原子核反応の講義ノート。

教科書は N.K.Glendenning の Direct Nuclear Reactions (Academic Press) を使用する。この教科書には記載されていないが、実用上大切と思われる項目を取り上げた。

２０世紀の物理に寄与した、代表的な散乱実験

殻模型とその具体的な計算

複合核形成過程と Hauser-Feshbach の公式

偏極現象の記述

CDCC

角運動量の復習

２体相互作用の多重極展開

先ず最初に、現代物理に重大な影響を及ぼした散乱現象がをいくらか拾ってみよう。但し、光子の散乱は除外しておく。

第１に思い出すのは、Coulomb 散乱と呼ばれる、Rutherford の名前と関連付けられる実験だろう。この散乱実験は、原子核の存在と原子模型という２０世紀の物理の根幹をなす実験として歴史に残るだろう。

この実験は、弾性散乱の実験と呼ばれるもので、入射・放出粒子の運動エネルギーが重心系では変化しないという特徴を持つ。歴史的にはずっと後から登場する粒子の固有スピンの向きが変化しても、弾性散乱は弾性散乱だとする。

弾性散乱でも、実験室系では放出粒子の運動エネルギーは散乱角度に依存する。この角度依存性を測定すると、入射粒子の質量の知識を仮定すると、散乱体の質量に付いての情報を得る事が可能である。

弾性散乱の特徴と、クーロン相互作用の特徴を区別して考えておかねばならない。弾性散乱では、運動エネルギーの値は変化しないので、運動量移行が反応を特徴つけるパラメータとして意味を有する。Born 近似では散乱振幅は、散乱の原因となる相互作用の Fourier 展開に直接関係している。相互作用の強さは、散乱強度に直接関係しているから、散乱強度を測ると相互作用の強さが分かると考えられる。

一方、運動量移行は散乱角度により変化するから、入射エネルギーを一定にして、散乱確率と散乱角の間にどのような関係があるかを実験的に測定して、ポテンシャルの空間分布を推定する事になる。簡単な表現を用いるならば、散乱体の大きさが調べられると思えば良い。このときに、注目しておくべき事の一つに散乱体の大きさと、入射粒子の de Broglie 波長との関係がある。

問) 運動エネルギーが 1 eV から 1 GeV まで変化するとき、電子と陽子の de Broglie 波長はどの程度変化するか？

これらの粒子で、1 nm から 1 fm 迄の空間分解能を実現するには、どの程度の運動量及び運動エネルギー移行を問題にしなければならないか？運動学が低エネルギー側では非相対論で良いが、途中で相対論的な議論をしなければいけない事に注意しておこう。

次に、クーロン散乱の特殊性に言及しておこう。波の散乱を考えると、入射波の波長と散乱体の大きさ (波長) との比較で、干渉の様子が規定されているという事を思い出さねばならない。クーロン散乱をこの観点から見ると、2 体散乱を重心系で考えるから、問題とする系の長さを規定する物理量は換算質量に対する de Broglie 波長しか登場しない。

ここで、静電気及び静磁気に関するクーロン力についてのコメントをはさんでおこう。電磁気学の教科書では、$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ をもって、電荷の存在と磁荷の不存在を主張していると述べている。この記述は自身は正しいが、もっと重要な舞台装置の視点が抜けている。即ち、この法則は電磁気現象が生起している空間が Euclid 空間である事を確認している。もともとは、我々の住んでいる空間が Euclid 空間であるという事は証明されていない単なる作業仮説であったが、Maxwell の方程式を正しいと認識することは上に述べた作業仮説を肯定している事にもなっている。

この事を念頭に置いてクーロン散乱をもう一度見直してみよう。長さの概念が一つしか無い系での散乱現象では、散乱現象は有る種のパラメータで scale されてしまう。即ち、散乱強度は分かるが散乱体の大きさは分からないという事が経験されている。

一般的な散乱問題では散乱体の空間的な広がり (大きさ) に対する長さがもう一つ登場する。二つの長さが登場すると、両者の波の競合 (干渉、うねり) がおこり、散乱の微分断面積に山や谷が登場する。

2) 電子の波動性を示す実験として、 Ramsauer 効果を引用しておこう。軌道角運動量が 0 の電子のみが、希ガス原子から大きな引力をうけて、位相がπ だけずれるのに、他の軌道角運動量状態はほとんど影響を受けないという特殊な場合には、電子の散乱断面積が有意に小さくなるという現象である。電子の波としての性質が大きく表れるというものであった。

この現象は、前期量子論を確認するという意味で大切な現象である。ついでに言うと、電子の波動性を示す実験としてよく引用される Davisson-Germer の実験が１９２４年であり、Ramsauer 効果の発見は１９２１年、de Broglie の粒子と波動の二重性の論文は１９２３年である。

入射粒子の運動エネルギーの一部が散乱体の内部エネルギーとして使用されるとき、このような反応を (狭義の) 非弾性散乱と呼ぶ。

3) Franck-Herz の実験をこの例として、引用しよう。非弾性散乱では、散乱体の内部

構造が散乱粒子の運動状態に影響を与える。Franck-Herz の実験ではエネルギー移行量を測定する事で、散乱体の励起エネルギーは線スペクトルで有ることが分かった。古典力学ではエネルギーの値は連続量で有るはずだから、これだけでも意識革命をもたらすのに充分ショッキングな出来事であろう。この実験は、１９１３年との事である。

非弾性散乱により放出される粒子の角分布やその強度を入射エネルギーの関数として測定すると、散乱体の更に詳しい情報が得られるだろうと言うことは想像できるだろう。

希ガスと電子の弾性散乱角分布のエネルギー依存性は、定量的な実験が行われ、量子力学の発展を促して来た。量子力学の教科書には必ず散乱という章が設けられているが、ここでは Born 近似が先ず調べられ、１次の摂動では説明が出来ないという事で、２次又もっと高次の摂動を考慮すること、クーロン力に起因する平面波の歪みを取り入れた計算手法 (DWBA)、散乱体の基底状態以外に励起状態をも考慮した解析手法等が提案される事となった。

散乱現象の分類という意味では、上に述べた (狭義の) 非弾性散乱以外に広義の非弾性散乱がある。広義の非弾性散乱は弾性散乱以外の散乱現象と捉える場合が多い。狭義の非弾性散乱には inelastic scattering、 広義の非弾性散乱には non-elastic scattering とでも言葉を使い分けると良いのだが、どちらも inelastic scattering という言葉を使用しているので紛らわしい。

non-elastic な２体反応の場合には、放出粒子が入射粒子と異なる場合もあるだろう。このような反応は組み替え反応と呼ばれている。

４) Ra の α 崩壊に依って放出される α 粒子 を Be に照射すると、エネルギーの高い粒子が放出され、Chadwick により、新粒子だと認定された。Anderson は同じく１９３２年に陽電子を宇宙線の研究で発見し、新しい粒子の存在という概念に対して、抵抗感を払拭した。

時間が経過してもその値が変化しない時、その物理量を運動の恒量とか不変量、保存量とか呼ぶ。例えば上に述べた Chadwick による中性子の発見には、エネルギーと運動量という保存量が重要な役割を担っている。反応の前後で不変な物理量も、保存量と呼ばれている。例えば、電荷の保存や重粒子数の保存である。

５) 李・楊は有る種の核反応で作られるΛ 粒子の崩壊の角分布からパリティーの非保存を提案した。日本人では森田正人先生も、パリティー非保存を考えておられたとの事であるが、論文には書いておられない。弱い相互作用におけるパリティー非保存は、β 崩壊の角分布から断定された。

注： Nuclear Physics という雑誌が発行されている。これが、A と B という２分冊になったのが、１９６７年である。これより古くは、Nuclear Physics と Subatomic Physics とは大まかにいって同義語である。この事は例えば E.Fermi の Nuclear Physics という教科書で取り扱われている題材を見れば分かるだろう。

散乱過程は、散乱体や共鳴状態の研究に不可欠であり、この解析手法は物理の必須要件だと言って過言ではないだろう。

これ以降は、原子核現象に限定した話をしよう。中性子の発見後、この中性子の原子核による吸収断面積の測定により、二つの概念が導入された。一つは E.Fermi が見付けて解釈に窮したものであり、Bohr、Breit、Wigner 等により複合核と呼ばれた。同様の概念として、散乱状態に埋め込まれた束縛 (共鳴) 状態がある。この複合核概念は、原子核の液滴模型へと発展していく。
注：Soliton の本を読むと、Fermi-Pasta-Ulma の再帰現象と言うのが登場する。複合系の一つの自由度に与えられた運動エネルギーが多くの自由度に分散してしまうのか、それともともう一度元の (又は別の) 自由度に集中するのかという問いに対する数値実験の結果である。この数値実験は、Ergode 仮説との関連で語られるが、上で述べたように複合核という概念にたどり着けなかった Fermi の胸の内が推し量られる。

中性子散乱で導入されたもう一つの概念は、Barshall による断面積の標的と入射エネルギー双方に関する依存性から導かれた、幅の広い共鳴 (山と谷の存在) 現象を基礎とするものであった。この現象を、Porter, Weisskopf、Feshbach は入射波の吸収効果を含んだポテンシャル散乱として説明した (１９５４)。この吸収効果を取り込んだ、従って虚部を有するポテンシャル模型は、光学模型と呼ばれる。１９４９年に magic number を説明するために作られた束縛状態に対する殻模型の散乱状態への拡張という意味を持っている。
この光学模型は実用的であったので、これ以降の原子核反応の理論的な取り扱いの出発点として拡張されて来た。実用的という意味で、この発達を支えて来たものは、広い意味の加速器技術、電子回路技術を含む放射線検出器および数値計算理論を含む計算機の発達が挙げられる。但し、原子核物理学は計算機の発達に先行したところがあり、当時の計算機を駆使するにはしたが、計算機の能力が低すぎたという意味での理論と計算能力との不整合が随所に見られた。現在の計算能力を利用できるならばと悔やんでいる理論家は多い。
原子核反応を極端な場合二つに分けて、複合核形成過程と直接反応とに呼ぶ。勿論この中間過程に色々と名前をつける事も行われている。この授業では、直接過程を取り上げる。Glendenning の教科書を採用するとそうなる。授業の途中で、複合核形成過程としての Hauser-Feshbach の式と呼ばれるものの導出及び、殻模型を用いた 分光因子 (spectroscopic amplitude) の計算を別途加える予定である。Hauser-Feshbach の式は、現在の原子核物理学の応用分野の一つとして、元素合成という問題に応用されている。元素合成は宇宙に存在する元素の起源を定量的に議論するという分野である。
直接反応と複合核形成過程の中間領域は現在も、精力的に解析手法が開発されつつ有る。研究者側からは、純粋な核反応機構という興味が先ず挙げられる。複雑系という言葉が流行しているが、複雑系と言う流口語を使用せずに、複雑系を具体的に取り上げている良い例だと思っている。応用する方から言うと、巨大加速器ではどのような二 (三) 次粒子がどのような割合で作られるかという事前の知識は、放射線防御という観点から必要である。更に、人類のエネルギー源として原子力発電 (本当は核力発電！) が使われているが、この廃棄物処理の手法として、原子核反応を利用しようと真剣に考えている一団の人達が居

る。その人達にとっては、原子核反応の起こる割合の細かな数値は死命を制する情報であり、各種の原子力発電所で作られた世界中の核廃棄物の運命は彼らの肩にかかっている。

原子核が一つだけ真空中に浮いていると考えよう。地球上では原子核のまわりには当然電子が存在すると考えたくなる。電子と核子の質量は約９４０倍異なるので、質量的にはひとまず無視しても良い。

また、原子核と電子との相互作用は一般的に言って小さい。例えば、電子の束縛エネルギーは水素原子では約１３ eV であり、ウラニュウムの最内殻でも１１５ keV である。一方、原子核の一番外側を回っていると考えられる核子の束縛エネルギーでも 8 MeV 程度あると言われている。これらの事実は、電子を当面無視することを正当化する。当然重力は小さすぎるから無視する。

時間的には時間の原点も意味を持たないだろう。従ってエネルギーは良い量子数となる。即ち、原子核を記述するのにエネルギー量子数を利用する。これとほぼ等価な質量数を用いる場合も当然ある。

真空中に原子核が一つだけ存在するとき、周囲の空間は均質で異方性が無いだろう。このような空間では、運動量が保存する。原子核を研究するのに、動いている原子核よりも重心が止まっているほうが研究しやすいから、出来るだけ対象とする原子核の重心運動は止める様な座標系を使う。この座標系では運動量の保存は、あまり意味を持たない。

空間の等方性を仮定すると言うことは、回転に対する不変性を要求することである。従って、角運動量 (軌道角運動量でなく全角運動量) が良い量子数になる。更に、空間反転に対する不変性も要求する。従って、全系のパリティーも良い量子数となる。核力の電荷独立性を仮定する立場からは、アイソスピンも良い量子数である。

このような訳で、孤立系を記述するパラメータとして、エネルギー、角運動量、パリティーは無くてはならない知識である。角運動量の知識は、必須な知識である。

殻模型とこれを用いた分光因子の計算

殻模型では、核子は有る与えられたポテンシャルの中を運動しているとする。Pauli 原理を認めるから、エネルギー的に下に位置する単一粒子準位から順番に核子が詰められて、基底状態をつくる。この単一粒子状態を作るポテンシャルをどのように作るかという事は、それはそれで問題である。歴史的には 1) 解析的に計算が可能である。 2) 2 体系の波動関数を重心運動と相対運動に (解析的に) 分離可能である。といった理由で 3 次元調和振動子が使われる時代が長く続いた。調和振動子模型では、調和振動子の強さが唯一のパラメータであり、このパラメータは原子核の平均的な半径を再現するという指導原理で決められる。調和振動子を規定する量子数は、角度方向波動関数は球面調和関数であるから、軌道角運動量 ℓ と磁気量子数 m である。動径方向波動関数の値が 0 となる回数 n が使われる。有る種の計算手法では動径方向波動関数から 1 / r をあらかじめ外へ出しておく場合が有り、原点で波動関数の値が 0 かどうかという議論に持ち込まれても困る。無限遠点でも束縛状態の波動関数は 0 になることは自明である。そこで、n の数え方として原点と無限遠点を除くというやり方と、原点は含むが無限遠点を除くというやり方があり、混用されている。n=0 から始まったり、n=1 から始まったりする。一方、原子物理の世界では、動径方向の節の数でなく、エネルギー量子数が使用されている。3 次元調和振動子のエネルギーは $(2n+\ell+3/2)\hbar\omega$。但し、この式では n=0 から始まる。$\hbar\omega = 40A^{1/3}$ という数値を使う場合が多い。

調和振動子模型では、N = 2 0 迄の magic number は説明が付くがそれ以上の説明を付けるためには、強いスピン・軌道力を導入しなければならない。このスピン・軌道力はスピンと軌道角運動量が平行のときに引力となる。

スピン・軌道力を対角化する量子数として、以下で定義される全角運動量 j を導入する。$\mathbf{j} = \ell + \mathbf{s}$。角運動量の合成順に注意しておこう。自分で勝手に決めても良いが、一度きめるとその順番を死守しなければ計算間違いを起こす原因となる。

スピン・軌道力のポテンシャルをどうするかも問題であるが、Thomas 型、 即ち中心力ポテンシャルの微分を r で割ったもの、が採用される機会が多い。

それでは中心力は？単一粒子準位と考えられる励起状態を出来るだけ再現するという指導原理で作るのが良いだろう。又、核力は r が大きい所では引力であり、小さくなると非常に強い斥力が働き、更に加えて テンソル力も非常に大切である等と言う様な難しい事は当面無視する。以下の Woods-Saxon (逆 Fermi) 型というのが良く使われる。$V(r) = \dfrac{V_0}{1+\exp{(r-R)/a}}$ パラメータの値は、核子弾性散乱を再現する様な光学模型のパラメータとも整合性を保つことが求められる。

残留相互作用を取り込んだ殻模型の具体的な計算に付いて

次に、核子間に相互作用を導入する。核子間相互作用も、平均値としては一体状態のポテンシャルを作るのに取り込まれているが、取り込めなかった相互作用を残留相互作用と呼ぶ。

以下の様な記号を導入する。単一粒子状態を指定する量子数の組みを、α の様なギリシャ文字で書く。具体的には、動径方向波動関数の零点数、全角運動量 j とその z 成分 m、アイソスピンの z 成分 n と思っておく。この状態の creation operator を $c^\dagger_\alpha$ とする。空孔状態の creation operator を $a^\dagger_\alpha$ とすると、粒子の creation operator とは以下の関係がある。

$$a^\dagger_{jmn} = (-1)^{j+m+1/2+n} c_{j-m-n} \equiv c_{\widetilde{jmn}}$$

~記号は時間反転という物理的な意味がある。ここに登場した数値、1 / 2 はアイソスピンの大きさである。ギリシャ文字 α に対応するローマ字 a は、z 成分 (m,n) を含まない量子数の組みを表すと約束する。

粒子や空孔の演算子は、fermion の交換関係を満足する。

これまでの所を、以下の様なハミルトニアンで記述する。

$$H = H_{sp} + H_{int}$$

$$H_{sp} = \sum_\alpha \epsilon_a c^\dagger_\alpha c_\alpha, \quad H_{int} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} c^\dagger_\alpha c^\dagger_\beta c_\delta c_\gamma$$

ϵ_a は単一粒子状態のエネルギーであり、$V_{\alpha\beta\gamma\delta}$ は残留相互作用の行列要素である。

粒子状態を空孔状態で書くときには、

$$c^\dagger_\alpha c_\alpha \to a_{\tilde{\alpha}} a^\dagger_{\tilde{\alpha}} = 1 - a^\dagger_{\tilde{\alpha}} a_{\tilde{\alpha}}$$

の様に書き換える。その結果、

$$H = H_{sh} + H_{21} + H_2 + const.$$

ここで、

$$H_{sh} = -\sum_\alpha \epsilon_a a^\dagger_\alpha a_\alpha, \quad H_{21} = -4 \sum_{\alpha,\beta,\gamma} V_{\beta,\gamma,\alpha,\gamma} a^\dagger_{\tilde{\alpha}} a_{\tilde{\beta}}$$

$$H_2 = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} V_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} a^\dagger_{\tilde{\delta}} a^\dagger_{\tilde{\gamma}} a_{\tilde{\alpha}} a_{\tilde{\beta}}, \quad const. = 2\sum_a (2j_a+1)\epsilon_a + 2\sum_{\alpha,\beta} V_{\alpha,\beta,\alpha,\beta}$$

この式を見ると、単一粒子状態のエネルギーと単一空孔状態のエネルギーは (定数を除くと) 符号が反対である。しかし、H_{21} の項も見掛け上空孔のエネルギーの様な恰好をしている。自分で変形して由来を考えてみよ。第 3 項目は、空孔間に働く残留相互作用である。この項は、実質的には、粒子間の残留相互作用と同じである。

閉核の外に、複数の粒子が有るときに残留相互作用の行列要素を計算してこれを対角化すれば良い。

実際に 2 粒子 (空孔) 又は 3 粒子 (空孔) 状態の波動関数を書き下してみよう。

2 粒子状態の基底：

$$|(ab)IM,TN>= N_{ab}\sum_{m_a,m_b,n_a,n_b}(j_a m_a j_b m_b|IM)(1/2n_a 1/2n_b|TN)c^\dagger_{j_a m_a n_a}c^\dagger_{j_b m_b n_b}|0> \\ = N_{ab}\sum(\alpha,\beta|I)c^\dagger_\alpha c^\dagger_\beta|0>$$

最後の表現は、青木の個人的な略号である。沢山の記号を並べて書くのが煩わしい時には、かなり便利に使える (使えた)。a,b の記号は同じ物を 2 回数えてはいけないので、記号的に $a \le b$ としておく。

この基底は、殻模型の真空 $|0)$ に単一粒子状態 α 、と β に粒子を一つずつくっつけて、全角運動量 I、アイソスピン T を作っている。Pauli 原理が有るから、I や T の取り得る値には角運動量の理論では許される状態以上にきつい制限が課せられる。

規格化定数は以下の様になる。

$$N_{ab} = \begin{cases} 1 & \text{if a} \neq \text{b} \\ 1/\sqrt{2} & \text{a=b and I+T=odd} \end{cases}$$

この式を導くには、以下の Clebsch-Gordan 係数の対称性を使用する。

$$(j_1\, m_1\, j_2\, m_2|JM) = (-1)^{j_1+j_2-J}(j_2\, m_2\, j_1\, m_1|JM)$$

a=b でかつ I + T が偶数というのは Pauli 原理により禁じられている。基底の内積を計算してみれば分かることであるが、この場合には、$N_{ab} = 0$ という結論が得られる。

2 体の相互作用の行列要素は、

$$((ab)IMTN|H_{int}|(cd)IMTN) = 4N_{ab}N_{cd}\sum(\alpha\,\beta|I)(\gamma\,\delta|I)V_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} = H(a,b,c,d;IT)$$

逆に解くと、

$$V_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} = \frac{\sqrt{(1+\delta_{ab})(1+\delta_{cd})}}{4}\sum_{IT}(\alpha\,\beta|I)(\gamma\,\delta|I)H(a,b,c,d;IT)$$

