D 行列と球面調和関数

D 行列が球面調和関数と関係していることを見ていきます。「ウィグナーの D 行列」で求めた関係を使っています。後半の話では「角運動量の合成」での話を使うので、表記に気を付けてください。

ウィグナーの D 行列と球面調和関数との関係を示します。極座標 (r,θ,ϕ) の角度 θ,ϕ による状態を $|\theta,\phi\rangle$ とし、角運動量演算子の z 成分 $\hat{J}_z$ の固有状態 $|j,m\rangle$ の j を 0 以上の整数に制限したものを l としたとき (軌道角運動量のみを考える)、「角運動量演算子」の最後で触れたように、球面調和関数 $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ を

$$Y_{l,m}(\theta,\phi)=\langle\theta,\phi|l.m\rangle$$

と与えられます。オイラー角 α,β,γ による回転演算子

$$\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)=e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar}e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}e^{-i\gamma\hat{J}_z/\hbar}$$

によって回転させた後の状態 $|\theta',\phi'\rangle$ を使って

$$Y^*_{l,m}(\theta',\phi')=\langle l,m|\theta',\phi'\rangle=\langle l,m|\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|\theta,\phi\rangle \tag{1}$$

これに $|l,m\rangle$ の完全性を挟むことで

$$Y^*_{l,m}(\theta',\phi')=\sum_{m'}\langle l,m|\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|l,m'\rangle\langle l,m'|\theta,\phi\rangle=\sum_{m'}D^{(l)}_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma)Y^*_{l,m'}(\theta,\phi) \tag{2}$$

として、球面調和関数の角度の変換が D 行列によって与えられます。球面調和関数は $|l,m\rangle$ から作られているので、$|l,m\rangle$ の変換がそのまま反映しただけです。複素共役を取れば

$$\begin{aligned}Y_{l,m}(\theta',\phi')=\sum_{m'}\langle l,m|\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|l,m'\rangle\langle l,m'|\theta,\phi\rangle &= \sum_{m'}(D^{(l)}_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma))^*Y_{l,m'}(\theta,\phi)\\ &= \sum_{m'}D^{(l)}_{m'm}(-\gamma,-\beta,-\alpha)Y_{l,m'}(\theta,\phi)\end{aligned}$$

となります（角度の状態 $|\theta,\phi\rangle$ に回転演算子を作用させるために複素共役を取ったので逆回転になっている)。

この関係から $D^{(l)}_{m0}(\alpha,\beta,\gamma)$ が簡単に求まります。球面調和関数はルジャンドル陪関数 P^m_l によって

$$Y_{l,m}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P^m_l(\cos\theta)e^{im\phi}$$

$$P^m_l(z)=(1-z^2)^{m/2}\frac{d^m}{dz^m}P_l(z)\qquad (P_n(z)=\frac{1}{2^nn!}\frac{d^n}{dz^n}(z^2-1)^n)$$

$\theta=0$ のとき、$z|_{\theta=0}=\cos\theta|_{\theta=0}=1$ なので 0 にならないためには、$m=0$ でないといけないです。そして、ルジャンドル多項式 $P_n(z)$ は $P_n(1)=1$(数学の「ルジャンドル多項式」参照) なので

$$Y_{l,0}(0,\phi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\quad (P_l^0(1)=P_l(1)=1)$$

として、$\theta=0$ では m とは無関係になっています。

これを利用するために、(1) で $\theta=0$ とします。$\theta=0$ は z 軸上にいることなので、$\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)$ にいる最初の z 軸周りの角度 γ の回転は意味がなくなり、γ の依存性はなくなります。次の y 軸周りの回転での角度 β は z 軸からの角度に対応するので θ' は β になります。最後の z 軸周りの角度 α の回転は xy 平面上の角度になるので ϕ' は α です。というわけで、このときの (2) は

$$\begin{aligned}
Y^*_{l,m}(\beta,\alpha)&=D^{(l)}_{m0}(\alpha,\beta)Y^*_{l,0}(0,\phi)\\
&=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}D^{(l)}_{m0}(\alpha,\beta,\gamma)\\
D^{(l)}_{m0}(\alpha,\beta,\gamma)&=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y^*_{l,m}(\beta,\alpha)
\end{aligned}$$

となり、$D^{(l)}_{m0}$ が求まります。また、$m=0,\alpha=\gamma=0,\beta=\theta$ なら

$$D^{(l)}_{00}(0,\theta,\gamma)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y^*_{l,0}(\theta,0)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l^0(\cos\theta)=P_l^0(\cos\theta)=P_l(\cos\theta)$$

