

5.7 球面調和関数

5.7.1 軌道角運動量の表現

さて、以上のように回転の生成元は量子力学の軌道角運動量演算子と $\frac{1}{\hbar}L_k$ の関係を持っている。群の表現としては、生成元を l_k

$$l_k = -i\epsilon_{kij}x_i\partial_j \quad (5.119)$$

を使うのが自然である。

l_k が $SO(3)$ のリー環の交換関係を満たすので、表現行列を求めた時と同様に、昇降演算子

$$\begin{aligned} l_{\pm} &= l_1 \pm il_2 = -i(y\partial_z - z\partial_y) \pm (z\partial_x - x\partial_z) \\ &= (\mp x - iy)\partial_z \pm z(\partial_x \pm i\partial_y) = \mp X_{\pm}\partial_z \pm 2z\partial_{\mp} \end{aligned} \quad (5.120)$$

と、 l_z

$$l_z = -i(x\partial_y - y\partial_x) = \frac{1}{2}[(x + iy)(\partial_x - i\partial_y) - (x - iy)(\partial_x + i\partial_y)] \quad (5.121)$$

を定義しておく。ここで、新しい座標

$$X_{\pm} = x \pm iy, \quad \partial_{\pm} = \frac{1}{2}(\partial_x \mp i\partial_y), \quad [\partial_+, X_+] = [\partial_-, X_-] = 1 \quad (5.122)$$

を導入した。 $X_+^* = X_-$ 。この座標に変数変換すると、それぞれの演算子は

$$l_{\pm} = \mp(x_{\pm}\partial_z - 2z\partial_{\mp}), \quad l_z = X_+\partial_+ - X_-\partial_- \quad (5.123)$$

と書ける。

一般論に従って、既約表現は、highest weight state から作ることができる。そこで

$$l_+\Psi_u(x, y, z) = 0 \quad (5.124)$$

となるような関数を求めると、 a_l を定数として

$$\Psi_u = a_l X_+^l = a_l (x + iy)^l \quad (5.125)$$

$$l_-^k = (X_-\partial_z - 2z\partial_+)^k \quad (5.126)$$

$$\Psi_{lm} = a_l \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \ell_-^{l-m} X_+^l \quad (5.127)$$

5.7.2 極座標表示

このような，関数は回転対称性のある時の波動関数として現れる．例えば中心力ポテンシャルの時のシュレディンガー方程式を解く場合極座標をとるのが通常なので，表現の基底を極座標でつくってみる．ハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V(r) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \quad (5.128)$$

で与えられる．ここで，極座標のラプラシアンは

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} (-\vec{\ell}^2) \quad (5.129)$$

$$-\vec{\ell}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (5.130)$$

で与えられる．変数分離を行うことにより波動関数は $\chi(r)\psi(\theta, \phi)$ と書け

$$\vec{\ell}^2 \psi = \alpha \psi \quad (5.131)$$

という固有関数が，角度方向の波動関数を与えることになる．ここに，回転群の表現が関わってくる．

3次元の極座標を使うと，回転の生成元は

$$\begin{aligned} \ell_1 &= i \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \ell_2 &= i \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \ell_3 &= -i \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned} \quad (5.132)$$

と書け，カシミヤ演算子（全角運動量）は

$$\vec{\ell}^2 = - \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (5.133)$$

となるので，ラプラシアンに現れる角度方向の演算子とちょうど一致する．そこで，回転群の表現ベクトルを極座標で作ってやればよい．

昇降演算子はそれぞれ

$$\ell_+ = e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (5.134)$$

$$\ell_- = e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (5.135)$$

で与えられる．

5.7.3 表現ベクトルとしての球面調和関数

ここで、表現の一般論に従って、 ℓ_3 と ℓ^2 の固有ベクトルを求めてみよう¹⁹。

微分演算子による生成元は、今までの回転群の表現を座標表示に移って書いたことになっている。つまり

$$\langle \theta, \phi | \hat{J}_i | l, m \rangle = \ell_i \langle \theta, \phi | l, m \rangle \quad (5.136)$$

として、生成元 \hat{J}_i が微分演算子 ℓ で表現されたと考えることができる。以下では、 θ, ϕ 表示に移り、 $|jm\rangle$ の代わりに $Y_{lm}(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | l, m \rangle$ と書く。すると、行列表現の行列要素は

$$\begin{aligned} \langle l, m' | \hat{J}_i | l, m \rangle &= \int d\Omega \langle l, m' | \theta, \phi \rangle \langle \theta, \phi | \hat{J}_i | l, m \rangle \\ &= \int d\Omega \langle l, m' | \theta, \phi \rangle \ell_i \langle \theta, \phi | l, m \rangle \\ &= \int d\Omega \overline{Y_{lm'}(\theta\phi)} \ell_i Y_{lm}(\theta\phi) \end{aligned} \quad (5.137)$$

よって

$$\langle l, m' | \hat{J}_i | l, m \rangle = \int d\Omega \overline{Y_{lm'}(\theta\phi)} \ell_i Y_{lm}(\theta\phi) \quad (5.138)$$

ただし、 $\int d\Omega$ は立体角の積分

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin\theta d\theta d\phi \quad (5.139)$$

である。

一方、微分演算子 ℓ_i と、表現行列の関係から、

$$\ell_i Y_{lm} = \langle \theta\phi | \hat{J}_i | l, m \rangle = \sum_{m'=-l}^l Y_{lm'} \langle lm' | \hat{J}_i | lm \rangle \quad (5.140)$$

この対応関係を使うと、角運動量の表現の構成法を繰り返すことで、微分方程式の級数解による球面調和関数の表示をシステムティックに構成できる。

5.7.4 球面調和関数の表現としての構成

球面調和関数 Y_{lm} は、表現ベクトルと同様に ℓ_3 の固有関数になっている。つまり

$$\ell_3 Y_{lm} = m Y_{lm} \quad (5.141)$$

¹⁹これらの量子数はそれぞれ

1. l 方位量子数
2. m 磁気量子数

と呼ばれる。

よって

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \psi_{lm}(\theta)e^{im\phi} \quad (5.142)$$

と書ける. highest weight state は

$$l_3 Y_{ll} = l Y_{ll} \Rightarrow Y_{ll}(\theta, \phi) = \psi_{ll}(\theta)e^{il\phi} \quad (5.143)$$

である. ここで, Y が一価関数であることから, m 従って l は整数しか取りえない. ここでは, 習慣に従って, lowest weight state $Y_{l,-l}$ から出発して, l_+ を作用させて表現ベクトルを構成してみよう.

1. lowest weight state : lowest weight state の ϕ 依存性は

$$Y_{l,-l} = \psi_{l,-l}(\theta)e^{-il\phi} \quad (5.144)$$

で与えられる. さらに, lowest weight state であるという条件が

$$l_- Y_{l,-l} = e^{i(-l-1)\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + l \cot \theta \right) \psi_{l,-l}(\theta) = 0 \quad (5.145)$$

を要請するので, 規格化定数 a を除いて

$$\psi_{l,-l}(\theta) = a(\sin \theta)^l \quad (5.146)$$

と決まる. ここに, l_+ をかけてすべての表現ベクトルを求めよう.