ここで与えた行列要素 H(a、b、c、d ; I T) は、単一粒子エネルギー ϵ_a と一緒に 0p shell 核に対して、Cohen と Kurath が Nucl. Phys. **73**(765) 1 に、sd shell 核に対して、Wildenthal が Progress in Particle and Nuclear Physics vol II ('83) p5 に与えている。これより重い原子核に対する系統的な計算がなされているかどうかは知らない。

Phys. Rev. C**55**187(1997) が質量数 4 9 の原子核を対象とした計算をしている。

OXBASH という殻模型のプログラムが世界的に広く利用されている。

これらのパラメータは、質量数が有る範囲の原子核の内の知られた励起状態のエネルギー、スピンとパリティーの情報を元にして、上の記号の ϵ_a と残留相互作用の行列要素 H(a,b,c,d;I,T) を未知数とする多次元の最小 2 乗法を用いて再現した。

次に 2 空孔状態の場合には、基底は以下の様に書き下せる。

$$|(ab)IMTN) = N_{ab}\sum(\alpha\,\beta|I)a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta|0)$$

ここで、規格化定数は、

$$N_{ab} = 1/\sqrt{(1+\delta_{ab})}_8 \quad \text{I+T is odd if a=b}$$

この基底を用いたハミルトニアンの行列要素を書き下せば以下の様になる。

$$((ab)IMTN|H_{sh}(cd)|IMTN) = -\epsilon_a - \epsilon_b$$

単一空孔エネルギーは単一粒子状態のエネルギーの符号を変えたものである。

$$\begin{aligned}((ab)IMTN|H_{21}|(cd)IMTN) = & -\sum_{J'T'} \frac{(2J'+1)(2T'+1)}{2} \\ & \times \sum_{x=a,b} \left\{ \sum_y \frac{H(x,y,x,y;J'T')}{(2j_x+1)N_{xy}^2} \right\}\end{aligned}$$

単一空孔が近くに存在する 'y' というラベルをつけられた粒子 (空孔) 全てと相互作用する効果である。ここでは粒子だけ又は空孔だけが存在するような、和のとりかたをしているが、粒子と空孔が共存する状態も当然考えるべきである。この式の内、状態 a に関係する項だけを取り出して、上で書き下した単一空孔状態エネルギーに足し込む事が出来る。その結果、単一空孔状態エネルギーは以下の様に変更されると考えても良い。

$$\epsilon_a(hole) \to -\epsilon_a(partilce) - \sum_{J'T'y} \frac{(2J'+1)(2T'+1)}{2} \frac{H(a,y,a,y;J'T')}{(2j_a+1)N_{ay}^2}$$

H_2 の行列要素は、 2 粒子状態と 2 空孔状態とでは実質的に同一である。

3 粒子系の場合を簡単にやっておこう。実際に経験のある、 3 空孔状態の場合を書いておこう。先ず、基底を定義する。

$$|ab(D)c;E) = N \sum (\alpha,\beta|D)(D,\gamma|E) a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger |0)$$

この式の norm を計算する際に、後の都合の為に、bra の部分の量子数に対しては ' を付けておいた。したがって、下の式で $a = a'$ 等と置くと、規格化定数は簡単に書き下せる。

$$\begin{aligned}N^{-2} = & \quad \delta_{cc'}\delta_{dd'}\{\delta_{aa'}\delta_{bb'} - (-)^{a+b-D}\delta_{ab'}\delta_{ba'}\} \\ & + \quad (-)^{D+E}\hat{D}\hat{D}'W(a,b,c,E;D,D')\delta_{bc'}\{(-)^c\delta_{ab'}\delta_{ca'} - (-)^{a+D'}\delta_{aa'}\delta_{b'c}\} \\ & + \quad (-)^{a-E}\hat{D}\hat{D}'W(a,b,E,c;D,D')\delta_{a'c}\{(-)^{D'}\delta_{ab'}\delta_{bc'} - (-)^{b+c}\delta_{ac'}\delta_{bb'}\}\end{aligned}$$

ここで、スピンとアイソスピンを統合した記号が使用されている。

$$\hat{D} = \sqrt{(2I_D+1)(2T_D+1)}$$

$$W(a,b,c,E;D,D') = W(j_a,j_b,j_c,I_E;I_D,I'_D)W(1/2,1/2,1/2,T_E;T_D,T'_D)$$

$$(-)^{a-E} = (-1)^{j_a+1/2-(I_E+T_E)}。$$

上で定義した基底を使用する時に注意するべき事の一つに、norm を計算すると 0 になり有る種の状態は Pauli 原理により許されない場合がある。もう一つ注意すべき点は、外見上は独立に見えるのに実は二つのベクトルが線形独立ではない場合が有る。殻模型の計算に関連して、cfp (coefficeint of fractional parentage) というキーワードでここいらの事情が登場する。

例えば、$p_{1/2}$, $p_{3/2}$ 状態に 3 個の粒子を詰めて、$1/2^-$ 状態を作る組合せは、次の 5 個である。

$$(p_{1/2})^3,\ (p_{1/2})^2_{I=1,T=0}p_{3/2},\ (p_{3/2})^2_{I=0,T=1}p_{1/2},\ (p_{3/2})^2_{I=1,T=0}p_{1/2},\ (p_{3/2})^3$$

norm 以外に上の式を用いて直交するかどうかも確認しておくのが良い。

H_{sh}, H_{21} の行列要素の計算は、困難が無いと思う。H_2 の行列要素の計算結果は以下の通りである。実際に手元の計算では ^{13}N の計算をやったせいだろうか、以下の行列要素しか記録が無い。

$(aa(D)c; E|H_2|a'a'(D')c'; E)=$

$$\begin{aligned}
&4\hat{D}\hat{D'}\textstyle\sum_F \hat{F}^2 W(a,c,a,E;F,D)W(a',c',a',E;F,D')H(a',c',a,c;F)\delta_{aa'}\\
&-2\hat{D}\hat{D'}W(a,c,a,E;D',D)H(a',a',a,c+D')((-)^{a+E}\delta_{ac'}\\
&-2\hat{D}\hat{D'}W(a',c',a',E;D,D')H(a',c',a,a+D)(-)^{a'+E}\delta_{ac'}\\
&+H(a',a',a,a;D)\delta_{DD'}\delta_{cc'}
\end{aligned}$$

後は計算したい状態のスピン、アイソスピンを指定し、可能な全ての状態を取り出して行列要素を計算して、この行列を対角化して固有値とと固有ベクトルを計算すれば良い。今の場合は行列が小さいので、対角化に苦労はないだろう。しかし、対称行列の計算手法に関して簡単な指針を与えておこう。行列の次元が低い時には、Jacobi 法でも固有値は簡単に計算できる。少し次元が大きくなって来ると、先ず最初に Householder 法を使用して、三重対角行列に変換し、その後 QR 法を用いると全ての固有値が計算できる。全ての固有値でなく、低い励起状態に対応する固有値だけが欲しい場合には Strum の方法を使用すると良い。固有値が求まると、固有ベクトルの計算には、逆反復法を用いると収束が早い。

簡単な場合として ^{14}N の 1 $^+$ T=0 、 0 $^+$ T=1 状態を ^{16}O の 2 空孔状態として計算した結果を例示しておこう。この場合 $p_{1/2}, p_{3/2}$ 状態を考慮する。単一粒子状態のエネルギーは $\epsilon_{1/2}$=2.42 MeV, $\epsilon_{3/2}$=1.13 MeV という値をもちいる。$H(j_1,j_2,j_3,j_4;IT)$ の値は、先に引用した Cohen-Kurath の論文で (8-16)POT と呼ばれているものを用いる。単一空孔状態エネルギーへの補正 (H_{21} 項) は、$p_{3/2}, p_{1/2}$ に対してそれぞれ、-23.77 MeV, -8.71 MeV となる。 1 $^+$ 状態に対しては、以下の行列を対角化すれば良い。

$$\begin{matrix} 41.84 & 3.21 & 1.77 \\ 3.21 & 32.37 & 1.20 \\ 1.77 & 1.20 & 28.29 \end{matrix}$$

同様に、 0 $^+$ 状態に対して対角化する行列は、以下の 2 行 2 列の行列である。

$$\begin{matrix} 41.95 & \text{-}5.50 \\ \text{-}5.50 & 32.82 \end{matrix}$$

この結果、以下のような波動関数とエネルギー準位が得られる。

0^+	1	16.29	-0.914		0.406
1^+	0	15.21	0.945	0.298	0.137
1^+	0	3.59	-0.319	0.932	0.173
0^+	1	2.68	0.406		0.914
1^+	0	0.00	-0.076	-0.207	0.975
I^π	T	Ex (MeV)	$(p_{3/2})^2$	$(p_{1/2}p_{3/2})$	$(p_{1/2})^2$

下の二つの励起状態の励起エネルギーは、実験的には 2.31, 3.95 MeV である。

分光因子 (**Spectroscopic Amplitude**) の計算

始状態と終状態の殻模型による波動関数が以下の様に書き下せたと仮定する。簡単な、^{14}N を標的とする非弾性散乱を想定しておこう。

始状態 $|A) = \sum_{a\leq b} S(A;ab)(\alpha,\beta|A)a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta|0)$

終状態 $|B) = \sum_{c\leq d} S(B;cd)(\gamma,\delta|B)a^\dagger_\gamma a^\dagger_\delta|0)$

この様な状態間で、j_1 状態にあった粒子が j_2 状態に励起されるとすると以下の様な行列要素を計算すれば良い。換算行列要素で記すと

$$(B \parallel [c^\dagger_{j_2}c_{j_1}]_j \parallel A) = \sum (-)^{j_1+I_C-I_B-T_B}\hat{j}\hat{A}\hat{B}W(A,j_2,I,j_1;C,j) \times \left[\begin{array}{c} \delta_{Cb}S(A;j_2C)\{S(B;j_1C)^*\delta_{j_1c}\delta_{j_2a}\delta_{C,d} + S(B;Cj_1)^*\delta_{j_1d}\delta_{j_2d}\delta_{Cc}\} \\ +\delta_{Ca}S(A;Cj_2)\{S(B;j_1C)^*\delta_{j_1c}\delta_{j_2b}\delta_{Cd} + +S(B;Cj_1)^*\delta_{j_1d}\delta_{j_2b}\delta_{Cc}\} \end{array}\right]$$

非弾性散乱の演算子は、1 体演算子でありこれを挟む状態には 2 粒子が含まれているから、始状態では a 又は b は状態 1 に等しくなければならず、等しくなかった方は反応に関与しないので終状態の内の c 又は d 状態に等しくなければならない。同様の事情は終状態と状態 2 の間にもある。反応に関与しない状態を C (core) という記号で書いてある。傍観者 (spectator) と呼ばれることが多い。最後に、^{14}N の第 1 励起状態 (Ex=2.68 MeV) を励起する場合のこの行列要素の値を表にしておこう。

j_1	j_2	$(1\text{st} \parallel [c^\dagger_{j_2}c_{j_1}]_{j=1} \parallel \text{gnd})$
$p_{1/2}$	$p_{1/2}$	2.673
$p_{1/2}$	$p_{3/2}$	-0.401
$p_{3/2}$	$p_{1/2}$	-0.126
$p_{3/2}$	$p_{3/2}$	-0.065

^{13}**N(d,p)**^{14}**N** 反応の分光因子

(d,p) 反応は粒子 1 個を標的核にくっつける反応だから、$c^\dagger_j$ の行列要素を計算すればよい。出発点とする波動関数は以下の様に書かれているとする。

標的核 ^{13}N : $\quad |A) = \sum S(A;ab(D),c)(\alpha,\beta|D)(D,\gamma|A)a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a^\dagger_\gamma|0)$

残留核 ^{14}N : $\quad |B) = \sum_H S(B;de)(\delta,\epsilon|B)a^\dagger_\delta a^\dagger_\epsilon|0)$

結果だけ書くと

$$(B\,\|c_j^\dagger\,\|A) = 2\ \hat{A}S(A;aa(D)c)S^*(B;de)$$
$$\sum\Big\{\ (-)^{A+j-B}\,\delta_{cj}\delta_{BD}\delta_{ad}\delta_{ae}$$
$$+\hat{j}\hat{B}W(j,j,A,c;D,B)\delta_{aj}\{\delta_{ad}\delta_{ce}+(-)^{j_a+j_c-I_B-T_B}\delta_{ae}\delta_{cd}\}\ \Big\}$$

基底状態間遷移に対する値は以下の通りとなる。

j		$p_{1/2}$	$p_{3/2}$
$(^{14}\mathrm{N(gs)}\|$	$c_j^\dagger$	$\|^{13}\mathrm{N(gs)})$	2.0299	-0.1547

ここで取り上げた場合は、殻模型がかなり良く成り立っている場合であって、特定の状態への係数が際だって大きいことが、数値計算の結果分かる。

和則

反応強度は、入射エネルギーや反応の原因となる相互作用の強さにも当然依存する。このような原因を取り除くことが出来たとすると、ここで計算した分光因子の 2 乗が反応強度に比例した因子として残る。

この分光因子に付いては、次のような保存則がある。(d、p) 反応の終状態に付いて和をとってみる。

$$\sum_B |(B\,|c_{jm}^\dagger|A)|^2 = (A\,|c_{jm}c_{jm}^\dagger|A) = (A\,|(1-n_{jm})\,|A)$$

ここで、n_{jm} は状態 (jm) に対する粒子数演算子である。(d、p) 反応により初期状態から終状態へ移される角運動量の磁気量子数は通常は測定されないから、これに付いての和も取っておこう。その結果、

$$\sum_{B,j_z(=m)} |(B|c_{jm}^\dagger\,|A)\,|^2 = (2j+1) - (A|\sum_m n_{jm}|\,A)$$

単一粒子状態 j は最大 (2 j + 1) 個の粒子がつまり得る。そして、(A | $\sum_m n_{jm}$| A) は基底状態 A に詰まっている j 状態の粒子数を与える。

即ち、この関係式を言葉で言うと、j を固定して全ての終状態に対して取った散乱強度の和は、標的核の基底状態は、単一粒子状態がどの程度空いているかという割合に比例する。

直観的に言って、(d、p) 反応は中性子をくっつけるから、単一粒子状態 j を指定して考えると、状態 j が空いていないと反応は起こらない。空き状態が多ければ、その状態に入る確率も高くなるという非常に単純な結論である。

ここでは、中性子をくっつける (d、p) 反応を例に取った。逆に中性子を取ってくる (p、d) 反応を取り上げると、標的核の基底状態には、単一粒子状態 j がどの程度詰まっているかという情報を引き出すことが出来る。

即ち、1 核子移行反応は、直接過程であると仮定するならば、標的核に単一粒子状態がどの程度含まれているかという波動関数の情報をもたらす。

spectroscopic amplitude は散乱振幅の比例係数として、位置つけられている。実用的な意味を与える手段の一つとして、DWBA 法とその類の計算手法プログラムが使用される。即ち、この手法では spectroscopic amplitude を 1 だと仮定したときの微分断面積その他の観測可能量を、有る種のパラメータの関数として、予言してくれる。この計算値と、実験値を比較すれば良いわけである。

この種の議論には、j は最初から与えられていたが、この j を如何に決めるかという問題にも答えておかねばならない。先ず、最初の方の議論に有ったように、微分断面積の散乱角依存性は、標的核に持ち込まれた軌道角運動量 ℓ に大きく依存する。端的には、最初に微分断面積が最大になる散乱角度を測定すれば良い。これで ℓ が分かる。放出粒子が識別出来ていれば、その粒子の固有スピン s も非常に多くの場合分かっている。移行角運動量 j は、ここで登場した ℓ と s とのベクトル和だからかなり可能性は制限されるが、一般にはこれだけでは断定的には決定できない。勿論、α 粒子の様にスピンが 0 ならば ℓ を決めただけでお仕舞いである。j を決めるためにはもう一つ独立な測定量が必要である。原子核反応の観点からは、この物理量として偏極量を挙げる事が出来る。例えば、ビームの進行方向に垂直な方向に偏極した偏極重陽子を用いた (d、p) 反応ので放出される陽子の断面積は、$j = \ell - 1/2$ と $j = \ell + 1/2$ の可能な場合で、左右に放出される割合が異なり、前方では右が多いか左が多いかという事を測定すれば、両可能性のどちらかが確実に判断出来る。

S 行列

光学ポテンシャルの下での部分波展開における動径方向の波動関数漸近形は、Glendenning の教科書 (G 4.15) 式では、以下の様に書いてあった。

$$f_\ell(k_\alpha, r_\alpha) \to F_\ell + T_\ell(G_\ell + i\, F_\ell)$$

この式は、短距離力に起因する、クーロン力の補正として右辺第 2 項を追加するという物理的な意味付けがはっきりする書き方になっているが、定在波と進行波を混ぜ合わせて書いているという意味では、不思議な構造の式である。そこで、右辺を進行波のみを用いて書いてみよう。

$$I_\ell = G_\ell - i\, F_\ell, \quad O_\ell = G_\ell + i\, F_\ell$$

をそれぞれ内向きと外向きの進行波とするから、

$$F_\ell + T_\ell(G_\ell + i\, F_\ell) = \frac{-1}{2i}(I_\ell - S_\ell\, O_\ell)$$

と変形できる。但し、

$$S_\ell = 1 + 2\, i\, T_\ell = 1 + 2\, i\, e^{i\delta_\ell} \sin\delta_\ell = e^{2\, i\delta_\ell}$$

であり、S 行列 (要素) と呼ばれる。内向き波と外向き波が対等に併記されていて、内向き波の振幅に対し外向き波の振幅と位相がどのように変化したかという事が分かり易い表現となっている。

波の吸収

複素ポテンシャルを $V + i\, W$ と書いた時のシュレーディンガー方程式を書いてみよう。

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V + i\, W)\psi = E\psi$$

この方程式の複素共役な方程式は

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V - i\, W)\psi^* = E\psi^*$$

上の式に ψ^*、下の式に ψ を掛けて引き算をすると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*) + 2\, i\psi^*\, W\, \psi = 0$$

更に原点を中心とする大きな球面の内部で体積分する。その結果、

$$\int \vec{i} \cdot d\vec{S} = \frac{2}{\hbar} < W >$$

という関係式を得る。左辺はグリーンの定理を用いて変形してあり、球面を通過して流れ出す流束であり、右辺は虚部ポテンシャルの期待値に比例している。

次に左辺を少し具体的に評価してみよう。例えば、(G 4.7) の真中の式に上で書き下した f_ℓ の漸近形を代入する。内向き波と外向き波は無限遠方では干渉しないと仮定して流束の動径成分を個別に計算する。

$$i_{in} = -\frac{\pi\hbar}{m\,k}\sum_\ell (2\,\ell+1), \quad i_{out} = +\frac{\pi\hbar}{m\,k}\sum_\ell (2\,\ell+1)|S_\ell|^2$$

全体を平面波の流束 $v(=\hbar\,k/m)$ で割ると、

$$\frac{\pi}{k^2}\sum(2\,\ell\,+1)(1-|S_\ell|^2) = -\frac{2}{\hbar v} < W >$$

という関係式が得られる。左辺は、流入した流速と流れ出した流速の差というイメージであるから、全反応断面積 σ_R である。即ち、全反応断面積は 虚部ポテンシャルの期待値に比例するという常識的な結論が得られた。$1-|S_\ell|^2$ は部分波吸収確率という意味がある。

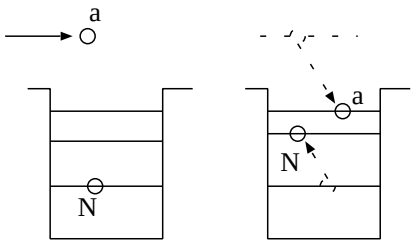
ここでは、入射粒子のスピンを無視して全反応断面積の式を書いたが、スピンが s だとすると、左辺は次の様に変更される。

$$\sigma_R = \frac{\pi}{k^2\,(2\,s\,+1)}\sum_{\ell,j}(2\,j\,+1)(1-|S_{\ell,j}|^2)$$

全反応断面積はほぼ標的の幾何学的な大きさを表現すると考えられる。

複合核形成過程と **Hauser-Feshbach** の式

複合核のイメージは以下のようなものであった。入射粒子 a が原子核に入って来たとする。このとき、入射粒子 a は、核内核子 N と相互作用し図の様に、a のエネルギーが下がり、N のエネルギーがあがる。



この結果、a も N も束縛状態に入ってしまう。全系のエネルギーとしては 入射粒子 a を放出しても良いのだが、上の右の図の様な状態になると実質的に粒子放出は禁止されてしまう。この後で、a や N は独自に近くの核内核子と相互作用して自分が持っているエネルギーをエネルギー的に下にある核子に与えると、粒子 a が放出される確率はどんどん小さくなるだろう。粒子 a が持ち込んだエネルギー、角運動量、パリティー等は保存されるし、寿命が非常に長くなるのであたかも束縛状態の様に見える。そのような訳で、この状態は、散乱状態に埋め込まれた束縛状態と呼ばれる。

