日本大学大学院理工学研究科

量子理工学専攻 量子力学 II

—固有値問題から散乱理論まで—

2020 年度後期

(最終更新日: 2020 年 9 月 11 日)

大谷 聡
日本大学量子科学研究所
ohya@phys.cst.nihon-u.ac.jp
http://aries.phys.cst.nihon-u.ac.jp/~ohya/

目次

はじめに v

参考文献 vii

単位系と記号 ix

第 1 章 1 次元調和振動子 1
1.1 昇降演算子 . . . 1
1.2 Hermite 多項式 . . . 4
参考文献 . . . 9

第 2 章 空間回転対称性 11
2.1 3 次元特殊直交群 $SO(3)$ とその Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ . . . 11
2.1.1 3 次元回転行列 . . . 11
2.1.2 無限小変換と生成子 . . . 14
2.2 Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ の表現の分類 . . . 17
2.3 Wigner の D 行列 . . . 21
2.4 球面調和関数 . . . 24
2.5 Clebsch-Gordan 分解 . . . 31
参考文献 . . . 36

第 3 章 Coulomb 力で相互作用する二体系 37
3.1 中心力場中の二体問題—重心運動と相対運動の分離 . . . 37
3.2 水素原子 . . . 42
3.3 Coulomb 散乱 . . . 47
3.3.1 放物線座標での Schrödinger 方程式 . . . 47
3.3.2 散乱解 . . . 50
3.3.3 散乱振幅 . . . 52
参考文献 . . . 53

第 4 章 元素の周期表 55
参考文献 . . . 57

第 5 章 散乱理論 59
5.1 散乱理論の概略 . . . 59
5.2 漸近条件と S 行列 . . . 62
5.2.1 漸近条件 . . . 62
5.2.2 Møller 演算子と S 行列 . . . 67
5.2.3 Schrödinger 描像での S 行列と Dyson 級数 . . . 70
5.2.4 Heisenberg 描像での S 行列と漸近演算子 . . . 71
5.2.5 Lippmann-Schwinger 方程式 . . . 73
5.3 散乱断面積と S 行列 . . . 78
5.3.1 微分散乱断面積 . . . 78

5.3.2 光学定理 81
参考文献 82

第 6 章 摂動論 83
6.1 時間に依存しない摂動論 83
6.1.1 1 次の摂動論 86
6.1.2 2 次の摂動論 86
6.2 時間に依存する摂動論 87
6.2.1 Fermi の黄金律 88
参考文献 91

付録 A 数学の補足 93
A.1 ベクトル空間 93
A.2 群 94
A.3 表現 95

はじめに

この授業では量子力学 I に引き続き量子力学の基礎について学びます．内容は調和振動子や水素原子などを扱います．これらは物理学科出身の学生なら学部で一度は勉強した事があるでしょう．但し，量子力学は難しいので，一度勉強しただけではなかなか修得できません．この授業では，学部で量子力学を学んだ事がない学生も対象に，基礎的な所から始めて量子力学を学びます．但し，単なる学部の復習では無くもう少し高度な視点も提供しようと思います．

授業は基本的にこの講義ノートに従って進めます．(但し，時間の都合で一部省略する話題もあります．) この講義ノートは 6 つの章から成っていて，各章の概要は次の通りです:

第 1 章　1 次元調和振動子
調和振動子は量子力学的模型の雛形．この章では 1 次元調和振動子のハミルトニアンの固有値問題を解く．昇降演算子を用いた代数的解法および Schrödinger 方程式の解析解について学ぶ．

第 2 章　空間回転対称性
空間回転対称性を持つ系で重要な角運動量代数について学ぶ．ユニタリー既約表現の分類や Wigner の D 行列，球面調和関数，Clebsch-Gordan 分解について学ぶ．

第 3 章　Coulomb 力で相互作用する二体系
Coulomb 力で相互作用する二体問題について学ぶ．重心運動と相対運動の分離について学んだ後，電子と陽子の束縛状態 (水素原子) のエネルギースペクトルを求める．Coulomb 散乱の厳密解についても学ぶ．

第 4 章　元素の周期表
元素の周期表は角運動量の量子化と Pauli の排他律の帰結である事を学ぶ．

第 5 章　散乱理論
散乱の量子論の導入．漸近条件と S 行列について学んだ後，Lippmann-Schwinger 方程式や散乱断面積，光学定理について学ぶ．

第 6 章　摂動論
固有値問題が厳密に解けない場合の近似解法を学ぶ．近似解法の代表例である時間に依存しない摂動論，及び時間に依存する摂動論について学ぶ．

また，巻末の付録に量子力学を学ぶにあたって知っておくと良い数学 (主に代数の分野) を簡単にまとめました．

上の概要からも明らかですが，この授業では基本的に量子力学の一体問題を取り扱います．散乱問題もポテンシャル散乱しか取り扱いません．多体問題については (二体問題を除いて) 殆ど触れません．

参考文献

量子力学の教科書は山程ありますが，ここでは次の 2 冊を挙げておきます:

[1] J. J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, 2nd ed. (Cambridge University Press, 2017)
[2] S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics*, 2nd ed. (Cambridge University Press, 2015)

どちらも定評のある良い教科書です．[1] は吉岡書店から邦訳も出ているので，英語が苦手な人はそれを読んでも良いでしょう．

この講義後半では散乱の量子論を扱いますが，これに関しては上記 2 冊よりも次の John R. Taylor の教科書の方が遥かに明快で現代的です:

[3] J. R. Taylor, *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions* (Dover Publications, 2006)

この本は初版が 1972 年と古いですが，物理系の学生向けの散乱理論の教科書としてはこれがベストだと思います．

単位系と記号

この講義ノートで使う単位系や記号，各種関数をまとめておきます．

- **cgs-Gauss 単位系**
  国際単位系では MKSA 単位系を使う事になっていますが，MKSA 単位系では電場と磁場が異なる次元を持つので，電磁気学が登場する物理の学習には不向きです．この講義では電場と磁場が同じ次元を持つ cgs-Gauss 単位系を用います．電場を $\boldsymbol{E}$，磁場を $\boldsymbol{B}$，電荷密度を ρ，電流密度を $\boldsymbol{j}$ とすると，この cgs-Gauss 単位系では Maxwell 方程式は次の様になります:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{E} &= 4\pi\rho \\ \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{B} - \frac{1}{c}\partial_t\boldsymbol{E} &= \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j} \\ \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{B} &= 0 \\ \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\partial_t\boldsymbol{B} &= 0 \end{aligned}$$

  特に水素原子を論じる時に重要なのが，2 つの点電荷 q_1 と q_2 の間に働く Coulomb 力です．cgs-Gauss 単位系では Coulomb 力 $\boldsymbol{F}$ は次の様に表されます:

$$\boldsymbol{F} = \frac{q_1 q_2}{r^2}\frac{\boldsymbol{r}}{r}$$

  また，対応する Coulomb ポテンシャル V は次の様になります:

$$V = \frac{q_1 q_2}{r}$$

- **デルタ関数**

$$\delta^d(\boldsymbol{x}) = \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}$$

第 1 章

1 次元調和振動子

量子力学は数学的には Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ とその上の線型演算子の理論で，物理系の状態は Hilbert 空間の単位ベクトルとして表され，物理系の観測可能量は Hilbert 空間上のエルミート演算子として表されます[*1]．特に重要なエルミート演算子がハミルトニアン H で，この演算子 H が物理系の時間発展を支配します．通常，この H は古典力学系を正準量子化の方法で量子化して構成しますが，ここではとりあえず何らかの方法で H が与えられたとしましょう．この時，解くべき量子力学の問題は基本的に次の 3 つだけです:

1. **H の定義域を求める**
   H が確かにエルミート演算子として振る舞う $\mathcal{H}$ の部分空間を求める．
2. **H のスペクトルを求める**
   H の固有値問題を解いて，固有値・固有ベクトルを求める．
3. **H の散乱問題を解く**
   無限の過去・無限の未来での漸近運動を支配する漸近ハミルトニアンを使って，S 行列要素 (散乱振幅) を求める．

まず 1 ですが，これをちゃんとやるには難しい数学 (主に関数解析) が必要なのでこの講義では一切扱いません[*2]．3 は第5章で取り扱います．この章では，量子力学的模型の雛形である調和振動子を例に，2 の固有値問題を解いて行きます．

1.1 昇降演算子

質量 m，角振動数 ω の 1 次元調和振動子を考えましょう．この系のハミルトニアン H は次式で与えられます:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{1.1.1}$$

但し，x は位置演算子，p は運動量演算子で，共にエルミート演算子です．また，次の交換関係を満たします:

$$[x,p] = i\hbar, \quad [x,x] = 0, \quad [p,p] = 0 \tag{1.1.2}$$

以下，このハミルトニアンの固有値問題 $H|E\rangle = E|E\rangle$ を解いて行きましょう．その為の準備としてまず次の 2 つが重要です:

① ハミルトニアンの因数分解
まず，最初の準備はハミルトニアンの「因数分解」です．次の様にやります:

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \\ &= \hbar\omega\left(\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \frac{1}{2\hbar m\omega}p^2\right) \\ &= \hbar\omega\left[\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}p\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}p\right) - \frac{i}{2\hbar}(xp-px)\right] \\ &= \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \tag{1.1.3}$$

[*1] より正確には物理系の状態は Hilbert 空間の単位ベクトルでは無く**単位射線** (**unit ray**) で，一般には**密度行列** (**density matrix**) です．また，観測可能量はエルミート作用素では無く**自己共軛作用素** (**self-adjoint operator**) です．エルミート性よりも自己共軛性の方が制限が強く，量子力学でも重要なスペクトル分解定理や Stone の定理は自己共軛作用素に対して成り立ちます．但し，この辺は説明すると長くなるので，この授業ではそこまで厳密さは追求せず，「全てを線型代数の類推で済ませる」という物理の因習に従って講義を進めて行きます．

[*2] 但し，重要でないという事ではありません．H の定義域 (domain) はとても重要です．しかし，この問題はかなり数学的なので，この講義では一切触れません．一切触れませんし，H の定義域を真面目に調べなければならない模型も扱いません．

但し，最後の等号で交換関係 $[x,p]=xp-px=i\hbar$ を使いました．また，a，$a^\dagger$ は次式で与えられる演算子です:

$$a:=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x+\frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}p \tag{1.1.4a}$$

$$a^\dagger:=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x-\frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}p \tag{1.1.4b}$$

$a^\dagger$ は a のエルミート共軛となっている事に注意しましょう．

② H，a，$a^\dagger$ の交換関係

次に，a と $a^\dagger$ の間の交換関係を調べましょう．まず，a 自身，$a^\dagger$ 自身の交換関係は自明にゼロです:

$$[a,a]=0\quad\text{and}\quad[a^\dagger,a^\dagger]=0 \tag{1.1.5}$$

従って，非自明な交換関係は a と $a^\dagger$ の交換関係で，これは式(1.1.2)を使うと次の様に計算されます:

$$\begin{aligned}[a,a^\dagger]&=\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x+\frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}p,\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x-\frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}p\right]\\&=\frac{m\omega}{2\hbar}[x,x]-\frac{i}{2\hbar}[x,p]+\frac{i}{2\hbar}[p,x]+\frac{1}{2\hbar m\omega}[p,p]\\&=\frac{m\omega}{2\hbar}\cdot0-\frac{i}{2\hbar}\cdot i\hbar+\frac{i}{2\hbar}\cdot(-i\hbar)+\frac{1}{2\hbar m\omega}\cdot0\\&=1\end{aligned} \tag{1.1.6}$$

但し，2 行目の等号は交換関係の双線型性から従い，3 行目の等号は式(1.1.2)と交換関係の反対称性から従います:

$$\text{(双線型性)}\quad[A,\alpha B+\beta C]=\alpha[A,B]+\beta[A,C] \tag{1.1.7a}$$

$$[\alpha A+\beta B,C]=\alpha[A,C]+\beta[A,C] \tag{1.1.7b}$$

$$\text{(反対称性)}\quad[A,B]=-[B,A] \tag{1.1.7c}$$

ここで，A，B，C は任意の演算子で，α，β は任意の c 数です．以上で a と $a^\dagger$ の間の交換関係が分かりました．
次に，H と a，$a^\dagger$ の間の交換関係を知る必要があります．計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned}[H,a]&=\left[\hbar\omega\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right),a\right]\\&=\hbar\omega[a^\dagger a,a]\\&=\hbar\omega\left([a^\dagger,a]a+a^\dagger[a,a]\right)\\&=\hbar\omega\left(-1\cdot a+a^\dagger\cdot0\right)\\&=-\hbar\omega a\end{aligned} \tag{1.1.8a}$$

$$\begin{aligned}[H,a^\dagger]&=\left[\hbar\omega\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right),a^\dagger\right]\\&=\hbar\omega[a^\dagger a,a^\dagger]\\&=\hbar\omega\left([a^\dagger,a^\dagger]a+a^\dagger[a,a^\dagger]\right)\\&=\hbar\omega\left(0\cdot a+a^\dagger\cdot1\right)\\&=+\hbar\omega a^\dagger\end{aligned} \tag{1.1.8b}$$

但し，3 行目と 8 行目で交換関係に対して成り立つ次の Leibniz 則を使いました:[*3]

$$\text{(Leibniz 則)}\quad[A,BC]=[A,B]C+B[A,C] \tag{1.1.9a}$$

$$[AB,C]=[A,C]B+A[B,C] \tag{1.1.9b}$$

以上で準備が終わりました．次の固有値方程式を考えましょう:

$$H|E\rangle=E|E\rangle \tag{1.1.10}$$

[*3] 式(1.1.9a)と(1.1.9b)の等号は両辺の交換関係をバラせば簡単に証明出来ます．これらを Leibniz 則と呼ぶのは，特に式(1.1.9a)が微積分学で出て来る Leibniz 則 $\frac{d}{dx}(fg)=(\frac{d}{dx}f)g+f(\frac{d}{dx}g)$ と同じ構造をしているからです．(式(1.1.9a)の A が $\frac{d}{dx}$ に対応し，B と C がそれぞれ f と g に対応しています．) 式(1.1.8a)に出て来る $[a^\dagger a,a]$ といった交換関係は Leibniz 則を使って計算するようにしましょう．決して $[a^\dagger a,a]=a^\dagger aa-aa^\dagger a$ などとバラさないように．

この固有値方程式の解は次の 2 つだけで完全に決定されます:

① $a^\dagger$ と a はエネルギー固有値を $\pm\hbar\omega$ だけ上げ下げする昇降演算子

式(1.1.10)の固有ベクトル $|E\rangle$ に a と $a^\dagger$ を作用させて作ったベクトル $a|E\rangle$ と $a^\dagger|E\rangle$ を考えましょう．これらに H を作用させると次の様になります:

$$\begin{aligned} Ha|E\rangle &= ([H,a]+aH)\,|E\rangle \\ &= (-\hbar\omega a + aE)\,|E\rangle \\ &= (E-\hbar\omega)a|E\rangle \end{aligned} \tag{1.1.11a}$$

$$\begin{aligned} Ha^\dagger|E\rangle &= \left([H,a^\dagger]+a^\dagger H\right)|E\rangle \\ &= \left(+\hbar\omega a^\dagger + a^\dagger E\right)|E\rangle \\ &= (E+\hbar\omega)a^\dagger|E\rangle \end{aligned} \tag{1.1.11b}$$

但し，2 行目および 5 行目で H を固有値 E に置き換えました．式(1.1.11a)より $a|E\rangle$ は H の固有値 $E-\hbar\omega$ に属する固有ベクトルで，一方，式(1.1.11b)より $a^\dagger|E\rangle$ は H の固有値 $E+\hbar\omega$ に属する固有ベクトルである事が分かります．言い換えると，a はエネルギー固有値を $\hbar\omega$ だけ下げる演算子で，一方，$a^\dagger$ はエネルギー固有値を $\hbar\omega$ だけ上げる演算子です．この意味で $a^\dagger$ を昇演算子，a を降演算子，2 つを総称して昇降演算子と呼びます．この昇降演算子を使うと，或るエネルギー固有ベクトル $|E\rangle$ が与えられた時，$|E\rangle$ に a を n 回作用させる事で固有値が $n\hbar\omega$ だけ下がった固有ベクトル $a^n|E\rangle \propto |E-n\hbar\omega\rangle$ が作れ，$a^\dagger$ を n 回作用させる事でエネルギー固有値が $n\hbar\omega$ だけ上がった固有ベクトル $(a^\dagger)^n|E\rangle \propto |E+n\hbar\omega\rangle$ が作れます．これは模式的に次の様なシーケンスとして表せます:

$$\cdots \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} |E-n\hbar\omega\rangle \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} \cdots \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} |E-\hbar\omega\rangle \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} |E\rangle \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} |E+\hbar\omega\rangle \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} \cdots \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} |E+n\hbar\omega\rangle \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} \cdots \tag{1.1.12}$$

② ノルムの正定値性 $\|a|E\rangle\| \geq 0$ から不等式 $E \geq \frac{1}{2}\hbar\omega$ が従う．等号 $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ が成り立つのは $a|E\rangle = 0$ の場合のみ

唐突ですが，次にベクトル $a|E\rangle$ のノルムを考えましょう．このベクトルのノルムの 2 乗は次の様に計算されます:

$$\begin{aligned} \|a|E\rangle\|^2 &= \langle E|a^\dagger a|E\rangle \\ &= \langle E|\left(\frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}\right)|E\rangle \\ &= \left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)\langle E|E\rangle \\ &= \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \geq 0 \end{aligned} \tag{1.1.13}$$

但し，ベクトル $|E\rangle$ は $\||E\rangle\|^2 = \langle E|E\rangle = 1$ と規格化されているとしました．従って，ノルムの正定値性 $\|a|E\rangle\| \geq 0$ より固有値 E に対して次の不等式が成り立つ事が分かります:

$$E \geq \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{1.1.14}$$

特に重要なのが式(1.1.13)で等号 $\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} = 0$ が成り立つ場合で，これが成り立つのは $a|E\rangle$ がゼロベクトルになる場合のみです:[*4]

$$E = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad \Leftrightarrow \quad a|E\rangle = 0 \tag{1.1.15}$$

さて，エネルギー固有値 E がどんな値でも取れたとすると，一般に上の①と②は両立しません．なぜなら，適当な固有ベクトル $|E\rangle$ に a を作用させ続けて行く事で，最終的に $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ 以下のエネルギー固有値の固有ベクトルが作れてしまうからです．これが起こらない為には，上のシーケンス(1.1.12)の左側が途中で途切れること，即ち，或る $|E_0\rangle$ が存在して $a|E_0\rangle = 0$ となる必要があります:

$$0 \underset{a}{\leftarrow} |E_0\rangle \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} |E_0+\hbar\omega\rangle \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} \cdots \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} |E-\hbar\omega\rangle \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} |E\rangle \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} |E+\hbar\omega\rangle \underset{a}{\overset{a^\dagger}{\rightleftarrows}} \cdots \tag{1.1.16}$$

然るに，式(1.1.15)より $a|E_0\rangle = 0$ となる時のエネルギー固有値 E_0 は $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ しかありませんから，取り得る固有値の値は E_0 を最低固有値として $E_1 = (1+\frac{1}{2})\hbar\omega$，$E_2 = (2+\frac{1}{2})\hbar\omega$，といった具合に決まります．以上の議論より，昇降演算子の性質(1.1.12)とノ

[*4] ノルムがゼロになるのはゼロベクトルだけ (長さがゼロのベクトルはゼロベクトルだけ)，という事を思い出しましょう．

ルムの正定値性(1.1.13)が両立する為には，エネルギー固有値は次の様に量子化されねばならない事が分かりました:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n \in \{0, 1, 2, \cdots\} \tag{1.1.17}$$

これで固有値が分かったので，次に規格化された固有ベクトル $|E_n\rangle$ を求めましょう．基本的には $|E_n\rangle \propto (a^\dagger)^n|E_0\rangle$ なのですが，この比例係数が知りたいわけです．この比例係数は次の漸化式を使って決めるのが最も簡単です:

$$|E_n\rangle = c_n a^\dagger |E_{n-1}\rangle \tag{1.1.18}$$

まずこの比例係数 c_n を求めましょう．以下，$|E_n\rangle$ と $|E_{n-1}\rangle$ は共に規格化されているとします．この仮定の下，式(1.1.18)両辺のノルム 2 乗を取ると次の様になります:

$$\begin{aligned}
1 &= \langle E_n|E_n\rangle \\
&= |c_n|^2\langle E_{n-1}|aa^\dagger|E_{n-1}\rangle \\
&= |c_n|^2\langle E_{n-1}|\left([a, a^\dagger] + a^\dagger a\right)|E_{n-1}\rangle \\
&= |c_n|^2\langle E_{n-1}|\left(1 + \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)|E_{n-1}\rangle \\
&= |c_n|^2\left(1 + \frac{E_{n-1}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)\langle E_{n-1}|E_{n-1}\rangle \\
&= |c_n|^2\left(1 + n - 1 + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) \\
&= |c_n|^2 n
\end{aligned} \tag{1.1.19}$$

よって，$|c_n|^2 = 1/n$ でなければなりません．一般性を失うこと無く c_n は正の実数と出来るので，これより $c_n = 1/\sqrt{n}$ となります．よって，$|E_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}a^\dagger|E_{n-1}\rangle$ が成り立つ事が分かりました．この漸化式を逐次的に使っていくと，結局 $|E_n\rangle$ は次の様に表される事が分かります:

$$\begin{aligned}
|E_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}}a^\dagger|E_{n-1}\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n}}a^\dagger\left(\frac{1}{\sqrt{n-1}}a^\dagger|E_{n-2}\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}(a^\dagger)^2|E_{n-2}\rangle \\
&= \cdots \\
&= \frac{1}{\sqrt{n(n-1)\cdots 1}}(a^\dagger)^n|E_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|E_0\rangle
\end{aligned} \tag{1.1.20}$$

但し，$|E_0\rangle$ は規格化されているとしています．以上で，$a|E_0\rangle = 0$ を満たす $|E_0\rangle$ さえ分かれば，規格化された固有ベクトル $|E_n\rangle$ は式(1.1.20)で与えられる事が分かりました．まとめると，規格化された固有ベクトル $|E_n\rangle$ は次の 3 つのステップで求める事が出来ます:

① **方程式 $a|E_0\rangle = 0$ を解く**

② **規格化条件 $\||E_0\rangle\| = 1$ を満たす様に $|E_0\rangle$ を正しく規格化する**

③ **上で求めた $|E_0\rangle$ に $a^\dagger$ を n 回作用させて $|E_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|E_0\rangle$ を構成する**

以下では座標表示でこのプロセスを行って，エネルギー固有関数を求めて行く事にしましょう．

1.2　Hermite 多項式

今までは演算子 x と p は適当な Hilbert 空間上に作用するエルミート演算子で，交換関係 $[x, p] = i\hbar$ を満たすものとして抽象的に扱って来ました．以下では，Hilbert 空間として直線 $\mathbb{R}$ 上の 2 乗可積分な関数の全体を考える事にします[*5]．この時，演算子 x と p は

[*5] この様な直線 $\mathbb{R}$ 上の 2 乗可積分な関数の全体を $L^2(\mathbb{R})$ と記します．証明はしませんが，$L^2(\mathbb{R})$ は内積(1.2.5b)から定まるノルムに関して完備で，従って Hilbert 空間である事が言えます．

次の様な対応で関数に作用する (微分) 演算子として実現されます:[*6]

$$x \to x \tag{1.2.1a}$$

$$p \to -i\hbar\frac{d}{dx} \tag{1.2.1b}$$

特に昇降演算子(1.1.4a)と(1.1.4b)は次の様な 1 階微分演算子として実現されます:

$$a \to \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right) = +\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\frac{d}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar}x\right) \tag{1.2.2a}$$

$$a^\dagger \to \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right) = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\frac{d}{dx} - \frac{m\omega}{\hbar}x\right) \tag{1.2.2b}$$

ここで，一般に任意関数 $W(x)$ に対して成り立つ微分演算子としての等式[*7]

$$\frac{d}{dx} + W'(x) = \mathrm{e}^{-W(x)}\,\frac{d}{dx}\,\mathrm{e}^{W(x)} \tag{1.2.3}$$

に注意すると，式(1.2.2a)と(1.2.2b)は次の様にも書き表せます:

$$a \to +\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\,\frac{d}{dx}\,\mathrm{e}^{+\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{1.2.4a}$$

$$a^\dagger \to -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\mathrm{e}^{+\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\,\frac{d}{dx}\,\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{1.2.4b}$$

この表式はとても便利で，実際，後で使います．また，ベクトル $|\psi\rangle$ や内積 $\langle\psi|\phi\rangle$ はこの関数の空間では次の様に表されます:

$$|\psi\rangle \to \psi(x) \tag{1.2.5a}$$

$$\langle\psi|\phi\rangle \to \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi^*(x)\phi(x) \tag{1.2.5b}$$

以上で座標表示 (即ち Hilbert 空間として直線上の 2 乗可積分な関数の全体を選んだ場合) についての準備が終わりました．以下では，前節最後に述べた 3 つのステップに従って，座標表示でのエネルギー固有状態 (エネルギー固有関数) を求めて行きましょう．以下，前節で $|E_n\rangle$ と記していたものは $\psi_n(x)$ と書く事にします．

① 方程式 $a|E_0\rangle = 0$ を解く

まず式(1.2.2a)より条件 $a|E_0\rangle = 0$ は基底状態のエネルギー固有関数 $\psi_0(x)$ に対する次の 1 階微分方程式になります:

$$a|E_0\rangle = 0 \quad \to \quad \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\frac{d}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar}x\right)\psi_0(x) = 0 \tag{1.2.6}$$

この微分方程式は簡単に解けて，答えは次の様になります:

$$\psi_0(x) = N\,\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{1.2.7}$$

但し，N は積分定数 (規格化定数) で，これは規格化条件から決めます．

② 規格化条件 $\||E_0\rangle\| = 1$ を満たす様に $|E_0\rangle$ を正しく規格化する

次に N を決めましょう．式(1.2.5b)より規格化条件 $\||E_0\rangle\|^2 = \langle E_0|E_0\rangle = 1$ は $\psi_0(x)$ に対する次の条件として表されます:

$$\||E_0\rangle\|^2 = 1 \quad \to \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\psi_0(x)|^2 = 1 \tag{1.2.8}$$

[*6] 言い換えると，演算子 x と p の関数 $\psi(x)$ への作用を次の様に定義します:

$$(x\psi)(x) := x\psi(x) \quad \& \quad (p\psi)(x) := -i\hbar\frac{d\psi}{dx}(x)$$

この様に定義された演算子 x と p は，内積 $(\psi,\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi^*(x)\phi(x)$ の下でエルミート演算子，即ち，$(\psi, x\phi) = (x\psi,\phi)$，$(\psi, p\phi) = (p\psi,\phi)$ を満たし，任意の $\psi(x)$ に対して交換関係 $([x,p]\psi)(x) = ((xp-px)\psi)(x) = -i\hbar x\frac{d\psi}{dx}(x) + i\hbar\frac{d}{dx}(x\psi(x)) = i\hbar\psi(x)$ も満たします．

[*7] 実際，任意関数 $\psi(x)$ に対して次が成り立ちます:

$$\mathrm{e}^{-W(x)}\,\frac{d}{dx}\left(\mathrm{e}^{W(x)}\,\psi(x)\right) = \mathrm{e}^{-W(x)}\left(W'(x)\,\mathrm{e}^{W(x)}\,\psi(x) + \mathrm{e}^{W(x)}\,\psi'(x)\right) = \left(\frac{d}{dx} + W'(x)\right)\psi(x)$$

$\psi(x)$ は任意なので，これは微分演算子として等式 $\mathrm{e}^{-W(x)}\,\frac{d}{dx}\,\mathrm{e}^{W(x)} = \frac{d}{dx} + W'(x)$ が成り立つ事を意味します．

上で求めた解(1.2.7)を使ってこの積分を計算しましょう．計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned} \text{式(1.2.8)の積分} &= |N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \\ &= |N|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \end{aligned} \tag{1.2.9}$$

但し，2 行目で Gauss 積分の公式 $\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \mathrm{e}^{-Ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{A}}$ を用いました．以上より，規格化定数は $|N|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$ を満たさなければなりません．一般性を失う事無く N は正の実数と出来るので，以下では N を次の様に選びましょう:

$$N = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \tag{1.2.10}$$

これで規格化定数が求まりました．

③ 上で求めた $|E_0\rangle$ に $a^\dagger$ を n 回作用させて $|E_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|E_0\rangle$ を構成する

最後に $\psi_n(x)$ を求めましょう．式(1.2.4b)より $\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|E_0\rangle$ は次の様な $\psi_0(x)$ の n 階微分として表されます:

$$\begin{aligned} |E_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|E_0\rangle \quad \to \quad \psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(-1)^n \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{n/2} \mathrm{e}^{\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \frac{d}{dx}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \times \cdots \times \mathrm{e}^{\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \frac{d}{dx}\left(\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\psi_0(x)\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(-1)^n \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{n/2} \mathrm{e}^{\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \frac{d^n}{dx^n}\left(\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\psi_0(x)\right) \\ &= N \times \frac{1}{\sqrt{n!}}(-1)^n \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{n/2} \mathrm{e}^{\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \frac{d^n}{dx^n}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \\ &= N\,\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \times \frac{1}{\sqrt{n!}}(-1)^n \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{n/2} \mathrm{e}^{\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \frac{d^n}{dx^n}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \end{aligned} \tag{1.2.11}$$

但し，3 行目で式(1.2.7)を使いました．式(1.2.11)最終行の因子 $N\,\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ は基底状態のエネルギー固有関数 $\psi_0(x)$ に他ならない事に注意しましょう．

さて，ここで新たに無次元の変数 $\xi = (\frac{2m\omega}{\hbar})^{1/2}x$ を導入すると，$\frac{d}{dx} = \frac{d\xi}{dx}\frac{d}{d\xi} = (\frac{2m\omega}{\hbar})^{1/2}\frac{d}{d\xi}$ なので $\frac{d^n}{dx^n} = (\frac{2m\omega}{\hbar})^{n/2}\frac{d^n}{d\xi^n}$ と表せます．この変数 ξ を使うと，式(1.2.11)最終行の因子 $\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{n/2}\mathrm{e}^{\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\frac{d^n}{dx^n}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$ は $\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ とよりシンプルに書き表せる事に注意しましょう．結局，n 番目の励起状態のエネルギー固有関数 $\psi_n(x)$ は，次の様に「(基底状態のエネルギー固有関数)×(残り)」という構造になっている事が分かりました:

$$\psi_n(x) = \psi_0(x)H_n(\sqrt{\tfrac{2m\omega}{\hbar}}x) \tag{1.2.12}$$

ここで，H_n は「残り」の関数で，次式で定義されます:

$$H_n(\xi) := \frac{1}{\sqrt{n!}}(-1)^n\,\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{1.2.13}$$

今から見て行く様に，この「残り」の関数 $H_n(\xi)$ は ξ の n 次多項式です．式(1.2.13)で定義される n 次多項式を **Hermite 多項式 (Hermite polynomial)** と呼びます[*8]．

以上で規格化されたエネルギー固有関数が求まりました．結局，1 階微分方程式(1.2.6)さえ解けば，あとは適当に微分して行けば全てが求まる，という構造になっている事に注意しましょう[*9]．これで終わっても良いのですが，最後に Hermite 多項式の具体的表式を求めておこうと思います．以下では，式(1.2.13)の n 階微分を実際に実行して行きます．Hermite 多項式を今後積極的に使っていく事は無いのですが，数ある有名な直交多項式のうちの 1 つなので，以下に示す計算も 1 度は自分でやっておくと良いでしょう．

[*8] Hermite 多項式の定義には幾つか流儀があって，例えば岩波の数学公式 Ⅲ「特殊函数」(p. 91) では次の様に定義されています:

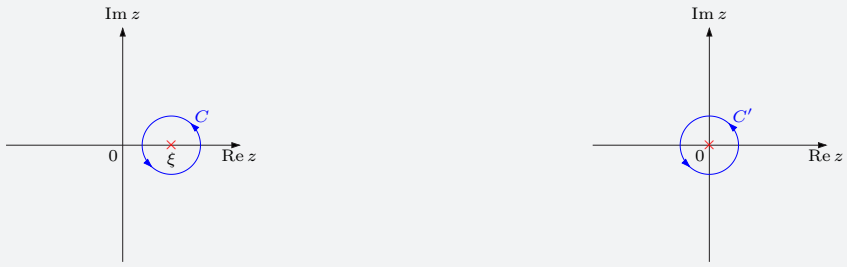
$$H_n(x) = (-1)^n\,\mathrm{e}^{\frac{1}{2}x^2}\frac{d^n}{dx^n}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}x^2}$$

この定義は式(1.2.13)と因子 $1/\sqrt{n!}$ だけ異なりますが，今やっている 1 次元調和振動子の量子力学の文脈では，エネルギー固有関数 $\psi_n(x)$ は

(基底状態のエネルギー固有関数) × (残りの n 次多項式)

とする方が自然なので，この講義ノートでは Hermite 多項式は式(1.2.13)の様に定義する事にします．ちなみに，多くの厳密に解ける 1 次元 Schrödinger 方程式の解は「(基底状態のエネルギー固有関数) × (n 次多項式)」という構造をしています．

[*9] 実はこの「1 階微分方程式さえ解けば全てが求まる」という構造は多くの厳密に解ける 1 次元 Schrödinger 方程式に共通します．



(a) 積分経路 C **(b)** 積分経路 C'

図1.1: 式(1.2.15)の積分経路 C と C'．赤色のバッテン (×) は極の位置を表します．

Hermite 多項式の導出

さて，式(1.2.13)の n 階微分 $\frac{d^n}{d\xi^n}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ を計算したい訳ですが，この n 階微分は次の Cauchy の積分公式を使って計算するのが最も簡単で，最もエレガントです:

$$f^{(n)}(\xi) = n! \oint_C \frac{dz}{2\pi i}\,\frac{f(z)}{(z-\xi)^{n+1}} \tag{1.2.14}$$

但し，積分経路 C は $z=\xi$ を反時計回りに回る適当な閉経路です．この Cauchy の積分公式を使うと，微分 $\frac{d^n}{d\xi^n}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ は次の様に簡単に計算出来ます:

$$\begin{aligned}
\frac{d^n}{d\xi^n}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} &= n! \oint_C \frac{dz}{2\pi i}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}z^2}}{(z-\xi)^{n+1}} \\
&= n! \oint_{C'} \frac{dz}{2\pi i}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(z+\xi)^2}}{z^{n+1}} \\
&= n!\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} \oint_{C'} \frac{dz}{2\pi i}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}z^2-\xi z}}{z^{n+1}} \\
&= n!\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{\ell+m}\xi^m}{2^\ell \ell! m!} \oint_{C'} \frac{dz}{2\pi i}\, z^{2\ell+m-n-1} \\
&= n!\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} \sum_{\ell=0}^{[\frac{n}{2}]} \frac{(-1)^{n-\ell}\xi^{n-2\ell}}{2^\ell \ell!(n-2\ell)!}
\end{aligned} \tag{1.2.15}$$

この計算は少し説明が必要でしょう．まず 1 行目の積分経路 C は図1.1aに示す様な複素 z 平面内の閉経路です．また，2 行目の等号は変数変換 $z \to z+\xi$ から従います．この変数変換を行うと積分経路が $z=0$ 周りを反時計回りに回る閉経路 C' に変わる事に注意しましょう (図1.1b参照)．3 行目の等号は等式 $\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(z+\xi)^2} = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}z^2-\xi z}$ から従います．また，4 行目の等号は $\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}z^2-\xi z} = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}z^2}\,\mathrm{e}^{-\xi z}$ と書いて指数関数をそれぞれ $z=0$ 周りで Taylor 展開した次の二重級数の表式から従います:

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}z^2-\xi z} &= \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}z^2}\,\mathrm{e}^{-\xi z} \\
&= \left[\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{1}{\ell!}\left(-\frac{1}{2}z^2\right)^\ell\right]\left[\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}(-\xi z)^m\right] \\
&= \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^{\ell+m}\xi^m}{2^\ell \ell! m!}\, z^{2\ell+m}
\end{aligned} \tag{1.2.16}$$

また，5 行目の等号は次の積分結果から従います:

$$\oint_{C'} \frac{dz}{2\pi i}\, z^{2\ell+m-n-1} = \begin{cases} \delta_{m,n-2\ell} & \text{for} \quad \ell \le \frac{n}{2} \\ 0 & \text{for} \quad \ell > \frac{n}{2} \end{cases} \tag{1.2.17}$$

これを導出するにはまず公式 $\oint_{C'} \frac{dz}{2\pi i}\, z^{n-1} = \delta_{n,0}$ を思い出します．この公式より式(1.2.17)の積分は $2\ell+m-n=0$ の場合のみ，即ち，$m=n-2\ell$ の場合のみゼロでない事が分かります．ところで，いま m は非負の整数ですから，$m=n-2\ell \ge 0$ でなければなりません．即ち，$\ell \le \frac{n}{2}$ を満たす様な ℓ でないと等号 $2\ell+m-n=0$ は成り立ちません．以上より，式(1.2.17)が従います．式(1.2.15)の 5

行目ではこの結果を使って m について和を取りました．また，ℓ は整数なので $\frac{n}{2}$ に Gauss 記号 $[\ \cdot\ ]$ を付けました．Gauss 記号 $[x]$ は「x を超えない最大の整数」という意味で，例えば，$[\frac{3}{2}]=1$，$[2]=2$，$[\pi]=3$ となります．

以上の計算結果より，Hermite 多項式(1.2.13)は結局次の様な ξ の n 次多項式である事が分かります:

$$\begin{aligned} H_n(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(-1)^n\,\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\,\frac{d^n}{d\xi^n}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(-1)^n\,\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\times n!\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\sum_{\ell=0}^{[\frac{n}{2}]}\frac{(-1)^{n-\ell}\xi^{n-2\ell}}{2^\ell\ell!(n-2\ell)!} \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{\ell=0}^{[\frac{n}{2}]}(-1)^\ell\frac{n!}{2^\ell\ell!(n-2\ell)!}\xi^{n-2\ell} \end{aligned} \tag{1.2.18}$$

但し，2 行目で式(1.2.15)を代入し，3 行目で $(-1)^n(-1)^{n-\ell}=(-1)^{-\ell}=(-1)^\ell$ を使いました．

以下，Hermite 多項式の満たす重要な性質を 3 つほど列挙して終わりにしましょう．

① パリティ変換の下での偶奇性

Hermite 多項式(1.2.18)は空間反転 (パリティ変換)$\xi\to-\xi$ の下で次の様に振る舞います:

$$\begin{aligned} H_n(-\xi) &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{\ell=0}^{[\frac{n}{2}]}(-1)^\ell\frac{n!}{2^\ell\ell!(n-2\ell)!}(-\xi)^{n-2\ell} \\ &= (-1)^n\frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{\ell=0}^{[\frac{n}{2}]}(-1)^\ell\frac{n!}{2^\ell\ell!(n-2\ell)!}\xi^{n-2\ell} \\ &= (-1)^n H_n(\xi) \end{aligned} \tag{1.2.19}$$

但し，2 行目で $(-1)^{n-2\ell}=(-1)^n$ を使いました．よって，Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ は n が偶数の時は偶関数，n が奇数の時は奇関数である事が分かりました．基底状態のエネルギー固有関数 $\psi_0(x)$ は偶関数ですから，式(1.2.12)の $\psi_n(x)$ も n が偶数の時は偶関数で，n が奇数の時は奇関数となります．

② 規格直交性

前節でエネルギー固有状態は規格直交性 $\langle E_n|E_m\rangle=\delta_{nm}$ を満たす様に作りましたが，これの帰結として，この節で作ったエネルギー固有関数 $\psi_n(x)$ も次の規格直交性を満たします:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\psi_n^*(x)\psi_m(x)=\delta_{nm} \tag{1.2.20}$$

ところで $\psi_n(x)=\psi_0(x)H_n(\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x)$ なので，上の規格直交性は次の様になります:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\,|\psi_0(x)|^2H_n(\sqrt{\tfrac{2m\omega}{\hbar}}x)H_m(\sqrt{\tfrac{2m\omega}{\hbar}}x)=\delta_{nm} \tag{1.2.21}$$

但し，Hermite 多項式は実関数である事を使いました．次に $\xi=\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x$ と変数変換し，基底状態のエネルギー固有関数 $\psi_0(x)$ の具体的表式(1.2.7)及び規格化定数(1.2.10)を使って少し計算すると，式(1.2.21)は次の様に書き直せます:

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\,H_n(\xi)H_m(\xi)=\sqrt{2\pi}\delta_{nm} \tag{1.2.22}$$

これが Hermite 多項式の規格直交性です．重み関数 $\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ は本質的に基底状態のエネルギー固有関数の 2 乗である事に注意しましょう．

③ 母関数

上の導出から明らかですが，式(1.2.15)3 行目の表式を使うと，Hermite 多項式(1.2.13)は次の複素積分で表す事が出来ます:

$$\begin{aligned} H_n(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(-1)^n\,\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\times n!\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\oint_{C'}\frac{dz}{2\pi i}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}z^2-\xi z}}{z^{n+1}} \\ &= \sqrt{n!}\oint_{C'}\frac{dz}{2\pi i}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}z^2+\xi z}}{z^{n+1}} \end{aligned} \tag{1.2.23}$$

但し，2 行目で $z \to -z$ と変数変換しました．ところで，一般に複素 t 平面の原点 $t=0$ を囲む閉経路 C' 内で正則な関数 $f(t)$ に対しては，Cauchy の積分公式 $f^{(n)}(0) = n! \oint_{C'} \frac{dz}{2\pi i} \frac{f(z)}{z^{n+1}}$ より，$f(t)$ の $t=0$ 周りでの Taylor 展開は次の様に書けます:

$$\begin{aligned} f(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} t^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} t^n \oint_{C'} \frac{dz}{2\pi i} \frac{f(z)}{z^{n+1}} \end{aligned} \tag{1.2.24}$$

正則関数 $f(t) = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}t^2+\xi t}$ に対してこの表式を適用すると，式(1.2.23)と組み合わせる事で次の等式が成り立つ事が分かります:

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}t^2+\xi t} &= \sum_{n=0}^{\infty} t^n \oint_{C'} \frac{dz}{2\pi i} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}z^2+\xi z}}{z^{n+1}} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) \frac{t^n}{\sqrt{n!}} \end{aligned} \tag{1.2.25}$$

これより，関数 $\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}t^2+\xi t}$ の $t=0$ 周りでの Taylor 展開の展開係数から Hermite 多項式が読み取れるという事が分かります．この意味で，関数 $\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}t^2+\xi t}$ を Hermite 多項式の**母関数** (**generating function**) と呼びます．

参考文献

冒頭で「ハミルトニアン H が与えられた時，解くべき量子力学の問題は 3 つしかない」と述べましたが，これは Michael Reed と Barry Simon の教科書第 1 巻 VIII 章 11 節 (pp. 302–305) に載っている有名な一節の受け売りです:

[1] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, Vol. I: Functional Analysis* (Academic Press, 1981)

出典を明らかにするという目的で挙げましたが，この本はタフな数学書なので，よほど数学好きでない限り見ない方が良いです．

第 2 章

空間回転対称性

前章では 1 次元調和振動子を例に，ハミルトニアンの固有値問題 $H|E\rangle = E|E\rangle$ を厳密に解きました．一般にはこの手の固有値問題を解くのは非常に難しいのですが，考えている物理系に**対称性** (**symmetry**) があると往々にして解析がずっと簡単になります．対称性とは一言で言えば「物理法則を変えない視点の変化」で，量子力学では確率を不変に保つ変換 (Hilbert 空間の元を別の元へ写す 1 対 1 対応) として定義されます．論理を明確にする為にここではブラケット記法はやめて，Hilbert 空間の元を単に Ψ，Hilbert 空間の内積を $(\ \cdot\ ,\ \cdot\ )$，確率を不変に保つ変換 (対称性変換) を $\Psi \mapsto U\Psi$ と書く事にしましょう．1930 年代前半，Eugene P. Wigner はこの様な対称性変換 U は次の 2 つのタイプしか有り得ない事を示しました:[*1]

1. **線型ユニタリー変換**

$$\begin{aligned} (\text{線型性}) \quad & U(\alpha\Psi + \beta\Phi) = \alpha U\Psi + \beta U\Phi \\ (\text{ユニタリー性}) \quad & (U\Psi, U\Phi) = (\Psi, \Phi) \end{aligned}$$

2. **反線型反ユニタリー変換**

$$\begin{aligned} (\text{反線型性}) \quad & U(\alpha\Psi + \beta\Phi) = \alpha^* U\Psi + \beta^* U\Phi \\ (\text{反ユニタリー性}) \quad & (U\Psi, U\Phi) = (\Psi, \Phi)^* \end{aligned}$$

但し，α，β は線型結合の係数です．線型ユニタリー変換，反線型反ユニタリー変換共に $|(U\Psi, U\Phi)|^2 = |(\Psi, \Phi)|^2$ を満たすので確率は不変に保たれる事に注意しましょう．また，証明はしませんが，反線型反ユニタリー変換は時間反転を含む対称性変換でのみ現れ，時間並進・空間並進・空間回転・空間反転などの対称性変換は全て線型ユニタリー変換で表される事が知られています．この章では，応用上特に重要な空間回転対称性に焦点を絞って，対称性変換を調べて行きます．

2.1　3 次元特殊直交群 $SO(3)$ とその Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$

考えている物理系に空間回転対称性があるかどうかはもちろん模型に依りますが，中心力の下で運動をしている点粒子の系などは空間回転対称性があります．水素原子はその良い例です．この様な空間回転の下で不変な系が与えられた時，この系の状態ベクトルが空間回転の下でどの様に変換されるのか，という事を知るのがまず基本的な解くべき問題です．そして，この問題を解くには空間回転の持つ代数的構造を知っておく必要があります．この話はどうしても数学的になってしまうのですが，まずは馴染みのある 3 次元の回転行列の話から始めて行きましょう．

2.1.1　3 次元回転行列

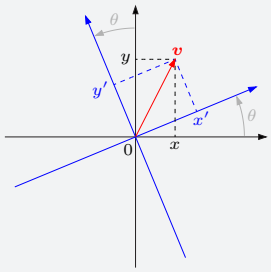
3 次元空間の実ベクトル $\boldsymbol{v} = (v_1, v_2, v_3)$ を考えましょう．このベクトルの回転とは，ノルム $\|\boldsymbol{v}\| := \sqrt{(v_1)^2 + (v_2)^2 + (v_3)^2}$ を不変に保つ線型変換 R で，次の様に表されます:

$$\boldsymbol{v} \mapsto \boldsymbol{v}' = \mathsf{R}\boldsymbol{v} \tag{2.1.1}$$

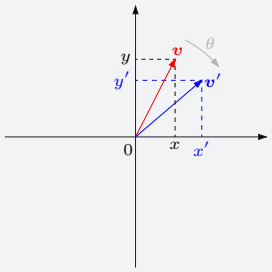
但し，R は 3×3 の実行列です．この R は何でも良い訳ではなく，$\|\boldsymbol{v}'\| = \|\boldsymbol{v}\|$ となる為には R に条件が付きます．実際，$\boldsymbol{v}'$ のノルムの 2 乗を計算すると次の様になります:

$$\|\boldsymbol{v}'\|^2 = \boldsymbol{v}'^{\mathsf{T}}\boldsymbol{v}' = \boldsymbol{v}^{\mathsf{T}}\mathsf{R}^{\mathsf{T}}\mathsf{R}\boldsymbol{v} \tag{2.1.2}$$

[*1] E. P. Wigner, *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra* (Academic Press, 1959)．これは英訳で，ドイツ語の原著は 1931 年に出版されています．吉岡書店から「群論と量子力学」というタイトルで邦訳も出ています．



(a) 受動的変換: ベクトル $\boldsymbol{v}$ は固定して座標系を反時計回りに回転



(b) 能動的変換: 座標系は固定してベクトル $\boldsymbol{v}$ を $\boldsymbol{v}'$ へ時計回りに回転

図2.1: 受動的変換と能動的変換．$x' = x\cos\theta + y\sin\theta$，$y' = -x\sin\theta + y\cos\theta$ と書いた時，これには上の 2 つの見方があります．

但し，$^\intercal$ は転置を表します．これが任意の $\boldsymbol{v}$ に対して $\|\boldsymbol{v}'\|^2 = \|\boldsymbol{v}\|^2$ となる為には $\mathsf{R}^\intercal\mathsf{R}$ が単位行列 $\mathbf{1}$ でなければなりません．従って，次の条件を得ます:

$$\mathsf{R}^\intercal\mathsf{R} = \mathbf{1} \tag{2.1.3}$$

この条件を満たす行列 R を**直交行列**と呼びます．直交行列に対しては $\mathsf{R}^{-1} = \mathsf{R}^\intercal$ が成り立ちます．また，上の R として $\mathsf{R}^\intercal$ を持って来ると $(\mathsf{R}^\intercal)^\intercal\mathsf{R}^\intercal = \mathsf{R}\mathsf{R}^\intercal = \mathbf{1}$ が成り立つ事にも注意しましょう．

さて，条件(2.1.3)を満たす行列が全てベクトルの回転を表すかと言うと，そうではありません．これを見る為に式(2.1.3)両辺の行列式を取りましょう．$\det(\mathsf{R}^\intercal\mathsf{R}) = (\det\mathsf{R}^\intercal)(\det\mathsf{R}) = (\det\mathsf{R})(\det\mathsf{R}) = (\det\mathsf{R})^2$ および $\det\mathbf{1} = 1$ に注意すると次を得ます:

$$(\det\mathsf{R})^2 = 1 \tag{2.1.4}$$

従って，R の行列式は $+1$ か -1 でなければなりません:

$$\det\mathsf{R} = \pm 1 \tag{2.1.5}$$

$\det\mathsf{R} = -1$ となる行列 R は基本的に空間反転 (パリティ変換)$\boldsymbol{v}' = -\boldsymbol{v}$ を表し，連続的なベクトルの回転を表すものではありません[*2]．従って，以下では $\det\mathsf{R} = +1$ のものだけを考える事にします．この $\mathsf{R}^\intercal\mathsf{R} = \mathbf{1}$ かつ $\det\mathsf{R} = +1$ を満たす 3×3 実行列の全体は行列の掛け算の下で **Lie 群** (**Lie group**) を成し，3 次元の**特殊直交群** (**special orthogonal group**) と呼ばれます．3 次元特殊直交群は通常 $SO(3)$ と記され，$SO(3)$ の元を回転行列と呼びます．数式で書くと $SO(3)$ は次の様に定義されます:

$$SO(3) = \{3\times 3 \text{ の実行列 } \mathsf{R} : \mathsf{R}^\intercal\mathsf{R} = \mathbf{1} \ \ \& \ \ \det\mathsf{R} = 1\} \tag{2.1.6}$$

ここで幾つか $SO(3)$ の元の例を挙げておきましょう:

① x 軸，y 軸，z 軸周りでの回転

良く知っている様に，x 軸，y 軸，z 軸周りの角度 θ の回転は次の行列で表されます:

$$\mathsf{R}_1(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}, \quad \mathsf{R}_2(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}, \quad \mathsf{R}_3(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.1.7}$$

容易に確かめられる様に，上の行列の転置は逆行列 (即ち角度 θ を $-\theta$ に置き換えたもの) を与え，行列式も $+1$ です．従って，これらは全て $SO(3)$ の元です．

ちなみに，ここで想定している回転はベクトルは固定して座標系を回転する**受動的変換** (**passive transformation**) で，座標系は固定してベクトルを回転する**能動的変換** (**active transformation**) ではありません．両者は本質的には同じですが，回転の向きが互いに逆なのでどちらを反時計回りにするかで θ の符号が異なります (図2.1参照)．よく符号で混乱するので注意しましょう．

② 一般の回転行列

上で挙げた例は全て特定の座標軸周りの回転行列で，1 つのパラメータ θ だけで記述されています．しかし，すぐ後で分かりますが，一般の回転行列 $\mathsf{R} \in SO(3)$ は 3 つの独立なパラメータで記述されます．$SO(3)$ の一般の元の表し方は幾つもありますが，

[*2] より正確には $\det\mathsf{R} = -1$ を満たす直交行列はパリティ変換と連続的に繋がっている変換を表します．また，一般に行列式が -1 の行列 R と R' の積 $\mathsf{R}\mathsf{R}'$ の行列式は $\det(\mathsf{R}\mathsf{R}') = (\det\mathsf{R})(\det\mathsf{R}') = (-1)(-1) = +1$ となってしまうので，行列式が -1 の行列の全体は行列の積の下で閉じない (即ち群にならない) 事にも注意しましょう．

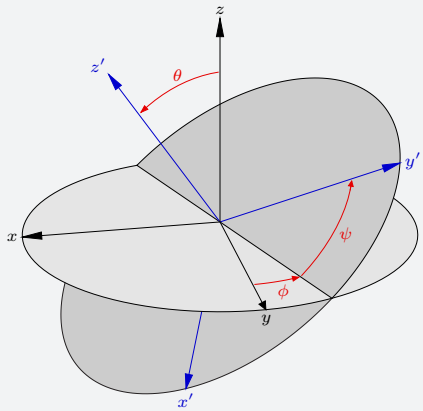


図2.2: 回転行列 $\mathsf{R}(\psi,\theta,\phi)=\mathsf{R}_3(\psi)\mathsf{R}_2(\theta)\mathsf{R}_3(\phi)$ で表される直交座標系の回転.