となります。

求めた関係の分かりやすい使用例として、球対称なハミルトニアン演算子の固有関数を求めます。ハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ の固有値と固有状態が

$$\hat{H}|E\rangle=E|E\rangle$$

となっているとします。球対称であるなら角運動量は保存するので、このハミルトニアン演算子と角運動量演算子は交換します。エネルギーの状態は角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}$ の作用とは無関係であるなら

$$\begin{aligned}
&\hat{H}|E,l,m\rangle=E|E,l,m\rangle\\
&\hat{J}_z|E,l,m\rangle=\hbar m|E,l,m\rangle\\
&\hat{\boldsymbol{J}}^2|E,l,m\rangle=\hbar^2 l(l+1)|E,l,m\rangle\quad(-l\leq m\leq l)
\end{aligned}$$

ここに位置の状態 $|\boldsymbol{x}\rangle$ の回転変換を加えます。回転を分かりやすくするために極座標として

$$|\boldsymbol{x}\rangle=|r,\theta,\phi\rangle$$

これは z 軸上の位置 $|r,0,0\rangle$ を y 軸周りに θ、z 軸周りに ϕ だけ回転させたものなので

$$e^{-i\phi\hat{J}_3/\hbar}e^{-i\theta\hat{J}_2/\hbar}|r,0,0\rangle=\hat{U}(\phi,\theta,0)|r,0,0\rangle=|r,\theta,\phi\rangle$$

そうすると

$$\begin{aligned}\psi_{l,m,E}(\boldsymbol{x}) &= \langle r,\theta,\phi|E,l,m\rangle = \langle r,0,0|\hat{U}^\dagger(\phi,\theta,0)|E,l,m\rangle \\ &= \langle r,0,0|\sum_{m'}|E,l,m'\rangle\langle E,l,m'|\hat{U}(0,-\theta,-\phi)|E,l,m\rangle \\ &= \sum_{m'}\langle r,0,0|E,l,m'\rangle D^{(l)}_{m'm}(0,-\theta,-\phi)\end{aligned}$$

$|r,0,0\rangle$ は z 軸周りの回転で何も変化しないので、z 軸周りの回転演算子 $\hat{U}_z$ の作用は

$$\hat{U}_z(\phi)|r,0,0\rangle = e^{-i\phi\hat{J}_z/\hbar}|r,0,0\rangle = |r,0,0\rangle$$

そうすると

$$\langle r,0,0|E,l,m'\rangle = \langle r,0,0|\hat{U}^\dagger_z(\phi)|E,l,m'\rangle = \langle r,0,0|e^{i\phi\hat{J}_z/\hbar}|E,l,m'\rangle = \langle r,0,0|e^{im'\phi}|E,l,m'\rangle$$

から、$m'=0$ でないといけないです。よって

$$\begin{aligned}\Psi_{l,m,E}(\boldsymbol{x}) &= \langle r,0,0|E,l,0\rangle D^{(l)}_{0m}(0,-\theta,-\phi) \\ &= \psi_{l,E}(r)D^{(l)}_{0m}(0,-\theta,-\phi) \\ &= \psi_{l,E}(r)D^{(l)}_{0m}(0,-\theta,-\phi) \\ &= \psi_{l,E}(r)(D^{(l)}_{m0}(\phi,\theta,0))^* \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\psi_{l,E}(r)Y_{l,m}(\theta,\phi) \\ &= R_{l,E}(r)Y_{l,m}(\theta,\phi)\end{aligned}$$

となり、角運動量演算子と交換するハミルトニアン演算子の固有関数には球面調和関数が出てくるのが分かります。別の言い方をすれば、球対称 (回転変換で不変) なハミルトニアン演算子の固有関数には球面調和関数が出てきます。ただし、動径部分に関する情報は何もないので $R_{l,E}(r)$ が何かはこれだけでは分かりません。

球面調和関数を使う話でよく出てくる積分

$$\begin{aligned}&\int_0^\pi d\beta\sin\beta\int_0^{2\pi}d\alpha Y^*_{l,m}(\beta,\alpha)Y_{l_A,m_A}(\beta,\alpha)Y_{l_B,m_B}(\beta,\alpha) \\ &\quad= \sqrt{\frac{(2l_A+1)(2l_B+1)}{4\pi(2l+1)}}\langle l_A,0;l_B,0|(l_A,l_B)l,0\rangle\langle l_A,m_A;l_B,m_B|(l_A,l_B)l,m\rangle \qquad (3)\end{aligned}$$