後から使うから次の事実を指摘しておこう。持ち込む角運動量の大きさは個別の標的原子核毎に異なっていても構わないが、軌道角運動量の量子化軸 (ビームの進行方向) 成分 (L_z) はいつも 0 である。

この様な過程を経て作られた複合核は、原理的には束縛状態では無いのだからそのうちには、何らかの粒子を放出して安定状態に落ち着く。この時に放出される粒子は、エネルギー的に許されるならばどんな粒子でも原理的には放出可能だろう。一般的な傾向としては、中性子が放出される確率が他の粒子が放出される確率よりも大きい。

複合核が形成されてから粒子放出過程が起こるまでに、少し極端な仮定として、複合核は自分が作られた時の記憶は全て失うとする。数式の変形と言う形式的な形としては、干渉項を無視するという事である。

入射粒子 a と標的核 A のスピンを s_a、標的核のスピンを I_A とする。入射粒子のスピン・軌道力を無視するわけにはいかないが、簡単に話を進めるために、標的核のスピンに依存する力は働かないと仮定する。

スピン表示での散乱状態波動関数は以下の通りとする。

$$\begin{aligned}\chi^{(+)}_{ma',ma}(\mathbf{k}_a,\mathbf{r}) = \quad & \frac{4\pi}{k_a r}\sum_{j,\ell,m_\ell} i^\ell \exp(i\sigma_\ell)\frac{i}{2}\{I_\ell - S_{\ell,j}\,O_\ell\} \\ & \times(\ell,m_\ell,s_a,m_a|j,m)(\ell,m'_\ell,s_a,m'_a|j,m)\,Y^*_{\ell,m_\ell}(\hat{\mathbf{k}_a})\,Y_{\ell,m'_\ell}(\hat{\mathbf{r}})\end{aligned}$$

式の意味は、多分分かるだろうが、 I_ℓ, O_ℓ は内向きと外向きのクーロン波動関数である。$S_{\ell,j}$ は S 行列の行列要素であり、振幅 1 の入射波に対する散乱波の振幅と位相を与えている。

内向き波と外向き波との部分は、以下の様に書かれる事も多い。

$$\frac{i}{2}\{I_\ell - S_{\ell,j}O_\ell\} = F_\ell + C_{\ell,j}O_\ell$$

このとき、F_ℓ の部分が純粋なクーロン散乱に対応する事も覚えているだろう。

この式では、入射粒子の進行方向をベクトル $\mathbf{k}_a$ としているので、最初の、Clebsch-Gordan 係数の引数に特別の値が入っているわけではない。スピン・軌道相互作用があると、入射波の軌道とスピン角運動量の量子化軸成分と散乱波の量子化軸成分とは同じ値ではない。全角運動量の保存則があるから、二つの Clebsch-Gordan 係数の j m の値は共通である。

入射粒子の進行方向を z 軸と取ると、

$$Y^*_{\ell,m}(\hat{\mathbf{k}_a}) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\delta_{m,0}$$

これから、複合核形成過程の断面積の計算を開始するが、繁雑になるので、当面 a という下付き文字を省略する。さて、入射波と散乱波の流れの密度を原点を中心とする半径の非常に大きな球面上で積分して、単位時間当たりの流量を計算しよう。大きな r に対して

以下の近似が成立する。

$$I \to \exp(-ikr + \cdots), \quad O \to \exp(ikr + \cdots)$$

流れの密度を計算するとき、動径部分や角度部分の微分が登場するが、上に記した位相部分以外の微分をすると、$O(r^{-3})$ となるのに、位相部分の微分は $O(r^{-2})$ であるから、大きな r に対してここだけが残る。又、複合核形成過程を考慮するのだから、ひとまず出口チャネルの効果は無視する。そのために、放出粒子のスピンの量子化軸成分に対して和をとる。この結果、外向き (I_{out}) の流量は、

$$I_{out} = v\frac{\pi}{k^2}\sum_{\ell,j}(2\ell+1)(\ell,0,s,m_s|jm_s)^2|S_{\ell,j}|^2$$

となり、内向き流量は上の式で全体に負号をつけ、$|S_{\ell,j}|^2$ の部分を 1 とすればよい。ここで、$v = \hbar k/\mu$ は、a と A との重心系での相対速度である。単位時間、単位体積当たりの流量という換算をするには、この式を v で割れば良い。入射波と放出波の流量は、無限大の球面上で積分したのだから、発散する。しかし、その差は発散しない。全反応断面積と言う意味を持つ。

$$\sigma^{m_s}_{\ell,j} = \frac{\pi}{k^2}(2\ell+1)(\ell,0,s,m_s|j,m_s)^2 T_{\ell,j}, \quad \sigma^{m_s} = \sum_{\ell,j}\sigma^{m_s}_{\ell,j}$$

ここで、$T_{\ell,j} \equiv 1 - |S_{\ell,j}|^2$ を定義し、部分波吸収 (透過) 係数と呼ぶ。入射粒子がポテンシャル障壁を透過して原子核内に入るというイメージを伝える。入射粒子が偏極していないならば、m_s に付いて平均する。そのときには、

$$\sigma^{abs} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{\ell,j}\frac{2j+1}{2s+1}T_{\ell,j}$$

この式が、通常の全反応断面積の式として引用される事が多い。

標的核のスピンをここで考慮する。標的核のスピンが 0 ならば、上の計算では (j, m_s) というスピンの複合核が作られるのだが、これに標的核のスピン (I_A, M_A) が結合して、スピンが (J, M_J)、パリティーが (Π_J) という複合核が形成されるとする。この断面積は

$$\sigma_{J,M_J,\Pi_J} = \sum_{m_s,M_A,\ell,j}\frac{1}{(2s+1)(2I_A+1)}\Delta(\ell,\alpha,\Pi_J)\,\sigma^{m_s}_{\ell,j}\,(j,m_s,I_A,M_A|J,M_J)^2$$

但しここで、$\Delta(\ell,\alpha,\Pi_J)$ はパリティーの保存則を満たすための記号である。相対運動によるパリティー $(-)^\ell$、入射チャネルの粒子の固有パリティーの積 $\alpha = (\Pi_a \times \Pi_A)$ 及び複合核のパリティー Π_J がパリティー保存則を満足するときには 1、そうでなければ 0 という値をとる。ここで、入射チャネルのスピン方向で、平均をとっておいた。

次に、以下の関係を使い、少し式の変形を行う。

$$(a,\alpha,b,\beta|c,\gamma)^2 = (-)^{b+\beta}(2c+1)\sum_{\lambda}(a,\alpha,a,-\alpha|\lambda,0)(c,-\gamma,c,\gamma|\lambda,0)W(a,c,a,c;b,\lambda)$$

$$Z(\ell_1,j_1,\ell_2,j_2;s,L) \equiv \sqrt{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)(2j_1+1)(2j_2+1)} \times (\ell_1,0,\ell_2,0|L,0)\,W(\ell_1,j_1,\ell_2,j_2;s,L)$$

これにより、以下の様な変形が可能である。

$$\sigma^{m_s} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{\ell,j}(-)^{s+m_s}\sum_{L}(j,-m_s,j,m_s|L,0)Z(\ell,j,\ell,j;s,L)T_{\ell,j}$$

$$\sigma_{J,M_J,\Pi_J} = \sum\Delta(\ell,\alpha,\Pi_J)\sigma_{\ell,j}(-)^{I_A+M_A}\frac{(2J+1)}{(2s+1)(2I_A+1)} \times\textstyle\sum_{L'}(j,m_s,j,-m_s|L',0)(J,-M_J,J,M_J|L',0)W(j,J,j,J;I_A,L')$$

更に、$M_J = m_s + M_A$ の和を固定して、m_s, M_A について和をとると

$$\sigma_{J,M_J,\Pi_J} = \frac{\pi}{(2s+1)(2I_A+1)\,k^2}\sum(-)^{s+I_A+2j-L+M_J}(J,-M_J,J,M_J|L,0)\tau(\alpha)$$

ここで、$\tau(\alpha)$ は次式で定義され、α チャネルから複合核が形成される (崩壊する) 相対確率を表す。

$$\tau(x) = \sum_{\ell,j}\Delta(\ell,x,\Pi_J)(2J+1)\,Z(\ell,j,\ell,j;s,L)\,W(j,J,j,J;I,L)T_{\ell,j}$$

この式の右辺の物理量には、左辺の x で指定されるチャネルの下付き記号が付く。

こうして作られた複合核 (J、M_J,Π_J) は b + B (スピン s_b, I_B) へ崩壊すると仮定する。これからは下付き足で、a、b、A、B 等を識別する。

複合核が崩壊する相対確率は上で求めた断面積に対して崩壊確率を掛ければ良い。当面は相対確率として、次式を取る。(あとで規格化する)

$$w \equiv \sum_{m_{s_b},M_B,m_{\ell_b},\ell_b,j_b}(\ell_b,m_{\ell_b},s_b,m_{s_b}|j_b,m_b)^2(j_b,m_b,I_B,M_B|J,M_J)^2|Y_{\ell_b,m_{\ell_b}}(\theta_b,\phi_b)|^2T_{\ell_b,j_b}$$

この因子も $\tau(\beta)$ という形に書ける事を以下の様にして示す。

$$Y_{\ell,m_{\ell_b}}(\theta,\phi)^*Y_{\ell,m_{\ell_b}}(\theta,\phi) = \textstyle\sum_{L_b}(-)^{m_{\ell_b}}\dfrac{2\ell_b+1}{4\pi}(\ell_b,0,\ell_b,0|L_b,0)(\ell_b,m_{\ell_b},\ell,-m_{\ell_b}|L_b,0)P_{L_b}(\cos(\theta))$$

次に、$(\ell_b,m_{\ell_b},s_b,m_{s_b}|j_b,m_b)^2$ を掛けて、$m_{\ell_b}+m_{s_b}=m_b$ を固定して、m_{ℓ_b}, m_{s_b} で和をとると、

$$\textstyle\sum_{m_{\ell_b}}(\ell_b,m_{\ell_b},s_b,m_{s_b}|j_b,m_b)^2|Y_{\ell_b,m_{\ell_b}}(\theta_b,\phi_b)|^2 = \dfrac{(-)^{s_b+m_b}}{4\pi}\sum_{L_b}(j_b,-m_b,j_b,m_b|L_b,0)Z(\ell_b,j_b,\ell_b,j_b;s_b,L_b)P_{L_b}(\cos(\theta))$$

更に、$(j_b, m_b, I_B, M_B|J, M_J)^2$ を掛け、$m_b + M_B = M_J$ を固定して m_b, M_B で和をとると、

$$w = \frac{1}{4\pi}(-)^{s_b+I_B+2j_b-L_b+M_J}(J, -M_J, J, M_J|L_b, 0)\tau(\beta)P_{L_b}(\cos(\theta))$$

これで、$\tau(x)$ という因子が入口と出口に共通に表れるから、先に述べた相対確率という意味が納得できるだろう。この w を σ_{J,M_J,Π_J} に掛けると、a+A というチャネルを経由して作られた複合格 (J, M_J, Π_J) が b + B チャネルに崩壊するという相対確率と角分布が評価できる。先ず、積の位相の部分を処理しておこう。

$$\text{位相} = (-)^{s_a+I_A+2j_a-L_a+M_J+s_b+I_B+2j_b-L_b+M_J} = (-)^{I_A-s_a-I_B+s_b-L_a+L_b}$$

ここで、$s + I + M_J$ と $s + j$ は整数であることを使った。これで、複合核のスピン方向 (M_J) について和をとる準備が出来た。和をとると、最後まで残った Clebsch-Gordan 係数が消えて、δ_{L_a,L_b} が登場する。ここまでで、

$$\sum_{M_J}\sigma(J, M_J, \Pi_j) \propto \frac{(-)^{I_A-s_a-I_B+s_b}}{4(2s_a+1)(2I_A+1)\,k_a^2}\sum_L \tau(\alpha)\tau(\beta)P_L(\cos\theta_b)$$

可能な全ての放出チャネルに対する τ 係数で割れば比例係数の必要は無い。最後になすべき事は、可能な全ての J, Π_J について和を取ることである。従って、

$$\sigma^c(\alpha \to \beta) = \frac{(-)^{I_A-s_a-I_B+s_b}}{4(2s_a+1)(2I_A+1)\,k_a^2}\sum_{J,\Pi_J,L}\tau(\alpha)\frac{\tau(\beta)}{\sum_\gamma \tau(\gamma)}P_L(\cos\theta_b)$$

この式のγ に付いての和は、外側に有る和の指数、J, Π_J, L と矛盾しない範囲でとる。

式の導出を振り返ってみると、角運動量の結合法則はきちんと取り入れるが、異なる部分からの干渉効果は完全に無視している。この結果、上の公式に登場する L は偶数のみである。形式的には、Z 係数の中にパリティー Clebsch-Gordan 係数が登場している事からの結論である。別の言葉で言うと、入射粒子の運動量が z 軸方向を向いているので、この運動量と位置座標のベクトル積できまる入射粒子の軌道角運動量は必ず z 軸に直交している。m_{s_a}, M_A に付いては平均化されているので、これらも 0 と考えて良い。全系の角運動量の z 成分が 0 であるという保存則が、反応の前後を通じて成立している。従ってこの系は z 軸に垂直な面 (x-y 面) に関して対称になる。

実際に、放出粒子の角分布が９０度対称性をもつかどうかと言うことが、複合核形成過程を経由しているかどうかの判断材料として使用される。例外的な場合として、s 波だけが反応に寄与していれば、この判断基準は使用できない。

偏極現象

スピンという自由度

ここで言う偏極現象と言うのは、スピンに依存した現象を指す。スピンという概念は、原子スペクトルにおける微細構造を説明するために導入された自由度である。スピンに関して、朝永振一朗著 " スピンはめぐる" を参照して、いくらか話題を拾ってみよう。

電子スピンは、Uhlenbeck, Goudsmit により１９２５年に提案され、Dirac 方程式によりその存在が理論的に裏つけられたのが１９２８年。

陽子がスピン１／２を持つ事は、堀健夫が測定した H_2 分子の発光スペクトルの強度比を、Dennison が解析して、１９２７年に発見した。その後、１９３２年に中性子が発見されると、原子核は陽子と中性子の束縛状態である事に Heisenberg がすぐに気付いた。同じ年に、陽子と中性子の束縛状態である重陽子も発見された。重陽子の光分解反応により、Chadwick,Goldhaber が、中性子の質量を測定したのが１９３４年。同年に重陽子のスピンが 1 である事が、Murphy と Johnston により調べられた。ここで中性子が、Rutherford が存在を予想していた陽子と電子の強固な束縛状態である可能性を否定された。陽子の磁気能率が測定されたのは、１９３３年の Stern と Estermann の実験による。この実験で、陽子は Dirac 粒子である可能性が否定された。１９３４年に Rabi 達は陽子と重陽子の磁気能率を測定し、これから中性子の磁気能率を負であると推定した。電荷を持たないのに、大きな磁気能率を有するという不思議な結論が導かれた。

このような経過の後、電子や核子には第４の自由度があり、その自由度は量子力学的には、$\hbar$ ／２ という大きさの角運動量であることが認識された。

スピンに依存する相互作用

Fermi 粒子、Bose 粒子という区別と、統計性や波動関数の対称性は１９２０年代には認識されていた。ここでは、Pauli 原理以外のスピンに依存する原子核現象を問題にする。Pauli 原理に起因する現象としては、クーロン力しか働いていないと考えられる体系で、ある場合にスピンが大きい方がエネルギー的に安定であるという Hund の規則がある。

1. 陽子、中性子、重陽子のスピンを見ると、角運動量の合成則から重陽子のスピンは０と１が可能だのに縮退は無いという事実である。分離した０の状態は何処へいったのか？０エネルギーに外挿された時、陽子と中性子の弾性散乱全断面積が重陽子の束縛エネルギーから推定される値より異常に大きいという事実から、両者は約３ MeV 隔たっている事が分かった。^{3}S 状態と ^{1}S 状態で、p+n 反応の断面積が大きく異なると言われたのは１９３５年である (Wigner)。

2. 重陽子の電気的４重極能率が０でない事を示したのは、１９５０年の Kolsky 達の仕事である。このことは、重陽子の基底状態における、テンソル力による S,D 状態の混合を意味する。

3. 原子核の束縛エネルギーや磁気能率等のデータから magic number が提案された。２８ 以上の magic number を説明するためには、スピン・軌道力が必要であるとい

う事が認識されたのは、１９４９年らしい。(G. Mayer が詳細な論文を書いたのは翌年) p + ^{4}He の２回散乱実験で ^{5}Li の $p_{3/2}$、$p_{1/2}$ 共鳴準位の順番が確定したのは１９５２年の事である。(Heusinkveld and Freier)

4. ３００ MeV 程度迄の陽子・陽子弾性散乱の位相のずれが確定してくると、^3P_J (J=0,1,2) の位相のずれのエネルギー依存性から、中心力とテンソル力以外にどうしてもスピン・軌道力の存在が要請された。

他にも数え挙げる事は可能だろうが、これらの事実を踏まえて原子核内でのスピン依存力の存在は確認されていった。核子スピンの存在と、強いスピン・軌道力とは、偏極実験の応用へと導いていった。

初期の偏極実験では、偏極イオン源が利用できなかったので、２回散乱に依る偏極の測定が主であったが、偏極イオン源が利用できる様になると偏極分析能 (分解能と呼ばれる事の方が多いが、やっていることは分解ではなく分析である) の実験が主になった。

偏極の記述

物理量は、結局のところ、ある演算子の行列要素を書き下したものであるので、演算子や行列要素を計算すべき基底に依存する部分がある。偏極の記述に際しサイクロトロン系の加速器を使用するグループはデカルト座標を使用し、直線加速器系のグループは球テンソルを使用する傾向にある。ベクトル偏極を取り扱う程度ならばデカルト座標系が直観的に理解がしやすいが、テンソル偏極にまで視野を広げると統一的な球テンソルの取り扱いがすっきりする。ここでは、球テンソルの取り扱いを使用する。

偏極とは、相互に位相関係の無い粒子群に対して、スピン演算子の行列要素を論ずる事である。問題を以下の二つに分ける。

1) 位相関係が無い集合体に対する量子力学的な取り扱い。

2) 個々の粒子のスピン演算子からつくられる複合演算子の定義。

最初の問題に対する処方として、密度行列を取り上げる。次の例から始めよう。複数の中性子が有り、個々の粒子のスピン波動関数は $\psi_i = a_i\,\alpha + b_i\,\beta$ と与えられる。$\alpha,\ \beta$ は s_z の期待値が $\pm 1/2$ の固有状態であり、個々の波動関数は $|a_i|^2 + |b_i|^2 = 1$ と規格化されている。全系の波動関数を $\psi = \sum_i \psi_i$ だとすると、以下の関係式が成立する。

$$< s_z >=< \sum_j s_z^j >= \sum_j |a_j|^2 - |b_j|^2,\ \ < s_+ >=< \sum_j s_x^j + i s_y^j >= \sum_j a_j^* b_j,\ \ < s_- >= \sum_j b_j^* a_j$$

粒子系の記述には波動関数の展開係数の絶対値以外の組合せも登場する。

ある混合状態は、量子数 α で記述される状態を含む確率を p_α とする。当然、$\sum_\alpha p_\alpha = 1$ である。この混合状態を想定して、ある演算子 Ω の期待値を計算する。

$$< \Omega >= \sum_\alpha p_\alpha < \alpha|\Omega|\alpha >$$

任意に設定できる規格直交系 $|i>$ を持って来て $|\alpha>$ を展開しよう。

$$|\alpha>=\sum_i |i><i|\alpha>$$

新しい基底を用いて、$<\Omega>$ を書き直すと、

$$<\Omega>=\sum_{\alpha,i,j} p_\alpha <\alpha|j><j|\Omega|i><i|\alpha>=\sum_{i,j} <j|\Omega|i><i|\rho|j>$$

ここで、以下の密度行列 ρ が定義された。

$$<i|\rho|j>\equiv\sum_\alpha <i|\alpha> p_\alpha <\alpha|j>, \quad 又は\rho\equiv\sum_\alpha |\alpha> p_\alpha <\alpha|$$

周りくどい変形をしているようだが、完全系 $|i>$ は既知だとすると $<j|\Omega|i>$ は完全に定義された量であり、混合状態を記述する量 $<i|\rho|j>$ との積和に分離したことになる。この分離に依り、演算子の性質を混合状態とは独立に議論出来る。

例： スピンが $1/2$ のある純粋状態を $|\alpha>=\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ と書く。上の成分が $s_z=1/2$、下の成分が $s_z=-1/2$ 状態を表す。スピンの向きが、量子化軸 (z 軸) と平行でなければ、純粋状態といえども複数の成分を有する。但し、純粋状態では混じり合う時の大きさ以外に位相まで決っている。この状態α の射影演算子は $\mathrm{P}_\alpha=|\alpha><\alpha|$ だから行列で書くと、

$$P_\alpha=\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}(a^*\ b^*)=\begin{pmatrix} aa^* & a\,b^* \\ b\,a^* & bb^* \end{pmatrix}$$