量子力学への応用上は次の表式が便利です:[*3]

$$\mathsf{R}(\psi,\theta,\phi)=\mathsf{R}_3(\psi)\mathsf{R}_2(\theta)\mathsf{R}_3(\phi)\quad(0\le\psi<2\pi,\ 0\le\theta\le\pi,\ 0\le\phi<2\pi) \tag{2.1.8}$$

これが一般的な表式なのですが，これだけだと天下り的過ぎるので，式(2.1.8)が一般の回転行列を表すという事を簡単に導出しておきましょう．まず，任意の単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ を用意します．直感的に明らかですが，どんな方向を向いている単位ベクトルでも，適当に回転を施せば必ず z 軸方向の単位ベクトル $\boldsymbol{e}_3=(0,0,1)$ に一致させる事が出来ます．即ち，任意の $\boldsymbol{n}$ に対して必ずある回転行列 $\mathsf{R}\in SO(3)$ が存在して次の様に書けます:

$$\mathsf{R}\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_3 \tag{2.1.9}$$

ところで，任意の単位ベクトルは球座標を用いて次の様に表せます:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{n}&=\begin{pmatrix}\sin\theta\cos\phi\\ \sin\theta\sin\phi\\ \cos\theta\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}\cos\phi&-\sin\phi&0\\ \sin\phi&\cos\phi&0\\ 0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\theta&0&\sin\theta\\ 0&1&0\\ -\sin\theta&0&\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}\\ &=\mathsf{R}_3(-\phi)\mathsf{R}_2(-\theta)\boldsymbol{e}_3\\ &=\mathsf{R}_3^{-1}(\phi)\mathsf{R}_2^{-1}(\theta)\boldsymbol{e}_3\end{aligned} \tag{2.1.10}$$

ここで，2 番目の等号は行列とベクトルの積を計算すれば左辺に一致する事から従います．3 番目の等号は式(2.1.7)から従い，4 番目の等号は $\mathsf{R}_3^{-1}(\theta)=\mathsf{R}_3(-\theta)$ および $\mathsf{R}_2^{-1}(\theta)=\mathsf{R}_2(-\theta)$ から従います．この $\boldsymbol{n}$ に対する球座標表示(2.1.10)を式(2.1.9)に代入すると次の様になります:

$$\mathsf{R}\mathsf{R}_3^{-1}(\phi)\mathsf{R}_2^{-1}(\theta)\boldsymbol{e}_3=\boldsymbol{e}_3 \tag{2.1.11}$$

この等式は $\mathsf{R}\mathsf{R}_3^{-1}(\phi)\mathsf{R}_2^{-1}(\theta)$ が $\boldsymbol{e}_3$ を不変に保つ回転行列である事を意味しますが，その様なものは z 軸周りの回転行列しか無いので，必ずある $\mathsf{R}_3(\psi)$ が存在して次の様に書けねばなりません:

$$\mathsf{R}\mathsf{R}_3^{-1}(\phi)\mathsf{R}_2^{-1}(\theta)=\mathsf{R}_3(\psi) \tag{2.1.12}$$

この両辺に右から $\mathsf{R}_2(\theta)\mathsf{R}_3(\phi)$ を掛けると $\mathsf{R}=\mathsf{R}_3(\psi)\mathsf{R}_2(\theta)\mathsf{R}_3(\phi)$ となって，これが式(2.1.8)に書いた回転行列です．これが一般的であるというのは $\boldsymbol{n}$ が任意であった事から従います．式(2.1.11)が成り立つからと言って $\mathsf{R}\mathsf{R}_3^{-1}(\phi)\mathsf{R}_2^{-1}(\theta)=\mathbf{1}$ とは限らない，という所が味噌です．また，上の導出から明らかだと思いますが，角度 (ψ,θ,ϕ) の範囲は $0\le\psi<2\pi$，$0\le\theta\le\pi$，$0\le\phi<2\pi$ となります[*4]．図2.2に回転行列(2.1.8)で表される座標系の回転を図示しました．

[*3] 式(2.1.8)の表式は状態ベクトルの空間回転の下での変換則を調べる時に便利です．
[*4] 角度 (ψ,θ,ϕ) は力学でも登場する Euler 角と本質的に同じです．但し，Euler 角の定義は人によってまちまちなので，他の教科書と比べる時は注意しましょう．

2.1.2　無限小変換と生成子

さて，上の例で登場した回転行列は全て連続パラメータ (角度) を含んでいて，このパラメータ依存性は全て三角関数を通して現れています．従って，上の回転行列はこのパラメータに関して微分可能，特に Taylor 展開可能です．例えば，式(2.1.7)の回転行列を θ が微小だとして $\theta = 0$ 周りで Taylor 展開すると，θ の 1 次の近似で次の様になります:

$$\mathsf{R}_1(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} = \mathbf{1} + \theta \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} + O(\theta^2) \tag{2.1.13a}$$

$$\mathsf{R}_2(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} = \mathbf{1} + \theta \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + O(\theta^2) \tag{2.1.13b}$$

$$\mathsf{R}_3(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{1} + \theta \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + O(\theta^2) \tag{2.1.13c}$$

但し，$\sin\theta = \theta + O(\theta^3)$ と $\cos\theta = 1 + O(\theta^2)$ を使いました．これに倣って，一般の無限小回転の回転行列 R を次の様に書きましょう:

$$\mathsf{R} = \mathbf{1} + \omega + O(\omega^2) \tag{2.1.14}$$

但し，ω は 3×3 の実行列で，その行列要素 ω_{ij} は微小だとします．この様に書いた R が直交行列になるには ω に制限が付きます．実際，ω の 1 次のオーダーで $\mathsf{R}^\intercal\mathsf{R}$ を計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned} \mathbf{1} &= \mathsf{R}^\intercal\mathsf{R} \\ &= \left(\mathbf{1} + \omega^\intercal + O(\omega^2)\right)\left(\mathbf{1} + \omega + O(\omega^2)\right) \\ &= \mathbf{1} + \omega + \omega^\intercal + O(\omega^2) \end{aligned} \tag{2.1.15}$$

従って，ω の 1 次のオーダーで $\mathsf{R}^\intercal\mathsf{R} = \mathbf{1}$ を満たす為には，ω は反対称行列でなければなりません:

$$\omega^\intercal = -\omega \tag{2.1.16}$$

さて，3×3 の実反対称行列の独立な成分は 3 つだけですから，以下では $\theta_1 = \omega_{23} = -\omega_{32}$，$\theta_2 = \omega_{31} = -\omega_{13}$，$\theta_3 = \omega_{12} = -\omega_{21}$ と書く事にしましょう．すると，反対称行列 ω が次の様に書き表されます:

$$\begin{aligned} \omega &= \begin{pmatrix} 0 & \omega_{12} & \omega_{13} \\ \omega_{21} & 0 & \omega_{23} \\ \omega_{31} & \omega_{32} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \theta_3 & -\theta_2 \\ -\theta_3 & 0 & \theta_1 \\ \theta_2 & -\theta_1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \theta_1 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} + \theta_2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \theta_3 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \theta_1\mathsf{X}_1 + \theta_2\mathsf{X}_2 + \theta_3\mathsf{X}_3 \end{aligned} \tag{2.1.17}$$

ここで，X_1，X_2，X_3 は 3×3 の実反対称行列で次式で定義されます:

$$\mathsf{X}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathsf{X}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathsf{X}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.1.18}$$

上の議論からも明らかですが，任意の 3×3 実反対称行列 ω は上の 3 つの行列の線形結合で表されます．この X_1，X_2，X_3 を基底として張られる実反対称行列の全体は行列の和とスカラー倍の下で閉じている線型ベクトル空間で，且つ交換関係の下でも閉じている **Lie 代数** (**Lie algebra**) です[*5]．この様な 3×3 実反対称行列の全体を $SO(3)$ の Lie 代数と呼び，$\mathfrak{so}(3)$ と記します:

$$\mathfrak{so}(3) = \{\theta_1 X_1 + \theta_2 X_2 + \theta_3 X_3 : \theta_1, \theta_2, \theta_3 \text{ は実数}\} \tag{2.1.19}$$

[*5] 一般に，交換関係の下で閉じている線型ベクトル空間を Lie 代数と呼びます．今の場合，$\mathsf{A} = -\mathsf{A}^\intercal$，$\mathsf{B} = -\mathsf{B}^\intercal$ を任意の実反対称行列とした時，一般に $(\mathsf{AB} - \mathsf{BA})^\intercal = \mathsf{B}^\intercal\mathsf{A}^\intercal - \mathsf{A}^\intercal\mathsf{B}^\intercal = \mathsf{BA} - \mathsf{AB} = -(\mathsf{AB} - \mathsf{BA})$ が成り立つので交換関係 $[\mathsf{A}, \mathsf{B}]$ も必ず実反対称行列になります．つまり実反対称行列の全体は交換関係の下で閉じています．更に，実反対称行列の全体は行列の和とスカラー倍の下でも閉じている (即ち任意の実反対称行列 A と B に対してその実数係数の線形結合 $\alpha\mathsf{A} + \beta\mathsf{B}$ も必ず実反対称行列になる) ので，Lie 代数になるわけです．

さて，この Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ は回転行列 $\mathsf{R} \in SO(3)$ の単位元 $\mathbf{1}$ 近傍の振る舞いを決める実反対称行列 ω から成っているわけですが，逆にこの Lie 代数の構造が分かれば有限の回転行列が完全に再現出来ます．これを見る前に，上の反対称行列の基底 X_i に負の虚数 $-i$ を掛けてエルミート化し，更に $\hbar$ を掛けて角運動量の次元を持たせた行列 $\mathsf{J}_i = -i\hbar\mathsf{X}_i$ を導入しておきましょう:

$$\mathsf{J}_1 = \hbar\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix},\quad \mathsf{J}_2 = \hbar\begin{pmatrix}0&0&i\\0&0&0\\-i&0&0\end{pmatrix},\quad \mathsf{J}_3 = \hbar\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix} \tag{2.1.20}$$

直接計算で容易に確かめられる様に，この様に定義した行列は次の交換関係を満たします:

$$[\mathsf{J}_1, \mathsf{J}_2] = i\hbar\mathsf{J}_3,\quad [\mathsf{J}_2, \mathsf{J}_3] = i\hbar\mathsf{J}_1,\quad [\mathsf{J}_3, \mathsf{J}_1] = i\hbar\mathsf{J}_2 \tag{2.1.21}$$

この 3×3 エルミート行列 J_i を 3 次元特殊直交群 $SO(3)$ の**生成子** (**generator**) と呼びます．数学的観点からはわざわざ虚数を入れたり $\hbar$ を入れたりするのは不自然なのですが，量子力学ではエルミート演算子が重要で，更に J_i には角運動量演算子 (の 3×3 行列表示) という物理的意味があるので，物理では X_i よりもこの J_i を使います．この生成子 J_i を用いると，式(2.1.14)の無限小回転の回転行列は次の様に書けます:

$$\mathsf{R} = \mathbf{1} + \frac{i}{\hbar}\theta_i\mathsf{J}_i + O(\theta^2) \tag{2.1.22}$$

また，行列の成分で書くと，式(2.1.20)の jk 成分 $(\mathsf{J}_i)_{jk}$ は 3 階完全反対称テンソル ε_{ijk} を用いて次の様にも書けます:[*6]

$$(\mathsf{J}_i)_{jk} = -i\hbar\varepsilon_{ijk} \tag{2.1.23}$$

以下，この生成子の持つ重要な性質を 3 つほど列挙しておきます:

① J_i の指数関数 $\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta\mathsf{J}_i}$ は回転行列 $\mathsf{R}_i(\theta)$ を再現する

生成子 J_i は単位元近傍の無限小回転から現れたものですが，これの指数関数 $\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta\mathsf{J}_i}$ は式(2.1.7)で与えた有限の回転行列 $\mathsf{R}_i(\theta)$ を完全に再現します．これは直接計算で確かめる事が出来て，例えば $\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta\mathsf{J}_1}$ を計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta\mathsf{J}_1} &= \exp\left[\theta\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\theta^n}{n!}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}^n \\
&= \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{\theta^{2k}}{(2k)!}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}^{2k} + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{\theta^{2k-1}}{(2k-1)!}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}^{2k-1} \\
&= \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} + \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\frac{\theta^{2k}}{(2k)!}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} + \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^{k-1}\frac{\theta^{2k-1}}{(2k-1)!}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&0\end{pmatrix} + \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\theta^{2k}}{(2k)!}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} + \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^{k-1}\frac{\theta^{2k-1}}{(2k-1)!}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix}1&0&0\\0&\cos\theta&\sin\theta\\0&-\sin\theta&\cos\theta\end{pmatrix} \\
&= \mathsf{R}_1(\theta)
\end{aligned} \tag{2.1.24}$$

但し，2 行目で n が偶数の場合と奇数の場合の 2 つに分け，3 行目で直接計算から従う次の等式を使いました:

$$\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}^{2k} = (-1)^k\begin{pmatrix}0&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} \tag{2.1.25a}$$

$$\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}^{2k-1} = \begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}^{2(k-1)}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix} = (-1)^{k-1}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix} \tag{2.1.25b}$$

また，6 行目で三角関数の $\theta=0$ 周りでの Taylor 展開 $\cos\theta = \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\theta^{2k}}{(2k)!}$ と $\sin\theta = \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^{2k-1}\frac{\theta^{2k-1}}{(2k-1)!}$ を使いました．他の回転行列も同様で，直接計算によって $\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta\mathsf{J}_2} = \mathsf{R}_2(\theta)$ と $\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta\mathsf{J}_3} = \mathsf{R}_3(\theta)$ が確かめられます．特に一般の回転行列(2.1.8)は

[*6] $\varepsilon_{123} = +1$ としています．

次の様に書けます:

$$\mathsf{R}(\psi,\theta,\phi) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\psi \mathsf{J}_3}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta \mathsf{J}_2}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\phi \mathsf{J}_3} \tag{2.1.26}$$

② J_i は相似変換 $\mathsf{R}^{-1}\mathsf{J}_i\mathsf{R}$ の下で空間回転 $\mathsf{J}_i \mapsto \mathsf{R}_{ij}\mathsf{J}_j$ を受ける

生成子 J_i は相似変換 $\mathsf{R}^{-1}\mathsf{J}_i\mathsf{R}$ の下でベクトルとして変換されます．即ち，任意の $\mathsf{R} \in SO(3)$ に対して次の等式が成り立ちます:

$$\mathsf{R}^{-1}\mathsf{J}_i\mathsf{R} = \mathsf{R}_{ij}\mathsf{J}_j \tag{2.1.27}$$

まずこれを示しましょう．左辺の行列の kl 成分を計算すると，次の様に右辺の行列の kl 成分に一致します:

$$\begin{aligned}
\text{左辺の } kl \text{ 成分} &= (\mathsf{R}^{\intercal}\mathsf{J}_i\mathsf{R})_{kl} \\
&= (\mathsf{R}^{\intercal})_{km}(\mathsf{J}_i)_{mn}\mathsf{R}_{nl} \\
&= -i\hbar\varepsilon_{imn}\mathsf{R}_{mk}\mathsf{R}_{nl} \\
&= -i\hbar(\mathsf{R}_{ia}\mathsf{R}_{mb}\mathsf{R}_{nc}\varepsilon_{abc})\mathsf{R}_{mk}\mathsf{R}_{nl} \\
&= -i\hbar\mathsf{R}_{ia}\varepsilon_{abc}(\mathsf{R}_{mb}\mathsf{R}_{mk})(\mathsf{R}_{nc}\mathsf{R}_{nl}) \\
&= -i\hbar\mathsf{R}_{ia}\varepsilon_{abc}\delta_{bk}\delta_{cl} \\
&= -i\hbar\mathsf{R}_{ia}\varepsilon_{akl} \\
&= \mathsf{R}_{ia}(\mathsf{J}_a)_{kl} \\
&= \text{右辺の } kl \text{ 成分}
\end{aligned} \tag{2.1.28}$$

但し，3 行目で $(\mathsf{J}_i)_{mn} = -i\hbar\varepsilon_{imn}$ と $(\mathsf{R}^{\intercal})_{km} = \mathsf{R}_{mk}$ を使い，4 行目で次の等式を用いました:[*7]

$$\varepsilon_{ijk} = \mathsf{R}_{ia}\mathsf{R}_{jb}\mathsf{R}_{kc}\varepsilon_{abc} \tag{2.1.29}$$

また，6 行目は $\mathsf{R}^{\intercal}\mathsf{R} = \mathbf{1}$ から従う等式 $\mathsf{R}_{ki}\mathsf{R}_{kj} = \delta_{ij}$ を使い，8 行目で再び $(\mathsf{J}_a)_{kl} = -i\hbar\varepsilon_{akl}$ を使いました．式(2.1.26)は J_i が相似変換の下でベクトルとして振る舞う事，即ち $\mathsf{J}_i \mapsto \mathsf{R}_{ij}\mathsf{J}_j$ と空間回転される事を示していて，この変換則から例えば $\mathbf{J}^2 = \mathsf{J}_1^2 + \mathsf{J}_2^2 + \mathsf{J}_3^2$ が相似変換の下で不変である事，即ち

$$\mathsf{R}^{-1}\mathbf{J}^2\mathsf{R} = \mathbf{J}^2 \tag{2.1.30}$$

が成り立つ事が簡単に言えます[*8]．これは $\mathbf{J}^2$ が空間回転の下で不変である事 (即ちスカラー量である事) を意味しています．

③ 交換関係 $[\mathsf{J}_i,\mathsf{J}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\mathsf{J}_k$ は J_i が相似変換 $\mathsf{R}^{-1}\mathsf{J}_i\mathsf{R}$ の下で空間回転を受ける事の言い換え

式(2.1.21)では直接計算によって交換関係を求めましたが，実はこの交換関係は相似変換の下での変換則(2.1.26)で R が特に無限小変換の場合に他なりません．これを見ておきましょう．まず R として式(2.1.22)を持って来ると，式(2.1.26)は次の様になります:

$$\left(\mathbf{1} + \frac{i}{\hbar}\theta_j\mathsf{J}_j + O(\theta^2)\right)^{-1} \mathsf{J}_j \left(\mathbf{1} + \frac{i}{\hbar}\theta_j\mathsf{J}_j + O(\theta^2)\right) = \left(\delta_{ij} + \frac{i}{\hbar}\theta_k(\mathsf{J}_k)_{ij} + O(\theta^2)\right)\mathsf{J}_j \tag{2.1.31}$$

この左辺と右辺をそれぞれ計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned}
\text{左辺} &= \left(\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\theta_j\mathsf{J}_j + O(\theta^2)\right)\mathsf{J}_i\left(\mathbf{1} + \frac{i}{\hbar}\theta_j\mathsf{J}_j + O(\theta^2)\right) \\
&= \mathsf{J}_i + \frac{i}{\hbar}(\mathsf{J}_i\mathsf{J}_j - \mathsf{J}_j\mathsf{J}_i)\theta_j + O(\theta^2) \\
&= \mathsf{J}_i + \frac{i}{\hbar}[\mathsf{J}_i,\mathsf{J}_j]\theta_j + O(\theta^2)
\end{aligned} \tag{2.1.32a}$$

$$\begin{aligned}
\text{右辺} &= \left(\delta_{ij} + \frac{i}{\hbar}\theta_k(-i\hbar\varepsilon_{kij}) + O(\theta^2)\right)\mathsf{J}_j \\
&= \mathsf{J}_i - \varepsilon_{ikj}\mathsf{J}_j\theta_k + O(\theta^2) \\
&= \mathsf{J}_i - \varepsilon_{ijk}\mathsf{J}_k\theta_j + O(\theta^2)
\end{aligned} \tag{2.1.32b}$$

但し，式(2.1.32b)の 1 行目で $(\mathsf{J}_k)_{ij} = -i\hbar\varepsilon_{kij}$ を使い，最終行で和を取る添字 kj を $k \to j$，$j \to k$ と書き換えました．この両辺の θ の 1 次の項を比較すると次の交換関係が得られます:

$$[\mathsf{J}_i,\mathsf{J}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\mathsf{J}_k \tag{2.1.33}$$

以上より，交換関係とは J_i が相似変換の下でベクトルとして変換される事の無限小バージョンに他ならない，という事が分かりました．これは直接計算で交換関係を求めただけではなかなか気付かない事です．同様にして，$\mathbf{J}^2$ の変換則(2.1.30)の無限小バージョンから $\mathbf{J}^2$ が任意の J_j と交換する事が言えます:

$$[\mathbf{J}^2, \mathsf{J}_j] = 0 \tag{2.1.34}$$

これは $\mathbf{J}^2$ が空間回転の下で不変である事の言い換えに過ぎません．

2.2 Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ の表現の分類

前節では座標系 (観測者) を回転した時に 3 次元ベクトルがどの様に変換されるかを調べました．以下では同様の問題を量子力学へと拡張します．即ち，座標系 (観測者) を回転した時に状態ベクトルがどの様に変換されるかを調べて行きます．これは数学的には Lie 群 $SO(3)$ のユニタリー既約表現の分類の問題になるのですが，この問題は対応する Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ の表現を分類する事でほぼ完全に解く事が出来ます．まずはこの辺の数学的背景について簡単に述べておきましょう．

数学的背景

まずは 3 次元ベクトル $\boldsymbol{v}$ を考えましょう．回転行列の全体が群を成す事から殆ど自明ですが，座標系を z 軸周りに θ 回転した後，更に θ' 回転して得られる座標系から見たベクトルは，座標系を一気に $\theta+\theta'$ 回転して得られる座標系から見たベクトルと等しいです．数式で書くとこれは次の様になります:

$$\mathsf{R}_3(\theta')\mathsf{R}_3(\theta)\boldsymbol{v} = \mathsf{R}_3(\theta+\theta')\boldsymbol{v} \tag{2.2.1}$$

但し，$\mathsf{R}_3(\theta)$ は式(2.1.7)で与えた z 軸周りでの角度 θ の回転行列で，$SO(3)$ の元です．これと同様の問題は量子力学では次の様になります．冒頭で述べた様に，回転対称性を持つ量子力学系では座標系の回転は状態ベクトル $|\Psi\rangle$ への或るユニタリー変換として表されます．回転行列 $\mathsf{R} \in SO(3)$ に対応するユニタリー演算子を $U(\mathsf{R})$ と書くと，式(2.2.1)に対応するのは次の様なものになります:

$$U(\mathsf{R}_3(\theta'))U(\mathsf{R}_3(\theta))|\Psi\rangle = U(\mathsf{R}_3(\theta+\theta'))|\Psi\rangle \tag{2.2.2}$$

ここで，U は $SO(3)$ から Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上へのユニタリー演算子への写像

$$\begin{array}{ccc} U : SO(3) & \to & \mathcal{H} \text{ 上のユニタリー演算子} \\ \cup & & \cup \\ \mathsf{R} & \mapsto & U(\mathsf{R}) \end{array} \tag{2.2.3}$$

で，任意の $\mathsf{R} \in SO(3)$ に対して次の性質を満たさなければなりません:

$$\text{(群の掛け算則)} \quad U(\mathsf{R})U(\mathsf{R}') = U(\mathsf{R}\mathsf{R}') \tag{2.2.4a}$$

$$\text{(ユニタリー性)} \quad U^\dagger(\mathsf{R})U(\mathsf{R}) = U(\mathsf{R})U^\dagger(\mathsf{R}) = I \tag{2.2.4b}$$

但し，I は $\mathcal{H}$ 上の恒等演算子です．この写像 U を $SO(3)$ の**ユニタリー表現 (unitary representation)** と呼びます．そして，上の条件(2.2.4a)と(2.2.4b)を満たす写像 U をきちんと構成して，ユニタリー演算子 $U(\mathsf{R})$ の状態ベクトルへの作用を知る，というのが基本的な解くべき問題となります．但し，実際上はこの問題を直接解くよりも，対応する Lie 代数の表現 π を調べて，それから U を構成する方がずっと簡単です．ここで，Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ の表現 π とは，$\mathfrak{so}(3)$ から Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の線型演算子への写像

$$\begin{array}{ccc} \pi : \mathfrak{so}(3) & \to & \mathcal{H} \text{ 上の線型演算子} \\ \cup & & \cup \\ \mathsf{A} & \mapsto & \pi(\mathsf{A}) \end{array} \tag{2.2.5}$$

で，任意の $\mathsf{A}, \mathsf{B} \in \mathfrak{so}(3)$ に対して次の性質を満たすものを指します:

$$\text{(線型性)} \quad \pi(\alpha\mathsf{A}+\beta\mathsf{B}) = \alpha\pi(\mathsf{A}) + \beta\pi(\mathsf{B}) \tag{2.2.6a}$$

$$\text{(交換関係)} \quad [\pi(\mathsf{A}), \pi(\mathsf{B})] = \pi([\mathsf{A}, \mathsf{B}]) \tag{2.2.6b}$$

---

*7 $\mathsf{R}_{ia}\mathsf{R}_{jb}\mathsf{R}_{kc}\varepsilon_{abc}$ は添字 ijk の入れ替えの下で完全反対称である事，及び $\mathsf{R}_{1a}\mathsf{R}_{2b}\mathsf{R}_{3c}\varepsilon_{abc} = \det\mathsf{R} = +1$ に注意すると，等式(2.1.29)が成り立つ事が言えます．

*8 $\mathsf{R}^{-1}\mathbf{J}^2\mathsf{R} = \mathsf{R}^{-1}\mathsf{J}_i\mathsf{J}_i\mathsf{R} = \mathsf{R}^{-1}\mathsf{J}_i\mathsf{R}\mathsf{R}^{-1}\mathsf{J}_i\mathsf{R} = (\mathsf{R}_{ij}\mathsf{J}_j)(\mathsf{R}_{ik}\mathsf{J}_k) = \mathsf{R}_{ij}\mathsf{R}_{ik}\mathsf{J}_j\mathsf{J}_k = \delta_{jk}\mathsf{J}_j\mathsf{J}_k = \mathbf{J}^2$．実際，式(2.1.20)を使うと $\mathbf{J}^2 = 2\hbar^2\mathbf{1} = 1(1+1)\hbar^2\mathbf{1}$ と単位行列に比例している事が分かるのでこれは当然です．

但し，α, β は線型結合の係数です．ひとたびこの写像 π が分かると，これの指数関数を考える事で対応する Lie 群の表現が得られます．例えば，回転行列 $\mathsf{R}_j(\theta)$ が生成子 J_i の指数関数 $\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta\mathsf{J}_i}$ で表せた様に，ユニタリー演算子 $U(\mathsf{R}_j(\theta))$ も対応する $\pi(\mathsf{J}_i)$ の指数関数 $\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta\pi(\mathsf{J}_j)}$ で書き表せます．また，この π が分かれば，一般の回転行列(2.1.8)に対応するユニタリー演算子は次の様に与えられます:

$$\begin{aligned} U(\mathsf{R}(\psi,\theta,\phi)) &= U(\mathsf{R}_3(\psi)\mathsf{R}_2(\theta)\mathsf{R}_3(\phi)) \\ &= U(\mathsf{R}_3(\psi))U(\mathsf{R}_2(\theta))U(\mathsf{R}_3(\phi)) \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\psi\,\pi(\mathsf{J}_3)\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\theta\,\pi(\mathsf{J}_2)\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\phi\,\pi(\mathsf{J}_3)\right) \end{aligned} \tag{2.2.7}$$

以下では，まずこの π を具体的に構成していきます．Lie 代数は生成子 J_i を基底として張られる線型ベクトル空間なので，生成子の表現 $\pi(\mathsf{J}_i)$ が分かれば充分である事に注意しましょう．記号の簡略化の為，以下では $\pi(\mathsf{J}_i)$ を次の様に表す事にします:

$$J_i := \pi(\mathsf{J}_i) \tag{2.2.8}$$

この J_i は仮定(2.2.6a)(2.2.6b)及び(2.2.4b)から次を満たします:[*9]

$$(\text{交換関係}) \quad [J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k \tag{2.2.9a}$$

$$(\text{エルミート性}) \quad J_i^\dagger = J_i \tag{2.2.9b}$$

以下では，まずこの J_i の状態ベクトルへの作用を調べて行きましょう．

Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ の表現の分類

まず，次の様な J_1 と J_2 の線型結合を導入します:

$$J_\pm := J_1 \pm iJ_2 \tag{2.2.10}$$

$J_\pm^\dagger = J_\mp$ に注意しましょう．以下では，$\{J_1, J_2, J_3\}$ では無く $\{J_+, J_-, J_3\}$ を使って行きます．まずこれらの交換関係を調べておきましょう．計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned} [J_3, J_\pm] &= [J_3, J_1 \pm iJ_2] \\ &= [J_3, J_1] \pm i[J_3, J_2] \\ &= i\hbar J_2 \pm i\cdot(-i\hbar J_1) \\ &= \pm\hbar(J_1 \pm iJ_2) \\ &= \pm\hbar J_\pm \end{aligned} \tag{2.2.11a}$$

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= [J_1 + iJ_2, J_1 - iJ_2] \\ &= [J_1, J_1] - i[J_1, J_2] + i[J_2, J_1] + [J_2, J_2] \\ &= 0 - i\cdot i\hbar J_3 + i\cdot(-i\hbar J_3) + 0 \\ &= 2\hbar J_3 \end{aligned} \tag{2.2.11b}$$

また，$\boldsymbol{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$ は次の様に表されます:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}^2 &= J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 \\ &= (J_1 \mp iJ_2)(J_1 \pm iJ_2) \mp i(J_1J_2 - J_2J_1) + J_3^2 \\ &= J_\mp J_\pm \mp i\cdot i\hbar J_3 + J_3^2 \\ &= J_\mp J_\pm + J_3(J_3 \pm \hbar) \end{aligned} \tag{2.2.12}$$

直接計算でも確かめる事が出来ますが，この演算子 $\boldsymbol{J}^2$ は J_3 及び $J_\pm$ と交換します:

$$[\boldsymbol{J}^2, J_3] = 0 \tag{2.2.13a}$$

$$[\boldsymbol{J}^2, J_\pm] = 0 \tag{2.2.13b}$$

[*9] 仮定(2.2.6a)と(2.2.6b)より $[\pi(\mathsf{J}_i), \pi(\mathsf{J}_j)] = \pi([\mathsf{J}_i, \mathsf{J}_j]) = \pi(i\hbar\varepsilon_{ijk}\mathsf{J}_k) = i\hbar\varepsilon_{ijk}\pi(\mathsf{J}_k)$ が成り立ち，これから式(2.2.9a)が従います．また，θ が微小だとして $U(\mathsf{R}_j(\theta)) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta\pi(\mathsf{J}_i)} = I + \frac{i}{\hbar}\theta\pi(\mathsf{J}_i) + O(\theta^2)$ と $\theta = 0$ 周りで展開すると，θ の 1 次で $U^\dagger(\mathsf{R}_i(\theta))U(\mathsf{R}_i(\theta)) = (I - \frac{i}{\hbar}\theta\pi^\dagger(\mathsf{J}_i))(I + \frac{i}{\hbar}\theta\pi(\mathsf{J}_i)) + O(\theta^2) = I + \frac{i}{\hbar}\theta(\pi(\mathsf{J}_i) - \pi^\dagger(\mathsf{J}_i)) + O(\theta^2)$ となり，これが式(2.2.4b)を満たす為には $\pi^\dagger(\mathsf{J}_i) = \pi(\mathsf{J}_i)$ でなければなりません．これから式(2.2.9b)が従います．

従って，$\boldsymbol{J}^2$ と $\{J_+, J_-, J_3\}$ のどれか 1 つは同時対角化可能です．以下では，$\boldsymbol{J}^2$ と J_3 の同時固有状態を考える事にします．この同時固有状態を $|a,b\rangle$ と書く事にして，次の様な固有値方程式を考えましょう:

$$\boldsymbol{J}^2|a,b\rangle = a\hbar^2|a,b\rangle \tag{2.2.14a}$$
$$J_3|a,b\rangle = b\hbar|a,b\rangle \tag{2.2.14b}$$

但し，J_i は角運動量の次元を持っているので，$\hbar$ を括り出して a と b は無次元になる様にしました．知りたいのはこの固有値 a と b の取り得る値で，これは調和振動子の時と同様，次の 2 つだけで完全に決定されます:

① $J_\pm$ は J_3 の固有値 $b\hbar$ を $\pm\hbar$ だけ上げ下げする昇降演算子

まず，固有ベクトル $|a,b\rangle$ に $J_\pm$ を作用させて作ったベクトル $J_\pm|a,b\rangle$ を考えましょう．このベクトルに $\boldsymbol{J}^2$ と J_3 を作用させると次の様になります:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2 J_\pm|a,b\rangle &= ([\boldsymbol{J}^2, J_\pm] + J_\pm\boldsymbol{J}^2)|a,b\rangle \\ &= (0 + J_\pm a\hbar^2)|a,b\rangle \\ &= a\hbar^2 J_\pm|a,b\rangle \end{aligned} \tag{2.2.15a}$$
$$\begin{aligned}J_3 J_\pm|a,b\rangle &= ([J_3, J_\pm] + J_\pm J_3)|a,b\rangle \\ &= (\pm\hbar J_\pm + J_\pm b\hbar)|a,b\rangle \\ &= (b\pm 1)\hbar J_\pm|a,b\rangle \end{aligned} \tag{2.2.15b}$$

但し，2 行目と 5 行目で交換関係(2.2.13b)と(2.2.11a)を使い，固有値方程式(2.2.14a)と(2.2.14b)を使って $\boldsymbol{J}^2$ と J_3 はそれぞれ固有値 $a\hbar^2$ と $b\hbar$ に置き換えました．式(2.2.15a)より $J_\pm|a,b\rangle$ は $\boldsymbol{J}^2$ の固有値 $a\hbar^2$ の属する固有ベクトルで，一方，式(2.2.15b)より $J_\pm|a,b\rangle$ は J_3 の固有値 $(b\pm1)\hbar$ の固有状態に属する固有ベクトルである事が分かります．従って $J_\pm|a,b\rangle \propto |a,b\pm1\rangle$ で，$J_\pm$ は J_3 の固有値だけを $\pm\hbar$ だけ上げ下げする昇降演算子である事が分かりました．この昇降演算子を使うと，ある固有ベクトル $|a,b\rangle$ が与えられた時，調和振動子の時と同じ様に次のようなシーケンスを構成する事が出来ます:

$$\cdots \underset{J_-}{\overset{J_+}{\rightleftarrows}} |a,b-n\rangle \underset{J_-}{\overset{J_+}{\rightleftarrows}} \cdots \underset{J_-}{\overset{J_+}{\rightleftarrows}} |a,b-1\rangle \underset{J_-}{\overset{J_+}{\rightleftarrows}} |a,b\rangle \underset{J_-}{\overset{J_+}{\rightleftarrows}} |a,b+1\rangle \underset{J_-}{\overset{J_+}{\rightleftarrows}} \cdots \underset{J_-}{\overset{J_+}{\rightleftarrows}} |a,b+n\rangle \underset{J_-}{\overset{J_+}{\rightleftarrows}} \cdots \tag{2.2.16}$$

② ノルムの正定値性 $\|J_\pm|a,b\rangle\| \geq 0$ から不等式 $a \geq b(b\pm1)$ が従う．等号 $a = b(b\pm1)$ が成立つのは $J_\pm|a,b\rangle = 0$ の場合のみ

次にベクトル $J_\pm|a,b\rangle$ のノルム 2 乗を考えましょう．$\||a,b\rangle\| = 1$ という仮定の下でこれを計算すると，次の様になります:

$$\begin{aligned}\|J_\pm|a,b\rangle\|^2 &= \langle a,b|J_\mp J_\pm|a,b\rangle \\ &= \langle a,b|\left(\boldsymbol{J}^2 - J_3(J_3\pm\hbar)\right)|a,b\rangle \\ &= \left(a\hbar^2 - b\hbar(b\hbar\pm\hbar)\right)\langle a,b|a,b\rangle \\ &= (a - b(b\pm1))\,\hbar^2 \geq 0 \end{aligned} \tag{2.2.17}$$

但し，2 行目で $J_\mp J_\pm = \boldsymbol{J}^2 - J_3(J_3\pm\hbar)$ を使い，3 行目で固有値方程式(2.2.14a)と(2.2.14b)を使い，4 行目で $\||a,b\rangle\|^2 = \langle a,b|a,b\rangle = 1$ を使いました．従って，ノルムの正定値性 $\|J_\pm|a,b\rangle\| \geq 0$ より次の不等式を得ます:

$$a \geq b(b\pm1) \tag{2.2.18}$$

特に重要なのが式(2.2.18)で等号 $(a - b(b\pm1))\hbar^2 = 0$ が成り立つ場合で，これはノルムの正定値性より $J_\pm|a,b\rangle$ がゼロベクトルになる場合のみです:

$$a = b(b\pm1) \quad \Leftrightarrow \quad J_\pm|a,b\rangle = 0 \tag{2.2.19}$$

さて，固有値 b がどんな値でも取れたとすると，一般に上の①と②は両立しません．なぜなら，適当な固有ベクトルに $J_\pm$ を作用させ続けていく事で，最終的に不等式 $b(b\pm1) < a$ を満たさない固有値 b の固有ベクトルが作れてしまうからです．これが起こらない為には，上のシーケンス(2.2.16)の両側が途中で途切れる事，即ち，或る $|a,b_{\min}\rangle$ と $|a,b_{\max}\rangle$ が存在して $J_-|a,b_{\min}\rangle = 0$ かつ $J_+|a,b_{\max}\rangle = 0$ となる必要があります:

$$0 \underset{J_-}{\leftarrow} |a,b_{\min}\rangle \underset{J_-}{\overset{J_+}{\rightleftarrows}} |a,b_{\min}+1\rangle \underset{J_-}{\overset{J_+}{\rightleftarrows}} \cdots \underset{J_-}{\overset{J_+}{\rightleftarrows}} |a,b_{\max}-1\rangle \underset{J_-}{\overset{J_+}{\rightleftarrows}} |a,b_{\max}\rangle \overset{J_+}{\rightarrow} 0 \tag{2.2.20}$$

然るに，式(2.2.19)より $J_-|a,b_{\min}\rangle = 0$ かつ $J_+|a,b_{\max}\rangle = 0$ となるのは $a = b_{\min}(b_{\min}-1)$ かつ $a = b_{\max}(b_{\max}+1)$ の場合だけですから，これより $b_{\min}$ と $b_{\max}$ に対して条件 $b_{\max}(b_{\max}+1) = b_{\min}(b_{\min}-1)$ を得ます．ところで，①より $b_{\max}$ と $b_{\min}$ の差はゼロ

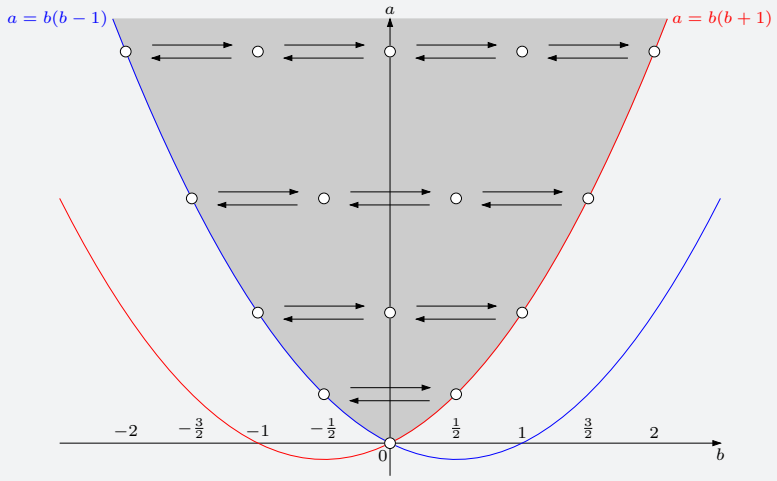


図2.3: Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ の表現の分類．濃い灰色の領域がノルムの正定値性 $\|J_\pm|a,b\rangle\| \geq 0$ を満たす領域で，特に赤色と青色の放物線が等号 $\|J_\pm|a,b\rangle\| = 0$ が成り立つ領域を表します．また，白丸が固有ベクトル $|a,b\rangle$ を表し，矢印が昇降演算子 $J_\pm$ の固有ベクトル $|a,b\rangle$ への作用を表します．特に右向きの矢印が J_+ の作用，左向きの矢印が J_- の作用を表しています．$b_{\max} \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots\}$ とした時，$\|J_\pm|a,b\rangle\| \geq 0$ と $J_\pm|a,b\rangle \propto |a,b\pm1\rangle$ が両立する為には a の取り得る値は $a = b_{\max}(b_{\max}+1)$ と量子化され，b の取り得る値は $\{-b_{\max}, -b_{\max}+1, \cdots, b_{\max}-1, b_{\max}\}$ と量子化されます．

以上の整数ですから，$b_{\max} - b_{\min} \in \{0, 1, 2, \cdots\}$ でなければなりません．結局，$b_{\max}$ と $b_{\min}$ に対して次の 2 つの条件が課される事になります:

$$b_{\max}(b_{\max}+1) = b_{\min}(b_{\min}-1) \tag{2.2.21a}$$
$$b_{\max} - b_{\min} \in \{0, 1, 2, \cdots\} \tag{2.2.21b}$$

この条件式を解きましょう．まず，式(2.2.21a)は $(b_{\max} + b_{\min})(b_{\max} - b_{\min} + 1) = 0$ と因数分解出来る事に注意すると，この条件式に対する解は $b_{\max} + b_{\min} = 0$ または $b_{\max} - b_{\min} = -1$ となりますが，式(2.2.21b)より $b_{\max} - b_{\min} = -1$ は有り得ず，従って $b_{\max} + b_{\min} = 0$，即ち，$b_{\min} = -b_{\max}$ の解しか有り得ません．これと式(2.2.21b)を合わせると，$2b_{\max} \in \{0, 1, 2, \cdots\}$，即ち，

$$b_{\max} \in \{0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \cdots\} \tag{2.2.22}$$

となる事が分かります．結局，非負の整数又は半整数の $b_{\max}$ を 1 つ持って来た時，固有値方程式は次の様になります:

$$\boldsymbol{J}^2|a,b\rangle = b_{\max}(b_{\max}+1)\hbar^2|a,b\rangle \tag{2.2.23a}$$
$$J_3|a,b\rangle = b\hbar|a,b\rangle \tag{2.2.23b}$$

但し，$b_{\max}$ を固定した時，b の取り得る値は $\{-b_{\max}, -b_{\max}+1, \cdots, b_{\max}\}$ となります．ただ，この表記は全く標準的では無いので，以下では $|a,b\rangle$ と書いていたものを $|j,m\rangle$，$b_{\max}$ と書いていたものを j，b と書いていたものを m と書き直して，固有値方程式を次の様に書く事にします:

$$\boldsymbol{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \tag{2.2.24a}$$
$$J_3|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle \tag{2.2.24b}$$

但し，$j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots\}$ 及び $m \in \{-j, -j+1, \cdots, j\}$ です．これで $\boldsymbol{J}^2$ と J_3 の固有値の取り得る値が完全に分類出来ました．図2.3に固有値の取り得る値をまとめました．

次に $J_\pm|j,m\rangle \propto |j,m\pm1\rangle$ の比例係数を求めておきましょう．比例係数を $c_\pm$ と書いて次の様に表す事にします:

$$J_\pm|j,m\rangle = c_\pm|j,m\pm1\rangle \tag{2.2.25}$$

$|j,m\rangle$ と $|j,m\pm1\rangle$ が共にノルムが 1 に規格化されているとしてこの両辺のノルム 2 乗を計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned}\|J_\pm|j,m\rangle\|^2 &= \hbar^2\left(j(j+1) - m(m\pm1)\right)\\ &= \hbar^2(j\mp m)(j\pm m+1)\\ \|c_\pm|j,m\rangle\|^2 &= |c_\pm|^2\||j,m\rangle\|^2\end{aligned} \tag{2.2.26a}$$

$$= |c_\pm|^2 \tag{2.2.26b}$$

一般性を失う事無く $c_\pm$ は正の実数とする事が出来るので，以下では $c_\pm = \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}$ としましょう．すると，式(2.2.25)は次の様になります:

$$J_\pm|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}|j,m\pm1\rangle \tag{2.2.27}$$

以上の結果(2.2.23b)と(2.2.27)より，$2j+1$ 個の固有ベクトル $\{|j,m\rangle : m=-j,\cdots,j\}$ で張られる線型ベクトル空間の上では，演算子 $\{J_3, J_+, J_-\}$ は行列要素が次で与えられる $(2j+1)\times(2j+1)$ の行列 $\{\mathsf{J}_3^{[j]}, \mathsf{J}_+^{[j]}, \mathsf{J}_-^{[j]}\}$ として振る舞う事が分かります:

$$(\mathsf{J}_3^{[j]})_{m'm} := \langle j,m'|J_3|j,m\rangle = \hbar m\delta_{m'm} \tag{2.2.28a}$$

$$(\mathsf{J}_\pm^{[j]})_{m'm} := \langle j,m'|J_\pm|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\delta_{m',m\pm1} \tag{2.2.28b}$$

また，式(2.2.28b)より，この $2j+1$ 次元空間の上では，演算子 $J_1 = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$ と $J_2 = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$ は行列要素が次で与えられる $(2j+1)\times(2j+1)$ のエルミート行列 $\mathsf{J}_1^{[j]}$ と $\mathsf{J}_2^{[j]}$ で表される事が分かります:

$$(\mathsf{J}_1^{[j]})_{m'm} = \frac{\hbar}{2}\left(\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\delta_{m',m+1} + \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\delta_{m',m-1}\right) \tag{2.2.29a}$$

$$(\mathsf{J}_2^{[j]})_{m'm} = \frac{\hbar}{2i}\left(\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\delta_{m',m+1} - \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\delta_{m',m-1}\right) \tag{2.2.29b}$$

実際，行列要素がこの様に与えられる行列 $\{\mathsf{J}_1^{[j]}, \mathsf{J}_2^{[j]}, \mathsf{J}_3^{[j]}\}$ は交換関係(2.2.9a)を満たす事が容易に確認出来ます．この様に，元々 3×3 行列だった $\mathfrak{so}(3)$ の生成子 $\{\mathsf{J}_1, \mathsf{J}_2, \mathsf{J}_3\}$ から，同じ交換関係を満たす $(2j+1)\times(2j+1)$ のエルミート行列 $\{\mathsf{J}_1^{[j]}, \mathsf{J}_2^{[j]}, \mathsf{J}_3^{[j]}\}$ を対応付ける写像

$$\pi^{[j]} : \mathsf{J}_i \mapsto \mathsf{J}_i^{[j]} \tag{2.2.30}$$

を Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ の**スピン j 表現** (**spin-j representation**) と呼び，固有ベクトル $\{|j,m\rangle : m=-j,\cdots,j\}$ を基底として張られる $2j+1$ 次元線型ベクトル空間 $\mathcal{H}^{[j]}$ をスピン j の**表現空間** (**representation space**) と呼びます．以上で Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ の表現の分類が全て完了しました．

例: スピン 1/2 表現

以上，一般論を展開して来たので，ここで簡単な例を 1 つ挙げておきましょう．一番簡単なのは $j=0$ の場合ですが，この時は全ての生成子が 1×1 の単位行列 1 で表されるので自明過ぎます[*10]．最も簡単で且つ非自明な例は $j=1/2$ の場合なので，この場合を調べましょう．公式(2.2.29a)(2.2.29b)(2.2.28a)に従って 2×2 エルミート行列 $\{\mathsf{J}_3^{[\frac{1}{2}]}, \mathsf{J}_+^{[\frac{1}{2}]}, \mathsf{J}_-^{[\frac{1}{2}]}\}$ を計算すると次の様になります:

$$\mathsf{J}_1^{[\frac{1}{2}]} = \begin{pmatrix} (\mathsf{J}_1^{[\frac{1}{2}]})_{+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} & (\mathsf{J}_1^{[\frac{1}{2}]})_{+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \\ (\mathsf{J}_1^{[\frac{1}{2}]})_{-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} & (\mathsf{J}_1^{[\frac{1}{2}]})_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_1 \tag{2.2.31a}$$

$$\mathsf{J}_2^{[\frac{1}{2}]} = \begin{pmatrix} (\mathsf{J}_2^{[\frac{1}{2}]})_{+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} & (\mathsf{J}_2^{[\frac{1}{2}]})_{+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \\ (\mathsf{J}_2^{[\frac{1}{2}]})_{-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} & (\mathsf{J}_2^{[\frac{1}{2}]})_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2i}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_2 \tag{2.2.31b}$$

$$\mathsf{J}_3^{[\frac{1}{2}]} = \begin{pmatrix} (\mathsf{J}_3^{[\frac{1}{2}]})_{+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} & (\mathsf{J}_3^{[\frac{1}{2}]})_{+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \\ (\mathsf{J}_3^{[\frac{1}{2}]})_{-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} & (\mathsf{J}_3^{[\frac{1}{2}]})_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_3 \tag{2.2.31c}$$

従って，$\mathfrak{so}(3)$ の生成子のスピン 1/2 表現は単に Pauli 行列の $\hbar/2$ 倍で与えられる事が分かりました．容易に分かる様にこれらは全てエルミート行列で，また，交換関係 $[\mathsf{J}_i^{[\frac{1}{2}]}, \mathsf{J}_j^{[\frac{1}{2}]}] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\mathsf{J}_k^{[\frac{1}{2}]}$ を満たします．

2.3 Wigner の D 行列

前節で Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ の表現を作ったので，次にこれを使って $SO(3)$ のユニタリー表現を具体的に構成して行きましょう．任意の状態ベクトルにユニタリー演算子 $U(\mathsf{R})$ が作用した時，その状態ベクトルがどの様に変換されるのかを知りたい訳ですが，任意の状態ベクトルは $|j,m\rangle$ の線型結合で表す事が出来るので[*11]，固有ベクトル $|j,m\rangle$ の変換則が分かれば充分です．以下，$U(\mathsf{R})$ がスピン j の

[*10] この様に全てが単位元で表される表現を**自明表現** (**trivial representation**) と呼びます．

[*11] 証明はしていませんが，$\{|j,m\rangle\}$ は完全正規直交系を与えます．

表現空間 $\mathcal{H}^{[j]}$ に作用する場合を考えましょう．$U(\mathsf{R})$ は線型演算子なので，$U(\mathsf{R})|j,m\rangle$ は必ず次の様な $|j,m'\rangle$ $(m'=-j,\cdots,j)$ の線型結合で表されます:

$$U(\mathsf{R})|j,m\rangle = \sum_{m'=-j}^{j} |j,m'\rangle \mathsf{D}^{[j]}_{m'm}(\mathsf{R}) \tag{2.3.1}$$

ここで，$\mathsf{D}^{[j]}_{m'm}(\mathsf{R})$ は線型結合の係数で，次式で表されます[*12]:

$$\mathsf{D}^{[j]}_{m'm}(\mathsf{R}) = \langle j,m'|U(\mathsf{R})|j,m\rangle \tag{2.3.2}$$

行列要素が $\mathsf{D}^{[j]}_{m'm}(\mathsf{R})$ で与えられる $(2j+1)\times(2j+1)$ 行列を $\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R})$ と書く事にすると，仮定(2.2.4a)と(2.2.4b)から任意の R に対してこの行列は次を満たす事が言えます:

$$\text{(群の掛け算則)}\quad \mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R}')\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R}) = \mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R}'\mathsf{R}) \tag{2.3.3a}$$

$$\text{(ユニタリー性)}\quad [\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R})]^\dagger \mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R}) = \mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R})[\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R})]^\dagger = \mathbf{1} \tag{2.3.3b}$$

この様に，元々 3×3 直交行列だった $SO(3)$ の元 R が，同じ群の掛け算則を満たす $(2j+1)\times(2j+1)$ ユニタリー行列 $\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R})$ で表す事が出来ました．式(2.3.2)で定まる $\mathsf{R}\in SO(3)$ から $\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R})\in U(2j+1)$ を対応付ける写像

$$\mathsf{D}^{[j]} : \mathsf{R} \mapsto \mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R}) \tag{2.3.4}$$

を $SO(3)$ のスピン j のユニタリー表現と呼びます[*13]．

さて，基底の変換則(2.3.1)が $(2j+1)\times(2j+1)$ ユニタリー行列(2.3.2)で定まる事が分かった訳ですが，ひとたびこのユニタリー行列 $\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R})$ が分かると，任意の状態ベクトルの変換則も分かります．これを見る為に，スピン j の表現空間 $\mathcal{H}^{[j]}$ に属するベクトル $|\Psi^{[j]}\rangle$ を次の様に基底で展開しましょう:

$$|\Psi^{[j]}\rangle = \sum_{m=-j}^{j} \Psi^{[j]}_m |j,m\rangle \tag{2.3.5}$$

ここで，$\Psi^{[j]}_m$ は複素数の展開係数です．このベクトルに $U(\mathsf{R})$ を作用させると次の様になります:

$$\begin{aligned} U(\mathsf{R})|\Psi^{[j]}\rangle &= \sum_{m=-j}^{j} \Psi^{[j]}_m U(\mathsf{R})|j,m\rangle \\ &= \sum_{m=-j}^{j} \Psi^{[j]}_m \sum_{m'=-j}^{j} |j,m'\rangle \mathsf{D}^{[j]}_{m'm}(\mathsf{R}) \\ &= \sum_{m'=-j}^{j} \left(\sum_{m=-j}^{j} \mathsf{D}^{[j]}_{m'm}(\mathsf{R}) \Psi^{[j]}_m \right) |j,m'\rangle \end{aligned} \tag{2.3.6}$$

但し，2 行目で式(2.3.1)を用いました．従って，展開(2.3.5)の係数から作られるベクトルを $\boldsymbol{\Psi}^{[j]} = (\Psi^{[j]}_j,\cdots,\Psi^{[j]}_{-j})^\intercal$ と書く事にすると，式(2.3.6)からこの $2j+1$ 成分複素ベクトル $\boldsymbol{\Psi}^{[j]}$ の変換則が次の様に読み取れます:

$$\boldsymbol{\Psi}^{[j]} \mapsto \mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R})\boldsymbol{\Psi}^{[j]} \tag{2.3.7}$$

最後に，R が式(2.1.26)で与えられる一般の回転行列の場合の $\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R})$ について調べておきましょう．まず，式(2.2.7)よりこの時のユニタリー演算子は次の様に表されます:

$$U(\mathsf{R}(\psi,\theta,\phi)) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\psi J_3}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta J_2}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\phi J_3} \tag{2.3.8}$$

スピン j の表現空間の上では，このユニタリー演算子の行列要素は次の様になります:

$$\begin{aligned} \mathsf{D}^{[j]}_{m'm}(\mathsf{R}(\psi,\theta,\phi)) &= \langle j,m'|\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\psi J_3}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta J_2}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\phi J_3}\,|j,m\rangle \\ &= \mathrm{e}^{i\psi m'}\langle j,m'|\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta J_2}\,|j,m\rangle\,\mathrm{e}^{i\phi m} \end{aligned}$$

[*12] 実際，式(2.3.1)より $\langle j,m'|U(\mathsf{R})|j,m\rangle = \sum_{m''=-j}^{j}\langle j,m'|j,m''\rangle \mathsf{D}^{[j]}_{m''m}(\mathsf{R}) = \sum_{m''=-j}^{j}\delta_{m'm''}\mathsf{D}^{[j]}_{m''m}(\mathsf{R}) = \mathsf{D}^{[j]}_{m'm}(\mathsf{R})$ となります．

[*13] この段階では分かりませんが，j が半整数の場合は実は $SO(3)$ の表現を与えません．これについてはすぐ後で述べます．

$$= \mathrm{e}^{im'\psi}\,\mathrm{e}^{im\phi}\,\mathsf{d}^{[j]}_{m'm}(\theta) \tag{2.3.9}$$

但し，2 行目で J_3 を固有値 m', m に置き換えました．また，$\mathsf{d}^{[j]}(\theta)$ は行列要素が次で与えられる $2j+1$ 次のユニタリー行列です:[*14]

$$\mathsf{d}^{[j]}_{m'm}(\theta) = \langle j, m'|\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta J_2}\,|j, m\rangle \tag{2.3.10}$$

行列要素が式(2.3.9)で与えられるユニタリー行列 $\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R}(\psi,\theta,\phi))$ を特に **Wigner の D 行列** (**Wigner's D-matrix**) と呼び，行列要素が式(2.3.10)で与えられるユニタリー行列 $\mathsf{d}^{[j]}(\theta)$ を **Wigner の小 d 行列** (**Wigner's small d-matrix**) と呼びます．式(2.3.9)は行列要素の表式ですが，$SO(3)$ の生成子のスピン j 表現 $\{\mathsf{J}^{[j]}_1, \mathsf{J}^{[j]}_2, \mathsf{J}^{[j]}_3\}$ を用いると，Wigner の D 行列は次の様にも書き表せます:

$$\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R}(\psi,\theta,\phi)) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\psi\mathsf{J}^{[j]}_3}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta\mathsf{J}^{[j]}_2}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\phi\mathsf{J}^{[j]}_3} \tag{2.3.11}$$

例: スピン 1/2 表現

一般には Wigner の D 行列はとても複雑な関数で表されるのですが，$j = 1/2$ の時は簡単で，式(2.3.11)から直接計算で直ぐに求める事が出来ます．$j = 1/2$ の時の生成子の表現行列(2.2.31a)–(2.2.31c)を使うと，$j = 1/2$ の時の Wigner の D 行列は次のユニタリー行列で与えられる事が分かります:

$$\begin{aligned}
\mathsf{D}^{[\frac{1}{2}]}(\mathsf{R}(\psi,\theta,\phi)) &= \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\psi\mathsf{J}^{[\frac{1}{2}]}_3}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta\mathsf{J}^{[\frac{1}{2}]}_2}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\phi\mathsf{J}^{[\frac{1}{2}]}_3} \\
&= \mathrm{e}^{i\frac{\psi}{2}\sigma_3}\,\mathrm{e}^{i\frac{\theta}{2}\sigma_2}\,\mathrm{e}^{i\frac{\theta}{2}\sigma_3} \\
&= \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{+i\frac{\psi}{2}} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-i\frac{\psi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2} \\ -\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{+i\frac{\phi}{2}} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{+i\frac{\psi+\phi}{2}}\cos\frac{\theta}{2} & \mathrm{e}^{+i\frac{\psi-\theta}{2}}\sin\frac{\theta}{2} \\ \mathrm{e}^{-i\frac{\psi-\phi}{2}}\sin\frac{\theta}{2} & \mathrm{e}^{-i\frac{\psi+\theta}{2}}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.3.12}$$

但し，2 行目から 3 行目への移行は式(2.1.24)で行った様に指数関数の Taylor 展開を計算すれば得られます．この行列と式(2.3.7)を使うと，例えば「スピン上向き状態」$|\uparrow\rangle := 1\cdot|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle + 0\cdot|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$ と「スピン下向き状態」$|\downarrow\rangle := 0\cdot|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle + 1\cdot|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$ は空間回転 $\mathsf{R}(\psi,\theta,\phi)$ の下で次の様に変換される事が分かります:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{+i\frac{\psi+\phi}{2}}\cos\frac{\theta}{2} \\ \mathrm{e}^{-i\frac{\psi-\phi}{2}}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{2.3.13a}$$

[*14] 今後積極的に使って行く事は殆ど無いのですが，行列要素(2.3.10)は次の様に計算出来ます．まず，$\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\theta J_2} = \mathrm{e}^{\frac{1}{2\hbar}\theta(J_+ - J_-)}$ と書けますが，この右辺は実は次の様に分解出来ます:

$$\mathrm{e}^{\frac{1}{2\hbar}\theta(J_+ - J_-)} = \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\tan\frac{\theta}{2}J_-}\,\mathrm{e}^{\frac{2}{\hbar}\log\cos\frac{\theta}{2}J_3}\,\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\tan\frac{\theta}{2}J_+}$$

この等式を示すのは少し難しいのですが，取り敢えずこれを認めると，$m' \geq m$ の場合は行列要素(2.3.10)は次の様に計算されます:

$$\begin{aligned}
\mathsf{d}^{[j]}_{m'm}(\theta) &= \langle j, m'|\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\tan\frac{\theta}{2}J_-}\,\mathrm{e}^{\frac{2}{\hbar}\log\cos\frac{\theta}{2}J_3}\,\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\tan\frac{\theta}{2}J_+}\,|j, m\rangle \\
&= \sum_{n'=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\tan\frac{\theta}{2})^{n'}(\tan\frac{\theta}{2})^{n}}{\hbar^{n'+n}n'!n!}\langle j, m'|(J_-)^{n'}\,\mathrm{e}^{\frac{2}{\hbar}\log\cos\frac{\theta}{2}J_3}(J_+)^{n}|j, m\rangle \\
&= \sum_{n'=0}^{j-m'}\sum_{n=0}^{j-m} \frac{(-\tan\frac{\theta}{2})^{n'}(\tan\frac{\theta}{2})^{n}}{n'!n!}\sqrt{\frac{(j-m')!}{(j+m')!}\frac{(j+m'+n')!}{(j-m'-n')!}}\sqrt{\frac{(j-m)!}{(j+m)!}\frac{(j+m+n)!}{(j-m-n)!}}\langle j, m'+n'|\,\mathrm{e}^{\frac{2}{\hbar}\log\cos\frac{\theta}{2}J_3}\,|j, m+n\rangle \\
&= \sum_{n'=0}^{j-m'}\sum_{n=0}^{j-m} \frac{(-\tan\frac{\theta}{2})^{n'}(\tan\frac{\theta}{2})^{n}}{n'!n!}\sqrt{\frac{(j-m')!}{(j+m')!}\frac{(j+m'+n')!}{(j-m'-n')!}}\sqrt{\frac{(j-m)!}{(j+m)!}\frac{(j+m+n)!}{(j-m-n)!}}\,\mathrm{e}^{(m'+n'+m+n)\log\cos\frac{\theta}{2}}\,\delta_{m'+n',m+n} \\
&= \sqrt{\frac{(j-m')!}{(j+m')!}\frac{(j-m)!}{(j+m)!}}(\cos\tfrac{\theta}{2})^{m'+m}\sum_{n'=0}^{j-m'}\sum_{n=0}^{j-m}\frac{(-1)^{n'}}{n'!n!}\sqrt{\frac{(j+m'+n')!}{(j-m'-n')!}\frac{(j+m+n)!}{(j-m-n)!}}(\sin\tfrac{\theta}{2})^{n'+n}\delta_{m'+n',m+n} \\
&= \sqrt{\frac{(j-m')!}{(j+m')!}\frac{(j-m)!}{(j+m)!}}(\sin\tfrac{\theta}{2})^{m'-m}(\cos\tfrac{\theta}{2})^{m'+m}\sum_{n'=0}^{j-m'}\frac{1}{(n+m'-m)!n'!}\frac{(j+m'+n')!}{(j-m'-n')!}(-\sin^2\tfrac{\theta}{2})^{n'} \quad \text{for} \quad m' \geq m
\end{aligned}$$

