^3 12}(J_{1-}^3+3J_{1-}^2J_{2-}+3J_{1-}J_{2-}^2+J_{2-}^3)|1,1,1,1\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar^3 12}(3J_{1-}^2J_{2-}+3J_{1-}J_{2-}^2)|1,1,1,1\rangle \\
&= \frac{1}{12}(3\sqrt{2\cdot 2}\cdot\sqrt{2}|1,-1,1,0\rangle+3\sqrt{2\cdot 2}\cdot\sqrt{2}|1,-01,-1\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,-1,1,1\rangle+|1,1,1,-1\rangle)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
|2,-2\rangle &= \frac{1}{\hbar^4\sqrt{4\cdot 3\cdot 2\cdot\cdot 2\cdot 3\cdot 4}}J_-^4|2,2\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar^4 24}(J_{1-}^4+\begin{pmatrix}4\\1\end{pmatrix}J_{1-}^3J_{2-}+\begin{pmatrix}4\\2\end{pmatrix}J_{1-}^2J_{2-}^2+\begin{pmatrix}4\\3\end{pmatrix}J_{1-}J_{2-}^3+J_{2-}^4)|1,1,1,1\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar^4 24}6J_{1-}^2J_{2-}^2|1,1,1,1\rangle \\
&= \frac{1}{24}6(2\cdot 2)|1,-1,1,-1\rangle \\
&= |1,-1,1,-1\rangle
\end{aligned}
$$

$m=1$ の状態には上記の $|2,1\rangle$ 以外にももう一つあり、それが $|1,1\rangle$ のはずで、これらが完全系をつくる

$$
\begin{aligned}
(|2,1\rangle,|1,1\rangle) &= (|1,0,1,1\rangle,|1,1,1,0\rangle)M \\
&= (|1,0,1,1\rangle,|1,1,1,0\rangle)\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & * \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & *\end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

ここで、直交するように埋めれば

$$
(|2,1\rangle,|1,1\rangle) = (|1,0,1,1\rangle,|1,1,1,0\rangle)\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}
$$

これをつかって

$$
\begin{aligned}
|1,0\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} J_- |1,1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} (J_{1-} + J_{2-})(|1,0,1,1\rangle, |1,1,1,0\rangle) \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{2}|1,-1,1,1\rangle + \sqrt{2}|1,0,1,0\rangle, \sqrt{2}|1,0,1,0\rangle) + \sqrt{2}|1,1,1,-1\rangle) \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\
&= (|1,-1,1,1\rangle, |1,0,1,0\rangle, |1,1,1,-1\rangle) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\
&= (|1,-1,1,1\rangle, |1,0,1,0\rangle, |1,1,1,-1\rangle) \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\
|1,-1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} J_- |1,0\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} (J_{2-}|1,-1,1,1\rangle, (J_{1-} + J_{2-})|1,0,1,0\rangle, J_{1-}|1,1,1,-1\rangle) \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\
&= (|1,-1,1,0\rangle, |1,-1,1,0\rangle + |1,0,1,-1\rangle, |1,0,1,-1\rangle) \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\
&= (|1,-1,1,0\rangle, |1,0,1,-1\rangle) \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\
&= (|1,-1,1,0\rangle, |1,0,1,-1\rangle) \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

これは確かに

$$
J_- |1,-1\rangle = (J_{1-} + J_{2-})|1,-1\rangle = 0
$$

最後に $m = 0$ の状態は 3 つあって

$$
\begin{aligned}
(|2,0\rangle, |1,0\rangle, |0,0\rangle) &= (|1,-1,1,1\rangle, |1,0,1,0\rangle, |1,1,1,-1\rangle) M \\
M &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & * \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & * \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & * \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

最後の列を他と直交するようにうめれば

$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

つまり

$$|0,0\rangle = (|1,-1,1,1\rangle, |1,0,1,0\rangle, |1,1,1,-1\rangle) \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

M をキチンと決めるには

$$\begin{aligned} M &= (\psi_C, \psi) \\ \psi_C &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と書いて

$$E_3 = MM^\dagger = \psi_C\psi_C^\dagger + \psi\psi^\dagger \equiv P + \psi\psi^\dagger$$

より

$$\psi = (E_3 - P)\psi$$

ここで

$$(E_3 - P)^2 = E_3 - P$$

より任意の ϕ に対して

$$\psi \propto (E_3 - P)\phi$$

よって

$$\begin{aligned} \psi &= \psi'/\|\psi'\| \\ \psi' &= (E_3 - P)\phi \end{aligned}$$

今の場合

$$
\begin{aligned}
P &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \\
E_3 - P &= \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

$\phi = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ として $\psi' = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}$ これを規格化して $\psi = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$。これは先ほど求めたものに等しい。

2.6 既約テンソルとウィグナー・エッカートの定理

2.6.1 既約テンソル演算子

まず、球面調和関数 $Y_{\ell m}$, 任意の関数 f として

$$\begin{aligned} L_z(Y_{\ell m}f) &= (L_zY_{\ell m})f + Y_{\ell m}L_zf \\ &= \hbar mY_{\ell m} + Y_{\ell m}f \\ L_\pm(Y_{\ell m}f) &= (L_\pm Y_{\ell m})f + Y_{\ell m}L_\pm f \\ &= \hbar\sqrt{(\ell\mp m)(\ell\pm m+1)}Y_{\ell m\pm 1}f + Y_{\ell m}L_\pm f \end{aligned}$$

となる。これを次のように書こう

$$\begin{aligned} [L_z, Y_{\ell m}] &= \hbar mY_{\ell m} \\ [L_\pm, Y_{\ell m}] &= \hbar\sqrt{(\ell\mp m)(\ell\pm m+1)}Y_{\ell m\pm 1} \end{aligned}$$

特に $\ell = 1$ とすれば第 2 式は

$$[L_\pm, Y_{1m}] = \hbar\sqrt{(1\mp m)(2\pm m)}Y_{1m\pm 1}$$

つまり

$$\begin{aligned} [L_+, Y_{11}] &= 0, & [L_-, Y_{11}] &= \hbar\sqrt{2}Y_{10} \\ [L_+, Y_{10}] &= \hbar\sqrt{2}Y_{11}, & [L_-, Y_{10}] &= \hbar\sqrt{2}Y_{1-1} \\ [L_+, Y_{1-1}] &= \hbar\sqrt{2}Y_{10}, & [L_-, Y_{1-1}] &= 0 \end{aligned}$$

これを角運動量 $\boldsymbol{J}$ ($[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$) の代数

$$\begin{aligned} [J_+, J_+] &= 0, & [J_-, J_+] &= -2\hbar J_z \\ [J_+, J_z] &= -\hbar J_+, & [J_-, J_z] &= \hbar J_- \\ [J_+, J_-] &= 2\hbar J_z, & [J_-, J_-] &= 0 \end{aligned}$$

と比べてみれば、$[J_{z,\pm}, \cdot]$ の $\cdot$ の位置で

$$\begin{aligned} Y_{11} &\rightleftarrows -\frac{1}{\sqrt{2}}J_+ \\ Y_{10} &\rightleftarrows J_z \\ Y_{1-1} &\rightleftarrows \frac{1}{\sqrt{2}}J_- \end{aligned}$$

という対応がある。

よって球面調和関数を一般化して 0 以上の整数 k に対して、$T_q^{(k)}$, $q=-k,-k+1\cdots,k-1,k$ という $2k+1$ 個の演算子を以下の関係式を満たすものを k 階の既約テンソル演算子と呼ぶ。

$$\begin{aligned}[J_z, T_q^{(k)}] &= \hbar k T_q^{(k)} \\ [J_\pm, T_q^{(k)}] &= \hbar\sqrt{(k\mp q)(k\pm m+1)}T_{q\pm 1}^{(k)}\end{aligned}$$

よって上記の対応は角運動量自身が $k=1$ 階の既約演算子であることを示唆する。

より一般に全章の議論によればベクトル演算子 $\boldsymbol{V}=\begin{pmatrix}V_x\\V_y\\V_z\end{pmatrix}$ とは軌道角運動量演算子 $\boldsymbol{L}$ に対して

$$[L_i, V_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}V_k$$

を満たすものであり、座標 $\boldsymbol{r}$, 運動量 $\boldsymbol{r}$, 角運動量 $\boldsymbol{J}$ がこれを満たした。よって

$$\begin{aligned}T_1^{(1)} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(J_x+iJ_y) \\ T_0^{(1)} &= J_z \\ T_{-1}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(J_x-iJ_y)\end{aligned}$$

とすれば、これが 1 階の既約テンソル演算子となることを意味する。

2.6.2　既約テンソル演算子の積

ここでは次のような k_i 階の既約テンソル演算子の積を考えてみよう

$$T_q^k = T_{q_1}^{(k_1)}T_{q_2}^{(k_2)}\langle k_1q_1, k_2q_2|kq\rangle$$

ここで $\langle k_1q_1, k_2q_2|kq\rangle$ はクレブシュ・ゴルダン係数である。これと角運動量演算子との交換子を計算すれば

$$[\boldsymbol{J}, T_{q_1}^{(k_1)}T_{q_2}^{(k_2)}] = [\boldsymbol{J}, T_{q_1}^{(k_1)}]T_{q_2}^{(k_2)} + T_{q_1}^{(k_1)}[\boldsymbol{J}, T_{q_2}^{(k_2)}]$$

に注意して

$$\begin{aligned}[J_z, T_q^{(k)}] &= [J_z, T_{q_1}^{(k_1)}T_{q_2}^{(k_2)}]\langle k_1q_1, k_2q_2|kq\rangle \\ &= \Big[[J_z, T_{q_1}^{(k_1)}]T_{q_2}^{(k_2)} + T_{q_1}^{(k_1)}[J_z, T_{q_2}^{(k_2)}]\Big]\langle k_1q_1, k_2q_2|kq\rangle \\ &= \hbar(q_1+q_2)T_{q_1}^{(k_1)}T_{q_2}^{(k_2)}\langle k_1q_1, k_2q_2|kq\rangle \\ &= \hbar(q_1+q_2)T_q^{(k)}\end{aligned}$$

同様に

$$
\begin{aligned}
[J_\pm, T_q^{(k)}] &= [J_\pm, T_{q_1}^{(k_1)} T_{q_2}^{(k_2)}] \langle k_1 q_1, k_2 q_2 | kq \rangle \\
&= \Big[[J_\pm, T_{q_1}^{(k_1)}] T_{q_2}^{(k_2)} + T_{q_1}^{(k_1)} [J_\pm, T_{q_2}^{(k_2)}] \Big] \langle k_1 q_1, k_2 q_2 | kq \rangle \\
&= \hbar \Big[\sqrt{(k_1 \mp q_1)(k_1 \pm q_1 + 1)} T_{q_1 \pm 1}^{(k_1)} T_{q_2}^{(k_2)} \\
&\qquad + \sqrt{(k_2 \mp q_2)(k_2 \pm q_2 + 1)} T_{q_1}^{(k_1)} T_{q_2 \pm 1}^{(k_2)} \Big] \langle k_1 q_1, k_2 q_2 | kq \rangle \\
&= \hbar T_{q_1}^{(k_1)} T_{q_2}^{(k_2)} \Big[\sqrt{(k_1 \mp (q_1 \mp 1))(k_1 \pm (q_1 \mp 1) + 1)} \langle k_1 q_1 \mp 1, k_2 q_2 | kq \rangle \\
&\qquad + \sqrt{(k_2 \mp (q_2 \mp 1))(k_2 \pm (q_2 \mp 1) + 1)} \langle k_1 q_1, k_2 q_2 \mp 1 | kq \rangle \Big] \\
&= \hbar T_{q_1}^{(k_1)} T_{q_2}^{(k_2)} \Big[\sqrt{(k_1 \mp q_1 + 1)(k_1 \pm q_1)} \langle k_1 q_1 \mp 1, k_2 q_2 | kq \rangle \\
&\qquad + \sqrt{(k_2 \mp q_2 + 1)(k_2 \pm q_2)} \langle k_1 q_1, k_2 q_2 \mp 1 | kq \rangle \Big]
\end{aligned}
$$

ここで一般に

$$
|jm \pm 1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}} J_\pm |jm\rangle
$$

だから

$$
\begin{aligned}
\hbar \sqrt{(k_1 \mp q_1 + 1)(k_1 \pm q_1)} |k_1 q_1 \mp 1\rangle &= J_{1\mp} |k_1 q_1\rangle \\
\hbar \sqrt{(k_2 \mp q_2 + 1)(k_2 \pm q_2)} |k_2 q_2 \mp 1\rangle &= J_{2\mp} |k_2 q_2\rangle
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
[J_\pm, T_q^{(k)}] &= T_{q_1}^{(k_1)} T_{q_2}^{(k_2)} \langle k_1 q_1, k_2 q_2 | (J_{1\mp}^\dagger + J_{2\mp}^\dagger) | kq \rangle \\
&= T_{q_1}^{(k_1)} T_{q_2}^{(k_2)} \langle k_1 q_1, k_2 q_2 | J_\pm | kq \rangle \\
&= \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q_1}^{(k_1)} T_{q_2}^{(k_2)} \langle k_1 q_1, k_2 q_2 | kq \pm 1 \rangle \\
&= \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q \pm 1}^{(k)}
\end{aligned}
$$

となり $T_q^{(k)}$ は $k = k_1 + k_2$ 階の既約テンソル演算子となる。
　またクレブシュゴルダン係数の直交性より

$$
\sum_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \sum_{q=-k}^{k} \langle kq | k_1 q_1', k_2 q_2' \rangle T_q^{(k)} = T_{q_1'}^{(k_1')} T_{q_2'}^{(k_2')}
$$

これは, Clebsch-Gordan 係数の対称性も使って以下の様にかける。

$$
\begin{aligned}
T^{(k_1)}_{q_1} T^{(k_2)}_{q_2} &= T^{(k)}_q \langle kq | k_1 q_1, k_2 q_2 \rangle \\
&= \langle k_1 q_1, k_2 q_2 | kq \rangle T^{(k)}_q
\end{aligned}
$$

2.6.3　2 つのベクトル演算子の積

2 つのベクトル演算子 $\boldsymbol{U}$, $\boldsymbol{V}$ からテンソル

$$(UV)_{ij,i'j'j} = U_{ii'} V_{jj'}$$

を構成できるが、一般にこれは既約でない。

ここで $= 1 \otimes 1$ に対応する CG 係数を復習すれば、非自明なものは以下の通り

$$1 \otimes 1 = 2 \oplus +1 \oplus 0$$

j	m	m_1	m_2	$\langle j_1 m_1, j_2 m_2 \| jm \rangle$
2	2	1	1	1
2	1	0	1	$1/\sqrt{2}$
2	1	1	0	$1/\sqrt{2}$
2	0	-1	1	$1/\sqrt{6}$
2	0	0	0	$2/\sqrt{6}$
2	0	1	-1	$1/\sqrt{6}$
2	-1	-1	0	$1/\sqrt{2}$
2	-1	0	-1	$1/\sqrt{2}$
2	-2	-1	-1	1

j	m	m_1	m_2	$\langle j_1 m_1, j_2 m_2 \| jm \rangle$
1	1	0	1	$-1/\sqrt{2}$
1	1	1	0	$1/\sqrt{2}$
1	0	-1	1	$-1/\sqrt{2}$
1	0	0	0	0
1	0	1	-1	$1/\sqrt{2}$
1	-1	-1	0	$-1/\sqrt{2}$
1	-1	0	-1	$1/\sqrt{2}$
0	0	-1	1	$1/\sqrt{3}$
0	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$
0	0	1	-1	$1/\sqrt{3}$

よって一階のテンソル演算子

$$
\begin{aligned}
U_1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(U_x + iU_y) \\
U_0 &= U_z \\
U_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(U_x - iU_y)
\end{aligned}
$$

V も同様、対してまず 0 階の既約テンソル（スカラー）は

$$
\begin{aligned}
T_0^{(0)} &= U_{m_1}V_{m_2}\langle 1m_1, 2m_2|00\rangle \\
&= U_1V_{-1}\langle 11, 1-1|00\rangle + U_0V_0\langle 10, 10|00\rangle + U_{-1}V_1\langle -11, 21|00\rangle \\
&= -U_+V_-(1/\sqrt{2^2\cdot 3}) + U_zV_z(-1/\sqrt{3}) - U_-V_+(1/\sqrt{2^2\cdot 3}) \\
&= (-1/\sqrt{3})(\frac{1}{2}(U_+V_- + U_-V_+) + U_zV_z) \\
&= -\frac{1}{3}\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{V}
\end{aligned}
$$

続いて 1 階の既約テンソル (ベクトル) は

$$
\begin{aligned}
T_1^{(1)} &= U_{m_1}V_{m_2}\langle 1m_1, 2m_2|11\rangle \\
&= U_0V_1\langle 10, 11|11\rangle + U_1V_0\langle 11, 10|11\rangle \\
&= U_z(-1/\sqrt{2})V_+(-1/\sqrt{2}) + (-1/\sqrt{2})U_+V_z(1/\sqrt{2}) \\
&= \frac{1}{2}\big(U_z(V_x+iV_y) - (U_x+iU_y)V_z\big) \\
&= \frac{1}{2}\big((U_zV_x - U_xV_z) - i(U_yV_z - U_zV_y)\big) \\
&= \frac{1}{2}\big((\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_y - i(\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_x) \\
&= \frac{-i}{2}(\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_+ \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_1
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
T_0^{(1)} &= U_{m_1}V_{m_2}\langle 1m_1, 2m_2|10\rangle \\
&= U_{-1}V_1\langle 1-1, 11|10\rangle + U_1V_{-1}\langle 11, 1-1|10\rangle \\
&= -(1/2)U_-V_+(-1/\sqrt{2}) - (1/2)U_+V_-(1/\sqrt{2}) \\
&= \frac{1}{2\sqrt{2}}\big((U_x-iU_y)(V_x+iV_y) - (U_x+iU_y)(V_x-iV_y)\big) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(iU_xV_y - iU_yV_x) \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_z \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
T^{(1)}_{-1} &= U_{m_1}V_{m_2}\langle 1m_1, 2m_2|1-1\rangle \\
&= U_0V_{-1}\langle 10, 1-1|1-1\rangle + U_{-1}V_0\langle 1-1, 10|1-1\rangle \\
&= U_z(1/\sqrt{2})V_-(1/\sqrt{2}) + (1/\sqrt{2})U_-V_z(-1/\sqrt{2}) \\
&= \frac{1}{2}\big(U_z(V_x-iV_y) - (U_x-iU_y)V_z\big) \\
&= \frac{1}{2}\big((U_zV_x - U_xV_z) + i(U_yV_z - U_zV_y)\big) \\
&= \frac{1}{2}\big((\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_y + i(\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_x\big) \\
&= \frac{i}{2}(\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_- \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_{-1}
\end{aligned}
$$