この 2 行 2 列の行列を、単位行列 $\mathbf{1}$ と Pauli 行列 σ で展開する。

$$P_\alpha=a_0\mathbf{1}+\mathbf{a}\cdot\sigma=\begin{pmatrix} a_0+a_z & a_x-ia_y \\ a_x+ia_y & a_0-a_z \end{pmatrix}$$

この両者を比較すると、

$$a_0=(|a|^2+|b|^2)/2=1/2,\ a_x=(ab^*+ba^*)/2,\ a_y=i(ab^*-ba^*)/2,\ a_z=(|a|^2-|b|^2)/2$$

ここで登場した $a_x,\ a_y$ は $<s_->, <s_+>$ にも組合せを変えて登場している事に注意。

状態α はベクトル $\mathbf{a}$ でも表現出来る事がこれで分かる。先には、二つの複素数 a,b (4 個の実数) で表現したが規格化条件があるので 3 個の実数だけが独立だから 3 個の実数をベクトルで表現出来るならば、独立量に関する限りは矛盾は無い。状態 $|\alpha>$ とは直交する状態 $|\beta>$ があり、こちらはベクトル $\mathbf{b}$ で記述出来るとする。状態 $|\alpha>$ と $|\beta>$ とが確率 $\mathrm{p}_\alpha,\ \mathrm{p}_\beta$ で混じり合っている状態の密度行列は以下の様に与えられる。

$$\rho=\{1/2\mathbf{1}+\mathbf{a}\cdot\sigma\}p_\alpha+\{1/2\mathbf{1}+\mathbf{b}\cdot\sigma\}p_\beta=\frac{1}{2}\mathbf{1}+(p_\alpha\mathbf{a}+p_\beta\mathbf{b}\cdot\sigma)=\frac{1}{2}\mathbf{1}+\mathbf{c}\cdot\sigma$$

ここで、$p_\alpha + p_\beta = 1$ を使った。当然 $p_\alpha\mathbf{a}+p_\beta\mathbf{b}=\mathbf{c}$ である。
このようにして、スピンが 1 / 2 の混合状態はベクトル $\mathbf{c}$ で記述できることが示された。
問 直観的に言って、上の例で直交する状態とはスピンが逆向きの状態でなけらばならない。$\mathbf{b}=\mathbf{-a}$ であることを示せ。

密度行列は以下の性質を有することが示せる。

1) ρ は Hermit である。

2) $\mathrm{Tr}(\rho)=1$ 。

3) $\mathrm{Tr}(\rho^2)\leq 1$

4) 演算子 Ω の期待値は $\mathrm{Tr}(\Omega\rho)=\mathrm{Tr}(\rho\Omega)$ で与えられる。

5) 系の Hamiltonian H が与えられている時、ρ の時間変化は次式で与えられる。

$$i\hbar\frac{d\rho}{dt} = [H,\, \rho]$$

注意： 演算子 Ω に対する Heisenberg の運動方程式は

$$-i\hbar\frac{d\Omega}{dt} = [H,\, \Omega]$$

であるから符号が異なる。

次に、演算子の定義に進む。スピンが 1 / 2 の系の密度行列は $\rho =(\mathbf{1}+\mathbf{p}\cdot\sigma)$ で与えられる事が分かった。従ってスピンが 1 / 2 の混合状態はベクトル $\mathbf{p}$ で記述出来る。先に独立量が 3 個という事情があったからこのような事が可能である事も説明した。スピンが 1 以上だと 2 行 2 列の行列で密度行列が表現出来ないので、事情は複雑になる。偏極実験では、座標系の回転をしばしばすることになるので、一般論としては球テンソルを使用するのが間違いが少ないと思われる。以下では頭ごなしの定義から始める。
以下の行列要素を与える演算子 τ_{kq} を定義する。

$$(s, m_a|\tau_{kq}|s, m_b) \equiv \sqrt{2k+1}(s, m_b, k, q|s, m_a) \quad 0 \leq k \leq 2s$$

これは、次の換算行列要素で演算子を定義するのと同等である。

$$(s\|\tau_k\|s) = \sqrt{(2s+1)(2k+1)}$$

$\tau_{k,q}$ は、Wigner-Eckert の定理を満足するから、k 次の球テンソル演算子である。τ_{kq} の期待値を $t_{k,q}$ と記す。全ての t_{kq} を与える事は、密度行列を与えることと等価である事が、以下の様にして示される。

$$t_{kq} = Tr(\rho\tau_{kq}) = \sum_{m,m'} \rho_{m,m'}(\tau_{k,q_{m',m}})$$
$$= \sum \sqrt{2k+1}(s,m,k,q|s,m')\rho_{m,m'} = \sqrt{2s+1}\sum(-)^{s-m}(s,m,s,-m'|k,-q)\rho_{m',m}$$

逆に解くと、

$$\rho_{m,m'} = \frac{1}{\sqrt{2s+1}}\sum_{k,q}(-)^{s-m}(s,m,s,-m'|k,-q)t_{kq}$$
$$= \frac{1}{2s+1}\sum_{k,q}(t_{kq}(-)^q\tau_{k,-q})_{m,m'}$$
$$= \frac{1}{2s+1}\sum_{k,q}(t_{kq}\tau^{\dagger}_{kq})_{m,m'}$$

即ち、記号的には

$$\rho = \frac{1}{2s+1}\sum_{k,q} t_{k,q}\tau^{\dagger}_{k,q}$$

この式は、(2 s + 1) 行 (2 s + 1) 列の密度行列を演算子 $\tau_{k,q}$ で展開した時の展開係数が、$t_{k,q}/(2s+1)$ で有ることを述べている。別の言い方ををすれば、密度行列のうち、角運動量 (k、q) と同じ変換性を有する部分がどの程度有るかを示すのが $t_{k,q}$ である。

$\tau_{k,q}$ の作り方
スピン演算子 s を用いて k 階のテンソル $s_{k,q}$ を作ったとすると、

$$\tau_{k,q} = \sqrt{(2s+1)(2k+1)}s_{k,q}/(s\|s_k\|s)$$

Wigner-Eckart の定理より、$\tau_{k,q}$ と $s_{k,q}$ は比例し、比例係数の比は、換算行列要素の比になるからである。即ち、スピン演算子を用いて高階のテンソルを作り、適当に規格化したのが τ_{kq} である。
s= 1 / 2 の場合の $\tau_{k,q}$ は、

$$s_{\pm1} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(s_x \pm is_y), \quad s_0 = s_z$$

というデカルト座標と球表現の関係を知っていると簡単だから、s = 1 の場合を例示しておこう。

$$\tau_{0,0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \tau_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \tau_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\tau_{2,2} = \sqrt{3}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \tau_{2,1} = -\sqrt{\frac{3}{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \tau_{2,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

密度行列と座標回転

ある座標系 C をオイラー角 (α, β, γ) だけ回転した座標系を C' とする。二つの座標系を区別するために suffix C、C' をつける。D 関数の定義より両座標系での角運動量 j の波動関数には以下の関係がある。

$$|j, m' >_{c'} = \sum_m |j, m >_c D^j_{m,m'}(\alpha, \beta, \gamma)$$

従って、両座標系での密度行列の行列要素の間には、以下の関係がある。

$$(\rho_{j',i'})_{c'} = \sum_{i,j} D^*_{j,j'} < j| \sum_\alpha > p_\alpha < \alpha|i > D_{i,i'} = (D^\dagger \rho_{c'} D)_{j',i'}$$

真中の式の D で挟まれた部分は、回転する前の系の密度行列の行列要素である。この式は、形式的には以下の事を意味する。

$$\rho_{c'} = D^\dagger \rho_c D$$

注意： D 関数は行ベクトルに作用しているので、量子力学で通常行われる列ベクトルへのユニタリー変換とは少し表現が異なっている。$D\rho_c D^\dagger = \rho_{c'}$ ではない。

この結果を用いると、$t_{k,q}$ の回転に対する変換性を確認できる。

$$(t_{k,q})_{c'} = \sum_q (t_{k,q})_c D^k_{q',q}(\alpha, \beta, \gamma)$$

特に、軸対称な系では、q = 0 でなければ $t_{k,q} = 0$ である事が導ける。

例：スピン 1 の系があり、$t_{0,0}, t_{1,0}, t_{2,0}$ のみが 0 でない事が分かっていたとする。この系を別の座標系 C' から見る。但し、C 座標系の量子化軸の極角と方位角は、 C' 座標系では θ, ϕ であるとする。即ち、C$->$C' という回転のオイラー角は $\alpha = 0, \beta = -\theta, \gamma = -\phi$ ととればよい。両座標系でのスピンモーメントには以下の関係が成り立つ。

$$(t_{0,0})_{c'} = (t_{0,0})_c \text{座標系を回転してもビーム強度は変わらない}$$

$$(t_{1,0})_{C'} = (t_{1,1})_c D^{(1)}_{1,0} + (t_{1,0})_c D^{(1)}_{0,0} + (t_{1,-1})_c D^{(1)}_{-1,1} = \cos\theta (t_{1,0})_c$$

ここで、以下の事実を使用した。

$$(t_{1,1})_c = (t_{1,-1})_c = 0, \quad D^{(1)}_{0,0} = \cos\theta$$

同様に、

$$(t_{1,1})_{c'} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin\theta \exp(i\phi)(t_{1,0})_c, \quad (t_{2,0})_{c'} = \frac{3\cos^2\theta - 1}{2}(t_{2,0})_c$$

$$(t_{2,1})_{c'} = -\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta\sin\theta\exp(i\phi)(t_{2,0})_c, \quad (t_{2,2})_{c'} = \sqrt{\frac{3}{8}}\sin^2\theta\exp(2i\phi)(t_{2,0})_c$$

一般に、

$$(t_{kq})_{c'} = (t_{k,0})_c(-)^q\sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}}Y^*_{k,q}(-\theta,-\phi)$$

これらの関係式を用いると、イオン源から出て来た偏極イオンに色々なテンソル成分を持たせることが出来る。

反応後のスピン

一次粒子と二次粒子のスピン波動関数を $|s_a, m_a> \ |s_b, m_b>$ と書く。この両者を関係付ける行列を M と書く。常識的な散乱行列のスピン表示と思えば良い。

これにより、反応前後の系の密度行列を $\rho_i,\ \rho_f$ とすると、両者は次の関係で結ばれる。

$$\rho_f = \frac{2s_a+1}{Tr(MM^\dagger)}M\rho_i M^\dagger$$

これは、次の様に考えれば良い。反応前の密度行列の行列要素、$< s_a, m_{a'}|\rho_i|s_a, m_a >$ が反応後どのようになるかが M に依り与えられている。まず、右側は、$|s_a, m_a > \rightarrow |s_a, m_a >< s_a, m_a|M^\dagger|s_b, m_b >$ 、一方左側は、$< s_a, m_{a'}| \rightarrow < s_b, m_{b'}|M|s_a, m_{a'} >< s_a, m_{a'}|$ と変換されるから、全体では以下の様に変換される。

$$< s_b, m_{b'}|M|s_a, m_{a'} >< s_a, m_{a'}|\rho_i|s_a, m_a >< s_a, m_a|M^\dagger|s_b, m_b > \propto < s_b, m_{b'}|\rho_f|s_b, m_b >$$

一方、これは終状態の密度行列の行列要素であるはずだから、右辺の比例関係が成立せねばならない。

ところで、M は一般に ユニタリー行列ではないので、flux は保存しない。どこかで規格化の作業をしなければならない。

$\mathrm{Tr}(\rho_f)$=1 とするために、無偏極一次粒子 $(\rho_i = \dfrac{1}{2s_a+1}\times\ \mathbf{1})$ に対する二次粒子の強度 $\mathrm{Tr}(MM^\dagger)/(2s_a+1)$ で割っておくと最初の表現に落ち着く。

反応後のスピンモーメント $t^f_{k,q}$ は、次式で与えられる。

$$t^f_{k,q} = Tr(\rho_f\tau^f_{k,q}) = \sum_{\alpha,\beta}(\rho_f)_{\alpha,\beta}\sqrt{2k+1}(s_b,\beta,k,q|s_a,\alpha)$$

次に、反応前後のスピンの相関 (偏極移行係数) の計算をする。

一 (二) 次粒子系のスピンモーメントを $t^i_{k,q}$ $(t^f_{k',q'})$ と書くと両者は 1 次関係にある。

$$t^f_{k',q'} = \sum_{k,q} Z^{k',q'}_{k,q}\ t^i_{k,q}$$

と書き、Z を偏極移行 (相関) 係数と呼ぶ。$t_{k,q}$ は密度行列と $\tau_{k,q}$ の跡であたえられているから、M を用いて書くと、

$$t^f_{k',q'} = \frac{2s_a+1}{Tr(MM^\dagger)} Tr(M\rho_i M^\dagger \tau^f_{k',q'}(s_b)) = \frac{1}{Tr(MM^\dagger)} \sum_{k,q} t^i_{k,q}\, Tr(M{\tau^\dagger_{k,q}}^i(s_a) M^\dagger \tau^f_{k',q'}(s_b))$$

この式から、Z 係数を引っ張り出すと、

$$Z^{k',q'}_{k,q} = \frac{1}{Tr(MM^\dagger)} Tr\{M{\tau^\dagger_{k,q}}^i(s_a) M^\dagger \tau^f_{k',q'}(s_b)\}$$

特に、偏極ビームによる反応粒子の強度 $t^f_{0,0}$ は、一次粒子のスピンモーメント $t^i_{k,q}$ に依存する。

$$t^f_{0,0} = \sum_{k,q} Z^{0,0}_{k,q}\, t^i_{k,q}$$

この時の、Z 係数を以下の様に書き、

$$T_{k,q} \equiv (-)^q Z^{0,0}_{k,-q}$$

T_{kq} を偏極分析能とよぶ。偏極分解能と呼ぶ人が多いが、反応でやっていることは分解ではなく分析であるので、個人的には分析能を採用している。

例： 重陽子の弾性散乱に対して

$$M = \begin{pmatrix} A & B & C \\ D & E & -D \\ C & -B & A \end{pmatrix}$$

と書けたとする。これは、散乱振幅のスピン表示における相反性と呼ばれる対称性 ($M_{m',m} = (-)^{m'-m} M_{-m',-m}$) を露わに書いただけである。このとき、以下の関係式が成立する。

$$3\sigma = 2\{|A|^2 + |B|^2 + |C|^2 + |D|^2\} + |E|^2$$

σ は微分断面積であり、 3 はスピン多重度である。

$$3\sigma \times (iT_{1,1}) = \sqrt{6} Im\{B^*(A-C) + E^* D\}$$

$$3\sigma \times (T_{2,1}) = -\sqrt{6} Re\{B^*(A-C) + E^* D\}$$

$$3\sigma \times (T_{2,0}) = \sqrt{2}\{|A|^2 - 2|B|^2 + |C|^2 + |D|^2 - |E|^2\}$$

$$3\sigma \times (T_{2,2}) = \sqrt{3}\{2Re(A^*C) - |D|^2\}$$

これらは、全て実数である。$iT_{1,1}$ に虚数単位をつけた理由は、実数にする為の人為的な定義である。

問 スピンが 1 / 2 の粒子の弾性散乱では

$$M = \begin{pmatrix} g & -ih \\ ih & g \end{pmatrix}$$

と与えられる。このとき、$iT_{1,1}$ を計算せよ。

この表現では、g はスピンの向きが散乱により変化しない成分を記述し、h はスピン成分が変化する散乱振幅である。従って h はスピン依存力が散乱に寄与していなければ 0 である。上の問いを解くと、$iT_{1,1}$ は g と h が干渉していることがわかるが、弾性散乱波の吸収も大切な要因であることが分かる。

Bohr の定理

最後に、重陽子ビームの偏極度の絶対較正その他に使用され ボーアの定理として引用されることのある事実を書いておこう。元来は K 中間子のパリティーを決定するのに使用された指導原理である。

2 体反応 A(a,b)B を仮定し、パリティーの保存と散乱振幅の反応面対称性を仮定する。反応面に関する反転という操作は、下の図を比較すると、パリティー変換と変換後の y 軸 (y' と記した) のまわりの１８０度の回転と等価で有ることが分かる。

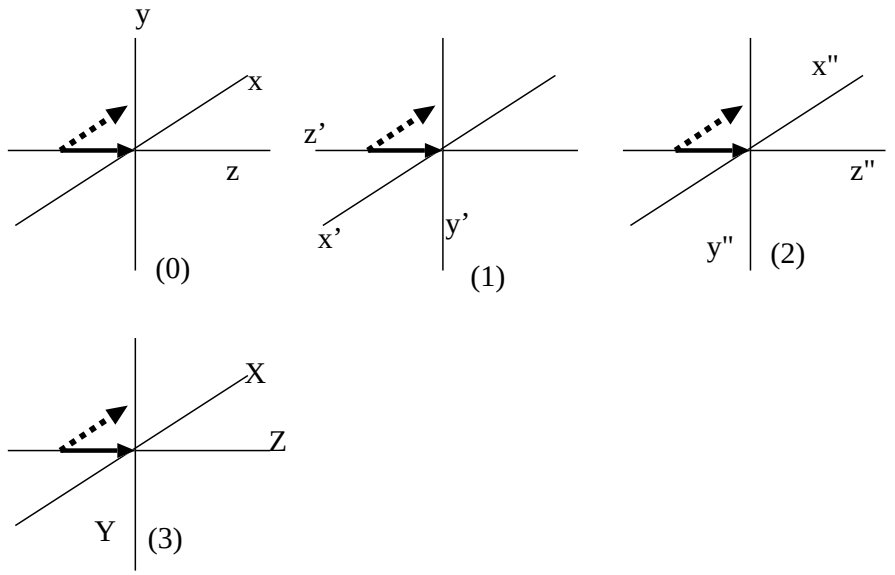


図 (0) は、思考の出発点であり、原点にある標的に向かって z 軸の負の向きから入射粒子が入って来る。その粒子のスピンは、もう一つの矢印で与えられている。習慣的に、放出粒子は xz 面内に有り反応面に垂直に y 軸をとる。(1) は (0) の図に対して、パリティー変換を施して座標系の向きを変えた物であり、(2) は (1) に対して、y' 軸を回転軸として１８０度の回転を施してある。一方 (3) は (0) に対して反応面 (x-z 面) に対して鏡映を施してある。結果的に、(2) と (3) は一致すると言う事実を使う。

パリティー変換に依り、全系のパリティーは $\Pi_a\Pi_A\Pi_b\Pi_B$ だけ変化する。新 y 軸の周りの角度β の回転の演算子は $\exp(i\beta J_y)$ であることを思い出すと、この演算の固有値は、J_y

のところを固有値で置き換えれば良い。

初期状態や終状態がこの演算の固有状態であれば、この演算に対して不変である。(固有値の定義だ！)。従って、次の保存則が導けた。

$$\Pi_a\Pi_A \exp\{i\pi((s_a)_y + (I_A)_y)\} = \Pi_b\Pi_B \exp\{i\pi((s_b)_y + (I_B)_y)\}$$

例： テンソル分析能の絶対測定への応用

$^{16}\mathrm{O(d,}\alpha)^{14}\mathrm{N}(2.31\ \mathrm{MeV},\ 0^+)$ 反応を考える。先ず、この反応に関与する粒子の固有パリティーは全て + であり、入射重陽子だけがスピンを有するので、この重陽子のスピンの z 成分だけを考慮すればよい。先ず、スピン 1 に対し、$\alpha = \gamma = 0, \beta = \pi$ というオイラー角に対する D 関数は

$$D^{(1)}(0,\pi,0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

即ち、$|s_a, m_a >$ という順に固有値並べたとき、

$$R_y(\pi)|1,1 >= |1,-1>, \quad R_y(\pi)|1,0 >= -|1,0>, \quad R_y(\pi)|1,-1 >= |1,1>$$

である。この操作で $|1,0>$ 状態は符号が変わるから、この反応には寄与しない。又、$|1,1>, |1,-1>$ 状態が関与する散乱振幅は等しい。結局のところ、一つの散乱振幅だけで反応が記述できる。散乱振幅は、重陽子のスピンの z 成分の足を持ち、1、0、− 1 に対し、M=(f,0,f) と書ける。この結果、

$$\sigma = \frac{2|f|^2}{3}, \quad iT_{1,1} = T_{2,1} = 0$$

となり、$T_{2,0}, T_{2,2}$ は以下の様な計算が出来る。$T_{2,0}$ の計算を露わに書くと、

$$3\sigma T_{2,0} = (f,0,f)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f^* \\ 0 \\ f^* \end{pmatrix} = \sqrt{2}|f|^2$$

この結果、

$$T_{2,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad T_{2,2} = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

この値は、エネルギーや散乱角度に依存しないという特徴がある。

CDCC 法

重陽子の束縛エネルギーは約 2 . 2 MeV であり, この値は平均的な核子の束縛エネルギーである 8 MeV よりは小さい。原子核の研究に使用される、加速器から取り出される粒子の運動エネルギーはこの値よりもずっと大きい場合がほとんどである。従って、散乱途中で重陽子が陽子と中性子に解離 (分解) する確率は無視できない。