を求めます。右辺の状態は角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{A}},\hat{\boldsymbol{B}}$ による $\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{A}}+\hat{\boldsymbol{B}}$ での状態なので、「角運動量の合成」での話を持ち込みます。ここから $\hat{\boldsymbol{J}}$ が合成された角運動量演算子になることに注意してください。

表記をまとめておきます。$\hat{A}_z,\hat{B}_z,\hat{J}_z$ の固有値と固有状態は

$$\hat{A}_z|j_A, m_A\rangle = \hbar m_A|j_A, m_A\rangle \quad (-j_A \le m_A \le j_A)$$

$$\hat{B}_z|j_B, m_B\rangle = \hbar m_B|j_B, m_B\rangle \quad (-j_B \le m_B \le j_B)$$

$$\hat{J}_z|(j_A, j_B)j, m\rangle = \hbar m|(j_A, j_B)j, m\rangle \quad (|j_A - j_B| \le j \le j_A + j_B\ ,\ -j \le m \le j)$$

$|j_A, m_A\rangle, |j_B, m_B\rangle$ のテンソル積から作る状態を

$$|j_A, m_A; j_B, m_B\rangle = |j_A, m_A\rangle \otimes |j_B, m_B\rangle$$

これによって $|(j_A, j_B)j, m\rangle$ を展開して

$$\begin{aligned}
|(j_A, j_B)j, m\rangle &= \sum_{m_A=-j_A}^{j_A}\sum_{m_B=-j_B}^{j_B} \langle j_A, m_A; j_B, m_B|j_A, j_B; j, m\rangle|j_A, m_A; j_B, m_B\rangle \\
&= \sum_{m_A=-j_A}^{j_A}\sum_{m_B=-j_B}^{j_B} C(j_A, j_B, j : m_A, m_B, m)|j_A, m_A; j_B, m_B\rangle
\end{aligned}$$

$C(j_A, j_B, j : m_A, m_B, m)$ はクレブシュ・ゴルダン係数で、クレブシュ・ゴルダン係数のときは

$$C(j_A, j_B, j : m_A, m_B, m) = \langle j_A, m_A; j_B, m_B|j, m\rangle$$

と書きます。また、混乱することはないと思うので、$|(j_A, j_B)j, m\rangle$ を $|j, m\rangle$、$|j_A, m_A; j_B, m_B\rangle$ を $|m_A; m_B\rangle$ と書いてしまいます。

クレブシュ・ゴルダン級数を求めます。D 行列は回転演算子と角運動量演算子の固有状態によって定義されています。なので、角運動量演算子と同じ関係を持つ $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{A}} + \hat{\boldsymbol{B}}$ と、その $\hat{J}_z$ の固有状態 $|(j_A, j_B)j, m\rangle$ からも D 行列を作れます。このときの回転演算子を

$$\hat{U}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar}e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}e^{-i\gamma\hat{J}_z/\hbar} \quad (\hat{J}_y = \hat{A}_y + \hat{B}_y\ ,\ \hat{J}_z = \hat{A}_z + \hat{B}_z)$$

とします。

d 行列に $|m_A; m_B\rangle$ の完全性

$$\sum_{m_A=-j_A}^{j_A}\sum_{m_B=-j_B}^{j_B} |m_A; m_B\rangle\langle m_A; m_B| = \sum_{m_A=-j_A}^{j_A}\sum_{m_B=-j_B}^{j_B} |j_A, m_A; j_B, m_B\rangle\langle j_A, m_A; j_B, m_B| = 1$$

を挟むことで

$$\begin{aligned}
d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \langle j, m'|\hat{U}(\beta)|j, m\rangle &= \sum_{m_A, m_B} \langle j, m'|\hat{U}(\beta)|m_A; m_B\rangle\langle m_A; m_B|j, m\rangle \\
&= \sum_{m_A, m_B} \langle m_A; m_B|j, m\rangle\langle j, m'|\hat{U}(\beta)|m_A; m_B\rangle
\end{aligned}$$

クレプシュ・ゴルダン係数は実数なので

$$\langle j,m'| = \sum_{m'_A,m'_B} \langle j,m'|m'_A;m'_B\rangle\langle m'_A;m'_B| = \sum_{m'_A,m'_B} \langle m'_A;m'_B|j,m'\rangle\langle m'_A;m'_B|$$

これを入れれば

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \sum_{m_A,m_B}\sum_{m'_A,m'_B} \langle m_A;m_B|j,m\rangle\langle m'_A;m'_B|j,m'\rangle\langle m'_A;m'_B|\hat{U}(\beta)|m_A;m_B\rangle$$