あわせて

$$
T^{(1)}_q = \frac{i}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_q
$$

2 階の既約テンソルは

$$
T^{(2)}_2 = U_{m_2}V_{m_2}\langle 1m_1, 1m_2|22\rangle = U_1V_1\langle 11, 11|22\rangle = U_1V_1
$$

$$
T^{(2)}_{-2} = U_{m_2}V_{m_2}\langle 1m_1, 1m_2|2-2\rangle = U_{-1}V_{-1}\langle 1-1, 1-1|2-2\rangle = U_{-1}V_{-1}
$$

$$
\begin{aligned}
T^{(2)}_1 &= U_{m_1}V_{m_2}\langle 1m_1, 2m_2|21\rangle \\
&= U_0V_1\langle 10, 11|21\rangle + U_1V_0\langle 11, 10|21\rangle \\
&= U_0V_1(1/\sqrt{2}) + U_1V_0(1/\sqrt{2}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(U_0V_1 + U_1V_0)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
T^{(2)}_{-1} &= U_{m_1}V_{m_2}\langle 1m_1, 2m_2|2-1\rangle \\
&= U_0V_{-1}\langle 10, 1-1|2-1\rangle + U_{-1}V_0\langle 1-1, 10|2-1\rangle \\
&= U_0V_{-1}/\sqrt{2}) + U_{-1}V_0(1/\sqrt{2}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(U_0V_{-1} + U_{-1}V_0)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
T_0^{(2)} &= U_{m_1}V_{m_2}\langle 1m_1, 2m_2|20\rangle \\
&= U_{-1}V_1\langle 1-1, 11|20\rangle + U_0V_0\langle 10, 10|20\rangle + U_1V_{-1}\langle 11, 1-1|20\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}}(U_{-1}V_1 + 2U_0V_0 + U_1V_{-1})
\end{aligned}
$$

2.6.4　ウィグナー・エッカートの定理

次にテンソル演算子と規格直交化された状態 $\{|j_2m_2\rangle\}$ の次のような積を考えて見ましょう。

$$
\begin{aligned}
|jm\rangle' &= \sum_{q_1m_2} T_{q_1}^{(k_1)}|j_2m_2\rangle\langle k_1q_1, j_2m_2|jm\rangle \\
&\equiv \sum_{q_1m_2} |\Omega_{q_1,m_2}^{k_1j_2}\rangle\langle k_1q_1, j_2m_2|jm\rangle \\
|\Omega_{q_1,m_2}^{k_1j_2}\rangle &= T_{q_1}^{(k_1)}|j_2m_2\rangle
\end{aligned}
$$

この $|\Omega_{q_1,m_2}^{k_1j_2}\rangle$ に $\boldsymbol{J}$ を作用させれば

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{J}|\Omega_{q_1,m_2}^{k_1j_2}\rangle &= \boldsymbol{J}T_{q_1}^{(k_1)}|j_2m_2\rangle \\
&= [\boldsymbol{J}, T_{q_1}^{(k_1)}]|j_2m_2\rangle + T_{q_1}^{(k_1)}\boldsymbol{J}|j_2m_2\rangle
\end{aligned}
$$

となる。

つまり

$$
\begin{aligned}
J_z|\Omega_{q_1,m_2}^{k_1j_2}\rangle &= \hbar(q_1+m_2)|\Omega_{q_1,m_2}^{k_1j_2}\rangle \\
J_\pm|\Omega_{q_1,m_2}^{k_1j_2}\rangle &= \hbar\sqrt{(k_1\mp q_1)(k_1\pm q_1+1)}T_{q_1\pm 1}^{(k_1)}|j_2m_2\rangle \\
&\qquad +\hbar\sqrt{(j_2\mp m_2)(j_2\pm m_2+1)}T_{q_1}^{(k_1)}|j_2m_2\pm 1\rangle \\
&= \hbar\sqrt{(k_1\mp q_1)(k_1\pm q_1+1)}|\Omega_{q_1\pm 1,m_2}^{k_1j_2}\rangle \\
&\qquad +\hbar\sqrt{(j_2\mp m_2)(j_2\pm m_2+1)}|\Omega_{q_1,m_2\pm 1}^{k_1j_2}\rangle
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
J_z|jm\rangle' &= \sum_{q_1,m_2} \hbar(q_1+m_2)|\Omega^{k_1 j_2}_{q_1,m_2}\rangle\langle k_1 q_1 j_2 m_2|jm\rangle \\
&= \sum_{q_1,m_2} \hbar(q_1+m_2)|jm\rangle' \\
&= \hbar m|jm\rangle' \\
J_\pm|jm\rangle' &= \sum_{q_1 m_2} \Bigg[\hbar\sqrt{(k_1\mp q_1)(k_1\pm q_1+1)}T^{(k_1)}_{q_1\pm1}|j_2m_2\rangle\langle k_1q_1j_2m_2|jm\rangle \\
&\qquad +\hbar\sqrt{(j_2\mp m_2)(j_2\pm m_2+1)}T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2\pm1\rangle\langle k_1q_1j_2m_2|jm\rangle\Bigg] \\
&= \sum_{q_1 m_2} \Bigg[\hbar\sqrt{(k_1\mp(q_1\mp1))(k_1\pm(q_1\mp1)+1)}T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2\rangle\langle k_1q_1\mp1,j_2m_2|jm\rangle \\
&\qquad +\hbar\sqrt{(j_2\mp(m_2\mp1))(j_2\pm(m_2\mp1)+1)}T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2\rangle\langle k_1q_1,j_2m_2\mp1|jm\rangle\Bigg] \\
&= \sum_{q_1 m_2} \Bigg[\hbar\sqrt{(k_1\mp q_1+1))(k_1\pm q_1)}T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2\rangle\langle k_1q_1\mp1,j_2m_2|jm\rangle \\
&\qquad +\hbar\sqrt{(j_2\mp m_2+1))(j_2\pm m_2)}T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2\rangle\langle k_1q_1,j_2m_2\mp1|jm\rangle\Bigg] \\
&= \sum_{q_1 m_2} \Bigg[T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2\rangle J_{1\mp}|k_1q_1,j_2m_2\rangle)^\dagger|jm\rangle + T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2\rangle(J_{2\mp}|k_1q_1,j_2m_2\rangle)^\dagger jm\rangle\Bigg] \\
&= \sum_{q_1 m_2} T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2\rangle\langle k_1q_1,j_2m_2|(J_{1\pm}+J_{2\pm)})|jm\rangle \\
&= \sum_{q_1 m_2} T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2\rangle\langle k_1q_1,j_2m_2|J_\pm|jm\rangle \\
&= \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\sum_{q_1 m_2} T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2\rangle\langle k_1q_1,j_2m_2|jm\pm1\rangle \\
&= \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}|jm\rangle'
\end{aligned}
$$

となる。[9] [10] すなわち $|jm\rangle'$ も角運動量の固有状態となる。

---

[9]

$$
\hbar\sqrt{(j\pm m)(j\mp m+1)}|jm\mp1\rangle \quad = \quad J_\mp|jm\rangle
$$

[10]尚途中の変形には 2 つの角運動量があたらかも存在するような計算を行ったが、前後をみればこれはクレブシュ・ゴルダン係数に関する関係式を与えるにすぎないので今の場合にも正しい変形となる。

ここでクレブシュ・ゴルダン係数の直交性から逆に解いて

$$|\Omega^{k_1 j_2}_{q_1,m_2}\rangle = \sum_{jm} |jm\rangle' \langle jm|k_1 q_1, j_2 m_2\rangle$$

これと $|j'm'\rangle$ との内積をとれば

$$\begin{aligned}
\langle j'm'|\Omega^{k_1 j_2}_{q_1,m_2}\rangle &= \langle j'm'|T^{(k_1)}_{q_1}|j_2 m_2\rangle \\
&= \sum_{jm} \langle j'm'|jm\rangle' \langle jm|k_1 q_1, j_2 m_2\rangle \\
&= \sum_{jm} \delta_{jj'}\delta_{mm'} \langle jm|jm\rangle' \langle jm|k_1 q_1, j_2 m_2\rangle \\
&= \langle j'm'|j'm'\rangle' \langle j'm'|k_1 q_1, j_2 m_2\rangle
\end{aligned}$$

書き直して

$$\langle jm|\Omega^{k_1 j_2}_{q_1,m_2}\rangle = \langle jm|jm\rangle' \langle jm|k_1 q_1, j_2 m_2\rangle$$

さらに $\langle jm|jm\rangle'$ は m に依らないことは次の変形でわかる

$$\begin{aligned}
\langle jm-1|jm-1\rangle' &= \frac{1}{\sqrt{\hbar(j+m)(j-m+1)}} \langle jm-1|J_-|jm\rangle' \\
&= \frac{1}{\sqrt{\hbar(j+m)(j-m+1)}} (J_+|jm-1\rangle)^\dagger |jm\rangle' \\
&= (|jm\rangle)^\dagger |jm\rangle' \\
&= \langle jm|jm\rangle'
\end{aligned}$$

そこで

$$\langle jm|jm\rangle' = \frac{\langle j\|T^{k_1}_{q_1}\|j\rangle}{\sqrt{2j+1}}$$

と書いて分子を 還元行列要素 とする。この時、上関係式より

$$\begin{aligned}
\langle jm|T^{(k_1)}_{q_1}|j_2 m_2\rangle &= \langle jm|jm\rangle' \langle jm|k_1 q_1, j_2 m_2\rangle \\
&= \frac{\langle j\|T^{(k_1)}_{q_1}\|j_2\rangle}{\sqrt{2j+1}} \langle jm|k_1 q_1, j_2 m_2\rangle
\end{aligned}$$

よりこのように行列要素が幾何学的な m に依存する クレブシュ・ゴルダン係数 とそれ以外に分かれることを ウィグナー・エッカートの定理 という。

　これより計算しやすい m^0, m_2^0 に対して行列要素を計算することで

$$\langle jm^0|T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2^0\rangle \quad = \quad \frac{\langle j\|T^{(k_1)}_{q_1}\|j_2\rangle}{\sqrt{2j+1}}\langle jm^0|k_1q_1, j_2m_2^0\rangle$$

から

$$\frac{\langle j\|T^{(k_1)}_{q_1}\|j_2\rangle}{\sqrt{2j+1}} \quad = \quad \frac{\langle jm^0|T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2^0\rangle}{\langle jm^0|k_1q_1, j_2m_2^0\rangle}$$

と還元行列要素を決定すれば任意の m, m_2 に対して

$$\langle jm|T^{(k_1)}_{q_1}|j_2m_2\rangle \quad = \quad \frac{\langle j\|T^{(k_1)}_{q_1}\|j_2\rangle}{\sqrt{2j+1}}\langle jm|k_1q_1, j_2m_2\rangle$$

と CG 係数のみで任意の行列要素が決定できることとなる。
　すぐに導かれるしかし重要な帰結としてスカラー演算子 $\mathcal{O}_S$ に対して

$$\langle jm|\mathcal{O}_S|j'm'\rangle \quad = \quad 0, \quad j-j \neq 0$$

ベクトル演算子 $\mathcal{O}_V$ に対して

$$\langle jm|\mathcal{O}_V|j'm'\rangle \quad = \quad 0, \quad j-j' \neq 0, \pm 1$$

第3章　回転群とその表現

以下この節では $\hbar = 1$ とする。

3.1　連続群としての回転群

3.1.1　回転操作の作る群

以前の議論に従えば，回転 とは次の座標変換として定義される。

$$\boldsymbol{r} \quad \mapsto \quad \boldsymbol{r}' = R\boldsymbol{r}$$

ここで行列 R(回転行列) は

$$\begin{aligned} R &\in SO(3) \\ \widetilde{R}R &= E_3 \\ \det R &= 1 \end{aligned}$$

であり、

$$|\boldsymbol{r}'| \quad = \quad |\boldsymbol{r}|$$

つまり、回転とは長さを変えない変換である。

なお、ベクトル演算子としての座標 $\boldsymbol{r}$ は回転操作によって次のように変換されることにも注意しよう。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}' &= \widetilde{R}\boldsymbol{r} \\ (x', y', z') &= (x, y, z)R \end{aligned}$$

ここで、一般に回転行列は次の関係式を満たす。

$$\det(R - E_3) \quad = \quad \det(\widetilde{R} - E_3) = \det(R^{-1} - E_3) = \det R^{-1}\det(E_3 - R) = -\det(R - E_3)$$

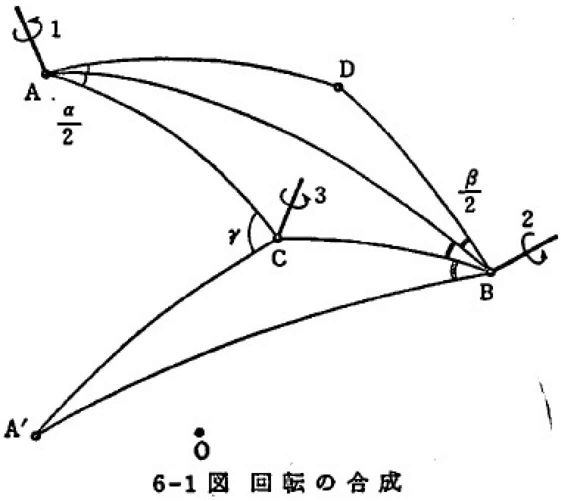

図 3.1: 回転の合成 (犬井-田辺-小野寺、応用群論より)

よって $\det(R-E_3)=0$ であり、以下のような $\boldsymbol{v}$ が存在する

$$R\boldsymbol{v} \;=\; \boldsymbol{v}$$

つまり $\boldsymbol{v}$ 上の点は回転で不変、つまり $\boldsymbol{v}$ は回転軸となる。よって、以後回転を回転軸$\boldsymbol{v}$ と回転角 α で $R_\alpha(\boldsymbol{v})$ と表現しよう。

ここでまず $\boldsymbol{v}_1$ 軸周りに α 回転、続いて $\boldsymbol{v}_2$ 軸周りに β 回転することを考えよう。$R=R_\beta(\boldsymbol{v}_2)R_\alpha(\boldsymbol{v}_1)$ とすれば

$$\begin{aligned}\widetilde{R}R &= \widetilde{R}_\alpha\widetilde{R}_\beta R_\beta R_\alpha = E_3\\ \det R &= \det R_\beta \det R_\alpha = 1\end{aligned}$$

であるからこれも回転となるが、その回転角と中心は図の $\boldsymbol{v}_3$ と γ となる。

ここで一連の対称操作 R に対して以下の関係式が成り立つとき、対称操作は群を作ると呼ぶ。

- 積について閉じている

$$R_2R_1 \;=\; {}^\exists R$$

- 結合律

$$(R_3R_2)(R_1) \;=\; R_3(R_2R_1)$$

- 単位元の存在

$$R\,{}^{\exists}e \;=\; {}^{\exists}eR = R$$

- 逆元の存在

$$R\,{}^{\exists}R^{-1} \;=\; {}^{\exists}R^{-1}R = e$$

よって回転操作は群をつくる。これを回転群と呼ぶ。この群はここで説明したように回転軸と回転角という連続なパラメターでラベルされるが、このような連続パラメターによりラベルされる群を連続群とよぶ。

回転を回転軸 $\hat{\boldsymbol{v}}$ と回転角 $|\boldsymbol{v}|$ で $R(\boldsymbol{v})$ と表せば回転軸は回転により不変だから $R(\boldsymbol{v})\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}$ よって、任意の回転 Q に対して

$$QR(\boldsymbol{v})Q^{-1} \cdot Q\boldsymbol{v} \;=\; Q\boldsymbol{v}$$

より回転 $R' = QRQ^{-1}$ はベクトル $Q\boldsymbol{v}$ を動かさない。つまり回転 R' の軸は $Q\boldsymbol{v}$ である。また QRQ^{-1} は基底変換ともみることができるので R と $R' = QRQ^{-1}$ の回転角は等しい。また、Q は R の軸を R' の軸に移す回転ともいえる。このような

$$R' \;=\; QRQ^{-1}$$

のような関係にある対称操作 R と R' は同じ class(類) に属すると呼ぶ。

3.1.2 オイラー角による回転の表示

一般の回転 R を次のような回転の合成として考える。

1. z 軸周りの角度 α の回転 $R_\alpha(z)$。座標軸は $(x_1, y_1, z_1 = z)$, へ。

2. 続いて新しい y_1 軸周りの角度 β の回転 $R_\beta(y_1)$。座標軸は $(x_2, y_2 = y_1, z_2)$ へ。

$$R_\beta(y_1) \;=\; R_\alpha(z)R_\beta(y)[R_\alpha(z)]^{-1}$$

3. 続いてさらに新しい z_2 軸周りの角度 γ の回転 $R_\gamma(z_2)$

$$R_\gamma(z_2) \;=\; R_\beta(y_1)R_\gamma(z_1)[R_\beta(y_1)]^{-1}$$

ここで

$$R_\gamma(z_1) \;=\; R_\alpha(z)R_\gamma(z)[R_\alpha(z)]^{-1} = R_\gamma(z)$$

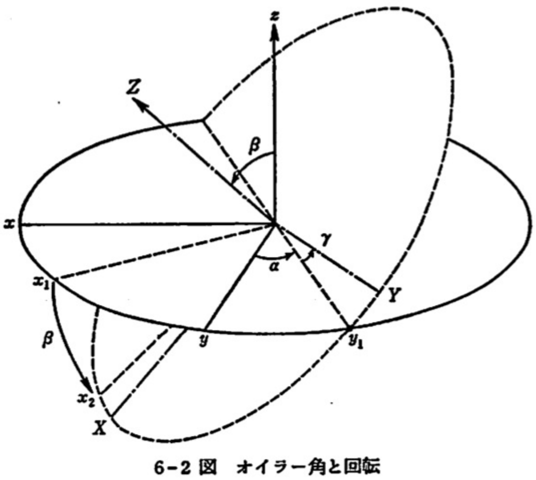

図 3.2: オイラー角 (犬井-田辺-小野寺、応用群論より)