但し，3 行目で次の関係式を使いました:

$$(J_+)^n|j, m\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{(j-m)!}{(j+m)!}\frac{(j+m+n)!}{(j-m-n)!}}|j, m+n\rangle & \text{for} \quad n \leq j-m \\ 0 & \text{for} \quad n > j-m \end{cases}$$

ユニタリー性 $\mathsf{d}^{[j]}(\theta)^\dagger = \mathsf{d}^{[j]}(-\theta)$ から従う等式 $\mathsf{d}^{[j]}_{m'm}(\theta) = \mathsf{d}^{[j]\,*}_{mm'}(-\theta)$ に注意すると，上の表式の θ を $-\theta$ に置き換えて，更に m と m' を入れ替えれば，$m' \leq m$ の場合の Wigner の小 d 行列が得られる事が分かります．

$$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix}\mathrm{e}^{+i\frac{\psi-\phi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}\\ \mathrm{e}^{-i\frac{\psi+\phi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} \tag{2.3.13b}$$

注意: j が半整数の時は $SO(3)$ の表現を与えない

今まで Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ の表現行列が分かればそれの指数関数を考える事で対応する Lie 群 $SO(3)$ の表現行列が得られると言って来ましたが，実は j が半整数の時は $\mathfrak{so}(3)$ の表現行列の指数関数は $SO(3)$ の表現行列を与えません．最後にこれを見ておきましょう．

まず，任意の $j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots\cdots\}$ に対して生成子 J_3 のスピン j 表現は次の対角行列で与えられます:

$$\mathsf{J}_3^{[j]} = \hbar\,\mathrm{diag}(j, j-1, \cdots, 1-j, -j) \tag{2.3.14}$$

これを用いて z 軸周りの 2π 回転 $\mathsf{R}_3(2\pi)$ のスピン j 表現を調べてみましょう．簡単な計算より次が従います:

$$\begin{aligned}\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R}_3(2\pi)) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\cdot 2\pi \mathsf{J}_3^{[j]}\right)\\ &= \mathrm{e}^{i2\pi\,\mathrm{diag}(j,j-1,\cdots,1-j,-j)}\\ &= \mathrm{diag}(\mathrm{e}^{i2\pi j}, \mathrm{e}^{i2\pi(j-1)}, \cdots, \mathrm{e}^{i2\pi(1-j)}, \mathrm{e}^{i2\pi(-j)})\\ &= \begin{cases}+\mathbf{1} & \text{for} \quad j \in \{0,1,2,\cdots\}\\ -\mathbf{1} & \text{for} \quad j \in \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \cdots\}\end{cases}\end{aligned} \tag{2.3.15}$$

従って，$\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R}_3(2\pi)) = (-\mathbf{1})^{2j}$ を得ます．一方，元々 $\mathsf{R}_3(2\pi) = \mathbf{1}$ なので，$j \in \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \cdots\}$ の時は単位元が単位元に写されていない事が分かります．これは，j が半整数の時は $\mathsf{D}^{[j]}$ が $SO(3)$ の表現を与えていない事を意味します[*15]．しかし，$\mathsf{D}^{[j]}(\mathsf{R}_3(4\pi)) = \mathbf{1}$ となるので，4π 回転すれば単位元が単位元に写されます．この様に j が半整数の時は周期が 2π では無く 4π であるという意味で，j が半整数の時の表現を $SO(3)$ の **2 価表現** (**double-valued representation**) と呼んだりします．良く知っている様にスピンが整数の粒子はボゾン，半整数の粒子はフェルミオンなので，上の j が粒子のスピン角運動量の大きさを表すと思うと，上の数学的事実は標語的に

「ボゾンは 2π 周期，フェルミオンは 4π 周期」

と表す事が出来ます．

2.4　球面調和関数

第2.2節で $J_\pm|j,m\rangle \propto |j,m\pm1\rangle$ である事を見ましたが，この昇降演算子 $J_\pm$ を用いると，任意の固有ベクトル $|j,m\rangle$ は $J_-|j,-j\rangle = 0$ を満たすベクトル $|j,-j\rangle$ を用いて $|j,m\rangle \propto (J_+)^{j+m}|j,-j\rangle$ と書ける事が分かります．以下，まずこの比例係数を求めましょう．これは式(2.2.27)から従う次の m に関する漸化式を用いて求めるのが最も簡単です:

$$|j,m\rangle = \frac{1}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{(j-m+1)(j+m)}}J_+|j,m-1\rangle \tag{2.4.1}$$

この漸化式を逐次的に使って行くと，任意の規格化された固有ベクトル $|j,m\rangle$ が次の様にして $|j,-j\rangle$ を用いて表す事が出来ます:

$$\begin{aligned}|j,m\rangle &= \frac{1}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{(j-m+1)(j+m)}}J_+|j,m-1\rangle\\ &= \frac{1}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{(j-m+1)(j+m)}}J_+\left(\frac{1}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{(j-m+2)(j+m-2)}}J_+|j,m-2\rangle\right)\\ &= \frac{1}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{(j-m+1)(j-m+2)\times(j+m)(j+m-1)}}(J_+)^2|j,m-2\rangle\\ &= \cdots\\ &= \frac{1}{\hbar^{j+m}}\frac{1}{\sqrt{(j-m+1)(j-m+2)\cdots 2j\times(j+m)(j+m-1)\cdots 1}}(J_+)^{j+m}|j,-j\rangle\end{aligned}$$

[*15] それでは j が半整数の時は駄目なのかと言うと，そういう訳ではありません．j が整数・半整数の場合両方ともに量子力学では重要です．鍵となるのは位相 $\mathrm{e}^{i\theta}$ だけ異なる 2 つのベクトルは同じ物理的状態を表すという点で，これにより単位元 $\mathsf{R}_3(2\pi) = \mathbf{1}$ が位相因子 $\mathrm{e}^{i\theta}$ を除いて単位元に写されていれば問題は無いのです．数学的に言うと，式(2.3.4)の表現 $\mathsf{D}^{[j]}$ は $SO(3)$ から商空間 $U(\mathcal{H})/\{\mathrm{e}^{i\theta}\,I\}$ への群の掛け算則を保つ写像であれば良い，という事になります．但し，$U(\mathcal{H})$ は Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上のユニタリー演算子の全体で，商空間 $U(\mathcal{H})/\{\mathrm{e}^{i\theta}\,I\}$ は位相 $\mathrm{e}^{i\theta}$ だけ異なる元は同一視した $\mathcal{H}$ 上のユニタリー演算子の全体を表します．この様な表現を一般に**射影ユニタリー表現** (**projective unitary representation**) と呼び，2 価表現は射影表現の特別な場合です．

$$= \frac{1}{\hbar^{j+m}}\sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}}(J_+)^{j+m}|j,-j\rangle \tag{2.4.2}$$

但し，$|j,-j\rangle$ は規格化条件 $\||j,-j\rangle\| = 1$ を満たすとしています．これで，$|j,-j\rangle$ さえ分かれば式(2.4.2)より一般の規格化された固有ベクトル $|j,m\rangle$ が構成出来る事が分かりました．

結局，第1章でやった調和振動子の時と同様，規格化された固有ベクトルは次の手順で求める事が出来ます:

① 方程式 $\boldsymbol{J_3|j,-j\rangle = -j\hbar|j,-j\rangle}$ と $\boldsymbol{J_-|j,-j\rangle = 0}$ を解く

② 規格化条件 $\boldsymbol{\||j,-j\rangle\| = 1}$ を満たす様に $\boldsymbol{|j,-j\rangle}$ を正しく規格化する

③ 上で求めた $\boldsymbol{|j,-j\rangle}$ に $\boldsymbol{J_+}$ を $\boldsymbol{j+m}$ 回作用させて $\boldsymbol{|j,m\rangle = \frac{1}{\hbar^{j+m}}\sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}}(J_+)^{j+m}|j,-j\rangle}$ を構成する

以下，この手順に従って応用上重要な球面調和関数を求めて行きましょう．

球面調和関数

今までは演算子 $\{J_1,J_2,J_3\}$ は適当な Hilbert 空間上に作用するエルミート演算子で，交換関係 $[J_i,J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$ を満たすものとして抽象的に扱って来ました．以下では，Hilbert 空間として 2 次元球面 $\mathbb{S}^2$ 上の 2 乗可積分な関数全体を考えて行きます．その為の準備として，まず 3 次元 Euclid 空間 $\mathbb{R}^3$ 上の関数に対しては演算子 $\{J_1,J_2,J_3\}$ は次の様な 1 階微分演算子として実現される事に注意しましょう:

$$L_1 = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{2.4.3a}$$

$$L_2 = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{2.4.3b}$$

$$L_3 = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{2.4.3c}$$

実際，容易に確かめる事が出来る様に，この微分演算子は交換関係 $[L_i,L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ を満たし，次の内積に関してエルミートです:

$$(f,g) := \int d^3\boldsymbol{x}\, f^*(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{x}) \tag{2.4.4}$$

但し，f,g は任意の 2 乗可積分な関数です．次にこの微分演算子を球座標を用いて書き直しましょう．まず，球座標 (r,θ,ϕ) を次の様に導入します:

$$(x,y,z) = (r\sin\theta\cos\phi, r\sin\theta\sin\phi, r\cos\theta) \quad (0\le r<\infty,\ 0\le\theta\le\pi,\ 0\le\phi<2\pi) \tag{2.4.5}$$

これを用いて (x,y,z) を全て (r,θ,ϕ) を用いて書き直すと，式(2.4.3a)–(2.4.3c)は次の様に r に依存しない 2 次元球面上の関数に作用する微分演算子として表されます[*16]:

$$L_1 = -i\hbar\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{2.4.6a}$$

$$L_2 = -i\hbar\left(+\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{2.4.6b}$$

[*16] 式(2.4.6a)–(2.4.6c)を導出するには次の連鎖公式を用います:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi}$$
$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi}$$
$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

但し，

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi, \quad \frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}, \quad \frac{\partial\phi}{\partial x} = -\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}$$
$$\frac{\partial r}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi, \quad \frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}, \quad \frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}$$
$$\frac{\partial r}{\partial z} = \cos\theta, \quad \frac{\partial\theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r}, \quad \frac{\partial\phi}{\partial z} = 0$$

これらを式(2.4.3a)–(2.4.3c)に代入してまとめると，式(2.4.6a)–(2.4.6c)が得られます．

$$L_3 = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{2.4.6c}$$

直接計算で容易に確かめる事が出来ますが，これらの微分演算子も交換関係 $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ を満たし，次の内積に関してエルミートです:

$$(f, g) := \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, \sin\theta f^*(\theta,\phi)g(\theta,\phi) \tag{2.4.7}$$

但し，f, g は 2 次元球面上の 2 乗可積分な関数です．また，昇降演算子は次の様に表されます:

$$\begin{aligned} L_\pm &= L_1 \pm iL_2 \\ &= \hbar\,\mathrm{e}^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \end{aligned} \tag{2.4.8}$$

以上で準備が終わりました．前節までで $|j, m\rangle$ と書いていたものを $Y_{jm}(\theta,\phi)$ と書く事にしましょう．これは次の固有値方程式の解で，内積(2.4.7)の下でノルムが 1(即ち $\|Y_{jm}\| = \sqrt{(Y_{jm}, Y_{jm})} = 1$) を満たすものとして定義されます:

$$\boldsymbol{L}^2 Y_{jm}(\theta,\phi) = j(j+1)\hbar^2 Y_{jm}(\theta,\phi) \tag{2.4.9a}$$
$$L_3 Y_{jm}(\theta,\phi) = m\hbar Y_{jm}(\theta,\phi) \tag{2.4.9b}$$

また，前節までの一般論から，昇降演算子 $L_\pm$ の関数 Y_{jm} への作用は次の様になります:

$$L_\pm Y_{jm}(\theta,\phi) = \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}Y_{j,m\pm1}(\theta,\phi) \tag{2.4.10}$$

以下，この関数 Y_{jm} を求めましょう．この節の冒頭で述べた様に，この関数は微分方程式(2.4.9a)(2.4.9b)を愚直に解かずとも，次の 3 つのステップだけで求める事が出来ます:

① 方程式 $\boldsymbol{L_3 Y_{j,-j} = -j\hbar Y_{j,-j}}$ と $\boldsymbol{L_- Y_{j,-j} = 0}$ を解く

まず最初のステップは $Y_{j,-j}$ を求める事です．この関数は条件 $L_3 Y_{j,-j} = -j\hbar Y_{j,-j}$ と $L_- Y_{j,-j} = 0$ を満たさなければなりませんが，式(2.4.6c)と式(2.4.8)よりこの条件は次の連立 1 階微分方程式になります:

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}Y_{j,-j}(\theta,\phi) = -j\hbar Y_{j,-j}(\theta,\phi) \tag{2.4.11a}$$
$$\hbar\,\mathrm{e}^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)Y_{j,-j}(\theta,\phi) = 0 \tag{2.4.11b}$$

この方程式を解きましょう．その為に，まず上の連立 1 階微分方程式は次の様に書き直せる事に注意しましょう:

$$\left(\frac{\partial}{\partial\phi} + ij\right)Y_{j,-j}(\theta,\phi) = 0 \tag{2.4.12a}$$
$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - j\cot\theta\right)Y_{j,-j}(\theta,\phi) = 0 \tag{2.4.12b}$$

ここで，1 番目の方程式は式(2.4.11a)を単に書き直しただけで，2 番目の方程式は式(2.4.11b)に現れる微分 $\frac{\partial}{\partial\phi}$ を式(2.4.12a)を使って $-ij$ に置き換えれば得られます．上の微分方程式は簡単に解けて，まず式(2.4.12a)から ϕ 依存性は $Y_{j,-j} \propto \mathrm{e}^{-ij\phi}$ である事が分かり，式(2.4.12b)から θ 依存性が $Y_{j,-j} \propto (\sin\theta)^j$ と決まります．結局，連立 1 階微分方程式(2.4.11a)(2.4.11b)の解は次の様になります:

$$Y_{j,-j}(\theta,\phi) = N\,\mathrm{e}^{-ij\phi}(\sin\theta)^j \tag{2.4.13}$$

但し，N は積分定数 (規格化因子) で，これは規格化条件から決めます．

② 規格化条件 $\boldsymbol{\|Y_{j,-j}\| = 1}$ を満たす様に $\boldsymbol{Y_{j,-j}}$ を正しく規格化する

次に N を決めましょう．2 次元球面上の内積(2.4.7)を思い出すと，規格化条件 $\|Y_{j,-j}\|^2 = 1$ は次の様に表されます:

$$\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, \sin\theta|Y_{j,-j}(\theta,\phi)|^2 = 1 \tag{2.4.14}$$

上で求めた解(2.4.13)を使って左辺の積分を計算しましょう．計算すると次の様になります:

$$\text{左辺の積分} = |N|^2 \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, \sin\theta(\sin\theta)^{2j}$$

$$
\begin{aligned}
&= |N|^2 \cdot 2\pi \int_{-1}^{1} d\cos\theta\,(1-\cos^2\theta)^j \\
&= |N|^2 \cdot 4\pi \int_{0}^{1} d\cos\theta\,(1-\cos^2\theta)^j \\
&= |N|^2 \cdot 2\pi \int_{0}^{1} dt\, t^{-\frac{1}{2}}(1-t)^j \\
&= |N|^2 \cdot 2\pi \cdot \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(j+1)}{\Gamma(j+\frac{3}{2})} \\
&= |N|^2 \cdot \frac{4\pi(2^j j!)^2}{(2j+1)!}
\end{aligned}
\tag{2.4.15}
$$

但し，2 行目で積分変数を θ から $\cos\theta$ に変え，また ϕ 積分も実行し，3 行目で被積分関数が $\cos\theta$ の偶関数である事を使って積分範囲を 0 から 1 の半分にして 2 を掛け，4 行目で $t=\cos^2\theta$ と変数変換しました．また，5 行目の等号は次の Euler のベータ関数の積分公式の $(p,q)=(\frac{1}{2},j+1)$ の場合から従います:

$$
B(p,q)=\int_0^1 dt\, t^{p-1}(1-t)^{q-1}=\frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)} \quad \text{for} \quad \mathrm{Re}\,p>0 \ \ \& \ \ \mathrm{Re}\,q>0 \tag{2.4.16}
$$

最後の等号はガンマ関数の公式 $\Gamma(\frac{1}{2})=\sqrt{\pi}$, $\Gamma(j+1)=j!$, $\Gamma(j+\frac{3}{2})=(j+\frac{1}{2})(j-\frac{1}{2})\cdots\frac{1}{2}\Gamma(\frac{1}{2})=\frac{(2j+1)!}{2^{2j+1}j!}\sqrt{\pi}$ を代入すれば得られます．従って，規格化条件(2.4.14)が成り立つ為には $|N|=\frac{1}{2^j j!}\sqrt{\frac{(2j+1)!}{4\pi}}$ でなければなりません．一般性を失う事無く N は正の実数と出来るので，以下では N を次の様に選ぶ事にしましょう:

$$
N=\frac{1}{2^j j!}\sqrt{\frac{(2j+1)!}{4\pi}} \tag{2.4.17}
$$

これで規格化因子が決まりました．

③ 上で求めた $Y_{j,-j}$ に L_+ を $j+m$ 回作用させて $Y_{jm}=\frac{1}{\hbar^{j+m}}\sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}}(L_+)^{j+m}Y_{j,-j}$ を構成する

以上の結果を用いて Y_{jm} を求めましょう．これはこの節の冒頭で述べた一般論から，$Y_{jm}=\frac{1}{\hbar^{j+m}}\sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}}(L_+)^{j+m}Y_{j,-j}$ を計算する事で求まります．式(2.4.8)と式(2.4.13)を使ってまず $\frac{1}{\hbar^{j+m}}(L_+)^{j+m}Y_{j,-j}$ を計算すると，次の様になります:

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{\hbar^{j+m}}(L_+)^{j+m}Y_{j,-j}(\theta,\phi) \\
&= \mathrm{e}^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\mathrm{e}^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\cdots\mathrm{e}^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\mathrm{e}^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)N(\sin\theta)^j\,\mathrm{e}^{-ij\phi} \\
&= N\,\mathrm{e}^{im\phi}\left[\mathrm{e}^{-i(m-1)\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\mathrm{e}^{i(m-1)\phi}\right]\left[\mathrm{e}^{-i(m-2)\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\mathrm{e}^{i(m-2)\phi}\right] \\
&\quad\times\cdots\times\left[\mathrm{e}^{-i(1-j)\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\mathrm{e}^{i(1-j)\phi}\right]\left[\mathrm{e}^{-i(-j)\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\mathrm{e}^{i(-j)\phi}\right](\sin\theta)^j \\
&= N\,\mathrm{e}^{im\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-(m-1)\cot\theta\right)\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-(m-2)\cot\theta\right) \\
&\quad\times\cdots\times\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-(1-j)\cot\theta\right)\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-(-j)\cot\theta\right)(\sin\theta)^j \\
&= N\,\mathrm{e}^{im\phi}\left[(\sin\theta)^{m-1}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta)^{-(m-1)}\right]\left[(\sin\theta)^{m-2}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta)^{-(m-2)}\right] \\
&\quad\times\cdots\times\left[(\sin\theta)^{1-j}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta)^{-1+j}\right]\left[(\sin\theta)^{-j}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta)^{j}\right](\sin\theta)^j \\
&= N\,\mathrm{e}^{im\phi}(\sin\theta)^m\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\cdots\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)(\sin\theta)^{2j} \\
&= N\,\mathrm{e}^{im\phi}(\sin\theta)^m\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)^{j+m}(\sin\theta)^{2j}
\end{aligned}
\tag{2.4.18}
$$

但し，2 番目と 3 番目の等号は第1.2節でも使った微分演算子に対して成り立つ公式(1.2.3)から従います．(但し，2 番目の等号に関しては一番右に ϕ に依存した関数が来ないので，$\mathrm{e}^{-i(-j)\phi}\,\partial_\phi\,\mathrm{e}^{i(-j)\phi}=\partial_\phi-ij$ 等とはならず，単に $\mathrm{e}^{-i(-j)\phi}\,\partial_\phi\,\mathrm{e}^{i(-j)\phi}=-ij$ となります．) ここで，新たな変数 ξ を次の様に導入しましょう:

$$
\xi=\cos\theta \quad (0\le\theta\le\pi) \tag{2.4.19}
$$

すると，$\frac{\partial}{\partial\theta} = \frac{\partial\xi}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\xi} = -\sin\theta\frac{\partial}{\partial\xi}$ なので次が成り立ちます:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} = -\frac{\partial}{\partial\xi} \tag{2.4.20}$$

この変数 ξ を使うと，$0 \le \theta \le \pi$ に対しては $\sin\theta = \sqrt{1-\cos^2\theta} = \sqrt{1-\xi^2}$ と書けるので，結局 $Y_{jm}(\theta,\phi)$ は次の様に書き表されます:

$$\begin{aligned} Y_{jm}(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}}\cdot\frac{1}{\hbar^{j+m}}(L_+)^{j+m}Y_{j,-j}(\theta,\phi) \\ &= \sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}}\cdot\frac{1}{2^j j!}\sqrt{\frac{(2j+1)!}{4\pi}}\,\mathrm{e}^{im\phi}(1-\xi^2)^{m/2}\left(-\frac{d}{d\xi}\right)^{j+m}(1-\xi^2)^j \\ &= \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}\frac{(j-m)!}{(j+m)!}}\,\mathrm{e}^{im\phi}\,P_{jm}(\xi) \end{aligned} \tag{2.4.21}$$

但し，2 行目で規格化因子の具体的表式(2.4.17)を使いました．また，最後の等号で現れた $P_{jm}(\xi)$ は ξ の $2j-(j+m)+m=j$ 次多項式で，次式で定義されます:

$$P_{jm}(\xi) = \frac{(-1)^{j+m}}{2^j j!}(1-\xi^2)^{m/2}\frac{d^{j+m}}{d\xi^{j+m}}(1-\xi^2)^j \tag{2.4.22}$$

式(2.4.21)で定義される $Y_{jm}(\theta,\phi)$ を**球面調和関数 (spherical harmonics)**，式(2.4.22)で定義される $P_{jm}(\xi)$ を **Legendre 陪多項式 (associated Legendre polynomial)** と呼びます．

以上で固有値方程式(2.4.9a)(2.4.9b)の規格化された解が求まりました．結局，調和振動子の時と同様，連立 1 階微分方程式(2.4.11a)(2.4.11b)さえ解けば，後は適当に微分をして行く事で全てが求まる，という構造になっている事に注意しましょう．

さて，ここで球面調和関数の周期性に関して 1 つ注意を与えておきましょう．上の表式(2.4.21)は任意の $j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots\}$ に対する方程式(2.4.9a)(2.4.9b)の解を与えますが，j が半整数の時は ϕ に関して 2π 周期では無く 4π 周期になります．実際，次が成り立ちます:

$$\begin{aligned} Y_{jm}(\theta,\phi+2\pi) &= \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}\frac{(j-m)!}{(j+m)!}}\,\mathrm{e}^{im(\phi+2\pi)}\,P_{jm}(\cos\theta) \\ &= \mathrm{e}^{i2m\pi}\,Y_{jm}(\theta,\phi) \\ &= (-1)^{2m}Y_{jm}(\theta,\phi) \end{aligned} \tag{2.4.23}$$

j が半整数の時は m も半整数なので，$j \in \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \cdots\}$ の時は ϕ 方向に関して 2π 周期性では無く 4π 周期性を示す事が分かります．これは前節最後で議論した「j が半整数の時は $SO(3)$ の 2 価表現を与える」という事と本質的に同じです．但し，ここでの議論は「ϕ 方向に関して 2π 周期性を示さないから駄目だ」と言っている訳ではありません．どういう周期性を示すべきか，と言うのは波動関数にどういう境界条件を課すのか，という事に依存し，どういう境界条件が課せるのか，と言うのは微分演算子 $\{L_1, L_2, L_3\}$ が正しくエルミート演算子となる様な境界条件であれば基本的には全く問題ありません．エルミート性の要請から複数の境界条件が許される場合は，それぞれの境界条件が異なる量子力学系を記述するというだけの話になります．しかし，多くの具体的模型 (例えば水素原子) では周期的境界条件を課すので，以下では最も基本的な j が整数の場合を考える事にしましょう．

Legendre 陪多項式の導出

さて，球面調和関数には幾つかの重要な性質があって，特にパリティ変換や複素共軛の下での変換性が重要です．しかし，これらの変換性を知るには Legendre 陪多項式の具体的表式を知っておく必要があるので，まずはこれを求めておきましょう．以下，j が整数の場合のみを考えます．

Legendre 陪多項式は式(2.4.22)で定義される訳ですが，これの具体的表式は微分 $\frac{d^{j+m}}{d\xi^{j+m}}(1-\xi^2)^j$ を計算すれば求まります．第1.2節のエルミート多項式の場合でもやった様に，この様な微分は Cauchy の積分公式(1.2.14)を使って計算するのが簡単です[*17]．式(1.2.15)に

[*17] 実際は単に微分を計算したいだけなら Cauchy の積分公式を使うよりも 2 項展開 $(1-\xi^2)^j = \sum_{k=0}^{j}\binom{j}{k}(-1)^{j-k}\xi^{2(j-k)}$ を用いた方が簡単です．これを使うと Legendre 陪多項式(2.4.22)は次の様に書き表されます:

$$P_{jm}(\xi) = \frac{(-1)^{j+m}}{2^j j!}(1-\xi^2)^{m/2}\sum_{k=0}^{j}\binom{j}{k}(-1)^{j-k}\frac{d^{j+m}}{d\xi^{j+m}}\xi^{2j-2k} = (-1)^m(1-\xi^2)^{m/2}\sum_{k=0}^{[\frac{j-m}{2}]}\frac{(-1)^k}{2^k}\frac{(2j-2k-1)!!}{k!(j-m-2k)!}\xi^{j-m-2k}$$

倣って計算すると，次の様になります:

$$\begin{aligned}
\frac{d^{j+m}}{d\xi^{j+m}}(1-\xi^2)^j &= (-1)^j \frac{d^{j+m}}{d\xi^{j+m}}\left[(\xi-1)^j(\xi+1)^j\right] \\
&= (-1)^j (j+m)! \oint_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{(z-1)^j(z+1)^j}{(z-\xi)^{j+m+1}} \\
&= (-1)^j (j+m)! \oint_{C'} \frac{dz}{2\pi i} \frac{(z+\xi-1)^j(z+\xi+1)^j}{z^{j+m+1}} \\
&= (-1)^j (j+m)! \sum_{k=0}^{j}\sum_{\ell=0}^{j} \binom{j}{k}\binom{j}{\ell} (\xi-1)^k(\xi+1)^\ell \oint_{C'} \frac{dz}{2\pi i} z^{(j-k)+(j-\ell)-(j+m+1)} \\
&= \begin{cases} (-1)^j (j+m)! \displaystyle\sum_{k=0}^{j-m} \binom{j}{k}\binom{j}{k+m} (\xi-1)^k(\xi+1)^{j-m-k} & \text{for} \quad m \geq 0 \\ (-1)^j (j+m)! \displaystyle\sum_{k=-m}^{j} \binom{j}{k}\binom{j}{k+m} (\xi-1)^k(\xi+1)^{j-m-k} & \text{for} \quad m \leq 0 \end{cases}
\end{aligned} \tag{2.4.24}$$

ここで，1 行目で $1-\xi^2 = -(\xi-1)(\xi+1)$ を使い，2 行目で Cauchy の積分公式(1.2.14)を使って $z=\xi$ 周りを反時計回りに回る複素 z 平面内の閉経路 C(図1.1a参照) に沿った積分に書き換えました．また，3 行目では変数変換 $z \to z+\xi$ を行い，原点 $z=0$ 周りの閉経路 C'(図1.1b参照) に沿った積分に書き換えています．更に 4 行目では次の 2 項展開を使いました:[*18]

$$(z+\xi-1)^j = \sum_{k=0}^{j} \binom{j}{k} (\xi-1)^k z^{j-k} \tag{2.4.25a}$$

$$(z+\xi+1)^j = \sum_{\ell=0}^{j} \binom{j}{\ell} (\xi+1)^\ell z^{j-\ell} \tag{2.4.25b}$$

そして，式(2.4.24)の等号では次の積分結果を用いました:

$$\oint_{C'} \frac{dz}{2\pi i} z^{j-m-k-\ell-1} = \begin{cases} \delta_{\ell,j-m-k} & \text{for} \quad -m \leq k \leq j-m \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{2.4.26}$$

この積分は次の様にして導出出来ます．まず公式 $\oint_{C'} \frac{dz}{2\pi i} z^{n-1} = \delta_{n,0}$ より式(2.4.26)は $\ell = j-m-k$ の場合のみ 1 で他の場合はゼロとなります．ところで ℓ の範囲は $0 \leq \ell \leq j$ なので，$0 \leq j-m-k \leq j$ の場合のみ，即ち $-m \leq k \leq j-m$ を満たす k の場合のみ $\ell = j-m-k$ を満たす事が出来ます．これらを合わせると式(2.4.26)を得ます．次に k の範囲は元々 $0 \leq k \leq j$ なので，条件 $-m \leq k \leq j-m$ と両立するのは m が正の場合は $0 \leq k \leq j-m$ の時，m が負の場合は $-m \leq k \leq j$ の時である事に注意して ℓ に関して和を取ると，式(2.4.24)の最後の表式が得られます．

ここで，式(2.4.24)の $m \leq 0$ の場合に現れる和を少し書き換えましょう．和を取る変数 k を $k \to k-m$ と書き換えると次の様になります:

$$\begin{aligned}
\sum_{k=-m}^{j} \binom{j}{k}\binom{j}{k+m} (\xi-1)^k(\xi+1)^{j-m-k} &= \sum_{k=0}^{j+m} \binom{j}{k-m}\binom{j}{k} (\xi-1)^{k-m}(\xi+1)^{j-k} \\
&= (\xi-1)^{-m}(\xi+1)^{-m} \sum_{k=0}^{j+m} \binom{j}{k-m}\binom{j}{k} (\xi-1)^k(\xi+1)^{j+m-k} \\
&= (-1)^{-m}(1-\xi^2)^{-m} \sum_{k=0}^{j+m} \binom{j}{k-m}\binom{j}{k} (\xi-1)^k(\xi+1)^{j+m-k}
\end{aligned} \tag{2.4.27}$$

これと定義(2.4.22)及び式(2.4.24)の計算結果を用いると，最終的に Legendre 陪多項式は次の様に書き表す事が出来ます:

$$P_{jm}(\xi) = \frac{(-1)^{j+m}}{2^j j!}(1-\xi^2)^{m/2} \frac{d^{j+m}}{d\xi^{j+m}}(1-\xi^2)^j$$

但し，関係式(2.4.29)を導出するにはこの表式よりも式(2.4.28)の表式の方が便利です．

*18 $\binom{j}{k}$ は 2 項係数で，定義は $\binom{j}{k} = \frac{j!}{k!(j-k)!}$ です．紛らわしいですが 2 成分縦ベクトルではありません．$\binom{j}{k} = \binom{j}{j-k}$ に注意．

$$= \begin{cases} (-1)^m \dfrac{(j+m)!}{2^j j!}(1-\xi^2)^{+m/2} \displaystyle\sum_{k=0}^{j-m} \binom{j}{k}\binom{j}{k+m}(\xi-1)^k(\xi+1)^{j-m-k} & \text{for} \quad m \geq 0 \\ \dfrac{(j+m)!}{2^j j!}(1-\xi^2)^{-m/2} \displaystyle\sum_{k=0}^{j+m} \binom{j}{k}\binom{j}{k-m}(\xi-1)^k(\xi+1)^{j+m-k} & \text{for} \quad m \leq 0 \end{cases} \tag{2.4.28}$$

この表式から明らかですが，Legendre 陪多項式は m の正負に関わらず次の等式を満たします:

$$P_{jm}(\xi) = (-1)^m \frac{(j+m)!}{(j-m)!} P_{j,-m}(\xi), \quad \forall m \in \{-j, -j+1, \cdots, j\} \tag{2.4.29}$$

以上で準備が終わりました．以下，球面調和関数と Legendre 陪多項式の満たす重要な性質を 4 つ程列挙して終わりにしましょう:

① 規格直交性

固有ベクトル $|j,m\rangle$ を規格直交性 $\langle j,m|j',m'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$ を満たす様に作った事の帰結として，球面調和関数も次の規格直交性を満たします:

$$\int_{-1}^{1} d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, Y^*_{jm}(\theta,\phi) Y_{j'm'}(\theta,\phi) = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{2.4.30}$$

これに式(2.4.21)を代入すると，Legendre 陪多項式が次の直交関係を満たす事が分かります:

$$\int_{-1}^{1} d\xi\, P_{jm}(\xi) P_{j'm}(\xi) = \frac{2}{2j+1}\frac{(j+m)!}{(j-m)!}\delta_{jj'} \tag{2.4.31}$$

但し，$\int_0^{2\pi} d\phi\, \mathrm{e}^{-im\phi}\mathrm{e}^{im'\phi} = 2\pi\delta_{mm'}$ を使いました．

② パリティ変換の下での偶奇性

まず変数変換 $\xi \to -\xi$ の下で $\frac{d}{d\xi} \to -\frac{d}{d\xi}$ となる事に注意すると，Legendre 陪多項式(2.4.22)は次の等式を満たす事が分かります:

$$P_{jm}(-\xi) = (-1)^{j+m} P_{jm}(\xi) \tag{2.4.32}$$

これより，空間反転 $(\theta,\phi) \to (\pi-\theta, \pi+\phi)$ の下で球面調和関数は次の様に変換されます:[*19]

$$\begin{aligned} Y_{jm}(\pi-\theta,\pi+\phi) &= \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}\frac{(j-m)!}{(j+m)!}}\,\mathrm{e}^{im(\pi+\phi)} P_{jm}(-\cos\theta) \\ &= \mathrm{e}^{im\pi}(-1)^{j+m} Y_{jm}(\theta,\phi) \\ &= (-1)^j Y_{jm}(\theta,\phi) \end{aligned} \tag{2.4.33}$$

従って，球面調和関数は j が偶数の時はパリティ偶，j が奇数の時はパリティ奇である事が分かりました．

③ 複素共軛

球面調和関数は複素関数ですが，その複素共軛を取ると次の様になります:

$$\begin{aligned} Y^*_{jm}(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}\frac{(j-m)!}{(j+m)!}}\,\mathrm{e}^{-im\phi} P_{jm}(\cos\theta) \\ &= \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}\frac{(j-m)!}{(j+m)!}}\,\mathrm{e}^{-im\phi}(-1)^m \frac{(j+m)!}{(j-m)!} P_{j,-m}(\cos\theta) \\ &= (-1)^m \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}\frac{(j+m)!}{(j-m)!}}\,\mathrm{e}^{-im\phi} P_{j,-m}(\cos\theta) \\ &= (-1)^m Y_{j,-m}(\theta,\phi) \end{aligned} \tag{2.4.34}$$

但し，2 行目で式(2.4.29)を使いました．この関係式は時間反転の下での変換性を調べる時によく使います．

④ 空間回転の下での変換性

$\boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ を球座標表示での単位ベクトルとして，球面調和関数を $\boldsymbol{n}$ の関数だと思って $Y_{jm}(\boldsymbol{n})$ と書く事にしましょう．すると，固有ベクトル $|j,m\rangle$ が空間回転 $\mathsf{R} \in SO(3)$ の下で $U(\mathsf{R})|j,m\rangle = \sum_{m'=-j}^{j} |j,m'\rangle \mathsf{D}^{[j]}_{m'm}(\mathsf{R})$ と変換される事の帰結として，球面調和関数 $Y_{jm}(\boldsymbol{n})$ は空間回転の下で次の変換性を示します:

$$Y_{jm}(\mathsf{R}^{-1}\boldsymbol{n}) = \sum_{m'=-j}^{j} Y_{jm'}(\boldsymbol{n}) \mathsf{D}^{[j]}_{m'm}(\mathsf{R}) \tag{2.4.35}$$

2.5 Clebsch-Gordan 分解

これまで $\boldsymbol{J}^2$ と J_3 の同時固有状態 $|j,m\rangle$ を考え，このベクトルの空間回転の下での変換則(2.3.1)等を調べてきました．この節では，この変換則(2.3.1)に従って変換する 2 つのベクトル $|j_1,m_1\rangle \in \mathcal{H}^{[j_1]}$ と $|j_2,m_2\rangle \in \mathcal{H}^{[j_2]}$ を持って来て，これらの**テンソル積 (tensor product)** で作られる次の様なベクトルを考えます:

$$|j_1,m_1\rangle \otimes |j_2,m_2\rangle \in \mathcal{H}^{[j_1]} \otimes \mathcal{H}^{[j_2]} \tag{2.5.1}$$

以下，1 番目のベクトル $|j_1,m_1\rangle$ に作用する角運動量演算子を $\boldsymbol{J}_1 = (J_{1,1}, J_{1,2}, J_{1,3})$，2 番目のベクトル $|j_2,m_2\rangle$ に作用する角運動量演算子を $\boldsymbol{J}_2 = (J_{2,1}, J_{2,2}, J_{2,3})$ と表す事にしましょう．すると，I を恒等演算子として全角運動量は $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 \otimes I + I \otimes \boldsymbol{J}_2$ で与えられます．$j_1, j_2 \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots\}$ を固定した時，m_1 と m_2 の取り得る値はそれぞれ $2j_1+1$ 通りと $2j_2+1$ 通りなので，式(2.5.1)の様なベクトルは全部で $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 個あります．この $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 個のベクトルを基底とするベクトル空間 $\mathcal{H}^{[j_1]} \otimes \mathcal{H}^{[j_2]}$ は，実は全角運動量 $\boldsymbol{J}$ の大きさが定まっておらず，次の様な $\boldsymbol{J}$ の大きさが定まった部分空間の直和から成っています:

$$\begin{aligned}(2j_1+1)(2j_2+1) \text{ 次元空間} = &(\text{全角運動量の大きさが } j_1+j_2 \text{ の } 2(j_1+j_2)+1 \text{ 次元空間})\\ &\oplus (\text{全角運動量の大きさが } j_1+j_2-1 \text{ の } 2(j_1+j_2-1)+1 \text{ 次元空間})\\ &\oplus (\text{全角運動量の大きさが } j_1+j_2-2 \text{ の } 2(j_1+j_2-2)+1 \text{ 次元空間})\\ &\oplus \cdots\\ &\oplus (\text{全角運動量の大きさが } |j_1-j_2| \text{ の } 2|j_1-j_2|+1 \text{ 次元空間})\end{aligned} \tag{2.5.2}$$

ここで，右辺の部分空間の次元をそれぞれ足すと，左辺の元々の空間次元 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ に一致する事に注意しましょう:

$$\begin{aligned}\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) &= (2|j_1-j_2|+1) + (2(|j_1-j_2|+1)+1) + \cdots + (2(j_1+j_2)+1)\\ &= (j_1+j_2+1+|j_1-j_2|)\,(j_1+j_2+1-|j_1-j_2|)\\ &= (2j_1+1)(2j_2+1)\end{aligned} \tag{2.5.3}$$

角運動量の大きさだけに注目して，上の分解(2.5.2)を次の様に書く事もあります:

$$j_1 \otimes j_2 = (j_1+j_2) \oplus (j_1+j_2-1) \oplus (j_1+j_2-2) \oplus \cdots \oplus |j_1-j_2| \tag{2.5.4}$$

いわゆる**角運動量の合成 (addition of angular momenta)** とはこの様な分解を行う事で，式(2.5.2)の分解を **Clebsch-Gordan 分解**と呼びます．数学的には「既約表現のテンソル積を既約表現の直和に分解する」というもので，量子力学では色々な場面で登場します．例えば 1 粒子系では次の様な所で Clebsch-Gordan 分解が登場します:

① 1 粒子系の軌道角運動量とスピン角運動量の合成

一般に電子や陽子，中性子などの粒子はスピンの自由度を持っていますが，このスピン自由度も考慮すると，粒子の波動関数は空間座標依存性を記述する軌道波動関数と，スピン自由度を記述するスピン波動関数のテンソル積で表されます:

$$(\text{軌道波動関数}) \otimes (\text{スピン波動関数}) \tag{2.5.5}$$

$\boldsymbol{L}$ を軌道角運動量，$\boldsymbol{S}$ をスピン角運動量とすると，粒子の全角運動量 $\boldsymbol{J}$ は $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} \otimes I + I \otimes \boldsymbol{S}$ となります．この 1 粒子系の Hilbert 空間を全角運動量 $\boldsymbol{J}$ の大きさで分解する時に行うのが Clebsch-Gordan 分解です．

② 1 粒子系のスピン軌道相互作用

空間回転対称性を持つ系では全角運動量 $\boldsymbol{J}$ は保存してハミルトニアン H と交換しますが，一般には軌道角運動量 $\boldsymbol{L}$ やスピン角運動量 $\boldsymbol{S}$ それぞれが H と交換するとは限りません．その典型例がスピン軌道相互作用 $H \propto \boldsymbol{L} \otimes \boldsymbol{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 \otimes I - I \otimes \boldsymbol{S}^2)$ を持つ系で，この様な系では $\{\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{L}^2 \otimes I, I \otimes \boldsymbol{S}^2, J_3\}$ が H と交換する演算子の最大の組なので，状態ベクトルをこれらの同時固有状態で展開した方が便利です．これは系の Hilbert 空間を全角運動量 $\boldsymbol{J}$ の大きさで分解する Clebsch-Gordan 分解に他なりません．

[*19] 空間反転 $(x,y,z) \to (-x,-y,-z)$ は球座標で表すと $(r,\theta,\phi) \to (r,\pi-\theta,\pi+\phi)$ になります．実際，定義(2.4.5)を用いればこれが空間反転を与える事は簡単に分かります．

さて，以下では式(2.5.2)に示した分解を説明して行きます．まず記法の簡略化の為，式(2.5.1)で与えた 2 つのベクトルのテンソル積を次の様に書く事にします:

$$|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle := |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \tag{2.5.6}$$

定義から明らかな様に，このベクトルは $\{\boldsymbol{J}_1^2 \otimes I, J_{1,3} \otimes I, I \otimes \boldsymbol{J}_2^2, I \otimes J_{2,3}\}$ の同時固有状態で，次の固有値方程式を満たします:[*20]

$$(\boldsymbol{J}_1^2 \otimes I)|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \tag{2.5.7a}$$
$$(J_{1,3} \otimes I)|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = m_1\hbar|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \tag{2.5.7b}$$
$$(I \otimes \boldsymbol{J}_2^2)|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \tag{2.5.7c}$$
$$(I \otimes J_{2,3})|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = m_2\hbar|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \tag{2.5.7d}$$

また，昇降演算子 $J_{1,\pm} \otimes I$ と $I \otimes J_{2,\pm}$ は次の様に作用します:

$$(J_{1,\pm} \otimes I)|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = \hbar\sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)}|j_1, m_1 \pm 1; j_2, m_2\rangle \tag{2.5.8a}$$
$$(I \otimes J_{2,\pm})|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = \hbar\sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)}|j_1, m_1; j_2, m_2 \pm 1\rangle \tag{2.5.8b}$$

次に全角運動量の 2 乗 $\boldsymbol{J}^2$ の固有状態を考えましょう．まず，$\boldsymbol{J}^2$ は次で与えられます:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2 &= J_i J_i \\ &= (J_{1,i} \otimes I + I \otimes J_{2,i})\,(J_{1,i} \otimes I + I \otimes J_{2,i}) \\ &= J_{1,i}J_{1,i} \otimes I + 2J_{1,i} \otimes J_{2,i} + I \otimes J_{2,i}J_{2,i} \\ &= \boldsymbol{J}^1 \otimes I + 2\boldsymbol{J}_1 \otimes \boldsymbol{J}_2 + I \otimes \boldsymbol{J}_2^2\end{aligned} \tag{2.5.9}$$

上の表式の最終行 2 項目から明らかですが，$\boldsymbol{J}^2$ は $\boldsymbol{J}_1^2 \otimes I + I \otimes \boldsymbol{J}_2^2$ では無い事に注意しましょう．この $\boldsymbol{J}^2$ と交換する演算子は $\boldsymbol{J}_1^2 \otimes I$ と $I \otimes \boldsymbol{J}_2^2$，それから $J_i = J_{1,i} \otimes I + I \otimes J_{2,i}$ のどれか 1 つなので，以下では $\{\boldsymbol{J}_1^2 \otimes I, I \otimes \boldsymbol{J}_2^2, \boldsymbol{J}^2, J_3\}$ の同時固有状態を考える事にします．この同時固有状態を $|j_1, j_2; j, m\rangle$ と書く事にすると，これは次の固有値方程式を満たします:

$$(\boldsymbol{J}_1^2 \otimes I)|j_1, j_2; j, m\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2|j_1, j_2; j, m\rangle \tag{2.5.10a}$$
$$(I \otimes \boldsymbol{J}_2^2)|j_1, j_2; j, m\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2|j_1, j_2; j, m\rangle \tag{2.5.10b}$$
$$\boldsymbol{J}^2|j_1, j_2; j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j_1, j_2; j, m\rangle \tag{2.5.10c}$$
$$J_3|j_1, j_2; j, m\rangle = m\hbar|j_1, j_2; j, m\rangle \tag{2.5.10d}$$

また，容易に確かめられる様に，全角運動量の 2 乗は $\boldsymbol{J}^2 = J_\mp J_\pm + J_3(J_3 \pm \hbar)$ と書けます．但し，$J_\pm = J_{1,\pm} \otimes I + I \otimes J_{2,\pm}$ で，これは交換関係 $[J_3, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm$ を満たすので J_3 の固有値 $m\hbar$ を $\pm\hbar$ だけ上げ下げする昇降演算子です．第2.2節と全く同様の議論を行うと，この昇降演算子 $J_\pm$ は上の同時固有状態に次の様に作用する事が言えます:

$$J_\pm|j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}|j_1, j_2; j, m \pm 1\rangle \tag{2.5.11}$$

この昇降演算子を使うと，j を 1 つ与えた時，m の取り得る値は $\{j, j-1, \cdots, -j\}$ の $2j+1$ 通りである事が言えます．また，j は必ず整数か半整数でなければならない事も言えます．これらも第2.2節の議論と全く同じ様にして証明出来ます．

以上，2 種類のベクトル $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ と $|j_1, j_2; j, m\rangle$ を導入しましたが，今から明らかにしたいのはこれらの間の関係で，特に次の 2 つの事柄を明らかにしなければなりません:

① $\boldsymbol{j_1}$ と $\boldsymbol{j_2}$ が与えられた時，$\boldsymbol{j}$ はどんな値を取るか

② $\boldsymbol{\{j_1, j_2, j, m\}}$ が与えられた時，$\boldsymbol{|j_1, j_2; j, m\rangle}$ は $\boldsymbol{|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle}$ を使ってどの様に表されるか

今から見て行く様に，j は勝手な値は取れず，j_1 と j_2 で決まる或る定まった値しか取れません．この事を見る前に，まず上の②を考え

[*20] **テンソル積の演算について**．一般に，演算子 $A \otimes B$ のベクトル $|a\rangle \otimes |b\rangle$ への作用は次で定義されます:

$$(A \otimes B)(|a\rangle \otimes |b\rangle) := A|a\rangle \otimes B|b\rangle$$

また，演算子 $A_1 \otimes B_1$ と $A_2 \otimes B_2$ の積は次で定義されます:

$$(A_1 \otimes B_1)(A_2 \otimes B_2) := A_1A_2 \otimes B_1B_2$$

また，2 つのベクトル $|a_1\rangle \otimes |b_1\rangle$ と $|a_2\rangle \otimes |b_2\rangle$ の内積 $(\ \cdot\ ,\ \cdot\ )$ は次で定義されます:

$$(|a_1\rangle \otimes |b_1\rangle, |a_2\rangle \otimes |b_2\rangle) := (|a_1\rangle, |b_1\rangle)(|a_2\rangle, |b_2\rangle)$$

ブラケット記法で書くとこの内積は $(\langle a_1| \otimes \langle b_1|)(|a_2\rangle \otimes |b_2\rangle) = \langle a_1|a_2\rangle\langle b_1|b_2\rangle$ です．

ておきましょう．$|j_1,m_1;j_2,m_2\rangle$ は正規直交基底を成すので，$|j_1,j_2;j,m\rangle$ は必ず次の様な線型結合で書き表されます:

$$|j_1,j_2;j,m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1,m_1;j_2,m_2\rangle C_{j_1j_2j}(m_1,m_2,m) \tag{2.5.12}$$

但し，$C_{j_1j_2,j}(m_1,m_2,m)$ は線型結合の係数で，これは次の内積で与えられます:

$$C_{j_1j_2j}(m_1,m_2,m) = \langle j_1,m_1;j_2,m_2|j_1,j_2;j,m\rangle \tag{2.5.13}$$

実際，式(2.5.12)とベクトル $|j_1,m_1;j_2,m_2\rangle$ の内積を取れば $\langle j_2,m_1;j_2,m_2|j_1,j_2;j,m\rangle = C_{j_1,j_2j}(m_1,m_2,m)$ が出て来ます．この線型結合の係数 $C_{j_1j_2j}(m_1,m_2,m)$ を **Clebsch-Gordan 係数**と呼び，これが分かれば上の②が解けた事になります．この Clebsch-Gordan 係数には幾つか一般的な性質があるので，まずこれらを列挙しておきましょう:

① **$C_{j_1j_2j}(m_1,m_2,m)$ は $m = m_1 + m_2$ の場合のみ非ゼロ**

まず次の量を考えてみましょう:

$$\langle j_1,m_2;j_2,m_2|J_3|j_1,j_2;j,m\rangle \tag{2.5.14}$$

式(2.5.10d)及び Clebsch-Gordan 係数の定義(2.5.13)よりこれは次の様に書けます:

$$\begin{aligned} \text{式(2.5.14)} &= m\hbar\langle j_1,m_2;j_2,m_2|j_1,j_2;j,m\rangle \\ &= m\hbar C_{j_1j_2j}(m_1,m_2m) \end{aligned} \tag{2.5.15}$$

一方，$J_3 = J_{1,3}\otimes I + I\otimes J_{2,3}$ なので式(2.5.7b)と(2.5.7d)より $J_3|j_1,m_1;j_2,m_2\rangle = (m_1+m_2)\hbar|j_1,m_1;j_2,m_2\rangle$ となります．これより式(2.5.14)は次の様にも書けます:

$$\begin{aligned} \text{式(2.5.14)} &= (m_1+m_2)\hbar\langle j_1,m_2;j_2,m_2|j_1,j_2;j,m\rangle \\ &= (m_1+m_2)\hbar C_{j_1j_2j}(m_1,m_2m) \end{aligned} \tag{2.5.16}$$

よって，式(2.5.15)と(2.5.16)を等号で結ぶと次の等式が得られます:

$$(m-m_1-m_2)C_{j_1j_2j}(m_1,m_2,m) = 0 \tag{2.5.17}$$

これより $m = m_1+m_2$ でなければ Clebsch-Gordan 係数はゼロである事が分かりました．

② **漸化式(2.5.8a)(2.5.8b)(2.5.11)の帰結として $C_{j_1j_2j}(m_1,m_2,m)$ も或る漸化式を満たす**

今度は次の量を考えてみましょう:

$$\langle j_1,m_1;j_2,m_2|J_\pm|j_1,j_2;j,m\rangle \tag{2.5.18}$$

まず式(2.5.11)よりこれは次の様になります:

$$\begin{aligned} \text{式(2.5.18)} &= \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\langle j_1,m_1;j_2,m_2|j_1,j_2;j,m\pm1\rangle \\ &= \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}C_{j_1j_2j}(m_1,m_1,m\pm1) \end{aligned} \tag{2.5.19}$$

一方，$J_\pm = J_{1,\pm}\otimes I + I\otimes J_{2,\pm}$ なので式(2.5.8a)と(2.5.8b)より $J_\mp|j_1,m_1;j_2,m_2\rangle = \hbar\sqrt{(j_1\pm m_1)(j_1\mp m_1+1)}|j_1,m_1\mp1;j_2,m_2\rangle + \hbar\sqrt{(j_2\pm m_2)(j_2\mp m_2+1)}|j_1,m_1;j_2,m_2\pm1\rangle$ が成り立ちます．従って，式(2.5.18)は次の様にも書けます:

$$\begin{aligned} \text{式(2.5.18)} &= \hbar\sqrt{(j_1\pm m_1)(j_1\mp m_1+1)}\langle j_1,m_1\mp1;j_2,m_2|j_1,j_2;j,m\rangle \\ &\quad + \hbar\sqrt{(j_2\pm m_2)(j_2\mp m_2+1)}\langle j_1,m_1;j_2,m_2\mp1|j_1,j_2;j,m\rangle \\ &= \hbar\sqrt{(j_1\pm m_1)(j_1\mp m_1+1)}C_{j_1j_2j}(m_1\mp1,m_2,m) \\ &\quad + \hbar\sqrt{(j_2\pm m_2)(j_2\mp m_2+1)}C_{j_1j_2j}(m_1,m_2\mp1,m) \end{aligned} \tag{2.5.20}$$

よって，式(2.5.19)と(2.5.20)を等号で結ぶと，Clebsch-Gordan 係数は次の漸化式を満たす事が分かります:

$$\begin{aligned} \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}C_{j_1j_2j}(m_1,m_2,m\pm1) &= \sqrt{(j_1\pm m_1)(j_1\mp m_1+1)}C_{j_1j_2j}(m_1\mp1,m_2,m) \\ &\quad + \sqrt{(j_2\pm m_2)(j_2\mp m_2+1)}C_{j_1j_2j}(m_1,m_2\mp1,m) \end{aligned} \tag{2.5.21}$$

後は適当な初期条件の下で上の漸化式を解けば，原理的には Clebsch-Gordan 係数は求める事が出来ます．

さて，次に先程の①で述べた「j_1 と j_2 が与えられた時，j はどんな値を取るか」という問いを考えましょう．これを解くには上で出て来た $m = m_1 + m_2$ を使います．j_1 と j_2 が与えられた時，m_1 と m_2 の取り得る値はそれぞれ $\{j_1, j_1 - 1, \cdots, -j_1\}$ と $\{j_2, j_2-1, \cdots, -j_2\}$ なので，これより m の取り得る値は $\{j_1+j_2, j_1+j_2-1, \cdots, -j_1-j_2\}$ となる事が分かります．但し，$m = m_1+m_2$ なので一般には m の値を 1 つ定めてもそれを与える (m_1, m_2) の組み合わせは 1 通りではありません．例えば $m = j_1 + j_1$ の時はこれを与える (m_1, m_2) の組み合わせは (j_1, j_2) の 1 通りですが，$m = j_1 + j_2 - 1$ の時は $(j_1 - 1, j_2)$ と $(j_1, j_2 - 1)$ の 2 通りあります．Clebsch-Gordan 分解を理解する最初のステップはこの様な組み合わせが何通りあるのか網羅する事で，これは地道に数え上げて行くのが一番手っ取り早いです．以下，一般性を失う事無く $j_1 \geq j_2$ としましょう．この時，$m \in \{j_1 + j_2, \cdots, -j_1 - j_2\}$ の値を与える全ての可能な (m_1, m_2) の組み合わせを数え上げていくと，最終的に次の表の様になります:

$m = m_1 + m_2$ の値	左の m を与える (m_1, m_2) の組み合わせ					左の組合せの数
$m = j_1 + j_2$	(j_1, j_2)					1
$m = j_1 + j_2 - 1$	$(j_1 - 1, j_2)$	$(j_1, j_2 - 1)$				2
⋮	⋮	⋮				⋮
$m = j_1 - j_2 + 1$	$(j_1 - 2j_2 + 1, j_2)$	$(j_1 - 2j_2 + 2, j_2 - 1)$	$\cdots$	$(j_1, -j_2 + 1)$		$2j_2$
$m = j_1 - j_2$	$(j_1 - 2j_2, j_2)$	$(j_1 - 2j_2 + 1, j_2 - 1)$	$\cdots$	$(j_1 - 1, -j_2 + 1)$	$(j_1, -j_2)$	$2j_2 + 1$
⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮
$m = 0$	$(-j_2, j_2)$	$(-j_2 + 1, j_2 - 1)$	$\cdots$	$(j_2 - 1, -j_2 + 1)$	$(j_2, -j_2)$	$2j_2 + 1$
⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮
$m = -j_1 + j_2$	$(-j_1, j_2)$	$(-j_1 + 1, j_2 - 1)$	$\cdots$	$(-j_1 + 2j_2 - 1, -j_2 + 1)$	$(-j_1 + 2j_2, -j_2)$	$2j_2 + 1$
$m = -j_1 + j_2 - 1$	$(-j_1, j_2 - 1)$	$(-j_1 + 1, j_2 - 2)$	$\cdots$	$(-j_1 + 2j_2 - 1, -j_2)$		$2j_2$
⋮	⋮	⋮				⋮
$m = -j_1 - j_2 + 1$	$(-j_1, -j_2 + 1)$	$(-j_1 + 1, -j_2)$				2
$m = -j_1 - j_2$	$(-j_1, -j_2)$					1

簡単に確認出来るので計算は書きませんが，右に書いた組み合わせの数の総和は $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ になる事に注意しましょう．

さて，上の表から明らかですが，m の最大値 $m = j_1 + j_2$ を与える組み合わせは $(m_1, m_2) = (j_1, j_2)$ の 1 通りしかありません．また，この最大の固有値を与える固有ベクトルは $|j_1, j_1; j_2, j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle$ です．ところで，一般に角運動量の第 3 成分の最大固有値を角運動量の大きさと呼ぶので，上の固有ベクトルはスピン $j = j_1 + j_2$ 表現の $m = j_1 + j_2$ に対応する事が分かります．よって，次の様に同一視します:

$$|j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle \tag{2.5.22}$$

これは Clebsch-Gordan 係数で言うと次の様になります:

$$C_{j_1 j_2, j_1+j_2}(m_1, m_2, j_1 + j_2) = \delta_{m_1, j_1}\delta_{m_2, j_2} \tag{2.5.23}$$