ここで歴史的な事実を一つ引用しておこう。サイクロトロンを発明したローレンスは、原子番号 Z の小さな原子核を、当時発見されて間もない、重陽子で照射し (d,p) 反応による反応生成物の収量を放射化法で測定した。その結果陽子やα 粒子で照射した時の生成物の収量の入射粒子エネルギー依存性は ガモフのトンネル効果の理論で説明できるのに反し、重陽子照射の場合にはトンネル効果だけでは説明できないと結論した。オッペンハイマーとフィリップスは、入射重陽子が原子核の作るクーロン場で解離し、自由になった中性子だけが標的原子核と衝突して吸収されるというアイデアを提案した。

その後、3 体問題的に重陽子 (その他の小さな束縛エネルギーの粒子の) 弾性散乱を記述する方法として、Rawitscher[1] の論文があり、最終的に Continuum Discretized Coupled Channels (CDCC) という名前で理解される事となった。

詳細は開発者達の報告書 [2] を参照するのが最も良いと考える。

このメモでは、重陽子に特化して p-n 系の内部運動の波動関数の記述と CDCC の簡単な解説をする。重陽子の波動関数の部分を、例えば ^{6}Li を (重陽子) + (α 粒子) と置き換えて考えると、別の小さな束縛エネルギーの複合粒子の弾性散乱を記述出来る事になる。但し、個別の複合粒子に対応した、散乱状態に埋め込まれた共鳴状態の様な、特殊事情を取り込む必要があるだろう。

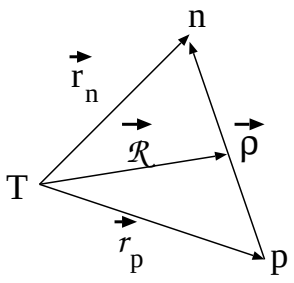
CDCC 概観

基本的には、図で示したように重陽子を陽子と中性子の束縛系と考え、衝突の途中で非束縛状態に励起される確率も存在すると考える。

従って、CDCC では、全系を陽子 p、 中性子 n 及び標的核 T の 3 個で構成されると考える。全系のハミルトニアン H を、以下の様に書く、

$$H = T_R + V_p(r_p) + V_n(r_n) + H_\rho.$$

全系の波動関数は、標的 T から見た陽子と中性子の運動と言えばよいから、$\mathbf{r}_p$, $\mathbf{r}_n$ という座標で記述しても良いが、p+n には束縛状態があるから、重心座標 ($\mathbf{R}$) と p-n 系の相対座標 (ρ) を主に使用する。



$$\mathbf{R} = \frac{m_p\mathbf{r_p} + m_n\mathbf{r_n}}{(m_p + m_n)}$$

$$\rho = \mathbf{r_n} - \mathbf{r_p}$$

$\mathbf{r_p}, \mathbf{r_n}$ から $\mathbf{R}, \rho$ という座標変数への変換のヤコビアンは 1 であるから、位相空間の体積の大きさの変化は考える必要が無い。

標的核は、陽子や中性子と $V_p,\ V_n$ というポテンシャルを通じて相互作用するが、内部励起は無視した。そのかわり相互作用ポテンシャルとして、入射重陽子のエネルギーの半分の運動エネルギーを有する核子光学ポテンシャルを用いる。光学ポテンシャルを用いると、非弾性散乱や、入射重陽子や核子が標的核に吸収される過程が暗黙の内に考慮される。

全系の波動関数 Ψ は、角運動量の固有状態 $\Psi_{J,\,M}$ で展開される。この展開係数は、Glendenning の教科書の p35-36 に記載された様な方法で、規格化される。

特定の角運動量 $J,\ M$ を持った状態は、陽子と中性子の重心運動の波動関数 $\chi(\mathbf{R})$ と相対運動の波動関数 $\phi(\rho)$ の積で展開される。

$$\Psi_{J,\,M} = \sum_c [\phi_c(\rho),\ \chi_c(\mathbf{R})]_{J,\,M}$$

ここに書いた c での和は、$p-n$ 系の束縛状態及び全ての散乱状態を示しているので、連続エネルギーに対応する散乱状態に対しては、本当は和ではなくて積分で表示されるべきだが、簡単化してある。鉤括弧の部分は、角運動量の結合を示している。$\phi_c(\rho)$ や $\chi(\mathbf{R})$ の連続領域に対応する部分を離散化して数値計算が出来る様にする。この時、重心運動のエネルギーは大きいから、少しくらい重心運動のエネルギーが変化しても、大きくかわる事はないだろうが、p-n 系の内部エネルギーは 0 から増えて行くとすると、波動関数も大きく変化すると考える。従って、p-n 系の内部運動量 (波数) でビン (bin) を作り、重心運動はその中心値で置き換え、内部運動に対しては波数での平均を計算し、平均的な波動関数 $\hat{\phi}$ で置き換える。

$$\Psi_{J,\,M} = \sum_{c,n} [\hat{\phi}_{c,n}(\rho),\ \hat{\chi}_{c,n}(\mathbf{R})]_{J,\,M}$$

和の足は有限になったので、番号で波動関数を識別出来る様になった。次に、個別の波動関数のそれぞれの空間で角運動量固有関数部分と動系部分の積に分ける。例えば、

$$\hat{\phi}_{c,n}(\rho) = \hat{u}_{c,n}(\rho)/\rho\ i^\ell\, \mathbf{Y}_{\ell,\,s,\,I,\,\mu}(\hat{\rho}, \xi)$$

ここで、ξ は重陽子内の核子スピンを表す変数である。$\mathbf{Y}$ はスピン・角度波動関数と呼ばれ、球面調和関数と固有スピン波動関数の積に Clebsch-Gordan 係数を掛けて和を取り、I, μ という角運動量の固有状態としている。動系部分は、微分方程式を単純化するために ρ で割ってある。

一方、相互作用を記述する 核子光学ポテンシャルの部分は多重極展開しておく。

$$V(r) = \sum_\lambda v_\lambda(R, \rho)\, P_\lambda(\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\rho})$$

当然、 P_λ は Legendre 関数であり、その変数は二つの単位ベクトルの内積である。

これだけの準備をして、波動関数をシュレーディンガー方程式に代入し、左から p-n 系の波動関数及び重心系のスピン・角度波動関数

$$\{\hat{u}^{\beta}_{c,n}(k^c_n,\rho)i^{L_c+\ell_c}[\mathbf{Y}_{\ell_c,s,I_c}\,Y_{L_c}]_{J,\mu_0}\}^*$$

を掛けて、ρ 及び $\hat{R}$ の角度積分を実行すると、

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu_R}\left(\frac{d^2}{dR^2}-\frac{L_c(L_c+1)}{R^2}\right)-E_{c,n}\right\}\chi^J_{L_c,n}(K^c_n,R)=-\sum_{c,c',n,n'}V^J_{c,n:c',n'}(R)\chi^J_{L'_c,n'}(K^{c'}_{n'},R)$$

μ_R は、’重陽子’と標的核の相対運動を記述する換算質量である。

想像が付くと思うが、この行列要素の計算はそれなりに Racah 代数の練習になる。核子のスピン・軌道相互作用の行列要素からは、重陽子のスピン・軌道相互作用以外に、重陽子を壊すと同時にスピンの向きを変えるような相互作用も登場するがその大きさは一般的に言って小さい。

’重陽子’散乱状態波動関数は、以下の境界条件を満足する。

$$\chi^J_{c,n}(K^c_n,R)=0,\quad at\ R=0$$

$$\chi^J_{c,n}(K^c_n,R)\to I_{L_0}(K^c_nR)\delta_{L_c,L_{c_0}}\delta_{c,c_0}-\sqrt{\frac{K_0}{K^c_n}}\hat{S}^J_{L_c,n;L_{c'},n'}O_{L_c,n}(K^c_nR)$$

ここで、下付指数 0 は’重陽子’基底状態を示し、I と O は内向きと外向きのクーロン波動関数である。この境界条件を満足する様に、$\hat{S}$ 行列が決定される。離散化しない状態の正しい S 行列は、離散化の補正をしておかねばならない。

$$S=\frac{\hat{S}}{\sqrt{\Delta k^c_n}}$$

’重陽子’の波動関数はクーロン波動関数を用いて漸近形が規定されたので、更に対応する状態のクーロン力の位相のずれを掛けねばならない。

p-n 系の波動関数

H_ρ は、p-n 系の束縛状態及び散乱状態を記述する。参考論文 [2] では、p-n 系の記述が少ないので、少し丁寧に書いておこう。ここでは、陽子や中性子のスピンの向きが散乱過程で変化しないと仮定するので、スピン 3 重状態に限定する。H_ρ に関する具体的な表現と数値が必要ならば、Reid[3] の論文を引用する。但し、p+n 系のスピン I が 3 の場合には、位相のずれの実験値を再現する様な ガウス型ポテンシャルを用いる。スピン 3 重状態は、テンソル力により 2 単位大きさの異なる軌道角運動量状態が混じる事に注意する必要がある。p-n 系の波動関数を、以下の様に書く。

$$\phi^c_{I,\mu}(\mathbf{k},\rho)=\frac{1}{\rho}\sum_{\ell_c}u^c_{\ell_c}(k,\rho)\mathbf{Y}_{\ell_c,S,I,\mu},\quad \mathbf{Y}_{\ell,S,I,\mu}\equiv i^{\ell}[Y_\ell(\hat{\rho})\,\phi_S]_{I,\mu}$$

角括弧は、角運動量の合成を表す。ctak.f の中では、$\ell + \mathbf{S} = \mathbf{I}$ の順番になっている。波動関数は、束縛状態に対しては 1 に規格化され、散乱状態は以下の漸近形を持つとする。

非結合状態に対しては、

$$u_\ell(\rho) \to \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(k\rho - \frac{\ell\pi}{2} + \delta\right).$$

結合状態は、テンソル力が無視出来る極限で、軌道角運動量が I−1 (I+1) の状態が主成分となる状態をα (γ) で区別する。散乱状態を Blatt-Biedenharn の位相のずれと混合パラメータ [4] を用いて記述する。α 状態に対して、

$$\begin{pmatrix} u_{I-1} \\ u_{I+1} \end{pmatrix}_\alpha \to \sqrt{\frac{2}{\pi}} \begin{pmatrix} c\,\sin\left(k\rho - (I-1)\pi/2 + \alpha\right) \\ s\,\sin\left(k\rho - (I+1)\pi/2 + \alpha\right) \end{pmatrix}.$$

γ 状態に対しては、

$$\begin{pmatrix} u_{I-1} \\ u_{I+1} \end{pmatrix}_\gamma \to \sqrt{\frac{2}{\pi}} \begin{pmatrix} -s\,\sin\left(k\rho - (I-1)\pi/2 + \gamma\right) \\ c\,\sin\left(k\rho - (I+1)\pi/2 + \gamma\right) \end{pmatrix}.$$

ここでα とγ は、それぞれの状態の位相のずれをも表現している。但し、$c = \cos\epsilon$、及び $s = \sin\epsilon$ と略記した。ϵ 又は $\sin 2\epsilon$ は混合パラメータと呼ばれる事がある。S 行列要素と位相のずれとには、以下の関係がある。

$$S = \begin{pmatrix} c^2\exp(2i\alpha) + s^2\exp(2i\gamma),\ cs\{\exp(2i\alpha) - \exp(2i\gamma)\} \\ cs\{\exp(2i\alpha) - \exp(2i\gamma)\},\ s^2\exp(2i\alpha) + c^2\exp(2i\gamma) \end{pmatrix}$$

ここで登場した Blatt-Biedenharn の位相のずれは、核子散乱の記述に使用されるバー付の位相のずれとは以下の関係にある。

$$\alpha + \gamma = \bar{\alpha} + \bar{\gamma}$$

$$\sin(\bar{\alpha} - \bar{\gamma}) = \frac{\tan 2\bar{\epsilon}}{\tan 2\epsilon}, \quad \sin(\alpha - \gamma) = \frac{\sin 2\bar{\epsilon}}{\sin 2\epsilon}$$

CDCC では、連続状態を離散化する為に、次の近似を用いる。

$$\hat{u}^c_{\ell_c}(k_n, \rho) = \frac{1}{\sqrt{\Delta k_n}} \int_{k_{n-1}}^{k_n} u^c_{\ell_c}(k, \rho)\, dk$$

更に散乱状態の波数 k に、上限 k_{max} を設ける。実用的な計算には、p-n 系として ${}^3S_1 - {}^3D_1$、${}^3D_{2,3}$, ${}^3P_{0,1}$、${}^3P_2 - {}^3F_2$ の 6 個のスピン状態に限定する。結合状態はハイフン で繋がれている。

ポテンシャルの多重極展開

核子光学ポテンシャルの独立変数は核子座標 $\mathbf{r}_p$, $\mathbf{r}_n$ であるが、この独立変数を $\mathbf{R}$、ρ に変更し、更に多重極展開する。

$$V_x(r_x) = \sum_\lambda v^\lambda_x(R, \rho) P_\lambda(\hat{R} \cdot \hat{\rho}), \quad \text{x=p or n.}$$

この展開は数値的に実行する。ある種のポテンシャルに対しては、解析的に多重極展開が出来る。 2 体相互作用の多重極展開というメモが参考になるだろう。

スピン・軌道ポテンシャルの展開では、陽子 (中性子) のスピンを $\mathbf{s}_p(\mathbf{s}_n)$ とし、核子ポテンシャルの関数形が陽子と中性子とで同じならば、以下の様に書ける [1]。

$$V_p^{SO}(r_p)\ell_{\mathbf{p}}\cdot\sigma_{\mathbf{p}}+V_n^{SO}(r_n)\ell_{\mathbf{n}}\cdot\sigma_{\mathbf{n}}=\frac{1}{2}\{(V_p(r_p)^{SO}+V_n(r_n)^{SO}\}(\mathbf{L}+\ell)\cdot(\mathbf{s}_p+\mathbf{s}_n)+\cdots$$

$\cdots$ の項は、∇ を含む項や、$\mathbf{s}_p-\mathbf{s}_n$ の項が登場するが、これらは無視した。

これまでの CDCC の計算では、' 重陽子' の重心にクーロン力は作用させていた。しかし、クーロン力による分解過程を正しく考慮するには、陽子と標的核のクーロン力も多重極展開する必要がある。ctak.f では、一様に帯電した球のつくるクーロンポテンシャルを使用する。この場合には多重極展開は解析的に実行出来る。

真空偏極の等価ポテンシャル

Dirac による Dirac 方程式の導入後、真空偏極に付いて考察せねばならなくなった。第 1 近似として導入されたのが Uehling Potential として知られている。このポテンシャルは、非常に古いが現在でもμ 中間子原子の束縛エネルギーの評価に使用される。陽子・陽子散乱においてラザフォードの公式から、後方で約 0 . 5 %程度弾性散乱断面積を増加させる効果がある。

クーロン障壁よりも低いエネルギーの重陽子弾性散乱を計算するには、この真空偏極ポテンシャルの導入は必須である。

以下の真空偏極の第 1 近似ポテンシャル $V_2(R)$[5] を重陽子の重心運動ポテンシャルとして加える。

$$V_2(R)=\frac{2\alpha e^2\lambda_e}{3R}\int_0^\infty dr'r'\rho_C(r')\{K_0(2|R-r'|/\lambda_e)-K_0(2|R+r'|/\lambda_e)\}$$

ここで $\rho_C(R)$ は、 標的核の電荷密度であり、一様に帯電した球を仮定する。α は微細構造定数、 λ_e は電子のコンプトン波長を 2π で割ったものである。また、関数 $K_0(x)$ は、次式で定義される。

$$K_0(x)=\int_1^\infty dt\exp(-x\,t)\sqrt{t^2-1}\left(1/t^3+1/2t^5\right).$$

$V_2(R)$ の二重積分を数値的に実行するのは簡単である。

参考文献

1 G.H. Rawitscher and S.N. Mukherjee, *Nucl. Phys.* **123**(1979) 330

2 M. Kawai et.al., *Prog. Theor. Phys. Supp.* **89**(1986). 特に、第 3 章に CDCC の実用的な記述がなされている。重陽子の分解過程により放出される、陽子のエネルギー

スペクトル (3 重微分断面積) に関しては、第 4 章を見ると良い。第 4 章での記述は、重陽子のスピンを無視しているが、このメモでは重陽子のスピンを正しく取り入れたところが、上の文献よりも一般化された点の一つである。

3 R.V. Reid, Jr., *Ann. Phys.* **40**(1968) 411.

4 岩垂、大槻、玉垣、亘 著、 核物理学講座 5 “素粒子の一般的性質” 共立出版。 1 9 5 9
この本は今では入手が困難かも知れない。

5 E.A. Uehling, *Phys. Rev.***48**(1948) 55. L.W. Fullerton and G.A. Rinker, Jr.,*Phys. Rev.***A13** (1976) 1283 and K.-N. Huang, *Phys. Rev.***A14**(1976) 1311.

これは、核物理 II の付録的な性格を持つ、角運動量の講義ノートである。

0. はじめに

古典力学では、角運動量 $\mathbf{L}$ は位置ベクトル $\mathbf{r}$ と運動量 $\mathbf{p}$ とのベクトル積として定義された。

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \tag{0-1}$$

中心力の下では、運動の恒量として大切な概念である。量子力学では、位置と運動量のデカルト座標での成分の間に交換関係を導入している。この角運動量は、作用の次元を持つので、$\hbar$ で割って無次元化したものを改めて角運動量としておく。

その場合には、$\mathbf{L}$ の成分の間の交換関係は次の様になる。

$$[L_x,\, L_y] = i\, L_z \tag{0-2}$$

この関係は、以下の様に書かれる場合も多い。

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\, \mathbf{L} \tag{0-2}$$

左辺は、ある意味で二次形式であるのに、右辺は一次形式になっている事に注意しておこう。

角運動量の大きさは、ベクトルの通常のやり方で定義されるが、習慣的には平方根を取らずに、 2 乗のままで利用される。以下の交換関係が確認出来る。

$$[\mathbf{L}^2, L_x] = [\mathbf{L}^2, L_y] = [\mathbf{L}^2, L_z] = 0 \tag{0-3}$$

個別の成分同士は非可換であるが、 2 乗とは全ての成分が可換であるから、$\mathbf{L}^2$ と どれか一つの成分、習慣的に z 成分 L_z の同時固有関数を考える。この交換関係に注目して、固有値を評価する事が可能である。

1. 固有値と固有関数

式 (0-2) の交換関係を満足する例として軌道角運動量以外に以下の例を与える事が出来る。

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

この行列は Pauli のスピン行列と呼ばれる場合もあり、単位行列と共に組み合わせて、 4 元数の具体的な表現を与える。電子スピンを考える時に避けては通れない概念である。この可能性を考慮して、角運動量の記号を $\mathbf{L}$ から、$\mathbf{j}$ に変更しておく。

(0-2),(0-3) の交換関係を考慮し、$\mathbf{j}^2$ と j_z の固有値を A、B と書き、その同時固有関数を $|A, B>$ と記す。

即ち、

$$\mathbf{j}^2|A, B> = A|A, B> \quad j_z|A, B> = B|A, B> \tag{1-2}$$

角運動量はエルミートであるから固有値は実数であり、A を与えた時、B の値には以下の制限がある。

$$A =< \mathbf{j}^2 >=< j_x^2 + j_y^2 + j_z^2 > \geq < j_z^2 >= B^2 \qquad (1-3)$$

次の j_z に関する昇降演算子を定義する。

$$j_\pm = j_x \pm i\, j_y \qquad (1-4)$$

この演算子は以下の交換関係を満足する。

$$[j_z,\, j_\pm] = \pm j_\pm \qquad (1-5)$$

これから、

$$[j_z, j_\pm]|A, B >= j_z\, j_\pm |A, B > -B\, j_\pm |A, B >= \pm\, j_\pm |A, B > \qquad (1-6)$$

又は、

$$j_z\, j_\pm |A, B >= (B \pm 1) j_\pm |A, B > \propto |A, B \pm 1 > \qquad (1-7)$$

即ち、$j_\pm$ を $|A, B >$ に演算すると磁気量子数 B の値が 1 だけ増減する。この意味で、昇降演算子と呼ばれる。$|A, B >$ に順次 j_+ を演算して B の値を一つずつ増す事が可能であるが、(1-3) により、B^2 には上限が与えられているので、B の上限と下限を $B_{max},\ B_{min}$ と書く。一方、以下の関係式が書ける。

$$\mathbf{j}^2 = j_x^2 + j_y^2 + j_z^2 = j_+\, j_- - j_z + j_z^2 = j_-\, j_+ + j_z + j_z^2 \qquad (1-8)$$