よって

$$
\begin{aligned}
R(\alpha,\beta,\gamma) &= R_\gamma(z_2)R_\beta(y_1)R_\alpha(z) \\
&= R_\gamma(z_2)\cdot R_\beta(y_1)\cdot R_\alpha(z) \\
&= [R_\beta(y_1)R_\gamma(z_1)[R_\beta(y_1)]^{-1}]\cdot R_\beta(y_1)\cdot R_\alpha(z) \\
&= R_\beta(y_1)R_\gamma(z_1)\cdot R_\alpha(z) \\
&= R_\alpha(z)R_\beta(y)[R_\alpha(z)]^{-1}\cdot R_\gamma(z)\cdot R_\alpha(z) \\
&= R_\alpha(z)R_\beta(y)R_\gamma(z)
\end{aligned}
$$

これを オイラー角 α,β,γ による回転の表示とよぶ。
変域は

$$
\begin{aligned}
0 &\le \alpha < 2\pi \\
0 &\le \beta < 2\pi \\
0 &\le \gamma < 2\pi
\end{aligned}
$$

前節までの議論に従って $\hat{\boldsymbol{n}}$ 軸周りの角度 θ の回転 $R_\theta(\hat{\boldsymbol{n}})$ に対応するユニタリ変換、角運動量演算子を用いて

$$
R_\theta(\hat{\boldsymbol{n}}) = e^{-i\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{J}}
$$

と書ける。これからオイラー角による一般の回転 (に対応するユニタリ変換) を次のように書く。

$$R(\alpha,\beta,\gamma) \;=\; e^{-iJ_z\alpha}e^{-iJ_y\beta}e^{-iJ_z\gamma}$$

これら回転操作は群を作り、それぞれが連続なパラメター $\boldsymbol{n},\theta$ および α, β,γ 等により決まる。このような群を連続群とよぶ。

次節では対称操作が群を作ることの量子力学における意味を少し一般的にまとめてみよう。

3.1.3 対称性の作る群とその表現

ここで回転操作など一般の対称操作を R と書けば、前の議論に従って

$$\psi(\boldsymbol{r}) \;\mapsto\; R\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(R^{-1}\boldsymbol{r})$$

であったが、これを少し一般化して

$$\begin{aligned}\psi &\;\mapsto\; \psi^R = R\psi\\ |\psi\rangle &\;\mapsto\; R|\psi\rangle\end{aligned}$$

と書こう。以下、この変換は全空間での確率を保存しユニタリとする。

$$\begin{aligned}\langle\psi^R|\psi^R\rangle &= \langle\psi|R^\dagger R|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle\\ R^\dagger R &= 1\end{aligned}$$

関連して演算子 $\mathcal{O}$ は変換後と前が同じになるよう定めるとして

$$\langle\psi^R|\mathcal{O}^R|\psi^R\rangle \;=\; \langle\psi|R^\dagger\mathcal{O}^R R|\psi\rangle = \langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle$$

より

$$\mathcal{O}^R \;=\; R\mathcal{O}R^\dagger = R\mathcal{O}R^{-1}$$

となる。

特にハミルトニアン H がこの変換で不変なら

$$\begin{aligned}RHR^{-1} &= H\\ [H,R] &= 0\end{aligned}$$

とハミルトニアンは R と可換となる。

この時、一般にハミルトニアンの固有値 E が d 重に縮退しているとすれば、

$$H|\psi_i\rangle \;=\; |\psi_i\rangle E, \quad i = 1, \cdots, d$$

と書こう。これにユニタリ変換 R を作用させれば

$$RH|\psi_i\rangle \;=\; HR|\psi_i\rangle = R|\psi_i\rangle E$$

つまり $R|\psi_i\rangle$ も同じエネルギーの固有状態となるから、次のように $\{|\psi_i\rangle\}$ の線形結合として書けるはずである。

$$R|\psi_i\rangle \;=\; |\psi_j\rangle D_{ji}(R)$$

ここで線形結合の係数は対称操作 R に依存するはずであるから $D_{ji}(R)$ と書いた。これを

$$\begin{aligned} \psi &= (|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi)_d\rangle) \\ \{D(R)\}_{ji} &= D_{ji}(R) \end{aligned}$$

として、つぎのように書こう。

$$R\psi \;=\; \psi D(R)$$

なお、R がユニタリであるから

$$\begin{aligned} (R\psi)^\dagger &= \psi^\dagger R^\dagger = D^\dagger \psi^\dagger \\ \psi^\dagger R^\dagger R\psi &= \psi^\dagger\psi = E_d = D^\dagger\psi^\dagger\psi D = D^\dagger D \end{aligned}$$

と D も d 次元のユニタリ行列となる。

よって対称操作 R が群をつくり

$$R_{21} \;=\; R_2 R_1$$

とすれば

$$\begin{aligned} R_{21}\psi &= R_2R_1\psi = R_2\psi D(R_1) = \psi D(R_2)D(R_3) \\ &= \psi D(R_{21}) \end{aligned}$$

となる。これは群の操作 R ごとに定まる d 次元のユニタリ行列 $D(R)$ が

$$D(R_2R_1) \;=\; D(R_2)D(R_1)$$

を満たすことを意味する。この関係を $\{D(R)\}$ が R の d 次元表現を作り、ψ がその基底となると言う。または、ψ が R の d 次元表現 $D(R)$ に従って変換すると表現する。少し一般にいえば、対称操作が群をつくり、基底の変換則を定める行列 $D(R)$ がその <u>群の表現</u> を与えるのである。

3.1.4　回転群の表現としての角運動量の基底関数

一般に回転操作 $R=e^{-i\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}}$ に対して

$$R\psi = \psi D$$

となるが、特に無限小変換 $R=1-i\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$ に対してその変換行列つまり回転群の表現は基底と $\boldsymbol{J}$ の行列要素を与えることで定まる。関して、今までの議論に従って

$$\begin{aligned} J_z|\psi_m\rangle &= m|\psi_m\rangle \\ J_\pm|\psi_m\rangle &= \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}|\psi_{m\pm1}\rangle \end{aligned}$$

となるが、これは

$$\begin{aligned} J_z\psi &= \psi D^j(J_z), \quad J_z|\psi_m\rangle = |\psi_{m'}\rangle D^j_{m'm}(J_z) \\ J_\pm\psi &= \psi D^j(J_\pm), \quad J_\pm|\psi_m\rangle = |\psi_{m'}\rangle D^j_{m'm}(J_\pm) \end{aligned}$$

と書いたとき

$$\begin{aligned} D^j_{m'm}(J_z) &= \delta_{m'm}m \\ D^j_{m'm}(J_\pm) &= \delta_{m',m\pm1}\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}) \end{aligned}$$

となることを意味する。この表現を回転群の スピン j 表現 という。勿論この表現の次元は $2j+1$ である。

この時、一般の回転角の回転群の元をオイラー角により $R(\alpha,\beta,\gamma)=e^{-iJ_z\gamma}e^{-iJ_y\beta}e^{-iJ_z\alpha}$ と書けば

$$\begin{aligned} R(\alpha,\beta,\gamma)\psi_m &= \psi_{m'}[D^j(R(\alpha,\beta,\gamma))]_{m'm} \\ \langle jm'|R|jm\rangle &= \langle jm'|e^{-iJ_z\alpha}e^{-iJ_y\beta}e^{-iJ_z\gamma}|jm\rangle \\ &= e^{-im'\gamma}\langle jm'|e^{-iJ_y\beta}|jm\rangle e^{-im\alpha} \\ &= [D^j(R(\alpha,\beta,\gamma))]_{m'm} \end{aligned}$$

非自明なのは J_y からの寄与だから $\alpha=\gamma=0$ として

$$\begin{aligned} [D^j(R(\alpha,\beta,\gamma))]_{m'm} &= e^{-im'\alpha}d^j_{m'm}e^{-im\gamma} \\ d^j_{m'm} &= \langle jm'|e^{-iJ_y\beta}|jm\rangle \end{aligned}$$

以下の節で、この $d^j_{m'm}$ を決定しよう。

その前に、角運動量の合成の回転群としての意義をすこしまとめておこう。

3.1.5 クレブシュ・ゴルダン係数と角運動量

スピン j 表現の基底 ψ^j として

$$\begin{aligned} \psi^j &= (|j,-j\rangle, |j,-j+1\rangle, \cdots, |j,j\rangle) \\ R\psi^j &= \psi^j D^j(R) \end{aligned}$$

クレブシュ・ゴルダン係数をつかって

$$|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = |jm\rangle\langle jm|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$$

に回転を作用させれば

$$\begin{aligned} R|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle &= |j_1 m_1', j_2 m_2'\rangle D^{j_1}_{m_1' m_1} D^{j_2}_{m_2' m_2} \\ &= |jm'\rangle D^j_{m'm}\langle jm|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle \end{aligned}$$

よって

$$D^{j_1}_{m_1' m_1} D^{j_2}_{m_2' m_2} = \langle j_1 m_1', j_2 m_2'|jm'\rangle D^j_{m'm}\langle jm|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$$

CG 係数の対称性よりこれは以下の様にも書ける。

$$\begin{aligned} D^{j_1}_{m_1' m_1} D^{j_2}_{m_2' m_2} &= \langle jm'|j_1 m_1', j_2 m_2'\rangle\langle jm|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle D^j_{m'm} \\ &= \langle j_1 m_1', j_2 m_2'|jm'\rangle\langle j_1 m_1, j_2 m_2|jm\rangle D^j_{m'm} \end{aligned}$$

3.2　シュウィンガーボゾンによる回転群の記述

J. Schwinger "On angular momentum" p.229 in *Quantum theory of angular momentum* Ed. L. C. Biedenharn and nad H. van Dam, Academic press (1965) 参照。

3.2.1　シュウィンガー Boson よる角運動量

シュウィンガーに従って 2 種類の独立な Boson $a_\pm$ を導入する。

$$\begin{aligned}
[a_\zeta, a_{\zeta'}^\dagger] &= \delta_{\zeta\zeta'}, \\
[a_\zeta, a_{\zeta'}] &= 0, \quad [a_\zeta^\dagger, a_{\zeta'}^\dagger] = 0
\end{aligned}$$

ここで $a = \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix}$ として次の全粒子数 n と角運動量 $\boldsymbol{J}$ を導入する。

$$\begin{aligned}
n &= n_+ + n_- = a^\dagger a \\
&= a_\zeta^\dagger a_\zeta = a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_- \\
\boldsymbol{J} &= \frac{1}{2} a^\dagger \boldsymbol{\sigma} a, \\
J_+ &= J_x + iJ_y = a_+^\dagger a_- \\
J_- &= J_x - iJ_y = a_+^\dagger a_+ \\
J_z &= \frac{1}{2}(n_+ - n_-)
\end{aligned}$$

この交換関係は $i\neq j$ として

$$
\begin{aligned}
[J_i,J_j] &= \frac{1}{4}[a^\dagger_\alpha(\sigma_i)_{\alpha\beta}a_\beta, a^\dagger_\gamma(\sigma_j)_{\gamma\delta}a_\delta] \\
&= \frac{1}{4}\Big[a^\dagger_\alpha(\sigma_i)_{\alpha\beta}[a_\beta,a^\dagger_\gamma](\sigma_j)_{\gamma\delta}a_\delta + a^\dagger_\gamma(\sigma_j)_{\gamma\delta}[a^\dagger_\alpha,a_\delta](\sigma_i)_{\alpha\beta}a_\beta\Big] \\
&= \frac{1}{4}\Big[a^\dagger_\alpha(\sigma_i)_{\alpha\beta}\delta_{\beta\gamma}(\sigma_j)_{\gamma\delta}a_\delta - a^\dagger_\gamma(\sigma_j)_{\gamma\delta}\delta_{\alpha\delta}(\sigma_i)_{\alpha\beta}a_\beta\Big] \\
&= \frac{1}{4}\Big[a^\dagger_\alpha(\sigma_i)_{\alpha\beta}(\sigma_j)_{\beta\delta}a_\delta - a^\dagger_\gamma(\sigma_j)_{\gamma\alpha}(\sigma_i)_{\alpha\beta}a_\beta\Big] \\
&= \frac{1}{4}\Big[a^\dagger_\alpha(\sigma_i\sigma_j)_{\alpha\delta}a_\delta - a^\dagger_\gamma(\sigma_j\sigma_i)_{\gamma\beta}a_\beta\Big] \\
&= \frac{1}{4}a^\dagger(\sigma_i\sigma_j-\sigma_j\sigma_i)a \\
&= \frac{1}{2}i\epsilon_{ijk}a^\dagger\sigma_k a \\
&= i\epsilon_{ijk}J_k
\end{aligned}
$$

と確かに角運動量の交換関係をみたす。

続いて $\boldsymbol{J}^2$ を計算しよう。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{J}^2 &= \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2 \\
&= \frac{1}{2}(a^\dagger_+a_-a^\dagger_-a_+ + a^\dagger_-a_+a^\dagger_+a_-) + \frac{1}{4}(n_+-n_-)^2 \\
&= \frac{1}{2}\big(n_+(n_-+1)+n_-(n_++1)\big) + \frac{1}{4}\big((n_++n_-)^2-4n_+n_-\big) \\
&= \frac{1}{2}n+\frac{1}{4}n^2 = \frac{1}{2}n(\frac{1}{2}n+1)
\end{aligned}
$$

ここで $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{\sigma}/2$ から

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 &= 2(\sigma_{1+}\sigma_{2-}+\sigma_{1-}\sigma_{2+})+\sigma_{1z}\sigma_{2z} \\
\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2|\pm\pm\rangle &= |\pm\pm\rangle \\
\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2|\pm\mp\rangle &= 2|\mp\pm\rangle - |\pm\mp\rangle
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)|\pm\pm\rangle) &= 2|\pm\pm\rangle = 2P_{12}|\pm\pm\rangle \\
(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)|\pm\mp\rangle &= 2|\mp\pm\rangle = 2P_{12}|\pm\mp\rangle
\end{aligned}
$$

ここで P_{12} は <u>置換演算子</u>

$$
P_{12}|ij\rangle = |ji\rangle
$$

である。よって

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 &= 2P_{12}-1\\
(\sigma_1)_{\alpha\beta}(\sigma_2)_{\gamma\delta} &= 2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}-\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}
\end{aligned}
$$

これを使えば

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{J}^2 &= \frac{1}{4}a_\alpha^\dagger(\sigma_1)_{\alpha\beta}(\sigma_2)_{\gamma\delta}a_\beta a_\gamma^\dagger(\sigma_2)_{\gamma\delta}(\sigma_2)_\delta a_\delta\\
&= \frac{1}{4}(2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}-\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta})a_\alpha^\dagger a_\beta a_\gamma^\dagger a_\delta\\
&= \frac{1}{2}a_\alpha^\dagger a_\beta a_\beta^\dagger a_\alpha-\frac{1}{4}a_\alpha^\dagger a_\alpha a_\gamma^\dagger a_\gamma\\
&= \frac{1}{2}a_\alpha^\dagger a_\beta(a_\alpha a_\beta^\dagger+\delta_{\alpha\beta})-\frac{1}{4}n^2\\
&= \frac{1}{2}n(n+1)-\frac{1}{4}n^2=\frac{1}{2}n(\frac{1}{2}n+1)
\end{aligned}
$$

　これはまた、よって j,m を次のように定義すれば

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{J}^2 &= j(j+1)\\
j &= \frac{1}{2}n=\frac{1}{2}(n_++n_-)\\
m &= \frac{1}{2}(n_+-n_-)\\
n_+ &= j+m\\
n_- &= j-m
\end{aligned}
$$

$j,\,m$ の固有状態は以下の様になる。

$$
\begin{aligned}
|jm\rangle &= |n_+n_-\rangle\\
&= \frac{1}{\sqrt{n_+!n_-!}}(a_+^\dagger)^{n_+}(a_-^\dagger)^{n_-}|0\rangle\\
&= \frac{1}{[(j+m)(j-m)]^{1/2}}(a_+^\dagger)^{n_+}(a_-^\dagger)^{n_-}|0\rangle
\end{aligned}
$$

3.2.2 回転群の表現行列

これを用いて回転群の表現行列 $D^j_{m'm}$ および $d^j_{m'm}$ を求めよう。まず、

$$
\begin{aligned}
e^{-iJ_y\beta}|jm\rangle &= \frac{1}{[(j+m)(j-m)]^{1/2}} e^{-iJ_y\beta}(a_+^\dagger)^{n_+}(a_-^\dagger)^{n_-}|0\rangle \\
&= \frac{1}{[(j+m)(j-m)]^{1/2}} (e^{-iJ_y\beta}a_+^\dagger e^{+iJ_y\beta})^{n_+}(e^{-iJ_y\beta}a_-^\dagger e^{+iJ_y\beta})^{n_-}e^{-iJ_y\beta}|0\rangle \\
&= \frac{1}{[(j+m)(j-m)]^{1/2}} (e^{-iJ_y\beta}a_+^\dagger e^{+iJ_y\beta})^{n_+}(e^{-iJ_y\beta}a_-^\dagger e^{+iJ_y\beta})^{n_-}|0\rangle
\end{aligned}
$$

一般に $|\boldsymbol{n}| = 1$ なるベクトル $\boldsymbol{n}$ に対して

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} &= P_+ - P_- \\
P_\pm &= \frac{1}{2}(E_2 \pm \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}) \\
P_\pm^2 &= P_\pm = P_\pm^\dagger \\
P_+ + P_- &= E_2 \\
P_+P_- &= 0
\end{aligned}
$$