2. 昇降演算子の作用 : 表現論から

$$l_+ \psi_{lm} e^{im\phi} = \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \psi_{l,m+1}(\theta) e^{i(m+1)\phi} \quad (5.147)$$

なので, $\psi_{l,-l}$ を k 回作用させれば, $\psi_{l,k-l}$ がもとまる. 結果は

$$\psi_{lm} = a(-1)^{l+m} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!(l+m)!}} \sin^m \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{l+m} \sin^{2l} \theta \quad (5.148)$$

証明 この式が正しいことを帰納法でしめす.

$m = -l$ のときは自明なので, $m = k$ の解きに成り立つとして

$$\begin{aligned} l_+ \psi_{lk} e^{ik\phi} &= e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi_{lk} e^{ik\phi} \\ &= e^{i(k+1)\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - k \cot \theta \right) \psi_{lk} \\ &= e^{i(k+1)\phi} \sin^k \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin^k \theta} \psi_{lk} \right) \end{aligned} \quad (5.149)$$

一方表現論の関係式から

$$\begin{aligned}
 \psi_{lk+1} &= \frac{1}{\sqrt{(l-k)(l+k+1)}} \sin^k \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin^k \theta} \psi_{lk} \right) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{(l+k)(l-k+1)}} \sin^k \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin^k \theta} a (-1)^{l+k} \sqrt{\frac{(l-k)!}{(2l)!(l+k)!}} \sin^k \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{l+k} \sin^{2l} \theta \right) \\
 &= \sin^{k+1} \theta (a (-1)^{l+k+1}) \sqrt{\frac{(l-k-1)!}{(2l)!(l+k+1)!}} \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{l+k+1} \sin^{2l} \theta
 \end{aligned} \tag{5.150}$$

となつて、 $m = k + 1$ の場合にも成り立っている。

3. 規格化： a の値は規格化によって定まる。今の場合積分は立体角 $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ による積分で内積が定義されているので、

$$\langle l, -l | l, -l \rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \psi_{l,-l}^* \psi_{l,-l} = 2\pi |a|^2 \int_0^\pi \sin^{2l+1} \theta = 2\pi |a|^2 (s^l l!)^2 \frac{2}{sl+1} = 1 \tag{5.151}$$

これより

$$a = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \tag{5.152}$$

が定まる。

以上の結果から、良く知られた次の表示がもとまった。

球面調和関数

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \sin^m \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{l+m} \sin^{2l} \theta e^{im\phi} \tag{5.153}$$

5.8 調和振動子と $SU(2)$

5.8.1 調和振動子と dynamical symmetry

調和振動子系は、多くの分野に現れ非常に応用の広い物理系である。これは、微小振動による近似が多くの場面で現れることに関係している。一方、場の理論や弦理論も基本的に無限次元調和振動子である。そこで、ここでは調和振動子系の対称性を少し解説する。例として、具体的に取り上げるのは、 $SU(2)$ であるが、これは回転群を理解するためにも非常に良いシステムである。

そこで、2次元の(等方)調和振動子を考える。ハミルトニアンは

$$H = \sum_{\rho} \left(\frac{1}{2m} p_{\rho}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x_{\rho}^2 \right) \tag{5.154}$$

である。この系には、2次元回転 $O(2)$ に対する対称性がある。

簡単のために, $m = \omega = 1$ として, 量子化を行う. 調和振動子の量子化は生成消滅演算子

$$\mathbf{a}_\rho = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(x_\rho + ip_\rho), \quad \mathbf{a}_\rho^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(x_\rho - ip_\rho) \quad (5.155)$$

を使って行うのが見通しがよい. 個数演算子は

$$[(x + ip), (x - ip)] = 2i[p, x] = 2\hbar \Rightarrow [\mathbf{a}_\rho, \mathbf{a}_\sigma^\dagger] = \delta_{\rho\sigma} \quad (5.156)$$

という交換関係を満たす. これをハミルトニアンに代入すると

$$H = \hbar \sum (\mathbf{a}_\rho^\dagger \mathbf{a}_\rho + \frac{1}{2}) = \hbar(N + 1) \quad (5.157)$$

を得る. ここで, N は個数演算子で

$$N = N_1 + N_2, \quad N_\rho = \mathbf{a}_\rho^\dagger \mathbf{a}_\rho \quad (5.158)$$

と定義されている.

このハミルトニアンは, 2次元回転よりも大きな対称性を持っている. つまり, 2個の消滅演算子の回転

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{a}'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix} \quad (5.159)$$

で不変であることがわかる. ただし, $U = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$ は $U^\dagger U = 1$ ユニタリ行列. このように, 空間的に期待される対称性よりも大きな対称性を持つ場合があり一般に **dynamical symmetry**(動的対称性) と呼ばれる. 動的対称性は正準変換の中でハミルトニアンを不変にする変換として特徴づけられる.

このユニタリ変換が対称性であるためには, ハミルトニアンが不変であると同時に, 生成消滅演算子の交換関係が不変でないといけない²⁰. それぞれを確認しておこう.

1. **正準交換関係**: $\mathbf{a}'_{\rho'} = U_{\rho'\rho} \mathbf{a}_\rho$ とすると

$$[\mathbf{a}'_{\rho'}, \mathbf{a}'_{\sigma'}^\dagger] = U_{\rho'\rho} U_{\sigma'\sigma}^* [\mathbf{a}_\rho, \mathbf{a}_\sigma^\dagger] = U_{\rho'\rho} U_{\sigma'\sigma}^* \delta_{\rho\sigma} \quad (5.160)$$

これが不変であるためには

$$UU^\dagger = 1 \quad (5.161)$$

つまり, U がユニタリであればよい.

2. **ハミルトニアンの不変性**: ハミルトニアンは個数演算子 N で書かれており,

$$N = (\mathbf{a}_1^\dagger, \mathbf{a}_2^\dagger) \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix} \quad (5.162)$$

と書けるので, $\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix}$ を複素2次元ベクトルと思った時の複素回転で不変である. つまり, 上記の $U(2)$ の対称性を持っている.

²⁰量子力学の交換関係がもともとポアソン括弧からきていることを思い出すと, 交換関係の不変性は古典力学的にはポアソン括弧の不変性である. つまり, ここで考えているユニタリ変換が生成消滅演算子の交換を力学変数の変換と見た時, 正準変換であることを意味する.