このベクトルに降演算子 J_- を作用させて行く事で $2(j_1 + j_2) + 1$ 個のベクトル $\{|j_1, j_2; j_1 + j_2, m\rangle\}_{m=-j_1-j_2}^{j_1+j_2}$ が作れますが，この $2(j_1 + j_2) + 1$ 個のベクトルで張られる部分空間が全角運動量 $j = j_1 + j_2$ の表現空間 $\mathcal{H}^{[j_1+j_2]}$ を与える事になります．

次に上の表で $m = j_1 + j_2 - 1$ の場合を考えましょう．この固有値を与えるベクトルは $|j_1, j_1 - 1; j_2, j_2\rangle = |j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle$ と $|j_1, j_1; j_2, j_2-1\rangle = |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2-1\rangle$ の 2 つですが，これらの線型結合で得られる線型独立なベクトル 2 つのうちの 1 つが上の方法で構成される表現空間 $\mathcal{H}^{[j_1+j_2]}$ の元になっています．まずこれを見ておきましょう．公式 $|j_1, j_2; j, m\rangle = \frac{1}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{(j-m)(j-m+1)}}J_-|j_1, j_2; j, m+1\rangle$ を使って $|j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$ を計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned}
|j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \frac{1}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{2(j_1 + j_2)}}J_-|j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{2(j_1 + j_2)}}\left(J_{1,-} \otimes I + I \otimes J_{2,-}\right)|j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{2(j_1 + j_2)}}\left(\hbar\sqrt{2j_1}|j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle + \hbar\sqrt{2j_2}|j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2 - 1\rangle\right) \\
&= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}|j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}|j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2 - 1\rangle
\end{aligned} \tag{2.5.24}$$

一方，簡単に確かめられる様に線型結合 $\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}|j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}|j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2 - 1\rangle$ は上のベクトルとは直交する単位ベクトルで，また J_+ を作用させるとゼロになります．このベクトルの J_3 の固有値は $j_1 + j_2 - 1$ なので，このベクトルはスピン

$j=j_1+j_2-1$ 表現の $m=j_1+j_2-1$ に対応することが分かります．よって，次の様に同一視します:

$$|j_1,j_2;j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle=\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}|j_1,j_1-1\rangle\otimes|j_2,j_2\rangle-\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}|j_1,j_1\rangle\otimes|j_2,j_2-1\rangle \tag{2.5.25}$$

このベクトルに降演算子 J_- を作用させて行く事で $2(j_1+j_2-1)+1$ 個のベクトル $\{|j_1,j_2;j_1+j_2-1,m\rangle\}_{m=-j_1-j_2+1}^{j_1+j_2-1}$ が作れますが，この $2(j_1+j_2-1)+1$ 個のベクトルで張られる部分空間が全角運動量 $j=j_1+j_2-1$ の表現空間 $\mathcal{H}^{[j_1+j_2-1]}$ を与える事になります．

以下，同様の手続きをずっと繰り返すと，最終的に $j=j_1+j_2$ から $j=j_1-j_2$ までの表現空間が構成出来る事が分かります．ここまでは $j_1\geq j_2$ の場合でやりましたが，$j_2\geq j_1$ の場合は単に上の議論の j_1 と j_2 を入れ替えれば良く，一般には $j=j_1+j_2$ から $j=|j_1-j_2|$ までの互いに直交する表現空間に分解されます．これが式(2.5.2)で示した Clebsch-Gordan 分解です．

例: $\ell\otimes\frac{1}{2}=(\ell+\frac{1}{2})\oplus(\ell-\frac{1}{2})$

以上，証明とは言えないまでも，割と一般的な議論をやってきたのでここで 1 つ Clebsch-Gordan 分解の具体例を挙げておきましょう．以下では，軌道角運動量の大きさが ℓ でスピン角運動量の大きさが $\frac{1}{2}$ の 1 粒子系を想定して，$j_1=\ell$ 及び $j_2=\frac{1}{2}$ の場合を考えてみます．この場合の Clebsch-Gordan 分解は $(2\ell+1)\times 2$ 次元空間が $2(\ell+\frac{1}{2})+1$ 次元空間と $2(\ell-\frac{1}{2})+1$ 次元空間に直交分解されるというもので，式(2.5.4)の記法を用いると次の様になります:[*21]

$$\ell\otimes\tfrac{1}{2}=(\ell+\tfrac{1}{2})\oplus(\ell-\tfrac{1}{2}) \tag{2.5.26}$$

まず，$j=\ell\pm\frac{1}{2}$, $m\in\{j,j-1,\cdots,-j\}$ とした時，式(2.5.12)の分解は次の様になります:

$$\begin{aligned}|\ell,\tfrac{1}{2};j,m\rangle&=\sum_{m_1=-\ell}^{\ell}\sum_{m_2=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}|\ell,m_1\rangle\otimes|\tfrac{1}{2},m_2\rangle C_{\ell,\frac{1}{2},j}(m_1,m_2,m)\\&=\sum_{m_1=-\ell}^{\ell}|\ell,m_1\rangle\otimes|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle C_{\ell,\frac{1}{2},j}(m_1,\tfrac{1}{2},m)+\sum_{m_1=-\ell}^{\ell}|\ell,m_1\rangle\otimes|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle C_{\ell,\frac{1}{2},j}(m_1,-\tfrac{1}{2},m)\\&=|\ell,m-\tfrac{1}{2}\rangle\otimes|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle C_{\ell,\frac{1}{2},j}(m-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},m)+|\ell,m+\tfrac{1}{2}\rangle\otimes|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle C_{\ell,\frac{1}{2},j}(m+\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2},m)\end{aligned} \tag{2.5.27}$$

但し，3 行目で $m_1=m-m_2$ を使いました．以下，まず $j=\ell+\frac{1}{2}$ の時の Clebsch-Gordan 係数を求めて行きましょう．これは漸化式(2.5.21)を解く事で得られます．そこで，まず漸化式(2.5.21)を以下の議論で使い易い様に書き換える事にしましょう．式(2.5.21)の両辺の m を $m\mp1$ に置き換えて，更に両辺を $\sqrt{(j\mp(m\mp1))(j\pm(m\mp1)+1)}=\sqrt{(j\pm m)(j\mp m+1)}$ で割ります．すると，漸化式(2.5.21)は次の様になります:

$$\begin{aligned}C_{j_1j_2j}(m_1,m_2,m)=&\sqrt{\frac{(j_1\pm m_1)(j_1\mp m_1+1)}{(j\pm m)(j\mp m+1)}}C_{j_1j_2j}(m_1\mp1,m_2,m\mp1)\\&+\sqrt{\frac{(j_2\pm m_2)(j_2\mp m_2+1)}{(j\pm m)(j\mp m+1)}}C_{j_1j_2j}(m_1,m_2\mp1,m\mp1)\end{aligned} \tag{2.5.28}$$

これに $j_1=\ell$, $j_2=\frac{1}{2}$, $j=\ell+\frac{1}{2}$, $m_1=m-m_2$ を代入して，$m_2=\frac{1}{2}$ の時は下側の符号，$m_2=-\frac{1}{2}$ の時は上側の符号の場合を選ぶと，任意の m に対して次が成り立つ事が分かります:

$$C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(m\mp\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2},m)=\sqrt{\frac{\ell\pm m+\frac{1}{2}}{\ell\pm m+\frac{3}{2}}}C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(m\pm\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2},m\pm1) \tag{2.5.29}$$

これを使ってまず $C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(m-\frac{1}{2},\frac{1}{2},m)$ を求めましょう．漸化式(2.5.29)の上側の符号の場合を逐次的に使って行くと次の様になります:

$$\begin{aligned}C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(m-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},m)&=\sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{\ell+m+\frac{3}{2}}}C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(m+\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},m+1)\\&=\sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{\ell+m+\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{\ell+m+\frac{3}{2}}{\ell+m+\frac{5}{2}}}C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(m+\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2},m+2)\end{aligned}$$

[*21] $\ell>0$ を仮定しています．$\ell=0$ の場合は $0\otimes\frac{1}{2}=\frac{1}{2}$ となって自明なので，ここでは考えません．

$$
\begin{aligned}
&= \sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{\ell+m+\frac{5}{2}}} C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(m+\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2},m+2) \\
&= \cdots \\
&= \sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{\ell+\ell+1}} C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(\ell,\tfrac{1}{2},\ell+\tfrac{1}{2}) \\
&= \sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}
\end{aligned}
\tag{2.5.30}
$$

但し，最終行で $C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2})=1$ を使いました．同様にして漸化式(2.5.29)の下側の符号の場合を使うと，$C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2},m)$ も次の様に求まります:

$$
\begin{aligned}
C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(m+\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2},m) &= \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{\ell-m+\frac{3}{2}}} C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(m-\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2},m-1) \\
&= \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{\ell-m+\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{3}{2}}{\ell-m+\frac{5}{2}}} C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(m-\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2},m-2) \\
&= \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{\ell-m+\frac{5}{2}}} C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(m-\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2},m-2) \\
&= \cdots \\
&= \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{\ell-(-\ell-1)}} C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(-\ell,-\tfrac{1}{2},-\ell-\tfrac{1}{2}) \\
&= \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}
\end{aligned}
\tag{2.5.31}
$$

但し，最終行で $C_{\ell,\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}}(-\ell,-\frac{1}{2},-\ell-\frac{1}{2})=1$ を使いました．以上より任意の $m\in\{\ell+\frac{1}{2},\cdots,-\ell-\frac{1}{2}\}$ に対して次が得られます:

$$
|\ell,\tfrac{1}{2};\ell+\tfrac{1}{2},m\rangle = \sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}|\ell,m-\tfrac{1}{2}\rangle\otimes|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}|\ell,m+\tfrac{1}{2}\rangle\otimes|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \tag{2.5.32}
$$

これで全角運動量 $j=\ell+\frac{1}{2}$ の状態ベクトルが構成出来ました．次に全角運動量 $j=\ell-\frac{1}{2}$ の場合の状態ベクトルを構成したい訳ですが，これは改めて Clebsch-Gordan 係数を求めるよりも式(2.5.32)と直交する単位ベクトルを考える方がずっと簡単です．答えは次の様になります:

$$
|\ell,\tfrac{1}{2};\ell-\tfrac{1}{2},m\rangle = \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}|\ell,m-\tfrac{1}{2}\rangle\otimes|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}|\ell,m+\tfrac{1}{2}\rangle\otimes|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \tag{2.5.33}
$$

但し，$m\in\{\ell-\frac{1}{2},\cdots,-\ell+\frac{1}{2}\}$ です．

参考文献

この章では物理数学の様な話題ばかり扱いましたが，3 次元特殊直交群 $SO(3)$ とその Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ の表現論は量子力学では非常に重要なので，この辺の数学にも是非慣れておきましょう．物理系の学生向けに書かれた群論・表現論の教科書は幾つもありますが，次の Anthony Zee の教科書がとても良いです:

[1] A. Zee, *Group Theory in a Nutshell for Physicists* (Princeton University Press, 2016)

この本は話題も豊富で，物理への応用も色々と書かれています．また，読んでいて非常に面白いのでお薦めです．

第 3 章

Coulomb 力で相互作用する二体系

第1章で 1 次元調和振動子の固有値問題 $H|E\rangle = E|E\rangle$ を厳密に解きましたが，この調和振動子と双璧を成す量子力学の厳密可解模型が**水素原子** (**hydrogen atom**) です．水素原子は Coulomb 力で相互作用する電子と陽子の束縛状態で，そのハミルトニアンは cgs-Gauss 単位系では次の様に与えられます:

$$H = \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2} - \frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|}$$

ここで，下付き添字 1 が付いているものは電子の位置や運動量，質量を表し，下付き添字 2 が付いているものは陽子のものを表しています．また，e は素電荷です．一般に Coulomb 力の様な中心力の下での二体問題は，重心運動と相対運動を分離する事で最終的には 1 次元半直線上の一体問題に帰着されます．水素原子の場合はこの一体問題の Schrödinger 方程式が厳密に解けるのですが，その解法は驚くほど色々なものがあります．その中でも代表的なものは次の 4 つです:

- **冪級数展開による解法**
  Schrödinger 方程式の解として冪級数解を仮定し，これを Schrödinger 方程式に代入する事で展開係数を決定して行く方法.
- **Laplace 変換による解法**[*1]
  Schrödinger 方程式の解の Laplace 変換を考える事で，微分方程式の問題を複素積分の問題に帰着させる方法.
- **Laplace-Runge-Lenz ベクトルを用いた解法**
  角運動量と Laplace-Runge-Lenz ベクトルが Lie 代数 $\mathfrak{so}(4)$ を成す事を用いて，表現論からエネルギー固有値を決定する方法.
- **形状不変性を用いた解法**
  ハミルトニアンの因数分解及び遠心力・Coulomb ポテンシャルが「形状不変」である事を用いた解法.

この中で最も標準的なのは冪級数展開による解法でしょう．実際，多くの教科書がこの方法で解を求めています．但し，この解法は解を見つけるまでは比較的単純ですが，規格化因子まで決定しようとすると途端に難しい特殊函数の積分を実行しなければなりません．そこで，この講義では**形状不変性** (**shape invariance**) を用いて水素原子のスペクトル問題を解く事にします．実はこの方法が最も簡単で，この方法では或る 1 階微分方程式さえ解けば規格化因子も含めて厳密解が完全に決定出来るのです．

この章では中心力場中の二体問題の一般論から始めて，前半では水素原子のエネルギースペクトルを求めます．難しい特殊関数の理論を知らなくても，形状不変性を使えばこの固有値問題は簡単に解く事が出来ます．その後，電子と陽子の Coulomb 力の下での散乱問題を解きます．残念ながらこの散乱問題は形状不変性では解けないので，後半では愚直に Schrödinger 方程式を解く事にします．

3.1 中心力場中の二体問題—重心運動と相対運動の分離

古典力学の場合

まず古典力学の二体問題から始めましょう．質量 m_1 と m_2 の 2 つの質点から成る孤立系を考えます．2 つの質点の位置ベクトルを $\boldsymbol{x}_1$ 及び $\boldsymbol{x}_2$ とすると，運動方程式は次の様になります:

$$m_1 \frac{d^2\boldsymbol{x}_1}{dt^2} = +\boldsymbol{F} \tag{3.1.1a}$$

$$m_2 \frac{d^2\boldsymbol{x}_2}{dt^2} = -\boldsymbol{F} \tag{3.1.1b}$$

[*1] Laplace 変換による解法はあまり見かけないかもしれませんが，例えば Landau-Lifshitz の理論物理学教程第 3 巻 “Quantum Mechanics” の巻末にある Mathematical Appendices §d には載っているので，複素解析が好きな人は勉強してみると良いかもしれません.

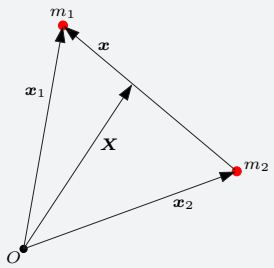


図3.1: 重心座標 $\boldsymbol{X} = \frac{m_1\boldsymbol{x}_1+m_2\boldsymbol{x}_2}{m_1+m_2}$ と相対座標 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2$.

但し，$\boldsymbol{F}$ は 2 質点間に働く内力です．まず右辺がゼロになる様に式(3.1.1a)と(3.1.1b)の両辺を足してみましょう．すると次が得られます:

$$(m_1+m_2)\frac{d^2}{dt^2}\left(\frac{m_1\boldsymbol{x}_1+m_2\boldsymbol{x}_2}{m_1+m_2}\right) = \boldsymbol{0} \tag{3.1.2}$$

この方程式は位置ベクトル $\boldsymbol{X} = \frac{m_1\boldsymbol{x}_1+m_2\boldsymbol{x}_1}{m_1+m_2}$ にある質量 $M = m_1+m_2$ の 1 個の質点の運動方程式と見なせる事が出来ます．この M を全質量，$\boldsymbol{X}$ を重心座標，$M\dot{\boldsymbol{X}}$ を全運動量を呼び，まとめると次式で定義されます:

$$\text{(全質量)} \quad M = m_1+m_2 \tag{3.1.3a}$$

$$\text{(重心座標)} \quad \boldsymbol{X} = \frac{m_1\boldsymbol{x}_1+m_2\boldsymbol{x}_2}{m_1+m_2} \tag{3.1.3b}$$

$$\text{(全運動量)} \quad \boldsymbol{P} = M\dot{\boldsymbol{X}} = (m_1+m_2)\frac{m_1\dot{\boldsymbol{x}}_1+m_2\dot{\boldsymbol{x}}_2}{m_1+m_2} = \boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2 \tag{3.1.3c}$$

但し，$\boldsymbol{p}_1 = m_1\dot{\boldsymbol{x}}_1$ 及び $\boldsymbol{p}_2 = m\dot{\boldsymbol{x}}_2$ です．構成から明らかですが，重心の運動方程式は自由粒子の運動方程式なので，重心運動は単なる等速直線運動である事が分かります．

次に 2 質点間の相対的な座標 $\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2$ の運動方程式を構成する事を考えましょう．まず式(3.1.1a)と(3.1.1b)の両辺をそれぞれ m_1 と m_2 で割って，その後それぞれの両辺を引くと次が得られます:

$$\frac{d^2}{dt^2}(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2) = \left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)\boldsymbol{F} \tag{3.1.4}$$

次にこの両辺に $(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2})^{-1} = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$ を掛けると次の様になります:

$$\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\frac{d^2}{dt^2}(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2) = \boldsymbol{F} \tag{3.1.5}$$

この方程式は位置ベクトル $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2$ にある質量 $m = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$ の 1 個の質点の運動方程式と見なせる事が出来ます．この m を換算質量，$\boldsymbol{x}$ を相対座標，$m\dot{\boldsymbol{x}}$ を相対運動量と呼び，まとめると次式で定義されます:

$$\text{(換算質量)} \quad m = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2} \tag{3.1.6a}$$

$$\text{(相対座標)} \quad \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2 \tag{3.1.6b}$$

$$\text{(相対運動量)} \quad \boldsymbol{p} = m\dot{\boldsymbol{x}} = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}(\dot{\boldsymbol{x}}_1-\dot{\boldsymbol{x}}_2) = \frac{m_2\boldsymbol{p}_1-m_1\boldsymbol{p}_2}{m_1+m_2} \tag{3.1.6c}$$

この様に，中心力の下で運動する孤立系の二体問題は重心運動と相対運動に分離する事が出来ます．重心運動は自明な等速直線運動なので，解くべき問題は相対運動の運動方程式だけになる事に注意しましょう．以下では，同じ事を量子力学の二体問題に適用して行きます．その為に，まず $\boldsymbol{x}_1$ と $\boldsymbol{x}_2$ は重心座標 $\boldsymbol{X}$ と相対座標 $\boldsymbol{x}$ を用いて次の様に表せる事に注意しましょう:

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{X} + \frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{x} \tag{3.1.7a}$$

$$\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{X} - \frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{x} \tag{3.1.7b}$$

同様に，$\boldsymbol{p}_1$ と $\boldsymbol{p}_2$ は全運動量 $\boldsymbol{P}$ と相対運動量 $\boldsymbol{p}$ を用いて次の様に表せます:

$$\boldsymbol{p}_1 = \frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{P} + \boldsymbol{p} \tag{3.1.8a}$$

$$\boldsymbol{p}_2 = \frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{P} - \boldsymbol{p} \tag{3.1.8b}$$

量子力学の場合

さて，次に 2 粒子の相対距離の大きさのみに依存する二体間相互作用ポテンシャル V で相互作用する 2 粒子系を考えます．この系の Schrödinger 方程式は

$$H\Phi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)=E\Phi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2) \tag{3.1.9}$$

但し，ハミルトニアン H は次で与えられます:

$$H=\frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1}+\frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2}+V(|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|) \tag{3.1.10}$$

これを全運動量と相対運動量で表す事を考えましょう．式(3.1.8a)と(3.1.8b)を代入すると次の様になります:[*2]

$$\begin{aligned}H&=\frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1}+\frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2}+V(|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|)\\&=\frac{1}{2m_1}\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{P}+\boldsymbol{p}\right)^2+\frac{1}{2m_2}\left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{P}-\boldsymbol{p}\right)^2+V(|\boldsymbol{x}|)\\&=\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(|\boldsymbol{x}|)\end{aligned} \tag{3.1.11}$$

波動関数も対応して次の変数分離型を仮定しましょう:

$$\Phi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)=\Psi(\boldsymbol{X})\psi(\boldsymbol{x}) \tag{3.1.12}$$

すると，Schrödinger 方程式は次の様になります:

$$\left(\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(|\boldsymbol{x}|)\right)\Psi(\boldsymbol{X})\psi(\boldsymbol{x})=E\Psi(\boldsymbol{X})\psi(\boldsymbol{x}) \tag{3.1.13}$$

この両辺を $\Psi(\boldsymbol{X})\psi(\boldsymbol{x})$ で割ると次の様になります:

$$\frac{\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}\Psi(\boldsymbol{X})}{\Psi(\boldsymbol{X})}+\frac{\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(|\boldsymbol{x}|)\right)\psi(\boldsymbol{x})}{\psi(\boldsymbol{x})}=E \tag{3.1.14}$$

この表式から明らかですが，左辺第 1 項は $\boldsymbol{X}$ だけに依存し，左辺第 2 項は $\boldsymbol{x}$ だけに依存しています．一方，右辺は座標に依存しない定数 E です．$\boldsymbol{X}$ だけに依存するものと $\boldsymbol{x}$ だけに依存するものを足して定数になるには，それぞれが $\boldsymbol{X}$ と $\boldsymbol{x}$ には依存しない定数でなければなりません．この定数を $E_{\text{重心}}$ 及び $E_{\text{相対}}$ とすると，右辺第 1 項・第 2 項はそれぞれ次を満たさなければなりません:

$$\frac{\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}\Psi(\boldsymbol{X})}{\Psi(\boldsymbol{X})}=E_{\text{重心}}\quad\&\quad\frac{\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(|\boldsymbol{x}|)\right)\psi(\boldsymbol{x})}{\psi(\boldsymbol{x})}=E_{\text{相対}} \tag{3.1.15}$$

但し，$E_{\text{重心}}$ と $E_{\text{相対}}$ は次の関係を満たします:

$$E_{\text{重心}}+E_{\text{相対}}=E \tag{3.1.16}$$

結局，中心力場中の二体系の Schrödinger 方程式(3.1.9)は，次の様に重心運動と相対運動の Schrödinger 方程式に分離される事が分かりました:

$$\text{(重心運動)}\quad\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}\Psi(\boldsymbol{X})=E_{\text{重心}}\Psi(\boldsymbol{X}) \tag{3.1.17a}$$

$$\text{(相対運動)}\quad\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(|\boldsymbol{x}|)\right)\psi(\boldsymbol{x})=E_{\text{相対}}\psi(\boldsymbol{x}) \tag{3.1.17b}$$

[*2] 簡単に確認出来ますが，$\boldsymbol{x}_a=(x_{a1},x_{a2},x_{a3})$, $\boldsymbol{p}_a=(p_{a1},p_{a2},p_{a3})$ $(a=1,2)$ が交換関係 $[x_{aj},p_{bk}]=i\hbar\delta_{ab}\delta_{jk}$ を満たす時，式(3.1.3b)，式(3.1.3c)，式(3.1.6b)，式 (3.1.6c)で定義された重心座標，全運動量，相対座標，相対運動量は次の交換関係を満たします:

$$[X_j,P_k]=i\hbar\delta_{jk},\quad[x_j,p_k]=i\hbar\delta_{jk},\quad\text{others vanish}$$

古典力学の場合同様，重心運動の Schrödinger 方程式は自由粒子の方程式なので簡単に解けます．従って，実際に解かなければならないのは相対運動の Schrödinger 方程式で，以下では相対運動だけに注目して議論を進めて行きましょう．まず，相対運動のハミルトニアンを次の様に書く事にします:

$$H_{\text{相対}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r) \tag{3.1.18}$$

但し，$r = |\boldsymbol{x}|$ です．以下，このハミルトニアンを扱い易い便利な表式に書き換えて行きましょう．証明はすぐ後で与えますが，運動量の 2 乗 $\boldsymbol{p}^2$ は軌道角運動量 $\boldsymbol{L}$ を用いて次の様に表せる事を使います:

$$\boldsymbol{p}^2 = p_r^2 + \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2} \tag{3.1.19}$$

ここで，p_r は動径方向の運動量演算子で，次で定義されます:[*3]

$$p_r := -i\hbar r^{-1}\frac{\partial}{\partial r} r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \tag{3.1.20}$$

まず式(3.1.19)を証明しましょう．これを証明するにはまず軌道角運動量 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p}$ に対して次が成り立つ事を使います:

$$\boldsymbol{L}^2 = r^2\boldsymbol{p}^2 - (\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}) + i\hbar(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}) \tag{3.1.21}$$

実際，$\boldsymbol{L}^2$ を計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{L}^2 &= L_i L_i \\
&= (\epsilon_{ijk}x_j p_k)(\epsilon_{ilm}x_l p_m) \\
&= \epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm}x_j p_k x_l p_m \\
&= (\delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl})x_j p_k x_l p_m \\
&= x_j p_k x_j p_k - x_j p_k x_k p_j
\end{aligned} \tag{3.1.22}$$

但し，4 行目で公式 $\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}$ を使いました．次に交換関係 $[x_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk}$ を使って式(3.1.22)最終行の 1 項目と 2 項目を書き換えて行きましょう．それぞれ計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned}
x_j p_k x_j p_k &= x_j([p_k, x_j] + x_j p_k)p_k \\
&= x_j(-i\hbar\delta_{kj} + x_j p_k)p_k \\
&= -i\hbar x_j p_j + x_j x_j p_k p_k \\
&= -i\hbar(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}) + (\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x})(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p})
\end{aligned} \tag{3.1.23a}$$

$$\begin{aligned}
x_j p_k x_k p_j &= x_j p_k([x_k, p_j] + p_j x_k) \\
&= x_j p_k(i\hbar\delta_{kj} + p_j x_k) \\
&= i\hbar x_j p_j + x_j p_j p_k x_k \\
&= i\hbar(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}) + (\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})([p_k, x_k] + x_k p_k) \\
&= i\hbar(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}) + (\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})(-i\hbar\delta_{kk} + (\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})) \\
&= -2i\hbar(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}) + (\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})
\end{aligned} \tag{3.1.23b}$$

以上をまとめると式(3.1.21)が成り立つ事が分かります．次に直接計算で確かめられる様に，$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}$ は次の様に表す事が出来ます:[*4]

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p} &= -i\hbar\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\nabla} \\
&= -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}
\end{aligned} \tag{3.1.24}$$

[*3] 動径方向の運動量演算子は $p_r = -i\hbar\frac{\partial}{\partial r}$ ではありません．式(3.1.20)に書いた様に，動径方向の運動量演算子は $-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}$ を $r^{-1}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial r})r$ と相似変換したもので，この相似変換は 3 次元積分 $\int d^3\boldsymbol{x} = \int_0^\infty\int_{-1}^1\int_0^{2\pi} r^2 dr d\cos\theta d\phi$ に現れる r^2 を $\frac{1}{2}$ 乗したものから来ています．

[*4] 式(3.1.24)を示すには，球座標 $\boldsymbol{x} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\phi)$ では $\boldsymbol{\nabla}$ は次の様に表される事を使うと良いです:

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

但し，$\boldsymbol{e}_r = \frac{\partial\boldsymbol{x}}{\partial r}/|\frac{\partial\boldsymbol{x}}{\partial r}| = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$，$\boldsymbol{e}_\theta = \frac{\partial\boldsymbol{x}}{\partial\theta}/|\frac{\partial\boldsymbol{x}}{\partial\theta}| = (\cos\theta\cos\phi, \cos\theta\sin\phi, -\sin\theta)$，$\boldsymbol{e}_\phi = \frac{\partial\boldsymbol{x}}{\partial\phi}/|\frac{\partial\boldsymbol{x}}{\partial\phi}| = (-\sin\phi, \cos\phi, 0)$ です．$\boldsymbol{x} = r\boldsymbol{e}_r$ 及び $\{\boldsymbol{e}_r, \boldsymbol{e}_\theta, \boldsymbol{e}_\phi\}$ が互いに直交する単位ベクトルである事を使うと，$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\nabla} = r\frac{\partial}{\partial r}$ と書ける事がすぐに分かります．

これと式(3.1.21)を使うと次が成り立つ事が分かります:

$$\begin{aligned} r^2\boldsymbol{p}^2 &= \boldsymbol{L}^2 + (\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}) - i\hbar(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}) \\ &= \boldsymbol{L}^2 - \hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r} - \hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r} \\ &= \boldsymbol{L}^2 - \hbar^2 r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} - 2\hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r} \\ &= \boldsymbol{L}^2 - \hbar^2 r^2\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right) \\ &= \boldsymbol{L}^2 + r^2 p_r^2 \end{aligned} \tag{3.1.25}$$

ここで，4 行目の等号は 4 行目の表式を計算すると 3 行目に一致する事から従います．$\boldsymbol{L}^2$ は r 微分を含まない事[*5]に注意して両辺を r^2 で割ると，式(3.1.19)が得られます．結局，相対運動のハミルトニアン(3.1.18)は次の様に表せる事が分かりました:

$$H_{\text{相対}} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2} + V(r) \tag{3.1.26}$$

次に相対運動の波動関数 $\psi(\boldsymbol{x})$ を球面調和関数で展開しましょう:

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=0}^{\infty}\sum_{m=-j}^{j} R_j(r)Y_{jm}(\theta,\phi) \tag{3.1.27}$$

ここで，$R_j(r)$ は展開係数関数で，r だけに依存する関数です．この展開を用いると，相対運動の Schrödinger 方程式(3.1.17b)は次の様になります:

$$\begin{aligned} 0 &= (H_{\text{相対}} - E_{\text{相対}})\,\psi(\boldsymbol{x}) \\ &= \sum_{j=0}^{\infty}\sum_{m=-j}^{j}\left(\frac{p_r^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2} + V(r) - E_{\text{相対}}\right)R_j(r)Y_{jm}(\theta,\phi) \\ &= \sum_{j=0}^{\infty}\sum_{m=-j}^{j}\left[\left(\frac{p_r^2}{2m} + \frac{j(j+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) - E_{\text{相対}}\right)R_j(r)\right]Y_{jm}(\theta,\phi) \end{aligned} \tag{3.1.28}$$

但し，3 行目で $\boldsymbol{L}^2Y_{jm} = j(j+1)\hbar^2Y_{jm}$ を用いました．球面調和関数は正規直交基底を成すので，この等式が成り立つ為には大括弧の中身がゼロにならなければなりません．これより次の動径方向の Schrödinger 方程式を得ます:

$$\left(\frac{p_r^2}{2m} + \frac{j(j+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right)R_j(r) = E_{\text{相対}}R_j(r) \tag{3.1.29}$$

ここで，$p_r^2 = -\hbar^2(r^{-1}\frac{d}{dr}r)(r^{-1}\frac{d}{dr}r) = -\hbar^2 r^{-1}\frac{d^2}{dr^2}r$ に注意して両辺に r を掛けると，この方程式は次の様になります:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{j(j+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right)\varphi_j(r) = E_{\text{相対}}\varphi_j(r) \tag{3.1.30}$$

但し，

$$\varphi_j(r) = rR_j(r) \tag{3.1.31}$$

これはポテンシャル $V_{\text{eff}}(r) = \frac{j(j+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)$ 中を運動する半直線 $(0 \le r < \infty)$ の上の一体問題の Schrödinger 方程式に他なりません．この $V_{\text{eff}}(r)$ を**有効ポテンシャル** (**effective potential**) と呼びます．結局，中心力場中の二体問題は，一般に 1 次元半直線上の一体問題(3.1.30)に帰着される事が分かりました．

[*5] 式(2.4.6a)–(2.4.6c)を使うと $\boldsymbol{L}^2$ は次の様に表されます:

$$\boldsymbol{L}^2 = \hbar^2\left[-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

3.2　水素原子

以上，中心力場中の二体問題の一般論を繰り広げたので，以下では 2 粒子間相互作用として Coulomb ポテンシャルを考えて，水素原子のエネルギー固有値問題を解いて行きましょう．まず，cgs-Gauss 単位系では Coulomb ポテンシャルは次式で与えられます:

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \tag{3.2.1}$$

但し，e は素電荷です．この時，動径方向の Schrödinger 方程式(3.1.30)は両辺に $\frac{2m}{\hbar^2}$ を掛けると次の様になります:

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{j(j+1)}{r^2} - \frac{2g}{r}\right)\varphi_{\mathcal{E},j}(r) = \mathcal{E}\varphi_{\mathcal{E},j}(r) \tag{3.2.2}$$

但し，g と $\mathcal{E}$ はそれぞれ (長さ)$^{-1}$ と (長さ)$^{-2}$ の次元を持つ量で，次式で定義されます:[*6]

$$g = \frac{me^2}{\hbar^2} \tag{3.2.3a}$$

$$\mathcal{E} = \frac{2mE_{\text{相対}}}{\hbar^2} \tag{3.2.3b}$$

また，固有値 $\mathcal{E}$ に属する固有関数という事を強調する為に，今まで φ_j と書いていたものを $\varphi_{\mathcal{E},j}$ と書き換えています．

さて，以下では $\mathcal{E} < 0$ の場合を解いて行きます．これは電子と陽子の束縛問題を解く事に対応し，これが解ければ水素原子のエネルギー準位が分かります．この問題を解く時に良く用いる解法は，微分方程式(3.2.2)の解として或る種の冪級数解を仮定して，その展開係数を決定して行くというやり方ですが，この方法だと規格化因子を決定するのに難しい特殊関数の積分を実行しなければならないので，ここではやりません．以下ではハミルトニアンの因数分解及び形状不変性というものを用いて式(3.2.2)の固有値問題を解いて行く事にします．以下，簡単の為，式(3.2.2)左辺の 2 階微分演算子をハミルトニアンと呼ぶ事にして，次の様に書く事にします:

$$H_j = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{j(j+1)}{r^2} - \frac{2g}{r} \tag{3.2.4}$$

この微分演算子の固有値問題は次の 4 つのステップで解く事が出来ます:

① ハミルトニアンの因数分解

1 次元調和振動子の時にもやった様に，まず最初のステップはハミルトニアンの「因数分解」です．直接計算で簡単に確かめる事が出来ますが，微分演算子(3.2.4)は次の様に定数項を除いて「因数分解」出来ます:

$$H_j = A_j^- A_j^+ + \mathcal{E}_j \tag{3.2.5}$$

但し，$A_j^\pm$ と $\mathcal{E}_j$ は次で与えられます:

$$A_j^\pm = \pm\frac{d}{dr} - \frac{j+1}{r} + \frac{g}{j+1} \tag{3.2.6a}$$

$$\mathcal{E}_j = -\frac{g^2}{(j+1)^2} \tag{3.2.6b}$$

1 階微分演算子 A_j^+ と A_j^- は次の半直線上の内積に関して互いにエルミート共軛である事に注意しましょう:

$$(f,g) := \int_0^\infty dr\, f^*(r)g(r) \tag{3.2.7}$$

さて，次に唐突ですが $A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j}$ のノルム 2 乗を考えます．これは計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned}\|A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j}\|^2 &= (A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j}, A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j}) \\ &= (\varphi_{\mathcal{E},j}, A_j^- A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j}) \\ &= (\varphi_{\mathcal{E},j}, (H_j - \mathcal{E}_j)\varphi_{\mathcal{E},j})\end{aligned}$$

[*6] この g は Bohr 半径 $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ の逆数です．Bohr 半径は水素原子のおおよその半径を表す量で，$\hbar c \cong 200\text{MeV}\cdot\text{fm}$, $mc^2 \cong 0.5\text{MeV}$, $\frac{e^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$ を使うと，次の様に見積もる事が出来ます:

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar c}{mc^2\cdot\frac{e^2}{\hbar c}} \cong \frac{200\text{MeV}\cdot\text{fm}}{0.5\text{MeV}\cdot\frac{1}{137}} \cong 5\times10^{-11}\text{m}$$

$$\begin{aligned} &= (\mathcal{E}-\mathcal{E}_j)(\varphi_{\mathcal{E},j},\varphi_{\mathcal{E},j}) \\ &= \mathcal{E}-\mathcal{E}_j \geq 0 \end{aligned} \tag{3.2.8}$$

但し，2 行目で $(A_j^+)^\dagger = A_j^-$ を使い，3 行目で $A_j^- A_j^+ = H_j - \mathcal{E}_j$ を使いました．また，4 行目で H_j を固有値 $\mathcal{E}_j$ に置き換えて内積の外に出し，5 行目で $\varphi_{\mathcal{E},j}$ が 1 に規格化されているという仮定 $\|\varphi_{\mathcal{E},j}\|^2 = (\varphi_{\mathcal{E},j},\varphi_{\mathcal{E},j}) = 1$ を使いました．最後の不等号はノルムの正定値性 $\|A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j}\| \geq 0$ から従います．よって，固有値 $\mathcal{E}$ に対して次の不等式が成り立つ事が分かります:

$$\mathcal{E} \geq \mathcal{E}_j \tag{3.2.9}$$

特に重要なのが等号 $\mathcal{E} = \mathcal{E}_j$ が成り立つ場合で，ノルムの正定値性よりこれが成り立つのは $A_j^+\varphi_{\mathcal{E}_j,j} = 0$ の場合しかありません．式(3.2.6a)より，この条件は次の 1 階微分方程式を与えます:

$$\left(\frac{d}{dr} - \frac{j+1}{r} + \frac{g}{j+1}\right)\varphi_{\mathcal{E}_j,j} = 0 \tag{3.2.10}$$

この 1 階微分方程式は簡単に解く事が出来て，答えは次の様になります:

$$\varphi_{\mathcal{E}_j,j}(r) = N_j r^{j+1}\exp\left(-\frac{g}{j+1}r\right) \tag{3.2.11}$$

但し，N_j は規格化定数です．$\mathcal{E}_j$ は固有値 $\mathcal{E}$ の下限なので，これが H_j の基底状態のエネルギー固有関数になります．
次に規格化定数 N_j を $\|\varphi_{\mathcal{E}_j,j}\| = 1$ を満たす様に決めましょう．式(3.2.11)のノルム 2 乗を計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty dr\,|\varphi_{\mathcal{E}_j,j}(r)|^2 \\ &= |N_j|^2\int_0^\infty dr\,r^{2j+2}\,\mathrm{e}^{-\frac{2g}{j+1}r} \\ &= |N_j|^2\left(\frac{j+1}{2g}\right)^{2j+3}\int_0^\infty dt\,t^{2j+2}\,\mathrm{e}^{-t} \\ &= |N_j|^2\left(\frac{j+1}{2g}\right)^{2j+3}\Gamma(2j+3) \end{aligned} \tag{3.2.12}$$

但し，3 行目で $t = \frac{2g}{j+1}r$ と変数変換し，4 行目で次のガンマ関数の積分表示を使いました:

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty dt\,t^{z-1}\,\mathrm{e}^{-t} \tag{3.2.13}$$

よって，$|N_j| = \frac{1}{\sqrt{\Gamma(2j+3)}}(\frac{2g}{j+1})^{j+\frac{3}{2}}$ です．一般性を失う事無く N は正数と出来るので，次の様に選ぶ事にします:

$$N_j = \frac{1}{\sqrt{(2j+2)!}}\left(\frac{2g}{j+1}\right)^{j+\frac{3}{2}} \tag{3.2.14}$$

但し，$\Gamma(2j+3) = (2j+2)!$ を使いました．以上まとめると，j を 1 つ固定した時のハミルトニアン H_j の基底状態のエネルギー固有値は式(3.2.6b)で，基底状態のエネルギー固有関数は式(3.2.11)で与えられる事が分かりました．

② パートナーハミルトニアンの構成

次のステップは因数分解で現れた因子 A_j^- と A_j^+ の順番を入れ替えて新たなハミルトニアンを構成する事です:

$$A_j^+A_j^- + \mathcal{E}_j \tag{3.2.15}$$

この様にして得られた新たなハミルトニアンを H_j のパートナーハミルトニアンと呼びます．まず式(3.2.6a)を使ってこのパートナーハミルトニアンを計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned} A_j^+A_j^- + \mathcal{E}_j &= \left(\frac{d}{dr} - \frac{j+1}{r} + \frac{g}{j+1}\right)\left(-\frac{d}{dr} - \frac{j+1}{r} + \frac{g}{j+1}\right) - \frac{g^2}{(j+1)^2} \\ &= -\frac{d^2}{dr^2} + \left(-\frac{j+1}{r} + \frac{g}{j+1}\right)^2 + \frac{j+1}{r^2} - \frac{g^2}{(j+1)^2} \\ &= -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{(j+1)(j+2)}{r^2} - \frac{2g}{r} \end{aligned}$$

$$= H_{j+1} \tag{3.2.16}$$

従って，パートナーハミルトニアンは元々のハミルトニアンの j を $j+1$ にシフトしたものになっています．これが形状不変性と呼ばれるものの 1 つです．構成から明らかですが，$\{H_j, H_{j+1}, A_j^{\pm}\}$ は次の**繋絡関係式 (intertwining relation)** を満たします:

$$H_{j+1}A_j^+ = A_j^+ H_j \tag{3.2.17a}$$
$$H_j A_j^- = A_j^- H_{j+1} \tag{3.2.17b}$$

重要なのは，この繋絡関係式より「H_j と H_{j+1} のエネルギースペクトルは基底状態を除いて等しい」という事が言える事です．これを見る為に $A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j}$ と $A_j^-\varphi_{\mathcal{E},j+1}$ を考えましょう．これらに H_{j+1} と H_j を作用させると次の様になります:

$$\begin{aligned} H_{j+1}A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j} &= A_j^+ H_j\varphi_{\mathcal{E},j} \\ &= \mathcal{E}A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j} \end{aligned} \tag{3.2.18a}$$
$$\begin{aligned} H_j A_j^-\varphi_{\mathcal{E},j+1} &= A_j^- H_{j+1}\varphi_{\mathcal{E},j+1} \\ &= \mathcal{E}A_j^-\varphi_{\mathcal{E},j+1} \end{aligned} \tag{3.2.18b}$$

但し，式(3.2.18a)(3.2.18b)それぞれの 1 行目で繋絡関係式を使い，2 行目で H_j と H_{j+1} をそれぞれ固有値 $\mathcal{E}$ に置き換えました．よって，$A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j}$ は H_{j+1} の固有値 $\mathcal{E}$ に属する固有関数で，$A_j^-\varphi_{\mathcal{E},j+1}$ は H_j の固有値 $\mathcal{E}$ に属する固有関数を与える事が分かります．然るに，H_{j+1} の固有値 $\mathcal{E}$ に属する固有関数は $\varphi_{\mathcal{E},j+1}$ で，H_j の固有値 $\mathcal{E}$ に属する固有関数は $\varphi_{\mathcal{E},j}$ ですから，これらは定数倍を除いて一致しなければなりません．従って，次の比例関係を得ます:

$$\varphi_{\mathcal{E},j+1} \propto A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j} \tag{3.2.19a}$$
$$\varphi_{\mathcal{E},j} \propto A_j^-\varphi_{\mathcal{E},j+1} \tag{3.2.19b}$$

この比例係数は両辺のノルムを計算する事で簡単に決める事が出来て，次の様になります:

$$\varphi_{\mathcal{E},j+1} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}-\mathcal{E}_j}}A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j} \tag{3.2.20a}$$
$$\varphi_{\mathcal{E},j} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}-\mathcal{E}_j}}A_j^-\varphi_{\mathcal{E},j+1} \tag{3.2.20b}$$

実際，$\|\varphi_{\mathcal{E},j}\| = 1$ 及び $\|\varphi_{\mathcal{E},j+1}\| = 1$ の仮定の下，式(3.2.20a)両辺のノルム 2 乗を計算すると，$\|\varphi_{\mathcal{E},j}\|^2 = \frac{1}{\mathcal{E}-\mathcal{E}_j}\|A_j^+\varphi_{\mathcal{E},j}\|^2 = \frac{1}{\mathcal{E}-\mathcal{E}_j}(\mathcal{E}-\mathcal{E}_j) = 1$ となります．但し，2 番目の等号で式(3.2.8)を使いました．式(3.2.20b)も同様です．この様に，$A_j^{\pm}$ を作用させる事で $\varphi_{\mathcal{E},j}$ から $\varphi_{\mathcal{E},j+1}$，又は $\varphi_{\mathcal{E},j+1}$ から $\varphi_{\mathcal{E},j}$ を構成する事を **Darboux 変換**と呼んだりします．重要なのは，H_j の固有値 $\mathcal{E}$ の状態があれば必ず H_{j+1} にも固有値 $\mathcal{E}$ の状態があり，逆に H_{j+1} に固有値 $\mathcal{E}$ の状態があれば必ず H_j にも固有値 $\mathcal{E}$ の状態がある，という事です．但し，式(3.2.20a)(3.2.20b)から明らかですが，この等エネルギースペクトルの構造は $\mathcal{E} = \mathcal{E}_j$ の場合を除きます．この $\mathcal{E} = \mathcal{E}_j$ の場合は重要なので，最後にこれについて調べておきましょう．①で議論した様に，H_j の基底状態のエネルギー固有値は $\mathcal{E} = \mathcal{E}_j$ なので，この場合は式(3.2.20a)が ill-defined です．従って，H_{j+1} のエネルギースペクトルに $\mathcal{E} = \mathcal{E}_j$ があるかどうかはこれだけでは分かりません．今から見る様に，H_{j+1} のスペクトルには実は $\mathcal{E} = \mathcal{E}_j$ はありません．これを見るには式(3.2.8)でやった様に $A_j^-\varphi_{\mathcal{E},j+1}$ のノルム 2 乗を計算すると良いです．計算法は全く同じなので省略すると，答えは次の様になります:

$$\|A_j^-\varphi_{\mathcal{E},j+1}\|^2 = (\varphi_{\mathcal{E},j+1}, (H_{j+1}-\mathcal{E}_j)\varphi_{\mathcal{E},j+1}) = \mathcal{E}-\mathcal{E}_j \geq 0 \tag{3.2.21}$$

よって，H_{j+1} の固有値も不等式 $\mathcal{E} \geq \mathcal{E}_j$ を満たし，ノルムの正定値性より等号 $\mathcal{E} = \mathcal{E}_j$ が成り立つのは $A_j^-\varphi_{\mathcal{E}_j,j+1} = 0$ の場合のみとなります．この条件は式(3.2.6a)より次の 1 階微分方程式を与える事が分かります:

$$\left(-\frac{d}{dr} - \frac{j+1}{r} + \frac{g}{j+1}\right)\varphi_{\mathcal{E}_j,j+1} = 0 \tag{3.2.22}$$

この方程式も簡単に解けて，答えは次の様になります:

$$\varphi_{\mathcal{E}_j,j+1}(r) \propto r^{-j-1}\exp\left(\frac{g}{j+1}r\right) \tag{3.2.23}$$

この関数は明らかに半直線上で 2 乗可積分ではありません．従って，Hilbert 空間の元では無く，理論のスペクトルには含まれません．以上まとめると，H_j と H_{j+1} 共にエネルギー固有値の下限は $\mathcal{E}_j$ で，$\mathcal{E} = \mathcal{E}_j$ をスペクトルに含むのは H_j のみ，$\mathcal{E} > \mathcal{E}_j$ を満たす固有値 $\mathcal{E}$ に対しては H_j と H_{j+1} は等スペクトルでエネルギー固有関数は互いに Darboux 変換(3.2.20a)(3.2.20b)で結び付いている，という構造になっている事が分かりました．

③ パートナーハミルトニアンの再因数分解

次のステップは②で得られたパートナーハミルトニアン H_{j+1} の「再因数分解」です．ステップ①の議論から明らかですが，H_{j+1} は次の様にも「因数分解」出来ます:

$$\begin{aligned} H_{j+1} &= A_j^+ A_j^- + \mathcal{E}_j \\ &= A_{j+1}^- A_{j+1}^+ + \mathcal{E}_{j+1} \end{aligned} \tag{3.2.24}$$

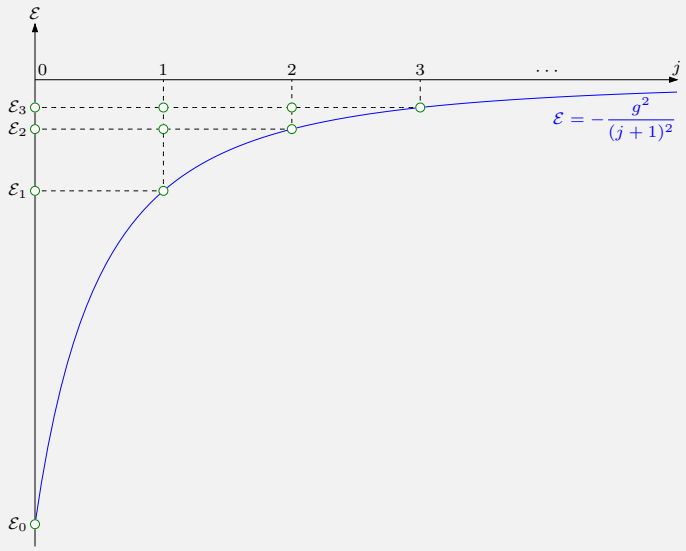
また，これも①から明らかですが，この因数分解から得られる H_{j+1} の固有値 $\mathcal{E}$ に対する不等式は $\mathcal{E} \geq \mathcal{E}_{j+1}$ で，特に等号 $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{j+1}$ が成り立つ時のエネルギー固有関数は式(3.2.11)の j を $j+1$ に置き換えたものになります．この $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{j+1}$ のエネルギー固有関数は 2 乗可積分である事に注意しましょう．また，任意の j に対して $\mathcal{E}_{j+1} = -\frac{g^2}{(j+2)^2} > -\frac{g^2}{(j+1)^2} = \mathcal{E}_j$ が成り立つので，因数分解 $H_{j+1} = A_j^+ A_j^- + \mathcal{E}_j$ から得られる不等式 $\mathcal{E} \geq \mathcal{E}_j$ よりも制限がきつくなっている事にも注意しましょう．②の最後で述べた様に，H_j と H_{j+1} のスペクトルは $\mathcal{E} = \mathcal{E}_j$ を除いて等しいので，上の議論から H_j のエネルギー固有値は基底状態が $\mathcal{E} = \mathcal{E}_j$，第 1 励起状態が $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{j+1}$ である事が分かります．

④ ステップ②と③を繰り返す

最後に，上の再因数分解(3.2.24)から明らかですが，$H_{j+1} = A_{j+1}^- A_{j+1}^+ + \mathcal{E}_{j+1}$ のパートナーハミルトニアンとして $H_{j+2} = A_{j+1}^+ A_{j+1}^- + \mathcal{E}_{j+1}$ が得られます．そして，この H_{j+2} も再因数分解する事が出来て，それのパートナーハミルトニアンとして H_{j+3} が得られます．この様にして再因数分解とパートナーハミルトニアンの構成を繰り返して行くと，次の様な無限個のハミルトニアンの階層が得られます:

$$\begin{array}{rccccc} H_0 = & A_0^- A_0^+ + \mathcal{E}_0 & & & & \\ H_1 = & A_0^+ A_0^- + \mathcal{E}_0 = & A_1^- A_1^+ + \mathcal{E}_1 & & & \\ \vdots & \vdots & & & & \\ H_j = & & = A_{j-1}^+ A_{j-1}^- + \mathcal{E}_{j-1} = & A_j^- A_j^+ + \mathcal{E}_j & & \\ H_{j+1} = & & = & A_j^+ A_j^- + \mathcal{E}_j = & A_{j+1}^- A_{j+1}^+ + \mathcal{E}_{j+1} & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \end{array} \tag{3.2.25}$$

また，②と③で見て来た様に，j を 1 つ任意に固定した時，H_j の基底状態のエネルギー固有値は $\mathcal{E}_j = -\frac{g^2}{(j+1)^2}$ で，第 1 励起状態のエネルギー固有値は $\mathcal{E}_{j+1} = -\frac{g^2}{(j+2)^2}$，そして $\mathcal{E}_{j+1}$ 以上のエネルギー固有値は H_{j+1} と完全に等スペクトルです．これと上の無限個のハミルトニアンの階層を用いると，水素原子のエネルギースペクトルの構造は次の様な図で表す事が出来ます:



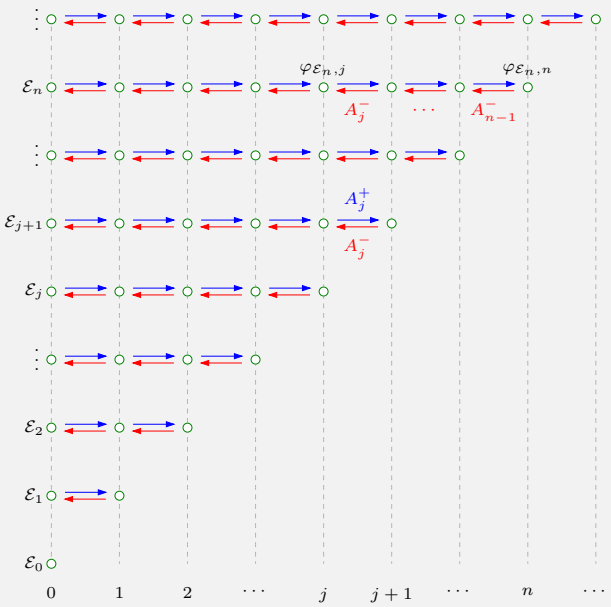
但し，青色の曲線がノルムの正定値性(3.2.8)から得られるエネルギー固有値の下限で，緑色の丸がエネルギー固有状態を表しています．この図より，まずエネルギー準位が次の様に読み取れます:

$$\mathcal{E}_n = -\frac{g^2}{(n+1)^2}, \quad n \in \{0, 1, 2, \cdots\} \tag{3.2.26}$$

また，上の図の水平方向の破線から分かる様に，$\mathcal{E}_n$ を 1 つ固定した時，同じ $\mathcal{E}_n$ を与える j の値は $j = 0, 1, \cdots, n$ の $n+1$ 個である事も読み取れます．ところで第2.2節で見て来た様に，各 j は $2j+1$ 重に縮退しているので，n 番目のエネルギー準位の縮退度は次の様になります:

$$\sum_{j=0}^{n}(2j+1) = 2 \cdot \frac{n(n+1)}{2} + (n+1) = (n+1)^2 \tag{3.2.27}$$

以上が水素原子のエネルギー固有値の全てです．
次にエネルギー固有関数を求めましょう．これも先程の図から読み取れるのですが，あの図をもっと分かり易い様に模式的に書き直すと次の様になります:



但し，縦軸がエネルギー $\mathcal{E}$ で，横軸が角運動量の大きさ j です．緑色の丸がエネルギー固有状態を表していて，角運動量の大きさが j と $j+1$ の間にある青色の矢印が A_j^+，赤色の矢印が A_j^- を表しています．この図よりエネルギー固有関数 $\varphi_{\mathcal{E}_n,j}$ が知りたければ同じエネルギー固有値に属する右端の状態 $\varphi_{\mathcal{E}_n,n}$ に演算子 $\frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_j}}A_j^- \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_{j+1}}}A_{j+1}^- \cdots \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_{n-1}}}A_{n-1}^-$ を作用させて行けば得られる，という事が分かります．即ち，次の様に Darboux 変換(3.2.20b)を逐次的に用いて行けば求まります:

$$\begin{aligned}
\varphi_{\mathcal{E}_n,j}(r) &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_j}}A_j^-\varphi_{\mathcal{E}_n,j+1}(r) \\
&= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_j}}A_j^-\left(\frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_{j+1}}}A_{j+1}^-\varphi_{\mathcal{E}_n,j+2}(r)\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_j}}\frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_{j+1}}}A_j^-A_{j+1}^-\varphi_{\mathcal{E}_n,j+2}(r) \\
&= \cdots \\
&= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_j}}\frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_{j+1}}}\cdots\frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_{n-1}}}A_j^-A_{j+1}^-\cdots A_{n-1}^-\varphi_{\mathcal{E}_n,n}(r)
\end{aligned} \tag{3.2.28}$$

但し，$\varphi_{\mathcal{E}_n,n}$ は 1 階微分方程式 $A_n^+\varphi_{\mathcal{E}_n,n} = 0$ の解で，次で与えられます:

$$\varphi_{\mathcal{E}_n,n}(r) = \frac{1}{\sqrt{(2n+2)!}}\left(\frac{2g}{n+1}\right)^{n+\frac{3}{2}} r^{n+1}\exp\left(-\frac{g}{n+1}r\right) \tag{3.2.29}$$

結局，1 階微分方程式 $A_n^+\varphi_{\mathcal{E}_n,n} = 0$ を解いて $\varphi_{\mathcal{E}_n,n}$ を規格化さえすれば，後は適当に微分をして行く事で正しく規格化された一般のエネルギー固有関数 $\varphi_{\mathcal{E}_n,j}$ が求まる事が分かりました．以上が形状不変性を用いた Schrödinger 方程式の解法の全てです．

最後に，通常は上で出て来た n に 1 を加えたものを**主量子数** (**principal quantum number**) と呼び，$n \in \{1, 2, 3, \cdots\}$ と記します．上の n とは 1 だけずれているので注意しましょう．

3.3 Coulomb 散乱

前節で $E_{\text{相対}} < 0$ の場合のエネルギー固有値・固有関数を求めたので，次は $E_{\text{相対}} > 0$ の場合を考えましょう．この場合，相対運動の Schrödinger 方程式(3.1.17b)は両辺に $\frac{2m}{\hbar^2}$ を掛けると次の様になります:

$$\left(-\boldsymbol{\nabla}^2 - \frac{2g}{r}\right)\psi(\boldsymbol{x}) = k^2\psi(\boldsymbol{x}) \quad \text{with} \quad k := \sqrt{\frac{2mE_{\text{相対}}}{\hbar^2}} > 0 \tag{3.3.1}$$