規格直交化された固有ベクトル $\psi_\pm$ で射影演算子を

$$
P\pm = \psi_\pm\psi_\pm^\dagger
$$

と書けば

$$
U = (\psi_+, \psi_-)
$$

に対して

$$
(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})U = U\mathrm{diag}\,(+1, -1)
$$

よって

$$
a' = \begin{pmatrix} a'_+ \\ a'_- \end{pmatrix} = U^\dagger a, \quad a = Ua'
$$

として

$$
[a'_\alpha, (a'_\beta)^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}
$$

と通常のボゾンであり、

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J} &= a^\dagger\frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2}a \\
&= \frac{1}{2}(n'_+ - n'_-) \\
n'_\pm &= a'^\dagger_\pm a'_\pm
\end{aligned}
$$

これから $e^{-i\theta a^\dagger a}ae^{+i\theta a^\dagger a} = e^{i\theta}a$ に注意して

$$
\begin{aligned}
e^{-i\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}}ae^{i\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} &= Ue^{-i\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}}a'e^{i\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} \\
&= U\mathrm{diag}\ (e^{i\frac{\theta}{2}}, e^{-i\frac{\theta}{2}})a' \\
&= U\mathrm{diag}\ (e^{i\frac{\theta}{2}}, e^{-i\frac{\theta}{2}})U^\dagger a \\
&= (\psi_+, \psi_-)\mathrm{diag}\ (e^{i\frac{\theta}{2}}, e^{-i\frac{\theta}{2}})\begin{pmatrix} \psi_+^\dagger \\ \psi_-^\dagger \end{pmatrix} a \\
&= (e^{i\frac{\theta}{2}}P_+ + e^{-i\frac{\theta}{2}}P_-)a \\
&= \frac{1}{2}(e^{i\frac{\theta}{2}}(E_2 + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})) + e^{-i\frac{\theta}{2}}(E_2 - (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})))a \\
&= (E_2\cos\frac{\theta}{2} + i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sin\frac{\theta}{2})a
\end{aligned}
$$

よって $\boldsymbol{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ として

$$
\begin{aligned}
e^{-i\beta J_y}ae^{i\beta J_y} &= e^{-i\beta J_y}\begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix}e^{i\beta J_y} = \begin{bmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & \sin\frac{\beta}{2} \\ -\sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix}\begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} a_+\cos\frac{\beta}{2} + a_-\sin\frac{\beta}{2} \\ -a_+\sin\frac{\beta}{2} + a_-\cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

よって $n_+ = j+m$, $n_- = j-m$ に注意して

$$
\begin{aligned}
e^{-iJ_y\beta}|jm\rangle &= \frac{1}{[(j+m)(j-m)]^{1/2}}(a_+^\dagger\cos\frac{\beta}{2}+a_-^\dagger\sin\frac{\beta}{2})^{n_+}(-a_+^\dagger\sin\frac{\beta}{2}+a_-^\dagger\cos\frac{\beta}{2})^{n_-}|0\rangle \\
&= \frac{1}{[(j+m)(j-m)]^{1/2}}\sum_{k\ell}\begin{pmatrix} n_+ \\ k \end{pmatrix}\begin{pmatrix} n_- \\ \ell \end{pmatrix} \\
&\qquad \times(a_+^\dagger)^{n_+-k}(a_-^\dagger)^k\cos^{n_+-k}\frac{\beta}{2}\sin^k\frac{\beta}{2} \\
&\qquad \times(a_+^\dagger)^{n_--\ell}(a_-^\dagger)^\ell(-)^{n_--\ell}\sin^{n_--\ell}\frac{\beta}{2}\cos^\ell\frac{\beta}{2} \\
&= \frac{1}{[(j+m)(j-m)]^{1/2}}\sum_{k\ell}\begin{pmatrix} j+m \\ k \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j-m \\ \ell \end{pmatrix}(-)^{j-m-\ell} \\
&\qquad \times(a_+^\dagger)^{2j-k-\ell}(a_-^\dagger)^{k+\ell}\cos^{j+m-k+\ell}\frac{\beta}{2}\sin^{j-m-\ell+k}\frac{\beta}{2}
\end{aligned}
$$

これと $\langle jm'|$ との行列要素は $a_+^\dagger$ が $n_+ = j+m'$ 個, $a_-^\dagger$ が $n_- = j-m'$ の項から得られることに注意すれば

$$
\begin{aligned}
2j-k-\ell &= j+m', \to j-k-\ell = m' \\
k+\ell &= j-m'
\end{aligned}
$$

まとめて $\ell = j-k-m'$ であれば、これらは両立するので、この関係式を用いて ℓ を消去する。よって、まず各項のべきを求めれば

$$
\begin{aligned}
2j-k-\ell &= 2j-k-j+k+m' = j+m' \\
k+\ell &= j-m' \\
j-m-\ell &= j-m-j+k+m' = k-m+m' \\
j+m-k+\ell &= j+m-k+j-k-m' = 2j-2k+m-m' \\
j-m-\ell+k &= j-m+k-j+k+m' = 2k-m+m'
\end{aligned}
$$

最後に規格化に注意すれば

$$
\begin{aligned}
d^j_{m'm} &= \langle jm'|e^{-iJ_y\beta}|jm\rangle \\
&= \frac{1}{[(j+m)(j-m)]^{1/2}}\sum_{k\ell}(-)^{k-m+m'}\begin{pmatrix} j+m \\ k \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j-m \\ j-k-m' \end{pmatrix}\sqrt{(j+m')!(j-m')!} \\
&\qquad \times \cos^{2j-2k+m-m'}\frac{\beta}{2}\sin^{2k-m+m'}\frac{\beta}{2} \\
&= \sum_k (-)^{k-m+m'}\frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j+m-k)!k!(k-m+m')!(j-k-m')!} \\
&\qquad \times \cos^{2j-2k+m-m'}\frac{\beta}{2}\sin^{2k-m+m'}\frac{\beta}{2}
\end{aligned}
$$

3.2.3　$j=1/2$ の回転行列

まず $j=1/2$ のときは、

$$
\begin{aligned}
d^{1/2}_{\frac12,\frac12} &= \sum_{k=0}^{0}(-)^k\frac{\sqrt{(\frac12+\frac12)!(\frac12-\frac12)!(\frac12+\frac12)!(\frac12-\frac12)!}}{(\frac12+\frac12-k)!k!(k-\frac12+\frac12)!(\frac12-k-\frac12)!}\cos^{1-2k+\frac12-\frac12}\frac{\beta}{2}\sin^{2k-\frac12+\frac12}\frac{\beta}{2} \\
&= \cos\frac{\beta}{2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
d^{1/2}_{\frac12,-\frac12} &= \sum_{k=0}^{0}(-)^{k+1}\frac{\sqrt{(\frac12-\frac12)!(\frac12+\frac12)!(\frac12+\frac12)!(\frac12-\frac12)!}}{(\frac12-\frac12-k)!k!(k+\frac12+\frac12)!(\frac12-k-\frac12)!}\cos^{1-2k-\frac12-\frac12}\frac{\beta}{2}\sin^{2k+\frac12+\frac12}\frac{\beta}{2} \\
&= -\sin\frac{\beta}{2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
d^{1/2}_{-\frac12,\frac12} &= \sum_{k=1}^{1}(-)^{k-1}\frac{\sqrt{(\frac12+\frac12)!(\frac12-\frac12)!(\frac12-\frac12)!(\frac12+\frac12)!}}{(\frac12+\frac12-k)!k!(k-\frac12-\frac12)!(\frac12-k+\frac12)!}\cos^{1-2k+\frac12+\frac12}\frac{\beta}{2}\sin^{2k-\frac12-\frac12}\frac{\beta}{2} \\
&= \sin\frac{\beta}{2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
d^{1/2}_{-\frac12,-\frac12} &= \sum_{k=0}^{0}(-)^{k}\frac{\sqrt{(\frac12-\frac12)!(\frac12+\frac12)!(\frac12-\frac12)!(\frac12+\frac12)!}}{(\frac12-\frac12-k)!k!(k+\frac12-\frac12)!(\frac12-k+\frac12)!}\cos^{1-2k-\frac12+\frac12}\frac{\beta}{2}\sin^{2k+\frac12-\frac12}\frac{\beta}{2} \\
&= \cos\frac{\beta}{2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
d^{1/2} &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \\
D^{1/2} &= \begin{pmatrix} e^{-i\frac{1}{2}\alpha} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{1}{2}\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{1}{2}\gamma} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{1}{2}\gamma} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} e^{-i\frac{1}{2}(\alpha+\gamma)}\cos\frac{\beta}{2} & -e^{-i\frac{1}{2}(\alpha-\gamma)}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{i\frac{1}{2}(\alpha-\gamma)}\sin\frac{\beta}{2} & e^{i\frac{1}{2}(\alpha+\gamma)}\cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \\
&= e^{-i\frac{\gamma}{2}\sigma_z} e^{-i\frac{\beta}{2}\sigma_y} e^{-i\frac{\alpha}{2}\sigma_z}
\end{aligned}
$$

であることに注意すれば、$\hat{\boldsymbol{n}}$ 軸周りの θ 回転は

$$
\begin{aligned}
D^{1/2} &= u(\hat{\boldsymbol{n}},\theta) \\
&= e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = E_2\cos\frac{\theta}{2} - i\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sin\frac{\theta}{2} \in SU(2)
\end{aligned}
$$

に対応する。

これは、このユニタリ表現であるから、

$$
[D^{1/2}]^{-1} = [D^{1/2})]^{\dagger}
$$

であり、さらに

$$
\det D^{1/2} = 1
$$

である。よって、この行列の作る群は $\underline{SU(2)}$ と呼ばれる。また、この行列は複素数 $a, b \in \mathbb{C}$ に対して

$$
\begin{aligned}
D^{1/2} &= \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \\
1 &= |a|^2 + |b|^2
\end{aligned}
$$

とも書ける (<u>ケーリー・クラインパラメター</u>)。なお

$$
\begin{aligned}
a &= e^{-i\frac{1}{2}(\alpha+\gamma)}\cos\frac{\beta}{2} \\
b &= -e^{-i\frac{1}{2}(\alpha-\gamma)}\sin\frac{\beta}{2}
\end{aligned}
$$

であり、$0 \le \beta/2 \le \pi/2$ から

$$
0 \le \cos\beta/2, \sin\beta/2 \le 1
$$

であるが、$a=b=-1$ を表現するには

$$
\begin{aligned}
0 \le \alpha < 2\pi \\
0 \le \gamma < 2\pi
\end{aligned}
$$

では不可能で

$$
\begin{aligned}
0 \le \alpha < 2\pi \\
0 \le \gamma < 4\pi
\end{aligned}
$$

とする必要がある。オイラー角による回転としては同じ回転を 2 種類に表すことに注意しよう。つまり

$$
SO(3) \quad \rightleftarrows \quad SU(2)
$$

の対応は 1 対 2 である。これを $j=1/2$ の時の表現は 2 価であるといいこの表現を 2 価表現 という。

また、4 つの実数を $\mathrm{Re}\,\alpha = x_1$, $\mathrm{Im}\,\alpha = x_2$, $\mathrm{Re}\,\beta = x_3$, $\mathrm{Im}\,\beta = x_4$ とすれば

$$
x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 \;=\; 1
$$

となり、(x_1, x_2, x_3, x_4) は 4 次元空間内の 3 次元球面 S^3 をつくる。つまり $SU(2) \cong S^3$ である。

これは 2 次元平面内の単位円 (1 次元球面)S^1

$$
\begin{aligned}
z &= e^{i\theta} \\
|z|^2 &= 1
\end{aligned}
$$

が $U(1)$ と同相なことに対応する $U(1) \cong S^1$。

3.2.4 $j = \ell = 0, 1, 2, \cdots$ の回転行列と球面調和関数

次に $j=\ell$ をゼロ以上の整数としたとき、$m=0$, $m' = M$ と書いて

$$
\begin{aligned}
d^{\ell}_{M0} &= \sum_k (-)^{k+M} \frac{\sqrt{\ell!\ell!(\ell+M)!(\ell-M)!}}{(\ell-k)!k!(k+M)!(\ell-k-M)!} \cos^{2\ell-2k-M}\frac{\beta}{2} \sin^{2k+M}\frac{\beta}{2} \\
D^{\ell}_{M0}(\alpha\beta\gamma) &= e^{-iM\alpha} \sum_k (-)^{k+M} \frac{\sqrt{\ell!\ell!(\ell+M)!(\ell-M)!}}{(\ell-k)!k!(k+M)!(\ell-k-M)!} \cos^{2\ell-2k-M}\frac{\beta}{2} \sin^{2k+M}\frac{\beta}{2}
\end{aligned}
$$

特に $M=\ell$ とすれば

$$
\begin{aligned}
D^\ell_{\ell 0} &= e^{-iM\alpha}\sum_{k=0}(-)^{k+\ell}\frac{\sqrt{\ell!\ell!(2\ell)!0!}}{(\ell-k)!k!(k+\ell)!(\ell-k-\ell)!}\cos^{\ell-2k}\frac{\beta}{2}\sin^{2k+\ell}\frac{\beta}{2} \\
&= e^{-i\ell\alpha}(-)^\ell\frac{\sqrt{\ell!\ell!(2\ell)!0!}}{\ell!0!\ell!0!}\cos^\ell\frac{\beta}{2}\sin^\ell\frac{\beta}{2} \\
&= (-)^\ell e^{-i\ell\alpha}\frac{\sqrt{(2\ell)!}}{2^\ell\ell!}\sin^\ell\beta
\end{aligned}
$$

これを球面調和関数 $Y_{\ell m}$ の定義とくらべると

$$
Y_{\ell\ell}(\beta,\alpha) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}[D^\ell_{\ell 0}(\alpha,\beta)]^*
$$

となる。

一般にオイラー角 $(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0)$ により指定される回転 $R(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0)$ とオイラー角 (α,β,γ) により指定される回転 $R(\alpha,\beta,\gamma)$ を考え，回転 Q を以下の様に定める

$$
Q^{-1}R(\alpha,\beta,\gamma) = R(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0)
$$

つまり、オイラー角 $(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0)$ により指定される回転に引き続いて回転 Q を行うことがオイラー角 (α,β,γ) で指定される回転となるような回転である。

このとき $\hat{z}$ を $R(\alpha,\beta,\gamma)$ で回転した点の関数を $\psi(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z})$ として、定義から

$$
Q\psi(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) = \psi(Q^{-1}R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) = \psi(R(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0)\hat{z})
$$

となる。ここで N は任意として

$$
\psi_M(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) \equiv [D^\ell_{MN}(R(\alpha,\beta,\gamma))]^*
$$

とすると、これは表現 D^ℓ の基底となることが次のようにして示せる。

$$
\begin{aligned}
Q\psi_M(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) &= \psi_M(R(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0)\hat{z}) \\
&= [D^\ell_{MN}(R(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0))]^* \\
&= [D^\ell_{MN}(Q^{-1}R(\alpha,\beta,\gamma))]^* \\
&= [D^\ell_{MK}(Q^{-1})]^*[D^\ell_{KN}(R(\alpha,\beta,\gamma))]^* \\
&= [[D^\ell(Q)]^\dagger]^*_{MK}[D^\ell_{KN}(R(\alpha,\beta,\gamma))]^* \\
&= [D^\ell_{KN}(R(\alpha,\beta,\gamma))]^*D^\ell_{KM}(Q) \\
&= \psi_K(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z})D^\ell_{KM}(Q)
\end{aligned}
$$

よって $Y_{\ell\ell}$ での考察から規格化定数も含めて、$N=0$ として

$$
\begin{aligned}
Y_{\ell m}(\beta,\alpha) &= Y_{\ell m}(R(\alpha,\beta,0)\hat{z}) \\
&= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}[D^{\ell}_{m0}(\alpha,\beta)]^* \\
&= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\sum_k(-)^{k+m}\frac{\ell!\sqrt{(\ell+m)!(\ell-m)!}}{(\ell-k)!k!(k+m)!(\ell-k-m)!} \\
&\quad \times\cos^{2\ell-2k-m}\frac{\beta}{2}\sin^{2k+m}\frac{\beta}{2}e^{+im\alpha}
\end{aligned}
$$

特に $Y_{\ell 0}(\beta,\alpha)=\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}P_\ell(\cos\beta)$ だから

$$
D^{\ell}_{\ell 0}(R(\alpha,\beta,\gamma) = P_\ell(\cos\beta)
$$

応用上重要な公式なのでまとめよう。

球面調和関数と回転群の行列要素

$$
\begin{aligned}
Y_{\ell m}(\beta,\alpha) &= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}[D^{\ell}_{m0}(\alpha,\beta)]^* \\
P_\ell(\cos\beta) &= D^{\ell}_{\ell 0}(R(\alpha,\beta,\gamma)
\end{aligned}
$$

更に、これに対して CG 係数と回転の以下の関係式を使うと

$$
D^{j_1}_{m_1'm_1}D^{j_2}_{m_2'm_2} = \langle jm'|j_1m_1',j_2m_2'\rangle\langle jm|j_1m_1,j_2m_2\rangle D^{j}_{m'm}
$$

$j_1=\ell_1$,$j_2=\ell_2$,$j=\ell$ $m_1=m_2=0$ として

$$
\begin{aligned}
[D^{\ell_1}_{m_1'0}D^{\ell_2}_{m_1'0}]^* &= \langle\ell m'|\ell_1m_1',\ell_2m_2'\rangle\langle\ell m|\ell_1 0,j_2 0\rangle[D^{\ell}_{m'm}]^* \\
&= \langle\ell m'|\ell_1m_1',\ell_2m_2'\rangle\langle\ell 0|\ell_1 0,j_2 0\rangle[D^{\ell}_{m'0}]^*
\end{aligned}
$$

これを球面調和関数で書いて

$$
\frac{4\pi}{\sqrt{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}}Y_{\ell_1m_1'}Y_{\ell_2m_2'} = \langle\ell m'|\ell_1m_1',\ell_2m_2'\rangle\langle\ell 0|\ell_1 0,j_2 0\rangle\frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2\ell+1}}Y_{\ell m'}
$$