5.8.2 固有関数の構成

よって、波動関数は $U(2)$ の表現に分解できるはずである。つまり、固有関数がこの対称性の群の既約表現で分類される。波動関数の満たすべきシュレディンガー方程式は

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (5.163)$$

である。固有状態はフォック状態で求めることができる。それぞれの振動子のフォック状態は真空 $|0\rangle_\rho$ に生成演算子を作用させて作ることができる。

$$\mathbf{a}_\rho|0\rangle_\rho = 0, \quad |p\rangle_\rho = \frac{1}{\sqrt{p!}}(\mathbf{a}_\rho^\dagger)^p|0\rangle \quad (5.164)$$

ここで、 $|p\rangle_\rho$ は規格化されており

$$\langle p|q\rangle = \delta_{pq}, \quad \mathbf{a}_\rho^\dagger|p\rangle_\rho = \sqrt{p+1}|p+1\rangle, \quad \mathbf{a}_\rho|p\rangle = \sqrt{p}|p-1\rangle_\rho \quad (5.165)$$

を満たす。

2次元の調和振動子の状態は

$$|p\rangle_1|q\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{p!q!}}(\mathbf{a}_1^\dagger)^p(\mathbf{a}_2^\dagger)^q|0\rangle_1|0\rangle_2 \quad (5.166)$$

で全て得られる。そこで、 $U(2) = SU(2) \times U(1)$ の対称性に注目して、これを既約表現に分解して見よう。

1. 生成消滅演算子を使ったり一環の構成まず、この調和振動子の演算子を使って、 $SU(2)$ の表現を具体的に作ることができる。生成消滅演算 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ と個数演算子は交換関係

$$[N_\rho, \mathbf{a}_\rho^\dagger] = \mathbf{a}_\rho^\dagger, \quad [N_\rho, \mathbf{a}_\rho] = -\mathbf{a}_\rho \quad (5.167)$$

をみたく。

ハミルトニアンは個数演算子そのものなので、ハミルトニアンと可換な演算子としては生成消滅演算子の個数を変えないような演算子を考えればよい。そこで次のような、演算子を考える。

$$J^i = \frac{1}{2}\sigma_{ab}^i \mathbf{a}_a^\dagger \mathbf{a}_b \quad (5.168)$$

ここで、 σ^i はパウリ行列である。

$$J_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1^\dagger \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_2^\dagger \mathbf{a}_1), \quad J_2 = \frac{-i}{2}(\mathbf{a}_1^\dagger \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_2^\dagger \mathbf{a}_1), \quad J_3 = \frac{1}{2}(N_1 - N_2) \quad (5.169)$$

これと個数演算子が、2個の生成消滅演算子から作られる個数演算子と可換なエルミート演算子の全てである。

角運動量のとくと同様に、昇降演算子 $J_\pm = J_1 \pm iJ_2$ を導入すると、それらは簡単に

$$J_+ = \mathbf{a}_1^\dagger \mathbf{a}_2, \quad J_- = \mathbf{a}_2^\dagger \mathbf{a}_1 \quad (5.170)$$

と書けることが分かる。すると

$$[J_+, J_-] = [\mathbf{a}_1^\dagger \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_2^\dagger \mathbf{a}_1] = \mathbf{a}_1^\dagger [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_2^\dagger] \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2^\dagger [\mathbf{a}_1^\dagger, \mathbf{a}_1] \mathbf{a}_2 = N_1 - N_2 = 2J_3 \quad (5.171)$$

よって

$$[J_+, J_-] = 2J_3 \quad (5.172)$$

$$[J_3, J_+] = J_+ \quad , \quad [J_3, J_-] = -J_- \quad (5.173)$$

これより, J_i は, $SO(3)$ と同じ交換関係を満たすことがわかる.

2. Casimir 演算子 Casimir 演算子は

$$\begin{aligned} J^2 &= J_3^2 + \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) = J_3^2 - J_3 + J_+J_- \\ &= \frac{1}{4}(N_1 - N_2)^2 - \frac{1}{2}(N_1 - N_2) + \mathbf{a}_1^\dagger \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_2^\dagger \mathbf{a}_1 \\ &= \frac{1}{4}(N_1 - N_2)^2 - \frac{1}{2}(N_1 - N_2) + N_1(N_2 + 1) \\ &= \frac{1}{4}(N_1 + N_2)^2 + \frac{1}{2}(N_1 + N_2) \\ &= \frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \end{aligned} \quad (5.174)$$

さて, J_i はそれぞれ生成演算子と消滅演算子の積でできているので, ある状態に J_i を作用させた時, その状態の N の固有値を変えない. つまり

$$[J_i, H] = \hbar[J_i, N] = 0 \quad (5.175)$$

なので, J^2 と J_3 を H と同時に対角化できる. 角運動量にならって, J^2 の代わりに $\frac{N}{2}$ の固有値を j で表す. $J^2 = j(j+1)$ である. $N = 2j$ である.

3. 固有状態の構成 次に, 状態にそれぞれの演算子を作用させる.

$$|p\rangle_1 |q\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{p!q!}} (\mathbf{a}_1^+)^p (\mathbf{a}_2^+)^q |0\rangle_1 |0\rangle_2 \quad (5.176)$$

とすると, 固有値は

$$\frac{N}{2} |p\rangle_1 |q\rangle_2 = \frac{p+q}{2} |p\rangle_1 |q\rangle_2 \quad , \quad J_3 |p\rangle_1 |q\rangle_2 = \frac{1}{2}(p-q) |p\rangle_1 |q\rangle_2 \quad (5.177)$$

なので,

$$|j, m\rangle \equiv |p\rangle_1 |q\rangle_2 \quad , \quad j = \frac{1}{2}(p+q) \quad , \quad m = \frac{1}{2}(p-q) \quad , \quad p = j+m \quad , \quad q = j-m \quad (5.178)$$

と定義する. これより, J_i が j の固有値を変えないので, 角運動量と同様に j の値が既約表現を分類する. $\frac{1}{2}\mathbb{Z} \ni j \geq 0$ であることは明らかである. j が一定の状態は $p+q=2j$ になるような $p, q \geq 0$ の組み合わせの数だけある. つまり, エネルギーの固有状態は $2j+1$ 個の縮退をしていることが分かる. また, $-j \leq m \leq j$ も明らかである.

この表現を使うと、それぞれの演算子の行列表現、つまり行列要素も簡単にもとまる。たとえば、

$$J_+|j, m\rangle = \mathbf{a}_1^\dagger \mathbf{a}_2 |p\rangle_1 |q\rangle_2 = \sqrt{p+1} |p+1\rangle_1 \sqrt{q} |q-1\rangle = \sqrt{(p+1)q} |j, m+1\rangle \quad (5.179)$$

よって

$$\langle j, m+1 | J_+ | j, m \rangle = \sqrt{(p+1)q} = \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \quad (5.180)$$

同様に

$$\langle j, m-1 | J_- | j, m \rangle = \sqrt{(q+1)p} = \sqrt{(j-m+1)(j+m)} \quad (5.181)$$

また

$$\langle j' m' | J_3 | j, m \rangle = m \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (5.182)$$

など、回転群の行列要素を簡単に求めることができる。

5.8.3 $U(1)$ について

以上、 $SU(2)$ の表現について、生成消滅演算子のことばで既約表現を構成した。一方、もともとの理論には $U(2)$ の対称性があったのに、 $U(1)$ はどうなったのか。このことは、 $U(1)$ 変換がどのような変換かを考えるとすぐにわかる。

$U(1)$ とは、今の場合 2×2 の対角部分の寄与で、 \mathbf{a}_i に共通の位相変換を行うことに相当する。

$$U(1) \ni e^{i\phi} : \mathbf{a}_i \rightarrow e^{i\phi} \mathbf{a}_i \quad (5.183)$$

すると

$$U(1) \ni e^{i\phi} : |j, m\rangle \rightarrow e^{(p+q)i\phi} |j, m\rangle = e^{2ji\phi} |j, m\rangle \quad (5.184)$$

$U(1)$ 変換は指数の ϕ の係数に比例するので今の場合、 $N = 2j$ の固有値で固有状態がラベルされる。これは、エネルギー固有値と比例しているので、 $U(1)$ の対称性は本質的に新しい量子数をもたらさない。