$E_{\text{相対}} < 0$ の場合は縮退度 $(n+1)^2$ の離散固有値 $E_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{g^2}{(n+1)^2}$ $(n \in \{0,1,2,\cdots\})$ が現れましたが，今から見て行く様に $E_{\text{相対}} > 0$ の場合は縮退度 ∞ の連続固有値になります．この様な連続固有値の場合の解は色々な表式があるのですが，物理的に最も興味があるのは**散乱解** (**scattering solution**) です．即ち，或る特定の波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ で入射して来た波が Coulomb 相互作用で散乱を受け，最終的に全方位に放射されて行くという状況を表す解です．この様な散乱問題では特定の波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の方向を特別視しているので，今まで使って来た球面座標系を用いて Schrödinger 方程式を解くのは適当ではありません．Coulomb ポテンシャルの場合，散乱問題を解析するのに都合が良い座標系は放物線座標系と呼ばれるものなのですが，この座標系は殆どの人にとっては馴染みが無いでしょう．以下，まず放物線座標系とはなんぞやという所から始めて，Coulomb 相互作用の下での二体の散乱問題を厳密に解いて行きます．この散乱問題では前節で使った形状不変性は殆ど無力なので，この節では愚直に Schrödinger 方程式を解く事にします[*7]．

3.3.1 放物線座標での Schrödinger 方程式

上で述べた様に散乱問題では入射粒子の波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の方向を特別視するので，球面座標系を用いて Schrödinger 方程式を解くのは適切ではありません．一般性を失う事無く $\boldsymbol{k} = (0,0,k)$ として良いので，以下では z 方向が入射粒子の運動量方向だとしましょう．

まず，z 方向を特別視している座標系として**円柱座標系** (**cylindrical coordinate system**) があります．良く知っている様に円柱座標系は (ρ,ϕ,z) の 3 つ組で指定される座標系で，これは直交座標 (x,y,z) と次の関係があります:

$$x = \rho\cos\phi, \quad y = \rho\sin\phi, \quad z = z \tag{3.3.2}$$

但し，$\rho \in [0,\infty)$, $\phi \in [0,2\pi)$, $z \in (-\infty,\infty)$ です．原理的にはこの円柱座標系でもなんの問題も無いのですが，Coulomb 散乱の問題ではこの座標系ではうまく変数分離が出来ないので，普通はこの円柱座標系を少し変更した**放物線座標系** (**parabolic coordinate system**) を用います．まず $\rho^2 = x^2+y^2$ は次の様に書ける事に注意しましょう:

$$\rho^2 = x^2+y^2 = r^2 - z^2 = (r+z)(r-z) \tag{3.3.3}$$

但し，$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ です．放物線座標系とは最後の $r+z$ と $r-z$ を独立変数に選ぶ座標系の事で，これらを次の様に記します:

$$\xi = r+z \quad \& \quad \eta = r-z \tag{3.3.4}$$

より正確に言うと，放物線座標系とは 3 つ組 (ξ,η,ϕ) で指定される座標系の事で，直交座標 (x,y,z) とは次の関係があります:

$$x = \sqrt{\xi\eta}\cos\phi, \quad y = \sqrt{\xi\eta}\sin\phi, \quad z = \frac{\xi-\eta}{2} \tag{3.3.5}$$

但し，$\xi,\eta \in [0,\infty)$, $\phi \in [0,2\pi)$ です．$x^2+y^2 = \xi\eta$ なので $z = \frac{1}{2}(\xi - \frac{x^2+y^2}{\xi}) = \frac{1}{2}(\frac{x^2+y^2}{\eta} - \eta)$ と書ける事に注意しましょう．この様にして定義された座標系が放物線座標系と呼ばれるのは，ξ（または η）を固定した時，$z = \frac{1}{2}(\xi - \frac{x^2+y^2}{\xi})$（または $z = \frac{1}{2}(\frac{x^2+y^2}{\eta} - \eta)$）で定まる曲面が放物面になるからです (図3.2参照)．以下，まずはこの放物線座標系での Laplacian の表式を求める事にしましょう:

① 計量

放物線座標系に限らず，一般に曲線座標系での Laplacian は**計量** (**metric**) を用いて求めるのが最も簡単です．まず，式(3.3.5)より次が成り立ちます:

$$dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\eta}{\xi}}\cos\phi\,d\xi + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\xi}{\eta}}\cos\phi\,d\eta - \sqrt{\xi\eta}\sin\phi\,d\phi \tag{3.3.6a}$$

$$dy = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\eta}{\xi}}\sin\phi\,d\xi + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\xi}{\eta}}\sin\phi\,d\eta + \sqrt{\xi\eta}\cos\phi\,d\phi \tag{3.3.6b}$$

[*7] この節の内容は Landau-Lifshitz の理論物理学教程第 3 巻 “Quantum Mechanics” の §37 及び §135 に基づいています．Landau-Lifshitz に書かれてある内容以上の事は含んでいないので，そちらを見た方が良いかも知れません．

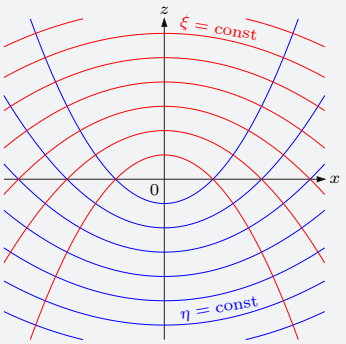


図3.2: $\xi = \text{const}$ および $\eta = \text{const}$ で定まる 2 次元放物面の $y = 0$ での断面図．赤色の曲線が $z = \frac{1}{2}(\xi - \frac{x^2+y^2}{\xi})$ で定まる 2 次元放物面の $y = 0$ での断面図を表し，青色の曲線が $z = \frac{1}{2}(\frac{x^2+y^2}{\eta} - \eta)$ で定まる 2 次元放物面の $y = 0$ での断面図を表します．

$$dz = \frac{d\xi - d\eta}{2} \tag{3.3.6c}$$

これより微小線要素 ds の 2 乗は次の様になります:

$$\begin{aligned} ds^2 &= dx^2 + dy^2 + dz^2 \\ &= \frac{\xi+\eta}{4\xi} d\xi^2 + \frac{\xi+\eta}{4\eta} d\eta^2 + \xi\eta d\phi^2 \end{aligned} \tag{3.3.7}$$

これから計量 g が次の様に読み取れます:

$$\mathsf{g} = (\mathsf{g}_{ij}) = \begin{pmatrix} \frac{\xi+\eta}{4\xi} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\xi+\eta}{4\eta} & 0 \\ 0 & 0 & \xi\eta \end{pmatrix} \tag{3.3.8}$$

以下では計量の逆 g^{-1} と行列式 $\det \mathsf{g}$ が必要なので，これも計算しておきましょう．計算すると次の様になります:

$$\mathsf{g}^{-1} = (\mathsf{g}^{ij}) = \begin{pmatrix} \frac{4\xi}{\xi+\eta} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4\eta}{\xi+\eta} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\xi\eta} \end{pmatrix} \tag{3.3.9a}$$

$$\det \mathsf{g} = \left(\frac{\xi+\eta}{4}\right)^2 \tag{3.3.9b}$$

② Laplacian

一般に Laplacian は計量を用いて次の様に表せます:[*8]

$$\boldsymbol{\nabla}^2 = \frac{1}{\sqrt{\det \mathsf{g}}} \partial_i \sqrt{\det \mathsf{g}}\, \mathsf{g}^{ij} \partial_j \tag{3.3.10}$$

これを用いると，放物線座標系での Laplacian は次の様に表される事が分かります:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla}^2 &= \frac{1}{\sqrt{\det \mathsf{g}}} \left(\partial_\xi \sqrt{\det \mathsf{g}}\, \mathsf{g}^{\xi\xi} \partial_\xi + \partial_\eta \sqrt{\det \mathsf{g}}\, \mathsf{g}^{\eta\eta} \partial_\eta + \partial_\phi \sqrt{\det \mathsf{g}}\, \mathsf{g}^{\phi\phi} \partial_\phi \right) \\ &= \frac{4}{\xi+\eta} \left[\frac{\partial}{\partial\xi} \xi \frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{\partial}{\partial\eta} \eta \frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\xi} + \frac{1}{\eta} \right) \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \\ &= \frac{4}{\xi+\eta} \left[\xi \frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{\partial}{\partial\xi} + \eta \frac{\partial^2}{\partial\eta^2} + \frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\xi} + \frac{1}{\eta} \right) \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \end{aligned} \tag{3.3.11}$$

[*8] まず適当なスカラー関数 f に対して次が成り立ちます:

$$\begin{aligned} \int d^3\boldsymbol{x}\, \sqrt{\det \mathsf{g}}\, \mathsf{g}^{ij} (\partial_i f)(\partial_j f) &= \int d^3\boldsymbol{x} \left[\partial_i \left(\sqrt{\det \mathsf{g}}\, \mathsf{g}^{ij} f \partial_j f \right) - f \partial_i \left(\sqrt{\det \mathsf{g}}\, \mathsf{g}^{ij} \partial_j f \right) \right] \\ &= \int d^3\boldsymbol{x}\, \sqrt{\det \mathsf{g}}\, f \left[-\frac{1}{\sqrt{\det \mathsf{g}}} \partial_i \left(\sqrt{\det \mathsf{g}}\, \mathsf{g}^{ij} \partial_j f \right) \right] \end{aligned}$$

但し，2 行目で部分積分した時に現れる表面項は捨てました．これより Laplacian が式(3.3.11)で与えられる事が読み取れます．

さて，以上で放物線座標系での Laplacian の表式が分かったので，この座標系での Schrödinger 方程式を書き下して見ましょう．式(3.3.11)を式(3.3.1)に代入すると次の様になります:

$$\begin{aligned}
0 &= \left(\boldsymbol{\nabla}^2 + \frac{2g}{r} + k^2\right)\psi \\
&= \left[\frac{4}{\xi+\eta}\left(\xi\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{\partial}{\partial\xi} + \eta\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} + \frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\xi}+\frac{1}{\eta}\right)\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) + \frac{4g}{\xi+\eta} + k^2\right]\psi \\
&= \frac{4}{\xi+\eta}\left[\xi\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{\partial}{\partial\xi} + \eta\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} + \frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\xi}+\frac{1}{\eta}\right)\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + g + \frac{k^2}{4}(\xi+\eta)\right]\psi
\end{aligned} \tag{3.3.12}$$

次に，相対運動の波動関数 $\psi(\xi,\eta,\phi)$ は ϕ 方向に関しては $\psi(\xi,\eta,\phi+2\pi)=\psi(\xi,\eta,\phi)$ と周期的なので，これは Fourier 級数展開する事が出来ます．ϕ に関して Fourier 級数展開すると次の様になります:

$$\psi(\xi,\eta,\phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \varphi_m(\xi,\eta)\,\mathrm{e}^{im\phi} \tag{3.3.13}$$

但し，$\varphi_m(\xi,\eta)$ は Fourier 級数展開の展開係数関数で，ξ と η だけに依存する関数です．この展開(3.3.13)を式(3.3.12)に代入すると次の様になります:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{im\phi}\left[\xi\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{\partial}{\partial\xi} + \eta\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} + \frac{\partial}{\partial\eta} - \frac{m^2}{4}\left(\frac{1}{\xi}+\frac{1}{\eta}\right) + g + \frac{k^2}{4}(\xi+\eta)\right]\varphi_m(\xi,\eta) = 0 \tag{3.3.14}$$

ここで，$\mathrm{e}^{im\phi}$ は正規直交基底なので，この等式が成り立つ為には各 m で次の等式が成り立たなければなりません:

$$\left[\left(\xi\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{m^2}{4\xi} + \frac{k^2}{4}\xi\right) + \left(\eta\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} + \frac{\partial}{\partial\eta} - \frac{m^2}{4\eta} + \frac{k^2}{4}\eta\right) + g\right]\varphi_m(\xi,\eta) = 0, \quad \forall m \in \{0,\pm1,\pm2,\cdots\} \tag{3.3.15}$$

重心運動と相対運動の分離の時と同様，この微分方程式は変数分離型です．そこで，関数 $\varphi_m(\xi,\eta)$ は次の様に変数分離されると仮定しましょう:

$$\varphi_m(\xi,\eta) = u_m(\xi)v_m(\eta) \tag{3.3.16}$$

これを式(3.3.15)に代入して，その後両辺を $u_m(\xi)v_m(\eta)$ で割ると次の様になります:

$$\frac{\xi u_m'' + u_m' + (-\frac{m^2}{4\xi} + \frac{k^2}{4}\xi)u_m}{u_m} + \frac{\eta v_m'' + v_m' + (-\frac{m^2}{4\eta} + \frac{k^2}{4}\eta)v_m}{v_m} = -g \tag{3.3.17}$$

但し，プライム ($'$) は微分を表します．この式は第 1 項目は ξ だけに依存する関数で，第 2 項目は η だけに依存する関数です．しかし，任意の ξ, η に対してこれら 2 つの項を足すと定数 $-g$ にならなければならないので，式(3.3.17)が成り立つ為には左辺第 1 項目・第 2 項目共に座標に依存しない或る定数でなければなりません．即ち，$u_m(\xi)$ と $v_m(\eta)$ は次を満たさなければなりません:

$$\frac{\xi u_m'' + u_m' + (-\frac{m^2}{4\xi} + \frac{k^2}{4}\xi)u_m}{u_m} = -g_1 \quad \& \quad \frac{\eta v_m'' + v_m' + (-\frac{m^2}{4\eta} + \frac{k^2}{4}\eta)v_m}{v_m} = -g_2 \tag{3.3.18}$$

ここで，g_1, g_2 は定数で，次の関係を満たさなければなりません:

$$g_1 + g_2 = g \tag{3.3.19}$$

結局，放物線座標系では相対運動の Schrödinger 方程式(3.3.1)は次の 2 つの 2 階微分方程式の問題に帰着される事が分かりました:

$$\xi u_m'' + u_m' + \left(-\frac{m^2}{4\xi} + \frac{k^2}{4}\xi + g_1\right)u_m = 0 \tag{3.3.20a}$$

$$\eta v_m'' + v_m' + \left(-\frac{m^2}{4\eta} + \frac{k^2}{4}\eta + g_2\right)v_m = 0 \tag{3.3.20b}$$

但し，m は任意の整数です．以下，これらを用いて Coulomb 相互作用の下での二体散乱の厳密解を求めて行きます．

3.3.2　散乱解

さて，今から微分方程式(3.3.20a)(3.3.20b)を解きたい訳ですが，今興味があるのは一般解ではありません．今興味があるのは $z \to -\infty$ の無限遠で z 方向に波数ベクトル $\boldsymbol{k} = (0, 0, k)$ で入射された波が Coulomb 相互作用で散乱を受けるという散乱現象で，$\boldsymbol{k}$ 軸周りに回転対称な現象です．数式で書くと，これは $z \to -\infty$ で次の境界条件を満たす解を求めよ，という問題になります:

$$\psi(\boldsymbol{x}) \to \mathrm{e}^{ikz} \quad \text{as} \quad z \to -\infty \tag{3.3.21}$$

まずこの境界条件を放物線座標系で書き直しましょう．式(3.3.5)より $z = (\xi - \eta)/2$ $(\xi, \eta \in [0, \infty))$ なので，この条件は次の様に書き換えられます:

$$\psi(\xi, \eta, \phi) \to \mathrm{e}^{ik(\xi-\eta)/2} \quad \text{as} \quad \eta \to +\infty \tag{3.3.22}$$

これは任意の ξ に対して成り立てという条件なので，まず ξ 依存性が次の様に決定されます:

$$u_m(\xi) = \delta_{m0}\, \mathrm{e}^{ik\xi/2} \tag{3.3.23}$$

但し，今考えている散乱現象は $\boldsymbol{k}$ 軸周りに回転しても同じ現象なので，波動関数 $\psi(\xi, \eta, \phi) = \sum_m u_m(\xi) v_m(\eta)\, \mathrm{e}^{im\phi}$ に ϕ 依存性はあってはならない (即ち，$m = 0$ の場合のみゼロでない) という事を使いました．次に $m = 0$ の条件の下，式(3.3.23)を式(3.3.20a)に代入してみましょう．計算すると次の様になります:

$$\begin{aligned} 0 &= \xi u_0'' + u_0' + \left(\frac{k^2}{4}\xi + g_1\right) u_0 \\ &= -\frac{k^2}{4} u_0 + \frac{ik}{2} u_0 + \left(\frac{k^2}{4}\xi + g_1\right) u_0 \\ &= \left(g_1 + \frac{ik}{2}\right) u_0 \end{aligned} \tag{3.3.24}$$

よって，式(3.3.20a)が成り立つ為には定数 g_1 は次を満たさなければなりません:

$$g_1 = -\frac{ik}{2} \tag{3.3.25}$$

これで g_1 が決定出来たので，式(3.3.19)より g_2 も次の様に決まります:

$$g_2 = g - g_1 = g + \frac{ik}{2} \tag{3.3.26}$$

$m = 0$ の条件の下，これを式(3.3.20b)に代入すると次の方程式が得られます:

$$\eta v_0'' + v_0' + \left(\frac{k^2}{4}\eta + g + \frac{ik}{2}\right) v_0 = 0 \tag{3.3.27}$$

後はこの微分方程式を解けば良いだけです．これを解く為に，まず境界条件(3.3.22)を考慮して $v_0(\eta)$ の関数形を次の様に仮定しましょう:

$$v_0(\eta) = \mathrm{e}^{-ik\eta/2} f(\eta) \tag{3.3.28}$$

但し，f は η の或る関数で，境界条件(3.3.22)を満たす為には $\eta \to +\infty$ で定数に漸近しなければなりません．この仮定(3.3.28)を式(3.3.27)に代入して計算すると，最終的に f に対する次の微分方程式が得られます:

$$\eta f'' + (1 - ik\eta) f' + g f = 0 \tag{3.3.29}$$

実はこれは有名な微分方程式で，**合流型超幾何微分方程式** (**confluent hypergeometric differential equation**) と呼ばれる類のものです．但し，この方程式は難しい常微分方程式論を知らなくても形式的には冪級数解を仮定する事で簡単に解く事が出来ます．以下，$f(\eta)$ として次の冪級数解を仮定しましょう:

$$f(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \eta^n \tag{3.3.30}$$

但し，α_n は係数で，以下ではこれを決めて行きます．まず式(3.3.30)を式(3.3.29)に代入すると次の様になります:

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_{n=0}^{\infty} \left[n(n-1)\alpha_n \eta^{n-1} + n\alpha_n \eta^{n-1} - ikn\alpha_n \eta^n + g\alpha_n \eta^n \right] \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \left[n^2 \alpha_n \eta^{n-1} - ik(n-1)\alpha_{n-1} \eta^{n-1} + g\alpha_{n-1} \eta^{n-1} \right] \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \left[n^2 \alpha_n - ik \left(n - 1 + \frac{ig}{k} \right) \alpha_{n-1} \right] \eta^{n-1}
\end{aligned} \tag{3.3.31}$$

よって，方程式(3.3.29)が成り立つ為には α_n は次の漸化式を満たさなければなりません:

$$\alpha_n = ik \cdot \frac{n - 1 + \frac{ig}{k}}{n^2} \alpha_{n-1} \tag{3.3.32}$$

この漸化式は簡単に解けて，次の様になります:

$$\begin{aligned}
\alpha_n &= ik \cdot \frac{n - 1 + \frac{ig}{k}}{n^2} \alpha_{n-1} \\
&= (ik)^2 \cdot \frac{(n - 1 + \frac{ig}{k})(n - 2 + \frac{ig}{k})}{n^2 (n-1)^2} \alpha_{n-2} \\
&= \cdots \\
&= (ik)^n \cdot \frac{(n - 1 + \frac{ig}{k})(n - 2 + \frac{ig}{k}) \cdots (0 + \frac{ig}{k})}{[n(n-1)\cdots 1]^2} \alpha_0 \\
&= (ik)^n \cdot \frac{(\frac{ig}{k})_n}{n!n!} \alpha_0
\end{aligned} \tag{3.3.33}$$

但し，$(x)_n$ は **Pochhammer 記号**で，次式で定義されます:

$$(x)_n := x(x+1)(x+2)\cdots(x+n-1) \tag{3.3.34}$$

$(1)_n = n!$ に注意しましょう．よって，式(3.3.33)を式(3.3.30)に代入する事で $f(\eta)$ が次の様に求まりました:

$$\begin{aligned}
f(\eta) &= \alpha_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\frac{ig}{k})_n}{(1)_n} \frac{(ik\eta)^n}{n!} \\
&= \alpha_0 F(\tfrac{ig}{k}, 1; ik\eta)
\end{aligned} \tag{3.3.35}$$

ここで，$F(\alpha, \gamma; z)$ は**合流型超幾何関数** (**confluent hypergeometric function**) と呼ばれる特殊関数で，次で定義されます:

$$F(\alpha, \gamma; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n}{(\gamma)_n} \frac{z^n}{n!} \tag{3.3.36}$$

$m = 0$ に注意して式(3.3.23)と(3.3.28)を $\varphi_m(\xi, \eta) = \delta_{m0} u_0(\xi) v_0(\eta)$ に代入し，これを式(3.3.13)に代入すると，最終的に次の相対運動の波動関数が得られます:

$$\begin{aligned}
\psi(\xi, \eta, \phi) &= u_0(\xi) v_0(\eta) \\
&= \alpha_0 \, \mathrm{e}^{ik(\xi - \eta)/2} \, F(\tfrac{ig}{k}, 1; ik\eta)
\end{aligned} \tag{3.3.37}$$

この表式から明らかですが，α_0 は規格化因子の役割を果たします．以下，$\alpha_0 = N$ と書く事にして，$z = (\xi - \eta)/2$ 及び $\eta = r - z$ を用いると，式(3.3.37)は直交座標系で次の様に表されます:

$$\begin{aligned}
\psi(\boldsymbol{x}) &= N \, \mathrm{e}^{ikz} \, F(\tfrac{ig}{k}, 1; ik(r - z)) \\
&= N \, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \, F(\tfrac{ig}{k}, 1; i(kr - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}))
\end{aligned} \tag{3.3.38}$$

但し，2 行目で $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{x} = kr\cos\theta = kz$ を使いました．(θ は $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{x}$ の成す角で，この θ を用いると $z = r\cos\theta$ となります．) 今まで馴染みの薄い放物線座標系を使って来ましたが，最終的には普通の直交座標系で解を書き表す事が出来ました．式(3.3.38)が Coulomb 相互作用の下での二体散乱の厳密解です．

3.3.3　散乱振幅

さて，以上で Coulomb 散乱の厳密解を得た訳ですが，この厳密解を求めただけでは殆どなんの役にも立ちません．重要なのは厳密解(3.3.38)の無限遠方での振る舞いで，これから Coulomb 散乱の厳密な**散乱振幅 (scattering amplitude)** が求まるのです．以下，用いるのは合流型超幾何関数の次の漸近形です:

$$F(\alpha,\gamma;z)\to\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}(-z)^{-\alpha}\left[1+O(\tfrac{1}{z})\right]+\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}\,\mathrm{e}^{z}\,z^{\alpha-\gamma}\left[1+O(\tfrac{1}{z})\right]\quad\text{as}\quad|z|\to\infty \tag{3.3.39}$$

この漸近形を導出するのは大変なので，以下ではこれは認める事にしましょう．一旦式(3.3.39)を認めると，厳密解(3.3.37)に現れる $F(\frac{ig}{k},1;ik\eta)$ の漸近形が次の様に評価出来ます:

$$\begin{aligned}
F(\tfrac{ig}{k},1;ik\eta)&\to\frac{1}{\Gamma(1-\frac{ig}{k})}(-ik\eta)^{-\frac{ig}{k}}+\frac{1}{\Gamma(\frac{ig}{k})}\,\mathrm{e}^{ik\eta}(ik\eta)^{\frac{ig}{k}-1}\\
&=\frac{1}{\Gamma(1-\frac{ig}{k})}(\mathrm{e}^{-\frac{i\pi}{2}}\,k\eta)^{-\frac{ig}{k}}+\frac{\frac{ig}{k}}{\frac{ig}{k}\Gamma(\frac{ig}{k})}\,\mathrm{e}^{ik\eta}\,\frac{(\mathrm{e}^{\frac{i\pi}{2}}\,k\eta)^{\frac{ig}{k}}}{ik\eta}\\
&=\frac{1}{\Gamma(1-\frac{ig}{k})}\,\mathrm{e}^{-\frac{\pi g}{2k}}\,\mathrm{e}^{-\frac{ig}{k}\log(k\eta)}+\frac{\frac{ig}{k}}{\Gamma(1+\frac{ig}{k})}\,\mathrm{e}^{ik\eta}\,\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\pi g}{2k}}\,\mathrm{e}^{\frac{ig}{k}\log(k\eta)}}{ik\eta}\\
&=\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\pi g}{2k}}}{\Gamma(1-\frac{ig}{k})}\left[\mathrm{e}^{-\frac{ig}{k}\log(k\eta)}+\frac{g}{k^2}\frac{\Gamma(1-\frac{ig}{k})}{\Gamma(1+\frac{ig}{k})}\frac{\mathrm{e}^{ik\eta+\frac{ig}{k}\log(k\eta)}}{\eta}\right]\\
&=\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\pi g}{2k}}}{\Gamma(1-\frac{ig}{k})}\left[\mathrm{e}^{-\frac{ig}{k}\log(kr-kz)}+\frac{g}{k^2\sin^2(\frac{\theta}{2})}\,\mathrm{e}^{\frac{2ig}{k}\log\sin(\frac{\theta}{2})}\frac{\Gamma(1-\frac{ig}{k})}{\Gamma(1+\frac{ig}{k})}\frac{\mathrm{e}^{ik(r-z)+\frac{ig}{k}\log(2kr)}}{r}\right]
\end{aligned} \tag{3.3.40}$$

但し，2 行目で $-i=\mathrm{e}^{-\frac{i\pi}{2}}$ と $i=\mathrm{e}^{\frac{i\pi}{2}}$ を使い，3 行目でガンマ関数の性質 $z\Gamma(z)=\Gamma(z+1)$ から従う $\frac{ig}{k}\Gamma(\frac{ig}{k})=\Gamma(\frac{ig}{k}+1)$ を使い，5 行目で $\eta=r-z=r(1-\cos\theta)=2r\sin^2(\frac{\theta}{2})$ を使いました．この漸近形からまず規格化因子 N を次の様に選びましょう:

$$N=\mathrm{e}^{\frac{\pi g}{2k}}\,\Gamma(1-\tfrac{ig}{k}) \tag{3.3.41}$$

すると，$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}=kz$ に注意すると厳密解(3.3.38)の漸近形は次の様になる事が分かります:

$$\psi(\boldsymbol{x})\to\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\frac{ig}{k}\log(kr-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})}+f(\theta)\frac{\mathrm{e}^{ikr+\frac{ig}{k}\log(2kr)}}{r} \tag{3.3.42}$$

但し，$f(\theta)$ は次で定義される量です:

$$f(\theta)=\frac{g}{2k^2\sin^2(\frac{\theta}{2})}\,\mathrm{e}^{\frac{2ig}{k}\log\sin(\frac{\theta}{2})}\frac{\Gamma(1-\frac{ig}{k})}{\Gamma(1+\frac{ig}{k})} \tag{3.3.43}$$

この $f(\theta)$ を Coulomb 散乱の散乱振幅と呼びます．今まで散乱理論については全く触れて来ませんでしたが，この散乱振幅の表式から演繹される事が幾つかあるので，最後にそれについて簡単に述べて終わりにしましょう．以下，証明・導出は与えません．散乱理論については第5章で改めて学ぶ予定です．

① **散乱振幅を k の複素関数として見た時，正の虚軸上にある 1 位の極の位置から束縛状態のエネルギー準位が読み取れる**

まず一般にガンマ関数 $\Gamma(z)$ は z がゼロ又は負の整数の所で 1 位の極を持つ事が知られています．即ち，n をゼロ又は負の整数とした時，$z=-n$ 近傍で次の様に Laurent 展開される事が知られています:

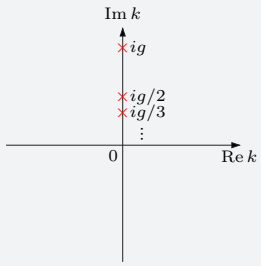
$$\Gamma(z)=\frac{(-1)^n/n!}{z+n}+O(1)\quad\text{for}\quad|z+n|\ll 1 \tag{3.3.44}$$

これを使うと，散乱振幅を波数 k の関数として見た時，式(3.3.43)は因子 $\Gamma(1-\frac{ig}{k})$ を含んでいるので k が次の関係を満たす所で 1 位の極を持つ事が分かります:

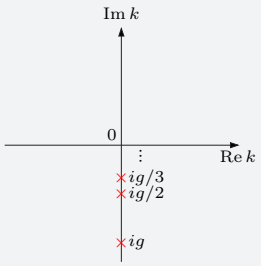
$$1-\frac{ig}{k}=-n,\quad n\in\{0,1,2,\cdots\} \tag{3.3.45}$$

即ち，複素 k 平面の次の虚軸上の位置に 1 位の極を持っています (図3.3参照):

$$k=\frac{ig}{n+1},\quad n\in\{0,1,2,\cdots\} \tag{3.3.46}$$



(a) $g > 0$ の引力相互作用の場合



(b) $g < 0$ の斥力相互作用の場合

図3.3: 散乱振幅(3.3.43)の 1 位の極．正の虚軸上にある 1 位の極が束縛状態 (bound state) に対応し，bound state pole と呼ばれます．一方，負の虚軸上にある 1 位の極は反束縛状態 (anti-bound state) とか仮想状態 (virtual state) と呼ばれるものに対応し，anti-bound state pole とか virtual state pole と呼ばれます．反束縛状態・仮想状態とは大雑把に言って「Schrödinger 方程式の解だが 2 乗可積分では無いもの」の事です．

実は 2 体散乱の散乱振幅が k の関数として正の虚軸上に 1 位の極を持つ場合，そこから 2 体の束縛状態のエネルギー準位を読み取る事が出来ます．実際，今の問題では $g > 0$ の引力相互作用の場合は極(3.3.46)は正の虚軸上にあるので，これから束縛状態のエネルギー準位が次の様に読み取れます:

$$\mathcal{E} = k^2 = \left(\frac{ig}{n+1}\right)^2 = -\frac{g^2}{(n+1)^2}, \quad n \in \{0, 1, 2, \cdots\} \tag{3.3.47}$$

これは前節で導出したエネルギー固有値(3.2.26)と完全に一致している事に注意しましょう．

② 微分散乱断面積

散乱振幅が分かると，それの絶対値二乗を計算する事で微分散乱断面積 $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ が得られます．式(3.3.43)に現れる因子 $\mathrm{e}^{\frac{2ig}{k}\log\sin(\frac{\theta}{2})}$ と $\frac{\Gamma(1-\frac{ig}{k})}{\Gamma(1+\frac{ig}{k})}$ は実数の k に対しては共に大きさ 1 の複素数なので，$|f(\theta)|^2$ を計算すると次の様になります:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{g^2}{4k^4\sin^4(\frac{\theta}{2})} = \frac{m^2e^4}{4p^4\sin^4(\frac{\theta}{2})} \tag{3.3.48}$$

但し，最後の等号で $g = me^2/\hbar^2$ を使い，$p = \hbar k$ としました．これは古典力学でも学ぶ Rutherford 散乱の微分散乱断面積と完全に一致しています．従って，Coulomb 散乱に関しては，古典力学で計算しても量子力学で計算しても結果は同じになります．

参考文献

ハミルトニアンの因数分解と形状不変性

第3.2節ではハミルトニアンの因数分解と形状不変性を用いて水素原子の離散エネルギー準位を求めましたが，この様な因数分解に基づいた Schrödinger 方程式の解法は，量子力学の文脈では Erwin Schrödinger が初めて導入しました:

[1] E. Schrödinger, “A Method of Determining Quantum-Mechanical Eigenvalues and Eigenfunctions,” *Proc. Roy. Irish Acad. (Sec. A)* **46** (1940) 9–16.

[2] E. Schrödinger, “Further Studies on Solving Eigenvalue Problems by Factorization,” *Proc. Roy. Irish Acad. (Sec. A)* **46** (1940/1941) 183–206.

その後，この方法は色々な人達によって洗練されていったのですが，この辺の方法論は次の 2 つのレビュー論文に良くまとめられています:

[3] L. Infeld and T. E. Hull, “The Factorization Method,” *Rev. Mod. Phys.* **23** (1951) 21–68.

[4] F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, “Supersymmetry and quantum mechanics,” *Phys. Rept.* **251** (1995) 267–385, `arXiv:hep-th/9405029 [hep-th]`.

また，日本語の教科書では次の 2 冊に解説が載っています:

[5] 坂本眞人，『量子力学から超対称性へ』(サイエンス社，2012 年)

[6] 佐々木隆，『可解な量子力学系の数理物理』(サイエンス社，2015 年)

実は厳密に解ける 1 次元 Schrödinger 方程式は殆どこの方法で解けるので，興味がある人は勉強してみると良いかも知れません．

Coulomb 散乱

第3.3節では放物線座標を導入して Coulomb 散乱の厳密解を求めましたが，このやり方は Landau-Lifshitz の完全なる受け売りです:

[7] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* (Butterworth-Heinemann, 1977)

§37 に放物線座標での Coulomb 問題が解説されており，§135 に Coulomb 散乱の解法が載っています．但し，§135 では電荷が同符号の荷電粒子の 2 体散乱を想定しているので，この講義ノートとは結合定数の符号が異なります．比較する時は注意しましょう．

また，本文では全く述べませんでしたが，実は Coulomb 散乱は散乱問題としては非常に高度な話題で，通常，散乱理論では無限遠方では粒子は相互作用が切れて自由粒子として振る舞うと仮定して理論を作って行くのですが，Coulomb 力は長距離力なので相互作用が切れず，実は自由粒子にはなりません．より正確に言うと，$r \to \infty$ でポテンシャルが $V(r) \propto \frac{1}{r^\alpha}$ と振る舞う時，$\alpha > 1$ なら無限遠での漸近運動を記述する漸近ハミルトニアンは自由ハミルトニアンになるのですが，$0 < \alpha \leq 1$ の場合は漸近ハミルトニアンが自由ハミルトニアンにはなりません (第5.2.1節参照)．それでは一体どんな漸近ハミルトニアンになるのだ，と興味がある人は次の John D. Dollard の論文を見てみましょう:

[8] J. D. Dollard, “Asymptotic Convergence and the Coulomb Interaction,” *J. Math. Phys.* **5** (1964) 729–738.

ちなみに「漸近運動が自由粒子運動にならない」という事は場の量子論に行っても引き継がれて，それが摂動論的量子電磁力学のいわゆる**赤外問題** (**infrared problem**) の起源になって行きます．

第 4 章

元素の周期表

前章第3.2節で Coulomb 力で相互作用する電荷 $+e$ の陽子と電荷 $-e$ の電子の二体系の束縛問題を厳密に解きましたが，この二体系は最も簡単な原子の模型で，**原子番号 (atomic number)** $Z=1$ の水素原子を表すのでした．ここで，原子番号とは原子核の中にある陽子の個数で，一般に原子番号 Z の (電気的に中性な) 原子は電荷 $+Ze$ の原子核と電荷 $-e$ の Z 個の電子から成ります．そこで，電子に番号 i $(i=1,2,\cdots,Z)$ を割り当てて i 番目の電子の位置と運動量をそれぞれ $\boldsymbol{x}_i$ と $\boldsymbol{p}_i$ と表す事にしましょう．原子核は電子に比べてずっと質量が大きいので[*1]原子核は原点に固定されているとしてその運動は無視すると，この Z 粒子系のハミルトニアンは次で与えられます:

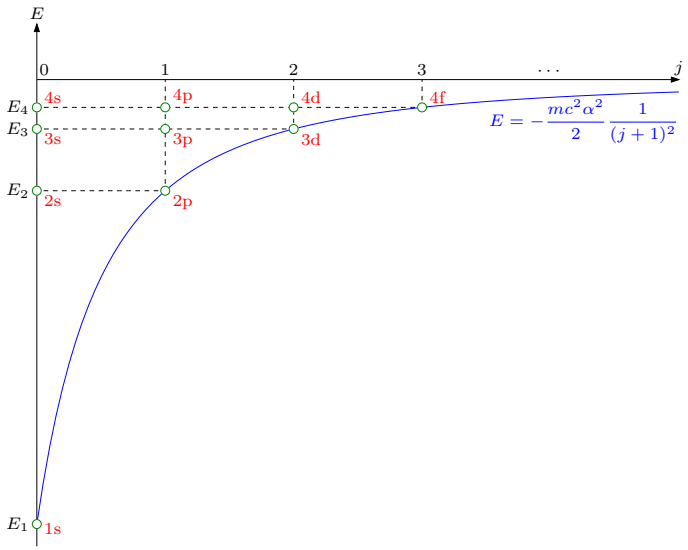
$$H=\sum_{i=1}^{Z}\left(\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m}-\frac{Ze^2}{|\boldsymbol{x}_i|}\right)+\sum_{i=1}^{Z-1}\sum_{j=i+1}^{Z}\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j|} \tag{4.1}$$

ここで，第 1 項目が Z 個の電子の運動エネルギー，第 2 項目が原子核と電子の間の Coulomb 相互作用，第 3 項目が電子間の Coulomb 相互作用を表します．但し，$Z=1$ の場合は第 3 項目はありません．以下，幾つか新しい記号を導入する必要があるので，復習も兼ねて $Z=1$ の場合のエネルギースペクトルをもう一度まとめておきましょう．

$Z=1$ の場合，式(4.1)は (m を換算質量と読み替えれば) 前章第3.2節で解いた相対運動のハミルトニアンと同じで，その離散固有値は n を主量子数として次式で与えられるのでした:[*2]

$$E_n=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{g^2}{n^2}=-\frac{mc^2\alpha^2}{2}\frac{1}{n^2}\quad(n=1,2,3,\cdots) \tag{4.2}$$

但し，$g=\frac{me^2}{\hbar^2}$ は Bohr 半径の逆数で，$\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}\simeq\frac{1}{137}$ は微細構造定数です．また，主量子数 n を一つ固定した時，軌道角運動量の大きさ j の取り得る値は $j=0,1,2,\cdots,n-1$ の n 通りで，j を一つ固定した時，磁気量子数 m の取り得る値は $m=j,j-1,\cdots,-j$ の $2j+1$ 通りでした．第3.2節でも示しましたが，このエネルギー準位 E_n(または主量子数 n) と軌道角運動量の大きさ j の関係を図で表すと次の様になります:



[*1] 陽子の質量は約 938MeV/c^2 で，電子の質量は約 0.511MeV/c^2 なので約 1800 倍違います．

[*2] 第3.2節では式(3.2.26)の様に $\mathcal{E}_n=-g^2/(n+1)^2$ $(n=0,1,2,\cdots)$ と書いて来ましたが，第3.2節最後で述べた様に主量子数はこの n に 1 を加えたものになります．また，$\mathcal{E}_n=-g^2/n^2$ $(n=1,2,3,\cdots)$ と式(4.2)の関係は $\mathcal{E}_n=(2m/\hbar^2)E_n$ です．

但し，緑色の丸は主量子数 n と軌道角運動量の大きさ j で指定される状態を表します．これを**原子軌道** (**atomic orbital**)(または電子軌道) と呼び，上の図の緑色の丸の隣に赤字で書いた 1s, 2s, 2p 等はこの原子軌道を表す記号です．この記号の最初の数字は主量子数を表していて，最後の s, p, d, f 等のアルファベットは軌道角運動量の大きさを表しています．但し，このアルファベットと軌道角運動量の大きさ j の間の対応は次の様になります:[*3]

$$\begin{aligned}
\mathrm{s} &\Leftrightarrow j=0\\
\mathrm{p} &\Leftrightarrow j=1\\
\mathrm{d} &\Leftrightarrow j=2\\
\mathrm{f} &\Leftrightarrow j=3\\
\mathrm{g} &\Leftrightarrow j=4\\
\mathrm{h} &\Leftrightarrow j=5\\
&\vdots
\end{aligned}$$

この原子軌道の記号を用いると，先程の図を上下ひっくり返したものは次の様に模式的に書き表す事が出来ます:

$$\begin{array}{cccccc}
\mathrm{1s} & & & & & \\
\mathrm{2s} & \mathrm{2p} & & & & \\
\mathrm{3s} & \mathrm{3p} & \mathrm{3d} & & & \\
\mathrm{4s} & \mathrm{4p} & \mathrm{4d} & \mathrm{4f} & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots &
\end{array}$$

以上が $Z=1$ の場合の厳密なエネルギースペクトルの構造だった訳ですが，$Z>1$ の場合は残念ながら厳密解は知られていません．しかし，定性的には上のスペクトルの構造と殆ど同じで，エネルギー固有状態は主量子数 n，軌道角運動量の大きさ j，磁気量子数 m で指定する事が出来ます[*4]．但し，$Z=1$ の場合と異なりエネルギー固有値は一般に n と j の両方に依存する事が知られています．

さて，電子はスピン 1/2 のフェルミオンで，Pauli の排他律に従います．即ち，同じ (n,j,m) で指定される状態にはスピンの向きが異なる 2 つの電子が占有出来ます．従って，或る n と j で指定されたエネルギー固有値に属する固有状態は $2(2j+1)$ 重に縮退しています．ところで，原子番号 Z の原子の最低エネルギー状態とは，原子軌道のエネルギー準位の低い方から順に Pauli の排他律に従って Z 個の電子を詰めていったものの事です．そこで，この規則に従って電子を原子軌道に詰めてみましょう．計算は示しませんが，電子はおおよそ次の順番で原子軌道を占有して行く事が知られています:

$$\begin{array}{cccccc}
\mathrm{1s} & & & & & \\
\mathrm{2s} & \mathrm{2p} & & & & \\
\mathrm{3s} & \mathrm{3p} & & & & \\
\mathrm{4s} & \mathrm{3d} & \mathrm{4p} & & & \\
\mathrm{5s} & \mathrm{4d} & \mathrm{5p} & & & \\
\mathrm{6s} & \mathrm{4f} & \mathrm{5d} & \mathrm{6p} & & \\
\mathrm{7s} & \mathrm{5f} & \mathrm{6d} & \mathrm{7p} & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots &
\end{array}$$

これらの原子軌道にエネルギーの低い方から順に Pauli の排他律に従って電子を詰めて行くと，s 軌道には 2 個の電子，p 軌道には 6 個の電子，d 軌道には 10 個の電子が占有出来て，最終的に次の表にまとめる事が出来ます:

1s																	1s
2s	2s											2p	2p	2p	2p	2p	2p
3s	3s											3p	3p	3p	3p	3p	3p
4s	4s	3d	3d	3d	3d	3d	3d	3d	3d	3d	3d	4p	4p	4p	4p	4p	4p
5s	5s	4d	4d	4d	4d	4d	4d	4d	4d	4d	4d	5p	5p	5p	5p	5p	5p
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

この表が元素の**周期表** (**periodic table**) です．

[*3] s, p, d, f はそれぞれ sharp, principal, diffuse, fundamental の頭文字です．f 以降は g, h, ⋯ とアルファベット順になります．

[*4] 今までちゃんと述べませんでしたが，主量子数 n は「(動径波動関数の節の数) + $(j+1)$」と定義されます．ここで，動径波動関数の**節 (node)** とは原点を除いた動径波動関数の零点 (関数がゼロとなる点) の事です．

さて，高校化学で学んだ様に，原子の化学的性質は基本的に最外殻の原子軌道を占有する電子の数で決まって，この最外殻軌道の電子を**価電子** (**valence electron**) と呼ぶのでした．上の表を周期表と呼ぶ理由は，同じ様な化学的性質を示す元素が周期的に現れるからなのですが，この周期性の起源は価電子の数が必ず或る特定のパターンでしか現れない事にあります．そして，この価電子の数が或る特定のパターンでしか現れないという事の起源は角運動量の量子化に他なりません．従って，物理的には「元素の周期表は角運動量の量子化と Pauli の排他律の帰結」と言って良いです．

参考文献

元素の周期表について解説している教科書は沢山あります．冒頭viiページの参考文献で挙げた本で言えば，次の Steven Weinberg の教科書の §4.5 中盤以降に周期表の説明が載っています:

[1] S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics*, 2nd ed. (Cambridge University Press, 2015)

第 5 章

散乱理論

これまで 1 次元調和振動子や水素原子のエネルギー固有値を厳密に求めてきましたが，量子力学にはこの様な固有値問題と並んで重要な解くべき問題があります．それが**散乱問題** (**scattering problem**) です．実際，多くの物理の分野で実際に行われる実験は，調べたい対象 (標的) に粒子を入射し，標的との散乱によって放射される粒子を検出器で測定，それによって標的の性質を調べるというものになります．この様な散乱問題では，標的との相互作用が局所的ならば，標的から充分離れた入射粒子・放射粒子は漸近的に自由粒子運動を行うでしょう．従って，局所相互作用で支配される散乱現象は次の様な時間発展で起こると期待されます:

$$(\text{自由粒子運動}) \to (\text{標的との相互作用}) \to (\text{自由粒子運動})$$

この素朴な物理的描像を理論的に定式化するのが**散乱理論** (**scattering theory**) です．散乱理論は古典力学でも作る事が出来ますが，この章では量子力学に於ける散乱理論を作り上げていきます．以下では，まず第5.1節で散乱理論の概略について述べた後，第5.2節で **S 行列** (**S-matrix**) を導入します．この S 行列が散乱理論で最も重要な演算子です．最後に第5.3節で S 行列の行列要素から散乱断面積を得る方法について学びます．散乱理論に於いては，この散乱断面積が実験と比較可能な基本的物理量となります．

さて，散乱現象で最も興味があるのは 3 次元の場合ですが，1 次元や 2 次元などの低次元の場合も同様に重要です．今から見て行く様に，散乱理論は任意次元で作ることが出来るので，この章では空間次元を d として d 次元の散乱理論を考えて行く事にしましょう．また，この章では論理を明確にするために内積 $(\,\cdot\,,\,\cdot\,)$ やノルム $\|\,\cdot\,\|$ の記号を多用しますが，この時，状態ベクトルを $|\Psi\rangle$ の様にブラケット記法を用いて表すと縦線が増えて見苦しいので，この章ではブラケット記法を使うのはやめて，状態ベクトルは単に Ψ，状態ベクトルの内積は (Ψ,Φ)，ノルムは $\|\Psi\|$ 等と表す事にします．まとめると次の様な対応になります:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &\leftrightarrow \Psi \\ \langle\Psi|\Phi\rangle &\leftrightarrow (\Psi,\Phi) \\ \||\Psi\rangle\| &\leftrightarrow \|\Psi\| \end{aligned}$$

また，状態ベクトルが特に時間依存する場合は $\Psi(t)$ と書き，状態ベクトルの座標表示 (波動関数) は $\Psi(\boldsymbol{x},t)$ 等と書く事にします．

5.1 散乱理論の概略

さて，散乱の量子論を作るに当たって幾つか明らかにしなければならない事があります．まずそれらについて簡単に概略を述べておきましょう[*1]．以下に述べることは少し難しく感じるかも知れませんが，初めから全てを理解出来なくても気にしてはいけません．具体的な計算や証明は次節以降で取り扱います．

漸近状態の存在

この章の冒頭で述べた様に，局所相互作用で支配される散乱現象の時間発展は「(自由粒子運動) → (相互作用) → (自由粒子運動)」となる筈です．この様な時間依存した現象を取り扱う時は，時間に依存した形式で一般論を展開するのが物理的にも数学的にも最も明快です．今，散乱現象を示す量子力学系のハミルトニアンを H としましょう．この時，この系の時間に依存した Schrödinger 方程式は次で与えられます:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = H\Psi(t) \tag{5.1.1}$$

[*1] この節の内容は Reed & Simon の教科書 (章末の参考文献 [6]) の XI.1 に書かれてある事の劣化版です．私の記述は数学的にはかなりいい加減なので，詳細については [6] を見た方が良いです．

但し，$\Psi(t)$ はこの系の状態ベクトルです．形式的にはこの Schrödinger 方程式は簡単に解く事が出来て，解は次の様になります:

$$\Psi(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Psi \quad \text{with} \quad \Psi = \Psi(0) \tag{5.1.2}$$

実際，この両辺を t で微分すれば式(5.1.1)が得られる事は直ぐに分かります．

次に，$t \to \mp\infty$ での粒子の漸近運動を考えましょう．相互作用が局所的ならばこの漸近運動は自由粒子運動になる筈です．この自由粒子運動が実現されるのは粒子が標的から充分遠くへ離れる無限の過去・無限の未来のみですが，漸近運動を記述する手段として仮想的に全ての $t \in (-\infty, \infty)$ について自由粒子運動をする系を導入するのが便利です．この仮想的な自由粒子系の時間発展を記述するハミルトニアンを H_0 とした時，この系の時間に依存した Schrödinger 方程式は次の様になります:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = H_0\psi(t) \tag{5.1.3}$$

この方程式は式(5.1.1)と同様，次と等価です:

$$\psi(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi \quad \text{with} \quad \psi = \psi(0) \tag{5.1.4}$$

以上，2 つのハミルトニアン H と H_0 で時間発展が記述される 2 つの系を導入しましたが，興味があるのは勿論ハミルトニアンが H の系で，特に $t \to \mp\infty$ で自由粒子状態に漸近する状態ベクトル $\Psi(t)$ に興味があります．まず入射粒子状態から始めましょう．散乱過程で登場する入射粒子状態とは，Schrödinger 方程式(5.1.1)の解の内，特に $t \to -\infty$ で或る自由粒子状態 $\psi(t)$ に漸近する解の事を指します:

$$\Psi^{\mathrm{in}}(t) \to \psi(t) \quad \text{as} \quad t \to -\infty \tag{5.1.5}$$

そして，この様な Schrödinger 描像での状態ベクトル $\Psi^{\mathrm{in}}(t)$ の特に $t = 0$ での値 (即ち Heisenberg 描像での状態ベクトル)$\Psi^{\mathrm{in}} = \Psi^{\mathrm{in}}(0)$ を**漸近 in 状態** (**asymptotic in-state**) と呼びます．同様に，散乱過程で登場する放射粒子状態とは，Schrödinger 方程式(5.1.1)の解の内，特に $t \to +\infty$ で或る自由粒子状態 $\psi(t)$ に漸近する解の事を指します:

$$\Psi^{\mathrm{out}}(t) \to \psi(t) \quad \text{as} \quad t \to +\infty \tag{5.1.6}$$

上と同様，この様な Schrödinger 描像での状態ベクトル $\Psi^{\mathrm{out}}(t)$ の特に $t = 0$ での値 $\Psi^{\mathrm{out}} = \Psi^{\mathrm{out}}(0)$ を**漸近 out 状態** (**asymptotic out-state**) と呼びます．そして，物理の問題として興味があるのは，無限の過去 $t \to -\infty$ で $\psi_\beta(t)$ という自由粒子状態に漸近する解 $\Psi^{\mathrm{in}}_\beta(t)$ が，無限の未来 $t \to +\infty$ で別の自由粒子状態 $\psi_\alpha(t)$ として見出される確率振幅 $S_{\alpha\beta}$ です．これは次の内積で与えられます:

$$S_{\alpha\beta} = \lim_{t\to+\infty}(\psi_\alpha(t), \Psi^{\mathrm{in}}_\beta(t)) \tag{5.1.7}$$

但し，α や β は粒子を特徴付ける適当なラベルで，状態ベクトルは 1 に規格化されているとします．次節で見る様に，式(5.1.7)の極限は $(\Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Psi^{\mathrm{in}}_\beta)$ に収束し，更に **S 行列**と呼ばれる演算子の行列要素として表すことが可能で，**S 行列要素**と呼ばれます．第5.3節で議論しますが，ひとたびこの S 行列要素が分かればそれからこの散乱過程の散乱断面積が計算出来て，理論と実験を比較する事が出来ます．

さて，直感的には上で述べた通りなのですが，理論的には極限(5.1.5)(5.1.6)の意味が不明瞭です．どういう極限の下で自由粒子状態に収束するのか，という事をより明確にする必要があります．次節で見るように，ある自由粒子状態 $\psi(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi$ が存在して，状態ベクトル $\Psi^{\mathrm{as}}(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Psi^{\mathrm{as}}$ $(\mathrm{as} = \mathrm{in}, \mathrm{out})$ が $t \to \mp\infty$ で $\psi(t)$ に **強収束** (**strong convergence**) する時，Ψ^{as} を漸近 in/out 状態と定義します．与えられた相互作用系に漸近 in/out 状態が存在するか否かは，その様に強収束する状態ベクトルが存在するか否かという問題に帰着されます．今後は用語の簡略化の為，漸近 in/out 状態を総称して単に**漸近状態** (**asymptotic state**) と呼ぶ事にしましょう．

(弱い) 漸近的完全性

Schrödinger 方程式(5.1.1)で記述される元々興味がある量子力学系の状態ベクトルの集合を $\mathcal{H}$，$t \to \mp\infty$ での漸近運動を記述する仮想的な自由粒子系の状態ベクトルの集合を $\mathcal{H}_0$ と記すことにしましょう．この時，無限の過去 $t \to -\infty$ で自由粒子状態に漸近する状態ベクトル (漸近 in 状態) の集合を $\mathcal{H}_{\mathrm{in}} \subset \mathcal{H}$ と書くことにします:

$$\mathcal{H}_{\mathrm{in}} = \left\{ \Psi^{\mathrm{in}} \in \mathcal{H} : \begin{array}{l} \text{ある自由粒子状態 } \psi \in \mathcal{H}_0 \text{ が存在して} \\ \Psi^{\mathrm{in}}(t) \to \psi(t) \quad \text{as} \quad t \to -\infty \end{array} \right\} \tag{5.1.8}$$

同様に，無限の未来 $t \to +\infty$ で自由粒子状態に漸近する状態ベクトル (漸近 out 状態) の集合を $\mathcal{H}_{\mathrm{out}} \subset \mathcal{H}$ と書きましょう:

$$\mathcal{H}_{\mathrm{out}} = \left\{ \Psi^{\mathrm{out}} \in \mathcal{H} : \begin{array}{l} \text{ある自由粒子状態 } \psi \in \mathcal{H}_0 \text{ が存在して} \\ \Psi^{\mathrm{out}}(t) \to \psi(t) \quad \text{as} \quad t \to +\infty \end{array} \right\} \tag{5.1.9}$$

この 2 つの状態ベクトルの空間が実は一致する時，即ち，次の等号が成り立つ時，

$$\mathcal{H}_{\text{in}} = \mathcal{H}_{\text{out}} \tag{5.1.10}$$

相互作用系は**弱い漸近的完全性** (**weak asymptotic completeness**) を示す，と言います．直感的には無限の過去で相互作用が切れて自由粒子運動をしていた状態は，(標的に捕捉される事無く) 無限の未来でも相互作用が切れて自由粒子運動をするだろう，と期待したくなります．この素朴な期待を保証する為の条件が上の弱い漸近的完全性です．ここで，「弱い (weak)」という形容詞が付いているのはどういう事か気になるでしょう．いわゆる漸近的完全性には更に強い条件が課されるのですが，それを見る為にまず束縛状態 (bound state) の状態ベクトルの集合 $\mathcal{H}_{\text{bound}} \subset \mathcal{H}$ を導入しましょう．これは元々興味がある相互作用系のハミルトニアン H の (ノルムが有限な) 固有ベクトルの集合です:

$$\mathcal{H}_{\text{bound}} = \{\Psi \in \mathcal{H} : H\Psi = E\Psi\} \tag{5.1.11}$$

この $\mathcal{H}_{\text{bound}}$ の直交補空間が $\mathcal{H}_{\text{in/out}}$ である時，即ち，次の等号が成り立つ時，

$$\mathcal{H}_{\text{in}} = \mathcal{H}_{\text{out}} = \mathcal{H}_{\text{bound}}^{\perp} \tag{5.1.12}$$

相互作用系は**漸近的完全性** (**asymptotic completeness**) を示す，と言います[*2]．これは元々興味がある相互作用系の全状態ベクトルの空間 $\mathcal{H}$ が次の様な直和で表される事を意味します:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{in}} \oplus \mathcal{H}_{\text{bound}} = \mathcal{H}_{\text{out}} \oplus \mathcal{H}_{\text{bound}} \tag{5.1.13}$$

直感的には束縛状態は特定の空間領域に局在して存在しているため散乱現象には寄与せず，その様な束縛状態を除いた状態ベクトルだけが散乱現象に寄与するだろうと期待したくなります．この素朴な期待を保証するための条件が上の漸近的完全性です．与えられた相互作用系が本当に (弱い) 漸近的完全性を示すのかどうかは非常に非自明な問題で，判定条件は存在しますが多くの場合仮定します．

漸近状態の一意性と S 行列

どんな自由粒子状態を持って来ても，それを漸近的に実現する状態ベクトル $\Psi(t)$ が必ず 1 つ存在するとしましょう．即ち，任意の自由粒子状態 $\psi \in \mathcal{H}_0$ に対して必ず或る漸近状態 $\Psi^{\text{as}} \in \mathcal{H}_{\text{as}}$ 存在し，それが一意的に定まるとします．すると，自由粒子状態 $\psi \in \mathcal{H}_0$ と漸近状態 $\Psi^{\text{as}} \in \mathcal{H}_{\text{as}}$ を 1 対 1 に対応付ける全単射 (bijection)Ω_{as} が定義出来ます:

$$\Omega_{\text{in}} : \mathcal{H}_0 \to \mathcal{H}_{\text{in}} \tag{5.1.14a}$$
$$\Omega_{\text{out}} : \mathcal{H}_0 \to \mathcal{H}_{\text{out}} \tag{5.1.14b}$$

更に弱い漸近的完全性(5.1.10)も成り立つと仮定しましょう．即ち，$\mathcal{H}_0$ と $\mathcal{H}_{\text{in}}$ は 1 対 1 対応をし，$\mathcal{H}_0$ と $\mathcal{H}_{\text{out}}$ も 1 対 1 対応をし，且つ $\mathcal{H}_{\text{in}} = \mathcal{H}_{\text{out}}$ であると仮定します．この時，Ω_{as} を使って自由粒子状態から自由粒子状態への全単射 S が定義できます:[*3]

$$S = \Omega_{\text{out}}^{-1}\Omega_{\text{in}} : \mathcal{H}_0 \to \mathcal{H}_0 \tag{5.1.15}$$

通常，この全単射 S を **S 行列** (**S-matrix**) と呼びます．但し，S 行列の定義には幾つか流儀があって，文献によっては $\Omega_{\text{out}}\Omega_{\text{in}}^{-1} : \mathcal{H}_{\text{in}} \to \mathcal{H}_{\text{out}}$ を S 行列と呼んでいたりもします．実際，(量子力学では殆ど登場しませんが) 場の量子論では次の漸近 out 状態から漸近 in 状態への全単射 S_{H} も登場します:

$$S_{\text{H}} = \Omega_{\text{in}}\Omega_{\text{out}}^{-1} : \mathcal{H}_{\text{out}} \to \mathcal{H}_{\text{in}} \tag{5.1.16}$$