$|m_A;m_B\rangle$ に対して $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ はそれぞれの固有状態にしか作用しないので

$$\begin{aligned}\langle m'_A;m'_B|\hat{U}(\beta)|m_A;m_B\rangle &= \langle j_A,m'_A|e^{-i\beta\hat{A}_y/\hbar}|j_A,m_A\rangle\langle j_B,m'_B|e^{-i\beta\hat{B}_y/\hbar}|j_B,m_B\rangle \\ &= d^{(j_A)}_{m'_Am_A}(\beta)d^{(j_B)}_{m'_Bm_B}(\beta)\end{aligned}$$

となっています。$d^{(j)}_{m'm}(\beta;A)$, $d^{(j)}_{m'm}(\beta;B)$ と書くことにします。これを使えば

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \sum_{m_A,m_B}\sum_{m'_A,m'_B} \langle m_A;m_B|j,m\rangle\langle m'_A;m'_B|j,m'\rangle d^{(j)}_{m'm}(\beta;A)d^{(j)}_{m'm}(\beta;B)$$

D 行列では

$$\begin{aligned}&\langle m'_A;m'_B|\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|m_A;m_B\rangle \\ &\quad= \langle m'_A|e^{-i\alpha\hat{A}_z/\hbar}e^{-i\beta\hat{A}_y/\hbar}e^{-i\gamma\hat{A}_z/\hbar}|m_A\rangle\langle m'_B|e^{-i\alpha\hat{B}_z/\hbar}e^{-i\beta\hat{B}_y/\hbar}e^{-i\beta\hat{B}_z/\hbar}|m_B\rangle \\ &\quad= e^{-i\alpha m'_A}e^{-i\gamma m_A}\langle j_A,m'_A|e^{-i\beta\hat{A}_y/\hbar}|j_A,m_A\rangle e^{-i\alpha m'_B}e^{-i\gamma m_B}\langle j_B,m'_B|e^{-i\beta\hat{B}_y/\hbar}|j_B,m_B\rangle \\ &\quad= e^{-i\alpha m'_A}e^{-i\gamma m_A}d^{(j)}_{m'm}(\beta;A)e^{-i\alpha m'_B}e^{-i\gamma m_B}d^{(j)}_{m'm}(\beta;B) \\ &\quad= D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma;A)D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma;B)\end{aligned}$$

となるだけなので

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) = \sum_{m_A,m_B}\sum_{m'_A,m'_B} \langle m_A;m_B|j,m\rangle\langle m'_A;m'_B|j,m'\rangle D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma;A)D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma;B)$$

これは反対に書くこともできます。先に $d^{(j)}_{m'm}(\beta;A), d^{(j)}_{m'm}(\beta;B)$ を作るように書くと

$$\begin{aligned}d^{(j)}_{m'm}(\beta;A)d^{(j)}_{m'm}(\beta;B) &= \langle j_A,m'_A|e^{-i\beta\hat{A}_y/\hbar}|j_A,m_A\rangle\langle j_B,m'_B|e^{-i\beta\hat{B}_y/\hbar}|j_B,m_B\rangle \\ &= \langle m'_A;m'_B|\hat{U}(\beta)|m_A;m_B\rangle\end{aligned}$$

$|j,m\rangle$ の完全性

$$\sum_{j=|j_A-j_B|}^{j_A+j_A}\sum_{m=-j}^{j}|j,m\rangle\langle j,m| = \sum_{j=|j_A-j_B|}^{j_A+j_A}\sum_{m=-j}^{j}|(j_A,j_B)j,m\rangle\langle (j_A,j_B)j,m| = 1$$

を 2 つ挟むと

$$\langle m'_A;m'_B|\hat{U}(\beta)|m_A;m_B\rangle = \sum_{j',m'}\sum_{j,m}\langle m'_A;m'_B|j',m'\rangle\langle j',m'|\hat{U}(\beta)|j,m\rangle\langle j,m|m_A;m_B\rangle$$