5.8.4 $SU(3)$

以上のように、2次元の調和振動子は $U(2)$ 対称性を持つことがわかる。すると3次元では、 $U(3)$ 、さらに N 次元では $U(N)$ 対称性を持つことが期待される。

5.8.4.1 3次元調和振動子 2次元の場合と同様に生成消滅演算子でハミルトニアンを書くと

$$H = \sum_{\rho=1}^3 \mathbf{a}_\rho^\dagger \mathbf{a}_\rho + \frac{3}{2} = \sum_{\rho=1}^3 N_\rho + \frac{3}{2} \quad (5.185)$$

ただし、 $\hbar = 1$ でさらに $m = \omega = 1$ とした。また N_ρ はそれぞれの方向の振動子の個数演算子であり、先ほどと同様に次の交換関係

$$[N_\rho, \mathbf{a}_\rho^+] = \mathbf{a}_\rho^+ \quad , \quad [N_\rho, \mathbf{a}_\rho] = -\mathbf{a}_\rho \quad (5.186)$$

をみtas。

ハミルトニアンが個数演算子で書けるということは、2次元の場合と同様に生成演算子の数が同じ状態はエネルギーが縮退していることになる。よって、規約表現は

$$|k, m, n\rangle = (\mathbf{a}_1^\dagger)^k (\mathbf{a}_2^\dagger)^m (\mathbf{a}_3^\dagger)^n |0\rangle \quad (5.187)$$

$k + m + l = N$ である。対称性の演算子は、個数を変えない演算子なので

$$\mathbf{a}_j \mathbf{a}_i^\dagger \quad (5.188)$$

の組み合わせで書くことができ、ハミルトニアンを除くと8個の独立な演算子があることがわかる。

$$T_a = \frac{1}{2} \mathbf{a}_\rho^\dagger \lambda_{a\rho\sigma} \mathbf{a}_\sigma \quad (5.189)$$

$$\begin{aligned} \lambda_a = \sigma_a, \lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.190)$$

$$\text{Tr}\left\{\left(\frac{1}{2}\lambda_a\right)\left(\frac{1}{2}\lambda_b\right)\right\} = \frac{1}{2}\delta_{ab} \quad (5.191)$$

である。

$$[T_a, T_b] = \frac{1}{4} \mathbf{a}^\dagger [\lambda_a, \lambda_b] \mathbf{a} = f_{abc} T_c \quad (5.192)$$

が成り立つ。 f_{abc} は $SU(3)$ の構造定数である。

5.8.4.2 縮退の構造

1. $N = 1$, 3次元表現 (4このボールの3個の隙間に2個の線を引く ${}_3C_2$)

$$|1, 0, 0\rangle \quad (5.193)$$

2. $N = 2$, 6次元 (5このボールの4個の隙間に2本の線を引く ${}_4C_2$)

$$|2, 0, 0\rangle \quad |1, 1, 0\rangle \quad (5.194)$$

3. $N = 3$, ${}_5C_2 = 10$ 次元

4. $N = 4$, ${}_6C_2 = 15$ 次元

これらは角運動量の表現とパリティを考えれば分解できる。

5.8.5 レンツベクトル

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2(\dot{\theta}^2 + \sin^2 \theta \dot{\phi}^2)) \quad (5.195)$$

$$U(r) = -\frac{k}{r} \quad (5.196)$$

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(r) \quad , \quad \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (5.197)$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{km} \mathbf{p} \times \mathbf{L} - \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (5.198)$$

$$\mathbf{A} \dot{\mathbf{r}} = \left(\frac{1}{km} \mathbf{p} \times \mathbf{L} - \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \cdot \mathbf{r} \quad (5.199)$$

$$A r \cos \theta = \frac{1}{mk} L^2 - r \quad (5.200)$$

$$H = \frac{k^2 m}{2L^2} (\mathbf{A}^2 - 1) \quad (5.201)$$

$$\left| \mathbf{p} + mk \frac{\mathbf{A} \times \mathbf{L}}{L^2} \right| = \frac{mk}{L} \quad (5.202)$$

5.9 直積表現と既約分解

5.9.1 角運動量の合成

回転対称性がある系においては、角運動量が保存することを議論してきた。量子力学においては、このことはそれぞれの状態、または状態を表す波動関数が、角運動量演算子の固有状態になることを意味する。一方、粒子が固有のスピン角運動量を持っていることが知られている。ここで、次のような疑問が生じる。水素原子の周りの波動関数はシュレディンガー方程式を解くことで求まるが、その時スピンの効果は入っていない。では、ある軌道角運動量を持った状態で電子が運動する場合、全体の角運動量はどのようになるのか？

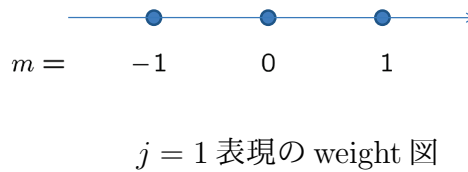
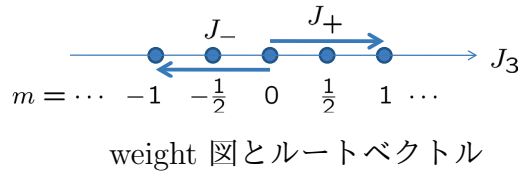
このように、2つの角運動量が共存する状態は、数学的には回転群の積表現を作ることに対応する。ここでは、その積表現の既約分解について解説する。

5.9.2 表現の図的表示：weight 図

量子力学で、回転対称性がある場合はその状態は角運動量の固有状態でラベルされ、それぞれ状態をラベルする j, m はそれぞれ、方位角運動量と磁気量子数と呼ばれる。群論においては、 J_3 の固有値は **weight** と呼ばれ、 j は **highest weight** と呼ばれる。よって、群の表現は highest weight で分類され、それぞれの表現ベクトルは weight でラベルされる。

このことは、表現ベクトルを J_3 の固有値、つまり weight を直線上の点として表すと理解しやすい。このようにすると表現ベクトルは、数直線上の整数または半整数の点に対応する。highest weight j をきめると、そこから1だけ下がったところに点を打ちそれを繰り返して $-j$ まで、全ての点に対応して一個ずつの状態が存在することになる。この

ような図を **weight 図 (diagram)** とよび、全ての可能なこのような点の集合を **weight lattice** とよぶ。 J_{\pm} の作用によって、その間の移動が引き起こされるがその移動を表すベクトルを **ルート (root) ベクトル** と呼ぶ。以下の計算はこの図を使うと理解しやすい。



5.9.3 積表現：角運動量の合成

量子力学では、例えば、それぞれが角運動量の固有状態にある 2 粒子の状態の積状態を考える必要が出てくる。例えば、水素原子の固有状態は、波動関数を球面調和関数を使って展開することで、軌道角運動量の固有状態として作られる。一方、電子はスピン角運動量をもっている。すると、電子が水素原子のある固有軌道にある時の状態は、どのような角運動量の固有状態に分類されるべきなのか？一般に 2 つの角運動量を持ったものが共存するとき、その合成系を表す状態の回転は全角運動量で特徴づけられるが、このような全角運動量の表現はどのように構成されるのか？