この S_{H} を **Heisenberg 描像での S 行列**と呼びます．一方，式(5.1.15)で定義される S を S_{H} と区別する為に **Schrödinger 描像での S 行列**と呼びます．摂動論で登場する S 行列の Dyson 級数表示は S に対する冪級数表示で，一方，場の量子論で登場する非摂動論的にも成り立つ LSZ 公式や Haag-Ruelle 散乱理論で扱う S 行列は S_{H} です．S と S_{H} は相似変換 $S = \Omega_{\text{in}}^{-1}S_{\text{H}}\Omega_{\text{in}}$ で結びついているので，この意味で両者は大差無くどちらを使うかは殆ど趣味の問題ですが，この講義ノートでは両者を明確に区別して調べていきます．殆どの量子力学・場の量子論の教科書では S と S_{H} を区別せず混同しているので注意しましょう．

[*2] 基本的に $\mathcal{H}_{\text{in/out}}$ は H の連続スペクトルに属する状態ベクトルの空間で，一方，$\mathcal{H}_{\text{bound}}$ は H の離散スペクトルに属する状態ベクトルの空間です．両者は互いに直交するので漸近的完全性の条件(5.1.12)は弱い漸近的完全性の条件(5.1.10)と同じなのではないかと思うかもしれません．しかし，数学的には漸近的完全性は**特異スペクトル** (**singular spectrum**) に属する状態ベクトルの空間を含まないという事を含んでいて，式(5.1.10)よりも強い条件になっているのです．特異スペクトルとはなんぞやと思うでしょうが，これを説明するには難しい測度論が必要なのでここでは説明しません．

[*3] $S = \Omega_{\text{out}}^{-1}\Omega_{\text{in}}$ は $\Omega_{\text{in}} : \mathcal{H}_0 \to \mathcal{H}_{\text{in}}$ と $\Omega_{\text{out}}^{-1} : \mathcal{H}_{\text{out}} \to \mathcal{H}_0$ の合成写像なので，正確には弱い漸近的完全性が成り立たずとも $\mathcal{H}_{\text{in}} \subset \mathcal{H}_{\text{out}}$ であれば S は定義できます．(但し，この場合 S はユニタリー演算子にはなりません．) 一方，$S_{\text{H}} = \Omega_{\text{in}}\Omega_{\text{out}}^{-1}$ は $\Omega_{\text{out}}^{-1} : \mathcal{H}_{\text{out}} \to \mathcal{H}_0$ と $\Omega_{\text{in}} : \mathcal{H}_0 \to \mathcal{H}_{\text{in}}$ の合成写像なので，Ω_{as} が全単射である限り $\mathcal{H}_{\text{in}} \neq \mathcal{H}_{\text{out}}$ でも定義できます．

上の議論をまとめると，漸近状態の一意性が言えれば全単射 $\Omega_{\mathrm{as}} : \mathcal{H}_0 \to \mathcal{H}_{\mathrm{as}}$ が定義でき，(弱い) 漸近的完全性の条件と合わせることで S 行列も定義できます．逆に $\mathcal{H}_0$ から $\mathcal{H}_{\mathrm{as}}$ への全単射 Ω_{as} があれば漸近状態の一意性が言え，S 行列も定義できます．従って，漸近状態の一意性及び S 行列が定義できるか否かという問題は，全単射 Ω_{as} が存在するか否かという問題に帰着されます．次節で見るように漸近状態が存在すればそれは一意的に定まり，($\mathcal{H}_{\mathrm{bound}} = \varnothing$ の時は)Ω_{as} はユニタリー演算子として実現され，(弱い) 漸近的完全性の条件の下で S 及び S_{H} もユニタリー演算子になります．以上が散乱理論の大枠で，次節でまず漸近状態を構成して，その後，演算子 $\{\Omega_{\mathrm{as}}, S, S_{\mathrm{H}}\}$ を構成する，という事をやっていきます．その後，第5.3節で S 行列要素と散乱断面積の関係を見て行きます．

5.2　漸近条件と S 行列

前節で述べた様に，散乱理論では Schrödinger 描像での状態ベクトル (または Heisenberg 描像での演算子) の無限の過去・無限の未来 $t \to \mp\infty$ での漸近挙動を調べるので，必然的に色々な極限操作を取り扱う事になります．この極限操作が非常に微妙で，これを曖昧にしていると直ぐに何をやっているのか分からなくなります．この極限操作を明確にしながら散乱理論の基本的性質を明らかにしていきましょう．以下では「不等式を駆使して等式を証明する」という事を頻繁にやっていきます．この節の内容はこれまでの章と比べてかなり数学的ですが，使う道具は主にノルムの正定値性，三角不等式，Cauchy-Schwarz の不等式，そして Cauchy の収束判定法など基本的なものばかりなので[*4]，慣れさえすれば証明や計算も充分追うことが出来ると思います．

5.2.1　漸近条件

前節で述べた様に，局所相互作用で支配される散乱理論で重要なのは，Schrödinger 方程式(5.1.1)の解のうち $t \to -\infty$ ($t \to +\infty$) の無限の過去 (無限の未来) で自由粒子状態に収束する状態ベクトル $\Psi^{\mathrm{in/out}}$ です．前節ではこれを漸近 in 状態 (漸近 out 状態) と呼び，上の極限を乱暴に

$$\Psi^{\mathrm{in/out}}(t) \to \psi(t) \quad \text{as} \quad t \to \mp\infty \tag{5.2.1}$$

と書きましたが，これではどういう意味で右辺に収束するのかが曖昧です．以下では，まず $t \to \mp\infty$ で自由粒子状態に一致するとはどういう事かを明らかにし，漸近状態の定義を与えていきましょう．

まず 2 つの状態ベクトル Ψ と Φ が等しいとは，勿論 $\Psi = \Phi$ ですが，これは $\Psi - \Phi = 0$ とも書けます．$\Psi - \Phi = 0$ なら両辺のノルムを取って $\|\Psi - \Phi\| = 0$ ですが，逆に $\|\Psi - \Phi\| = 0$ ならノルムの正定値性より $\Psi - \Phi = 0$ を意味します．つまり $\Psi = \Phi$ と $\|\Psi - \Phi\| = 0$ は同値です．これを踏まえて，状態ベクトル $\Psi^{\mathrm{as}}(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi^{\mathrm{as}}$ と自由粒子状態 $\psi(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\psi$ が $t \to \mp\infty$ で一致する，という事を次の様に定義しましょう:

$$\lim_{t\to\mp\infty} \| \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi^{\mathrm{as}} - \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\psi\| = 0 \tag{5.2.2}$$

ここで，$\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ と $\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$ はユニタリー演算子であることを使うと，式(5.2.2)のノルムは次の様に書き換えることが出来ます:

$$\begin{aligned} \| \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi^{\mathrm{as}} - \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\psi\| &= \|\Psi^{\mathrm{as}} - \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\psi\| \\ &= \| \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi^{\mathrm{as}} - \psi\| \end{aligned} \tag{5.2.3}$$

従って，式(5.2.2)は次の 2 つと等価です:

$$\lim_{t\to\mp\infty} \| \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\psi - \Psi^{\mathrm{as}}\| = 0 \tag{5.2.4a}$$

$$\lim_{t\to\mp\infty} \| \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0 t}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi^{\mathrm{as}} - \psi\| = 0 \tag{5.2.4b}$$

これらの式は，時間に依存したベクトル $\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\psi$ と $\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0 t}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi$ がそれぞれノルムの下でベクトル Ψ^{as} と ψ に収束する事を表します．この様にノルムの下で収束する事を**強収束** (**strong convergence**) と呼び，次の様に書きます:

$$\Psi^{\mathrm{as}} = \operatorname*{s\text{-}lim}_{t\to\mp\infty} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\psi \tag{5.2.5a}$$

$$\psi = \operatorname*{s\text{-}lim}_{t\to\mp\infty} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi^{\mathrm{as}} \tag{5.2.5b}$$

ここで，s-lim は強収束による極限である事を強調する為の記号で，**強極限** (**strong limit**) と呼びます．

[*4] この辺の数学は解析学の序盤で出て来る ϵ-δ 論法や Cauchy 列等の周辺の話題です．忘れてしまった人は復習しておくと良いでしょう．

さて，式(5.2.4a)(5.2.4b)は式(5.2.2)と等価ですが，この 2 つの表式は「読み方」が異なります．式(5.2.4a)は自由粒子状態 ψ が与えられた時，時間に依存したベクトル $\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi$ の $t\to\mp\infty$ の強極限で与えられるのが漸近状態 Ψ^{as} である，という事を表します．一方，式(5.2.4b)は漸近状態 Ψ^{as} が与えられた時，時間に依存したベクトル $\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Psi^{\mathrm{as}}$ の $t\to\mp\infty$ の強極限で与えられるのが自由粒子状態 ψ である，という事を表します．ところで，今興味があるのは Ψ^{as} をどうやって構成するか，という問題なので，式(5.2.4a)が漸近状態の定義を与えるわけです．この事は重要なので，次の定義という形で明確に述べておきましょう:

漸近状態の定義

状態ベクトル $\Psi^{\mathrm{as}}\in\mathcal{H}$ が漸近状態であるとは，或る自由粒子状態 $\psi\in\mathcal{H}_0$ が存在し，

$$\lim_{t\to\mp\infty}\|\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi-\Psi^{\mathrm{as}}\|=0 \tag{5.2.6}$$

が成り立つ事を言う．言い換えると，時間に依存したベクトル $\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi$ が $t\to\mp\infty$ で強収束するとき，その極限を漸近状態と呼ぶ．この時，漸近状態を次の様に記す:

$$\Psi^{\mathrm{as}}=\operatorname*{s\text{-}lim}_{t\to\mp\infty}\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi \tag{5.2.7}$$

次節で詳しく見る様に，この漸近状態が分かればそれを使って S 行列要素が計算出来ます．そこで理論的に問題になるのは，上で定義した漸近状態がどういう場合に存在するのか，即ち，ベクトル $\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi$ はどういう場合に強収束するのか，強収束する場合その極限値は一意的なのか，一意的に存在する場合どうやって漸近状態を具体的に構成するのか，といった事で，これらを明らかにしなければなりません．以下，これらについて一つ一つ見ていきましょう．

漸近状態の一意性

式(5.2.6)で定義した漸近状態 Ψ^{as} は，存在する場合，一意的に定まります．これは簡単に示す事が出来るので，まずこれを見ていきましょう．

まず $t\to\mp\infty$ で自由粒子状態 ψ に収束する漸近状態が 2 つあったとしましょう．即ち，1 つの $\psi\in\mathcal{H}_0$ に対して

$$\lim_{t\to\mp\infty}\|\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi-\Psi_1^{\mathrm{as}}\|=0 \tag{5.2.8a}$$

$$\lim_{t\to\mp\infty}\|\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi-\Psi_2^{\mathrm{as}}\|=0 \tag{5.2.8b}$$

を満たす漸近状態が Ψ_1^{as} と Ψ_2^{as} の 2 つあったと仮定します．今から示したいのは，実は $\Psi_1^{\mathrm{as}}=\Psi_2^{\mathrm{as}}$ である，という事ですが，これを示す為にまずこの 2 つの漸近状態の差のノルムを評価しましょう．次の様に計算します:

$$\begin{aligned}\|\Psi_1^{\mathrm{as}}-\Psi_2^{\mathrm{as}}\|&=\|\Psi_1^{\mathrm{as}}-\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi+\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi-\Psi_2^{\mathrm{as}}\|\\&\le\|\Psi_1^{\mathrm{as}}-\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi\|+\|\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi-\Psi_2^{\mathrm{as}}\|\\&\to 0\quad\text{as}\quad t\to\mp\infty\end{aligned} \tag{5.2.9}$$

但し，2 行目で三角不等式 $\|\Psi+\Phi\|\le\|\Psi\|+\|\Phi\|$ を，3 行目で仮定(5.2.8a)(5.2.8b)を用いました．ここで，Hilbert 空間のノルムは正定値である事を思い出すと，上の式は $0\le\|\Psi_1^{\mathrm{as}}-\Psi_2^{\mathrm{as}}\|\le 0$，即ち，

$$\|\Psi_1^{\mathrm{as}}-\Psi_2^{\mathrm{as}}\|=0 \tag{5.2.10}$$

を意味します．然るに，ノルムの正定値性よりノルムが零になる状態ベクトルは零ベクトルしかありませんから，上の式は $\Psi_1^{\mathrm{as}}-\Psi_2^{\mathrm{as}}=0$ を意味します．これで 2 つの漸近状態は一致する事が分かりました．以上の結果を次の形で明確に述べておきましょう:

漸近状態の一意性

漸近状態は存在するならば唯一つである．即ち，1 つの自由粒子状態 ψ に対して

$$\lim_{t\to\mp\infty}\|\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi-\Psi_1^{\mathrm{as}}\|=0 \tag{5.2.11a}$$

且つ

$$\lim_{t\to\mp\infty}\|\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi-\Psi_2^{\mathrm{as}}\|=0 \tag{5.2.11b}$$

ならば $\Psi_1^{\mathrm{as}}=\Psi_2^{\mathrm{as}}$.

漸近状態が存在する為の十分条件

次に漸近状態 $\Psi^{\rm as}$ はどのような時に存在するのか，その存在条件を吟味してみましょう．

式(5.2.7)で見た様に，漸近状態 $\Psi^{\rm as}$ はベクトル $\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi$ の $t\to\mp\infty$ での強極限で与えられるので，この極限を調べる為にまず次の演算子を導入しましょう:

$$\Omega(t) := \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \tag{5.2.12}$$

以下，この演算子の表式を強極限が調べ易い様に書き換えていきます．まず式(5.2.12)を t で微分しましょう．すると次が得られます:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\Omega(t) &= \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,H\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} - \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,H_0\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\\ &= \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht}(H-H_0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\end{aligned} \tag{5.2.13}$$

この両辺を $t=0$ から t まで積分しましょう．積分すると次の様になります:

$$\int_0^t d\tau\,\frac{d}{d\tau}\Omega(\tau) = \frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}H\tau}(H-H_0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0\tau} \tag{5.2.14}$$

左辺の積分は $\Omega(t)-\Omega(0)$ で，定義(5.2.12)から $\Omega(0)=I$ (I: 恒等演算子) なので，I を右辺に移項する事で次の等式が得られます:

$$\Omega(t) = I + \frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}H\tau}(H-H_0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0\tau} \tag{5.2.15}$$

次にこの両辺を自由粒子状態 $\psi\in\mathcal{H}_0$ に作用させましょう．すると次式を得ます:

$$\Omega(t)\psi = \psi + \frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H\tau}(H-H_0)\psi(\tau) \tag{5.2.16}$$

但し，$\psi(\tau)=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0\tau}\,\psi$ を使いました．定義から漸近状態は $\Psi^{\rm as}=\text{s-lim}_{t\to\mp\infty}\,\Omega(t)\psi$ なので，漸近状態が存在するか否かという問題は式(5.2.16)右辺の状態ベクトルが $t\to\mp\infty$ で強収束するか否かという問題になります．この右辺の状態ベクトルが強収束するか否かを見る為には **Cauchy の収束判定法**を使うのが一番簡単です．即ち，任意の t_1,t_2 に対して

$$\|\Omega(t_1)\psi-\Omega(t_2)\psi\|\to 0 \quad \text{as} \quad t_1,t_2\to\mp\infty \tag{5.2.17}$$

が言えれば，$\Omega(t)\psi$ は強収束し，その極限が (唯一つ) 存在します．これを満たす為の条件を見つけましょう．まず，式(5.2.16)を使うと $\Omega(t_1)\psi$ と $\Omega(t_2)\psi$ の差は次の様に書けます:

$$\begin{aligned}\Omega(t_1)\psi-\Omega(t_2)\psi &= \frac{i}{\hbar}\int_0^{t_1} dt\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}(H-H_0)\psi(t) - \frac{i}{\hbar}\int_0^{t_2} dt\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}(H-H_0)\psi(t)\\ &= \frac{i}{\hbar}\int_{t_2}^{t_1} dt\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}(H-H_0)\psi(t)\end{aligned} \tag{5.2.18}$$

この両辺のノルムを評価すると次の不等式が得られます:

$$\begin{aligned}\|\Omega(t_1)\psi-\Omega(t_2)\psi\| &= \left\|\frac{i}{\hbar}\int_{t_2}^{t_1} dt\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}(H-H_0)\psi(t)\right\|\\ &\le \int_{t_2}^{t_1} dt\left\|\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}(H-H_0)\psi(t)\right\|\\ &= \frac{1}{\hbar}\int_{t_2}^{t_1} dt\,\|(H-H_0)\psi(t)\|\end{aligned} \tag{5.2.19}$$

但し，2 行目で積分に対する三角不等式を用いました．また，一般性を失う事無く $t_1>t_2$ を仮定しました．3 行目の積分が $t_1,t_2\to\mp\infty$ の極限でゼロに収束すれば良い訳ですが，これが満たされるかどうかは勿論 H と H_0 の具体形に依ります．しかし，これが収束する為の十分条件は見積もることが出来ます．十分大きい $|t|$ に対してある正数 C と ϵ が存在し，

$$\|(H-H_0)\psi(t)\| \le C|t|^{-1-\epsilon}, \quad \epsilon>0 \tag{5.2.20}$$

が満たされる時，積分(5.2.19)は収束します．実際，計算してみると

$$\int_{t_2}^{t_1} dt\,\|(H-H_0)\psi(t)\| \le C\int_{t_2}^{t_1} dt\,|t|^{-1-\epsilon} = \frac{C}{\epsilon}\left(\frac{1}{|t_2|^\epsilon}-\frac{1}{|t_1|^\epsilon}\right)\to 0 \quad \text{as} \quad t_1,t_2\to\pm\infty \tag{5.2.21}$$

となって，$\epsilon > 0$ なら $\|\Omega(t_1)\psi - \Omega(t_2)\psi\| \to 0$ が言えます．従って，条件(5.2.20)が満たされている時ベクトル $\Omega(t)\psi$ は正しく強収束して極限が存在する事が分かりました．またこの時，式(5.2.16)より漸近状態は次式で与えられる事も分かります:

$$\Psi^{\text{as}} = \operatorname*{s-lim}_{t\to\mp\infty} \Omega(t)\psi = \psi + \frac{i}{\hbar}\int_0^{\mp\infty} dt\, \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}(H - H_0)\psi(t) \tag{5.2.22}$$

以上より，ノルム $\|(H - H_0)\psi(t)\|$ が $|t| \to \infty$ で $1/|t|$ よりも速くゼロに収束する時，漸近状態が存在して式(5.2.22)で与えられる事が分かりました．これは重要なので次の形で明確に述べておきましょう:

漸近状態が存在する為の十分条件

十分大きい $|t|$ に対して或る定数 $C > 0$ と $\epsilon > 0$ が存在し，不等式

$$\|(H - H_0)\psi(t)\| \le C|t|^{-1-\epsilon} \tag{5.2.23}$$

が成り立つ時，漸近状態は存在して次式で与えられる:

$$\Psi^{\text{as}} = \psi + \frac{i}{\hbar}\int_0^{\mp\infty} dt\, \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}(H - H_0)\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\, \psi, \quad \text{as} = \text{in}, \text{out} \tag{5.2.24}$$

以上，一般論を繰り広げて来たので，ここで簡単で重要な例を 1 つ挙げておきましょう．

例: 短距離ポテンシャル

上で漸近状態が存在する為の十分条件を挙げたので，それを使って 1 粒子系のポテンシャル問題で漸近ハミルトニアン H_0 として自由ハミルトニアンを持って来た時に漸近状態がいつ存在するのか調べてみましょう．考えるのは次のハミルトニアンで記述される 1 粒子系です:

$$H = H_0 + V(\boldsymbol{x}) \quad \text{with} \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 \tag{5.2.25}$$

但し，V はポテンシャルで無限遠で冪関数 $1/|\boldsymbol{x}|^\alpha$ よりも速くゼロに収束するとします．即ち，充分大きい $|\boldsymbol{x}|$ に対して或る正数 C と α が存在して次の不等式を満たすとします:

$$|V(\boldsymbol{x})| \le \frac{C}{|\boldsymbol{x}|^\alpha} \quad \text{for large enough } |\boldsymbol{x}| \tag{5.2.26}$$

$\alpha > 0$ である限り $1/|\boldsymbol{x}|^\alpha$ は無限遠でゼロに収束するので，どんな正数 α に対してもこの系の粒子は無限遠で自由粒子として振る舞うだろうと期待したくなりますが，実はそうではありません．今から見て行く様に，$\alpha > 1$ の場合は任意次元 d で条件(5.2.23)が満たされ漸近状態は存在しますが，$0 < \alpha \le 1$ の場合は条件(5.2.23)を満たさないのです．

さて，式(5.2.23)を評価したいわけですが，これを評価する為には $\psi(t)$ を知る必要があります．即ち，次の自由ハミルトニアンに対する時間に依存した Schrödinger 方程式を解く必要があります:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\psi(\boldsymbol{x}, t) \tag{5.2.27}$$

但し，$\psi(\boldsymbol{x}, t)$ は状態ベクトル $\psi(t)$ の座標表示です．まずこの Schrödinger 方程式を解きましょう．$t = 0$ での初期条件を $\psi(\boldsymbol{x}, 0) = \psi(\boldsymbol{x})$ とした時，この方程式の解は次の時間並進 $\psi(\boldsymbol{x}, 0) \mapsto \psi(\boldsymbol{x}, t)$ を記述する積分変換で与えられます:

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = \int d^d\boldsymbol{y}\, K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}; t)\psi(\boldsymbol{y}) \tag{5.2.28}$$

ここで，K は上の積分変換の積分核 (integral kernel) で，**Feynman 核** (**Feynman kernel**) と呼ばれるものです．これは次を満たすものとして定義されます:

$$\text{(Schrödinger 方程式)} \quad \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{x}}^2\right) K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}; t) = 0 \tag{5.2.29a}$$

$$\text{(初期条件)} \quad K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}; 0) = \delta^d(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) \tag{5.2.29b}$$

ここで，記号 $\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{x}}$ は変数 $\boldsymbol{x}$ に作用する微分 $\boldsymbol{\nabla}$ であるという事を強調する為の記号です．この Feynman 核の性質を使うと，式(5.2.28)が初期条件 $\psi(\boldsymbol{x}, 0) = \psi(\boldsymbol{x})$ の下での Schrödinger 方程式 $(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2)\psi(\boldsymbol{x}, t) = 0$ の解である事は直ぐに分かります．従って，問題

は式(5.2.29a)(5.2.29b)を満たす Feynman 核を求めよ，という問題に帰着されますが，この問題は簡単に解くことが出来て，答えは次の積分で表されます:[*5]

$$K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};t)=\int\frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}t+\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\right)\tag{5.2.30}$$

この Feynman 核の積分表示を式(5.2.28)に代入すると次の様になります:

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},t)&=\int d^d\boldsymbol{y}\int\frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}t+\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}\,\psi(\boldsymbol{y})\\&=\int\frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}t+\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}\,\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})\\&=\int\frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}tE(\boldsymbol{p})}\,\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})\end{aligned}\tag{5.2.31}$$

但し，$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})$ は $\psi(\boldsymbol{x})$ の Fourier 変換で，次式で与えられます:

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})=\int d^d\boldsymbol{y}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{y}}\,\psi(\boldsymbol{y})\tag{5.2.32}$$

また，$E(\boldsymbol{p})$ は次式で定義されます:

$$E(\boldsymbol{p})=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v}\quad\text{with}\quad\boldsymbol{v}=\frac{\boldsymbol{x}}{t}\tag{5.2.33}$$

以下，$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{x}/t$ を固定して，まず $\psi(\boldsymbol{x},t)$ の $|t|\to\infty$ での振る舞いを調べましょう．その後，それを用いてノルム $\|(H-H_0)\psi(t)\|$ の $|t|\to\infty$ での振る舞いを調べることで条件(5.2.23)を満たすかどうか吟味します．

さて，積分(5.2.31)の $|t|\to\infty$ での振る舞いですが，この様な振る舞いを調べる時は**停留位相法 (stationary phase method)** を用いるのが常套手段です．まず，$E(\boldsymbol{p})$ の停留点，即ち，$\frac{\partial E}{\partial p_i}=0$ となる点 $\boldsymbol{p}=\bar{\boldsymbol{p}}$ を求めましょう．まず $E(\boldsymbol{p})$ の 1 階微分を計算すると次の様になります:

$$\frac{\partial E(\boldsymbol{p})}{\partial p_i}=\frac{p_i}{m}-v_i\tag{5.2.34}$$

従って，停留点 $\boldsymbol{p}=\bar{\boldsymbol{p}}$ は次で与えられます:

$$\bar{\boldsymbol{p}}=m\boldsymbol{v}\tag{5.2.35}$$

この停留点近傍で $E(\boldsymbol{p})$ を Taylor 展開すると次が得られます:

$$\begin{aligned}E(\boldsymbol{p})&=E(m\boldsymbol{v})+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2E(m\boldsymbol{v})}{\partial p_i\partial p_j}(p_i-mv_i)(p_j-mv_j)\\&=-\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2+\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-m\boldsymbol{v})^2\end{aligned}\tag{5.2.36}$$

同様に，$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})$ もこの停留点近傍で Taylor 展開しましょう:

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})=\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v})+\frac{\partial\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v})}{\partial p_i}(p_i-mv_i)+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v})}{\partial p_i\partial p_j}(p_i-mv_i)(p_j-mv_j)+O(p_i-mv_i)^3\tag{5.2.37}$$

これらを式(5.2.31)に代入して評価していくと次の様になります:

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},t)&=\int\frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}t[-\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2+\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-m\boldsymbol{v})^2]}\left[\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v})+\frac{\partial\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v})}{\partial p_i}(p_i-mv_i)+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v})}{\partial p_i\partial p_j}(p_i-mv_i)(p_j-mv_j)+O(p_i-mv_i)^3\right]\\&=\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}t\frac{m\boldsymbol{v}^2}{2}}\int\frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}t\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}}\left[\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v})+\frac{\partial\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v})}{\partial p_i}p_i+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v})}{\partial p_i\partial p_j}p_ip_j+O(p_i^3)\right]\end{aligned}$$

[*5] 積分(5.2.30)は $\boldsymbol{p}$ について平方完成すれば簡単に実行出来て，答えは次の様になります:

$$K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};t)=\left(\frac{m}{2\pi\hbar it}\right)^{\frac{d}{2}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|^2}{2t}\right)$$

但し，判定条件(5.2.23)を評価するには積分表示(5.2.30)だけで充分で，この章では上の表式は使いません．

$$
\begin{aligned}
&= \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}t\frac{m\boldsymbol{v}^2}{2}} \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}t\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}} \left[\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v}) + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v})}{\partial p_i \partial p_j} p_i p_j + O(p_i^4)\right] \\
&= \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}t\frac{m\boldsymbol{v}^2}{2}} \left[\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v}) \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}t\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}} + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v})}{\partial p_i \partial p_j} \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\, p_i p_j\, \mathrm{e}^{-it\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}} + \cdots\right] \\
&= \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}t\frac{m\boldsymbol{v}^2}{2}} \left[\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v}) \left(\frac{2\hbar m}{t}\right)^{\frac{d}{2}} \int \frac{d^d\boldsymbol{u}}{(2\pi\hbar)^d}\, \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{u}^2} + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2\tilde{\psi}(m\boldsymbol{v})}{\partial p_i \partial p_j} \left(\frac{2\hbar m}{t}\right)^{\frac{d}{2}+1} \int \frac{d^d\boldsymbol{u}}{(2\pi\hbar)^d}\, u_i u_j\, \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{u}^2} + \cdots\right] \\
&= \left(\frac{m}{2\pi\hbar i t}\right)^{\frac{d}{2}} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\boldsymbol{x}^2}{2t}}\, \tilde{\psi}\left(\tfrac{m\boldsymbol{x}}{t}\right)\left[1 + O(\tfrac{1}{t})\right]
\end{aligned}
\tag{5.2.38}
$$

但し，2 行目で $\boldsymbol{p} \to \boldsymbol{p} + m\boldsymbol{v}$ と変数変換し，3 行目で奇関数の積分はゼロになる事を使いました．また，5 行目では $\boldsymbol{u} = (\frac{t}{2\hbar m})^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{p}$ と変数変換し，6 行目では Gauss 積分を実行して 1 項目だけを書きました．この第 1 項目が $|t|$ が十分大きい時の主要な寄与です．これを使って状態ベクトル $(H - H_0)\psi(t) = V\psi(t)$ のノルム 2 乗を評価すると次の様になります:

$$
\begin{aligned}
\|V\psi(t)\|^2 &= \int d^d\boldsymbol{x}\, |V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x},t)|^2 \\
&= \int d^d\boldsymbol{x}\, |V(\boldsymbol{x})|^2 |\psi(\boldsymbol{x},t)|^2 \\
&= \left|\frac{m}{2\pi\hbar t}\right|^d \int d^d\boldsymbol{x}\, |V(\boldsymbol{x})|^2 |\tilde{\psi}(\tfrac{m\boldsymbol{x}}{t})|^2 \left[1 + O(\tfrac{1}{t})\right] \\
&= \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\, |V(\tfrac{t\boldsymbol{p}}{m})|^2 |\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})|^2 \left[1 + O(\tfrac{1}{t})\right] \\
&\le \left|\frac{t}{m}\right|^{-2\alpha} C^2 \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\, |\boldsymbol{p}|^{-2\alpha} |\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})|^2 \quad \text{for large enough } |t|
\end{aligned}
\tag{5.2.39}
$$

但し，3 行目で式(5.2.38)を使い，4 行目で $\boldsymbol{p} = \frac{m\boldsymbol{x}}{t}$ と変数変換しました．また，5 行目でポテンシャルに対する不等式(5.2.26)を代入しました．式(5.2.39)を判定条件(5.2.23)と比較すると，$\alpha > 1$ の時はノルム $\|(H - H_0)\psi(t)\|$ は $|t| \to \infty$ で $1/|t|$ よりも速くゼロに収束するので漸近状態が存在する事が分かります[*6]．この様に，無限遠で $1/|\boldsymbol{x}|$ よりも速くゼロに収束するポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ を**短距離ポテンシャル** (**short range potential**) と呼びます．この短距離ポテンシャルに対しては，$\Psi(t)$ は $|t| \to \infty$ で自由粒子状態に強収束します．これは重要なので次の形で明確に述べておきましょう:

短距離ポテンシャル

十分大きい $|\boldsymbol{x}|$ に対して或る定数 $C > 0$ と $\alpha > 1$ が存在し，不等式

$$
|V(\boldsymbol{x})| \le \frac{C}{|\boldsymbol{x}|^\alpha} \tag{5.2.40}
$$

が成り立つ時，V を短距離ポテンシャルと呼ぶ．この短距離ポテンシャルに対しては $\Psi(t)$ は $|t| \to \infty$ で自由粒子状態に強収束する．

一方，無限遠で $1/|\boldsymbol{x}|$ と同じかそれよりも遅くゼロに収束するポテンシャルを**長距離ポテンシャル** (**long range potential**) と呼びます．長距離ポテンシャルに対しては，$\Psi(t)$ は $|t| \to \infty$ で自由粒子状態に強収束しません．これは，長距離ポテンシャルに対しては漸近運動を記述するハミルトニアンが自由ハミルトニアン $H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ では無い事を意味します．実際，第5.2.5節で見る様に，第3.3.2節で導出した Coulomb 散乱の厳密解の漸近形(3.3.42)は，$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ の時の Lippmann-Schwinger 方程式から得られる漸近形(5.2.115)とは一致しないのです．長距離ポテンシャルの散乱理論は非常に難しいので，この章では短距離ポテンシャルのみを扱う事にします．

5.2.2 Møller 演算子と S 行列

これまでの議論より，条件(5.2.23)が満たされれば漸近状態 $\Psi^{\mathrm{as}} \in \mathcal{H}$ は一意に存在し，式(5.2.24)で与えられる事が分かりました．従って，任意の自由粒子状態 $\psi \in \mathcal{H}_0$ に対して条件(5.2.23)が成り立てば，$\mathcal{H}_0$ から $\mathcal{H}$ への 1 対 1 かつ中への写像 Ω_{as} が次の様に定義出来ます:

$$
\Omega_{\mathrm{as}} : \psi \mapsto \Omega_{\mathrm{as}}\psi := \Psi^{\mathrm{as}} = \psi + \frac{i}{\hbar}\int_0^{\mp\infty} dt\, \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}(H - H_0)\psi(t), \quad \mathrm{as} = \mathrm{in}, \mathrm{out} \tag{5.2.41}
$$

一般に写像 Ω_{as} の**値域** (**range**) を $\operatorname{ran}\Omega_{\mathrm{as}} = \{\Omega_{\mathrm{as}}\psi : \psi \in \mathcal{H}_0\}$ と書きますが，以下ではこれを次の様に書き表す事にします:

$$
\mathcal{H}_{\mathrm{as}} = \operatorname{ran}\Omega_{\mathrm{as}} \subset \mathcal{H}, \quad \mathrm{as} = \mathrm{in}, \mathrm{out} \tag{5.2.42}
$$

[*6] 但し，式(5.2.39)最終行の積分が有限である事を仮定しています．即ち，任意の d に対して $\int d^d\boldsymbol{p}\, |\boldsymbol{p}|^{-2\alpha}|\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})|^2 < \infty$ を仮定しています．

この $\mathcal{H}_{\rm as}$ は前節の式(5.1.8)(5.1.9)で導入した $\mathcal{H}_{\rm as}$ と同じものです．この写像 $\Omega_{\rm as}:\mathcal{H}_0\to\mathcal{H}_{\rm as}$ を **Møller 演算子** (**Møller operator**)[*7] と呼び，$\Omega(t)$ の強極限で得られる事から次の様に記します:

$$\begin{aligned}\Omega_{\rm as}&=\operatorname*{s\text{-}lim}_{t\to\mp\infty}\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\\&=I+\frac{i}{\hbar}\int_0^{\mp\infty}dt\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}(H-H_0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\end{aligned}\tag{5.2.43}$$

以下ではこの Møller 演算子 $\Omega_{\rm as}$ が重要な役割を果たします．まず $\Omega_{\rm as}$ の満たす性質を列挙しましょう:

① 半等長性[*8]

Møller 演算子は**半等長演算子** (**partial isometry**) で，等式 $\|\Omega_{\rm as}\psi\|=\|\psi\|$ を満たします．実際，任意の t に対して

$$\|\Omega(t)\psi\|=\|\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi\|=\|\psi\|\tag{5.2.44}$$

が成り立つので $t\to\mp\infty$ の極限でも成り立ち，$\|\Omega_{\rm as}\psi\|=\|\psi\|$ が言えます．すると，$\|\Omega_{\rm as}\psi\|^2=(\Omega_{\rm as}\psi,\Omega_{\rm as}\psi)=(\psi,\Omega_{\rm as}^\dagger\Omega_{\rm as}\psi)$ なので，これは $\Omega_{\rm as}^\dagger\Omega_{\rm as}$ は $\Omega_{\rm as}\Psi_{\rm bound}=0$ となる束縛状態 $\Psi_{\rm bound}$ を除いた空間の上では恒等演算子として振る舞います．従って，次が成り立ちます:

$$\Omega_{\rm as}^\dagger\Omega_{\rm as}=P_{(\ker\Omega_{\rm as})^\perp}\tag{5.2.45}$$

但し，$\ker\Omega_{\rm as}=\{\Psi:\Omega_{\rm as}\Psi=0\}$ で，$P_{(\ker\Omega_{\rm as})^\perp}$ は $\ker\Omega_{\rm as}$ の直交補空間への射影演算子です．また，証明はしませんが次が成り立ちます:

$$\Omega_{\rm as}\Omega_{\rm as}^\dagger=P_{\mathrm{ran}\,\Omega_{\rm as}}\tag{5.2.46}$$

一般に，式(5.2.45)(5.2.46)を満たす様な演算子を**半等長演算子**と呼びます．但し，束縛状態がなければ Møller 演算子はユニタリー演算子になります．以下では簡単のため束縛状態は無いとして，$\Omega_{\rm as}$ はユニタリー演算子だとしましょう．

② 繋絡(けいらく)関係式

式(5.2.12)で演算子 $\Omega(t)=\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$ を導入しましたが，これは任意の有限な τ,t に対して $\Omega(\tau+t)=\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Omega(\tau)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$ を満たすので，t を固定して $\tau\to\mp\infty$ の極限を取れば次の恒等式

$$\Omega_{\rm as}=\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Omega_{\rm as}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\tag{5.2.47}$$

が得られます．実際，これは直接計算でも確かめる事が出来ます．式(5.2.43)を使うと，上の右辺は次の様に計算されます:

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Omega_{\rm as}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}&=\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\left(I+\frac{i}{\hbar}\int_0^{\mp\infty}d\tau\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H\tau}(H-H_0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0\tau}\right)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\\&=\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}+\frac{i}{\hbar}\int_0^{\mp\infty}d\tau\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H(\tau+t)}(H-H_0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau+t)}\\&=I+\frac{i}{\hbar}\int_0^{t}d\tau\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H\tau}(H-H_0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0\tau}+\frac{i}{\hbar}\int_t^{\mp\infty}d\tau\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H\tau}(H-H_0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0\tau}\\&=I+\frac{i}{\hbar}\int_0^{\mp\infty}d\tau\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H\tau}(H-H_0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0\tau}\\&=\Omega_{\rm as}\end{aligned}\tag{5.2.48}$$

但し，2 行目で式(5.2.15)を使い，また，$\tau\to\tau-t$ と変数変換しました．これで等式(5.2.47)が証明出来ました．式(5.2.47)の両辺に左から $\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ を掛ける事で次の等価な式が得られます:

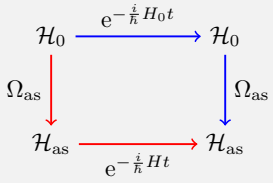
$$\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Omega_{\rm as}=\Omega_{\rm as}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\tag{5.2.49}$$

両辺を t で微分して $t=0$ と置くと，これは次の等式を与えます:

$$H\Omega_{\rm as}=\Omega_{\rm as}H_0\tag{5.2.50}$$

式(5.2.49)や式(5.2.50)の様な一種の絡み合った交換関係を一般に**繋絡関係式** (**intertwining relation**) と呼び，上の $\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ と $\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$ または H と H_0 の様に 2 つの異なる演算子を絡み合わせているものを一般に**繋絡演算子** (**intertwining operator** または **intertwiner**) と呼びます．今の場合，繋絡演算子は Møller 演算子 $\Omega_{\rm as}$ です．上の繋絡関係式(5.2.49)は次のダイアグラムを思い浮かべると視覚的に理解出来ます:

[*7] 波動演算子 (wave operator) 若しくは Møller 波動演算子とも呼ばれます．デンマーク人化学・物理学者 Christian Møller (1904–1980) によって導入されました．Møller の発音は「マーラー」が一番近いでしょうか．



左上の $\mathcal{H}_0$ から出発して，赤矢印の経路に従って Ω_{as} と $\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ を合成した写像が式(5.2.49)左辺の合成写像 $\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Omega_{\mathrm{as}}$ で，青矢印の経路に従って $\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$ と Ω_{as} を合成した写像が式(5.2.49)右辺の合成写像 $\Omega_{\mathrm{as}}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$ です．この 2 つの経路で合成した写像が同じ結果を与えるというのが繋絡関係式(5.2.49)の意味する所です．式(5.2.50)も同様です．上図の様なダイアグラムを一般に**可換図式** (**commutative diagram**) と呼びます．

S 行列

以上，自由粒子状態から漸近状態への 1 対 1 対応 (Møller 演算子)$\Omega_{\mathrm{as}} : \mathcal{H}_0 \to \mathcal{H}_{\mathrm{as}}$ を導入したので，これを使って散乱理論で最も重要な演算子である **S 行列** (**S-matrix**) を導入しましょう．まず，S 行列要素の定義から始めて行きます．

前節でも述べた様に，散乱の量子論で興味があるのは無限の過去で自由粒子として振る舞っていた状態ベクトルが，標的との散乱を経て，無限の未来で再び自由粒子として振る舞う確率振幅です．より明確に言うと，$t \to -\infty$ で或る (Schrödinger 描像での) 自由粒子状態 $\psi_\beta(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\,\psi_\beta$ に強収束するベクトル $\Psi^{\mathrm{in}}_\beta(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Psi^{\mathrm{in}}_\beta$ が，$t \to +\infty$ でまた別の自由粒子状態 $\psi_\alpha(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\,\psi_\alpha$ として見出される確率振幅に興味があります．この確率振幅は次の内積で与えられます:

$$S_{\alpha\beta} := \lim_{t\to+\infty} (\psi_\alpha(t), \Psi^{\mathrm{in}}_\beta(t)) \tag{5.2.51}$$

ここで，ψ_α と Ψ^{in}_β は共にノルムが 1 に規格化されているとします．また，添字 α と β は粒子を特徴付けるインデックスで，全角運動量などをひとまとめにして表しているものと理解しましょう．式(5.2.51)で定義される量を **S 行列要素**と呼びます．今から見て行く様に，式(5.2.51)右辺の極限は $(\Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Psi^{\mathrm{in}}_\beta)$ に収束します．実際，$(\psi_\alpha(t), \Psi^{\mathrm{in}}_\beta(t))$ と $(\Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Psi^{\mathrm{in}}_\beta)$ の差の絶対値を評価すると次の様になります:

$$\begin{aligned}
|(\psi_\alpha(t), \Psi^{\mathrm{in}}_\beta(t)) - (\Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Psi^{\mathrm{in}}_\beta)| &= |(\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\,\psi_\alpha, \Psi^{\mathrm{in}}_\beta) - (\Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Psi^{\mathrm{in}}_\beta)| \\
&= |(\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\,\psi_\alpha - \Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Psi^{\mathrm{in}}_\beta)| \\
&\le \|\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\,\psi_\alpha - \Psi^{\mathrm{out}}_\alpha\|\|\Psi^{\mathrm{in}}_\beta\| \\
&\to 0 \quad \text{as} \quad t \to +\infty
\end{aligned} \tag{5.2.52}$$

但し，1 行目で等式 $(\psi_\alpha(t), \Psi^{\mathrm{in}}_\beta(t)) = (\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\,\psi_\alpha, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Psi^{\mathrm{in}}_\beta) = (\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\,\psi_\alpha, \Psi^{\mathrm{in}}_\beta)$ を使い，3 行目で **Cauchy-Schwarz の不等式** $|(\Psi, \Phi)| \le \|\Psi\|\|\Phi\|$ を使いました．また，4 行目は漸近状態の定義(5.2.6)から従います．式(5.2.52)は，$t \to +\infty$ の極限で 2 つの内積 $(\psi_\alpha(t), \Psi^{\mathrm{in}}_\beta(t))$ と $(\Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Psi^{\mathrm{in}}_\beta)$ は一致する事を意味します．よって，次が得られました:

$$S_{\alpha\beta} = \lim_{t\to+\infty} (\psi_\alpha(t), \Psi^{\mathrm{in}}_\beta(t)) = (\Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Psi^{\mathrm{in}}_\beta) \tag{5.2.53}$$

さて，式(5.2.51)で定義した S 行列要素は式(5.2.53)最右辺に収束する事が分かりましたが，Møller 演算子を使うとこの最右辺の表式は実際に或る演算子の行列要素として表すことが出来ます．$\Psi^{\mathrm{as}} = \Omega_{\mathrm{as}}\psi$ を使うと，まず次の様に表すことが出来ます:

$$\begin{aligned}
S_{\alpha\beta} &= (\Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Psi^{\mathrm{in}}_\beta) \\
&= (\Omega_{\mathrm{out}}\psi_\alpha, \Omega_{\mathrm{in}}\psi_\beta) \\
&= (\psi_\alpha, \Omega^\dagger_{\mathrm{out}}\Omega_{\mathrm{in}}\psi_\beta)
\end{aligned} \tag{5.2.54}$$

また，次の様に表すことも出来ます:

$$\begin{aligned}
S_{\alpha\beta} &= (\Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Psi^{\mathrm{in}}_\beta) \\
&= (\Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Omega_{\mathrm{in}}\psi_\beta) \\
&= (\Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Omega_{\mathrm{in}}\Omega^\dagger_{\mathrm{out}}\Omega_{\mathrm{out}}\psi_\beta) \\
&= (\Psi^{\mathrm{out}}_\alpha, \Omega_{\mathrm{in}}\Omega^\dagger_{\mathrm{out}}\Psi^{\mathrm{out}}_\beta)
\end{aligned} \tag{5.2.55}$$

[*8] ここの半等長性の議論はかなり雑なので，詳細は章末の参考文献を参照してください．良く分からなければ，取り敢えず束縛状態が無ければ Møller 演算子はユニタリーだと思っておけば良いです．

但し，3 行目で $\Omega_{\rm out}^\dagger\Omega_{\rm out}=I$ を使いました．結局，S 行列要素 $S_{\alpha\beta}$ には (定義式(5.2.51)を除いて) 次の 3 つの等価な表式がある事が分かりました:

$$S_{\alpha\beta}=(\Psi_\alpha^{\rm out},\Psi_\beta^{\rm in})=(\psi_\alpha,S\psi_\beta)=(\Psi_\alpha^{\rm out},S_{\rm H}\Psi_\beta^{\rm out}) \tag{5.2.56}$$

但し，演算子 S と $S_{\rm H}$ は次で定義されます:

$$S=\Omega_{\rm out}^\dagger\Omega_{\rm in}:\mathcal{H}_0\to\mathcal{H}_0 \tag{5.2.57a}$$
$$S_{\rm H}=\Omega_{\rm in}\Omega_{\rm out}^\dagger:\mathcal{H}_{\rm out}\to\mathcal{H}_{\rm in} \tag{5.2.57b}$$

演算子 S を **Schrödinger 描像での S 行列**と呼び，演算子 $S_{\rm H}$ を **Heisenberg 描像での S 行列**と呼びます．S と $S_{\rm H}$ は互いに相似変換 $S_{\rm H}=\Omega_{\rm in}S\Omega_{\rm in}^{-1}$ で結び付いているので，この意味で両者は大差ありませんが，この講義ノートでは S と $S_{\rm H}$ は明確に区別します．多くの物理の教科書では S と $S_{\rm H}$ を区別せずに混同しているので注意しましょう．以下ではこの S と $S_{\rm H}$ についてより詳しく見て行きましょう．

5.2.3　Schrödinger 描像での S 行列と Dyson 級数

Schrödinger 描像での S 行列 S に対しては，摂動計算で便利な Dyson 級数表示があります．これを導出しましょう．まず定義から $S=\Omega_{\rm out}^\dagger\Omega_{\rm in}$ で，Møller 演算子は $\Omega_{\rm as}=\text{s-lim}_{t\to\mp\infty}\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$ なので，S は次の演算子の $t\to+\infty$ 及び $t_0\to-\infty$ の極限で与えられます:

$$\begin{aligned}U(t,t_0)&=\Omega^\dagger(t)\Omega(t_0)\\&=\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t_0}\end{aligned} \tag{5.2.58}$$

以下，この演算子を $t\to+\infty$ と $t_0\to-\infty$ の極限が取りやすい表式に書き換えて行きましょう．まず，両辺を t で偏微分すると $U(t,t_0)$ は次の微分方程式を満たすことが分かります:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)&=\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}\,H_0\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t_0}-\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}\,H\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t_0}\\&=-\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}(H-H_0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t_0}\\&=-\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}(H-H_0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t_0}\\&=-\frac{i}{\hbar}H_{\rm I}(t)U(t,t_0)\end{aligned} \tag{5.2.59}$$

但し，$H_{\rm I}(t)$ は次で定義される演算子です:

$$H_{\rm I}(t):=\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}(H-H_0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \tag{5.2.60}$$

次に式(5.2.59)の微分方程式を解きましょう．式(5.2.59)の両辺を $t=t_0$ から t まで積分すると次が得られます:

$$U(t,t_0)=I-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t dt_1\,H_{\rm I}(t_1)U(t_1,t_0) \tag{5.2.61}$$

この等式を逐次的に使っていくと次の形式的冪級数解が得られます:

$$\begin{aligned}U(t,t_0)&=I-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t dt_1\,H_{\rm I}(t_1)\left[I-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t_1}dt_2\,H_{\rm I}(t_2)U(t_2,t_0)\right]\\&=I-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t dt_1\,H_{\rm I}(t_1)+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^t dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\,H_{\rm I}(t_1)H_{\rm I}(t_2)U(t_2,t_0)\\&=\cdots\\&=\sum_{n=0}^\infty\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^t dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_n\,H_{\rm I}(t_1)H_{\rm I}(t_2)\cdots H_{\rm I}(t_n)\\&=\sum_{n=0}^\infty\frac{(-\frac{i}{\hbar})^n}{n!}\int_{t_0}^t dt_1\int_{t_0}^t dt_2\cdots\int_{t_0}^t dt_n\,\mathcal{T}\{H_{\rm I}(t_1)H_{\rm I}(t_2)\cdots H_{\rm I}(t_n)\}\end{aligned} \tag{5.2.62}$$

ここで，$\mathcal{T}$ は**時間順序積** (**time-ordered product**) で次式で定義されます:

$$\mathcal{T}\{H_{\rm I}(t_1)H_{\rm I}(t_2)\cdots H_{\rm I}(t_n)\} := \sum_{\sigma\in S_n}\theta(t_{\sigma(1)}-t_{\sigma(2)})\theta(t_{\sigma(2)}-t_{\sigma(3)})\cdots\theta(t_{\sigma(n-1)}-t_{\sigma(n)})H_{\rm I}(t_{\sigma(1)})H_{\rm I}(t_{\sigma(2)})\cdots H_{\rm I}(t_{\sigma(n)}) \quad (5.2.63)$$

但し，S_n は n 次対称群，σ は対称群の元で添字 $\{1,2,\cdots,n\}$ の置換です．この置換は全部で $n!$ 個あります．Schrödinger 描像での S 行列 S は形式的には式(5.2.62)の $t\to+\infty$ 及び $t_0\to-\infty$ の極限なので，結局次の様な無限級数として表すことが出来ます:

$$\begin{aligned} S &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\frac{i}{\hbar})^n}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\int_{-\infty}^{\infty}dt_2\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_n\,\mathcal{T}\{H_{\rm I}(t_1)H_{\rm I}(t_2)\cdots H_{\rm I}(t_n)\} \\ &=: \mathcal{T}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt\,H_{\rm I}(t)\right) \end{aligned} \quad (5.2.64)$$

但し，$\mathcal{T}\exp(\ \cdot\ )$ は**時間順序指数関数** (**time-ordered exponential**) で，その定義は 1 行目の無限級数です．S 行列に対するこの形式的無限級数表示を **Dyson 級数** (**Dyson series**) と呼び，この Dyson 級数を使うと S 行列要素は次の様に表されます:

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\frac{i}{\hbar})^n}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\int_{-\infty}^{\infty}dt_2\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_n\,(\psi_\alpha,\mathcal{T}\{H_{\rm I}(t_1)H_{\rm I}(t_2)\cdots H_{\rm I}(t_n)\}\psi_\beta) \\ &= (\psi_\alpha,\psi_\beta)-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt\,(\psi_\alpha,H_{\rm I}(t)\psi_\beta)+O(H_{\rm I}^2) \end{aligned} \quad (5.2.65)$$

摂動論ではこの形式的無限級数を使って S 行列要素を計算するのが常套手段で，特に 2 行目の第 2 項目までで切り捨てる $H_{\rm I}$ の 1 次近似を **Born 近似** (**Born approximation**) と呼びます．

5.2.4 Heisenberg 描像での S 行列と漸近演算子

さて，今まで Schrödinger 描像での状態ベクトル $\Psi(t)$ の $t\to\mp\infty$ での振る舞いを調べてきましたが，最後に Heisenberg 描像での演算子 $\mathcal{O}(t)=\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathcal{O}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ の $t\to\mp\infty$ での振る舞いを調べてみましょう．

まず任意の (Schrödinger 描像での) 演算子 $\mathcal{O}$ に対して次式が成り立ちます:[*9]

$$\lim_{t\to\mp\infty}(\Psi_\alpha^{\rm as}(t),\mathcal{O}\Psi_\beta^{\rm as}(t)) = \lim_{t\to\mp\infty}(\psi_\alpha(t),\mathcal{O}\psi_\beta(t)) \quad (5.2.66)$$

これを示しましょう．まず次の等式が成り立つ事に注意します:

$$\begin{aligned} &(\Psi_\alpha^{\rm as}(t),\mathcal{O}\Psi_\beta^{\rm as}(t))-(\psi_\alpha(t),\mathcal{O}\psi_\beta(t)) \\ &=(\Psi_\alpha^{\rm as}(t)-\psi_\alpha(t),\mathcal{O}\Psi_\beta^{\rm as}(t))+(\psi_\alpha(t),\mathcal{O}(\Psi_\beta^{\rm as}(t)-\psi_\beta(t))) \\ &=(\Psi_\alpha^{\rm as}(t)-\psi_\alpha(t),\mathcal{O}\Psi_\beta^{\rm as}(t))+(\mathcal{O}^\dagger\psi_\alpha(t),\Psi_\beta^{\rm as}(t)-\psi_\beta(t)) \end{aligned} \quad (5.2.67)$$

この等式を使うと，内積 $(\Psi_\alpha^{\rm as}(t),\mathcal{O}\Psi_\beta^{\rm as}(t))$ と $(\psi_\alpha(t),\mathcal{O}\psi_\beta(t))$ の差の絶対値は次の様に評価出来ます:[*10]

$$\begin{aligned} &\left|(\Psi_\alpha^{\rm as}(t),\mathcal{O}\Psi_\beta^{\rm as}(t))-(\psi_\alpha(t),\mathcal{O}\psi_\beta(t))\right| \\ &=\left|(\Psi_\alpha^{\rm as}(t)-\psi_\alpha(t),\mathcal{O}\Psi_\beta^{\rm as}(t))+(\mathcal{O}^\dagger\psi_\alpha(t),\Psi_\beta^{\rm as}(t)-\psi_\beta(t))\right| \\ &\le\left|(\Psi_\alpha^{\rm as}(t)-\psi_\alpha(t),\mathcal{O}\Psi_\beta^{\rm as}(t))\right|+\left|(\mathcal{O}^\dagger\psi_\alpha(t),\Psi_\beta^{\rm as}(t)-\psi_\beta(t))\right| \\ &\le\|\Psi_\alpha^{\rm as}(t)-\psi_\alpha(t)\|\|\mathcal{O}\Psi_\beta^{\rm as}(t)\|+\|\mathcal{O}^\dagger\psi_\alpha(t)\|\|\Psi_\beta^{\rm as}(t)-\psi_\beta(t)\| \\ &\to 0\quad\text{as}\quad t\to\mp\infty \end{aligned} \quad (5.2.68)$$

但し，3 行目で任意の複素数 z と w に対する三角不等式 $|z+w|\le|z||w|$ を使い，4 行目で Cauchy-Schwarz の不等式 $|(\Psi,\Phi)|\le\|\Psi\|\|\Phi\|$ を使いました．また，5 行目は漸近状態の定義(5.2.2)から従います．以上で式(5.2.66)が示せました．ところで，式(5.2.66)に現れる行列要素 $(\Psi_\alpha^{\rm as}(t),\mathcal{O}\Psi_\beta^{\rm as}(t))$ と $(\psi_\alpha(t),\mathcal{O}\psi_\beta(t))$ はそれぞれ次の様に書き換える事が出来ます:

$$(\Psi_\alpha^{\rm as}(t),\mathcal{O}\Psi_\beta^{\rm as}(t)) = (\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Psi_\alpha^{\rm as},\mathcal{O}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Psi_\beta^{\rm as})$$

[*9] 正確には $\mathcal{O}$ は任意の演算子ではなく，**有界作用素** (**bounded operator**) と呼ばれるクラスの演算子でなければここでの議論は成り立ちません．(有界作用素とは任意のベクトル ψ に対して $\|\mathcal{O}\psi\|<\infty$ が成り立つ演算子のことを指します．より正確には，任意のベクトル ψ に対して或る正数 M が存在して $\|\mathcal{O}\psi\|\le M\|\psi\|$ と書ける時，$\mathcal{O}$ を有界作用素と呼びます．また，M の下限を $\mathcal{O}$ の演算子ノルムと呼び，$\|\mathcal{O}\|$ と記します．) 有界作用素でない演算子を**非有界作用素** (**unbounded operator**) と呼びますが，この演算子は定義域 (domain) を調べなければならないのでここでは議論しません．非有界作用素と言うとその名前から何か特殊な例外の様な印象を受けるかもしれませんが，量子力学では非有界作用素は至る所に登場します．

[*10] 正確には式(5.2.68)5 行目の極限でゼロになる事が言えるのは $\|\mathcal{O}\Psi_\beta^{\rm as}(t)\|<\infty$ 且つ $\|\mathcal{O}^\dagger\psi_\alpha(t)\|<\infty$ の場合で，これが成り立つのは $\mathcal{O}$ が有界作用素の場合です．

$$
\begin{aligned}
&= (\Psi^{\mathrm{as}}_{\alpha}, \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathcal{O}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Psi^{\mathrm{as}}_{\beta}) \\
&= (\Psi^{\mathrm{as}}_{\alpha}, \mathcal{O}_{\mathrm{H}}(t)\Psi^{\mathrm{as}}_{\beta}) \qquad (5.2.69a) \\
(\psi_{\alpha}(t), \mathcal{O}\psi_{\beta}(t)) &= (\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi_{\alpha}, \mathcal{O}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi_{\beta}) \\
&= (\psi_{\alpha}, \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\mathcal{O}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\psi_{\beta}) \\
&= (\Omega^{\dagger}_{\mathrm{as}}\Omega_{\mathrm{as}}\psi_{\alpha}, \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\mathcal{O}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\Omega^{\dagger}_{\mathrm{as}}\Omega_{\mathrm{as}}\psi_{\beta}) \\
&= (\Omega^{\dagger}_{\mathrm{as}}\Psi^{\mathrm{as}}_{\alpha}, \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\mathcal{O}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\Omega^{\dagger}_{\mathrm{as}}\Psi^{\mathrm{as}}_{\beta}) \\
&= (\Psi^{\mathrm{as}}_{\alpha}, \Omega_{\mathrm{as}}\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\mathcal{O}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\Omega^{\dagger}_{\mathrm{as}}\Psi^{\mathrm{as}}_{\beta}) \\
&= (\Psi^{\mathrm{as}}_{\alpha}, \mathcal{O}_{\mathrm{as}}(t)\Psi^{\mathrm{as}}_{\beta}) \qquad (5.2.69b)
\end{aligned}
$$