$\hat{U}(\beta)$ にいる J_y は $|j,m\rangle$ の j を変えないので、0 にならないためには $j'=j$ が要求され

$$\begin{aligned}\langle m'_A;m'_B|\hat{U}(\beta)|m_A;m_B\rangle &= \sum_{j',m'}\sum_{j,m}\langle m'_A;m'_B|j',m'\rangle\langle j',m'|\hat{U}(\beta)|j,m\rangle\langle j,m|m_A;m_B\rangle\delta_{j'j}\\ &= \sum_{j}\sum_{m,m'}\langle m'_A;m'_B|j,m'\rangle\langle j,m'|\hat{U}(\beta)|j,m\rangle\langle j,m|m_A;m_B\rangle\\ &= \sum_{j}\sum_{m,m'}\langle m'_A;m'_B|j,m'\rangle\langle j,m|m_A;m_B\rangle d^{(j)}_{m'm}(\beta)\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}d^{(j)}_{m'm}(\beta;A)d^{(j)}_{m'm}(\beta;B) &= \sum_{j}\sum_{m,m'}\langle j,m|m_A;m_B\rangle\langle m'_A;m'_B|j,m'\rangle d^{(j)}_{m'm}(\beta)\\ &= \sum_{j}\sum_{m,m'}\langle m_A;m_B|j,m\rangle\langle m'_A;m'_B|j,m'\rangle d^{(j)}_{m'm}(\beta)\end{aligned}$$

2 行目の書き換えは並びを揃えて見やすくするためにしているだけです。D 行列も同様なので

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma;A)D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma;B) = \sum_{j}\sum_{m,m'}\langle m_A;m_B|j,m\rangle\langle m'_A;m'_B|j,m'\rangle D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$$

これをクレブシュ・ゴルダン級数 (Clebsch-Gordan series) と言います。省略せずにもとの表記すれば

$$\begin{aligned}&D^{(j_A)}_{m'_Am_A}(\alpha,\beta,\gamma)D^{(j_B)}_{m'_Bm_B}(\alpha,\beta,\gamma)\\ &\quad= \sum_{j=|j_A-j_B|}^{j_A+j_B}\sum_{m,m'=-j}^{j}\langle j_A,m_A;j_B,m_B|(j_A,j_B)j,m\rangle\langle j_A,m'_A;j_B,m'_B|(j_A,j_B)j,m'\rangle D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)\end{aligned}$$

これから (3) が導けます。

j_A,j_B,j を整数 l_A,l_B,l とし、$m_A=0,m_B=0$ とします。このときはクレブシュ・ゴルダン係数の制限から $m=0$ なので

$$D^{(l_A)}_{m'_A0}(\alpha,\beta,\gamma)D^{(l_B)}_{m'_B0}(\alpha,\beta,\gamma) = \langle l_A,0;l_B,0|l,0\rangle\langle l_A,m'_A;l_B,m'_B|l,m'\rangle D^{(l)}_{m'0}(\alpha,\beta,\gamma)$$

整数 l に対して球面調和関数とは

$$D^{(l)}_{m,0}(\alpha,\beta,\gamma)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y^*_{l,m}(\beta,\alpha)$$

となっているので

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{4\pi}{2l_A+1}}\sqrt{\frac{4\pi}{2l_B+1}}Y^*_{l_A,m_A}(\beta,\alpha)Y^*_{l_B,m_B}(\beta,\alpha)&=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\sum_l\sum_{m'}\langle 0;0|l,0\rangle\langle m'_A;m'_B|l,m'\rangle Y^*_{l,m'}(\beta,\alpha)\\ Y_{l_A,m_A}(\beta,\alpha)Y_{l_B,m_B}(\beta,\alpha)&=\sqrt{\frac{(2l_A+1)(2l_B+1)}{4\pi(2l+1)}}\sum_j\sum_{m'}\langle 0;0|l,0\rangle\langle m'_A;m'_B|l,m'\rangle Y_{l,m'}(\beta,\alpha)\end{aligned}$$

クレブシュ・ゴルダン係数 $\langle m_A;m_B|l,m\rangle$ は実数なので、複素共役をとっても変わりません。
$Y^*_{l,m}(\beta,\alpha)$ を両辺にかけて α,β で積分すると、今の球面調和関数は 1 に規格化されているので直交性

$$\int_0^\pi d\theta\sin\theta\int_0^{2\pi}d\phi\ Y^*_{l',m'}(\theta,\phi)Y_{l,m}(\theta,\phi)=\delta_{l'l}\delta_{m'm}$$

を使うことで

$$\begin{aligned}&\int_0^\pi d\beta\sin\beta\int_0^{2\pi}d\alpha Y^*_{l,m}(\beta,\alpha)Y_{l_A,m_A}(\beta,\alpha)Y_{l_B,m_B}(\beta,\alpha)\\ &\qquad=\sqrt{\frac{(2l_A+1)(2l_B+1)}{4\pi(2l+1)}}\langle l_A,0;l_B,0|l,0\rangle\langle l_A,m_A;l_B,m_B|l,m\rangle\end{aligned}$$

となり、具体的な値はクレブシュ・ゴルダン係数が分かれば求められます。