このような問題は、回転群の表現の積表現を作ることに相当する。ここでは、一般に積表現について解説する。ここで考える問題は、具体的には

問題：積表現の既約分解

highest weight が j_1, j_2 で与えられる、2 個の表現を考え、その基底ベクトルを

$$|j_1, m_1\rangle, |j_2, m_2\rangle \tag{5.203}$$

とする。その積表現はどのような既約表現に分解されるか？

である。この問題を次の順序で解いていく。

以下で使う重要な公式は

$$|j, m - 1\rangle = ((j + m)(j - m + 1))^{-\frac{1}{2}} J_- |j, m\rangle \tag{5.204}$$

$$|j, m + 1\rangle = ((j - m)(j + m + 1))^{-\frac{1}{2}} J_+ |j, m\rangle \tag{5.205}$$

1. 表現空間の次元：直積表現の表現ベクトルは，それぞれの表現の積として定義できる．よって直積表現の基底は

$$|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle \quad (5.206)$$

で張られ，その空間の次元は $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ である．

2. 積表現の回転と生成元：積表現の回転は

$$\hat{R}_\theta(|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle) = (\hat{R}_\theta|j_1, m_1\rangle)(\hat{R}_\theta|j_2, m_2\rangle) \quad (5.207)$$

であり，無限小回転は $\hat{R} = 1 - i\epsilon\hat{\mathbf{J}}$ を代入すると

$$\begin{aligned} (1 - i\epsilon\hat{\mathbf{J}})(|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle) &= ((1 - i\epsilon\hat{\mathbf{J}}|j_1, m_1\rangle)((1 - i\epsilon\hat{\mathbf{J}}|j_2, m_2\rangle)) \\ &= |j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle \\ &\quad - i\epsilon\left((\hat{\mathbf{J}}|j_1, m_1\rangle)|j_2, m_2\rangle + |j_1, m_1\rangle(\hat{\mathbf{J}}|j_2, m_2\rangle)\right) + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (5.208)$$

のようになるので，1次の項だけを見ると

$$\hat{\mathbf{J}}(|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle) = (\hat{\mathbf{J}}|j_1, m_1\rangle)|j_2, m_2\rangle + |j_1, m_1\rangle(\hat{\mathbf{J}}|j_2, m_2\rangle) \quad (5.209)$$

を得る。²¹

無限小変換のそれぞれが作用する表現ベクトルをラベルを付けて区別すると，全体の無限小変換の生成元は

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}^{(1)} + \hat{\mathbf{J}}^{(2)} \quad (5.212)$$

と書ける．それぞれ $J^{(i)}$ は， $|j_i, m_i\rangle$ に作用する．

量子力学では \mathbf{J} は全角運動量演算子と呼ばれ²²，このように積表現を作ることは，それぞれの角運動量の和に関する表現を求めることになるので，角運動量の合成と呼ばれる．

3. \mathbf{J} の highest weight state :

$$\hat{J}_3 = \hat{J}_3^{(1)} + \hat{J}_3^{(2)} \quad (5.213)$$

なので， J_3 の固有値のもっとも大きな状態，つまり \mathbf{J} の highest weight state は積表現の中の $m = j_{max}$ の状態でもあり

$$|j_{max}, j_{max}\rangle_T = |j_1, j_1\rangle|j_2, j_2\rangle \quad (5.214)$$

²¹正確には，表現のテンソル積

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (5.210)$$

を考えると，その回転の生成元は

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}^{(1)} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{J}^{(2)} \quad (5.211)$$

²²実際は \hbar をかけた量．

で与えられる。この状態の J_3 の固有値は明らかに $m = j_1 + j_2$ なので、積表現の最大の角運動量は $j_{max} = j_1 + j_2$ であることが分かる²³。この状態は一個だけ存在する。われわれは、この状態に

$$\hat{\mathbf{J}}_- = \hat{\mathbf{J}}_-^{(1)} + \hat{\mathbf{J}}_-^{(2)} \quad (5.215)$$

をかけていくことで、 $2j_{max} + 1$ 次元の表現空間 $V_{j_{max}} = V_{j_1+j_2}$ を得る。

4. **Second highest weight state:** $\hat{\mathbf{J}}_3$ の固有値が $m = j_{max} - 1$ の状態は

$$|j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle, \quad |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle \quad (5.216)$$

の二つがあるが、この中で $V_{j_1+j_2}$ に属するベクトルは

$$J_- |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle = \sqrt{2j_1} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle + \sqrt{2j_2} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle \quad (5.217)$$

なので、これに直交するベクトル

$$\sqrt{2j_2} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle - \sqrt{2j_1} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle \quad (5.218)$$

が、まだ表現に分類されていない状態として残っている。このベクトルに $\hat{\mathbf{J}}_+ = \hat{\mathbf{J}}_+^{(1)} + \hat{\mathbf{J}}_+^{(2)}$ を作用させると 0 になることが分かる。よって、この状態は highest weight state である。そこで、この状態を

$$|j_{max} - 1, j_{max} - 1\rangle_T \quad (5.219)$$

とする。われわれは、この状態に $\hat{\mathbf{J}}_-$ を作用させることによって、 $2(j_{max} - 1) + 1 = 2(j_1 + j_2 - 1) + 1$ 次元の表現空間 $V_{j_1+j_2-1}$ を得る。

5. **積表現の既約分解と表現空間の次元:** この操作は、直積空間をとりつくすまで行うことが出来るので、

積表現の分解

$$V_{j_1} \otimes V_{j_2} = V_{j_1+j_2} \oplus V_{j_1+j_2-1} \oplus \cdots \oplus V_{|j_1-j_2|} \quad (5.220)$$

ここで、分解したときに $|j_1 - j_2|$ で表現が終わることは、直観的には 2 つの状態のスピンの最大限打ち消しあった時の状態であることで理解できる。また、両辺の状態数が次のように等しいことから理解できる：

$$\begin{aligned} \text{分解後の状態数} &= 2(j_1 + j_2) + 1 + 2(j_1 + j_2 - 1) + 1 + \cdots + 2|j_1 - j_2| + 1 \\ &= 2\left((1 \text{ から } j_1 + j_2 \text{ までの和}) - (1 \text{ から } |j_1 - j_2| - 1 \text{ までの和})\right) \\ &= (j_1 + j_2 + 1)^2 - (|j_1 - j_2|)^2 \\ &= (j_1 + j_2 + |j_1 - j_2| + 1)(j_1 + j_2 - |j_1 - j_2| + 1) \\ &= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \end{aligned} \quad (5.221)$$

つまり、分解後の状態数の総和は積表現を作った 2 個の表現の状態数の積に等しい。

²³もし、これより大きな角運動量の状態があれば、その表現の磁気量子数 m の値は $j_1 + j_2$ より大きな状態も含むが、積表現の中にはそのような状態はない。

5.9.4 例 1) $j = \frac{1}{2} \otimes j = \frac{1}{2}$

最大の m を持つ状態 (highest weight state) は

$$|1, 1\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \quad (5.222)$$

である.

公式より

$$J_- |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, \quad J_+ |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \quad (5.223)$$

また,

$$J_- |1, 1\rangle = \sqrt{2}|1, 0\rangle, \quad J_- |1, 0\rangle = \sqrt{2}|1, -1\rangle \quad (5.224)$$

を得る.