$'$ をとって整理すれば

$$
Y_{\ell_1m_1}Y_{\ell_2m_2} = \sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2\ell+1)}}\langle\ell m|\ell_1m_1,\ell_2m_2\rangle\langle\ell 0|\ell_1 0,j_2 0\rangle Y_{\ell m}
$$

よって球面調和関数の直交性より

3 つの球面調和関数の積の積分

$$\begin{aligned}\int d\Omega Y^*_{\ell m}(\Omega)Y_{\ell_1 m_1}(\Omega)Y_{\ell_2 m_2}(\Omega)\\ = \left[\sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2\ell+1)}}\langle \ell 0|\ell_1 0, j_2 0\rangle\right]\langle \ell m|\ell_1 m_1, \ell_2 m_2\rangle\end{aligned}$$

この $\left[\cdots\right]$ 部分は m_1, m_2, m によらず、m_1, m_2, m 依存性は CG 係数のみで定まる。

次にオイラー角 $(\phi_0, \theta_0, 0)$, $(\phi_1, \theta_1, 0)$ に対応する回転を R_0, R_1 とし

$$R_0^{-1}R_1 = R_2$$

に対応するオイラー角を (Φ, Θ, Γ) としよう。この時、

$$D^\ell_{00}(R_0^{-1}R_1) = \sum_m D^\ell_{0m}(R_0^{-1})D^\ell_{m0}(R_1) = \sum_m [D^\ell_{m0}(R_0)]^* D^\ell_{m0}(R_1) = D^\ell_{00}(R_2)$$

より

$$\frac{4\pi}{2\ell+1}\sum_m Y_{\ell m}(\theta_0, \phi_0)Y^*_{\ell m}(\theta_1, \phi_1) = P_\ell(\cos\Theta)$$

なお

$$\hat{z}_0 = R_0\hat{z},\ \hat{z}_1 = R_1\hat{z},\ \hat{z}_2 = R_2\hat{z}$$

として

$$R_1\hat{z} = R_0 R_2\hat{z}$$

より

$$\begin{aligned}\hat{z}_0 &= R_0\hat{z}\\ \hat{z}_1 &= R_0\hat{z}_2\end{aligned}$$

であるから $\hat{z}_0$ と $\hat{z}_1$ とのなす角は $\hat{z}$ と $\hat{z}_2$ のなす角に等しく、これは Θ である。ここで $\hat{z}_0$ と $\hat{z}_1$ はそれぞれ (θ_0, ϕ_0), (θ_1, ϕ_1) で指定されていることに注意すれば Θ は方向 (θ_0, ϕ_0) と (θ_1, ϕ_1) とのなす角である。これが球面調和関数の加法定理である。

球面調和関数の加法定理

$$\frac{4\pi}{2\ell+1}\sum_m Y_{\ell m}(\hat{\Omega})Y^*_{\ell m}(\hat{\Omega}') \quad = \quad P_\ell(\hat{\Omega}\cdot\hat{\Omega}')$$

3.2.5 多重極展開

上述の加法定理が重要な役割をはたす多重極展開についてこの節でまとめよう。まずルジャンドル関数に関する次のロドリゲスの公式を複素関数論のグルサの定理を用いて書き直そう。[1]

$$\begin{aligned} P_\ell(t) &= \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dt^\ell}(t^2-1)^\ell = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{\ell!}{2\pi i}\int_C d\xi\,\frac{(\xi^2-1)^\ell}{(\xi-t)^{\ell+1}} \\ &= \frac{1}{2\pi i}\int_{C_t} d\xi\left[\frac{\xi^2-1}{2(\xi-t)}\right]^\ell \frac{1}{\xi-t} \end{aligned}$$

C_t^+ は t を正にまわる十分小さな積分路である。ここで $\dfrac{1}{\zeta}=\dfrac{\xi^2-1}{2(\xi-t)}$ とすれば[2] 逆に解いて

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{1\pm R}{\zeta} \\ R &= \sqrt{1-2t\zeta+\zeta^2}) \end{aligned}$$

ここで $\zeta\to 0$ の時

$$R \;\to\; 1-t\zeta+\frac{1}{2}\zeta^2, \quad \xi\to\frac{1\pm(1-t\zeta+\frac{1}{2}\zeta^2)}{\zeta}$$

---

[1] コーシーの積分定理よりある関数 $f(z)$ が複素平面上正則な領域内 z を正の向きに囲む閉曲線 C_z^+ に対して

$$f(z) \;=\; \frac{1}{2\pi i}\int_{C_z^+} d\xi\,\frac{f(\xi)}{\xi-z}$$

これを n 回微分して

$$f^{(n)}(z) \;=\; \frac{n!}{2\pi i}\int_{C_z^+} \xi\,\frac{f(\xi)}{(\xi-z)^{n+1}}$$

これをグルサの定理と呼ぶ。

[2]

$$\zeta\xi^2-\zeta \;=\; 2\xi-2t, \quad \zeta\xi^2-2\xi+2t-\zeta=0, \quad \xi=(1\pm\sqrt{1-2t\zeta+\zeta^2})/\zeta$$

だから

$$\xi \;=\; \frac{1-R}{\zeta}$$

の分枝をとれば $\zeta\to 0$ の時 $\xi\to t-\frac{1}{2}\zeta$。よって ζ 平面の C_0^+ は ξ 平面の C_t^+ に写る。また、$1-R=\xi\zeta$ に注意して

$$\begin{aligned} d\xi &= \frac{-d\zeta}{\zeta^2}(1-R)-\frac{1}{\zeta}\frac{-2t+2\zeta}{2R}d\zeta=\frac{-R+R^2+t\zeta-\zeta^2}{\zeta^2 R}d\zeta \\ &= \frac{-R-t\zeta+1}{\zeta^2 R}d\zeta=\frac{\xi-t}{\zeta R}d\zeta \end{aligned}$$

よって

$$P_\ell(t) \;=\; \frac{1}{2\pi i}\int_{C_0^+} d\zeta\,\frac{1}{R\zeta^{\ell+1}}=\frac{1}{\ell!}\frac{d^\ell}{d\zeta^\ell}\frac{1}{R}\bigg|_{\zeta=0}=\frac{1}{\ell!}\frac{d^\ell}{d\zeta^\ell}\frac{1}{\sqrt{1-2t\zeta+\zeta^2}}\bigg|_{\zeta=0}$$

これは $\frac{1}{R}$ を $\zeta=0$ の周りでテイラー展開するとみれば

$$\frac{1}{R} \;=\; \frac{1}{\sqrt{1-2t\zeta+\zeta^2}}=\sum_{\ell=0}^{\infty}P_\ell(t)\zeta^\ell$$

これを ルジャンドル関数の母関数展開 と呼ぶ。

これを用いて

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} &= \frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{r}^2-\boldsymbol{r}'^2-2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}'}}=\frac{1}{r_>}\frac{1}{\sqrt{1-2(\frac{r_<}{r_>})\cos\theta+(\frac{r_<}{r_>})^2}} \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{r_<^\ell}{r_>^{\ell+1}}P_\ell(\cos\theta) \end{aligned}$$

ここで $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{r}'$ がなす角の大きさが θ であり、$r_>$ は $|\boldsymbol{r}|$ と $|\boldsymbol{r}'|$ の大きい方 $r_<$ は小さい方である。

さらにここで 球面調和関数の加法定理 を使えば

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \;=\; 4\pi\sum_{\ell m}\frac{1}{2\ell+1}\frac{r_<^\ell}{r_>^{\ell+1}}Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{\Omega}})Y_{\ell m}^*(\hat{\boldsymbol{\Omega}}')$$

ここで局所的な電荷分布 $\rho(\boldsymbol{r})$ が十分遠方に作る静電ポテンシャルを $\phi(\boldsymbol{r})$ とすれば

$$\phi(\boldsymbol{r}) \;=\; \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int d^3r'\,\frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

ただし $\rho(\boldsymbol{r})=0$, $|\boldsymbol{r}|>^{\exists} R$。これに上記の展開を使えば $r_<=r'$, $r_>=r$ ととれて [3]

多重極展開

$$\begin{aligned}\phi(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_{\ell m}\frac{4\pi}{2\ell+1}\frac{q_{\ell m}}{r^{\ell+1}}Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{r}})\\ q_{\ell m} &= \int d^3r'\,(r')^{\ell}\rho(\boldsymbol{r}')Y^*_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{r}}')\end{aligned}$$

これを多重極展開と呼び、$q_{\ell m}$ は多重極子と呼ばれる。

3.2.6 生成母関数と上昇下降演算子

スピノル $x=\begin{pmatrix} x_+ \\ x_- \end{pmatrix}$ に対して

$$\phi_{jm}(x) \equiv \frac{x_+^{j+m}x_-^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}$$

とすれば

$$|jm\rangle = \phi_{jm}(a^\dagger)|0\rangle$$

よって

$$\begin{aligned}\sum_{m=-j}^{j}\phi_{jm}(x)|jm\rangle &= \sum_{m=-j}^{j}\phi_{jm}(x)\phi_{jm}(a^\dagger)|0\rangle = \sum_{m=-j}^{j}\frac{(a_+^\dagger x_+)^{j+m}(a_-^\dagger x_-)^{j-m}}{(j+m)!(j-m)!}|0\rangle\\ &= \frac{1}{(2j)!}(a_+^\dagger x_+ + a_-^\dagger x_-)^{2j}|0\rangle\\ &= \frac{(a^\dagger x)^{2j}}{(2j)!}|0\rangle\end{aligned}$$

---

[3]

$$\begin{aligned}\phi(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int d^3r'\rho(\boldsymbol{r}')r'\sum Y^*_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{r}}')\frac{4\pi}{2\ell+1}\frac{1}{r^{\ell+1}}Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{r}})\\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_{\ell m}\frac{4\pi}{2\ell+1}\frac{q_{\ell m}}{r^{\ell+1}}Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{r}})\\ q_{\ell m} &= \int d^3r'\,(r')^{\ell}\rho(\boldsymbol{r}')Y^*_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{r}}')\end{aligned}$$

これから

$$e^{(a^\dagger x)}|0\rangle = \sum_{jm}\phi_{jm}(x)|jm\rangle$$

つづいて $af(a^\dagger)|0\rangle = \frac{\partial}{\partial a^\dagger}f(a^\dagger)|0\rangle$ に注意して $(e^{a\partial}f(x) = f(x+a))$

$$\begin{aligned}
\sum_{jm}\phi_{jm}(x)e^{\lambda J_+}|jm\rangle &= e^{\lambda a_+^\dagger a_-}\sum_{jm}\phi_{jm}(x)|jm\rangle \\
&= e^{\lambda a_+^\dagger a_-}e^{(a^\dagger x)}|0\rangle \\
&= e^{\lambda a_+^\dagger \frac{\partial}{\partial a_-^\dagger}}e^{(a^\dagger x)}|0\rangle \\
&= e^{a_+^\dagger x_+ + (\lambda a_+^\dagger + a_-^\dagger)x_-}|0\rangle \\
&= e^{a_+^\dagger (x_+ + \lambda x_-) + a_-^\dagger x_-}|0\rangle \\
&= \phi_{jm}((x_+ + \lambda x_-, x_-))|jm\rangle
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
\langle jm|\sum_{j'm'}e^{\lambda J_+}|j'm'\rangle\phi_{j'm'}(x) &= \phi_{jm}(x_+ + \lambda x_-, x_-) \\
&= \frac{(x_+ + \lambda x_-)^{j+m}x_-^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\sum_{k=0}^{j+m}\lambda^k\begin{pmatrix} j+m \\ k\end{pmatrix}x_+^{j+m-k}x_-^{j-m+k} \\
&= \sum_{m'=m-k=-j}^{j}\lambda^{m-m'}\begin{pmatrix} j+m \\ m-m'\end{pmatrix}x_+^{j+m'}x_-^{j-m'} \\
&= \sum_{m'=-j}^{m}\lambda^{m-m'}\frac{\sqrt{(j+m')!(j-m')!}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\frac{(j+m)!}{(m-m')!(j+m')!}\phi_{jm'}(x) \\
&= \sum_{m'=-j}^{m}\frac{\lambda^{m-m'}}{(m-m')!}\sqrt{\frac{(j+m)!(j-m')!}{(j+m')!(j-m)!}}\phi_{jm'}(x)
\end{aligned}$$

よって

$$\langle jm|J_+^{m-m'}|jm'\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!(j-m')!}{(j+m')!(j-m)!}}, \quad (m \geq m')$$

複素共役をとって $m \rightleftarrows m'$ として

$$\langle jm|J_-^{m'-m}|jm'\rangle = \sqrt{\frac{(j+m')!(j-m)!}{(j+m)!(j-m')!}}, \quad (m' \geq m)$$

3.2.7　シュウィンガーボゾンの $SU(2)$ 変換

スピノル $x = \begin{pmatrix} x_+ \\ x_- \end{pmatrix}$ が

$$x^\dagger x \;=\; |x_+|^2 + |x_-|^2 = 1$$

を満たすとき、絶対値1と呼べば、これは次の行列の $SU(2)$ のケーリー・クラインパラメーターとなる。

$$u \;=\; (x, -i\sigma_y x^*) = \begin{pmatrix} x_+ & -x_-^* \\ x_- & x_+^* \end{pmatrix} \in SU(2)$$

特に

$$\begin{aligned} a'^\dagger &= ({a'_+}^\dagger, {a'_-}^\dagger) \\ &= a^\dagger u \\ &= (a_+^\dagger x_+ + a_-^\dagger x_-, -a_+^\dagger x_-^* + a_-^\dagger x_+^*) \end{aligned}$$

としたとき、

$$\begin{aligned} [a'_\alpha, {a'_\beta}^\dagger] &= \delta_{\alpha\beta} \\ [a'_\alpha, a'_\beta] &= 0 \\ [{a'_\alpha}^\dagger, {a'_\beta}^\dagger] &= 0 \end{aligned}$$

とこれも通常のボゾンとなる。なお、一般に2つのスピノル

$$x \;=\; \begin{pmatrix} x_+ \\ x_- \end{pmatrix},\ y = \begin{pmatrix} y_+ \\ y_- \end{pmatrix}$$

に対して

$$\begin{aligned} (xy) &= (yx) = x_+ y_+ + x_- y_- \\ [xy] &= -[yx] = x_+ y_- - x_- y_+ \end{aligned}$$

とすれば、規格化条件 $(xx) = 1$ の下で、

$$a'^\dagger \;=\; ((xa^\dagger), [x^\dagger a^\dagger])$$

と書ける。なお

$$a \;=\; ua' = \begin{pmatrix} x_+ & -x_-^* \\ x_- & x_+^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (xa^\dagger)^\dagger \\ [xa^\dagger]^\dagger \end{pmatrix}$$

これらを用いた次の関係式に注意しよう。

$$
\begin{aligned}
|jj\rangle' &\equiv \frac{(xa^\dagger)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}|0\rangle \\
&= \frac{({a'_+}^\dagger)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}|0\rangle \\
&= \frac{(a_+^\dagger x_+ + a_-^\dagger x_-)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}|0\rangle \\
&= \sqrt{(2j)!}\sum_m \frac{(a_+^\dagger x_+)^{j+m}(a_-^\dagger x_-)^{j-m}}{(j+m)!(j-m)!}|0\rangle \\
&= \sqrt{(2j)!}\sum_m \frac{x_+^{j+m}x_-^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|jm\rangle \\
&= \sqrt{(2j)!}\sum_m |jm\rangle\phi_{jm}(x)
\end{aligned}
$$

また、

$$
\begin{aligned}
1 &= (2j)!\sum_m \phi_{jm}^*(x)\phi_{jm}(x) = \sum_m \frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}|x_+|^{2(j+m)}|x_-|^{2(j-m)} \\
&= (|x_+|^2+|x_-|^2)^{2j} = x^\dagger x
\end{aligned}
$$

$j=1/2$ のスピン表現は $\underline{SO(3)}$ の表現であったから，$SO(3)\to SU(2)$ の対応が具体的にあたえられているが、逆に

$$
\begin{aligned}
u &= e^{i\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{S}} = e^{i\frac{1}{2}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \in SU(2) \\
|\boldsymbol{n}| &= 1
\end{aligned}
$$

に対して

$$
\begin{aligned}
a'^\dagger &= a^\dagger u \\
a' &= u^\dagger a \\
a &= ua'
\end{aligned}
$$

だから

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{J} &= \frac{1}{2}a^\dagger\boldsymbol{\sigma}a \\
&= \frac{1}{2}a'^\dagger\boldsymbol{\sigma}'a'
\end{aligned}
$$

ここで

$$\boldsymbol{\sigma}' \equiv u\boldsymbol{\sigma}u^\dagger$$

これは

$$(\sigma'_\alpha)^2 = E_2$$

また、$\alpha \neq \beta$ の時、

$$\begin{aligned}\sigma'_\alpha\sigma'_\beta &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}u\sigma_\gamma u^\dagger \\ &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma'_\gamma\end{aligned}$$

さらに $\boldsymbol{\sigma}'$ はトレースがゼロの 2×2 行列なので、

$$\mathrm{Tr}\boldsymbol{\sigma}' = \mathrm{Tr}u\boldsymbol{\sigma}u^\dagger = \mathrm{Tr}u^\dagger u\boldsymbol{\sigma} = \mathrm{Tr}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$$

パウリ行列の実係数の線形和としてで次のように展開できる。

$$\begin{aligned}\sigma'_\alpha &= Q_{\alpha\beta}\sigma_\beta \\ Q_{\alpha\beta} &\in \mathbb{R}\end{aligned}$$

更に

$$\begin{aligned}\{\sigma'_\alpha, \sigma'_\beta\} &= Q_{\alpha\alpha'}Q_{\beta\beta'}\{\sigma_{\alpha'}, \sigma_{\beta'}\} \\ &= Q_{\alpha\alpha'}Q_{\beta\beta'}2\delta\alpha'\beta' \\ &= 2Q_{\alpha\gamma}Q_{\beta\gamma} = 2\delta_{\alpha\beta}\end{aligned}$$