但し，式(5.2.69b)の 3 行目で $\Omega^{\dagger}_{\mathrm{as}}\Omega_{\mathrm{as}} = I$ を使い，4 行目では $\Psi^{\mathrm{as}} = \Omega_{\mathrm{as}}\psi$ を使いました．また，式(5.2.69b)最終行の $\mathcal{O}_{\mathrm{as}}(t)$ は**漸近演算子** (**asymptotic operator**) で，次式で定義されます:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{O}_{\mathrm{as}}(t) &:= \Omega_{\mathrm{as}}\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\mathcal{O}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\Omega^{\dagger}_{\mathrm{as}} \\
&= \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Omega_{\mathrm{as}}\mathcal{O}\Omega^{\dagger}_{\mathrm{as}}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \\
&= \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\,\mathcal{O}_{\mathrm{as}}(0)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \qquad (5.2.70)
\end{aligned}
$$

ここで，2 行目で繋絡関係式(5.2.49)を使い，3 行目で $\mathcal{O}_{\mathrm{as}}(0) = \Omega_{\mathrm{as}}\mathcal{O}\Omega_{\mathrm{as}}$ を使いました．従って，等式(5.2.66)は Heisenberg 演算子 $\mathcal{O}_{\mathrm{H}}(t)$ の行列要素 $(\Psi^{\mathrm{as}}_{\alpha}, \mathcal{O}_{\mathrm{H}}(t)\Psi^{\mathrm{as}}_{\beta})$ が $t \to \mp\infty$ の極限で漸近演算子 $\mathcal{O}_{\mathrm{as}}(t)$ の行列要素 $(\Psi^{\mathrm{as}}_{\alpha}, \mathcal{O}_{\mathrm{as}}(t)\Psi^{\mathrm{as}}_{\beta})$ に収束することを意味し，次の様に書き表す事が出来ます:

$$
\lim_{t\to\mp\infty}(\Psi^{\mathrm{as}}_{\alpha}, (\mathcal{O}_{\mathrm{H}}(t) - \mathcal{O}_{\mathrm{as}}(t))\Psi^{\mathrm{as}}_{\beta}) = 0 \qquad (5.2.71)
$$

この様に，或る演算子が行列要素の下で或る演算子に収束することを**弱収束** (**weak convergence**) と呼び，次の様に書きます:

$$
\text{w-}\lim_{t\to\mp\infty}(\mathcal{O}_{\mathrm{H}}(t) - \mathcal{O}_{\mathrm{as}}(t)) = 0 \qquad (5.2.72)
$$

ここで，w-lim は弱収束による極限である事を強調する為の記号で，**弱極限** (**weak limit**) と呼びます．弱極限という名前が示す様に，この極限は強極限よりも条件が弱く，強収束するなら弱収束する事は簡単に言えますが，逆は一般に成り立ちませんので注意しましょう．

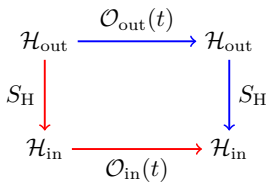
さて，Heisenberg 描像での S 行列の定義 $S_{\mathrm{H}} = \Omega_{\mathrm{in}}\Omega^{\dagger}_{\mathrm{out}}$ を思い出すと，漸近演算子 $\mathcal{O}_{\mathrm{as}}(t)$ に対して次の等式が成り立つ事が分かります:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{O}_{\mathrm{in}}(t) &= \Omega_{\mathrm{in}}\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\mathcal{O}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\Omega^{\dagger}_{\mathrm{in}} \\
&= \Omega_{\mathrm{in}}\Omega^{\dagger}_{\mathrm{out}}\Omega_{\mathrm{out}}\,\mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\mathcal{O}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\,\Omega^{\dagger}_{\mathrm{out}}\Omega_{\mathrm{out}}\Omega^{\dagger}_{\mathrm{in}} \\
&= \Omega_{\mathrm{in}}\Omega^{\dagger}_{\mathrm{out}}\mathcal{O}_{\mathrm{out}}(t)\Omega_{\mathrm{out}}\Omega^{\dagger}_{\mathrm{in}} \\
&= S_{\mathrm{H}}\mathcal{O}_{\mathrm{out}}(t)S^{\dagger}_{\mathrm{H}} \qquad (5.2.73)
\end{aligned}
$$

但し，2 行目で $\Omega^{\dagger}_{\mathrm{in}}\Omega_{\mathrm{in}} = I$ を使いました．式(5.2.73)の両辺に右から S_{H} を掛けると，この等式は次の様に書き換える事が出来ます:

$$
\mathcal{O}_{\mathrm{in}}(t)S_{\mathrm{H}} = S_{\mathrm{H}}\mathcal{O}_{\mathrm{out}}(t) \qquad (5.2.74)
$$

これは繋絡関係式に他ならず，今の場合，S 行列 S_{H} が繋絡演算子です．また，上の繋絡関係式は可換図で表すと次の様になります:



左上の $\mathcal{H}_{\mathrm{out}}$ から出発して，赤矢印の経路に沿って演算子 S_{H} と $\mathcal{O}_{\mathrm{in}}(t)$ を合成したもの $\mathcal{O}_{\mathrm{in}}(t)S_{\mathrm{H}}$ が式(5.2.74)左辺で，青矢印の経路に沿って演算子 $\mathcal{O}_{\mathrm{out}}(t)$ と S_{H} を合成したもの $S_{\mathrm{H}}\mathcal{O}_{\mathrm{out}}(t)$ が式(5.2.74)右辺を表します．そして，この 2 つの経路に沿って合成したものが等しいという事を主張するのが繋絡関係式(5.2.74)です．

以上の結果をまとめると，Heisenberg 演算子 $\mathcal{O}_{\rm H}(t)$ は $t \to \mp\infty$ の極限で漸近演算子 $\mathcal{O}_{\rm as}(t)$ に弱収束し，Heisenberg 描像での S 行列 $S_{\rm H}$ は漸近演算子 $\mathcal{O}_{\rm in}(t)$ と $\mathcal{O}_{\rm out}(t)$ を絡み合わせる繋絡演算子である，という事になります．但し，量子力学では Heisenberg 描像での S 行列 $S_{\rm H}$ や漸近演算子を使う事は殆どありません．実際，この講義ノートでもこれ以降 $S_{\rm H}$ や $\mathcal{O}_{\rm as}$ は登場しません．但し，場の量子論ではこの節で議論した Heisenberg 描像での結果を駆使します．実際，場の量子論で非摂動論的にも正当化出来る LSZ 公式で使う漸近場とは $\mathcal{O}_{\rm as}(t)$ のことで，そこで登場する漸近状態は $\Psi^{\rm as}$，そして S 行列は S ではなく $S_{\rm H}$ です．一方，Schrödinger 描像での S 行列に対する Dyson 級数(5.2.64)は本質的に摂動論的です．この辺は非常に混乱しやすい所なので，場の量子論を勉強する予定の人は心に留めておきましょう．

5.2.5 Lippmann-Schwinger 方程式

今まで時間依存した Schrödinger 描像での状態ベクトルから出発して，それの $t \to \mp\infty$ での漸近的振る舞いを調べる事で漸近状態や S 行列などを導入して来ました．これまでの議論は一般論を構築する上では重要ですが，S 行列要素を求める為の実用的な計算に耐えうる理論かと言うと，決してそうではありません．実用上難しい点は 2 つあって，まず 1 つ目は今までの議論は全て有限ノルムの状態ベクトルに対する理論であるという点です．有限ノルムの状態ベクトルは物理的には波束を表しますが，実用上は波束は取り扱い辛く，平面波の方が計算はずっと簡単です．そして 2 つ目は時刻 t に関する積分が取り扱いにくいという点です．S 行列要素を求めるには式(5.2.21)で定義される漸近状態 $\Psi^{\rm as}$ を求めれば良いのですが，波束に対しては式(5.2.21)は簡単に計算出来る代物ではありません．以下では，漸近ハミルトニアンの固有状態を用いた固有関数展開を使って，あらわに時間には依存しない散乱理論を作って行きます．時間に依存しない形式だと「$t \to \mp\infty$ で相互作用が切れて状態ベクトルは自由粒子状態に漸近する」という物理的描像が明白にはなりませんが，実際上はこの時間依存しない形式で計算する方がずっと簡単なのです．この節で示す散乱理論を「形式的散乱理論 (formal scattering theory)」とか「時間に依存しない散乱理論 (time-independent scattering theory)」と呼んだりします．

さて，以下の議論の出発点は漸近状態 $\Psi^{\rm as}$ に対する表式(5.2.21)で，以下ではこれを変形して行きます．まず，ϵ を正の無限小量として式(5.2.21)に現れる $V := H - H_0$ を $V \to V\,\mathrm{e}^{-\epsilon|t|}$ と置き換えて，全てを計算した後で $\epsilon \to 0_+$ の極限を取ることにしましょう．この置き換えの下で，式(5.2.24)は次の様になります:

$$\begin{aligned}\Psi^{\rm as} &= \psi + \frac{i}{\hbar}\lim_{\epsilon\to 0_+}\int_0^{\mp\infty} dt\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,V\,\mathrm{e}^{-\epsilon|t|}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\,\psi \\ &= \psi + \frac{i}{\hbar}\lim_{\epsilon\to 0_+}\int_0^{\mp\infty} dt\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,V\,\mathrm{e}^{\pm\epsilon t}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\,\psi \end{aligned} \tag{5.2.75}$$

但し，2 行目で積分範囲が $(-\infty, 0)$ の t に対しては $|t| = -t$，積分範囲が $(0, +\infty)$ の t に対しては $|t| = t$ である事を使いました．この表式から明らかですが，因子 $\mathrm{e}^{-\epsilon|t|}$ を入れた事で積分の $t \to \mp\infty$ での収束性が上がります．この様にポテンシャル V を $V\,\mathrm{e}^{-\epsilon|t|}$ に置き換える操作を adiabatic switching と呼んだりします．

次に，自由粒子状態 ψ を自由ハミルトニアン H_0 の固有状態 $\psi_{\boldsymbol{p}}$ で展開しましょう:

$$\psi = \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\,c_{\boldsymbol{p}}\psi_{\boldsymbol{p}} \tag{5.2.76}$$

但し，$\psi_{\boldsymbol{p}}$ は H_0 の固有値 $E_{\boldsymbol{p}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ の固有状態で，次の固有値方程式を満たします:

$$H_0\psi_{\boldsymbol{p}} = E_{\boldsymbol{p}}\psi_{\boldsymbol{p}} \quad \text{with} \quad E_{\boldsymbol{p}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \tag{5.2.77}$$

この固有状態 $\psi_{\boldsymbol{p}}$ は座標表示では単なる平面波 $\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}$ で，式(5.2.76)は単なる Fourier 積分表示 $\psi(\boldsymbol{x}) = \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\,c_{\boldsymbol{p}}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}$ に他なりません．また，この固有状態の規格化は次のデルタ関数規格化です:

$$(\psi_{\boldsymbol{p}}, \psi_{\boldsymbol{q}}) = (2\pi\hbar)^d\delta^d(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{q}) \tag{5.2.78}$$

但し，内積 $(\,\cdot\,,\,\cdot\,)$ は関数 f と g に対しては次で定義されます:

$$(f, g) := \int d^d\boldsymbol{x}\,f^*(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{x}) \tag{5.2.79}$$

また，式(5.2.76)の $c_{\boldsymbol{p}}$ はこの展開の展開係数で，自由粒子状態 ψ のノルムが有限 ($\|\psi\| < \infty$) になる為にはこの係数は $\int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\,|c_{\boldsymbol{p}}|^2 < \infty$ を満たさなければなりません．

さて，次に展開(5.2.76)を式(5.2.75)に代入しましょう．H_0 が $\psi_{\boldsymbol{p}}$ に作用すると固有値 $E_{\boldsymbol{p}}$ に置き換わるので，t 積分が簡単に実行出来て次の様になります:

$$\Psi^{\rm as} = \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\,c_{\boldsymbol{p}}\left(\psi_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{\hbar}\lim_{\epsilon\to 0_+}\int_0^{\mp\infty} dt\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,V\,\mathrm{e}^{\pm\epsilon t}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_{\boldsymbol{p}} t}\,\psi_{\boldsymbol{p}}\right)$$

$$
\begin{aligned}
&= \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\, c_{\boldsymbol{p}} \left(\psi_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{\hbar} \lim_{\epsilon\to 0_+} \int_0^{\mp\infty} dt\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\boldsymbol{p}} - H \pm i\epsilon)t}\, V\psi_{\boldsymbol{p}} \right) \\
&= \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\, c_{\boldsymbol{p}} \left(\psi_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{\hbar} \lim_{\epsilon\to 0_+} \left[\frac{\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\boldsymbol{p}} - H \pm i\epsilon)t}}{-\frac{i}{\hbar}(E_{\boldsymbol{p}} - H \pm i\epsilon)} \right]_{t=0}^{t=\mp\infty} V\psi_{\boldsymbol{p}} \right) \\
&= \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\, c_{\boldsymbol{p}} \left(\psi_{\boldsymbol{p}} + \lim_{\epsilon\to 0_+} \frac{1}{E_{\boldsymbol{p}} - H \pm i\epsilon} V\psi_{\boldsymbol{p}} \right)
\end{aligned}
\tag{5.2.80}
$$

一方，第5.2.2節より漸近状態 $\Psi^{\mathrm{as}} = \Omega_{\mathrm{as}}\psi$ は自由粒子状態 ψ に Møller 演算子 Ω_{as} を作用させたものなので，展開(5.2.76)を使うと次が得られます:

$$
\begin{aligned}
\Psi^{\mathrm{as}} &= \Omega_{\mathrm{as}}\psi \\
&= \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\, c_{\boldsymbol{p}} \Omega_{\mathrm{as}} \psi_{\boldsymbol{p}} \\
&= \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^d}\, c_{\boldsymbol{p}} \Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}
\end{aligned}
\tag{5.2.81}
$$

但し，$\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}$ は形式的に次で定義される状態です:

$$
\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}} = \Omega_{\mathrm{as}}\psi_{\boldsymbol{p}} \tag{5.2.82}
$$

よって，上の 2 つの式(5.2.80)と(5.2.81)を比較すると次の等式が得られます:

$$
\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}} = \psi_{\boldsymbol{p}} + \lim_{\epsilon\to 0_+} \frac{1}{E_{\boldsymbol{p}} - H \pm i\epsilon} V\psi_{\boldsymbol{p}} \tag{5.2.83}
$$

以上で式(5.2.75)から t 積分を完全に消し去る事が出来ました．この等式から $\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}$ に対して得られる重要な事があるので，まずはそれらを列挙しておきましょう:

① 固有値方程式

$\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}$ はハミルトニアン H の固有値 $E_{\boldsymbol{p}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ の固有状態です．これを見る為に，式(5.2.83)に左から演算子 $E_{\boldsymbol{p}} - H$ を掛けてみましょう．$\lim_{\epsilon\to 0_+} 1/(E_{\boldsymbol{p}} - H \pm i\epsilon)$ は演算子 $E_{\boldsymbol{p}} - H$ の逆である事を使うと，次が得られます:

$$
\begin{aligned}
(E_{\boldsymbol{p}} - H)\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}} &= (E_{\boldsymbol{p}} - H)\psi_{\boldsymbol{p}} + V\psi_{\boldsymbol{p}} \\
&= (E_{\boldsymbol{p}} - H)\psi_{\boldsymbol{p}} + (H - H_0)\psi_{\boldsymbol{p}} \\
&= (E_{\boldsymbol{p}} - H_0)\psi_{\boldsymbol{p}} \\
&= 0
\end{aligned}
\tag{5.2.84}
$$

よって，$\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}$ は次の固有値方程式を満たす事が分かりました:

$$
H\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}} = E_{\boldsymbol{p}}\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}} \quad \text{with} \quad E_{\boldsymbol{p}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \tag{5.2.85}
$$

② 規格化

$\psi_{\boldsymbol{p}}$ の規格化は式(5.2.78)のデルタ関数規格化でしたが，$\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}$ の規格化も全く同じものになります．実際，式(5.2.82)を使って $\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}$ と $\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{q}}$ の内積を取ると次の様になります:

$$
\begin{aligned}
(\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}, \Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{q}}) &= (\Omega_{\mathrm{as}}\psi_{\boldsymbol{p}}, \Omega_{\mathrm{as}}\psi_{\boldsymbol{q}}) \\
&= (\psi_{\boldsymbol{p}}, \Omega^{\dagger}_{\mathrm{as}}\Omega_{\mathrm{as}}\psi_{\boldsymbol{q}}) \\
&= (\psi_{\boldsymbol{p}}, \psi_{\boldsymbol{q}}) \\
&= (2\pi\hbar)^d \delta^d(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{q})
\end{aligned}
\tag{5.2.86}
$$

但し，3 行目で有限ノルムの状態ベクトルに対して成り立つ等式 $\Omega^{\dagger}_{\mathrm{as}}\Omega_{\mathrm{as}} = I$ を平面波にも形式的に適用しました．

さて，式(5.2.83)で t 積分を完全に取り去る事が出来たわけですが，この表式はこのままでは使い勝手が良くありません．それは，実際上は式(5.2.83)の座標表示で計算を進めて行くのですが，演算子 $\lim_{\epsilon\to 0_+} 1/(E_{\boldsymbol{p}} - H \pm i\epsilon)$ の座標表示は相互作用系のフルな Green 関数なので容易に計算出来る代物では無いからです．これを回避する為に，式(5.2.83)を更に書き換えて行きます．まず，一般に可逆な演算子 (逆が存在する演算子)A と B に対して次が成り立つ事に注意しましょう:

$$
A^{-1} = B^{-1} + B^{-1}(B - A)A^{-1} \tag{5.2.87}
$$

実際，右辺を計算すると左辺に一致する事が簡単に示せます．次に，$A = E_{\boldsymbol{p}} - H \pm i\epsilon$ 及び $B = E_{\boldsymbol{p}} - H_0 \pm i\epsilon$ としてこの等式を使うと，式(5.2.83)は次の様に変形できます:

$$\begin{aligned}
\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}} &= \psi_{\boldsymbol{p}} + \lim_{\epsilon\to 0_+} \frac{1}{E_{\boldsymbol{p}} - H \pm i\epsilon}(H - H_0)\psi_{\boldsymbol{p}} \\
&= \psi_{\boldsymbol{p}} + \lim_{\epsilon\to 0_+} \left[\frac{1}{E_{\boldsymbol{p}} - H_0 \pm i\epsilon} + \frac{1}{E_{\boldsymbol{p}} - H_0 \pm i\epsilon}(H - H_0)\frac{1}{E_{\boldsymbol{p}} - H \pm i\epsilon}\right](H - H_0)\psi_{\boldsymbol{p}} \\
&= \psi_{\boldsymbol{p}} + \lim_{\epsilon\to 0_+} \frac{1}{E_{\boldsymbol{p}} - H_0 \pm i\epsilon}(H - H_0)\left[\psi_{\boldsymbol{p}} + \frac{1}{E_{\boldsymbol{p}} - H \pm i\epsilon}(H - H_0)\psi_{\boldsymbol{p}}\right] \\
&= \psi_{\boldsymbol{p}} + \lim_{\epsilon\to 0_+} \frac{1}{E_{\boldsymbol{p}} - H_0 \pm i\epsilon}(H - H_0)\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}
\end{aligned} \tag{5.2.88}$$

但し，4 行目で式(5.2.83)を使いました．これより $\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}$ に対する次の方程式が得られます:

$$\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}} = \psi_{\boldsymbol{p}} + \lim_{\epsilon\to 0_+} \frac{1}{E_{\boldsymbol{p}} - H_0 \pm i\epsilon} V\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}} \tag{5.2.89}$$

この方程式を **Lippmann-Schwinger 方程式**と呼びます．この方程式は座標表示では次の様になります:

$$\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x}) = \psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x}) + \int d^d\boldsymbol{y}\, G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p)V(\boldsymbol{y})\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{y}) \tag{5.2.90}$$

ここで，$G^{\pm}$ は **Green 関数**で次式で与えられます:

$$G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p) = \lim_{\epsilon\to 0_+} \int \frac{d^d\boldsymbol{q}}{(2\pi\hbar)^d} \frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}}{\frac{p^2}{2m} - \frac{\boldsymbol{q}^2}{2m} \pm i\epsilon} \tag{5.2.91}$$

但し，$p = |\boldsymbol{p}| > 0$ としました．

以下，興味があるのは Lippmann-Schwinger 方程式の右辺の $|\boldsymbol{x}| \to \infty$ での漸近形で，実はこの漸近形から散乱振幅を読み取ることが出来ます．式(5.2.90)から明らかですが，この漸近形を求めるにはまず Green 関数の $|\boldsymbol{x}| \to \infty$ での振る舞いを知らなければなりません．以下ではまず $G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p)$ の関数形を求めて，その後，$|\boldsymbol{x}| \to \infty$ での漸近形を求める，という事をやります．

d 次元 Green 関数

以下では d 次元の Green 関数を求めて行きます．まず，積分(5.2.91)は次の様に書ける事に注意しましょう:

$$\begin{aligned}
G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p) &= \lim_{\epsilon\to 0_+} \int \frac{d^d\boldsymbol{q}}{(2\pi\hbar)^d} \frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}}{\frac{p^2}{2m} - \frac{\boldsymbol{q}^2}{2m} \pm i\epsilon} \\
&= -2m \lim_{\epsilon\to 0_+} \int \frac{d^d\boldsymbol{q}}{(2\pi\hbar)^d} \frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}}{\boldsymbol{q}^2 - p^2 \mp i2m\epsilon} \\
&= -2m \lim_{\epsilon\to 0_+} \int \frac{d^d\boldsymbol{q}}{(2\pi\hbar)^d} \frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}}{\boldsymbol{q}^2 - p^2 \mp i\epsilon} \\
&= -2m \lim_{\epsilon\to 0_+} \int \frac{d^d\boldsymbol{q}}{(2\pi\hbar)^d} \frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}}{\boldsymbol{q}^2 - (p \pm i\epsilon)^2}
\end{aligned} \tag{5.2.92}$$

但し，3 行目で $2m\epsilon$ を改めて ϵ と置きました．これは，ϵ は最終的にゼロにするので $2m(>0)$ などといった因子はどうでも良いからです．また，4 行目は ϵ の 1 次のオーダーで成り立つ次の等式から従います:

$$\begin{aligned}
(p \pm i\epsilon)^2 &= p^2 \pm i2p\epsilon - \epsilon^2 \\
&= p^2 \pm i\epsilon
\end{aligned} \tag{5.2.93}$$

但し，2 行目で $2p\epsilon(>0)$ を改めて ϵ と置き，ϵ^2 の項は捨てました．

さて，式(5.2.92)の積分結果を知りたいわけですが，この積分を計算するよりもまず次の積分を計算する方がずっと簡単です:

$$G_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p) = -2m \int \frac{d^d\boldsymbol{q}}{(2\pi\hbar)^d} \frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}}{\boldsymbol{q}^2 + p^2} \tag{5.2.94}$$

ひとたびこの積分が計算出来て G_{B} を $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$, p の関数として表すことが出来れば，この関数を $G_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p\,\mathrm{e}^{\mp i\frac{\pi}{2}})$ と**解析接続**することで $G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p)$ が求まります．まずこの事を見ましょう．まず ϵ の 1 次のオーダーで次の等式が成り立つ事に注意します:

$$p\,\mathrm{e}^{\mp i(\frac{\pi}{2}-\epsilon)} = p\,\mathrm{e}^{\mp i\frac{\pi}{2}}\,\mathrm{e}^{\pm i\epsilon}$$

$$
\begin{aligned}
&= \mp ip\,\mathrm{e}^{\pm i\epsilon} \\
&= \mp ip(1 \pm i\epsilon + O(\epsilon^2)) \\
&= \mp i(p \pm ip\epsilon) \\
&= \mp i(p \pm i\epsilon)
\end{aligned} \tag{5.2.95}
$$

ここで，3 行目で Taylor 展開 $\mathrm{e}^{\pm i\epsilon} = 1 \pm i\epsilon + O(\epsilon^2)$ を使い，4 行目で ϵ の 2 次以上の項は捨てました．また，5 行目では $p\epsilon$ を改めて ϵ と置きました．この等式を使うと次が得られます:

$$
\begin{aligned}
G_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p\,\mathrm{e}^{\mp i(\frac{\pi}{2}-\epsilon)}) &= -2m\int\frac{d^d\boldsymbol{q}}{(2\pi\hbar)^d}\,\frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}}{\boldsymbol{q}^2+(\mp i(p\pm i\epsilon))^2} \\
&= -2m\int\frac{d^d\boldsymbol{q}}{(2\pi\hbar)^d}\,\frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}}{\boldsymbol{q}^2-(p\pm i\epsilon)^2}
\end{aligned} \tag{5.2.96}
$$

式(5.2.92)よりこの両辺の $\epsilon \to 0_+$ の極限を取ると次が成り立つ事が分かります:

$$
G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p) = G_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p\,\mathrm{e}^{\mp i\frac{\pi}{2}}) \tag{5.2.97}
$$

この等式より，$G_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p)$ が分かればこれを $p \to p\,\mathrm{e}^{\mp i\frac{\pi}{2}}$ と解析接続する事で $G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p)$ が得られる事が分かります．

さて，次に積分(5.2.94)を計算して $G_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p)$ を求めましょう．この積分の計算法は色々ありますが，次の様にやるのが最も簡単です．まず，次の等式が成り立つ事に注意しましょう:

$$
\frac{1}{\boldsymbol{q}^2+p^2} = \int_0^\infty d\tau\,\mathrm{e}^{-(\boldsymbol{q}^2+p^2)\tau} \tag{5.2.98}
$$

実際，右辺の積分を計算すると左辺に一致する事が容易に確かめられます．次にこの等式を使って積分(5.2.94)を計算しましょう．計算方法は，まず式(5.2.98)を代入した後に $\boldsymbol{q}$ 積分と τ 積分の積分順序を入れ替え，次に指数関数の指数部分を $\boldsymbol{q}$ について平方完成して先に $\boldsymbol{q}$ 積分を実行する，という風にやります．具体的に書くと次の様になります:

$$
\begin{aligned}
G_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p) &= -2m\int\frac{d^d\boldsymbol{q}}{(2\pi\hbar)^d}\int_0^\infty d\tau\,\mathrm{e}^{-(\boldsymbol{q}^2+p^2)\tau+\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})} \\
&= -2m\int_0^\infty d\tau\int\frac{d^d\boldsymbol{q}}{(2\pi\hbar)^d}\,\mathrm{e}^{-(\boldsymbol{q}^2+p^2)\tau+\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})} \\
&= -2m\int_0^\infty d\tau\,\mathrm{e}^{-\frac{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|^2}{4\hbar^2\tau}-p^2\tau}\int\frac{d^d\boldsymbol{q}}{(2\pi\hbar)^d}\,\mathrm{e}^{-\tau(\boldsymbol{q}-i\frac{\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}}{2\hbar\tau})^2} \\
&= -2m\int_0^\infty d\tau\,\mathrm{e}^{-\frac{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|^2}{4\hbar^2\tau}-p^2\tau}\,\frac{1}{(4\pi\hbar^2\tau)^{\frac{d}{2}}} \\
&= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left(\frac{p}{2\pi\hbar|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right)^{\frac{d}{2}-1}\int_0^\infty ds\,s^{-\frac{d}{2}}\,\mathrm{e}^{-\frac{p}{\hbar}\frac{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}{2}(s+\frac{1}{s})}
\end{aligned} \tag{5.2.99}
$$

但し，2 行目で積分順序を入れ替え，3 行目で $\boldsymbol{q}$ について平方完成し，4 行目で Gauss 積分の公式を使いました．また，5 行目は次の変数変換から従います:

$$
\tau = \frac{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}{2\hbar p}s \tag{5.2.100}
$$

知らないとなかなか気付きませんが，式(5.2.99)の最後の積分は第 2 種変形 Bessel 関数 $K_{\frac{d-2}{2}}(\frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|)$ の積分表示 (の 2 倍) に他なりません．実際，$K_\nu(z)$ は次の様に表せる事が知られています:[*11]

$$
K_\nu(z) = \frac{1}{2}\int_0^\infty ds\,s^{-\nu-1}\exp\left(-\frac{z}{2}\left(s+\frac{1}{s}\right)\right) \tag{5.2.101}
$$

この第 2 種変形 Bessel 関数を使うと，G_{B} は結局次の様に表されます:

$$
G_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p) = -\frac{m}{\pi\hbar^2}\left(\frac{p}{2\pi\hbar|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right)^{\frac{d-2}{2}}K_{\frac{d-2}{2}}(\tfrac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|) \tag{5.2.102}
$$

これから Green 関数 $G^{\pm}$ が次の様に得られます:

$$
G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p) = G_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p\,\mathrm{e}^{\mp i\frac{\pi}{2}})
$$

[*11] 例えば岩波数学公式 III『特殊関数』の 187 ページに載っています．

$$= -\frac{m}{\pi\hbar^2}\left(\frac{p\,\mathrm{e}^{\mp i\frac{\pi}{2}}}{2\pi\hbar|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right)^{\frac{d-2}{2}} K_{\frac{d-2}{2}}\left(\tfrac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\,\mathrm{e}^{\mp i\frac{\pi}{2}}\right)$$
$$= -\frac{m}{\pi\hbar^2}\left(\frac{p}{2\pi\hbar|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right)^{\frac{d-2}{2}} \mathrm{e}^{\mp i\frac{d-2}{4}\pi}\, K_{\frac{d-2}{2}}\left(\tfrac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\,\mathrm{e}^{\mp i\frac{\pi}{2}}\right) \tag{5.2.103}$$

これで任意次元の Green 関数が求まりました．この結果を使うと，例えば 1 次元，2 次元，3 次元の Green 関数は次の様になる事が分かります:

$$G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p) = \begin{cases} \pm\dfrac{m}{ip}\,\mathrm{e}^{\pm i\frac{p}{\hbar}|x-y|} & \text{for} \quad d=1 \\ -\dfrac{m}{\pi\hbar^2}K_0\left(\tfrac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\,\mathrm{e}^{\mp i\frac{\pi}{2}}\right) & \text{for} \quad d=2 \\ -\dfrac{m}{2\pi\hbar^2}\dfrac{\mathrm{e}^{\pm i\frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} & \text{for} \quad d=3 \end{cases} \tag{5.2.104}$$

但し，$K_{\frac{1}{2}}(z) = K_{-\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\,\mathrm{e}^{-z}$ を使いました．

d 次元 Green 関数の漸近形

次に Green 関数 $G^{\pm}$ の無限遠での振る舞いを調べましょう．その為に，まずは G_{B} の無限遠での振る舞いを調べます．使うのは式(5.2.99)最後の積分表示で，これは改めて書くと次の様になります:

$$G_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left(\frac{p}{2\pi\hbar|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right)^{\frac{d-2}{2}} \int_0^\infty ds\, s^{-\frac{d}{2}} \exp\left(-\frac{\frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}{2}\left(s+\frac{1}{s}\right)\right) \tag{5.2.105}$$

この積分を評価する前に，$g(s)$ を $s=s_0$ に最小値を持つ下に凸な関数として，まず次の様な積分を考えましょう:

$$I(\alpha) = \int_a^b ds\, f(s)\,\mathrm{e}^{-\alpha g(s)}, \quad \alpha > 0 \tag{5.2.106}$$

但し，$a < s_0 < b$ で，$f(s)$ は適当な関数です．α が 1 より充分大きい時，この積分は鞍点法で評価する事が出来て，一般に次の様になる事が言えます:

$$I(\alpha) \approx \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha g''(s_0)}} f(s_0)\,\mathrm{e}^{-\alpha g(s_0)}\left(1+O(\alpha^{-1})\right) \quad \text{for} \quad \alpha \gg 1 \tag{5.2.107}$$

これが鞍点近似で，この鞍点近似を使うと積分(5.2.105)の $\frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}| \gg 1$ での振る舞いを調べる事が出来ます．まず，$\alpha = \frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|$, $f(s) = s^{-d/2}$, $g(s) = \frac{1}{2}(s+\frac{1}{s})$ としましょう．すると，$g(s)$ は $s=1$ に最小値を持つので，式(5.2.107)より積分(5.2.105)は次の様に評価されます:

$$\int_0^\infty ds\, s^{-\frac{d}{2}} \exp\left(-\frac{\frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}{2}\left(s+\frac{1}{s}\right)\right) \approx \sqrt{\frac{2\pi}{\frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}} \exp\left(-\frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\right) \quad \text{for} \quad \frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}| \gg 1 \tag{5.2.108}$$

これを式(5.2.105)に代入すると次の様になります:

$$G_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p) \approx -\frac{m}{\hbar p}\left(\frac{p}{2\pi\hbar|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right)^{\frac{d-1}{2}} \exp\left(-\frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\right) \quad \text{for} \quad \frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}| \gg 1 \tag{5.2.109}$$

これより Green 関数 $G^{\pm}$ の $\frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}| \gg 1$ での振る舞いが次の様に得られます:

$$G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p) = G_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p\,\mathrm{e}^{\mp i\frac{\pi}{2}})$$
$$\approx -\frac{m}{\hbar p}\left(\frac{p}{2\pi\hbar|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right)^{\frac{d-1}{2}} \mathrm{e}^{\mp i\frac{d-3}{4}\pi} \exp\left(\pm i\frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\right) \quad \text{for} \quad \frac{p}{\hbar}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}| \gg 1 \tag{5.2.110}$$

次に，特に $|\boldsymbol{x}| \gg |\boldsymbol{y}|$ の場合を考えましょう．まず，$|\boldsymbol{x}| \gg |\boldsymbol{y}|$ の時，$|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|$ は次の様に振る舞う事に注意します:

$$|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}| = \sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})^2}$$
$$= \sqrt{|\boldsymbol{x}|^2 - 2\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y} + |\boldsymbol{y}|^2}$$

$$
\begin{aligned}
&= |\boldsymbol{x}|\sqrt{1-2\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\frac{\boldsymbol{y}}{|\boldsymbol{x}|}+\frac{|\boldsymbol{y}|^2}{|\boldsymbol{x}|^2}} \\
&= |\boldsymbol{x}|\left[1+\frac{1}{2}\left(-2\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\frac{\boldsymbol{y}}{|\boldsymbol{x}|}+\frac{|\boldsymbol{y}|^2}{|\boldsymbol{x}|^2}\right)+\cdots\right] \\
&= |\boldsymbol{x}|\left[1-\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\frac{\boldsymbol{y}}{|\boldsymbol{x}|}+O(\tfrac{|\boldsymbol{y}|^2}{|\boldsymbol{x}|^2})\right] \\
&= |\boldsymbol{x}|-\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{y}+O(\tfrac{|\boldsymbol{y}|^2}{|\boldsymbol{x}|}) \qquad (5.2.111)
\end{aligned}
$$

但し，$\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{x}/|\boldsymbol{x}|$ は $\boldsymbol{x}$ 方向の単位ベクトルです．同様にして，$|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|^{-(d-1)/2}$ は次の様に振る舞います:

$$
|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|^{-\frac{d-1}{2}}=|\boldsymbol{x}|^{-\frac{d-1}{2}}\left(1+O(\tfrac{|\boldsymbol{y}|}{|\boldsymbol{x}|})\right) \qquad (5.2.112)
$$

以上の結果(5.2.110)(5.2.111)(5.2.112)を用いると，Green 関数 $G^{\pm}$ は無限遠 $|\boldsymbol{x}|\to\infty$ で次の様に振る舞う事が分かります:

$$
G^{\pm}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p)\to-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left(\frac{p}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{d-3}{2}}\mathrm{e}^{\mp i\frac{d-3}{4}\pi}\frac{\exp\left(\pm\frac{i}{\hbar}(p|\boldsymbol{x}|-p\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{y})\right)}{|\boldsymbol{x}|^{\frac{d-1}{2}}}\quad\text{as}\quad|\boldsymbol{x}|\to\infty \qquad (5.2.113)
$$

これで Green 関数の漸近形が分かりました．

漸近 in 状態の無限遠での挙動と散乱振幅

以上の結果を使って，最後に Lippmann-Schwinger 方程式(5.2.90)の無限遠 $|\boldsymbol{x}|\to\infty$ での振る舞いを調べましょう．考えるのは漸近 in 状態 $\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}$ に対する Lippmann-Schwinger 方程式です:

$$
\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})=\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})+\int d^d\boldsymbol{y}\,G^{+}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};p)V(\boldsymbol{y})\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{y}) \qquad (5.2.114)
$$

式(5.2.113)の G^{+} の漸近形を使うと，この方程式の右辺は $|\boldsymbol{x}|\to\infty$ で次の様に振る舞う事が分かります:

$$
\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})\to\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})+f(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p})\,\mathrm{e}^{-i\frac{d-3}{4}\pi}\frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar}p|\boldsymbol{x}|\right)}{|\boldsymbol{x}|^{\frac{d-1}{2}}}\quad\text{as}\quad|\boldsymbol{x}|\to\infty \qquad (5.2.115)
$$

但し，$f(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p})$ は次式で定義されます:

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left(\frac{p}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{d-3}{2}}\int d^d\boldsymbol{y}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{y}}\,V(\boldsymbol{y})\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{y}) \\
&= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left(\frac{p}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{d-3}{2}}(\psi_{\boldsymbol{p}'},V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}) \qquad (5.2.116)
\end{aligned}
$$

ここで，$\boldsymbol{p}'=p\hat{\boldsymbol{x}}$ は $\boldsymbol{x}$ 方向を向く大きさ p の運動量で，状態ベクトル $\psi_{\boldsymbol{p}'}$ の座標表示は平面波 $\psi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{x})=\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}}$ です．式(5.2.116)で定義される $f(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p})$ を**散乱振幅** (**scattering amplitude**) と呼びます．$f(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p})$ は次元を持った量で，容易に確かめられる様にその次元は $[\text{長さ}]^{\frac{d-1}{2}}$ です．特に $|f(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p})|^2$ の次元は $[\text{長さ}]^{d-1}$ で，これは d 次元空間の「面積」の次元と一致する事に注意しましょう．実際，次節で証明するように，$|f(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p})|^2$ は d 次元の微分断面積を与えるのです．また，散乱振幅の定義に位相 $\mathrm{e}^{-i\frac{d-3}{4}\pi}$ は入れませんでしたが，これは光学定理が単純な表式になる様にそうしました．これは第5.3.2節で明らかになります．

5.3　散乱断面積と S 行列

これまで 1 体のポテンシャル散乱に対する S 行列要素を調べて来ましたが，この S 行列要素は基本的に特定の 1 粒子状態から別の 1 粒子状態への遷移振幅を与えるものです．しかし，多くの実際の実験では個々の粒子を最初から最後まで逐一追ったりはせず，多数の粒子から成る粒子ビームを標的に衝突させて，その後，標的から散乱されて出て来た粒子を測定器で観測する，というものになっています．この様な散乱実験で重要な物理量は**散乱断面積** (**scattering cross section**) です．この節では，S 行列要素から如何にして散乱断面積を得るか，という方法について説明します．

5.3.1　微分散乱断面積

運動量 $\boldsymbol{p}$ で入射し，運動量 $\boldsymbol{p}'(\neq\boldsymbol{p})$ で放射される 1 体のポテンシャル散乱を考えましょう．この散乱現象に対する**微分散乱断面積** (**differential scattering cross section**) を $d\sigma(\boldsymbol{p}'\leftarrow\boldsymbol{p})$ と表す事にすると，これは次で定義されます:

$$
d\sigma(\boldsymbol{p}'\leftarrow\boldsymbol{p})=\frac{(\text{単位時間当たりの遷移確率})\times(\text{終状態の状態密度})}{(\text{単位時間当たりに }\boldsymbol{p}\text{ に垂直な単位面積を通過する入射粒子数})} \qquad (5.3.1)
$$

ここで，(単位時間当たりの遷移確率)，(終状態の状態密度)，(単位時間当たりに $\boldsymbol{p}$ に垂直な単位面積を通過する入射粒子数) はそれぞれ次で与えられます:

$$(\text{単位時間当たりの遷移確率}) = \frac{1}{\mathrm{T}}\frac{|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, S\psi_{\boldsymbol{p}})|^2}{\|\psi_{\boldsymbol{p}'}\|^2\|\psi_{\boldsymbol{p}}\|^2} \tag{5.3.2a}$$

$$(\text{終状態の状態密度}) = \mathrm{V}\frac{d^d\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^d} \tag{5.3.2b}$$

$$\begin{aligned}(\text{単位時間当たりに } \boldsymbol{p} \text{ に垂直な単位面積を通過する入射粒子数}) &= (\text{入射粒子数密度}) \times (\text{入射粒子の速さ}) \\ &= \frac{1}{\mathrm{V}}\frac{p}{m}\end{aligned} \tag{5.3.2c}$$

但し，S は Schrödinger 描像での S 行列，$\mathrm{T} = \int_{-\infty}^{\infty} dt$ は散乱過程の全時間，$\mathrm{V} = \int d^d\boldsymbol{x}$ は系の全体積です．今は 1 体のポテンシャル散乱を考えているので入射粒子数密度は $1/\mathrm{V}$ である事に注意しましょう．以下，まず式(5.3.1)の分子の (単位時間当たりの遷移確率) × (終状態の状態密度) を計算して，その後，$d\sigma(\boldsymbol{p}' \leftarrow \boldsymbol{p})$ を計算します．

(単位時間当たりの遷移確率) × (終状態の状態密度) の計算

まず行列要素 $(\psi_{\boldsymbol{p}'}, S\psi_{\boldsymbol{p}})$ を扱い易い様に変形しましょう．式(5.2.83)と $(\psi_{\boldsymbol{p}'}, S\psi_{\boldsymbol{p}}) = (\Psi^{\mathrm{out}}_{\boldsymbol{p}'}, \Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})$ を使うと，この行列要素は次の様に書き直せる事が分かります:

$$\begin{aligned}
(\psi_{\boldsymbol{p}'}, S\psi_{\boldsymbol{p}}) &= (\Psi^{\mathrm{out}}_{\boldsymbol{p}'}, \Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}) \\
&= (\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}'} + \Psi^{\mathrm{out}}_{\boldsymbol{p}'} - \Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}'}, \Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}) \\
&= (\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}'}, \Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}) + (\Psi^{\mathrm{out}}_{\boldsymbol{p}'} - \Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}'}, \Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}) \\
&= (2\pi\hbar)^d\delta^d(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}) + \lim_{\epsilon\to 0_+}\Big(\left[\frac{1}{E_{\boldsymbol{p}'} - H - i\epsilon} - \frac{1}{E_{\boldsymbol{p}'} - H + i\epsilon}\right] V\psi_{\boldsymbol{p}'}, \Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}\Big) \\
&= (2\pi\hbar)^d\delta^d(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}) + \lim_{\epsilon\to 0_+}\Big(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V^\dagger\left[\frac{1}{E_{\boldsymbol{p}'} - H - i\epsilon} - \frac{1}{E_{\boldsymbol{p}'} - H + i\epsilon}\right]^\dagger \Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}\Big) \\
&= (2\pi\hbar)^d\delta^d(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}) + \lim_{\epsilon\to 0_+}\Big(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\left[\frac{1}{E_{\boldsymbol{p}'} - H + i\epsilon} - \frac{1}{E_{\boldsymbol{p}'} - H - i\epsilon}\right] \Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}\Big) \\
&= (2\pi\hbar)^d\delta^d(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}) + \lim_{\epsilon\to 0_+}\Big(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\left[\frac{1}{E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}} + i\epsilon} - \frac{1}{E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}} - i\epsilon}\right] \Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}\Big) \\
&= (2\pi\hbar)^d\delta^d(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}) + \lim_{\epsilon\to 0_+}\frac{-2i\epsilon}{(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}})^2 + \epsilon^2}(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}) \\
&= (2\pi\hbar)^d\delta^d(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}) - 2\pi i\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}})(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})
\end{aligned} \tag{5.3.3}$$

但し，4 行目で規格化(5.2.86)及び式(5.2.83)を使い，6 行目でポテンシャル V はエルミートである事 ($V = V^\dagger$) を使いました．また，7 行目でハミルトニアン H を $\Psi^{\mathrm{as}}_{\boldsymbol{p}}$ の固有値 $E_{\boldsymbol{p}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ に置き換え，最終行で次の等式を使いました:

$$\lim_{\epsilon\to 0_+}\frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} = \pi\delta(x) \tag{5.3.4}$$

今，$\boldsymbol{p} \neq \boldsymbol{p}'$ の状況を考えているので式(5.3.3)の 1 項目はゼロとなる事に注意すると，単位時間当たりの遷移確率は次で与えられる事が分かります:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mathrm{T}}\frac{|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, S\psi_{\boldsymbol{p}})|^2}{\|\psi_{\boldsymbol{p}'}\|^2\|\psi_{\boldsymbol{p}}\|^2} &= \frac{1}{\mathrm{T}}\frac{[2\pi\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}})]^2|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})|^2}{\mathrm{V}\cdot\mathrm{V}} \\
&= \frac{1}{\mathrm{T}}\frac{2\pi\hbar\delta(0)\cdot 2\pi\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}})|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})|^2}{\mathrm{V}\cdot\mathrm{V}} \\
&= \frac{1}{\mathrm{T}}\frac{\frac{\mathrm{T}}{\hbar}\cdot 2\pi\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}})|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})|^2}{\mathrm{V}\cdot\mathrm{V}} \\
&= \frac{1}{\mathrm{V}^2}\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}})|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})|^2
\end{aligned} \tag{5.3.5}$$

但し，$\|\psi_{\boldsymbol{p}}\|^2 = \int d^d\boldsymbol{x}\,|\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})|^2 = \int d^d\boldsymbol{x}\,|\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}\,|^2 = \int d^d\boldsymbol{x} = \mathrm{V}$ および $2\pi\hbar\delta(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\ \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ から従う $2\pi\delta(E=0) = \frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt = \mathrm{T}/\hbar$ を使いました．よって，式(5.3.1)分母の (単位時間当たりの遷移確率) × (終状態の状態密度) は次の様になります:

$$\frac{1}{\mathrm{T}}\frac{|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, S\psi_{\boldsymbol{p}})|^2}{\|\psi_{\boldsymbol{p}'}\|^2\|\psi_{\boldsymbol{p}}\|^2}\cdot\mathrm{V}\frac{d^d\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^d} = \frac{1}{\mathrm{V}^2}\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}})|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})|^2\cdot\mathrm{V}\frac{d^d\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^d}$$

$$= \frac{1}{\mathrm{V}}\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}})|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})|^2 \frac{d^d\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^d} \tag{5.3.6}$$

微分散乱断面積の計算

以上の結果を用いて微分散乱断面積(5.3.1)を計算しましょう．式(5.3.6)と式(5.3.2c)の比を取ると次の様になります:

$$\begin{aligned} d\sigma(\boldsymbol{p}' \leftarrow \boldsymbol{p}) &= \frac{\dfrac{1}{\mathrm{T}}\dfrac{|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, S\psi_{\boldsymbol{p}})|^2}{\|\psi_{\boldsymbol{p}'}\|^2\|\psi_{\boldsymbol{p}}\|^2} \cdot \mathrm{V}\dfrac{d^d\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^d}}{\dfrac{1}{\mathrm{V}}\dfrac{p}{m}} \\ &= \frac{2\pi m}{\hbar p}\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}})|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})|^2 \frac{d^d\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^d} \end{aligned} \tag{5.3.7}$$

ここで，デルタ関数 $\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}})$ は次の様に書き換えられる事に注意しましょう:[*12]

$$\begin{aligned} \delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}}) &= \delta(\tfrac{p'^2}{2m} - \tfrac{p^2}{2m}) \\ &= \frac{m}{p}\left(\delta(p' - p) + \delta(p' + p)\right) \\ &= \frac{m}{p}\delta(p' - p) \end{aligned} \tag{5.3.8}$$

但し，$p = |\boldsymbol{p}|$ 及び $p' = |\boldsymbol{p}'|$ です．2 行目の等号は p と p' は共に正の量なので $p + p'$ はゼロにはなり得ず，従って $\delta(p + p') = 0$ となる事から従います．よって，式(5.3.8)を式(5.3.7)に代入すると次が得られます:

$$\begin{aligned} d\sigma(\boldsymbol{p}' \leftarrow \boldsymbol{p}) &= \frac{2\pi m}{\hbar p}\frac{m}{p}\delta(p' - p)|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})|^2 \frac{p'^{\,d-1}dp'd\Omega}{(2\pi\hbar)^d} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left(\frac{p}{2\pi\hbar}\right)^{d-3} |(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})|^2\delta(p' - p)dp'd\Omega \end{aligned} \tag{5.3.9}$$

次にこの両辺を形式的に $dp'd\Omega$ で割りましょう．すると次が得られます:

$$\frac{d\sigma}{dp'd\Omega}(\boldsymbol{p}' \leftarrow \boldsymbol{p}) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left(\frac{p}{2\pi\hbar}\right)^{d-3} |(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})|^2\delta(p' - p) \tag{5.3.10}$$

運動量 $\boldsymbol{p}$ で入射した粒子ビームが運動量 $\boldsymbol{p}'$ で立体角 $d\Omega$ の領域に散乱される場合の微分散乱断面積はこれを $p' = 0$ から $p' = \infty$ まで積分したもので，次の様になります:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\boldsymbol{p}' \leftarrow \boldsymbol{p}) &= \int_0^\infty dp' \frac{d\sigma}{dp'd\Omega}(\boldsymbol{p}' \leftarrow \boldsymbol{p}) \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left(\frac{p}{2\pi\hbar}\right)^{d-3} |(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})|^2 \end{aligned} \tag{5.3.11}$$

但し，$|\boldsymbol{p}'| = |\boldsymbol{p}|$ です．これは，デルタ関数 $\delta(p' - p)$ の為に始状態と終状態の運動量の大きさが等しい場合だけが生き残るからです．式(5.3.11)が d 次元の 1 体のポテンシャル散乱に対する微分散乱断面積で，この微分散乱断面積は散乱振幅(5.2.116)を使うと次の様に書けます:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\boldsymbol{p}' \leftarrow \boldsymbol{p}) = |f(\boldsymbol{p}', \boldsymbol{p})|^2 \tag{5.3.12}$$

これが有名な微分散乱断面積と散乱振幅の絶対値 2 乗の間の関係です．この公式により，1 体のポテンシャル散乱の微分散乱断面積は，時間に依存しない Schrödinger 方程式 $H\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}} = E_{\boldsymbol{p}}\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}$ の解の無限遠での振る舞いから決定出来るという事が分かります．(但し，解としては漸近形が式(5.2.115)となる様なものでなければなりません．) 言い換えると，公式(5.3.12)によって散乱問題も時間に依存しない Schrödinger 方程式を解くという微分方程式の問題に帰着させる事が出来たという事になります．

[*12] 式(5.3.8)はデルタ関数に対して成り立つ次の等式から従います:

$$\delta(f(p')) = \sum_{p'_i \in \{p' : f(p') = 0\}} \frac{1}{\left|\frac{df}{dp'}(p'_i)\right|}\delta(p' - p'_i)$$

$f(p') = \frac{p'^2}{2m} - \frac{p^2}{2m}$ とすると，$\frac{df}{dp'}(p') = \frac{p'}{m}$ で，方程式 $f(p') = 0$ の解は $p' = \pm p$ なので，これらを上の等式に代入すると式(5.3.8)が得られます．

5.3.2 光学定理

最後に，S 行列のユニタリー性から全散乱断面積と散乱振幅の虚部の間の関係式が導けるので，これを導出してこの章を終わりにしましょう．

簡単の為，まずは有限次元線型代数の話から始めましょう．S を適当なユニタリー行列として，これが次の様に書けるとしましょう:

$$\mathsf{S} = \mathbf{1} - i\mathsf{T} \tag{5.3.13}$$

この時，$\mathsf{S}^\dagger\mathsf{S} = \mathbf{1}$ より次が成り立ちます:

$$\begin{aligned}\mathbf{1} &= \mathsf{S}^\dagger\mathsf{S} \\ &= (\mathbf{1} + i\mathsf{T}^\dagger)(\mathbf{1} - i\mathsf{T}) \\ &= \mathbf{1} - i(\mathsf{T} - \mathsf{T}^\dagger) + \mathsf{T}^\dagger\mathsf{T}\end{aligned} \tag{5.3.14}$$

これより行列 T に対して次の条件が成り立つ事が分かります:

$$i(\mathsf{T} - \mathsf{T}^\dagger) = \mathsf{T}^\dagger\mathsf{T} \tag{5.3.15}$$

行列 T の pq 成分を T_{pq} と表す事にすると，上の等式は行列要素で書き表すと次の様になります:

$$i(\mathsf{T}_{pq} - \mathsf{T}^*_{qp}) = \sum_{p'} \mathsf{T}^*_{p'p}\mathsf{T}_{p'q} \tag{5.3.16}$$

但し，$(\mathsf{T}^\dagger)_{pq} = \mathsf{T}^*_{qp}$ を使いました．上の等式で特に $p = q$ の場合，式(5.3.16)は次の様になります:

$$-2\,\mathrm{Im}\,\mathsf{T}_{pp} = \sum_{p'} |\mathsf{T}_{p'p}|^2 \tag{5.3.17}$$

以上は有限次元線型代数の場合ですが，散乱理論の場合も同様で，上のユニタリー行列が S 行列 S に対応し，式(5.3.17)の行列要素 $\mathsf{T}_{p'p}$ や和 $\sum_{p'}$ は次の量に対応します:

$$\mathsf{T}_{p'p} \to 2\pi\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}})(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}) \tag{5.3.18a}$$

$$\sum_{p'} \to \int \frac{d^d\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^d} \tag{5.3.18b}$$

この対応付けの下，1 体のポテンシャル散乱に於ける等式(5.3.17)の対応物は次の様になります:

$$-2\,\mathrm{Im}(\psi_{\boldsymbol{p}}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}) = \int \frac{d^d\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^d}\, 2\pi\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{p}})|(\psi_{\boldsymbol{p}'}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}})|^2 \tag{5.3.19}$$

但し，両辺共に $2\pi\delta(E = 0)$ で割りました．式(5.3.7)を思い出すと，この等式の右辺は微分散乱断面積 $d\sigma(\boldsymbol{p}' \leftarrow \boldsymbol{p})$(に $\frac{\hbar p}{m}$ を掛けたもの) を終状態の運動量 $\boldsymbol{p}'$ で積分したもので，これは**全散乱断面積** (**total scattering cross section**)$\sigma_{\mathrm{tot}}(\boldsymbol{p})$ に他なりません．よって次の等式を得ます:

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathrm{tot}}(\boldsymbol{p}) &= -\frac{2m}{\hbar p}\,\mathrm{Im}(\psi_{\boldsymbol{p}}, V\Psi^{\mathrm{in}}_{\boldsymbol{p}}) \\ &= \frac{2m}{\hbar p}\frac{2\pi\hbar^2}{m}\left(\frac{2\pi\hbar}{p}\right)^{\frac{d-3}{2}}\,\mathrm{Im}\,f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}) \\ &= 2\left(\frac{2\pi\hbar}{p}\right)^{\frac{d-1}{2}}\,\mathrm{Im}\,f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})\end{aligned} \tag{5.3.20}$$

但し，2 行目で式(5.2.116)を使いました．この等式は全散乱断面積 $\sigma_{\mathrm{tot}}(\boldsymbol{p})$ が $\boldsymbol{p} \to \boldsymbol{p}$ の**前方散乱** (**forward scattering**) の散乱振幅 $f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})$ の虚部で決定される事を意味します．等式(5.3.20)を**光学定理** (**optical theorem**) と呼びます．式(5.2.116)で散乱振幅 f の定義に位相 $\exp(-i\frac{d-3}{4}\pi)$ を加えていたら，光学定理の表式は $\sigma_{\mathrm{tot}} \propto \mathrm{Im}\,f$ という単純な形にはならなかった事に注意しましょう．また，光学定理(5.3.20)を次の様に書く事もあります:

$$\mathrm{Im}\,f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}) = \frac{1}{2}\left(\frac{p}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{d-1}{2}}\sigma_{\mathrm{tot}}(\boldsymbol{p}) \tag{5.3.21}$$

これを使うと，逆に全散乱断面積を求めることで前方散乱の散乱振幅の虚部が決定出来るという事が分かります．

参考文献

S 行列は John A. Wheeler と Werner Heisenberg によって導入されましたが，この章で取り扱った様な散乱理論は Josef-Maria Jauch によって創始されました:

[1] J. M. Jauch, “Theory of the scattering operator,” *Helv. Phys. Acta.* **31** (1958) 127–158.
[2] J. M. Jauch, “Theory of the scattering operator. II, Multichannel scattering,” *Helv. Phys. Acta.* **31** (1958) 661–684.