最大の m を持つ状態 (highest weight state) に J_- を作用させると

$$J_- |1, 1\rangle = J_- (|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle) = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad (5.225)$$

よって

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle) \quad (5.226)$$

これに直交する状態は

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle - |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle) \quad (5.227)$$

さらに,

$$J_- |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle) = \sqrt{2} |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad (5.228)$$

よって

$$|1, -1\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad (5.229)$$

見やすくするために

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle, \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle \quad (5.230)$$

と書くと, これらの角運動量の合成の結果は次のようにまとめることができる.

2個のスピン $\frac{1}{2}$ の角運動量の合成：

1. $j = 0$ の状態

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle - |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle) \quad (5.231)$$

2. $j = 1$ の状態

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle + |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle) \\ |1, -1\rangle &= |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (5.232)$$

3. 積表現の表現空間の既約分解：

$$V_{\frac{1}{2}} \otimes V_{\frac{1}{2}} = V_0 \oplus V_1 \quad (5.233)$$

5.9.5 例2) $j = 1 \otimes j = \frac{1}{2}$

一般式から

$$\begin{aligned} |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} J_- |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle \\ |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{2} J_- |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} J_- |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \end{aligned} \quad (5.234)$$

また,

$$J_- |1, 1\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle, \quad J_- |1, 0\rangle = \sqrt{2} |1, -1\rangle \quad (5.235)$$

最大の m を持つ状態 (highest weight state) は

$$|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = |1, 1\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \quad * \quad (5.236)$$

である. この状態に J_- を作用させると

$$J_- |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = J_- (|1, 1\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle) = \sqrt{2} |1, 0\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + |1, 1\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad (5.237)$$

よって

$$|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 1\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad * \quad (5.238)$$

これに直交する状態は

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 0\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad ** \quad (5.239)$$

さらに,

$$\begin{aligned} J_- | \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} (\sqrt{2} | 1, -1 \rangle | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle + | 1, 0 \rangle | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle) + \sqrt{\frac{2}{3}} | 1, 0 \rangle | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \\ &= 2 (\sqrt{\frac{1}{3}} | 1, -1 \rangle | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} | 1, 0 \rangle | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle) \end{aligned} \quad (5.240)$$

よって

$$| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} | 1, -1 \rangle | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} | 1, 0 \rangle | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \quad * \quad (5.241)$$

さらに,

$$\begin{aligned} J_- | \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} | 1, -1 \rangle | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle + \sqrt{\frac{4}{3}} | 1, -1 \rangle | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \\ &= \sqrt{3} | 1, -1 \rangle | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \\ &= \sqrt{3} | \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \rangle \end{aligned} \quad (5.242)$$

よって

$$| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \rangle = | 1, -1 \rangle | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \quad * \quad (5.243)$$

一方, $j = \frac{1}{2}$ の状態は, J_- を作用すると

$$J_- | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} | 1, -1 \rangle | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} | 1, 0 \rangle | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle - \sqrt{\frac{4}{3}} | 1, 0 \rangle | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \quad (5.244)$$

よって,

$$| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} | 1, -1 \rangle | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} | 1, 0 \rangle | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \quad ** \quad (5.245)$$

であり, 確かに, $| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \rangle$ と直交し, さらに J_- を作用させると 0 になることが分かる.

* の 4 状態と ** の 2 状態がそれぞれの既約表現の空間の基底になっているので

$$V_1 \otimes V_{\frac{1}{2}} = V_{\frac{3}{2}} \oplus V_{\frac{1}{2}} \quad (5.246)$$

の既約分解が実現された.

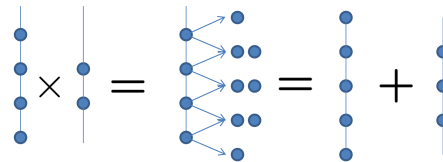
5.9.6 図による分解例

積表現を作るとき, どのような表現が現れるかを直観的に知るには, 図による分解が簡単で分かりやすい. 以下にその例をあげておく. 例えばスピン $\frac{3}{2}$ とスピン $\frac{1}{2}$ の状態の積を考える.

分解の手順

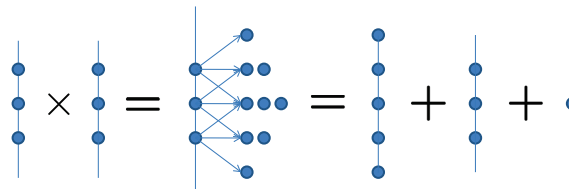
1. $V_{\frac{3}{2}}$ は m の取る値が 4 個 $m = (-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2})$, $V_{\frac{1}{2}}$ は m の取る値が 2 個 $m = (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ なのでそれぞれの状態 $| j, m \rangle$ に点を対応させる.
2. $\frac{3}{2}$ の状態例えば $| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \rangle$ に, スピン $\frac{1}{2}$ の状態をかけると m の値は $\frac{1}{2}$ 増えるか, 減るかなので, それぞれを矢印で示す.
3. 一番上の点から, 既約表現に相当する図を取り出し分離し, 残った図に同様のことを繰り返す.

1. $j = \frac{3}{2} \otimes j = \frac{1}{2}$ の図による既約分解



$$V_{\frac{3}{2}} \otimes V_{\frac{1}{2}} = V_2 \oplus V_0 \quad (5.247)$$

2. 2つの $j = 1$ の状態の積の図による既約分解



$$\begin{aligned} V_1 \otimes V_1 &= V_2 \oplus V_1 \oplus V_0 \\ 3 \times 3 &= 5 + 3 + 1 \end{aligned} \quad (5.248)$$

5.10 波動関数の回転と全角運動量

5.10.1 場と回転

まず、一般に場の概念について説明しておく。

場とは、空間の各点に分布している量をあらわす一般には関数の組である。

今、上で議論した、波動関数は空間の点を与えるとある複素数を与える。一方、電場 \vec{E} などは、空間の点を与えると、あるベクトルが一つ定まるようになっている。つまり、 \vec{E} は3個の関数がセットになった場と考えられる。このような場をベクトル場と呼ぶ。これに対して、先のように各点にある複素数を定める場をスカラー場と呼ぶ。

5.10.1.1 ベクトル場とその回転 ベクトル場の例は様々あるが、例えば電場 E_i や磁場 B_i が代表的である。ベクトル場の回転は、場として受ける回転の影響と、ベクトルとしての回転の影響の両方を考慮しなければならない。そこで、ベクトル場 $v_i(x)$ の回転による変換性は

$$T_R v^i(x) = R_{ij} \mathcal{R} v^j = e^{-i\mathbf{u} \cdot (\mathbf{l} + \mathbf{L})} v^i(x) \quad (5.249)$$

で与えられる。ここで、 $R = D_1$ 表現行列を表す。そこで、ベクトル場の回転の生成元として、

$$J_k = l_k + L_k \quad (5.250)$$

を導入すると、回転は

$$T_R v^i(x) = e^{-i\mathbf{u} \cdot \mathbf{J}} v^i(x) \quad (5.251)$$

と書ける。 J は全角運動量の演算子に比例している²⁴。つまり、ベクトル場は一般に $|l, m\rangle|1, m'\rangle$ 状態で展開できる。

5.10.1.2 スピノル場とその回転 スピノル場は、空間の各点にスピノルが分布した状態を表す量で、関数2個の組からなる：

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \end{pmatrix} = (\psi^\alpha) \quad (5.252)$$