よって

$$Q_{\alpha\gamma}Q_{\beta\gamma} = \delta_{\alpha\beta}$$

つまり

$$Q\widetilde{Q} = E_3$$

これは Q が直交行列であることを意味する。更に以下の議論から $\det Q = 1$ よって

$$\boldsymbol{Q} \in SO(3)$$

これは

$$SU(2) \to SO(3)$$

の対応を示す。

更に、

$$\sigma_1'\sigma_2'\sigma_3' = u\sigma_1'\sigma_2'\sigma_3'u^\dagger = uiu^\dagger = iE_2$$

また、

$$\begin{aligned}
\sigma_1'\sigma_2'\sigma_3' &= Q_{1\alpha}Q_{2\beta}Q_{3\gamma}\sigma_\alpha\sigma_\beta\sigma_\gamma \\
&= \sum_\gamma \left[\sum_{\alpha(=\beta)}(Q_{1\alpha}Q_{2\alpha})Q_{3\gamma}\sigma_\gamma + \sum_{\alpha\neq\beta}Q_{1\alpha}Q_{2\alpha}Q_{3\gamma}\sigma_\alpha\sigma_\beta\sigma_\gamma\right] \\
&= \sum_{(\alpha,\beta,\gamma)=P(123)} Q_{1\alpha}Q_{2\alpha}Q_{3\gamma}\sigma_\alpha\sigma_\beta\sigma_\gamma \\
&= \sum_{(\alpha,\beta,\gamma)=P(123)} Q_{1\alpha}Q_{2\alpha}Q_{3\gamma}iE_2\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \\
&= iE_2 \det Q
\end{aligned}$$

よって

$$\det Q = 1$$

3.2.8 角運動量の合成とウィグナーの $3j$ 記号

2 種類のスピノルを作る総計 4 つのボソンを使って

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{J}_1 &= \frac{1}{2}a^\dagger\sigma a \\
\boldsymbol{J}_2 &= \frac{1}{2}b^\dagger\sigma b
\end{aligned}$$

とする。

ここで

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_+ &= a^\dagger b = (a^\dagger b) \\
\mathcal{J}_- &= b^\dagger a = (b^\dagger a) = \mathcal{J}_+^\dagger \\
\mathcal{J}_z &= \frac{1}{2}(a^\dagger a - b^\dagger b) = \mathcal{J}_z^\dagger = n_a - n_b
\end{aligned}$$

とすれば、

$$\begin{aligned}
[\mathcal{J}_+, \mathcal{J}_-] &= [a^\dagger b, b^\dagger a] = [a_\alpha^\dagger b_\alpha, b_\beta^\dagger a_\beta] = [a_\alpha^\dagger, b_\beta^\dagger a_\beta]b_\alpha + a_\alpha^\dagger[b_\alpha, b_\beta^\dagger a_\beta] \\
&= b_\beta^\dagger[a_\alpha^\dagger, a_\beta]b_\alpha + a_\alpha^\dagger[b_\alpha, b_\beta^\dagger]a_\beta = -b^\dagger b + a^\dagger a = 2\mathcal{J}_z \\
[\mathcal{J}_z, \mathcal{J}_+] &= \frac{1}{2}[a_\alpha^\dagger a_\alpha - b_\alpha^\dagger b_\alpha, a_\beta^\dagger b_\beta] = \frac{1}{2}\left[a_\alpha^\dagger[a_\alpha, a_\beta^\dagger]b_\beta - a_\beta^\dagger[b_\alpha^\dagger, b_\beta]b_\alpha\right] = a^\dagger b = \mathcal{J}_+ \\
[\mathcal{J}_z, \mathcal{J}_-] &= ([\mathcal{J}_-^\dagger, \mathcal{J}_z^\dagger])^\dagger = ([\mathcal{J}_+, \mathcal{J}_z])^\dagger = -\mathcal{J}_+^\dagger = -\mathcal{J}_-
\end{aligned}$$

とこれらは角運動量の交換関係を満たす。また、

$$
\begin{aligned}
[J_{1+}, \mathcal{J}_+] &= [a_+^\dagger a_-, a^\dagger b] = [a_+^\dagger a_-, a_-^\dagger b_-] = a_+^\dagger [a_-, a_-^\dagger] b_- = a_+^\dagger b_- \\
[J_{2+}, \mathcal{J}_+] &= [b_+^\dagger b_-, a^\dagger b] = [b_+^\dagger b_-, a_+^\dagger b_+] = a_+^\dagger [b_+^\dagger, b_+] b_- = -a_+^\dagger b_-
\end{aligned}
$$

よって $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2$ として

$$
\begin{aligned}
[J_+, \mathcal{J}_+] &= 0 \\
([J_+, \mathcal{J}_+])^\dagger &= [\mathcal{J}_-, J_-] = 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
[J_{1+}, \mathcal{J}_-] &= [a_+^\dagger a_-, b^\dagger a] = [a_+^\dagger a_-, b_+^\dagger a_+] = b_+^\dagger [a_+^\dagger, a_+] a_- = -b_+^\dagger a_- \\
[J_{2+}, \mathcal{J}_+] &= [b_+^\dagger b_-, b^\dagger a] = [b_+^\dagger b_-, b_-^\dagger a_-] = b_+^\dagger [b_-, b_-^\dagger] a_- = -b_+^\dagger a_-
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
[J_+, \mathcal{J}_-] &= 0 \\
([J_+, \mathcal{J}_-])^\dagger &= [\mathcal{J}_+, J_-] = 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
[J_{1z}, \mathcal{J}_+] &= \frac{1}{2}[n_{a+} - n_{a-}, a^\dagger b] = \frac{1}{2}[n_{a+} - n_{a-}, a_+^\dagger b_+ + a_-^\dagger b_-] \\
&= \frac{1}{2}[n_{a+}, a_+^\dagger b_+] - \frac{1}{2}[n_{a-}, a_-^\dagger b_-] = \frac{1}{2}(a_+^\dagger b_+ - a_-^\dagger b_-) \\
[J_{2z}, \mathcal{J}_+] &= \frac{1}{2}[n_{b+} - n_{b-}, a^\dagger b] = \frac{1}{2}[n_{b+} - n_{b-}, a_+^\dagger b_+ + a_-^\dagger b_-] \\
&= \frac{1}{2}[n_{b+}, a_+^\dagger b_+] - \frac{1}{2}[n_{b-}, a_-^\dagger b_-] = \frac{1}{2}(-a_+^\dagger b_+ + a_-^\dagger b_-)
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
[J_z, \mathcal{J}_+] &= 0 \\
([J_z, \mathcal{J}_+])^\dagger &= -[J_z, \mathcal{J}_-] = 0
\end{aligned}
$$

続いて

$$
[J_z, \mathcal{J}_z] = \frac{1}{4}[n_+ - n_-, n_a - n_b] = 0
$$

$$
\begin{aligned}
[J_{1+}, \mathcal{J}_z] &= \frac{1}{2}[a_+^\dagger a_-, n_a - n_b] = \frac{1}{2}[a_+^\dagger a_-, a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_-] = \frac{1}{2}[a_+^\dagger a_-, a_+^\dagger a_+] + \frac{1}{2}[a_+^\dagger a_-, a_-^\dagger a_-] \\
&= = \frac{1}{2}a_+^\dagger [a_+^\dagger, a_+] a_- + \frac{1}{2}a_+^\dagger [a_-, a_-^\dagger] a_- = 0 \\
[J_{2+}, \mathcal{J}_z] &= \frac{1}{2}[b_+^\dagger b_-, n_a - n_b] = -\frac{1}{2}[b_+^\dagger b_-, b_+^\dagger b_+ + b_-^\dagger b_-] = -\frac{1}{2}[b_+^\dagger b_-, b_+^\dagger b_+] - \frac{1}{2}[b_+^\dagger b_-, b_-^\dagger b_-] \\
&= = \frac{1}{2}b_+^\dagger [b_+^\dagger, b_+] b_- + \frac{1}{2}b_+^\dagger [b_-, b_-^\dagger] b_- = 0
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
[J+,\mathcal{J}_z] &= 0\\
([J+,\mathcal{J}_z])^\dagger &= -[J-,\mathcal{J}_z])=0
\end{aligned}
$$

以上から

$$
[J_i,\mathcal{J}_j] = 0
$$

$$
\begin{aligned}
2\boldsymbol{J}_1\cdot\boldsymbol{J}_2 &= \frac{1}{2}a_\alpha^\dagger a_\beta b_\gamma^\dagger b_\delta(2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}-\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta})\\
&= a_\alpha^\dagger a_\beta b_\beta^\dagger b_\alpha - \frac{1}{2}a_\alpha^\dagger a_\alpha b_\gamma^\dagger b_\gamma\\
&= a_\alpha^\dagger a_\beta (b_\alpha b_\beta^\dagger - \delta_{\alpha\beta}) - \frac{1}{2}a_\alpha^\dagger a_\alpha b_\gamma^\dagger b_\gamma\\
&= a_\alpha^\dagger b_\alpha b_\beta^\dagger a_\beta - n_a - \frac{1}{2}n_a n_b\\
&= \mathcal{J}_+\mathcal{J}_- - n_a - \frac{1}{2}n_a n_b
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{J}^2 &= \frac{1}{2}n_a(\frac{1}{2}n_a+1)+\frac{1}{2}n_b(\frac{1}{2}n_b+1)+\mathcal{J}_+\mathcal{J}_- - n_a - \frac{1}{2}n_a n_b\\
&= \frac{1}{2}(n_a+n_b)-n_a+\frac{1}{4}(n_a^2+n_b^2-2n_a n_b)+\mathcal{J}_+\mathcal{J}_-\\
&= -\frac{1}{2}(n_a-n_b)-n_a+\frac{1}{4}(n_a-n_b)^2+\mathcal{J}_+\mathcal{J}_-\\
&= \mathcal{J}_+\mathcal{J}_- + \mathcal{J}_z(\mathcal{J}_z-1)\\
&= \mathcal{J}_-\mathcal{J}_+ + \mathcal{J}_z(\mathcal{J}_z+1)
\end{aligned}
$$

一方、$J=i\sigma_y=\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}$ として

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}_+ &= a^\dagger J\widetilde{b^\dagger} = a_+^\dagger b_-^\dagger - a_-^\dagger b_+^\dagger = [a^\dagger b^\dagger]\\
\mathcal{K}_- &= \mathcal{K}_+^\dagger = [ab]\\
\mathcal{K}_3 &= \frac{1}{2}(a^\dagger a + b^\dagger b)+1 = \frac{1}{2}(n_a+n_b)+1 = \frac{1}{2}n+1
\end{aligned}
$$

として

$$
\begin{aligned}
[\mathcal{K}_+, \mathcal{K}_-] &= [a_+^\dagger b_-^\dagger - a_-^\dagger b_+^\dagger, b_- a_+ - b_+ a_-] \\
&= [a_+^\dagger b_-^\dagger, b_- a_+] - [a_+^\dagger b_-^\dagger, b_+ a_-] - [a_-^\dagger b_+^\dagger, b_- a_+] + [a_-^\dagger b_+^\dagger, b_+ a_-] \\
&= [a_+^\dagger b_-^\dagger, b_- a_+] + [a_-^\dagger b_+^\dagger, b_+ a_-] \\
&= b_-[a_+^\dagger, a_+] b_-^\dagger + a_+^\dagger [b_-^\dagger, b_-] a_+ + b_+ [a_-^\dagger, a_-] b_+^\dagger + a_-^\dagger [b_+^\dagger, b_+] a_- \\
&= -b_- b_-^\dagger - a_+^\dagger a_+ - b_+ b_+^\dagger - a_-^\dagger a_- \\
&= -(n_a + n_b + 2) = -2\mathcal{K}_z \\
[\mathcal{K}_z, \mathcal{K}_+] &= \frac{1}{2}[n_a + n_b, a_+^\dagger b_-^\dagger - a_-^\dagger b_+^\dagger] \\
&= \frac{1}{2}\left[[n_a, a_+^\dagger b_-^\dagger] + [n_b, a_+^\dagger b_-^\dagger] - [n_a, a_-^\dagger b_+^\dagger] - [n_b, a_-^\dagger b_+^\dagger] \right] \\
&= \frac{1}{2}\left[[a_+^\dagger a_+, a_+^\dagger b_-^\dagger] + [b_-^\dagger b_-, a_+^\dagger b_-^\dagger] - [a_-^\dagger a_-, a_-^\dagger b_+^\dagger] - [b_+^\dagger b_+, a_-^\dagger b_+^\dagger] \right] \\
&= \frac{1}{2}(a_+^\dagger b_-^\dagger + b_-^\dagger a_+^\dagger - a_-^\dagger b_+^\dagger - a_-^\dagger b_+^\dagger) = a_+^\dagger b_- - a_-^\dagger b_+ \\
&= \mathcal{K}_+ \\
[\mathcal{K}_z, \mathcal{K}_-] &= -\mathcal{K}_-
\end{aligned}
$$

また

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}_+ \mathcal{K}_- &= (a_+^\dagger b_-^\dagger - a_-^\dagger b_+^\dagger)(b_- a_+ - b_+ a_-) \\
&= a_+^\dagger a_+ b_-^\dagger b_- - a_-^\dagger a_+ b_+^\dagger b_- - a_+^\dagger a_- b_-^\dagger b_+ + a_-^\dagger a_- b_+^\dagger b_+ \\
&= n_a n_b - a_+^\dagger a_+ b_+^\dagger b_+ - a_-^\dagger a_- b_-^\dagger b_- - a_-^\dagger a_+ b_+^\dagger b_- - a_+^\dagger a_- b_-^\dagger b_+ \\
&= n_a n_b - a_\alpha^\dagger a_\beta b_\beta^\dagger b_\alpha
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
2\boldsymbol{J}_1 \cdot \boldsymbol{J}_2 &= a_\alpha^\dagger a_\beta b_\beta^\dagger b_\alpha - \frac{1}{2} n_a n_b \\
&= -\mathcal{K}_+ \mathcal{K}_- + \frac{1}{2} n_a n_b
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{J}^2 &= \frac{1}{2}n_a(\frac{1}{2}n_a+1)+\frac{1}{2}n_b(\frac{1}{2}n_b+1)-\mathcal{K}_+\mathcal{K}_-+\frac{1}{2}n_an_b \\
&= \frac{1}{2}(n_a+n_b)+\frac{1}{4}(n_a^2+n_b^2+2n_an_b)-\mathcal{K}_+\mathcal{K}_- \\
&= \frac{1}{2}n+\frac{1}{4}(n_a+n_b)^2-\mathcal{K}_+\mathcal{K}_- \\
&= \frac{1}{2}n(\frac{1}{2}n+1)-\mathcal{K}_+\mathcal{K}_- \\
&= (\mathcal{K}_z-1)\mathcal{K}_z-\mathcal{K}_+\mathcal{K}_- \\
&= (\mathcal{K}_z+1)\mathcal{K}_z-\mathcal{K}_-\mathcal{K}_+
\end{aligned}
$$

ここで $\boldsymbol{J}^2$, J_z, $\mathcal{J}_z$, $\mathcal{K}_z$ は可換なので、その同時固有状態として

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{J}^2|jm\mu\nu\rangle &= j(j+1)|jm\mu\nu\rangle \\
J_z|jm\mu\nu\rangle &= m|jm\mu\nu\rangle \\
\mathcal{J}_z|jm\mu\nu\rangle &= \mu|jm\mu\nu\rangle \\
\mathcal{K}_z|jm\mu\nu\rangle &= \nu|jm\mu\nu\rangle
\end{aligned}
$$

としたとき、まず、

$$
\begin{aligned}
\mu &= j_1-j_2 \\
\nu &= j_1+j_2+1
\end{aligned}
$$

逆に

$$
\begin{aligned}
j_1 &= \frac{\mu+\nu-1}{2} \\
j_2 &= \frac{-\mu+\nu-1}{2}
\end{aligned}
$$

と $(j_1,j_2)\rightleftarrows(\mu,\nu)$ が対応する。

ここで、$\mathcal{J}_z$ は通常の角運動量であり

$$-j\le\mu\le j$$

これより

$$|j_1-j_2|\le j$$

$\mathcal{K}$ については $\mathcal{K}_+\mathcal{K}_-$ は半正定値だから

$$\begin{aligned} -j(j+1)+\nu(\nu-1) &\geq 0 \\ \nu &\geq j+1 \\ j_1+j_2 &\geq j \end{aligned}$$

$$\mathcal{K}_z\mathcal{K}_\pm|jm\mu\nu\rangle = (\nu\pm 1)\mathcal{K}_\pm|jm\mu\nu\rangle$$

より

$$\mathcal{K}_\pm|jm\mu\nu\rangle = C_{\nu\pm}|jm\mu\nu\pm 1\rangle$$

であるが、規格化因子は

$$\begin{aligned} |C_{\nu\pm}|^2 &= \langle jm\mu\nu|\mathcal{K}_\mp\mathcal{K}_\pm|jm\mu\nu\rangle \\ &= \langle jm\mu\nu|[(\mathcal{K}_z\pm 1)\mathcal{K}_z - j(j+1)]|jm\mu\nu\rangle \\ &= \nu(\nu\pm 1)-j(j+1) \\ &= (\nu+j)(\nu-j)\pm(\nu\mp j) \\ &= (\nu\mp j)(\nu\pm j\pm 1) \end{aligned}$$

よって $C_{\nu-}=0$, $\nu=j+1$ だから

$$\mathcal{K}_-|jm\mu j+1\rangle = 0$$

これが最小の ν であり、

$$C_{\nu+} = \sqrt{(\nu-j)(\nu+j+1)}$$

ととって、

$$\begin{aligned} |jm\mu j+2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1\cdot(2j+2)}}\mathcal{K}_+|jm\mu j+1\rangle \\ |jm\mu j+3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1\cdot 2\cdot(2j+3)(2j+2)}}\mathcal{K}_+^2|jm\mu j+1\rangle \\ &\vdots \\ |jm\mu\nu\rangle &= \sqrt{\frac{(2j+1)!}{(\nu-j-1)!(j+\nu)!}}\mathcal{K}_+^{\nu-j-1}|jm\mu j+1\rangle \\ &= \omega_{j\nu}(\mathcal{K}_+)|jm\nu j+1\rangle \end{aligned}$$