散乱理論はちゃんとやると数学的に非常に難しいですが，物理系の学生に向けた教科書としては次の John R. Taylor の教科書が最も良いと思います:

[3] J. R. Taylor, *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions* (Dover Publications, 2006)

より数学志向の人は次の教科書を参考にすると良いかもしれません:

[4] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, Vol. III: Scattering Theory* (Academic Press, 1979)
[5] W. O. Amrein, J. M. Jauch, and K. B. Sinha, *Scattering Theory in Quantum Mechanics* (Benjamin-Cummings Publishing, 1977)
[6] W. O. Amrein, *Hilbert Space Methods in Quantum Mechanics* (EPFL Press, 2009)

特に [5] が読みやすいと思います．[6] は [5] をより現代的にした教科書で，内容も難しめです．また，[4] はがちがちの数学書ですが，XI.1 にまとめられている散乱理論の概略は非常に素晴らしいです．また，次の Franco Strocchi の教科書は場の量子論の教科書ですが，第 2 章 6 節に量子力学の散乱理論に対する非常に良い概観が載っています:

[7] F. Strocchi, *An Introduction to Non-Perturbative Foundations of Quantum Field Theory* (Oxford University Press, 2013)

この講義ノートでも使用した「Schrödinger 描像での S 行列」や「Heisenberg 描像での S 行列」という名称は上の Strocchi の教科書から拝借しました．また，第5.2.4節で取り扱った漸近演算子の議論は [7] の第 2 章 6.4 節を参考にしました．

第 6 章

摂動論

これまでは調和振動子や Coulomb 力で相互作用する二体系など厳密に解ける模型のみ扱って来ました．しかしながら，現実の問題では厳密解が分からない場合の方が圧倒的に多く，この様な場合は何らかの近似計算を行って固有値問題や散乱問題を解く事になります．この章では，厳密に解ける模型から微小にずれている模型に対して有効な**摂動論** (**perturbation theory**) と呼ばれる近似解法について学びます[*1]．摂動論は大きく分けて**時間に依存しない摂動論** (**time-independent perturbation theory**) と**時間に依存する摂動論** (**time-dependent perturbation theory**) の 2 種類がありますが，前者を第6.1節で，後者を第6.2節で取り扱う事にします．

前章に引き続き，この章でもブラケット記法を使うのはやめて，状態ベクトルは単に Ψ，状態ベクトルの内積は (Ψ, Φ)，演算子 $\mathcal{O}$ の行列要素は $(\Psi_n, \mathcal{O}\Psi_m)$ 等と表す事にします．まとめると次の様な対応になります:

$$
\begin{aligned}
|\Psi\rangle &\leftrightarrow \Psi \\
\langle\Psi|\Phi\rangle &\leftrightarrow (\Psi, \Phi) \\
\langle\Psi_n|\mathcal{O}|\Psi_m\rangle &\leftrightarrow (\Psi_n, \mathcal{O}\Psi_m)
\end{aligned}
$$

また，状態ベクトルが特に時間依存する場合は $\Psi(t)$ 等と書く事にします．

6.1 時間に依存しない摂動論

次の形のハミルトニアンを考えましょう:

$$H = H_0 + \varepsilon V \tag{6.1.1}$$

ここで，H_0 と V はエルミート演算子で，ε は実数のパラメータだとします．以下では，H_0 の固有値・固有ベクトルは全て分かっているとして，H の固有値・固有ベクトルを ε の冪級数として求める事を考えます．$|\varepsilon| \ll 1$ なら，この冪級数展開の最初の数項で十分良い近似解が得られると期待して良いでしょう．この期待の下，ε に関する多項式近似を行うのが摂動論です．

まず，H_0 は次の固有値方程式を満たすとしましょう:

$$H_0\Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(0)}, \quad n \in \{0, 1, 2, \cdots\} \tag{6.1.2}$$

但し，H_0 の固有ベクトル $\{\Psi_n^{(0)}\}$ は完全正規直交系を成すとします．即ち，次の等式が成り立つとします:[*2]

$$(\text{規格直交性}) \quad (\Psi_n^{(0)}, \Psi_m^{(0)}) = \delta_{nm} \tag{6.1.3a}$$

$$(\text{完全性}) \quad \Psi = \sum_n (\Psi_n^{(0)}, \Psi)\Psi_n^{(0)} \quad \text{for any } \Psi \tag{6.1.3b}$$

以下では，$\{E_n^{(0)}\}$ と $\{\Psi_n^{(0)}\}$ は全て求まっていると仮定します．また，簡単の為，以下ではエネルギー準位に縮退は無いとします[*3]．

さて，解きたいのは次の固有値方程式です:

$$H\Psi_n = E_n\Psi_n, \quad n \in \{0, 1, 2, \cdots\} \tag{6.1.4}$$

[*1] 他の近似解法としては
- WKB 近似 (WKB approximation)
- 変分法 (variational method)
- 数値解析 (numerical method)

等がありますが，この講義ではこれらは扱いません．

[*2] 完全性には幾つかの等価な言い回しがありますが，この章では式(6.1.3b)を使うので，この言い回しを採用しています．

[*3] エネルギー準位に縮退がある場合はこの節の方法はそのままでは使えず，別途考え直さなければなりません．しかしこれは面倒なので，この講義ではエネルギー準位に縮退が無い場合のみを扱う事にします．

E_n や Ψ_n は勿論 ε に依存します．以下では，E_n や Ψ_n は $\varepsilon = 0$ 周りで冪級数展開可能だとして，その展開係数を求めて行くという事をします．以下，まずは E_n や Ψ_n の $\varepsilon = 0$ 周りでの冪級数展開がどの様になるのかを見ておきましょう．

まず，E_n の冪級数展開は次の様にやります．$\varepsilon \to 0$ では $E_n \to E_n^{(0)}$ なので，E_n は $\varepsilon = 0$ 周りで次の様に冪級数展開可能だとします:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)} + \cdots \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k E_n^{(k)} \end{aligned} \tag{6.1.5}$$

但し，$E_n^{(k)}$ $(k = 1, 2, \cdots)$ は ε に依存しない未定の展開係数です．

次に，Ψ_n の冪級数展開は次の様にやります．まず，$\{\Psi_n^{(0)}\}$ は完全正規直交系なので，Ψ_n は必ず次の様に展開出来ます:

$$\begin{aligned} \Psi_n &= \sum_m c_{mn}(\varepsilon) \Psi_m^{(0)} \\ &= c_{nn}(\varepsilon) \Psi_n^{(0)} + \sum_{m \neq n} c_{mn}(\varepsilon) \Psi_m^{(0)} \end{aligned} \tag{6.1.6}$$

但し，$c_{mn}(\varepsilon)$ は展開係数で，これは ε に依存します．$\varepsilon \to 0$ では $\Psi_n \to \Psi_n^{(0)}$ なので，展開係数は $\varepsilon \to 0$ で $c_{nn}(\varepsilon) \to 1$ および $c_{mn}(\varepsilon) \to 0$ $(m \neq n)$ を満たす必要がありますが，取り敢えず Ψ_n の規格化は無視すると，$c_{nn}(\varepsilon)$ に関しては ε に依らず 1 だと仮定して良いです[*4]．こうすると，展開係数 $c_{mn}(\varepsilon)$ は次の様に $\varepsilon = 0$ 周りで冪級数展開されます:

$$c_{mn}(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \text{for} \quad m = n \\ \varepsilon c_{mn}^{(1)} + \varepsilon^2 c_{mn}^{(2)} + \cdots & \text{for} \quad m \neq n \end{cases} \tag{6.1.7}$$

これを式(6.1.6)に代入すると，Ψ_n は次の様に $\varepsilon = 0$ 周りで冪級数展開される事になります:

$$\begin{aligned} \Psi_n &= \Psi_n^{(0)} + \sum_{m \neq n} c_{mn}(\varepsilon) \Psi_m^{(0)} \\ &= \Psi_n^{(0)} + \sum_{m \neq n} \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k c_{mn}^{(k)} \Psi_m^{(0)} \\ &= \Psi_n^{(0)} + \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k \left(\sum_{m \neq n} c_{mn}^{(k)} \Psi_m^{(0)} \right) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \Psi_n^{(k)} \end{aligned} \tag{6.1.8}$$

但し，

$$\Psi_n^{(k)} := \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(k)} \Psi_m^{(0)}, \quad \forall k \in \{1, 2, 3, \cdots\} \tag{6.1.9}$$

定義(6.1.9)から明らかですが，$\Psi_n^{(k)}$ $(k = 1, 2, \cdots)$ は $\Psi_n^{(0)}$ を含まないので，次の直交関係が成り立つ事に注意しましょう:

$$(\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(k)}) = 0, \quad \forall k \in \{1, 2, 3, \cdots\} \tag{6.1.10}$$

以上で E_n と Ψ_n の $\varepsilon = 0$ 周りでの冪級数展開が終わったので，次にこれらの展開係数を決定して行きましょう．式(6.1.1)及び冪級数展開(6.1.5)(6.1.8)を固有値方程式(6.1.4)に代入して ε の冪の次数でまとめると，次が得られます:

$$\begin{aligned} 0 &= H\Psi_n - E_n \Psi_n \\ &= (H_0 + \varepsilon V) \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \Psi_n^{(k)} - \left(\sum_{\ell=0}^{\infty} \varepsilon^\ell E_n^{(\ell)} \right) \left(\sum_{m=0}^{\infty} \varepsilon^m \Psi_n^{(m)} \right) \end{aligned}$$

[*4] 規格化を考慮に入れなければ $c_{nn}(\varepsilon)$ は常に 1 に出来る，というのは式(6.1.6)を書き換えた次の表式から分かります:

$$\Psi_n = c_{nn}(\varepsilon) \left(\Psi_n^{(0)} + \sum_{m \neq n} \frac{c_{mn}(\varepsilon)}{c_{nn}(\varepsilon)} \Psi_m^{(0)} \right)$$

この表式よりまず展開係数 $c_{nn}(\varepsilon)$ は規格化定数と見做せるという事が分かります．そこで取り敢えずこの因子は無視して，$c_{mn}(\varepsilon)/c_{nn}(\varepsilon)$ を改めて $c_{mn}(\varepsilon)$ と思い直すと，展開係数が式(6.1.7)の様に書ける事が分かります．

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k H_0 \Psi_n^{(k)} + \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^{k+1} V \Psi_n^{(k)} - \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \varepsilon^{\ell+m} E_n^{(\ell)} \Psi_n^{(m)} \\
&= H \Psi_n^{(0)} + \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k H_0 \Psi_n^{(k)} + \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k V \Psi_n^{(k-1)} - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\ell=0}^{k} \varepsilon^k E_n^{(\ell)} \Psi_n^{(k-\ell)} \\
&= E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)} + \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k \left(H_0 \Psi_n^{(k)} + V \Psi_n^{(k-1)} \right) - E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)} - \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k \left(\sum_{\ell=0}^{k} E_n^{(\ell)} \Psi_n^{(k-\ell)} \right) \\
&= \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k \left(H_0 \Psi_n^{(k)} + V \Psi_n^{(k-1)} - \sum_{\ell=0}^{k} E_n^{(\ell)} \Psi_n^{(k-\ell)} \right)
\end{aligned}
\tag{6.1.11}
$$

但し，4 番目の等号で $k = \ell + m$ と置き，和を取る変数を (ℓ, m) から (k, ℓ) に置き換えました．$m = k - \ell \geq 0$ なので，ℓ の範囲は 0 から k までとなる事に注意しましょう．また，5 行目第 1 項で固有値方程式(6.1.2)を使いました．式(6.1.11)は任意の ε に対して成り立たねばならないので，次の条件式が得られます:

$$
H_0 \Psi_n^{(k)} + V \Psi_n^{(k-1)} - \sum_{\ell=0}^{k} E_n^{(\ell)} \Psi_n^{(k-\ell)} = 0, \quad \forall k \in \{1, 2, 3, \cdots\}
\tag{6.1.12}
$$

次にこの両辺と $\Psi_m^{(0)}$ の内積を取りましょう．計算すると次の様になります:

$$
\begin{aligned}
0 &= (\Psi_m^{(0)}, H_0 \Psi_n^{(k)} + V \Psi_n^{(k-1)} - \sum_{\ell=0}^{k} E_n^{(\ell)} \Psi_n^{(k-\ell)}) \\
&= (\Psi_m^{(0)}, H_0 \Psi_n^{(k)}) + (\Psi_m^{(0)}, V \Psi_n^{(k-1)}) - \sum_{\ell=0}^{k} E_n^{(\ell)} (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k-\ell)}) \\
&= (H_0 \Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k)}) + (\Psi_m^{(0)}, V \Psi_n^{(k-1)}) - \sum_{\ell=0}^{k-1} E_n^{(\ell)} (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k-\ell)}) - E_n^{(k)} (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(0)}) \\
&= E_m^{(0)} (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k)}) + (\Psi_m^{(0)}, V \Psi_n^{(k-1)}) - \sum_{\ell=0}^{k-1} E_n^{(\ell)} (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k-\ell)}) - E_n^{(k)} \delta_{nm} \\
&= (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k)}) + (\Psi_m^{(0)}, V \Psi_n^{(k-1)}) - \sum_{\ell=1}^{k-1} E_n^{(\ell)} (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k-\ell)}) - E_n^{(k)} \delta_{nm} \\
&= \begin{cases}
(\Psi_n^{(0)}, V \Psi_n^{(k-1)}) - E_n^{(k)} & \text{for} \quad m = n \\
(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k)}) + (\Psi_m^{(0)}, V \Psi_n^{(k-1)}) - \displaystyle\sum_{\ell=1}^{k-1} E_n^{(\ell)} (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k-\ell)}) & \text{for} \quad m \neq n
\end{cases}
\end{aligned}
\tag{6.1.13}
$$

但し，4 行目第 1 項で固有値方程式(6.1.2)を使い，4 行目第 4 項で規格直交性(6.1.3a)を使いました．式(6.1.13)より次の関係式を得ます:

$$
E_n^{(k)} = (\Psi_n^{(0)}, V \Psi_n^{(k-1)})
\tag{6.1.14a}
$$

$$
(\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k)}) = \frac{1}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \left(-(\Psi_m^{(0)}, V \Psi_n^{(k-1)}) + \sum_{\ell=1}^{k-1} E_n^{(\ell)} (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k-\ell)}) \right) \quad \text{for} \quad m \neq n
\tag{6.1.14b}
$$

但し，$k = 1$ の時は式(6.1.14b)第 2 項目はありません．ひとたび $(\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k)})$ が分かれば，完全性(6.1.3b)よりベクトル $\Psi_n^{(k)}$ は次の様にして構成される事に注意しましょう:

$$
\begin{aligned}
\Psi_n^{(k)} &= \sum_m (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k)}) \Psi_m^{(0)} \\
&= \sum_{m \neq n} (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(k)}) \Psi_m^{(0)}, \quad \forall k \in \{1, 2, 3, \cdots\}
\end{aligned}
\tag{6.1.15}
$$

但し，2 行目で式(6.1.10)を使いました．式(6.1.14a)と(6.1.14b)は一種の漸化式で，式(6.1.15)と組み合わせる事で k の低い方から順に $E_n^{(k)}$ と $\Psi_n^{(k)}$ を求める事が出来ます．以下，$k = 1, 2$ の場合でこの操作を具体的に行ってみましょう．

6.1.1　1 次の摂動論

まず $k=1$ の時は式(6.1.14a)(6.1.14b)は次の様になります:

$$E_n^{(1)} = (\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}) \tag{6.1.16a}$$

$$(\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(1)}) = -\frac{(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad \text{for} \quad m \neq n \tag{6.1.16b}$$

よって，式(6.1.15)よりベクトル $\Psi_n^{(1)}$ は次の様になります:

$$\begin{aligned}\Psi_n^{(1)} &= \sum_{m\neq n} (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(1)})\Psi_m^{(0)} \\ &= -\sum_{m\neq n} \frac{(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \Psi_m^{(0)}\end{aligned} \tag{6.1.17}$$

結局，ε の 1 次のオーダーでは H の固有値・固有ベクトルは次の様に演算子 V の行列要素で決まる事が分かりました:

$$E_n = E_n^{(0)} + \varepsilon(\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}) + O(\varepsilon^2) \tag{6.1.18a}$$

$$\Psi_n = \Psi_n^{(0)} - \varepsilon \sum_{m\neq n} \frac{(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \Psi_m^{(0)} + O(\varepsilon^2) \tag{6.1.18b}$$

6.1.2　2 次の摂動論

次に $k=2$ の場合を計算してみましょう．式(6.1.14a)(6.1.14b)に式 (6.1.16a)(6.1.17)を代入すると次の様になります:

$$\begin{aligned}E_n^{(2)} &= (\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(1)}) \\ &= (\Psi_n^{(0)}, V\left[-\sum_{m\neq n} \frac{(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \Psi_m^{(0)}\right]) \\ &= -\sum_{m\neq n} \frac{(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})(\Psi_n^{(0)}, V\Psi_m^{(0)})}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \\ &= -\sum_{m\neq n} \frac{(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})(V\Psi_n^{(0)}, \Psi_m^{(0)})}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \\ &= -\sum_{m\neq n} \frac{|(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}\end{aligned} \tag{6.1.19a}$$

$$\begin{aligned}(\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(2)}) &= \frac{1}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \left(-(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(1)}) + E_n^{(1)}(\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(1)})\right) \\ &= \frac{1}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \left(-(\Psi_m^{(0)}, V\left[-\sum_{\ell\neq n} \frac{(\Psi_\ell^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})}{E_\ell^{(0)} - E_n^{(0)}} \Psi_\ell^{(0)}\right]) + (\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})(\Psi_m^{(0)}, -\sum_{\ell\neq n} \frac{(\Psi_\ell^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})}{E_\ell^{(0)} - E_n^{(0)}} \Psi_\ell^{(0)})\right) \\ &= \frac{1}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \left(\sum_{\ell\neq n} \frac{(\Psi_\ell^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_\ell^{(0)})}{E_\ell^{(0)} - E_n^{(0)}} - \frac{(\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}\right) \quad \text{for} \quad m \neq n\end{aligned} \tag{6.1.19b}$$

但し，式(6.1.19a)4 行目で V はエルミート演算子である事を使い，5 行目で内積の共軛性の性質 $(\Psi, \Phi) = (\Phi, \Psi)^*$ を使いました．式(6.1.15)(6.1.19b)よりベクトル $\Psi_n^{(2)}$ は次の様に表されます:

$$\begin{aligned}\Psi_n^{(2)} &= \sum_m (\Psi_m^{(0)}, \Psi_n^{(2)})\Psi_m^{(0)} \\ &= \sum_{m\neq n} \left[\sum_{\ell\neq n} \frac{(\Psi_\ell^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_\ell^{(0)})}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})(E_\ell^{(0)} - E_n^{(0)})} - \frac{(\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})^2}\right] \Psi_m^{(0)}\end{aligned} \tag{6.1.20}$$

結局，ε の 2 次のオーダーでは H の固有値・固有ベクトルは次の様になる事が分かりました:

$$E_n = E_n^{(0)} + \varepsilon(\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}) - \varepsilon^2 \sum_{m\neq n} \frac{|(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} + O(\varepsilon^3) \tag{6.1.21a}$$

$$\begin{aligned}\Psi_n = \Psi_n^{(0)} &- \varepsilon \sum_{m\neq n} \frac{(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \Psi_m^{(0)} \\ &+ \varepsilon^2 \sum_{m\neq n} \left[\sum_{\ell\neq n} \frac{(\Psi_\ell^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_\ell^{(0)})}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})(E_\ell^{(0)} - E_n^{(0)})} - \frac{(\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})(\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)})}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})^2} \right] \Psi_m^{(0)} + O(\varepsilon^3)\end{aligned} \tag{6.1.21b}$$

以上，ε の 2 次のオーダーまでの計算を行いましたが，同様の操作を繰り返して行けば原理的には ε の任意のオーダーまで計算する事が出来ます．これまでの計算から明らかですが，$\{E_n^{(0)}\}$ と $\{\Psi_n^{(0)}\}$ が全て分かっていれば，あとは行列要素 $(\Psi_n^{(0)}, V\Psi_m^{(0)})$ さえ計算すれば原理的には全て求まるという構造になっています．

6.2 時間に依存する摂動論

次の形の時間に依存したハミルトニアンを考えましょう:

$$H(t) = H_0 + \varepsilon V(t) \tag{6.2.1}$$

ここで，H_0 と $V(t)$ はエルミート演算子で，ε は実数のパラメータだとします．以下では，H_0 の固有値 $\{E_n^{(0)}\}$ 及び固有ベクトル $\{\Psi_n^{(0)}\}$ は全て分かっているとして，始状態が H_0 の或る固有状態 $\Psi_i^{(0)}$ であった時，終状態が H_0 の別の固有状態 $\Psi_f^{(0)}$ である確率 $P_{f\leftarrow i}$ を ε の冪級数として求める事を考えます．$|\varepsilon| \ll 1$ なら，この冪級数展開の最初の数項で十分良い近似解が得られると期待して良いでしょう．この期待の下，$P_{f\leftarrow i}$ を ε に関する多項式近似で求めるのが時間に依存する摂動論です．以下では，前節同様 $\{\Psi_n^{(0)}\}$ は完全正規直交系を成すと仮定して，式(6.1.3a)(6.1.3b)を満たすとします．

さて，次の時間に依存する Schrödinger 方程式を時刻 $t = 0$ での初期条件 $\Psi(0) = \Psi_i^{(0)}$ の下で解く事を考えましょう:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = H(t)\Psi(t) \quad \text{with} \quad \Psi(0) = \Psi_i^{(0)} \tag{6.2.2}$$

仮定より H_0 の固有ベクトル $\{\Psi_n^{(0)}\}$ は完全正規直交系を成すので，$\Psi(t)$ は必ず次の様に展開出来ます:

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t)\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}\, \Psi_n^{(0)} \tag{6.2.3}$$

ここで，$c_n(t)$ は時間に依存する展開係数で，位相 $\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}$ は後の便利の為に入れておきました．ひとたびこの展開係数 $c_n(t)$ が分かれば，時刻 t で系の状態が $\Psi_f^{(0)}$ である確率 $P_{f\leftarrow i}(t)$ は次で与えられます:

$$P_{f\leftarrow i}(t) = |(\Psi_f^{(0)}, \Psi(t))|^2 = |c_f(t)|^2 \tag{6.2.4}$$

以下，展開係数 $c_n(t)$ を ε の冪級数として求めて行きましょう．

まず，展開(6.2.3)を時間に依存する Schrödinger 方程式(6.2.2)に代入します．すると次が得られます:

$$\begin{aligned}
0 &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) - H(t)\Psi(t) \\
&= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_n c_n(t)\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}\, \Psi_n^{(0)}\right) - (H_0 + \varepsilon V(t))\left(\sum_n c_n(t)\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}\, \Psi_n^{(0)}\right) \\
&= \sum_n \left(i\hbar\dot{c}_n(t) + E_n^{(0)}c_n(t)\right) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}\, \Psi_n^{(0)} - \sum_n E_n^{(0)}c_n(t)\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}\, \Psi_n^{(0)} - \varepsilon\sum_n c_n(t)\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t} V(t)\Psi_n^{(0)} \\
&= \sum_n i\hbar\dot{c}_n(t)\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}\, \Psi_n^{(0)} - \varepsilon\sum_m c_m(t)\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_m^{(0)}t} V(t)\Psi_m^{(0)} \\
&= \sum_n i\hbar\dot{c}_n(t)\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}\, \Psi_n^{(0)} - \varepsilon\sum_m c_m(t)\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_m^{(0)}t} \sum_n (\Psi_n^{(0)}, V(t)\Psi_m^{(0)})\Psi_n^{(0)} \\
&= \sum_n \left(i\hbar\dot{c}_n(t) - \varepsilon\sum_m c_m(t)\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})t} (\Psi_n^{(0)}, V(t)\Psi_m^{(0)})\right) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}\, \Psi_n^{(0)}
\end{aligned} \tag{6.2.5}$$

但し，4 行目第 2 項で和を取るインデックスを n から m へと書き換え，5 行目第 2 項では完全性(6.1.3b)から従う等式 $V(t)\Psi_m^{(0)} = \sum_n (\Psi_n^{(0)}, V(t)\Psi_m^{(0)})\Psi_n^{(0)}$ を使いました．また，ドット ($\dot{}$) は時間微分を表します．式(6.2.5)最終行の表式より，時間に依存する Schrödinger 方程式(6.2.2)が成り立つ為には，展開係数 $c_n(t)$ は次の微分方程式を満たさなければならない事が分かります:

$$\dot{c}_n(t) = -\frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_m \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})t}(\Psi_n^{(0)}, V(t)\Psi_m^{(0)})c_m(t) \tag{6.2.6}$$

次にこの微分方程式を解きましょう．まず変数を t から τ へ書き換えて，両辺を $\tau = 0$ から $\tau = t$ まで積分すると次が得られます:

$$c_n(t) - c_n(0) = -\frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_m \int_0^t d\tau\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})\tau}(\Psi_n^{(0)}, V(\tau)\Psi_m^{(0)})c_m(\tau) \tag{6.2.7}$$

但し，$\int_0^t d\tau\, \dot{c}_n(\tau) = c_n(t) - c_n(0)$ を使いました．よって，展開係数 $c_n(t)$ は次の様に書けます:

$$c_n(t) = c_n(0) - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_m \int_0^t d\tau\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})\tau}(\Psi_n^{(0)}, V(\tau)\Psi_m^{(0)})c_m(\tau) \tag{6.2.8}$$

これを逐次的に用いると，$c_n(t)$ は次の様に ε の冪級数として表す事が出来ます:

$$\begin{aligned}
c_n(t) &= c_n(0) - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_m \int_0^t d\tau\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})\tau}(\Psi_n^{(0)}, V(\tau)\Psi_m^{(0)})c_m(\tau) \\
&= c_n(0) - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_m \int_0^t d\tau\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})\tau}(\Psi_n^{(0)}, V(\tau)\Psi_m^{(0)})\left[c_m(0) - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_{m'}\int_0^\tau d\tau'\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)}-E_{m'}^{(0)})\tau'}(\Psi_m^{(0)}, V(\tau')\Psi_{m'}^{(0)})c_{m'}(\tau')\right] \\
&= c_n(0) - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_m c_m(0)\int_0^t d\tau\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})\tau}(\Psi_n^{(0)}, V(\tau)\Psi_m^{(0)}) \\
&\quad + \left(\frac{i\varepsilon}{\hbar}\right)^2 \sum_m\sum_{m'}\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\tau'\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})\tau}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)}-E_{m'}^{(0)})\tau'}(\Psi_n^{(0)}, V(\tau)\Psi_m^{(0)})(\Psi_m^{(0)}, V(\tau')\Psi_{m'}^{(0)})c_{m'}(\tau') \\
&= \cdots \\
&= c_n(0) - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_m c_m(0)\int_0^t d\tau\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})\tau}(\Psi_n^{(0)}, V(\tau)\Psi_m^{(0)}) \\
&\quad + \left(\frac{i\varepsilon}{\hbar}\right)^2 \sum_m\sum_{m'} c_{m'}(0)\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\tau'\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})\tau}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)}-E_{m'}^{(0)})\tau'}(\Psi_n^{(0)}, V(\tau)\Psi_m^{(0)})(\Psi_m^{(0)}, V(\tau')\Psi_{m'}^{(0)}) + O(\varepsilon^3)
\end{aligned} \tag{6.2.9}$$

次に初期条件 $\Psi(0) = \Psi_i^{(0)}$ を課しましょう．$\Psi(0) = \sum_n c_n(0)\Psi_n^{(0)}$ より，$c_n(0)$ は次の様に決まります:

$$c_n(0) = \delta_{ni} = \begin{cases} 1 & \text{for} \quad n = i \\ 0 & \text{for} \quad n \neq i \end{cases} \tag{6.2.10}$$

これを代入すると，式(6.2.9)は次の様になります:

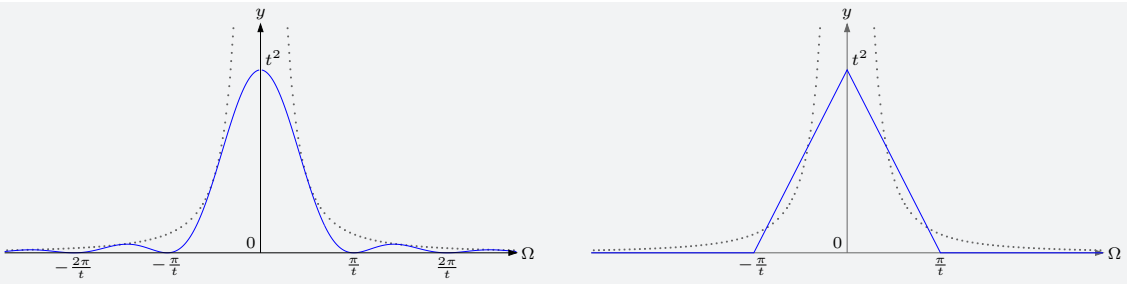
$$\begin{aligned}
c_n(t) &= \delta_{ni} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\int_0^t d\tau\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_i^{(0)})\tau}(\Psi_n^{(0)}, V(\tau)\Psi_i^{(0)}) \\
&\quad + \left(\frac{i\varepsilon}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_0^t d\tau\int_0^\tau d\tau'\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})\tau}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)}-E_i^{(0)})\tau'}(\Psi_n^{(0)}, V(\tau)\Psi_m^{(0)})(\Psi_m^{(0)}, V(\tau')\Psi_i^{(0)}) + O(\varepsilon^3)
\end{aligned} \tag{6.2.11}$$

以上，ε の 2 次のオーダーまでの表式を求めましたが，式(6.2.9)で行った操作を繰り返して行けば，原理的には ε の任意のオーダーまで計算する事が出来ます．後は行列要素 $(\Psi_n^{(0)}, V(t)\Psi_m^{(0)})$ を計算して式(6.2.9)の積分を実行して行けば，展開係数 $c_n(t)$ を ε の冪級数として表す事が出来ます．以下，単色摂動と呼ばれるクラスの $V(t)$ に制限して，展開係数 $c_n(t)$ 及び遷移確率 $P_{f\leftarrow i}(t)$ の構造を更に調べて行く事にします．

6.2.1 Fermi の黄金律

以下，$V(t)$ として次の形のものを考えましょう:

$$V(t) = V\,\mathrm{e}^{-i\omega t} + V^\dagger\,\mathrm{e}^{+i\omega t} \tag{6.2.12}$$



(a) $f(\Omega)=\frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2}$ の概形　　**(b)** $f(\Omega)=\frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2}$ の三角形近似

図6.1: 関数 $y=f(\Omega)=\frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2}$ の概形とその三角形近似．点線は $y=\frac{1}{\Omega^2}$ を表します．

但し，V は時間に依存しない或る演算子です．この $V(t)$ は単一の角振動数 ω (或いは振動数 $\nu=\frac{\omega}{2\pi}$) のみに依存するので，この様な摂動を**単色摂動** (**monochromatic perturbation**) と呼びます．

さて，上の $V(t)$ を式(6.2.11)に代入すると，展開係数 $c_n(t)$ は ε の 1 次で次の様に表されます:

$$\begin{aligned}
&c_n(t)\\
&=\delta_{ni}-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left[(\Psi_n^{(0)},V\Psi_i^{(0)})\int_0^t d\tau\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_i^{(0)}-\hbar\omega)\tau}+(\Psi_n^{(0)},V^\dagger\Psi_i^{(0)})\int_0^t d\tau\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_i^{(0)}+\hbar\omega)\tau}\right]+O(\varepsilon^2)\\
&=\delta_{ni}-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left[(\Psi_n^{(0)},V\Psi_i^{(0)})\,\mathrm{e}^{\frac{i}{2\hbar}(E_n^{(0)}-E_i^{(0)}-\hbar\omega)t}\frac{\sin\left(\frac{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}-\hbar\omega}{2\hbar}t\right)}{\frac{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}-\hbar\omega}{2\hbar}}+(\Psi_n^{(0)},V^\dagger\Psi_i^{(0)})\,\mathrm{e}^{\frac{i}{2\hbar}(E_n^{(0)}-E_i^{(0)}+\hbar\omega)t}\frac{\sin\left(\frac{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}+\hbar\omega}{2\hbar}t\right)}{\frac{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}+\hbar\omega}{2\hbar}}\right]\\
&\quad+O(\varepsilon^2)
\end{aligned}\tag{6.2.13}$$

但し，2 番目の等号で次の定積分の結果を用いました:

$$\int_0^t d\tau\ \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_i^{(0)}\mp\hbar\omega)\tau}=\frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_i^{(0)}\mp\hbar\omega)t}-1}{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_i^{(0)}\mp\hbar\omega)}=\mathrm{e}^{\frac{i}{2\hbar}(E_n^{(0)}-E_i^{(0)}\mp\hbar\omega)t}\frac{\sin\left(\frac{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}\mp\hbar\omega}{2\hbar}t\right)}{\frac{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}\mp\hbar\omega}{2\hbar}}\tag{6.2.14}$$

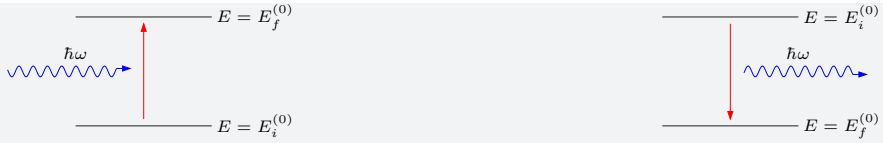
式(6.2.13)を使うと，遷移確率 $P_{f\leftarrow i}(t)$ $(f\neq i)$ は ε の最低次近似で次の様に表されます:

$$\begin{aligned}
P_{f\leftarrow i}(t)&=|c_f(t)|^2\\
&=\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}\left[|(\Psi_f^{(0)},V\Psi_i^{(0)})|^2\frac{\sin^2\left(\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}+\hbar\omega}{2\hbar}t\right)}{\left(\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}+\hbar\omega}{2\hbar}\right)^2}+|(\Psi_f^{(0)},V^\dagger\Psi_i^{(0)})|^2\frac{\sin^2\left(\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}-\hbar\omega}{2\hbar}t\right)}{\left(\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}-\hbar\omega}{2\hbar}\right)^2}\right.\\
&\quad+(\Psi_f^{(0)},V\Psi_i^{(0)})(\Psi_f^{(0)},V^\dagger\Psi_i^{(0)})^*\,\mathrm{e}^{-i\omega t}\frac{\sin\left(\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}+\hbar\omega}{2\hbar}t\right)\sin\left(\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}-\hbar\omega}{2\hbar}t\right)}{\left(\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}+\hbar\omega}{2\hbar}\right)\left(\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}-\hbar\omega}{2\hbar}\right)}\\
&\quad\left.+(\Psi_f^{(0)},V\Psi_i^{(0)})^*(\Psi_f^{(0)},V^\dagger\Psi_i^{(0)})\,\mathrm{e}^{+i\omega t}\frac{\sin\left(\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}+\hbar\omega}{2\hbar}t\right)\sin\left(\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}-\hbar\omega}{2\hbar}t\right)}{\left(\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}+\hbar\omega}{2\hbar}\right)\left(\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}-\hbar\omega}{2\hbar}\right)}\right]\\
&\quad+O(\varepsilon^3)
\end{aligned}\tag{6.2.15}$$

この表式から明らかな様に，遷移確率の t 依存性は全て三角関数を通して現れるので，$P_{f\leftarrow i}(t)$ は時間に関して周期性を持ちます．しかしながら，t が充分大きい時，この遷移確率は関係式 $E_f^{(0)}=E_i^{(0)}\pm\hbar\omega$ を満たす所が主要な寄与を与え，この寄与は t に比例して増大する事が言えます．以下，この t が充分大きい場合を調べて，この節を終える事にしましょう．

まず，式(6.2.15)第 1・2 項目の $t\to\infty$ での振る舞いを調べる為に，次の関数を考えましょう:

$$f(\Omega)=\frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2}\tag{6.2.16}$$



(a) エネルギー $\hbar\omega$ の吸収　　**(b)** エネルギー $\hbar\omega$ の放出

図6.2: エネルギー $\hbar\omega$ の吸収と放出の概念図.

但し，$\Omega = E_f^{(0)} - E_i^{(0)} \mp \hbar\omega$ です．この関数の Ω 依存性を図6.1aに示しました．この図から明らかな様に，この関数は $\Omega = 0$ で最大値 $f(0) = t^2$ を取り，$\Omega \neq 0$ では $1/\Omega^2$ に比例して減衰して行きます．また，この関数は $\Omega t = n\pi$ $(n = 1, 2, \cdots)$ で零点を持ちます．従って，t をどんどん大きくして行くと，この関数は $\Omega = 0$ で鋭いピークを持つ図6.1bに示した三角形に近付いて行きます．ところで，この三角形の面積は $\frac{1}{2} \times \frac{2\pi}{t} \times t^2 = \pi t$ なので，充分大きい t に対しては，関数(6.2.16)は $\pi t\delta(\Omega)$ と近似出来るのではないかと予想出来ます．実際，関数(6.2.16)を t で割ったものの $t \to \infty$ の極限が $\pi\delta(\Omega)$ になるという次の公式が成り立ちます:[*5]

$$\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t} = \pi\delta(\Omega) \tag{6.2.17}$$

これより，$t \to \infty$ の極限で次が成り立つ事が分かります:

$$\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{E_f^{(0)} - E_i^{(0)} \mp \hbar\omega}{2\hbar} t\right)}{\left(\frac{E_f^{(0)} - E_i^{(0)} \mp \hbar\omega}{2\hbar}\right)^2 t} = \pi\delta\left(\tfrac{E_f^{(0)} - E_i^{(0)} \mp \hbar\omega}{2\hbar}\right) = 2\pi\hbar\delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)} \mp \hbar\omega) \tag{6.2.18}$$

但し，2 番目の等号でデルタ関数の性質 $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$ (但し，a は定数) を使いました．

以上，式(6.2.15)第 1・2 項目の $t \to \infty$ での振る舞いを調べて来ましたが，この第 1・2 項目に比べて，式(6.2.15)第 3・4 項目は $t \to \infty$ では無視出来る事が言えます．取り敢えずこれを認めると，遷移確率(6.2.15)を全時間 t で割ったもの，即ち，単位時間あたりの遷移確率 $\Gamma_{f\leftarrow i}$ は，$t \to \infty$ の極限で次の様に振る舞う事が分かります:

$$\begin{aligned}\Gamma_{f\leftarrow i} &= \lim_{t\to\infty} \frac{P_{f\leftarrow i}(t)}{t} \\ &= \frac{2\pi\varepsilon^2}{\hbar}\left[|(\Psi_f^{(0)}, V\Psi_i^{(0)})|^2\delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)} - \hbar\omega) + |(\Psi_f^{(0)}, V^\dagger\Psi_i^{(0)})|^2\delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)} + \hbar\omega)\right] + O(\varepsilon^3)\end{aligned} \tag{6.2.19}$$

この式で表される時間に依存する摂動論の最低次近似の結果を **Fermi の黄金律** (**Fermi's golden rule**) と呼びます．デルタ関数 $\delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)} \mp \hbar\omega)$ は物理的にはエネルギー保存を表し，特に式(6.2.19)第 1 項目はエネルギー $\hbar\omega$ を放出して $E = E_i^{(0)}$ のエネルギー準位から $E = E_f^{(0)}$ のエネルギー準位へ遷移する過程，第 2 項目はエネルギー $\hbar\omega$ を吸収して $E = E_i^{(0)}$ のエネルギー準位から $E = E_f^{(0)}$ のエネルギー準位へ遷移する過程に対応します (図6.2参照).

[*5] 極限 $\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t}$ がデルタ関数 $\pi\delta(\Omega)$ になるというのは次の様にして分かります．まず，$\Omega \neq 0$ の場合，極限 $\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t}$ はゼロです．実際，正の t に対して次の不等式が成り立ちます:

$$0 \leq \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t} \leq \frac{1}{\Omega^2 t} \xrightarrow{t\to\infty} 0 \quad \text{for} \quad \Omega \neq 0$$

よって，$\Omega \neq 0$ に対しては $0 \leq \lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t} \leq 0$，即ち，$\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t} = 0$ となります．また，$\lim_{\Omega\to 0} \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t} = \lim_{\Omega\to 0} \frac{(\Omega t)^2 + O(\Omega t)^4}{\Omega^2 t} = t$ なので，$\Omega = 0$ に対しては極限 $\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t}$ は t の 1 乗で無限大になります．更に，関数 $f(\Omega) = \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t}$ の実軸上の定積分を計算してみると，これが π となる事も次の様にして言えます:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\Omega\, \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t} = \left[-\frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega t}\right]_{\Omega=-\infty}^{\Omega=\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega\, \frac{\sin(2\Omega t)}{\Omega} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{\sin(x)}{x} = \mathrm{Im}\left(\mathrm{p.v.} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{e^{ix}}{x}\right) = \pi$$

但し，最初の等号で $\frac{1}{\Omega^2} = -\frac{d}{d\Omega}\frac{1}{\Omega}$ を使って部分積分をしました．また，p. v. は Cauchy の主値で，主値積分 $\mathrm{p.v.} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{e^{ix}}{x}$ は次の様にして計算されます:

$$\mathrm{p.v.} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{e^{ix}}{x} := \lim_{\epsilon\to 0_+} \left(\int_{-\infty}^{\epsilon} dx\, \frac{e^{ix}}{x} + \int_{\epsilon}^{\infty} dx\, \frac{e^{ix}}{x}\right) = \lim_{\epsilon\to 0_+} \left(\int_{(-\infty,\epsilon]\cup C_\epsilon\cup[\epsilon,\infty)} dz\, \frac{e^{iz}}{z} - \int_{C_\epsilon} dz\, \frac{e^{iz}}{z}\right) = 2\pi i - i\pi = i\pi$$

ここで，C_ϵ は複素 z 平面の原点を中心とした半径 ϵ の下半円を反時計回りに回る積分経路です．また，積分 $\int_{(-\infty,\epsilon]\cup C_\epsilon\cup[\epsilon,\infty)} dz\, \frac{e^{iz}}{z}$ の計算では積分経路を上半平面で閉じて留数定理を使いました．以上より，$\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t} = \pi\delta(\Omega)$ が分かります．

参考文献

時間に依存しない摂動論

第6.1節で取り扱った時間に依存しない摂動論は Rayleigh-Schrödinger の摂動論と呼ばれる方法で，これは Erwin Schrödinger が次の論文で導入しました:

[1] E. Schrödinger, “Quantisierung als Eigenwertproblem,” *Annalen Phys.* **80** (1926) 437–490.

この論文では摂動論を使って Stark 効果などが議論されているので，興味がある人は眺めてみると良いでしょう．但し，タイトルから分かる様にこの論文はドイツ語で書かれています．

因みに，時間に依存しない摂動論には Rayleigh-Schrödinger の摂動論の他に Brillouin-Wigner の摂動論と呼ばれる方法もあります．この方法は Léon Brillouin が次の論文で導入しました:

[2] L. Brillouin, “Les problèmes de perturbations et les champs self-consistents,” *J. Phys. Radium* **3** (1932) 373–389.

第6.1節で見た様に，Rayleigh-Schrödinger の摂動論では，例えばハミルトニアン $H = H_0 + \varepsilon V$ の厳密な固有値 E_n は H_0 の固有値 $E_n^{(0)}$ 及び行列要素 $(\Psi_n^{(0)}, V\Psi_m^{(0)})$ で表して行くのですが，Brillouin-Wigner の摂動論では，E_n を E_n, $E_n^{(0)}$, 及び $(\Psi_n^{(0)}, V\Psi_m^{(0)})$ で表して行きます．これは一般には解析的に解けないのですが，Rayleigh-Schrödinger の摂動論と比べて摂動級数の収束性が良いと言われています．Brillouin-Wigner の摂動論は量子化学の分野で使われているそうなので，興味のある人は調べてみると良いでしょう．

時間に依存する摂動論

第6.2節では時間に依存する摂動論の 1 次近似で Fermi の黄金律を導出しました．Fermi の黄金律は Fermi の名前が冠されていますが，これを初めて導出したのは Paul A. M. Dirac です．次の論文で与えられました:

[3] P. A. M. Dirac, “The Quantum Theory of Emission and Absorption of Radiation,” *Proc. Roy. Soc. Lond.* **A114** (1927) 243–265.

付録 A

数学の補足

量子力学を学ぶ上で知っておくと良い数学 (主に代数の分野) を列挙しました．記述は厳密では無いので，厳密さを追求する人は注意してください．ここでは概観を述べるだけに留めています．具体例は載せていません．

A.1　ベクトル空間

和とスカラー倍に対して閉じた集合がベクトル空間ですが、これに色々な構造を付け加えていく事で、Hilbert 空間や Lie 代数になっていきます．以下，Lie 代数の箇所を除いて，ベクトルはケット ($|a\rangle$ など) で表します．

ベクトル空間

集合 V が次の 2 つの条件 (I), (II) を満たしている時，V を複素係数の**ベクトル空間** (**vector space**) と呼ぶ:

(I) **和に関する条件．** $|a\rangle, |b\rangle \in V$ に対し和 $|a\rangle + |b\rangle \in V$ が定義され，次を満たす:

$$
\begin{aligned}
\text{(結合律)} \quad & (|a\rangle + |b\rangle) + |c\rangle = |a\rangle + (|b\rangle + |c\rangle) && \text{(A.1.1a)}\\
\text{(交換律)} \quad & |a\rangle + |b\rangle = |b\rangle + |a\rangle && \text{(A.1.1b)}\\
\text{(零ベクトルの存在)} \quad & |a\rangle + 0 = |a\rangle && \text{(A.1.1c)}\\
\text{(逆元の存在)} \quad & |a\rangle + (-|a\rangle) = 0 && \text{(A.1.1d)}
\end{aligned}
$$

(II) **スカラー倍に関する条件．** $|a\rangle \in V, \alpha \in \mathbb{C}$ に対しスカラー倍 $\alpha|a\rangle \in V$ が定義され，次を満たす:

$$
\begin{aligned}
\text{(結合律)} \quad & (\alpha\beta)|a\rangle = \alpha(\beta|a\rangle) && \text{(A.1.2a)}\\
\text{(単位元の存在)} \quad & 1|a\rangle = |a\rangle && \text{(A.1.2b)}\\
\text{(ベクトルに関する分配則)} \quad & \alpha(|a\rangle + |b\rangle) = \alpha|a\rangle + \alpha|b\rangle && \text{(A.1.2c)}\\
\text{(スカラーに関する分配則)} \quad & (\alpha + \beta)|a\rangle = \alpha|a\rangle + \beta|a\rangle && \text{(A.1.2d)}
\end{aligned}
$$

- 和 $|a\rangle + |b\rangle$ やスカラー倍 $\alpha|a\rangle$ を取った後でもベクトル空間 V の元 (要素) になっている，という事がまず大前提として重要です．これを「和やスカラー倍に対して閉じている」と言います．
- ベクトル空間のことを線型ベクトル空間と呼んだりもします．線型性を強調したい場合に使います．
- 量子力学では状態ベクトルの集合が線型ベクトル空間を成します．量子力学で線型性が重要なのは重ね合わせの原理を尊重する為です．ちなみに，零ベクトル 0 は基底状態 $|0\rangle$ ではありません．
- ベクトル空間の定義は殆ど自明なことしか要請していないので，こういう定義なのだという程度に思っておけば良いです．

計量ベクトル空間

ベクトル空間 V が更に次の条件 (III) も満たす時，V を**計量ベクトル空間** (**metric vector space**) と呼ぶ:

(III) **内積に関する条件．** $|a\rangle, |b\rangle \in V$ に対して内積 $(|a\rangle, |b\rangle) \in \mathbb{C}$ が定義され，次を満たす:

$$
\begin{aligned}
\text{(線型性)} \quad & (|a\rangle, \alpha|b\rangle + \beta|c\rangle) = \alpha(|a\rangle, |b\rangle) + \beta(|a\rangle, |c\rangle) && \text{(A.1.3a)}\\
\text{(共軛性)} \quad & (|a\rangle, |b\rangle) = (|b\rangle, |a\rangle)^* && \text{(A.1.3b)}\\
\text{(正定値性)} \quad & (|a\rangle, |a\rangle) \geq 0 && \text{(A.1.3c)}\\
& (|a\rangle, |a\rangle) = 0 \quad \Rightarrow \quad |a\rangle = 0 && \text{(A.1.3d)}
\end{aligned}
$$

- 計量ベクトル空間とは要するに内積の備わったベクトル空間のことです．計量ベクトル空間のことを**内積空間** (**inner product space**) とか**前 Hilbert 空間** (**pre-Hilbert space**) と呼んだりもします．
- 「共軛」は「共役」の旧字体です．「軛」の訓読みは「くびき」で，牛車を引く 2 頭の牛が離れないように首につなげた木を意味します．「共軛」で「軛をともにする」という洒落た意味があったのですが，常用漢字に置き換わって無味乾燥になりました．
- 内積 $(|a\rangle, |b\rangle)$ はブラケット記法で書くと $\langle a|b\rangle$ ですが，この付録ではブラ $\langle a|$ は使わないことにします．本文では使っています．
- 線型性と共軛性から次の反線型性が言えます:

$$(\text{反線型性}) \quad (\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle, |c\rangle) = \alpha^*(|a\rangle, |c\rangle) + \beta^*(|b\rangle, |c\rangle) \tag{A.1.4}$$

- 内積の正定値性からノルム $\|\cdot\|$ が定義できます:

$$\||a\rangle\| = \sqrt{(|a\rangle, |a\rangle)} \geq 0 \tag{A.1.5}$$

Hilbert 空間

計量ベクトル空間 V がノルムに関して完備である時，V を **Hilbert 空間** (**Hilbert space**) と呼ぶ．Hilbert 空間は通常 $\mathcal{H}$ と記す．

- 「完備である」とは任意の Cauchy 列 (数列の一種) が $\mathcal{H}$ 上に必ず収束する，というもので，Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ のある種の連続性を保証する為の条件です．Hilbert 空間上で微積分をやったり，色々な極限操作をするために必要で，数学者はこの辺を非常に気にしますが，我々は数学をやりたい訳では無いのでこの辺は追求しない方が得策です．Hilbert 空間は単なる計量ベクトル空間では無いという事だけ知っていれば良いです．

Lie 代数

ベクトル空間 $\mathfrak{g}$ が次の条件 (Ⅳ) を満たす時，$\mathfrak{g}$ を **Lie 代数** (**Lie algebra**) と呼ぶ:

(Ⅳ) **積に関する条件．** $A, B \in \mathfrak{g}$ に対してある種の積 (Lie 括弧とか括弧積と呼ぶ)$[A, B] \in \mathfrak{g}$ が定義され，次を満たす:

$$(\text{双線型性}) \quad [A+B, C] = [A, C] + [B, C] \tag{A.1.6a}$$
$$[A, B+C] = [A, B] + [A, C] \tag{A.1.6b}$$
$$(\text{反対称性}) \quad [A, B] = -[B, A] \tag{A.1.6c}$$
$$(\text{Jacobi 律}) \quad [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \tag{A.1.6d}$$

- 積の演算 $[\,\cdot\,,\,\cdot\,]$ を $[A, B] = AB - BA$ で定義すると，上の条件は自明に成り立ちます．要するに，交換関係の下で閉じたベクトル空間を Lie 代数と呼びます．
- Lie 代数は元々 Lie 群の単位元近傍の振る舞いを調べる為に導入されましたが，上の様に Lie 群を持ち出さずとも定義されます．
- 量子力学では状態ベクトルに作用する線型演算子の集合が Lie 代数を成します．線型演算子の集合も和とスカラー倍に対して閉じていて，ベクトル空間を成します．

A.2 群

掛け算に対して閉じた集合が群ですが，これに「微分もできる」という構造が入ったものが Lie 群です．

群

集合 G に掛け算 (これを $\circ$ で表す) と呼ばれる演算が備わっていて，次の条件を満たす時，G を**群** (**group**) と呼ぶ:

(Ⅴ) **群の公理．** $g, h \in G$ に対し掛け算 $g \circ h \in G$ が定義され，次を満たす:

$$(\text{結合律}) \quad g \circ (h \circ i) = (g \circ h) \circ i \tag{A.2.1a}$$
$$(\text{単位元の存在}) \quad g \circ 1 = 1 \circ g = g \quad \text{for all } g \in G \tag{A.2.1b}$$
$$(\text{逆元の存在}) \quad g \circ g^{-1} = g^{-1} \circ g = 1 \tag{A.2.1c}$$

- 単位元 1 はただ一つだけ存在するということも公理として要請します．また g が与えられた時，その逆元 g^{-1} は一意的に定まるという事も要請します．

Lie 群

Lie 群とは群 G の元が連続パラメータの集合 $\{\theta_1,\cdots,\theta_N\}$ でラベルされる群のことで，G の元 $g=g(\theta_1,\cdots,\theta_N)$ はパラメータについて連続かつ微分可能．(特に Taylor 展開できる．) パラメータを適当に再定義することで，一般性を失うこと無く $g(0,\cdots,0)=1$ とできる．(つまりパラメータ空間の原点を単位元 $1\in G$ に対応させる事ができる．)

- $g(0,\cdots,0)=1$ の条件下で，$g(\theta_1,\cdots,\theta_N)\in G$ を原点 $(\theta_1,\cdots,\theta_N)=(0,\cdots,0)$ の周りで Taylor 展開すると次の様になります:

$$g(\theta_1,\cdots,\theta_N)=1+i\theta_a T^a+O(\theta\theta)\quad\text{但し}\quad T^a=-i\frac{\partial g}{\partial\theta_a}(0,\cdots,0) \tag{A.2.2}$$

  T^a $(a=1,\cdots,N)$ を Lie 群 G の生成子と呼び，一般に生成子の集合は Lie 代数 $\mathfrak{g}$ になります．Lie 群 G の単位元近傍の無限小変換の振る舞いは，対応する Lie 代数 $\mathfrak{g}$ を調べることで完全に分かります．但し，Lie 群の大局的な構造までは分かりません．例えば有名な例だと，Lie 群 $SU(2)$ と $SO(3)$ の Lie 代数 $\mathfrak{su}(2)$ と $\mathfrak{so}(3)$ は完全に同じですが，Lie 群としては両者は 1 対 1 に対応せず 2 対 1 対応になります．

A.3 表現

量子論で (Lie) 群や Lie 代数などが重要なのは，こういった代数系が状態ベクトルの空間に線型演算子として作用するからです．代数系がベクトル空間上で線型演算子として実現されることを「**表現 (representation)**」と言い，表現を調べる数学の分野を「**表現論 (representation theory)**」と言います．量子論で重要なのは (Lie) 群や Lie 代数そのものでは無く，その表現です．表現とは一言で言えば，抽象的に定義された代数系を具体的なベクトル空間上の線型演算子として実現させることです．

群の表現

群 G のベクトル空間 V 上の表現 π とは，G から「V から V への線型写像の成す集合」への写像

$$\begin{array}{rccc}\pi: & G & \to & \{V\text{ から }V\text{ への線型写像}\}\\ & \cup & & \cup\\ & g & \mapsto & \pi(g)\end{array} \tag{A.3.1}$$

で，次の性質を満たすものである:

$$\text{(群 } G \text{ の掛け算則)}\quad \pi(g)\pi(h)=\pi(g\circ h) \tag{A.3.2a}$$
$$\text{(単位元の存在)}\quad \pi(1)=1 \tag{A.3.2b}$$

- 「V から V への線形写像」を「V 上の線形写像」と呼びます．V 上の線型写像のことを線型演算子，線型作用素と呼んだりしますが，これらは全て同義です．
- 写像 π の満たすべき性質(A.3.2a)と(A.3.2b)は，集合 $\{\pi(g):g\in G\}$ も群 G の公理(A.2.1a)–(A.2.1c)を満たすようにする為の最小限の設定です．実際，(A.3.2a)と(A.3.2b)から次が従います：

$$\text{(結合律)}\quad \pi(g)(\pi(h)\pi(i))=(\pi(g)\pi(h))\pi(i) \tag{A.3.3a}$$
$$\text{(単位元の存在)}\quad \pi(g)1=1\pi(g) \tag{A.3.3b}$$
$$\text{(逆元の存在)}\quad \pi(g)\pi(g^{-1})=\pi(g^{-1})\pi(g)=1 \tag{A.3.3c}$$

  (A.3.3c)から特に $\pi(g^{-1})=\pi(g)^{-1}$ が分かります．
- $\pi(g)$ はベクトル $|a\rangle\in V$ に作用する線型演算子です．即ち，あるベクトル $|a'\rangle\in V$ が存在し，$\pi(g)|a\rangle=|a'\rangle$ となります．線型であるとは $\pi(g)(\alpha|a\rangle+\beta|b\rangle)=\alpha\pi(g)|a\rangle+\beta\pi(g)|b\rangle$ を満たす，という事です．
- 上では乱暴に「V から V への線型写像の成す集合」と言いましたが，この集合には恒等変換とすべての元に対する逆元が含まれていなければなりません．
- ベクトル空間 V が N 次元の場合，ベクトルは N 成分ベクトルとして書けるので，「V 上の線型写像の成す集合」は逆行列を持つ $N\times N$ の正方行列の集合になります．この様な行列の集合を一般線形群 $GL(N,\mathbb{C})$ と呼びます．
- 応用上はベクトル空間として内積の備わっている計量ベクトル空間 V を考えます．特に量子論で重要なのが，任意のベクトル

$|a\rangle, |b\rangle \in V$ に対して内積を不変に保つ (つまり $(|a'\rangle, |b'\rangle) = (|a\rangle, |b\rangle)$ となる) 表現 π です:

$$(\pi(g)|a\rangle, \pi(g)|b\rangle) = (|a\rangle, |b\rangle) \quad \text{for all } g \in G \tag{A.3.4}$$

この様な内積を変えない計量ベクトル空間 V 上の表現 π をユニタリー表現と呼びます.

- 表現 π が実現されるベクトル空間 V のことを**表現空間** (**representation space**) と呼びます.

Lie 代数の表現

Lie 代数 $\mathfrak{g}$ のベクトル空間 V 上の表現 π とは, $\mathfrak{g}$ から「V 上の線型写像の成す集合」への線型写像

$$\begin{array}{rccc} \pi: & \mathfrak{g} & \to & \{V \text{ 上の線型写像}\} \\ & \cup & & \cup \\ & A & \mapsto & \pi(A) \end{array} \tag{A.3.5}$$

で, 次の性質を満たすものである:

$$\text{(線型性)} \quad \pi(\alpha A + \beta B) = \alpha\pi(A) + \beta\pi(B) \tag{A.3.6a}$$

$$\text{(Lie 代数の交換関係)} \quad \pi([A, B]) = [\pi(A), \pi(B)] \tag{A.3.6b}$$

- 群の表現の時と同じように, 写像 π の満たすべき性質(A.3.6a)と(A.3.6b)は, 集合 $\{\pi(A) : A \in \mathfrak{g}\}$ も Lie 代数にする為の最小限の要請です.
- Lie 代数 $\mathfrak{g}$ の場合も, 表現 π が実現されるベクトル空間 V の事を表現空間と呼びます.