この式から、

$$A = B_{max} + B_{max}^2 = -B_{min} + B_{min}^2 \qquad (1-9)$$

この式から、

$$(B_{max} + B_{min})(B_{max} - B_{min} + 1) = 0 \qquad (1-10)$$

を得る。$B_{max} \geq B_{min}$ であるから、左辺第 2 項は正である。従って、

$$B_{min} = -B_{max} \qquad (1-11)$$

が結論される。$|A, B_{max} >$ に N 回 j_- を演算すると $|A, B_{min} >$ が得られるとすると、$B_{min} + N = B_{max}$ となる N が存在する。即ち、

$$B_{max} = -B_{min} = N/2 \qquad (1-12)$$

となる 0 又は正の整数 N が存在する。$B_{max} = N/2 = j$ と書く。(1-9) より、

$$A = j(j+1) \qquad (1-13)$$

固有値が確定した。今後 $|A, B >$ のかわりに、$|j, m >$ という記号を使用する。

$$\mathbf{j}^2 |j, m >= j(j+1)|j, m >,\quad j_z |j, m >= m|j, m > \qquad (1-14)$$

j を与えた時、磁気量子数 m の取り得る値は、$m=-j$ から 1 ずつ増え、$m=j$ 迄の (2j+1) 個あり、この (2j+1) はスピン多重度と呼ばれる。
(1-8),(1-14) より以下の関係式が導かれる。

$$< j,m|j_{\pm}\, j_{\mp}|j,m >= |\, j_{\mp}|j,m > |^2 = (j \pm m)(j \mp m + 1) \tag{1-15}$$

この式から、相隣る磁気量子数の状態間の位相を次の式で定義する。

$$j_{\pm}|j,m >= +\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}|j,m \pm 1 > \tag{1-16}$$

$j_x = (j_+ + j_-)/2,\ j_y = (j_+ - j_-)/2i,\ j_z$ の行列要素を $j = 1/2,\ 1$ に対して具体的に書き下してみよ。

電流を測定する電流計の様に、角運動量を具体的に測定する角運動量計は存在しない。現象の起こり方を詳しく定量的に調べ、角運動量の理論と突き合わせてこの値を推定する。

2. 軌道角運動量の波動関数

極座標を用いて、(0-1) を書き下す。

$$L_{\pm} = e^{\pm i\phi}\left\{ i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi} \pm \frac{\partial}{\partial\theta}\right\}, \quad L_z = -i\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{2-1}$$

$\mathbf{L}^2$ に関しては、

$$\mathbf{L}^2 = -\left\{ \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\} \tag{2-2}$$

L^2 のこの表現は、極座標での ∇^2 の角度部分に比例している。$L^2,\ L_z$ の固有値が $\ell(\ell+1),\ m$ をとる場合を取り上げる。

$$L_z|\ell,m >= -i\frac{\partial}{\partial\phi}|\ell,m >= m|\ell,m > \tag{2-3}$$

この微分方程式は簡単に解け、

$$|\ell,m >= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\,m\phi}\Theta_{\ell,m} \tag{2-4}$$

この関数が周期 2π の周期を持つ為に、量子数 m は整数でなければならない。

$\Theta_{\ell,m}$ は ϕ に依存しない。(2-4) は極角 θ と方位角 ϕ 依存性が変数分離された。極角成分を解く為に、$m=-\ell$ の場合 $\Theta_{\ell,-\ell}$ を考える。

$$L_-|\ell,-\ell >= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\phi}\left\{ i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\partial}{\partial\theta}\right\} e^{i\ell\,\phi}\Theta_{\ell,-\ell} = 0 \tag{2-5}$$

即ち、

$$\left\{\frac{d}{d\theta} - \ell\cot\theta\right\}\Theta_{\ell,-\ell} = 0 \qquad (2-6)$$

この微分方程式はすぐ解ける。

$$|\,\ell, -\ell\,> = \frac{1}{2^\ell\,(\ell)!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}\sin^\ell\theta\, e^{i\ell\phi} \qquad (2-7)$$

規格化因子の計算は漸化式を用いて簡単に計算できる。位相は習慣に依存する。この結果に、$L_+^{\ell+m}$ を作用させると

$$L_+^{\ell+m}|\ell, -\ell> = \sqrt{\frac{(\ell+m)!(2\ell)!}{(\ell-m)!}}|\ell, m> \qquad (2-8)$$

一方、

$$L_+ e^{im\phi}\Theta_{\ell,m} = -e^{i(m+1)\phi}\sin^{m+1}\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin^{-m}\Theta_{\ell,m}\right) \qquad (2-9)$$

を複数回繰り返し、

$$L_+^{\ell+m}e^{-i\ell\phi}\Theta_{\ell,-\ell} = (-1)^{\ell+m}e^{im\phi}\sin^m\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta \qquad (2-10)$$

従って、

$$|\ell,\, m> = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\cdot\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\frac{e^{im\phi}}{2^\ell\,\ell!}(-\sin\theta)^m\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell+m}(\cos^2\theta-1)^\ell \qquad (2-11)$$

この右辺は、以下の様に書く場合も多い。

$$|\ell,\, m> = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{2}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}P_{\ell,|m|}(\cos\theta)\frac{e^{i\,m\,\phi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (2-12)$$

右辺の $P_{\ell,m}(\cos\theta)$ はルジャンドル陪関数と呼ばれ、更に、左辺は $Y_{\ell,\,m}(\theta,\,\phi)$ と書き、球面調和関数と呼ばれる。

時間反転に対する考慮から、球面調和関数に、i^ℓ という位相が導入される場合も多い。

3. 角運動量の合成

二つの独立な角運動量状態 $|j_1, m_1>,\ |j_2, m_2>$ が与えられたとする。この系を記述する場合、全系の持つ角運動量で状態を識別する方が便利である場合がある。状態 1 と 状態 2 とが角運動量をやりとりするが、全体としては角運動量を保存する場合である。

この合成系の持つ角運動量の和は次式で定義する。

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 \qquad (3-1)$$

この時、

$$[j_x,\, j_y] = ij_z \tag{3-2}$$

であり、

$$[\mathbf{j}^2, j_x] = [\mathbf{j}^2, j_y] = [\mathbf{j}^2, j_z] = 0 \tag{3-3}$$

も成立するから、$\mathbf{j}^2,\ j_z$ の同時固有状態を考える事が可能である。一方

$$\mathbf{j}^2 = \mathbf{j}_1^2 + \mathbf{j}_2^2 + j_{1+}j_{2-} + j_{1-}j_{2+} + 2j_{1z}j_{2z} \tag{3-4}$$

$\mathbf{j}^2$ と j_z は $\mathbf{j}_1^2$ や$\mathbf{j}_2^2$ とは可換である事が判る。一方、$j_{1z},\ j_{2z}$ は $\mathbf{j}^2$ と交換しない。従って、全系の角運動量を指定する固有値は、$j_1,\ j_2,\ j,\ j_z$ である。この合成系は、$|j_1, m_1 > |j_2, m_2 >$ を基底として展開する事が可能であるが、合成した角運動量状態 $|(j_1, j_2)j, m >$ を基底として展開する事も可能である。即ち、両基底は以下のユニタリー変換で結ばれる。

$$|(j_1, j_2)j, m >= \sum_{m_1, m_2} |j_1, m_1 > |j_2, m_2 >< j_1, m_1\, j_2, m_2|(j_1, j_2)j, m > \tag{3-5}$$

展開係数 $< j_1, m_1\, j_2, m_2|(j_1, j_2)j, m >$ は Clebsch-Gordan 係数と呼ばれる。簡単の為に、$< j_1, m_1\, j_2, m_2|j, m >$ と書く。

先ず、$j_1, m_1,\ j_2, m_2$ を与えた時、 j, m の取り得る範囲を考えよう。(3-1) 式の z 成分を取り上げると、

$$j_z = j_{1z} + j_{2z}, \quad \text{又は}, \quad m = m_1 + m_2 \tag{3-6}$$

即ち、磁気量子数は代数和を考えれば良い。従って、(3-5) 右辺の和では、(3-6) の条件を満足する場合のみを取る。

j の範囲を考える。(3-6) から、$< j_z >$ の最大値、即ち j の最大値は $j_1 + j_2$ である。最小値を決めるために、(3-5) に登場する独立な状態の数を数えれば良い。

(3-5) 右辺に登場する事が可能な独立な状態の数は $(2j_1 + 1)\,(2j_2 + 1)$ である。一方、左辺に登場できる j の値の下限を j_{min} と書くと

$$\sum_{j_{min}}^{j_1+j_2} (2j + 1) = (2j_1 + 1)\,(2j_2 + 1) \tag{3-7}$$

が成立すべきである。これから、j の取り得る範囲が確定する。j, m について纏めると、

$$j_{max} = j_1 + j_2,\ j_{min} = |j_1 - j_2|, \qquad m = m_1 + m_2 \tag{3-8}$$

(3-5) を逆に解くと、

$$|j_1, m_1 > |j_2, m_2 >= \sum_j < j_1, m_1,\ j_2, m_2|j, m > |j, m > \tag{3-9}$$

CG 係数の ユニタリー条件を以下に書いておこう。

$$\sum_{m_1} < j_1, m_1,\ j_2, m_2|j, m >< j_1, m_1,\ j_2, m_2|j', m >= \delta_{j,j'} \tag{3-10}$$

$$\sum_j < j_1, m_1,\ j_2, m-m_1|j, m >< j_1, m_1,\ j_2, m-m_1'|j, m >= \delta_{m_1, m_1'} \qquad (3-11)$$

4. Clebsch-Gordan 係数の具体的な計算

先ず、(3-5) で項が一つしか登場しない場合を取り上げる。

$$|j_1+j_2, j_1+j_2 >= |j_1, j_1 > |j_2, j_2 > \qquad (4-1)$$

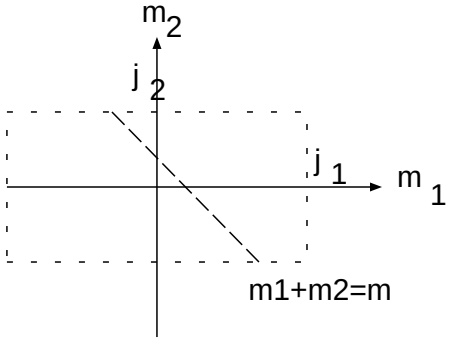
であるとすると、

$$< j_1, m_1 = j_1,\ j_2, m_2 = j_2|j = j_1+j_2, m = j_1+j_2 >= +\mathbf{1} \qquad (4-2)$$

(3-1) と (1-16) の知識があると、$j = j_1 + j_2$ に関する CG 係数は計算可能である。
j の値が最大値とは異なる一般の場合を考える。(3-4) の行列要素を計算し、(3-5) を用いて CG 係数が満足する漸化式をつくる。

但し、記号が面倒になるから $C(m_1, m_2) \equiv <\ j_1, m_1,\ j_2, m_2|j, m_1+m_2\ >$ と略する。
$j_1,\ j_2,\ j$ は変化しないから書かないし、$m = m_1 + m_2$ である。

$$\begin{aligned}\{j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1) - 2m_1\,m_2\}C(m_1, m_2) = \\ \sqrt{(j_1-m_1)(j_1+m_1+1)(j_2+m_2)(j_2-m_2+1)}C(m_1+1, m_2-1) \\ + \sqrt{(j_1+m_1)(j_1-m_1+1)(j_2-m_2)(j_2+m_2+1)}C(m_1-1, m_2+1)\end{aligned} \qquad (4-3)$$



図を見ながら、この 3 項漸化式の利用法を説明しよう。$m(=\ m_1 + m_2)$ を与えると、$(m_1,\ m_2)$ 平面上に 1 本の直線が引ける。この直線上で、(4-3) の漸化式が有効である。非物理的点 $(m_1 = m - j_2 - 1, m_2 = j_2 + 1)$ での CG 係数は 0 であるから、(4-3) は $C(m_1 = m - j_2, m_2 = j_2) = C$ を未知数とすると $C(m_1 = m - j_2 + 1, m_2 = j_2 - 1)$ は、C に比例するある数として確定する。m_1 の値を一つ増やして (4-3) を用いると、$C(m - j_2 + 2, j_2 - 2)$ も C の関数として確定する。このようにして、直線上にある全ての点での CG 係数は C の 1 次関数として確定する。
次に、C の絶対値の決定にユニタリー条件を利用する。即ち、

$$\sum_{m_2} C(m-m_2, m_2)^2 = 1 \qquad (4-4)$$

最後に、C の符号は正であるとする。

$$C = C(m_1 = m - j_2, m_2 = j_2) > 0 \qquad (4-5)$$

これで、全ての不確定要素が無くなった。

CG 係数が満足する 3 項漸化式として、j_1, m_1, j_2, m_2 を固定 (従って m も固定される) し、j のみを変化させるものも知られているが、導き方は少し複雑である。

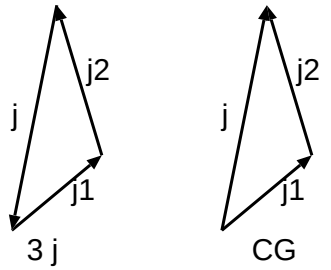
5. CG 係数の対称性

CG 係数に対する一般式を書き下す事は、Wigner や Racah によってなされた。群論の知識を仮定せずに、一般式を与えるには Racah のやり方が参考になる。紹介するには、沢山の式を書かねばならないからサボる事にした。数値計算という意味では、上に記したやり方が良いと思う。一方、CG 係数の対称性を導く為には、 Racah の式の知識が必要である。

対称性を議論する前には、 3-j 係数を利用するのが良いだろう。

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \equiv \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2\,j_3+1}} < j_1, m_1,\ j_2, m_2 | j_3, -m_3 > \qquad (5-1)$$

変な位相が付いているが、これは CG 係数と 3 j 係数 が取り扱う 3 個の角運動量の足し算方法に差があるためである。下図参照。



対称性は以下の通り。 3 j 係数を 2 成分の要素が 3 列に並んでいると見ると、これらの列の偶置換に対し、大きさも符号も変えない。従って任意に偶置換を行って良い。

1) 列の入れ換えが奇置換、 2) 全ての磁気量子数の符号を変える という操作に対しては、絶対値は変わらないが、$(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ という符号が付く。

従って、$\mathbf{j} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2$ と $\mathbf{j} = \mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_1$ とでは、和の順番が異なるから、波動関数の位相が異なる可能性がある。この事を忘れると、悔しい思いをする事がある。

パリティー CG 係数。

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \{1 + (-1)^{j_1+j_2+j_3}\}/2$$

$$\times (-1)^g \sqrt{\frac{(2g-2j_1)!(2g-j_2)!(2g-j_3)!}{(2g+1)!}} \frac{g!}{(g-j_1)(g-j_2)!(g-j_3)!} \qquad (5-2)$$

ここで、$2g = j_1 + j_2 + j_3$ であり、右辺の先頭の因子は $2g$ が偶数でなければ 0 とする為に付けられた。この因子は、３個の軌道角運動量に対するパリティー保存を要求する時に登場する場合がある。

ユニタリー条件を書いておこう。但し、$|j_1 - j_2| \geq j_3 \geq j_1 + j_2$ は自明とする。

$$\sum_{m_1,m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ m_1 & m_2 & m_3' \end{pmatrix} = \frac{1}{2j_3+1} \delta_{j_3,j_3'} \delta_{m_3,m_3'} \qquad (5-3)$$

$$\sum_{j_3,m_3} (2j_3+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{m_1,m_1'} \delta_{m_2,m_2'} \qquad (5-4)$$

角運動量の和の計算には CG 係数、各種の式変形には 3j 係数を利用すると言うのが実際の使い分けの指針だろう。

個人的には、全てを CG 係数で行っているが。。。

6. ４個の角運動量の和と 9j 係数

４個の角運動量 $j_i,\, m_i \quad (i = 1,2,3,4)$ を加える時には、複数の結合手順を考える事が出来る。例えば、

$$\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 = \mathbf{J}_{12}, \quad \mathbf{j}_3 + \mathbf{j}_4 = \mathbf{J}_{34}, \quad \mathbf{J}_{12} + \mathbf{J}_{34} = \mathbf{J} \qquad (6-1)$$

$$\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_3 = \mathbf{J}_{13}, \quad \mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_4 = \mathbf{J}_{24}, \quad \mathbf{J}_{13} + \mathbf{J}_{24} = \mathbf{J} \qquad (6-2)$$

という結合手順は中間状態は異なるが、最終結果は同じであるから、両結合手順で作られた波動関数は、ユニタリー変換により関係をつける事が可能である。これを次の様に書こう。

$$|(j_1,j_3)J_{13},(j_2,j_4)J_{24};J,M> = \sum_{J_{12},\,J_{34}} < J_{13},J_{24};J|J_{12},J_{34};J > |(j_1,j_2)J_{12},(j_3,j_4)J_{34};J,M > \qquad (6-3)$$

$$< J_{13},J_{24};J|J_{12},J_{34};J > = \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} \qquad (6-4)$$

(6-3) で左辺は M を含むのに、右辺が M に依存しない理由は、このユニタリー変換が量子化軸の取り方に依存しないからである。

(6-4) で平方根の因子が右辺に取り出されている理由は、9j 係数の対称性が向上するからである。

(6-3) 式を、CG 係数を用いて顕に書き下し、登場する波動関数の独立性を用いると次式を得る。

$$< j_1, m_1,\ j_3, m_3 | J_{13}, M_{13} >< j_2, m_2,\ j_4, m_4 | J_{24}, M_{24} >< J_{13}, M_{13},\ J_{24}, M_{24} | J, M >$$

$$= \sum_{J_{12},\, J_{34}} \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)} \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right\}$$

$$\times < j_1, m_1,\ j_2, m_2 | J_{12}, M_{12} >< j_3, m_3,\ j_4, m_4 | J_{34}, M_{34} >< J_{12}, M_{12},\ J_{34}, M_{34} | J, M > \qquad (6-5)$$

長い式だ。ここで、(1) $< j_1, m_1,\ j_2, m_2 | J'_{12}, M_{12} >$ を掛け、$M_{12}(= m_1 + m_2)$ を固定して、$m_1,\ m_2$ で和をとる

(2) $< j_3, m_3,\ j_4, m_4 | J'_{34}, M_{34} >$ を掛け、$M_{34}(= m_3 + m_4)$ を固定して、$m_3,\ m_4$ で和をとる

(3) 更に、$< J_{12}, M_{12},\ J_{34}, M_{34} | J, M >$ を掛け、$M(= M_{12} + M_{34})$ を固定して、$M_{12},\ M_{34}$ で和をとる。この結果、以下の 9j 係数を 6 個の CG 係数の積和で表現する式を得る。

$$\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)} \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right\}$$

$$= \sum_{m_1+m_2+m_3+m_4=M} < j_1, m_1,\ j_3, m_3 | J_{13}, M_{13} >< j_2, m_2,\ j_4, m_4 | J_{24}, M_{24} >$$

$$\times < j_1, m_1,\ j_2, m_2 | J_{12}, M_{12} >< j_3, m_3,\ j_4, m_4 | J_{34}, M_{34} >$$

$$\times < J_{13}, M_{13},\ J_{24}, M_{24} | J, M >< J_{12}, M_{12},\ J_{34}, M_{34} | J, M > \qquad (6-6)$$

右辺の和は、$\sum_i m_i = M$ という条件付きという意味である。

この式を 3j 係数を用いて書くと対称性がはっきりする。

$$\left\{ \begin{array}{ccc} J_{11} & J_{12} & J_{13} \\ J_{21} & J_{22} & J_{23} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} \end{array} \right\}$$

$$= \sum_{all M_{ij}} \left(\begin{array}{ccc} J_{11} & J_{12} & J_{13} \\ M_{11} & M_{12} & M_{13} \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc} J_{21} & J_{22} & J_{23} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc} J_{31} & J_{32} & J_{33} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{array} \right)$$

$$\times \left(\begin{array}{ccc} J_{11} & J_{21} & J_{31} \\ M_{11} & M_{12} & M_{13} \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc} J_{12} & J_{22} & J_{32} \\ M_{12} & M_{22} & M_{32} \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc} J_{13} & J_{23} & J_{33} \\ M_{13} & M_{23} & M_{33} \end{array} \right) \qquad (6-7)$$

3j 係数の対称性から、以下の対称性が導ける。

(1) 行又は列の偶置換に対して絶対値や符号を変えない。

(2) 行又は列の奇置換に対して絶対値は変わらないが、$(-1)^{\sum_{i,j} J_{i,j}}$ の符号が付く

(3) 左上から右下へ向かう対角線に対する入れ換え、いわゆる行列の転置に対して、(2) で導入したと同じ位相が付くだけで、絶対値は変化しない。

ユニタリー変換の条件は以下の様に書ける。

$$\sum_{J_{13},J_{24}}(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array}\right\}\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J'_{12} \\ j_3 & j_4 & J'_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array}\right\} = \frac{\delta_{J_{12},J'_{12}}\,\delta_{J_{34},J'_{34}}}{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)} \tag{6-8}$$

7. 3 個の角運動量の和

前節の作業に於いて j_i のどれか一つを 0 だとすると、3 個の角運動量の結合に対するユニタリー変換の規則とこれに付随する変換係数を導入する事が出来る。$j_4 = 0$ としてみよう。この時の、ユニタリー変換の変換行列要素は

$$\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)}\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array}\right\}$$