ここで

$$\omega_{j\nu}(\lambda) = \sqrt{\frac{(2j+1)!}{(\nu+j)!(\nu-j-1)!}}\lambda^{\nu-j-1}$$

またこれは次のようにも書ける。[4]

$$[(2j+1)!]^{-1/2}\sum_{\nu=j+1}^{\infty}\chi_{j\nu}(\lambda)|jm\mu\nu\rangle = e^{\lambda\mathcal{K}_+}|jm\mu j+1\rangle$$

$$\chi_{j\nu}(\lambda) = \lambda^{\nu-j-1}\sqrt{\frac{(j+\nu)!}{(\nu-j-1)!}}$$

特に $\nu=j+1$ に関しては $\nu=j_1+j_2+1$ だから $j=j_1+j_2$ であり、$j_1-j_2=\mu$ より

$$j_1 = \frac{j+\mu}{2}$$
$$j_2 = \frac{j-\mu}{2}$$

さらに $j=m$ とすれば，$j_1+j_2=m_1+m_2$ つまり、$j_1=m_1, j_2=m_2$。よって

$$|jj\mu j+1\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{j_1+m_1}(b_+^\dagger)^{j_2+m_2}}{\sqrt{(j_1+m_1)!(j_2+m_2)!}}|0\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{j+\mu}(b_+^\dagger)^{j-\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!}}|0\rangle$$

これを座標変換した形で書き直して

$$|jj\mu j+1\rangle' = \frac{({a'}_+^\dagger)^{j+\mu}({b'}_+^\dagger)^{j-\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!}}|0\rangle$$

としたものを元の座標で書けば、

$$\sqrt{(2j)!}\sum_m|jm\mu j+1\rangle\phi_{jm}(x) = \frac{(xa^\dagger)^{j+\mu}(xb^\dagger)^{j-\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!}}|0\rangle \qquad (*:\text{Schwinger}(3.18))$$

---

[4]

$$[(2j+1)!]^{-1/2}\sum_{\nu=j+1}^{\infty}\lambda^{\nu-j-1}\sqrt{\frac{(j+\nu)!}{(\nu-j-1)!}}|jm\mu\nu\rangle = \sum_{\nu=j+1}^{\infty}\frac{1}{(\nu-j-1)!}(\lambda\mathcal{K}_+)^{\nu-j-1}|jm\mu j+1\rangle = e^{\lambda\mathcal{K}_+}|jm\mu j+1\rangle$$

$\phi_{j\mu}(\xi)$ を掛けて μ で和をとれば

$$\begin{aligned}\sqrt{(2j)!}\sum_{m\mu}|jm\mu j+1\rangle\phi_{jm}(x)\phi_{j\mu}(\xi) &= \frac{1}{(2j)!}\sum_{\mu}(\xi_+a^\dagger x)^{j+\mu}(\xi_-b^\dagger x)^{j-\mu}\frac{(2j)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!}|0\rangle \\ &= \frac{1}{(2j)!}(\xi_+a^\dagger x+\xi_-b^\dagger x)^{2j}|0\rangle\end{aligned}$$

さらに j で足して

$$\sqrt{(2j)!}\sum_{jm\mu}|jm\mu j+1\rangle\phi_{jm}(x)\phi_{j\mu}(\xi) = e^{\xi_+(xa^\dagger)+\xi_-(xb^\dagger)}|0\rangle$$

これに $e^{\lambda\mathcal{K}_+}=e^{\lambda[a^\dagger b^\dagger]}$ を作用させれば

$$\begin{aligned}e^{\lambda[a^\dagger b^\dagger]+\xi_+(xa^\dagger)+\xi_-(xb^\dagger)}|0\rangle &= \sqrt{(2j)!}\sum_{jm\mu}e^{\lambda\mathcal{K}_+}|jm\mu j+1\rangle\phi_{jm}(x)\phi_{j\mu}(\xi) \\ &= \sqrt{(2j)!}\sum_{jm\mu\nu}\frac{1}{(2j+1)!}|jm\mu\nu\rangle\phi_{jm}(x)\phi_{j\mu}(\xi)\chi_{j\nu}(\lambda) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2j+1}}\sum_{jm\mu\nu}|jm\mu\nu\rangle\phi_{jm}(x)\phi_{j\mu}(\xi)\chi_{j\nu}(\lambda) \qquad \text{(Schwinger(3.35))}\end{aligned}$$

また、上記 (*) に $\omega_{j\nu}(\mathcal{K}_+)$ を作用させて、

$$\sqrt{(2j)!}\sum_{m}|jm\mu\nu\rangle\phi_{jm}(x) = \sqrt{(2j+1)!}\frac{[a^\dagger b^\dagger]^{\nu-j-1}(xa^\dagger)^{j+\mu}(xb^\dagger)^{j-\mu}}{\sqrt{(\nu+j)!(\nu-j-1)!(j+\mu)!(j-\mu)!}}|0\rangle$$

ここで表示を $\mu=j_1-j_2$, $\nu=j_1+j_2+1$ を使って (j_1,j_2) に変えると以下の様になる。

$$\sum_{m}|j_1j_2jm\rangle\phi_{jm}(x) = \left[\frac{2j+1}{(j+j_1+j_2+1)!}\right]^{1/2}\frac{[a^\dagger b^\dagger]^{j_1+j_2-j}(xa^\dagger)^{j+j_1-j_2}(xb^\dagger)^{j-j_1+j_2}}{\sqrt{(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!}}|0\rangle$$

ここで

$$|j_1j_2jm\rangle = |jm\mu\nu\rangle$$

である。$x_+\to z_-^*$, $x_-\to -z_+^*$, と書いて

$$\begin{aligned}(xa^\dagger) &= x_+a_+^\dagger+x_-a_-^\dagger=z_-^*a_+^\dagger-z_+^*a_-^\dagger=[a^\dagger z^*] \\ (xb^\dagger) &= [b^\dagger z^*]\end{aligned}$$

$$\sum_m |j_1 j_2 j m\rangle \phi_{jm}(\begin{pmatrix} z_-^* \\ -z_+^* \end{pmatrix}) =$$
$$\left[\frac{2j+1}{(j+j_1+j_2+1)!}\right]^{1/2} \frac{[a^\dagger b^\dagger]^{j_1+j_2-j}[a^\dagger z]^{j+j_1-j_2}[b^\dagger z]^{j-j_1+j_2}}{\sqrt{(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!}}|0\rangle$$

これと

$$\sum_{m_1 m_2} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \phi_{j_1 m_1}(x)\phi_{j_2 m_2}(y) = e^{(xa^\dagger)+(yb^\dagger)}|0\rangle$$

との内積を $j = j_3, m = -m_3$ として書けば [5] [6] [7]

$$\sum_{m_1 m_2 m_3} \langle j_1 j_2 j_3 - m_3 | j_1 m_1 j_2 m_2\rangle (-)^{j_3+m_3} \phi_{j_1 m_1}(x)\phi_{j_2 m_2}(y)\phi_{j_3 m_3}(z)$$
$$= (-)^{j_1+j_2-j_3}\left[\frac{2j_3+1}{(j_3+j_1+j_2+1)!}\right]^{1/2} \frac{[yx]^{j_1+j_2-j_3}[xz]^{j_3+j_1-j_2}[yz]^{j_3-j_1+j_2}}{\sqrt{(j_1+j_2-j_3)!(j_3+j_1-j_2)!(j_3-j_1+j_2)!}}$$

5

$$\begin{aligned} [a^\dagger b^\dagger] &= a_+^\dagger b_-^\dagger - a_-^\dagger b_+^\dagger \\ [a^\dagger b^\dagger]^\dagger &= b_- a_+ - b_+ a_- = -[ba] \end{aligned}$$

6

$$\phi_{jm}(\begin{pmatrix} z_- \\ -z_+ \end{pmatrix})) = \frac{(z_-)^{j+m}(-z_+)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!)}} = (-)^{j-m}\frac{(z_+)^{j-m}(z_-)^{j+m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!)}} = (-)^{j-m}\phi_{j-m}(z)$$

7

$$\begin{aligned} \langle 0|[ba]^{j_1+j_2-j_3}[az]^{j_3+j_1-j_2}[bz]^{j_3-j_1+j_2}e^{(xa^\dagger)+(yb^\dagger)}|0\rangle &= \langle 0|[ba]^{j_1+j_2-j_3}[az]^{j_3+j_1-j_2}[\frac{\partial}{\partial b^\dagger}z]^{j_3-j_1+j_2}e^{(xa^\dagger)+(yb^\dagger)}|0\rangle \\ &= \langle 0|[ba]^{j_1+j_2-j_3}[az]^{j_3+j_1-j_2}[yz]^{j_3-j_1+j_2}e^{(xa^\dagger)+(yb^\dagger)}|0\rangle \\ &= \langle 0|[ba]^{j_1+j_2-j_3}[xz]^{j_3+j_1-j_2}[yz]^{j_3-j_1+j_2}e^{(xa^\dagger)+(yb^\dagger)}|0\rangle \\ &= [yx]^{j_1+j_2-j_3}[xz]^{j_3+j_1-j_2}[yz]^{j_3-j_1+j_2}\langle 0|e^{(xa^\dagger)+(yb^\dagger)}|0\rangle \\ &= [yx]^{j_1+j_2-j_3}[xz]^{j_3+j_1-j_2}[yz]^{j_3-j_1+j_2} \end{aligned}$$

ここでクレブシュ・ゴルダン係数の定義を思い出して

$$\begin{aligned}\langle jm|j_1m_1j_2m_2\rangle &= \langle j_1j_2jm|j_1m_1j_2m_2\rangle \\ &\equiv \sqrt{2j+1}\rangle(-)^{j_1-j_2+m}X(j_1j_2j;m_1m_2-m) \\ &\equiv \sqrt{2j+1}\rangle(-)^{j_1-j_2+m}\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m\end{array}\right\}\end{aligned}$$

により $\underline{X\text{ 記号}}$ ならびに $\underline{\text{ウィグナーの }3j\text{ 記号}}$ を定義すれば

$$\begin{aligned}&\sum_{m_1m_2m_3} X(j_1j_2j_3;m_1m_2m_3)\phi_{j_1m_1}(x)\phi_{j_2m_2}(y)\phi_{j_3m_3}(z) \\ &= \frac{1}{\sqrt{(j_1+j_2+j_3+1)!}}\frac{[yx]^{j_1+j_2-j_3}[xz]^{j_3+j_1-j_2}[yz]^{j_3-j_1+j_2}}{\sqrt{(j_1+j_2-j_3)!(j_3+j_1-j_2)!(j_3-j_1+j_2)!}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(j_1+j_2+j_3+1)!}}\frac{[yz]^{j_3-j_1+j_2}[zx]^{j_3+j_1-j_2}[xy]^{j_1+j_2-j_3}}{\sqrt{(j_1+j_2-j_3)!(j_3+j_1-j_2)!(j_3-j_1+j_2)!}}\end{aligned}$$

となる。

これを展開して各次数を比べることで X 係数の具体的な形を定めよう。($J = j_1+j_2+j_3$) まず右辺は

$$\begin{aligned}&\sum_{m_1m_2m_3} X(j_1j_2j_3;m_1m_2m_3)\phi_{j_1m_1}(x)\phi_{j_2m_2}(y)\phi_{j_3m_3}(z) \\ &= \sum_{m_1m_2m_3} X(j;m)\frac{1}{\prod_{i=1}^3[(j_i+m_i)!(j_1-m_i)!]}x_+^{j_1+m_1}x_-^{j_1-m_1}y_+^{j_2+m_2}y_-^{j_2-m_2}z_+^{j_3+m_3}z_-^{j_3-m_3}\end{aligned}$$

次に左辺は

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{(j_1+j_2+j_3+1)!}}\frac{[yz]^{j_3-j_1+j_2}[zx]^{j_3+j_1-j_2}[xy]^{j_1+j_2-j_3}}{\sqrt{(j_1+j_2-j_3)!(j_3+j_1-j_2)!(j_3-j_1+j_2)!}} \\ &= \sum_{n_1n_2n_3}\frac{1}{[(J+1)!(J-2j_1)!(J-2j_2)!(J-2j_3)!]^{1/2}} \\ &\times\begin{pmatrix} J-2j_1 \\ n_1\end{pmatrix}\begin{pmatrix} J-2j_2 \\ n_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix} J-2j_3 \\ n_3\end{pmatrix} \\ &\times(y_+z_-)^{J-2j_1-n_1}(-y_-z_+)^{n_1}(z_+x_-)^{J-2j_2-n_2}(-z_-x_+)^{n_2}(x_+y_-)^{J-2j_3-n_3}(-x_-y_+)^{n_3} \\ &= \sum_{n_1n_2n_3}(-)^n\frac{1}{[(J+1)!]^{1/2}}\prod_{i=1}^3\frac{[(J-2j_i)!]^{1/2}}{(J-2j_i-n_i)!n_i!} \\ &x_+^{J-2j_3-n_3+n_2}x_-^{J-2j_2-n_2+n_3}y_+^{J-2j_1-n_1+n_3}y_-^{J-2j_3-n_3+n_1}z_+^{J-2j_2-n_2+n_1}z_-^{J-2j_1-n_1+n_2} \qquad (**)\end{aligned}$$

ただし、$n = n_1 + n_2 + n_3$。次に x_+ のべきを比べて

$$j_1 + m_1 = J - 2j_3 - n_3 + n_2 = j_1 + j_2 - j_3 - n_3 + n_2$$

書き直して

$$n_2 - n_3 = m_1 - j_2 + j_3$$

同様に全てを書けば

$$\begin{aligned} n_2 - n_3 &= m_1 - j_2 + j_3 \\ n_3 - n_1 &= m_2 - j_3 + j_1 \\ n_1 - n_2 &= m_3 - j_1 + j_2 \end{aligned}$$

この条件下で

$$X(j;m) = \sum_{n_1 n_2 n_3} (-)^n \frac{1}{[(J+1)!]^{1/2}} \prod_{i=1}^{3} \frac{[(j_i+m_i)!(j_i-m_i)!(J-2j_i)!]^{1/2}}{(J-2j_i-n_i)!n_i!}$$

X 記号の定義式を以下の様に書いて

$$\sum_m X(j;m)\phi_{j_1m_1}(x)\phi_{j_2m_2}(y)\phi_{j_3m_3}(z) = \frac{[yz]^{J-2j_1}[zx]^{J-2j_2}[xy]^{J-2j_3}}{\sqrt{(J+1)!(J-2j_1)!(J-2j_2)!(J-2j_3)!}}$$

以下のように定義する $\Phi_{j_1j_2j_3}(\alpha\beta\gamma)$ をかけて $j_1j_2j_3$ で和をとれば、$(J-2j_1)+(J-2j_2)+(J-2j_3) = J$ に注意して

$$\Phi_{j_1j_2j_3}(\alpha\beta\gamma) = \sqrt{(J+1)!}\frac{\alpha^{J-2j_1}\beta^{J-2j_2}\gamma^{J-2j_3}}{\sqrt{(J-2j_1)!(J-2j_2)!(J-2j_3)!}}$$

$$\begin{aligned} &\sum_{jm} X(j;m)\phi_{j_1m_1}(x)\phi_{j_2m_2}(y)\phi_{j_3m_3}(z)\Phi_{j_1j_2j_3}(\alpha\beta\gamma) \\ &= \sum_{j_1j_2j_3} \frac{(\alpha[yz])^{J-2j_1}(\beta[zx])^{J-2j_2}(\gamma[xy])^{J-2j_3}}{(J-2j_1)!(J-2j_2)!(J-2j_3)!} \\ &= \sum_J \sum_{j_1'+j_2'+j_3'=J} \frac{(\alpha[yz])^{j_1'}(\beta[zx])^{j_2'}(\gamma[xy])^{j_3'}}{(j_1'+j_2'+j_3')!} \\ &= \sum_J \frac{(\alpha[yz]+\beta[zx]+\gamma[xy])^J}{J!} \\ &= e^{\alpha[yz]+\beta[zx]+\gamma[xy]} \end{aligned}$$

右辺が X 記号の母関数を与える。

これから X 記号、ウィグナーの $3j$ 記号の対称性は容易にみちびかれる。まず、右辺は (j_1,j_2,j_3), (m_1,m_2,m_3), (α,β,γ), (x,y,z) の巡回置換に対して不変なので、

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix}$$

次に例えば $j_1 \rightleftarrows j_2$, $m_1 \rightleftarrows m_2$, $\alpha \rightleftarrows -\beta$, $\gamma \rightleftarrows -\gamma$, $x \rightleftarrows y$, に対して右辺は不変、また $\Phi_{j_2j_1j_3}(-\beta,-\alpha,-\gamma) = (-)^J\Phi_{j_1j_2j_3}(\alpha,\beta,\gamma)$ であるから

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j_1 \\ m_3 & m_2 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} = (-)^J \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

また、$x_+ \to x_-$, $y_+ \to y_-$, $z_+ \to z_-$, $\alpha \to -\alpha$, $\beta \to -\beta$, $\gamma \to -\gamma$ に対して $[xy] \to -[xy]$ などとなるので右辺は不変、$\Phi_{j_1j_2j_3}(-\alpha,-\beta,-\gamma) = (-)^J\Phi_{j_1j_2j_3}(\alpha\beta\gamma)$, $\phi_{jm} \to \phi_{j-m}$ だから

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-)^J \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

特に $m_1 = m_2 = m_3 = 0$ として

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0: \quad J = j_1 + j_2 + j_3 = \mathrm{odd}$$

クレブシュ・ゴルダン係数に関して

$$\begin{aligned} \langle jm|j_2m_2, j_1m_1\rangle &= \sqrt{2j+1}(-)^{j_2-j_1+m} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j \\ m_2 & m_1 & -m \end{pmatrix} \\ &= \sqrt{2j+1}(-)^{j_2-j_1+m+J} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \\ &= (-)^{j_1+j_2-j}\sqrt{2j+1}(-)^{j_1-j_2+m} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \\ &= (-)^{j_1+j_2-j}\langle jm|j_1m_1, j_2m_2\rangle \end{aligned}$$