量子力学では電子の波動関数はこのように書かれ、 ψ^1 がスピナップの状態、 ψ^2 がスピンドアウンの状態を表す。スピノル場の変換性はベクトルの場合と同様に

$$T_R \psi = e^{-i\mathbf{u} \cdot \mathbf{J}} \psi \quad (5.253)$$

ただし、全角運動量は今度は

$$J = l + S = \left(l_k + \frac{1}{2} \sigma_k \right) \quad (5.254)$$

で与えられる。つまり、電子の波動関数は $Y_{lm}|\frac{1}{2}, s\rangle$ で展開できる。

5.11 ウィグナー・エッカルトの定理 (Wigner-Eckart theorem)

5.11.1 クレプシュ・ゴルダン係数 (Clebsch-Gordan coefficients)

以上の例で見たように、highest weight が j_1 と j_2 の状態から $|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$ の状態を作ることができ一般に

$$|J, M\rangle = \sum_{m_1, (m_1+m_2=M)} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | J, M\rangle \quad (5.255)$$

と書いたとき、 $\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | J, M\rangle$ を、クレプシュ・ゴルダン係数と呼ぶ。

この書き方は、

$$|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad (5.256)$$

と書いていることに相当する。

クレプシュ・ゴルダン係数の間には次の直交関係がある。

1. 定義式に $\langle J', M' |$ をかけると

$$\delta_{JJ'} \delta_{MM'} = \sum_{m_1, m_2} \langle J' M' | j_1 m_1; j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | J M\rangle \quad (5.257)$$

2. $|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$ の時、 $|J, M\rangle$ は $V_{j_1} \otimes V_{j_2}$ の直交基底で直積空間上で $\sum_{J, M} |J, M\rangle \langle J, M| = \mathbf{1}$ が成り立つので、

$$\delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} = \sum_{J, M} \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | J M\rangle \langle J M | j_1 m'_1; j_2 m'_2\rangle \quad (5.258)$$

²⁴角運動量演算子はこれに \hbar を掛けた量である。その場合回転を表す今の演算子と一致するために、 \hbar で割る必要があり、そのことを考慮すると通常の角運動量演算子による回転の表現と一致する。以下では簡単のために、この量も全角運動量と呼ぶ。

5.11.2 摂動論について

演算子によっても，角運動量が運ばれる場合がある．例えば，ある固有状態 $|n\rangle$ が

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (5.259)$$

で与えられているとしよう．そこに外力が働いていてその影響でハミルトニアンが $H + \Delta H$ に変形されたとする．同様に，外力の影響で波動関数は $|n\rangle + |\Delta\rangle$ に固有値は $E + \Delta E$ になったとすると，シュレディンガー方程式は

$$(H + \Delta H)(|n\rangle + |\Delta\rangle) = (E + \Delta E)(|n\rangle + |\Delta\rangle) \quad (5.260)$$

ここで，外力は小さいとして，1次のオーダーだけに注目すると，

$$\Delta H|n\rangle + H|\Delta\rangle = \Delta E|n\rangle + E|\Delta\rangle \quad (5.261)$$

$|n\rangle$ が H の固有状態であることを使うために， $\langle m|$ で期待値をとると $m = n$ の場合

$$\langle n|\Delta H|n\rangle = \Delta E \quad (5.262)$$

$m \neq n$ の時

$$\langle m|\Delta H|n\rangle = (E_n - E_m)\langle m|\Delta\rangle \quad (5.263)$$

を得る．よって，固有エネルギーのずれや，状態 $|m\rangle$ への遷移確率を与える行列要素が ΔH の行列要素として求まる．そこで，外力が z 方向に働いているとすると一般に $\Delta H = Kz$ と書ける．(K は定数.) この時， ΔH は角運動量 $j = 1$ を運んでいる．

5.11.3 ウィグナー・エッカルトの定理と証明

ある状態 ψ と物理量 \hat{T} を考える．回転変換 \hat{R} に対して次のような演算が

$$\begin{array}{ccc} |\psi\rangle & \xrightarrow{\hat{T}} & \hat{T}|\psi\rangle \\ \hat{R}\downarrow & & \hat{R}\downarrow \\ \hat{R}|\psi\rangle & \xrightarrow{\hat{R}\hat{T}\hat{R}^{-1}} & \hat{R}\hat{T}|\psi\rangle \end{array} \quad (5.264)$$

である必要があることから，演算子 \hat{T} の回転は，共役変換：

$$\hat{R}\hat{T}_n\hat{R}^{-1} = \hat{T}_m D_{mn}(\hat{R}) \quad (5.265)$$

であらわされる．このとき， D_{mn} はその演算子の表現の表現行列になる．このことは，演算子が回転によって自明でない変換を受ける場合，いくつかの組みの演算子 \hat{T}_n が回転群の表現ベクトルとして互いに変換されることを意味する．

今 $\hat{T}_{n_1}^{j_1}$ が highest weight j_1 の既約表現に属しているとする．このとき，

$$\hat{R}(\hat{T}_{n_1}^{j_1}|j_2, n_2\rangle) = \hat{T}_{n_1}^{j_1}|j_2, n_2\rangle D_{m_1 n_1}^{(j_1)} D_{m_2 n_2}^{(j_1)} \quad (5.266)$$

となり、ちょうど積表現 $V_{j_1} \otimes V_{j_2}$ と同じ変換をしている。そこで、クレプシュ・ゴルダン係数を使えば

$$|T : J, M\rangle = \sum_{m_1, (m_1+m_2=M)} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | J, M \rangle \hat{T}_{m_1}^{j_1} |j_2, m_2\rangle \quad (5.267)$$

\hat{T}_n^j が $|j, n\rangle$ と違うところは、規格化されていないところであるが表現の性質から、 J を定めれば $|T : J, M\rangle$ の M の違う状態は J_- をかければ得られるので、相対的な因子は表現の性質で決まっている。よって

$$|T : J, M\rangle = \langle J || T || J \rangle |J, M\rangle \quad (5.268)$$

と書ける。

逆に解くと

$$\hat{T}_{m_1}^{j_1} |j_2, m_2\rangle = \sum_{J, m} \langle J, m_1 + m_2 | j_1, m_1; j_2, m_2 \rangle |T : J, m_1 + m_2\rangle \quad (5.269)$$

なので、演算子 \hat{T} の行列要素は

$$\langle J, M | \hat{T}_{m_1}^{j_1} |j_2, m_2\rangle = \langle J, m_1 + m_2 | j_1, m_1; j_2, m_2 \rangle \langle J || T || J \rangle \delta_{M, m_1+m_2} \quad (5.270)$$

とあらわされる。これをウィグナー・エッカルトの定理という。

この性質は、量子力学においては非常に有用である。様々な作用素の期待値を考えると、本質的に計算する必要があるのは

$$\langle J || T || J \rangle = \langle J, J | T | J, J \rangle \quad (5.271)$$

である。

highest weight の場合などで計算すればよい。

5.12 縮退と対称性 (補足)

量子力学では現実の問題では、相互作用を摂動的に考えることが実用的である。もっとも簡単な摂動の議論は次のようになる。今ハミルトニアン H_0 の固有関数系が次のように与えられているとする。

$$H_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle \quad (5.272)$$

ここに、 H' の摂動をかけたとすると、新しいハミルトニアンは $H + \lambda H'$ となる。この系の状態を H_0 の固有関数系で摂動展開することを考える。つまり

$$(H_0 + \lambda H') (|n\rangle + \lambda \sum_m c_m |m\rangle) = (\varepsilon_n + \lambda \varepsilon') (|n\rangle + \lambda \sum_m c_m |m\rangle) \quad (5.273)$$