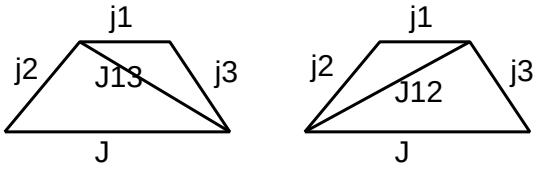
$$\overset{j_4=0}{\longrightarrow} \sqrt{(2J_{12}+1)(2j_3+1)(2J_{13}+1)(2j_4+1)}\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & J_{12} & j_2 \\ J_{13} & J & j_2 \\ j_3 & j_3 & 0 \end{array}\right\}$$

$$\equiv (-1)^{j_2+j_3+J_{12}+J_{13}}\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{13}+1)}\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & J_{12} & j_2 \\ J & J_{13} & j_3 \end{array}\right\}$$

$$= (-1)^{j_2+j_3+J_{12}+J_{13}}\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{13}+1)}\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ J & j_3 & J_{13} \end{array}\right\}$$

$$=< (j_1,j_3)J_{13}j_2;J|(j_1,j_2)J_{12}j_3;J > \tag{7-1}$$

最後の式は、6j 係数の定義である。即ち、以下の左図で示される結合様式の基底を右図の結合様式での基底で展開する時のユニタリー変換の行列要素が、(7-1) で与えられる。



もしも 9j 係数の中で、 $j_3 = 0$ とすると、ある意味で逆変換に対する 6j 係数が導ける。

$$< (j_1,j_2)J_{12}j_3;J|(j_1,j_3)J_{13}j_2;J >$$

$$= (-1)^{j_1+j_2+j_3+J}\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)}\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{array}\right\} \tag{7-2}$$

9j 係数を 3j 係数で展開する (6-7) 式を用いると、 6j 係数は 4 個の 3j 係数の積和として表現できる。

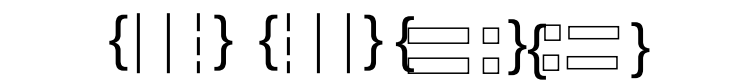
$$\left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_1' & j_2' & j_3' \end{array} \right\} = \sum_{all\ m_i,\, m_i'} \left(\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc} j_1 & j_2' & j_3' \\ m_1 & m_2' & -m_3' \end{array} \right)$$

$$\left(\begin{array}{ccc} j_1' & j_2 & j_3' \\ -m_1' & m_2 & m_3' \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc} j_1' & j_2' & j_3 \\ m_1' & -m_2' & m_3 \end{array} \right) \qquad (7-3)$$

9j 係数の特殊な場合が 6j 係数であると考えると、対称性や直交性の式を簡単に書き下せる。

$$\sum_J (2J+1) \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J \\ j_1' & j_2' & J' \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J \\ j_1' & j_2' & J'' \end{array} \right\} = \frac{\delta_{J',J''}}{2J'+1} \qquad (7-4)$$

対称性は、(7-3) と 3j 係数の対称性を利用する方が理解しやすいかも知れない。



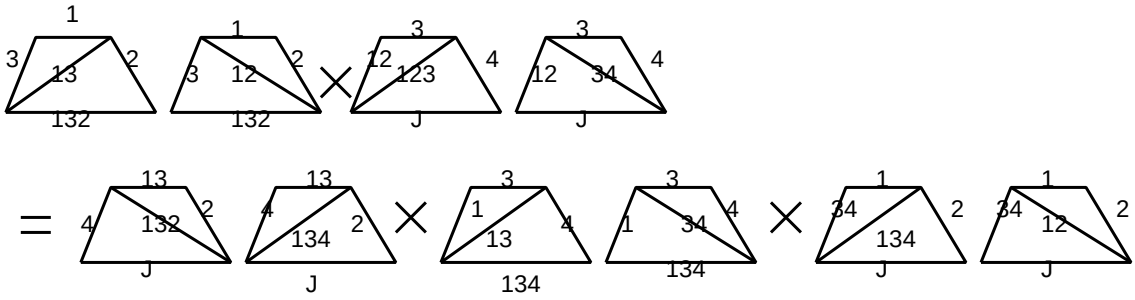
列毎の任意の入れ換え (図の太い縦線に対応する列) を行っても、絶対値も符号も変わらない。図の横に長い長方形の部分を上下に入れ換えても、絶対値も符号も変わらない。従って、上下に位置する成分をたすき掛けに入れ換えても構わない。

6j 係数は (7-3) で 3j 係数とつながっているので、原理的には計算可能である。

二つの 6j 係数の積は 3 個の 6j 係数の積和で書け、Biedenharn-Elliot の関係式と呼ばれる。次の恒等式に注目しよう。

$$\begin{aligned} &< ((j_1,j_3)J_{13},j_2)J_{132},j_4;J|(j_1,j_2)J_{12}(j_3,j_4)J_{34};J> \\ &\quad =< \underline{((j_1,j_3)J_{13}j_2)J_{132}}j_4;J|\underline{((j_1,j_2)J_{12}j_3)J_{132}}j_4;J> \\ &\quad < ((j_1,j_2)\underline{J_{12}j_3)J_{132}j_4;J}>|(j_1,j_2)\underline{J_{12}(j_3,j_4)J_{34};J}> \qquad (7-5) \\ &= \sum_{J_{134}} < ((j_1,j_3)\underline{J_{13},j_2)J_{132},j_4;J}|((j_1,j_3)\underline{J_{13}j_4)J_{134}j_2;J}> \\ &\quad < \underline{((j_1,j_3)J_{13}j_4)J_{134}}j_2;J|\underline{((j_3,j_4)J_{34}j_1)J_{134}}j_2;J> \\ &\quad < ((j_3,j_4)\underline{J_{34}j_1)J_{134}j_2;J}|\underline{(j_1,j_2)J_{12}}(j_3,j_4)\underline{J_{34};J}> \qquad (7-6) \end{aligned}$$

多分、この式の意味する所は明らかだと思う。(7-5) (7-6) の項の内、共通部分を除き、下線部に着目すると、全てのブラケットが 6j 係数で書ける事が判る。式を書き下す便利の為に、全てのブラケットを図示しておこう。



(7-5) と (7-6) を等置し、上の図を参照しながら (7-1),(7-2) を利用すると、以下の関係式を導けるだろう。途中で、 結合順序を逆転する CG 係数の位相が登場する。

$$\left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_1' & j_2' & j_3' \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_1'' & j_2'' & j_3'' \end{array} \right\}$$

$$= \sum_J (-1)^{j_1+j_2+j_3+j_1'+j_2'+j_3'+j_1''+j_2''+j_3''+J} \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2' & j_3' \\ J & j_3'' & j_2'' \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} j_1' & j_2 & j_3' \\ j_3'' & J & j_1'' \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} j_1' & j_2' & j_3 \\ j_2'' & j_1'' & J \end{array} \right\} \tag{7-7}$$

9j 係数は (6-7) の様に 6 個の 3j 係数の積和で、6j 係数は (7-3) の様に 4 個の 3j 係数の積和で表現出来る。従って、(6-7) 右辺の 6 個の 3j 係数の一部を 6j 係数に組み上げるならば、9j 係数と 6j 係数の関係をつける事が出来る。二つの CG 係数を掛けて和をとると、

$$\sum_J (2J+1) \left\{ \begin{array}{ccc} J_{13} & J_{24} & J \\ J_{12} & J_{34} & J' \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} J_{13} & J_{24} & J \\ j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \end{array} \right\} = (-1)^{2J'} \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ J_{24} & J' & j_4 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} j_3 & j_4 & J_{34} \\ J' & J_{13} & j_1 \end{array} \right\} \tag{7-8}$$

6j 係数の直交性を利用して、左辺の 6j 係数を右辺へ移すと、

$$\left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right\} =$$

$$\sum_{J'} (2J'+1) \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_3 & J_{13} \\ J_{24} & J & J' \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} j_2 & j_4 & J_{24} \\ j_3 & J' & J_{34} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} J_{12} & J_{34} & J \\ J' & j_1 & j_2 \end{array} \right\} \tag{7-9}$$

どの 3j 係数を纏めて 6j 係数に組み上げるかという自由度があるから、実用的には、同種の異なる関係式を書き下す事が可能である。この式は、 9j 係数の計算に利用される。

Racah は、CG 係数に対する顕な式と (7-3) から 6j 係数に対する顕な式を書き下した。大きくはない角運動量が関与する場合に利用できる。

大きな角運動量にも利用できる手法を次に紹介する。(7-7) で $j_1'' = 1/2$ とおき、 この特殊な場合の 6j 係数に対する顕な式を代入すると、6j 係数に対する複数の漸化式を作る事が出来る。これらの漸化式を組み合わせて、$1/2$ だけ角運動量が変化する部分を消去すると次の 1 変数 (j_1) のみの漸化式が導ける。

$$j_1E(j_1)\{j_1+1\}+(2j_1+1)F(j_1)\{j_1\}+(j_1+1)E(j_1)\{j_1-1\}=0 \qquad (7-10)$$

ここで、以下の略号を用いた。

$$\{j_1\}=\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{array}\right\}$$

$$E(j_1)=\Big[\{j_1^2-(j_2+j_3)^2\}\{(j_2+j_3+1)^2-j_1^2\}\{j_1^2-(J_2-J_3)^2\}\{(J_2+J_3+1)^2-j_1^2\}\Big]^{1/2}$$

$$\begin{aligned} F(j_1)=P(j_1)\{-P(j_1)+P(j_2)+P(j_3)\}+P(J_2)\{P(j_1)+P(j_2)-P(j_3)\} \\ +P(J_3)\{P(j_1)-P(j_2)+P(j_3)\}-2P(j_1)P(J_1) \end{aligned}$$

この漸化式、(7-4) の和則及び以下の位相則を用いると、CG 係数の場合と同じ処方で 6j 係数が計算出来る。

$$sgn(\{j_1\})=(-1)^{j_2+j_3+J_2+J_3} \qquad (7-11)$$

6j 係数は以下の式により、Racah 係数の対称性を改良したものである。

$$\left\{\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{array}\right\}=(-1)^{j_1+j_2+J_1+J_2}\,W(j_1,j_2,J_2,J_1;j_3,J_3) \qquad (7-12)$$

右辺の Racah 係数は、位相以外に J_2 と J_1 の並び方にも注意をしておこう。

座標系の回転

ここでは、D 関数を簡単に復習する。

座標軸の回転は、非可換である。例えば次の二つの回転を取り上げる。

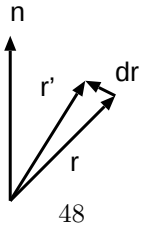
$$R_x(\alpha)=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}, \qquad R_y(\beta)=\begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix} \qquad (8-1)$$

これから、

$$R_x(\alpha)R_y(\beta)\neq R_y(\beta)R_x(\alpha) \qquad (8-2)$$

は自明であろう。この事は軌道角運動量の交換関係と密接に関係している。

スカラー場、$\psi(\mathbf{r})$ がある座標系で与えられたとして、この場を原点を固定して、単位ベクトル $\mathbf{n}$ を回転軸として無限小角 $\delta\theta$ だけ回転する。図を参照。



回転前後の位置ベクトルには、$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + d\mathbf{r}$ の関係があり、$d\mathbf{r} = \mathbf{n}\delta\theta \times \mathbf{r}$ の関係がある。回転後のスカラー場 $R\psi(\mathbf{r}')$ は、回転前のスカラー場 $\psi(\mathbf{r})$ と次の関係にある。

$$R\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \delta\theta\mathbf{n} \times \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) - (\delta\theta\mathbf{n} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla\psi(\mathbf{r}) + O(\delta\theta^2) \qquad (8-3)$$

右辺を Tayler 展開項で、$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla, \quad \ell\hbar = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ を用いると、

$$R\psi(\mathbf{r}) = (1 - i\delta\theta\mathbf{n} \cdot \ell)\psi(\mathbf{r}) \qquad (8-4)$$

$R\psi$ は無限小回転演算子 R とスカラー場の積と考えても良いが、積全体で一つの関数を表すと考える方が良いだろう。$\hbar\ell$ はエルミート演算子であり、角運動量である。有限回転は、この式を積分すれば良いから、回転の演算子は、指数関数の肩に載せればよい。

$$e^{-i\theta\mathbf{n}\cdot\ell} \qquad (8-5)$$

ここで、少しインチキをして角運動量を拡張して、$\ell \to \mathbf{j}$ としておくと、回転軸を表す単位ベクトルを $\mathbf{n}$ とし、回転前後の場を $\psi',\ \psi$ とすると、両者は以下の関係にある。

$$\psi' = e^{-i\mathbf{n}\cdot\mathbf{j}}\psi \qquad (8-6)$$

ここで、場が角運動量の固有状態だとすると、$\mathbf{j}^2$ と j は交換可能だから、角運動量の大きさは左右両辺で同じである。一方、左右両辺に登場する角運動量の量子化軸成分は異なる。

オイラー角

原点を固定した任意の回転を次の 3 回の回転の合成として表現する。

1) z 軸を回転軸とする角度 α の回転

2) 新しい座標系 (x', y', z') に対し、y' 軸を回転軸とする角度 β の回転

3) 更に新しい座標系 (x", y", z") に対し、z" 軸を回転軸とする角度 γ の回転

このオイラー角に対する回転の演算子を $R(\alpha, \beta, \gamma)$ とすると、

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i(\gamma j_{z''} + \beta j_{y'} + \alpha j_z)} \qquad (8-7)$$

と書ける。簡単な演算子操作の後、

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i(\alpha\, j_z + \beta\, j_y + \gamma\, j_z)} \qquad (8-8)$$

と書き換えられる。前者 (8-7) では、角運動量演算子が、回転直後の座標系の成分であるのに対し、後者では全ての角運動量成分が回転前の古い座標系で書かれている。その変わり、後者では回転の順番が変化している。この演算子の行列要素を以下の様に書く。

$$D^j_{m',m}(\alpha, \beta, \gamma) = < j, m' | e^{-i(\alpha\, j_z + \beta\, j_y + \gamma\, j_z)} | j, m > = e^{-i\alpha\, m'}\, d^j_{m',m}(\beta) e^{-i\gamma\, m} \qquad (8-9)$$

別の書き方をすると、回転された後の角運動量波動関数 $\psi'_{j,m'}$ は回転前の波動関数 $\psi_{j,m}$ を用いて展開出来る。

$$\psi'_{j,m'} = \sum_m \psi_{j,m} D^j_{m\,m'}(\alpha, \beta, \gamma) \tag{8-10}$$

当然の事であるが、この変換はユニタリー変換である。

この D は、Wigner の D 関数と呼ばれ、対称軸を回転軸とする独楽の運動に対する波動関数としても知られている。この場合、角運動量の二つの磁気量子数 m, m' の一つは量子化軸成分であり、もう一方は対称軸に射影した成分である。

ある意味で、$D^j_{m,m'}$ は角運動量の大きさが j であり、二つの磁気量子数をもち、以下の関係がある。

$$D^{j_1}\mu_1, m_1\, D^{j_2}\mu_2, m_2 = \sum_j < j_1, \mu_1,\ j_2, \mu_2 | j, \mu_1{+}\mu_2 >< j_1, m_1,\ j_2, m_2 | j, m_1{+}m_2 > D^j_{\mu_1+\mu_2, m_1+m_2} = \sum \tag{8-11}$$

この式は、Clebsch-Gordan 級数と呼ばれる。

(8-10) の両辺に、特別の場合の球面調和関数を代入し、以下の関係が導ける。

$$D^{\ell\,*}_{m,\,0}(\alpha,\, \beta,\, \gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell,\,m}(\beta,\, \alpha) \tag{8-12}$$

(8-11) と (8-12) を組み合わせると、角度変数を共有する二つの球面調和関数の積和を一つの球面調和関数で表す事が出来る。

$$\begin{aligned} Y_{\ell,m}(\theta,\phi) = \sum_{m_1+m_2=m} & \sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2\ell+1)}} < \ell_1, 0, \ell_2, 0 | \ell, 0 > \\ & \times < \ell_1, m_1, \ell_2, m_2 | \ell, m > Y_{\ell_1,m_1}(\theta,\phi) Y_{\ell_2,m_2}(\theta,\phi) \end{aligned} \tag{8-13}$$

この場合、角運動量の保存則以外に、パリティーの保存則があるから、単純な CG 係数以外の係数が登場している。３個の角運動量の重なり積分をする場合によく使用される。

球テンソル演算子と **Wigner Eckart** の定理

ある種の演算子は角運動量を持つ。又は演算子を特定の角運動量を有する演算子の和として展開出来る。そこで、演算子 $T_{k,q}$ が角運動量演算子との間に次の交換関係がある時、この演算子を球テンソル演算子 (spherical tensor operator) と呼ぶ。

$$[j_\pm, T_{k,q}] = \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{k,q\pm1}, \quad [j_z, T_{k,q}] = q\, T_{k,q} \tag{9-1}$$

球テンソル演算子を、D 関数を用いて (8-10) で定義する場合もある。

例えば、球座標で定義した磁気能率や電気的４重極能率は球テンソル演算子になるが、これらをデカルト座標で定義するならば、球テンソル演算子ではない。

二つの異なる自由度に属する球テンソル演算子の積和から、異なる次数の球テンソル演算子を作る事が出来る。

$$[T_{k_1} \times T_{k_2}]_{k,q} = \sum_{q_1+q_2=q} < k_1, m_1,\, k_2, q_2 | k,\, q > T_{k_1,q_1}\, T_{k_2,q_2} \qquad (9-2)$$

左辺は、次数が k, q の球テンソル演算子である。

球テンソル演算子の行列要素には、次の Wigner-Eckart の定理が成立する。

$$< j', m' | T_{k,q} | j, m >= (-1)^{j'-m'} \begin{pmatrix} j' & k & j \\ -m' & q & m \end{pmatrix} < j' || T_k || j > \qquad (9-3)$$

CG 係数を用いて書くと、

$$< j', m' | T_{k,q} | j, m >= \frac{1}{\sqrt{2j'+1}} < j, m,\, k, q | j', m' >< j' || T_k || j > \qquad (9-3')$$

(9-3) 式の右辺に位相が登場する理由は、ブラベクトルに角運動量 $|j, -m >$ を持つ状態としての性格を持たせる為である。この式は、$T_{k,q}|j, m >$ を新しい状態とし、この状態に $< j', m'|$ を掛けて積分した時、全体として角運動量が 0 となる成分だけが残るという事を言っている。次の CG 係数の値を知っていると分かりやすいだろう。

$$< j, m,\, j, -m | 0, 0 >= \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}} \qquad (9-4)$$

(9-3) 式の右辺は、量子化軸の方向に依存する磁気量子数に関係する 3j 係数の部分と、量子化軸に関係しない純粋に物理的な部分の積に分解されている。

2 本の縦棒で特徴付けられる部分は、換算行列要素 (reduced matrix element) と呼ばれる。T がエルミートな演算子であると仮定すると、

$$< j' || T_k || j >= (-1)^{j'-j} < j || T_k || j' >^* \qquad (9-5)$$

即ち、換算行列要素の左右を反転しても絶対値は変化しない。

異なる磁気量子数状態間の遷移強度比は、3j 係数の 2 乗のので表現できる場合がある事を Wigner-Eckart の定理は示している。

状態 $|j, m >$, $< j', m|$ がどちらも Fermi-Dirac か Bose-Einstein 統計に従い両統計が混じる事はないとし、T_k が両状態を結ぶ相互作用の一部であると考えると、j が (半) 奇数ならば j' も (半) 奇数 であるから、k は必ず 0 又は自然数となる。即ち、状態間の相互作用を媒介する粒子のスピンは必ず整数であるという結論が導ける。

二つの球テンソル演算子 (通常は一方を角運動量演算子とする) の行列要素に関して、次のランデの射影公式が成立する。

$$< j, m' | \mathbf{T} | j, m >= \frac{< j, m' | (\mathbf{T} \cdot \mathbf{j}) | j, m >}{j(j+1)} < j, m' | \mathbf{j} | j, m > \qquad (9-6)$$

この式により、磁気能率の演算子 μ と角運動量演算子 j とを比例係数で結ぶ事が出来る。

$$\mu = g\,\mu_B \mathbf{j} \tag{9-7}$$

しかし、左右のブラとケットに登場する角運動量の大きさが同じである事は忘れない様に。

ある種の研究分野では、換算行列要素の比を定数と考えて、等価ハミルトニアンという概念を導入している。

換算行列要素の計算は、計算が簡単な場合の行列要素を実際に計算し、 3 j 係数で割る事によりなされる。

以下の様な簡単な場合は、断り無しに使用される場合が多い。

$$< j'||\mathbf{1}||j >= \sqrt{2j+1}\delta_{j',j}, \qquad < j||\mathbf{j}||j >= \sqrt{j(j+1)(2j+1)} \tag{9-8}$$