さらに θ を任意の実数として $x_\pm \to x_\pm e^{\pm i\theta}$, $y_\pm \to y_\pm e^{\pm i\theta}$, $z_\pm \to z_\pm e^{\pm i\theta}$ に対して右辺は自明に不変で左辺は $e^{2i\theta(m_1+m_2+m_3)}$ だけ余分な因子がつくので、

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = 0: \quad m_1 + m_2 + m_3 \neq 0$$

付 録A　ディラックのブラケット記法

以下 ディラックのブラケット記法 についてまとめよう。

A.1　関数空間でのブラケット記法

関数 f とはある数 x にある数 y を対応させる規則であり，これを

$$\begin{aligned} f : x &\mapsto y \\ y &= f(x) \end{aligned}$$

と書く。同様に 演算子 A とは関数 f に関数 g を対応させる規則で

$$\begin{aligned} A : f &\mapsto g \\ g &= Af \\ g(x) &= (Af)(x) \end{aligned}$$

などと書く。なお 汎関数I とは関数 f に値 y を対応させる規則であり次のように書かれる。

$$\begin{aligned} I : f &\mapsto y \\ y &= I[f(x)] \end{aligned}$$

ここで関数に対する演算子の作用をコンパクトに記述する方法が ディラックのブラケット記法 であるが、これを以下説明しよう。

区間 $[a, b]$ で定義される関数 $\psi(x)$ をベクトルとみて

$$\begin{aligned} \psi(x) &\rightleftarrows |\psi\rangle \\ \psi^*(x) &\rightleftarrows \langle\psi| \end{aligned}$$

と書き，$\langle\psi|$ をブラベクトル，$|\psi\rangle$ をケットベクトルとし，$\psi(x)$ と $\varphi(x)$ との関数としての内積 (ψ,φ) を

$$(\psi,\varphi) \;=\; \int dx\,\psi^*(x)\varphi(x) \equiv \langle\psi|\varphi\rangle$$

と表現する。つまり，ブラとケットはこの内積に関してお互いに共役である。これを以下のように書く。

$$\begin{aligned}\big(|\psi\rangle\big)^\dagger &= \langle\psi| \\ \big(\langle\psi|\big)^\dagger &= |\psi\rangle\end{aligned}$$

更に，演算子 A の関数 $\psi(x)$ への作用を

$$A\psi(x) \;\rightleftarrows\; |A\psi\rangle = A|\psi\rangle$$

と書く。演算子 A のエルミート共役 $A^\dagger$ は

$$(\psi,A\varphi) \;=\; (A^\dagger\psi,\varphi)$$

であるが

$$\langle A^\dagger\psi| \;=\; \big(|A^\dagger\psi\rangle\big)^\dagger = \big(A^\dagger|\psi\rangle\big)^\dagger = \langle\psi|(A^\dagger)^\dagger = \langle\psi|A$$

より

$$\langle\psi|A\varphi\rangle \;=\; \langle A^\dagger\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|A|\varphi\rangle$$

と整合的である。くりかえすと

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle \;=\; \langle\psi|(A|\varphi) = (\langle\psi|A)|\varphi\rangle$$

のいずれとみても良いが，

$$\langle\psi|A \;=\; (A^\dagger|\psi\rangle)^\dagger$$

であることに留意する。なお

$$\begin{aligned}(\langle\psi|A|\varphi\rangle)^* &= (\langle\psi|A\varphi\rangle)^* = (\langle A^\dagger\psi|\varphi\rangle)^* = \int dx\,\big(A^\dagger\psi(x)\big)\varphi^*(x) = \langle\varphi|(A^\dagger\psi\rangle) \\ &= \langle\varphi|A^\dagger|\psi\rangle\end{aligned}$$

である。

　また、デルタ関数 に対応するケットベクトルを

$$|\delta(x-a)\rangle \;=\; |a\rangle$$

と書けば、一般の関数 $\psi(x)$ に対して

$$\langle a|\psi\rangle \;=\; \int dx\,(\delta(x-a))^*\psi(x) = \psi(a)$$

よってブラケット記法で関数 $\psi(x)$ は次のように表記される

$$\psi(x) \;=\; \langle x|\psi\rangle$$

特に $\psi(x) = \delta(x-a)$ の場合，上の定義に従えば $|\psi\rangle = |a\rangle$ と書いたので

$$\langle x|a\rangle \;=\; \delta(x-a)$$

となる。これはケットベクトル $|x\rangle$ の 規格直交性

$$\langle x|y\rangle \;=\; \delta(x-y)$$

と理解できる。

　規格直交化された関数列 $\{\varphi_n(x)\}$ に対してその規格直交性は

$$\langle \varphi_n|\varphi_m\rangle \;=\; \delta_{nm}$$

と書け、完全性

$$\sum_n \varphi_n(x)\varphi_n^*(y) \;=\; \delta(x-y)$$

は

$$\sum_n \langle x|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|y\rangle \;=\; \langle x|y\rangle$$

となる。よって

$$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \;=\; 1$$

がブラケット記法による 完全性 の関係式である。

　ここでは，議論をわかり安くするために 1 次元で議論したが，多次元への拡張は自明であろう。

A.2　フォック空間でのブラケット記法

なお、以上の関数空間でのブラケット記法と次のいわゆるフォック空間でのブラケット記法とを区別して混乱しないようにしよう。例えば、ボーズ演算子とは $[a, a^\dagger] = 1$ となる演算子であるが、真空を

$$\begin{aligned} a|0\rangle &= 0 \\ \langle 0|a^\dagger &= 0 \end{aligned}$$

と定義すれば、後述のように自然数 n に対して

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

とすれば、

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$$

となる。ここで $\hat{n} = a^\dagger a$ は粒子数演算子と呼ばれる。

なお

$$e^{i\lambda\hat{n}}|0\rangle = |0\rangle$$

A.3　エルミート演算子に関する重要な性質

ディラックのブラケット記法により，エルミート演算子の重要な性質をまとめておこう。エルミート演算子 A に対して，固有値 a の規格化されたケット $|a\rangle$ に対する固有方程式は

$$A|a\rangle = |a\rangle a$$

となるが，そのエルミート共役をとって[1]

$$\langle a|A^\dagger = \langle a|A = a^*\langle a|$$

[1]任意の演算子 A のエルミート共役 $A^\dagger$ の定義は，任意の状態 $|x\rangle$, $|y\rangle$ に対して

$$\langle x|(A|y\rangle) = \langle A^\dagger x|y\rangle$$

であった。よって、この左辺を

$$\langle x|(A|y\rangle) = \langle x|A|y\rangle$$

と書くとき，

$$\langle x|A = \langle A^\dagger x| = (|A^\dagger x\rangle)^\dagger$$

である。

この関係に注意して，最初の式の左辺に $\langle a|$ をかけると

$$\langle a|A|a\rangle = (\langle a|A)|a\rangle = a^*\langle a|a\rangle = a^*$$

右辺は a となるから

$$a^* = a$$

エルミート演算子の固有値

エルミート演算子の固有値は実数である。

次に異なる固有値 a, b $(a \neq b)$ に属する 2 つの固有ケット $A|a\rangle = |a\rangle a$, $A|b\rangle = |b\rangle b$ を考えよう。この時

$$\begin{aligned}\langle a|A|b\rangle &= \langle a|(A|b\rangle) = \langle a|b\rangle b \\ &= (\langle a|A)|b\rangle = a\langle a|b\rangle\end{aligned}$$

より $(a-b)\langle a|b\rangle = 0$。これをまとめて,

固有ケットの直交性

エルミート演算子の異なる固有値に属する固有ケットは直交する。

$$\langle a|b\rangle = 0, \quad (a \neq b)$$

一般に有限次元 n 次元のエルミート演算子は縮退した固有値を持ち得るが、その際はエルミート演算子に微小摂動を加えてその縮退を解けば，一般に n 個の直交した固有ケットを持ち、有限次元なら、必ず規格化可能であり、これらが n 次元空間全体の (規格直交化された) 基底となる。つまり, 任意のケット $|v\rangle$ に対して

$$|v\rangle = \sum_i |a_i\rangle v_i, \langle a_i a_j\rangle = \delta_{ij}$$

と展開可能である。なお，この関係は微小摂動をゼロにする極限でも（物理的には）問題なく成立することにも注意しよう。これに $\langle a_i$ をかけて

$$v_i = \langle a_i|v\rangle$$

よって

$$|v\rangle = \sum_i |a_i\langle a_i|v\rangle = \big(\sum_i |a_i\langle a_i|\big)|v\rangle$$

ここで $|v\rangle$ は任意だから

$$\sum_i |a_i\langle a_i| \quad = \quad 1$$

これを固有ケットの完全性という。

固有ケットの完全性

(有限次元の) エルミート演算子の固有ケットは規格直交化された完全系を作る。

ここで固有値 a_i の空間への射影演算子を

$$P_i \quad = \quad |a_i\rangle\langle a_i|$$

とすれば,

$$P_i^2 \quad = \quad |a_i\rangle\langle a_i|a_i\rangle\langle a_i| = |a_i\rangle\langle a_i| = P_i$$

を満たし，上記完全性より

$$\sum_i P_i \quad = \quad 1$$

となる。

ここで，任意の規格直交化された完全系 $|i\rangle$, $i = 1, 2, \cdots$

$$\langle i|j\rangle \quad = \quad \delta_{ij}, \ \sum_i |i\rangle\langle i| = 1$$

に対してユニタリ演算子 U を次のように定義する。

$$U \quad = \quad \sum_i |a_i\rangle\langle i|$$

$$U^\dagger \quad = \quad \sum_i |i\rangle\langle a_i|$$

この演算子がユニタリであることは次のように確認できる。

$$UU^\dagger \quad = \quad \sum_i |i\rangle\langle i| = 1$$

$$U^\dagger U \quad = \quad \sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = 1$$

これを用いて

$$AU \quad = \quad \sum_i A|a_i\rangle\langle i| = \sum_i |a_i\rangle a_i\langle i|$$

これに右から $U^\dagger$ をかけて

$$
\begin{aligned}
A &= \sum_i |a_i\rangle a_i\langle i| \sum_i | = \sum_{ij} |a_i\rangle a_i\langle i|j\rangle\langle a_j| \\
&= \sum_i |a_i\rangle a_i\langle a_i| = \sum_i a_i P_i
\end{aligned}
$$

これをエルミート演算子の <u>スペクトル分解</u> という。

これは次のようにも示せる。まず N 次元のエルミート行列 A を対角化する行列 $\boldsymbol{V}$ として

$$
\begin{aligned}
A\boldsymbol{V} &= \boldsymbol{V}\mathrm{diag}\,(a_1, \cdots, a_N) \\
\boldsymbol{V} &= (|a_1\rangle, |a_2\rangle, \cdots |a_N\rangle)
\end{aligned}
$$

$\boldsymbol{V}$ のユニタリ性は

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{V}^\dagger\boldsymbol{V} &= E_N \\
(\boldsymbol{V}^\dagger\boldsymbol{V})_{ij} &= \langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}
\end{aligned}
$$

完全性は

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^\dagger &= E_N \\
\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^\dagger &= (|a_1\rangle, \cdots |a_N\rangle) \begin{pmatrix} \langle a_1| \\ \vdots \\ \langle a_N| \end{pmatrix} = \sum_i P_i \\
P_i &= |i\rangle\langle i|
\end{aligned}
$$

よって有限次元ではユニタリ性と完全性は等価である。また

$$
A = \boldsymbol{V}\mathrm{diag}\,(a_1, \cdots, a_N)\boldsymbol{V}^\dagger = \sum_i a_i P_i
$$

となる。

A.4　可換なエルミート演算子

議論を進める前に，この機会に交換子に関する以下の公式を与えておこう。[2]

$$\begin{aligned}[AB,C] &= A[B,C]+[A,C]B \\ [A,BC] &= B[A,C]+[A,B]C\end{aligned}$$

以下可換な 2 つのエルミート演算子 A, B について考えよう

$$[A,B] = AB-BA=0$$

これを A の固有ケット $|a\rangle$, $|a'\rangle$，($A|a\rangle=|a\rangle a, A|a'\rangle=|a'\rangle a'$) で挟めば

$$\begin{aligned}\langle a|(AB-BA)|a'\rangle &= a\langle a|B|a'\rangle-\langle a|B|a'\rangle a' \\ &= (a-a')\langle a|A|a'\rangle=0\end{aligned}$$

よって (有限次元の) 2 つの (対角化可能な) 演算子 A, B が可換 $[A,B]=0$ である時，A の異なる固有値に属する固有状態 $|a\rangle$, $|a'\rangle$, に関する B の行列要素はゼロである。

$$\langle a|B|a'\rangle = 0, \quad a\neq a'$$

つまり A の固有状態に縮退がなければ $|a\rangle$ は B を対角化する、つまり B の固有状態ともなる。重複するが、詳しく説明すれば,

$$B|a\rangle = \sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|B|a\rangle=|a\rangle\langle a|B|a\rangle$$

つまり，$|a\rangle$ は B の固有値 $\langle a|B|a\rangle$ の固有ベクトルである。

A に縮退がある場合、B はブロック対角化されているから、縮退を n で区別しよう。ここで、縮退度は M とし、他に縮退はないとしよう。よって完全性は

$$\sum_{a'\neq a}|a'\rangle\langle a'|+\sum_n|an\rangle\langle an|=1$$

となる。

[2]

$$\begin{aligned}A[B,C]+[A,C]B &= ABC-ACB+(ACB-CAB)=ABC-CAB=[AB,C] \\ [A,BC] &= -[BC,A]=-B[C,A]-[B,A]C=B[A,C]+[A,B]C\end{aligned}$$

ここで

$$\langle an|B|an'\rangle = (\langle an'|B^\dagger|an\rangle)^* = (\langle an'|B|an\rangle)^*$$

となるからブロック行列もエルミートだから，対角化できて B の固有値で区別される。具体的には，ブロックエルミート行列の固有値 b の固有ベクトルの成分を $\langle an'|ab\rangle$, $n'=1,\cdots,M$ として

$$\sum_{n'=1}^{M}\langle an|B|an'\rangle\langle an'|ab\rangle = \langle an|ab\rangle b$$

となる。よって

$$|ab\rangle = \sum_{n=1}^{M}|an\rangle\langle an|ab\rangle$$

として

$$\begin{aligned} B|ab\rangle &= \left(\sum_{a'\neq a}|a'\rangle\langle a'| + \sum_{n}|an\rangle\langle an|\right)B\sum_{n'=1}^{M}|an'\rangle\langle an'|ab\rangle \\ &= \sum_{nn'}|an\rangle\langle an|B|an'\rangle\langle an'|ab\rangle \\ &= \sum_{n}|an\rangle\langle an|ab\rangle b = |ab\rangle b \end{aligned}$$

とこれは B の固有値 b の固有ベクトルとなる。一般の状況への拡張は自明であるから以上併せて

可換なエルミート演算子の 同時対角化

$[A,B]=AB-BA=0$ と可換なエルミート演算子 ($A^\dagger=A, B^\dagger=B$) は同時対角化可能である。

$$\begin{aligned} A|a,b\rangle &= |a,b\rangle a \\ B|a,b\rangle &= |a,b\rangle b \end{aligned}$$

付 録B　ボーズ演算子の代数

B.1　ボーズ演算子の代数

まず最初に以下必要なボーズ粒子の性質をまとめておこう。

$$
\begin{aligned}
[a, a^\dagger] &= 1, \\
a|0\rangle &= 0
\end{aligned}
$$

として、

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

は $\hat{n} = a^\dagger a$ に対して

$$
\hat{n}|j\rangle = j|j\rangle
$$

まず n の多項式 $f(n)$ について[1]

$$
af(n) = f(n+1)a
$$

また

[1]

$$
\begin{aligned}
an &= aa^\dagger a = (a^\dagger a + 1)a = na + a = (n+1)a \\
an^2 &= an \cdot n = (n+1)a \cdot n = (n+1)^2 a \\
&\cdots \\
an^k &= (n+1)^k a
\end{aligned}
$$

- 高次の交換子に関して [2]

$$
\begin{aligned}
[a^k, a^\dagger] &= k a^{k-1} \\
[a, (a^\dagger)^k] &= k (a^\dagger)^{k-1}
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
[a, f(a^\dagger)] &= \frac{\partial}{\partial a^\dagger} f(a^\dagger) \\
a f(a^\dagger)|0\rangle &= \frac{\partial}{\partial a^\dagger} f(a^\dagger)|0\rangle \\
[a^\dagger, f(a)] &= (-[a, f(a^\dagger)])^\dagger = -\frac{\partial}{\partial a} f(a)
\end{aligned}
$$

- n との交換子について [3]

$$
\begin{aligned}
[a^k, n] &= k a^k, \quad k = 1, 2, \cdots \\
[n, (a^\dagger)^k] &= k (a^\dagger)^k, \quad k = 1, 2, \cdots
\end{aligned}
$$

---

[2]

$$
\begin{aligned}
[a^2, a^\dagger] &= a[a, a^\dagger] + [a, a^\dagger]a = 2a \\
[a^3, a^\dagger] &= a[a^2, a^\dagger] + [a, a^\dagger]a^2 = 3a^2 \\
[a^k, a^\dagger] &= a[a^{k-1}, a^\dagger] + [a, a^\dagger]a^{k-1} = a(k-1)a^{k-2} + a^{k-1} = k a^{k-1} \\
[a, (a^\dagger)^k] &= k (a^\dagger)^{k-1}
\end{aligned}
$$

[3]

$$
\begin{aligned}
[a, n] &= [a, a^\dagger a] = a \\
[a^2, n] &= a[a, n] + [a, n]a = 2a^2 \\
[a^3, n] &= a^2[a, n] + [a^2, n]a = 3a^3 \\
[a^k, n] &= k a^k
\end{aligned}
$$

索 引