ここで、 $\lambda = 0$ とすると、この式は eq.(5.272) に戻る。エネルギーの摂動 ε' は、この方程式の両辺に $\langle k|$ をかけ、 λ の 1 次の項を比べると求まる。実際、 λ の 1 次の項は

$$\lambda \langle k | H' | n \rangle + \sum_m c_m \lambda \langle k | H_0 | m \rangle = \lambda \varepsilon' \langle k | n \rangle + \lambda \varepsilon_n \sum_m c_m \langle k | m \rangle \quad (5.274)$$

となり，固有関数の直交性から

$$\varepsilon' = \langle n | H' | n \rangle \quad (5.275)$$

を得る．

Example ゼーマン効果：一般に球対称な系では，角運動量が保存し状態は \mathbf{L}^2 が同じならばエネルギーは縮退する．つまり，角運動量の大きさが ℓ で与えられる状態はその磁気量子数 m とすると， $|\ell, m\rangle$ のようにラベルされ， $2\ell + 1$ 重に縮退する．そこに z 方向の磁場をかけると

$$\lambda H' = \lambda \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \lambda B L_z \quad (5.276)$$

となる．つまり

$$\varepsilon' = \langle \ell, m | H' | \ell, m \rangle = Bm \quad (5.277)$$

となり，状態は m によって分解してしまう．

5.12.1 Example: スピン系

スピン 2 個のシステムを考える．スピン演算子を $S^i = \frac{1}{2}\sigma^i$ である．スピン角運動量は $j = \frac{1}{2}$ の場合を考え，波動関数 $|j, s\rangle$ は， S_3 の固有状態として

$$S_3 |\frac{1}{2}, s\rangle = \hbar s |\frac{1}{2}, s\rangle, \quad s = \pm \frac{1}{2} \quad (5.278)$$

の線形結合で指定できる．

簡単のために

$$|\uparrow\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\downarrow\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad (5.279)$$

と表す．また $\hbar = 1$ とする．つまり

$$S_3 |\uparrow\rangle = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, \quad S_3 |\downarrow\rangle = -\frac{1}{2} |\downarrow\rangle \quad (5.280)$$

スピンの 2 個あるのでそれぞれを $\vec{S}^{(i)}$ のように区別する．今の系のハミルトニアンを

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_I \\ H_0 &= E(|\vec{S}^{(1)}|^2 + |\vec{S}^{(2)}|^2) \\ H_I &= 2\lambda \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} \end{aligned} \quad (5.281)$$

である．このハミルトニアンの波動関数はそれぞれのスピンの状態の積で表せる．つまり

$$\Psi(s, s') = |s\rangle_1 |s'\rangle_2, \quad s, s' = \uparrow, \downarrow \quad (5.282)$$

である．

1. 状態全てを書く

$$\Psi(\uparrow, \uparrow) = |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \quad (5.283)$$

2. H_0 の固有値は

$$H\Psi(s, s') = E(|\vec{S}^{(1)}|^2 + |\vec{S}^{(2)}|^2)\Psi_{s, s'} = E\left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\right)\Psi_{s, s'} = \frac{3}{2}E\Psi(s, s') \quad (5.284)$$

となり, 4つの状態が縮退している.

3. H_I の固有状態は全スピンを

$$\vec{J} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)} \quad (5.285)$$

とすると

$$\vec{J}^2 = (\vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)})^2 = (\vec{S}^{(1)})^2 + (\vec{S}^{(2)})^2 + 2\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} \quad (5.286)$$

よって

$$2\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} = \vec{J}^2 - (\vec{S}^{(1)})^2 - (\vec{S}^{(2)})^2 \quad (5.287)$$

4. 固有値は

$$H_I = \lambda\left(j(j+1) - \frac{3}{2}\right) \quad (5.288)$$

となり, 全角運動量 j の値で決まる.

5. 固有状態は $j = 1, 0$ が得られる.

$$(5.289)$$

6. これに, 磁場による相互作用 $H_B = 2\mu B(S_3^{(1)} + S_3^{(2)})$ を考えると, $j = 1$ の状態の縮退が解ける.

5.12.2 ゼーマン効果

フェルミオンがスピン $\frac{1}{2}$ の粒子であることが確認されたのはゼーマン効果の観測による. 電磁場中の電荷 $-e$ の電子のシュレディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi, \quad H = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} \quad (5.290)$$

$$p^\mu = (H, \vec{p}) \rightarrow (p^\mu - eA^\mu) = (H + e\phi, \vec{p} - e\vec{A}) \quad (5.291)$$

の置き換えをすればよい. このとき

$$\frac{1}{2m_e}(\vec{p} - e\vec{A})^2 = \frac{1}{2m_e}(\vec{p}^2 - e(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + e^2\vec{A}^2) \quad (5.292)$$

いま電磁場を

$$\vec{A} = \frac{1}{2}B(-y, x, 0) \quad (5.293)$$

とすると

$$\vec{B} = \text{rot}\vec{A} = (0, 0, B) \quad (5.294)$$

となり, z 軸方向の定数磁場を与える. この \vec{A} は $\text{div}\vec{A} = 0$ なのでクーロンゲージ条件を満たしている. そこで, これを代入すると

$$\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p} = 2\vec{A} \cdot \vec{p} = B(xp_y - yp_x) = BL_z = \vec{B} \cdot \vec{L} \quad (5.295)$$

よって

$$H = \frac{1}{2m_e} \vec{p}^2 + e\phi - \frac{e}{2m_e} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{e^2 B^2}{8m_e} (x^2 + y^2) \quad (5.296)$$

ここで

$$\vec{M}_L = \frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad (5.297)$$

を軌道磁気モーメントと呼ぶ. よって, 磁場による摂動を考えると, エネルギーが $\vec{M}_L \cdot \vec{B}$ だけシフトする. これを正常ゼーマン効果とよぶ.

一方, シュテルン・ゲルラッハの実験による電子ビームの分裂や, 異常ゼーマン効果と呼ばれるエネルギーのシフトが発見された. これは, 電子がスピン角運動量 $\frac{1}{2}$ を持っていることをあらわし, そのシフトは磁気モーメントを

$$\vec{M} = \frac{e}{2m_e} (\vec{L} + 2\vec{S}) \quad (5.298)$$

とすることで, 定量的に合うことが知られている. クォーク・レプトンといった素粒子や核子などのフェルミオンは一般にスピン $\frac{1}{2}$ を持つが, その磁気モーメントへのスピン角運動量の寄与は一般に粒子による. このことを考慮して一般の粒子の磁気モーメントを次のように定義する.

粒子の磁気モーメントは

$$\vec{M} = \frac{e}{2m_e} (\vec{L} + g\vec{S}) \quad (5.299)$$

と表され, g は粒子の種類によることが知られている. この g をランダウの g 因子 (g -factor) と呼ぶ.

つまり, 異常ゼーマン効果は電子の g -factor は2であることを示す. この g -ファクターは場の量子論の効果を取り込むとわずかに2からずれることが知られており, 量子電磁力学の検証として良く研究されている.