球テンソル演算子の行列要素

(9-2) 式で定義される球テンソル演算子の行列要素は、角運動量を対角化する基底に対しては、簡単に計算出来る。

$$\begin{aligned} &< \alpha', j'||\mathbf{T}_k||\alpha, j >= (-1)^{j'+k+j}\sqrt{2k+1} \\ &\quad \times \sum_{\alpha'', j''} < \alpha', j'||\mathbf{T}_{k_1}||\alpha'',\, j'' >< \alpha'', j''||\mathbf{T}_{k_2}||\alpha,\, j > \left\{ \begin{array}{ccc} k_1 & k_2 & k \\ j & j' & j'' \end{array} \right\} \end{aligned} \tag{9-9}$$

α 等は、角運動量以外の量子数を表し、中間状態に関して和を取っている。

もしも、$\mathbf{T}_{k_1}$ が自由度 1 に、$\mathbf{T}_{k_2}$ が別の自由度 2 に、作用するならば、以下の様な関係が成立する。

$$\begin{aligned} &< (\alpha_1', j_1',\ \alpha_2', j_2'); J'||\mathbf{T}_k||(\alpha_1, j_1,\ \alpha_2, j_2); J >= \sqrt{(2J'+1)(2k+1)(2J+1)} \\ &\quad \times \left\{ \begin{array}{ccc} j_1' & j_2' & J' \\ j_1 & j_2 & J \\ k_1 & k_2 & k \end{array} \right\} < \alpha_1', j_1'||\mathbf{T}_{k_1}||\alpha_1, j_1 >< \alpha_2', j_2'||\mathbf{T}_{k_2}||\alpha_2, j_2 > \end{aligned} \tag{9-10}$$

$$\begin{aligned} &< (\alpha_1', j_1',\ \alpha_2', j_2'); J'||(\mathbf{T}_{k_1} \cdot \mathbf{T}_{k_2})||(\alpha_1, j_1,\ \alpha_2, j_2); J >= (-1)^{j_1+J+j_2'}\sqrt{2J+1} \\ &\quad \times \left\{ \begin{array}{ccc} j_1' & j_2' & J \\ j_2 & j_1 & k \end{array} \right\} < \alpha_1', j_1'||\mathbf{T}_{k_1}||\alpha_1, j_1 >< \alpha_2', j_2'||\mathbf{T}_{k_2}||\alpha_2, j_2 > \delta_{J,J'} \end{aligned} \tag{9-11}$$

一方だけに作用する演算子の行列要素に対しては、

$$\begin{aligned} &< (\alpha_1', j_1',\ \alpha_2', j_2'); J'||\mathbf{T}_{k_1}|| < (\alpha_1, j_1,\ \alpha_2, j_2); J >= (-1)^{j_1'+j_2'+J+k}\sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \\ &\qquad \times < \alpha_1', j_1'||\mathbf{T}_{k_1}||\alpha_1, j_1 > \left\{ \begin{array}{ccc} j_1' & J' & j_2' \\ J & j_1 & k \end{array} \right\} \delta_{\alpha_2',\alpha_2}\,\delta_{j_2',j_2} \end{aligned} \tag{9-12}$$

$$< (\alpha_1', j_1',\, \alpha_2', j_2'); J'||\mathbf{T}_{k_2}|| < (\alpha_1, j_1,\, \alpha_2, j_2); J >= (-1)^{j_1'+j_2+J'+k}\sqrt{(2J+1)(2J'+1)}$$

$$\times < \alpha_2', j_2'||\mathbf{T}_{k_2}||\alpha_2, j_2 > \left\{ \begin{array}{ccc} j_2' & J' & j_1' \\ J & j_2 & k \end{array} \right\} \delta_{\alpha_1',\alpha_1}\, \delta_{j_1',j_1} \qquad (9-13)$$

最後の方はかなり計算を省略したので、(9-10) でも導いておこう。

$$M =< (j_1, j_2)J_{12}, M_{12}|[\mathbf{T}_{J_{13}} \times \mathbf{T}_{24}]_{J,M}|(j_3, j_4)J_{34}, M_{34} >$$

を直接計算し、 Wigner-Eckart の定理と比較すればよい。$\mathbf{j_1} + \mathbf{j}_2 = \mathbf{J}_{12}$ に対応して、

$$\sum_{m_1+m_2+M_{12}=0} (-1)^{j_1-j_2+M_{12}} \hat{J_{12}} \left(\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ m_1 & m_2 & -M_{12} \end{array} \right) |j_1, m_1 > |j_2, m_2 >$$

が登場し、$< j_1, m_1|\mathbf{T}_{J_{13},M_{13}}|j_3, m_3 >$ には Wigne-Eckart の定理を適用する。但しここで、$\hat{j} = \sqrt{2j+1}$ という略号を用いた。

$$M = \sum_{\substack{m_1+m_2-M_{12}=0, \\ m_3+m_4-M_{34}=0, \\ M_{13}+M_{24}-M=0}} (-1)^{j_1-j_2+M_{12}} \hat{J_{12}} \left(\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ m_1 & m_2 & -M_{12} \end{array} \right) (-1)^{j_3-j_4+M_{34}} \hat{J_{34}} \left(\begin{array}{ccc} j_3 & j_4 & J_{34} \\ m_3 & m_4 & -M_{34} \end{array} \right)$$

$$\times (-1)^{J_{13}-J_{24}+M} \hat{J} \left(\begin{array}{ccc} J_{13} & J_{24} & J \\ M_{13} & M_{24} & -M \end{array} \right) (-1)^{j_1-m_1} \left(\begin{array}{ccc} j_1 & J_{13} & j_3 \\ -m_1 & M_{13} & m_3 \end{array} \right) < j_1||\mathbf{T}_{J_{13}}||j_3 >$$

$$(-1)^{j_2-m_2} \left(\begin{array}{ccc} j_2 & J_{24} & j_4 \\ -m_2 & M_{24} & m_4 \end{array} \right) < j_2||\mathbf{T}_{J_{24}}||j_4 >$$

先ず、磁気量子数に依存する位相を処理しておこう。

$$(-1)^{M_{12}+M_{34}+M-m_1-m_2} = (-1)^{M_{12}}$$

$-m_1,\ -m_2$ を改めて $m_1,\ m_2$ と書き、 1 、 4 、 5 番目の 3j 係数の内部での入れ換えを行う。

$$\left(\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ m_1 & m_2 & -M_{12} \end{array} \right) \to \left(\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ -m_1 & -m_2 & -M_{12} \end{array} \right) = (-1)^{j_1+j_2+J_{12}} \left(\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ m_1 & m_2 & M_{12} \end{array} \right)$$

$$\left(\begin{array}{ccc} j_1 & J_{13} & j_3 \\ -m_1 & M_{13} & m_3 \end{array} \right) \to \left(\begin{array}{ccc} j_1 & J_{13} & j_3 \\ m_1 & M_{13} & m_3 \end{array} \right) = (-1)^{j_1+j_3+J_{13}} \left(\begin{array}{ccc} j_1 & j_3 & J_{13} \\ m_1 & m_3 & M_{13} \end{array} \right)$$

$$\left(\begin{array}{ccc} j_2 & J_{24} & j_4 \\ -m_2 & M_{24} & m_4 \end{array} \right) \to \left(\begin{array}{ccc} j_2 & J_{24} & j_4 \\ m_2 & M_{24} & m_4 \end{array} \right) = (-1)^{j_2+j_4+J_{24}} \left(\begin{array}{ccc} j_2 & J_{24} & j_4 \\ -m_2 & M_{24} & m_4 \end{array} \right)$$

ここに登場している位相を簡略化しておこう。

$$(-1)^{j_1-j_2+j_1+j_2+J_{12}+j_3-j_4+J_{13}-J_{24}+j_1+j_1+j_3+J_{13}+j_2+j_2+j_4+J_{24}+M_{12}} = (-1)^{-J_{12}+M_{12}}$$

但し、$j_1+j_3+J_{13},\ j_1+j_2+J_{12}$ に対する三角条件を使用した。

次に、5 個の 3j 係数に対して独立な磁気量子数で和をとると、

$$\text{3j の和} = \begin{pmatrix} J_{12} & J_{34} & J \\ M_{12} & -M_{34} & -M \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}$$

この 3j 係数の内部で順番を変え、磁気量子数の符号を全て逆にすると、

$$\text{3j の和} = \begin{pmatrix} J_{12} & J & J_{24} \\ -M_{12} & M & M_{24} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}$$

これまでの所を取りまとめると、

$$M = (-1)^{-J_{12}+M_{12}} \hat{J_{12}} \hat{J_{34}} \hat{J} \begin{pmatrix} J_{12} & J & J_{24} \\ -M_{12} & M & M_{24} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}$$

$$\times < j_1||\mathbf{T}_{J_{13}}||j_3 >< j_2||\mathbf{T}_{J_{24}}||j_4 >$$

他方、M の式に直接 Wigner-Eckart の定理を適用すると、

$$M = (-1)^{J_{12}-M_{12}} \begin{pmatrix} J_{12} & J & J_{24} \\ -M_{12} & M & M_{24} \end{pmatrix} < (j_1,j_2)J_{12}||[\mathbf{T}_{J_{13}} \times \mathbf{T}_{J_{24}}]_J||(j_3,j_4)J_{34} >$$

両者を等置すると、求める結果が導けた。

これを知れば、(9-11)-(9-13) は簡単な演習問題になってしまう。

計算したい相互作用を、このような球テンソル演算子を用いて如何に展開するかという話題は、別の節で既に与えた。

実用的な計算過程では、相対距離のみに依存する 2 体相互作用を、それぞれの粒子座標の多重極展開をせねばならない事がある。以下の文はそのときに参考になる。

相互作用の多重極展開の公式集

中心力の多重極展開。粒子 1 と 2 の間にその相対距離にのみ依存する力が働いている場合を想定する。但し、スピンのスカラー積に依存する部分があっても良い。

$$V(1,2) = f(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \sum_S V_S(\vec{x}_1^S \cdot \vec{x}_2^S)$$

ここで、

$$\vec{x}^S = \begin{cases} \vec{1} \text{ if } & \text{S=0} \\ \vec{\sigma} \text{ if } & \text{S=1} \end{cases}$$

先ず、$f(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ を多重極展開する。

$$f(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = 4\pi \sum_{L,M} g_L(r_1, r_2)(Y_L(1) \cdot Y_L(2))$$

スピンを考慮したベクトル球面調和関数を次式で定義しておく。

$$\mathbf{Y}_{LSJ,M} \equiv \sum (L, M_L, S, M_S | J, M) Y_{L,M} x_{S,M_S} = [Y_L, x_S]_{J,M}$$

この記号を使用すると、

$$V(1,2) = 4\pi \sum_{L,S,J} (-)^{L+S-J} g_L(r_1, r_2)(\mathbf{Y}(1) \cdot \mathbf{Y}(2))$$

個別の相互作用に対しては、 $g_L(r_1, r_2)$ を計算出来ればよい。

テンソル力に対する多重極展開。

$$V_{tens}(1,2) = V_T \, f(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) S_{1,2}$$

という形のテンソル力を考える。ここで、

$$S_{1,2} \equiv 3(\vec{\sigma}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_1)(\vec{\sigma}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2) - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = \sqrt{\frac{24\pi}{5}} (Y_2(\hat{\mathbf{r}}_{1,2}) \cdot [\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2]_2)$$

この右辺の Y_2 と $f(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ の積をフーリエ展開する。

$$v_2(p) \equiv \frac{2}{\pi} \int_0^\infty f(r) j_2(pr) r^2 dr$$

$j_2(x)$ は球ベッセル関数である。この逆展開から、次式を定義する。

$$g_{k_1,k_2}(r_1, r_2) \equiv i^{k_2+2-k_1} \int v_2(p) j_{k_1}(pr_1) j_{k_2}(pr_2) p^2 dp$$

この結果、

$$f(r)Y_{2\mu}(\hat{\mathbf{r}}) = \sum \sqrt{\frac{4\pi(2k_1+1)(2k_2+1)}{5}}(k_1,0,k_2,0|2,0) \\ [Y_{k_1}(1), Y_{k_2}(2)]_{2,\mu} g_{k_1,k_2}(r_1,r_2)$$

次にスピン演算子と、個別の球面調和関数を結合させて、ベクトル球面調和関数を導入すれば良い。その結果、

$$V_{tens}(1,2) = 4\pi(-\sqrt{2})V_T \sum(-)^{k_1}\sqrt{3(2k_1+1)(2k_2+1)}(k_1,0,k_2,0|2,0) \\ W(k_1,k_2,1,1;2,J)(\mathbf{Y}_{k_1,1,J}\cdot\mathbf{Y}_{k_2,1,J})g_{k_1,k_2}(r_1,r_2)$$

先に書き下した、中心力の場合を含めるように書くと、以下のように統一できる。

$$V(1,2) = 4\pi \sum_{k=0,2;S} f(k) V_S^k \sum_{k_1,k_2}(-)^{k_1}\sqrt{(2S+1)(2k_1+1)(2k_2+1)}(k_1,0,k_2,0|k,0) \\ W(k_1,k_2,S,S;k,J)(\mathbf{Y}_{k_1,S,J}(1)\cdot\mathbf{Y}_{k_2,S,J}(2))\, g_{k_1,k_2}(r_1,r_2)$$

ここで、 f(0)=1、f(2)=$-\sqrt{2}\delta_{S,1}$ である。

個別の相互作用の展開

中心力を想定し、次の４種の相互作用の多重極展開を書き下しておく。

(1) δ 型相互作用

$$\delta(\vec{r_1}-\vec{r_2}) = \frac{1}{r_1 r_2}\delta(r_1-r_2)\delta(\cos\theta_1-\cos\theta_2)\delta(\phi_1-\phi_2)$$

であるから、

$$g_L(r_1,r_2) = \frac{\delta(r_1-r_2)}{2r_1r_2}$$

(2) クーロン型相互作用

$$V(|r_1-r_2|) = \frac{1}{|r_1-r_2|} = \frac{1}{r_>}\sum_L \left(\frac{r_<}{r_>}\right)^L P_L(\cos\theta)$$

と書けるから、

$$g_L(r_1,r_2) = \frac{{r_<}^L}{(2L+1){r_>}^{L+1}}$$

(3) ガウス型相互作用

$$V(1,2) = \exp(-\beta^2|r_1-r_2|^2) \\ = \exp\{-\beta^2(r_1^2+r_2^2)\}\exp\{i(2i\beta^2 r_1 r_2\cos\omega)\}$$

と書ける。ここで ω は $\hat{\mathbf{r}}_1$ と $\hat{\mathbf{r}}_2$ の角度である。後半部分を Rayleifgh 展開すると

$$g_L(r_1,r_2) = i^L \exp\{\underset{56}{-}\beta^2(r_1^2+r_2^2)\} j_L(2i\beta^2 r_1 r_2)$$

少し、数値計算上の注意を加えておこう。引数が純虚数 の球ベッセル関数は変形ベッセル関数と呼ばれている。

$$j_\nu(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{\nu+1/2}(z)$$

$$I_\nu(z) = \exp\{-\frac{\nu\pi i}{2}\} J_\nu(iz), \quad K_\nu(z) = \frac{\pi}{2}\frac{I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)}{\sin \nu z}$$

以下の漸化式が使用できる。

$$I_{\nu-1}(z) = \frac{2\nu}{z} I_\nu(z) + I_{\nu+1}(z), \quad K_{\nu+1}(z) = \frac{2\nu}{z} K_\nu(z) + K_{\nu-1}(z)$$

当然の事であるが、I は下へ、K は上へ漸化式を使用すること。規格化、又は初期値は以下の通りである。

$$I_{1/2}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sinh z, \quad I_{3/2}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} (\cosh z - \sinh z/z)$$

$$K_{1/2}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \exp(-z), \quad K_{3/2}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \exp(-z)(1 + 1/z)$$

(4) 湯川型の相互作用

$$V(1,2) = \frac{\exp(-\beta|r_1 - r_2|)}{\beta|r_1 - r_2|} = -h_0^{(1)}(i\beta|r_1 - r_2|)$$

ここで、$h_0^{(1)}$ は第 1 種の球ハンケル関数である。一般に球ベッセル関数とその親類達 $z_n(z)$ は、以下の関係を満足する。

$$z_0(\sqrt{z^2 - 2z\zeta\cos\omega + \zeta^2}) = \sum_L (2L+1) j_L(r_<) z_L(r_>) P_L(\cos\omega)$$

従って

$$g_L(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{\beta r_<}} I_{L+1/2}(\beta r_<) \frac{1}{\sqrt{\beta r_>}} K_{L+1/2}(\beta r_>)$$

テンソル力に対する g_{k_1,k_2}
次の場合が、実際に使われた。

(1) f(r)=r^2 h(r) と書いたとき、h(r) の多重極展開が知られている場合。

まず、Moshinsky がいわゆる Moshinsky bracket の計算時に使ったとされる以下の関係式が成り立つ事に注目する。

$$r^\lambda Y_{\lambda,\mu}(\hat{r}) = \sum_{\ell,m} \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} \binom{2\lambda}{2\ell}^{1/2} (sr_a)^{\lambda-\ell} (tr_b)^\ell (\lambda - \ell, \mu - m, \ell, m|\lambda, \mu) \times Y_{\lambda-\ell,\mu-m}(\hat{r}_a) Y_{\ell,m}(\hat{r}_b)$$

但し、ここで $\vec{r} = s\vec{r}_a + t\vec{r}_b$ という関係を仮定している。一方、当初の仮定より次式が成立する。

$$h(r) = 4\pi \sum h_L(r_a, r_b) Y^*_{L,M}(\hat{\mathbf{r}}_a) Y_{L,M}(\hat{\mathbf{r}}_b)$$

これだけの知識で、$h(r)r^2 Y_{2,\mu}(\hat{r})$ が $\vec{r}_a, \vec{r}_b$ を用いて多重極展開できることが分かる。

$$\begin{aligned} g_{k_1,k_2}(r_1, r_2) =& \sum_{\ell,L} (-)^{k_2+\ell}(2L+1)\sqrt{\frac{5(5-2\ell)}{(2k_1+1)(2k_2+1)}\binom{5}{2\ell}} \\ &\times \frac{(L,0,2-\ell,0|k_1,0)(L,0,\ell,0|k_2,0)}{(k_1,0,k_2,0|2,0)} \\ &\times W(k_1,k_2,2-\ell,2;2,L)(sr_1)^{2-\ell}(tr_2)^{\ell} h_L(r_1,r_2) \end{aligned}$$

但し、$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ であるから、s = 1、t=−1 とする。r_1, r_2 の冪乗が登場するが、st< 0 であるので、ℓ が大きくなると、この表現は誤差を招きやすいので高次の展開に使用してはいけない。

この式の、Clebsch-Gordan 係数の比で表される部分を露わに書き下す人もいる。

(2) π 中間子をやりとりする時に生じるとされているテンソル相互作用。OPEP(one pion excahnge potential) の場合

$$f(r) = \frac{\exp(-\alpha r)}{\alpha r}\left(1 + \frac{3}{\alpha r} + \frac{3}{(\alpha r)^2}\right) = g(\alpha r)$$

下に示した、regularized two pion exchange potential の特殊な場合として計算がされている。原点付近で r^{-3} という振舞が嫌われている。結果だけ書くと、

$$g^{OPEP}_{k_1,k_2}(r_1, r_2) = \frac{I_{k_1+1/2}(\alpha r_<)}{\sqrt{\alpha r_<}} \times \frac{K_{k_2+1/2}(\alpha r_>)}{\sqrt{\alpha r_>}} - \frac{1}{\alpha^3 r_1 r_2}\delta(r_1 - r_2)$$

(3) regularized TWOPEP の場合。

$$f(r) = g(\alpha r) - \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^3 g(\beta r)$$

g(x) は、OPEP の場合に定義されている。

テンソル力の一般論のところで示した計算を忠実に実行する。

$$v_2(p) = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty r^2 dr j_2(pr) f(r) = \frac{2p^2}{\pi\alpha^3}\left(\frac{1}{\alpha^2+p^2} - \frac{1}{\beta^2+p^2}\right)$$

次に、逆変換の公式に代入する。

$$g_{k1,k_2}(r_1, r_2) = i^{k_2+2-k_1}\frac{2}{\pi\alpha^3}\int_0^\infty \left(\frac{1}{\alpha^2+p^2} - \frac{1}{\beta^2+p^2}\right) j_{k_1}(pr_1) j_{k_2}(pr_2) p^4 dp$$

この被積分関数は $p = i\alpha$ と $i\beta$ に 1 位の極を持つ。この積分を実行すると、

$$\begin{aligned} g_{k_1,k_2}(r_1, r_2) =& \frac{I_{k+1/2}(\alpha r_<)}{\sqrt{\alpha r_<}} \times \frac{K_{k_2+1/2}(\alpha r_>)}{\sqrt{\alpha r_>}} \\ & - \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^3 \frac{I_{k+1/2}(\beta r_<)}{\sqrt{\beta r_<}} \times \frac{K_{k_2+1/2}(\beta r_>)}{\sqrt{\beta r_>}} \end{aligned}$$

ここでも、変形 Bessel や 変形 Neuman 関数が登場している。この結果の式で、β を無限大とすると、OPEP の式が導ける。δ 関数の項は、$r_< = r_>$ という関係を保持したまま β を無限大にすると出て来る因子である。